

計算科学を用いたアルミニウム合金中の溶質原子の拡散挙動の解明

芝浦工業大学大学院理工学研究科材料工学専攻；
修士課程2年
東海林瑞希

1. はじめに

私は芝浦工業大学大学院理工学研究科材料工学専攻修士課程2年生として、アルミニウム合金の時効析出挙動に関する研究を行っています。この度は本誌「はばたく」での執筆という貴重な機会をいただきましたので、研究内容の紹介とともに、博士課程に向けた抱負について述べたいと思います。

2. 見えない世界を可視化する

私は学部4年次から、芹澤愛教授の指導の下、時効硬化型アルミニウム合金におけるナノクラスタおよびギニエ・プレストン(Guinier-Preston: GP)ゾーンの形成挙動の解明に取り組んでいます。時効硬化型アルミニウム合金は時効処理に伴って、ナノクラスタやGPゾーンといった溶質原子の微小な凝集体を形成します。この凝集体は析出物の前駆体であるため、これらの分布やサイズを制御することで、更なるアルミニウム合金の高強度化が期待できます。しかし、ナノクラスタやGPゾーンの形成挙動は合金種によって多様に変化し、そのメカニズムは未だ解明されていません。そこで、計算機シミュレーションを用いて、それらの形成メカニズムを調査し、アルミニウム合金の高強度化に有効な熱処理条件の探索を行っています(図1)。具体的には、確率変数のサンプリングにより現象の予測を行うモンテカルロ法を活用し、観察が困難な拡散過程の可視化を行っています。計算機シミュレーションを用いた最適条件の探索が可能となれば、高機能材料の開発コスト削減が期待されます。

私は学部生時代からマイクロ組織の制御で特性を大きく変化させられるアルミニウム合金に魅力を感じ、以前からプログラミングに興味があったこともあり、アルミニウム合金中の高強度化に向けて、溶質原子の拡散挙動の調査を目的に、計算機を活用した研究を行うことになりました。当初は純粋な興味からプログラミングを勉強しただけの初学者であり、計

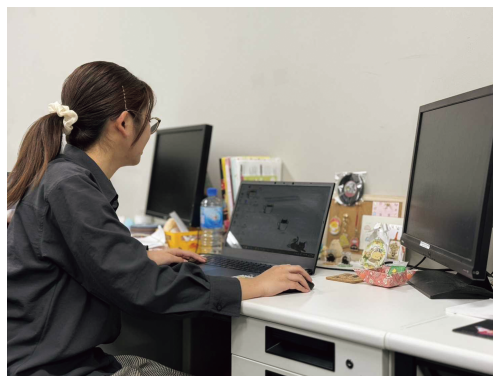


図1 自身のデスクにて計算機シミュレーションを行っている著者。(オンラインカラー)

算機シミュレーションの知識は全くありませんでした。しかし、芹澤先生の計らいと日本原子力研究開発機構(Japan Atomic Energy Agency: JAEA)の都留智仁先生のご厚意で、JAEAに常駐して計算機シミュレーションについて学ぶ機会を頂き、少しずつ自身の研究に応用できるようになりました。とはいえ、正直なところ、同期が着々とデータを集める中、学部4年生の秋頃まで、解析手法すら確立できていないことに対して、焦りしかありませんでしたが、些細な疑問点についても丁寧にご指導くださったJAEAのIvan Lobzenko先生の支えもあり、何とか解析手法を確立することができました。その過程で、目に見えない現象を扱うからこそ、得られた解析結果が本当に現実で起こり得ることなのか、丁寧に検証する重要性を実感しました。

卒業研究では、確立したこの解析手法を用いて、Al-Mg-Si合金およびAl-Cu合金中のナノクラスタおよびGPゾーンの形状の違いについて、溶質原子の原子間相互作用および結合角に基づいた解釈の提案に成功しました⁽¹⁾。しかし、試行を重ねる中で、実験的に得られているものとは異なる結果が得られることがありました。このようなときに、学会でお会いした先生方から「上手いかわない結果の方が大切」と言われたことを思い出し、諦めずに原因を突き止める努力を重ね、格子歪みによって構造が変化するという新たな視点に基づく解釈を提案するに至りました。国内・国際学会でこれらの研究成果を発表したところ、優秀ポスター賞あるいはBest poster awardを受賞することができました。発表を通じ、同じ分野のみならず、他分野の研究者に研究内容に興味を持ってもらえたり、理解してもらえたりした瞬間に非常に大きな喜びを感じたことを今でも鮮明に覚えています。

この経験は、私が博士課程への進学を決めた理由の一つでもあります。手法から結果の解釈まで自身で計画を立てて切り開いていく“研究者”という生き方の楽しさの一端を知ることができた気がしています。また、芹澤研究室は学会への参加や他の研究者との交流を積極的に促していることもあり、様々な学会で普段はお会いできない先生方と交流できたことは、私にとって何物にも代え難い経験と考えています。一線で活躍している研究者が楽しそうに自身の研究対象について語る様子を間近で見られたことは、間違いなく研究の道

へ進む後押しになりました。

私は現在、時効に伴う合金中の空孔濃度変化がナノクラスタおよび GP ゾーンに与える影響に関する研究を行っております。今まで使用していたモンテカルロ法は、濃度変化などを伴う系を取り扱うことは困難とされていることから、新たなシミュレーション手法の確立を目標に日々研究に努めております。

3. お わ り に

私は来年度より博士課程に進学する予定ですが、そこでも計算科学を駆使し、材料の未解明な現象を解明する挑戦を続

けたいと考えています。新たな知見を追求するだけでなく、次世代の産業や科学に革新をもたらすような研究を行えるよう邁進してまいります。

最後になりましたが、本稿執筆の機会を設けていただいた会報編集委員の皆様、これまで私と議論してくださったすべての研究者の方々にこの場を借りて厚く御礼申し上げます。

文 献

- (1) M. Shoji, K. Kurihara, I. Lobzenko, T. Tsuru and A. Serizawa: J. Japan Inst. Light Metals, **74** (2024), 535-545.
(2024年12月9日受理) [doi:10.2320/materia.64.196]
(連絡先: 135-8548 東京都江東区豊洲 3-7-5)