

令和 4 年 6 月 26 日現在

機関番号：11501

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2021

課題番号：18K13528

研究課題名（和文）熱過程を考慮した分子計算によるダイバータ損耗・蓄積にHeバブルが及ぼす影響の解明

研究課題名（英文）Effects of He bubbles on erosion and retention on divertor by molecular simulation considering thermal processes

研究代表者

齋藤 誠紀 (Saito, Seiki)

山形大学・大学院理工学研究科・准教授

研究者番号：40725024

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：ITERや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。そこで、本研究では、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した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近年、持続可能な開発目標としてSDGsの達成が求められているが、核融合発電技術は、エネルギー枯渇の心配が無く安全な発電技術として注目されている。その一方式である磁場閉じ込め核融合方式において、炉心プラズマの性能を維持しつつ炉壁への負荷を下げる方法として周辺プラズマの非接触化が進められている。炉壁から放出される水素分子が関与する再結合過程が非接触化した周辺プラズマの挙動に大きく影響する可能性が示唆されている。本研究により、炉壁から放出される水素分子の振動・回転準位が得られたことで、中性粒子輸送過程をより正確に計算でき、非接触化した周辺プラズマ挙動を理解する一助となる。

研究成果の概要（英文）：In magnetic confinement devices such as ITER and LHD, the transport of hydrogen atoms and molecules in the edge plasma has a significant role on the refueling and plasma confinement performance for core plasma. Plasma particles are transported to the core plasma through repeated recombination and ionization in edge plasma. It is known that the rate coefficients of molecular active recombination, represented by dissociative and charge exchange recombination, strongly depend on the vibrational and rotational states of the molecules. Therefore, in this study, the translational, vibrational, and rotational energies and the distribution of vibrational and rotational levels of hydrogen atoms and molecules emitted from the tungsten wall are calculated by molecular dynamics simulation.

研究分野：核融合科学

キーワード：分子過程 プラズマ対向壁 核融合 水素リサイクリング

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

磁場閉込め核融合装置では、燃料（水素同位体）やヘリウム（He）灰等が磁力線に沿って炉心プラズマからダイバータ（プラズマと直接接する部分）へと輸送される。燃料（水素同位体）のダイバータへの蓄積やスパッタなどによる不純物の発生と損耗を十分に抑えなければ、磁場閉込め核融合装置の実現は難しい。

現在、フランスで建設中の ITER では、W 材がダイバータの有力な候補である。W 材に He プラズマが照射されると、W 材中に He バブルが成長することが知られている。He バブルの発生により、燃料粒子等のダイバータへの吸収率やスパッタリング率が変化すると予想される。ITER での D-T 反応実験を控える今、核燃焼により生じる He 灰がダイバータでのプラズマ-材料相互作用に及ぼす影響を入念に調査・予測する必要がある。

名古屋大学や北海道大学など、いくつかの研究グループにより、W 材への He 含有水素プラズマ照射実験が行われている。しかし、その結果は実験毎に異なり、定性的な理解ですら不十分である。特に、材料への He 蓄積（およびバブル形成）が、スパッタリング率を増加させるのか減少させるのかという基本的な問いですら、統一見解が得られていない。

2. 研究の目的

本研究は当初、ヘリウムバブルの存在が核融合炉タングステン壁に与える影響を熱過程を考慮して理解することに焦点を当て開始した。タングステン-ヘリウムポテンシャル[1]の導入や、拡散コード FACE との連携、ヘリウムバブルが中性子輸送過程（図1）に与える影響などの計算を進める中、タングステン壁で生じる重要な物理現象の中でも、水素分子のリサイクリング過程を理解することが近年注目されているデタッチドプラズマにおける周辺プラズマの挙動理解につながることに気が付いた。そこで、研究の焦点をタングステン壁上での水素リサイクリング過程に切り替え、以下に記すことを目的に研究を進めた。

ITER や LHD などの磁場閉込め装置において、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、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。

