

照射誘起欠陥に対する非線形超音波混合応答の分子動力学法による定量化

Quantification of nonlinear ultrasonic mixing response to radiation-induced defects using molecular dynamics

*松田 那由多¹, 森 承宇, 沖田 泰良¹

¹東京大学

ナノオーダーの微細組織形成を検出する非破壊検査技術を科学的根拠に基づき構築するために、分子動力学法を用いて結晶欠陥を導入した系の混合周波数応答変化を定量化した。

キーワード：非破壊検査，格子欠陥，音響非線形パラメータ

1. 緒言

結晶性材料内部に形成する転位，析出物等のナノ組織を非線形超音波（NLU）応答により検出する技術は，軽水炉圧力容器鋼の照射脆化[1]等，様々な分野で適用が試みられてきた．また，NLUで頻繁に用いられてきた第2次高調波発生（SHG）よりも信頼性・再現性が高いことが期待される周波数混合も近年提案されている[2]．科学的根拠に基づいた非破壊検査技術の構築には，ナノ組織と信号変化の関係を物理メカニズムに基づき解析することが求められる．特に，分子動力学（MD）法は原子レベルの挙動から同関係を把握することができる強力な手法である[3]．本研究では，MDを用いて周波数混合とSHGのNLU応答の整合性を検証し，Feを対象とした完全結晶，並びに結晶欠陥導入時の混合周波数応答を定量化することを目的とする．

2. 計算方法

MD計算はLAMMPS[4]を用い，Fe原子間ポテンシャルは[5]によって与えた． $x[100]$ 217nm, $y[010]$ 5.7nm, $z[001]$ 5.7 nm で y, z 方向周期境界， x 方向自由境界，0K で常圧のセルを設定し， $x=0$ nm 原子に時間強制変位を与えることで周波数の異なる2つの弾性波（周波数 f_1, f_2 ，振幅 a ）を導入した．セル内には，0～1%の濃度で原子空孔をランダムに分布させた．波動伝搬後，原子面の変位時系列データに対して，それらの平均値を高速フーリエ変換等の周波数解析を行うことにより，周波数 $f_1 \pm f_2$ 成分の振幅 $a_{\pm}$ を定量化し，非線形パラメータ $\beta_{\pm}$ を以下の式によって求めた．

$$\beta_{\pm} = \frac{a_{\pm}}{4a^2 k_1 k_2 x_D} \quad k_1, k_2: \text{導入周波数の波数}, x_D: \text{波の伝播距離}$$

3. 結果と考察

弾性論では β は周波数や伝播距離に依存しない一方，本計算では周波数・伝播距離の増大に伴って減衰が大きくなることがわかった．また，各々の伝播距離での振幅 a を用いることにより，減衰を補正できることも明らかとなった（図1）．更に，SHG，混合成分の各々の手法で算出される β は良い一致を示した．これらの結果から，ナノ組織検出性を有する非破壊検査技術に対する周波数混合の高い適用可能性が期待できる．

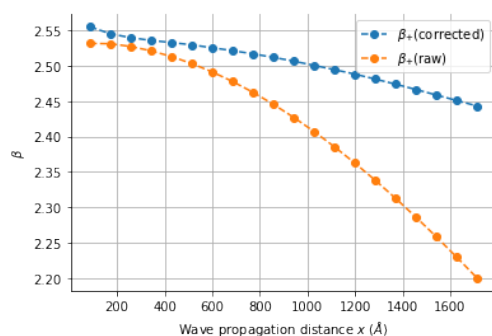


図1 非線形パラメータ β の伝播距離依存性

参考文献

- | | |
|---|--|
| [1] K. H. Matlack et al., J. Appl. Phys., 111, 054911 (2012). | [2] N. Li et al., NDT & E Int., 79, 63 (2016). |
| [3] W. Setayawan et al., J. Appl. Phys., 124, 035104 (2018). | [4] S. Plimpton, J. Comp. Phys., 117, 1 (1995). |
| [5] G. Bonny et al., Philos. Mag., 89, 34 (2009). | [6] S. Mori et al., Materialia, 22, 101371 (2022). |

*Nayuta Matsuda¹, Syou Mori, and Taira Okita¹

¹Univ. of Tokyo