

On-the-fly キネティック・モンテカルロ法を用いた 面心立方金属中における照射誘起欠陥の挙動に関する検討

On-the-fly kinetic Monte Carlo simulations for evaluating the behavior
of irradiation-induced defects in face-centered cubic metals

早川 頌¹, *柴崎 京介², 沖田 泰良³, 板倉 充洋⁴, Haixuan Xu⁵, Yury N. Osetsky⁶

¹ 東京大学大学院工学系研究科, ² 東京大学工学部, ³ 東京大学人工物工学研究センター,

⁴ 日本原子力研究開発機構, ⁵ The University of Tennessee, ⁶ Oak Ridge National Laboratory

中性子照射下で形成する照射欠陥集合体の挙動と形態に関して、分子動力学 (MD) 法の結果を初期値とし、On-the-fly キネティック・モンテカルロ法を用いた解析を行った。原子挙動の精確さを保持しつつ、MD 法よりも二桁近い長時間での欠陥拡散を再現することが可能となった。

キーワード： キネティック・モンテカルロ法, 自己格子間原子, 空孔, カスケード損傷

1. 緒言

原子炉構造材料では、中性子照射により高密度の結晶欠陥が形成すること（カスケード損傷）が大きな特徴である。結晶欠陥の拡散、微細組織変化に伴い、構造材料の機械的特性が変化していくため、欠陥形成過程を精緻に把握することが原子炉材料劣化を予測する上で重要である。カスケード損傷は、従来より分子動力学 (MD) 法で定量化されてきたが、MD 法で到達可能な時間スケールは実質上数 100 ps であるため、多数回の拡散を伴う欠陥集合体の挙動を再現し、微細組織発達を予測することは、事実上不可能である。また、カスケード損傷下で形成する欠陥集合体は極めて複雑な形状であるため、イベントリストを事前に作成する必要のあるキネティック・モンテカルロ法 (KMC) を用いることは適切でない場合が多い。そこで本研究では、活性化過程を各ステップで逐一算出する On-the-fly KMC を用い、カスケード損傷で形成する欠陥集合体の、より長い時間スケールでの挙動と形態を把握することを目的とする。

2. 計算方法

本研究では、第一次はじき出しエネルギー 50keV としたカスケード損傷の MD 結果[1]を原子配列の初期値とし、Self-evolving atomistic kinetic Monte Carlo (SEAKMC)[2]を用いて欠陥集合体挙動の解析を行った。また、面心立方金属を対象とした原子間ポテンシャル[3]を用いた。

3. 結果・考察

図 1 には、600K での計算結果の一例を示す。MD 法を用いた 0.1 ns までの解析[1]では不動であると見なされていた自己格子間原子 (SIA) 集合体が、格子定数の数倍もの距離を拡散することが本計算で初めて明らかとなった。この拡散は数 ns 以上で発生し、これは MD 計算での取り扱いが困難な時間スケールである。本手法は、MD 法では取り扱い不可能な時間スケールの現象を、原子挙動の精確さを保持しつつ、再現できることを意味し、さらにより長い時間スケールで発生すると考えられる集合体形態変化等も本手法により予測可能であることを示唆する。

参考文献

[1] D. Nakanishi et al, submitted to Philo. Mag.

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

[3] V. Borovikov et al., MSMSE. 23 (2015) 055003.

S. Hayakawa¹, *K. Shibasaki², T. Okita³, M. Itakura⁴, H. Xu⁵, Y.N. Osetsky⁶

¹School of Engineering, Univ. of Tokyo, ²Faculty of Engineering, Univ. of Tokyo, ³RACE, Univ. of Tokyo, ⁴JAEA-CCSE, ⁵Univ. of Tennessee, ⁶ORNL

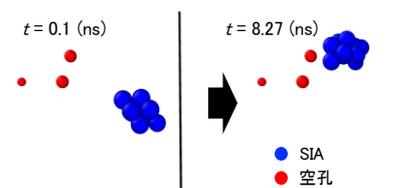


図 1 SEAKMC による
SIA 集合体の挙動解析