

審査の結果の要旨

氏名 バスキ アグン プジャント

長寿命放射性廃棄物のうちマイナーアクチニド (MA)、即ち Np、Am、Cm を水素化物ターゲットとして高速炉炉心中に装荷し、その高い中性子束を利用して核変換処理を行うことが提案されている。この場合、MAを含む水素化物の熱力学的諸量、状態図、物性値などについては信頼できるデータがきわめて不足しているため、燃料設計、燃焼評価などを適切に実施する上で困難がある。そこで、本研究では、主として計算により関連する水素化物について状態図や平衡解離圧などを推定評価し、その結果から各種水素化物燃料について、有望と考えられる組成の提案を行っている。

第1章は序論であり、研究の背景を述べ、本研究の目的を明らかにしている。

第2章では、理論的枠組みについてまとめている。金属間化合物—水素系の熱力学、並びに各種物質系の状態図の熱力学的背景について原理を述べ、続いて単体、定比化合物、置換型溶体、規則相、格子間型溶体、及び液相に対する熱力学的モデルについてまとめている。さらに半実験的モデルの一般論を述べた後で、Miedema の原子胞モデル、並びに Griessen—Driessen のバンド構造モデルについて原理的説明を行い、それらを2元系、および3元系水素化物へ適用する方法についてまとめている。

第3章では、計算結果と実験的研究について述べている。Np—Zr—H系の計算では、Np—Zr系並びにZr—H系の文献データは小規模な補正を施した上で採用することにし、文献データの無いNp—H系については、類似の系のデータに基づく等により推定値を導出しており、これら3種のサブ系のデータと、格子安定性の予測値、水素化物の過剰ギブスエネルギーの推定値を合わせて、Np—Zr—H系状態図の作成を行っている。同様の作業をPu—Zr—H系、Ce—Zr—H系についても実施している。

半実験的方法の適用としては、3元系水素化物の生成エンタルピを求めようとして、Miedemaモデル、およびGriessen—Driessenモデルを適用して予測値を計算している。ThZr₂H_x系の生成エントロピについては、Bartscherらの実験データから算出している。以上の手法の妥当性を確認するため、実験データの報告されているTh—Zr—H系について、同様の計算を実施し、実測値との対比を行ったところ、両者の一致性はきわめて良好であることが示され、本手

法の妥当性が証明できたと結論している。

Ce-Zr-H 系については、計算に加えて実験を行って、生成する相を EPM A (電子プローブマイクロアナライザ) により分析し、予測との一致性を確認している。この結果からも本研究の計算手法による状態図予測の妥当性が明かにされたと論じている。

第 4 章は、結論であり、本研究の重要な成果をまとめている。

第 5 章は、本研究の結果から Th-Zr-H 系、U-Zr-H 系、Np-Zr-H 系、Pu-Zr-H 系、Am-Zr-H 系の各 3 元系における代表的組成について各温度での水素解離圧の推定値を表示し、その推定解離圧に基づいて、各 3 元系水素化合物を核燃料として用いる場合に望ましいと推定される組成を提案している。

以上を要約すれば、本研究は、アクチノイド元素とジルコニウムからなる複合水素化物系について、計算により状態図、並びに平衡水素圧を推定し、また一部実験を行うとともに、既存のデータとの比較対照などを行って、計算による推定の妥当性を確認している。さらに、これらの 3 元系化合物をアクチノイド水素化物燃料として用いる場合の最適組成を提案したもので、測定データの乏しい物質系について熱力学的諸量値や状態図を計算によって推定評価する手法の開発に貢献するなど、システム量子工学、中でも核燃料工学に寄与するところが少なくない。

よって本論文は博士 (工学) の学位請求論文として合格と認められる。