



ハイエントロピー合金

元素の多様性と不均一性に基づく新しい材料の学理

High Entropy Alloys - Science of New Class of Materials Based on Elemental Multiplicity and Heterogeneity

実用金属とその強化原理



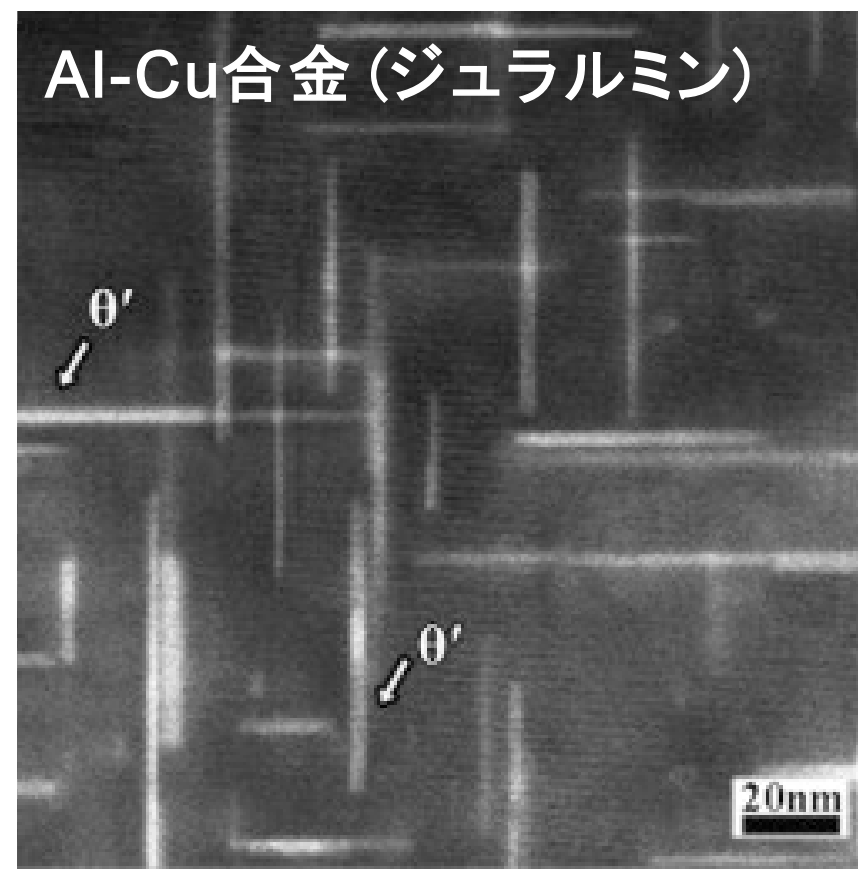
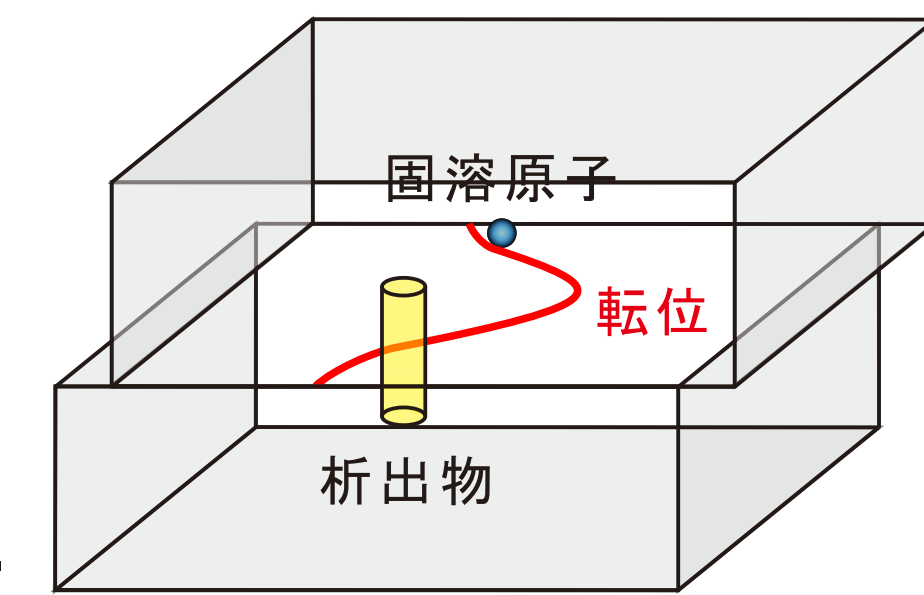
純金属
例) Fe, Mg, Al...
柔らかすぎて
実用化不可能



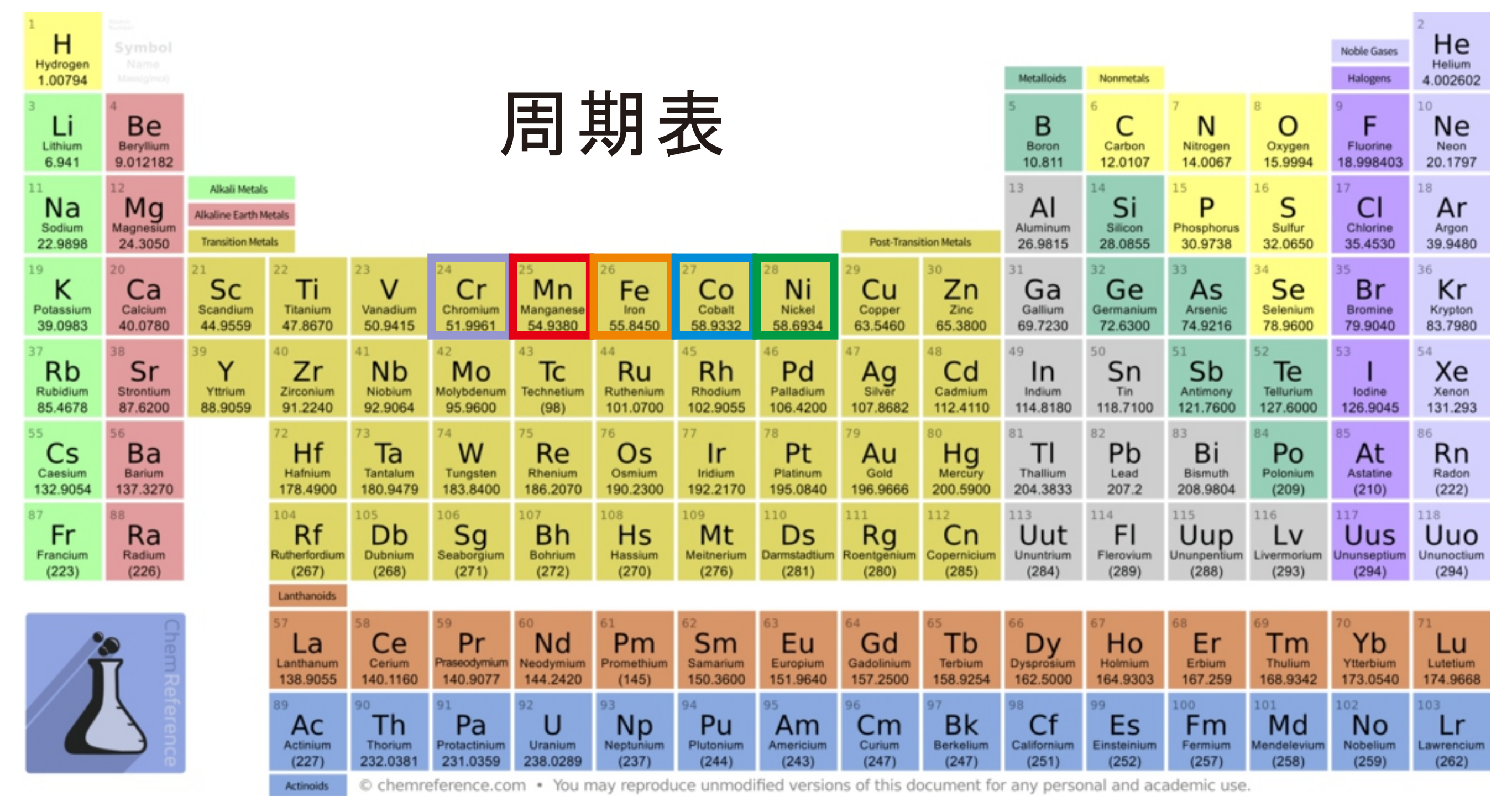
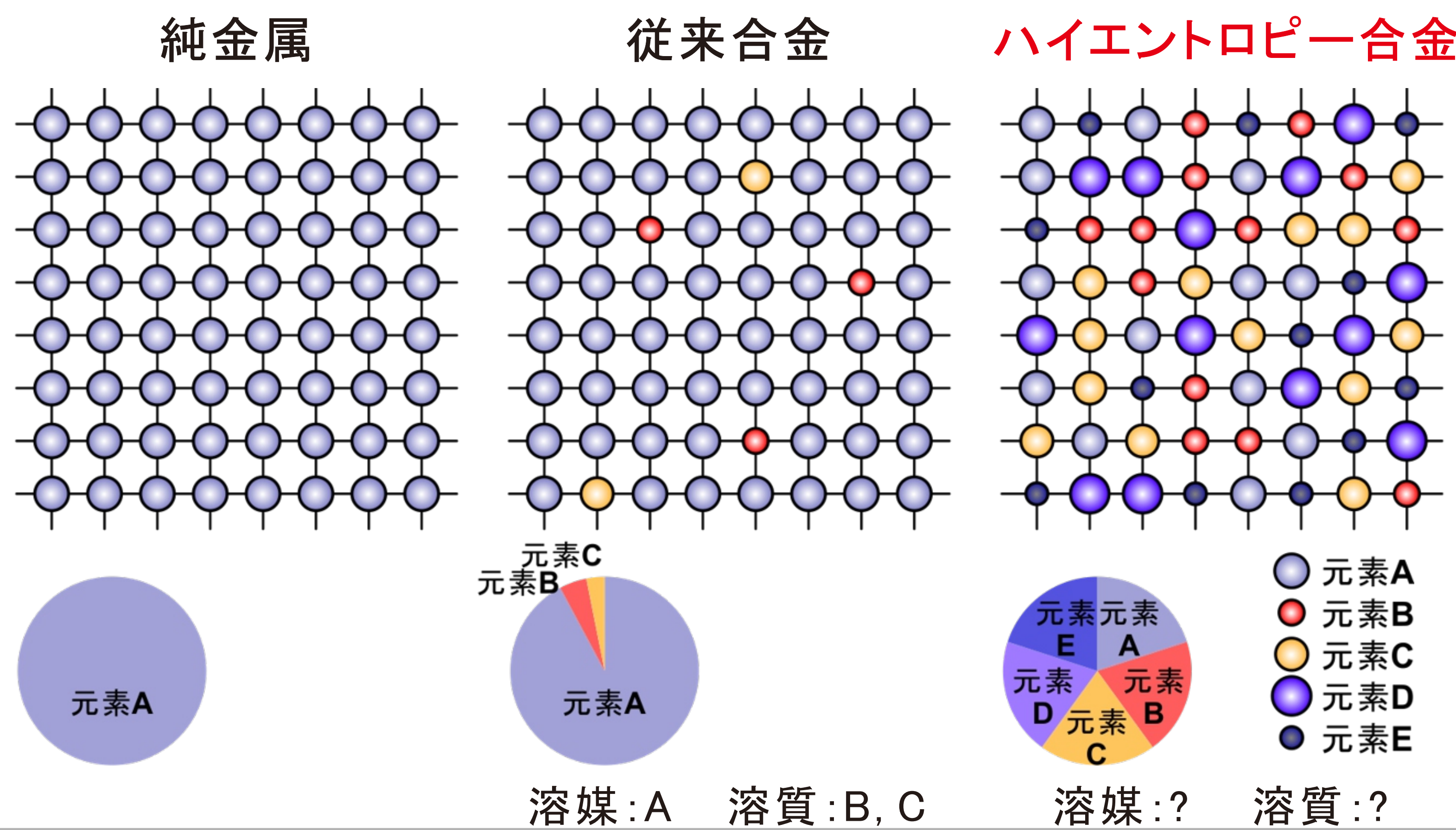
材料の強化原理:
転位が運動する際に結晶から受ける
抵抗を増大させること

