

日本—V4 国際共同研究「先端材料」 2023 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	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	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
西本 宗矢	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 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：第一原理計算で得られた知見に基づき合金組成を決定し、昨年度に引き続き合金群の製造を実施する。WP2 物理的特性の学際的調査：基礎的および高分解能の組織解析の知見に基づき物理モデルを改良すると共に、材料塑性の発現機構を解明するための解析を実施する。WP3 使用条件を想定した材料特性評価：工学的応用を想定した腐食挙動の調査、および熱特性と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

2022 年度に引き続き WP1、WP2、WP3 の体制で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いて Mg-Zn-Al-Y 合金の相安定性を解析した。第一原理計算で得られた生成エンタルピーをもとに凸包線(Convex Hull)を使用して、18R 型長周期積層(LPSO)構造型 Mg 合金中の $L1_2$ クラスターの Zn サイトが Al に置換された場合の構造安定性への影響を調査した。Al 置換数 x が 0～7 の範囲で変化した場合、 $x = 1, 4, 6$ の相が安定であるという結果が得られた。さらに、安定な結晶構造中の M_6Y_8 クラスターの構造($M = \text{Al/Zn}$)を詳細に調査した結果、クラスターの中心原子が Zn よりも Al の時の生成エネルギーが大きく負になることが明らかとなった。（２）Mg-Ca-Al 系ラーベス構造の安定性解析を進め、より広い組成空間調査とクラスター展開法と第一原理計算手法を組み合わせることが必要であることが明らかになった。このため、第一原理計算とクラスター展開法を連携させるためのプログラム開発を行った。

（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試料提供するのに加え、2024 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（鑄造塊に押出し加工を施した Mg-Ca-Zn-Y-Mn 系 I/M, RS P/M 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ことを合意するに至った。

WP2 では、（２－１）カレル大学との連携による基礎的な組織評価、（２－２）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高分解能組織解析、（２－３）物理モデルを活用した材料塑性の解明を実施した。（２－１）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、組織形態と組成分布に関するメゾスケール微細組織観察データを取得し、その結果をプロジェクト内の各メンバーと共有した。さらに各解像度の組織を特徴づける指標の抽出と組織の定量的評価も実施した。（２－２）高分解能組織解析では、2022 年度に引き続き 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。（２－３）物理モデルを活用した材料塑性の解明では、2022 年度に構築した解析手法をさらに改良し、LPSO 型 Mg 合金鑄造材および押出材を対象とする結晶塑性有限要素解析を実施し、塑性変形時の活動変形機構の活動度を定量的に評価した。

WP3 では、(6) 工業用途での腐食挙動の調査、(7) 熱特性および不燃性、(8) 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。(6) 工業用途での腐食挙動の調査では、LPSO 型 Mg-Zn-Y-Al 系合金急冷材および Mg-Ca-Zn-Mn-Y 合金急冷材について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。また、高い耐食性を示した Mg-Al-Ca-Mn 鋳造合金押出材において、高分解能 HAADF-STEM/EDS 観察を行うことで、耐食性に悪影響を及ぼす Fe 不純物をスカベンジング効果で不活性化したことによる耐食性の向上が明らかになってきている。(7) 熱特性および不燃性では、マグネシウム合金表面に形成する酸化皮膜の特徴づけを酸化皮膜に作用する残留応力を用いて行い、高い不燃特性を発現するために必要な酸化皮膜の特徴を明らかにしつつある。(8) 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メカニズムを確立する指針を得た。

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。