

水素および希ガスと各種金属原子間のポテンシャルモデルの開発  
**Development of potential model between hydrogen, helium and metal atoms**

伊藤篤史<sup>1,2</sup>, 加藤周一<sup>3</sup>, 中村浩章<sup>1,4</sup>  
 ITO Atsushi M.<sup>1,2</sup>, KATO Shuichi<sup>3</sup>, NAKAMURA Hiroaki<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>核融合研, <sup>2</sup>総研大, <sup>3</sup>同志社大院工, <sup>4</sup>名大院工  
<sup>1</sup>NIFS, <sup>2</sup>SOKENDAI, <sup>3</sup>Doshisha Univ., <sup>4</sup>Nagoya Univ.

磁場閉じ込め型核融合実験装置の炉内壁材料であるタングステンの研究においては、水素および希ガスプラズマとのプラズマ壁相互作用(PWI)が重要な課題となる。我々はシミュレーションを用いることで原子スケールのダイナミクスや物性値の評価を行う第一原理的な観点で、タングステン材料の研究を行っている。

材料視点で見た際のPWIは、一般に、時空間スケールおよびエネルギースケールの異なる現象が連成した複合物理過程になっている。その為、シミュレーション研究では、本分野で開発された二体衝突近似法(BCA)に加えて、物性・化学分野で開発された分子動力学(MD)、密度汎関数理論(DFT)、動的モンテカルロ法(KMC)などを使い分けることで多角的な議論を行うマルチスケール解析を行う。基礎技術としては物性・化学分野の技術を流用する一方で、プラズマ・核融合特有の現象も多々見られるため、PWIへの応用の為の独自の手法開発も必須である。我々のグループで開発したBCA-MDハイブリッド手法[1]や、MD-MCハイブリッド手法[2,3]などがその例である。

さて、タングステンの単純なMDシミュレーションにおいても、プラズマ・核融合分野の独自の発展が求められた。それがタングステン原子と水素原子や希ガス原子の間の相互作用をモデル化したポテンシャルモデルの開発である。計算の際に実際に、タングステンは核融合以外の分野でのシミュレーション研究例が少なく、国内外のPWIシミュレーション研究者から、タングステン系のポテンシャルモデルがそれぞれ独自に開発されている[4-6]。我々もDFTとエネルギーを比較することで最適なポテンシャルを得るDownfolding法[7]を用いることでタングステン-ヘリウム系のポテンシャルを開発した[8]。

しかし、これらのポテンシャルモデルはある

原子配置に関しては非常に精度良くエネルギーを再現できるものの、それを越えた範囲では信頼性があるとは言いがたい[9]。我々のモデルでも融点は1000K以上も高くなってしまっている。これは、DFTとのエネルギー比較を行うサンプル構造の空間が十分に広くないため発生する問題である。

そこで本研究では、タンパク質などの生体分子などの未知の構造を効率的に探索する為に開発されたマルチカノニカルアンサンブル法[10,11]を用い、固体状態から液体状態まで非常に広いエネルギー範囲でタングステンのサンプル構造を採取する(図1)。これを基に関数形の最適化を図ることで、熔融現象までも見通した理想的なポテンシャルモデルを得る。また、タングステンだけでなく、タンタル等の別種金属のポテンシャル作成にも取り組む。

#### Reference

- [1] S. Saito, et al., J. Nucl. Mater. **415** (2011) S208-S211.
- [2] A. M. Ito, et al., J. Nucl. Mater. **463** (2015) 109-115.
- [3] A. M. Ito, et al., Nucl. Fusion **55** (2015) 073013.
- [4] N. Juslin, et al., J. Appl. Phys. **98** (2005) 123520.
- [5] N. Juslin and B. D. Wirth, J. Nucl. Mater. **432** (2013) 61-6.
- [6] X.-C. Li, et al, J. Nucl. Mater. **426** (2012) 31.
- [7] Y. Yoshimoto, J. Chem. Phys. **125** (2006) 184103.
- [8] A. M. Ito, et al., Phys. Scr. **T159** (2014) 014062.
- [9] M. A. Cusentino, et al., J. Nucl. Mater. **463** (2015) 347-350.
- [10] U. H. E. Hansmann, et al., Chem. Phys. Lett. **259** (1996) 321.
- [11] N. Nakajima, et al., J. Phys. Chem. **B 101** (1997) 817.