

氏 名 剣 持 貴 弘

学位（専攻分野） 博士(理学)

学 位 記 番 号 総研大甲第393号

学位授与の日付 平成11年3月24日

学位授与の要件 数物科学研究科 核融合科学専攻

学位規則第4条第1項該当

学 位 論 文 題 目 軽イオンスパッタリングのダイナミカル・シミュレーション

論 文 審 査 委 員 主 査 教 授 大藪 修義
教 授 川村 孝弐
教 授 野田 信明
教 授 堀内 利得
教 授 室賀 健夫（核融合科学研究所）
教 授 高村 秀一（名古屋大学）

論文内容の要旨

プラズマ・壁相互作用の問題は核融合炉開発の重要な課題の一つである。現在、核融合研究装置の第一壁の壁材料の開発という点から研究が進められ、多くの成果を得ている。

TRIM, ACAT, TRYDIN等に代表されるような計算機シミュレーションコードによるスパッタリングの解析は実験データのない条件下でのデータを得るための有効な手法の一つである。しかしながら、これらのシミュレーションコードは固体中の入射粒子や構成原子の拡散などの時間経過に伴うダイナミカルな熱的過程が取り入れられていない。ダイバータ板などの対向材は高エネルギーのプラズマ粒子に長時間曝され高温になることから、熱的過程を考慮することは重要である。そのため、ダイナミカルなスパッタリング過程を評価できるシミュレーションコードとして岡山理科大学のYamamuratを中心とした研究グループによってACAT-DIFFUSEが開発された。

ACAT-DIFFUSEコードでは粒子間の衝突を二体間衝突近似モデルを用いて評価し、モンテカルロ法を用いてスパッタリングの解析を行うが、実際にイオンビーム等が固体表面に照射された場合、固体内では原子の衝突などの減速過程と粒子の拡散などの熱的過程が同時に進行する。しかしながら、ACAT-DIFFUSEコードにおいては、減速過程が起こる時間間隔が 10^{-12} 秒程度であるのに対して、熱的過程が起こる時間間隔が秒のオーダーであることを考慮して、減速過程と熱的過程を分離して評価する。即ち、まず一定の照射量の入射粒子に対して、減速過程をACATルーチンで評価し、ACATの計算で得られた固体中での粒子の分布を基にして熱的過程をDIFFUSEルーチンで評価する。そして、必要な照射量に達するまでこれを繰り返す。著者はこのコードを核融合研究装置に関連する水素同位体やヘリウムなどの軽粒子入射の場合に適用できるように改良し解析を行った。

核融合炉の第一壁やダイバータ板などの壁材料の候補材として B_4C , SiC, WC等の種々の複合材が考えられている。実際それらの候補材についてはスパッタリング収量、固体中の水素リテンション等多くの点について研究が進められてきた。しかしながら、それらに対して照射による固体の表面組成比変化という点についての研究はあまりなされていない。特に複合材の場合、固体を構成する構成原子の表面結合エネルギーや質量が異なるためにそれぞれのスパッタリング収量が異なり、ある構成原子が選択的にスパッタリングされるといふ選択スパッタリングと呼ばれる機構が存在する。この選択スパッタリングの結果、表面近傍の組成比が照射前と照射後で異なるという実験結果はCu-Niなどの二元合金系について多く報告されている。核融合研究装置の候補材として考えられている複合材についても照射前後で表面近傍の組成比が異なることが予想される。

そのためダイナミカル・シミュレーションを行えるACAT-DIFFUSEコードを用いて軽イオン照射による B_4C の表面組成比変化の解析を行った。 B_4C においては、表面結合エネルギーがボロンの方が弱いために、照射によってボロンが選択的にスパッタリングされ、ボロンの表面濃度が減少することが考えられる。そして、

ACAT-DIFFUSEコードによる解析の結果から、スパッタリングのしきい値近傍の低エネルギー（50 eV）で斜入射の場合、 B_4C の表面組成比（B/C）はある程度の照射量を超えると、照射前の組成比4から大きく減少することを初めて示した。また、入射エネルギーが低いほど、固体表面からのボロンの選択スパッタリングが促進され、垂直入射の場合の方が斜入射より拡散の効果が強くなるメカニズムについて理論的考察を行った。

また、入射粒子が水素や重水素で核融合研究装置の壁材料が炭素や炭素系複合材の場合、固体中で水素原子と炭素原子が化学反応して揮発性のガスであるメタン（ CH_4 ）やアセチレン（ C_2H_2 ）を生成し、それらのガスが固体表面から放出される時、炭素材の表面近傍の損耗を引き起こす化学スパッタリングと呼ばれる過程が観測される。化学スパッタリングは高温では物理スパッタリングに代わって炭素材の損耗の主要な過程となることが実験的に報告されており、核融合研究装置の壁材料として炭素材を用いる場合には、化学スパッタリングを制御することが課題である。

化学スパッタリングについては幾つかの理論モデルが提案されているが、現在までのところ化学スパッタリングの複雑なメカニズムを説明できる理論的に確立されたモデルは報告されていない。化学スパッタリングについては実験による研究が進んでおり、理論による研究やシミュレーションによる解析が不足している。

本論文ではRothのモデルを基にして、固体内で化学スパッタリングが起こる領域（Reaction Zone）という考えを導入し、炭素材の水素イオン照射による表面の損耗のモデリングを行った。そして、この新たなモデルを取り入れたACAT-DIFFUSEを用いて解析を行い、実験で観測されるメタン生成の照射量依存性を再現できることを示した。

