

8. 表面再構成の計算機実験

杉 林 直 彦

タングステン(001)表面は室温付近より低温で再構成転移を起こし、より大きな単位格子の $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ R45° 構造になる。これがタングステン原子の平均位置が変位するために起こる現象であることは確められている。この表面に水素を吸着させていくと水素の量に応じて、まず $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ R45° 構造を保ったまま変位の方向が変わり、次に不整合相が現れ、次にその不整合相があるひとつの方向に乱れを持つ状態(一次元的秩序状態)になり、水素が表面で飽和すると表面は 1×1 構造になる。

このようにタングステン(001)表面水素吸着系には多様な現象が現れるが、我々はこれらの現象を格子ガスモデルと表面タングステン原子の変位モデルとを組合せて、モンテカルロ法計算機実験により解析を行なう。

我々は、水素はタングステンを介しての間接相互作用を持ち、水素が凝縮する転移が存在すること、平均場近似での結果とは異なり、変位方向の変化はゆるやかで相転移ではないことを示唆する結果を得た。又、不整合相及び一次元的秩序状態についても知見を得た。

9. Cross-section 法によるニッケルの照射損傷の研究

杉 本 勝

次世代エネルギー源として核融合が期待されているが、その開発を行なう上で、第一炉壁に如何なる材料を用いるべきかということが大きな問題の一つになっている。高エネルギー粒子の照射効果に拠って材料は劣化する。この材料の寿命が融合炉の寿命を決める要因となることから、耐照射損傷性の高い材料の開発が急がれている。その為の基礎研究として、高エネルギー粒子の照射に拠って材料中に生成される欠陥の挙動、点欠陥集合体の形状、振舞いを明らかにすることは重要である。中でも透過型電子顕微鏡に拠る観察は微視的な組織変化を調べるのに有効であり、照射初期からの損傷形態を追っていくことに拠って、損傷の機構を解明するこ

とができる。

しかし、透過型電子顕微鏡による観察は厚さ数百 nm 以下の薄膜領域に限られる。そのため照射実験は主に電子顕微鏡観察用薄膜試料片によって行なわれてきた。一方、実際に材料として使用される物質は、厚板材 (bulk) であり、bulk に於ける照射損傷を研究することが真に重要である。

照射した bulk 試料を入射表面に垂直に切出し、その断面を透過型電子顕微鏡で観察する方法、cross-section 法が考案されたが、これは手法的に困難で、その有効性にも拘らずあまり行なわれていない。特に、照射効果の基本的研究のための詳細な観察、解析の例は少ない。

本研究では先ず、cross-section 法を用いることに抛り、bulk に於ける照射損傷の透過型電子顕微鏡観察の技法を確立した。次に、高純度ニッケルに 1.5 MeV H^+ 及び 1.8 MeV He^+ を照射量と温度とを変えて照射し、この方法により観察した。更に比較の為に、電子顕微鏡観察用薄膜試料片に 25 KeV He^+ を照射し、透過型電子顕微鏡で観察した。

イオン照射では、損傷関数は深さに依存し、或深さでピークを持つ。室温に於ける照射では black dot 状の点欠陥集合体が観察され、損傷関数のピーク付近で、その密度も最大になる。 He^+ 照射では、点欠陥集合体密度の深さ分布は損傷関数に強く依存し、損傷のない深い領域では点欠陥集合体は観察されない。一方 H^+ 照射では、その密度分布の損傷関数への依存性は弱く、損傷のない深い領域にも点欠陥集合体が観察され、点欠陥の拡散を反映した結果となっている。両者を比べると He^+ 照射の方が損傷量が一桁少ないにも拘らず、点欠陥集合体密度は一桁多い。

これらの結果に抛り、 H^+ 照射では注入した水素の影響は少なく、点欠陥集合体の核は拡散速度の大きい格子間原子からなり、 H^+ 照射では拡散の小さい原子空孔と注入されたヘリウムとの複合体が核になると推測される。

又、水素イオンを照射した試料では損傷量のピーク付近に、rod 状の点欠陥集合体が観察された。

550 °C にて照射した試料では、cavities 及び、転位が平均投影飛程付近に局在しているのが観察された。このとき cavities の密度は薄膜実験の場合より数桁少ない。この相違は、bulk 実験では、損傷領域が、表面から離れている為に、表面の格子間原子に対する sink 効果が小さいと考えられる。

以上のように、cross-section 法を用いた研究により、bulk に於ける点欠陥集合体の核形成に原子空孔やガス原子が関与すること、及び、bulk に於ける損傷形態と薄膜のそれとの差異が明らかになった。