

核融合研究における原子レベルでの プラズマと材料の振る舞い

中村 浩章

- 核融合科学研究所・ヘリカル研究部
- 名古屋大学工学系研究科電気工学専攻（併任）

共同研究者

核融合科学研究所

高山有道

伊藤篤史

山形大: 斎藤

名大: 大野研究室

九大: 吉田

富大: 波多野

同志社: 剣持、吉川

九工大: 安永

京都工繊大: 藤原

静大: 大矢分子研: 齊藤

概要

- はじめに
 1. プラズマと壁との相互作用
 2. 炭素材の分子動力学シミュレーション
 3. タングステンの分子動力学シミュレーション
 4. トリチウム壊変効果のDNA分子動力学シミュレーション
 5. まとめ

核融合科学研究所の紹介

大学共同利用機関法人

自然科学研究機構 核融合科学研究所

総研大

(岐阜県土岐市)

- ・大型ヘリカル実験装置 (LHD)
- ・理論・シミュレーション



1) スーパーコンピュータ

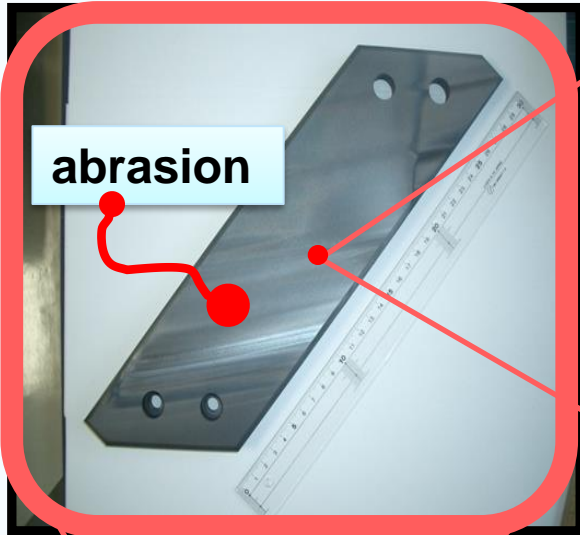
HPCG (High Performance Conjugate Gradients) ベンチマークにて、国内3位、世界10位。[2020.11.18]

2) バーチャルリアリティー装置**Complexscope****プラズマシミュレータ雷神**

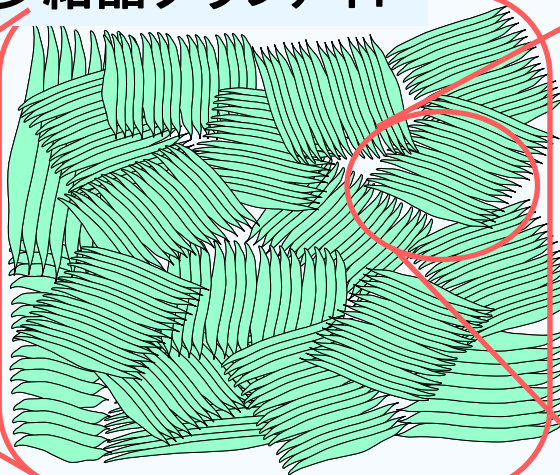
総ラック数	30
モデル名	NEC SX-Aurora TSUBASA A412-8
総ベクトルホスト数	540ノード
総ベクトルエンジン数	4320基
総ベクトルエンジン演算性能	10.5 PFLOPS
総ベクトルエンジン主記憶容量	202TiB
ノード間転送速度(双方向)	10 TB/s

