



شبیه‌سازی برخورد غبار پولکی شکل با دیواره‌ی اول توکامک

بختیاری رمضانی، مهدیه^{۱*}؛ عبدالهی درگاه، مهنزا؛ عبداللّهی قهی، نیره^۱

^۱ سازمان انرژی اتمی ایران، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده فیزیک پلاسما و گداخت هسته‌ای

چکیده:

در توکامک‌ها، همه‌ی محصولات فرسایشی حاصل از برهم‌کنش پلاسما - دیواره، غبار نامیده می‌شود. ذرات غبار براساس سازوکار تولیدشان شکل‌های مختلفی دارند. در آزمایشگاه حرکت چرخشی این ذرات مشاهده شده است. در این مقاله، برخورد دانه‌ی غبار پولکی شکل (کره‌وار پخ) به دیواره‌ی گرافیتی با استفاده از کد لمپس شبیه‌سازی است. در این جا جنس دانه‌ی غبار گرافیت در نظر گرفته شده است که حول محور تقارنش دوران می‌کند. براساس فرضیات و مدل شبیه‌سازی، نتایج نشان می‌دهند که دانه‌های گرافیتی نقش قابل توجهی در تخریب سطوح گرافیتی دیواره‌ی اول توکامک ندارد.

کلمات کلیدی: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، دانه‌ی غبار، دیواره اول توکامک، چرخش، گرافیت

مقدمه:

دیواره‌های کربنی توکامک در اثر برخورد با پلاسما به‌طور قابل توجهی فرسایش یافته و تعداد زیادی غبار تولید می‌کنند. اغلب یافته‌های تجربی مهم برای مطالعه‌ی غبار در دستگاه‌های گداخت از روش‌های مختلفی هم‌چون تحلیل موشکافانه تجمع غبار در طی بیرون ریخته‌شدن، روش پراکندگی لیزر و استفاده از دوربین‌های سریع به‌دست آمده‌اند. تحلیل تجمع غباری که وارد پلاسما می‌شود، اطلاعات مهمی از توزیع اندازه و مساحت غبار، ترکیب و شکل آن فراهم می‌کند. غبار جمع شده (که بخش مهم آن هیدروژن است) ترکیب موادی از عناصر پوششی پلاسما (PFC) است. این غبار شکل‌های گوناگونی شبیه پولک، نامنظم و گاهی نیز شکل‌های کروی دارد که احتمالاً مکانیزم‌های متفاوت تولید غبار هم‌چون پوسته‌پوسته‌شدن لایه‌های جابه‌جا شده، تراکم ناخالصی‌ها در نواحی سرد پلاسما، بیرون‌اندازی غبار از سطح‌های پوششی پلاسما و دیگر مکانیزم‌های تخریب باعث گوناگون شدن شکل‌های غبار شده است [۱]. بازه‌ی ابعاد این ذرات از چند نانومتر تا میلی‌متر است. سرعت ذرات غبار منفردی که توسط دوربین‌های سریع مشاهده شده به چند صد m/s می‌رسد [۲]. داده‌های تجربی حاصل از عملکرد توکامک نشان می‌دهد دانه‌های غباری که در طی فرآیندهای خاصی تولید می‌شوند با سرعتی بیش‌تر از 1 kms^{-1} در پلاسما حرکت می‌کنند. با استفاده از این سرعت و طول عمرهای به‌دست آمده، دانه‌های غبار گرافیتی به شعاع $1\text{ }\mu\text{m}$ قبل از تبخیر شدنشان مسیری حدود $10\text{--}1\text{ m}$ در ITER طی می‌کنند.



حد استاندارد مقدار غبار در ITER برابر است با: الف) یک تُن غبار سرد که عبارت است از کل ذرات غبار متحرک (6 kg کربن، 6 kg بریلیوم و 6 kg تنگستن) که یک بحث کاملاً نگران‌کننده است. ب) غبار داغ شامل غبارهایی است که روی سطوح داغ باقی می‌مانند. در بیش‌تر تقریب‌های حدی به‌دست آمده برای ITER، این مقدار غبار در کم‌تر از ۱۰۰ تخلیه‌ی الکتریکی تولید می‌شود. بنابراین مسأله‌ی غبار یکی از مباحث اصلی برای ساخت رآکتورهای آینده است [۳].

