

令和元年6月25日現在

機関番号：14301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K18260

研究課題名(和文)強度因子の異なる欠陥が混在する組織における材料強度評価モデルの構築

研究課題名(英文) Materials strength evaluation model in the microstructure contains various defects with various strength factor

研究代表者

藪内 聖皓 (Yabuuchi, Kiyohiro)

京都大学・エネルギー理工学研究所・助教

研究者番号：70633460

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：本研究は、強度因子の異なる様々な欠陥が混在する組織中での、硬化量を正しく評価することが可能なモデルを転位動力学法を用いて検討することを目的としている。

転位動力学コードの開発は申請者がこれまでに開発してきた計算コードを元に改良を行い、転位論で見積もられる値を参考に修正等を繰り返した結果、概ね期待される結果を得られる計算コードを開発することができた。開発した計算コードを用いて、複数の欠陥が存在する場合について計算を行ったが、欠陥同士の位置関係や密度によって硬化量は変化するため、強度因子だけで整理することが困難であることが明らかとなった。今回得られた成果を元に更に研究を進めていく必要がある。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究を通して得られる成果は、異なる強度因子をもつ欠陥が混在する組織の硬化量を算出するモデルが科学的根拠に基づいて提案されることである。本成果は照射欠陥に対しての計算モデルだけでなく様々な析出物が混在するような組織に対しても応用可能であり、転位論の発展に寄与する学術的に意義深い研究である。また、原子炉や核融合炉で引き起こされる照射脆化(硬化)について、「これまでの機械試験データの外挿ではなく、組織学に立脚した機構論的理解が必要」という認識の高まりから、国内外で精力的に研究が続けられており、本研究は工学的にも極めて重要な研究といえる。

研究成果の概要(英文)：The objective of this study is to investigate the evaluation model of strength in various defects with various strength factor using dislocation dynamics.

The dislocation dynamics code was developed. The calculation results were compared with the value estimated by the dislocation theory and the code was modified. Finally, expected values were obtained by the developed code. The strength mechanisms were calculated by the developed code, and the hardening depended on the position of defects, the number density, and so on. To organize the data with only strength factor was difficult. Therefore, further investigations are necessary.

研究分野：構造材料

キーワード：転位 転位動力学 材料強度 格子欠陥 転位ループ ボイド 析出物

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

構造材料として使用される材料の重要な特性はやはり塑性変形する(延性がある)ことであり、その塑性変形を担っている重要な因子が転位である。転位は、3次元の結晶中に含まれる一次元状の欠陥で、不純物原子のように実態のある欠陥ではなく、原子配列の局所的な乱れとして特徴づけられる。転位の最も重要な役割は、結晶の塑性変形を担う点にある。外部応力を結晶に加えると、転位が特定の結晶面上をすべり運動することにより、結晶は塑性変形を起こす。材料の使用中に意図せず導入される欠陥が存在する場合、これらの欠陥は転位の運動を妨げることで材料の延性低下(脆化)を引き起こす。その脆化度合いを正確に評価・予測して使用することが、安全上極めて重要である。

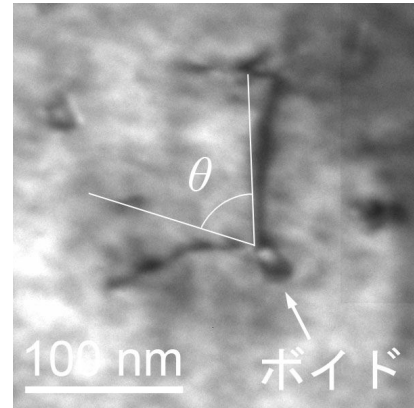


図1 欠陥と転位との相互作用

使用中に欠陥が導入されることで脆化していく環境の代表例として、原子炉や核融合炉などの粒子線照射環境が挙げられる。これらで使用される材料は、中性子などの高エネルギー粒子線照射に曝され、材料中に転位ループ、ポイド(空孔が3次元に集合した欠陥)、照射誘起析出物など、様々な照射欠陥が導入されることで脆化していく。さらに、使用される実用鋼はマルテンサイト鋼や酸化物分散強化鋼など複雑な組織を有している。このように転位に対する様々な障害物が多数混在する中で、照射による脆化を微細組織の観点から評価するためには、各欠陥それぞれの転位に対する強さとそれらが混在する中での転位の運動を正しく理解することが重要である。

