

機関番号：17102

研究種目：基盤研究 (C)

研究期間：2008～2011

課題番号：20560616

研究課題名 (和文) 異方性弾性論の数理解明と格子欠陥のための計算コード作成

研究課題名 (英文) Study on anisotropic elasticity theory and development of computer code for lattice defects

研究代表者

大澤 一人 (Ohsawa Kazuhito)

九州大学・応用力学研究所・助教

研究者番号：90253541

研究分野：工学

科研費の分科・細目：材料工学・金属物性

キーワード：格子欠陥・計算材料物理・照射損傷

### 1. 研究計画の概要

(1) 材料として利用されている物質のほとんどが異方性弾性体である。しかしながら、異方性弾性論に基づく解析はその理論の複雑さのために敬遠されてきた傾向がある。本研究ではまず異方性弾性論の数理解明を目的とし、同時に解析に役立つ計算コードの開発を目的としている。(2) さらに格子欠陥の計算に関連してマルチスケールシミュレーションが有効と考えられている。それは、欠陥に近い歪の大きい領域は第一原理計算で処理し、欠陥から遠い領域の計算は弾性論や経験ポテンシャルを用いることで、大きな系でより正確な計算をしたのと同じ効果を得ようとする計算方法である。本研究は格子欠陥の弾性論的な扱いの研究を目的としているのでマルチスケールシミュレーションは重要な応用の1つである。(3) 近年の計算機の発達により第一原理計算が可能になった上にそのための汎用コードを使えるようになった。第一原理と弾性論的な扱いをする領域を組み合わせたマルチスケールシミュレーションを研究する予定である。

### 2. 研究の進捗状況

(1) 異方性弾性体中の任意の形状をした転位ループの周囲に作られる応力場を計算するための積分表式はMuraの公式と言われている。Muraの積分表式を直接積分することで応力関数が得られることが証明できた。本研究で得られた応力関数はMuraの公式と被積分関数を形式的に置き換えるだけなので見通しがよく簡単である特徴がある。異方性弾性体の中にある転位ループ間の相互作用エネルギーはそ

の応力関数から導出される。その具体的な積分形式は転位線に沿った線積分と単位円上の周回積分の合計三重積分の形式になった。(論文①と③参照) 転位ループ間の相互作用エネルギーを得るには数値積分をする必要があるが、そのための計算コードを作成した。転位に関する情報：転位線の通過する座標、Burgersベクトルの大きさや向き、異方性弾性体の弾性定数、の情報を入力することで計算できる。(2) マルチスケールシミュレーションのために第一原理計算のための汎用計算コードVASPを使った計算を始めた。空孔とその周辺の原子構造の計算をBCC金属(鉄、タングステン)について行った。鉄は最も利用されている金属、タングステンは核融合炉材料として期待されているため選んだ。空孔だけの構造と空孔に水素が捕獲された状態(空孔水素複合体)の構造を計算した。その結果、BCC金属の空孔には6個程度の水素しか捕獲されないことが定説であったが、タングステン空孔には12個もの水素が捕獲されることがわかった。(論文②参照) これは空孔内部の水素は0-siteが安定と思われてきた定説を覆す重要な発見であると考えられる。

### 3. 現在までの達成度

おおむね順調に進展している(理由)異方性弾性体中の転位ループに関する応力関数および応力場の計算方法がわかった。また、その数値計算による計算コードも完成した。これより当初の予定はおおむね達成できたと考える。さらにマルチスケールシミュレーションのため第一原理計算を始めたことで金属水素系の研究に貢献できた。

#### 4. 今後の研究の推進方策

転位ループの作る応力場およびそれを数値計算するための計算コードは作成された。今後は異方性弾性論を応用したマルチスケールシミュレーションを行うことで格子欠陥に関する材料計算の研究を進めてゆきたい。欠陥の近傍は結晶からの原子の変位が大きいので第一原理計算をする必要があるが計算機の負担が大きい。一方で欠陥よりも十分遠い領域では原子の変位は連続弾性論的な取り扱いでもよく、その場合計算機の負担は小さい。そのような性格の異なる領域を組み合わせることで実質的に大きな系の計算が可能になる方法に flexible boundary condition と呼ばれる方法がある。この方法を応用して比較的大きな転位の周囲の原子構造を計算するスキームを確立したい。

#### 5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 3 件)

① K. Ohsawa, M. Yagi, H. Koizumi and E. Kuramoto, Stress function for dislocation loops in anisotropic crystals, IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering Vol. 3 pp. 012027-1-6 (2009) 査読あり.

