

# 平成25年度 新学術領域研究（研究領域提案型） 中間評価結果（所見）

## 研究領域名

シンクロ型LPSO構造の材料科学 ―一次世代軽量構造材料への革新的展開―

## 研究期間

平成23年度～平成27年度

## 領域代表者

河村 能人（熊本大学・先進マグネシウム国際研究センター・教授）

## 研究領域の概要

我が国で見出された、濃度変調と構造変調が同期した新奇なシンクロ型LPSO構造に関する新たな材料科学の学術領域を打ち立てる。そのために、学理探究に必要不可欠な物理、化学、材料、機械分野の実験と理論・計算科学に関連する最先端の知的・技術的資源を結集した組織的な連携研究により、シンクロ型LPSO構造に関する構造科学の構築、濃度・構造変調設計原理の確立、変形ダイナミクスの解明、さらにはキンクバンド強化という新しい材料強化原理・理論の構築を行い、我が国で開発された超高強度LPSO型Mg合金のみならず、次世代軽量構造材料への革新的展開に繋げる。

## 領域代表者からの報告

### 1. 研究領域の目的及び意義

**研究領域名：**シンクロ型LPSO構造の材料科学 ―一次世代軽量構造材料への革新的展開―

**研究期間：**H23年度～H27年度

**領域代表者所属・職・氏名：**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・河村能人

**補助金交付額(各年度の研究領域全体の直接経費)：**

年度	H23年度	H24年度	H25年度	H26年度	H27年度
交付額	254,700,000円	210,110,000円	207,025,000円	223,000,000円	221,600,000円
備考	追加配分含む	公募研究含む	公募研究含む	予定額	予定額

### (1) 領域の目的

本領域の目的は、日本で開発された超高強度マグネシウム合金の中に初めて見出された、濃度変調と構造変調が同期したシンクロ型LPSO構造を対象に、①そのユニークな構造、②形成メカニズム、③常識を覆す力学特性と新しい材料強化原理を、最先端の研究手法や世界トップクラスの大型量子線施設を駆使してオールジャパンの異分野融合体制で世界に先駆けて明らかにし、我が国が主導して、この構造に潜む新たな材料科学の学術領域を打ち立てることである。

### (2) 領域の特徴

本領域の大きな特徴は、下記の2点である。

- ① 物理・化学・材料・機械を専門とするナノ計測分野、理論計算分野、材料プロセス分野等の知的・技術的資源を結集し、最先端の実験手法と計算科学を用いた組織的な異分野融合研究を推進する。
- ② J-PARC や SPring-8 等の大型量子線施設を活用した高精密構造解析の「その場実験」をコアにした連携研究を推進する。

### (3) 我が国の学術水準の向上・強化における本領域の意義

21世紀の軽量化構造材料として世界が開発競争を繰り広げているマグネシウム合金(以下Mg合金という)の分野で、常識を覆すような高強度を示す合金が我が国で開発され、世界的に注目されている(図1)。この合金の強化相は、濃度変調と構造変調が同期した新奇

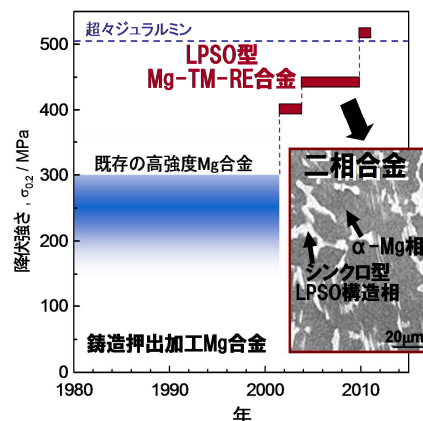


図1 我が国で開発された革新的LPSO型Mg合金

な長周期積層型規則構造(シンクロ型 LPSO 構造 “Synchronized Long-Period Stacking Ordered Structure”)を有している(図 2)。この新  
 奇な構造については、形成メカニズムや力学特性・強化原理といった  
 根本的なことが未解明のままである。

そこで本領域では、可能性を秘めたシンクロ型 LPSO 構造そのもの  
 を材料科学における飛躍的な発展のエンブリオと位置付け、最先端  
 の知的・技術的資源を結集して組織的に研究することを立案した。異  
 分野の多様な研究者が連携して取り組むことにより、シンクロ型 LPSO  
 構造の本質的解明が初めて可能になり、我が国が高い国際競争力を  
 有する材料科学分野の飛躍的な発展をもたらすことができる。

**(4) 研究の学術的背景**

合金中に見られる規則構造には、特定の面内における周期的な溶  
 質濃度の変化が生ずる長周期規則構造や最密面の規則的な積層変  
 化が生ずる長周期積層構造などがある。前者は金属組織中でしばし  
 ば観察され、殆どが Cu<sub>3</sub>Au 型 fcc 構造を基本とした 1 次元的規則性を  
 示す(図 3 (a))。このような周期的な溶質濃度の変化は濃度変調と定  
 義される。一方、後者は原子配列の規則性ではなく、最密面の規則  
 的な積層変化が生じており、このような積層変化は構造変調と定義さ  
 れる(図 3 (b))。一般的には、濃度変調や構造変調は独立して生ず  
 る現象であり、両方が同時に観察されることは無かった。しかし、これ  
 らが同期して生ずる新奇な長周期構造が、本領域代表者らによって  
 Mg-TM-RE 系 Mg 合金(TM:遷移金属元素、RE:希土類元素)におい  
 て発見された。

