

領域略称名：ハイエントロピー合金
領域番号：6006

令和2年度科学研究費助成事業
「新学術領域研究（研究領域提案型）」
に係る中間評価報告書

「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」

領域設定期間

平成30年度～令和4年度

令和2年6月

領域代表者 京都大学・工学研究科・教授・乾 晴行

目 次

研究組織

1	総括班・総括班以外の計画研究	1
2	公募研究	2

研究領域全体に係る事項

3	研究領域の目的及び概要	5
4	審査結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況	7
5	研究の進展状況及び主な成果	8
6	研究発表の状況	13
7	研究組織の連携体制	18
8	若手研究者の育成に関する取組状況	19
9	研究費の使用状況・計画	20
10	今後の研究領域の推進方策	21
11	総括班評価者による評価	23

研究組織

(令和2年6月末現在。ただし終了した研究課題は終了時現在、補助事業廃止の研究課題は廃止時現在。)

1 総括班・総括班以外の計画研究

研究項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
X00 総	18H05450 ハイエントロピー合金新学術領域研究の連携的企画運営	平成30年度 ～ 令和4年度	乾 晴行	京都大学・大学院工学研究科・教授	6
A01 ア 計	18H05451 ハイエントロピー合金の特異な力学特性の支配因子解明	平成30年度 ～ 令和4年度	乾 晴行	京都大学・大学院工学研究科・教授	4
A01 イ 計	18H05452 ハイエントロピー効果に基づく新材料創製と新機能創出	平成30年度 ～ 令和4年度	加藤 秀実	東北大学・金属材料研究所・教授	5
A02 ウ 計	18H05453 計算材料科学によるハイエントロピー合金の力学特性の解明と制御	平成30年度 ～ 令和4年度	尾方 成信	大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授	6
A02 エ 計	18H05454 計算熱力学と計算組織学の融合によるハイエントロピー合金設計の加速	平成30年度 ～ 令和4年度	小山 敏幸	名古屋大学・大学院工学研究科・教授	5
A03 オ 計	18H05455 先端プロセスによるハイエントロピー合金の作製とナノ・マイクロ組織制御	平成30年度 ～ 令和4年度	辻 伸泰	京都大学・大学院工学研究科・教授	4
A03 カ 計	18H05456 ハイエントロピー合金に内在する元素間相互作用と相安定性原理の実験的解明	平成30年度 ～ 令和4年度	古原 忠	東北大学・金属材料研究所・教授	4
計		平成30年度 ～ 令和4年度			
計		平成30年度 ～ 令和4年度			
計		平成30年度 ～ 令和4年度			
総括班・総括班以外の計画研究 計 7 件					

[1] 総：総括班、計：総括班以外の計画研究、公：公募研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

2 公募研究

研究項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
A01 公	19H05161 低放射下高濃度固溶体合金の探索と創製	令和元年度 ～ 令和2年度	橋本 直幸	北海道大学・大学院工学院・教授	1
A01 公	19H05162 液中プラズマプロセッシングを用いたバルクから合成するハイエントロピー合金ナノ粒子	令和元年度 ～ 令和2年度	米澤 徹	北海道大学・大学院工学院・教授	1
A01 公	19H05163 等比多成分酸化ガラスにおける多重協奏的配位数変化による高クラック耐性の獲得	令和元年度 ～ 令和2年度	増野 敦信	弘前大学・理工学研究科・准教授	1
A01 公	19H05166 高エントロピー系合金に内在する局所構造普遍性・特異性のパルス通電によるあぶり出し	令和元年度 ～ 令和2年度	谷本 久典	筑波大学・大学院数理物質科学研究科・准教授	1
A01 公	19H05167 ハイエントロピー型合金のマルテンサイト変態特性解明と新規高温形状記憶合金の開発	令和元年度 ～ 令和2年度	金 熙榮	筑波大学・大学院数理物質科学研究科・教授	1
A01 公	19H05170 ハイエントロピー固溶ナノ合金の創製と新機能探索	令和元年度 ～ 令和2年度	北川 宏	京都大学・大学院理学研究科・教授	1
A01 公	19H05172 新生体用ハイエントロピー合金の開発と細胞との相互作用	令和元年度 ～ 令和2年度	永瀬 丈嗣	大阪大学・超高压電子顕微鏡センター・准教授	1
A01 公	19H05173 ハイエントロピー合金における局所的構造物性の研究	令和元年度 ～ 令和2年度	花咲 徳亮	大阪大学大学院理学研究科・教授	1
A01 公	19H05174 単結晶弾性定数から見るハイエントロピー合金の力学特性と構造安定性	令和元年度 ～ 令和2年度	田中 克志	神戸大学・大学院工学研究科・教授	1
A01 公	19H05175 化学平衡をチューニング可能なハイエントロピー水素吸蔵合金	令和元年度 ～ 令和2年度	秋葉 悦男	九州大学・水素エネルギー国際研究センター・特任教授	1
A02 公	19H05169 データ科学的構造モデリングを基盤とする第一原理熱力学アセスメント法の開発	令和元年度 ～ 令和2年度	本郷 研太	北陸先端科学技術大学院大学・准教授	1
A02 公	19H05177 第一原理局所応力計算によるハイエントロピー結晶内部の原子レベル応力	令和元年度 ～ 令和2年度	椎原 良典	豊田工業大学・工学(系)研究科・准教授	1

	状態の解明				
A03 公	19H05164 中性子回折によるハイエントロピー合金の局所構造解析	令和元年度 ～ 令和2年度	池田 陽一	東北大学・金属材料研究所・助教	1
A03 公	19H05165 多元拡散対法を利用した新規ハイエントロピー材料の探索とハイスループット物性測定	令和元年度 ～ 令和2年度	池田 輝之	茨城大学・大学院理工学研究科・教授	1
A03 公	19H05168 スパッタおよび加工熱処理によって作製したハイエントロピー合金の電気特性	令和元年度 ～ 令和2年度	宮嶋 陽司	金沢大学・理工研究域機械工学系・准教授	1
A03 公	19H05171 電子状態計算に基づくハイエントロピー合金電子物性のカクテル効果シミュレーション	令和元年度 ～ 令和2年度	中村 康一	京都先端科学大学・工学部・教授	1
A03 公	19H05176 Metallurgical Alchemy by Ultra-Severe Plastic Deformation	令和元年度 ～ 令和2年度	エダラティ カベ	九州大学・カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所, 助教	1
A03 公	19H05178 ハイエントロピー合金の結晶粒微細化による高耐食性化	令和元年度 ～ 令和2年度	宮本 博之	同志社大学・理工学部・教授	1
A03 公	19H05180 ナノ・マイクロ組織ハイエントロピー合金の優れた高温特性を制御するメカニズム解明	令和元年度 ～ 令和2年度	ハルヨ ステファヌス	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・原子力科学研究部門 J-PARC センター・研究主幹	1
公募研究 計 19 件					

[1] 総：総括班、計：総括班以外の計画研究、公：公募研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

研究領域全体に係る事項

3 研究領域の目的及び概要

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時の領域計画書を基に、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、どのような点が「革新的・創造的な学術研究の発展が期待される研究領域」であるか、研究の学術的背景や領域設定期間終了後に期待される成果等を明確にすること。

補助金交付額（各年度の研究領域全体の直接経費）

年度	H30年度	H31/R1年度	R2年度	R3年度	R4年度
交付額	234,600,000円	250,100,000円	251,500,000円	248,000,000円	249,200,000円
備考	追加配分含む	公募研究含む	公募研究含む	予定額	予定額

(1) 領域の研究目的

未開の多成分系状態図の中央近傍の化学組成を持つハイエントロピー合金を研究対象に、それらが示す新奇で特異な材料物性を(1)物性解析, (2)材料設計, (3)材料創製という3つの研究項目のもと、実験と理論計算にまたがるさまざまな分野背景を有する優秀な研究者が世界最先端の研究手法・研究設備を駆使し連携して、オールジャパン体制でハイエントロピー合金に特有のハイエントロピー効果の本質を明らかにし、多様な構成原子間の非線形相互作用(カクテル効果)に潜む新たな材料科学の学術領域を打ち立てることである。

(2) 領域の全体構想

本領域で上記の研究目的を達成するための全体構想は以下のとおりである。

- ① 材料科学, 機械工学, 物理, 化学分野の物性解析, ナノ計測, 理論計算, 材料プロセス等の知的・技術的資源を結集し, 世界最先端の実験・計算手法を用いた系統的かつ組織連携的な異分野融合研究を推進する。
- ② 世界最先端の大型計算・実験施設の活用ならびに研究設備共用化, 共通試料配布, 若手人材交流・育成を通して, 異分野連携研究を推進する。

(3) 研究の学術的背景・応募領域の着想に至った経緯

従来の合金(図 3.1(a))は, ある1種類の特定期間を終了したものであり, Fe 基合金, Ni 基合金などと呼ばれる。これに対して近年, ハイエントロピー合金(図 3.1(b))と呼ばれる新しいコンセプトの高濃度多元固溶体合金系が注目されている。ハイエントロピー合金は, 構成元素の種類と濃度の大きさに起因した大きな配置のエントロピーにより安定化された不規則固溶体と考えられ, 多様な構成原子間の非線形相互作用に起因する(単純混合則では表現できない)物性発現に関するカクテル効果などの所謂「ハイエントロピー効果」を持つと言われている。ある元素の組み合わせにより得られるハイエントロピー合金には, 従来合金には見られない特異で優れた力学特性を示すものが多く, 低温で非常に強度が高く, 同時に靱性も高い FCC 型 CrMnFeCoNi 合金(図 3.2)や, 高温になっても強度が殆ど減少しない BCC 型 VNbMoTaW 合金などがよく知られている。これらはハイエントロピー効果の一つ「歪んだ結晶格子」に起因する特性と考えられているが, 概念的・定性的なものが多く, 発見された特異な力学特性の基礎的メカニズムは殆ど解明されていない。しかし, 優れた力学特性は, これまで探索が行なわれなかった未開の多元系状態図の中央近傍領域の化学組成(図 3.3)の合金で見出されたものであり, 状態図における角隅の化学組成近傍で探索されたある1種類の特定期間を終了した従来合金とは根本的に異なり, 探索を続けることで更に優れた力学特性を示す未知の合金系が数多く

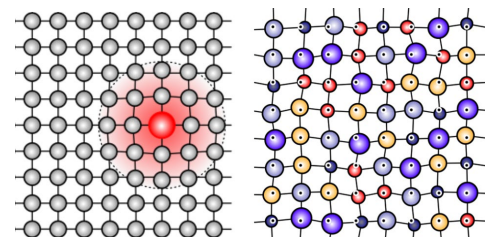


図 3.1. (a)通常の固溶体合金と(b)ハイエントロピー合金の模式図。

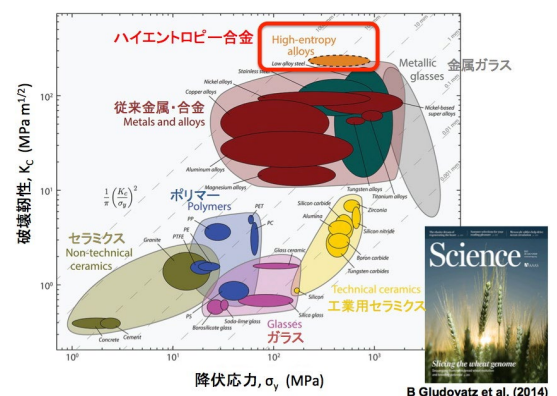


図 3.2. 構造材料における強度(降伏応力)と破壊靱性の関係 (Gludovatz et al, *Science* 345 (2014) 153). 強度と靱性を兼ね備えた, 従来合金を凌駕するハイエントロピー合金がいくつか発見されている。

見つかる可能性は非常に高い。カクテル効果を考えれば、複数の物理の非線形相関により、力学特性だけでなく熱電特性や磁性など様々な機能特性でも特異な挙動を示す合金が見つかる可能性も高い。本新学術領域では、関連する幅広い分野の一流研究者を糾合し、既知の化学組成のハイエントロピー合金から着手して特異な力学特性のメカニズムを解明しつつ、一方で獲得される相安定性や組織形成原理に基づいて新規な化学組成のハイエントロピー合金を探索することによって、既存の従来合金では示しえない優れた力学特性・機能特性を持つ新材料が開発できる可能性が高いと考え、研究計画を着想するに至った。

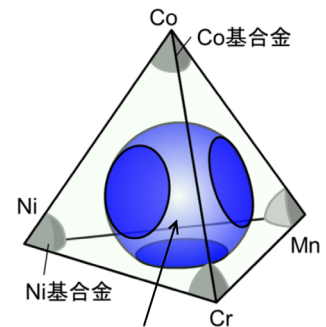
(4) 本領域の意義: 革新的・創造的な学術研究の発展が期待される研究領域

本領域は、ハイエントロピー効果の概念の下、多元系状態図の中央近傍の化学組成空間(図 3.3)で合金探索を行い、特異な力学・機能特性の出現メカニズムを探求するとともに、新規材料の特性制御・設計を行うものであり、材料科学・工学と機械工学、材料化学の融合を計算材料科学・計算材料力学を媒介として行いつつ、新しい学術分野としてのマテリアルズ・インフォマティクスへの展開を企図しており、革新的・創造的な学術研究への発展が期待できる。その一例を合金の強度を記述する学術理論の発展について以下に説明する。前述のように、従来合金では溶質原子と溶媒原子の原子サイズの違いに起因する球対称歪場(図 3.1(a))と転位との相互作用力に基づいて強度の増大(固溶強化)が記述されているが、ハイエントロピー合金では多種の構成元素が高濃度に存在するため、溶媒・溶質原子の区別もできず、従来合金の球対称歪場を適用する物理的な意味すら失われ、その強度を説明できる理論体系は全く存在しない。このような中、本領域研究からハイエントロピー合金の強度記述のために提案された構成原子の平均原子変位による力学強度のスケージング理論(図 3.4)が世界的な注目を集めている。このスケージング理論がいかなる合金においても成り立てば、あらゆる固溶体金属に適用可能な世界初の普遍的な理論体系が構築されることになり、合金の強度に対する理解が飛躍的に発展することとなる。また、状態図の角隅近傍の組成を有する従来合金から大きく外れた状態図の中央近傍のこれまで未開の化学組成空間で全く新規な合金探索がなされるため、従来合金とは全く異なる優れた特異な力学・機能特性を示す材料を新たに発見する可能性が高く、材料特性の飛躍的向上と革新的材料開発が見込まれる。本領域が対象とする合金探索は、マテリアルズ・インフォマティクスを利用した材料探索が効果を発する分野であり、計算機を利用した新規材料探索という先端的課題においても重要な成功例となることができる。

(5) 領域設定期間終了後に期待される成果等

本研究領域が最終的に目指すものは、特異で優れた材料特性を示すハイエントロピー合金の探索、特性発現メカニズム解明と制御である。例えば、力学特性の場合、材料の「塑性変形と強度」に関する理解と制御が獲得できれば、高い強度だけでなく、大きな延性や靱性など、複数の優れた機能を有する次世代の構造材料を実現することが可能となる。このように材料開発が行われるならば、以下にみるように、関連学術分野は飛躍的に発展し、材料の実用化とともに環境・エネルギー問題解決への寄与などを通して、持続可能な社会の実現に貢献できる。

