مجله علوم و فنون هسته‌ای، جلد ۹۷، شماره ۳، پاییز ۱۴۰۰

Journal of Nuclear Science and Technology
Vol. 97, No. 4, 2021

شبیه‌سازی برخورد نانوذره غبار با دیواره گرافیتی با استفاده از کد لمپس

مهدیه بختیاری رمضانی، مهناز عبدالهی درگاه*، نیره عبداللهی قهی
پژوهشکده‌ی پلاسما و گداخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی: ۵۱۱۱۳-۱۴۳۹۹، تهران- ایران

*Email: mah.abdollahi@gmail.com

مقاله‌ی پژوهشی
تاریخ دریافت مقاله: ۹۹/۲/۱ تاریخ پذیرش مقاله: ۹۹/۶/۱۵

چکیده

در این پژوهش برخورد نانوذره غبار با دیوار گرافیتی با استفاده از کد لمپس، که اساس آن روش دینامیک مولکولی است، شبیه‌سازی شده است. ذرات غبار بر اساس سازوکار تولیدشان در توکامک‌ها، شکل‌ها و اندازه‌های مختلفی دارند. در این کار دو نوع دانه غبار درنظر گرفته شده است: ابتدا نانوذره تنگستن کروی‌شکل و سپس نانوذره‌ای از جنس گرافیت و با هندسه پولکی‌شکل که با دیواره‌ای گرافیتی برخورد می‌کنند. در دستگاه گداخت، یون‌ها، اتم‌ها و مولکول‌های هیدروژن با دانه غبار برخورد می‌کنند و گشتاور تصادفی ایجاد می‌کنند که منجر به تغییرات کوچکی در اندازه‌حرکت زاویه‌ای دانه می‌شود. بنابراین در شبیه‌سازی علاوه‌بر سرعت انتقالی، چرخش غبار حول محور تقارنش نیز درنظر گرفته شده و برای چنین نانوذراتی، آستانه سرعت که منجر به تخریب سطح می‌شود برآورد شده است. نتایج نشان می‌دهند که برخلاف نانوذره تنگستن، دانه‌های گرافیتی نقش مهمی در تخریب سطوح گرافیتی ندارند بلکه با توجه سرعت برخورد، ممکن است روی سطح بچسبند و یا تخریب شده و به محیط بازگردند.

کلیدواژه‌ها: نانوذره غبار، کد لمپس، گرافیت، تنگستن، چرخش

Simulation of collision of dust nanoparticles with graphite wall using LAMMPS code

M. Bakhtiyari Ramezani, M. Abdollahi Dargah*, N. Abdollahi Ghahi
Plasma and Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.Box: 14399-51113, Tehran - Iran

Research Article
Received 20.4.2020, Accepted 5.9.2020

Abstract

In the present work, we have simulated the collision of dust nanoparticles with graphite wall using LAMMPS code, based on the molecular dynamics method. Dust particles have different shapes and sizes depending on their production mechanism in Tokamaks. In this work, two types of dust grains have been considered: a spherical tungsten nanoparticle and a graphite nanoparticle with an oblate geometry that collides with a graphite wall. In the fusion device, ions, hydrogen atoms, and molecules collide with the dust grain and create stochastic torques, leading to minor variations in the angular momentum of the grain. Therefore, in the simulations, the dust rotation around its symmetry axis has also been considered in addition to the transfer velocity. For such nanoparticles, the threshold speed of nanoparticles that leads to surface damage has been estimated. The results show that, unlike tungsten nanoparticles, graphite grains do not play a significant role in the degradation of the graphite surfaces. Still, due to the speed of the collision, they may either stick to the surface or be damaged and return to the environment.

