特集 粒界偏析における計算材料科学の最前線

ハイエントロピー合金の粒界偏析と粒界からの転位放出

塩谷光平* 新山友暁**[1] 下川智嗣**[2]

1. はじめに

近年，ハイエントロピー合金(High-entropy alloy，以下HEAとする)[1][2]と呼ばれる新しい合金系が注目を集め，盛んに研究が行われている[3]-[5]．HEAは一般的には，5種類以上の原子種をほぼ等量ずつ混合することにより作成される結晶性の固溶体合金の総称である(図1(a))．多種類の原子をそれぞれ高濃度に混合することにより，これまでに作成・実用化されてきたような希薄系合金(図1(b))では達成できないほどの高い配置のエントロピーを実現することができるため，相分離や金属間化合物の形成が抑制された高濃度の多成分合金として安定化するものと考えられている．また，HEAの中には，高強度と高延性を両立して示すもの[6]-[8]や，高温耐性を示すもの[9][10]など，従来の合金を凌駕するような様々な優れた機械的性質を示すものが数多く報告されている．このことからHEAは次世代の構造用材料の有力な候補として幅広い応用が期待されている．

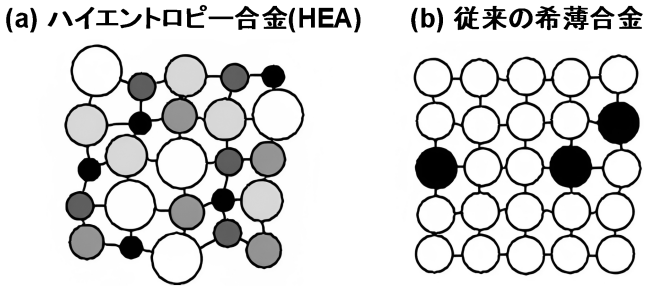

図1 (a)ハイエントロピー合金(HEA)と(b)従来の希薄合金の原子構造の模式図．従来の合金では溶質原子が少量だけ混合しているのに対して，HEAでは各原子種がほぼ等量ずつの割合で均等に混合している．また，HEAは大小様々な原子種から結晶構造が形成されるため，結晶格子が歪んでいる．

HEAの注目すべき特徴の一つとして，構成原子種の原子サイズが様々に異なっていることがあげられる．この原子サイズの違いにより，結晶格子には格子欠陥が存在していなくても原子レベルのひずみが生じている[3][4][11](図1(a))．この格子ひずみが転位のすべり運動の抵抗として機能するために，強化機構として従来の金属材料で導入されるような固溶原子や析出物をはじめとした転位運動の障害物がなくても材料強度の向上が実現され得る．例えば，格子のひずみの大きさを表す平均原子変位パラメータ(Mean square atomic displacement; MSAD)とHEAの降伏応力には正の相関があり，HEA中の格子ひずみが転位運動を抑制することで高い降伏応力が実現されることが報告されている[12][13]．このように，原子サイズの異なる元素がほぼ等量ずつ混ざり合うことで，結晶粒内に原子スケールの力学場の不均一性が生じ，このことがHEAの力学特性に強く関与していると考えられている．

結晶材料には転位以外にも粒界と呼ばれる面欠陥が存在している．粒界は結晶方位の異なる隣接粒間の界面であり，そこでは結晶格子の並進対称性が壊されている．そのため，粒界は転位運動に対する強い抵抗として機能し[14]，材料強度は粒径依存性を示す[15][16]．さらに，粒界は結晶領域よりもエネルギーが高い領域であり，結晶粒集団における力学場の不均一性を生じ，破壊の起点として機能することが知られている．また，粒界はその構造に応じた大小様々な隙間(自由体積)を有し，拡散[17]や転位放出[18]-[21]の優先サイトとして

* 金沢大学大学院自然科学研究科機械科学専攻；大学院生(〒920-1192 金沢市角間町)
** 金沢大学理工研究域機械工学系；1)准教授 2)教授
Grain Boundary Segregation and Dislocation Emission from Grain Boundaries in High-entropy Alloys; Kohei Shiotani*, Tomoaki Niiyama** and Tomotsugu Shimokawa** (Division of Mechanical Science and Engineering, Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University, Kanazawa)
Keywords: *high-entropy alloy, grain boundary, dislocation, segregation, molecular dynamics, Monte Carlo*
2023年6月25日受理[doi:10.2320/materia.62.658]

