JAEA-Review 2013-030



大規模施設の構造を計算科学手法により 評価するための基盤技術に関する共同研究開発 (共同研究)

Joint R&D of Basic Technology to Evaluate Structure of a Large-scale System by the Computing Science (Joint Research)

> システム計算科学センター 東京大学 人工物工学研究センター

Center for Computational Science & e-Systems Research into Artifacts, Center for Engineering The University of Tokyo

December 2013

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは独立行政法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。 本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。 なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ(<u>http://www.jaea.go.jp</u>) より発信されています。

独立行政法人日本原子力研究開発機構 研究技術情報部 研究技術情報課
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根2番地4
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency. Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to Intellectual Resources Section, Intellectual Resources Department, Japan Atomic Energy Agency. 2-4 Shirakata Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan

Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2013

JAEA-Review 2013-030

大規模施設の構造を計算科学手法により評価するための基盤技術に関する 共同研究開発(共同研究)

日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター

東京大学 人工物工学研究センター

(2013年7月8日受理)

本報告書では、平成 23 年度における東京大学・人工物工学研究センターと日本原子力研究開発 機構・システム計算科学センターの共同研究について報告する。この共同研究での主な研究成果 は、大規模な構造解析などを高速かつ効率的に行うためのミドルウェア開発および材料安全性評 価のためのモデル構築である。また、共同研究の一環として、ワークショップやセミナーを開催 した。これらの活動概要について報告する。

本研究は日本原子力研究開発機構と東京大学人工物工学研究センターとの共同研究に基づいて実施したものである。

システム計算科学センター(駐在):〒277-8587 千葉県柏市柏の葉 5-1-5 東京大学柏キャンパス内

東京大学人工物工学研究センター:〒277-8568 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

JAEA-Review 2013-030

Joint R&D of Basic Technology to Evaluate Structure of a Large-scale System by the Computing Science (Joint Research)

Center for Computational Science & e-Systems Japan Atomic Energy Agency Kashiwanoha, Kashiwa-shi, Chiba-ken

Research into Artifacts, Center for Engineering The University of Tokyo Kashiwanoha, Kashiwa-shi, Chiba-ken

(Received July 8, 2013)

This report provides an overview of the joint research of the Center for Computational Science & e-Systems (CCSE), JAEA and Research into Artifacts, Center for Engineering, the University of Tokyo in fiscal year 2011 (April 1, 2011 – March 31, 2012). The primary results of the research and development activities are the development of the middleware to perform the structural analysis fast and efficiently and the model construction to evaluate the safety of the materials. Other results of the activity are holding a joint workshop and seminars. Overview of the activity is also included in this paper.

Keywords: R&D Activities, CCSE, RACE, Joint Research, Large-scale System, High Performance Computing, Structural Analysis

This work has been performed in JAEA as a joint research with Research into Artifacts, Center for Engineering, the University of Tokyo.

目 次

1. はじめに	1
2. 大規模複雑人工物シミュレーション	4
2.1 共同研究報告(テーマA:計算科学)	4
2.1.1 共同研究の概要	4
2.1.2 2011 年度の共同研究の内容	5
2.2 共同研究報告(テーマ B:材料計算科学)	15
2.2.1 共同研究の概要	15
2.2.2 2011 年度の共同研究の内容	15
3. 学術講演会等の活動	97
3.1 第 21 回 RACE コロキウム/第 23 回 CCSE ワークショップ報告	97
3.2 原子力計算科学セミナー	99
3.3 連携記念報告:東京大学と日本原子力研究開発機構間の計算科学研究における	る組織開
始記念会	100
付録	103
1 協定書	103
2 覚書	105
3 RACE コロキウム/第 23 回 CCSE ワークショップ ポスター	107

Con	ten	ts
COL	uun	LO

1.	Introduction	1				
2.	Large-Scale Simulation required for Complex Artifacts	4				
	2.1 Report of joint research (Theme A : Computational Science)	4				
	2.1.1 Overview	4				
	2.1.2 Achievement in fiscal year 2011	5				
	2.2 Report of joint research (Theme B : Computational Material Science) $ \cdots $					
	2.2.1 Overview	15				
	2.2.2 Achievement in fiscal year 2011	15				
3.	Academic lecture and related activities	97				
	3.1 21st RACE(Research into Artifacts, Center for Engineering) colloquium/					
	23rd CCSE(Center of Computational Science & e-Systems) workshop	97				
	3.2 Seminar for computational science and engineering in nuclear science					
	and enginerring	99				
	3.3 Opening ceremony for joint study in computational science and					
	engineering between The Unviersity of Tokyo and Japan Atomic					
	Energy Agency	100				
Ар	ppendix	103				
	1. Arrangement between The Unviersity of Tokyo and Japan Atomic Energy Ag	gency				
	2. Memorandum between The Unviersity of Tokyo and Japan Atomic Energy A	.gency				
	3. Brochure of RACE colloquium and CCSE workshop	105				

1. はじめに

計算科学研究は、コンピュータを活用して物理現象の予測や人工物設計の最適化、また データの高速処理の技術等を開発する研究である。近年のコンピュータ性能の飛躍的な向 上により、従来は不可能であった複雑な現象の予測なども可能になり、気象予測、遺伝情 報解析、航空機設計など広い分野で応用が進みつつある。このため、各国とも産業競争力 向上のための戦略技術として計算科学研究の振興に多大の努力を払っている。

特に原子力分野では、放射性物質や核燃料を使用するため、実験に多大な費用を要する ことから、研究開発を効率化するために計算科学の活用がますます重要になっている。こ のため独立行政法人日本原子力研究開発機構(原子力機構)は、各研究部門の研究に計算科学 を活用するととともに、システム計算科学センターにおいて最先端の計算科学技術を開発 し、原子力研究に活用する研究を進めてきた。一方国立大学法人東京大学(東大)は、幅広い 学術分野において、計算科学を活用した基礎基盤研究を展開している。したがって両者の 研究開発能力と人材、シーズとニーズの融合・連携を一層強化することにより、計算科学 研究を活用した産業競争力基盤の強化と原子力研究開発の効率化の相乗的進展が期待され ている。

このため、平成20年4月8日に締結された「国立大学法人東京大学と独立行政法人日本 原子力研究開発機構との間における連携協力の推進に係る協定書」第2条第2項(付録1) に基づき、東大と原子力機構は、平成23年1月31日付で「国立大学法人東京大学と独立 行政法人日本原子力研究開発機構との計算科学研究協力に関する覚書」(付録2)を締結し た。

本覚書の締結により、計算科学の技術基盤強化と、その原子力研究開発への適用について、両法人の間の連携が一層強化され、我が国における学術と原子力利用の振興発展に大きく寄与することが期待されている。

本覚書をもとに、原子力機構の計算科学研究者が東大(柏キャンパス)に駐在し、東大にお ける幅広い分野の研究者との日常的な知的交流の場を形成することにより、大学における 新たな学術体系・技術基盤の構築と、原子力機構における原子力分野への難課題への速や かな適用展開とを両輪として進めることになった。これにより、世界の計算科学研究をリ ードする革新的なモデリングとシミュレーション技術の確立を目指し、さらに柏を拠点に 全国的な連携の取り組みに努めることにより、我が国における学術と原子力利用の振興発 展に大きく寄与していく。

本覚書の概要は、以下の通りである。

締結日:平成23年1月31日 施行日:平成23年1月31日 締結者:

国立大学法人東京大学 理事·副学長(産学連携本部長) 松本 洋一郎 独立行政法人日本原子力研究開発機構 理事(産学連携担当) 戸谷 一夫

主な協力内容:

① 計算科学の新たな学術体系・技術基盤の構築と原子力計算科学への適用展開に係る研 究協力及び情報交換

② 研究人材の育成

- ③ 研究者交流の促進
- ④ 組織連携型研究協力を円滑に推進するための乙の職員の甲の施設への駐在

このような協定と覚書のもと、人工物工学研究センターとシステム計算科学センターは、 平成23年度より共同研究を推進している。システム計算科学センターは、客員研究員を派 遣(6名)し、外部資金応募を進めた。図1.1に共同研究の概要を示すとともに、以下に、 その具体な計画内容の概要を述べる。

東京大学と日本原子力研究開発機構との計算科学研究協力(H23年度~)

『大規模複雑人工物の統合シミュレーション』



図 1.1 人工物工学研究センターとシステム計算科学センター間の共同研究協力

平成23年度における研究者間の研究協力内容は、システム計算科学センターが中期計 画に基づいて進めている原子力構造材料シミュレーションの分野の研究を加速できる研究 と、中期計画推進上必要となる計算科学の基盤技術開発である。具体的には、次の通りで ある。

①共同研究課題名:「大規模複雑人工物の統合シミュレーション環境構築」

(研究目的) 原子炉などの大規模施設の構造や機能を計算科学手法により評価するための 基盤技術を開発する

(研究内容) 材料特性評価のためのモデル構築および大規模な構造解析などを高速かつ効率的に行うためのミドルウェアの開発を行う。

担当者: 東大:人工物工学研究センター 奥田洋司教授、沖田泰良准教授

原子力機構:システム計算科学センター 武宮博室長、板倉充洋研究副主幹

②外部資金応募

以下を東大柏キャンパスの情報基盤センター、人工物工学研究センターと共に提案した。 文科省 CREST「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創

出」領域

(研究目的)「自動チューニング機構を有するオープンなアプリケーション開発・実行環境 (ppOpen-HPC)」の研究開発。これは今後主流となると想像される異種 CPU を結合した スーパーコンピュータの処理能力を充分に引き出す科学技術アプリケーションの効率的な 開発,安定な実行に資するものである。

(研究内容) 計算科学において汎用性の高い有限要素法, 差分法, 有限体積法, 境界要素法, 個別要素法に限定し, 各手法の特性に基づきハードウェアに依存しない共通インタフェー スを有するアプリケーション開発用ライブラリ群, 耐故障機能を含む実行環境を実現する。 担当者: 東大:情報基盤センター 中島研吾教授(代表)、他4名

人工物工学研究センター 奥田洋司教授 情報理工学系研究科、新領域創成科学研究科 他、6名 原子力機構:システム計算科学センター 山田進研究副主幹

2. 大規模複雑人工物シミュレーション

2.1 共同研究報告 (テーマA:計算科学)

2.1.1 共同研究の概要

共同研究の1つとして、CRESTの研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシ ステムソフトウェア技術の創出」の内の1研究課題「自動チューニング機構を有するアプ リケーション開発・実行環境(研究代表者:中島研吾教授、東京大学)」を共同提案し、こ れに基づいた研究課題を実施している。この研究課題では、ポストペタスケールシステム としてホスト CPU とアクセラレータによるヘテロジニアスなアーキテクチャによる計算 ノードを有す計算機システムを想定し、その性能を有効に利用するための科学技術アプリ ケーションの効率的な開発や安定な実行に資する「自動チューニング機構を有するオープ ンなアプリケーション開発・実行環境(ppOpen-HPC, pp=post-petascale)」の研究開発 を目的としている。この ppOpen-HPC は

- ppOpen-APPL: 各手法に対応した並列プログラム開発のためのライブラリ群
- ppOpen-MATH: 各離散化手法に共通の数値演算ライブラリ群
- ppOpen-AT:科学技術計算のための自動チューニング(AT) コンパイラ
- ppOpen-SYS:ノード間通信,耐故障機能に関連するライブラリ群

の 4 つで構成される。一般の計算機ユーザはこれらを利用することにより、プログラムの アルゴリズムや計算機の構造を考慮することなく、ポストペタスケールシステムに対して 自動的に最適化されたアプリケーションの開発が可能になると考えられる。また、最適化 されたライブラリ群が自動的に生成されるため、ハードウェア依存のチューニングのプロ セスは全て ppOpen-AT に集約されるため、計算機環境が変化しても、ppOpen-AT のみを 変更すれば良い。そのため、この研究開発の成果を用いることで、一般のユーザでも様々 なアーキテクチャのポストペタスケールシステムに対して、その性能を容易に引き出すこ とができるようになると考えられる。

本共同研究では、ppOpen-APPL の中で有限要素法(Finite-Element Method, FEM) によるアプリケーション部分についての研究開発が対象である。具体的には FEM によるア プリケーションの開発を支援するために

- ▶ 共通データ入出力インタフェース
- ▶ 領域間通信
- ▶ 係数マトリクス生成
- ▶ 離散化手法の特性を考慮した前処理付き反復法
- ▶ 適応格子,動的負荷分散

の機能を持つ ppOpen-APPL/FEM の研究開発が対象である。また、ppOpen-APPL/FEM は以下のような要件を満たしているものとする:

- FORTRAN, C, C++, OpenCL 等によるユーザープログラムから呼び出せるハードウ ェアに依存しない共通インタフェースを備える。
- FORTRAN, C, C++等のプログラミング言語, OpenMP+MPI ハイブリッド並列プロ グラミングモデルによって記述されている。
- ▶ 機能の一部については CUDA または OpenCL によって記述する。
- ▶ 三次元四面体,六面体,梁・板・シェル要素(低次,高次)をサポートする。

実際、FEM は様々な分野の科学技術アプリケーションで広く使用されており、ポストペタ スケールシステムにおいても非常に重要なアプリケーションの 1 つになると考えられてい るが、FEM では非構造なデータであるため、計算手法の最適化が非常に困難である。しか し、本研究で ppOpen-AT と連携した FEM 向けのアプリケーション開発環境 ppOpen-APPL/FEM を整備することで、FEM アプリケーション開発者は、最適化、チュ ーニングの作業から解放され、科学技術計算における研究開発の効率を高めることができ ると考えられる。また、数百万以上のコア数を有し、さらにヘテロジニアスアーキテクチ ャと想定されているポストペタスケールシステムで効率的に高精度の計算を行うためには、 必要に応じで計算精度を変化させる混合精度演算手法が有効であると考えられている。こ の成果は、ppOpen-APPL の各反復解法ソルバー、ppOpen-MATH/MG に直接適用される 他、ppOpen-AT における最適化にも役立つものと考えている。

本共同研究では ppOpen-APPL/FEM の開発の中で、最も計算量が多く高速化が困難であるオペレーションの1つである線形方程式の求解の高速化を研究の対象としている。

2.1.2 2011 年度の共同研究の内容

人工物工学研究センターとシステム計算科学センターは、本年度、有限要素法において 係数行列が疎ではあるがクリロフ部分空間法に基づく反復法(以下、クリロフ反復法と略 す)では安定に計算することのできない線形方程式が存在するため、この方程式を安定に 計算する手法の共同研究を行った。クリロフ反復法での収束性や誤差は行列の条件数の大 きさに大きく依存し、条件数が大きいと反復計算が収束しなかったり、たとえ収束したと しても多くの反復を必要とするなど、安定的に計算できなくなることが知られている^[1]。こ の問題を回避する1つの方法として、反復法内の演算を倍精度ではなく4倍精度で行うこ とが提案されており、実際、収束性や精度が向上することが報告されている^[1,2,3]。本共同研 究ではクリロフ反復法のこの性質に注目し、システム計算科学センターが既に並列計算ラ イブラリ「PARCEL」として開発し、公開している非対称行列用の反復法を4倍精度化す ることを考えた。具体的には、

- 安定化双共役勾配法(BiCGStab 法)
- 一般化最小残差法(GMRES 法)
- 擬似的最小残差法(TFGMR法)
- 一般化積型双共役勾配法(GPBi-CG法)

の4つの並列計算ルーチンを4倍精度化し、その収束性および並列計算性能を調査することを目標とした。

この4倍精度化において、基本演算はシステム計算科学センターがこれまでに開発した Baily の double-double アルゴリズムを利用した4倍精度 BLAS ルーチン (QPBLAS) お よびその開発の際に得られた4倍精度化に関する知見を利用することにした。また、すべ ての演算を4倍精度するのではなく、ベクトルの内積計算等を中心に4倍精度化するだけ でも収束性および精度が向上するという報告^[2]があり、計算量の観点から、必要最低部分の みの4倍精度化を行うことにした。

並列性能評価

開発した 4 つのルーチン (BiCGStab 法、GMRES 法、TFQMR 法、GPBi-CG 法) につ いて、1PE, 2PEs, 4PEs, 8PEs にて、

- · 反復回数
- 処理時間
- 速度向上比
- · 並列化効率

を計測した。この計測において使用した計算機環境は

- ・ 9ノード×2システムのうち1ノードを利用して計測
- ・ 12 コア/1 ノード
- ・ メモリ;96GB/1ノード、スワップ;96GB/1ノード、キャッシュ;12MB/1コア
- Intel(R) Xeon(R) CPU X5660 @ 2.80GHz

である。計測に利用した問題は、200×200のポアソン方程式である。GMRES 法のリスタート数は 15 回とした。

この結果を図 2.1.1~2.1.12 に示す。この結果から、今回の問題では 4 倍精度化による収 束性の向上は見られない。これは対象となる方程式の条件数がさほど大きくないためであ ると考えられるが、次項での議論により、この収束性については、さらなる調査の必要性 があることが指摘されていることに注意が必要である。また、計算時間は 4 倍精度化する ことで 2~3 倍の増加になっていることが確認できる。しかし、4 倍精度化することにより、 並列性能は向上していることが確認できる。これは 4 倍精度化による演算量の増加率が通 信量の増加率よりも大きいため、並列計算できる演算の割合が増加したためであると考え られる。



図 2.1.1 処理時間(4倍精度ルーチン)



図 2.1.2 処理時間(倍精度ルーチン)



図 2.1.3 速度向上比(4倍精度ルーチン)



図 2.1.4 速度向上比(倍精度ルーチン)



図 2.1.5 並列化効率(4倍精度ルーチン)



図 2.1.6 並列化効率(倍精度ルーチン)



図 2.1.7 反復1回あたりの処理時間(4倍精度ルーチン)



図 2.1.8 反復1回あたりの処理時間(倍精度ルーチン)



図 2.1.9 反復1回あたりの速度向上比(4倍精度ルーチン)



図 2.1.10 反復1回あたりの速度向上比(倍精度ルーチン)



図 2.1.11 反復1回あたりの並列化効率(4倍精度ルーチン)



図 2.1.12 反復1回あたりの並列化効率(倍精度ルーチン)

条件数の大きい行列に対する収束性の調査

倍精度ルーチンと4倍精度ルーチンを用いて Glued Wilkinson 行列および Frank 行列に 対する収束性を比較した結果を図 2.1.13 および図 2.1.14 に示す。GMRES 法のリスタート 数については 100 回としている。本来であれば、4 倍精度ルーチンが安定かつ高速に計算で きるはずであるが、いずれも、倍精度ルーチンと 4 倍精度ルーチンが同様の収束状況を示 している。この結果から、今回開発したプログラムのどこかに 4 倍精度演算を行うべきと ころで倍精度演算を行っている等、実装上の不具合の可能性を否定できない。来年度はこ の実装上の不具合の可能性の調査を行い、他の条件数の悪い行列に対する収束性を系統的 に調査する予定である。



図 2.1.13 Glued Wilkinson 行列に対する収束性



図 2.1.14 Frank 行列に対する収束性

参考文献

[1]長谷川秀彦、阿部邦美、"クリロフ部分空間法に対する多倍長演算の効果"、第 29 回数値 解析シンポジウム、2000 年

[2]小武守恒、藤井昭宏、長谷川秀彦、西田晃、"高速な4倍精度演算を用いたクリロフ部分 空間法の安定化"、計算工学講演会論文集、Vol. 12、2007年

[3] 長谷川秀彦、小武守恒、"演算精度を変えれば見えてくる線形方程式の世界"、計算工学 講演会論文集、Vol. 12、2008 年

2.2 共同研究報告 (テーマB:材料計算科学)

2.2.1 共同研究の概要

原子力材料の経年劣化について、東京大学人工物工学研究センターの沖田研究室は実験 観察とシミュレーションによる解析の両面から研究を行っており、一方、日本原子力研究 開発機構・システム計算科学センター・シミュレーション技術開発室の原子力材料研究チ ームも、主に電子・原子スケールでのシミュレーションを行い、実験研究を行っている原 子力機構の他部門と連携し劣化メカニズムの研究を行っている。システム計算科学センタ ーの柏移転を機に、両研究チームは情報交換やゲスト研究者を招いての研究報告会を定期 的に行っており、また競争的外部資金をこれまでに共同で二件申請し、共著論文もいくつ か執筆している。以下ではこの共同研究の概要について述べる。

2.2.2 2011 年度の共同研究の内容

2.2.2.1 構造材料の物理モデル構築

原子力プラント構造材料は照射下で供用されるとミクロ組織が変化し、それに伴う機械 的特性の劣化は、時として原子力プラントシステム全体の健全性に直接的な影響を及ぼす。 これらを念頭に、本共同研究では第一の課題として、ミクロ組織と機械的特性(マクロ特 性)の相関を記述するモデルの検討を行う。特に、極めて低い照射量に於いてもボイドが 形成すること、ボイドが照射硬化に代表される機械的特性変化を決定づけるミクロ要因で あることに着目して、今年度は照射下ミクロ組織として、転位ループに加えてボイドを取 り入れた検討を行う。また、超音波検査では、特定の照射条件下での(すなわち検査時の) ミクロ組織、特にボイドスエリングを定量化することが可能である。しかしながら、ボイ ドスエリングによる寸法不安定性のみならず、マクロ特性変化としての照射硬化を予測し うるモデルに展開するため、あるいは、ボイドスエリングや照射硬化などの材料劣化が更 なる供用でどのように進展していくかを予測するため、ボイドミクロ組織(すなわちボイ ド密度と径)を求める手法構築が求められている。そのため、第二の課題として、超音波 検査とこれまで蓄積されてきたデータからボイドのサイズ分布を求める手法を検討する。 構造材料のマクロ特性は化学組成や結晶構造のみならず、その内部に存在する原子・ナノ スケールの結晶欠陥、即ち点欠陥(空孔、格子間原子、添加物/不純物原子、及びそれらの集 合体)、線欠陥(転位)、面欠陥(粒界、積層欠陥)の挙動から支配的な影響を受けるが、そうし た結晶欠陥の挙動を再現する上で、結晶欠陥間の相互作用に関するモデル化は必須である。 欠陥間相互作用の 1 つとして弾性力学的相互作用、即ち弾性力学で記述されるような応力 場、ひずみ場を介して、結晶欠陥が相互に接触しないまま、距離を隔てて引力・斥力或い はトルクを及ぼしあう作用がある。残る一方の相互作用は、結晶欠陥同士が接触、あるい は 1nm オーダー程度の距離にまで接近する事によって生じる相互作用であり、根本的に連 続体を前提とする弾性力学ではモデル化できず、原子論的なモデルが必須となるものであ る。分子動力学法(MD法)は、材料中の原子の運動をニュートン方程式に従って逐一解析す る強力な技術であり、結晶欠陥の接触/近距離相互作用の動特性を理論的に再現する事実上 唯一の手段である。

