



جذب شیمیایی اتم هیدروژن روی سطح غبار در پلاسمای منحرف کننده

مهدیه بختیاری رضانی^{۱*}، جعفر محمودی^۲، ناصر علی نژاد^۱

۱. پژوهشکده‌ی فیزیک پلاسما و گداحت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی: ۱۴۳۹۹-۵۱۱۱۳، تهران - ایران
۲. گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم پایه، دانشگاه قم، صندوق پستی: ۳۷۱۶۱۴۶۶۱۱، قم - ایران

چکیده: مشخصات پلاسما در ناحیه‌ی منحرف کننده‌ی توکامک به وسیله‌ی مقادیرهای متفاوت از پارامترهای پلاسما (چگالی و دمای پلاسما)، ترکیب پلاسما و فرایندهای بویای غالب در پلاسما تعیین می‌شود. روشی برای مطالعه‌ی نظری برهم کنش هیدروژن با سطح دانه‌ی غبار ارایه و نتایج به دست آمده، برای تشکیل مولکول هیدروژن روی سطح دانه‌های غبار در ناحیه‌ی منحرف کننده به کار گرفته شد. در این روش، با در نظر گرفتن هر دو جای‌گاه جذب شیمیایی و فیزیکی روی سطح دانه، اتم‌های جذب شده روی سطح از طریق پخش گرمایی از یک جای‌گاه به جای‌گاه دیگر رفته و مولکول هیدروژن را تشکیل می‌دهند. آهنگ تشکیل مولکول هیدروژن روی سطح غبار دما-بالا در ناحیه‌ی منحرف کننده برای گستره‌ای از دماها و چگالی‌های گاز به دست آمد.

کلیدواژه‌ها: پلاسما، توکامک، غبار، منحرف کننده

Hydrogen chemisorption on the dust grain in divertor plasma

M. Bakhtiyari Ramezani^{1*}, J. Mahmoodi², N. Alinezhad¹

1. Plasma Physics and Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.Box: 14399-51113, Tehran - Iran
2. Department of Physics, Faculty of Science, Qom University, P.O.Box: 3716146611, Qom - Iran

Abstract: Tokamak divertor plasma is characterized by variety of plasma parameters such as plasma density and temperature, as well as plasma composition and overcoming plasma dynamics processes. A model was surveyed for theoretical study of the interaction of hydrogen with dust surface and the results is applied to the formation of H₂ molecule on the dust grain surfaces in the tokamak divertor plasma. In this model, by considering both physisorbed and chemisorbed sites on the grain surface, the adatoms on the surface migrate from one adsorb site to other adsorb site by thermal diffusion and form H₂ on the dust grain surfaces. The H₂ formation rate on the high temperature dust surfaces in the divertor plasma region has been found for a range of gas temperatures and densities.

Keywords: Plasma, Tokamak, Dust, Divertor

*email: mahdijeh.bakhtiyari@gmail.com

تاریخ دریافت مقاله: ۹۲/۱۲/۱۶ تاریخ پذیرش مقاله: ۹۳/۶/۳۱



۱. مقدمه

اغلب، ذرات غبار در دستگاه‌های هم‌جوشی از برهم‌کنش‌های پلاسما-سطح دیواره تشکیل می‌شوند، از آنجا که دیواره‌ی اول توکامک به دلیل عدد اتمی پایین و خصوصیت‌های برجسته‌ی ترمومکانیکی کربن اساساً از فیبرهای کربنی ساخته شده است، بنابراین مواد کربنی عنصر اصلی در ترکیب‌های غبار خواهد بود [۶].

در این مقاله، ضمن مطالعه‌ی ویژگی‌های اصلی دانه‌های غبار در پلاسما منحرّف کننده‌ی توکامک^(۳) و توصیف فرایندهایی که منجر به تشکیل هیدروژن مولکولی روی سطح می‌شوند، با بررسی مرحله‌های تشکیل H_2 روی سطح غبار، بازده تشکیل هیدروژن مولکولی در پلاسما منحرّف کننده به دست آورده شده و آهنگ کل تشکیل مولکول هیدروژن روی سطح دانه‌های غبار در پلاسما منحرّف کننده محاسبه شده است.