Keywords: Dust nanoparticle, LAMMPS code, Graphite, Tungsten, Rotation

۱. مقدمه

در رآکتور توکامک، پلاسما با ترکیب میدان مغناطیسی قطبی و چنبره‌ای در محفظه خلأ محصور می‌شود. با توجه به محصورسازی محدود، ذرات می‌توانند فرار کرده و به دیوار اطراف برخورد کنند. برهم‌کنش پلاسما- دیواره می‌تواند به دیواره اول که شامل دیوار اصلی و منحرف‌کننده[1] است، آسیب برساند. اتم‌هایی که از جداره محفظه پلاسما کنده می‌شوند، می‌توانند وارد پلاسما شده و آن را آلوده کنند. برخلاف اتم‌های سبک مانند هیدروژن، اتم‌های سنگین عناصر آهن، نیکل، کروم، اکسیژن و ... حتی در دماهای گداخت نیز کاملاً یونیزه نمی‌شوند. ناخالصی‌ها با عدد اتمی بالاتر، چون الکترون‌های مقید بیش‌تری دارند، خیلی شدیدتر انرژی تابش می‌کنند. فرسایش و افزایش ناخالصی و غبار در پلاسما باعث سرد و رقیق شدن آن و در نتیجه کاهش بازدهی گداخت می‌شود [۱]. بنابراین انتخاب مواد مناسب که در معرض ذرات پلاسما هستند، برای تأمین عملکرد ایمن رآکتور و اقتصادی بودن آن بسیار اهمیت دارد [۲، ۳]. هم‌چنین کنترل این ناخالصی‌ها و بررسی جنبه‌های مختلف فیزیک این ذرات برای پیشرفت رآکتورهای آینده به‌عنوان منبع‌های انرژی صنعتی امری کاملاً ضروری است. از مدت‌ها پیش وجود ذرات ریزجامد "غبار" به‌عنوان ناخالصی در دستگاه‌های گداخت مغناطیسی مشاهده شده است و تاکنون برخی جنبه‌های فیزیکی غبار هم چون سازوکارهای تولید غبار، نیروهای اعمال شده روی غبار و برخورد غبار با مواد دیواره‌ها مطالعه شده است [۴، ۵].

این غبار شکل‌های گوناگونی شبیه پولک، نامنظم و گاهی نیز شکل‌های کروی دارد که احتمالاً سازوکارهای متفاوت تولید غبار هم‌چون پوسته‌پوسته‌شدن لایه‌های جابه‌جا شده، تراکم ناخالصی‌ها در نواحی سرد پلاسما، بیرون‌اندازی غبار از سطح‌های پوششی پلاسما و دیگر سازوکارهای تخریب باعث گوناگون شدن شکل‌های غبار شده است [۵]. بازه ابعاد این ذرات از چند نانومتر تا ده‌ها میکرون گسترده است [۶]. سرعت ذرات غبار منفردی که توسط دوربین‌های سریع مشاهده شده به چند صد m/s می‌رسد [۷]. داده‌های تجربی حاصل از عملکرد توکامک نشان می‌دهند دانه‌های غباری که در طی فرایندهای 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 $1\ \mu m$ قبل از تبخیر شدن مسیری حدود $1-10\ m$ را در ITER طی می‌کنند. در توکامک ITER، طول عمر تنگستن مانند گرافیت تقریباً $0.1\ ms$ است.

شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای از یک‌سو نقش با ارزشی در درک و پیش‌بینی نتایج مدل‌ها ایفا می‌کنند و از سوی دیگر می‌توانند وقوع برخی مشاهدات تجربی را توجیه نمایند. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی[2] (MD) یک ابزار محاسباتی مفید برای سیستم‌های بس‌ذره‌ای در مقیاس نانو است.

پیش از این در سال ۲۰۱۳ برهم‌کنش دیوار- پلاسما در توکامک با استفاده از روش دینامیک مولکولی انجام شده که در آن اثر برخورد نانوذره کروی تنگستنی با دیوار تنگستنی در دو سرعت m/s ۱۰۰ و m/s ۱۰۰۰ شبیه‌سازی شده است [۸]. نتایج نشان داد که در هر دو حالت، دیوار آسیب نمی‌بیند. در سال ۲۰۱۹ اتریک و همکارانش نشان دادند که دانه غبار تنگستن در برخورد با دیوار تنگستنی تغییر شکل می‌یابد و به دیوار می‌چسبد [۹].

در میان مواد مصرف شده برای دیواره اول توکامک، گرافیت به‌دلیل عدد اتمی پایین و خواص ترمومکانیکی ویژه‌ای که دارد، گزینه مناسبی برای دیواره اول توکامک به‌شمار می‌آید. از سوی دیگر دیواره‌های کربنی توکامک در اثر برخورد با پلاسما به‌طور قابل‌توجهی فرسایش یافته و تعداد زیادی غبار تولید می‌کنند [۱۰]. بنابراین در این پژوهش، اثر برخورد دانه غبار به سطح گرافیتی با استفاده از کد لمپس[3] شبیه‌سازی شده است. ابتدا دانه‌های غبار نانوذره‌ای کروی‌شکل از جنس تنگستن و سپس نانوذره گرافیتی با هندسه پولکی‌شکل در نظر گرفته شده است. در این شبیه‌سازی اثر چرخش دانه غبار در تخریب سطح نیز بررسی شده است.

۲. چرخش غبار

حرکت چرخشی دانه غبار در دستگاه‌های گداخت را می‌توان به‌عنوان یک پارامتر مهم در توصیف دینامیکی حرکت دانه تلقی کرد.

چنان‌چه سطح دانه غبار ناهمگن باشد، یعنی ورود و خروج ذرات روی دانه به‌صورت نامتقارن باشد (به‌عنوان مثال 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. فرایندهای مختلفی باعث چرخش فوق‌حرارتی دانه غبار می‌شود که یکی از مهم‌ترین آن‌ها تشکیل و تبخیر مولکول هیدروژن روی سطح دانه است [۱۱].