欠陥間相互作用の中でも転位と照射誘起点欠陥集合体の相互作用は、構造材料の照射硬 化の主要因であり、構造物中での応力緩和・再分配挙動、インシデント時の破断、き裂進 展挙動や衝撃吸収性能を評価する上で重点的にモデル化を推進しなければならない過程で ある。点欠陥集合体と転位の弾性力学的相互作用に対しては、Wolfer、Okita らにより定式 化され(図 2.2.1)、転位と点欠陥集合体の長距離に及ぶ相互作用の影響を定量的に評価する 事が可能となった。一方の点欠陥集合体—転位間の接触/近距離相互作用については、フェ ライト鋼を対象として MD 法を適用した系統的な研究が沖田らによって進められ(図 2.2.2)、 点欠陥集合体が転位と接触する事による反応がバーガースベクトルの関係、集合体寸法、 温度によってバーガースベクトル変化、付着、全吸収、分裂と部分的吸収など多彩に変化 することが推定された。本成果は、TEM による直接観察が困難であるが故に未解明であっ た、サブナノスケールの点欠陥集合体と転位の接触相互作用過程とその照射硬化への影響 が、従来適用されてきた単純なモデルとは著しく乖離している事を指摘した点で両期的で あった。





図 2.2.1 転位周辺におけるひずみ場中での格子間原子集合体のエネルギー変化 Wolfer, Okita らの理論による。点線は集合体の回転を考慮しない従来の線形弾性論の結果、 赤線は回転を考慮した改良線形弾性論の結果を示す。各々の位置関係は、右に示した。



図 2.2.2 フェライト鋼 (600K) 中のらせん転位が格子間原子集合体 (転位ループ) に接触してから離脱するのに必要な外部せん断応力 集合体寸法および接触プロセスによって転位との反応様式が異なり、転位の移動、 ひいては硬化に及ぼす影響も異なる。

MD 法は上記の通り硬化をはじめ照射誘起ミクロ組織とマクロ特性変化の相関モデルを 検討する上で強力な手段であるが、本研究開発において MD 法の適用範囲をオーステナイ ト系ステンレス鋼に拡大するにあたり、問題となるのは原子間ポテンシャルである。原子 間ポテンシャルは、MD 法において系のエネルギーを原子間距離の関数として与えるもので、 MD 法による解析の大前提であり、必然的に原子間ポテンシャルの質が解析結果に重大な影 響を及ぼす。周知の通りオーステナイト系ステンレス鋼は、Fe, Cr, Ni を主体とする不規則 性の高い固溶体であるため、適切な原子間ポテンシャルを設定し物性を再現する上で純 Fe や低合金鋼にはない困難さがあり、そもそも原子間ポテンシャルの適用実績が少なく、等 価オーステナイト元素ともいうべき仮想的な原子からなる 1 元系面心立方 (FCC) 金属と して再現した事例が少数ある一方、3元系合金として信頼できる再現結果が得られた原子間 ポテンシャルは存在しない。そのため、本研究開発では、平成22年度より新たにオース テナイト系ステンレス鋼の原子間ポテンシャルの開発に着手した。本研究開発で構築する 原子間ポテンシャルは、精度上の信頼性と現実的計算量の範囲内での構築・計算可能性を 両立させるため、原子挿入法 (EAM: Embedded Atom Method) ポテンシャルの形式をと るものとした。原子間ポテンシャルの質が MD 法による計算結果を左右する事から、原子 間ポテンシャルに一定の物理的根拠が求められる一方で、現実的計算量の範囲で原子間ポ テンシャルを純理論的に導出し、値を計算する事は困難である。そのため、MD 法によって 再現したい状態に近いと思われる状態をバランス良くいくつか選択し、これらの状態に対 する実験結果や第一原理計算の結果を予め用意しておき、何らかの物理的意義を持った簡 便な関数形をこれらの結果にフィットさせる事で、半経験的な原子間ポテンシャルを構築

するという戦略を採用する。Daw と Baskes らによって開発された EAM ポテンシャルと は、「物理的意義を持った簡便な関数形」の一種であり、非局在化した電子による結合とい う、金属原子間の相互作用様式を非常に少ない計算量で模擬する事を狙っている。Daw、 Baskes らとほぼ同時期、Finnis と Sinclair も金属を対象とした新たな形式の原子間ポテン シャルを開発した。Finnis、Sinclair のポテンシャルは物理モデルとしては EAM ポテンシ ャルの一種ではないと解釈される場合もあるが、数学的形式は EAM ポテンシャルと同じで ある。これらの新たな形式のポテンシャルは、それ以前に広く用いられていた金属向け経 験的 2 原子間ポテンシャルが抱えていたいくつかの問題、即ち必ず Cl2=C44 となる問題、 空孔形成エネルギーの絶対値が大きすぎる問題、表面緩和(表面付近で格子定数が変化する 現象)が逆符号である問題を一挙に解決した。本研究開発においては、これらに基づいて、 多元系として複雑な性質を示すオーステナイト系ステンレス鋼に対して、モデルの妥当性 に関する調査に基づいた原子間ポテンシャル構築を目指している。この検討結果に関して は、2.2.2.2 で示す。

オーステナイト系ステンレス鋼を再現する原子間ポテンシャルの開発を進めると同時に、 単元系 FCC 金属に対して既に広く用いられている原子間ポテンシャルを利用して、応力の 影響に関しての検討を併行して行った。実機構造材料では、照射量勾配、温度勾配等、内 部応力を生じさせる要因が存在しうる。このように構造材特有の現象として、応力環境下 での材料挙動を把握することを目的として、MD 法により応力付加時の照射欠陥形成過程に 関する影響を詳細に解析し、定量化を試みた。特に今年度は、複雑な応力、ひずみ付与下 における欠陥形成過程、照射条件や材料物性が異なる条件下に於ける影響について検討を 行った。この結果に関して、2.2.2.3 で示す。

同様に、単元系 FCC 金属を対象として、材料内部に存在する欠陥である転位と点欠陥集 合体の相互作用の基本的特性、並びにそれらが機械的特性変化に及ぼす影響についての検 討を併行して行った。特に、転位と相互作用を検討する照射欠陥として、これまで行って きた転位ループの他、ボイドも含めた検討を行った。この結果は2.2.2.4 で示す。

従来、ボイドスエリングを求める方法の一つとして、TEM 観察によりボイドサイズ分布 として数密度と径を定量化し、式(2-2.1)に代入することで求めてきた。

$$s = \frac{4\pi}{3} \sum_{i} r_i^3 N_i, \quad N = \sum N_i$$

(2-2.1)

 $s: スエリング、<math>r_i: i$ グループに属するボイド径、 $N_i: i$ グループに属するボイド数密度 N: ボイド数密度

本研究開発は、式(2·2.1)の逆過程、すなわちボイドスエリングからボイドサイズ分布を求める手法の構築を行う。これにより、ボイド平均径 d等を求めることも可能となり、オロワンモデルを適用する場合に、硬化に比例する $\sqrt{N \cdot d}$ を算出できる。これらを統合すること

で、超音波試験で得られたスエリング測定値から機械的特性を算出することが可能となる。 更に、ボイドサイズ分布を求めることで、ミクロ組織の入力パラメータを求めることがで き、経時変化モデルの精緻化に資することも可能となる。この検討結果は2.2.2.5 で示す。 また2章末に2.2.2.1節の参考文献[1-35]を記載するとともに、本研究テーマに関連した研 究発表のリストを示す。

2.2.2.2 オーステナイト系ステンレス鋼三元系の電子構造計算による原子間ポテンシャルの開発

① はじめに

本項の究極的な目的は、オーステナイト系ステンレス鋼の主要元素である Fe, Cr, Ni 三元 系を対象として、照射劣化挙動を原子スケールの現象から予測するための基礎となる、照 射欠陥生成過程、経時変化、転位と照射欠陥の相互作用等を再現することである。そのた めには、この合金系での空孔や格子間原子の形態、生成エネルギー、移動エネルギー、さ らに欠陥集合体の形状および生成エネルギー、移動エネルギーなどを正しく再現する原子 間ポテンシャルの開発が必要である。また、応力下での欠陥の振舞いや、様々な格子間原 子集合体の形態を再現するためには、上記物理量の応力依存性や、積層欠陥エネルギー (Stacking Fault Energy: SFE) なども再現する必要がある。本研究開発では、Fe, Cr, Ni 三元系 について様々な原子配置の第一原理計算を行い、それらの結果を良く再現する原子間ポテ ンシャルをフィッティングによって求めることを第一目標としている。今年度は、この三 元系について格子欠陥を含まない完全結晶系に対象とし、その FCC 構造の相安定性と格子 定数およびそれらの性質への合金元素の影響を再現する原子間ポテンシャルを開発した。

② 磁性と相安定性の問題

オーステナイト系ステンレス鋼は FCC 構造であり、これは常温常圧では体心立方(BCC) 構造で安定な Fe に、Ni が混入することによって通常は室温で不安定な FCC 構造が安定化 するためと考えられる。Fe+Ni 合金系の温度と Ni 濃度の状態図では、純 Fe の BCC・FCC 相転移温度が Ni 濃度の上昇とともに低下していく。高温の γ 相では Fe と Ni は均一に混合 しているが、ある温度以下では Ni 濃度が一定以上である γ 相と、Ni 濃度の低い α 相に分離 し、さらに温度を下げると全体が均一な BCC 構造の α 相に転移する。常温では熱力学的に は FCC 構造は不安定であるが、Ni 原子の拡散は常温で事実上起こらないために FCC 相が 維持されることになる。これらより、Ni や Cr の濃度によらず常に FCC 相が安定となる原 子間ポテンシャルを作成することがシミュレーションを行う上で効率的であると考えられ る。

この課題を設定する上で、問題となるのが第一原理計算における FCC 相の安定性である。 原子間ポテンシャルを作成するためには、フィッティングの元となる第一原理計算を行い、 その結果を再現するようにフィッティングを行うが、第一原理計算では絶対零度のエネル

ギーのみ計算可能である。純 Fe において高温で FCC 相が安定になるのはエントロピーの効 果であり、これは第一原理計算に取り入れることができない。第一原理計算の結果に基づ いて原子間ポテンシャルを作成する限り、FCC 構造でなく BCC 構造が安定となることは避 けられない。また、Feの FCC 相の第一原理計算においては、エネルギーを最も下げる安定 な構造は各原子の磁性モーメントが特定の[100]方向に周期構造をもつ反強磁性状態である ことが分かっており、その場合には結晶がその方向に伸長し面心正方 (FCT) 構造となる不 安定性が存在する(図 2.2.3)。FCC 構造の Fe では、この反強磁性秩序のキューリー点が数 K 程度であるため常温ではこうした反強磁性秩序は存在せず、各原子の磁性モーメントはラ ンダムな方向を向いているため、FCT 不安定性は存在しない。つまり第一原理計算の結果 に忠実にフィッティングを行うと、FCC 相が安定となる原子間ポテンシャルを作成できな いということになる。この問題を解決するため、今年度は第一原理計算において磁性を考 慮しない解析を行い、これを元にして原子間ポテンシャルを作成した。これは、磁性を考 慮しない計算の場合、Fe では FCC 相が BCC 相より安定となることが知られているためで ある。定性的には磁性が BCC 構造を安定化させると考えられており、高温では磁性秩序が 消失するために磁性の寄与が低下し、FCC 構造が安定化するという側面もある。しかし高 温で各原子は磁性モーメントを失ったわけではなく、原子ごとにばらばらな向きを向いて いる。これを磁性がないとして扱うことの妥当性評価は、今後詳細に検討していく必要が ある課題である。



図 2.2.3 Fe の FCC 構造における最も安定な磁性状態、およびその磁性状態における最も 安定な格子構造。格子が磁性秩序の周期方向に伸長するとともに向きの異なるス ピンをもつ原子同士が引き合う。

今年度は、磁性の問題についても予備的な計算および考察を行った。まず、その結果を 示す。FeのFCC構造中にCrあるいはNi原子が規則的に配列しているFe_xCr₁およびFe_xNi₁ の原子配列について、xが4,8の場合に強磁性的な状態(F)と反強磁性的な状態(AF)のエネル ギーを第一原理計算により解析し、比較を行った。強磁性的な状態においては第一原理計 算で初期状態をFe原子のスピンが全て揃った状態に設定し、CrあるいはNi原子のスピン の初期状態は0に設定して計算した。電子構造緩和の結果、Cr原子はFeと反対方向のスピ ンを持ち、Ni 原子は Fe 原子と同じ方向のスピンを持つ状態が得られた。反強磁性的な状態 においては Fe 原子のスピンが[100]方向に層状の構造を持ち、周期的な↑↑↓↓という状態を初 期状態とし、Cr および Ni は強磁性のケースと同様、スピン 0 を初期値とした。この場合、 Cr 原子はその場所に Fe 原子があった場合のスピンの向きと同じ方向、Ni 原子はほとんど 0 のスピンの値となる状態に収束した。参考のため、小規模な Fe+Cr+Ni 混合系の電子構造計 算を用いて計算した反強磁性的状態での磁性モーメントの空間分布を図 2.2.4 に示す。

Cr 濃度が増加していく場合には、Fe と Cr の間の反強磁性的相互作用が強いため、Fe の スピンが揃い、孤立している Cr 原子がその反対向きの磁性モーメントを向き周囲の Fe 原 子との反強磁性的相互作用でエネルギーを下げることが分かった。Cr がない場合は状態 AF の方が状態Fより一原子あたり 0.08eV エネルギーが低いが、Fe₇Cr₁の場合はその差が 0.01eV に減少し、Fe₃Cr₁の場合は状態 F の方が状態 AF より一原子あたり 0.05eV だけエネルギー が低くなるという結果が得られた。Ni 濃度が増加していく場合、Fe 原子のスピンが揃って いて Ni 原子のスピンと同じ向きを向くことで Fe, Ni 原子間の強磁性相互作用のためにエネ ルギーが下がり、Fe₇Ni₁の場合は AF 状態の方が一原子あたり 0.04eV だけ安定、Fe₃Ni₁の場 合は差がほぼ 0 となった。



図 2.2.4 Fe+Cr+Ni 混合系の反強磁性的状態での磁性モーメントの空間分布 赤と青の面はそれぞれ上向き、下向きのスピン偏極が一定以上となる部分を示す。茶、青、 白の球はそれぞれ Fe, Cr, Ni 原子を表す。

これらの結果から分かるように、Cr や Ni の割合を増やしていくと、純 Fe では反強磁性状態が安定であったのに対し、強磁性的な状態がより安定化していく。このような強磁性状態は結晶の各軸に対して対称であり、反強磁性状態で現れる FCT 不安定性を持たないため、このような第一原理計算を元にして原子間ポテンシャルを作成した場合には FCC 相が少なくとも準安定にはなることが保障される。更に Ni の割合を増加させた場合に BCC 構造と

FCC 構造のエネルギー差が減少し、より FCC 相が安定になるのであれば、Ni 原子が拡散し て欠乏するような領域が出てこない限り FCC 相が安定に存在できるような原子間ポテンシ ャルを作成することが可能である。

今後は磁性を含まない計算を元に原子間ポテンシャルを先行して開発しつつ、適宜磁性 を含めた原子間ポテンシャルの開発についてその可能性を検討していく予定である。

③ 原子間ポテンシャル

今年度作成した Fe+Cr+Ni 三元系の原子間ポテンシャルは、式(2-2.2)で表される一般的な EAM タイプである。

$$U = \sum_{i,j} \Phi(R_{ij}) + \sum_{i} F(\rho_i), \quad \rho_i = \sum_{j} \Psi(R_{ij}) \quad (2-2.2)$$

三元系においては、2つの原子の組み合わせが6通りあるので、二体ポテシャルは原子 のペアに応じて6種類の関数を用いる。電子密度分布ψは原子iが原子jの電子密度に及ぼ す影響であるが、これは*i*,*j*それぞれの原子の種類の組み合わせに応じて9種類の異なる関 数を使用する。また埋め込み関数は3種類の元素に対応した3種類の関数を使用する。合 計で18種類の関数を使用することになる。これらの関数をスプライン曲線で表現し、そ のパラメータについて第一原理計算の結果と合うように調整するのが一般的な原子間ポテ ンシャル開発の手続きである。図2.2.5 にフィティングの結果得られたこれらの関数のプロ ットを示す。フィッティングの具体的な手続きを次項以降で述べる。

④ Fe-Fe 項のフィッティング

前述のように、まずは純 Fe を対象として、FCC 構造が安定となる原子間ポテンシャルを 作成する必要がある。図 2.2.6 に、純 Fe の FCC 構造と BCC 構造について格子定数を変化さ せた場合の一原子あたりのエネルギーを示す。丸印で示す点が第一原理計算の結果で、実 線が開発した原子間ポテンシャルを用いて計算した結果である。FCC 構造は BCC 構造と比 較して一原子あたり約 0.2eV だけエネルギーが低く、安定であることが分かる。また一軸引 張やせん断ひずみなどの変形を加えた場合も第一原理計算を行い、FCC 構造が安定である ことが分かった。それらの計算結果もフィッティングに取り入れてあるため、開発した原 子間ポテンシャルを用いて MD 計算を行った場合でも、純 Fe では FCC 構造が安定となる。 この部分での今後の課題は、純 Fe における FCC 構造での空孔や格子間原子の生成エネルギ ーや移動エネルギー、また自由表面のエネルギーや弾性定数、積層欠陥ネルギー、フォノ ン分散などについて第一原理計算を行い、それらを再現するようにポテンシャルを改良し ていく必要がある。



図 2.2.5 フィッティングによって作成した原子間ポテンシャルにおける二体ポテシャル φ、 電子密度分布 ψ および埋め込み関数 F の関数形



図 2.2.6 格子定数に対する純 Fe の FCC 構造と BCC 構造のエネルギーのプロット

⑤ Fe-Cr、Fe-Ni 項のフィッティング

FCC 構造、BCC 構造それぞれについて Fe 原子を一定割合で置換し、Fe_xCr₁および Fe_xNi₁ で表される周期的で規則的な構造について格子定数を変化させてエネルギーを第一原理計 算により求めた。図 2.2.7 は Cr や Ni の濃度に対して、原子一個あたりのエネルギーがどの ように変化するかをプロットしたものである。FeとNiはFCC構造、CrはBCC構造の場合 の完全結晶の原子一個当たりのエネルギーを原子の個数分加算した値をエネルギーの原点 とした。丸印や四角で示す点が第一原理計算の結果、実線が作成した原子間ポテンシャル を用いて計算した結果である。Cr および Ni の増加によって、FCC 構造と BCC 構造のエネ ルギーの差はほとんど変化しなかったことを考慮し、安定な FCC 構造の場合のみを示して ある。このプロットは、FCC 構造の純 Fe に対する Cr/Ni の溶存エネルギーと等価であり、 Cr の場合は負で溶存しやすく、Ni の場合は正であって溶存するより分離した方が安定とい う結果になり、Niの場合については実験事実と反する。これについては磁性を入れた計算 を行ったところ、Ni の場合にも負になったため、この相違は磁性の扱いに起因したもので あることが分かった。ただし融点よりはるかに低い温度で実際に分離が起こるかどうかは、 この曲線が上に凸か下に凸であるかで決まり、上に凸であれば溶質原子間に引力的相互作 用があり、照射による拡散で相分離が起こる可能性がある。第一原理計算の結果およびフ ィッティングによって得られた原子間ポテンシャルによる計算結果ともに直線に近く、溶 質原子間の相互作用は非常に弱いことを示唆している。したがって MD において融点より 十分低温で計算を行う限り、相分離はおこらないと考えてよい。



図 2.2.7 規則的な Fe_xCr₁系および Fe_xNi₁系における Cr, Ni 溶存エネルギーの 濃度に対する依存性

⑥ 検証

原子間ポテンシャルの開発には周期的で規則的な構造を持った配置を用いたが、実用合金では溶質原子はランダムに配列していると考えられる。そのようなランダムな配列について実際に第一原理計算を行い、そのエネルギーについて作成した原子間ポテンシャルを用いて計算した値と比較することで、この原子間ポテンシャルの妥当性を検証した。第一原理計算はFCC構造の単位格子が2x2x2並んだ32原子からなる系について、Fe原子21個、Cr原子6個、Ni原子5をランダムに配置したものを60ケース生成し、そのエネルギーを計算した。図2.2.8 にこれらの配置について第一原理計算のエネルギーと原子間ポテンシャルによって計算したエネルギーの対応を示す。配置によるエネルギーのばらつきが±0.3eV程度であるのに対し、第一原理計算と原子間ポテンシャルによる計算のエネルギー差は0.5eV程度であり、ランダムネスがある場合にはうまく第一原理計算を再現できていないことを示している。これを改善するには、ランダムな配置の結果をフィッティングの計算に取り入れるという方法が考えられる。





横軸が第一原理計算のエネルギー、縦軸がポテンシャルから計算されるエネルギーである。 緑の直線からのズレがフィッティングの誤差である。

⑦ 今後の課題

まず第一に、ランダムな配置について第一原理計算の結果を適切に再現できるように原 子間ポテンシャルを改善することが直近の目標となる。第二ステップとして、純 Fe を対象 として表面エネルギー、SFE、弾性定数、フォノン分散、欠陥の生成エネルギーおよび移動 エネルギーを第一原理計算によって求め、それらを再現するように純 Fe に相当する原子間 ポテンシャルを改良する。さらに、Cr, Ni が一定濃度で規則的に配列した場合について同 様の計算を行い、濃度依存性を調べた上でそれを再現するように原子間ポテンシャルを改 良し、ランダムな原子配置場合についても第一原理計算の結果と比較することでその妥当 性を検証する。