機能することも知られている．ここでHEAにおける粒界に着目する．先述したようにHEAは大小様々なサイズの原子種で構成されるため，粒界において，もし粒界の自由体積の大きさに見合ったサイズの原子が粒界を構成することを通じて粒界全体の自由体積を減少させることができれば，その結果として粒界は力学的に安定化することになる(例えば，自由体積が大きな原子サイトにはサイズの大きな原子が，自由体積の小さな原子サイトにはサイズの小さな原子が配置されるなど)．このとき，粒界を構成する原子種の組成比率には偏りが生じるため，粒界偏析が発生することになる．実際にHEAにおいて粒界偏析が発生することは，3次元アトムプローブのような実験的手法から多く確認されている[22)-(27)]．しかしながら実験的なアプローチのみではHEAにおける粒界偏析の発生がどのように粒界を介した塑性現象に影響を与え，HEAの優れた力学特性の発現に関与し得るのかを理解することは困難である．

このような力学現象を原子スケールで検討できる有力な手法の一つとして分子動力学(Molecular dynamics; MD)シミュレーションがあげられる．MDシミュレーションは，各々の原子に働く力を用いてNewtonの運動方程式を立式し，それらを時間的に発展させることを通じて原子の運動を追跡する手法である．そのため原子スケールの時間的・空間的な解像度で格子欠陥を力学的に検討・考察することが可能である．そしてMDシミュレーションでは，用いる原子間ポテンシャルの特色に応じて，現実的な材料だけでなく，ある物性のみを恣意的に変更した仮想的な材料をモデル化し，その力学現象をシミュレートすることも可能である．そのため，原子間ポテンシャルのチューニングを通じて仮想材料の物性を制御することにより，ある力学現象に対する支配因子を特定するためのツールとして効力を発揮しうる．本報では，著者らが近年取り組んでいるHEAにおける粒界偏析や粒界を介した塑性現象(特に粒界からの転位放出現象)に対して，MDシミュレーションを用いて検討・考察して得られた知見について紹介する[28)]．本報ではまず，HEAをシンプルに原子スケールでモデル化する手法について述べ，その手法を用いて作成したHEAモデルを用いた粒界偏析シミュレーションと，変形解析を通じた粒界からの転位放出現象について述べる．最後に，これまでに得た知見に基づいて今後の研究の展望について述べる．

2. ハイエントロピー合金の原子モデリング

HEAを構成する原子種のサイズの多様性と粒界偏析，さらには粒界からの転位放出現象との関係について調査するために，同程度のサイズの原子種から構成されるHEAから，ばらつきが大きく異なるサイズの原子種から構成されるHEAまで，様々な構成原子サイズを有するHEAをモデル化した．ここでは5種類の原子から構成されるHEAを対象とした．

(1) 原子サイズのばらつきの定量化

原子サイズが様々に異なる原子種から構成されるHEAモデルを作成する際には，次式に示す原子サイズ差パラメータ[29)]を用い，その原子サイズのばらつきを定量化した．

$$\delta = 100\sqrt{\sum_{\alpha=1}^{n} c_\alpha \left(1-\frac{r_\alpha}{\sum_{\beta=1}^{n} c_\beta r_\beta}\right)^2} \qquad (1)$$

ここで，nはHEAを構成する原子種の数(ここでは$n=5$)，c_α，r_αはそれぞれ構成原子種αの混合割合と原子サイズである．著者らは，2次元系の多元系モデルの液体状態からの急冷シミュレーションを通じて，$\delta<8$であれば多元系合金が結晶材料として安定化することを見出している[28)]．そのため，ここでは$\delta<8$の範囲である$\delta=0$, 2.06, 4.12及び6.15をもつ2次元系原子モデルを作成した．なお，$\delta=0$は異種原子間で原子サイズに差がないことを意味し，その値が大きくなるのに伴って原子サイズの差が大きくなることを意味する(異種原子間で原子サイズを変える手法については後述する)．

(2) 原子間相互作用

MDシミュレーションによってHEAの原子シミュレーションを実施するためには，HEAの構成原子間に発生する相互作用エネルギーを表現する必要がある．近年，物性を実験や第一原理計算から得られる値にフィッティングすることを通じて，HEAをよりリアルに表現するような原子間相互作用を構築する試みが活発に行われてきた[30)-(35)]．その一方で本研究では，HEAを構成する原子種の原子サイズと粒界が持つ固有の隙間(自由体積)という幾何学的な関係に着目した検討を目的としている．そのため本研究では，先述したようなHEAのリアルさを追求した原子間相互作用ではなく，原子サイズは原子種によって異なるが，原子間結合力のような化学的効果は全ての原子種間で同じになるような仮想的なHEAを用いた検討を行った．そのような検討を可能にするための5元系のHEAの原子間相互作用として，次式に示すようなMorseポテンシャル$\phi^{\alpha\beta}(r)$をベースとする原子間ポテンシャル$\phi_s^{\alpha\beta}(r)$を用いた．

$$\phi_s^{\alpha\beta}(r) = \begin{cases} \phi^{\alpha\beta}(r) - \phi^{\alpha\beta}(r_c) - (r-r_c)\dfrac{d\phi^{\alpha\beta}(r_c)}{dr} & (r \le r_c) \\ 0 & (r > r_c) \end{cases} \qquad (2)$$

