

令和元年6月21日現在

機関番号：82110

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2018

課題番号：15K06672

研究課題名(和文) タングステン合金における照射誘起析出発生メカニズム解明

研究課題名(英文) Mechanism of radiation-induced precipitation in W-based alloys

研究代表者

鈴木 知明 (Suzudo, Tomoaki)

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・研究主幹

研究者番号：60414538

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：核融合材料に用いられるタングステン合金における照射誘起析出現象は材料の延性低下を招くため、それを適切にモデリングすることが重要となる。本研究では第一原理計算およびキネティックモンテカルロ法による解析の結果、照射によって生成された合金元素の格子間原子が母相元素のタングステンと混合ダンベルを形成しそれが3次元運動することにより合金元素を伴った空孔と再結合し、照射誘起析出とスウェリング抑制が同時におきるという結果を得た。この結果はこれまでの実験結果と合致することが分かった。また、チタン、バナジウム、クロムの溶質元素においても混合ダンベルが形成され、照射効果抑制が期待されることが分かった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

将来の脱炭素社会の構築に向けて、核融合炉はエネルギー源として重要なオプションである。そのためには、高温プラズマを閉じ込めるための装置を実現しなくてはならない。タングstenは高融点などの優れた性質から、プラズマに対向する内壁の材料としての応用が期待されている。しかしながら、照射下のタングstenにおいて核変換レニウムが発生しそれが析出することによって材料が脆化することが知られている。本研究によって、我々は材料脆化の原因となる析出のメカニズムを第一原理計算から明らかにした。これにより、析出を予測したり、または抑制したりする方法などへの発展が可能となった。

研究成果の概要(英文)：Because radiation-induced precipitation phenomena in tungsten alloys, which are applied to nuclear fusion materials, lead to a decrease in the ductility of the material, it is important to model them appropriately. In this research, as a result of first principles calculation and kinetic Monte Carlo analyses, we found that interstitial atoms of the alloy element generated by irradiation form a mixed-dumbbell with a tungsten atom, and the mixed-dumbbell has a 3D motion. Recombination of the mixed-dumbbell to another alloy element accompanying vacancies resulted in the simultaneous occurrence of radiation-induced precipitation and suppression of swelling. This result is consistent with the previous experimental results. In addition, it was found that mixed dumbbells are formed also for solute elements of titanium, vanadium and chromium, and it is expected that the irradiation effect is suppressed with these alloying elements.

研究分野：照射材料科学

キーワード：タングsten 第一原理計算 照射誘起析出

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

核融合炉の第一壁およびダイバータのプラズマ対向材料は、高照射・熱負荷など非常に厳しい環境下で使用されるため、高い熱的・機械的性能が要求される。現在、その候補材として高融点で高スパッタリング抵抗のタングステン(W)材が注目されているが、その照射効果に関する知見はまだ十分とは言えない。一般に、金属材料に高エネルギー粒子を照射するとその機械的性質が劣化する。この現象はすでに半世紀以上前から知られており、そのメカニズム解明のため様々な実験的・理論的研究が行われてきた。典型的な劣化の原因としては照射によるキャビティや転位ループの形成が挙げられるが、W の場合にはそれらに加えて照射誘起析出(RIP)が発生する。これはある特定の合金種において照射が原因となって母相とは異なった相が析出する現象である。このような相は熱力学的平衡状態では析出せず、照射下特有の現象である。使用する W 材が仮に純 W であったとしても、中性子照射の過程で核変換反応によってレニウム(Re)やオスミウム(Os)等が生成され、照射とともに W-Re-Os 合金に変化し、RIP 現象によって相や相が析出する。析出物は材料の変形を妨げるので、照射によって材料の延性が低下する。よって、RIP メカニズムの理解し、その発生を精度良く予測することは、現在多国間の国際協力で進められている核融合炉計画におけるプラズマ対向材の設計に大きく貢献すると考えられる。

2. 研究の目的

タングステン(W)材は高融点・高スパッタリング抵抗などの性質から核融合炉のプラズマ対向被覆材の候補として注目されている。しかし、中性子照射下では W は核変換反応により W-Re、W-Re-Os 等の合金に変化し、それらでは母相とは別の溶質原子を含んだ相が析出するため材料脆化が懸念される。これは溶質原子が照射下で凝集して発生する照射誘起析出(RIP)現象であるが、その詳細なメカニズムは解明されておらず予測が困難である。最近、申請者らは W 中の Re・Os 原子の移動パターンを第一原理計算により初めて明らかにした。本研究では、これらの成果に基づいて、上記 RIP の時間発展モデルを構築し、これまで定性的理解にとどまってきた RIP 発生メカニズムを原子論的に解明し、中性子照射で観察される析出相発生の予測技術の構築を目的とする。

