

連載
講座今、核融合炉の壁が熱い！
—数値モデリングでチャレンジ

第3回 III. 壁の表面で何が起きているか

徳島大学 大宅 薫, 核融合科学研究所 相良明男

III. 壁の表面で何が起きているか

最近のプラズマ・壁相互作用に係るシミュレーションコードの開発は、トカマク等の実機実験と密接に連携しながら進んでいる。新しい現象の予測や観測された現象の解釈といった面で大きな成果を上げており、核融合炉内の複雑環境における研究手段として、今後、ますます重要になると考えられる。現在、コードの開発者は世界的に見ても限られており、ITER やその後の核融合炉開発において活躍する若いコード開発者の育成が急務である。本稿が、学生諸君にとって、コード開発に携わるきっかけとなれば、望外の喜びである。

1. 複雑な環境におかれたプラズマ対向壁の損耗

固体表面にイオンや中性粒子、電子あるいは光を照射すると、表面が損耗することはよく知られている。スパッタリングと呼ばれる現象である。プラズマと炉壁との相互作用に関する種々の問題の中で、古くからモデリングとシミュレーションの重要性が認識されていた。その後、損耗した原子が光を放射しプラズマの温度を低下させることが、核融合炉の実現を目指す人々に由々しき問題として受け止められ、ほとんどの核融合実験装置に光放射の少ない炭素が壁材料として使用された。電子デバイスの半導体薄膜を作る人からすればプラズマプロセッシング¹⁾として願ってもない現象が、核融合にとっては悪玉として嫌われている所以である。

ある程度のエネルギーを持った粒子が固体表面に入射すると、固体内で様々な衝突過程を通してその運動エネルギーを失っていく。固体原子は入射粒子との弾性衝突の結果、そのエネルギーの一部を与えられ、それがあるしきい値を越えると格子位置から弾き出され、次々に衝突を繰り返す。このようにして作られた反跳原子のカス

The Fusion Reactor Wall is Getting Hot!—A Challenge towards the Future for Numerical Modelling (3) : Chap. III What is really happening on the surface? : Kaoru OHYA, Akio SAGARA.

(2008年 6月5日 受理)

各回タイトル

第1回 I. はじめに

II-1 壁の前で何が起きているか? (物理モデル)

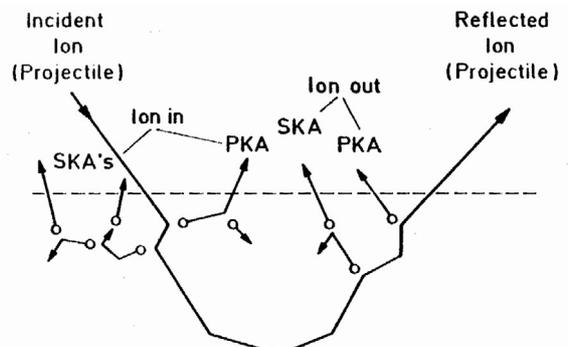
第2回 II-2 壁の前で何が起きているか? プラズマの攻撃

ケードの一部が表面に達し、表面の結合を破ってスパッタリング粒子として放出される(第III-1図中のPKAやSKA's)。この過程をモンテカルロ法で模擬するのが有名なTRIM(TRansport of Ion in Matterの略)コードである³⁾。これまで作られたどのコードも、基本的には入射粒子も固体原子も、固体内の電子との相互作用でエネルギーを失いながら直進し、静止した固体原子との弾性衝突でのみ方向を変える。その際、弾性衝突で失うエネルギーを固体原子に与える。したがって、固体内を単位長さ進むときに失うエネルギー(電子的阻止能という)と古典的な弾性衝突理論を用いた二体衝突モデルが基本要素となる。すでに様々な粒子と固体との組合せでそのデータベースが作られ、幅広いエネルギー域で多くの材料に対してデータを近似するスパッタリング収量の実験式がある。

(1) 単一イオンによる基本モデル

(a) スパッタリング

表面から放出されるとき、運動エネルギーの法線方向成分が表面結合エネルギー(通常、昇華エネルギー)より大きくなければならないので、スパッタリングには入射イオンのエネルギーにしきい値がある。スパッタリングは、弾き出された反跳原子の密度によっていくつかの類型に分けられる。例えば、第III-1図に見られるように、カスケードがそれほど密でない場合を線形カスケードと呼び、線形ボルツマン方程式によるSigmundのスパッタリング理論⁴⁾がある。簡潔な理論にかかわらず、入射

