

MD 法による中性子照射下結晶欠陥形成過程に及ぼす材料物性の影響 (4) -ひずみ負荷の影響-

MD simulations to evaluate effects of stacking fault energies on defect formation process in crystalline materials under neutron irradiation (4) -Influence of stress and strain-

*川満 昭英¹, 沖田 泰良², 早川 頌¹, 板倉 充洋³

¹ 東京大学工学系研究科, 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

面心立方金属を対象として, 中性子照射下での結晶欠陥形成におけるひずみ負荷の影響を分子動力学法により定量化した. 引張ひずみ負荷により, 特に格子間原子集合体の形成が影響を受けることが明らかとなった.

キーワード: カスケード損傷, 積層欠陥エネルギー, 分子動力学法, ポアソン変形

1. 緒言

軽水炉炉内構造材料として広く使用されるオーステナイト鋼は, 積層欠陥エネルギー (SFE) が最も低い面心立方 (FCC) 金属の一つである. また, 応力負荷環境下においては欠陥形成が応力の影響を受けることが知られている^[1]. 本研究では, 中性子照射および応力負荷複合環境下でのオーステナイト鋼の結晶欠陥形成過程における特徴を解明するため, SFE のみ異なる複数の原子間ポテンシャル^[2]を用い, かつ引張ひずみを負荷した MD 計算により照射欠陥数, 欠陥集合体の形態に及ぼす SFE およびひずみ負荷の影響を解析した.

2. 計算手法

本研究では, MD 計算コードである Lammmps^[3]を用いて MD 計算を行った. SFE が 14.6 ~ 186.5 mJ/m² と異なりその他の物性値はほぼ一定に保たれている 6 つの FCC 金属原子間ポテンシャルを用い, 計算セルとして軸方向 $x[1,1,0]$, $y[1,-1,1]$, $z[1,-1,-2]$ のセルを設定した. そして, 計算セルに 0.1 ~ 1% のひずみを印加し, 中心原子にエネルギーを与えることにより中性子照射を模擬した 100ps までの計算を各条件で 20 ~ 25 回繰り返し行うことにより, 欠陥形成数, 及び欠陥集合体の形態に及ぼすひずみ負荷および SFE の影響を明らかにした.

3. 結果

Cu を対象材料とし, 一次はじき出しエネルギー (E_{PKA}) が 30keV での計算における欠陥集合体サイズ分布を図 1 に示す. なお, 縦軸には単軸引張ひずみ 1% を印加した場合の結果とひずみを与えない場合の結果の比を用いた. ひずみの印加により格子間原子集合体および空孔集合体の総数はともに増加するが, 特に格子間原子集合体はひずみの影響を強く受け, 大きいサイズの集合体の形成が促進される一方で, 空孔集合体は格子間原子集合体に比べると形成個数の増加は緩やかであった. これは引張ひずみにより格子間原子が周囲の格子を押し開けて集合体を形成するのに必要なエネルギーを軽減させたことで格子間原子集合体の安定性が増したためと考えられる.

参考文献

- [1] S. Miyashiro, S. Fujita, and T. Okita. Journal of Nuclear Materials 415.1 (2011) 1-4.
[2] V. Borovikov, M.I. Mendeleev, A.H. King, and R. Lesar, MSMSE 23 (2015) 055003
[3] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator <http://lammps.sandia.gov/>

*Akihide Kawamitsu¹, Taira Okita², Sho Hayawaka¹ and Mitsuhiro Itakura³

¹ School of Engineering, the University of Tokyo, ² Research into Artifacts, Center of Engineering, the University of Tokyo, ³ Japan Atomic Energy Agency

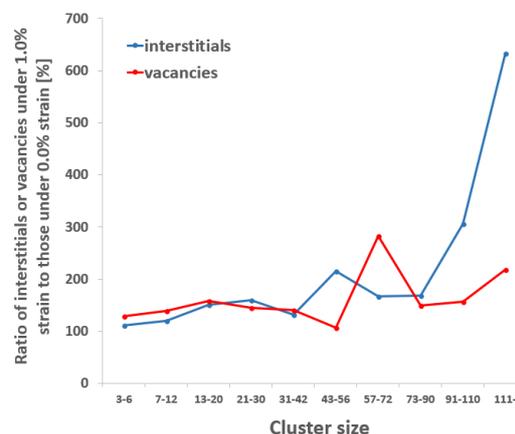


図 1 欠陥集合体サイズ分布