وقتی اتم هیدروژن روی سطح غبار وارد می‌شود با توجه به دمای اتم فرودی، یا به‌طور ضعیف (جذب فیزیکی[4]) و یا به‌طور

1. Divertor

2. Molecular Dynamics
3. LAMMPS Code
4. Physisorption

قوی (جذب شیمیایی[1]) 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 فرایند لانگمویر-هینشلوود[2] (LH) و الی- رایدل[3] (ER) برهم‌کنش کرده و مولکول هیدروژن تشکیل می‌دهند [۱۲، ۱۳]. 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 به‌طور همسان‌گرد توزیع نشده‌اند.

در هر دوره تناوب چرخش مکانیکی، نموی از اندازه‌حرکت زاویه‌ای (ΔJ) به دانه وارد می‌شود که منجر به چرخش فوق حرارتی دانه می‌شود. ولی مهم‌ترین آن‌ها اندازه‌حرکت زاویه‌ای است که به‌واسطه تشکیل و سپس تبخیر مولکول هیدروژن روی سطح دانه غبار به آن اعمال می‌شود. همان‌طور که بیان شد، گشتاور منظمی که به‌واسطه تشکیل H_2 به‌وجود می‌آید، باعث می‌شود دانه با سرعتی ۱۰ تا ۱۰۰ برابر سرعت چرخشی حرارتی حول خود بچرخد [۱۳].

بنابراین وقتی غبار در پلاسما وارد می‌شود، ماهیت دینامیکی آن تغییر می‌کند و حتی اگر تعداد آن کم باشد نیز تأثیر به‌سزایی در عملکرد پلاسما خواهد داشت. درواقع در پلاسمای لبه توکامک، غبار به‌عنوان چاهی برای اتم‌های یونیزه و غیریونیزه هیدروژن عمل می‌کند، آن‌ها را می‌بلعد و به‌ازای آن‌ها مولکول هیدروژن تولید می‌کند. بنابراین ذرات غبار به‌عنوان سطوح جاذب برای بازترکیب اتم‌های پرانرژی پلاسما و تشکیل مولکول‌های هیدروژن، انرژی را از محیط گرفته و منجر به سردشدن و خاموشی پلاسما می‌شوند. در واقع به‌واسطه جذب اتم‌های هیدروژن روی سطح غبار و هم‌دمایی آن‌ها با سطح است که انرژی پلاسما هدر رفته و پلاسما تضعیف می‌شود [۱۴].

۳. 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. در این کد با اعمال معادلات حرکت نیوتن، مجموعه‌ای از موقعیت‌های اتمی به‌صورت پی‌درپی به‌دست می‌آید. از معایب کد لمپس می‌توان به نداشتن واسطه کاربری گرافیکی و ناتوانی در تولید تصاویر متحرک اشاره کرد. در این کار برای شبیه‌سازی برخورد دانه غبار به سطح یا دیوار گرافیتی از بسته نرم‌افزاری لمپس مربوط به نسخه ۲۰۱۳ و برای تصویرسازی از نرم‌افزار Ovito استفاده شده است. هردو نرم‌افزار به‌صورت رایگان در اختیار کاربران قرار دارد [۱۵، ۱۶].

دیواره اول توکامک و یا صفحات منحرف‌کننده به‌عنوان سطح هدف در نظر گرفته شده‌اند که شامل سطح گرافیتی متشکل از ۱۰۴۷۹۶ اتم در سه لایه است. این سطوح به موازات صفحه xy و به ابعاد ۳۰ nm ×۳۰ nm در نظر گرفته شده‌اند. فاصله لایه‌ها از یک‌دیگر ۳٫۳۵ A°، ساختار شبکه هگزاگونال و ثابت شبکه ۲٫۵ A° است. تمام مرز لایه‌های گرافیت، به عرض ۵ A°، ثابت در نظر گرفته شده است. دمای تعادلی ۷۰۰ K با استفاده از توزیع ماکسول- بولتزمن اعمال شده است که این در حدود دمای لبه پلاسما در توکامک است.