組織制御

- ・ 固溶化
- ・ 析出
- ・ 結晶粒微細化
- ・ 結晶方位制御 etc..



ハイエントロピー合金とは



多種の元素がランダムに混ざった固体
溶媒と溶質を区別することができない

特徴1: 高い配置のエントロピー

配置のエントロピー ($S_{conf.} = -R \sum n_i \ln(n_i)$) のギブス自由エネルギーへの寄与 ($G = H - TS$) が大きい
ため化合物形成や相分離を生じにくい

元素数	エントロピー
2	0.69R
3	1.10R
4	1.39R
5	1.61R

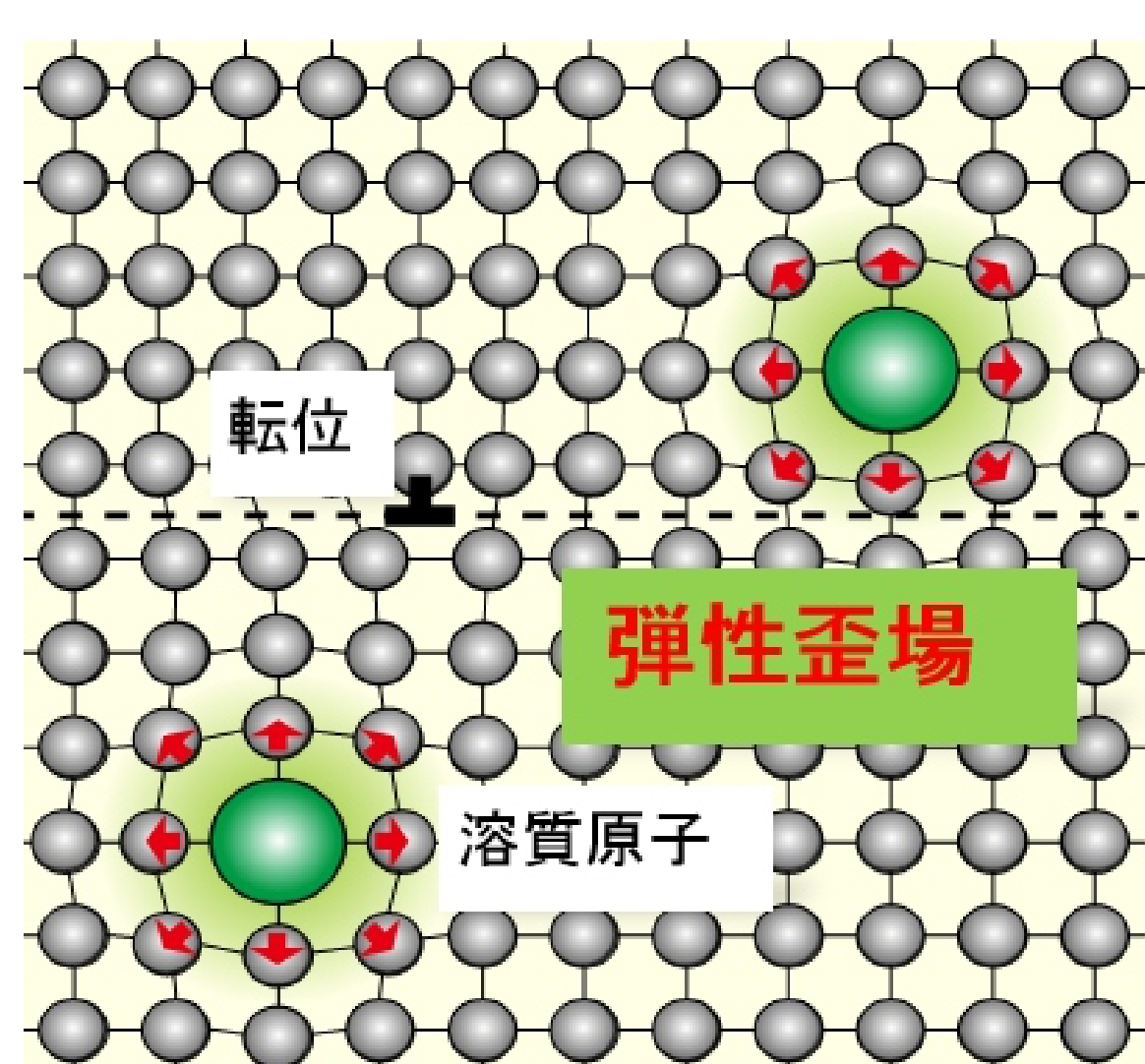


小 $S_{conf.}$ 大

ハイエントロピー合金の例

- ・ FCC構造: CrMnFeCoNi, CrFeCoNiAl, CrFeCoNiCu (3d遷移金属元素)
- ・ BCC構造: TiZrNbHfTa, VNbMoTaW, TiZrNbTaAl (4,5,6族元素)
- ・ HCP構造: YGdTbDyHo, FeCoRuRe, VCoRuRe (含希土類元素)