۲. خصوصیت‌های دانه‌های غبار

دیواره‌های کربنی توکامک در اثر برخورد پلاسما با آن‌ها به طور قابل توجهی فرسایش یافته و تعداد زیادی دانه‌ی غبار تولید می‌کنند. چون این دانه‌های غبار کربنی شامل مقدار زیادی (از ایزوتوپ‌های) هیدروژن هستند، بودشان در رآکتورهای هم‌جوشی از لحاظ ایمنی باید کاملاً کنترل شود. به طور مثال، وقتی ذرات غبار با بخار یا هوا واکنش می‌دهند پرتوزا، سمّی و قابل انفجار خواهند بود. به هر حال، به دلیل تعداد کم ذره‌های غبار در توکامک شاید نتوان پلاسما توکامک را پلاسما غباری نامید ولی همین تعداد کم هم به دلیل ایجاد مسایل ایمنی، عملکرد دستگاه‌های هم‌جوشی را کاملاً تحت تأثیر خود قرار خواهد داد، بنابراین شناخت مشخصه‌های اساسی پویایی غبار ضروری است [۳، ۶].

اندازه‌ی قطر متوسط دانه‌های غبار در دستگاه‌های هم‌جوشی از $0.46 \mu m$ (DIII-D)^(۴) تا $9.6 \mu m$ (LHD)^(۵) است. شکل دانه‌های غبار معمولاً شبیه پولک، نامنظم و گاهی نیز کروی است که احتمالاً این تنوع شکل به واسطه‌ی فرایندهای متفاوت تولید غبار هم‌چون پوسته پوسته شدن لایه‌های جابه‌جا شده، تراکم ناخالصی‌ها در نواحی سرد پلاسما، بیرون‌اندازی غبار از سطح‌های پوشش پلاسما و دیگر فرایندهای تخریب است [۳]. یکی از موضوعاتی که در مطالعه‌های تجربی و نظری مورد توجه

شناخت سازوکار برهم‌کنش هیدروژن-سطح کاربرد گوناگونی در فیزیک و صنعت دارد. برای مثال، چند دهه‌ای است که این بحث در زمینه‌های پژوهشی مختلف هم‌چون تشکیل مولکول هیدروژن در فضا و اثرهای برهم‌کنش پلاسما-سطح در دستگاه‌های هم‌جوشی به طور گسترده مورد پژوهش قرار گرفته است [۱، ۲].

از مدت‌ها پیش وجود ذرات ریزجامد «غبار» به عنوان ناخالصی در دستگاه‌های هم‌جوشی مغناطیسی مشاهده شده است. بنابراین، کنترل این ناخالصی‌ها و بررسی جنبه‌های مختلف فیزیک این ذرات برای پیشرفت رآکتورهای آینده به عنوان منبع‌های انرژی صنعتی امری کاملاً ضروری است. البته، تاکنون برخی جنبه‌های فیزیک غبار هم‌چون سازوکارهای تولید غبار، نیروهای اعمال شده روی غبار و برخورد غبار با مواد دیواره‌ها مورد مطالعه قرار گرفته است [۳].

فراوان‌ترین مولکول در جهان مولکول هیدروژن است؛ فرایند تشکیل مولکول هیدروژن از طریق ترکیب اتم‌های هیدروژن روی سطح غبار یکی از سازوکارهای مهم و جالب در محیط بین‌ستاره‌ای است؛ تاکنون پژوهش‌های تجربی و نظری بسیاری توسط اختر فیزیک‌دان‌ها در این زمینه انجام شده است [۴].

وقتی اتم هیدروژن به سطح غبار می‌رسد، یا به طور ضعیف (جذب فیزیکی)^(۱) و یا به طور قوی (جذب شیمیایی)^(۲) به سطح می‌پیوندد. پس از چسبیدن به سطح، اتم‌ها از طریق تونل‌زنی کوانتومی و یا جست و خیز گرمایی می‌توانند روی سطح پخش شوند، و در نهایت بازترکیب اتم‌های هیدروژن روی سطح منجر به تشکیل مولکول هیدروژن خواهد شد. تاکنون آزمایش‌های مختلفی برای توصیف فرایند جذب روی سطح‌های کربنی و گرافیتی انجام شده است. نتیجه‌ی آزمایش‌ها نشان می‌دهد که نوع چسبندگی اتم‌های فرودی به سطح شدیداً به دمای اتم و غبار وابسته است، مطالعه‌های نظری نیز این مطلب را تأیید می‌کند. از پژوهش‌های تجربی و نظری نتیجه می‌گیریم که اتم هیدروژنی که از فضای گازی روی سطح غبار گرافیت فرود می‌آید، جذب فیزیکی شده (43 meV) و یا جذب شیمیایی (0.67 eV) می‌شود [۴، ۵].

