

## 面心立方金属における原子空孔集合体形成過程の照射劣化に及ぼす影響

The effect of vacancy cluster formation on irradiation degradation in face-centered cubic metals.

\*二宮 孝太<sup>1</sup>, 早川 頌<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> 日本原子力開発機構システム計算科学センター

面心立方金属を対象として、原子空孔集合体の安定形態、らせん転位との直接接触に伴う硬化に及ぼす積層欠陥エネルギー (SFE) の影響を分子動力学法により解明した。ボイドを対象とした場合、転位の自己エネルギーを取り入れることで、SFE の影響を解析解に取り入れることが可能であることがわかった。

**キーワード**：オーステナイト鋼、分子動力学法、積層欠陥四面体、ボイド

### 1. 緒言

照射に伴う機械的特性変化は、主として照射欠陥と転位の相互作用に起因する。面心立方金属に於いては、照射欠陥集合体の安定形態と転位の拡張幅、双方が積層欠陥エネルギー (SFE) によって異なるため、SFE が機械的特性変化を決定づける材料物性と考えられる。本研究では、特に原子空孔集合体とらせん転位の相互作用に着目して、分子動力学 (MD) 法を用いて、集合体の安定形態、硬化に及ぼす SFE の影響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<sup>[1]</sup>。SFE が 14.6 - 186.5 mJ/m<sup>2</sup> 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<sup>[2]</sup>のうち 4 つを用い、x [10-1] 30.9 nm, y [1-21] 49.6 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  $\mathbf{b} = a_0/2 [10-1]$  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原子空孔集合体を配置した。温度と集合体サイズを系統的に変化させた計算を各条件 10 回行い、集合体の安定形態、及びらせん転位との直接接触に伴う臨界分解せん断応力 (CRSS) を算出した。

### 3. 結論

図 1 には、100K でボイドを配置した場合における CRSS のボイドサイズ依存性を示す。ボイドサイズ、SFE の増加とともに硬化は大きくなることがわかる。図 1 の点線は、Cu に相当する SFE=44.1 mJ/m<sup>2</sup> に於いて弾性論で予測される<sup>[3]</sup>CRSS である。解析解と MD 結果は良い一致を示し、さらに転位の自己エネルギーにより SFE の影響を解析解に取り入れることが可能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.

[3] D.J. Bacon et al., Philos. Mag. 28 (1973) 1241.

\*Kota Ninomiya<sup>1</sup>, Sho Hayakawa<sup>1</sup>, Taira Okita<sup>2</sup> and Mitsuhiro Itakura<sup>3</sup>

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

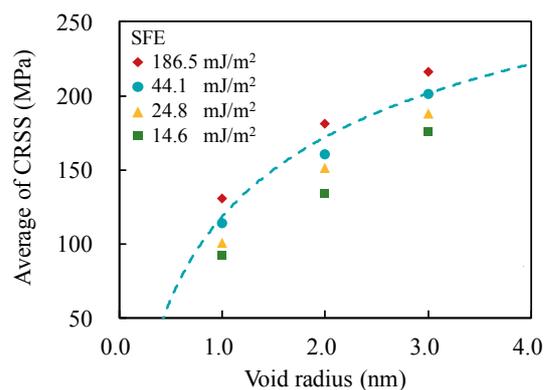


図 1 CRSS のボイドサイズ依存性