

特集

分子動力学 (MD) を応用して何ができるか

材料力学および構造健全性評価学への 分子動力学シミュレーションの応用*

中 谷 彰 宏**



Applications of Molecular Dynamics Simulation to Evaluation of Materials
Strength and Structural Integrity*

by NAKATANI Akihiro**

キーワード

計算力学, シミュレーション, モデリング, 力学特性, 破壊, 塑性変形, 転位力学,
マルチスケール解析

1. はじめに

「構造解析」という用語は様々な分野で、様々な意味に用いられているが、ここでは、変形体の力学問題に対し、内部に適切な幾何学的構造を記述するモデルを導入して行なう解析方法の総称をこう呼ぶことにする。連続体力学に基礎をおくモデル化を行ない、有限要素法 (Finite Element Method; FEM) に代表されるシミュレーションによって、変形体の力学問題にアプローチする構造解析手法は、今や固体力学分野のインフラストラクチャとして定着している。一方、分子動力学 (Molecular Dynamics; MD) シミュレーションは、変形体の内部に原子構造モデルを仮定して実施される構造解析手法の一つと位置付けることができる (例えば、MD 法の原子レベル構造解析への具体的応用の一例として最近の報告¹⁾を参照願いたい)。MD 法は、統計力学の理論やモデルの検証を目的として始まり、今でも、それが基礎となっていることに変わりはないが、マイクロ構造を設計することによる新しいデバイスの開発が進んでいる昨今、マイクロ材料の強度・健全性評価、機能設計、製造プロセスの提案、実装方案の獲得を目指した構造解析手法として、従来のマクロ機械設計において FEM が果たしているのと同様な役割を原子/分子レベルで担うことが期待されている²⁾。ここでは、材料力学分野、特に、構造健全性評価に関わる原子系シミュレーションについて展望する。なお、本稿は、既に報告した資料^{3, 4)}を再構成し、加筆したものである。

2. 分子動力学法の最近の進歩

現在の力学の理論的アプローチは、先人の知恵による

ところが大きい。前世紀末からのコンピュータの発達によって、それまで、原理的には実行可能とされながらも、現実的には見向きもされなかった定式化や方法論が脚光を浴びるなど、予期せぬ方向に進んでいる。原子レベルシミュレーションもこのような方法論の一つである。ここではその現状について簡単に整理する。

2.1 シミュレーションの時空間スケールの大規模化

図1は、MD シミュレーションの粒子数と1ステップに要する CPU 時間の関係を示している (Beazley らの論文の掲載図⁵⁾に加筆)。コンピュータの性能は平均的にみて Moore の法則⁶⁾に沿って順調に向上していることが知られており、それとともに原子レベルシミュレーションの規模は年々大きくなっている。現在、空間スケールでは 10^8 原子 (一辺サブミクロンオーダーの立方体) を対

