

領域略称名：ハイエントロピー合金
領域番号：6006

令和5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）」
に係る研究成果報告書（研究領域）兼
事後評価報告書

「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5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	1

研究領域全体に係る事項

3 交付決定額	5
4 研究領域の目的及び概要	6
5 審査結果の所見及び中間評価結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況	8
6 研究目的の達成度及び主な成果	10
7 研究発表の状況	15
8 研究組織の連携体制	20
9 研究費の使用状況	21
10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況	23
11 若手研究者の育成に関する取組実績	24
12 総括班評価者による評価	25

研究組織

(令和5年3月末現在。ただし完了した研究課題は完了時現在、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
総括班・総括班以外の計画研究 計 7 件					

[1] 総：総括班、国：国際活動支援班、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	21H00136 低放射化ハイエントロピー合金の耐照射性評価と照射損傷メカニズムの解明	令和3年度 ～ 令和4年度	橋本 直幸	北海道大学・工学研究院・教授	1
A01 公	21H00137 1族・2族元素による低密度ハイエントロピー合金の創製	令和3年度 ～ 令和4年度	礮部 繁人	北海道大学・工学研究院・准教授	1

A01 公	21H00138 フラッシュランプアニール法による高エントロピー合金ナノ粒子合成法の確立	令和3年度 ～ 令和4年度	米澤 徹	北海道大学・工学研究院・教授	1
A01 公	21H00140 電気抵抗測定から読み解く高エントロピー合金の自己組織化による階層構造	令和3年度 ～ 令和4年度	谷本 久典	筑波大学・数理物質系・准教授	1
A01 公	21H00141 ハイエントロピー複合アニオン化合物の創製と新機能探索	令和3年度 ～ 令和4年度	清水 亮太	東京工業大学・物質理工学院・准教授	1
A01 公	21H00146 偏析制御に注目した革新的生体ハイエントロピー合金(BioHEA)の開発	令和3年度 ～ 令和4年度	永瀬 丈嗣	兵庫県立大学・工学研究科・教授	1
A01 公	21H00147 放射光の元素分解能を活用したハイエントロピー合金における局所構造の解明	令和3年度 ～ 令和4年度	花咲 徳亮	大阪大学・理学研究科・教授	1
A01 公	21H00148 ハイエントロピー合金の短範囲秩序形成に伴う弾性的性質の変化	令和3年度 ～ 令和4年度	田中 克志	神戸大学・大学院工学研究科・教授	1
A01 公	21H00149 多成分系セラミックスナノ粒子を原料としたハイエントロピー合金ナノ材料の合成	令和3年度 ～ 令和4年度	樽谷 直紀	広島大学、先進理工系科学研究科(工)・助教	1
A01 公	21H00151 結晶構造次元性に着目したハイエントロピー合金型サイトを有する新超伝導体の開発	令和3年度 ～ 令和4年度	水口 佳一	東京都立大学、理学研究科・准教授	1
A01 公	21H00152 トップダウン・ボトムアップレーザープロセスによるハイエントロピー合金ナノ粒子創製	令和3年度 ～ 令和4年度	八ツ橋 知幸	大阪公立大学・大学院理学研究科・教授	1
A01 公	21H00153 超多元ナノポーラス合金の展開	令和3年度 ～ 令和4年度	藤田 武志	高知工科大学、環境理工学群、教授	1
A01 公	21H00157 量子ビーム連携利用による高エントロピー合金の弾性特性の微視的解明	令和3年度 ～ 令和4年度	筒井 智嗣	公益財団法人高輝度光科学研究センター、回折・散乱推進室、主幹研究員	1
A02 公	21H00142 ハイエントロピー合金の非弾性変形における非平衡臨界挙動	令和3年度 ～ 令和4年度	新山 友暁	金沢大学・機械工学系・准教授	1

A02 公	21H00154 (廃止) 第一原理原子応力計算によるハイ エントロピー合金内部の溶質原子 誘起応力場の解明	令和3年度 ～ 令和4年度	椎原 良典	豊田工業大学・工学(系)研究 科・准教授	
A03 公	21H00139 量子ビームによるハイエントロピー合 金の局所化学構造の可視化	令和3年度 ～ 令和4年度	池田 陽一	東北大学・金属材料研究所・ 助教	1
A03 公	21H00150 Superfunctional High-Entropy Nanomaterials by Ultra-Severe Plastic Deformation	令和3年度 ～ 令和4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, 准教授	1
A03 公	21H00155 高エントロピー合金の耐食性に及ぼ す結晶粒微細化の影響	令和3年度 ～ 令和4年度	宮本 博之	同志社大学・理工学部・教授	1
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 等比多成分酸化物ガラスにおける多 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(廃止) 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状態の解明	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
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 カバー	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 37 件 (廃止を含む)					

[1] 総：総括班、国：国際活動支援班、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 交付決定額

年度	合計	直接経費	間接経費
平成 30 年度	306,670,000 円	235,900,000 円	70,770,000 円
令和元年度	304,330,000 円	234,100,000 円	70,230,000 円
令和 2 年度	305,370,000 円	234,900,000 円	70,470,000 円
令和 3 年度	300,950,000 円	231,500,000 円	69,450,000 円
令和 4 年度	302,510,000 円	232,700,000 円	69,810,000 円
合計	1,519,830,000 円	1,169,100,000 円	350,730,000 円

4 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	235,900,000 円	234,100,000 円	234,900,000 円	231,500,000 円	231,754,343 円
備考	追加配分含む	公募研究含む	公募研究含む	公募研究含む	返還分差引く

(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 4.1(a))は, ある1種類の特定元素を主要元素とし, そこに少量の合金元素を添加したものであり, 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 4.1(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 4.2)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 4.3)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種の特定元素を主要元素とする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, 複数の物理的非線形相関により, 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

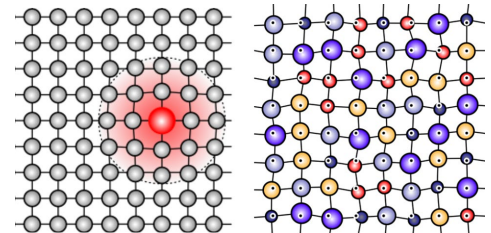


図 4.1. (a)通常の固溶体合金と(b)ハイエントロピー合金の模式図。

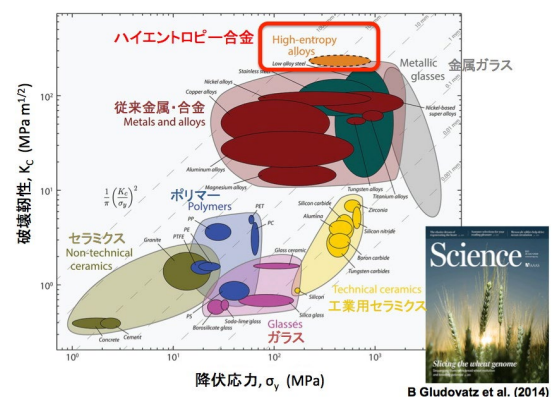


図 4.2. 構造材料における強度(降伏応力)と破壊靱性の関係 (Gludovatz et al. *Science* 345 (2014) 153). 強度と靱性を兼備した, 従来合金を凌駕するハイエントロピー合金がいくつか発見されている。

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 4.3)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 4.1(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ルリング理論(図 4.4)が世界的な注目を集めている。このスケールリ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。

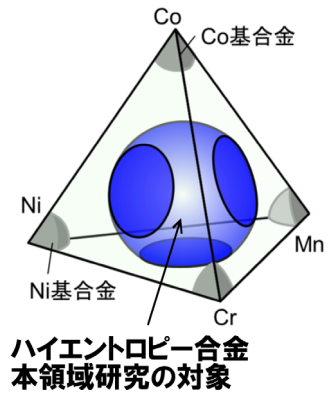


図 4.3. 本領域研究の対象となるハイエントロピー合金の化学組成。

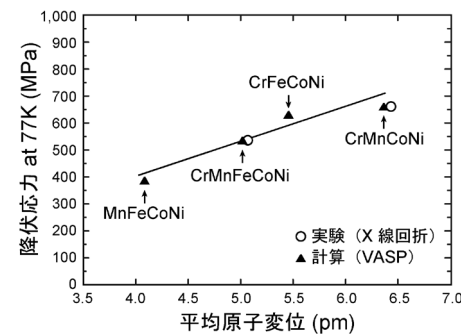


図 4.4. 等原子分率 Cr-Mn-Fe-Co-Ni 5 元系ハイエントロピー合金の各構成元素の平均原子変位と低温強度の線形関係。

5 審査結果の所見及び中間評価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、審査結果の所見及び中間評価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。

本新学術領域では、採択審査時および中間評価時の**所見で示された事項を真摯に受け止め、適切な対応を行った**。その結果、物理・化学を含む関連異分野との有機的な連携を実現し、またハイエントロピー合金の機能特性に関する興味深い成果を数多く得るなど、次の研究プロジェクト展開にも繋がりうる幅広い成果を得る事ができた。また、**研究の目標を再構築する契機**となり、設置した外部アドバイザーから有益なコメントを受ける事ができたなど、**指摘事項が本領域研究の発展に大いに役立った**。

(審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況)

【審査所見】(2018年7月4日付け)

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の、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ます。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かった。特に、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なる精進をしつつ、新学術領域研究を推進した。特に、**総括班には領域内の連携を密にするための機能**を持たせ、総括班内で計画班代表者間の連絡を密にし、各班の研究進捗状況を把握した上で、公募班も含めた**研究者間の適切な連携をコーディネート**した。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)、大型実験施設(SRring-8, J-PARC)の利用のための講習会を開催し、利用支援を行い、共同利用を通じた連携・共同研究の促進を具体的かつ綿密に行った。

(中間評価結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況)

【評価結果の所見】(2020年12月22日付け)

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特異な材料物性やその背後にあるカクテル効果について、実験と理論にまたがる様々な分野の研究者が最先端の研究手法と緊密な共同研究を通してその本質を解明し、新たな材料科学を展開しようとする研究である。これまでの研究において強度と破壊靱性の両立やナノポーラスハイエントロピー合金など、優れた機能・材料が見いだされていることに加え、平均原子変位パラメータによる強度支配因子の解明や計算と機械学習を応用した組成・物性予測など、学理の形成も含めた幅広い展開が進められている。これらの成果は我が国の材料科学の英知を結集した世界的にも独創性の高い優れた研究であり、今後の更なる進展によって一層の学理拡充と新たな機能材料設計指針の導出が期待される。以上の点から、研究領域の設定目的に照らして、期待どおりの進展が認められる。

一方で、本研究領域の最重要課題でもあるカクテル効果の原理解明や強度以外の物性への拡張、並びに領域全体での連携・協業についてはやや不足している部分があるように見受けられた。今後は公募研究組織も含めた広範かつ多彩な連携体制を基に、より根源的な学理を構築するとともに新たな機能性材

料が創出されることを期待したい。

【対応状況】

上記の通り、中間評価では本新学術領域研究に対して「期待どおりの進展が認められる」との**大変肯定的な評価**を頂いた。しかし、そのような評価に甘んじることなく、新学術領域研究の**更なる改善と向上に心がけた**。研究成果に関しては、現時点で、学術雑誌論文 846 報、学会発表 1,033 件、書籍 30 件、産業財産権の出願・取得 16 件という多大な成果を挙げることができた。学術雑誌論文の多くは、関連分野の国際一流誌 (Acta Materialia (IF=9.2), International Journal of Plasticity (IF=8.5), Scripta Materialia (IF=6.3), Journal of Alloys and Compounds (IF=6.3)) に掲載され、Nature Materials (IF=47.6, 学術論文[93]), Nature Communications (IF=17.6, 学術論文[18,48,49,73,77]), Advanced Materials (IF=27.3, 学術論文[26,33]) などのいわゆるハイ・インパクト・ジャーナルにも論文が掲載された。さらに現時点でも複数の成果がこのような論文誌への掲載を目標に論文化されつつある。勿論、インパクトファクターやハイ・インパクト・ジャーナルへの偏重は、必ずしも学問分野の発展には好ましいことばかりでもないとも考えており、各分野の堅実な一流誌に数多くの優れた成果を発表できたことをより重要な成果であると考えている。優れた成果の発信を反映して、本学術領域研究の参画者の論文被引用数も大きく増加しており、**本新学術領域研究グループの当該分野におけるインパクトを国際的に高める**事ができた。

「領域全体での連携・協業にやや不足している部分があるように見受けられた」とのご指摘を頂いたが、コロナ禍の影響で研究者間の往来が抑制された状況での活動であったためそのような印象をもたれたのではないかと推測する。実際に、2018 年の審査所見では「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、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」と評価いただいた点であり、上記の審査所見への対応状況でも記述したとおり、実際に**総括班を中心に研究者間の有機的な連携・協業の促進**を図った。具体的には、**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。また、研究者の要望を聞いた上で、領域内で用いる**共通試料(合金)**を設定し、希望研究者に配布した。このような共通試料を設けることにより、異なる研究室・班間の連携が促進された。また、**試料が標準化**されることで**実験データの比較検討が容易**となり、**学問的理解の深化に繋がった**。領域内研究チーム間の共同研究による国際専門雑誌への出版論文数は、中間評価までの前期 2(2019~20)年度での 31 件から後期 2(2021~22)年度での 51 件へと飛躍的に増加したのは、このような連携・協業を促進する取り組みの結果と考えている。

