

中性子照射下における Fe 内の非平衡欠陥生成に関する統計的評価

Statistical assessment of athermal point defect production in iron during neutron irradiation

*祝 梁帆¹, 陳 昱婷¹, 森下 和功¹

¹京都大学

分子動力学法により計算された 20 eV～50 keV の PKA エネルギーの衝突カスケードデータベースと中性子照射場が作る PKA エネルギースペクトルをもとに、点欠陥やカスケードクラスターの生成率について、その平均値とゆらぎについて統計学に基づき評価し、これがマイクロ構造発達に対する影響を調査した。

キーワード：照射損傷，衝突カスケード，照射欠陥，統計，ゆらぎ

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中に点欠陥が高密度に生成され、それによって材料の機械特性は劣化（脆化）する。炉設計および高経年化炉の保全においては、照射脆化を考慮することが重要である。従来の照射脆化予測では、点欠陥生成について、主に平均的なふるまいに関する議論が行われてきたが、生成数や空間的ゆらぎの効果についてはほぼ議論されていない。生成欠陥濃度のゆらぎはマイクロ構造発達に影響する可能性があり、照射脆化予測を高度化する上で重要な論点である。本研究では、点欠陥やカスケードクラスターの生成率の平均値やそのゆらぎについて統計学的評価を行い、それがマイクロ構造発達に対する影響を調査することを目的とした。

2. 解析手法

分子動力学（MD）解析を用いて、 α -Fe 材料中の原子のひとつをランダムに選び、それを一次はじき出し原子(PKA)とし、その原子に 20 eV～50 keV の運動エネルギー(=PKA エネルギー)をランダムの方角に与え、その後の原子間衝突連鎖をシミュレーションした。同一の PKA エネルギーに対し 1000 ケースのシミュレーションを実施した。その結果に対して、統計的な分析を行い、図 1 のように、点欠陥やカスケードクラスターの生成数の確率分布関数、それらの平均および標準偏差を PKA エネルギーの関数として求めた^[1]。次に、例として HFIR 照射場等が作る PKA エネルギースペクトルを PHITS(Version 3.280)^[2]コードを用いて評価し、上述の MD 解析結果と合わせることで、照射場特有の欠陥生成率評価を試みた。さらに、この結果をモンテカルロ法や反応速度論解析の入力とすることで、特定の照射場におけるマイクロ構造発達を定量評価した。非平衡欠陥生成率やカスケードクラスター生成率のゆらぎがマイクロ発達評価に及ぼす影響について考察した。

3. 結果

図 2 は欠陥生成数の中性子入射エネルギー依存性を示す。中性子エネルギーが 1MeV より小さいときに欠陥生成数の分布は正規分布に従い、それより大きくなると段々指数分布になった。点欠陥生成速度のゆらぎがマイクロ構造発達に対する影響は小さいが、カスケードクラスターの生成率のゆらぎに対する影響は大きいことが分かった。

参考文献

[1] Y. Chen, et al., Nucl. Mater. Energy, 30 (2022) 101150. [2] T. Sato, et al., J. Nucl. Sci. Technol. 55 (2018) 684.

Liangfan Zhu¹, Yuting Chen¹, Kazunori Morishita¹

¹ Kyoto Univ.

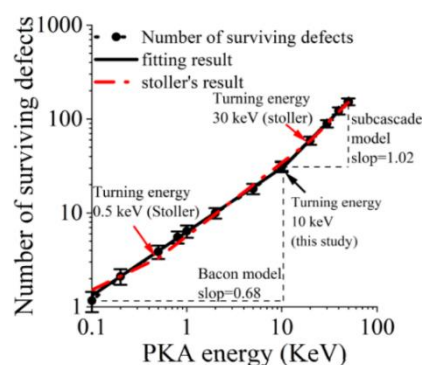


図 1 欠陥生成数と PKA エネルギーの関係

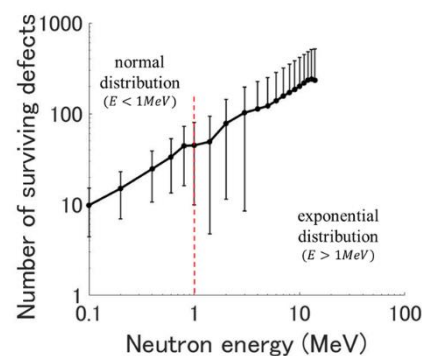


図 2 欠陥生成数と中性子エネルギーの関係