

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 16 日現在

機関番号：13601

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2016

課題番号：25400532

研究課題名(和文) 水素原子・水素分子の内部状態を精密に考慮した核融合周辺プラズマ解析コードの開発

研究課題名(英文) Construction of collisional-radiative models and a neutral transport code with accurate internal states of atomic and molecular hydrogen

研究代表者

澤田 圭司 (SAWADA, Keiji)

信州大学・学術研究院工学系・教授

研究者番号：40262688

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,100,000円

研究成果の概要(和文)： 始状態の振動・回転状態に大きく依存するプラズマ中の水素分子の各種反応の速度係数を計算するため、電子・振動・回転状態の計4133準位を区別した水素分子衝突輻射モデルを構築した。これを用いて原型炉非接触プラズマに水素分子(300 Kのポピュレーション分布)が入射した場合の電子・振動・回転状態ポピュレーションの時間変化を計算して分子活性化再結合等の速度係数を計算した。

我々が従来から開発を進めている中性粒子輸送コードには、水素原子の衝突により水素分子の振動・回転状態が変化する過程を新たに組み込んだ。また方位量子数まで扱う水素原子衝突輻射モデルを構築した。

研究成果の概要(英文)： A rovibrationally resolved collisional-radiative model of molecular hydrogen that includes 4,133 rovibrational levels for electronic states whose united atom principal quantum number is below six is developed. The population distribution of the rovibrational in the electronic ground state in a fusion demo detached divertor plasma is investigated by solving the model time-dependently with an initial 300 K Boltzmann distribution. The effective reaction rate coefficients of molecular assisted recombination and of other processes in which atomic hydrogen is produced are calculated using the obtained time-dependent population distribution.

A neutral transport code including the rovibrational excitation of molecule hydrogen induced by atomic hydrogen, and a collisional-radiative model of atomic hydrogen with the levels specified by the principal and azimuthal quantum numbers are also developed.

研究分野：プラズマ光学

キーワード：水素原子 水素分子 衝突輻射モデル 中性粒子輸送コード 振動状態 回転状態 分子活性化再結合  
非接触プラズマ

## 1. 研究開始当初の背景

核融合発電の実現に向け、ダイバータ板の熱負荷軽減が大きな課題となっている。ITER では、非接触プラズマの利用が想定されているが、非接触プラズマの理解はこれまで十分ではなく、水素分子の関与した分子活性再結合の正確な評価が必要である。世界で広く用いられている中性粒子輸送コード EIRENE による計算では、分子活性再結合の寄与は、装置により様々であるが、ITER では小さいとされている (Progress in the ITER Physics Basis, Chapter 4, Nucl. Fusion 47, S203-S263, (2007))。しかしその計算では水素分子の振動・回転密度分布が考慮されていない。解離性付着 (分子活性再結合反応の内の一過程) の反応速度係数は分子の振動・回転に大きく依存するため、分子活性再結合がこれまで過小評価されている可能性がある。我々が開発を進めている中性粒子輸送コードでも、振動密度分布は考慮されているものの回転密度分布は考慮されていない。

また、中性粒子輸送コード EIRENE では、水素原子と水素分子の衝突による、水素分子の振動・回転励起が考慮されていない。この過程はこれまであまり関心が持たれていないが、この効果を考慮すれば、分子活性再結合の実効的速度係数はさらに大きくなる可能性がある。一方、衝突する水素原子に目を移すと、水素原子は水素分子の解離で生成された直後 3 eV 程度の運動エネルギーをもつが、水素分子と衝突して減速する。このため、水素原子のライマン発光線の輻射輸送 (他の原子による光吸収) の効果が大きくなり、プラズマの実効的な再結合速度係数は、光吸収で励起した原子の電子衝突電離により小さくなる可能性がある。

水素原子衝突輻射モデルは、従来、我々のモデルを含め、主量子数のみ準位が区別されていた。しかしながら、核融合プラズマ中で磁場によるゼーマン効果を考慮した輻射輸送計算を行うには、方位量子数・磁気量子数まで区別したモデルが必要となっていた。

## 2. 研究の目的

上に記した課題を解決するために、水素原子・水素分子の内部状態を精密に考慮した核融合周辺プラズマ解析コードの開発を行うことが目的である。我々は、核融合プラズマの水素原子・水素分子の反応・空間的な流れ、粒子バランス・エネルギーバ

