

修士論文

分子動力学法による 酸化物分散強化メカニズムの検討： 転位のカッティング抵抗の評価

指導教員：屋代 如月

睦門 賢憲

2011年2月

神戸大学大学院 工学研究科 博士過程前期課程 機械工学専攻

Master thesis

Molecular Dynamics Simulation on
Oxide Dispersion Hardening Mechanism:
Evaluation of Dislocation Cutting Resistance

Takanori MUTSUKADO February 2011

Division of Mechanical Engineering,
Graduate School of Technology
Kobe University, Kobe, Japan

要約

ODS 鋼中の転位挙動解明の一助とすべく、本研究では Fe 中の Y_2O_3 粒子と転位の相互作用を分子動力学シミュレーションにより検討した。ただし、Y および O 原子は陽に区別せずに平均化した「 Y_2O_3 粒子」として扱い、2 体間ポテンシャル関数の形でそのパラメータを第一原理計算により決定している。得られたポテンシャルを用い、まず Y_2O_3 クラスタを整合析出させた bcc-Fe において、刃状転位を析出物に衝突させるシミュレーションを行った。その結果、析出物が 0.6[nm] のときは抵抗を受けることなく通過すること、サイズが 0.9[nm] より大きい場合、析出物に接触すると引き寄せられる挙動を示し、かつ通過する際には大きくピンニングされること、ピンニングされる時間の長さは析出物サイズに比例して大きくなること、などが示された。また、周期方向の析出物間隔を変化させると、析出物間距離が大きいほど転位は大きく湾曲できるために、カッピングを生じるのに要する時間(=与えたせん断ひずみ)が短くなること、転位芯と析出物を結ぶすべり面上のせん断応力分布を調べると、転位芯前後の大きなせん断応力が析出物と合体することで緩和されること、などを明らかにした。次に、らせん転位と析出物の衝突について同様のシミュレーションを行った。その結果、転位芯方向の周期セル長さを刃状転位の場合と同程度 (10[nm]) とすると、らせん転位は析出物前方ですべり面上下方向の運動を生じ、高エネルギーのジョグを残すことや、析出物と母相の界面をすべり面として通過することなどが明らかになった。最後に同じくらせん転位について、上下に等間隔に配置した 2 つの析出物の間を通過させるシミュレーションを、析出物間隔を 0.0 ~ 2.0[nm]、析出物直径を 1.0, 2.0[nm] と変えて行った。その結果、析出物の直径が 1[nm] のときは、隙間が 0 以外の場合いずれも初期に転位が析出物方向に引き寄せられ、その後すぐに析出物位置より 4[nm] 程度はなれた点で一時的に停滞する挙動を示すこと、また、隙間が 0.5[nm] と小さなとき、らせん転位がすべり面を変え、析出物と母相の界面に沿って通過したことなどが示された。一方、析出物の直径を 2.0[nm] とした場合は上記とは逆に転位が動き出す時間は隙間を 0 とした場合が最も早かった。臨界せん断応力に達して転位が動き出すのはこの動き出した時よりももう少し後の時点であることが系のせん断応力変化から示されており、この「フライング」は析出物の引力によるものと推測される。

Summary

For a new insight on the dislocation motion in oxide dispersion strengthened (ODS) ferritic steels, we have performed several molecular dynamics simulations on the interaction between dislocation and Y_2O_3 nano cluster in bcc-Fe. Here, we don't distinguish each Y and O atom but treat as monatomic pseudo atom of " Y_2O_3 particles" and represent their behavior with two body potential form as same as Johnson potential for Fe. The potential parameters are fitted to the real hcp- Y_2O_3 by using the ab-initio DFT calculation, for the equilibrium lattice length and bulk modulus. First, we set an edge dislocation and proceed to bump into Y_2O_3 nanocluster, changing the cluster diameter and periodic distance in the dislocation line direction. When the diameter of the precipitate is 0.6[nm], edge dislocation cut through the precipitate without receiving resistance. When the diameter is larger than 0.9[nm], the precipitate attracts the dislocation line and bends it both in the approaching and penetrating process. This tendency is more clear if we change the periodic distance since the line tension is weakened with larger interval between precipitates. The change in the stress distribution around dislocation core reveals that the core stress is relaxed when the dislocation cross over the precipitate. Then we have performed similar simulation on screw dislocation. Screw dislocation shows vertical motion at about a few nanometer away from the precipitate leaving high-energy atoms (jogs) and passes through the interface between the precipitate and bcc-Fe matrix. Finally, we have also simulated the screw dislocation passing between two precipitates, changing the spacing and diameter of the precipitates. In the case of the diameter of 1.0[nm], the dislocation are attracted first but immediately slows down at the point of 4.0[nm] away from precipitates, expect the precipitate spacing of 0.0[nm] or contacting two cluster. With the small spacing of 0.5[nm] the screw dislocation changes the slip plane and passes the precipitate-matrix interface, as preciously mentioned. In the simulation of 2.0 diameter, it is clear that the dislocation begins to glide before the blunting point in the stress-strain response, and the 0[nm] spacing precipitates attract the dislocation earlier than the other spacing.

目次

1	緒論	1
2	解析手法	4
2.1	分子動力学法	4
2.2	Johnson ポテンシャル	5
2.3	Johnson ポテンシャルフィッティング	5
2.4	速度スケーリング法	8
2.5	高速化手法	8
2.5.1	領域分割による高速化	8
3	刃状転位と析出物の相互作用	11
3.1	シミュレーション条件	11
3.2	シミュレーション結果及び考察	13
3.2.1	カッピング挙動	13
3.2.2	転位の移動量ならびにせん断応力	14
3.2.3	転位通過前後の析出物構造変化	16
3.2.4	析出物間距離の影響	17
3.2.5	刃状転位のせん断応力場	18
3.3	結言	18

4	らせん転位と析出物の相互作用	20
4.1	シミュレーション条件	20
4.2	シミュレーション結果及び考察	22
4.2.1	カッティング挙動	22
4.2.2	転位の移動量ならびにせん断応力	23
4.2.3	交差すべりによる回避挙動	25
4.3	結言	31
5	析出物間を運動するらせん転位挙動	32
5.1	シミュレーション条件	32
5.2	シミュレーション結果及び考察	33
5.2.1	らせん転位挙動	33
5.2.2	析出物サイズおよび析出物間距離の影響	35
5.3	結言	39
6	結論	40
	参考文献	42
A	関連学術講演	44
	謝辞	48

第1章 緒論

原子炉の高燃焼度化は、限られた資源の有効利用や二酸化炭素を排出しない原子力エネルギーの高効率利用に欠かせない技術の一つであり、その最も有効な手段の一つとして、原子炉燃料被覆管材料の改良が進められている。現在の炉心材にはジルコニウム合金やオーステナイト鋼が用いられている。ジルコニウム合金は中性子吸収性に優れているものの高温下での強度に課題があり、より一層の高燃焼度化は難しい。またオーステナイト鋼は加工性や水環境下における耐食性において優れた材料であり、高燃焼度化に向けた研究開発が進められている⁽¹⁾が、高照射領域における照射脆化やスウェリング、照射誘起応力腐食割れなどの問題を抱えている。そこで、酸化イットリウム (Y_2O_3) の分散強化により、高温強度と耐中性子照射性という2つの原子炉材料に重要な性質を向上させた酸化物分散型強化鋼 (ODS 鋼) が原子炉の有力な材料として期待が寄せられている⁽²⁾。すでに、ODS 鋼は組織制御を行うことで、これまで課題であった加工性および延性改善が改善され、さらに高温および放射線環境化において実用に絶えうる十分な強度を持つ状態にあり、高温下の引張試験、クリープ試験の結果や、放射線環境下の安定性などが報告され^(3, 4)、様々な種類の ODS 鋼に対して、特性評価などが行われている⁽⁵⁾。また、Cr, Al 等の添加物を加えることにより腐食に対して非常に強いことも報告されている⁽⁶⁾。上記の重要な特性は転位のすべりに対して、ODS 鋼が酸化物粒子を形成し、抵抗となることで生じていると考えられており、その際に析出物の大きさや、粒子間距離に応じて抵抗の大きさも変化する⁽⁷⁾。

転位と析出物の相互作用というテーマは、分子動力学法 (Molecular dynamics : MD) や離散転位動力学 (Discrete dislocation dynamics : DDD)^(8, 9) シミュレーションなどの計算材料科学の分野で活発に議論されている。DDD は任意の曲線形状を有する転位線を多数の直線セグメントに離散化し、各セグメントと他の転位との相互作用を考えることにより、転位の運動を逐次追跡する手法である。DDD では、厳密には原子構造を

考慮しなければならない転位芯レベルの相互作用 (対消滅, 交差すべり, ジョグ・ジャンクション形成など) を臨界距離や臨界力などのローカルルールを導入することで再現可能にし, 計算負荷を軽減することで, 原子レベルより一階層上のスケールでの多数の転位のふるまいを対象とする. ODS 鋼中における分散粒子をモデル化した試みがすでになされているが⁽¹⁰⁾, DDD は転位論, すなわ連続体力学の枠組の中で定式化されているため, 析出物-母相界面は常に連続かつ滑らかとなる. 個々の原子が無視できないナノサイズの析出物を扱うのに, その仮定がはたして正しいのかどうかは議論の余地がある.

一方, 分子動力学法により, 個々の原子を考えて転位芯と析出物の相互作用を直接議論する試みも盛んになされてきた. やはり, 鉄の脆化の観点から bcc-Fe 中の銅析出物と, 刃状およびらせん転位の相互作用についてシミュレーションがなされ, 析出物サイズに応じて臨界せん断応力も上昇するが, 収束する上限があることが示されている^(11, 12). 対象は違うが, 著者らのグループでも Ni 基単結晶超合金中の立方体析出物と刃状, らせん転位の相互作用を検討している⁽¹³⁾. 転位-析出物ではなく, 酸化イットリウムに関する原子レベルの検討に目を向けると, イットリア安定ジルコニア (YSZ) を対象としたシミュレーション⁽¹⁴⁾ が盛んになされている. また, イオン系の分子動力学では鉄と酸素原子間の電荷の移動を考慮したポテンシャルが提案されているが, Fe, Y, O を同時に一つのポテンシャル関数で表現したものは見あたらない. これは, イオン結合, 共有結合, 金属結合すべてを再現できるポテンシャル関数が現時点では存在しないためである. したがって, Fe, Y, O 間の相互作用を扱うためには現時点では第一原理計算しか残されていないが, 計算量が膨大となり転位と析出物の相互作用はいうまでもなく, ナノサイズの析出物でさえも解析が困難である.

工業的には, 厳密な正確さよりも大まかな傾向をつかむためのツールとしてのシミュレーションに期待がよせられている. そこで本研究では, Y_2O_3 としての性質を大まかには再現しつつ, 鉄中の転位との相互作用をシミュレートするため, Y 及び O を陽に区別せずに平均化した「 Y_2O_3 粒子」として扱い, 2 体間ポテンシャルである Johnson potential⁽¹⁵⁾ で表現する. Y_2O_3 平均原子のポテンシャルは, hcp 構造 (コランダム

構造)としたときの格子長さ, および, 膨張・収縮に対するエネルギー変化 (体積弾性率) を正しく再現できるように, Y, O 原子の電子状態も考慮した第一原理計算によりフィッティングする. Fe 原子については Johnson ポテンシャルが既に提案されているので, 同じポテンシャル関数の枠組みの中で整合析出させた Y_2O_3 粒子に転位を衝突させるシミュレーションを行う.

以下に, 各章の概略を示す.

第 2 章では分子動力学法の基礎理論, 第一原理計算による Johnson ポテンシャルのフィッティング, および領域分割による高速化手法について説明する. 第 3 章では, Y_2O_3 クラスタに刃状転位を衝突させるシミュレーションを行い, その挙動や, すべり面上のせん断応力分布について検討する. 第 4 章では, Y_2O_3 クラスタにらせん転位を衝突させるシミュレーションを行い, 刃状転位とは異なる交差すべりによるメカニズム等を議論する. 第 5 章では, らせん転位が運動するすべり面上下に析出物を対称に配置し, らせん転位が通過する際の挙動を析出物間距離や析出物の大きさを変えて検討する. 第 6 章では本研究で得られた結果を総括する.

第2章 解析手法

2.1 分子動力学法

分子動力学法 (Molecular Dynamics Method ; MD) は, 系を構成する個々の原子についてニュートンの運動方程式

$$m^\alpha \frac{d^2 \mathbf{r}^\alpha}{dt^2} = \mathbf{F}^\alpha \quad (2.1)$$

を作成し, これを数値積分することによって全原子の運動を追跡する手法である. ここで t は時間, \mathbf{r}^α , m^α はそれぞれ原子 α の位置ベクトル及び質量である. 原子 α に作用する力 \mathbf{F}^α は系全体のポテンシャルエネルギー E_{tot} の空間座標についての勾配ベクトルから次式のように求められる.

$$\mathbf{F}^\alpha = -\frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial \mathbf{r}^\alpha} \quad (2.2)$$

式 (2.1) の数値積分には, Verlet の方法が簡便で高精度が得られるため MD 法ではよく用いられる. 時刻 $t \pm \Delta t$ での原子 α の座標 $\mathbf{r}^\alpha(t \pm \Delta t)$ をテーラー展開すると

$$\mathbf{r}^\alpha(t \pm \Delta t) = \mathbf{r}^\alpha(t) \pm \Delta t \frac{d\mathbf{r}^\alpha}{dt} + \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{d^2 \mathbf{r}^\alpha}{dt^2} \pm \frac{(\Delta t)^3}{3!} \frac{d^3 \mathbf{r}^\alpha}{dt^3} + O((\Delta t)^4) \quad (2.3)$$

となる. 両式の和をとり式 (2.1) を代入すると

$$\mathbf{r}^\alpha(t + \Delta t) = 2\mathbf{r}^\alpha(t) - \mathbf{r}^\alpha(t - \Delta t) + (\Delta t)^2 \frac{\mathbf{F}^\alpha(t)}{m} + O((\Delta t)^4) \quad (2.4)$$

を得る. これより, 時刻 $t - \Delta t$ と t における全原子の位置を既知として, 時刻 $t + \Delta t$ における任意の原子 α の位置を求めることができる.