- ①希薄濃度合金を対象に構築された合金強度の理論を多元系高濃度合金も含めたあらゆる合金に適用できる普遍的な理論の構築が期待でき、合金構造、合金強度に関する学術の飛躍的発展が期待できる。
- ②ハイエントロピー合金の強度を構成元素の平均原子変位で記述する新規なアイデアが提案されており、強度だけでなく、延性・靱性を支配する因子を解明できれば、学術を基礎とした強度と延性・靱性を具備した材料の設計指針の構築が期待できる。
- ③これまで未開の化学組成領域、多元系状態図の中央近傍の化学組成を対象に研究開発が進められるため、力学物性だけでなく機能特性(触媒特性など)においても優れた特性を示す従来材料の延長線上にはない新規な材料の開発が期待できる。
- ④本領域で計算材料科学を中心に進める研究は、いわゆるマテリアルズ・インフォマティクスの先駆け的な研究成果ともなり、優れた構造・機能材料の材料設計に革命的な進歩をもたらすと期待できる。



ハイエントロピー合金
本領域研究の対象

図 3.3. 本領域研究の対象となるハイエントロピー合金の化学組成。

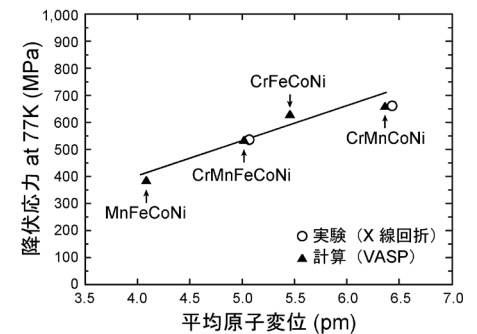


図 3.4. 等原子率 Cr-Mn-Fe-Co-Ni 5 元系ハイエントロピー合金の各構成元素の平均原子変位と低温強度の線形関係。

4 審査結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況

研究領域全体を通じ、審査結果の所見において指摘を受けた事項があった場合には、当該指摘及びその対応状況等について、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

【審査所見】(再掲)

本研究領域は、多成分系状態図の中央近傍の化学組成を持つハイエントロピー合金の材料物性について、実験と理論計算にまたがる様々な研究者が最先端の研究手法で調べ、その本質を明らかにしようとするものである。添加量を変えていくという従来の金属合金の研究手法とは異なり、数種の元素をほぼ等価に混ぜた状態から調べるという発想が新しく、これまで困難であった強度と延性・靱性を具備した材料開発が期待できるほか、あらゆる固溶体金属に適用可能な普遍的な新しいハイエントロピー合金の理論体系の構築が期待される。我が国以外でも、同様の概念の大型プロジェクトが複数立ち上がっているが、最先端の実験科学と機械学習なども含んだ最先端の計算科学を活用した本研究領域により、我が国の材料分野への世界的優位性をより一層引き上げて発展させることが期待される。

研究実績や学会運営などの実績が豊富な領域代表者のもとで、研究企画・研究推進アドバイザー等による構成で全体を俯瞰した運営と研究推進を可能にした有機的連携体制ができている。また、共同研究、設備の共有化などの研究推進のための体制、及び総括班や各計画研究組織の役割が整理されており、研究領域全体の推進が期待できる。

【対応状況】

審査所見では大変高い評価をいただき、改善すべき点として指摘を受けた事項はない。特に、(1)全体を俯瞰した運営と研究推進を可能にした有機的連携体制と(2)共同研究、設備の共有化などの研究推進のための体制、及び総括班や各計画研究組織の役割の明確化について高い評価を受けており、これらの点を更に高度化しつつ、従来合金を含めた普遍的な新しいハイエントロピー合金の理論体系の構築という学術的目標と強度と延性・靱性を具備した新規な材料開発という応用的目標の達成に向けてさらに精進していきたい。

5 研究の進展状況及び主な成果

(1) 領域設定期間内及び中間評価実施時までには何をどこまで明らかにしようとし、中間評価実施時までにはどこまで研究が進展しているのか、(2) 本研究領域により得られた成果について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。(1)は研究項目ごと、(2)は研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で記載すること。なお、本研究領域内の共同研究等による成果の場合はその旨を明確にすること。

(1) A01 班「ハイエントロピー合金の特異な力学特性の支配因子解明」の研究進展状況

1) 研究進展の目標: ハイエントロピー効果に基づいて出現する新規で特異な材料特性とその支配因子を探索・解明し、ハイエントロピー効果の本質を根源的に解明することが**領域設定期間内の達成目標**であり、異常に高い低温降伏強度、異常に高い低温引張延性・韌性、異常に高い高温降伏強度、強度の特異な結晶粒径依存性、高温クリープ強度について重点的に実験研究を行い、理論計算班との密接な連携のもと、これらの特異性と4つのハイエントロピー効果の相関を明らかにすることが、**中間評価実施時までの研究達成目標**である。

2) 研究成果:

【計画研究班の成果】

① ハイエントロピー合金の特異な力学特性の支配因子解明:

CrMnFeCoNi₅ 元系およびその派生4元系、3元系ハイエントロピー合金単結晶の作製に成功し、10~1273Kの広範囲な温度範囲で強度、引張伸びなど力学物性の系統的な調査を世界で初めて行った。0Kに外挿した臨界分解せん断応力・CRSSは合金の構成元素の平均原子変位(MSAD)と正の相関を示し、引張伸びは双晶変形の活動を伴い、積層欠陥エネルギーの減少とともに増大することを解明した。積層欠陥エネルギーは合金の平均価電子濃度の増加とともに減少する(図5.1)ことから、延性・韌性の支配因子が積層欠陥エネルギーであることを解明した。また、双晶変形の開始応力は、従来知見とは全く異なり、強い温度依存性を示すことを明らかにした。(A02班との共同研究)

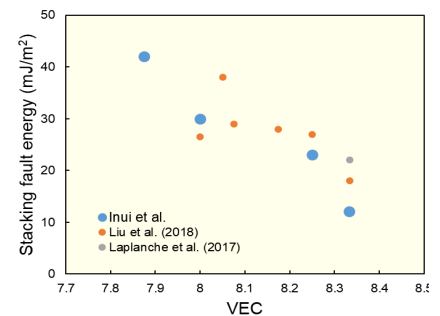


図 5.1. 積層欠陥エネルギーと平均価電子濃度の関係

② ハイエントロピー合金の局所構造の解明:完全にランダムな原子配列を取ると考えられていたCrMnFeCoNi₅元系では、電子回折図形の1/3{422}位置に散漫散乱が見られ、結晶格子が静的変位を伴ってかなり乱れていることが解明された。熱処理により散漫散乱強度が変化することから短範囲規則化が生じており、固溶体の原子配列に構成元素の組み合わせによって変化する混合エンタルピーによる寄与が示唆された。

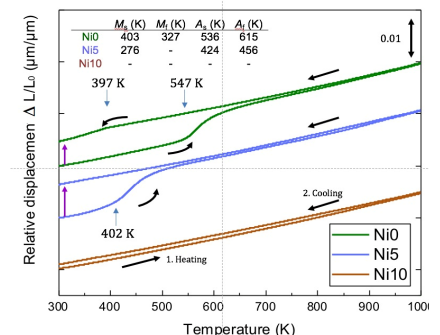


図 5.2. Ni量(x)を0, 5, 10mol%としたCr₂₀Mn₂₀Fe₂₀Co_{40-x}Ni_x系ハイエントロピー合金の形状記憶効果。

③ ハイエントロピー合金の新規な力学特性の発現:FCC相、HCP相の相安定性制御を通し、応力や温度の変化によりFCC/HCPマルテンサイト変態を示す一連のCr₂₀Mn₂₀Fe₂₀Co_{40-x}Ni_x系ハイエントロピー合金の創製に成功した。x=10合金では応力誘起マルテンサイト変態に起因するTRIP効果により、優れた強度-延性バランスを示し、x=0, 5とした合金では加熱-冷却により可逆的なFCC-HCPマルテンサイト変態を示す事を解明した。x=0, 5合金は加熱によりマルテンサイト変態温度付近で予歪みが回復する形状記憶効果を示す事が明らかになった(図5.2)。(A03班との共同研究)

【公募研究班の成果】

① ハイエントロピー合金の特異な力学特性の支配因子解明:CrMnFeCoNi₅元系およびその派生4元系、3元系ハイエントロピー合金単結晶の弾性定数を系統的に調べ、構成元素数が増加するにつれて弾性異方性が大きくなる傾向があることを解明した。これは、構成元素数が増加するに伴い、原子間結合が異方性を増すことを意味し、X線回折による電子分布解析の結果と一致する。(班内、A02班との共同研究)

② ハイエントロピー合金の局所構造の解明:Spring-8を用いてEXAFSによりCrCoNiの原子構造を調べると、Crの周りの格子乱れが特に大きく、デバイワラー因子も大きく、乱れを誘発するゲスト原子的な役割を果たすことを解明した。CrMnFeCoNi₅元系と同様に原子番号が小さい元素ほど原子変位が大きく、ゲスト原子的な役割を果たす元素の同定に大きな指針を得た。(班内共同研究)

3) 研究進展の状況:各研究者がターゲットとするハイエントロピー合金の力学特性の支配因子解明に向けた実験技術・手法を確立し、支配因子に関する論理的あるいは大胆な仮説のもと、新規で特異な力学特性の創製も行われており、研究計画は予想以上に順調に進展している。さらに、理論計算グループとの連携を強化して、支配因子の実証・解明を達成する計画である。

(2) A01 伊班「ハイエントロピー効果に基づく新材料創製と新機能創出」の研究進展状況

1) **研究進展の目標**: 領域設定期間内に金属やセラミックスの結晶質および非晶質の幅広い材料群において新規ハイエントロピー材料の創製方法を確立し、それらに新機能を見出すことを**領域設定期間内の達成目標**としている。そのうち**中間評価実施時まで**に新規ハイエントロピー材料の創製技術を確立することを目指しており、その後ハイエントロピー合金の組成および内部構造と機能性の関係を明らかにすることで新機能創出にこぎつける。

2) 研究成果:

【計画研究班の成果】

① **ハイエントロピー金属材料の創製**: 金属溶湯脱成分にハイエントロピー効果を導入することでポーラス構造微細化に成功し、比表面積 55.7m²/g、静電容量 58.3F/g のナノポーラスハイエントロピー合金の創製に成功した(図 5.3)。また、バルク金属ガラスにおいて配置エントロピーとガラス形成能の関係を明らかにし、センチメートル級のガラス形成能を有する Zr-Hf-Ti-Al-Co-Ni-Cu 金属ガラスの創製に成功した。(班内共同研究)

② **ハイエントロピーセラミックスの創製**: 粉末冶金法によってハイエントロピーセラミックスを合成する原料として複数の酸化物から構成される高次多元複合顆粒の調整に成功した。また超高压高温合成法を用いて複数種の陽イオンを含むコチュナイト型酸化物を作製することに成功した。

③ **耐食性ハイエントロピー合金の創製**: CoCrFeMnNi 等モル合金の腐食挙動を解析し、各合金元素の耐食性への役割を解明した。この合金では Co が耐食性を向上させているという特異な現象が確認された。この知見を基に高い耐孔食性を有する Fe-20Cr-20Ni-20Co-6Mo ハイエントロピー合金の創製に成功した。(A02 班との共同研究)

【公募研究班の成果】

① **構造材料用ハイエントロピー合金創製**: 低放射化ハイエントロピー合金を創製に資する基礎研究として構成元素の積層欠陥エネルギー変化に及ぼす影響を調べ、Mn が照射耐性の向上に有効であることを明らかにした。また、純チタンと同等の生態適合性を有し、細胞接着性の高い Ti-Zr-Nb-Ta-Mo 生体ハイエントロピー合金の創製に成功した。(A01, A03 班との共同研究)

② **機能材料用ハイエントロピー合金創製**: ソルボサーマル連続フロー合成によって任意組成の RuRhPdIrPt, RuRhPdOsIrPt ハイエントロピーナノ粒子合成に成功し、水素発生反応において Pt よりも高い触媒活性を有することを明らかにした。室温で可逆的に水素を吸蔵できる Ti-V-Cr-Nb-Mo の BCC 単相ハイエントロピー合金の創製に成功した。レーザーアブレーション法により Fe-Ni 合金のナノ粒子合成に成功した。(班内共同研究)

3) **研究進展の状況**: A01 伊班ではこれまでの研究において各分担者がターゲットとするハイエントロピー材料の創製技術を確立してきた。今後は創製したハイエントロピー材料の機能性最適化に重点を置き、新機能創出を目指す計画であり研究は順調に進展している。

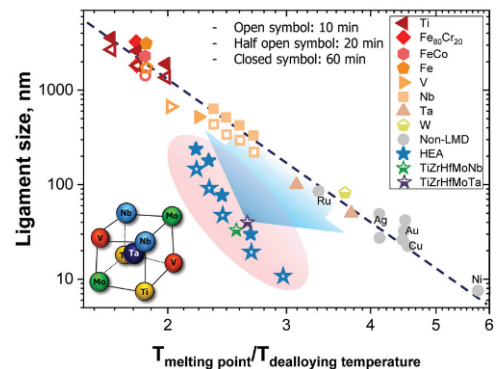


図 5.3. ポーラス金属のリガメントサイズの温度依存性。ハイエントロピー合金では同一規格化温度でリガメントサイズが純金属や従来合金よりも1桁小さい。(Adv. Mater. 32 (2020)1906160)

(3) A02 ウ班「計算材料科学によるハイエントロピー合金の力学特性の解明と制御」の研究進展状況

1) **研究進展の目標**: 幅広い応力、温度、変形速度にわたり力学特性と局所電子・原子構造、合金組成、組織との関連を予測的に記述する力学特性マップ(構成則)を構築して力学特性制御則を確立することが**領域設定期間内の達成目標**であり、局所電子・原子構造が種々の格子欠陥特性に与える影響、各種格子欠陥の振る舞いとマクロ力学特性との関連について重点的に探求し、ハイエントロピー合金の力学特性に現れるハイエントロピー効果の発現メカニズムを根源的に解明することが**中間評価実施時までの研究達成目標**である。

2) 研究成果:

【計画研究班の成果】

① **ハイエントロピー合金のニューラルネットワークポテンシャルの構築**: ハイエントロピー合金の高精度分子動力学解析を目指す上で最大のボトルネックとなっていた原子間相互作用の問題を解決するために、新たにニューラルネットワークを活用した世界初の原子間相互作用を構築した(図 5.5)。これにより、第一原理計算の精度を保ちつつ大規模な分子動力学計算が可能となった。今後の原子論的解析を加速させる大きなブレークスルーが達成された。(班内共同研究)

② **ハイエントロピー合金の欠陥構造の解明**: BCC 構造を有するハイエントロピー合金のらせん転位の転位芯構造の大規模第一原理計算を実施した(図 5.4)。BCC 相を持つ HEA の中で力学的安定性の高い MoNbTaVW