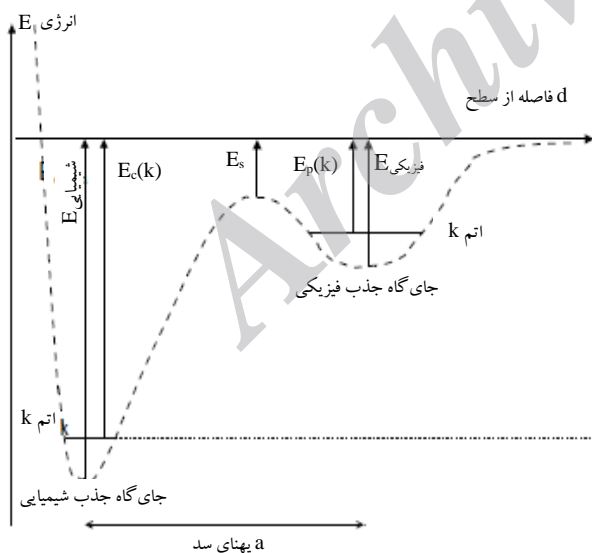
۲.۳ فرایند پخش اتم هیدروژن روی سطح غبار

اتم هیدروژن جذب شده، از طریق فرایند تونل‌زنی کوانتومی^(۸) یا جهش گرمایی^(۹) روی سطح غبار پخش می‌شود [۵، ۱۰]. ما سطح غباری با جای گاه‌های جذب فیزیکی و شیمیایی در نظر می‌گیریم، به طوری که این جای گاه‌های جذب با انرژی‌های متفاوت از یک‌دیگر به‌طور افقی روی سطح قرار گرفته‌اند. هم‌چنین فرض می‌کنیم فرایند پخش افقی در میان جای گاه‌های هم‌نوع (جای گاه‌های جذب فیزیکی یا جذب شیمیایی) و پخش عمودی در میان جای گاه‌های جذب ناهم‌نوع اتفاق می‌افتد (شکل ۱). تحرک اتم هیدروژن برای عبور از یک جای گاه جذب به دیگر جای گاه جذب چنین بیان می‌شود [۱۱]

$$\mu_{ij} = f_i \times P_{ij} \quad (۳)$$

که در آن، i و j نشان‌دهنده‌ی جای گاه جذب فیزیکی (p) یا شیمیایی (c)، P_{ij} احتمال عبور از سد انرژی و f_i ضریب نوسان در جای گاه i است که می‌توان آن را به صورت زیر تقریب زد

$$f_i \cong \sqrt{\frac{\lambda \sigma_d n_s E_i}{\pi^2 m}} \quad (۴)$$



شکل ۱. سد بین یک جای گاه جذب فیزیکی و یک جای گاه جذب شیمیایی برای اتم k که به سطح پیوند شده است [۱۲].

قرار گرفته این است که دانه‌های غنی شده با کربن، به صورت بی‌شکل^(۶) معمولاً دانه‌های کربنی و در شکل بلوری معمولاً دانه‌های گرافیتی نامیده می‌شوند. دانه‌های غبار بزرگ سطحی مشابه با سطح کربن بی‌شکل دارند، در حالی که دانه‌های غبار کوچک ($\leq 100 \text{ \AA}$) سطحی مشابه با گرافیت دارند. این دو مدل دانه، خصوصیت‌های سطحی متفاوتی دارند [۷].

۳. فرایندهای مؤثر بر تشکیل H_2 روی سطح غبار

برای فهم سازوکار تشکیل H_2 لازم است فرایندهای مؤثر روی سطح غبار هم‌چون فرایند جذب، پخش، واکنش و واجذب^(۷) بررسی شود.

