

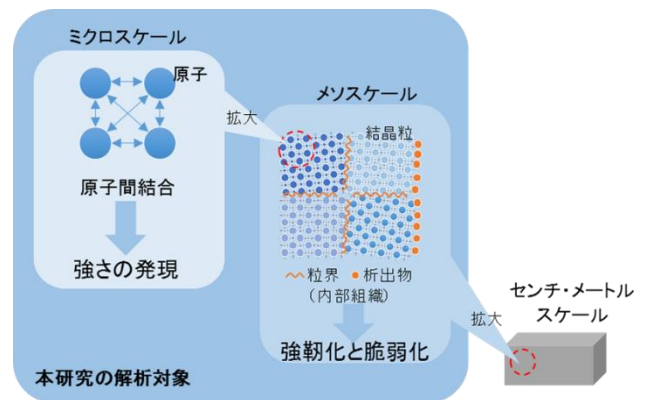
スパコンが明らかにする電子の状態、原子の配列と材料強度の関係
 - 材料の強さをマルチスケールで解析 効率的な材料設計を可能に -



1

2

Fe-Si



概要図: 実材料の強度には、電子・原子のふるまいと内部組織の両方が影響する。

npj Computational Materials-Nature
 2017 3 10

図1

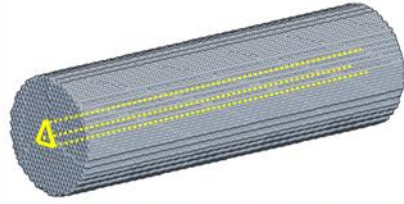


図1: 材料の内部における原子の配列と結晶中の転位(線状の原子配列の乱れ)を黄色で示す。

図2

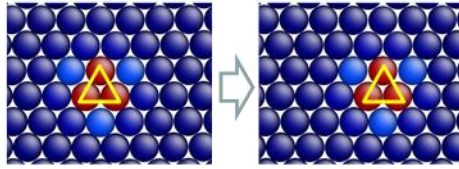


図2: 図1の断面図。転位が動く前後の原子配列の変化を示す。

原子が左から右に移動

図3

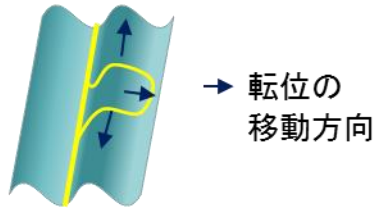


図3: 転位の運動。黄色で示した転位の一部分がエネルギーの山を乗り越え、隣接する部分が横方向に動くことで、転位の全体が前進し、変形が生じる。

npj Computational Materials-Nature (2017) 3:10

Mechanical properties of Fe-rich Si alloy from Hamiltonian

Tetsuo Mohri, Ying Chen, Masanori Kohyama, Shigenobu Ogata, Arkapol Saengdeejing, Somesh Kumar Bhattacharya, Masato Wakeda, Shuhei Shinzato and Hajime Kimizuka

DOI ; doi:10.1038/s41524-017-0012-4

1

()

2

○

JSTC

計算材料科学を専門とする 5 は特にマイクロからメソスケールに対象を絞り、このスケール域に取り組んだ 4 機関の成果です。

TEL 022-215-2327

Email tmohri@imr.tohoku.ac.jp

TEL 022-215-2144 FAX:022-215-2482

Email pro-adm@imr.tohoku.ac.jp