MD 法による中性子照射下結晶欠陥形成過程に及ぼす材料物性の影響に関する検討

MD simulations to evaluate effects of the material property on defect formation process under neutron irradiation

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

MD 法により，高エネルギー中性子照射環境で構造材料に形成する空孔集合体の形態を解明した．比較的大きな集合体が形成する場合，低積層欠陥エネルギーで集合体サイズが大きくなることが明らかとなった．

キーワード：分子動力学法，カスケード損傷，欠陥集合体，積層欠陥エネルギー

1. 緒言

本研究では，積層欠陥エネルギー（SFE）が最も低い FCC 金属の一つであるオーステナイト鋼を対象として，高エネルギー中性子入射に伴う結晶欠陥形成過程の特徴的な明らかにするため，SFE のみ異なる 6 つの原子間ポテンシャル[1]を用いた分子動力学（MD）法を行った．

2. 計算手法

本研究で用いた原子間ポテンシャルは，SFE が 14.6~186.5 mJ/m^2 と異なる一方，その他の物性値は極力一定に保たれている FCC 金属原子間ポテンシャルである．PKA エネルギー (E_{PKA}) 1~50 keV，初期温度 100K とし，各条件で 20 ~ 40 回の繰り返し計算を行い，残存欠陥数及び欠陥集合体形態に与える SFE の影響を解析した．更に，欠陥集合体の安定形態を明らかにするため，E_{PKA} = 20 keV において 1100K で 100ps のアニールを行った．

3. 結果・考察

図 1 には，代表的な空孔集合体を示す．比較的大きな集合体は，積層欠陥を内部に包含する Frank ループあるいは積層欠陥四面体（SFT）に近い構造をとり，特に空孔数 45 個以上からなる集合体は，その殆どが SFT となることが分かった．これらの集合体は SFE が低い場合に形成確率が上昇するため，図 2 に示すように，比較的大きな空孔集合体が形成する場合（E_{PKA} = 50 keV，及び E_{PKA} = 20 keV + アニール）にのみ，低 SFE で空孔集合体の平均径が上昇することが明らかとなった．

謝辞：本研究は文部科学省平成 28 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．

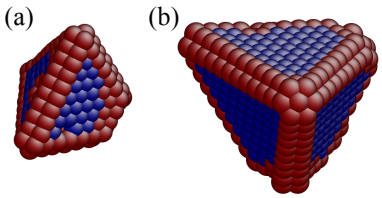

図 1 観察された空孔集合体の一例
(a) 50 keV, 44.1 mJ/m^2
(b) 20 keV + anneal, 14.8 mJ/m^2

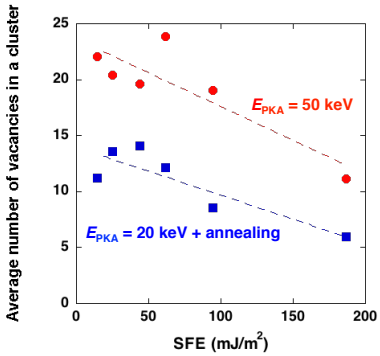

図 2 空孔集合体サイズの SFE 依存性

参考文献

[1] V. Borovikov et al., Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 23 (2015) p.16.

*Taira Okita[1], Yang Yingjuan[2] and Mitsuhiro Itakura[3]
[1] Research into Artifacts, Center for Engineering, the University of Tokyo, [2] School of Engineering, the University of Tokyo, [3] Center for Computational Science & e- Systems, Japan Atomic Energy Agency