$E_{in}=1.0\text{ MeV (Target-}^4\text{He)}$

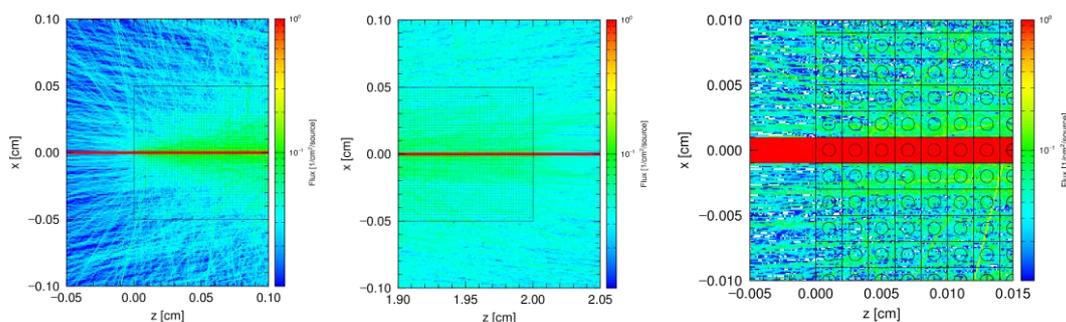


図1 ヘリウムバブルが存在するタングステン材に照射された中性子線の軌跡 [2]

3. 研究の方法

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[3, 4]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2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。また、熱過程を考慮するため、標的材の端部を熱伝導方程式と接する熱浴法の考案も行い実装した[5, 6]。

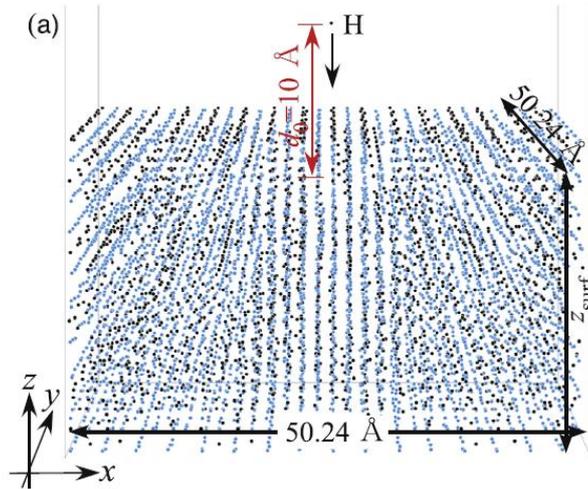


図2 分子動力学法によるタングステン壁水素リサイクリングモデル[7]
(Copyright: The Japan Society of Applied Physics)

4. 研究成果

4. 1 タングステン壁上での水素分子形成の素過程の解明

壁面で水素分子が形成される過程を図3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。

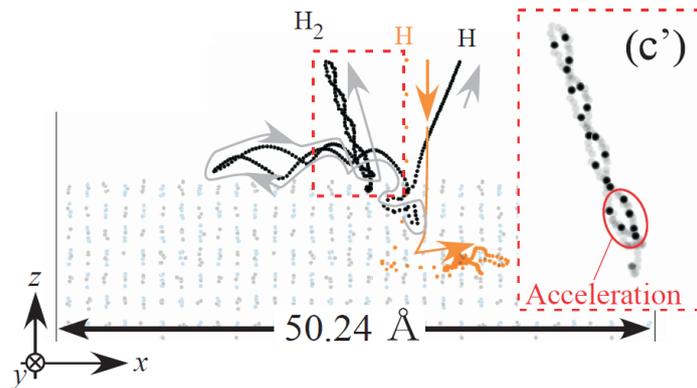


図3 壁表面で水素分子が形成される例[7]
(Copyright: The Japan Society of Applied Physics)

4. 2 古典タングステン - 水素ポテンシャルと第一原理計算の比較

上述の水素分子形成過程では、壁表面の水素原子を束縛するポテンシャル井戸（表面結合エネルギー）が重要な役割を果たす。そこで、実装したEAMポテンシャルとOpenMXを用いた第一原理計算と結果を比較し、ポテンシャル井戸の確かさを確認した。その結果を図4に示す。タングステン壁面と水素原子の相互作用エネルギーの壁面に垂直方向の距離の依存性のグラフである。この結果から、EAMポテンシャルの方が第一原理計算の方がより井戸を浅く見積もっており、実際には、水素原子は、古典MDの計算結果よりもより束縛されやすい可能性があることが分かった。

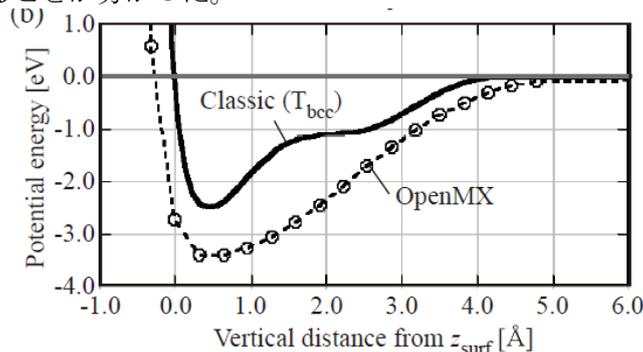


図4 タングステン壁上のポテンシャル井戸[7]
(Copyright: The Japan Society of Applied Physics)