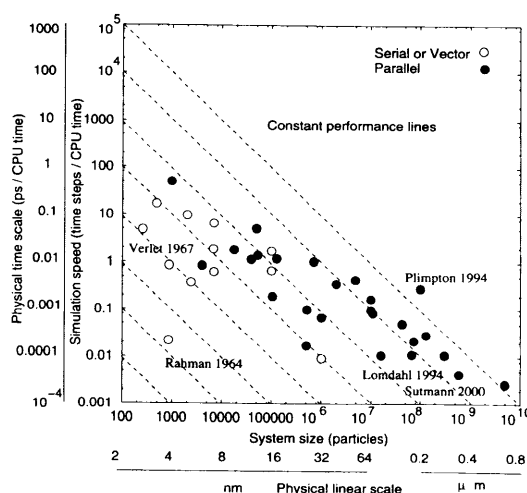


図1 三次元短距離相互作用分子動力学シミュレーションの空間・時間マップ: Beazley らによる図⁵⁾に加筆

*原稿受付 平成15年7月1日

** 大阪大学 大学院工学研究科 Graduate School of Engineering,
Osaka University

象とできるまでに至っている。

2.2 多様なアンサンブルへの対応

平衡系に対する原子シミュレーションでは、マクロな熱力学的パラメータを規定した条件下でアンサンブル平均により系の特性を評価することに基礎を置いている。粒子数 N 、体積 V 、全エネルギー E を規定した (N, V, E) アンサンブルに対応する時系列データを得るオーソドックスな MD 法に対し、1980 年以後、(N, V, T) アンサンブル (温度一定の方法)、(N, p, H) アンサンブル (圧力一定の方法)、(N, p, T) アンサンブル (温度・圧力一定の方法)、(N, σ, T) アンサンブル (温度・応力一定の方法) などの方法⁷⁾が次々考案され、さらに 1990 年以降は、従来の統計力学の枠組を越えて、極めて低頻度の現象 (従来の方法では長時間の計算が必要) を加速的にシミュレートするマルチカノニカル法などの方法が提案されてきている⁸⁾。一方、固体力学分野では、マイクロメカニクスで扱われる RVE (Representative Volume Element) の内部構造として原子モデルを仮定する試みがなされている。この枠組を用いれば、均質化法など、現在、連続体力学をベースに行なわれている様々なマルチスケール解析の一部分への原子シミュレーションの応用が期待できる。一方、非平衡系についてはなお多くの問題が未解決であり、非平衡統計力学理論と非平衡 MD シミュレーションとは、今後も相補的な関係のもとで発展していくと考えられる。

2.3 力場の高精度化

原子にはたらく力をいかに正確に評価するかが、現実の材料特性評価を成功させる鍵を握っている。量子力学により力場を計算しつつ原子核の分子動力学計算を行なう第一原理計算はその有力な方法の一つで、1985 年に Car と、Parrinello が画期的な方法を示した後、様々な方法論が提案され、コンピューターの進歩とともに、着実に扱える系は大きくなり、材料強度分野においても実用段階に入っている⁹⁾。

2.4 非古典力学的方法

MD 法は、古典力学すなわち Newton の運動方程式を解くことに基礎を置く方法であるが、運動方程式そのものを違ったものに置き換えることも検討されている。例えば、原子の運動を Newton 力学ではなく、Langevin 動力学で扱う方法は、原子レベルの現象の違った側面からの評価を可能にする。また、トンネル効果による原子運動は、原子運動自身を量子力学的に扱う必要がある。MD 解析では、時間積分に対し非常に小さい時間ステップを用いなければならない、長い時間スケールで起こる現象を扱うことが難しいという短所を有しているが、それを克服するための様々な方法が検討されはじめている。

3. 材料力学・構造健全性評価問題への応用

マイクロデバイスからマクロ構造物にいたるあらゆる人工物に対して、物が壊れるのはなぜか? どのようにして壊れるのか? といった破壊のメカニズムに対する問いかけは、工学の中心テーマの一つであり続けているといっても過言ではない。近年の MD シミュレーションに代表

される原子レベルの解析手法によりこのような構造健全性評価の基礎となる原子レベルの変形機構や、結合則に対する理解は、飛躍的に進んでいる。

3.1 破壊力学 (き裂力学) 問題への適用

き裂の力学に対する原子レベルからのアプローチは、連続体モデルに基礎を置く破壊力学との対比から理論展開が行なわれるとともに、早い時期から様々な原子シミュレーションが行なわれている¹⁰⁾。

図 2 は、bcc 鉄単結晶に導入したモード I 型開口き裂 (図 (a) および (b) は、それぞれ、き裂面、き裂前縁方向が、(110) 面、 $[\bar{1}10]$ 方向、および、(001) 面、 $[\bar{1}10]$ 方向の配向の場合) に対して、実施した MD 解析によって得られた典型的な原子構造のスナップショットを示している¹¹⁾。図 (a) では、き裂先端から転位の発生が見られ、き裂先端が鈍化するが、図 (b) では、き裂先端から変形双晶が発達し、へき開的にき裂が進展する。この例は結晶の配向が違えば破壊のメカニズムが全く異なることを示している。

このようなシミュレーションの意義は、第一に、き裂先端近傍場で起こる構造変化を「直接観察」し、へき開破壊、転位発生、相変態などの変形メカニズムとその物理的意味を理解することにより、第二に、これらの変形メカニズムに対し、き裂進展条件、転位生成条件、ぜい性延性遷移温度などの諸量を定量的に評価することにある。

一方、微小材料の破壊、き裂の初生、酸化・腐食、き裂面間摩擦、高速変形と動的不安定などの問題は、通常は、純粋な「き裂力学」だけでは単純に扱えない。しかしながら、原子レベルシミュレーションでは、高いレベルのモデル化を行なわないため、あらかじめ想定しなかった挙動がシミュレーションの結果得られる多数の自由度の時間発展の中に発見できる可能性を有している。

