

京都大学教育研究振興財団助成事業
成果報告書

平成20年11月5日

財団法人京都大学教育研究振興財団
会長 辻 井 昭 雄 様

所属部局・研究科 京都大学大学院エネルギー科学研究科

職名・学年 博士後期課程3年

氏 名 渡 辺 淑 之

事業区分	平成20年度・国際研究集会派遣助成		
研究集会名	2008年第4回マルチスケール材料モデリング国際会議 (4th International Conference on Multiscale Materials Modeling, 2008)		
発表題目	放射線照射環境下でのSiC材料中の欠陥特性に関する分子動力学解析 (MD simulations for defect properties in -SiC under irradiation)		
開催場所	Tallahassee-Leon County Civic Center, Tallahassee, Florida, USA		
渡航期間	平成20年10月26日 ~ 平成20年11月2日		
成果の概要	タイトルは「成果の概要/報告者名」として、A4版2000字程度・和文で作成し、添付して下さい。「成果の概要」以外に添付する資料 無 有()		
会計報告	交付を受けた助成金額	200,000 円	
	使用した助成金額	200,000 円	
	返納すべき助成金額	0 円	
	助成金の使途内訳 (使用旅費の内容)	航空券(関空 - タラハシー 往復):	¥174,670
		リムジンバス(京都駅 - 関西空港 往復):	¥ 3,800
		宿泊費(6泊):	¥35,020
		会議参加料:	¥43,251
	合計:	¥256,741	
		上記に充当	

成 果 の 概 要

氏 名	渡 辺 淑 之	所 属	京都大学大学院エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻 博士後期課程3年
件 名	放射線照射環境下での SiC 材料中の欠陥特性に関する分子動力学解析 (MD simulations for defect properties in β -SiC under irradiation)		
概 要	<p>炭化珪素 (SiC) 材料は、耐環境特性 (高温高強度、耐食性、耐摩耗性、高温での化学的安定性、優れた熱伝導度、低崩壊熱、低誘導放射特性など) に優れることから航空宇宙、高温ガスタービン、先進核分裂炉 (高温ガス炉)・核融合炉用耐熱性構造材料として期待されている。特に、先進核分裂炉・核融合炉の改良・開発の鍵となるのは、その中枢部分に使用されている材料である。これらの材料は炉心部において核反応により生成する高エネルギー中性子の照射を被り、材料内部に「照射損傷」を生じる。弾き出し損傷 (材料構成原子の格子位置からの弾き出し、変位損傷) により形成されたミクロな欠陥は、核変換損傷 (構成原子の核反応による、核種の変換やガス原子の生成) により生じたミクロな欠陥と複雑な相互作用の結果として、材料のマクロな特性を変化させる。この効果は「照射効果」と呼ばれる。構造材料の代表的な照射効果は、体積膨張 (スウェリング) 照射クリープおよび照射脆化である。セラミックスにおいては熱伝導率低下も重要な照射効果として挙げられる。このような照射効果は、照射により材料中に高濃度に蓄積した点欠陥 (格子間原子、空孔、アンチサイト欠陥) やそれらの集合体である欠陥集合体 (格子間原子集合体、空孔集合体) の生成・成長により、材料のミクロ構造が変化することに起因する。これまで、核分裂炉、イオン加速器、電子線照射実験などにより、照射下での SiC 材料中で生じるミクロ構造変化、すなわち、欠陥集合体の成長に関するさまざまな照射条件依存性 (例えば、格子間原子集合体は 1dpa 以上、600 以上で成長し、空孔集合体は 10dpa 以上、1000 以上で成長するなど) が明らかになってきた。しかしながら、それら集合体の形成・成長挙動の機構論的理解はほとんど進んでいないのが現状である。炉の健全性・寿命評価・新材料開発への指針を与えるためには、高精度な照射下材料挙動予測ツールの開発が必要不可欠である。</p> <p>以上を踏まえて、本研究では、先進核分裂炉・核融合炉の構造材料として期待されている SiC 材料を対象とし、その照射下ミクロ構造変化を機構論的に解明・モデル化することを目的としている。今回は、格子間原子集合体の形成・成長挙動のモデル化するのに重要なパラメータとなる欠陥エネルギー (点欠陥やその集合体の形成・結合・移動エネルギー) を原子レベルでの理論解析より評価することを試みた。本研究で得られた主たる結果を以下に示す。</p> <p>1. 格子間原子集合体の形成に関するエネルギー論</p> <ul style="list-style-type: none"> ● 単一の C 格子間原子の安定構造は C-C ダンベル型であり、単一の Si 格子間原子の安定構造 (形成エネルギーが最も低い状態) は、TC サイト侵入型であった。これらの安定構造は、第一原理計算結果 (文献値) と一致するものであった。また、比較的小さい (実験的に観察不可能な) サイズの集合体中の各格子間原子は、上記の安定構造に類似の構造を有していることが確認された。それらの安定構造の共通点として、純 C 結晶 (ダイヤモンド) 純 Si 結晶、純 β-SiC 結晶におけるそれぞれの平衡ボンド (C-C, Si-Si, Si-C) 長をうまく保持する原子配置を有していることを発見し、集合体の安定構造は、ボンド長と関係付けることでうまく説明 (解釈) できることを見出した。 ● 組成比 (I^S/I^C) = 1 の比較的大きな (実験的に観察可能な) サイズの集合体の安定構造は、積層欠陥を有する板状の欠陥であった。この欠陥は、照射実験でも観察されているフランクグループの一種と推測され、実験結果の再現において、本計算で使用した原子間ポテンシャル関数 (Gao-Weber ポテンシャル) の有用性が示唆された。 ● 格子間原子集合体の形成エネルギーは、サイズに対する増加傾向を示していた。ここで、組成比 (I^S/I^C) = 1 のフランクグループ型の集合体に着目し、その形成エネルギーをサイズの関数 		

