



ガラス特性への計算科学的アプローチに携わって

大阪大学大学院基礎工学研究科 博士後期課程2年
宮崎 成正

私は、大阪大学大学院基礎工学研究科機能創成専攻の博士後期課程2年に在籍し、同専攻尾方成信教授にご指導いただき、金属ガラスの変形能や形成能に関するモデリングおよびシミュレーションに取り組んでいます。本稿を執筆する貴重な機会を与えて頂き感謝申し上げます。この機会を利用して、現在の研究経過とともに研究に携わって感じたことについて述べさせて頂きたいと思います。

私の所属する尾方研究室では主に、電子・原子論に立脚したマルチスケール・マルチフィジクスモデリング手法を用いて、拡散や転位といった材料変形の素過程が、種々の材料のマクロな変形様式や強度や靱性などの機械的特性に与える影響およびそのメカニズムの解明を行っています。私が学部4年生での配属先選択時には、計算機を使うのが得意だからというのと、幼い頃より身近にあったゲーム機やパソコンが動く仕組みを知っておきたいとの思いで、単純に尾方研究室を希望しました。配属して最初に頂いた研究テーマは、加速分子動力学法を用いた金属ガラスの過冷却液体の緩和メカニズムの検討でした。原子モデリング法の代表である分子動力学法を用いて直接解析することができる時間窓はフェムト秒～数ナノ秒です。したがって、この研究のカギとなる点は、通常の分子動力学法では捉える事のできない長い時定数（数秒～数時間）を有するガラスの動的な緩和現象を、どのようにして分子動力学法で捉えるかという点にあります。時間スケール問題を克服する方策として、1つは計算機の高速度化が挙げられます。計算機の性能はこの10年でも約100倍も向上しており、特に近年はCPUの複数のコアを並列し計算する技術が進歩しています。またスパコンでも数万コアでの並列により1秒あたり1京回以上もの演算処理が可能な時代になりました。このように計算機の高速度化は著しいものの、上記のような長い時定数に対して分子動力学解析を為し遂げるには至りません。2つ目に、モデリング手法や理論の発展が挙げられ、分子動力学法を時間粗視化して加速する種々の手法が近年多く提案されております。そのひとつにABC (Autonomous Basin Climbing) 法と呼ばれる、相互作用する原子モデル系のポテンシャルエネルギー極小点付近にブースト

エネルギーを加え状態遷移を強制的に起こすことで、現象を加速するとともに熱活性化過程の詳細を明らかにする手法があります。私は、このABC法を用いて金属ガラスの緩和過程の温度依存性の解析を行うため、まず既存の分子動力学法の計算コードに本手法をインプリメントすることから始めました。プログラムの作成を通して、計算ループや順序を少し変えることで並列計算効率が何倍にもなることなど実感しました。学部の演習の授業では並列化効率や計算効率までを考えてプログラム作成をしていませんでしたので、このとき身についたプログラミングの知識や技術が、その後の計算機を用いた研究において大変な力となりました。その後、緩和過程の解析に成功し、翌年度に成果をまとめて無事論文として発表することができました。この年度より金属ガラスの原子論に造詣の深い譯田真人助教が尾方研究室に赴任され、執筆に際して金属ガラスの実験的・原子論的背景に関して様々な観点からアドバイスを頂くことができたのも幸いでした。また、その後も現在に至るまで、先生方の人脈を通じて、海外留学や国際会議での発表、各種金属ガラスの研究会やプライベートなミーティングにも同行させて頂き、駆け出しの学生にとっては最先端の議論に触れる多くの良い経験を与えていただきました。

学部の卒業研究のまとめが終わるころ、尾方先生より博士課程への進学を勧められました。当初は就職を考えており1度はお断りしましたが、ちょうど少し前に出身の高校に立ち寄り籍時の担任の先生から、「もしも教授が博士課程進学を勧めるなら、それは1つのチャンスと思って勝負してみるのも悪くないよ。」といった言葉を頂いていたのを思い出しました。後日、博士課程進学のことを伝えた際、尾方先生より「ガラスの緩和のモデリングについては修士終了までに世界のトップで通用する専門性を持つつもりでやりなさい。博士課程修了時にはPh.D. すなわち哲学博士と呼ばれる学位を持つのだから、材料モデリングや力学だけでなく幅広い領域でプロフェッショナルとしての仕事ができるようにしなさい。」といったアドバイスを頂きました。以降、後輩への指導や関連するテーマの論文や学会発表のチェックを通し、自身で研究課題を設定できる力を涵養するよう努めております。

金属ガラスに限らず固体材料の変形ダイナミクスは、原子・電子スケールでのエネルギー論的な観点からみると、多次元の複雑なエネルギー曲面上での振る舞いであるため、分からない事が多く、それ故にやりがいのある研究と感じております。変形ダイナミクス現象と同じく、私の研究にも数多くのエネルギー障壁が存在しており、再三それにぶつかり立ち止まった状態になります。そこから研究室の先生方、学生や家族などの周囲のサポートに助けられながらなんとか山を越え、そして再び谷に落ちるといった、山あり谷ありの経路を歩む毎日です。しかし、博士課程修了後には、独り立ちして自力で山を越え、次の道を切り開いていけるように、日々全力で研究に取り組みたいと考えています。

(2014年7月4日受理)[doi:10.2320/materia.53.486]

(連絡先: 〒560-8531 豊中市待兼山町 1-3)