



第8回 Ⅲ.核融合材料のメソスケールシミュレーション

日本原子力開発機構 蕪木英雄, 鈴土知明, 板倉充洋

I. はじめに

一般的に、放射線照射下での構造材料は、硬化や脆化 などが起こり寿命が短くなる。照射が構造材料に及ぼす 影響の研究についてはすでに長い歴史があるが、核融合 炉の実現に向けてさらなる技術の飛躍が必要である。核 融合炉が照射という観点から決定的に軽水炉と異なるの は中性子のエネルギーである。DT核融合炉では約14 MeV の中性子が生成され、プラズマに直接触れる核融 合炉ブランケットの第一壁部分は高速中性子にさらされ ることになる。したがって、まず候補材として低放射化 材であることが望まれる。現在,日本ではF82H,ヨー ロッパでは EUROFER と呼ばれるフェライト/マルテン サイト鋼の候補材が開発され、それぞれ試験研究が行わ れている。しかしながら、フェライト/マルテンサイト 鋼の中性子照射に関しては、まだ多くのことがわかって いない。特に、核融合炉と同じような条件の照射実験を 多数行い、データを蓄積するには、多くの時間と費用を 必要とする。このような観点から、計算科学または計算 機シミュレーションに対して,現象のメカニズム解明と モデル化により実験データを補間、拡張する役割が期待 されている¹⁾。

金属が,電子,陽子,イオン,中性子等の高エネルギー 粒子の照射を受けると,結晶格子中の原子は正常な位置 からはじき出されて損傷を受ける。電子のような軽い粒 子による照射の場合では,格子位置からはじき出された

The Fusion Reactor Wall is Getting Hot!—A Challenge towards the Future for Numerical Modelling(8): Chap. Ⅶ Mesoscale Simulations of Irradiated Materials: Hideo KABURAKI, Tomoaki SUZUDO, Mitsuhiro ITA-KURA. (2008年 11月 5 日 受理)

各回タイトル
第1回 I.はじめに Ⅱ-1 壁の前で何が起きているか?(物理モデル)
第2回 Ⅱ-2 壁の前で何が起きているか?(プラズマの攻撃)
第3回 Ⅲ.壁の表面で何が起きているか
第4回 Ⅳ.壁の中で何が起きているか
第5回 Ⅴ.壁はどのくらい熱くなるか
第6回 Ⅵ-1 壁の中は傷まないか(放射線の照射によって 受ける壁材料のダメージ)

第7回 VI-2 壁の中は傷まないか(放射線の照射によって 受ける壁材料のダメージをいかに予測するか) 原子が格子間に入った格子間原子ともとの格子位置に空 孔が発生する(第1図)。これらをフレンケル対と呼ぶ。 重イオンや中性子による照射の場合では,原子のはじき 出しが次々と発生して,より複雑な衝突カスケードを形 成する。衝突カスケードでは,フレンケル対だけではな く,格子間原子や空孔が集まってクラスタが形成され る。はじき出された格子間原子の大部分は空孔と再結合 して元に戻る。材料の温度,格子間原子を吸収するシン クの存在にも依存するが,はじき出された原子の一部分 は,格子間原子,空孔同士から構成される大きな欠陥ク ラスタに成長する。特に衝突カスケード中では,欠陥の 分布に非一様な空間的な相関をもたらし,ミクロ組織の 変化を生じ得る。

第1図において、空孔や格子間原子のような欠陥は、 その形状から点欠陥と呼ばれ、点欠陥の集合体をクラス タという。それに対して、材料の塑性を担う線状の格子 欠陥を転位と呼ぶ。転位は、結晶中のある面ですべりが 生じたとき、すべりが生じた部分とすべってない部分と の線状の境界を構成する欠陥である。転位の運動は、材 料の塑性変形のミクロな表現である。一般的に、転位は 点欠陥を吸収する。この吸収の強さをシンクの強さと呼 ぶ。転位の格子間原子に対するシンクの強さは空孔に対 するそれよりも一般的に大きい。フレンケル対としてで きた同数の空孔と格子間原子のうち、格子間原子が多く 転位に吸収されるので、バルク中には空孔が余ることに なり、再結合できなくなる。このようなシンクの強さの 差が引き起こす効果を、一般にバイアス効果と呼んでい