として数式化することを試みた。ここでは、一般の金属で用いられてきた経験式に新たな補正項を加えた数式を構築し、先のMD解析結果（計算値）を用いて近似式を得た。得られた近似式は、サイズの小さい（フランクフルプの構造を有していない）集合体の形成エネルギーの傾向もうまく再現しており、幅広いサイズの集合体への適用可能性を示唆する結果となった。この理由については現在調査中であるが、ミクロとマクロの間を精度良く繋ぐ手法（数式）を実証する結果となるかもしれない。

- 結合エネルギーの組成依存性をもとに、集合体の熱的安定性を組成比 ($I^{Si/C}$) の関数として整理したところ、 $I^{Si/C}=1$ （化学量論組成）の集合体、Siリッチの集合体、Cリッチの集合体の順で、熱的に安定であることが確認された。 β -SiCにおけるSiとCのはじき出しエネルギーにあまり差がないことを考慮すると、一般に照射環境下では、SiとC両方の格子間原子が存在することになる。従って、大雑把に言えば、照射下で最も多く存在する割合が高いのは、 $I^{Si/C}=1$ に比較的近い集合体であると予測される。以上より、今回得られた解析結果は、実験事実（実験で観察される集合体の組成）を裏付ける根拠となるものである。

2. 点欠陥の移動に関するエネルギー論

- 格子間原子および空孔の移動エネルギー共に、MS法を用いた場合よりもMD&MS法を用いた場合の方が、より低い移動エネルギーを得た。これは、有限温度で系を緩和させることでより緩和が促進される可能性が高くなることを示しており、MD&MS法の有用性が実証された。
- 計算より得られたC格子間原子の移動エネルギーは、Si格子間原子のそれよりも低い結果となり、これは実験事実と一致している。また、ここで得られた格子間原子および空孔の移動エネルギーは、金属ものよりも高いものであった。これは、SiCにおける欠陥集合体の成長が金属におけるそれよりも比較的高温でなければ観察されないという実験事実とも一致しており、本計算で用いた原子間ポテンシャルの有用性が示唆された。

これらの知見は、今後のSiC材料の高精度な照射下挙動予測ツール（モデル）開発への指針を与える必要不可欠な要素になるものである。

論文発表時には、諸外国の研究者から多くの反響（賞賛・質問・助言など）を頂いた。さらに、諸外国の最先端の研究情報を得ることができ、今後の研究の方向性が明確になった。