炭素ダイバータイル材の階層構造

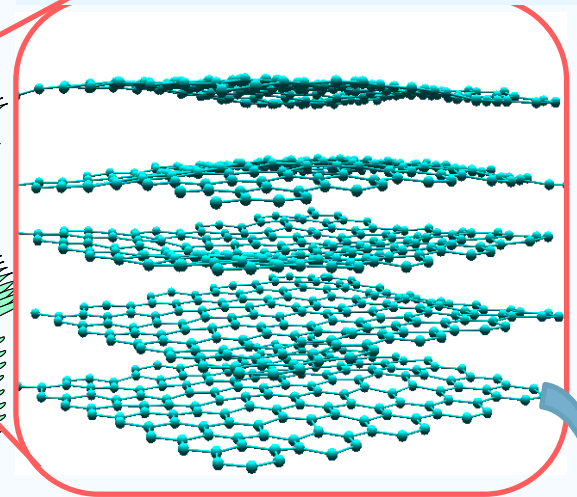
炭素ダイバータイル



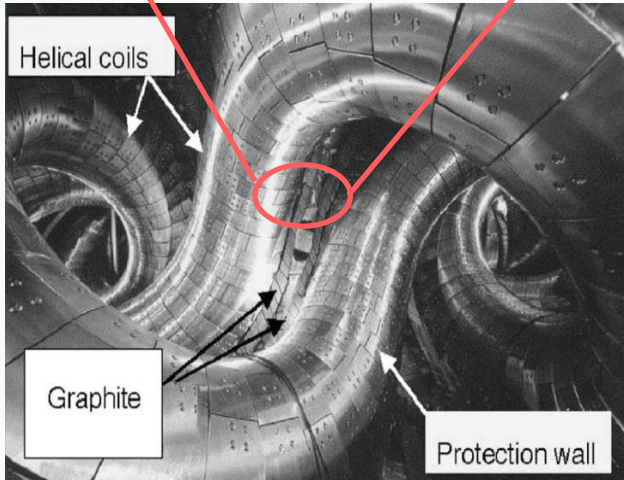
多結晶グラファイト



単結晶グラファイト



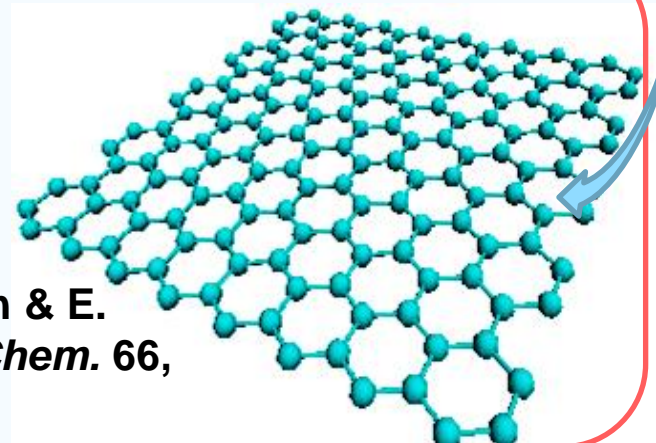
inner structure of LHD



グラフェン

- 分子
- 六員環 (蜂の巣構造)
- シート状の2次元構造

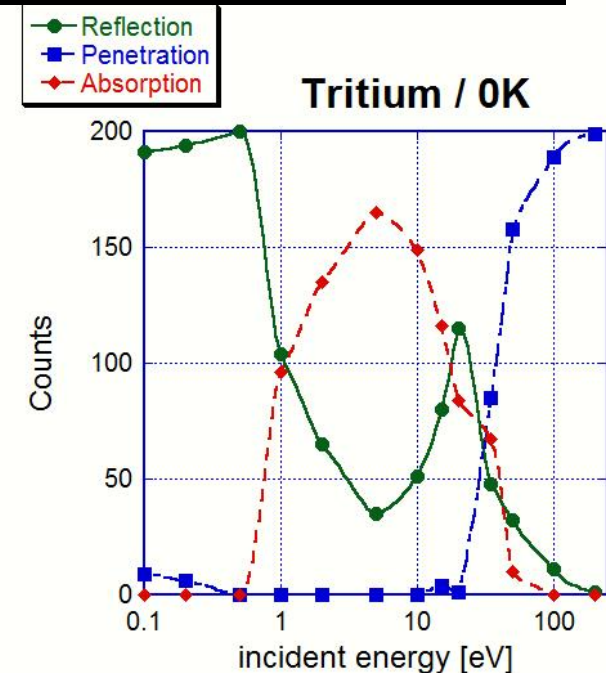
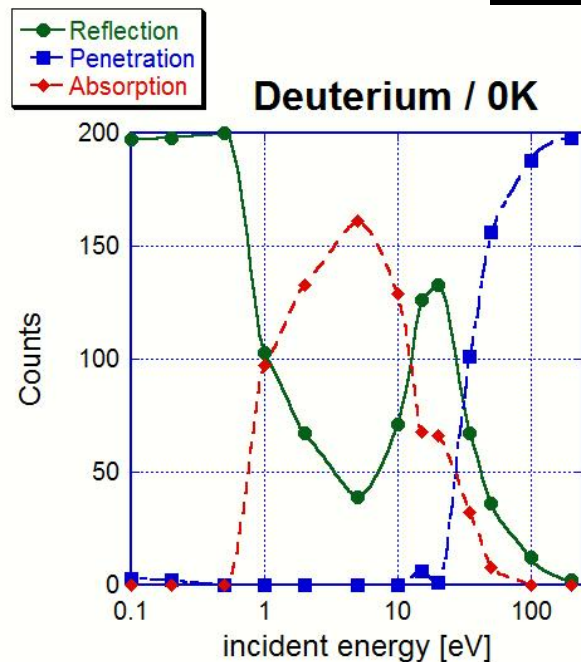
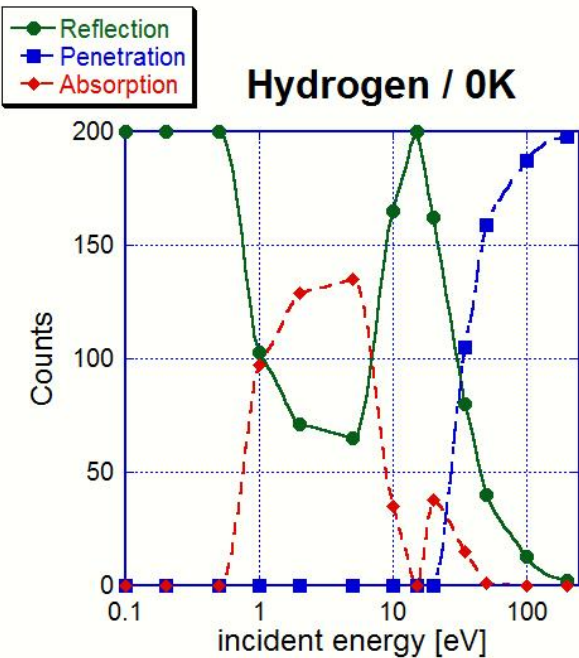
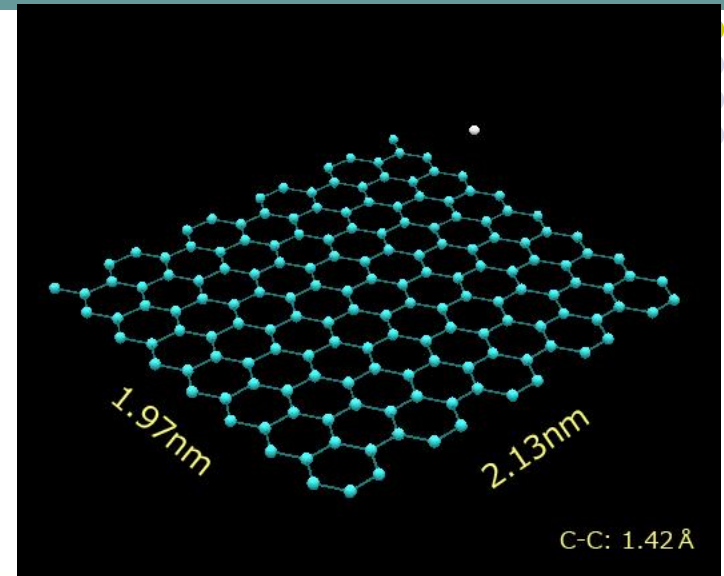
* H. -P. Boehm, R. Setton & E. Syumpp, *Pure & Appl. Chem.* 66, 1893 (1994).



