



東京大学
THE UNIVERSITY OF TOKYO



京都工芸繊維大学
KYOTO INSTITUTE OF TECHNOLOGY



北海道大学
HOKKAIDO UNIVERSITY

平成 29 年 4 月 6 日

完全な均質核生成は起こりえるのか？ — スーパーコンを用いた超大規模分子動力学シミュレーションで実証—

1. 発表者：

- 澁田 靖（東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻 准教授）
坂根 慎治（京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科設計工学専攻 博士後期課程 1 年）
三好 英輔（京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科設計工学専攻 博士後期課程 1 年）
大喜多 慎（東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻 修士課程 2 年）
高木 知弘（京都工芸繊維大学機械工学系 准教授）
大野 宗一（北海道大学大学院工学研究院材料科学部門 准教授）

2. 発表のポイント：

- ◆自然界における形態形成の基本現象である核生成について、実験では実現不可能で理想的な均質核生成過程をスーパーコンピュータ上で再現。
- ◆均質核生成過程に局所的な不均一性が発現することを発見し、そのメカニズムを解明。
- ◆スーパーコンピュータを活用した材料プロセス研究の新しい方向性を提案。

3. 発表概要：

東京大学大学院工学系研究科の澁田靖准教授、京都工芸繊維大学機械工学系の高木知弘准教授、北海道大学大学院工学研究院の大野宗一准教授らの研究チームは、スーパーコンピュータを用いた大規模分子動力学法シミュレーション（注 1）により純金属過冷却（注 2）融液からの均質核生成過程を再現し、均質核生成中に局所的な不均一性が発現することを発見し、そのメカニズムの解明に成功しました。

金属材料生成の多くは核生成に端を発しますが、実際のプロセスでは不純物や壁からの不均質生成に支配されます。よって理想的な均質核生成の多くは未だ不明で議論の渦中にあります。研究チームは今回、純金属過冷却融液中に発現した先行核周りの液体に 20 面体の局所構造が増加し多数の衛星核を発現させることや、一部の先行核表面から特定の方位関係を持った別の結晶粒が不均質核生成するなど、均質核生成中においても局所的な不均一性があることを明らかにしました。これらの成果は基礎現象の解明という学術分野の開拓だけでなく、スーパーコンピュータに立脚した材料プロセス研究に新たな設計を与えることが期待されます。

本成果は英国のオンライン科学雑誌 *Nature Communications* に日本時間 4 月 5 日（水）午後 6 時（英国時間 4 月 5 日（水）午前 10 時）に掲載されました。

なお、本研究は科研費基盤研究（B）、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点および、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラの助成を受けて実施されました。また本研究の一部は、文部科学省ポスト「京」重点課題 7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」（CDMSI）の一環として実施したものです。

4. 発表内容：

【研究の背景】

核生成は自然界における多くの形態形成に見られる基本的な現象です。多くの金属材料についても核生成にはじまる凝固過程を経て生成されるため、核生成の学術的理解と材料プロセスにおける核生成の制御が長年の課題です。実際のプロセスでは不純物や壁からの不均質生成に支配されるため、理想的な均質核生成を観察することは困難です。そこで核生成現象を理解するため、これまで数多くのシミュレーション研究がなされてきましたが、核生成現象は発生確率に大きく依存するため、複数の核が同時多発的に生成して組織を形成する過程を統一的に解析・理解することは、計算系の時空間スケールの限界から不可能でした。

【研究内容】

近年の計算機性能の飛躍的向上により、数値解析手法で取り扱える時空間スケールが大幅に広がっています。研究チームは近年特に注目されている GPU（注3）加速コンピューティングに着目し、計算で取り扱える時空間スケールの限界に起因する研究停滞を突破することを試みました。研究チームは GPU で並列可能な分子動力学法コードを独自に開発し、GPU スパコン「TSUBAME 2.5（注4）」上で 512 GPU 並列からなる大規模計算（図1）を行い、10 億原子以上の全原子の位置と速度を追跡する分子動力学法シミュレーションを実現しました。

具体的には純鉄融液を過冷却状態に保持し、核生成が起きる過程を観測しました。均質核生成により先行核が発現した後、先行核周りに多数の衛星核が発現することを見出しました。液体構造をより詳細に解析し、先行核周りの液体に 20 面体の局所構造が増加し衛星核の発現を誘発していることを突き止めました。さらに、一部の先行核表面から粒界エネルギーの小さい特定の方位関係を持った別の結晶粒が不均質核生成することも発見しました。

【社会的意義・今後の予定】

計算物質科学・計算材料科学に基づく新規材料設計においては、未だ存在しない元素の組み合わせを網羅的に計算して新しい物性を予測することが重要な取り組みの一つです。一方、本研究成果は、スーパーコンピュータ上でプロセス実験を原子レベルで忠実に再現するという先駆的な試みの結果であり、実プロセスの高度化に直結する貴重な知見に相当します。今後もスーパーコンピュータをはじめとする計算機環境が向上することは必至で、当該分野の国際的競争が激しくなることは間違いありません。このような状況の下、本研究はスーパーコンピュータに立脚した材料プロセス研究に新たな設計を与えるものとして期待されます。

5. 発表雑誌：

雑誌名：「Nature Communications」（オンライン版：4月5日）

論文タイトル：Heterogeneity in homogeneous nucleation from billion-atom molecular dynamics simulation of solidification of pure metal