در این پژوهش مدل‌سازی برهم‌کنش‌ها از طریق میدان نیروی واکنشی انجام شده است که در واقع میدان نیروی غیرپیوندی بوده و تشخیص پیوندها برحسب فاصله بین دو اتم در ساختار مربوطه، برطبق ضریب‌های کوانتومی صورت می‌گیرد که در میدان نیرو لحاظ شده است. از این‌رو نیروی پتانسیل در نظر گرفته شده از نوع پتانسیل‌های عمومی وابسته به مرتبه پیوند[4] است. انرژی سیستم به‌صورت مجموعی از انرژی های معین مربوط به برهم‌کنش‌های درون‌مولکولی است. تابع پتانسیل[5] Rebo برای محاسبه انرژی پیوندهای کووالانسی و نیروی بین‌اتمی استفاده می‌شود. در این شبیه‌سازی از پتانسیل Airebo[6] برای اتم‌های کربن هر لایه از گرافیت استفاده شده که در واقع تعمیم‌یافته پتانسیل Rebo است و در آن برهم‌کنش واندروالسی (E_{ij}^{LJ}) و انرژی زاویه‌ای پیچشی $(E_{kijl}^{Torsion})$ نیز درنظر گرفته می‌شود [۱۷]:

$$E=\frac{1}{2}\sum_{i}\sum_{j\neq i}\left[E_{ij}^{Rebo}+E_{ij}^{LJ}+\sum_{k\neq i,j}\sum_{l\neq i,j,k}E_{kijl}^{Torsion}\right] \quad (۱)$$

به همان‌صورتی‌که در بسته نرم‌افزاری لمپس اجرا می‌شود، برهم‌کنش بین لایه‌های گرافیت با پتانسیل لنارد– جونز توصیف شده است:

1. Chemisorption
2. Langmure-Hinshelwood
3. Eley-Rideal
4. Bond order
5. Reactive Empirical Bond Order
6. Adaptive Intermolecular Reactive Bond Order

$$E_{LJ} = ۴\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{۱۲} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{۶}\right] \qquad r < r_c \qquad (۲)$$

که در این شبیه‌سازی عمق چاه پتانسیل $\varepsilon = ۰٫۰۰۳\,\text{ev}$، فاصله‌ای که در آن پتانسیل صفر می‌شود $\sigma = ۲٫۴۲\,\text{A}^\circ$ و شعاع قطع $r_c = ۱۲\,\text{A}^\circ$ جای‌گذاری شده است.

۴. نتایج شبیه‌سازی

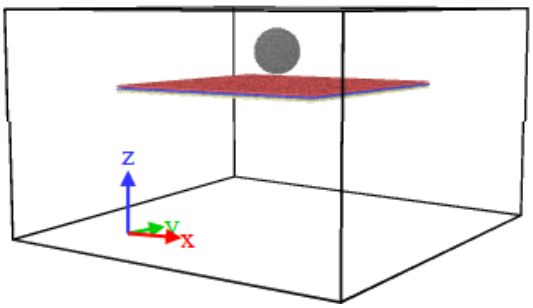
۱.۴ نانوذره کروی تنگستن

دانه غبار از جنس تنگستن با جرم اتمی ۱۸۳٫۸۴ u و ساختار شبکه bcc است که هندسه آن کروی‌شکل و به شعاع ۳ nm در نظر گرفته شده است. برای تشکیل دانه از پتانسیل بین اتمی eam[1] استفاده شده که نوعی برهم‌کنش جفت‌جفت برای عناصر و آلیاژهای فلزی است و انرژی کل آن برای هر اتم عبارت است از [۱۸]:

$$E_i = F_\alpha\left(\sum_{j\neq i}\rho_\beta\left(r_{ij}\right)\right) + \frac{۱}{۲}\sum_{j\neq i}\phi_{\alpha\beta}\left(r_{ij}\right) \qquad (۳)$$

که در آن F_α انرژی نهفته[2] (مجموع انرژی‌های لازم برای تشکیل ماده) است که تابعی از چگالی الکترون اتمی، ρ_β، است. $\phi_{\alpha\beta}$ ضرایب پتانسیل برهم‌کنش و α و β نوع اتم‌های iام و jام هستند. ضرایب پتانسیل از سایت مرجع NIST[3] [۱۹] جای‌گذاری شده‌اند. هم‌چنین پتانسیل برهم‌کنش بین اتم‌های دیوار و دانه، لنارد- جونز درنظر گرفته شده است.

ابعاد جعبه شبیه‌سازی ۵۰nm×۵۰nm×۳۰nm است به‌طوری‌که در دو بعد x و y شرایط مرزی تناوبی و در راستای z آزاد (غیرتناوبی) درنظر گرفته شده است. تعداد کل اتم‌ها ۱۱۱۹۷۰ و مرکز دانه تنگستن در فاصله ۴٫۵ nm از دیوار گرافیتی است. در شکل ۱ شرایط مکانی اولیه سیستم در جعبه شبیه‌سازی نشان داده شده است.



شکل ۱. شرایط مکانی اولیه سیستم در جعبه شبیه‌سازی.

