

オーステナイト鋼の 原子間ポテンシャル開発

板倉充洋

日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター

宮代聡

東京大学大学院 工学系研究科 原子力国際専攻

沖田泰良

東京大学 人工物研究センター

2012/01/20 東大柏キャンパス

研究の背景

- 原子力材料としてのオーステナイト(ステンレス鋼)
- 安全評価と設計に必要な物性値
- 計算科学による貢献
- 計算科学による貢献: 純金属の場合
- 計算科学による貢献: 合金の場合および課題

研究の詳細

- ポテンシャル開発の方針
- 電子構造計算
- 計算結果
- 計算結果のフィッティング
- 磁性の問題
- まとめ

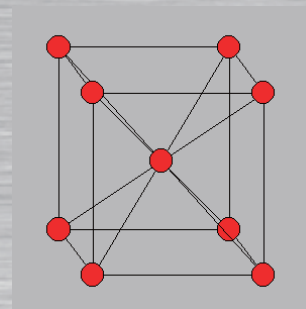
原子力材料としてのオーステナイト鋼(ステンレス)

構造材料：オーステナイトとフェライト

フェライト鋼：Fe+C (+Cr) BCC構造

強度・耐放射化

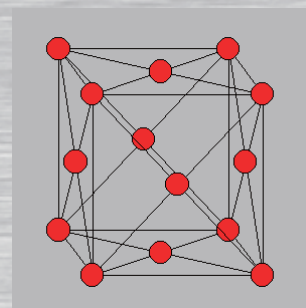
- 軽水炉 圧力容器
- 核融合炉



オーステナイト鋼：Fe+Cr+Ni +C FCC構造

耐蝕性・高温での安定性

- 軽水炉 炉内構造物(シュラウド等)
- 軽水炉 炉内配管
- 軽水炉 格納容器内張り



Cr:	BCC	
Fe:	低温 BCC	高温 FCC
Ni:	FCC	

低温

高温

安全評価・設計に必要な材料物性値

軽水炉材料の経年評価・耐震安全性評価

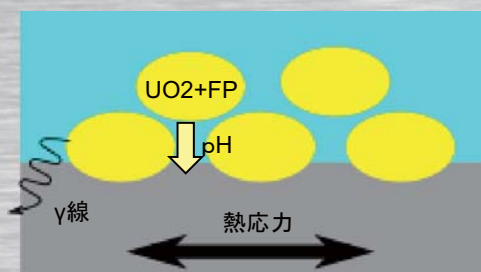
- 脆性遷移温度の上昇(フェライトのみ)
- 破断応力の低下・降伏応力の上昇
- 応力腐食割れ(SCC)発生・進展速度

新型炉の設計

- 高温・高照射条件でのクリープ・スウェリング特性

福島第一 格納容器下部

落下した燃料からの熱応力、γ線、溶出FPによるpH変化などに対する耐SCC性能評価



計算科学による貢献

実験結果の
理論的説明

検査結果に基づ
く経年変化予測

未知の条件下での物性予測
(実験条件のスクリーニング)

応力腐食割れ
進展速度

破断応力の低下・
降伏応力の上昇

クリープ・スウェリ
ング特性の予測

Cr原子の移動、水素・酸
素原子の移動(反応)

- 分子動力学
- 電子構造計算

照射によって生成される格子欠陥と
転位の相互作用

- 分子動力学
- 動的モンテカルロ法
- 転位動力学

計算科学による貢献

Cr原子の移動、酸素原子の移動(反応)

照射によって生成される格子欠陥と転位の相互作用

ミクロ

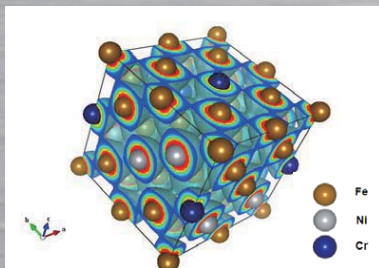
メゾ

電子構造計算

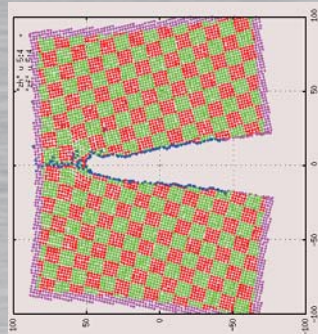
分子動力学

動的モンテカ
ルロ法

転位動力学



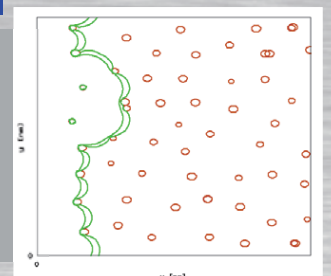
- 異なる元素間の相互作用
- 原子間ポテンシャル作成の基礎データ



- 照射カスケードによる点欠陥生成
- 点欠陥と転位の相互作用
- 破断に必要なエネルギー



- 点欠陥の拡散、集合



- 点欠陥分布の転位運動への影響
- 降伏応力

合金のモデル化が望まれる部分

研究の背景

- 原子力材料としてのオーステナイト(ステンレス鋼)
- 安全評価と設計に必要な物性値
- 計算科学による貢献
- 計算科学による貢献: 純金属の場合
- 計算科学による貢献: 合金の場合および課題