著者：Yasushi Shibuta*, Shinji Sakane, Eisuke Miyoshi, Shin Okita, Tomohiro Takaki and Munekazu Ohno

DOI 番号：10.1038/s41467-017-00017-5

7. 問い合わせ先：

<研究に関する事>

東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻
准教授 澁田 靖 (しぶた やすし)

Tel : 03-5841-7118

E-mail : shibuta@material.t.u-tokyo.ac.jp

<報道に関する事>

東京大学大学院工学系研究科 広報室

Tel : 03-5841-1790

E-mail : kouhou@pr.t.u-tokyo.ac.jp

京都工芸繊維大学総務課広報室

Tel : 075-724-7016

E-mail : koho@jim.kit.ac.jp

北海道大学総務企画部広報課 広報・渉外担当

Tel : 011-706-2610

E-mail : kouhou@jim.u.hokudai.ac.jp

8. 用語解説：

注1：分子動力学法シミュレーション

物質・材料を構成しているすべての原子の運動について、運動方程式を解くことによりその軌跡を追跡する計算手法。初期位置・速度および各原子に作用する力が分かれば、各時間のすべての原子の位置及び速度が一意に決定される決定論的計算手法。原子に作用する力はポテンシャル関数より与えられる。

注2：過冷却

物質の相変化において、本来変化すべき温度以下でも安定相が出現しない状態。液体の場合、凝固点以下でも固相にならず液相が保持される状態。

注3：GPU

Graphitic Processing Unit の略称。Graphitic Processing Unit とは、パーソナルコンピュータやワークステーション等において画像処理を担当する部品で、大量のデータを複数のプロセッサで同時かつ並列処理することが可能。

注4：TSUBAME2.5

東京工業大学に設置された大規模クラスター型スーパーコンピュータ。NVIDIA 社製 GPU アクセラレータ「Tesla K20X」が 4,224 枚搭載されている。

9. 添付資料：

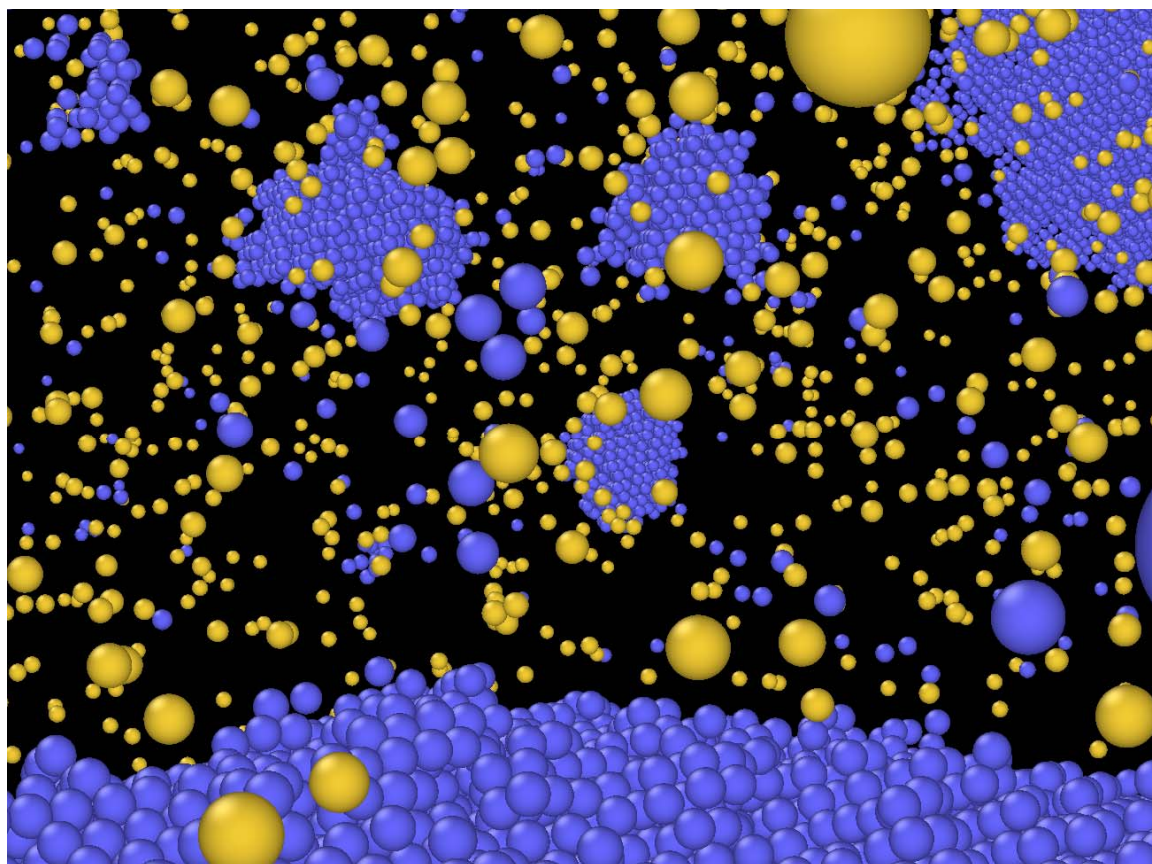


図1 多数の衛星核出現の様子を示した大規模分子動力学計算のスナップショット