دانه تنگستن در راستای z با سرعت‌های انتقال از مرتبه یک‌دهم تا چند km/s به دیوار برخورد می‌کند. در این مدل دمای اولیه ۷۰۰ K درنظر گرفته شده است. سیستم اولیه در مدت زمان ۱ ps به تعادل می‌رسد و سپس در شرایطی که برای دانه آنسامبل میکروکانونیکی (NVE) و برای دیوار آنسامبل کانونیکی (NVT) اعمال شده است، شبیه‌سازی برخورد طی مدت زمان ۱۰ ps انجام می‌شود.

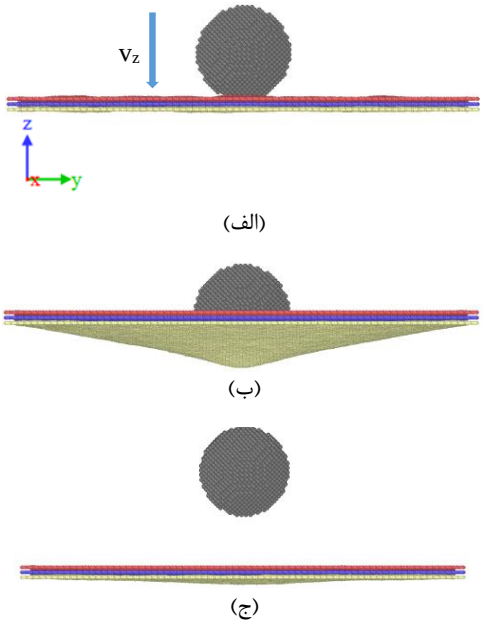
شکل ۲ برخورد نانوذره تنگستن به دیوار را در لحظه برخورد و پس از آن نشان می‌دهد. برای پیدا کردن آستانه سرعت که منجر به تخریب دیواره می‌شود، ابتدا سرعت نانوذره را در جهت z– و به اندازه ۵۰۰ m/s در نظر گرفته می‌شود (شکل ۲ الف). در این شرایط، همان‌طور که در شکل ۲ ب و ۲ ج نشان داده شده است، بدون آن‌که دیوار تخریب شود، نانوذره برمی‌گردد.

با افزایش سرعت تا ۲ km/s، هم‌چنان تخریب قابل‌توجهی رخ نمی‌دهد ولی همان‌طور که در شکل ۳ نشان داده شده است، به ازای سرعت ۲٫۸ km/s علاوه بر دیوار، نانوذره هم تخریب می‌شود. به‌عبارتی سرعت آستانه تخریب برای چنین نانوذره‌ای ۲٫۸ km/s به‌دست آمد.

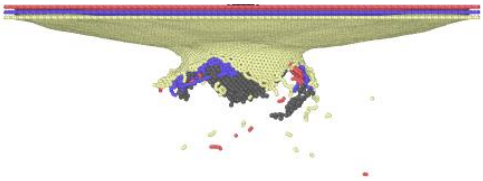
نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهند که چنان‌چه این دانه با این سرعت آستانه (۲٫۸ km/s) و تحت زاویه به دیوار برخورد کند، فارغ از این‌که برخورد تحت چه زاویه‌ای باشد، باز هم منجر به تخریب دیوار می‌شود. شکل‌های ۴ ب و ۴ ج به‌ترتیب نتیجه برخورد دانه تحت زاوایای ۴۵ و ۳۰ درجه نسبت را نشان می‌دهد.

در ادامه، اثر برخورد دانه کروی تنگستنی چرخان به دیوار گرافیتی شبیه‌سازی شده است. شعاع دانه‌ی غبار ۳ nm و سرعت انتقالی آن ۲ km/s و در جهت z– است. با محاسبه جرم و لختی دورانی کره تنگستن، سرعت زاویه‌ای فوق‌حرارتی آن حدود $\omega = ۶٫۴\times۱۰^{۱۱}\ \text{rad/s}$ برآورد می‌شود. همان‌طور که در شکل ۵ الف مشاهده می‌شود، دانه و دیوار تخریب می‌شوند و هم‌چنین دانه تخریب‌شده دوباره به محیط برمی‌گردد (شکل ۵ ب). این در حالی است که برای چنین دانه‌ای در حالت بدون چرخش تخریب در سرعت آستانه ۲٫۸ km/s رخ می‌دهد. بنابراین، دینامیک چرخش برای چنین غبارهایی آثار تخریبی بیش‌تری را به‌دنبال دارد.

