MD 法を用いた原子空孔集合体-転位相互作用に及ぼす積層欠陥エネルギーの影響解明

Influence of stacking fault energies on the interaction between a void and dislocation evaluated by MD simulations

*土井原 康平[1]，沖田 泰良[2]，板倉 充洋[3]
[1]東京大学大学院工学系研究科，[2]東京大学人工物工学研究センター，[3]日本原子力研究開発機構

低積層欠陥エネルギー(SFE)金属であるオーステナイト鋼に着目し、照射硬化のミクロ要因である転位-ボイド相互作用に及ぼす SFE の影響を原子レベルで解明した。
キーワード：オーステナイト鋼、機械的特性変化、分子シミュレーション

1. 緒言

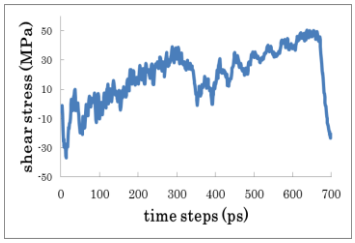
オーステナイト鋼は SFE が最も低い面心立方(FCC)金属の一つであり、SFE が温度に依存するという特徴を持つ[1]。FCC 金属中において転位は二本の部分転位に拡張しており、その拡張幅は SFE に反比例する。拡張した転位は照射下において形成されるボイドによって運動を阻害され、結果として降伏応力が上昇する(照射硬化)。本研究では、FCC 金属を対象とした MD 計算により、転位とボイドの相互作用に及ぼす SFE の影響を原子レベルの挙動から明らかにすることを目的とする。

2. 計算手法

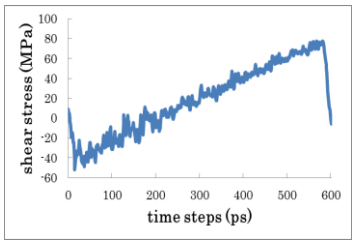
本研究における MD シミュレーションでは MD 計算コードである lammps[2]を用いた。SFE が 14.6~186.5mJ/m^2 と変化する一方、そのほかの物性値はほぼ同一の 6 つの FCC 金属間ポテンシャルを用い、x[1,0,-1] 41 nm, Y[1,-2,1] 40 nm, Z[1,1,1] 25 nm のセルを設定した。初期条件として b=a_0/2(1.0.-1)の刃状転位とボイドを配置し、ひずみを印加することで相互作用を確認した。

3. 結果

MD シミュレーションにおいて二つの相互作用形態が確認された。図 1 にボイド直径 2nm、温度 100K、SFE14.6、186.5mJ/m^2 の応力履歴を示す。図 1(a)は Double Partial Deppinning (DPD)という相互作用形態であり、先行部分転位分離時と後続部分転位分離時に対応して応力のピークが二つ観察され、それぞれの分離に時間差がある。図 1(b)は Single Perfect Deppining (SPD)という相互作用形態であり、転位が局所的に完全転位化し、先行部分転位と後続部分転位がほぼ同時にボイドから分離した。そのために応力のピークは一つだけ観察された。これらの相互作用形態は SFE、ボイド径、温度などによって異なり、ミクロ因子の抵抗強さに対応する臨界せん断応力(CRSS)の SFE 依存性は相互作用形態によって異なった。特に低 SFE においては、DPD の発生確率が高く、CRSS は小さくなる傾向にあった。



(a) 14.6mJ/m^2



(b) 186.5 mJ/m^2

図 1 各 SFE の応力履歴

謝辞：本研究は文部科学省平成 28 年度エネルギー対策特別会計委託事業「高効率 TRU 燃焼を可能とする革新的水冷却炉 RBWR の研究開発」の成果を含む.

参考文献

[1] R. M. Latanision et al , Metallurgical Transactions , volume2(1971)505-509
[2]LAMMPS Molecular Dynamics Simulator < http://lammps.sandia.gov/>

*Kohei Doihara[1], Taira Okita[2] and Mitsuhiro Itakura[3]
[1]School of Engineering, the Univ. of Tokyo, [2]Reserch into Artifacts, Center for Engineering, the Univ. of Tokyo, [3] Japan Atomic Energy Agency