

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 27 年 5 月 28 日現在

機関番号：13903

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2012～2014

課題番号：24740201

研究課題名(和文) 転位キンク・ダイナミクスのマルチスケール解析

研究課題名(英文) Multiscale analyses of dislocation-kink dynamics

研究代表者

小林 亮 (KOBAYASHI, Ryo)

名古屋工業大学・工学(系)研究科(研究院)・助教

研究者番号：70560126

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：材料内部の欠陥である転位の運動，特に水素やヘリウムなどの軽元素との相互作用の理解は，水素脆化や核融合炉材料の照射損傷を改善するために不可欠である．本研究では，原子スケールのシミュレーションからこれらの問題を解明するための手法を開発し，その有用性を確認した．特に，ハイブリッド原子-粗視化粒子法を開発し，タングステン中のヘリウムバブルの形成機構を解明し，鉄中らせん転位と水素との相互作用解明の端緒をつけた．

研究成果の概要(英文)：The mechanism of dislocation dynamics and interactions with light-weight impurities such as hydrogen and helium is important issue on the hydrogen embrittlement and irradiation damage of structural materials. However, so far, the atomistic simulation about the dislocation dynamics and interactions with those impurities is difficult because of its multiscale nature and complexity. We have developed the hybrid atomistic/coarse-grained method that enables us to simulate efficiently keeping its accuracy. And through molecular statics and dynamics simulation, we have clarified the mechanism of dislocation loop nucleation in tungsten under helium irradiation, and hydrogen/helium effects on dislocation motion in pure bcc iron.

研究分野：材料力学，機械材料

キーワード：転位 分子動力学 核融合材料 照射損傷 水素脆化

1. 研究開始当初の背景

(1) 種々の材料の機械的特性、特に塑性や靱性といった性質は、材料内部における転位という一次元欠陥の運動機構によって大きく影響を受ける。転位線がキンク対を生成し、そのキンク対が進行することによって一原子列だけ進行する。このキンク対生成エネルギーおよびキンクの拡散エネルギーが転位の移動度、ひいては材料の機械的性質を特徴づける。しかし、これらの値は転位芯の乱れた原子構造に強く依存するために、線形弾性理論での予測から大きく外れることがある。また、実験による転位芯の原子構造の直接観測は非常に困難なため、原子論的シミュレーションからのアプローチが期待されていた。

転位運動の高精度な原子論的シミュレーションを行うためには、上述した転位芯の原子構造を正確に再現することに加え、転位周辺の広範囲に広がる歪み場を考慮しなければならない。密度汎関数理論に基づく第一原理計算のような高精度な手法を用いると、原子構造を正確に求められるが、計算速度が非常に遅いため歪み場を考慮することができない。そこで転位運動の解析には原子間相互作用に古典ポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションが行われてきた。しかし、古典ポテンシャルを用いたとしても、広範囲に広がる歪み場を十分に考慮するには膨大な原子数を扱わねばならず、効率が非常に悪い。また、古典ポテンシャルの近似精度が十分でなく、現象の再現性が悪いという課題もあった。

2. 研究の目的

上記のような状況の下、転位のように、一部分(転位芯)では大きな原子変位があるが、周辺には微小な弾性変形が広範囲に広がるような状況・現象を効率的かつ高精度にシミュレートするために、転位芯には原子論的手法を適用し、周辺の弾性変形領域には粗視化手法を用い、それらを境界で不自然な力などが生じないように繋げるハイブリッド原子・粗視化手法を開発する。この手法を用い、核融合炉壁材料の照射損傷における転位生成機構および、転位ループ拡散機構を解明する。

3. 研究の方法

(1) 弾性変形領域を原子群を粗視化した粒子を用いて高効率に計算する粗視化粒子法を開発し、原子系と滑らかな接合させてダイナミクスをシミュレートするハイブリッド

原子・粗視化粒子法を開発する。

(2) ハイブリッド原子・粗視化粒子法を転位ダイナミクスに適用する場合には、広範囲に広がる粗視化領域を効率的に計算する必要がある。そのため、ハイブリッド原子・粗視化粒子法プログラムを並列し、大規模系への適用を可能にする。

