

照射効果評価における転位ループ形成による内部応力評価

Evaluation of internal stress by dislocation loop formation for irradiation effect evaluation

*大野 健太郎¹, 陳 昱婷¹, 中筋 俊樹¹, 阮 小勇¹, 森下 和功¹

¹京都大学

純鉄およびタングステンにおいて、照射欠陥の生成により誘起される内部応力の上昇の影響を調査するために、欠陥が生じたときの緩和体積および欠陥周辺の変位場を分子動力学法(Molecular Dynamics:MD)を用いて計算した。

キーワード: 内部応力, 転位ループ, 照射効果, 分子動力学法

1. 緒言

原子炉や核融合炉に使用される鉄鋼材料では中性子照射による脆化を考慮した健全性評価がその供用期間設定の上で重要となる。一方、中性子照射によって導入された照射欠陥による内部応力によって局所的な変形が起こることが理論計算により示された^[1]。本研究では、分子動力学法を用いて、純鉄およびタングステンに照射欠陥が生成した場合の欠陥周辺の変位場と緩和体積を計算した。

2. MD シミュレーション

純鉄、タングステンともに $10a_0 \times 10a_0 \times 10a_0$ の bcc セル(総原子数:2000)に $\langle 110 \rangle$ 自己格子間原子(Self-interstitial atom:SIA)および原子空孔(Vacancy:V)を導入し MD を用いて緩和体積および欠陥周辺の変位場を求めた。シミュレーションにおいて、Fe には Mendeleev^[2], W には Zhou^[3]のポテンシャルを使用した。欠陥を導入したときの体積を Ω_{def} , 欠陥のないセルの体積を Ω_{per} とすると、緩和体積 Ω_{rel} は以下の式で表される。

$$\Omega_{\text{rel}} = \Omega_{\text{def}} - \Omega_{\text{per}} \quad (1)$$

3. 結果・考察

Fe および W の空孔近接の原子の変位を図 1 に示す。Fe, W ともに空孔の第一近接原子は空孔に近づく方向に動き、第二近接原子は空孔から遠ざかるように動いている。また、W では第二近接原子の変位が第一近接原子の変位の絶対値よりも大きくなった。緩和体積計算の結果を以下に示す。原子体積を Ω_0 (Fe: $1.164 \times 10^{-2} [\text{nm}^3]$, W: $1.585 \times 10^{-2} [\text{nm}^3]$) とすると、Fe では $\Omega_{\text{rel}}^{\text{SIA}}/\Omega_0 = 0.976$, $\Omega_{\text{rel}}^{\text{V}}/\Omega_0 = -0.201$, W では $\Omega_{\text{rel}}^{\text{SIA}}/\Omega_0 = 1.399$, $\Omega_{\text{rel}}^{\text{V}}/\Omega_0 = -0.076$ となった。空孔の緩和体積は負であるのに対し、SIA の緩和体積は正の値を示した。SIA の緩和体積と空孔の緩和体積の合計で表されるフレネル対の緩和体積は Fe: $0.775\Omega_0$, W: $1.323\Omega_0$ となった。この体積の増加が材料に局所的な応力を生じさせていると考えられる。

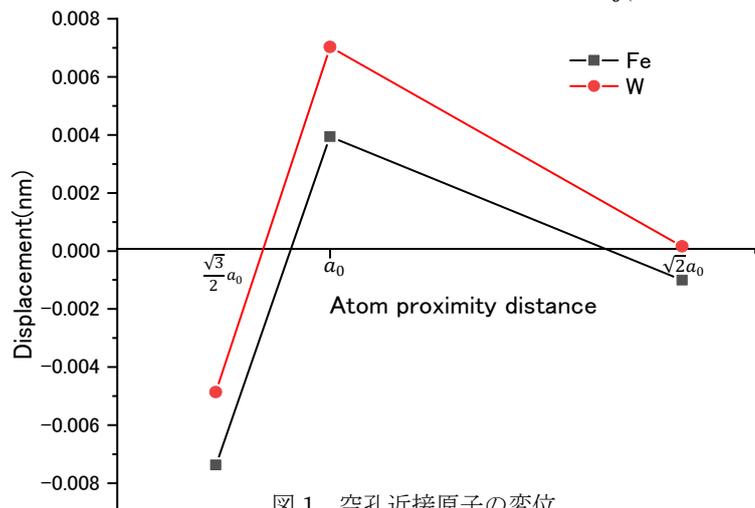


図 1 空孔近接原子の変位

参考文献

[1] Dudarev, S L, Mason, D R, Tarleton, E, Ma, P-W & Sand, A E 2018, Nuclear Fusion vol. 58, no. 12, 126002

[2] Mendeleev, Han, Srolovitz, Ackland, Sun and Asta, Phil Mag A, 83, 3977-3994 (2003)

[3] Zhou et al, Acta Mater, 49, 4005 (2001)

*Kentaro Ono¹, Yuting Chen¹, Toshiki Nakasuji¹, Xiaoyong Ruan¹ and Kazunori Morishita¹

¹Kyoto Univ.