

BCA-MD-KMC マルチハイブリッド手法によるファズ構造形成の研究

○伊藤篤史*, 高山有道*, 中村浩章*** (核融合研*, 名大院工**)

Corresponding author: ito.atsushi@nifs.ac.jp

ヘリウムプラズマが照射されると、タングステンの表面付近にヘリウムバブルと呼ばれる数 nm の大きさの気泡が無数にできる。それが破裂して表面に穴が開く。そこからさらに照射を続けることで表面の凹凸が次第に成長し、長さ 100 nm~1 μm, 太さ 20 nm~50 nm 程度のファズ構造[1,2]が生えてくる。ヘリウムプラズマを使った本現象はタングステン以外の金属でも発現する。本現象の詳細とその応用に関しては文献[3]の解説を参照されたし。

ヘリウムバブルの発生メカニズムに関しては密度汎関数理論(DFT)[4,5]を用いて良く調べられており、閉殻構造の希ガス原子が金属中の電子から受ける斥力を下げようとして、自ら凝集して電子密度の低い部分を作るものと理解されている。また、分子動力学(MD)[6,7]によって、数 nm 程度まで大きくなったヘリウムバブルは 5 GPa 以上に及ぶその圧力をもって母材のタングステン原子を押し出し、転位ループとして放出することが明らかになっている。言い換えれば、バブル半径程度の円柱状の領域のタングステンを<111>方向へ平行移動させる。それが表面に向けて起これば数 nm 程度隆起する。

一方で、大規模 MD シミュレーションや MD-MC ハイブリッド法(後述)[8,9]からは、ヘリウムバブルに起因したこの転位ループ放出だけでは数 nm 以上の長さのファズ構造まで成長し得ないことがわかってきた。そこで本研究では、真の成長メカニズムを探るため BCA-MD-KMC 三連ハイブリッド法[10]を開発し、ファズ構造の再現に取り組んだ。

BCA-MD-KMC 三連ハイブリッド法では、ヘリウム粒子の入射過程を二体衝突近似法(BCA)で、材料内部に入ったヘリウムの拡散過程を動的モンテカルロ(KMC)で、ヘリウムバブルによる母材タングステンの変形を MD で解く。これまでの研究でヘリウム拡散と母材変形だけを解く MD-MC ハイブリッド法を開発したが、ファズ構造の成長には完全には至らなかった。そこで本研究では BCA を追加した三連ハイブリッドとすることで粒子の弾き出しによる効果を取り入れた。

BCA とは入射粒子と弾き出された粒子だけの動きを古典力学的に計算する手法であるが、MD と異なり多体相互作用を無視して、最近接粒子との二体散乱の繰り返しとして軌跡を求める。MD と比べ精度が劣るように捉えられがちだが、一般に運動エネルギーが高い(数十 eV 以上)ほど散乱断面積が小さくなるので多体相互作用の影響は小さいと考えられる。一方で MD よりもかなり高速に計算でき、実験相当のプラズマ粒子の入射回数を計算できる唯一の手法である。

実験におけるヘリウムプラズマ粒子の入射フラックスは $1.4 \times 10^{22} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ である。本シミュレーションで扱った 20 nm × 20 nm の表面では、約 0.2 μm 間隔で粒子が飛来する頻度である。この間に金属内部に入ったヘリウム原子が金属格子間を拡散し、凝集または表面から放出される。対して、成長にファズが生えるのに必要な照射総量は 10^{24} m^{-2} 程度であり、照射時間で約 100 s に相当する。これは MD では到底再現できない時間スケールである。本ハイブリッド法では、入射された後のヘリウムの拡散・凝集過程だけを抜き出して KMC で追いかけて、MD は転位ループの再現に必要な 1 ps 程度の計算を定期的に繰り返した。100 s のうち MD は計 100 ns 程度である。

本ハイブリッド法を用いることで、100s 相当の計算を 40 日間程度で完了することができた。結果として長さ約 25nm のファズ構造の成長を再現することができた。また実験から示唆されていた時間依存性として、ファズの長さが照射時間の平方根に比例する点と、総照射量が閾値を超えてから急速に成長が始まる点が本シミュレーションでも確認できた。

さらに、本シミュレーションで原子レベル動きを解析した結果、入射ヘリウム原子によるタングステン原子の弾き出しとその再堆積効果が表面の凹凸を卓越させ、ファズの成長を引き起こしていることを明らかにすることができた。

参考文献

- [1] S. Takamura, et al. *Fusion Research* **1**, 051 (2006).
- [2] S. Kajita, et al. *Nucl. Fusion* **49**, 095005 (2009).
- [3] 高村秀一ほか, プラズマ核融合学会誌, 小特集, *J. Plasma Fusion Res.*, **94**, 294-326 (2018).
- [4] A. Takayama, et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **52**, 01AL03 (2013).
- [5] T. Tamura, et al, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **22**, 015002 (2014).
- [6] F. Sefta et al., *Nucl. Fusion* **53**, 073015 (2013).
- [7] R. Kobayashi, et al., *J. Nucl. Mater.* **463**, 1071-1074 (2015).
- [8] A. M. Ito, et al., *J. Nucl. Mater.* **463**, 109-115 (2015).
- [9] A. M. Ito, et al., *Nucl. Fusion* **55**, 073013 (2015).
- [10] A. M. Ito, et al., *Plasma and Fusion Res.*, **13**, 3403061 (2018).