۱.۳ جذب هیدروژن روی سطح غبار

در فرایند جذب (ایزوتوپ‌های) هیدروژن روی سطح غبار، بسته به دمای اتم فرودی، دو برهم‌کنش متفاوت بین اتم و سطح رخ می‌دهد [۵، ۸، ۹]. اگر اتم هیدروژن به‌طور ضعیف توسط نیروی واندروالس (تقریباً چند meV) به سطح متصل شود، جذب فیزیکی است و اگر به‌طور قوی توسط نیروی کووالانسی (تقریباً چند eV) به سطح پیوندد، جذب شیمیایی است. با فرض این که هر برخورد بین اتم هیدروژن و سطح منجر به چسبندگی شود، آهنگ تجمع اتم‌های هیدروژن Ψ_H ، روی سطح دانه‌ی غبار این است

$$\Psi_H = n_H v_H \sigma_d \quad (۱)$$

که در آن، n_H و v_H ، به ترتیب، چگالی و سرعت متوسط اتم‌های هیدروژن در فاز گازی است و $\sigma_d = \pi R_d^2$ سطح مقطع مؤثر دانه غبار کروی است. هم‌چنین تعداد جای گاه‌های جذب، N_s ، روی سطح دانه‌ی غبار کروی با شعاع R_d ، برابر است با

$$N_s = 4\pi R_d^2 n_s \quad (۲)$$

که در آن، n_s چگالی سطحی جای گاه‌های جذب (بر سانتی‌متر مربع) روی سطح غبار است.

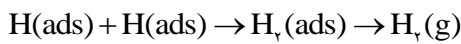


جدول ۱. ضریب‌های انتقال برای پخش از جای گاه i به جای گاه j [۱۲].

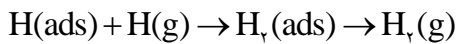
T_{ij}	B_i	B_j	B_{ij}	Z
T_{pp}	$E_p(k)-E_{sp}$	$E_p(k)-E_{sp}$	۰	A
T_{cc}	$E_c(k)-E_{sc}$	$E_c(k)-E_{sc}$	۰	A
T_{pc}	$E_p(k)-E_s$	$E_c(k)-E_s$	$E_c(k)-E_p$	a
T_{cp}	$E_c(k)-E_s$	$E_p(k)-E_s$	$E_p(k)-E_c$	a

۳.۳ برهم کنش اتم‌های هیدروژن و تشکیل H_2 روی سطح غبار

اتم‌های هیدروژن روی سطح غبار از طریق دو فرایند لانگمویر-هاینشل وود^(۱۰) (LH) و الی-رایدل^(۱۱) (ER) برهم کنش می‌کنند [۱۴]. فرایند هاینشل وود چنین نمایش داده می‌شود



در این فرایند، اتم هیدروژن به سطح غبار می‌پیوند و سپس روی سطح پخش می‌شود تا به اولین اتم به دام افتاده روی سطح رسیده و با آن ترکیب شود. این جا، هر دو اتم‌های به دام افتاده با سطح هم‌دما می‌شوند. این فرایند شدیداً به دما و پوشش سطح وابسته است. فرایند الی-رایدل، برهم کنش مستقیم بین اتم هیدروژن گازی با اتم جذب شده است که چنین نمایش داده می‌شود



در این جا، یک برهم کنش مؤثر بین اتم‌های هیدروژن زمانی رخ می‌دهد که اتم هیدروژن جذب شده روی سطح جای گزیده شده باشد. واکنش‌پذیری در این فرایند بیش‌تر به آهنگ برخورد اتم‌های هیدروژن به سطح و نسبت جذب به واجذب اتم‌ها وابسته است. بنابراین، بازده تشکیل مولکول‌های هیدروژن این است

$$\eta = \frac{2N_{H_2}}{N_H} \quad (۸)$$

که N_H در آن، تعداد اتم‌های هیدروژن روی سطح دانه و N_{H_2} تعداد مولکول‌های هیدروژن تشکیل شده روی سطح است. سرانجام پس از تشکیل H_2 ، فرایند واجذب اتفاق می‌افتد. دو سازوکار برای واجذب اتم‌های هیدروژن از سطح وجود دارد: یکی واجذب گرمایی و دیگری به واسطه‌ی انرژی است که در اثر واکنش غیر گرمایی به طور خودبه‌خود آزاد می‌شود.