第III-1図 イオン反射とスパッタリングの概念図²⁾

PKAは入射イオンによって弾き出された原子(第1反跳原子)で、SKAは反跳原子によって弾き出された原子(第2反跳原子)。

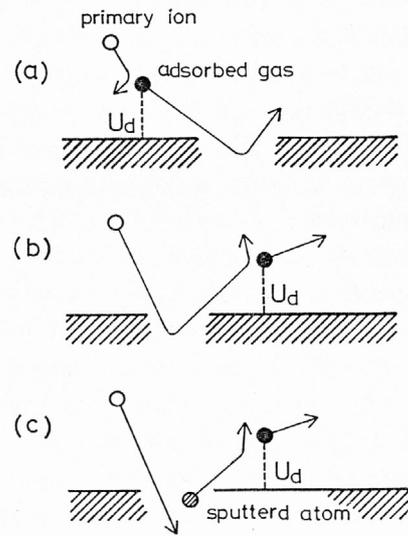
イオン、標的物質の様々な組合せに対して、スパッタリング収量(入射粒子1個当たりの放出数の平均値)の入射イオンエネルギーや入射角への依存性だけでなく、スパッタリング原子のエネルギー分布(Thompson分布)や放出角度分布(余弦分布)が統一的に議論できることから、理論的、実験的研究の出発点となった。これによると、スパッタ原子が入射イオンとの弾性衝突でエネルギーを得ることから、スパッタリング収量はおおよそ核的阻止能(固体内を単位長さ進む間にイオンが弾性衝突で失うエネルギーのこと)に比例する。

一方、標的原子より軽い水素のような軽イオンによるカスケードは、固体反跳原子に与えるエネルギーが小さいのでカスケードをつくることは稀であり、主に、後方散乱された軽イオンが表面から再び放出される際に(反射イオンまたは後方散乱イオンと呼ぶ、第Ⅲ-1図中の Reflected Ion)表面原子を弾き飛ばすことによると考えられ(第Ⅲ-1図中の PKA)、スパッタリング収量は入射イオンの反射率に比例する。これら2つの異なった関係を内挿し、未知パラメータを多くの実験値データと比較して、松波らはスパッタリング収量に対する実験式を導いた⁵⁾。この式は1984年に発表され、すでに20年以上経過しているにもかかわらず、その改良形も含めて、現在も使用されている。

(b) 吸着ガスのイオン衝撃脱離

核融合プラズマは極めてきれいな好きであり、壁表面の炭素や酸素などの軽不純物吸着ガスをあらかじめ十分に取り除いておく必要がある。数100℃の熱脱離では不十分であるため、グロー放電やマイクロ波放電によるイオン衝撃脱離を併用した放電洗浄が有効であるが、その最適化制御にはモデリングによる理解と予測が大切である。

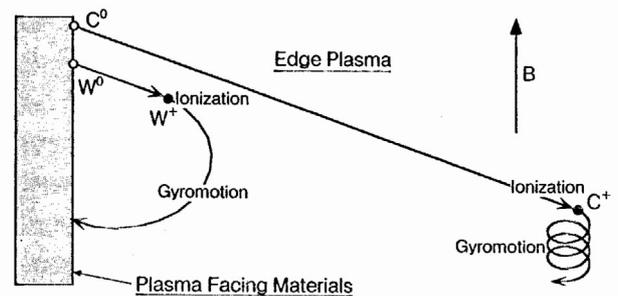
第Ⅲ-2図に Winters & Sigmund モデルと呼ばれる二体弾性衝突によるイオン衝撃脱離過程を示す⁶⁾。入射イオンと吸着ガスの1回の衝突と、衝突の前または後の反射過程(a), (b), あるいはスパッタリング後の弾性衝突過程(c)によって表す。したがって、脱離断面積(確率)は粒子反射係数あるいはスパッタ率を重みとして、微分散乱断面積 $d\sigma/dE$ を真空側の全立体角で積分することによって計算することができる。吸着ガスが単分子層以下で入射イオン束も著しく高くない通常の場合は線形近似が可能であり、全脱離断面積は(a), (b), (c)各断面積の単純和でよい。微分散乱断面積には Lindhard が導いた指数関数近似式、スパッタ率 Y には前述の松波らの半経験式を利用し、角度依存性には余弦則を仮定する。他方、粒子反射係数 R には各種経験式を代用するが、Ne や Ar などの重いイオンの場合は実験例が少なく、TRIM 計算などに頼るのは今後の課題である。低速イオン散乱法による最表面吸着ガス測定により、実験とモデルがよく一致することが確かめられている⁷⁾。



