

# 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)

氏名 楊 運民

高い損傷量までの照射を受ける構造用材料の変形・破断挙動は、一般的な加工硬化を伴う応力歪み関係とは大きく異なり、塑性歪が局所的に集中するチャネリング変形が現れることが知られるようになってきた。しかし、チャネリング変形をミクロな機構に基づいて明らかにして、長期間にわたる構造健全性確保のための評価手法として活用する試みはほとんどなされてこなかった。

本論文においては、面心立方格子金属材料の応力下における照射誘起欠陥クラスタ挙動を、分子動力学を用いたシミュレーションによって系統的に評価して、照射損傷により硬化した材料のチャネリング変形ミクロ機構を解明することに成功している。特に、1) 転位チャンネル内の転位は既存の転位からの増殖機構が働くのではなく、高い応力下で不動から可動へ遷移する照射誘起欠陥クラスタから生成されうること、2) 大きい欠陥クラスタは、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こと、3) 転位チャンネル内の欠陥クラスタ掃去はクラスタサイズと方位性の双方に依存することを明らかにし、総合的な変形モデルを提案している。

第1章は、照射を受ける構造用材料の変形・破断機構解明の課題をまとめるとともに、照射環境に置かれる材料特性の評価における計算機シミュレーションの有効性を明らかにし、研究の目的を述べている。

第2章は、本研究で用いた長距離 EAM タイプの原子間ポテンシャルの有効性と変形シミュレーションに必要な境界条件について論じるとともに、欠陥導入の手法、変形応力負荷手法、及び欠陥の可視化手法について議論している。

第3章では、可動な格子間原子欠陥集合体の転位との相互作用及び高い応力環境での挙動を論じている。小さい可動格子間原子クラスタは、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様式を適用できないことを明らかにしている。また、この小さなクラスタは弾性限に近い高応力でクラウディオンのバンドルとなって次元運動するが、塑性変形への寄与は小さいことを見いだしている。一方、多数の格子間原子を含むクラスタは、低応力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。また、六角形の完全ループでは、変形によって引き伸ばされ、一対のらせん転位がプリズム面に生成されることを明らかにしている。

第4章では、積層欠陥を持った格子間原子型フランクループの変形挙動を解析し、

小さなフランクループは高い圧力レベルで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ことを明らかにしている。また、小さなフランク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・バンドルに変化し、転位によって掃去されうることを示している。さらに、フランクループのサイズ増加に伴い、転位に対して安定化して、転位との交差によってアンフォールトしなくなることを見いだしている。このように照射された材料の主たる硬化要因であるフランクループは、十分な圧力下では変形中にアンフォールトし可動となって、変形下での転位源を提供しうることを明らかにした。

第5章では、空孔型欠陥クラスタの変形挙動について、シミュレーション結果を検討して、空孔型フランクループや積層欠陥四面体は転位との相互作用に対して安定で、分解吸収されにくいことを見いだしている。また転位のトラップ効果は、空孔型フランクループ、格子間原子型フランクループ、積層欠陥四面体の順に高くなることに加えて、比較的大きな空孔型フランクループと積層欠陥四面体は、高応力で転位源となることを明らかにしている。

第6章では、以上の結果をふまえて、チャネリング変形の機構を転位源の形成、欠陥クラスタの掃去の機構、及び変形の局在化の3つの観点から提示するとともに、様々な実験結果を説明している。

本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、既存の転位論によって展開されてきた機構とは明確な違いがある。即ち、従来の多くの研究では、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たが、本論文では、転位であって不動欠陥である照射誘起欠陥は、転位チャンネルが存在する高い応力環境においては、可動転位に変化することを初めて明らかにした。さらに、欠陥クラスタの密度とサイズ分布の双方が、チャネリング変形に影響し、従来説明できなかったチャネリング変形の温度依存性を説明することにも成功している。

以上を要するに、本研究は照射環境に置かれる構造用材料の局所変形機構を計算機シミュレーションに基づいた独自の手法で明らかにしており、照射材料工学並びにシステム量子工学に寄与するところが多大である。よって、本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。