

分子動力学法を用いた FCC 金属におけるボイド-転位相互作用の定量化

MD simulations to quantify the interaction between a void and dislocation in FCC metals

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

分子動力学法を用いて, FCC 金属における刃状転位-ボイド相互作用過程を定量化した. 部分転位がボイドから分離する過程を取り入れることで, 弾性論を用いた硬化モデルが適用できることを明らかにした.

キーワード: オーステナイト鋼, 分子動力学, 刃状転位, 照射硬化, ボイド

1. 緒言

照射下微細組織のうち, ボイドは照射硬化に及ぼす影響が大きいと見做され, そのマイクロ要因解明を目的とした実験・計算的検討が, 従来から行われてきた. しかし, FCC 金属に於いては, 分子動力学 (MD) で算出される硬化と弾性論を用いた予測 (BKS モデル)^[1]に大きな相違が生じることが課題であった^[2]. 特にオーステナイト鋼では, 積層欠陥エネルギー (SFE) が低く転位は 2 本の部分転位に広く拡張している上, 低照射量からボイドが頻りに観察されるため, 原子レベルの挙動に基づいてボイド形成に伴う硬化を定量化する手法の構築が求められる. 本研究では, ボイド径, SFE, 温度を変化させたボイド-刃状転位相互作用過程を MD 法によって解析し, ボイド形成に伴う硬化を弾性論で記述する手法の確立を目的とする.

2. 計算方法

本研究の MD 計算では, LAMMPS を用いた^[3]. SFE が 14.6 – 186.5 mJ/m² 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^[4]を用い, x [10-1] 44.1 or 77.1 nm, y [1-21] 40.1 nm, z [111] 25.2 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 $b = a_0/2 [10-1]$ の刃状転位, 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 – 700 K, ボイド直径 2.0 – 8.0 nm と変化させた計算を行い, その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 に, ボイド直径 4.0 nm における CRSS の SFE 依存性を示す. オーステナイト鋼に相当する低 SFE では, 拡張幅が広いと見做され部分転位が時間差を伴ってボイドから分離する (図 2 (a)). この場合の CRSS は, BKS モデルで 1 本の部分転位を b としたモデル (図 1 (i)) と極めて良い一致を示す. 一方, 高 SFE では, 2 本の部分転位が同程度湾曲しほぼ同時にボイドから分離する (図 2 (b)). この場合の CRSS は, 2 本の部分転位を b としたモデル (図 1 (iii)) と一致する. 従来は, 完全転位を用いた検討のみ (図 1 (ii)) が行われてきたが, MD 法で求まる部分転位の挙動を取り入れることで, ボイド形成に伴う硬化を弾性論で予測可能であることが明らかとなった.

参考文献

- [1] D.J. Bacon et al., Philos. Mag. 28 (1973) 1241.
- [2] Y.N. Osetsky et al., Philos. Mag. 90 (2010) 945.
- [3] V. Borovikov et al., Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 23 (2015) 055003.
- [4] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator <<http://lammps.sandia.gov/>>

Kohei Doihara¹, *Taira Okita² and Mitsuhiro Itakura³

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

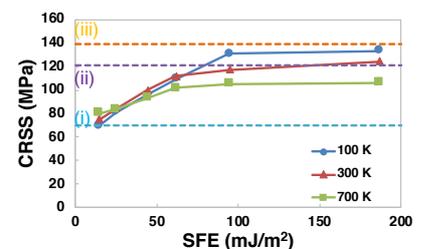


図 1: CRSS の SFE 依存性

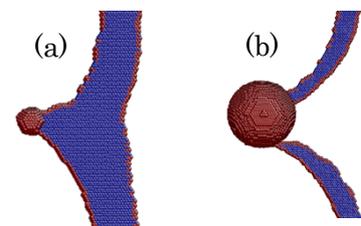


図 2: ボイドから分離時における転位の湾曲, (a)低 SFE, (b)高 SFE