2.2 Johnson ポテンシャル

純鉄のポテンシャル関数として提案された 2 体間ポテンシャルである. 系のポテンシャルエネルギー E_{tot} は原子間の 2 体間相互作用の和として次式のように与えられる.

$$E_{\text{tot}} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta(\neq\alpha)} \left[-C_1(r^{\alpha\beta} - C_2)^3 + C_3r^{\alpha\beta} - C_4 \right] \quad (2.5)$$

ここで, $r^{\alpha\beta}$ は粒子 α, β 間の距離, C_1 から C_4 はポテンシャルパラメータである. ポテンシャルのエネルギー変化を図 2.1 に示す.

2.3 Johnson ポテンシャルフィッティング

Y_2O_3 粒子同士および Fe と Y_2O_3 粒子の相互作用における式 (2.5) のポテンシャルパラメータの決定方法について説明する. まず, 平均化した「 Y_2O_3 粒子」の相互作用パラメータを決めるために, Kresse らにより開発された平面波基底ウルトラソフト擬ポテンシャル法に基づく第一原理バンド計算コード VASP⁽¹⁵⁾(Vienna Ab-initio Simulation Package) による第一原理計算を行う. 第一原理計算における計算条件を表 2.1 に示す. 図 2.2 に示すような hcp の単位格子に Y 及び O 原子を配置したスーパーセルを用い, その格子長さ la の変化に対する全自由エネルギーの変化を求めた (図 2.3 の実線). 得られたエネルギー変化について, 同じスーパーセルに Y と O 粒子の区別なく単一種類の「仮想粒子」を配置し, Johnson potential で C_1 から C_4 を変化させてエネルギー勾配が一致するようパラメータフィッティングを行った. 得られたパラメーターは $C_1=0.523[\text{ev}]$, $C_2=3.09[\text{ev}]$, $C_3=0.194[\text{ev}]$, $C_4=1.56[\text{ev}]$ と決定した (図 2.3 の一点鎖線). 次に Fe と Y_2O_3 粒子のパラメータについて説明する. ペアポテンシャルにおける 2 種原子間の相互作用はそれぞれのエネルギー値の平均であると仮定し, 相加平均により決定している. パラメーターは $C_1=0.703[\text{ev}]$, $C_2=3.06[\text{ev}]$, $C_3=0.323[\text{ev}]$, $C_4=1.57[\text{ev}]$ と決定した.

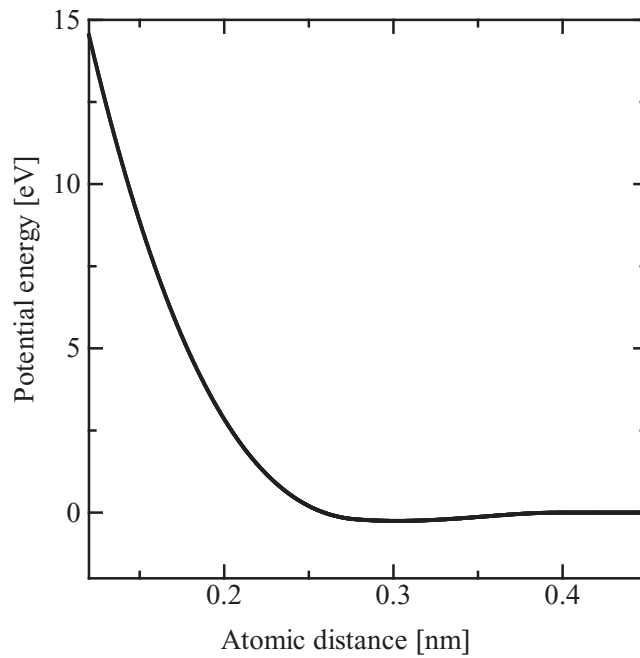


Fig.2.1 Fe energy curve.

Table 2.1 DFT calculation condition.

	Y ₂ O ₃	Fe
Number of ions	2	2
Number of electrons	16	9
Number of bands	12	10
Cutoff energy [eV]	296.9	495.0
Number of k points	15 ³	8 ³

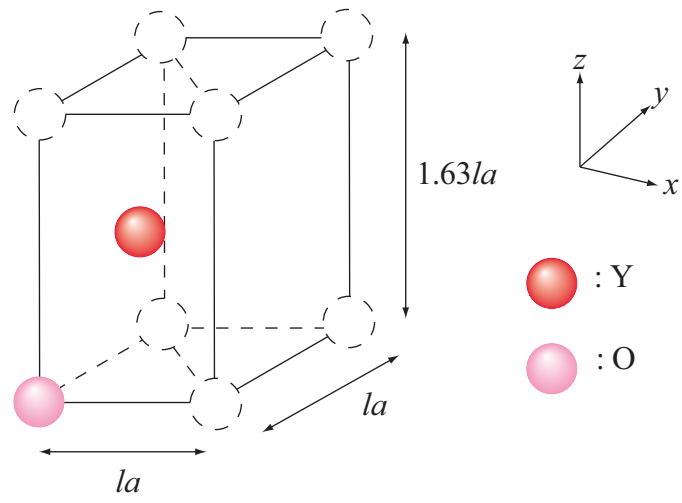


Fig.2.2 hcp unit lattice of Y_2O_3 .

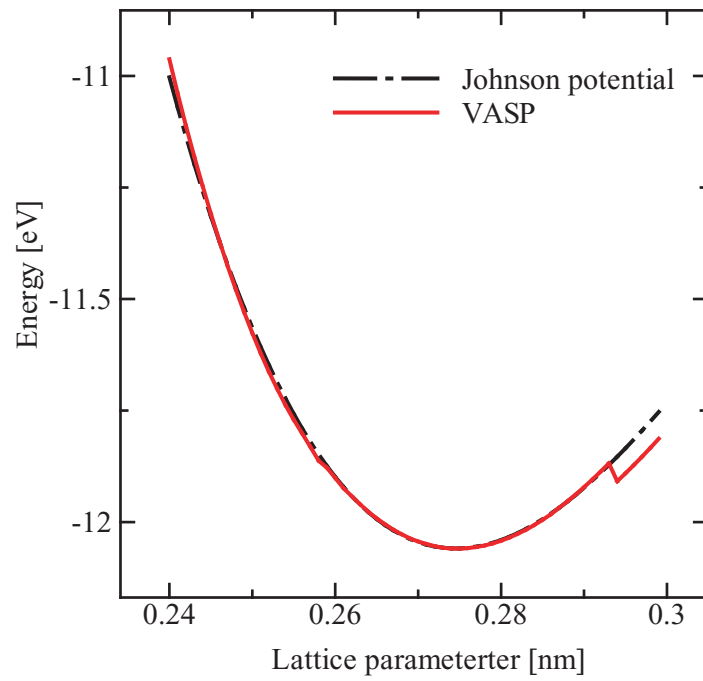


Fig.2.3 Y_2O_3 energy curve.

2.4 速度スケーリング法

分子動力学法で温度制御する場合、もっとも簡単で直接的な方法として速度スケーリング法がよく用いられる。熱統計力学より系の運動エネルギー K は次のように表される。

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N m^{\alpha} \mathbf{v}^{\alpha} \cdot \mathbf{v}^{\alpha} = \frac{3}{2} N k_B T \quad (2.6)$$

ここで、 m^{α} は原子 α の質量、 \mathbf{v}^{α} は原子 α の速度、 N は系の全原子数、 k_B はボルツマン定数、 T は系の温度である。式 (2.6) より、系の温度 T は原子速度を用いて、次のように求められる。

$$T = \frac{\sum m^{\alpha} \mathbf{v}^{\alpha} \cdot \mathbf{v}^{\alpha}}{3Nk_B} \quad (2.7)$$

設定温度が T_C 、式 (2.7) より求めたある時刻の温度が T のとき、速度スケーリング法では、各原子の速度 \mathbf{v}^{α} を $\sqrt{T_C/T}$ 倍し設定温度 T_C に近づける。ベルレ法では、

$$\Delta \mathbf{r}^{\alpha}(t + \Delta t) = \mathbf{r}^{\alpha}(t + \Delta t) - \mathbf{r}^{\alpha}(t) = \mathbf{r}^{\alpha}(t) - \mathbf{r}^{\alpha}(t - \Delta t) + (\Delta t)^2 \frac{\mathbf{F}^{\alpha}(t)}{m} \quad (2.8)$$

を $\sqrt{T_C/T} \Delta \mathbf{r}^{\alpha}(t + \Delta t)$ で置き換えることに相当する。平衡状態では、能勢の方法⁽¹⁶⁾ など外部との熱のやりとりをする変数を考慮した拡張系の分子動力学法によって得られるカノニカルアンサンブルに一致することが示されている。

2.5 高速化手法

2.5.1 領域分割による高速化

式 (2.5) からわかるように、 N 個の原子からなる系では、 E_{tot} の評価に $N \times (N - 1)$ 回の原子対の計算が必要となる。一方、実際の結晶中では近接原子による遮蔽 (screening)

効果により第二近接距離程度より離れた原子はほとんど作用を及ぼさないことが知られている．このため、分子動力学計算では相互作用打ち切り (カットオフ) 半径 r_c を導入し (図 2.4), その半径内の原子からの寄与のみを考慮する．

しかしながら、相互作用する原子対の検索に $N \times (N - 1)$ 回の試行を要するため、系が大きくなるにつれ計算負荷が飛躍的に増加する．これを避けるために r_c よりひとまわり大きい半径 r_{fc} (図 2.4) 内の原子をメモリーに記憶し、 r_{fc} 内での原子対の探索とすることによりオーダー N の計算に近づける方法 (粒子登録法⁽¹⁷⁾) がこれまでよく用いられてきた．しかしながら、粒子登録法では r_{fc} 半径より外の原子が r_c 内に達すると力の評価が適切でなくなるので、一定のステップ毎に登録粒子の更新 ($N \times (N - 1)$ 回の探査) を行わなければならない．このため、系がある程度の規模以上に大きくなると、粒子登録による高速化は登録更新の負荷により打ち消される．

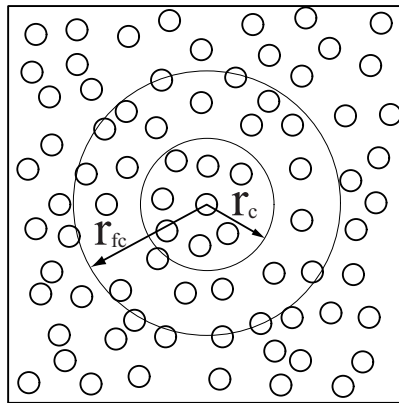


Fig.2.4 Schematic of bookkeeping method.

領域分割法では、まず図 2.5 に模式的に示すようにシミュレートする系をカットオフ距離程度の格子状に分割する。ある原子に作用する力を評価する際には、その原子が属する領域（図 2.5 の着色部）と隣接領域内（図 2.5 の斜線部）の原子からカットオフ距離内の原子を探索する。原子が属する領域は、位置座標を領域ブロックの辺長 b_x, b_y で除した際の整数により判断できるので、領域分割そのものの計算負荷は小さい。領域分割法は、粒子登録法において登録更新の負荷が大きくなるような大規模な系の高速化に適している。

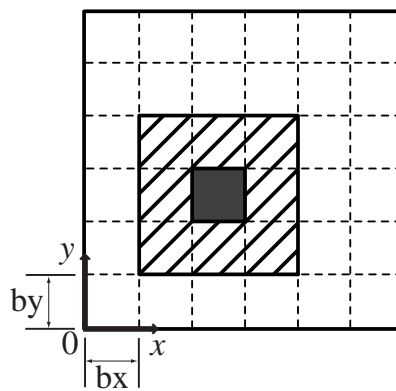


Fig.2.5 Schematic of domain decomposition.

第3章 刃状転位と析出物の相互作用

3.1 シミュレーション条件

x, y, z 軸をそれぞれ $[111]$, $[11\bar{2}]$, $[\bar{1}10]$ として, bcc の Fe 単位格子を $60 \times 16 \times 21$ 並べた直方体セルを解析対象とする. セルの寸法は $14.7 \text{ [nm]} \times 11.2 \text{ [nm]} \times 8.49 \text{ [nm]}$ で原子数は 119,952 である. 図 3.1 に模式的に示すように, セルの前縁から x 方向に 9.60 [nm] , y, z 方向にはそれぞれセル半分の距離の点を中心として, 半径 $d/2$ 以内の Fe 原子を「 Y_2O_3 粒子」に置換し, 整合析出させた Y_2O_3 クラスタースとした. 析出物直径 d は $0.6, 0.9, 1.5, 3.0, 5.0 \text{ [nm]}$ の 5 通りとした.

析出物を有しない系を含めて合計 6 つのシミュレーションセルについて, x 方向のセル前縁から 4.43 [nm] の位置に, y 方向に無限の長さを持つ刃状転位を導入する. 具体的には図 3.2 に示すように, 刃状転位記号の下の 1 原子層を抜き取り (図 3.2(b)), 100000 [fs] の初期緩和計算を行って導入する. なお, すべり面下部の転位導入部周辺では, 転位からの距離に応じて初期に原子をシフトさせている (図 3.2(b)).

初期緩和計算は, x, y 方向に周期境界条件, z 方向は端面法線方向の運動のみ拘束する条件で行い, 垂直方向の応力が零になるようにセル寸法を制御した. 温度は 10 [K] とし, 速度スケール法により制御した.

その後, セル上端面の原子は $[111]$ 方向, 下端面の原子は $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 方向に微小な変位 $1.0 \times 1.0^{-6} \text{ [nm]}$ だけ毎ステップ移動させる条件で zx 方向のせん断シミュレーションを行い, 転位を析出物に接近させた.

なお, 本シミュレーションでは y 方向に対して周期境界を適用しているため, 析出物も周期的に並ぶ構造となる (図 3.3). そこで, 析出物のサイズだけでなく析出物間距離の違いを検討するため, セルの y 方向寸法を $5, 10, 25 \text{ [nm]}$ と変えた系での検討も行った.