特徴2: 従来の固溶強化理論の限界



Fleisherモデル

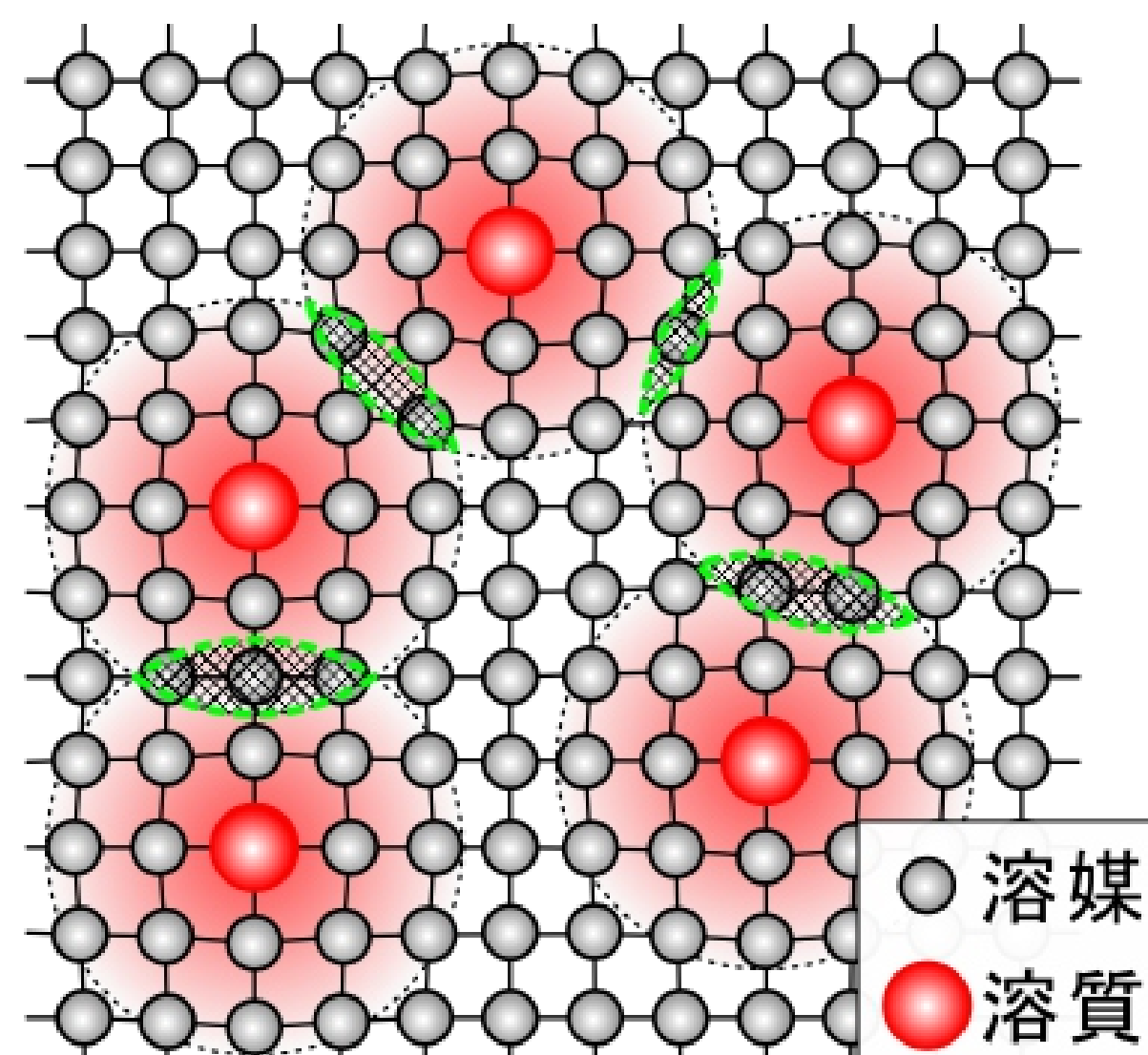
適用合金

超希薄合金
(固溶度 $c < 0.1 \text{at.}\%$)

モデルの特徴

- ・ 孤立溶質原子
- ・ 球対称歪

理論式 $\tau^F = \left(\frac{F_{max}}{2\Gamma} \right)^{3/2} \left(\frac{2\Gamma}{b^2} \right) c^{1/2}$ **$c^{1/2}$ 則**



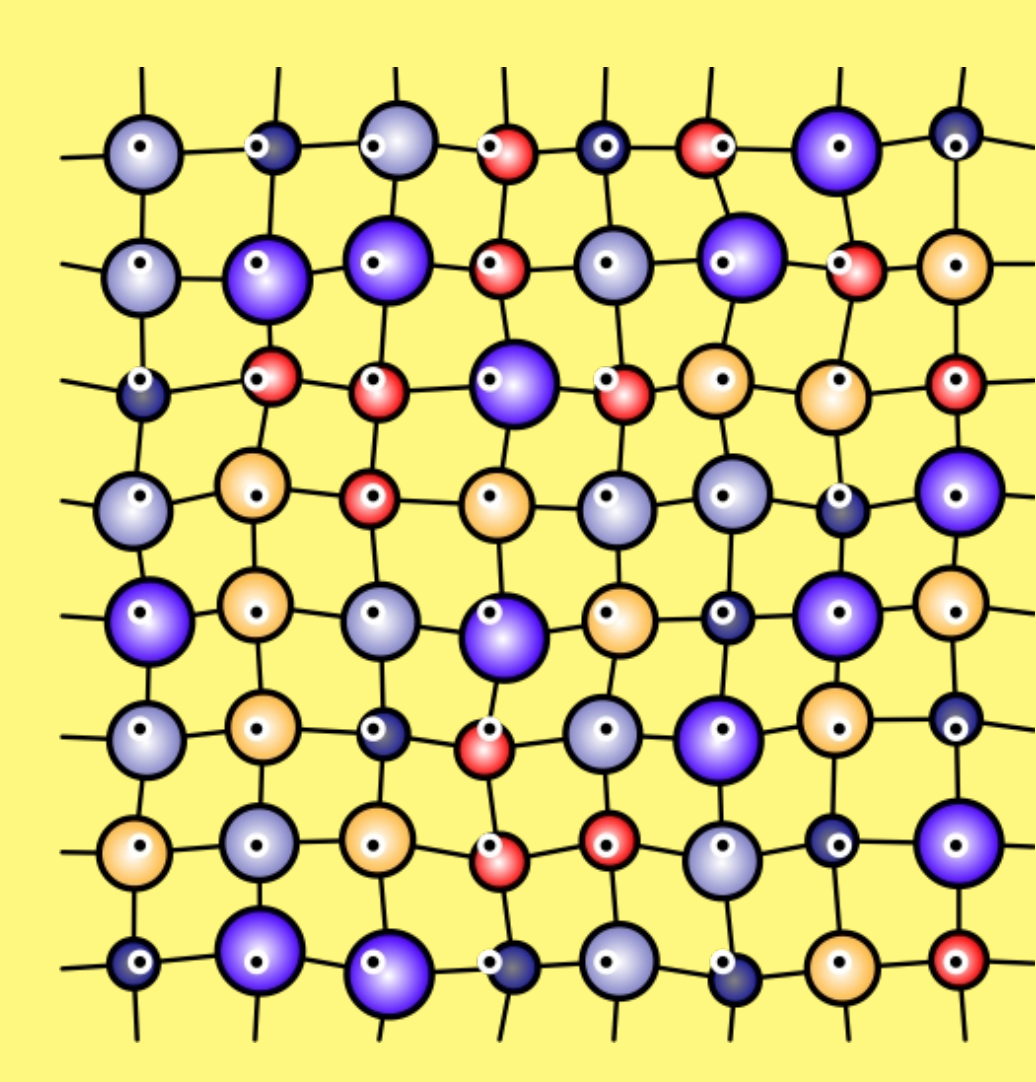
Labuschモデル

希薄合金

(固溶度 $c = 0.1 \sim \text{数at.}\%$)

- ・ 複数個の溶質原子集団による歪場の重なり

理論式 $\tau^L = \left(\frac{U_{max}^4}{w\Gamma b^9} \right)^{1/3} c^{2/3}$ **$c^{2/3}$ 則**



