

IFERC-CSC 大型計算機利用報告書(プロジェクト枠)

2019 年度

研究課題名	Molecular dynamics simulation of hydrogen recycling in plasma-facing materials for Neutral transport code
上記の頭文字	MD_HRCYC

研究代表者 (PI)・協力者:

研究代表者名	齋藤誠紀 (山形大学)
研究協力者	中村浩章 (核融合科学研究所) 澤田圭司 (信州大学) 河村学思 (核融合科学研究所) 蓮尾昌裕 (京都大学) 小林政弘 (核融合科学研究所)

本研究は、核融合科学研究所共同研究・LHD 計画共同研究課題「分子動力学にもとづく水素プラズマ対向壁リサイクリングモデルの構築による中性粒子輸送コードの精密化と LHD 発光線解析 (代表: 齋藤誠紀、世話人: 小林政弘、研究コード: NIFS16KOAP031)」の一環として実施されました。また、本研究は JSPS 科研費 18K13528 および 19K03800 の助成を受けたものです。

1. 成果の概要 (200字程度)

分子動力学 (MD) 法を用いて炭素壁への水素入射を計算するコードを開発した。また、入射水素の運動エネルギーが熱として周囲へ伝わる様子を模擬するため、熱伝導方程式と接続する計算モデルを開発した。そして、炭素壁から放出される水素原子・分子の放出角分布、並進エネルギー分布、振動・回転準位分布を計算することに成功した。

2. 成果の詳細

2.1. 研究概要

エルゴディック領域・ダイバータ領域等の周辺領域での水素原子分子の輸送や反応は、コアプラズマへの燃料補給やプラズマの閉じ込めに大きな影響を与えると考えられ、それらは炉壁の熱負荷軽減の役割を担うことも期待される。しかし、プラズマ対向壁において反射・放出されるのは原子か分子か (もしくはその比率はどうか)、それらの運動量・運動エネルギー分布はどうか、さらに分子であれば振動・回転状態はどうなっているのかが、その後の粒子の輸送や反応に重要であるにもかかわらず、情報は乏しい。そこで本研究は、これらの情報を分子動力学に基づいて計算する水素プラズマ対向壁リサイクリングモデルを構築した。

2.1. 水素プラズマ対向壁リサイクリングモデル開発 [1]

図 1(a)に示すように、炭素原子 3872 個、水素原子 2080 個からなるアモルファス炭素を用意し、Langevin 熱浴(NVT アンサンブル)を用いて 300 K に保持する。その後、

熱浴を外し(NVE アンサンブル)、アモルファス炭素に水素を 1 原子入射させる。図 1(b)に示すように、水素原子の入射により、水素原子や分子、炭化水素などが標的材から放出される。水素原子入射後 50 ps の間に放出される水素原子・分子・炭化水素の放出角、並進エネルギー、振動エネルギー、回転エネルギー等を調べた。

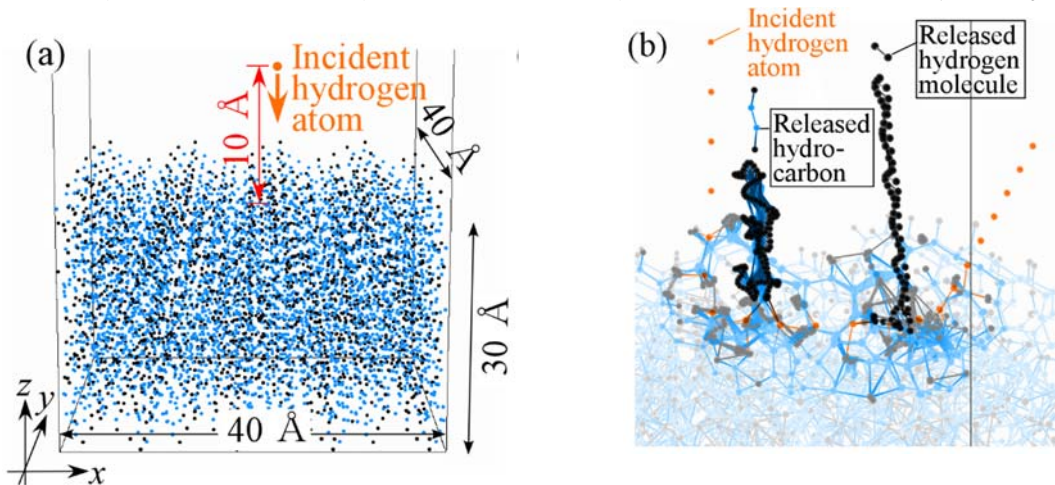


図 1 (a) 炭素壁水素リサイクリングモデルとして計算した分子動力学計算の系、
(b) 水素原子が入射することで一つの水素分子 (H_2) と一つの炭化水素分子 (C_2H_2) が放出する例

2.2. 分子動力学法と熱伝導方程式とのハイブリッド計算法の開発 [2]

分子動力学 (MD) 法を用いて炭素壁への水素入射を計算するコードを開発する際、標的材に入射する水素原子の持つエネルギーが標的材へと伝わる熱伝導を、限られた計算資源でどのように計算するのが課題となった。そこで、分子動力学計算領域の外側にも均一に標的材が分布していると仮定しセルに分割して各セルの持つエネルギーを熱伝導方程式に従って解く計算手法を開発した。分子動力学計算領域の端部は、熱伝導方程式計算領域のセルと重複し、熱伝導方程式で解いた温度と同じになるように速度スケールリング法により各セルに含まれる原子の平均運動エネルギーを調節する。開発した分子動力学法と熱伝導方程式とのハイブリッド計算法を用いて、エネルギー伝搬の時間発展を計算し、両者に顕著な差が無いことを確認した。図 2 は、この計算法を用いて計算した際の標的材の温度の時間発展を示す。はじめ 300K であった標的材の温度は、水素原子の入射により 360K 程度まで上昇する。その後、約 50ps 程度の時間をかけて初期温度まで戻ることがわかる。この計算から、標的材に打ち込まれた水素原子のエネルギー緩和過程は 1ps 程度のスケールで生じるのに対し、標的材からの排熱過程は数十 ps の時間スケールで生じることがわかった。