که در آن، m جرم اتم هیدروژن و E_i عمق چاه در جای گاه جذب i ، جایی که اتم هیدروژن به سطح متصل می‌شود (E_c یا E_p). احتمال انتقال اتم هیدروژن روی سطح غبار از جای گاه i به جای گاه j برابر است با

$$P_{ij} = \frac{1}{kT_d} \left[\int_0^{B_i} \exp\left(-\frac{E}{kT_d}\right) T_{ij}^{(0)} dE + \int_{B_i}^{\infty} \exp\left(-\frac{E}{kT_d}\right) T_{ij}^{(v)} dE \right] \quad (۵)$$

که در آن، k ثابت بولتزمن و T_d دمای غبار، E انرژی اتم‌های هیدروژن، $T_{ij}^{(v)}$ و $T_{ij}^{(0)}$ ضریب‌های انتقال برای عبور از سد انرژی برای رفتن از جای گاه i به جای گاه j است [۱۱، ۱۲، ۱۳]. فرض می‌کنیم اتم‌های هیدروژن جذب شده با سطح دانه‌ی غبار هم‌دما شوند، بنابراین تابع توزیع انرژی آن‌ها یک توزیع بولتزمن با میانگینی برابر با دمای غبار خواهد بود. در معادله‌ی ۵، جمله‌ی اول طرف راست احتمال تونل‌زنی بین جای‌گاه‌های i و j را نشان می‌دهد، زیرا انرژی اتم هیدروژن کم‌تر از سد انرژی B_i است، در حالی که جمله‌ی دوم نشان‌دهنده‌ی احتمال عبور بین جای‌گاه‌های i و j از طریق جهش گرمایی است، زیرا انرژی اتم هیدروژن بیش‌تر از سد انرژی B_i است. ضریب انتقال برای پخش از طریق تونل‌زنی کوانتومی، $T_{ij}^{(0)}$ ، عبارت است از

$$T_{ij}^{(0)} = \epsilon A \left[(1+A)^{-1} + \frac{B_i B_j (\sinh(\sqrt{2m(B_i-E)} Z))^2}{(B_i-E)E} \right]^{-1} E \langle B_i \quad (۶)$$

و ضریب پخش گرمایی $T_{ij}^{(v)}$ چنین تعریف می‌شود

$$T_{ij}^{(v)} = \epsilon A \left[(1+A)^{-1} - \frac{B_i B_j (\sin(\sqrt{2m(E-B_i)} Z))^2}{(B_i-E)E} \right]^{-1} E \rangle B_i \quad (۷)$$

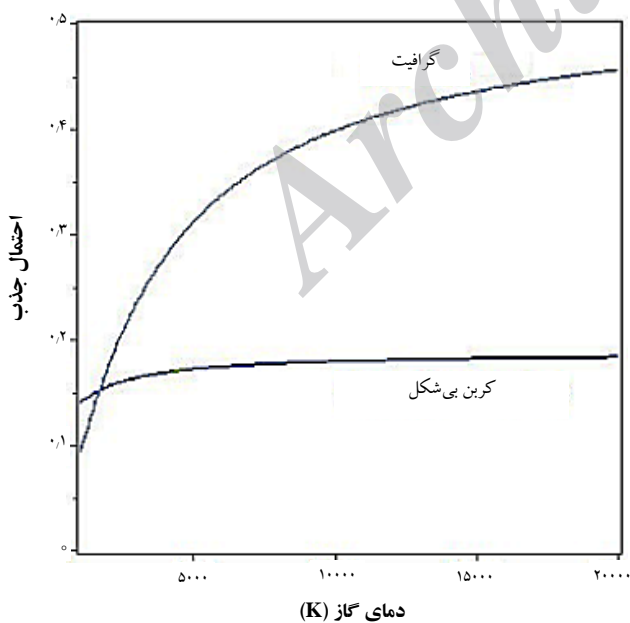
در رابطه‌های ۶ و ۷، E و m ، به ترتیب، انرژی و جرم اتم هیدروژن جذب شده، B_i سد انرژی در جای گاه i و Z پهنای سد انرژی است. هم‌چنین $A = \sqrt{\frac{E-B_{ij}}{E}}$ مقدار ثابتی است که در آن B_{ij} انرژی سد بین جای‌گاه‌های i و j است. مقدار این انرژی‌ها در جدول ۱ داده شده است.

