



講座 核融合材料の照射下挙動に関するマルチスケールモデリング

3. 空間的な大きさのスケールの壁をいかに克服するか

蔵元 英一¹⁾, 平谷 正人¹⁾, 沖田 泰良¹⁾, 森下 和功²⁾, 関村 直人³⁾, 曾根田 直樹⁴⁾

(九州大学応用力学研究所, ¹⁾ローレンスリバモア国立研究所, ²⁾京都大学エネルギー理工学研究所,

³⁾東京大学大学院工学系研究科, ⁴⁾電力中央研究所)

How can we bridge the multiple lengthscale models of radiation damage processes?

KURAMOTO Eiichi, HIRATANI Masato¹⁾, OKITA Taira¹⁾, MORISHITA Kazunori²⁾,
SEKIMURA Naoto³⁾ and SONEDA Naoki⁴⁾

Research Institute for Applied Mechanics, Kyushu University, Kasuga, Fukuoka 816-8580, Japan,

¹⁾*Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA 94551, USA,*

²⁾*Institute of Advanced Energy, Kyoto University, Uji, Kyoto 611-0011, Japan,*

³⁾*Graduate School of Engineering, University of Tokyo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656, Japan,*

⁴⁾*Central Research Institute of Electric Power Industry, Komae, Tokyo 201-8511, Japan*

(Received 23 April 2004)

The multiscale simulation method for the damage evolution in irradiated materials is presented. It is shown that the bias effect plays an important role in the damage evolution, such as void swelling and others. The bias effects in general can be categorized into two, dislocation bias and production bias, and basic behaviors for these processes are investigated from the viewpoint of (i) the interaction between a dislocation and point defects and defect clusters, and (ii) one dimensional motion of interstitial clusters (bundled crowdions). Not only the atomistic features in a model lattice (in the region of smaller scale), but also the elastic features in the elastic body (in the region of larger scale) are presented. From these fundamental studies the prediction of the damage evolution in materials under irradiation will become available.

Keywords:

multiscale modeling, length scale, void swelling, dislocation bias, production bias, dislocation loop

3.1 空間的な大きさのスケールに関する問題

第2章 (Vol.80 No.4) では、二体衝突近似法 (BCA), 分子動力学法 (MD), 機構論的モンテカルロ法 (KMC), 反応速度論的手法のそれぞれに適用可能な時間スケールの説明を行い, また, それらの手法から得られる評価結果をいかにしてつないで, 照射損傷過程の全貌 (特に, 照射による材料組織変化) を明らかにするについて解説した. このような照射損傷過程の中で, 変位カスケード損傷はナノメートル程度の空間領域で起こり照射欠陥の生成をもたらすが, このうち再結合を逃れて生き残ったものは, 時間をかけて材料中をより長い距離移動する. このような観点から見ると, 照射損傷過程は, 時間だけでなく, 空間的にも非常に大きな広がりをもつマルチスケールな現象といえることができる. 考慮すべき空間領域を広げていくと, 移動する照射欠陥がたどり着く場所 (シンク) での反応, すなわち, 他の欠陥との相互作用を考慮する必要がある. 相互作用の大きさは, 基本的に欠陥どうしの距離 (r) に依存する. 例えば一方が直線状転位の場合, 転位のひずみ場は $1/r$ に比例するので, 最大100ナノメートルにおよぶ相互作用を

考える必要がある. 第2章でも説明した反応速度論的解析においては, このような空間的に広い範囲におよぶ相互作用は, 通常, バイアス因子の中に押し込めて表す. この「バイアス効果」は照射効果の本質であり, 核融合材料の挙動予測モデルを構築する際の最も重要な因子のひとつになる.

転位との反応のような長距離におよぶ相互作用を考える場合, 欠陥どうしの距離に応じて, モデルの取り扱いが異なることがある. すなわち, 材料は, ミクロな立場からは並進対称性を有する結晶として扱われる一方で, マクロな立場からは連続体モデルによって記述される. このようなミクロ・マクロの取り扱いは, 従来, 固体物理と材料学という学問分野の中で, それぞれ独立に進展することが多かったが, 近年のマルチスケールモデリング研究の進展によって, ようやく, このミクロとマクロの並列行進に終止符を打つ情勢が生まれてきたと言える. このようなミクロ・マクロの一貫したものの方 (ミクロ・マクロ相関) は, 上述した欠陥どうしの相互作用の記述だけでなく, 材料のモデル化研究全体の問題でもある. 特に, 核融合材料の照

authors' e-mail: kuramoto@riam.kyushu-u.ac.jp, hiratani1@llnl.gov, okita1@llnl.gov, morishita@iae.kyoto-u.ac.jp, sekimura@q.t.u-tokyo.ac.jp, soneda@criepi.denken.or.jp

射効果のように、マクロな材料の劣化の中にミクロな様相が明瞭に存在するような場合、すなわち、高エネルギー中性子による原子はじき出しという格子の描像そのものから始まる劣化が構造物全体の寿命を決定づけるような場合に重要である。ミクロ・マクロ相関を構築するためには、マクロ、メゾ、ナノの各段階で起きている現象をよく理解し、各々の段階で得られるモデルを上手につなげて全体像を明らかにすることが重要である。

