

審査の結果の要旨

氏名 シェペレフ アレクサンダー

本論文は、照射環境におかれる合金材料において、機械的性質と化学的性質の変化の多大なる影響を及ぼす照射誘起偏析を評価するモデルを開発することによって、長期間に渡って使用される材料の健全性を予測評価する手法の基盤を確立しようとするものである。

論文は7章で構成されており、第1章は材料の照射効果全般をサーベイし、照射誘起偏析過程の原子論的基盤を整理するとともに、照射誘起偏析モデル構築による材料特性変化予測の必要性を議論している。

第2章は、照射誘起偏析の反応速度論的手法を用いたモデルによって、異なる損傷速度から得られた鉄-クロム-ニッケル系3元合金における偏析結果を評価している。この結果、実用炉条件からイオン照射による高い損傷速度に至る広い範囲において、損傷速度が低いほど照射誘起偏析が大きくなることを合金系ごとに定量的に示すことに成功している。

第3章は、鉄-クロム-ニッケル系3元合金において、格子間原子の集合体として最も高い頻度で形成されうるニッケルどおしの複合体の形成のモデル化を試み、近年、分子動力学法等によって明らかにされてきた格子間原子の微少集合体の移動過程も取り込んで、照射誘起偏析を評価するモデルを構築することに成功している。この結果、特に低い損傷導入速度でニッケル複合体モデルを用いた評価がさらに照射誘起偏析を加速しうることを示唆している。

第4章では、格子間原子集合体の形成と移動過程をさらに一般的に取り扱うために、合金における格子間原子ダンベルの形成、変換と拡散を取り扱うモデルを定式化することを試み、これを3元系合金に適用できるモデルとして完成させた。

第5章では、4章において構築したモデルのパラメータについて、議論しており、各種の実験結果と第一原理的な計算手法を援用して、各種の格子間原子ダンベル間のエネルギー差が、照射誘起偏析結果に本質的であることを示唆するとともに、適切なパラメータの組み合わせを提示している。この上で、新たに構築した格子間原子ダンベルを取り込んだモデルが、特に低損傷速度と高温において従来モデルとは、異なった結果を与えることを示している。

第6章は、第4章と5章において、開発したモデルによる照射誘起偏析評価結果を各種の実験結果と比較している。この結果、多くの実験結果が新たなモデルによって、よく再現しうることを示している。また、格子間原子ダンベルに基づくモデルが拡張できると考えられる格子間不純物を含有する実用合金についての照射誘起偏析結果をモデル計算結果と比較して議論しており、本研究で開発したモデルの適用性を評価している。さらに、照射誘起偏析と照射下クリープ変形及びスエリングによる体積膨張を同様なミクロモデルによって問い扱うことを示しており、析出物を形成する合金材料を含めて、モデルの汎用性が高いことを示している。

第7章は、結論であり、合金材料における照射誘起偏析を格子間原子集合体の形成と拡散を適切に表現するモデルによって評価できる手法の開発とその有用性をまとめている。また、多元系合金材料に活用できる汎用モデルとしての重要性、及び損傷速度効果を適切に表現することによって、超長期間の材料挙動を短時間の加速試験等

から得られた試験結果をも併用して、説得力のある評価手法とできることを議論している。

以上を要するに本論文においては、評価が困難であった照射誘起偏析過程をマイクロモデルに基づいて評価することに成功しており、システム量子工学、特に量子材料工学並びにシステム保全学に寄与することが大きい。

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。