第Ⅲ-2図 イオン衝撃脱離の Winters & Sigmund モデル

(2) スパッタ粒子の再堆積

損耗した壁材料原子は中性のままシース領域を越えてプラズマ中に入り、主として電子との衝突によって電離して輸送する。タンゲステンやモリブデンなど、たくさんの束縛電子をもつ重い原子は、電離し易く磁界中の旋回運動(ラーマー運動)の半径が大きいいため、壁の近くでイオンになり旋回運動の1周期内に壁に戻り、損耗した場所のごく近傍に再堆積する。プロンプト・リデポジションと呼ばれ、ダイバータ内で起こる重要な現象である(第Ⅲ-3図参照)。元々は磁力線が壁表面に斜めに入射する幾何学的効果として注目されたが、シース電界やプラズマ流との摩擦力などの効果も大きいことがわかり、現在、他の効果も含めて、損耗位置近傍に再堆積するローカル・リデポジションの意味で使われている。プロンプト・リデポジションはシミュレーションによって予測され、後に実験で検証された現象である。Brooks が開発した REDEP コードによるシミュレーションでは、プラズマエッジ温度50 eV に対するモリブデン・ダイバータ板の年間損耗量は約140 cm であるのに対し、プロンプト・リデポジションを考慮した正味の損耗量はほとんど



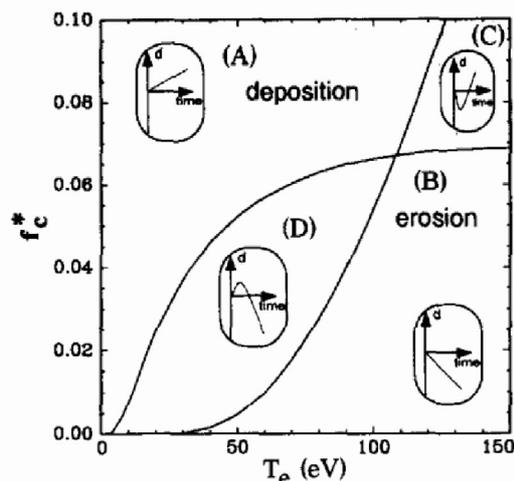
第Ⅲ-3図 スパッタリングした炭素とタンゲステンの磁界中のプラズマでの軌道⁸⁾

0 cm という、衝撃的なものであった⁹⁾。核融合炉内のプラズマ対向壁の損耗量を予測するには、単に壁原子が損耗するスパッタリングのような固体内での衝突過程のシミュレーションのみでは不十分で、前回までに議論された周辺プラズマの不純物輸送コードと連結する必要がある。

(3) プラズマ壁相互作用でのモデル

核融合炉壁近傍のプラズマ中には、燃料である重水素や三重水素のイオン、核融合生成物であるヘリウムイオンのほか、壁材料(不純物)原子がイオン化されて存在する。不純物イオンは燃料イオンに比べてその密度ははるかに低いものの、イオンの価数が高くシースでの加速エネルギーが高いことや質量が大きいため、壁の損耗に大きな影響を及ぼす。TRIMと同様なモデルのEDDYコード¹⁰⁾では、水素同位体イオンと数種の不純物イオンをその存在比に応じて選択し、壁近傍のプラズマ温度とそれぞれのイオン種の平均電荷数を与える。イオンの速度分布をマクスウェル分布とし、それをシース電位で壁方向に加速して、壁表面を衝撃する。衝撃イオンの固体内での軌道が衝突の際に選ばれる乱数によって異なるため、入射イオンの選択から軌道計算までを繰り返して実行し、放出された粒子のエネルギーと角度をサンプリングする。このようにして、それらの分布とスパッタリング収量を得る。

