

## 小特集 磁場閉じ込め核融合装置における水素原子分子輸送研究の新展開

# 2. 要素モデルの統合が実現する壁からプラズマまでを含めた中性粒子輸送研究

## 2. Neutral Particle Transport Studies over the Plasma to the Wall Realized by Integration of Element Models

齋藤 誠紀<sup>1)</sup>, 中村 浩章<sup>2,3)</sup>, 澤田 圭司<sup>4)</sup>, 河村 学思<sup>2,5)</sup>, 小林 政弘<sup>2,5)</sup>

SAITO Seiki<sup>1)</sup>, NAKAMURA Hiroaki<sup>2,3)</sup>, SAWADA Keiji<sup>4)</sup>,

KAWAMURA Gakushi<sup>2,5)</sup> and KOBAYASHI Masahiro<sup>2,5)</sup>

<sup>1)</sup>山形大学, <sup>2)</sup>核融合科学研究所, <sup>3)</sup>名古屋大学, <sup>4)</sup>信州大学, <sup>5)</sup>総合研究大学院大学

(原稿受付: 2021年10月24日)

非接触をはじめとするダイバータプラズマの諸現象を理解するため、壁での粒子リサイクリング、荷電粒子、中性粒子を扱うコードの統合を進めている。水素分子には、電子状態のほか、回転および振動の内部自由度があり、分子活性化再結合をはじめとするプラズマ中の水素分子の各種の反応速度係数は、水素分子の始状態の振動・回転量子数により、数桁にわたって変化する。また、低温のプラズマでは、プラズマ中の電子やプロトン衝突による水素分子の振動・回転励起がプラズマのエネルギー損失チャンネルとして重要と考えられる。このため、水素分子の振動・回転状態を中性粒子やプラズマの輸送と組み合わせて解く統合モデルを開発した。

### Keywords:

plasma wall interaction, molecular dynamics, carbon, tungsten, neutral transport code, collisional-radiative model, rovibrational population, molecular assisted recombination, EMC3-EIRENE code, peripheral plasma transport.

### 2.1 はじめに

核融合装置において、ダイバータプラズマは外界との接点であり、壁の影響を直接受ける。とりわけ、非接触をはじめとするダイバータプラズマの諸現象では、水素分子・原子がプラズマや壁材料とどのように相互作用するかを理解し、粒子・運動量・エネルギーバランスを正しく記述するモデルが必要とされている。その中でも、水素分子の複雑な反応過程を精密に取り扱う必要があり、近年注目され、進展が著しい。

水素分子には、電子状態のほか、回転状態および振動状態の内部自由度がある。後述する分子活性化再結合(MAR)をはじめとするプラズマ中の水素分子の各種の反応速度係数は、水素分子の振動・回転量子数により、数桁にわたって変化する。また、低温のプラズマでは、プラズマ中の電子やプロトン衝突による水素分子の振動・回転励起がプラズマのエネルギー損失チャンネルとして重要と考えられる。しかしながら、プラズマ中の水素分子の輸送を考える従来のモデルでは、これらは無視されることが多かった。

このような背景から、我々は、電子・振動・回転励起準位を直接取り扱うコードの整備を進め、プラズマや壁材料との相互作用を正しく取り扱うために必要な、材料・中性粒子・プラズマを記述する各コードの連携を進めている。必要なコード群は以下ようになる。

1. プラズマ中のプロトンは壁で中性化されて水素原子

または水素分子として再放出される。原子と分子の割合や放出角・放出速度、さらに分子の場合は振動・回転状態を決めるモデル：プラズマ対向壁水素リサイクリングモデル

2. プラズマ中の水素原子と水素分子の運動を電子・イオンとの衝突や中性粒子同士の衝突を考慮しながら追跡するモデル：これには2つのモデルが必要である。

(a) 水素原子および水素分子の衝突輻射モデル

(b) 中性粒子輸送コード

これらの役割分担は以下の解説中に示す。

3. 水素原子・分子を含むプラズマの電子・イオンの密度・温度・フラックスを決めるモデル：プラズマ流体輸送コード

本章では、これらのコード開発の現状について紹介する。

### 2.2 プラズマ対向壁水素リサイクリングモデル

#### 2.2.1 シミュレーションモデル

プラズマ対向壁に水素原子が入射する系を分子動力学法を用いて計算[1]する。水素原子が入射すると、プラズマ対向壁から水素原子・分子が放出する場合がある。このようにして放出した水素原子・分子の放出角やエネルギー分布等を解析する。図1(a)に炭素壁に水素原子が入射する場合の計算系を示す。原子間相互作用には Brenner ポテン

シャル[2]を用いる。炭素壁の場合、水素を含有するアモルファス炭素を標的材とする。標的材を生成するために、まず、 $10\text{Å} \times 10\text{Å} \times 30\text{Å}$ の大きさの、 $x, y$ 方向に周期境界を有する水素含有アモルファス炭素の単位構造 (図1 (b)) を作成する。この単位構造は、過剰な水素原子を含むアモルファス炭素構造体をまず作製し、その後、標的材の温度を上昇 (アニール処理) させて過剰な水素原子を除去することで生成する。図1 (c) に示すように、 $x, y$ 方向に4つ単位構造を並べて  $40\text{Å} \times 40\text{Å} \times 30\text{Å}$ の大きさの標的材を生成する。図の標的材は、3872個の炭素原子と2080個の水素原子から構成 ( $H/C = 0.53$ ) される。標的材の表面から  $d_0 = 10\text{Å}$  高い位置から、水素を1原子を標的材に入射し、シミュレーション開始後 50 ps 経過するまでの時間発展を計算する。シミュレーション開始時における入射水素の  $x$  座標と  $y$  座標は、図1 (c) の灰色で示された  $10\text{Å} \times 10\text{Å}$  の領域内に一様ランダムに決定する。入射エネルギー、入射角度、標的材の温度をパラメータとする。入射原子の  $x$  座標および  $y$  座標が異なることを除いて同じ初期状態で1500回の試行を行い、標的材から放出する粒子の放出角やエネルギーの分布等を計算する。

水素原子が標的材に入射すると、入射エネルギー (入射水素原子が有する運動エネルギー) が周辺の原子に伝わり熱エネルギーへと変換される。その結果、入射点近傍の標的材の熱エネルギーが一時的に上昇する。実際のプラズマ対向材に水素原子が入射する場合、入射点から十分に離れた位置まで熱エネルギーが伝播する。そのため、一時的に上昇した入射点近傍の熱エネルギーは徐々に下がり、やがて周囲の温度と同じ熱平衡状態に戻ると考えられる。しかし、分子動力学計算では、入射点から十分に離れた位置にある原子の運動まで計算すると現実的な時間で計算を完了できない。そのため、分子動力学計算領域の境界から計算領域外へと熱エネルギーが伝播する過程を別途計算に組み込む必要がある。本研究では、熱伝導方程式を解くことで分子動力学計算領域外へと熱エネルギーが伝播する計算手法を新たに開発した[3]。分子動力学計算領域の外側に、その点の温度を保持する計算セルを配置し、熱伝導方程式

を用いて温度の時間発展を求める。図1 (c) の斜線で示された領域を温度制御領域とよぶ。温度制御領域に属する原子の熱平衡を仮定し、分子動力学計算系から得られるその領域の原子の運動エネルギーの平均値を温度に換算する。換算した温度を熱伝導を計算するセルの温度として設定する。熱伝導方程式を数値積分し、分子動力学計算の1ステップに相当する時間だけ計算セルの温度を時間発展させる。1ステップ経過した後の温度制御領域の温度になるように、分子動力学計算系の原子の運動エネルギーを速度スケール法で補正する。この計算を繰り返すことで、熱エネルギーが分子動力学計算領域外へと伝播する過程を模擬する。熱伝導方程式を計算する際、熱拡散率 ( $3.93 \times 10^{-7} \text{m}^2/\text{s}$ ) は、標的材と同じ材質の材料の熱伝導を計算する分子動力学法を別途実施して求めた。図2に、標的材に水素が1原子入射した際の計算セルの温度の時間発展の例を示す。水素原子の入射に伴い分子動力学計算領域 (MD region) の温度が上昇し、2 ps 経過後以降は領域外に配置された計算セルの温度が上昇する様子がわかる。熱伝導方程式の境界条件は初期温度 300 K に固定されている。そのため、50 ps 経過後には、分子動力学計算領域の温度が下がっている。図3に、入射水素を除く標的材中の全原子の運動エネルギーの平均値を絶対温度 [K] の単位で表した値  $T^*$  の時間発展の例を示す。標的材全体で熱平衡状態であれば、 $T^*$  は標的材の温度を表す量である。水素原子が入射した直後では、入射点近傍の原子の速度分布関数はマクスウェル分布から外れるため、ここでは、温度とはよばず  $T^*$  として表記する。図3で黒色で示されているグラフは、熱伝導方程式と接続することで分子動力学計算領域から熱エネルギーが失われる過程を取り入れたハイブリッド計算の結果である。一方、灰色で示されているグラフは、熱伝導方程式とは接続していない小正準集団 (NVEアンサンブル) における結果である。2つのグラフはどちらも、最初 300 K の標的材は、水素原子の入射により 370 K 程度まで上昇する。その後、小正準集団で計算した結果は  $T^*$  の値が下がらない。一方、熱伝導方程式とのハイブリッド計算の結果は、50 ps のシミュレーション時間が経過する

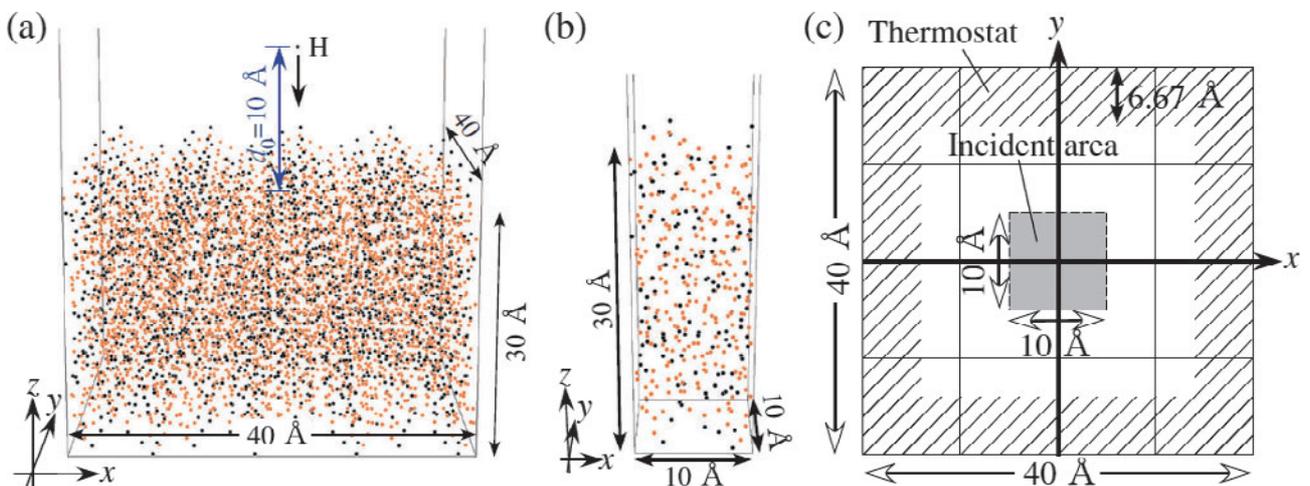


図1 (a)炭素壁に水素原子が入射する場合の計算系。(b)標的材を構成する単位構造。(c)標的材を  $z$  軸方向から見た時の模式図[1].

