

分子動力学にもとづく水素プラズマ
対向壁リサイクリングモデルの構築による
中性粒子輸送コードの精密化とLHD発光線解析

京都大学 工学研究科 蓮尾昌裕

LHD計画共同研究(H28 – H31)

分子動力学にもとづく水素プラズマ対向壁リサイクリングモデル の構築による 中性粒子輸送コードの精密化とLHD発光線解析

研究代表

斎藤誠紀

釧路工業高等専門学校

世話人

小林政弘

核融合科学研究所

協力者

澤田圭司

信州大学

河村学思

核融合科学研究所

中村浩章

核融合科学研究所

後藤基志

核融合科学研究所

蓮尾昌裕

京都大学

東條賢

中央大学

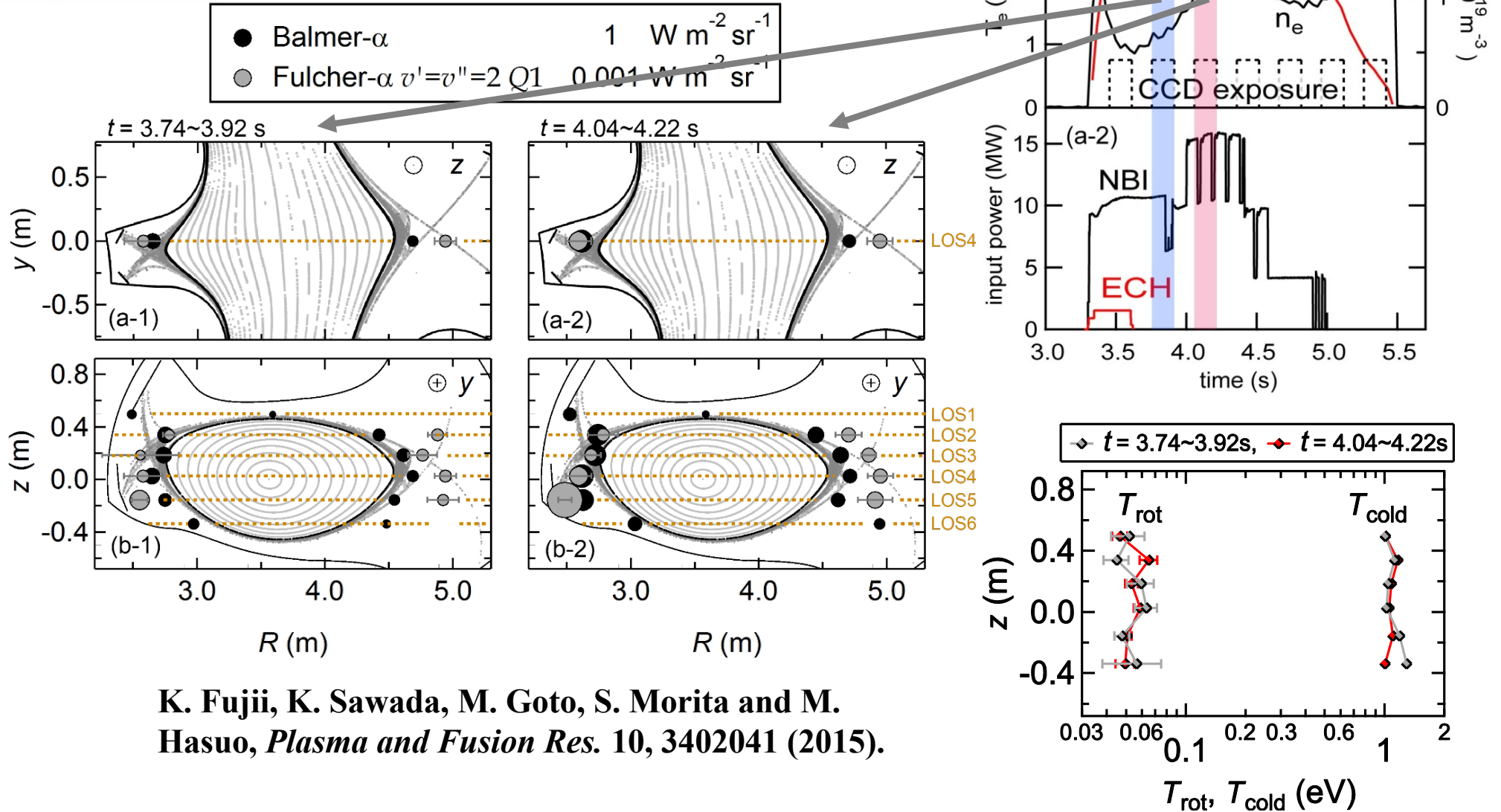
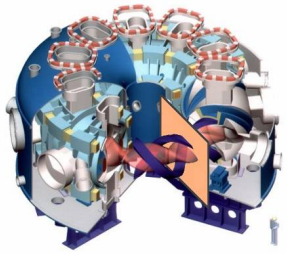
佐々木浩一

北海道大学

西山修輔

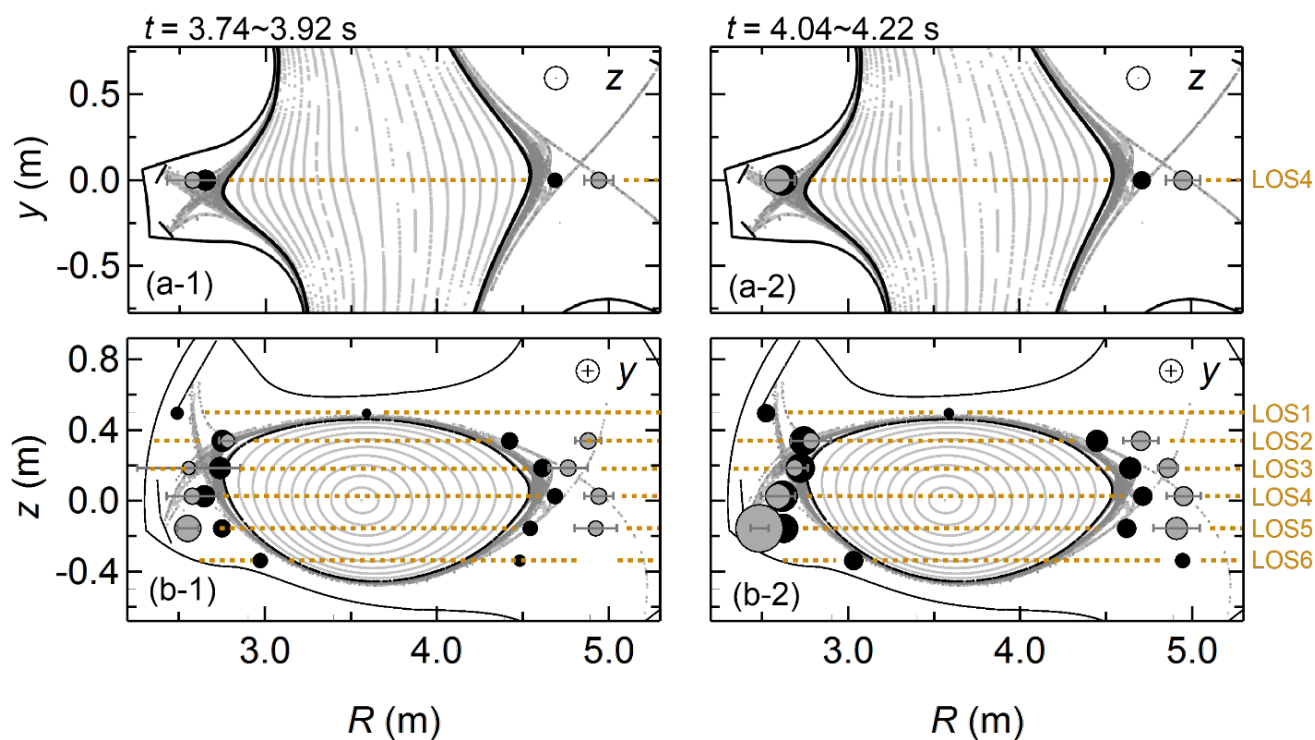
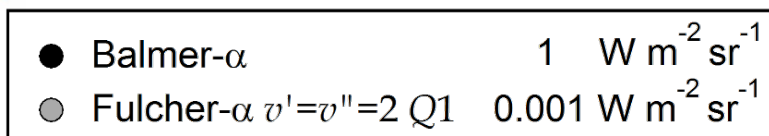
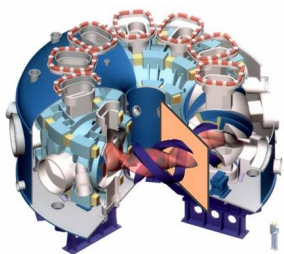
北海道大学

LHDでのH₂, H発光強度とH₂温度の空間分布



K. Fujii, K. Sawada, M. Goto, S. Morita and M. Hasuo, *Plasma and Fusion Res.* 10, 3402041 (2015).

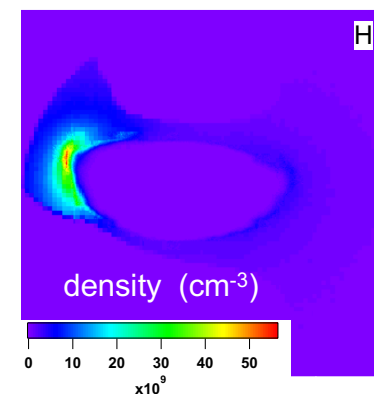
LHDでのH₂, H発光強度とH₂温度の空間分布



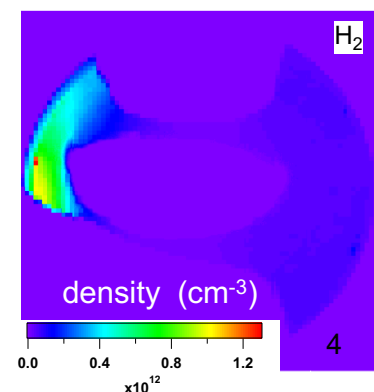
K. Fujii, K. Sawada, M. Goto, S. Morita and M. Hasuo, *Plasma and Fusion Res.* 10, 3402041 (2015).