また、「強度以外の物性への拡張にやや不足している」とのご指摘を頂いた。本研究領域の中心的な研究課題は強度など構造材料の力学特性であるが、ハイエントロピー合金に関する世界のプロジェクトではあまり取り上げられる事がなかった**機能性材料を世界に先駆けて取り込む**ことにした。本研究領域では A01 班がこれを担当しているが、更に、公募研究において力学特性以外の機能特性に関する挑戦的研究を積極的に採択し、研究活動コミュニティーの異なる研究者を多数取り込むことができた。これらの研究者の多くは、過去に**ハイエントロピー合金研究の経験のない新規参入研究者**であり、総括班を中心に、研究設備の共同利用などを通し連携・共同研究の促進を図るなど研究者間の**適切な連携をコーディネート**した。その結果、新学術領域内の研究が活性化し、特にハイエントロピー合金が示す新規な物性・特性が複数発見されるなど、優れた成果を達成することに繋がった。具体的には、新規な**合金触媒** [31 など]、**光触媒** [100,102 など]、**ナノポーラス材料** [26 など]、**水素吸蔵合金** [98,101 など]、**生体適応合金** [34,72 など]、**超伝導体** [91 など] が見出され、このような**機能性ハイエントロピー材料**だけで、学術雑誌論文 181 報、学会発表 282 件、書籍 11 件、産業財産権の出願・取得 10 件という**多大な成果**を挙げることができた。機能性ハイエントロピーセラミックに関する総録 (Review) 論文 (総録論文リスト[3]) を本学術領域研究の参画者により出版したことも特筆に値する。

6 研究目的の達成度及び主な成果

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか、(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 ア班「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」

1) 研究の目標およびその達成度: 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**研究目標**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・靱性など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、以下に示すように、これらの特異性とハイエントロピー効果の相関を解明でき、**目標を十分に達成する事ができた**。

2) 主な研究成果

【計画研究班の成果】

① **ハイエントロピー合金の強度・延性の支配因子解明:** CrMnFeCoNi 5 元系およびその派生 4 元系, 3 元系ハイエントロピー等原子量および非等原子量合金単結晶を作製し, 10~1273K の広範囲な温度範囲で強度, 引張伸びなど単結晶の力学物性の系統的な調査に世界で初めて成功した。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。ハイエントロピー合金の高強度は高い格子ひずみに起因し, MSAD により定量的記述ができることを明らかにした。双晶変形は FCC 構造ハイエントロピー合金の高延性, 特に低温高延性の起源であり, 積層欠陥エネルギーが低いほど双晶変形がより容易に発現することから, 延性・靱性の支配因子が積層欠陥エネルギーであることを明らかにした。また, MSAD および積層欠陥エネルギーと合金組成との関係を解明し, 計算と実験を融合する方法で高強度・高延性合金を設計する方法を確立した(図 6.1)。(A02 班との共同研究)

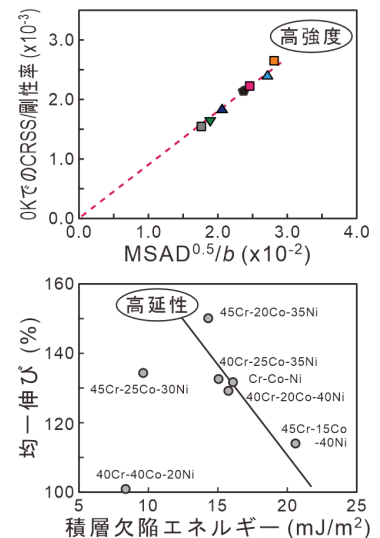


図 6.1. (a)MSAD と強度, (b)積層欠陥エネルギーと引張伸び。

② **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見出した。また 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を明らかにした。Cr₂₀Mn₂₀Fe₂₀Co_{40-x}Ni_x 系合金は他合金よりも広い範囲で変態温度を変える事ができ, Cr₃₀Mn₁₀Fe₂₀Co₄₀ 合金は約 700K と TiZrHfNiCu 系に匹敵する高い形状回復温度を示し, 高温用形状記憶合金としても有望である事が分かる(図 6.2)。(A03 班との共同研究)

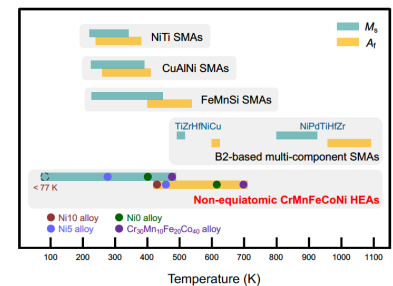


図 6.2. 各種形状記憶合金のマルテンサイト変態温度の比較。

【公募研究班の成果】

① **ハイエントロピー合金の短範囲規則化発現の実証:** CrCoNi で短範囲規則が発達する温度範囲および発達速度を世界に先駆けて解明した。Cr-Cr の反発, Cr-Co の吸引相互作用によるもので, 活性化エネルギーから原子拡散に律速されることを解明した(図 6.3)。(A01 および A02 班との共同研究)

② **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:**

CrMnFeCoNi 5 元系およびその派生 4, 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, 構成元素数の増加に伴う弾性異方性の増大を見出した。これは構成元素数の増加に伴い, 原子間結合が異方性を増すことを意味する。また, 短範囲規則の発達による弾性定数の数%の増大を確認し, 強い結合の形成が示唆された。(班内, A02 班との共同研究)

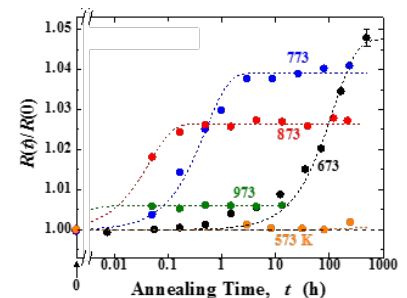


図 6.3. 等温焼鈍による CrCoNi 合金の電気抵抗変化。

(2) A01 イ班「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」

1) 研究の目標およびその達成度: 金属/非金属, 結晶/非結晶, バルク/ナノ構造等, 結合種や構造形態を広く網羅した材料系において, ハイエントロピー化が引き起こす特異な性質を明らかにし新材料を創製することが研

究目標であり、日本の独創的材料科学技術(金属溶湯脱成分, 急冷凝固, 超高音高压合成, 高次複合粉末化, マイクロ電気化学システム)を用いて新機能の創製ができ、**目標を十分に達成する事ができた。**

2) 主な研究成果

【計画研究班の成果】

① **ハイエントロピー合金のナノポーラス化:** $(Ti_{0.2}V_{0.2}Nb_{0.2}Mo_{0.2}Ta_{0.2})_{25}Ni_{75}$ を前駆合金として、 $Mg_{90}Ca_{10}$ 合金液体脱成分媒体を用いた金属溶湯脱成分処理により Ni 元素の選択的溶出に成功し、残存 Ti, V, Nb, Mo, Ta 成分が体心立方構造を有するナノポーラスハイエントロピー合金の自己組織化に成功した。特に低温・短時間の脱成分処理で得られたナノポーラスハイエントロピー合金は、約 10 nm のリガメントサイズで、約 7 nm の超微細孔分布を有し、比表面積は $55.7 \text{ m}^2/\text{g}$ と極めて大きな値を示した。安定化した固溶体中に発達した短範囲規則性がスラギッシュ拡散を誘発し、超微細気孔の形成に繋がったと考えられる(図 6.4)。(班内, A02 班との共同研究)

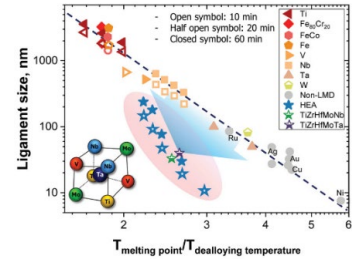


図 6.4. ポーラス金属のリガメントサイズの温度依存性。

② **金属ガラスの二つのガラス遷移温度の解離現象:** 金属ガラスをハイエントロピー(HE)化することにより、熱力学および動力学で定義される2つのガラス遷移温度(T_g , T_α)間の密接な対応関係が崩壊する現象を発見した。HE 金属ガラスは液体の安定性が高まり、比較的均質性が高い微細なドメイン構造を有している(図 6.5)。ドメインはせん断誘起変態領域(STZ)として働き、粘性流動(α 緩和)の素過程となる局所緩和(β 緩和)を誘起するが、HE 金属ガラスはより微細な STZ を有するため、その成長・連結に伴い α 緩和の発現までにより多くの熱エネルギーを必要とした結果、 T_α が高温側にシフトしたと考えられる。(班内, A02 班との共同研究)

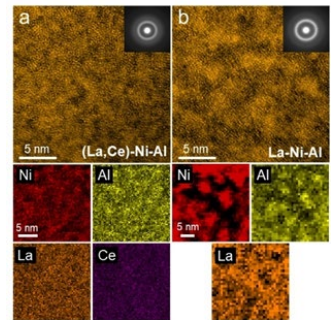


図 6.5. (a)HE 金属ガラスおよび (b)LE 金属ガラスの不均一構造の STEM 像と EDS マップ。

③ 耐孔食性と耐高温酸化性に優れた Al 含有ハイエントロピー合金の開発:

耐高温酸化性と耐孔食性に優れた合金として $Al_8Co_{19}Cr_{23}Fe_{32}Ni_{18}$ ハイエントロピー合金を開発した。この合金の 1273 K での空気中での耐高温耐酸化性は Al 無添加の $Co_{19}Cr_{23}Fe_{40}Ni_{18}$ 合金よりも格段に高く、新開発の硫酸電解処理により、耐高温酸化性を低下させることなく耐孔食性を著しく向上させることに成功した。耐孔食性の向上は、硫酸電解処理により耐高温酸化性に寄与する Al 濃度を維持したまま Cr 濃度が 2 倍以上に濃化したことにより、不動態中のカチオンの混合エントロピーを増大するように Cr 濃度が高まったことに起因していると考えられる。

【公募研究班の成果】

① **新規な機能特性探索:** ハイエントロピーアプローチにより、新規な機能特性を探索し、重量水素密度が高い $LiMgAlTiV$ 系水素吸蔵合金、生体適合性発現メカニズムに優れた $Ti-Zr-Hf-Co-Cr-Mo$ 生体用ハイエントロピー合金、20 GPa 以上の圧力域で T_c が不変であるハイエントロピー合金型 $AgInSnPbBiTe_5$ 超伝導合金、高強度・高耐照射特性を有する Co フリーの $FeCr_{0.8}Ni_xMn_y$ 系ハイエントロピー合金など、高機能特性を有する多数の新規ハイエントロピー合金を見出した。また、レーザーアブレーション法、フラッシュランプアニール法などハイエントロピー合金ナノ粒子の汎用的な合成法を確立し(図 6.6)、水の電気分解用電極材としてベンチマーク触媒である白金やイリジウム酸化物よりも優れた特性をもつナノポーラス触媒の合成にも成功した。(A01, A02, A03 班との共同研究)

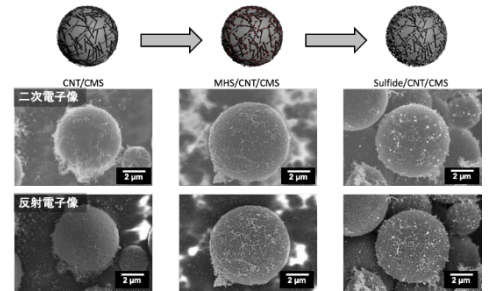


図 6.6. 新規開発プロセスによるハイエントロピー硫化物ナノ粒子の形成過程。

(3) A02 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」

1) **研究の目標およびその達成度:** 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発現メカニズムを根源的に解明することを通じて、幅広い応力、温度、変形速度範囲における力学特性と局所電子・原子構造、合金組成、組織の関連を予測的に記述する構成則を構築することが**研究目標**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、**当初の予定通り目標を達成する事ができた。**

2) 主な研究成果

【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、代表的な合金系

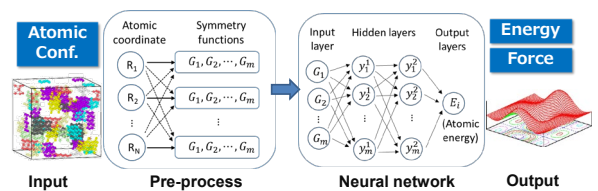


図 6.7. ニューラルネットワークポテンシャル。

(FCC 型 CrCoNi および BCC 型 MoNbTa, ZrNbTa) に対し, 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 6.7). これにより第一原理計算精度による大規模原子シミュレーションが可能となり, 後述する世界初の化学秩序形成動力学解析を実現させるブレークスルーをもたらした. (班内共同研究)

② 化学秩序構造と構造の形成動力学の解明: 第一原理計算精度を有するニューラルネットワーク原子間相互作用と, 機械学習によって高速化された新開発の動的モンテカルロ法を用いて, CrCoNi 合金が化学秩序構造を発現することを立証し, その原子構造の具体化と, 温度依存性, 形成速度の解明に世界で初めて成功した(図 6.8). さらに, ナノインデンテーション原子シミュレーションによって化学秩序形成が局所変形の力学強度を変化させることを明らかにした. (A01, A03 班との共同研究)

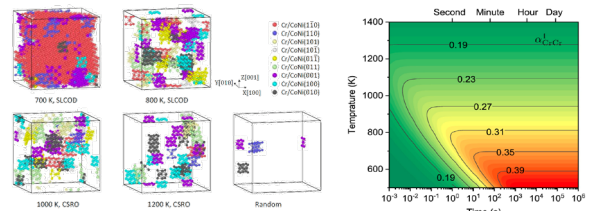


図 6.8. 化学秩序構造と構造の形成動力学.