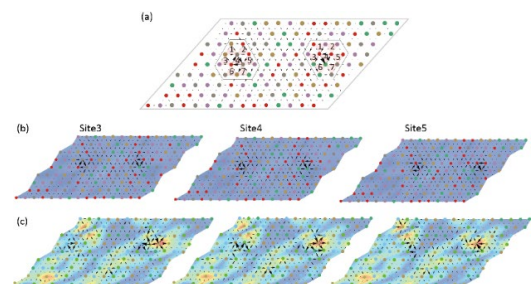


図 5.4. BCC ハイエントロピー合金の転位芯構造。

と安定性が低い ZrNbTaTiHf を対象とし、結晶格子点からの原子の局所変位と転位構造の関係を解析した。前者は局所変位が大きく転位芯が拡張し、転位運動が通常の単元系金属とは大きく異なることが示唆された。(都留, 尾方, 下川の共同研究, A01 班との共同研究)

③ **ハイエントロピー合金における粒界特性の解明:** 傾角粒界からの転位放出現象を分子動力学法を用いて原子論的に解析し、多結晶体の強度に粒界偏析が強く関与していることを見出した。ある特定の原子サイズ比を持つ合金では、偏析による粒界組成の変化に起因して粒界の自由体積が減少することで、粒界からの転位放出現象が困難になり、ハイエントロピー合金の強度が増加することを見出した(図 5.6)。また粒界偏析を精度良くかつ高速に解析することを可能とする世界初のデータベース駆動型セミグラウンドカノニカルモンテカルロ法の開発に成功している。(下川, 久保, 青柳, 尾方の共同研究, A03 班との共同研究))

【公募研究班の成果】

① **ハイエントロピー合金中の局所原子応力解析:** Cantor 合金 (CrMnFeCoNi) の構成元素からなる 4 元・3 元・2 元 FCC 合金について複数の方法論による第一原理局所応力計算を実施し、方法論が適用可能であることを明らかにするとともに(図 5.7), これまで解析例のない BCC 型ハイエントロピー合金(MoNbVTaW)に対して第一原理局所応力計算を可能とした。(椎原, 都留, 下川の共同研究)

3) **研究進展の状況:** 新規解析手法の開発を行い、これまで不可能であった精度で局所電子・原子構造が転位や粒界の格子欠陥特性に与える影響、さらにはこれらの格子欠陥の振る舞いとマクロ力学特性との関連について検討ができており、研究は予想以上に順調に進展している。

(4) A02 エ班「計算熱力学と計算組織学の融合によるハイエントロピー合金設計の加速」の研究進展状況

1) **研究進展の目標:** 期間内: 第一原理電子状態計算を援用した計算状態図解析および実験的アセスメントに基づき, HEA 固溶体の相安定性に関する知見を深化させるとともに, HEA 熱力学データベースの拡充をはかる。フェーズフィールド(PF)法と実験データを活用した, 各種パラメータの逆問題式推定法を確立する。および近年, データ科学にて培われた機械学習ノウハウを, HEA 特性最適化に活用する道を拓く。 **中間評価まで:** HEA 固溶体のギブスエネルギー関数が、広義正則溶体近似でよいのか, 他の詳細モデルが必要なのかを明確化する。濃度プロファイルの時間発展の実測データから, PF 法を仲介に, ギブスエネルギーの熱力学パラメータや拡散係数を逆問題式に推定する手法を確立するとともに, Sluggish-Diffusion(SD)の本質を明確化する。さらにデータ科学分野における機械学習のノウハウの調査を終え, HEA 合金開発に役立つ方法論整備を開始する。

2) 研究成果:

【計画研究班の成果】

① **HEA における固溶体安定性と化合物形成傾向の解明:** FCC および BCC 基の HEA を対象として, 五元系合金を構成する三ないし四元系固溶体のギブスエネルギーをクラスター展開・変分法から評価し, 三元系合金を対象として遺伝的アルゴリズムによる安定構造の探索を行った。図 5.8 は, 基底状態での化合物生成傾向の計算結果である。(a)は等比組成で固溶体が生成する Cantor 合金を構成する三元系の相領域で, 三元化合物が生成しないことが示された。(b)は複数の HEA 系で生成する化合物数を横軸に, 縦軸を $\Omega \equiv T\Delta S_{mix} / |\Delta H_{mix}|$ としたプロットで, ほとんどの合金系で, 三元化合物が生成しにくい傾向があることがわかる。

② **HEA における熱平衡空孔濃度の解析:** HEA 中の拡散現象を検討するための基礎的な物性である, 熱空孔濃度の温度依存性を算出した。HEA における Sluggish-Diffusion(SD)が正しいとすると, HEA では空孔濃度が低下していることが予測される。しかし本解析から, 純物質 (FCC

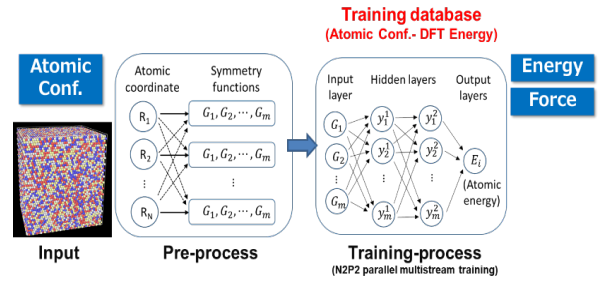


図 5.5. ニューラルネットワークポテンシャル。

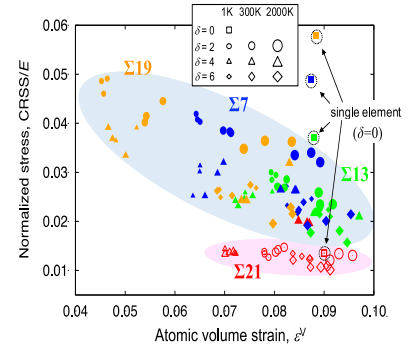


図 5.6. 強度(CRSS)と原子サイズの関係。

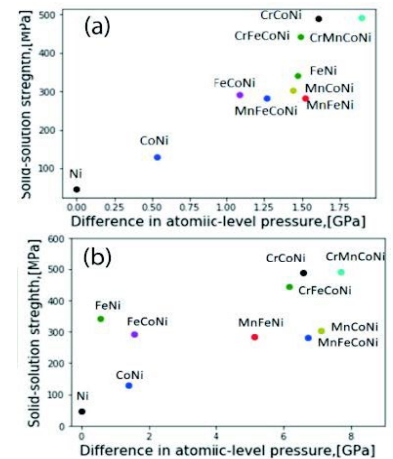


図 5.7. 局所(原子)応力と強度との関係。

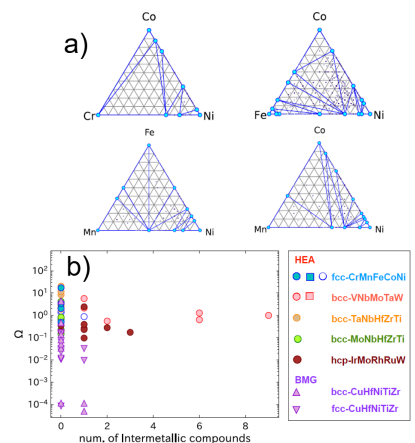


図 5.8. (a)基底状態の三元系状態図の相平衡、および(b)化合物生成数のΩ依存性の計算結果。

構造)中の熱空孔濃度と比較して, HEA の空孔濃度は全く低下していない結果が得られた. これは, HEA の SD が空孔量の観点から議論できないことを示している. (A01, A03 班との共同研究)

③ **データ同化手法を活用したパラメータ推定:** 拡散対における濃度プロファイルの実験データを活用し, アジョイント法を用いて, 拡散係数の導出を試みた. 対象は CoCrFeMnNi 五成分系の FCC 相とし, 非線形拡散方程式の理論式から, データ同化に用いるアジョイント方程式を独自に導出した. 計算結果は実験を系統的に再現し, 本手法によって, 拡散実験を定量的に表現できる拡散係数が得られることが示された. さらに拡散係数だけでなく, 構成相の熱力学的パラメータも同時推定できることも確認した. (A03 班との共同研究)

【公募研究班の成果】

① **データ科学を活用した熱力学アセスメント:** CoCrFeNi 合金系の可能な原子配置を網羅的に考慮し, 当該系における磁気秩序による系の安定性を計算科学的に検証した. その結果, $L1_2$ 構造に反強磁性的な Cr 原子を置くことで, 強磁性的な Fe/Co/Ni 原子配置やランダム原子配置よりも有意に, 系が安定化することが明らかとなった. (班内, A01 班との共同研究)

3) **研究進展の状況:** 当初の予定通り研究は順調に進展している. また公募班のデータ科学に関するノウハウと解析結果は, A02 エ班にて整備を進めている熱力学データベースおよび状態図の情報を補完するものである.

(5) A03 才班「先端プロセスによるハイエントロピー合金の作製とナノ・マイクロ組織制御」の研究進展状況

1) **研究進展の目標:** 領域設定期間内に, 凝固, 加工熱処理, 粉末冶金, 3D プリンティングという4種類の重要プロセスを通じてハイエントロピー合金のナノ・マイクロ組織やマクロ形態の制御を行い, 優れた特性を有するハイエントロピー合金創製のための指導原理を獲得する. **中間評価実施時**までは, 各プロセスを典型的な単相ハイエントロピー合金に適用し, ハイエントロピー合金特有の現象を発見・抽出するとともに, 異なるプロセスで得られた成果を共有し, 種々のプロセスを俯瞰した知見を得るための連携研究を開始する.

2) 研究成果:

【計画研究班の成果】

① **ハイエントロピー合金の凝固挙動の解明:** FCC ハイエントロピー合金の基礎的凝固過程を, 放射光を用いた時間分解 CT と X 線回折を組み合わせた独自手法により世界で初めて明らかにした(図 5.9). ハイエントロピー合金の偏析挙動を定量的に解析して, 4元系 CoCrFeNi 合金でほぼcongleruent 組成の合金を見出した. こうした成果は, 電子ビーム 3D プリンティング時の組織形成の解釈や BCC ハイエントロピー合金の力学特性の改善につながり, 計画班全体の研究進展に大きく寄与した. (班内共同研究)

② **ハイエントロピー合金の結晶粒超微細化:** FCC および BCC ハイエントロピー合金において, 平均粒径 $1\mu\text{m}$ 以下の完全再結晶超微細粒組織を得ること, 超微細粒組織がネットワーク状に連結した調和組織を作製することに成功した. ハイエントロピー合金では結晶粒超微細化が生じやすいこと, HfNbTaTiZr BCC ハイエントロピー合金では, 高温変形中に特異な粒界すべりが生じるといった興味深い現象が見出された. (A01 班との共同研究)

③ **優れた力学特性を有するハイエントロピー合金:** 本研究で得られた超微細粒組織および調和組織を有する FCC 単相ハイエントロピー合金は, 高い強度と大きな引張延性を併せ持つことが明らかとなった. 得られた試料を用いた系統的な力学特性試験より, 原子レベルの不均一性が FCC ハイエントロピー合金の高い強度に最も寄与していることが明らかとなった. HfNbTaTiZr BCC ハイエントロピー合金の乏しい引張延性が偏析によるものであることを班内連携により明らかにし, 熱処理によって同合金の延性を大きく改善することに成功した.

【公募研究班の成果】

① **ハイエントロピー合金が示す興味深い機能特性:** 計画班では想定していなかった興味深い機能特性が得られた. CoCrFeMnNi FCC ハイエントロピー合金の電気特性および耐食性と粒径など組織の関係が系統的に明らかになった. 計算状態図と結晶粒超微細化手法を組み合わせ, チタン合金より優れた細胞代謝特性を有する TiAlFeCoNi 合金や, 光触媒特製に優れた TiHfZrNbTaO₁₀ 合金(図 5.10)を作製することに成功した. これらの成果は適切に組織制御を行うなどしたハイエントロピー合金試料を計画班から提供することによって得られたものである. (班内共同研究)

② **新しい実験手法の開発:** 通常の加工熱処理では作製が

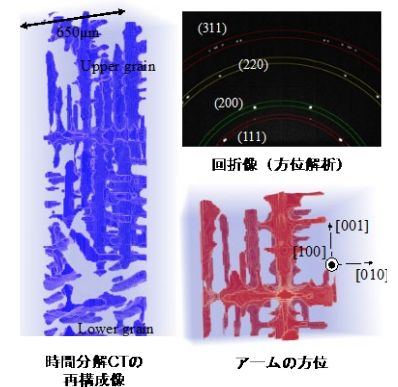


図 5.9. FCCハイエントロピー合金の凝固過程の放射光時間分解 CT 観察結果.

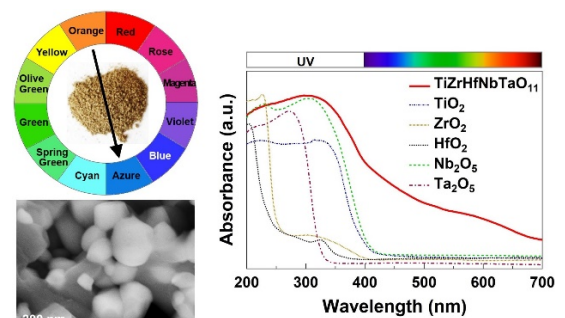


図 5.10. 光触媒特製に優れた TiHfZrNbTaO₁₀ 合金.

