

日本—V4 国際共同研究「先端材料」 2022 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・センター長 教授	材料製造、基礎的な組織特性解析
安藤 新二	熊本大学・先進マグネシウム国際研究センター・副センター長 教授（2023 年 3 月～）	変形挙動の解析
山崎 倫昭	熊本大学・先進マグネシウム国際研究センター・教授	高分解能組織解析
Alexey Vinogradov	熊本大学・先進マグネシウム国際研究センター・卓越教授（2023 年 1 月～）	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
Donald S. SHIH	熊本大学・先進マグネシウム国際研究センター・特任教授（～2022 年 12 月）	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・准教授	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・先進マグネシウム国際研究センター・准教授	計算材料設計
井上 晋一	熊本大学・先進マグネシウム国際研究センター・助教	材料製造、基礎的な組織特性解析

2. 日本側研究チームの研究目標及び計画概要

各ワークパッケージ（WP）において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、目的の異なる合金群の製造を開始する。WP2（物理的特性の学際的調査）では、基礎的および高分解能の組織解析に加えて物理モデルを活用した材料塑性の解明を実施する。WP3（使用条件を想定した材料特性評価）では、腐食挙動、熱特性および不燃性の系統的な評価を実施する。

3. 日本側研究チームの実施概要

WP1、WP2 に加え、本年度より開始の WP3 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-Al-Y 合金の相安定性の解析と、（2）第一原理分子動力学法を用いた希薄 Mg-Zn-Y 希薄合金の急冷過程における原子クラスター解析、（3）急冷法を用いた各種 Mg 合金の材料製造条件の確立を実施した。

（1）第一原理計算に基づく Mg-Zn-Al-Y 合金の相安定性の解析では、第一原理計算から得られた生成エンタルピーと凸包線（Convex Hull）を用いて、18R 型長周期積層

（LPSO）構造型 Mg 合金中に存在する L12 クラスターの Zn サイトを Al が置換した場合を考え、Al 置換が構造安定性に与える影響を調べた。Al 置換数 x を 0~7 まで変化させた場合、 $x = 2$ と 4 の相が安定となることが明らかとなった。また、Mg-Zn-Y 合金においては、Zn 原子は Y がつくる平面から外に飛び出した安定構造をとるのに対し、Mg-Al-Y 合金では Al 原子が Y がつくる平面内に留まろうとする傾向があることがわかった。

（2）第一原理分子動力学（MD）法を用いた急冷過程での局所構造解析では、熔融状態における溶質元素の役割を明らかにした。各 MD ステップの原子構造をボロノイ多面体に分割し、原子周りの局所構造を解析した。その結果、973K の熔融状態においても正 20 面体が Zn または Mg を中心に形成されることがわかった。この指数をもつ原子クラスターが最も小さな体積をもつことが知られており、Mg-Zn-Y 合金では熔融状態から短距離秩序があることが明らかとなった。

（3）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の試料提供に加え、次年度には生体適合型 Mg-Ca-Zn-Y-Mn 合金鑄造材および急冷材（鑄造塊に押し出し加工を施した Mg-Ca-Zn-Y-Mn 系 I/M (Ingot Metallurgy) , RS P/M (Rapidly Solidified Powder Metallurgy) 合金)、Mg-Zn-Y 合金の試料提供また Mg-Zn-Y RS P/M 合金の耐食性を向上させるための添加元素を検討するまでに至った。

WP2 では、（4）基礎的な組織評価、カレル大学との連携による（5）高分解能組織解析、カレル大学とエトヴェシュ・ロラード大学との連携による（6）物理モデルを活用した材料塑性の解明を実施した。

（4）基礎的組織解析では、光学顕微鏡、共焦点顕微鏡および走査型電子顕微鏡を用いて鑄造材および押出材の組織観察を実施し、得られた結果をプロジェクト内の各メンバーと共有した。

（5）高分解能組織解析では、LPSO 型 Mg 合金鑄造材および押出材に含まれる析出物や格子欠陥に注目した観察を行ったことに加えて、塑性変形後の試料観察より、転位組織形成の把握、さらに変形に伴い形成された変形帯の微細構造について明らかにした。

（6）物理モデルを活用した材料塑性の解明では、LPSO 型 Mg 合金の変形機構を導入した結晶塑性有限要素法を用いて、引張および圧縮の単軸負荷解析を実施し、各種パラメータが変形挙動、形状変化、不均一変形、集合組織発達に及ぼす影響を定量的に評価した。

WP3 では、（7）工業用途での腐食挙動の調査、（8）熱特性および不燃性、（9）得られた結果の厳密な分析を海外研究機関と連携しつつ実施した。

（7）工業用途での腐食挙動の調査では、LPSO 型 Mg-Zn-Y-Al 系合金急冷材を、単ロール式液体急冷法で作製した急冷薄帯を押出固化成形することでバルク状試料とするプロセスにより作製し、疑似生体液中での浸漬腐食試験を実施して腐食特性を把握するとともに、力学特性についても調査し、作製した急冷合金が降伏強さ 320~410 MPa、延性 7~19%、腐食速度 0.10 mm/year と優れた特性を示すことを明らかにした。

（8）熱特性および不燃性では、熊本大学独自に開発した昇温時その場観察・温度測定装置により発火点測定の実験環境も整備した。これにより各種急冷材と鋳造まま材の発火点測定を実施したところ、その高温酸化挙動や発火点に関してプロセスの違いによる大きな差異がないことが確かめられた。

（9）得られた結果の厳密な分析では、高分解能走査電子顕微鏡観察と電子線後方散乱回折を中心に、開発急冷合金の特殊な金属組織の解析を進め、高強度・高延性・高耐食性を発現する最適組織の設計指針を得た。

WP1 および WP2、WP3 により得られた結果は V4 側の研究者とも情報共有することで研究の加速推進を図っている。以上のことから、本プロジェクトは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。