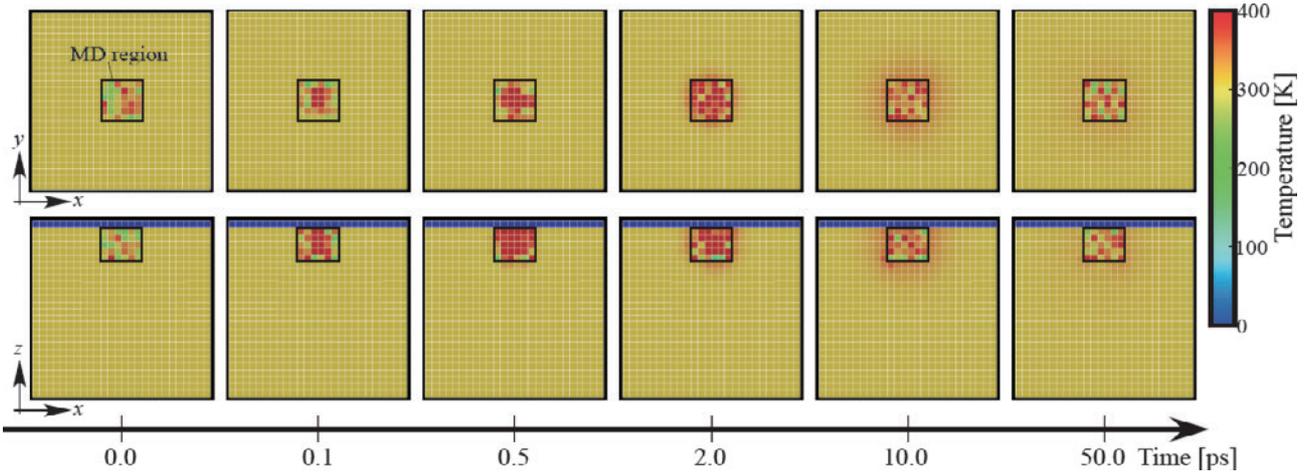


図2 分子動力学計算系に接続した熱伝導方程式の計算セルの時間発展[3].

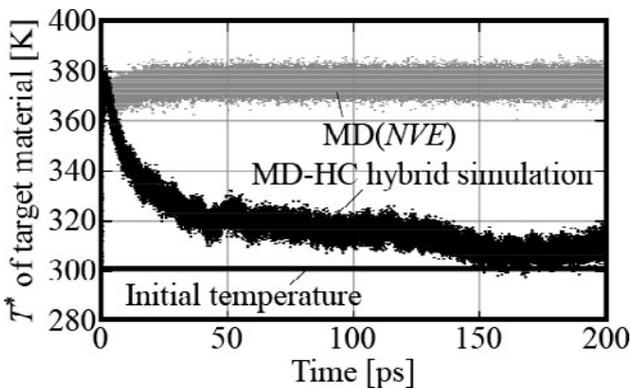


図3 入射水素を除く標的材中の全原子の運動エネルギーの平均値を絶対温度[K]の単位で表した値  $T^*$  の時間発展[3].

と、熱伝導の計算により標的材から熱エネルギーが失われ、約 310 K 程度まで戻る。図 4 に、100 eV の入射エネルギーで水素原子を標的材へ入射したときの各種エネルギーの時間発展の計算例を示す。入射原子の運動エネルギー（緑色）は、標的材に入射後徐々に失われ、0.1 ps 以内に停止することがわかる。入射原子の運動エネルギーの低下に伴い、標的材の熱エネルギー（赤色）およびポテンシャルエネルギー（青色）が上昇する。分子動力学計算領域から領域外へと流れ出した熱エネルギーの総和（橙色）は、1 ps が経過した頃から徐々に上昇し、それに伴い、標的材の熱エネルギー（赤色）およびポテンシャルエネルギー（青色）は減少する。先にも説明したとおり、分子動力学計算領域からの排熱が完了し、初期温度に戻るまで、50 ps から 100 ps 程度の時間を要する。

開発した分子動力学計算モデルを用いて計算した水素原子・分子の放出過程の例を図 5 に示す。図 5 (a) は、標的材表面の原子と入射水素が衝突し、標的材の浅い位置で入射水素の向きが変わり、反射する例である。このような場合、入射水素は入射エネルギーをほとんど失わずに反射する。図 5 (b) は、比較的材料深部まで入射水素が到達した後、最終的に表面に戻り反射する場合である。図 5 (c) は、標的材中の水素原子を入射水素がはじき出す例である。はじき出された水素原子は、入射水素が反射する場合と比べて運

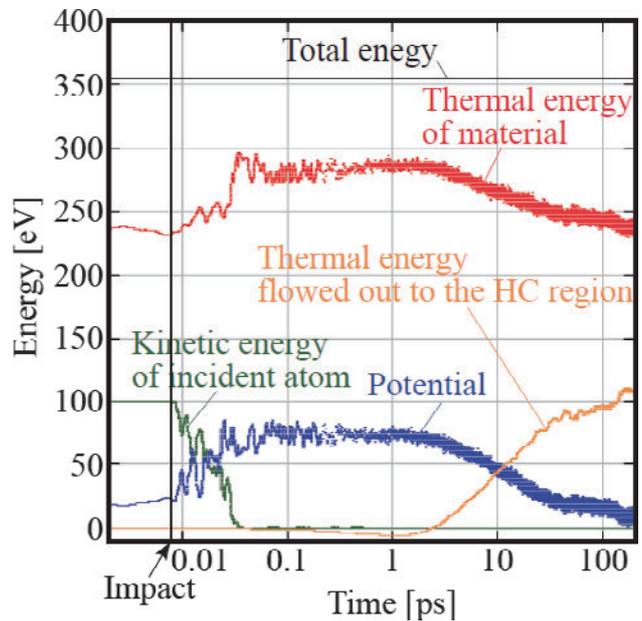


図4 標的材に水素が 100 eV で入射した際の各種エネルギーの時間発展[3].

動エネルギーが低い場合が多い。図 5 (d) は、標的材中の炭素原子間の化学結合を入射水素が切断し、炭化水素や水素分子が放出する場合である。図 5 (e) は、標的材中の水素と入射水素が化学結合し、分子を形成して標的材から放出する例である。このように、化学反応を考慮した多様な放出過程を計算できることも分子動力学法を用いる本計算モデルの強みである。

### 2.2.2 放出水素原子・分子の各種分布

前節で紹介した標的材初期温度 300 K の水素含有アモルファス炭素 (H/C = 0.53) に、入射エネルギー 100 eV で垂直に水素原子を入射した場合を例にして、1500 試行により得た水素原子・分子の放出時間や各種エネルギー分布について説明する。水素原子・分子の放出時間の分布を図 6 に示す。多くの水素は、水素入射後、0.1 ps 以内に放出していることがわかる。入射水素が反射する場合（赤色実線）と比べ、元々標的材中に存在した水素がはじき出される場合（濃赤色点線）は、少し遅れて放出することが多い。また、

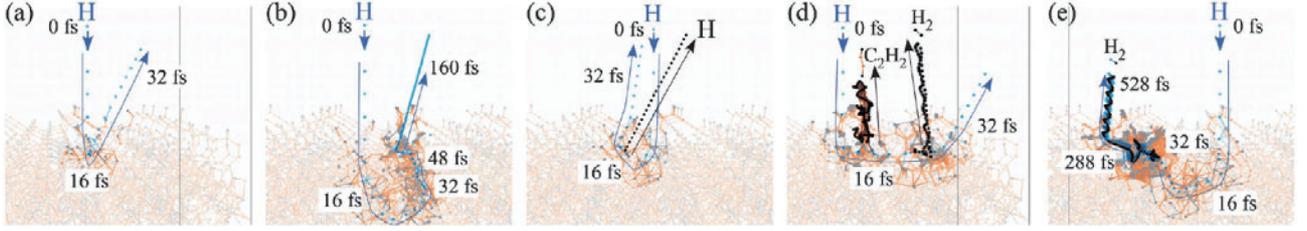


図5 水素原子・分子の放出過程の例[1].

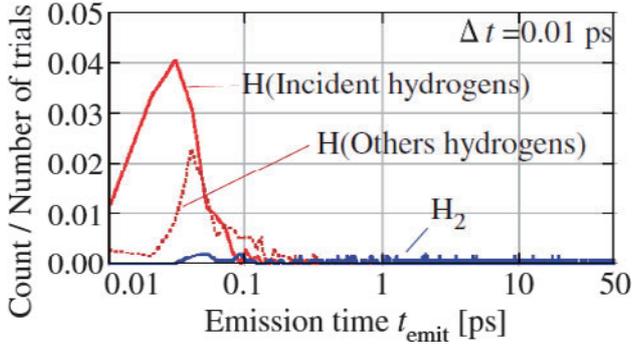


図6 放出水素原子・分子の放出時間の分布[1].

水素分子が放出する場合（青色実線），10 ps の時間が経過した後も低い確率ながら水素分子が放出され続ける．この結果は，水素原子の多くは入射水素との衝突過程により放出するのに対し，水素分子の多くは熱的な過程により放出されやすいことを示唆している．

放出角分布を図7に示す．放出角分布は，放出角を $\theta$ ，垂直入射の場合を $\theta=0$ とすると，立体角が $\sin\theta$ に比例するため，その放出角率は $\sin\theta$ に比例する．また，多くの計算では，放出確率は， $\cos\theta$ にも比例する[4]ことが示されている．そこで，図7に示した放出角の分布を $a \sin\theta \cos^b\theta$ でフィッティングすると，パラメータ $(a, b)$ の値は，入射水素原子が反射する場合は $(0.035, 1.63)$ ，はじき出しにより水素原子が放出する場合は $(0.038, 2.52)$ ，水素分子が放出する場合は $(0.079, 2.93)$ となった．反射の場合に比べ，はじき出しおよび分子の放出の場合は， $\cos\theta$ の次数が高い傾向がある．

以下の式で定義する並進エネルギー $E_g$ の分布を図8に示す．

$$E_g \equiv \frac{1}{2} M \mathbf{v}_g^2, \quad M \equiv m_1 + m_2, \quad \mathbf{v}_g \equiv \frac{m_1 \mathbf{v}_1 + m_2 \mathbf{v}_2}{m_1 + m_2} \quad (1)$$

ここで， $m_i$ ， $\mathbf{v}_i$ は， $i$ 番目の水素原子の質量および速度である．並進エネルギーの分布から，はじき出しにより水素原子が放出する場合（濃赤色点線）と比べて，入射水素が反射する場合（赤色実線）は比較的高いエネルギーを保持して放出することがわかる．また，分子が放出する場合（青色実線）は，水素原子の放出より低い並進エネルギーである確率が高いが，稀に1 eVを超える並進エネルギーを有する分子も生じる．

### 2.2.3 水素分子の振動・回転運動の取り扱い

相対速度 $\mathbf{v}$ と重心速度 $\mathbf{v}_g$ を用いると，電子の運動を無視

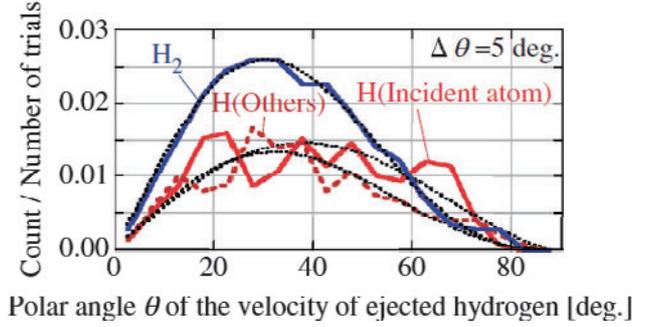


図7 放出水素原子・分子の放出角の分布[1].

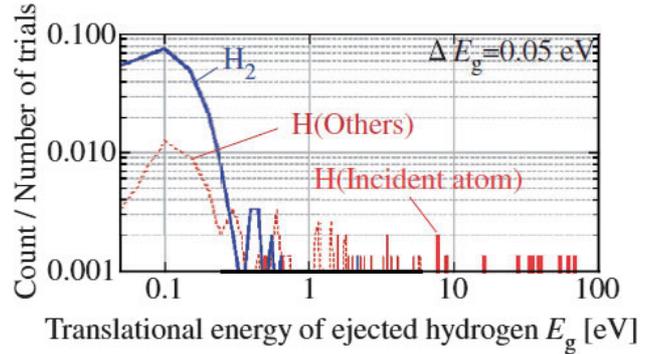


図8 放出水素原子・分子の並進エネルギーの分布[1].