壁材料原子が入射イオンである場合にはその一部が材料内部に溜まり(堆積)、正味の損耗量は損耗と堆積のバランスによって決まる。したがって、ITERダイバータのバップル板として使用されるタンゲステンに炭素材のダイバータ板(垂直ターゲット)から損耗された炭素が不純物イオンとして入射した場合、損耗量の評価は非常に複雑になる。プラズマ中の炭素イオンの割合とプラズマ温度によって、損耗から堆積へあるいは堆積から損耗へとプラズマ照射中に変化する場合がある。第III-4図はTRIMに不純物イオンの注入と衝突カスケードによる材料混合モデルを追加したTRIDYNコードの代表的な計算例である¹¹⁾。プラズマ温度が比較的高く、プラズマ中の不純物炭素の割合も高いと、照射初期にタンゲステン表面が損耗され、後に炭素の堆積が支配的となる。逆に、プラズマ温度が低く、炭素割合が小さい場合は、まず炭素堆積が起こり、次第に損耗へと変化する。シミュレーションと実験との比較は同様なモデルを追加したEDDYコードでも行われ、核融合科学研究所の大型ヘリカル装置LHDの黒鉛ダイバータ¹²⁾や、ドイツ・ユーリッヒ研究機構のトカマク装置TEXTORに挿入したタンゲステン試験片の表面分析結果¹³⁾を説明できる。壁材料の温度が高くなると、タンゲステン中の炭素の拡散や炭素堆積層の化学スパッタリングなど、シミュレーションモデルに導入すべき効果が増加し、評価は難しくなる。現在、ダイバータ条件を模擬した米国UCSDの



第III-4図 TRIDYNコードの計算例¹¹⁾

不純物(炭素)イオンを含む重水素プラズマの照射によるタンゲステンの損耗と不純物堆積の変化を示す。プラズマ中の不純物の割合 f_c (縦軸)とプラズマ電子温度 T_e (横軸)によって、特徴的な変化(領域(A),(B),(C),(D))が起こる。

直線型プラズマ装置PISCES等で実験が精力的に進められており、これら効果を導入したシミュレーションモデルも検討されている。

(4) 高熱流での損耗、特に炭素材

核融合炉、特にダイバータ領域のプラズマ・壁相互作用の特徴として、入射するプラズマ粒子束およびその熱流が極めて大きいことがある。ITERのダイバータ板に流入するプラズマ熱流は数10 MW/m²に達すると想定され、これは太陽表面に匹敵する(第I章第I-5図)。炭素繊維強化複合材(CFC)は耐熱性に富み、高強度、高弾性率および高熱伝導性を有し、さらに耐熱衝撃特性にも優れているので、ITERで最も熱・粒子負荷の大きい部分(垂直ターゲット)に使われる。しかし、数100°Cを越えると、炭素材に注入された水素が再放出するとき、水素分子や水素原子ではなく、炭素と結合してメタン等の炭化水素分子の放出が顕著になる。これは先に述べたスパッタリング(物理スパッタリングという)とは異なり化学スパッタリングと呼ばれて、さらに高温(1,000°C以上)での照射促進昇華などとともに、炭素材固有の損耗現象である。10²⁴m⁻²・s⁻¹にも及ぶ水素同位体プラズマ粒子束にさらされるITERでの炭素材の損耗機構として重要と考えられている。このような高粒子束照射では損耗率は減少する傾向があるが、化学スパッタリング率の粒子束依存性とその原因は分かっていない。

一方、発生した炭化水素分子は、壁材料原子と同様に、プラズマ中で電離し磁力線に沿って輸送される。厄介なのは、これが炉内のどこかに再付着して水素を多量に取り込んだ再堆積層をつくる(共堆積層ということ)ことである。次節で詳しく述べる核融合炉壁のトリチウムの蓄積量の評価と関係する。このような炭素材の欠点から、炭素材

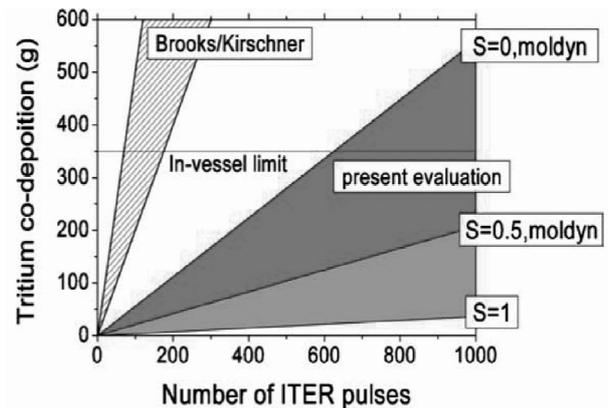
の使用を危ぶむ声が大きくなり、代わりにタングステンを使用することが検討されている。