چرخش غبار:

حرکت چرخشی دانه‌ی غبار در دستگاه‌های گداخت را می‌توان به‌عنوان یک پارامتر مهم در توصیف دینامیکی حرکت دانه تلقی کرد، زیرا حرکت چرخشی ذرات به‌طور تجربی در آزمایشگاه فیزیک پلاسما مشاهده شده است. چنان‌چه سطح دانه غبار ناهمگن باشد، یعنی ورود و خروج ذرات روی دانه به‌صورت نامتقارن باشد، مثلاً از یک ناحیه وارد شده و از ناحیه‌ای دیگر بیش‌تر کنده شوند، گشتاورهای ناشی از این بی‌نظمی تصادفی در شکل یا سطح دانه منجر به چرخش فوق‌حرارتی دانه می‌شود. فرآیندهای مختلفی باعث چرخش فوق‌حرارتی دانه غبار می‌شود. یکی از مهم‌ترین آنها تشکیل و تبخیر مولکول هیدروژن روی سطح دانه است.

وقتی اتم هیدروژن روی سطح غبار وارد می‌شود با توجه به دمای اتم فرودی، یا به‌طور ضعیف (جذب فیزیکی) و یا به‌طور قوی (جذب شیمیایی) به سطح می‌پیوندد. پس از چسبندگی به سطح، اتم‌ها از طریق مکانیزم تونل‌زنی کوانتومی و یا جست و خیز حرارتی روی سطح غبار پخش می‌شوند. سپس اتم‌های هیدروژن روی سطح غبار از طریق دو فرآیند لانگمیر - هاینشل‌وود^۴ (LH) و الی - رایدل^۵ (ER) برهم‌کنش می‌کنند و مولکول هیدروژن تشکیل می‌دهند [۵، ۴]. این مولکول‌ها پس از تشکیل روی سطح سریعاً تبخیر می‌شوند، حال چنان‌چه سطح دانه ناهمگن باشد گشتاورهای ناشی از این بی‌نظمی تصادفی در شکل یا سطح دانه منجر به چرخش فوق‌حرارتی دانه می‌شود. زیرا تشکیل مولکول هیدروژن در مکان‌های خاصی از سطح دانه اتفاق می‌افتد که لزوماً این مکان‌ها به‌طور همسان‌گرد توزیع نشده‌اند.

در هر دوره تناوب چرخش مکانیکی، نمودی از اندازه حرکت زاویه‌ای (ΔJ) به دانه وارد می‌شود که منجر به چرخش فوق‌حرارتی دانه می‌شود، ولی مهم‌ترین آن‌ها اندازه حرکت زاویه‌ای است که به‌واسطه‌ی تشکیل و سپس تبخیر مولکول

Physisorption^۲

Chemisorption^۳

Langmuir-Hinshelwood^۴

Eley-Rideal^۵



هیدروژن روی سطح دانه‌ی غبار به آن اعمال می‌شود. همان‌طور که گفتیم گشتاور منظمی که به واسطه‌ی تشکیل H_p به وجود می‌آید، باعث می‌شود دانه با سرعتی ۱۰ تا ۱۰۰ برابر سرعت چرخشی حرارتی حول خود بچرخد.

فرضیات و مدل شبیه‌سازی:

لمپس یکی از کدهای دینامیک مولکولی است که قابلیت مدل‌سازی مجموعه‌ای از ذرات در فازهای مختلف گاز، مایع و جامد را داراست. که در آن با اعمال معادلات حرکت نیوتن، مجموعه‌ای از موقعیت‌های اتمی به صورت پی‌درپی به دست می‌آید. از معایب کد لمپس نداشتن واسطه‌ی کاربری گرافیتی و ناتوانی در تولید تصاویر متحرک است. در این جا برای شبیه‌سازی برخورد دانه‌ی غبار با سطح یا دیوار گرافیتی از بسته‌ی نرم‌افزاری لمپس مربوط به نسخه ۲۰۱۳ و برای تصویرسازی از نرم‌افزار Ovito استفاده شده است. هر دو نرم‌افزار به صورت رایگان در اختیار کاربران قرار دارد [۶، ۷].

سطح گرافیتی متشکل از 104796 اتم در سه لایه به موازات صفحه‌ی xy و به ابعاد $30 \text{ nm} \times 30 \text{ nm}$ است. فاصله‌ی لایه‌ها از یکدیگر $3.35 \text{ \AA}$ ، ساختار شبکه‌ی هگزاگونال و ثابت شبکه $2.5 \text{ \AA}$ است. تمام مرز لایه‌های گرافیت به عرض $5 \text{ \AA}$ ثابت در نظر گرفته شده است. دمای تعادلی 700 K با استفاده از توزیع ماکسول - بولتزمن اعمال شده است که این دمای لبه‌ی پلاسما در توکامک است.