中性水素粒子輸送
シミュレーション
(信州大: 澤田)

原子



分子



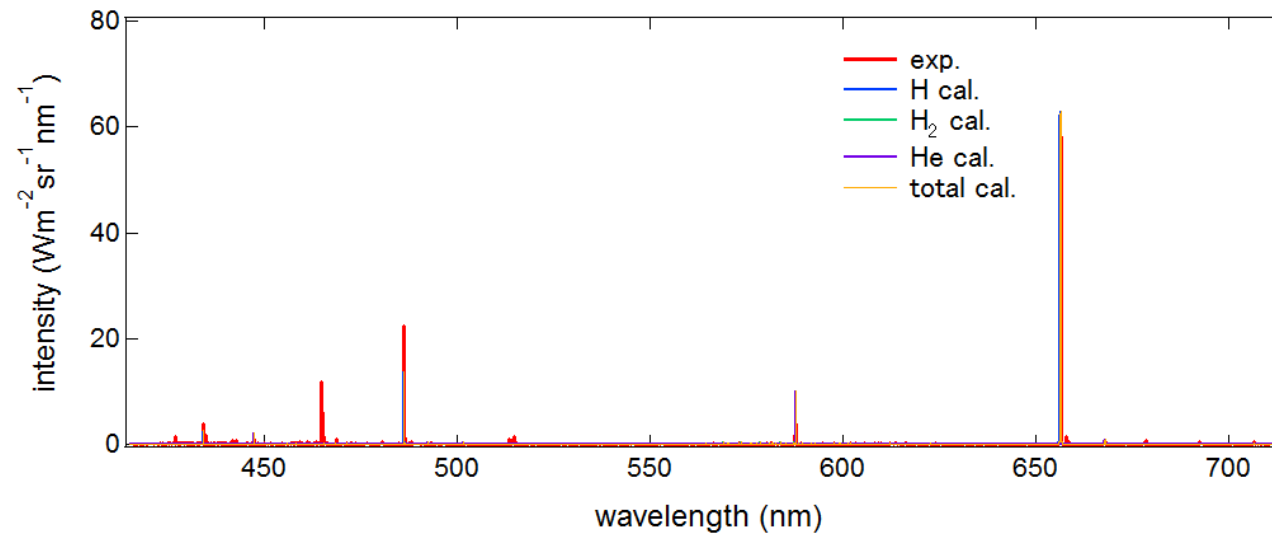
中性水素粒子輸送シミュレーション(信州大:澤田)と LHDプラズマ水素分光計測(京大:藤井)の比較

Divertor Plasma $\rightarrow$ H_2 (473 K) : H (473 K) = 1.0 : 0.0

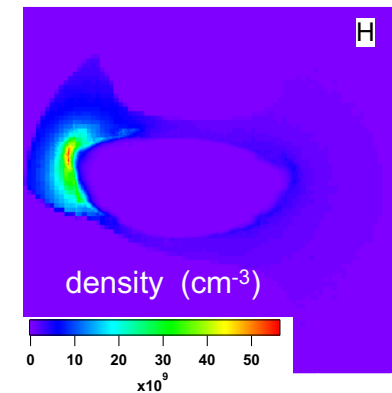
$\text{H} \rightarrow$ Wall $\rightarrow$ H_2 (300 K) : H (mirror) = 0.9 : 0.1

広波長帯域高分解分光システムによる水素原子分子発光スペクトルとの比較

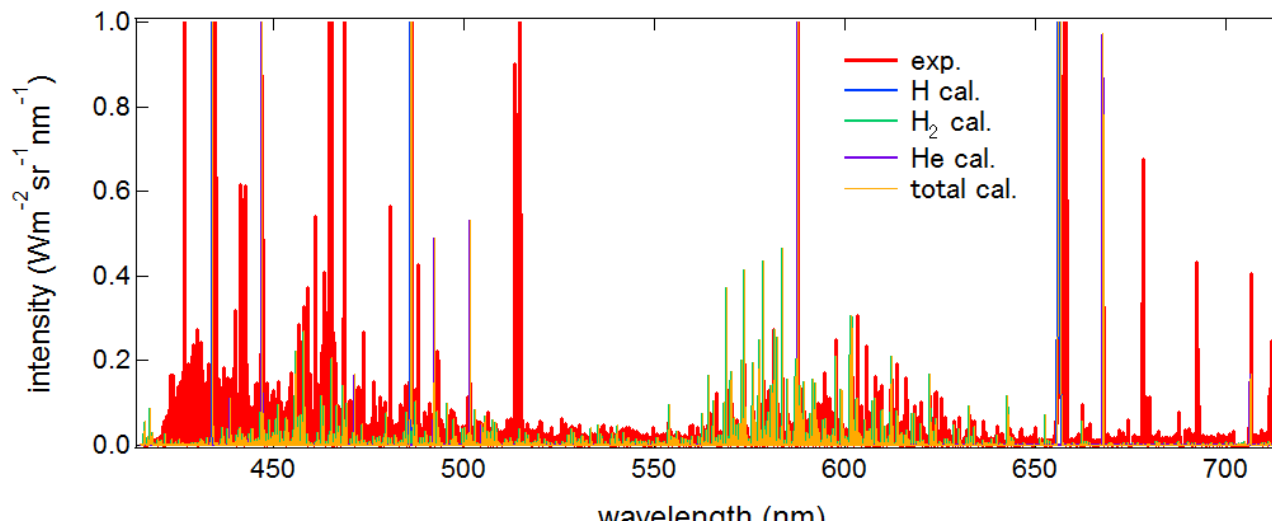
原子



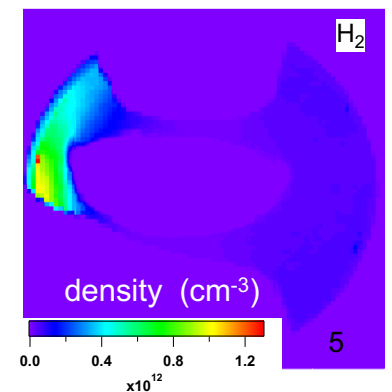
原子



分子



分子



中性水素粒子輸送シミュレーション(信州大:澤田)と LHDプラズマ水素分光計測(京大:藤井)の比較

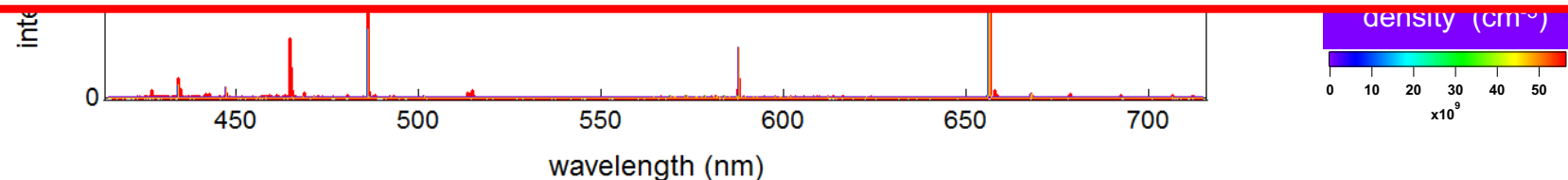
Divertor Plasma $\rightarrow$ H_2 (473 K) : H (473 K) = 1.0 : 0.0
 $\text{H} \rightarrow$ Wall $\rightarrow$ H_2 (300 K) : H (mirror) = 0.9 : 0.1