この構造の特徴は、図 2 の高分解能電子顕微鏡像で示したように、  
 TM と RE が濃化した 2 原子層が hcp 構造底面に一定の間隔で存在  
 し、c 軸方向に周期的な積層構造を持つ点である。このような異種原  
 子の積層が、凝固時あるいは熱処理によって自然に形成される自己  
 組織化過程を示すことがこの構造の大変興味深い点であり、シンク  
 ロ型 LPSO 構造と名付けられた所以でもある。これに対して従来の長周  
 期規則構造や長周期積層構造は、濃度変調と構造変調が同期して  
 いないという意味で非シンクロ型 LPSO 構造と言える。また、このシン  
 クロ型 LPSO 構造が目されるもう一つの理由は、図 4 に示すように、  
 加工によりキンクバンド(以降キンク帯)が導入されて機械的性質が従  
 来材に比べて著しく改善することである。キンク帯とは異方性の強い  
 層状物質にみられる挫屈形態であり、岩石の褶曲においてもしばし  
 ば観察される。特にシンクロ型 LPSO 構造では、その原子配列に起因  
 して非底面すべりや双晶変形が抑制されるため、キンク帯の形成によ  
 る塑性変形(以後キンク変形)は重要な塑性変形機構となる。さらにそ  
 の一方で、一旦形成されたキンク帯は hcp 金属など層状物質に特有  
 の底面すべりに対する大きな抵抗となるため、機械的性質の劇的な  
 向上がもたらされると考えられている。

**(5) 応募領域の着想に至った経緯**

シンクロ型 LPSO 構造相を強化相にした合金は、革新的な構造用材料としての可能性を無限に秘めているも  
 のの、その形成や強化メカニズムの本質は未解明である。Al 合金の室温時効の発見によって、ジュラルミンを  
 はじめとする高強度 Al 合金が開発されたが、当時の観察技術の未熟さゆえにその原因は永い間特定できず、  
 新合金は試行錯誤的に開発されてきた経緯がある。資源やエネルギーをめぐって熾烈な競争を繰り広げている  
 現代においては、このような新現象の本質解明のわずかな遅れは、我が国の国際競争力の著しい低下をも  
 たらす恐れがある。そこで物理・化学・材料・機械を専門とするナノ計測分野、理論計算分野、材料プロセス分  
 野等の研究者が一体となった研究チームを組織し、最先端の実験手法と計算科学を用いた組織的な異分野  
 融合研究を推進することによって、希土類元素を添加しない高強度 Mg 合金、hcp 基チタン合金をはじめとする  
 他の材料でも、シンクロ型 LPSO 構造を強化相として応用した新材料の創成が可能になると考えた。

**(6) 該当する公募領域の「対象」と、領域の発展方法と取組み方法**

本領域は、「異なる学問分野の研究者が連携して行う共同研究等の推進により、当該研究領域の発展を目  
 指すもの」に該当する。本領域の参画研究者は、計画研究の研究代表者 9 名、分担研究者 16 名、連携研究者  
 16 名に加えて、H24 年度から新たに加わった公募研究の研究代表者 8 名であり、総勢 49 名の研究者が 24 研

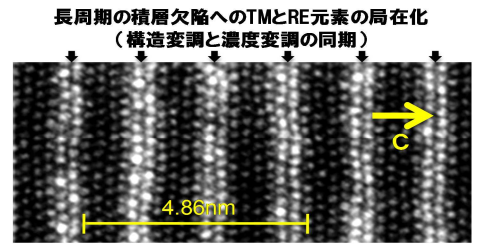


図2 シンクロ型LPSO構造 (HAADF-STEM像)

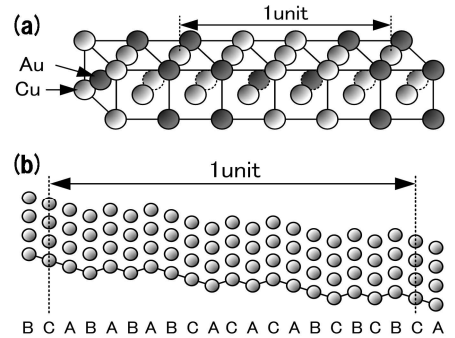


図3 (a)長周期規則構造 (Cu<sub>3</sub>Au)  
 (b)長周期積層構造 (18R)

