

# 25aD40P

## 高融点金属におけるヘリウム凝集のシミュレーション Simulation of helium agglomeration in high melting point metals

大森晃平<sup>1)</sup>, 志賀紘輝<sup>1)</sup>, 伊庭野建造<sup>1)</sup>, Lee Heun Tae<sup>1)</sup>, 上田良夫<sup>1)</sup>  
OMORI Kohei<sup>1)</sup>, SHIGA Koki<sup>1)</sup>, IBANO Kenzo<sup>1)</sup>, Heun Tae Lee<sup>1)</sup>, UEDA Yoshio<sup>1)</sup>

1)大阪大学工学研究科

1)Graduate School of Engineering Osaka University

### 1. Introduction

タングステンにヘリウム(He)イオンを照射すると特徴的なナノ構造が形成されることが知られている。Heイオンは重水素と三重水素の核反応によって生成されるので、プラズマ対向壁として期待されるタングステンを長期間使用するにはその形成メカニズムを解明することが必要である。現在のところ、その形成条件は詳細に研究されたが、その形成メカニズムを完全に解明したものは存在していない。

最近では、モリブデン(Mo)などの他の金属でもナノ構造が形成されるのが確認された[1]。また、タングステン中での希ガスの凝集傾向を第一原理計算によって調べられたりもしている[2]。しかしながら、種々の金属におけるナノ構造の形状とそのヘリウムの凝集のしやすさを比較し、評価したものは未だに無いと思われる。

そこで私たちは、既に調べられているタングステン(W)、タンタル(Ta)、Moに加えてニオブ(Nb)のヘリウムの凝集のしやすさを調べ、実際に照射した実験結果と比較することにより、第5周期と第6周期の同族元素間での傾向、及びその凝集傾向がナノ構造形成に果たしている役割を評価した。

### 2. Experiment

シミュレーション実験では、密度汎関数理論に基づいて作成された第一原理シミュレーションソフトであるOpenMXを用いた。Moのsupercellは $4 \times 4 \times 4$  unit cellsとし、その格子定数は $3.3225 \text{ \AA}$ とした。また、サンプルk点は $4 \times 4 \times 4$ とし、カットオフエネルギーは $200 \text{ Ry}$ とした。交換相関ポテンシャルとしてGGAを用いた。Supercell中心付近にHe粒子を0個、1個、2個と数を変化させながら配置し、その度に系全体に加わる力が $3.0 \times 10^{-3} \text{ hartree/bohr}$ 以下になるまで構造最適化し、その時の全エネルギー求めた。

照射実験では、 $2.45 \text{ GHz}$ のマイクロ波を用い

たECR放電でHeプラズマを作り、試料に照射した。その時のフラックスは $\sim 10^{21} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ であり、フルエンスは $\sim 10^{25} \text{ m}^{-2}$ である。また、試料ホルダーに電圧を印加することにより、Heイオンのエネルギーを $100\text{-}200 \text{ eV}$ として実験を行った。試料温度 $T$ は融点 $T_m$ に対して $T/T_m$ で標準化した値で $\sim 0.3$ とした。表面構造は走査型電子顕微鏡(SEM)を用いて観察した。

### 3. Results

ヘリウム凝集シミュレーションの結果は、族毎の傾向をはっきり示すものとなった。第6族であるMoとWではHe粒子の数が増えるごとにエネルギーの利得が大きいものとなった。これは、ヘリウム凝集が起きやすいことを示している。第5族であるNbとTaではHe粒子が増えてもわずかなエネルギーの利得にとどまった。これは第6族の原子と比べてヘリウム凝集が起りにくいことを示している。

照射実験の結果は、第6族であるMoとWでは似た形状の構造物が見られた。試料表面から垂直に伸びる棒状の構造物が密集しているのが確認できた。第5族であるNbとTaでは少し違う傾向が見られた。共に試料表面上に数百nmの大きさのホールが見られるが、Nbではそのホールの縁からコーン状のものが生えているのが確認できた。

ヘリウム凝集が起りやすいものは構造が密であり、そうでないものは疎である傾向が示唆される。ただ、比較数が少ないので、今後はさらに数種類の金属で同様の実験を行うことを考えている。

### References

- [1] Shin Kajita, Nucl. Fusion 49 (2009) 095005
- [2] A. M. Ito, et al., J. Nucl. Mater., 463 (2015) 109-115