3.2 バイアス因子一欠陥反応のしやすさ

第1章で紹介したように、高エネルギーの中性子などの照射により結晶中にフレンケル対(格子間原子, 原子空孔)が発生することは古くから知られている。しかしこれらの欠陥はそのままでは一般に、直接電子顕微鏡で観察することが難しく、数ナノメートルまで集合体が成長して初めて観察可能になる。両方の欠陥とも高温では通常十分な移動度を有しており、したがって照射下にある結晶中では、同数の格子間原子と原子空孔の流れが常に存在している。もし仮に、これらの格子間原子と原子空孔がすべて再結合(消滅)反応を起こせば、照射欠陥は後に残らないはずである。しかし実際には、再結合を免れた格子間原子, 原子空孔がそれぞれの集合体を形成することになる。また、もしそれぞれの集合体がある大きさを有しているとしても、その集合体の場所に同数の格子間原子, 原子空孔が到着して吸収されただけでは、その集合体の新たな成長は不可能である。したがって、集合体が安定して成長するためには、その集合体を形成する欠陥と同種の欠陥が他方より多く吸収される必要がある。ここに、照射によって材料特性変化が生じるすべての根本原因が存在する。これがバイアス効果である。

上記の議論を、第2章で示した反応速度論において考える。単独の格子間原子(i)と原子空孔(v)の濃度変化は、以下の式で表される。

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} = \eta_v P - \xi D_v C_v D_i C_i - D_v \sum_S N^S A^S Z_v^S C_v \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \eta_i P - \xi D_v C_v D_i C_i - D_i \sum_S N^S A^S Z_i^S C_i \quad (2)$$

ここで、 C_i , C_v はそれぞれ格子間原子濃度, 原子空孔濃度, $\eta_{i,v}$ は自由点欠陥生成率, P は損傷速度, ξ は再結合効率, $D_{i,v}$ は拡散係数, S はシンクの種類, N^S はシンク濃度, A^S は反応断面積(捕獲断面積), $Z_{i,v}^S$ はバイアス因子を示す。照射温度が非常に高い場合を除いて、照射によって生成する原子空孔濃度は熱平衡濃度より非常に大きいので、簡単のため、ここでは熱平衡空孔濃度を無視する。式(1)および(2)の定常解($\partial C_v / \partial t = \partial C_i / \partial t = 0$)を考える。変位カスケード損傷から直接形成される格子間原子集合体の形成を考えない場合($\eta_i \eta_v$)、すなわち、変位カスケード損傷によって生成した欠陥がすべて単独の点欠陥の場合、式(1)(2)の右辺第1項と第2項はそれぞれまったく等しくなる。さらに、すべての S に対して $Z_i^S D_i C_i = Z_v^S D_v C_v$ が成り立つならば、式(1)(2)は $D_i C_i$ および $D_v C_v$ に対して全

くの等価になるので $D_i C_i = D_v C_v$ 。したがって、 $Z_i^S = Z_v^S$ となる。これは、シンク S に対する格子間原子と原子空孔の反応のしやすさがまったく等しいことを示す。しかしながら、あるシンク S との反応のしやすさが格子間原子と原子空孔とで異なる場合($Z_i^S \neq Z_v^S$)には、欠陥流束の対称性($D_i C_i = D_v C_v$)は崩れることになる。

金属, 合金などでは、通常、転位とよばれる線状欠陥が含まれる。これは、応力が負荷されている物質の変形に重要なはたらきをする欠陥であり、転位線の方角とひずみの方向によって、刃状転位とらせん転位に分類される。詳しくは固体物理の教科書を参照されたい[1]。特に、刃状転位は、らせん転位と比較して大きなバイアスをもつシンクであり、原子空孔よりも格子間原子の方を優先的に吸収する。そのため、マトリックス中では原子空孔が過剰になり、結果として、ボイド(原子空孔の集合体)の形成, 成長が起こることになる。これがいわゆる転位バイアス(dislocation bias)である。Fig. 1は、金属結晶中に形成したボイドの電子顕微鏡写真である。この写真を見ると、格子間原子集合体(転位ループ)は転位線へと成長しており、転位線は格子間原子を優先的に吸収しながら上昇運動(転位の移動方法のひとつ)を続けている。ボイドは過剰な原子空孔の供給を受けて、安定に成長している。

このようなバイアス効果が発生するのは、格子間原子と原子空孔は、厳密な粒子・反粒子(符号が異なるだけで他のふるまいはまったく同じという意。)の関係にあるわけではなく、その絶対値において非常に異なっているからである。上述の転位バイアスの効果は、緩和体積(欠陥が存在することによる格子の体積変化)の大きさの違いに起因している。すなわち、格子間原子の方が原子空孔よりも緩和体積が大きいために、転位の応力場と強く相互作用し、格子間原子と原子空孔の対称性が崩れ、バイアスが発生することになる。Table 1には緩和体積と密接な関係があると考えられる形成エネルギーを示すが、格子間原子の方が原子空孔よりもはるかに大きな値をもつことがわかる。通常の金属では、形成エネルギーの大きい格子間原子の方が原



Fe-15%Cr-16%Ni
neutron irradiated (JMTR)
(8×10^{21} n/cm², 480°C)

Fig. 1 Transmission electron micrographs of void formation in Fe-Cr-Ni alloy irradiated by neutrons.

Table 1 Calculated formation energies of a self-interstitial atom and a vacancy in metals.