化学スパッタリングは、TRIMなどで取り扱うようなフェムト秒のオーダーの衝突過程とは異なり、緩慢な熱的反応が支配する現象である。これについて、化学や物性物理学の分野で使われている分子動力学(MD)法の適用が進んでいる。MDシミュレーションには、古典的MDと第一原理MDとがある。前者は、原子間の相互作用ポテンシャルをあらかじめ粒子の種類や位置の関数として求めておいて各原子の運動に関するニュートン方程式を解くもので、後者は、各時間ステップごとにシュレディンガー方程式を解いて系の電子状態を決定し、原子間の相互作用をより正確に求めるものがある。現在のところ、計算時間のかかりすぎる第一原理MDより、古典的MDが化学スパッタリングのシミュレーションに使われている。しかし、原子間相互作用のモデルの良否が計算精度に大きく影響するため、ダイバータ内、さらに第一壁それぞれで異なった材料が使用されるITERのプラズマ・壁相互作用には、D、T、C、W、Beのような多元系の相互作用ポテンシャル関数を考える必要がある。Nordlundらは最近、炭化水素系のBrenner形関数を拡張してH-C-W系に対するポテンシャル関数を作成したが、その計算にtwo persons・year、つまり、二人で1年(あるいは一人で2年)の期間を要としたという¹⁴⁾。彼らは現在、Beも加えた系で関数を作成中である。

MDシミュレーションは、ITERの非接触ダイバータにおける低温(~1 eV)で高密度なプラズマと材料との相互作用を研究する有力な手段である。今後の計算機性能の向上をにらみながら、更なるコード開発とそれによる現象理解が期待される。

2. プラズマ化したトリチウムの対向壁への蓄積

炭素材料をプラズマ対向壁として使用している大型トカマク装置JET(欧州)やJT-60U(日本原子力研究開発機構)では、外側ダイバータ部が主として損耗し、損耗した炭素が内側ダイバータ部に再堆積している。再堆積層は多量の水素を含んでおり、特にJETでは再堆積層中の水素濃度が原子比((D+T)/C)で0.4にもなることが報告されている。第Ⅲ-5図はJETや2000年にシャットダウンした米国大型トカマク装置TFTRのデータを基に、ITERの放電回数とともにトリチウムが炉内に蓄積されていく予測シミュレーションの結果である¹⁵⁾。2年前の予測(図中のBrooks/Kirschner)ではわずかに数十回の放電でトリチウム許容蓄積量を越えていたものが、最近の予測(present evaluation)では1,000回程度まで伸びている。JT-60Uの内側ダイバータ部の再堆積速度はJETの約半分、水素濃度ははるかに小さい((H+D)/C<0.05)。再堆積層がタイルとタイルの隙間やプラズ



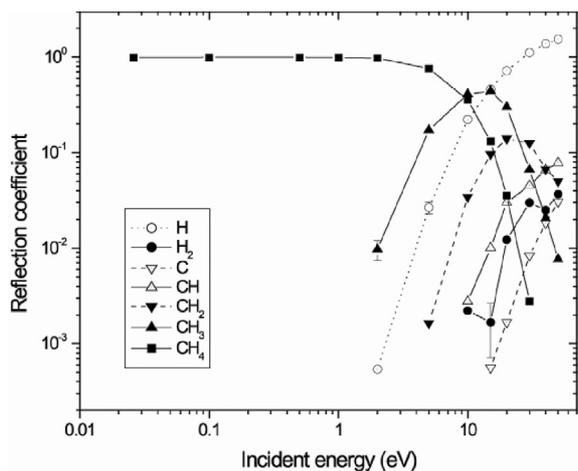
第Ⅲ-5図 ITERのトリチウム蓄積予測¹⁵⁾

マ照射による損耗がない場所に多いことから、ダイバータ部やタイルの幾何学的構造と壁の温度の違い(JT-60Uが高い)が原因と考えられている。

炭素材から損耗した炭化水素分子は、プラズマ中で電離されるとともに解離し、その形を変えながら輸送される。そのモデルには様々な形の炭化水素の原子分子過程(例えば、電子衝突による電離、解離、再結合/イオン衝突による電離)の生起確率または衝突断面の詳しい情報が必要である。これらは周辺プラズマの流れに沿って内側ダイバータに運ばれて再堆積するか、内側ダイバータから少し離れたプラズマの当たらない場所に再堆積することがわかってきた。一方、外側ダイバータから反対方向にドーム領域を通る経路も考えられる。炭素不純物は一気に長距離を輸送されるのではなく、損耗と再堆積を繰り返しながら輸送されているようである。

