

平成 21 年 5 月 20 日現在

研究種目：若手研究 (B)

研究期間：2006 ~ 2008

課題番号：18760570

研究課題名 (和文) 高品質核融合レーザー材料の作成法の確立

研究課題名 (英文) Establishment of method of making non-linear optical material for fusion

研究代表者

朝熊 裕介 (ASAKUMA YUSUKE)

兵庫県立大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号：40364038

研究成果の概要：現在高出力のレーザーにおいて、レーザー光の短波長領域への効率の良い波長変換が求められている。そこで、波長変換素子として有名な KDP 結晶に不純物として染料を加え、色素増感により光学特性の向上を図ることを目的とした。また、同様に、金属イオンの添加結晶を作成し、その偏光度を調べ、光学特性を評価した。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	1,100,000	0	1,100,000
2007 年度	1,600,000	0	1,600,000
2008 年度	800,000	240,000	1,040,000
総計	3,500,000	240,000	3,740,000

研究分野：

科研費の分科・細目：化学工学

キーワード：非線形光学結晶、偏光度、波長変換素子

1. 研究開始当初の背景

現在、核融合レーザー材料として、KDP(KH_2PO_4)結晶が考えられている。超高温のプラズマを閉じ込めるために、その条件として、熱破壊に強く、レーザーを誘導、放出するための大きな断面積、優れた透過特性を持つなどがあげられる。しかし、これらの要求を満たすには、厳しい品質の条件(純度、結晶形状、硬度、保存性など)が必要である。特に、結晶内不純物は熱破壊の原因となる熱歪を引き起こし、さらに、表面に吸着している不純物とともにレーザー波長変換の不安定要素となる。しかし、結晶内への不純物の取り込み機構に関して未だに不明な点が多い。また、溶液内の不純物は結晶表面に吸着し、成長速度($1 \times 10^{-8} \text{m}$ オーダー)を減少させ、

結晶の大型化(径 10cm 以上)に対して、大きなマイナス要因となる。そこで、より高品質な結晶を高効率に作成するために、結晶の成長速度、結晶内純度分布を求め、不純物の固液界面での移動現象を解明する。

2. 研究の目的

現在、核融合レーザー材料として、KDP(KH_2PO_4)結晶は、レーザー光は高強度で照射され、短波長であるため、優れた波長変換光学結晶が要求される。しかし、KDP 等の無機光学非線形結晶は出し尽くされている。そこで、様々な操作条件で作成したレーザー波長変換材料を作成し、レーザーによる光学特性(偏光度)を検討する。同時に、数値解析によって KDP 結晶に関する添加物分配機

構について検討する。

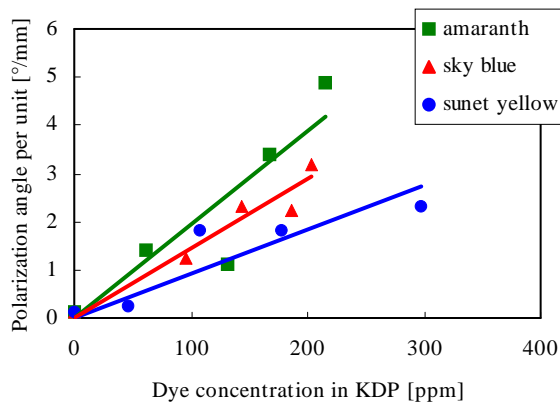
3. 研究の方法

偏光度測定装置を製作し、様々な条件で作成した結晶（着色、金属イオン添加）に対して、光学特性の測定を行った。

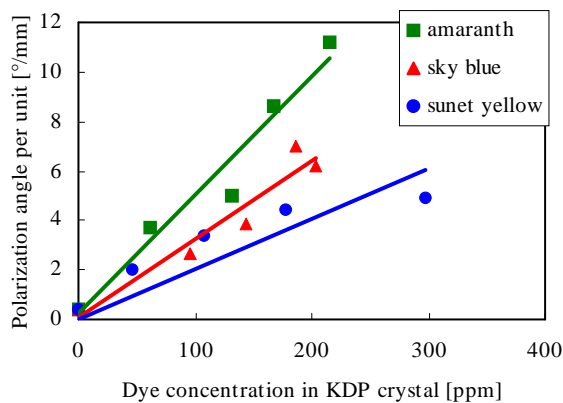
今回、結晶の光学特性の高機能化を目指し、有機物である染料と金属イオンの分配のメカニズムを分子軌道法により解析した。