	Fe	Ni	Au	Cu
dumbbell	3.89	4.86	4.39	3.62
crowdion	3.94	5.04	4.71	3.90
vacancy	1.83	1.42	0.96	1.19

(unit: eV)

原子空孔よりも迅速に完全結晶中に消えていくことになり、その結果として過剰原子空孔の3次元集合体（ボイド）がマトリクス中に形成される。もちろん、これは非常に単純化した議論であり、形成エネルギーのほか、格子間原子と原子空孔の移動エネルギーの大小関係にも左右される。通常、格子間原子の方が原子空孔よりも小さな移動エネルギーをもっているため、格子間原子は素早くシンクへ消滅し、マトリクス中の原子空孔濃度は相対的に大きくなる。したがって、上述したアンバランスな状況はさらに顕著となる。もし逆に、格子間原子の移動エネルギーが原子空孔よりも大きいならば、ボイド形成は抑制される方向に向かうはずであるが、通常の金属ではこの仮定が成り立つことはない。

格子間原子と原子空孔のもつひずみ場の違いにより、原子空孔は空間的に3次元に集合化することが可能であるが、大きなひずみをもつ格子間原子は、結晶中で3次元の集合体を形成することができず、平面状集合体（これが転位ループである）になる。この転位ループの形成と成長は新たな原子面の形成を意味し、一度形成された欠陥をもう一度完全結晶に戻すことになる。これは、原子空孔との再結合や表面への流出なしに、結晶の並進対称性を有する状態へ回復する最も良い方法であり、そのため、転位ループもしくは直線状転位は、格子間原子を優先的に吸収しようとするのである。一方、原子空孔は、平面状欠陥を形成するだけでなく、3次元集合体を形成することも多く、そのため、必ずしも、格子間原子で見られる完全結晶への戻り方をするわけではない。この違いが、転位バイアスをもたらしていると言える。

転位以外のシンクに対しても、シンクのもつひずみ場と格子間原子および原子空孔の相互作用がそれぞれ異なるがゆえに、バイアス効果をもつことがある。例えば非常に小さなボイド（この場合、原子空孔集合体という方が的確であろう）は、その表面における結晶の不連続性がもたらす「鏡像効果」により点欠陥と強く相互作用することが知られている（ただし、TEMで観察可能な半径1 nm程度以上のボイドは、バイアスを持たない「中性的なシンク」として考えてもよい）。この際の相互作用は短距離相互作用ではあるが、原子空孔に対してよりも格子間原子に対して強い引力となり、その大きさの絶対値は転位バイアスと同程度となる。

上述した転位バイアスとボイドバイアスの大きな違いの

ひとつは、その相互作用の符号にある。原子空孔集合体であるボイドは、反対符号の格子間原子に対して優先的に吸収する。そのため、ボイドバイアスによって欠陥集合体は縮小し、材料は照射前の状態に戻ろうとする（いわゆる材料の自己修復性）。一方、ボイドの反対符号である格子間原子集合体はもつ転位バイアスも、ボイドバイアスと同様、格子間原子を優先的に吸収する。そのため、転位バイアスの場合は、欠陥集合体を継続的に成長させることになる。したがって、照射効果を考える上では、前者よりも後者の転位バイアスの方が重視される[2]。

3.3 生成バイアス効果

これまでの議論は $\eta_i = \eta_v$ として扱ってきた。しかし、第2章で見たように、変位カスケード損傷から格子間原子集合体が直接形成されることがあり、また、その中でクラウドイオン（crowdion）の束の構造をもつものは空間的に1次元方向の移動を容易に行って、転位や結晶粒界のようなシンクまで移動する。この場合も、最終的には格子間原子が完全結晶にもどろうとしているという点では、転位バイアスと同様の効果を生じるが、シンクでの消滅までの過程が異なるため生成バイアス（production bias）とよばれている[3]。すなわち、転位バイアスの場合には、格子間原子は3次元運動によりシンクに到達するが、生成バイアスの場合には、集合体を形成して1次元運動によりシンクに到達し、さらに、完全にシンクに吸収されるまでにもう1ステップの反応、すなわち運動の方向転換など、が必要となる。

格子間原子集合体（転位ループ）は、サイズの的には格子間原子と直線状転位の中間に位置する欠陥であるが、それゆえに、その移動については、転位と同様に扱うべきか、点欠陥と同様に扱うべきかという格子欠陥物理上の未解決問題も含まれる。すなわち、転位ループの移動を、従来直線状転位の移動に用いられてきたパイエルズ応力（絶対零度において転位がすべり運動をおこすのに必要な剪断応力）によって表現すべきか、あるいは、従来点欠陥の移動の場合に用いられてきた熱活性化エネルギーによって表現すべきか、という問題である。転位ループ（クラウドイオンの束）は、直線状転位と同様、剪断（shear）によって移動する欠陥であるものの、移動に要するエンタルピーを E としたときの E/kT の大きさは通常の高温条件ではかなり小さくなるため、転位ループの移動は転位の移動と類似的に扱うべきでないという議論もある。転位ループの移動については3.5節で扱う。また、転位ループ（クラウドイオンの束）の移動様式に関しても、転位線の場合にしっかりと定義されるいわゆる“キンク対形成”と同様に扱ってよいのか、あるいは、集合体中のクラウドイオンの単なる熱的な振動として扱うべきなのか、という問題もある。従来、このような点欠陥と転位の接点に関する議論は十分なされてこなかったが、今後、このような問題は、集合体のサイズによって整理する必要があるかもしれない。

3.4 バイアス因子の評価

ここでは、上に示したバイアス因子についての定量的な求め方について述べる。バイアス因子は、シンクとの相互作用が存在する場合の点欠陥流束（格子間原子なら D_iC_i 、原子空孔なら D_vC_v ）と、存在しない場合の点欠陥流束の比として与えられる。すなわち、 E_{int} をシンクと欠陥の相互作用エネルギーとした場合の拡散方程式（Fick の法則）：

$$\nabla \cdot \left(\nabla DC - \frac{DC}{kT} \nabla E_{int} \right) = 0 \quad (3)$$