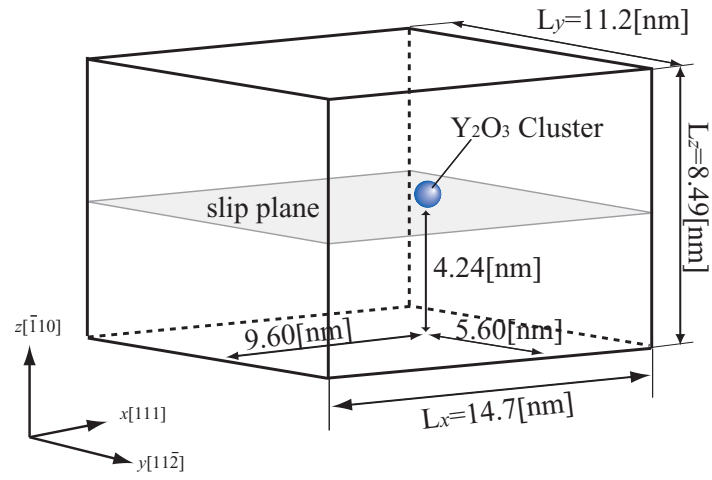


Fig.3.1 Dimensions of simulation cell for edge dislocation.

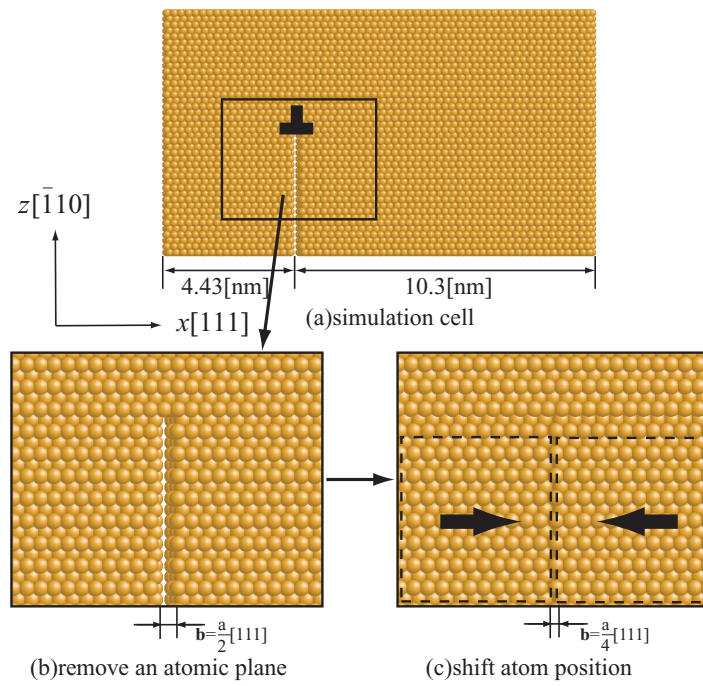


Fig.3.2 Setting of edge dislocation.

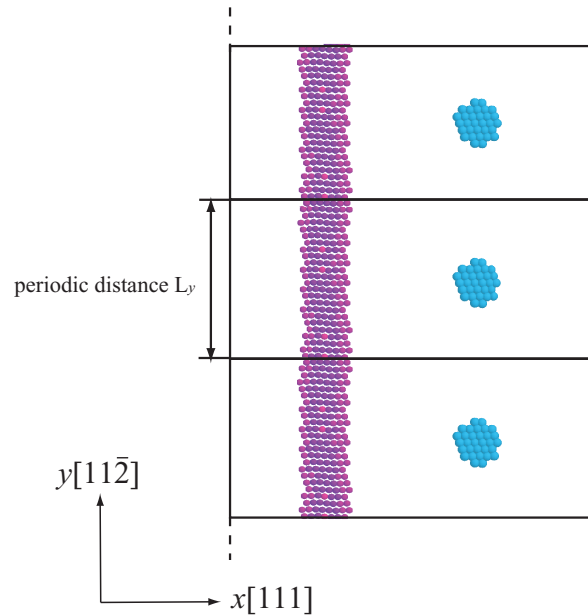


Fig.3.3 Periodic distance between Y_2O_3 precipitates.

3.2 シミュレーション結果及び考察

3.2.1 カutting挙動

析出物直径が $1.5[\text{nm}]$ の場合の、析出物中心を通るすべり面上の転位の運動の様子を例として図 3.4 に示す。転位は、ポテンシャルエネルギーの高い原子を転位芯として着色している。また、 Y_2O_3 も薄く着色して表示している。

初期状態 (図 3.4(a)) から、転位はすべり面上を x 軸方向に進み、 $t=60000[\text{fs}]$ の時に析出物の前縁に到達すると (図 3.4(b)), 接触した部分が析出物中心に引き寄せられるような挙動を示す (図 3.4(c))。その後、 $t=72000$ から $104000[\text{fs}]$ にかけて、転位が析出物を抜け出す際 (図 3.4(e)) には、先に抜けた転位からの張力を受けて大きくピンニングされて析出物を通過した。その後、転位は自身の張力により、直線状の形状に戻っている (図 3.4(f))。

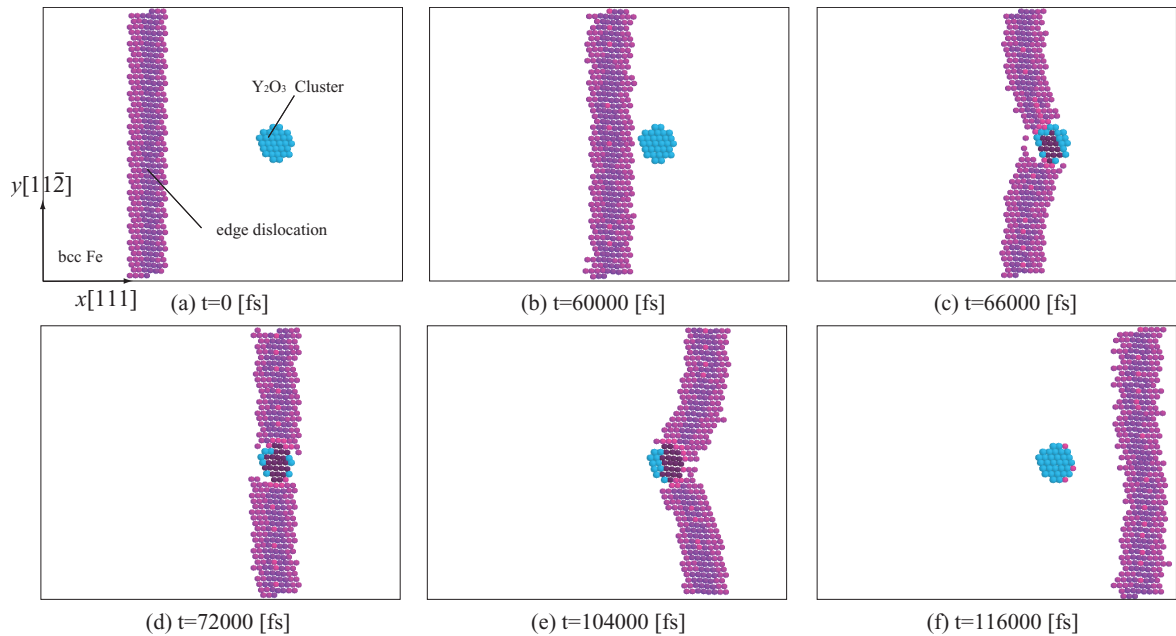


Fig.3.4 Motion of edge dislocation on the slip plane.

3.2.2 転位の移動量ならびにせん断応力

図 3.5 に示すように、析出物中心を通るすべり面上において、析出物と同じ幅の測定領域内に存在する転位芯原子の移動量を求め、1 原子当たりの平均の時間変化として図 3.6 に示す。また、解析セル全体で評価した zx 方向せん断応力の時間変化を図 3.7 に示す。析出物が存在しない場合 (図 3.6, 3.7 の太い実線)、転位はせん断を与え始めてから $t \approx 20000$ [fs] 近傍で動き始め、その後は一定の速度で運動している。その時のせん断応力を見ると、転位が動き出すまでは応力が上昇しているが、一定の速度での運動時にはほぼ一定のせん断応力を保っている (動摩擦力に相当)。直径 0.6 [nm] の析出物の場合でも (図中濃い点線)、析出物がない場合とほぼ同様の傾向を示している。一方、直径 0.9 [nm] 以上の析出物では、析出物の前縁に近づくと急速に析出物に引き寄せられており (図 3.6 矢印)、その後は転位の速度 (図 3.6 における勾配) が低下する (図 3.6 矢印)。析出物を貫通すると急激に移動量が増加するが (図 3.6 矢印)、これは、先の図 3.4 で示したようにピンニングされた転位が貫通後、転位張力により直線状になるためである。転位が析出物によりピンニングされる時間 (図 3.6 のプラトー領域の時間) は、析出物が大きくなるにつれ長くなるが、析出物内を進行する速度 (図 3.6 の勾配) は析

出物によらず一定である。図3.6におけるこれらのピンニング挙動は、図3.7のせん断応力変化にも顕著に現れている。析出物に転位が引き寄せられると系のせん断応力が低下しており(図3.7矢印), その量は析出物が大きいほど大きい。この応力緩和については後に考察する。転位が析出物を貫通するまでに系のせん断応力は再び上昇し、その臨界応力は析出物が大きくなる程大きくなる(図3.7矢印)。

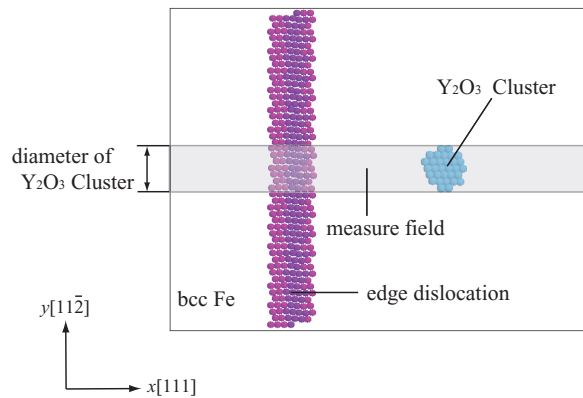


Fig.3.5 Measure field.

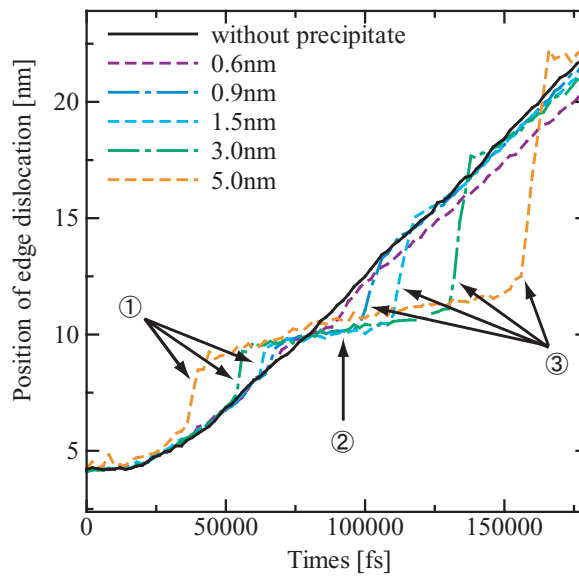


Fig.3.6 Change in position of edge dislocation(oxide $d=1.5$ [nm]).

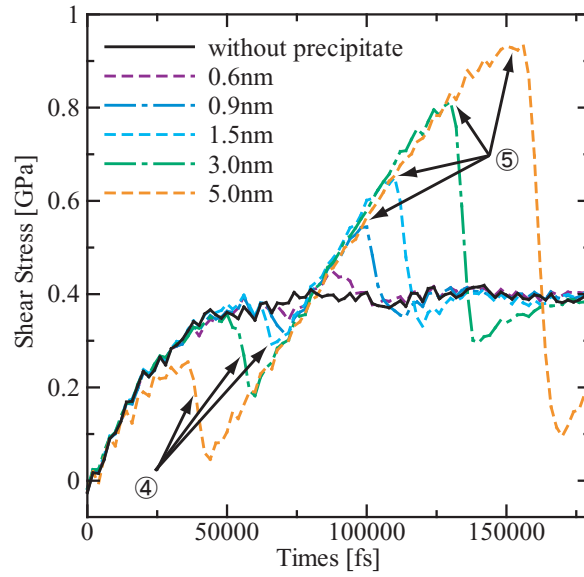


Fig.3.7 Change in shear stress.

3.2.3 転位通過前後の析出物構造変化

転位が析出物を通過した後の Y_2O_3 粒子のスナップショットを示す (図 3.8). 図は析出物直径が 1.5[nm] のときの例で, Y_2O_3 粒子を転位芯方向から見たものである. 図 3.8 より転位が通過すると Y_2O_3 析出物のすべり面より上部分が $b = \frac{a}{2}[111]$ 分だけずべている事が確認できる. したがって, Y_2O_3 は bcc 構造の一部として, $(11\bar{2})$ すべり面上での転位の通過によりずれている.

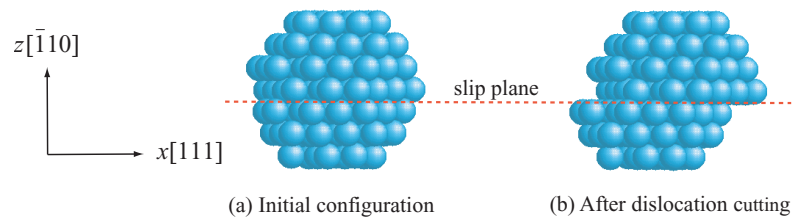


Fig.3.8 Morphology change of precipitate by cutting of edge dislocation.

