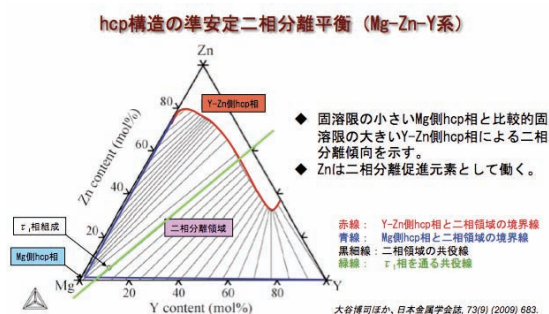


研究成果

<p>テーマ：次世代耐熱Mg合金材料設計開発 サブテーマ：1-1合金組成開発 小テーマ：LPSO相生成メカニズム解明</p>
<p>サブテーマリーダー（所属、役職、氏名）：河村能人（熊本大学 教授） 研究従事者（所属、役職、氏名）：河村能人（熊本大学 教授）、山崎倫昭（熊本大学 准教授 兼 テクノ産業財団 雇用研究員）、大谷博司（九州工業大学 教授）、糸井貴臣（千葉大学 准教授）、稲澤利春（千葉大学 大学院生）</p>
<p>1. 研究の概要、新規性及び目標</p> <p>①研究の概要</p> <p>LPSO構造を有するMg合金展伸材に適した合金成分とダイカスト材に適した合金成分の開発を行うために、LPSO相の生成条件を明らかにする研究を行った。本合金の特徴であるLPSO構造を生成する合金組成条件を明らかにし、生成四原則を提示するとともに熱力学的計算による生成メカニズムの考察を行った。また、鑄造凝固時にLPSO相が形成される合金群をタイプ I 合金、鑄造凝固時にはLPSO相は形成されないが、その後の溶体化-高温時効によりLPSO相が析出する合金をタイプ II 合金として分類可能であることを明らかにした。</p> <p>LPSO 相生成メカニズムの解明を目的として、その熱力学的計算手法を確立し、Mg-TM-RE 及び Mg-Al-RE 三元系における準安定 hcp 相の自由エネルギー計算とそれに基づく相分離挙動の熱力学的考察手法を示した。実験による LPSO 相形成組成探査においては、約 30 種の LPSO 相形成合金種を発見・確認した。</p> <p>②研究の独自性・新規性</p> <p>Mg-TM-RE及びMg-Al-RE三元系における準安定hcp相の自由エネルギー計算とそれに基づく相分離挙動の熱力学的考察手法を確立し、LPSO相の生成メカニズムを熱力学的に説明した。</p> <p>③研究の目標（フェーズ毎に数値目標等をあげ、具体的に）</p> <p>【フェーズ I】</p> <p>Mg-Zn-Y三元系合金を対象として、その熱力学的特性をCALPHAD法により評価し、あらゆる組成と温度において相平衡が計算できるような熱力学データベースを構成し、合金組成探査の指針を得る。</p> <p>【フェーズ II】</p> <p>CALPHAD法を用いて、Mg-Y-ZnをはじめとするMg-RE-TM三元系の熱力学的解析を行い、LPSO構造が出現する合金系の熱力学的特徴を把握する。さらに第一原理計算、熱力学的解析の結果を総合して、LPSO構造形成時の組織学的因子を抽出し、この構造の形成メカニズムについて考察する。実験的にもLPSO相形成組成の探査を継続し、新奇合金の開発を目指す。</p>
<p>2. 研究の進め方及び進捗状況（目標と対比して）</p> <p>LPSO相を生成する合金組成条件をMg-TM-RE合金系(TM：遷移金属、RE：希土類金属)において広く調査し、生成四原則の精密化を図った。その生成条件を図1に示す。またMg-Zn-Y三元系の熱力学的解析結果と第一原理計算の結果との対比によりLPSO相の形成過程への考察を行った。Mg-Zn-Y三元系における相平衡の計算が可能になったことから、LPSO構造の熱力学的安定性を考察する手法を確立した。図2には、計算により得られた準安定hcp相を持つ場合のMg-Zn-Y三元系計算状態図を示す。この計算状態図を基に実験的なLPSO相形成組成の探査を継続している。</p>
<p>図1 LPSO相を形成する元素のクライテリア (説明：LPSO相を形成する元素を原子半径差、混合エンタルピー、固溶限等で整理することが可能である。)</p>
<p>Atomic Radius, r Mixing Enthalpy, ΔH^{mix} Crystal Structure Solid Solubility in Mg, SS</p> <p>Mg hcp</p> <p>X hcp or fcc</p> <p>RE hcp</p> <p>$-22\% \leq (r_X - r_{Mg})/r_{Mg} \leq -10.6\%$ $-4 \text{ kJ/mol} \leq \Delta H^{mix}_{Mg-X} \leq 3 \text{ kJ/mol}$ $0at\% \leq SS_X \leq 2.4at\%$</p> <p>$10.6\% \leq (r_{RE} - r_{Mg})/r_{Mg} \leq 11.9\%$ $\Delta H^{mix}_{Mg-RE} \approx -5 \sim -6 \text{ kJ/mol}$ $3.75at\% \leq SS_{RE} \leq 9.33at\%$</p> <p>$-31 \text{ kJ/mol} \leq \Delta H^{mix}_{X-RE} \leq -22 \text{ kJ/mol}$</p> <p>Mg-Zn-RE RE=Y, Dy, Ho, Er, Tm RE= Gd, Tb Mg-TM-Y TM=Co, Cu, Ni, Zn</p>

