

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ПАРАМЕТРОВ МАТЕРИАЛА НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ЛАЗЕРНО- ИНДУЦИРОВАННОЙ ДЕСОРБЦИИ

Систематический контроль содержания изотопов водорода (в т.ч. радиоактивного трития) в обращенных к плазме элементах (ОПЭ) является одной из основных задач, решение которой необходимо для обеспечения продолжительной работы будущих термоядерных установок по типу ИТЭР. В настоящее время активно исследуется возможность использования лазерно-стимулированных методов для осуществления *in-situ* диагностики содержания захваченного газа в ОПЭ [1]. Одним из таких методов является анализ лазерно-индуцированной десорбции (ЛИД), в основе которого лежит нагрев участка исследуемой поверхности лазерным импульсом с последующим масс-спектрометрическим анализом вышедшего газа [2] или спектроскопическим анализом фотонного потока, зарегистрированного после дополнительной ионизации десорбированного газа в плазме [3].

Интерпретация экспериментальных данных представляет из себя решение обратной задачи, в которой на основе результатов проведенных измерений требуется определить исходное содержания изотопов водорода в поверхностном слое ОПЭ. Отсутствие точной информации о свойствах исследуемого материала усложняет решение обратной задачи и может привести к росту погрешности при обработке измерений. В рамках данной работы на примере вольфрама был проведен численный анализ влияния неопределенности параметров материала на эффективность ЛИД водорода.

Анализ проводился на основе одномерной реакционно-диффузионной модели транспорта водорода в материалах, учитывающей временную эволюцию концентрации адатомов водорода (c_s) на поверхности [4]:

$$\frac{dc_s}{dt} = J_{bs} - J_{sb} - J_{des}, \quad (1)$$

где J_{bs} – поток атомов водорода из объема на поверхность, J_{sb} – поток атомов водорода с поверхности в объем, J_{des} – поток десорбированных частиц, состоящий из атомов и молекул. Рассматривались два сценария импульсного нагрева поверхности: наносекундный нагрев с гауссовым временным профилем ($\text{ПШПВ} = 25$ нс) и миллисекундный нагрев с

трапецевидным временным профилем (длительность плато ≈ 5 мс). Предполагалось, что в материале присутствует один тип ловушек водорода, равномерно распределенных в слое толщиной $L_{trap} = 10$ мкм, с концентрацией n_0 , начальной заселенностью p и барьером выхода E_{dt} . Оценка влияния неопределенности параметров материала на эффективность ЛИД строилась на поэтапном варьировании коэффициента теплопроводности (κ) вольфрама и величин n_0, p, E_{dt} . Для представления количественных характеристик использовались следующие величины: $N_0 = n_0 p L_{trap}$ – начальное содержание водорода, $F_{diff} = \int (J_{bs} - J_{sb}) dt$ – число вышедших на поверхность частиц, $F_{des} = \int J_{des} dt$ – число десорбированных атомов водорода.

На рисунке 1 приведены зависимости доли вышедших на поверхность и десорбированных атомов водорода при различных параметрах материала и ловушек. В обоих сценариях нагрева наблюдается повышенный выход водорода из объема на поверхность при полной начальной заселенности ловушек, что связано с более слабым влиянием эффекта перезахвата диффундирующих атомов на начальном этапе облучения. В случае неполной начальной заселенности величина F_{diff}/N_0 меняется незначительно, что говорит о пропорциональности выхода водорода начальному содержанию. Существенное отличие между двумя случаями нагрева поверхности проявляется в доле десорбированных атомов. При лазерном облучении с наносекундной длительностью доля десорбированных частиц падает с уменьшением начального содержания водорода и барьера выхода из ловушек, где последнее вызвано выходом атомов водорода на поверхность после окончания лазерного воздействия. В свою очередь, при миллисекундном нагреве $F_{des} \approx F_{diff}$ во всех рассмотренных случаях, что говорит о меньшей роли поверхностных эффектов по сравнению с предыдущим режимом нагрева. Причем максимальное отклонение результатов в каждой серии моделирования (а, б, в) от среднего значения выборки составляет величину порядка 50 %.

Для пояснения наблюдаемого отличия в режимах десорбции в двух сценариях нагрева был рассмотрен безразмерный параметр:

$$\sigma = \tau_{des}/\tau_{sb}; \quad (2)$$

где τ_{des} – характерное время десорбции водорода с поверхности в форме атомов/молекул, τ_{sb} – характерное время реабсорбции адатомов водорода, Этот параметр характеризует то, чем определяется режим десорбции: реабсорбцией ($\sigma \gg 1$) или выходом с поверхности ($\sigma \ll 1$). На рисунке 2 (а)

представлена зависимость параметра σ от температуры и полного потока десорбированных частиц. Видно, что при характерных для ЛИД параметрах, по большей части, реализуется режим, контролируемый реабсорбцией, при котором $F_{des} \approx F_{diff}$, однако в случае нс-ЛИД возможен переход в другой режим.

