

第一原理手法によるBCC鉄転位芯の解析

先進・創出分野

放射線損傷に伴う材料の物性変化と破壊の微視的シミュレーション
プロジェクト責任者: 蕪木英雄 (日本原子力研究開発機構)

-- Earth Simulator Challenge --

清水大志 日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター
尾方成信 大阪大学大学院工学研究科
付属原子分子イオン制御理工学センター
山口正剛 日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター
君塚肇 (株) 日本総研ソリューションズ サイエンス事業部
叶野琢磨 日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター
蕪木英雄 日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター

最終目標:

金属材料の水素脆化の機構解明

- ・現象の発見より130年以上、脆化機構は不明
- ・高強度鋼の遅れ破壊
- ・原子炉内構造物の応力腐食割れ

水素脆化機構

- ・水素と転位の相互作用による転位移動度の増加
→ 水素脆化を促進する塑性変形の影響を解明

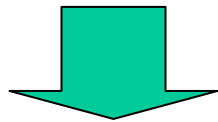
地球シミュレータ目標:

- ・精密な第一原理計算を用いたBCC金属(Mo, Fe)中
らせん転位の転位芯構造及びパイエルス応力を決定する
- ・第一原理計算による水素による転位移動度の増加を
決定する

BCC 金属 : Fe, Mo, Ta, V, Cr, Nb, W

低温で脆性的

らせん転位 $a/2\langle 111 \rangle$ の正確な転位芯の構造及びパイエルス応力の決定がBCC金属の塑性変形、破壊の解析に必要

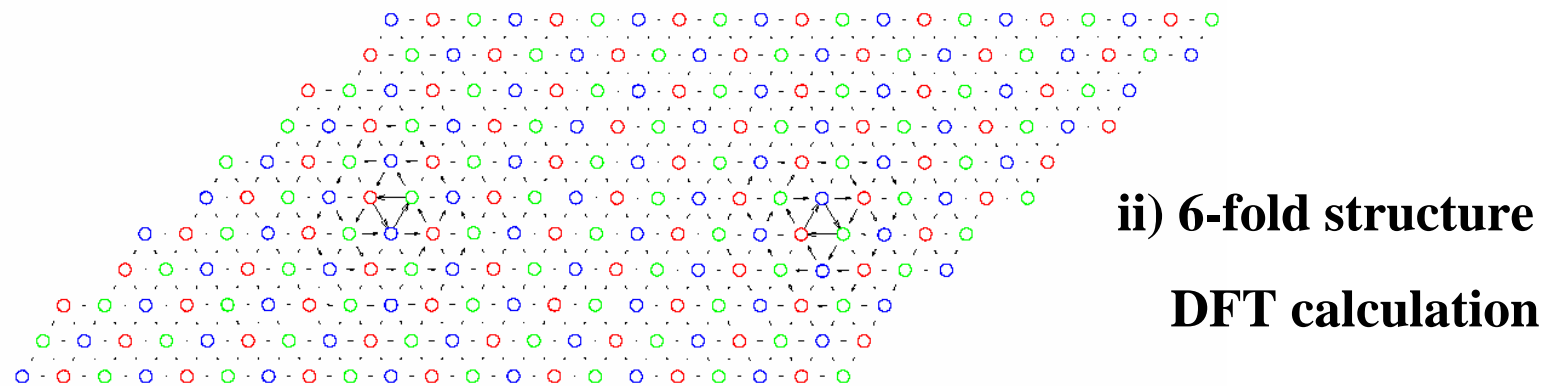
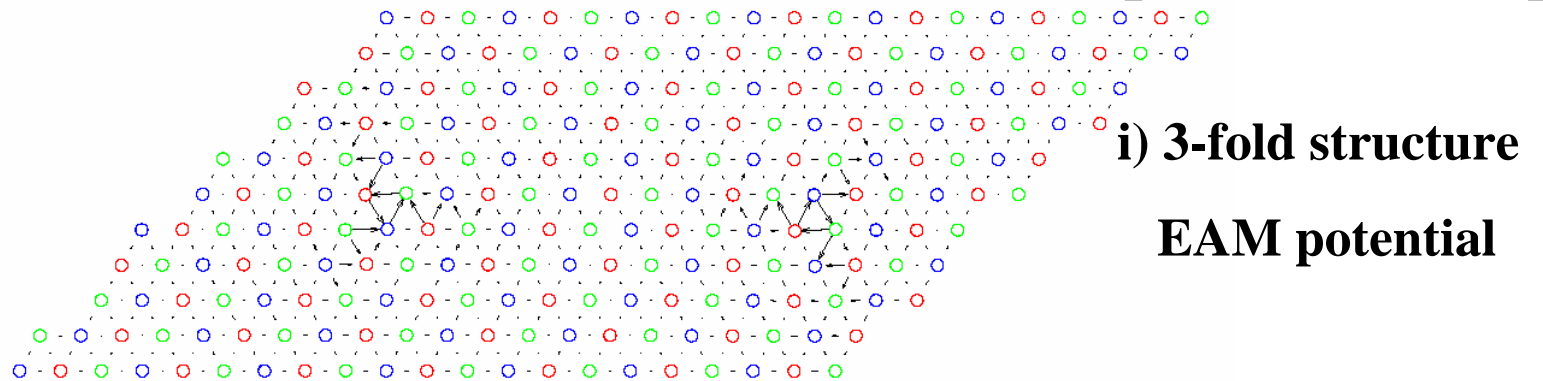


