

タングステン結晶粒界近傍のヘリウムに対する密度汎関数計算 DFT calculation on helium in the vicinity of tungsten grain boundary

高山有道¹, 伊藤篤史^{1,2}, 中村浩章^{1,3}
TAKAYAMA Arimichi¹, ITO M. Atsushi^{1,2}, NAKAMURA Hiroaki^{1,3}

¹核融合研, ²総研大, ³名大
¹NIFS, ²Sokendai, ³Nagoya Univ.

核融合炉ダイバータ材としてタングステンの研究が進められている。われわれはシミュレーション技法を用いて、密度汎関数法に基づく第一原理計算による原子スケールから分子動力学法や（動的）モンテカルロ法によるサブマイクロメートルスケールの研究を行っている[1-4]。

密度汎関数法による第一原理計算として、結晶および単空孔にヘリウム・水素が捕捉された系に対する評価をこれまでに行ってきた[1-3]。実際のタングステン材は多結晶であり結晶粒界が存在している。そのため、結晶粒界が捕捉原子に与える影響を評価することは意義がある。

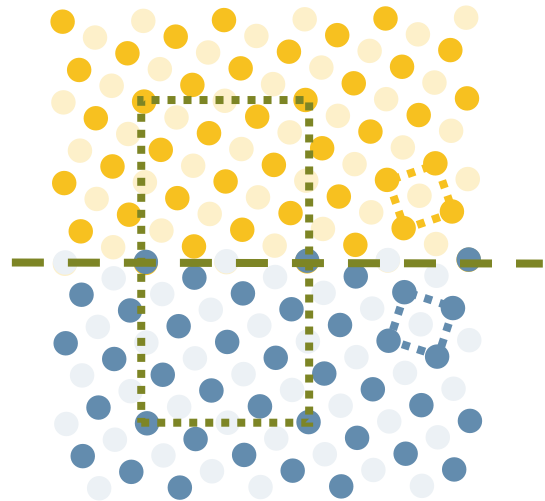
計算対象とする結晶粒界のモデルとして、図に示す $\Sigma 5$ CSL(Coincidence Site Lattice)モデルを用いた。この系はエネルギー的にみて（準）安定なため、実際のタングステン材中に存在する結晶粒界のモデルとして妥当なものであると考えられる。

密度汎関数計算にはOpenMXコード(Open source package for Material eXplorer)[5]を用い、主としてIFERC-CSCのHELIOSスーパーコンピュータ上で実行した。

本発表では、タングステン結晶粒界近傍でのヘリウムに対して実行した密度汎関数計算について報告し、単空孔および格子間捕捉された場合との比較を行う。

References

- [1] A. Takayama, A. M. Ito, S. Saito, N. Ohno, H. Nakamura, Jpn. J. Appl. Phys. **52** (2013) 01AL03.
- [2] Y. Oda, A. M. Ito, A. Takayama, H. Nakamura, Plasma Fusion Res. **9** (2014) 340117.
- [3] A. Takayama, A. M. Ito, Y. Oda, H. Nakamura, J. Nucl. Mater. **463** (2015) 355.
- [4] A. M. Ito, A. Takayama, Y. Oda, T. Tamura, R. Kobayashi, T. Hattori, S. Ogata, N. Ohno, S. Kajita, M. Yajima, Y. Noiri, Y. Yoshimoto, S. Saito, S. Takamura, T. Murashima, M. Miyamoto, H. Nakamura, Nucl. Fusion, **55** (2015), 073013.
- [5] OpenMX <http://www.openmx-square.org/>



図：計算に用いた結晶粒界モデル $\Sigma 5$ CSL
丸印はタングステン原子の位置。濃い丸印と薄い丸印とが紙面垂直方向に交互に積層される。色の違いは元となる結晶の回転方向の違いを表している。中央にある中央破線が結晶粒界面である。