動画に関してはご相談ください

### PWIモデリングの現状と課題

### 伊藤 篤史 Atsushi M. Ito ito.atsushi@nifs.ac.jp

#### 核融合科学研究所

#### 謝辞

平成23-25年度自然科学研究機構「若手研究者による分野間連携研究プロジェクト」 中村浩章,高山有道,小田泰丈,時谷政行(核融合研),

大野哲靖, 梶田信, 矢嶋美幸,野杁泰幸(名大),

尾形修司,田村友幸,小林亮,服部達徳(名工大),

吉本芳英(鳥取大),村島隆浩(東北大),奥村久士(分子研),小谷隆行(天文台), 和田元,剣持貴弘(同志社大),松尾太郎(京大),西浦正樹(東大), 斎藤誠紀(釧路高専),高村秀一(愛工大),宮本光貴(島根大),吉田直亮(九大)

### PWIモデリングの現状と課題

#### 材料寄りのPWIモデリング

# → 分子動力学(MD)は役者不足 → 他のシミュレーションとの連携が重要

- 1. "タングステンの繊維状ナノ構造形成過程"に例を 見るMDと他のシミュレーションの連携
- 2. MD視点で見たPWIモデリングの将来と課題

#### 1. "タングステンの繊維状ナノ構造形成過程"に例を 見るMDと他のシミュレーションの連携

2. 将来へ向けたさらなるMDの拡張

繊維状ナノ構造の成長の様子

• 泡構造(ヘリウムバブル)ができた後、繊維状の構造が生える



\*S. Kajita, et al., Nucl. Fusion. 49 (2009) 095005.



S. Kajita, et al., J.Nucl.Mater.418(2011)152-158.



### 繊維状ナノ構造形成における四段階過程



### 1. penetration proc.: Energy window for penetration

- Lower limit of He penetration by DFT[2] well agrees with that measured by NAGDIS[1].
- Energy windows for Ne and Ar are much smaller, relate to Yajima's experiment[M. Yajima, etal, Plasma Sci. & Tech., 15 (2013) 282,]



[1] lower limit measured by experiment with NAGDIS:
 D. Nishijima, M.Y. Ye, N. Ohno and S. Takamura: J. Nucl. Mater. 313-316, 97 (2003), 329-333, 1029 (2004) Proc. 30<sup>th</sup> EPS ECA 27A (2003) 2, 163.

[2] lower limit as the solution energy calculated by DFT(QMAS)

T. Tamura, R. Kobayashi, S. Ogata, A. M. Ito, Model. Sim. Mater. Sci. Eng., 22 (2014) 015002.

[3] higher limit as the sputtering threshold energy calculated by BCA( $AC \forall T$ )

S. Saito, etal, J. Nucl. Mater. 438, (2013) S895–S898.

### 単空孔中のヘリウム凝集



タングステン単空孔中の13Heの凝集構造



タングステン空孔中の12Hの凝集構造









### 2nd step Nobel Gas Agglomeration is Unlimited

The binding energies of He atoms in a mono-vacancy calculated by OpenMX code based on density functional calculation (DFT).

- Binding energy of Helium in tungsten is always positive.
  - $\rightarrow$  Helium agglomeration is advanced.
  - $\rightarrow$  Hydrogen agglomeration is stepped.
- Helium can agglomerated in also many kinds of metallic materials.



### 2nd process Helium can agglomerates without vacancy

• Helium agglomeration is advanced even if it is located at interstitial site



Binding energy of He at tungsten interstitial site

T. Tamura et.al.\*



The electron density lower than bulk

- Noble gas cluster generates the region in which is lower than that of pure bulk material. The region becomes new stable site for the next noble gas atoms.
- T. Tamura, R. Kobayashi, S. Ogata, A. M. Ito, Model. Sim. Mater. Sci. Eng., 22 (2014) 015002..

### He diffusion is accelerated by clustering

- The migration barrier of helium atom is smaller than that of hydrogen.
- The migration barrier of helium dimer becomes one third of single atom.



