

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

(3) ジルコニウム中溶質元素・照射欠陥相互作用の第一原理計算

Research and Development of RBWR for High Efficiency Transuranium Elements Burner

(3) First-principles calculation of interaction between solute atoms and irradiation defects in Zr

*板倉 充洋¹, 沖田 泰良²

¹JAEA, ²東大

燃料被覆管の照射挙動モデル化のため、代表的な溶質元素である鉄および水素と、格子空孔や格子間原子などの照射欠陥との相互作用エネルギーを第一原理計算で求め、照射損傷の時間発展に溶質元素が及ぼす影響を明らかにする。

キーワード：第一原理計算

1. 緒言

RBWR は局所的に中性子束を強くし TRU 燃焼を目指すものであるが、その実現には従来より多い照射量において燃料被覆管の健全性が保たれることを確認する必要がある。そのためには照射欠陥と材料中の合金元素の拡散、反応過程をモデル化し欠陥クラスターや析出物が照射と共にどう変化していくかを調べる必要がある。本発表では照射欠陥およびジルカロイにおいて代表的な合金元素である鉄について、その拡散定数や結合エネルギーを第一原理計算で調べ、その数値を用いて欠陥クラスターの時間発展を計算した結果を示す。

2. 計算結果

鉄原子はジルコニウム(Zr)中でクロムなどと共に析出物として存在しているが、照射とともに溶出し格子間原子として拡散し、また空孔と強く結合することが知られている。今回格子間原子としての鉄原子の安定位置と移動障壁を第一原理計算で計算した結果、移動障壁は<c>方向に 0.3eV、<a>方向に 0.45eV であり、Zr 格子間原子と原子空孔の中間的な値であることが分かった。これは鉄原子が空孔より速く拡散しその成長に大きな影響を与えることを示唆する。また鉄原子、格子間原子、空孔の間の結合エネルギーを計算した結果、空孔同士の結合エネルギーが最も弱く 0.2eV 程度であったが、格子間原子同士、鉄と格子間原子の結合エネルギーはいずれも 1eV 程度で強く結合することが分かった。

これらの数値を元に、欠陥クラスターの数とサイズの時間変化をクラスターダイナミクス法で計算した結果、まず格子間原子クラスターが成長し、ここに鉄原子が加わって複合クラスターになるが、その後空孔の拡散の時間スケールではこのクラスターに空孔が結合し格子間原子が減少していき、最終的に空孔と鉄原子からなるクラスターに変化することが分かった。また鉄原子がない場合、空孔のみのクラスターは結合エネルギーの低さから容易に分解し成長できないことが分かった。これは照射 Zr においてボイドが観察されないという実験事実とも符合する。

3. 結論

Zr の照射による組織変化には鉄などの合金元素が強く影響することが分かった。実際には空孔・鉄クラスターはより安定な転位ループとなりその積層欠陥に鉄原子が結合した状態に変化するはずである。その過程をモデル化するには複数の鉄原子や空孔が平面的に結合した状態の安定性を評価する必要がある。

*Mitsuhiro Itakura¹ and Taira Okita²

¹JAEA, ²U.Tokyo