

9-3 鉄の変形を原子の動きから理解する

—原子シミュレーションによるらせん転位の運動と結晶すべり面変化の解析—

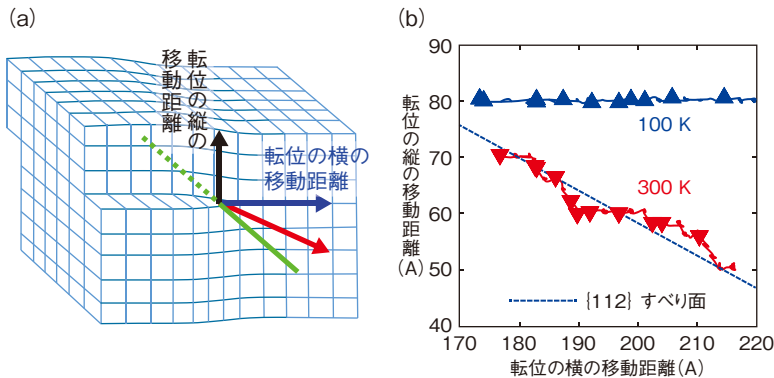


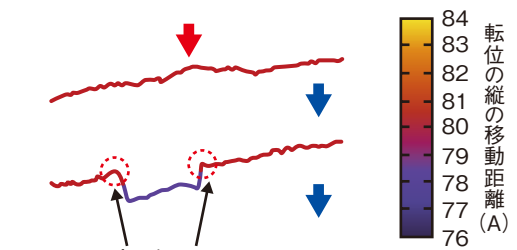
図9-5 鉄結晶のすべりによるらせん転位の移動

(a) は結晶中のらせん転位を概念的に示したもので、 \cdots で示した位置に転位線が存在します。鉄結晶において、低温では \rightarrow の方向に横に転位が進みますが、温度が高くなると縦の成分が加わり進行方向が \rightarrow のように変化します。結晶のすべり面は転位の移動面ですので、温度が上昇すると結晶のすべり面が変化することになります。(b) は転位位置の変化をシミュレーションしたものです。100 Kの場合、横にまっすぐ進んでいくのに対し、300 Kの場合、縦方向にも転位位置が進んでいき、実験で観察された現象を再現することが分かりました。

金属の変形は大まかに弾性変形と塑性変形の2種類に分けることができます。弾性変形の場合、ばねの変形のように金属に加えている力を元に戻せばその変形も元に戻ります。塑性変形の場合には、金属内部の結晶面がすべってしまい元には戻りません。鉄は低温において脆くなる性質がありますが、結晶がすべりにくくなること、すなわち塑性変形しにくくなるのが原因であると考えられています。低温での鉄の塑性変形の多くは、図9-5 (a) に示したらせん転位と呼ばれる線状の格子欠陥がある結晶面を移動することによって起き、この結晶面はすべり面と呼ばれています。らせん転位が移動するためのしきいエネルギー値が高いことが、鉄の低温での塑性変形しにくさ、すなわち脆さの原因になっています。

さて、鉄の結晶学的なすべり面は量子力学的な計算によって求めることができ、その結果は低温の実験結果に一致しています。しかしながら、温度を室温程度に上げていくにしたがって理論値からずれていくことが知られています。具体的には低温では図9-5 (a) において青い矢印のようにらせん転位が横にまっすぐ進みますが、温度が上がるにしたがってその方向が赤い矢印のように変化します。鉄は非常に身近な材料で、その機械的特性は工学的にも重要であるにもかかわらず、この現象のメカニズムはまだ理解されていません。そこで私たちはスーパーコンピュータを用いて、原子シミュレーション法によってこの温度変化の研究を行いました。

原子シミュレーション法では原子間力を計算するモデルが必要で、量子学的計算結果をフィッティングして

図9-6 原子シミュレーションによる鉄結晶中のらせん転位線の時間変化 (\rightarrow は時間変化を表す)

温度が高くなると \rightarrow で示したように転位線に揺らぎが生じ、それが引き金となって転位のある部分が一つ下の結晶面に張り出し、最終的には転位線全体が下に移動し、縦の移動成分が加わります。このように転位が縦に移動することを交差すべりといいます。図の中央部分のように転位の一部が張り出した部分はキンクペアと呼ばれます。交差すべりがキンクペアによって起きることを初めて計算で示しました。

作成したものを使用しました。図9-5 (b) は、シミュレーションの結果を示したもので、100 K ではらせん転位が横にまっすぐ進んでいくのに対し、300 K では{112}面と呼ばれる面に沿って斜めに進んでおり、実験で知られている現象を再現することができました。図9-5 (b) を詳しく見ると転位の位置が平均して2回に1回、一つ下層に移動しています。このような現象を交差すべりといいます。これが高温で転位の縦の移動成分が観測される原因と考えられます。高温における交差すべりの現象を詳細に調べたところ、図9-6 に示すように、揺らぎによって転位のある部分だけが別の層に移動して、それをきっかけとして、らせん転位全体が別の層に移動することが分かりました。すなわち、温度の上昇による格子振動の増加が原因となって、交差すべりが生じ、図9-5 で示したような実験で観測されているすべり面変化が起きていと理解できます。

原子力材料は経年変化によって徐々に脆くなりますがその原因はよく分かっていません。らせん転位は金属が脆くなる現象のパズルを解くための重要な部品です。今回の研究成果は基礎科学的なものです。金属の破壊現象など原子力材料研究の要となる研究に応用可能です。

本研究は、日本学術振興会科学研究費補助金基盤研究(C) (No.26420865) 「原子炉構造材の強度劣化評価に資する照射欠陥-転位相互作用の研究」の助成を受けた、福井大学との共同研究による成果です。

(鈴木 知明)

●参考文献

Suzudo, T. et al., Analyzing the Cross Slip Motion of Screw Dislocations at Finite Temperatures in Body-Centered-Cubic Metals: Molecular Statics and Dynamics Studies, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, vol.27, no.6, 2019, p.064001-1-064001-15.