

## 自己評価報告書

平成23年 4月28日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2008～2011

課題番号：20560771

研究課題名（和文） 空孔をプローブとした金属中の自己格子間原子およびそのクラスターの移動に関する研究

研究課題名（英文） A Study on Migration of Self International Atom and its Clusters Using Vacancies as a Probe

研究代表者

岩井 岳夫 (IWAI TAKEO)

東京大学・大学院工学系研究科・助教

研究者番号：30272529

研究分野：工学

科研費の分科・細目：総合工学・原子力学

キーワード：原子力材料、陽電子消滅法、鉄、dpa、カスケード損傷

## 1. 研究計画の概要

点欠陥生成の初期過程については、古くからはじき出しの連鎖現象が起こることが指摘され、入射粒子が材料構成原子（一次はじき出し原子：Primary Knock-on Atom, PKA）に大きいエネルギー（keV～MeV）を与えたときには、局所的に高密度の点欠陥が生成する「衝突カスケード」を生成すると考えられてきた。計算機技術と分子動力学法の発達により、はじき出し過程→冷却過程（空孔と格子間原子が再結合する過程）に至るシーケンシャルな過程が描かれ、カスケード冷却後の空孔・格子間原子の配置が計算機上で調べられるようになった。その後の照射損傷組織の発達を特徴付ける重要な情報としては、

I 空孔・格子間原子のカスケード内クラスタリング

II 自由点欠陥生成効率

III クラスターの移動

が挙げられる。これらに関する分子動力学法などの計算機シミュレーションによる評価は盛んになされているが、これらの計算結果を裏付けるような十分な実験研究がなされてきたとは言えない。本研究では、空孔型欠陥にきわめて敏感な測定手法である陽電子消滅法を用いて、カスケード損傷構造を直接的に評価できる実験データを導出し、計算機シミュレーションの妥当性を検証する。

## 2. 研究の進捗状況

照射によって導入される格子欠陥の量は、材料における照射による劣化の度合いを示す重要なパラメータである。導入される格子欠陥量を表すパラメータとしては、Norgett, Robinson, Torrens のいわゆる“NRT”による古典的モデルで計算される Displacement

Per Atom (NRTdpa, 通常は単に dpa と表記する)が一般的に使用されている。しかしながら、分子動力学法(MD)などの計算科学的手法の発達によって、NRT モデルで計算される導入欠陥の量は、その後の照射組織発達に対して有効な欠陥の量とは必ずしも一致しないことがわかってきた。keV 以上の高いエネルギーが一次はじき出し原子 (Primary Knock-on Atom: PKA) に与えられた場合、局所的なはじき出しの連鎖現象が引き起こされる (カスケード損傷)。本研究においては、前述のように実際に照射組織を制御する欠陥生成量を見積もるのに必要なはじき出し損傷効率 $\eta$ について、低温でのイオン照射と陽電子ビーム測定、および電気抵抗法を通じて実験的に測定・評価を行った。低温でのイオン照射と、その場で実施可能な陽電子ビーム測定によって、照射欠陥生成過程における基礎パラメータであるはじき出し損傷効率を実験的に評価する画期的な手法を開発した。その結果、はじき出し損傷効率は 1MeV プロトンで 0.3、2.8MeV 炭素イオンで 0.2 と前年度までに評価された。今年度は炭素イオン(2.8MeV)及びプロトン(1MeV)を用いて純鉄の等時焼鈍による電気抵抗変化のアレニウススペクトルを導出した。さらにプロトン(1MeV)照射を用いて、極低温照射下での欠陥生成効率に溶質元素が与える影響を調査した。欠陥生成効率は純鉄で 0.3~0.4、鉄基合金で 0.5~0.7 程度の値を示した。この結果は、EAM ポテンシャルを用いたカスケード損傷シミュレーションの結果 (0.2~0.5) と比べ概ね近い値を示している。溶質原子の組成による系統的な違いは明らかにはならなかった。

### 3. 現在までの達成度

#### ③やや遅れている。

(理由)

カスケード損傷に関する情報を実験的に導出するという当初の目的に対して、はじき出し損傷効率については達成できたが、移動に関する情報の導出についてまだ達成できていないため。

