

Behaviors of Defect Clusters in Irradiated Metals during Deformation

(被照射金属内の欠陥クラスタの応力挙動)

指導教官 関村直人教授 阿部弘亨助教授

楊 運民

1. 導入

ステンレス鋼のような FCC 金属は、核分裂炉の構造材として広く用いられており、更に将来その実現が期待されている核融合炉の構造材として期待される物質である。これらの材料の特徴は中性子をはじめとした放射線照射場におかれるという点であり、この条件下では種々の照射欠陥が材料中に形成されることが知られている。このような照射欠陥は、巨視的には比較的低温で脆くなる、すなわち照射脆化と呼ばれる現象を引き起こし、降伏応力が上昇し加工硬化率が下降する。このとき微視的には転位の運動に起因した塑性変形が狭い領域に限定されるという、転位チャネリング現象が観察されることが多々ある。この現象は材料の均一伸びを阻害するという点で有害であり、チャネリング変形のメカニズムと、これに主たる寄与を及ぼすと予測される照射誘起欠陥の変形挙動は正確に解明されなければならない。しかし、現在の知識では満足する理解が得られてはいない。例えば、フランクループ（積層欠陥を持った転位ループ、 $b=1/3\langle 111 \rangle$ 、 b は Burgers Vector）は転位との交差によって完全転位ループ($b=1/2\langle 110 \rangle$)にアンフォールトし、プリズム面（111 面）においてすべり運動し消滅すると考えられてきた。しかし、プロトン照射されたステンレス鋼のその場 TEM 観察実験により、プリズム面での滑り運動は観察されず、一方フランクループは転位との交差によっても安定であるということが報告されている。この矛盾は、今までの考え方には無い新しい機構の存在を示唆している。注意すべきことは、この分野においては欠陥と転位の相互作用についてのみ関心がもたれており、転位との相互作用を含まない欠陥自身の挙動が常に見落とされてきたということである。もし仮に欠陥での原子配置変化が転位との交差前後で無視できるならば、どの地点においても転位は等しい密度の障害物と交差しなければならず、金属は降伏応力を示さないという間違った結論に至ってしまう。一方で、転位との相互作用を調べる前に、応力付加環境下での欠陥挙動の解析は、手順的に正しいということである。本研究では、まず変形の基礎過程を原子レベルで解明するために、分子動力学 (MD) 手法を用いたシミュレーション手法を開発した。そして照射誘起欠陥（フランクループ、完全転位ループ、SFT）の応力負荷環境下における変形挙動と、可動店との相互作用を解析した。更に模擬計算結果に基づき、転位チャネリングの形成メカニズムを提案する。

2. 手順

ステンレス鋼は原子力工学における実用材料として主要な金属だが、正確な原子間ポテンシャルは与えられていない。一方、銅はステンレスと同じ結晶構造であり、積層欠陥エネルギーが同程度で、正確な原子間ポテンシャルが求められている。以上の理由から、本研究では銅を模擬材料とした。現在提案されている複数のポテンシャルのうち、ローズ状態方程式と FCC-HCP 構造安定性の双方を再現できることから長距離 EAM ポテンシャル (LRFS、Mishin) を用いた。MD 計算は、図 1 に示すように（ここで a_0 は格子定数）のサイズの結晶（原子数約 120,000 個）を構築し、速度スケーリング法を用いて温度 10K にて実行した。低温でシミュレーションは計算コストを減らすため、より長い相互作用の時間刻みを用いることが可能で、また温度揺らぎを制限することによって解析をより簡単にする。leapfrog Verlet アルゴリズムを用いて、時間刻み 5fs で時間積分した。応力負荷は圧縮試験とし、応力方向は図 1 中の軸 2 に平行とし、 δ 面と BC 方向

が最もすべり変形を生じやすいようにとった。ここで、図中のトンプソン記号は結晶面と方向の指数付けを簡単にするために用いた。固定境界条件を軸 2 を法線ベクトルとする表面に適用し、他の表面には自由境界条件を適用した。欠陥と転位は結晶の中心に挿入し、ポテンシャルエネルギーを最小化するために 20,000 ステップの事前緩和を行った。圧縮試験は変異性漁法で実行した。すなわち、ある計算ステップで束縛原子面を一定量 (0.1、0.2%) 変位させ、その後格子を 5,000 ステップの間緩和し、これを総変形量 5 ないし 10% まで変形した。圧縮応力は束縛原子面と変形領域間の相互作用を積分して得た。欠陥の原子配列とその変形挙動は、ポテンシャルエネルギーによるスクリーニングと原子面の積層解析を行うことで可視化した。