を考えた場合、 $E_{int} = 0$ として計算される欠陥流束 J_c と、相互作用エネルギー E_{int} を含めた場合の欠陥流束 J_a との比 J_a/J_c をバイアス因子と定義する。このように、バイアス因子を求めるためには、欠陥とシンクの相互作用エネルギー E_{int} を求めることと、境界条件を設定して（通常は、シンクから無限遠の欠陥密度を与える。）、拡散方程式（3）を解くことが必要になる。ただ、後者の解析は非常に複雑なため、後に示すように、シンクと欠陥の相互作用エネルギーが kT （ k はボルツマン定数、 T は温度）となる距離を捕獲半径として求め、そこからバイアス因子を求めるという簡略化した方法がとられることも多い。

以下では、バイアス因子の計算に必要な相互作用エネルギーの評価について、各々の手法を用いて評価したこれまでの研究成果ならびに今後の課題について示す。

3.5 転位ループの移動

Fig.2 は、MD 法を用いて計算したパイエルス応力のループサイズ（転位ループに含まれている格子間原子の数）依存性を示す。鉄（bcc）、ニッケル（fcc）の両方ともに、パイエルス応力はループサイズとともに減少し、直線状刃状転位に対する値に漸近する。実験的には、パイエルス応力は降伏応力から評価されるが、通常、実験で測定される降伏応力は、鉄とニッケルでは大きく異なり、鉄の方がとくに低温では大きな値を示す。しかし、これは鉄のらせん転位に対するパイエルス応力がニッケルの場合より大きいためであり、刃状転位のみを比較すると、Fig.2 は、鉄とニッケルではそれほど差がないことを示している。

転位ループのパイエルス応力がサイズとともに減少する理由は、bcc 金属の場合、以下のように考えられる。すなわち、 $\{110\}$ 面上の直線状刃状転位は $\langle 112 \rangle$ 方向から見て、 $b/3$ ごとに原子配置が等価である。これは bcc 中の直線状刃状転位の場合、安定位置は b 周期ではなく、 $b/3$ 周期であることを示す。サイズの大きな転位ループにおいても、同様のことが観察されるが、転位ループのサイズが小さくなると、セグメント長の減少による終端効果（end effect）のため $b/3$ 周期が崩れて、パイエルス応力が大きくなると考えられる [4]。転位の安定周期とパイエルス応力の関係は複雑であるが、周期が長いほどパイエルス応力が大きくなることは、容易に想像がつく。Fe 中の $b/3$ 周期の直線状刃状転位（転位線方向は $\langle 112 \rangle$ ）と b 周期の直線状転位（転位線方向は $\langle 111 \rangle$ 、前者と約 19° ずれている）のパイエルス

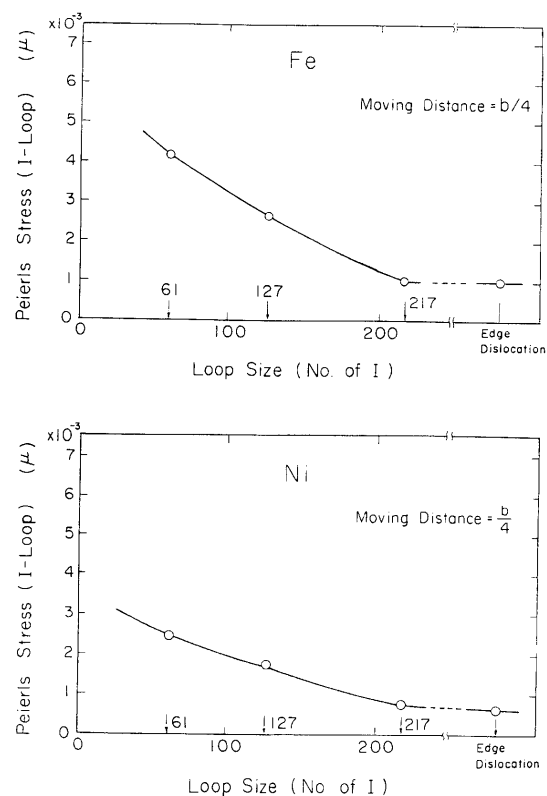


Fig. 2 Size dependence of calculated Peierls stress for dislocation loops in Fe and Ni.

応力を調べてみるとそれぞれ 0.0004μ 、 0.0006μ （ μ ：剛性率）であり、やはり周期の短い方がパイエルス応力は小さいことがわかる。一方、fcc 金属の場合には、転位の拡張の問題もありさらに複雑であるが、転位ループのサイズの減少とともに終端効果によりパイエルス応力が大きくなるのは bcc 金属の場合と同じであろうと考えられる。

パイエルス応力はこれまで転位に対して定義されてきたが、上述したように、格子間原子集合体（転位ループ）のサイズの減少とその適応限界について考えてみなければならない。最も極端な場合として格子間原子（クラウディオン）1 個の場合を考えてみる。これまで転位は剪断応力の負荷により運動するが、点欠陥の場合には外力に対して直接反応せず、熱活性化運動を行うとされてきた。しかし、この場合、外力の負荷は結晶中一様な剪断応力のような場合を想定している。Fig.3 に示すような軸対称な剪断応力の負荷を、単一のクラウディオンの場合に適用してみると、例えばクラウディオンの軸上に軸方向を同じくする他のクラウディオンが存在している場合などが考えられる。この場合、問題にしているクラウディオンが応力によって移動することは明らかであり、他のクラウディオンから受けた応力は、ミクロな軸対称剪断応力と考えられる。したがって、単一のクラウディオンに対してもパイエルス応力を適用することを容認してよいということになる。この認識は、点欠陥と転位をこれまでに別の欠陥に分類してきた見方に対して変更を迫ることになり大変興味深い。

