

成果報告3

「クリープ特性評価に向けた 原子スケールシミュレーションの開発」

原 祥太郎

平成28年2月24日

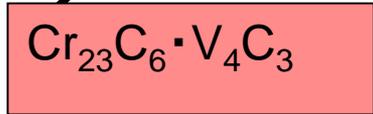
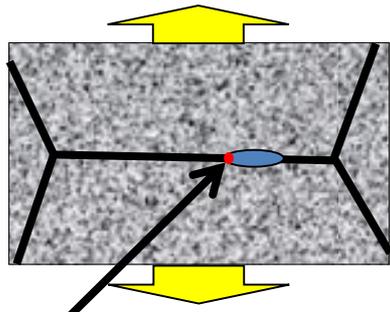


背景

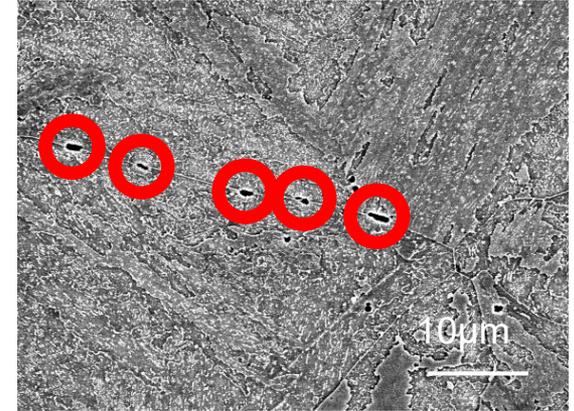
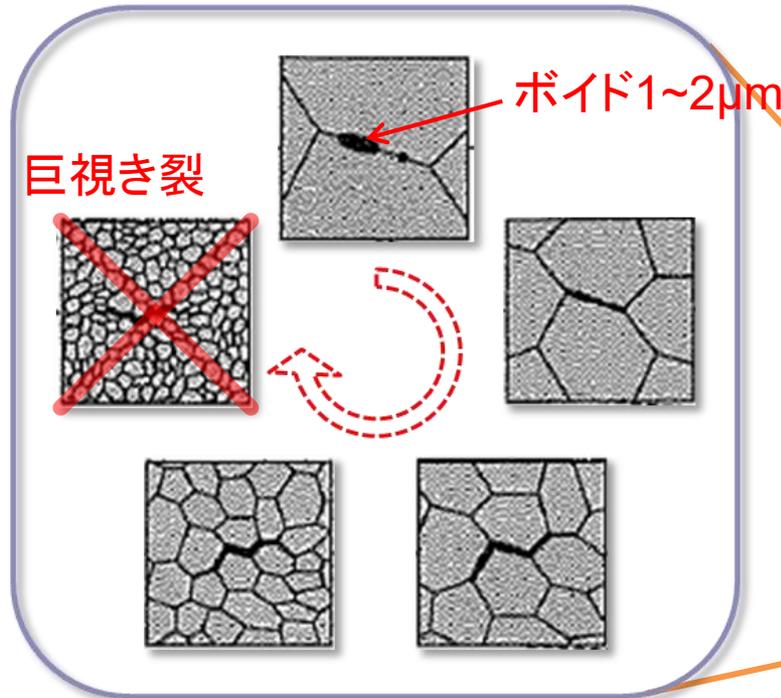
➤ クリープポイド