### 4. 今後の研究の推進方策

23年度も引き続きイオン加速器による照射実験を継続する予定であったが、利用していたイオン加速器が東日本大震災で被災し、半年～1年程度の間使用不可能の見込みである。そのため、23年度前半は加速器及び本研究に使用する実験設備の復旧を第一とする。それが完了し次第以下の実験に着手する。

対象は主として純鉄を用いる。カスケードを脱出して自由に動き回る格子間原子の評価は、以下のような手法を採る。

(1) 数ミクロン～数十ミクロンの厚さの試料を準備する。単結晶が理想であるが、結晶粒径が試料厚さより大きければよい。

(2) 陽電子ビームで測定しやすい深さ(約1 $\mu$ m程度)に、水素イオンで空孔型欠陥を導入する。こちら側の面を「空孔プローブ面」と呼ぶ。空孔濃度は、陽電子が100%空孔型欠陥で消滅する濃度を少し下回る程度が理想である。

(3) 空孔プローブ面と反対の面をイオン照射する。照射温度は、空孔が動けないステージⅢ以下の温度(200K以下)に設定する。

(4) イオン照射により生成した自由に動ける格子間原子は、試料厚さ分の距離を移動して空孔プローブで再結合消滅する。これによる空孔濃度の変化を陽電子ビーム測定装置で測定し、自由格子間原子に関する各種パラメータを導出する。

以上の手法にて、カスケードから脱出する自由格子間原子に関して、ユニークな実験データを取得する。23年度は、以下の項目を実施する。

- ・ 実験手法の妥当性の実証
- ・ 格子間原子移動温度の測定

(従来のステージⅠの最低温度23Kより低い温度で移動するか?)

得られたデータは、既存の計算機シミュレーションの結果と比較検討し、計算手法やポテンシャル、各種パラメータの検証・最適化に資する。

### 5. 代表的な研究成果

(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5件)

①H Tsuchida, T Iwai, S Kasai, H Tanaka, N Oshima, R Suzuki, T Yoshiie and A Itoh, “Vacancy evolution in Ni during irradiation at high temperatures studied by in situ positron annihilation spectroscopy in comparison with simulation profiles”, Journal of Physics: Conference Series 262 (2011) 012060, 査読有。

②A Kinomura, R Suzuki, T Ohdaira, N Oshima, K Ito, Y Kobayashi and T Iwai, “Defect profiles in ion-irradiated metal samples by slow positron beams in comparison with simulation profiles”, Journal of Physics: Conference Series 262 (2011) 012029, 査読有。

③T. Iwai, K. Murakami, Y. Katano, T. Iwata, T. Onitsuka and H. Abe, “A positron beam study on vacancy formation in iron by ion beam irradiation at low temperature”, Journal of Physics: Conference Series 225 (2010) 012023, 査読有。

[学会発表] (計14件)

①T Iwai, K Murakami, Y Katano, T Iwata, T Onitsuka, H Abe, N. Sekimura, “Defect production in iron at low temperature by ion beam irradiation evaluated with positron beam”, Nuclear Materials 2010, 2010年10月5日, ドイツ・カールスルーエ。

②K Murakami, T Iwai, H Abe, Y Katano, T Iwata, T Onitsuka and N. Sekimura, “Recovery of ion irradiation-induced defects in reactor pressure vessel model alloys”, Nuclear Materials 2010, 2010年10月5日, ドイツ・カールスルーエ。

③村上健太, 関村直人, 岩井岳夫, 片野吉男, 岩田忠夫, 阿部弘亨, 鬼塚貴志, 「原子炉圧力容器モデル合金の低温イオン照射による欠陥の回復挙動」, 日本原子力学会2010年秋の大会, 2010年9月16日, 北海道大学。

④Takeo Iwai, Kenta Murakami, Yoshio Katano, Tadao Iwata, Takashi Onitsuka, Naoto Sekimura and Hiroaki Abe, “Ion-beam induced defect production in iron at low temperature investigated with positron beam Doppler broadening”, 12th International Workshop on Slow Positron Beam Techniques, 2010年8月4日, オーストラリア・マグネティック島。

⑤岩井岳夫, 村上健太, 片野吉男, 岩田忠夫, 関村直人, 鬼塚貴志, 阿部弘亨, 「陽電子ビームによる極低温下イオン照射欠陥蓄積過程の評価」, 日本原子力学会2010年春の年会, 2010年3月27日, 茨城大学水戸キャンパス。