

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 9 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(A)

研究期間：2011～2014

課題番号：23246161

研究課題名(和文) 固体増殖材料の長期特性変化のマルチスケール/マルチフィジックスモデリング

研究課題名(英文) Multi-scale/multi-physics modeling of long-term evolution of material properties in solid breeding materials

研究代表者

田中 知 (Tanaka, Satoru)

東京大学・工学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：10114547

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 36,500,000円

研究成果の概要(和文)：核融合炉で想定される固体増殖材料の物性変化や照射損傷過程を研究し、以下のことがわかった。Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub>において、表面における水素同位体の滞留量は、表面原子数の数10倍程度である。同じ結晶粒径の材料においても、表面の物理的・化学的状態の変化によって、数倍程度は滞留量が増減しうる。バルクでは、Li燃焼に伴い、滞留量の増加と拡散速度の低下が想定される。照射損傷としては、Li燃焼によるLi<sub>2</sub>O欠損とTiアンチサイト型欠陥が重要である。特にアンチサイト型欠陥は弾き出しによる生成が容易である一方で、材料物性に与える影響が大きい。その挙動や影響はこれまで十分に研究されておらず、今後詳細な検討が必要である。

研究成果の概要(英文)：We studied the physical/chemical property change and radiation damage processes, which are expected to occur during fusion reactor operation, in solid breeding materials. In Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub>, it was found that the hydrogen inventory on the surface is several tens times of the number of atoms on the topmost surface. Even for materials of the same grain size, the surface inventory can differ by several times, according to the physical/chemical condition of the surface. In the bulk, the tritium inventory will increase and the tritium diffusivity will decrease during the reactor operation, due to the Li deficiency induced by the lithium burning. Regarding radiation damages, Li<sub>2</sub>O deficiency, which is caused by the lithium burning and subsequent hydrogen release, and Ti anti-site defect are important. Especially, the anti-site defect should play a key role because it is easily formed by displacement and it largely changes the material property.

研究分野：核融合炉工学，トリチウム工学

キーワード：核融合炉 固体増殖材料 トリチウム チタン酸リチウム 照射損傷 分子動力学計算 量子力学計算

### 1. 研究開始当初の背景

核融合炉開発において、ITERの次段階である DEMO 炉では、プラズマの制御に加えて、燃料サイクルや核融合炉発電システムの信頼性・確実性を高め、実証することが求められる。そのためには、燃料であるトリチウムの製造、および高エネルギー粒子の運動エネルギーの熱エネルギーへの変換といった、発電炉としての性能・成立性に直結する役割を中心的に担う増殖ブランケットの、設計を最適化することが求められる。

現状で最も実現性の高いペブル充填方式の固体増殖ブランケットの場合、その設計の難しさは、材料が核融合炉環境、すなわち高温かつ厳しい照射環境下に長期間置かれる中で、長期に渡る性能の担保が必要な点にある。そういった極限環境に置かれる結果として、原子 (~nm) スケールでは照射損傷や化学組成変化、ペブルスケール (~mm) では粒成長やペブルの割れ、ペブルベッドスケール (~m) では熱機械特性の変化や物質移行といった nm~m の空間スケール、fs~year の時間スケールのマルチフィジックスな現象が同時並行的に生じる。そして、それらの現象は相互に影響し合い、その影響は時間とともに変化するため、全体として極めて複雑な挙動を示す。

それに対して既往研究では、固体増殖材料からのトリチウム放出速度やペブルベッドの機械熱特性などの物性評価が広く行われてきた。また、照射の影響把握のために、中性子照射やイオン照射等も利用されてきた。しかし、それらの成果を設計に資するためには、核融合炉環境下(長時間の高温・照射環境下)で想定される物理的・化学的な変化や照射欠陥の蓄積等の過程を、マクロな物性値の評価に留まるのではなく詳細に理解して、モデル化する必要がある。

### 2. 研究の目的

そこで本研究は、固体増殖ブランケットを対象に、信頼性の高いブランケット設計を行う上で不可欠な、核融合炉環境下すなわち長時間に渡る高温/照射環境下に置かれた固体増殖材料の特性変化を、現象のマルチスケール/マルチフィジックス性を考慮した計算科学的アプローチを駆使することで分析し、モデル化することを目的とする。特に、水素同位体挙動に影響を与える要因や、照射損傷が材料の安定性や物性に与える影響について、注目する。

