

審査の結果の要旨

氏名 志村 憲一郎

核融合炉の開発において、プラズマ-壁相互作用 (Plasma-Wall Interactions; PWI) の解明は、高い安定性を有するプラズマの維持、トリチウムを含む水素同位体燃料粒子の管理などの点から、重要な課題の一つである。PWIはさらに幾つかの重要な「素過程」にブレークダウンされ、プラズマ対向材料表面は、燃料粒子の輸送という観点からは、気相(真空)とバルクの間には存在する2次元の非連続面とみなすことができ、これを介して様々な素過程が競合することになる。その複雑さゆえ、今や燃料粒子の振る舞いを既存の反応速度論で扱うことは限界に達したと言わざるを得ない状況にある。そこで、本研究は、離散的な手法であるセルオートマトン(CA)法に注目し、これを利用した核融合炉燃料粒子-表面相互作用のモデル化の可能性を検討した。全体は10章より構成されるが、まず第1~3章で上述した点を踏まえて本研究の位置付けを行っている。さらに、本論に入る前に、第4章で論文提出者が共同研究者として行ったNbに対する原子駆動重水素透過実験に触れ、そこで得られた結果の一部が既存の理論やモデルでは解釈できないことを指摘している。

こうして第5章ではじめてCA法が取り上げられ、その登場した歴史的な経緯や特長が述べられている。さらに、幾つかの重要な概念が提示され、以降の第6章から第9章において、本手法を初めて核融合炉燃料粒子-材料表面相互作用の問題に適用した結果とそれに対する考察が展開される。

まず第6章では、表面吸着水素の脱離に関する2次元モデルの構築を試みている。脱離を、ランダムに動き回る水素原子が表面拡散により表面上を移動し、2つの水素原子同士が会合し水素分子を生成し表面から放出されるプロセスと捉え、モデルでは、表面拡散と表面からの放出について単純な「遷移ルール」を与え、これに基づき脱離速度を計算している。別途、反応速度論に基づく厳密解(Polanyi-Wigner式)を導出し、両者の結果を比較している。CA法による計算結果はセル数に依存するものの、100万セル以上で、厳密解と良く一致することが示されている。しかし、より複雑なメカニズムに適用するとなると計算時間が膨大になることが懸念された。そこで、セル数を減らした計算が可能か否かの検討を、続く第7章で述べている。ここで構築したモデルは表面を一次元とみなすものであるが、2次元の場合の1/10程度のセル数で厳密解と定性的に符合している。

表面を1次元的にみなせるということで、表面とサブ表面(バルクの一部)が結合した系を対象にできる見通しが得られたとして、第8章では表面-サブ表面間で粒子の輸送を伴う脱離の問題に取り組んでいる。ここでは初期条件としてバルクにも水素が存在するとして計算を行っている。計算により、表面上の水素のみからの脱離に加え、バルクから表面

に流入した水素による脱離のピークが高温側に現れることが示された。こうした現象は実際の昇温脱離実験でも見られており、ここでも CA 法による計算結果は現実的な描画を再現している。さらに特筆すべきは、計算結果を精査すると、表面→バルク、バルク→表面へ流れる水素原子のフラックスが等しくなることが示されている点である。これは、表面-バルク間の“擬似”平衡を仮定して初めて定義される「水素再結合係数」なる速度定数がもはやその根拠を失ったことを意味し、これに依拠する「古典的な」反応速度論はここに破綻する。ただ、ここでの計算における仮定や初期条件は、計算機の制約上、やや非現実的な側面を露呈しているが、この点が改善されれば結果の定量性はさらに向上するものと期待される。

一方、第9章では、セラミックス増殖材料からのスイープガスによるトリチウム回収を念頭に置いたモデリングを試みている。酸化リチウムのようなイオン結晶は非均質性が大きく、表面での吸着・脱離は金属に比べはるかに複雑である。しかし、ここでも従前の章で採用したような単純な遷移ルールを与えることで、反応速度論に基づくモデルと定性的に符合する結果を得ている。しかも、既存の限られた計算機の能力で、表面での相互作用がほぼ定常に達するまでの長時間にわたって反応プロセスの追跡ができています。

以上で述べられたことから、本研究の結論が第10章で導かれる。一般に複雑とされていた核融合炉燃料粒子-材料表面相互作用に関わる問題が、抽象的なモデルとはいえ、全く新しい観点より解釈できることを示した点が、本研究の最大の成果とすることができる。

以上を要約すれば、本研究は、このように、システム量子工学の中でも核融合炉工学、とりわけプラズマ-壁相互作用の分野の発展に寄与するところが少なくない。また、CA法の適用範囲を固相-気相間、固相中の物質移動一般の問題にまで拡張し得ることを示したという点でも貢献は大である。

よって本論文は博士(工学)の学位請求論文として合格と認められる。