③ 特異な転位構造とそれがもたらす力学特性の解明: 代表的 BCC ハイエントロピー合金 VNbMoTaW と TiZrNbHfTa のらせん転位の大規模第一原理計算を実施し, 前者の転位はコンパクトであるのに対し後者は拡張し, 後者の転位芯エネルギーは弾性論予測より著しく低いことがわかった(図 6.9). また, 転位運動のエネルギー障壁を評価し, HCP 元素(Zr)の添加がすべり面を(110)面から(112)面へと変化させることがわかった. これにより, 実験で観察される両者のマクロなすべり変形の違いが, 構成元素に由来することが解明され, 構成元素の濃度制御による力学特性設計の可能性が示された. (班内および A01 班との共同研究)

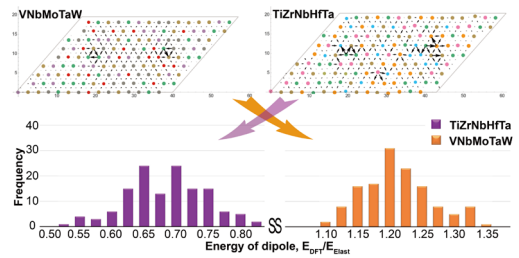


図 6.9. BCC ハイエントロピー合金の転位芯構造.

【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, 3, 2 元系 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, これらの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 6.10), これまで解析例のない BCC 型ハイエントロピー合金(MoNbVTaW)に対する第一原理局所応力計算を可能とした(班内共同研究).

② ハイエントロピー合金の非弾性変形の非平衡臨界挙動の発見: 分子動力学解析による粒界引張解析によって, 塑性変形とき裂進展の非平衡臨界挙動(イベント)が何れも特有のベキ分布を普遍的に示すことを発見した. また合金中の原子サイズ分散が大きい場合, 粒界エネルギーが低下し, き裂進展が抑制されることを解明した. (班内および A03 班との共同研究)

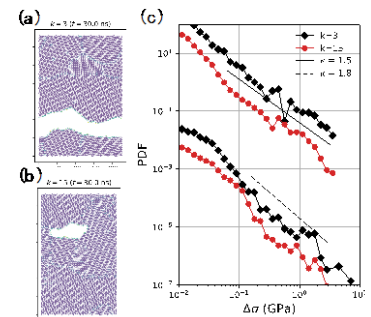


図 6.10. 応力降下量の統計分布.

(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」

1) 研究の目標およびその達成度: 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, 熱力学データベースの拡充を図り, ハイエントロピー合金(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, フェーズフィールド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し, 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ことが**研究目標**であり, **当初の予定通り以上の目的を達成**する種々の方法論を確立した.

2) 主な研究成果

【計画研究班の成果】

① 第一原理計算と機械学習(ML)を組合せた高 MSAD 固溶体探索: 等原子組成系と非等原子組成系 $A_x(BCDE)_{1-x}$ ($x=0.2, 0.3, 0.4$) の DFT 計算データと, ECNet (Element Convolution Neutral Network) の ML モデルを利用した転移学習を組み合わせ, 5 種類の 5 元系に対する広範囲の組成域 ($x=0\sim 0.4$) における平均原子変位量 $RMSD$ ($=MSAD^{0.5}$) と形成エネルギーの予測を行った. 図 6.11(a)と(b)で, 4 個の●印は $RMSD$ がピーク値を取り, かつ形成エネルギーが比較的小さい正の値となる組成である. $Pd_x(FeCoNiCr)_{1-x}$ 系(紫の線)に着目すると, 今回, より高い $RMSD$ 値を示す組成として, $x=0.32$ が見出された. 即ち, 第一原理電子状態計算と ML を組合せることにより, 高い固溶強化を示す HEA 組成を探索する新たな手法を開発・確立した. (班内, A01 班との共同研究)

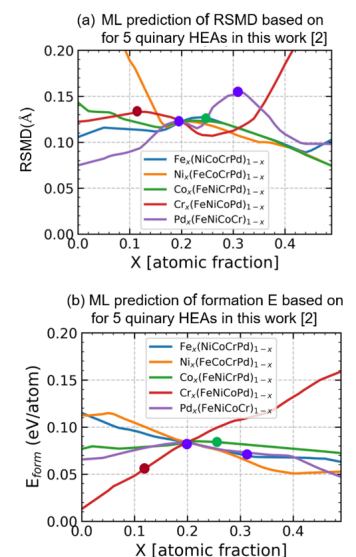


図 6.11. RMSD と形成エネルギーの組成依存性に関する計算結果.

② **Sluggish diffusion(SD)の本質解明**: CALPHAD 法と連携した拡散理論体系から SD が普遍的に導き得るかを検証した. 理想溶体近似の混合のギブスエネルギーを用いた理論解から, 配置エントロピー項が SD に寄与する状況は理論的に導かれないことを証明した. 易動度パラメータ内の相互作用項について, 典型的な HEAs として等組成合金の单相を想定すると, 相互作用項が成分数の増加にともないゼロに漸近することを理論的に明らかにした(図 6.12 は, Cantor 合金の成分から構成される各種合金系に対し, この挙動を具体的に計算した結果である). 多成分・高組成が原因となりトレーサー拡散係数に SD が生じることは原理的にあり得ない. 特定の元素が相互作用項に大きく寄与し, その結果, 拡散が遅くなることは起こり得るが, これはその元素固有の影響であり, ハイエントロピー効果に基づくものではない. (班内, A01, A03 班との共同研究)

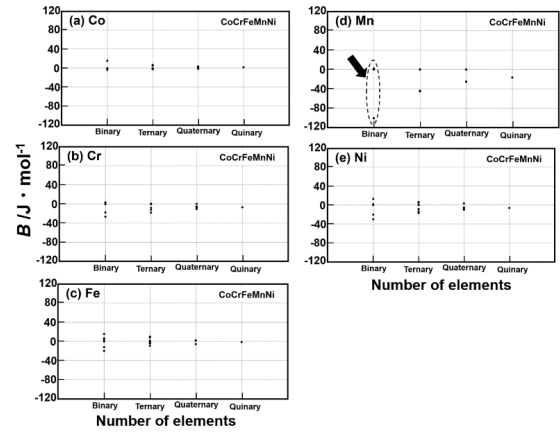


図 6.12. Cantor 合金の成分から構成される各種合金系における, 易動度パラメータ内の相互作用項 B の成分数の増加にともなう変化.

③ **状態図および相互拡散係数の実験的決定およびデータ解析における機械学習手法の開発**: 多成分系の状態図および拡散解析に関して, 拡散対実験等を用いて状態図および相互拡散係数を決定した. Fe-Co-Mn 系, Cr-Mn-Co 系では, 熱力学的な解析と易動度パラメータの評価を同時に行い, 状態図上の拡散経路を再現するパラメータ算出に成功した. 機械学習手法の本分野への展開として, 拡散対濃度プロファイル情報を用い, 逆問題式にフェーズフィールド法を活用し, 材料パラメータを推定する手法を構築した. 計算の効率化ならびに汎用性向上のため, 機械学習のツールである PyTorch と自動微分またはネルダーミード法を活用したモジュールを整備した. その他, 多成分系における粒界偏析の温度依存性を系統的に解析する計算モジュールも開発した. (班内, 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を解明した. (班内, A01 班との共同研究)

(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」

1) **研究の目標およびその達成度**: 凝固・鋳造, 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により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, ハイエントロピー合金特有の組織形成過程と機構を明らかにし, ナノ・マイクロ組織と種々の特性の相関関係を明らかにして, 望ましい特性を獲得するためのプロセス指針を獲得することが**研究目標**であり, **当初の予定通り以上の目的を達成**する種々の方法論・プロセス指針を確立した.

2) **主な研究成果**

【計画研究班の成果】

① **先端凝固プロセスによるマイクロ組織制御**: Co-Cr-Fe-Mn-Ni 系や Co-Cr-Cu-Fe-Mn 系等のハイエントロピー合金における凝固・相変態挙動についてその場放射光 X 線回折・蛍光測定を用いて調査し, 元素間の相互作用エネルギーに起因した液相分離や拡散変態, マルテンサイト変態等を含む複雑な過程を経ることにより特異な凝固組織が形成できることを見出した(図 6.13). また, 電子ビーム粉末床融合 (EB-EBF) 3D プリント法により高融点金属から成るハイエントロピー合金 (HfMoNbTaTi 等) の凝固挙動と作製条件との関係を検証し, 電子ビームのエネルギー密度や走査速度の制御により凝固偏析を抑制できることを明らかにした. (班内共同研究)

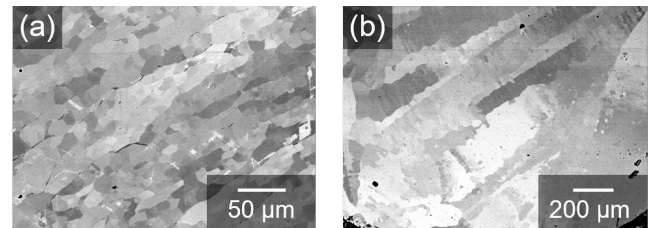


図 6.13. (a) $Cr_{22}Mn_{11}Fe_{44}Co_{23}$ 合金および (b) CrMnFeCoNi 合金の凝固組織.

② **変形組織発達と再結晶挙動の解明**: FCC または BCC 構造を有するハイエントロピー合金に対し, 種々の温度, ひずみ量の一軸引張・圧縮変形やねじり変形, 圧延変形等を施すことで, 従来の金属材料よりも微細な変形組織が発達することを明らかにした. また強加工を施したハイエントロピー合金に対して熱処理を施すと, 再結晶核が高密度に核生成し, かつ粒成長が抑制されることで微細な再結晶組織を容易に得られることが判明した. (A01, 02 班との共同研究)

③ **ナノヘテロ組織形成による優れた力学特性の付与**: 微細結晶粒組織 (Shell) のネットワーク構造とその内部に分布した粗大結晶粒組織 (Core) からなるナノヘテロ組織 (調和組織) を有した CoCrFeMnNi ハイエントロピー合金をボールミリングと粉末冶金法により作製した. 通常の均一な組織を有する試料に比べて調和組織ハイエントロピー合金は, 室温や低温において優れた強度と延性を示すことが明らかとなった. また, 高温では動的再結晶と粒界すべりにより超塑性的な変形挙動を示す可能性が示唆された. (A01, A02 班との共同研究)

【公募研究班の成果】

① **先端量子ビーム解析手法による組織変化の定量測定**: 変形中のその場中性子回折実験により, CoCrFeMnNi, CoCrFeNi 合金の種々の温度における変形挙動を定量的に調査し, 極低温で積層欠陥や双晶の生成が変形応力増大に寄与することを明らかにした. また, 放射光 X 線小角散乱法により CoCrFeMnNi 中に数十 nm 程度の元素濃度分布の揺らぎがあり, 塑性変形によりそのスケールが小さくなることが判明した. このような元素濃度分布の揺らぎは自由電子の散乱源となり電気抵抗率を増大させることを明らかにした. (班内および A01 班との共同研究)

② **優れた機能特性を有するハイエントロピー合金の創成**: 第一原理計算や熱力学計算と実験を組み合わせることで優れた耐久性を有する水素吸蔵ハイエントロピー合金の作製に成功した. $Ti_{0.4}Zr_{1.6}CrMnFeNi$ 合金は 1000 回の水素吸蔵・放出サイクル後も高い水素吸蔵能を保持することが可能である. (図 6.14) (班内および A01 班との共同研究)

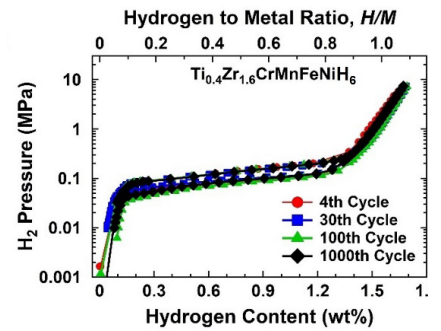


図 6.14. $Ti_{0.4}Zr_{1.6}CrMnFeNi$ 合金の水素吸蔵特性.

(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」

1) **研究の目標およびその達成度**: 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することが**研究目標**であり, **当初の予定通り以上の目的を達成**することができた.

2) **主な研究成果**

【計画研究班の成果】

① **元素間相互作用により誘起される規則化・相分離の解明**:

Fe-Ni-Mn, Fe-Ni-Al 中エントロピー合金の低温時効で Ni-Mn, Ni-Al の規則化がスピノーダル分解を誘起し変調構造が発達することを組織解析と熱力学計算により明確にした. 侵入型 HEA 固溶合金創製を目的とした fcc Fe-35Ni-10X(X=V, Cr, Mo)合金の低温窒化では, X-N 引力相互作用に起因したスピノーダル分解による X-N クラスターリングが生じ, 著しい表面硬化が発現した. Cr 濃度勾配を有する Fe-35Ni/Fe-35Ni-30Cr 合金拡散対の窒化により, Cr-N クラスターリングと表面硬化に及ぼす Cr 濃度依存性をハイスループットで解明した(図 6.15). (班内共同研究)

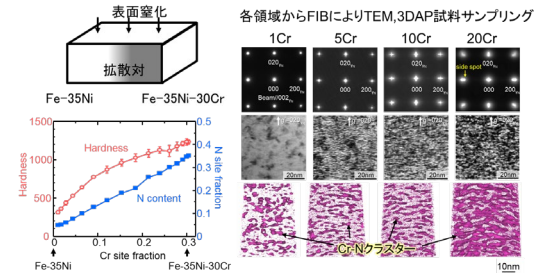


図 6.15. Fe-35Ni-Cr 拡散対低温窒化材における Cr-N クラスターリングおよび表面硬化の Cr 濃度依存性.

