

会議のトピックス(II)

## 日本原子力学会「2023 年秋の大会」

核データ部会・材料部会合同セッション

材料損傷評価のための核データおよび材料照射研究への活用

2023 年 9 月 7 日 13:00~14:30 名古屋大学 東山キャンパス

### (1) 粒子・重イオン輸送計算コード PHITS と核データを用いた照射損傷量の計算と検証実験

日本原子力研究開発機構  
原子力基礎工学研究センター  
放射線挙動解析研究グループ  
岩元 洋介

[iwamoto.yosuke@jaca.go.jp](mailto:iwamoto.yosuke@jaca.go.jp)

#### 1. はじめに

原子炉、核融合及び加速器施設の構造材の照射損傷量の指標として、NRT モデル (Norgett, Robinson, Torrens model) [1]で導出される標的原子 1 個あたりの弾き出し数(dpa: displacement per atom)が用いられる。図 1 に照射効果全体の時間とサイズスケールを示す。照射損傷の過程として、核反応、原子衝突、欠陥集合体の形成、拡散と成長、及びマクロな材料特性への影響などがある。この中の初期の段階である核反応や原子衝突、弾き出し損傷の近似などが dpa の計算に関連する。そこで発表者らは、あらゆる放射線施設の材料の照射損傷量 (NRT-dpa) の評価を可能にするため、粒子・重イオン輸送計算コード PHITS [2]と核データライブラリ JENDL を用いた、広いエネルギー範囲 (eV - TeV) の中性子、陽子、重イオン照射に対応する材料の照射損傷計算手法 [3,4]を開発した。この手法では、PHITS は JENDL を用いて、初期の弾き出し損傷を取り扱う。一方、2018 年に Nordlund らから、分子動力学 (MD) 計算により導出された格子間原子と空孔からなる欠

陥の非熱的な再結合補正 (arc: athermal recombination correction) の研究成果が報告された [5]。著者らは PHITS を改良し再結合補正を考慮した照射損傷量 (arc-dpa) の評価を可能とした。また、計算手法の検証のため、極低温の照射装置を開発し、陽子照射に対する dpa に関連する弾き出し損傷断面積の測定 [6,7]を実施した。

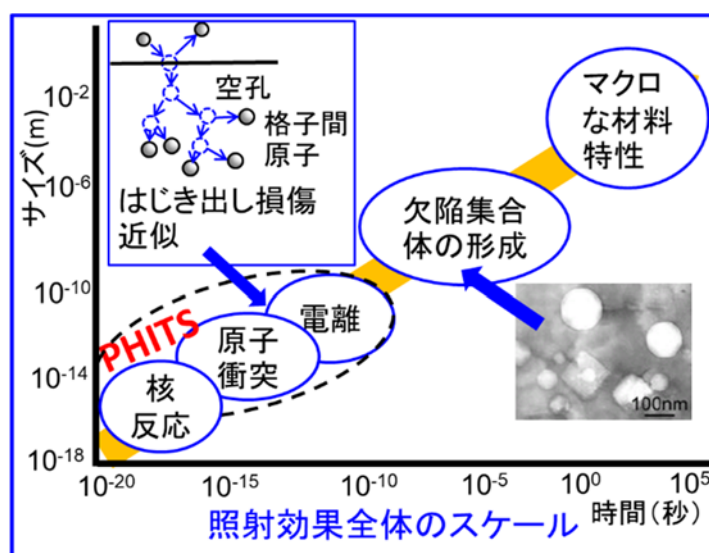


図1 照射効果全体のスケール。PHITS は初期の弾き出し損傷を取り扱う。

本報告では、本計算手法の概要、様々な照射条件における NRT-dpa と arc-dpa の計算及び陽子ビームを用いた弾き出し断面積の検証実験について紹介する。

なお、本研究に関連する国際活動として、2012-2018 年にかけて、IAEA の共同研究プロジェクト(CRP)「Primary Radiation Damage Cross Sections」[8,9]が実施された。本プロジェクトでは、70 年代に確立した NRT-dpa を見直すことを目的とし、核データ分野において標準である核データ処理コード NJOY を用いた弾き出し断面積計算、ターゲット反跳核 (PKA)エネルギースペクトル計算、MD 計算による欠陥生成メカニズム解明などが議論された。著者らは本報告内容の研究を実施し、本 CRP 会合の活動に貢献した。

