

ミルフィーユ構造の変形特性に関する研究

大阪大学大学院基礎工学研究科・君塚肇, 市岡航平, 福井浩毅
大阪大学基礎工学部・岩井佑樹, 大依加奈, 高橋操平

目的 種々の金属系および高分子系ミルフィーユ構造の変形特性を解析するため, 電子論的・原子論的シミュレーション手法の開発・整備を進める.

内容 ミルフィーユ構造の形成条件および変形特性を解析するために必要となる(1)第一原理計算に基づく合金の熱力学的安定性評価, (2)分子動力学法に基づく変形素過程の抽出, (3)粗視化・加速分子動力学法に基づく高分子凝集体の状態探索, を行うための手法の整備・開発を行った.

結果 金属の塑性変形素過程のエンタルピー (または自由エネルギー) 地形の応力・温度依存性を評価するためのシミュレーション手法を構築し, 種々の金属系を対象にケーススタディを実施した. また, ポテンシャル埋め立てによる状態探索の加速手法を構築し, 高分子鎖モデルを対象に試行計算を実施した.

利用した計算機
ノード時間

OCTOPUS
1万時間