 第1図 照射によって生成される様々な格子欠陥,空孔(a), 格子間原子(b),空孔クラスタ(C),格子間原子クラス タ(d) る。バイアス効果は空孔クラスタの形成および成長を促 進する。このシンクの強さの差はわずかであることがわ かっているが、そのわずかな差が、照射環境に長時間さ らされ欠陥が蓄積されて、材料の機械的性質に大きな影 響を及ぼす。例えば、体積変化で10%程度のスエリング (膨張)が起きると、構造材としては大変使いにくくな る。核融合炉材料として照射量100 dpa(dpa は、照射に よりはじき出された格子原子数の照射領域に存在する全 格子原子数に対する比)を想定した場合で、スエリング を10%以下に抑えるためには、はじき出された格子間原 子の99.9%が空孔と再結合しなければならないと評価さ れる²。この値からも、核融合材料研究がいかにチャレ ンジングであることがわかる。

マルチスケールモデリングにおける メソスケールの計算科学研究手法

計算科学の照射損傷への応用はどのようにして行われ ているのであろうか?上述のように,照射損傷は原子レ ベルの事象であり,それを物理的に記述するには量子力 学的なモデリングが必要になる。このスケールで開発さ れた計算方法は,基本的にどのような原子およびそれら を組み合わせた体系に対してもあいまいな仮定を用いる ことなく適用できるので,第一原理計算法と呼ばれ,上 記で議論した欠陥に関連したエネルギーなどを最も正確 に求めることができる。しかしながら,現在の最高速の 計算機でもこれらの計算に使用できる原子数は100個程 度で,それは1辺が1.3 nm 程度の鉄の立方体にすぎず, 大きく複雑な欠陥への適用は困難である。また,計算コ ストも膨大であり,原子配置の緩和計算によりエネル ギー最小の体系を見つけることは可能であるが,現状で は原子の時間変化を追う計算は困難である。

もう一つの計算科学で多用される代表的方法論は分子 動力学(MD: molecular dynamics)法である。これはあ らかじめ与えられた原子間ポテンシャルを用いて一つ一 つの原子の古典的運動方程式を解いていく方法である。 良い経験ポテンシャルができれば、この方法では体系の 時間発展や温度の効果などの計算が期待できる。現状の 計算機で取り扱える粒子数は単純な系なら数100万から 1,000万個程度は可能である。この方法は、例えば、高 速中性子を材料に入射した場合に生成される欠陥の種類 やその数を評価するのに用いることができる。しかしな がら,MD法での時間発展の長さは1psから高々1ns 程度であり、空孔クラスタが熱的に移動して欠陥クラス タが成長するような長時間の時間発展計算には使えな い。また、はじき出しカスケードのシミュレーションで は、入射粒子の方向についてのアンサンブル平均をとる ことなどの統計処理が重要であり,多くの計算機資源を 必要とする。空間的な制約から実際の損傷状態を大域的 に再現するのではなく,ある注目すべき事象を取り出し てそれのシミュレーションを行うという使い方がされ る。

このように、原子・分子レベルで正確なクラスタ形 成・成長計算を行おうとすれば,時間的,空間的な制約 は厳しくなる。しかしながら、実際の核融合炉構造材料 は長時間にわたる様々な損傷の積み重ねにより劣化して いく。このギャップは計算機技術の進展のみで簡単に埋 められるようなものではない。以下で紹介するキネ ティック・モンテカルロ(kMC: kinetic Monte Carlo)法 と反応速度論の方法は、いずれも近似の導入によってそ のような制約をかなり軽減することが可能である。これ らはメソ(ミクロとマクロスケールの中間のスケールの こと)からマクロスケールの現象に適用可能であり、従 来から用いられてきた手法であるが、最近、ミクロから マクロスケールまでの手法を全体としてとらえるマルチ スケールモデリングの立場から位置付けることにより新 たな展開を見せている。メソからマクロの手法では、空 間、時間的に平均した量を扱うため、経験的なパラメー タが入ってくることは避けることができない。従来はミ クロの手法が発達していなかったため、現象の素過程を 正確に把握することができず、誤ったメカニズムに基づ いた議論もなされてきた。現在は第一原理計算、分子動 力学法等の原子論的手法による原子, 欠陥等の運動に関 する新たな知見に基づき、これらをメソ、マクロの手法 と結合させて現象を予測し、従来の実験結果の解釈を見 直すことも行われている(第2図)。