不可能な、結晶粒径が数 nm～数十 nm のナノ結晶ハイエントロピー合金を作製するためのスパッタ装置の作製を行った。また J-PARC において、高温変形中のその場中性子回折を可能とする装置環境を開発し、熱膨張率や相分解過程を観測することに成功した。(A01 班との共同研究)

3) 研究進展の状況: 中間評価実施時までの目標は達成できた。ハイエントロピー合金の特徴的な組織形成現象や、得られたハイエントロピー合金の優れた力学特性が新たに見出された。また計画班との連携によって各公募班の研究を加速し、特に機能特性に関する興味深い成果を得ることができた。

(6) A03 力班「ハイエントロピー合金に内在する元素間相互作用と相安定性原理の実験的説明」の研究進展状況

1) 研究進展の目標: 均一な固溶体に内在する原子レベルの構造や組成、規則度の不均一性の本質を総合的に評価するとともに、種々の熱処理条件での固溶体の不安定化、複雑な相構造の形成過程を系統的に調査することで、ハイエントロピー合金の相安定性原理の解明と基礎学理に基づく組織設計原理の確立を目指す。**中間評価時点の目標**は、多元合金の元素間相互作用および拡散 kinetics を解明するための手法確立と、ハイエントロピー合金を含む多元合金の組織解析への応用であり、順調な成果を上げている。

2) 研究成果: 本計画研究では、次の 3 つの分担項目で、ハイエントロピー合金のナノ構造と微細組織設計の原理確立に取り組んでいる。①熱力学・組織形成解析—多元系モデル合金の相安定性解明、②元素相関解析—高合金溶体における放射光を含む精密 X 線回折および 3DAP を用いた統計解析による規則化/クラスタリング傾向の実験的解明、③点欠陥・拡散解析—固溶体中の点欠陥と元素間相互作用の実験的、理論的解析。また公募班では、J-PARC 中性子回折利用による局所構造解析、多元拡散対による新合金探索、DFT 計算による電子物性のシミュレーションが実施されている。以下に現在までの成果をまとめる。

【計画研究班の成果】

① 元素間相互作用によって誘起される規則化と相分離の重畳現象解明: FCC 基の規則化が期待される Fe-Ni-Al 合金を種々の条件で時効した結果 500°C 以上で時効硬化が認められた。STEM 観察での超格子反射とスピノーダル分解に典型的な変調構造(図 5.11), 3DAP 測定での Al, Ni の同一箇所での濃化、の検出により Ni-Al の規則化と二相分離の重畳が生じることが明らかとなった。(班内, A01 班との共同研究)

② 合金に内在する元素間相互作用の実験的説明: SEM/FIB と TEM を併用した局所領域の 3DAP 試料作製手法を構築し、CrMnFeCoNi 合金での積層欠陥を含む局所解析、結晶軸を制御した元素規則配置の検出技術確立した。ハイエントロピー合金に内在する規則化および相分離の前駆としての非整合構造解析に最適な XRD 装置を整備し、非晶質合金、酸化物機能性材料での SRO/MRO 検出に成功した。(A01, A02 班との共同研究)

③ ハイエントロピー合金中の拡散現象と点欠陥構造の関係解明: 陽電子寿命法と第一原理計算により CoCrFeMnNi 合金中の空孔の拡散挙動の定量評価を行い、空孔形成エンタルピーは各元素の純金属と、また移動エンタルピーは 4 元系合金等と比較して顕著な差は見られないことを見出した。(班内, A02 班との共同研究)

【公募研究班の成果】

① 量子線回折によるハイ・ミディアムエントロピー合金の局所構造解析: 生成エンタルピーの異なるミディアムエントロピー合金 T-CoNi (T=Cr, Mn, Fe) について SPring-8 での EXAFS 解析を行い、平均格子定数の違いでは説明できず何らかの局所構造の違いを示唆するスペクトル変化を見出した。(A01, A02 班との共同研究)

② ハイエントロピー合金における新材料・新物性のハイスループット探索: 多元系の広大な組成空間での相平衡や存在組成範囲を効率よく決定する多元拡散対解析を CrMnFeCoNi 合金に適用し、970°C での種々の時間の焼鈍により本系ハイエントロピー相の存在範囲を反映した可能性がある高点密度組成領域を見出した。代表的 BCC 構造の TiZrNbHfTa エントロピー合金を中心に比較的小規模なモデルを多数導入した第一原理計算により、第 1 近接原子の組み合わせを引数とする平均変位ベクトルと、局所絶電変換特性量としてのゼーベック係数を効果的に導出し、種々の元素の物性に対する影響の特徴を見出した。

3) 研究進展の状況: 現在まで、多元合金における元素間相互作用ならびに拡散 kinetics を解明するための手法が確立され、ハイエントロピー合金を含む多元系高合金に内在するナノレベルの規則度・組成の不均一性が解明されつつある。今後、班内連携での共通試料を用いたマルチディメンション解析、共同研究も含めた研究対象の拡大および新基軸の検討、など研究の加速が期待される。

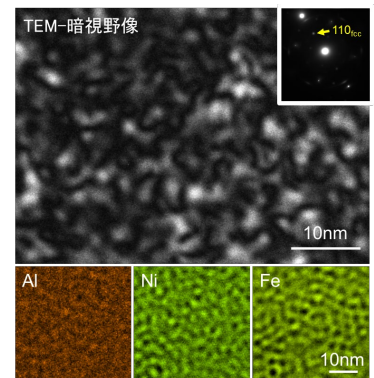


図 5.11. Fe-Ni-Al 合金時効材での規則化を伴う元素濃度揺らぎ。

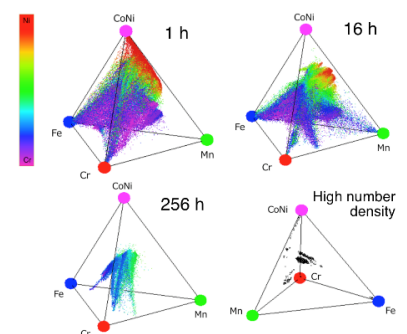


図 5.12. 970°C での CrMnFeCoNi 合金の存在点マップと交点密度領域。

6 研究発表の状況

研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で、本研究領域により得られた研究成果の発表の状況（主な雑誌論文、学会発表、書籍、産業財産権、ホームページ、主催シンポジウム、一般向けのアウトリーチ活動等の状況。令和2年6月末までに掲載等が確定しているものに限る。）について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。なお、雑誌論文の記述に当たっては、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究代表者（発表当時、以下同様。）には二重下線、研究分担者には一重下線、corresponding author には左に*印を付すこと。

(1) 学術的研究成果の公表の状況

1) 学術的成果公表状況の概要

領域研究開始からこれまでの2年間に公表した学術的成果の概要をその具体的数値とともに以下に示す。

① **学術論文**：学術論文の総数は269編であるが、そのうちハイエントロピー合金の構造・物性に直接関連する学術論文（直接関連論文）は61編で、本領域研究に間接的に関連する論文（間接関連論文）は208編ある。本領域研究は異分野融合のプロジェクト研究であり、およそ85%の研究者が、領域研究開始までハイエントロピー合金の構造・物性に関する研究とは無関係で、領域研究開始時にハイエントロピー合金の研究に初めて着手するという状況であったため、学術論文として投稿できる内容の研究成果を出すのに時間がかかっていたが、現在では、直接関連論文としての学術論文が着々と投稿されている。

② **領域内連携研究の成果**：領域内の異なる研究チーム間の連携・共同研究によって生み出された研究成果は、ハイエントロピー合金の構造・物性に直接関連する学術論文の16%、国内・国際学会発表の18%、受賞の3%に上り、連携・共同研究が着実に進展している。

表 6.1. これまでの学術的成果。

業績種別		件数	領域内の複数の研究室間の連携研究(内数)
学術論文	直接関連論文	61編	10件 (16%)
	間接関連論文	208編	19件 (9%)
解説・総説		35編	3件 (9%)
著書		7件	0件 (0%)
学会発表 (一般講演・ポスター発表)	国際	105件	
	国内	313件	
基調・招待講演	国際	93件	14件 (15%)
	国内	112件	22件 (20%)
受賞		37件	1件 (3%)
特許		6件	0件 (0%)

2) 学術論文(直接関連論文 61編, 間接関連論文 208編, 直接関連論文のうち領域内の複数の研究グループ間の連携・共同研究成果 4編: 以下, 主要 50編を示す)

[A01 ア]

- [1] “Room temperature deformation of 6H-SiC single crystals investigated by micropillar compression”, *K. Kishida, Y. Shinkai, H. Inui, *Acta Materialia* **187** (2020) 19-28.
- [2] 【若手】“Preparation of Silver Nanoparticles by Arc Plasma Method and Their Properties”, *T. Mineta, T. Saito, T. Yoshihara, H. Sato, *Materials Transactions* **60** (2019) 569-573.
- [3] 【若手】“Domain structure and lattice effects in a severely plastically deformed CoCrFeMnNi high entropy alloy”, *Alok Singh, D.A. Basha, Yoshitaka Matsushita, Koichi Tsuchiya, Zhaoping Lu, Tai-Gang Nieh, Toshiji Mukai, *Journal of Alloys and Compounds* **812** (2020) 152028.
- [4] 【若手】“A strategy of designing high-entropy alloys with high-temperature shape memory effect”, *Jein Lee, Koichi Tsuchiya, Wataru Tasaki, Hyun Seok Oh, Takahiro Sawaguchi, Hideyuki Murakami, Takanobu Hiroto, Yoshitaka Matsushita, Eun Soo Park, *Scientific Reports* **9** (2019) 13140.
- [5] 【若手・連携】“Neutron diffraction study of temperature-dependent elasticity of B19' NiTi—Elinvar effect and elastic softening”, *A. Ahadi, E. Khaledialidusti, T. Kawasaki, S. Harjo, A. Barnoush, K. Tsuchiya, *Acta Materialia* **173** (2019) 281-291.
- [6] 【若手】“Temperature Dependence of Activation Enthalpy for Yielding in Bimodal Ti-6Al-4V”, B.R. Anne, M. Tanaka, T. Morikawa, *Mater. Trans.* **60** (2019) 1828-1832.
- [7] “On the influence of crystallography and dendritic microstructure on microshear behavior of single crystal Ni-based superalloys”, *G. Laplanche, N. Wiecezorek, F. Fox, S. Berglund, J. Pfetzinger-Micklich, K. Kishida, H. Inui, G. Eggeler, *Acta Mater.* **160** (2018) 173-184.
- [8] 【若手】“Temperature dependence of the yield stress in α -Titanium investigated with crystal plasticity analysis”, *Y. Okuyama, M. Tanaka, T. Ohashi, T. Morikawa, *Mater. Sci. Forum* **941** (2018) 1474-1478.
- [9] 【若手】“Vanishing of room-temperature slip avalanches in a face-centered-cubic high-entropy alloy by ultrafine grain formation”, *J. Qiang, K. Tsuchiya, H. Diao, P. K. Liaw, *Scripta Materialia* **155** (2018) 99-103.

[A01 イ]

- [1] 【若手】“High-temperature mechanical behavior of B2-ordered Ti-Mo-Al alloys”, Y. Lu, J. Yamada, R. Miyata, H. Kato, *K. Yoshimi, *Intermetallics* **117** (2020) 106675.
- [2] 【若手】“Design of Heat-Conductive hBN-PMMA Composites by Electrostatic Nano-Assembly”, A. Yokoi, *W.K. Tan, T. Kuroda, G. Kawamura, A. Matsuda, *H. Muto, *Nanomaterials* **10** (2020) 134.
- [3] “Microstructural effects on hardness and optical transparency of birefringent aluminosilicate nanoceramics”, *N. A. Gaida, N. Nishiyama, O. Beermann, U. Schurmann, A. Masuno, C. Giehl, K. Niwa, M. Hasegawa, S. Bhat, R. Farla, L. Kienle, *Ceramic Engineering and Science* **2** (2020) 76-82.
- [4] “High-Entropy Alloys with Hexagonal Close-Packed Structure in Ir₂₆Mo₂₀Rh_{22.5}Ru₂₀W_{11.5} and Ir_{25.5}Mo₂₀Rh₂₀Ru₂₅W_{9.5} Alloys Designed by Sandwich Strategy for the Valence Electron Concentration of Constituent Elements in the Periodic Chart”, *A. Takeuchi, T. Wada, H. Kato, *Materials Transactions* **60** (2019) 1666-1673.
- [5] 【若手・連携】“Development of strong and ductile metastable face-centered cubic single-phase high-entropy alloys”, *D. Wei, X. Li, S. Schonecker, J. Jiang, W.M. Choi, B.J. Lee, H.S. Kim, A. Chiba, H. Kato, *Acta Materialia* **181** (2019) 318-330.
- [6] 【若手・連携】“Introducing dislocations locally in Al-supersaturated α -Ti₃Al single crystal via nanoscale wedge indentation”, *D. Wei, Y. Koizumi, M. Nagasako, Y. Kubota, T. Aoyagi, Y. Nakagawa, M. Yoshino A Chiba, H. Kato,

Intermetallics **113** (2019) 106557.

- [7] 【若手・連携】“Novel Co-rich high performance twinning-induced plasticity (TWIP) and transformation-induced plasticity (TRIP) high-entropy alloys”, *D. Wei, X. Li, J. Jiang, W. Heng, Y. Koizumi, W.M. Choi, B.J. Lee, H.S. Kim, H. Kato, A. Chiba, *Scripta Materialia* **165** (2019) 39-43.
- [8] “Anomalously low modulus of the interpenetrating-phase composite of Fe and Mg obtained by liquid metal dealloying”, *I.V. Okulov, P.A. Geslin, I.V. Soldatov, H. Ovri, S.H. Joo, H. Kato, *Scripta Materialia* **163** (2019) 133-136.
- [9] 【若手】“PMMA-ITO Composite Formation via Electrostatic Assembly Method for Infra-Red Filtering”, *W.K. Tan, A. Yokoi, G. Kawamura, A. Matsuda, *H. Muto, *Nanomaterials* **9** (2019) 886.

【A02 ウ】

- [1] 【若手】“An Atomistic Modeling Study of the Relationship between Critical Resolved Shear Stress and Atomic Structure Distortion in FCC High Entropy Alloys — Relationship in Random Solid Solution and Chemical-Short-Range-Order Alloys —”, *M. L. Ali, S. Shinzato, V. Wang, Z. Shen, J. -P. Du, S. Ogata, *Materials Transactions* **61** (2020) 605-609.
- [2] “Hydrogen-accelerated spontaneous microcracking in high strength aluminium alloys”, *T. Tsuru, K. Shimizu, M. Yamaguchi, M. Itakura, K. Ebihara, A. Bendo, K. Matsuda, H. Toda, *Scientific Reports* **10** (2020) 1998.
- [3] 【連携】“Anomalous solution softening by unique energy balance mediated by kink mechanism in tungsten-rhenium alloys”, *T. Tsuru, M. Wakeda, T. Suzudo, M. Itakura, S. Ogata, *Journal of Applied Physics*, **127** (2019) 025101-0-9.
- [4] 【若手】“Phase transformation assisted twinning in a face-centered-cubic FeCrNiCoAl_{0.36} high entropy alloy”, P. Yu, R. Feng, J. -P. Du, S. Shinzato, J. -P. Chou, B. Chen, Y. -C. Lo, P. K. Liaw, *S. Ogata, *A. Hu, *Acta Materialia* **181** (2019) 491-500.
- [5] 【若手】“Controlled growth of single-crystalline metalnanowires via thermomigration across a nanoscale junction”, D. -G. Xie, Z. -Y. Nie, S. Shinzato, Y. -Q. Yang, F. -X. Liu, *S. Ogata, *J. Li, E. Ma, *Z. -W. Shan, *Nature Communications* **10** (2019) 4478-1-8.
- [6] 【若手】“Atomistic prediction of the temperature- and loading-rate-dependent first pop-in load in nanoindentation”, *Y. Sato, S. Shinzato, T. Ohmura, *S. Ogata, *International Journal of Plasticity* **121** (2019) 280-292.
- [7] 【若手】“Anharmonicity in Structural Degree of Freedom: A Central Key for Bidirectional Stability in Thermodynamic Average”, K. Yuge, S. Ohta, T. Setoyama, R. Miyake, *AMTC letters* **6** (2019) 232-233.
- [8] 【連携】“Mechanism of hardening and damage initiation in oxygen embrittlement of body-centred-cubic niobium”, P. -J. Yang, Q. -J. Li, T. Tsuru, S. Ogata, J. -W. Zhang, H. -W. Sheng, Z. -W. Shan, G. Sha, *W. -Z. Han, *J. Li, *E. Ma, *Acta Materialia* **168** (2019) 331-342.
- [9] 【若手】“Hydrogen embrittlement controlled by reaction of dislocation with grain boundary in alpha-iron”, *L. Wan, W. Geng, A. Ishii, J. Du, Q. Mei, N. Ishikawa, H. Kimizuka, *S. Ogata, *International Journal of Plasticity* **112** (2019) 206-219.