研究の詳細

- ポテンシャル開発の方針
- 電子構造計算
- 計算結果
- 計算結果のフィッティング
- 磁性の問題
- まとめ

ポテンシャル開発の方針

- 鉄クロム二元合金については様々な研究があるがFe+Cr+Niについてはほとんどない
- 出発点となるプラットフォームを作成することが重要

電子構造計算に基づき 原子間ポテンシャルを開発・改良していく

- 格子定数・弾性定数・積層欠陥エネルギー
- 格子空孔・格子間原子の生成エネルギー・移動障壁
- 格子欠陥クラスタの安定配置、エネルギー
- 表面エネルギー、転位のエネルギー、粒界面エネルギー

電子構造計算に基づき物理量を再現

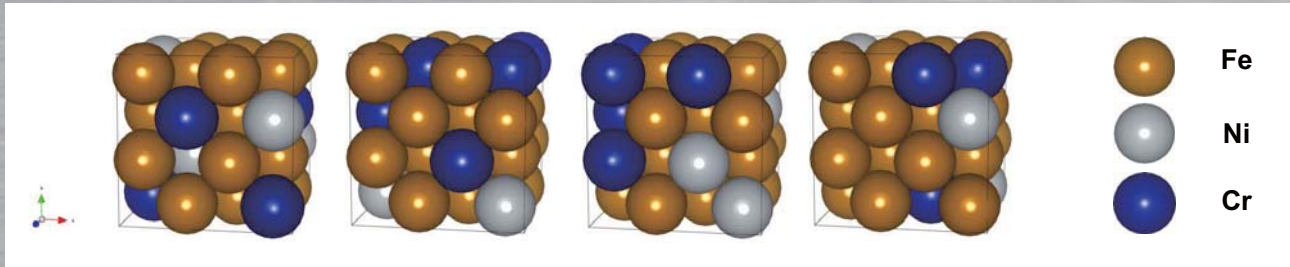
より複雑な状態を分子動力学で生成

その状態の電子構造計算を行う



電子構造計算

ランダムな合金配置を多数ケース計算



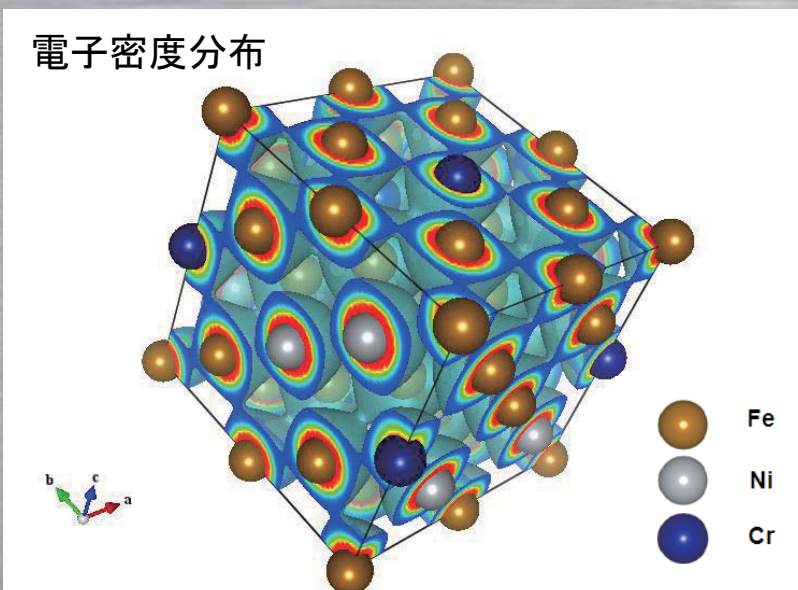
- Fe₂₃+Cr₅+Ni₄ 合計32原子 (Cr16% Ni 13%)
- Cr, Niの位置はランダムに選ぶ
- 量子計算コード VASP を使用
- 各配置のエネルギーと電子密度、安定構造を計算
- Fe, Cr, Niともに非磁性原子として扱う(後述)