② Kazuhito Ohsawa, Junya Goto, Masahiro Yamakami, Masatake Yamaguchi, and Masatoshi Yagi, Trapping of multiple hydrogen atoms in a tungsten monovacancy from first principle, Phys. Rev. B 82, 184117-1-6 (2010) 査読あり.

③ Kazuhito Ohsawa, Masatoshi Yagi, Hirokazu Koizumi, and Eiichi Kuramoto, Interaction energy between dislocation loops in an anisotropic crystal: Application of elasticity theory, J. Nucl. Mater. (2011) to be published 査読あり

[学会発表] (計 16 件)

国際会議

① Kazuhito Ohsawa *et al.*, Stress Functions for dislocation loops in anisotropic crystals, Dislocation 2008, 2008 年 10 月 17 日, 香港

② Kazuhito Ohsawa *et al.*, Dislocation loops in anisotropic crystals: application of elasticity theory, 14th International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM-14), 2009 年 9 月 7 日, 札幌コンベンションセンター

③ Kazuhito Ohsawa *et al.*, Hydrogen

trapping in a single vacancy formed in tungst, Multiscale Materials Modeling 2010, 2010 年 10 月 7 日, Freiburg 大学

国内の学会や研究会

④大澤一人ら、異方性弾性体中の転位とその応力場および応力関数の研究、軽水炉研究会、2008 年 7 月 11 日、九州大学

⑤大澤一人ら、異方性弾性体中の転位が作る応力場および応力関数の研究、日本金属学会、2008 年 9 月 25 日、熊本大学

⑥大澤一人ら、異方性弾性体中の転位ループおよびその相互作用エネルギー、日本物理学会、2009 年 3 月 27 日、立教大学

⑦大澤一人ら、異方性弾性体中の転位ループ間の相互作用エネルギー、日本金属学会、2009 年 3 月 28 日、東京工業大学

⑧大澤一人ら、タングステンへの水素吸蔵とその安定構造、日本金属学会、2009 年 9 月 17 日、京都大学

⑨大澤一人ら、異方性弾性論にもとづく転位ループの研究、日本物理学会、2009 年 9 月 26 日、熊本大学

⑩大澤一人ら、タングステン粒界への水素吸蔵と機械的強度の第一原理計算、マルチスケールでのプラズマ・壁相互作用の理解、2010 年 3 月 19 日、九州大学

⑪大澤一人ら、タングステン単空孔での水素捕獲の第一原理計算、日本物理学会、2010 年 3 月 20 日、岡山大学

⑫大澤一人ら、タングステン単空孔への水素捕獲とその安定構造、日本金属学会、2010 年 3 月 30 日、筑波大学

⑬大澤一人ら、タングステン空孔での水素捕獲とその安定構造、原子炉圧力容器鋼脆化機構研究の最近の進展、2010 年 7 月 31 日、東北大学

⑭大澤一人ら、タングステン中の原子空孔への水素捕獲、格子欠陥フォーラム、2010 年 9 月 22 日、河内長野荘

⑮大澤一人ら、第一原理によるタングステン空孔への水素捕獲に関する研究、日本物理学会 2010 年 9 月 23 日、大阪府立大学

⑯大澤一人ら、タングステン空孔での複数個の水素捕獲に関する第一原理計算、京都大学原子炉実験所ワークショップ「材料照射効果と応用」、2010 年 12 月 18 日、京都大学