

人工知能（AI）技術を取り入れた核燃料開発研究の加速 (7) 放射光 XAFS による ZrO_2 高温融体の構造及び電子状態解明

Acceleration of nuclear fuel development research Incorporating artificial intelligence (AI) technology
(7) Structural and electronic properties of high-temperature melts of ZrO_2 by synchrotron radiation based XAFS

*矢板 毅¹, 小林 徹¹, 谷田 肇¹, 小無 健司², 有田 裕二³, 新納 圭亮³, 渡辺 博道⁴, 森本 恭一¹
森 一樹⁵, 加藤 信彦⁵

¹JAEA, ²東北大学, ³福井大学, ⁴産総研, ⁵CTC

3000K を超える高温での燃料挙動解明を目的とし、ジルコニウム酸化物の高温における構造及び電子状態解明を放射光 XAFS 法により実施した。この測定をもとに大気圧力下での温度変化による ZrO_2 の相転移、これに伴う構造及び電子状態の変化について紹介する。

キーワード：高温融体, XAFS, ジルコニウム酸化物, 構造, 電子状態

1. 緒言

ZrO_2 は単斜晶、正方晶、立方晶の3つの多形態を持つことが一般に認められている。この理解によれば、温度の上昇に伴って対応する固溶体が、このスキームに沿って多くの相図が構築されるはずである。しかしながら、よく知られた正方晶の第二層は3つの結晶系から変化する図には当てはまらず、準安定相として見なさざるを得ないとの報告もある[1]。1960年代初頭ごろから X 線あるいは中性子線回折などによる構造データに関する報告があるが、殆どが融点とされている 2988K 以下の測定であり、融点を超える高温融体の構造解明は非常に重要であると考えている。本研究は、タンゲステン基板上における通電加熱により 3000K を超える温度に試料を加熱し、XAFS 測定により構造及び電子状態解析を実施した結果について報告する。

2. 実験概要

測定試料及び加熱炉に関しては、前講演の通り。実験は、SPring-8 BL22XU ビームラインで EXAFS 領域の測定を約 10s 程度で取得可能な QXAFS システムによって測定した。

3. 結論及び考察

図1に通電量が 515W (3000K 超) までの Zr-K 吸収端による XANES スペクトルを示す。1s-4p による電子励起では、温度変化とともに電子状態の変化が読み取れる。

参考文献

[1] E. R. Andrievskaya, 'Phase equilibria in the refractory oxide systems of zirconia, hafnia and yttria with rare-earth oxides' *J. Eur. Ceram. Soc.* **28**, 2363 (2008).

*Tsuyoshi Yaita¹, Tohru Kobayashi¹, Hajime Tanida¹, Kenji Konashi², Yuji Arita³, Keisuke Niino³, Hiromichi Watanabe⁴, Kyoichi Morimoto¹, Kazuki Mori⁵, Nobuhiko Kato⁵

¹JAEA, ²Tohoku Univ., ³Fukui Univ., ⁴AIST, ⁵CTC

本研究発表は文部科学省 原子力システム研究開発事業「人工知能(AI)技術を取り入れた核燃料開発研究の加速」の助成を受けたものです。

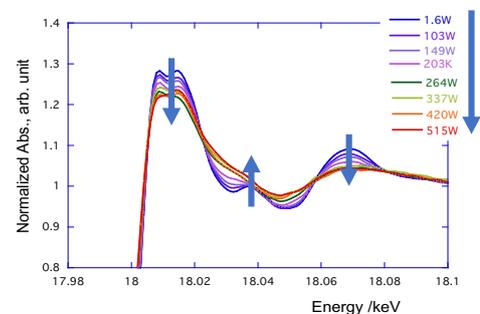


図1 通電量 (W) に対する XANES スペクトルの変化 *矢印は、温度の上昇方向を示す。