

## 中性子照射下における材料損傷過程の反応速度論解析

Rate theory analysis of material damage process under neutron irradiation

\*祝 梁帆<sup>1</sup>, 森下 和功<sup>1</sup>, 渡辺 淑之<sup>2</sup>

<sup>1</sup>京都大学, <sup>2</sup>QST

反応速度論により照射欠陥集合体の蓄積過程のモデル化を行い, その挙動を明らかにした. そして, 溶質クラスターの形成エネルギーを考慮し, 損傷速度(dpa/s)や照射温度などの照射条件の違いが材料照射損傷に及ぼす影響を評価した.

**キーワード**: 材料照射損傷, 照射相関, 欠陥集合体, 蓄積, 反応速度論

### 1. 緒言

原子炉や核融合炉の構造物においては, 中性子の照射を受けて材料内に欠陥集合体(溶質クラスターや転位欠陥)が形成され, その機械特性は劣化するため, 炉設計および炉の保全には照射劣化を考慮することが重要である. 照射速度の違いにより, 脆化の原因となる溶質クラスターや転位欠陥の生成率が変化してしまう. 溶質元素がクラスター形成に与える影響やクラスター形成に関する照射速度依存性については詳しく分かっていない. より高精度の脆化予測を実現するには, この照射速度の違いによるクラスター形成の挙動の変化や, 溶質原子がクラスター形成に与える影響を詳しく理解することが必要である.

本研究ではクラスターの形成エネルギーについて組成だけでなくクラスターサイズの関数になるように再度フィッティングし, 速度論モデルを用いて, 中性子照射条件の違いが欠陥集合体形成に及ぼす影響を明らかにした.

### 2. 数値解析手法

MD データ<sup>[1]</sup>に基づき, 最小二乗法を用いてクラスターサイズ  $n$  の関数として再度フィッティングして, 溶質クラスターの形成エネルギーや結合エネルギーについて, 再フィッティングした式<sup>[2]</sup>と分子動力学式や正則溶体近似の式と比較した. また, 空孔-銅クラスターについてこの式のパラメータを基に反応速度論モデルを構築し, 照射場依存性や照射温度の影響を調べた. このモデルでは, 単欠陥 (I, Cu, U) のみが移動するとし, それらの集合化や消滅, 熱的解離を表現でき, それぞれの欠陥濃度の経時変化を解いた.

### 3. 結論

図1は再度フィッティングした式とMDデータ比較し, その妥当性を検証した. 縦軸に形成エネルギー, 横軸にクラスターサイズとしている. 組成  $\alpha$  を固定した場合, サイズの増加に合わせて形成エネルギーも増加する. また図2は縦軸をクラスター内の銅原子の組成, 横軸を温度としている. 照射温度が大きくなるほど, また照射速度が遅くなるほど, クラスター内の銅原子の組成が大きくなり, 空孔主体のクラスターではなく銅原子主体のクラスターが形成されることが分かる.

### 参考文献

[1] Kazunori Morishita, Toshiki Nakasuji, and Xiaoyong Ruan. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, Vol. 393, pp. 101–104, 2017.

[2] 松岡 雄地. 軽水炉圧力容器鋼における溶質クラスターの解析. 2021 京都大学大学院エネルギー科学研究科. 修士論文

\*Liangfan Zhu<sup>1</sup>, Kazunori Morishita<sup>1</sup> Yoshiyuki Watanabe<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Kyoto Univ., <sup>2</sup>QST

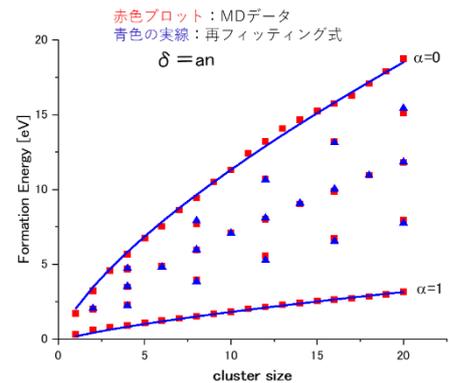


図1 MD データと再フィッティング式の形成エネルギーの比較

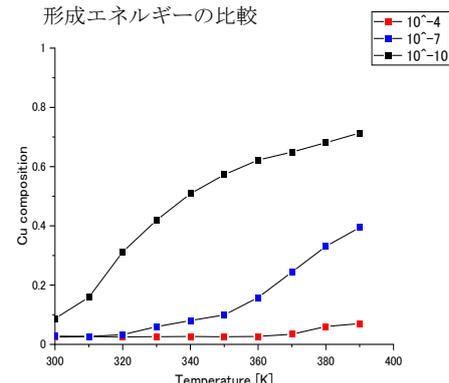


図2 空孔-銅クラスターの組成の照射速度依存性