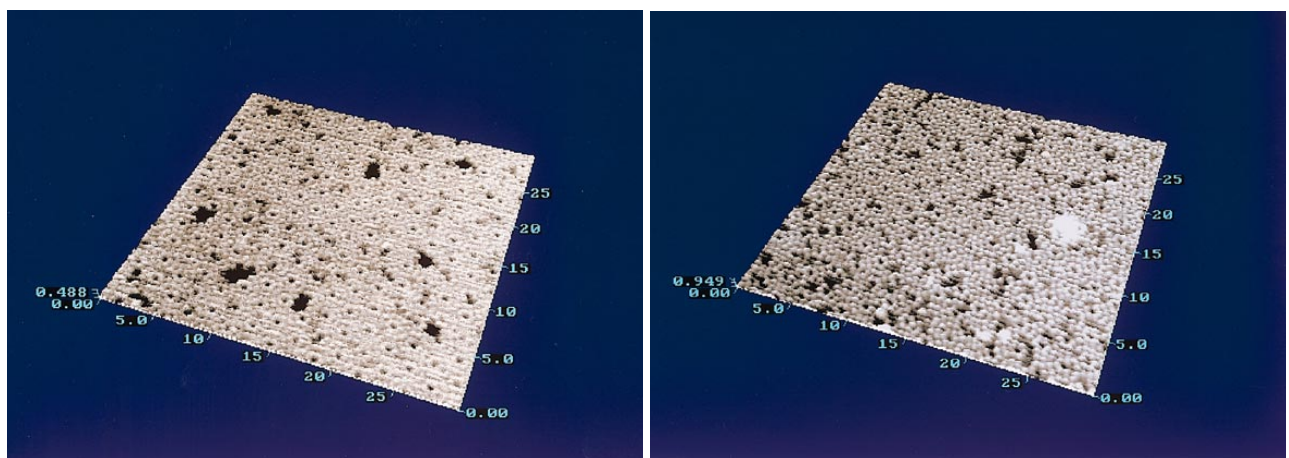


Basic Research on the Development of New Materials Used under Strong Radiation Fields 極限放射線環境下での材料挙動のモデリングと 材料開発のための基盤的研究

プロジェクトリーダー 勝 村 庸 介

東京大学 大学院工学系研究科
附属原子力工学研究施設 教授



(A) (B) シリコン (111) 面の 30nm x 30nm の範囲を俯瞰的に示したトンネル顕微鏡写真 (A) は、50keV アルゴンイオンを 1.0×10^{16} ions/m² 照射した直後の欠陥 (原子欠損) の様子を示した、集団的に原子が欠損する場合やはじき出された原子群が表面に吸着して振動している様子 (写真の右) も観察できる。(B) は、この試料を 600 °C で 10 秒間アニールした時の写真で、アニールによって欠陥 (原子欠損) が集合することがはっきりと確認できる。

1. 研究目的

現在のエネルギー源の一つである原子炉の長寿命化、高燃焼度化の達成や、新しい将来の原子力システムの開発においては、高温高压条件下の強い放射線場といった極限的複合環境で高い機能を有し、かつその機能を維持できる材料の開発が不可欠であり、耐環境性の高い新材料の開発、精度の高い材料の寿命予測手法の開発が望まれている。そのためには極限的複合環境下での材料挙動の深い理解は不可欠である。本研究では極限複合環境として、放射線、高温水、高応力場を対象とする。

現在の分析技術は材料表面を原子レベルで観測、操作でき、放射線による欠陥、偏析などの現象を観測できる。加えて、制御された放射線照射、たとえば中性子照射を模擬したイオンビーム粒子を一つ一つ材料に照射して観測すれば、劣化や損傷の過程を初期の段階から空間的に時間を追って把握することも可能である。一方、分子軌道法、分子動力学といった量子論に基づいた計算も進み、電子、原子レベルのシミュレーション手法は励起の素過程から非晶化に至る空間的にも時間的にも幅広い様相にわたる現実の系を扱えるようになってきた。電子・原子といった空間レベルで、時間分解能をもった実験手法による観測と、量子レベルでのモデル化により、原子力材料の特徴である放射線環境における材料の振る舞いの理解とともに、高い機能を有する材料を創製するための基礎研究を行い、また、従来のマクロな経験式でなく、ミクロな知見に基づいたマクロ挙動の理解を目指している。ミクロとマクロを結ぶモデルの構築が本研究の特徴である。具体的な課題と各テーマの関係を図 1 に示す。



超臨界圧二酸化炭素流動ループののぞき窓を調節中

2. 研究内容

1) 量子レベルモデル開発による耐環境性材料評価と設計

照射環境における材料特性劣化を定量的に予測するためにはカスケード損傷のような微小な領域（～10nm）で起こる損傷物理現象を詳しく理解し、マクロ特性の変化へ結びつけなければならない。ここでは分子動力学法によって得られた極短時間現象を実時間現象に結合するためにモンテカルロ法を利用し、カスケード損傷によって生成された点欠陥が自由点欠陥となる過程をモデリングを構築している。さらに、計算機シミュレーションとの直接比較を可能とし、材料の照射環境下での特性評価モデル構築に寄与するために、走査プローブ顕微鏡を活用して、イオン照射による微小な表面現象を原子レベルで明らかにすることを進めている。

