

超温度場におけるナノ金属材料で生じる固相対流現象の原子シミュレーション

大阪大学 基礎工学研究科 新里秀平、Shihao Zhang, Fanshun Meng, Junping Du, 尾方成信

- 目的** 非常に大きな温度勾配下(超温度場)におけるナノ固体金属材料に生じる固相対流現象の詳細を原子シミュレーションを用いて明らかにする
- 内容** 実験により固相対流が生じることが観察されている純銅ナノピラーを対象として、非平衡分子動力学法により表面及び材料内部の原子の拡散挙動を追跡し、低温側界面における原子の密度分布と応力の計測を行った。
- 結果** 表面における高温側から低温側への拡散と内部における低温側から高温側への拡散を捉え、接点界面において内部と外周での原子の密度が異なること、およびそれに伴いback-stressが発生することを明らかにした。

利用した計算機	SQUID GPUノード群
ノード時間	15,000 時間
使用メモリ	50 GB/ジョブ
並列化	1ノード 並列