ハイエントロピー合金

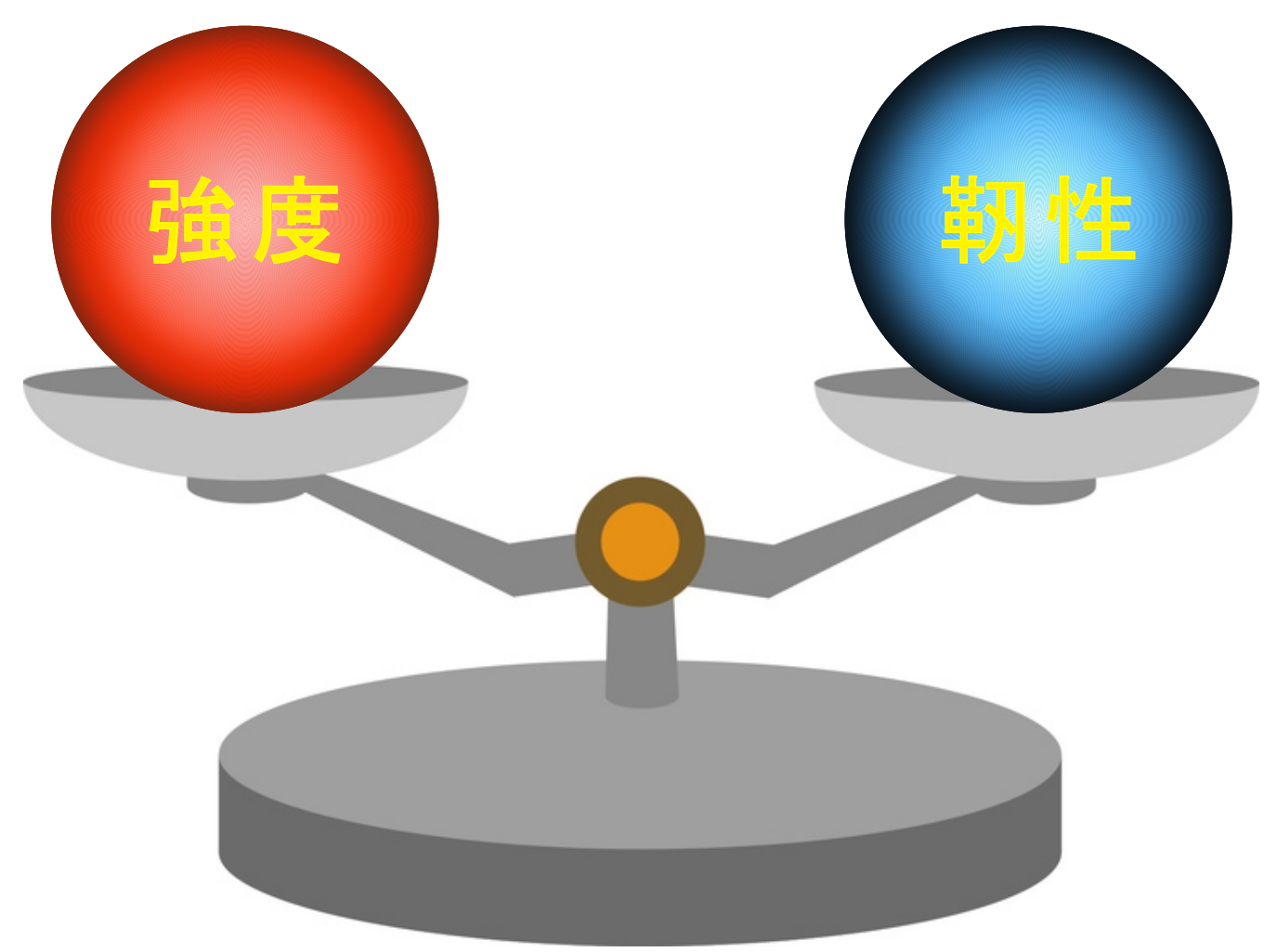
等原子量合金

$A_{20}B_{20}C_{20}D_{20}E_{20}$

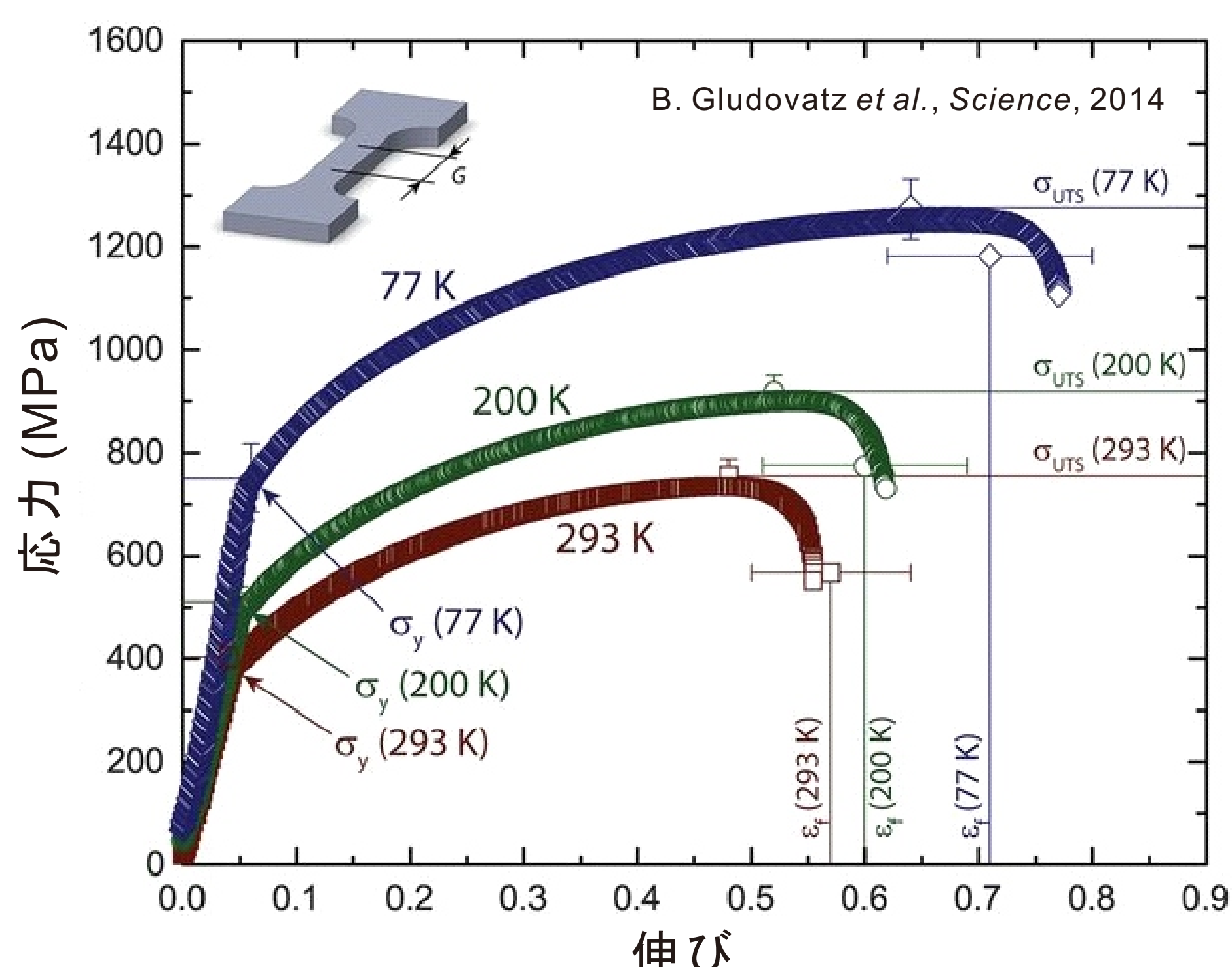
- ・ 溶質/溶媒の区別が不可
- ・ 複雑な歪場

従来理論では
立式不可能

特徴3: トレードオフの打破: 強くてしなやかな夢の材料



『強くてしなやかな材料』に求められる強度と韌性の両立は困難とされてきた