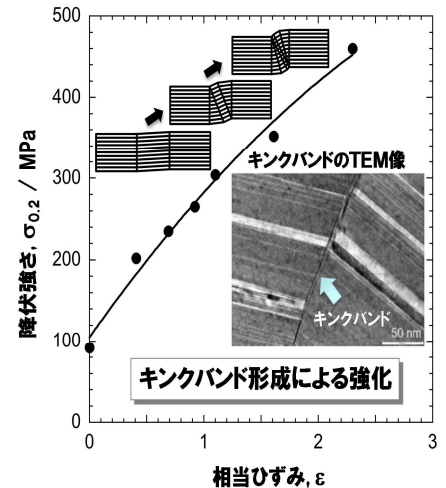


図4 シンクロ型LPSO構造の降伏強さの加工率依存性

究機関から結集したオールジャパンの体制となっている。目的を達成するために必要な研究分野の研究者を集めた結果、LPSO 構造や Mg 合金の研究に初めて携わる研究者が約 70%で、しかも領域代表者と面識のなかった研究者が 50%にのぼり、正しく異分野が融合した研究組織となっている。また、平均年齢が 45.4 歳 (H25 年 6 月現在)と新進気鋭の研究者が中心であることから、次世代の材料科学分野を担うことができる若手人材育成を通して本領域の持続的な発展と幅広い分野への展開を図ることが期待できる。

## (7) 領域の発展が学術水準の向上・強化に及ぼす効果

- ① 本領域の発展は、我が国で開発された超高強度軽量 LPSO 型 Mg 合金の実用化に資することが期待できる。この材料が実用化された暁には、環境・エネルギー問題の解決に大きく寄与し、高度に持続可能な社会の実現をもたらすものと期待される。
- ② 形成メカニズムの解明は、シンクロ型 LPSO 構造を強化相にした希土類レスの高強度 Mg 合金や高強度 Ti 合金等の開発に展開できる可能性が高い。また、有益な工学的特性を有しながら形成機構が未解明のまま残されている Ti-Si-C 系セラミックの MAX Phase、鉄鋼材料の Z Phase、高温超伝導材料のペロブスカイト化合物に代表される長周期物質の形成機構の解明にも大きく寄与できる。
- ③ シンクロ型 LPSO 構造で見出された「キンク強化」の体系化は、固溶強化、析出強化、加工強化、結晶粒微細化強化、複合強化に次ぐ第6番目の新しい材料強化法として歴史に刻まれ、我が国の材料科学分野の高い評価に繋がるものと期待される。また、キンク変形に関して得られる新規な知見は、MAX Phase 等で稀に観察される延性発現機構(強化しない)の解明をもたらす、高延性セラミック材料の開発等に資することが期待される。
- ④ このように、シンクロ型LPSO構造の新学術領域の確立は、産業につながる工学分野の発展をもたらすのみならず、周辺の基礎学問分野にも大きな影響を与え、多岐かつ長期にわたって我が国の科学技術や学術水準の向上・強化に資するものである。

## 2. 研究の進展状況及び成果の概要

### 【応募時に研究領域として設定した研究の対象】

「異なる学問分野の研究者が連携して行う共同研究等の推進により当該研究領域の新たな展開を目指すもの」

### (1) 領域全体の順調な進展状況

総括班は、本領域研究を戦略的かつ効果的に推進することを目的に、6つの部会と事務局(事務局本部と研究支援活動用の3つのサテライト事務局)を設置して領域運営と研究支援活動を組織的に行ってきた。外部評価委員からは従来にない特徴的な取り組みとして高く評価されている。

【領域企画・運営部会活動】「研究企画委員会」、「研究推進委員会」、「研究評価委員会」ならびに「全体会議」、「総括班会議」、「班会議」、「連携会議」の開催(表 1)を通して、研究計画の企画・調整・立案、審議、連絡・周知徹底ならびに評価を行うことによって、領域の企画・運営を効果的かつ円滑に実施できた。

【領域内交流推進部会】「合宿研究会」、「成果報告会」、「班研究会」、「連携研究会」、「領域キックオフシンポジウム」、「公募キックオフシンポジウム」等を開催(表 2)することによって、領域内のベクトル合わせと情報の共有化を図ることができ、異分野の研究者が連携して行う共同研究を推進することができた。特に、「サマースクール」や「施設見学会」を開催(表 3)することによって、初めて Mg 合金を扱う研究者(領域の約 70%に相当)の支援や大型量子線施設を活用した領域内交流の推進を図ることができた。

【研究支援活動部会】①大型量子線施設の活用支援を通じた連携研究の推進、②実験結果の整合性を確保するための品質が安定した共通試料やオーダーメイド試料の提供、③参画研究者のベクトル合わせと最新情報の共有化を図るための研究成果 DB の構築・運用を、組織的かつ戦略的に推進した結果、早い段階で領域研究を軌道に乗せることができた。

