

# 水素原子が被覆した固体表面におけるポテンシャルの研究

## Study of potential on solid surface covered with hydrogen atoms

○高田克、高木郁二

京都大学大学院 工学研究科 原子核工学専攻

Katsumi Takata, Ikuji Takagi

Department of Nuclear Engineering

While operating the fusion reactor, a lot of tritium is flying to the plasma facing wall. In this study, MD simulation is used to investigate the reflection behavior when low-energy hydrogen atoms are incident on the surface of a solid on which hydrogen atoms are absorbed.

### 1. 緒言

現在、原子力発電よりも安全かつ、重水素のように海水から事実上無限に入手できる資源を利用した核融合炉の実用化が期待されている。その核融合炉の実用化の課題の一つが炉壁表面での入射水素原子が反射する割合が大きくなる場合、再びプラズマへと戻っていく割合が大きくなり、プラズマの粒子バランスの維持が難しくなってしまうことである。特に、炉壁に水素同位体原子が被覆した状態で低エネルギーの水素同位体原子が入射したときの反射挙動はいまだに解明されていない。そこで、本研究では水素原子が被覆した固体表面に低エネルギーの水素原子が入射したときの挙動を分子動力学法によって調べた。

### 2. シミュレーション内容

初めにシミュレーション領域上のNi表面に水素原子を吸着させ水素原子が被覆したNi表面を作成する（図1中央）。そして、水素原子が被覆したNi表面に対して1eVの水素原子を、入射角度15度、45度、75度で入射し、反射率と反射角度分布を測定することで入射角と反射挙動の関係を調べる。

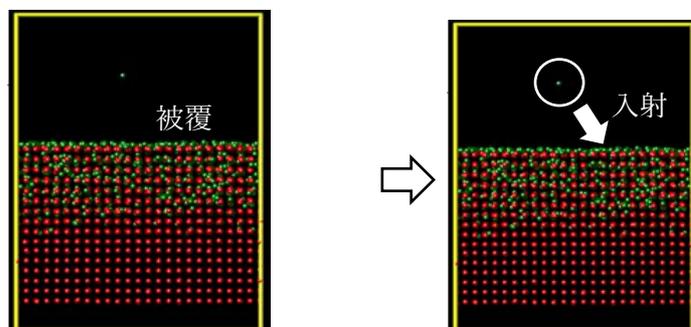


図1.シミュレーション概要図

### 3. シミュレーション結果・考察

#### i. 入射角が 15 度、45 度の場合

入射角が 15 度および 45 度のときは図 2,3 に示すように入射角度に対する依存性は見られなかった。また、反射率は 15 度の時は 15%、45 度の時は 11% という値となった。

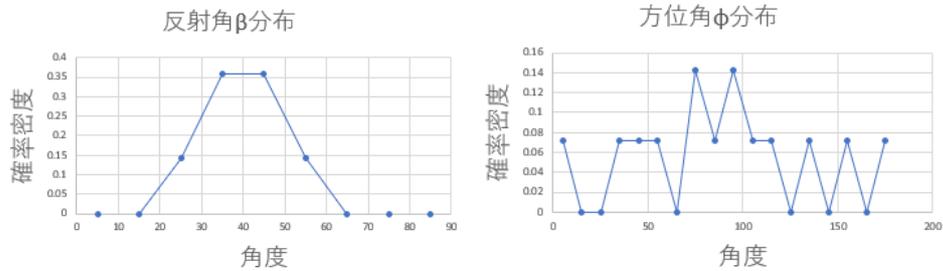


図 2.入射角 15 度の結果

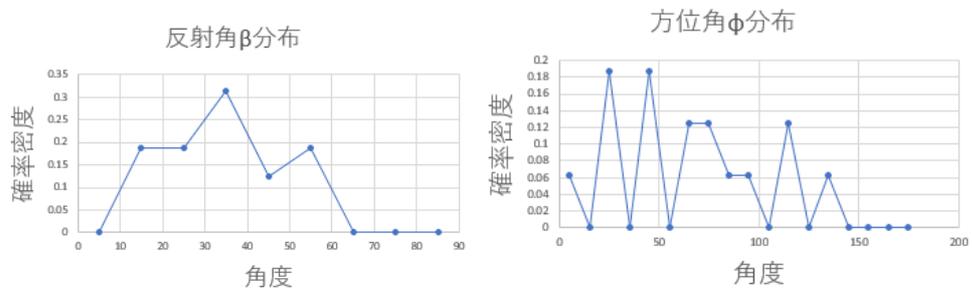


図 3.入射角 45 度の結果

#### ii. 入射角が 75 度の場合

入射角が 75 度のとき、図 4 に示すように入射角度と反射角度が等しくなる鏡面反射が起こっていることが分かった。また、反射率は 100%と 15 度、45 度の時と比べて非常に高い値となった。この違いは固体表面に対する法線方向の速さによって、水素原子が反射する位置が異なっていることが原因であると思われる。

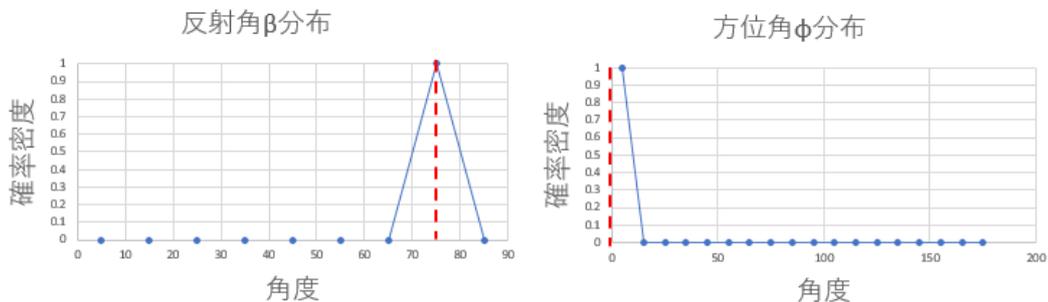


図 2.入射角 75 度の結果