以上のようなマルチスケールモデリングの考え方は, 電子、原子のミクロレベルの科学的計算とマクロレベル の連続体近似による工学的計算を同じスケール上で位置 づけ、現象のモデル化という観点から、各スケールの計 算手法を結合して工学的計算の予測精度を向上すること を目的としている。マルチスケールモデリングを実施す る際,構造物と電子,原子レベルの間のスケール比は10¹⁰ を越すことや各スケールにおける計算手法の適用範囲の 制約等から、特にメソスケールの領域に大きなギャップ が存在している。このギャップを埋めるために、現在で は精密な実験を用いてモデルの検証を行っていくことが 行われている。マルチスケールモデリングの観点から照 射材料を見たとき、大きくは2つの過程がある。一つは、 照射欠陥クラスタの発達によるミクロ組織の変化を予測 すること、次に、これらミクロ組織の変化から材料の機 械的性質の変化を導出することである。照射現象の数値 シミュレーションは主に前者の領域で実施されている。 後者の領域では, MD法, 転位動力学法, 連続体の方法 等による試みはあるが、引っ張り試験や破壊靭性試験の 結果を直接再現するほどの手法が確立されているわけで はない。しかし、マルチスケール的な見方を通して、実 験データの原子レベルからの機構論的理解が深まってい

日本原子力学会誌, Vol. 51, No. 1 (2009)



ることは確かである。

1. キネティック・モンテカルロ法

核融合炉材料においては、中性子照射によるはじき出 しによって生成した格子間原子(以下 I と略記)や空孔 (以下 V と略記),および核変換により生成した He 原 子等の一部が時間の経過とともに集合してクラスタを作 り、それが材料の機械的性質を変化させる。長時間照射 を受けた場合のこのようなクラスタの形成をシミュレー ションする手法としてよく使われるのがキネティック (動的)モンテカルロ法(kinetic Monte Carlo),略して kMC 法と呼ばれる手法である。格子欠陥の移動プロセ スは MD 法の時間スケールに比べるとかなり遅い。こ の移動プロセスは通常は単純な熱活性過程であり、欠陥 がとなりの場所に移動するためのエネルギー障壁を乗り 越えた場合に移動が起こり、その頻度はエネルギー障壁 の高さで決定される。このプロセスには欠陥のごく近傍 の原子のみが係わっているので、他の原子すべての運動 も計算するのは効率が悪い。そこで、格子欠陥のみに注 目して、その移動頻度等の基本的性質を入力データとし て他の方法で得て、それに基づいて格子欠陥の移動や反 応を計算する kMC 法を用いる。

kMC法と MD 法を比較した場合の大きな違いは, MD が時間を常に一定の割合で進めてその間に起こる過程を すべて計算する「タイムドリヴン」な手法であるのに対 し, kMC ではまず何が起こるかを先に決定してそのあ とでそのような事象(イベント)が起こるためにはどの程 度の時間経過が妥当かを計算して, それに基づいて時間 を進める「イベントドリヴン」な手法である点である。格 子欠陥の移動は, MD の時間スケールで見ると非常にま れなイベントなので, 長時間計算しても何も起こらない 可能性があるが, kMC の場合では起こりうるあらゆる イベントをまずすべて列挙する。具体的には, すべての 格子欠陥について移動可能なすべての方向への移動を 別々のイベントとして扱う。他にもイベントの種類があ るがそれは後述する。

こうしてすべてのイベントのリストを作り、そのどれ かが起こるまで時間を強制的に進める。それぞれのイベ ントの単位時間あたりの発生確率を P_i とおく。ただし、 $P_i \ll 1$ であるとする。時間 t の経過の後に「どのイベン トも起こらない」という確率は $\exp(-\sum_i P_i t)$ と書ける。 ここで、 $P_i \ll 1$ を使って近似した。このような確率分布 は乱数を使って再現可能であり、0から1まで一様に分 布する乱数 r を用いて、「何かが起こる」までの時間を $-\log(r)/\sum_i P_i$ と決定することができる。具体的に、ど のイベントが起きるのかも乱数を用いて決定する。各イ ベントが起こる確率は P_i に比例するから、区間0-1を P_i に比例した幅で分割して時間を決めた乱数とは別の乱数 を置き、それが入った区間に対応するイベントを選ぶ。 イベントを選んだら実際にそのイベントを起こし、格子 欠陥の位置などを更新する。

