

О ВОЗДЕЙСТВИИ ПОТОКА ИОНОВ ГЕЛИЕВОЙ ПЛАЗМЫ ПОВЫШЕННОЙ ЭНЕРГИИ НА НАНОСТРУКТУРУ ВОЛЬФРАМА

В. В. Кулагин^{a,b}, М. М. Цвентух^{a**}*

^a *Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия*

^b *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
115409, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 21 ноября 2023 г.,
после переработки 17 января 2024 г.
Принята к публикации 18 января 2024 г.

Рассмотрены процессы образования плазмы из нановолокон вольфрама, содержащих пузыри гелия, под воздействием потока энергии и частиц из гелиевой плазмы в условиях повышенного до сотен вольт пристеночного потенциала, когда наблюдается спонтанное инициирование всплесков взрывной электронной эмиссии. Показано, что для развития моделей инициирования под внешним воздействием потока энергии и частиц требуется учет гетерофазной структуры нановолокон. Методом молекулярной динамики проведено атомистическое моделирование взаимодействия налетающего атома гелия повышенной энергии (100–500 эВ) с ансамблем атомов гелия в наноразмерном пузыре с твердотельной концентрацией газа (10^{29} м^{-3}), удерживаемом в приповерхностном слое вольфрама. Получено время релаксации энергии в гетерофазной системе нанопузыря в вольфраме, составляющее единицы пикосекунд. Показано, что при энергии падающих частиц на уровне сотен электронвольт возможен перегрев приповерхностных нанопузырей, который приводит к их взрыву за времена порядка 10 пс. Такая энергия сопоставима с полной энергией частиц нанопузыря, и при таком пристеночном потенциале наблюдаются спонтанные инициирования всплесков взрывной электронной эмиссии.

DOI: 10.31857/S0044451024050134

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время вольфрам рассматривается в качестве одного из основных материалов обращенных к плазме элементов будущих термоядерных установок, типа ИТЭР. Вольфрам характеризуется высокой температурой плавления, низким коэффициентом распыления, низким захватом изотопов водорода, но подвержен структурным изменениям при облучении поверхности ионами гелиевой плазмы. Облучение вольфрама гелием ведет к развитию морфологии поверхности с образованием наноструктур, известных как вольфрамовый нанопух [1].

Характерные условия образования вольфрамового пуха следующие: температура поверхности

$T = 900\text{--}2000 \text{ К}$, энергия ионов гелия $E_0 > 20 \text{ эВ}$, доза облучения $\Phi > 10^{20} \text{ см}^{-2}$ [2]. Характерный поперечный размер отдельных наноструктур обычно составляет порядка 10 нм, а их высота может достигать нескольких микрометров в зависимости от потока и дозы облучения. Важно отметить, что в данных наноструктурах также присутствует захваченный гелий как в растворенном состоянии, так и в виде сформировавшихся гелиевых пузырей [3]. Физические свойства вольфрамового нанопуха, как материала, обращенного к плазме, сильно отличаются от свойств в случае чистого вольфрама. Одним из негативных эффектов, связанных с образованием вольфрамового нанопуха, является повышенная вероятность зажигания униполярных дуг, что ведет к увеличению эрозии обращенной к плазме поверхности [4–6].

На данный момент механизмы роста и свойства вольфрамового пуха подробно исследовались для

* E-mail: v.kulagin@lebedev.ru

** E-mail: mmtsv@lebedev.ru, elley@list.ru

случая облучения поверхности вольфрама ионами гелия низкой энергии 20–100 эВ [7–11]. При этом для повышенной энергии (сотни электронвольт) рост волокон сменяется распылением, а также спонтанно инициируются «пробои» — всплески тока взрывной электронной эмиссии [12–14].

В данной работе исследуется процесс выделения энергии потока ионов внешней плазмы, падающего на наноструктуру, в условиях, соответствующих образованию металлической плазмы из нановолокон. В разд. 2 приводятся оценки свойств плазмы, образующейся в результате всплесков взрывной электронной эмиссии, следующие из теории вакуумного разряда и свойств наноструктуры. В разд. 3 обсуждается передача энергии при атомных столкновениях. В разд. 4 описано проведенное численное моделирование процессов релаксации энергии падающего атома гелия в гетерофазной системе с нанопузырем гелия в вольфраме методом молекулярной динамики. В разд. 5 содержится обсуждение полученных результатов.

2. ИНИЦИИРОВАНИЕ ПРОБОВ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ПЛАЗМЫ

Функционирование униполярных дуговых разрядов представляет собой импульсно-периодическое образование сгустков плазмы из материала поверхности за счет всплесков взрывной электронной эмиссии [15, 16]. Эквивалентный коэффициент распыления (отношение плотности вольфрама, покидающего стенку, к плотности плазмы) может достигать ~ 10 [17], что на порядки величины выше физического распыления вольфрама легкими ионами низких энергий [18, 19].

Для «чистой» поверхности был получен порог потока внешней энергии из плазмы q на уровне 200 МВт/см², который достаточен для компенсации интенсивного охлаждения поверхности эмиссией электронов и обеспечивает взрывную джоулев перегрев участков поверхности — взрывную эмиссию [20]. При этом, в случае малой плотности внешней плазмы и большой энергии ее частиц, данным большим потоком энергии q из материала поверхности может создаваться плотная плазма, обеспечивающая протекание эмиссионного тока высокой плотности j , достаточной для взрыва. Предельная величина составляет примерно

$$j_M \sim j_{pl} = en_{pl} \left(\frac{T_e}{2\pi m_e} \right)^{1/2}, \quad (1)$$

где n_{pl} и T_e — плотность плазмы и температура электронов в ней.

Присутствие развитой наноструктуры поверхности может существенно облегчить процесс формирования такой первичной плазмы, так как, очевидно, что из-за наноструктуры снижается количество связей между атомами вещества материала поверхности. В работе [5] была предложена модель «изолированного слоя» для оценки параметров такой плазмы. Концентрация атомов, согласно этой модели, может быть примерно оценена из равенства приходящего из плазмы потока энергии и потока энергии, уносимой испарением атомов вольфрама, а именно:

$$n_1 = n_{pl} \left(\frac{M_W}{M_{He}} \right)^{1/2} \frac{E_0^{3/2}}{E_{coh} T_W^{1/2}}, \quad (2)$$

где M_W и M_{He} — массы атомов вольфрама и гелия, E_0 — энергия падающих на поверхность ионов гелия, E_{coh} — энергия связи атомов вольфрама (в нормальных условиях $E_{coh} = 9$ эВ, но из-за наноструктуры может быть ниже [17, 21]), T_W — температура атомов слоя вольфрама, соответствующая равновесию потоков нагрева и охлаждения $T_W \sim 1$ эВ [5]. Далее происходит ионизация под воздействием внешней плазмы [5].

