

# 水素に覆われたガラス表面における水素原子反射挙動に関する研究

## Reflection of eV-energy hydrogen atom on hydrogen-covered surface

\*中川 雄貴, 中野 晋太郎, 高木 郁二  
京都大学

ガラス表面における低エネルギー水素原子の反射率は1に近く、鏡面反射する原子が多いことが以前の実験で示された。この傾向を分子動力学(MD)計算によって確かめた。

**キーワード：反射、水素リサイクリング、水素原子、分子動力学計算、ガラス**

### 1. 緒言

本研究では、固体表面に入射した水素原子が原子のまま入射方向に戻る過程を反射と呼ぶ。この反射は、核融合炉内における水素リサイクリングにとって重要な過程であるが、化学的な相互作用が大きく影響するeV程度の領域については未だ明らかになっていない。

### 2. 実験結果

以前の研究[1]では、ホウケイ酸ガラス表面における1eV程度の水素原子の反射率は0.93であり、鏡面反射する原子が多いことが示された。今回は、重水素原子に曝しているガラス表面における重水素の密度を核反応法によって測定した結果、表面は重水素で覆われていることが分かった。

### 3. 分子動力学計算

MD計算に用いるガラスはMeltQuench法とVacuumGap法によって作成し、動径分布関数によって適切に生成していることを確認した(図1)。MD計算ではポテンシャルとしてReaxFFを用いた。その結果、1eVの水素原子が入射した場合、表面の水素密度が高いほど反射率も高くなり(図2)、水素密度が高い条件下では鏡面反射する水素が多かった。これらの結果は2で示した実験結果をよく整合した。

### 4. 考察

表面が水素に覆われると、どの固体でも反射率が高くなると考えられる。反射率が高いと水素原子はプラズマに直接面していない領域にまで輸送され、このことが水素リサイクリングに影響を及ぼしている可能性がある。

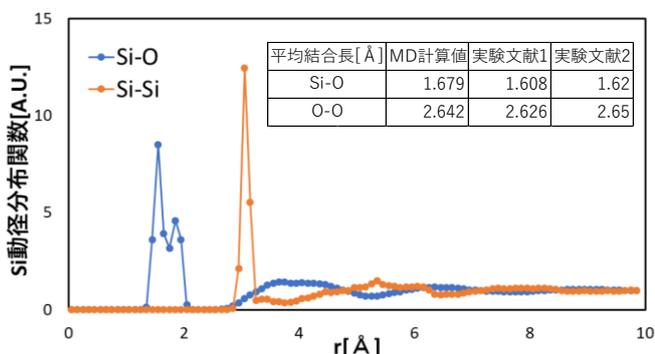


図1. ガラス中のSiの動径分布

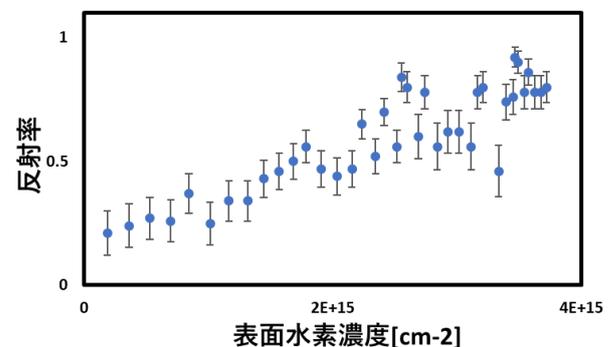


図2. 反射率の表面水素密度依存性

### 参考文献

[1]中野晋太郎ら, 日本原子力学会春の年会, 2014, 茨城大学(2019)

\*Yuki Nakagawa, Shintaro Nakano and Ikuji Takagi

Kyoto Univ.