時間依存密度汎関数理論を用いた タングステンに対する入射水素イオンの 中性化過程解析

戸田悠斗^A,高山有道^{B, A},伊藤篤史^{B, A} 総研大^A,核融合研^B E-mail: toda.yuto@nifs.ac.jp

背景

- 原子スケールでのプラズマ―壁相互作用(PWI)シミュレーションは二体衝突近似, 分子動力学, 密度汎関数理論など様々な手法で行われてきたが、その計算は入射粒子を中性の原子で代替したものが殆どである。
- プラズマから飛来するイオンは壁表面と相互作用し、中性化されると考えられるがその詳細は明らかになっていない。

まとめ

- 時間依存密度汎関数理論という量子力学的な手法を用いて、プラズマ―壁相互作用における水素イオンの中性化過程を 計算した。
- 反射後の水素の(系の)状態は、イオン・中性原子・負イオンの3つが重ね合わされた状態となる。

歴史的には、入射粒子を中性の原子で代替してきた

二体衝突近似 分子動力学 密度汎関数理論 (BCA) (MD) (DFT)

Y.T., A.T., A. M.I., Implementation of Interatomic Potential for Charged Particle Collision, 11th ICRP, (2022)

中性原子·基底状態

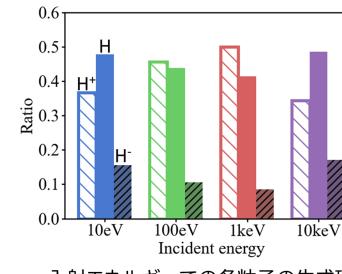
裸の原子核が扱える

時間依存

密度汎関数理論

(TDDFT)

Injected onto Graphene



入射エネルギーでの各粒子の生成確率