【広報・交流推進部会】日本金属学会、日本機械学会、日本物理学会、日本放射光学会等でシンクロ型 LPSO 構造やそれに関連したシンポジウム等を企画・開催することによって、異分野学術交流の推進を図ることができた。さらに、領域ホームページの運営やニュースレターの発行・配布によって、本領域の全国に向けた発信を実施することができた。また、領域主催の国際会議 LPSO2012 を開催するとともに、領域メンバーが実行委員等として多くの国際会議の開催に係わり、本領域の世界に向けた情報発信や国際交流を推進することができた。さらに、熊本大学が H15 年から運営している「高性能 Mg 合金創成加工研究会」(8 回分)を共催することによって、超高強度 Mg 合金の実用化を期待している応用分野の研究者や技術者との交流を推進することができた。これらを通して、本領域の新たな展開を目指した基盤形成を国内外で着実に進めることができた。(参照:「8. 研究成果の公表の状況」の表 10～表 13、図 28 と図 29)

**表1 領域会議・委員会の実施状況**

年度	開催日	実施内容	開催場所	備考
H23	H23.9.23	総括班会議、班会議(3班)、連携会議(2連携)、全体会議	スター研修センター小伝馬町・東京	
	H24.3.23	研究評価委員会、研究推進委員会、研究企画委員会、総括班会議、班会議(3班)、連携会議(2連携)、全体会議	キャンパスイノベーションセンター・東京	
H24	H24.5.12	総括班会議、班会議(3班)、連携会議(2連携)、全体会議	エッサム神田ホール・東京	
	H24.10.1	総括班会議、班会議(3班)、連携会議(3班合同)、全体会議	札幌コンベンションセンター・札幌	
	H25.3.19	研究評価委員会、研究推進委員会、研究企画委員会、総括班会議、班会議(3班)、連携会議(3班合同)、全体会議	軽井沢プリンスホテル・軽井沢	
H25	H25.6.15	総括班会議	エッサム神田ホール・東京	
	H25.10.1	研究評価委員会、研究推進委員会、研究企画委員会、総括班会議、班会議(3班)、連携会議(3班合同)、全体会議	ラフォーレ琵琶湖・守山	予定
	H26.3	研究評価委員会、研究推進委員会、研究企画委員会、総括班会議、班会議(3班)、連携会議(3班合同)、全体会議	軽井沢プリンスホテル・軽井沢	予定

**表2 領域研究会の実施状況**

年度	開催日	実施内容	開催場所	備考
H23	H23.9.5	A02班研究会	愛媛大学・松山	
	H23.9.23	領域キックオフシンポジウム	スター研修センター小伝馬町・東京	
	H23.12.27	A03班研究会	キャンパスイノベーションセンター・東京	
	H24.2.23	A01, A02, A03班連携研究会	熊本大学・熊本	
	H24.2.24	A01班研究会	東京大学・東京	
H24	H24.3.6	A03班研究会	大阪大学・大阪	
	H24.3.23	平成23年度成果報告会	キャンパスイノベーションセンター・東京	
	H24.4.10	A01班研究会	東京大学・東京	
	H24.5.12	公募班キックオフシンポジウム	エッサム神田ホール・東京	
	H24.11.5	A01, A02, A03班連携研究会	Spring-8・佐用	
	H24.12.27	A02班研究会	名古屋工業大学・名古屋	
	H25.3.4	A03班研究会	大阪大学・大阪	
	H25.3.9-11	A01, A03班連携研究会	北見工業大学・北見	
	H25.3.18-19	平成24年度成果報告会	軽井沢プリンスホテル・軽井沢	
	H25.4.25	A01班研究会	東京大学・東京	
H25	H25.7.26	A03班研究会	エッサム神田ホール・東京	予定
	H25.7	A02班研究会	熊本大学・熊本	予定
	H25.9.29-10/1	平成25年度合宿研究会	ラフォーレ琵琶湖・守山	予定
	H26.3	平成25年度成果報告会	軽井沢プリンスホテル・軽井沢	予定

**表3 サマースクール/見学会の実施状況**

年度	開催日	実施内容	開催場所	備考
H23	H24.3.15	J-PARC見学会	J-PARC・東海村	
H24	H24.9.25-27	熊大MRCサマースクール	熊本大学・熊本	
	H24.11.5	Spring-8見学会	Spring-8・佐用	
	H24.12.4	LPSO型マグネシウム合金・溶解鑄造および塑性加工施設見学会	熊本大学および不二ライトメタル・熊本	
H25	H25.9.24-25	熊大MRCサマースクール	熊本大学・熊本	予定

**表4 若手交流会・特別講演**

年度	開催日	実施内容	開催場所	備考
H23	H23.11.24-25	第1回若手交流会・特別講演会	ホテル阪急エキスポパーク・大阪	
H24	H24.9.20-21	第2回若手交流会・特別講演会	愛媛大学・松山	
	H24.12.3	第3回若手交流会・特別講演会	熊本大学・熊本	
H25	H25.9.20	第4回若手交流会・特別講演会	金沢勤労者プラザ・金沢	予定

