

MD法を用いた高エネルギー中性子照射下における 自己格子間原子集合体形成過程の解明

MD simulations to evaluate formation process of self-interstitial-atom clusters
under high energetic neutron irradiation

*寺山 怜志¹, 岩瀬 祐樹², 早川 頌³, 沖田 泰良¹, 板倉 充洋⁴

¹東京大学大学院工学系研究科, ²東京大学工学部, ³テネシー大学, ⁴日本原子力研究開発機構

面心立方金属を対象にして、高エネルギー中性子照射下における自己格子間原子集合体の形成に及ぼす積層欠陥エネルギー(SFE)の影響を分子動力学法により定量化した。集合体が大きい場合、可動な集合体の数は積層欠陥エネルギーが大きくなると、従来の依存傾向から外れることが明らかとなった。

キーワード：カスケード損傷、面心立方金属、積層欠陥エネルギー

1. 緒言

軽水炉炉内構造材料として用いられているオーステナイト鋼は最も SFE が低い金属であるため、欠陥集合体形態が特異な可能性がある。そのため、構造材料の挙動予測を行う上で、SFE の影響を解明することは重要である。我々のグループでは、SFE が低くなると完全転位ループの形成促進により、可動な集合体の形成率が高くなることを明らかにした^[1]。一方、このことは比較的集合体が小さい場合においてのみ成立し、集合体が大きくなると明らかでない可能性も示唆してきた^[2]。そこで、本研究では、面心立方金属の場合における、大きな集合体形成率が高くなるより高エネルギー付与下での自己格子間原子集合体の特徴を解明した。

2. 計算手法

本研究では、SFEのみを 14.6~186.5mJ/m²において 6 段階で変化させ、その他の物性値を極力一定にした面心立方金属の原子間ポテンシャルを用いて計算を行った^[3]。初期温度については既往研究を参考に 600K に設定し^[1]、一次はじき出しエネルギー(E_{PKA})を 100keV、計算セル内原子数を 4.7×10^7 にして、NVE アンサンブルで 100ps までの計算を行った。各条件においては、25 回の繰り返し計算を行い、結晶欠陥形成数、および欠陥集合体の形態に及ぼす SFE の影響を明らかにした。

3. 結論

図 1 には、集合体の大きさごとに分類し、全集合体数に対する可動な集合体数割合の SFE 依存性を示す。サイズが 48 個以下の集合体では、低 SFE で完全転位ループが多く形成し可動な集合体が多く観察される従来の傾向同様、SFE の増加に伴い可動な集合体の割合は減少することが分かる。一方、 $E_{PKA} = 100\text{keV}$ では、比較的大きな集合体も形成しており、サイズが 49~192 の集合体に着目すると、従来の傾向は限られた範囲においてのみしか観察されず、最も大きな SFE ではその傾向から外れていることが分かる。これは、高エネルギー付与非平衡下での欠陥形成過程においても、静的エネルギー計算結果^[2]を反映した欠陥形態となることが分かった。

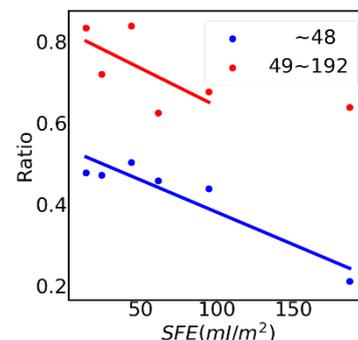


図 1 可動な集合体数割合の
SFE 依存性

参考文献

[1] 沖田泰良他, 日本原子力学会 2016 年秋の大会

[2] S.Hayakawa et al, J Mater Sci (2019) 54:11096

[3] V.Borovikov et al., Modeling Simukl. Mater. Sci. Eng.23(2015)055003

*Satoshi Terayama¹, Yuki Iwase², Sho Hayakawa³, Taira Okita¹ and Mitsuhiro Itakura⁴

¹School of Engineering, the University of Tokyo, ²Faculty of Engineering, the University of Tokyo, ³University of Tennessee, ⁴Japan Atomic Energy Agency