Для условий импульсного воздействия плазмы в виде ELM (Edge Localized Mode) [18], имеющей энергию частиц E_0 порядка 1 кэВ и плотность плазмы n_{pl} порядка 10^{14} см⁻³, плотность n_1 составит более 10^{18} см⁻³, что соответствует нижней границе плотности плазмы, достаточной для инициирования взрывоэмиссионных всплесков, согласно работам [22, 23]. Однако также наблюдается и спонтанное инициирование — без триггера в виде потока энергии.

2.1. Спонтанное инициирование

Уже в первой работе по экспериментальному исследованию взаимодействия плазмы с такой наноструктурированной вольфрамовой поверхностью в крупной термоядерной установке — стеллараторе LHD (Large Helical Device) [12] — было получено инициирование дуговых разрядов в стационарной плазме с плотностью на уровне 10^{12} см⁻³ и энергией падающих на поверхность ионов 100–200 эВ в области дивертора. Поток энергии q и соответствующая плотность n_1 (выражение (2)) оказываются меньше на несколько порядков, чем в случае импульсного воздействия плазмы во время ELM (которых не возникает в плазме, удерживаемой в магнитной конфигурации стелларатора), а именно порядка 10^{15} см⁻³.

Аналогичные параметры плазмы (плотность на уровне 10^{12} см⁻³) были и в последующих экспериментах в линейном симуляторе NAGDIS-II [13, 14],

где отдельно исследовалось спонтанное инициирование. При этом основное влияние на инициирование оказывало увеличение пристеночного потенциала примерно с 300 В до 400–500 В [13]. Очевидно, что соответствующее этому увеличению потока энергии и соответствующей плотности n_1 всего в 1.5–2 раза (см. (2)) не может заведомо объяснить инициирование взрывоэмиссионных всплесков.

Отметим, кроме того, что рассмотренная «энергетическая» модель [5] не учитывает, во-первых, большое количество газа в волокнах, а во-вторых, снижение средней энергии связи атомов вольфрама в наноструктуре, так как соответствующие количественные исследования были проведены позднее.

2.2. Содержание гелия

В результате прямых экспериментальных измерений было определено количество гелия, содержащегося в наноструктуре волокон [24]. Отношение частиц составило $\text{He}/\text{W} = 13 \pm 4\%$. Учитывая, что плотность вольфрама в нормальных условиях составляет $n_W \approx 6 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, средняя по нановолокнам концентрация гелия составит порядка $\langle n_{\text{He}} \rangle \sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$. Освобождение такого количества газа при масштабном разрушении волокон может существенно повлиять на параметры плазмы. Хотя потенциал ионизации гелия ($I_{\text{He}+1} = 25 \text{ эВ}$) существенно выше, чем вольфрама ($I_{\text{W}+1} = 7.98 \text{ эВ}$), что приводит к преимущественному формированию металлической плазмы, а не газовой, взрывы нанометровых пузырей с примерно твердотельной плотностью газа в них, n_{He} на уровне 10^{23} см^{-3} [24], будут приводить к заполнению объема структуры нановолокон газом высокой концентрации.

Для кубического расширения $nr^3 = \text{const}$ и начального размера пузыря 1 нм получим уменьшение концентрации газа с увеличением расстояния:

$$n_{\text{He}}(r) = 100/r^3,$$

что дает высокую концентрацию 10^{20} см^{-3} и 10^{17} см^{-3} на удалении 10 нм и 100 нм, соответствующем расстоянию между соседними нановолокнами.

2.3. Энергия связи

На основе модели, связывающей средний заряд ионов взрывоэмиссионной плазмы вакуумного дугового разряда и энергии связи атомов металла катода [25, 26], а также экспериментальных результатов по заряду ионов плазмы вакуумной дуги, горячей на слоях вольфрамовых нановолокон [27], была

оценена средняя энергия связи для такой наноструктуры [17]:

$$\langle E_{\text{coh}} \rangle = 10 \text{ эВ} \langle n \rangle / n_W, \quad (3)$$

где $\langle n \rangle$ — средняя концентрация атомов в волокнах, составляющая от нескольких сотых до десятых долей от концентрации вольфрама в нормальных условиях (n_W).

Наименьшее измеренное значение $\langle n \rangle / n_W$ составило около 5% [28], что дает для средней энергии связи $\langle E_{\text{coh}} \rangle \approx 0.5 \text{ эВ}$. Учет этой величины в уравнении (2) увеличит оцениваемое значение плотности n_1 в $E_{\text{coh}} / \langle E_{\text{coh}} \rangle = 18$ раз, до уровня 10^{16} см^{-3} .

Данные особенности связаны с «тонкой структурой» рассматриваемой гетерофазной системы нановолокон, свойства которой требуется корректно учесть в задаче о формировании плазмы.

3. ПЕРЕДАЧА ЭНЕРГИИ В СТОЛКНОВЕНИЯХ

3.1. Столкновения гелий–вольфрам

Исходя из отношения атомных масс вольфрама и гелия

$$M_W / M_{\text{He}} \approx 46,$$

можно видеть, что в каждом соударении атомам вольфрама от гелия передается только небольшая часть энергии, и полная передача произойдет за число соударений порядка M_W / M_{He} .

При энергии $E_0 = 50 \text{ эВ}$, превышающей пороговое значение для инициирования роста волокон [2], величина передаваемой атомам вольфрама энергии составляет

$$E_0 M_{\text{He}} / M_W \sim 1 \text{ эВ},$$

что достаточно для нагрева волокон и может быть существенным для их роста. При повышении энергии ионов гелия до 500 эВ переданная атомам вольфрама энергия может достигать

$$E_0 M_{\text{He}} / M_W \sim 10 \text{ эВ},$$

что сравнимо с энергией связи вольфрама в нормальных условиях ($E_{\text{coh}} = 9 \text{ эВ}$) и может быть достаточным для существенного распыления нановолокон. Как отмечалось в [13], распыление может иметь значение для спонтанного инициирования при повышении потенциала.

