

[H27-01]

加速器を利用した照射材料挙動モデルの構築と微小試験法の開発

Modeling of microstructural evolution in irradiated materials by using ion accelerator and development of experimental method with miniature specimen

照射下ミクロ組織発達モデル構築

Modeling of microstructural evolution in materials under irradiation

沖田泰良^{A)}, Yang Yingjuan^{B)}, 早川頌^{B)},
Taira Okita^{A)}, Yang Yingjuan^{A)}, Sho Hayakawa^{A)}
^{A)} the University of Tokyo

1. はじめに

1. 緒言

高エネルギー粒子照射下で使用する原子力材料においては、はじき出し連鎖過程（カスケード損傷過程）により高密度の原子空孔、自己格子間原子（SIA : Self-Interstitial Atom）と共に、欠陥集合体も直接形成することが明らかとなっている[1]。この過程で形成する SIA 集合体は、一次元方向への極めて迅速な拡散により、高密度の原子空孔存在領域から逸脱する。これにより点欠陥の再結合率が減少し、照射劣化を促進する要因となりうることが指摘されている[2]。そのため、カスケード損傷下で形成する SIA 集合体の挙動を精緻に把握することが、中性子照射環境での特異的な劣化挙動を解明する上で不可欠である。

本研究では、一次元運動により転位近傍に集積した SIA 集合体が、別方向への移動により転位に吸収される過程に着目して、そのモデル化を行った。特に、7SIA 以上の比較的大きな集合体の転位への吸収・消滅メカニズムである保存的上昇運動に関して、弾性論と分子シミュレーションを融合させることによって、定量化した。

2. 計算方法

SIA 集合体縁部に存在する欠陥のパイプ拡散は、転位とのひずみ場相互作用により、優先的な拡散方向、優先度合いが決まる。縁部欠陥が転位側に集積し SIA 集合体重心が変化した場合、保存的上昇運動が発生したと見なす。この過程に必要なパラメータ（欠陥形成エネルギー、パイプ拡散係数、相互作用エネルギー）は分子動力学法により算出し、機構論

的モンテカルロの入力パラメータとして、SIA 集合体の保存的上昇運動をモデル化した。

3. 結果・考察

図 1 は上昇運動速度に対する転位からの距離依存性を示す。転位近傍において急激な上昇運動速度の増加が見られる。この速度は、転位からの距離の逆 2 乗に比例しており、アインシュタインの関係式から得られる結果と一致している。また図 2 は上昇運動速度の SIA 集合体サイズ依存性を示す。上昇運動速度は SIA 集合体直径の⁻⁸ 乗に比例することが明らかとなった。この結果は、従来の解析的モデルよりも強い依存性である[3]。これは、SIA 集合体縁部に存在する SIA と原子空孔の再結合から逃れパイプ拡散する確率が、集合体サイズと共に急激に減少することに起因する。

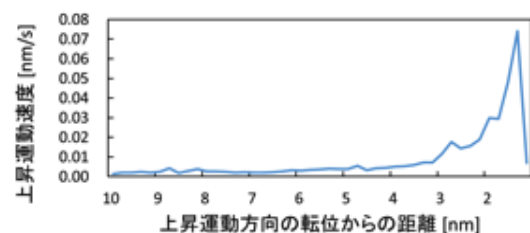


図 1 SIA 集合体保存的上昇運動速度の
転位からの距離依存性

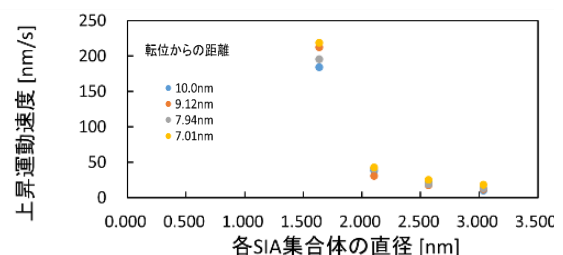


図 2 保存的上昇運動速度の SIA 集合体
サイズ依存性

[H27-01]

参考文献

- [1] R.S. Averback, T. Diaz de la Rubia, in: H. Ehrenreich, F. Spaepen (Eds.), Solid State Physics, vol. 51, Academic Press, 1998, p. 281.
- [2] B.N. Singh, M. Eldrup, A. Horsewell, P. Ehrhart and F. Dworschak, Phil. Mag. A 80 (2000) p.2629.
- [3] H. Trinkaus, B.N. Singh, A.J.E. Foreman, Journal of Nuclear Materials, 251(1997)172.