

タングステン壁における水素リサイクリングの 分子動力学シミュレーション

Molecular Dynamics Simulation of Hydrogen Recycling on Tungsten Wall

齋藤誠紀¹, 中村浩章^{2,3}, 澤田圭司⁴, 小林政弘^{2,5}, 河村学思^{2,5}, 蓮尾昌裕⁶, 井戸毅⁷
SAITO Seiki¹, NAKAMURA Hiroaki^{2,3}, SAWADA Keiji⁴, KOBAYASHI Masahiro^{2,5},
KAWAMURA Gakushi^{2,5}, HASUO Masahiro⁶, IDO Takeshi⁷

¹山形大, ²核融合研, ³名大, ⁴信大, ⁵総研大, ⁶京大, ⁷九大

¹Yamagata Univ., ²NIFS, ³Nagoya Univ., ⁴Shinshu Univ., ⁵SOKENDAI, ⁶Kyoto Univ., ⁷Kyusyu Univ.

1. 研究背景と目的

LHDなどの磁場閉じ込め装置において、周辺プラズマでの水素原子・分子の輸送は、コアプラズマへの燃料補給やプラズマ閉じ込め性能に大きく影響する。プラズマ粒子は、再結合や電離を繰り返しながらコアプラズマに輸送されるが、解離性再結合や荷電交換再結合に代表される分子活性再結合の反応係数は、分子の振動・回転状態に強く依存することが知られている。信州大学・澤田氏らのグループは、水素分子の振動・回転準位を考慮した中性粒子輸送計算コードの開発を進めている。しかし、分子過程を考慮した中性粒子輸送計算を実施する際、その境界条件である炉壁から、どのような振動・回転準位の水素分子が発生するのかが不明であった。そこで、われわれは、分子過程を考慮した中性粒子輸送計算の実施を目指し、壁から放出される水素原子・分子の並進・振動・回転エネルギーと振動・回転準位の分布を分子動力学に基づいて計算する水素リサイクリングモデルを開発している。炭素壁[1-3]をターゲットに開発した計算モデルを、本研究では、タングステン壁に拡張[4]することを目指す。

2. シミュレーション手法・モデル

分子動力学法を用いてタングステンおよび水素原子の運動を計算する。原子間相互作用はEAMポテンシャルを用い、運動方程式の積分には2次のシンプレクティック差分法を用いる。

タングステン壁水素リサイクリングモデルの計算系を図1に示す。黒点が水素原子、青点がタングステン原子をそれぞれ表す。50.24 Å×50.24 Å×30.167 Åの領域にタングステン4608原子、水素2272原子を配置した構造を標的材とする。水素原子を標的材に一発打ち込む計算を行う。水素原子の入射エネルギーは100 eVとし、z軸に平行に打ち込む。xおよびy方向には周期境界条件を課する。水素原子の入射位置をランダムに変えて同様の試行を1500回繰り返し、標的材から放出された水素原子・分子の並進・振動・回転エネルギーと振動・回転

準位の分布、放出角の分布を得る。また、放出水素原子・分子の軌道を解析し、放出過程の素過程を調べる。

3. シミュレーション結果

開発したリサイクリングモデルから得られた結果の例として、壁面で水素分子が形成される過程を図2に示す。軌道解析の結果、一部の水素原子は壁面上に比較的長時間束縛されるため、表面上の他の水素原子と化学結合し、分子となって表面から放出されることが確認された。

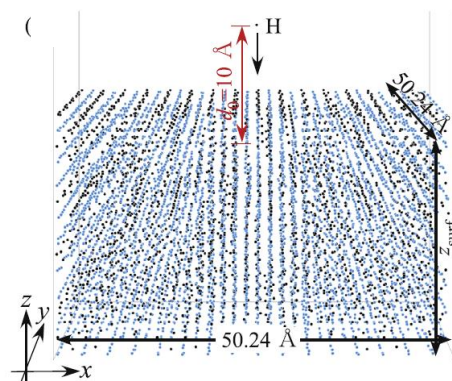


図1 分子動力学法によるタングステン壁水素リサイクリングモデル[4]

(Copyright: The Japan Society of Applied Physics)

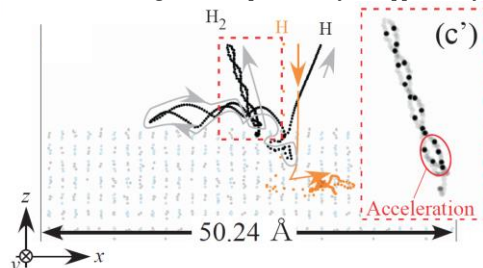


図2 壁表面で水素分子が形成される例[4]

(Copyright: The Japan Society of Applied Physics)

参考文献

- [1] S. Saito *et al.*, Contrib. Plasma Phys. e201900152 (2020).
- [2] S. Saito *et al.*, Plasma Fusion Res., **15** (2020) 2403073.
- [3] K. Sawada *et al.*, Contrib. Plasma Phys. e201900153 (2020).
- [4] S. Saito *et al.*, Jpn. J Appl. Phys., **60** (2021) SAAB08.