4. 研究成果

Fig.1 に結晶内染料濃度と偏光度の関係を示す。いずれの染料場合も、結晶内の染料濃度が増加すると、偏光度は増加した。また、着色した(101)面は、(100)面より分配、吸着が多く、転移・欠陥の存在割合が多いため、高い偏光度を示すと考えられる。つまり、分子軌道法によると、染料の最大径は KDP の格子間距離の約 4~7 倍もあり、染料が吸着、分配した後に格子ひずみが生じ、その複屈折現象により、全体の屈折率が変化したためだと考えられる。



(a) (100)面

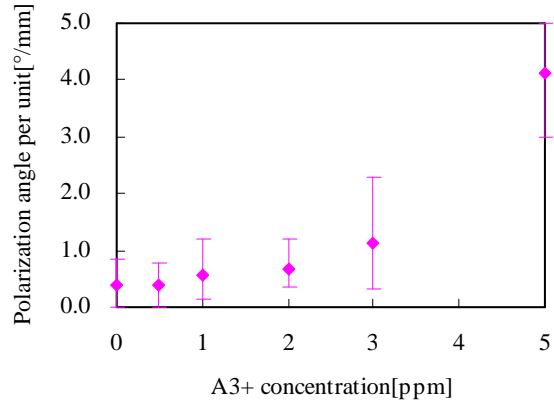


(b) (101)面

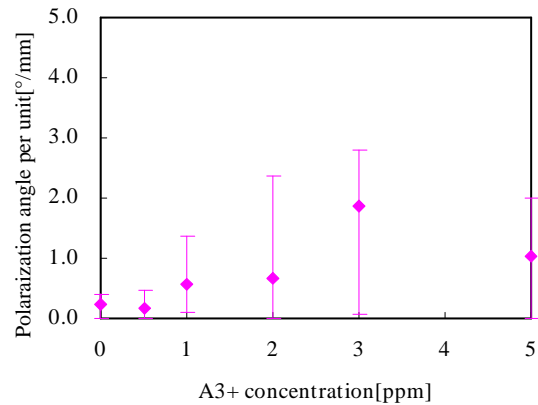
Fig.1 偏光度と KDP 内染料濃度の関係

次に、金属イオンを吸着した結晶を作成し、その偏光度を測定した。Fig.2 に金属イオンが吸着した(100)面の(a)水平方向、(b)垂直方向の

結果を示す。転移は(100)面に対して、水平に引き起こすと考えられ、水平方向の偏光度は小さくなったと考えられる。また、金属イオンの濃度とともに偏光度は増加した。これは吸着の量が増加し、転移が引き起こされたと考えられる。



(a) 水平



(b) 垂直

Fig.2 偏光度と金属イオン濃度の関係

これらの実験結果を考察するため、添加物の吸着現象を分子軌道法により解析した。まず、KDP 結晶構造を計算した。KDP 結晶は(100),(101)面から構成され、光学的に異方性が存在する。また、今回用いた添加剤（金属イオンと染料）に関して、分子軌道法から静電ポテンシャル(ESP: Electrostatic potential distribution)を計算した。この静電ポテンシャルの定量的な意味は、プロトンがその分子周囲に配置された時の引力と反発力を意味する。その静電ポテンシャル Fig.3-5 に示す。まず、結晶の ESP 分布では、(100)面、(101)面はそれぞれ負、正の分布を示す。一方、金属イオンは正の分布を示す。これは、正の電荷を持つ金属イオンなどの添加剤が(100)面に吸着し、成長速度を抑制する実験結果と一致する。一方、染料の ESP は、負の分布を示す。これは、正の分布を示す(101)面に染料が吸着・着色する結果と一致する。