一般的に,金属の場合, I の移動障壁は0.3 eV 程度, V の移動障壁は0.7-1.0 eV 程度で圧倒的にI が速く拡散する。一定の時間を経過させるための計算量は一番速く移動する欠陥の個数に比例し,通常はI の個数に比例する。 $I \ge V$ の対消滅などによってI の数が減ってくると、今度はV の個数に比例した計算コストとなる。移動の計算に必要な移動頻度は、MD や第一原理計算により求める。必要となるデータは、欠陥がそのような移動を試みる頻度 J_0 と移動障壁エネルギー E_m であり、これらから移動頻度は $P_i=J_0\exp(-E_m/kT)$ と計算できる。ここで、k はボルツマン定数、T は絶対温度である。 J_0 は欠陥が安定状態のまわりで振動している振動数で置き換えることができる。障壁エネルギーは MD でも第一原理計算でも、移動の前後の状態の配置がわかっていれば、その間の峠点でのエネルギーを計算する手法がいろ

いろ開発されている。イベントとしては、こうした欠陥 の移動のほかに欠陥自体を生成するはじき出し過程も含 める必要があり、新たに生成した*I*や*V*をはじき出し が起こった点の周辺にばらまいておく。

こうして生成した I, V, He が拡散して別の欠陥と 出会う。 I と V が出会うと対消滅して消え、 I 同士、 V 同士が出会えばそこで欠陥が合体しクラスタを作る。ま た,HeはVと出会うと空隙に入り込み安定化する。こ れにさらに Vや Heが合体すると大きな空間に Heが複 数含まれている「バブル」となる。 I が2つ結合したもの を Lなどと書くことにする。一般的に、対消滅やクラス タ形成はエネルギーが下がるので熱活性過程ではなく, 出会うと瞬間的に起こるイベントである。したがって, *I*, *V*, He の移動イベントを1回発生させたら,近くに 反応できる相手がいないか調べて、いた場合はすぐにそ の反応を起こす。具体的には,例えば I が移動した場合, 移動先に V がいれば両方消滅させる。 V のクラスタ Vn がいればIを消滅させ V_n を V_{n-1} に変化させる。移動先 に別のIやIのクラスタ I_n がいた場合,合体して I_n や I_{n+1} を作る。

このような計算を繰り返すことで,はじき出しによっ てHeバブルやIn, Vn といった欠陥の集合体のうち,ど れがどの程度の密度で形成するかを知ることができる。 In や Vn は転位の運動を阻害するので材料を硬化, 脆化 させる。そうした欠陥の密度と硬化, 脆化の度合の関係 を転位動力学などで見積もることで,材料の機械的性質 の変化を予測することが可能となる。また He バブルが 粒界面にできると粒界面の結合力を低下させ,粒界脆化 を引き起こすので,計算された粒界 He 濃度をもとに粒 界脆化の度合を予測することができる。ただし,こうし た見積りには, kMC の入力データを計算する MD, kMC,およびその結果を硬化, 脆化に結びつけるモデ ルの3つの手法を組み合わせることが必要であり,正確 な値を出すのはチャレンジングな課題である。

2. 反応速度論の方法

上記で見てきたように、kMC 法は各照射欠陥間の反応に対応するイベントの発生確率をもとに、現象の時間変化を計算する方法である。この方法では起こりうるイベントをあらかじめ決めることにより MD 法に比較して負荷を小さくすることができるが、原子レベルの過程の計算が残されているため、計算可能な領域、時間は大きな制限を受ける。実際の実験および原子力機器に対応した高照射量、長時間の時効現象を予測するには、少なくとも最大10⁶個を越す原子から構成されるクラスタの形成、発展を記述しなければならない。そのため、原子レベルのモデルをより平均化した手法を用いる必要がある。はじき出しにより生成された格子間原子および原子空孔は拡散、再結合し、並行していろいろな大きさのク

ラスタが形成されるが、大きなクラスタに対しては平均 場近似を用い、空間的に平均化した密度を求める。これ らいろいろな大きさのクラスタそれぞれについて、密度 の時間発展を記述する拡散 - 反応連立レート方程式を数 値的に解くことが行われている。このような平均場近似 を用いて照射欠陥クラスタ、ソース、シンク項の分布の 時間、空間平均およびミクロ組織の空間平均を埋め込ん だ有効媒質を考えることにより、基本的にどのような欠 陥の密度でも取り扱うことが可能になる。もちろん、平 均化操作をすることにより、カスケード照射等による欠 陥生成時の空間、時間相関等特定の情報が無視されるこ とになる。これらの過程は多成分系における化学反応と 同様の定式化が可能である³⁰。