جذب شیمیایی شده‌اند، روی سطح باقی مانده، حرکت کرده، باز ترکیب شده و مولکول هیدروژن تشکیل می‌دهند. در نتیجه، بیش‌ترین واکنش مؤثر برای تشکیل H_2 در دماهای بالا ناشی بر خورد اتم‌هایی است که به طور شیمیایی جذب شده‌اند.

در پلاسمای منحرف‌کننده، انرژی اتم‌های هیدروژن و دمای غبار به اندازه‌ی کافی بالا است، بنابراین تحرک اتم‌ها روی سطح غبار به صورت جنب و جوش گرمایی است و اتم هیدروژن بر سد انرژی بین جای‌گاه‌های جذب غلبه می‌کند ($T_{ij}^{(0)} = 0$). در دماهای بالا اتم‌های هیدروژن می‌توانند مستقیماً وارد جای‌گاه‌های جذب شیمیایی شده، مولکول هیدروژن را تشکیل دهند. بنابراین، احتمال عبور از سد جذب شیمیایی اتم هیدروژن برابر است با

$$P_H = \varphi \left(1 + \sqrt{\frac{E_c - E_S}{E_p - E_S}}\right)^{-1} \exp\left(-\frac{E_p - E_S}{E_p} + T_{\text{gas}}\right) \quad (9)$$

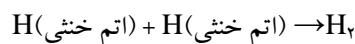
که در آن، E_S انرژی نقطه‌ی زین (اسبی) است. در شکل ۲، این احتمال به صورت تابعی از دمای اتم هیدروژن T_{gas} روی سطح‌های گرافیت و کربن بی‌شکل با دمای ۷۰۰ K رسم شده است. مطابق این شکل، اتم‌های هیدروژن دما-بالا، بیش‌تر روی سطح گرافیت جذب شیمیایی می‌شوند تا سطح کربن بی‌شکل.



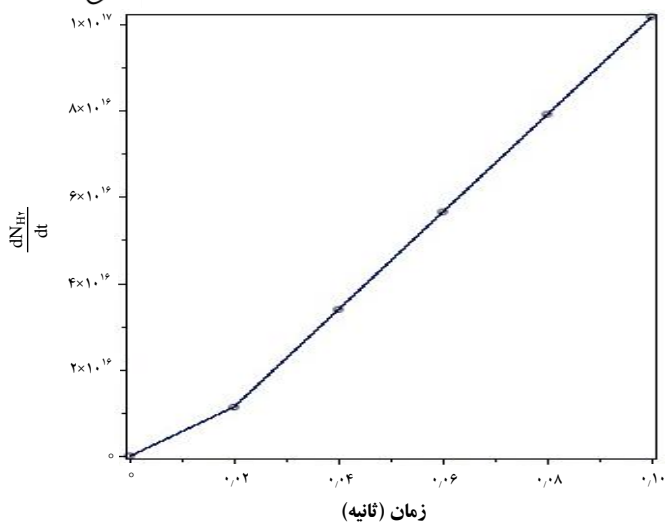
شکل ۲. احتمال جذب شیمیایی مستقیم یک اتم گازی با دمای T_{gas} روی سطح‌های کربن بی‌شکل و گرافیت.