αとβは原子種を意味し，本研究では簡易的に$\alpha, \beta=1, 2, 3, 4, 5$の整数を割り当てた．$r_c$はカットオフ距離であり，原子間結合距離が$r_c$以遠では結合エネルギーや結合力がゼロになるようにMorseポテンシャルの形状をチューニングした．なお，本研究で用いた原子間相互作用のベースとしたMorseポテンシャル$\phi^{\alpha\beta}(r)$は，次式のように表現できるシンプルな2体間相互作用の一種である．

$$\phi^{\alpha\beta}(r) = D^{\alpha\beta}\{e^{-2a^{\alpha\beta}(r-r_0^{\alpha\beta})} - 2e^{-a^{\alpha\beta}(r-r_0^{\alpha\beta})}\} \qquad (3)$$

$D^{\alpha\beta}$，$a^{\alpha\beta}$及び$r_0^{\alpha\beta}$はそれぞれ，原子種αとβ間の凝集エネルギー，弾性定数及び安定結合距離に関連するパラメータである．先述したように本研究では，原子サイズは原子種によって異なるものの原子間結合力のような化学的効果は全ての原

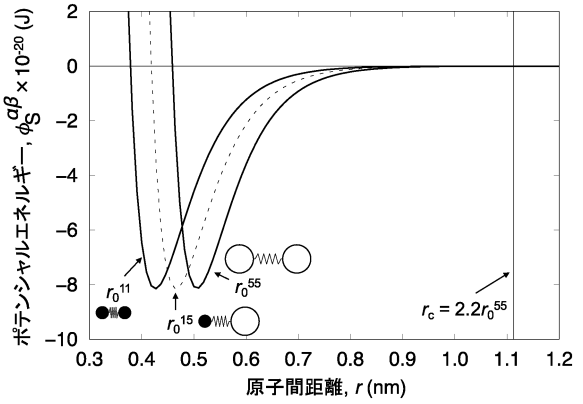

図2　HEAの原子間ポテンシャルの例．ここでは$\delta=6.15$をもつHEAモデルの構成原子種の中で最小サイズ(原子種1)と最大サイズ(原子種5)の2体間相互作用を示した．ポテンシャルの深さ，極小値付近の曲率，及び極小値の位置はそれぞれ，凝集エネルギー，弾性定数，及び安定原子間結合距離に関連する．

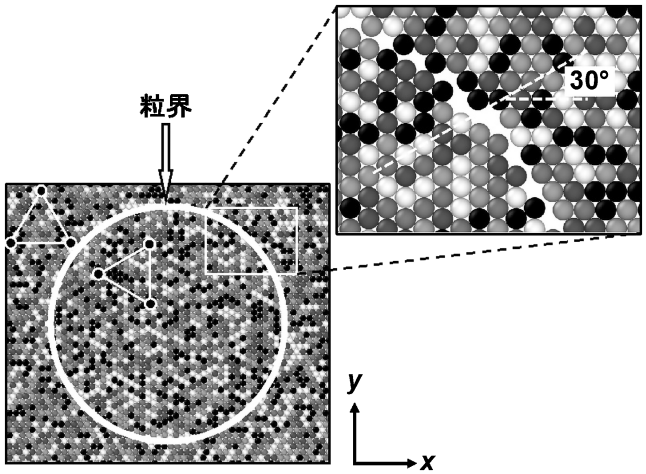

図3　粒界偏析と粒界からの転位放出シミュレーションのための初期の原子配置．原子の色の違いは原子種の違いを表す．5種類の原子種はランダムに分布している．粒界は円環状に配置されており，粒界を構成する隣接粒間の方位差は30度である．

子種間で同じになるような仮想的なHEAを対象とするため，$D^{\alpha\beta}$と$a^{\alpha\beta}$は全ての同種原子間と異種原子間で一定値とし，$r_0^{\alpha\beta}$のみαとβの組み合わせで様々に変えることで，原子サイズのみが異なる仮想的なHEAモデルを作成した．同種原子間の$r_0^{\alpha\alpha}$はαが1から5になるにつれて大きな値となり，異種原子間の$r_0^{\alpha\beta}$は$r_0^{\alpha\alpha}$と$r_0^{\beta\beta}$の平均値とした．**図2**に参考として，$\delta=6.15$ をもつHEAモデルの構成原子種の中で最小サイズ(原子種1)と最大サイズ(原子種5)の原子間ポテンシャル$\phi_s^{\alpha\beta}(r)$を示した．ポテンシャルの深さ(凝集エネルギー)と極小値付近の曲率(弾性定数)は全ての原子種間で同じ値に揃え，極小値の位置(安定原子間距離)のみを同種原子間で変えることを通じて，原子サイズのみが原子種間で異なるHEAモデルを作成した．