ランスを理解するために、(a) 水素原子衝突輻射モデル、(b) 水素分子衝突輻射モデル、およびこれらを組み込んだ(c) 水素原子・分子中性粒子輸送コードの構築を行ってきた。本研究ではこれらの精密化を進める。

## 3. 研究の方法

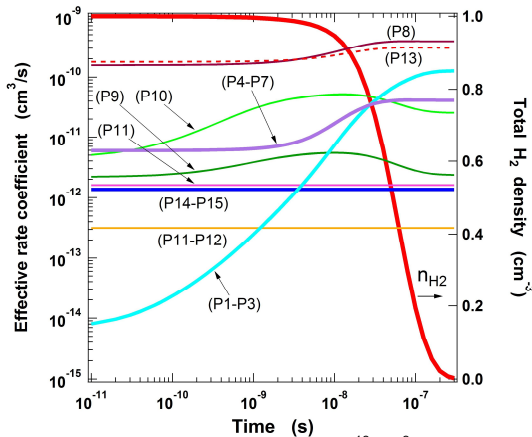
まず我々が開発している水素分子衝突輻射モデルの整備を進める。信州大の RF プラズマで観測される水素分子の発光線強度を用いて、組み込まれている電子衝突励起断面積 (主に電子状態励起) の評価を行う。さらに、電子基底状態の振動・回転ポピュレーション分布の決定のため、電子衝突以外の水素原子衝突・水素分子衝突・プロトン衝突を組み込む。次にこの水素分子衝突輻射モデルを中性粒子輸送コードに組み込み、水素分子の電子・振動・回転状態を考慮した中性粒子輸送コードを構築する。輸送コード中では、水素原子と水素分子との衝突の際の分子の振動・回転励起に伴う原子の運動エネルギーの変化を考慮する。またこれらに加え、主量子数・方位量子数で準位を区別した水素原子衝突輻射モデルを構築する。

## 4. 研究成果

水素分子衝突輻射モデルでは、水素分子の電子・振動・回転状態の計 4133 準位を区別した水素分子衝突輻射モデルを構築した。まず、信州大の RF プラズマで観測される水素分子の発光線強度を再現するように電子衝突励起断面積 (電子状態励起) の補正を行った。

次に、電子基底状態の振動・回転状態ポピュレーションに影響を与える過程として、従来から考慮していた電子衝突のほか、水素原子衝突・水素分子衝突・プロトン衝突を組み込んだ。原型炉 (SlimCS) の非接触ダイバータプラズマに水素分子 (300 K のポピュレーション分布) が入射した場合の電子・振動・回転状態ポピュレーションの時間変化を計算して分子活性化再結合の速度係数を計算したところ、振動・回転準位ポピュレーションの増加に伴い速度係数は増大し、最大で従来考えられているものより 20 倍程度大きくなる結果が得られた (次の表と図)。

Label	Process
(P1)	$H_2(X^1\Sigma_g^+, v, J) + e \rightarrow H_2^- \rightarrow H(p = 1 \text{ or } 2) + H^-$
(P2)	$H^- + H^+ \rightarrow H(1) + H(p = 2 \text{ or } 3)$
(P3)	$H(p = 2 \text{ or } 3) \rightarrow H^* \rightarrow H(1)$
(P4)	$H_2(X^1\Sigma_g^+, v) + H^+ \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+, v') \rightarrow H(1)$
(P5)	$H_2^+(X^2\Sigma_g^+, v') + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+, v'') + e$
(P6)	$H_2^+(X^2\Sigma_g^+, v'') + e \rightarrow H(1) + H(p \geq 2)$
(P7)	$H(p \geq 2) \rightarrow H^* \rightarrow H(1)$
(P8)	$H_2(X^1\Sigma_g^+, v) + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1) + H(1)$
(P9)	$H_2^*(\text{singlet}, v, J) \rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+) + h\nu \rightarrow H(1) + H(1)$
(P10)	$H_2^*(\text{triplet}, v, J) \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + h\nu \rightarrow H(1) + H(1)$
(P11)	$H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H(1) + H(p \geq 2)$
(P12)	$H(p \geq 2) \rightarrow H^* \rightarrow H(1)$
(P13)	$H_2(X^1\Sigma_g^+, v) + H \rightarrow H + H + H$
(P14)	$H^+ + e \rightarrow H(1)$
(P15)	$H^+ + e \rightarrow H^* \rightarrow H(1)$



