

## カスケード損傷による $\alpha$ -Fe 中の非平衡欠陥生成：分子動力学解析

Statistical Arguments on Athermal Defect Production in  $\alpha$ -Fe due to Displacement Cascades:  
Molecular Dynamics Simulation Study

\*陳 昱婷<sup>1</sup>, 阮 小勇<sup>1</sup>, 中筋 俊樹<sup>1</sup>, 森下 和功<sup>1</sup>, 渡辺 淑之<sup>2</sup>

<sup>1</sup>京大, <sup>2</sup>量研

核分裂反応によって発生した中性子は構造材料中の原子と衝突し、カスケード損傷を引き起こす。この原子間衝突の連鎖によって生成する非平衡欠陥は、材料のマイクロ構造、ひいては、材料のマクロ機械的性質に多大な影響を及ぼす。本研究では、分子動力学によって  $\alpha$ -Fe のカスケード損傷をシミュレートし、カスケード衝突エリアと欠陥生成数の依存性について調べた。同じ入射エネルギーによって引き起こされた多体相互作用、欠陥の再結合プロセスなどの、残留欠陥数分布への影響を検討する。

**キーワード**：照射損傷、統計的、非平衡欠陥生成数、多体相互作用

### 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、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、カスケード衝突の欠陥に及ぼす溶融ゾーンの影響について説明しました。

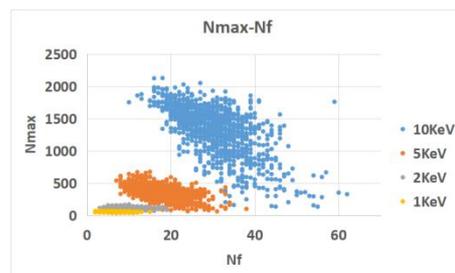
### 2. 方法

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、環境温度 0K、PKA エネルギー 1-10KeV 範囲で固定し、ランダムな方向に対して 1000 個のカスケードを作り、欠陥生成数を評価した。欠陥の数と分布は Wigner-Seitz 法で判断され、最大欠陥数での原子配列がカスケード衝突ピークのスナップショットとして取られました。融解ゾーンの形態は、衝突ピークの原子温度が融点よりも高い場合、原子は溶融ゾーンになると判断された。そのうち、定範囲原子の平均温度は融点よりも高くの中心原子は液体原子と判断された。入射エネルギーによっても、融解ゾーン、ピークと残留欠陥の依存性を分析した。

### 3. 結果

結果によって、溶融ゾーン、ピークと残留欠陥の平均値は入射エネルギーと正の相関がありますが、液体原子数の増やすは入射エネルギー増加とともに緩める。同一入射エネルギーの場合、残留欠陥数はピーク欠陥数に反比例し、入射エネルギーの増加とともに相関が増加します。

溶融ゾーン原子温度の入射エネルギー依存性について、2 KeV から原子温度平均値はエネルギーに負関係になる。同一入射エネルギーの場合、融解ゾーンの単原子温度は  $N_{max}$  と負の相関があり、入射エネルギーの増加とともに相関は低下する。



### 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 Chen<sup>1</sup>, Xiaoyong Ruan<sup>1</sup>, Toshiki Nakasuji<sup>1</sup>, Kazunori Morishita<sup>1</sup>, Yoshiyuki Watanabe<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Kyoto University, <sup>2</sup>National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology