

He⁺イオン照射されたパイロクロア型酸化物の He 捕捉

He Retention of He⁺ Ion-irradiated Pyrochlore-type Oxides

*土屋 文¹, 山本 琢也², 大澤 一人³, G.R. Odette²

¹名城大学, ²カリフォルニア大学, ³九州大学

反跳粒子検出(ERD)法および第一原理計算を用いて、He⁺イオン照射された Y₂Ti₂O₇ 中の He の捕捉について調べた。その結果、He は Y₂Ti₂O₇ 中に形成された O 空孔欠陥を占有することがわかった。

キーワード： パイロクロア型酸化物、第一原理計算、ヘリウム、格子間位置、酸素空孔

1. 緒言

フェライト鋼(α-Fe)にナノサイズの微細な酸化物粒子(Y₂Ti₂O₇)を分散させた補強材料(NFAs)が核融合炉の構造材の候補の一つとして挙げられている。転位の運動の抑制が材料中に添加されたナノ微細 Y₂Ti₂O₇ 粒子によって促進され、材料強度が高まることが期待される。さらに、分散粒子がプラズマ粒子として照射される He、H 等を捕捉し、ボイドスウェリング(膨張)や粒界脆化などを抑えることが期待される。本研究では、反跳粒子検出(ERD)法を用いて、He⁺イオン照射された Y₂Ti₂O₇ 中の He 濃度を測定し、He が Y₂Ti₂O₇ 中に捕捉されることを確認するとともに、第一原理計算プログラム(VASP)を用いて、Y₂Ti₂O₇ およびα-Fe 中の四面体、八面体型格子間、酸素(O)および鉄(Fe)の空孔に捕獲された He による欠陥形成エネルギーを求め、He⁺イオン照射された NFAs 中に捕獲された He の最も安定な占有位置を決定することを目的とした。

2. 実験

9 MeV の酸素イオン(O⁴⁺)ビームを用いた ERD 法によって、室温で 1×10¹⁸ ions/cm² の照射量まで照射された Y₂Ti₂O₇ 中の He 濃度を測定した。また、VASP 計算コードを用いて、He の 1 原子をパイロクロア型 Y₂Ti₂O₇ および体心立方晶のα-Fe 中の四面体および八面体型格子間、O および Fe 空孔に占有させた時の欠陥形成エネルギーを求めた。さらに、He が格子間および空孔に占有した時の状態密度および電子密度分布も調べた。

3. 結論

He⁺イオン照射された Y₂Ti₂O₇ の ERD スペクトルを図 1 に示す。約 0.1 at%以下の He が Y₂Ti₂O₇ 中に存在することがわかった。次に、Y₂Ti₂O₇ 中に捕捉された He による欠陥形成エネルギーを図 2 に示す。He はα-Fe 中よりも Y₂Ti₂O₇ 中の O 空孔を占有することがわかった。電子密度の変化により、捕獲された He は他の構成元素と斥力を生じて広い領域において安定であると考えられる。従って、NFAs は He 捕捉によるスウェリングが生じ難いことが予測される。

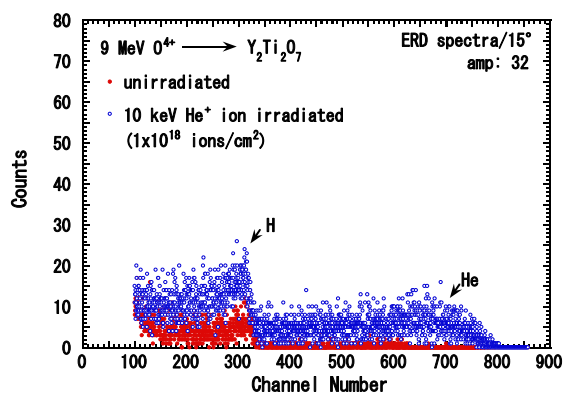


図 1 未照射および 10 keV He⁺イオン照射された Y₂Ti₂O₇ における ERD スペクトル。

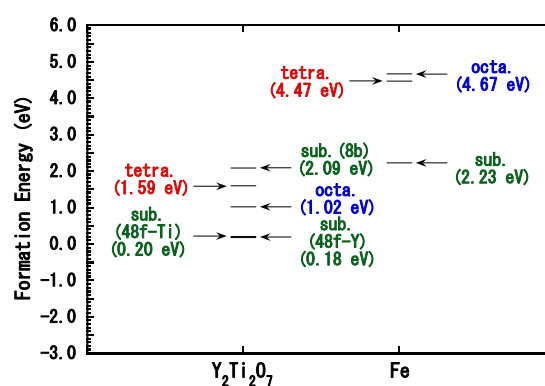


図 2 Y₂Ti₂O₇ およびα-Fe 中の四面体(tetra.)、八面体(octa.)型格子間および空孔(sub.)に占有した He による欠陥形成エネルギー。

*Bun Tsuchiya¹, Takuya Yamamoto², Kazuhito Ohsawa³ and George R. Odette²

¹Meijo Univ., ²Univ. of California, ³Kyushu Univ.