

保存的上昇運動を取り入れた結晶欠陥相互作用のモデル化

Modeling for an interaction between lattice defects by incorporating conservative climb motion

*早川 頌¹, 沖田 泰良², 愛知 正温², 板倉 充洋³

¹東京大学大学院工学系研究科, ²東京大学人工物工学研究センター, ³日本原子力研究開発機構システム計算科学センター

中性子照射下で形成する格子間原子集合体の挙動を再現するため、分子動力学法とモンテカルロ法を用いて集合体の保存的上昇運動を定量化した。集合体の回転運動が保存的上昇運動速度に影響を与えることが明らかとなった。

キーワード: モンテカルロ法、分子動力学法、照射損傷、鉄鋼材料

1. 緒言

原子炉構造材料の特徴としてカスケード損傷による格子間原子(SIA: Self-Interstitial Atom)集合体の形成が挙げられる。SIA 集合体は転位応力場の影響を受け転位近傍に集積するが、これら集合体の転位への吸収過程を考えた場合、特にサイズの大きい集合体に関しては保存的上昇運動が吸収プロセスの支配的なメカニズムになる[1,2]。本研究では、BCC 鉄における SIA 集合体の保存的上昇運動による刃状転位への吸収過程のシミュレーションを行う。この際、転位近傍における集合体の軌跡と形状の評価も行い、シミュレーションの入力パラメータとして用いる。

2. 計算方法

SIA 集合体縁部において、パイプ拡散を通した欠陥の転位側への集積が転位応力場により誘起されるが、その集積により引き起こされる集合体の重心移動を保存的上昇運動の発生と考える。この拡散過程の活性化エネルギーは分子動力学(MD)計算により求め、また転位近傍における集合体の軌跡と形状に関しては弾性論と MD 計算によって求めた。これら算出値を入力パラメータとして用いて機構論的モンテカルロシミュレーションを行った。

3. 結果・考察

転位近傍における集合体の挙動を MD により評価した結果、転位余剰面に対して集合体面が非平行な(回転した)状態で集合体が存在することが明らかとなった。この回転が保存的上昇運動に与える影響に関して、直径 1.6nm の集合体の回転の有無による保存的上昇運動速度の変化を図 1 に示す。なお h_{climb} は上昇運動方向の転位-集合体間距離である。 $h_{\text{climb}} \geq 3\text{nm}$ の領域では回転の有無が速度に影響を与えない一方で、 $h_{\text{climb}} \leq 3\text{nm}$ では回転による大きな速度の変化が見られる。これは集合体縁上での欠陥パイプ拡散時の転位との相互作用エネルギーの変化量が回転の影響を受けることに起因する。特に転位極近傍において回転による急激な速度上昇が見られることから、集合体の転位への吸収プロセスの評価に際して集合体の回転を取り入れる必要があることが分かった。

謝辞 本研究は文部科学省平成 27 年度エネルギー対策特別会計委託事業「高効率 TRU 燃焼を可能とする革新的水冷却炉 RBWR の研究開発」の成果を含む。

参考文献

- [1] B.N. Singh, N.M. Ghoniem, H. Trinkaus, Journal of Nuclear Materials, 307-311(2002)159-170.
[2] D.A. Terentyev, L. Malerba, M. Hou, Physical Review B, 75(2007)104-108.

*Sho Hayakawa¹, Taira Okita², Masaatsu Aichi² and Mitsuhiro Itakura³

¹School of Engineering, the Univ. of Tokyo, ²Research into Artifacts, Center for Engineering, the Univ. of Tokyo, ³Center for Computational Science & e- Systems, Japan Atomic Energy Agency

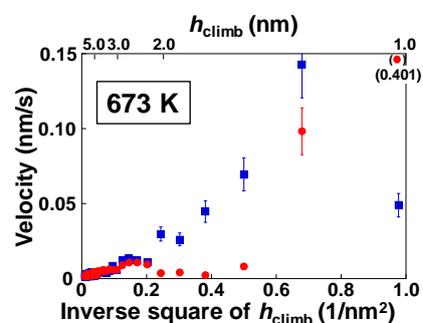


図1 上昇運動速度 (赤: 集合体の回転を取り入れた場合、青: 集合体の回転を取り入れない場合)