

第一原理計算に基づく軽水炉圧力容器鋼のモデリング

Modeling of Light Water Reactor Pressure Vessel Steel Based on First-Principles Calculations

*王 抱朴¹、末吉 功汰¹、祝 梁帆¹、CHEN Yuting¹、森下 和功¹、福元 謙一²、岩切 宏友³

¹京都大学, ²福井大学, ³琉球大学

Fe-Mn-Ni-Si 系材料における軽水炉圧力容器鋼の照射損傷挙動を解明するためには、高精度な原子間ポテンシャルの構築が求められる。本研究では、そのために必要な多様な構造に対して第一原理計算を行い、エネルギーなどの物理量を取得した。機械学習に用いるデータセットとしての多様性および網羅性を評価した。

キーワード：軽水炉圧力容器鋼, 照射損傷, 第一原理計算

1. 緒言

軽水炉圧力容器鋼は、原子炉の中心構造材として、極めて過酷な中性子照射環境下においても長期間にわたる高い構造健全性が要求される材料である。その照射環境では、材料内部にナノスケールの欠陥や析出物が形成され、機械的特性の劣化、すなわち脆化や硬化といった現象を引き起こすことが知られている。これらの照射損傷挙動は原子レベルで進行するため、そのメカニズムを理解し、将来的な健全性評価や寿命予測に繋げることが重要な課題となっている。中でも Fe-Mn-Ni-Si 系合金は、軽水炉鋼に含まれる代表的な元素を含む多元系であり、照射下における微細構造変化や力学的性質の変動といった観点から注目されている。照射脆化の理解を深める上で、この系に対する原子レベルのシミュレーションの有用性が期待されている。このようなシミュレーションを実行するためには、分子動力学 (Molecular Dynamics, MD) や格子キネティックモンテカルロ (Kinetic Lattice Monte Carlo, KLMC) といった手法が有効であるが、それらの計算には対象材料に適した高精度な原子間ポテンシャルが必要不可欠である。特に、近年の機械学習技術の発展に伴い、注目されているニューラルネットワークポテンシャル (Neural Network Potential, NNP) は、第一原理計算に匹敵する精度と高い計算効率を両立する点で有望視されている。

しかしながら、NNP の性能はその学習に用いるデータの質と多様性に大きく依存しており、信頼性の高い第一原理計算に基づく学習データの整備が不可欠である。本研究では、Fe-Mn-Ni-Si 系材料を対象とし、密度汎関数理論 (Density Functional Theory, DFT) に基づく第一原理計算により、NNP 構築に資するポテンシャルエネルギー、原子間力等のデータを系統的に取得することを目的とする。得られたデータセットは、今後の研究において NNP を構築し、それを MD や KLMC シミュレーションに適用することで、照射脆化を含む材料特性変化の予測・評価を可能とするための基盤情報として活用されることが期待される。

2. 計算方法と結果

本研究では、VASP コード[1, 2, 3]を用いて Fe-Mn-Ni-Si 系材料に関する第一原理計算を実施した。初期検証として、凝集エネルギーと格子定数などの基礎物性、および欠陥形成エネルギーなどの欠陥物性を算出し、既存の実験値や他の計算値との比較を通じて計算の妥当性を確認した。その後、Fe-Mn-Ni-Si 系におけるランダム固溶構造や空孔・格子間原子を含む欠陥構造、歪み・体積変化を伴う構造など、多様な照射損傷に対して構造のエネルギーおよび原子間力を系統的に取得し、機械学習に用いるデータセットを構築した。得られたデータは、対称性関数値の分布図による可視化を通じて、データセットのカバレッジ確認にも活用している。当日は、それらの可視化結果についても併せて報告する。

参考文献

[1] Kresse G., et al., Comput. Mater. Sci., 6 (1996) 15. [2] Kresse G., et al., Phys. Rev. B, 54 (1996) 11169.

[3] Kresse G., et al., Phys. Rev. B, 59 (1999) 1758.

*Baopu Wang¹, Kota Sueyoshi¹, Liangfan Zhu¹, Yuting Chen¹, Kazunori Morishita¹, Kenichi Fukumoto² and Hiroto Iwakiri³

¹Kyoto Univ., ²Fukui Univ., ³Ryukyus Univ.