* A. Sagara et al, (LHD Experimental Group), *J. Nucl. Mater.* 313-316, 1 (2003).

(1) 同位体効果

- 単一原子(H, D, T)を単一グラフェンシートに入射
- Hの質量 1.007947u · Dの質量 2.0141018u · Tの質量 3.01605u

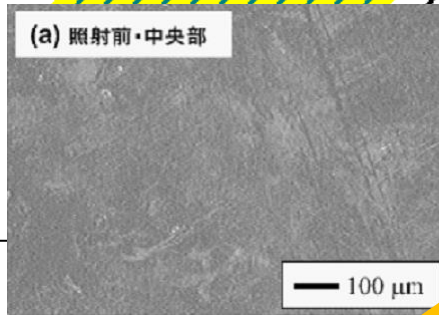


高配行熱分解黒鉛(HOPG)への水素照射 ＝シミュレーションの予言を実証実験(名大大野研)＝

バルク部

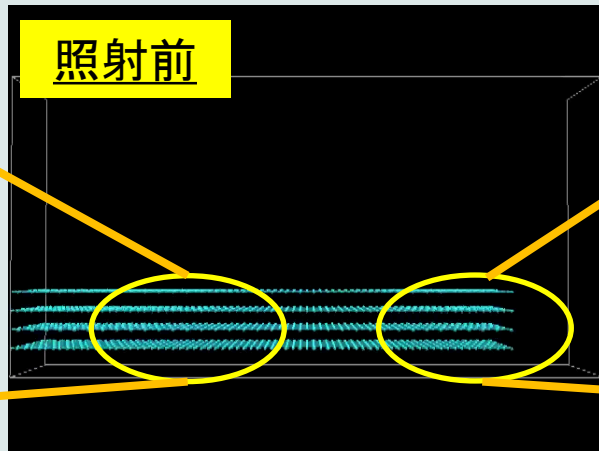
実験(名大大野研)

(a) 照射前・中央部



MDシミュレーション

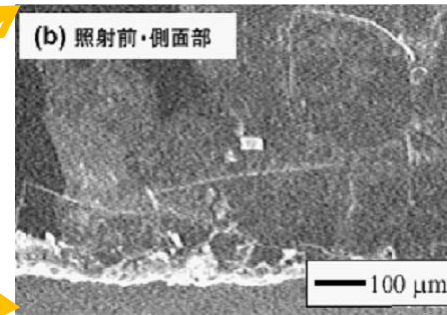
照射前



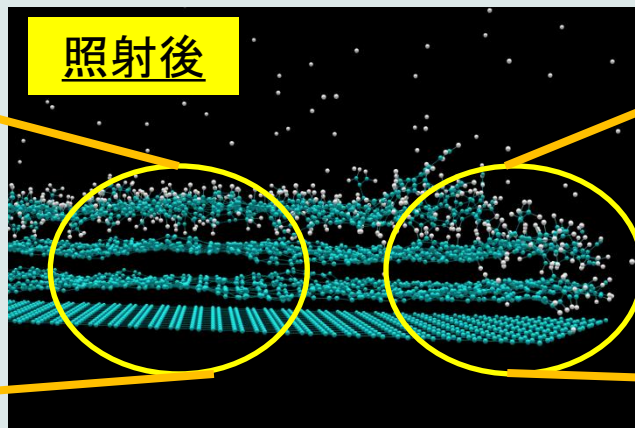
端部

実験(名大大野研)