4. 3 回転エネルギー・振動エネルギーの評価

水素リサイクリングにおいて、高い振動・回転準位を有する水素分子が存在すると、荷電交換再結合、解離性再結合などの分子活性再結合のレート係数が高くなることが知られている。そこで、タングステンへ壁から放出した水素分子の振動・回転準位を計算した。 $H/W=0.49$ 、300Kの標的材に、入射エネルギー100 eVで水素が入射した場合に放出される水素分子の振動エネルギーおよび回転エネルギーの分布を図5に示す。結果から、熱エネルギーと比して格段に高いエネルギー（1eV程度）を有する水素分子が存在することが示された。

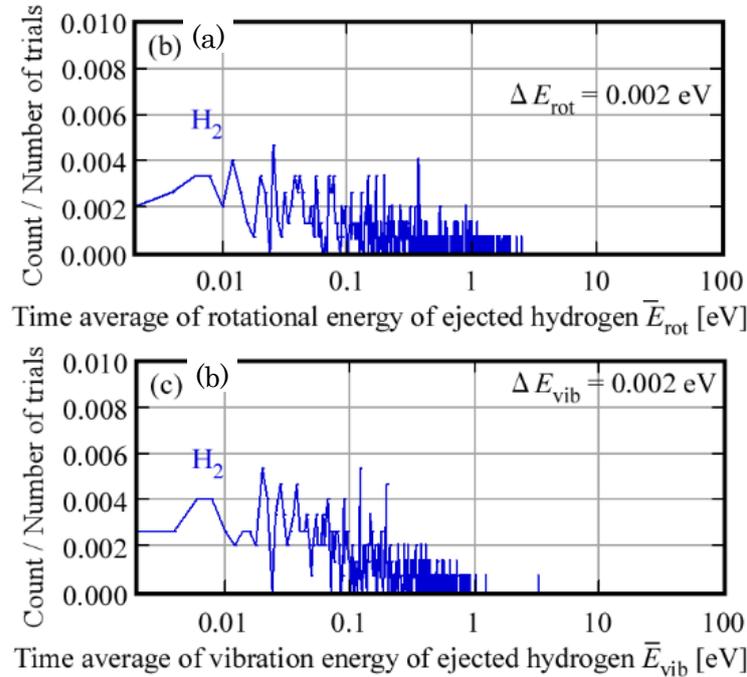


図5 放出された水素分子の(a)回転エネルギー分布および(b)振動エネルギー分布[7]
(Copyright: The Japan Society of Applied Physics)

2. 4 タングステン壁におけるリサイクリング水素のH/W依存性の調査

タングステン壁水素リサイクリングモデルを H/W の値が異なる複数の標的材に適用し、放出水素原子・分子数の H/W 依存性を調べた。標的材の温度は 300K、入射エネルギーは 100eV とした。結果を図 6 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。

2. 6 タングステン壁における放出分子の振動・回転準位の見積もり

タングステン壁の分子動力学計算に用いている EAM ポテンシャルは、真空中の水素分子のエネルギーの精度に問題があったため、振動・回転準位を見積もることができなかった。そこで、水素分子が真空中に放出した際、より正確なポテンシャル[8]へ切り替えることで、振動・回転準位の見積もりに成功した。図 7 に見積もった回転準位の分布を示す。図から分かる通り、炭素壁と同様、高い回転準位の水素分子が存在することが示された。