(3)　解析モデルと解析条件

粒界偏析シミュレーションや粒界からの転位放出シミュレーションの原子配置としては，様々な粒界構造からの転位放出現象を単一の原子モデル内で表現するために，**図3**に示すような円環状の粒界モデルを用いた．なお，図中の原子の色の違いは原子種の違いを表す．ここでは5種類の原子種は等量ずつ原子モデルの格子点上にランダムに配置した．また，原子サイズ差は先述したように$\delta=0, 2.06, 4.12$及び6.15をとるような4種類の原子系を用いた．

先述の手法によって作成した円環状粒界モデルでは各原子種がランダムに分布しているが，実際にはエネルギー的な効果によって，粒界近傍ではその構造に対応したエネルギー的に有利な特定の原子種の比率が高まる可能性が考えられる．そこで，以下で述べるモンテカルロ(Monte Carlo; MC)法とMD法を組み合わせた「ハイブリッドMC/MD法」を用いることで，ある温度T(焼鈍温度)において熱力学的な平衡状態に近い原子配置を獲得した．まず，ランダムに2つの原子を選択しその位置を入れ替えた．それらの原子の入れ替え後にMD法により構造緩和計算を行い，原子の入れ替え前後の粒界モデル全体のエネルギー差ΔEを決定した．得られたエネルギー差に対してMetropolisの基準[36][37]に従い，$\Delta E \leq 0$の場合には無条件でそれらの原子位置の入れ替えを採択する一方で，$\Delta E > 0$の場合には$\exp[-\Delta E/(kT)]$の確率で原子の位置交換を採択するものとした．ここでkはBoltzmann定数，Tは焼鈍温度である．焼鈍温度は$T=300$ ($=0.12\ T_m$)，1000($=0.4\ T_m$)，及び2000($=0.8\ T_m$)Kを選んだ．T_mは対象とする4種類のδをとる原子モデルの融点であり，$T_m=2500$ Kである．

以上の手法によって得られる焼鈍後の円環状粒界モデルに対して，温度1Kでのy方向及びx方向の単軸圧縮変形解析を行い，HEA中の粒界の転位放出能力について検討した．

3.　ハイエントロピー合金における粒界構造特性

(1)　焼鈍シミュレーションによるエネルギー変化

図4に示したのは，$\delta=2.06$のHEAにおいて温度$T=300, 1000$，及び2000 Kでハイブリッド MC/MD法による焼鈍シミュレーションを実施した際の，原子モデル全体でのポテンシャルエネルギー変化である．いずれの温度における焼鈍においても，モンテカルロステップの増加に伴うポテンシャルエネルギーの減少が見られる．そしてその減少量はモンテカルロステップの増加に伴って小さくなり，次第に一定値に収束していくような傾向が見られる．この傾向は焼鈍温度が低い$T=300$ Kほど顕著であることがわかる．この挙動はGibbsの自由エネルギーの式から解釈することができる．すなわち，この挙動は低温であるほど配置のエントロピーよりもエネルギーを優先した原子配置を実現しようとするのに対して，高温下では配置のエントロピーの寄与が大きくなるような原子配置(ランダム配置)を実現しようとすること

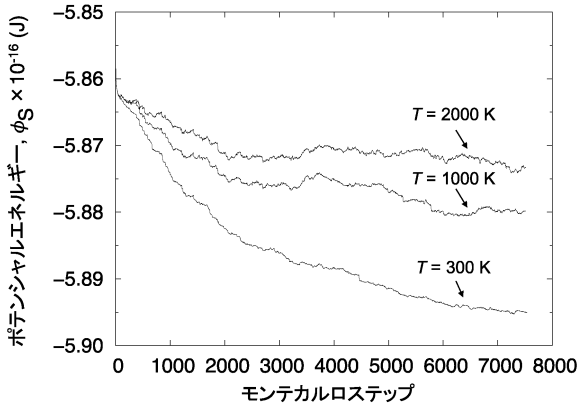

図4　温度 $T=300, 1000$，及び 2000 K で原子サイズ差 $\delta=2.06$ の HEA モデルにハイブリッド MC/MD 法による焼鈍を行った際の全ポテンシャルエネルギー変化．温度が低いほどポテンシャルエネルギーの減少量が大きいことがわかる．

