моделирование взаимодействия гелия повышенной энергии с поверхностью вольфрама методом молекулярной динамики: первые результаты [[1]](#footnote-1)\*)

1,2Кулагин В.В., 1Цвентух М.М.

1Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (ФИАН),
 г. Москва, Россия, mmtsv@lebedev.ru,
2Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, г. Москва, Россия,
 vvkulagin@mephi.ru.

В настоящее время вольфрам рассматривается в качестве одного из основных материалов обращенных к плазме элементов (ОПЭ) будущих термоядерных установок типа ИТЭР. В процессе эксплуатации реактора, работающего на DT-смеси, вольфрам будет подвержен мощным тепловым нагрузкам, а также бомбардировке нейтронами и ионами плазмы, одним из компонентов которой будет гелий. Облучение вольфрама гелием на начальном этапе инициирует образование кластеров/пузырей захваченного газа, а после приводит к формированию наноструктурированной морфологии поверхности по типу пуха [1].

Рост вольфрамового пуха ведет к изменению теплофизических свойств ОПЭ (например, снижению теплопроводности [2]), а также повышает вероятность зажигания униполярных дуг [3] и эрозии поверхности [4], что является крайне нежелательным эффектом из-за риска попадания тяжелой примеси в горячую плазму. Отдельный интерес представляет образование вольфрамового пуха при повышенной разности потенциалов между плазмой и ОПЭ – переходный режим рост-распыление нановолокон, когда возможно спонтанное инициирование взрывоэмиссионных импульсов на наноструктурированной поверхности. На данный момент эволюция нановолокон вольфрама достаточно подробно изучена в случае облучения поверхности вольфрама гелием низкой энергии (20 – 100 эВ) [5], однако детальное описание процессов формирования нанопуха в переходном режиме рост-распыление требует дополнительных исследований как первых этапов, при которых происходит кластеризация гелия, так и поздних фаз развития морфологии поверхности.

В рамках данной работы были получены первые результаты моделирования начальной стадии облучения поверхности вольфрама (доза $F∼10^{19}-10^{20}$ м-2) атомами гелия повышенной энергии. Моделирование проводилось для поверхности вольфрама (100) при условиях, характерных для переходного режима рост-распыление нановолокон: температура поверхности $T=1000$ К, начальная энергия приходящих атомов гелия $E=100-500$ эВ. На основе результатов моделирования был проведен анализ динамики захвата гелия, образования и развития гелиевых кластеров/пузырей в объеме вольфрама. В ходе анализа были определены профили энерговыделения внедренных атомов, а также распределения кластеров/пузырей гелия по глубине и размеру в зависимости от дозы и начальной энергии атомов. Результаты были получены методом молекулярной динамики в программном пакете LAMMPS [6].

Работа была выполнена при финансовой поддержке РНФ в рамках проекта 22-12-00274. Моделирование проводилось при использовании ресурсов высокопроизводительного вычислительного центра НИЯУ МИФИ.

Литература

1. M.J. Baldwin, R.P. Doerner, Nucl. Fusion, 2008, 48, 035001.
2. S. Kajita, T. Yagi, K. Kobayashi, M. Tokitani et al., Results Phys., 2016, 6, 877-878.
3. S. Kajita, Noiri Y., Ohno N., Phys. Scr., 2015, 90, 095604.
4. S.A. Barengolts, D. Hwangbo, S. Kajita et al., Nucl. Fusion, 2020, 64, 044001.
5. J.A.R. Wright, Tungsten, 2022, 5, 184-193.
6. S. Plimpton, J. Comput. Phys., 1995, 117, 1-19.
1. \*) [DOI – тезисы на английском](http://www.fpl.gpi.ru/Zvenigorod/L/E/en/JF-Kulagin_e.docx) [↑](#footnote-ref-1)