При этом общая длина траектории L составит

$$L \sim a M_W / M_{\text{He}} \approx 14 \text{ нм}$$

(где $a = 3.165 \text{ \AA}$ — период кристаллической решетки

вольфрама), что по порядку величины совпадает с поперечным размером нановолокон — десятки нанометров [1].

Для оценки глубины пробега нужно учесть рассеяние на большие углы при соударении частиц сильно различающихся масс. Однако более важно наличие в волокнах большого количества ранее внедренного гелия.

3.2. Столкновения гелий–гелий

При средней концентрации $\langle n_{\text{He}} \rangle \sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$ столкновения He–He будут достаточно частыми, но еще более важно, что в таких соударениях из-за равенства масс может произойти передача большой части или всей энергии. При этом в процессе роста нановолокон атомы гелия накапливаются в вольфраме и объединяются в нанопузыри с концентрацией газа порядка твердотельной $n \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$. Падающий атом гелия в таком пузыре может потерять всю энергию за одно столкновение, при этом столкновения происходят с частотой

$$nv\sigma \sim 10^{14} \text{ с}^{-1},$$

где $v \sim 10^7 \text{ см/с}$ — скорость падающего атома гелия, $\sigma \approx 10^{-16} \text{ см}^2$ — сечение столкновений [29]. Более подробные результаты можно получить на основе работы [30]. Оценим время релаксации (τ_{He}) атома в бесконечном объеме, заполненном атома-

ми гелия при температуре, равной 1000 К, согласно уравнениям [30]

$$\tau_{\text{He}} = \int_0^N \frac{dN'}{n\sigma(E(N')/2)v(E(N'))}, \quad (4a)$$

$$N(E_i, E_f) = \int_{E_f}^{E_i} \frac{dE'}{\langle \delta E' \rangle}, \quad (4b)$$

$$\langle \delta E \rangle = \frac{E}{2} \int_0^\pi (1 - \cos \theta) \rho(\varepsilon, \theta) d\theta, \quad (4c)$$

$$\rho(\varepsilon, \theta) = \frac{2\pi \sin \theta}{\sigma(\varepsilon)} \frac{d\sigma(\varepsilon, \theta)}{d\Omega}, \quad (4d)$$

где N — среднее число столкновений, необходимых для уменьшения энергии быстрого атома от начального значения E_i до конечного значения E_f , $v(E)$ — скорость быстрого атома, $\langle \delta E \rangle$ — средняя доля энергии, передаваемая при упругом соударении между атомами гелия, θ — угол рассеяния в системе центра масс, ε — энергия столкновения частиц в системе центра масс, $\rho(\varepsilon, \theta)$ — нормированное распределение плотности вероятности углов рассеяния, $\sigma(\varepsilon)$ и $d\sigma(\varepsilon, \theta)/d\Omega$ — полное и дифференциальное сечение рассеяния соответственно.

Используя выражения для полного и дифференциального сечений рассеяния из [30], полученные путем аппроксимации результатов квантовомеханических расчетов, и численно интегрируя уравнения (4), можно оценить время термализации быстрого атома с энергией $E = 100\text{--}500 \text{ эВ}$ в газе с температурой $T = 1000 \text{ К}$ и концентрацией $n = \alpha n_W$. Полученное время релаксации быстрого атома гелия составляет величину порядка 10–100 фс (см. рис. 1).

Однако характерная длина пробега до столкновения

$$\lambda \sim 1/n\sigma \sim 1 \text{ нм} \quad (5)$$

сравнима с характерными размерами нанопузырей [31]. Это означает, что требуется рассматривать гетерофазную систему. Подробные результаты можно получить на основе атомистического моделирования [32–34].

Отметим, что сам нагрев поверхности до 900–2000 К, необходимый для роста нановолокон, происходит рассматриваемым потоком ионов из плазмы. При этом скорость релаксации энергии в такой гетерофазной системе будет определять, происходит ли «равномерный» нагрев или энергия локализуется в пузырье, что может приводить к его «взрыву».

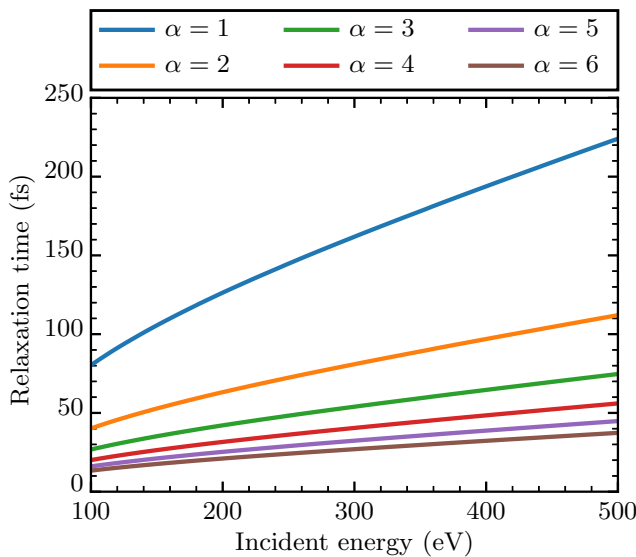


Рис. 1. Зависимости времени релаксации энергии быстрого атома гелия в бесконечном объеме, заполненном гелием при температуре равной 1000 К и различных значениях концентрации

Проведем численное атомистическое моделирование методом молекулярной динамики процесса взаимодействия атома гелия повышенной энергии (сотни электронвольт) с наноструктурой вольфрама, содержащей гелиевый нанопузырь с твердотельной плотностью газа.

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

4.1. Методика

Расчеты методом молекулярной динамики проводились в программном пакете LAMMPS [35, 36]. Взаимодействие между атомами вольфрама описывалось ЕАМ-потенциалом Финниса – Синклера [37, 38] с модификациями для учета близкого взаимодействия от Акленда и Тетфорда [39] и ультраблизкого взаимодействия от Джуслина и Вирта [40]. Взаимодействие вольфрам–гелий определялось парным потенциалом Джуслина и Вирта [40], взаимодействие гелий–гелий — парным потенциалом Бэка [41, 42] с модификацией для малых расстояний от Моришиты и других [43].

