

水素リサイクリングモデルによって明らかになった壁からの高回転エネルギー水素分子の放出

齋藤誠紀・中村浩章



はじめに

プラズマが炉壁へ与える影響を最小限に抑える手法として、中性のガスを噴射し壁近傍のプラズマを中性の水素原子・分子に戻す方法(デタッチメント)が検討されています。このような環境下では、水素原子だけでなく、壁近傍に存在する水素分子の存在がプラズマの挙動に強く影響すると予想されています。このプラズマ挙動を正しく理解するためには、水素リサイクリングとよばれる、炉壁から水素分子が放出される過程を解明することが大切です。さらに、放出した水素分子がプラズマに与える影響は、その分子の振動と回転の状態にも強く依存するため、これらの状態を知ることも大切となります。これらの情報を実験によって得ることは困難なため、原子の運動方程式を解く分子動力学法とよばれるシミュレーション手法を用いて、水素原子・分子の放出過程の詳細や、水素分子の振動・回転エネルギーを計算する手法「水素リサイクリングモデル」を開発しました。さらに、このモデルを用いて得られた情報を使って、放出原子・分子のプラズマ中での振る舞いを計算することにも成功しました。本稿では、これらの計算によって明らかになった、水素原子・分子の放出過程、放出原子・分子の特徴などを紹介します。

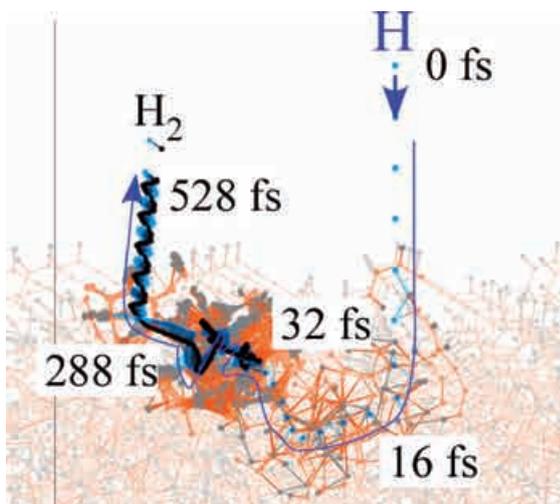


図1 炭素壁水素リサイクリングモデルの計算例。橙色は炭素原子、灰色は壁内の水素原子、水色は入射水素原子の軌跡を表しています。黒色は入射水素原子と結合した壁内の中の水素原子を表します。数値はシミュレーション開始からの経過時間で、単位fsはフェムト秒(フェムトは1000兆分の1)を意味します。

炭素壁からの水素分子の放出過程

水素リサイクリングモデルを用いて明らかにした、炭素壁からの水素分子の放出過程の例を図1に示します。炭素壁に入射した水素原子(水色)が炭素壁の中を移動し、壁内の水素原子(黒色)と化学結合して分子を形成し、表面から放出されています。この過程以外にも、入射水素原子がそのまま反射して放出する、壁の中の水素原子が入射原子との衝突によりはじき出され、別の水素原子と結合し分子となる等、様々な放出過程があることも見つけました。また、放出した水素分子の振動・回転エネルギーを計算することにも成功し、1電子ボルト程度の比較的大きな振動・回転エネルギーを有する分子が発生することも発見しました。図2では、この水素リサイクリングモデルを用いて計算した、回転エネルギーごとの水素分子が放出される割合(放出係数)を示しています。従来、分子は熱的な過程により放出されると考えられてきました。そのため、放出する水素分子の振動・回転エネルギー分布は、炉壁の温度に相当するボルツマン因子で表せると考えられてきました。しかし、図2に示すように、放出される水素分子はボルツマン因子から外れています。これは、入射水素原子と炭素壁内の原子たちとの衝突は非平衡状態にあり、ボルツマン因子で想定されるより高い回転エネルギーの分子が放出されていることを意味します。これらの高いエネルギーを有する水素分子が、

