OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	An Atomistic Modeling Study of the Chemical Ordering and Chemical Ordering Related Properties of Multi-principal Element Alloys
Author(s)	Md.Lokman, Ali
Citation	大阪大学, 2021, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/85418
rights	
Note	やむを得ない事由があると学位審査研究科が承認したため、全文に代えてその内容の要約を公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

Form 3

Abstract of Thesis

Name （Md. Lokman Ali）	
Title	An Atomistic Modeling Study of the Chemical Ordering and Chemical Ordering Related Properties of Multi-principal Element Alloys (マルチプリンシパルエレメント合金中の化学秩序および化学秩序に関する性質の原子論的研究)

Abstract of Thesis

Multi-principal element alloys are a new class of metallic crystalline materials, also named medium entropy alloys (MEAs) for ternary systems and high entropy alloys (HEAs) for quaternary, quinary, or senary systems. As the number of medium- to high entropy alloys being studied and impressive structural properties increase rapidly, questions regarding the role played by their complex chemical fluctuations rise concomitantly. Here, using a combination of large -scale molecular dynamics (MD), density functional theory (DFT) and Semi Grand Canonical Monte-Carlo (SGCMC) simulation methods, we investigate the impressive mechanical properties of medium and high entropy alloys. The current PhD project investigates three different aspects of multi-principal element alloys.

The first aspects involve studying the pressure and temperature effects on the fundamental physical metallurgy of NiCoFeCrMn HEA and its subsystems. The structural, elastic, mechanical, electronic, and thermal properties of Ni-based multi-principal element alloys are investigated by ab-initio molecular dynamics (AIMD) calculations and molecular dynamic (MD) simulations. First, the elastic, electronic, and mechanical properties of the Ni-based alloys are calculated; these include the bulk, shear, and Young's moduli, the anisotropy factor, Poisson's ratio, Pugh's ratio, and the hardness. Next, the effects of temperature and pressure on the structural, elastic, mechanical, and electronic characteristics of Ni-based high entropy alloy and its subsystems are analyzed. We have also investigated the lattice dynamical properties and found that the materials under consideration are dynamically stable. The NiCoFeCrMn HEA has the highest entropy among these alloys and subsystems. Moreover, it has a low thermal expansion coefficient, suggesting that it is suitable for high-temperature applications.

Secondly, we demonstrate the relation between the critical resolved shear stress (CRSS) and atomic structure distortion in FCC high entropy alloys and also analyze the chemical short-range order (CSRO) effects on their relationship using molecular dynamics (MD) simulation-controlled Lennard-Jones (LJ) interatomic potentials. We found an almost linear relationship exists between CRSS and RMSAD for the random solid solution (RSS) of ternary, quaternary, and quinary alloy systems. The universality relation was also confirmed by a more realistic embedded atom method (EAM) potential. However, alloy systems that have a chemical short-range order (CSRO) do not follow this universal linear relationship.

The last part of this PhD project consists of studying the grain boundary segregation and chemical ordering in NiCoCr MEA using SGCMC method. The segregation of the grain boundary (GB) and chemical short-range order (CSRO) has a significant impact on the evolution of the microstructure and mechanical characteristics of multi-principal element alloys. The process of GB segregation and CSRO formation at GB in NiCoCr medium entropy alloy (MEA) at the various GBs is difficult to describe, and the formation of CSRO in GB is yet unknown. To fix this problem, we researched GB segregation at different temperatures in a NiCoCr MEA alloy. A Semi Grand Canonical Monte Carlo (SGCMC) approach is used to prepare thermodynamically equilibrium GB segregation in these simulations. As a demonstration, this methodology is applied to a GB is the NiCoCr system. At higher temperatures, the rate of energy decreasing is faster, and energetically atomic configurations occur more frequently. Grain boundary segregation decreases as temperature rises, while model size does not affect on grain boundary segregation. In addition, by computing partial radial distribution function (RDF), the chemical short-range order (CSRO) at GBs was also investigated and found that the different short-range order was found at grain boundary from bulk. By clarifying the roots of GB segregations and CSRO formation at GB in multi-principal element alloys, the current research offers a basic understanding of segregation and chemical ordering in multi-principal element alloy crystal defects.

様式７

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　名　（　Md. Lokman Ali　）	
論文審査担当者	（職）　氏名 主査　教授　尾方成信 副査　教授　垂水竜一 副査　教授　中村篤智

論文審査の結果の要旨

Md. Lokman Ali氏の博士論文は、マルチプリンシパルエレメント合金の基礎力学物性、およびマルチプリンシパルエレメント合金中に発生する化学秩序が力学物性に与える影響を、各種原子論的解析を用いて明らかにした研究成果をまとめたものである。

マルチプリンシパルエレメント合金は3種類以上の合金元素が等モル比で含まれる合金であり、従来の合金のように主たる元素に少量の添加元素を加えたものとは大きく異なる組成を有している。このため、従来合金にない力学特性を発現することが知られているが、そのメカニズムについては十分に明らかになっていない。このような背景のもと、Md. Lokman Ali氏による本研究ではまず、第一原理電子状態計算に基づく弾性的性質や線膨張係数の解析を実施し、その基本力学物性を明らかにしている。次に、マルチプリンシパルエレメント合金が高い強度を有することの根源的理由を明らかにするために、面心立方格子構造をもつマルチプリンシパルエレメント合金に対して分子動力学シミュレーションを用いた塑性変形開始応力（降伏応力）の解析を実施し、化学秩序を有しないマルチプリンシパルエレメント合金の降伏応力は、一般的にマルチプリンシパルエレメント合金特有の平衡状態での原子の結晶格子点からの変位の二乗に比例することを明らかにしている。一方で、化学秩序を有する場合にはこの限りではないことも明らかにしている。最後に、マルチプリンシパルエレメント合金の実材料は多結晶合金であり、粒界の性質が材料の力学特性を支配すると考えられることから、粒界の構造について検討している。その結果、粒界には特定の元素が析出することから、化学組成が粒内のそれとは異なること、さらには、粒界に沿った方向に粒内とはことなる化学秩序が形成され、それによって粒界が安定化していることを明らかにしている。

令和3年8月3日に審査担当者とMd. Lokman Ali氏とで審査委員会を開き、Md. Lokman Ali氏に博士論文の内容について説明を行わせ質疑・討論および口頭試問を行った。論文の内容はこの分野の進展に寄与する十分な新規性を有していることから、本論文は博士（工学）の学位論文として価値のあるものと認める。