転位ループに加わる負荷応力を徐々に増加しそれに対応する転位ループの中心位置を細かく決定することにより、

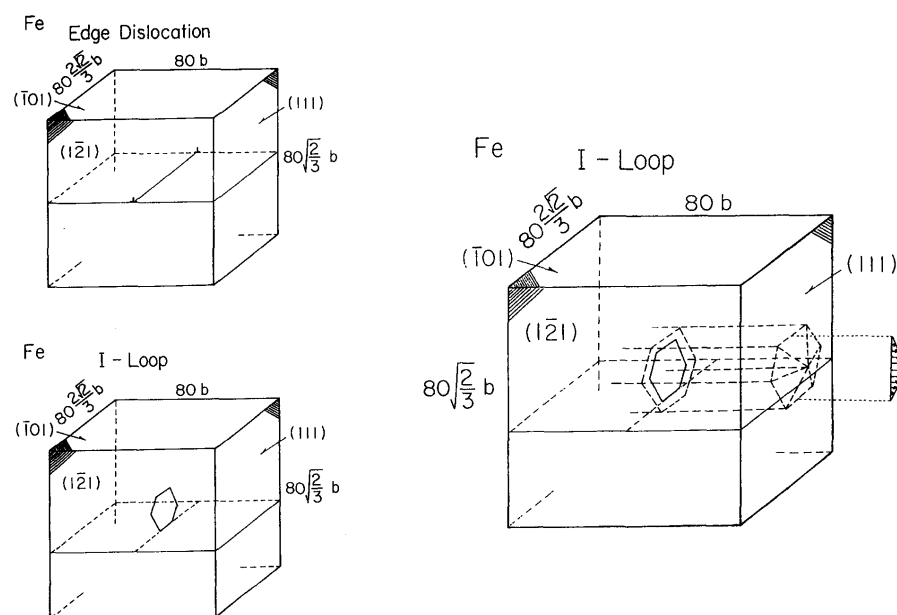


Fig. 3 Axial-symmetric shear stress applying to a dislocation loop in Fe crystals.

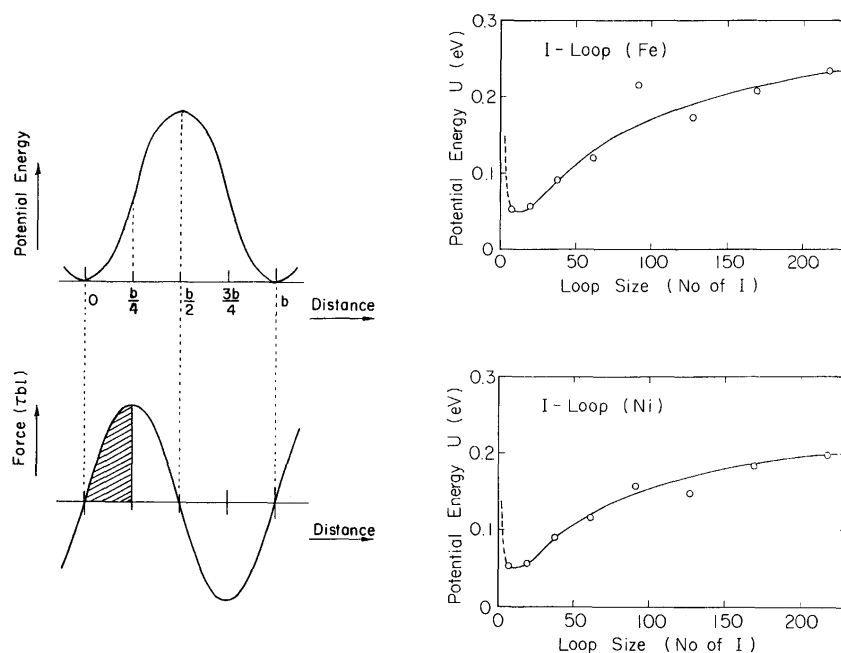


Fig. 4 Evaluation of activation energy for loop migration from a force-distance curve.

いわゆる応力-距離曲線 (force-distance curve) が得られ、これを積分することにより転位ループの移動に対する活性化エネルギーを求めることができる。Fig. 4に鉄およびニッケルに対する結果を示すが、微小集合体の領域 (格子間原子数で約20) に極小値があることが特徴である。単一のクラウディオンに対して集合体になることにより活性化エネルギーが一旦減少することは予想外のことであり、この減少はパイエルス応力の減少に起因しており集合体 (クラウディオンの束) に特有の事情である。0.05 eVという値は非常に小さい値であり、格子間原子集合体の一次元運動は熱活性化運動として容易に起こりうることがわかる。ループサイズの増大とともに活性化エネルギーが増加する

のは周囲の長さが増すためである。

3.6 転位と格子間原子、格子間原子集合体の相互作用

転位ループ移動のための活性化エネルギーは非常に低く、常温でも容易に起こりうる。移動した転位ループは、材料中に存在するシンクとの相互作用をし、その相互作用エネルギーが極小となる安定位置まで移動する。ここでの相互作用エネルギーとは、ひずみ場がない場合に比べ、転位のひずみ場が存在する場合の形成エネルギーの変化である。Fig. 5には、刃状転位とらせん転位の周辺でのひずみ場を示すが、転位は、距離だけでなく、方位にも依存するひ