### 3. 研究の方法

上記の目的を達成するために、計算機シミュレーションと実験を組み合わせることで研究を展開した。計算機シミュレーションでは、密度汎関数理論(DFT)に基づく量子力学計算と、古典分子動力学(MD)計算を主に利用した。実験では、水素同位体の加熱放出測定、電子スピン共鳴法、赤外・ラマン分光実験、

X線CT法、電子顕微鏡観察、ルミネッセンス測定等を実施した。

### 4. 研究成果

核融合炉で想定される増殖材料の長期的な特性変化を、「物理的・化学的特性の変化」、「照射損傷過程」に分類し、研究を展開した。前者では、主に水素同位体の滞留・放出特性に材料の物理的・化学的特性変化が与える影響について、後者では照射損傷過程の理解とそれが材料の安定性や物性に与える影響について、調べた。

#### (1) 物理的・化学的特性変化とその影響

##### 水素滞留・放出挙動

既往研究により、増殖材料の結晶粒径が材料の水素同位体保持特性や放出特性に影響を与えることが示唆されている。ただし、これまでは多結晶を利用した実験が主に行われており、結晶粒の大きさについても十分に制御していない実験が多い。そこで、本研究では単結晶試料を使った実験を行うことで、結晶粒の影響を明確に抽出し、分析を進めた。まず最初に、 $\text{Li}_2\text{TiO}_3$  単結晶をフラックス法により作成した。そして、作成した単結晶を、ふるいと光学顕微鏡を用いてサイズごとに分けた。その後、重水素を熱吸収させ、水素同位体の滞留・放出挙動を評価した。

結晶粒径の関数として重水素放出挙動を整理した結果、数  $\mu\text{m}$  より結晶粒が小さい場合は表面での水酸基の再結合脱離過程が、それより粒径が大きい場合はバルクから表面への水素同位体の拡散過程が、 $\text{Li}_2\text{TiO}_3$  からの水素同位体放出反応の律速過程となることがわかった。また、実験で採用した重水素の熱吸収条件(重水 100 Pa 雰囲気, 1073 K)では、数  $10\mu\text{m}$  より結晶粒が小さい場合は、表面水酸基として存在する水素の量が、バルクに溶解している水素の量よりも多くなった。実炉環境では照射欠陥による水素同位体の捕捉によって、バルクの水素同位体量は増加すると考えられるが、表面水酸基として存在する水素同位体の量も多く、実炉でも重要な寄与を持つと考えられる。

表面水酸基の影響をより正確に評価するために、高純度試料の入手が容易な  $\text{LiNbO}_3$  を模擬材料としてさらに実験を進めた。BET比表面積測定や電子顕微鏡観察による材料のキャラクタリゼーションを行い、放出実験の結果と比較することで、表面積と表面水酸基量の相関を評価した。そして、材料の前処理条件や結晶性(単結晶と多結晶の違い等)が与える影響を分析した。結果として、比表面積と表面水酸基量の間には良好な比例関係が確認された。表面における水酸基の保持量は、表面の原子数の数10倍と見積もられた。また、水素の保持に寄与する実効的な表面積は、結晶性や熱処理条件の違いにより、同じ粒径を持つ材料であっても数倍の範囲で変化することが示唆された。水素同位体の熱放

出挙動の類似性から、 $\text{Li}_2\text{TiO}_3$  においても同様の現象が想定される。

水素の滞留量について表面水酸化物の寄与が大きいことを考えれば、実炉における水素同位体の滞留・放出挙動を正確に評価・予測するには、結晶粒のサイズやペブルの理論密度に加えて、表面積および表面化学状態の評価および制御も重要となる。比表面積は、表面水酸基としての水素同位体インベントリを見積る上で、適当な指標として使えると考えられる。

