

## 3B1a

### 分子動力学を用いた水素 グラファイト反応の研究

(名大理, 核融合研\*) 伊藤篤史, 中村浩章\*, 高山有道\*

ito.atsushi@nifs.ac.jp

核融合プラズマ閉じ込め装置において、一部閉じ込めきれないプラズマ粒子は磁束線に導かれダイバータと呼ばれる部分に衝突する。装置の損傷を抑えるためダイバータは炭素材(グラファイト)で覆われているが、水素との衝突で炭素材は損耗してゆく。さらに炭化水素分子や水素分子が発生しプラズマ閉じ込めにとって不純物となる。プラズマ壁相互作用と呼ばれるこの問題は古くから盛んに議論がされてきたが、原子スケールで、つまりケミカルな反応に基づいた理論的アプローチはほとんど行われてこなかった。そのため、炭素材の損耗過程や炭化水素の発生メカニズムは未解明なままとなっている。我々は分子動力学シミュレーションによりプラズマ壁相互作用問題の解明を目指している。

最も基本的な反応過程である水素単原子 - グラフェン反応 [1,2] から、多層グラファイトを模擬した大きな炭素材と多量の水素との反応 [3] など、多角的な研究を行うことで各スケールでの支配的な物理現象がどのように関係しあっているかを示す。水素単原子 - グラフェン反応では炭素原子が  $sp^2$  結合構造から  $sp^3$  結合構造へオーバーハングする時間スケールによって水素原子の化学吸着を説明することができる。スケールを一つ上げて水素の量を増やした系を用意すると、グラフェン中の  $sp^3$  結合構造が増えるが、この系からは C-C ボンドの切れやすさと、水素の化学吸着による構造変化の関係を得ることができた。それによれば C-C ボンドを構成している両方の炭素原子が水素を表裏逆に化学結合している場合に最も C-C ボンドの切断が起こりやすい。逆にそのような構造が発生しなければ、グラフェンは長期にわたり安定である可能性を示唆している。これは実際に多層グラファイトと多量水素との反応を良く説明することができる。

本公演ではさらに討論会の趣旨にあわせ、量子化学計算を使わずにあえて古典力学に従った分子動力学だからこそ定義できる物理量である粒子間エネルギー流についても触れる。これによって化学反応時のエネルギーの拡散などを視覚化しダイナミクス解明の為の有意な情報となることなどを議論したい。

本公演ではさらに討論会の趣旨にあわせ、量子化学計算を使わずにあえて古典力学に従った分子動力学だからこそ定義できる物理量である粒子間エネルギー流についても触れる。これによって化学反応時のエネルギーの拡散などを視覚化しダイナミクス解明の為の有意な情報となることなどを議論したい。

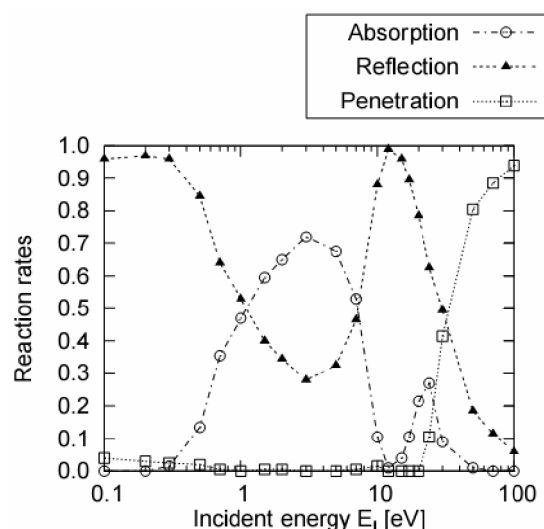


図1: 水素単原子 - グラフェン反応における吸着・反射・貫通率の入射エネルギー依存性

[1] A. Ito and H. Nakamura, J. Plasma Phys. **72** (2006) 805.

[2] A. Ito, H. Nakamura, and A. Takayama, cond-mat/0703377.

[3] H. Nakamura and A. Ito, Mol. Sim. **33** (2007) 121