

## 2P13

### タングステン再堆積過程における入射角度依存性の分子動力学による研究 Dependence on incident angle of projectile atom in deposition process of tungsten

高山 有道<sup>1)</sup>, 伊藤 篤史<sup>1)</sup>, 中村 浩章<sup>1,2)</sup>

TAKAYAMA Arimichi<sup>1)</sup>, ITO Atsushi M.<sup>1)</sup>, NAKAMURA Hiroaki<sup>1,2)</sup>

<sup>1)</sup>核融合研, <sup>2)</sup>名大院工

<sup>1)</sup>NIFS, <sup>2)</sup>Nagoya U.

タングステン材にヘリウムを照射した場合に見られるファズとよばれるナノ構造の形成メカニズム解明に向けて精力的に研究が行われている。その中で、スパッタされたタングステンの再堆積過程がファズ形成に対して重要な役割を担っている可能性が指摘されている。そこで我々は、タングステンのセルフスパッタおよび再堆積に対する入射条件依存性を分子動力学シミュレーションによって明らかにすべく研究を進めている。

シミュレーションには、我々の開発した分子動力学シミュレーション用ライブラリGLIPS [1] を用いた。GLIPSでは、3次元デカルト座標系で定義された計算ドメイン内で各種熱浴による温度制御もしくはエネルギー保存条件下でシンプレクティック積分により時間発展を解く。 $x, y, z$ の各方向に対して周期境界条件を課す。計算領域内に標的となるタングステンを置き、 $z$ -directionには十分大きな真空領域を設定することにより材料表面を導入する。

タングステン原子を標的材料に入射し、分子動力学法により系の時間発展を追跡する。入射原子の初期位置  $(x, y)$  は乱数により決定する一方、垂直方向には固定値を用いる。標的材料から離れた領域に達した原子は透過もしくは脱離したものとみなし、計算ドメインから除外する。平衡に達したとみなせるに十分な時間

が経過したところで1試行計算を終了し、標的材料の原子配置を初期化して新たな試行を開始する。したがって、本研究では連続入射により標的材料中に導入される欠陥や表面構造の変化による影響は考慮していない。

タングステン自己照射の分子動力学シミュレーションによって観測される物理過程の概略図を図1に示す。

本発表では、低入射エネルギー領域において主要な過程となる吸着（再堆積）について、タングステン原子の入射角度依存性を中心に報告する。

[1] A. M. Ito, A. Takayama, Y. Oda, et al.: J. Nucl. Mater. **463**, 109 (2015).

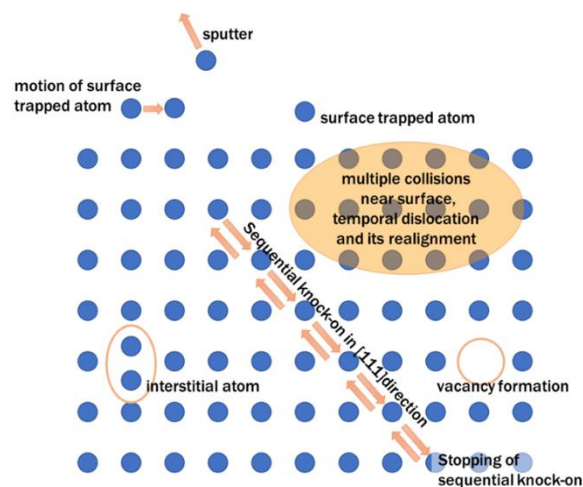


図1. タングステン自己照射の MD シミュレーションにおいて観測される種々の物理過程