

日本金属学会九州支部・日本鉄鋼協会九州支部

第 276 回材料科学談話会のお知らせ

平成23年11月11日

関西大学システム理工学部の 齋藤 賢一 先生をお迎えして、下記のとおり講演会を開催いたします。皆様、奮ってご参加下さい。

講 師： 齋藤 賢一 先生

(関西大学システム理工学部機械工学科 准教授)

講演題目： 分子動力学法 (MD) の基礎と固体力学問題への適用

日 時： 平成23年11月29日(火) 16時10分～17時40分

会 場： 熊本大学工学部研究棟 I 3階 308号室
熊本市黒髪2丁目39番1号

要 旨：分子動力学法 (MD) の基礎的事項をまず講述し、いくつかの固体力学 (材料力学、弾性力学、塑性力学) に関する研究課題へ適用した例を示す。MD では、物質の構成要素である原子・分子の運動を、力学原理に則ってコンピュータを用いて数値的に解析する手法である。物質をできるだけ多数の粒子を用いてモデル化し、適切な境界条件のもとで解析することで、温度や圧力などの巨視的かつ平衡場での熱力学変数を求めることができる。また、粒子個々の時間発展を動的な計算で求めているため、系を非平衡場として捉えることで拡散係数や熱伝導係数などの輸送係数も推定できる。現在、材料特性を精密に表現する原子間ポテンシャルの設定方法、扱える粒子数の制限 (単一研究室レベルではかなり頑張って数百万程度まで) の克服が、課題といえる。固体力学問題への適用として、延性材料(アルミニウム)に対する巨大ひずみ加工の MD 解析を示す。多結晶モデルを構築して、結晶粒微細化のメカニズムと結晶粒界をはじめとする格子欠陥の詳細な挙動を解析する。また、応力やひずみといった本来は連続体で定義される物理量の局所的な取り扱いを試みている。続いて、塑性加工分野で重要な棒線の伸線加工 (引抜き) プロセスを、原子レベルの視点を持つ MD モデルを構築する。ダイスとの接触・摩擦による材料(bcc の α 鉄を想定)の変形、欠陥の挙動、組織変化などを調べる。

談話会についてのお問い合わせは、下記の連絡先をお願いいたします。

交通手段の詳細については、下記のホームページをご覧ください。

熊本大学黒髪キャンパスへの交通手段: <http://jugon.eng.kumamoto-u.ac.jp/faculty/faculty08.html>

黒髪キャンパス(黒髪南地区)の地図: <http://www.eng.kumamoto-u.ac.jp/faculty/faculty07.html>

材料科学談話会世話人： 西田 稔

連絡先：連川 貞弘 (熊本大学大学院自然科学研究科 産業創造工学専攻)

Tel & Fax: 096-342-3720 E-mail: turekawa@kumamoto-u.ac.jp