3.1.1 マクロ解析との連携とマルチスケール解析

Cotterell¹²⁾ は、単調負荷下の準静的き裂問題では、破壊プロセス領域 (Fracture Process Zone; FPZ) の寸法に応じて有効な力学的アプローチの方法が異なることを指摘している。これに加えて、実際には、FPZ の寸法は負荷や履歴に依存しており、FPZ 内部の構造は均一ではないため、破壊を非現象論的に扱うには、FPZ の内部の構造変化を扱う力学が必要である。すなわち、ミクロとマク

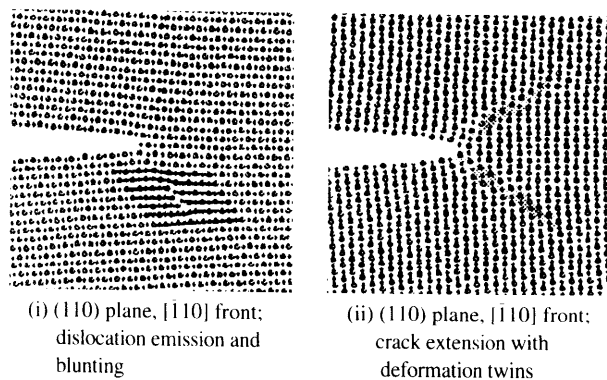


図2 Bcc 鉄のき裂先端近傍場の変形の結晶配向依存性

口の中間の領域（メゾスコピック領域、メゾ領域）の取り扱いが重要となる。例えば、結晶体のみかけのマクロ強度は、内部の格子欠陥の存在によって影響を受ける（通常、マクロな負荷は平均的にはFPZによって遮蔽され、安全側の評価となるが、FPZ内の局所的な欠陥の存在はしばしば内部の局所応力を増大させ、危険側の評価となる。これは、例えば、欠陥として転位を考える場合と、微小き裂を考える場合を想起すれば明解である）。一方、FPZ内のき裂先端近傍の構造変化は、規則的に並んだ原子の結合面がへき開的に離れる、あるいは、すべりによって転位が発生するといったマイクロ構造の変化の過程で起こる様々な原子レベルの事象と無関係に考えることができない。

マルチスケール（マルチレベル）解析によりマイクロとマクロとの間の溝を埋める（すなわち、メゾ領域の複雑な現象を理解する）試みでは、メゾ領域の現象のモデル化に際しては、マイクロの自由度の除去や統合およびマイクロ現象の取捨選択を効率良く適切に行うためのアイデアが要求される。現在行なわれている方法の多くは、原子系の運動に対する束縛条件をマクロシミュレーションで規定し、同時に原子系の自由エネルギー表現を用いて、マクロシミュレーションの従来の構成式に相当する部分を補うといったアプローチがとられている。現時点ではある特定の現象に対しては時間・空間の限界を克服する

有力な方法の一つである¹³⁾が、多様な原子構造の変化すべてに対応できるわけではなく、今後のさらなる研究が必要である。

図3は、アモルファス金属のき裂先端場の変形および応力状態に対して、原子シミュレーションと連続体シミュレーションの結果を比較したものである¹⁴⁾。ここで連続体解析は、き裂の無い巨視的均質性を仮定したモデルを用いた材料試験の原子シミュレーションによって決定した構成式を用いている。両者は定量的にも良い一致を示しており、このようなマルチスケール解析が有効であることを示している。

3.1.2 転位動力学シミュレーション

離散転位塑性論（Discrete Dislocation Plasticity; DDP）では、転位線を連続体中の特異線としてモデル化し、その運動を扱う。その結果、原子レベルの分解能を保ちつつ、自由度を大幅に減少させることが可能となる。さらに、多数の離散的な転位構造を連続な転位密度に置き換えることにより、結晶塑性論と結びつけることが考えられる（図4にこのようなマルチスケール解析の例を模式的に示している）。

図5と、図6は、金属セラミックス界面き裂の離散転位動力学解析の例を示している^{15, 16)}。欠陥原子と転位分布の対応や、応力分布の一致から、図4のようなマルチスケール解析の有効性が確認できる。

現在、転位動力学シミュレーションは、大規模計算により多数の転位の三次元的な転位間の相互作用を扱えるまでに発展しており¹⁷⁾、破壊問題においても転位動力学への期待は大きい¹⁸⁾。そのような期待の中で、転位動力学シミュレーションのモデルの妥当性の検討や、必要なパラメーターを決定することが、原子レベルのシミュレーションの一つの役割である。

