MD 法を用いた高エネルギー中性子照射下における欠陥形成過程の解明

MD simulations to evaluate defect formation process under high energetic neutron irradiation

*寺山 怜志¹,岩瀬 祐樹¹,早川 頌¹,沖田 泰良¹,板倉 充洋² ¹東京大学大学院工学系研究科,²日本原子力研究開発機構

面心立方金属を対象に、高エネルギー中性子照射下での結晶欠陥集合体形成に及ぼす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。SFE は欠陥集合体の形態に影響を及ぼし、その影響はより 大きな欠陥集合体で顕著になることが明らかとなった。

キーワード:カスケード損傷、面心立方金属、積層欠陥エネルギー

1. 緒言

軽水炉炉内構造材料として使用されるオーステナイト鋼は、積層欠陥エネルギーが極めて低いことが特徴 として挙げられる。オーステナイト鋼の照射下での劣化挙動を把握するためには、欠陥形成過程における SFE の影響を解明することが求められる。本研究では、SFE のみ異なる複数の原子間ポテンシャルを用いた分子 動力学(MD)計算を行い、大きな欠陥集合体形成がより形成しやすい高エネルギー付与下での結晶欠陥形成 過程に及ぼす SFE の影響を解明した。

2. 計算手法

本研究では、SFE のみを 14.6mJ/m²~186.5mJ/m² で変化させ、温度や格子状数などその他の物性値は極力一 定に保った 6 つの面心立方金属原子間ポテンシャルを用いた^[1]。初期温度は 600K、計算セル内原子数を 4.7 ×10⁷ に設定した。一次はじき出しエネルギー (E_{PKA})として 100keV を中心付近原子の [135] 方向に与え、 NVE アンサンブルで 100ps までの計算を行った。各条件において、25 回の繰り返し計算を行い、結晶欠陥形 成数、およ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、計算の一例として SFE = 186.5mJ/m²におけるエネルギー 付与後約 100ps 後における欠陥分布を示す。1ps 以下の極めて短時間に 多数の欠陥が極微小領域に形成するが、その大半は再結合により消滅 する。その後、数 10ps の間に欠陥集合体の形成が確認された。 E_{PKA} = 100 keV では、よりサイズの大きい欠陥集合体が高密度に形成された ^[2]。大きな自己格子間原子集合体に着目すると、大半は積層欠陥ループ

(図中赤丸)あるいは完全転位ループ(図中青丸)として観察され、この2種類の形成割合は、静的条件下で計算した各々の形成エネルギーに依存することが明らかとなった。 すなわち、100 keV のエネルギー付与下に於ける欠陥形成過程においても、1原子あたり0.1eV~1.0 eV 程度の相違である SFE の影響を反映して、その欠陥集合体の形態が決定づけられることが明らかとなった。

参考文献

[1] V. Borovikov et al., Modeling 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

*Satoshi Terayama¹, Yuki Iwase¹, Sho Hayakwa¹, Taira Okita¹and Mitsuhiro Itakura² ¹School of Engineering, the University of Tokyo, ²Japan Atomic Energy Agency



図 1:SFE=186.5 mJ/m2 におけるエ ネルギー付与後約 100ps における スナップショット。白点が結晶欠 陥を示す。