



Title	Atomistic simulation study of the radiation resistance of high/medium entropy alloys
Author(s)	Li, Yangen
Citation	大阪大学, 2023, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/92983
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

Abstract of Thesis

Name (Li Yangen)	
Title	Atomistic simulation study of the radiation resistance of high/medium entropy alloys (高・中エントロピー合金の照射損傷に関する原子論的研究)
<p>Abstract of Thesis</p> <p>High/medium entropy alloys (H/MEAs), a new class of alloys, have attracted extensive attention because of their outstanding properties, such as high strength, high tensile ductility and good corrosion. In particular, their excellent radiation resistance makes them possible to be applied to the materials used in nuclear plant. However, the mechanism of the excellent radiation resistance of H/MEAs have not been fully understood. In order to fundamentally understand the properties of H/MEAs and facilitate the development of high-performance H/MEAs, in this work, we have used a variety of atomic simulation methods, including density function theory (DFT), molecular dynamic (MD) and Monte Carlo (MC) to systematically study the surface radiation resistance and internal defects evolution of CoNiCrFeMn HEA. We have also further studied the chemical ordering effect on the radiation resistance of CoNiCrFeMn HEA, as well as the chemical domain structure in CrCoNi MEA and its effect on vacancy and interstitial diffusion behavior.</p> <p>Surface radiation results show that compared to pure Ni, CoNiCrFeMn HEA has less defects during a single primary knock-on atom (PKA) process, and the average depth of defects distribution is shallower. For the consecutive radiation bombardments, CoNiCrFeMn HEA also exhibits much higher surface radiation resistance. Even under extreme irradiation flux, the number of defects in CoNiCrFeMn HEA is much less and stable and suggesting good surface radiation resistance, while in the pure Ni, the formation of dislocation will lead to a boost of defects. As for the internal radiation results, compared to pure Ni, less defects and dislocations are produced in the CoNiCrFeMn HEA, and interstitial cluster have much smaller mean free path (MFP) and exhibit a 3-D motion during migration. The 3-D motion of interstitial cluster in HEA will increase the opportunity of recombination of interstitial and vacancy, which may explain the mechanism of good radiation resistance in HEAs.</p> <p>We further studied the chemical ordering of CoNiCrFeMn HEA and its effect on radiation resistance. The hybrid MD – MC annealing simulation results show that a Cr-rich region will form in CoNiCrFeMn HEA at a lower temperature of 600 K; whereas, annealing at a higher temperature of 1100 K will form a chemical short-range order (CSRO). MD radiation damage simulation shows that the Cr-rich region accelerates the aggregation and evolution of defects, facilitating more dislocation formation. On the other hand, the CSRO effectively delays the growth of defect number and tends to reduce the dislocation density and defect diffusion, suggesting enhanced radiation resistance. The CSRO structure will be destroyed by radiation damage, thus the enhanced radiation resistance will disappear in due time. Therefore, we propose a CSRO radiation damage – diffusion healing competition model, which can help us to better understand and design radiation resistance of HEAs with CSRO.</p> <p>Finally, chemical domain structure and its effect on defect (interstitial and vacancy) diffusion are studied in CrCoNi MEA. A machine learning neural network potential (NNP) based on the DFT training dataset is used to accurately describe interatomic interactions in CrCoNi MEA. After annealing below 800 K, long-range chemical domain structures will form in CrCoNi MEA. Defect diffusion MD simulation results show that the formation of chemical domain structures could reduce mean squared displacement (MSD) of defect diffusion process, which leads to the sluggish diffusion of the defects. Investigating the correlation between defect diffusion region and the distribution of chemical domain structures, chemical domain structures could limit defect diffusion region and lead to inhomogeneous diffusion, which is the origin of the sluggish diffusion.</p>	

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 (Li Yangen)	
	(職) 氏 名
論文審査担当者	主査 教授 尾方成信
	副査 教授 垂水竜一
	副査 教授 中村篤智

論文審査の結果の要旨

Li Yangen氏の博士論文は高・中エントロピー合金が耐照射損傷性に優れていることを原子論的解析を用いて明らかにした研究成果をまとめたものである。

高強度、高強度、高延性、高耐食性などの優れた特性を有する高中エントロピー合金 (H/MEA) は、これまでの合金と比較して耐放射線性に優れていることから、原子力プラントに使用する材料として期待されている。しかし、H/MEAの耐照射損傷が高い理由は、これまで十分に理解されていない。

本研究では、それを根源的に解明するためにまず、密度汎関数理論(DFT)、分子動力学(MD)、モンテカルロ法(MC)などの様々な原子シミュレーション手法を用いて、CoNiCrFeMn HEAの表面の耐照射損傷性と内部欠陥の発展、CoNiCrFeMn HEAの耐照射損傷性に及ぼす化学秩序の効果、CrCoNi MEAの化学ドメイン構造が空孔や格子間原子の拡散挙動に及ぼす影響を明らかにした。具体的には、CoNiCrFeMn HEAは純Niに比べて、照射時の欠陥生成が少なく、欠陥が生成する平均深さが浅いため。高い表面耐照射損傷性を示すことを明らかにした。

さらに、CoNiCrFeMn HEAが有する化学秩序構造とそれが耐照射損傷に与える影響を明らかにした。MC/MDハイブリッドアニールシミュレーションの結果、CoNiCrFeMn HEA中に、600Kの低温アニールではCrリッチな領域が形成されるのに対し、1100Kの高温アニールでは化学的短距離秩序(CSRO)が形成されることを明らかにした。さらに、MDシミュレーションにより、Crリッチ領域では欠陥の凝集と欠陥場の発展が促進する一方で、CSROが形成された場合は欠陥数の増加が遅くなることで、転位密度と欠陥拡散が減少し、耐照射損傷性が向上することを明らかにした。

最後に、CrCoNi MEAの化学的秩序構造と欠陥(格子間及び空孔)拡散への影響を明らかにした。高精度な機械学習ニューラルネットワークポテンシャル(NNP)を用いて、CrCoNi MEAの原子間相互作用を正確に記述し、800K以下でこのMEAをアニールすると、長距離化学秩序構造が形成されることを示した。さらに、分子動力学法による欠陥拡散解析を行い、化学秩序構造の形成は欠陥拡散の平均二乗変位(MSD)を減少させ、欠陥拡散を遅くすることを明らかにした。欠陥拡散領域と化学秩序構造の空間相関を調べた結果、化学秩序構造が、欠陥拡散領域を制限し、不均一拡散を引き起こすことで、平均的な拡散速度が遅くし、高い耐照射損傷をもたらしていることを示した。

令和5年8月3日に審査委員会を開き、Li Yangen氏に博士論文の内容について説明を行わせ質疑・討論および口頭試問を行った。論文の内容はこの分野の進展に寄与する十分な新規性を有していることから博士（工学）の学位論文として価値のあるものと認める。