

分子動力学法を用いた非線形超音波成分のナノ構造依存性に関する定量化

molecular dynamics studies to evaluate the change in the non-linear ultrasonic component
caused by nano-structures

*森 承宇¹, 沖田 泰良¹, 板倉 充洋²

¹ 東京大学, ² 日本原子力研究開発機構(JAEA)

ナノ構造を検出する非破壊検査技術開発のために、分子動力学法を用いて完全結晶 Fe 中に欠陥や析出物を導入した際、非線形超音波成分の変化を定量化した。

Keywords : non-destructive inspection, lattice defect, acoustic nonlinearity parameter

1. 緒言

非線形超音波応答 (NLU) により、結晶性材料の劣化を検出する技術が様々な工学分野で用いられてきた。近年では、軽水炉圧力容器鋼の照射脆化を検出する技術への展開も図られており [1], NLU 変化と微細組織、及び機械的特性変化の対応を物理的メカニズムに基づき解明することが求められる。本研究では、圧力容器鋼の主成分である体心立方 Fe を対象とし、分子動力学 (MD) による NLU の定量化を目的とする。

2. 計算方法

本研究の MD 計算は LAMMPS [2] を用い、Fe 原子間ポテンシャルは [3] によって与えた。x [100] 86.7~8670 nm, y [010], z [001] 5.708 nm で y, z 方向周期境界, x 方向自由境界, 0K で常圧の完全結晶を設定した。これに対して、x=0 nm 原子面上の二層の原子に強制変位を与えることで正弦波を導入した。x=5708 nm を検出に設定し、原子面の重心変位時系列データをフーリエ変換 (FFT) 等の周波数解析を行うことにより、導入した周波数成分の振幅 A_1 と第二高調波の振幅 A_2 を定量化した。さらに以下の式から非線形パラメータ β を得た。

$$\beta = \frac{A_2}{8A_1^2 k^2 x} \quad k: \text{波数ベクトル}, \quad x: \text{波の伝搬距離}$$

3. 結果と考察

図 1 に完全結晶 Fe に 500GHz の超音波を導入したときの時系列データと FFT による周波数解析結果を示す。完全結晶 Fe の β は 2.58 であり、この値は周波数 5~500GHz の範囲で一定であった。また、この系に原子空孔や不純物原子 Cu を導入した場合、 β は減少し、その減少率はサイズによって異なることが明らかとなった。

参考文献

- [1] K. H. Matlack et al., J. Appl. Phys., 111, 054911 (2012)
- [2] S. Plimpton, J. Comp. Phys. 117, 1. (1995).
- [3] G. Bonny et al., Philosophical Magazine, 89(34-36) (2009)

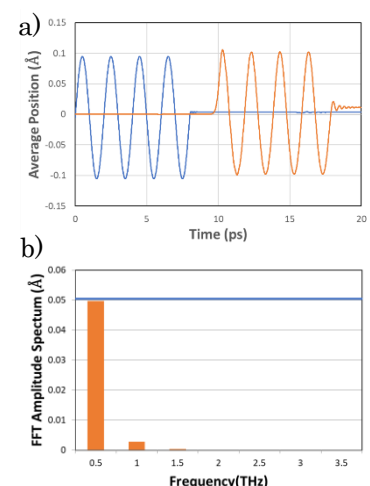


図 1 完全結晶の 500GHz 超音波応答
a) 時系列データ b) 周波数解析結果

*Syou Mori¹, Taira Okita¹, and Itakura Mitsuhiro²

¹Univ. of Tokyo, ²Japan Atomic Energy Agency (JAEA)