

軟 X 線発光分光法によるベリライドの価電子構造と化学状態の分析

Valence electron and chemical state analysis of Be_{12}M ($\text{M} = \text{Ti}$ and V) beryllides by soft X-ray emission spectroscopy

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

¹京都大学, ²東北大学, ³量研機構

固体増殖方式の核融合ブランケットでは中性子増倍材の $\text{Be}(n, 2n)$ 反応を利用して燃料トリチウムの自己供給性を実現する。本研究では、優れたエネルギー分解能を持つ軟 X 線発光分光法により、耐酸化性に優れた先進増殖材ベリライド Be_{12}M ($\text{M} = \text{Ti}, \text{V}$) の価電子構造の分析を行った。また、ベリライドや酸化物相から得られる $\text{Be-K}\alpha$ 情報をもとに構成した、水蒸気酸化ベリライド試料の元素・化学状態マッピング結果についても報告する。

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

先進中性子増倍として期待されるベリリウム金属化合物（ベリライド）は金属ベリリウムと比較して優れた高温耐酸化性を示すが、その電子構造は十分に理解されていない。そこで本研究では、軟 X 線発光分光法によってベリライドの電子状態の分析を行った。

2. 研究手法

プラズマ焼結されたベリライド試料 Be_{12}M ($\text{M} = \text{Ti}, \text{V}$) を対象に価電子構造の分析を行った。試料分析には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）を用いた。また、密度汎関数法に基づく第一原理計算によって Be の状態密度を計算し、実験結果との直接比較を行った。

3. 結果と考察

図 1 に BeO 試料と Be_{12}V 試料からの $\text{Be-K}\alpha$ スペクトルの測定結果及び計算結果を示す。 BeO 試料では、 Be_{12}V 試料と比較して $\text{Be-K}\alpha$ が低エネルギー側に約 4 eV のケミカルシフトが生じることを確認した。第一原理計算による $\text{Be-K}\alpha$ のエネルギーは 10% 程度過小評価されたが、ピークの形状や酸化物のケミカルシフトは実験結果とよい一致を示した。100.0~112.0, 100.0~106.5, 106.5~112.0 eV エネルギー範囲におけるピーク面積を P_A , P_B , P_C と定義し（図 1）、化学状態マッピングを実施した。本発表では、水蒸気酸化ベリライド試料の化学状態マッピングの結果を併せて報告する。

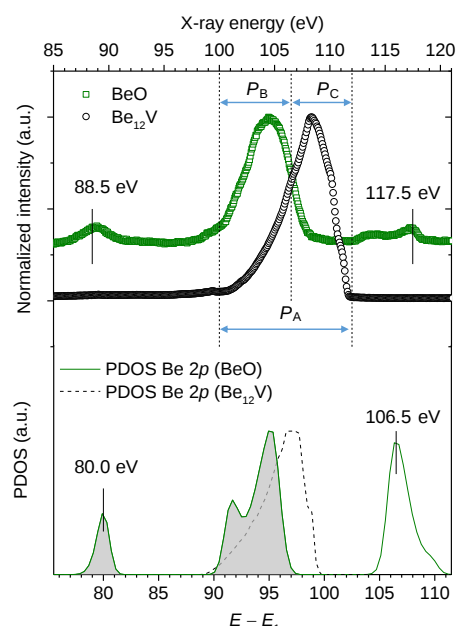


図 1 $\text{Be-K}\alpha$ スペクトルの実験結果（上）と第一原理計算結果（下）

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

¹Kyoto Univ., ²Tohoku Univ., ³QST