材料部会報

Nuclear Materials Letters

(2008年6月)

(部会ホームページ http://www.soc.nii.ac.jp/aesj/division/material/)

目次

I. 秋の大会材料部会企画セッション報告・・・・・・・・・・・・・・・・・2
I-1 材料照射プロセスのマルチスケール解析と He 損傷機構の解明
森下和功
I-2 金属内原子空孔に多重捕獲された水素挙動の第一原理分子
動力学的研究 加藤太治
I-3 第一原理計算による粒界脆化のモデリング
山口正剛、蕪木英雄・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 10
II. 日韓ジョイントサマースクール報告・・・・・ 16
III. 九州大学名誉教授杉崎昌和先生を部会よりフェローに推薦 · 17
IV. 第7回「材料」夏期セミナーのご案内
V. 2008年以降の行事および行事予定 ····· 19
VI. 寄稿のお願い・・・・・ 20
VII. 運営委員会委員名簿······ 20
VIII. 編集後記······ 20

I. 秋の大会材料部会企画セッション報告

「原子炉材料損傷のマルチスケール解析に向けた要素モデルの高度化」

平成 19 年度原子力学会秋の大会における材料部会企画セッションは、「原子炉材料損傷のマル チスケール解析に向けた要素モデルの高度化」をテーマとして、北九州国際会議場にて開催され た。3名の講師より、マルチスケールモデリングの現状と克服すべき課題、さらに最新の要素モ デルに基づく計算解析例についての講演を頂いた。会場は、立ち見の聴講者が現れるほど盛況で あり、さらに各講演について活発な議論が展開され、本テーマへの関心の高さが伺えた。

セッションの概要

初めに、京都大学エネルギー理工学研究所の森下和功氏より、「材料照射プロセスのマルチスケ ール解析と He 損傷機構の解明」について御講演を頂戴した。講演の冒頭では、材料の照射プロ セスにおけるマルチスケール解析の概念と現状、さらには克服すべき問題点について、大変明快 なご説明を頂くことができた。特に、マルチスケール解析において、時間の粗視化の問題が常に はらんでいる危険性を十分考慮しながら計算解析を進める必要性を述べていたことについては、 同じ計算解析をする者として肝に銘じなければならないと再認識させられた。さらに、講演の後 半では、材料中における He の挙動について、分子動力学計算の結果に熱力学的な考察を交えな がら、種々の条件下における計算例を示された。高圧 He バブルからは自己格子間原子あるいは そのクラスター放出が十分に起こりうることが示された。さらに、KMC 法により空間的・時間 的な He バブル 黄郎についても詳細な検討がなされており、核融合炉第一壁材料とダイバータ材 料では He バブル成長の律則過程が異なることが予測されたことは非常に興味深い。

続いて、核融合科学研究所の加藤太治氏より、「金属内原子空孔に多重捕獲された水素挙動の第 一原理分子動力学的研究」について御講演頂いた。加藤氏は、フェライト鉄とタングステン中に おける原子空孔と水素原子との相互作用について、第一原理計算に基づく電子論的な観点から検 討を行っており、単原子空孔への水素の捕獲について詳細に検討されていた。単原子空孔にトラ ップさた水素は、周囲の金属と共有結合し、捕獲位置は空孔内壁(周辺)に寄ることになり、電 子状態密度からも鉄の d 軌道と水素の s 軌道の混成が生ずることが示された。講演の中で、単原 子空孔へ水素が捕獲されるにつれ水素の結合エネルギーが減少傾向にあること、さらに6 個以上 の水素は捕獲出来ないことが第一原理に基づくエネルギー計算より明らかにされた。

さらに、日本原子力研究開発機構の山口正剛氏より、「第一原理計算による粒界脆化のモデリン グ」について御講演頂いた。粒界脆化に関し、従来はその影響が無視されていた凝集エネルギー (表面エネルギーと粒界エネルギーの差)に着目し、幾つかの対応粒界において第一原理計算に より凝集エネルギーを求められていた。さらに、PやS等の不純物元素が偏析した状態での解析 結果より、それぞれの元素が異なる粒界脆化のメカニズムを発現させることが初めて示された。 特に、強い脆化元素であるSについて、電子状態(電子密度分布)の観点から脆化要因を視覚的 に示された図には非常に感銘を受けた。また、BやCによる粒界強化のメカニズムについても、 これらの元素が粒界をより安定化される効果を持つことから説明がなされた。

どの講演においても非常に活発な質疑応答が展開されたが、時間の制約のため途中で議論を止めざるを得なかったことは非常に残念であった。

最後に、ご多忙中にもかかわらず、講師を快くお引き受け頂きました先生方に厚く御礼を申し 上げます。また、準備段階から本セッションの企画、運営にご協力頂いた多くの方々に、この場 を借りて謝意を表します。(運営委員 北海道大学・坂口紀史)

I-1 講演資料

材料照射プロセスのマルチスケール解析と He 損傷機構の解明

A multiscale modeling study of radiation damage processes in nuclear energy materials to provide the comprehensive model of helium damage mechanism

京都大学エネルギー理工学研究所 森下 和功

1. はじめに

核融合炉材料が,他の工業材料と比べて著しく異なるのは,放射線照射という特殊な環境で使用される点である.照射により材料内には,多量のはじき出し欠陥(原子空孔と自己格子間原子)や不純物(H, He,核変換生成物)が生成する.はじき出し欠陥の生成そのものは,ピコ秒(10⁻¹² s)かつナノメートル(10⁻⁹ m)オーダーの現象であるが,欠陥の多くは拡散するので,照射の影響は,時間とともに材料全体に拡がる.その結果,材料のミクロ組織や材料特性は変化(劣化)する.一般に,空間的に多岐のスケールにわたる現象をマルチスケールな現象とよぶが,照射損傷過程は,空間スケールはもちろんのこと,時間的にもエネルギー的にもマルチスケールな現象である(図1).核融合炉材料の開発や寿命評価,炉の健全性確保,補修技術開発等を実現するためには,このような非平衡な現象のマルチスケール性を十分に考慮した上でモデル化し,高精度の材料挙動予測手法を確立しなければならない.

材料挙動のモデル化が困難な原因のひとつに、材料の構造階層性がある. すなわち、材料は、現象 の空間スケールに応じて、原子、原子集団、連続体などとして扱われる. また、その中に不均一性の 問題(材料は、母相、表面、粒界、転位、析出物等の要素を含む)が絡む. 要するに、構造階層性を もつ複雑な系(材料)の中で起こる非平衡なマルチスケール現象をいかにモデル化するか、というの が照射材料モデリングの課題ということになる. このような課題を、ひとつの解析・評価手法で解く のは不可能であるので、複数の手法を駆使し、それぞれから得られる結果を巧みにつないでいって、 問題の本質に迫る必要がある(マルチスケールモデリング).