Данный набор потенциалов межатомного взаимодействия позволяет достаточно точно воспроизвести результаты *ab initio* расчетов [40] и часто применяется как для анализа динамики растворенного гелия в вольфраме при фиксированной температуре [32, 33, 44–46], так и для моделирования кумулятивного облучения поверхности вольфрама атомами гелия с начальной энергией в диапазоне 100–500 эВ [47–49]. Важно заметить, что неупругие потери энергии быстрых частиц при их торможении в объеме материала не учитываются явным образом при моделировании методом молекулярной динамики. По данным программного пакета TRIM [50] доля неупругих потерь при торможении атома гелия с начальной энергией равной 500 эВ составляет $\approx 60\%$ в вольфраме и $\approx 14\%$ в гелии. С учетом этого времени релаксации энергии гелиевых пузырей, оцениваемые в работе, представляют из себя верхнюю границу возможных значений.

Геометрия представляла из себя модельную поверхность вольфрама с размерами $40a \times 40a \times 50a$ и ориентацией (100) при температуре $T = 1000$ К (рис. 2), $a = 3.183$ Å. Вдоль осей x и y были заданы периодические граничные условия, тогда как вдоль оси z было разрешено свободное движение атомов. Четыре нижних атомных слоя были «заморожены» (скорость равна нулю) для предотвращения миграции геометрии. Над атомами вольфрама дополнительно задавалась пустая область толщиной $10a$ для имитации свободной поверхности.

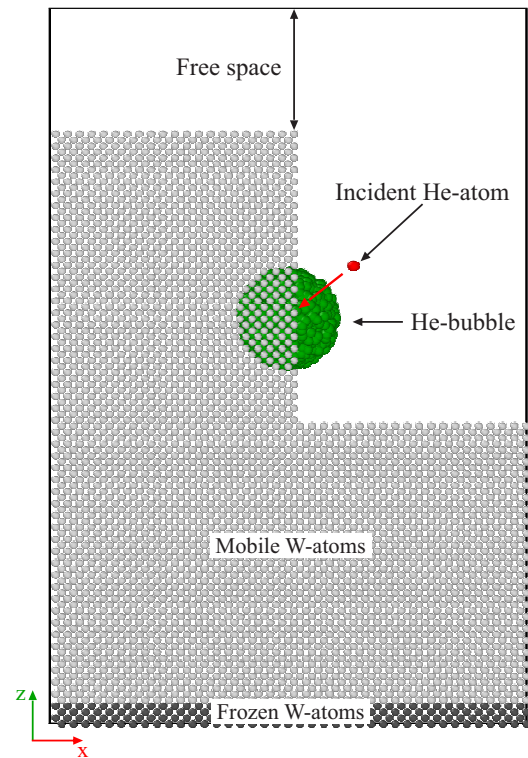


Рис. 2. Начальная геометрия, использованная при моделировании взаимодействия быстрого атома гелия с пузырем гелия. Серые сферы — подвижные атомы вольфрама, черные сферы — «замороженные» атомы вольфрама, зеленые сферы — атомы пузыря гелия, красная сфера — налетающий атом гелия. Красная стрелка показывает направление начальной скорости налетающего атома. Часть подвижных атомов вольфрама скрыта для наглядности

Создание пузыря гелия осуществлялось в два этапа. Сначала из идеальной решетки вольфрама удалялись атомы, лежащие в сфере радиусом r с центром в плоскости, параллельной поверхности. Глубина центра симметрии сферы подбиралась таким образом, чтобы задаваемая конфигурация оставалась устойчивой во время термализации при $T = 1000$ К. Затем в вырезанной сфере случайным образом размещалось заданное количество атомов гелия. Были рассмотрены пузыри гелия с радиусами от $1a$ до $4a$ (от 3.183 Å до 12.732 Å) со значением заселенности пузырей ($\varphi = N_{\text{He}}/N_V$ — отношение числа атомов гелия N_{He} к числу вакансий N_V в пузыре гелия) равным 2, выбранным на основе результатов многомасштабного моделирования кумулятивного облучения поверхности вольфрама гелием [32, 33]. Соответствующая концентрация $n = 2\varphi/a^3 \approx 10^{23}$ см $^{-3}$. Затем в течение 500 пс проводилась термализация системы при помощи термостата Ноэ – Гувера [51, 52].

Для моделирования взаимодействия быстрого атома с пузырем пробный атом гелия помещался на поверхности сферы радиусом $(r + a)$ с начальной энергией E_0 и вектором скорости по направлению к центру сферы (рис. 2). При таком подходе исключаются модельные случаи отражения бомбардирующих атомов от поверхности и термализации быстрого атома в вольфраме, не попавшего в пузырь, которые наблюдались бы в случае моделирования облучения участка поверхности вольфрама, содержащего пузырь гелия. Начальная энергия была фиксирована и лежала в диапазоне от 100 до 500 эВ. Для получения более детальных результатов в ходе моделирования был использован переменный временной шаг из диапазона 0.01–1 фс. Величина временного шага обновлялась каждые 10 итераций и подбиралась так, чтобы ни один атом не сдвигался более чем на 0.05 Å за одну итерацию. Расчет завершался, когда величина суммарной кинетической энергии пузыря уменьшалась до 1.025 от начального уровня. В процессе моделирования взаимодействия термостат выключался, а полная энергия системы фиксировалась.

Визуализация атомных конфигураций осуществлялась при помощи бесплатной версии программного пакета OVITO [53]. Все псевдослучайные числа, использованные в ходе моделирования, генерировались на основе алгоритма «вихрь Мерсенна» [54], реализованного в Python-модуле «random». Помимо этого, проводилась оценка давления гелиевых пузырей (P_{bubble}) на основе вириального соотношения

$$P_{bubble} = \frac{1}{3V} \sum_i \left(m_i v_i^2 + \frac{1}{2} \sum_j \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij} \right), \quad (6)$$

где i — порядковый номер атома гелия в пузыре, j — порядковый номер соседнего атома от i -го атома, m_i — масса i -го атома, v_i — скорость i -го атома, $\mathbf{F}_{ij}$ — вектор силы, действующей на i -й атом со стороны j -го атома, $\mathbf{r}_{ij}$ — радиус-вектор от j -го атома до i -го, V — объем гелиевого пузыря, который определялся на основе метода диаграммы Вороного, реализованного в LAMMPS.