壁から発生する水素の情報はパラメータ

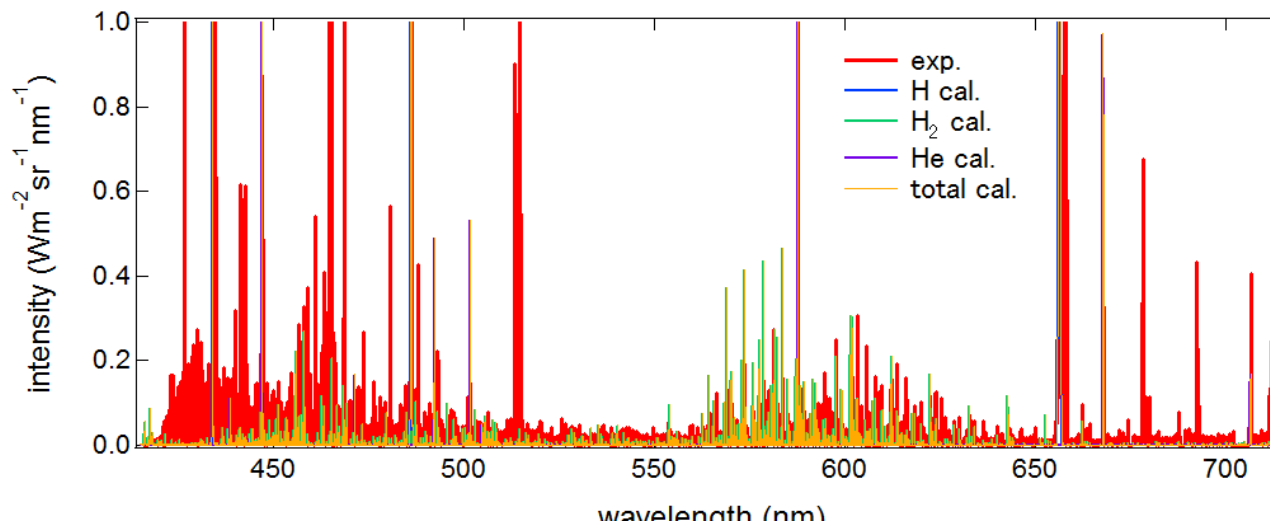
- 分子／原子比
- 分子の運動・回転・振動エネルギー

$\rightarrow$ 壁での水素リサイクリングモデルの開発が必要

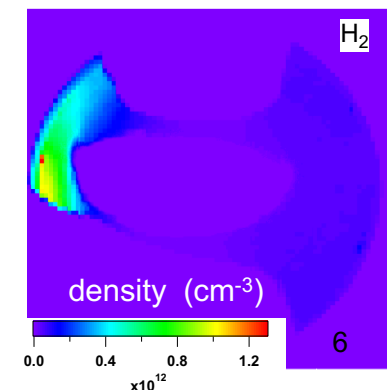
原子



分子



分子

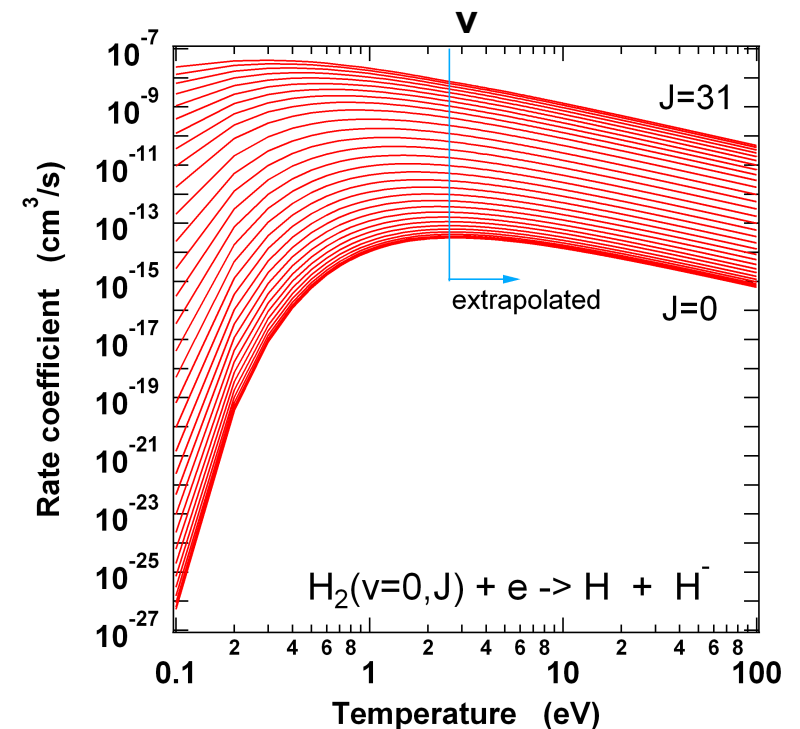
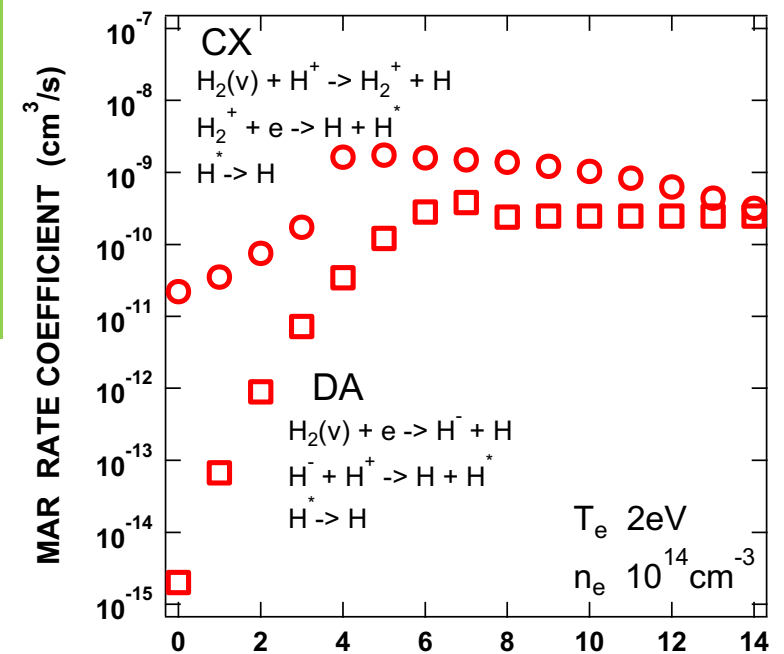
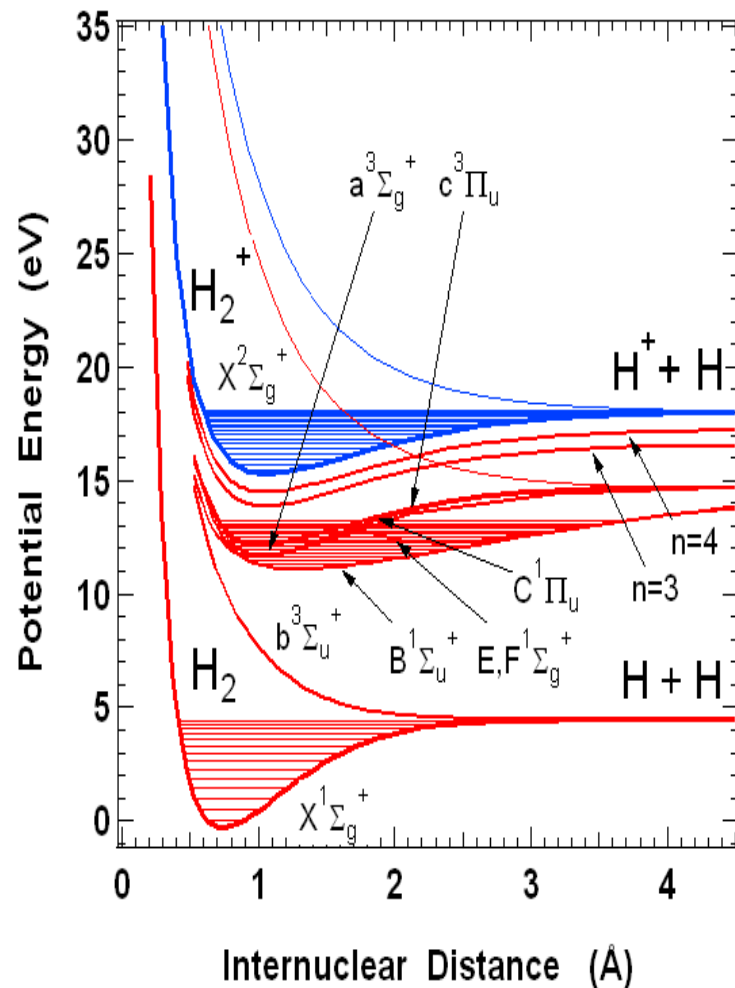


H₂ Collisional-Radiative Model

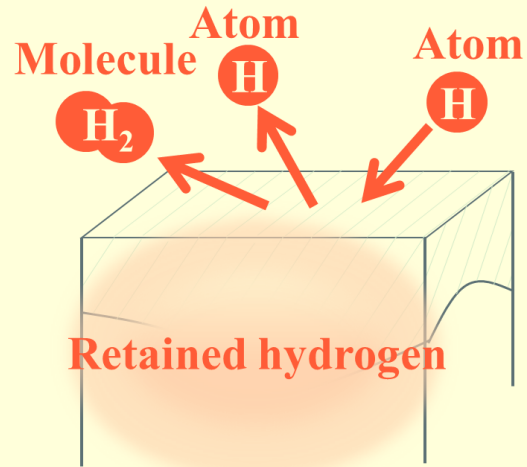
信州大澤田

Electronic, vibrational, and rotational states are included.

Effective rate coefficients for neutral transport code

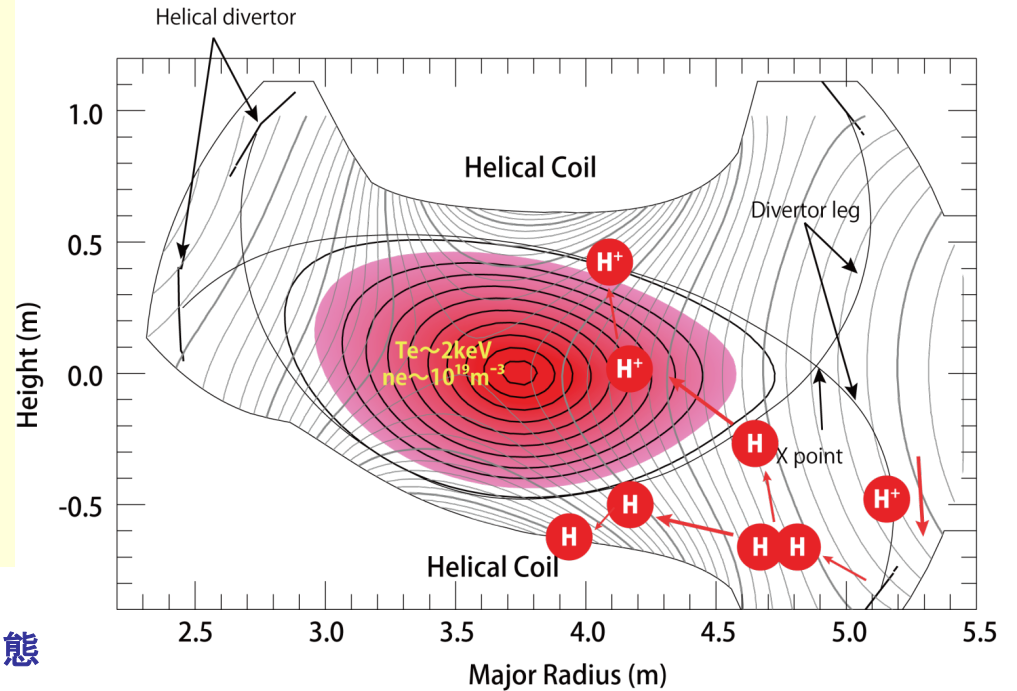


計算コードの整備

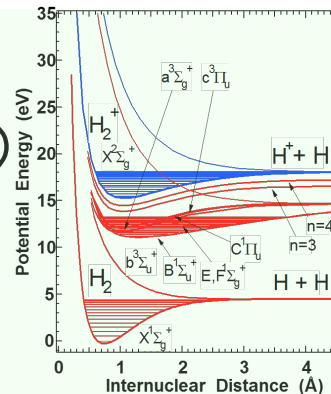


水素プラズマ対向壁リサイクリングモデル (分子動力学法) 中村・斎藤

放出水素原子 放出角、並進エネルギー
放出水素分子 放出角、並進エネルギー、振動・回転状態



水素分子衝突輻射モデル (電子・振動・回転状態を区別) 澤田



基底・励起状態を考慮した各種反応の速度係数

EMC3-EIRENE

(EIRENE : 中性粒子輸送コード)

河村・小林

ダイバータ近傍 ・ ダイバータレッグ

電子温度・電子密度

澤田・後藤 中性粒子輸送コード

1. 分子動力学法を用いた 水素プラズマ対向壁リサイクリングモデルを構築

NIFS 中村浩章, 釧路高専 斎藤誠紀

分子動力学法(MD)

