

マグネシウムおよびマグネシウム合金中の 転位および積層欠陥に関する第一原理的研究

First-principles study of dislocations and stacking faults in magnesium and magnesium alloys

上村 直樹
関西医科大学医学部

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・マグネシウム合金における高い力学特性の発現メカニズムを第一原理計算を用いて明らかにする。特に、①マグネシウム合金における元素置換によるすべり系への影響や、②マグネシウムの転位挙動を調べた。

2. 研究成果の内容

- ① 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のすべり系を第一原理計算によって評価した。LPSO マグネシウム合金の組成はマグネシウム、遷移金属元素 (TM), 希土類元素 (RE) で表され、TM および RE の元素置換が一般化積層欠陥エネルギーに及ぼす影響を調べた。その結果、TM の違いが大きく影響することが明らかとなった。
- ② マグネシウムは結晶構造に起因して塑性変形の異方性が大きく、 $\langle c \rangle$ 軸方向の変形を担うすべり系の理解が重要であることから、二次錐面における $\langle c + a \rangle$ 転位の挙動解明を目的として、千原子規模のスラブモデルを用いた第一原理分子動力学計算を実施した。有限温度および外部応力の影響を考慮した解析を行い、応力状態が $\langle c + a \rangle$ 転位の分解挙動に重要な役割を果たすことを示唆する結果が得られた。

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は、扱えるモデルサイズや計算精度に限界がある。我々が対象とする積層欠陥や転位を含む計算モデルは第一原理計算では大規模になりやすく、

十分な計算精度を確保するには研究室内の計算機では現実的に実行が難しい。また、原子配置の違いにより多数の構造モデルを扱う必要がある。特に本研究で実施した第一原理分子動力学 (DFT-MD) 計算においては、GPU 資源を用いることで計算時間を大幅に短縮することが可能であり、CPU のみの場合と比較しても約 4 倍程度の高速化が得られた。このような大規模かつ長時間の DFT-MD 計算は、GPU が搭載されたスパコン環境なしには現実的に実施困難である。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

今後は、転位を中心とした欠陥挙動の解明を起点として、添加元素の影響を考慮した解析を進めることで、マグネシウム合金における規則構造の形成機構およびその発現過程、特に積層構造の周期性や添加元素のクラスター形成に関する理解につなげることを目指す。

5. 成果発表

(1) 学会発表

[1] “DFT-MD simulations of decomposition behaviors of Pyramidal-II $\langle c + a \rangle$ edge dislocations in Mg”, Naoki Uemura, Ryosuke Matsumoto, The 10th Symposium on Multiscale Materials Mechanics: Mechanism and Modeling —A satellite symposium of ICSMA 20—, Kyoto, Japan, June, 2025.

[2] “First-Principles Study on Slip Properties and Bonding Characteristics in LPSO Structures of Mg–Y–Zn Alloy”, Naoki Uemura, Ryosuke Matsumoto, Materials Research Meeting 2025, Yokohama, Japan, December, 2025.

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース※		
		当初配分	移行*	一般利用による追加
Pegasus	○	16,000		
Miyabi-G	○	45,000	+6,000	
Miyabi-C	○	6,400	-6,000	
※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				