再堆積層はその化学スパッタリング率が通常の炭素材料に比べてはるかに大きいといわれている。また、JETやJT-60Uにおける実験とシミュレーションの比較から、壁に再入射する炭素や炭化水素の大部分は壁表面で反射され、特に炭化水素分子の再付着率はほとんどゼロと考えられている。再付着率(=1-反射率)は入射粒子の種類、例えばラジカル種やそのエネルギーによって大きく変化するとともに、炭化水素が表面で解離しその形を変えてプラズマ中に戻る。さらに、これらが炉壁の各部の表面形状や表面状態によって異なる。核融合炉のトリチウム蓄積速度を予測するには、これら膨大な量の基礎データがシミュレーションのために必要であり、基礎実験にすべてを期待するにはあまりにも多過ぎる。

最近、Ruzicらは、炭化水素と表面との相互作用を古典的MDコードMOLDYNを用いて調べた¹⁶⁾。あらかじめ水素原子を照射し続けて水素濃度の高い表面層をつくっておき、それに0.1~100 eVのCH₄をぶつけて水素原子と炭素原子を含むすべての反射粒子について反射率を計算した(第Ⅲ-6図参照)。シミュレーションモデルの基礎となる素過程データをさらにシミュレーションでつくることで、様々な条件でのシミュレーションが可能と

第III-6図 MOLDYN シミュレーション¹⁶⁾

なるかもしれない。実験データとのクロスチェックは欠かせないが、今後のプラズマ・壁相互作用研究の一つの方向を与えている。

3. 総合化への連携

炭素壁の損耗と再堆積の問題は、炭素が損耗する場所と速度、炭素の輸送、再堆積する場所と速度にとどまらず、再堆積層の剥離、あるいはトリチウムを含んだダストの発生へ発展し、これらもトリチウムの炉内蓄積と排出速度を予測する上で重要な問題と認識されている。このような評価を可能にするシミュレーションコードに関して、これまでプラズマ側と材料側から、個人ベースで、それぞれのコードを拡張する形で開発と現象理解が進められてきた。モデリングの手法や理論的取扱いなど、物性物理学、天文学等の他分野と共通するところもある。それらで先行的に得られている知見を学び、プラズマコード開発者と材料コード開発者が情報を共有し連携を強化することによって、現象を総合的に理解する必要がある。最近ようやくそのようなコミュニティーが作られ始め、国内で開発されたコードの複合化、総合化を目

的とした連携研究が始まった。

—参考文献—

- 1) M.A.Lieberman, A.J.Lichtenberg, *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing*, 2nd Edition, Wiley, New Jersey, (2005).
- 2) W.Eckstein, *Computer Simulation of Ion-Solid Interactions*, Chap.12, Springer, Berlin, (1991).
- 3) J.P.Biersack, W.Eckstein, *Appl. Phys.*, **A 34**, 73 (1984).
- 4) P.Sigmund, *Phys. Rev.*, **184**, 383 (1969).
- 5) N.Matsunami, Y.Yamamura, *et al.*, *At. Data Nucl. Data Tables*, **31**, 1 (1984).
- 6) H.F.Winters, P.Sigmund, *J. Appl. Phys.*, **45**, 4760 (1974).
- 7) A.Sagara, *et al.*, *J. Nucl. Mater.*, **103&104**, 357 (1981).
- 8) 上田良夫, 大宅 薫, *プラズマ・核融合学会誌*, **72**, 983 (1996).
- 9) J.Brooks, *et al.*, *J. Nucl. Mater.*, **128&129**, 400 (1984).
- 10) K.Ohya, *Phys. Scr.*, **T124**, 70 (2006).
- 11) D.Naujoks, W.Eckstein, *J. Nucl. Mater.*, **230**, 93 (1996).
- 12) A.Sagara, *et al.*, *J. Nucl. Mater.*, **313-316**, 1 (2003).
- 13) K.Ohya, T.Tanabe, M.Rubel, *et al.*, *J. Nucl. Mater.*, **329-333**, 732 (2004).
- 14) N.Juslin, *et al.*, *J Appl. Phys.*, **98**, 123520 (2005).
- 15) J. Roth, *et al.*, *J. Nucl. Mater.*, **337-339**, 970 (2005).
- 16) D.Alman, D.N.Ruzic, *J. Nucl. Mater.*, **313-316**, 182 (2003).

著者紹介

大宅 薫(おおや・かおる)



徳島大学
(専門分野/関心分野)核融合装置における
プラズマ・壁相互作用, 粒子・固体相互作用
の計算機シミュレーション

相良明男(さがら・あきお)

本誌, **50**[6], pp.383 (2008) 参照。