空孔の拡散によって結晶粒界にできる孔

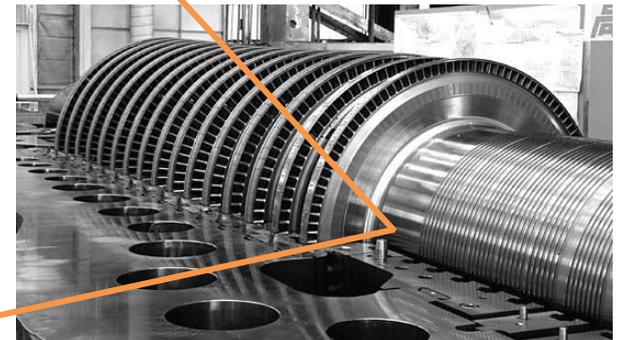
成長 → 連結 → 微小き裂 → 巨視き裂 → 破壊



応力軸に垂直な
粒界で発生

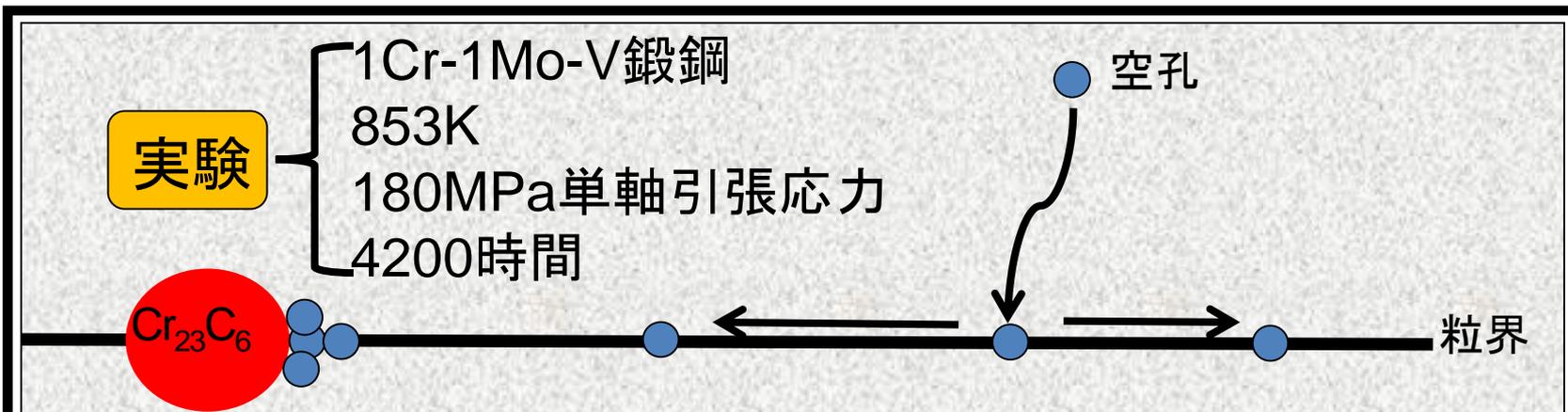


片岡,2010



クリープボイド発生機構に関する先行研究

※中村馨, 緒方隆志, クリープボイド発生観察によるボイド発生モデルの開発, 電力中央研究所, 研究報告: 2009.



実験的考察

- 空孔が粒界に進入
- 応力軸に垂直な粒界で拡散が促進
- 粒界上の炭化物近傍で空孔凝集
- ある一定以上の大きさで実観測可

ミクロスケールからの
考察・可視化が必要



ボイド発生

Ni基超合金のクリープ変形に関する先行研究

高温クリープの律速過程:

Ni/Ni₃Al界面近傍での転位上昇運動

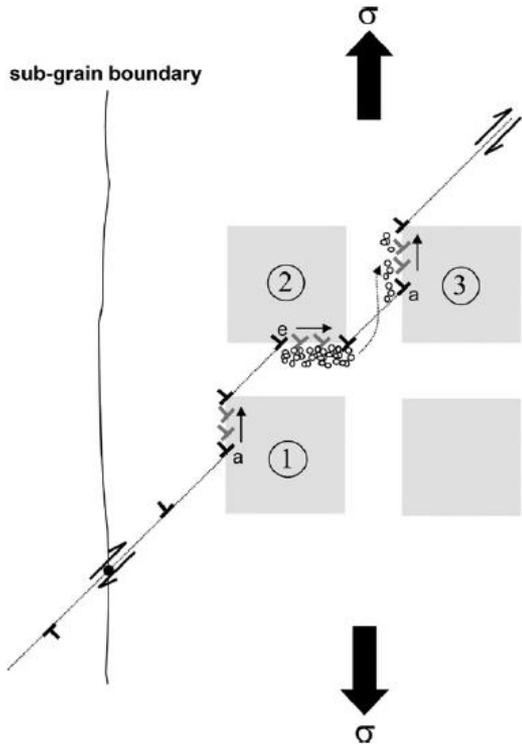
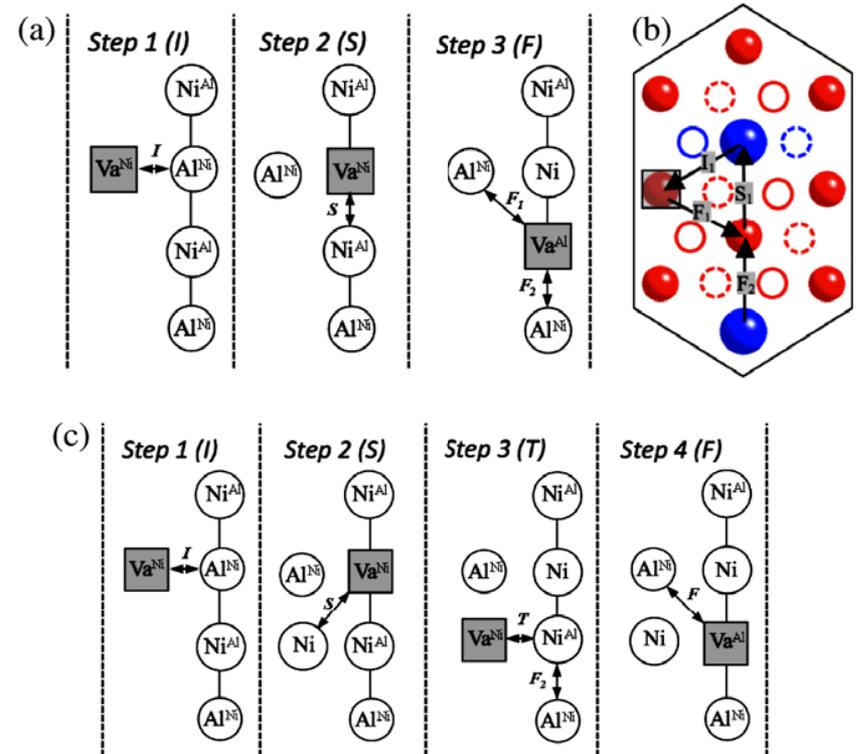


Fig. 1. Basic geometry of climb/glide events in a nickel-based single crystal superalloy.

