

## 審査の結果の要旨

論文題目 New Multi-Scale Tools for Modeling the Structural Evolution of the Reactor Pressure Vessel under Irradiation  
(原子炉圧力容器鋼における照射下微細組織発達モデリングに関するマルチスケールシミュレーションツールの開発)

氏 名 Andrew Ballard

本論文は原子炉圧力容器鋼の中性子照射による照射脆化の予測評価手法を対象として、その工学的意義を踏まえて、材料のミクロな変化機構に基づいた新たな評価手法をマルチスケールシミュレーションの立場から開発することを目的としている。

論文は7章で構成されており、第1章では原子炉圧力容器の照射脆化の概要を整理するとともに、中性子照射損傷に関する基本的に理解に基づいた照射脆化を引き起こすミクロな溶質原子クラスター形成と欠陥集合体に関する研究をレビューしている。またこれらの現象をマルチスケールなモデル化とその物理的ならびに数理的基盤の観点から整理し、最近の軽水炉の高経年化対策における中性子照射脆化評価を高度化する意義をまとめた上で、本研究の目的と構成について述べている。

第2章では、原子間ポテンシャルの適用性に関して、圧力容器鋼の照射脆化に寄与する6種類の元素（鉄、ニッケル、マンガン、シリコン、リン及び銅）を対象として電子スピンの効果を統一的な手法で考慮した最新ポテンシャルである原子挿入法に基づくYangポテンシャルを評価している。空孔メカニズムによる原子移動エネルギーを分子動力学法を用いて6つの元素すべてについて評価することによって、第一原理計算結果が存在する元素については、その値と比較しほぼ一致することを見出している。さらに鉄については、空孔移動エネルギー評価結果が実験事実とよく符合することを議論しており、Yangポテンシャルが中性子照射損傷と長期間にわたる溶質原子クラスターと欠陥集合体形成のマルチスケールシミュレーションに適した原子間ポテンシャルであるとまとめている。

第3章は、カスケード損傷に関する分子動力学シミュレーションを対象として、6種類の元素を含む系での中性子照射損傷に伴う直接的な溶質原子クラスター形成過程を評価している。各元素の含有量をパラメータとして多数回の分子動力学計算を行った結果に基づいて統計的な処理を行い、総残存格子欠陥量及び溶質原子クラスター形成に対する各元素の影響を解明することに成功している。

第4章は、中性子照射損傷に伴うカスケード冷却過程後の欠陥集合体と溶質原子クラスターの組成や構造に関するシミュレーション手法を議論している。広範囲の原子相互作用を評価しうるモデル開発の必要性を論じた上で、パラレルテンパリング法を用いた手法の物理的原理とモンテカルロ法へ適用する利点について物理的な検討を行い、カスケード損傷後の各種クラスター形成過程のシミュレーションコードを開発している。このコードを用いて、1次はじき出し原子の発生後の分子動力学計算が適用できる数ピコ秒後以降の長期間のミクロ組織発達

に関する原理的実証に成功している。また、物理定数データベースを求めておく必要がない本手法の利点を活用することによって、効率的なマルチスケールシミュレーションが可能となることを定量的に提示している。

第5章は、モンテカルロ法に適用すべき原子間ポテンシャルの最適化を遺伝アルゴリズムを活用して行い、従来の古典的ポテンシャルを用いた溶質原子クラスター形成シミュレーションと比較して、論じている。

第6章は、新たな原子環境敏感型キネティックモンテカルロ法の開発を取り上げている。転位等のマイクロな欠陥集合体の周囲に存在するひずみ場の影響を溶質原子クラスター形成過程のシミュレーションに組み入れる手法が原子環境敏感型キネティックモンテカルロ法であり、そのシミュレーションの原理をコード化するとともに、らせん転位のまわりの溶質原子クラスターの形成と転位の移動後のクラスター残存過程を鉄・リン合金及び鉄・銅合金について行うことに成功している。

第7章は、全体の総括であり、軽水炉压力容器用低合金鋼の中性子照射脆化評価手法のための原子間ポテンシャル開発、分子動力学計算及びモンテカルロ法を含むマルチスケールシミュレーションの今後の課題を取りまとめている。

以上を要するに、本論文においては、原子レベルの理解に基づいてマクロな材料特性を予測評価するための、マルチスケールシミュレーションの課題を系統的に提示し、それを複数のオリジナルな手法によって結合することに成功しており、システム量子工学、特に原子炉材料科学に寄与するところが極めて大きい。

よって、本論文は、博士（工学）の学位請求論文として合格であると認められる。