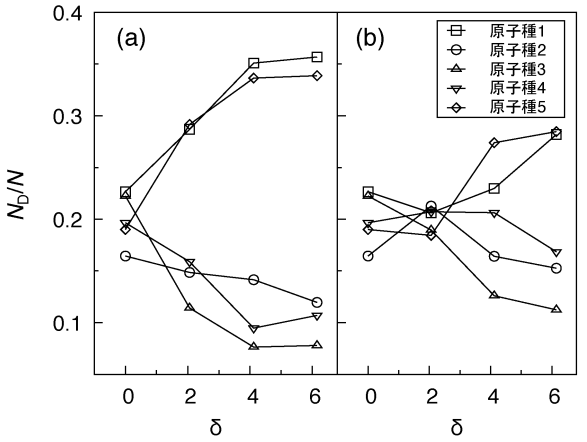

図5　焼鈍温度が(a) $T=300$ K と(b) 2000 K においてハイブリッド MC/MD 法を適用した際の，粒界を構成する原子種の比率と原子サイズ差 δ の関係．$\delta=0$(単元系)においても粒界を構成する原子種が等比率になっていないのは，粒界を構成する原子の個数が少ないことに起因した組成の揺らぎのためである．

に対応していると考えることができる．そのため低温での焼鈍では配置のエントロピーの低い原子配置が実現されていると考えられ，粒界偏析が生じていることが予想される．

(2)　焼鈍後の粒界における原子組成

図5 に示したのは，(a) $T=300$ K と(b) 2000 K において円環状粒界モデル中の粒界を構成する原子組成比率と原子サイズ差 δ の関係である．まず，$\delta=0$(単元系)における原子組成に着目すると，粒界を構成する原子種は等比率になっていないことがわかる．これは粒界を構成する原子の個数が少ないことに起因した組成の揺らぎであることを注記しておく．$T=300$ K と 2000 K ではいずれの温度下においても，原子サイズ差 δ の増加に伴って最小サイズの原子種(Element 1)と最大サイズの原子種(Element 5)が粒界を構成する割合が増加する傾向が見てとれる．またこの傾向が強いのは温度が

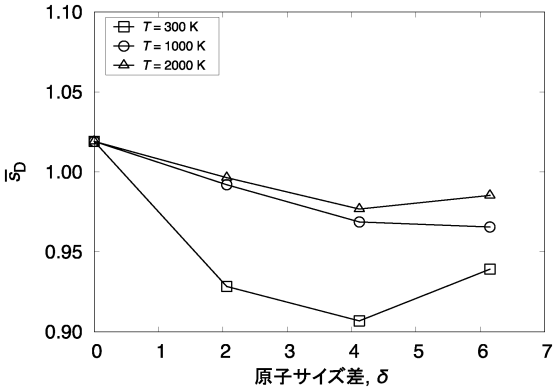

図6　粒界における原子混合度 $\bar{s}_D$ と原子サイズ差 δ の関係．焼鈍温度 $T=300, 1000$，及び 2000 K について示した．焼鈍温度が低いほど粒界における原子混合度が小さく，このことは粒界偏析が発生していることを意味している．

低い 300 K の方であることもわかる．このことから，HEA の粒界偏析の傾向は原子サイズ差だけではなく焼鈍温度にも依存していることが理解できる．これは，先述したように Gibbs の自由エネルギーに対するエントロピーの寄与が温度に比例することからも自然に理解できる現象である．

図6 に示したのは，粒界における原子混合度 $\bar{s}_D$ と原子サイズ差 δ の関係である．ここでは焼鈍温度 $T=300, 1000$，及び 2000 K における解析結果を示した．$\bar{s}_D$ は配置のエントロピーの考え方に基づいて定義した量であり，その値が 1 であれば周囲の原子種はランダムに混合していることを意味し，値が小さくなるのに伴って特定の原子種が集まっていることを意味する指標である(この指標の導出等の詳細については文献[28]を参照されたい)．まず，$\delta=0$ では $\bar{s}_D$ は 1 を超える値を示していることがわかるが，これは $\bar{s}_D$ の計算に用いた原子配置のサンプル数が少ないことに起因した 1 からの揺らぎである．そのため，サンプル数の増加に伴い $\bar{s}_D$ は 1 に収束することを注記しておく．次に各 δ における $\bar{s}_D$ の変化に着目すると，焼鈍温度の低下に伴って $\bar{s}_D$ は減少することがわかる．このことは，HEA の粒界は局所構造が同種原子で構成される傾向を持つことを意味しており，$\bar{s}_D$ の減少は粒界偏析が発生していることとその偏析の度合いを定量的に示している．

図7 に示したのは，$\delta=4.12$ の HEA モデルにおいて，(a) 300 K と(b) 1000 K で焼鈍した際の粒界構造である．粒界を構成する原子種に着目するために結晶粒内の原子は消去して示した．これらの粒界構造より，本研究でモデル化したような原子間相互作用力が全ての原子種間で一定の仮想的な HEA モデルでは，低温での焼鈍ほど粒界は黒い原子(最小サイズの原子種)と白い原子(最大サイズの原子種)から構成される傾向が強くなることがわかる．このように HEA の構成原子種のサイズの違いに起因して粒界偏析が発生することが視覚的かつ定性的に理解できる．なお，ここでは様々な粒界構造を併せ持つ円環状の粒界モデルを用いたため粒界構造