する古典分子動力学法の範囲では，水素分子が有する全エネルギー $E_{\text{tot}}$ は以下のように記述できる．

$$E_{\text{tot}} = \frac{1}{2} M \mathbf{v}_g^2 + \frac{1}{2} \mu \mathbf{v}^2 + U, \quad \mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (2)$$

ここで， $m_1$  および  $m_2$  は水素分子を構成する2つの水素原子の質量であり， $U$  は水素原子間のポテンシャルエネルギーである．重心座標系のハミルトニアンは，極座標 $(r, \theta, \phi)$ で以下のように記述できる．

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar}{2\mu} \Delta + U, \quad \Delta \equiv \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Lambda, \quad (3)$$

$$\Lambda \equiv \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}. \quad (4)$$

この場合， $\psi$ を波動関数， $E$ をエネルギー固有値とすると，シュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi + \frac{1}{r^2} \Lambda \psi + U \psi = E \psi \quad (5)$$

となる．動径方向の波動関数を $\psi_v(r)$ とすると，次数 $J$

の球面調和関数  $Y_J(\theta, \phi)$  を用いて波動関数  $\psi(r, \theta, \phi)$  を  $r^{-1}\psi_v(r)Y_J(\theta, \phi)$  と置くことができる。ここで、動径方向の波動関数  $\psi_v(r)$  の量子数  $v$  は振動準位、 $Y_J$  の次数  $J$  は回転準位とよばれる。  $\theta$ ,  $\phi$  と  $r$  を変数分離すると、  $\psi_v(r)$  が満たすべき以下の方程式を得る。

$$-\frac{\hbar}{2\mu} \frac{d^2\psi_v}{dr^2} + U(r)\psi_v + \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\mathbf{L}}{r}\right)^2 \psi_v = E\psi_v \quad (6)$$

ここで、  $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$  は軌道角運動量演算子である。  $\psi_v$  が  $\mathbf{L}$  の固有関数であれば、その固有値は回転準位  $J$  を用いて以下のように書ける。

$$\mathbf{L}^2\psi_v = \hbar^2 J(J+1)\psi_v \quad (7)$$

式(6)の第1項と第3項はそれぞれ振動および回転運動に対応する。したがって、古典系における重心座標系での水素分子の全エネルギー  $E_{\text{classic}}$  は

$$\frac{1}{2}\mu \left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + U(r) + \frac{1}{2\mu} \left(\frac{\mathbf{L}_{\text{classic}}}{r}\right)^2 = E_{\text{classic}} \quad (8)$$

と書ける。ここで、  $\mathbf{L}_{\text{classic}} = (L_{\text{classic } x}, L_{\text{classic } y}, L_{\text{classic } z})$  は古典系で計算した重心周りの2つの水素原子の軌道角運動量(c-数)であり、前述の  $\mathbf{L}$  は演算子(q-数)である。計算モデルでは、古典系における回転エネルギー  $E_{\text{rot}}$  および振動エネルギー  $E_{\text{vib}}$  を以下のように定義する。

$$E_{\text{vib}} \equiv \frac{1}{2}\mu \left(\frac{dr}{dt}\right)^2, \quad E_{\text{rot}} \equiv \frac{1}{2\mu} \left(\frac{\mathbf{L}_{\text{classic}}}{r}\right)^2. \quad (9)$$

放出水素分子の回転エネルギー  $E_{\text{rot}}$  および振動エネルギー  $E_{\text{vib}}$  の時間平均の分布を図9(a), (b)にそれぞれ示す。放出水素分子の中には、0.1 eVを超える並進エネルギーを有する分子が多数存在した。一方、振動・回転エネルギーは、ほとんどの分子が0.1 eVより低いことがわかる。しかし、稀ではあるが、1 eVを超える振動・回転エネルギーを有する水素分子も存在し、炉壁の温度である300 Kの熱エネルギーと比べると高いエネルギーを有する分子が存在することが示された。水素分子が放出するとき、多くの場合で熱的な過程の寄与が大きいが、入射水素との直接的な衝突による非平衡な過程により形成され放出に至る分子が存在することが示唆される。

中性粒子輸送コードと連携する際、振動・回転の量子準位である振動準位  $v$  および回転準位  $J$  の分布が必要になる。古典系の分子動力学計算から量子準位を特定することは難しいが、本計算モデルでは、古典分子動力学法により得られる値から放出水素分子の振動・回転準位を以下の方法を用いて見積る。

1. 式(8)を用いて、  $E_{\text{classic}}$  を分子動力学計算により求める。
2. 式(7)を用いて、  $\mathbf{L}_{\text{classic}}$  から  $J_{\text{classic}}$  を求める。
3. 求めた  $J_{\text{classic}}$  を四捨五入し整数化する。
4. シュレディンガー方程式(6)を満たす  $(J, E, v)$  の組から、  $J = J_{\text{classic}}$  であり、かつ、  $E$  が  $E_{\text{classic}}$  に最も近

い組み合わせを探し、振動準位  $v$  を特定する。

放出水素分子の回転準位  $J$  および振動準位  $v$  の分布を図10(a), (b)にそれぞれ示す。比較的高い回転・振動準位を有する水素分子が存在することがわかる。また、これらの高い回転・振動準位を有する水素分子は、水素原子の入射から1 ps以内の短い時間に放出する。このことから、入射水素原子との衝突過程が高準位の分子を生むことが示唆される。図11に、振動準位が基底状態 ( $v = 0$ ) の場合の回転準位  $J$  への励起エネルギーの分布を示す。この分布がボル

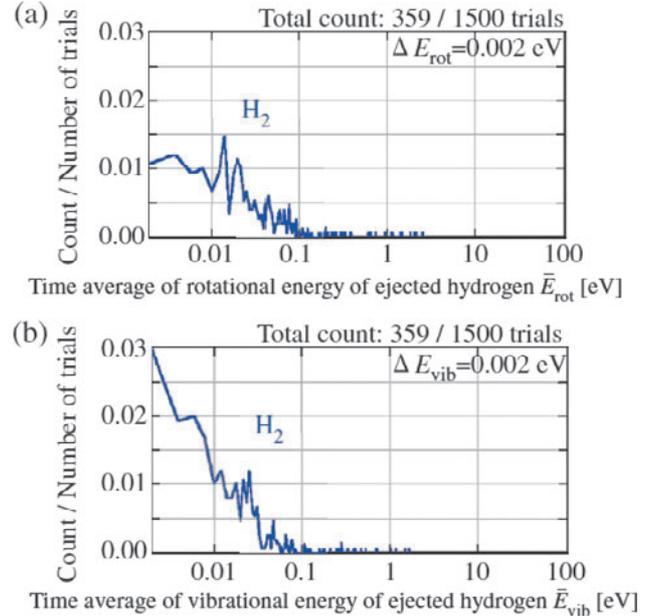


図9 放出水素分子の(a)回転エネルギー  $E_{\text{rot}}$  および(b)振動エネルギー  $E_{\text{vib}}$  の時間平均の分布[1]。

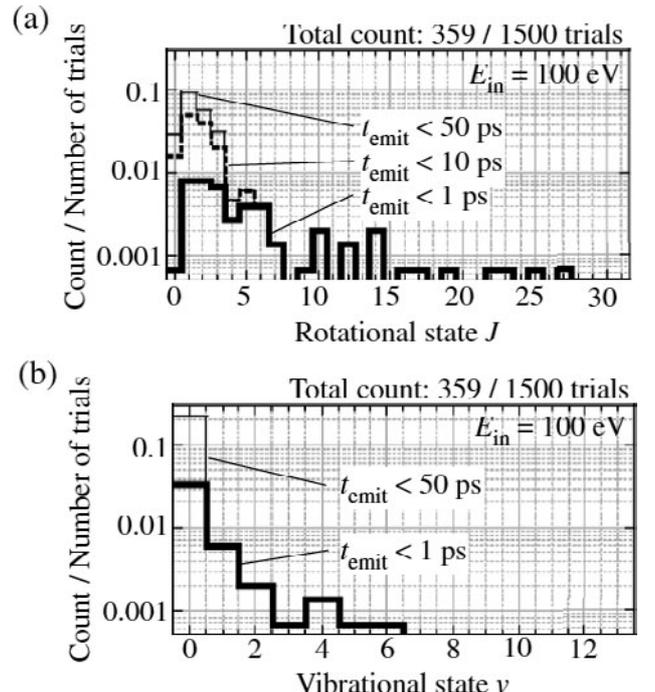


図10 放出水素分子の(a)回転準位  $J$  および(b)振動準位  $v$  の分布[1]。

ツマン因子に従うとしてフィッティングすることで、回転温度を求めることができる[5]。入射水素原子との非平衡な衝突過程によりボルツマン因子から外れる高い回転準位を有する水素分子が生じることがわかる。熱エネルギーよりも格段に高い振動・回転エネルギーを有するこれらの分子が周辺プラズマの挙動に強く影響する可能性が示唆される。

2.2.4 タングステン壁の計算例

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計算[6]も実施している。図12に示すとおり、bcc 結晶構造を用意し、格子間に水素原子を配置した構造を標的材とする。原子間相互作用にはEAMポテンシャル[7]を用いる。この計算モデルを用いて、タングステン壁から水素分子が放出する過程を計算した例を図13(a)に示す。炭素壁とは異なり、タングステン壁の場合には、材料表面において水素分子が形成される過程が観測される。入射水素（橙色）により炉壁の中の水素原子（黒色）がはじき出され、表面から放出する。図13(b)に示すように、タングステン壁表面には水素原子との相互作用エネルギーが負になる領域が存在する。そのため、放出された水素原子の一部は、表面近傍に捕捉されて炉壁の表面を移動する。その後、表面に存在する別の水素原子（黒色）と出会い化学結合して水素分子が形成される。分子を形成するとタングステン壁との相互作用エネルギーが変化するため、水素分子は壁から斥力を受けて加速しながら表面を離れることが明らかとなった。（齋藤，中村）

2.3 水素原子および水素分子の衝突輻射モデル

水素分子の衝突輻射モデルに先立ち、まず簡単な水素原子の衝突輻射モデルをとりあげ、衝突輻射モデルそのものの説明を行いたい。衝突輻射モデルは、電子衝突や光の自然放出などによる励起原子密度（ポピュレーション）の時間変化を記述する連立微分方程式からなる。これを解いて得られた励起原子密度を用いると、さらに励起状態を経由

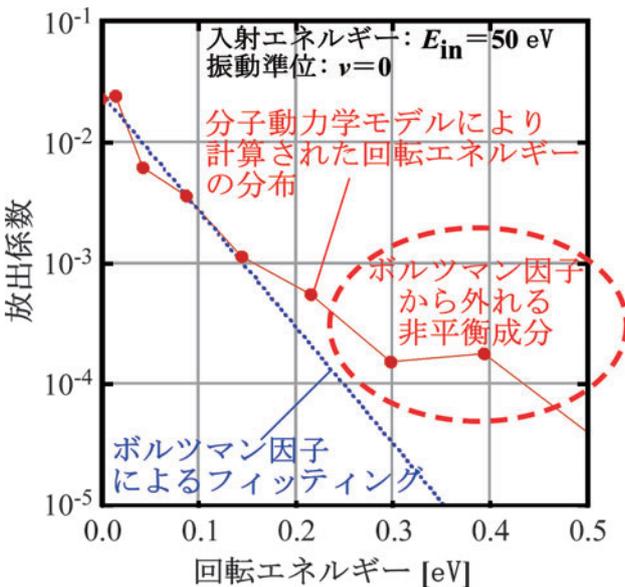


図11 振動準位が基底状態 ( $v=0$ ) の場合の回転準位  $J$  への励起エネルギーの分布[5]。

する電離や再結合の反応速度係数の大きさや励起原子からの発光強度が計算できる。

2.3.1 水素原子衝突輻射モデルと準定常近似

水素原子の衝突輻射モデルについて説明する。ここでは、プラズマは  $H, H^+$ 、および電子だけから構成されるとする。また同一の主量子数を持つ状態は、その統計重率に従ってポピュレーションが分布すると仮定する[8]。

水素原子衝突輻射モデル 主量子数  $p$  で表される状態のポピュレーション  $n(p)$  の時間変化は次の式で表される[8]。

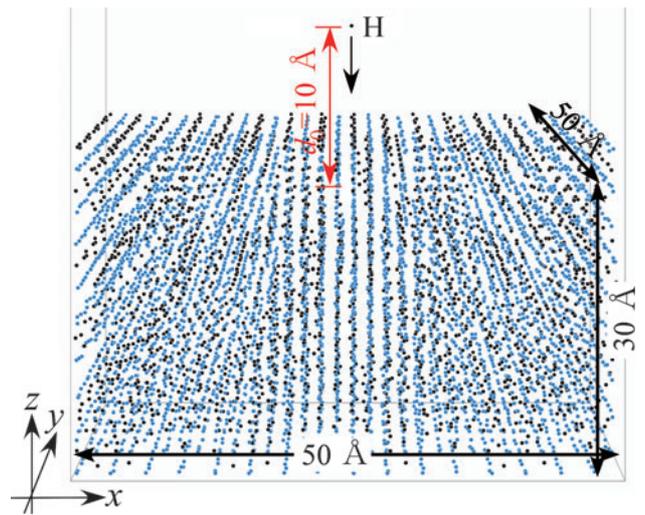


図12 タングステン壁に水素原子が入射する場合の計算系[6] (Copyright (2021) The Japan Society of Applied Physics)。

