

タングステンナノ構造のマルチスケールシミュレーション
Multi-scale Simulation for Tungsten Nano-structure

伊藤篤史¹, 高山有道¹, 吉本芳英², 斎藤誠紀³, 中村浩章^{1,3}
 Atsushi M. ITO¹, Arimichi TAKAYAMA¹, Yoshihide YOSHIMOTO²,
 Seiki SAITO³, and Hiroaki NAKAMURA^{1,3}

核融合研¹, 鳥取大工², 名大工³
 NIFS¹, Tottori Univ.², Nagoya Univ.³

近年は磁場閉じ込め型核融合炉のダイバーター板や第一壁として、タングステン材料が盛んに用いられている。中でも、ITERにおけるダイバーター板として炭素材料の使用フェーズを全てタングステン材料の使用フェーズへと変更することなどが現在検討されており、タングステン材料のプラズマ対向性の研究が非常に重要な時期となっている。さて、このタングステン材料はヘリウム照射を受けることで、バブル状[1]や髭状(ファズ) [2,3]のナノ構造ができることが実験から報告されている。これらのナノ構造の形成はタングステンのプラズマ対向性に大きな影響を与えると同時に、産業応用の可能性も持ち合わせており、非常に興味深い現象である。最近では、ヘリウム以外の希ガスによるナノ構造の形成の可能性の調査報告[4]や、タングステンの代わりに鉄を用いてバブル構造を作成した報告[5]もあり、実験は盛んに行われている。一方でナノ構造の形成に関する理論的研究は少なく、形成メカニズムは良くわかっていない。我々は複合的な材料シミュレーション手法を組み合わせ[27E32P]ナノ構造の形成メカニズムの解明を目指している。

さて、タングステンナノ構造の形成は、次の三段階の過程に分解できると我々は考えている。まず、表面からの希ガスの入射過程である。拡散による内部への侵入の前には、入射による直接的な飛程として少なくとも金属格子数層分(1 nm程度)の侵入が必要である。金属と希ガスの組み合わせでは、入射による1 nmの侵入に、場合によっては数十eVの入射エネルギーが必要となる。一方であまりエネルギーが高いとスパッタリングによって表面が削れてしまいナノ構造の形成を阻害する。この観点から、金属と希ガスの組み合わせに毎に、入射による有効な侵入が可能かどうかを議論することができる。この見積もりはACVTコードによるBCA計算によって行うことができる[6]。

次に十分に侵入した希ガスがバブルを形成するためには、金属中で自己集合を起さなければならぬ。この拡散による自己集合過程は、金属中の空孔による希ガスの捕獲エネルギーを計算することで議論する。すなわち、空孔を基点に希ガス原子は集合した方が安定なのか、ばらばらに存在した方が安定なのかを問う。これには非常に正確な計算が必要であり、我々は密度汎関数法による量子化学計算によって捕獲エネルギーを見積もった[7,30E28P]。

最後に、自己集合した1nm以下の希ガスの塊が10nmから100nm程度の構造へと成長していく過程がある。この現象は、数eV程度のエネルギースケールの現象なのでBCAでは扱えず、また空間スケールが大きいためDFTでも到底計算できない。よって、MDによる取り扱いとなるが、時間スケールが非常に大きい現象の為に通常のMDでは当然追いきれない。我々は、まずタングステンと希ガス系に向けた、MDのポテンシャルモデルを開発した。そこでは、ダウンフォールディング法[8]を用いて、自動生成されたサンプル構造に対してDFTとのエネルギー差が最小になるように、ポテンシャルモデルの最適化を行った[9]。さらにこれを用いて大規模並列化を行ったMDコードの開発を行う。さらに、時間スケールを短縮して構造変化を取り扱う拡張アンサンブル系のMDの導入に取り組み、ヘリウムの成長過程の再現に挑戦する。

[1] H. Iwakiri, et al., *J. Nucl. Mater.* **283-287** (2000) 1134.

[2] S. Takamura, et al., *Plasma Fusion Res.: Rapid Communications*, **1** (2006) 051.

[3] S. Kajita, et al., *Nucl. Fusion*, **47** (2007) 1358.

[4] M. Yajima, et al., *J. Plasma Sci. Tech.*, accepted.

[5] M. Tokitani, et al., *J. Nucl. Mater.* **329-333** (2004) 761.

[6] S. Saito, et al., *PSI 2012*, P2-78.

[7] A. Takayama, et al., *Jpn. J. Appl. Phys.*, accepted.

[8] Y. Yoshimoto, *J. Chem. Phys.*, **125**, (2006) 184103.

[9] A. M. Ito, et al. *PSI 2012*, P2-66.