

分子動力学法を用いた面心立方金属における析出硬化ナノメカニズム解明に関する研究

Molecular dynamics studies to evaluate the nano-mechanism responsible for precipitation hardening in FCC systems

*津川 聖人¹, 岩瀬 祐樹¹, 沖田 泰良¹, 早川 頌², 板倉 充洋³,

¹東大,²テネシー大学,³JAEA

分子動力学法を用いて、面心立方金属中に形成したナノスケールの析出物と刃状転位の相互作用、及びそれに伴う硬化を定量化した。

キーワード：照射硬化，オーステナイト鋼，転位

1. 緒言

オーステナイト鋼は、軽水炉炉内構造材料として使用されており、中性子照射下では γ' 相、G 相等の析出物が観察される^[1]。これに伴い、局所的な化学組成が変化するだけでなく、転位の運動を阻害し降伏応力が上昇する。本研究では、析出物形成に伴う硬化のナノメカニズムを解明することを目的とし、面心立方 (FCC) 金属を対象とした分子動力学 (MD) 法により、転位と析出物の相互作用を解明した。

2. 計算方法

本研究では、LAMMPS により MD 計算を行った^[2]。SFE は $14.6\text{--}186.5\text{ mJ/m}^2$ と変化するが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^[3]を用いた。x [10-1] 44.1 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に、 $\mathbf{b} = a_0/2 [10-1]$ の刃状転位、及び重心が転位のすべり面上に存在する球状析出物を設定した。温度 100–500 K, 析出物直径 (d_{ppt}) 2.0–8.0 nm で変化させた計算を行い、相互作用形態を明らかにするとともに、応力履歴から臨界分解せん断応力 (CRSS) を定量化した。

3. 結果

図 1 には、SFE 44.1 mJ/m^2 , 100K, $d_{\text{ppt}} 4.0\text{ nm}$ での応力履歴と転位通過後の析出物を示す。本条件下では、二本の部分転位が局所的に完全化した後に析出物を通過し、それに伴い応力のピークが 1 回のみ観察された。同サイズのボイドと比較して、析出物と転位の相互作用による CRSS は高く、析出物は転位移動の強い障害物として働くことがわかった。転位通過後には析出物周辺に転位ループ (Orowan loop) が形成し、セルのエネルギーが上昇することが明らかとなった。

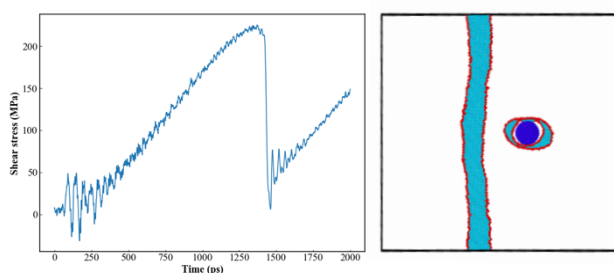


図 1 SFE 44.1 mJ/m^2 , 100K, $d_{\text{ppt}} 4.0\text{ nm}$ における応力履歴 (左図) と転位通過後の析出物 (右図)

参考文献

- [1] P.J. Maziasz, J. Nucl. Mater. 205 (1993) 118.
 [2] S. Plimpton, J. Comput. Phys. 117 (1995) 1.
 [3] V. Borovikov et al., Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 23 (2015) 055003.

*Kiyoto Tsugawa¹, Yuuki Iwase¹, Taira Okita¹, Sho Hayakawa² and Mitsuhiro Itakura³

¹the University of Tokyo, ²University of Tennessee, ³JAEA-CCSE