

S3-4

シミュレーションで見られるファズ成長の スパッタリング・再堆積過程の重要性

Importance of sputtering and redeposition processes on the growth of Fuzz in numerical simulation

伊藤 篤史¹, 高山 有道¹, 中村 浩章^{1,2}

Atsushi M. ITO¹, Arimichi TAKAYAMA¹, Hiroaki NAKAMURA^{1,2}

¹核融合研, ²名大院工

¹NIFS, ²Nagoya Univ.

ヘリウム(He)プラズマを照射することで誘起される繊維状ナノ構造[1,2]、通称Fuzz、について、形成過程を調べるためにシミュレーションを用いた研究に取り組んでいる。特に複数の計算手法を組み合わせたハイブリッド計算法を開発することで、原子レベルのシミュレーションにおいて時間スケールを秒や分のオーダーまで到達できる点が特徴である。

以前の研究において、MD-MC ハイブリッド計算法[3,4]を開発し、Fuzz 構造の初期形成までは追いかけられたが、その後どれだけ計算を続けても実験ほど長い Fuzz が生えることはなかった。MD-MC ハイブリッド計算法では、He の拡散過程を KMC で解き、He バブルによるループパンチングや表面破裂を MD で解いて

いたが、これらだけでは成長に必要な物理過程が足りていないという結論に至った。

以下に述べる検討から、新たに He イオンの入射過程も連結させることにした。研究者の間では、He プラズマの入射エネルギーがスパッタリング閾値エネルギーよりも低いために、W 原子の弾き出しは起こらないか、殆ど効いていないと考えられていた。一方で実験研究者との議論から、質量損失が実際には 0 ではないという情報もあった。また、高エネルギー照射であっても Fuzz が長くなればなるほどスパッタリング収率が低くなるという実験もある。

入射過程といえば伝統的に二体衝突近似法(BCA)が利用されており、TRIM や ACAT といった伝統的なコードは周辺プラズマコードの境

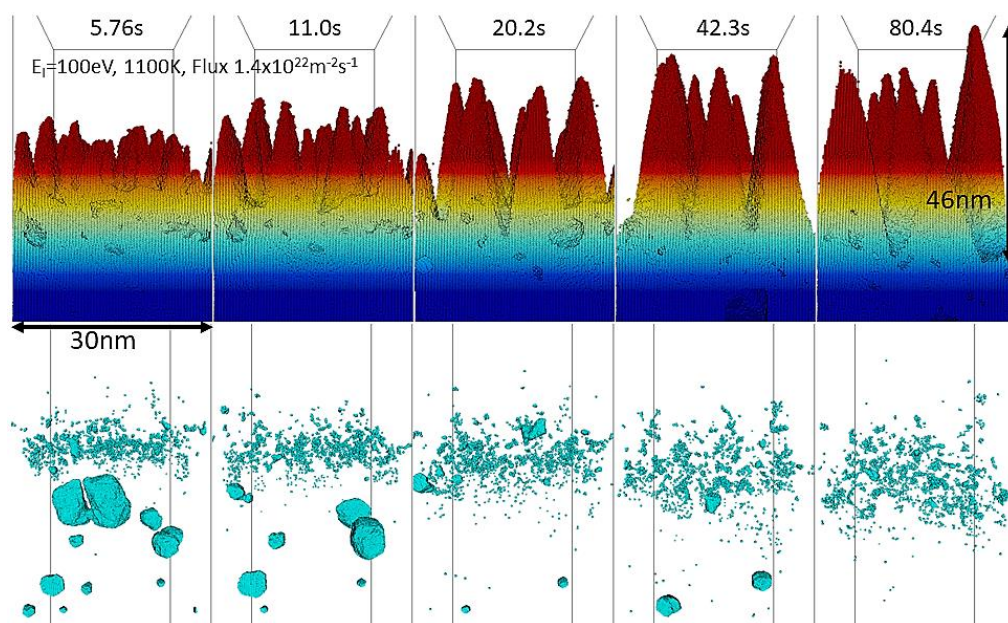


図1: BCA-MD-KMC 三連ハイブリッドによって再現された Fuzz 構造(上)と内部の He だけを描いた様子(下)。上図の原子の色の違いは高さ(z 座標)の違いを意味する。照射時間が 80 秒の時点でおおよそ 46nm の高さに達している。

界条件の算出にも使われている。しかし、BCAの理論モデルを見直してみると、弾き出し閾値エネルギーの定義自体に曖昧さがある点は重要である。少なくとも結合の弱いタングステン原子であれば低いエネルギーでも弾き出せるはずが、BCAの伝統的なコードで使われているモデルでは一律にバルクの基準で弾き出しの閾値エネルギーが決まってしまうている。