2.2.2.3 欠陥形成に及ぼす応力・ひずみの影響に関する検討

本研究開発においては、中性子照射下における代表的な欠陥形成過程の一つであるカス ケード損傷過程に対し、外部ひずみが与える影響を原子シミュレーションによって評価した。

計算手法の概略

(a) 計算条件の選定

カスケード損傷過程に影響を与える可能性のあるパラメータとしては、材種、初期温度、 中性子から第一はじき出し原子(PKA: Primary Knock-on Atom)に与えられる PKA エネルギー が挙げられる。

材種については、元素の空間分布などの影響を排し、欠陥形成過程に対する外部ひずみ 影響の基礎特性を明確化する目的から、単元系を対象とした。特に、本研究開発の対象材 料であるオーステナイト系ステンレス鋼における挙動予測に資するため、FCC 構造かつ低 い SFE を持つ Cu を選択した。

温度条件については、先行研究において詳細な検討が行われ、900K においては影響が確認されたものの、100K、600K においては、それほど顕著な影響は確認されなかったことを考慮し^[36]、初期温度としては 100K を選択した。選択した 100K という温度は、FBR 炉心供用温度とは異なるが、本研究開発で得られる結果は、広範な温度域を代表する特性を提供すると考えられる。

PKA エネルギーは、カスケード損傷過程における最も代表的なパラメータの一つであり、 特に顕著な影響を与える可能性がある。実用上においても、エネルギースペクトルとの関 連において重要であり、単一の中性子エネルギーを仮定した場合においてさえ PKA エネル ギーは様々であることを踏まえれば、この依存性を解明する必要性は必然的に高い。一方 で、少なくともα-Fe においては、後述する欠陥形成効率が 10keV 以上の PKA エネルギーに おいて顕著な増加傾向を示さないことが知られている^[37]。また、例外は存在するものの、

ー定以上の PKA エネルギーの条件下においては、図 2.2.9 に示すに、より小さなサブカス ケードに分岐することが知られている^[38]。これらの先行研究は、大きな PKA エネルギーが 必ずしも小さな PKA エネルギーにおける現象からかけ離れた特性を示さないことを示唆し ている。

これらの知見に基づき、本研究開発に於いては、Cuの 100K における完全結晶に対する

外部ひずみの影響を、10keVのPKAエネルギー条件下において詳細に解析し、さらに、代表的な特性を与えたひずみ条件に対して様々なPKAエネルギー依存性を明らかにすることとした。



図 2.2.9 様々な PKA エネルギーにおけるカスケード損傷過程の再現結果^[38]

(b)計算モデル

本検討では、数十万~数百万個の原子挙動を直接再現可能な MD 法で、原子間相互作用 を記述する原子間ポテンシャルには Mishin^[39]により構築された EAM ポテンシャルを用い ^[40]、解析した。X,Y,Z 軸方向をそれぞれ、[1 1 0]、[1 1]、[11 2]とし、全方位を周期境界 条件とした。ひずみは、原子の初期配置を設定する段階で結晶全体に均一に印加した。周 期境界条件により、結晶のひずみが維持されることから、一定ひずみ下におけるカスケー ド損傷過程の再現が行われる。

計算は、系の粒子個数(N)、体積(V)、エネルギー(E)を一定とする、NVE アンサンブルで 行った。100K で安定させた結晶を用意し、PKA エネルギーに対応する加速度を中心原子に 与えることによりカスケード損傷を計算した。1回のカスケード損傷過程では、数個の欠陥 集合体のみが得られるため、PKA に与える加速度の方向を変えながら、各々の条件下で250 回のカスケード損傷計算結果を統計的に解析した。この際、PKA の加速方位に対し、欠陥 形成は依存性を持つことが先行研究で明らかになっている^[38]。本研究開発では、このよう なカスケード損傷過程が本来持っているばらつきよりも、再現された応力の影響の確から しさを統計的に求めることが重要であるため、250回の計算結果を 50回ごとにグループ化 し、各グループにおける平均値を1サンプルとして扱った。これら、250回のカスケードの 結果からくくり出された 5 つのサンプルの標準偏差をカスケード損傷に関するグラフのエ ラーバーとした。

(c) 格子欠陥の評価手法

本研究開発では、カスケード損傷過程による欠陥形成を可視化し、形成された格子欠陥 の性状を把握するために、独自に解析コードを開発した。図 2.2.10 に、解析コードによる 欠陥同定の模式図を示す。本解析コードでは、 (a)可視化対象となる結晶の各原子から最近 接の格子点を割り当て、(b)格子点ごとに割り当てられた原子数を数え上げ、(c)1つも原子 が割り当てられなかった格子点を空孔、2つ以上の原子が割り当てられた格子点を格子間 原子サイトとして同定した。この後さらに、欠陥サイトから最近接サイトに存在する同種 の欠陥を連鎖的に検索することで、欠陥集合体サイズを同定した。



点欠陥集合体の方向同定においては、3 個以上の点欠陥の集合を点欠陥集合体と定義し、 図 2.2.11 に示すように周辺原子の本来の格子位置からの変位量が最も大きい方位を点欠陥 集合体のバーガースベクトルの方位として判定した。本研究開発では、すべての欠陥集合 体が異方性を持つ転位ループであると仮定し、点欠陥集合体周辺の原子の変位が最も大き い方向が転位ループのバーガースベクトルであると定義して、方位同定を行った。



図 2.2.11 点欠陥集合体の方向同定に用いる周辺原子のずれの模式図

② 10keV の単ーカスケードにおける応力・ひずみ印加の影響評価

(a) 評価条件および評価手法の詳細

本研究開発では、応力・ひずみ印加の影響を決定付ける支配因子の特定と、これにより 現実の複雑な応力・ひずみ条件下における欠陥形成予測に資することを目的とし、様々な 応力条件における欠陥形成に対して系統的に解析を行った。

表 2.2.1 に計算条件の一覧を示す。せん断変形 (SHE) を与えるにあたり、せん断印加面 と垂直な軸方向の周期境界で結晶に乱れが生じないよう、せん断ひずみ量に応じてセルサ イズを調整した。このため、原子数はひずみ条件によって異なるが、20keV の場合における セルサイズを変更した場合の検討結果からこの影響は微細であることが明らかになってい る。原子数の影響については、次項で述べる。

評価対象として、全残存点欠陥総数の平均と標準偏差を求めるとともに、点欠陥、2量体、 および 3 つ以上の点欠陥が集合した欠陥集合体のそれぞれに含まれる残存点欠陥数を求め た。

Strain	Number of atoms	\mathcal{E}_{11}	E 22	E 33	ε ₁₂ =ε ₂₁	E 23=E 32	ε ₃₁ =ε ₁₃
No-strain	559440						
Isometric	559440	-0.50	1.00	-0.50			
Poisson	559440	-0.26	1.00	-0.26			
Uni-axial	559440		1.00				
Hydrostatic	559440	1.00	1.00	1.00			
SHExy 2.04%	907,200				1.02		
SHEyx 0.50%	1,529,136				0.25		
SHEyx 1.02%	745920				0.51		
SHEyx 1.46%	522144				0.73		
SHEyx 2.04% (SHEyx)	372960				1.02		
SHEyz 1.96%	671328					0.98	
SHEzy 2.02%	932400					1.01	
SHEzx 0.50%	1545120						0.25
SHEzx 1.00%	772560						0.50
SHEzx 1.52%	506160						0.76
SHEzx 1.99% (SHEzx)	772560						1.00
SHExz 2.01%	650160						1.01
SHEyx 2.02% + UNI 1.00%	372960		1.00		1.01		
SHEzx 1.99% + UNI 1.00%	772560		1.00				1.00

表 2.2.1 計算対象としたひずみ条件の一覧

(b) 外部ひずみ印加下における欠陥形成過程の再現結果

図 2.2.12 に、MD 法により再現した 1.0%引張ひずみ下におけるカスケード損傷過程の一例を示す。図 2.2.12 においては、格子間原子と空孔をそれぞれ赤と青の点として表示しており、計算セル内の何も表示されていない領域は欠陥を含まない完全な結晶である。(i),(ii)において、PKA エネルギーによって弾き出し連鎖が開始されると、赤と青の点として表示された欠陥が集中して存在する領域(以下、カスケード領域)が形成される。この過程は、一

般に衝突過程と呼ばれる。カスケード領域は、(iii)に示すように僅か 1ps 程度のうちに最大 となり、10keVのPKAエネルギーに対して 10nm 程度の大きさとなっていることがわかる。 その後、(iv), (v), (vi)に見られるカスケード領域は急激な収縮がわずか数 ps の間に起こり、 大半の欠陥は消滅する。この過程は、冷却過程と呼ばれている。現象が概ね落ち着いた後 も、数十 ps にわたってシミュレーションを継続したが、(vii), (viii)の比較から確認できる通 り、冷却過程収束後の大きな変化は観察されなかった。



図 2.2.12 1.0% 引張ひずみ印加下におけるカスケード損傷過程の典型例

図 2.2.12 (viii)において、残存した欠陥を拡大したものを図 2.2.13 に示す。空孔、格子間原 子の双方において、単体で存在する点欠陥のみでなく、2 個の点欠陥が集合した 2 量体、多 数の欠陥が集合した格子間原子集合体が形成されていることが確認できる。特に、格子間 原子型の集合体については、平板状の組織を持つ転位ループと呼ばれる組織を形成してい ることが確認された。


図 2.2.13 1.0% 引張ひずみ印加下におけるカスケード損傷過程において形成された欠陥の 詳細

(c) 点欠陥形成総個数に対する応力・ひずみ印加の影響

(c-1) 単純ひずみが欠陥形成に及ぼす影響

図 2.2.14、図 2.2.15 に、それぞれカスケード損傷当たりの格子間原子、空孔平均形成総個 数変化を、-1%から 1%の範囲の単軸変形に対してプロットしたものを示す。実線で示した 総点欠陥数のグラフから、単軸引張の印加により総点欠陥数が顕著に増加することが明ら かになった。また、引張変形の場合ほど顕著ではないが、単軸圧縮下においても増加傾向 が確認された。このことから、単軸ひずみが印加された条件下では、照射欠陥形成が促進 されることがわかる。

また、図 2.2.14、図 2.2.15 には、点欠陥(mono-interstitials, mono-vacancies)・2 量体 (di-interstitials, di-vacancies)・3 つ以上の欠陥集合体(interstitial clusters, vacancy clusters)各々に 含まれる点欠陥数を一点鎖線で示した。点欠陥数、2 量体については、外部ひずみによる形 成数の大きな増加は見られず、総点欠陥数の増加は専ら欠陥集合体の増加によることが明 らかになった。







図 2.2.15 空孔形成数の単軸ひずみ量依存性

(c-2) 垂直ひずみによって構成された様々な変形モードが欠陥形成に及ぼす影響

前項で扱った単軸ひずみは、体積変化を伴う異方的な変形である。体積変化と異方変形 は、欠陥形成に影響を及ぼす因子と考えられるため、これら 2 つの因子を分離し、欠陥形 成促進を支配する因子を特定することにより、様々なひずみ条件における欠陥形成促進効 果の予測に資する。また、現実の材料は、単軸引張に対してポアソン変形をするため、上 記の因子との関連においてポアソン変形がどのように扱われるかという点にも言及する。

欠陥形成促進の支配因子を特定するために、新たに等積ひずみ条件と等方ひずみ条件に おける解析を行った。これらひずみ条件の模式図を図 2.2.16 に示す。セルサイズは無ひず みにおいて各辺 19nm とし、原子数は 559,440 個の系を用いた。

全残存点欠陥総数の平均と標準偏差を求めるとともに、点欠陥、2量体、および3つ以上 の点欠陥が集合した欠陥集合体のそれぞれに含まれる残存点欠陥数を求めた。また、欠陥 形成促進を支配する法則性を明らかにする目的で、欠陥集合体のサイズ分布も解析対象と した。



図 2.2.16 検討対象とした変形モードの模式図

表 2.2.2 に示す様々な変形モード、等方変形と等積変形について前項と同様の検討を行い、 総欠陥形成個数を図 2.2.17 に示した。等方変形については、それぞれ-3%から 3%までの体 積増加に対応する-1%から 1%の全方位に等価なひずみを与えた。等積変形については、1% のひずみを y 軸方向に、-0.5%のひずみを x, z 方向にそれぞれ与えた。この変形モードは、 全体として体積増加を示さない一方で、x, z 方向に加えた圧縮ひずみにより、変形の異方性 は増加している。

	Anisotropy		Volume change		Strain		
	(aspect	ratio y/x = y/z)			x axis	y axis	z axis
単軸変形(UNI)	0	0.990 to 1.010	0	1.00%	0.00%	-1.00% to 1.00%	0.00%
等方変形 (HYD)	Х	1.000	0	-3.00% to 3.00%	-1.00% to 1.00%	-1.00% to 1.00%	-1.00% to 1.00%
等積変形 (ISO)	0	1.015	Х	0.00%	-0.50%	1.00%	-0.50%

表 2.2.2 検討対象とした変形モードの詳細

欠陥形成個数は、等方膨張変形に対して単調に増加したが、その影響は微細であった。 等積 0.33%ひずみは 1.0%の体積膨張に対応し、体積変化の観点からは単軸 1.0%引張の場合 と等価である。この一方で、等積変形においては、体積膨張を起こさないにもかかわらず、 欠陥形成個数の顕著な増加が確認され、等積 1.0%ひずみの場合においては、y 軸方向に等 価なひずみを持つ単軸変形の場合に比して、はるかに大きな欠陥形成個数を示した。これ らの結果は、欠陥形成個数の外部ひずみ印加による増加が、体積増加ではなく、異方的な 変形の印加によって発生していることを示唆している。

また、図 2.2.17 で、等方膨張変形条件において形成欠陥数が増加し、等方圧縮条件において減少することが確認された。格子間原子型の欠陥は周辺の結晶を押し広げる方向にひずみを発生させるのに対し、空孔型の欠陥は結晶を収縮させる方向のひずみを発生させる。したがって、等方膨張条件は格子間原子型欠陥の形成促進に対して有利に、空孔型欠陥の形成に不利に働く一方で、等方圧縮条件は格子間原子型欠陥に不利に、空孔型欠陥に有利に働くと考えられる。このことから、等方圧縮条件で欠陥数が減少する傾向は、空孔型欠陥の形成が促進される効果よりも、格子間原子型欠陥の形成を抑制する効果が勝っていることを示していると考えられる。すなわち、変形の印加による欠陥形成の増加、主に格子間原子の形成の促進によることが示唆された。



図 2.2.17 種々のひずみ条件における欠陥形成数のひずみ量依存性

新たに検討した変形モードに対しても、図 2.2.18、図 2.2.19 に示すように、点欠陥・2 量体・3 つ以上の欠陥集合体に分類して検討を行った結果、単軸変形の場合と同じく、欠陥形

成総個数の変化は専ら欠陥集合体の形成個数変化によることが明らかになった。特に、等 方的 1.00% 圧縮(HYD -1.00%) における結果から、ひずみによって欠陥形成が促進される場合 のみならず、欠陥形成が抑制される場合においても、欠陥形成個数変化が欠陥集合体形成 個数変化に起因することが確認された。



図 2.2.18 単軸ひずみ条件下における格子間原子形成数変化



図 2.2.19 様々な単軸ひずみ条件下における空孔形成数変化

本項におけるここまでの検討により、外部ひずみによる残存欠陥数への影響は、異方的 なひずみ印加による大きなサイズの格子間原子集合体の形成促進によって支配されている ことが明らかになった。しかし、現実の金属材料に単軸の変形を加えた場合の変形である ポアソン変形は、本項で扱った等積1.0%変形(ISO 1.00%)と等方1.00%変形(HYD 1.00%)の中 間に位置する。Cuのポアソン比を特定するために、様々なポアソン比を仮定して実際にシ ミュレーションセルを形成し、系のポテンシャルエネルギーを求めた結果を図 2.2.20 に示 す。この結果、0.263 の場合にポテンシャルエネルギーは最低となり、これが本研究開発で 用いた原子間ポテンシャルに於けるポアソン比である。



図 2.2.20 仮定した様々なポアソン比に対する Cu 結晶のポテンシャルエネルギー

ポアソン変形を再現し、カスケード損傷過程による欠陥形成数を評価した結果を、等積 1.0%引張、単軸1.0%引張、等方1.0%膨張の場合の結果とともに図2.2.21に示す。この結果、 ポアソン変形は特異的な傾向を示さず、等積1.0%引張、単軸1.0%引張の中間の欠陥形成数 を示した。

これらの検討の結果から、引張方向の単軸の変形を印加した方位と垂直な 2 方位に対す る圧縮変形量が大きいほど欠陥形成が促進されることが明らかになった。



図 2.2.21 x, z 方向のひずみ量に対する欠陥形成個数 NFの依存性

(c-3) せん断変形が欠陥形成に及ぼす影響

より複雑なひずみ条件の扱い方を検討するため、せん断ひずみ印加の影響を検討した。 このとき、実際に結晶内に応力を発生させるひずみ成分にあたる Green-Lagrange ひずみテ ンソルは、y 軸に垂直な面に与えられる x 方向の式(2-2.3)で与えられる。

$$E = \begin{bmatrix} 0 & \varepsilon_{xy} & 0 \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \varepsilon_{xy} & 0 \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xy}^{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 0 & \varepsilon_{xy} & 0 \\ \varepsilon_{yx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$
(2-2.3)

この時、垂直ひずみ成分である *Eyy* が含まれるが、一次近似においては無視でき、対称成分のみが残る。したがって、今回与えた単純せん断は、純粋せん断で近似することが可能である。

前項により、欠陥数増加は格子間原子集合体増加の影響としてとらえることが適切であることが示唆された。このため、これ以降は、格子間原子集合体の欠陥サイズのみに注目してサイズ分布と欠陥個数の関係を検討する。一方で、全点欠陥数の観点からは、形成される格子間原子数と空孔数は等しく、これらを特に区別して扱う必要はないため、格子間原子数または空孔数を N_F として統一的に扱う。

本研究開発では、統計誤差が大きくなりやすいカスケード損傷過程に対して、応力印加 による影響を見る必要から、工学せん断ひずみで2%程度の大変形を扱っている。このため、 大変形においても弾性変形を前提とする 2 次関数による近似が成り立つことを確認すると ともに、実効的な弾性係数を求める目的で、図 2.2.22 に示すように、分子静力学を用いて ひずみエネルギーを導出した。



図 2.2.22 工学せん断ひずみに対するひずみエネルギー依存性

2次関数をフィッティングした結果、非常に良い一致を示したことから、今回ひずみエネ ルギーを計算した-3%から3%までのせん断ひずみは今回設定した完全結晶において線形弾 性領域であることがわかる。さらに、フィッティングされた2次関数の2階微分から式(2-2.4) を用いて横弾性係数を求めた結果を、表2.2.3に示した。

$$G = \frac{n}{V} \frac{d^2 E}{d\gamma^2}$$
(2-2.4)

G: 横弾性係数、n: 系内の原子個数、V: 系の体積、E: 系のひずみエネルギー、 y: せん断ひずみ

Strain	Modulus of rigidity [GPa]
SHExy	40.18
SHEyx	40.01
SHEyz	40.01
SHEzy	40.21
SHEzx	56.78
SHExz	57.03

表 2.2.3 図 2.2.22 から導出した各方位の横弾性係数一覧

工学せん断ひずみに対して、欠陥形成数 N_F を整理したものを図 2.2.23 に示す。同じひず み量であっても、ひずみ印加方位によって同じひずみ量に対する N_F の値には有意な差異が 確認された。この N_F における差異の要因を明らかにするために、表 2.2.3 から各ひずみ条件 における応力を算出し、図 2.2.23 を応力に対して整理したものを図 2.2.24 に示す。欠陥数 形成数 N_F は応力に対して方位を問わずほぼ一定の依存性を示し、2 次関数によってよく近 似された。すなわち、XZ と ZX は同等のせん断ひずみに対して、他の 4 方位の場合よりも 大きなせん断応力が発生したことが、高い N_F の原因であり、 N_F はひずみよりもむしろ応力 に依存していることを示唆している。

これらの結果に、対称性を考慮して 2 次関数をフィッティングした結果を図 2.2.24 に示 す。せん断応力に対する欠陥数 $N_{\rm F}$ の変化は、 $\tau=0$ で最小値を取る 2 次関数に対して非常に 良い一致を示し、

$$N_F = A\tau^2 + B \tag{2-2.5}$$

に対して、 $A = 2.6751 \times 10^{-6}$, B = 19.575を与えた。



図 2.2.23 工学せん断ひずみに対する欠陥形成個数依存性



(c-4) 複合的なひずみ条件に対する整理方法の提案

Uni-axial strain の場合との比較において、単純せん断ひずみを yx、zx にそれぞれ印加した 場合(SHEyx2.04%、SHEzx1.99%)、せん断ひずみと引張ひずみを同時にかけた場合の $N_{\rm F}$ の変化を図 2.2.25 に示す。この結果、zx せん断においては、単軸引張を加えて印加するこ とにより、欠陥数の増加が確認された。一方、yx せん断においては、加えて単軸ひずみを 印加することによる顕著な欠陥数増加は確認されなかった。単軸変形印加による $N_{\rm F}$ の変化 は、無ひずみ条件に単軸変形を加えた場合とは大きく異なっている。すなわち、単軸変形 とせん断変形の $N_{\rm F}$ 増加に及ぼす影響は、線形加算不可能であることが明らかになった。



図 2.2.25 様々なせん断応力に対する欠陥形成個数依存性

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_{12} & 0 \\ \sigma_{21} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_{12} & 0 \\ \sigma_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$
(2-2.6)

固有方程式は一般の応力テンソルに対して、

$$(\sigma_{11} - \sigma)l \times \sigma_{12}m \times \sigma_{13}n = 0 \tag{2-2.7}$$

$$\sigma_{21}l \times (\sigma_{22} - \sigma)m \times \sigma_{23}n = 0 \tag{2-2.8}$$

$$\sigma_{31}l \times \sigma_{32}m \times (\sigma_{31} - \sigma)n = 0 \tag{2-2.9}$$