## 2. 計算

### 2.1 PHITS の概要

PHITS [2]は、任意の 3 次元体系内における放射線挙動を解析できる汎用モンテカルロ計算コードである。その適応範囲は、原子力分野で重要な 20 MeV 以下の中性子や光子の他に、加速器工学や医療・宇宙分野で評価対象となる高エネルギー陽子や重イオンなど、現実的に挙動解析が必要なほぼ全ての放射線である。核反応は、核子と核子が直接相互作用する動的過程と、その後に平衡状態に達した原子核が崩壊する静的過程に分けて模擬

する。核反応の動的過程には核内カスケードモデルなどが用いられ、静的過程のシミュレーションには蒸発・核分裂モデルが使われる。20 MeV 以下の中性子による核反応は、核データライブラリ JENDL-4.0 で模擬する。その際、イベントジェネレータモードにより二次中性子のみならず二次陽子や反跳核などの情報も引き出せる。

## 2.2 照射損傷計算手法の概要

図 2 に PHITS の照射損傷計算手法の概要を示す。照射損傷計算は、主に核反応やエネルギー損失過程によるイオンの材料中の輸送、クーロン弾性散乱を含む入射粒子からターゲット反跳核(PKA)へのエネルギー転移、カスケード損傷近似からなる。PHITS に組み込まれた Nordlund らが導出した欠陥生成効率は、図 3 に示すとおり、核的損失による材料の損傷エネルギーの関数で表される [5]。Nordlund らの MD 計算結果から、損傷エネルギー数十 keV 以下の範囲では、損傷エネルギーが増えるにつれて、格子間原子と空孔が非熱的な再結合により回復し、欠陥生成効率は低下する。損傷エネルギー数十 keV を超えると欠陥生成効率は一定に近づく。

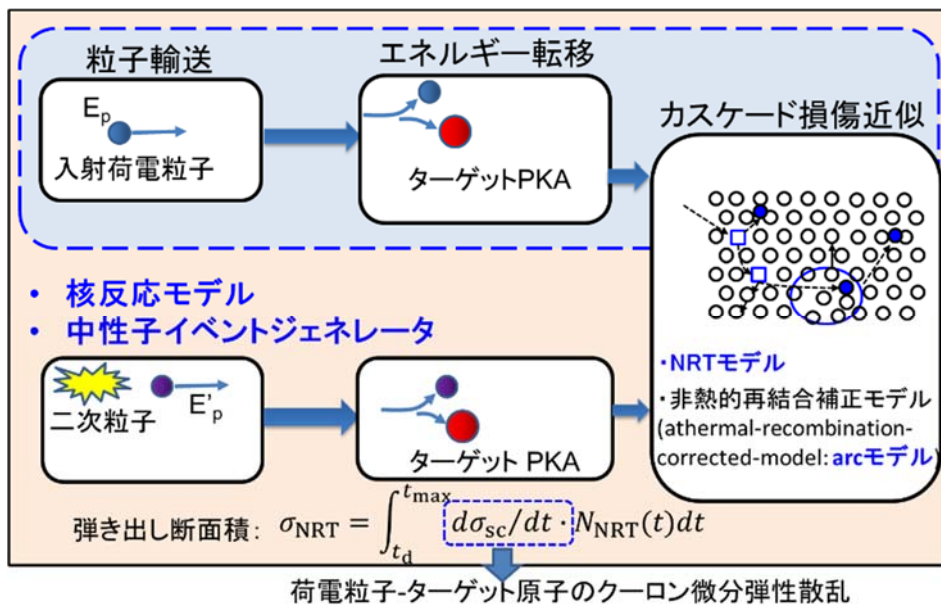


図 2 PHITS の照射損傷計算手法の概要 [3,4]

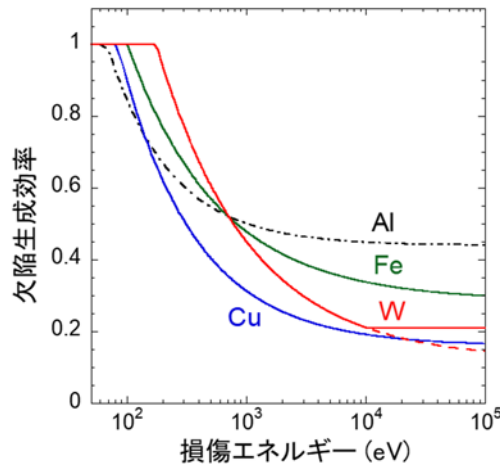


図3 Al, Cu, Fe, W に対する欠陥生成効率 [5]

