

# 3Bp05

## ヘリウム拡散および凝集過程の金属比較シミュレーション Simulation of helium diffusion and aggregation process in metals

文一樹<sup>1</sup>, 伊藤篤史<sup>2</sup>, 伊庭野健造<sup>1</sup>, Lee Heun Tae<sup>1</sup>, 上田良夫<sup>1</sup>  
Iisu Mun<sup>1</sup>, A. M. Ito<sup>2</sup>, K. Imano<sup>1</sup>, H.T. Lee<sup>1</sup>, Y. Ueda<sup>1</sup>

1大阪大学工学研究科

2核融合科学研究所ヘリカル研究部

<sup>1</sup>Graduate School of Engineering, Osaka University.

<sup>2</sup>Department of Helical Plasma Research, National Institute for Fusion Science.

### 1. 研究背景・目的

タングステン(W)に代表されるように金属に特定の条件でヘリウム(He)プラズマを照射すると、特徴的な構造が形成されることが確認されている[1]. これらHeプラズマ誘起構造には温度依存性があり、同様の照射条件で実験を行っても金属毎に形成される構造が異なる. Wやモリブデン(Mo)といった金属では繊維状構造が形成され、このような構造が形成されると高い光吸収率を示すようになり、またその表面積の増大という特徴と合わせて、様々な応用が期待される. しかしながら、その詳細な形成メカニズムは不明な点が多く、応用を考える上でメカニズムを解明することは重要である. 本研究では、Heバブルの形成傾向の違いがHeプラズマ誘起構造に影響を与えていると考え、金属におけるHeの拡散および凝集過程に着目し、数値シミュレーションを行った. 各金属内でのHeの凝集傾向を調査するため密度汎関数理論(DFT)に基づく第一原理計算を用いてHe結合エネルギーを計算した. さらにDFT計算結果を利用して長時間スケールのシミュレーションを再現するために動的モンテカルロ法(KMC)に基づいたシミュレーションコードを開発し、金属毎のHeバブルの形成傾向を調査した.

### 2. DFT計算

シミュレーションコードはOpenMX[2]を用いた. 図1に各種金属における格子間におけるHe結合エネルギーの計算結果を示す.

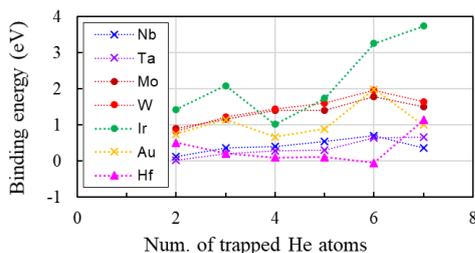


図1 各種金属中の格子間におけるHe結合エネルギー

傾向として繊維状構造が形成されるW, Mo, Irといった金属ではHe結合エネルギーが大きく、Heが凝集しやすいことが見られた.

### 3. KMCシミュレーション

本研究で開発したKMCコードは体心立方構造(BCC)金属のみを扱った. Heの凝集は格子間でのみ起こるとし、HeはTetrahedral Site(T-site)間のみを拡散し、トラップされる. KMCシミュレーションに必要な移動障壁エネルギーなどのパラメータはDFT計算を利用して求めた. 図2, 3に経過時間1μs後におけるKMCシミュレーションのスナップショットをW, ニオブ(Nb)について示す.

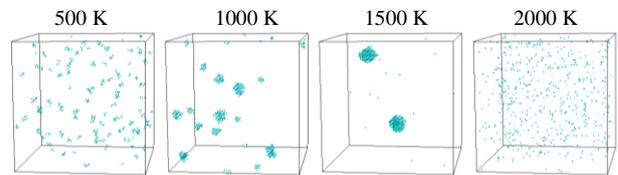


図2 各温度におけるWのKMCシミュレーション結果

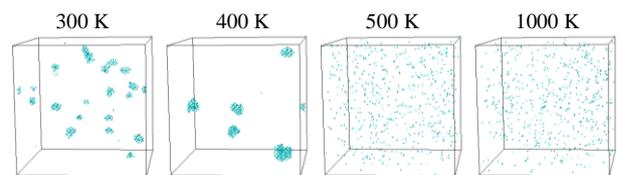


図3 各温度におけるNbのKMCシミュレーション結果

この図からWでは1500 K, Nbでは400 Kで大きいHeバブルが形成され、各種金属には大きいHeバブルが形成されやすい適切な温度が存在する. またDFT計算で求めたHe結合エネルギーが高い金属では比較的高い温度領域で大きいHeバブルが形成されることが確認できた. この結果から金属毎のHeバブルの形成傾向の違いはDFT計算で求めたHe結合エネルギーの違いが大きく影響していると思われる.

### References

- [1]. S. Kajita, et al., J. Appl. Phys. 113, 134301(2013).
- [2]. OpenMX, [www.openmx-square.org](http://www.openmx-square.org).