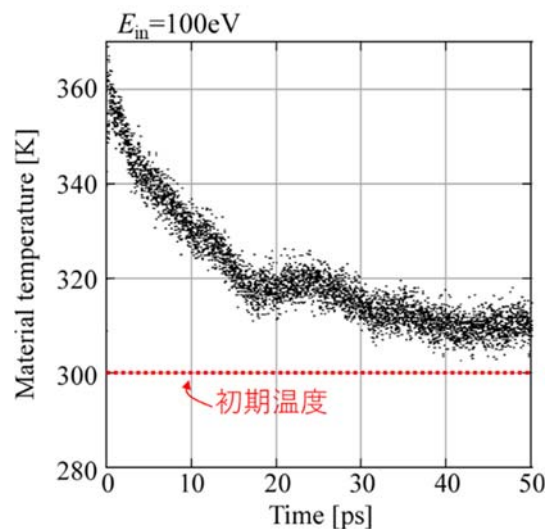


図 2 熱伝導計算領域を MD 計算領域に接続することで計算した標的材温度の時間発展

2.3 古典 MD 法から振動・回転状態を決定する方法を確立 [1]

古典 MD 法を用いたリサイクリングモデルから得た放出水素分子の角運動量とエネルギー固有値から、対応する振動・回転状態を算出する方法を確立した。得られた放出水素分子の振動・回転準位の分布を図 3 に示す。さらに、放出時間を調べたところ、準位の高い水素分子は、準位の低い水素分子と比べて水素原子の入射後 1 ps 以内の短い時間で放出されることが判明した。

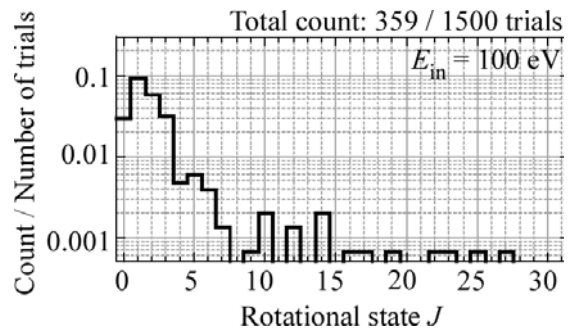


図 3 放出された水素分子の回転準位 J の分布

2.4 古典 MD 法から振動・回転状態を決定する方法を確立 [3]

中性粒子輸送コードでは、電子温度・密度・イオン流などのプラズマ（荷電粒子）の情報を要する。EMC3 を用いて計算した LHD の電子温度・密度などの背景プラズマの情報を中性粒子輸送コードと連携した。さらに、開発した炭素壁水素プラズマリサイクリングモデルから得た水素原子・分子の放出角・並進エネルギー・振動準位・回転準位などの分布を中性粒子輸送コードに取り入れ、振動・回転準位を考慮した中性粒子輸送計算に成功した。図 4 に、EMC3 および水素リサイクリングの分子動力学計算モデルを組み入れた中性粒子輸送計算の結果を示す。

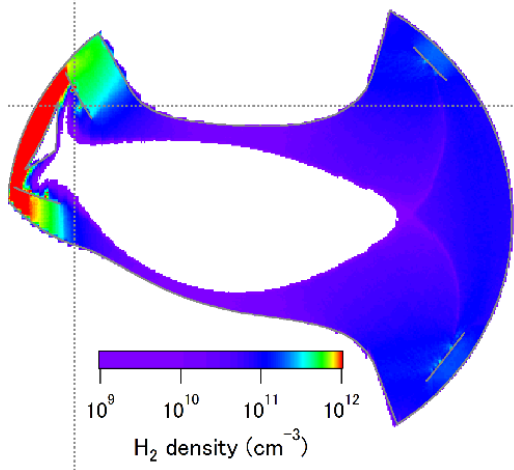


図 4 水素分子の振動・回転状態を区別した中性粒子輸送コードにより計算した LHD 内の水素分子分布。壁でのソースとして、本課題で開発した炭素壁水素リサイクリングモデルから得た放出粒子の振動状態・回転状態等の情報を取り入れた。また、プラズマ流体コード EMC3 により得られた LHD の電子温度・密度・イオン流などのプラズマ（荷電粒子）の情報も組み込んでいる。

- [1] S. Saito, H. Nakamura, K. Sawada, G. Kawamura, M. Kobayashi, M. Hasuo, Contrib. Plasma Phys. e201900152 (2020).
 [2] S. Saito, H. Nakamura, K. Sawada, G. Kawamura, M. Kobayashi, M. Hasuo, “Development of a Molecular Dynamics Method with Heat Transfer into Bulk for Ion Injection into Materials”, Plasma Fusion Res., Accepted (2020).
 [3] K. Sawada, H. Nakamura, S. Saito, G. Kawamura, M. Kobayashi, K. Haga, T. Sawada, M. Hasuo, Contrib. Plasma Phys. e201900153 (2020).

3. 研究のキーワード

1.リサイクリング	2.分子動力学	3 振動・回転	4.炭素壁	5.分子活性再結合
-----------	---------	---------	-------	-----------