図1 マルチスケールな材料照射プロセス

2. マルチスケールモデリング手法

欠陥挙動の熱力学はエネルギー論(energetics)と運動論(kinetics)に分けて考える.系が平衡であ れば、その状態をエネルギー論で記述することが可能であるが、照射材料は非平衡なので、その両方 が必要となる.エネルギー論は、欠陥の導入場所(母相、粒界、転位、表面などの材料構成要素)に 依存し、照射条件には依存しない.一方、運動論は、照射条件に強く依存する.どのような欠陥がど ういう順番で生成・蓄積していくか(運動論)によって、材料の照射下ミクロ組織発達は大きく変わ る.

母相, 粒界, 転位, 析出物等の多くの材料構成要素を含む複雑な系(実用材料)をモデル化するに は, まず, 材料をそれぞれの要素に分割し, それぞれのエネルギー論を求めることから始まる. 要素 ごとの欠陥形成エネルギーを評価することは重要である.系が連続体とみなせるときは,線形弾性論 等を使った評価が行われる.格子の効果など,材料の構造階層性が重要になる場合は,分子動力学(MD) 解析が有効になる.次にそれらのエネルギー論をもとに,運動論を検討する.重要なのは,材料構成 要素間の相互作用である.一般に,母相と析出相を別々に照射して得られるミクロ組織変化は,両相 を含む系のミクロ組織変化とは一致しない.これは,欠陥の拡散によって引き起こされる要素間の相 互作用が存在するからである.そこで,要素ごとに定式化される欠陥反応速度論式を,拡散項をカッ プリングさせながら解くという作業が必要になる.しかしながら,各要素のエネルギー論ですらすべ てが明らかでない現状において,実用材料の運動論を正しく求めるのは難しい.

照射損傷過程のマルチスケール性の克服は、系の状態を記述するパラメータ数(自由度)をいかに 減らすかである.材料内の欠陥挙動は、周辺の原子や電子のふるまいで決まるが、これは第一原理計 算(FP)で求めることができる.しかしながら、同手法で解析可能な系の大きさには限界があるので、 原子間ポテンシャル関数を導入し、原子のみを追跡する.これが、(古典的)MD法である.はじき出し 欠陥の生成や拡散・消滅・集合体形成などを見ることができる.しかしながら、そこでもやはり、扱 える系の大きさや時間スケールには限界があるので、欠陥挙動のみに着目した手法が採用される.そ れがキネティックモンテカルロ(KMC)法である.さらには、欠陥ひとつひとつの位置情報を無視し、そ のすべてを欠陥濃度という指標に押し込める方法がある.これが反応速度論(RT)解析である.このように FP→MD→KMC→RT と各手法をつなぐことにより、系の状態の記述に必要なパラメータ数を減らし ていく.このような操作により、詳細情報は徐々に失われるが、代わりに、解析可能な時空間スケー ルが拡大する.

3. ヘリウム損傷

He バブル形成に関する実験では、2 種類の温度依存性が観察されている. ひとつは、ボイド形成と 同様に、バブル形成温度域に上限と下限が存在する場合である. 下限温度は原子空孔が移動し始める 温度(回復ステージ III)であり、上限温度はバブルの熱的安定性で決まる. このような温度依存性は、 核融合炉第一壁材料内の He 損傷(~15 appm He /dpa)で観察される. そこでは、(n,α)反応によって 生成した He 原子がはじき出し欠陥と相互作用を繰り返す結果、ミクロ組織が変化する. もうひとつの 温度依存性は、He 粒子が直接入射される核融合炉ダイバータ材料の場合(>10000 appm He/dpa)であ る. このときは、原子空孔が移動できない低温でもバブルは形成する.

材料内に過剰の原子空孔や He が存在すると, それらはバブルとして析出する. 核生成のしやすさは, 核生成エネルギームg=VAG_V+Sy+G_{el}で表される. n 個の He 原子, m 個の原子空孔, l 個の SIA から 1 個 のバブルが形成されるとすると,核生成エネルギーは, $\Delta g=G_{B}-n\mu_{He}^{M}-m\mu_{V}^{M}-l\mu_{SIA}^{M}$ と書ける. ここで, μ_{i}^{M} は母相中の欠陥 i (i=He, V, SIA) の化学ポテンシャル, G_Bはバブルの形成自由エネルギーである. バブル中の He 数 N_{He}およびバブル中の原子空孔数 N_Vは,それぞれ n および m-l (もちろん m>l) とな る. G_Bは, He の状態方程式と弾性論を組み合わせた連続体の取扱いや MD 法を使って評価される. G_Bをバブル中の欠陥 i の数で微分したのが,バブル内の欠陥 i の化学ポテンシャル μ_{i}^{B} である. 平衡状 態ならば $\mu_{i}^{B}=\mu_{i}^{M}$ である. また,いつも $\mu_{V}^{B}=-\mu_{SIA}^{B}$ は成り立つので, $\mu_{V}^{M}=-\mu_{SIA}^{M}$ となる. 結局,平衡 状態では, $\Delta g=G_{B}-N_{He}\mu_{He}^{M}-N_{V}\mu_{V}^{M}$ となる.

図2は、Fe 母相中の He バブルの核生成エネルギーを示す. $N_{He}=0$ の場合(ボイド)、 Δg はよく知られた上に凸のグラフになる.エネルギー最大値 Δg^* がボイドの臨界核 R^* に対応する. $N_{He}=0$ の条件のまま、空孔濃度 C_V を高くすると Δg^* は小さくなり、温度 Tを高くすると Δg^* は高くなる.図2に示すように、ボイド中に He 原子を導入すると Δg^* は減少する.これは、He の存在により、バブルの核生成が促進されることを示す.一方、小サイズ領域では、 N_{He} の増大にともなって Δg は上昇するが、これは、小サイズのボイドに多量の He 原子を詰め込むことが困難であることを示す.以下、He 原子の詰め込みの



図 2 He バブルの核生成エネルギーの模式





程度を表す指標として、バブル中のHe密度(N_{He}/N_{V} =He/V比)を使う.

バブルは、可動欠陥の流出入により成長・収縮する. 平衡ならば Δg^* からバブル核発生率が求まるが、照射による非平衡な系では、エネルギー論のみで論ずることはできない. そこで運動論を考える. バブルを半径 *R* の球とすると、バブルに流入する欠陥 *i* の<u>正味の</u>フラックスは、 $I_i=4\pi R Z_i D_i$ [$C_i(\infty)-C_i(R)$]/Qで与えられる.

