

S1-5

分子動力学に基づく水素リサイクリングモデルの原型炉への適用

Application of hydrogen recycling model based on molecular dynamics to DEMO reactor

齋藤誠紀¹, 中村浩章^{2,3}, 澤田圭司⁴, 星野一生⁵, 小林政弘^{2,6}, 蓮尾昌裕⁷

小島翔樹¹, 飯田聖人¹, 土居健志⁴,

SAITO Seiki¹, NAKAMURA Hiroaki^{2,3}, SAWADA Keiji⁴, HOSHINO Kazuo⁵,
KOBAYASHI Masahiro^{2,6}, HASUO Masahiro⁷, *et al.*

¹山形大, ²核融合研, ³名大, ⁴信大, ⁵慶大, ⁶総研大, ⁷京大

¹Yamagata Univ., ²NIFS, ³Nagoya Univ., ⁴Shinshu Univ., ⁵Keio Univ., ⁶SOKENDAI, ⁷Kyoto 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。本研究では、LHDの炭素壁[1-3]をターゲットにした計算モデルをタングステン壁[4]に拡張し、DEMO炉の周辺プラズマ挙動に壁でのリサイクリングがどのように影響するのかを解明することを目指す。

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。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。特定の入射エネルギーで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・分子の並進エネルギーと振動・回転準位の分布、放出角の分布を得る。水素の入射エネルギーと標的材の水素・タングステン原子比(H/W)の値を変え、リサイクリング過程の変化を調べる。

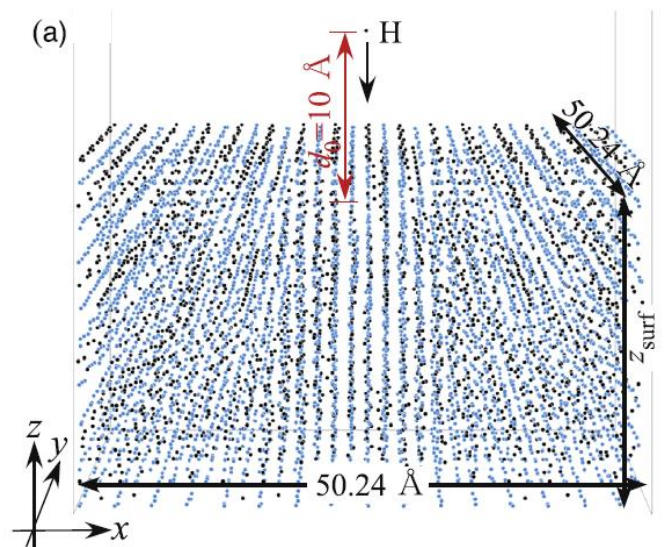


図1 分子動力学法によるタングステン壁水素リサイクリングモデル[4]

(Copyright: The Japan Society of Applied Physics)

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、入射エネルギーを100 eVに固定し、放出水素原子・分子数のH/W依存性を図2に示す。「H(Incident atoms)」は入射原子が反射した場合を、「H(Others)」は標的材の中の水素原子がはじき出された場合を、「H₂(Containing incident H atom)」は入射水素原子を含む分子が放出した場合を、「H₂(Not Containing incident H atom)」は入射水素を含まない水素分子が放出された場合を示す。グラフから、H/Wの増加にともなう反射する水素原子数が減少し水素分子の放出数が増加することがわかる。また、H/Wが0.04のときときでも、約5分の1程度の水素は分子の形で放出されることがわかる。

