



いろいろな視点からアルミニウムに触れた学生生活

芝浦工業大学大学院理工学研究科
機能制御システム専攻；博士後期課程2年
栗原 健輔

1. はじめに

私は現在、芝浦工業大学大学院機能制御システム専攻に在籍しています。この度は「はばたく」執筆の貴重な機会を頂戴しましたので、これまでに私が取り組んだ研究内容や、研究活動を通して感じたことを紹介いたします(図1)。

2. これまでの研究内容

私は2021年度に芹澤愛准教授(現・教授)の下で、Al-Mg-Si合金における溶質原子のクラスタリングに関する研究を開始しました。本合金は溶体化処理を施した後、熱処理前に保持していた温度によって熱処理後の硬さが変化するという、非常に興味深い特性を持っています。これは溶体化処理後に形成されるナノクラスタ(溶質原子の微小な集合体)が温度によって異なるためであり、室温では強化相である β'' 相へ遷移しにくいCluster (1)が、100℃近辺では β'' 相へ遷移しやすいCluster (2)がそれぞれ形成されると考えられています⁽¹⁾。しかし、Cluster (1)とCluster (2)が析出挙動に対して各々異なる影響を及ぼす原因、そして形成温度によって異なるナノクラスタが形成される原因については、ともにいまだ解明されていません。また、3次元アトムプローブや透過型電子顕微鏡(TEM)はナノクラスタを直接観測することができる非常に強力な手法である一方で、ナノクラスタの形成、成長および安定性に対して大きく影響を与えていると考えられる空孔を捉えた例は過去にありません。これに対し、第一原理計算では溶質原子および空孔間の結合を再現した原子モデルを用いることで熱力学的な観点からの評価が可能になります。そこで、私は第一原理計算を用いて溶質原子および空孔間の結合エネルギーを評価することで溶質原子および空孔間の結合がナノクラスタの熱的安定性や形成過程に及ぼす影響の解明を試みました。その結果、空孔は溶質原子間の結合を安定化させること、そして、ナノクラスタはその内部で溶質原子と空孔との結合が形成されることで安定化していることを明らかにすることができました⁽²⁾。こうした時効析出挙動に及ぼす影響に加え、転位との相互作用もナノクラスタの種類によって異なることが提案されており、修士課程からはナノクラスタと転位との相互作用の解明を目指して研究を行ってきました。大規模なシミュレーションが可能な分子動力学法を適用した結果、ナノクラスタにおけるMg/Si比によって転位との相互作用が異なることが見出されてきており、今後さらに解析を進めていきたいと考えています。

このように、修士課程まではAl-Mg-Si合金に形成される



図1 2024年6月にアメリカ・アトランタで開催されたThe 19th International Conference on Aluminum Alloys(ICAA19)に臨む筆者(向かって左側)。(オンラインカラー)

ナノクラスタについて計算科学的手法を用いた研究を行っていました。一方で、これまでの研究を通して実際に材料に触れて研究を行う経験を積むことが必要だと考えていたことに加え、研究室内でたびたび行っていた議論を通して興味を持ったことから、博士課程に進んでからはこれまでのテーマに加え、水蒸気を活用したアルミニウム合金上への耐食性皮膜形成に関する研究にも挑戦しています。水蒸気プロセスと呼ばれるこの技術は、160~280℃程度の水蒸気と金属基材を直接反応させることで、基材由来の水酸化物で構成された耐食性皮膜を形成させる技術であり、アルミニウム合金の場合、二層構造のAlO(OH)皮膜が形成されます。純水のみを使用するこの表面処理は極めて環境にやさしい技術であるといえますが、皮膜形成の反応場や皮膜が二層構造を呈するメカニズム、皮膜形成に対し基材の溶質原子が及ぼす影響など未解明な部分が数多く残っています。私は現在、これらの解明に取り組んでおり、反応場におけるH₂Oの状態や各層が成長していく方向など、これまでブラックボックスになっていた皮膜形成過程が少しずつ明らかになってきています。

3. おわりに

博士課程に進んでからは、研究分野や手法を修士課程までに取り組んだものから大きく変えてアルミニウム合金に関する研究を行ってきました。しかし、これまでのナノクラスタに関する数々の研究報告や、自身で行ってきた耐食性皮膜形成の実験結果を解釈するに当たっては、極めて微細な組織の安定性や溶質原子間の相互作用について、熱力学的な観点からの裏付けが必要となる場面が非常に多く、この点で実験と計算科学的手法とを両輪で行っていくことの重要性を強く実感してきました。実験と計算の双方に深い見識を持ち、両方を相補的に使いこなせるような研究者を目指して、今後も挑戦する姿勢を忘れず研究に取り組みたいです。

最後になりますが、本稿執筆の機会をくださいました日本金属学会の皆様、ご指導いただいております芝浦工業大学の芹澤愛教授、日本原子力研究開発機構の都留智仁研究主席ならびにIvan Lobzenko研究員をはじめ、これまでお世話になった多くの方々にこの場を借りて厚く御礼申し上げます。

文 献

- (1) A. Serizawa, S. Hirose and T. Sato: Metall. Mater. Trans. A, **39**(2008), 243-251.
- (2) K. Kurihara, I. Lobzenko, T. Tsuru and A. Serizawa: Mater. Trans., **64**(2023), 1930-1936.
(2024年12月9日受理)[doi:10.2320/materia.64.337]
(連絡先: 〒135-8548 東京都江東区豊洲3-7-5)