

構造健全性評価の信頼性向上に向けた計算科学基盤の構築と破壊挙動の解明

(受託者)学校法人東京理科大学

(研究代表者)高橋昭如 理工学部機械工学科

(再委託先)一般財団法人電力中央研究所、学校法人東洋大学

(研究期間)平成 28 年度～30 年度

1. 研究の背景とねらい

供用期間中の炉心部における中性子の照射や熱時効による影響によって低合金鋼（原子炉圧力容器鋼）、ステンレス鋳鋼やオーステナイトステンレス鋼は脆化することが知られている。すなわちこれらの金属材料は、延性脆性遷移温度の上昇や、上部棚エネルギーが低下するため、機器の健全性評価を行う上で考慮すべき重要な因子となっている。今後、安全性が確保された軽水炉を、40 年を超えて利用して行くことが必要となるが、40 年を越えた軽水炉の継続運転の判断の時点のみならず、その後も継続して金属材料の劣化に関する理解の改善に努め、最新の知見に基づいて健全性を保証するとともに、広く社会全般への説明性を向上させることが必要である。このためには、原子炉構造材料の脆化や延性-脆性遷移のメカニズムを詳細に把握し、脆化の程度を精度良く予測・評価することを可能にする新たな基盤技術の開発への不断の取組みが不可欠である。

金属材料の脆化や延性-脆性遷移のメカニズムに関する研究として、①実験的研究を用いた材料の組織観察および機械的特性の測定や、②計算科学を応用したマルチスケール材料モデリングによるアプローチがこれまでも行われてきた。しかし、実験的研究に基づくミクロ組織と機械的特性を繋ぐメカニズムの理解は必ずしも十分ではなく、経験的なアプローチが用いられることが多い。この問題の解決には現在の実験技術は十分でなく、②のマルチスケール材料モデリングの活用が不可欠である。マルチスケール材料モデリングにより金属材料の脆化のメカニズムを知ることができれば、ミクロからマクロにわたる脆化のメカニズムを知ることが可能となる。しかし、これまでのマルチスケール材料モデリングによる研究では、マルチスケール材料モデリングの全体像を描く一方で、個々のスケールでの現象の計算機シミュレーションや実験的測定に留まり、スケール間の相互作用やミクロからマクロまでを横断した脆化メカニズムの理解には至っていない。

【研究の目的】

本研究では、原子炉構造材料の延性-脆性遷移に焦点を絞り、延性-脆性遷移の基本的なメカニズムを解明するためのマルチスケール材料モデリングを基礎とする計算科学的基盤技術の構築を行う。構築した計算科学的基盤技術によって得られる延性-脆性遷移のメカニズムに関連する情報と、これまでに蓄積されてきた実験的観察結果を統合することにより、工学的に必要なパラメータ（例えば破壊靱性値）を導き出すことを目指す。

2. これまでの研究成果

以下に平成 29 年度の研究成果の概略をまとめる。

2.1. 転位の運動特性の分子動力学モデリング

らせん転位や刃状転位に限らず全ての混合転位の温度依存性を考慮した運動特性を転位動力学法に実装するために、転位の運動特性、特に転位の易動度や摩擦応力を分子動力学法で計算し、そのモデル化を実施した。

平成 28 年度に計算した鉄中の $\{110\}$ 、 $\{112\}$ 上の混合転位（刃状転位とらせん転位を含む）のバ

イエルス応力に加えて、 $\{123\}$ 上の混合転位のパイエルス応力を、分子動力学法を用いて計算した。計算に用いた原子間ポテンシャルは埋め込み原子法ポテンシャル⁽¹⁾で、原子モデルは Periodic Array of Dislocations (PAD)⁽²⁾モデルを用いた。計算領域の上下面付近の原子に強制的に転位のバーガースベクトル方向の変位を与えることによってせん断変形を加えた。図1に計算結果を示す。図の横軸は、転位線とバーガースベクトルの角度であり、混合転位の種類を示す。らせん転位のパイエルス応力が高いが、それに加えて、いくつかの混合転位においても高いパイエルス応力が見られる。