材料中に欠陥や粒子が存在すると、図1に示すように転位は移動を妨げられ、張り出した後欠陥を乗り越える。欠陥を乗り越える際の転位の張り出し角  $\theta$  を用いて、欠陥の強さ(強度因子)は  $k = \cos(\theta/2)$  で定義される。申請者はこれまでに、粒子線照射下で形成する様々な欠陥の転位に対する抵抗力について、実験・計算の両面から多くの成果を報告してきた。中でも、長く論争がされてきたポイドについて、強度因子にして0.6から0.8と転位に対する抵抗力が大きいことを示したことは、申請者の最近の特筆すべき成果である。本成果は、透過型電子顕微鏡を用いて転位がポイドに引っかかっているところを直接観察したものであり、信憑性の高いデータとして評価されている。一方、過去に報告されているポイドの強度因子は、引張試験等の結果を分散強化モデルに当てはめることで推定されたものであり、それらは0.1から0.3程度と小さい[S.L. Porollo et al., JNM 1998, M. Ando et al., JNM 2000, 他]。この差異は、分散強化モデルで推定される値の算出には、次に示す仮定が含まれており、その仮定が大きく誤っていることを示唆している。

(ア)各種欠陥による硬化量は分散強化モデル  $\Delta\sigma = M \cdot \mu b(Nd)^{1/2}$  に従う(Mはテイラー因子、 $k$ は強度因子、 $\mu$ は剛性率、 $b$ はバーガースベクトル、 $N$ は欠陥の数密度、 $d$ は欠陥の平均サイズ): この式は強度因子  $k$  の欠陥が3次元に等間隔で配列していると近似した時の硬化量を示しており、粒子線照射下のように異なる強度因子を持つ欠陥が不規則に形成する組織では適切ではない。転位ループ、ポイド、照射誘起析出物などの強度因子はそれぞれ異なる。

(イ)欠陥1, 2, 3...による硬化量  $\Delta\sigma_1, \Delta\sigma_2, \Delta\sigma_3...$  による総硬化量は、 $\Delta\sigma_{total} = \Delta\sigma_1 + \Delta\sigma_2 + \Delta\sigma_3 + \dots$  という線形加算則で表される: 欠陥の強さが著しく異なりかつ密度が非常に小さい場合は良い近似となるが、粒子線照射下で形成する高密度な欠陥組織には明らかに当てはまらない。

上記のような単純な分散強化モデルは、粒子線照射下で形成される組織の硬化量を正しく記述できていない。そこで本研究では、強度因子の異なる様々な照射欠陥が混在する組織中での転位の運動プロセスを明らかにし、硬化量を正しく評価することが可能なモデル(計算式)を構築することを目的とする。

### 2. 研究の目的

転位論は、ミクロな組織とマクロな機械特性を結びつける重要な理論であるが、複雑な組織に対しては、まだまだ体系化されておらず、解決すべき多くの課題を抱えている。本研究はそのような課題の一つに取り組むものである。本研究の目的は、強度因子の異なる様々な照射欠陥が混在する組織中での転位の運動プロセスを明らかにすることで、硬化量を正しく評価することが可能なモデル(計算式)を科学的根拠に基づいて構築することである。本研究期間内では転位動力学法と呼ばれる計算機シミュレーションを用いることで、まずは数値計算の観点から前述の目的を達成する。

### 3. 研究の方法

本研究では、実験では系統的にすすめることが困難な上記の課題に対して、転位動力学法(計算機シミュレーション)を用いることで解決を試みる。計算機シミュレーションでは、欠陥の種類、数密度、サイズ、各欠陥の存在割合などをコントロールすることが容易であるため、実験では困難な系統的な研究を展開することが可能である。転位動力学法とは、個々の転位素片の時間発展を追跡し、評価する手法である。

まず、本研究を効率よく実施するために、申請者がこれまでに開発してきた転位動力学計算コードの改良を行う。転位に対する各欠陥の抵抗力については、これまでに透過型電子顕微鏡観察等によって実験的に求められた値や、分子動力学計算などの計算機シミュレーションで得られた値を、強度因子として用いる。特に、転位ループとポイドは近年の分子動力学シミュレーションの結果から、転位の種類（刃状転位、らせん転位）、すべり面、バーガスベクトルの違い、転位が切る場所によって抵抗力が異なることが示されている。申請者もこれまでにファセットポイドの強度因子について、透過型電子顕微鏡観察及び分子動力学計算によって検討を行ってきた(図2)。実験によって得られたファセットポイドは3種類存在し、それぞれについて、転位との相互作用を計算している。参考までに計算を行った球状のポイドについては、これまでに報告されている結果をサポートする結果が得られた。ファセットポイドは球状のポイドに比べてわずかに強度が高い結果が得られた。特に転位面の下側は上側に比べてわずかに強度が高い結果が得られている。我々の研究成果も含めたこれまでの研究成果を考慮に入れ、適切な計算モデルを検討する。析出物については、任意に強度因子を変えることが可能なモデルとし、各種パラメータを柔軟に設定可能な計算コードを構築する。開発した転位動力学計算コードを用いて、まずは各欠陥が単独で存在する場合について、各種計算パラメータを変えて計算を行う。次に、各欠陥を混在させた組織に対して計算を行う。特に、各種欠陥の存在割合（密度）や析出物の強度因子を変えて系統的に研究を行い、上記の結果も合わせて比較・検討を行うことで、転位の運動プロセスを明らかにするとともに、硬化量を算出する計算モデル（計算式）を構築する。

