

## Modeling of Hydrogen Recycling Process

## on Plasma Facing Walls by Molecular Dynamics Method

齋藤誠紀<sup>1)</sup>, 中村浩章<sup>2,3)</sup>, 澤田圭司<sup>4)</sup>, 星野一生<sup>5)</sup>, 小林政弘<sup>2)</sup>, 蓮尾昌裕<sup>6)</sup>  
SAITO Seiki<sup>1)</sup>, NAKAMURA Hiroaki<sup>2,3)</sup>, SAWADA Keiji<sup>4)</sup>, HOSHINO Kazuo<sup>5)</sup>,  
Kobayashi Masahiro<sup>2)</sup>, HASUO Masahiro<sup>6)</sup>

1)山形大、2)NIFS、3)名大、4)信大、5)慶大、6)京大)

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

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。デタッチメント下における周辺プラズマの挙動を正確に理解する為には、分子過程を考慮した中性粒子輸送計算が助けになる。しかし、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。

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。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し、複数の水素原子をタングステン中のランダムな位置に配置した。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。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。

計算結果を図2に示す。H/Wが大きくなると、反射する水素原子数は減少、はじき出しにより放出される水素原子数は増加することがわかった。これは、入射水素と質量が等しい水素が標的材中

に増加することで、入射エネルギーがより効果的に標的材中水素へ移り、はじき出しが起こりやすくなるためだと考えられる。また、H/Wの増加に伴い、水素分子放出数も指数関数的に増加する。H/W=0.04程度の場合でも、放出する水素原子の1/5程度は分子として放出することがわかり、タングステン材の場合でも水素分子の放出を無視できないことが示された。

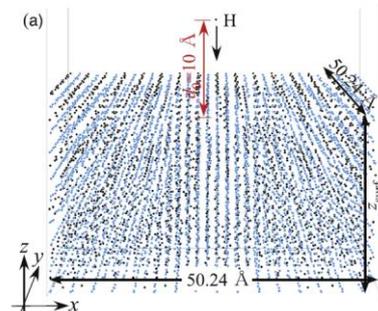


図1 分子動力学法によるタングステン壁水素リサイクリングモデル[4]  
(Copyright: The Japan Society of Applied Physics)

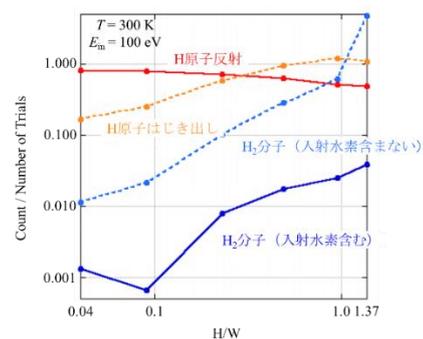


図2 放出水素原子数・分子数のH/W依存性

## 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.