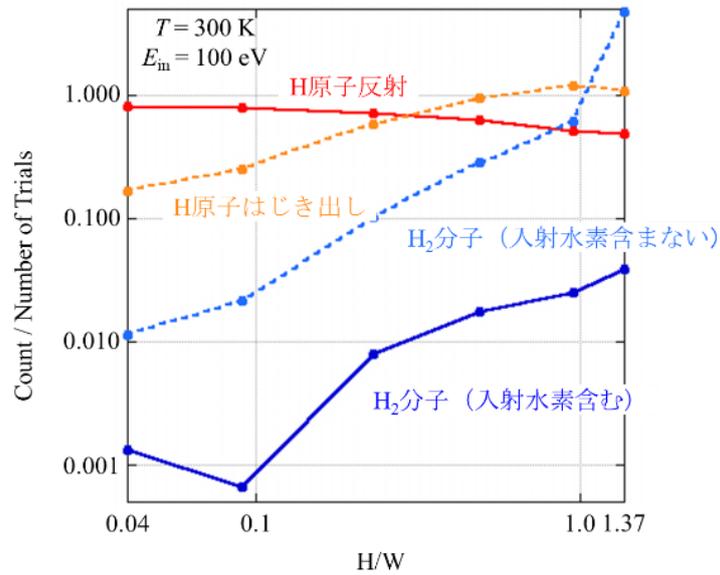


図 6 放出水素原子数・分子数の H/W 依存性

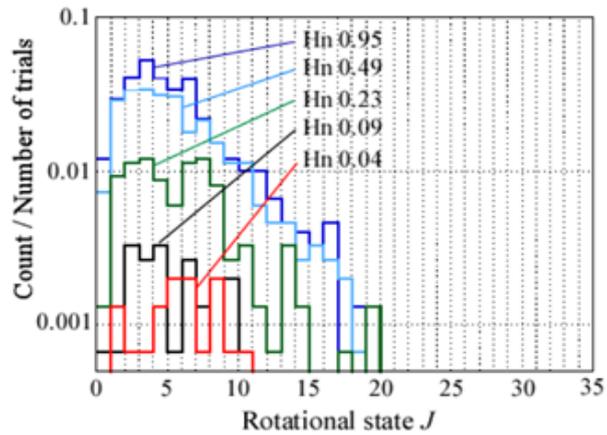


図 7 放出水素分子の回転準位の分布

参考文献

- [1] A. M. Ito, Phys. Scr., T159 (2014) 014062.
- [2] S. Saito et al., Proc. JSST 2019, Day1 62.
- [3] Li-Fang Wang et al., J. Phys. Condens. Matter, 29 (2017) 435401.
- [4] R. D. Smirnov et al., Nuclear Fusion, 58 (2018) 126016.
- [5] S. Saito et al., Contrib. Plasma Phys. e201900152 (2020).
- [6] S. Saito et al., Plasma Fusion Res., 15 (2020) 2403073.
- [7] S. Saito et al., Jpn. J Appl. Phys., 60 (2021) SAAB08.
- [8] L. Wolniewicz, J. Chem. Phys., 103 (1995) 1792.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 9件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Seiki Saito, Hiroaki Nakamura, Keiji Sawada, Masahiro Kobayashi, Gakushi Kawamura, Takumi Sawada, and Hasuo Masahiro	4. 巻 60
2. 論文標題 Molecular dynamics simulation for hydrogen recycling on tungsten divertor for neutral transport analysis	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SAAB08
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.35848/1347-4065/abc105	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Saito Seiki, Nakamura Hiroaki, Sawada Keiji, Kawamura Gakushi, Kobayashi Masahiro, Hasuo Masahiro	4. 巻 none
2. 論文標題 Molecular dynamics simulation model of hydrogen recycling on carbon divertor for neutral transport analysis in large helical device	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Contributions to Plasma Physics	6. 最初と最後の頁 e201900152
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/ctpp.201900152	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 K. Sawada, H. Nakamura, S. Saito, G. Kawamura, M. Kobayashi, K. Haga, T. Sawada, M. Hasuo	4. 巻 none
2. 論文標題 Neutral-Transport Code for Rovibrational Population Calculation of Molecular Hydrogen in LHD Plasmas	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Contributions to Plasma Physics	6. 最初と最後の頁 e201900153
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/ctpp.201900153	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 S. Saito, H. Nakamura, K. Sawada, M. Kobayashi, G. Kawamura, M. Hasuo	4. 巻 -
2. 論文標題 Development of Simulation Model of Hydrogen Recycling on Carbon Divertor by Molecular Dynamics Simulation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Proceedings of ICMSquare 2018	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 I. Kawata, H. Nakamura, Y. Fujita, S. Saito	4. 巻 -
2. 論文標題 Electromagnetic field analysis of the microwave jet plasma generator using the FDTD method	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Proceedings of JSST 2018	6. 最初と最後の頁 42-45
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 S. Fueki, H. Nakamura, S. Saito	4. 巻 -
2. 論文標題 The Effect of Helium Plasma Irradiation to Tungsten Materials with Helium Bubbles	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Proceedings of JSST 2018	6. 最初と最後の頁 46-49
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 K. Suzuki, H. Nakamura, S. Saito	4. 巻 -
2. 論文標題 Neutron irradiation simulation on tungsten materials by PHITS code	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Proceedings of JSST 2018	6. 最初と最後の頁 39-41
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 S. Saito, H. Nakamura, K. Sawada, M. Kobayashi, G. Kawamura, M. Hasuo	4. 巻 -
2. 論文標題 Molecular Dynamics Simulation of Ion Implantation with Heat Transfer into Bulk	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Proceedings of JSST 2018	6. 最初と最後の頁 80-83
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 S. Saito, H. Nakamura, K. Suzuki	4. 巻 -
2. 論文標題 Neutron Irradiation Effects on Bubble Formed Tungsten Material	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Proceedings of ISPlasma 2019	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計14件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 11件)

