

一般化積層欠陥エネルギーと転位芯構造を用いた析出強化機構の検討

— 溶質原子クラスター形成による圧力容器脆化機構解明 —

背景

現在軽水炉の運転期間長期化が計画されており、原子炉圧力容器の構造健全性を確保するためには同容器鋼の脆化機構を解明することが重要である。銅含有量の多い圧力容器鋼では中性子照射により Cu 原子を主体とする溶質原子クラスター（Cu クラスター）が形成され、これが転位運動の障害物となることで材料が硬化または脆化する（これを析出強化という）と理解されている（図 1）。しかし Cu クラスターが障害物として働くメカニズムや、降伏応力などマクロな物性値との関係が必ずしも明らかでないため、コンピュータシミュレーションを用いて、Cu クラスターと転位の相互作用を明らかにする必要がある。

目的

体心立方構造（BCC）の Fe と Cu における一般化積層欠陥エネルギー（Generalized Stacking Fault Energy: GSFE）（図 2）を計算し、Fe および Cu 中における転位芯^{*1}の構造を明らかにすること。また、転位動力学法により析出強化のメカニズムを検討すること。

主な成果

本研究では、まず第一原理計算および古典分子動力学法により GSFE を計算し、そこで得られた値を用いて、転位芯の構造を決定した。また、転位芯構造を考慮した転位動力学計算を行うことによって、圧力容器鋼材中に Cu クラスターが存在することによる降伏応力の増加量を予測した。本研究の特徴は転位芯構造を考慮した転位動力学計算を圧力容器鋼材に適用した点である。以上の手法により以下のような成果を得た。

1. Fe と BCC-Cu^{*2}の GSFE を第一原理計算により計算した（図 3）。BCC-Cu の GSFE が Fe に比べて低い値となることが分かった。
2. 第一原理計算から得た GSFE を用いて Fe と BCC-Cu における刃状転位の転位芯構造を計算した（図 4）。Fe 中に比べると BCC-Cu 中では転位芯の幅が広がることが分かった。
3. 第一原理計算から得た GSFE を用いて転位芯構造を考慮した転位動力学解析を行い Cu クラスターが存在することによる降伏応力の増加量を計算した。計算結果は Cu クラスターの存在する Fe の降伏応力の実験結果とよく一致した（図 5）。転位芯の広がりや考慮することで実験値と一致したことから、析出強化には母材と Cu クラスター中における転位芯構造の違いが重要な役割を果たしていることが確認できた。

*1 ひずみが弾性的では無くなる転位線近傍の領域。材料により異なるが、転位線から 1-2 nm 程度の領域。

*2 Cu の結晶は常温で FCC 構造であるが、Fe 中に析出した Cu で特に微小なものは BCC 構造をとる。原子炉圧力容器鋼では数 nm 程度の微小クラスターしか観察されないため BCC-Cu のみについて考慮すればよい。

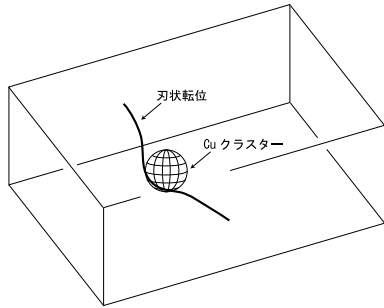


図 1 刃状転位と Cu クラスタの配置のイメージ。刃状転位は Cu クラスタによって移動が阻害される。

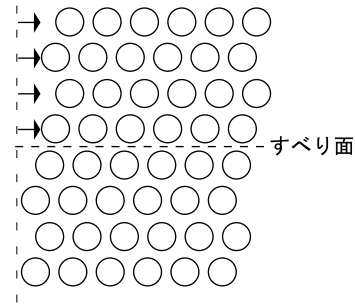


図 2 一般化積層欠陥のイメージ。原子を O で示す。すべり面を境として任意の距離だけ変位させることで一般化積層欠陥が形成され、その形成に必要な単位面積辺りのエネルギーとして GSFE が定義される。

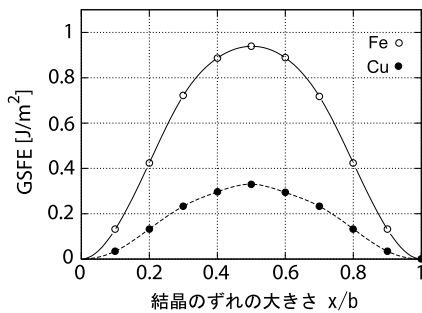


図 3 第一原理計算を用いて計算した Fe と BCC-Cu の GSFE を示す。横軸は転位のバーガースベクトル b を単位としている。

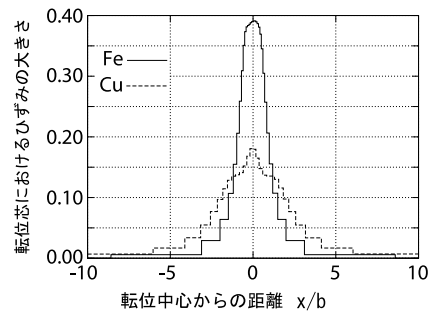


図 4 第一原理計算を用いて計算した Fe と BCC-Cu の転位芯密度。密度は積分値が b となるように規格化されている。

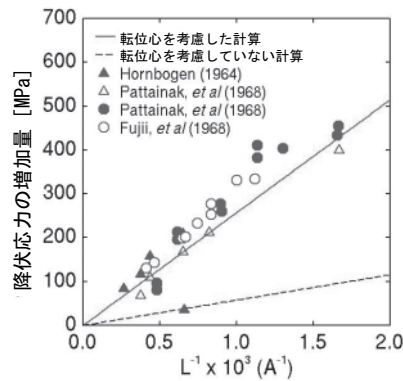


図 5 転位動力学法を用いて求めた Cu クラスタの存在する Fe における降伏応力の増加量と実験値の比較。Cu クラスタサイズが 2 nm の場合について示す。●○▲印はそれぞれ実験値を示し、実線は転位を小転位の集合体としてモデル化する新しい手法による結果、点線は従来の転位を単一の線としてモデル化した場合の結果を示す。L はクラスタ間の平均距離を表す。

研究報告 Q08023	キーワード：原子炉压力容器，照射脆化，銅濃縮クラスタ，転位
担当者	中島 健一（材料科学研究所 原子力材料領域）
連絡先	（財）電力中央研究所 材料科学研究所 Tel. 046-856-2121（代） E-mail: msrl-rr-ml@criepi.denken.or.jp