ここで、 Z_i は欠陥捕獲効率、 Ω は原子体積、 D_i は拡散係数、 $C_i(r)$ はバブル中心からの距離 rにおける欠

陥濃度である. I_i の正負は $C_i(\infty)$ と $C_i(R)$ の大小で決まることになる. $C_i(\infty)$ は母相の欠陥濃度であり,欠陥の生成・拡散・消滅・集合化等,様々な反応式を連立することで得られる. 照射条件に強く依存する. 一方, $C_i(R)$ はバブル表面の欠陥濃度である. これは,バブル表面での局所平衡の仮定から, $C_i(R)$ =exp[$-(E_i^{\text{F}}-\mu_i^{\text{B}})/kT$]となる.ここで, E_i^{F} は母相における欠陥iの形成エネルギーである.また, $E_i^{\text{F}}-\mu_i^{\text{B}}$ は,欠陥iをバブルから抜き去って,母相内におく際のエネルギー変化であるから,これをバブルに対する欠陥iの結合エネルギー G_i^{BND} とよぶ. G_i^{BND} は,バブルの性質(N_{He} , N_V)のみで決まり,照射条件には依存しない. 図3は,MD法で求めた Fe 母相中のバブルに対する各種点欠陥の結合エネルギーを示す. 連続体の取扱いでもほぼ同様になる. G_V^{BND} は He/V 比の増加関数になり, $G_{\text{He}}^{\text{BND}}$ と $G_{\text{SIA}}^{\text{BND}}$ は減少関数になる. つまり,高He/V 比のバブルからは,原子空孔は抜けにくく,原子は抜けやすいことになる.

上述の全欠陥フラックスを $I=I_i^{IN}-I_i^{OUT}$ とおくと,バブル体積の増加率 dV/dtは $\Omega(I_V^{N}-I_V^{OUT}-I_{SIA}^{IN}+I_{SIA}^{OUT})$ で与えられる.従来のMansurらのバブル成長理論は,括弧内の+ I_{SIA}^{OUT} を無視した形であるが,比較的低圧力のバブルが観察される核融合炉第一壁材料については十分な仮定である.図4は,Mansurらが示したバブルの成長速度 dR/dtのサイズ依存性である.上述の dV/dtから求められる. N_{He} が大きくなるにつれて,成長速度は $A \rightarrow B \rightarrow C$ となる.曲線Aでは,dR/dt=0と2箇所で交わる.半径 R_1 より小さなバブルは成長し(dR/dt>0), R_1 より若干大きなバブルは収縮する(dR/dt<0).そのため, R_1 は安定なバブル径と言える.一方, R_2 より若干小さなバブルは収縮し,大きなバブルは成長する. R_1 と R_2 の間では,dR/dt<0となることから,半径 R_1 の安定なバブルが R_2 以上に成長するには,欠陥フラックスの確率論的ゆらぎが必要になる(ここで示した R_2 は,図2の臨界半径R*と同じ).ただし, N_{He} が増大して曲線Cの状態になると,あらゆるサイズでdR/dt>0となり,ゆらぎの効果なしでも成長できる.

4. ヘリウムバブルの核生成・成長

バブル核生成・成長のメカニズムマップ:バブルが平面(N_{He}, N_V)内をどのように運動するかによって, バブルの核生成・成長を記述することができる.まず,系が平衡状態にある場合を述べる.平衡条件 から欠陥濃度 C_i(∞)を算出し,さらに,(N_{He}, N_V)の値のみで定まる C_i(R)を評価すると,各(N_{He}, N_V)に 対して I_i^Nおよび I_i^{OUT}が求まる.平面(N_{He}, N_V)上の各点に対して,最も支配的な現象を調べると,図 5 になる.平面(N_{He}, N_V)は,4 つの領域に分割される:(1)He 吸収が優勢で,空孔放出が優勢であるバ ブルの収縮領域,(2) He 吸収が優勢で,空孔吸収が優勢であるバブルの成長領域,(3) He 放出が優勢で, 空孔吸収が優勢であるバブルの成長領域,(4) He 放出が優勢で,SIA 放出が優勢であるバブルの成長領 域.白抜き矢印は,その領域のバブルが平面内のどの方向に進むかを示す.この図をバブル成長の<u>メ</u> カニズムマップとよぶ.メカニズムマップは,温度等の条件や材料構成要素に依存し,核生成エネル ギーと密接に関係する.その対応を図5に示す.

照射下条件におけるメカニズムマップの例を図6に示す. 平衡条件では濃度 $C_{l}(\infty)$ が極めて低い SIA や He も,照射下条件では高くなる. そのため,SIA の吸収によるバブル収縮領域が形成され,He 吸収領域が拡大する. 図の白抜き矢印にあるように,空孔放出および SIA 吸収の領域ではバブルは収縮し,それ以外では成長する. この図を直線A,B,C で切ると,それぞれ,Mansurの成長速度(図4)のA,B,C に対応する. 図4の特徴的半径 R_1 , R_2 , R_0 は図6の N_{V1} , N_{V2} , N_V *に対応する.

バブル核生成・成長の KMC 解析:バブルに欠陥 *i* が流入する確率,および,バブルから欠陥 *i* が放出 される確率を,それぞれ *I*_i ^N と *I*_i ^{out}に比例すると考え,乱数を使って実際に起こる事象を決定する.

そのような操作を繰り返すと、バブルの核生成・成長を調べることができる. 図 7 は、原子空孔のみ存在する系(Fe)におけるボイドサイズの時間発達を示す. He は存在しないので、ボイドは、図 6 の 直線 $N_{\text{He}}=0$ 上を左から右へ移動することになる. $N_V < N_{V0}$ の領域は収縮が優勢であるから、ボイドはな かなか成長せず、図 7 に示すような潜伏期間が存在する. 潜伏期間は、温度 630K までは単調に減少す るが、それ以上の温度では増加する. 温度 650K 以上では、ボイドは成長しなかった. この温度が、Fe の回復ステージ V である. なお、ここで示す潜伏期間の時間スケールは、MD 法単独では追跡不可能 なほど長. KMC 法の優位性が現れている. 成長期の成長速度(図 7 の傾き)を求め、アレニウスプロ ットを描くと、その傾きは原子空孔の移動エネルギー E_V^m に一致する. これは、ボイドの成長が原子空 孔の移動に律速されること意味する.

次に、Fe 中に原子空孔、SIA、He が存在する系を考える.ステージ V 以上の高温では、ボイドは成 長・収縮を繰り返すものの,なかなか大きく成長しない.しかしながら,系内に He が存在すると,バ ブルは速やかに核生成するようになる. C_{He}(∞)が高いほど, 収縮は抑えられ, 一方的な成長が起こるよ うになる.また,平面($N_{\text{He}}, N_{\text{V}}$)内のバブルの軌跡(核生成経路)を調べると,低温ほど He/V 比(= $N_{\text{He}}/N_{\text{V}}$) は高くなり, SIA の熱的放出によるバブル成長が顕著になる. そこで, さまざまな温度および He 濃度 $C_{\text{He}}(\infty)$ に対して ($C_{V}(\infty)$ や $C_{\text{SIA}}(\infty)$ は一定), 潜伏期間終了後のバブル成長速度を求め, アレニウスプロ ットしたのが図8である. C_{He}(∞)=0の場合を示す点線は、回復ステージVより低温側のみ示している (高温側ではボイドは核生成しない). C_{He}(∞)≠0になると高温側でも核生成する. C_{He}(∞)が比較的小さ なうちは、その成長速度直線は点線のグラフと一致する. すなわち、「He は、高温でのバブル核生成 を可能にするが、バブルの成長速度には影響を与えない、このようなバブルの成長は、やはり原子空 <u>孔の移動に律速される.」ということが言える.この条件は、核融合炉第一壁の He 損傷</u>に対応する. 一方, C_{He}(の)が比較的大きな場合は, 成長速度そのものが増大し, アレニウスプロットの傾きまでもが 変化する.このときの活性化エネルギーは He の移動エネルギー E_{He}mに一致する.これは,バブル成長 が Heの移動に律速されることを示す.このとき, SIA 放出機構が支配的にはたらいており,そのため, 原子空孔が動かない低温でもバブルは成長することになる.この条件は、核融合炉ダイバータ材料の He 損傷に対応するものと考えられる.



