

壁材の原子運動を、コンピュータで予想する

中 村 浩 章

核融合科学研究所の大型ヘリカル装置(LHD)の容器のプラズマと接触する部分は、損傷を防ぐため耐熱性の高い炭素材料が使われています。最近では、タングステンなどの金属材料の検討も行われるようになってきました。このような固体の材料が、プラズマにさらされた場合の耐久性についての情報が、壁の材料を選定するために必要になります。ところが、実験ではプラズマが固体にぶつかって結晶構造が壊れる瞬間の様子を調べることはなかなか容易ではありません。そこで、「数値実験研究プロジェクト」のプラズマ壁相互作用シミュレーショングループでは、コンピュータ上で運動方程式を解いて固体原子の動的な振舞いを調べています。この記事では、ここ数年間にわたる炭素材のシミュレーションについて紹介します。

炭素材には図1のように様々な種類の結晶構造(グラファイト(黒鉛)・ダイヤモンド・アモルファスカーボン)があります。これを同素体といいます。この物質に水素のプラズマが照射されるとどうなるかを、分子動力学法という計算方法で調べました。

分子動力学法では、数千個ないし数千万個の膨大な粒子についてのニュートンの運動方程式を計算します。本来運動方程式には、粒

子の位置座標の空間微分や時間微分の項がありますが、分子動力学法では、“微分”を“差分”という演算で近似します。また、分子動力学法では原子間に働く力を計算するためにポテンシャルが必要になります。高校の物理で習いますが、ポテンシャルを空間微分すると力を求めることができます。我々は、炭素原子と水素原子の間のポテンシャルとして、ブレンナーが1990年代にカーボンナノチューブの研究用に開発したポテンシャルを改良したものを利用しました。このような分子動力学法プログラムを組み上げ、炭素同素体への水素を照射した際の反応を調べてきました。

グラファイト(図1(a))は、「ハチの巣」構造をとるグラフェンという分子が何層にも重なってできています。グラファイトにプラズ

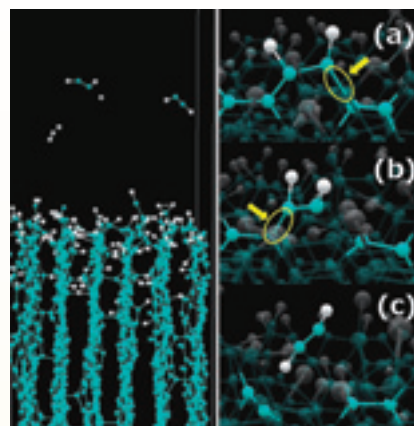


図2 グラファイトの端側に水素を照射した場合のシミュレーションの様子。炭化水素 C_2H_2 が発生することを突き止めました。青色粒子が炭素、白色粒子が水素。(a)水素がグラファイトの端部の炭素に結合することで、炭素の結合を一つ切ります。(b)そして、もう一つの炭素の結合も切れ、(c) C_2H_2 が発生する反応の様子を見つけました。

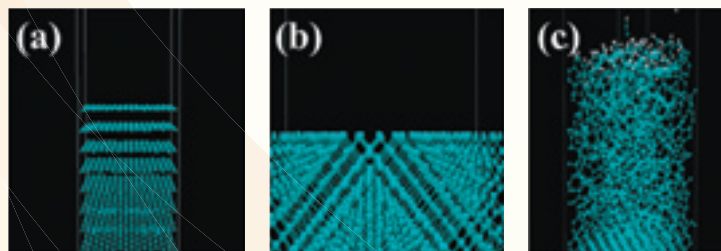


図1 炭素同素体の結晶構造。(a)グラファイト、(b)ダイヤモンド、(c)アモルファスカーボン。

マがぶつかった場合、炭化水素 C_2H_2 が生成されるという実験報告がありました。しかし、グラフェンは安定な分子で実験から想定されている程度のエネルギーの水素がぶつかっても炭素間の結合を切ることは困難なので、炭化水素 C_2H_2 を作り出す仕組みが分かりませんでした。この考えを確かめるため、図1(a)のようなグラファイトの上部から、水素をぶつけるシミュレーションを行いました。水素を大量にぶつけると、水素を跳ね返していたグラファイトがやがて壊れていくことを確認できましたが、予想通り炭化水素 C_2H_2 は発生せず、数個の炭素がつながった鎖状の炭素分子が発生するのみでした。そこで、我々は知恵を絞り、グラファイトの向きを変える新たなシミュレーションを行いました(図2)。今度は端にいる炭素は共有結合の手に余裕があるため水素と容易に結合し、炭化水素 C_2H_2 が発生しました。この現象により、グラファイトの端がある場合は、水素の照射に対してもろくなことが分かりました。