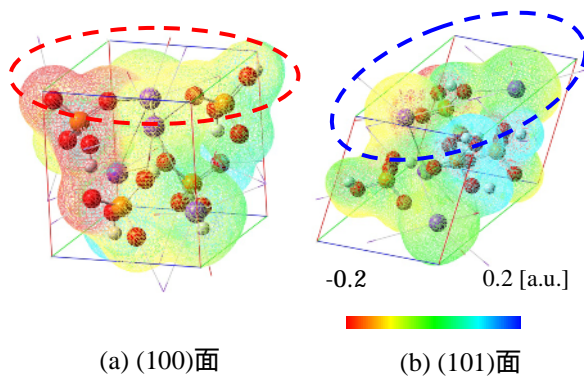


Fig. 3 静電ポテンシャル分布

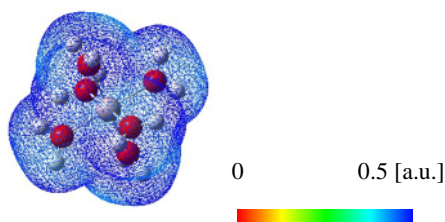


Fig. 4 金属イオンの静電ポテンシャル分布

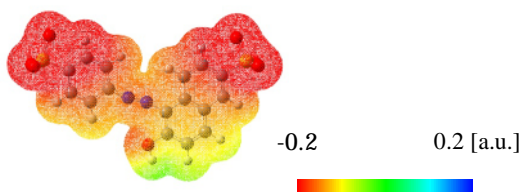


Fig. 5 染料の静電ポテンシャル分布

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計6件)

Experimental and theoretical study of recovery mechanism of impurity effect by the addition of EDTA, Y.Asakuma, M.Nishimura, K.Maeda, K.Fukui, H.M.Ang, M.O.Tade, Crystal Research and Technology, **42**, 424-431 (2007) 査読有

Colouring mechanism of dyed KDP crystal by quantum chemistry, Y.Asakuma, Q.Li, M.Nishimura, K.Maeda, K.Fukui, H.M.Ang, M.O.Tade, Journal of Molecular Structure THEOCHEM, **810**, 7-13 (2007) 査読有

Clarification of impurity coloring and adsorption mechanism for KDP crystal growth by computational chemistry, Y.Asakuma, K.Maeda, K.Fukui, Journal of Computer Chemistry Japan, **7**, 1-8 (2008) 査読有

Quantum estimation of impurity effect for

KDP crystal growth, Y.Asakuma, L.Gee, K.Maeda, K.Fukui, H.M.Ang, M.O.Tade, Journal of Molecular Structure THEOCHEM, **851**, 225-231 (2008) 査読有

A study of growth mechanism of KDP and ADP crystals by means of quantum chemistry, Y.Asakuma, Q.Li, K.Maeda, K.Fukui, H.M.Ang, M.O.Tade, Applied Surface Science, **254**, 4524-4530 (2008) 査読有

Kinetic and theoretical studies of metal ion adsorption in KDP solution, Y.Asakuma, N.Takeda, K.Maeda, K.Fukui, Applied Surface Science, **255**, 4140-4144 (2009) 査読有

〔学会発表〕(計5件)

Gaussian 法による金属イオン吸着メカニズムの解明

朝熊裕介, 前田光治, 福井啓介, Ang Ha Ming, Tade Moses

分離技術会 2006 年会研究発表講演要旨集, S5-04P (2006)

キレート剤を含む KDP 水溶液における金属イオンの不純物効果の解明

西村元輔, 朝熊裕介, 前田光治, 福井啓介
化学工学会第72回年会発表講演要旨集 C108(2007)

量子化学計算による KDP 結晶の着色メカニズムの解明

朝熊裕介, 西村元輔, 前田光治, 福井啓介
分離技術会 2007 発表会 S5-2(2007)

KDP 飽和溶液中の不純物吸着メカニズムの解明

中野茂樹, 朝熊裕介, 前田光治, 福井啓介
化学工学会関西支部 姫路大会 C213 (2008)

計算化学による KDP 結晶成長に関する金属イオン吸着機構の解明

朝熊裕介, 前田光治, 福井啓介
化学工学会第73回年会発表講演要旨集 Q303 (2008)

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.eng.u-hyogo.ac.jp/mse/mse9/sanki4.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

朝熊 裕介 (ASAKUMA YUSUKE)

兵庫県立大学・大学院工学研究科・准教授
研究者番号：40364038