【若手人材育成部会】後述するように、「若手研究会」を企画・開催(表4)することによって、本領域の55%を占める若手研究者の交流を活発にすることができ、若手研究者を主体にした異分野融合の連携研究の活性化に繋げることができた。また、「若手国内異分野武者修行」や「若手海外武者修行」のプログラムに対して、現実に即した制度改革を行うことによって、本プログラムを軌道に乗せることができた。

【図書出版・知財部会】成果報告会において、国際特許事務所の弁理士による知財掘り起こしを実施した結果、特許申請の検討が数件行われるなど、知財確保に向けた活動を着実に実施することができた。またMaterials Transactions に”Long-Period Stacking Ordered Structure and Its Related Materials (I)”を特集号(13編収録)として発刊できた。さらに、Materials Science & Engineering: R (Impact Factor: 19.75)として、編集委員の推薦で”Innovation of Magnesium Alloys by Synchronized LPSO Structure”というテーマの特集号の企画が決まった。他の学術雑誌からもReview特集号の企画が持ち込まれており、現在その対応を協議中である。

**(2) A01 班「構造科学」の順調な進展状況**

本領域内で、A01 班は、最先端の構造解析手法と計算科学を融合させることにより、新奇な構造を有するLPSO 構造に関して、その構造の観点から、力学特性等の物性発現の解明及び物性予測を可能とする「LPSO 構造科学」の構築を目的としている。現在、電子線・陽電子等を用いた原子レベル構造解析(A01-1、実験系)と中性子・放射光を用いた精密構造・組織解析(A01-2、実験系)によりLPSO 構造を精密に決定し、構造に由来する諸特性の解明と第一原理計算を用いた構造決定因子の解明(A01-3、計算系)に取り組んでいる。実験系2グループ、計算系1グループが密接に連携を取りながら、研究を進めており、その結果、現時点で、①LPSO 相における規則-不規則(OD: Order-Disorder)構造とLPSO 構造の解明、②LPSO 構造物質の原子配列の形成エネルギー予測評価法の確立、③大型量子線施設利用に関しては、LPSO 構造物質に適用するためのその場観察実験法の確立等の順調な成果を上げている。

また、本班の特徴として、得られた構造情報、物性値を他班に積極的に提供して領域内研究を活性化している。以下に特筆すべき成果・進展状況を記述する。

**1) 化学的秩序と積層秩序の相関の決定**

電子顕微鏡観察により、Mg-Zn(Al)-RE 系 LPSO 相の積層方向への化学的秩序と積層秩序は、常に同期したシンクロ型であると共に、構造多形が存在することを明らかにした。

**2) OD 構造とLPSO 構造の解明**

電子顕微鏡観察により、以下のことを明らかにした。

① Mg-Al-Gd 系 LPSO 相は、従来の報告とは異なり Al と Gd が濃縮する濃縮層は2層ではなく4層であり、濃縮4重層内においてL1<sub>2</sub>型構造と同様の原子配列を持つクラスターを形成している。このクラスターは、Mg-Al-Gd ブロック内(面内)で長周期にわたって規則配列し、濃縮4原子層を含む6原子層が構造ブロックとなっている。一方、この構造ブロックの積層は積層方向に特定の周期性はなく、一次元積層不整を伴う。この構造は、規則-不規則(OD: Order-Disorder)構造として記述できる。焼鈍が不十分の場合は、OD 構造が出現し、十分な焼鈍を行うことにより、構造ブロックの積層に規則性を伴う最安定構造が出現する。

② Mg-Zn-Y 系 LPSO 相においても濃縮相は 4 層であり、同様の  $TM_6RE_8$  クラスターを形成するが、クラスターの面内配列秩序が低い。また一次元積層不整を伴う。この構造が、LPSO 構造であることが結論される。現在、電子顕微鏡観察により提案された構造モデルに基づいて、量子線精密結晶構造解析による結晶構造パラメータ(格子定数、原子座標、サイト占有率、規則度等)の決定を進めている。

### 3) 第一原理計算による LPSO 構造物性評価

LPSO 構造発現因子を原子・電子レベルから特定することを目的に、電子顕微鏡により提案された構造モデルを元にして、Mg-Al-Gd 系と Mg-Zn-Y 系 LPSO 構造の結合・変形特性(溶質原子の結合・偏析エネルギー、一般化積層欠陥エネルギー、弾性定数等)を評価した。さらに原子配列モデリング手法の構築を進めた結果、Mg-TM-RE 系構造における多様な原子配列の形成エネルギーを予測評価することが可能となった。この手法を電子顕微鏡による構造モデル構築に適用することによって、電子・原子構造解析における理論的支持を与えた。このようにして評価した原子配列構造や物性値を他班に提供して領域内研究を推進している。

### 4) 大型量子線施設利用

大型量子線施設利用に関しては、J-PARC、SPring-8 共に LPSO 構造物質の特徴である数 nm におよぶ長周期構造(通常物質の周期構造は、0.1nm オーダー)に適用するためのその場実験手法を確立して、精密結晶構造解析や応力応答評価を進めた。本領域の目的である LPSO 構造そのものの特性解明の一環として、18R 単相 LPSO 合金の結晶構造レベルでの応力応答を調べ、c 軸方向に硬い異方性があることを初めて明らかにすると共に、力学特性基礎データとなる回折弾性定数の評価に成功した。更に、実用上重要な二相合金(LPSO 相+Mg 母相)では、LPSO 相が強度を担うという決定的な証拠を初めて捉えることができた。