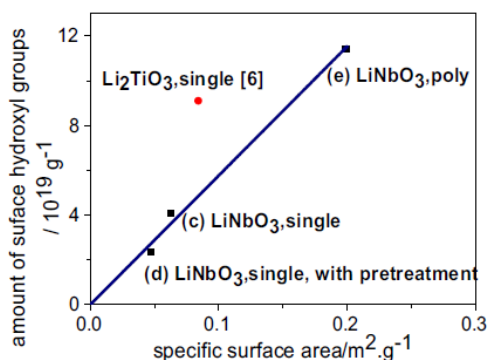


図 1: 比表面積と表面水酸基量の相関。

#### $\text{Li}_2\text{TiO}_3$ 表面構造の同定

表面が水素同位体挙動に与える影響の大きさを鑑み、 $\text{Li}_2\text{TiO}_3$  の表面構造の同定を行った。そのために、走査型トンネル顕微鏡 (STM) による表面観察を実施した。まず、 $\text{Li}_2\text{TiO}_3$  単結晶試料を Ar スパッタリングし、その後 1200 K 以上でアニーリングすることで、還元した単結晶試料を作成した。1200 K の加熱処理後、低エネルギー電子回折法により表面結晶構造を分析したところ、表面構造は良く整列しており、顕著な再構成は生じていないことが確認された。次に、STM により、ステップの高さが 0.3 nm 程度と見積もられた。このことは、表面が単一の層構造 (厚さ 0.3 nm 程度) を有していることを示唆している。また、周期性が約 0.4 nm の六方構造が確認された。これらの STM 像 (図 2) の分析結果から、表面が Li 終端構造であることが示唆された。

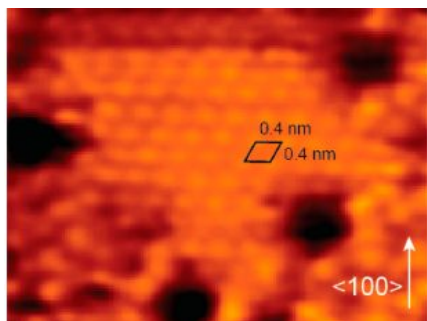


図 2:  $\text{Li}_2\text{TiO}_3(001)$  表面の STM 像。

さらに詳細に表面構造を同定するために、量子力学計算により表面構造と表面エネルギーを評価した。実験結果で示唆された Li 終端構造が安定であることが、量子力学計算においても確認された。また、表面の Li 空孔が表面エネルギーに与える影響は僅かであることがわかった。Li やその欠陥の移動度が高いことを考えれば、 $\text{Li}_2\text{TiO}_3$  の表面は様々な Li 配置をとることが想定される。つまり、 $\text{Li}_2\text{TiO}_3$  表面は Li の配置に関して動的で多様な構造をとると考えられる。

#### Li 燃焼反応の影響評価

増殖材料では Li のトリチウムへの核変換が起こる。その結果、材料の熱力学的な安定性が変化し、結晶構造の変化等につながると考えられる。結晶構造が変われば材料物性が大きく変化するため、Li のトリチウムへの変換が、材料の結晶構造や安定性に与える影響を評価することは重要である。そこで、Li と水素を化学的に置換させることで (プロトン交換反応)、核変換が進んで Li の量が減少した場合の結晶構造の変化を模擬する実験を行った。そのために、安息香酸を利用するプロトン交換反応を  $\text{Li}_2\text{TiO}_3$  単結晶に対して適用した。ラマン分光により結晶構造を分析したところ、安息香酸への浸漬時間に依存してスペクトルが変化することが確認された。また、赤外吸収分光の測定では OH 結合ピークが顕著に検出され、プロトン交換反応が生じたことが確認された。

プロトン交換試料に対して X 線回折 (XRD) 測定を行ったところ、アナターゼ型  $\text{TiO}_2$  に由来する回折ピークが観察された。ラマン分光におけるスペクトルの変化も、アナターゼ型  $\text{TiO}_2$  の含有を示すものであった。

DTA/TGA による分析を行ったところ、水素が 350 °C から 550 °C の温度領域で脱離することが確認された。この温度領域は、ラマン分光スペクトル (図 2) や XRD 回折パターンに大きな変化が見られ、アナターゼ由来のピークが増大する温度領域と一致した。以上の結果は、 $\text{Li}_2\text{TiO}_3$  結晶中の Li が水素に変換され、加熱による水素の脱離が進んだ場合には、 $\text{Li}_2\text{TiO}_3$  から  $\text{Li}_2\text{O}$  の欠損が進み、アナターゼ型  $\text{TiO}_2$  が形成されることを示唆している。

