

Mendeleev ポテンシャルによる鉄の分子動力学シミュレーション 照射カスケード損傷による欠陥生成について

Molecular Dynamics Simulation of Iron by Mendeleev Potential

On defect generation due to irradiation cascade damage

*陳 昱婷¹, 阮 小勇¹, 中筋 俊樹¹, 森下 和功¹, 渡辺 淑之²

¹京都大, ²量研

核分裂反応によって発生した中性子は構造材料の構成原子と衝突し、カスケード損傷を引き起こす。この衝突連鎖によって生成する非平衡欠陥は、材料のマイクロ組成やマイクロ構造、ひいては、材料の機械的性質に多大な影響を及ぼすことが知られている。本研究では、分子動力学法によって鉄中のカスケード損傷プロセスをシミュレートし、欠陥生成量や空間分布の PKA エネルギー依存性を調べた。

キーワード: 照射損傷、照射欠陥、溶融ゾーン、非平衡欠陥生成数の統計評価

1. 緒言

照射を受けた材料内ではカスケード損傷により多くの格子欠陥が生成し、材料内の格子欠陥数は平衡欠陥数より数桁高くなる^[1]。そのため、その材料の機械的特性は劣化することになるが、材料の照射影響を正しく評価するには、まず、カスケード損傷による欠陥生成率等を正しく求める必要がある。本研究では、分子動力学 (MD) 計算を行い、鉄中の高エネルギーPKA による欠陥生成数の統計を評価した。

2. 方法

Mendeleev ポテンシャルに基づく分子動力学計算を行い、カスケード損傷による非平衡欠陥生成数を評価した。計算条件は、初期温度 0K、PKA エネルギー0.1keV~10keV、PKA 初速度の方向をランダムとした。各エネルギーに対して 1000 個のカスケードを作り、統計処理を行った。

3. 結果 図 1 は各 PKA エネルギーに対する欠陥生成数分布を表す。欠陥生成数の平均値は PKA エネルギーの増加とともに増加し、また分布幅は広がっていく。PKA エネルギーが 10keV の分布においては複数のピークが見られるが、それより低い PKA エネルギーについては、ほぼ正規分布を示していると言える。図 2 は、欠陥生成数 (平均値) および損傷効率 (Kinchin-Peace モデルに対する比) の PKA エネルギー依存性を示している。損傷効率は、エネルギーの増加に伴い減少し、エネルギー10KeVにおいて約0.3程度になる。当日は、カスケード損傷による欠陥生成のメカニズムについて詳細に考察する。

参考文献

[1] Nordlund K, Zinkle S J, Sand A E, et al. Improving atomic displacement and replacement calculations with physically realistic damage models[J]. Nature communications, 2018, 9(1): 1084.

*Yuting Chen¹, Xiaoyong Ruan¹, Toshiki Nakasuji¹, Kazunori Morishita¹, Yoshiyuki Watanabe²

¹Kyoto University, ²National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology

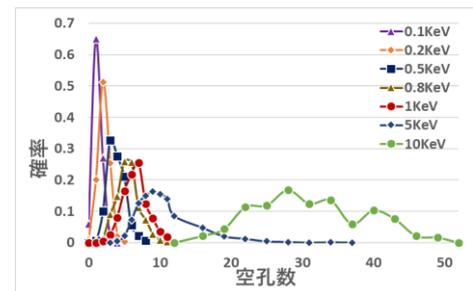


図 1 Fe 中のカスケード損傷によって生成するはじき出し欠陥数分布の PKA エネルギー依存性

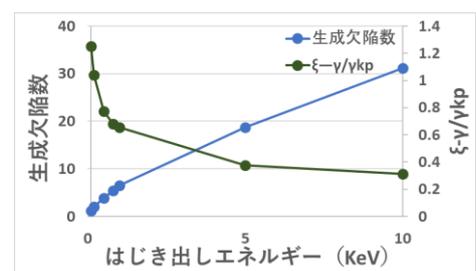


図 2 Fe 中のカスケード損傷によって生成するはじき出し欠陥数および損傷効率の PKA エネルギー依存性