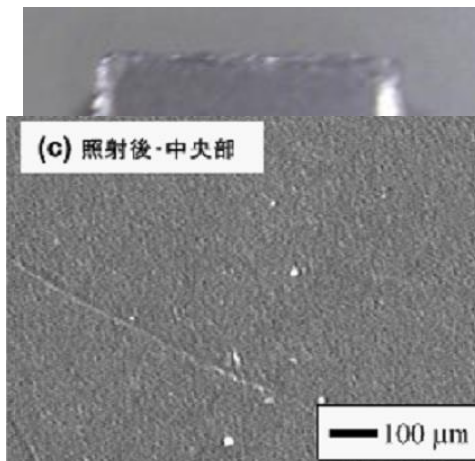
(b) 照射前・側面部



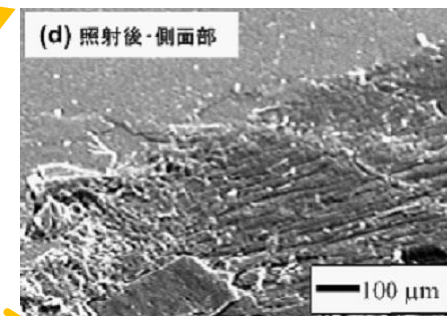
照射後



(c) 照射後・中央部

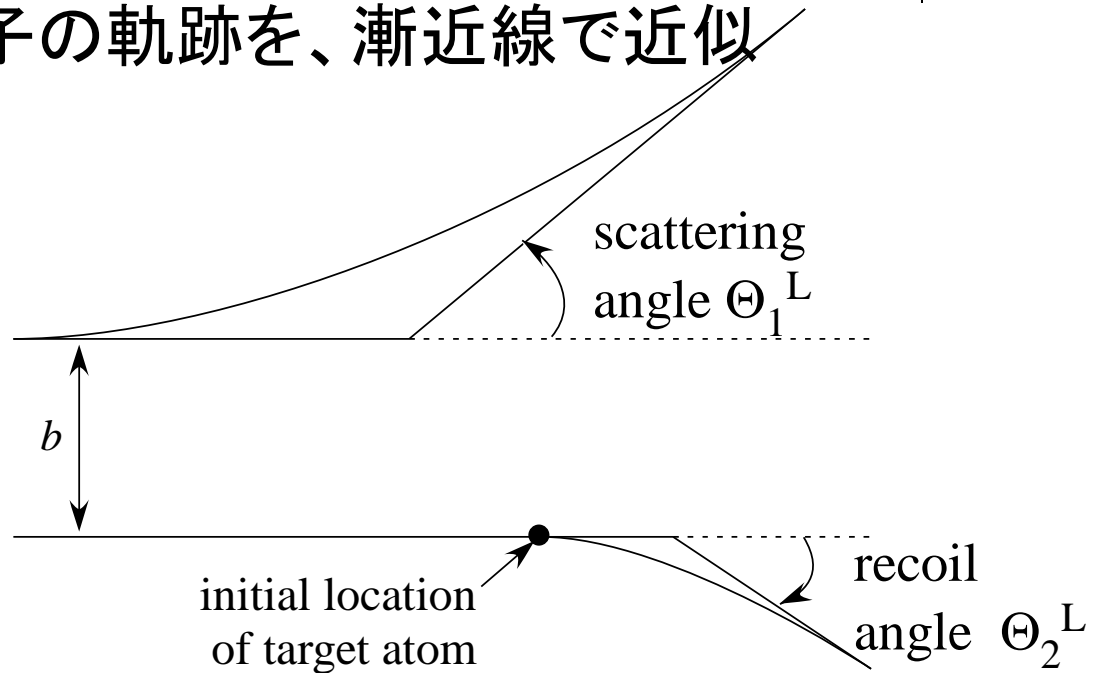
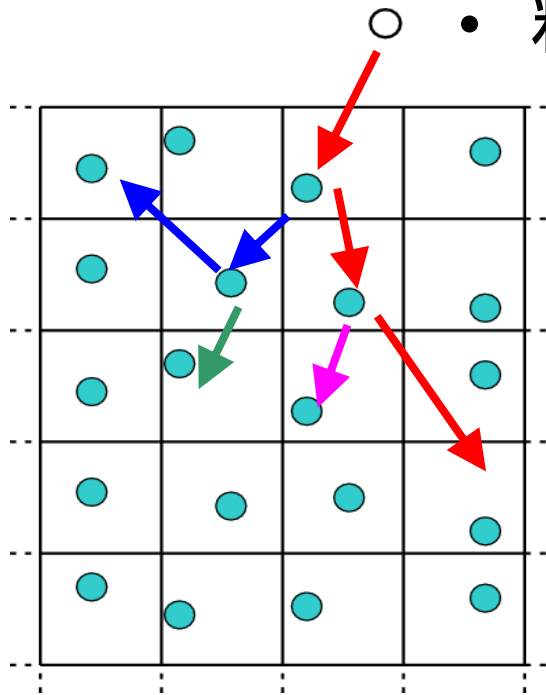


(d) 照射後・側面部



二対衝突近似法

- 周辺原子を無視
- 最近接原子との二体衝突のみ考慮。
- 粒子の軌跡を、漸近線で近似



Thomas-Fermi Potential (Moliere approximation):

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi(r/a)$$

$$\Phi(x) = A_1 e^{-B_1 x} + A_2 e^{-B_2 x} + A_3 e^{-B_3 x}$$

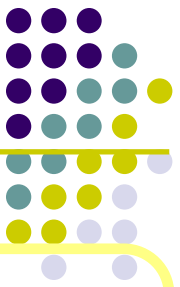
Z_1, Z_2 : atomic number of
the projectile atom and the target.

a : screening length

$A_1=0.35, A_2=0.55, A_3=0.10$

$B_1=0.3, B_2=1.2, B_3=6.0$

シミュレーションコードの紹介



ACATコード (Y. Yamamura, 1985)