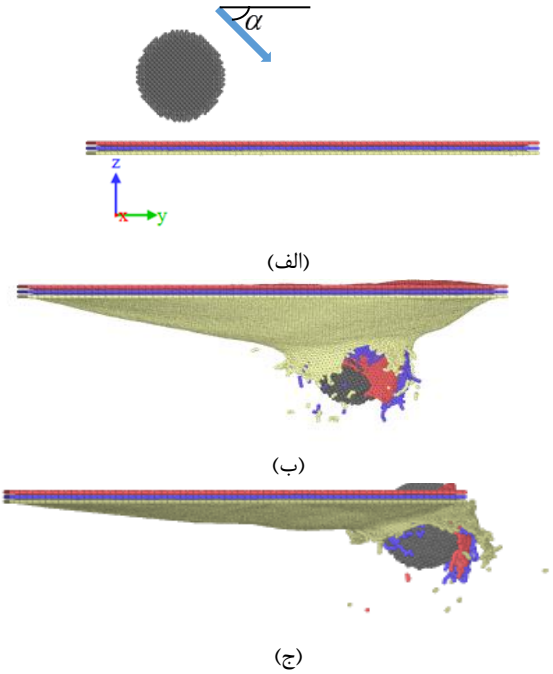
1. Embedded Atom Method
2. Embedded Energy
3. National Institute of Standards and Technology



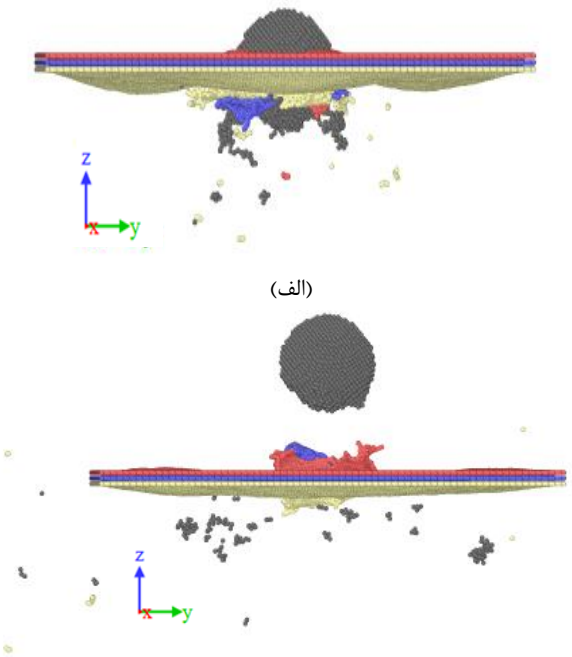
شکل ۲. برخورد نانوذره تنگستن با سرعت انتقالی ۵۰۰ m/s به دیوار گرافیتی الف) در لحظه برخورد، ب) پس از برخورد و ج) برگشت نانوذره.



شکل ۳. تخریب دیوار گرافیتی در برخورد نانوذره‌ی تنگستن با سرعت انتقالی ۲٫۸ km/s.



شکل ۴. تخریب دیوار گرافیتی در برخورد نانوذره تنگستن با سرعت انتقالی ۲٫۸ km/s الف) قبل از برخورد، ب) بعد از برخورد تحت زاویه $\alpha = ۴۵^\circ$ و ج) $\alpha = ۳۰^\circ$.



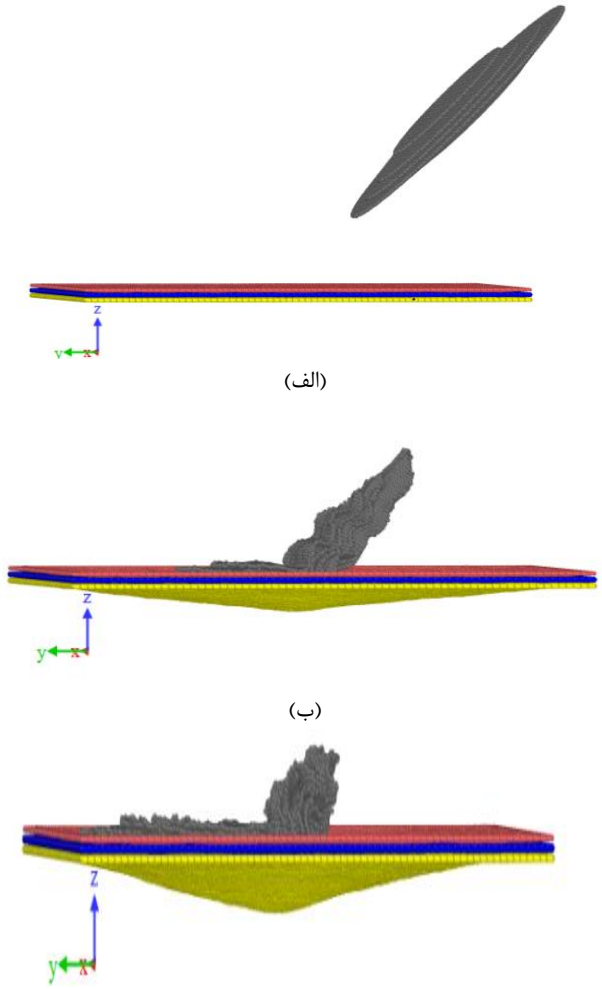
شکل ۵. برخورد غبار کروی تنگستن به دیوار گرافیتی با سرعت انتقالی ۲ km/s و سرعت زاویه‌ای $\omega = ۶٫۴\times۱۰^{۱۱}\ rad/s$ حول محور z الف) تخریب دانه و دیوار، ب) بازگشت دانه تخریب‌شده به محیط.

