

機関番号：82110

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2008～2010

課題番号：20560622

研究課題名（和文）照射下微細組織変化予測のための点欠陥クラスタ安定性評価

研究課題名（英文）Stability evaluation of point defect clusters to estimate microstructural change during irradiation

研究代表者

實川 資朗 (JITSUKAWA SHIRO)

独立行政法人日本原子力研究開発機構・原子力基礎工学研究部門・研究主席

研究者番号：80354835

研究成果の概要（和文）：高エネルギー中性子の照射により材料中に生じる、点欠陥の集合体の照射下での成長/消滅挙動に関し、イオン照射実験をもとに、集合体が周囲に形成する点欠陥を捕獲する領域を評価し、これまでの想定よりも大きく、かつ歪み場により形成されること明らかにした。これをもとに微細組織変化シミュレーションを行い、集合体密度が飽和を生じる機構及び集合体の安定性を正確に定めることに成功し、将来的な照射損傷制御法の端緒を得た。

研究成果の概要（英文）：Capture radius of interstitial loops for point defect clusters have been evaluated by in situ ion-irradiation experiment and model calculation. Relatively large capture radius for clusters was obtained. Also, the minimum size for dislocation loop exhibiting strain field has been detected, The value is of about 1nm. By using minimum size of interstitial loops and using capture radius for clusters fate and the stability of point defect clusters has been evaluated. The results are useful to control irradiation damage.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
19年度	1,100,000	330,000	1,430,000
20年度	900,000	270,000	1,170,000
21年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	2,500,000	750,000	3,250,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：材料工学・金属物性

キーワード：格子欠陥、電子顕微鏡、照射損傷、点欠陥クラスタ、微細組織

1. 研究開始当初の背景

高エネルギー粒子の照射により材料中に生成する格子間原子(I)や原子空孔(V)のクラスタは、照射中に成長し、材料の微細組織を変化させる。これが原因の一つとなり強度等の巨視的特性の変化が生じる。これまでクラスタのうちで、比較的大きな V-クラスタ(数 10nm 以上)の安定性及び成長挙動を中心に研究が行われ、この結果、ボイドスウェリングの機構等が明らかにされた。

一方、I-クラスタの生成や成長を含む「安

定性」等については、初期に理論的な取扱いがなされたが、実験的な評価に複雑な点があり進展は少なかった。しかし、I-クラスタの安定性は、格子欠陥の基本的性質を反映することに加え、材料の照射硬化挙動を支配するため、破壊靱性の低下、延性脆性遷移温度の上昇、疲労寿命の低下、さらに応力腐食割れ感受性の増加等を左右する。従って応用上も、例えば、地震力を受けて微小変形した炉心機器の再使用可能性判断等について、照射挙動の予測を通じ、有力な科学的基盤の一つを提

供する重要性を持つ。なお、これまでのI-クラスタと点欠陥との相互作用に関する研究では、I-クラスタの安定性(或いは、「点欠陥を吸収する力」)は、クラスタの状態(例えば、大きさ)に依存せず一定とされることが多かった。

我々は、以前より照射下でのその場観察等によりI-クラスタの成長挙動等の安定性評価手法の開発を進めてきており、クラスタの安定性がクラスタの寸法に依存し、小さいI-クラスタが消滅しやすい(低安定性)ことを指摘してきた[4,5]。これは、クラスタが持つ歪み場の重なり度合いが、クラスタの性質を変えた結果と考えている(点欠陥を吸収して成長する力が減少した)。このI-クラスタの安定性をパラメータの一つに加えることで、照射硬化の照射量依存性と言った、応用上も重要な挙動を、初めて明瞭にし得ることを明らかにした。また、イオン照射によるシミュレーション照射実験等の結果から、実際の炉での挙動を推定しようとする場合、常に問題とされる未解決問題である「照射損傷速度の効果」の補正法も、より明確になると考える。本提案では、I-クラスタの安定性に関するクラスタ寸法依存性を主に照射実験等により定量的に示し、これに基づく計算コードと照射実験により、構築した照射下微細組織変化の予測能力を検証することを目指した。

2. 研究の目的

本提案では、最初の段階として、照射下でのその場観察実験により、I-クラスタの成長挙動を測定し、この結果から安定性と寸法の関係等のデータを収集し、これを解析して反応速度論ベースの微細組織変化コードに組み込む。次いで、実際の照射下微細組織変化と比較することで、I-クラスタの安定性評価に加えて、微細組織変化の予測能力を定量的に評価する。また、コードを多次元化し、照射下でしばしば形成されるナノメートルレベルの周期構造形成に及ぼす様々な支配因子の評価等を試み、これを通じて予測能力をさらに高める。