4.2. Время релаксации энергии

Было проведено порядка 10^3 расчетов для каждой конфигурации (r, E_0) , когда случайным образом задавалось положение налетающего атома гелия и атомов гелия в пузыре при предварительной термализации. Пример временных эволюций кинетической энергии быстрого атома и суммарной

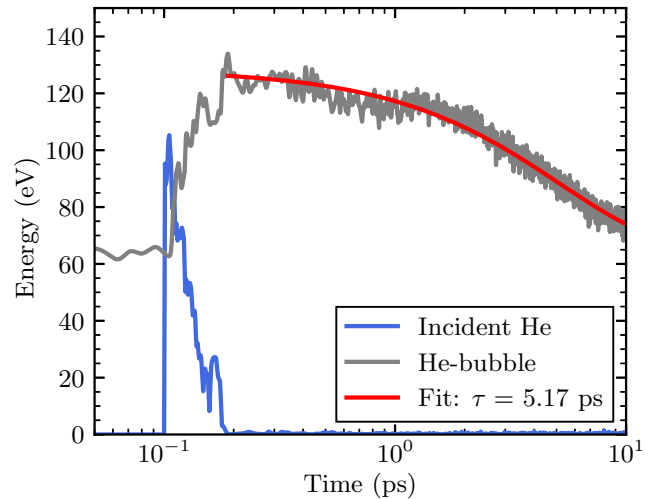


Рис. 3. Временные зависимости энергий гелиевого пузыря ($r = 3a$, $N_V = 245$, $N_{He} = 490$) и налетающего атома гелия ($E_0 = 100$ эВ). Быстрый атом гелия вводится в систему на 0.1 пс

кинетической энергии гелиевого пузыря ($r = 3a$, $N_V = 245$, $N_{He} = 490$) приведен на рис. 3.

Отметим, что термализация быстрого атома в данном гелиевом пузыре, окруженном атомами вольфрама, происходит за время порядка 0.1 пс, что в 2.5 раза больше соответствующего значения, полученного на основе выражений (4). Важно заметить, что аппроксимационные аналитические выражения для полного и дифференциального сечений рассеяния, приведенные в [30], имеют наибольшую погрешность для случая столкновений гелий–гелий. Тем не менее полученные времена близки по величине, что подтверждает эффективность передачи энергии от быстрого атома гелия к атомам пузыря гелия.

Для оценки характерного времени релаксации энергии гелиевых пузырей каждая временная зависимость полной энергии пузыря аппроксимировалась выражением

$$E(t) = A + B \exp\{(-t/\tau)\} \quad (7)$$

(красная линия на рис. 3). Затем для каждой серии моделирования определялась плотность распределения характерного времени τ методом аппроксимации Парзена–Розенблатта [55, 56]. На рис. 4 приведены плотности распределения характерного времени релаксации суммарной энергии гелиевого пузыря в зависимости от его радиуса (a) и начальной энергии влетающего атома (b). Видно, что характерные времена релаксации после влета быстрого атома τ составляют единицы пикосекунд, при этом полная релаксация энергии достигается за вре-

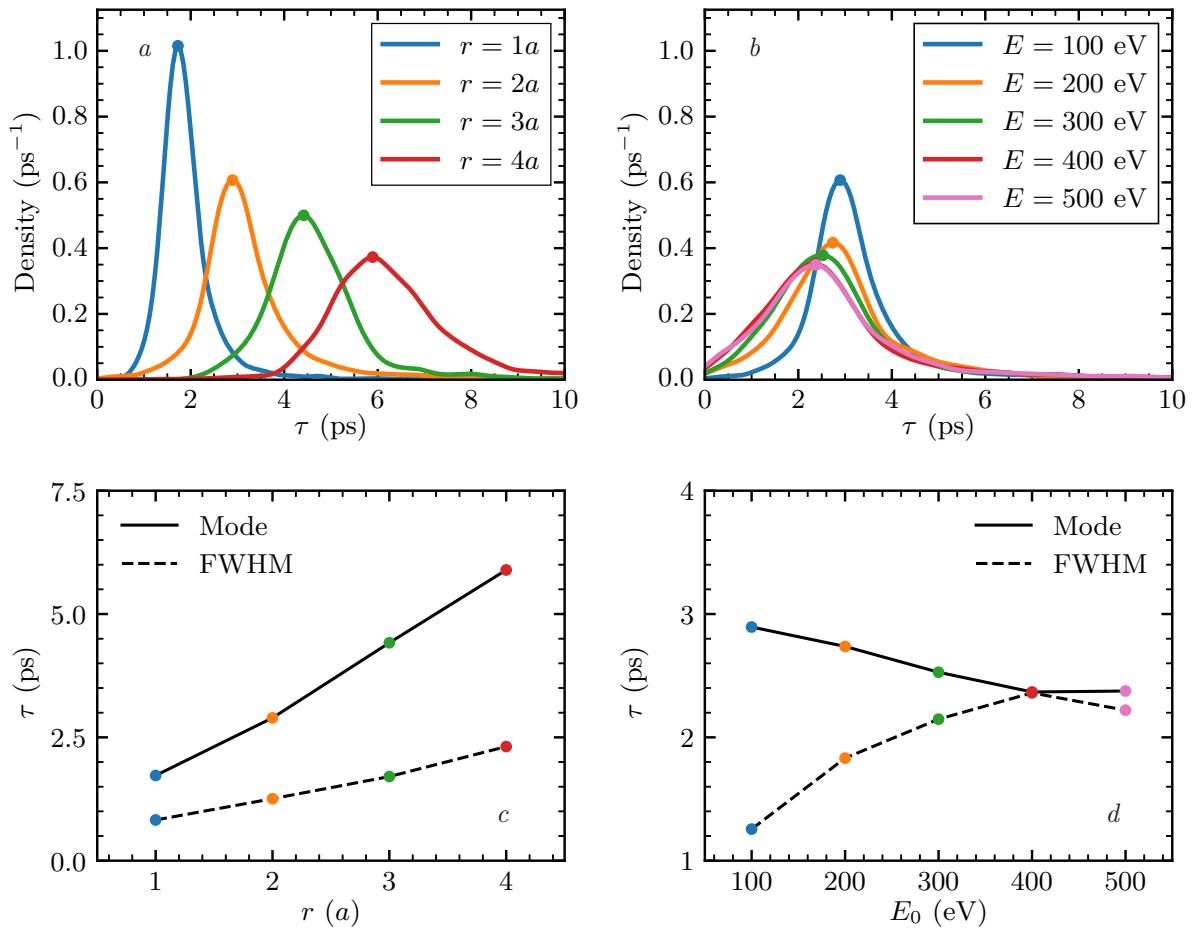


Рис. 4. Плотность распределения характерного времени релаксации энергии гелиевого пузыря после влета в него быстрого атома гелия в зависимости от радиуса пузыря (a) при $E_0 = 100$ эВ и в зависимости от начальной энергии налетающего атома (b) при $r = 2a$. c , d — соответствующие зависимости моды и ПШПВ-распределений

мая порядка 3τ , что согласуется с экспоненциальной зависимостью.