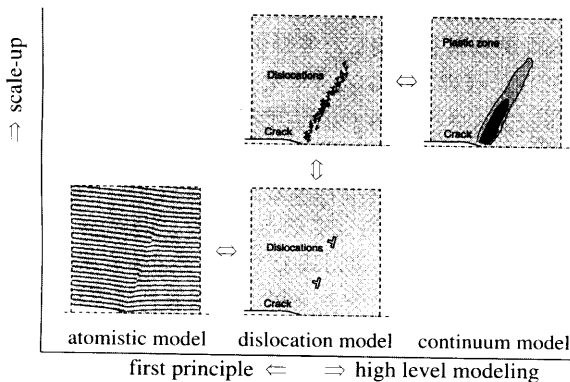


図3 延性き裂先端近傍場の塑性変形の階層的様相とマルチスケールモデルの考え方の一例

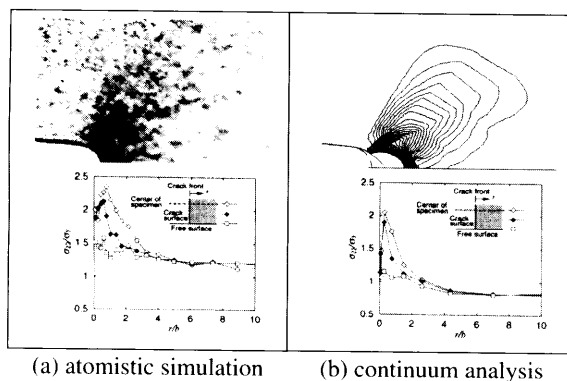


図4 アモルファス金属中のき裂先端近傍場の原子シミュレーションと連続体解析の比較

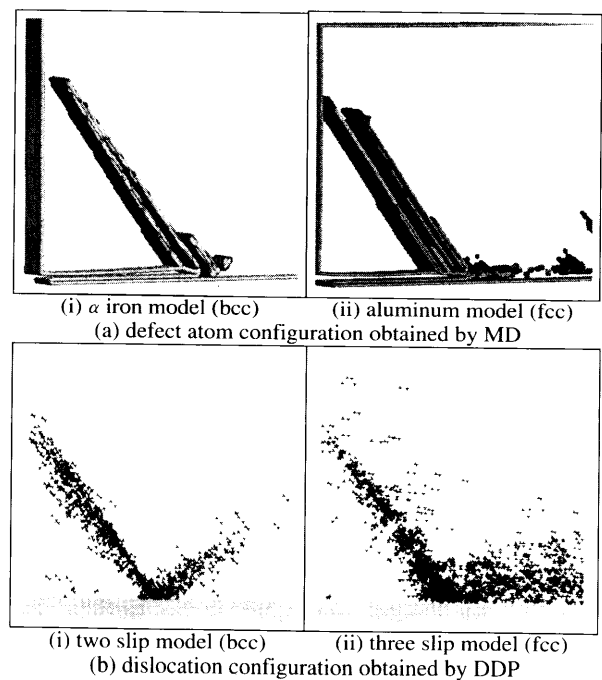


図5 異種材料界面き裂先端近傍の欠陥分布

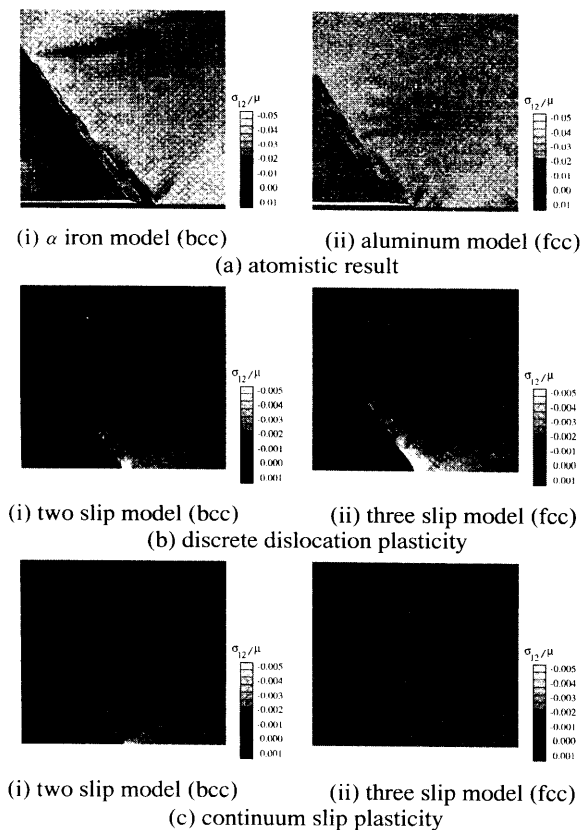


図6 異種材料界面き裂先端近傍の応力分布 (σ_{12})