高エネルギー粒子照射は、カスケード損傷を介してI、Vクラスタを生じさせる。もしクラスタが安定であれば、照射量に連れてクラスタの数密度が増え続け、硬化量も増え続けるはずであるが、実際には硬化は照射量に対して飽和傾向を示す。これは小さいI-クラスタの安定性が低くなければ説明しにくい。このように小さいI-クラスタの安定性は、実用的にも重要性が高い照射硬化挙動の鍵の一つであると考えられる。なお、これはステンレス鋼や銅のような面心立方金属の場合であって、鉄のような体心立方金属については、取り扱いの中に、これに加えて、クラスタ自体の移動による消滅過程も含める必要

があると考えて進めた。

3. 研究の方法

点欠陥クラスタの安定性の評価は、V-クラスタの一部に関するものを除き、検討例が極めて少ない。本研究では、電子顕微鏡中でのその場照射実験による微細組織変化の連続観察と、MD法や反応速度論等の計算機実験を用いて、観察結果の解析とモデル化を行い、特に、「I-クラスタ(転位ループ)が点欠陥を吸収する力」を定量的に明らかにすることを試みた。初年度は、主に電子線照射下での微細組織のその場観察、及びMD法によるクラスタと点欠陥に働く力等の原子レベルでの計算機実験を行った。次いで、電子顕微鏡中で、イオン照射による組織変化を観察し、また電子線照射を組み合わせることで、カスケードにより導入されるクラスタの影響を評価する。加えて反応速度論に基づく計算等を使い、以前より進めて来た照射及び計算機実験の結果に基づき、I-クラスタと点欠陥の間に働く力を評価した。これに加えて、カスケードによるクラスタ生成の影響を組み入れ、広い寸法範囲及び長時間にわたる、かつカスケード損傷の影響を含めた微細組織変化の計算機シミュレーション手法を得ると共に、実験結果と比較して有効範囲を評価した。また、組織変化とマクロ的特性を結びつけるパラメータの一つである照射による硬化量を、極微小硬さ試験によりイオン照射試料について評価し、マクロ的な特性変化の予測に発展させるよう進めた。

4. 研究成果

電子顕微鏡による照射下微細組織のその場観察、及びMD法と反応速度論による微細組織変化に関する計算機実験を進め、計算方法を見いだした。計算機実験では、点欠陥クラスタと点欠陥の相互作用を反応速度論計算に組み込み、従来のモデルでは説明がつきにくかった、照射下でのクラスタの消滅過程のモデル化を進め、微細組織変化の照射量依存性の予測精度を向上させた。また、その場観察実験では、クラスタ密度の照射速度依存性の評価を進め、クラスタの数密度を決める因子として、移動による合体、空孔の吸収による収縮等を抽出した。当初の目標を達成し、加えて、マルチスケールモデル化を進め、国際会議での発表準備等も進めた。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計4件)

K. Suzuki, S. Jitsukawa, N. Okubo and F. Takada, "Intensely irradiated steel

components: Plastic and fracture properties, and a new concept of structural design criteria for assuring the structural integrity” Nuclear Engineering and Design, 240(2010)1290

S. Jitsukawa, K. Suzuki, N. Okubo, M. Ando and K. Shiba, “Irradiation effects on reduced activation ferritic/martensitic steels - tensile, impact, fatigue properties and modeling”, Nuclear Fusion, 49 (2009) 115006

Y. Abe and S. Jitsukawa, “Phase transformation of Cu precipitate in Fe-Cu alloy studied using self-guided molecular dynamics”, Philosophical Magazine Letters, 89 (2009) 535

Y. Abe and S. Jitsukawa, “Lowest energy structures of self-interstitial atom clusters in alpha-iron from a combination of Langevin molecular dynamics and the basin-hopping technique”, Philosophical Magazine, 89 (2009) 375

[学会発表] (計 3 件)

S. Jitsukawa, Y. Abe, K. Suzuki and N. Okubo, “Preliminary models on irradiation induced changes of microstructure and stress-strain relations to estimate mechanical response of austenitic and martensitic steel components”, ASTM E-10 Symposium 2011 6月

Y. Abe, S. Jitsukawa, N. Okubo, H. Matsui, T. Tsukada, “Microstructural evolution of austenitic stainless steel under cascade damage condition predicted by cluster dynamics simulation: comparison with neutron irradiated α -iron”, ASTM E-10 Symposium 2011 6月

S. Jitsukawa, et. al., “Irradiation effects on fracture behavior of martensitic and austenitic steels for fusion reactor”, International Conference on Fusion Reactor Materials, 2009, 9月

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

名称：
発明者：

権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況 (計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

[その他]
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

實川 資朗 (JITSUKAWA SHIRO)

独) 日本原子力研究開発機構・研究主席
研究者番号：80354835

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

大久保 成彰 (OKUBO NARIAKI)

独) 日本原子力研究開発機構・研究員
研究者番号：60391330

阿部 陽介 (ABE YOSUKE)

独) 日本原子力研究開発機構・研究員
研究者番号：50400403