

プラズマ固体相互作用解析のための階層シミュレーション  
**Hierarchical Simulations for Analysis of Plasma-material Interaction**

中村浩章<sup>1,2</sup>、伊藤篤史<sup>1</sup>、高山有道<sup>1</sup>、斎藤誠紀<sup>2</sup>  
 NAKAMURA Hiroaki<sup>1,2</sup>, ITO M. Atsushi<sup>1</sup>, TAKAYAMA Arimichi<sup>1</sup>, SAITO Seiki<sup>2</sup>

<sup>1</sup>核融合研、<sup>2</sup>名大エネルギー理工  
<sup>1</sup>NIFS, <sup>2</sup>Nagoya Univ.

プラズマ壁相互作用について、原子レベルからのダイナミクス解明を目指して、分子動力学(MD)法・二体衝突近似(BCA)法といったシミュレーション技法の開発を行ってきた。当面の研究対象としては、CFC(Carbon Fiber Composite：炭素繊維強化炭素)への水素原子の照射を想定してきた。実際のダイバータ板(CFC)は、図1に示す通り、階層構造になっている。このような系の水素照射に対する反応を調べるため、炭素同素体である(i)グラフェン、(ii)グラファイト、(iii)ダイヤモンドを扱えるようになった[1-4]。

具体的な成果の一例として、グラファイト材料の表面結晶構造の違いによって水素入射による化学スパッタリングのメカニズムが大きく変わることを明らかにした。

また、BCA 法については、任意の原子配置をもつ標的材料を取り扱えるように改良した ACVT(Atomic Collision in Any Target) コードを開発した[5,6]。さらに、追跡対象粒子の運動エネルギーが高い間は ACVT 法を用いて粒子追跡を行い、衝突によって運動エネルギーを失って閾値以下になったところで MD 法に切り替える BCA-MD ハイブリッドシミュレーションコードも開発した。このハイブリッドコードを用いた研究成果として、一辺がサブマイクロメートル程度の大きさの単結晶グラファイトへの水素原子照射(入射エネルギー 1 keV) 反応の解析があげられる。

さらに、炭素以外の素材への適応を想定し、現在密度汎関数(DFT)法を用いて、タングステン中のヘリウム捕獲エネルギーの計算[8]や、MDに必要なポテンシャルモデルの開発[7]を行っている。

参考文献

- [1]. A. Ito, H. Nakamura, Japanese Journal of Applied Physics, **47**, 4715 (2008).
- [2]. H. Nakamura, A. Takayama, A. Ito, Contributions to Plasma Physics. **48**, 265 (2008)
- [3]. A. Ito, et al., Plasma and Fusion Research **5** S2020 (2010).
- [4]. H. Nakamura, et al., Japanese Journal of Applied Physics **50**,01AB04 (2011)
- [5]. A. Takayama, et al., Japanese Journal of Applied Physics **50**,01AB03 (2011)
- [6]. S. Saito, et al., Journal of Nuclear Materials **415**, S208 (2011)
- [7]. 伊藤、他、第 29 回プラズマ核融合学会年会、27E39P.
- [8]. 高山、他、第29回プラズマ核融合学会年会、30E28P

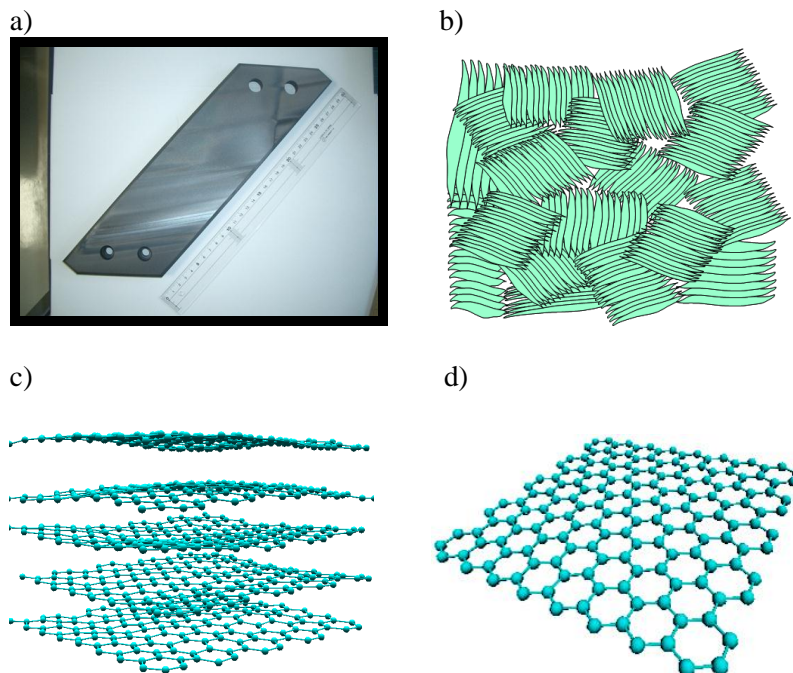


図1. 炭素ダイバータ板の階層構造  
 LHD で使われたダイバータ板(a). 多結晶グラファイト(b), 単結晶グラファイト(c)、グラフェン(d)のイメージ図。