Z. Zhu et al. Acta. Mater. (2012)

中温クリープの律速過程:

Ni₃Al内での拡散による原子再配置



L. Kovarik et al. Prog. In Mater. Sci. (2009)

本プロジェクトにおける研究課題

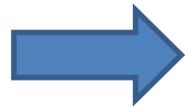
クリープ変形機構の解明に向けて:

空孔を媒介とした粒界拡散機構

空孔が凝集する機構

空孔と転位の相互作用機構

を考察・可視化できるミクロ計算モデルの提示を目指す



「長時間スケールで生じる原子輸送問題」の解決

本分野における現状

マイクロ計算手法

扱える材料
(原子間ポテンシャル)

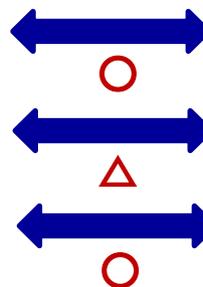
従来報告

現象

分子動力学

コード開発状況: ○

Ni3Al: ○
CrMoV: △



空孔媒介の粒界拡散

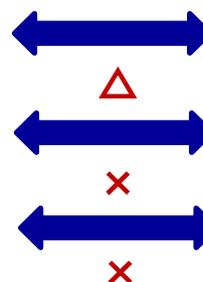
空孔凝集機構

空孔と転位の相互作用

加速分子動力学

コード開発状況: △

Ni3Al: ○
CrMoV: ?



空孔媒介の粒界拡散

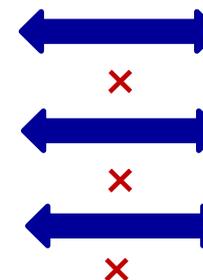
空孔凝集機構

空孔と転位の相互作用

拡散分子動力学

コード開発状況: ×

Ni3Al: ○
CrMoV: ?



