

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

(2) ループサイズによる相互作用形態の変化

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

(2) Change in the interaction morphology with loop size

*林 祐二郎¹, 沖田 泰良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. 5つの過程による Frank loop 除去メカニズムが観察され, これらは, メカニズムによって異なる loop 径・SFE 依存性を持つことが明らかとなった.

キーワード: 分子動力学計算, オーステナイト鋼, 照射欠陥

1. 緒言

被照射材では, Frank loop などの照射下マイクロ組織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]. FCC 金属に於いて, SFE が転位拡張幅, Frank loop の安定性を決定付ける一方, ループ径が障害物としての強さ, バーガースベクトル変化の容易さに影響することから, これらの影響を取り入れた吸収過程の解明が必要となる. 本研究では, 刃状転位と Frank loop の相互作用形態を解析し, loop 除去メカニズムの解明, 及び局所的塑性変形帯形成に及ぼす loop 径・SFE の影響を解明することを目的とする.

2. 手法

SFE のみ異なる 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 ($b=ad/2[10\bar{1}1]$) と Frank loop を接触させ, その挙動を観察した. Frank loop は直径 2-8nm, (-1-11)面, (-111)面, (1-11)面を設定し, 計算温度は 100K とし, 同条件で複数回の計算を行った.

3. 結果・考察

Loop が unfault する場合, 極めて効率的に局所的塑性変形帯を形成する. 刃状転位との接触による loop の unfault として, 5つの過程が存在し, 一部の例外を除き, loop 径が小さいほど, また, SFE が低いほど unfault が起こりやすいことが分かった. 図 1 に, 例外となる(-1-11)面における相互作用形態を示す. 前方に張り出した先行転位が loop を迂回して閉じることが unfault の発生有無を決め, loop 径が 4nm においては Frank loop は unfault により転位に容易に吸収されるが, 2nm 程度に小さくなると, 前方転位は閉じやすくなり, unfault が発生しない. これは小さい loop ほど unfault しやすいという従来の知見とは異なる結果である. この他, 前方転位のみとのコア反応によって loop が unfault を起こす低 SFE 特有の過程も明らかとなった. loop 径は SFE 同様, 相互作用に大きく影響を与えることが明らかとなった.

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

*Yujiro Hayashi¹, Taira Okita¹ and Mitsuhiro Itakura²

¹Tokyo Univ., ²Japan Atomic Energy Agency.

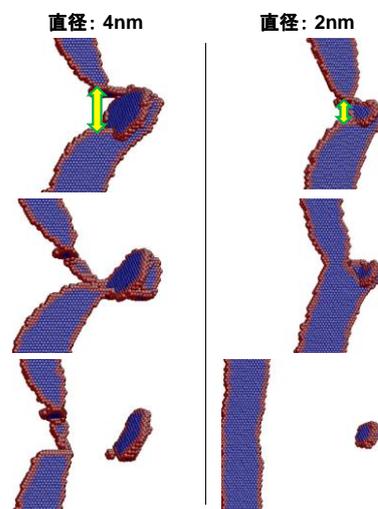


図 1. (-1-11)面ループの径依存性