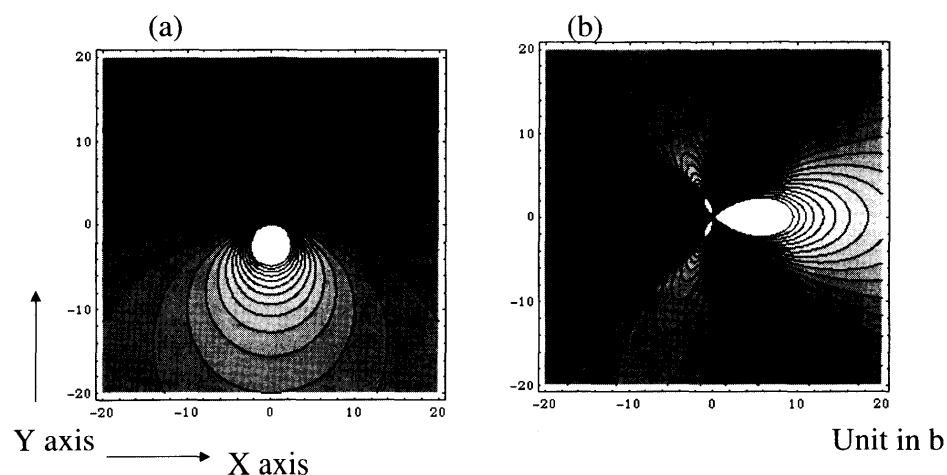


Fig. 5 Stress field around dislocations. The difference in the color corresponds to the sign and strength. (a) screw dislocation σ_{xz} , $\vec{b} = \vec{l} = (0,0,1)$, (b) edge dislocation σ_{xy} , $\vec{b} = (1,0,0)$, $\vec{l} = (0,0,1)$, $\vec{b}$ is the burgers vector and $\vec{l}$ is the line vector.

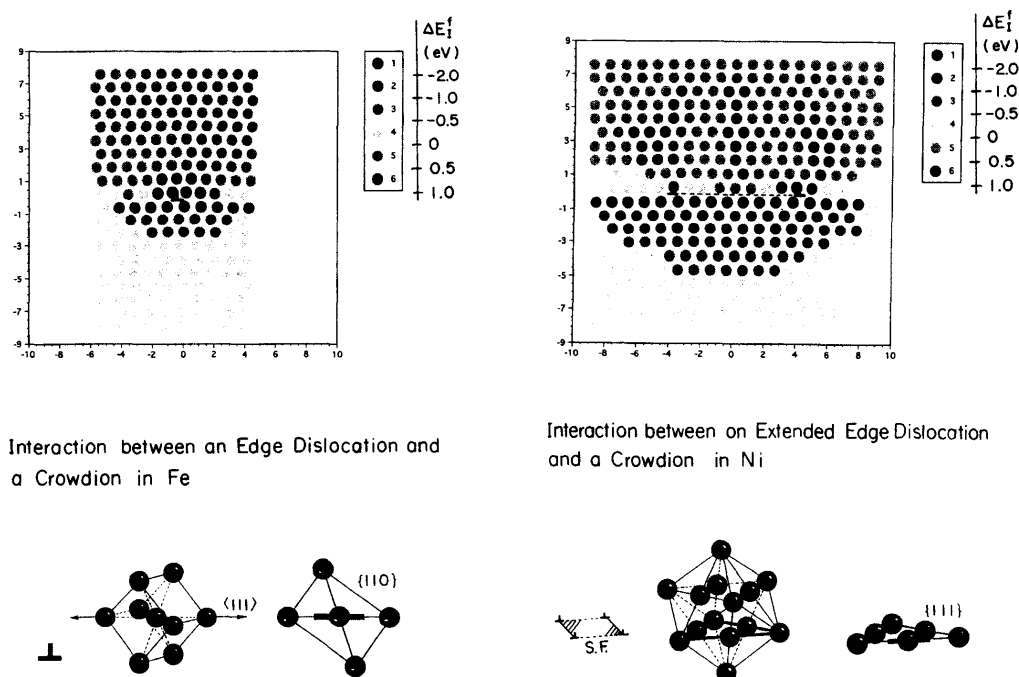


Fig. 6 Interaction between a crowdion and an edge-dislocation in Fe and Ni.

ずみ場を持つことがわかる。転位周辺のひずみ場に関しては、主に線形弾性論を用いて詳細に研究されてきたが、線形弾性論は転位のコア部分の反応に適用することができず、MD法を用いた評価が必要である。すなわち、転位と格子間原子集合体の相互作用を考える場合、転位と集合体の間の距離が $\sim 10^{-10}$ m 程度の近接コア反応のときはMD法を、それより遠く $\sim 10^{-7}$ m までのときは線形弾性論を用いる必要がある。

Fig. 6 には、MD 法で計算した、鉄およびニッケル中の刃状転位周辺での格子間原子の形成エネルギーを示す。ここで、格子間原子としてクラウディオンの軸方向が転位の Burgers vector に平行な場合について計算を行っている。また、ここでは示さないが、原子空孔の形成エネルギーに

についても同様の計算を行っている。その結果、格子間原子は原子空孔より大きな捕獲領域を有すること、ニッケル (fcc) の方が鉄 (bcc) よりも大きな格子間原子の捕獲領域を有することなどが明らかになった。すなわち、これは、bcc 金属より fcc 金属の方が格子間原子を優先的に吸収し、その結果、bcc 金属より fcc 金属中の原子空孔濃度が過剰になり、よりボイド形成・成長を促進することを示している。実際、ボイド形成成長に起因するスウェリング（照射された材料の体積膨張現象）を比較した場合、オーステナイト系ステンレス鋼 (fcc) が、フェライト系ステンレス鋼 (bcc) よりも大きいことは、よく知られた事実である [5]。

また、格子間原子集合体の捕獲半径に対しては、ニッケルと鉄で大きな相違がなく、そのサイズとともに捕獲半径

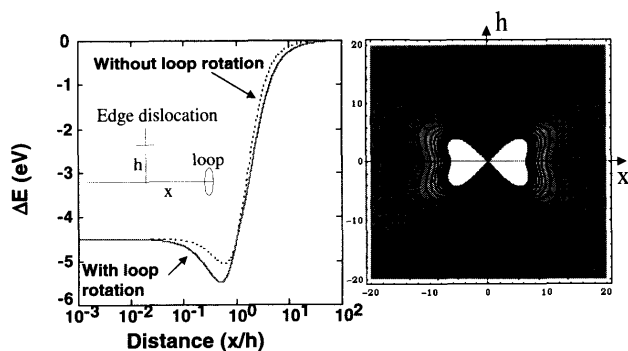


Fig. 7 Interaction energy between an edge-dislocation and a dislocation loop calculated with linear elastic theory. In this calculation, the loop size, r_b , is set to 0.5 nm, and h is to $3x r_b$.