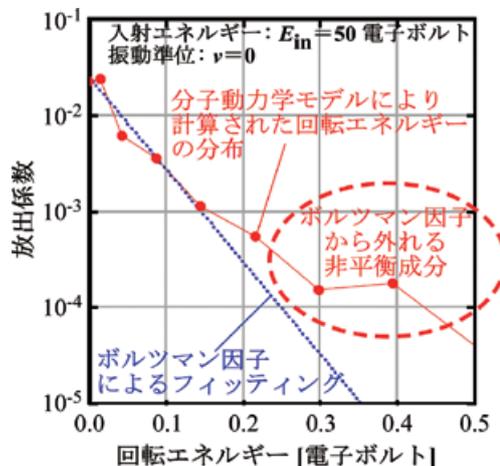


図2 炭素壁水素リサイクリングモデルに得られた水素分子の回転エネルギーの分布。

従来考えられているよりも周辺プラズマの挙動に強く影響する可能性が示唆されます。

タングステン壁からの水素分子の放出過程

ITERなどの炉壁(ダイバータ)に用いられるタングステン壁を対象にした水素リサイクリングモデルの開発も行いました。そのモデルを用いて発見した、タングステン壁からの水素分子の放出過程を図3(a)に示します。これは、壁材料の表面において水素分子が形成されるといふ反応過程で、炭素壁の場合は見られなかったものです。この過程の詳細は以下のとおりです。入射水素(橙色)により炉壁中の水素原子(黒色)がはじき出され表面から放出されますが、この放出水素原子はタングステン壁表面近くに捕まってしまう(灰色)。この捕まる場所は、図3(b)に示すようなタングステンと水素原子との相互作用エネルギーが負になる領域(青色)です。この領域に捕まえられた水素原子は、炉壁表面に対して垂直方向(z方向)の移動は制限されますが、炉壁表面と並行方向(x方向)には移動できます。この移動によって、同じく捕まえられている別の水素原子(黒色)とたまたま出会った場合には、二つの原子は化学結合して水素分子となります。この分子になることでタングステン壁との相互作用エネルギーが変わり、壁から斥力を受けて加速しながら表面を離れます。このように、タングステン壁特有の放出過程を明らかにしました。

中性粒子輸送計算との連携

炭素壁水素リサイクリングモデルを用いて得られた放出水素原子・分子の情報を用いて、それら

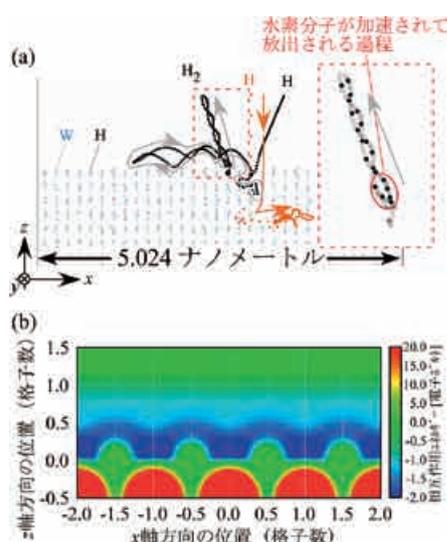


図3 (a)タングステン壁水素リサイクリングモデルの計算例。水色はタングステン原子、灰色及び黒色は水素原子、橙色は入射水素原子の軌跡を表しています。(b)タングステン壁の表面近傍における水素原子とタングステン壁の相互作用エネルギーの空間分布。

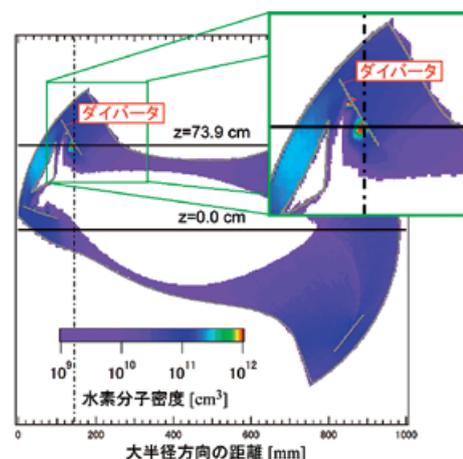


図4 LHDを対象に実施した中性粒子輸送計算の例。周辺プラズマ中の水素分子の空間分布を示しています。

中性粒子が大型ヘリカル装置(LHD)のプラズマの中でどのように振る舞うかを計算しました。この中性粒子輸送計算では、LHDのプラズマの電子温度・密度などの情報が必要ですが、それらはEMC3と呼ばれる流体計算コードを用いて計算しています。図4は、このような中性粒子輸送計算の結果で、LHDのポロイダル断面における周辺プラズマ中の水素分子の分布を示しています。炭素でできている、ダイバータと呼ばれる炉壁から放出された水素原子・分子が、電離や再結合を引き起こしながら周辺プラズマ中を輸送していく過程を計算することに成功しました。また、ダイバータから放出される高い振動・回転エネルギーを有する水素分子が高い反応性を持つため、ダイバータから数センチメートルの距離で消失することが明らかになりました。

今後の展開

LHDでは水素分子からの発光を分析することにより、ダイバータ近傍に存在する水素分子の振動・回転エネルギーの分布を計測することにも成功しています。今後、この計測結果と計算結果との詳細な比較を行う予定です。

また、水素リサイクリングモデルの改良にも取り組みます。リサイクリング過程には、壁の温度や壁へ入射する水素原子のエネルギー、壁内の水素密度などが影響しますが、今回開発したモデルは扱えるパラメータの範囲が限られています。これを改良し、広範囲のパラメータに対応し、壁と動的に変化する周辺プラズマを一挙に計算したいと考えています。やがては、デタッチメントを想定した原型炉の設計などへ本モデルを適用することを展望しています。

(山形大学理工学研究科 准教授、
基礎物理シミュレーション研究系 教授)