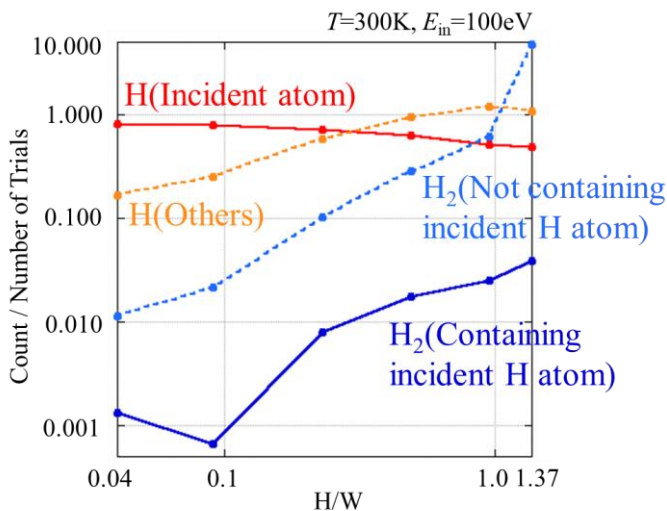


図2 タングステン壁から放出された水素原子・分子数の H/W 依存性

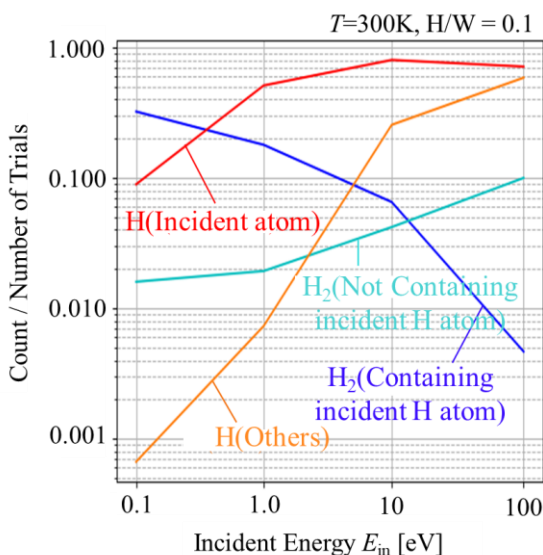


図3 タングステン壁から放出された水素原子・分子数の入射エネルギー依存性

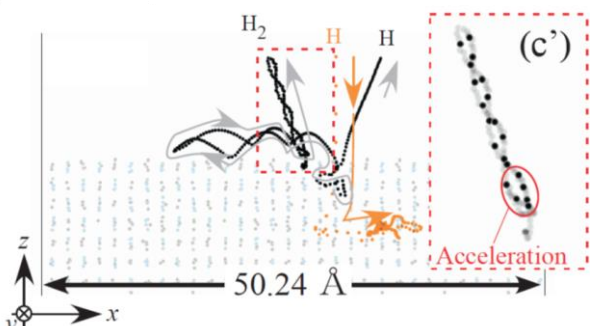


図4 タングステン壁表面での水素分子形成過程の例 [4]

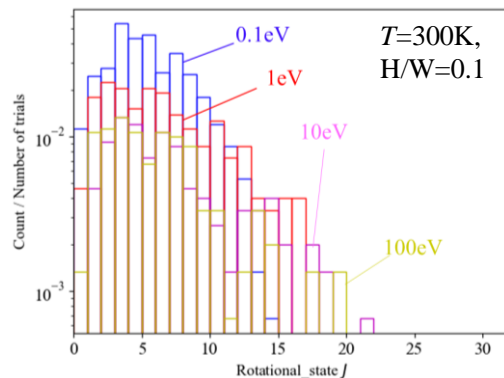


図5 放出水素分子の回転準位分布の入射エネルギー依存性

H/W の値を 0.1 に固定した場合の放出水素原子・分子数の入射エネルギー依存性を図 3 に示す。入射エネルギーが小さくなるほど水素原子の放出数が減り、分子の放出数が大きくなるのがわかる。特に、分子放出に関しては、入射水素を含む分子の放出は入射エネルギーの減少とともに減るが、入射水素を含む分子の放出が増加する。タングステン壁の場合、壁表面に水素原子が束縛され、束縛された水素原子が表面を移動する間に、表面に存在する別の水素原子と結合し、分子が形成され放出される過程があることが原子の軌道解析から分かった。この様子を図 4 に示す。入射水素（橙色）によりはじき出された水素原子（黒色）がタングステン表面から放出される際、材料表面の結合エネルギーにより表面に束縛され、長時間表面にとどまっている事が確認できる。そして、最終的に、表面の別の水素原子と結合し分子となって表面から放出している。表面結合エネルギーは約 1eV であるので、これよりも入射エネルギーが低い場合、入射水素は材料表面に高い確率で束縛され、図 4 に示した過程を経て分子を形成し放出する。そのため、入射エネルギーの低下とともに、入射水素を含む分子の放出が大きくなる事が理解される。

放出水素分子の回転準位分布の入射エネルギー依存性を図 5 に示す。図に示されるとおり、入射エネルギーが低い場合でも、比較的高い回転準位の分子が存在することがわかる。以上の事から、非接触条件での運転が想定される原型炉の周辺プラズマにおいて、ダイバータへ入射する低エネルギーの水素原子が高い回転・振動準位の分子を生み出し、周辺プラズマ挙動に影響する可能性が示唆される。

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.