

研究成果

ハイエントロピー合金の耐照射性の解明

徐虬 複合原子力科学研究所准教授、黄紹松 大連理工大学准教授、钟志宏 合肥工業大学教授らの研究グループは、ハイエントロピー合金 CoCrFeMnNi の耐照射性のメカニズムを解明しました。

本研究成果は、2021年1月12日に英国の科学誌「Scientific Reports」に掲載されました。

研究者からのコメント

ハイエントロピー合金 CoCrFeMnNi は、優れた機械的性能を持ちかつ安定した材料であるため、広く研究されています。また、この合金は優れた耐照射性を有することも報告されています。耐照射性に優れている理由は定かではありませんが、ハイエントロピー合金の原子レベルの応力や局所的な格子歪みにより、照射により形成した点欠陥の移動障害壁が大きくなっていると考えられています。本研究では、 CoCrFeMnNi 合金においては、本来高速変形後に形成されるはずの原子空孔集合体が観察されませんでした。第一原理に基づいた計算から CoCrFeMnNi 合金の原子空孔集合体が不安定であることが分かりました。従って、ハイエントロピー合金 CoCrFeMnNi の優れた耐照射性は原子空孔集合体の形成ができないため、照射によって形成された格子間原子と原子空孔のお互いの再結合が促進されることによるものという結果が得られました。

概要：原子力材料は高エネルギー粒子の照射と共に、強度や延性などの力学特性が劣化します。劣化過程をいかに遅らせるかが原子力材料開発の目標です。本研究では、面心立方構造を持つ金属で、多数の原子空孔が形成されることが良く知られている高速変形条件下でも CoCrFeMnNi 合金においては、原子空孔集合体の形成が透過型電子顕微鏡で観察されませんでした。即ち、原子空孔が形成されても、原子空孔が集まらないと結論されます。計算機シミュレーションによる解析結果から二つの原子空孔からなる集合体が形成されますが、三つの原子空孔集合体が不安定になるため、形成されないことが分かりました。従って、 CoCrFeMnNi 合金中の原子空孔は同時に形成された格子間原子と再結合するか、粒界などで消滅するかしかありません。結果的に、点欠陥が形成されても、合金中に残らないので、材料の力学特性に影響しません。

背景：一般的に面心立方構造を持つ金属は中性子などの高エネルギー粒子に照射されると体積膨張（ボイドスウェリング）の現象が現れることが知られています。これは照射によって形成された原子空孔が集まる結果です。材料中に多数の原子空孔が集まった空洞が存在すると、材料は脆くなります。一方、同じ面心立方構造のハイエントロピー合金

CoCrFeMnNi は優れた力学特性を有します。また、最近、CoCrFeMnNi の耐照射性も良いと報告されました。その原因について、色々な仮説があります。例えば、ハイエントロピー合金の各元素の原子サイズが違うので、照射によって形成された格子間原子や原子空孔の移動が難しくなり、格子間原子と原子空孔の再結合確率が高くなります。その結果、残存する欠陥が少なくなり、耐照射性が良くなるという考えです。しかし、直接この仮説を支持する実験結果は殆どありません。本研究では、高濃度($\sim 10^{-4}$)の原子空孔を形成させたCoCrFeMnNi の微細組織を透過型電子顕微鏡により観察しました。その結果を原子レベルで解析し、耐照射性が良いメカニズムを解明しました。

研究手法・成果：高エネルギー粒子による照射と同じように塑性変形により、格子間原子と原子空孔が形成されます。本研究では、厚み 50 ミクロンのハイエントロピー合金 CoCrFeMnNi を 10%/s の歪速度で高速変形しました。面心立方構造の銅は同じ方法で変形すると、 10^{-4} 程度の格子間原子と原子空孔が形成されます。銅の場合、平均サイズ 1nm 程度の原子空孔集合体が観察されたのに対して、CoCrFeMnNi においては、変形により形成された転位または双晶以外に、原子空孔集合体は観察されませんでした。このことはハイエントロピー合金 CoCrFeMnNi においては、原子空孔集合体の形成が難しいこと示唆しています。

その原因を第一原理に基づいた計算により調べました。CoCrFeMnNi においては、二つの原子空孔からなる集合体が形成されますが、三つの原子空孔集合体が形成されません。従って、原子空孔が形成されても、集まらないので、格子間原子との再結合や粒界などへの消滅しかありません。その結果材料の劣化に寄与しません。

波及効果、今後の予定：ハイエントロピー合金 CoCrFeMnNi は中性子照射により寿命の長い放射能を生成する Co や Ni を含んでいるので、直接原子力材料としては使えませんが、本研究で得られた知見を用いて低放射化元素だけを含むハイエントロピー合金の開発に貢献したいと考えています。

研究プロジェクトについて

本研究は本研究所と大連理工大学、合肥工業大学と部局間学術交流協定による共同研究です。

<論文タイトルと著者>

タイトル：Irradiation Resistance Mechanism of the CoCrFeMnNi Equiatomic High-Entropy Alloy

著者：Q. Xu, H.Q. Guan, Z.H. Zhong, S.S. Huang, J.J. Zhao

掲載誌：Scientific Reports (www.nature.com/articles/s41598-020-79775-0)

【DOI】 <https://doi.org/10.1038/s41598-020-79775-0>

【用語集】

- (1) ハイエントロピー合金：等原子組成比の5つ以上の元素で構成されており、混合のエントロピーを高めた材料。
- (2) 点欠陥：格子欠陥の一種で、代表的なものは、格子間原子や原子空孔。
- (3) 格子間原子：結晶格子位置の間に入り込んだ原子。
- (4) 原子空孔：結晶格子位置に原子が存在しない所。