ミニ特集　計算科学を用いたマグネシウムの合金設計・変形・組織形成研究の最前線

企画にあたって

染川英俊* 池田賢一**

マグネシウムは，地中埋蔵量が豊富で，実用金属の中で最軽量であるため，次世代の軽量金属材料として注目を浴びている．本会第２分科のテーマでもある「エコマテリアル」分野に対しても，輸送機器をはじめとする部材軽量化効果が高いなど，その役割は極めて大きい．

マグネシウムおよびマグネシウム合金に関する研究は，世界的に盛んであり，図１に示すように，関連学術論文の掲載数は年々増加傾向にある．例えば，昨年の論文数は2000年と比較して７倍以上である．本誌においても，2015年にミニ特集号として「シンクロ型 LPSO 構造の材料科学」が発刊され[1]，本会欧文誌でも，マグネシウムに関する特集号が企画され，2001年から「高性能マグネシウムの新展開」が６度にわたり，また，2013年と2015年には「長周期積層構造とその関連材料」が刊行されている[2][3]．2000年頃の研究報告例は，強度，延性，クリープなど，鋳造材や展伸材の機械的性質が主流であった．最近では，素材の安全性・信頼性に関する力学特性は勿論のこと，溶接・接合技術や二次成形（加工）性の改善，生体適合の評価や，新規機能性の探索など，その研究内容は，基礎から応用まで多岐にわたっている．

一方で，六方晶金属からなるマグネシウムの室温塑性変形機構は，転位のすべり変形のみでは von Mises の条件を満足しないことから，双晶変形が関与し，立方晶系金属とは異なる力学挙動を示すことが知られている[4]．昨今の飛躍的な計算機性能の向上によって，実験科学と計算科学を融合させた材料開発や基礎現象の究明が進められている．マグネシウムに関しても，結晶構造に起因した特異な力学挙動の解明に注目した研究が実施され，その論文掲載数は増加傾向にある（図１参照）．しかし，計算科学の分野においても六方晶金属の変形挙動を議論するためには，立方晶系金属で構築された評価手法が適用できない場合があることから，様々な検討や取組みがなされ，報告されている．

そこで，今回のミニ特集では，マグネシウム計算科学の最近の話題でもある転位すべりなどの塑性変形機構，き裂進展問題，集合組織や第二相の組織形成に関する現象・諸特性について，第一原理計算，分子動力学，結晶塑性，フェーズフィールド法のように評価スケールの異なる計算科学的アプローチによって得られた成果について解説いただいた．本会会員の知識や理解を深めていただくことはもとより，これから金属材料研究に取り組もうとしている次代を担う若手技術者や研究者の契機になれば，望外の喜びである．末筆ながら，多忙にもかかわらず，本特集の趣旨に賛同し，執筆に快諾いただいた先生方に重ねて感謝申し上げる．

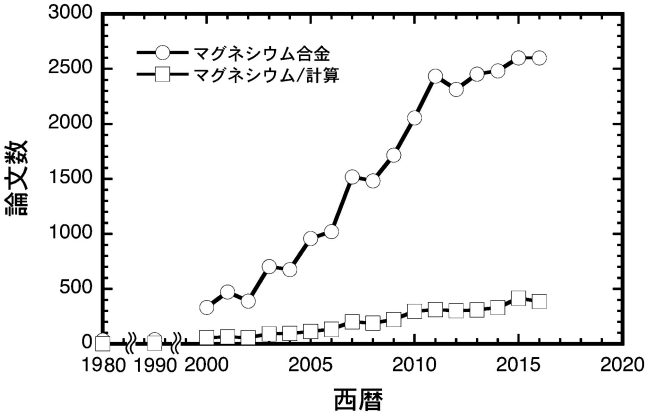

図１　Web of Science に掲載されている年度毎の論文数．

文　献

（１）例えば古原　忠：まてりあ，**54**(2015), 43.
（２）Y. Kojima: Mater. Trans. JIM, **42**(2001), 1154–1159.
（３）T. Furuhara et al.: Mater. Trans., **54**(2013), 631.
（４）吉永日出男：稠密六方晶金属の変形双晶，内田老鶴圃，(2007).

★★★