

BCA-KMCハイブリッドシミュレーションによるプラズマ照射下の水素・ヘリウムリテンション挙動解明

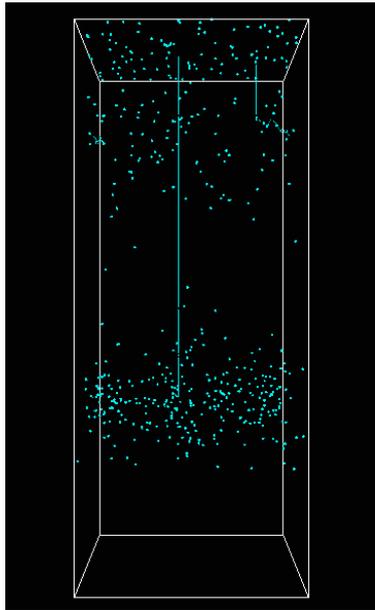
加藤 周一^{A, B}, 伊藤 篤史^{B, C}, 高山 有道^B, 和田 元^A, 笹尾 眞実子^A, 中村 浩章^{B, D}
^A同志社大, ^BNIFS, ^CSOKENDAI, ^D名古屋大

研究概要

材料に照射されるプラズマ粒子の入射フラックスとフルーエンスは、現実にかかるPWI(Plasma-Wall Interaction)現象に大きく寄与する。従ってPWIシミュレーションをする際には、実験同様の入射フラックスで照射して、実験と同等の入射フルーエンスに達するまで計算し続ける必要がある。またPWI分野の抱える諸問題には水素リサイクリングやトリチウム吸蔵がため、水素とダイバータ材料として注目されているタングステン(W)材料相互作用の理解は重要である。

そこで本研究では、水素粒子の入射過程を二体衝突近似法(BCA)が担当し、一方で材料内に吸蔵された水素や、粒子衝突で形成された原子空孔の拡散過程はKMCで取り扱うBCA-KMCハイブリッド手法を考案しコード開発を行った。

照射過程と拡散過程の粒子スケール同時シミュレーション



BCA-KMCハイブリッドシミュレーションによってBCC結晶のW材料に照射された水素原子の軌道と、材料内を拡散する水素原子の様子。実線はBCAによってシミュレートされた直入射時の水素原子の軌道を示す。入射された水素の一部はチャネリングにより微小角散乱による減速をしながらある一定の深さまで侵入する。この侵入深さは入射エネルギーでほぼ決定される。十分に水素が減速できれば、現象は照射過程から熱的な拡散過程へと移行する。青色の球はKMCによりシミュレーションされたW材料内部を拡散する水素の位置を表している。

シミュレーション結果

入射エネルギー300 eVの水素が 10^{22} atoms/m²のフラックスで、BCC結晶のW材料(面方位(100), 1000 K)に照射された場合の各時間における系のスナップショットを以下に示す。照射時のチャネリング効果により一定の深さに集中して分布していた水素が、時間経過と共に材料内を拡散していく様子が確認できる。