② **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 CrMnFeCoNi 合金とそのサブシステムおよび Mn を Al で置換した $Al_xCrFeCoNi$ 合金について原子空孔の形成および移動エネルギーの定量評価を行った. CrMnFeCoNi 合金とそのサブシステムでは純金属と比較しても形成および移動エネルギーには顕著な差は見られず, 拡散の活性化エネルギーも同程度であり, 平均的な化学結合状態に大きな変化がない(図 6.16). 一方, $Al_xCrFeCoNi$ 合金では Al 添加により空孔移動エネルギーが顕著に減少する. 第一原理計算により, Al 添加で各原子種の空孔形成エネルギーが低下する傾向が見られたことから, Al 添加で拡散の活性化エネルギーは低下すると考えられる. これらの結果は, Al 添加に伴う平均二乗変位の増加に加えて, 近接原子との結合力の低下が影響していると考えられる. (班内, A02 班との共同研究)

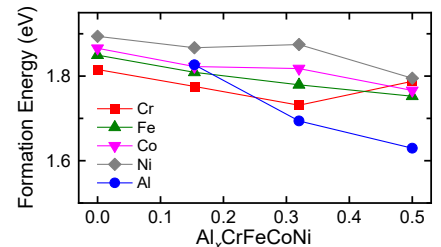


図 6.16. Al 添加による空孔形成エネルギーの変化(計算値)

一方, $Al_xCrFeCoNi$ 合金では Al 添加により空孔移動エネルギーが顕著に減少する. 第一原理計算により, Al 添加で各原子種の空孔形成エネルギーが低下する傾向が見られたことから, Al 添加で拡散の活性化エネルギーは低下すると考えられる. これらの結果は, Al 添加に伴う平均二乗変位の増加に加えて, 近接原子との結合力の低下が影響していると考えられる. (班内, A02 班との共同研究)

【公募研究班の成果】

① **量子線回折による局所構造解析**: 生成エンタルピーの異なる中エントロピー合金 T-CoNi (T=Cr, Mn, Fe) の EXAFS 解析から得られた平均二乗相対原子変位の温度変化から, 静的・動的成分の分離に成功し, 中性子回折解析との併用で MnCoNi 合金の比較的大きな静的成分が規則化に起因することを明らかにした. 中性子散乱実験で, MnCoNi 合金の規則相は特定の温度領域でのみ発達し, 長時間熱処理材では, 相関長の短い成分 (~4 nm) と分解能限界に達した成分が存在し, 短距離秩序相と長距離秩序相の共存の可能性が示された(図 6.17) (A01, A02 班との共同研究).

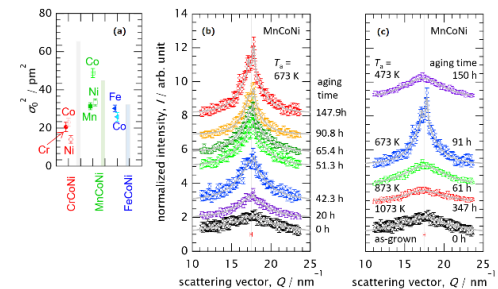


図 6.17. 中エントロピー合金 T-CoNi (T = Cr, Mn, Fe) の(a)EXAFS: 静的平均二乗相対変位, (b, c)中性子: MnCoNi 合金の超格子反射の焼鈍時間・温度変化.

7 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、一般向けアウトリーチ活動等の状況。令和5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。

本新学術領域研究の活動で得られた研究成果は、数多くの論文および学会発表として公表された。2023年5月30日現在の全研究成果は、学術雑誌論文846報、学会発表1,033件、書籍・図書30件、産業財産権の出願・取得16件に達している。また、ホームページやニュースレターの発行を通じて、領域の活動や成果を発信してきた。国際ワークショップや国内シンポジウムを主催したほか、関連分野の国際会議を主催・共催したり、関連学会でハイエントロピー合金セッションを企画するなど、新しい学術分野の定着のために精力的に活動を行った。また、各大学のアカデミックデイやジュニアキャンパスでの情報発信を通じ、一般社会への積極的な成果公表と普及に努めた。

(1) 学術論文（主要102編を示す、領域内の複数の研究グループ間の連携・共同研究成果には◆、若手研究者による研究成果には◇を記す）

[A01 ア計画班]

- [1] ◆◇"Evolution of short-range order and its effects on the plastic deformation behavior of single crystals of the equiatomic Cr-Co-Ni medium-entropy alloy", L. Li, Z. Chen, S. Kuroiwa, M. Ito, K. Yuge, *K. Kishida, H. Tanimoto, Y. Yu, H. Inui, E.P. George, *Acta Materialia*, **243** (2023), 118537.
- [2] ◇"Temperature-dependent yield stress of single crystals of non-equiatomic Cr-Mn-Fe-Co-Ni high-entropy alloys in the temperature range 10-1173 K", Z. Fan, L. Li, *Z. Chen, M. Asakura, C. Zhang, Z. Yang, H. Inui, E.P. George, *Acta Materialia*, **246** (2023), 118712.
- [3] ◆◇"A new route to achieve high strength and high ductility compositions in Cr-Co-Ni-based medium-entropy alloys: a bridge connecting theoretical calculation and experimental measurement", Z. Wang, L. Li, *Z.H. Chen, K. Yuge, K. Kishida, H. Inui and M. Heilmaier, *Journal of Alloys and Compounds*, **959** (2023), 170555.
- [4] ◇"Effect of strain-induced grain boundary migration on microstructure and creep behavior of extruded AZ31 magnesium alloy prepared by pre-compression and annealing treatment", T. Mineta, R. Suzumura, A. Konya, H. Sato, *Materials Today Communications*, **34** (2023), 105502.
- [5] "Temperature dependence of the yield stress in TiZrNbHfTa body-centered cubic high-entropy alloy", *M. Tanaka, S. Yamasaki, T. Morikawa, *Mater. Sci. Eng. A*, **871** (2023) 144917.
- [6] ◇"Tensile and compressive plastic deformation behavior of medium-entropy Cr-Co-Ni single crystals from cryogenic to elevated temperatures", L. Li, Z.H. Chen, S. Kuroiwa, M. Ito, K. Kishida, H. Inui, E.P. George, *International Journal of Plasticity*, **148** (2022), 103144.
- [7] ◇"Plastic deformation of single crystals of the equiatomic Cr-Mn-Fe-Co-Ni high-entropy alloy in tension and compression from 10 K to 1273 K", M. Kawamura, N.L. Okamoto, K. Kishida, M. Asakura, E.P. George, H. Inui, *Acta Materialia*, **203** (2021), 116454.
- [8] ◆◇"Effects of annealing on hardness, yield strength and dislocation structure in single crystals of the equiatomic Cr-Mn-Fe-Co-Ni high entropy alloy", D.S. Zhou, Z.H. Chen, K. Ehara, K. Niitsu, K. Tanaka and H. Inui, *Scripta Materialia*, **191** (2021), 173-178.
- [9] "Persistent slip observed in TiZrNbHfTa: A body-centered high-entropy cubic alloy", *M. Tanaka, S. Okajo, S. Yamasaki, T. Morikawa, *Scripta Materialia*, **200** (2021) 113895.
- [10] ◇"Effect of initial microstructure on grain refinement under hot compression in CrMnFeCoNi high-entropy alloy with Al addition", *H. Watanabe, T. Murata, N. Ikeo, T. Mukai, K. Han, K. Tsuchiya, *Materialia*, **18** (2021) 101172.
- [11] "Exploring the hydrogen absorption and strengthening behavior in nanocrystalline face-centered cubic high-entropy alloys", *Y. Zhao, J-M. Park, K. Murakami, S. Komazaki, M. Kawasaki, K. Tsuchiya, J-Y. Suh, U. Ramamurty, *J-I. Jang, *Scripta Materialia*, **203** (2021) 114069.
- [12] "Effect of cold-working on phase formation during heat treatment in CrMnFeCoNi system high-entropy alloys with Al addition", H. Watanabe, T. Murata, S. Nakamura, N. Ikeo, T. Mukai, K. Tsuchiya, *Journal of Alloys and Compounds*, **872** (2021) 159668.
- [13] ◆◇"Prediction of face-centered cubic single-phase formation for non-equiatomic Cr-Mn-Fe-Co-Ni high-entropy alloys using valence electron concentration and mean-square atomic displacement", K. Niitsu, M. Asakura, K. Yuge, H. Inui, *Materials Transactions*, **61**, No. 9 (2020), 1874-1880.

[A01 イ計画班]

- [14] ◆"Fe₂₀Mo₂₀Ni₂₀Rh₂₀Ru₂₀ and Fe₁₄Mo₃₅Ni₁₅Rh₁₅Ru₂₁ ultrahigh-mixing-entropy alloys with single hexagonal close-packed structure", *A. Takeuchi, T. Wada, K. Amiya, H. Kato, T. Nagese, *Materials Transactions*, **64** (2023) 841-848.
- [15] ◇"Role of Cu in corrosion resistance of CoCrCuFeNi medium-entropy alloys: Importance of compositional change and thickening of oxide films", M. Kato, M. Nishimoto, *I. Muto, Y. Sugawara, *Corrosion Science*, **213** (2023) 110982.
- [16] "Controlled formation of carbon nanotubes incorporated ceramic composite granules by electrostatic integrated nano-assembly", *H. Muto, Y. Sato, *W.K. Tan, A. Yokoi, G. Kawamura, A. Matsuda, *Nanoscale*, **14** (2022) 9669-9674.
- [17] ◆◇"High-entropy design and its influence on glass-forming ability in Zr-Cu-based metallic glass", Y. Ohashi, *T. Wada, H. Kato, *Journal of Alloys and Compounds*, **915** (2022) 165366.
- [18] ◆◇"Decoupling between calorimetric and dynamical glass transitions in high-entropy metallic glasses", J. Jiang, Z. Lu, J. Shen, T. Wada, *H. Kato & *M.W. Chen, *Nature Communications*, **12** (2021) 3843.

- [19] ◇ "Pitting at inclusions of the equiatomic CoCrFeMnNi alloy and improving corrosion resistance by potentiodynamic polarization in H₂SO₄", *L. Pao, I. Muto, Y. Sugawara, *Corrosion Science*, **191** (2021) 109748.
- [20] ◇ "Roles of alloying elements in the corrosion resistance of equiatomic CoCrFeMnNi high-entropy alloy and application to corrosion-resistant alloy design", *T. Aiso, M. Nishimoto, I. Muto, Y. Sugawara, *Materials Transactions*, **62** (2021) 1677-1680.
- [21] ◆◇ "Experimental and molecular dynamics studies of phase transformations during cryogenic thermal cycling in complex TiNi-based crystalline/amorphous alloys", J. Jiang, W.-S.Ko, S.-H.Joo, D.X.Wei, T. Wada, H. Kato, D.V. Louzguine-Luzgin, *Journal of Alloys and Compounds*, **854** (2021) 155379.
- [22] ◇ "Effect of dealloying rate on transformation behavior during liquid metal dealloying", *S.-H. Joo, H. Kato, *Journal of Alloys and Compounds*, **831** (2020) 154733.
- [23] "Improved green body strength using PMMA-Al₂O₃ composite particles fabricated via electrostatic assembly", *W.K. Tan, T. Matsuzaki, A. Yokoi, G. Kawamura, A. Matsuda, H. Muto, *Nano Express*, **1** (2020) 030001.
- [24] ◇ "Ordering kinetics of nanoporous FeCo during liquid metal dealloying and the development of nanofacets", *S.-H. Joo, K. Yubuta, H. Kato, *Scripta Materialia*, **177** (2020) 38-43.
- [25] ◇ "Transformation mechanisms and governing orientation relationships through selective dissolution of Ni via liquid metal dealloying from (FeCo)_xNi_{100-x} precursors", *S.-H. Joo, H. Kato, *Materials & Design*, **185** (2020) 108271.
- [26] ◆◇ "Beating thermal coarsening in nanoporous materials via high-entropy design", *S.-H. Joo, J.W. Bae, W.Y. Park, Y. Shimada, T. Wada, S.H. Kim, A. Takeuchi, T.J Konno, *H. Kato, I.V. Okulov, *Advanced Materials*, **60** (2019) 1906160.
- [27] ◆◇ "Development of porous FeCo by liquid metal dealloying: evolution of porous morphology and effect of interaction between ligaments and melt", *S.-H. Joo, T. Wada, H. Kato, *Materials & Design*, **180** (2019) 107908.
- [28] ◆ "Septenary Zr-Hf-Ti-Al-Co-Ni-Cu high-entropy bulk metallic glasses with centimeter-scale glass-forming ability", *T. Wada, J.Jiang, K. Yubuta, H. Kato, A. Takeuchi, *Materialia*, **7** (2019) 100372.
- [29] ◆ "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.
- [A01 公募班]
- [30] "Irradiation behavior of HfNbTaTiV in comparison of HfNbTaTiZr and F82H", *Y. Zong, R. Ikubo, N. Hashimoto, H. Oka, *Journal of Nuclear Science and Technology*, **135** (2023) 2161241.
- [31] "Fabrication of FeCoNi medium-entropy alloy nanoparticles by high-repetition-rate UV picosecond laser ablation in water", A. Watanabe, *T. Yatsuhashi, *Journal of Alloys and Compounds*, **950** (2023) 169896.
- [32] ◇ "Formation condition and effect on the early stages of plastic deformation of chemical short-range order in Cr-Co-Ni medium-entropy alloy", *T. Teramoto, K. Kitasumi, R. Shimohara, Y. Ito, R. Shimizu, K. Tanaka, *Journal of Alloys and Compounds*, **941** (2023), 169016.
- [33] ◆◇ "Corrosion-resistant and high-entropic non-noble-metal electrodes for oxygen evolution in acidic media", A.A.H. Tajuddin, M. Wakisaka, T. Ohto, Y. Yu, H. Fukushima, H. Tanimoto, X. Li, Y. Misu, S. Jeong, J. Fujita, H. Tada, T. Fujita, M. Takeguchi, K. Takano, K. Matsuoka, Y. Sato, *Y. Ito, *Advanced Materials*, **35** (2023) 2207466.
- [34] ◆◇ "Design and development of Ti-Zr-Hf-Nb-Ta-Mo high-entropy alloys for metallic biomaterials", Y. Iijima, T. Nagase, A. Matsugaki, P. Wang, K. Ameyama, *T. Nakano, *Materials & Design*, **202** (2021) 109548.
- [35] ◆ "Element dependence of local disorder in medium-entropy alloy CrCoNi", *N. Hanasaki, M. Oda, K. Niitsu, K. Ehara, H. Murakawa, H. Sakai, H. Nitani, H. Abe, H. Sagayama, H. Uetsuka, T. Karube, H. Inui, *AIP Advances*, **11** (2021) 125216.
- [36] ◇ "Synthesis of high-entropy-alloy-type superconductors (Fe,Co,Ni,Rh,Ir)Zr₂ with tunable transition temperature", M. Kasem, A. Yamashita, Y. Goto, T.D. Matsuda, *Y. Mizuguchi, *Journal of Materials Science*, **56** (2021) 9499.
- [A02 ウ計画班]
- [37] ◇ "Mechanisms of chemical-reaction-induced tensile deformation of an Fe/Ni/Cr alloy revealed by reactive atomistic simulations", *Y. Wang, H. Zhao, C. Liu, Y. Ootani, N. Ozawa, *M. Kubo, *RSC Advance*, **13** (2023) 6630-6636.
- [38] ◆ "Influence of group IV element on basic mechanical properties of BCC medium-entropy alloys using machine-learning potentials", I. Lobzenko, Y. Shiihara, H. Mori, *T. Tsuru, *Computational Materials Science*, **219** (2023) 112010.
- [39] ◆ "Improvement effect on mechanical properties in Co-free medium-entropy alloys: A first-principles study", I. Lobzenko, D. Wei, M. Itakura, Y. Shiihara, *T. Tsuru, *Results in Materials*, **17** (2023) 100364.
- [40] "Chemical domain structure and its formation kinetics in CrCoNi medium-entropy alloy", *J.-P. Du, P. Yu, S. Shinzato, F.-S. Meng, Y. Sato, Y. Li, Y. Fan, *S. Ogata, *Acta Materialia* **240** (2022) 118314.
- [41] ◇ "Chemical ordering effect on the radiation resistance of a CoNiCrFeMn high-entropy alloy", Y. Li, J.-P. Du, P. Yu, R. Li, S. Shinzato, *Q. Peng, *S. Ogata, *Computational Materials Science*, **214** (2022) 111764.
- [42] ◆ "Ultrahigh yield strength and large uniform elongation achieved in ultrafine-grained titanium containing nitrogen", Y. Chong, T. Tsuru, B. Guo, R. Gholizadeh, K. Inoue, *N. Tsuji, *Acta Materialia*, **240** (2022) 118356.
- [43] ◆ "Atomic stress state inside fcc and bcc random alloys: A first-principles approach", *Y. Shiihara, Y. Itai, I. Lobzenko, T. Tsuru, *Frontiers in Materials*, **9** (2022) 895626.
- [44] ◆ "Rediscovery of Hall-Petch strengthening in bulk ultrafine grained pure Mg at cryogenic temperature: A combined in-situ neutron diffraction and electron microscopy study", *R. Zheng, *W. Gong, J.-P. Du, S. Gao, M. Liu, G. Li, T. Kawasaki, S. Harjo, C. Ma, S. Ogata, N. Tsuji, *Acta Materialia*, **238** (2022) 118243.
- [45] ◇ "Theory of history-dependent multi-layer generalized stacking fault energy- A modeling of the micro-substructure evolution kinetics in chemically ordered medium-entropy-alloys", *P. Yu, *J.-P. Du, S. Shinzato, F.-S. Meng, *S. Ogata, *Acta Materialia*, **224** (2022) 117504-1-12.
- [46] "Highly pressurized helium nanobubbles promote stacking-fault-mediated deformation in FeNiCoCr high entropy alloy", W. Lin, D. Chen, C. Dang, P. Yu, F. Meng, T. Yang, Y. Zhao, S. Liu, J. Du, G. Yeli, C.-T. Liu, *Y. Lu, *S. Ogata, *J. Kai, *Acta Materialia*, **210** (2021) 116843-1-11.
- [47] "Configurational geometry bridges equilibrium structure information from a single to multiple compositions for binary discrete systems", S. Ohta, R. Miyake and *K. Yuge, *Journal of Physical Society of Japan*, **90** (2021) 034801.

