

液体ブランケット用セラミック被覆材の焼成過程
及び照射損傷による発光特性変化と電子状態計算

Changes in luminescence properties of ceramic coating materials for liquid blanket by fabrication process and radiation damages and electronic structure calculation.

森本純毅¹, 田中照也^{1,2}, 加藤太治^{1,2}, 坂上裕之², 吉野正人³, 室賀健夫^{1,2}

Junki Morimoto¹, Teruya Tanaka², Daiji Kato², Hiroyuki Sakaue², Masahito Yoshino³, Takeo Muroga²

¹総研大、²核融合研、³名古屋大

¹SOKENDAI, ²NIFS, ³Nagoya Univ.

1、背景と目的

液体ブランケットでは、水素透過低減、電気絶縁、耐食などの機能を持つセラミック被覆が検討されているが、照射損傷により材料の特性が変化する可能性がある。この特性変化の機構を電子状態の理論計算に基づいて解明することを目指している。今回は、被覆材料の電子状態と密接に関連がある光学特性の変化への適用を試みている。MOD(Metal Organic Decomposition) 法により異なる温度で焼成した被覆試料、及びイオンビーム照射した市販バルク試料を対象に、電子ビーム誘起発光スペクトル(カソードルミネッセンス)の変化を測定した。結晶中の欠陥や構造変化を模擬した電子状態計算との比較、考察を進めている。

2、実験方法・理論計算方法

現在、ブランケット用セラミック被覆候補材料である Y_2O_3 、 TiO_2 、を対象に研究を進めている。これらの被覆成膜用の MOD 溶液をステンレス基板上にディップコーティングにより塗布し、450-900°Cで焼成することで、厚み 0.5 μm 程度の被覆試料を作製した。また、比較用に、直径 10 mm、厚み 1 mm の市販バルク試料を用意した。 Y_2O_3 バルク試料に対しては、2 MeV He^{2+} ビームを照射し、表面近傍にて ~ 0.1 dpa (はじき出しエネルギーを 25 eV とした SRIM コードの結果)の損傷を与えた。各試料に対して、電子ビーム誘起発光スペクトルを測定した。測定した発光ピークの起源を明らかにするために、本研究では、The General Atomic and Molecular Electronic Structure

System (GAMESS)を使用した電子状態計算の適用を試みている。分子軌道に基づく CIS (一電子励起配置間相互作用) 法による励起状態への遷移エネルギーと振動子強度(遷移の起こりやすさ)を計算から求めた。

3、結果

Y_2O_3 の MOD および非照射のバルク試料では、焼成温度の低下により、350 nm 付近の発光ピークの強度の減少や、発光ピークの長波長側へのシフトが見られた。焼成温度の低い試料ほど結晶度が悪く、発光スペクトルに影響を及ぼしたことが考えられる。理論計算では、酸素欠陥の導入により、500 nm 以上で遷移可能な励起状態の割合が増える。このことから、長波長側へのピークのシフトは酸素欠陥に起因する可能性がある。

一方、 Y_2O_3 バルク試料に対するイオンビーム照射では、焼成温度の効果とは異なる発光スペクトル変化を見せることがわかり、現在、考えられる結晶変化の検討とそれを模擬したクラスターモデルに対する準位計算を進めている。

また、 TiO_2 試料では、焼成温度に応じて 520 nm、610 nm、840 nm 付近にピークが見られた。XRD の結果より、450°C、650°C 焼成の試料は Anatase 型、900°C 焼成の試料、バルク試料は Rutile 型であることが考えられ、これらの構造の違いにより、発光スペクトルが変化したと考えられる。この結晶構造が異なる場合の発光ピーク波長との相関についても、各構造を模擬した電子状態計算と発光に寄与する励起過程の選択を含む考察を進めている。

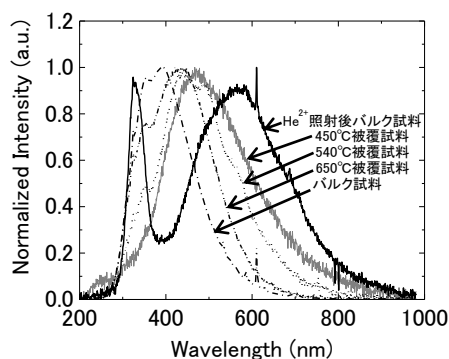


図 1 Y_2O_3 の電子ビーム誘起発光スペクトル

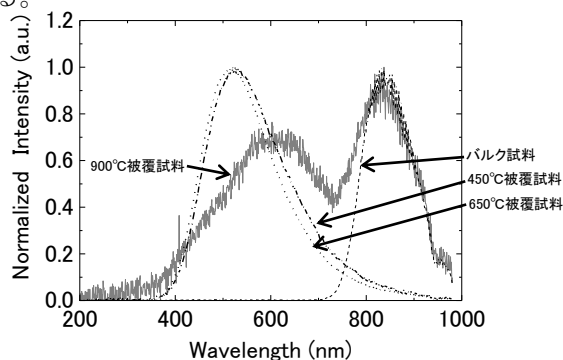


図 2 TiO_2 の電子ビーム誘起発光スペクトル