まずは完全結晶に関する知見を得る

計算結果

電子構造、結晶構造とも
ほぼ完全なFCC構造

電子密度分布



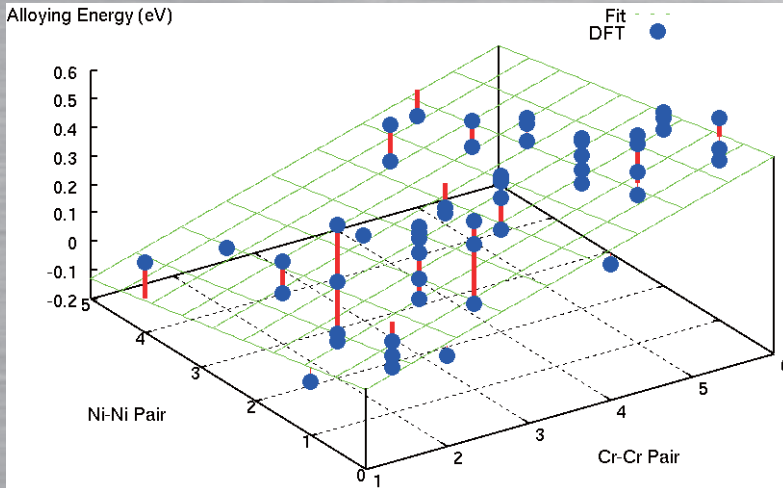
原子半径: Ni < Fe < Cr

Cr-Cr ペア: 反発
Ni-Ni: ペア: 引力

原子が格子定数の
2%程度移動

計算結果のフィッティング

全エネルギーをCr-Cr, Ni-Ni, Cr-Ni
近接ペアの数でFit



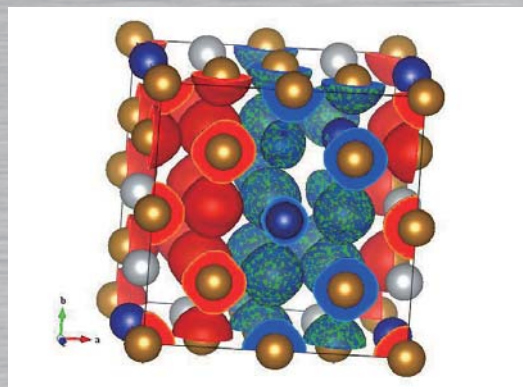
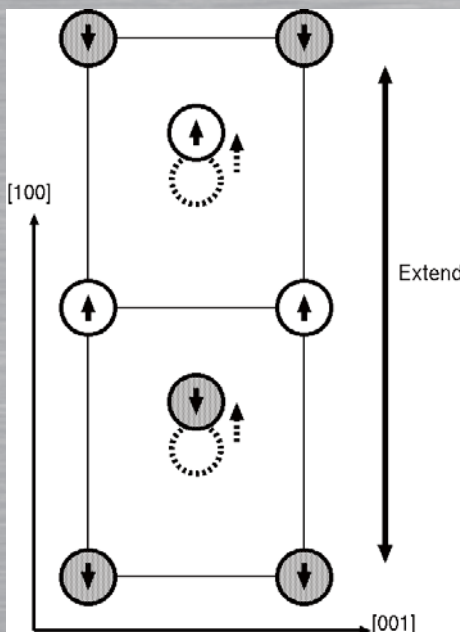
- Cr-Cr: +0.08(1) eV
- Ni-Ni: -0.04(1) eV
- Cr-Ni: -0.03(1) eV

- 全変動の75%を説明可能
- 信頼できるFittingには50ケース程度必要

溶質原子間の相互作用は 800K相当
完全ランダムな配置は現実的と言える

磁性の問題

数10K以下で磁性秩序が出現しFCC構造が不安定化



[100]方向に2格子周期の磁性構造
磁性周期方向に結晶が伸長

高温ではエントロピー効果でこのよ
うな対称性の破れは起こらない

常温では磁性の影響は小さいと考え無視する

まとめ

オーステナイト原子間ポテンシャルの用途

- 分子動力学・モンテカルロ計算を用い、耐蝕性を担うCr原子の応力・照射環境下での挙動を予測する

開発の現状

- 開発に必要な電子構造計算の計算規模を見積もった
(配置 × 数十ケース)
- ほぼ均一なFCC結晶とみなせる事が分かった
- 合金元素(Cr, Ni)同士の近接相互作用は弱く、完全にランダムな配置を用いて計算しても問題ないことが分かった

今後

- 徐々に複雑な配置を再現していき、最終的には転位と点欠陥の相互作用まで再現する