まだ決定的な結論は得られていない

1. 実験による観察・測定 => 困難
2. 計算による方法 => 結果は原子間ポテンシャル及び境界条件に依存する

BCC構造金属(Mo, Fe)中のらせん転位芯構造

(1) 計算手法により2つの構造(Differential Displacement -map)



(2) パイエルス応力も計算手法・条件に依存

2.1 GPa (DFT, Woodward et al.) ~

3.8 GPa (Tight – Binding, Wang et al.)

第一原理計算(DFT)による

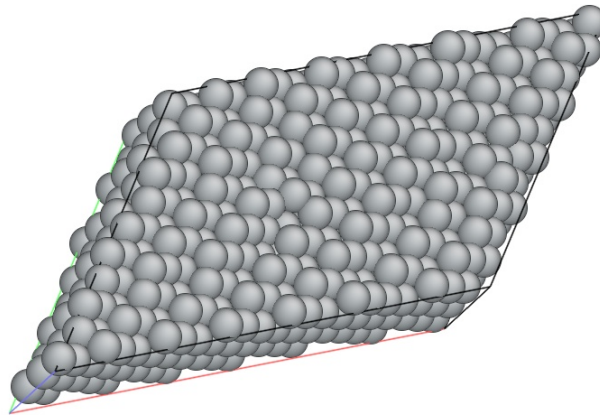
らせん転位芯構造、パイエルス応力の決定

- ・ 正確な全エネルギーの計算

=> **VASP** (Vienna Ab-initio Simulation Package)

DFT: PAW-PBE

- ・ 境界条件、スーパーセル(2つのらせん転位の配置、ひずみの影響) => 検討済み



231 atom supercell

- ・ 計算条件を明確にする (数値誤差の正確な見積もり)

=> 平面波とk点収束性のチェック

計算コストについて

モリブデン(Mo):