空孔媒介の粒界拡散

空孔凝集機構

空孔と転位の相互作用

Ni3Al系は既存
ポテンシャルあり

CrMoV系は
別グループで開発段階

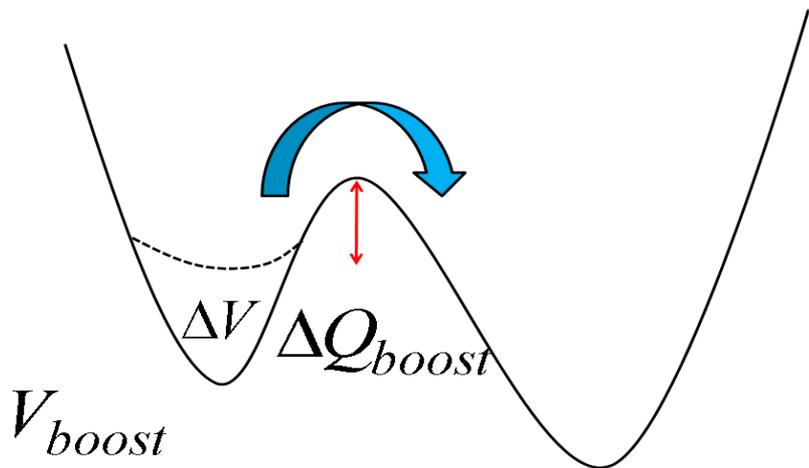
扱える
時間
スケール



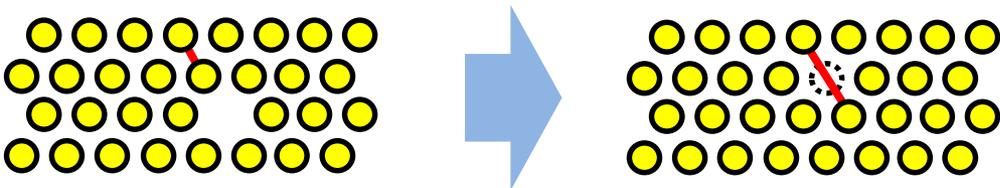
空孔媒介の粒界拡散解析

加速分子動力学法

ポテンシャル曲面のlocal minimumに ΔV を加え、系を安定状態から追い出し、現象を加速化

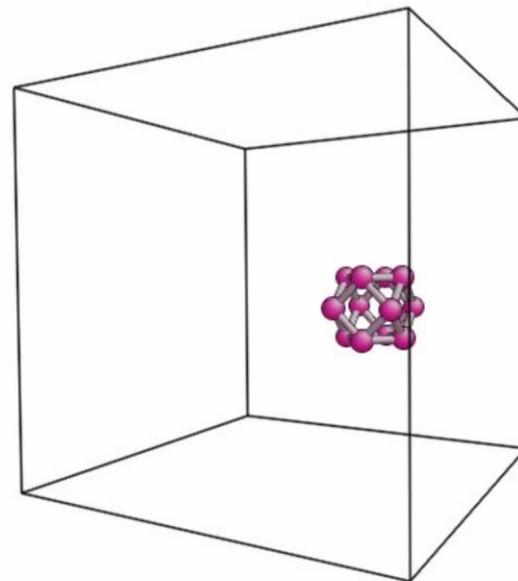


