

機関番号：14301

領域設定期間：平成30年度～令和4年度

領域番号：6006

研究領域名（和文） 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物理

研究領域名（英文） High Entropy Alloys: Science of New Class of Materials Based on Elemental Multiplicity and Heterogeneity

領域代表者

乾 晴行 (INUI Haruyuki)

京都大学・工学研究科・教授

研究者番号：30213135

交付決定額（領域設定期間全体）：（直接経費）1,169,100,000円

研究成果の概要

ハイエントロピー合金は、狭義には「5種類以上の構成元素から成る等原子分率単相固溶体合金」を指すが、近年では「多元系状態図中央付近の組成を持つ等原子分率から外れた高濃度固溶体合金や析出物を含む多相合金」にまで対象が広がりつつある。このような広義の意味での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材料特性を示すものが多く、多様な構成原子間の相互作用による単純な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に起因すると考えられる。本領域は、ハイエントロピー合金が示す新奇で特異な材料物性を、様々な分野背景を有する研究者の緊密な共同研究を通じて解明し、多様な構成元素間の非線形相互作用に潜む新たな材料科学の学術領域を打立てることを目指して研究を推進した。構造材料の力学特性では、強度と延性を支配する材料因子を解明、その制御から優れた力学特性を付与するハイエントロピー合金設計法を確立するなど優れた成果が得られた。また、水素吸蔵特性、生体適合特性、耐照射特性、触媒特性などに優れた数多くの機能性ハイエントロピー合金を見出すことができた。

研究分野：理工系

キーワード：ハイエントロピー合金、多元系等原子量合金、高次固溶体、カクテル効果、材料強度、破壊靱性、固溶強化、相安定性、トラップ効果、元素多様性、元素不均一性

1. 研究開始当初の背景

従来の合金は、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。学理に基づいた指導原理に従っ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。

2. 研究の目的

本領域では、ハイエントロピー合金が示す新奇で特異な材料物性を、様々な分野背景を有する研究者の緊密な共同研究を通じて解明し、多様な構成元素間の非線形相互作用に潜む新たな材料科学の学術領域を打ち立てることを目的としている。従来合金とは異なり、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研究者が最先端の研究手法を駆使し連携して、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、従来型材料を越えた新規材料を開発・提供し得る新領域を創成することを本領域研究の目的としている。

3. 研究の方法

上記の目的を効果的に達成するために、次の三つの研究項目を立てて研究を推進する。総括班による研究統括（企画、調整、運営）の下、各研究項目を、それぞれ2班の計画研究班が担当し、研究を強力に推進する。

- ・研究項目A01 新材料・機能創出と物性発現機構解明
- ・研究項目A02 物性発現モデリングと合金設計
- ・研究項目A03 相安定性原理解明とナノ・マイクロ組織制御

研究項目A01では、ハイエントロピー合金の特異な力学特性の支配因子を解明するとともに、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を行う。研究項目A02では、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を行うとともに、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研究を推進する。研究項目A03では、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を行いつつ、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・マイクロ組織制御に関する研究を推進する。項目を超えた共同研究を通してハイエントロピー合金の学理確立と新規機能導出に取り組む。

4. 研究の成果

いずれの研究項目でも、当初計画の予測を上回る進展状況を示している。各研究項目毎の主な研究成果を以下に示す。

(1) A01 ア班：力学及び新規材料特性の発現メカニズム解明

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。

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 $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Co}_{40-x}\text{Ni}_x$ 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。 $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Co}_{40-x}\text{Ni}_x$ 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, $\text{Cr}_{30}\text{Mn}_{10}\text{Fe}_{20}\text{Co}_{40}$ 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。

(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ハイエントロピー合金のナノポーラス化:

($\text{Ti}_{0.2}\text{V}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Mo}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}$) $_{25}\text{Ni}_{75}$ を前駆合金として, $\text{Mg}_{90}\text{Ca}_{10}$ 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 m^2/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ッグ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。

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. 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.

(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」

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(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. 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した.

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. 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.

(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. $Pd_x(FeCoNiCr)_{1-x}$ 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.

②Sluggish 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. 多成分・高組成が原因として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.

(5) A03 オ班「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. 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.

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.

(6) A03 カ班「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解明」

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.

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AlxCrFeCoNi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。一方、AlxCrFeCoNi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。

5. 主な発表論文等（受賞等を含む）

(1) 主な発表論文（研究期間中の発表論文数：846編，そのうち33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）

- [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] ◆◇”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.
- [3] ◆◇”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.
- [4] ◇”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.
- [5] ◆”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.
- [6] ◆”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.
- [7] ”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.
- [8] ◇”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.
- [9] ◇”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.
- [10] ◇”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.
- [11] ”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.
- [12] ◇”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.
- [13] ◆”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.
- [14] ”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.
- [15] ◆”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.
- [16] ◆”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.
- [17] ◆◇”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.
- [18] ◇”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. Sedláč, H. Seiner, R. Kainuma: *Advanced Materials*, **34** (2022) 2202305.

- [19] ◆”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
- [20] ◆◇”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. Furuhashi, E. Ma, H. Kato, *Acta Materialia*, **225** (2022) 117571.
- [21] ◆◇”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.
- [22] ◇◇”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.
- [23] ◆◇”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.
- [24] ◆◇”Design and development of Ti-Zr-Hf-Nb-Ta-Mo high-entropy alloys for metallic biomaterials”, Y. Iijima, T. Nagese, A. Matsugaki, P. Wang, K. Ameyama, *T. Nakano, *Materials & Design*, **202** (2021) 109548.
- [25] ”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.
- [26] ◆◇”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.
- [27] ◇”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.
- [28] ◇”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. Furuhashi, E.S. Park, *C.C. Tasan, *Nature Materials*, **19**(2020), 1175–1181.
- [29] ◇”Unique universal scaling in nanoindentation pop-ins”, Y. Sato, S. Shinzato, *T. Ohmura, *T. Hatano, and *S. Ogata, *Nature Communications*, **11** (2020) 4177.
- [30] ◇”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.
- [31] ◆◇”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.
- [32] ◆◇”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.
- [33] ◆◇”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.

(2) 著書(総計 30 件: うち主要 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).

(3) 受賞等 (研究期間中の受賞数: 計 116 件, うち若手研究者の受賞 40 件, 学生の受賞 51 件: 主要 10 件を示す)

- ・「文部科学大臣表彰(研究部門)」, 古原 忠, 文部科学省 (2023.4).
- ・「増分量賞」, 土谷浩一, (公社) 日本金属学会 (2023.3).
- ・「村上記念賞」, 乾 晴行, (公社) 日本金属学会 (2022.9).
- ・「本多フロンティア賞」, 辻 伸泰, (公財) 本多記念会 (2022.5).
- ・「Alexander von Humboldt Award」, 乾 晴行, Alexander von Humboldt Foundation (2021.11).
- ・「Thermec Distinguished Award」, 乾 晴行, Thermec Committee (2021.11).
- ・「村上記念賞」, 土谷浩一, (公社) 日本金属学会 (2020.9).
- ・「本多フロンティア賞」, 乾 晴行, (公財) 本多記念会 (2019.5).
- ・「増分量賞」, 乾 晴行, (公社) 日本金属学会 (2019.3).
- ・「Thermec Distinguished Award」, 古原 忠, Thermec Committee (2018.7).

ホームページ等

<http://www.hightentropy.mtl.kyoto-u.ac.jp>