MDシミュレーションによるプラズマ対向炭素材料の エッチング特性

1 まえがき

核融合によるエネルギー問題の解決は、常 に大きな期待がかけられているが、現段階で は技術的困難が残っており実現に至っていな い。大規模に研究されている熱核融合炉

(ITER等) では、プラズマ状態にしたガス を数千度~1億度程度まで加熱し、核融合反 応を引き出す。このような熱核融合炉では、 炉内の第一壁やダイバータ板などのプラズマ 対向材料とプラズマ粒子との相互作用による ダスト粒子の生成や材料の損耗・損傷が、核 融合プラズマを維持する上で問題となる1)-5)。

現在、熱核融合炉において、超高温核融合 プラズマを維持するための重要な役割を担う のが磁気ダイバータ配位におけるダイバータ プラズマ及び、イオン・粒子照射を受けるダ イバータ板である2),6),7)。熱負荷に対する耐性 や低原子番号材料である等の理由で、ダイバ ータ板の材料として主に用いられている物質 の一つがグラファイトなどの炭素材料である 1)-7)。従って、炭素材料の物理・化学スパッタ リング率の評価、それによる炭素損耗量の評 価を正しく行うために、化学スパッタリング 過程の原子スケールでのメカニズムの理解は 重要である。

我々は既に予備的な数値シミュレーション を分子動力学(MD)法によって行った⁸⁾。そ こでは、基板としてグラファイトとアモルフ ァスカーボンを用い、そこに25eV及び50eV で、水素(H)あるいは三重水素(T)を入射 した。基板炭素のスパッタリングイールドは 顕著な同位元素効果を示し、また、入射エネ ルギーはむしろ低い方がイールドが高いとい う結果が得られた。

更に、脱離した炭化水素クラスターは、そ の中に炭素を1個だけ含むCH_xという形のも のよりも、2個含む C_2H_x タイプの方が多くな る事が示された。

浜口 智志 日大生産工 0山城 昌志 大阪大・エ

> これは、ある程度実験結果9,10)とも一致を示 しており、必ずしもメタンのみが炭素材料損 耗の主な部分を占めるわけでは無い事を示唆 している。

> 今回、脱離物の粒子種の特定とともに、それ らが基板から脱離する際にどの程度の運動エ ネルギーを持っているのかを計算した。それ らの事から、どの粒子種がプラズマ中への不 純物となりやすいのかを推定する。

2 MDシミュレーション法

今回用いたモデル基板は、グラフェン6層 からなるグラファイトと、アモルファスカー ボンである。アモルファスは、1.993[g/cm³] の密度になるように2×2×2[nm²]の立方体中 に炭素原子を、乱数を用いて配置した。グラ ファイトの表面積は1.72×2.13[nm²]である。 両基板とも、初期状態では800個の炭素原子 を含み、300[K]で熱平衡化した。どちらに対 しても、表面に垂直に25eVあるいは50eVで 水素(H)、重水素(D) 及び三重水素(T) を入射した。入射数は各々5000発であるが、 これは流量(dose量)としては、グラファイ トでは1.36×10¹⁷/cm²、アモルファスカーボン では1.25×1017/cm2となる。基板の水平方向(x 方向とy方向)には周期的境界条件を課してい る。

原子間ポテンシャルは、Brenner¹¹⁾によるポ テンシャル関数を用い、H,D 及び Tは、化 学的性質は全く同一で、その質量のみが違う として扱った。

運動方程式はvelocity-Verlet法を用いて解 き、時間ステップは0.5フェムト秒([fs])、 粒子入射の間隔は3.0ピコ秒([ps])とした。 最初の2.4[ps]は全エネルギー一定で入射粒子 の運動エネルギーを緩和し、その後の0.6[ps] で設定温度の300[K]まで戻し、次の粒子入射 を行う。

Etching Characteristics of Carbon-Based Plasma Facing Materials by MD Simulation Study