Из приведенных на рис. 4 зависимостей видно, что с увеличением размера пузыря примерно линейно растет среднее время релаксации $\langle\tau\rangle$:

$$\langle\tau\rangle [\text{пс}] = 0.23 + 1.40(r/a), \quad (8)$$

а также полная ширина на полувысоте $\delta\tau$:

$$\delta\tau [\text{пс}] = 0.29 + 0.49(r/a). \quad (9)$$

Также можно видеть, что с увеличением начальной энергии E_0 среднее время релаксации линейно снижается, а ширина распределения растет.

Таким образом, энергия падающего атома гелия действительно может эффективно передаваться ансамблю атомов пузыря. За пикосекундные времена для нанометровых размеров пузырей происходит релаксация и передача энергии от газа к атомам вольфрама.

5. ОБСУЖДЕНИЕ

Оценим время попадания нового атома гелия в пузырь τ_{impl} . Характерный поток ионов из пристеночной плазмы Γ_{pl} в условиях экспериментов [12–14] составляет $\Gamma_{pl} \sim 10^{19} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$. Поперечный размер нанопузыря гелия — «сечение столкновений» — $\sigma_{bubble} = \pi r^2 \sim 10^{-14} \text{ см}^2$. Тогда для характерного времени получим величину

$$\tau_{impl} \sim (\Gamma_{pl} \sigma_{bubble})^{-1} = 10 \text{ мкс}. \quad (10)$$

Очевидно, что τ_{impl} существенно превосходит полученные времена релаксации энергии, составляющие единицы пикосекунд. Таким образом, неравновесное состояние с повышенной энергией в газе нанопузыря будет наблюдаться только в течение единиц пикосекунд после падения быстрой частицы.

В недавней работе [57] исследовались процессы «взрывного» разрушения приповерхностных нанопузырей гелия при высоком давлении газа в них. На основе результатов моделирования методом молекулярной динамики были получены уравнения состо-

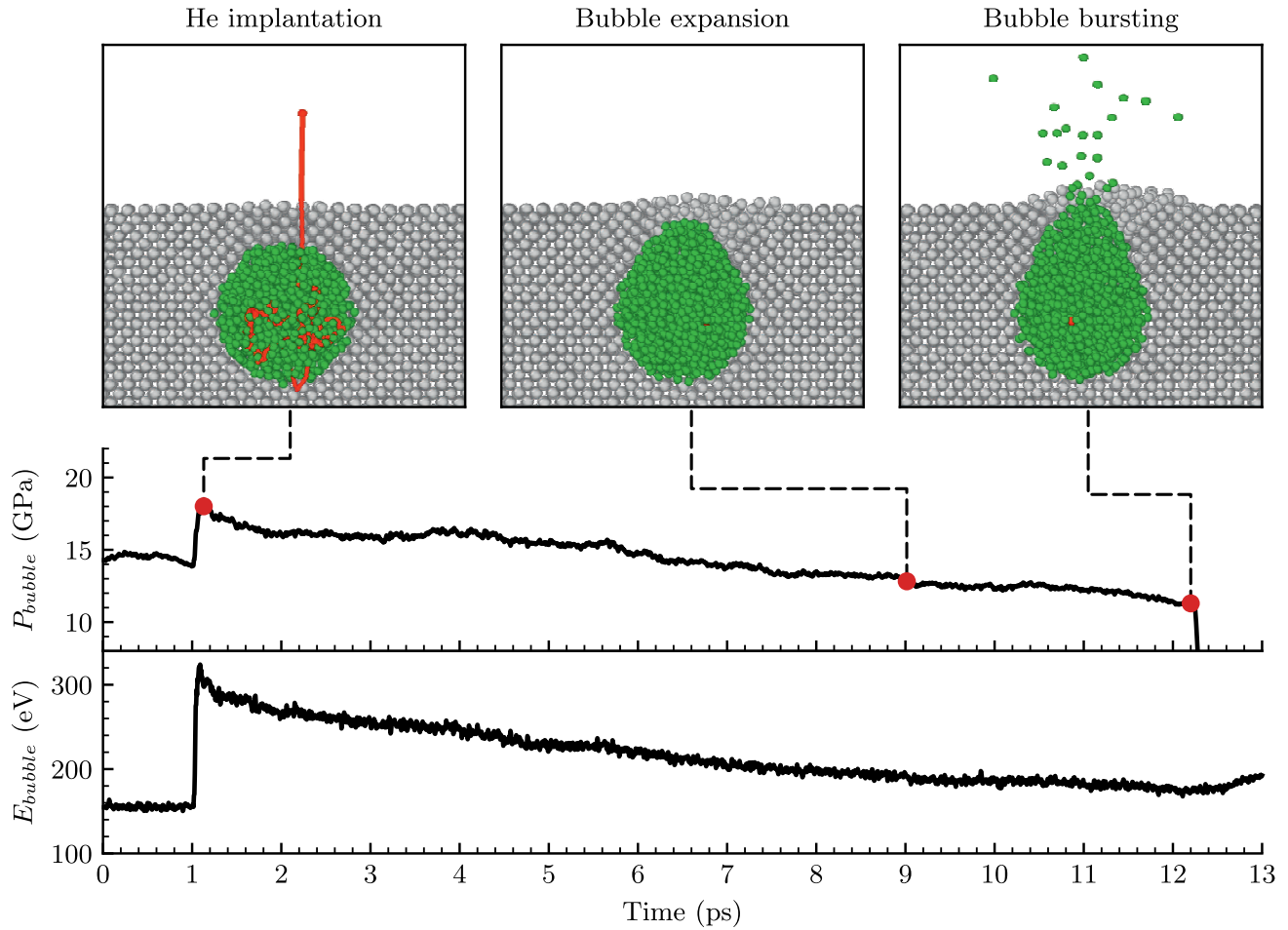


Рис. 5. Временные зависимости давления (P_{bubble}) и суммарной кинетической энергии (E_{bubble}) гелиевого пузыря ($r = 4a$, $N_{He} = 1100$, $N_V = 537$) во время его разрушения, вызванного внедрением атома гелия повышенной энергии ($E_0 = 250$ эВ)

