

材料のマルチスケールモデリングのためのプログラムコードの開発

大阪大学 機械工学専攻 澁谷陽二, 松中 大介

目的: 材料の力学挙動をマイクロからメゾ, マクロスケールまで統一的に扱うことのできる計算機コードを開発する.

第一原理計算に基づく電子・原子スケールでの材料の力学挙動シミュレーターの開発を行った. 材料中の欠陥挙動に対して第一原理計算および分子動力学シミュレーションを用いた解析コードを開発した. 化学反応経路探索のための汎用プログラムを作成し表面反応ダイナミクスに適用した. 動的モンテカルロ法やマルチフェーズフィールド法などを導入して時間発展シミュレーションの加速化を行った.

Crack on (0001) in Mg

$\gamma=0.167$ [J/m²]

原子間ポテンシャル

$\gamma=0.308$ [J/m²]

