

博士学位論文審査要旨

2016年2月17日

論文題目：二体衝突近似にもとづいた粒子-物質相互作用の数値シミュレーション

学位申請者：加藤 周一

審査委員：

主査：同志社大学大学院理工学研究科 教授 和田 元
副査：同志社大学大学院理工学研究科 教授 吉門 進三
副査：自然科学研究機構核融合科学研究所 教授 中村 浩章

要 旨：

高エネルギー粒子は材料中に進入し、減速に伴って材料に照射損傷を与え、材料の性質を変化させる。この際の進入深さは粒子エネルギーに応じて変化し、あるエネルギー以上の粒子は十分薄い材料を通過するが、通常は材料中で止まってしまうか、表面近傍で反射されてしまうので、実験的にどのような相互作用が生じているか確認することは困難である。そこで本研究では、最も単純な二体衝突近似にもとづいた数値シミュレーションの妥当性を実験的に検証した上で、作成したコードを原子核実験での荷電交換フォイル系の設計と、核融合炉材料内部での吸収粒子と入射粒子の交換現象の二つの応用分野への適用について調査した結果を報告している。これらの結果にもとづき、これまでの計算機資源では決して現実的でなかった、材料内部の入射粒子空間分布の完全粒子モデルにもとづく計算結果について報告し、その有効性について議論している。

本論文は単純なシミュレーションコードの開発に終始するのではなく、粒子反射実験との比較によるモデルの適用限界と、実験データとの比較において注意すべき事項の抽出を行い、また、高エネルギー領域での大角度散乱については、荷電交換系の形状効果が散乱の原因にはなりえないことを明らかにしている。特に完全粒子モデルにもとづく照射粒子の材料内空間分布計算については、本論文において初めて公開される内容であり世界で初の報告になる。この計算で扱った系が核融合炉壁の水素同位体吸蔵であることから、その成果は新規性のみならず有用性について見ても十分高い。特にこの数値シミュレーション実験で予想すべき反応を実験的に再現するためには、一定以上の放射性物質を用いて厳重なるシールドを行い、科学者がある程度の被爆を覚悟で実施することになり、これをシミュレーション実験で行えるようになったことの科学的・工学的意義は非常に大きい。以上より本論文は、博士（工学）（同志社大学）の学位論文として十分な内容を有するものと認める。

総合試験結果の要旨

2016年2月17日

論文題目：二体衝突近似にもとづいた粒子-物質相互作用の数値シミュレーション

学位申請者：加藤 周一

審査委員：

主査：同志社大学大学院理工学研究科 教授 和田 元
副査：同志社大学大学院理工学研究科 教授 吉門 進三
副査：自然科学研究機構核融合科学研究所 教授 中村 浩章

要 旨：

本論文の提出者は本学大学院，工学研究科電気電子工学専攻博士課程（前期課程）を2013年3月に修了後，2013年4月に理工学研究科電気電子工学専攻博士課程（後期課程）に入学し，現在在籍中である。

本論文の主たる内容は Japanese Physical Society Conference Proceedings, 1, art. No. 013067 (2014), Journal of Nuclear Materials, 463, 351 (2015), Japanese Journal of Applied Physics, 55, art. No. 01AH11 (2016) に掲載されて既に十分な評価を得ている。2016年1月6日，午後3時より約2時間に亘り，提出論文に関する博士論文公聴会が開かれた。講演後種々の質疑が行われたが，提出者の説明により十分な理解が得られた。公聴会終了後，審査委員による学力確認のための口頭試験を実施したところ，論文提出者の十分な学力を確認する事ができた。また，国際会議に第一著者として三件の論文を提出して自ら英語で発表を行っているのに加え，語学試験にも合格していることから，十分な語学力を有するものと認められる。以上，論文提出者の専門分野における学力ならびに語学力は十分であることを確認した。よって総合試験の結果は合格であると認める。