各原子の結合長に基づいて ΔV を決定

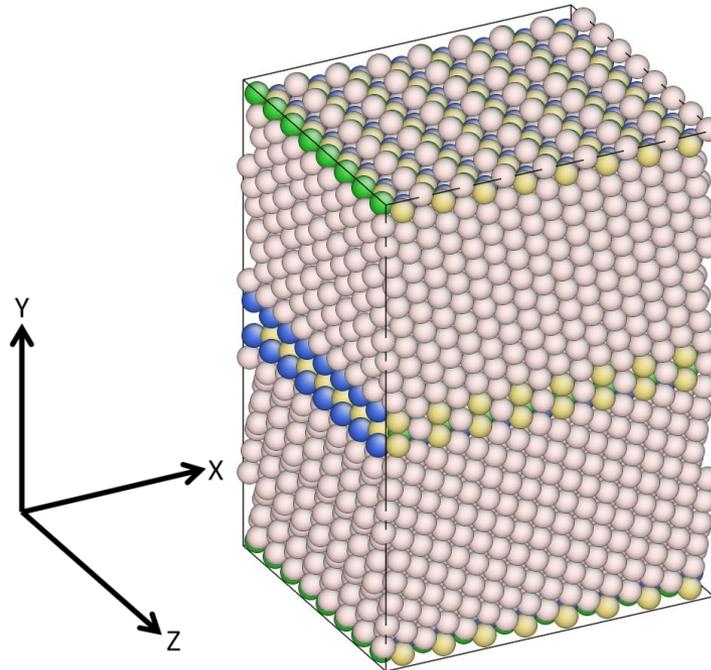


ターゲット結合を伸ばす
方向に力が加わる

バルク中の空孔拡散



粒界拡散解析例

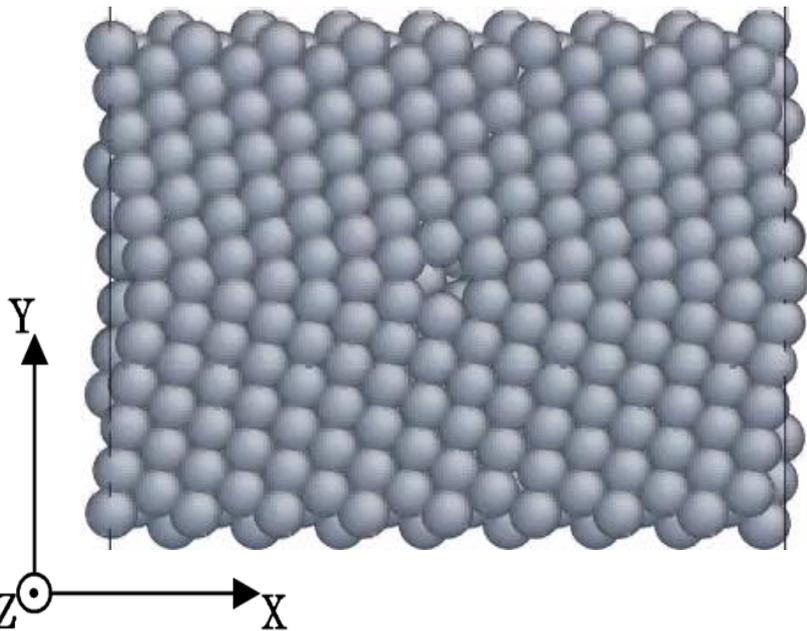


$\Sigma 11$ 傾角粒界

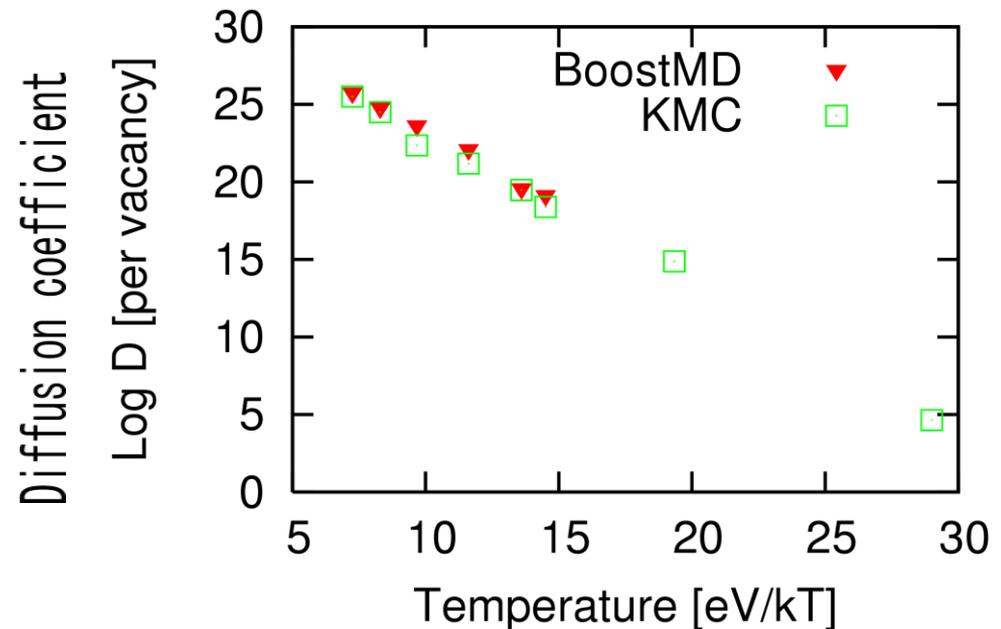
Fe原子数 5504個
セルサイズ (37.8Å, 53.3Å, 32.7Å)
Misorientation 129.5°
エネルギー的に安定な粒界面

空孔は一個のみ (離合は考えない)