(3) 核融合炉壁面材料の候補であるタンゲステンへ、核融合のゴミであるヘリウムを侵入させるシミュレーションを行い、転位ループの形成機構および転位ループの運動とヘリウム原子との相互作用について解析する。

(4) 鉄鋼材料における水素脆化の場合には、転位芯と水素の相互作用が重要となるが、水素と転位芯の相互作用は古典ポテンシャルで扱うには複雑なため、転位芯に第一原理計算を適用するハイブリッド量子-古典法を開発し、転位芯と水素の相互作用機構解明のためシミュレーションを行う。

4. 研究成果

(1) 原子スケールの系と粗視化スケール系では最短原子間(粒子間)距離が異なるために、系の分散関係および存在できる弾性波の最短波長が異なる。そのため、それらの二つの系を接合すると、二つの系でかみ合わないフォノンはその境界で反射してしまい、不自然な波が生じる。我々はこの境界に余分な原子(粒子)を配置し、それらがランジュバン方程式に従いかみ合わない弾性波を吸収するようにすることで、この非物理的な反射を抑制することに成功した(図1)。このハイブリッド原子-粗視化粒子法を用いることで従来困難であった、ハイブリッド系のダイナミクス計算が可能になり、すべてを原子で扱った場合と結果が一致すること、計算負荷を大幅に減らすことができることを示した(論文①)。

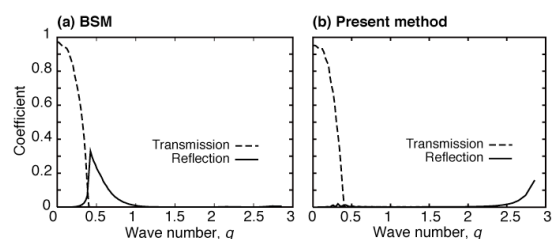


図1 境界での弾性波の透過および反射係数。(a)従来法と(b)提案法。ある波数での反射を大幅に減らすことに成功した。

(2) ハイブリッド原子-粗視化粒子法を大規模な系へ適用可能にするために、MPI ライブラリを用いた空間分割並列化を行った。これにより、粗視化したことによる自由度の削減だけでなく、並列化したことによる高速化が実現できた。例として、擬二次元のグラフェンのインデンテーションによる破壊シミュレーション (図2, 論文①) においては、全てを原子で扱う場合に比べ、29 倍の高速化に成功した。

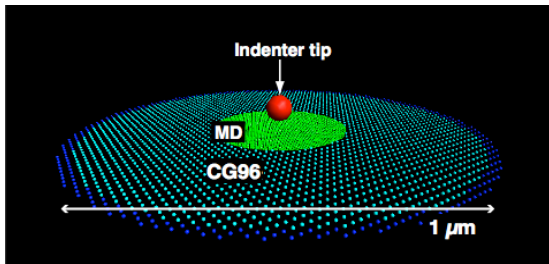


図2 グラフェンのナノインデンテーション・シミュレーションの設定。インデンタが当たる周辺のみ原子を、その周辺には粗視化粒子を配置している。

(3) 次期核融合実験炉のダイバータのプラズマ対抗壁面へ採用される予定のタングステンは、高エネルギーヘリウム照射によって転位ループやバブルなどが発生することが知られている。ここでは、ヘリウムバブルが発生する位置や、転位ループが発生する位置を前もって知ることができないため、ハイブリッド原子-粗視化粒子法は適用できなかったため、フル原子系のシミュレーションをおこなった (論文②)。その結果、以下のようなことが分かった。(イ) 温度が高い程ヘリウムが拡散し易く、互いに衝突しやすくなる。一度衝突したヘリウム原子はクラスタを形成し拡散できなくなる。そのため、高温になると大きなクラスタが生じ、バブルが発生しやすくなるという結果となった。これは実験結果をよく説明している。(ロ) ヘリウムクラスタがある大きさに達するとクラスタ周辺から押し出されたタングステン原子が転位ループとして放出される。転位ループはヘリウムを引きつけるため、転位ループの軌跡にはヘリウムバブルの核がいくつも形成され、ヘリウムバブルの増殖機構が存在することを初めて示した。