【A02 エ】

- [1] “Thermal vacancies in high-entropy alloys”, *T. Abe, *Mater. Trans.* **61** (2020) 610-615.
- [2] 【若手】“Thermodynamic origin of solute-enriched stacking-fault in dilute Mg-Zn-Y alloys”, M. Egami, I. Ohnuma, M. Enoki, H. Ohtani, *E. Abe, *Materials and Design* **188** (2020) 108452.
- [3] 【若手】“Growth behavior of the δ -Ni₃Nb phase in superalloy 718 and modified KJMA modeling for the transformation-time-temperature diagram”, J.J. Ruan, N. Ueshima, *K. Oikawa, *J. Alloy. Comp.* **814** (2020) 152289.
- [4] 【若手】“Estimation of material parameters based on precipitate shape: efficient identification of lowerror region with Gaussian process modeling”, *Y. Tsukada, S. Takeno, M. Karasuyama, H. Fukuoka, M. Shiga and T. Koyama, *Scientific Reports* **9** (2019) 15794.
- [5] “Solidification analysis by non-equilibrium phase field model using thermodynamics data estimated by machine learning”, *S. Nomoto, H. Wakameda, M. Segawa, A. Yamanaka and T. Koyama, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **27** (2019) 084008.
- [6] “Black phosphorene exhibiting negative thermal expansion and negative linear compressibility”, *L. Wang, C. Wang and Y. Chen, *J. Phys.: Condens. Matter* **31** (2019) 465003.
- [7] “Experimental Determination and Thermodynamic Evaluation of Low-Temperature Phase Equilibria in the Fe-Ni Binary System”, *I. Ohnuma, S. Shimenouchi, T. Omori, K. Ishida and R. Kainuma, *CALPHAD* **67** (2019) 101677.
- [8] 【若手】“Phase-field simulation of spinodal decomposition and its effect on stress-induced martensitic transformation in Ti-Nb-O alloys”, *Y. Ishiguro, Y. Tsukada, T. Koyama, *Computational Materials Science* **151** (2018) 222-230.
- [9] “Computational phase diagrams for the Nd-based magnets based on the combined ab initio/ CALPHAD approach”, *T. Abe, Y. Chen, A. Saengdeejing and Y. Kobayashi, *Scripta Materialia* **154** (2018) 305-310.

【A03 オ】

- [1] 【若手】“Yield strength and misfit volumes of NiCoCr and implications for short-range-order”, Binglun Yin, Shuhei Yoshida, Nobuhiro Tsuji, *W.A. Curtin, *Nature Communications* (2020) in press.
- [2] 【連携】【若手】“Effect of Elemental Combination on Microstructure and Mechanical Properties of Quaternary Refractory Medium Entropy Alloys”, *Qian He, Shuhei Yoshida, Hideyuki Yasuda, and Nobuhiro Tsuji, *Materials Transactions* **61** (2020) 577-586.
- [3] 【若手】“Deformation microstructures and strength of face-centered cubic high/medium entropy alloys”, *Shuhei Yoshida, Takuto Ikeuchi, Yu Bai, Akinobu Shibata, Niels Hansen, Xiaoxu Huang, and Nobuhiro Tsuji, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* **580** (2019) 012053.
- [4] 【若手】“Unique high-temperature deformation dominated by grain boundary sliding in heterogeneous necklace structure formed by dynamic recrystallization in HfNbTaTiZr BCC refractory high entropy alloy”, *Rajeshwar R. Eleti, Atul H. Chokshi, Akinobu Shibata, Nobuhiro Tsuji, *Acta Materialia* **183** (2020) 64-77.
- [5] 【若手】“Simultaneous Strength-Ductility Enhancement of a Nano-Lamellar AlCoCrFeNi_{2.1} Eutectic High Entropy Alloy by Cryo-Rolling and Annealing”, *T. Bhattacharjee, I. S. Wani, S. Sheikh, I. T. Clark, T. Okawa, S. Guo, P. P. Bhattacharjee, N. Tsuji, *Scientific Reports* **8** (2018), article no.3276.
- [6] 【若手】“Characterization of Growing Dendrites in CrMnFeCoNi High-Entropy Alloy by Time-Resolved and In-Situ Tomography”, K. Nakano, T. Narumi, K. Morishita, H. Yasuda, *Materials Transactions* **61** (2020) 596-604.
- [7] “In-situ observation of dislocation dynamics near heterostructured interfaces”, Y. Zhu, H. Zhou, C. Huang, X. Sha, X. Ma, H. Höppel, M. Göken, X. Wu, K. Ameyama, X. Han, *Materials Research Letters* **7** (2019) 376-382.
- [8] 【若手】“Development of strong and ductile metastable face-centered cubic single-phase high-entropy alloys”, *D. Wei, X. Li, S. Schönecker, J. Jiang, W.-M. Choi, B.-J. Lee, H.S. Kim, A. Chiba, H. Kato, *Acta Materialia* **181** (2019) 318-330.

- [9] 【若手】“Nitinol powders generate from Plasma Rotation Electrode Process provide clean powder for biomedical devices used with suitable size, spheroid surface and pure composition”, T.-I. Hsu, C.-M. Wei, L.-D. Wu, Y.-P. Li, A. Chiba, *M.-H. Tsai, *Scientific Reports* **8-1** (2018) 13776.

【A03 力】

- [1] 【若手】“Natural-mixing guided design of refractory high-entropy alloys with as-cast tensile ductility”, *Shaolou Wei, Ji Yun Kang, Yong Zhang, Sang Jun Kim, Yongjie Zhang, Tadashi Furuhashi, Eun Soo Park, and Cemal Cem Tasan, *Nature Materials* (2020) accepted.
- [2] 【若手】“Weak influence of ferrite growth rate and strong influence of driving force on dispersion of VC interphase precipitation in low carbon steels”, *Yongjie Zhang, Kunio Shinbo, Goro Miyamoto, Tadashi Furuhashi, *Acta Materialia* **186** (2020), 533-544
- [3] “Chemical boundary engineering: a new route towards lean, ultrastrong yet ductile steel”, *Ran Ding, Yingjie Yao, Binhan Sun, Geng Liu, Jianguo He, Tong Li, Xinhao Wan, Zongbiao Dai, Dirk Ponge, Dierk Raabe, Chi Zhang, Andy Godfrey, Goro Miyamoto, Tadashi Furuhashi, Zhigang Yang, Sybrand van der Zwaag, Hao Chen, *Science Advances* **6-13** (2020) 1430.
- [4] “Vacancy formation enthalpy in CoCrFeMnNi high-entropy alloy”, *K. Sugita, N. Matsuoka, M. Mizuno, H. Araki, *Scripta Materialia* **176** (2020) 32–35.
- [5] “Effect of Al Content and Cold Rolling on the Microstructure and Mechanical Properties of Al₅Cr₁₂Fe₃₅Mn₂₈Ni₂₀ High-Entropy Alloy”, *S. Elkhatatny, M. A.-H. Gepreel, A. Hamada, K. Nakamura, K. Yamanaka, and A. Chiba, *Materials Science and Engineering A* **759** (2019) 380-390.
- [6] “Solidification microstructures of the ingots obtained by arc melting and cold crucible levitation melting in TiNbTaZr medium-entropy alloy and TiNbTaZrX (X = V, Mo, W) high-entropy alloys”, T. Nagase, K. Mizuuchi, T. Nakano, *Entropy* **21** (2019) 483.
- [7] 【連携】“Microstructural details of hydrogen diffusion and storage in Ti–V–Cr alloys activated through surface and bulk severe plastic deformation”, *Marc Novelli, Kaveh Edalati, Shota Itano, Hai-Wen Li, Etsuo Akiba, Zenji Horita, Thierry Grosdidier, *International Journal of Hydrogen Energy* **45-8** (2020) 5326-5336
- [8] 【若手】“Missing-Linker Metal-organic Frameworks for Oxygen Evolution Reaction”, Z. Xue, K. Liu, Q. Liu, Y. Li, Manrong Li, C. Su, N. Ogiwara, H. Kobayashi, H. Kitagawa, M. Liu, G. Li, *Nature Communications* **10** (2019) 5048.
- [9] “Proton Conductivity and Sorption Study in Three Sulfonic Group Functionalized Mixed Ligand Coordination Polymers and the Impact of Structural Dynamicity on Their Property”, D. Maity, S. Ghosh, K. Otake, H. Kitagawa, D. Ghoshal, *Inorganic Chemistry* **58-19** (2019) 12943-12953.

3) 解説・総説 (総計 35 件: 主要 9 件を示す)

- [1] 【若手・連携】ミニ特集「ハイエントロピー合金の研究最前線」“FCC型等原子量ハイエントロピー合金の平均原子変位と強度特性” *岡本 範彦, 弓削 是貴, 乾 晴行, 日本金属学会誌「まてりあ」 **57** (2018) 312-316.
- [2] 【若手】“合金化熔融亜鉛めっき鋼板皮膜を構成するFe-Zn系金属間化合物の結晶構造と力学特性” *岡本 範彦, 乾 晴行, 日本金属学会誌「まてりあ」 **57** (2018) 169-175.
- [3] 【若手】“高エントロピー合金の塑性変形挙動と単結晶マイクロピラー圧縮試験法による固溶強化量測定” *岡本範彦, 乾 晴行, 日本機械学会誌 **121** (2018) 12-15.
- [4] “高エントロピー合金の強ひずみ加工による組織極微細化” *土谷 浩一, チャン ジェン, 日本機械学会誌 **121** (2018) 28-32.
- [5] 【若手】“マテリアルデザインのための粒子集積化技術” 横井敦史・Wai Kian TAN・武藤浩行, セラミックス **55** (2020) 36.
- [6] “材料工学へのデータサイエンス手法の適用” *小山敏幸, 塚田祐貴, ふえらむ **23** (2018) 680-686.
- [7] 【若手】“ハイエントロピー合金の結晶粒超微細化” 吉田周平, 池内琢人, Bhattacharjee Tilak, Bai Yu, 柴田曉伸, 辻伸泰, 粉体および粉末冶金 **67** (2020) 113-120.
- [8] 【若手】“純チタンに匹敵する生体適合性を有する生体用bcc型ハイエントロピー合金の設計と開発” 當代光陽, 永瀬丈嗣, 中野貴由, チタン **68** (2020) 59-63.
- [9] 【若手】“元素間融合を基軸とする物質開発と応用展開” 草田康平 北川宏, 化学工学誌 **84** (2020) 11-14.

4) 著書 (総計 11 件: 主要 4 件を示す)

- [1] “First-Principles Modeling of Intrinsic Materials Strength”, S. Ogata; Handbook of Materials Modeling: Applications: Current and Emerging Materials (2019) (eds. W. Andreoni and S. Yip, Springer).
- [2] 「材料設計計算工学 計算熱力学編(増補新版)」,阿部太一,内田老鶴圃 (2019).
- [3] 「材料設計計算工学 計算組織学編(増補新版)」,小山敏幸,内田老鶴圃 (2019).
- [4] 「第3 章バルク熱電材料のハイスループットな研究手法」in 「次世代熱電変換材料・モジュール開発と信頼性」,池田輝之,シーエムシー出版 (2020).

5) 国内・国際学会発表 (総計 418 件, 基調講演・招待講演を含まない: 詳細省略)

6) 基調講演・招待講演 (総計 205 件, うち若手研究者によるもの 23 件: 主要 15 件を示す)

- [1] H. Inui, “Single-crystal mechanical properties of equiatomic CrMnFe-CoNi high-entropy alloy and its derivative equiatomic quaternary and ternary medium-entropy alloys” Possibilities and Limitations of Quantitative Materials Modeling and Characterization 2019 (Bernkastel-Kues,Germany) 2019.5.19-5.22.
- [2] Haruyuki Inui, Kyosuke Kishida, Kodai Niitsu“Single-crystal Mechanical Properties of Equiatomic CrMnFeCoNi High-entropy Alloy and its Derivative Equiatomic Quaternary and Ternary Medium-entropy Alloys”, Materials Structure & Micromechanics of Fracture(MSMF9) (Brno,Czech Republic). 2019.6.26-28.
- [3] Haruyuki Inui, Kyosuke Kishida, Kodai Niitsu, “Effects of Heat-Treatment on Mechanical Properties of Equiatomic CrMnFeCoNi High-Entropy Alloy and Its Derivative Equiatomic Quaternary and Ternary Medium-Entropy Alloys”, 2019 MRS FALL MEETING & EXHIBIT (Boston, MA, U.S.A) 2019.12.1-6.
- [4] Tsuchiya, Koichi, QIANG, Jian, LEE, Jein, MURAKAMI, Hideyuki. “Exploring Opportunity of High Entropy Alloys: Microstructure Control, High Temperature Oxidation Resistance and Stacking Fault Energy”, THERMEC 2018 (Paris, France) 2018.7.9.
- [5] 【若手】Soo-Hyun Joo, Takeshi Wada, Hidemi Kato, “Evolution of porous structure and unique orientation relationships during liquid metal dealloying from FCC precursor to BCC ligament”, International Symposium on Creation of Life Innovation

- Materials for Interdisciplinary and International Researcher Development Satellite (iLIM-s) (Nagoya, Japan) 2019.11.01-03
- [6] 【若手】Y. Aoyagi, D. McDowell, “Multiscale crystal plasticity modeling on martensitic transformation based on mixture law”, International Conference on Plasticity, Damage and Fracture (ICPDF) 2020 (Rivera Maya, Mexico) 2020.1.5.
- [7] S. Ogata, Y. Sato, T. Ohmura and S. Shinzato, “Atomistic prediction of the temperature- and loading-rate-dependent pop-in load in nanoindentation”, The 4th International Symposium on Atomistic and Multiscale Modeling of Mechanics and Multiphysics (ISAM4-2019) (Nuremberg, Germany) 2019.8.5-8.
- [8] T. Tsuru, T. Suzudo, “First-principles calculations of the motion of screw dislocation around solutes in W alloys”, 6th FMTCP Workshop (Walla Walla, USA) 2019.6.24-26.
- [9] Y. Tsukada, E. Harata, T. Koyama, “Microstructure-property analysis accelerated by machine learning technique with phase-field method and image-based property calculations”, The 13th World Congress on Computational Mechanics (New York, USA) 2018.7.22-27.
- [10] Y. Chen, T. Nguyen-Dung and A. Saengdeejing, “High entropy alloy effect on stability of potential permanent magnets”, (TMS2020) (San Diego, USA) 2020.2. 24-27.
- [11] Nobuhiro Tsuji, Tilak Bhattacharjee, Yu Bai, Nokeun Park, Shu Kurokawa, Pinaki Bhattacharjee, Rajeshwar Eleti, Shuhei Yoshida, “Microstructure Control and Resultant Change in Mechanical Properties in High Entropy Alloys”, MRS Fall Meeting 2018, (Boston, Massachusetts, USA) 2018.11.25-30.
- [12] K. Ameyama, “Role of UFG-shell network on improving mechanical properties in harmonic structure material”, TMS Annual Meeting & Exhibition (San Diego, USA), 2020.2.24-28.
- [13] 【若手】E-W. Huang, C-W. Tsai, A-C. Yeh, S.Y. Lee, S. Harjo, P. Liaw, T-N. Lam, Y-S. Chou, “Element Effects of CoCrFeNi-based High-entropy Alloys on Low-cycle Fatigue”, TMS 149th Annual Meeting & Exhibition (San Diego, USA) 2020.02.23-27.
- [14] Tadashi Furuhashi, Yongjie Zhang, Mitsutaka Sato, Goro Miyamoto, “Light element strategy in advanced high strength steels”, The 9th International Conference on Advanced Materials Processing (ICAMP-9) (Shenyang, China) 2018. 9.25-28.
- [15] Hiroshi Kitagawa, “Density-of-States Engineering For New Nano-Materials”, Frontier Symposium in Chemistry 2020, (Thiruvananthapuram, India) 2020. 1. 17-18.