3.2.4 析出物間距離の影響

図 3.9 に、析出物間距離を変化させた時の転位の移動量を示す。図 (b) は先に示した図 3.6 と同じものである。なお、辺長が 5.0[nm] で析出物直径が 5.0[nm] の場合には、辺長と析出物直径が等しく、析出物が周期境界方向に繋がっている状態になるため除いてある。

いずれの析出物間隔においても、析出物直径が 0.6[nm] のときは、析出物がない場合とほぼ同様の傾向を示しており転位は抵抗を受けずに通過する。0.9[nm] 以上では先述のような吸着 ピンニング挙動を示す。

転位の初期位置はいずれのセルでも同じため、図 3.6 の矢印で示した部分の挙動に大きな差は無いが、例えば図 3.9(b) と (c) に矢印で示した析出物 5.0[nm] の場合を比較すると、転位が析出物を貫通して離れるまでに要する時間が析出物の間隔が大きくなるにつれ短くなる。ただし、粒径が小さくなるとその差は小さくなり、0.9[nm] の場合は図 (a) ~ (c) いずれもほとんど同時刻に貫通している。すなわち、析出物が大きくなると貫通するのに必要な力が大きくなるが、析出物の間隔が大きい程、先の図 3.4 で示したように転位の湾曲が大きくなるため、転位張力が大きくなり早い時間にカッティングを生じる。一方、析出物が小さければ比較的小さい力で析出物を貫通するので、析出物の間隔に影響されない。

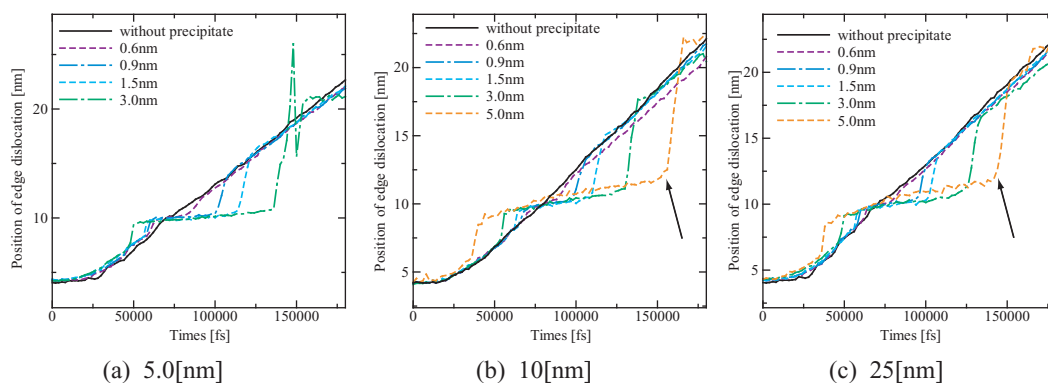


Fig.3.9 Edge dislocation position(spacing effect).

3.2.5 刃状転位のせん断応力場

析出物中心を通るすべり面上の zx 方向のせん断応力分布を、以下のようにして求めた。図 3.5 で示した測定領域の原子に生じる zx 方向のせん断応力を求め、かつ、 x 方向に領域を格子長さで分割し、それぞれで平均化して求めた (図 3.10)。図では、転位が析出物から離れている状態 (図 (b)) の応力分布を実線で、転位が析出物にトラップされた状態 (図 (c)) のそれを破線で示している。転位芯前後の強いせん断応力が、転位が析出物と合体した時に緩和されていることが分かる。3.2 節において、転位が析出物に接近する時に解析セルのせん断応力の低下が見られたのは、このような転位の応力場の緩和によるものである。

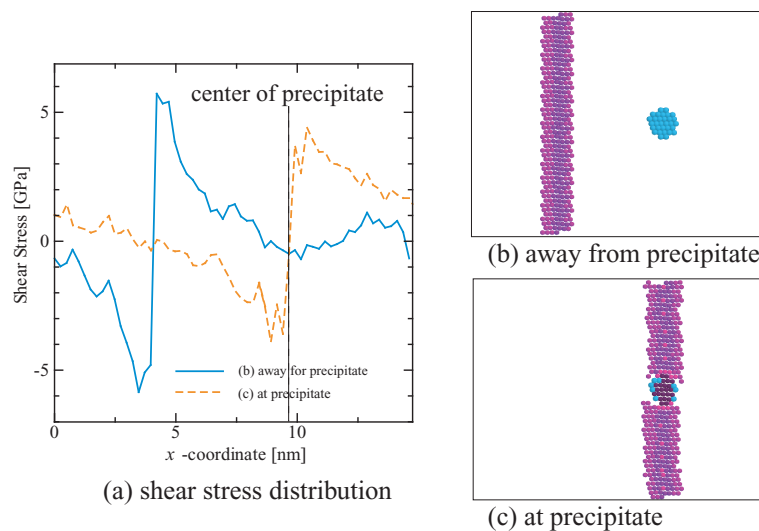


Fig.3.10 Shear stress profile.

3.3 結言

鉄中の Y_2O_3 クラスタと刃状転位の相互作用を原子レベルから検討するため、平均化した Y_2O_3 粒子をナノサイズのクラスタとして整合析出させた bcc-Fe において、刃状転位を接近させるシミュレーションを行った。析出物の大きさ、ならびに周期的に

並ぶ析出物間隔などを変えて検討し、以下のような結果を得た。

(1) 析出物サイズが 0.6[nm] のときは刃状転位は抵抗を受けることなく通過した。析出物サイズが 0.9[nm] より大きい場合、析出物に接触すると、引き寄せられる挙動を示し、かつ通過する際には大きくピンニングされた。ピンニングされる時間の長さは析出物サイズに比例して大きくなる。

(2) セルのせん断方向の応力変化を調べた結果、0.9[nm] を越える析出物では転位が析出物にトラップされた時に一時的に急減し、その減少量は析出物サイズに比例して大きくなった。また、転位が析出物を通過する際には大きなせん断応力を必要とし、これも析出物の寸法に応じて著しく上昇していた。

(3) 周期セルの転位芯方向の長さを考えて析出物間の距離を変化させたシミュレーションでは、析出物が大きい (1.5[nm] 以上) とき、カッティングが完了する時間に変化が見られた。析出物間距離が大きければ転位は大きく湾曲し、強い転位張力を生じるので、析出物サイズが大きい時はカッティングを生じるのに要する時間が短くなる。

一方、0.9[nm] の小さな析出物では湾曲による大きな転位張力を要せずにカッティングを生じるため、析出物間隔によらずカッティングが完了する時間は一定となった。

(4) 転位芯と析出物を結ぶすべり面上のせん断応力分布を調べた結果、転位芯前後の大きなせん断応力が、析出物と合体することで緩和されることが示された。

第4章 らせん転位と析出物の相互作用

4.1 シミュレーション条件

刃状転位のシミュレーションとは転位の進行方向が異なるので、図 4.1 のように x, y, z 座標の向きを変えて bcc の Fe 単位格子を $21 \times 14 \times 37$ 並べた直方体セルを解析対象とする。セルの寸法は $5.20 \text{ [nm]} \times 9.80 \text{ [nm]} \times 15.0 \text{ [nm]}$ で原子数は 65,268 である。図中に模式的に示したように、セルの前縁から z 方向に 9.00 [nm] 、 x, y 方向にはそれぞれセル半分の距離の点を中心として、半径 $d/2$ 以内の Fe 原子を「 Y_2O_3 粒子」に置換し、整合析出させた Y_2O_3 クラスタとした。析出物直径 d は $0.6, 0.9, 1.5, 3.0 \text{ [nm]}$ の 4 通りとした。

析出物を有しない系を含めて合計 5 つのシミュレーションセルについて、 z 方向のセル前縁から 4.50 [nm] の位置に、 x 方向に無限の長さを持つらせん転位を導入する。具体的には、図 4.2 に示すように、解析セルの上半分かつ①の領域に存在する原子を $[111]$ 方向に $1/2$ バーガスベクトル分、その下半分の原子は $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 方向に $1/2$ バーガスベクトル分移動させ、 100000 [fs] の初期緩和計算を行って導入する。なお、②の領域に関しては、①とその他の領域とを線形的につなぐように変位を与えている。

x 方向に周期境界条件、 z 方向は自由境界、 y 方向は端面法線方向の原子運動のみ拘束する条件で初期緩和計算を行い、垂直方向の応力が零になるようにセル寸法を制御した。温度は 10 [K] とし、速度スケール法により制御した。

その後セル上端面の原子は $[111]$ 方向、下端面の原子は $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 方向に微小な変位 $3.0 \times 1.0^{-6} \text{ [nm]}$ を毎ステップ与えることで xy 方向のせん断シミュレーションを行い、転位を

進行させた。

なお、前章同様析出物が x 方向に周期的に並ぶ構造となるので、析出物間距離の違いについて検討するため、セルの x 方向寸法を $10[\text{nm}]$ とした系でも検討を行った。前章より小さな系 (幅 $5.2[\text{nm}]$) を基準としているのは、後述のようにらせん転位では交差すべりを起こしやすくなるためである。

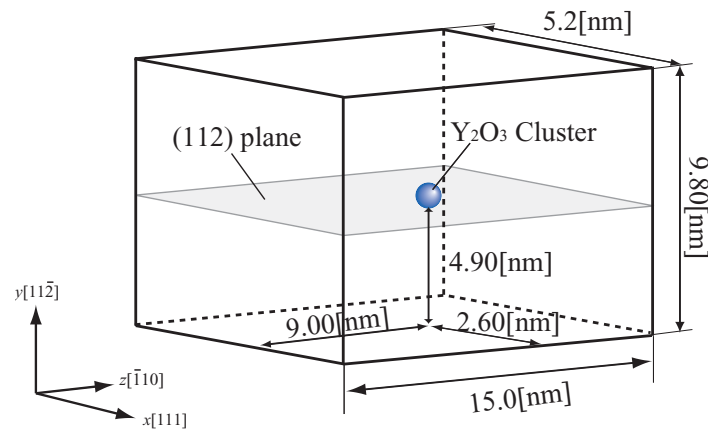


Fig.4.1 Dimensions of simulation cell for screw dislocation.

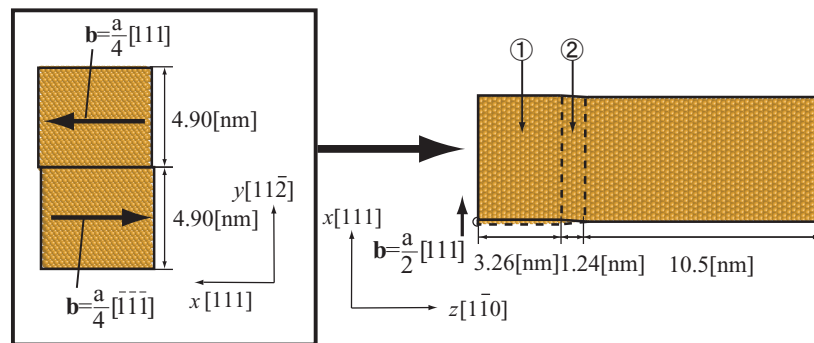


Fig.4.2 Setting of screw dislocation.

4.2 シミュレーション結果及び考察

4.2.1 カッティング挙動

析出物直径が $1.5[\text{nm}]$ の場合の、析出物中心を通るすべり面上の転位の運動の様子を例として図 4.3 に示す。周期セルの寸法のためもあるが、前章の刃状転位の挙動と異なり、らせん転位は析出物を通過するときに吸着やピンニングによる湾曲は生じず、直線状のまま通過した。転位通過前後の析出物の変化を図 4.4 に示す。刃状転位のとおり、転位の通過によってすべり面より上部分が $b = \frac{a}{2}[111]$ 分だけ移動していることが確認できる。また、転位通過後の析出物周りには高エネルギー原子が残留する。析出物の上半分がずれる方向は、先の刃状転位によるものと同じであるが、今回のらせん転位の方に多く高エネルギー原子が残留するのは、この方向が短い周期セルの方向であるためと考えられる。

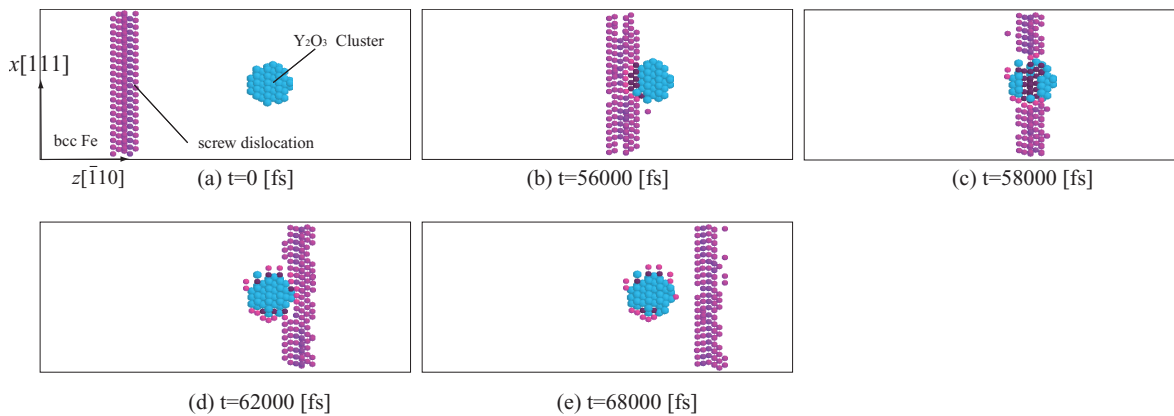


Fig.4.3 Motion of screw dislocation on the slip plane(oxide $d=1.5[\text{nm}]$).

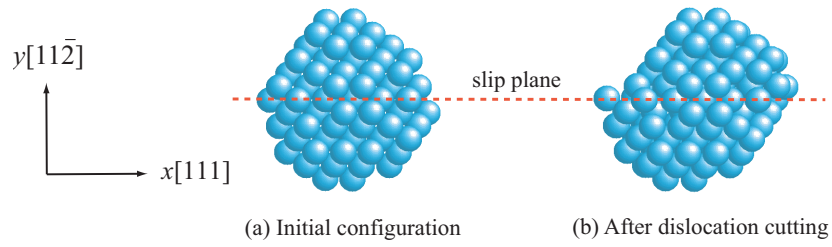


Fig.4.4 Morphology change of precipitate by cutting of screw dislocation.

