

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	実験及び分子動力学法による液体鉛合金中の金属不純物拡散に関する研究
Title(English)	Experimental and Molecular Dynamics Study on Metallic Impurity Diffusion in Liquid Lead Alloys
著者(和文)	高雲
Author(English)	Yun Gao
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第10497号, 授与年月日:2017年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:高橋 実,竹下 健二,加藤 之貴,小林 能直,塚原 剛彦
Citation(English)	Degree:Doctor (Engineering), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第10497号, Conferred date:2017/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	審査の要旨
Type(English)	Exam Summary

(博士課程)

論文審査の要旨及び審査員

報告番号	甲第	号	学位申請者氏名		高 雲		
			氏 名	職 名			
論文審査 審査員	主査		高橋 実	教授	塚原 剛彦	准教授	
	審査員		竹下 健二	教授			
				加藤 之貴	教授		
				小林 能直	教授		

論文審査の要旨 (2000 字程度)

本研究は「Experimental and Molecular Dynamics Study on Metallic Impurity Diffusion in Liquid Lead Alloys (実験および分子動力学法による液体鉛合金中の金属不純物拡散に関する研究)」と題し、8章より構成されている。

第1章、「Introduction」では、鉛ビスマス共晶合金(LBE:Lead-bismuth eutectic)を冷却材とする高速炉、およびリチウム鉛(Pb-17Li)を液体ブランケットとする核融合炉において、構造材料の溶解腐食による循環系における金属不純物の物質輸送特性の評価が重要であることを述べ、その評価のために必要な物性としてこれらの鉛合金中における金属不純物の拡散特性を調べることの必要性を指摘し、これに関連する既往研究を概観して課題を抽出し、鉄鋼材料の主成分である鉄(Fe)とニッケル(Ni)の液体LBE中と液体Pb-17Li中における拡散特性を調べることを本研究の目的としていることとその意義を述べている。

第2章「Experimental method」では、液体LBE中および液体Pb-17Li中におけるFeとNiの拡散係数をFickの第二法則に基づき求める実験方法を確立したことを述べている。すなわち、酸素濃度を低減させたLBEまたはPb-17Liを鉛直に置かれた毛細管内に充填して融解させ、予め還元したFeまたはNi粉末を液体鉛合金の上部に添加して飽和濃度まで溶解させ、電気炉内で所定の温度に保って鉛直下向きに一定時間拡散させ、この試料を取り出して硝酸溶液に溶解させICP-MS分析により試料中のFeまたはNiの濃度分布を測定する手法を用い、イオン交換クロマトグラフィーを用いて上記の硝酸溶液からFeまたはNiを99.8%まで溶離することにより試料中の低濃度のFeまたはNiの濃度を0.001wt%の精度まで測定できるように改善したことを述べている。

第3章「Experimental study of iron and nickel diffusion in liquid LBE」では、第2章で確立した拡散係数の実験方法を用いて、500℃～650℃の温度の液体LBE中におけるFeとNiの拡散係数を測定し、その特性と実験相関式を求めている。このFeの拡散係数はNiの拡散係数とほぼ等しいこと、その理由として拡散係数が粒子サイズに依存し、FeおよびNiの粒子サイズがほぼ等しいためであると考察している。また、FeおよびNiの拡散係数の温度依存性がほぼ等しいことを明らかにし、さらに試料のSEM分析結果より拡散過程において溶解金属原子が凝集する可能性があることを見出している。

第4章「Experimental study of iron and nickel diffusion in liquid Pb-17Li」では、第2章で確立した拡散係数の実験方法を用いて、300℃～600℃の温度の液体Pb-17Li中におけるFeおよびNiの拡散係数を測定し、その特性と実験相関式を求めている。Feの拡散係数は温度450℃以上においてNiの拡散係数よりおよそ2倍大きく、温度450℃以下においてNiの拡散係数より小さいことを述べ、拡散係数のアレニウス式から、Feの拡散に要する活性化エネルギーはNiより大きく、その理由として、Feの原子サイズがNi原子サイズより大きいためであると考察している。

第5章「Computational method - Molecular dynamics simulation」では、原子埋め込み法(EAM)による分子動力学法を用いた液体LBE中および液体Pb-17Li中のFeとNiの拡散特性の解析方法を提案し、経験的パラメータを用いて原子間ポテンシャルエネルギーを計算し、液体LBEおよび液体Pb-17Liの密度、熱膨張率、比熱および粘性係数の計算に適用することにより解析モデルの妥当性を検証した後、第一原理計算により得られた原子間相互作用のデータに基づき、溶質原子のFeとNiの溶媒原子Pb、Bi、Liとの原子間力を求め、分子動力学法による拡散係数の解析方法を確立したことを述べている。

第6章「Molecular dynamics simulation of iron and nickel diffusion in liquid LBE」では第5章で述べた分子動力学法による拡散係数の解析方法を用いて、FeおよびNiの液体LBE中における拡散特性について解析を行い、Fe原子またはNi原子が液体LBE中で拡散しながら直ちに微小粒子に凝集することを見出し、凝集した粒子の大きさは温度の増加と共に小さくなることを明らかにしている。この凝集の理由をFe原子同士およびNi原子同士が強い親和性を有することにあると考察し、凝集したFeおよびNiの拡散係数の解析結果はStokes-Einsteinの理論式による計算結果とよく一致することを明らかにしている。

第7章「Molecular dynamics simulation of iron and nickel diffusion in liquid Pb-17Li」では第5章で述べた分子動力学法による拡散係数の解析方法を用いて、FeおよびNiの液体Pb-17Liにおける拡散特性について解析を行い、Fe原子同士およびNi原子同士の親和性が小さいためFe原子またはNi原子が凝集せず単一原子として拡散すること、およびFeおよびNiの拡散係数が実験結果およびStokes-Einstein理論式とほぼ一致することを明らかにし、Feの拡散に要する活性化エネルギーがNiより大きく、その理由としてFe原子の半径がNi原子より2pm程大きいためであると考察している。

第8章「Conclusions」では、以上の各章で得られた成果を総括し、結論を述べている。

これを要するに、本論文は鉛ビスマス冷却高速炉と核融合炉液体Pb-17Liブランケットの循環系における不純物金属の輸送特性を評価する上で必要な拡散係数と拡散特性について実験および分子動力学法解析に基づき明らかにしており、工学上および工業上貢献するところが大きい。よって、本論文は博士(工学)の学位論文として十分価値あるものと認められる。

注意:「論文審査の要旨及び審査員」は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。