いろいろな大きさの点欠陥が混在する系を考える(第 3図)。照射により発生する欠陥としては、基本的には 格子間原子 I と空孔 V,およびそれらが n 個集合した クラスタIn, Vn がある。これらが、それぞれ相互に反 応しあう体系を考える。今, 種類AとBの欠陥が反応 して種類 C の欠陥ができる過程,およびその逆の反応 過程*A*+*B*≒*C*を考える。右方向に進む正の反応割合を 表す速度定数を k⁺, 左方向に進む負の反応の速度定数 *k*⁻とする。この系に存在する欠陥の種類*A*,*B*,*C*の密度 C_A , C_B , C_c を定義する。ここで、欠陥が移動しない場 合は全体系で一様に密度を定義し、移動する場合は局所 的な密度分布を考える。一般的に, I, V や小さなクラ スタは拡散により移動し、大きなクラスタは移動しない と仮定することが行われている。上記反応式において、 正と負方向に対応する反応の割合の差は $GR = k^+ C_A C_B$ k^-C_c となる。ここで、正の形成反応の速度定数は、各 欠陥A, B がある距離以内に近づいたとき反応が起こ るように決める。逆に、負の解離反応の速度定数は、平 衡条件(GR = 0)を使い熱活性化過程として決める。

欠陥間の反応は,基本的に空孔 V と格子間原子 I の 組み換えである。ここで想定する反応は, kMC 法で考 察したイベントと共通したモデルから導出する。空孔 V と格子間原子 I の数が変化するのは,初期条件における 照射による欠陥の生成,空孔 V と格子間原子 I の反応



第3図 欠陥クラスタのモデリング

日本原子力学会誌, Vol. 51, No. 1 (2009)

による消滅($I + V \rightarrow 0$)および転位等欠陥を吸収するシ ンクへの消滅による。これら生成,消滅過程以外は,I, Vの数は保存されるので,各種A,B,Cに対する連続 の式,すなわち質量保存則を求めればよい。

以上のように,反応速度論の方法は kMC 法と同じよ うな運動論的モデルであり,取り扱うシミュレーション 範囲も重なる領域があり,かつクラスタ反応の素過程の モデル化も共通している。しかし,これら2つの手法は 基本的な相違がある。前者は決定論的であるのに対し, 後者では確率論的である。また,クラスタの密度に対し ては,前者では空間で平均化した有効媒質を用いるの対 して,後者は空間依存を持っている。最近,これら2つ の手法を同じ領域,条件下で詳細に比較することが行わ れている⁴。

■.メソ、マクロスケール領域における 最近の計算科学研究

以上紹介してきたメソスケールの方法では大幅な近似 が用いられているため、モデルの検証は重要である。こ の検証は同様の条件で行われた実験結果と照合すること が最も望ましい。しかし、実際には実験と計算の詳細な 比較は困難であることが多い。以下では、実験と計算と の比較や計算における異なるメソスケール手法間の比較 をした最近の代表的研究を紹介する。

最初の研究は、Fuらの kMC 法による照射欠陥クラ スタの発達過程の研究である⁵⁾。この研究は、高純度 α 鉄の電子照射(照射量~2-200×10⁻⁶dpa)後、アニーリ

ング時における電気抵抗測定結果⁶を kMC 法により再 現することを試みたものである。この研究の一番の特徴 は、第一原理計算により、I、I2、I3、V、V2、V3、V4の 欠陥の安定な配置,可能な移動メカニズムおよび結合エ ネルギーを定量的に決定し、それらの値をもとに kMC 法における欠陥挙動のモデル化を行っていることであ る。材料中の格子欠陥は電気抵抗を増加させるので、電 気抵抗を測定することによって格子欠陥の状態を推測す ることができる。実験では、低温で照射をして、一定の 昇温速度で徐々に温度を上げていく。そうすると突然抵 抗値が回復する温度があるが、これはある特定の種類の 欠陥がこの温度で消滅することを示している。実験で得 られた回復ステージは第4図中に矢印で示してある。そ れらは、 $I_{D2}(107.5 \text{ K})$; $I_{E}(122-144 \text{ K})$; II(164-185 K); III (220-278 K)等であり、それぞれ I: V の相関および 非相関再結合, I2の移動, Vの移動に原因すると解釈さ れていた。今まで行われてきた経験ポテンシャルによる 鉄中照射欠陥の研究結果からは、I_EやIIのステージを 合理的に説明することができなかった。第一原理計算に より、これら照射欠陥の性質の計算が行われ、実験結果 を新たな描像により解釈することが可能になった。実験 では、マクロ量である抵抗値が得られるだけであるが、 kMC 法では、ミクロ量である欠陥の種類とその数の変 化を得ることができる。以上のように、kMC 法は、実 験結果の解釈を検証、補足することができる。

