

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 (2)

MD simulations to evaluate effects of stacking fault energies on defect formation process in crystalline materials under neutron irradiation (2)

中西 大貴¹, Yang Yingjuan¹, 川畑 友弥¹, *沖田 泰良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

面心立方金属を対象として, 中性子照射下での結晶欠陥形成, 及びその積層欠陥エネルギー (SFE) の影響を分子動力学法により定量化した. 計算対象とした全ての温度で, 欠陥集合体の形態は準静的エネルギー計算を反映し SFE によって異なる一方, 欠陥形成数は SFE に依存しないことが明らかとなった.

キーワード: カスケード損傷, 積層欠陥エネルギー, 照射欠陥, オーステナイト鋼, 原子力材料

1. 緒言

軽水炉炉内構造材料として広く使用されるオーステナイト鋼は, 積層欠陥エネルギー (SFE) が最も低い面心立方 (FCC) 金属の一つである. 本研究では, SFE のみ異なる複数の原子間ポテンシャル^[1]を用いた MD 計算を行い, 中性子照射環境で供されるオーステナイト鋼の結晶欠陥形成での特徴を解明した.

2. 計算手法

本研究では, SFE が 14.6~186.5 mJ/m² と異なる一方, その他の物性値は極力一定に設定した 6 つの FCC 金属原子間ポテンシャルを用いて計算を行った^[1]. 一次はじき出しエネルギー (PKA エネルギー, E_{PKA}) を 1~50 keV, 計算セル内原子数を 6.0×10^4 ($E_{PKA} = 1$ keV)~ 1.1×10^7 ($E_{PKA} = 50$ keV), 初期温度を既往研究の 100 K^[2]に加え 300 K, 600 K に設定し, NVE アンサンブルにて 50~100 ps までの計算を行った. 各条件で 25~40 回の繰返し計算を行い, 結晶欠陥形成数, 及び欠陥集合体の形態に及ぼす SFE の影響を明らかにした.

3. 結論

図 1 には $E_{PKA} = 50$ keV における残存欠陥数 (N_F) の SFE 依存性を示す. N_F は NRT モデルで計算される理論値^[3]の約 15~30% であり, 温度とともに減少する傾向にあることが明らかとなった. 一方, 50 keV を含む全ての E_{PKA} に於いて, N_F の SFE 依存性は見られなかった. 特に $E_{PKA} = 50$ keV では, 欠陥集合体の形成率が高く且つ比較的大きな集合体も形成するため, 準静的エネルギー計算を反映し, 低 SFE では積層欠陥を内包する欠陥集合体が多く形成する. しかし, このような条件下に於いても, N_F には SFE の影響が観察されない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.

参考文献

- [1] V. Borovikov et al., Modelling Simukl. Mater. Sci. Eng. 23 (2015) 055003
- [2] 沖田泰良他, 日本原子力学会 2016 年秋の大会
- [3] M.J. Norgett et al., Nucl. Eng. Des. 33 (1975) 50.

Daiki Nakanishi¹, Yingjuan Yang¹, Tomoya Kawabata¹, *Taira Okita² and Mitsuhiro Itakura³

¹School of Engineering, the University of Tokyo, ²Research into Artifacts, Center of Engineering, the University of Tokyo, ³Japan Atomic Energy Agency

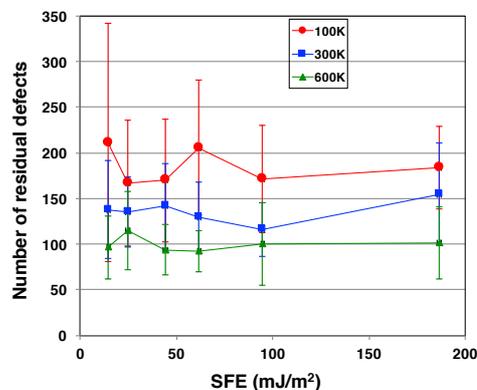


図 1 $E_{PKA} = 50$ keV における残存欠陥数の SFE 依存性