は増大することがわかった。

Fig. 7 には、線形弾性論を用いて計算した直線刃状転位と欠陥集合体の相互作用エネルギーの距離依存性を示す。両者の Burgers vector は、上述した MD 法の計算と同様、平行とした。両者の距離が約 100 nm 程度以下で相互作用エネルギーは熱振動エネルギーより大きくなる。また、相互作用エネルギーから計算した安定位置は、 $x/h \sim 1.0$ の場所であり、引力により可動な転位ループはこの位置まで移動すると考えられる[6]。しかし、集合体を構成している格子間原子（クラウディオン）は集合体の中に留まっており、刃状転位にはまだ吸収されていない。最終的に完全結晶内にもどっていないのでバイアス効果としては未完成である。すなわち、バイアス効果が十分機能するためには、集合体の転位への吸収が進まなければならない。そのためには温度が高いことが必要となる。なお、集合体の転位への吸収については、上述したように近接コア反応になるので、MD 法が有効であろう。

線形弾性論の歴史は古く、弾性論が成り立つ範囲（ひずみが小さい）であれば、さまざまな欠陥どうしの相互作用を簡便に記述することが可能である。しかしながら、どのようなモデルを含むかで、異なる結果が出ることもある。先に、転位と転位ループの Burgers vector が平行という仮定のもとに起こり得る反応に対して説明をしたが、Fig. 7 には、直線転位のひずみ場により、転位ループの normal vector が変化する場合の結果も示した。このようなモデルを入れると、転位ループの安定位置は変化する。従来、特にらせん転位とそれに垂直な Burgers vector の転位ループに関しては相互作用がないとされていたが、normal vector を変化させることで引力がはたらくことがわかった。MD 法ではそのような効果は解析モデルの中に暗に含まれているが、計算体系は小さいものに限られる。したがって、MD 法によって得られる結果と線形弾性論によって得られる結果を上手に組み合わせることが重要である。

3.7 転位移動のダイナミクス

これまで、転位と欠陥の相互作用を MD 法と線形弾性論を用いて評価する方法を解説した。上述した相互作用エネルギーやバイアス因子は、照射によって生成した可動欠

陥が転位とどれくらいの強さで反応するのかを表すよい指標であり、照射を受けた材料のマイクロ組織変化のモデル化に使われる。核融合炉構造材料開発においては、照射による機械的特性変化、すなわち外部応力に対する材料の変形挙動を評価する必要があるが、このモデル化に関しても、転位と照射欠陥の反応が重要になる。一般に、未照射材における引張試験では、応力とひずみが比例する弾性領域に続き、転位の増殖と移動による塑性変形が始まる。さらに外部応力を増加させると、転位同士の組織化や堆積により、応力集中が起こり最終的に材料は破断する。一方、照射材においては、欠陥集合体の局所的なひずみ場、あるいは欠陥集合体との原子レベルでの接触により、転位の移動は阻害される。すなわち、照射欠陥が点在する材料中で、転位はどれくらいスムーズに移動できるか、というのが照射材料の機械的特性を決めるのである。

このような照射材料の機械的特性を評価する場合、特に転位と照射欠陥の相互作用を取り入れて転位移動のダイナミクスをモデル化することが重要となる。この場合でも MD 法単独で評価することは原理的に可能であるが、MD 法で扱える原子数は現時点で高々 10^8 個程度であるため、100 nm にも及ぶ転位-照射欠陥相互作用を評価することは事実上不可能である。そこで、このような転位の挙動を詳細に解析する方法として転位動力学法（DD 法）がある。DD 法は、主に外部応力下での転位の運動を追跡する手法である。多数の転位間や欠陥集合体の相互作用など、非常に複雑な過程を含む計算でも、DD 法を用いることで可能となる。DD 法によって転位の動きを評価する場合、遠距離相互作用が支配的となる領域では線形弾性論を、近距離で欠陥と転位のコア反応が支配的となる領域では MD 法の結果を組み合わせる使用する。

DD 法では、転位の各部分を直線セグメントで近似し、自己エネルギー、転位間の弾性相互作用エネルギー、およびフォノンとの非弾性散乱などによるエネルギー散逸を計算し、その挙動の時間発展を少しずつ求めて行く方法である。一方、近接コア反応（例えば反平行転位の対消滅、junction 形成、交差すべりなど、Fig. 8 参照）に対しては、主に MD 法の結果を、入力パラメータとして取り入れる。転位の各セグメントに作用する局所的な力（ $\vec{F}$ ）は、以下に示す Peach-Koehler の式を用いて計算する。

$$\vec{F} = (\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) \times \vec{l} \quad (4)$$

