

# メカノケミカル酸化動力学に基づく応力腐食割れの 物理化学的機序の解明

庄子 哲雄 (東北大学 大学院工学研究科 教授)

## 【概要】

軽水炉環境下における構造材料の応力腐食割れ現象の根絶を目指し、新たな材料設計の概念、すなわち応力腐食割れ進展メカニズムに立脚した耐応力腐食割れ特性に優れた第3世代オーステナイト系ステンレス鋼並びにニッケル基合金の開発基盤を構築する。き裂の進展は熱力学必然であり、工学はその進展性の制御にある。特に、機械工学を学術背景とする研究者と化学を学術背景とする研究者の有機的連携により、最重要経年損傷モードである応力腐食割れき裂進展の機構的解明に基づいた次世代材料開発を効果的に推進することが可能である。具体的には、メカニズム研究が世界的に最も進んでいる研究代表者らによって解明されたき裂先端特異応力場における物質移動を伴う酸化現象(き裂酸化モデル)に着目し、量子化学分子動力学や応力加速拡散計算により酸化物生成エネルギー及び酸素拡散特性を定量評価し、鉄基合金及びニッケル基合金における各種添加元素の効果について定量的な評価を行い応力腐食割れ進展耐性に優れたオーステナイト系合金の開発基盤の構築を目指す。試作開発された材料は、同じく研究代表者らによって提案されているき裂進展機構に立脚した加速き裂進展試験によりその有効性を検証する。原子レベルでの分子動力学の実験的検証の一助として1999年ノーベル化学賞受賞者 Ahmed Zewail 教授(カリフォルニア工科大学)との連携を進める。

## 【期待される成果】

本研究代表者のグループは、応力腐食割れ現象の物理化学的解明に関して、平成11年度より5年間、文部科学省中核的研究拠点形成プログラムの支援を受け「破壊の物理化学」に関して世界を先導する研究成果をあげてきた。具体的には、連続体力学的アプローチに基づくき裂先端力学とき裂先端の酸化動力学を組み合わせた世界初めてのき裂進展速度の理論式を提案し、主要因子として応力加速拡散の定量評価の重要性を世界に先駆けて指摘している。本研究では、量子化学分子動力学に基づき、反応動力学に基づくき裂進展機構に立脚した耐応力腐食割れ特性に優れた第3世代合金の試作を行い、次世代軽水炉における応力腐食割れ問題を根本的に解決する材料開発の道筋を得る。

## 【関連の深い論文・著書】

- 1). Q.J.Peng, J. Kwon and T. Shoji, "Development of a fundamental crack tip strain rate equation and its application to quantitative prediction of stress corrosion cracking of stainless steels in high temperature oxygenated water" [**Journal of Nuclear Materials** 324 (2004)52-61]
- 2). Tetsuo Shoji, "Progress in the mechanistic Understanding of BWR SCC and Its Implication to the Prediction and SCC Growth Behavior in Plants" **Proceedings of 11th International Conference on Environmental Degradation of Mechanicals in Nuclear Power Systems-Water Reactors**. August 10-14, 2003, Stevenson, Washington, ANS Paper, No81906

【研究期間】 平成17～21年度

【研究経費】 85,900,000円

【ホームページ】 <http://www.rift.mech.tohoku.ac.jp/index.html>