

第5, 6族元素に対するヘリウム誘起ナノ構造の研究 Study of helium induced nanostructure for group 5 and 6 elements

大森晃平¹, 伊藤篤史^{2,3}, 山下直人¹, 志賀紘輝¹, 伊庭野健造¹, Lee Heun Tae¹, 上田良夫¹
K. Omori¹, A. M. Ito^{2,3}, K. Shiga¹, N. Yamashita¹, K. Imano¹, H.T. Lee¹, Y. Ueda¹

1大阪大学工学研究科

2核融合科学研究所ヘリカル研究部

3総合研究大学院大学物理化学研究科

¹Graduate School of Engineering, Osaka University.

²Department of Helical Plasma Research, National Institute for Fusion Science.

³Department of Fusion Science, The Graduate University for Advanced Studies.

1. 研究背景・目的

タングステンにヘリウムイオンを照射すると、繊維状の構造が形成される。そのような構造を持つようになると高い光吸収率を示すことが知られており、またその表面積の増大という特徴と合わせて様々な応用が期待される。最近ではヘリウム誘起ナノ構造が形成されたタングステンを酸化させた試料を用いて、水分解が促進されることが報告されている[1]。

繊維状構造の形成過程は衝突粒子による弾き出し過程や弾き出された粒子の再堆積過程とは異なることが実験的にわかっており、また理論的な視点でタングステン中のヘリウムの凝集、バブル形成過程が第一原理計算や分子動力学法を用いて調べられている。しかしながら、その詳細な形成メカニズムは不明である。最近の研究では、タングステン以外にもタンタルやプラチナなどで異なる構造が形成されることが確認されている。

本研究では、第5族であるニオブ、タンタルと第6族であるモリブデン、タングステンにヘリウムプラズマを照射し、形成される構造を比較した。また、密度汎関数理論(DFT)に基づく第一原理計算を用いてヘリウム凝集エネルギーを調べその差を比較した。続いてNielsen-Martin の手法[2]を用いてDFT計算結果から応力テンソルを求め、構造形成に与えるその影響を評価した。

2. 実験・計算方法

ECR プラズマ発生装置を用いてヘリウムプラズマを発生させ、試料に照射した。照射条件として、全ての金属でフラックス $\sim 10^{21} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$ 、フルエンス $\sim 10^{25} \text{ m}^{-2}$ 、試料表面温度 T_s は融点温度 T_m で規格化した値 T_s/T_m で ~ 0.3 となるように

した。照射後の試料表面、及び断面を FE-SEM を用いて観察し、比較を行った。

ヘリウム凝集エネルギーは、OpenMX コードを用いて計算した。各元素で bcc 結晶内の 1 格子間にヘリウム原子を n 個詰め、そのときの系全体のエネルギーを計算し、 $n-1$ 個と 1 個に分かれているときのエネルギーと比較し、分かれているときと凝集しているときでどちらがより安定か評価した。また、応力テンソルも Nielsen-Martin の手法を用いて OpenMX コードで計算された。

3. 実験・計算結果

結果として、ヘリウム誘起構造とヘリウム凝集傾向の族毎の類似性が見られることがわかった。照射結果から、第5族では試料表面に数十から数百 nm の大きさのホールが形成され、第6族では数 nm の太さの繊維状の構造が形成されることがわかった。計算結果から、全ての金属で常にヘリウムは凝集したほうが安定であるが、第5族と比べ第6族ではより凝集が起きやすいことが確認された。

これらは、ヘリウムの凝集のしやすさがヘリウム誘起構造の形成メカニズムを理解するうえで重要な役割を果たしている可能性を示唆している。

References

- [1] M de Respinis, G De Temmerman, I Tanyeli, MCM van de Sanden, R. P Doerner and M. J Baldwin, ACS Applied Materials & Interfaces 5, 7621 (2013).
- [2] O. H. Nielsen and Richard M. Martin, Phys. Rev. B 32, 3780 (1985).