

А.Б. ЛЯШЕНКО¹, Ю. ПОЛВИ², Э. САФИ²
Ф. ДЖУРАБЕКОВА^{1,2}, К. НОРДЛУНД^{1,2}

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
²University of Helsinki, Helsinki, Finland

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПЫЛЕНИЯ ВОЛЬФРАМА АЗОТОМ

Экстремально большие потоки тепла на материалы первой стенки, ожидающиеся в токамаках-реакторах, одна из основных проблем на пути реализации термоядерной энергетики. Возможное решение – добавление в диверторную плазму небольшого количества специально выбранного газа. В вольфрамовом диверторе реактора ITER предлагается использовать для этого азот (N) [1]–[3]. Но взаимодействие азота с пластинами дивертора будет приводить к эрозии и изменению свойств вольфрама (W).

Энергия активации диффузии азота в вольфраме очень велика: $E_a = 2.32 \pm 0.16$ эВ [4]. По этой причине в ходе бомбардирования вольфрама азотом последний накапливается в материале, формируя слой моонитрида (WN), ограниченный несколькими нанометрами.

В данной работе мы исследуем распыление вольфрама азотом методом молекулярной динамики. Для расчёта используется недавно разработанный потенциал взаимодействия W-N [5]. Мы моделируем кумулятивное распыление вольфрама азотом для энергий в диапазоне 10 – 1000 эВ при температуре 300К и 600К. Начальный образец состоит из 3000 атомов вольфрама расположенных в узлах объёмно-центрированной кристаллической (ОЦК) решётки. Характерный размер образца $27 \times 27 \times 67$ Å. Для моделирования макроскопического бруска металла на параллельные грани наложены периодические граничные условия. Атомы азота запускаются с высоты 5 Å над поверхностью под углом 10 градусов к нормали верхней грани образца. Последние 3 слоя атомов вольфрама в начальном образце жёстко зафиксированы, рис.1. Один запуск моделирует 7 пс времени эксперимента. Этого времени достаточно для релаксации образца перед запуском следующего атома азота.

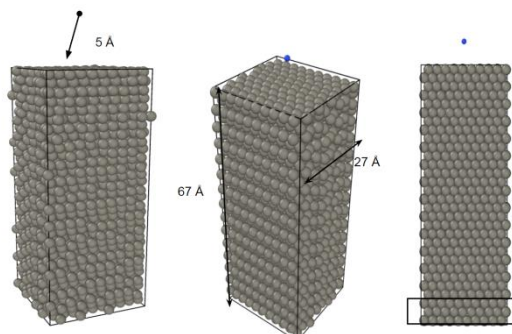


Рис. 1 Образец до начала распыления. Серые сферы визуализируют атомы вольфрама, синяя – атом азота. На рисунке также указаны характерные размеры образца и параметры моделирования.

В ходе моделирования азот накапливается в исходном образце. В начале зависимость концентрации азота от количества запусков близка к линейной. Однако, по мере того как поверхность вольфрама наполняется азотом, процесс его накопления замедляется за счёт роста коэффициента распыления уже накопленного в образце азота, рис.2. Это происходит тем быстрее, чем меньше энергия налетающих частиц и, соответственно, чем меньше глубина слоя насыщения. Для энергии 10 эВ насыщение было достигнуто после 6000 запусков.

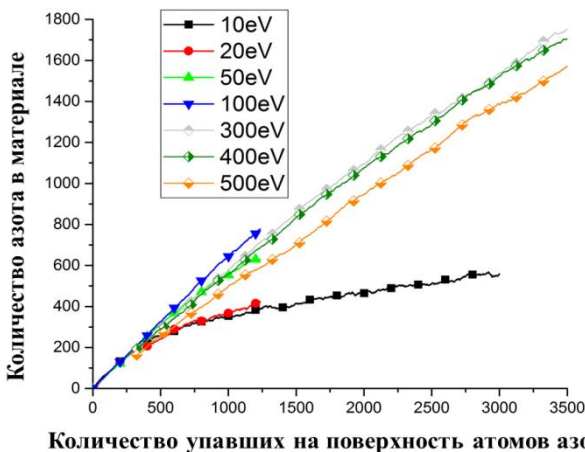


Рис. 2 Зависимость количества накопленного в материале азота от числа налетающих атомом для различных энергий.