2) 極限環境下計測材料の劣化機構の解明と耐劣化特性評価

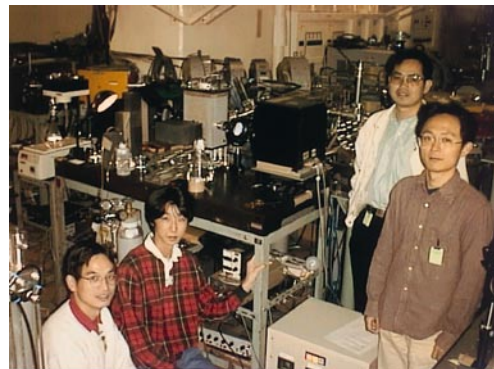
計測用材料は外部変化に敏感であるという性質上、照射劣化が起こりやすいものが多い。特に半導体材料などでは、宇宙における利用など荷電粒子放射線場での劣化が問題になる場合が多い。照射劣化の問題は直接放射線にさらされる放射線検出器においては特に大きい。ここでは計測素子の照射劣化について知見を得るために、新しい高分解能観察装置を開発し、それを用いた実験を行いデータを得ることを目的とした研究を行っている。蛍光X線による材料の観察は分子レベルでの材料の状態を知る上で有効である。しかし、エネルギー分解能と検出効率を両立させることや、迅速測定が困難であった。ここでは、可能な新しい数eV程度のエネルギー分解能を持ち迅速測定の可能な超高分解能エネルギー分散型X線マイクロカロリメータの開発を行っている。

3) パルスラジオリシス法による高温水の放射線分解研究

原子炉の高温高压下での冷却水の化学挙動が材料の腐食、応力腐食割れといった健全性に深く関わることが知られていることから、高温高压水の放射線分解評価は工学的に重要であるとともに、極限条件下での冷却水の挙動解明という意味でも興味深い。室温から500℃まで超臨界圧水をも含む高温水の放射線分解の解明を進めている。これまで制御した条件下での研究としてはこれまで300℃が最高であるが、本研究では500℃、500気圧までの広範囲な条件下の実験を進めている。現在、ナノ秒の時間スケールでのパルスラジオリシス測定を行っている。すでに、世界で初めて水和電子を観測、スペクトルを得て、水和電子が超臨界条件下でも存在することを明らかにした。引き続き、水和電子の収量、反応性についての測定を行っている。

4) 高温高压下流体の伝熱劣化現象模擬実験と数値シミュレーション

伝熱流動は、材料への応力、腐食といった直接的な境界条件を与えるだけではなく、間接的にも腐食生成物の濃縮や質量移行などの材料健全性に寄与する要因となる。ここでは超臨界圧流体における伝熱劣化現象高温高压下流体における伝熱劣化現象を取り上げる。伝熱劣化模擬実験を超臨界圧二酸化炭素流動ループで実施するとともに、粒子画像流速測定法およびホログラフィック干渉系を駆使してマクロ的な熱伝達係数や伝熱劣化熱流束などの情報を得る。平行してよりミクロスケールの情報を数値取得をシミュレーションで行う。これらを実験結果と比較しながら、伝熱劣化現象のメカニズムの解明に役立てるとともに、伝熱劣化現象の定量的予測を目指す。



高温水、超臨界圧水のパルスラジオリシス実験装置前の研究員と大学院生



超臨界圧二酸化炭素流動ループ

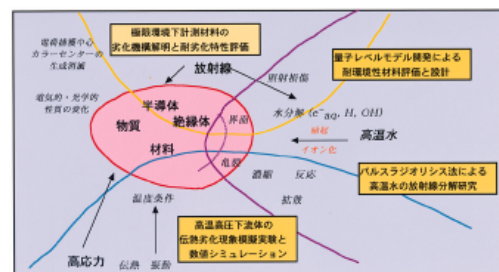
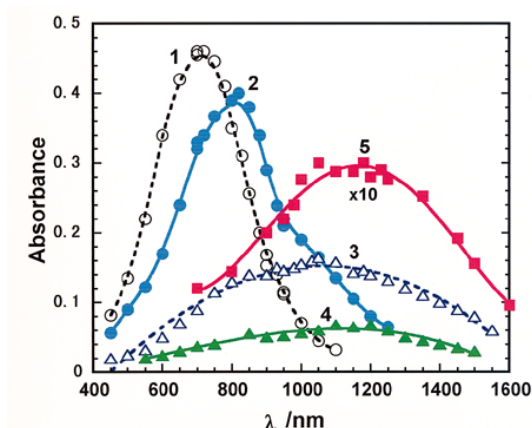


図1 具体的な課題と各テーマの関係



3. 研究の体制

期 間：1998年7月～2003年3月

構 成：研究分担者3名、リサーチアソシエイト、大学院生を中心とする研究協力者約15名が研究を進めています。

実施場所：東京大学大学院工学系研究科附属原子力工学研究施設及びシステム量子工学専攻

図2 パルスラジオリシス法により観測した重水(D₂O)中の水和電子のスペクトルです。室温から温度が上昇するに従い、長波長シフトしていることが判ります。300℃以上のデータはこの実験で世界で初めて得られました。(1)室温、(2)100℃、1気圧(3)250℃、200気圧(4)350℃、250気圧(5)400℃、350気圧(5)は超臨界圧水