

## On-the-fly モンテカルロ法を用いた BCC 鉄における 自己格子間原子集合体の保存的上昇運動に関する検討

On-the-fly kinetic Monte Carlo for a conservative climb of a cluster of self-interstitial atoms in BCC-Fe

\*早川 頌<sup>1</sup>, 沖田 泰良<sup>2</sup>, 板倉 充洋<sup>3</sup>, Haixuan Xu<sup>4</sup>, Yuri N. Osetsky<sup>5</sup>

<sup>1</sup> 東京大学大学院工学系研究科, <sup>2</sup> 東京大学人工物工学研究センター, <sup>3</sup> 日本原子力研究開発機構,

<sup>4</sup>The University of Tennessee, Knoxville, <sup>5</sup>Oak Ridge National Laboratory

活性化過程探索法と機構論的モンテカルロ法の融合により、BCC-Fe における自己格子間原子集合体の保存的上昇運動のモデル構築を行なった。特にサイズの小さい自己格子間原子集合体に関しては、既往研究で開発されたモデルでは再現できない複雑な原子挙動を伴って保存的上昇運動が発生し得ることが明らかとなった。

**キーワード**：保存的上昇運動、On-the-fly モンテカルロ法、自己格子間原子集合体、照射損傷

### 1. 緒言

中性子照射下での特徴的な過程として可動な自己格子間原子(SIA: Self-interstitial atom)集合体の形成が挙げられるが、これら集合体の他の微細組織への吸収過程の際の運動機構として保存的上昇運動が存在する。当グループでは保存的上昇運動の予測モデル構築を従来行ってきたが[1]、事前予測による原子拡散パターンに基づいて SIA 集合体の挙動を記述しており、特に小さい SIA 集合体に見られるような複雑な集合体挙動が再現できていない可能性があることが課題であった。本研究では、BCC-Fe を対象とし、事前予測を必要としない活性化過程探索法と機構論的モンテカルロ法(KMC: Kinetic Monte Carlo)の融合による SIA 集合体の保存的上昇運動のモデル構築を図る。さらに構築したモデルを用いて、SIA 集合体同士の相互作用に起因する、SIA 集合体の吸収過程を再現する。

### 2. 計算方法

上記融合手法の遂行に際し、本研究では Self-evolving atomistic kinetic Monte Carlo (SEAKMC) [2]を用いた。SEAKMC においては KMC による時間進展と並行して原子拡散過程の探索を行うため、拡散パターンに関する事前の入力値を必要としない。なお計算効率を図るべく、SIA 集合体のすべり運動を除外するために活性化エネルギー 0.4 eV 以下のイベントは除外した。

### 3. 結果・考察

図 1 は拡散イベントが発生することにより SIA 集合体の形状が変化する様子を示すが、ある原子の拡散に誘起され複数の原子が連動して移動するような複雑な拡散現象が発生していることが分かる。さらにこの拡散イベントの活性化エネルギーは 0.5 eV 程度であり、このような複雑な過程を経る一方で比較的低い活性化エネルギーで発生するイベントが本計算では多数確認された。以上の知見より、

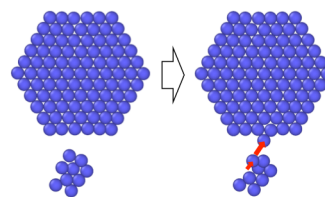


図 1 SIA 集合体形状変化の様子

特にサイズの小さい SIA 集合体において、単純な個々の原子の拡散パターンでは記述できない、複数の原子が連動して拡散するような現象が保存的上昇運動発生のための主要プロセスである可能性が示唆される。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] T. Okita et al., Acta Mater., 118 (2016) 342.

[2] H. Xu et al., Phys. Rev. B, 84 (2011) 132103.

\*Sho Hayakawa<sup>1</sup>, Taira Okita<sup>2</sup>, Mitsuhiro Itakura<sup>3</sup>, Haixuan Xu<sup>4</sup>, Yuri N. Osetsky<sup>5</sup>

<sup>1</sup>School of Engineering, The Univ. of Tokyo, <sup>2</sup>Research into Artifacts, Center for Engineering, The Univ. of Tokyo, <sup>3</sup>Japan Atomic Energy Agency, <sup>4</sup>The Univ. of Tennessee, Knoxville, <sup>5</sup>Oak Ridge National Laboratory