

高速重イオン照射誘起によるスピネル中カチオンの不規則挙動の X 線分光分析

X-ray Absorption Spectroscopy Study of Cationic Disorder in Spinel Structure Induced on Swift Heavy Ion Irradiations

*吉岡 聡¹, 山本 知一¹, 安田 和弘¹, 松村 晶², 小林 英一³, 奥平 幸司⁴, 石川 法人⁵

¹九州大学, ²久留米高等専門学校, ³九州シンクロトロン光研究センター, ⁴千葉大学,

⁵原子力研究機構

抄録：高速重イオン照射によるスピネル構造セラミックスのカチオンの不規則挙動を X 線吸収分光により観察した。実験スペクトル変化を詳細に理解するために、第一原理法による理論スペクトルを用いた。

キーワード：照射効果, スピネル, 不規則化, X 線吸収分光

1. 緒言

スピネル構造化合物には、放射線照射への高い耐性に関する研究報告が数多くある。この特性発現の要因の一つに、スピネル構造が有する 2 種のカチオンサイト間でのカチオン不規則化が挙げられる。高速重イオン照射によるスピネル材料の局所構造変化の理解にも、この不規則配列を定量的に評価することが不可欠である。そこで本研究では、高速重イオン照射誘起によるスピネル構造 MgAl_2O_4 の局所状態変化を X 線吸収分光 (XAFS) 法により観察した。さらに密度汎関数理論に基づく計算スペクトルから実験の解析を行った。

2. 研究方法

イオン照射実験は、原子力機構のタンデム加速器で行い、 MgAl_2O_4 多結晶体に 100 MeV Xe イオンを照射した。照射量は、 $3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ から $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ までとした。XAFS 測定は、高エネルギー加速器研究機構 Photon Factory の BL11A で行い、Mg K-edge 及び Al K-edge 吸収端微細構造 (XANES) を蛍光法により測定した。XANES 理論スペクトルは、FL-APW 法により算出した。

3. 結果

図 1 に非照射試料及びイオン照射した試料の Mg K-edge XANES スペクトルを示す。照射量の低い 3×10^{11} , $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 試料では、非照射試料と比べスペクトルに大きな変化が見られないものの、照射量の高い $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 試料のスペクトルには、特徴的なピーク (A~C) の強度比が変化し、さらにスペクトル全体が高エネルギー側にシフトしている。Al K-edge の測定でも高照射量試料でスペクトルに大きな変化が観察され、Mg K-edge の結果と良い対応をしている。

4. 結論

理論スペクトルによる解析から、これらの実験スペクトルの変化は Mg と Al のサイトの交換に起因することが明らかになった。

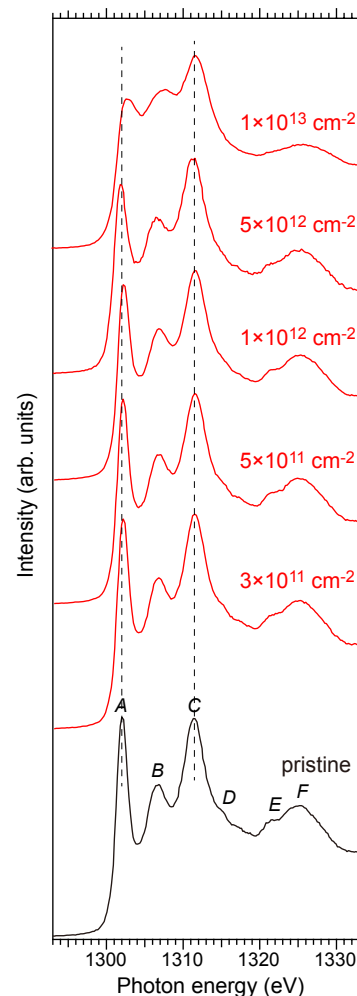


図 1. イオン照射した MgAl_2O_4 の Mg K-edge XANES スペクトル。

*Satoru Yoshioka¹, Tomokazu Yamamoto¹, Kazuhiro Yasuda¹, Syo Matsumura², Eiichi Kobayashi³, Koji Okudaira⁴
and Norito Ishikawa⁵

¹Kyushu Univ., ² National Institute of Technology, Kurume College, ³Kyushu Synchrotron Light Research Center, ⁴Chiba Univ.,

⁵Japan Atomic Energy Agency.