高いパイエルス応力を持つ転位は、キンク対の発生と、キンクの転位に沿った移動によって移動することが知られている。そこで、Nudged Elastic Band (NEB) 法を用いてキンク対形成エネルギーを計算した。らせん転位のキンク対形成エネルギーについてはこれまでも研究が行われているが、本研究ではらせん転位に限らず、パイ

エルス応力が高い混合転位についてもキンク対の形成エネルギーを計算した。その結果、らせん転位のキンク対形成エネルギーが最も高く、転位芯内の転位線方向について原子の近接距離が長くなるにつれてキンク対形成エネルギーが低くなることがわかった。さらに、原子モデルにせん断応力を負荷し、転位の移動速度を調べることによって、 $\{123\}$ 上の混合転位の易動度を調べた。図2に温度が 100K の時の易動度の計算結果を示す。温度が 100K の低温の状態においては、図1において高いパイエルス応力を示す角度がおおよそ 60° および 125° の混合転位転位の易動度が低くなる分布を示した。一方、温度が 300K を越えると、らせん転位の易動度を最小、刃状転位の易動度を最大とする山形の分布を示すことがわかった。また、温度が 300K 以上においては、各混合転位の易動度に大きな変化は見られなかった。

鉄中に銅原子が分散する場合の転位の移動度および摩擦応力についても分子動力学法を用いて調べた。 $\{110\}$ 上の混合転位に注目し、銅原子の濃度を 0.25~3at.%に変化させ、銅原子の濃度による易動度および摩擦応力への影響を調べた。その結果、易動度については、銅原子の濃度を変化させても、顕著な変化は見られず、銅原子の易動度に対する影響は無視できる程度に小さいことがわかった。一方、摩擦応力については、銅原子の濃度が増えると、摩擦応力が大きくなった。すなわち、銅原子の濃度は、摩擦応力の大きさに影響を与えることがわかった。

2.2. き裂先端での転位の放出・運動・弾性場を考慮した破壊靱性値評価のための計算科学基盤技術の開発

き裂先端での転位の放出・運動・弾性場を直接計算し、転位のき裂先端の遮蔽効果を考慮した破壊靱性値の数値解析手法の開発を実施した。具体的にはき裂を転位の堆積で表現することで、き裂

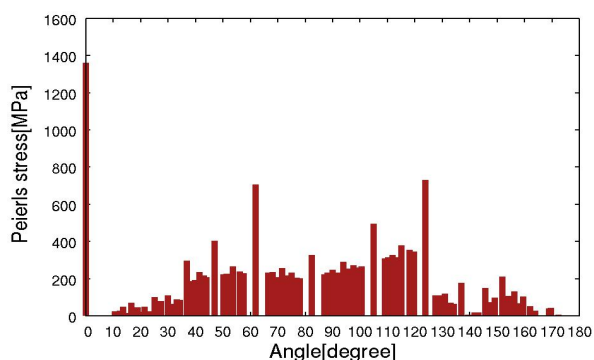


図1 $\{123\}$ 上の混合転位のパイエルス応力の計算結果

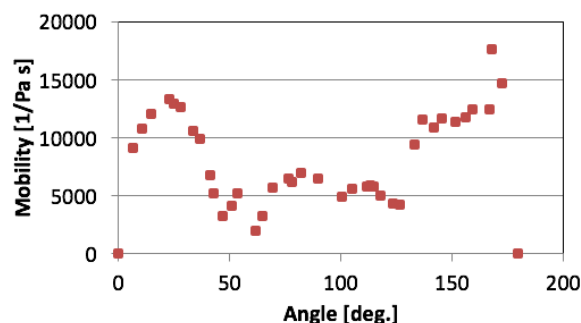


図2 $\{123\}$ 上の混合転位の易動度の計算結果 (温度: 100K)

先端から放出された転位とともに転位動力学のみでき裂および転位の挙動解析を実施することが可能な数値解析法の開発を行った。平成 28 年度では、転位を用いたき裂の数値解析法の高精度化および数値的安定化に成功した。平成 29 年度は、き裂先端からの転位の放出モデルを実装することによって、き裂先端からの放出された転位の運動および転位が与えるき裂先端での応力拡大係数への影響（転位の遮蔽効果）を考慮することを可能にした。