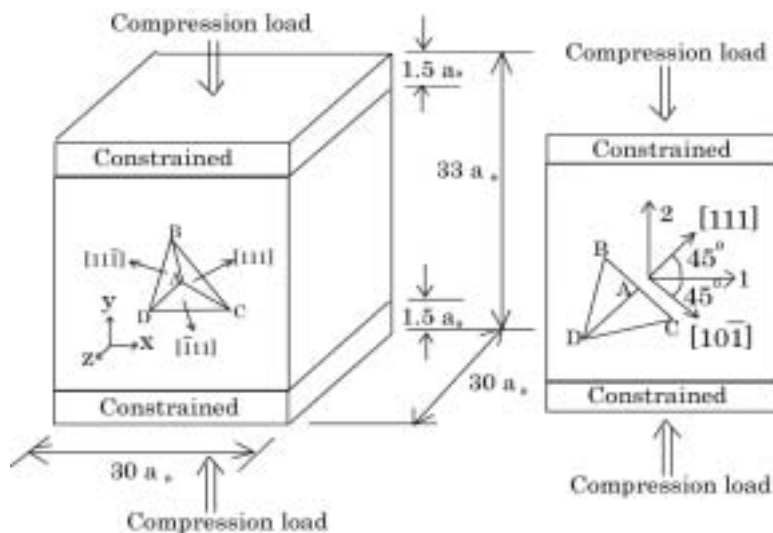


Fig 1. Size and orientation of the simulation model.

3. 照射誘起欠陥の変形挙動

3.1 可動格子間原子クラスター (可動 I クラスター)

格子間原子 (SIA) を 7、37、517 個含む可動 I クラスターの応力下変形挙動を解析し、以下の結果を得た。

- A. 小さい可動 I クラスター (37 個以下の SIA) は通常の完全転位ループとは異なる挙動を示し、古典的な転位論で示される相互作用の方程式を適用できない。
- B. 7 個の SIA を持った小さな I クラスターは弾性限度度の高い応力 (5Gpa) でクラウディオン・バンドル化し 110 方向に一次元運動した。このクラウディオンバンドルの塑性変形への寄与は小さい。
- C. 517 個の SIA を含んだ I クラスターは低応力 (500MPa) でプリズム面すべりが可能で、その高い移動性と大きなサイズのため大きな塑性変形に寄与する。
- D. サイズの大きい六角形の完全ループ (517 個の SIA) はその辺のうちの一対が不動であり、他の偏の運動の弱い障害物となっている。変形によってそれらはループの他の可動成分とともに滑る。その結果、完全ループは引き伸ばされ、一対のらせん転位プリズム面に生成される。
- E. 転位からのスタンドオフ距離 (クラスターが安定でいられる最小距離) は、I クラスターがちょうど 7 個の SIA を含む時には、クラスターのサイズと対応している。クラスターがより大きくなると、クラスターはより安定なり、スタンドオフ距離はゼロに向かって鋭く減少する。
- F. I クラスターのバーガーズベクトルは転位に対するシンク強度を決定する。転位は同じバーガーズベクトルを持ったクラスターと強く相互作用する。
- G. I クラスター (37 個以下の SIA) 同士の相互作用は、サイズと相対位置に依存する。古典的な転位論ではこのような反応を説明することが出来ない。
- H. 転位と結合した後、I クラスター (7 個の SIA) は転位に沿って自由表面へすばやく移動できる。しかし、比較的大きいクラスター (37 個の SIA) は転位の障害物として振る舞い、硬化を誘起する

3.2 格子間原子型フランクループ (I 型フランクループ)

格子間原子を 7、61、187 と 517 個含む I 型フランクグループの変形挙動を解析し、以下の結果を導いた。

- A. 7 個の SIA からなるフランクグループは高い圧力レベル下で<100>方向に沿って可動なクラウディオ・バンドルに変形するが、これは塑性変形に対して主要な寄与を与えるものではない。
- B. 7 個の SIA からなるフランクグループは転位との交差によって容易に可動クラウディオ・バンドルに変形し、転位によって掃去される。
- C. フランクグループのサイズ増加に伴い、転位に対して安定化する。61 個以上の SIA からなるグループでは初期地点にとどまり、転位はグループに若干トラップされた後通過する。187 個以上の SIA からなるグループでは転位との交差によってアンフォールトしない。
- D. グループと転位間の角度はその相互作用過程に影響するそれぞれのバーガーズベクトルが互いに垂直であれば、一つの転位による交差ではグループを二つに分けることが出来ず、グループは転位による交差に対して最も安定である。それ以外の場合には、一つの転位はグループを 2 つにせん断することができ、このような転位との交差を繰り返すことによってグループは小さく分けられる。
- E. 十分な圧力下では、517 以上の SIA からなる大きなグループは転位源となり、グループ自身は変形の間アンフォールトし可動となる。このときの臨界応力はグループサイズの増加とともに減少する。

