3H08 2018年秋の大会

MD 法を用いた原子空孔集合体-転位相互作用に及ぼす積層欠陥 エネルギーの影響解明 (4)

Influence of stacking fault energies on the interaction between a void and dislocation evaluated by MD simulations (4)

土井原 康平1, *沖田 泰良2, 板倉 充洋3

¹東大・工, ²東大・人工物工学研究センター, ³日本原子力研究開発機構

低積層欠陥エネルギー(SFE)金属であるオーステナイト鋼に着目し、照射硬化のミクロ要因としてボイドとらせん転位の相互作用に及ぼすSFEの影響を原子レベルで解明した。交差すべりの発生有無、及びその発生回数が相互作用を決定づける因子であることが明らかとなった。

キーワード: オーステナイト鋼, 分子シミュレーション, 機械的特性変化, らせん転位, ボイド

1. 緒言

照射下微細組織の中で,原子空孔集合体(ボイド)は照射硬化に及ぼす影響が大きいため,そのミクロ要因である転位との相互作用を精緻に解析することが求められる.特に,らせん転位は交差すべりによりすべり面が変化し,これに伴い複雑な挙動を示す可能性がある.交差すべりは原子レベルの挙動であり,その発生頻度は積層欠陥エネルギー(SFE)に強く依存する.そのため,低 SFE であるオーステナイト鋼では,原子レベルの挙動に基づいてボイド形成による硬化を予測する必要がある.本研究では,ボイド径,SFE を変化させた MD 計算によりボイド-らせん転位相互作用の解明,及び硬化を定量化することを目的とする.

2. 計算方法

MD 計算では、LAMMPS を用いた[1]. SFE が $14.6-186.5 \, \mathrm{mJ/m^2}$ と変化する一方、その他の物性値はほぼ等しい 6 つの FCC 金属原子間ポテンシャル[2]のうち 4 つをを用い、x [10-1] 30.9 nm、y [1-21] $49.6 \, \mathrm{nm}$ 、z [111] 25.0 nm、x 軸 y 軸方向周期境界、z 軸方向自由境界の計算セルを設定した。初期条件として $b = a_0/2$ [10-1] のらせん転位、及び重心が転位のすべり面上に存在するようにボイドを配置した。温度 $100 \, \mathrm{K}$ 、ボイド直径 $2.0-6.0 \, \mathrm{nm}$ と変化させた計算を各条件 $10 \, \mathrm{D}$ 行い、応力履歴から臨界分解せん断応力 (CRSS) を算出した。

3. 結果と考察

図 1, 図 2 に、ボイド直径 2.0nm における相互作用形態の SFE による相違を示す。低 SFE では、ボイドとの接触によりらせん転位は交差すべりを起こし、転位全体が主すべり面から(図 1(a))から第二すべり面(図 1(b))に変化する。ひずみを増すと、転位全体が再び主すべり面に戻り(図 1(c))、ボイドと分離する。一方、

高 SFE では、交差すべりが容易に発生するため、転位全体のすべり面が変化する前に、新たなすべり面の変化が起こる(図 2(a)). ひずみを増すと、異なるすべり面の境界で結晶欠陥を形成しボイドから分離する(図 2(b)). この場合、極めて高い硬化が観察された. 相互作用形態及びボイドによる硬化を決定づける因子は、交差すべりの発生頻度であることが明らかとなった.

参考文献

- [1] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator < http://lammps.sandia.gov/>
- [2] V. Borovikov et al., Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 23 (2015) 055003.

Kohei Doihara¹, *Taira Okita² and Mitsuhiro Itakura³

¹School of Engineering, University of Tokyo, ²Research into Artifacts, Center for Engineering, University of Tokyo, ³JAEA-CCSE

