

審査の結果の要旨

氏名 劉 曉陽

ジルコニウム合金は、軽水炉の燃料被覆管材料として利用されており、その使用条件下での変形機構を解明することは、原子力発電の安全性確保のための基幹をなすものである。本論文では、ジルコニウム合金での変形挙動が中性子照射を受けることによって変化する機構を、分子動力学法を活用した計算機シミュレーションによって、転位と欠陥集合体の相互作用に基づくミクロな立場から検討し、燃料被覆管の破損限界評価のための基礎的な研究を行っている。

本論文は7章で構成されている。

第1章では、本論文における研究の背景並びに目的を述べている。燃料被覆管の健全性を確保する工学的要請、及び変形と破損に至るミクロからマクロまでの物理的現象を明らかにすることの意義をまとめ、金属ジルコニウム中の転位とその欠陥集合体との相互作用に起因する変形挙動の機構解明を計算機シミュレーションによって行うことの重要性を議論している。これに基づいて、すべり運動をする転位と転位ループの相互作用を明らかにし、中性子照射を受けたジルコニウム合金において主すべり面が変化する機構を解明することを本論文の目的と設定したことを述べている。

第2章は、開発した計算機シミュレーション手法について、詳述している。異方性を持つ稠密六方晶であるジルコニウムの変形を取り扱うために、分子動力学法に基づいて一般的な結晶構造と転位及び欠陥集合体を対象とした変形を取り扱いうる新たなコードを開発した成果、及びシミュレーション結果の可視化法について論じている。

第3章は、開発した分子動力学シミュレーション手法の検証を行っている。特に原子間ポテンシャルの有効性について多数のポテンシャルを比較して議論を行い、Ackland 教授との継続的な議論に基づいた新しいポテンシャルがジルコニウムの転位挙動と変形を扱う上で最適であることを導いている。また、六方晶金属における転位芯の構造を議論し、柱面にすべり面を持つ2種類の刃状転位の安定性と可動性について、積層欠陥エネルギーの評価等に基づいて検討するとともに、底面がすべり面となる刃状転位の構造を明らかにしている。

第4章は、六方晶の柱面上にすべり面を持つ転位と各種の格子間原子ループ及び空孔型ループとの相互作用を系統的にシミュレーションした結果から明らかにしている。

また第5章は、底面上のすべり系における転位とループとの相互作用について、同様に系統的に計算機シミュレーションを行った結果について、論じている。

これらの結果、柱面をすべり面とする刃状転位とループはバーガースベクトルの向きが同じ場合、キンク及び空孔の形成はあるものの、転位のすべり運動に対してループは大き

な障害とはならないことを明らかにしている。さらに、バーガースベクトルの向きが異なる柱面上の刃状転位とループの相互作用は、転位のすべり運動の障害となる不動のジョグを形成することを明らかにした。また、底面がすべり面である転位がループと相互作用する場合は、ループのバーガースベクトルにかかわらず常にキンクが形成されるが、キンクはすべり運動が可能であって、転位運動の障害とはならないことを明らかにしている。

第6章は、ループのサイズが変形挙動に与える影響について、サイズを数種類変化させたシミュレーション結果に基づいて、議論している。軽水炉の使用温度で想定されるサイズより小さなループであっても、新しい Ackland ポテンシャルに基づいたシミュレーションでは吸収や引きずり現象は確認されず、ループのサイズ効果は小さいことを見いだしている。

第7章は結論であり、これまでの計算機シミュレーションの結果をまとめて、総合的な議論を行っている。ジルコニウム合金の変形挙動は、転位チャネリングの形成過程と転位のループセグメントの吸収容易性ととも、転位がループを突破する困難さによって評価できることを示し、この困難さを評価する指標を提示することに成功している。この指標は、転位とループの相互作用の結果、可動な欠陥集合体が形成するか否かを示すものであって、中性子照射によってループが形成したジルコニウム合金では、六方晶底面でのすべりが卓越するとの実験事実を説明するとしている。

以上を要するに、本論文は、原子炉の安全性評価の上で重要な燃料被覆管材料としての使用環境におけるジルコニウムの変形機構を最新の原子間ポテンシャルに基づいた分子動力学シミュレーションによって明らかにすることに成功しており、システム量子工学、特に原子炉燃料システム工学の発展に寄与することが少なくない。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。