ここで,対象とした照射は電子照射であるので欠陥の 種類も比較的単純である。しかしながら,高速中性子照 射の場合には,照射で生成される欠陥は一様に分布した



第4図 電子線照射による回復過程(電気抵抗の温度に対する微分値)(a)と格子欠陥 (空孔,格子間原子,空孔クラスタおよび格子間原子クラスタ)数の変化(b) (文献5)より引用)

36

フレンケル対ではなく、カスケード損傷と呼ばれる非一 様な欠陥分布になるため、例えば、MD 法によって照射 損傷データを構築する必要がある。また、すでに述べた ように He 原子を含めてモデリングする必要がある。さ らに、上の例ではアニールによる回復現象を対象とした が,照射による変化を kMC 法で行うにはまだ時間的な 制約があり、せいぜい実際の核融合炉材料の寿命の 1/1,000程度までしかシミュレーションできない。上の 例では、欠陥の量についてはあまり問題にされていない が、スエリング現象では V や V クラスタの量を正しく 予測する必要がある。しかし、欠陥が転位や粒界で消滅 する確率を正しく見積もらなければ欠陥の量を正しく評 価することはできず、それは容易なことではない。ちな みに上の応用例ではそれらの消滅効果は無視されてい る。高速中性子照射の kMC シミュレーションについて は、現在いくつかの研究がある^{7,8}。このように、kMC 法は単純な照射損傷過程に対しては強力であるが、計算 領域で取り扱える欠陥の数密度に限界が存在するため、 実際の原子炉環境に対応したより現実に近いシミュレー ションをするためには、計算負荷の軽い反応速度論の方 法を用いる必要がある。

そこで、kMC 法と反応速度論の方法を同一条件下で 比較し、照射による欠陥の回復過程をシミュレーション した研究を紹介する⁹⁰。この研究では、低温で鉄原子を 照射した鉄結晶を一定温度で昇温する回復過程を対象と する。初期条件は MD シミュレーションによる、はじ き出しカスケードの結果をもとに設定した。kMC 法に おいては、MD 法で得られた各欠陥の大きさと位置を取 り入れた初期条件を用いた。一方、反応速度論の方法で は、大きなクラスタは平均化操作により空間的に一様に 分布しているとして初期条件を決めた。

第5図にkMCと反応速度論(RT)を比較した結果を 示す。全体として2つの方法による結果はよく一致して いることがわかる。顕著な違いは回復初期に見られる。 特にT=115KにおけるIとV間の相関による再結合 は、反応速度論の方法では再現できない。しかし、 I と I2の移動に伴う回復過程は、kMCの結果と若干ピーク の位置は異なるが、よく再現されていることがわかる。 両手法による高温における欠陥の回復過程のピークはよ く一致しており、欠陥間の相関の影響は高温における回 復過程に大きな影響を及ぼしていないことがわかる。照 射量10⁻⁴dpaの場合の計算においても、同様に欠陥間の 相関の効果により低温におけるピークに相違が見られる が,高温においては両手法で良い一致が得られた。また, これらそれぞれの回復ピークに伴う照射欠陥の挙動も詳 しく解析され、そのピーク出現の欠陥レベルでのメカニ ズムも明らかにされた。

以上紹介したメソ,マクロスケールのシミュレーショ ンでは,第一原理計算により小さなクラスタの挙動,特



第5図 照射量10⁻⁶dpa における kMC と反応速度論(RT)に よる欠陥回復過程(全欠陥数の温度に対する微分値) の結果(文献9)より引用)

性を明確に決定できるようになったため,不純物や欠陥 等,他の要素の影響を同定できるようになったことに意 義がある。また,これらのモデリングと対応させること のできる精密な実験結果の存在は不可欠である。