- ACAT: Atomic Collisions in Amorphous Target
- 標的材料: アモルファスのみ

Y. Yamamura and Y. Mizuno: IPPJ-AM-40, Inst. Plasma Phys., Nagoya University (1985).



AC▽Tコード

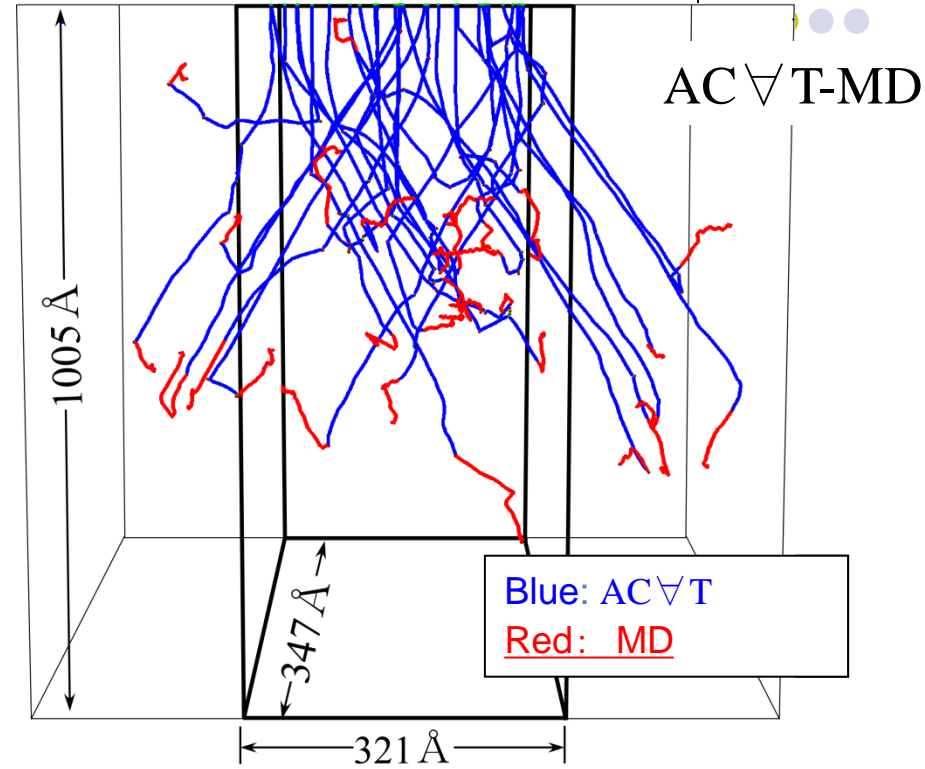
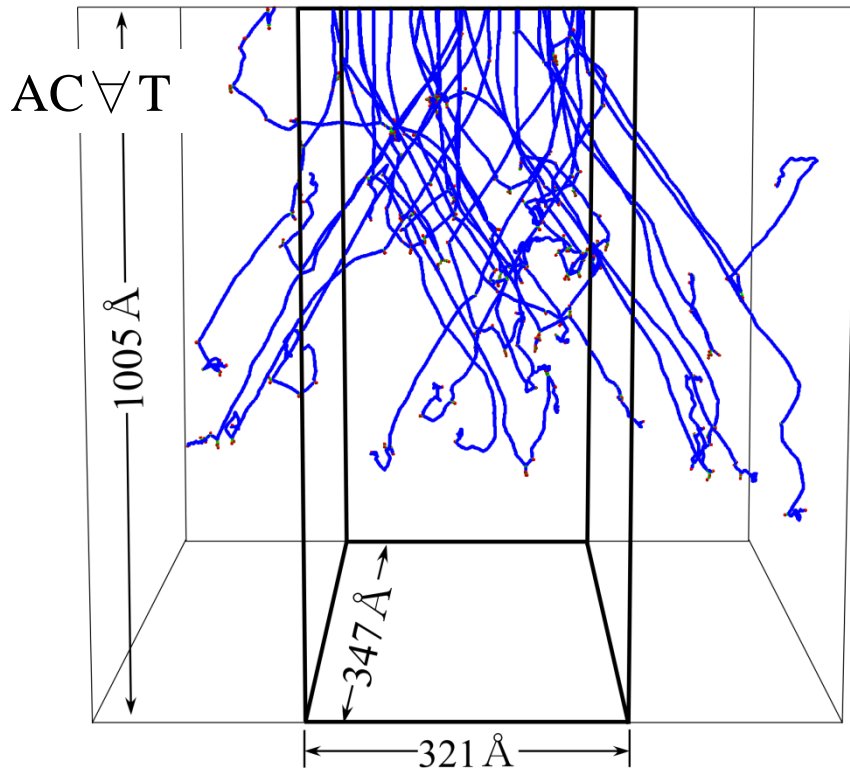
- AC▽T: Atomic Collisions in **Any** structured Target
 1. 標的材料: 任意の構造
(単結晶, 多結晶, 格子欠陥, アモルファス)
 2. 照射損傷による標的材料の構造変化

Arimichi Takayama, Seiki Saito, Atsushi M. Ito, Takahiro Kenmotsu, and Hiroaki Nakamura: Jpn. J. Appl. Phys, **50**, 01AB03, (2011).

結果 (AC ∇ T vs AC ∇ T-MD)

Trajectories of Hydrogen atoms

Incident kinetic energy : 1 keV



	depth [Å]	horizontal distance [Å]
AC ∇ T	394.9 ± 78.4	206.9 ± 42.1
AC ∇ T-MD	384.5 ± 70.4	206.5 ± 45.0

炭素材からタングステンへ

- ITERダイバータ板: **炭素** → **タングステン** へ一本化?

課題		カーボン	タングステン
不純物	発生起源	物理 & 化学スパッタ	物理スパッタのみ
	プラズマへの影響	低Z材	高Z材
トリチウム	蓄積	多い	少ない?
	再堆積	多い	少ない?
耐久性	熱負荷	溶融しない	溶融する
	強度	われない?	われる(Heバブル構造、ファズ構造)

ファズ(綿毛)構造 (名大大野研・愛工大高村研)

タングステンの脆化の問題

⇒ 構造ができないような条件の特定が必要。

He できる。Ar、Neではできない。

Ar

He

-
- 1) 量子力学計算
 - 2) 連続体モデル計算

名大大野G

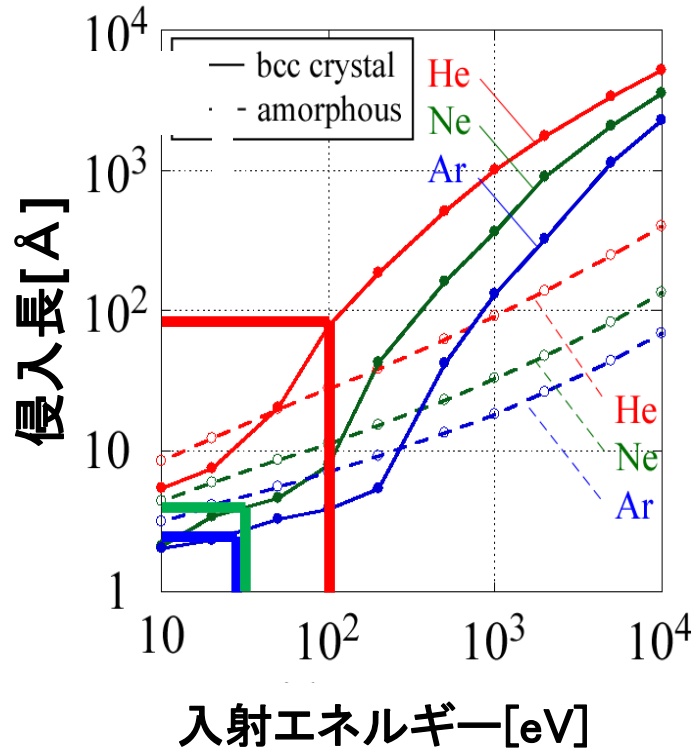
実験報告2: タングステンナノ構造の照射ガス依存性

incident gas	Nano structure in tungsten
He	生成する
Ne	しない
Ar	しない
H	しない

[4] M. Yajima, et al, Journal of Plasma Science and Technology, in Press.