T. Tamura, R. Kobayashi, S. Ogata, A. M. Ito, Model. Sim. Mater. Sci. Eng., 22 (2014) 015002..

ヘリウムバブルの形成シミュレーション(MD)

#### MDでの仮想実験:空孔が無くてもヘリウムバブルの凝集が可能

#### He:5%, 空孔:1% 混入

#### He:5%混入,空孔なし



### ヘリウムバブル成長を支配するミクロの機構



- 1. 空孔He捕獲
  - ✓ He-空孔結合エネルギー: 2-3 eV/ He atom<sup>[1]</sup>
  - ✓ 空孔中のHe拡散障壁エネルギー: ~6 eV/ He atom[Y. Oda]
  - →「凝集と拡散阻害の競争」
- 2. 格子間凝集
  - ✓ 格子間凝集エネルギー:1-2 eV/ He atom<sup>[2,3]</sup>
  - ✓ 格子間拡散: Heクラスタ > He単原子 [T.Tamura, PSI21]
  - →「凝集による拡散の加速」

[1] A. Takayama, et al., JJAP 52(2013) 01AL03,

[2] C.S. Becquart, S. Domain PRL97(2006) 196402,

[3] T.Tamura, et al., Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 22 (2014) 015002.

シミュレーションで得られたループパンチング



### これまでの繊維状ナノ構造の成長モデル

#### (1) S I Krasheninnikov Phys. Scr. T145 (2011) 014040



**Figure 2.** Schematic views of the (a) initial stage of the fiber growth, (b) developed fiber, (c) viscose flow of W to the tip of the fiber due to the force caused by the pressure of He in the growing fiber.

Krasheninnikovモデルでは再現できない

### (2) S. Kajita, et al., J.Nucl.Mater.418(2011) 152-158. Surf. temp.:1400 K, Ion energy: 50 eV Original surface <1x10<sup>25</sup> He<sup>+</sup>/m<sup>2</sup> (b) ~1x10<sup>25</sup> He<sup>+</sup>/m<sup>2</sup> (c) 0 0.0 0 ~2x10<sup>25</sup> He<sup>+</sup>/m<sup>2</sup> (d)

>2x10<sup>25</sup> He<sup>+</sup>/m<sup>2</sup>

### 既存のシミュレーション手法の限界





### 分子動力学法(MD)

- 原子の動きを正確に計算
- 短い時間しか再現できない

× ヘリウムの拡散

○ タングステンの歪みや変形

### モンテカルロ法(MC)

- 原子の動は簡略化して計算
- 長い時間を再現できる

○ ヘリウムの拡散
 × タングステンの歪みや変形

MD-MCハイブリッドシミュレーション

- モンテカルロ法(MC)でヘリウムの拡散を計算してから、 分子動力学法(MD)で全体の形状変化を計算
- これを繰り返す



繊維状ナノ構造形成のMD-MCハイブリッドシミュレーション



46.2 nm

### 繊維状ナノ構造形成のMD-MCハイブリッドシミュレーション



#### The present simulation system under psudo-3D space





#### Full 3D simulation will be shown as soon!

The present simulation system is three dimensional, but the side in y-direction is thin. The reason of that is just only to reduce calculation time to do many try & error.

### 繊維状ナノ構造形成の鍵となるメカニズム



成長の鍵となるメカニズム

- ヘリウムバブルの表面破裂
- めくれ上がった形状を維持できるタン グステンの強度
- 本当に再現できたのか?
- まだまだ初期段階まで
- 見た目以外の判定
  - → フラクタル次元解析[Kajita et al.\*]

Kajita et al., Physics Letters A 378 (2014) 2533–2538.



\*S. Kajita, et.al. APEX 3(2010) 085204

#### Comparable formation time scale as helium fluence



MD-MC doped He amount: 4.8 x 10<sup>21</sup>[m<sup>-2</sup>] Un-trea

Experimental fluence: 10<sup>24</sup>~10<sup>25</sup>[m<sup>-2</sup>]

<sup>-</sup> <u>Un-treated processes in MD-MC:</u>

80% of helium are reflected by the surface in penetration process.

By ejection from the surface in diffusion process, only 1-2% of helium atoms are retained, which are agreement between experiment\* and kinetic MC.

