

大規模並列分子動力学シミュレーションによる
タングステン材料中のヘリウムバブル挙動

**Helium Bubble Behaviors in Tungsten Material with Large-scale Parallel
Molecular Dynamics Simulation**

伊藤篤史¹, 中村浩章^{1,2}
Atsushi M Ito¹ and Hiroaki Nakamura^{1,2}

核融合研¹, 名大院工²
NIFS¹, Nagoya Univ.²

ヘリウムプラズマをタングステン表面に照射することで、材料内部にヘリウムの詰まったナノバブル構造ができ、さらに照射を続けることで毛細状のナノ構造が形成される[1]。本現象は、金属中に強制的に入れたヘリウムがトリガーとなって引き起こされる、全く新しいタイプの金属材料の自己組織化現象であると考えられる。我々は、このようなタングステン表面ナノ構造の形成メカニズムの解明を目指し、様々なスケールのシミュレーション手法を用いた研究を行っている。プラズマの表面侵入過程においては二体衝突近似法(BCA)を用いた解析を行い、ヘリウムの侵入とスパッタリングによる表面損耗の競争について議論した[2]。また、タングステン中のヘリウム凝集の核形成に関して、密度汎関数理論(DFT)による第一原理計算を用いた解析を行い、水素比べてヘリウムの凝集能力が高いことを示した[3]。本研究では分子動力学法(MD)を用いてタングステン中のヘリウム凝集を調べた。また、より単純化した手法である動的モンテカルロ法(KMC)を用いた実験と同程度の時空間スケールを取り扱ったシミュレーションに関しても、本年会にて報告する[4]。

まず初めに原子間ポテンシャルモデルの開発を行った[5]。信頼性の高いポテンシャルモデルを作る方法として Yoshimoto によって提唱された downfolding 法[6]を用い、数百種類の原子配置に対して DFT と MD 間でエネルギーの差が最小になる様にポテンシャルの関数形の最適化を行った。

続いて、開発したポテンシャルモデルを用いて、MD シミュレーションを行った。タングステン原子に対して 5%のヘリウムを、安定な格子間 T サイトのランダムな位置に配置し、2000K の温度環境で時間発展させた。図 1(a),(b)はそれぞれ、初期空孔が 1%存在する場合と存在しない場合における 100ps 経過後の様子である。これより、空孔が無い場合の方が大きなヘリウムバブルが形成されていることが分かる。この理由として、ヘリウムバブル形成においては、空孔による凝集核形成だけでなく拡散の阻害の方が大きな影響を与えていると考えられる。

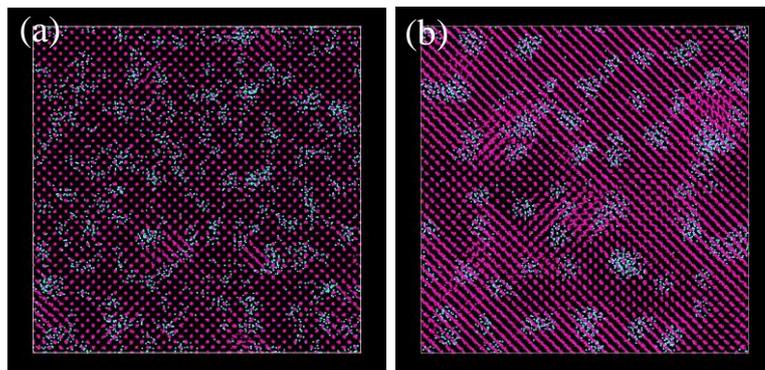


図1 : MD によるヘリウムバブル凝集. 紫色および水色の点はそれぞれタングステン原子とヘリウム原子である. 左図(a)は 1%の空孔が存在し, 右図(b)には空孔が存在しない.

- [1] S. Kajita, et al., Jpn. J. Appl. Phys. **50**, 08JG01 (2011).
 [2] S. Saito, et al., J. Nucl. Mater. **438**, S895–S898 (2013).
 [3] A. Takayama, et al., Jpn. J. Appl. Phys. **52**, 01AL03 (2013).
 [4] 小田泰丈, et al. プラズマ核融合学会, 第30回年会, 03pC15.
 [5] A. M. Ito, et al., J. Nucl. Mater. in Press.
 [6] Y. Yoshimoto, J. Chem. Phys., **125**, 184103 (2006).