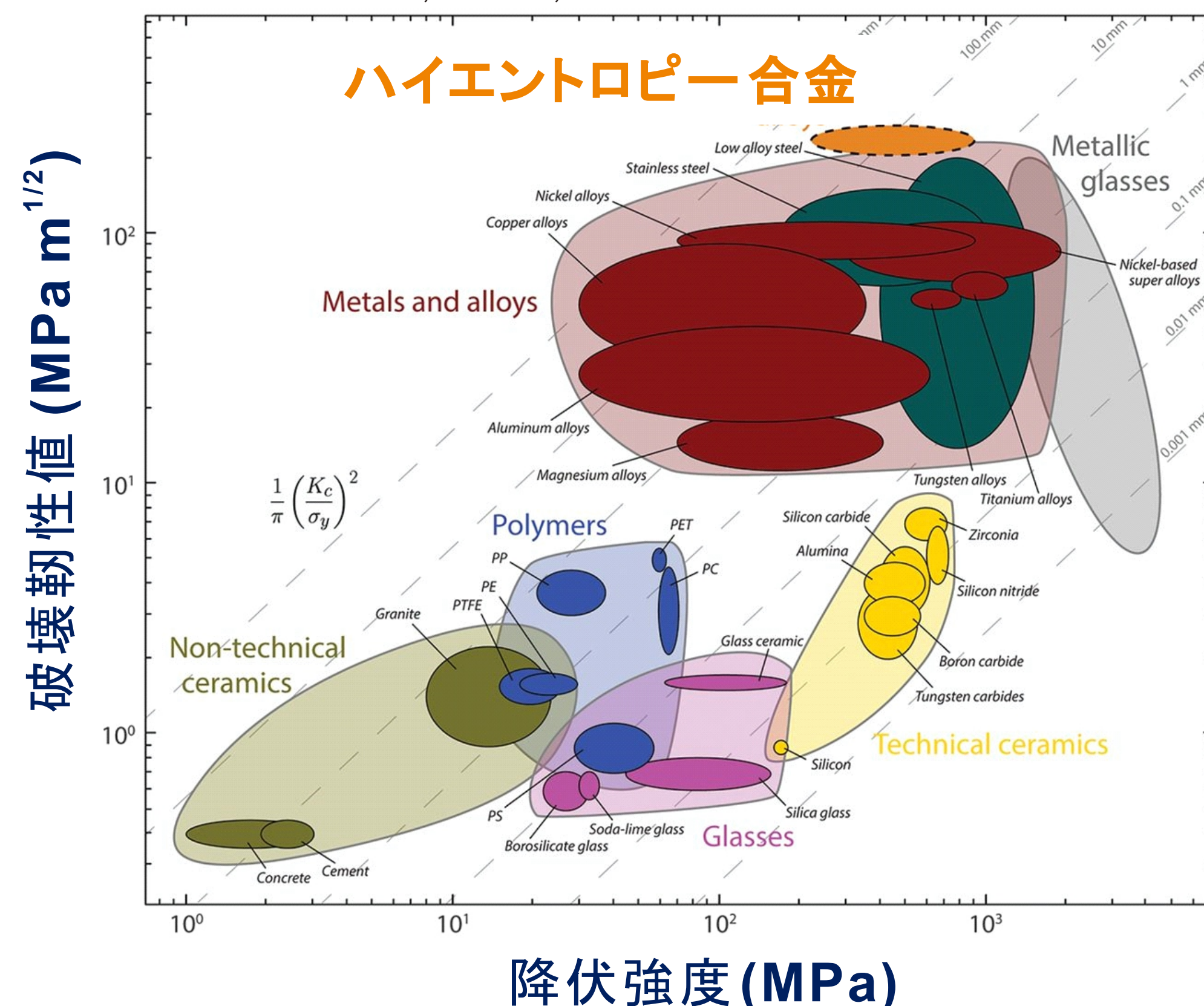


CrMnFeCoNiハイエントロピー合金の応力-歪曲線

極度に歪んだ結晶格子による材料強化

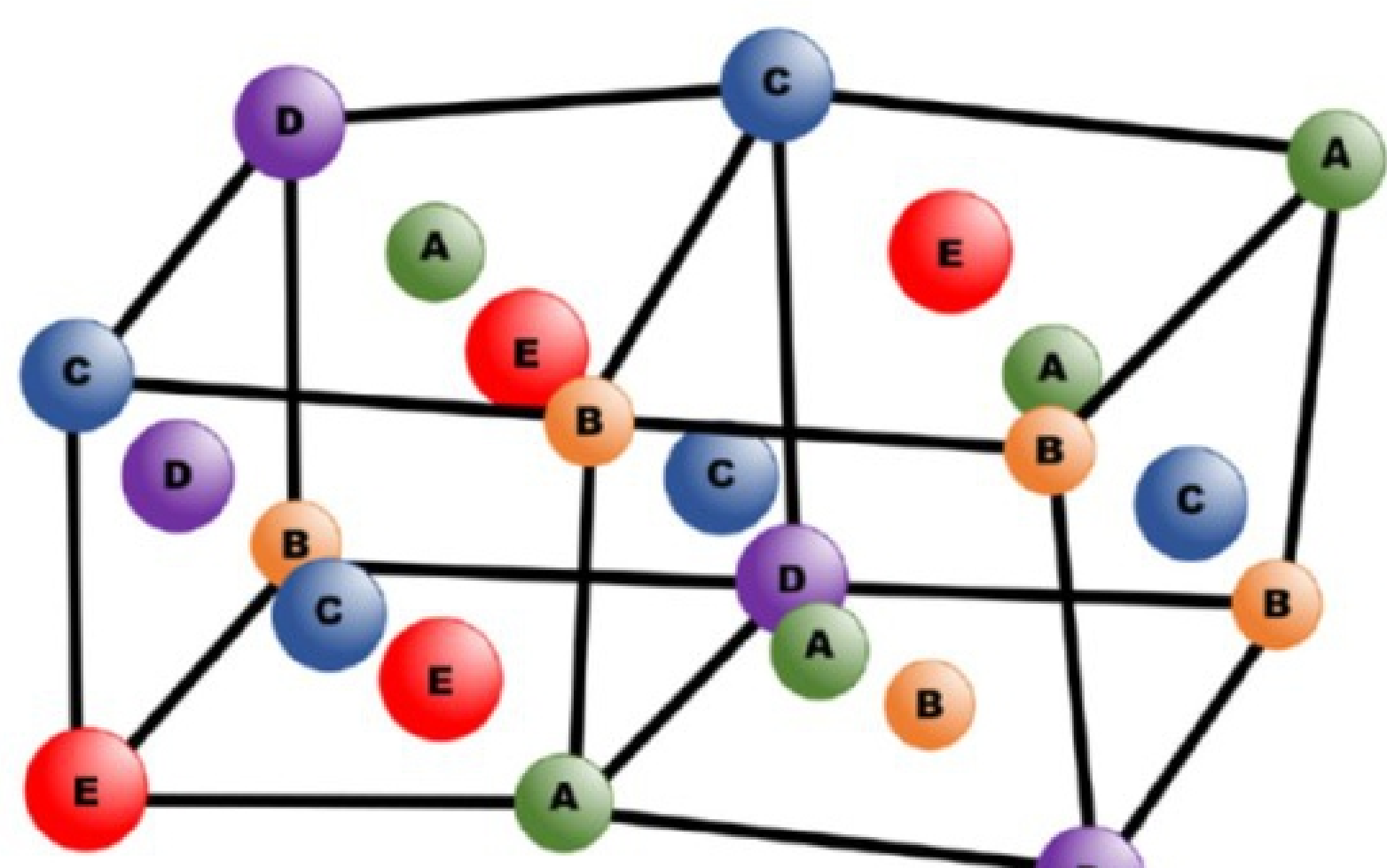
→ Ni基超合金なみの強度 & 金属系材料最高クラスの破壊韌性値を実現

B. Gludovatz et al., Science, 2014

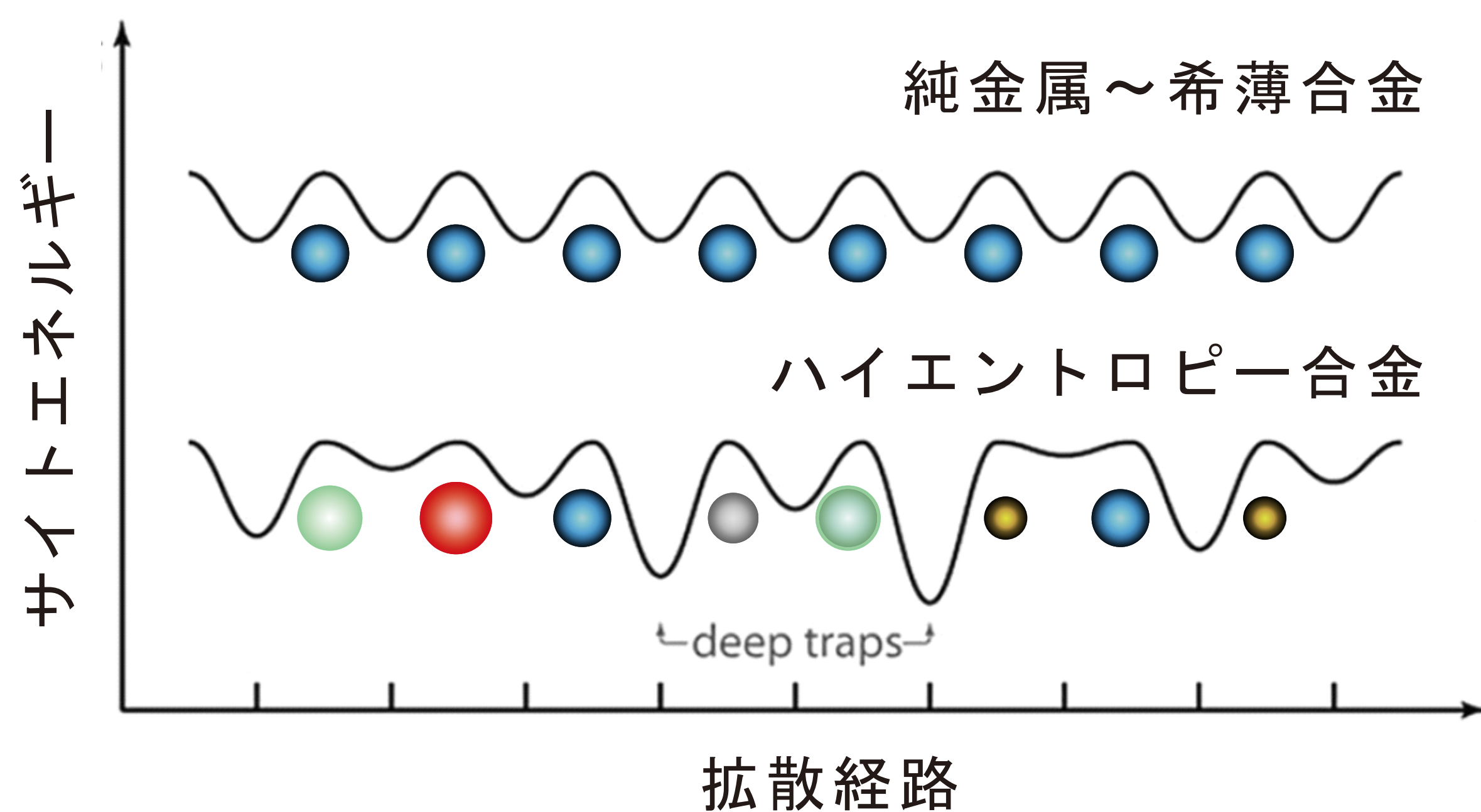


降伏強度 (MPa)