4.2.2 転位の移動量ならびにせん断応力

前章と同様にして評価した転位芯の位置の時間変化, ならびに系のせん断応力変化を図 4.5 および図 4.6 に示す. 図中の水平方向の破線は析出物の中心位置を表している. 析出物が存在しない場合 (図 4.5, 4.6 の太い実線), 転位は垂直方向の破線で示した約 36000[fs] 近傍で動き始め, その後はわずかではあるが 2 次曲線的に加速している. 約 60000[fs] 近傍の矢印①で示した部分では転位速度がわずかに減少しているが, これは転位が解析セルの端面 (15[nm]) に接近したためと考える. せん断応力の変化を見ると, 転位が動き出す点で応力上昇が鈍化するものの, 刃状転位の場合と異なり, 転位が 66000[fs] でセルから抜けるまで緩やかに上昇した. 直径 0.6 ~ 1.5[nm] の析出物の場合, 転位の位置ならびにせん断応力の変化とともに析出物がない場合との違いを見出すことは難しい. 唯一, 直径 3.0[nm] の析出物では (図中薄い一点鎖線), 矢印②で示したように他の系よりも析出物に先に達しており, またそのときにせん断応力が低下する (図 4.6 矢印③)

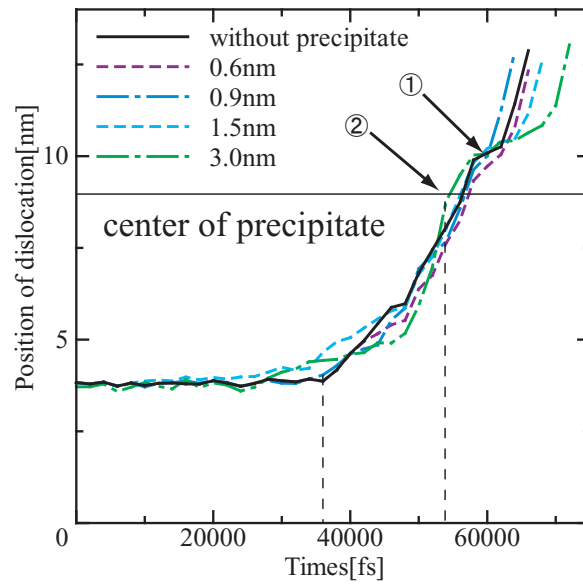


Fig.4.5 Change in position of screw dislocation.

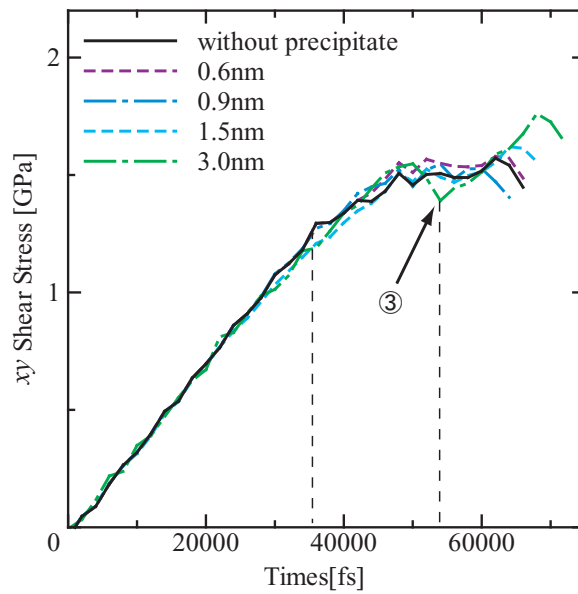


Fig.4.6 Change in shear stress(screw dislocation model).

4.2.3 交差すべりによる回避挙動

析出物間距離を 10[nm] とした時の転位芯の z 方向位置の時間変化, ならびに, 解析セル全体で評価した xy 方向せん断応力の変化を, 先の 5[nm] のときの結果と比較して図 4.7 および, 図 4.8 に示す. ただし, 後述のように 10[nm] のシミュレーションでは中央のすべり面以外にも転位が運動するので, すべり面を限定せずに z 方向の位置を測定している. 転位芯の位置変化を見ると, いずれの析出物直径においても 5[nm] の間隔では見られなかったような階段状の挙動を示している. 以下では, 析出物間隔が 5[nm] の場合と, 転位の移動量に大きな違いが見られた 0.6, 0.9, 3.0[nm] の析出物サイズについて考察する.

析出物直径が 0.6, 0.9[nm] の場合, $t=30000$ [fs] 近傍で転位が移動しはじめてからすぐに, 矢印①で示すように $t=40000 \sim 55000$ [fs] 間に殆ど停止した状態となり, その後急激に移動し始める. そのときのせん断応力を見ると, ピンニングを抜けるまで応力が上昇し続けており, その後は低下している. 上記の $t=40000 \sim 55000$ [fs] 間の転位速度の低下はそれぞれの析出物サイズにおいて, 異なるメカニズムによりもたらされている. まず, 析出物直径が 0.6[nm] の場合について考察する. 転位芯方向から見た転位挙動を, 析出物が存在しない場合を図 4.9 の上部に, 析出物直径が 0.6[nm] の場合を下部に比較して示した. 析出物がない場合はらせん転位は $[\bar{1}10]$ 方向へ直進しているが, 析出物がある場合, $t=42000 \sim 53000$ [fs] の図 (b)(c) で接近しにくくなっており, 反力を受けている可能性が示唆される. (c) (d) の変化は, わずかではあるが転位芯は点線で示した補助線の下端に接する位置まで下降する. 比較のため, $t=0$ および 65000[fs] の時の転位位置を拡大したものを図 4.9 の下部に示した. y 方向の高さを確認すると, $[\bar{1}\bar{1}2]$ 方向に 1 原子分移動している. 図 4.10 に, 析出物が存在しない場合と析出物直径が 0.6[nm] の場合の転位芯の位置について, 上下方向の移動量の時間変化を示す. 破線で示す析出物直径 0.6[nm] のシミュレーションでは, 30000[fs] 近傍から下方向に移動しはじめ, 51000[fs] 近傍で一原子分の下降を完了した. なお, $d=0.6$ [nm](図 4.9(e)) では, 析出物周囲にも高エネルギーの原子が残留したため, 横からみると転位芯が 2 つあるようにみえている点に注意されたい. 次に, 析出物直径が 0.9[nm] の場合について, 図 4.7 およ

び, 図 4.8 のうち, 析出物直径が 0.9[nm] の場合のみをピックアップしたもの, ならびに上下方向の移動量, そして転位の挙動を図 4.11 にまとめて示す. なお, 図 (c) の上下方向の移動量は, 析出物に当たる部分だけでなく, 転位から離れた位置 (図 (c)(i) の帯状部分) での測定結果も示している. 図 (a) を見ると, 点線①で示した 40000[fs] の手前でわずかに移動 (0.09[nm]) するものの, その後の移動は遅く, せん断応力 (図 (b)) にも変化はない. このとき, 図 (c) の上下方向の移動を見ると中心部分が下方向にずれはじめている. このときの転位の形状は図 (ii) で示したように「キンク」を生じた形となっており, 析出物に当たる部分とそうでない部分に上下方向の段差を生じる (図 (c)). 図 (a) に戻ると, 点線②の時点で転位の速度が上がるが, このとき系のせん断応力もピークを示す (図 (b)). このときの転位形状は図 (d)(ii) に示すように $t=48000$ [fs] のとき的位置に高エネルギー原子を残留しながら転位の幅が広げられるように”drag”されている. その後の図 (d)(iv) ~ (vi) を見るとその位置に高エネルギー原子を残して転位は析出物-母相界面近くをすべり面として抵抗なく通過した. 析出物直径 3.0[nm] の時の変化を同様に図 4.12 にまとめて示す. この場合, らせん転位は図 (c) のように上下に移動するが, 析出物を回避することが出来ないため, 破線②~③と図 (d)(ii) ~ (vi) で示すように析出物によって停滞し, より高いせん断を与えられたとき貫通する.

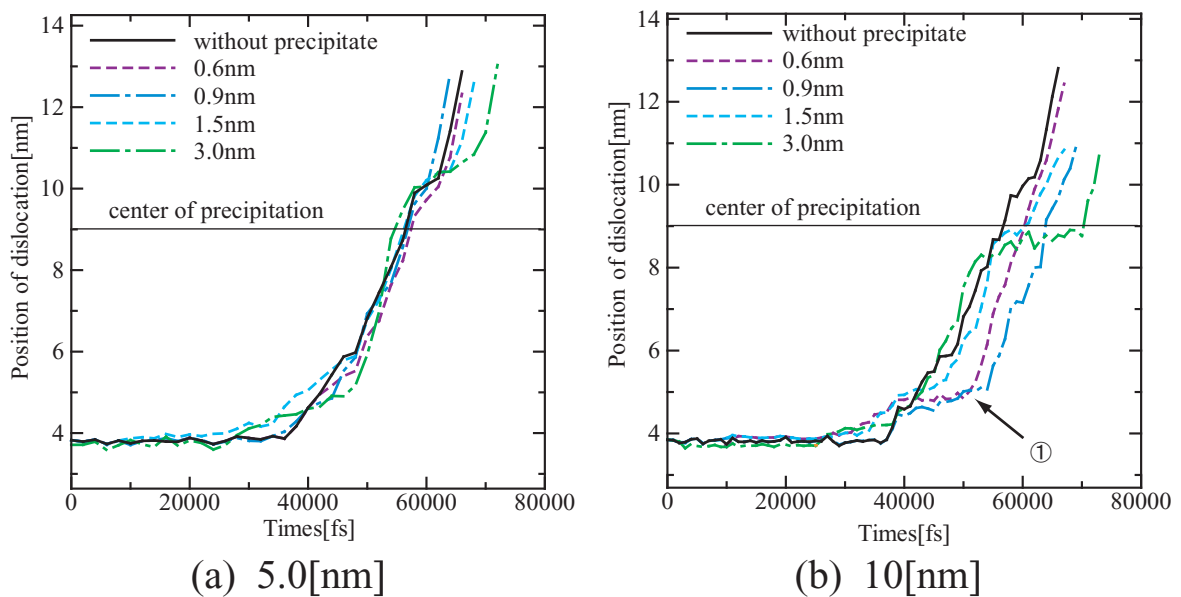


Fig.4.7 Screw dislocation position(spacing effect).

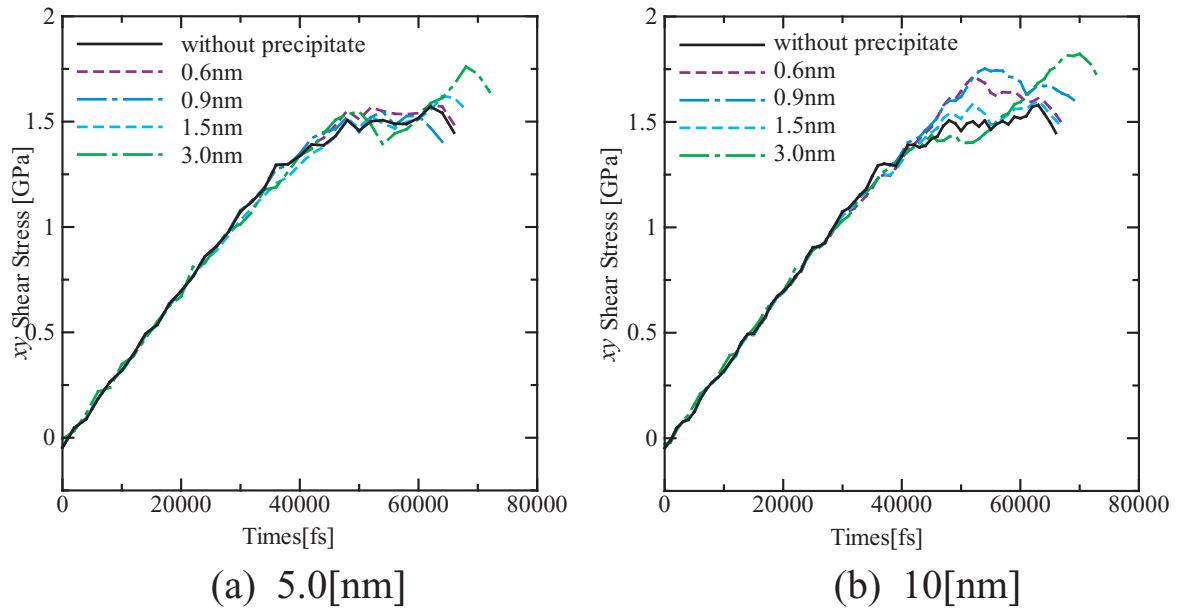


Fig.4.8 Change in shear stress(spacing effect).

