

報告番号	甲 第 10332 号
------	-------------

主 論 文 の 要 旨

論文題目 分子シミュレーションを用いたプラズマ照射下での炭素
ダイバータ板損耗過程および水素蓄積過程の解明

氏 名 齋藤 誠紀

論 文 内 容 の 要 旨

磁場閉じ込め核融合では、磁場によってプラズマを容器に閉じ込める。磁力線終端はダイバータ板に接続されている。ダイバータ板は、磁力線に沿って輸送されてきた不純物をプラズマから取り除く役割を担っている。ダイバータ板はプラズマに直接接触するため、プラズマ照射にともなうダイバータ板の損耗と水素同位体の蓄積が問題となる。核融合発電を実現するため、損耗過程と水素同位体蓄積過程のメカニズムを明らかにし、それらの知見を活かして耐プラズマ特性に優れた材料を開発することが求められる。

ダイバータ板などのプラズマ対向材は、イオン、電子、高速中性子、X線などに晒される。そこで、プラズマ対向材には、(1) 低水素同位体蓄積、(2) 低スパッタリング、(3) 高耐熱、(4) 高耐放射線の四つの性質が要求される。そこで、本研究では、プラズマと材料の相互作用を原子スケールで解明し、耐プラズマ特性に優れた材料を開発するための知見を得ることを目的とした。プラズマ対向材として要求される四つの性質のうち、特に、水素同位体の蓄積過程に焦点を絞り、炭素材料と水素プラズマの相互作用を主に解明した。

様々なメーカーが独自の方法で材料を製造しており、種々の材料に対して数多くの測定が行われている。そして、製造方法によって材料の物理特性にはばらつきが生じることがわかっている。物理特性が大きく異なる原因は、材料を構成する原子同士の化学結合や原子配位の違いに起因している。物理特性が材料ごとに異なる原因を探るためには、化学的な視点に立ち、材料の原子配位に注目して、材料原子とプラズマ粒子の相互作用を考えなければならない。実験的手法により、材料構造のいかなる違いがその物理特性に影響しているのかを解明しようとする試みがなされている。しかし、実験的手法によって得られる情報は、その材料に限定された知見であり、プラズマ 材料相互作用を体系的に理解するには限界がある。また、材料の詳細な原子配位はその製造元ですら把握していないことが多く、材料の物理特性を、材料を構成する原子一つ一つの動的挙動に還元することは実験的手法では難しい。そこで、本研究では、実験的手法に変わる研究手法として、原子一つ一つの動きを計算し、材料に照射された原子の動的挙動をミクロスコピックな視点から解明する数値計算手法を確立した。

本研究では、分子動力学法および二体衝突近似法を用いる。プラズマ対向材には、数 eV から数 keV 程度のエネルギー範囲でイオンが入射する。低エネルギーでイオンがプラズマ対向材に入射する場合、化学反応や多体相互作用が材料中の原子の運動に影響する。このような条件においては、分子動力学法が有効である。一方、入射エネルギーが数百 eV を超える場合には、電子励起によるエネルギー損失が入射原子の運動に及ぼす影響を無視できない。このような条件においては、二体衝突近似法が有効である。さらに、本研究では、二体衝突近似法と分子動力学法を組み合わせたハイブリッドシミュレーションを開発し、数 eV から数 keV までの様々な入射エネルギーでプラズマ粒子が材料に飛来するダイバータ板の物理系をサブマイクロメートルスケールで解くことに成功した。

上述したシミュレーション手法を用いて、材料を構成する最小要素から順に大きな要素へと知見を組み上げる。炭素材料と水素プラズマの相互作用を解明するため、まず、炭素材料で最も基本的な構造となるグラフェンと水素原子の相互作用を解明した。次に、グラフェンが層状に積み重なった構造を有する単結晶グラファイトと水素原子の相互作用を解明した。最後に、単結晶グラファイトが様々な結晶角で集合した多結晶グラファイトと水素原子の相互作用を解明した。このように、マクロからミクロへと迫る実験的手法とは逆のアプローチにより、炭素材料への水素原子蓄積過程を原子スケールから解明した。