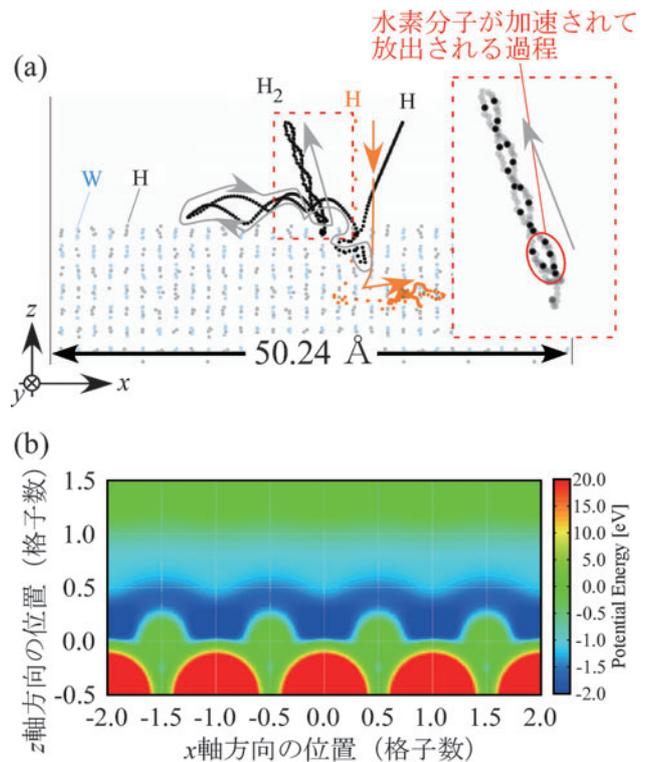


図13 (a) タングステン壁表面で形成される水素分子の放出過程。(b) タングステン壁表面のポテンシャルコンター図[6] (Copyright (2021) The Japan Society of Applied Physics)。

$$\begin{aligned}
dn(p)/dt = & \sum_{q < p} C(q, p) n_e n(q) \\
& + \sum_{q > p} \{F(q, p) n_e + A(q, p)\} n(q) \\
& + \alpha(p) n_{\text{H}^+} n_e^2 + \beta(p) n_{\text{H}^-} n_e \\
& - \left\{ \left( \sum_{q < p} F(p, q) + \sum_{q > p} C(p, q) + S(p) \right) n_e \right. \\
& \left. + \sum_{q < p} A(p, q) \right\} n(p) \quad (10)
\end{aligned}$$

ここで、 $n_e$  と  $n_z$  は電子密度とプロトン密度である。 $C(p, q)$  と  $F(p, q)$  は状態  $p$  から状態  $q$  への電子衝突励起速度係数とその逆過程の脱励起速度係数、 $A(p, q)$  は状態  $p$  から状態  $q$  への自然放出確率、 $S(p)$  と  $\alpha(p)$  は状態  $p$  の電離速度係数と状態  $p$  への三体再結合速度係数、 $\beta(p)$  は放射再結合速度係数である。 $C(p, q)$ 、 $F(p, q)$ 、 $S(p)$ 、 $\alpha(p)$ 、 $\beta(p)$  は電子温度の関数である。

**準定常近似** 時間変化するプラズマを考える。多くの場合、電子温度、電子密度、イオン密度、基底原子密度の時間変化に対する励起状態ポピュレーションの応答時間がきわめて短いことから、連立微分方程式を励起準位に対するものと基底準位に対するものに分けて扱う。

励起準位については、式(10)を式(11)のような行列表示で書くことができる。計算の際は考慮する単位はある大きな主量子数でうち切る。式中の  $K$  は正方行列である。打ち切った高励起準位のポピュレーションは簡単な近似式で考慮することができる[8]。

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \vdots \\ n(4) \\ n(3) \\ n(2) \end{pmatrix} = & K \begin{pmatrix} \vdots \\ n(4) \\ n(3) \\ n(2) \end{pmatrix} \\
& + \begin{pmatrix} \vdots \\ \alpha(4) n_e + \beta(4) \\ \alpha(3) n_e + \beta(3) \\ \alpha(2) n_e + \beta(2) \end{pmatrix} n_z n_e + \begin{pmatrix} \vdots \\ C(1, 4) \\ C(1, 3) \\ C(1, 2) \end{pmatrix} n(1) n_e \quad (11)
\end{aligned}$$

核融合プラズマのプラズマパラメータでは、励起原子の応答時間が短いことから、式(11)の左辺はすべての励起準位について0と近似できる。これを準定常近似という。成立条件については文献[8, 9]に与えられている。励起原子のポピュレーションから見ると環境(電子温度、電子密度、イオン密度、基底原子密度)は時間変化しないくらいゆっくりに見えており、励起原子のポピュレーションは各瞬間でその環境の元での定常解になる、という近似である。準定常近似を用いると連立微分方程式(11)は連立一次方程式となる。励起準位のポピュレーションは、 $K$  の逆行列を求めることにより簡単に得ることができ、次式のように書くことができる。

$$n(p) = R_0(p) n_{\text{H}^+} n_e + R_1(p) n(1) n_e \quad p = 2, 3, \dots \quad (12)$$

ここで  $R_0(p)$  および  $R_1(p)$  は電子温度と電子密度の関数である。多くの場合、ポピュレーション分布は右辺第1項または第2項だけで表され、それぞれ再結合プラズマ成分、電離プラズマ成分とよばれる[8]。基底状態の速度方程式(10)は  $p \geq 2$  について得られた  $R_0(p)$  および  $R_1(p)$  を用いて整理して、

$$\frac{d}{dt} n(1) = -\frac{d}{dt} n_z = -S_{\text{CR}} n(1) n_e + \alpha_{\text{CR}} n_{\text{H}^-} n_e$$

のように書くことができる。ここで  $S_{\text{CR}}$  および  $\alpha_{\text{CR}}$  は実効的電離速度係数、実効的再結合係数とよばれる。これらは電子温度と電子密度の関数である。あとで述べる中性粒子輸送コードの中で水素原子を追跡するときは、これらの係数がテーブル化されたものを用いて基底状態原子を追跡する。多数の基底原子の追跡して基底原子密度が算出された後に励起原子密度が必要な場合は式(12)を用いる。

**水素原子衝突輻射モデルの拡張** これまで表1中の(P1)-(P4)だけを扱ったが、水素分子が存在する場合、(P6)-(P7)、(P9)-(P11)、(P15)-(P16)でも励起原子が生成される。これらはそれぞれ式(11)の右辺に新しい項を追加

表1 本節の計算例で考慮する原子・分子過程。H\*は励起原子、H<sub>2</sub>\*は電子励起状態分子である。\*でまとめて表した励起状態間の遷移は原子あるいは分子の衝突輻射モデルで扱われる。 $p$ は水素原子の主量子数。 $v$ と $v'$ 、 $J$ は現モデルで区別しているものを表す。

Label	Process
(P1)	$\text{H}^+ + e \rightarrow \text{H}$
(P2)	$\text{H}^+ + e \leftrightarrow \text{H}^* \rightarrow \text{H}$
(P3)	$\text{H} + e \rightarrow \text{H}^+ + 2e$
(P4)	$\text{H} + e \leftrightarrow \text{H}^* + e \rightarrow \text{H}^+ + 2e$
(P5)	$\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v) + e \rightarrow \text{H}_2(b^3\Sigma_u^+) + e \rightarrow \text{H} + \text{H} + e$
(P6)	$\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow \text{H} + \text{H}(p \geq 2) + e$
(P7)	$\text{H}(p \geq 2) \rightarrow \text{H}^* \rightarrow \text{H}$
(P8)	$\rightarrow \text{H}^+ + e$
(P9)	$\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v, J) + e \rightarrow \text{H}_2^- \rightarrow \text{H}(p = 1 \text{ or } 2) + \text{H}^-$
(P10)	$\text{H}^- + \text{H}^+ \rightarrow \text{H} + \text{H}(p = 2 \text{ or } 3)$
(P11)	$\text{H}(p = 2 \text{ or } 3) \rightarrow \text{H}^* \rightarrow \text{H}$
(P12)	$\rightarrow \text{H}^+ + e$
(P13)	$\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v) + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+, v') \rightarrow \text{H}$
(P14)	$\text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+, v') + e \rightarrow \text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+, v'') + e$
(P15)	$\text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+, v'') + e \rightarrow \text{H} + \text{H}(p \geq 2)$
(P16)	$\text{H}(p \geq 2) \rightarrow \text{H}^* \rightarrow \text{H}$
(P17)	$\rightarrow \text{H}^+ + e$
(P18)	$\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v, J) + e \leftrightarrow \text{H}_2^*(\text{excited}, v', J') + e$
(P19)	$\text{H}_2^*(\text{singlet}, v, J) \rightarrow \text{H}_2(X^1\Sigma_g^+) + h\nu \rightarrow \text{H} + \text{H}$
(P20)	$\text{H}_2^*(\text{triplet}, v, J) \rightarrow \text{H}_2(b^3\Sigma_u^+) + h\nu \rightarrow \text{H} + \text{H}$
(P21)	$\text{H}_2^*(\text{excited}, v, J) + e \rightarrow \text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+, v') + 2e$
(P22)	$\text{H}_2^*(\text{excited}, v, J) \rightarrow \text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v', J') + h\nu$
(P23)	$\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v, J) + e \rightarrow \text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v', J') + e$
(P24)	$\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v, J) + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v', J') + \text{H}^+$
(P25)	$\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v) + \text{H} \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{H}$
(P26)	$\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v, J) + e \rightarrow \text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+, v') + 2e$
(P27)	$\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v, J) + e \rightarrow \text{H}^+ + \text{H} + 2e$
(P28)	$\text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+, v) + e \rightarrow \text{H} + \text{H}^+ + e$

することによりモデルに組み込むことができる [10, 11].

ここでは扱わなかったが、例えば再結合プラズマでは水素原子ライマン線の輻射輸送（光吸収）は、基底原子からの励起にともない電離を増加させて再結合を妨げる可能性がある。これまで説明したモデルは局所的に励起原子密度を決めるものであったが、ある位置で放出された光が他の場所で吸収されると、励起原子密度が局所的に決まらなくなる。我々は輻射輸送について、プラズマの各場所の励起水素原子密度と輻射場を同時に収束計算で求めるコードを開発済みである [12].