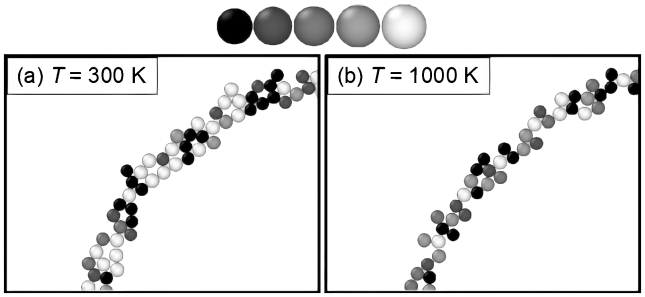

図7　焼鈍温度が(a) 300 K と(b) 1000 K における $\delta = 4.12$ の HEA の粒界構造．結晶粒内の原子は消去して粒界領域中の原子のみ示した．低温ほど黒い原子(最小の原子)と白い原子(最大の原子)が多く粒界領域に存在しており，粒界偏析が発生していることがわかる．

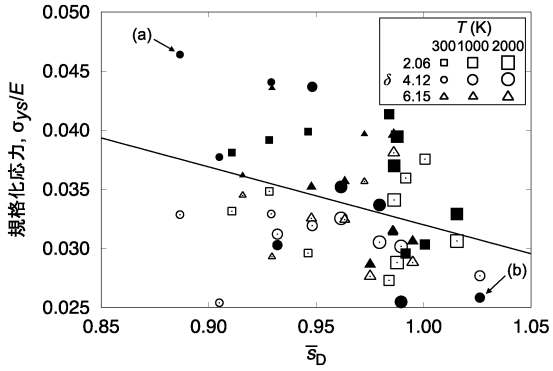

図8　粒界からの転位放出応力 σ_{ys}/E と粒界中の原子混合度 $\bar{s}_D$ の関係．転位放出応力はヤング率 E で規格化して示した．白抜きと黒塗りのプロットはそれぞれ，y 方向及び x 方向圧縮における転位放出応力である．また，図7に示した粒界構造を持つ HEA モデルの転位放出応力と，フィッティングにより得られる直線も図中に示した．

の特定が困難であり，先述したような原子サイズと粒界の隙間との関係(隙間が小さな原子サイトにはサイズが小さな原子が偏析するなど)を見出すことはできなかった．そのため，このような関係は対称傾角粒界を用いた著者らの後の研究において議論した[38]．

4.　ハイエントロピー合金の粒界からの転位放出現象

ハイブリッド MC/MD 法による焼鈍で得られた円環状粒界モデルに対して，温度 1 K で x 方向及び y 方向に単軸圧縮変形を加え，粒界から転位が放出したときの応力 σ_{ys} を測定した．ここでは粒界を構成する原子種の組成の偏りを示すパラメータである原子混合度 $\bar{s}_D$ と σ_{ys} の関係を検討した．なお，負荷荷重方向が異なると解析モデルの弾性定数も変化するため，各応力ひずみ曲線の傾きからヤング率 E を算出し，σ_{ys} を E で正規化した上で，異なる δ のモデル間での比較を行った．

図8に示したのは，粒界から転位が放出されたときの規格化応力 σ_{ys}/E と粒界の原子混合度 $\bar{s}_D$ の関係である．プロットの形状の違いは原子サイズ差 δ，大きさの違いはハイブリッド MC/MD シミュレーションにおける焼鈍温度 T の違いであり，白抜き，黒塗りのプロットはそれぞれ y 方向，x 方向の単軸圧縮において得られる値を意味している．$\bar{s}_D$ が小さくなることに伴い σ_{ys}/E が大きくなる傾向がみられる．つまり，HEA の粒界を構成する原子種の組成が不均質になり，粒界偏析が発生することで粒界から転位が放出しにくくなることを意味している．ここで，図6で示したように粒界の局所的な組成の偏りは温度に依存して変化しうることを思い出すと，このことは HEA に熱処理を加えることで粒界の組成が変化することを意味しており，熱処理の結果として，HEA の粒界を介した塑性現象を制御できる可能性を示唆している．一方で，図8のプロットからは，δ と σ_{ys}/E の間に明確な相関は確認できないことに注意が必要である．このことは，粒界から転位が放出する現象は，原子サイズ差 δ のみでは整理できず，粒界の局所的な組成の偏りが重要な因子であることを意味している．