参考文献: 森下和功, "核融合炉材料の照射損傷モデリング", 金属, Vol.77 (2007) pp. 412-417.

図8 バブル成長速度のアレニウスプロット

⊨0.078eV

=5×10−•

5 × 10⁻⁷

 $C_{\text{He}}=0$

25

 $5 \times 10^{\circ}$

20

 $l/k_{\rm B}T$ (eV ⁻¹)

5 × 10-8

5 × 10⁻¹⁰

30

7

I-2 講演資料

金属内原子空孔に多重捕獲された水素挙動の第一原理分子動力学的研究

核融合科学研究所 加藤太治

金属中の原子空孔は水素原子の捕獲サイトとなる。磁気核融合炉のダイバータ部では高いフルーエ ンスで水素原子が材料内部に侵入し、原子空孔による水素原子の捕獲が進行するだろう。鉄への重水 素イオン打ち込みと水素吸蔵スペクトルの測定から、鉄中に水素原子を6個まで多重捕獲した原子空 孔の存在が推測された[1]。この実験で推定された水素原子と単原子空孔のクラスタの結合エンタルピ ー(0.6, 0.4 eV)は、水素原子の溶解エネルギー(0.3 eV)よりも大きい。そのため、深井等の理論的 予測によれば[2]、単原子空孔の熱平衡濃度は水素原子を多重捕獲することにより指数関数的に増大す る。よって、ダイバータ部で使用される金属材料の水素腐食や水素吸蔵が懸念される。

第一原理分子動力学により、ナノスケールでの材料の非経験的な構造解析・予測が可能になった。 そこで、金属原子 54 個から成る超格子から原子 1 個を取り除いて単原子空孔を作り、その 8 面体サイトに水素原子を付着させたクラスタの安定構造と全エネルギーの第一原理分子動力学計算を、フェライト鉄とタングステンについて行った。尚、本計算では密度汎関数理論に基づいた VASP コード[3]を用いた。

単原子空孔に水素原子を捕獲させると、安定な捕獲位置は空孔周辺に寄る(図1)。金属中での水素 原子同士は互いに強く反発するが、空孔内壁表面の遷移金属電子とは共有結合するため、捕獲位置は 空孔内壁(周辺)に寄ると考えられる。確かに、鉄の場合に水素原子を捕獲したときの状態密度をみ ると、鉄原子の3d軌道と水素原子の1s軌道の混成により誘起された結合性準位が、鉄のdバンドの 直下に確認できた。

超格子の全エネルギーを E(M₅₄)、格子間位置(4面体サイト)に1個の水素原子が固溶した超格子 の全エネルギーを E(M₅₄H₁)、単原子空孔にn個の水素原子が捕獲されたクラスタを含む超格子の全エ ネルギーを E(M₅₃V₁H_n)として、格子間位置を基準にした水素原子とクラスタの結合エネルギー:es= E(M₅₃V₁H_n-1)・E(M₅₃V₁H_n)+ E(M₅₄H₁)・E(M₅₄)を計算した結果は図2のようになった。単原子空孔 に捕獲された水素原子の数が2個までは、結合エネルギーの変化がほとんどないが、個数が増えるに 従い結合エネルギーは減少する傾向にある。これは、金属中での水素原子同士の反発相互作用による。 しかし、その減少傾向は単調ではなく、5個目の結合エネルギーは逆に増加している。また、捕獲され た水素原子が8面体の6個の頂点を全て占めた場合は、結合エネルギーが溶解エネルギーを大きく下 回る。つまり、格子間位置にある6個目の水素原子がクラスタに結合するよりも、水素分子として表 面から出てゆく方がエネルギー利得は大きいことを意味している。これらの知見は、金属中でのクラ スタ挙動(濃度やサイズなど)のキネティクスをより詳細に研究する上で重要になると考えている。

参考文献

- [1] F. Besenbacher et al., J. Appl. Phys. 61, 1788 (1987).
- [2] 深井 有 黒川善文 平岡寛勝, 日本金属学会誌 61(8), 663 (1997).
- [3] G. Kresse and J. Furthmueller, Phys. Rev. B 54, 11169 (1996).
- [4] Y. Tateyama and T. Ohno, Phys. Rev. B 67, 174105 (2003).

8



図 1 2 個の水素原子を捕獲した単原子空 孔を含む鉄超格子。第一原理分子動力学に よる安定構造のイメージ。中央に位置する 原子空孔の8面体の上下の頂点に水素原子 が捕獲されている。挿入された平面は、平 面上での電子密度分布を見るためのもの。



図2 単原子空孔の8面体サイトに捕獲され た水素原子の結合エネルギー。点線は水素原 子の溶解エネルギー。フェライト鉄について は、他の第一原理分子動力学計算の結果[4] とほぼ一致する。

第一原理計算による粒界脆化のモデリング

日本原子力研究開発機構 山口正剛 蕪木英雄

近年、粒界脆化を模擬した第一原理計算が可能になり、様々な溶質元素の偏析による粒界脆化メカ ニズムが明らかになってきた。本講演では、我々が開発してきたそのモデリング手法といくつかの応 用例を紹介する。

1. 緒言

【背景】「粒界脆化」あるいは「粒界割れ」は、様々な原子力材料に共通した重要な研究対象である。 例えば原子炉圧力容器鋼においては、高経年化による照射量の増大により、リン(P)偏析による粒界脆 化が懸念されている。炉心シュラウド等の炉内構造物においては、粒界に沿ってき裂が進展する粒界 型応力腐食割れ(IGSCC)等の発生が問題となっている。次世代炉構造材料において問題となるヘリウム 脆化も、基本的には粒界が脆化する現象である。

【破壊力学と第一原理計算】 破壊力学の枠組みの中では、弾塑性体の脆性破壊が生じる条件は、 Griffith- Orowan- Irwin の破壊条件として次のように与えられている。(Fig. 1 参照) **破壊応力**