### 2.3.2 電子・振動・回転状態を考慮した水素分子衝突輻射モデル

**水素分子のエネルギー準位** 我々の水素分子のモデルでは図14(a)の電子状態を考慮している。それぞれの電子状態で振動・回転状態 [13] を考慮しており、水素分子衝突輻射モデルでは全部で4133の準位が考慮されている。各振動・回転のエネルギー値は文献 [14] の値を用い、不足するものについては電子状態ポテンシャルを用いて Schrödinger 方程式から計算した。図14(b)は電子基底状態の回転状態  $J$

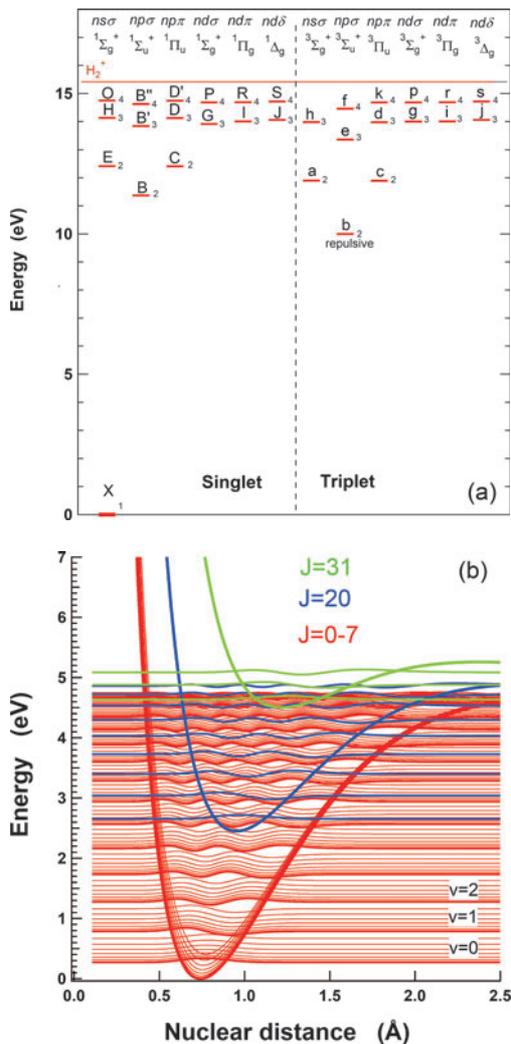


図14 (a)モデルで考慮した電子状態。(b)電子基底状態  $H_2(X^1\Sigma_g^+)$  の回転状態  $J$  を区別した振動波動関数およびエネルギー固有値。各エネルギー固有値を表すラインを基準として振動波動関数を表している。

を区別した振動波動関数およびエネルギー固有値を表している。電子やイオンによる振動・回転励起に必要なエネルギーがどれくらいかこの図からわかる。低温プラズマにおいてこの過程による荷電粒子のエネルギー損失チャンネルがあることに注意しておく必要がある。

**考慮する分子過程** 表1は水素原子および水素分子の衝突輻射モデル中で扱われている原子・分子過程を示している。反応の起こりやすさを表す断面積または速度係数は文献 [15] にまとめられている。例として、表1中の(P9)の速度係数および (P13) の断面積を図15(a) (b) に示す。これらのように分子の関与する各種反応は、多くの場合、始状態の回転・振動状態に大きく依存する。

### 2.3.3 DEMO 非接触プラズマへの応用例

文献 [19] 中で計算されている DEMO SlimCS ダイバータのプラズマパラメータを参考とし、 $T_e = T_{H^+} = T_H = 2\text{ eV}$ ,  $n_e = n_{H^+} = 10^{16}\text{ cm}^{-3}$ ,  $n_H = 10^{15}\text{ cm}^{-3}$  のプラズマ中に入射された水素分子のポピュレーションの時間変化を水素分子衝突輻射モデルで計算した。初期ポピュレーションは 300 K のボルツマン分布としている。電子励起状態の振動・回転状態については水素原子のモデルで紹介した準定常近似を適用し、電子基底状態  $X^1\Sigma_g^+$  の301の振動・回転状態については準定常近似を用いずに時間変化を計算した。水素

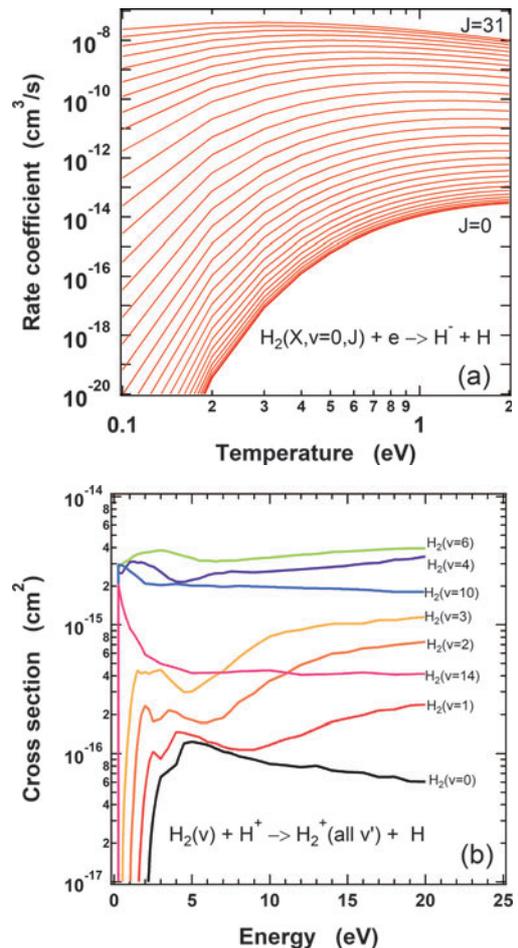


図15 (a)  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v=0, J) + e \rightarrow H_2^+ \rightarrow H(p=1\text{ or }2) + H^-$  の速度係数 [16]. (b)  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v) + H^+ \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+, v) \rightarrow H(1)$  の断面積 [17, 18].

分子と衝突する背景の水素分子は  $v = 0, J = 0, 1$  に限定し、温度と密度は  $T_{H_2} = 1 \text{ eV}, n_{H_2} = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  に固定した。

計算結果を図16, 図17, 図18に示す。図16は  $X^1\Sigma_g^+$ ,  $v=0$  の回転状態のポピュレーションの時間変化である。図17は表1中で原子が生成される各種反応の実効的速度係数である。図17から(P9-P11)と(P13-P16)の分子活性化再結合とよばれる反応の実効速度係数が  $X^1\Sigma_g^+$  の301の振動・回転状態ポピュレーションの増加に伴い大きくなることわかる。図18は水素分子との衝突に伴うプラズマ中の電子とイオンの実効的エネルギー損失係数を表す。いま考えている低温のダイバータプラズマでは電子衝突による振動・回転励起が最も大きいことがわかる。我々の計算機コードのほかでは、このエネルギー損失過程が考慮されていないため、プラズマ温度を高く見積もりすぎている可能性がある。(澤田)

### 2.4 水素分子の電子・振動・回転状態を考慮した中性粒子輸送コード

先に記した電子・振動・回転状態を区別した水素分子衝突輻射モデルを我々の中性粒子輸送コードに組み込んだ[20]。計算では電子基底状態の301の振動・回転状態の分子を独立な粒子として追跡する。電子励起状態には準定常近似を適用し、電子励起状態を経由する過程を考慮している。

#### 2.4.1 中性粒子輸送コードの概要

中性粒子輸送コードでは、粒子源から放出される粒子の1つ1つをプラズマ中の反応を考慮しながら追跡する。いま、ある内部状態の水素分子がある方向にある速さで壁から放出されたとする。もしもこれと同じ水素分子が多数個あるとすれば、飛び出した方向に沿って、解離や電離等による分子数の減衰を計算することができ、各位置での分子が失われる重みを計算することができる。これを元に、壁から飛び出した1個の分子の追跡において、それがどこで失われるかを乱数を用いて決める。位置を決めた後はどの反応が起こったかを、反応の起こりやすさの重みから、乱数を用いて決める。反応が起こった後に追跡する粒子種やその速度も乱数を用いて決める。容器内の空間はセルに分割されており、粒子の追跡中は、各セルでセルを通過する時間が記録される。壁で放出される中性粒子やプラズマ中の再結合過程で生成される中性粒子など、粒子源から放出されるいろいろな粒子種・速さ・方向の粒子を1つ1つ追跡し、各セルでは粒子種別に通過時間を蓄積し、各セルでの蓄積通過時間をセル体積で割ったものが粒子密度に比例する。粒子源から1秒あたりに放出される粒子の蓄積時間を用いれば密度の絶対値が得られる。速度別に通過時間を蓄積すれば速度分布関数を得ることもできる。

#### 2.4.2 LHD への応用例

我々の中性粒子輸送コードによるLHDプラズマの計算では、現在は2.5節で述べる周辺プラズマ輸送コードEMC3-EIRENE[21]で求められた電子・イオンの温度・密度分布とカーボンダイバータへのイオン流束を用いている。計算ではダイバータ板に到達したイオン流の中性化に

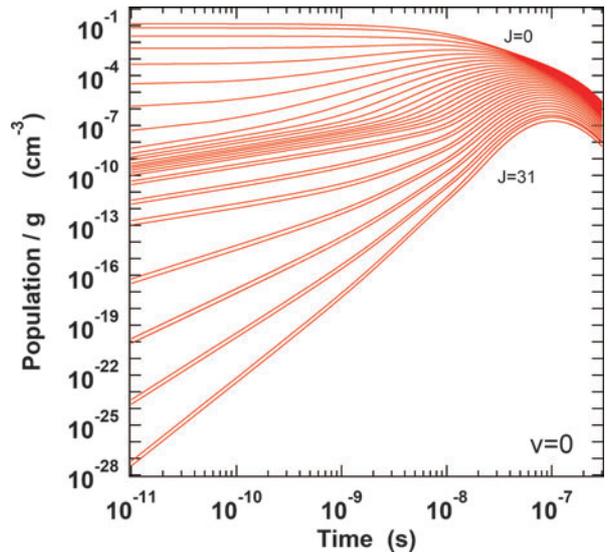


図16 統計重率  $g$  で割った  $X^1\Sigma_g^+$  ( $v=0$ ) の各  $J$  のポピュレーション。

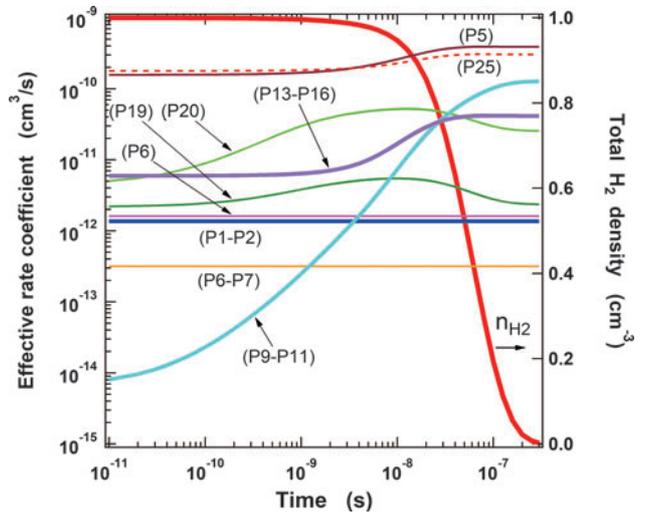


図17 分子活性化再結合の実効的速度係数を含む表1中の過程の速度係数。

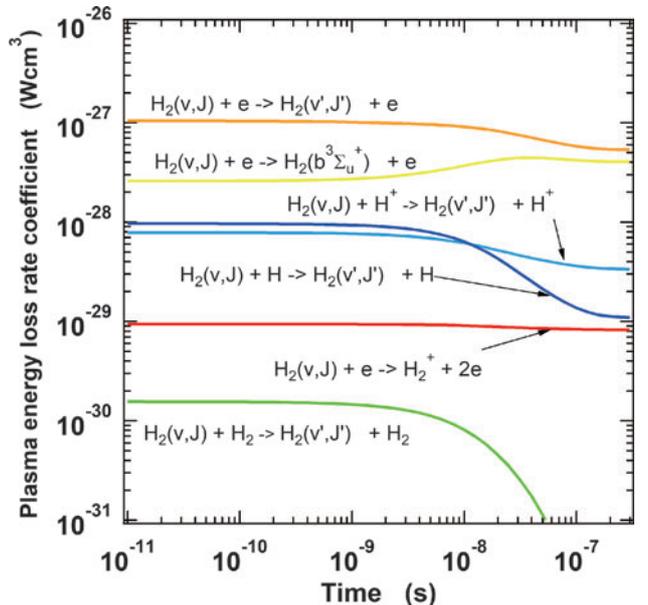


図18 エネルギー損失の実効的速度係数。

より放出された原子・分子を粒子源としている。放出された原子と分子の割合や分子の振動・回転状態の分布は2.2節の分子動力学計算の結果[20]を与え、放出される原子・分子の流束の絶対値はイオン流束から決めている。原子がステンレス壁面で反射される際の原子と分子の割合はTRIMコード[22,23]の結果を用いている。水素原子・分子を追跡する際に、背景である水素原子・分子との弾性散乱を考える場合は、背景の原子・分子の密度・速度分布が必要になる。我々のコードでは、ある一定の粒子数を追跡する際は背景は一定とみなし、そのあとで背景の情報を更新する収束計算ができるようになっている。