今後は、確立した手法を基に、両施設に導入した低温から高温までの温度制御が可能な構造解析用変形ステージを活用しながら A02 班(形成メカニズム)や A03 班(力学特性と新強化原理)との多重外場環境下その場実験をコアとした連携研究を進展・加速させていく。

以上、これまでの構造解析と理論研究によって、LPSO 構造に関する結晶構造や力学基本特性の定量的評価が着実に進捗しており、新規 LPSO 構造物質を含めた精密構造解析・理論計算及び他班との連携研究を通じて、「LPSO 構造科学」が構築されるものと思われる。

## (3) A02 班「形成メカニズム解明」の順調な進展状況

A02 班は、LPSO 構造の濃度・構造変調設計原理の確立を目指して、原子間結合エネルギー解析および格子歪エネルギー解析の両面からシンクロ型 LPSO 構造形成メカニズム解明にアプローチするとともに、極限環境物質合成によるシンクロ型 LPSO 構造物質群の拡大にも取り組んでいる。

### 1) 原子間結合エネルギー解析

原子間結合エネルギー解析では、計算状態図および実験状態図の両面からの安定構造・安定性の評価を行うとともに、その知見をベースに偏析と積層欠陥のシンクロ性、形成機構から相形成を明らかにする量子線による相・組織形成の評価、状態図の自由エネルギーをベースに液相からの相・組織の出現シーケンスのフェーズフィールドシミュレーションを連携させることにより、複数のエネルギー差の小さな構造間での構造選択および構造変調と組成変調がシンクロする過程とエネルギー的条件を明らかにすることを目的としている。現在は Type I の Mg-Zn-Y 系状態図の精密評価より、その形状が従来の報告とは異なることがわかっており、相安定性への温度・組成の効果について計算状態図的検討を進めるとともに、Type II さらに RE フリーや Ti 系への拡張にも取り組み始めている。量子ビームの組織解析法の確立に加えて、当初実験的困難が予想されていた液相の関与するその場測定も技術的目処が立っている。新規手法としての走査トンネル顕微鏡による LPSO 合金(A03-1 グループ提供)の破断面の超高分解能観察により、Mg の(0001)面内の合金元素の規則クラスターの配列をとらえることに初めて成功しており、現在 A01-1、A02-1 グループでの構造情報も参考にして、STM 像の詳細な解釈および熱処理や組成によるクラスター配列の変化の観察を進めている。凝固過程のフェーズフィールドモデリングの手法もすでに確立されており、今後状態図と量子ビームによるキネティクス情報のブリッジングによる統合的理解の進展が期待される。

### 2) 格子歪エネルギー解析

格子歪エネルギー解析では、LPSO 構造が関与する各種構造相変態における変態歪場およびエネルギーの評価と歪緩和解析、濃度・構造変調に起因するエネルギー変化の電子論的評価、2種類の変調がシンクロする相変態のフェーズフィールドモデリングの観点から、LPSO 構造生成への格子歪の影響を実験、理論的に検討している。Mg-Zn-Y 合金の HAADF-STEM および HRTEM 解析からは、前駆段階での hcp 中のゾーン型の元素濃化に伴う構造ユニットの形成とレゾ機構による成長が素過程として示唆され、第一原理計算キネティックモンテカルロシミュレーションからは、積層欠陥に濃化した溶質原子がさらに周囲の溶質原子を引きつけ、次の積層欠陥の導入を助長することが示唆された。LPSO 構造形成時の歪エネルギーのマイクロメカニクス解析では、歪の拡散緩和が十分起こりえないこと、構造ユニット間の弾性相互作用を考慮すると H 構造は R 構造より歪みエネルギーが小さいことが明らかになった。フェーズフィールドモデリングでは、Mg-Zn-Y 合金の相分離初期では、純 Mg コーナーでの準安定スピノーダル分解の発現、積層欠陥領域への溶質元素の偏析に駆動された積層欠陥の拡張を見出している。以上、Mg-Zn-Y 系に集中した多くの側面からの検討により、今まで不

明であった LPSO 構造の形成過程について、hcp 中の積層欠陥の形成と hcp 中の相分離が重畳して fcc 構造ユニットの生成につながり、弾性的と思われる相互作用が LPSO 構造の形成過程に深く関与することが明らかになりつつある。

### 3) 極限環境での物質合成

極限環境での物質合成では、通常環境場、超高圧環境場、急冷場での新物質探索の研究を通して、①シンクロ型 LPSO 構造の新物質(新規合金成分と新規積層構造)の発見と同定、②発見されたシンクロ型 LPSO 構造物質の体系的分類、③シンクロ型 LPSO 構造を形成する合金元素の精密なクライテリアの提案、④シンクロ型 LPSO 構造形成のプロセス条件の確立、を目的として研究を行っている。

