

原子論に基づくMg{10-12}双晶変形の 臨界応力の温度速度依存性評価

大阪大学 基礎工学研究科 氏名 石井明男, 山添恵介, 黒崎亮介

目的 六方最密構造Mgにおける{10-12}双晶変形はMgにおける塑性変形の主な担い手として重要であるがその変形の温度依存性評価は未だ明らかにされていない. 本研究ではその臨界応力の温度依存性評価について原子論に基づいて明らかにする

内容 加速分子動力学法を用いて温度条件を変更してMg{10-12}双晶変形の発生する臨界応力を評価した. その結果を用いてオロワンの式に基づいて温度ごとの臨界応力を予測した.

結果 得られた臨界応力の温度依存性は常温での実験結果と良い一致を示し, さらに低温における臨界応力の温度依存性の変化が顕著であることがわかった.

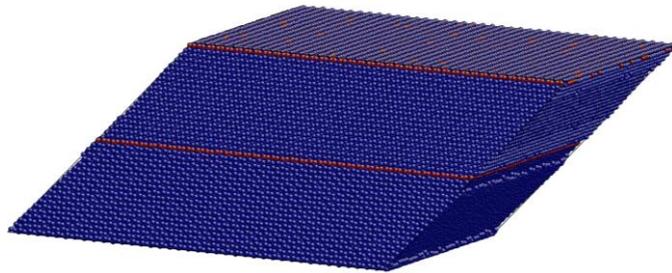


図1.使用したマグネシウム双晶モデル
(原子数32000, 赤色領域は双晶界面)

利用した計算機
ノード時間

Octopus
10000時間

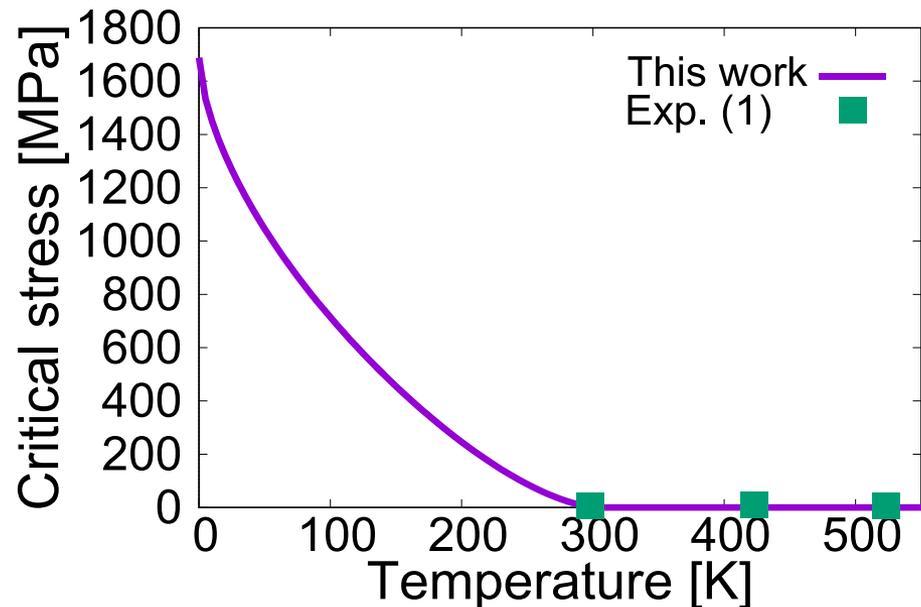


図2. Mg{10-12}双晶変形の臨界応力の温度依存性