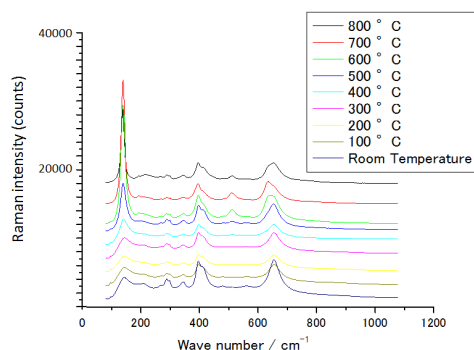


図 3: Li-H 交換反応後の加熱によるラマンスペクトルの変化。

### Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub> 中での水素の安定性

次に、バルク中での水素同位体の挙動に Li 空孔が与える影響を、量子力学計算を用いて分析した。Li<sub>2</sub>O, Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub>, Li<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>, LiNbO<sub>3</sub> 等の種々の Li 酸化物を対象とした。いずれの材料においても、水素同位体は Li 空孔と相互作用することでその安定性が 1 eV 程度高まることを確認した。Li 空孔との相互作用においては、Li の位置に水素が置換的に収まる構造ではなく、Li 空孔に配向した水酸基 (OH<sup>-</sup>) が一般に安定な構造であることがわかった。

Li<sub>2</sub>O では結晶の高い対称性により、Li 空孔配向型水酸基は一つの構造しか存在しない。一方で、3 元素系では、結晶の対称性の低下に伴って、異なるエネルギーと構造を有する複数の Li 空孔配向型水酸基が得られた。例えば Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub> においては 10 以上の異なる水酸基構造がある。そしてそれらの水酸基の安定性は、H-O-Ti の角度や、Li 空孔の位置により整理できることがわかった。Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub> の場合、H-O-Ti の角度が 90°, Li 空孔が Ti-O の層状構造の中に位置する配置が、最も高い安定性を持つ。図 4 にその構造を示す。角度依存性は、O-H や Ti-O が有する共有結合的な相互作用に起因すると考えられる。

Li<sub>2</sub>O と Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub> において水素拡散の障壁を評価したところ、典型的な値として 1-1.5 eV が得られた。これらの値は、拡散定数の活性化エネルギーの実験報告値とも近い値である。一方で、水素が Li 空孔と相互作用せずに格子間型として存在する場合には、その拡散障壁として 1 eV 程度の値が得られた。以上の結果から、核融合炉で Li の燃焼が進み Li 空孔の濃度が高まると、水素同位体の滞留量の増加や、若干の水素同位体放出速度の低下が見られると想定される。また、Li の燃焼により生じると考えられる Li<sub>4</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>12</sub> 相は、本質的に部分占有の格子位置を陽イオンが有している。それらの非占有の格子位置が Li 空孔と同様の影響を与える可能性も考えられる。

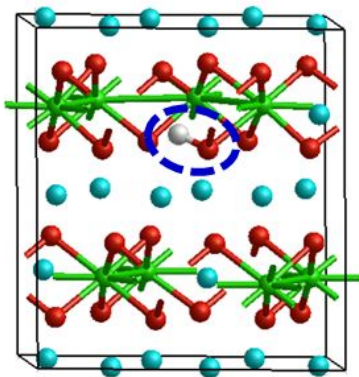


図 4: 量子力学計算で同定した Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub> 中で最も安定な Li 空孔配向型水酸基の構造。(水色: Li, 緑: Ti, 赤: O, 白: H. 水酸基を青破線で強調)

### (2) 照射損傷の過程とその影響

照射損傷過程とその影響については、まず、MD シミュレーションにより、弾き出しによる欠陥生成過程を分析した。そして、重要と思われる欠陥種について、その影響の評価をさらに進めた。また、適宜実験結果との比較を行った。以下ではシミュレーションの結果を中心に記載する。

#### 弾き出しエネルギーの評価

1 点欠陥を生成するのに必要なエネルギー (弾き出しエネルギー) は、照射欠陥生成量を評価する上で重要な因子である。そのため、種々の Li 酸化物を対象に、MD 計算による評価を実施した。

Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub>, LiAlO<sub>2</sub>, Li<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub> のいずれの材料においても、Li が他の元素に比べて低い弾き出しエネルギーを持つことを確認した。LiAlO<sub>2</sub> において、組成が同一で結晶構造が異なる系を含めて評価を行ったところ、顕著な結晶構造依存性が見られた。また、いずれの酸化物においても、金属元素 (例えば、Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub> における Ti) はアンチサイト型欠陥を主に形成することがわかった。

Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub> において、その弾き出しエネルギーを Li<sub>2</sub>O, TiO<sub>2</sub> の弾き出しエネルギーと比較した。Li の弾き出しエネルギーはいずれの材料においても同程度であったのに比べて、Ti については Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub> で弾き出しエネルギーが TiO<sub>2</sub> に比べて有意に小さいことが確認された。3 元素系 Li 酸化物では金属元素のアンチサイト型欠陥が形成できることで、通常の 2 元素酸化物から予測されるよりも弾き出しエネルギーが低下したと考えられる。また、弾き出しエネルギーには強い方位依存性が見られた (図 5)。方位の重みを考慮した平均値として、Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub> では Li 20 eV, Ti 30 eV, O 65 eV の弾き出しエネルギーが得られた。

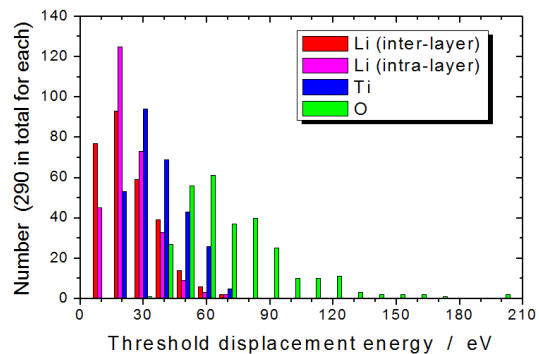


図 5: Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub> における弾き出しエネルギーの方位依存性 (異なる 290 の弾き出し方位によるシミュレーション結果の分布)。

#### 高エネルギーによる損傷過程

LiAlO<sub>2</sub> において keV オーダー (1 keV, 3 keV, 5 keV) の反跳エネルギーでの弾き出しシミュレーションを実施した。異なる結晶構造においては、同じ反跳エネルギーでも欠陥生成量が大きく異なることを確認した。ただし、



その違いは弾き出しエネルギーの違いから説明することができた。つまり、3 元素という複雑な系においても、弾き出しエネルギーは欠陥生成量を見積もる上で有効な情報である。また、結晶構造の影響は、イオン電荷と原子密度との関連性が見られた。具体的には、イオン電荷が大きいほど、また原子密度が高いほど、弾き出しエネルギーは増加し、同じ反跳エネルギーでの欠陥生成量は減少する。前者は、イオン性結晶の原子間相互作用が主にクーロン相互作用に起因することを考えれば原子間相互作用の強さと関連付けることで理解できる。また、後者は結晶内で格子間原子を安定に置くことの出来る空隙の大きさと関連付けることで理解できる。

ボロノイ分割を利用して欠陥の種類を分類した結果、高エネルギーでの弾き出しの場合にも、多くの Al 欠陥がアンチサイト型欠陥( $Al_{Li}$ )として存在することが確認された。また、それに伴って形成された Al 空孔への Li 格子間原子の捕捉による、Li のアンチサイト型欠陥( $Li_{Al}$ )も顕著に確認された(表 1)。

以上の結果から、材料の種類によらず、3 元素系 Li 酸化物では、空孔や格子間原子に加えて、金属元素のアンチサイト型欠陥が主要な欠陥として形成されることがわかった。

表 1:  $LiAlO_2$ における形成された全欠陥量に対するアンチサイト型欠陥の割合。(5 keV O 原子の反跳における MD 計算の結果)