\*H.T. Lee et.al., Trans. Fusion Sci. & Tech. 63 (2013) 233

#### Dependence on penetration depth is confirmed

- Although penetration depth is nano-meter, which is estimated by BCA simulation, the difference of penetration depth in nano-meter is effective to fuzzy nanostructure formation in the MC-MD hybrid simulation.
- We now research the relation between the incident energy threshold to generate fuzzy nano-structure\* and this dependence on penetration depth.

\*S. Kajita, et al., Nucl. Fusion. 49 (2009) 095005





Comparison among penetration depth D at the doped He amount of 2.4 x  $10^{21}$  m<sup>-2</sup>

タングステン材料とヘリウムプラズマの相互作用

#### ヘリウムはタングステン内部でバブル(気泡)を形成できる

希ガスが凝集しタングステンを押し広げることで電子密度を下げ、自らの受ける床力を下げるため

ヘリウムプラズマ照射で繊維状ナノ構造が生える

- ヘリウムの泡の力が引き起こす金属の変形
- 変形後のナノ形状を維持できるタングステンの強度

繊維状ナノ構造研究の意義

- ダイバーター板の耐久性の重要課題
- 科学的な興味深さ:他分野からの技術流入、人材流入
- 新材料としての応用:新規触媒材料、光吸収材料など

#### 1. "タングステンの繊維状ナノ構造形成過程"に例を 見るMDと他のシミュレーションの連携

2. MD視点で見たPWIモデリングの将来と課題



#### ◆相互作用ポテンシャル

- 精度: 0.1 eV/atom ~ 1000K ~ 0.1 Gpa
- 全ての元素のモデルが整備されていない

### ミクロなモデルとの連携が必要

#### ◆時間・空間スケール

• 0.1 μm, 10 nm (10<sup>8</sup> atoms, 10<sup>8</sup> steps)

マクロなモデルとの連携が必要

タングステン系ポテンシャルモデル

• DFT(量子計算)の結果を利用してMDポテンシャルを開発



#### 主なタングステン系ポテンシャル

- Ackland–Finnis–Sinclair (AFS)
  potential (1987), レガシーモデル
- Juslin-Nordlund (2005), EU
- ➤ Juslin-Wirth(2013), US
- ➢ Li-Lu (2012) , 中国
- ▶ Ito (2013), 日本 **PWI-MD**
- PWI分野からMD一般へ貢献
- 各グループがDFTを採用したため、開発が楽になった。
- ・ 炭素時代には進まなかった。

ポテンシャルモデル開発の方針

案1)タングステンを母材とし、不純物元素の拡張

- 案2)に比べて容易
- タングステン材料の研究だけなら十分
- 具体的課題の計算に注力できる

案2)ユニバーサルモデル(全元素)を目指す

- タングステン以外の元素も母材にできる
- 難しい(理論屋にとってはモチベーションとなる)
- 具体的課題の計算に注力しにくい(人手の問題)

ポテンシャルモデル開発の方針

案1)タングステンを母材とし、不純物元素の拡張

- 案2)に比べて容易
- タングステン材料の研究だけなら十分
- 具体的課題の計算に注力できる

案2)ユニバーサルモデル(全元素)を目指す

- タングステン以外の元素も母材にできる
- 難しい(理論屋にとってはモチベーションとなる)
- 具体的課題の計算に注力しにくい(人手の問題)

### ポテンシャルモデル開発方法の概念



### マクロとの対応



### ハイブリッドシミュレーションによる弱点の補い

## BCA-MD

- 高エネルギー: BCA
- 低エネルギー:MD

### MD-MC

- 材料変形:MD
- He拡散:MC

# MD-FDTD

- 材料:MD
- ・ レーザー:FDTD





### マクロなモデルへの物性値提供

#### 表面溶融

• 粘性係数,自己拡散係数,表面張力→ CFD解析

### SOL/Divertorプラズマ

- スパッタ率、反射率など
- 粒子の電離の問題

#### 構造材料

• 粒界効果を含めたマクロな物性値を見積もれるか

### 特定トリチウム時代(~2009)のPWIシミュレーション

J. Plasma Fusion Res. Vol.86, No.12 (2010) 679-680

小特集 周辺プラズマからプラズマ対向壁材料までのシミュレーションコード・モデルの最前線 Recent Progress of Simulation and Modeling in SOL/Divertor Plasma and Plasma Facing Material