 $(1-v^2)(\sigma^*)^2 \pi a_c / E \ge \gamma_p + 2\gamma \cdots$

νはポアソン比、 σ *は破壊応力、 a_{o} はき裂半長さ、Eはヤング率である。①式の 左辺はき裂進展におけるエネルギー開放率 (J/m^2) を表し、右辺の γ_{p} は転位運動に 費やされる塑性仕事、 2γ は原子間結合を引き剥がして2つの破壊表面を作るのに 要するエネルギーすなわち凝集エネルギーである。通常の金属における破壊では、



塑性仕事(γ_p)は凝集エネルギー(2γ)に比べて桁違いに大きいため(γ_p >> 2γ)、 **Fig.1: 破壊の概念図** 2γ が無視されることがしばしばあるが、それは誤りである。仮に 2γ がゼロならば応力の集中が起こ らないため γ_p もゼロになるはずであり、 2γ が大きくなるからこそ γ_p も大きくなる[1,2]。つまり、詳 しい関数形は解明されていないものの、 γ_p は以下のように 2γ に対する関数になっているはずである。

 $\gamma_n = \gamma_n(2\gamma)$ ($\gamma_n(0) = 0$ であるような、2 γ に対する増加関数)…②

すなわち、①式と②式から 2 γ の低下が破壊応力(σ *)の低下に密接に関連していることがわかる。さらに、延性脆性遷移温度(DBTT)は破壊エネルギー(γ_p +2 γ)と大まかには逆比例関係になっていることが実験的にも知られていることから、同様にして DBTT は 2 γ と逆比例の関係にあると考えられる。このようにして、2 γ は粒界脆化を支配する鍵となっている。

粒界破壊の場合には、2ッは粒界凝集エネルギーであり、溶質原子の偏析がない場合、

$2\gamma = 2\gamma_s - \gamma_{gb} \cdots \otimes$

と表される。ここで、2 γ_s は粒界破壊によって生じる2つの破壊表面の表面エネルギー、 γ_{gb} は破壊前 の粒界エネルギーである。溶質原子が粒内に固溶した状態から粒界へ移動(偏析)することにより獲 得するエネルギーが粒界偏析エネルギー($\Delta E^{seg}_{gb, total}$ [eV])であり、この分だけ粒界エネルギーが減少 する。破壊面が生じると溶質原子は表面吸着した状態になり、このとき固溶状態を基準にして見た吸 着エネルギーは表面偏析エネルギー($\Delta E^{seg}_{s, total}$ [eV])と呼ばれる。今考えている粒界面の面積を *A* とすると、その中にいくつかの溶質原子が偏析したときの粒界凝集エネルギーは次のように表される。 $2\gamma = (2\gamma_s - \Delta E_{s,total}^{seg} / A) - (\gamma_{gb} - \Delta E_{gb,total}^{seg} / A) \cdots \textcircled{4}$

低温の場合(溶質原子の拡散速度がき裂進展に追いつかない場合)、割れた後の2つの破壊表面にお けるある面積 A 内での溶質原子数は、割れる前の粒界における溶質原子数に等しいとしてよい。逆に 高温の場合や溶質元素が水素の場合(溶質原子の拡散速度がき裂進展に追いつく場合)、溶質原子の化 学ポテンシャルが一定になるように、破壊の前後で溶質原子数が変化することを考慮する必要がある。

これらのエネルギーは基本的に原子間結合エネルギーであるため、量子力学に基づいた電子構造計 算、すなわち第一原理計算から精度よく求めることができるはずである。しかし、計算時間が膨大に なるため、なかなか現実的な計算は行うことができなかった。対称性のよい結晶粒界でさえ、原子に 働く力がゼロになるように構造緩和をした上で2γを求めることは、ごく最近になってやっと可能にな ったのである。

我々はここ数年来、溶質元素の偏析による2γの変化を第一原理計算から計算する手法を構築してき た。そして、原子力機構の大型計算機を活用しつつ、様々な溶質元素による鉄やニッケルの粒界脆化 メカニズムを次第に明らかにしつつある。現在までに得られた結果では、粒界脆化元素として有名な 元素(P,S等)は確かに2γを低下させ、粒界強化元素として知られる元素(B,C等)は2γを上昇させる。 その低下(上昇)の大きさも、溶質元素の実験的に知られている脆化(強化)能力の大きさに比例し た形で得られている。つまり、「2γが粒界脆化の鍵を握っている」という上記の考え方を実証する結 果が計算から得られている[3-5]。

2. モデリング

【結晶粒界】結晶粒界とは、方位の違う結晶同士が接す る界面であり、そこでは原子配置に乱れが生じている。 しかしながら、その乱れは粒界面から高々2,3 原子層以 内に収まる。そのため、対称性のよい結晶粒界ならば100 個程度の原子を用いれば十分に粒界の構造を再現できる。 Fig.2 に、bcc Fe 23(111)[1-10]対称傾角粒界を含むユ ニットセルを示した。bcc Fe の(111)面に相当する原子 層 19 層からなっており、3 次元的に並進対称性を持って いる。上下に真空(vac)の層を入れて、粒界の上下の結晶 が粒界に沿って自由にすべること(粒界すべり)ができ るようにしている。

ただし、このようにして 100 個程度の原子で表すこと



Fig.2: bccFe Σ 3(111)対称傾角粒界を含むユニットセル。(a)は側面図。(b)は粒界面の断面。サイト0は粒界空孔を表す。

ができるのは、対称性の高い粒界つまり対応粒界に限られる。しかも、粒界面上下の結晶において、 粒界面と平行な方向の並進ベクトルが互いに一致し、かつ、高々1nm 以内に収まることが必要である。 例えば、対称傾角粒界の場合には10個以上のΣ値(あるいは傾角)を持った粒界に対してこのような ユニットセルを作ることができるが、bcc Fe (100)面のねじれ粒界の場合には1つか2つしか作れな い。

実際の材料で脆化しやすいのはランダム粒界と言われているが、ランダム粒界は小さなユニットセルで表すことができないので、第一原理計算では実際上扱うことはできない。しかしながら、対応粒界でも種類によっては壊れないわけではない。計算に用いる bcc Fe Σ3(111)粒界のエネルギーは(111)表面エネルギーの半分以上あり、ランダム粒界のエネルギーよりは低いと思われるが、双晶境界の場合のような極端に低い粒界エネルギーよりはずっと高い。Fe-1%P 合金において粒界破壊面の P 濃度をオージェ電子分光で調べた実験[6]では、ランダム粒界を作っていたと思われる高指数面で P 濃度が低いという結果が得られている。つま

り、ランダム粒界の方が対応粒界に比べて壊れやすいというだけで、質的に何かが違うとは今のとこ ろ考えられない。そこで、「壊れにくい対応粒界を用いて計算を行ったところ、ある溶質元素は偏析し て脆化をもたらす」、という計算結果が得られれば、「ランダム粒界ではもっと偏析してもっと脆化す るだろう」、と推測できる。

