

Kinetic Monte Carloモデルを用いた転位運動解析に基づく 固溶体効果の非経験的予測

大阪大学 大学院基礎工学研究科 氏名 新里 秀平

目的 結晶金属材料の塑性変形を律速する転位運動をkinetic Monte Carlo(kMC)法を用いてモデル化し、降伏強度に対する固溶原子の影響を予測する枠組みを構築する。

内容 原子モデリングに基づき転位運動の活性化エネルギーに対する固溶原子の影響を解析し、転位運動のkMCモデルに導入する。kMCシミュレーションにより得られた転位の運動速度とその付加応力、温度、固溶原子濃度依存性から降伏強度を獲得し、固溶体効果の予測を行なった。

結果 得られた降伏強度を図1に示す。予測した降伏強度は経験的に得られているパラメータを用いずに固溶体強化の傾向を再現することを示した。

利用した計算機 OCTOPUS

ノード時間	40時間/run
使用メモリ	1GB
並列化	12並列

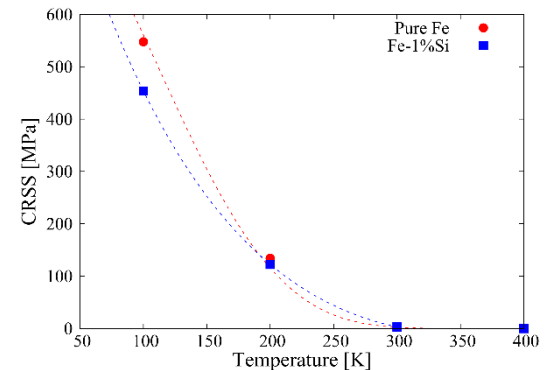


図1. Fe-Si合金の降伏強度予測値