

機械学習分子動力学法による Zr 中の空孔集合体挙動解明に関する研究

Behaviors of Vacancy Clusters in Zr by Machine Learning Molecular Dynamics

*津川 聖人¹, 寺山 怜志, 沖田 泰良¹, 奥村 雅彦², 板倉 充洋²

¹ 東京大学, ² 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、原子空孔集合体の挙動を解明した。

キーワード：ニューラルネットワーク，空孔集合体，第一原理計算

1. 緒言

BWR で使用される Zry-2 では、燃焼度が一定値 (~40GWd/t) を超すと、c-type 転位ループが観察されることが知られている^[1]。c-type 転位ループは、中性子照射下で形成した原子空孔が異方拡散し、六方晶底面上に集合体を形成し、これが潰れてできたものと考えられている^[2]。c-type 転位ループが観察される燃焼度とほぼ同時に Zry-2 の水素吸収量が急激に増加し^[3]、水素脆化が誘起されることが確認されている^[4]。これらを踏まえると、c-type 転位ループの形成過程を解明することは、水素脆化を抑制した材料設計のためにも重要な研究課題と位置付けられる。本研究では、機械学習ポテンシャル (MLP) を用いた分子動力学 (MD) 法により、c-type 転位ループ形成過程を原子レベルの挙動から解明することを目的とする。

2. 計算方法

本研究では、VASP^[5]を用いて第一原理計算を行い、小さな系における原子分布とエネルギーの対応関係を表すデータセットを作成した。これらを教師信号として入力し、BP 法^[6]が実装されている N2P2 を用いて^[7]、ANN によってトレーニングを行うことで、原子分布とエネルギーの対応関係を大きな系において拡張した。これらによって作成した MLP を用いて、LAMMPS^[8]で MD 計算を実行した。

3. 結果

図 1 には一辺あたりの空孔数が 10 個の六角形集合体を底面に配置した場合の構造緩和による形態変化を示す。空孔集合体は、空孔形成エネルギーと集合体に含まれる原子数の積で近似されるエネルギー分高くなっているため (図(a))、このエネルギーを減少させるため原子間距離が短くなるように、集合体直上と直下の原子が移動を開始する (図(b))。このまま集合体が潰れると不安定構造となってしまうため、局所安定の方向へのスライドを開始し積層欠陥位置で準安定構造となる (図(c))。この一連の動きによって、c-type 転位ループの形成が確認された (図(d))。これらの過程を解明するためには、空孔形成エネルギー、表面エネルギー、底面における転位の挙動、積層欠陥エネルギーを精緻に取り入れたポテンシャルが不可欠であり、本研究で構築した MLP によって初めて可能となった。

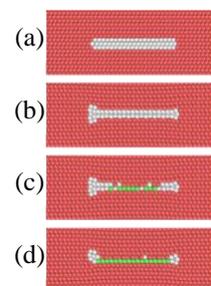


図 1 c-type 転位ループ形成過程

参考文献

- [1] A.V. Barashev et al., J. Nucl. Mater., 461 (2015) 85. [2] S.M. Lie et al., Nat. Commun., 11 (2020) 5766.
 [3] F. Garzarolli et al., J. ASTM Int. 7 (2010) 1. [4] 宮下俊靖ら, 日本原子力学会和文論文誌 7 (2008) 380.
 [5] G. Kresse et al., Phys. Rev. B. 54 (1996) 11169. [6] J. Behler et al., Phys. Rev. Lett. 98 (2007) 1-4.
 [7] A. Singraber et al., J. Chem. Theory Comput. 15 (2019) 1827. [8] S. Plimpton, Phys. 117 (1995) 1.

*Kiyoto Tsugawa¹, Satoshi Terayama, Taira Okita¹, Masahiko Okumura² and Mitsuhiro Itakura²

¹ the University of Tokyo, ²JAEA-CCSE