- [48] "Atomistic processes of surface-diffusion-induced abnormal softening in nanoscale metallic crystals", X. Wang, S. Zheng, S. Shinzato, Z. Fang, Y. He, Li Zhong, C. Wang, S. Ogata, *S.X. Mao, *Nature Communications*, **12** (2021) 5237.
- [49] ◇ "Unique universal scaling in nanoindentation pop-ins", Y. Sato, S. Shinzato, *T. Ohmura, *T. Hatano, and *S. Ogata, *Nature Communications*, **11** (2020) 4177.
- [50] ◇ "Reduction of dislocation, mean free path, and migration barriers by high entropy alloy: insights from atomistic study of irradiation damage of CoNiCrFeMn", Y. Li, *R. Li, *Q. peng, S. Ogata, *Nanotechnology*, **31** (2020) 425701.
- [51] ◆◇ "Dislocation emission from grain boundaries in high-entropy alloys: Influence of atomic composition at grain boundaries", *K. Shiotani, T. Niiyama, T. Shimokawa, *Materials Transactions*, **61** (2020) 1272-1279.
- 【A02 工計画班】
- [52] ◆ "Stabilization of equiatomic solutions due to high-entropy effect", *T. Abe, K. Han, Y. Goto, I. Ohnuma, and T. Koyama, *Materials Transaction*, **64** (2023) 877-884.
- [53] ◇ "DFT calculations of structural, magnetic and stability of FeNiCo-based and FeNiCr-based quaternary alloys", *N-D. Tran, T. Davey, Y. Chen, *Journal of Applied Physics*, **133** (2023) 045101.
- [54] ◆ "Sublattice alloy design of high-strength steels: application of clustering and nanoscale precipitation of interstitial and substitutional solutes", *T. Furuhashi, Y. Zhang, M. Sato, G. Miyamoto, M. Enoki, H. Ohtani, T. Uesugi, H. Numakura, *Scripta Materialia*, **223** (2023), 115063.
- [55] "Element-wise representations with ECNet for material property prediction and applications in high-entropy alloys", X.M. Wang, N-D. Tran, S.M. Zeng, C. Hou, Y. Chen, and *J. Ni., *npj Computational Materials*, **8** (2022) 253.
- [56] ◆◇ "Thermodynamic and atomic mobility assessment of the Co-Fe-Mn system", *S. P. Pendem, N. Ueshima, K. Oikawa, Y. Tsukada, and T. Koyama, *Journal of Materials Science*, **57** (2022) 15999-16015.
- [57] "Investigations on the phase transformations, equilibria and athermal ω in Ni-Ga-Cr ternary system", *J.J. Ruan, Y.Y. Chen, K. Kobayashi, N. Ueshima, K. Oikawa, *Materials*, **15** (2022), 7617.
- [58] ◆ "Machine-learning-based phase diagram construction for high-throughput batch experiments", *R. Tamura, G. Deffrennes, K. Han, T. Abe, H. Morito, Y. Nakamura, M. Naito, R. Katsube, Y. Nose, K. Terayama, *Science and Technology of Advanced Materials: Methods*, **2** (2022) 153-161.
- [59] ◆ "Simple approach for evaluating the possibility of sluggish diffusion in high-entropy alloys", *T. Koyama, Y. Tsukada, T. Abe, *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, **43** (2022), 68-77.
- [60] ◆◇ "Acceleration of phase diagram construction by machine learning incorporating Gibbs' phase rule", *K. Terayama, K. Han, R. Katsube, I. Ohnuma, T. Abe, Y. Nose, R. Tamura, *Scripta Materialia*, **208** (2022) 114335.
- [61] ◇ "Stability and thermodynamics properties of CrFeNiCoMn/Pd high entropy alloys from first principles", *N-D. Tran, A. Saengdeejing, K. Suzuki, H. Miura, Y. Chen, *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, **42** (2021) 606-616.
- [62] ◆ "Sm-Ti binary thermodynamic database and phase diagram", *A. Saengdeejing, Y. Chen, O. Takeda, M. Enoki, S. Sugimoto, H. Ohtani, and A. Taichi, *Calphad*, **75** (2021) 102357.
- [63] ◇ "Phase equilibria, martensitic transformations and deformation behaviors of the subsystem of Cantor alloy—low-cost Fe-Mn-Cr alloys", *J.J. Ruan, N. Ueshima, H.G. Li, K. Oikawa: *Materialia*, **20** (2021), 101231.
- [64] "Effect of short-range ordering in high-entropy alloys", *T. Abe, *Materials Transactions*, **62** (2021) 711-718.
- [65] "BCC-HCP-FCC multiple transformations and ϵ loop in the Fe-Cr-Co-Mn system", *T. Omori, K. Ando, I. Ohnuma, R. Kainuma, K. Ishida, *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, **42** (2021) 735-747.
- [66] ◇ "Investigation on the σ -phase-related equilibria in Cr-Mn-Co system", *H. G. Li, *J. J. Ruan, N. Ueshima, K. Oikawa, *Journal of Alloys and Compounds*, **867** (2021), 159024.
- [67] "Calphad modeling of LRO and SRO using ab initio data", *M. Enoki, B. Sundman, M.H.F. Sluiter, M. Selleby, H. Ohtani, *Metals*, **10** (2020) 998.
- [68] ◆ "Formation and stability of solute enriched stacking fault in the Mg-Zn-Y, Mg-Co-Y and Mg-Zn-Ca ternary systems", *M. Egami, I. Ohnuma, M. Enoki, H. Ohtani, and E. Abe, *Materials Transactions*, **61** (2020) 839-848.
- 【A02 公募班】
- [69] "Order-disorder competition in equiatomic 3d-transition-metal quaternary alloys: Phase stability and electronic structure", H. Mizuseki, R. Sahara, *K. Hongo, *Science and Technology of Advanced Materials: Methods*, **3** (2023) 2153632.
- [70] "Stochastic estimations of the total number of classes for a clustering having extremely large samples to be included in the clustering engine", *K. Utimula, G.I. Prayogo, K. Nakano, K. Hongo, *R. Maezono, *Advanced Theory and Simulations*, **4** (2021) 202000301.
- 【A03 才計画班】
- [71] ◇ "Global understanding of deformation behavior in CoCrFeMnNi high entropy alloy under high-strain torsion deformation at a wide range of elevated temperatures", R. Gholizadeh, S. Yoshida, Y. Bai, S. Kurokawa, A. Shibata, *N. Tsuji, *Acta Materialia*, **243** (2023) 118514.
- [72] ◇ "Flexible and tough superelastic Co-Cr alloys for biomedical applications", T. Odaira, S. Xu, K. Hirata, X. Xu, T. Omori, K. Ueki, K. Ueda, T. Narushima, M. Nagasako, S. Harjo, T. Kawasaki, L. Bodnárová, P. Sedlák, H. Seiner, R. Kainuma: *Advanced Materials*, **34** (2022) 2202305.
- [73] ◇ "Non-Hookean large elastic deformation in bulk crystalline metals", S. Xu, T. Odaira, S. Sato, X. Xu, T. Omori, S. Harjo, T. Kawasaki, H. Seiner, K. Zoubková, Y. Murakami, R. Kainuma: *Nature communications*, **13** (2022) 5307.
- [74] ◆ "Heterogeneous evolution of lattice defects leading to high strength and high ductility in harmonic structure materials through atomic and dislocation simulations", T. Shimokawa, T. Hasegawa, K. Kiyota, T. Niiyama, K. Ameyama, *Acta Materialia*, **226** (2022) 17679
- [75] ◆◇ "Destruction of mesoscopic chemically modulated domains in single phase high entropy alloy via plastic deformation", *Y. Miyajima, T. Nagata, K. Takeda, S. Yoshida, S. Yasuno, C. Watanabe, K. Ishikawa, H. Adachi, N. Tsuji: *Scientific Reports*, **240** (2022) 118356.
- [76] ◇ "Enhancement of fatigue resistance by overload-induced deformation twinning in a CoCrFeMnNi high-entropy alloy", T-N. Lam, S.Y. Lee, N-T. Tsou, H-S. Chou, B-H. Lai, Y-J. Chang, R. Feng, T. Kawasaki, S. Harjo, P.K. Liaw, A-C. Yeh, M-J. Li, R-F. Cai, S-C. Lo, E-Wen Huang, *Acta Materialia*, **201** (2020) 412-424.