合金系拡大による新物質探索では、新たに Mg-Ni-Sm 合金での 18R 構造、Mg-Co-Y 系では 15R 構造(従来と異なる新規構造!)を見出し、超急冷場プロセスによる新物質探索では、急速凝固  $Mg_{97}Co_1Sm_2$  系合金においてはこれまでに報告の無い底面内クラスター配置を持つ新規相の発見に至っている。また、超高圧高温下でのその場 X 線回折実験より、Mg-Zn-Y 系 LPSO 相は通常環境下よりも不安定化すること、高温高圧下での水素化処理で  $MgH_2$  他の水素化物の生成などが明らかになっており、物質群の拡大および新機能探索の研究は着実に進んでいる。

以上より、現在までの研究成果より、形成メカニズムについて根本的な考えはまとまりつつあり、その場観察と極限環境の効果的な利用、班内/班外との連携研究および情報共有により、さらに理解が進みシンクロ型 LPSO 構造の設計原理が確立されるものと思われる。

## (4) A03 班「力学特性解明と新強化原理の構築」の順調な進展状況

A03 班では、シンクロ型 LPSO 構造で見出された特異な変形機構の解明と、それを基にした新たな強化原理の確立を目指している。特に最大の眼目となる「キンク帯」と呼ばれる塑性変形過程で顕在化する組織について、その構造、形成機構、そして高強度化への寄与を明確化する。これを基盤として LPSO 型合金が有する極めて優れた力学物性の起源を明らかにし、新学術として新たな強化法の学理を構築することを目的とする。この目的に向かって、観察・計測を主体とした実験 Gr、マルチスケールな手法を有する計算力学 Gr、そしてキンク帯の回位モデルに焦点を絞った理論・実験融合 Gr が他班も含め強く連携して研究を進め、順調な成果を挙げている。

### 1) キンク帯による高強度化の実証

キンク帯による高強度化実証の研究ではまず、キンク導入に伴う強度上昇の実験的証拠を得ることが目的である。これについては Mg 系シンクロ型 LPSO 合金において常温から 300°C にわたる温度域で、キンク帯導入により底面すべりの変形抵抗が 4 倍上昇することが見出されただけでなく、キンク帯の間隔の  $1/2$  乗に比例して強度が増加することが明らかとなった。これは常温強度だけでなく高温強度に及ぼすキンク帯強化の寄与を定量的に示す重要な成果であり、強化メカニズムの解明に本質的な貢献を果たすと期待される。また計算 Gr では、結晶塑性 FEM でキンク帯の存在をモデリングし、降伏強度の増加に関して実験結果を定量的に再現することに成功している。

### 2) 特異な変形機構の解明

特異な変形機構解明に関する研究では、キンク帯の形成過程とその構造の解明が焦点となるが、ここでは特に計算 Gr の研究が順調に推移している。まず結晶塑性 FEM でキンク変形の再現に成功し、その結果、キンク帯のエンブリオとその発達箇所として、構造上の初期結晶方位の揺らぎ等の初期不整や構造全体の弾性ひずみエネルギーが最小化される部位であることなど固体力学上の問題が解明された。さらに分子動力学シミュレーションにより、2H 構造に対し LPSO 構造では双晶変形が抑制されること、その一方で底面に先立ち非底面すべりが生じ、これをトリガとして底面に大量の転位が供給されキンク変形が開始、高密度の底面転位群の配列で鋭いキンク界面の形成が再現された。一方実験系では、シンクロ型 LPSO 構造においてキンク変形が何故促進されるのか、非シンクロ型として濃度変調を有しない Ni 基 LPSO 相や 2H 構造を有する純 Zn 結晶を比較材として研究が行われた。その結果 Mg 系シンクロ型 LPSO では 18R、14H 構造の違いによらず、底面すべり、キンク変形が主変形機構を担うのに対して、非シンクロ型ではすべり面の選択性により高い自由度が見いだされた。これはシンクロ型でのキンク帯形成が他構造に比べ促進される有力な理由となる。さらに Mg 系シンクロ型 LPSO 合金で、レンズ状に高速に成長するキンク帯の動的様相をその場観察で捉えた。また nm オーダーの微細マーカー法によりキンク帯発生に伴う塑性歪み分布を定量的に捉え、それが双晶変形と異なる変形モードであることが実証された。

### 3) 新強化原理の確立

新強化原理の確立では、キンク帯の構造解明とそのモデル化の推進が基盤となるが、前者については超高圧電子顕微鏡や EBSD 解析によりキンク帯の回転軸や角度、界面のモルフォロジー等、キンク帯のメゾ構造解析が着実に進展している。また高分解能電顕法 HAADF-STEM、STEM-EDX による構造解析も精力的に進められている。特にキンク帯先端の原子構造解析は、その近傍の大きな歪み場の存在が観察の障害となるが、適切な方位選定等により着実な進展が期待される。またキンク帯を如何なる物理的モデルとして捉えるかという議論が計算 Gr を中心に領域全体で活発に展開されている。そこではキンク帯を、飽くまで転位

