

## 機械学習分子動力学法による Zr 中の照射劣化挙動の解明

Atomistic behavior in Zirconium under irradiation by machine-learning molecular dynamics

\*寺山 怜志<sup>1</sup>, 沖田 泰良<sup>1</sup>, 板倉 充洋<sup>2</sup>, 奥村 雅彦<sup>2</sup>

<sup>1</sup>東京大学工学系研究科, <sup>2</sup>JAEA

軽水炉燃料被覆管として使用される Zr を対象として、第一原理計算結果を教師信号とする機械学習分子動力学法により、照射下で形成する原子空孔集合体の挙動を精緻に解明する上で重要な基礎物性を再現する原子間ポテンシャルを作成した。

**キーワード**：ニューラルネットワーク、空孔型欠陥、燃料被覆管、第一原理計算

### 1. 緒言

軽水炉燃料被覆管として使用される Zr 合金は、水素吸収による延性低下が課題である。Zr 合金の水素吸収量は照射線量が閾値を超えると急激に増加し、これが中性子照射下で空孔集合体が潰れてできる c-type 転位ループ(c-loop)とおおよそ同じ照射量で起こることが分かっている[1]。そのため、原子挙動に基づく c-loop 形成過程を明らかにすることが、劣化機構を解明する上で重要な要素の一つとなる。しかし、従来の古典的分子動力学(MD)法では、特に空孔型欠陥の挙動を取り扱う上でその精度が不十分であることが課題であった。これらを踏まえて、本研究では、高精度で計算コストも低い機械学習分子動力学法(MLMD)を用いて、Zr 中での c-loop 形成過程を解明する上で重要な基礎物性を再現する原子間ポテンシャルの作成を目的とする。

### 2. 計算手法

MLMD では、Behler-Parrinello 法を用い[2]、小さな系で第一原理計算の結果をニューラルネットワークにより学習し、大きな系に拡張した。第一原理計算には VASP を用い、格子定数を 3.233Å、c/a を 1.600 に定めて計算した。系の学習には n2p2 パッケージを用い、カットオフ半径を 6.5Å の 3 層構造で学習を行った。これにより作成した原子間ポテンシャルを用いて、LAMMPS[3]により MD 計算を行った。

### 3. 結論

表 1 に、第一原理計算 (DFT) と MLMD によって求められた弾性定数、空孔形成エネルギー、表面エネルギーを示す。過去の第一原理計算 (表中\*DFT) と従来の MD 計算結果[4]も併せて載せる。本 DFT 計算の結果は、主たる物性値に於いて既往の DFT 計算と高い精度で一致した。また、MLMD でも本 DFT 計算の結果を適切に学習できたことが分かった。特に空孔の形成過程を再現することにおいて重要な空孔形成エネルギーを MD 計算より高い精度で再現できたことにより、c-loop の形成過程を解明することが可能になると考えられる。

表 1 主たる物性値

	*DFT	MD	DFT	MLMD
C <sub>11</sub> (GPa)	147	147	153	147
C <sub>12</sub> (GPa)	70	69	56	92
C <sub>13</sub> (GPa)	71	74	65	88
C <sub>33</sub> (GPa)	164	168	165	165
C <sub>44</sub> (GPa)	25	44	26	26
mon(eV)	2.07	1.79	2.05	2.12
$E_{sur}^f$ (meV/Å <sup>2</sup> )	100		102	103

### 参考文献

- [1] M. Griffiths, et al, J. Nucl. Mater. 150 (1987) 159.  
 [2] Jörg Behler et al, Phys. Rev. Lett. 98, 146, 401(2007).  
 [3] D.Dragoni et al, PRM 2 (2018) 013808.  
 [4] M.I. Mendeleev et al, Philos Mag. 87 (2007) 349.

\*Satoshi Terayama<sup>1</sup>, Taira Okita<sup>1</sup>, Mitsuhiro Itakura<sup>2</sup> and Masahiko Okumura<sup>2</sup>

<sup>1</sup>School of Engineering, the Univ of Tokyo., <sup>2</sup>JAEA.