そこで、弾き出しの閾値エネルギーがタングステンの結合状態によって変わるリーズナブルなモデルを構築し、そのモデルを取り入れたBDOGコードを新規に開発した。MD-MCハイブリッド計算法と結合することでBCA-MD-KMC三連ハイブリッド計算法となった。

また、MD-MCハイブリッド計算法よりもさらに高速化されたことで照射時間で100秒相当まで追いかける。これによりHeの入射フラックスを実験と同じ $10^{22} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$ に設定した計算ができる。本計算は数ノードのスパコンもしくはワークステーションを利用して一か月程度で完了できる。

BCA-MD-KMC三連ハイブリッド計算法を用いたシミュレーションの結果として、50nmに及ぶFuzzのような繊維状構造を再現できた(図1)。

本シミュレーションにおけるFuzz成長の要因はHeによるタングステン(W)原子の弾き出しであった。照射開始直後のフラットな表面状態ではHeによる弾き出しは起こらない。しかし、総照射量が増加して成長したHeバブルが表面で割れると、凹凸のできた表面には結合の弱いW原子が現れ、弾き出しが始まる。その弾き出されたW原子が真空中に飛び出す前に凸部分に再堆積することで、Fuzzの成長が継続的に続くことが分かった。本シミュレーションは以下の点で実験と一致する。

まず、Fuzz成長の時間依存性(図2)を見ると、長さが時間の平方根に比例することが分かる。ここで重要な点は、弾き出されたWの再堆積が高い確率で起こる点であり、この場合は長さが照射時間の $1/2$ 乗に比例する。一方で、モデル内で意図的に再堆積を抑制してやると、成長はするものの長さが照射時間の $1/3$ 乗となり、成長速度が実験よりも遅くなる。このことから再堆積が重要な過程であるといえる。再堆積率が高いので、観測可能な正味のスパッタリング収率は非常に小さい($\sim 10^{-4}$)ことも実験と一致している。また、再堆積が成長を促進するというnano tendril bundles (NTBs)[6]の成長メカ

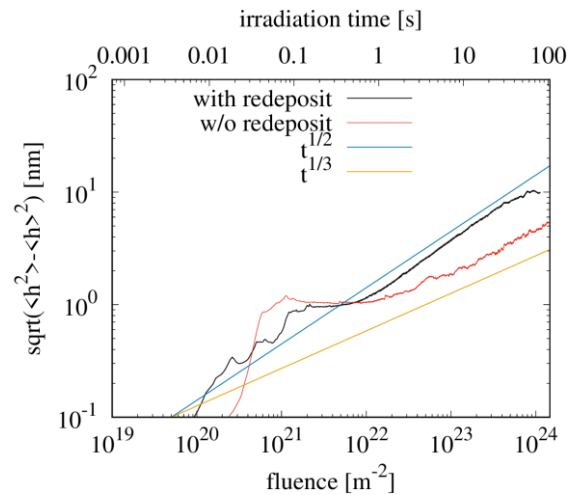


図2: Fuzz成長の時間依存性。縦軸は表面の高さの二乗平均平方根である。スパッタリングされたW原子の再堆積を考慮したモデルは黒線、再堆積を抑制した場合が赤線である。

ニズムとも矛盾しない。

次に、照射量がある必要量(incubation fluence)[7]を超えてから成長が始まる点も再現できている。図2をみると照射量が 10^{21} m^{-2} までの高さの増加は1 nm程度であり、これはバブルによる表面のswellingである。その後はバブルの表面破裂によってヘリウムが抜けるために一時的に成長が止まる。十分に凹凸ができると 10^{22} m^{-2} から本格的な成長が始まる。

また講演では入射エネルギー依存性[8]についても紹介したい。

本研究からの主張は、核融合炉のダイバータ周辺でプラズマを低エネルギーに保てたととしても、Heバブルによる表面の凹凸形成によって観測できない弾き出しと再堆積が起こり、表面が劣化する可能性があるということである。

- [1] S. Takamura, et al., Plasma Fusion Res. **1**, 051 (2006).
- [2] M. J. Baldwin and D. P. Doerner, Nucl. Fusion **48**, 035001 (2008).
- [3] A. M. Ito, et al., J. Nucl. Mater., **463**, 109-115. (2015).
- [4] A. M. Ito, et al., Nucl. Fusion **55**, 073013 (2015).
- [5] A. M. Ito, et al., Plasma Fusion Res. **13** (2018) 3403061.
- [6] D. Hwangbo, et al., Nucl. Fusion **58** (2018) 096022.
- [7] T. Petty, et al., Nucl. Fusion **55** (2015) 093033.
- [8] S. Kajita, et al., Nucl. Fusion. **49** (2009) 095005.