3.1.3 Cohesive Zone モデル

上で述べた離散転位塑性論から結晶塑性論に至る粗視化が延性破壊に関係するモデル化であるとすれば、Cohesive Zone (CZ) モデル¹⁹⁾は、原子レベルのへき開による結合の切断から、マクロなき裂進展に至る粗視化の問題に関係している。CZ モデルは、物理的な意味が明確で、マクロ有限要素解析に実装しやすい方法論として多くの研究でその有効性が示されている。近年、離散転位塑性論との連成問題にも適用されており、例えば、Maoら²⁰⁾は、多層膜のき裂成長過程の転位による遮蔽効果を調べている。

Cohesive 則は、原子間の結合則、いいかえると、原子レベルシミュレーションと密接に関係している。しかしながら、原子間の結合の切断に対するエネルギー変化が、そのままマクロき裂進展を特徴づける界面ポテンシャルに対応するかどうかは、先に述べた FPZ の寸法や破壊機構などとも関連しているため未解決の問題として残されている。この問題に対して、最近、繰り込み群の方法を用いて、原子レベルの結合則からマクロな Cohesive 則を導く方法が示されている²¹⁾。そこでは、繰り込み操作を繰り返すことにより得られる Cohesive ポテンシャルは、放物線と一定値でつくられる関数に漸近し、そして、その間、弾性係数と表面エネルギーが保存され、破壊のクライテリアは、繰り込み回数とは無関係に Griffith の基準で評価できるが、ピーク応力は、繰り込み回数 N に対して、 $1/\sqrt{N}$ になり、限界開口変位は、 $\sqrt{N}$ になるという興味深い結果を導いている。これはマクロな有限要素解析において、例えば界面近傍の要素寸法に応じて適切な界

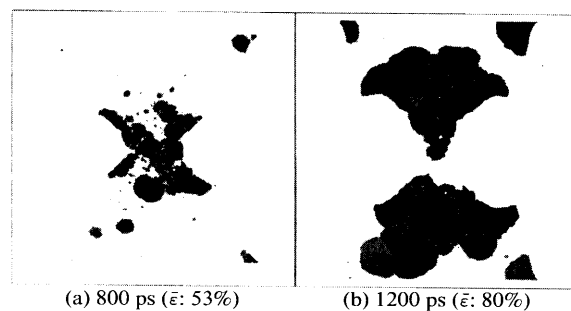


図7 アモルファス金属の変形誘起ナノ結晶化

面構成式を用いる必要性を強調するものと解釈できる。このような試みは、まだ一般的な全ての問題に対して適用できるものではないけれども、今後、理解が進むものと期待される。

3.2 統一的方法としての分子動力学法

固体・液体・気体といった物質の三態は、原子レベルのモデルでは、ポテンシャルを通じて統一的に扱われる。例えば、温度を制御変数として、加熱・冷却のシミュレーションを実施すれば、融解・凝固過程の解析が可能になる²²⁾。図7は、このプロセスによってモデルアモルファス金属を生成し、両側に切欠きを有する試験片を作成し、引張変形解析を実施した結果得られたスナップショットである。平滑板の引張変形解析²³⁾と同様に、このような切欠きを有する材料でも、変形が局所化する領域で結晶が生成し、多結晶組織が現れる。

単純な構成則を仮定した連続体シミュレーションでは、このような過程で起こる事態を予測することは難しい。つまり、アモルファス・結晶間の相変化を記述する状態方程式に対する先験的な知識が必要である。また、先に述べたマルチスケール解析でも想定したモデル化で現象が内挿できる場合に限ってその有効性が認められるが、予期せぬメカニズムには対応できず、モデルが破綻する。一方、原子シミュレーションは、原理的には想定しない変形を許容する守備範囲の広さを有しておりそのメカニズムを発見するツールとなり得ることを再度強調しておく。

