ジルコニウム中溶質元素の第一原理計算

First-princilpes study of solute elements in Zirconium

*板倉　充洋 [1]，沖田 泰良 [2]
[1] 原子力機構，[2] 東京大学

ジルカロイ燃料被覆管における照射損傷・照射成長について、照射欠陥と鉄・クロムなどの溶質元素の相互作用について第一原理計算を用いて評価する。

キーワード： ジルコニウム，第一原理計算，燃料被覆管

1. 緒言

ジルカロイ燃料被覆管は一定の燃焼度あるいは時間の経過の後に<c>軸方向への収縮ひずみが発生する。この過程には照射欠陥の移動・成長が関わっているが、それらと鉄・クロムなどの溶質元素との相互作用を明らかにする必要がある。相互作用は単純な原子半径差による弾性相互作用であるとは限らず、量子的な効果を正確に評価するために第一原理計算が必要となる。

2. 計算方法

鉄原子はジルコニウム中でクロムと共に析出しているが、照射とともに析出物から溶出し母相中へと拡散することが知られている。また鉄原子は母相中で格子間原子として存在することが第一原理計算により判明している。ただしこの鉄原子がどのように母材中を拡散するのかは様々なプロセスを想定し、それぞれについて第一原理計算を行い移動エネルギーを評価する必要があるが、これまでに網羅的に計算した例はない。例えば鉄原子が格子間原子のまま拡散していくのか、あるいは Zr の格子間原子や空孔の拡散に付随して移動するのかによって拡散定数は大きく違ってくる。本発表ではこれらの様々な可能性についてその移動プロセスの障壁エネルギーを評価した結果を示す。

*Mitsuhiro Itakura[1], Taira Okita[2]
[1]JAEA, [2]Univ. Tokyo.