	-LiAlO	-LiAlO	-LiAlO
Li	45%	53%	43%
Al	95%	52%	62%
O	5%	9%	4%

#### 欠陥の種類と安定性

MD シミュレーションで見られた欠陥について、その生成エネルギーを量子力学計算で評価した結果を表 2、表 3 に示す。Li<sub>2</sub>O 欠損エネルギーは、Li<sub>2</sub>O 欠損  $Li_2TiO_3$  を、 $Li_2TiO_3$  完全結晶と  $TiO_2$  (ルチル型) に分解する反応のエネルギーとして定義した。TiO<sub>2</sub> 欠損エネルギーも同様である。いずれの欠損の場合においても、分解した方がエネルギー的に安定であることが確認された。また、 $Li_4Ti_5O_{12}$  等の形成も、Li<sub>2</sub>O 欠損  $Li_2TiO_3$  として存在するよりもエネルギー的に有利であることが確認された。ただし、実際には、分解や第二相の形成には活性化反応を伴うため、欠陥の蓄積が進み反応障壁が低下しなければ、容易に反応は進まないと考えられる。より詳細な議論を行うには、分解・第二相形成の過程を把握し、その反応障壁を分析する必要があるが、それは今後の課題である。

フレンケル欠陥とアンチサイト欠陥については、Li のフレンケル欠陥形成エネルギーが他の元素と比べて小さいこと、またアンチサイト欠陥の形成エネルギーが Ti のフレンケル欠陥の形成エネルギーに比べて著しく

小さいことが確認された。一般に、欠陥生成エネルギーと弾き出しエネルギーには正の相関があり、弾き出しエネルギーは欠陥生成エネルギーの数~10 倍となる。この相関を考えれば、量子力学計算で得られた欠陥エネルギーと、MD 計算で得られた弾き出しエネルギーの関係性は妥当である。量子力学計算の結果からも、アンチサイト欠陥が弾き出しにより多く形成されることが確かめられた。

表 2:  $Li_2O$  欠損,  $TiO_2$  欠損,  $Ti_{Li}$ - $Li_{Ti}$  アンチサイト欠陥対の生成エネルギー

$Li_2O$ 欠損	$TiO_2$ 欠損	Antisite
約 2 eV	約 2 eV	約 1 eV

表 3: フレンケル欠陥の生成エネルギー

Li pair	Ti pair	O pair
約 2 eV	約 5 eV	約 5 eV

#### 欠陥が機械・熱物性に与える影響の評価

これまでの結果を考慮すると、リチウムトリチウムへの核変換による  $Li_2O$  ユニットの減少と、フレンケル対や置換型欠陥(Li 置換型 Ti, Ti 置換型 Li)の蓄積の、2 つの損傷プロセスが重要であると考えられる。後者では特に Li のフレンケル対やアンチサイト型欠陥が多く生成される。ただし、Li 空孔や Li 格子間原子の移動度は高いため Li フレンケル対の回復は容易であると考えられる。また  $Li_2TiO_3$  の結晶構造が主に Ti-O の層状構造に支持されていることを考えれば、アンチサイト欠陥がより大きな影響を与えると考えられる。

そこで、 $Li_2O$  欠損とアンチサイト型欠陥の生成が、 $Li_2TiO_3$  の物性に与える影響を MD 計算により評価した。一例として、機械物性(体積弾性率)、結晶体積、凝集エネルギーに与える影響を評価した結果を図 6 に示す。縦軸は、完全結晶の値を基準として算出した物性値の変化率である。アンチサイト欠陥は生成が容易であるにも関わらず、 $Li_2TiO_3$  の結晶の安定性や構造、物性に大きな影響を与えることがわかった。

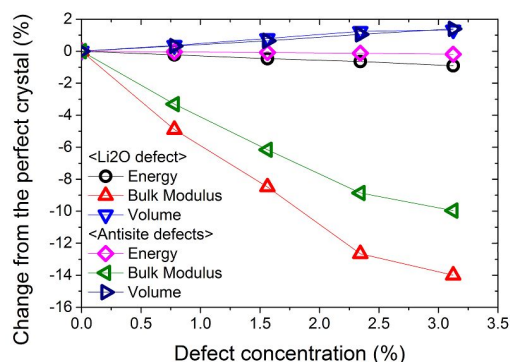


図 6: アンチサイト欠陥と  $Li_2O$  欠損が  $Li_2TiO_3$  の物性に与える影響。

### (3)まとめ

核融合炉で想定される固体増殖材料の物性変化や照射損傷過程について研究を行った。Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub>において、表面における水素同位体の滞留量は、表面原子数の数10倍程度であることがわかった。同じ結晶粒径の材料においても、表面の物理的・化学的状態の変化により、数倍程度は滞留量が増減しうる。バルクにおいては、Li 燃焼に伴って、滞留量の増加と拡散速度の低下が想定される。照射損傷としては、Li 燃焼によるLi<sub>2</sub>O欠損とTiのアンチサイト型欠陥の蓄積が重要である。特にアンチサイト型欠陥は生成が容易である一方で、材料物性に与える影響が大きいことが示唆された。その挙動や影響はこれまで十分に研究されておらず、今後さらなる検討が必要である。