【電子構造計算(全エネルギー計算)による粒界偏析と脆化のモデリング】 Fig.1のようなユニット セルを用い、Vienna Ab initio Simulation Package (VASP)というコードを用いて計算を行っている。 このコードは第一原理分子動力学法(電子構造計算)コードとしては最もよく普及しており、ほとん どの元素に対して精度のよい計算(0.01eV/atom 程度の数値精度)が可能である。ただし、現在の大型計 算機をもってしても、「最初に溶質原子を粒界から離れたところに置き、温度を上げて拡散させて粒界 にトラップされる(偏析する)様子をシミュレートする」というような動力学計算は時間がかかりす ぎて行うことができない。そこで、次のような手続きをとっている。

(1)Fig.1のセルを用い、溶質原子は「手で」様々な偏析原子サイトに置換あるいは挿入し、原子に働 く力がゼロになるように構造緩和を行った後の全エネルギーから、粒界偏析エネルギー(Δ E^{seg}_{gb.total}[eV])を算出する。

(2) 複数の溶質原子による合計の粒界偏析エネルギーが最大になるように、各偏析濃度における偏析原 子配置を決めていく。(そのため、最も安定な偏析原子配置を見落とす可能性もあるので注意が必要で ある。)

(3) 各偏析濃度において、引っ張り試験計算を行い、粒界凝集エネルギー及び粒界引っ張り強度を算 出する。

(4) 平衡偏析のマクリーンモデルを用い、溶質原子のバルク中濃度、時効温度、及び計算した偏析エ ネルギーから、各偏析濃度の実現可能性を考察する。

引っ張り試験計算としては以下のような方法をとっている。理想を言えば、粒界から遠い部分をつ かんで粒界に垂直な方向へ徐々に引っ張っていき、同時に原子位置の緩和を行い、さらに粒界面に平 行な方向のセルパラメータを最適化(ポアソン比を考慮)し、原子面分離による破壊を発生させなが ら最大引っ張り応力(σ_{max})と粒界凝集エネルギー(2γ)を求めるのが理想である。しかしながら、こ のような計算は非常に時間がかかる上に、壊れる直前には弾性エネルギーを溜め込むために構造が非 常に不安定になり、計算が収束しにくくなる。そのため、ある破壊面を仮定した上で引き離し、2つの 破面間距離の異なるデータを10点程度用意し、それぞれの点で構造最適化を行う、という手法をとっ ている。このとき、2つの破面が再びくっつかないように、粒界から遠い原子の位置は固定しておく。 そして、2つの破面が十分離れた位置での計算結果から粒界凝集エネルギーを算出する。そして、最初 にもどっていくつかの異なる破壊面で計算を行い、もっとも弱い破壊面を選んで最終的な 2γを出して いる。ここでも、最も弱い破壊面を見落とす可能性は捨てきれないので注意が必要である。

最大引っ張り応力(σ_{max} :き裂先端で原子面分離を引き起こすために必要な集中応力であり、き裂全体にかける破壊応力 σ *とは異なる)は正確に算出するのが難しい量であり、その上、①式の破壊条件にはあらわには含まれていない。そのため、 σ_{max} は単純な方法で近似的に算出するに留めている[4]。

3.計算例

【PとSの粒界脆化メカニズム】最も顕著な脆化元素として古くからよく知られている硫黄(S)については、すでに1980年にBriantとMessmerによってNi₄Sクラスターの電子構造計算がなされ、「SはNiから電子を奪うので、粒界を支えるNi-Ni結合から電子が奪われることにより粒界強度が低下するのではないか」という、現在でもよく知られている仮説が提唱された。しかし、この説は的を射ていない。粒界脆化の鍵となる物理量は2 γ であるのに、その変化を論じていないからである。以下では、脆化元素として有名な硫黄(S)とリン(P)の粒界偏析が2 γ をどのように下げるかについて、我々が解明したメカニズムを説明していく[5]。

Fig.3 の概念図に示すように、粒 界偏析した溶質元素 (P/S) が 2 γ を 下げるのには2種類のメカニズムが ある。一つは、(i)「粒界よりも表面 <u>を安定化させる効果」</u>であり、もう 一つは(ii)「溶質原子間の相互作用 (反発)により、粒界を不安定化さ せる効果」である。粒界偏析する溶 質元素は、偏析によって粒界エネル ギー (γ_m) を下げるが、それ以上に 表面エネルギー(2γ。)を下げる場 合 ($\Delta E^{seg}_{gb, total} < \Delta E^{seg}_{s, total}$) には、 ④式と Fig. 3(a) からわかるように 2 yを下げる効果をもつ。これが(i) の効果である。粒界偏析濃度(C)が増 して溶質原子が互いに接するように なり (C>C₁)、溶質原子間に反発力が 生じる場合、それは粒界エネルギー (γ_m)を上げるので、これも2γを 下げる効果になる。これが(ii)の効 果である。2つの破壊面ができると、 粒界中で反発していた2つの溶質原 子は互いに別々の破壊表面に分かれ て吸着した方が安定になるので、表 面における溶質原子同士の反発の効 果は、C₁の2倍の濃度であるC₂程度 までは現れず、C,以上で現れる。こ



こで、(ii)の効果による粒界エネルギー(γg)の上昇分は、粒界偏析エネルギーの低下分に相当し、それは溶質原子を粒界偏析しにくくする効果を持つ。

Fig. 4 に bcc Fe Σ 3 粒界において計算した 2 γ の 低下を示す。Fig. 4(a)の棒グラフは P による 2 γ 低下の様子である。Fig. 3(b)と比較するとわかる が、P は(i)(ii)両方の効果を持っているものの、 (i)の効果が弱いためこれだけでは強い脆化は生 じず、(ii)の効果が現れてはじめて粒界破壊が生 じると考えられる。そして同時に、(ii)による粒 界偏析のしにくさが現れるため、P は比較的弱い 脆化元素になっていると考えられる。この計算結 果は、比較的高い濃度(900 at.ppm)の P が粒内に 含まれていないと純粋な鉄では粒界破壊が生じな い[5]という実験事実とコンシステントである。

Sの場合、逆に(i)の効果が非常に強いので、大変面白いことが起こる。粒界において隣接した S



Fig.5: 偏 析 原 子 数 8 個 の 場 合 の 電 子 密 度 図 (electron/A³)。(a) S の場合、粒界中に偏析して隣接し た S-S 間距離は大きく伸び、その間の電子密度がほと んどゼロになり、部分的に破面に近い状態ができてい る。(b) P の場合、P-P 間距離は伸びるものの、破面 に近い状態は形成されない。

