

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, 岩井佑樹, 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
6万時間