ここで、 $\vec{b}$ は Burgers vector、 $\vec{\sigma}$ は応力テンソル、 $\vec{l}$ は line vector である。この局所的な力から、構成方程式を用いて転位の速度（ v ）と変位（ r ）を計算する。計算過程の中では、通常は弾性相互作用の評価に費やす計算回数が最も多く、長距離相互作用を考慮すると、 N セグメントから成る系では計算回数のオーダーは N の 2 乗程度となる。すなわち、転位密度の増大とともに、計算負荷は急激に増加してしまう。そのため、遠距離にある各セグメントからの相互作用に関しては多重極子展開近似などの工夫が必要である。それでもなお、高密度の欠陥集合体を計算対象にすると、転位の各セグメントあたりの計算負荷が急激に増大

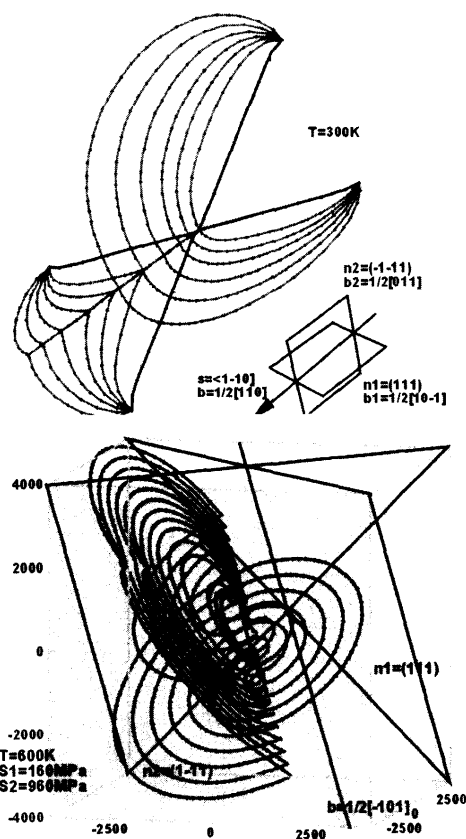


Fig. 8 Junction formation (top) and cross slip of dislocations generated by Frank-Read source (bottom).

し、計算対象すべてを解析することが不可能になる。さらなる計算の効率化やより強力な計算機を用いたシミュレーションが期待される。

照射下材料の機械特性変化を求めるためには、第2章で概観した手法（BCA法、MD法、KMC法、反応速度論的手法）を用いて得られた欠陥集合体のサイズ分布、空間分布を入力パラメータとして、これらと転位の各セグメントとの相互作用を評価することになる。一例として、Fig. 9には、格子間原子集合体の密度（個数）を変化させた場合

の、応力-歪み曲線の計算結果を示した。この計算で格子間原子集合体の空間分布はランダムとしている。欠陥集合体密度の増加に従って、降伏応力が増加とともに応力の不安定性（応力の振動現象）が増大することがわかる。これらDD法の結果から、メゾスケールにおける照射下での塑性的物理量（例えば転位密度の応力に対する変化、照射によるすべり抵抗の変化）を求めることができる。これらの物理量を有限要素法（FEM）などの連続体モデルの構成方程式に取り入れることにより、さらに大きな系における機械的特性変化を評価することが可能である。

3.8 おわりに

これまで3回にわたって「核融合材料の照射下挙動に関するマルチスケールモデリング」と題する講座記事を連載してきた（Vol.80, No.3, 4, 6）。照射損傷過程は、時間的にも、空間的な大きさとしても、エネルギー的な面も、本質的にマルチスケールな現象であり、単独の手法で評価することは困難である。そこで、各種手法を相補的に組み合わせることによって現象の全貌を明らかにしようというのが、マルチスケールモデリングである。記事のすべてを読んでいただけた読者には理解されたと思うが、このモデリング手法はまだ確立されたものではなく、所々に既存の手法では埋められない理論上の穴（スケール間のギャップ）が存在する。今後益々の手法開発、計算機性能の向上が望まれる。

参考文献

- [1] 加藤雅治：入門転位論（裳華房，2003）。
- [2] T. Okita and W.G. Wolfer, J. Nucl. Mater. **327**, 130 (2004).
- [3] C.H. Woo and B.N. Singh, Philos. Mag. A **65**, 880 (1992).
- [4] J.P. Hirth and J. Lothe, *Theory of Dislocations* (McGraw-Hill, New York, 1968).
- [5] 蔵元英一：まてりあ **35**, 110 (1996).
- [6] W.G. Wolfer, T. Okita and D.M. Barnett, Phys. Rev. Lett. **92**, 085507 (2004).

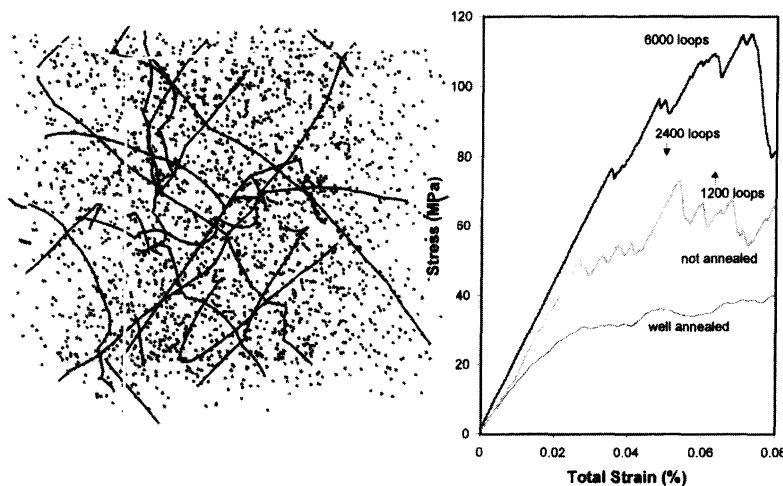


Fig. 9 Dislocation network interacting with Frank-sessile dislocation loops (left) and corresponding stress-strain curve (right).