

Mg結晶中の双晶核生成の 原子シミュレーション

大阪大学 基礎工学研究科 石井明男、山添恵介、平安山涼、尾方成信

目的 双晶核生成過程の原子構造変化の詳細を調べることで核生成プロセスを原子レベルで明らかにする。

内容 Mg4000原子を含むHCP解析モデル結晶をMEAMポテンシャルで駆動し、300Kおよび2.8GPaの有限温度・有限せん断応力下で分子動力学解析を実施し、核生成過程を観察した。

結果 観察された核生成と、それが成長していく様子を図に示す。生成した核の境界がBP(Basal-Prism)境界、PB(Prism-Basal)境界、双晶境界によって構成されている。また、核の成長（境界の移動）は、一様せん断変形と、原子対の回転（シャッフリング）がカップリングして実現されている。

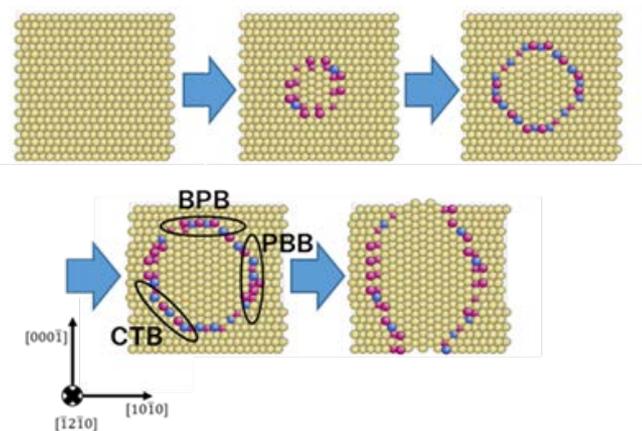


図 変形双晶の核生成過程

利用した計算機

OCTOPUS