7) 受賞 (総計 34 件, うち若手研究者の受賞 3 件, 学生の受賞 29 件: 主要 12 件を示す)

- [1] 乾 晴行 (公財)本多記念会 第 16 回本多フロンティア賞
「ナノ・メゾ構造を制御した先進構造材料の創製」, 学士会館, 2019.5.31.
- [2] 【若手】池上健太, 奥山彫夢, 森川龍哉, 田中将己, 竹中雅紀, 学生ポスターセッション優秀賞
「マイクロカンチレバーを用いた Fe-3%Si 鋼の迂り変形挙動解析」日本鉄鋼協会 178 回秋季講演大会, 岡山大学, 2019.9.12. (指導学生の受賞)
- [3] 【若手】Masaomi Okutani, Best Poster Presentation Award, “Plastic deformation behavior of single crystals of Fe-Cr sigma phase at room temperature”, Intermetallics 2019 (Bad Staffelstein, Germany) 2019.9.30-10.4. (指導学生の受賞)
- [4] 【若手】Masaomi Okutani, Nobuyuki Kadota, Kyosuke Kishida, Haruyuki Inui, Best Poster Award, “Micropillar compression of single crystals of Fe-Cr sigma phase”, Beyond Nickel-Based Superalloys III (Nara Kasugano International Forum) 2019.6.11-14. (指導学生の受賞)
- [5] 【若手】鈴木飛翔, 森川龍哉, 田中将己, 藤瀬淳, 小野敏昭, ポスター賞, 「Cz-Si 単結晶の塑性変形挙動解析」, 日本金属学会 2018 年秋季 (第 163 回) 講演大会, 仙台国際センター, 2018.09.19 (指導学生の受賞)
- [6] 【若手】K. Ehara, M. Asakura, K. Niitsu, K. Kishida, H. Inui, Best Poster Award, “Plastic Deformation of Single Crystals of a Cr-Co-Ni Equiatomic Medium Entropy Alloy”, 2018 MRS Fall Meeting (Boston, MA, U.S.A) 2018.11.25-30. (指導学生の受賞)
- [7] 【若手】Masomi Okutani, Nobuyuki Kadota, Kyosuke Kishida, Haruyuki Inui, Best Poster Award, “Plastic Deformation Behavior of Single-Crystalline Micropillars of the Fe-Cr Sigma Phase”, 2018 MRS Fall Meeting (Boston, MA, U.S.A) 2018.11.25-30. (指導学生の受賞)
- [8] 乾 晴行, 日本金属学会 増分量賞, 「合金化溶融亜鉛めっき鋼板の防食性改善—マイクロ力学試験からの基礎知見」, 日本金属学会 2019 年春期 (第 164 回) 講演大会 (東京電機大学 東京千住キャンパス) 2019.3.21.
- [9] 【若手】Gerelmaa Khuchitbaatar, Hidemi Kato, Best Poster Presentation, “Preparation of nanoporous tungsten by liquid metal dealloying”, III All-Russian Conference (with international participation) «Hot Topics in Solid State Chemistry: From New Ideas to New Materials» Novosibirsk, Russia, 2019.10.03 (指導学生の受賞)
- [10] 加藤秀実, 和田武, 第 43 回研究進歩賞, 「金属溶湯脱成分法を用いたポーラス金属粉末の開発」一般社団法人粉体粉末冶金協会, 2019.06.04
- [11] 【若手】藤原英道, 金子 洋, 大谷博司, 榎木勝徳, 宇都宮 裕, 日本銅学会第 53 回論文賞, 「銅合金における加工組織シミュレーションモデルを用いた変形双晶組織と強度の解析」, 銅と銅合金 58(2019)45-51. 2019.12.19
- [12] 【若手】林直宏, 中島一喜, 榎木勝徳, 大谷博司, 日本金属学会論文賞 (若手講演論文部門), 「Al-Cu-Mg 3 元系状態図の熱力学的解析」日本金属学会誌 83(2019)378-387. 2020.3.17 (指導学生の受賞)

8) 特許 (総計 4 件)

- [1] 発明の名称: ポーラス金属、特願 2019-019274、出願日: 2019.2.6、加藤秀実、朱修賢
- [2] 発明の名称: Device and method for manufacturing alumina composite particle, WO 2018021468, H. Muto, A. Yokoi, N. Kimura, G. Kawamura, A. Matsuda
- [3] 発明の名称: 双晶変形が抑制されたチタン合金の製造方法及びチタン合金、特願 2019-038687、出願: 2019 年、鮎山 恵、川畑美絵、南谷大樹、長野健太郎
- [4] 発明の名称: 炭素含有鉄合金材の製造方法及び炭素含有鉄合金材、特願 2018-157141、出願: 2018 年、鮎山 恵、入谷竜平、川畑美絵

9) 報道など (総計 13 件, うち新聞発表 11 件, WEB 2 件: 主要 13 件を示す)

- [1] 【新聞】土谷浩一「元素 5 種で形状記憶合金」日刊産業新聞, 2019.10.17.
- [2] 【新聞】土谷浩一「形状記憶ハイエントロピー合金」鉄鋼新聞, 2019.10.17.
- [3] 【新聞】土谷浩一「形状記憶するハイエントロピー合金」化学工業日報, 2019.10.17.

- [4] 【WEB】加藤秀実「ハイエントロピー合金のナノポーラス化に成功 金属に多機能性をもたらす 2 つの技術の複合効果を利用し、新しい材料分野を開拓」 2019.12.19.
- [5] 【WEB】ステファヌス・ハルヨ「極低温で現れる先進的合金の特異な変形メカニズムを解明」 <http://j-parc.jp/c/press-release/2020/03/26000503.html>
- [6] 【新聞】古原 忠「新所長に聞く」 日刊産業新聞, 2020.4.20.
- [7] 【新聞】飴山 薫、永瀬丈嗣「インプラント合金、適合性高く高強度 阪大など、25 年めど実用化」 日刊工業新聞, 2020. 01. 29.
- [8] 【新聞】永瀬丈嗣「人工骨など向け高強度の新合金」 日本経済新聞, 2019. 08. 05.
- [9] 【新聞】北川宏「現代の錬金術 別々の金属で新合金」 毎日新聞・共同通信, 2019.11.15.
- [10] 【新聞】北川宏「ナノ粒子レベル均一な合金量産」 京都新聞, 2019.11.23.
- [11] 【新聞】北川宏「希少元素 代替や再利用進む」 読売新聞, 2019.11.17.
- [12] 【新聞】北川宏「ナノ固溶合金の量産技術」 化学工業日報, 2019.10.2.
- [13] 【新聞】北川宏「フルヤ金属と京大、固溶合金の連続合成が可能なら量産化技術を共同開発」 日本経済新聞電子版, 2019.9.30.

(2) 領域の公開・広報活動

1) 領域のホームページをニューズレター

・領域ホームページ

・ニューズレター



図 6.1. 領域ホームページ(<https://highentropy.mtl.kyoto-u.ac.jp/>)

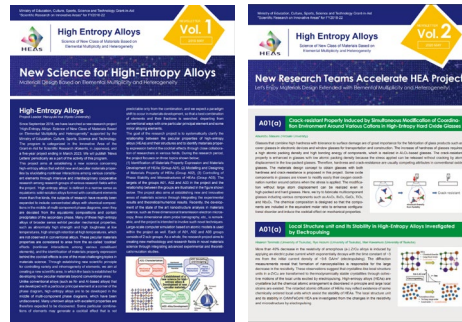


図 6.2. ニューズレター (第1号:2019年5月発行、第2号:2020年5月発行)

2) 論文特集号 (2件)

- [1] まてりあ小特集号「ハイエントロピー合金の材料科学」(Vol. 57, No. 7 (2018)).
- [2] Materials Transactions, Special Issue on Materials Science on High-Entropy Alloys (Vol. 61, No.4 (2020)).

3) 書籍 (1件)

- [1] ハイエントロピー合金～カクテル効果が生み出す多彩な新物性, 内田老鶴圃(2020年4月), 乾 晴行(編著).

4) 異分野学術交流を目指した国内学会・シンポジウムなど (総計 24 件: 主要 5 件を示す)

- [1] 日本学術振興会第 133 委員会, 第 242 回研究会「ハイエントロピー合金の材料科学」, (東京理科大学) 2019.1.26.
- [2] 三機関連携シンポジウム, 「物質構造の階層性とフォノン物性の理解」, (秋葉原 UDX), 2019.9.17.
- [3] ESISM 公開講演会, 「変形の基礎問題」, (学士会館), 2019.9.18.
- [4] 日本金属学会, 高温変形の組織ダイナミクス研究会「2019 年度夏の学校」, (石川県青少年研修センター), 2019.9.23-25.
- [5] 日本鉄鋼協会東北支部, 湯川記念講演会, (弘前大学創立 50 周年記念会館), 2019.12.4.



図 6.3. 書籍表紙

5) 国際交流を目指した国際会議など (総計 12 件, うち主催 5 件, 共催 7 件: 主要 5 件を示す)

- [1] MRS 2018 Fall Meeting, High-Entropy Alloys II (Boston, MA), November 25, 2018. 講演数: 55 件, ポスター発表: 12 件.
- [2] Beyond Nickel-Base Superalloys III (Nara, Japan) June 14-18, 2019. 講演数: 46 件, ポスター発表: 11 件
- [3] 4th International Symposium on Hetero Structure and Advanced Materials (Harmonic 2019), (Shiga, Japan), October 26, 2019. 講演数: 12 件, ポスター発表: 19 件.
- [4] International Congress on High Entropy Alloys, (Seattle, WA), November 17-21, 2019. 講演数: 126 件, ポスター発表: 42 件.
- [5] Materials Research Meeting 2019, Fundamental Issues in Structural Materials, (MRM2019), (Yokohama, Japan), December 10-14, 2019. 講演数: 36 件, ポスター発表: 6 件.

(3) 一般向けアウトリーチ活動

1) 一般向けシンポジウムの開催など (総計 2 件)

- [1] 京都大学アカデミックデイ 2019, 「新しい材料設計: ハイエントロピー合金」, 乾 晴行, 京都大学吉田キャンパス, 2019.9.15.
- [2] 京都大学アカデミックデイ 2018, 「新しい材料設計: ハイエントロピー合金」, 乾 晴行, 京都大学吉田キャンパス, 2018.9.22.

2) 展示会などへの出展 (総計 1 件)

- [1] 武藤浩行, 横井敦史, Tan Wai Kian, “表紙写真提供: 第 44 回セラミックスに関する顕微鏡写真展出品作品「静電相互作用による集積技術を利用した単分散複合顆粒」“日本セラミックス協会誌(CERAMICS JAPAN), 第 55 巻 2020 年 表紙の採択, 2020.1.

7 研究組織の連携体制

研究領域全体を通じ、本研究領域内の研究項目間、計画研究及び公募研究間の連携体制について、図表などを用いて具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

(1) 研究組織と領域内で設定している研究項目

本領域が5年間の研究期間内に明らかにしようとする研究項目は、ハイエントロピー合金の基本的課題に対応した以下の3点であり、それぞれの課題に対応した計画研究班を設置するとともに、公募研究班によりそれぞれの計画研究を強化するように組織している。本領域には、計画研究の研究代表者(6名)、研究分担者(22名)、連携研究者(8名)、及び公募研究の研究代表者(19名)の総勢55名が20研究機関から結集している。

- ① 力学及び新規材料特性の発現メカニズム解明 (A01班)
- ② 計算科学による力学物性・相安定性の学理解明 (A02班)
- ③ 材料創製プロセスとナノ・マイクロ組織制御 (A03班)

これらの研究項目に系統的かつ組織的に取り組むために、以下のように、各班ごとに2つの計画研究班を置いている。本領域研究の基盤となるハイエントロピー合金の構造と特異な力学・機能特性の発現メカニズムの根本的理解には、電子・原子論の観点からの動力学的、統計熱力学的情報の獲得(A02)、温度、応力などの環境作用下での原子もしくはそれに準じるスケールでの原子運動の解析や直接観察(A01)、特異現象が生じる高品質な材料の創製(A03)が不可欠である。その理解を具体的な材料のマクロな性質と結びつけ、新しい構造・機能材料の創造へと繋げるためには、マルチスケール解析・マテリアルズ・インフォマティクスの手法(A02)による予測と、予測に基づく材料創製(A03)、さらにはそれに対する物性評価試験(A01)やマルチスケール階層構造解析(A01、A03)による実験検証が不可欠である。

- 【A01ア】ハイエントロピー合金の特異な力学特性の支配因子解明
- 【A01イ】ハイエントロピー効果に基づく新材料創製と新機能創出
- 【A02ウ】計算材料科学によるハイエントロピー合金の力学特性の解明と制御
- 【A02エ】計算熱力学と計算組織学の融合によるハイエントロピー合金設計の加速
- 【A03オ】先端プロセスによるハイエントロピー合金の作製とナノ・マイクロ組織制御
- 【A03カ】ハイエントロピー合金に内在する元素間相互作用と相安定性原理の実験的解明

公募研究は上記の各研究項目に対応するように選定しており全体会議はもちろん、各計画研究班内・間の研究会にも出席し、計画研究班と連携を深めるとともに、研究強化に強く寄与している。

(2) 総括班研究支援部会の関与と連携研究の推進

【大型施設利用】:初年度及び2年度初頭に大型計算機(東北大学金属材料研究所スーパーコンピューター)、大型実験施設(SRing-8, J-PARC)の利用のための講習会を開催し、大型施設の利用支援を行っている。特に公募研究の研究代表者にはこのような大型研究施設の指導的な使用者の立場の研究者も多く、共同利用を通じた連携・共同研究の促進が図られている。

【領域内設備共同利用】:初年度にアンケートにより共有設備として使用できる各計画研究の研究者の所有研究設備を把握し、領域ホームページ等を通じて公開し、公募研究の研究者でも簡単な予約のみで使用できるように整備した。現状で200を越える研究設備が登録されており、研究設備の重複購入を避け、共同研究や若手人材交流の促進が顕著にみられる。

【共通試料・オーダーメイド試料配布】:単結晶、多結晶試料について3研究拠点を指定して領域内に共通試料、オーダーメイド試料の配布を行い、研究進展の促進を図っている。公募研究の研究者からの需要は多く、連携・共同研究の促進に顕著な成果が見られている。

(3) 有機的な連携研究の成果

上記のような総括班研究支援部会の行う、大型実験・計算機施設の共同利用を通じた連携・共同研究の促進、共通・オーダーメイド試料の配布、各研究者所有設備の共通設備化を通して、領域内の連携・共同研究は盛んになっており、研究開始から2年間で公表した学術論文の5%、国内・国際会議での発表の8%が連携研究の成果である。