で与えられ、この連立同次方程式のゼロでない解の存在条件は、

$$\begin{vmatrix} \sigma_{11} - \sigma & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} - \sigma & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} - \sigma \end{vmatrix} = 0$$
(2-2.10)

である。 今回のケースにおいては、固有方程式が

 $-\sigma l + \sigma_{12}m = 0 \tag{2-2.11}$

$$\sigma_{21}l - \sigma m = \sigma_{12}l - \sigma m = 0 \tag{2-2.12}$$

$$-\sigma n = 0 \tag{2-2.13}$$

で、0でない解の存在条件は、

$$\begin{vmatrix} -\sigma & \sigma_{12} & 0 \\ \sigma_{12} & -\sigma & 0 \\ 0 & 0 & -\sigma \end{vmatrix} = 0$$
(2-2.14)

で与えられる。上式を展開すると

$$\sigma(\sigma + \sigma_{12})(\sigma - \sigma_{12}) = 0 \tag{2-2.15}$$

が得られ、

$$\sigma = 0, \quad \pm \sigma_{12} \tag{2-2.16}$$

と求めることができる。

上記のように整理することで、せん断成分を含むひずみ条件は、垂直ひずみのみから構成されるひずみへと変換可能である。同様の操作を、図 2.2.25 の各ひずみ条件に対して適用すると、UNI+SHEyx の場合について、

$$\varepsilon = 0, \frac{1}{2} \left(\varepsilon_{yy} \pm \sqrt{\varepsilon_{yy}^2 + 4\varepsilon_{xy}^2} \right), \qquad (2-2.17)$$

SHEzx の場合について、

$$\mathcal{E} = 0, \ \pm \mathcal{E}_{xz}, \tag{2-2.18}$$

UNI-SHEzx の場合について、

$$\varepsilon = \varepsilon_{yy}, \pm \varepsilon_{xz}. \tag{2-2.19}$$

という主ひずみ、すなわち直交する垂直ひずみ成分に変換可能である。この結果として求 まる主ひずみの大きさを整理したものを表 2.2.4 に示す。

Strain	E _{major} [%]	\mathcal{E}_{middle} [%]	€ _{minor} [%]
No-strain	0.00	0.00	0.00
Isometric	1.00	-0.50	-0.50
Poisson	1.00	-0.26	-0.26
Uni-axial	1.00	0.00	0.00
Hydrostatic	1.00	1.00	1.00
SHEyx	1.02	0.00	-1.02
SHEzx	1.00	0.00	-1.00
UNI+SHEyx	1.65	0.00	-0.63
UNI+SHEzx	1.02	1.00	-1.02

表 2.2.4 各ひずみ条件に対する主ひずみ変換の結果一覧

UNI+SHEyx と UNI+SHEzx では主ひずみに変換した場合のひずみ条件が大きく異なること が分かる。図 2.2.25 で最も大きな欠陥形成個数増加が確認された UNI+SHEzx のひずみ条件 は、図 2.2.21 で最も大きな欠陥形成個数増加が確認された等積ひずみ(Isometric)に近い変形 モードである。このことから、主ひずみとして整理されたひずみ条件を比較することで、 欠陥増加をある程度予測可能であることが示唆された。

本結果から、ひずみ条件と欠陥形成促進効果の相関は複雑であり、すべてのひずみ条件 に対する欠陥形成促進効果を簡単な関数で表現することは困難であることが明らかになっ た。すなわち、簡単な関数で整理可能な単純せん断等の例外を除いて、各応力・ひずみ条 件に対する欠陥形成促進効果を正確に評価するためには、個々のケースに対して、MD 法に よる解析を行う必要がある。

一方で、複雑なひずみ条件に対しても、主ひずみ解析を用いることで、より単純なひず み条件として整理することが可能であり、これまでに試行した様々なひずみ条件との類似 性を考慮することで、どの程度の欠陥数増加が見込まれるかをある程度予測できる可能性 が示唆された。

(d) 欠陥集合体サイズ分布に対する外部ひずみ影響評価

欠陥集合体の形成に注目し、種々のひずみ条件下において形成される格子間原子集合体、 および空孔集合体のサイズ分布をそれぞれ図 2.2.26、図 2.2.27 に示した。格子間原子、空孔 ともに、大きいサイズの欠陥集合体は等積 1.00%変形(ISO 1.00%)において最も多く形成され、 次いで単軸 1.00%引張(1.00)、等方 1.00%膨張(HYD 1.00%)の順に大きい形成個数が確認され た。これらの、大きいサイズの欠陥集合体の形成が確認された条件は、大きな欠陥形成個 数が観測された条件とよく一致した。



図 2.2.26 種々のひずみ条件下において形成される格子間原子集合体のサイズ分布



図 2.2.27 種々のひずみ条件下において形成される空孔集合体のサイズ分布

欠陥集合体のサイズ分布との関連において、さらに詳細な解析を行うために、欠陥集合体のサイズを1、2、3、4、5-6、7-10、11以上(11-)の7つのグループに分割し、各サイズの 欠陥集合体の総点欠陥数への寄与を求めた。単軸 1.00%引張による点欠陥総数の増加率を、 上で定義した欠陥集合体サイズのカテゴリーごとに整理した結果を図 2.2.28 に示す。外部 ひずみ印加による顕著な欠陥生成個数の増加は、点欠陥、2 量体の形で存在する欠陥のみな らず、3、4、5-6 といった小さいサイズの欠陥集合体においても確認されなかった。このこ とは、欠陥形成総個数の増加は専らサイズ 7 以上の大きなサイズの欠陥集合体の形成促進 によることを示している。特に、サイズ 11 以上の欠陥集合体における増加が顕著であり、 単軸 1.00%引張変形の印加によって、サイズ 11 以上の欠陥集合体に含まれる点欠陥個数は 約4倍にまで増加した。



図 2.2.28 単軸 1.00% 引張ひずみ印加による各サイズの欠陥集合体に含まれる点欠陥増加率

(e) 欠陥集合体形成方位との関連における外部ひずみ影響評価



図 2.2.29 格子間原子集合体形成方位の[111]単軸ひずみ量依存性

サイズ帯ごとに格子間原子集合体の形成個数全体に占める<111>、<110>各方位の集合体形成個数を整理した結果をそれぞれ図2.2.30、図2.2.31に示す。大きいサイズの欠陥集合体ほど、全体に占める<110>系の格子間原子集合体の割合が大きく、<111>系の格子間原子集合体の割合が大きく、<111>系の格子間原子集合体の割合が大きく、<111>系の格子間原



図 2.2.30 形成された全格子間原子集合体に占める<111>系格子間原子集合体の割合の [111]単軸ひずみ依存性



図 2.2.31 形成された全格子間原子集合体に占める<110>系格子間原子集合体の割合の [111]単軸ひずみ依存性

格子間原子集合体は、余剰な結晶面が一面結晶内に挿入された転位ループとしてとらえ ることができる。次項で詳細に示すが、転位ループの形成エネルギーは、平板の周の長さ に対応する転位の形成エネルギーと、<111>系の転位ループにのみ見られる積層欠陥形成 エネルギーの総和としてとらえることができる。これに対して、<110>系の転位ループに おいては、積層欠陥は形成されないため、転位としての形成エネルギーのみを考慮すれば 良い。したがって、転位ループ半径の2乗に比例する積層欠陥形成エネルギーを含む<111> 系転位ループと、転位の形成エネルギーのみを考慮すれば良い<110>系転位ループの比率 を考えた場合、大きいサイズになるほど<110>系転位ループがエネルギー的に優位になる と考えられる。

図 2.2.30、図 2.2.31 において、大きいサイズの欠陥集合体ほど、全体に占める<110>系の 格子間原子集合体の割合が大きく、<1 1 1>系の格子間原子集合体の割合が小さくなったこ とは上記の理論と一致する傾向である。このことから、積層欠陥形成エネルギーの重要性 が示唆された。積層欠陥形成エネルギーを決定づける値として、材料に依存する物性値で ある SFE があり、SFE が高いほど、単位面積あたりの積層欠陥形成エネルギーは大きくな り、結果として<1 1 1>系の格子間原子集合体の形成確率は低くなると考えられる。前項に おいて大きいサイズの格子間原子集合体の形成促進が全点欠陥形成数を決定づける因子で あることが明らかになったことから、SFE の相違に起因する<1 1 1>型の格子間原子集合体 形成確率の相違は、現象に大きな影響を及ぼす可能性がある。これらのことから、オース テナイト系ステンレス鋼における応力影響を予測する上で、SFEの相違が及ぼす影響の評価 は重要になることが示唆された。特に、オーステナイト系ステンレス鋼は、最も低い SFE を有する FCC 金属と考えられているため、SFEの相違が応力下欠陥形成に及ぼす影響を検 討することが求められる。

③ 様々な PKA エネルギーにおける欠陥形成挙動変化の検討

(a) 評価条件および評価手法の詳細

(a-1)先行研究との関連

これまで、無ひずみ条件における欠陥形成の PKA エネルギー依存性に関する先行研究は いくつか存在する。

まず、10keV 以下の低エネルギーの領域については、カスケード損傷後に残存する欠陥個数 N_F は経験的に、PKA エネルギー E_n の関数として、以下のように表されてきた^[37]。

$$N_F = A \left(E_p \right)^m \tag{2-2.20}$$

ここで、MD の計算結果から得られる *A* と *m* は経験的な定数である。式(2-2.20)を用いて、 MD 法の結果を整理した先行研究の結果を図 2.2.32 に示す^[37]。各プロットは、MD 法による 再現を基にしたデータであり、各線はこれに *A* および *m* をフィッティングパラメータとし てフィッティングした近似直線を、右下の表は決定されたフィッティングパラメータの決 定値がまとめられている。図 2.2.32 から、式(2-2.20)が 5keV や 10keV といった比較的低い PKA エネルギーにおいて、良い一致を示していることがわかる。



図 2.2.32 欠陥形成数 N_F の PKA エネルギー E_p に対する依存性(低 PKA エネルギー)^[37]

図 2.2.32 においても比較値として参照されているが、欠陥形成個数はしばしば式(2-2.21) で表される半経験的な理論モデル、NRT モデルにおける欠陥生成個数 N_{NRT} との比較において扱われる。

$$N_{NRT} = 0.8 \frac{E_{dam}(E_p)}{2E_d}$$
(2-2.21)

 E_d : はじき出しエネルギー、 E_{dam} : 損傷エネルギー、 E_p : PKA エネルギー

特に、欠陥形成個数 $N_F \varepsilon$ 、NRT モデルにおける欠陥形成個数 N_{NRT} で除した N_F/N_{NRT} は、 欠陥形成効率(Defect formation efficiency)と呼ばれ、欠陥形成を特徴づける値として評価され てきた。この欠陥生成効率 N_F/N_{NRT} の PKA エネルギー E_p に対する依存性を、 α -Fe と Cu に ついてまとめた結果を図 2.2.33 に示す^[41]。この欠陥生成効率 N_F/N_{NRT} は、数 keV までは PKA エネルギーが高い条件ほど低い値をとるが、10keV 以上の高 PKA エネルギーにおいては飽 和傾向を示す。この傾向は、 α -Fe において、100keV までの範囲で評価され、高 PKA エネ ルギー条件では約 0.3 程度の一定値を取ることが確認されている。一方、今回扱う Cu にお いては、5keV 程度の PKA エネルギーから N_F/N_{NRT} が徐々に増加する傾向を示した。



図 2.2.33 欠陥形成効率 N_F/N_{NRT} の PKA エネルギー E_p に対する依存性 $^{[41]}$

(a-2) 評価条件の決定

上記の背景を踏まえ、本研究開発では、欠陥形成効率 N_F/N_{NRT}の PKA エネルギーに対す る依存性を求める。解析は、無ひずみの場合と、単軸 1.0%引張の場合に絞って行った。セ ルサイズは、10keV におけるシミュレーションセルのサイズを基本とし、原子数が PKA エ ネルギーに比例するように設定した。また、セルサイズの影響を調べるため、PKA エネル ギー20keVの場合について、2倍のセルサイズ、8倍の原子数のシミュレーションセルにお けるカスケード損傷過程を再現し、欠陥形成数を求めた。

前項において、変形による欠陥形成の増加は、主として格子間原子形成の促進に起因す ることが示唆されたことから、本項では格子間原子のみに注目して欠陥集合体サイズ分布 を求めた。

(b) 高 PKA エネルギー条件下における欠陥形成過程の再現結果

20keV と 30keV におけるカスケード損傷過程の再現結果を、それぞれ図 2.2.34、図 2.2.35 に示す。20keV、30keVともに、サブカスケードへの分岐が確認された。一方で、同等条件 の他の再現結果では、サブカスケードに分岐しない大きなカスケード領域の形成も確認さ れた。

(a)



図 2.2.34 20keV におけるカスケード損傷過程再現結果の典型例 (a) 無ひずみ条件下、(b) 1.0% 単軸ひずみ条件下



図 2.2.35 30keV におけるカスケード損傷過程再現結果の典型例 (a) 無ひずみ条件下、(b) 1.0%単軸ひずみ条件下

(c) PKA エネルギーとの関連における応力下点欠陥形成総個数の評価

PKA エネルギーに対する欠陥生成効率を無ひずみ条件、単軸 1.0%引張ひずみ条件の双方の場合について整理したものを図 2.2.36 に示す。

セルサイズの影響を調べるため、図 2.2.36 には、PKA エネルギー20keV の場合について、 2 倍のセルサイズ、8 倍の原子数のシミュレーションセルにおけるカスケード損傷過程再現 によって得られた結果も示した。通常用いたセルサイズにおける結果との相違は小さく、 エラーバーの範疇であった。したがって、今回採用したセルサイズにおいて、セルサイズ の影響は小さいと考えられる。

図 2.2.36 に白点で示した無ひずみ条件下において、欠陥生成効率は 10keV まで減少傾向 を示し、10keV 以上では増加傾向を示した。この結果は、原子間ポテンシャル、PKA 入射 方位などの計算条件が異なるにもかかわらず、図 2.2.33 に示した先行研究の結果と、定性的に良い一致を示した。これらの結果から、Cuにおいては 10keV 以上で欠陥生成効率が増加する傾向は、一般性を持った結果であると言える。

無ひずみ条件、単軸 1.0%引張ひずみ条件における欠陥生成効率の比較から、5keV 以上に おいてはひずみ印加によって欠陥生成効率が増加することが確認された。様々な PKA エネ ルギーにおけるひずみ印加の影響について、さらに詳細に解析するために、単軸 1.0%引張 ひずみ条件における欠陥生成効率を無ひずみ条件下の値で除した値を、PKA エネルギーの 値ごとに整理したものを図 2.2.37 に示す。PKA エネルギー1keV の場合においては、ひずみ 印加による欠陥形成の促進は確認されず、高い PKA エネルギーの場合ほど、ひずみ印加に よる欠陥形成促進が顕著であった。この傾向は、20keV で飽和し 30keV においては、20keV の場合よりも低い欠陥生成効率が得られた。



図 2.2.36 欠陥生成効率の PKA エネルギー依存性



図 2.2.37 1.00%単軸変形印加による欠陥生成数増加率の PKA エネルギー依存性

(d) PKA エネルギーとの関連における欠陥集合体形成に対する外部ひずみ影響評価

図 2.2.28 と同様に、欠陥集合体のサイズを1、2、3、4、5-6、7-10、11 以上(11-)の7つの グループに分割し、各サイズの欠陥集合体の総点欠陥数への寄与を求めた結果を図 2.2.38 に示す。10keV のみならず、1keV から 30keV までの様々な PKA エネルギーにおいても、 1-6 のサイズを持つ欠陥集合体の形成個数に大きな増加は確認されなかった。

この結果を踏まえ、サイズ 7 以上の格子間原子集合体のサイズ分布を図 2.2.39 に示す。 全体として、PKA エネルギーが高いほど、大きいサイズの欠陥集合体形成が促進され、欠 陥集合体サイズ分布がより大きい側へ広がっていくことが確認された。また、単軸 1.0%引 張ひずみの印加により、欠陥形成個数だけでなく、形成される最大欠陥集合体サイズも大 きくなる傾向も確認された。すなわち、高 PKA エネルギー、引張ひずみ印加下において、 大きいサイズの欠陥集合体の形成が顕著となる傾向がある。また、特に注目すべき点とし て、図 2.2.37 において点欠陥総数の増加が確認されなかった 1keV の場合においては、7 個 以上の格子間原子からなる格子間原子集合体は存在しないことが確認できる。この結果は、 外部ひずみによって影響を受ける 7 個以上のサイズの欠陥集合体が形成されないために、 PKA エネルギーが 1keV の場合において外部ひずみによる欠陥形成促進が確認されなかっ たことが示唆された。この傾向から、逆に、外部ひずみによって影響を受ける 7 個以上の サイズの欠陥集合体の形成が顕著となる高 PKA エネルギー条件において、外部ひずみ影響 による欠陥形成促進が顕著となる傾向も理解できる。



図 2.2.38 単軸 1.00% 引張ひずみ印加による各サイズの欠陥集合体に含まれる点欠陥増加率



図 2.2.39 単軸ひずみ条件下において形成される格子間原子集合体のサイズ分布

一方で、図 2.2.38 の統計においては、11 個以上の格子間原子から成る格子間原子集合体 についての欠陥増加率を議論することができない。このため、11 以上のサイズをさらに 10 ずつのグループに分類して同様の統計を取ったものを図 2.2.40 に示す。この統計において は、ひずみ印加条件においてのみ欠陥が形成されたサイズ帯では、増加率が発散し無限大 となる。このため、無限大に発散したプロットは無視することで、サイズ分布全体の傾向 をプロットした。最も欠陥形成促進の効果が顕著なサイズ帯は PKA エネルギーが高いほど 大きい側へとシフトすることが確認され、外部ひずみによる欠陥形成促進のサイズ分布と の対応は必ずしも一定ではなく、PKA エネルギーに依存して変化することが明らかになっ た。



図 2.2.40 単軸 1.00% 引張ひずみ印加による各サイズの欠陥集合体に含まれる点欠陥増加率

④ SFE の相違による欠陥形成挙動変化の検討

(a) FCC 金属における転位ループの性質に関する検討

欠陥集合体の大きさに影響を与える因子としては、照射条件として PKA エネルギー、材料条件として SFE が考えられるが、ここでは、材料物性の一つである SFE について検討を行う。

FCC 金属において、すべり面である {111} 面はこれ以上原子を詰めることのできない最密 面となっており、その原子面の積み重なり方は、A 面 B 面 C 面 A 面.....となっている。こ こで(111)面上の完全転位 b = a/2[-1,0,1]を考える。図 2.2.41 には、完全転位 b と、その部分 転位 b^{I} 及び b^{II} を示した。この完全転位が A 面と B 面の間のすべり面を動くと、b だけのず れがすべり面の上下の結晶に起こり、図 2.2.41 のように左の B の位置の原子が右の B の位 置へと移動する。完全転位の運動なので、すべりの前後での原子位置が B であることには 変わりがなく、...ABCABC...という FCC の積層には何の変化も生じない。しかし、部分転 位 $b^{I}=a/6[-1,-1,2]$ が動くと、本来 B の位置にあった原子が C の位置に移動することになり、 FCC 積層に変化が生じる。剛体球モデルを考えると、図 2.2.41 に示すように、(111)面上で b= a/2[-1,0,1]という変位が一度に起こるよりも、まず $b^{I}=a/6[-1,-1,2]$ の変位、次に $b^{II}=a/6[-2,1,1]$ の変位という、2 段階の変位が起こった方が、剛体球の接する谷間を通れるので、容易に変 位できることが予想できる。実際には、FCC 結晶中の完全転位は、*b-->b¹+ b¹¹*のように 2 本 の部分転位に分解されており、ここで現れた、*a*/6<-1,-1,2>型の部分転位をショックレーの 部分転位と呼ぶ^[42]。



図 2.2.41 部分転位の模式図^[42]

2本のショックレーの部分転位の間には面欠陥を生じ、これを積層欠陥(Stacking Fault)という。2本のショックレーの部分転位とその間の積層欠陥を含めて拡張転位といい、これを 完全転位が拡張したという。図 2.2.42 は、拡張転位の運動に伴ったすべり面の様子を紙面 に平行に示す。転位は正の刃状転位で、図の左から右に動いてくるとする。先頭の転位(右 側の転位)のバーガースベクトルは a/6[-2,1,1]である。この転位が通り過ぎて次の転位がくる までは、B 原子は C の位置に移っており、つまりこの転位の間では B 位置にあるべき原子 が C の位置にいるのであるから、その部分は原子面の積み重ねの順序の乱れ、すなわち積 層欠陥(Stacking Fault)となっている。積層欠陥は面欠陥の一種で、面積に比例する積層欠陥 形成エネルギーを持っている。そのために、拡張転位の幅は SFE が大きいほど小さくなる。



図 2.2.42 拡張転位の運動に伴ったすべり面の様子^[43]

直線刃状転位の単位長さあたりの弾性ひずみエネルギーは、式(2-2.22)で表される。

$$E = \frac{\mu b^2}{4\pi (1 - \nu)} \ln(\frac{R}{r_0})$$
(2-2.22)

μ:剛性率、b:バーガースベクトル、v:ポアソン比、R:結晶半径、
r₀:転位芯の半径であり、通常 5b 程度で考えられる

上記のような積層欠陥形成過程以外に、FCC 結晶中に積層欠陥が作られる過程として、 点欠陥が FCC 結晶の{111}面へ平板状に集まり、ループを形成することが挙げられる。FCC 結晶中においては、a/3[111]と表される積層欠陥を持つ積層欠陥転位ループと、a//2[110]と 表される完全転位ループが存在する。転位ループの半径をrとすると、それぞれの方位の転 位ループのエネルギーは、式(2-2.23a)、式(2-2.23b)で表される。

<111>方位:
$$E_{111} = \frac{\alpha' \mu \alpha^2 r}{3} + \gamma_{SFE} \cdot \pi r^2$$
 (2-2.23a)<110>方位: $E_{110} = \frac{\alpha' \mu \alpha^2 r}{2}$ (2-2.23b)

