

CaF₂の基礎特性の評価

(1) 実験的アプローチ

Evaluation of fundamental properties of CaF₂

(1) Experimental approach

*加藤正人¹, 土持亮太¹, 松本卓^{1,2}, Joshua T. White², Kenneth J. McClellan²

¹原子力機構, ²ロスアラモス国立研究所

室温から融点近傍までの CaF₂の基礎物性について実験的に評価した。特に CaF₂の高温比熱に着目し、フレンケル欠陥の生成及びブレディック転移の影響について評価した。得られた成果は、計算科学による評価の検証用データとして用いた。

キーワード：蛍石構造，熱物性，比熱

1. 緒言：前回の本年会において CaF₂の基礎物性の測定結果を報告した[1]。本報告では、米国ロスアラモス国立研究所(LANL)で測定した単結晶の熱物性とのデータの比較・評価を行い、CaF₂の高温比熱のメカニズムを評価することを目的とした。

2. 実験方法：CaF₂の単結晶について、ディラトメーターによる熱膨張測定、DSC による比熱測定、レーザフラッシュによる熱拡散率測定を実施した。

3. 結果及び考察：図1に DSC で取得した比熱のデータを示す。原子力機構(JAEA)で測定したデータは、多結晶体の測定結果であり、繰り返し3回測定を行った[1]。3回目の測定は室温以下の低温のデータである。LANL では単結晶の測定を行ったが繰り返し測定し、ほぼ一致した結果を得た。多結晶の測定結果は、繰り返し測定することによって単結晶の測定結果に近づいているように見える。図中には音速及び熱膨張係数から求めた(C_v+C_d)とフレンケル欠陥の生成を仮定して評価した(C_v+C_d+C_f)を示す。(C_v+C_d+C_f)の計算結果は約1200Kまでは実験値と良い一致を示している。また、約1200K以上の急激な比熱上昇は、ブレディック転移と考えられる。図に示すように、測定結果と、計算結果は約1200K以下の温度で良く一致することを確認した。

3. まとめ：CaF₂の基礎特性について、日米の装置を用いて測定を行い、高温領域の比熱挙動において、フレンケル欠陥生成とブレディック転移と考えられる比熱の上昇を確認した。得られた結果は、計算科学の検証用のデータとして用い、アクチニド酸化物の高温の熱特性評価への適用を進める。

参考文献

[1] 土持、加藤ら、原子力学会 2019 年春の年会予稿集 3M06

*Masato Kato¹, Ryota Tsuchimochi¹, Taku Matsumoto^{1,2}, Joshua T. White² and Kenneth J. McClellan²

¹Japan Atomic Energy Agency, ²Los Alamos National Laboratory

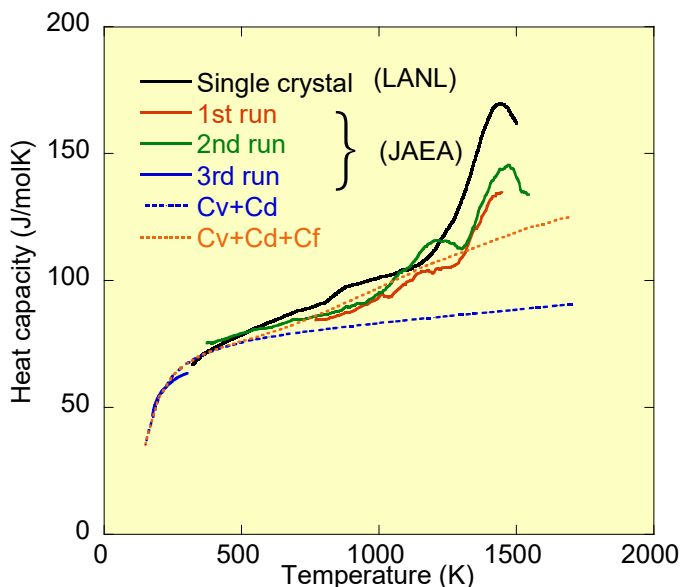


図1 DSC による比熱の測定結果