図19の電子温度と電子密度を用いた計算例を紹介する。図20は中性粒子輸送コードで計算されたLHDのある鉛直断面での水素分子密度 ( $X^1\Sigma_g^+$ ,  $v=0, J=0$ ) と原子密度を表している。また、図21は図20中の  $z=73.9$  cm および  $z=0$  cm 上の振動・回転ポピュレーション分布である。図22は図20および図21中の  $z=73.9$  cm, POSITION=130 における振動・回転ポピュレーションを表している。我々のコードを用いると、プラズマ中のすべての位置での振動・回転ポピュレーション分布が計算できる。中性粒子輸送コードで計算された水素原子密度および分子の振動・回転ポピュレーション分布を水素原子・分子衝突輻射モデルに与えると水素原子・分子のスペクトルを計算することができる。現在、LHD および著者の研究室のRFプラズマで計測されたスペクトルと計算結果を比較しながら、水素原子・分子が壁と衝突したときの扱いなど、コードの整備を

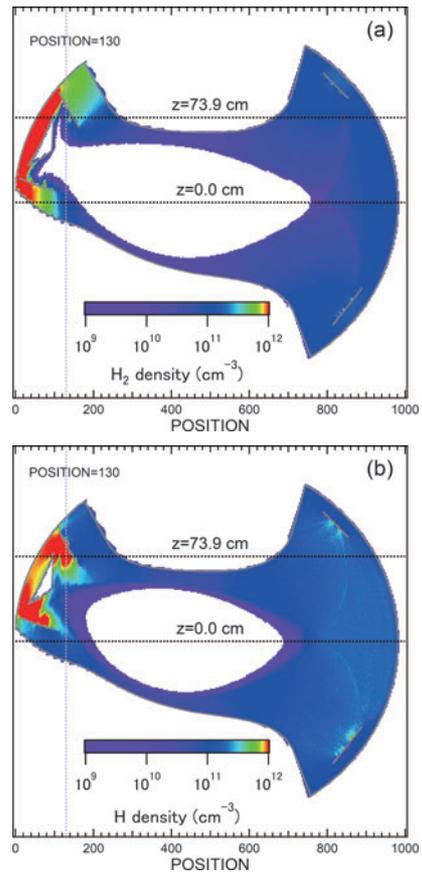


図20 中性粒子輸送コードで計算された(a)分子密度  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v=0, J=0)$  と(b)原子密度。

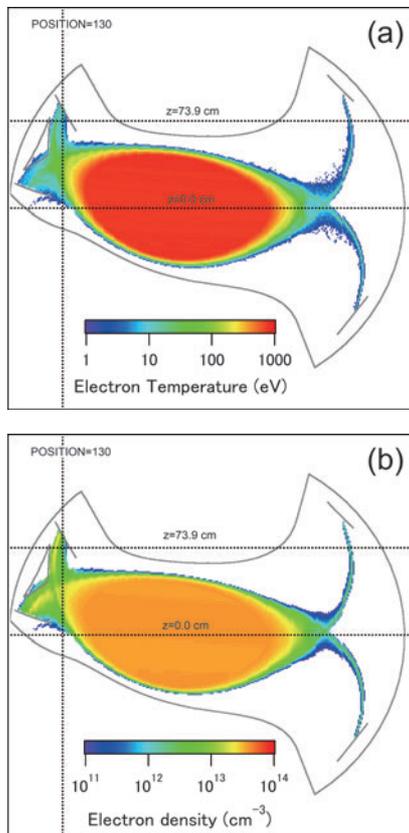


図19 EMC3-EIRENE で計算されたLHDのある鉛直断面の(a)電子温度と(b)電子密度。

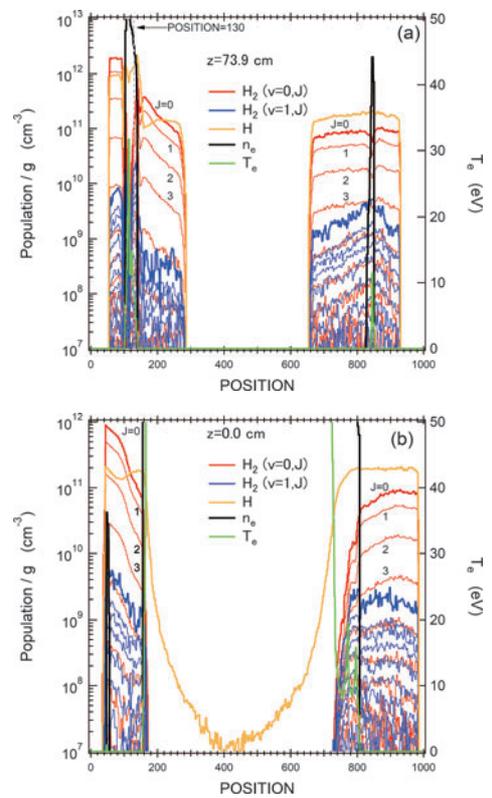


図21 図20中の(a)  $z=73.9$  cm および(b)  $z=0$  cm 上の振動・回転ポピュレーション分布。赤:  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v=0, J)$ 。青:  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v=1, J)$ 。橙: 水素原子密度。黒:  $n_e$ 。緑:  $T_e$ 。

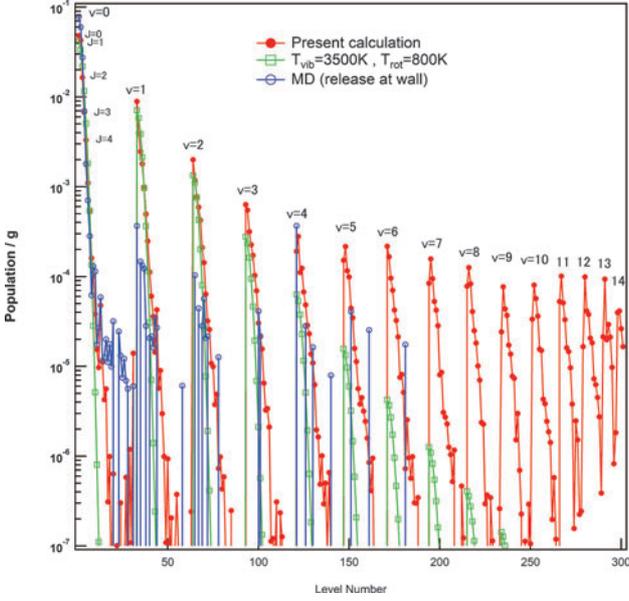


図22 図20および図21中の  $z = 73.9$  cm, POSITION = 130 における振動・回転ポピュレーション。横軸はモデル中の準位番号。赤：中性粒子輸送コード。緑： $T_{\text{vib}} = 3500$  K,  $T_{\text{rot}} = 800$  K のボルツマン分布。青：ダイバータから放出時の分布 (MD 計算)。

進めている。今後さらに、水素同位体 ( $D_2$ ,  $T_2$ ,  $DT$ ) のコード整備を進めていく予定である。(澤田)

## 2.5 プラズマと中性粒子の統合モデリング

2.4節に述べた中性粒子輸送モデルは背景プラズマを前提とした計算である。しかし、実際の装置では、プラズマと中性粒子はリサイクリング過程を通じて強く結合しており、片方を固定して考えることは現実と異なる状況をもたらす可能性があり、2.4節で用いた背景プラズマは、プラズマ輸送と中性粒子輸送を統合した EMC3-EIRENE コードで計算されたものである。Max-Planck プラズマ物理研究所で開発された EMC3 コード[24, 25]がプラズマ輸送を流体方程式に基づいて解き、Jülich 総合研究機構で開発された EIRENE コード[26]が中性粒子輸送を粒子描像に基づいて解く。現状では EIRENE コードを用いて求めたプラズマ分布を2.4節の中性粒子輸送コードに受け渡すのみであるが、この中性粒子輸送コードと EMC3 コードの双方向の結合を計画している。

EMC3-EIRENE コードは、トカマクを前提とする軸対称 2次元コードと異なり、3次元形状を持つ磁場閉じ込め装置を扱うことができ、密度・温度・フローなどの定常分布を数値的に求めることができる。国内においては、ヘリカル装置である LHD[27, 28]と Heliotron J[29, 30]、トカマク装置である JT-60SA[31]、直線装置である NAGDIS-II[32]で適用実績がある。本コードの概要と3次元形状に関わる適用事例が本学会誌2021年8月号の小特集[33]で述べられている。本節では、そこであまり述べられていないプラズマ輸送モデルから見た中性粒子の役割についての概要と、中性粒子に関連する二つの研究を紹介する。

### 2.5.1 簡易プラズマ輸送モデルに見られる中性粒子の影響

Scrape-Off-Layer (SOL) やダイバータ、あるいはエルゴディック領域 (以下ではまとめて周辺領域と呼ぶ) を含めた周辺プラズマの輸送を記述する方程式として、二流体方程式 (Braginskii 方程式[34]) が一般に用いられている。EMC3-EIRENE が用いる方程式は文献[35]に譲って、単純化した磁力線に沿う1次元の二流体方程式を次に示す。説明を目的に、プラズマ粒子衝突に関する粘性項や緩和項などを省略し、さらに定常を仮定した。

$$\frac{\partial n v}{\partial l} = S_p \quad (14)$$

$$m_e n v \frac{\partial v}{\partial l} + \frac{\partial n T_e}{\partial l} - e n \frac{\partial \phi}{\partial l} = -m_e v S_p \quad (15)$$

$$m_i n v \frac{\partial v}{\partial l} + \frac{\partial n T_i}{\partial l} + Z e n \frac{\partial \phi}{\partial l} = -m_i v S_p + S_m \quad (16)$$

ここで、 $l$ ：磁力線に沿った座標、 $n$ ：密度、 $v$ ：流速、 $m_e/m_i$ ：電子とイオンの質量、 $Z$ ：イオンの価数、 $e$ ：電荷素量、 $\phi$ ：静電ポテンシャル、 $S_p$ ：粒子ソース、 $S_m$ ：運動量ソースである。式(14)は粒子の釣り合い、式(15)と(16)はそれぞれ電子とイオンの運動量の釣り合いを表す。電子とイオンの温度は一樣と仮定し、粒子ソースから発生する粒子は初期速度を持たないと仮定した。電子の質量はイオンよりもずっと小さいので、電子の運動量を無視して、式(15)に  $Z$  をかけて(16)と足し合わせることで、

$$m_i n v \frac{\partial v}{\partial l} + \frac{\partial n (Z T_e + T_i)}{\partial l} = -m_i v S_p + S_m \quad (17)$$

が得られる。さらに、式(14)と(17)から  $S_p$  を消去すると、

$$m_i \frac{\partial n (v^2 + c_s^2)}{\partial l} = S_m \quad (18)$$

が得られる。ここで、 $c_s$  は音速  $\sqrt{(Z T_e + T_i)/m_i}$  である。式(14)と(18)が簡易流体モデルとして用いられる方程式である。式の上では磁力線方向の電場は無くなっているが、物理モデルとしては含まれており、式(15)から電場  $E$  が次のように計算される。

$$E = -\frac{\partial \phi}{\partial l} = -\frac{T_e}{e n} \frac{\partial n}{\partial l} \quad (19)$$

粒子ソースとしては、炉心から磁力線を横切って輸送されてくる粒子や原子の電離が考えられる。運動量ソースとしては、荷電交換反応によるプラズマと中性粒子との運動量交換が考えられる。ここでは、中性粒子ではなく、炉心から一樣に粒子が供給される例を取り上げる。すなわち、 $S_p$  は定数で、 $S_m = 0$  である。上流  $l = 0$  で流速が0となる (スタグネーション点) とし、プラズマが壁に達する位置  $l = L$  で流速が音速となる Bohm 条件を仮定すると、電子密度、ポテンシャル、流速、フラックスの規格化された解析解が次のように得られる。

$$\frac{n}{n_0} = \frac{1}{2} (1 + \sqrt{1 - l^2/L^2}) \quad (20)$$

$$\frac{e\phi}{T_e} = \ln(1 + \sqrt{1 - l^2/L^2}) \quad (21)$$

$$\frac{v}{c_s} = \frac{l/L}{1 + \sqrt{1 - l^2/L^2}} \quad (22)$$

$$\frac{nv}{n_0 c_s} = \frac{l}{2L} \quad (23)$$

ここで、スタグネーション点の電子密度を  $n_0$  とした。領域の長さ  $L$  を定める境界条件を用いたが、これは粒子ソースに  $S_p = 2n_0 c_s L$  を与えることに相当する。