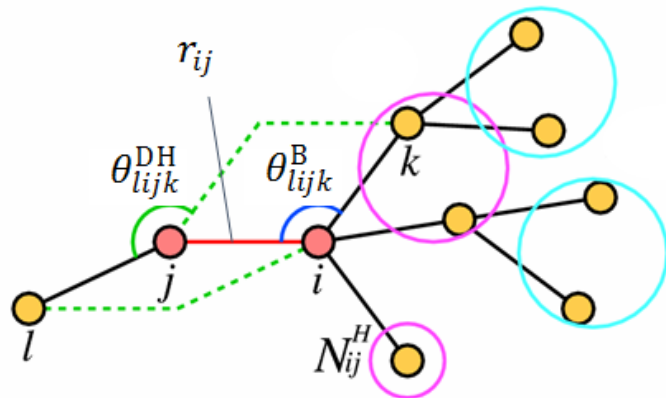
分子動力学: 原子(分子)の運動方程式の時間発展を解く

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_{i,j>i} U_{ij}(\{r\})$$

炭素-水素系の共有結合のモデル

Modified Brenner's reactive empirical bond order (REBO) Potential

$$U_{ij}(\{r\}) = V_{[ij]}^R(r_{ij}) - \bar{b}_{ij} V_{[ij]}^A(r_{ij})$$



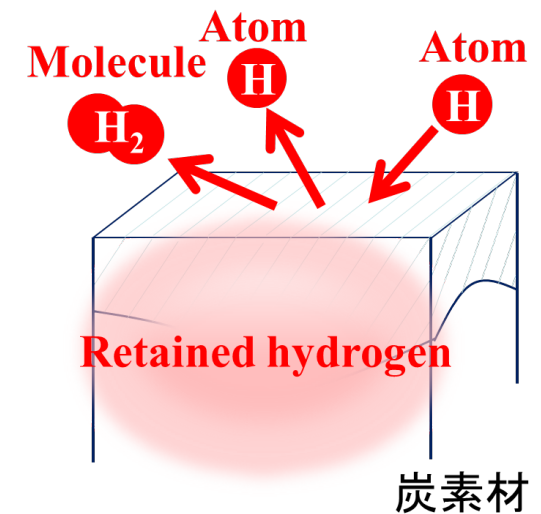
2体斥力ポテンシャル: $V_{[ij]}^R(r_{ij})$

2体引力ポテンシャル: $V_{[ij]}^A(r_{ij})$

多体力因子: $\bar{b}_{ij}(\{r\}, \{\theta^B\}, \{\theta^{DH}\})$

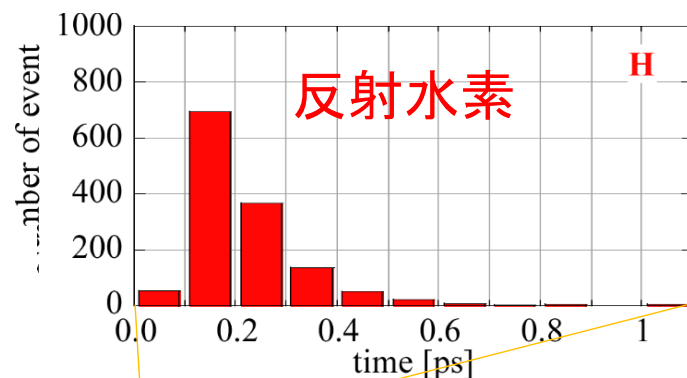
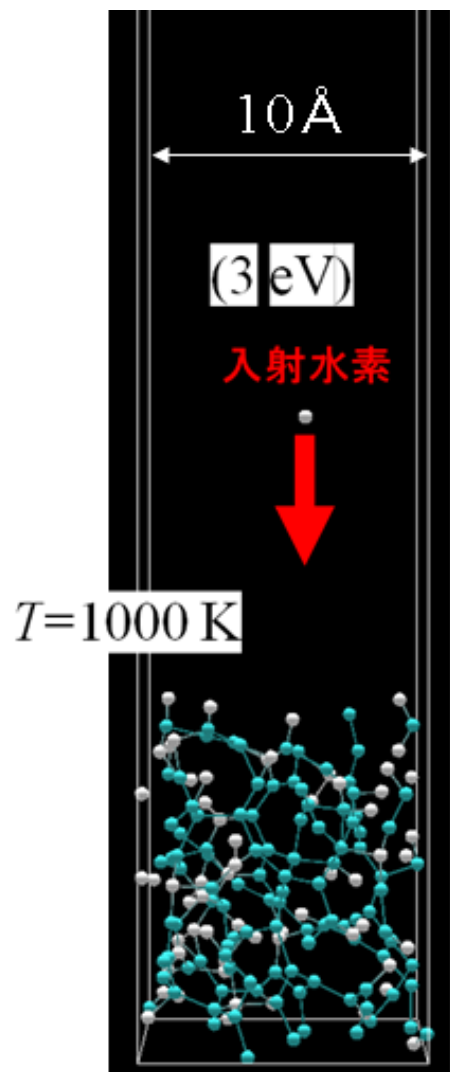
$\{\dots\}$: 多体力に関わる
全粒子に対する集合

D.W.Brenner, et. al., J. Phys. Condens Matter **14** 783 (2002).
A. Ito and H. Nakamura, Commun. Comput. Phys **4** (2008) 592.

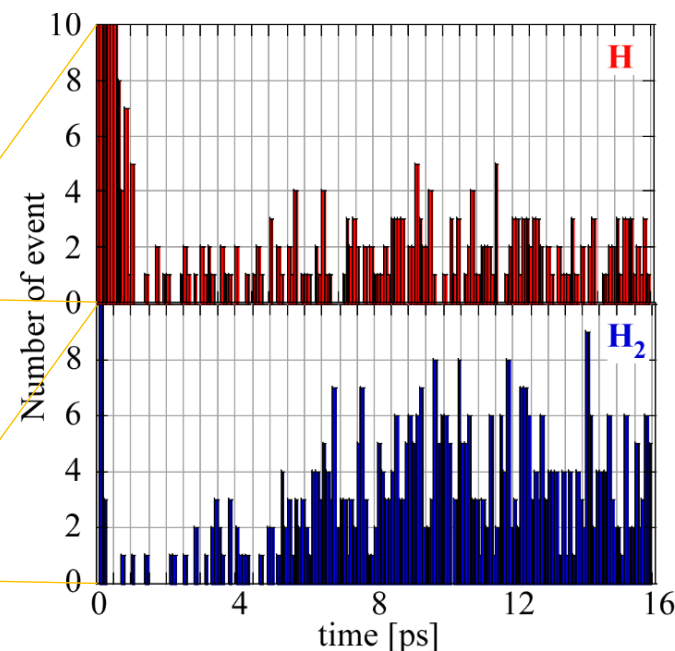
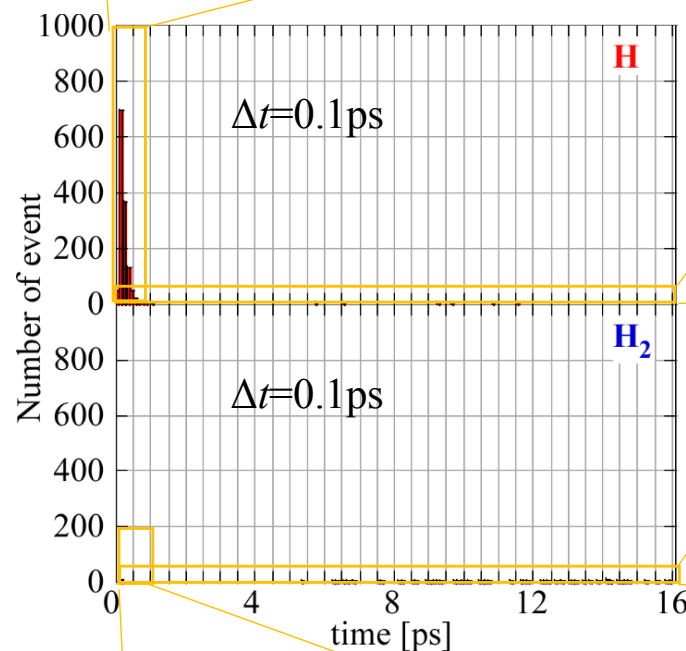


H原子 および H₂分子 発生イベント

$t = 16 \text{ ps}$



Total number of H emission events: 1554



Total number of H₂ emission events: 445

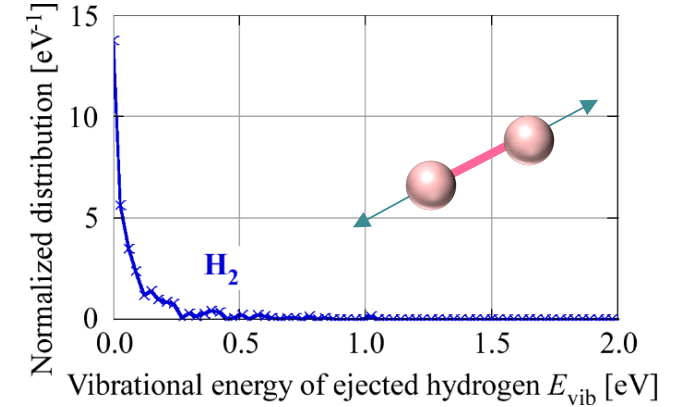
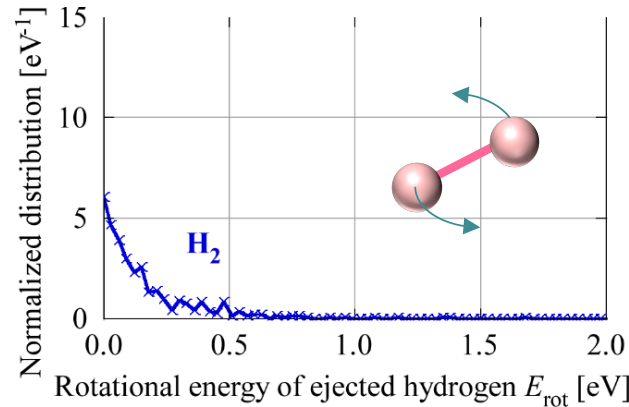
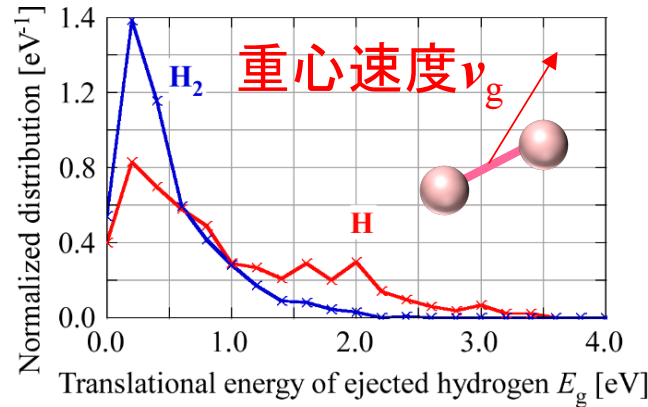
並進運動エネルギー E_g 、回転エネルギー E_{rot} 、振動エネルギー E_{vib} の分布

$$\text{全運動エネルギー} = E_g + E_{\text{rot}} + E_{\text{vib}}$$

$$E_g = m v_g^2 / 2$$

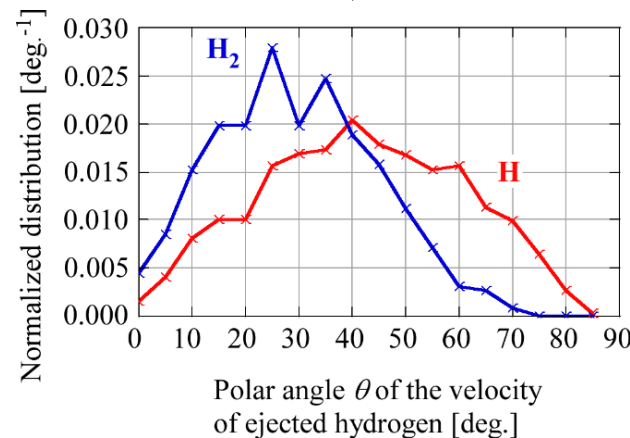
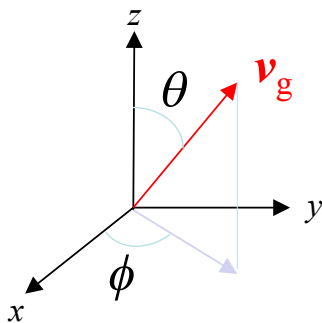
$$E_{\text{rot}}$$

$$E_{\text{vib}}$$

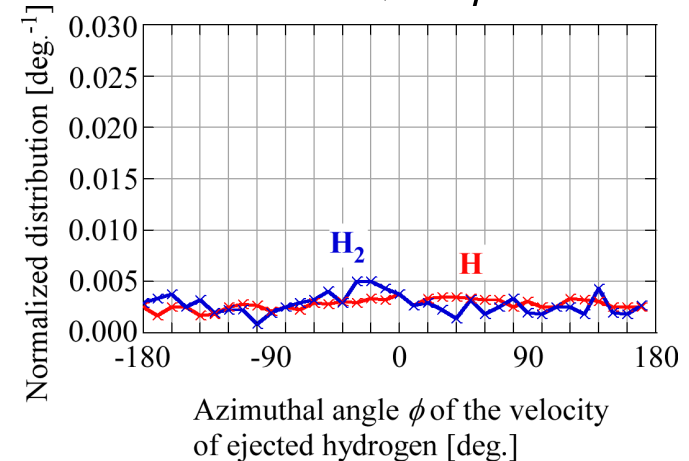


反射水素の角度分布(重心速度ベクトル v_g の向き)