Накопление азота уменьшает коэффициент распыления вольфрама почти на порядок. На рис. 3 представлен график, иллюстрирующий этот процесс. Объяснить это можно уменьшением концентрации вольфрама на поверхности материала [6]. Кроме того, в ходе работы было обнаружено, что энергия связи атомов вольфрама с материалом увеличивается при накоплении в образце азота. Это так же может быть причиной уменьшения коэффициента распыления. Коэффициент распыления вольфрама выходит перестает уменьшаться после накопления определенного количества азота. Эти значения сходятся с экспериментальными данными, рис. 4. Моделирование также показало, что до половины атомов вольфрама распыляются в виде молекул мононитрида (WN) при энергиях 300 эВ, 400 эВ и 500 эВ.

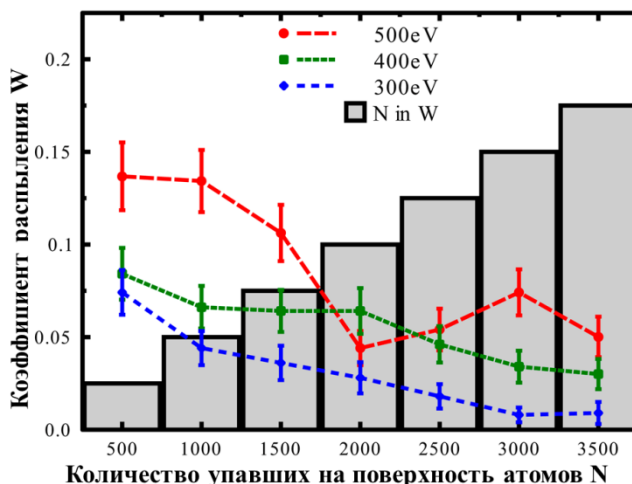


Рис. 3 Зависимость коэффициента распыления вольфрама от числа налетающих частиц атомарного азота. Серые столбики иллюстрирует относительное количество накопленного в образце азота.

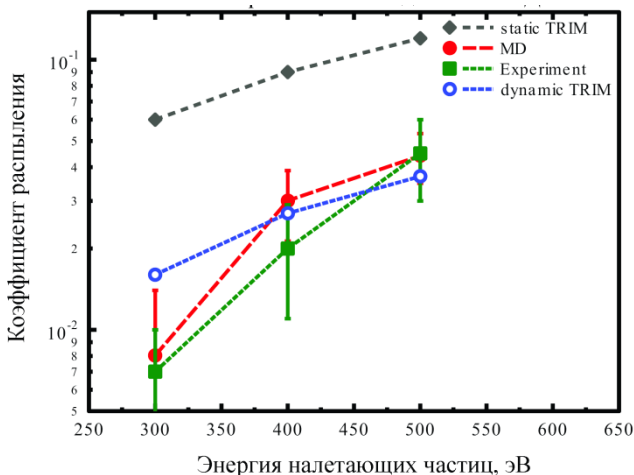


Рис. 4 Зависимость коэффициента распыления вольфрама от энергии налетающих частиц атомарного азота: эксперимент (квадраты), молекулярная динамика (цельные круги).

Список литературы

- [1] G. Pacher, H. Pacher, G. Janeschitz, A. Kukushkin, V. Kotov, and D. Reiter, “Modelling of DEMO core plasma consistent with SOL/divertor simulations for long-pulse scenarios with impurity seeding,” *Nucl. Fusion*, 2007.
- [2] K. Tobita *et al.*, “Compact DEMO, SlimCS: design progress and issues,” *Nucl. Fusion*, 2009.
- [3] X. Bonnin *et al.*, “ITER divertor plasma response to time-dependent impurity injection,” vol. 0, pp. 1–6, 2017.
- [4] J. Keinonen, J. Räisänen, and A. Anttila, “Diffusion of Nitrogen in Ion-Implanted Chromium and Tungsten,” *Appl. Phys. A Solids Surfaces*, vol. 35, no. 4, pp. 227–232, 1984.
- [5] J. Polvi, K. Heinola, and K. Nordlund, “An interatomic potential for W–N interactions,” *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 24, no. 6, p. 65007, 2016.
- [6] K. Schmid *et al.*, “Interaction of nitrogen plasmas with tungsten,” *Nucl. Fusion*, vol. 50, no. 2, p. 25006, 2010.