図23に密度、ポテンシャル、流速、フラックスを示す。粒子ソースが一樣なので、フラックスは壁に向かって線形に増加し、流速も単調増加するが、壁付近では急峻に増加する。密度とポテンシャルは単調減少し、壁付近では急峻に減少する。この領域は、一般に collisional presheath と呼ばれる。このモデルにおいては、これらの変化をもたらす元になる要素は粒子ソースのみであり、粒子ソースが不均一であれば、これらの物理量の変化もそれに合わせて変化する。とりわけ、磁場閉じ込め装置のように電離による粒子ソースが主な場合、プラズマの分布が壁で表面再結合する粒子量やその分布を決め、壁面から放出される中性粒子の量や分布がプラズマ中の電離分布を決め、それがプラズマ分布を決める。このように、粒子のリサイクリング過程を介して、プラズマと中性粒子が自己無撞着に決まる。

この簡易モデルで電子密度が単調減少するのは温度を一定と仮定したためであり、エネルギーのつり合い方程式も同時に解くと、壁に向かって温度の低下が生じ、場合によっては電子密度が上昇し、簡易モデルと描像が異なることに注意が必要である[36, 37]。また、中性粒子の輸送には、2.3節で述べられたような原子分子過程はもちろん、壁の形状や壁表面での反射・吸着など、様々な物理が関連する。プラズマへの影響にも、エネルギー損失や運動量損失、などの様々要素がある。そのため、こういった数値モデルを組み合わせて、全体の整合性を満たすようにプラズマと中性粒子を同時に解くことが必要とされる。前述の EMC3-EIRENE コードはこのような数値モデルの集合と、それらを実形状の空間で安定に解く数値スキームから成り立っている。しかし、非接触プラズマのように、プラズマと中性粒子の相互作用が局所的かつ支配的に生じる状

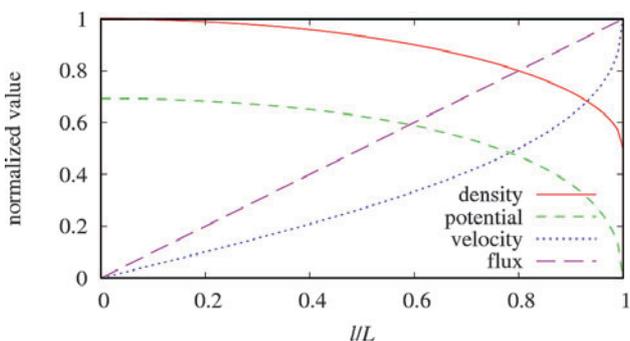


図23 簡易プラズマモデルの解析解。規格化して無次元量としている。左端がスタグネーション点、右端が壁に相当する。

況は数値モデルの整備が十分でなく、原子分子過程の反応断面積が示す急峻な変化特性や、粒子の生成（電離）と消滅（再結合）を伴う状況や、電子速度分布の非マクスウェル化や、計測が困難となる非常に低温（典型的には 1 eV 程度かそれ以下）の領域での検証など、課題は多い。

## 2.5.2 中性粒子輸送へのプラズマサイズの影響

炉心の閉じ込め性能予測の関しては、炉心サイズや形状へのスケージング則が経験的に知られており、設計上の重要な指標となっている。炉心領域のプラズマは閉じた磁力線からなる磁気面に強く束縛されているため、磁場構造の形状やサイズとともに、スケールする特性も多い。一方で、周辺領域では磁場とは無関係な中性粒子の存在や、壁形状の影響などがあるため、炉心領域と同じようなスケージング則は期待できない。以下に、その特徴が顕著に現れる例について述べる。

本学会誌2013年6月号の小特集[38]でヘリカル型核融合炉 FFHR-d1 の設計研究について詳細な解説が行われている。この設計は LHD を 4 倍に拡大したものがベースとなっている。正確には LHD と異なる部分があるが、ここでは単純に LHD をスケールしたものを考える。磁気軸位置  $R_{ax} = 3.6$  m の LHD 磁場配位と開ダイバータ形状を元に、2 倍および 4 倍に単純拡大した計算グリッドおよび壁を作成した。

相互比較のため、粒子および熱の垂直輸送係数は共通とし、それぞれ LHD 放電で典型的な概略値である  $0.5 \text{ m}^2/\text{s}$  と  $1 \text{ m}^2/\text{s}$  とした。炉心と周辺の境界面の電子密度として  $7 \times 10^{19}/\text{m}^3$  を共通で用い、その境界面を横切る熱フラックス（電子とイオンに等分配）を 9.375 MW, 75 MW, 600 MW と 8 倍ずつスケールアップした。9.375 MW は LHD 放電において使われる加熱量と同程度であり、600 MW は 3 GW の DT 核融合で発生する中性子とヘリウムが持つエネルギーのうち、ヘリウムがプラズマにもたらす加熱量である。結果としては、プラズマ体積あたりの加熱量を固定した条件となっている。軽水素プラズマを仮定し、不純物はないと仮定した。中性ガスの排気と燃料供給は行わないとした。

図24に水素原子の電離分布の比較を示す。LHD のいわゆる横長断面に相当する。図中の scale 値は装置サイズの拡大率を表し、LHD そのもの、2 倍、4 倍に拡大した場合であるが、比較のために縮小して同じサイズで示している。4 倍スケールの場合、電離がプラズマの表層に集中していることがわかる。中性粒子の電離衝突断面積は電子温度に依存する量で、電離レートは電離衝突断面積と電子密度と中性粒子密度の積である。そして、中性粒子は磁場に束縛されないため、典型的な核融合プラズマにおける電離平均自由行程は、1 mm から 100 mm 程度のオーダーで、プラズマサイズと直接の関係を持たない。したがって、プラズマサイズが大きくなれば、見かけ上の平均自由行程は相対的に短くなり、プラズマの奥深くまで進入する前に電離することになる。実際、この計算で仮定した炉心領域で電離した中性粒子の割合は、1 倍スケールで約 0.3%、4 倍スケールで約 0.02% であった。炉心でイオンが消滅すること

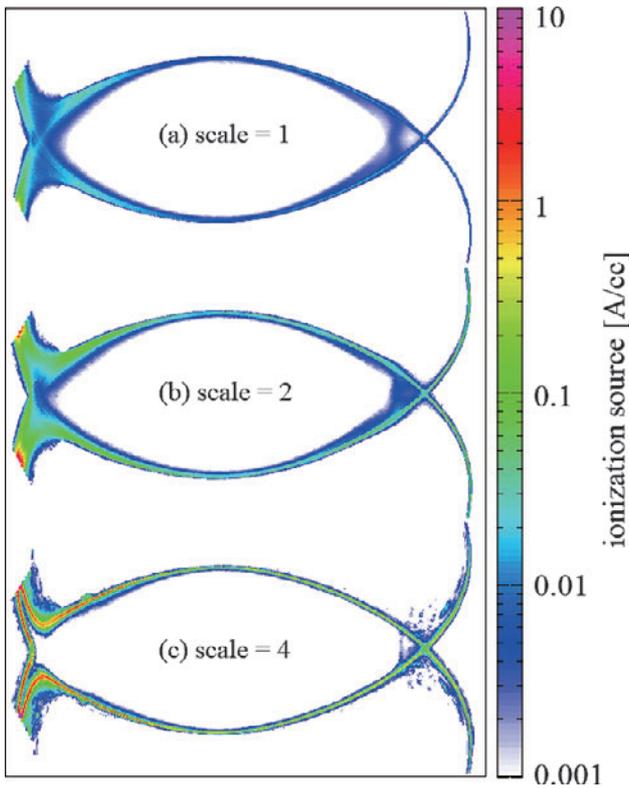


図24 中性粒子の電離分布の装置サイズ間比較. (a), (b), (c)の順でLHDサイズ, 2倍サイズ, 4倍サイズに相当するが, 同じサイズに揃えて図示している.

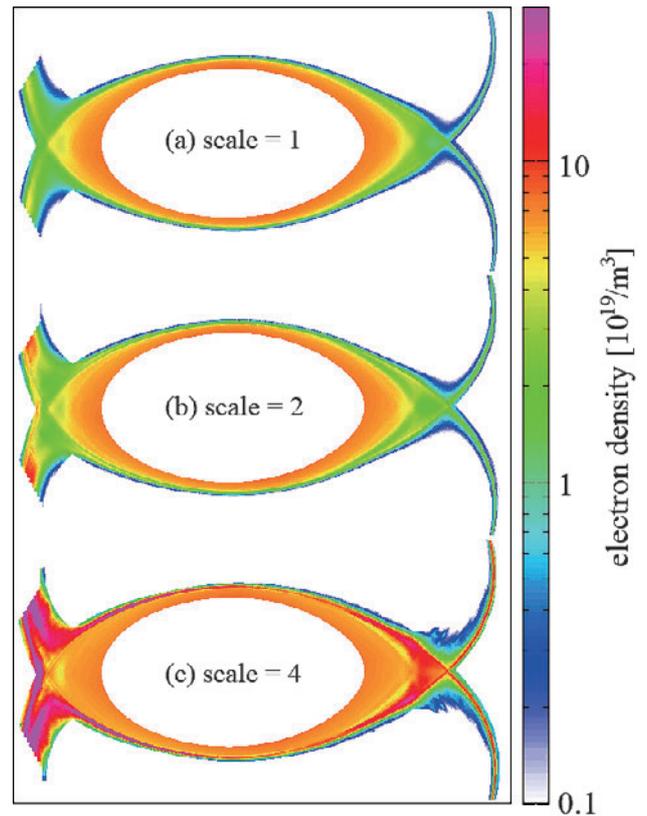


図25 電子密度分布の装置サイズ間比較. scale値の意味は図24と同じ.

はないため、電離した粒子はグローバルに見れば必ず径方向外向きに輸送される。そのため、ピンチ等の非拡散輸送が小さい状況では、外に向かって電子密度が減少し、その傾きは炉心に供給される粒子量に比例する。このように、炉心への粒子供給効率の落ちる大型装置の炉心では、電子密度分布が平坦化することになる。

図25に電子密度分布の比較を示す。もっとも明確な違いは、スケールアップに伴い、ダイバータレグの電子密度が極端に高くなっていることである。とりわけ、4倍スケールでは炉心はその数倍の電子密度の周辺プラズマで取り囲まれている。これは、前述の電離分布の違いによって生じるものであり、プラズマの表層部で電離したプラズマが磁力線に沿ってすぐにダイバータ板に到達するため、粒子のリサイクリングが表層部のみで閉じた状態になる。炉心への粒子供給効率の低下で、炉心密度を支えるためにより多くの中性粒子が必要となり、さらなる電子温度の低下と電子密度の上昇を引き起こしている。各分布中央の白い楕円領域は炉心領域であり、EMC3-EIRENEの計算領域外で、その境界において前述の電子密度と流入する熱フラックスを仮定している。

以上から、単純なスケールアップを用いた解析では、中性粒子の輸送に大きな違いが生じ、その結果として周辺電子密度の大幅な増加が生じることが示された。この電子密度増加は炉心プラズマ密度の制御性に大きく影響するため、その制御手法の研究は従来のサイズの装置よりも重要になると考えられる。すなわち、大きなガス排気量の確保

と、それと釣り合うベレット等による炉心近くへの粒子供給が可能であれば、それによって炉心密度を支えることができ、極端な炉心と周辺の電子密度の違いは緩和されると考えられる。

### 2.5.3 炉心パラメータの中性粒子輸送への影響

炉心領域は高温高密度で電離が素早く起きるため、一般に中性粒子密度は電子密度に比べて非常に低い。しかし、将来の大型装置については定かではないが、現存の装置サイズでは、ある一定量の水素原子が存在することが知られており、3.3節でLHDにおける計測手法と結果に関して述べる。

炉心の水素原子密度が無視できないケースとして、中性ビーム入射 (NBI) 加熱におけるエネルギー損失の問題がある。この加熱法は、高エネルギーの水素原子をプラズマに入射し、荷電交換反応で高エネルギーイオンを発生させ、イオンが炉心プラズマ中で電子を徐々に加熱するものである。この緩和過程の間に、水素原子と再度荷電交換反応が起きると、イオンエネルギーが中性粒子のエネルギーとして損失してしまい、加熱効率が低下する。

