

北海道大学 大学院工学研究院 材料科学部門主催

第 91 回マテリアルセミナー

下記の要領で第 91 回マテリアルセミナーを開催いたします。多数ご参加くださいますようお願い申し上げます。

記

日時：平成 28 年 4 月 15 日（金）14:00～15:00

場所：北海道大学工学部 材料化学棟 5 階 大会議室 (MC526)

講師：東京大学 大学院工学系研究科 澁田 靖 准教授

題目：超大規模分子動力学法による凝固中の核生成・界面ダイナミクスの解析

概要： 実用合金の凝固組織を高精度に制御するためには、凝固中の核生成挙動の解明や固液界面エネルギーおよび界面移動度といった界面物性の解明が不可欠である。しかし、これらの挙動や物性を実験のみから詳細に解明することは困難であるため、現在まで不明な点が多く残されてきた。近年、計算機資源の拡大や並列計算技術の向上によって、原子の挙動を直接記述する分子動力学法 (Molecular Dynamics, MD) が、従来連続体モデルで扱われてきた空間スケールの現象まで適用が拡張されつつある。特に、上記の凝固の諸問題に対する MD 解析の有効性が著しく増しているとともに、材料組織の計算との連携・融合への機運が高まっている。本講演では、MD による固液界面物性の原子論的な算出から、GPU 超並列計算による超大規模分子動力学シミュレーションによって凝固中の均一核生成を直接シミュレートした世界的に初めての試みを紹介する。

連絡先：北海道大学 大学院工学研究院
材料科学部門 組織制御学研究室
大野宗一

E-mail: mohno@eng.hokudai.ac.jp

内線 6344