この現象をさらに確かめるため、図3のようにグラファイトのハチの巣構造と端部の両方に水素をぶつけるシミュレーションを行いました。その結果、グラファイトの端部が先ず壊れ、その影響で、ハチの巣構造も壊れていくという様子が確認されました。また、壊れ

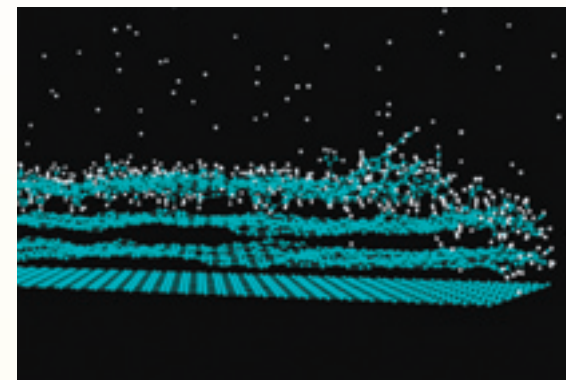


図3 グラファイトに水素を照射した場合のコンピュータシミュレーションの様子。炭素原子(青球)によって構成されたグラファイトに、写真の上方から水素原子(白球)がぶつかっています。

た結果、端部が「棚田(たなだ)」のような構造になることが分かりました。

シミュレーションから得られたグラファイトの壊れるこのような現象が、本当に現実起きるかを調べるため、名古屋大学大学院工学研究科の大野哲靖教授に実験をしてもらいました。実験では、なるべく理想的な結晶構造に近い高配向熱分解黒鉛(HOPG)を使って水素照射をしてもらいました(図4)。照射前の試料の中央部(a)と側面部(b)には亀裂などがほとんどありません。水素を照射後には、中央部(c)は照射前と変わりませんが、側面部(d)は、「棚田」構造になりました。この実験より、我々のシミュレーション結果の正しさを裏付けることができました。

現在、我々は炭素以外のタングステンなどの物質を扱えるように密度汎関数法と呼ばれる量子力学計算を行い、核融合炉で使う候補材のポテンシャルの開発を行っています。このポテンシャルを使って、数値実験プロジェクトの炉材に関する部分のシミュレーションとしていろいろな物質材料の耐久性を調べていきたいと考えています。

(基礎物理シミュレーション研究系 准教授)

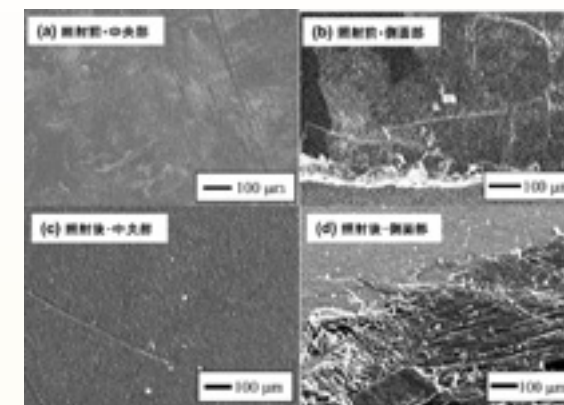


図4 黒鉛にプラズマを照射する前と後の電子顕微鏡の画像。高配向熱分解黒鉛の中心部(a)は、プラズマにさらされた後(c)でも殆ど損傷していません。一方で、端部では照射前(b)と照射後(d)で比べて、層が剥がれたように壊れることが確認できました。(この写真は、名古屋大学大学院工学研究科・大野哲靖教授から提供していただきました。)