極角 θ



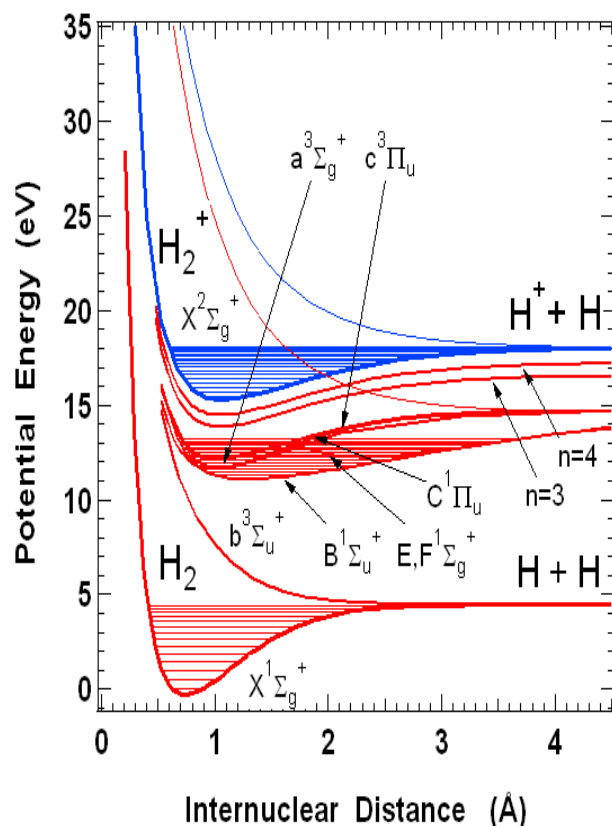
方位角 ϕ



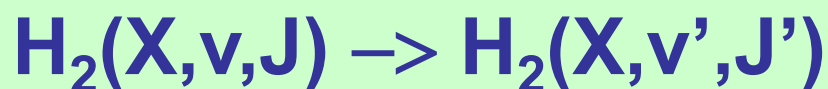
2. 電子・振動・回転状態を区別した水素分子衝突輻射モデルの構築

信州大学 澤田圭司

4133の準位を考慮



各種の断面積を新たに組み込んだ



Projectile

e, H⁺, H, H₂



1. Keiji Sawada and Motoshi Goto, “ Rovibrationally Resolved Time-Dependent Collisional-Radiative Model of Molecular Hydrogen and Its Application to a Fusion Detached Plasma”
Atoms 2016, 4(4), 29; doi:10.3390/atoms4040029
2. 澤田圭司, “電子・振動・回転状態を区別した水素分子衝突輻射モデルの構築”
プラズマ核融合学会第33回年会2016 2016.11.29-12.2東北大学 2016/11/29 29aP26

H₂ 各種反応の速度係数

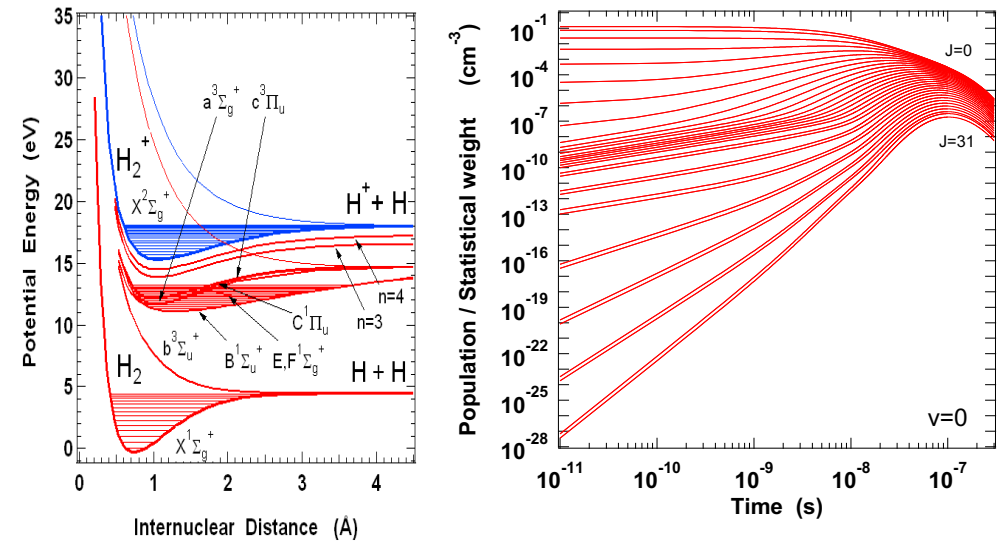
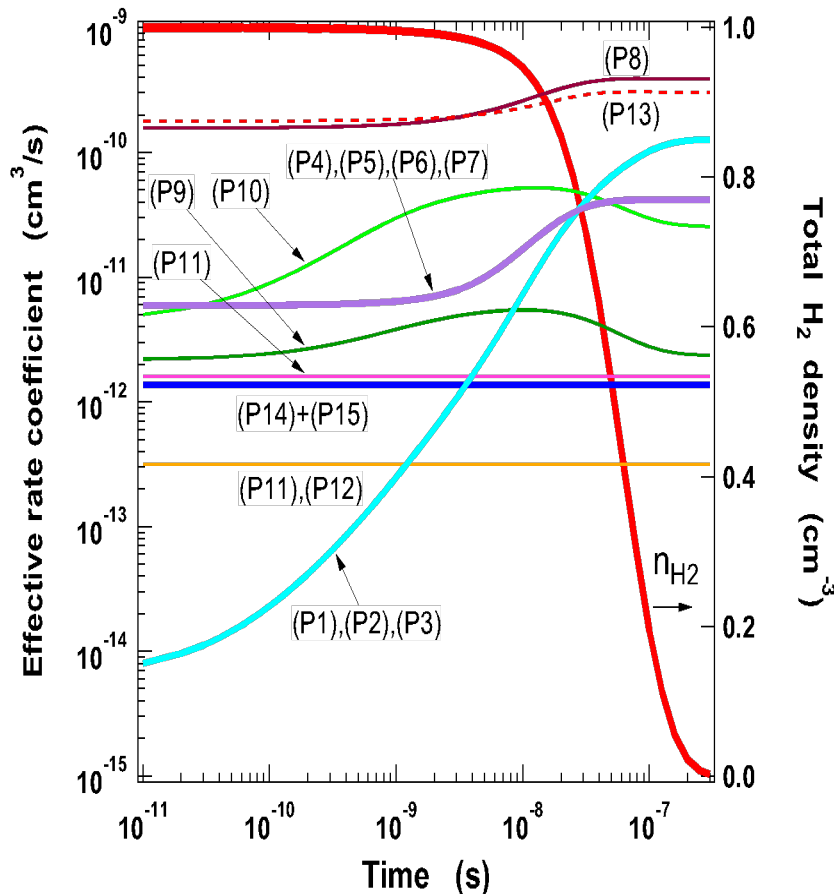
Plasma $T_e = 2 \text{ eV}$, $T_{H^+} = 2 \text{ eV}$

$$n_e = n_{H^+} = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$$

$$T_{H_2} = 1 \text{ eV}, n_{H_2} = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$$

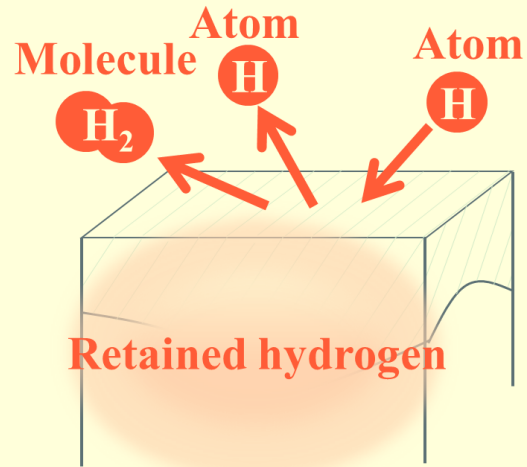
$$T_H = 2 \text{ eV}, n_H = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$$

Initial condition 300 K equilibrium



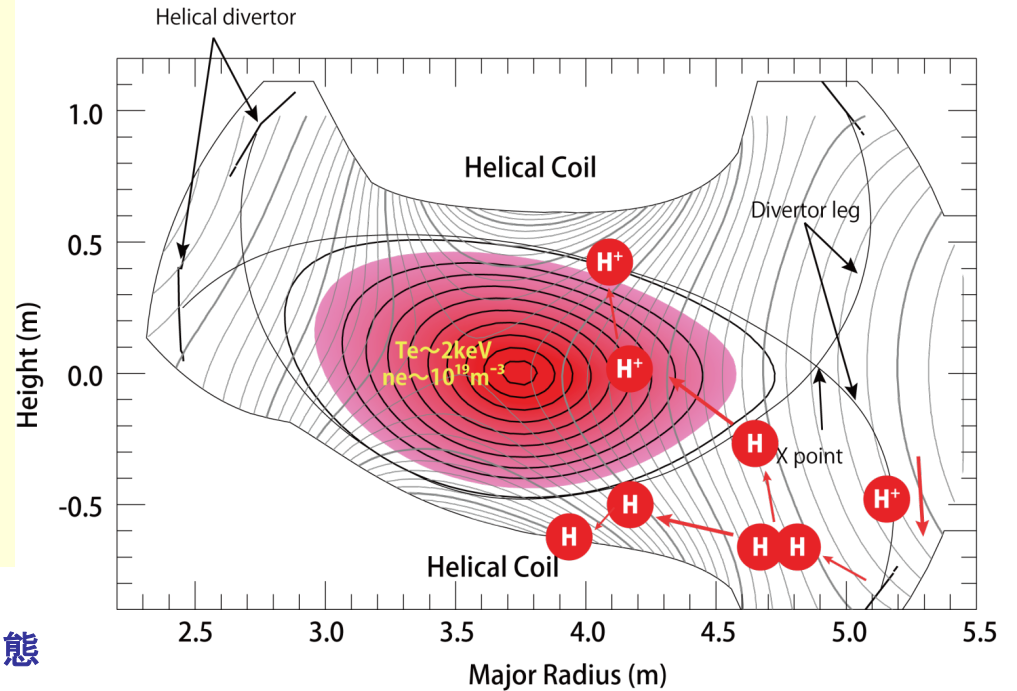
Label	Process
(P1)	$H_2(X^1\Sigma_g^+, v, J) + e \rightarrow H_2^- \rightarrow H(p = 1 \text{ or } 2) + H^-$
(P2)	$H^- + H^+ \rightarrow H(1) + H(p = 2 \text{ or } 3)$
(P3)	$H(p = 2 \text{ or } 3) \rightarrow H^* \rightarrow H(1)$
(P4)	$H_2(X^1\Sigma_g^+, v) + H^+ \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+, v') \rightarrow H(1)$
(P5)	$H_2^+(X^2\Sigma_g^+, v') + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+, v'') + e$
(P6)	$H_2^+(X^2\Sigma_g^+, v'') + e \rightarrow H(1) + H(p \geq 2)$
(P7)	$H(p \geq 2) \rightarrow H^* \rightarrow H(1)$
(P8)	$H_2(X^1\Sigma_g^+, v) + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1) + H(1)$
(P9)	$H_2^*(\text{singlet}, v, J) \rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+) + h\nu \rightarrow H(1) + H(1)$
(P10)	$H_2^*(\text{triplet}, v, J) \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + h\nu \rightarrow H(1) + H(1)$
(P11)	$H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H(1) + H(p \geq 2)$
(P12)	$H(p \geq 2) \rightarrow H^* \rightarrow H(1)$
(P13)	$H_2(X^1\Sigma_g^+, v) + H \rightarrow H + H + H$
(P14)	$H^+ + e \rightarrow H(1)$
(P15)	$H^+ + e \rightarrow H^* \rightarrow H(1)$
(P16)	$H_2^+(X^2\Sigma_g^+, v') + e \rightarrow H(1) + H^+ + e$
(P17)	$H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$
(P18)	$H_3^+ + e \rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+, v, J) + H \text{ or } H + H + H$