最後に、不純物の中心プラズマへの輸送という観点から、スパッターされた核融合研究装置の壁材料の構成原子のエネルギー分布の知見を得ることは重要である。現在、スパッター粒子のエネルギー分布を評価する公式としてトンプソンの公式が広く用いられている。入射粒子が重く、入射エネルギーが大きい場合に主要なスパッタリングの機構となる衝突カスケードによってスパッターされた粒子のエネルギー分布はトンプソンの公式によく従う。

しかしながら、入射エネルギーが低く、入射粒子が軽イオンの場合に、スパッターされた粒子のエネルギー分布は、特にエネルギー分布の高エネルギー側でトンプソンの公式と大きく異なることが知られている。これは軽イオン・スパッタリングの場合は、入射粒子の質量が軽いために十分発達した衝突カスケードをつくることが出来ず、はじき出し過程と呼ばれる機構が主なスパッタリング機構になるためである。

核融合研究装置の壁材料は水素や重水素のような軽イオンによるスパッタリングが起こることが考えられ、軽イオン・スパッタリングによるスパッター粒子のエネルギー分布を評価できる公式が必要である。そのため、本論文では軽イオンのスパッタリングの機構を考慮した反跳原子密度を輸送方程式から導き、新たな軽イオンに対する理論式を導いた。

この新たに導かれた理論式は、軽イオンのスパッタリングのメカニズムを考慮しているために、実験結果とトンプソンの公式との比較で観られるような大きな違いは観られない。さらに、シミュレーションによる解析によって得られた軽イオン・スパッタリングによるスパッター粒子のエネルギー分布との比較においても、新たな理論式はトンプソンの公式比べて良い一致を示す。しかしながら、現在までのところ、軽イオンによってスパッタリングされた粒子のエネルギー分布を測定した報告例が少ないために、この理論式は今後より多くの測定結果と比較検討する必要がある。

本論文において得られた主な成果は、ACAT-DIFFUSEコードを用いて、複合材 (B₄C) の軽イオン照射による表面組成比の入射エネルギー依存性、入射角依存性の解析を行ったこと。化学スパッタリングに関して、表面近傍でのメタン生成のモデルを導入し、炭素材の表面損耗の解析を行ったこと。また、軽イオンによってスパッターされた粒子のエネルギー分布を表す、新たな理論式を導いたことである。

論文の審査結果の要旨

本研究は、水素同位体、ヘリウムなどの軽元素イオンが固体表面に当たり固体材料を構成する原子が放出されるスパッタリング現象について、固体材料原子の熱運動などのダイナミカルな効果を考慮したシミュレーション・コードを開発し、現在核融合研究で問題となっている幾つかのテーマに適用し、新しい知見を得たものである。

申請者は、高エネルギー・イオンが固体表面に入射したときの衝突過程をモンテ・カルロ法に基づいて計算する ACAT コードと、固体の熱的效果を求める DIFFUSE コードを組み合わせた ACAT・DIFFUSE システムを用いている。このコードは岡山理科大学の山村泰道教授を中心とするグループにより開発が開始され、申請者は同大学の修士課程でこの開発に参画し、当専攻に於いて、特に核融合研究に関連する軽元素イオン・スパッタリングに適用できるように開発・改良を行ったものである。

最近では、ヘリカル系やトカマクなどの環状系装置のダイバータ板に、 B_4C のような複合材料を用いる研究が行われているが、ダイバータ・プラズマの温度に相当する 100 eV 以下のエネルギーのイオン・ビーム入射による複合材のスパッタリング率の実験データは殆ど無い。申請者は B_4C について物理スパッタリングのシミュレーション解析を行い、表面組成比変化の入射エネルギー、入射角依存性のデータを得ると共に、低エネルギー (50 eV) で斜入射の場合、一定の照射量の後で表面組成比 B/C が元の 4 から大きく減少することを初めて示した。また、高温での炭素材の水素イオンによるスパッタリングには CH_4 などの生成による化学スパッタリングの寄与があるが、申請者は炭素材表面近傍での入射水素イオンの打ち込みの深さを考慮した CH_4 生成の新しいモデルを考案し、実験で得られた化学スパッタリング率の照射量依存性の傾向を再現出来ることを示した。

申請者はまた、低エネルギー水素イオン入射のスパッタリングの機構について分析を行い、高エネルギー重イオンの衝突カスケードによる機構とは異なることを明らかにして、スパッタリングにより放出される材料原子のエネルギー分布を表す新しい理論式を導き、実験及びシミュレーション結果と良く一致している。これはダイバータ板で発生した不純物の輸送解析にとって重要な成果である。

以上のように本研究は、核融合研究に不可欠ではあるが、ビーム実験のデータがない条件下での軽イオン・スパッタリング・データを計算できるコードを開発し、且つこの分野に新しい知見を加えたもので、学位論文として合格と認められる。

面接試験に於いて、申請者から博士論文の内容について改めて説明が行われ、審査員全員から内容及びそれに関連するプラズマ・材料相互作用、固体物性等に関する質疑・応答が行われた。その結果、申請者はこの研究の目的、方法及び得られた新しい結果を的確に説明し、これまでの研究との関連性及び研究成果の核融合研究に於ける意義を十分理解していると認められると共に、関連する分野について正確な知識と理解を持っていることを確認した。

本論文は和文で書かれているが、申請者はすでにこの論文の内容の一部について

て、同人が筆頭著者としてまとめた英文論文を国際専門誌 *Journal of Nuclear Materials* (Vol.258-263, p729,1998) に掲載済みのほか、同じく同誌に筆頭著者としてもう一編が印刷待ちとなっていて、英語の学力も十分備えていると認められた。2月3日に開催された論文公開発表会においては、指定時間内に内容を要領よくまとめ、聴衆からの質問にも明確に答えていた。

以上から、審査委員会は申請者は学位試験に合格であると認めた。