(4) 鉄鋼材料における転位芯と水素 (もしくはヘリウム) との相互作用を高精度に求め

るために、ハイブリッド量子-古典シミュレーションプログラムも開発した。転位芯の原子構造および水素と鉄原子の間の電子授受を第一原理計算で計算し、周辺には古典ポテンシャルを用い、滑らかに接合した。この手法を用いて、純鉄中に存在するらせん転位が拡散する際に水素やヘリウムからどのような影響を受けるか計算した (図3)。BCC 構造にはらせん転位として2つのタイプが存在し、そのタイプに依存して水素との相互作用が大きく変化すること、水素とヘリウムでは電子の詰まり具合が異なるため、転位拡散への影響が真逆になることが初めて示された。

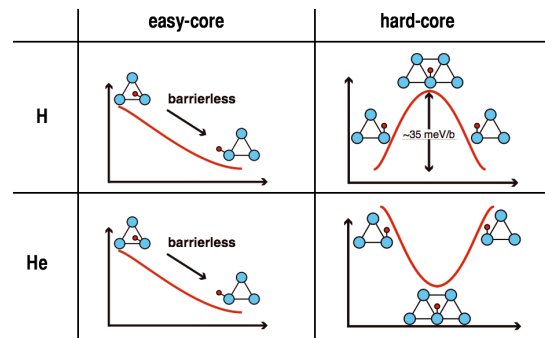


図3 二つのらせん転位芯構造と水素およびヘリウムとの相互作用。

## 5. 主な発表論文等

(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 Ryo Kobayashi, Takahide Nakamura and Shuji Ogata: *Concurrent Hybrid Simulation of Fracture Dynamics of Suspended Graphene at Finite Temperatures*, Transactions of the Materials Research Society of Japan, 37(1) (2012).
- ② Ryo KOBAYASHI, Tatsunori HATTORI, Tomoyuki TAMURA, Shuji OGATA, A molecular dynamics study on bubble growth in tungsten under helium irradiation, Journal of Nuclear Materials, (2014).
- ③ Atsushi M. Ito, Arimichi Takayamaa, Yasuhiro Odaa, Tomoyuki Tamura, Ryo Kobayashi, Tatsunori Hattori, Shuji Ogata, Noriyasu Ohno, Shin Kajita, Miyuki Yajima, Yasuyuki Noiri, Yoshihide Yoshimoto, Seiki Saito, Shuichi Takamura, Takahiro Murashima, Mitsutaka Miyamoto, Hiroaki Nakamura, Hybrid simulation research on formation mechanism of

tungsten nanostructure induced by helium plasma irradiation, *Journal of Nuclear Materials*, (2015)

[学会発表] (計 18 件)

- ① Ryo KOBAYASHI, Shuji OGATA, and Ronald E. Miller, Hybrid atomistic/coarse-grained-particle simulation of dislocation motions, WCCM 2012, Sao Paulo, Brazil, July 8-13, 2012.
- ② 小林亮, 田村友幸, 尾形修司, 「分子動力学法による転位運動への水素の影響」, 日本物理学会 秋季講演大会, 横浜国立大学, Sep. 18-21, 2012.
- ③ Ryo KOBAYASHI, Tomoyuki TAMURA, and Shuji OGATA, Monte Carlo Study of Elastic Contribution to Li Migration in Graphite, IUMRS-ICEM 2012, PACIFICO Yokohama, Japan, Sep. 24, 2012.
- ④ 小林亮, 田村友幸, 尾形修司, 「転位を含む材料への原子・粗視化粒子ハイブリッド法の適用」, 日本機械学会 第 25 回計算力学講演会 (JSME), 神戸, Oct. 6-9, 2012.
- ⑤ Ryo KOBAYASHI, Tomoyuki TAMURA, Shuji OGATA, and Ronald E. Miller, Concurrent Hybridization of Atomistic, Coarse-Grained-Particle, and Discrete-Dislocation Methods for Dynamic Problems, MMM 2012, Singapore, Oct. 15-19, 2012.
- ⑥ 小林亮, 田村友幸, 尾形修司, 「鉄中水素の転位拡散に与える影響: 量子古典ハイブリッド法による解析」, 日本物理学会 第 68 回年次大会, 広島大学, Mar. 26-29, 2013.
- ⑦ Ryo KOBAYASHI, Hydrogen Effects on Dislocation Motion in BCC Iron: Hybrid Quantum and Classical Simulation, Multiscale Modeling and Simulation in Materials Science, Shanhai Jiao Tong University, April 21-23, 2013. **(Invited)**.
- ⑧ 小林亮, 田村友幸, 尾形修司, 「タングステン中らせん転位拡散への水素およびヘリウムの影響: 量子古典ハイブリッド法を用いた解析」, 物理学会秋季大会, 徳島大学, Sep. 25, 2013.
- ⑨ 小林亮, 田村友幸, 尾形修司, 「鉄中水素の転位運動への影響: ハイブリッド量子古典法解析」, 日本機械学会計算力学講演会 2013, 佐賀大学, Nov. 03, 2013.
- ⑩ Ryo KOBAYASHI, Tatsunori HATTORI, Tomoyuki TAMURA, and Shuji OGATA, *Hydrogen and Helium Effects on Dislocation Motion in BCC Metals*, 23rd International Toki Conference, Ceratopia Toki, Nov. 20, 2013.
- ⑪ Ryo KOBAYASHI, Tomoyuki TAMURA,

