

# 固体界面を跨いだ熱・トリチウム・照射欠陥輸送解析コードの開発

Development of a simulation code for

the transports of heat, tritium and irradiation defects through interfaces in solid

\*小林 真<sup>1</sup>, 原 正憲<sup>2</sup>, 大矢 恭久<sup>3</sup>, Masashi Shimada<sup>4</sup>, Chase Tayler<sup>4</sup>

<sup>1</sup>核融合研, <sup>2</sup>富山大学水素研, <sup>3</sup>静大院理学領域, <sup>4</sup>アイダホ国立研究所

中性子照射によりタングステン中に導入される照射欠陥の輸送と、それに伴うトリチウムの滞留挙動について予測するための計算コードを構築した。原子空孔密度の導入温度依存性と過去に実施された水素同位体滞留量の変化に一致が見られた。

**キーワード:** トリチウム、タングステン、中性子照射、原子空孔

## 1. 緒言

核融合炉におけるプラズマ対向材料としてタングステンが有望視されているが、中性子などにより導入される照射欠陥にトリチウムが強く捕捉され、トリチウム回収が困難となる。これらの実験的検証と並行して、第一原理計算などで原子空孔のクラスター化とトリチウムの捕捉エネルギーなどの基礎データが導出されてきたが、実験データと計算データを橋渡しする計算コードの構築は未だ達成されていない。そこで、タングステン中の照射欠陥及びトリチウムの輸送現象を単純なモデルで表現し、既報の物理化学定数を用いて実験データを再現及び予測するための計算コードを構築することとした。

## 2. モデル

計算コードでは核融合炉第一壁などで使用されるタングステン多結晶材中の結晶粒を円柱形状に単純化した。照射欠陥については、フレンケル対である原子空孔と格子間原子を想定すると共に、各欠陥が集合しクラスター化することも考慮した。トリチウムや照射欠陥の輸送は円柱中の拡散項、相互作用項、ソース項で表現されることとした。相互作用項における結合エネルギーなどの物理化学定数は第一原理計算により算出された値を用いた。クラスター化した欠陥はそのサイズによりポテンシャルが異なるので、そのサイズの種類数まで輸送方程式を考慮し、陰解法を用いて収束計算した。

## 3. 結論

図1に、本計算コードにより算出された、異なる温度にて鉄イオン照射を0.5 dpa相当まで行った際にタングステン結晶粒中に発生する原子空孔密度を示す。原子空孔密度は鉄イオン照射温度の上昇に伴い減少した。このことは、温度上昇によりフレンケル対同士の再結合が促進されること、及び原子空孔が結晶粒表面へ拡散・消滅する速度が上昇したことに起因すると考えられた。図には過去に報告された同様の条件下での鉄照射の後に重水素ガス曝露されたタングステンバルク中の重水素濃度の推移\*を併せて示した。照射温度の変化に伴う原子空孔密度の推移と、重水素濃度の温度依存性に良い一致が見られた。

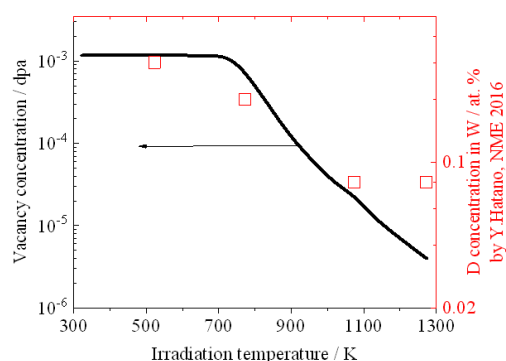


図1 異なる温度での鉄イオン照射によりタングステン中に導入される原子空孔密度と重水素濃度の相関

[\*] Y. Hatano, *et al*, *Nucl. Mater. Energy*, 9 (2016) 93-97.

\*Makoto Kobayashi<sup>1</sup>, Masanori Hara<sup>2</sup>, Yasuhisa Oya<sup>3</sup>, Masashi Shimada<sup>4</sup>, Chase Tayler<sup>4</sup>

<sup>1</sup>National Institute for Fusion Science, <sup>2</sup>University of Toyama, <sup>3</sup>Shizuoka Univ., <sup>4</sup>Idaho National Laboratory