

ミルフィーユ構造の変形特性に関する研究

名古屋大学大学院工学研究科・
君塚肇，稲葉智，野村泰隆

目的 種々の金属系，セラミックス系，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，を行うための手法の整備・開発を行った．

結果 MAX相セラミックスの塑性変形素過程の微視的描像を評価するため，分子動力学法と反応経路探索手法に基づくシミュレーションを実施した．また，第一原理計算データに基づきながら溶質クラスター形成過程を低計算コストで記述するための数値的枠組みを構築し，Al合金系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
6000時間