計算コードの整備

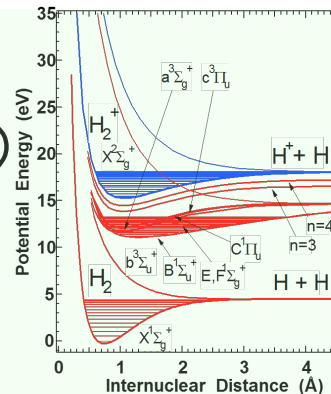


水素プラズマ対向壁リサイクリングモデル (分子動力学法) 中村・斎藤

放出水素原子 放出角、並進エネルギー
放出水素分子 放出角、並進エネルギー、振動・回転状態



水素分子衝突輻射モデル (電子・振動・回転状態を区別) 澤田



基底・励起状態を考慮した各種反応の速度係数

EMC3-EIRENE (EIRENE : 中性粒子輸送コード) 河村・小林

ダイバータ近傍 ・ ダイバータレッグ
電子温度・電子密度

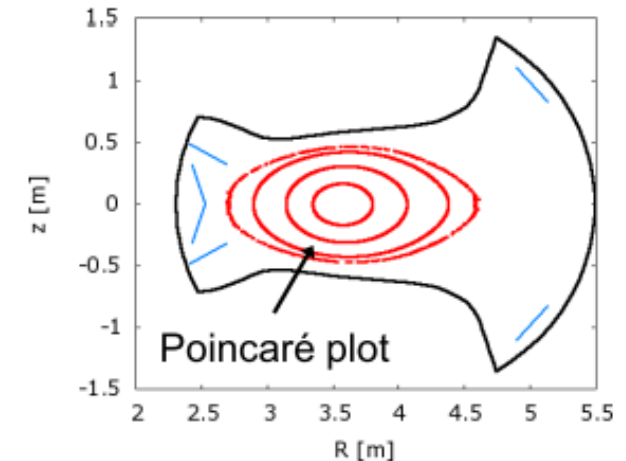
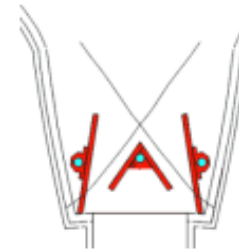
澤田・後藤 中性粒子輸送コード



Modeled parameters of LHD

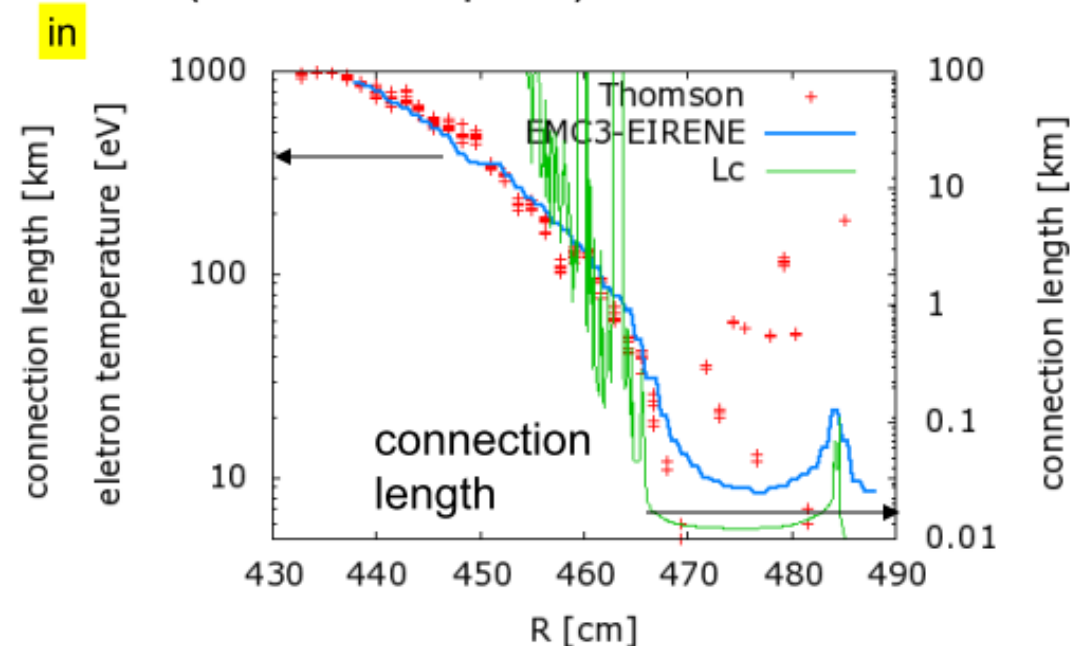
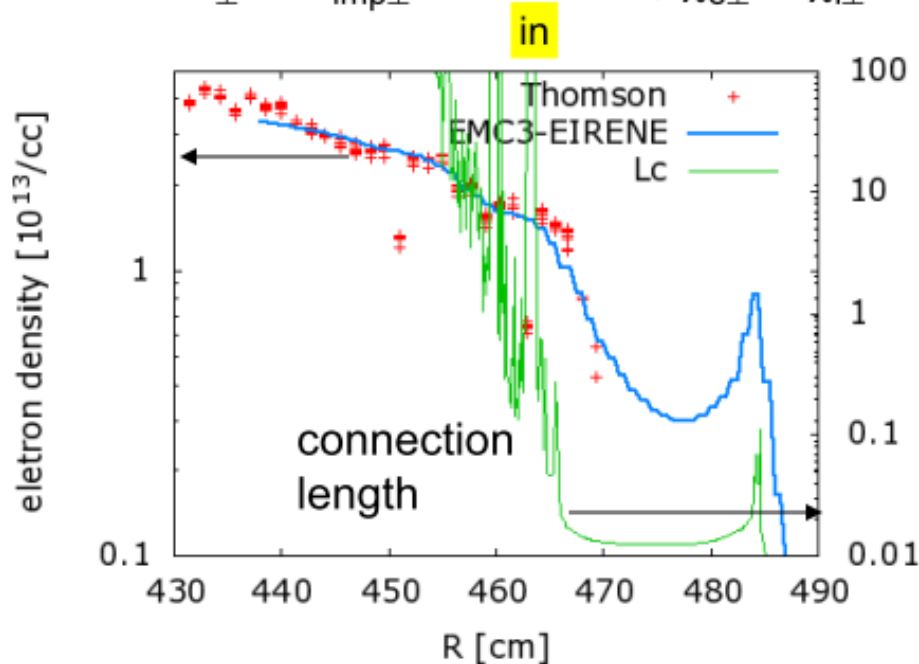
◆ Device model

- Magnetic axis position: $R_{ax}=3.6\text{m}$.
- Closed divertor at each section.
- No gas-pump inside the vessel.

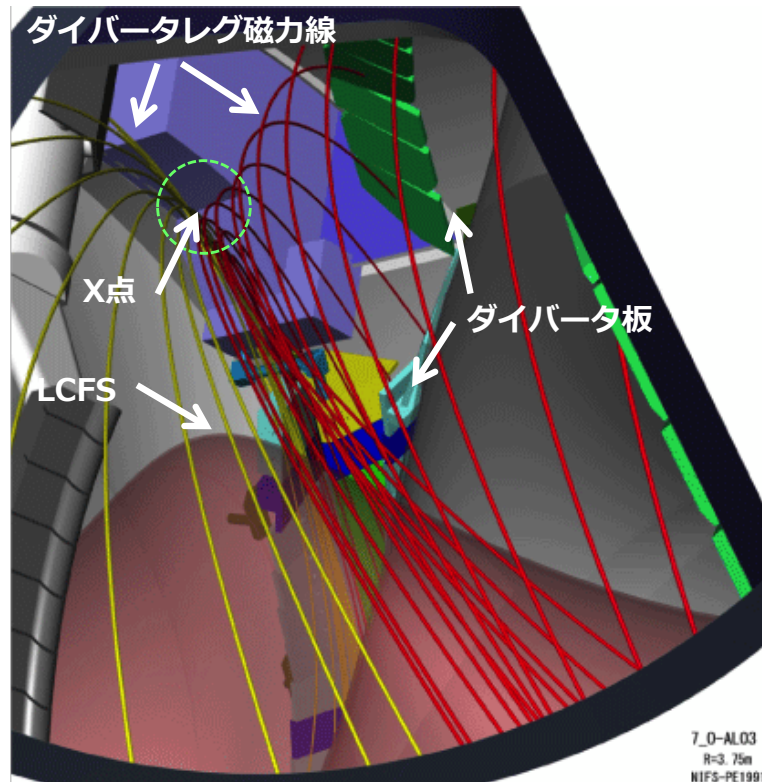


◆ Plasma model

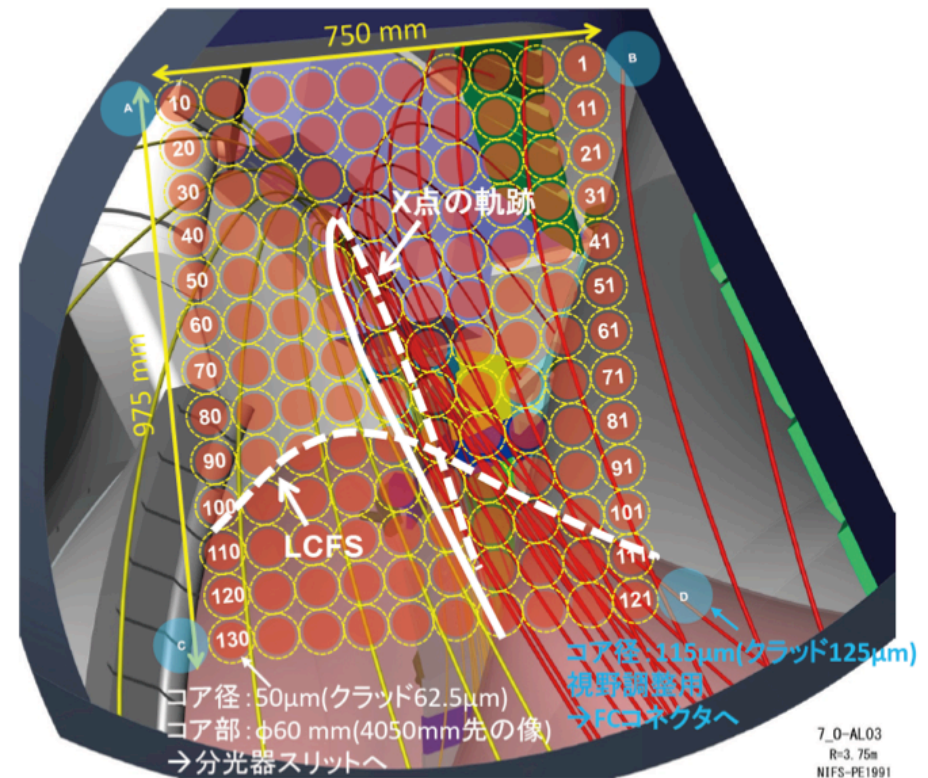
- Electron density: $3.3 \times 10^{19}/\text{m}^3$ at core boundary.
- Perpendicular transport coefficient:
 $D_{\perp} = D_{imp\perp} = 0.6 \text{ m}^2/\text{s}$, $\chi_{e\perp} = \chi_{i\perp} = 0.5 \text{ m}^2/\text{s}$ (uniform in space).



