

# MD法を用いたカスケード損傷下欠陥集合体形成に及ぼす積層欠陥エネルギーの影響 Molecular dynamics simulation to reveal the effect of stacking fault energy on defect cluster formation during collision cascade

\*Yang Yingjuan<sup>1</sup>, 平林潤一<sup>1</sup>, 沖田泰良<sup>2</sup>, 板倉充洋<sup>3</sup>

<sup>1</sup>東京大学大学院工学系研究科,<sup>2</sup>東京大学人工物工学研究センター,

<sup>3</sup>日本原子力研究開発機構システム計算科学センター

カスケード損傷下で形成される欠陥集合体に及ぼす積層欠陥エネルギー (SFE) の影響を解明することを目的とし、複数の原子間ポテンシャルを用いた分子動力学計算を行った。SFE が低い程、可動な格子間原子型集合体の密度、積層欠陥を含む空孔集合体の密度が上昇することが明らかとなった。

キーワード: 分子動力学法, カスケード損傷, 積層欠陥エネルギー, 格子間原子集合体, 空孔集合体

## 1. 緒言

本研究では、積層欠陥エネルギー (SFE) が最も低い FCC 金属の一つであるオーステナイト鋼の照射欠陥形成過程に於ける特徴を明らかにするため、SFE のみ異なる複数の原子間ポテンシャル<sup>[1]</sup>を用いた分子動力学 (MD) 法により、照射欠陥数、欠陥集合体の形態に及ぼす SFE の影響を解明した。

## 2. 計算手法

本研究で用いた原子間ポテンシャルは、SFE が 14.6~186.5 mJ/m<sup>2</sup> と異なる一方、その他の物性値は極力一定に保たれている 6 つの FCC 金属原子間ポテンシャル<sup>[1]</sup>である。PKA エネルギー ( $E_{PKA}$ ) 1~50 keV、初期温度 100K とし、各条件で 20~40 回の繰り返し計算を行い、残存欠陥数、欠陥集合体数とそのサイズ、欠陥集合体の形態に及ぼす SFE の影響を解析した。

## 3. 結果・考察

図 1 には  $E_{PKA} = 50\text{keV}$  で形成した格子間原子集合体の形態に関する SFE 依存性を示す。低 SFE では、Frank ループと共に、完全転位ループの形成確率も上昇することが明らかとなった。これは、10SIA からなる比較的小さな完全転位ループに於いても、縁部が拡張することにより、その形成エネルギーが低 SFE で小さくなるためである。また、空孔集合体に於いても、30 個以上空孔を含む比較的大きな集合体が形成する  $E_{PKA} = 50\text{keV}$  で、積層欠陥四面体・Frank ループが形成し、低 SFE でより多く観察された。

SFE は、欠陥残存数、欠陥集合体数とそのサイズ等には、ほぼ影響を及ぼさない。しかし、低 SFE で可動な格子間原子集合体・積層欠陥を内包する空孔集合体の形成数が大きくなることが明らかとなった。

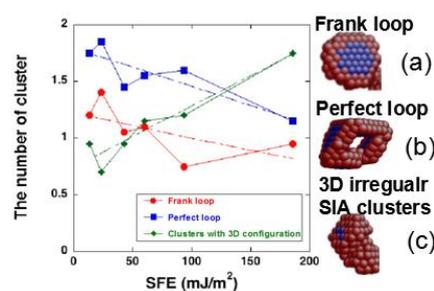


図 1 格子間原子集合体形態の SFE 依存性 ( $E_{PKA} = 50\text{keV}$ )

## 参考文献

[1] V. Borovikov et al., Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 23 (2015) p.16.

\*Yingjuan Yang<sup>1</sup>, Junichi Hirabayashi<sup>1</sup>, Taira Okita<sup>2</sup>, Mitsuhiro Itakura<sup>3</sup>

<sup>1</sup>School of Engineering, the University of Tokyo, <sup>2</sup>Research into Artifacts, Center for Engineering, the University of Tokyo, <sup>3</sup>Center for Computational Science & e- Systems, Japan Atomic Energy Agency