### 5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計 9 件)

D. Zhu, T. Oda, S. Tanaka, Fusion Sci. Technol. 60, 1147-1150 (2011).

H. Tsuchihira, T. Oda, S. Tanaka, "Displacement cascade simulation of LiAlO<sub>2</sub> using molecular dynamics", J. Nucl. Mater. 414, 44-52 (2011).

K. Azuma, T. Oda, S. Tanaka, J. Nucl. Mater. 442, S705-709 (2013).

D. Zhu, T. Oda, Y. Shono, S. Tanaka, J. Nucl. Mater. 442, S437-441 (2013).

H. Tsuchihira, T. Oda, S. Tanaka, J. Nucl. Mater. 442, S429-432 (2013).

K. Azuma, C. Dover, D.C. Grinter, R. Grau-Crespo, N. Almora-Barrios, G. Thornton, T. Oda, S. Tanaka, J. Phys. Chem. C 117, 5126-5131 (2013).

M. Kobayashi, K. Toda, Y. Oya, Kenji Okuno, J. Nucl. Mater. 447, 1-8 (2014).

D. Zhu, T. Oda, S. Tanaka, Fusion Engineering and Design 89, 2797-2805 (2014).

M. Kobayashi, H. Uchimura, K. Toda, Y. Oya, J. Nucl. Mater. 455, 735-738 (2014).

[学会発表](計 7 件)

T. Oda, S. Tanaka, "Multi-scale and multi-physics modeling of solid breeders", International Workshop of Ceramic Breeder Blanket Interactions, 2011/9, Portland, USA.

D. Zhu, T. Oda, S. Tanaka, "Study of surface morphology effects on hydrogen isotope behavior in ternary lithium oxides", International Workshop of Ceramic Breeder Blanket Interactions, 2011/9, Portland, USA.

K. Azuma, T. Oda, S. Tanaka, "Atomic-scale study of the interaction

between hydrogen and the Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub> (001) surface", International Conference on Fusion Reactor Materials, 2011/10, Charleston, USA.

H. Tsuchihira, T. Oda, S. Tanaka, "Effects of threshold displacement energies and recombination volumes on defect production by displacement cascade in LiAlO<sub>2</sub>", International Conference on Fusion Reactor Materials, 2011/10, Charleston, USA.

H. Kikuchi, T. Oda, S. Tanaka, "Modeling of temperature dependence of threshold displacement energy in Li<sub>2</sub>O by molecular dynamics simulation", International Conference on Fusion Reactor Materials, 2011/10, Charleston, USA.

D. Zhu, T. Oda, S. Tanaka, "Study of release behavior of hydrogen isotopes thermally absorbed in Li<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub> porous pellets", 4th Japan-China Workshop on Fusion-Related Tritium Science and Technology, 2012/5, Toyama, Japan.

T. Oda, Y. Zhang, W. Weber, S. Tanaka, "Molecular dynamics simulation on threshold displacement energies in lithium metatitanate", 2012 Computer Simulation of Radiation Effects in Solids, 2012/6, Santa Fe, USA.

### 6. 研究組織

#### (1)研究代表者

田中 知 (TANAKA, Satoru)  
東京大学・大学院工学系研究科・教授  
研究者番号：10114547

#### (2)研究分担者

大矢 恭久 (OYA, Yasuhisa)  
静岡大学・理学部・准教授  
研究者番号：80334291

#### (3)研究分担者

落合 謙太郎 (OCHIAI, Kentaro)  
日本原子力研究開発機構・核融合研究開発  
部門・研究副主幹  
研究者番号：30370373

#### (4)研究分担者

谷川 尚 (TANIGAWA, Hisashi)  
日本原子力研究開発機構・核融合研究開発  
部門・研究副主幹  
研究者番号：70370426