

プラズマ対向材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 for Hydrogen Recycling
on Plasma Facing Materials

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
SAITO Seiki¹, NAKAMURA Hiroaki^{2,3}, SAWADA Keiji⁴, KOBAYASHI Masahiro^{2,5},
KAWAMURA Gakushi^{2,5}, HASUO Masahiro⁶

¹山形大, ²核融合研, ³名大, ⁴信大, ⁵総研大, ⁶京大

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

1. 研究背景と目的

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。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]およびタングステン壁[4]ターゲットに開発した計算モデルについて説明する。

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。タングステン壁水素リサイクリングモデルの例を図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原子をbcc結晶となるように配置した構造を作成する。次に、複数の水素原子を作成したタングステン材中のランダムな位置に配置し、アニールすることで水素を含むタングステン材を作成する。このように作成した標的材に水素原子をz軸に平行に入射エネルギー100eVで一発打ち込む計算を行う。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。標的材の水素・タングステン原子比(H/W)を変え、リサイクリング過程の変化を調べる。

3. シミュレーション結果

タングステン壁リサイクリングモデルから得られた結果の例として、放出水素原子・分子数のH/W依存性を図2に示す。H/Wの増加にともない反射する水素原子数が減少することや水素分子の放出数が増加することなどがわかる。

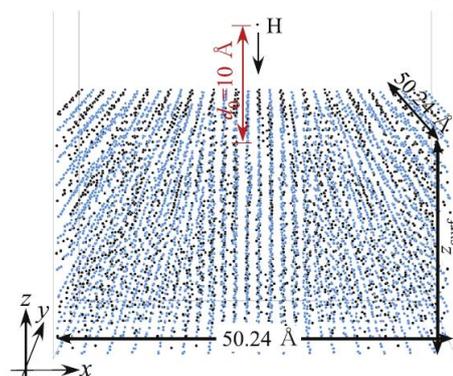


図1 分子動力学法によるタングステン壁水素リサイクリングモデル[4]

(Copyright: The Japan Society of Applied Physics)

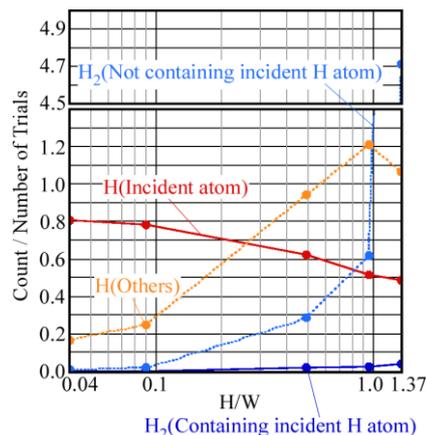


図2 タングステン壁から放出された水素原子・分子数のH/W依存性

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.