

審査の結果の要旨

氏名 江草 大佑

マグネシウムは比重が 1.74 と、アルミニウムの約 2/3、鉄の約 1/4 で、実用金属材料中で最も小さいことから比強度に優れ、さらに振動吸収性、熱伝導、電磁遮断性などにも優れるという利点を持っており、様々な工業分野での使用が期待されている。近年、Mg に微量の TM(遷移金属元素もしくは Zn)および RE(希土類元素もしくは Y)を添加した Mg-TM-RE 合金が、加工を施すことにより優れた力学特性を示すことから注目を集めている。この特性には、合金内に LPSO(long period stacking/order)相と呼ばれる特異な長周期構造を有する相が形成されること、そしてこの LPSO 相が加工時にキンク変形と呼ばれる特徴的な変形モードを呈することの 2 点に関与すると考えられている。本論文は「Mg-遷移金属-希土類合金に形成される長周期規則構造とその特異な変形組織」と題し、Mg-TM-RE 合金に形成される LPSO 相の結晶学的特徴と、LPSO 相を主相とする合金の変形組織の詳細調査に基づいて、微視的構造と特性との関連性を論じており、全七章で構成されている。

第一章の序論では、Mg 合金の結晶学的特徴とその代表的な変形機構を概説するとともに、近年の Mg-TM-RE 合金に関する研究成果を紹介し、本研究の位置づけ、新規性、目的について述べている。

第二章では電子顕微鏡法を用いた長周期規則構造の解析事例を紹介し、本研究で取り扱う規則構造の表記方法を述べている。

第三章では、試料作成方法、実験に用いた電子顕微鏡法・計算手法を説明するとともに、解析の際に用いた Convex hull(凸包)法、画像処理の手法について詳説している。

第四章では、Mg-Zn-Y 合金に形成される LPSO 相の構造解析を行った結果について述べている。電子回折法を用いた調査から、LPSO 相が有する規則構造が、既知であった積層方向に加えて、稠密面内方向にも発達していることを明らかにした。また、走査透過型電子顕微鏡(STEM)法を用いた直接観察から、規則構造が Zn/Y 原子の規則配列によって形成されていることを明らかにした。これらの観察結果を基に、Zn/Y 原子の $L1_2$ 型クラスターによって特徴付けられる LPSO 相の構造モデルを構築した。さらに、従来報告されていた LPSO 相の不定比性について、構造に含まれる $L1_2$ 型クラスターの局所的な粗密配列によって定性的

な説明を試みた。

第五章では、第一原理計算による構造最適化に基づき、LPSO 相の局所構造と照らし合わせた相安定性の起源について述べている。構造最適化の結果から、LPSO 相に含まれる $L1_2$ 型クラスター近傍の原子配置が、TM-RE 原子の組み合わせによって顕著に変化することが明らかとなった。特に Zn-Y 原子の組み合わせでは、クラスター内の原子配置が理想的な稠密構造から大きく変化し、クラスター中心位置に大きな空隙が形成されることが判明した。このクラスター中心位置は、基本稠密構造から見ると格子間サイトに相当するが、エネルギー計算の結果から格子間サイトに原子を導入した場合に構造が顕著に安定化することが示された。また、Convex hull 法を用いた構造安定性の評価から、格子間原子の導入により LPSO 相が 0 K での安定相となることが示された。格子間原子の存在・元素種の実験的検証は、STEM を用いた直接観察および像シミュレーションにより行った。最終的に、微弱ポテンシャル検出能に優れた環状明視野 (ABF)-STEM 法を用いた観察結果から、格子間原子として Mg が導入されていることが明らかとなった。

第六章では、LPSO 相を含む Mg-Zn-Y 合金の特徴的な変形組織を観察し、本合金の示す優れた機械特性との関連性を調査した結果を述べている。LPSO 相を含む合金は、高温押出加工などを施すことにより優れた特性を発現するようになるが、この時、結晶回転によって特徴付けられるキンク帯と呼ばれる変形組織が観察される。キンク帯近傍の組織を電子顕微鏡法を用いて調査したところ、GN 転位としての刃状転位がキンク界面に集積していることが明らかとなった。さらに欠陥部の原子配列を STEM 法を用いて観察したところ、転位芯周辺における添加元素の再分配挙動が確認された。この局所濃度変化は、高温下で加工を施したことによって添加元素が拡散したためであると考えられる。転位近傍における添加元素濃度の変化は、一度形成された転位を不動化させる事によってキンク界面を強固にし、その後の更なる変形に対する抵抗として働くことにより、本合金の優れた特性を実現していると考えられる。

第七章では本研究の成果をまとめ、本論文の結論を述べている。

このように本論文では、LPSO 相を含む Mg-TM-RE 合金について、最先端電子顕微鏡法や第一原理計算を効果的に用いた研究を行い、LPSO 結晶構造モデルの構築や、局所クラスター構造に基づく相安定性評価に成功している。また、キンク変形した合金中に形成される特徴的な欠陥構造を見いだすとともに、それらと機械特性との関連性を論じており、本合金の特性理解に寄与する研究内容として十分に評価できる。よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。