Masashi YAMASHIRO and Satoshi HAMAGUCHI



3 シミュレーション結果

T入射(25eV)における脱離粒子種。 図 1 左は全脱離種の内イールド値が上位の5種。 右は炭素を含む脱離種の内の上位5種。



図2 T入射(25eV)における脱離粒子種の 平均全運動エネルギーに対するz成分の比。

図1、図2共にデータは粒子入射が3000発 \sim 5000発 (0.82×10¹⁷/cm² \sim 1.36×10¹⁷/cm²) の間のものである。入射初期にはTは単なる 反射かあるいは吸着しているが、炭素の結合 ネットワークが破壊され基板炭素が脱離し始 めるには、ある程度以上の入射粒子数が蓄積 される必要があるため、このシミュレーショ ンの中で、比較的状態が定常に近付いたと考 えられる範囲を選んだ。

図1を見ると脱離粒子種としてはTやT₂が 多いが、炭素を含むクラスターに限定すると CTxの形よりも多くの炭素を含む粒子種が多 くなっているのが分かる。純粋に炭素のスパ ッタリングイールドを考えると、C₂T_xの形が 最も大きいという結果が得られた。これらの 結果は、有機高分子基板の窒素クラスターイ オンによるエッチングにおいても炭素の脱離 については同様の結果が得られている12)。

図2は、図1に対応した脱離粒子種の全運 動エネルギー(KEtot)とそのz成分(KEz) の比、KEz / KEtot を表している。運動エネル ギーは、ある特定の脱離クラスター、例えば 全CT2の運動エネルギーを合計し、その数で 割った平均値を用いている。運動エネルギー の値そのものは、当然Tが最も大きいが、比 をとった結果で見るとむしろ、大きなクラス ターの方が表面に垂直な方向の運動エネルギ ーの割合が大きくなっている事が分かる。 また運動エネルギーの値そのものは、H、D、

及びT共に数eV程度で、炭素を含むクラスタ ーではその10分の1から100分の1程度という 結果が得られた。スパッタリングイールドや 運動エネルギーの値など、本発表で詳細を報 告する。

「参考文献」

1) 山脇道夫、「核融合炉材料工学」、核 融合研究、第56卷、(1986) p.96. 2) 川村孝弌、「核融合開発におけるプラ ズマ・壁相互作用の役割」、核融合研究、 第63卷、(1990) p.235. 3) Y. Ueda. "Recent Studies of Plasma-Material-Interaction in Tokamak Experiments", J. Plasma Fusion Res. Vol.80, (2004) p.217. 4) 小特集「マルチスケールでのプラズ マ・壁相互作用の理解の現状」、J. Plasma Fusion Res. Vol.84, (2008) pp.917-945. 5) 大野哲靖、高村秀一、「核融合プラズ マとプラズマプロセッシングの橋渡し」、 J. Plasma Fusion Res. Vol.84, (2008) p.740. 6) 滝塚知典、「トカマクにおけるダイバ ータプラズマ」、核融合研究、第64巻、 (1990) p.255. 7) 嶋田道也、「ダイバータの概要」、プ ラズマ・核融合学会誌、第69巻、(1993) p.1146. 8) M. Yamashiro and S. Hamaguchi, "Generation of Dust Seeds by Sputtering of Carbon-based Plasma Facing Materials under Low-energy H/D/T Ion Bombardment", Proceedings of the 22nd IAEA Fusion Energy Conference (13-18 Oct., 2008, Geneva, Switzerland) #TH/P4-7-1-8 (2008). 9) T. Nakano, et al., "Measurement of the chemical sputtering yields of CH_4/CD_4 and C_2H_x/C_2D_x at the carbon divertor plates of JT-60U", Nucl. Fusion Vol.42, (2002) p.689. 10) B. V. Mech, et al., "Isotopic effects in hydrocarbon formation due to low-energy H/D impact on graphite", J. Nucl. Mater. Vol. 255, (1998) p.153. 11) D. W. Brenner, "Empirical

potential for hydrocarbons for use in simulationg the chemical vapor deposition of diamond films", Phys. Rev. **B** Vol.42, (1990) p.9458.

12) M. Yamashiro, H. Yamada and S. Hamaguchi, in preparation.