

照射下材料中の非平衡欠陥生成に関する統計評価 Statistical evaluation of non-equilibrium defect formation in materials during irradiation

陳 昱婷¹, 森下和功¹, 渡辺淑之²

¹京大, ²量研

Chen Yuting¹, Kazunori Morishita¹, Yoshiyuki Watanabe²

¹ Kyoto University, ² QST

研究背景: 構造材料の照射損傷においては、はじき出し損傷過程の統計的ふるまいに起因して、生成欠陥量にゆらぎが見られる。従来の研究では、計算機性能の制約により、はじき出し損傷過程のシミュレーションは高々数回行うことが限界であった。照射下構造材料の健全性評価の高度化のために統計的なゆらぎの効果を取り入れるには、まず、生成欠陥量の確率分布を評価する必要がある。本研究では、鉄中のカスケード損傷の分子動力学シミュレーションをひとつのPKAエネルギーあたり1000回行う、PKAエネルギーによる欠陥生成率とクラスター生成率について統計的視点から評価した。

研究課題: F82H鋼の主構成要素である純鉄を対象に大規模MD計算を実施し、カスケード損傷における残存欠陥数Nfについて評価した。ここでは、PKAエネルギーを0.02~50 keVとし、各条件で1000個以上の統計データを取得することで解析結果の精度向上を試みた。そして、既存のカスケード生成欠陥数モデルとの比較を試みた。

工夫: カスケード損傷計算においては、Mendelevポテンシャルを用いた分子動力学法により、 α -Fe材料中で生じるカスケード衝突をシミュレートした。計算条件は、PKAエネルギー0.02~50keV、PKAの方向をランダムとした。10keV以上の入射エネルギーに、二温度モデル(2T-MDモデル)を介して電子摩擦の影響を考慮した。各エネルギーに対してPKAの方向が異なる1000個のカスケード損傷をシミュレートし、シミュレーションセル内の原子に対して、Nordlund方法で溶融ゾーンを評価し、Wigner-Seitz法を使って欠陥(フレンケル対)を同定した。PKAエネルギーの関数として欠陥生成数の統計的な整理を行い、生成欠陥数のモデルの構築を試みた。

結果と考察: 生成欠陥数(=残存欠陥数の平均Nf)の確率分布は、ガウス分布を示す。Nfの平均値の

エネルギー依存性は、四つのエネルギー範囲に分割される。100eV未満ではNRTの線形分布に従う、0.1~10keVは、1keVを分岐とする2つの範囲に分割され、それぞれ指数0.73と0.68のべき乗関係を持ち、ベーコンモデルに近かった。10keV以上では再び線形関係に戻る。

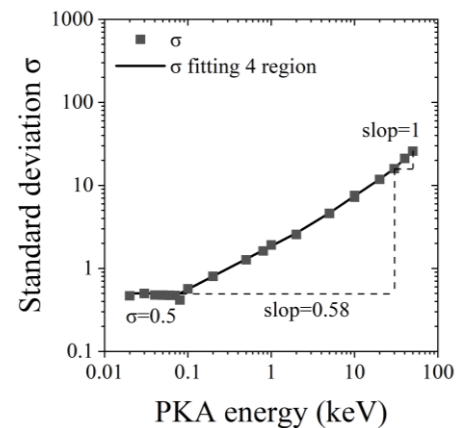
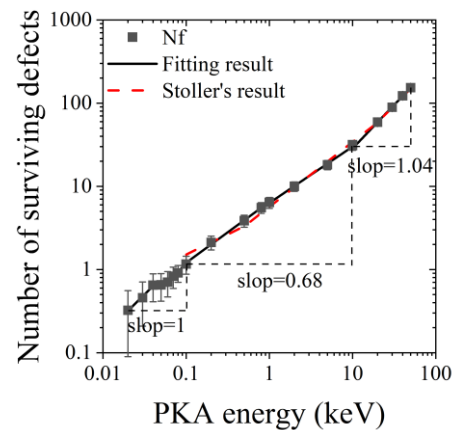


図1 生成欠陥数の平均値および標準偏差

標準偏差は、0.1keV、2keVと30keVを境界とする四つの領域に分割され、一定値(<0.1keV)、指数0.52(0.1~2keV)と0.67(2~20keV)のべき乗関係、線形関係(≥ 30 keV)を示した。