3.3 空孔欠陥 (V 型欠陥)

V 型欠陥には V 型フランクグループと積層欠陥四面体 (SFT) の 2 種類があり、これらの変形挙動には以下の特徴があった。

- A. V 型フランクグループや SFT は転位との相互作用に対して安定で、分解したり吸収されにくい。
- B. 転位のトラップ効果は V 型フランクグループ、I 型、SFT の順に高くなる。
- C. 比較的大きな V 型フランクグループと SFT は、高応力で転位源となる。

4. チャネリング変形メカニズムの提案

上記の結果とそれが意味するロジックを要約することにより、以下のチャネリング変形メカニズムを導き出した。

(1) 転位源の形成

重照射された FCC 金属は高密度の欠陥によって照射硬化し、応力集中することで不動な欠陥のうち比較的大きなものが転位に変化する、あるいは転位を放出する。これが変形過程における転位の起源となる

(2) 欠陥掃去の機構

大きい欠陥が上記のように転位に遷移し、一方で比較的小きな欠陥は、転位との交差によって掃去される。中程度のサイズの欠陥は、転位への遷移には不十分で、また転位による掃去も難しい。しかし、それらは転位との相互作用によりグループの晶壁面が一原子面ずれ、小さなものに分割される。そして最終的には小さな欠陥と同様に転位によって掃去される。

(3) 変形の局在化

転位の局在化には三つの理由がある。まず、欠陥は十分高い圧力レベル下でのみ転位に遷移することが出来るので、転位は本質的に応力集中点からのみ生成される。次に、生成された転位の運動により小

欠陥の密度は減少し、転位の運動が生じた面近傍では応力が低下する。この応力低下領域には転位源が形成されていることから、変形はその領域で優先的となり、他の領域における転位の生成を抑制する。更に、応力低下領域にある高密度の欠陥によって十分な転位が供給され、転位のチャンネルが形成される。この領域での転位形成が終了すると他の領域において新たに (1) の過程が進行し別の転位チャンネルが形成される。

(4) 本研究で提唱する新しい転位チャネリングの形成機構とその特性について

この研究で提案された転位チャネリングの形成機構とそれに基づく変形メカニズムは、既存の転位論で展開されてきたメカニズムとは明確な違いがある。多くの研究者が、転位源を見つけるためにネットワーク転位のみを考慮してきています。しかし、転位であって、不動欠陥である大きい照射誘起欠陥に、もっと注意を払うべきです。なぜなら、転位チャンネルが存在する高い応力環境がそれらを可動転位に変形させることができるからです。

本研究で提唱するメカニズムは欠陥の密度とサイズ分布の双方の重要性を高めます。照射誘起欠陥の高い密度は、高い応力レベル環境を保障するのに必要です。一方、欠陥のサイズが大きいほどより低い応力下で自己不動-可動変形をすることができます。両方の条件を満足しているなら、チャネリング変形が起こり、転位は単に他の機構から生成された転位の障害物として振舞います。

チャネリング変形内の転位源は枯渇するもので、それらは変形の間供給されることはありません。したがって、チャンネル内の連続した塑性変形は、有用な欠陥によって継続的に供給されるしかありません。もし欠陥がチャンネル内で枯渇したならば、新しいチャンネルが継続した変形を供給するために生成されなければいけません。

5. まとめ

本研究において、FCC 銅の応力下での欠陥挙動機構を分子動力学シミュレーションによって明らかにし、以下の結果を導いた。1) 転位チャンネル内の転位は既存の転位から生成されず、高い応力下で不動から可動へ遷移する照射誘起欠陥によって生成される。2) 大きい欠陥は、比較的低い応力で可動転位になるため、転位チャネリングの源となる。3) 転位チャンネル内の転位の掃去は欠陥のサイズと方位性の2つに依存する。しかし、分子動力学法におけるサイズや境界条件などの制約のために、この結果は定量的なものとはいえない。チャネリングに対する臨界条件を定量的に評価するために、この機構を三次元転位動力学シミュレーションのような連続モデルに組み込む更なる研究が必要である。