図2 計算で求められたMg-Zn-Y系状態図
 (説明：準安定なY-Zn系hcp相とMg系hcp相との二相領域とその領域を通る共役線を計算によって求めている。この状態図を用いることで、効率のよい実験的なLPSO相形成組成域の探査が可能となった。)



3. 主な成果

具体的な成果内容：

○LPSO相を生成する合金組成条件を生成四原則として提案した。

○CALPHAD法を用いて、Mg-Y-ZnをはじめとするMg-RE-TM三元系の熱力学的解析を行い、LPSO構造が出現する合金系の熱力学的特徴を把握するとともに、第一原理計算と熱力学的解析の結果を総合して、LPSO構造形成時の組織学的因子を抽出し、この構造の形成メカニズムについて考察する手法を確立した。

○実験的にLPSO相形成組成探査を行い、約30種のLPSO相形成組成を発見した。

特許件数：0件 論文数：3件 口頭発表件数：5件

4. 研究成果に関する評価

①国内外における水準との対比

従来の熱力学的状態図計算法に、第一原理計算の結果を取り入れる手法はきわめて新しい物性予測の手段であり、これに基づいて計算を行ったMg-Zn-Y三元系状態図は他の計算値の追従を許さない高い水準に位置している。

②実用化に向けた波及効果

LPSO相を形成する合金の構成元素に関するクライテリアを明らかにしたことで、合金組成制御及び熱力学の観点から高強度材料開発設計指針の基礎の確立に貢献した。

5. 残された課題と対応方針について

作製合金の品質向上と大型化への展開及び生産性向上を目指すテーマ2からの研究結果のフィードバックを参考に、低コスト化を念頭により最適な合金組成開発に取り組む。

	JST負担分(千円)							地域負担分(千円)							合計
	18年度	19年度	20年度	21年度	22年度	23年度	小計	18年度	19年度	20年度	21年度	22年度	23年度	小計	
人件費	0	0	79	79	79	52	289	0	0	146	744	798	33	1,721	2,010
設備費	0	0	2,102	13,922	2,042	1,343	19,409	0	0	5,885	0	2,789	0	8,674	28,083
その他研究費 (消耗品費、 材料費等)	0	0	1,276	2,321	1,729	1,334	6,660	0	0	3,759	7,807	13,015	23,550	48,131	54,791
旅費	0	0	69	0	0	55	124	0	0	0	54	0	82	136	260
その他	0	0	237	199	242	275	953	0	0	17	826	612	454	1,909	2,862
小計	0	0	3,763	16,521	4,092	3,059	27,435	0	0	9,807	9,431	17,214	24,119	60,571	88,006

代表的な設備名と仕様 [既存 (事業開始前) の設備含む]

J S T負担による設備：マイクロ波試料前処理装置、ICP発光分光分析装置、共焦点光学顕微鏡、X線回折装置、引張試験機等、小型真空溶解炉

地域負担による設備：300g小型溶解鑄造装置、85t小型押出プレス機、DSC装置、TG-DTA装置等