特徴4: トラップ効果による遅い原子拡散



FCCハイエントロピー合金の結晶構造



多様な原子サイズ、ランダムな配置によって生まれた局所的に深いエネルギーのサイトにトラップされる

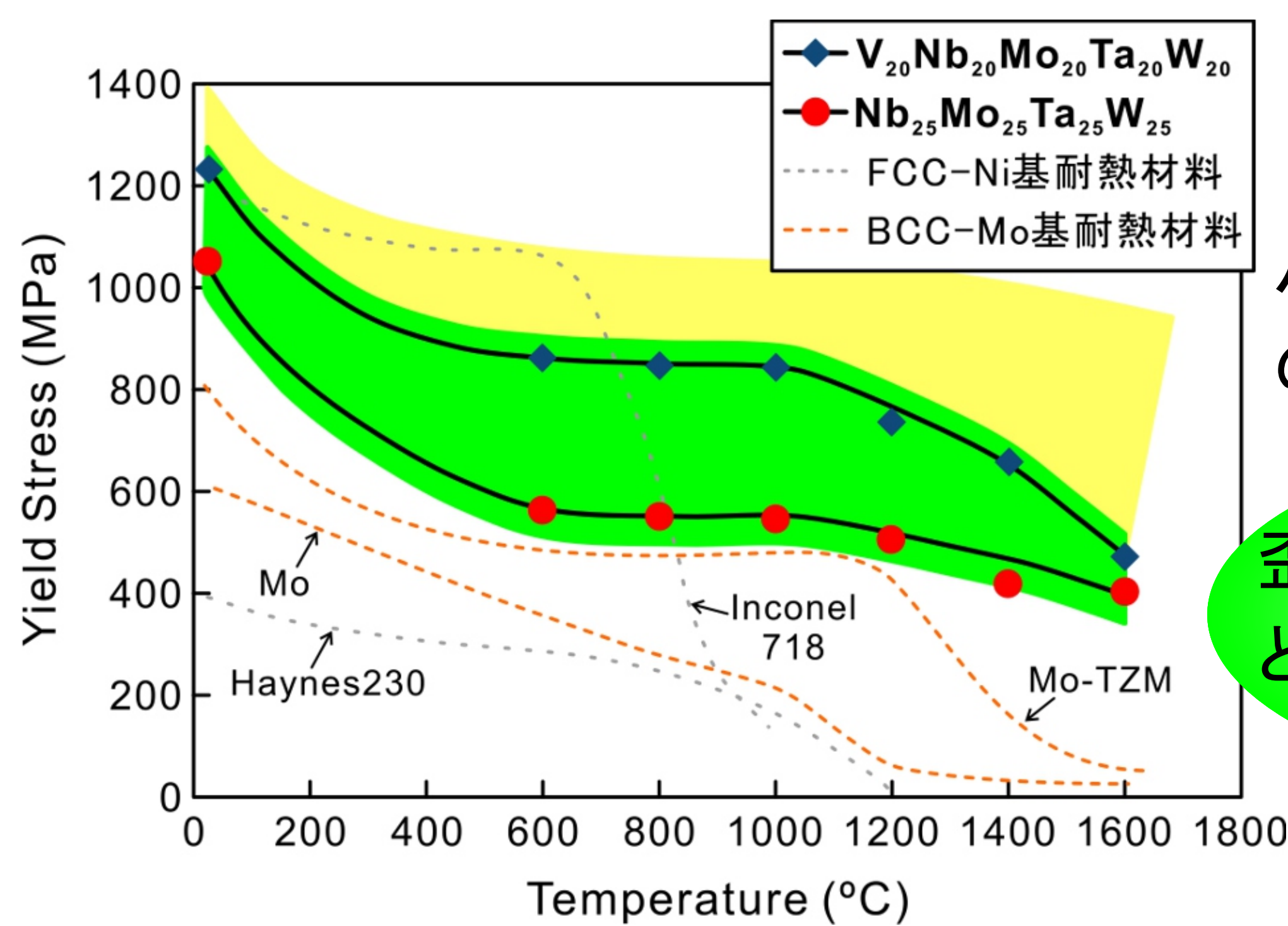
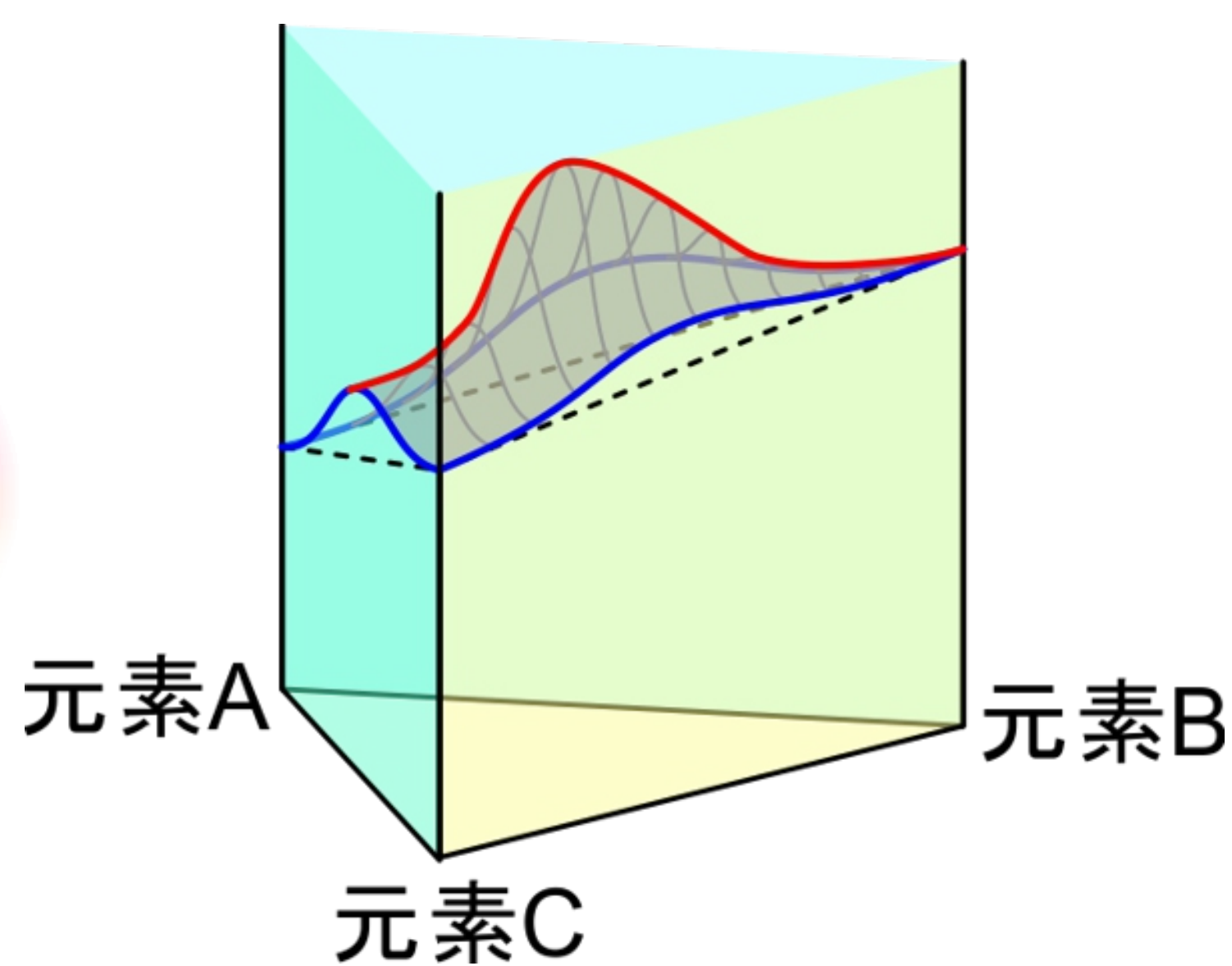
遅い原子拡散