Ⅳ. おわりに

以上概観してきたように,照射効果に関するシミュ レーションは、はじき出し損傷により形成された点欠 陥, クラスタが移動し, 再結合, 合体, 消滅する過程, すなわち照射によるミクロ組織の変化を予測することを 中心に行われている。特に最近,第一原理計算により点 欠陥および小さな点欠陥クラスタのエネルギー状態が正 確に計算されるようになり、これらの結果をメソスケー ルの kMC 法や反応速度論の手法と結合して、実験結果 の背景にあるミクロな機構を把握することが可能になっ てきた。まだ,照射量が低い領域に限られているが,今 後のより高い照射量におけるモデリングのためには、検 証可能な精密な実験と計算との協力が不可欠といえる。 一方,実際の材料の特性を予測するには、これらミクロ 組織の変化からマクロな機械的性質の変化を導出する必 要があるが、現状では計算科学の手法のみでは困難なこ とも多い。しかし、照射による材料硬化の後、照射欠陥 が存在しないせん断帯(転位チャネル)が形成されること に起因する局在化破断現象²や He をはじめ,不純物の 偏析による照射材料の硬化を伴わない粒界破壊現象¹⁰⁾ 等. 原因のよくわかっていない現象に対しては計算科学 的手法による解決が期待できる。前者では、転位動力学 法による転位レベルからの理解が一つの方向である¹¹⁾。 また、後者の問題では第一原理計算により、不純物の鉄 粒界への偏析強度およびその時の原子間結合強度が正確 に見積もることが可能になり¹²⁾,その結果を有限要素法 によるマクロな弾性シミュレーション¹³⁾と結合すること による破壊限界応力予測の試みも行われている。いずれ

日本原子力学会誌, Vol. 51, No. 1 (2009)

にせよ,実験結果をその原因から理解し,モデル化によ り核融合炉材料の設計に寄与するためには,マルチス ケールの観点から位置付けられたメソ,マクロスケール のシミュレーション手法の予測精度向上が不可欠といえ る。

最後に,核融合炉に関する照射材料の実験についてご 教示いただいた日本原子力研究開発機構の實川資朗氏に 感謝します。

一参 考 文 献一

- 1) 實川資朗, R. E. Stoller, F. W. Wiffen, 谷川博康, 安藤 正已, 鈴木一彦, 日本原子力学会誌, 49(9), 631 (2007).
- 2) S. J. Zinkle, Phys. Plasmas, 12, 058101 (2005).
- S. R. De Groot, P. Mazur, Non-Equilibrium Thermodynamics, Dover Publ., New York, (1984).
- R. E. Stoller, S. I. Golubov, C. Domain, C. S. Becquart, J. Nucl. Mater., 387, 77 (2008).
- 5) C-C Fu, J. Dalla Torre, F. Willaime, J. L. Bocquet, A. Barbu, *Nature Mater.*, 4, 68 (2005).
- S. Takaki, J. Fuss, H. Kugler, U. Dedek, H. Schultz, Radiat. Eff., 79, 87 (1983).
- 7) M. J. Caturla, J. Nucl. Mater., 351, 78 (2006).
- C, S. Deo, M.A. Okuniewski, S.G. Srivilliputhur, S.A. Maloy, M.I. Baskes, M.R. James, J.F. Stubbins, J. Nucl. Mater., 361, 141 (2007).
- 9) C. J. Ortiz, M. J. Caturla, Phys. Rev., B 75, 100102 (R) (2007).
- 10) G. R. Odette, T. Yamamoto, H. J. Rathbun, M. Y. He, M. L.

Hribernik, J. W. Rensman, J. Nucl. Mater., 323, 313 (2003).

- 11) T.Nogaret, D. Rodney, M.Fivel, C.Robertson, J. Nucl. Mater., 380, 22(2008).
- M.Yamaguchi, Y. Nishiyama, H. Kaburaki, *Phys. Rev.*, B 76, 035418 (2007).
- M. Itakura, H. Kaburaki, C. Arakawa, *Phys. Rev.* E 71, 055102 (R) (2005).

著者紹介

蕪木英雄(かぶらき・ひでお)



日本原子力研究開発機構 (専門分野/関心分野)計算材料科学,計算 物理

鈴土知明(すずど・ともあき)



日本原子力研究開発機構 (専門分野/関心分野)計算材料科学,特に 微細構造変化のシミュレーション

板倉充洋(いたくら・みつひろ)



日本原子力研究開発機構 (専門分野/関心分野)計算材料科学,計算 物理