例えば文献[39]においては、HSX装置[40]に対して中性粒子輸送コードAURORA[41]で炉心水素原子密度分布を計算し、NBIによる粒子デポジション計算コードHFREYA[42]と高エネルギー粒子追跡コードGNET[43,44]を用いて加熱効率を評価している。その結果、水素原子密度を基準値の半分にするだけで、ピーク加熱効率が20%から30%に増加する結果が得られ、炉心中性粒子密度は重要な要素

であることが指摘されている。

図26に水素の再結合・電離・荷電交換の反応速度係数 [45, 46] を示す。水素原子が 13.6 eV という電離エネルギーを持つため、10 eV 程度の電子温度を境に、低温側で急激に反応速度が低下する。また、高温側でも原子と電子と衝突断面積が低下するために反応速度の低下が生じる。一方で、荷電交換は背景プラズマの電子を陽に介在しない反応のため、電子温度への依存は小さく、炉心においても大きな反応速度係数を持ち、電離を免れて荷電交換をする原子が存在しうる。

炉心で起きた荷電交換反応で生じる水素原子はイオン温度を反映したエネルギーを持ち、それが周辺領域で再度荷電交換または電離する場合がある。その場合、炉心のエネルギーを水素原子が磁場と無関係に周辺領域に輸送したことになる。また、そのような反応が起きずに水素原子がプラズマを飛び出して壁に衝突し、エネルギーを壁に与えたり、スパッタリングによる壁損耗を引き起こす。このような炉心の水素原子密度やそれが引き起こすエネルギー損失の特性を見るため、EMC3-EIRENE コードによるパラメータスキャンを行った。

磁気軸位置  $R_{ax} = 3.6$  m の LHD に対して、不純物のない軽水素プラズマを仮定し、粒子および熱の垂直輸送係数を  $0.5 \text{ m}^2/\text{s}$  と  $1 \text{ m}^2/\text{s}$  とした。炉心電子密度を  $1 \times 10^{19} \text{ m}^{-3} \leq n_e \leq 8 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$ 、加熱パワーを  $2 \text{ MW} \leq P \leq 16 \text{ MW}$  の範囲で、安定な計算ができる18通りの組み合わせを用いた。炉心領域は中性粒子のみを解き、プラズマは空間的に一様な固定分布としている。炉心の電子温度は炉心側境界の値をそのまま用い、炉心電子およびイオン温度は炉心境界の値を1.5倍して用いた。この1.5という値には物理的な根拠はなく、電子温度分布が概ね中心ピークであることから、概算値として用いた。

炉心領域で平均した水素原子の温度と密度を、それぞれ炉心のイオン温度と電子密度で規格化したものを図27と図28に示す。原子温度がイオン温度に匹敵する場合があることがわかる。これは荷電交換が原子温度を左右していることを示している。また、原子密度が炉心のプラズマパラメータに強く依存していることがわかる。炉心電子密度が低いほど、水素原子割合が指数関数的に増えるのは、電離

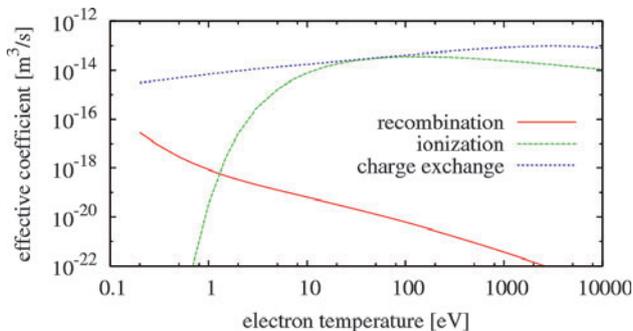


図26 ADAS データベース [45, 46] から得られた水素の再結合・電離・荷電交換の実効反応速度係数。この係数に反応に関係する粒子種 (再結合: 原子・イオン, 電離: 原子・電子, 荷電交換: イオン・電子) の密度をかけたものが反応速度となる。

レートが減るためと考えられる。加熱パワーが大きく、炉心電子密度が低いほど、原子温度がイオン温度に近づき、原子密度割合が高くなるのは、より炉心における荷電交換の影響を強く受けるためと考えられる。この描像は3.3節で述べられる考察と整合する。

図29に炉心での荷電交換反応でプラズマから失われたエネルギーを加熱パワーで規格化したものを示す。これらの計算では、加熱パワーからこのエネルギー損失を引いた量のエネルギーが、炉心側境界から周辺プラズマへ供給されるように設定している。エネルギー損失も、上で示した図と同様に高温低密度ほど大きいことがわかる。特に、10%を超えるエネルギー損失は、炉心のエネルギーバランスを含めた輸送研究にも影響を与える大きさであり、中性粒子を介した炉心と周辺の連携が重要な課題であることを示し

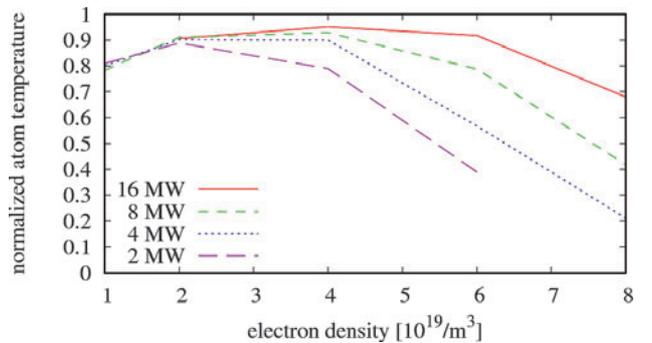


図27 炉心イオン温度で規格化した炉心水素原子温度。4本の線は上から順に加熱パワーが16, 8, 4, 2 MWの場合に相当する。

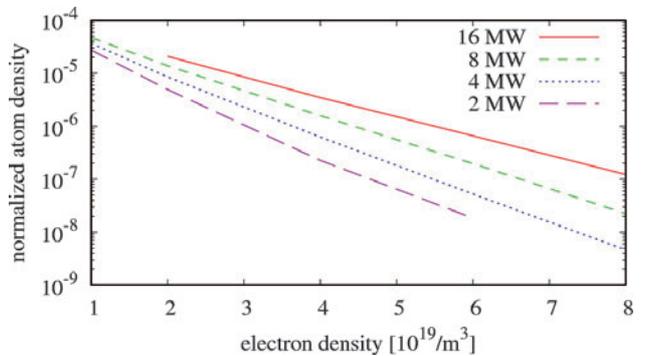


図28 炉心電子密度で規格化した炉心水素原子密度。

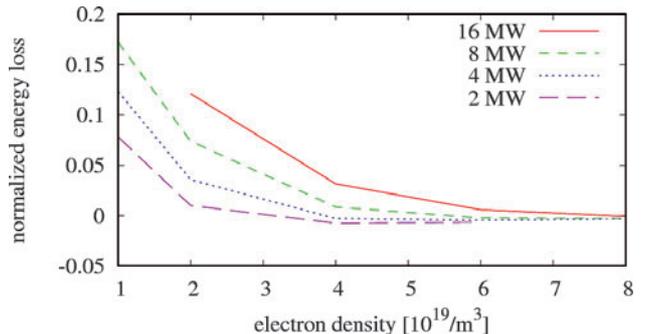


図29 加熱パワーで規格化した炉心の荷電交換エネルギー損失。

ている。

(河村)

### 参考文献

- [ 1 ] S. Saito *et al.*, Contrib. Plasma Phys. **60**, e201900152 (2020).
- [ 2 ] D.W. Brenner *et al.*, J.Phys. Condens. Matter **14**, 783802 (2002).
- [ 3 ] S. Saito *et al.*, Plasma Fusion Res. **15**, 2403073 (2020).
- [ 4 ] S. Berg *et al.*, J. Vac. Sci. Technol. A **5**, 202 (1987).
- [ 5 ] H. Nakamura *et al.*, accepted to Jpn. J. Appl. Phys. (2021), <https://doi.org/10.35848/1347-4065/ac2435>.
- [ 6 ] S. Saito *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **60**, SAAB08 (2021).
- [ 7 ] L.-F. Wang *et al.*, J. Phys. Condens. Matter **29**, 435401 (2017).
- [ 8 ] T. Fujimoto, Plasma Spectroscopy; The International Series of Monographs on Physics, 123 (Oxford University Press: Oxford, UK, 2004).
- [ 9 ] K. Sawada and T. Fujimoto, Phys. Rev. E **49**, 55655573 (1994).
- [10] K. Sawada and T. Fujimoto, J. Appl. Phys. **78**, 2913 (1995).
- [11] K. Sawada and T. Fujimoto, Contrib. Plasma Phys. **42**, 603 (2002).
- [12] K. Sawada, J. Plasma Physics **72**, 1025 (2006).
- [13] G. Herzberg, *Molecular Spectra and Molecular Structure: Spectra of Diatomic Molecules*, 2nd ed. (Krieger Publishing Co.: Malabar, Florida, USA, 1989).
- [14] H.M. Crosswhite, *Hydrogen Molecule Wavelength Tables of Gerhard Heinrich Dieke* (John Wiley & Sons Inc.: Hoboken, NJ, USA, 1972).
- [15] K. Sawada and M. Goto, Atoms **4**, 29 (2016).
- [16] J. Horáček *et al.*, *Rate Coefficients for Low-Energy Electron Dissociative Attachment to Molecular Hydrogen*; NIFS-DATA-73 (NIFS: Toki, Japan, 2003).
- [17] A. Ichihara *et al.*, J. Phys. B **33**, 47474758 (2000).
- [18] A. Ichihara *et al.*, At. Plasma-Mater. Interact. Data Fusion **9**, 193235 (2001).
- [19] K. Hoshino *et al.*, Contrib. Plasma Phys. **52**, 550554 (2012).
- [20] K. Sawada *et al.*, Contrib. Plasma Phys., **60**, e201900153 (2020).
- [21] G. Kawamura and M. Kobayashi, J. Plasma Res. **97**, 447-454 (2021).
- [22] W. Eckstein, *Computer Simulation of Ion-Solid Interactions* (Springer-Verlag, 1991).
- [23] Y. Yamamura, J. Plasma Fusion Res. **69**, 1012 (1993).
- [24] Y. Feng *et al.*, Contrib. Plasma Phys. **54**, 426 (2014).
- [25] Y. Feng *et al.*, Contrib. Plasma Phys. **44**, 57 (2004).
- [26] D. Reiter *et al.*, Nucl. Fusion **47**, 172 (2005).
- [27] G. Kawamura *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **60**, 084005 (2018).
- [28] G. Kawamura *et al.*, Contrib. Plasma Phys. **54**, 437 (2014).
- [29] R. Matoike *et al.*, Plasma Fusion Res. **14**, 3403127 (2019).
- [30] R. Matoike *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **63**, 115002 (2021).
- [31] H. Tanaka *et al.*, Contrib. Plasma Phys. **60**, e201900114 (2020).
- [32] T. Kuwabara *et al.*, Contrib. Plasma Phys. **56**, 598 (2016).
- [33] M. Kobayashi *et al.*, J. Plasam Fusion Res. **97**, 433 (2021).
- [34] S.I. Braginskii, Rev. Plasma Phys. **1**, 205 (1965).
- [35] Y. Feng *et al.*, J. Nucl. Mater. **266-269**, 812 (1999).
- [36] G. Kawamura *et al.*, J. Plasma Fusion Res. SERIES **8**, 455 (2009).
- [37] G. Kawamura *et al.*, Plasam Fusion Res. **5**, S1020 (2010).
- [38] A. Sagara *et al.*, J. Plasam Fusion Res. **89**, 359 (2013).
- [39] Y. Morishita *et al.*, Plasma Fusion Res. **14**, 3403152 (2019).
- [40] A.F. Almagri *et al.*, IEEE Trans. Plasma Sci. **27**, 114 (1999).
- [41] M.H. Hughes and D.E. Post, J. Comput. Phys. **28**, 43 (1978).
- [42] S. Murakami *et al.*, Fusion Technol. **27**, Suppl. S 256 (1995).
- [43] S. Murakami *et al.*, Nucl. Fusion **40**, 693 (2000).
- [44] S. Murakami *et al.*, Nucl. Fusion **46**, S425 (2006).
- [45] H.P. Summers, 2004, The ADAS User Manual, version 2.6, <http://adas.ac.uk/>.
- [46] H.P. Summers and M.G. O'Mullane, AIP Conference Proceedings **1344**, 179 (2011).