大きな構造変化を伴うもう一つの問題として、宇宙ゴミの人工衛星への超高速衝突時の破壊現象の例を挙げる。この問題に対し、宇宙ゴミを模擬した球形のプロジェクタイトと人工衛星外壁を模擬した平板のターゲットからなる解析モデルを作成し、分子動力学シミュレーションが実施されている。衝突時の破壊の様子を図8に示す²⁴⁾。衝突に伴う変形の詳細と、発生するデブリ雲の構造を検討した結果、デブリ雲は、衝突方向に沿って、前方、中央、そして、後方の3つの部分からなる構造を持っていることがわかる。このデブリ雲の構造特性は、Piektowski らによって実験的に調べられた結果²⁵⁾に一致している。通常、このような問題に対するマクロシミュレーションでは、現象論的な状態方程式が仮定されるが、ここでは物質の三態をすべて原子間の相互作用に帰着させて統一的に表現している。実際の現象との定量的な比較の点ではポテンシャルの精緻化や、スケールの違いの

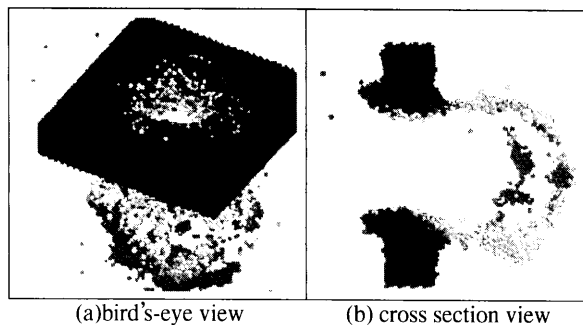


図8 高速飛翔物体の衝突によって形成されるデブリ雲

克服など、今後の研究が必要であるが、少なくとも MD によるミクロ構造変化からのボトムアップ的なアプローチから様々な問題に対して意味のある結果がもたらされることが期待される。

4. ポスト処理からインタラクティブシミュレーションへ

MD 法では、運動方程式の時間積分により、そこでは大きい自由度を有する系の相空間座標の時間発展を獲得し、その数値から多くの有益な情報を獲得することが要求される。シミュレーションが現実のスケールに近い解析を目指す程、得られる時系列データも膨大となり、そこから、解析する者にとって直観的に理解できる形に加工した意味のある結果を導き出すことが困難となる。

シミュレーションでは、正しいデータを得るための計算手法の確立とともに、二次的な計算（データ処理）を遂行するための測定装置に対応する部分やデータ処理のための理論を確立することが、全体の成功の是非に関わる最も重要な事項であるといっても過言ではない。

計算結果の可視化（Scientific Visualization; SV）やインタラクティブなシミュレーション²⁶⁾が今後ますます重要になってくるものと思われる。SV は、その重要性は誰もが認めるところであると思うが、定量的評価という意味での厳密性や客観性に乏しく、多くは直観に訴えるものであるため、力学問題の解析手法としての学問的位置付けが軽んじられてきた面があるように思われる。

可視化では、原子構造は原子の持つ運動エネルギーやサイトポテンシャルエネルギー、サイト応力、変位など、原子ひとつひとつに対する変数についての情報を用いて色分けその他の可視化処理を行なうことや、Voronoi 多面体解析や、CNA（Common Neighbor Analysis）²⁷⁾といったグラフ理論や計算幾何学的手法を援用する方法が有効である。図9は、棒状に加工したナノ多結晶試験片に対して、その上端と下端の速度を規定し引張変形解析を行ない、その後、CNA を適用した例を示している²⁸⁾。ここで、初期状態において同じ結晶粒を構成している原子により色付けを行なっている図9(a)に対して、図9(b)は引張ひずみ0.45の状態を示している。変形が局所化している中央部分にCNA解析を実行し、内部の構造解析を行なったものが図9(c)である。ここでは、断面図とhcp構造のみを表示した結果を示している。図より、粒内を