### 2.3 計算例

図4左に、10 MeV 鉄照射による鉄中の dpa 深さ分布の計算値を示す[4]。材料研究分野において標準で利用される SRIM コード[10]と PHITS の計算値は、荷電粒子の角度分散・エネルギー分散のモデルの違いからピークの広がりや位置に差が生じるが、概ね一致することが分かる。また、材料表面から 2.5  $\mu\text{m}$  のフルストップ領域において、arc-dpa は NRT-dpa の 0.3-0.4 倍であり、他のイオン照射も同様の傾向であることが分かった。図4右に、800 MeV 陽子照射によるタングステン中の dpa 深さ分布を示す[4]。SRIM は核反応モデルが組み込まれていないため、本ケースの計算は不可能である。PHITS の計算結果から、核反応生成物の寄与により材料表面の損傷量が大きいことが分かる。

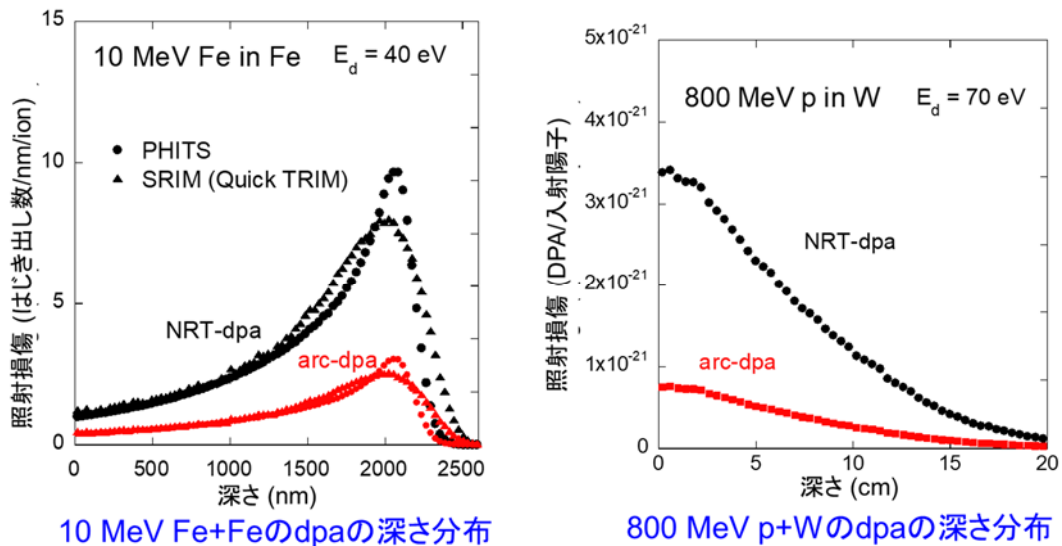


図4 dpa 深さ分布(左：10 MeV 鉄+鉄、右：800 MeV 陽子+タングステン)[4]。E<sub>d</sub>は、原子弾き出しのしきいエネルギー。

図 5 に原子炉、核融合、加速器環境下における中性子照射及び様々なエネルギーの陽子照射における材料のスケーリング係数 (NRT-dpa/arc-dpa) を示す [4]。1 MeV 陽子照射を除く全ての照射ケースにおいて、各材料のスケーリング係数はほぼ同じである。これらのケースでは損傷エネルギーが数 keV 以上と高く、図 3 に示すとおり、損傷エネルギーが増加するにつれて欠陥生成効率が一定に近づくためである。