Fe $\Sigma 11$ 傾角粒界での空孔拡散



1空孔入れた場合の空孔の軌跡

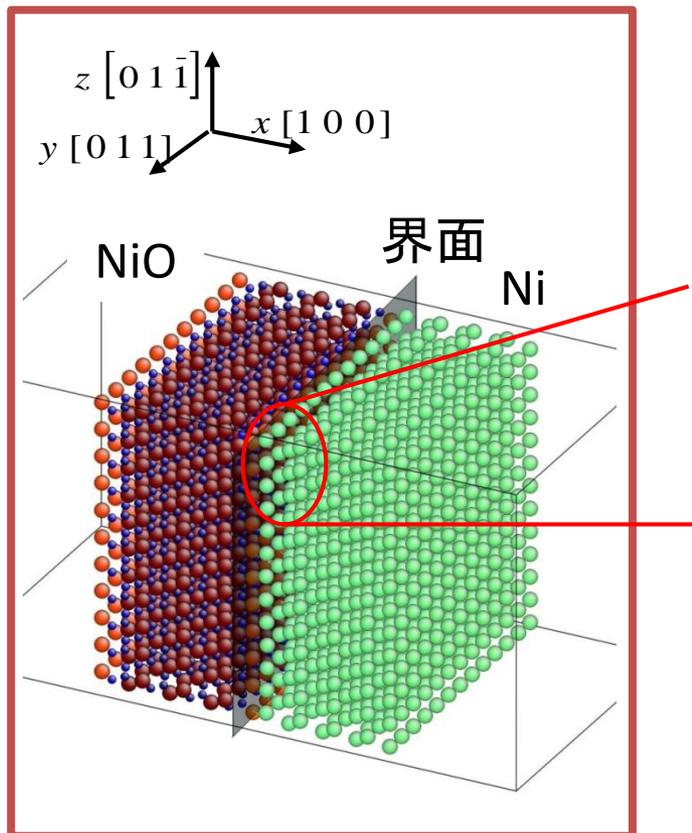


実験環境に近い温度での面内自己拡散移動エネルギーは $0.93 \pm 0.04 \text{ eV}$

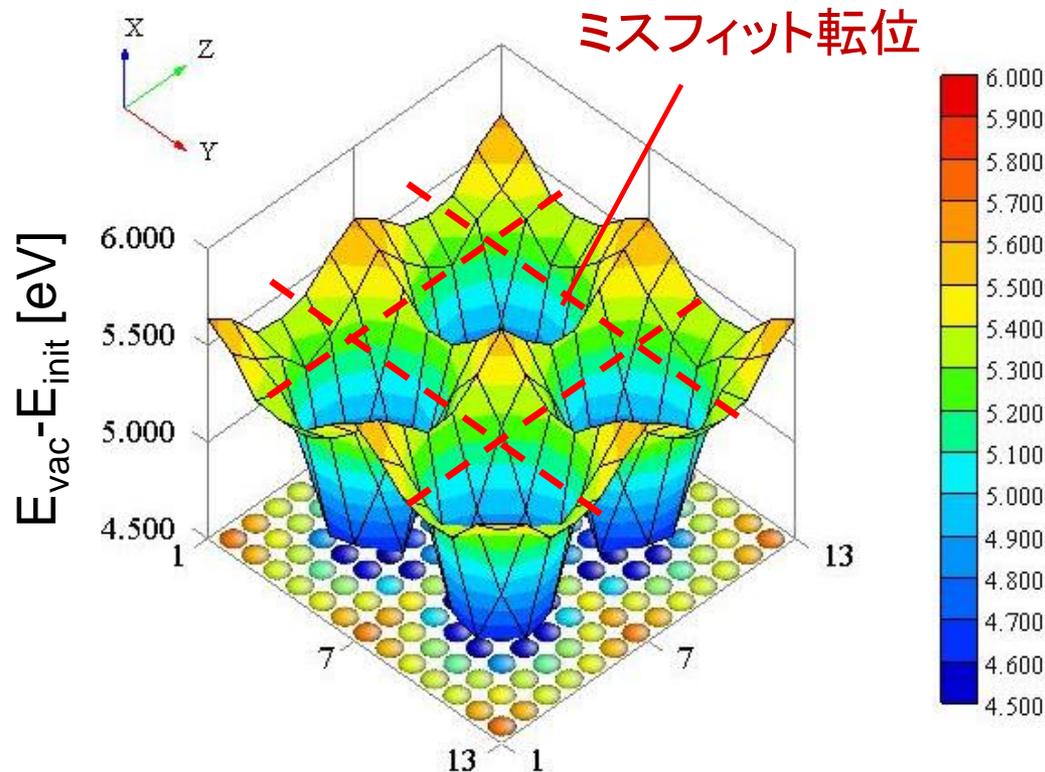
➤ Ni₃Alなど合金系への適用, 様々な粒界構造への適用が課題

界面上での空孔凝集解析

Ni/NiO界面



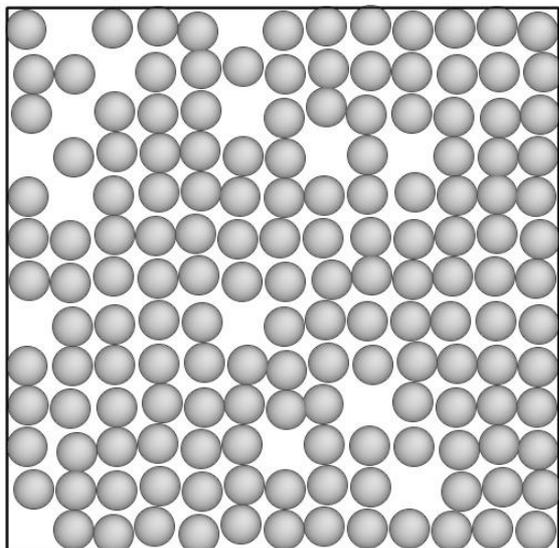
界面における空孔の安定性評価



ミスフィット転位の存在により、空孔安定性が約1.0[eV]変化.

