

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 5 月 25 日現在

機関番号：82110

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2012～2015

課題番号：24561044

研究課題名(和文) 転位バイアス因子の理論的解明

研究課題名(英文) Theoretical clarification of dislocation bias factor

研究代表者

鈴木 知明 (Suzudo, Tomoaki)

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・研究主幹

研究者番号：60414538

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,000,000円

研究成果の概要(和文)：照射によって材料は膨張するが、それは転位が優先的に格子間原子を吸収し空孔を結晶中に残す、転位バイアス因子が原因の一つとされている。過去に転位バイアス因子が理論的に評価されているが、観測される膨張率を再現できない。本研究では、その乖離が理論モデルの不正確さが原因であるという仮説を検討した。その結果、正確な記述をしても理論値と実験値の乖離は埋まらないという結果が得られ、膨張の主原因は転位バイアスではないと考えるに至った。

研究成果の概要(英文)：Some materials swells under irradiation, and it is said that this phenomenon is caused by preferential absorption of interstitial atoms into dislocations; this is called dislocation bias. In previous studies, the dislocation bias is theoretically evaluated, but the value failed to reproduce the swelling ratio observed in experiments. The current project examined the cause of this discrepancy by employing a numerical model, which is more accurate than previous theoretical models. As a result, the discrepancy did not disappear even by more accurate analyses, and we become suspicious of the claim that the dislocation bias causes swelling.

研究分野：原子力材料モデリング

キーワード：転位バイアス 格子間原子の拡散 照射スウェリング

1. 研究開始当初の背景

(1) 照射による材料の膨張、すなわち照射スウェリングのメカニズムについて、従来から転位が格子間原子を空孔に比較して優先的に吸収する、いわゆる転位バイアス因子が原因と考えられてきたが、その吸収率を理論的に計算すると、実験で得られている照射スウェリングを大きく過大評価することが知られていた。

(2) のちに照射スウェリングのもう一つメカニズムとして、格子間原子やそのクラスターが1次元運動をして照射による弾き出しの影響を受けた領域を空孔やそのクラスターに比較して速やかに離れていくことが原因とする、プロダクションバイアスモデルが考えられた。

2. 研究の目的

従来の転位バイアス因子の評価法は格子間原子と空孔による格子ひずみの違いを元に評価されたが、それらの拡散モードの違いは考慮されていなかった。特に、格子間原子が1次元運動する場合には転位がそれを吸収する確率に大きく影響すると考えられた。そこで本研究では従来の不正確さを除去したモデリングを行うことで照射実験を説明できるような転位バイアス因子を導出できるかどうかを検討した。

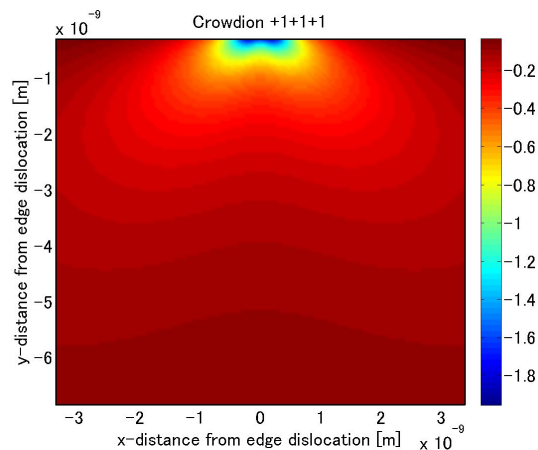


図1 <111>方向のクラウディオンと図上方中央にある刃状点との相互作用エネルギー

3. 研究の方法

(1) 照射環境で主に使用される BCC 金属に注目し、その転位バイアス因子をキネティックモンテカルロ法により評価を行った。具体的には、モリブデン結晶に1本の刃状転位を置いて、その近傍にある格子間原子との格子ひずみによる相互作用エネルギーを計算しておく(図1)。これにより任意位置での格子間原子の移動確率が得られる。次に格子間原子をシミュレーションボックスのある位置に挿入しその軌道を転位に吸収されるまで追跡する(図2)。