яния для гелиевых пузырей, удерживаемых в вольфраме, а также определены критические параметры (глубина залегания пузырей относительно поверхности h и их заселенность φ), при которых происходит их взрыв. При этом рассматривалось равновесное распределение температуры — «медленные» взрывы. В этом случае разрушение пузырей при фиксированной температуре происходит за счет достижения критического числа атомов (концентрации) гелия в пузыре. В нашем случае можно рассмотреть «быстрые» взрывы пузырей — когда сообщенная пузырю дополнительная энергия от падающей частицы не релаксирует, что приводит к кратковременному повышению кинетического давления гелиевого пузыря (первое слагаемое в правой части уравнения (6)) и, как следствие, его взрыву. А именно, рассмотрим «быстрые» взрывы — за времена менее $3\tau \sim 10$ пс (уравнение (8)). Отметим, что непосредственно сама скорость разрушения будет определяться температурой вольфрама и геометрией и может быть сравнима для обоих случаев.

В наших расчетах (см. геометрию на рис. 2) мы задавали глубокое залегание пузыря, чтобы получить стационарное решение. Очевидно, что взрываться будут пузыри, залегающие неглубоко от поверхности. Рассмотрим для примера именно такой случай, изображенный на рис. 5, где в гелиевый пузырь ($r = 4a$, $N_{He} = 1100$, $N_V = 537$, $\varphi \approx 2$), изначально находящийся на глубине $6a$ при температуре 1000 К, влетает быстрый атом гелия с начальной энергией 250 эВ.

Видно, что, действительно, за пикосекундные времена после падения быстрого атома в приповерхностный пузырь происходит его взрывное разрушение и высвобождение большого количества захваченного гелия. Напомним, что концентрация гелия в пузырях на уровне 10^{23} см^{-3} приблизительно на 3.5 порядка превышает концентрацию газа атмосферного давления ($2.7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$) и на 10 порядков — концентрацию газа, соответствующую рабочему давлению в экспериментах по росту нановолокон и спонтанному инициированию [12–14].

При расширении газа в пустоту скорость границы достигает [58]

$$u_{max} = \sqrt{\frac{4\gamma}{\gamma-1} \frac{E_{bubble}}{M_{He}N_{He}}}, \quad (11)$$

что для параметров на рис. 5 дает $6.2 \cdot 10^5$ см/с (показатель адиабаты $\gamma = 5/3$). Расстояние до соседних нановолокон (десятки нанометров) будет пройдено за порядка 10 пс. Передача механического импульса может быть существенной для разрушения поверхностных пузырей в соседних нановолокнах (см. [17]).

Также следует отметить, что полная энергия атомов гелия в наноразмерном пузыре E_{bubble} , находящемся в равновесии с вольфрамом, имеющим температуру в диапазоне 900–2000 К, составляет порядка 100 эВ (см. рис. 3 и 5). Таким образом, энергия падающих частиц гелия E_0 на уровне десятков электронвольт, соответствующая росту нановолокон (E_{growth}), недостаточна для существенного перегрева пузыря:

$$E_{growth} < E_{bubble} < E_{si}. \quad (12)$$

Выделяемая энергия E_0 рассеивается и обеспечивает нагрев всей наноструктуры. Напротив, повышения энергии E_0 до сотен электронвольт ($E_0 = E_{si}$) достаточно для заметного увеличения энергии ансамбля частиц в пузыре на пикосекундную длительность — достаточную для «быстрого» взрыва пузырей у поверхности (рис. 5). Данная энергия E_{si} соответствует повышению пристеночного потенциала до сотен электронвольт, $E_{si} = eU_{si}$ — когда спонтанно инициируются пробои.

Подчеркнем, что для высвобождения большого количества вольфрама и формирования металлической плазмы необходим большой энерговклад, который может быть обеспечен не рассматривавшимся в данной работе джоулевым энерговыделением при протекании тока.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрены процессы образования плазмы из нановолокон вольфрама, содержащих пузыри гелия, под воздействием потока энергии и частиц из гелиевой плазмы. Условия соответствуют экспериментам с повышенной энергией падающих частиц — повышенного до сотен вольт пристеночного потенциала, когда наблюдается спонтанное инициирование всплесков взрывной электронной эмиссии. Показано, что для развития моделей инициирования под внешним воздействием потока энергии и частиц требуется учет гетерофазной структуры нановолокон.

Методами молекулярной динамики проведено атомистическое моделирование взаимодействия налетающего атома гелия повышенной энергии (сотни электронвольт) с ансамблем атомов гелия в наноразмерном пузыре с твердотельной концентрацией газа, удерживаемом в приповерхностном слое вольфрама. Получено время релаксации энергии в гетерофазной системе нанопузыря в вольфраме, составляющее единицы пикосекунд.

Также было продемонстрировано, что при энергии падающих частиц на уровне сотен электронвольт возможен перегрев приповерхностных нанопузырей, который приводит к их взрыву за времена порядка 10 пс. Такая энергия сопоставима с полной энергией частиц нанопузыря, и при таком пристеночном потенциале наблюдаются спонтанные инициирования всплесков взрывной электронной эмиссии.

Благодарности. Молекулярнодинамические расчеты проводились при использовании ресурсов высокопроизводительного вычислительного центра НИЯУ МИФИ.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-12-00274).

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Kajita, N. Yoshida, and N. Ohno, Nucl. Mater. Energy **25**, 100828 (2020).
2. J. Wright, Tungsten **4**, 184 (2022).
3. K. D. Hammond, Mater. Res. Express **4**, 104002 (2017).
4. S. Kajita, S. Takamura, and N. Ohno, Nucl. Fusion **49**, 032002 (2009).
5. S. A. Barengolts, G. A. Mesyats, and M. M. Tsventoukh, IEEE Trans. Plasma Sci. **39**, 1900 (2011).
6. D. Hwangbo, S. Kawaguchi, S. Kajita, and N. Ohno, Nucl. Mater. Energy **12**, 386 (2017).
7. S. Kajita, W. Sakaguchi, N. Ohno et al., Nucl. Fusion **49**, 095005 (2009).
8. Y. Martynenko and M. Nagel', Plasma Phys. Rep. **38**, 996 (2012).
9. M. Baldwin and R. Doerner, Nucl. Fusion **48**, 035001 (2008).
10. S. Krashenninnikov, Phys. Scripta T **145**, 014040 (2011).
11. S. Kajita, N. Yoshida, R. Yoshihara et al., J. Nucl. Mater. **418**, 152 (2011).

