

MD 法による FCC 金属を対象とした刃状転位-Frank loop 相互作用に及ぼす積層欠陥エネルギーの影響

(1) 相互作用形態に及ぼす積層欠陥エネルギーの影響

MD simulations to evaluate the effects of stacking fault energy on the interaction between an edge dislocation and a Frank loop

(1) Effects of stacking fault energy on the interaction morphology

*沖田 泰良¹, 林 祐二郎¹, 早川 頌¹, 板倉 充洋²

¹ 東京大学, ² 日本原子力研究開発機構

抄録: 積層欠陥エネルギー(SFE)のみ異なる FCC 金属原子間ポテンシャルを用いて, 刃状転位と Frank loop 相互作用の MD シミュレーションを行った. SFE は転位拡張幅, Frank loop 安定性への影響を通じて相互作用形態を決定づけることが明らかとなった.

キーワード: 分子動力学法, オーステナイト鋼, 照射欠陥

1. 緒言

軽水炉炉内構造材として使用されるオーステナイト鋼では, 主たる照射下マイクロ組織である Frank loop が転位に吸収されることで局所的塑性変形帯が形成される^[1]. SFE は転位拡張幅, 及び Frank loop の安定性を決定付け, 特にオーステナイト鋼の SFE は温度・組成によって変化するため, 局所的塑性変形帯形成に及ぼす SFE の影響を評価することが求められる. 本研究では, 分子動力学 (MD) 法により刃状転位と Frank loop の相互作用形態を解析し, 局所的塑性変形帯形成に及ぼす SFE の影響を解明することを目的とする.

2. 手法

SFE のみを変えた 4 つの FCC 金属原子間 EAM ポテンシャル (SFE=14.6, 24.8, 44.1, 186.5 mJ/m²) を用い^[2], Lammmps による MD 計算を行った. セルサイズは, X 49.4nm×Y 22.3nm×Z 22.1nm, ひずみ速度一定で変形を加え, 刃状転位 ($b=ad/2[10\cdot1]$) と Frank loop を接触させ, その挙動を観察した. Frank loop は直径 8nm, (-1-11)面, (-111)面, (1-11)面を設定し, 計算温度は 100K で一定, 同条件複数回の計算を行った.

3. 結果・考察

例として, 図 1 に(-1-11)面の Frank loop における相互作用を示す. Frank loop が転位運動を阻害することにより, らせん転位成分が生成し, 交差すべりを起こす. これにより, 転位と Frank loop のコア反応が起き, ループ縁上に D-Shockley 成分が形成する. SFE24.8 mJ/m² の一部及び SFE44.1 mJ/m² 以上の全ての計算で, この D-Shockley により Frank loop 内の積層欠陥が解消され, Frank loop 半分が転位に吸収される反応が観察された. 一方, SFE14.6 mJ/m² では, 転位拡張幅が広いため, コア反応の完了前に前方転位が抜け, 吸収される反応は発生しなかった. このように, 特定の面に於いては, オーステナイト鋼のとり得る SFE 範囲内で相互作用形態が大きく変化し, 温度, 組成によるわずかな SFE の差異によって, 急激に局所的塑性変形帯形成が顕在化する可能性が示唆された.

謝辞: 本研究は文部科学省平成 27 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] N. Hashimoto et al. J. Nucl. Mater. 295-302 (2006) 351.

[2] V. Borovikov, et al., MSMSE 23 (2015) 055003

*Taira Okita¹, Yujiro Hayashi¹, Sho Hayakawa¹ and Mitsuhiro Itakura²

¹Tokyo Univ., ²Japan Atomic Energy Agency.

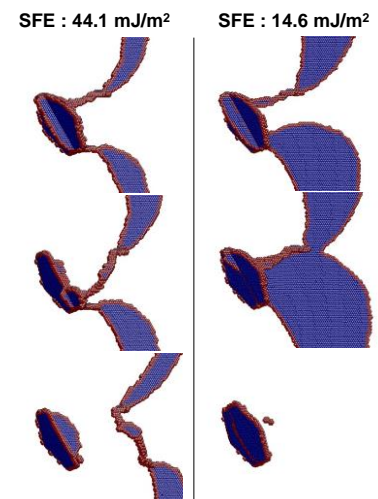


図 1. (-1-11)面 Frank loop の反応