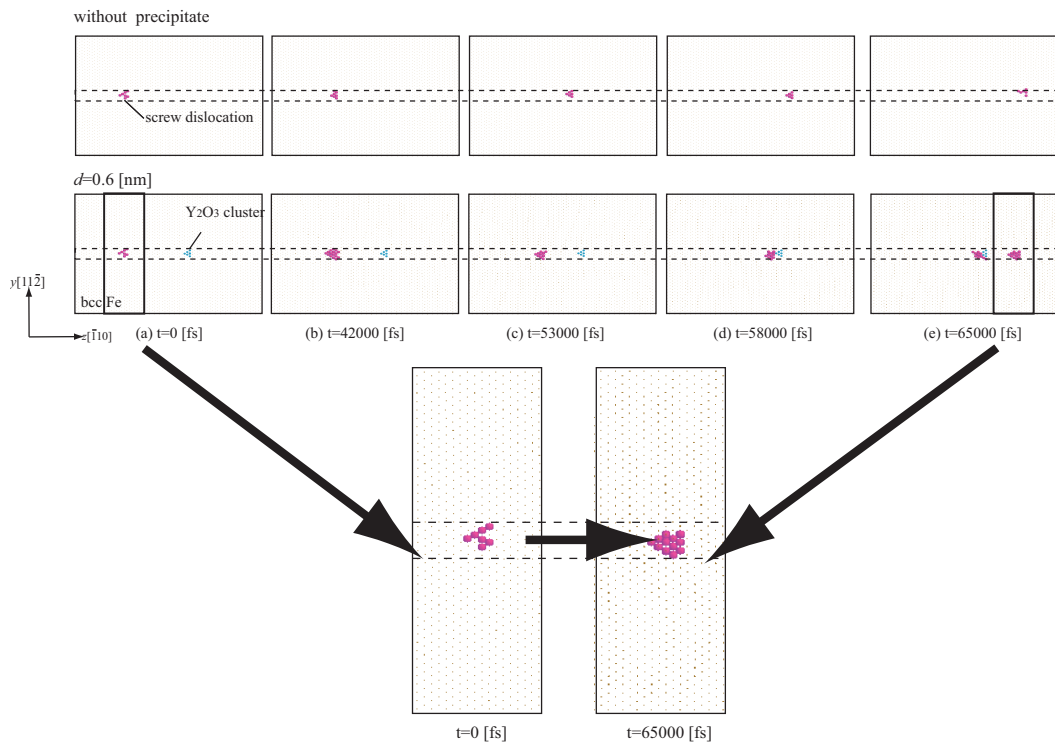


Fig.4.9 Screw dislocation motion (without precipitate and $d=0.6$ [nm] oxide).

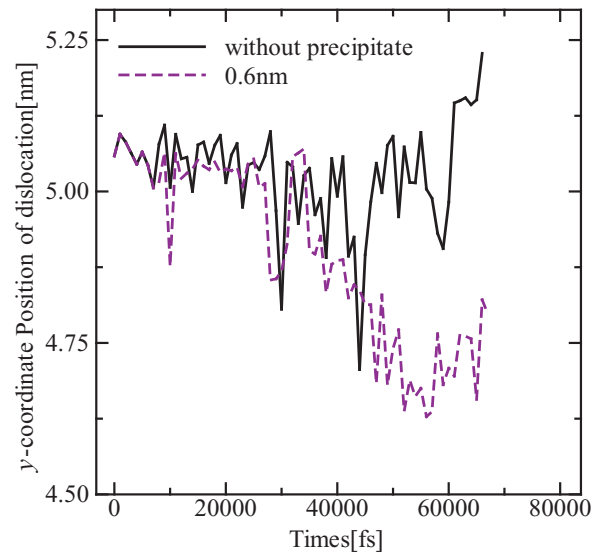
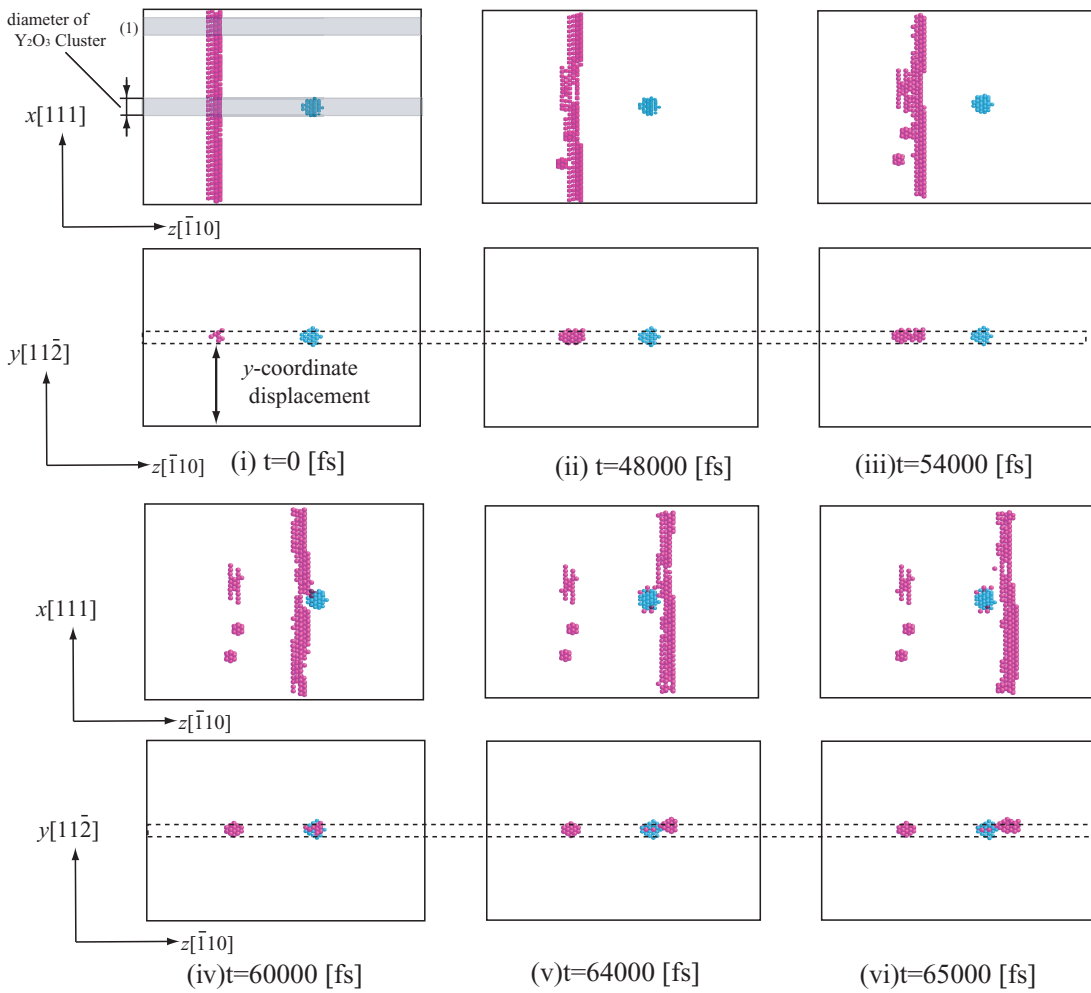
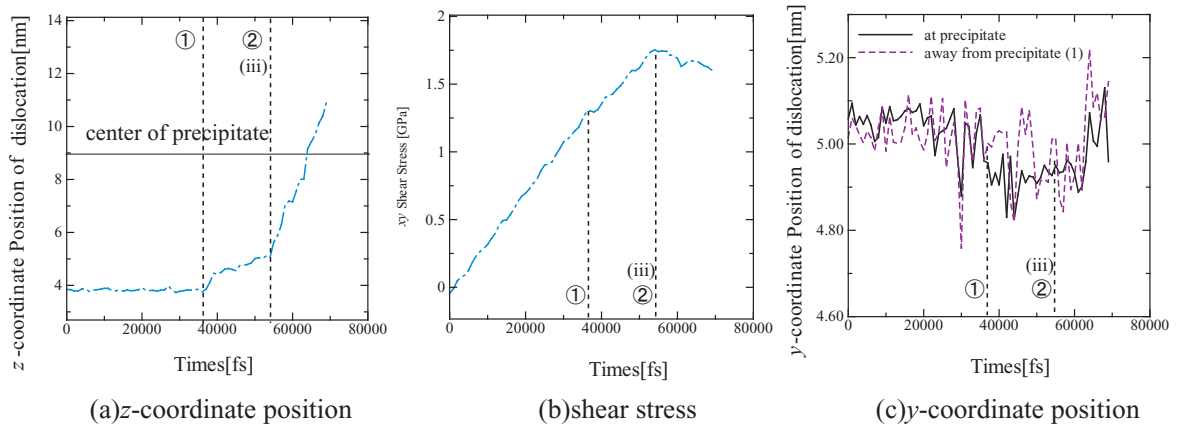


Fig.4.10 Out of plane motion of screw dislocation y -coordinate position (without precipitate and $d=0.6$ [nm] oxide).



(d) snapshots at point (i) ~ (vi)

Fig.4.11 Screw dislocation y -coordinate position and motion (oxide $d=0.9$ [nm]).

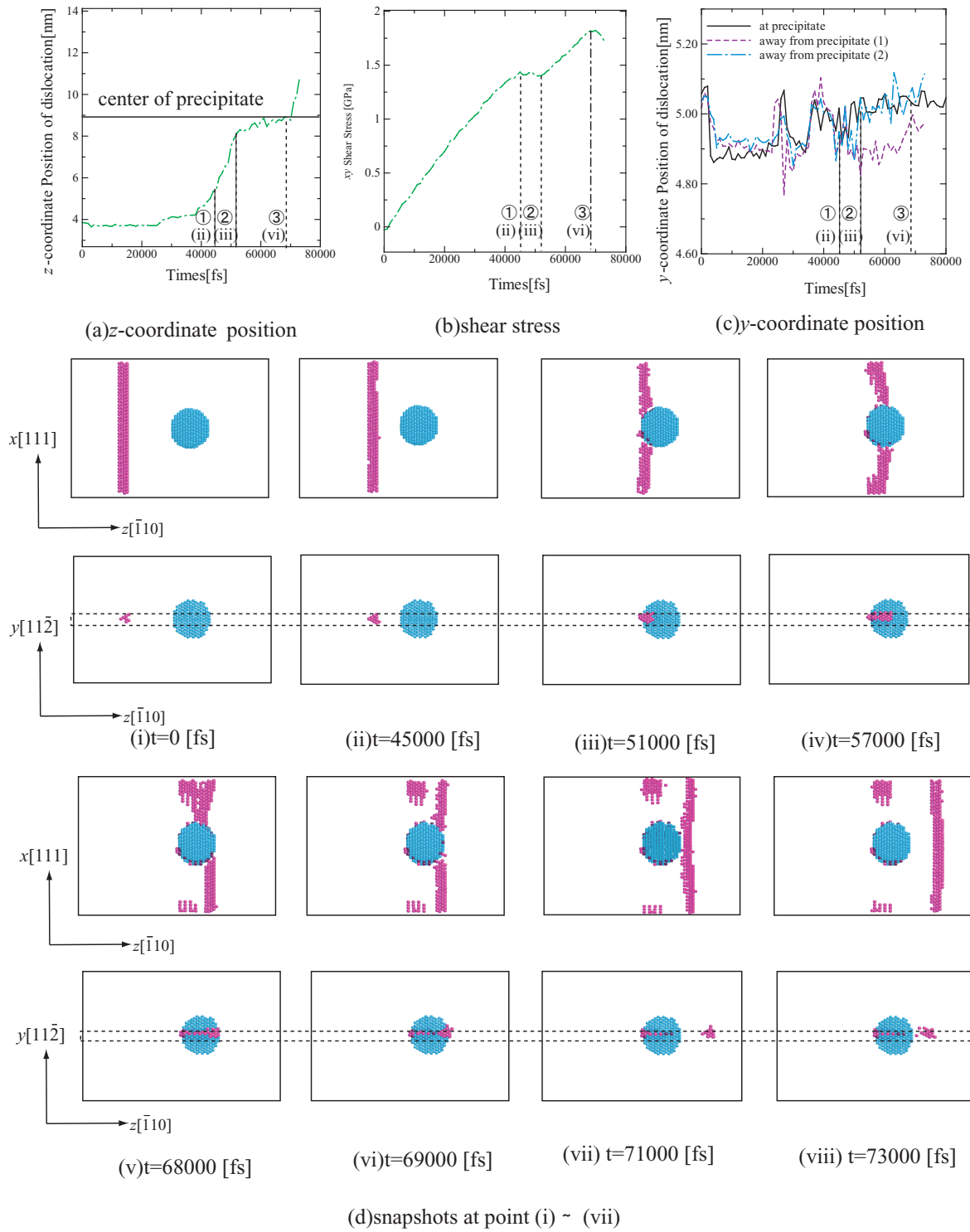


Fig.4.12 Screw dislocation y -coordinate position and motion (oxide $d=3.0$ [nm]).

4.3 結言

らせん転位と析出物の相互作用について、前章と同様のシミュレーションを行い、以下のような結果を得た。

(1) らせん転位は交差すべりを生じやすいため、転位線方向の周期セルを 5[nm] と短くして、析出物にぶつけるシミュレーションを行ったところ、析出物の直径が 0.6 ~ 1.5[nm] では殆ど抵抗を受けず通過し、3.0[nm] の場合のみわずかにピンニング挙動を示した。

(2) (1) のカッティング時には刃状転位の時と同様、析出物の上部が $b = \frac{a}{2}[111]$ だけずれた。

(3) 転位芯方向の周期セル長さが 2 倍の 10[nm] としたシミュレーションでは、析出物直径によって様々なメカニズムが観察された。析出物を 0.6[nm] とした場合、析出物前方で、らせん転位が一原子分の降下を生じている。そして、その高さを保ちながら通り抜けた。

(4) 析出物を 0.9[nm] とした場合、(3) と同様の降下を生じるが、キックを生じていた。その後は析出物の界面近くをすべり面として抵抗なく通過した。

(5) 析出物を 3.0[nm] とした場合、らせん転位は析出物サイズが大きいために降下による析出物の回避が出来ず、析出物を貫通する際に抵抗を生じていた。

第5章 析出物間を運動するらせん転位の挙動

5.1 シミュレーション条件

前章の4.1節と同じ軸, 大きさの解析セルに対して, 析出物を解析セルの中央すべり面に対して上下に対称に配置し, その間をらせん転位が通り抜けるようなシミュレーションを行う. 図5.1に示すように, セルの前縁からの位置は同じで, z 方向に 9.00 [nm], 上下に両者の間の距離が a となるよう等間隔に整合析出させた Y_2O_3 クラスタを配置した. 析出物直径 d は 1.0, 2.0 [nm] の 2 通り, 析出物間の距離を $a = 0.0, 5.0, 1.0, 2.0$ [nm] の 4 通りとした合計 12 通りのシミュレーションセルを行った.