۲.۴ نانوذره پولکی‌شکل گرافیتی

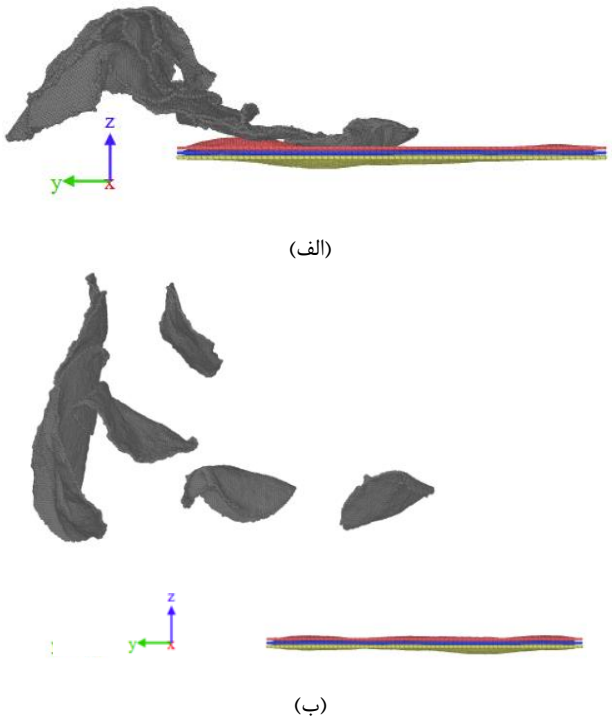
در این‌جا دانه غبار از جنس گرافیت و شکل هندسی آن کره‌وار پخت درنظر گرفته شده است، به‌طوری‌که بزرگ‌ترین شعاع آن ۱۰ nm و کوچک‌ترین شعاع ۱ nm باشد. تعداد ۱۴۹۸۹۳ اتم در جعبه شبیه‌سازی به ابعاد ۷۰ nm × ۷۰ nm ×۴۰ nm وجود دارد. در راستای موازی با صفحات گرافیت، شرایط مرزی تناوبی و در راستای عمود بر آن، غیرتناوبی درنظر گرفته شده است. برای دانه گرافیتی آنسامبل NVE و برای سطوح گرافیتی آنسامبل NVT فرض شده است.

در شکل ۶ برخورد دانه گرافیتی چرخان با دیوار، تحت زاویه ۴۵ درجه و با سرعت ۱٫۴ km/s نشان داده شده است. سرعت زاویه‌ای دانه گرافیتی از مرتبه فوق‌حرارتی و معادل $\omega=۱۰^{۶}\ rad/s$ در نظر گرفته شده است [۱۴]. دانه حول محور تقارنش می‌چرخد و همان‌طور که در شکل ۶ ب و ۶ ج مشاهده می‌شود، در این شرایط دانه گرافیتی روی سطح رسوب می‌کند. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد به‌طور معمول برخورد دانه‌های گرافیتی، به‌واسطه ساختار لایه‌ای که دارند، منجر به رسوب آن‌ها روی سطح دیوار می‌شود.

با حفظ شرایط، سرعت انتقالی دانه غبار تا ۵ km/s افزایش داده شد. نتیجه شبیه‌سازی برخورد در شکل ۷ نشان می‌دهد بدون آن‌که دیوار آسیب ببیند، دانه تخریب می‌شود و لایه‌های آن به محیط برمی‌گردد. باتوجه به ساختار لایه‌ای گرافیت و نیروی ضعیف واندروالس بین لایه‌ها در مقایسه با نیروی قوی کووالانسی بین اتمی در هر لایه، چنین تخریبی برای دانه دور از انتظار نیست.



شکل ۶. برخورد دانه پولکی‌شکل گرافیتی به دیوار گرافیتی با سرعت ۱ km/s تحت زاویه ۴۵ درجه و با سرعت زاویه‌ای $\omega=10^{6}$ rad/s حول محور تقارنش، الف) زمان اولیه t = ۰ps ب) بعد از برخورد t=۱۲ ps و ج) t=۱۶ ps.



شکل ۷. برخورد دانه پولکی‌شکل گرافیتی به دیوار گرافیتی با سرعت ۵ km/s تحت زاویه ۴۵ درجه و با سرعت زاویه‌ای $\omega=10^{6}$ rad/s حول محور تقارنش، الف) t=۱۰ ps ب) t=۱۶ ps.

