

論文審査の結果の要旨および担当者

| | | |
|------|-----|----------|
| 報告番号 | ※ 甲 | 第 10332号 |
|------|-----|----------|

氏 名 齋藤 誠紀

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

論文審査担当者

| | | | |
|----|-----------|-------|-------|
| 主査 | 名古屋大学 | 客員准教授 | 中村 浩章 |
| 委員 | 名古屋大学 | 教授 | 大野 哲靖 |
| 委員 | 名古屋大学 | 教授 | 吉田 隆 |
| 委員 | 名古屋大学 | 准教授 | 伊藤 高啓 |
| 委員 | 産業技術総合研究所 | 主任研究員 | 山田 英明 |

論文審査の結果の要旨

齋藤誠紀君提出の論文「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」は、新たに開発した数値計算手法を用いて、磁場閉じ込め核融合発電炉実現において重要な課題である水素プラズマ照射下での炭素材損耗の時間発展ならびに炭素材への水素侵入長を定量的に明らかにしたものである。本論文は全5章で構成されている。

第1章では、本論文の動機付けとなる研究背景と目的を詳述している。核融合発電技術の概要を説明し、プラズマの安定維持のためにプラズマと壁の相互作用が果たす役割について説明している。

第2章では、分子動力学法を用いた研究について述べている。グラフェンに水素原子を打ち込む分子動力学シミュレーションを行い、水素原子の吸着率、反射率、貫通率のエネルギー依存性を解明した。その結果、入射エネルギーが3 eV程度の場合、水素原子は炭素原子に化学結合しやすいこと、入射エネルギーが20 eVを超えると、水素原子はグラフェンを貫通することを示すことに成功した。さらに、アモルファス炭素の構造にも着目し、堆積過程によって形成されるアモルファス炭素の場合、炭素-炭素結合の向きの分布に異方性が現れることを導いた。

第3章では、二体衝突近似法を用いた研究について述べている。任意の構造を扱うために開発したACV Tコードの特徴とアルゴリズムを説明している。さらに、ACV Tコードを用いて、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い、結晶性が入射原子の運動に与える影響を調べた。その結果、標的材料が結晶構造を有する場合、チャネリングと呼ばれる現象により、材料深部まで水素原子が到達することや、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を発見している。また、標的原子の熱振動が水素蓄積過程に及ぼす影響も調べ、グラフェン層間を移動する水素原子のチャネリングは、600 K程度でも阻害されにくいことを示している。

第4章では、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法による研究について述べている。核融合炉ダイバータ板には、数 eV から数 keV のエネルギーを有する粒子が飛来する。広いエネルギー範囲の物理現象を扱うために、ハイブリッド法を開発した。この方法により、水素プラズマに晒された単結晶グラファイトの表面構造が照射損傷によって変化する過程を調べ、炭素原子の結合成分比の深さ分布を求めた。さらに、実際の炭素ダイバータ板である多結晶グラファイトを模擬した標的材料に、水素原子を打ち込むシミュレーションを行い、多結晶構造が入射水素原子の運動に与える影響を解明した。特に、約 100 eV 以下のエネルギーになると水素原子はグラフェン層間に捕捉される。この層間に補足された水素原子は、結晶内を長距離移動する。そのため、結晶粒が大きいほど入射水素は長距離移動でき、侵入長が長くなることを示した。

第5章では、本研究の総括および将来の展望を述べている。

上記の研究成果は、核融合発電装置炉材中に蓄積した水素同位体の除去技術への応用が期待できる。また、この論文で開発されたハイブリッド法は、核融合分野のみならず、プラズマプロセッシングなどの産業技術分野への貢献も期待できる。プラズマ-材料相互作用を体系立てて理解することで、複雑な材料微細加工技術の開発などにつながる可能性がある。

以上のように、本論文は、炭素材料-水素プラズマ相互作用に関する素過程を原子レベルから明らかにし、核融合発電炉の実現に大きく貢献するものである。更に、工業的に広く用いられている炭素材料のプラズマ処理過程の理解にも資する内容であり、学術上・工学上寄与するところが大きい。よって、本論文の提出者齋藤誠紀君は博士(工学)の学位を受けるに十分な資格があるものと判断した。