

タングステンの自己スパッタリング現象の分子動力学シミュレーションによる解析
Self-sputtering on tungsten material analyzed with MD simulation

高山有道¹, 伊藤篤史^{1,2}, 中村浩章^{1,3}

TAKAYAMA Arimichi¹, ITO M. Atsushi^{1,2}, NAKAMURA Hiroaki^{1,3}

¹核融合研, ²総研大, ³名古屋大

¹NIFS-NINS, ²Sokendai, ³Nagoya Univ.

核融合炉のプラズマ対向材料としてタングステンは有望であり、多くの研究が行われている。我々はこれまで密度汎関数法に基づく量子化学計算により原子スケールでの電子物性を主として調べてきた。シミュレーションによる材料研究を進めるには、より大きなスケールの取り扱いやプラズマとの相互作用についても考慮する必要がある。そのための手法として本研究では分子動力学法を用い、系統的なシミュレーションを実行する。これにより、周辺プラズマシミュレーションにおいて材料側の境界条件を与えるモデルを提示しうるものと考えている。

プラズマ対向材としてのタングステン研究では、タングステンのみならず水素やヘリウムとの相互作用も考慮する必要があるが、本研究ではセルフスパッタリング現象に絞って、タングステンのみを対象としてシミュレーションを実行した。

本シミュレーションでは、水平(x, y)および垂直z方向それぞれについて周期境界条件を課し、表面から一定距離離れた水平方向にはランダムな位置から指定したエネルギーをもったタングステン原子を標的に対して入射、十分な時間にわたって全原子の運動を追跡するよう実行した。表面を取り入れるため、z方向には十分な大きさの真空領域を設定した。入射粒子あるいは反跳された標的原子が標的のある位置から十分に離れた真空領域に達した場合、反射

または貫通したあるいはスパッタされたものとして記録、計数し、系から人工的に取り除いた。水平方向の周期長はスーパーセルサイズ依存性が出ない程度に大きく、また、時間発展のタイムステップは物理的に妥当な結果を与える程度まで小さくなるよう、それぞれ設定した。標的の初期温度はゼロとして純粋な体心立方格子の格子点に標的原子を配置し、また、熱浴による温度制御はせずにエネルギー保存系とした。

この原子入射シミュレーションを多数回実行することにより、スパッタリング率、吸着(吸収)率、粒子反射率、スパッタリング粒子あるいは反射粒子の速度分布、入射粒子の飛程分布、終状態の入射位置依存性などが評価できる。

シミュレーションの可変パラメーターとしては、標的タングステン材の面方位、入射エネルギー、入射角が挙げられる。ポスターセッションでは、スパッタリング率などの結果に対するこれらのパラメーター依存性について提示する。また、二体衝突近似モデルによる計算との比較についても言及する予定である。