 $\gamma_{\rm SFE}$: SFE

式(2-2.23a)は、rに比例する項と、 r^2 に比例する項の和となっており、式(2-2.23b)はrに比例する項のみとなっている。いま、 $\alpha'\mu a^2 r/3 < \alpha'\mu a^2 r/2$ であり、rの値が小さいうちは $E_{III} < E_{II0}$ となるが、rが大きくなると、 r^2 に比例する SFE の項により $E_{III} > E_{II0}$ となる。この 両ループの大小が入れ替わる瞬間の半径は臨界半径と定義される。臨界半径は SFE に依存 するため、SFE により転位ループの種類、及びそのサイズ分布が変化すると考えられる。

また、<111>方位の転位ループが形成されやすいrが小さい領域に限定しても、同じサイズの転位ループにおいては、低 SFE 金属の方が E_{III} は小さく、結果として高 SFE 金属よりも転位ループを形成しやすくなる。なお、PKA エネルギー、あるいははじき出し損傷に関与する原子の衝突過程に於けるエネルギーと比較すると、SFE のオーダーは低いが、系のエネルギーが低くなるカスケード損傷の冷却過程・熱的過程あるいはそれ以降では、はじき出し損傷に関与する原子のエネルギーと SFE は同程度となるため、欠陥形成過程に SFE の相違が影響を及ぼすと考えられる。これらの検討をもとに、ひずみ印加下でのカスケード損傷過程に与える影響に関して、MD 法による解析を行った。

原子間ポテンシャルとしては、SFE が異なりその他の物性値がほぼ同じ3 種類の EAM ポ テンシャルを利用した。それぞれの SFE の値は、14.6meV/m²、44.1 meV/m²、186.5 meV/m² である。

その他の計算条件などは、前項の条件に準ずる。

(b) 引張ひずみによる残存点欠陥数に与える影響の評価

図 2.2.43 には、カスケード損傷 1 回あたりに形成される格子間原子総数の SFE 依存性を

示す。ひずみ印加によって、格子間原子数は増加する傾向が確認され、このことは SFE に 依らない。

また、高 SFE で格子間原子総数が僅かに増加するが、欠陥総数に関しては SFE の影響は 小さいと言える。

図 2.2.44 には、0%ひずみ印可下の格子間原子総数と 0.5%、1%ひずみ印加下の格子間原 子総数の比に関する SFE 依存性を示す。0%ひずみ印可下の格子間原子総数と 0.5%ひずみ印 加下の格子間原子総数の比に関しては、SFE の影響は観察されなかった。一方で、1%ひず み印加下の格子間原子集合体総数の比に関しては、SFE に伴って比率が小さくなるという傾 向が観察された。これらから、ひずみ印可による格子間原子数増加率は、SFE が高い金属ほ ど減少する傾向があることが明らかとなった。



図 2.2.43 各ひずみ印加条件下における残存格子間原子総数の SFE 依存性



図 2.2.44 無ひずみ下格子間原子総数とひずみ印加下格子間原子総数の比に関する SFE 依存性

(c) 欠陥集合体サイズに対する影響評価

前項で述べたように、ひずみ印加下のカスケード損傷過程においては、格子間原子残存 率の増加は、より大きな格子間原子集合体の形成に起因する。このため、以下では格子間 原子集合体サイズ分布に関する検討を行う。

図 2.2.45、図 2.2.46 には、無ひずみ下、1.0%ひずみ印加下での、カスケード損傷一回あた りに形成された格子間原子集合体サイズ分布に関して、3 種類の原子間ポテンシャルで計算 した結果を示す。どの原子間ポテンシャルにおいても、ひずみ印加に伴いより大きな格子 間原子集合体形成が促進されている。一方、50 以上の格子間原子からなる集合体の発生頻 度は低いため、偶発性が高いと考えられるため、SFE との関係において最大サイズを論じる ことは困難である。

格子間原子集合体について確率密度に関するサイズ分布を図 2.2.47、図 2.2.48 に表す。 無ひずみ下、1.0%ひずみ印加下それぞれにおいて、各サイズの集合体の形成確率に原子間 ポテンシャルの影響は見られなかった。これより、図 2.2.44 で確認された格子間原子総数 の増加率の変化は、格子間原子集合体サイズ分布の変化によるものではないと考えられる。



図 2.2.45 無ひずみ下において形成される格子間原子集合体のサイズ分布 SFE 依存性



図 2.2.46 1.0%ひずみ下において形成される格子間原子集合体のサイズ分布 SFE 依存性



図 2.2.47 無ひずみ下において形成される格子間原子集合体サイズ分布の確率密度



図 2.2.48 1.0%ひずみ印加下において形成される格子間原子集合体サイズ分布の確率密度

(d) 欠陥集合体形成方位に対する SFE の影響の評価

SFEの相違は、格子間原子集合体の種類に影響を与えると考えられる。そのため、本項では格子間原子集合体の種類に着目して検討する。

図 2.2.49、図 2.2.50、図 2.2.51 には、それぞれ 3 種類のポテンシャルに於いて、各ひずみ 印加条件下でカスケード損傷一回あたりの<111>方位、<110>方位、<100>方位の格子間原子 集合体形成個数を示す。前項で Mishin の原子間ポテンシャルを用いて確認された傾向と同 じように、すべての原子間ポテンシャルにおいて、ひずみ印加により<111>方位の格子間原 子集合体の形成が促進されることが確認された。







図 2.2.50 44.1mev/m²の SFE における各方位格子間原子集合体の形成個数のひずみ量依存

性



図 2.2.51 186.5mev/m²の SFE における各方位格子間原子集合体形成個数のひずみ量依存性

従来の転位論に基づくと、FCC 金属においては、SFE が大きくなるほど<111>方位格子間 原子集合体の個数は減少し、<110>方位格子間原子集合体の個数が増加することが分かって いる。これを考慮し、図 2.2.52 には、各ひずみ印加条件下において、カスケード損傷一回 あたりに生成する<111>方位格子間原子集合体と<110>方位格子間原子集合体の比率を示す。 無ひずみ下においては、原子間ポテンシャルによる比率の相違が殆ど無い一方で、ひずみ 印加に伴い、僅かながら格子間原子集合体の種類に偏りが見られた。すなわち、SFE の値が 高くなるにつれ、<111>方位格子間原子集合体の割合が減少し、<110>方位格子間原子集合 体の割合が増加する傾向が観察された。これにより、SFE は、カスケード損傷における格子 間原子集合体の種類に影響を及ぼすことがわかった。



図 2.2.52 <111>方位集合体個数と<110>方位集合体個数の比率のひずみ量依存性

2.2.2.4 ミクロとマクロの関係を記述するモデルの検討

① 従来型照射硬化予測モデルとその課題

照射下ミクロ組織と硬さ変化の相関関係を表すための手段として、粒子硬化に基づく硬 化予測モデルである Dispersed Barrier Hardening (DBH) モデルが一般的に用いられてきた^[44]。 DBH モデルは材料中に分布している析出物や分散等が転位運動を阻害するという粒子硬化 のメカニズムに基づいて構築された硬化モデルである。図 2.2.53 にモデルの模式図を示す。 DBH モデルでは、ミクロ組織の数密度 N、直径 d と降伏応力の増分 Δσ_yには式(2-2.24)が成 立する。

$$\Delta \sigma_{v} = \alpha \mu b M \sqrt{Nd} \tag{2-2.24}$$

α: ミクロ組織の転位運動に対する抵抗の強さに対応した係数、μ:剛性率、 b:バーガースベクトルの大きさ、M:テーラー因子

オーステナイト系ステンレス鋼に関しては、転位の運動を対する抵抗の強さ*a*は、表 2.2.5 に示すように^[45]、実験結果に基づいて、ミクロ組織の種類毎に、一定値が定められてきた。

一方、DBH モデルは Orowan モデルに基づいた以下の仮定を置く。

・転位の障害物としてのミクロ組織が不動であり、転位との相互作用に際してその形状が 変化しないこと

・ 転位がすべり面を変えずに平面すべりをすること

近年、ミクロ組織観察結果に基づいて DBH モデルから求めた照射硬化予測値と実測した 照射硬化に大きく異なる場合があることが明らかとなった^[46]。このため、上記の仮定では 考慮されていない原子・分子スケールのミクロ現象を取り入れ、より精緻な硬化予測モデ ルを構築することが求められる。本項では、MD 法を用いて、転位とミクロ組織(ボイドと Frank loop)の相互作用、および硬化に対する影響を解析した。



図 2.2.53 粒子硬化機構(DBH モデル)の模式図

Relative strength	Barrier Type	Material	α	Ref. No.
Strong	Orowan	-	1	-
	Voids	Austenitics	~1	[47]
	Voids	Ni	~1	[48]
	Voids	Austenitics	~1	[49]
	Voids	Austenitics	~1	[50]
	Large Precipitates	Austenitics	~1	[50]
Intermidiate	Frank loop	Austenitics	0.33	[49]
	Frank loop	Austenitics	0.45	[51]
	Frank loop	Austenitics	0.45	[50]
	Small MC ppts	Austenitics	0.33-0.45	[51]
Weak	Small bubles	Austenitics	0.2	[49]
	Small loops /clusters	Austenitics	0.2	[52]
	Vacancy clusters	-	< 0.25	[53]
	Dislocations	-	0.15 ~ 0.3	[54]
	Dislocations	Austenitics	~ 0.11	[49]
	Dislocations	Austenitics	0.2	[50]

表 2.2.5 各ミクロ組織に対する係数 α の値[45]

② Frankloop-転位間相互作用に関する検討

(a) 計算モデルの設定

転位-Frankloop間の相互作用について刃状転位・らせん転位を挿入した場合の計算セル 構造の模式図を図 2.2.54 に示す。主な計算条件を表 2.2.6 にまとめた。

(i)





図 2.2.54 計算セルの模式図

(i) 刃状転位,(ii) らせん転位

表 2.2.6 主な計算条件

Frank loop のバーガーズベクトル	<i>b=a/</i> 3<111>
転位の種類	刃状・らせん転位 <i>b=a</i> /2[10-1]
計算セルサイズ	刃状転位:X 38.7[nm] x Y 22.2[nm] x Z 15.6[nm] らせん転位:X 38.7[nm] x Y 35.5[nm] x Z 15.6[nm]
Habit Plane	(111)面・(-111)面・(1-11)面
境界条件	刃状転位 X, Y 軸方向:周期境界, Z 軸方向:自由境界 らせん転位 X 軸方向:周期境界, Y, Z 軸方向:自由境界
ひずみ速度	$1.0 \times 10^7 [/sec]$

(b) 計算結果

本研究開発では、従来のモデルでは考慮されていなかった以下の重要な現象を明らかにした。

(b-1) 熱統計力学的に等価な条件下において生じる現象の相違

計算温度 100K において habit plane (-111) 面・半径 2.0nm 格子間原子型転位ループ (Interstitial-type dislocation loop, I-loop) と刃状転位との相互作用により観察された現象を図 2-2.55 ~ 図 2.2.57 に示した。応力印加の開始時を 0ps とする。

Frank loop は系に初期配置した状態では円形として設定したが、図 2.2.55(i)初期状態において Frank loop は円形ではなく六角形の形状になっている。これはループ周上に b=a/6<110>のバーガースベクトルを持つ stair-rod 転位と呼ばれる転位成分が発生して安定することを示している。刃状転位は印加されたせん断ひずみによって初期状態からすべり面上を移動し、(ii)に示すように Frank loop に接近する。この際、転位と Frank loop 双方に形態の変化は見られない。転位が Frank loop に近接する位置まで接近してきた転位は、(iii-1)で示されるように、Frank loop から引力により、Frank loop と直接接触をする。接触時の初期段階では拡張転位の前方にある Shockley 部分転位が Frank loop の縁にある部分でピン止めされているが、ひずみが増加するにつれ、(iii-1)~(iii-3)で示したようにピン止めから外れ、積層欠陥面を滑るように他方の Frank loop の縁まで抵抗を受けることなく、瞬時に移動する。その後、転位後方にある部分転位もまた転位の縁によって同様にピン止めされるが、その点から外れる際には積層欠陥面を滑るのではなく積層欠陥面から剥がれるように分離することが(iv-1)~(iv-3)に示されている。さらに拡張した転位が最終的に Frank loop 周上の一点にピン留めされ、その点においては拡張していた転位は収縮する。その後前方の部分転位がピン
によって、最終的に転位全体が Frank loop から分離する。この一連の過程の前後およびその 最中において Frank loop や転位はその構造・形状が変化していない。

一方、図 2.2.56 に示す現象は、図 2.2.55 で示した現象とは幾つかの過程において異なる 点が見られた。図 2.2.56(i)初期状態、(ii)接近時、(iii-1)および(iii-2)で示した Frank loop との 接触開始時においては、それぞれ図 2.2.55 とほぼ同じタイムステップにおいて同様の挙動 を示しているが、図 2.2.56(v-1)及び(v-2)に示された転位とループとの接触時においては、拡 張転位を構成する二本の部分転位の内、Frank loop により近い部分転位がその運動を阻害さ れることで図 2.2.55 に示された場合と比較してより長時間停滞しており、さらにその後再 び進行する際には拡張転位上にジョグと呼ばれる一原子面分の段差が生じている。Frank loop により近い部分転位が外れた後は、他方の部分転位は進行を妨げられることなく、す ぐに Frank loop からの分離が生じる。

更に、図 2.2.57 に示される現象は図 2.2.55、図 2.2.56 で示される現象と比較して、その相 違がより一層顕著である。図 2.2.57(i)~(iii-3)においては、図 2.2.55、図 2.2.56 との相違は見 られないが、図 2.2.57(iv-1)~(iv-4)に示される転位と Frank loop とが接触する間において、 図 2.2.55、図 2.2.56 とは異なり、Frank loop 周上から新たな転位成分が放出されていること が分かる。転位と Frankloop の相互作用の結果として、図 2.2.57(iv-4)に示すように Frank loop 内部の積層欠陥は解消されて Frank loop は perfect loop へと変化する。

また、perfect loop は内部に積層欠陥を持つ Frank loop とは異なって移動が可能であるため、 図 2.2.57(v-1)~(v-3)で示すように転位運動に引き摺られてその位置や habit plane を変える。 図 2.2.57(vi-1)および(vi-2)で示す転位がループから分離した後においても perfect loop に変化 したまま、その形態を保持する。以上に記した過程によって、図 2.2.57 においては図 2.2.55、 図 2.2.56 に見られるミクロ現象とは大きく異なり、転位との相互作用によって Frank loop が perfect loop へと変化した。一方、図 2.2.57 に示されたミクロ現象は図 2.2.55、図 2.2.56 で示 された現象と比較して、その発生頻度は著しく低かった。

図 2.2.55~ 図 2.2.57 において見られた現象は、計算温度や Frank loop・転位に関する条件 などは同一として行った複数回の MD 計算の結果として見られた。すなわち、熱統計力学 的には全く等価な条件下において全く異なる現象が生じることを意味している。

また、計算温度 100K において habit plane (1-11) 面・半径 2.0nm の I-loop と刃状転位と の相互作用において生じた現象を図 2.2.58 と図 2.2.59 に、その応力履歴を図 2.2.60 に示す。 図 2.2.55 ~ 図 2.2.57 の結果同様、ミクロ組織の形状の変化に差異がみられると同時に、降 伏応力の増分と比例関係にある臨界分解せん断応力 (CRSS: Critical Resolved Shear Stress) についても大きな差異が観察される。

MD 計算において初期の温度分布を計算系に与える際に、正規分布に従って各原子にラン ダムに速度ベクトルを分配している。その際に計算毎に異なるランダムシードを用いて異 なる乱数列を作り、その乱数列に従ってエネルギーの分配を行う。したがって、温度や Frank loop に関するパラメータを等しく設定して複数回の計算を行った場合、それらのシミュレ ーションは計算系全体では熱統計力学的に等価であると言えるが、局所的には必ずしも同 ーであるとは言えない。このような局所的な相違、特に Frank loop 近傍、転位近傍における わずかな初期条件の相違が、ミクロ現象、さらに CRSS に対しても大きな差異を与えること を明らかにした。



図 2.2.55 計算温度 100K にて habit plane (-111) 面・半径 2.0nm の I-loop と刃状転位 との相互作用において生じる現象 (I)



図 2.2.56 計算温度 100K にて habit plane (-111) 面・半径 2.0nm の I-loop と刃状転位 との相互作用において生じる現象 (II)



図 2.2.57 計算温度 100K にて habit plane (-111) 面・半径 2.0nm の I-loop と刃状転位 との相互作用において生じる現象 (III)







図 2.2.59 図 2.2.60 (B) に対応する現象



図 2.2.60 計算温度 100K における、habit plane(1-11)面・半径 2.0nm の I-loop と刃状 転位の相互作用によって生じる応力履歴

(b-2) ループの種類の差異に伴う CRSS のループ半径依存性の相違

図 2.2.61 に、計算温度 100K での habit plane (1-11) 面の I-loop および空孔型転位ループ (Vacancy-type dislocation loop, V-loop)と刃状転位との相互作用における CRSS の転位ループ 半径依存性を示す。I-loop では、ループ半径の増加に伴って CRSS も増加する。一方、V-loop では、CRSS は殆ど転位ループ径に依存しない。転位ループ径に依って、硬化に及ぼす影響 が異なり、特に小さなループに対しては、V-loop は I-loop と比較して転位運動を阻害する強 さが大きく、照射硬化に対する寄与も大きい。より精確な照射硬化予測のためには詳細な TEM 観察等による I-/V-loop の区別が必要となる。



図 2.2.61 CRSS のループ半径依存性

100K における habit plane: (-111) 面の I-loop・V-loop と刃状転位との相互作用の場合

本研究開発によって、Frank loop と転位との相互作用において、様々なナノメカニズムに よって Frank loop が転位の運動を阻害することが明らかになった。そして、そのメカニズム の相違によって CRSS や各因子に対する傾向が異なることが解明された。また転位ループ径 が小さい場合、V-loop は I-loop と比較して転位運動を阻害する強さが大きく、照射硬化に対 する寄与も大きいことが明らかになった。Frank loop と転位との相互作用について更なる研 究を進めることで、照射硬化のみならず、延性低下等の機械的特性変化についてもそのメ カニズムを明らかにし、特性変化に対する予測手法の構築に資することが可能となる。 ③ ボイド-転位間相互作用に関する検討

表 2.2.5 において、α=1 で与えられていることからも明らかなように、ボイドは転位のす べりを阻害する効果が強いミクロ組織である。このことから、ボイドと転位の相互作用に 関して、MD 法により詳細な解析を行った。

(a) 計算モデルの設定

刃状転位を挿入した MD 計算セルの模式図を図 2.2.62 に、主な計算条件を表 2.2.7 に示す。



図 2.2.62 計算セルの模式図

転位の種類	刃状・らせん転位 <i>b=a</i> /2[10-1]				
計算セルサイズ	X 25.6[nm] x Y 35.4[nm] x Z 31.3[nm]				
境界条件	X, Y 軸方向:周期境界, Z 軸方向:自由境界				
ひずみ速度	$1.0 \times 10^7 [/sec]$				
計算温度	100 [K]				

表 2.2.7 主な計算条件

(b) 計算結果

(b-1)熱統計力学的に等価な条件下において生じる現象の相違

前項で示したように、Frank loop と転位の相互作用では、熱統計力学的には全く等価な条件下において、ランダムな熱振動による初期条件のわずかな相違が、相互作用形態や CRSS

に大きな相違を生じさせることが明らかとなった。ボイドと転位の相互作用に於いても同様の現象が起こりうるかを確認するため、100K で半径 2.0nm のボイドと刃状転位について、 複数回計算を行った。図 2.2.63 にその応力履歴を示す。Frank loop と転位の相互作用とは異なり、有限温度でのボイドと刃状転位の相互作用では、ランダムな熱振動による初期条件 のわずかな差は、相互作用形態、及び CRSS に大きな影響を及ぼさないことがわかった。す なわち、ボイドと転位の相互作用に関しては、Frank loop の場合とは異なり、複数回の計算 を行い、その期待値を統計的に求めることは不要であることがわかった。



図 2.2.63 刃状転位と半径 2.0nm のボイドとの相互作用による応力履歴

(b-2) CRSS のボイド半径依存性

図 2.2.64 に、半径 0.5nm~2.5 nm のボイドと刃状転位の相互作用による応力履歴を示す。 半径が 1.5nm より小さいボイドと、2.0nm より大きなボイドで、応力履歴の形状が異なるこ とが分かる。半径が 1.5nm より小さいボイドでは、応力のピークが 2 回みられるのに対し、 半径が 2.0nm 以上のボイドの場合は、応力のピークは 1 回のみである。

図 2.2.65、図 2.2.66 には、それぞれ半径 1.5nm のボイド、半径 2.0nm のボイドを刃状転位 が通過する際の相互作用形態を示した。ボイド半径 1.5nm では、2 回見られる応力のピーク のうち、1 回目は先行する部分転位の曲がり角が最大となるタイムステップ(これを極大相 互作用と定義する。)に対応し、2 回目は後続する部分転位との極大相互作用に対応するこ とが分かる。また、ボイド半径 2.0nm では、1 回のみ見られる応力のピークは、後続する部 分転位の極大相互作用に対応することがわかる。また先行する部分転位と後続する部分転 位の極大相互作用の時間差は 12ps であり、ボイド半径 1.5nm の場合の時間差 93ps と比較す ると、極めて短い時間差で 2 本の部分転位がボイドを通過することが分かる。

図 2.2.67 に、CRSS のボイド半径依存性を示す。CRSS はボイド径にほぼ比例して増加することがわかる。転位がボイドを通過する際、相互作用形態に関しては半径によって大きな相違が見られたが、CRSS はそのような相互作用形態に依存せず、ボイド半径にほぼ比例

することが明らかとなった。



図 2.2.64 刃状転位とボイドとの相互作用によって生じる応力履歴



(iv)703ps:先行部分転位極大相互作用(v)800ps:後続部分転位極大相互作用(vi)808ps:通過後(せん断応力ピーク 1)(せん断応力ピーク 2)





(iv)874ps: 先行部分転位極大相互作用(v)886p: 後続部分転位極大相互作用(vi)894ps: 通過後



(せん断応力ピーク)