Ni/NiO界面上での空孔凝集

空孔15個をランダムに配置

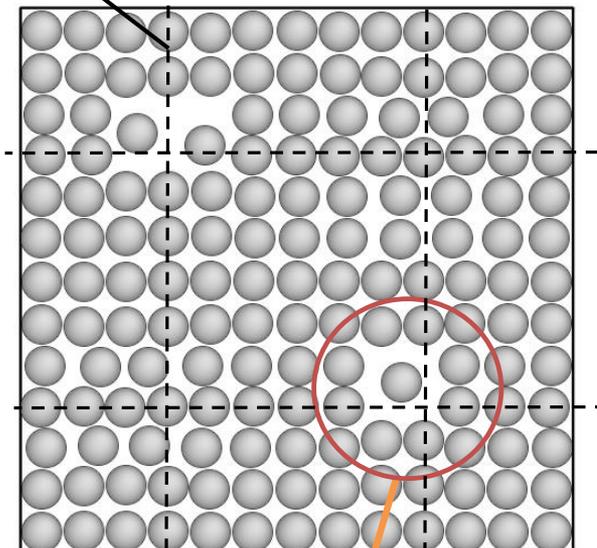


分子動力学計算

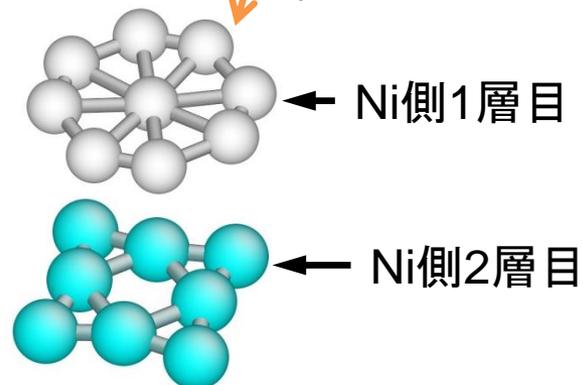


$T=500[\text{K}]$
 $1[\text{step}]=0.54[\text{fs}]$

ミスフィット転位

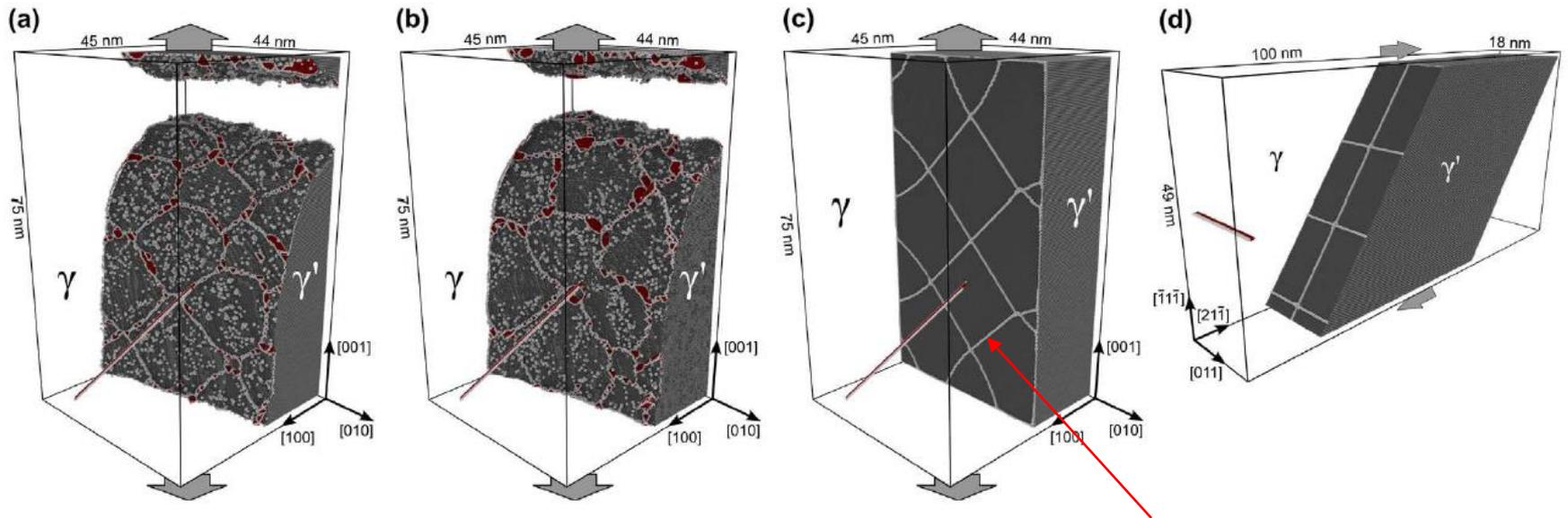


Ni空孔が**ミスフィット転位交点近傍**へ集まり、ミスフィット転位とNi空孔が相互作用し、交点近傍における原子構造が変化



Ni/Ni₃Al界面

A. Prakash et al., Acta Mater. (2015)



ミスフィット転位

拡散分子動力学コードの開発

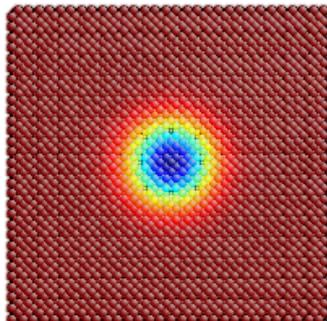
拡散分子動力学法

J. Li et al., PRB (2011)

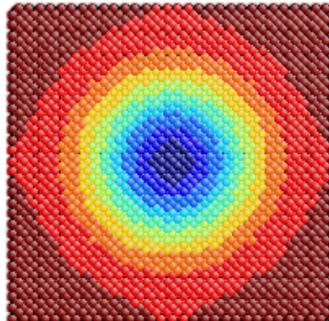
- ✓ 原子を熱でゆらさず、平均場近似
- ✓ 各原子(サイト)は0から1の間の濃度を持つ(0:空孔, 1:完全に原子)
- ✓ 各原子サイトの濃度を拡散方程式に従い時間発展を解く

空孔濃度分布の時間変化

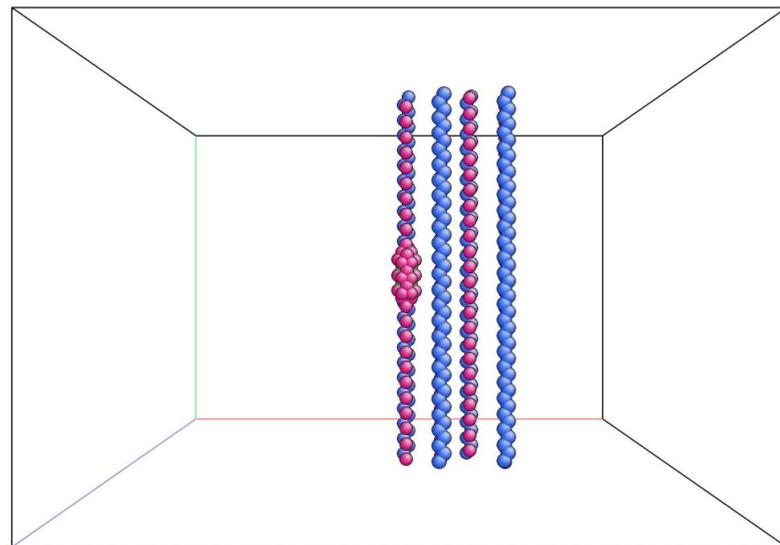
t=10



t=40



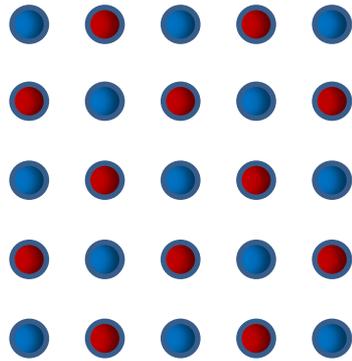
転位上昇運動の解明: S. Sakar et al., PRB (2012)