- [77] ◇◇”Yield strength and misfit volumes of NiCoCr and implications for short-range-order”, *B. Yin, S. Yoshida, N. Tsuji, and W. A. Curtin: *Nature Communications*, **11** (2020) 2507.
- [78] ◆◇”Effect of elemental combination on microstructure and mechanical properties of quaternary refractory medium entropy alloys”, *Q. He, S. Yoshida, H. Yasuda, and N. Tsuji, *Materials Transactions*, **61** (2020) 577-586.
- [79] ◇◇”Unique high-temperature deformation dominated by grain boundary sliding in heterogeneous necklace structure formed by dynamic recrystallization in HfNbTaTiZr BCC refractory high entropy alloy”, *R.R. Eleti, A.H. Chokshi, A. Shibata, N. Tsuji: *Acta Materialia*, **183** (2020) 64-77.
- [80] ◇◇”Effect of elemental combination on friction stress and Hall-Petch relationship in face-centered cubic high / medium entropy alloys”, *S. Yoshida, T. Ikeuchi, T. Bhattacharjee, Y. Bai, A. Shibata, N. Tsuji: *Acta Materialia*, **171** (2019) 201-215.
- [81] ◆◇”On microstructural homogenization and mechanical properties optimization of biomedical Co-Cr-Mo alloy additively manufactured by using electron beam melting”, D. Wei, A. Anniyaer, Y. Koizumi, K. Aoyagi, M. Nagasako, H. Kato, A. Chiba: *Additive Manufacturing*, **28** (2019), 215-227.
- [82] ◆◇”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.
- [83] ◇◇”Comparing cyclic tension-compression effects on CoCrFeMnNi high-entropy alloy and Ni-based superalloy”, T-N. Lam, Y-S. Chou, Y-J. Chang, T-R. Sui, A-C. Yeh, S. Harjo, S.Y. Lee, J. Jain, B-H. Lai, E-W. Huang, *Crystals*, **9** (2019) 420.
- [84] ◇◇”In situ neutron diffraction study of phase stress e ution in a ferrous medium-entropy alloy under low-temperature tensile loading”, J.W. Bae, J.G. Kim, J.M. Park, W. Woo, S. Harjo, H.S. Kim, *Scripta Materialia*, **165** (2019) 60-63.
- 【A03 カ計画班】
- [85] ◆◇”Sublattice alloy design of high-strength steels - application of nanoscale clustering of interstitial and substitutional solutes -”, *T. Furuahara, Y. Zhang, M. Sato, G. Miyamoto, M. Enoki, H. Ohtani, To. Uesugi, H. Numakura, *Scripta Materialia*, **223**(2023) 115063.
- [86] ◆◇”Metalloid substitution elevates simultaneously the strength and ductility of face-centered-cubic high-entropy alloys”, *D. Wei, L. Wang, Y. Zhang, W. Gong, T. Tsuru, I. Lobzenko, J. Jiang, S. Harjo, T. Kawasaki, J.W. Bae, W. Lu, Z. Lu, Y. Hayasaka, T. Kiguchi, N.L. Okamoto, T. Ichitsubo, H.S. Kim, T. Furuahara, E. Ma, H. Kato, *Acta Materialia*, **225** (2022) 117571.
- [87] ◇◇”Investigation of nano-scale phase formation in rapidly solidified Fe₂₀Co₂₀Ni₂₀Cr₂₀B_{20-x}Si_x alloys”, Y. Zhang, K. Inoue, *T. Tokunaga, M. Ishimaru, H. Era, *Materials Transactions*, **63**(2022) 1211-1216.
- [88] ◇◇”Prediction of short-range order in CrMnFeCoNi high-entropy alloy”, *M. Mizuno, K. Sugita, H. Araki, *Results in Physics*, **34** (2022) 105285.
- [89] ◇◇”Vacancy migration energies in CrMnFeCoNi, CrFeCoNi, and CrFeNi alloys and their effect on atomic diffusion”, *K. Sugita, R. Ogawa, M. Mizuno, H. Araki, A. Yabuuchi, *Scripta Materialia*, **208** (2022) 114339.
- [90] ◇◇”Displacement of hydrogen position in di-hydride of V-Ti-Cr solid solution alloys”, *K. Sakaki, H. Kim, E.H. Majzoub, A. Machida, T. Watanuki, K. Ikeda, T. Otomo, M. Mizuno, D. Matsumura, Y. Nakamura, *Acta Materialia*, **234**(2022) 118055.
- [91] ◆◇”Superconductivity of high-entropy-alloy-type transition-metal zirconide (Fe,Co,Ni,Cu,Ga)Zr₂”, M.R. Kasem, H. Arima, Y. Ikeda, A. Yamashita, Y. Mizuguchi, *Journal of Physics, Materials*. **5** (2022) 045001.
- [92] ◆◇”Direct observation of local chemical ordering in a few nanometer range in CoCrNi medium-entropy alloy by atom probe tomography and its impact on mechanical properties”, *K. Inoue, S. Yoshida, N. Tsuji, *Physical Review Materials*, **5** (2021) 085007.
- [93] ◇◇”Natural-mixing guided design of refractory high-entropy alloys with as-cast tensile ductility”, S. Wei, S. J. Kim, J. Kang, Y. Zhang, Y. Zhang, T. Furuahara, E.S. Park, *C.C. Tasan, *Nature Materials*, **19**(2020), 1175–1181.
- [94] ◇◇”Microstructure and tensile property of a precipitation strengthened high entropy alloy processed by selective laser melting and post heat treatment”, W.C. Lin, Y.J. Chang, T.H. Hsu, S. Gorsse, F. Sun, T. Furuahara, *A.C. Yeh, *Additive Manufacturing*, **36** (2020) 101601.
- [95] ◇◇”Vacancy formation enthalpy in CoCrFeMnNi high-entropy alloy”, *K. Sugita, N. Matsuoka, M. Mizuno, H. Araki, *Scripta Materialia*, **176** (2020) 32–35.
- [96] ◇◇”Defect energetics for diffusion in CrMnFeCoNi high-entropy alloy from first-principles calculations”, *M. Mizuno, K. Sugita, H. Araki, *Computational Materials Science*, **170** (2019) 109163.
- [97] ◇◇”Composition evolution of gamma prime nanoparticles in the Ti-doped CoFeCrNi high entropy alloy”, *B. Han, J. Wei, Y. Tong, D. Chen, Y. Zhao, J. Wang, F. He, T. Yang, C. Zhao, Y. Shimizu, K. Inoue, Y. Nagai, A. Hu, C. T. Liu, *J. J. Kai, *Scripta Materialia*, **148** (2018) 42–46.
- 【A03 公募班】
- [98] ◇◇”Crystal structure and hydrogen storage properties of AB-type TiZrNbCrFeNi high-entropy alloy”, G. Andrade, G. Zepon, K. Edalati, A. Mohammadi, Z. Ma, H.W. Li, R. Floriano, *International Journal of Hydrogen Energy*, **48** (2023) 13555-13565.
- [99] ◆◇”Corrosion behavior of ultrafine grained CoCrFeMnNi high-entropy alloys fabricated by high-pressure torsion”, H. Shimizu, M. Yuasa, H. Miyamoto, K. Edalati, *Materials*, **15** (2022) 1007.
- [100] ◇◇”High-entropy oxynitride as low-bandgap and stable photocatalyst for hydrogen production”, P. Edalati, X.F. Shen, M. Watanabe, T. Ishihara, M. Arita, M. Fuji, K. Edalati, *Journal of Materials Chemistry, A* **9** (2021) 15076-15086.
- [101] ◆◇”Microstructural details of hydrogen diffusion and storage in Ti-V-Cr alloys activated through surface and bulk severe plastic deformation”, M. Novelli, K. Edalati, S. Itano, H.W. Li, E. Akiba, Z. Horita, T. Grosdidier, *International Journal of Hydrogen Energy*, **45** (2020) 5326-5336.
- [102] ◇◇”High-pressure torsion to induce oxygen vacancies in nanocrystals of magnesium oxide: enhanced light absorbance, photocatalysis and significance in geology”, I. Fujita, K. Edalati, Q. Wang, M. Arita, M. Watanabe, S. Munetoh, T. Ishihara, Z. Horita, *Materialia*, **11** (2020) 100670.

(2) 解説・総説 (総計 88 件: 主要 4 件を示す)

- [1] “Recent progress in our understanding of phase stability, atomic structures and mechanical and functional properties of high-entropy alloys”, H. Inui, K. Kishida, Z.H. Chen, *Materials Transactions*, **63** (2022)394-401.
- [2] “Uniaxial mechanical properties of face centered cubic single- and multiphase highentropy alloys”, H. Inui, K. Kishida, L. Li, A.M. Manzoni, S. Haas, U. Glatzel, *MRS Bulletin*, **47** (2022) 168-175.
- [3] “High-entropy ceramics: Review of principles, production and applications”, S. Akrami, P. Edalati, M. Fuji, K. Edalati, *Materials Science and Engineering*, **R146** (2021) 100644.
- [4] “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」(ミニ特集「ハイエントロピー合金の研究最前線」), **57** (2018) 312-316.

(3) 著書 (総計 30 件: 主要 4 件を示す)

- [1] “The Plaston Concept”, I. Tanaka, N. Tsuji, H. Inui, Springer (2022).
- [2] 「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」, 乾 晴行(編著), 内田老鶴圃, (2020).
- [3] 「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).
- [4] 「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) 国内・国際学会発表 (総計 1,033 件, 基調講演・招待講演を含まない: 詳細省略)

(5) 基調講演・招待講演 (総計 367 件, うち若手研究者によるもの 62: 主要 3 件を示す)

- [1] H. Inui, L. Le, Z.H. Chen and K. Kishida, “Effects of Short-range Ordering on Mechanical Properties of Single Crystals of the Equiatomic CrCoNi Medium-entropy Alloy” High Entropy Materials—From Fundamentals to Potential Applications, MRS 2023 Spring (San Francisco, CA, USA) 2023.4.14.
- [2] H. Inui, K. Kishida, Z.H. Chen, “Some Peculiar Mechanical Properties of High-Entropy Alloys with FCC and BCC Structures”, International Conference on Strength of Materials (ICSMA 19), (Metz, France) 2022.7.26.
- [3] H. Inui, K. Kishida, K. Niitsu, “Single-Crystal Mechanical Properties of Equiatomic and Non-equiatomic High-Entropy Alloys of the Cr-Mn-Fe-Co-Ni System”, The Third International Conference on High Entropy Materials (ICHEM 2020), (Berlin, Germany) 2020.9.27.

(6) 受賞 (総計 116 件, うち若手研究者の受賞 40 件, 学生の受賞 51 件: 主要 3 件を示す)

- [1] 古原 忠 文部科学大臣表彰, 2023.4.10.
「元素機能に基づく鉄鋼材料の階層構造制御と高強度化の研究」
- [2] 乾 晴行(Haruyuki Inui) Alexander von Humboldt Award, 2021.11.16.
「Fundamental study for dislocation mechanisms for excellent mechanical properties in advance structural materials」.
- [3] 乾 晴行 (公財)本多記念会 第 16 回本多フロンティア賞, 2019.5.31.
「チラ・メゾ構造を制御した先進構造材料の創製」

(7) 特許 (総計 16 件, うち主要 4 件を示す)

- [1] 「水素吸蔵合金および水素吸蔵合金の製造方法」, 特許第 6821161(登録日 2021.1.8), 繁森敦, 辻上博司, 秋葉悦男.
- [2] 「水分解触媒」, 特願 2021-133953(出願日 2021.8.19), 藤田武志, チャイ ゼーシン.
- [3] 「コバルトクロム合金ブ材及びその製造方法、並びにこれを用いた医療用デバイス、ガスタービン用デバイス、または産業機器用デバイス」, 特願 2021-137738(出願日:2021.8.26), 土谷浩一, リ・サンミン、イ・ジャンホ.
- [4] 「ポーラス金属」, 特願 2019-019274(出願日:2019.2.6), 加藤秀実, 朱修賢.

(8) 領域のホームページとニュースレター

本新学術領域の公式ホームページ(和文および英文; (<https://highentropy.mtl.kyoto-u.ac.jp/>))を初年度の 2018 年に開設し、領域活動と研究成果の公開に務めた。また、本新学術領域の活動内容と研究成果を示すニュースレターを年 1 回のペースで印刷物および PDF 版として合計 4 号発行し、関連研究者や研究機関に配布して、本領域研究活動の公知に努めた。

(9) 主催シンポジウム (総計 34 件, うち主要 10 件を示す)

- [1] International Workshop on High-Entropy Alloys (京都, 2023 年 2 月 14-15 日).
- [2] 日本金属学会 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」. 研究期間内に合計 10 回開催.
- [3] Materials Research Meeting 2019 on Novel Structural Materials Based on New Principles Symposium, (Yokohama, 2019 年 12 月 10-14 日)
- [4] 日本金属学会 金属学会セミナー 「ハイエントロピー合金の材料科学」(東京, 2019 年 11 月 11 日).
また以下の関連シンポジウム(国際会議および異分野国交流内会議)などを共催した.
- [5] MRS 2022 Spring Meeting, High-Entropy Materials II-From Fundamentals to Potential Applications (Honolulu, HI; 2022 年 5 月 8 日~13 日).
- [6] 日本セラミックス協会シンポジウム「ハイエントロピー合金」(:遠隔), (北海道大学; 2021 年 9 月 2 日~3 日).
- [7] 日本セラミックス協会シンポジウム「ハイエントロピー合金」(:遠隔), (山梨大学; 2020 年 9 月 1 日~2 日).
- [8] International Congress on High Entropy Alloys, (Seattle, WA: ; 2019 年 11 月 17 日~21 日).
- [9] Beyond Nickel-Base Superalloys III (Nara, Japan; 2019 年 6 月 14 日~18 日).
- [10] MRS 2018 Fall Meeting, High-Entropy Alloys II (Boston, MA; 2018 年 11 月 25 日~28 日).

(10) 論文特集号 (総計 8 件, うち主要 3 件を示す)

- [1] 金属(アグネ社), 特集号「ハイエントロピー合金研究の最前線」, Vol. 92, No.1 (2022).
- [2] Materials Transactions(日本金属学会), Special Issue on Materials Science on High-Entropy Alloys (Vol. 61, No.4 (2020)).
- [3] まてりあ(日本金属学会), 特集号「ハイエントロピー合金の材料科学」, (Vol. 57, No. 7 (2018)).

