

新しい多元系材料ハイエントロピー合金の現状と未来

Current status and prospects of new multi-component material: high-entropy alloys

名大工¹ ○小山 敏幸¹, (M1)鈴木 竣¹, 塚田 祐貴¹

Nagoya Univ.¹, °Toshiyuki Koyama¹, (M1)Shun Suzuki¹, Yuhki Tsukada

E-mail: koyama@material.nagoya-u.ac.jp

【背景】ハイエントロピー合金(HEA)はその優れた単相特性から、固溶体の材料学が注目されがちであるが、HEA 固溶体の合金学的意義は、優れた特性を有する母相の発見にある。Fe 基や Ni 基合金という名称で記述するならば、新カテゴリー「HEA 基合金」の誕生であろう。母相自体の優れた特性に加え、HEA は種類も豊富であるため、HEA 基の合金群の開発自由度は広大であり(多種類の母相が使える)、この分野は金属材料学の新大陸の発見に匹敵する。さて新大陸の探検には地図作成が欠かせない。状態図は合金の地図であり合金開発の羅針盤的役割を担う。近年の CALPHAD(Calculation of Phase Diagrams)法の発展により、多成分系状態図の計算は日常となっているが、実は HEA は CALPHAD 法が最も不得意とする対象である。CALPHAD 法では、ギブスエネルギーを、純物質→二成分系→三成分系のように段階的に近似するので、状態図中央付近に位置する HEA の計算精度が最も低下するからである。また高濃度の多成分系では、もともと状態図の中央付近における相平衡の実験データが少ないことも要因である。したがって HEA 合金研究における状態図的課題は、多成分系状態図全組成域における、高精度・高効率な状態図アセスメントの実現に他ならない。

【解析手法】以上の課題解決へのアプローチは2つの方向に大別される。1つは、電子論に基づく相安定性解析、分子シミュレーションを活用した局所クラスターの安定性解析、および会合溶液モデルや擬化学モデルに基づくギブスエネルギー関数の精緻化を総合的に連携あせる方法である。もう1つは、組織形成シミュレーションを活用した逆問題解析から、HEA のギブスエネルギーを推定するアプローチで、これまで状態図の熱力学的パラメータのアセスメントに活用されて来なかった相変態の時間発展情報を活用する手法である(HEA の相平衡実験は、その回数が莫大な数にのぼるので、間接的な実験情報の効率的活用は不可欠と考える次第である)。本講演では、特にフェーズフィールド(PF)法を用いて、組織情報からギブスエネルギーを推定する逆問題手法について説明する(本手法は、基本的に、マテリアルズインフォマティクスにおける「データ同化」の PF 法分野への応用に相当する)。データ同化の手法には、逐次同化手法である各種のフィルター理論と、非逐次同化手法であるアジョイント法(4次元変分法ともよばれる)があり、いずれの方法も PF 法に適用できるが、特にアジョイント法との相性がよい。講演では PF 法とアジョイント法の関係、および当該手法を活用した解析例についてもふれる。

謝辞: 本研究の遂行には、新学術領域研究 ハイエントロピー合金(課題番号 18H05454)、および JST SIP(統合型材料開発システムによるマテリアル革命)のご支援をいただきました。