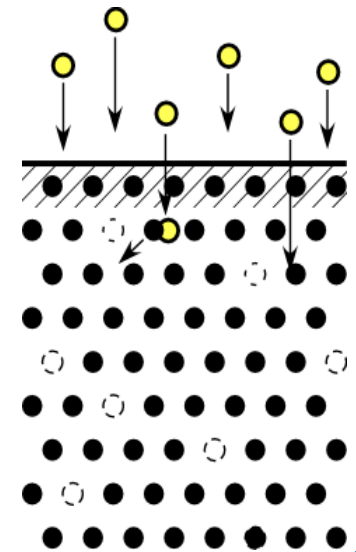
→ ガス依存性を、解明のターゲットに！

①BCAの結果: スパッタリング v.s. 侵入長



1. 侵入過程:

侵入長 v.s.
スパッタリング



- スパッタリング閾値: He~200eV, Ne~50eV, Ar ~ 40eV
- 侵入長: He~100 Å, Ne~6 Å, Ar ~ 4 Å
cf. タングステンの格子定数~ 3.1 Å

**NeとAr は侵入する前に、スパッタリングによりWを腐食
→ 実験事実と符合！**

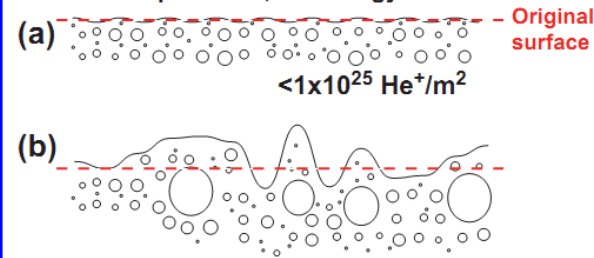
④綿毛(Fuzz)構造:モンテカルロ+分子動力学(MC-MD)

MDの計算: 10^{-11} 秒 cf. 繊維状構造形成: 1000秒
⇒ MC+MDで、計算時間を稼ぐ。

1. Heを、侵入過程を模擬して、発生。
2. モンテカルロで、Heを拡散(random walk)。
3. 分子動力学で、He+Wを時間発展。

繊維状構造の成長

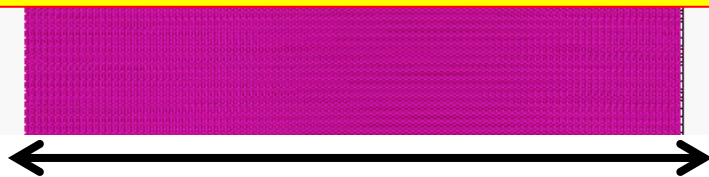
Surf. temp.: 1400 K, Ion energy: 50 eV



* ファズが生えたように見える。

【課題1】

- 二次元系だと、バブルの破裂による“めくり上がり”が大きすぎ。
∴ 奥行き方向の厚みの薄く、材料の強度が弱すぎる。



46.2 nm

A.M.Ito *et al.*, J. Nucl. Mat. **463** (2015) 109.

STEP2:過去に開発したMC+MDコード:三次元系

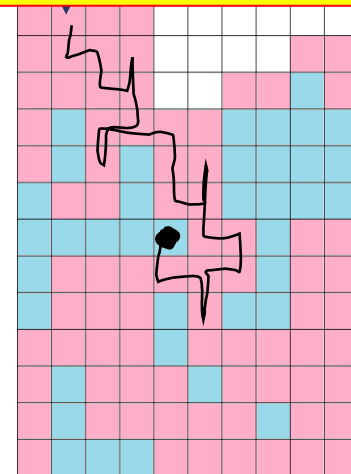
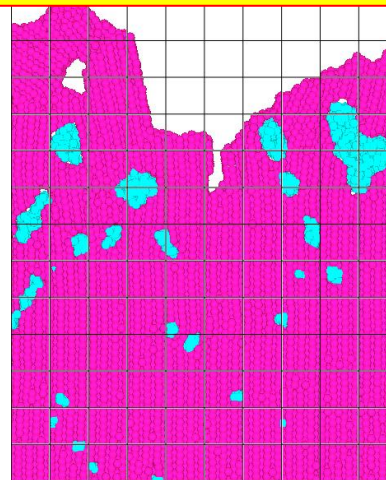
3次元系で 照射過程を解かず、Heを材料内に直接挿入

米国グループのFull-MD[Hammond Acta Mater. (2018)]でも同様に直接挿入

*** バブルの成長・破裂までは再現できる。**

【課題2】

- ・表面の穴が小さく、やがて埋まってしまい、成長が促進せず、大きなファズができない。

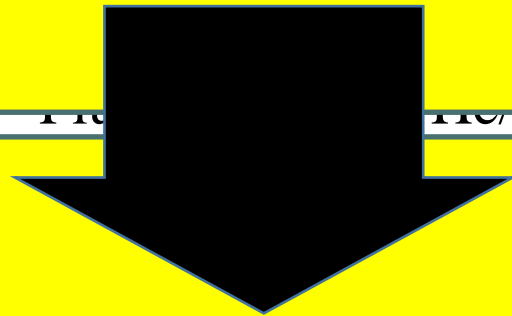


【ここから得られる改良方針】

1) ファズの発生・成長には、連続照射が必要⇒BCA-MD

2) ファズの成長促進には、弾き出しエネルギー改良要！

3) Heのタングステンへの拡散も必要 ⇒ MC-MD



BCA+MC+MD コード 開発 (結果を次頁)

* 弾き出しエネルギーも改良！

トリチウム壊変効果のDNA分子動力学シミュレーション

背景

トリチウムから放出されるβ線の飛程は短いため外部被曝が問題となることはほとんどなく、内部被曝に対する防護が重要となる。とりわけ、β線によるDNA損傷や、置換したトリチウムがヘリウム3へと壊変した場合のDNA損傷などが問題視されている。