8 若手研究者の育成に係る取組状況

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究遂行に携わった若手研究者（令和2年3月末現在で39歳以下。研究協力者やポスドク、途中で追加・削除した者を含む。）の育成に係る取組状況について、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

(1) 総括班における若手人材育成部会の設置

本研究領域総括班の中に若手人材育成部会を設置し、若手研究者の啓発、連携及び自律促進を行うとともに、若手人材育成を通じて若手研究者からのボトムアップによって領域研究の全体の活性化を図っている。本研究領域での研究活動を通じて、材料科学・材料工学を基軸とする我が国の学術の更なる発展を担う優秀な研究者・技術者を養成するための施策を実施し、ハイエントロピー合金に関わる研究を中心とした領域の学術研究活動の一環として、参画する個々の研究者の研究分野の枠を超えた横断的かつ連携的な研究の場の提供と交流推進を図っている。

(2) 若手人材育成部会の若手研究者育成に関する活動

1) 若手研究者の国内・国際人材交流

若手人材交流や領域内共同研究の促進を図るため各研究者の所有研究設備を領域内共通設備として開放している。この制度を使って、1週間以上の滞在を伴う若手人材交流が11件成立している。また、6か国9研究拠点からなる「ハイエントロピー合金国際コンソーシアム」協定を締結し、若手を含めた研究者の行き来自由なコンソーシアム内人材交流、国際共同研究の深化の促進を図っている。研究活動に関して広い視野、見識が得られるかを最大の審査項目として、本研究領域総括班審査委員会による厳正な審査を経て、3件を採択し（但し、うち2件は世界的な新型コロナウイルス感染の蔓延に伴ってやむを得ず中止・延期とした）、人材派遣を行った。これらの結果、領域内及び国際間の若手を中心とした共同研究が実験研究、理論研究の枠を超えて数多く立ち上がりつつある。

2) 若手研究者交流会、若手研究会

若手研究者交流会、若手研究会を開催し、領域内の若手研究者に情報交換の場を提供しつつ、自律的研究活動の立ち上げと啓蒙を行った。

【粉体粉末冶金協会 特別セッション】(H31年6月5日、於：東京工業大学)

「金属ガラス・ナノ結晶材料および高エントロピー合金の構造制御と応用に関する新たな展開」

講演：19件(内、40歳未満の講演：7件) 参加者：約30名

【日本材料学会 材料WEEK ワークショップ】(H31年10月16日、於：京都テルサ)

「金属ガラス、高エントロピー合金のメタラジーとメカニクス」

講演：19件(内、40歳未満の講演：9件) 参加者：約40名

【日本金属学会公募シンポジウム「ハイエントロピー合金の材料科学」】(R2年3月16日～18日、於：東京工業大学大岡山キャンパス)：基調講演(8件)、一般講演(22件)、参加者による自由討論を実施した。総参加者150名(うち領域研究者40名、学生60名、その他50名)。

(3) 若手人材育成活動の成果

1) 若手研究者・学生の受賞

領域研究開始から2年間で、多数の賞が若手研究者(3件)と学生(29件)に国内外で授与されており、ハイエントロピー合金の研究分野で、本領域が国際的に高い評価を得ていることが明らかである。主なものを列挙すると以下のようである。

2) 若手研究者・学生の国内・国際学会での発表ならびに基調・招待講演

若手研究者や学生の国内・国際会議での発表は下記のように大変活発に行われている。若手研究者の国内学会での発表は20件であり、国際会議での発表は35件である。そのうち、基調・招待講演は、国内学会で5件、国際会議で19件であり、ハイエントロピー合金分野の若手研究者は、国内のみならず国際的にも高い評価を受けていることがわかる。学生の国内学会での発表件数は207件、国際会議での発表件数は45件と非常に活発であり、次世代を担う研究者の育成も着実に実行されている。

表 8.1. 主な若手研究者・学生の受賞。

受賞者	賞名	会議名
奥谷将臣 (指導教員：乾晴行)	Best Poster Presentation Award	Intermetallics 2019
江原和輝 (指導教員：乾晴行)	Best Poster Award	2018 MRS Fall Meeting
G. Khuchitbaatar (指導教員：加藤秀美)	Best Poster Presentation	III All-Russian Conference

表 8.2. 主な若手研究者・学生の研究発表。

発表者	会議名
E-W. Huang, C-W. Tsai, A-C. Yeh, S.Y. Lee, S. Harjo, P. Liaw, T-N. Lam, Y-S. Chou	TMS 149th Annual Meeting & Exhibition
宮嶋 陽司, 永田 知裕, 石川 和宏	日本金属学会 2020 年度春期 (第 166 回) 講演大会 (基調講演)
P.P. Bhattacharjee, T. Bhattacharjee, I.S. Wani, S.R. Reddy, S. Sheikh, S. Guo, N. Tsuji	The 2nd International Conference on High-Entropy Materials (ICHM 2018)
弓削是貴	日本金属学会 2019 年秋期 (第 165 回) 講演大会 (基調講演)
新山友暁, 下川智嗣	日本金属学会 2018 年秋期大会
Y. Aoyagi, C. Watanabe, M. Kobayashi, Y. Todaka and H. Miura	International Symposium on Plasticity, Damage, and Fracture 2019, (ICPDF 2019)
Y. Aoyagi, A. Sagara, C. Watanabe, M. Kobayashi, Y. Todaka, H. Miura	The 10th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM-10)
Wataru TASAKI, Koichi TSUCHIYA, Takahiro SAWAGUCHI	7th NU-NIMS Materials Genome Workshop
LEE, Jein, TASAKI, Wataru, MURAKAMI, Hideyuki, TSUCHIYA, Koichi	6th NU-NIMS Materials Genome Workshop

9 研究費の使用状況・計画

研究領域全体を通じ、設備等（本研究領域内で共用する設備・装置の購入・開発・運用、実験資料・資材の提供など）の活用状況、研究費の使用状況や今後の使用計画、研究費の効果的使用の工夫について、総括班研究課題の活動状況と併せて具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

(1) 領域予算の概要

【領域全体予算の内訳】 本領域の5箇年の予算内訳は、計画研究が75%、公募研究が22%、総括班が3%である。研究支援活動を中心とした総括班の予算が比較的多いのが特徴であり、領域のプロジェクト研究を効率的に進めることを可能にしている。

【総括班予算の内訳】 総括班の5箇年の予算内訳は、研究活動支援経費が15%、若手人材育成経費が15%、国際会議開催経費が25%、その他の運営経費が45%である。本領域の研究活動に必須な共通試料の配布や連携・共同研究のコアとなる大型実験施設、大型計算機設備の利用支援をすることは、本領域研究の推進に不可欠であり、総括班の研究活動支援経費に計上しているため、その費用割合が高くなっている。

【領域全体の研究経費の使用状況】

設備備品費の大半は、研究開始から2年の間に導入が完了し、速やかに研究が立ち上がり加速されている。また、若手人材育成は本領域研究の最重要課題の一つであり、若手研究者、公募班研究者を含めて研究チーム間での研究人材の相互派遣を促進し、各研究者が持つ研究装置を互いに有効利用できるように旅費、人件費の使用執行を行っている。これまで研究は順調に進行しており、ほぼ当初の研究計画に沿って研究費の使用ができています。

(2) 設備等の有効活用

【共通試料作製設備の導入と効果的運用】

ブリッジマン型単結晶試料作製装置を京都大学に、多結晶試料作製装置を物質・材料研究機構に初年度に導入し、共通試料・オーダーメイド試料の配布を領域全体に行っている。現時点までに、単結晶試料12本、多結晶試料26種の供給を計画班及び公募班に完了している。

【各計画研究実施のための設備導入と効果的運用】

計画研究及び公募研究においても、当初計画に従って、必要な設備を速やかに導入し、直ちに運用を開始している。上記の単結晶試料作製装置、多結晶試料作製装置（高圧ねじり加工用アンビル）を含めて、主要な設備は初年度および2年度に導入を完了し、導入設備を活用して研究を効果的に実施している。

【計画研究実施者所有設備の共通設備化による効果的運用】

各研究者が持つ研究装置を互いに有効利用できるよう共通設備化を行っている。微細組織解析装置(TEM, STEM, SEM, 3D-AP)、各種力学特性試験機(万能力学試験機、クリープ試験機)、結晶作製装置(単結晶試料作製装置、多結晶試料作製装置、アーク溶解炉)など32の装置が共通設備として登録され、班内、領域内すべての研究者が簡単な予約のみで使用できる体制を整備している。

(3) 若手人材育成経費の有効活用

若手人材育成は本領域研究の最重要課題の一つであり、若手研究者、公募班研究者を含めて以下の3項目の事業を実施している。

- ①研究チーム間での研究人材の相互派遣:班内、領域内の異分野若手研究者班の交流を促進し、共同研究を促進するとともに、各研究者が持つ研究装置を互いに有効利用するために立案した。現時点まで、班内だけで3件の相互派遣が実現している。
- ②海外の先端研究機関への派遣:研究技術の研鑽、国際交流、国際共同研究を促進するために立案した。2年度に2件実現する予定であったが、新型コロナウイルス感染の蔓延のため、延期となっている。
- ③若手研究会:若手研究者同士の異分野交流を促進するため立案した。初年度1回、2年度2回(うち1回は新型コロナウイルス感染の蔓延のため延期)開催している。

(4) その他、研究費の効果的な使用

【班内交流の推進】

班内での研究会、若手研究会、連携研究会に加えて、施設見学会を計画班研究者の所属機関で開催することにより、共通設備の詳細を共有することができ、研究活動を促進するとともに、班内の交流を活性化・活発化することができた。

【共通試料の作製・配布】

研究支援員を配置し、原材料費、人件費を予算配分することで、共通試料の作製・配布を円滑に行うことができた。

10 今後の研究領域の推進方策

研究領域全体を通じ、今後の本研究領域の推進方策について、「革新的・創造的な学術研究の発展」の観点から、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、今後公募する公募研究の役割を明確にすること。また、研究推進上の問題点がある場合や、国際的なネットワークの構築等の取組を行う場合は、その対応策や計画についても記述すること。

(1) 研究領域の推進方策

1) 領域推進の基本方針

本領域の目的達成に必要な不可欠な研究分野から研究者を結集し、個々の能力を最大限引き出しつつ、学理探求のプロジェクト研究としてのベクトル・波長を揃えて、「革新的・創造的な学術研究の発展」を目指している。これを達成するため、特に以下の項目に注意を払っている。

- ① **強力な研究者による知の創造**: 多様な研究分野から結集した研究者が、公平かつ開け広げな議論を通して知的好奇心を満足させつつ、その能力を十分発揮しながら、新たな学理の構築に挑戦する。
- ② **プロジェクト研究としてのベクトル・波長合わせ**: 学理探求のプロジェクト研究であることを周知徹底し、個々の研究者の意識を統一し、研究のベクトル・波長合わせが可能となるよう研究会等を戦略的に企画し、研究者間の知的交流と刺激的な研究環境の醸成に努める。
- ③ **若手・異分野交流の促進**: 新たな学術領域を創製・展開する素養を構築し、我が国の学術分野の進歩・発展に貢献する若手研究者を中心とした人材育成を促進する。

2) 研究項目毎の研究の推進方針

【A01 班: 力学及び新規材料特性の発現メカニズム解明】

① 短範囲規則化 (SRO) などハイエントロピー合金中の特徴的な欠陥構造の定量的解明およびその力学特性との相関の調査を、大型実験施設など先端解析技術を活用して総合的に解明する。また、極低温での降伏強度及びその温度依存性から解明を進め、SROが強度に及ぼす影響について転位と溶質原子の相互作用の本質からの解明を目指す。変形双晶、マルテンサイト変態の形成メカニズムを合金の FCC-HCP 構造間のエネルギー差に着目して解明し、変形能、形状記憶特性に富んだ新合金の開発指針の解明を目指す。

② これまでの研究により金属、セラミックス、結晶質、非晶質の様々な材料において構造・機能材料用のハイエントロピー材料の創製技術を確立してきた。今後は熱力学計算と連携したハイエントロピー材料の組成探査を加速するとともに、構造解析とも連携してハイエントロピー材料の組成や内部構造と機能性の関係を明らかにすることで新機能の創出を達成する。

【A02 班: 計算科学による力学物性・相安定性の学理解明】

① これまでに構築したニューラルネットワークポテンシャルなどの新規原子論的解析手法を駆使し、各種合金組成を有するハイエントロピー合金の短距離秩序構造の特性や、それが合金中の欠陥構造や力学特性に与える影響を根源的に明らかにする。得られた原子論的知見に基づき、メゾ-マクロスケールでの材料挙動を表現可能な構成モデルを構築し、原子レベルの各種イベントの巨視的機械的特性への影響を明らかにすることによって高強度、高延靱性ハイエントロピー合金の設計指針の構築を目指す。

② HEA 状態図における熱力学パラメータおよび拡散係数などの材料定数等の整備を、順問題および逆問題手法の双方から継続的に進める。また機械学習ノウハウを当該分野に広く展開し、必要な情報を効率的に抜き出す各種最適化技術を高度化する。特に HEA 固溶体の平均場的描像と、短範囲規則などの原子的描像の材料科学を深化させるとともに、不均一系の拡散理論を援用し、HEA の拡散に対する理解を進展させる。

【A03 班: 材料創製プロセスとナノ・マイクロ組織制御】

① 現時点までに得られた各種プロセッシング中に生じるハイエントロピー合金の特異なナノ・マイクロ組織形成の機構を明らかにし、優れた特性を有するハイエントロピー合金実現のための指導原理とプロセス条件を、領域内共同研究および国際共同研究により解明する。

② FCC ハイエントロピー合金の構成元素からなる3元系高合金の微細構造評価を、TEM/STEM, X線散漫散乱/XAFS, 3DAP等のマルチスケール解析により解明する。隠れた‘元素’である原子空孔の実験および理論解析をBCC系に拡大するとともに、FCC高合金への窒化の応用により相安定性におよぼす侵入型元素の影響について検討する。またSANS解析との比較、合金特性のハイスループット解析の結果も参考に対象の選別を行い、効率の良い研究を進める。

3) 組織的かつ戦略的な運営による有機的な領域内連携の推進

これまで、総括班を中心とした以下の活動を中心として有機的な領域内連携の推進を進めてきた。今後もこれを継続するとともに、若手人材育成、異分野学術交流、国際学術交流などさらに強化して、有機的な領域内連携を推進していきたい。

- ① 「全体会議」、「班会議」、「総括班会議」などの連携研究の企画・調整や「連携会議」、「若手研究会」などの企画・調整を通じた連携研究の実行。
- ② 「共通試料配布」によるデータ互換性の担保とホームページを通じての研究成果のリアルタイム共有化。
- ③ 「大型施設利用促進」、「領域内設備共同利用」による研究経費の有効活用、共同研究や若手・異分野研究者人材交流の促進。
- ④ 共同研究や若手人材交流の促進。特に、上記の「領域内設備共同利用」を積極的かつ強力に推進している。
- ⑤ 「ハイエントロピー合金国際コンソーシアム」協定を通じた、若手研究者を中心とした行き来自由なコンソーシアム内人材交流、国際共同研究の深化の促進。

