

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 (3)

molecular dynamics studies to evaluate the change in the non-linear ultrasonic component caused by nano-structures (3)

*森 承宇¹, 松田 那由多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)

ナノスケールの材質変化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 中に原子空孔や銅原子を導入した際の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, non-reflective boundary

1. 緒言

非線形超音波応答 (NLU) により、結晶性材料の材質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いるが^[1]、科学的根拠に基づいた検査技術構築のためには、非線形成分変化と微細組織変化の対応を原子挙動に基づいて解析することが求められる。特に分子動力学 (MD) はその強力な手法である^[2]が、計算の都合上導入可能な波長が実験で用いる波長より 4 桁以上短い。本研究では無反射境界を用いて計算速度を 4000 倍にまで高速化し、検査で用いられる波長と同オーダーの波長でナノ構造に起因する NLU 信号の変化を定量化することを目的とする。

2. 計算方法

本研究の MD 計算は LAMMPS^[3]を用い、Fe 原子間ポテンシャルは^[4]によって与えた。x[100] 88.9nm, y[010], z[001] 57.08nm 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=0nm 原子面上の原子二層を正弦波で強制振動させることで弾性波を導入した。同位相、逆位相の超音波導入時の、x=28.5nm 原子面の重心変位時系列データを取得した後、それらの平均値をフーリエ変換 (FFT) 等の周波数解析を行うことにより、第二高調波の振幅 A_2 を定量化し、以下の式に代入することで非線形パラメータ β を得た。

$$\beta = \frac{A_2}{8A_1^2 k^2 x}$$

k : 波数ベクトル、 x : 波の伝搬距離

従来手法では系の x 方向の長さを反射が起こらない程度にまで伸ばし、得られる時系列データから β を求めた (図 1a)。

無反射境界は $x=57.1\text{nm}$ からのバッファ

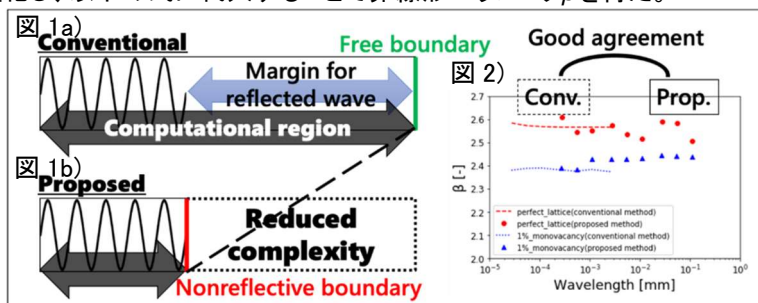


図 1 従来手法と提案手法の概要 図 2 二手法の β の周波数依存性

領域内のすべての原子の変位と速度を定期的にリセットし、検出位置での反射波の影響を排除することで実現した。提案手法ではこれを用いて計算を高速化し、導入波長を 0.11mm (周波数 50MHz) まで伸ばした。

3. 結果と考察

従来の MD 法及び提案手法を用いて、完全結晶 Fe 及び 1%の単空孔を加えた系における β を求めた。その周波数依存性を図 2 に示す。提案方法によって得た β の値は、二つの結晶の双方において従来の MD 法で得られた値とよく一致した。さらに、二つの結晶の β に有意な周波数依存性は見られないことを明らかにした。提案手法はナノスケールで生じる微細組織変化を検出するシミュレーションを可能とし、実験に対応するデータを提供しうる。

参考文献

- [1] K. H. Matlack et al., J. Appl. Phys., 111, 054911 (2012) [2] W. Setayawan et al, J. Appl. Phys., 124, 035104 (2018)
[3] S. Plimpton, J. Comp. Phys.117, 1. (1995). [4] G. Bonny et al., Philosophical Magazine, 89(34-36) (2009)

*Syou Mori¹, Nayuta Matsuda¹, Taira Okita¹, and Itakura Mitsuhiro²

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