

平成 30年 1月 17日

若手研究者海外挑戦プログラム報告書

独立行政法人 日本学術振興会 理事長 殿

受付番号 201780248

氏名 早川 頌

(氏名は必ず自署すること)

若手研究者海外挑戦プログラムによる派遣を終了しましたので、下記のとおり報告いたします。
なお、下記記載の内容については相違ありません。

記

1. 派遣先: 都市名 オークリッジ (国名 米国)
2. 研究課題名 (和文) : 微細組織変化に基づく原子炉構造材料の機械的特性変化予測手法構築に関する研究
3. 派遣期間: 平成 29年 9月 20日 ~ 平成 29年 12月 19日 (91日間)
4. 受入機関名・部局名: オークリッジ国立研究所・材料科学技術部門
5. 派遣先で従事した研究内容と研究状況 (1/2 ページ程度を目安に記入すること)

派遣されたオークリッジ国立研究所 (ORNL: Oak Ridge National Laboratory) では主に2つのことを行なった。1つ目は先方のグループが開発した On-the-fly kinetic Monte Carlo (kMC) の一種である Self-evolving atomistic kinetic Monte Carlo (SEAKMC) の高速化アルゴリズムの開発、そしてもう一つは開発した高速 SEAKMC の、照射下結晶欠陥集合体挙動のシミュレーションへの適用である。

一つ目の高速化手法に関して、本研究においては SEAKMC アルゴリズムの一番のボトルネックである活性化過程探索部分に注目した。On-the-fly kMC では通常、そのステップにおいて発生し得る活性化過程は各ステップにおいて逐一導出するが、これは多くの場合非常に計算コストが高い。SEAKMC においては活性化過程探索範囲を注目する領域のみに制限することにより計算コストの削減を実現しているが、それでも比較的大きな結晶欠陥のシミュレーションを試みる場合には計算時間が膨大になってしまう。そこで我々は、活性化過程探索を予測に基づき行なう手法を導入することで、最大で 1000 倍程度の効率を有する高速化 SEAKMC の開発に成功した。

二つ目の照射下結晶欠陥集合体挙動のシミュレーションに関して、本研究では、原子論的取り扱いが必要とされる一方で発生時間スケールが分子動力学計算のそれを優に超える BCC 鉄中の自己格子間原子集合体の保存的上昇運動のシミュレーションを行なった。この運動自体は従来重要性が指摘されて来っており、その数値モデルも多く開発されてきたが、その多くはモデル簡略化のための仮定に基づく不完全なものであった。そこで我々は On-the-fly kMC の一種である SEAKMC を用いることにより、発生し得る物理現象をそのまま模擬した保存的上昇運動のシミュレーションに成功した。

6. 研究成果発表等の見通し及び今後の研究計画の方向性 (1/2 ページ程度を目安に記入すること)

本滞在中に得られた研究成果は、さらなる進展の下、3つに分けて論文を執筆予定である。一つ目の論文では、SEAKMC 高速化アルゴリズムに関するものである。この論文では高速化アルゴリズムの詳細とベンチマーク計算に集中した議論を展開する。二つ目の論文では、BCC 鉄中の自己格子間原子集合体の保存的上昇運動のメカニズムに関する内容を執筆する。この論文では、保存的上昇運動発生の支配プロセスである、本研究で発見した新原子拡散メカニズムに関する知見等をまとめる。これら知見は、解析的モデルや通常のkMCをベースとしたモデルでは得ることができないものであり、非常に学術的価値が高いものである。三つ目の論文では、温度・集合体サイズを変えて保存的上昇運動の定量化を行なうことにより、運動の活性化エネルギーとその集合体サイズ依存性を議論する。これら内容は、照射下微細組織発達のマルチスケールモデリングに対して物理メカニズムに基づいた精確なパラメータを与え、他の研究の発展にも大きく貢献するものである。

今後の研究計画の方向性として、FCC 鉄における保存的上昇運動への拡張を思案している。FCC 金属においては、転位の拡張現象を考慮する必要があるが、それに伴う原子の転位縁上の拡散を考え場合これは非常に複雑な現象と言え、通常のkMCベースのモデルで再現するのは非常に困難である。しかし事前に発生イベントを予測する必要がなく、複雑な現象も模擬可能な SEAKMC を用いることによりこのようなシミュレーションは可能となる。

また、本滞在中に開発した高速化 SEAKMC は保存的上昇運動に対してのみではなく、他のあらゆる現象にも適用可能であり、現在カスケード損傷シミュレーションへの適用も思案している。当グループは以前カスケード損傷の分子動力学シミュレーションを行なったが、計算時間スケールの制約により、カスケード直後の残存欠陥の評価しかできなかった。SEAKMC を用いることにより、より長い時間スケールにおける欠陥挙動の評価を行なう予定である。

7. 本プログラムに採用されたことで得られたこと (1/2 ページ程度を目安に記入すること)

本プログラムに採用されたことにより、当分野において世界的に著名な研究所で研究を行なう機会を頂いたが、これは非常に価値のある経験となった。まず一つ感じたことは、周囲の研究者の知識・研究レベルの高さだった。世界的に名の通った研究所ということで、各国からの多くの優秀な研究者が働いていたが、そのような環境の中で研究を進め、議論をすることは困難も多かったが、非常に刺激になった。困難な環境に身を置くことで、多くのことを吸収できたように思う。また、英語でディスカッションを行なう能力に関しても成長したように思う。科学において英語は共通言語であり、今後国際的に研究者として活躍するにあたって英語の習得・使用は必須であるが、本滞在はそのための非常に良いトレーニングになった。また、当分野において著名な研究者である Y.N. Osetskiy 博士に Host Researcher になって頂き、滞在中多くの指摘・アドバイスを頂いたことも非常に貴重な経験だった。同博士の豊富な知識・経験に基づくアドバイスは非常に的確であり、常に私が行なう研究を良いものにしてくれた。

上記経験は多くの人々の支援があってこそのものだと認識している。本滞在実現に関わって下さった皆様、私を受け入れて下さった Y.N. Osetskiy 博士、そしてこのプログラムを提供して頂いた日本学術振興会に感謝したい。