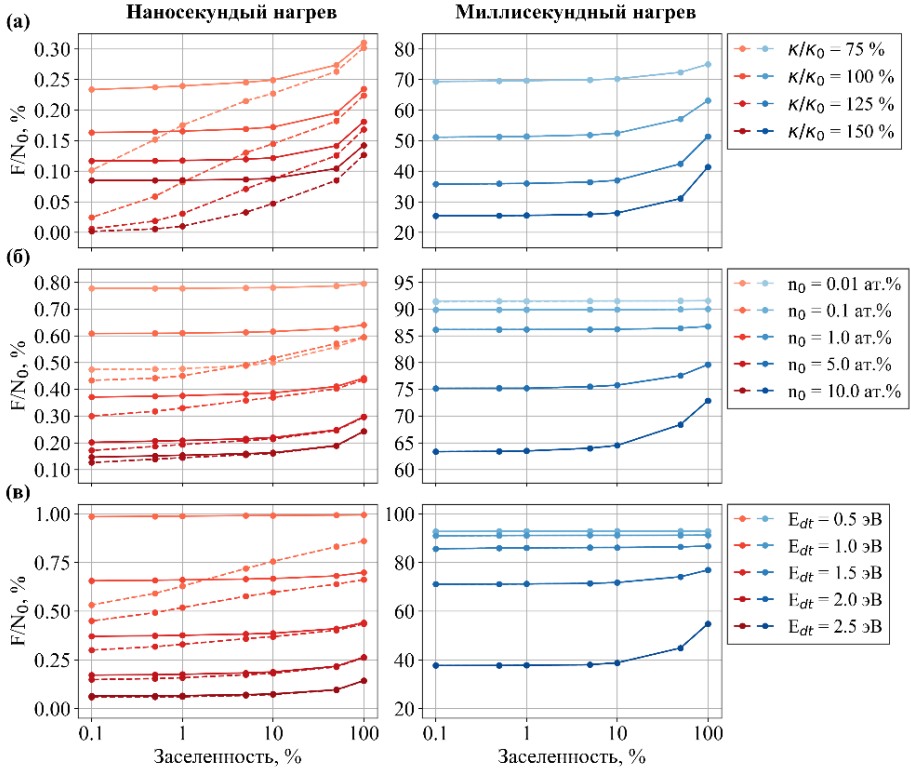


Рисунок 1 – Зависимость доли вышедших на поверхность (сплошные линии) и доли десорбированных (пунктирные линии) атомов в зависимости от начальной заселенности ловушек при наносекундном и миллисекундном нагреве: (а) – при различных значениях теплопроводности ($q_{нс} = 7$ кДж/м², $q_{мс} = 2.5$ МДж/м², $n_0 = 1$ ат.%, $E_{dt} = 1.5$ эВ); (б) – при различных значениях концентрации ловушек ($q_{нс} = 10$ кДж/м², $q_{мс} = 4$ МДж/м², $E_{dt} = 1.5$ эВ); (в) – при различных значениях барьерах выхода из ловушек ($q_{нс} = 10$ кДж/м², $q_{мс} = 4$ МДж/м², $n_0 = 1$ ат.%)

Для определения возможности реализации данного режима в случае ЛИД было проведено сравнение характерного времени реабсорбции с временем изменения температуры поверхности ($\xi = \tau_T / \tau_{sb}$). Из рисунка 2 (б) следует, что с ростом длительности импульса увеличивается окно параметров, при которых $\xi \gg 1$, т.е. с большей вероятностью реализуется режим, контролируемый реабсорбцией.

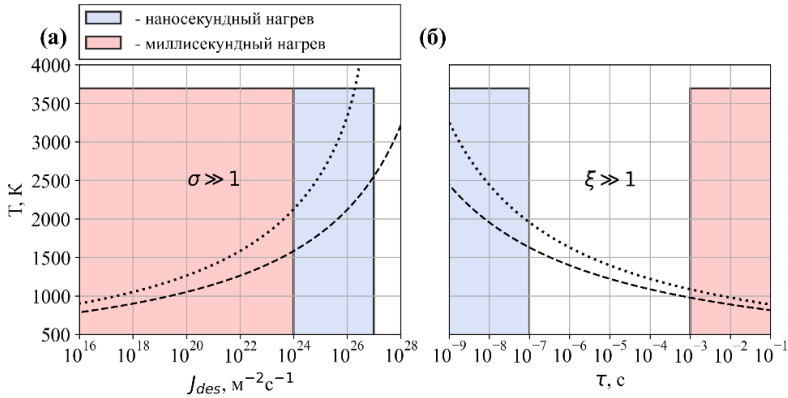


Рисунок 2 – Зависимость параметра σ от температуры и полного потока десорбированных частиц и зависимость параметра ξ от температуры и характерного времени изменения температуры в процессе лазерного нагрева. Пунктирные линии соответствует уровню $\sigma = 1$ и $\xi = 1$, точечные – уровню $\sigma = 1$ и $\xi = 10$

Таким образом, при использовании лазерных импульсов с миллисекундной длительностью можно ожидать, что погрешность интерпретации измерений из-за неопределенности параметров материала будет на уровне 50 % в то время, как соответствующая погрешность при применении нс-лазерных систем будет выше из-за существенного вклада от поверхностных эффектов.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 0723-2020-0043).

Литература

- [1] Mukhin E.E. et al Nucl. Fusion. 2016. Vol. 56, № 3. P. 036017
- [2] Lyu Y. et al. Phys. Scr. 2021. Vol. 96, № 12. P. 124040
- [3] Zlobinski M. et al. Fusion Eng. Des. 2011. Vol. 86, № 6–8. P. 1332–1335.
- [4] Kulagin V., Gasparyan Y., Degtyarenko N. Fusion Eng. Des. 2022. Vol. 184. P. 113287