材料の高温使用や長寿命化に有利

特徴5: 物性発現のカクテル効果

カクテル効果とは

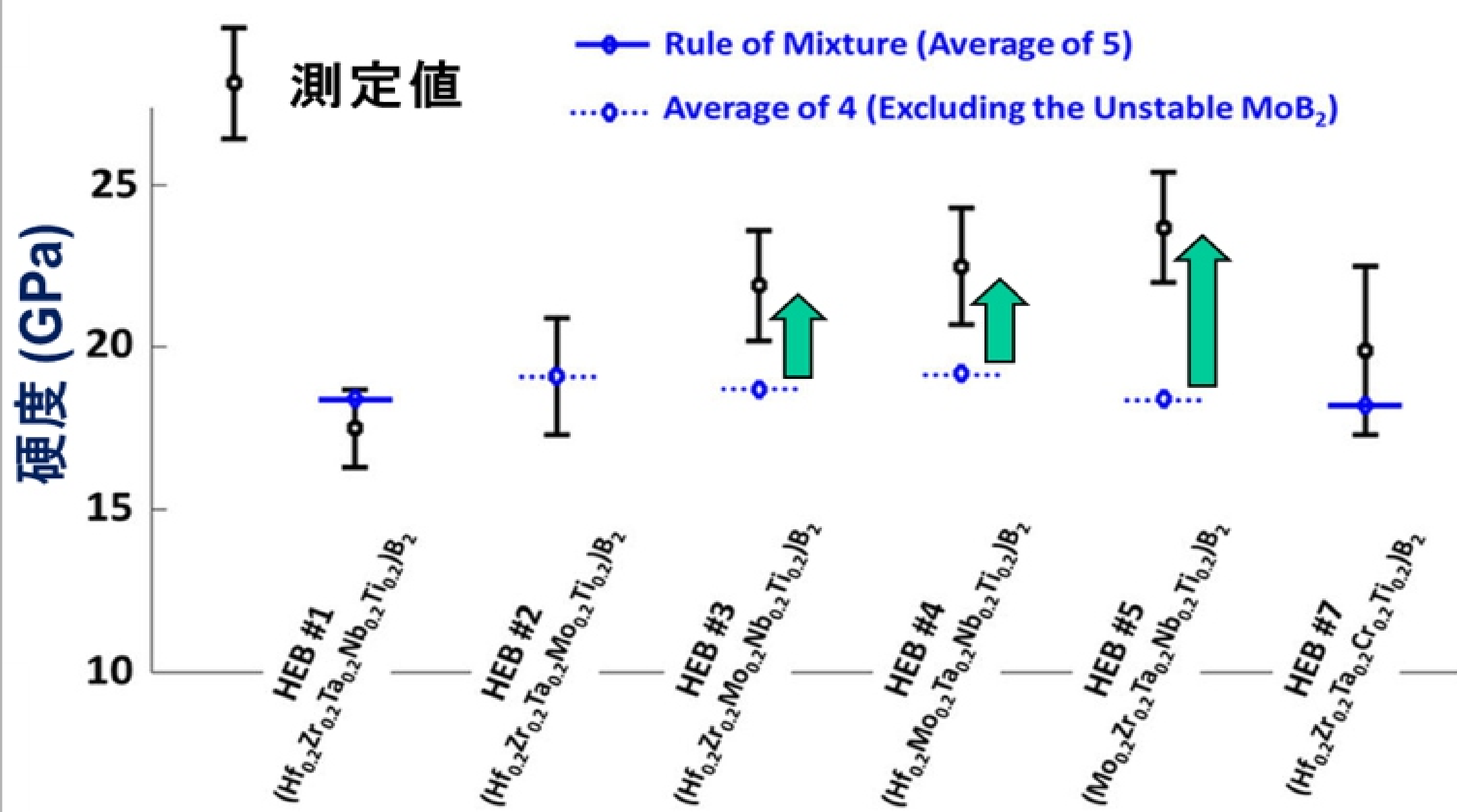
混合則による予測値を上回る物性の発現



ハイエントロピー-BCC合金の優れた高温強度

歪んだ結晶格子による強化とトラップ効果による耐熱化

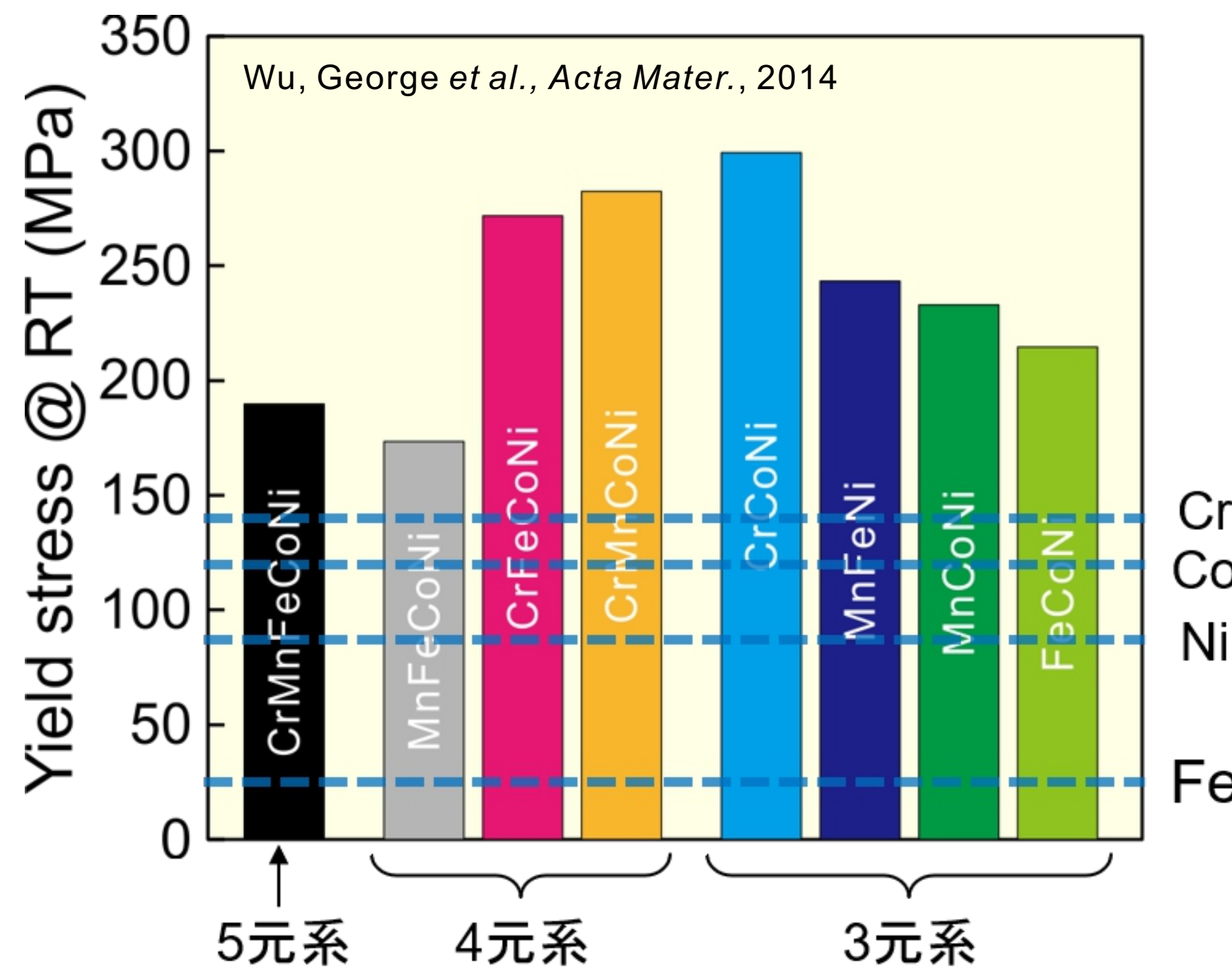
ハイエントロピー金属ボライドの硬度



J. Gild et al., Sci. Rep., 2016

単純混合則による推定値をはるかに上回る硬度

ハイエントロピー-FCC合金の降伏強度

