

原子力材料の固液界面の第一原理計算

DFT calculation of liquid/solid interface in nuclear materials

*板倉 充洋¹, 海老原 健一¹, 中村 博樹¹, 奥村 雅彦¹

¹JAEA

過酷事故解析で必要となる制御棒成分 B4C と熔融ステンレスのぬれ性パラメータ取得、および ADS 炉における液体鉛ビスマス冷媒による構造材料の液体金属脆化モデル化を行うため、これら材料の固体・液体界面の第一原理計算を行った結果を報告する

キーワード：第一原理計算

1. 緒言

ADS や FBR などの次世代炉では水の代わりに液体金属を冷媒として用いる場合が多く、特に ADS では鉛ビスマス冷媒による構造材の液体金属脆化が設計を決める要因となる。また福島第一原発の廃炉作業を前に、炉内で燃料、被覆管、制御棒、構造材など様々な材料が熔融し化学変化、反応して生成したデブリの組成や分布を予測することが現在求められている。こうしたテーマにおいて特に熔融した金属や酸化物とそれ以外の材料の相互作用が重要なファクターとなるが、それを調べるには大規模な第一原理計算が必要となる。

これまで第一原理計算は主に材料の固体状態での振る舞いを解明するのに応用され、大きな成果を挙げてきた。こうした系では結晶の並進対称性から小規模な周期セルを用いた計算で本質的な情報が得られてきたが、計算機能力の向上とともに格子欠陥など並進対称性を破る対象についても大きなセルを用いることで計算が可能となり、とくに材料の機械的特性を左右する格子欠陥の振る舞いなども解明されてきた。

一方で液体状態の計算では少なくとも 100 個程度の原子を用い、有限温度の原子の動きを追跡する分子動力学(MD)計算をもちい、少なくとも原子同士の位置の入れ替わりが何度も起きる程度の時間だけ計算を実行し物理量の熱平均をとることが求められ、固体の場合より必要とされる計算量がかなり多くなる。本講演では鉛ビスマス液体と鉄の界面に関する計算結果および液体状態の鉄に対するホウ素の熔融・拡散についての第一原理計算の結果および考察について発表する。

2. 計算結果

液体鉛ビスマスと鉄の界面の計算においては、鉛 104 原子、ビスマス 104 原子からなる混合液体状態を第一原理計算コード VASP を用い有限温度 MD 計算を行い、まず液体状態の配置を得た。次にこの配置を鉄 128 原子からなる固体状態の配置とサイズが合うようにセルの大きさを調節し、固体鉄と液体鉛ビスマスの界面を含むシステムを作成、これを初期状態として VASP による有限温度 MD 計算を行いエネルギーの平均を計算した。このエネルギーと鉛ビスマスだけの時のエネルギーおよび鉄だけの時のエネルギーを比較し、両者の界面エネルギーを評価した。その結果鉄の自由表面のエネルギーと比較して半分程度まで界面エネルギーが低下することが判明した。これはき裂が進展する時に隙間に液体金属が入り込むことで表面生成によるエネルギー増加が抑えられ、き裂進展が促進されることを示唆している。

3. 結論

液体状態のみならず、SiO₂ のアモルファス状態や準結晶合金など、非晶質の物質を対象とした第一原理計算は今後ますます重要となり新たな知見が得られていくと予想される。

*Mitsuhiro Itakura¹, Ken-ichi Ebihara¹, Hiroki Nakamura¹, Masahiko Okumura¹

¹JAEA