- ✓ 応力勾配下や欠陥が存在する中での空孔挙動(物質輸送)が拡散タイムスケールで評価可能

合金系へのコード拡張

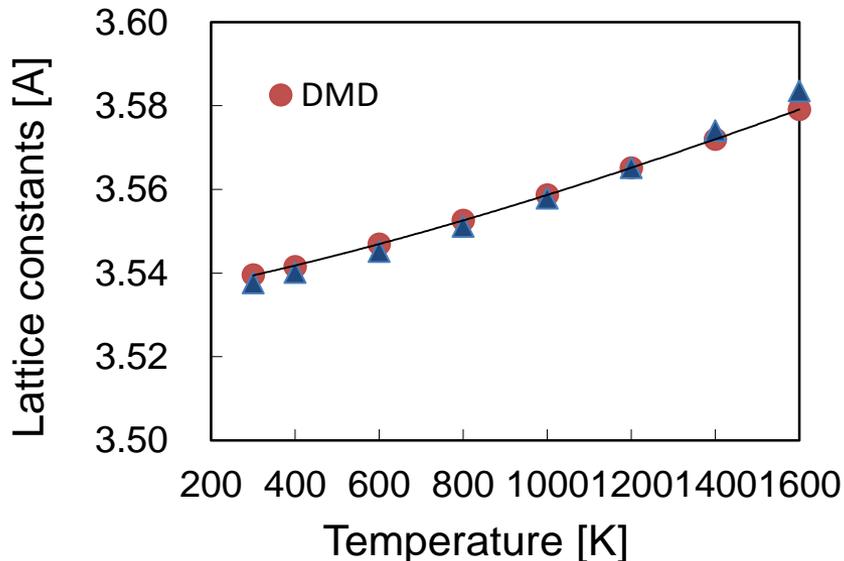
二元系合金への拡張



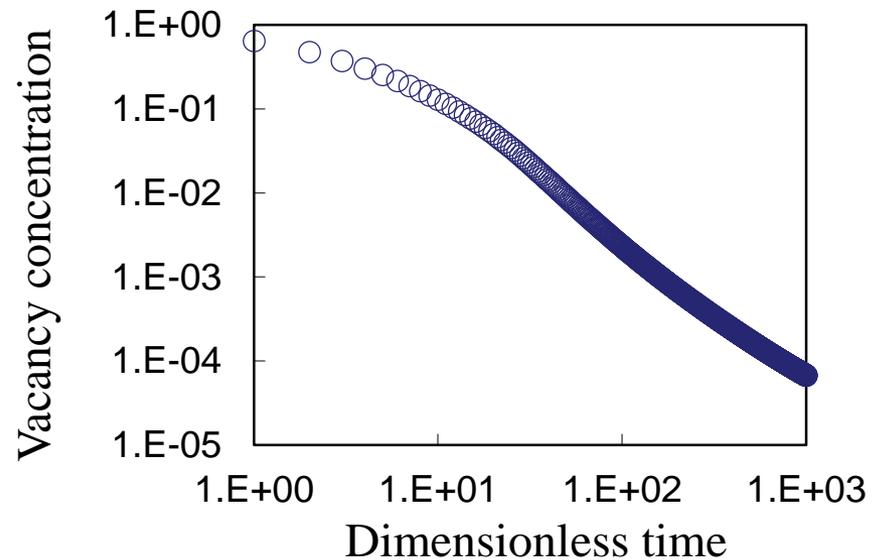
$$F_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} W_{ij} + \sum_{i=1}^N E_i^d$$

$$+ \frac{3}{2} k_B T \sum_{i=1}^N \left[c_i^A \left\{ \ln \left(\frac{\alpha_i \Lambda_A^2}{\pi} \right) - 1 \right\} + c_i^B \left\{ \ln \left(\frac{\alpha_i \Lambda_B^2}{\pi} \right) - 1 \right\} \right]$$

$$+ k_B T \sum_{i=1}^N (c_i^A \ln c_i^A + c_i^B \ln c_i^B + c_i^V \ln c_i^V)$$



Ni₃Al合金の格子定数の有限温度依存性を再現



Ni₃Al合金 (10800サイト, 1200 K)での初期空孔配置サイトの空孔濃度変化

まとめ

- 分子動力学法, 加速分子動力学法のNi/Ni₃Al系への適用に着手
- 拡散分子動力学法の基礎開発と合金系への拡張を実施

今後の予定

- 分子動力学シミュレーションによるNi₃Al転位上昇運動への解明
- 分子動力学シミュレーションによるNi₃Al系の空孔拡散機構の解明