

溶質原子クラスター形成による原子炉压力容器鋼の照射脆化機構の計算科学的検討

- 三元系鉄合金 (FeCuNi, FeCuSi, FeNiSi) の転位芯構造と剛性率 -

キーワード：原子炉压力容器，一般化積層欠陥エネルギー，第一原理計算， 報告書番号：Q12010
転位芯構造，溶質原子クラスター

背景

原子炉压力容器鋼は運転中の中性子照射を受けて靱性が低下する（照射脆化）。照射により鋼材中に形成される銅、ニッケル、シリコン、マンガンから成る溶質原子クラスターは照射脆化の主要因の1つと考えられており、鋼材の脆化量は溶質原子クラスターの体積率の平方根と概ね良い相関を持つことが知られている。一方で、単純な化学組成を持つモデル合金の熱時効実験では、脆化量に相当する硬化量では溶質原子クラスターの体積率に加え化学組成の影響が認められる。高照射量領域での脆化予測の精度向上を図る上で、溶質原子クラスターの化学組成が脆化に与える影響を転位との相互作用の観点から詳細に検討する必要がある。

目的

鉄中に銅、ニッケル、シリコンのうちの二元素を添加した剛性率を第一原理計算により求め、熱時効した压力容器鋼モデル合金の硬化量の評価を行う。また三元合金の一般化積層欠陥エネルギー^{*1} (GSFE) を第一原理計算により求め、剛性率の違いが脆化に与える影響を明らかにする。

主な成果

- 熱時効した压力容器鋼モデル合金 (0.5wt%Cu をベースに Ni と Si を添加) の硬化量は溶質原子クラスターの体積率だけでは説明できない^[2]が (図 1 (a))、第一原理計算の結果をもとに銅の含有量から推定した溶質原子クラスターの剛性率を用いて硬化量を評価することで、実験値と良い相関が得られた (図 1 (b))。
- 体心立方構造の種々の三元系鉄合金における剛性率 (表 1) と GSFE を用いて小転位モデル^{*2}により三元系鉄合金の転位芯構造を計算した (図 2)。鉄中に比べ Fe-25Cu25Si では転位芯の広がりが大きくなっており、転位がこの組成を持つ溶質原子クラスターを通過する場合には転位が離脱しにくくなると考えられる。図 2 で Cu と Si のクラスターにおける硬化量が推定値よりも大きくなっている原因の一つと考えられる。

^{*1} 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が形成され、その形成に必要な単位面積当たりのエネルギーが定義される。

^{*2} 転位を小転位に分解し、転位芯構造を多段階ステップ関数で近似するモデル。

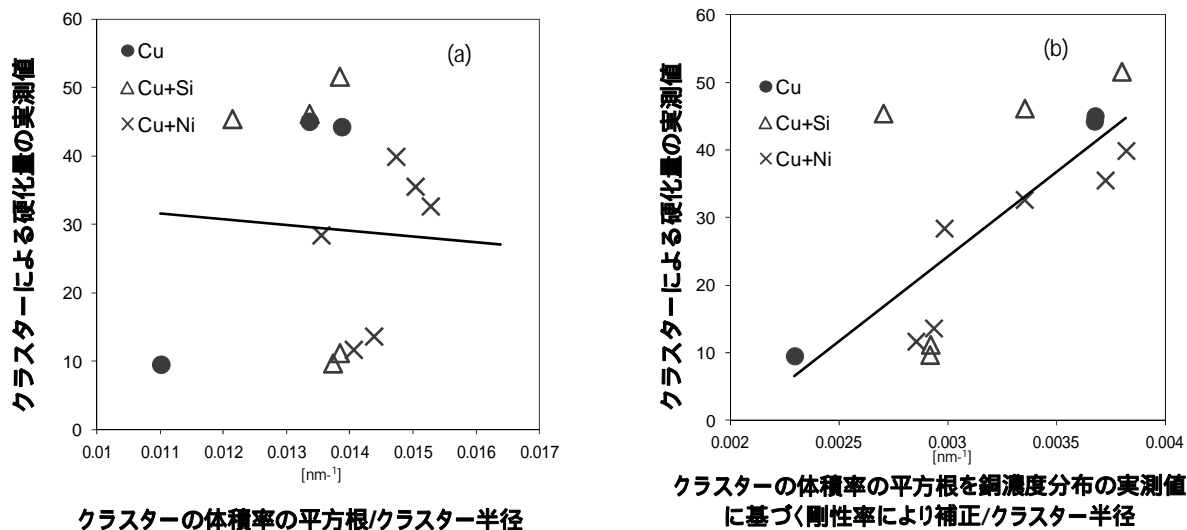


図1 硬化量と体積率の平方根の相関

溶質原子クラスターの実測値の銅の組成を元に第一原理計算により計算した剛性率により補正を行うことで正の相関が認められる。Siにより硬化が増えているのは転位芯の構造による影響が考えられる。残るデータのばらつきの原因はクラスター内における元素の分布の違いが原因と考えられる。

表1 体心立方構造の Fe, Fe-50Cu, Fe-50Ni, Fe-50Si, Fe-25Cu25Ni, Fe-25Cu25Si, Fe-25Ni25Si の剛性率(せん断弾性係数)の計算値

	剛性率 (GPa)
Fe	76.6
Fe-50Cu	45.0
Fe-50Ni	49.2
Fe-50Si	103
Fe-25Cu25Ni	30.7
Fe-25Cu25Si	167
Fe-25Ni25Si	79.0

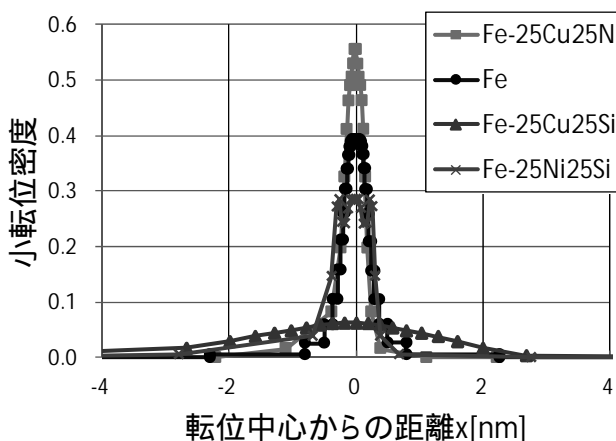


図2 体心立方構造の Fe, Fe-25Cu25Ni, Fe-25Cu25Si, Fe-25Ni25Si の転位芯の広がり。密度は積分値がパーガースペクトルbとなるように規格化している。

関連研究報告書	[1]Q11021 「一般化積層欠陥エネルギーを用いた溶質元素の転位芯構造の計算—二元系鉄合金の転位芯構造—」 [2]Q11026 「熱時効された圧力容器モデル合金の硬果に及ぼす固溶元素の影響」
研究担当者	大沼 敏治 (材料科学研究所 構造材料領域)
問い合わせ先	電力中央研究所 材料科学研究所 研究管理担当スタッフ Tel. 046-856-2121(代) E-mail : msrl-rr-ml@criepi.denken.or.jp

報告書の本冊(PDF版)は電中研ホームページ <http://criepi.denken.or.jp/> よりダウンロード可能です。

[非売品・無断転載を禁じる] ©2013 CRIEPI 平成25年5月発行

12 - 021