DNAへの放射線の影響

- ・ 直接作用・・・放射線がDNAに直接ヒット
- ・ 間接作用・・・放射線誘起フリーラジカルや活性酸素がDNAを攻撃
- ・ 壊変効果・・・DNA中の ^1H に置換した ^3H が ^3He に壊変し、化学結合が切断

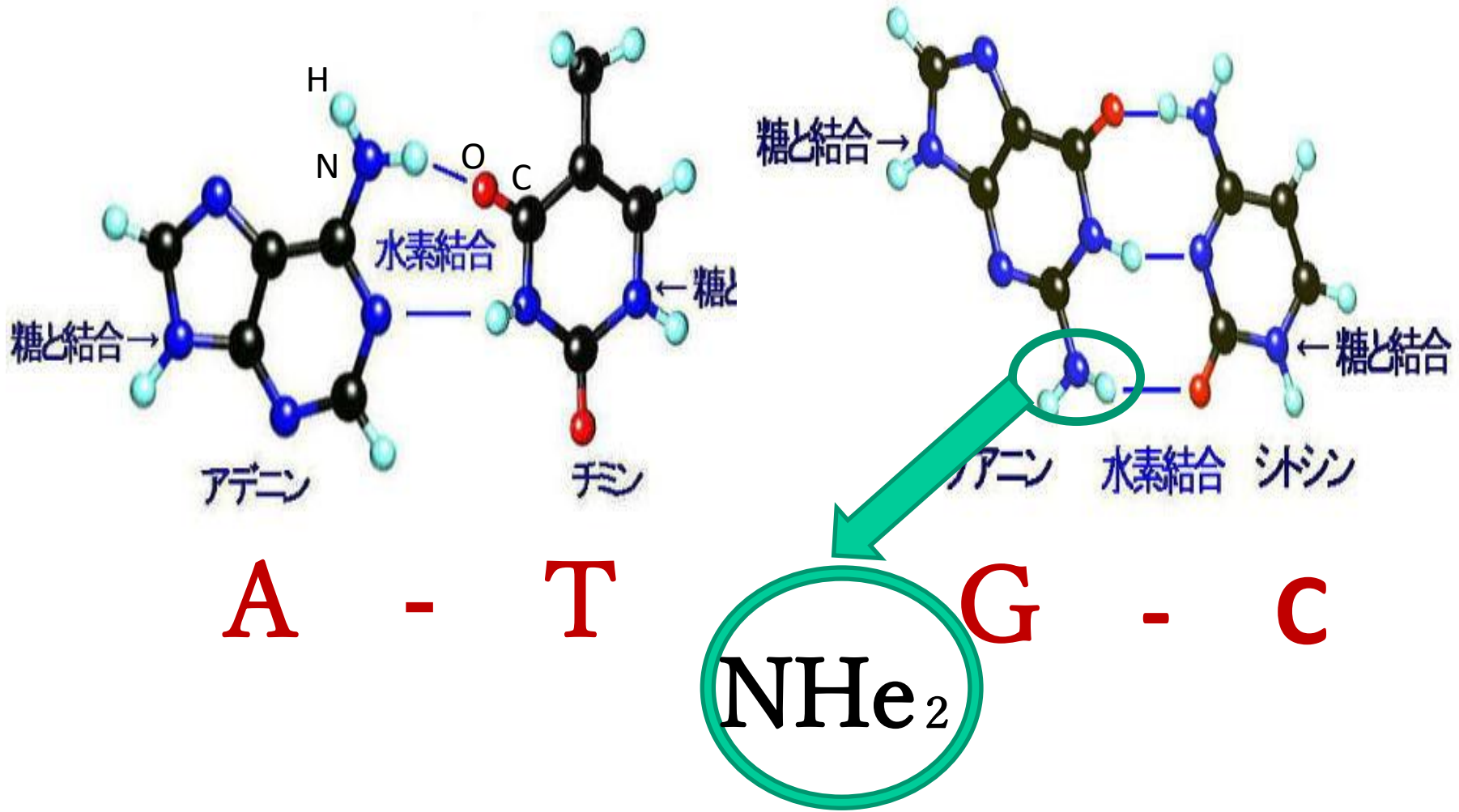
目的

損傷の分子メカニズムは、いまだ未解決の問題である。

⇒ ヘリウム3への壊変に伴うDNAの構造変化を分子動力学計算で予測

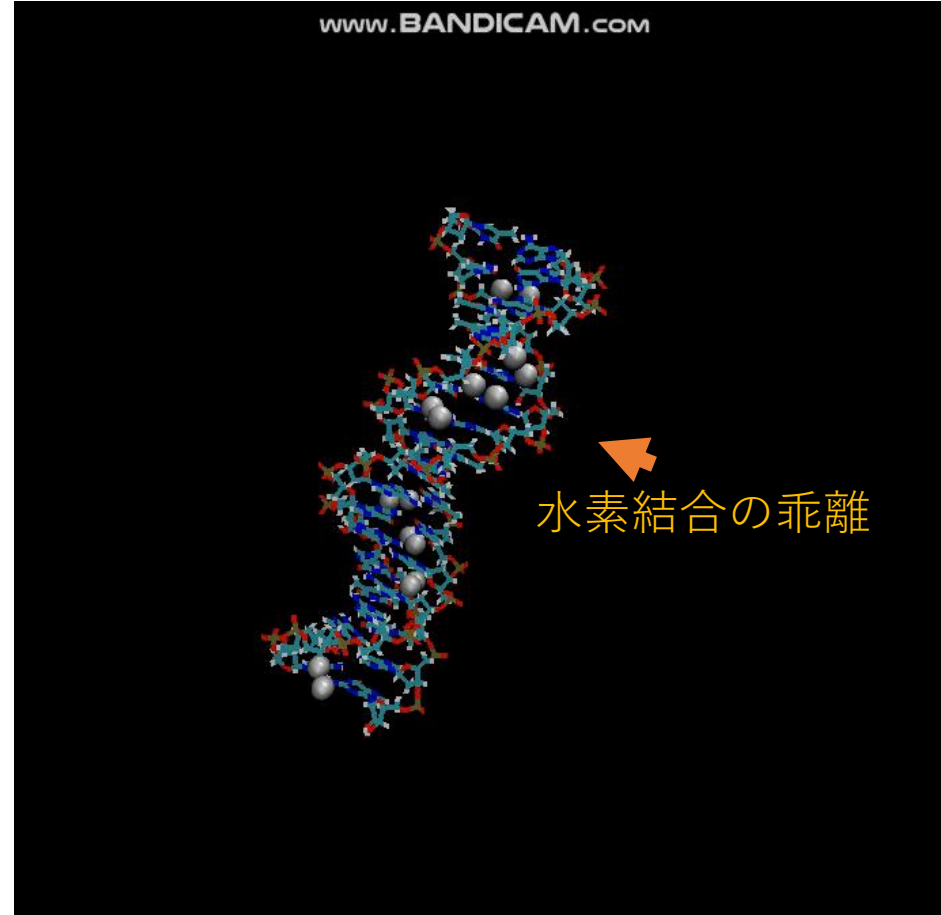
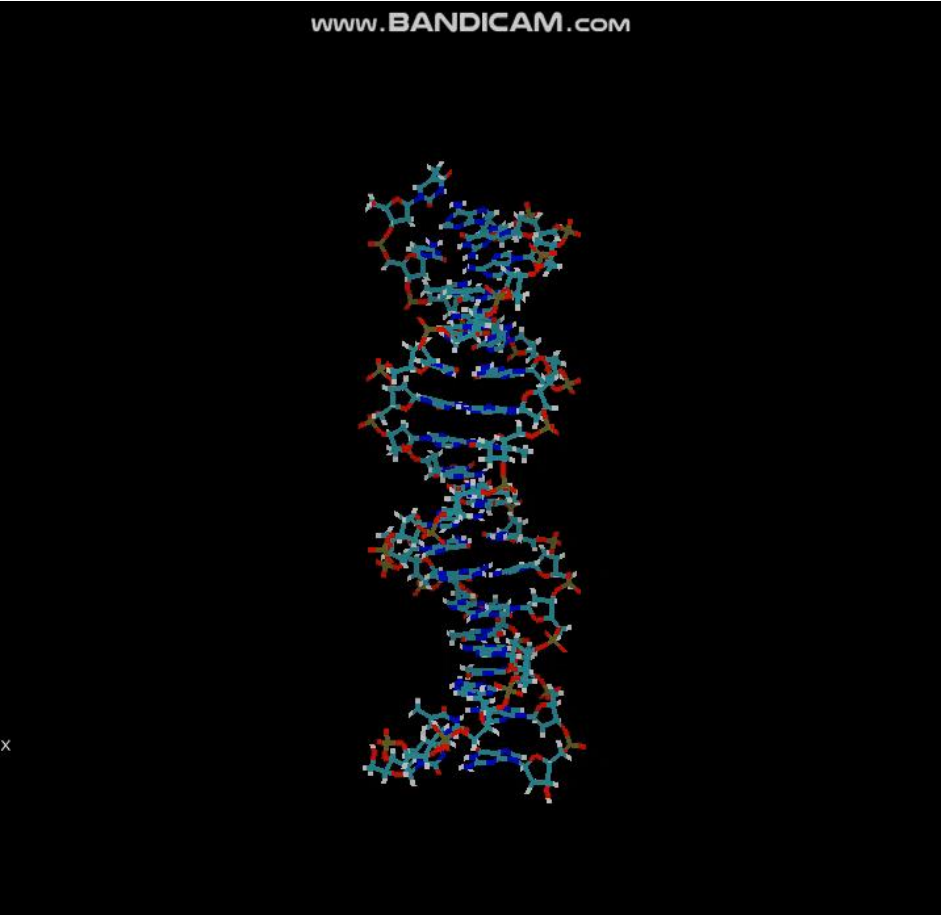
注)・実験は、富山大で。NIFSでは行わない。
・NIFSでは、シミュレーションのみ。

塩基間の水素結合



