

分子静力学法と線形弾性論に基づくBCC鉄中の照射欠陥の緩和体積の評価

Evaluation of the relaxation volume of irradiation defects in BCC iron based on molecular static method and linear elasticity theory

阮 小勇¹, 渡辺淑之¹, 森下和功², 野澤貴史¹
¹量研, ²京大

RUAN Xiaoyong¹, WATANABE Yoshiyuki¹, MORISHITA Kazunori², NOZAWA Takashi¹
¹QST, ²Kyoto University

研究背景: アクションプランの「核融合中性子照射影響の解明、照射劣化モデルの構築」の一環として、BAフェーズII活動では、ブランケット構造材の体積スウェリング（膨張現象）評価とその結果をもとに、健全性評価に必須である照射欠陥形成に起因する材料内部の応力分布（ひずみ分布）の評価を進めている。照射欠陥（欠陥集合体）の形成により生じる材料の体積変化量をナノスケールからマクロスケールまでの幅広いサイズ領域において評価し、構造材料の応力分布を予測することが必要である。

問題点: 欠陥集合体による体積変化量評価に関する研究は主に欧州を中心にダイバータ用材料であるタンゲステンを対象に行われてきた [1]。しかしながら、F82H鋼のようなフェライト系材料については限定的な情報（単一の格子間原子や空孔の体積変化量）しか存在してない。

研究目的: BCC鉄中の代表的な欠陥集合体である空孔（V）集合体と自己格子間原子（SIA）集合体の実質的な体積（緩和体積）を数値解析により定量化する。

数値解析手法: 分子静力学（MS）法と線形弾性論の物理式を用いた解析 [2,3]を行い、従来モデルに比べてより現実に近い（弾性歪みの効果を取り込んだ）解析により緩和体積を評価する。具体的には照射欠陥周辺の局所的変位量に着目し、原子レベルの大きさから数10 nmレベルの大きさの照射欠陥による体積変化量を算出した。続いて、算出した緩和体積を線形弾性論に基づいた連続体モデル式に適用し、緩和体積和体積をサイズの関数として定式化した。

結果と考察: 欠陥集合体の緩和体積はサイズ（N）に強く依存しており、SIA集合体の緩和体積はサイズの増加に伴い増加し、空孔集合体の緩和体積

は減少する傾向を示した。これらの傾向はタンゲステンなどの先行研究の結果 [1]とも良く一致している。また、取得した緩和体積量のサイズ依存性データを連続体モデル式に適用し、以下の近似式を得た。

- $V_{rel}^{SIA} = \Omega_0 N - 0.07 \Omega_0 \sqrt{N} \ln(N) - 0.055 \Omega_0 \sqrt{N} + 0.419 \Omega_0 (N \geq 1)$, (Ω_0 : 1個原子の体積)
- $V_{rel}^V = -0.108 \Omega_0 N^{\frac{2}{3}} - 0.417 \Omega_0 N^{\frac{1}{3}} + 0.229 \Omega_0 (N \geq 1)$

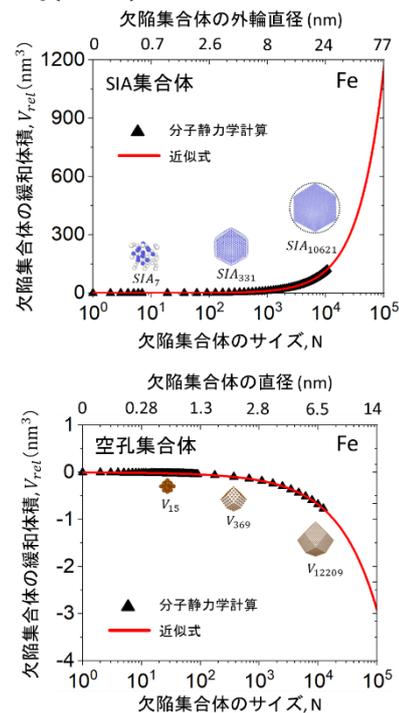


図1 BCC鉄におけるSIA集合体と空孔集合体の緩和体積と欠陥集合体サイズの関係

参考文献

- [1] Daniel R. Mason et al, J.Appl. Phys., 2019
- [2] J.P. Hirth, J. Lothe, Theory of Dislocations, 2nd ed., Krieger, Malabar, FL, 1992
- [3] K.Morishita et al, PRICM-4, Honolulu, HI, 2001