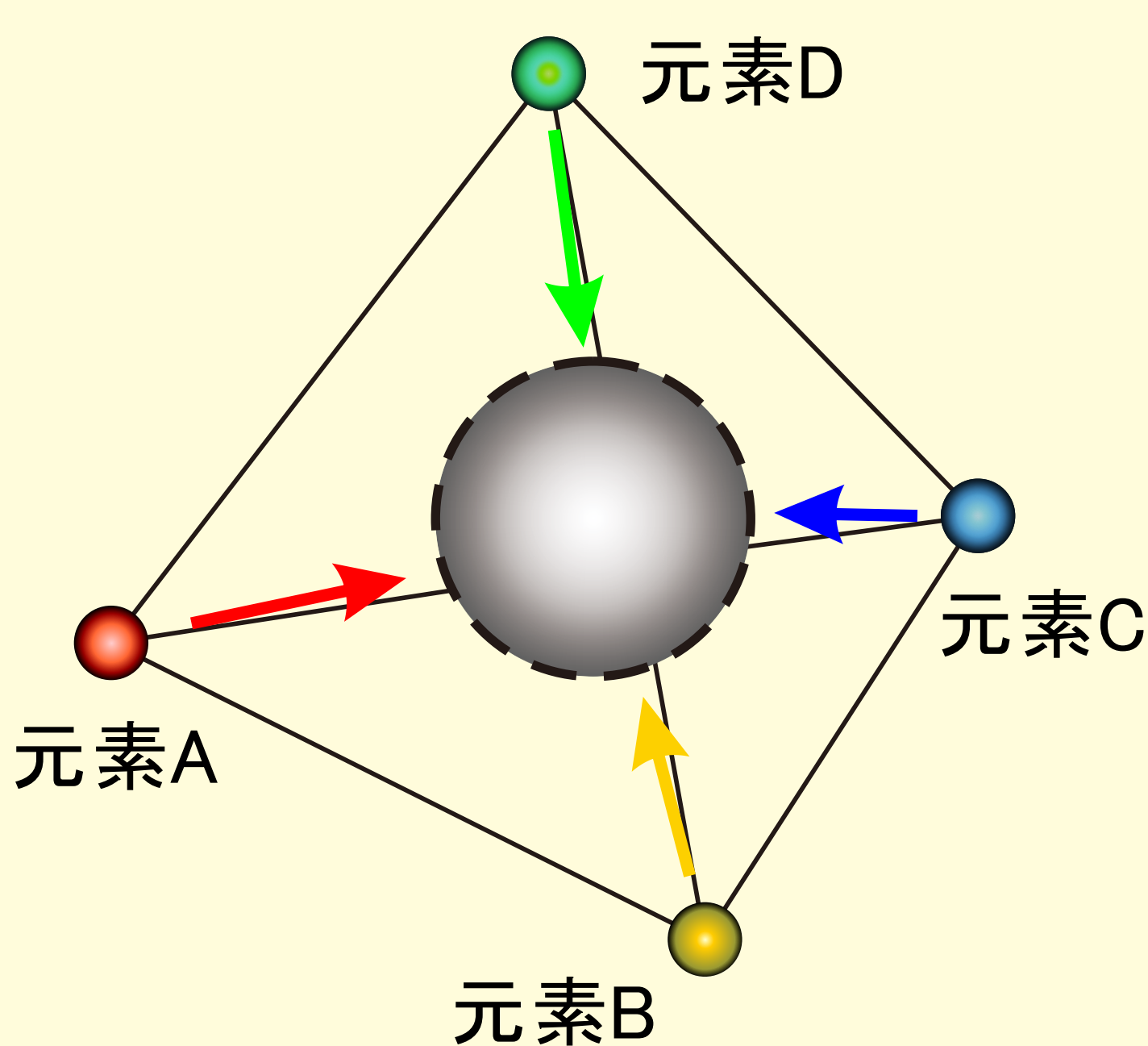


どの構成元素よりも優れた降伏強度を示す

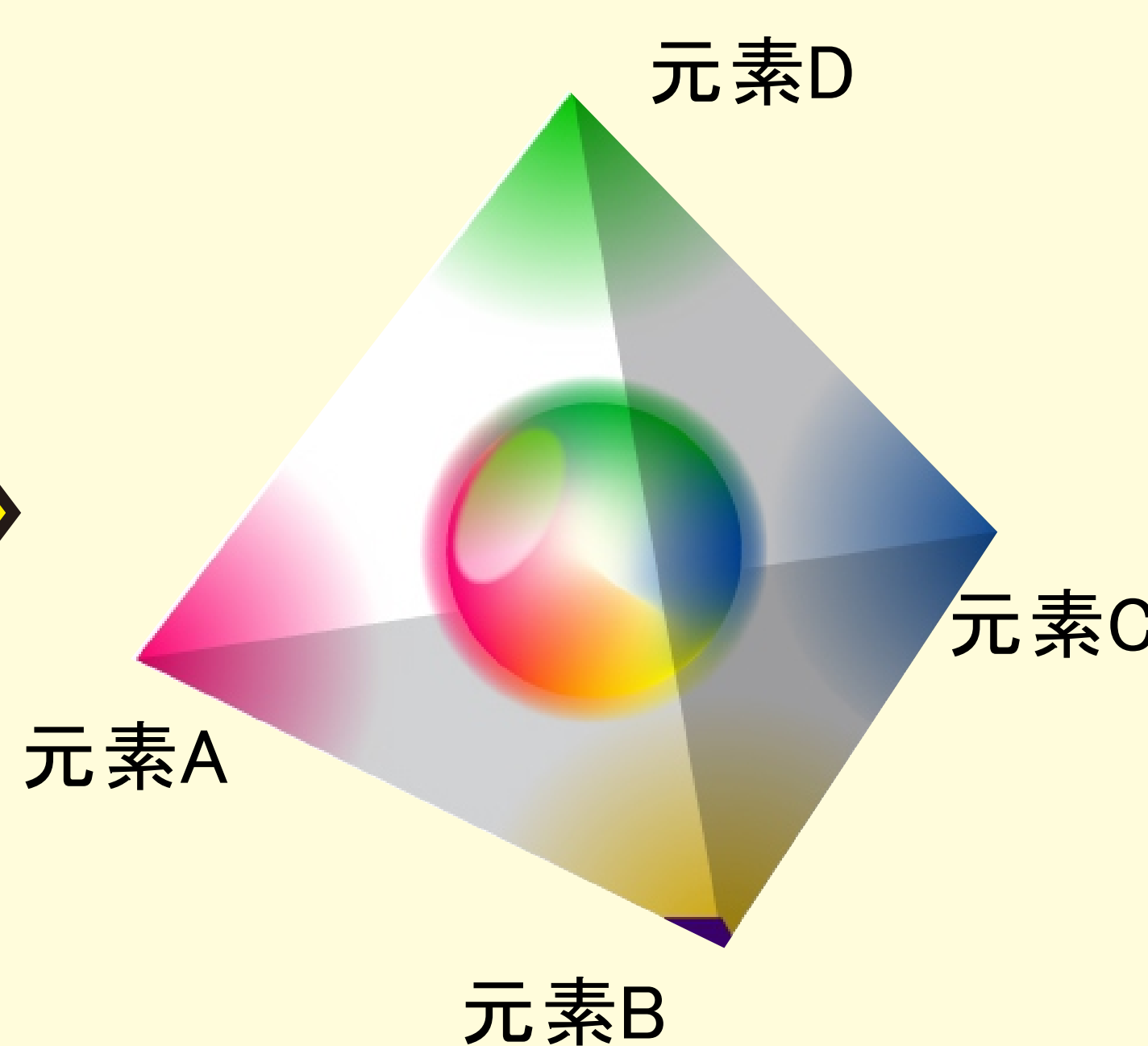
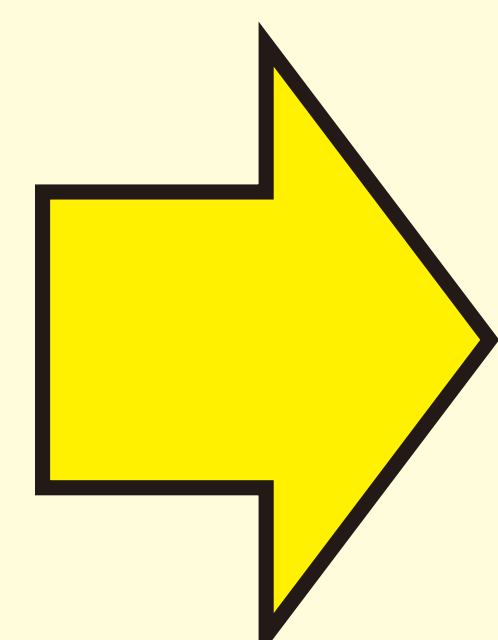
CoCrNi合金が最も優れている

『より多くの元素を混ぜればより強くなる』というわけではなく、組み合わせの最適化が必要

メタラジー(合金設計)のパラダイムシフト



従来のメタラジー
純元素をスタートとする『足し合わせ』の概念



新しいメタラジー
多元素混合状態をスタートとする『差し引き』の概念