図 2.2.67 CRSS のボイド半径依存性(100Kにおけるボイドと刃状転位との相互作用の場合)

(b-3) 接触位置の差異に伴う CRSS の相違

前項までで示した計算では、ボイドの重心を転位のすべり面上に設定し、ボイドの中心 位置における転位との相互作用を解析してきた。しかしながら、実際の相互作用では、ボ イドの重心がすべり面上に存在するケースだけではなく、むしろ重心とすべり面とは離れ ている場合が多く、照射硬化予測モデルを構築するためには、様々なすべり面での検討を 行うことが求められる。本項では、刃状転位と半径 1.0nm, 2.0nm のボイドとの相互作用に 関する解析を行い、転位のすべり面とボイドとの位置関係による相互作用形態及び CRSS への影響を検討した。

図 2.2.68 に示すように、刃状転位のすべり面とボイドの中心の距離を d(nm)と定義する。 半径 1.0nm と 2.0nm のボイドに対して、d の値を様々に変化させて計算を行った。図 2.2.69 に半径 1.0nm ボイドを対象として解析した CRSS と d/r (r:ボイド半径)の関係を示す。 d/r=-0.95 において CRSS が著しく高いことがわかる。この場合の相互作用形態を図 2.2.70 に示す。図 2.2.70(iv)に示すように、先行する部分転位の極大相互作用時に、ボイドに接し た部分の刃状転位が上昇運動していることが観察される。この相互作用形態をとる場合に は、局所的なジョグ形成が観察された。しかし、転位がボイドを通過した後には、ボイド 中の空孔との再結合によりジョグは消滅した。既往研究では^[55]、同様の条件下で上昇運動 は観察されなかったが、本研究開発において、ボイドと転位の相互作用過程に於いて、転 位の一部が上昇運動する現象が初めて観察された。一方、その他のdにおいては、現段階 では上昇運動は観察されなかった。これらを統合して、ボイド内部で刃状転位の上昇運動 する過程が存在し、その場合にはボイドが転位運動の障害物として特に強く働き、CRSS を 増加させる要因となることがわかった。

一方、d/r=-0.63 と d/r=0.63 の場合の相互作用形態と CRSS に着目すると、両者とも刃状転 位の上昇運動は観察されていないが、ボイドの中心から対称的な位置に存在しながらも、 両者の CRSS は異なることがわかる。これは刃状転位のひずみ場が非対称性であることに起 因する。この結果から、上昇運動が観察されない条件下に於いても、ボイドの中心に対し て硬化への寄与が非対称であることを硬化モデルに取り入れる必要があることが分かった。



図 2.2.68 ボイドと転位のすべり面との位置関係



図 2.2.69 半径1.0nm ボイドと刃状転位の相互作用に関する転位のすべり面位置とCRSSの関係



(iv)676ps:先行部分転位極大相互作用 (v)746ps:後続部分転位極大相互作用 (vi)748ps:通過後



図 2.2.70 dlr=-0.95 における半径 1.0nm のボイドと刃状転位との相互作用形態

図 2.2.71 には、半径 2.0nm ボイドに対して CRSS の d/r 依存性を示す。d/r が-0.63~-1.1 では、刃状転位の局所的な上昇運動が観察された。d/r=-0.63 と d/r=-1.1 における半径 2.0nm のボイドを刃状転位が通過する際に生じる相互作用形態をそれぞれ図 2.2.72 と図 2.2.73 に 示す。図 2.2.72(ii)で、刃状転位が空孔を吸収することによって上昇運動をし、図 2.2.72(iii) において通過後の転位にジョグ形成が見られる。d/r=-1.1 では、図 2.2.73(ii)で、刃状転位の 局所的上昇運動が観察されるが、図 2.2.73(iii)で通過後の転位にジョグ形成が観察されない。 これらから、半径が大きいボイドほど刃状転位が上昇運動する衝突範囲が広く、上昇運動 を生じさせる可能性が高いことが分かる。刃状転位の上昇運動は、CRSS を増加させる現象 であり、上昇運動の発生確率がボイド径に依存することが CRSS のボイド半径依存性の要因 となっていると考えられる。

刃状転位が上昇運動を起こす際の詳細な様子を図 2.2.74 に示す。上昇運動時には、2 本の 部分転位が1本の完全転位に結合している事がわかった。部分転位の再結合のしやすさは SFE によって決まるため、上昇運動の発生確率、並びボイドの硬化への寄与は、SFE に大き く依存すると考えられる。



図 2.2.71 半径 2.0nm のボイドと刃状転位の相互作用に関して CRSS の d/r 依存性



図 2.2.72 半径 2.0nm のボイドと刃状転位との相互作用形態(d/r=-0.63 の場合)



(刃状転位の局所的上昇運動)

図 2.2.73 半径 2.0nm のボイドと刃状転位との相互作用形態(d/r=-1.1 の場合)



(計算温度 100K、ボイド半径 2.0nm、d/r=-1.1 の場合)

ボイドは本質的に不動な照射欠陥である。低 SFE 金属であるオーステナイト系ステンレ ス鋼では刃状転位は広く拡張しているため、ボイドとの相互作用においても、空孔吸収、 上昇運動によるすべり面の変化、または相互作用によるボイド形状の変化は、極めて発生 しにくいと考えられてきた^[55,56]。そのため、オーステナイト系ステンレス鋼における刃状転 位とボイドの相互作用に関しては、オロワンモデルに基づいた DBH モデルの適用が最も容 易な現象の一つと考えられてきた。従来の DBH モデルでは、ボイドの転位異動に対する抵 抗の強さは、半径や衝突位置に依存せず、一律で最大の値 α=1 とされてきた^[45]。

しかし本研究開発に於ける解析の結果、以下の重要な3項目が明らかとなった。

・刃状転位がボイドを通過する際の相互作用形態、それに伴う CRSS は半径に依存する。

・転位とボイドの接触位置の相違によって、CRSS に差異が生じる。

・ボイドと刃状転位の相互作用で、刃状転位が局所的に上昇運動することがあり、この場合 CRSS は大きく増加する。

以上の 3 点によって、刃状転位とボイドの相互作用において、転位運動に対する抵抗の 強さαはボイド半径rや衝突位置dの関数として定量化する必要があることが明らかになっ た。そのため、ボイドの障害物としての強さを一律 α=1 とする従来の硬化予測では、その 予測値が実測値と異なることが示唆された。

また、上昇運動の発生確率は SFE にも強く依存するため、特に低 SFE 金属であるオース テナイト系ステンレス鋼の硬化予測モデルを検討する場合には、SFE の相違が CRSS に及 ぼす影響も取り入れることが求められる。

本研究開発では、刃状転位を中心にボイドとの相互作用の解析を行ったが、らせん転位 とボイドの相互作用によって、らせん転位が交差すべりをし、硬化に影響を及ぼすことが 先行研究で示唆されている^[57]。本研究開発においても、図 2.2.75 に示すように、同様の現 象が観察されている。今後、らせん転位とボイドの相互作用に関する詳細な解析を行い、 刃状転位におけるモデルと組み合わせることで、ボイドに関するより包括的な硬化予測手 法を構築しうると考えられる。



図 2.2.75 半径 1.0nm のボイドと螺旋転位との相互作用において生じる交差すべり

2.2.2.5 スエリングデータに基づいたボイドサイズ分布算出手法の確立

①ボイドサイズ分布算出の意義

本項では、式(2-2.1)で表わされるスエリング値とボイドサイズ分布の関係を用いて、非破 壊検査で得られるスエリング値からボイドサイズ分布を求める手法の構築を行った。尚、 この手法に於いては、非破壊検査で得られるデータがスエリングの1変数のみである一方、 サイズ分布を求めるためには数密度と径の2変数が必要であるため、理論上は解が不定で ある。そのため、以下に示す手法を用いた。

まず、Block3 と Block5 の照射材データを用い、後述のメトロポリス法により、実験デー タをよく再現するパラメータをスエリング値の関数として最適化した。この計算に於いて は、ボイド数密度は TEM 観察で得られたデータを用いた。すなわち、スエリングとボイド 数密度から、径を求める計算となる。

その結果をもとに、3.5節で示す EBR-II 照射 304 系オーステナイト系ステンレス鋼におけるボイド数密度のデータベースに基づいて、ボイド数密度を温度の関数として与え、スエリングから径を求める計算を行った。

本項では、特に照射硬化に注目し、オロワンモデルを仮定した場合に硬化に比例するミクロ値である√*Nd*を求め、実験データとの比較を行い、硬化予測手法としての適用性の検討を行った。

②計算手法·拘束条件

本計算では、モンテカルロ計算の一つであるメトロポリス法を用いて^[58]、ボイド径を持 つ複数個のオブジェクトの径を変化させ、最終的に求まるオブジェクトのサイズ分布をボ イドサイズ分布とする。初期データとして、超音波試験によって測定されたされたスエリ ング値、ボイド数密度の2つを用いる。

計算の初期状態として、材料内のボイド径が全て同一の状態であると仮定し、スエリング値と数密度から初期径 r₀を式(2-2.25)で示す値とし、このオブジェクトを 10³ 個定義した。

$$r_0 = \sqrt[3]{\frac{3S}{4\pi N}}$$

(2-2.25)

S: スエリング、N: ボイド数密度

次に、以下の試行を10⁵回繰り返す。

(i) オブジェクトを選択する(最初は1番目)

- (ii) [0,1]の乱数 r₁を発生させる。変更前のボイド径を d_i、変更後のボイド径を d_jとすると、 r_i≤ 0.5 ならば d_i =d_i - 1.0E-09 とし、r_i> 0.5 ならば d_i =d_i + 1.0E-09 とする。
- (iii) $|S_0 S_i| > |S_0 S_j|$ (2-2.26)

 $S_i: サイズ変更前のスエリング、<math>S_j: サイズ変更後のスエリング、S_0: 初期データのスエリ$ ング

式(2-2.26)が成立する場合、サイズ変更を採択し、次のオブジェクトを選択して(i)に戻る。 式(2-2.26)が成立しない場合、以下の採択確率関数 *p* を求める。

$$p = \exp\left\{-a(S) \cdot \left|\Delta V\right|^3 \cdot \left|\Delta S\right|\right\}$$
(2-2.27)

ここで、

$$\Delta V = \left(\frac{d_j}{2}\right)^3 - \left(\frac{d_i}{2}\right)^3, \quad \Delta S = \left|S_0 - S_i\right|$$
(2-2.28)

であり、a(S)が本計算で求めるパラメータである。

(iv) [0,1]の乱数 r_2 を発生させ、 $r_1 \leq p$ ならば、サイズ変更を採択し、次のオブジェクトを選択して(i)に戻る。 $r_1 > p$ ならば、サイズ変更を採択せず、次のオブジェクトを選択して(i)に 戻る。

採択確率関数には、 $\Delta V \ge \Delta S$ が含まれている。 ΔV はサイズ変更に伴うスエリング変化 に比例し、サイズ変更によってスエリング値の変動が大きくなる径が大きいオブジェクト ほどサイズ変更は起きにくいことを反映している。 ΔS は初期スエリング S_0 からのずれを 示し、 S_0 との差が開くようなオブジェクトのサイズ変更は採択されにくくなる。

以上の計算手法を用いて、ボイドの平均径に注目し、Block3、Block5のスエリングとボ イド数密度に関する実験結果から、実験データのボイド平均径を最適計算する*a*(*S*)を求めた。

③計算結果

表 2.2.8 に Block3、Block5 の 6 データから求めた *a* の値を示す。なお、平均径の誤差も考慮し、観測データの+10%の値に対応する *a* の値を求めた。図 2.2.76 には、*a* の自然対数に対するスエリング依存性を示す。

ブロック材	スライス材	深さ (mm)	スエリング, <i>S</i> (%)	<mark>ボイド</mark> 数密度, <i>N</i> (m⁻³)	а
Block 3	3E	12.5	12.5 1.84 2.2E+		2.68E-34
		25.0	2.76	2.6E+21	6.02E-35
		37.5	1.95	2.9E+21	1.32E-34
Block 5	5A	12.5	0.52	8.0E+20	1.00E-33
		25.0	0.47	8.0E+20	2.10E-33
	5D	25.0	0.23	3.0E+20	3.90E-27

表 2.2.8 Block3, Block5 のボイドデータに対応する a の値



図 2.2.76 aの自然対数に対するスエリング依存性

*a*をスエリング*S*のみの関数と仮定し、レーベンバーグ・マルカート法^[59]によるフィッティングを行うと、式(2-2.29)の関数で示される。式(2-2.29)と表 2.2.8 で示した結果を併せて図 2.2.77 に示す。



$$\ln a = \frac{0.424157}{S^{2.52354}} - 78.1191 \tag{2-2.29}$$

図 2.2.77 aの自然対数に対するスエリング依存性(フィッティング関数と実験データ)

④計算結果の検証

図 2.2.78 には、ボイド平均径と、式(2-2.29)から求めた *a*より算出した計算値と実験値(10% 増加)の比較を示す。両者は極めて良い一致を示し、5%以内の誤差範囲に収まることが分かる。

図 2.2.79 に、スエリング 1.84%でのボイドサイズ分布に関する実験結果と計算値の比較を 示す。計算結果は、最大ボイド径を過小評価し、径の小さいボイド密度を過大評価する傾 向があるものの、比較的良い一致を示すことが分かる。

これらにより、スエリングとボイド数密度が既知の場合におけるボイドサイズ分布を求める適切な手法が構築できたと考えられる。



図 2.2.78 ボイド平均径に関する実験データと計算結果の比較



図 2.2.79 ボイド平均径に関する実験結果と計算結果の比較 (スライス材 3E, 深さ 12.5mm, スエリング 1.84%, ボイド数密度 2.2x10²¹m⁻³)

⑤ボイドによる照射硬化予測への展開

本項では、後述する 3.5 節で示す EBR-II ボイド数密度の照射温度依存性データをもとに、 ボイド数密度を温度のみの関数と仮定し、照射温度からボイド数密度を導出する関数を求 める。その関数を用いてボイドサイズ分布を計算する。本項では特に照射硬化に着目し、 オロワンモデルを適用した場合に硬化に比例すると考えられるミクロ値√*Nd* (*N*:数密度、 *d*:ボイド平均径)を算出し、実験データとの比較を行う。

図 2.2.80 は、(詳細は 3.5 節で示すが) EBR-II 照射 304 系オーステナイト系ステンレス鋼 で観察されたボイド数密度に関して照射温度を横軸としてプロットしたものである。



図 2.2.80 EBR-II 照射 304 系オーステナイト系ステンレス鋼で観察されたボイド数密度に 関して照射温度をプロットしたもの

図 2.2.80 は、照射量を含めて照射条件が異なる試験で得られたデータであるにもかかわ らず、照射温度のみでプロットした結果である。EBR-II などの FBR 照射条件下では、ボイ ド数密度を照射温度 T のみの関数と仮定し、図 2.2.80 の赤線で示したフィッティングを行 うと、以下のように示される。

$$N = 4.12 \times 10^{29} \cdot \exp(-0.0285 \cdot T)$$
 (2-2.30)

式(2-2.30)を用い、Block3・Block5 の照射温度におけるボイド数密度を算出し、スエリン グを既知とし、メトロポリス法により、ボイド平均径を算出した。表 2.2.9 には、ボイド数 密度の算出値、ボイド平均径、√*Nd*の計算値に関して、実験値との比較に於いて示す。

ブロック材	スライス材	照射温度	スエリング		数密度[m⁻³]	平均径(+10%)	\sqrt{Nd} [m ⁻¹]
Block 3	3E	390 °C	1.84	実験値	2.24E+21	22.26 nm	7.06E+06
				計算值	2.50E+21	22.63 nm	7.52E+06
			2.76	実験値	2.61E+21	24.73 nm	8.03E+06
				計算值	2.50E+21	23.75 nm	7.71E+06
			2.08	実験値	2.85E+21	22.09 nm	7.93E+06
				計算值	2.50E+21	22.58 nm	7.51E+06
Block 5	5A	415 [°] C	0.52	実験値	8.00E+20	21.14 nm	4.11E+06
				計算值	1.23E+21	19.53 nm	4.89E+06
			0.47	実験値	7.99E+20	19.89 nm	3.99E+06
				計算值	1.23E+21	18.39 nm	4.75E+06
	5D		0.23	実験値	3.04E+20	18.50 nm	2.37E+06
				計算値	1.23E+21	12.19 nm	3.86E+06

表 2.2.9 Block3, Block5 のデータに対応する計算欠陥と実験値の比較

図2.2.81には、表2.2.9に示した実験と計算のデータの中で、特に照射硬化に対応する√*Nd*の比較を示す。図には±10%の範囲を黒点線で示した。大半のデータ、特に照射量が高く必然的にスエリングが高い(1%以上)データに関しては、実験値と計算結果は極めて良い一致を示し、相違は±10%以下であることがわかる。すなわち、本項で開発した手法によりFBR条件下でスエリングが1%以上発生した場合の照射硬化は、超音波検査で得られるスエリングとボイド数密度に関するデータベースからオロワンモデルに適用することで、±10%の精度で予測可能であるということを示している。これは極めて貴重な技術であり、超音波試験により、スエリングによる寸法不安定性のみならず、機械的特性としての照射硬化を非

破壊的に検出することが可能な技術である。これにより、FBR 材料の健全性評価手法確立 に大きな貢献することができた。

尚、スエリングが 1%以下の照射量が低いデータについては、スエリングから算出した \sqrt{Na} の計算結果は、10%以上過大評価することが分かる。これは、照射量が低いため、ボ イドが式(2-2.30)で示される値の $1/2 \sim 1/4$ と低く、必然的に \sqrt{Na} も低くなるためである。今 後、式(2-2.30)を精緻化し、照射量等の照射条件を含めた式に改良することで、低い照射量 でも適用可能な予測手法に展開が可能であると考えられる。



図 2.2.81 *Nd* に関する計算値と実験値の比較

テーマ B:材料計算科学 研究業績リスト

欧文誌

1) T. Okita, N. Sekimura, and F.A.Garmer: "Effects of dpa rate on swelling in neutron-irradiated Fe-Cr and Fe-Cr-Mo alloys", Journal of Nuclear Materials 417 (2011) p.944.

2) F.A. Garmer, T. Okita, N. Sekimura: "Swelling of pure vanadium and V-5Cr at ~430°C in response to variations in neutron flux-specta in FFTF", Journal of Nuclear Materials 417 (2011) p.314.

3) S. Miyashiro, S, Fujita, T. Okita: "MD simulations to evaluate the influence of applied normal stress or deformation on defect production rate and size distribution of clusters in cascade process for pure Cu", Journal of Nuclear Materials 415 (2011) p.1.

4) M. Sagisaka, Y. Isobe, F.A. Garner, S. Fujita, T. Okita: "Development of nondestructive inspection techniques for measurement of void swelling in irradiated microscopy disks", Journal of Nuclear Materials 417 (2011) pp.992-995.

5) S. Miyashiro, S. Fujita, T. Okita, H. Okuda: "MD simulations to evaluate the influence of normal strain on defect production at various PKA energies", Fusion Engineering and Design, 87(2012), pp.1352-1355.

6) M. Itakura, H. Kaburaki, and M. Yamaguchi, "First-Principles Study on the Mobility of Screw Dislocations in BCC Iron", ActaMaterialia, 60 (2012), pp.3698-3710.

和文誌

 1) 蕪木英雄, 鈴土知明, 板倉充洋 "今,核融合炉の壁が熱い!--数値モデリングでチャレンジ (第 8 回)7.核融合材料のメソスケールシミユレーション", 日本原子力学会誌 51(1) (通号 595) p.32.

2) 後藤和哉,志賀淳二,林雅江,沖田泰良,奥田洋司:"アセンブリ構造解析のための多点 拘束前処理付き並列反復解",日本機械学会論文集 78 (2012) p.708.

総説

沖田泰良: "原子炉のシミュレーション: 放射線環境下における材料損傷シミュレーション",日本シミュレーション学会誌「シミュレーション」30 (2011) p.70.

2) 高橋浩之、沖田泰良、落合孝正: "状態把握新技術適用性研究分科会の活動状況",日本 保全学会誌「保全学」10(2011) p.64.

2. 単行本・プロシーディングス

(1) 原著論文

欧文誌

1) S. Miyashiro, S. Fujita, M. Itakura, T. Okita: "MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS TO EALUATE THE EFFECT OF APPLIED STRAIN ON INTERSTITIAL CLUSTER FORIAMTION AND ORIENTATION UNDER COLLISION CASCADE DAMAGE", accepted for publication in proceedings of 20th International Conference on Nuclear Engineering.

2) T. Horinouchi, S. Miyashiro, M. Itakura, T. Okita: "MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS TO EVALUATE THE EFFECT OF THE DIFFERENCE IN MATERIAL PROPERTIES ON IRRADIATION-INDUCED DEFECT FORMATION UNDER APPLIED STRAIN", accepted for publication in proceedings of 20th International Conference on Nuclear Engineering.

3) M. Sato, T. Kikuchi, S. Miyashiro, T. Okita: "DIRECT OBSERVATION OF IRRADIATION-INDUCED DEFECT FORMATION ON A SI (111) SURFACE BY A LINKED FACILITY BETWEEN AN ION ACCELERATOR AND STM", accepted for publication in proceedings of 20th International Conference on Nuclear Engineering.

口頭発表・ポスター発表

国際会議等

1) T. Okita, S. Miyashiro, Y. Isobe, M. Sagisaka, J. Etoh: "Development for a non-destructive evaluation method detecting irradiation-induced microstructure change", The 5th Annual Asia-Pacific Nuclear Energy Forum on Materials for Nuclear Applications

2) S. Miyashiro, S. Fujita, M.Itakura and T. Okita, "MD Simulations for Defect Cluster Orientation Modeling under External Stress", Proceedings of ICFRM-15 (2011) submitted.

3) M.Itakura, S.Miyashiro, M.Yamaguchi and T.Okita, "Development of an EAM Potential for Fe-Cr-Ni Alloys", WCCM 2012, Sao Paulo, Brazil, June 13, 2012.