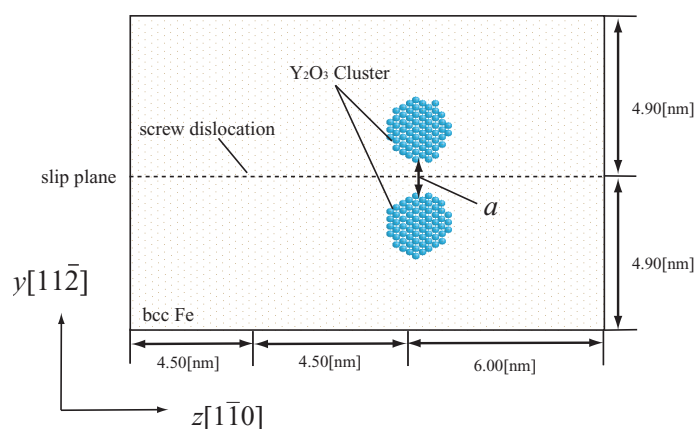
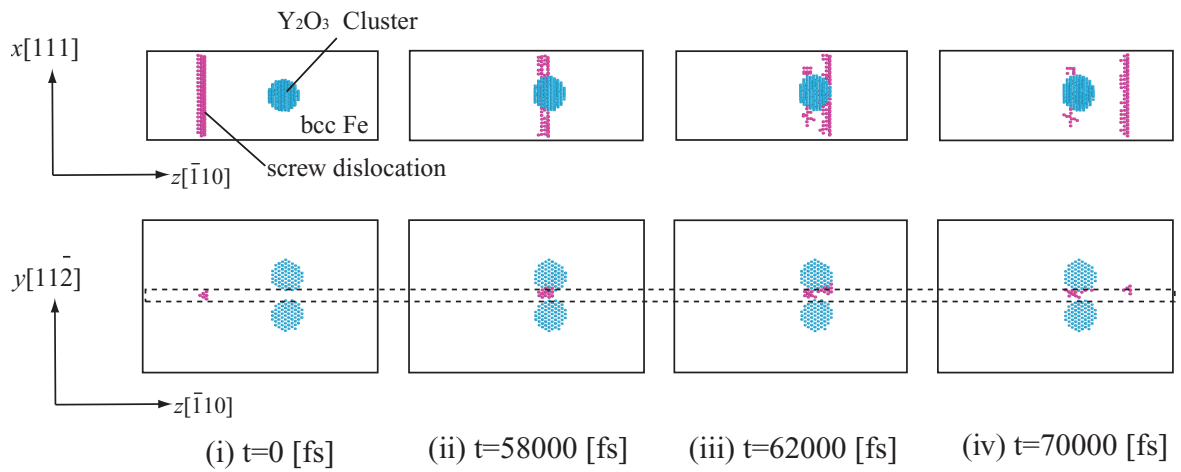


Fig.5.1 Dimensions of simulation cell.

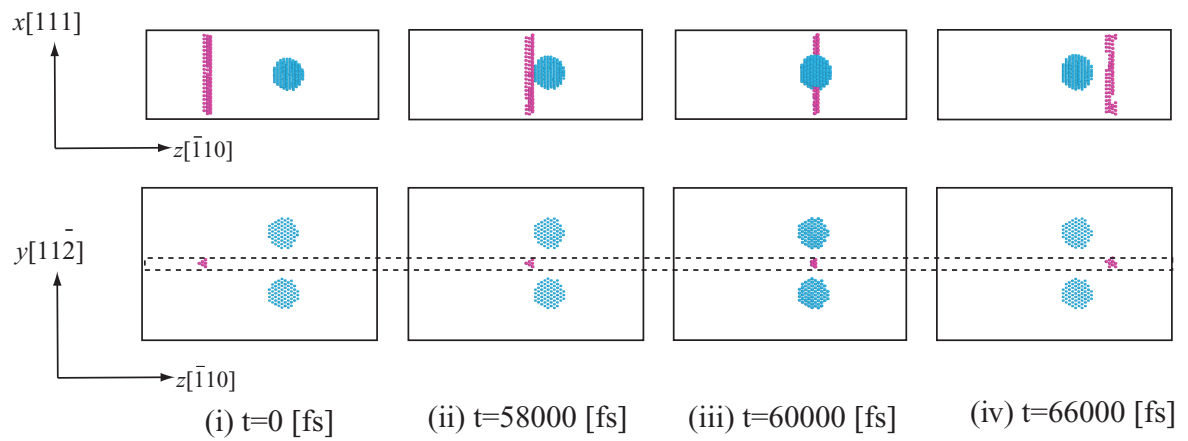
5.2 シミュレーション結果及び考察

5.2.1 らせん転位挙動

例として析出物直径が 2.0[nm], 析出物間距離が 0.5, 2.0[nm] の場合のらせん転位の運動の様子を図 5.2 に示す. 析出物間距離が 0.5[nm] のとき, 上段の上から見た図 (a)(上段) では, 転位は直線状のまま通過しているが, 析出物の周囲に高エネルギー原子が残留している. 転位芯方向から見た図 (a)(下段) では, らせん転位が上側の析出物に沿うように運動し, すべり面をその高さに変えて運動している. 析出物間距離が 2.0[nm] の場合は転位芯方向から見たとき, 析出物間の中間を転位が z 方向に進行している.



(a) interparticle distance $a=0.5$ [nm]



(b) interparticle distance $a=2.0$ [nm]

Fig.5.2 Motion of screw dislocation between two precipitates.

5.2.2 析出物サイズおよび析出物間距離の影響

ここでは同じ析出物サイズで、析出物間距離を変えたときの変化を議論する。析出物直径が $1.0[\text{nm}]$ のときの転位芯の位置の時間変化、ならびに系のせん断応力変化を図 5.3 に示す。転位芯の位置変化をみると、 $a=0$ で 2 つの析出物がすべり面で接触したとき以外は、 $t=30000[\text{fs}]$ 近傍から移動をし始めるが、矢印①で示した $t=40000[\text{fs}]$ で停滞している。この位置は析出物から $4[\text{nm}]$ 程度離れている。一方、 $a=0.0$ のときは転位が移動しはじめる時間は遅いが、停滞するのは矢印②で示した析出物中心から $1[\text{nm}]$ 程度の非常に接近した点である。いずれも、 $z=9[\text{nm}]$ の位置を通過するのは $t=56000 \sim 60000[\text{fs}]$ 付近であるが、このときの転位は大きな抵抗を受けず通過している。図 5.5 に $d=1.0$ で $a=0.0$ ならびに $2.0[\text{nm}]$ のときの転位の運動の様子を示す。 $a=2.0[\text{nm}]$ の図 (ii),(iii) において転位形状に変化はなく、ジョグも形成されていない。また、 $a=0.0[\text{nm}]$ の図 (v) において下の析出物界面に沿って運動しているのに対し、 $2.0[\text{nm}]$ では、析出物間の中心を通過している。

析出物直径を $2.0[\text{nm}]$ としたときの転位芯の位置の時間変化、ならびに系のせん断応力変化を図 5.4 に示す。先の $d=1.0$ の場合と異なり、逆に $a=0.0$ のときに転位が最も早い時刻に動きだしている。またいずれも $t=45000[\text{fs}]$ 付近 (矢印①) で位置変化に折れまがりを生じ、転位が加速している。この点ではせん断応力図も $d=1.0$ のときにはない、明確な折れまがりを示しており (図矢印②)、転位移動の臨界応力に対したることによる不安定挙動と解釈できる。析出物直下近傍での挙動では、転位が析出物に当たる。 $a=0.0$ の条件では析出物の前後で停滞する挙動が認められる (矢印③)。他の系では、 $a=0.5[\text{nm}]$ の場合は後述のように析出物界面に沿った転位の運動を生じたため矢印④で示したように傾きすなわち速度が変わっているが、その他は抵抗なく運動している。図 5.6 に $d=2.0$ で $a=0.5$ ならびに $2.0[\text{nm}]$ のときの転位の運動の様子を示す。 $a=0.5[\text{nm}]$ の図では、真ん中の図 (ii) において転位が上の析出物界面に沿って運動しているのに対し、 $a=2.0[\text{nm}]$ では、析出物間の中心を通過している。

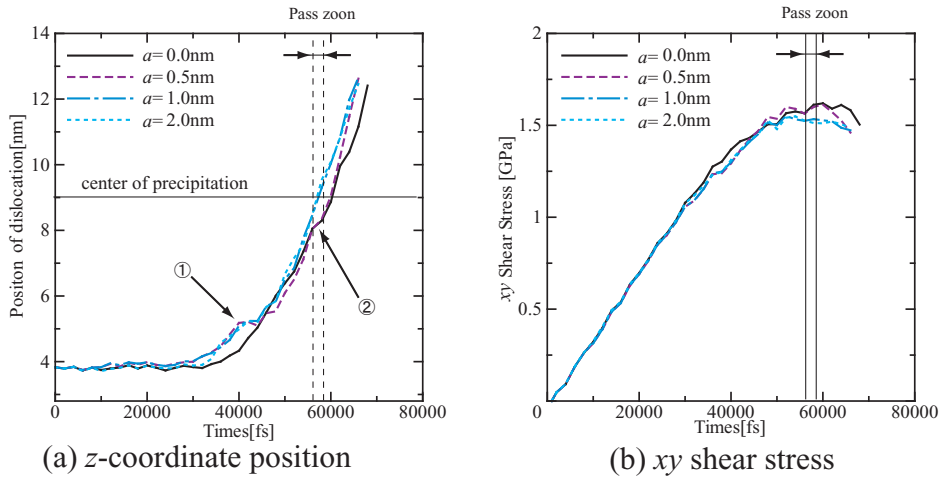


Fig.5.3 Change in position and shear stress of screw dislocation(oxide $d=1.0$ [nm]).

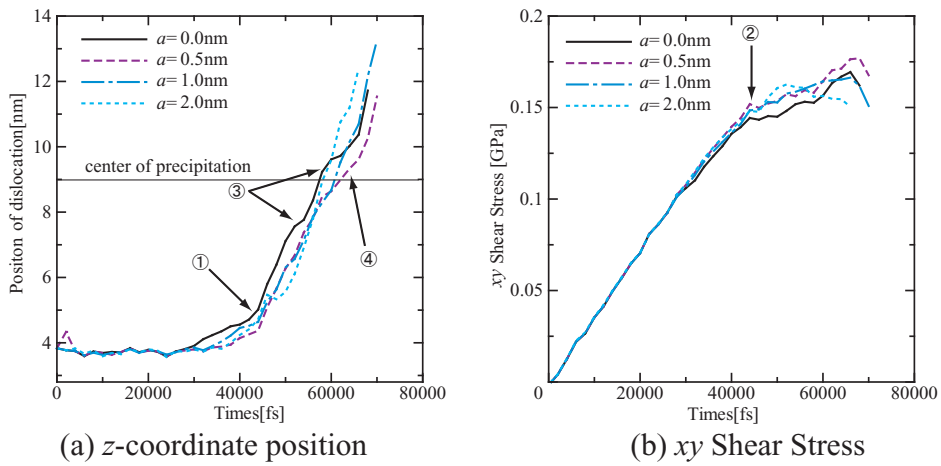


Fig.5.4 Change in position and shear stress of screw dislocation(oxide $d=2.0$ [nm]).

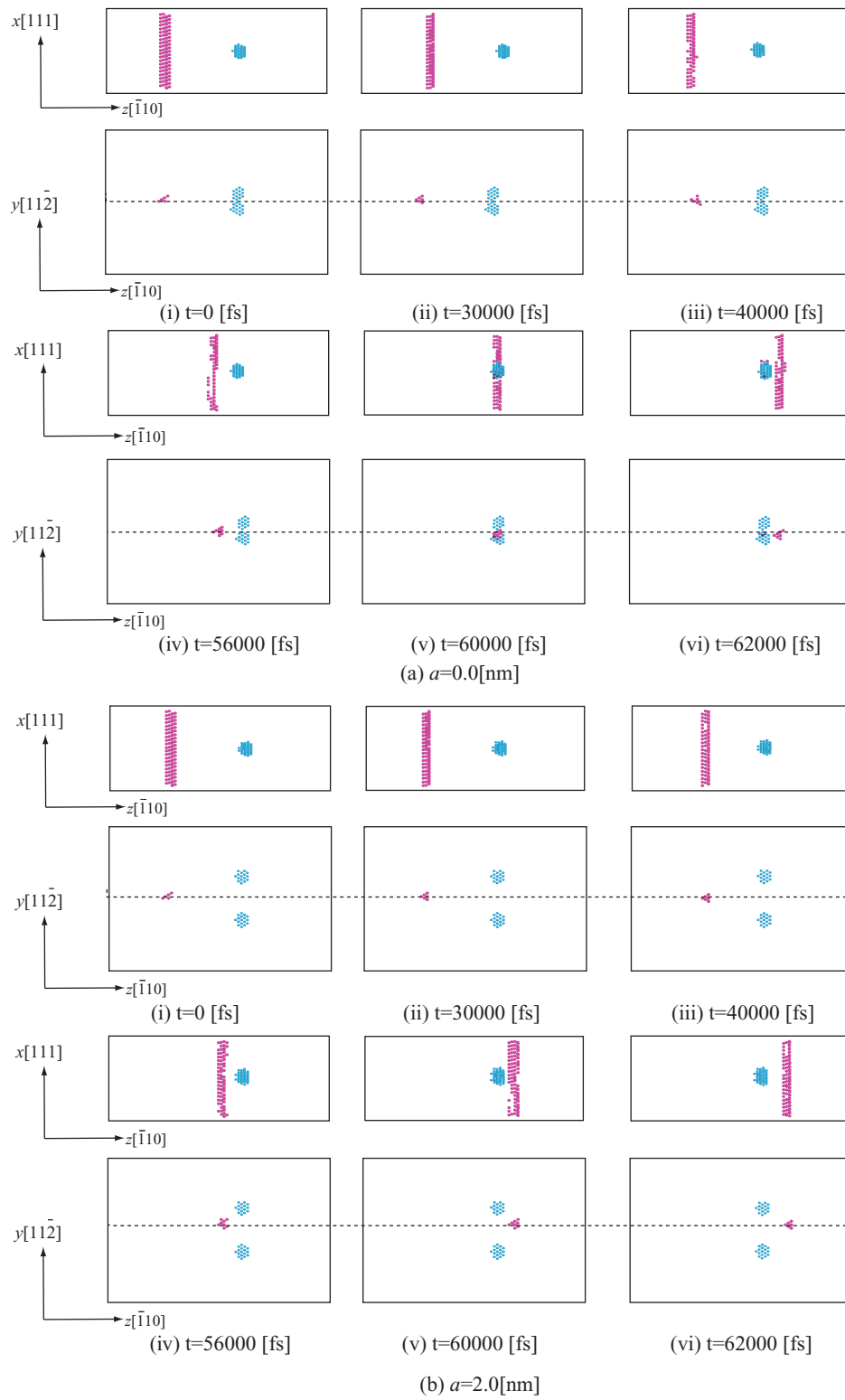


Fig.5.5 Motion of screw dislocation (oxide $d=1.0$ [nm], distance $a=0.0$ and 2.0 [nm]).