本論文は五つの章から構成される。以下に各章の概要を述べる。

第 1 章では、本論文の動機づけとなる研究背景と目的を説明する。ダイバータ材の原子スケールの構造についても言及する。

第 2 章では、分子動力学法を用いた研究について述べる。第 2 章は、三つの節から構成される。2.1 節では、分子動力学法の理論を説明する。2.2 節では、グラフェン 水素原子反応を解明した。炭素・ダイバータ板をナノメートルスケールでとらえると、水素原子とグラフェンの相互作用に還元できる。グラフェン 水素原子反応を詳細に解明することで、水素プラズマが炭素・ダイバータ板に照射されたときの水素蓄積過程を解明する手がかりを探った。グラフェンに打ち込まれた水素原子が、吸着・反射・貫通するための入射エネルギーと入射角度について詳細に調べることに成功した。2.3 節では、多結晶グラファイトの粒界の構造を考えるためにアモルファス炭素の構造を解明した。堆積過程によって形成されたアモルファス炭素は、炭素結合の向きに異方性が現れることを発見した。

第 3 章では、二体衝突近似法を用いた研究について述べる。第 3 章は、五つの節から構成される。3.1 節では、二体衝突近似法の理論を説明する。3.2 節では、ACAT コードを基に、任意構造を有する標的材料を扱うことが可能な ACVT コードを新たに開発し、単結晶グラファイトに水素原子を打ち込むシミュレーションを行った。そして、結晶性が入射原子の運動に与える影響を解明することに成功した。特に、材料が結晶構造を有する場合、チャネリングにより材料深部まで到達する水素原子が存在することを突き止めた。さらに、グラフェン層間に水素原子が捕捉され、長距離移動することも突き止めた。3.3 節では、照射損傷による標的材料の構造変化を調べるために、ACVT コードをさらに改良した。プラズマ照射により材料表面の結晶構造が破壊されアモルファス化する過程を調べた。そして、水素蓄積過程への材料構造の動的変化の影響を調べた。材料表面がアモルファス化することで、チャネリングが生じにくくなることを突き止めた。3.4 節では、標的材料原子の熱振動を考慮するように ACVT コードをさらに改良した。単結晶グラファイト (0001) 面へ入射した水

素原子のチャネリング経路は、10 K 程度の材料温度でも熱振動の影響により失われる。一方、グラフェン層間を移動する水素原子は、ダイバータ板使用温度 (600 K 程度) でも、その運動は阻害されにくいことを突き止めた。

第4章では、二体衝突近似法と分子動力学法のハイブリッドシミュレーションを用いた研究について述べる。第4章は、五つの節から構成される。4.1節では、ハイブリッドシミュレーションの概要について説明する。4.2節では、ハイブリッドシミュレーションにおいてエネルギー保存を実現するための方法を説明する。4.3節では、単結晶グラファイトに水素原子を打ち込むハイブリッドシミュレーションを行った。そして、二体衝突近似法の結果と比較し、ハイブリッドシミュレーションの有効性を確かめた。また、グラファイトに入射する水素原子は、グラフェンを構成する sp^2 炭素と共有結合を形成し、グラファイト中に蓄積することを突き止めた。4.4節では、照射損傷による標的材料の構造変化を調べた。ハイブリッドシミュレーションを用いることで、原子構造の化学的安定性を考慮した計算が可能になる。炭素原子の結合成分比の深さ分布などを得ることに成功した。また、原子間に働く多体相互作用により、二体衝突近似法による計算結果よりも早くチャネリング経路が失われることを突き止めた。4.5節では、実際の炭素・ダイバータ板に近い構造である多結晶グラファイトに水素原子を打ち込むシミュレーションを行った。多結晶構造が、入射水素原子の運動に与える影響を解明することに成功した。特に、100 eV 以下のエネルギーで入射する水素原子は、結晶粒中のグラフェン層間に捕捉されて、材料深部まで到達することを示した。また、結晶粒が小さいほど、入射水素の侵入長は短くなることもわかった。

第6章では、本研究の総括および将来の展望を述べる。

本研究では、小さな構造から大きな構造へとシミュレーションスケールを拡大し、材料中の原子挙動に関する知見を得ることに成功した。また、本研究の結果から、ダイバータ板として適する材料構造について若干の示唆を得た。これらの知見は、核融合発電を実現するために不可欠な課題の一つであるダイバータ板へのトリチウム蓄積量を評価する場合などに有用である。また、本研究で確立した数値計算手法により、実験研究と比較検討が可能なスケールの分子シミュレーションが可能になった。本研究で確立した数値計算手法とそれにより得られた知見により、耐プラズマ特性に優れた材料の開発へつなぐと期待する。