

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

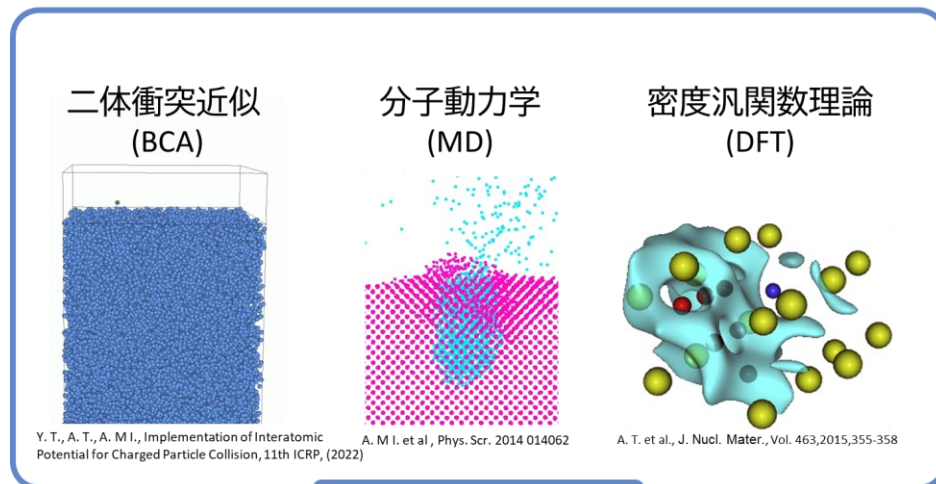
- 原子スケールでのプラズマ-壁相互作用(PWI)シミュレーションは二体衝突近似, 分子動力学, 密度汎関数理論など様々な手法で行われてきたが, その計算は入射粒子を中性の原子で代替したものが殆どである。
- プラズマから飛来するイオンは壁表面と相互作用し, 中性化されると考えられるがその詳細は明らかになっていない。

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。

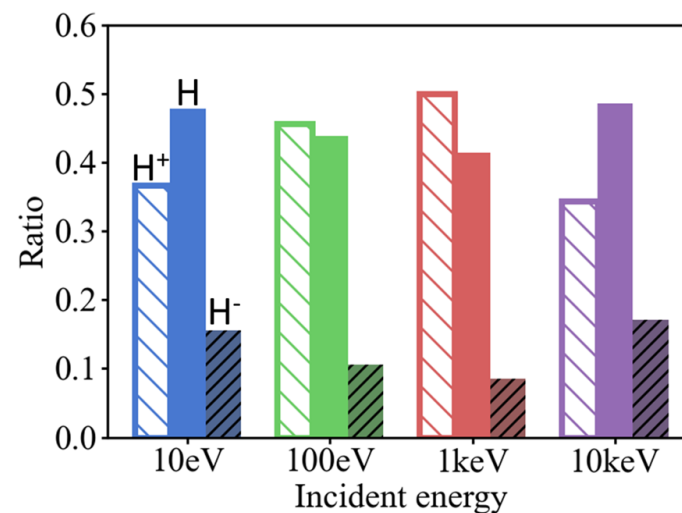
歴史的には, 入射粒子を中性の原子で代替してきた

裸の原子核が扱える



中性原子・基底状態

励起状態



入射エネルギーでの各粒子の生成確率