3. 研究の方法

これまでより精度を上げて第一原理計算により、溶質元素(Re および Os)と照射欠陥の複合体の結合エネルギーおよび移動エネルギーを計算する。この結果をもとに、照射下での微細構造発達のキネティックモンテカルロコードを作成する。また、これまで得られた実験データを整理し、計算で得られた結果の妥当性を検討する。

4. 研究成果

W-Re および W-Os 系の計算科学研究の結果、照射によって生成されたこれらの合金元素の格子間原子が母相元素のタングステンと混合ダンベルを形成しそれが3次元運動することにより合金元素を伴った空孔と再結合し、照射誘起析出とスウェリング抑制が同様のメカニズムでおきるという仮説に至った。その後、仮説の妥当性を詳細に検討した。その結果、これまでの実験結果に矛盾しないことが確認された。また、第一原理計算を用いて溶質元素の性質をより広範囲に検討し、チタン、バナジウム、クロムにおいて混合ダンベルが形成され合金元素として照射効果抑制の傾向が期待されることが分かった。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計 7 件)

1. K. Nordlund, S. J. Zinkle, T. Suzudo (7 番目), 他 10 名, "Primary radiation damage: A review of current understanding and models" J. Nuclear Materials 512 (2018) 450-479. (査読有り)
DOI:10.1016/j.jnucmat.2018.10.027
2. T. Suzudo, T. Tsuru, A. Hasegawa, "First-principles study of solvent-solute mixed dumbbells in body-centered-cubic tungsten crystals", J. Nuclear Materials 505 (2018) 15-21. (査読有り)
DOI:10.1016/j.jnucmat.2018.03.052
3. T. Tsuru, T. Suzudo, "First principles calculations of interaction between solutes and dislocations in tungsten", Nuclear Materials and Energy 16 (2018) 221-225. (査読有り)

DOI:10.1016/j.nme.2018.07.007

4. K. Nordlund, S. J. Zinkle, T. Suzudo (7 番目), 他 10 名, “ Improving atomic displacement and replacement calculations with physically realistic damage models ” Nature Communications 9:1084 (2018) 1-8. (査読有り)
DOI:10.1038/s41467-018-03415-5
5. J. Marian, C. S. Becquart, T. Suzudo (11 番目), 他 9 名, “ Recent advances in modeling and simulation of the exposure and response of tungsten to fusion energy conditions ”, Nuclear Fusion 57 (2017) 092008. (査読有り)
DOI:10.1088/1741-4326/aa5e8d
6. T. Suzudo, A. Hasegawa, “ Suppression of radiation-induced point defects by rhenium and osmium interstitials in tungsten ”, Scientific Reports 6:36738 (2016) 1-6. (査読有り)
DOI:10.1038/srep36738
7. T. Suzudo, M. Yamaguchi, A. Hasegawa, “ Migration of rhenium and osmium in tungsten ”, J. Nuclear Materials 467 (2015) 418-423. (査読有り)
DOI:10.1016/j.jnucmat.2015.05.051

[学会発表] (計 7 件)

1. T. Suzudo, “ Computational study of solute effects in tungsten under irradiation ”, IWSMT-14, Iwaki Japan, November 2018. (招待講演)
2. T. Suzudo, “ Modeling of solute effects on radiation damage in W-based alloys ”, COSIRES, Shanghai, China, June 2018. (招待講演)
3. T. Tsuru, T. Suzudo, “ First principles calculations of interaction between solutes and dislocations in tungsten ”, ICFRM-18, Aomori Japan, October 2017.
4. T. Suzudo, A. Hasegawa, “ How rhenium and osmium in tungsten crystals suppress radiation-induced defects ” MRS Spring Meeting, Phoenix, AZ, April 2017. (招待講演)
5. T. Suzudo, T. Tsuru, A. Hasegawa, “ Effect of Re and Os in W under irradiation: comparison between numerical and experimental results ”, 2nd MoD-PMI symposium, Loughbrough UK, June 2016.
6. T. Suzudo, “ Migration behaviors of rhenium and osmium interstitials in tungsten: *Ab initio* informed kinetic Monte Carlo study ”, ICFRM-17, Aachen Germany, October 2015.
7. T. Suzudo, “ Modeling of fusion materials degradation ”, US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop, Nagoya Japan, August 2015. (招待講演)

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

出願状況 (計 0 件)

名称 :
発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
出願年 :
国内外の別 :

取得状況（計 件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名：都留 智仁

ローマ字氏名：(Tsuru, Tomohito)

所属研究機関名：国立研究開発法人日本原子力研究開発機構

部局名：原子力科学研究部門 原子力科学研究所 原子力基礎工学研究センター

職名：研究職

研究者番号（8桁）：80455295

研究分担者氏名：長谷川 晃

ローマ字氏名：(Hasegawa, Akira)

所属研究機関名：東北大学

部局名：工学研究科

職名：教授

研究者番号（8桁）：80241545

(2) 研究協力者

研究協力者氏名：

ローマ字氏名：

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。