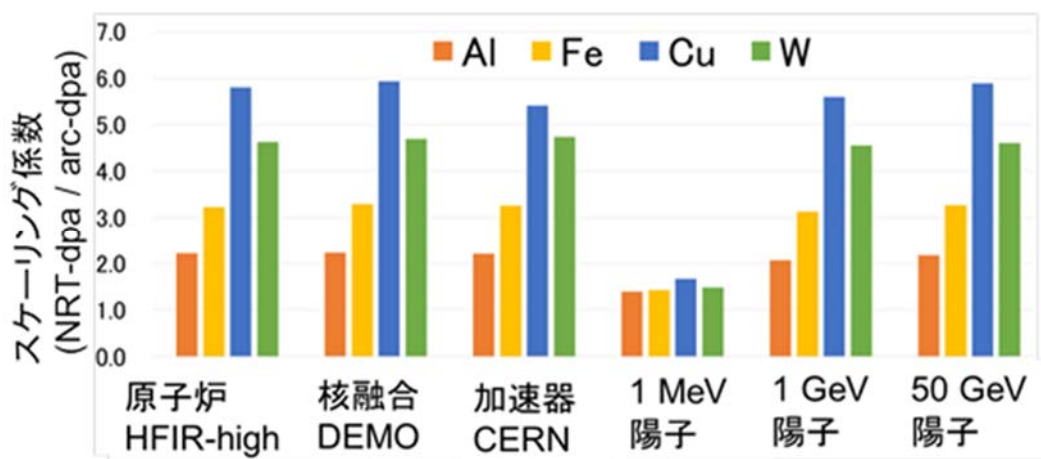


図 5 中性子と陽子照射による dpa スケーリング係数 [4]

### 3. 検証実験

計算コードの検証・改良に必要な弾き出し断面積の実験値は、「極低温(10 K 以下)の金属の照射欠陥(空孔-格子間原子)に伴う電気抵抗率増加」を用いて得られる。これまで、国外では米国ブルックヘブン国立研究所において液体ヘリウム冷媒による大型の装置を用いた 1~2 GeV 陽子の銅とタングステンに対する測定のみ実施されていた。著者らは様々な加速器施設で実験を遂行するため、図 6 に示すとおり、取扱いが簡便で無冷媒による小型極低温照射装置を独自に開発した[6,7]。空冷式のギフォード・マクマホン冷凍機の先端に、直径 0.25 mm のワイヤー試料が付随されたターゲットアセンブリを装着し、試料を熱伝導により極低温に冷却した。試料の電気抵抗は、電流源とナノボルトメーターを組み合わせた装置を用いて測定した。本装置を活用して、京大 FFAG 施設、阪大 RCNP のサイクロトロン施設、J-PARC の 3 GeV シンクロトロン施設、米国フェルミ研の加速器施設において、0.1 GeV~120 GeV 陽子に対するアルミニウム、鉄、銅、タングステンの実験値を取得した。各ケースにおいて、陽子照射中  $\mu\Omega$  オーダーの電気抵抗増加を測定した。図 7 に陽子照射によるアルミニウムの弾き出し断面積を示す[6,7]。arc-dpa の計算値は実験値を良く再現すること、陽子エネルギー 1 GeV 以上は核的損傷エネルギーが一定となるため、陽子エネルギーが増えるにつれて断面積が一定となることが分かった。

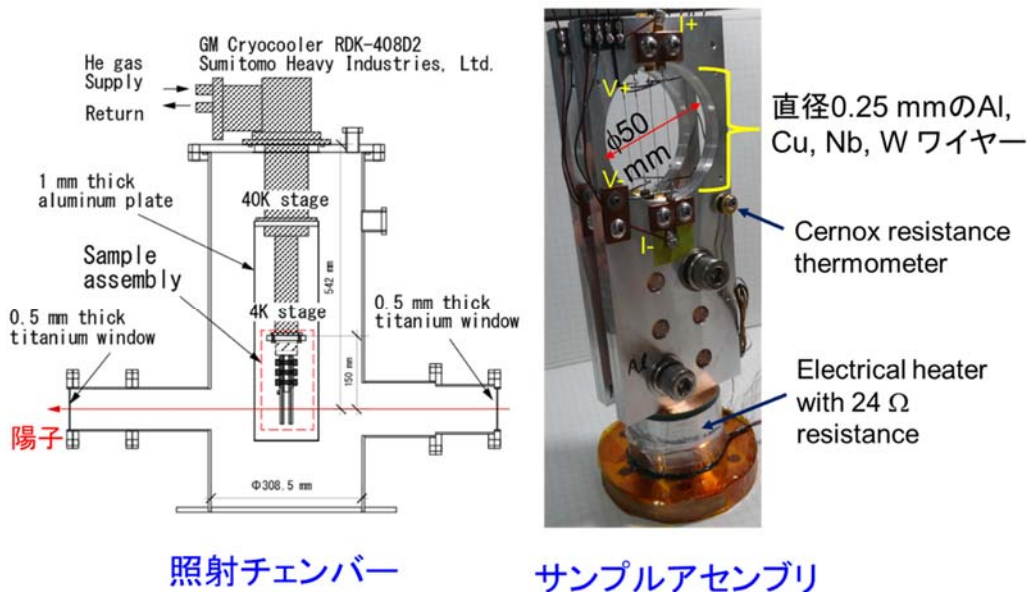


図6 小型極低温照射装置 [6,7]

