

BCC 鉄における格子間原子集合体の刃状転位への保存的上昇運動のモデル化

Conservative climb motion for a cluster of self-interstitial atoms

toward an edge dislocation in BCC-Fe

*早川 頌¹, 沖田 泰良², 板倉 充洋³, 愛知 正温²

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システム計算科学センター

BCC-Fe における格子間原子集合体の刃状転位への保存的上昇運動に関して、機構論的モンテカルロ法を用いたモデル化を行った。保存的上昇運動速度は、従来の解析的結果よりも強い集合体サイズ依存性を示すことが明らかとなった。

キーワード：保存的上昇運動、機構論的モンテカルロ法、格子間原子集合体

1. 緒言

カスケード損傷で形成する自己格子間原子(SIA: Self-Interstitial Atom)集合体は、転位とのひずみ場相互作用により、転位近傍に集積する[1]。これら SIA 集合体が転位へ吸収される過程に於いては、一次元すべり運動の他に保存的上昇運動が主要メカニズムとして挙げられる[2]。本研究では、BCC-Fe を対象とし、SIA 集合体の保存的上昇運動による刃状転位への吸収過程をモデル化することを目的とする。

2. 計算方法

SIA 集合体縁部に存在する欠陥のパイプ拡散は、転位とのひずみ場相互作用により、優先的な拡散方向、優先度合いが決まる。縁部欠陥が転位側に集積し SIA 集合体重心が変化した場合、保存的上昇運動が発生したと見なす。この過程に必要なパラメータ(欠陥形成エネルギー、パイプ拡散係数、相互作用エネルギー)は分子動力学法により算出し、機構論的モンテカルロの入力パラメータとして、SIA 集合体の保存的上昇運動をモデル化した。

3. 結果・考察

図 1 は上昇運動速度に対する転位からの距離依存性を示す。転位近傍において急激な上昇運動速度の増加が見られる。この速度は、転位からの距離の逆 2 乗に比例しており、アインシュタインの関係式から得られる結果と一致している。また図 2 は上昇運動速度の SIA 集合体サイズ依存性を示す。上昇運動速度は SIA 集合体直径の -8 乗に比例することが明らかとなった。この結果は、従来の解析的モデルよりも強い径依存性である[3]。これは、パイプ拡散する SIA と空孔が再結合から逃れ上昇運動に寄与する確率が、集合体サイズと共に急激に減少することに起因する。

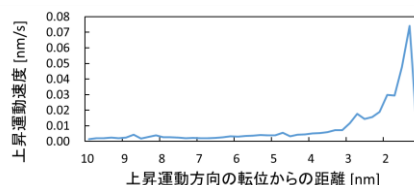


図 1 上昇運動速度の転位からの距離依存性

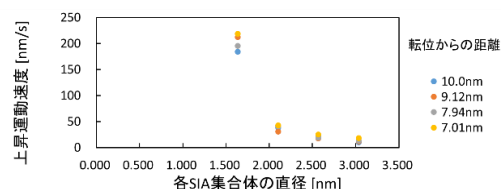


図 2 上昇運動速度の SIA 集合体サイズ依存性

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] B.N. Singh, N.M. Ghoniem, H. Trinkaus, *Journal of Nuclear Materials*, 307-311(2002)159-170.
 [2] D.A. Terentyev, L. Malerba, M. Hou, *Physical Review B*, 75(2007)104-108.
 [3] H. Trinkaus, B.N. Singh, A.J.E. Foreman, *Journal of Nuclear Materials*, 251(1997)172-187.

*Sho Hayakawa¹, Taira Okita², Mitsuhiro Itakura³ and Masaatsu Aichi²

¹School of Engineering, the Univ. of Tokyo, ²Research into Artifacts, Center for Engineering, the Univ. of Tokyo, ³Center for Computational Science & e- Systems, Japan Atomic Energy Agency