図8より，x 方向圧縮に対して y 方向圧縮の σ_{ys}/E は $\bar{s}_D$ に鈍感であることがわかる．本解析において粒界から放出される転位のバーガースベクトルがそれぞれの圧縮方向で反対符号となるが，一般的に粒界に存在する粒界転位と放出する格子転位のバーガースベクトルの関係は，転位放出現象に強く影響することが知られている[19]．そのため，x, y 方向の傾向が異なる原因として，今回用いた粒界を構成する粒界転位成分が考えられるが，円形粒界を用いたため非対称成分を多く含み粒界転位成分の特定が困難であった．それゆえに，粒界からの転位放出現象における負荷荷重方向依存性を検討するためには，粒界転位を容易に特定可能な対称傾角粒界を用いた考察が必要である．

上述した HEA の負荷荷重方向に対する粒界転位成分の影響を検討することを一つの目的として，著者らは対称傾角粒界を有する 2 次元系の HEA モデルを用いた粒界からの転位放出現象に関する検討も行っている[38]．この検討では，粒界偏析が発生することにより粒界自由体積が減少し粒界からの転位放出を困難化することを，様々な対応格子を有する粒界を用いて系統的に見出している．そして，転位放出応力の粒界偏析度合い依存性や負荷荷重方向依存性のみならず，粒界偏析が結晶粒内部と粒界の間の力学的な不均質性の緩和機構として機能する結果として，塑性現象の優先サイトとしての粒界の役割が抑制される可能性を示唆する結果を得ている．以上のように HEA の粒界偏析は，HEA の粒界を介した塑性現象に大きな影響を与える因子であることを見出している．

5.　ま　と　め

本報では，著者らが近年取り組んでいる HEA における粒界偏析や粒界からの転位放出現象に対して，MD シミュレーションを用いて検討・考察して得られた知見について紹介した．現在は，2 次元系の HEA モデル中の対称傾角粒界にお

ける粒界偏析や粒界からの転位放出現象の解析[38]をはじめとして，3次元系の実際の粒界構造ユニットを有する場合の転位放出現象など，粒界偏析が粒界を介した塑性現象に与える影響について原子スケールのアプローチで検討を行っている．これらの結果の詳細は別の機会に紹介させて頂ければ幸いである．本報で示したように原子シミュレーションは，実現象の中では切り離して考えることができない現象を分離して考えることができるため(ここではHEAの原子サイズの違いのみが粒界偏析や粒界からの転位放出現象に与える影響を検討した)，様々な事象が絡み合った複雑な現象をシンプルな現象に落とし込み，その現象の支配因子に関する詳細な情報を原子スケールの時空間的解像度で検討することができる．そのため原子シミュレーションは，材料中の格子欠陥の複雑な相互作用の結果として生まれる力学現象を理解するための1つの有用なツールとして，大きな役割を果たすことができる手法であると考えている．このような原子スケールのシミュレーションが，金属材料の力学現象を理解するための一助となれば幸いである．

本研究は，文部科学省科学研究費補助金・新学術領域研究(研究領域提案型)「ハイエントロピー合金」(課題番号：JP18H05453, JP21H00142)と日本学術振興会特別研究員奨励費(課題番号：JP21J21395)の補助を受けて実施したことを付記し，ここに謝意を表します．