博士學位論文要旨

論文題目：二体衝突近似にもとづいた粒子-物質相互作用の数値シミュレーション
氏名：加藤 周一

要 旨：

粒子-物質相互作用 (Particle-Material Interaction; PMI) は原子, 分子, あるいはイオンが材料表面に飛来して起こる現象のことを呼ぶ. 低エネルギー領域の反応では飛来粒子の堆積が起こり, エネルギーが高ければ反射や材料表面の損耗が起こる複雑な現象である. PMI 分野には古くから, 固体材料への粒子照射過程に関するシミュレーションに, 二体衝突近似法 (BCA) が採用されてきた. BCA とは, エネルギーを持った粒子が材料へと照射された時に起こる材料原子との衝突過程を, 最も相互作用の強い原子ペアの衝突とみなすことでシミュレーションする手法である. ハミルトニアンを求め, 運動方程式を時間について逐次積分し運動を解いていく分子動力学法 (MD) と比較すれば計算の精度は劣るものの, 散乱断面積が小さくなる高エネルギー領域での照射にはこのモデルが有効である. また計算コストも MD と比較して低いため, 多量の粒子入射計算ができるため実験と比較できるほどの十分な統計量を算出することができる. 本研究では二体衝突モデルに基づいた新しい計算手法を開発し, 様々な分野に適用することで BCA の新分野展開の可能性を提案する.

水素, あるいはその同位体粒子と材料の相互作用は, 特に核融合と高エネルギー物理学の分野において重要である. 核融合分野では主に, 比較的低エネルギー領域の PMI 現象との関連性が高い. 特に水素リサイクリングや炉内に設置してあるタングステン材料への水素同位体吸蔵問題が問題とされる.

そこで本研究では, 第一の研究として数 keV 程度の水素分子イオンビームをタングステン材料表面に照射したとき, そこから反射されてくる水素単原子イオンの反射特性を実験的に計測することで 分子-固体相互作用の基礎過程の一部を明らかにした. その上で実験を模擬した BCA シミュレーションを行うことで実験とシミュレーションの比較検討もした. 実験の結果, 材料表面にて分子は即座に解離され, そのときの単原子イオンの反射特性は, 分子の入射エネルギーを分子の構成原子に等分配した時のエネルギーによる単原子イオン照射時の反射特性と酷似することが分かった. また, 二体衝突モデルに基づいた Atomic Collision in Amorphous Target (ACAT) コードでの純粋なタングステン材料への水素原子打ち込みシミュレーションでは, 実験で観測された水素の反射エネルギーは, 入射エネルギーに近い値であることが分かっていたために, より現実に近い比較として, ある閾値エネルギーよりも高いエネルギーで反射されてくる粒子に関してのみ反射強度を見積もった. その結果, 実験で得られた傾向に近づいた.

次に第二の研究では, 核融合炉で重要となる水素リテンション問題を探るため, 水素同位体がタングステン材料内部に吸蔵されている場合への同位体粒子照射に関する研究をした. 特に吸蔵された同位体の粒子衝撃誘導放出特性を調べるため BCA シミュレーションを行うことで, その計算結果から導き出される同位体効果について議論した. また水素吸蔵問題に関するシミュレーションをするに当たり, 合金材料への粒子照射を目的として開発された ACAT では, タングステン材料内部に同位体が吸蔵されている状態を適切に模擬することができない. よって ACAT の計算モデルに修正を加えることで標準の ACAT モデルよりも, より現実に近いモデルに変更した. その上で材料内の蓄積同位体原子の粒子バランス方程式を提案し, その方程式中に含まれる吸収率と脱離収率を ACAT で見積もった. その結果, 材料内に吸蔵されたある種類の同位体を, 他種の同位体打ち込みによる効果で真空中へ放出させる場合, 誘導放出効率は濃度に対し指数関数的に

なることが分かった。またその時定数と、二体散乱時に入射粒子から標的粒子へと輸送されるエネルギー期待値との関連が導き出された。

これまでは主に低エネルギー領域の PMI 現象を取り扱ってきた。しかし第三の研究では、加速器のような MeV オーダーの高エネルギー領域での BCA の応用研究をした。大強度陽子加速器 J-PARC の RCS セクションでは、181 MeV まで加速された水素負イオンビームが直前の線形加速器から入射してくる。入射方式は、線形加速器からの水素負イオンビームを荷電変換炭素フォイルに透過させることで陽子ビームへと変換する荷電変換多重入射方式が採用されている。しかしビームがフォイルを透過する際に生じるビーム損失は、周囲の放射化を招く。よって元々高エネルギー領域の計算に有効である BCA シミュレーションで高エネルギー水素がフォイルに入射された場合の透過角度強度分布を見積もった。また実際に担当グループによって測定されたビーム入射部周辺の γ 線スペクトルデータを解析し、シミュレーション結果と比較することで、放射化の原因の検討を行った。