در این تحقیق مدل‌سازی برهم‌کنش‌ها از طریق میدان نیروی واکنشی صورت گرفته است که در واقع میدان نیروی غیرپیوندی بوده و تشخیص پیوندها برحسب فاصله‌ی بین دو اتم در ساختار مربوطه، برطبق ضریب‌های کوانتومی صورت می‌گیرد که در میدان نیرو لحاظ شده است. از این رو نیروی پتانسیل در نظر گرفته شده از نوع پتانسیل‌های عمومی وابسته به مرتبه‌ی پیوند است. انرژی سیستم به صورت مجموعی از انرژی‌های معین مربوط به برهم‌کنش‌های درون-مولکولی است. تابع پتانسیل $Rebo^v$ برای محاسبه‌ی انرژی پیوندهای کووالانسی و نیروی بین اتمی استفاده می‌شود. در این شبیه‌سازی ما از پتانسیل $Airebo^a$ برای اتم‌های کربن هر لایه از گرافیت استفاده می‌کنیم که در واقع تعمیم‌یافته‌ی پتانسیل $Rebo$ است و در آن برهم‌کنش واندروالسی (E_{ij}^{LJ}) و انرژی زاویه‌ای پیچشی ($E_{kijl}^{Torsion}$) نیز در نظر گرفته می‌شود [۸]:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left[E_{ij}^{Rebo} + E_{ij}^{LJ} + \sum_{k \neq i, j} \sum_{l \neq i, j, k} E_{kijl}^{Torsion} \right] \quad (1)$$

Bond order^v

Reactive empirical bond order^v

Adaptive intermolecular reactive bond order^a



به همان صورتی که در بسته‌ی نرم افزاری لمپس اجرا می‌شود، پتانسیل برهم‌کنش بین لایه‌های گرافیت را لنارد - جونز در نظر می‌گیریم:

$$E_{LJ} = \epsilon \epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad r < r_c \quad (2)$$

که در این شبیه‌سازی عمق چاه پتانسیل $\epsilon = 0.003 \text{ eV}$ ، فاصله‌ای که در آن پتانسیل صفر می‌شود $\sigma = 2.42 \text{ \AA}$ و شعاع قطع $r_c = 12 \text{ \AA}$ جایگذاری شده است.

نتایج شبیه‌سازی:

دانه‌ی غبار را از جنس گرافیت و شکل هندسی آن را پولکی شکل در نظر می‌گیریم. به‌طوری‌که بزرگ‌ترین شعاع آن 10 nm و کوچک‌ترین شعاع 1 nm باشد. تعداد 149893 اتم در جعبه‌ی شبیه‌سازی به ابعاد $70 \text{ nm} \times 70 \text{ nm} \times 40 \text{ nm}$ وجود دارد. در راستای موازی با صفحات گرافیت شرایط مرزی را تناوبی و در راستای عمود بر آن، غیرتناوبی در نظر گرفته شده است. برای دانه‌ی گرافیتی آنسامبل NVE و برای سطوح گرافیتی آنسامبل NVT فرض شده است. در شکل ۱ برخورد دانه‌ی گرافیتی چرخان با دیوار، تحت زاویه‌ی 45° درجه و با سرعت انتقالی 1 km/s و در زمان‌های مختلف نشان داده شده است. سرعت زاویه‌ای دانه‌ی گرافیتی حول محور تقارنش را از مرتبه‌ی فوق‌حرارتی و معادل $\omega = 10^6 \text{ rad/s}$ در نظر می‌گیریم [۹]. در این شرایط، همان‌طور که در شکل ۱ ب و ج مشاهده می‌شود، دانه‌ی گرافیتی روی سطح رسوب می‌کند.

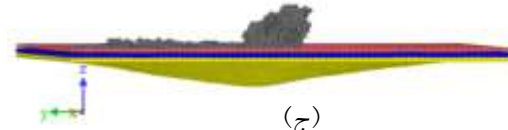
با حفظ شرایط، سرعت انتقالی دانه‌ی غبار را تا 5 km/s افزایش می‌دهیم نتیجه‌ی شبیه‌سازی برخورد در شکل ۲ نشان می‌دهد که دانه تخریب می‌شود بدون آن‌که دیوار آسیب ببیند و لایه‌های آن به محیط برمی‌گردد. باتوجه به ساختار لایه‌ای گرافیت و نیروی ضعیف واندوالس بین لایه‌ها در قیاس با نیروی کوهلر، که لایه‌ها را با هم نگه می‌دارد، در هر لایه چنین تخریب دانه دور از انتظار نیست.



