

1. 軽水炉発電

応力場を考慮したキネティックモンテカルロ計算コードの開発

—軽水炉圧力容器鋼材における格子間原子型転位ループと転位の相互作用への適用—

背 景

軽水炉の運転期間の長期化が計画される中、原子炉圧力容器の構造健全性を確保する上で高照射量領域における圧力容器鋼の照射脆化を精度よく予測することが重要である。当所では圧力容器鋼の中性子照射による照射損傷の蓄積を理論的に研究するために、キネティックモンテカルロ法(KMC)^{*1}に基づく計算機シミュレーションを用いてきた。従来のKMCでは鋼材中に存在する転位(先在転位)を点状の点欠陥吸収領域としてモデル化していたが、高照射量域になると先在転位近傍に自己格子間原子型転位ループ(SIAループ)^{*2}が集積することが実験的に知られており、この集積メカニズムの解明には数nmから数十nm程度離れた位置にある転位とSIAループの相互作用を考慮する必要がある。したがってこのような現象の解析のためには転位の応力場を正しく考慮した新しい転位モデルを用いたKMC計算コードの開発が必要である。

目 的

応力場の影響を考慮したKMC計算コードを開発し、鉄中に存在する転位近傍における自己格子間原子型転位ループの拡散挙動を調べる。

主な成果

1. KMCコードの開発

転位の応力場とSIAループ間の相互作用を考慮したKMC計算コードを開発した。この新しいKMC計算コードを用いることによって、従来点状の点欠陥吸収領域としてのみ考慮していた転位に代わり、転位の作り出す応力場の及ぼす遠距離相互作用を考慮した解析が可能となり、転位とSIAループの相互作用をより正確に計算できるようになった。

2. SIAループの転位への集積現象の解明

転位の近傍におけるSIAループの形成過程とその拡散挙動についてKMC計算コードを用いて調べた。刃状転位の引張りひずみ領域にSIAループが集積することが分かった(図1)。これは、SIAループが転位の引張り応力側でエネルギー的に安定になること(図2)から説明できる。実験で観察されている転位近傍へのSIAループの集積メカニズムの一つが、転位の作り出す応力場の影響であることが分かった。

3. 転位の応力場が自己格子間原子型転位ループのサイズに与える影響

転位が存在する場合には、転位が存在しない場合と比べて小型のSIAループが多く生成されることが分かった(図3)。これは転位によるSIAループの捕獲によってSIAループの成長が阻害されているためであると考えられる。転位数の増加は材料の脆化に影響を与える可能性があり、転位の応力場を正しく考慮する必要があることを示唆している。

主 担 当 者 材料科学研究所 原子力材料領域 主任研究員 中島 健一

関連報告書「応力場を考慮したキネティックモンテカルロ計算コードの開発 —軽水炉圧力容器鋼材における格子間原子型転位ループと転位の相互作用への適用—」 電力中央研究所報告:Q07019 (2008年6月)

*1 : 時間変化も考慮できるように拡張されたモンテカルロ法。

*2 : 自己格子間原子が集積し、円盤状の格子欠陥となったもの。

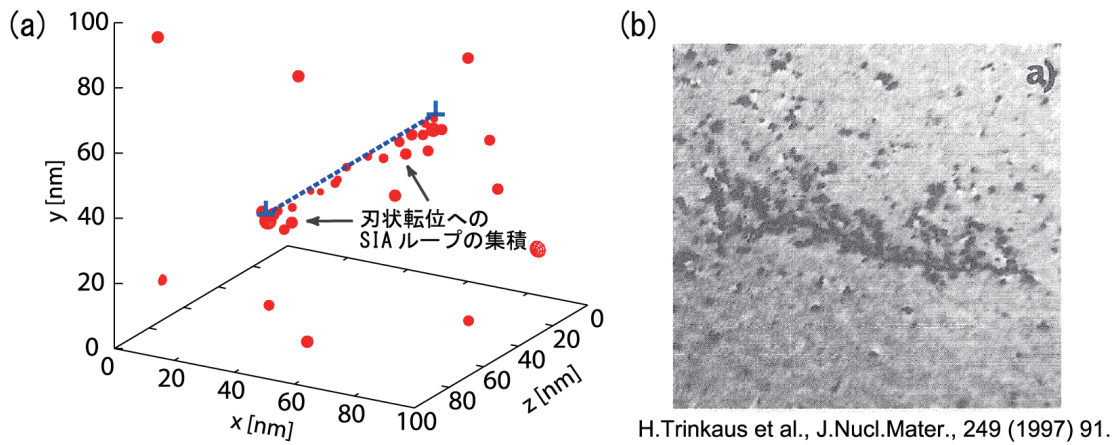


図 1 (a) KMC を用いた計算によって得られた SIA ループの空間分布 (b) 核分裂中性子を照射した Mo 中に観察された転位に集積する転位ループ

KMC による解析結果と同様な転位への集積現象が実験的にも観察されている。

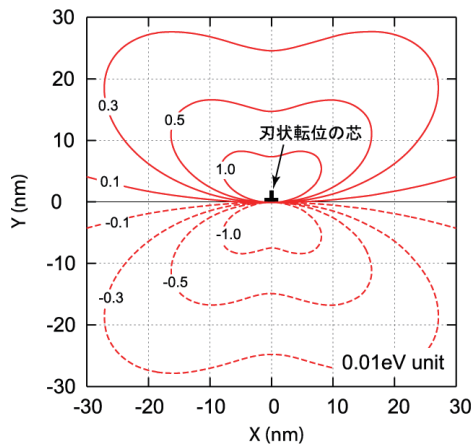


図 2 刃状転位との SIA ループの相互作用エネルギーの等高線表示

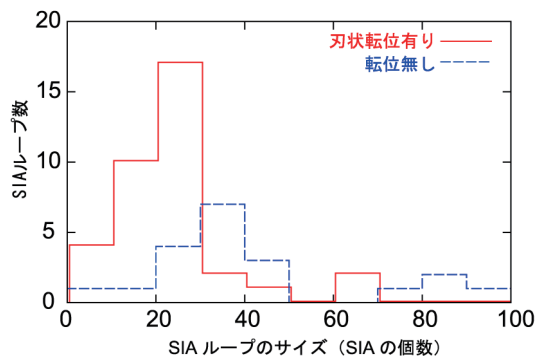


図 3 KMC を用いた計算によって得られた SIA ループのサイズ分布
サイズは SIA ループを構成している SIA の個数を表す。