The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	核融合炉材料中におけるヘリウムの化学状態に関する研究
Author(s)	福島, 公親
Citation	大阪大学, 1987, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/35437
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

【92】

氏名・(本籍)	福島公親（ふくしまきみちか）
学位の種類	工学博士
学位記番号	第 7528 号
学位授与の日付	昭和62年2月3日
学位授与の要件	学位規則第5条第2項該当
学位論文題目	**核融合炉材料中におけるヘリウムの化学状態に関する研究**
論文審査委員	(主査) 教授 井本 正介
	教授 三宅 正宣　教授 岡田 東一

論文内容の要旨

本論文は，核融合炉材料中におけるヘリウムの電子状態や化学状態に関する理論的研究をまとめたもので，7章から構成されている。

第1章は序論で，本研究の意義と目的とを述べている。

第2章では，材料の中性子照射で生成したヘリウムの材料強度に及ぼす影響及びその研究の現状を概括している。まず，ヘリウムがキャビティを形成しこれが脆化やスエリングを引き起こす過程について述べ，次にこれらの過程を取扱う現象論的モデルの問題点を明らかにし，第一原理に基づくミクロな解析の必要性について論述している。

第3章では，ヘリウムの電子状態及び化学結合状態を調べるために本研究で用いたＤＶ－Ｘα分子軌道法について説明している。

第4章では，面心立方格子構造を持つ金属ニッケルの格子間に存在するヘリウムの化学状態について調べ，ヘリウム原子は正四面体位置ではヘリウム－ニッケル間に弱い相互作用を持ち，正八面体位置では弱い斥力を受けること，またヘリウムが両方の位置を同時に占有した場合には正八面体位置のヘリウムに働く斥力は強くなることを見出している。

第5章では，金属ニッケルの空格子点を占有したヘリウムの化学状態を解析し，空格子点にトラップされた置換型ヘリウム原子は自由原子状態で安定であるが，空格子点にHe_2が存在する場合はヘリウム－ニッケル間にやや弱い相互作用があり，He_6やHe_8ではヘリウム－ニッケル間に強い斥力が働くこと，また格子間に存在する啞鈴型He_2は置換型ヘリウムのように安定ではないことを示している。

第6章では，圧縮されたヘリウムクラスターの電子状態を解析し，原子間距離の変化に伴うバンドギャ

ップエネルギーの変化の計算値は電子エネルギー損失分光の実験値とよく一致すること，またHeクラスターの圧力の計算値は距離の小さい所でバンド計算の結果とよく一致するとの結論を得ている。

第7章では，本研究の総括を行い，材料の格子間や空格子点に存在するヘリウムの電子状態を調べることによりヘリウムの化学状態や圧力等の基本的性質を明かにできると結論している。

論文の審査結果の要旨

本論文は，核融合炉中に照射注入されたヘリウムと格子欠陥との相互作用を解明するため，Ni原子とHe原子とから成る各種のクラスターについて分子軌道計算を行った結果をまとめたものである。

分子軌道計算の方法としてはＤＶ－Ｘα法を用い，先ず格子間位置にヘリウムが存在する場合について計算を行った結果，He－1sとNi－spdとはフェルミ準位の下に結合軌道と反結合軌道とをつくり，格子間Heとまわりの Niとの相互作用は全体として弱いものであることを示し，また正四面体位置と正八面体位置とでは後者の方により強く斥力が働くことを見出している。

次に金属Niの空格子点を一個または数個のHe原子が占有する場合について同様の計算を行い，一個の置換型He原子はまわりのNi原子から斥力を受けず，むしろ自由原子に近い安定状態にあること，二個のHe原子が一空格子点を占めた場合には格子間にある場合と同様の弱い相互作用を示し，六個以上ではHe－Ni間に強い斥力が働くことを明らかにしている。そして，さらに多数のHe原子が狭い空間に圧縮された場合についても計算を行い，得られた結果が実験値や他の計算方法による結果とよく一致することを示している。

以上のように，本論文はクラスターモデルを用いた分子軌道計算が，核融合炉材料中に注入されたヘリウムの挙動を解明するために役立つ種々の知見を与え，これが有効な手段であることを示したもので，原子力工学並びに材料科学に寄与するところが大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。