and Shuji OGATA, *Hydrogen and Helium Effect on Dislocation Motion in bcc-Iron: A Hybrid QM/MM Study*, MRS Fall meeting 2013, Boston, Dec. 03, 2013.

- ⑫ 小林亮, Multiscale simulation of defects in solids, 第 23 回 日本 MRS 年次大会, 横浜, Dec. 09, 2013. **(Invited)**
- ⑬ Ryo KOBAYASHI, Tatsunori HATTORI, Tomoyuki TAMURA, and Shuji OGATA, An MD Study of Self-Induced Bubble Growth in W under He Irradiation, ISPlasma2014, Meijo University, Mar. 2-6, 2014.
- ⑭ 小林亮, 田村友幸, 尾形修司, 「シリコン転位キンク拡散のハイブリッド量子古典法解析」日本物理学会第 69 回年次大会 @ 東海大学 湘南キャンパス, 2014.03.27-30.
- ⑮ Ryo KOBAYASHI, Tatsunori HATTORI, Tomoyuki TAMURA, and Shuji OGATA, An MD study on self-induced bubble growth in W under He irradiation, poster, PSI 21st @Kanazawa, 2014.05.26-30.
- ⑯ Ryo KOBAYASHI, Tomoyuki TAMURA, Shuji OGATA, QM/MM analysis of effect of hydrogen and helium on dislocation motions in BCC iron, WCCM XI @Barcelona, oral, 2014.07.20-25.
- ⑰ Ryo KOBAYASHI, Tatsunori HATTORI, Tomoyuki TAMURA, Shuji OGATA, An MD study of self-induced bubble growth under He irradiation in Tungsten, IUMRS-ICA 2014 @Fukuoka Univ., oral, 2014.08.24-30.
- ⑱ 小林亮, 田村友幸, 尾形修司, 「シリコン転位運動シミュレーションのための原子間ポテンシャル開発」, 日本物理学会 2014 年秋季大会 @中部大学, oral, 2014.09.07-10.
- ⑲ Ryo KOBAYASHI, Tomoyuki TAMURA, Shuji OGATA, Development of Machine-Learning-Based Interatomic Potential, NOSE30 @Keio Univ., poster, 2014.11.10-11.
- ⑳ 小林亮, 田村友幸, 尾形修司, 「シリコン-水素二元系の原子間ポテンシャル開発」, 日本物理学会第 70 回年次大会 @早稲田大学, oral, 2015.03.22.

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

名称 :

発明者 :

権利者 :

種類 :

番号：  
出願年月日：  
国内外の別：

○取得状況（計 0 件）

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
出願年月日：  
取得年月日：  
国内外の別：

〔その他〕

本研究で開発された分子動力学シミュレーションプログラムは、下記にて公開されている。

<https://github.com/ryokbys/nap>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

小林 亮 (KOBAYASHI, Ryo)  
名古屋工業大学・創成シミュレーション工  
学専攻・助教  
研究者番号：70560126

### (2) 研究分担者

( )

研究者番号：

### (3) 連携研究者

( )

研究者番号：