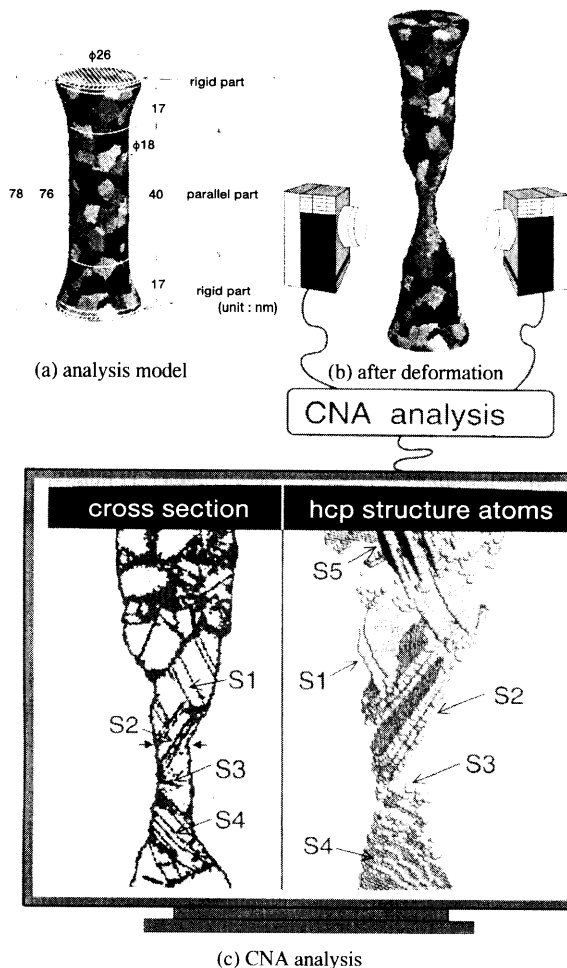


図9 ナノ多結晶微小試験片の引張シミュレーションとCNAによる検討

積層欠陥が貫く形で存在していることが確認でき（S1～S5のすべり系が活動）、また、S2のすべり系によって生じた積層欠陥がS1のすべり系による2次すべりの障害となっていることが確認できる。このように、これまでにCNAを用いて複雑な系の内部構造について、これまで得られなかった有意義な知見が多く得られている。

5. おわりに

コンピュータの発展とともに、分子動力学シミュレーションがこれまでのペースで発展を続ければ、大規模化シミュレーションは容易になり、エンジニアがノートパソコン上CADソフトで複雑な原子構造設計を行ない、ただちにシミュレーションで機能予測を行なう、あるいは、シミュレーションとアニメーションを同時に行ないながらインタラクティブシミュレーションを行なうというレベルに至るのはそう遠くないように思われる。

一方で、コンピュータシミュレーションによる特性評価では、シミュレーションの規模が大きくなり、また、対象が複雑になればなるほど全容を理解し、物事の本質をとらえることが難しくなってくる。このような場合にマルチスケールの考え方が重要になってくる。ミクロとマクロの中間のメゾスケールで起こる事象においては、

時間とともに変化する多様なプロセスそのものが強度や特性の発現の鍵を握っており、従来、ミクロやマクロスケール領域の両方で広く行なわれているように、数値データとして強度や特性を整理するといった考え方が通用しないという一面を持っているように思われる。その一方で、マクロには多くの現象がやはり単純な法則やパラメーターで記述されるものとして現れるのも事実である。特別な問題を除いてそのからくりはほとんど理解されていないのが現状であるが、今後、ミクロ構造の制御の問題と絡んで理解が進むものと期待される。

本稿の執筆をお勧め頂きました大阪大学 平田好則 助教授にお礼申し上げます。また、本稿に関連する事項についてご議論いただいた、大阪大学 北川浩 教授、Brown 大学 A. Needleman 教授、京都大学 北村隆行 教授ならびに、大阪府立大学 中谷敬子 博士、金沢大学 下川智嗣 博士、九州工業大学 松本龍介 博士に謝意を表します。