4) T.Okita, S.Miyashiro and M.Itakura, "A Study to Evaluate the Interaction between a Line Dislocation and Glissile Loops in BC Fe", WCCM 2012, Sao Paulo, Brazil, June 13, 2012.

5) S. Miyashiro, M. Itakura, and T. Okita, "Modeling of defect cluster formation and rotation under stress and irradiation by molecular dynamics method", ICONE20 Anaheim, USA, July 30-August 3, 2012.

6) S. Miyashiro, S. Fujita, T. Okita : "Molecular dynamics simulations to evaluate the influence of applied normal stress on defect cluster formation and behavior", The 5th Annual Asia-Pacific Nuclear Energy Forum on Materials for Nuclear Applications, 2011.6

7) S. Miyashiro, S. Fujita, T. Okita, "Modeling for stress-induced deformation of fusion reactor materials under irradiation" the 10th International Symposium on Fusion Technology, 2011.9

8) S. Miyashiro, S. Fujita, T. Okita, "MD simulations for defect cluster orientation modeling under external stress, The 15th International Conference on Fusion Reactor Materials, 2011.10

9) T. Okita, M. Shizimu, S. Fujita, H. Okuda, "A study to evaluate the interaction between a line dislocation and glissile loops in BCC Fe", The 15th International Conference on Fusion Reactor Materials, 2011.10

10) M. Sagisaka, J. Etoh, Y. Isobe, T. Okita, "elopment of Prediction Model of Ultrasonic Waves due to Irradiation-induced Material Degradations", The 15th International Conference on Fusion Reactor Materials, 2011.10

国内会議等

1) 匂坂充行、江藤淳二、磯部仁博、宮代聡、沖田泰良: "超音波を用いた照射下ミクロ組織の深さ分布定量技術の開発",日本原子力学会2011年秋の大会,F05,2011.9

2) 沖田泰良, 板倉充洋, 宮代聡, 菊池大朗, 佐野貴士, 磯部仁博, 匂坂充行, 江藤淳二: "実 験的アプローチからの計算科学への貢献 - オーステナイト鋼の照射劣化を対象として-", 第21回人工物コロキウム、第23回 CCSE ワークショップ, 2011.1

3) 菊池大朗、佐藤元洋、森田賢史、村上健太、宮代聡、沖田泰良:"イオン加速器連結走査

型トンネル顕微鏡を用いたはじき出し損傷の直接観察による分子シミュレーションへの貢献",第21回人工物コロキウム、第23回 CCSE ワークショップ,2011.1

4) 佐野貴士、沖田泰良: "ミクロ組織検出のための非破壊検査技術開発", 第 21 回人工物 コロキウム、第 23 回 CCSE ワークショップ, 2011.1

5) 匂坂充行、江藤淳二、松永嵩,枝川文哉,磯部仁博、沖田泰良:"米国実験炉廃材を用いた照射下ミクロ組織の非破壊定量手法の開発 -(1)実験的検討-",日本原子力学会 2012 年春の大会,J20,2012.3

6) 江藤淳二、匂坂充行、松永嵩,枝川文哉,磯部仁博、沖田泰良: "米国実験炉廃材を用 いた照射下ミクロ組織の非破壊定量手法の開発 – (2) 理論的検討–",日本原子力学会 2012 年春の大会,J21,2012.3

7) 沖田泰良,磯部仁博, 匂坂充行, 江藤淳二: "原子力発電プラント構造材を対象とした放 射線照射下ミクロ組織変化検出のための非破壊検査技術", 2012.3

その他特記事項

Other Achievements

受賞

1) 堀之内利浩, 宮代聡, 沖田泰良: 第4回日本原子力学会関東甲越支部学生研究発表会奨 励賞

2) S. Miyashiro, S. Fujita, M. Itakura, T. Okita : Quntified student award for the 20th International Conference on Nuclear Engineering

特許

1) 江藤淳二、匂坂充行、磯部仁博、沖田泰良:「材料劣化診断法」申請中

プロジェクト・外部資金

 文部科学省原子カシステム研究開発事業基盤研究開発分野革新技術創成型研究開発革 新的原子炉技術「EBR-II 廃材を用いた高速炉構造材健全性評価に関する研究開発」研究リ ーダー

2) 科学研究費補助金若手研究(A)「イオン加速器連結型走査型トンネル顕微鏡を用いた照 射下原子挙動解明に関する研究」研究リーダー

参考文献

 N. Sekimura, K. Morishita, E. Kuramoto, N. Soneda, T. Okita, M. Hiratani, Journal of Plasma and Fusion Research Vol. 80 (2004) p.228.

- [2] N. Soneda, T. Okita, K. Morishita, E. Kuramoto, M. Hiratani, N. Sekimuira, Journal of Plasma and Fusion Research Vol. 80 (2004) p.318.
- [3] E. Kuramoto, M. Hiratani, T. Okita, K. Morishita, N. Sekimura, N. Soneda, Journal of Plasma and Fusion Research Vol. 80 (2004) p.492.
- [4] 「平成 20 年度高経年化機器の状態監視のための新技術適用性に係る研究報告書」 2009.2 NPO 法人 日本保全学会 状態把握新技術適用性研究分科会
- [5] 文部科学省原子力システム研究開発事業「モデル・データ・検査融合に基づく炉内材料 劣化に関する研究開発 平成 19 年度報告書」 2008.3 国立大学法人東京大学
- [6] http://en.wikipedia.org/wiki/Experimental_Breeder_Reactor_II
- [7] "EBR-II REFLECTOR HEX BLOCK MEASUREMENT", Battele Memorandum No. 8121, 2003.
- [8] R.K. Guduru, K.A. Darling, R.Kishore, R.O. Scattergood, C.C. Koch, K.L. Murty, Materials Science and Engineering A 395, (2005) p.307.
- [9] V. Karthik, P. Visweswaran, A. Vijayraghavan, K.V. Kasiviswanathan, Baldev Raj, Journal of Nuclear Materials 393, (2009) p.425.
- [10] 福谷耕司, 西岡弘雅, 藤井克彦, "ステンレス鋼の軽水炉照射挙動", INSS MONOGRAPHS No.4, 2009.
- [11] J. L. Straalsund and C. K. Day, Nucl. Tech., 20 (1973) 27.
- [12] J.A. Spitznagel, R. Stickler, Metallergical Transactions Volume 5, (1974) p.1363.
- [13] 中代雅士, "超音波を用いた材料の損傷・劣化評価", 金属 68, No.8, (1998) p.701.
- [14] 横野 泰和, "超音波によるミクロ欠陥検出と材料劣化評価",高圧ガス 38, 3, (2001) p.232.
- [15] 今中 拓一, "超音波法による材料劣化の評価", 検査技術, 10, (2005) p.61.
- [16] 向井一弘,今中拓一,"材料の微細組織と超音波散乱理論(1)",工業材料,42,12, pp.73-78,1994.
- [17] "超音波探傷試験 III"、(社) 日本非破壊検査協会, 2001.
- [18] 向井一弘, 今中拓一, "材料の微細組織と超音波散乱理論(2)", 工業材料, 42, 15, pp.126-131, 1994.
- [19] K.Goebbles, "Structural Analysis by Scattered Ultrasonic Radiation, Reserch Techinique in Nondestructive Testing IV", ed.by R.Sharpe, Academic Press (Orland), 1990.
- [20] S.Lee et.al, Proceedings of the 10th Asia-Pacific Conference on Non-Destructive Testing Conference 2001.
- [21] A.B. Bhatia, J.Acoust.Soc.Am.31, pp.16-23, 1959.
- [22] 大岡紀一他, "原子炉容器用鋼材の中性子照射脆化の評価", 非破壊検査, 52, 5, (2003)p.235.
- [23] 今中拓一, "転位による音波の減衰", 検査技術, pp.45-50, 2006.

- [24] A.V.Granato, K.Lucke, J.Appl.Phys., 27, pp.583, 1956.
- [25] 今中拓一: "転位による共鳴吸収", 検査技術, pp.55-64, 2006.
- [26] I.M.Lifshits, G.D.Parkhomovskii: Zh.Eksp.ITheor.Fiz.20, pp.175-182 1950.
- [27] S.J. Zinkle, P.J. Maziasz, R.E. Stoller, J. Nucl. Mater. 206 (1993) 266.
- [28]石野栞, "照射損傷", 東京大学出版会 1979.
- [29] J. Gan et.al, J. Nucl. Mater. 299 (2001) 53.
- [30] G.A. Alers, D.O. Thompson, J. Appl. Phys. 32 (1961) 283.
- [31] D.O. Thompson, D.K. Holmes, J. Appl. Phys. 27 (1956) 191.
- [32] 鈴木誠也他, "SUS304 のクリープ変形に伴う超音波速度変化",日本材料学会,22,108
- [33] W.G. Wolfer, T. Okita, D.M. Barnett, Phys. Rev. Lett., 92 (2004) 085507
- [34] M.S. Daw, M.I. Baskes, Phys. Rev. Lett., 50 (1983) pp.1285-1288.
- [35] M.W. Finnis, J.E. Sinclair, Philo. Mag. A, 50 (1984) pp.45-55.
- [36] W.J. Phythian, R.E. Stoller, A.J.E. Foreman, A.F. Calder, D.J. Bacon, J. Nucl. Mater. 223 (1995) pp.245-261.
- [37] D.J. Bacon, F. Gao, Yu.N. Osetsky, J. Nucl. Mater. 276 (2000) pp.1-12.
- [38] R.E. Stoller, G.R. Odette, B.D. Wirth, J. Nucl. Matt 251(1997) pp.49-60.
- [39] Y. Mishin, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos, A.F. Voter, J.D. Kress, Phys. Rev. B, 63 (2001) 224106.
- [40] M.S. Daw, M.I. Baskes, Phys. Rev. B, 29 (1984) pp.6443-6453.
- [41] D.J. Bacon, Yu.N. Osetsky, R.E. Stoller, R.E. Voskoboinikov, J. Nucl. Mater. 323(2003) pp.152-162.
- [42] 加藤雅治, "入門転位論", 裳華房 1999.
- [43] 木村宏,"改訂材料強度の考え方", アグネ技術センター 2002.
- [44] B.N. Singh, J. Nucl. Mater. 249 (1997) 103.
- [45] G.E. Lucas, J. Nucl. Mater. 206 (1993) 287.
- [46] 橘内、他,日本原子力学会秋の大会 (2008).
- [47] J.J. Holmes, R.E. Robbins, J.L. Brimhall, B. Mastel, Acta Metall., 16 (1968) 955.
- [48] G.I. Kukinski, J.L. Brimhall, G.E. Kissinger, Acta Metall. (1972).
- [49] G.R. Odette, D. Frey, J. Nucl. Mater 85/86 (1979) 817.
- [50] F.A. Garner, M. Hamilton, N. Panayotou, G. Johnson, J. Nucl. Mater 103/104 (1981) 803.
- [51] M. Grossbeck, P. Maziasz, A. Rowcliffe, J. Nucl. Mater, 191-194 (1992) 808.
- [52] N. Yoshida, J. Nucl. Mater. 174 (1990) 220.
- [53] A.L. Bement, Rev. Roum. Phys. 17 (1972) 361.
- [54] G.I. Taylor, Proc. Roy. Soc. 145 (1934) 362.
- [55] T. Hatano, H. Matsui, Phys. Rev. 72 (2005) 094105.
- [56] Yu.N. Osetsky et al., Phil. Mag. 90, 7-8, (2010) 945.

- [57] T.Hatano, T.Kaneko, Y.Abe, H.Matsui, Physical Review B Vol.77, 064108 (2008).
- [58] 神山新一, 佐藤明, "モンテカルロ・シミュレーション", 朝倉書店 1997.
- [59]大野豊, 磯田和男, "新版数値計算ハンドブック", オーム社 1990.
- [60] 前田淳, "軽水炉炉内構造材料を対象としたナノメカニズムに基づく照射硬化予測手法の構築に関する研究",東京大学大学院工学系研究科修士論文 2011.3.
- [61] F.A. Garner, Material Science and Technology, Vol.10A Nuclear Materials 419.
- [62] F.A. Garner, Proceedings of Symposium of Optimizing Materials for Nuclear Applications, Warrendale, The Metallurgical Society of AIME, pp.111-139.
- [63] T. Okita, "Effects of Dose Rate on Irradiation Behavior in Structural Materials", Doctoral thesis of the University of Tokyo, 2002.3.
- [64] T. Okita, T. Sato, N. Sekimura, F.A. Garner, L.R. Greenwood, J. Nucl. Mater. 307-311 (2002) pp. 322-326.
- [65] F.A. Garner, M.L. Hamilton, D.L. Porter, T.R. Allen, T. Tsutsui, M. Nakajima, T. Kido, T. Ishii, G.M. Bond, B.H. Sencer, the 10th International Symposium on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems 2001.
- [66] H.R. Brager, F.A. Garner, G.L. Guthrie, J. Nucl. Mater. 66 (1977) pp.301-321.
- [67] H.R. Brager, J. Nucl. Mater. 57 (1975) pp.103-118.
- [68] P.J. Barton, B.L. Eyre, D.A. Stow, J. Nucl. Mater. 67 (1977) pp.181-197.
- [69] H.R.Brager, J.L.Straalsund, J. Nucl. Mater. 46 (1973) pp.134-158.
- [70] T. Bulanova, A. Fedoseev, G. Kalinin, B. Rodchenkov, V. Shamardin, J. Nucl. Mater. 329–333 (2004) pp.639–642.
- [71] J. Garnier, Y. Brechet, M. Delnondedieu, C. Pokor, P. Dubuisson, A. Renault, X. Averty, J.P. Massoud, J. Nucl. Mater. 413 (2011) pp.63–69.
- [72] C. Pokor, Y. Brechet, P. Dubuisson, J.-P. Massoud, A. Barbu, J. Nucl. Mater. 326 (2004) pp.19–29.
- [73] S. Hamada, M. Suzuki, P.J. Maziasz, A. Hishinuma, J. Nucl. Mater. 179-181 (1991) pp.515-518.
- [74] N. Hashimoto, E. Wakai, J.P. Robertson, T. Sawai, A. Hishinuma, J. Nucl. Mater. 280 (2000) pp.186-195.
- [75] E. Wakai, N. Hashimoto, J.P. Robertson, T. Sawai, A. Hishinuma, J. Nucl. Mater. 307–311 (2002) pp.352–356.
- [76] E. Wakai, N. Hashimoto, J.P. Robertson, S. Jistukawa, T. Sawai, A. Hishinuma. J. Nucl. Mater. 283-287 (2000) pp.435-439.
- [77] T.R. Allen, J.I. Cole, C.L. Trybus, D.L. Porter, H. Tsai, F. Garner, E.A. Kenik, T. Yoshitake, J. Ohta, J. Nucl. Mater. 348 (2006) pp.148–164.
- [78] J. Yu, D.S. Gelles, F.A. Garner, M.B. Toloczko, M.L. Hamilton, R.J. Kurtz, R.H. Jones, J. Nucl. Mater. 307–311 (2002) pp.357–361.

- [79] A. Etienne, B. Radiguet, P. Pareige, J.-P. Massoud, C. Pokor, J. Nucl. Mater. 382 (2008) pp.64–69.
- [80] T.A. Kenfield, W.K. Appleby, H.J. Busboom, W.L. Bell, J. Nucl. Mater. 75 (1978) pp.85-97.
- [81] E.E. Bloom, J.O. Stiegler, J. Nucl. Mater. 35 (1970) pp.244-246.
- [82] H.R. Brager, J.L. Straalsund, J. Nucl. Mater. 47 (1973) pp.105-109.
- [83] D. W. Sandusky, C. N. Spalaris, U. E. Wolff, J. Nucl. Mater. 42 (1972) pp.133-141.
- [84] J.M. Leitnaker, E.E. Bloom, J.O. Stiegler, J. Nucl. Mater. 49 (1973/74) pp.57-66.
- [85] J.O. Stiegler, E.E. Bloom, J. Nucl. Mater. 33 (1969) pp.173-185.
- [86] A. Renault, J. Malaplate, C. Pokor, P. Gavoille, J. Nucl. Mater. 421 (2012) pp.124–131.
- [87] L.K. Mansur, Nucl. Technol. 40 (1978) p.5.
- [88] J.A. Shields, ANL-RDP-69 (1977) pp. 1.11-1.15.
- [89] J. A. Shields, Argonne national Laboratory report ANL-RDP-83 (1979) pp. 7-11 7-14.

3. 学術講演会等の活動

3.1 第 21 回 RACE コロキウム/第 23 回 CCSE ワークショップ報告

第23回 CCSE ワークショップ「原子力計算材料科学 – 基礎から工学応用(高経年化・ 廃炉等)への展開–」と題して、平成24年1月20日(金)に、東京大学柏キャンパス総合 研究棟6階大会議室において開催しました。参加者は46名(内、大学;19名、民間;9名、 原子力機構;18名)で、主な参加機関は産業技術総合研究所、中部電力株式会社、三菱電 機株式会社、日本核燃料開発株式会社、日本 SGI 株式会社、カストマシステム株式会社、 東京大学、原子力機構でした。

原子力機構・システム計算科学センター(CCSE)は、原子力に役立つ計算科学基盤技術の開発と原子炉構造材における照射効果とそれに伴う経年変化等を課題に、東京大学人工物工学研究センター(RACE)との研究連携を開始したことを受け、連携後初の技術交流会として、第23回 CCSE ワークショップを開催しました。本ワークショップでは、原子力計算材料科学に関する双方のこれまでの研究成果を紹介するとともに、連携の進め方や期待できる成果の見通しについて議論しました。

開会挨拶において、RACEの影山和郎センター長から、CCSEとRACEが研究連携を開始した経緯や今後の指針について説明がありました。基調講演では、山内豊明氏(日本原子力発電株式会社)から、現在稼動中の軽水炉50基と運転を終了した9基の廃炉措置に向けた電力会社の取組みについて、講演が行われました。一般講演では、CCSEの鈴土知明氏から、照射材料モデリングにおけるキネティックモンテカルロの役割について、同じく板倉充洋氏から、オーステナイト鋼の原子間ポテンシャル開発について講演がありました。また、RACEの沖田泰良教授から、実験的アプローチからの計算科学への貢献について講演がありました。さらに、東京大学大学院工学系研究科の佐野貴士氏から、ミクロ組織検出のための非破壊検査技術開発について、同じく菊池大朗氏から、イオン加速器に関する分子シミュレーションについて講演がありました。最後に、CCSEの村松健センター長から、ミクロ組織を観測する(ミクロレベルのシミュレーションと直接比較できる)技術など若い研究者の取り組みを聞き、今後の連携に向けてよい触発を受けた旨の閉会挨拶があった。

福島第一原発の事故により原子力発電所の廃止措置に関する技術確立が喫緊の課題となっている社会情勢において、日本原子力発電株式会社の山内豊明氏から現場ならではの考え方や取り組み方針について知見を得られたことは、CCSEとRACEの研究連携の方向性を決める上で大変貴重な情報収集の場となりました。また、原子炉構造材に関わる研究者が一堂に会したことでシミュレーション手法に関わる詳細な議論等活発な意見交換ができました。

ワークショップの次第は、次の通りでした。

1) 第23回 CCSE ワークショップ「原子力計算材料科学 - 基礎から工学応用(高経年 化・廃炉等)への展開-」

【日時】

平成24年1月20日(金) 14:00-17:55

【場所】

千葉県柏市柏の葉 5-1-5 東京大学柏キャンパス総合研究棟6階大会議室

【主催】

日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター 東京大学・人工物工学研究センター

【共催】

日本原子力学会・計算科学技術部会

【プログラム】

14:00~14:05 「開会挨拶」 影山 和郎 (東京大学・人工物工学研究センター)

【基調講演】

14:05~15:05 「原子力発電所の廃止措置について」山内 豊明(日本原子力発電株式会社)

【一般講演】

- 15:05~15:35 「照射材料モデリングにおけるキネティックモンテカルロの役割」
 鈴土 知明(原子力機構・システム計算科学センター)
- 15:35~16:05 「オーステナイト鋼の原子間ポテンシャル開発」
 板倉 充洋(原子力機構・システム計算科学センター)

(休憩)

- 16:20~16:50 「実験的アプローチからの計算科学への貢献」沖田 泰良(東京大学・人工物工学研究センター)
- 16:50~17:05 「ミクロ組織検出のための非破壊検査技術開発」佐野 貴士(東京大学大学院工学系研究科)

17:05~17:20 「イオン加速器連結走査型トンネル顕微鏡を用いたはじき出し損傷の直接 観察による分子シミュレーションへの貢献」

菊池 大朗 (東京大学大学院工学系研究科)

17:20-17:50 「総合討論」 司会:沖田 泰良、板倉 充洋

17:50-17:55 「閉会挨拶」 村松 健(原子力機構・システム計算科学センター)

ワークショップのポスターは、付録3に掲載した。

3.2 原子力計算科学セミナー 原子力計算科学セミナーを、計4回した。以下、各セミナーの概況について報告する。

(1)第1回(2011/07/26):材料科学とシミュレーション
1.日時:2011年7月26日(火)15:00~17:00
2.講演:日本電子(株) 福嶋球琳男 技術顧問 「最新顕微鏡技術」

(2) 第2回(2011/08/25): 流体計算科学の最前線(図 3.2.1)
1.日時: 2011年8月25日(木) 14:45~16:45
2.講演:東京大学 越塚誠一 教授

「粒子法による流れのシミュレーション」 3.報告:日本原子力研究開発機構 鵜沢憲 研究員 「気液二相流の乱流モデルの妥当性検証」



図 3.2.1 第2回原子力計算科学セミナー

(3) 第3回(2011/12/22): 原子力分野に必要なシミュレーション基盤

1.日時: 2011年12月22日(木) 15:00~17:30

2.講演:東京大学 奥田洋司 教授

「階層的アセンブリ構造の並列有限要素法」

3.報告:日本原子力研究開発機構 山田進 副主幹研究員 「量子計算に現れる疎行列ベクトル積の並列化・高速化」

(4) 第4回(2012/03/29): 脂質膜・リポソームの分子シミュレーション (図 3.2.2)

1.日時: 2012年3月29日(木) 16:00~17:30

2.講演:産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門・分子シミュレーショングループ 研究 グループ長 篠田 渉 氏