集合体と見做すか、或は、より高次の欠陥としての回位と見做すか2つの立場からアプローチが行われている。後者のアプローチでは、離散転位塑性論の枠組みを拡張した回位モデルによる高次の離散欠陥塑性論の定式化が行われ、キンク変形の回位によるモデル化が進められており、今後、新たな強化原理の確立に繋がりたいと考えている。

以上、これまでのシンクロ型 LPSO 構造の塑性変形機構と強度に関する実験・理論的研究から、キンク帯の強化機構としての重要性が定量的に実証されると共に、その理論化・モデル化が着実に進展している。今後、他班の構造解析 Gr とさらに強く連携すると共に、実験 Gr と理論 Gr の融合を進め、シンクロ型 LPSO 構造の新奇な力学的挙動の理解を進展させ、それを基に新たな普遍的強化原理の確立を図って行く。

## 審査部会における所見

A + (研究領域の設定目的に照らして、期待以上の進展が認められる)

### 1. 総合所見

マグネシウムは資源が豊富で比強度比剛性の高い材料であり、今後の低炭素社会においても期待される。この分野で従来の常識を覆すシンクロ型 LPSO 構造を有する合金が、我が国で発見された。現実の応用に向けて極めて有望であるがメカニズムの本質が解明されていないこの革新的な構造について、計測、計算及び材料プロセスの研究者が融合し、新しい材料の創製原理を検討する研究領域である。実用を見据えた応用研究との切り分けがよくできており、メカニズムの本質を対象とした基礎的研究に絞った本領域の目的は明確である。領域運営については、領域代表者の強力なリーダーシップのもと、6つの部会と事務局を設置して研究支援活動を組織的に進めるなど、工夫されている。異なる学問分野の研究者の連携のもと、多数の成果が出ており、特に、Mg-Al-RE 系 LPSO 相については、STEM の直接観察により RE の濃縮が積層欠陥部の2層のみでなく4層にわたって起きていることを見出すなど当初予想していなかった成果もあげており、期待以上の進展が認められる。量子線や放射光を用いた精密構造解析も、まだ初期的なデータが出た段階であるが、既に本研究課題に対する有用性が見出されており、今後の成果が期待できる。

我が国発の新素材として発展が期待されるものであり、引き続き集中的に LPSO 構造の解明を目指してほしい。将来の実用化に向けて、異なる分野間でより踏み込んだ融合が加速されることを期待する。

### 2. 評価に当たっての着目点ごとの所見

#### (a) 研究の進展状況

総括班は、本領域研究を戦略的かつ効果的に推進することを目的に、6つの部会と事務局を設置して領域運営と研究支援活動を組織的に進めている。代表者の強力なリーダーシップと優れた研究者の集団によって、研究は順調に進展していると思われる。領域内の共同・融合研究も活発に行われている。

熊本大学と大阪大学を試料の供給拠点と位置付けて、早くから整備したことで、共通試料の配布を効率よく行うことにより、異分野の研究者の密な連携が実質的に行われている点は、高く評価できる。

#### (b) 研究成果

LPSO という一つの目標のために、多くの研究者の異なった研究手段が結集されており成果が上がっている。研究期間前半の成果は順調で、400 件余の優れた論文が発表されているほか、若手研究者を中心として 92 件の受賞がある。特に、原子レベルの構造解析は当初予想しなかった結果を得るなど、その存在意義を示している。それに対して、第一原理計算が単なる後からの説明以上の貢献をいかにできるかが期待される。量子線を用いた研究では、まだ初期的なデータが出た段階であるが、既に本研究課題に対する量子線及びその場測定の有用性が見出されており、高く評価できる。力学特性発現機構の解明では、新強化原理の確立を目指して、回位など新しい方向も検討されており、評価できる。

#### (c) 研究組織

領域代表者のリーダーシップのもと、研究項目間で連携が良くとれている。

#### (d) 研究費の使用

特に問題点はなかった。

**(e) 今後の研究領域の推進方策**

将来の実用化に向けて応用研究のプロジェクトも別途進められており、実用化へのビジョンと学理の探求をバランスよく推進していくことが期待される。そのために、異なる分野間でのより踏み込んだ融合が期待される。LPSO の機能のメカニズム解明が、より優れた新材料の開発の基礎となるように知識を体系化していただきたい。また、実用化にあたっては、破壊力学特性、疲労やクリープなど機械設計の観点からの力学特性の基礎的研究に力点を置くことも検討することが期待される。

**(f) 各計画研究の継続に係る審査の必要性・経費の適切性**

各計画研究はいずれも順調に進展しており、継続に係る審査は必要ない。ただし、一部の計画研究で、成果としての論文発表が見えにくいため、今後の積極的な発表を期待する。研究経費は、全ての研究項目について適切である。