1. 発表者名 Seiki Saito, Hiroaki Nakamura, Keiji Sawada, Masahiro Kobayashi, Gakushi Kawamura, Masahiro Hasuo
2. 発表標題 Numerical Simulation for Dynamics of Hydrogen Molecules from Inside of Divertor Material to SOL Plasmas
3. 学会等名 AAPPS-DPP2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Seiki Saito, Hiroaki Nakamura, Keiji Sawada, Masahiro Kobayashi, Gakushi Kawamura, Masahiro Hasuo
2. 発表標題 Molecular Dynamics Simulation on Hydrogen Recycling on Plasma Facing Materials
3. 学会等名 ISPlasma2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Seiki Saito, Hiroaki Nakamura, Keiji Sawada, Masahiro Kobayashi, Gakushi Kawamura, Masahiro Hasuo
2. 発表標題 Incident angle dependence of the atomic and molecular emission on hydrogen recycling on plasma facing materials
3. 学会等名 PSI2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1 . 発表者名 S. Saito, H. Nakamura, K. Sawada, M. Kobayashi, G. Kawamura, and M. Hasuo
2 . 発表標題 Molecular Dynamics Simulation for Hydrogen Recycling on Carbon Divertor
3 . 学会等名 4th International Workshop on Models and Data for Plasma-Material Interaction in Fusion Devices (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 S. Saito, H. Nakamura, K. Sawada, M. Kobayashi, G. Kawamura, and M. Hasuo
2 . 発表標題 Molecular Dynamics Simulation Model of Hydrogen Recycling on Tungsten Divertor for Neutral Transport Analysis in Fusion Device
3 . 学会等名 12th International Symposium on Advanced Plasma Science and its Applications for Nitrides and Nanomaterials (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 S. Saito, H. Nakamura, K. Sawada, M. Kobayashi, G. Kawamura, M. Hasuo
2 . 発表標題 Development of Simulation Model of Hydrogen Recycling on Carbon Divertor by Molecular Dynamics Simulation
3 . 学会等名 ICMSquare 2018 (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 I. Kawata, H. Nakamura, Y. Fujita, S. Saito
2 . 発表標題 Electromagnetic field analysis of the microwave jet plasma generator using the FDTD method
3 . 学会等名 JSST 2018 (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 S. Fueki, H. Nakamura, S. Saito
2 . 発表標題 The Effect of Helium Plasma Irradiation to Tungsten Materials with Helium Bubbles
3 . 学会等名 JSST 2018 (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 K. Suzuki, H. Nakamura, S. Saito
2 . 発表標題 Neutron irradiation simulation on tungsten materials by PHITS code
3 . 学会等名 JSST 2018 (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 S. Saito, H. Nakamura, K. Sawada, M. Kobayashi, G. Kawamura, M. Hasuo
2 . 発表標題 Molecular Dynamics Simulation of Ion Implantation with Heat Transfer into Bulk
3 . 学会等名 JSST 2018 (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 S. Saito, H. Nakamura, K. Suzuki
2 . 発表標題 Neutron Irradiation Effects on Bubble Formed Tungsten Material
3 . 学会等名 ISPlasma 2019 (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1. 発表者名 齋藤誠紀, 中村浩章, 澤田圭司, 小林政弘, 河村学思, 蓮尾昌裕
2. 発表標題 炭素壁水素リサイクリングの分子動力学計算
3. 学会等名 プラズマシミュレーションポジウム 2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 齋藤誠紀, 中村浩章, 澤田圭司, 小林政弘, 河村学思, 蓮尾昌裕
2. 発表標題 プラズマ対向壁リサイクリングモデル開発を目指した水素プラズマ照射の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 日本応用数理学会 2018年度年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 齋藤誠紀, 中村浩章, 澤田圭司, 小林政弘, 河村学思, 蓮尾昌裕
2. 発表標題 分子動力学法による炭素壁水素リサイクリングモデルの開発
3. 学会等名 第12回核融合エネルギー連合講演会
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

核融合大型計算機利用研究優秀賞（令和元年度） https://www.qst.go.jp/site/rokkasyo/44094.html

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------