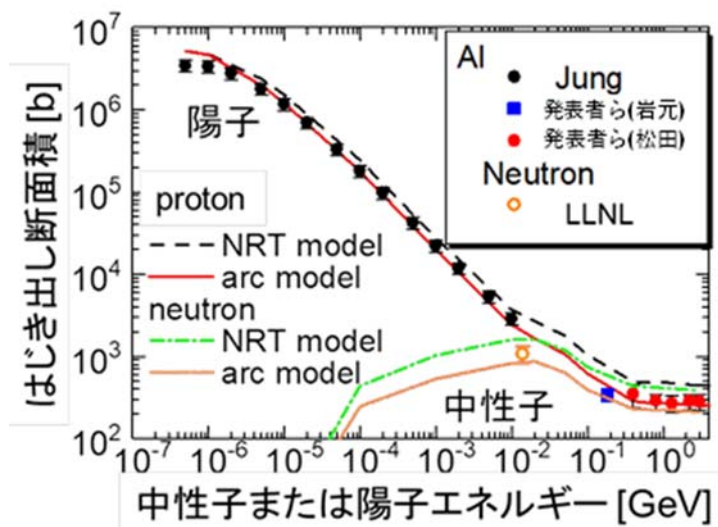


図7 中性子または陽子エネルギーに対するアルミニウムの弾き出し断面積[6,7]

#### 4. まとめ

広いエネルギーのあらゆる粒子照射に対する材料の dpa が計算可能な、PHITS と核データを用いた弾き出し損傷計算手法を開発し、金属材料（アルミニウム、銅、タングステンなど）に対する実験結果との比較を行った。その結果、最新の欠陥生成効率を PHITS に導入して得られた arc-dpa の計算値は実験値を良く再現すること、従来の NRT-dpa の計算値に比べ、1/2~1/6 であることが分かった。今後は様々な金属（単金属、合金）や半導体に対する欠陥生成効率の MD 計算による導出、検証実験が必要となる。

## 謝辞

本研究は、原子力機構（基礎工センター、J-PARC）、高エネ研、京都大学、大阪大学、米国フェルミ国立加速器研究所など様々な分野の研究者と共同で進めました。特に、計算手法の開発、実験準備と実験遂行において、多大なご協力を頂きました。深く御礼申し上げます。また、本研究は、JSPS 科研費若手研究 B(H25-H27) 25820450、基盤研究 B(H28-H30)16H04638、基盤研究 B(H31-R4) 19H02652、文部科学省 国家課題対応型研究開発推進事業 原子力システム研究開発事業「J-PARC を用いた核変換システム(ADS)の構造材の弾き出し損傷断面積の測定」(平成 28 年度～令和元年度)の助成を受けたものです。

## 参考文献

- [1] M.J. Norgett et al., Nucl. Eng. Des., 33, 50-54 (1975).
- [2] T. Sato et al., J. Nucl. Sci. Technol. 55, 684-690 (2018).
- [3] Y. Iwamoto et al., J. Nucl. Sci. Technol. 51, 98-107 (2014).
- [4] Y. Iwamoto et al., J. Nucl. Mater. 538, 152261 (2020).
- [5] K. Nordlund et al., Nature Communications 9, 1084 (2018).
- [6] Y. Iwamoto et al., J. Nucl. Mater. 508, 195-202 (2018).
- [7] H. Matsuda et al., J. Nucl. Sci. Technol. 57, 1141-1151 (2020).
- [8] J.-Ch. Sublet, et al., European Physical Journal Plus, 134, 350 (2019).
- [9] <https://www-nds.iaea.org/CRPdpa/>
- [10] J.F. Ziegler, M.D. Ziegler, J.P. Biersack, Nucl. Instrum. Methods B, 268, 1818-1823 (2010).