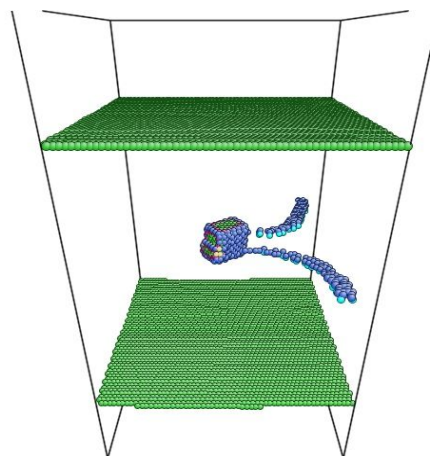


図2 ファセットポイドによる転位のピンニング

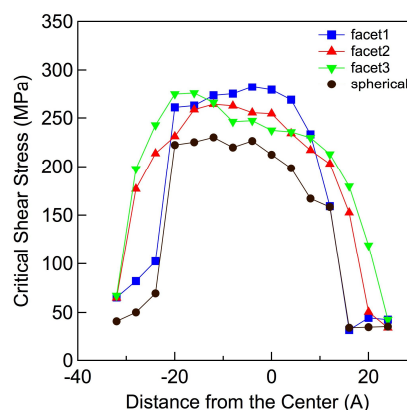


図3 臨界せん断応力のポイド中心からの距離依存性

#### 4. 研究成果

まず、初年度は、転位動力学コードの開発と計算環境の整備を行った。計算コードは申請者がこれまでに開発してきた転位動力学コードをもとに改良を行った。計算機はGPUを備えたワークステーションを導入し、本研究の計算を実行する環境を整えた。

次年度は、初年度に開発した計算コードを用いて、各種欠陥が存在する場合に各種入力パラメータを変えて計算を行った。転位論で見積もられる値を参考にコードの修正等を行い、概ね期待される結果を得られる計算コードを開発することができた。また、正方配列近似で欠陥を配置した場合と不規則に配置した場合の違いについても計算を行い、フリーデル機構として知られている結果とほぼ同等の結果が得られた。

最終年度は、複数の欠陥が存在する場合について計算を行った。欠陥同士の強度因子が大きく異なる場合、強度因子の大きい欠陥が材料の硬化に強く影響する結果が得られた。しかしながら、欠陥同士の位置関係や密度によって硬化量は変化するため、強度因子だけで整理することが困難であることが明らかとなった。また、今回対象とした転位は刃状転位であり、らせん転位による影響をさらに検討に加える必要がある。特にBCC金属の場合、らせん転位の運動が刃状転位よりも支配的であると考えられているため、らせん転位についての検討は重要である。らせん転位の交差すべりやすべり面の検討など、今回得られた結果をもとに更に研究を進めていく必要がある。

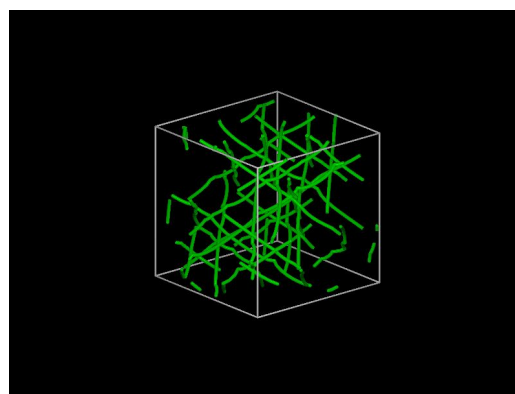


図4 転位同士の切り合い

#### 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 0 件)

〔学会発表〕(計 0 件)

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

〔その他〕

なし

6. 研究組織

なし

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。