低エネルギー領域での PMI 現象に注目するし、BCA シミュレーションの問題点を考えると、第一の研究では、タングステン材料にビームを照射し続けている系での計算にも関わらず、材料中の水素の吸蔵を無視して、純粋なタングステン材料を暗黙に仮定することでシミュレーションをしていた。また第二の研究では、水素を吸蔵したタングステン材料を照射標的材料としていたが、材料内の水素分布は一様であるとしていた。実験的に直接材料内の水素の分布を調べることは不可能である。またこの研究の結果で、水素同位体のスパッタリング収率は材料内の水素濃度が大きく影響を与える事がわかった。すなわち、材料内の水素の濃度だけではなく、その分布も現象自体に与える影響が大きいと重要であるということを示唆している。BCA のみで BCC 結晶のタングステンへ水素を連続入射させると、ある一定の深さに集中して非現実的な水素の粒子溜まりができる。これは新たな水素イオンが材料へと飛来してくる間に起こると考えられる材料内での水素の拡散による効果が無視されているからである。現実には、次の粒子が飛来するまでに先に吸蔵された粒子は拡散して、別の場所に移動すると考えられる。従って BCA でより現実に近い状況を模擬するためには拡散を考慮した連続照射シミュレーションを行う必要があり、新たな利用分野の開拓が求められることになった。

核融合分野で問題とされている水素リサイクリングやトリチウム吸蔵を現象論的に理解するためには、タングステン材料への水素の入射過程は勿論のこと、材料内で起こる不純物拡散の理解が必要である。そのため、過去には BCA である程度の粒子数を照射したら、それで得られた材料中の不純物濃度を連続的な場とみなして拡散方程式を解くハイブリッド手法が開発された。これは TDS 実験をあるレベルで再現できる等の一定の成功を取めたが、拡散方程式を解く都合上、BCA で得られた原子レベルのミクロな粒子分布情報を密度場に変換するため一度消してしまう。従って一貫した粒子スケールシミュレーションができない。加えて拡散方程式を解くには拡散粒子濃度は連続的な場になっていなければならない。このために将来の核融合炉で想定される高フラックス粒子照射下や、局所的濃度の不連続性が伴う場合は解くことができなくなり、取り扱いのできる計算条件に強い限定を受けてしまう問題があった。

近年の PMI シミュレーションでは、不純物が母材内部の構造を殆ど変化させることなく拡散する場合には、動的モンテカルロ法 (kMC) による取り扱いが適当とされている。kMC はランダム・ウォークモデルを更に発展させたもので、ある確率を持って金属格子構造内の局所安定サイト間で拡散粒子をジャンプさせる方法であり、粒子移動を比較的良好に再現したモデルを構築できる。また第一原理シミュレーションからタングステン中に水素が吸蔵されてもタングステン格子は殆ど歪むことはないことが分かっているため、水素-タングステン系への kMC の適用は妥当である。しかしながら、この kMC シミュレーションのみでは、プラズマ照射という要素を反映できない。実際には水素イオンの飛来により母材金属内に空孔が形成されたり、既にリテンションしている水素のスパッタリング現象なども起こるはずである。そこで最後の研究として、水素イオン

の入射過程を BCA が担当し、粒子照射過程で材料内に吸蔵された水素や、原子衝突で形成された空孔などの拡散を kMC で見積もることで照射過程と拡散過程を終始粒子スケールで同時に取り扱うことのできる BCA-kMC ハイブリッドシミュレーションを考案し、その雛型となるコードも完成させた。kMC に必要な物理パラメータは密度汎関数理論により算出した。その結果、過去の手法では計算できなかった条件でのシミュレーションを可能にしたと同時に、それが抱えていた課題の一部を克服することもできた。本論文では BCA-kMC ハイブリッドシミュレーションの実現を代表し、低エネルギー領域から高エネルギー領域までの幅広い分野での BCA の発展の可能性を提示した。今後も BCA は様々な分野で活用されることになると期待でき、本論文はその一助となるであろう。