分子動力学の準備状況 (グアニンのHの一部をHeに置換)

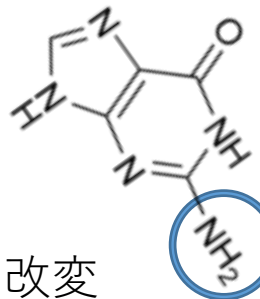
310K



DNA(ヒト telomere配列の一部)

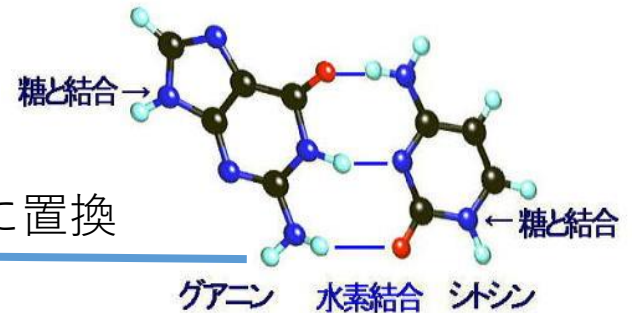
TCTAGGGGTTAGGGGTTAG

AGATCCCAATCCCAATC



Heに置換

NHe₂



MD計算: NAMD, 力場: charm36を改変

全体のまとめ

分子動力学シミュレーションを用いて、材料のシミュレーション研究を行ってきた。

1. 炭素材での分子動力学シミュレーション技法の開発
2. タングステンファズ構造形成解明のための、BCA-MD-KMCのハイブリッド法の開発
3. トリチウム壊変による生体高分子シミュレーション