

金属アモルファス中のき裂成長過程の 大規模原子シミュレーション

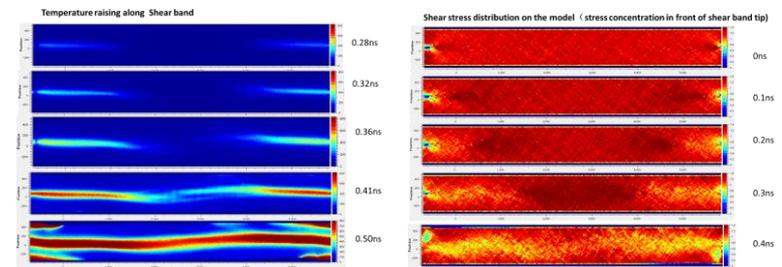
大阪大学 基礎工学研究科 Hongxian Xie, 石井明男, 尾方成信

目的 金属アモルファス材料中のせん断き裂の成長過程を原子レベルから明らかにする。

内容 大規模分子動力学シミュレーションにより金属アモルファスを作成し、作成した原子モデルに対して同シミュレーション手法を用いてせん断負荷を印加することにより、金属アモルファス材料中のき裂成長過程を解析した。

結果 これまでより大規模なモデル (650nm x 82nm x 4nm) を用いることにより、切り欠き部から原子ひずみの高い領域が帯状に形成され、せん断き裂が成長する過程をより長時間観察することができた。これによりせん断帯の幅や温度上昇に関する知見が得られた。

利用した計算機 OCTOPUS



図：分子動力学シミュレーションにおけるせん断帯進展時の温度分布（左）と応力分布（右）。