

動的モンテカルロ法によるタングステン中
ヘリウムバブルの形成機構の研究

Growth Mechanism of Helium Bubble in Tungsten by Kinetic Monte Carlo

小田泰丈¹, 伊藤篤史¹, 高山有道¹, 中村浩章^{1,2}
Yasuhiro Oda¹, Atsushi M Ito¹, Arimichi Takayama¹, Hiroaki Nakamura^{1,2}

核融合研¹, 名大院工²
NIFS¹, Nagoya Univ.²

タングステン(W)にヘリウム(He)原子を照射すると、バブル構造[1]や綿毛状(ファズ)構造[2]が形成されることが知られている。これらの構造は W 材料を脆化させる原因になる。しかし、ファズ構造はナノ材料としてのデバイス応用の観点から見ると、反射率がほぼゼロになる性質を活かした迷光対策材としての利用や、大きな表面積を活かした触媒としての利用などが考えられる。ところが、バブル構造やファズ構造の形成機構は、十分理解されていない。具体的には、W への He の侵入や拡散過程の詳細、バブル構造からファズ構造への転移過程などである。そこで本研究では、バブル構造の形成に関する研究を行った。

動的モンテカルロ(kMC)法を用いて W 中での He バブル構造の形成に関するシミュレーションを行った(図 1)。今回開発した kMC コードは、W 原子と He 原子の 2 つの原子の動きを考慮した 3 次元の kMC コードである。kMC シミュレーションに必要なパラメータは第一原理計算(DFT)[3]や二体散乱衝突近似法(BCA)[4]を用いて求めた。具体的には W や He の移動障壁エネルギーや照射された He の W 内への侵入長などである。

図 1 に kMC シミュレーション後のスナップショットを示す。この図では、He バブルを見やすくするために、BCC 構造からずれていないタングステン(8 配位のタングステン)は表示していない。表面付近や He バブルの周りにあるタングステン原子は配位数が少ないため、表示されている。図を見ると、He 原子が供給される表面付近では He バブルは大きく、深い部分にあるバブルは小さいことがわかる。また、図中 A, B の部分は、表面付近にできた He バブルが大きくなり、破裂してできた空孔である。このようにバブルが破裂して表面にできた空洞は実験でも観測されている[5]。

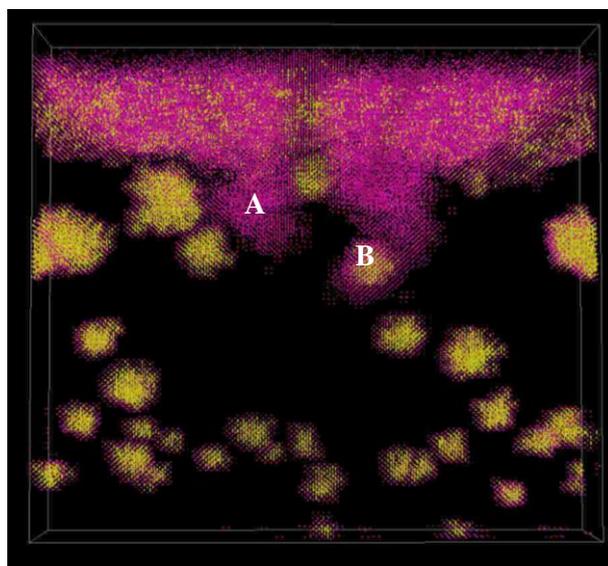


図 1 シミュレーション結果
明るい部分が He バブル。A, B の部分は表面の He バブルが破裂して空孔になった部分。

- [1] S. K. Das, *et al.*, *Advanced in Chemistry Series* **158** (1976) 112.
[2] S. Kajita, *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.* **50** (2011) 08JG01.
[3] A. Takayama, *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.* **52** (2013) 01AL03.
[4] S. Saito, *et al.*, *J. Nucl. Mater.* **438** (2013) S895–S898.
[5] S. Kajita, *et al.*, *J. Nucl. Mater.* **418** (2011) 152.