(11) その他(一般向けアウトリーチ活動)

京都大学アカデミックデイにおいて 2018 年から 5 年連続で「ハイエントロピー合金の材料科学」ブースを出展し、2019 年および 2020 年に京都大学ジュニアキャンパスで中学生向けに本研究領域の成果を中心に模擬講義を行うなど、メンバーが所属する大学各所で一般への情報公開に努めた。

8 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。

本新学術領域内の連携は、総括班 X00 がその機能を十分に発揮することにより、大変効果的に行われた。総括班 X00 は、領域全体の研究を計画・管理するだけでなく、共通試料を設定・作製して希望研究者に配布し、研究者間の連携のコーディネートも行った。このような活動により、特に公募班に多かったハイエントロピー合金研究への新規参入者の研究立ち上げをサポートし、計画班研究者との有機的な連携を確立する事ができた。また、各班は班内の勉強会・研究会だけでなく、異なる班間の勉強会・研究会を自発的に多数実施し、深い議論を行った。各計画班・公募班は当初設定された役割を果たしながら、**最終的には領域が一体となって調和を保ちながらハイエントロピー合金研究を遂行した**。本領域研究が獲得した卓越した研究成果は、新学術領域研究のスキームを生かした密接な連携・共同研究によってもたらされたものである。

本新学術領域研究の研究組織を図 8.1 に示す。本領域の**計画班**は、A01, A02, A03 の3つの研究グループにより成っている。それぞれの研究グループは、**力学及び新規材料特性の発現メカニズム解明 (A01)**、**計算科学による力学物性・相安定性の学理解明 (A02)**、**材料創製プロセスとナノ・マイクロ組織制御 (A03)**に関する研究を行う。また、3つのグループはそれぞれ研究対象とする特性、時間スケール、サイズスケールを異とした相補的な研究グループのペアから成っており、ハイエントロピー合金に関する実験研究と理論・計算研究の融合を図ることも、本領域研究の重要な目的である。**総括班 X00**は、領域全体の研究計画をデザイン・管理統括するとともに情報発信機能を担う。総括班は6つの計画班の研究代表者6名と外部評価・アドバイザー2名から成っている。以上のように、本領域内には総括班を含めて7つの計画班が設置されている。**公募班**は、計画班にない解析手法を領域に導入するとともに、力学特性以外の機能特性探索への挑戦的研究などを積極的に取り入れることとした。第1期(2019~2020年度)には19の公募班が、第2期(2021~2022年度)には18の公募班が採択され、領域の研究に参画した。

領域内の連携を密にするための機能を総括班 X00 に持たせた。すなわち、**総括班**内で計画班代表者間の連絡を密にし、各班の研究進捗状況を把握した上で、**研究者間の適切な連携をコーディネートした**。特に公募班には新規機能特性探索を求めたため、過去にハイエントロピー合金研究の経験のない新規参入研究者が多くいたので、公募班が採択された初年度(2019年度と2021年度)はじめは迅速なコーディネートが行われるよう留意した。また、総括班は、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)、**大型実験施設**(SRring-8, J-PARC)の**利用のための講習会**を開催し、利用支援を行い、共同利用を通じた連携・共同研究の促進を図った。**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**。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た。また、研究者の要望を聞いた上で、**領域内で用いる共通試料(合金)を設定し、希望研究者に配布した**。このような共通試料を設けることにより、**異なる研究室・班間の連携が促進された**。また、試料が標準化されることで実験データの比較検討が容易となり、**学問的理解の深化に繋がった**。

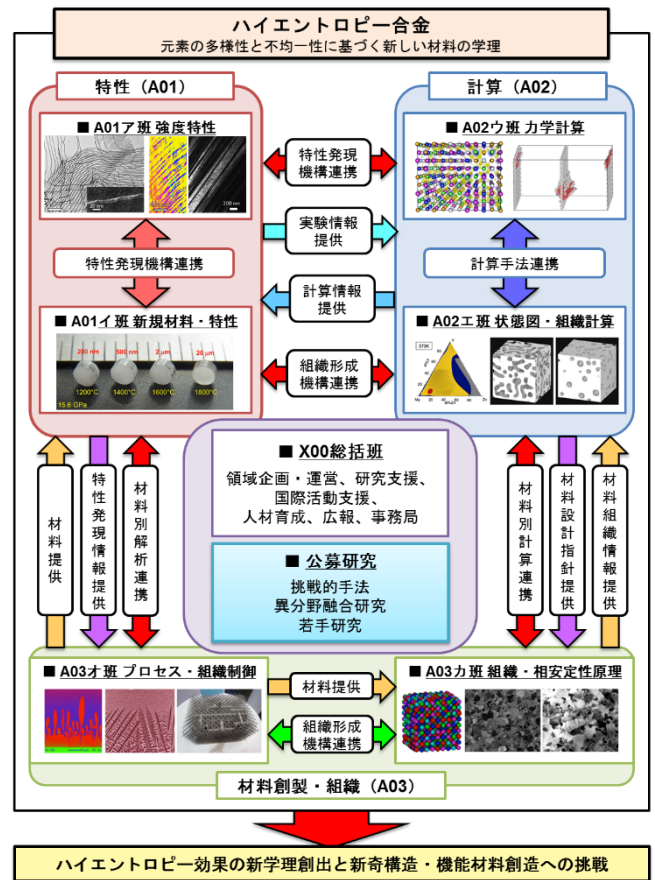


図 8.1. 本領域の研究組織。

9 研究費の使用状況

研究領域全体を通じ、研究費の使用状況や効果的使用の工夫、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2頁以内で記述すること。また、領域設定期間最終年度の繰越しが承認された計画研究（総括班・国際活動支援班を含む。）がある場合は、その内容を記述すること。

総括班の活動により領域内**共通試料**を作製・配布したり、各研究室で導入した**試料作製設備**、**材料解析装置**などを幅広く**共有**し、**研究費を効果的に使用**することができた。これらは領域内の**連携研究を促進する効果**があったとともに、領域研究終了後も今後中長期的に**関連分野の研究基盤として有効活用**することができる。

【共通試料作製設備の導入と効果的運用】

ハイエントロピー合金の実験研究を行うにあたっては、ハイエントロピー合金試料を作製する必要がある。例えば、単結晶作製はハイエントロピー合金の基礎物性解明には必須であるが、本新学術領域研究の開始時点において、十分な試料を作製できる拠点は、京都大学(光学式浮遊炉)、東北大学(ブリッジマン炉)程度であった。また、多結晶作製にも異なるプロセス間の比較・標準化を行う必要があった。そのため、「8.研究組織の連携体制」で述べたように、総括班X00で領域研究で用いる共通試料の需要を把握し、複数の研究チームに作製を依頼し、希望する領域内研究者に配布する仕組みを導入した。領域研究開始後、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(高圧ねじり加工用アンビル)を物質・材料研究機構に導入し(次ページ、表9.2)、共通試料・オーダーメイド試料の配布を領域全体に行った。5年間で作製・配布した共通試料のリストを表9.1に示す。このような同一化学組成の共通試料を作製し、複数の研究グループに配布することによって、連携研究を活性化するとともに、異なるプロセスや測定手法間の比較・標準化を行うことができ、ハイエントロピー合金研究の進展に大いに寄与することができた。

表 9.1. 5年間で作製・配布した共通試料のリスト(括弧内は配布試料数)。

共通試料	多結晶		単結晶	
	圧延	高圧ねじり加工	ブリッジマン	光学浮遊
Cr ₂₀ Mn ₂₀ Fe ₂₀ Co ₂₀ Ni ₂₀	○ (28)	○ (21)	○ (8)	—
Cr ₂₄ Mn ₁₉ Fe ₁₉ Co ₁₉ Ni ₁₉	○ (8)	—	○ (1)	—
Cr ₁₆ Mn ₂₁ Fe ₂₁ Co ₂₁ Ni ₂₁	○ (8)	—	—	—
Cr ₂₅ Fe ₂₅ Co ₂₅ Ni ₂₅	○ (24)	○ (12)	○ (6)	○ (2)
Cr ₃₄ Co ₃₃ Ni ₃₃	○ (28)	○ (24)	○ (6)	○ (4)
Cr ₄₀ Co ₃₀ Ni ₃₀	○ (6)	○ (6)	—	—

【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た。本新学術領域研究で導入した新規な装置(次ページ、表9.2)はもちろん、各研究者がそれまでに所有していた装置を含めて、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45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た。

プロセス装置の新たな導入等により、通常の前延プロセスに加えて、高圧ねじり加工は京都大学と物質・材料研究機構においても実施可能となり、また豊橋技科大や立命館大学における粉末プロセスを利用した粉末・組織作製や、東北大学および同志社大学における電析微細結晶創製が確立された。単結晶試料作製ではブリッジマン型では東北大学に加えて京都大学、神戸大学で実施可能となり、単結晶共通試料の供給体制が充実した。各拠点におけるこうした設備と手法は領域内の研究者に開放され、ハイエントロピー合金試料を幅広く提供することを可能とするとともに、試料作製に伴う研究者の往来を活発化し、結果として連携研究を促進する効果もあった。また、先端電子顕微鏡法など最先端の材料ナノ解析手法を具備することも、本領域研究の特徴であった。既存のこれら設備・手法が領域内で共用されるとともに、短範囲規則化に関する幾つかの新たな解析手法も本領域研究で導入された。また、SEM/EBSD やナノインデンテーション、引張試験機などの領域研究で導入された比較的汎用な装置類も、個々の研究室のみで使用するのではなく、領域内の連携研究に幅広く共有された。また、J-PARK における中性子回折手法や、

Spring-8 における放射光実験手法も、領域内の複数の共同研究者に使われるようになり、これら大型設備の用途拡大にも寄与する事ができた。

以上のように、本領域における研究費は、新学術領域研究の意図を踏まえて有効に使用する事ができた。本領域研究に参画した各研究室は、今後20年にわたってわが国の構造用金属材料研究の中核を担う重要な研究室である。したがって、本新学術領域研究の資金により導入された設備は、領域研究で築き上げられた人的ネットワークを利用して、ハイエントロピー合金新学術領域研究終了後も有効に活用されるものであり、高い費用対効果を挙げたと考えている。

【領域設定期間最終年度の繰越しが承認された計画研究】

領域研究機関の終了間際に A01 ア, A02 ウ計画班の連携研究から、機械学習を用いたハイエントロピー合金における短範囲規則構造の新規な解析法の萌芽が生まれ、Spring-8 など大型設備の利用を含め、この解決を目指して研究期間の延長を画策した。

表 9.2. 主要な物品明細。

年度	品名	仕様・性能等	数量	単価(円)	金額(円)	設置(使用)研究機関
H30	高輝度 X 線単結晶回折装置	(株)リガク製 XtaLAB Synergy	一式	21,600,000	21,600,000	東北大学
	遠心铸造装置一式	真壁技研 VF-AMF50/MA18324-010	一式	11,340,000	11,340,000	東北大学
	クリーブ試験装置	東伸工業株式会社 RT-30、加熱装置、付属装置含む	一式	7,992,000	7,992,000	弘前大学
	超小型アーク溶解炉一式	アトーテック ATO-M01 型	一式	4,536,000	4,536,000	東北大学
	真空焼成実験炉	KK18072601	一式	2,484,000	2,484,000	立命館大学
	高温真空引張試験システム	(株)都島製作所製 AG-20kNX	一式	1,846,800	1,846,800	京都大学
	プラズマ焼結装置用電源一式	エヌエスアロイ 500A 中古	一式	1,054,184	1,054,184	豊橋技術科学大学
	超硬製高圧ねじり加工用アンビル	上下 2 個 富士ダイス株式会社	一式	364,608	364,608	物質・材料研究機構
R1	示差走査熱量計	Netszch, DSC 404 F1	一式	9,999,000	9,999,000	京都大学
	超微小押し込み硬さ試験機(共用)	ENT-3100-AY	一式	9,895,050	9,895,050	東北大学
R2	デスクトップ X 線回折装置 一式	(株)リガク製 Miniflex600/DX 2/CW/DP	一式	4,400,000	4,400,000	東北大学
	ブリッジマン型一方向凝固用電気炉	ユーロシステム(株) AF1500-25	一式	957,000	957,000	京都大学
R3	単結晶 X 線構造解析装置 1 式	(株)リガク製 XtaLAB	一式	4,000,000	4,000,000	東北大学
R4	精密万能試験機(合算)	(株)島津製作所製 オートグラフ AGX-100kNV	一式	8,904,500	8,904,500	東北大学

10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況

研究領域全体を通じ、本研究領域の成果が当該学問分野や関連学問分野に与えたインパクトや波及効果などについて、「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1頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、応募時に「①既存の学問分野の枠に収まらない新興・融合領域の創成を目指すもの」、「②当該領域の各分野発展・飛躍的な展開を目指すもの」のどちらを選択したか、また、どの程度達成できたかを明確にすること。

本新学術領域の活動は国際的にも大変注目され、得られた研究成果は世界に大きなインパクトを与え、我が国のハイエントロピー合金研究は確固たる基盤を築いた。ハイエントロピー合金研究は国際でも広く認知され、関連学会と産業界に幅広く裾野を拡大しつつある。本領域後に開始された幾つかの構造材料大型研究プロジェクトにおいても、本領域に参加した研究者が数多く中核で活躍している。

本新学術領域・ハイエントロピー合金が関連する研究分野は、構造材料研究において過去20年間でも最も活発に研究活動が行われてきた分野である。多元系合金のエントロピー項の寄与により固溶体が安定化されるとのアイデアの下、2004年に5元系等原子量組成で実際にFCC、BCC構造をもつ固溶体合金が発見され、2014年にこのような合金の中から高強度と高延性を具備する特異な力学特性を有する合金がいくつか見出されたことがブレークスルーとなり、世界的に活況な研究が展開されるようになった。本新学術領域研究は、このような多元合金が示す特異な物性に潜むカクテル効果の解明を目指し、ハイエントロピー合金研究を更に大きく発展させるために計画されたものであり、すでに「6. 研究目的の達成度及び主な成果」や「7. 研究発表の状況」で述べた通り、大きな成果を挙げることができた。数多くの優れた研究論文を発表した結果、本新学術領域研究は国際的にも大変注目され、その成果は世界におおきなインパクトを与えた。2019年に開催した第1回ハイエントロピー合金国際ワークショップにおいて外国人招待講演者から寄せられた評価（「12. 総括班評価者による評価」に記載）は、それを端的に表している。本分野における重要な国際会議であるICHEM-3(2020年)におけるCantorの講演によれば、ハイエントロピー合金分野の研究は拡大傾向の真ただ中にあり、例えば材料工学分野における一流雑誌であるActa Materialiaの全期間引用数上位10位のうち、ハイエントロピー合金論文が6件を占めている。研究代表者の論文引用件数の推移を図10.1に示す(2023.5.14時点、Web of Scienceによる)。本新学術領域が開始された2018年から被引用数は大きく増加し、2018年には1年間で700件を超え、1000件を窺う勢いである。現時点で総被引用回数は12,200回超え、h-indexは52となっている。本領域研究が開始された2018年以降の論文でも、5編がTOP10%、1編がTOP1%論文にカウントされている。この傾向は領域代表者に限ることではなく、若手・中堅を含む参画研究者の多くに同様の効果が表れているものと考えられる。本領域研究の結果、ハイエントロピー合金分野において革新的・創造的な学術研究の発展に大きく寄与し、わが国は世界のトップレベルで揺るぎない基盤を築いたといえる。