原子同士は互いに反発するので S-S 原子間距離が伸びるのだが、さらに伸びて破壊表面に近い状態を 作った方が(i)の効果が現れて安定になるのでそうなってしまい、結果として反発によるエネルギー上 昇が減る。Fig.5 の電子密度図にその様子が明瞭に示されている。つまり、(i)の表面安定化効果が非 常に強いために粒界中ですでに半分割れているような状態が作られ、それによって(ii)の効果による 粒界エネルギー上昇が小さくなる。2 γ の計算結果はFig.4(b)に示されており、Fig.3(b)と比較すると その様子がよくわかる。以上の理由から、S は高濃度に偏析して互いに隣接してもあまり偏析しにくく ならない。このようなメカニズムにより、S は非常に強い脆化元素となっており、実験的にも数+ ppm という低い粒内 S 濃度で粒界破壊が生じる[5]。

【BとCの粒界強化メカニズム】B(ボロン)とC(カーボン)は粒界強化元素としてよく知られている。これらについての2 γ の計算は現在行っている最中だが、C < C₁の粒界偏析濃度では確かに2 γ が大きくなった。B と C の粒界偏析エネルギー($\Delta E^{seg}_{gb, total}$)は大きく、C は 1eV/atom 程度、B は 2eV/atom 程度もあった。それに比べると表面エネルギーの低下すなわち表面偏析エネルギー($\Delta E^{seg}_{s, total}$)は小さく、この差が2 γ を上昇させることがわかった。つまり、P,S の(i)の効果とは逆の、「<u>表面よりも粒</u> <u>界を安定化させる効果</u>」が、2 γ を大きくしている。

【酸素の脆化効果:応力腐食割れとの関連】同様にしてFeやNiにおける酸素(0)の脆化効果を計算 してみると、粒界偏析エネルギーが大きい上に、表面での安定化効果が非常に大きいために脆化効果 も非常に大きく、Sと同程度であることがわかった。同時に酸化物(Fe₂O₃, FeO, Fe₃O₄、NiO)の析出エ ネルギーも計算したところ、粒界偏析エネルギーより大きな値が得られ、偏析するよりも析出しやす いことがわかった。これらの結果は実験事実と矛盾しない。通常酸素は非常に固溶しにくいため、速 やかに酸化物として析出してしまう。このため、析出物が破壊の起点になることはあるものの、エレ メンタルな酸素が粒界に偏析して粒界脆化を引き起こす効果はあまり現れない。

しかしながら、高温強度の高い Ni 基合金において、650℃程度の高温、高い応力、酸素雰囲気中、 という条件下でき裂が進展し、酸素の供給を止めるとき裂進展も止まる、という実験結果が得られて いる。これは、き裂先端の応力集中部にエレメンタルな酸素が集まって脆化をもたらすためと考えら れており、McMahon らによって Dynamic Embrittlement と呼ばれている[7]。このようにして、特殊な 条件下ではエレメンタルな酸素による脆化が現れると考えられている。酸素は格子間原子として振舞 う侵入型元素として知られているが、計算上も格子間に侵入して周囲の Fe(Ni)格子を膨張させた方が、 Fe(Ni)原子と置換するよりもずっと安定である。このことは、酸素は大きな引っ張り応力のかかるき 裂先端に集まりやすいことを示している。

一方、応力腐食割れ(SCC)において、最近ではき裂先端が実は数nm程度の開口しかないこと(tight crack)、つまり、原子レベルでのdecohesionが起こっている可能性が高いこと、き裂先端に酸素が集まっていること、などが観測されている。また、log(き裂進展速度)vs(1/温度)のグラフをプロットすると、上記の Dynamic embrittlement と応力腐食割れ(IGSCC)のデータが大まかには一つの直線上に乗ることが、Bruemmer により示されている[8]。これは、2つの現象が同じメカニズムに基づいていること、すなわち、「酸素のき裂先端に集まる速さ(拡散速度)がき裂進展速度に関与している」ことを示唆している。

エレメンタルな酸素の粒界脆化効果が非常に強いことを示した我々の計算結果は、Dynamic Embrittlement 及び応力腐食割れの原因として候補に挙げられる上述の酸素脆化メカニズムが、理論的 にも十分有り得ることを示している。

Acknowledgement: (敬称略) 亀田純、西山裕孝、加治芳行、五十嵐誉廣の諸氏に感謝いたします。 参考文献:

[1] M.L. Jokl, V. Vitek, C.J. McMahon, Acta Metall. 28, 1479(1980).

[2] 木村宏, 改訂「材料強度の考え方」,アグネ技術センター, 2002.

- [3] M. Yamaguchi, M. Shiga, H. Kaburaki, *Science* 307, 393 (2005).
- [4] M. Yamaguchi, M. Shiga, H. Kaburaki, Mater. Trans. 47, 2682(2006).
- [5] M. Yamaguchi, Y. Nishiyama, H. Kaburaki, accepted in Phys. Rev. B and references therein.
- [6] S. Suzuki, K. Abiko, H. Kimura, Scripta Metall. 15, 1139(1981).
- [7] U. Krupp et al., Materials Research, 7,35(2004).
- [8] S. Bruemmer,

http://www.ornl.gov/sci/physical_sciences_directorate/Public/Presentations/Talk_14.pdf

II. 日韓ジョイントサマースクール報告

日韓ジョイントサマースクール

JSS-3 担当 大貫 惣明

MAM 担当 木村 晃彦

日本原子力学会の3部会合同(材料、核融合、燃料)の第三回日韓ジョイントサマースクール(JSS-3) ならびに材料部会共催の日韓ジョイントサマースクール(MAM)の2件は、8月27日からの週でソウル 国立大学を会場として開催されました。日韓両国から下記のように約150名以上が参加し、成功裏に 終了いたしました。各位におかれては、講義、開催、運営、醵金にご尽力いただきました。担当者と して厚く御礼申し上げます。

このサマースクールを通して、参加学生はそれぞれの研究分野の最近の進歩を学ぶことができ、また自分の研究成果をポスターで発表することができました。サッカーの試合やステューデントナイトは日韓交流におおいに役立ったと思われます。一方、講師の先生や一般参加の方々もそれぞれ日韓交流を行いました。また、先生方の講義のまとめでもあるテキストブックは日本原子力学会から公刊され、今回の参加者以外にも役立つと期待されます。さらに、見学旅行は、韓国訪問が初めての方が多かったのですが、NFRC、KBSI、KAERIを興味深く見学しました。

環境的観点からの原子力エネルギーの重要性、また将来に向けての人材育成プログラムなどが最近 の大きな課題になっていますが、このジョイントサマースクールはこのような課題に対して先見の明 のあるプログラムであり、今後も続いてゆくことを期待するものです。

記

< JSS-3>

参加者: 130名(大学院学生65名、講師44名、一般、支援スタッフ21名) 講 義: 40件(招待講義1件、プレナリー5件、パラレル講義34件) ポスター発表: 55件(優秀表彰 7件)

