

合金における界面や粒界の第一原理的研究

First-principles study of interfaces and grain boundaries in alloys

上村 直樹

京都先端科学大学 工学部

1. 研究目的

構造用金属材料は、社会基盤の中でもインフラ、輸送、電気、産業機械などを支える重要な材料である。これらの材料は高強度、高靱性、軽量化、耐環境性、加工性、耐久性、環境への配慮など、多様な特性が求められており、さらなる性能向上が不可欠である。そのためには、材料組織と材料特性の関係を原理的に解明する必要がある。本研究では、次世代の高強度軽量材料として注目されているマグネシウム合金（特に、長周期的な積層秩序と化学的秩序を併せ持つ LPSO (long-period stacking order) 構造を有したマグネシウム合金) を対象とし、この特徴的な構造の形成過程や高い力学特性の発現機構を解明することが目的である。

2. 研究成果の内容

本年度は、LPSO マグネシウム合金のすべり特性と元素置換の影響について、第一原理計算を用いて調査した。すべり特性は材料の塑性変形挙動を理解する手がかりになり得る。すべり特性は積層欠陥エネルギー (SFE: Stacking Fault Energy) という物理量を計算することで評価を行った。SFE は、スラブモデルに辻り面を設定し、その辻り面の上下の原子の相対的なずれに起因するエネルギー変化を計算することから求まる (図 1)。今回は底面辻りモデル (256 原子) と柱面辻りモデル (976 原子) を作成し、LPSO マグネシウム合金の構成元素である希土類元素と遷移金属元素を換えて、底面と柱面の SFE を評価した。遷移金属元素の元素置換によって柱面 SFE が大きく変化することがわかった。

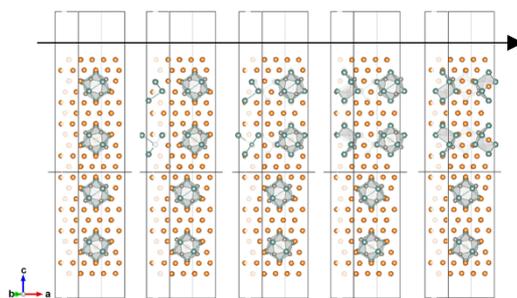


図 1. LPSO マグネシウム合金スラブモデルの中心部に辻り面を仮定し、辻り面の上部を特定の方向に微小変異させたモデル。

3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

研究室レベルの計算資源で扱えるモデルサイズや計算精度には限界がある。我々が着目している積層欠陥や粒界などを含んだ計算モデルは第一原理計算で取り扱うにはモデルサイズが大きくなり、かつ十分な計算精度を出すには研究室レベルの計算機では実質的に実行不可能である。また原子配置の組み合わせにより多数の構造モデルの解析も必要である。メニーコアな Wisteria や NVIDIA H100 を搭載した Pegasus を用いることで、大規模な計算モデルを大量に同時並列かつ高速に計算実行でき、十分な量の計算データを生成することができた。学際共同利用プログラムが果たした役割と意義は大きい。

4. 今後の展望

pegasus や miyabi の GPU を活用し、より計算負荷の高い第一原理分子動力学手法を用いて、マグネシウム合金の形成過程や転位の分解挙動などの解析に取り組む予定である。

5. 成果発表

(1) 学会発表

[1] 「LPSO 構造を持つマグネシウム合金のすべり系における 元素置換の影響:第一原理的研究」, 上村 直樹, 松本 龍介, 日本物理学会第 79 回年次大会 (2024 年), 北海道大学, 北海道, 2024 年 8 月.

[2] "Density functional theory study of the effects of tension/compression and elemental substitution on the prismatic slip in Mg alloys with long-period stacking ordered structures", Naoki UEMURA and Ryosuke MATSUMOTO, The 14th Asia-Pacific Conference on Fracture and Strength (APCFS 2024), Shimane, Japan, November, 2024.

使用計算機	使用計算機に ○	配分リソース※		
		当初配分	移行*	追加配分
Cygnus				
Pegasus	○	18,000		18,000
Wisteria/BDEC-01	○	144,000		36,000
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。 *バジェット移行を行った場合、「+2000」「-1000」のように記入				