すでに述べたように、例えば日本金属学会の講演大会ではハイエントロピー合金に関する公募シンポジウムが合計10回開催され、日本金属学会欧文誌・Materials Transactionでハイエントロピー合金に関する特集号が1度刊行された。その結果、常設セッションとして「ハイエントロピー合金」が設けられるなど、ハイエントロピー合金研究は国内でもその名前とともに広く認知され、新しい学術領域としての基礎を築いた。そして他分野・他学会にまたがる本領域研究の活動により、ハイエントロピー合金分野は金属材料分野だけに限らず、幅広い分野・学会に裾野を拡大することができた。物理学会、セラミックス協会、機械学会、材料学会、計算工学会などでは数多くの研究発表がなされている。公募研究を中心にハイエントロピー合金の機能特性についても興味深い結果が得られたことから、最近では物性物理を始めとする物理研究者や、機能性セラミックスをはじめとする無機化学研究者にもハイエントロピー合金への興味が広がりつつある。特に、実験系材料科学・材料工学分野と計算材料科学分野の間に確固とした連携が築き上げられたことは、今後の材料科学・工学分野の発展を考えた上でも意義深い。具体例として、いわゆる機械系・材料力学分野からの若手を中心とした気鋭の計算力学研究者が本新学術領域に参画し、Nature Communications誌などの著名雑誌にも論文を発表するなど、目覚ましい活躍を示した。当初は議論に際して専門用語の「翻訳」が必要な状況であったが、5年間の共同研究を経て、相互理解に基づく密接な関係と基盤を築くことができた。計算と実験の融合は、材料科学分野が今後進むべき重要な方向であり、本領域研究はその優れた成功例となることができた。本領域研究の成果は、素材産業をはじめとする産業界からも注目されている。「11. 総括評価者による評価」に示した産業界アドバイザーの評価は、それを示している。東日本大震災を経て、材料構造の重要性が社会で再認識され、複数の大型研究開発プロジェクトが現在実施されている。例えば、文部科学省データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト(本領域の計画班代表者の尾方がPI)、JST・CREST「ナノ力学」(計画班代表の辻がPI)、JST・さきがけ「ナノ力学」(計画班分担の都留がPI)などがそれである。これらは本新学術領域に参画して実力を高めた若手・中堅研究者が数多く参加し、プロジェクト研究を中心に担っている。

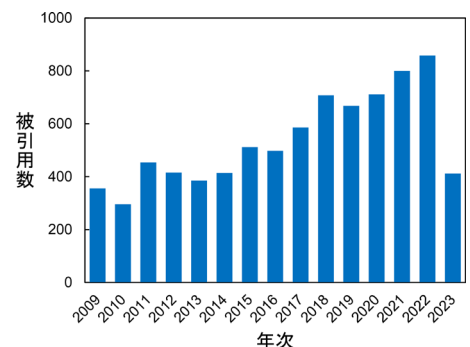


図10.1. 研究代表者の論文引用件数の推移。

11 若手研究者の育成に関する取組実績

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5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。）の育成に係る取組の実績について、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

次代を担う若手研究者の育成は、当初より本新学術領域の重要な目標の一つであり、領域研究活動により多大な成果を挙げた。数多くの学生の育成と研究室の活性化に寄与するとともに、若手・中堅研究者が数多くのアカデミックポジションを獲得することができた。

本新学術領域研究では、次代を担う若手研究者の人材育成を、当初から重要な目的の一つとして掲げていた。領域申請当時の計画班の研究研究者の平均年齢は、48歳であり、その後も若手研究者を積極的に登用して、自発的・自律的な研究活動を奨励してきた。参画研究室にはそうした方針にご理解とご協力をいただいた。また、優秀な若手ポスドク研究員を本研究費により積極的に雇用し、活発な研究活動を展開した。各学会におけるセミナー・講演会で若手研究者による招待講演等を積極的に企画し、日本金属学会講演大会で研究期間内に10回のハイエントロピー合金に関する公募シンポジウムを開催したが、その半数の5回のシンポジウムのオーガナイズを若手研究者が自発的に務めた。そうした雰囲気作りによって、若手研究者が伸び伸びと自由に活動できる環境が構築された。「8. 研究組織の連携体制」に記述したように、本研究領域内では、研究室や班の垣根を越えた共同研究、連携研究がきわめて活発に行われ、班内および班横断の勉強会も多数開催された。その結果、シニア・中堅人材だけの閉じた世界ではなく、若手研究者や大学院生も含めてメンバーが顔見知りとなり、人材交流も活発に行われた。次ページの非公開部分に具体的に列挙した通り、期間中に本研究領域に参画した若手・中堅研究者33名が、新たにアカデミックポジションを獲得あるいは昇任した。新たに就いたポジションは、教授2名、副・准教授9名、講師2名、助教13名、主任研究員・グループリーダー3名、独立研究者1名、研究員3名に達している。外国人研究者も数多く含まれていることは、本領域研究が国際的な環境下で実施されたことを示している。勿論、これは本研究領域のみの功績ではなく、各研究者の努力の賜物であるが、彼らが今後20年間の関連分野を支える貴重な人材であることは疑いもなく、優れた人材を広く輩出できたことは、本研究領域における人材育成が大きな成果を挙げたと結論づけることができる。

表11.1には、本研究領域内でのハイエントロピー合金研究による卒業・学位取得者の数をまとめている。5年間で学部生206名、修士212名、博士29名の教育に貢献することができた。彼らの多くは、アカデミックポジションの他に、素材産業をはじめとする企業の研究・開発部門に就職している。また、これだけの数の学生がハイエントロピー合金に携わったということは、各研究室でもハイエントロピー合金に関する研究活動が大変活発であったことを意味している。すなわち、教育と構造材料分野の活性化という点においても、本新学術領域研究は大きな成功を収めたと言える。

表 11.1. 本領域研究内でのハイエントロピー合金研究による卒業・学位取得者の数。

年度	学部卒業	修士	博士
2018	16人	8人	4人
2019	48人	32人	2人
2020	42人	50人	6人
2021	48人	50人	10人
2022	52人	72人	7人
合計	206人	212人	29人

表 11.2 には、大学院生や若手研究者の主要な受賞状況を示す。39歳以下の若手研究者の受賞件数は総数91件に達している。また、若手研究者が国際会議・国内会議で行った招待講演も62件に及んでいる。このこともまた、本新学術領域研究内で若手研究者が実力を伸ばし、成長したことを反映するものである。

表 11.2. 本領域研究内でのハイエントロピー合金研究による大学院生や若手研究者の主要な受賞状況。

日本鉄鋼協会 俵論文賞 2件	本多記念会 原田研究奨励賞 1件
日本金属学会 論文賞 3件、新進論文賞 2件	軽金属学会 軽金属奨励賞 1件
日本銅学会 論文賞 1件	日本鉄鋼協会 研究奨励賞 1件
日本材料学会 論文奨励賞 1件、学術奨励賞 1件	日本機械学会 若手優秀講演フェロー賞 1件
日本金属学会 奨励賞 1件	日本材料学会 学生優秀講演発表賞 4件
日本金属学会・日本鉄鋼協会 奨学賞 1件	日本金属学会 優秀ポスター賞 11件
日本機械学会 奨励賞(研究) 2件	種々の国際会議 Best Poster Award 10件

12 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、領域が主催したハイエントロピー合金に関する国際ワークショップ(2023年2月13～15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た。

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 (新報国マテリアル(株)・副社長 執行役員 CTO) [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

本新学術領域の目的は、ひとつの元素を主体に添加元素を加えて合金化し特性向上を計る従来の材料工学の常識とは異なり、多元系状態図中央の化学組成から出発するという新しい視点から学問体系を見直し、ハイエントロピー合金(HEA)に特有な組織形成機構や特性発現機構を明らかにして、新材料を探索・創製することであった。HEAは2004年にYehが基礎概念を考案しCantorが5元系等原子量固溶体合金を発見して以来注目された海外において研究開発が先行したが、2018～2022年度の本領域研究において、我が国が得意とする理論・計算・実験を融合した材料科学研究手法の適用によって、インパクトの高い多くの優れた成果が得られた。国際ワークショップ、金属学会等の定期講演大会や成果報告会等における発表を聴講して、単結晶作製による基礎実験、第一原理計算等による原子配列の考察、拡散現象の熱力学的理解、先端解析技術の活用、新プロセスの考案と新材料提案、等々、注目すべき研究発表に対して大きな反響があり、今や世界をリードする状況になったことを実感させられた。研究対象は、構造用金属材料のみに限らず、セラミックス、プラスチック、各種機能材料へと拡大されている。ここで得られた学術的知見は、鉄鋼や非鉄合金等の従来材料においてもさらなる発展に役立つ内容であり、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「材料研究開発力の優位性」をさらに高めることに貢献するもので、学術的に新しい分野を切り開いたと高く評価される。

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チームからなるバランスの良い構成であった。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が加わった強力な研究体制となった。乾教授を筆頭とする各チームリーダーを中心に精力的な活動が展開された。研究者間お互いに厳しくも建設的な議論が活発に行われ、相互理解の下に専門および所属の異なる研究者による共同研究が進められ多くの共著論文が発表されている。その中で若手研究者達の活躍が顕著にみられ将来のリーダーとなることが期待できる。

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したもので、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と期待された重要な学術研究であった。

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、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た。力学特性を中心とする材料物性に関する革新的な強度発現機構の解明、新たな高強度材料の発見につながった数々のブレイクスルーは言うまでもなく、化学材料の分野においても HEA の学理を利用してこれまで実現できなかった極めて高活性な新規触媒材料の開発に至ったことは特筆すべきである。

研究開始以来重点的に取り組まれた基礎熱力学の確立と電子論的解析・計算組織学モデリングは HEA の特異な物性を理解し、カクテル効果の本質に迫ることを可能として、新たな材料創製に重要な道標となった。また、従来物理の世界で議論されてきた局在電子論と磁性をはじめとする特異な物性との相関を明らかにする上でも極めて重要な知見となった。今後、より合理的な合金設計に基づく新たな材料開発が加速されることを期待する。研究後半に得られたこれらの成果も論文投稿、学会発表に加えて、著書として纏められると HEA 研究分野に留まらず、革新的な材料開発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。

本領域研究の運営は傑出しており、計画研究と公募研究の有機的結合、参画研究者間での連携、議論が活発に行われ、互いの相乗効果で研究成果の最大化が図られた。また、本領域研究において若手研究者が伸び伸びと研究を主導し、最終報告会においてもそれぞれ堂々と成果を披露して、議論の中心にあったことは嬉しい限りであり、若手育成とその強化に大いに貢献した。本学術領域研究の成果と、若手研究者を含めた関連分野の研究力が大いに強化されたことは、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、この成果を次代に繋ぐために必要な研究基盤整備を国としても継続的に施策として取り込んでいただきたい。

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

A national research program in Japan titled “High-Entropy Alloys” was initiated in July 2018 and ended in March 2023. This 5-year program was supported by the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology within the Innovative Area of Grant-in-Aid for Scientific Research scheme. The program was organized and led by Professor Haruyuki Inui of the Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University. The project aims were to establish new scientific principles for high-entropy alloys (HEA) that exhibit novel 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.

The program culminated in a highly successful international workshop on HEA held in Kyoto, 14-15 February 2023, to highlight scientific advances made over the course of the program. Eight oral presentations and 35 poster presentations were given by research teams within the HEA program to summarize their impressive achievements. Additionally, the workshop featured 6 invited talks by international HEA experts from U.S.A., Germany, France, and S. Korea.

The views expressed in this brief report are those of Prof. Easo P. George and Prof. H-S. Kim, who were those of the international experts invited to speak at the Kyoto workshop and are based on their review of the oral and poster presentations at the workshop.

Overall, the outcomes of the HEA program are very impressive indeed. It started with a thoughtful selection of research topics that enabled high-level performance within each of the individual projects. Subsequently, careful coordination of research activities and teams ensured that “the whole was greater than the sum of the parts”. As mentioned in an earlier report written after the international HEA symposium held in Yokohama in 2019, an outstanding feature of this program is the emphasis on the integration of experimental studies and computer simulations. This integration occurs in all three sub-topics of 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.

As was expected from the initial evaluation after approximately one and a half years of the establishment of the program, the quality of research conducted in the program is first-class and the scientific achievements rank at a high international level. There is no doubt that the results 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. Based on the high number of joint publications involving different teams from different laboratories/universities and the active discussions among different researchers (seniors and juniors) during the workshop it can be firmly concluded 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.

Especially commendable are the efforts of Prof. Inui for establishing this important and unique program and skillfully coordinating the various activities taking place in the program. He was assisted in these efforts by all the team members of the different projects whose achievements within the framework of the HEA program are to be congratulated.

May 22, 2023

 May 22, 2023

Prof. Easo P. George
University of Tennessee, Knoxville, USA



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