$T_e = T_{H^+} = T_H = 2\text{eV}$ ,  $T_{H_2} = 1\text{eV}$ ,  $n_e = n_{H^+} = 10^{16}\text{cm}^{-3}$ ,  $n_{H_2} = 10^{15}\text{cm}^{-3}$  のダイバータプラズマに水素分子が入射した場合の水素分子の各種反応速度係数の時間変化。初期励起状態密度は 300K のボルツマン分布。

中性粒子輸送コードでは、これまで水素原子と水素分子間の衝突に関して弾性衝突しか考慮されていなかった。本課題では、水素原子の衝突により水素分子の振動・回転状態が変化する過程(S.A. Wrathmall, D.R. Flower, J. Phys. B, 40, 3221-3230 (2007))を新たに組み込んだ。信州大 RF 放電のプラズマパラメータでは、水素原子の運動エネルギーを決める過程として、水素原子と水素分子の弾性散乱が支配的であり、振動・回転励起の寄与は小さいという結果になった。

水素原子衝突輻射モデルでは、方位量子数まで扱うモデルを構築した。また、主量子数・方位量子数・磁気量子数を区別したモデルを用いて SlimCS の非接触ダイバータプラズマ生成に対する水素原子ライマン線の輻射輸送の影響の評価を行った。磁場(ゼーマン効果)の影響について調べた。ゼーマン分離を計算し、さらに偏光を考慮して光の放出・吸収を計算した結果は、ゼーマン効果を見逃した計算結果と大きな相違がないことがわかった。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

(雑誌論文)(計 10 件)

K. Sawada and M. Goto, Rovibrationally Resolved Time-Dependent Collisional-Radiative Model of Molecular Hydrogen and Its Application to a Fusion Detached Plasma, Atoms, 4(4):29, 1-26 (2016) 査読有

M. Goto, K. Sawada, T. Oishi, S. Morita, Particle source and edge confinement study based on spectroscopic diagnosis in the LHD, Plasma Physics and Controlled Fusion 58, 84001-84005 (2016) 査読有

K. Hoshino, K. Sawada, R. Idei, S. Tokunaga, N. Asakura, K. Shimizu, N. Ohno, Photon Trapping Effects in DEMO Divertor Plasma, Contrib. Plasma Phys. 56, 657-662 (2016) 査読有

K. Fujii, K. Sawada, M. Goto, S. Morita, M. Hasuo, Hydrogen atomic and molecular emission locations and intensities in the LHD edge plasma determined from simultaneously observed polarization spectra, Plasma Fusion Res. 10, 3402041-1-5 (2015) 査読有

T. Yoshida, N. Ezumi, K. Sawada, Y. Tanaka, M. Tanaka, K. Nishimura, Numerical Study of the H0 Atomic Density and the Balmer Line Intensity Profiles in a Hydrogen Negative Ion Source with the Effect of Non-Equilibrium Electron Energy Distribution Function, Fusion Science and Technology 67, 650-653 (2015) 査読有

T. Shibata, M. Kashiwagi, A. Hatayama, K. Sawada, T. Inoue, M. Hanada, Numerical Study of the H0 Atomic Density and the Balmer Line Intensity Profiles in a Hydrogen Negative Ion Source with the Effect of Non-Equilibrium Electron Energy Distribution Function, Plasma Fusion Res. 9, 14010101(1-8) (2014) 査読有

M. Goto, K. Sawada, Determination of electron temperature and density at plasma edge in the Large Helical Device with opacity-incorporated helium collisional-radiative model, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 137, 23-28 (2014) 査読有

N. Ezumi, K. Takahashi, T. Yoshida, Y. Hatada, Y. Hayashi, C. Uchiyama, S. Iio, K. Sawada, N. Ohno, Zh. Kiss'ovski, Influence of Plasma-Neutral Collisions on Probe Measurements in Atmospheric Pressure Plasmas, Contributions to Plasma Physics 54, 304-307 (2014) 査読有

N. Ezumi, N. Kodama, K. Akahane, S. Shiozawa, K. Sawada, N. Ohno, Deuterium atomic density estimation in recombining plasmas using self absorption spectroscopy, Journal of Physics: Conference Series 410, 012046 (2013) 査読有

S. Kajita, T. Nishiwaki, N. Ohno, Noriyasu, K. Sawada, M. Takagi, Deuterium atomic density estimation in recombining plasmas using self absorption spectroscopy, IEEJ Transactions on Electrical and Electronic Engineering 8, 1-6 (2013) 査読有