í		周辺領域					Ύ)
コアプラズマ領域	エーアラビア頁比	周辺プラズマ		壁材料			
		プラズマ (流体方程式) SOLDOR <sup>*</sup> B2	中性粒子 (粒子軌道追跡 /原子分子過程) SONIC* NEUT2D* LPS EIRENE	不純物輸送 (粒子軌道追跡 /原子分子過程) ■ IMPMC <sup>*</sup> ■ IMPGYRO <sup>*</sup> ■ ERO	物理散乱 (二体散乱近似) ACAT/AC∀T* 水素拡散 (拡散方程式) DIFFUSE* EDDY* SDTrimSP	化学損耗・堆積 (分子動力学) 共有結合(REBO) C-H(2002) ・C-H(1990) ・W-H 分子間力 黒鉛層間力*	ブランケット領域

### 特定トリチウム時代(~2009)のPWIシミュレーション

小特集執筆者紹介  $\sim$ 



#### が藤篤史

2009年3月名古屋大学大学院理学研究科博士後期課 程修了.博士(理学).核融合科学研究所助教.専門 は材料の分子動力学シミュレーション.最近の趣味 は城・神社めぐり.おみくじを引いて研究の調子を 占っています.私の場合、大吉かどうかよりも、「勝

負・争い事」の項目が研究の調子とリンクしているようで不思議. そ れにちなんで収集している「勝守り」は、神社の個性が表れるデザイ ンが多く面白い.四月に結婚予定.



<sup>(11)</sup> の かず お 星 野 一 生

日本原子力研究開発機構・核融合研究開発部門・先 進プラズマ研究開発ユニット,博士研究員.2008年 に慶應義塾大学大学院理工学研究科・後期博士課程 を修了(博士(工学)).周辺プラズマのモデリング, 特に重金属不純物の輸送過程のモデリングとダイ

バータコードを用いたモデリングを中心に行っています.8月に男の 子が生まれました.日々成長していく我が子の勢いに,喜びとともに 驚きを感じる毎日です.



とう ま みつ のり藤 間光徳

慶應義塾大学大学院理工学研究科基礎理工学専攻博 士課程.主な研究分野はトカマク周辺領域における 不純物を含んだプラズマ輸送解析.最近,栄養学を かじって本気でベジタリアンになろうとしたが挫折 し,肉が大好きな自分を発見した.仲良くなりたい

人とは焼肉屋に行くのが一番.バイリンガルになる夢は,研究・その 他に役立つので挫折しないように頑張るつもり.とりあえず日記を自 己流の英語で書き始め,2ヶ月程度続いている.



#### が む ざ し

核融合科学研究所,核融合理論シミュレーション研 究系,助教.2008年に京都大学工学研究科,原子核工 学専攻,博士後期課程を修了.研究分野は周辺ダイ バータプラズマおよび不純物のモデリングとシミュ レーションです.学生時代からのコンピュータと核

融合研に来てから始めたサイクリングが趣味で,もっと昔はピアノなんかも弾いていました.まわりの結婚・出産報告が気になる年頃になって,後に続きたいと決意を新たにしています.



#### 診 診 哉 記

2009年3月愛知工業大学工学部卒業.現在,名古屋 大学工学研究科博士前期課程在学中.学部のころか らプラズマ壁相互作用の研究に従事.学部では実験 中心に研究を進めていたが,現在はシミュレーショ ンを主軸として研究を行っている.体力維持を目的

に夏はテニス,冬はスキーをやっている.



#### , 井 内 健 介

徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部先端 工学教育研究プロジェクト,助教.今年の5月から 転職し,東京エレクトロン㈱技術開発センター所属, 最先端基板洗浄技術開発に従事.今は実験やってま す.趣味は山梨,東京,京都,徳島の街を徘徊するこ

と. 行動範囲が広くなりました. 第二子誕生 (女の子).

### PWIモデリングの現状と課題

### MDだけでは勝負できない時代

 繊維状ナノ構造はDFT,KMCなど材料シミュレーションの導入・物性 分野との人材交流が進んだという意味で意義が高い

#### 今後の課題

- 繊維状ナノ構造の次は何をやろうか
- シミュレーションの技術開発の方向性
- PWI(プラズマ側)との距離が開いてしまった