図 3 にき裂先端からの転位の発生モデルの概略図を示す。き裂面上の線はき裂を表現する転位を表している。き裂先端前方に転位源を仮定し、転位源におけるせん断応力を計算する。このせん断応力が閾値を超えていた場合は、転位源を囲むように半円状の転位線分を発生させる。転位線分の両端の節点は、転位のすべり面とき裂面の交線上のみを動けるように拘束する。

開発した破壊靱性値評価のための転位動力学コードを用いて、貫通き裂問題の数値解析を実施した。図 4 に解析結果を示す。き裂面から $\pm 45^\circ$ にすべり面を設置し、すべり面上のき裂先端前方に転位源を配置した。引張応力を 0.1MPa/ns の速度で与えた。計算される破壊靱性値の温度依存性を模擬するため、転位の易動度を変化させて計算を行った。一般的に、温度が高い方が転位の易動度は大きくなる。図 5 にき裂先端での転位の発生および移動の様子を示す拡大図を示す。き裂先端から放出された転位線分は、隣接する転位線分と結合し、一本の転位線となって放出されていることがわかる。図 6 に、計算によって求められた、破壊靱性値を示す。 K_{tip} はき裂先端での応力拡大係数、 K_{app} はき裂の形状と、負荷した引張応力から計算される応力拡大係数、 K_{IC} は Griffith の破壊基準によって計算された応力拡大係数である。図より、易動度が大きくなると、き裂先端での応力拡大係数の値が小さくなっていることがわかる。すなわち転位による遮蔽効果の影響が大きくなっている。 K_{tip}/K_{IC} が 1 のとき、すなわちき裂先端の応力拡大係数が Griffith の破壊基準を満たした時の K_{app} の値を見ると、易動度が大きくなるにつれて、 K_{app} の値が大きくなっている。この K_{app} の値が破壊靱性値と解釈することができるので、易動度が高くなる、すなわち温度が高くなると破壊靱性値が大きくなるという一般的な傾向を示すことに成功した。

