

24Dp09 TiおよびZrの水素化過程の速度論モデリング Kinetic Modelling of the Hydrogenation Processes of Ti and Zr

濱本禎樹, 下畠佑太, 打越武, 西建吾, 山崎隼, ○田辺克明
Yoshiki Hamamoto, Yuta Shimohata, Takeru Uchikoshi, Kengo Nishi,
Jun Yamazaki, ○Katsuaki Tanabe

京大工 / Kyoto Univ.

緒言

Ti、Zr、およびそれらを含む合金や水素化物は、核融合炉材料、トリチウム輸送、中性子遮蔽など多数の用途を有する[1]。これらの設計や制御のために、また、運用における水素脆化防止の観点からも、水素化の機構の理解とシミュレータの構築は重要である。本研究では、Ti、Zrの水素吸蔵および放出過程における、表面吸脱着、subsurface 輸送、バルク内拡散を含む包括的な速度論モデルの構築を試みた。

計算方法

表面吸脱着流束、表面-バルク間流束、バルク内拡散流束を表す主要な式を含む一連の速度式群[2]から、金属中のH濃度分布の経時変化を計算した。当日詳細を示す。

結果

水素吸蔵・放出曲線の計算値は、複数の温度における一連の実験値を単一の速度パラメータの組により良好に再現し、モデルの妥当性が示された(図1)。また、実際の吸収速度とバルク内拡散を無視した仮想的な速度との比で定義した有効係数により、金属体の形状、サイズ、温度、水素圧力といった条件に応じた水素輸送の律速過程の遷移を系統的に示した。さらに、本モデルの適用性を示すケーススタディとして、軽水炉におけるジルカロイ燃料被覆管への水素の浸透・蓄積のシミュレーションから、水素脆化を防ぐ必要被覆厚みの算出を行った。また、核融合炉の第一壁におけるTi被覆材を想定した水素同位体の吸放出についてもシミュレーション事例を示す[4]。本モデルにより、広範な材料構造や運転条件に適用でき、高精度かつ簡便な金属の水素化のシミュレーションが可能となることが期待される。

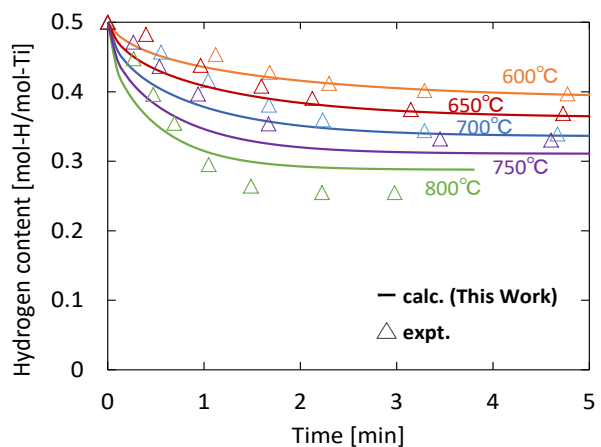
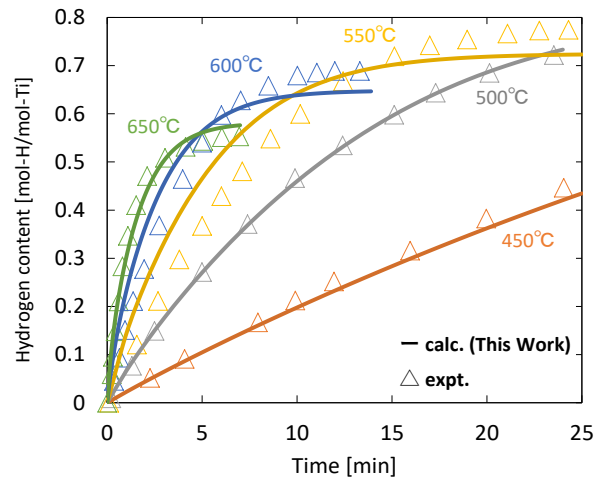


図1. Tiの水素吸蔵(上)・放出(下)曲線の計算値(線)と実験値[3](点)

[1] T. Tanaka, H. Muta, Y. Hishinuma, H. Tamura, T. Muroga, A. Sagara, *Fusion Sci. Technol.* **68**, 705 (2015).

[2] Y. Hamamoto, T. Uchikoshi, K. Tanabe, *Nucl. Mater. Energy* **23**, 100751 (2020).

[3] Y. Hirooka, M. Miyake, T. Sano, *J. Nucl. Mater.* **96**, 227 (1981).

[4] Y. Shimohata, Y. Hamamoto, K. Nishi, K. Tanabe, *Fusion Eng. Des.* **173**, 112833 (2021).