

BCC金属中らせん転位運動の加速分子動力学解析

大阪大学 大学院基礎工学研究科 吉田 敦司

目的 BCC金属中のすべり変形の温度依存性を明らかにするために加速分子動力学法を用いてらせん転位運動を解析する

内容 BCC金属中のらせん転位座標を，原子の相対変位により定式化し，これを集団変数として用いた加速分子動力学計算を行うことで，様々な荷重，温度条件下におけるらせん転位の移動方向及びその頻度を求めた．

結果 鉄中のらせん転位運動について解析を行い，低温・高荷重の条件ほど荷重方向に追従した移動が起こりやすく，高温ほど移動方向にばらつきがみられたことから，温度によるすべり面の変化が生じることが示唆される(図1)．以上の解析結果から，定式化した集団変数が有限温度下でのらせん転位の運動を表すために有効であることを確認した．

利用した計算機
ノード時間

OCTOPUS
475時間

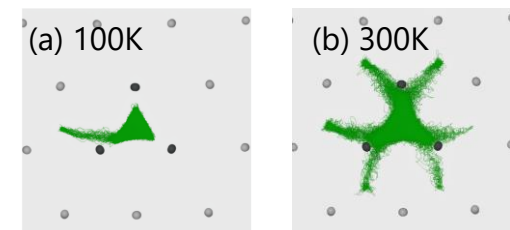


図1. らせん転位の運動軌跡