

# タングステン中のレニウムおよびオスミウム格子間原子の拡散 KMC シミュレーション

KMC Diffusion Simulations for Rhenium and Osmium Interstitials in Tungsten

\*鈴木 知明<sup>1</sup>, 長谷川 晃<sup>2</sup>

<sup>1</sup>原子力機構, <sup>2</sup>東北大学

タングステン中のレニウムおよびオスミウムの格子間原子の拡散挙動を解析するため、キネティックモンテカルロ法による数値シミュレーションを行った。その結果、それらの格子間原子はそれぞれタングステンと混合ダンベルを形成し回転および移動を繰り返しながら3次元運動することが確認された。

**キーワード：**プラズマ対向材料、照射環境、溶質原子拡散、キネティックモンテカルロ法

## 1. 緒言

タングステン(W)は高融点、高スパッタリング抵抗、低水素吸蔵などのすぐれた性質から将来の核融合炉における第一壁やダイバータにおけるプラズマ対向材として期待されている。しかしながら、中性子照射下で核変換により発生するレニウム(Re)やオスミウム(Os)が析出し材料の機械的性質を劣化させることが危惧されている。本研究では、計算科学的手法を用いて照射誘起析出のモデル化・予測に必要な Re や Os の拡散挙動を明らかにすることを目的とする。

なお、本研究は JSPS 科研費、24561044、15K06672 の助成を受けたものである。

## 2. シミュレーションモデル

KMC は、予め起こりえるイベント確率をリスト化しその情報に従って空間に広がった系を時間発展させる数値計算手法であり、格子欠陥挙動解析のシミュレーションに広く用いられている。本研究では、予め行った第一原理計算[1]にもとづいて、上記イベントリストを作成した。KMC 構築には JAEA で開発した KMC 構築用のオープンソースツール PAKSS を用いた。

## 3. 結果

1次元運動する自己格子間原子(SIA)とは異なり、これらの溶質原子は3次元運動することがわかった(例として Re の格子間原子の軌道を図1に示す)。しかしながら詳細な解析の結果、それらの拡散係数は同じ3次元運動の空孔拡散のように移動障壁エネルギーによって単純にモデル化できないことがわかった[2]。

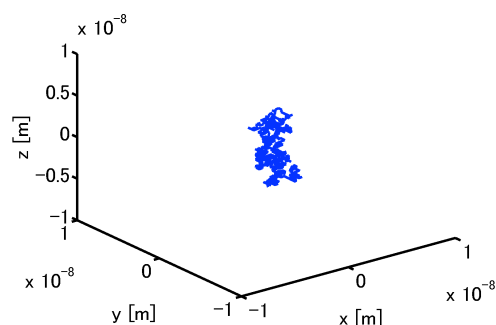


図1 KMC 時間発展による W-Re 混合ダンベルの軌跡: 1次元運動の SIA とは異なり、3次元の軌跡になっている。

## 参考文献

- [1] T. Suzudo et al., *Modeling Simulations Mater. Sci. Engin.* 22 (2014) 075006.
- [2] T. Suzudo, M. Yamaguchi, A. Hasegawa, *J. Nucl. Mater.* 467 (2015) 418—423.

\*Tomoaki Suzudo<sup>1</sup> and Akira Hasegawa<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Japan Atomic Energy Agency, <sup>2</sup>Tohoku Univ.