研究施設見学ツアー (Dae jeon): 11名









III. 九州大学名誉教授杉崎昌和先生を部会よりフェローに推薦

杉崎昌和先生は、昭和44年九州大学工学部応用 原子核工学科に着任以降、平成15年に定年退官を 迎えられるまで一貫して原子力の教育と研究に従事 され、現在も原子力学会の活動に積極的に参加され ています。先生のご専門は原子炉材料学であり、核 分裂炉材料及び核融合炉材料の物理化学的性質、挙 動の解明に取り組まれました。その成果として、軽 水炉燃料被覆管の高温酸化、水素吸収・拡散挙動の 解明及び材料中の水素分布の可視化技術の応用など、



また、核融合炉材料については、プラズマ対向壁材料などの高融点金属中の水素同 位体の拡散、熱拡散挙動の解明などに多くの業績を残されました。また、これら大 学における研究を通して、次世代の原子力を担う人材育成・教育にも情熱的に取り 組まれ、研究室を巣立った卒業生たちは各原子力の分野で活躍しています。

原子力学会へは昭和46年に入会され、以来35年以上にわたり活動を続けられ ており、春と秋の年会、大会への参加は勿論、平成8年には企画委員、平成10年 には九州支部支部長、さらに平成15年には材料部会部会長を務められました。ま たこの間、原子力学会オープンスクール開催や日韓の交流活動に多くの努力を傾け られました。以上の御活躍を基に、平成18年度に本部会では杉崎昌和先生をフェロ ーへ推薦し、認められました。(九州大学・渡辺英雄)

IV. 第7回「材料」夏期セミナーのご案内

事務局:九州大学・(独)日本原子力研究開発機構

2008年度の材料部会・夏期セミナーを下記の要領で開催いたします。学会員及び 部会員の皆様、奮ってご参加くださるよう、お願い申し上げます。

○開催日:2008年7月31日(木)14:00~8月2日(土)12:30

○開催場所:「箱根・ヴィラ ジャボーネ(原子力機構保養研修所)」 〒250-0404 神奈川県足柄下郡箱根町宮の下469-1 TEL 0460-87-7711

○プログラム(概要):

・原子炉材料概論:燃料被覆管材料の開発、核融合材料の開発

・原子炉材料研究の最近のトピックス:原子炉圧力容器鋼の照射脆化機構の研究 応力腐食割れ機構の研究

○参加費(テキスト代込み):

部会員	10,000円、	非部会員	(学会員)	15,000円
非学会員	20,000円、	学生会員	無料	

○宿泊と昼食:

宿泊(2食付)については、約6,500円/1泊となります。 2日目(8月1日)の昼食は、弁当となりますが、参加費に含まれています。 1日目及び3日目の昼食については各自で対応お願いします。

○申し込み要領

- ・申し込み締め切り:平成20年6月30日(月)
 <u>なお、収容人員の関係で先着45名にて締め切らせていただきます。</u>
 ・申し込み、問い合わせ先:
 - 材料部会・第7回夏期セミナー事務局 日本原子力研究開発機構 原子力基礎工学研究部門 加治 芳行 TEL:029-282-5386 FAX:029-282-6122

E-mail : kaji.yoshiyuki@jaea.go.jp

・申し込み方法:材料部会ホームページをご参照ください。

○交通手段

交通手段及び付近の案内図は下記の通りです。









箱根・ヴィラ ジャボーネ (原子力機構保養研修所)

- V. 2008年以降の行事と行事予定
 - (1) 材料部会平成 20 年度夏期セミナー
 2008 年 7 月 31 日~8 月 2 日 箱根・ヴィラ ジャボーネ (JAEA保養研 修所)
 - (2) 原子力学会 秋の大会
 2008 年 9 月 4 日 (木) ~6 日 (土) 高知工科大学
 - (3) 24th Symposium on Effects of Radiation on Nuclear Materials and the Nuclear Fuel Cycle
 2009 年 6 日 24 日 (水) 2 26 日 (士) Sheratan Denver Hatal

2008 年 6 月 24 日 (火) ~26 日 (木) Sheraton Denver Hotel

- (4) 第16回環太平洋原子力会議・青森大会(PBNC2008)
 2008年10月13日(月)~18日(土) 青森市文化会館
 http://www.pbnc2008.org/
- (5) Water Reactor Fuel Performance Meeting 2008 (WRFPM 2008) 2008年10月19日(日)~22日(水) Renaissance Seoul Hotel http://www.wrfpm2008.org/index.html
- (6) The Fourth International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM-2008)

2008 年 10 月 27 日 (月) ~31 日 (金) Tallahassee-Leon County Civic Center http://www.mmm2008.org/

- (7) 2009 International Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP2009)
 2009 年 5 月 10 日 (日) ~14 日 (木) 東京
- (8) 14th International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM-14)
 2009年9月6日(日)~12日(土) 札幌

VI. 記事寄稿のお願い

材料部会では、部会員の皆様からの部会報へのご寄稿を歓迎いたします。原子力関 連材料についての最近の研究や研究機関・施設・研究会の紹介、会議の案内や報告、 国際交流など、学会誌よりも気軽に話題提供してみたいという方は、ぜひお願い いたします。以下の電子メールアドレスあるいはお近くの運営委員会委員までご連絡 下さい。

材料部会運営委員会メールアドレス: z-unei@nuclear.jp

VII. 運営委員会委員名簿(2008年4月~)

以下のメンバーが2008年4月より材料部会の運営を担当します。部会運営に関する ご意見、ご要望がありましたら、お気軽に声をおかけください。また、電子メール でも受け付けております。よろしくお願いいたします。

部会長		木村晃彦	(京都大堂ràuギー理工学研究所)
	•		l	水酮八子)
副部会長	:	鈴木雅秀	(日本原子力研究開発機構)
財務小委員長	:	藤井克彦	((株)原子力安全システム研究所)
編集小委員長	:	岩井岳夫	(東京大学大学院工学系研究科)
編集小委員会委員	:	鹿野文寿	((株)東芝)
広報小委員長	:	垣内一雄	(原子燃料工業(株))
広報小委員会委員	:	橋本直幸	(北海道大学大学院工学研究科)
国内学術小委員長	:	加治芳行	(日本原子力研究開発機構)
国内学術小委員会委員	:	安田和弘	(九州大学工学研究院)
国際学術小委員長	:	佐藤 学	(東北大学大学院工学研究科)
国際学術小委員会委員	:	園田 健	(電力中央研究所)
庶務幹事	:	渡邉英雄	(九州大学応用力学研究所)
庶務幹事	:	山下真一郎	(日本原子力研究開発機構)
庶務幹事	:	黒崎 健	(大阪大学大学院工学研究科)
庶務幹事	:	鳥丸忠彦	(日本核燃料開発(株))

VIII. 編集後記

年2回の出版スケジュールをできるだけ崩さない、という新たな(?)編集方針にしたがって、既存の素材を有効利用して効率的な出版を図りましたが、3月予定の出版が延びてしまい申し訳ありません。ただその分、夏の学校の案内を掲載することができました。今年は会場の都合上定員がありますので、お早めにお申込ください。(岩井 記)