また、転位と点欠陥の相互作用に関する基礎

的なデータを得るため、第一原理および分子動力学シミュレーションを行った。

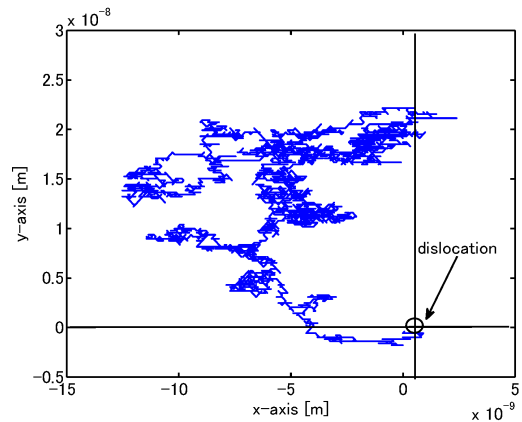


図2 キネティックモンテカルロ法でシミュレーションされた格子間原子の移動の軌道

(2) 下で述べるように、研究課題実行の後半では、タングステン中のレニウムのスウェリング挙動に対する影響について計算科学的な研究を行った。ここでは、第一原理計算によってタングステン中のレニウムの安定位置や移動モードなどを評価し(図3)、その結果に基づいてレニウムの拡散のキネティックモンテカルロ計算を行った。

4. 研究成果

(1) 我々は格子間原子が1次元運動するため、転位のそばに近づいても容易には吸収されず、転位近傍を離れていく可能性が高いと予測した。有意な確率で格子間原子が転位近傍から逃避できることができれば、実験観察で得られた照射スウェリングを理論的に再現できる可能性があると考えた。この予測を検証するため、この逃避確率を多数回のシミュレーションの平均として求めた。また参照データとして完全に3次元運動する格子間原子の逃避確率も求めた。これらを比較した結果、双方とも逃避確率は6割程度で有意な差は現れなかった。よってこれまでの不正確さを除去しても実験値と理論値のギャップは埋まらない、というのが結論であった。これは一般に1次元運動といわれるものが完全な1次元運動ではなくある確率で方向転換する3次元運動的な要素が入っていることによると考えられる。この結果、長年スウェリングが起きる原因の一つが転位バイアス因子によるとされてきたが、その解釈に疑問が生じることになった。

(2) 上記研究が予定より早く終了したため、同じ BCC 金属であるタングステンにレニウムを添加すると照射スウェリング効果が軽減される原因を解明するための研究を行った。その結果、レニウムを添加すると格子間原子が1次元運動から3次元運動に変化しプロ

ダクションバイアス効果が減ることが計算から予測された(図4)。それがスウェリング抑制の原因と考えられた。しかしながら、この仮説を確定するまでには至らず、この研究は引き続き行っている基盤研究に引き継がれた。

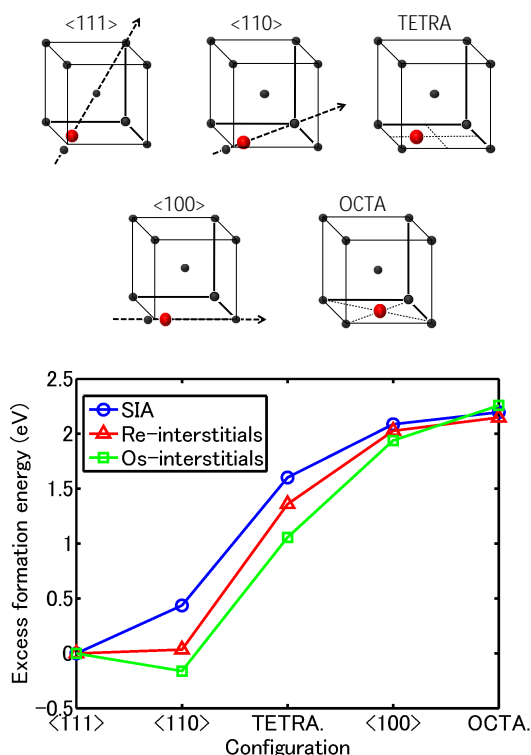


図3 タングステン結晶中のレニウムおよびオスミウムの格子間原子位置のバリエーションとそれらの形成エネルギー

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)

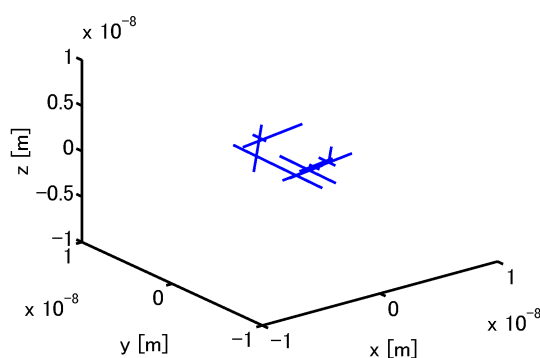
[雑誌論文](計3件)

