

機械学習分子動力学法を用いた Zr 中における空孔集合体挙動の解明

Behaviors of vacancy cluster in Zirconium by machine learning molecular dynamics

*馬場 貴生¹, 寺山 怜志², 沖田 泰良³, 板倉 充洋⁴, 奥村 雅彦⁴

¹ 東京大学工学部, ² 東京大学大学院工学系研究科, ³ 東京大学大学院工学系研究科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 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により原子間ポテンシャルを作成し, これを用いた分子動力学法により空孔集合体の挙動を解明した.

キーワード: 第一原理計算, c 型転位ループ, 燃料被覆管

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集合体を形成し, これが潰れて c-type 転位ループとなる. Zr 合金に特徴的な照射劣化は, 主として c-type 転位ループ形成とほぼ同時に発生するため[1], 原子挙動に基づいて c-type 転位ループ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である. 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[2]. 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 MD 法を用い, Zr 中での c-type 転位ループ形成過程を解明することを目的とする.

2. 計算方法の概要

機械学習 MD 法では, Behler-Parrinello 法を用い[3], 比較的小さな系で第一原理計算の結果を人工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, 系の拡張には N2P2 を用いて学習させた. また, 作成した原子間ポテンシャルを用いて, LAMMPS[4]により MD 計算を行った.

3. 計算結果

図 1 には, 教師信号の例として, 6 原子を含む系において格子定数, c/a をそれぞれ $\pm 15\%$ の範囲で変化させエネルギーを求めた第一原理計算の結果を示す. 格子定数 $3.227 \text{ \AA}$, $c/a 1.5975$ での最安定が再現されていることがわかる. ひずみ付与下における系のエネルギー計算は, 面心立方構造を対象としても行い教師信号とすることで, c-type 転位ループ形成で観察される積層欠陥部分の再現も可能となった.

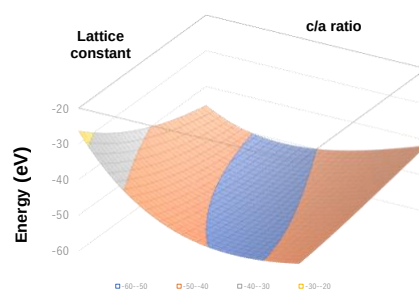


図 1 系のエネルギーの a 軸方向長さ, c/a 比依存性

参考文献

- [1] A. V. Barashev et al., J. Nucl. Mater. 461 (2015) p.85
- [2] H. Yu et al., 日本原子力学会 2017 年春の大会
- [3] J. Behler et al., Phys. Rev. Lett., 98 (2007) 146401
- [4] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator < <http://lammps.sandia.gov/> >

*Takao Baba¹, Satoshi Terayama², Taira Okita³, Mituhiro Itakura⁴ and Masahiko Okumura⁴

¹School of Engineering, the University of Tokyo., ²Department of Engineering, the University of Tokyo., ³Research into Artifacts, Center for Engineering, School of Engineering, the University of Tokyo., ⁴JAEC-CCSE