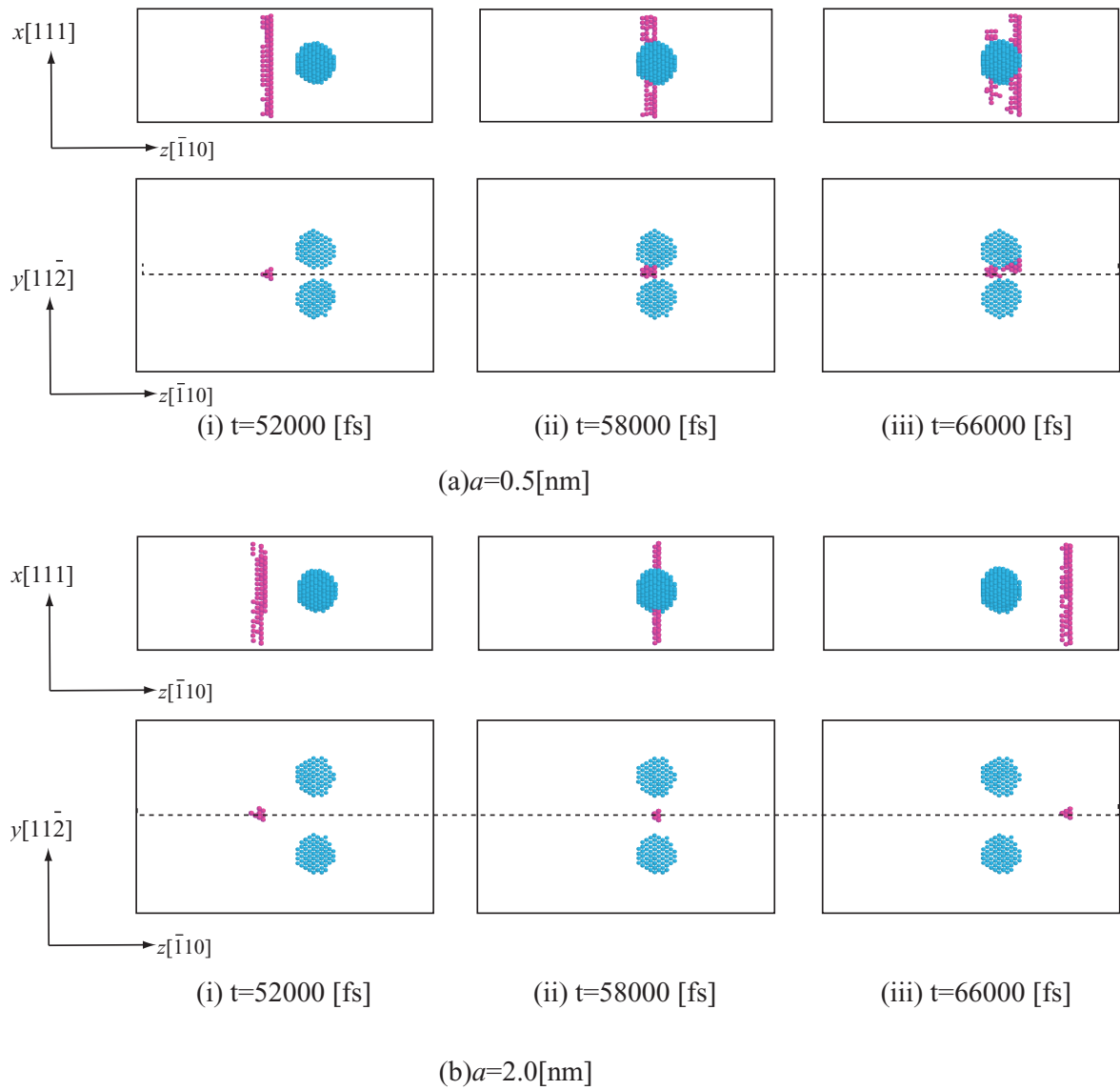


Fig.5.6 Motion of screw dislocation (oxide $d=2.0$ [nm], distance $a=0.5$ and 2.0 [nm]).

5.3 結言

転位が直接析出物に当たる場合だけでなく、析出物が近接したすべり面にある場合に転位に及ぼす影響を調べるため、上下に等間隔に配置した2つの析出物の間をらせん転位を通過させるシミュレーションを析出物間隔ならびに析出物直径を変えて行った。得られた結果を要約して以下に示す。

(1) 析出物の直径を 1.0[nm]、析出物間の隙間を 0.0, 0.5, 1.0, 2.0[nm] と変えたシミュレーションでは、隙間が 0 以外の場合いずれも初期に転位が析出物方向に引き寄せられ、その後すぐに析出物位置より 4.0[nm] 程度離れた点で一時的に停滞する挙動を示した。停滞した理由は現時点では不明である。

(2) 0.5[nm] の隙間の場合、らせん転位はすべり面を変えて析出物と母相の界面に沿って通過した。また、析出物の共通接線をすべり面とする 0.0[nm] の場合も析出物に沿って運動していた。

(3) 析出物の直径を 2.0[nm] とした場合、(1) とは逆に転位が動き出す時刻は隙間を 0 とした系が最も早かった。ただし、(1) の場合に比べ、外力によって転位が運動した時刻とそれ以前が明確にわかり、この「フライング」は析出物の引力によるものと考えられる。

第6章 結論

本研究では、鉄中の Y_2O_3 クラスターと転位の相互作用を原子レベルから検討するため、Y および O 原子を陽には区別せず、第一原理計算により求めた Y_2O_3 の格子長さおよび体積弾性率を再現できる「平均粒子」としてポテンシャルフィッティングし、bcc-Fe の刃状およびらせん転位とこの平均粒子によるナノクラスターの相互作用を分子動力学シミュレーションにより検討した。以下に得られた結果を総括する。

第2章では分子動力学法の基礎理論および、第一原理計算によるポテンシャルフィッティング、領域分割による高速化手法等について説明した。第3章では、 Y_2O_3 クラスターを整合析出させた bcc-Fe において、刃状転位を析出物に衝突させるシミュレーションを行った。その結果、析出物が 0.6[nm] のときは抵抗を受けることなく通過すること、サイズが 0.9[nm] より大きい場合、析出物に接触すると引き寄せられる挙動を示し、かつ通過する際には大きくピンニングされること、ピンニングされる時間の長さは析出物サイズに比例して大きくなること、などが示された。また、周期方向の析出物間隔を変化させると、析出物間距離が大きいほど転位は大きく湾曲できるために、カッティングを生じるのに要する時間(与えるせん断ひずみ)が短くなること、転位芯と析出物を結ぶすべり面上のせん断応力分布を調べると、転位芯前後の大きなせん断応力が、析出物と合体することで緩和されること、などを明らかにした。

第4章では、らせん転位と析出物の衝突について前章と同様のシミュレーションを行った。その結果、析出物サイズが 3.0[nm] の場合のみわずかにピンニング挙動を示すこと、転位芯方向の周期セル長さを刃状転位の場合と同程度(10[nm]) とすると、らせん転位は析出物前方ですべり面上下方向の運動を生じ、高エネルギーのジョグを残すことや、析出物と母相の界面をすべり面として通過することなどが明らかになった。

第5章では、同じくらせん転位について、上下に等間隔に配置した2つの析出物の間

を通過させるシミュレーションを、析出物間隔を 0.0 ~ 2.0[nm]、析出物直径を 1.0, 2.0[nm] と変えて行った。その結果、析出物の直径が 1.0[nm] のときは、隙間が 0 以外の場合いずれも初期に転位が析出物方向に引き寄せられ、その後すぐに析出物位置より 4.0[nm] 程度はなれた点で一時的に停滞する挙動を示すこと、また隙間が 0.5[nm] と小さなとき、らせん転位がすべり面を変え、析出物と母相の界面に沿って通過したことなどが示された。一方、析出物の直径を 2.0[nm] とした場合は上記とは逆に転位が動き出す時間は隙間を 0 とした系が最も早かった。臨界せん断応力に達して転位が動き出すのは析出物直径が 1.0[nm] のときよりももう少し後の時点であり、この「フライング」は析出物の引力によるものと結論付けられる。

参 考 文 献

- (1) H.Kishimoto, R.Kasada, O.Hashimoto, and A.Kimura, *Journal of Nuclear Materials*, **386** (2009),533.
- (2) A.V. Krajnikov, A.N.Demidik and H.M.Ortner, *Materials Science and Engineering A*, **234-236** (1997),357-360.
- (3) D.K. Mukhopadhyay, F.H. Froes, D.S. Gelles, *Journal of Nuclear Materials*, **258-263** (1998), 1209-1215.
- (4) P. Pareige, M.K. Miller, R.E.Stoller, D.T.Hoelzer, E.Cadel, B.Radigueta, *Journal of Nuclear Materials*, **360** (2007), 136-142.
- (5) R.L.Klueh ,J.P.Shingledecker, R.W.Swindeman, D.T.Hoelzer, *Journal of Nuclear Materials*, **341** (2005),103-114.
- (6) H.S.Cho, A.Kimura, S.Ukai, M.Fujiwara, *Journal of Nuclear Materials*, **329-333** (2004), 387-391.
- (7) Shigeharu UKAI, Takanari OKUDA, Masayuki FUJIWARA, Toshimi KOBAYASHI, Syunji MIZUTA and Hideharu NAKASHIMA, *Journal of NUCLEAR SCIENCE and TECHNOLOGY*, **Vol. 39, No. 8** (2002),872-879.
- (8) Zibib, H.M., Rhee, M.and Hirth, J.P., On Plastic Deformation and The Dynamics of 3D Dislocations, *Int. J. Mech. Sci.*, **40-2-3** (1998), 113-127.
- (9) Van der Giessen, E. and Needleman, A., Discrete Dislocation Plasticity, *Modeling Simulation Mater. Sci. Eng.*, **3** (1995), 689-735.
- (10) B. Bako, D.Weygand, M.Samaras, J.Chen, M. A.Pouchon, P.Gumbsch and W. Hoffelner, *Philosophical Magazine*, **87** (2007),3645-3656.
- (11) 赤星 保浩, 福田 忠生, 原田 昭治, 学術講演会講演論文集, **50**, (2001), 277-278.
- (12) AOKI Yuji, TAKAHASHI Akiyuki, KIKUCHI Masanori, *JSME annual meeting 2006(6)*, (2006), 57-58.

- (13) 鈴木雄風, 屋代如月, 富田佳宏, 刃状およびらせん転位とミスフィット転位の転位芯相互作用: 分子動力学による解析. , 日本機械学会論文集, A 編, 73-735 (2007), 1217-1224.
- (14) Ihata Katsuyoshi, Okazaki Hideo, Molecular Dynamics Simulation of YSZ by Shell model potential, *Abstracts of the meeting of the J. Phys. Sectional meeting* 2(1996), 308
- (15) Luo,W., Roundy,D., Cohen,M., Morris Tr,J.W., *Phys. Rev. B*, **66** (2002), 094110.
- (16) 北川浩, 渋谷陽二, 北村隆行, 中谷彰宏, 初心者のための分子動力学方, (1997), 養賢堂.
- (17) 上田顯, コンピューターシミュレーション, (1990), 朝倉書店.

付録 A 関連学術講演

睦門賢憲, 山本智, 屋代如月

”LJ ポテンシャルによる Fe 中の転位と Y₂O₃ 析出粒子の相互作用評価”
第 14 回分子動力学シンポジウム, 愛媛県県民文化会館, (2009.5)

睦門賢憲, 山本智, 屋代如月

”析出割合を変えた酸化イットリウム含有鉄の引張シミュレーション”
日本機械学会関西支部第 85 期定時総会講演会, 神戸大学, (2010.3)

睦門賢憲, 屋代如月

”転位と酸化イットリウムの短距離相互作用の定量的評価”
日本機械学会第 23 回計算力学講演会, 北見工業大学, (2010.9)

md

kansai

cmd

謝 辞

本研究を遂行するにあたり，懇切丁寧なご指導賜りました田中克志教授，木之下博助教授に深甚な感謝の意を表します．日頃の研生活および姿勢に対して幅広い視点から御助言・御協力頂きました屋代如月准教授に深く感謝致します．浅学な著者が論文執筆を完遂することができたのも先生に休日，平日を問わず親切丁寧にご指導いただいた事によるものでした．更には，阪上隆英教授，長谷部忠司准教授の有益な御教示や福井工業大学工学部機械工学科富田佳宏教授の広い御見識と暖かな御人柄に導かれたことは，著者にとって無類の幸福でありました．研究活動が円滑に行えるように研究環境の整備に御尽力して頂きました古宇田由夫技官に厚くお礼を申し上げます．本研究を遂行する上で，数々の御支援と御協力を頂きました諸先輩方に深く感謝致します．また，日々の生活において，励まし合い，時には刺激し合った同期の相賀裕太郎君，芦田雅樹君，蟹川准君，坂田了介君，岸本和也君，常見祐介君，福田晃司君，村上智宣君，望月利紀君に感謝致します．

最後に，六年間の大学生活に対して精神的にも経済的にも多大なる支援と理解頂いた父母，家族に感謝と敬意の意を表しましてここに記します．

平成 23 年 2 月 睦門 賢憲