k点サンプリング数を $1 \times 1 \times 20$ として次の結果を得ている

- ・転位芯構造は6-fold
- ・パイエルス応力は1.8GPa

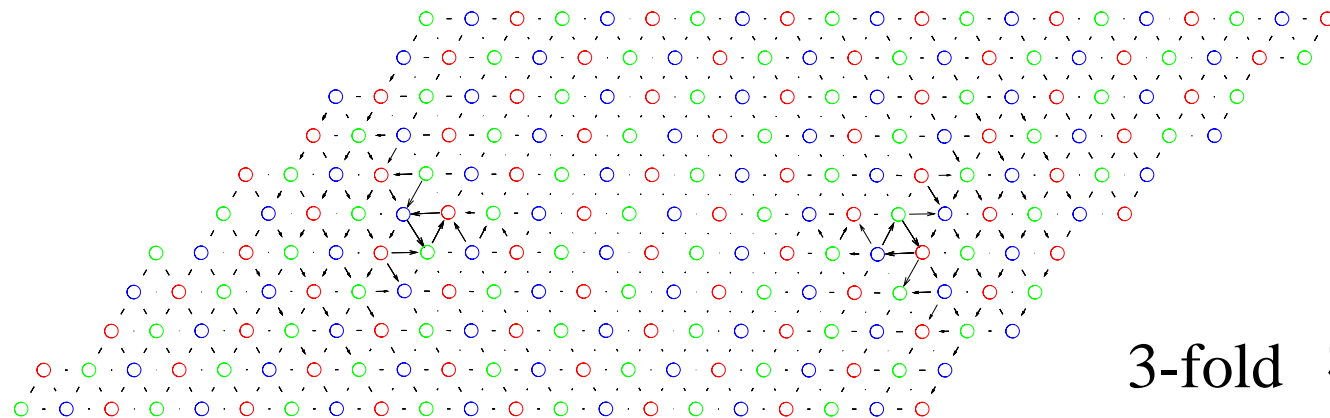
(従来の第一原理計算の結果より低い)

鉄(Fe):

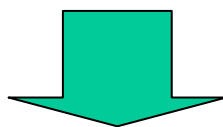
- ・スピン自由度は2(Moは1)
- ・電子系の反復計算の収束性が悪い
(Moの約5倍の反復回数)

