

京都大学 構造材料元素戦略研究拠点(ESISM)セミナー

日 時： 2012年12月12日(水) 13:30~15:00

場 所： 京都大学吉田キャンパス物理系新校舎(別紙参照)
5階材料工学セミナー室(527室)

講演者： 屋代如月

神戸大学大学院工学研究科機械工学専攻 准教授

講演題目： 局所変形の開始クライテリア：
原子弾性剛性に基づく局所格子不安定解析

講演概要：

き裂先端からの転位射出など、原子シミュレーションによって原子レベルの局所変形開始メカニズムを観察した後、問題となるのはその発生条件に関する定量的な議論である。応力拡大係数など、連続体近似に基づくクライテリアを原子シミュレーションに適用して議論することは、それらの理論の正当性ならびに適用限界を確認することには有用でも、例えばき裂表面の原子構造に起因した転位の発生条件等、ナノレベルでの新しい力学基準を見出すことはできない。また、局所応力や局所エネルギーなど、原子間ポテンシャルに依存する物理量で発生条件を議論しても、原子間ポテンシャルは実在材料に「似ているが異なる」モデル材料にすぎないため、ケースバイケースの基準になりがちである。

講演者は、非弾性変形開始時には必ず原子配置の組み換え＝局所格子の崩壊が生じることに着目し、格子力学で議論されてきた「格子不安定条件」に基づいて転位の発生や移動、へき開の発生等を統一的に議論することを提案してきた。用いる原子間ポテンシャルによって変形モードや臨界ひずみ・応力は当然変化するが、常に局所変形を「安定か不安定か」という力学的な基準で議論することで、用いたモデル材料にとどまらない普遍的な議論を目指している。具体的には、非線形弾性体の応力-ひずみ係数である弾性剛性係数 $B_{ij} = \Delta\sigma / \Delta\epsilon_j$ を個々の原子位置で局所的に評価した原子弾性剛性 (Atomic Elastic Stiffness; AES と称している) の正值性によって局所変形の開始クライテリア、ならびに系全体の不安定挙動 (= 応力急減) との関係性を議論する。本講演では、fcc 金属、ナノ多結晶体・アモルファス金属、シリコン、bcc 鉄について行ってきた一連の検討について概説するとともに、今後の展開について述べる。

世話人： 乾 晴行



京都大学吉田キャンパス マップ