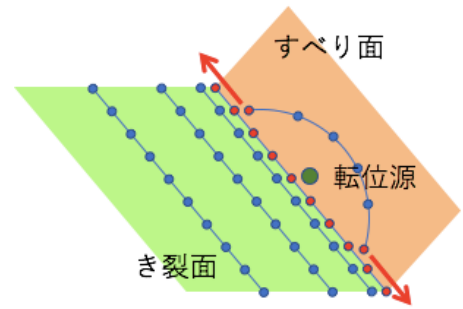


図 3 き裂先端からの転位の発生モデル

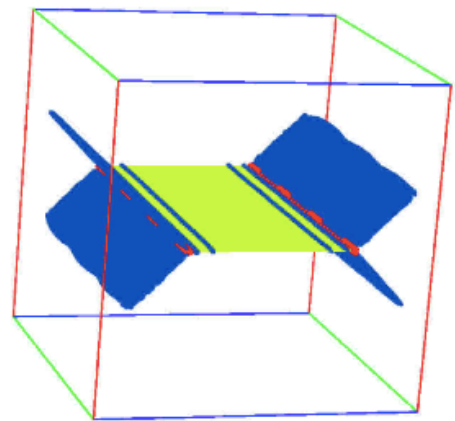


図 4 破壊靱性値の数値計算例

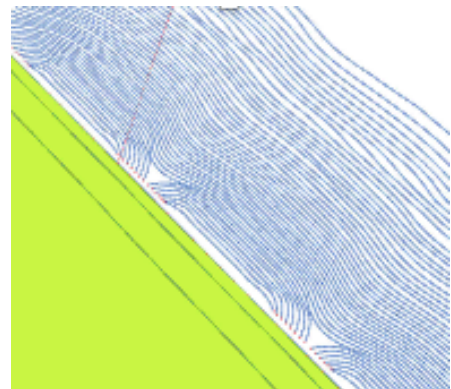


図 5 き裂先端部の拡大図

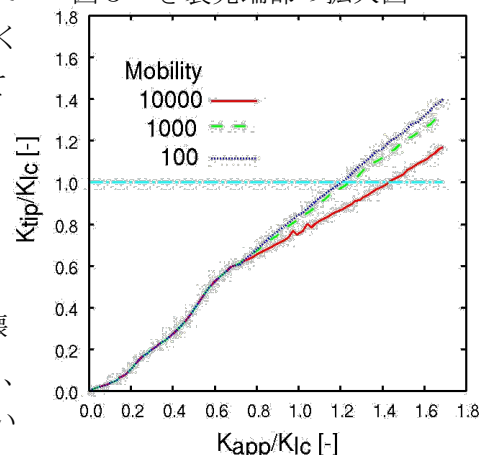


図 6 応力拡大係数の計算結果

図4の数値解析では、すべり面がき裂先端を含む場合であったが、すべり面がき裂先端を交差する場合についても転位の発生を可能にした。図4と同様に貫通き裂の引張応力の問題をすべり面を変えて計算した結果、転位の遮蔽効果は顕著に見られず、すべり面の方位によって、転位によるき裂先端の遮蔽効果の影響が大きく異なることがわかった。

2.3. き裂先端における力学的状態と破壊靱性値の関係の評価

き裂先端における転位の弾性場とき裂の応力場の相互作用を分析するために、破壊靱性値評価のための転位動力学シミュレーション結果の可視化を行った。さらに、単純な引張応力のみではなく、曲げ応力など様々な負荷状態における破壊靱性値の数値解析を実現するために、重ね合わせの原理に基づく転位動力学法と有限要素法の連成解析コードの開発を行った。

転位動力学法の計算結果は、転位の形状データのみであるが、転位が作る応力場を三次元直交格子上的応力のデータとして出力し、その結果の可視化を行った。その例を図7に示す。応力の三次元直交格子データから可視化した、転位が作る応力場の等値面表示の例である。さらに任意断面上の応力分布の可視化も行い、応力分布の表示についての検討を行った。

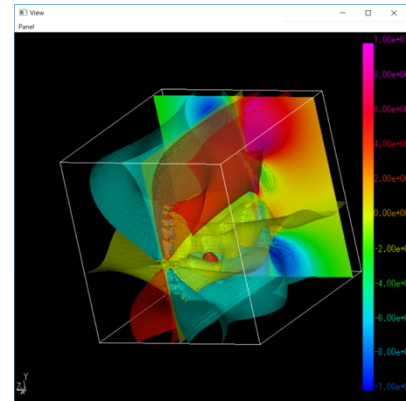


図7 転位が作る応力分布の等値面表示の例

重ね合わせの原理に基づく転位動力学法と有限要素法の連成解析コードの開発を行った。転位動力学法では、有限要素法の境界における応力の値を計算し、有限要素法では、転位動力学法で計算された境界における応力から面力を計算し、逆方向の面力を境界条件とした弾性問題の数値解析を行う。その計算結果として、転位の位置における応力の値を計算・出力し、転位動力学法でその応力を転位に作用する応力として用いる。これを互い違いに繰り返すことによって、自由表面や、固体に負荷された力学的境界条件の影響を転位動力学法で考慮することが可能になった。

3. 今後の研究

分子動力学法を用いて行った転位の運動特性を転位動力学法に入力可能な形でモデル化し、転位動力学法に実装することによって、転位の運動の結晶方位依存性や温度依存性を破壊靱性値評価において考慮することを可能にする。さらに、破壊靱性値評価の転位動力学解析に、照射や熱時効によって形成する析出物を入力し、その転位との相互作用を考慮することによって、析出物の形成による破壊靱性値への影響の評価を可能にする。また、有限要素法との連成解析による破壊靱性値評価を行うことで、曲げ応力など異なる負荷状態による破壊靱性値の評価を可能にする。

4. 参考文献

- (1) Ackland, G. J., et al., “Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron”, J. Phys., Vol. 16, S2629 (2004)
- (2) Osetsky, Y. N., et al., “An atomic-level model for studying the dynamics of edge dislocations in metals”, Model. Simul. Mater. Sci. Eng., Vol. 11, p. 427 (2003)