

高耐熱ハイレントロピー合金の特異な力学特性の起源 —電子状態計算に基づく力学機能設計—

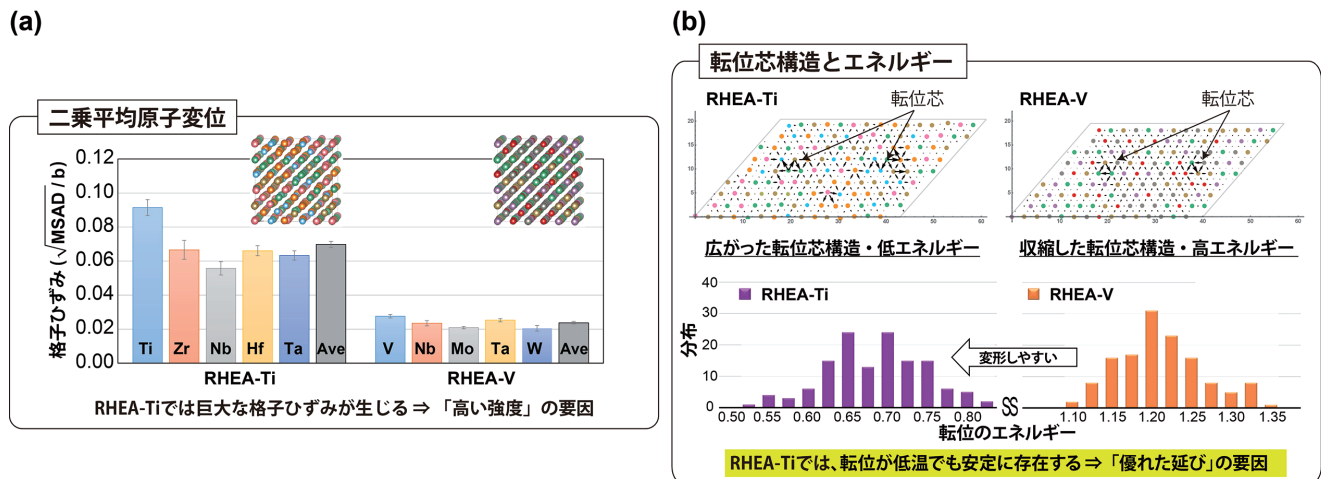


図1 電子状態計算による二つのハイレントロピー合金の格子ひずみと転位芯構造及び転位のエネルギー

Ni基超合金の耐熱温度を超えるガスタービンへの応用が期待される高耐熱ハイレントロピー合金 (RHEA) として、TiZrHfNbTa (RHEA-Ti) とVNbMoTaW (RHEA-V) という二つの合金が広く研究されてきました。本研究では、これらの合金の強度と延性が大きく異なることを実験によって示し、力学特性の違いを生じる因子を理論及び電子状態計算によって解明することを目的としました。

金属材料の強度は結晶の格子ひずみと相関することが知られています。そこで、格子ひずみを原子の変位によって評価する二乗平均原子変位 (MSAD) を用いて評価しました (図1 (a))。その結果、RHEA-TiのMSADはRHEA-Vと比べて約3倍大きく、強度を上昇させることが示されました。

次に延性を決定する転位構造の解析を行いました (図1 (b))。矢印に囲まれた転位芯領域で、RHEA-Tiの転位芯は不均質に広がっていることが確認されます。転位芯のエネルギーの分布を解析した結果、RHEA-Tiの転位のエネルギーは明らかに低いことが分かりました。これは、結晶中に転位が導入されやすいことを示しており、RHEA-Tiが優れた延性を持つ要因が転位の安定性にあることが分かりました。

これらの力学特性の違いは、Ti、Zr、Hfなどの第IV族元素によることも示され、構成元素の制御に立脚した元素戦略による力学機能設計への展開が期待されます。

本研究は、JSPS科研費 (JP18H05453) 「計算材料科学によるハイレントロピー合金の力学特性の解明と制御」の助成を受けたものです。

Tsuru, T. et al., Intrinsic Factors Responsible for Brittle Versus Ductile Nature of Refractory High-Entropy Alloys, Nature Communications, vol.15, issue 1, 2024, 1706, 10p.



原子力科学研究所
原子力基礎工学研究センター 都留 智仁



◀Webはこちらへ