

Zr 中における空孔型転位ループ形成過程の解明

Formation of a vacancy-type dislocation loop in Zr

*安達 悠希也¹, 強 光友², 早川 頌², 沖田 泰良³, 板倉 充洋⁴

¹ 東京大学工学部, ² 東京大学大学院工学系研究科, 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システム計算科学センター

軽水炉燃料被覆管として使用される Zr 合金を対象として、照射劣化を決定づける微細組織と考えられる c-type 空孔転位ループ形成に着目し、空孔集合体からの変換過程を分子動力学法により解析した。この過程に必要な活性化エネルギーは、集合体サイズに依存することがわかった。

キーワード： 燃料被覆管、分子動力学法、空孔集合体

1. 緒言

軽水炉燃料被覆管として使用される Zr 合金は、六方最密構造であるため、照射下で形成する微細欠陥は異方的に拡散する。それにより、原子空孔は底面上にも集合体を形成し (図 1(a))、これが潰れて c-type 空孔転位ループ (図 1(b)) となる。照射成長の breakaway、水素吸収量の急激な増加等、Zr 合金に特徴的な照射劣化は、主として c-type 転位ループ形成、及び Fe 原子の析出物からの欠乏とほぼ同時に発生するため^[1]、c-type 転位ループ形成過程を定量化することが、劣化機構を解明する上で重要な要素の一つである。本研究では、MD 法、及び Nudged Elastic Band (NEB) 法^[2]を用いて、c-type 空孔転位ループに変換する過程の活性化エネルギーを算出した。

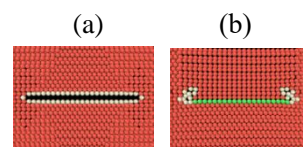


図 1 (a) 原子空孔集合体
(b) c-type 空孔転位ループ

2. 計算条件

MD 計算では、Sheng ポテンシャルを用い LAMMPS^[3]で行った。計算セルは、X[1-100]14nm、Y[11-20]16.2nm、Z[0001]12.9nm で、セル中心に一辺の空孔数 (l) が 3-10 の六角形集合体を挿入し 300K で約 50ps 緩和することで c-type 空孔転位ループを得た。NEB 計算には始点 (空孔集合体) と終点 (c-type 空孔転位ループ) の間に 8 個のイメージを線形内挿することで初期経路を作成し、イメージに作用する力が 0.01eV/Å 以下になるまで緩和した。その過程の最大エネルギー付近ではイメージ数を増加させることで、精緻に変換経路を求めた。

3. 計算結果・考察

図 2 に活性化エネルギーの空孔集合体サイズ依存性を示す。最も高いエネルギー障壁は、集合体サイズによらず原子変位が半分程度で見られた。活性化エネルギーは、19 個の集合体 ($l=3$) で最小値 2.3eV、空孔数の増加とともに徐々に増加し 271 個の集合体 ($l=10$) で 3.5eV となる。これらより、c-type 転位ループへの変換は、 $l=3$ 、直径 1.5nm 程度の集合体で主として発生すると考えられる。

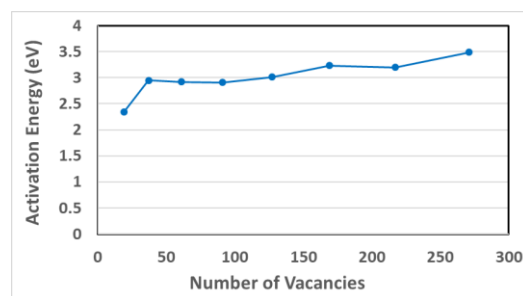


図 2 活性化エネルギーの
空孔集合体サイズ依存性

参考文献

[1] A. V. Barashev et al., J. Nucl. Mater. 461 (2015) p.85

[2] G. Henkelman et al., J. Chem. Phys. 113 (2000) 9978

[3] <<https://lammps.sandia.gov/>>

*Yukiya Adachi¹, Qiang Guanyou², Sho Hayakawa², Taira Okita³ and Mitsuhiro Itakura⁴

¹School of Engineering, the University of Tokyo., ²Department of Engineering, the University of Tokyo., ³Research into Artifacts, Center for Engineering, the University of Tokyo., ⁴Center for Computational Science & e-Systems, Japan Atomic Energy Agency.