→ k点サンプリング数を $1 \times 1 \times 4$ として、
転位芯構造及びパイエルス応力を評価

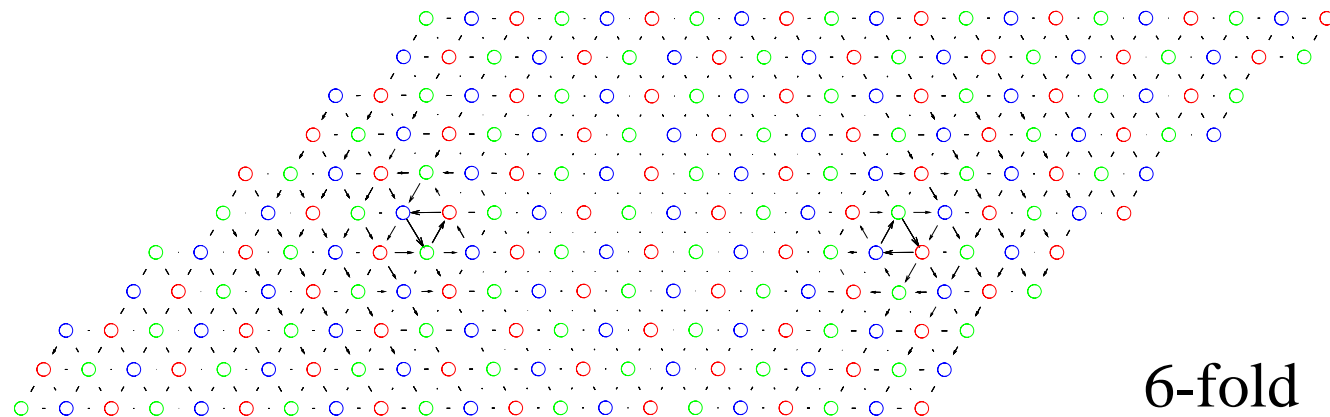
1x1x4 k-points による鉄らせん転位芯構造の緩和計算結果



3-fold 構造



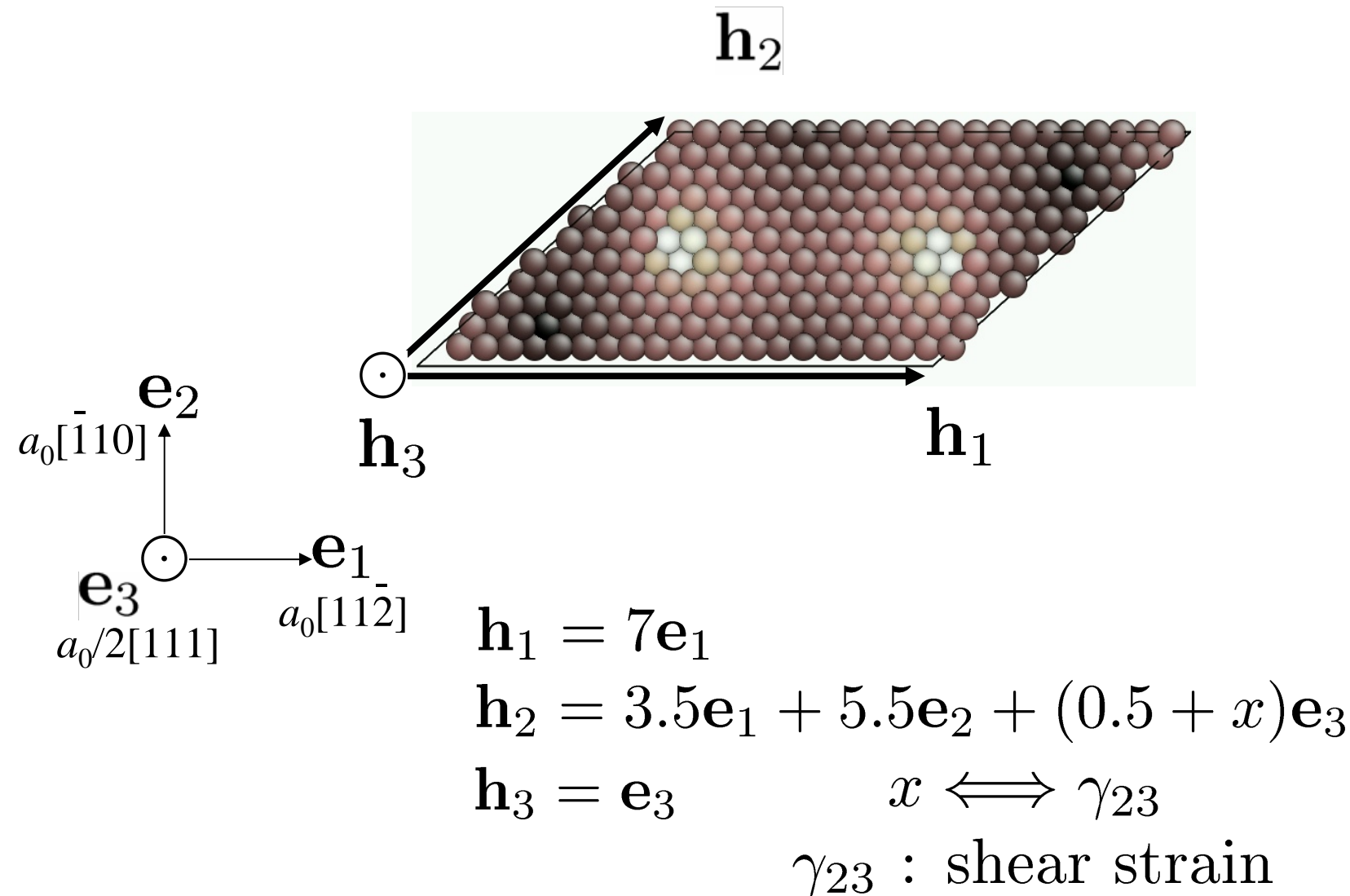
緩和



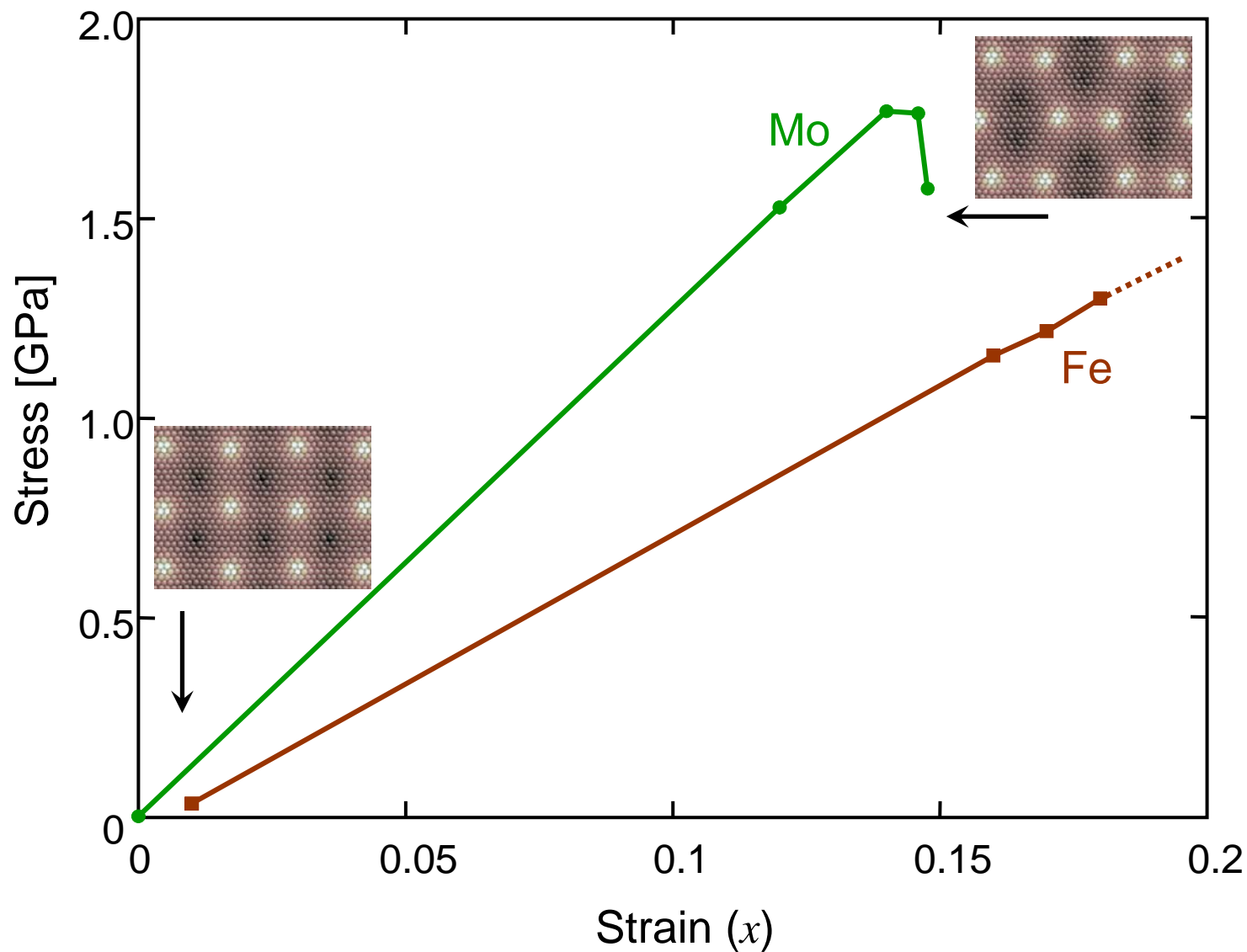
6-fold 構造

6-fold構造が得られた

せん断変形に対するらせん転位の不安定性 - パイエルス応力



せん断変形に対するらせん転位のパイエルス応力の決定



今年度の成果:

- ・精密な第一原理計算を行い、鉄中のらせん転位芯構造を6-fold構造と決定した
- ・せん断変形に対する鉄中のらせん転位の不安定化に関する精密な第一原理計算を行い、転位が移動を開始する臨界のひずみがモリブデンより高いことを確認した

今後の目標:

- ・第一原理計算による水素による転位移動度の増加測定する