

軟 X 線発光分光法による中性子増倍材 Be_{13}Zr の価電子状態の解析

Valence electron analysis of Be_{13}Zr beryllide neutron multiplier using soft X-ray emission spectrometry.

*向井 啓祐¹, 笠田 竜太², 小西 哲之¹, 藪内 聖皓¹, 金 宰煥³, 中道 勝³

¹京都大学, ²東北大学, ³量研機構

ベリリウムに遷移金属を添加した Be_{12}M ($\text{M} = \text{Ti}, \text{V}$) や Be_{13}Zr は優れた耐酸化特性を示すことが知られており、先進中性子増倍材として開発が進められている。本研究では軟 X 線発光分光器 (SXES) を用い、 Be_{13}Zr 試料から生じる Be-K 線を測定し、価電子構造の変化を分析した。

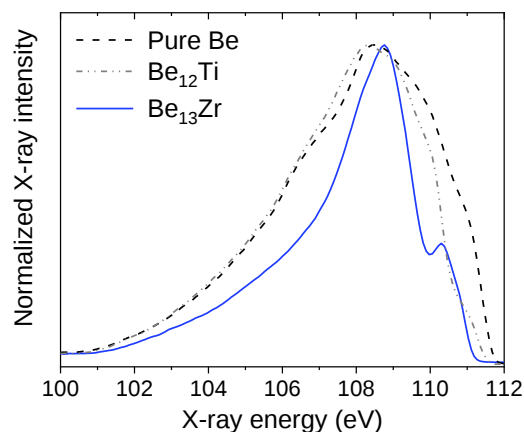
キーワード：核融合、ブランケット、中性子増倍材、ベリリウム、価電子構造

1. 緒言

固体増殖方式の核融合ブランケットではベリリウム化合物を用いて中性子を増倍し、トリチウムの自己燃料自給性を実現する。ベリリウムに遷移金属を添加したベリリウム金属間化合物（ベリライド）は優れた耐水蒸気酸化性を示すが、その化学的特性の発現理由は十分に理解されていない。本研究では、ベリライド金属間化合物の価電子構造と化学的特性の関係性の解明を目指し、 Be_{13}Zr の価電子構造解析を行った。

2. 研究手法

フィールドエミッション電子プローブマイクロアナライザ (JXA-8500F) に搭載された軟 X 線発光分光 (SXES) を用い、プラズマ焼結によって製造された Be_{13}Zr ベリライド試料の Be-K α スペクトルを分析した。また、密度汎関数法に基づく第一原理計算によってベリリウムの部分状態密度を計算し、実験軟 X 線スペクトルとの直接比較を行った。



3. 結果と考察

図 1 に Be, Be_{12}Ti , Be_{13}Zr 試料からの軟 X 線発光スペクトルを示す。 Be_{13}Zr 試料からの Be-K 線は 100 ~ 112 eV で測定され、スペクトル形状の変化やフェ

図 1 Be, Be_{12}Ti , Be_{13}Zr 試料からの Be-K 軟 X 線スペクトル

ルミ端付近の小ピークが観測された。第一原理計算では、 Be_{13}Zr 結晶中の Be 部分状態密度の計算結果より、Be-K α スペクトルをシミュレーションした。計算された軟 X 線スペクトルのメインピークは 97 eV であり、X 線エネルギーは実験結果よりも約 10% 過小評価された。また、計算スペクトルでは小ピークが 98.5 eV に発現し、Be 2p と Zr 3d の電子軌道の混成に起因することが示された。

*Keisuke Mukai¹, Ryuta Kasada,² Kiyohiro Yabuuchi¹, Satoshi Konishi¹, Jae-Hwan Kim³, Masaru Nakamichi³

¹Kyoto Univ., ²Tohoku Univ., ³QST