12. M. Tokitani, S. Kajita, S. Masuzaki et al., Nucl. Fusion **51**, 102001 (2011).
13. S. Kajita, Y. Noiri, and N. Ohno, Phys. Scripta **90**, 095604 (2015).
14. R. Zhang, S. Kajita, D. Hwangbo et al., Nucl. Mater. Energy **31**, 101178 (2022).
15. G. A. Mesyats, J. Nucl. Mater. **618**, 128 (1984).
16. S. A. Barengolts, G. A. Mesyats, and M. M. Tsventoukh, Nucl. Fusion **50**, 125004 (2010).
17. M. M. Tsventoukh, Phys. Plasmas **30**, 092511 (2023).
18. A. Loarte, B. Lipschultz, A. S. Kukushkin et al., Nucl. Fusion **47**, S203 (2007).
19. V. S. Mikhailov, P. Yu. Babenko, A. P. Shergin et al., J. Exp. Theor. Phys. **137**, 413 (2023).
20. С. А. Баренгольц, Г. А. Месяц, М. М. Цвентух, ЖЭТФ **134**, 1213 (2008) [S. A. Barengolts, G. A. Mesyats, and M. M. Tsventoukh, JETP **107**, 1039 (2008)].
21. K. H. Lin, S. L. Wang, C. Chen, and S. P. Ju, RSC Advances **4** (46), 24286 (2014).
22. D. L. Shmelev and S. A. Barengolts, IEEE Trans. Plasma Sci. **41**, 1959 (2013), <https://doi.org/10.1109/TPS.2013.2245347>.
23. M. M. Tsventoukh, Phys. Plasmas **25**, 053504 (2018), <https://doi.org/10.1063/1.4999377>.
24. Yu. Gasparyan, V. Efimov, and K. Bystrov, Nucl. Fusion **56**, 054002 (2016).
25. M. M. Tsventoukh, Phys. Plasmas **28**, 024501 (2021), <https://doi.org/10.1063/5.0034814>.
26. M. M. Tsventoukh, J. Phys. D: Appl. Phys. **55**, 355204 (2022), <https://doi.org/10.1088/1361-6463/ac77c8>.
27. S. A. Barengolts, D. Hwangbo, S. Kajita et al., Nucl. Fusion **60**, 044001 (2020), <https://doi.org/10.1088/1741-4326/ab73c3>.
28. D. Nishijima, M. Baldwin, R. Doerner, and J. Yu, J. Nucl. Mater. **415**(1), S96 (2011), <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2010.12.017>.
29. D. Ruzic and S. Cohen, J. Chem. Phys. **83**, 5527 (1985).
30. N. R. Lewkow, V. Kharchenko, and P. Zhang, Astrophys. J. **756**, 57 (2012).
31. S. Kajita, N. Yoshida, R. Yoshihara et al., J. Nucl. Mater. **418**, 152 (2011).
32. K. Hammond, S. Blondel, L. Hu et al., Acta Mater. **144**, 561 (2018).
33. K. Hammond, D. Maroudas, and B. Wirth, Sci. Rep. **10**, 2192 (2020).
34. E. A. Lobashev, A. S. Antropov, and V. V. Stegailov, JETP **136**, 174 (2023).
35. A. Thompson, H. Aktulga, R. Berger et al., Comput. Phys. Commun. **271**, 108171 (2022).
36. S. J. Plimpton, Comput. Phys. **117**, 1 (1995).
37. M. Finnis and J. Sinclair, Philos. Mag. A **50**, 45 (1984).
38. M. Finnis and J. Sinclair, Philos. Mag. A **53**, 161 (1986).
39. G. Ackland and R. Thetford, Philos. Mag. A **56**, 15 (1987).
40. N. Juslin and B. Wirth, J. Nucl. Mater. **432**, 61 (2013).
41. D. Beck, Mol. Phys. **14**, 311 (1968).
42. D. Beck, Mol. Phys. **14**, 332 (1968).
43. K. Morishita, R. Sugano, B. Wirth, and T. Diaz de la Rubia, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. Sect. B: Beam Interact. Mater. Atoms **202**, 76 (2003).
44. L. Hu, K. D. Hammond, B. D. Wirth, and D. Maroudas, Surf. Sci. **626**, L21 (2014).
45. S. Blondel, D. E. Bernholdt, K. D. Hammond, and B. D. Wirth, Nucl. Fusion **59**, 029501 (2019).
46. A. Weerasinghe, L. Hun, K. D. Hammond et al., J. Appl. Phys. **128**, 165109 (2020).
47. L. Pentecoste, P. Brault, A.-L. Thomann et al., J. Nucl. Mater. **470**, 44 (2016).
48. L. Pentecoste, A.-L. Thomann, P. Brault et al., Acta Mater. **141**, 47 (2017).
49. F. Ferroni, K. D. Hammond, and B. D. Wirth, J. Nucl. Mater. **458**, 419 (2015).
50. J. F. Ziegler, M. D. Ziegler, and J. P. Biersack, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. Sect. B: Beam Interact. Mater. Atoms **268**, 1818 (2010).
51. S. Nosé, J. Chem. Phys. **81**, 511 (1984).
52. W. Hoover, Phys. Rev. A **31**, 1695 (1985).
53. A. Stukowski, Model. Simul. Mater. Sci. Eng. **18**, 015012 (2010).
54. M. Matsumoto and T. Nishimura, ACM Trans. Model. Comput. Simul. **8**, 3 (1998).
55. M. Rosenblatt, Ann. Math. Stat. **27**, 832 (1956).
56. E. Parzen, Ann. Math. Stat. **33**, 1065 (1962).
57. W. Setyawan, D. Dasgupta, S. Blondel et al., Sci. Rep. **13**, 9601 (2023), <https://doi.org/10.1038/s41598-023-35803-3>.
58. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*, Физматгиз, Москва (1963), с. 91.