

マテリアルズ・インフォマティクスによる高熱伝導率を持つ新規核燃料材料の開発

Development of novel nuclear fuel materials with high thermal conductivity by materials informatics

*宮脇 侑司¹, 大石 佑治¹, 牟田 浩明¹, 熊谷 将也^{2,3}, 黒崎 健³

¹大阪大学, ²さくらインターネット, ³京都大学

機械学習によって熱伝導率が高いと予測されたウラン化合物の中から UFe_3B_2 を選択し、アーク溶解と放電プラズマ焼結により高密度単相試料を作製した。熱伝導率の温度依存性をレーザーフラッシュ法により評価し、機械学習の予測結果と比較した。

キーワード：マテリアルズ・インフォマティクス, 核燃料物質, ウラン化合物, UFe_3B_2 , 高熱伝導率

1. 緒言

現在、高融点や安定性などの長所を持つ二酸化ウラン (UO_2) 燃料が広く用いられているが、 UO_2 には熱伝導率が低いという短所がある。熱伝導率は原子炉の安全性に関わる重要な特性の一つであるため、高熱伝導率かつ他の要件を満たす新規核燃料材料の開発が望まれる。近年、材料科学と情報科学を融合させたマテリアルズ・インフォマティクスが注目されており、原子力分野でも京都大学のグループが機械学習を用いてウラン化合物の熱伝導率を予測した。その結果、 UFe_3B_2 などのウラン化合物が UO_2 よりも高い熱伝導率を持つと予測された。本研究では UFe_3B_2 を作製、熱伝導率を評価して機械学習による予測値と比較を行った。

2. 実験方法と結果

UFe_3B_2 の組成となるように秤量し、アーク溶解により塊とした。その後、均一化のため試料を粉碎し、放電プラズマ焼結を行い高密度バルク試料とした。

X 線回折測定により主相として UFe_3B_2 、不純物相としてわずかに UO_2 が確認された。また走査電子顕微鏡およびエネルギー分散型 X 線分析により U、Fe、B が均一に分布していることが確認された。これらの結果からほぼ単相の UFe_3B_2 試料の作製に成功したと言える。

図 1 にレーザーフラッシュ法による熱伝導率評価結果と機械学習による予測値を示す。評価した熱伝導率は昇温過程と降温過程で差が見られ、ヒステリシス挙動を示した。この挙動には熱膨張の異方性によるマイクロクラックの発生と回復が関係していると考えられる。また評価した熱伝導率は予測値とほぼ一致し、温度依存性も一致したことから、機械学習によって予測された UFe_3B_2 の熱伝導率は妥当と言える。

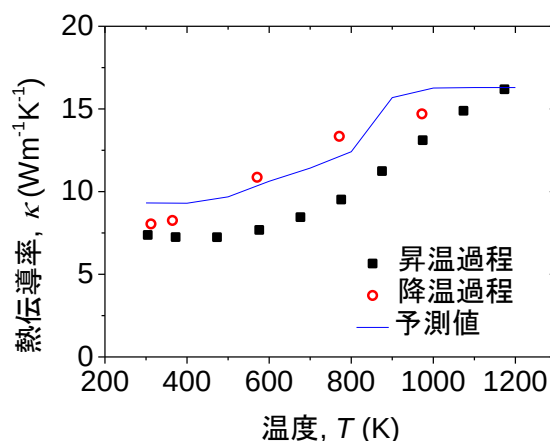


図 1 UFe_3B_2 の熱伝導率と機械学習によって予測された熱伝導率の温度依存性

3. 結論

本研究ではほぼ単相の UFe_3B_2 試料を作製した。評価した熱伝導率とその温度依存性は機械学習による予測とほぼ一致した。このことから UFe_3B_2 に関する予測値は妥当であると言える。この結果は新規核燃料材料の開発における機械学習の有用性を示唆するものである。

本研究は、文部科学省原子力システム研究開発事業新発想型「マテリアルズ・インフォマティクスによる核燃料開発」の一部である。

*Yuji Miyawaki¹, Yuji Ohishi¹, Hiroaki Muta¹, Masaya Kumagai^{2,3} and Ken Kurosaki³

¹Osaka Univ., ²SAKURA internet, ³Kyoto Univ.