

酸化物中のエルビウムイオン発光の結晶場計算と照射欠陥特性評価への応用

Crystal-field calculations of erbium ion spectra in oxide and its applications to characterization of radiation damages

加藤太治¹⁾、ガイガラス ゲディミナス^{1,2)}、坂上裕之¹⁾、田中照也¹⁾、村上 泉¹⁾、
室賀健夫¹⁾、相良明男¹⁾
D. Kato¹⁾, G. Gaigalas^{1,2)}, H.A. Sakaue¹⁾, T. Tanaka¹⁾, I. Murakami¹⁾, T. Muroga¹⁾,
and A. Sagara¹⁾

1)核融合研、2)ビルニュス大学
1) NIFS, 2) Vilnius University

本研究では、電気絶縁、トリチウム増殖・透過防止などの機能を担い、ブランケットシステムを成立させるために必要とされている酸化エルビウム被覆について、光学遷移を示す酸化物中のエルビウムイオン Er^{3+} からの発光スペクトルの詳細解析に取り組んでいる。図1に示すように、イオンビームや電子線の照射によって、酸化エルビウムの焼結体とコーティング試料からの蛍光が観測される[1,2]。コーティング試料については、その結晶性に依存して発光スペクトルが変化している様子が分かる。また、図2は、 $^4\text{F}_{9/2}$ と $^4\text{S}_{3/2}$ の発光線の相対強度比が、アルゴンイオン Ar^{+} の

照射量に伴い変化している様子を示している。この変化はアルゴンイオン照射により結晶中に蓄積される照射欠陥の影響と考えられている。

酸化エルビウムからの蛍光は、結晶中の Er^{3+} イオンの発光によるものであり、照射欠陥の蓄積によって発光体周辺の結晶場（リガンド場[3]）が変化し、それが発光スペクトルに影響を与えると考えられる。この結晶場の影響を理解することが、発光スペクトルの変化から欠陥のミクロ構造を研究するうえで最も重要である。そこで、我々は、相対論的原子過程コードgrasp2K[4]を発展させて、実験の蛍光スペクトルを与えるエルビウムイオン周辺の結晶場の理論計算に取り組んでいるので、それについて報告する。

参考文献

- [1] T. Tanaka et al., J. Nucl. Mater. 417 (2011) 794.
- [2] D. Kato et al., Plasma Fusion Res. 7 (2012) 2405043.
- [3] D.J. Newman, Adv. Phys. 20 (1971) 197.
- [4] P. Jönsson, G. Gaigalas, et al., Comput. Phys. Commun. 184 (2013) 2197.

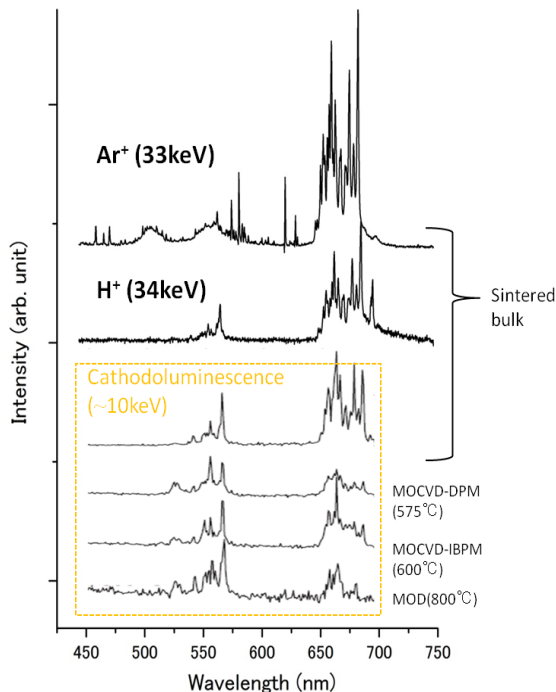


図 1 イオンビームと電子線により誘起される酸化エルビウム試料からの発光スペクトル。図の波長領域には、 $^4\text{F}_{9/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ (640~690nm) ならびに $^4\text{S}_{3/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ (530~580nm) の多重項間遷移が観測される。MOCVD-DPM, MOCVD-IBPM は有機金属気相成長法, MOD は有機金属分解により、それぞれ作成された酸化エルビウム被膜試料。

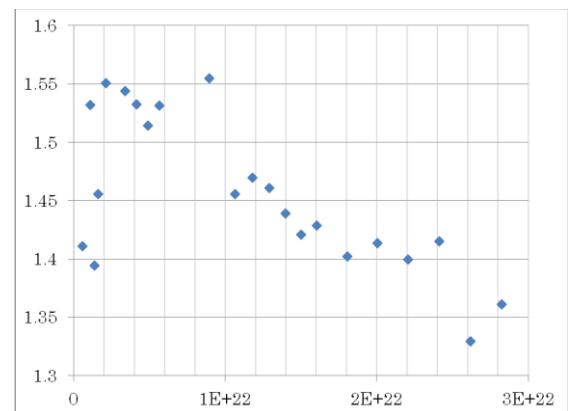


図2 酸化エルビウムの焼結体試料にアルゴン Ar^{+} イオン(35 keV)を照射して観測される684 nm ($^4\text{F}_{9/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$)と564 nm ($^4\text{S}_{3/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$)付近の発光線の強度比。横軸は単位面積当たりのイオン照射量 (m^{-2})。