参 考 文 献

- 1) 北村隆行, 梅野宜崇, 辻 長知, 中谷彰宏: 原子構造体の不安定変形モード解析, 日本機械学会論文集 A 編, 69-681 (2003), 945-951.
- 2) 中谷彰宏: 分子動力学法による塑性変形のシミュレーション, 材料, 48-11 (1999), 1328-1334.
- 3) 中谷彰宏: 分子動力学法の最前線-固体系ミクロシミュレーションとその周辺-, 日本機械学会講演資料集 (2001 年度年次大会先端技術フォーラム, 計算力学の最前線/胎動), VII (2001), 57-58.
- 4) 中谷彰宏: 原子レベルシミュレーションによる疲労研究動向, 日本機械学会講演論文集, No. 034-1 (3) (2003), 1-6.
- 5) D. M. Beazley, P. S. Lomdahl, N. Grønbech-Jensen, R. Giles and P. Tamayo: World Scientific's Annual Reviews in Computational Physics, 3 (1995), 119-175.
- 6) G. E. Moore: Cramming More Components onto Integrated Circuits, Electronics, 38-8 (1965), 114-117.
- 7) 能勢修一: 分子動力学シミュレーションの新しい方法論について, 固体物理, 24-3 (1989), 232-240.
- 8) 三上益弘: 分子動力学法による物質科学の現状と展望, 計算工学, 4-4 (1999), 203-207.
- 9) 川添良幸, 相原智康: 第一原理計算からの材料強度評価の可能性, 材料, 47-11 (1998), 1099-1105.
- 10) 澤村明賢, 山本良一: 原子レベルでのクラック進展のコンピュータシミュレーション, 日本金属学会会報, 31, (1992), 19-27.
- 11) 中谷彰宏: 金属結晶体の破壊機構の分子動力学法による研究, 大阪大学学位論文, (1993).
- 12) B. Cotterell: The Past, Present, and Future of Fracture Mechanics, Engng. Fract. Mech., 69-5 (2002), 533-553.
- 13) 中谷彰宏: 分子動力学法と連続体力学的手法の結合による材料の力学挙動のマルチスケール解析, 日本ゴム協会誌, 72-11 (1999), 659-665.
- 14) 松本龍介, 中谷彰宏, 北川 浩: アモルファス金属中のき裂開口挙動の解析 (原子モデルと弾粘塑性連続体モデルとの比較), 日本機械学会論文集 A 編, 69-683 (2003), 1074-1081.
- 15) A. Nakatani, W. J. Drugan, E. Van der Giessen and A. Needleman: Crack Tip Fields at a Ductile Single Crystal-Rigid Material Interface, Int. J. Fract., (2003), to be appeared.
- 16) A. Nakatani, A. Needleman and E. Van der Giessen: Multiscale Analysis of Near Tip Fields for a Metal-Ceramic Interface, Adv. Comput. Engng. Sci. (Proc. ICES'02), Eds. S. N. Atluri and D. W. Pepper, Tech Science Press, (2002) (CD-ROM publication).
- 17) V. Bulatov, F. F. Abraham, L. Kubin, B. Devincere and S. Yip: Connecting Atomistic and Mesoscale Simulations of Crystal Plasticity, Nature, 391 (1998), 669-672.
- 18) 菅田 淳, 城野政弘, 中谷彰宏, 植松美彦, 元屋敷靖子: 離散転位動力学法による疲労き裂先端近傍転位運動の負荷速度依存性の検討, 日本機械学会講演論文集, No. 99-16 (1999), 279-280.
- 19) A. Needleman: A continuum model for void nucleation by inclusion debonding, J. Appl. Mech., 54, (1987), 525-531.
- 20) S. X. Mao and M. Z. Li: Effects of Dislocation Shielding on Interface Crack Initiation and Growth in Metal/Ceramics Layered Materials, J. Mech. Phys. Solids, 47 (1999), 2351-2379.
- 21) O. Nguyen and M. Ortiz: Coarse-graining and Renormalization of Atomistic Binding Relations and Universal Macroscopic Cohesive Behavior, J. Mech. Phys. Solids, 50 (2002), 1727-1741.
- 22) 中谷敬子, 北川 浩, 中谷彰宏: 分子動力学法による単元系アモルファス金属の微視的空間構造と内部応力の評価, 日本機械学会論文集 A 編, 62-595 (1996), 847-852.
- 23) 松本龍介, 中谷彰宏, 北川 浩: アモルファス金属の変形誘起ナノ結晶化過程の分子動力学シミュレーション, 材料, 52-3 (2003), 235-240.
- 24) 高坂延良, 中谷敬子, 栢木良典, 杉山吉彦: 超高速衝突破壊の分子動力学シミュレーション, 日経サイエンス, 29-2 (1999), A 13.
- 25) A. J. Piekutowski: Fragmentation of Sphere Initiated by Hypervelocity Impact with a Thin Sheet, J. Impact Engng., 17 (1995), 627-638.
- 26) W. Humphrey, A. Dalke and K. Schulten: VMD-Visual Molecular Dynamics, J. Mol. Graphics, 14 (1996), 33-38. (<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>)
- 27) J. D. Honeycutt and H. C. Andersen: Molecular Dynamics Study of Melting and Freezing of Small Lennard-Jones Clusters, J. Phys. Chem., 91 (1987), 4950-4963.
- 28) T. Shimokawa, A. Nakatani and H. Kitagawa: Deformation and Fracture Mechanism of Round Bar Specimen of Nanocrystalline Materials by Molecular Dynamics Simulation, Proc. WCCM V., (2002), (ISBN 3-9501554-0-6, <http://wccm.tuwien.ac.at>)