

日本-V4 国際共同研究「先端材料」 2021年度 年次報告書	
研究課題名（和文）	極限環境下の使用に耐える多機能先進マグネシウム合金の開発
研究課題名（英文）	Development of Advanced Magnesium Alloys for Multifunctional Applications in Extreme Environments
日本側研究代表者氏名	河村 能人
所属・役職	熊本大学 先進マグネシウム国際研究センター センター長 教授
研究期間	2021年11月1日 ～ 2024年10月31日

1. 日本側の研究実施体制

氏名	所属機関・部局・役職	役割
河村 能人	熊本大学・先進マグネシウム国際研究センター	材料製造、基礎的な組織特性解析
山崎 倫昭	熊本大学・先進マグネシウム国際研究センター	高分解能組織解析
Donald S. SHIH	熊本大学・先進マグネシウム国際研究センター	データ解析、アプリケーションターゲット分析、微細構造の解析と破壊力学の融合
眞山 剛	熊本大学・先進マグネシウム国際研究センター	物理モデルを活用した材料塑性の解明
圓谷 貴夫	熊本大学・大学院先導機構	計算材料設計

2. 日本側研究チームの研究目標及び計画概要

本年度より開始のワークパッケージ（WP）においてそれぞれ次の目標を立てて研究を推進する。WP1（Mg合金の設計と製造）では、第一原理計算を援用した合金の試作を行い、目的の異なる三素材群の製造体制を構築する。WP2（物理的特性の学際的調査）では、基礎的のみならず高分解能組織解析を行うことで物理モデルを活用した材料塑性の解明に繋げる。

3. 日本側研究チームの実施概要

本年度より開始の WP1 および WP2 において、計画した目標に従い、国際的な連携体制の下で研究を滞りなく推進した。

WP1 では、(1)第一原理計算に基づく Mg-Zn-Y 合金の相安定性の解析と、(2)急冷法を用いた各種 Mg 合金の開発製造を実施した。(1)第一原理計算に基づく Mg-Zn-Y 合金の相安定性の解析では、電子顕微鏡観察による構造解析に基づき提案された 18R 型長周期積層 (LPSO) 構造のユニットセルの元素組成比を基にして、Zn の原子空孔を含ませた $Mg_{58}Zn_{7-x}Y_8$ 組成相、すなわち Mg と Y の比が一定で Zn の原子数を減じた場合の仮想相の格子パラメータを含む構造最適化を実行し、標準生成エンタルピーを系統的に計算したところ、18R 型 $Mg_{58}Zn_{7-x}Y_8$ 相に Zn 原子空孔 ($x = 1\sim 6$) を導入した状態は熱力学的には不安定であり、 $Mg_{58}Zn_7Y_8$ 相 ($x = 0$ の場合) と単体金属相 (Mg および Y) に相分離した方が安定であること、ただし、比較的低温であれば $x = 1$ および 3 の状態も準安定であり LPSO 相が安定に存在し得ることを示した。電子状態の解析からは LPSO 相への Zn 空孔導入が Zn-Mg 間の共有結合を強め、系の安定性を維持していることが明らかになりつつある。(2)急冷法を用いた各種 Mg 合金の開発製造では、LPSO 型 Mg-Zn-Y-Al 合金および生体適合型 Mg-Ca-Zn-Y-Mn 合金の二種類の試作合金を共同研究先のスロバキア科学アカデミー、カレル大学、ワルシャワ工科大学へ試料提供するに至った。

WP2 では、(3)基礎的な組織評価、カレル大学との連携による(4)高分解能組織解析を実施した。(3)基礎的組織解析では、本プロジェクトにおける基本組成の鋳造材、および基準となる加工条件により製造された押出材の結晶粒径、形態、各相の配置および結晶配向を光学顕微鏡、共焦点顕微鏡および走査型電子顕微鏡 (SEM) を用いて観察した。さらに(4)高分解能組織解析では、LPSO 型 Mg 合金鋳造材および押出材に対して、鋳造材に含まれる析出物や格子欠陥に加えて、塑性変形に伴い押出材中に形成される変形組織に注目して透過型電子顕微鏡 (TEM) による観察を行った。

WP1 および WP2 により得られた結果を、V4 側の研究者とも情報共有することにより効率的・相互補完的な研究を実現している。以上のことから、本プロジェクトは開始から半年程度ではあるが当初の計画に則して順調に推進していると自己評価できる。