

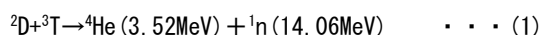
### 原子力材料挙動のモデリング研究

#### Modeling of Nuclear Reactor Materials Behavior under Irradiation

京都大学エネルギー理工学研究所 森下和功

#### 【背景と目的】

環境・エネルギー問題を恒久的に解決する将来的なテクノロジーのひとつに核融合炉発電があり、現在フランスのガダラッシュで国際熱核融合実験炉（ITER）が建設中である。核融合反応は、以下の式で示される。



ただし、D は重水素、T は三重水素である。反応後はヘリウムと中性子 (n) に分裂し、高エネルギーの中性子からエネルギーを取り出すことを想定している。その際、核融合炉壁は、核融合反応によって作り出された中性子や、炉心プラズマ領域において中性化して飛び出してしてくる水素同位体・ヘリウムなどの照射を受ける。特に、ヘリウムの照射効果は著しく、超高密度のヘリウムバブルなどの独特な格子欠陥を形成することが知られている。

ヘリウムバブルとは、希ガスであるヘリウム原子が固体内に空洞を作り、三次元状に集合したものである。これが材料表面に形成されると、表面層の剥離や重水素・三重水素の放出特性に変化を与え、結果としてプラズマの閉じ込めの安定性を阻害する可能性がある。

最近の研究により、エネルギーの低いプラズマによる照射においても高密度のヘリウムバブルが形成されることが明らかになり（従来の理論では形成されるはずがないと考えられてきた）、その挙動の解明が必須とされている。透過型電子顕微鏡などの実験手法だけでは原子レベルでの挙動についての知見を得ることはできないので、本研究ではコンピュータシミュレーションを用いて核融合炉材料中におけるヘリウムの基礎的な挙動を解明することを目的とする。

#### 【研究手法】

本研究では純鉄にヘリウムを照射する系についての分子動力学計算を行った。He-He 間および He-Fe 間のポテンシャルについては、京都大学化学研究所のスーパーコンピュータシステムで提供されている Materials Studio 6.1 に同梱されている DMol3 を利用して作成した。DMol3 は密度汎関数理論に基づく第一原理計算ソフトであり、内殻電子まで含んだ計算が可能であることから、原子間ポテンシャル作成に最適であると考えられる。なお、Fe-Fe 間は、金属中における自由電子が及ぼす多体効果を含んだ Finnis-Sinclair ポテンシャルを利用した。実験系としては、原子数 432 個の Fe のスーパーセルを作成し、その中にいくつかのヘリウムを配置し、NTP アンサンブル法（粒子数、温度、圧力が一定）を使用してヘリウムの挙動を調べた。

#### 【結果および考察】

鉄中のヘリウムは O サイト（6 個の鉄原子を頂点とする八面体の中心）の中心が安定な存在位置となった。鉄中に 2 個のヘリウムを配置した場合、低温下ではヘリウム同士がペアを組んだ構造が安定に存在する。ヘリウムペアは、お互いの距離が約 2.4 Å である第 3 近接に配位し、このときの結合エネルギーは約 0.12 eV であった。低温化ではヘリウムペアは分解しないで格子中を移動する傾向にあることから、O サイト間のジャンプ頻度を直接カウントすることにより、移動の活性化エネルギーを導出した。その結果、孤立したヘリウムにおける移動の活性化エネルギーは 0.036 eV、ヘリウムペアにおいては 0.035 eV であり、両者に有意な差は見られなかった。一方、

温度が高くなるとヘリウムペアは分解しやすくなり、ペア状態から独立状態に移る遷移温度（50%のヘリウムペアが分離する温度）は 102.5K であった。計算精度にはまだ問題があるものの、この温度においてヘリウムのペア状態と孤立状態間におけるギブスの自由エネルギー差が 0 になると仮定すると、両者のエントロピー差は  $1.17 \times 10^{-3} \text{eV/K}$  となった。

次に、鉄中に 10 個および 18 個のヘリウムをランダムに配置し、系の温度を 150 K として分子動力学計算を行い、1.5 ns 経過したときの鉄中のヘリウムの様子を図 1 にそれぞれ示す。ヘリウムは互いに第 3 近接を保ちつつ集合体を形成していき規則的な配列を有した格子間ヘリウム集合体を形成することが明らかになった。しかしながら、計算温度を室温（300K）とすると、このような集合体は形成されずにそれぞれのヘリウムは孤立した状態のみであった。一方、スーパーセル中のヘリウム数を 30 個にすると、300 K でも集合体を形成していくが、その過程で周囲の鉄原子を複数個（合計 18 個）まとめて押し出す現象が観察された。その後、すべてのヘリウム原子はこの空孔に捕獲され、ヘリウムバブルが形成された。これは、ヘリウムが結晶中に高濃度に存在する状況下では原子空孔が存在しなくても、ヘリウムバブルの形成が行われうることを示唆している。

#### 【謝辞】

本研究を実施するにあたり、琉球大学教育学部 岩切宏友 准教授、京都大学大学院 エネルギー科学研究科 博士課程 山本泰功氏、同 修士課程 中筋俊樹氏に多くのご協力をいただきました。ここに感謝の意を示します。

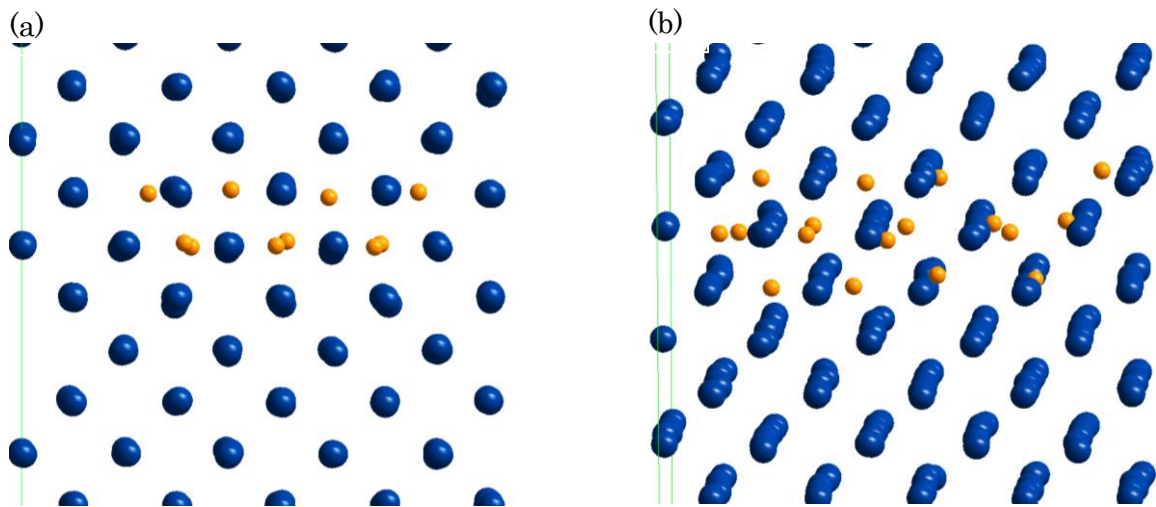


図1 分子動力学計算により形成された鉄中の格子間ヘリウム集合体。青が鉄原子、濃黄がヘリウム原子で格子間ヘリウム集合体付近の構造を抜粋して表示している。(a) 10 He、(b) 18 He