〔学会発表〕(計 14 件)

早川立起, 澤田圭司, 谷口秀夫, 前田晋之介, 大内健, 田中智尋, 秋山真範, 江角直道, 水素分子振動回転状態を考慮した中性粒子輸送コードによる RF プラズマの水素原子・分子発光線解析, プラズマ・核融合学会第 33 回年会, 2016.11.29, 東北大学青葉山キャンパス

谷口秀夫, 澤田圭司, 秋山真範, 田中智尋, 松崎秀平, LE TRUNG TUYEN, 江角直道, 後藤基志, 水素・ヘリウム RF プラズマのエシエル分光器を用いた紫外・可視領域発光線解析, プラズマ・核融合学会第 33 回年会, 2016.11.29, 東北大学青葉山キャンパス

澤田圭司, 電子・振動・回転状態を区別した水素分子衝突輻射モデルの構築, プラズマ・核融合学会第 33 回年会, 2016.11.29, 東北大学青葉山キャンパス

Keiji Sawada, Collisional-radiative model of molecular hydrogen. IAEA CRP on atomic and molecular data for state-resolved modelling of hydrogen and helium and their isotopes in fusion plasma, 2016.3.14, IAEA Headquarters, Vienna, Austria

後藤基志, 澤田圭司, LHD における中性粒子電離位置に関する考察, プラズマ・核融合学会第 3 2 回年会, 2015.11.26, 名古屋大学東山キャンパス

日高慎一, 澤田圭司, 松本展明, 木ノ脇慎平, 早川立起, 谷口秀夫, 重水素分子衝突輻射モデルの構築. プラズマ・核融合学会第 3 2 回年会, 2015.11.24, 名古屋大学東山キャンパス

木ノ脇慎平, 早川立起, 谷口秀夫, 松本展明, 澤田圭司, 後藤基志, RF ヘリウムプラズマにおけるヘリウム原子の励起準位ポピュレーションバランス. プラズマ・核融合学会第 3 2 回年会, 2015.11.25, 名古屋大学東山キャンパス

澤田圭司, 坂本隆一, 後藤基志, 中村浩章, 斎藤誠紀, LHD 第一壁に入射する水素原子・ヘリウム原子エネルギー分布の中性粒子輸送コードを用いた計算. プラズマ・核融合学会第 3 2 回年会, 2015.11.24, 名古屋大学東山キャンパス

田中大介, 西山直登, 木ノ脇慎平, 日高慎一, 谷口秀夫, 早川立起, 藤原大輔, 吉田拓, 澤田圭司, RF プラズマにおける水素・重水素およびヘリウムの発光線解析, プラズマ・核融合学会第 3 1 回年会 PLASMA2014, 2014.11.18, 朱鷺メッセ新潟コンベンションセンター

鈴木敬弘, 山本海地, 宮本雄矢, 澤田圭司, 後藤基志, ヘリウム原子発光線の輻射輸送収束計算, プラズマ・核融合学会第 3 1 回年会 PLASMA2014, 2014.11.18, 朱鷺メッセ新潟コンベンションセンター

澤田圭司, 藤井恵介, 後藤基志, 蓮尾昌裕, LHD における水素原子・分子およびヘリウム原子の発光線解析, プラズマ・核融合学会第 3 1 回年会 PLASMA2014, 2014.11.18, 朱鷺メッセ新潟コンベンションセンター

鈴木敬弘, 澤田圭司, 出井諒, 時間依存シュレディンガー方程式による水素原子の電子衝突励起断面積の計算, プラズマ・核融合学会第 3 0 回年会, 2013.12.5, 東京工業大学大岡山キャンパス

谷口和成, 澤田圭司, 鈴木岳, 江角直道, 電子・振動・回転状態を考慮した水素分子衝突輻射モデルの構築, プラズマ・核融合学会第 3 0 回年会, 2013.12.5, 東京工業大学大岡山キャンパス

出井諒, 澤田圭司, 水素原子の輻射輸送を考慮した水素原子・分子中性粒子輸送コードの構築, プラズマ・核融合学会第 3 0 回

会，2013.12.5，東京工業大学大岡山キャンパス

## 6 . 研究組織

### (1)研究代表者

澤田 圭司 (SAWADA, Keiji)  
信州大学・学術研究院工学系・教授  
研究者番号：40262688