観測ポートからの視野

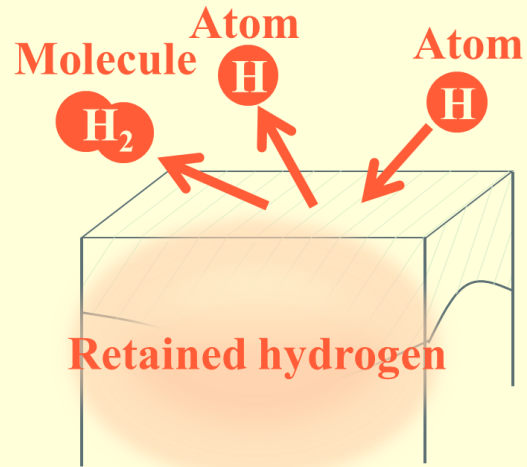


ファイバー列と視野の関係



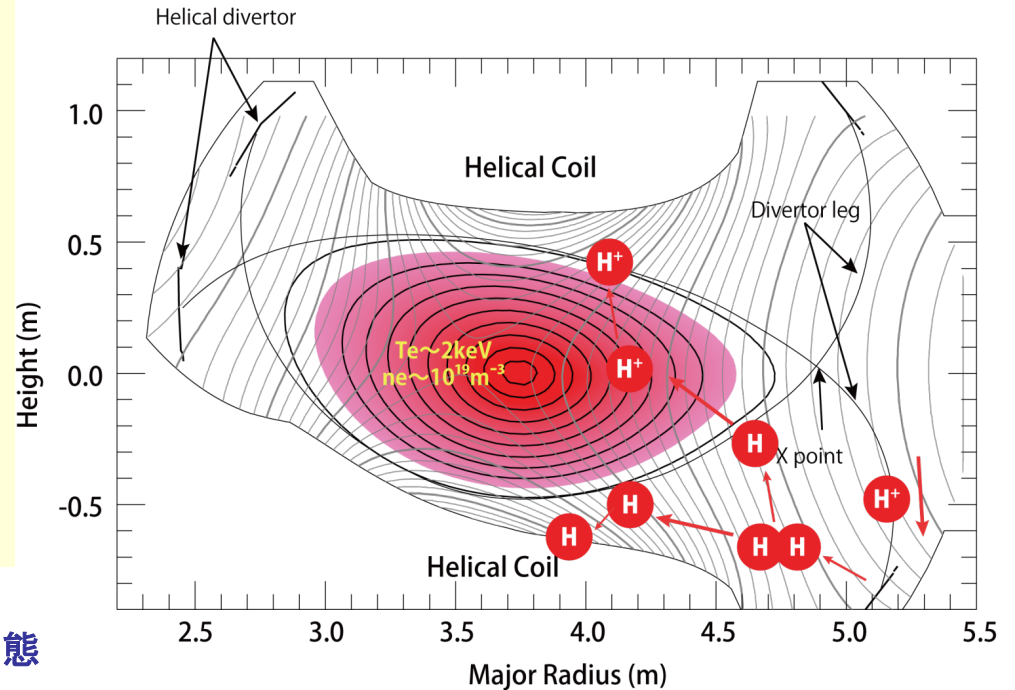
- ◆ 分光器スリットにファイバを縦に並べ、各チャンネルで独立に分光計測。
- ◆ チャンネル数を40 ch $\rightarrow$ 130 chに増設し、より広域な視野を確保した。

計算コードの整備

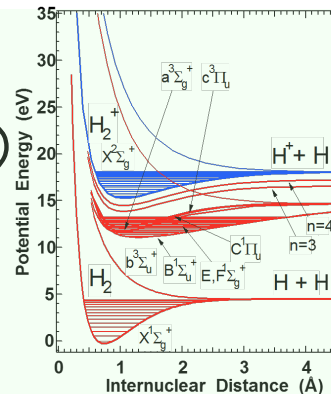


水素プラズマ対向壁リサイクリングモデル (分子動力学法) 中村・斎藤

放出水素原子 放出角、並進エネルギー
放出水素分子 放出角、並進エネルギー、振動・回転状態



水素分子衝突輻射モデル (電子・振動・回転状態を区別) 澤田



基底・励起状態を考慮した各種反応の速度係数

EMC3-EIRENE

(EIRENE : 中性粒子輸送コード)

河村・小林

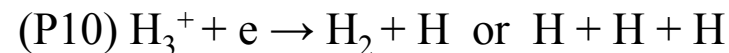
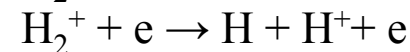
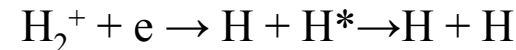
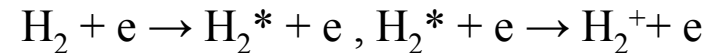
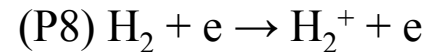
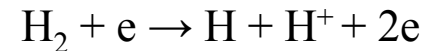
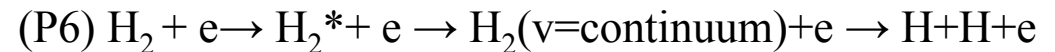
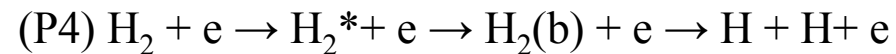
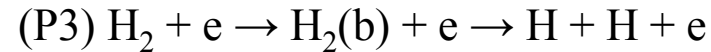
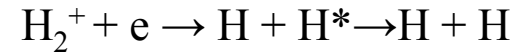
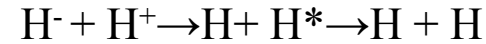
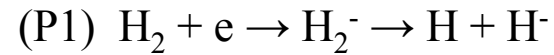
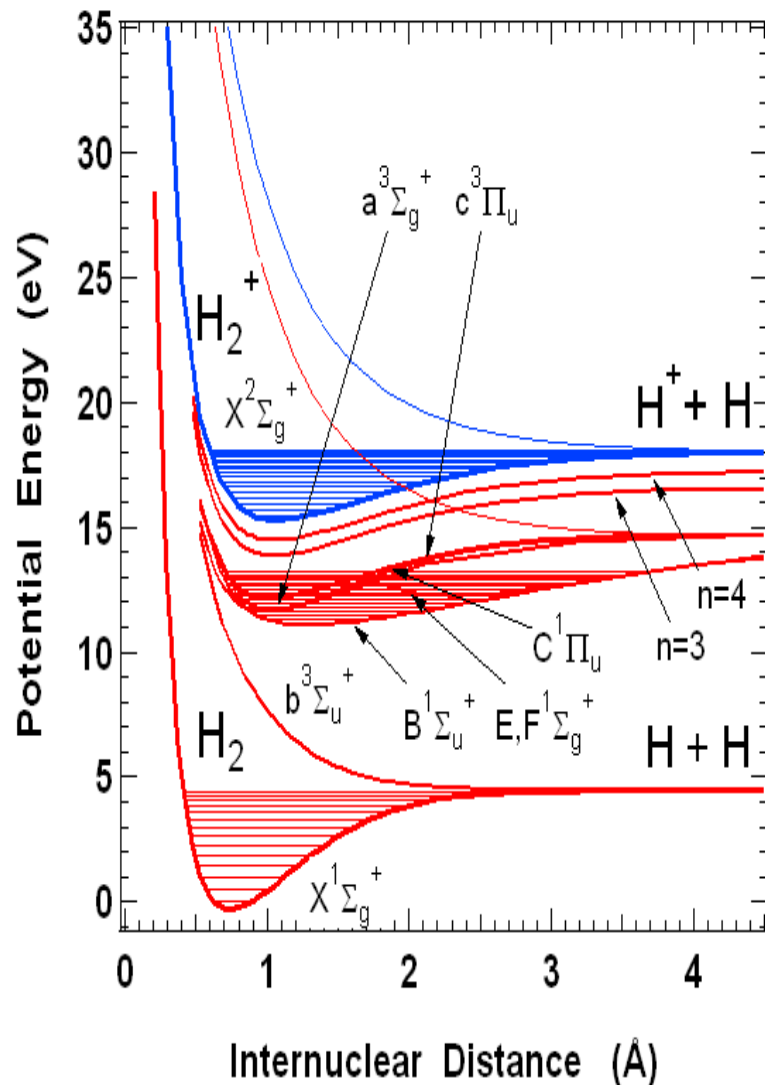
ダイバータ近傍 ・ ダイバータレッグ