文　　献

(1) J.-W. Yeh, S.-K. Chen, S.-J. Lin, J.-Y. Gan, T.-S. Chin, T.-T. Shun, C.-H. Tsau and S.-Y. Chang: Adv. Eng. Mater., **6** (2004), 299–303.
(2) B. Cantor, I.T.H. Chang, P. Knight and A.J.B. Vincent: Mater. Sci. Eng. A, **375–377** (2004), 213–218.
(3) Y. F. Ye, Q. Wang, J. Lu, C. T. Liu and Y. Yang: Mater. Today, **19** (2016), 349–362.
(4) D. B Miracle and O. N. Senkov: Acta Mater., **122** (2017), 448–511.
(5) H. Inui, K. Kishida and Z. Chen: Mater. Trans., **63** (2022), 394–401.
(6) B. Gludovatz, A. Hohenwarter, D. Catoor, E.H. Chang, E.P. George and R.O. Ritchie: Science, **345** (2014), 1153–1158.
(7) Y. Deng, C. C. Tasan, K. G. Pradeep, H. Springer, A. Kostka and D. Raabe: Acta Mater., **94** (2015), 124–133.
(8) Z. Li, K.G. Pradeep, Y. Deng, D. Raabe and C.C. Tasan: Nature, **534** (2016), 227–230.
(9) O. N. Senkov, G. B. Wilks, J. M. Scott and D. B. Miracle: Intermetallics, **19** (2011), 698–706.
(10) C.-C. Juan, M.-H. Tsai, C.-W. Tsai, C.-M. Lin, W.-R. Wang, C.-C. Yang, S.-K. Chen, S.-J. Lin and J.-W. Yeh: Intermetallics, **62** (2015), 76–83.
(11) J.-W. Yeh: Ann. Chim. Sci. Mat., **31** (2006), 633–648.
(12) N. L. Okamoto, K. Yuge, K. Tanaka, H. Inui and E. P. George: AIP Adv., **6** (2016), 125008.
(13) Md. Lokman Ali, S. Shinzato, V. Wang, Z. Shen, J.-P. Du and S. Ogata: Mater. Trans., **61** (2020), 605–609.
(14) H. V. Swygenhoven: Science, **296** (2002), 66–67.
(15) E. O. Hall: Proc. Phys. Soc. Lond., **64B** (1951), 747–753.
(16) N. J. Petch: J. Iron Steel Inst., **174** (1953), 25–28.
(17) T. Frolov and Y. Mishin: Phys. Rev. B, **79** (2009), 174110.
(18) M. A. Tschopp, G. J. Tucker and D. L. McDowell: Acta Mater., **55** (2007), 3959–3969.
(19) D. E. Spearot, M. A. Tschopp, K. I. Jacob and D. L. McDowell: Acta Mater., **55** (2007), 705–714.
(20) D. E. Spearot: Mech. Res. Comm., **35** (2008), 81–88.
(21) T. Shimokawa: Phys. Rev. B, **82** (2010), 174122.
(22) K. G. Pradeep, N. Wanderka, P. Choi, J. Banhart, B. S. Murty and D. Raabe: Acta Mater., **61** (2013), 4696–4706.
(23) D. Raabe, M. Herbig, S. Sandlöbes, Y. Li, D. Tytko, M. Kuzmina, D. Ponge and P.-P. Choi: Curr. Opin. Solid State Mater. Sci., **18** (2014), 253–261.
(24) Y. Zou, P. Okle, H. Yu, T. Sumigawa, T. Kitamura, S. Maiti, W. Steurer and R. Spolenak: Scr. Mater., **128** (2017), 95–99.
(25) C. M. Barr, J. E. Nathaniel II, K. A. Unocic, J. Liu, Y. Zhang, Y. Wang and M.L. Taheri: Scr. Mater., **156** (2018), 80–84.
(26) L. Li, Z. Li, A. Kwiatkowski da Silva, Z. Peng, H. Zhao, B. Gault and D. Raabe: Acta Mater., **178** (2019), 1–9.
(27) L. Li, R. D. Kamachali, Z. Li and Z. Zhang: Phys. Rev. Mater., **4** (2020), 053603.
(28) K. Shiotani, T. Niiyama and T. Shimokawa: Mater. Trans., **61** (2020), 1272–1279.
(29) S. Fang, X. Xiao, L. Xia, W. Li and Y. Dong: J. Non-Cryst. Solids., **321** (2003), 120–125.
(30) W.-M. Choi, Y. H. Jo, S. S. Sohn, S. Lee and B.-J. Lee: npj Comput. Mater., **4** (2018), 1–9.
(31) D. Farkas and A. Caro: J. Mater. Res., **33** (2018), 3218–3225.
(32) R. Gröger, V. Vitek and A. Dlouhý: Model. Simul. Mat. Sci. Eng., **28** (2020), 075006.
(33) X. Huang, L. Liu, X. Duan, W. Liao, J. Huang, H. Sun and C. Yu: Mater. Des., **202** (2021), 109560.
(34) O. R. Deluigi, R. C. Pasianot, F. J. Valencia, A. Caro, D. Farkas and E. M. Bringa: Acta Mater., **213** (2021), 116951.
(35) J.-P. Du, P. Yu, S. Shinzato, F.-S. Meng, Y. Sato, Y. Li, Y. Fan and S. Ogata: Acta Mater., **240** (2022), 118314.
(36) N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller and E. Teller: J. Chem. Phys., **21** (1953), 1087–1092.
(37) 上田　顯：分子シミュレーション―古典系から量子系手法まで―，裳華房，(2003).
(38) K. Shiotani, T. Niiyama and T. Shimokawa: Submitted.

塩谷光平

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★
2021年3月　金沢大学大学院自然科学研究科博士前期課程修了
2021年4月　金沢大学大学院自然科学研究科博士後期課程入学
2021年4月　日本学術振興会特別研究員(DC1)
専門分野：　計算材料力学(分子動力学法)
◎ハイエントロピー合金の粒界を介した塑性現象に関する原子シミュレーションに従事.
★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★

新山友暁

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★
2004年　立命館大学大学院理工学研究科数理科学専攻博士課程前期課程修了
2009年　立命館大学大学院理工学研究科総合理工学専攻博士課程後期課程修了
2020年11月－ 現職
専門分野：非線形物理学
★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★

下川智嗣

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★
2002年　大阪大学大学院工学研究科博士後期課程修了
2003年　金沢大学工学部助手
2015年10月－ 現職
専門分野：計算材料力学
★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★