4) 本領域研究終了後の展開を目指した若手人材育成、異分野学術交流の推進

本領域研究が終了した後も、特に若手研究者たちが、本領域研究で培われた経験をもとに、次の世代の新たな学術振興を先導し、貢献できるように、以下の方針のもとに研究領域の活動を推進している。

- ① 若手・異分野学術交流活動を推進することによって、国際的にも幅広い分野と学術交流を深め、本領域研究の深化を図りつつ、若手・異分野融合型のネットワークを構築する。
- ② 若手研究者を中心に自律的に国内、国際研究会を企画、実行し、本領域研究をボトムアップ的に支えるとともに、新規な学術分野を切り開く国際ネットワークの構築を図る。
- ③ 上記の活動を通して、新たな学術領域を創製・展開する素養を構築し、我が国の学術分野の進歩・発展に貢献する。

(2) 領域研究を推進する上での問題点とその対応策

- ① 本領域研究の目的を達成するために必要な研究分野の研究者を集めたため、本領域研究に参加してハイエントロピー合金の研究に初めて携わる研究者が、全参画研究者の85%に上り、領域研究の意思の統一、ベクトル合わせには多少時間がかかった。しかし、現在では、班会議に加えて、連携会議、若手研究会を通して参画研究者の情報の共有と研究ベクトル合わせ、意思統一が実現でき、領域研究が順調に進展している。今後も、研究者間の連携強化を更に図り、領域研究を推進していく予定である。
- ② 公募研究は合計19件採択することができ、セラミックスなど非金属系材料のハイエントロピー効果に関連した研究や触媒などの新規機能物性の研究、そのためのナノ粉末作製に関する研究など計画研究によりカバーできていない多様な研究分野からの提案を取り込むことができた。しかし、一方で、ハイエントロピー合金の構造、強化原理の解明を目指した計算材料科学分野からの応募は少なく、2件の採択に留まった。ハイエントロピー合金では元素の多様性と不均一性に関わる問題の解明が必須であることから考えれば、計算材料科学からのアプローチは是非とも強力に推進すべきと考えており、第2次公募研究の募集に向けて、異分野学術交流活動を推進しつつ、種々の学会等でパンフレット配布など広報活動を実施している。
- ③ 新型コロナウイルス感染の蔓延により、多人数による直接会合・集会の自粛が余儀なくされており、昨年度の成果報告会、今年度のスタートアップ会議を直接会合・集会形式としては中止せざるを得なかった。このため、領域内の多くの会議、例えば総括班会議などはZOOM等を使った遠隔会議に切り替えて開催している。また、国際連携のためのコンソーシアム会議なども遠隔会議で行っているが、本年度末に予定している本領域主催の国際ワークショップの開催は不透明となっている。著名な海外研究者を招待して開催する予定であるが、現状では海外渡航を恐れる研究者もおり、著作権、知的財産権にも配慮した遠隔会議方式も含めて検討している。

(3) 今後公募する公募研究の役割

計画研究によりカバーしきれない下記分野の研究を中心に補充し、領域研究の強化・活性化を図る。

- ① 斬新な計算手法、実験手法によるハイエントロピー合金の構造、強化原理の解明
- ② 新しい実験・解析手法ならびに新しい理論・計算手法の構築
- ③ セラミックス、有機物質など非金属系材料におけるハイエントロピー効果に関連した構造物性
- ④ 機能物性(電子物性、磁気物性など)の探索

(4) 国際ネットワークの構築と国際共同研究の促進

既に、6か国9研究拠点からなる「ハイエントロピー合金国際コンソーシアム」協定を初年度に締結し、若手を含めた研究者の行き来自由なコンソーシアム内人材交流、国際共同研究の深化の促進を図っている。年に2回程度の国際会議の開催(国内外での主催及び共催)を企画し国際共同研究の促進を図るとともに、成果の発信を行い、国際的な評価を受ける体制を整え、国際研究動向の分析も同時に行っている。これらの拠点の多く(ドイツ、韓国、台湾、アメリカ)は、それぞれの国での国家プロジェクトとしてハイエントロピー合金の研究拠点を持つ国に属するが、新たに国家プロジェクトへ申請を計画する拠点に対しても連携的に協力を行って国際ネットワークの強化を図っている。なお、交流を深めながらも、技術流出等には細心の注意を払っている。

11 総括班評価者による評価

研究領域全体を通じ、総括班評価者による評価体制（総括班評価者の氏名や所属等）や本研究領域に対する評価コメントについて、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

(1) 総括班の評価体制

1) 「研究評価委員会による評価」

総括班に「内部評価委員」と「外部評価委員」で構成される「研究評価委員会」を設置し、領域の研究の評価を行っている。「内部評価委員会」は領域代表者と計画研究班班長で構成され、リーダーの立場から各計画研究、公募研究の強化を行っている。一方、「外部評価委員会」は指導的な立場からの評価を外部委員にお願いするものであり、主として学術的観点から友田陽先生、応用的観点から五十嵐正晃先生に就任いただいて、豊富な経験に基づいた客観的評価をお願いしている。また、国際的な評価を得るために、領域が主催する国際会議に招待する著名海外研究者で「国際外部評価委員会」の Review Panel を構成し、国際的視点からの客観的評価をいただいている。ここでは、領域が主催した Materials Research Meeting (MRM) 2019 国際会議(2019年11月7~11日)に招待した著名海外研究者6名からなる Review Panel に評価をお願いした。

2) 評価方法

国内の評価委員は、「スタートアップ会議」、「研究成果報告会」など「領域全体研究会」だけでなく、「班会議」、「連携会議」にも出席して、個々の計画研究、公募研究だけでなく、領域全体や班全体としての研究計画、成果や総括班の活動内容の採点・評価を行っている。また、国内の外部評価委員の先生方には、評価内容を講評いただき、特に優れた計画研究、公募研究を表彰するなどして、個々の研究者及び領域全体の研究推進に対するモチベーションを高めるようにしている。

3) 外部評価委員

① 友田 陽 (茨城大学・理工学研究科・名誉教授) [専門分野: 鉄鋼材料学]

- ・ 物質・材料研究機構・構造材料研究拠点 解析・評価分野 高強度材料グループ 客員研究員
- ・ 茨城大学工学部長, 理工学研究科長, 日本鉄鋼協会会長, JST 技術評価委員等を歴任

② 五十嵐 正晃 (日鉄ケミカル&マテリアル(株)・常務執行役員) [専門分野: 合金設計, 結晶塑性学]

- ・ 元新日鐵住金(株)技術開発本部フェロー, 先端技術研究所長
- ・ 日本学術会議連携会員, 学術審議会専門委員, JST 技術評価委員等を歴任

③ Easo P. George (米国・テネシー大学・教授) [専門分野: 材料物性学]

- ・ Governor's Chair of Oak Ridge National Laboratory and University of Tennessee
- ・ Member of National Academy of Engineering, Director of the Center for Interface Dominated High Performance Materials of RUB 等を歴任

④ Hyoung Seop Kim (韓国・POSTECH・教授) [専門分野: 計算材料科学, 合金設計]

- ・ Director of the Center for High Entropy alloys, Director of Future Material Discovery Material Program
- ・ Fellow of Korean Academy of Science and Technology, President of Korean Powder metallurgy Institute, Editor of the Journal 'Intermetallics' 等を歴任

(2) 外部評価委員による中間評価用評価コメント

1) 外部評価委員の評価コメント概要

上記4名の外部評価委員からの評価コメントに共通しているのは、研究推進、広報・交流推進、若手人材育成において効率性、機動性を持たせ、広い学問分野に属する研究者間の連携がスムーズに実現するように工夫された組織運営面と、単結晶試料を含めた高品質の共通試料を用いて、試料間のバラツキを排除しつつ、タイムリーに研究試料が各研究者に行き渡り、既に先駆的研究成果が世界に発信されている研究推進面において高い評価をいただいていることである。

2) 友田 陽外部評価委員の評価コメント

本新学術領域研究は、鉄やアルミニウムのようなひとつの元素を主体として合金化する従来の材料工学の常識とは異なり、多元系状態図の中央付近の化学組成から出発して、優れた特性を発現するハイエントロピー材料を探索・創製することを目的にしている。研究体制は、物性(新材料・機能創出と物性発現機構の解明)、計算(物性発現モデリングと合金設計)、創製(ナノ・マイクロ組織制御と相安定性)の3チームでバランス良く構成されている。各個別分野で突出した力量を持つ研究者が結集した布陣の計画班に加えて、ユニークな提案で挑戦する公募班研究者から構成された強力な研究体制が出来上がっている。ハイエントロピー合金の研究自体は海外で先行し、国内では取り組む研究者は少なかったが、我が国が誇るべき理論・計算・実験の融合した材料研究開発手法の適用によって、開始2年間ですでにインパクトの高い世界的な成果が表れている。成果報告会等に参加して、代表者の乾教授を筆頭とする各チームリーダーを中心に国際会議や学会等において精力的な活動が展開され、まさに新しい学術領域を具現化しつつあると感じた。その研究開発は、構造用金属材料のみでなくセラミックスやプラスチック、さらには機能材料へと拡大しつつある。

すでに機能し始めているが、3チームの研究者間の相互理解をさらに深め、厳しく建設的な議論を活発化させてシナジー効果が現れることを期待したい。研究成果は従来の鉄鋼や非鉄合金等のさらなる発展にも役立つので、普遍的な「材料の多様性と不均一性に基づく新しい材料の学理」の確立と我が国の材料研究力の優位性をさらに高めること、特に若手研究会の活発な活動等を通して将来のリーダーが成長することを期待したい。

3) 五十嵐正晃外部評価委員の評価コメント

本領域研究は今世紀初頭に海外で基礎概念が見出されたハイエントロピー合金(HEA)について、未だ明らかでない特異な物性の発現機構を構成元素の多様性と不均一性に着目して解明し、新しい材料の学理として構築しようとするもので、我が国の強みであるものづくり産業の基盤を支えるマテリアル革新力のさらなる強化に資する重要な学術研究である。

領域代表者は本分野に関わる世界トップクラスの研究者を糾合し、最先端の実験と理論の両面から目的とする

新奇で特異な力学特性を中心とする材料物性を解析、設計、創製するために必要な研究体制と連携スキームを整えた。さらに公募研究でチャレンジングな課題を採択し、異分野研究者をも巻き込むことで、対象材料を従来の金属合金、セラミックス等構造材料のみならず化学材料にまで広げること成功し、HEA の可能性が既存の材料体系に留まらないあらゆる素材の飛躍的な高機能化と新たな機能発現に繋がる可能性を有することを短期間で世に示した。

HEA の特異な物性を理解する上で、基礎熱力学の確立は重要な役割を果たす。HEA に関連する熱力学データを精緻にアセスメントして、HEA の状態図を正確に計算することを可能とし、またカクテル効果の本質解明にも重要な情報を提供した。これらの成果は特異な力学特性とその発現機構・モデリング手法、将来の実用化を想定した種々のプロセッシング技術と組織制御に関するこれまでの成果と共にいち早く取り纏められて、2020 年 5 月に著書として出版された。この著書は HEA 研究のこれからの道を示す教科書として世界中で広く利用されることになるだろう。

今後さらに HEA が示す特異な物性の支配因子を種々の先端解析機器を用いて徹底的に解析し、2 元系、3 元系では現れない特異な力学特性の発現メカニズムを解明して、計算熱力学と計算組織学の融合による HEA 合金設計の加速、先端プロセスによる HEA の作製方法の確立とナノ・マイクロ組織制御を実現して、種々の分野への応用可能性を提示して貰いたい。

研究の進め方としては計画研究と公募研究を有機的に組み合わせ、参画研究者間での連携、議論が活発に行われており、その運営は傑出している。今後、さらに本領域に興味を持ち、主体的に取り組める若手研究者が領域研究内外で育成されることと、異分野研究者のさらなる参画促進が図られれば、この新しい学術領域がさらに発展し、我が国のものづくり産業の国際競争力の飛躍的な向上に寄与することは間違いなく、そのために必要な研究基盤整備も計画的に継続させていただきたい。

4) Easo P. George, Hyoung Seop Kim 外部評価委員の評価コメント

A new research program entitled “High-Entropy Alloys” was initiated in July 2018. This 5-year program is supported by Ministry of Education, Culture, Sports, Science and technology, and is categorized in the Innovative Area of Grant-in-Aid for Scientific Research scheme. The program is organized and led by Professor Haruyuki Inui of Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University. The project aims at establishing a new science concerning high-entropy alloys that exhibit new and peculiar materials properties by elucidating nonlinear interactions among various constituent elements through intensive and interdisciplinary cooperative research among research groups of various research fields covering experimental as well as theoretical and simulation studies.

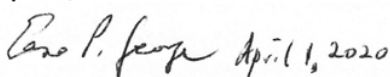
An international symposium on high-entropy alloys (HEA) was held in Yokohama on December 10-14, 2019 as a part of Materials Research Meeting 2019 (MRM 2019), in which more than 90 participants took part with a strong representation from research teams within the HEA program, together with a small number of invited speakers from other countries. The invited speakers from other countries are all renewed experts in the field of high-entropy alloys and were invited to give an overall summary of their opinions on the HEA project and on the progress achieved over the first one and half years of this 5-year project.

The views expressed in this brief report represent the collective opinions of the panel of the following international speakers; Prof. Easo P. George (U. S. A.), Prof. Hyoung Seop Kim (Korea), Prof. Cem Tasan (U. S. A.), Prof. John Lawandowski (U. S. A.), Prof. Yunzhi Wang (U. S. A.), Prof. Guillaume Laplanche (Germany).

The panel formulated several major comments based on the review of the publications and research highlights, the HEA program newsletter, and the oral and poster presentations in the symposium. We describe our comments in the following.

Our overall conclusions are very positive. The impressive achievements made within the first one and half years of this 5-year program demonstrate great success in all aspects covering the selection of research topics, coordination of research activities and teams, and performance of individual projects. It is evident that the success already obtained forms a solid basis for each research team within the program to accelerate their studies in the subsequent period of the program. An outstanding feature of this program is the emphasis on the integration of experimental studies and computer simulations. This integration is involved in all the three sub-topics in the program: Materials Properties (A01), Modelling and design (A02) and Phase stability (A03). Such an approach has led to advances and breakthroughs in all three research topics. The quality of research conducted in the program is of the first-class and the scientific achievement are at a high international level. There is no doubt that the result and publications from this program will have a strong and sustaining impact on future research activities in materials science both in Japan and in the world. From the high number of joint publications by different team from different laboratories/universities and the active discussions among different researchers (seniors and juniors) during the workshop we can firmly conclude that the teams ‘within the programs have interacted strongly’ with each other and made dedicated and efficient joint efforts to reach the targets of the program. We especially recognize the efforts of Prof. Inui for establishing this important and unique program and skillfully coordinating the various activities taking place in the program. Finally, we take this opportunity to congratulate not only Prof. Inui but also all team members on their achievements and we look forward to following their progress within the framework of the HEA program.

April 1, 2020



Prof. Easo P. George
Oak Ridge National Laboratory, U. S. A.



Prof. Hyoung Seop Kim
Pohang Univ. of Science and Technology, Korea