電子温度・電子密度

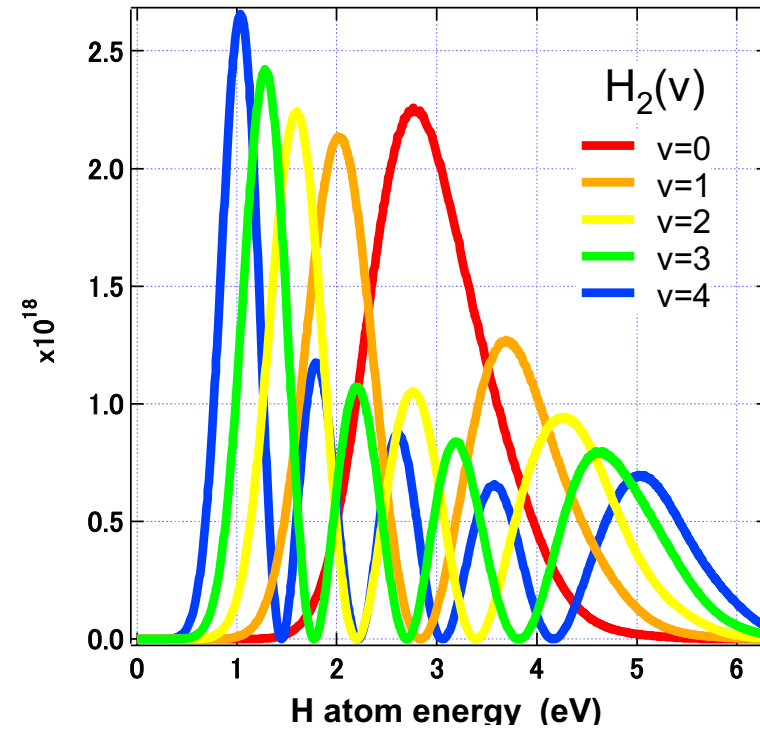
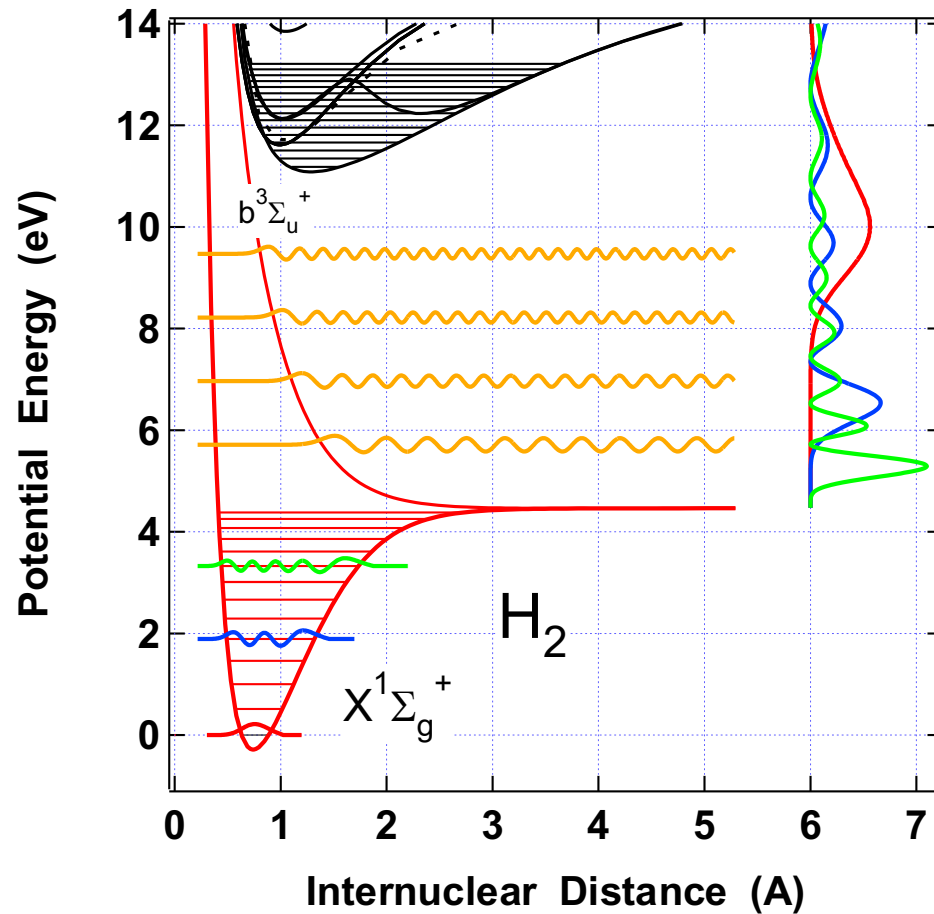
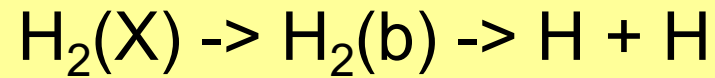
澤田・後藤 中性粒子輸送コード
信州大RFプラズマを用いた分光計測による
検証の準備

4. 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組み込んだ中性粒子輸送コードの構築と 信州大RFプラズマの分光計測によるその検証

輸送コードで考慮されている原子生成過程



4. 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組み込んだ中性粒子輸送コードの構築と 信州大RFプラズマの分光計測によるその検証



- ・水素原子生成時のエネルギー
→ 3 eV で多く分布
- ・水素分子
並進温度, 回転温度, 振動温度
= 300 K

4. 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組み込んだ中性粒子輸送コードの構築と 信州大RFプラズマの分光計測によるその検証

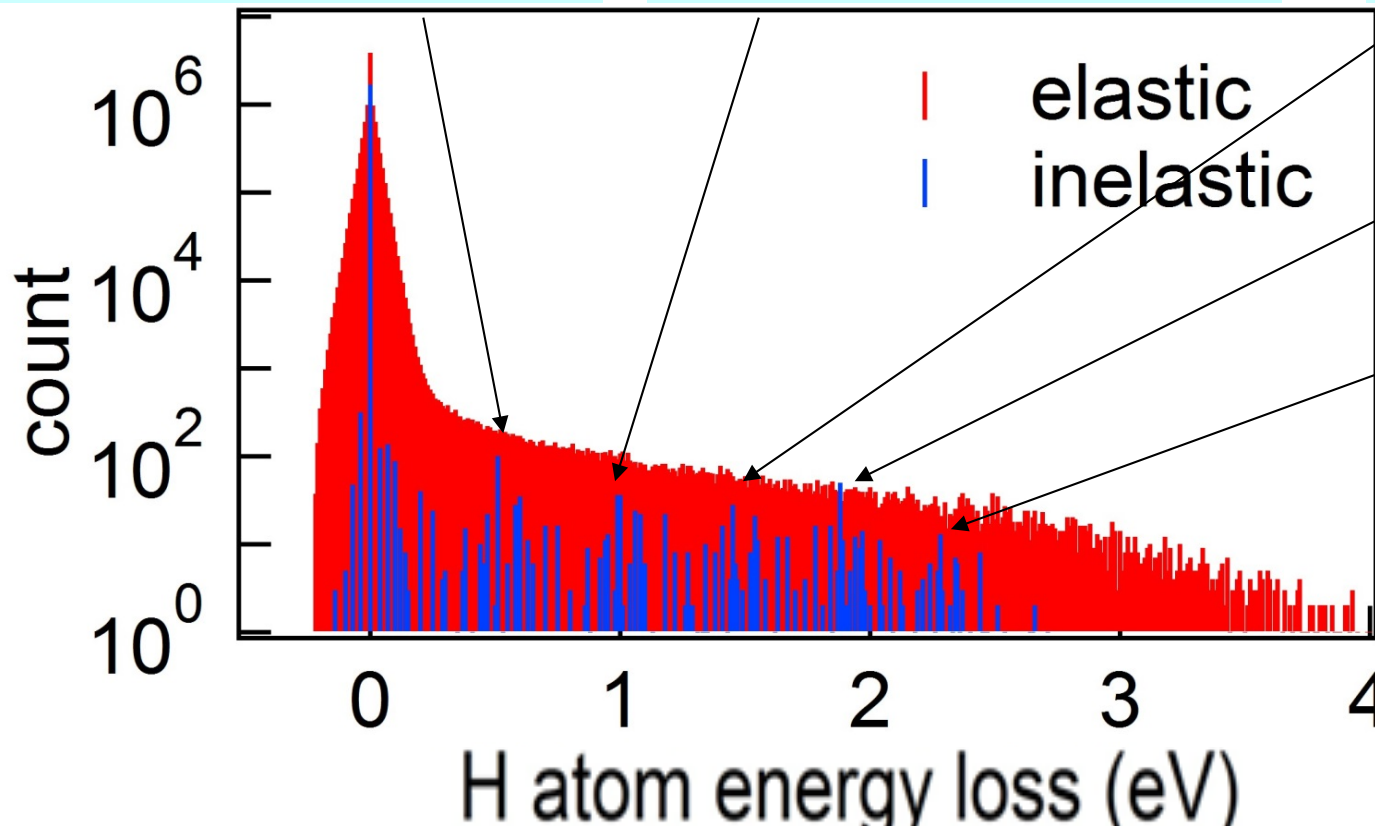
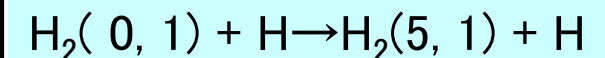
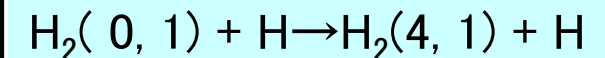
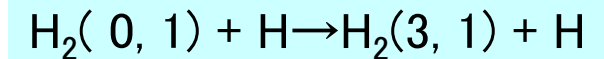
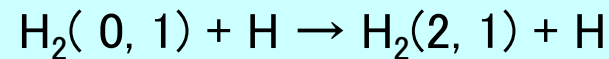
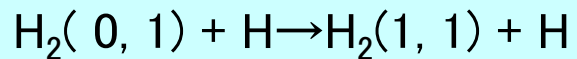
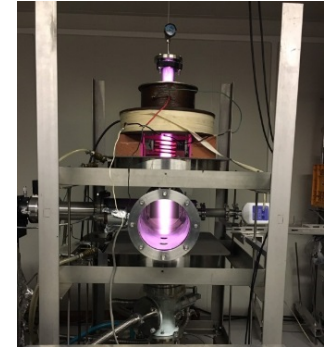
- 分子温度（並進：振動：回転）を300Kで固定
- 相対速度を原子の速度

$$T_e = 3.5 \text{ eV}$$

$$n_e = 4 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$$

$$T_{\text{H}_2} = 300 \text{ K}$$

$$n_{\text{H}_2} = 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$$



DEMO等、分子と原子の
並進温度が緩和の場合は
非弾性過程
が原子エネルギー損失に
効く可能性あり

まとめ

1. 分子動力学法を用いた水素プラズマ対向壁リサイクリングモデルの構築

- ・炭素壁リサイクリングモデルのための分子動力学計算基本コードを開発
- ・放出原子・分子数、放出極角・方位角、並進・振動・回転エネルギーの分布を計算

2. 電子・振動・回転状態を区別した水素分子衝突輻射モデルの構築

- ・電子・振動・回転状態を区別した水素分子衝突輻射モデルの構築
- ・非接触ダイバータプラズマに適用し、分子活性化再結合の速度係数を算出

3. EMC3-EIRENEコードによる周辺プラズマ分布の推定

- ・実験での分光計測と同様の視野でプラズマからの発光を得るモジュールを構築
- ・発光分布と絶対強度の実験との直接比較、磁力線構造との比較が可能になった

4. 水素分子衝突輻射モデルを組み込んだ中性粒子輸送コードの構築と 信州大RFプラズマ分光計測によるその検証

- ・澤田・後藤の中性粒子輸送コードに水素分子衝突輻射モデルを組み込んだ
- ・LHDおよび信州大RFプラズマの実験と比較のために中性粒子輸送コードを整備
- ・水素原子・分子発光線および水素原子ラインプロファイルの計測システムを整備