「脂質膜・リポソームの分子シミュレーション」



図 3.2.2 第4回原子力計算科学セミナーの様子

3.3 連携記念報告:東京大学と日本原子力研究開発機構間の計算科学研究における組織開始 記念会

以下に示す次第に従い、東京大学と日本原子力研究開発機構間の計算科学研究における 組織連携を記念する講演会を開催した。会には、柏市石黒副市長等のご臨席を賜るととも に、80余名の参加者が集った。 「東京大学と日本原子力研究開発機構間の計算科学研究における組織連携」 記念会次第

- 1. 日時:平成23年10月14日(金)16:30~17:30
- 2. 場所:東京大学柏キャンパス 総合研究棟6階大会議室
- 3. 記念会次第

16:30~16:35 開会:影山和郎(RACE センター長)
16:35~16:40 開会挨拶:松本洋一郎(東京大学副学長)
16:40~16:50 人工物工学研究センターの活動紹介: 影山和郎(RACE センター長)
16:50~17:00 システム計算科学センターの活動紹介: 村松健(CCSE センター長)
17:00~17:30 研究連携の取組紹介:奥田洋司(RACE 教授) 町田昌彦(CCSE 室長)
17:30~17:35 閉会挨拶: 戸谷一夫(日本原子力研究開発機構理事)

4. 懇親会次第(ノン・アルコール、17:35~18:35)

17:45~17:46 開 会 :中島憲宏 (CCSE 次長)
17:46~17:50 開会挨拶:戸谷一夫 (日本原子力研究開発機構理事)
17:50~17:55 来賓挨拶:石黒博 (柏市役所副市長) "
18:00~18:05 来賓挨拶:上田卓也 (東京大学新領域創成科学研究科長、柏共同 学術経営委員会委員長)
18:43~18:45 閉会挨拶:保立和夫 (東京大学産学連携本部長)

本会では、東京大学と日本原子力研究開発機構との間には、かねてより原子力工学分野 をはじめ多方面にわたる研究、教育の連携が進められていることの紹介にはじまり、平成 20年4月には、当時の小宮山総長のもと、本学と原子力機構との間で、包括的な連携協力 協定が締結された経緯説明があった。そして、この協定の傘のもと、このたび、平成23年 1月に東大と原子力機構との「計算科学研究協力に関する覚書」が交わされ、原子力機構シ ステム計算科学センターの柏駐在所が開設された同時に、東大人工物工学研究センターと の共同研究「大規模複雑人工物シミュレーションの連携研究」がスタートしたことが報告 された。図3.3.1の写真は、組織連携を記念して両組織の幹部が一同に会した様子である。

具体的な共同研究内容等の紹介が行われるとともに、様々な産学連携の形態がある中で、

今回のように場所も人も組織大でキャンバス内にというのは、東京大学にとって初めての ことであり、連携研究を推進するにあたっての相乗効果と、実りある成果に大いに期待が 寄せられた。

東日本大震災、福島第一原発事故を受け、深刻かつ流動的な社会状況、経済状況等を横 断的にとらえ、諸般の制約条件も鑑みつつ、科学技術に今後どう取り組むかの姿勢につい て意見が述べられた。

人工物工学研究センターは、約20年前の設立当初から、人間・人工物・環境の新たな関係の可能性を求めて、細分化された学問領域の方法論にとらわれない取り組みに挑戦して きていることが紹介された。

人工物工学の実践においては、計算機シミュレーションはさまざまな学問領域に横断的 に取り組むための強力な方法論であることを確認した。そして、今回スタートする「大規 模複雑人工物の統合シミュレーション」の枠組みの中におきましては、まさに、スーパー コンピュータやネットワークの利用技術などをはじめとする計算科学の基盤的技術の高度 化と、耐震、材料強度評価、あるいは震災後にあらたに浮上した緊急課題などへの応用範 囲の拡大に資する期待が寄せられた。

組織大の連携携帯を通じて緊密な共同研究体制を築くことで、学生教育面での効果も大いに期待が寄せられた。単に当該研究を推進するのみならず、学生は共同研究や研究上の 交流を通じて、自立した、国際的な研究者に成長できるための機会と刺激を大いに享受す る場にしていくことを確認した。

更に、柏キャンパス、東大他部局へ連携のウイングを広げて行き、計算科学基盤、その 展開研究において世界のトップランナーとして成果を輩出することへの期待が寄せられた。



図 3.3.1 組織連携を記念して
付録

1. 協定書

国立大学法人東京大学と独立行政法人日本原子力研究開発機構 との間における連携協力の推進に係る協定書

国立大学法人東京大学(以下「大学」という。)と独立行政法人日本原子力 研究開発機構(以下「機構」という。)が、両機関の連携協力を推進し、相互 の研究開発能力及び人材を活かして総合力を発揮することにより、学術研究の 発展と人材育成の充実、原子力に関する科学技術の向上及び原子力開発利用の 促進について、新たに重要な役割を果たすため、以下のとおり連携協力協定 (以下「本協定」という。)を締結する。

(目的)

第1条 本協定は、大学及び機構の研究開発、人材育成等に係る相互協力が可 能なすべての分野において、互恵の精神に基づき、具体的な連携協力を効果 的に実施するために必要な事項を定める。

(連携協力の推進)

- 第2条 大学及び機構は、相互の研究開発能力及び人材並びに機構の大学共同 利用システム等を活かした総合力を発揮するために必要な共同事業を実施す るものとし、原子力の基礎的研究、原子力エネルギー利用、量子ビーム利用 等の原子力研究開発における次の各号に定める連携協力を推進する。
 - (1) 共同研究等の研究協力
 - (2) 人材交流
 - (3) 人材育成
 - (4) 研究施設・設備の相互利用
 - (5) その他本協定の目的を達成するために、大学及び機構が必要と認める協力
- 2 大学及び機構は前項の連携協力を実施するため、本協定に基づく個別協定 等を締結することができる。

(連絡協議会)

第3条 大学及び機構は、連携協力を推進するため、連絡協議会を置く。

- 2 連携協力の具体的案件の検討を実施するため、連絡協議会に分科会を設置 することができる。
- 3 連絡協議会及び分科会の運営に関して必要な事項は、双方協議の上別途定 める。

(既存協定等の取扱い)

- 第4条 本協定の締結前に大学と機構との間に取り交わした取決めは、本協定 第2条第2項の規定に基づき締結されたものとみなす。
- 2 前項の取決めについては、必要に応じて本協定の趣旨に沿った内容に改訂 していくものとする。

(有効期間)

- 第5条 本協定の有効期限は、締結日から平成22年3月31日までとする。 ただし、期間満了の3月前までに解除の申し出がない場合は、さらに5年間 延長するものとし、その後についても同様とする。また、解除の申し出があった場合は、両者で協議して合意の上、期間満了時の時点で解除する。
- 2 前項の規定にかかわらず、大学又は機構が、本協定を終了したい場合は、 終了希望日の6月前までにその旨を他方に書面により通知することにより、 本協定を終了することができる。
- 3 第2条第2項の規定に基づき締結された協定の有効期限は、それぞれの協 定の定めに従う。

(協定の解釈)

第6条 本協定の解釈に疑義を生じた場合又は本協定に定めのない事項が生じた場合は、大学及び機構は、協議するものとする。

附則

- 1 本協定は、平成20年4月8日から実施する。
- 2 本協定の締結を証するため、本協定書2通を作成し、大学及び機構が署名の上、それぞれ1通を保管する。

平成20年4月8日

国立大学法人東京	大学		独立行政法人日本原子力研	听究開発	機構
総長	: 小宮山	宏	理事長	岡崎	俊雄

2. 覚書

国立大学法人東京大学と独立行政法人日本原子力研究開発機構との 計算科学研究協力に関する覚書

国立大学法人東京大学(以下「甲」という。)と独立行政法人日本原子力研究開発機構(以下 「乙」という。)とは、平成20年4月8日に締結された「国立大学法人東京大学と独立行政法人日 本原子力研究開発機構との間における連携協力の推進に係る協定書」(以下「協定書」という。) 第2条第2項に基づき、計算科学研究に係る協力をより一層密接に連携して推進するために、次 のとおり覚書を締結する。

(目的)

第1条本覚書は、計算科学研究の発展及び原子力に係る技術課題の効率的解決を図ることを 目的とし、甲及び乙が日常の研究活動において、頻繁かつ広範に交流することにより、相互の 研究開発能力及び人材をいかす組織連携型研究協力を推進するために必要な具体的事項を 定める。

(協力項目)

第2条 甲及び乙は、次の各号に定める項目について協力を推進する。

- (1)計算科学の新たな学術体系・技術基盤の構築及び原子力計算科学への適用展開に係る 研究協力並びに情報交換
- (2) 研究人材の育成
- (3) 研究者交流の促進
- (4) 組織連携型研究協力を円滑に推進するための乙の職員の甲の施設への駐在
- (5) その他、甲及び乙が合意した協力項目

(協力の実施)

- 第3条 前条に掲げる協力項目の実施に当たっては、あらかじめ甲及び乙が協議の上、甲及び 乙の所定の手続に従い、具体的条件等を定め実施するものとする。
- 2 甲は、乙の職員等が駐在するための必要な施設を乙に有償で貸与するものとする。乙は、 甲の施設に駐在するために必要な賃料その他の経費を甲に支払うものとし、当該経費の取扱 いについては、甲及び乙が協議の上、別途、定める。

(計算科学分科会)

- 第4条 甲及び乙は、第2条の協力項目を円滑に推進するため、協定書第3条第2項に基づく分 科会として計算科学分科会(以下「分科会」という。)を置く。
- 2 分科会の運営に関して必要な事項は、甲及び乙が協議の上、決定する。

(有効期間)

第5条本覚書の有効期間は、締結日から協定書の終了日までとする。但し、有効期間内において本覚書を終了する必要が生じた場合には、甲及び乙が協議の上、本覚書を終了することができるものとする。

,

1.1.1

(その他)

第6条 本覚書に定める事項に疑義が生じた場合若しくは定めのない事項が生じた場合又は改 正の必要が生じた場合には、その都度甲及び乙は協議して処理するものとする。

附 則

- 1 本覚書は、平成23年1月31日から実施する。
- 2 本覚書を証するため、本覚書を2通作成し、甲乙記名押印の上、各1通を保有する。

平成23年1月31日

甲東京都文京区本郷7丁目3番1号
 乙茨城県那珂郡東海村村松4番地49
 国立大学法人東京大学
 独立行政法人日本原第2本研究開発機構
 理事・副学長 松本 洋一郎
 理事 戸谷 一夫

3. RACE コロキウム/第 23 回 CCSE ワークショップ ポスター



This is a blank page.

表 1. SI 基本単位						
甘大昌	SI 基本ì	単位				
盔半里	名称	記号				
長さ	メートル	m				
質 量	キログラム	kg				
時 間	秒	s				
電 流	アンペア	А				
熱力学温度	ケルビン	Κ				
物質量	モル	mol				
光度	カンデラ	cd				

表2. 基本単位を用い	いて表されるSI組立里(豆の例				
知辛量	SI 基本単位					
和立里	名称	記号				
面 積平方	メートル	m^2				
体 積立法	メートル	m^3				
速 さ , 速 度 メー	トル毎秒	m/s				
加速度メー	トル毎秒毎秒	m/s^2				
波 数 每メ	ートル	m ⁻¹				
密度,質量密度キロ	グラム毎立方メートル	kg/m ³				
面積密度キロ	グラム毎平方メートル	kg/m ²				
比 体 積立方	メートル毎キログラム	m ³ /kg				
電流密度アン	ペア毎平方メートル	A/m^2				
磁界の強さアン	ペア毎メートル	A/m				
量濃度(a),濃度モル	毎立方メートル	mol/m ³				
質量濃度+口	グラム毎立法メートル	kg/m ³				
輝 度 カン	デラ毎平方メートル	cd/m ²				
屈 折 率 ^(b) (数	字の) 1	1				
<u>比透磁率(b)</u> (数	字の) 1	1				
(a) 量濃度 (amount concentrati	on)は臨床化学の分野では	物質濃度				
(substance concentration) Lt. FIFT Z						

(substance concentration)ともよばれる。
 (b) これらは無次元量あるいは次元1をもつ量であるが、そのことを表す単位記号である数字の1は通常は表記しない。

表3. 固有の名称と記号で表されるSI組立単位

			SI 租立单位	
組立量	名称	記号	他のSI単位による 表し方	SI基本単位による 表し方
亚	5.37 v (b)	red	1 (b)	m/m
	() / / / / / / (b)	(c)	1 1 (b)	2/ 2
		sr II-	1	m m -1
同 仮 多		пг		S .
カ	ニュートン	N		m kg s ⁻²
E 力 , 応 力	パスカル	Pa	N/m ²	m ⁻¹ kg s ⁻²
エネルギー,仕事,熱量	ジュール	J	N m	$m^2 kg s^2$
仕事率, 工率, 放射束	ワット	W	J/s	m ² kg s ⁻³
電荷,電気量	クーロン	С		s A
電位差(電圧),起電力	ボルト	V	W/A	$m^2 kg s^{-3} A^{-1}$
静電容量	ファラド	F	C/V	$m^{-2} kg^{-1} s^4 A^2$
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	$m^2 kg s^{\cdot 3} A^{\cdot 2}$
コンダクタンス	ジーメンス	s	A/V	$m^{2} kg^{1} s^{3} A^{2}$
磁東	ウエーバ	Wb	Vs	$m^2 kg s^2 A^1$
磁束密度	テスラ	Т	Wb/m ²	$\text{kg s}^{2} \text{A}^{1}$
インダクタンス	ヘンリー	Н	Wb/A	$m^2 kg s^{-2} A^{-2}$
セルシウス温度	セルシウス度 ^(e)	°C		K
光束	ルーメン	lm	cd sr ^(c)	cd
照度	ルクス	lx	lm/m ²	m ⁻² cd
放射性核種の放射能 ^(f)	ベクレル ^(d)	Βα		s ⁻¹
吸収線量 比エネルギー分与				~
カーマ	グレイ	Gy	J/kg	m ² s ²
線量当量,周辺線量当量,方向	2 ((g)	Su	Ulta	2 o ⁻²
性線量当量, 個人線量当量		50	o/kg	m s
酸素活性	カタール	kat		s ⁻¹ mol

酸素活性(カタール) kat [s¹ mol]
 (a)SI接頭語は固有の名称と記号を持つ組立単位と組み合わせても使用できる。しかし接頭語を付した単位はもはや ュヒーレントではない。
 (b)ラジアンとステラジアンは数字の1に対する単位の特別な名称で、量についての情報をつたえるために使われる。 実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号である数字の1は明 示されない。
 (a)測光学ではステラジアンという名称と記号srを単位の表し方の中に、そのまま維持している。
 (d)へルツは周崩現象についてのみ、ペシレルは抜焼性核種の統計的過程についてのみ使用される。
 (a)セルシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度度を表すために使用される。
 (d)やレシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度を表すために使用される。
 (d)かりたきさは同一である。しただかって、温度度差やす数値はとちらの単位でましても同じである。
 (f)放射性核種の放射能(activity referred to a radionuclide)は、しばしば誤った用語で"radioactivity"と記される。
 (g)単位シーベルト (PV,2002,70,205)についてはCIPM勧告2(CI-2002)を参照。

表4.単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

	S	[組立単位	
組立量	名称	記号	SI 基本単位による 表し方
粘度	パスカル秒	Pa s	m ⁻¹ kg s ⁻¹
カのモーメント	ニュートンメートル	N m	m ² kg s ⁻²
表 面 張 九	リニュートン毎メートル	N/m	kg s ⁻²
角 速 度	ラジアン毎秒	rad/s	m m ⁻¹ s ⁻¹ =s ⁻¹
角 加 速 度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s^2	m m ⁻¹ s ⁻² =s ⁻²
熱流密度,放射照度	ワット毎平方メートル	W/m^2	kg s ⁻³
熱容量、エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	$m^2 kg s^{-2} K^{-1}$
比熱容量, 比エントロピー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)	$m^2 s^{-2} K^{-1}$
比エネルギー	ジュール毎キログラム	J/kg	$m^{2} s^{2}$
熱 伝 導 率	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s ⁻³ K ⁻¹
体積エネルギー	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ⁻¹ kg s ⁻²
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m	m kg s ⁻³ A ⁻¹
電 荷 密 度	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ⁻³ sA
表 面 電 荷	「クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² sA
電 束 密 度 , 電 気 変 位	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² sA
誘 電 率	シファラド毎メートル	F/m	$m^{-3} kg^{-1} s^4 A^2$
透 磁 率	ミヘンリー毎メートル	H/m	m kg s ⁻² A ⁻²
モルエネルギー	ジュール毎モル	J/mol	$m^2 kg s^2 mol^1$
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	$m^2 kg s^{-2} K^{-1} mol^{-1}$
照射線量(X線及びγ線)	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ sA
吸収線量率	ダレイ毎秒	Gy/s	$m^2 s^{-3}$
放 射 強 度	ワット毎ステラジアン	W/sr	$m^4 m^{-2} kg s^{-3} = m^2 kg s^{-3}$
放 射 輝 度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	$W/(m^2 sr)$	m ² m ⁻² kg s ⁻³ =kg s ⁻³
酸素活性濃度	カタール毎立方メートル	kat/m ³	m ⁻³ e ⁻¹ mol

表 5. SI 接頭語								
乗数	接頭語	記号	乗数	接頭語	記号			
10^{24}	э 9	Y	10 ⁻¹	デシ	d			
10^{21}	ゼタ	Z	10 ⁻²	センチ	с			
10^{18}	エクサ	E	10 ⁻³	ミリ	m			
10^{15}	ペタ	Р	10 ⁻⁶	マイクロ	μ			
10^{12}	テラ	Т	10 ⁻⁹	ナノ	n			
10^{9}	ギガ	G	10^{-12}	ピコ	р			
10^{6}	メガ	M	10^{-15}	フェムト	f			
10^{3}	+ 1	k	10 ⁻¹⁸	アト	а			
10^{2}	ヘクト	h	10^{-21}	ゼプト	z			
10^{1}	デカ	da	10 ⁻²⁴	ヨクト	v			

表6.SIに属さないが、SIと併用される単位						
名称	記号	SI 単位による値				
分	min	1 min=60s				
時	h	1h =60 min=3600 s				
日	d	1 d=24 h=86 400 s				
度	٥	1°=(п/180) rad				
分	,	1'=(1/60)°=(п/10800) rad				
秒	"	1"=(1/60)'=(п/648000) rad				
ヘクタール	ha	1ha=1hm ² =10 ⁴ m ²				
リットル	L, 1	1L=11=1dm ³ =10 ³ cm ³ =10 ⁻³ m ³				
トン	t	$1t=10^{3}$ kg				

表7. SIに属さないが、SIと併用される単位で、SI単位で

衣される奴値が実験的に待られるもの						
名称		記号	SI 単位で表される数値			
電	子 >	ボル	ŀ	eV	1eV=1.602 176 53(14)×10 ⁻¹⁹ J	
ダ	N	ŀ	\sim	Da	1Da=1.660 538 86(28)×10 ⁻²⁷ kg	
統-	一原子	質量単	单位	u	1u=1 Da	
天	文	単	位	ua	1ua=1.495 978 706 91(6)×10 ¹¹ m	

表8.SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位

	名称		記号	SI 単位で表される数値
バ	-	N	bar	1 bar=0.1MPa=100kPa=10 ⁵ Pa
水銀	柱ミリメー	トル	mmHg	1mmHg=133.322Pa
オン	グストロー	- 4	Å	1 Å=0.1nm=100pm=10 ⁻¹⁰ m
海		里	М	1 M=1852m
バ	-	\sim	b	1 b=100fm ² =(10 ⁻¹² cm)2=10 ⁻²⁸ m ²
1	ッ	ŀ	kn	1 kn=(1852/3600)m/s
ネ	-	パ	Np	の形法はいかおはない
ベ		N	В	31単位との数値的な関係は、 対数量の定義に依存。
デ	ジベ	N	dB -	

表9. 固有の名称をもつCGS組立単位

名称	記号	SI 単位で表される数値			
エルグ	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J			
ダイン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N			
ポアズ	Р	1 P=1 dyn s cm ⁻² =0.1Pa s			
ストークス	St	$1 \text{ St} = 1 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1} = 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$			
スチルブ	$^{\mathrm{sb}}$	$1 \text{ sb} = 1 \text{ cd } \text{ cm}^{\cdot 2} = 10^4 \text{ cd } \text{ m}^{\cdot 2}$			
フォト	ph	1 ph=1cd sr cm ⁻² 10 ⁴ lx			
ガ ル	Gal	1 Gal =1cm s ⁻² =10 ⁻² ms ⁻²			
マクスウェル	Mx	$1 \text{ Mx} = 1 \text{ G cm}^2 = 10^{-8} \text{Wb}$			
ガウス	G	$1 \text{ G} = 1 \text{Mx cm}^{-2} = 10^{-4} \text{T}$			
エルステッド ^(c)	Oe	1 Oe ≙ (10 ³ /4π)A m ^{·1}			
(c) 3元系のCGS単位系とSIでは直接比較できないため、等号「 ▲ 」					

は対応関係を示すものである。

		表	(10.	SIに 属	禹さないその他の単位の例
	名	称		記号	SI 単位で表される数値
キ	ユ	IJ	ĺ	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq
$\scriptstyle u$	ン	トゲ	\sim	R	$1 \text{ R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{C/kg}$
ラ			K	rad	1 rad=1cGy=10 ⁻² Gy
$\scriptstyle u$			ム	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv
ガ	:	\sim	7	γ	1 γ =1 nT=10-9T
フ	II.	N	"		1フェルミ=1 fm=10-15m
メー	ートルネ	系カラ:	ット		1メートル系カラット=200 mg=2×10-4kg
ŀ			N	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標	進	大気	圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
力	П	IJ	ļ	cal	1cal=4.1858J(「15℃」カロリー), 4.1868J (「IT」カロリー) 4.184J(「熱化学」カロリー)
3	カ	17	~		$1 = 1 = 10^{-6} m$

この印刷物は再生紙を使用しています