(الف)

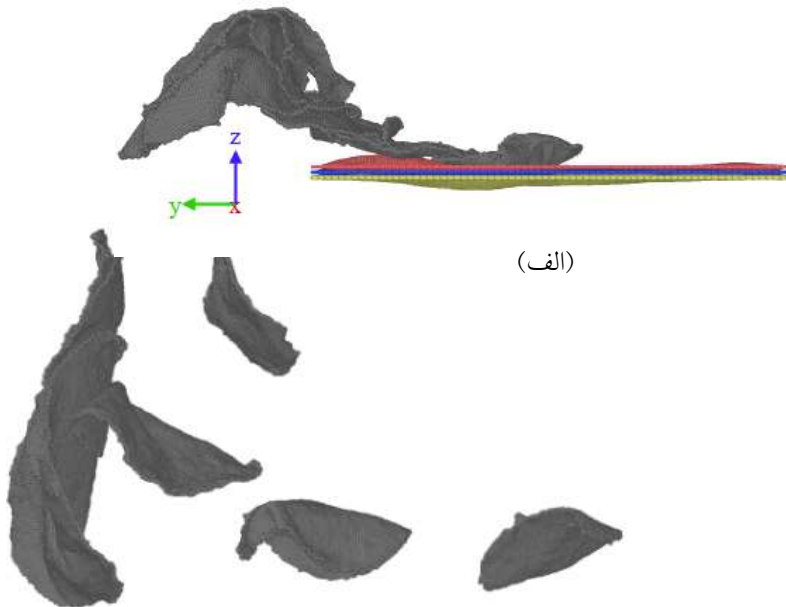


(ب)



(ج)

شکل ۱: برخورد دانه‌ی پولکی شکل گرافیتی به دیوار گرافیتی با سرعت 1 km/s تحت زاویه‌ی 45° و با سرعت زاویه‌ای $\omega = 10^\circ \text{ rad/s}$ حول محور تقارنش، الف) زمان اولیه $t=0 \text{ ps}$ ب) بعد از برخورد $t=12 \text{ ps}$ و ج) $t=16 \text{ ps}$.



(الف)



(ب)

شکل ۲: برخورد دانه‌ی پولکی شکل گرافیتی به دیوار گرافیتی با سرعت 5 km/s تحت زاویه‌ی 45° و با سرعت زاویه‌ای $\omega = 10^\circ \text{ rad/s}$ حول محور تقارنش، الف) $t=10 \text{ ps}$ ب) $t=16 \text{ ps}$.

نتیجه گیری:



در این مقاله برخورد دانه‌ی غبار گرافیتی چرخان با هندسه‌ی پولکی شکل، به دیوار گرافیتی شبیه‌سازی شده است. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد اولاً، دانه‌های گرافیتی در ابعاد نانو حتی با وجود چرخش اثر تخریبی قابل توجهی روی دیواره گرافیتی ندارند. ثانیاً، در سرعت‌های پایین دانه‌های گرافیتی به واسطه‌ی ساختار لایه‌ای که دارند، روی سطح دیوار رسوب آنها می‌کنند و ثالثاً، در سرعت‌های بالا خود دانه‌ها تخریب می‌شوند.

مراجع:

- [1] S. I. Krasheninnikov, A. Pigarov, R. Smirnov, M. Rosenberg, Y. Tanaka, and D. Benson, “Recent progress in understanding the behavior of dust in fusion devices”; *Plasma Phys. Control. Fusion*, **50**, 124054 (2008).
- [2] S. Ratynskaia, C. Castaldo, E. Giovannozzi, D. Rudakov, G. Morfill, M. Horanyi, J. H. Yu, and G. Maddaluno. “In situ dust detection in fusion devices”; *Plas. Phys. Contr. Fusion*, **50**, 124046 (2008).
- [3] J. Roth, E. Tsitrone, A. Loarte, T. Loarer, G. Counsell, R. Neu, V. Philipps, S. Brezinsek, M. Lehnen, P. Coad, C. Grisolia, K. Schmid, K. Krieger, A. Kallenbach, B. Lipschultz, R. Doerner, R. Causey, V. Alimov, W. Shu, O. Ogorodnikova, A. Kirschner, G. Federici, and A. Kukushkin, “Recent analysis of key plasma wall interactions issues for ITER”; *Journal of Nuclear Materials*, **390**, 1-9 (2009).
- [4] Y. Ferro, F. Marinelli, A. Allouche, and A. Jelea, Adsorption, diffusion, and recombination of hydrogen on pure and boron-doped graphite surfaces, *J. Chem. Phys.* **120**, (2004)11882-11888.
- [5] X. Sha, B. Jackson, and D. Lemoine, Quantum studies of Eley–Rideal reactions between H atoms on a graphite surface, *J. Chem. Phys.* **116**, 7158 (2002).
<https://lammps.sandia.gov/>
- [6] OVITO - The Open Visualization Tool, <http://ovito.org/>.
- [7] S.J. Stuart, A.B. Tutein, and J.A. Harrison, “A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions”; *J. Chem. Phys.* **112**, 6472–6486 (2000).
- [9] بختیاری رمضانی، مهدیه؛ رساله‌ی دکترا «مطالعه‌ی رفتار غبار در پلاسما توکامک»؛ ۱۳۹۳.