T. Suzudo, M. Yamaguchi, A. Hasegawa, Migration of rhenium and osmium in tungsten, Journal Nuclear Materials, 467 (2015) pp.418-423 (査読有り) 10.1016/j.jnucmat.2015.05.051

T. Suzudo, M. Yamaguchi, A. Hasegawa, Stability and mobility of rhenium and osmium in tungsten: first principles study. Modeling&Simulations Materials Science Engineering, 22 (2014) pp.075006-075006. (査読有り) 10.1088/0965-0393/22/7/07500

E. Ebihara, T. Suzudo, M. Yamaguchi, Y. Nishiyama, Introduction of vacancy drag effect to first-principles-base rate theory, Journal of Nuclear Materials 440 (2103) pp.627-632. (査読有り) 10.1016/j.jnucmat.2013.05.066

(a)



(b)

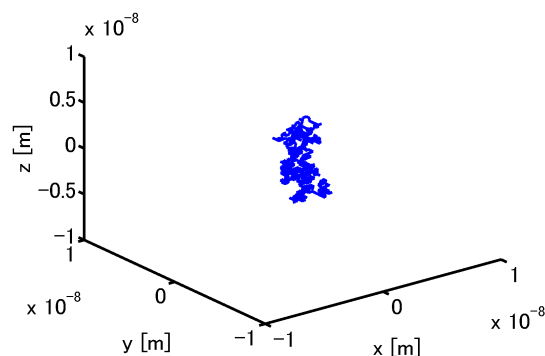


図4 (a) タングステン結晶中の自己格子間原子(SIA)の軌道、(b) タングステン結晶中のレニウム格子間原子の軌道。両方とも、第一原理計算をベースに原子論的なキネティックモンテカルロ法でシミュレーションを行った結果である。

[学会発表](計7件)

鈴木知明、長谷川晃、タングステン中のレニウムおよびオスミウム格子間原子の拡散 KMC シミュレーション、日本原子力学会、春の年会、東北大学(宮城県仙台市) (2016年3月26日~2016年3月28日)。

T. Suzudo, Migration behaviors of rhenium and osmium interstitials in tungsten: Ab initio informed kinetic Monte Carlo study, ICFRM-17, Aachen (Germany) (2015年10月11日~2015年10月16日)。

T. Suzudo, M. Yamaguchi, A. Hasegawa, Migration of rhenium and osmium in tungsten, Joint ICTP-IAEA Conference, Trieste (Italy) (2014年11月3日~2014年11月7日)。

E. Ebihara, T. Suzudo, M. Yamaguchi, Y. Nishiyama, Simulation for temperature dependence of irradiation-induced grain boundary phosphorus segregation using first-principles-based rate theory, NuMat2104, Clearwater (USA) (2014年10

月 27 日 ~ 2014 年 10 月 30 日).

研究者番号 :

鈴木知明、山口正剛、長谷川晃、W 中の Re および Os の拡散 : 第一原理計算による検討、日本金属学会 2014 秋期大会、名古屋大学 (愛知県名古屋市) (2014 年 9 月 24 日 ~ 2014 年 9 月 26 日).

鈴木知明、山口正剛、都留智仁、第一原理計算手法による W-Re, W-Os, Mo-Re 合金における照射欠陥解析、東北大学金属材料研究所ワークショップ、東北大学 (宮城県仙台市) (2013 年 11 月 7 日 ~ 2013 年 11 月 8 日).

T. Suzudo, S.I. Golubov, A.V. Barashev, Kinetic Monte-Carlo study of self-interstitial atom behavior near edge dislocation in a metallic crystal, TMS 2013, San Antonio (USA) (2013 年 3 月 3 日 ~ 2013 年 3 月 8 日).

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕
出願状況 (計 0 件)

取得状況 (計 0 件)

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

鈴木 知明 (SUZUDO, Tomoaki)

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・研究主幹
研究者番号 : 60414538

(2) 研究分担者

山口 正剛 (YAMAGUCHI, Masatake)

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・研究主幹
研究者番号 : 50360417

都留 智仁 (TSURU, Tomohito)

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・原子力科学研究部門原子力基礎工学研究センター・研究副主幹
研究者番号 : 80455295

(3) 連携研究者

()