۵. نتیجه‌گیری

در این مقاله اثر برخورد نانوذره تنگستن به شعاع ۳ nm به دیوار گرافیتی شبیه‌سازی شده است. نتایج نشان می‌دهد برای چنین دانه غباری، آستانه سرعت انتقالی که منجر به تخریب دیوار می‌شود ۲٫۸ km/s خواهد بود. نتایج شبیه‌سازی نشان داد این سرعت مستقل از زاویه برخورد است و آستانه سرعت تخریب با وجود سرعت چرخشی $\omega=6.4\times10^{11}$ rad/s، به ۲ km/s کاهش می‌یابد.

در ادامه، دانه غبار گرافیتی چرخان با هندسه پولکی‌شکل به دیوار گرافیتی شبیه‌سازی شده است. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد دانه‌های گرافیتی در ابعاد نانو، حتی با وجود چرخش، اثر تخریبی قابل‌توجهی روی دیواره گرافیتی ندارند. هم‌چنین در سرعت‌های پایین، دانه‌های گرافیتی به‌واسطه ساختار لایه‌ای که دارند، روی سطح دیوار رسوب می‌کنند و در سرعت‌های بالا، خود دانه‌ها تخریب می‌شوند.

مراجع

1. S. Banerjee, et al., *Dynamics of dust events in the graphite first wall equipped SST-1 tokamak*, Plasma Physics and Controlled Fusion, **60**, 095001 (2018).
2. D.J. Ward, S.L. Dudarev, *Economically competitive fusion*, Materials Today, **11**, 46 (2008).
3. E. Lazzaro, M. De Angeli, *Effects of dust on plasma discharges during tokamaks start-up phase*, 46th EPS Conference on Plasma Physics Italy-Milan, 8-12 July (2019).
4. J. Winter, *Dust: A new challenge in nuclear fusion research?* Phys. Plasmas. **7**, 3862 (2000).
5. A.K. Makar, *An Audit of Occurrence of Dust in Tokamak and Stability of Fusion Plasma*, Plasma and Fusion Research, **15**, 1405019 (2020).
6. C. Grisolia, et al., *Current investigations on tritiated dust and its impact on tokamak safety*, Nuclear Fusion, **59**, 086061 (2019).
7. J.P. Sharpe, D.A. Petti, H.W. Bartels, *A review of dust in fusion devices: Implications for safety and operational performance*, Fusion Engineering and Design, **63**, 153 (2002).
8. H. Rongjie, et al., *Molecular Dynamics Study on the Dust-Plasma/Wall Interactions in the EAST Tokamak*, Plasma Science and Technology, **15**, 318 (2013).
9. A. Autricque, et al., *Adhesion force of W dust on tokamak W plasma-facing surfaces: The importance of the impact velocity*, Nuclear Materials and Energy, **18**, 345 (2019).
10. A. Malizia, et al., *A review of dangerous dust in fusion reactors: From its creation to its resuspension in case of LOCA and LOVA*, Energies, **9**, 578 (2016).
11. M. Bakhtiyari-Ramezani, J. Mahmoodi, N. Alinejad, *Recombination of H atoms on the dust in fusion plasmas*, Physics of Plasmas, **22**, 073707 (2015).
12. Y. Ferro, et al. *Adsorption, diffusion, and recombination of hydrogen on pure and boron-doped graphite surfaces*, J. Chem. Phys. **120**, 11882 (2004).
13. X. Sha, B. Jackson, D. Lemoine, *Quantum studies of Eley–Rideal reactions between H atoms on a graphite surface*, J. Chem. Phys. **116**, 7158 (2002).
14. M. Bakhtiyari-Ramezani, J. Mahmoodi, N. Alinejad, *Diffusion coefficients of Fokker-Planck equation for rotating dust grains in a fusion plasma*, Physics of Plasmas, **22**, 113706 (2015).
15. https://lammps.sandia.gov.
16. OVITO-The Open Visualization Tool, http://ovito.org/.
17. S.J. Stuart, A.B. Tutein, J.A. Harrison, *A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions*, J. Chem. Phys. **112**, 6472 (2000).
18. M.S. Daw, M.I. Baskes, *Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals*. Physical Review B, **29**, 6443 (1984).
19. www.ctcms.nist.gov/potentials/system/W/.

COPYRIGHTS
©2021 The author(s). This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution (CC BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, as long as the original authors and source are cited. No permission is required from the authors or the publishers.

استناد به این مقاله

مهدیه بختیاری رمضانی، مهناز عبدالهی درگاه، نیره عبداللهی قهی (۱۴۰۰)، شبیه‌سازی برخورد نانوذره غبار با دیواره گرافیتی با استفاده از کد لمپس، ۹۷، ۳۷-۴۳

DOI: 10.24200/nst.2021.1294
Url: https://jonsat.nstri.ir/article_1294.html