

液体鉛ビスマス合金中の金属不純物の拡散特性に関する分子動力学的研究

Molecular Dynamics Study of Metallic Impurity Diffusion in Liquid Lead-bismuth Eutectic (LBE)

* 高 雲^{1,2}, Guido RAOS², Carlo CAVALLOTTI², 高橋 実³¹東工大原子核, ²Politecnico di Milano, ³東工大原子炉研

高温液体鉛ビスマスに溶解したニッケル, 鉄等の金属不純物の拡散特性について, ポテンシャルモデルとして埋め込み原子法を応用した分子動力学解析を行った. この解析結果と過去に実施した実験結果と比較することにより, 鉛ビスマス中の溶存金属不純物の拡散特性を理論的に明らかにした.

キーワード: 鉛ビスマス, 金属不純物, 分子動力学, 拡散係数, 溶解

1. 緒言 鉛ビスマスと構造材料との溶解腐食に影響を及ぼす構造材料の構成成分である Ni, Fe, Cr 等が液体鉛ビスマス中に溶解する場合の拡散特性および拡散係数を明らかにするため, これまで拡散特性について実験的に研究してきた. 本報告では, 原子間のポテンシャルエネルギーとして埋め込み原子法 (Embedding Atom Method, EAM^{[1,2])} を応用した分子動力学法を用いて, 金属不純物である Fe および Ni の液体鉛ビスマス中における拡散を解析した結果を報告する. 解析によって, 金属不純物の拡散現象また拡散係数のみならず, 高温液体鉛ビスマスの物理特性についても解析的に求めることができた.

2. 解析方法及び解析結果

2-1. ポテンシャルモデル 液体鉛ビスマス合金をモデル化するために, EAM を導入し, Pb, Bi, Ni および Fe の原子間の作用力を再現した. それに用いられた原子間ポテンシャルエネルギーの式は $E = \sum_{\alpha\beta} \left[F(\rho) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \Phi(r_{\alpha\beta}) \right]$ である. ここで, 第一項の埋め込みエ

ネルギーとペアポテンシャルエネルギーの和である.

2-2. 分子動力学解析 オープンソースの古典的分子動力学法パッケージである LAMMPS^[3] を用いて, カノニカルアンサンブル (NPT) とミクロカノニカルアンサンブル (NVT) モデル化した鉛ビスマスの密度, 熱膨張率, 粘性係数等について計算し, その結果を鉛ビスマスハンドブックの実験結果と比較し, モデルの妥当性について検討した. その後不純物である Fe, Ni を導入し, 拡散の解析を行った.

2-3. 解析結果及び考察 一例として Ni の拡散係数の結果を Fig.1. に示す. 白と赤のプロットはそれぞれ Ni 原子および凝集した Ni 粒子の解析結果を示し, 黒のプロットは過去の実験結果である. 実線は解析及び実験で得られた結果を直線近似したものであり, その近似式を同図に示す. 点線は Stokes Einstein の計算式による結果である. 実験で得られた拡散係数は Ni 原子の液体鉛ビスマス中における拡散係数より 1 桁小さいことから, 実験で見られた Ni の拡散は原子レベルの拡散ではなく, 粒子レベルの拡散であることがわかった. Stokes Einstein の計算式により, 実験中の Ni 粒子の粒径を求め, その粒径を用いて, 液体鉛ビスマス中の粒子の拡散解析を行った. その結果, 解析による Ni の拡散係数と実験で得られたものとが良く一致することがわかった. また, 解析で求めた Ni と Pb または Bi との原子対相関関数から, Bi 原子は Ni 原子との親和性が Pb より高いことがわかった.

3. 結論 EAM を用いた分子動力学法解析によって, 鉛ビスマス中における金属不純物の拡散係数を求めることができ, 原子レベルで拡散現象について評価することができた. Ni 粒子の拡散係数の解析結果と実験結果が良く一致し, Ni 原子の拡散係数の実験値より 1 桁小さいことがわかった. また, 原子対相関関数から, Bi 原子は Ni 原子との親和性が Pb 原子より高いことがわかった.

参考文献

- [1] M.S.Daw and M. I. Baskes, phys. Rev. B 29, 6443(1984) [2] S. M. Foiles, Phys. Rev. B 37, 6121 (1988)
[3] <http://lammps.sandia.gov/> [4] Y. Gao, Takahashi M., Nomura M., Mech. Eng. J, Vol. 2, No. 6 (2015)

^{*}Yun Gao^{1,2}, Guido Raos², Carlo Cavallotti² and Minoru Takahashi³

¹Dept. NuclEng, TokyoTech., ²Politecnico di Milano, ³RLNR Tokyo Tech.

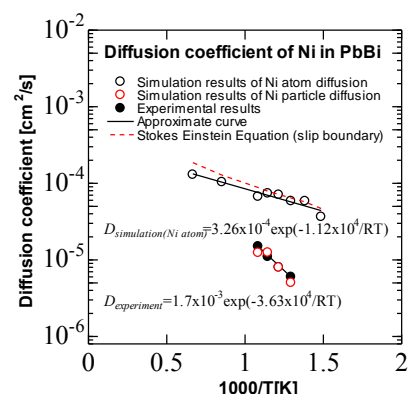


Fig.1. Simulation results of diffusion coefficient of Ni in liquid LBE compared to the experimental result