۴. محاسبه‌ی بازده تشکیل H_2 در پلاسمای منحرف‌کننده

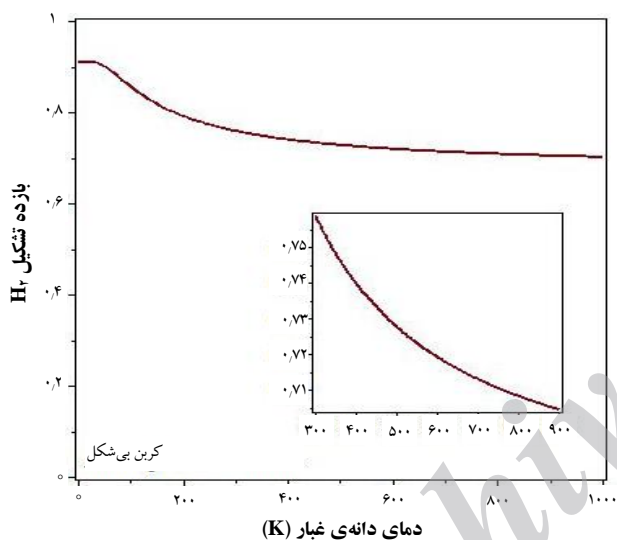
شرایط پلاσμα، برای لبه‌ی پلاσμα در ناحیه‌ی منحرف‌کننده با دمای الکترونی $T_e \cong 1 \text{ eV}$ در نظر گرفته شد [۱۵]. این دمای پایین، محیطی با برخوردهای اتمی پیچیده را توصیف می‌کند که در آن اتم‌های خنثی و یون‌های ناخالص کم بار وجود دارند. بخش اصلی گاز خنثی از اتم‌ها و مولکول‌های هیدروژن تشکیل شده است. یون‌ها و اتم‌های هلیوم، و هم‌چنین یون‌های ناخالص عناصر پوشش پلاσμα^(۱۲) (هم‌چون W، C، و Be) نیز در پلاسمای منحرف‌کننده وجود دارند. در این بخش از پلاسمای لبه، چگالی یون‌ها در بازه‌ی $10^{13} - 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ و چگالی گازهای خنثی $[H_2]$ و $[H]$ نیز از همین مرتبه‌ی بزرگی است. از واکنش‌های القا شده از برخورد بین H^+ ، H^- و H^* صرف‌نظر شده است، زیرا طول‌عمر این ذرات بسیار کوتاه ($< 10^{-7} \text{ s}$)، و در نتیجه چگالی‌شان نسبت به گازهای خنثی و الکترون بسیار کم است. در شرایط پلاسمای توکامک، چون سرعت متوسط الکترون‌ها خیلی بالاتر از یون‌ها است، بمباران ذرات غبار توسط الکترون‌ها موجب منفی شدن بار غبار می‌شود. بنابراین به دلیل برخوردهای زیادی که در پلاσμα وجود دارد، برخورد یون هیدروژن با ذرات غبار منفی نیز منجر به تولید اتم هیدروژن می‌شود. لذا، مدل جنبشی برای تشکیل H_2 روی سطح دانه‌ی غبار بر پایه‌ی واکنش زیر است



در این بخش، بازده تشکیل هیدروژن مولکولی تحت شرایط مختلف فیزیکی هم‌چون دما، اندازه، ماهیت شیمیایی دانه‌های مختلف (گرافیت، کربن بی‌شکل) و شار اتم‌های هیدروژن برآورد می‌شود. سازوکارهای مختلفی هم‌چون گسیل گرما-یونی، یونش نوری، گسیل میدانی و ... برای باردار شدن دانه‌های غبار موجود در پلاσμα وجود دارد. فرض می‌کنیم پوشش سطحی دانه‌ها کم بوده و مسأله‌ی اشباع سطح رخ نمی‌دهد. در دماهای بالا، اتم‌هایی که به طور فیزیکی جذب شده‌اند سریعاً با آهنگ α_p تبخیر می‌شوند، و تنها اتم‌هایی که



شکل ۳. آهنگ تشکیل مولکولهای هیدروژن روی سطح غبار کربن.



شکل ۴. بازده تشکیل H_2 برحسب دمای دانه‌ی غبار برای شار اتم‌های هیدروژن با دمای $T_{phys} + T_{gas}$ روی سطح غبار کربن کروی به شعاع $1 \mu m$.

۵. نتیجه‌گیری

برای مطالعه‌ی رفتار ذره‌های غبار تشکیل شده از ماده‌های مختلف (W, Mo, Fe, C, B, Be, Li) در پلاسماهای هم‌جوشی، طول عمر این ذره‌ها به صورت تابعی از پارامترهای پلازما تخمین زده شده است [۱۶]. به دلیل تفاوت در پویایی ذره‌های ساخته شده از ماده‌های سبک و سنگین، برخی از دانه‌های غبار طول عمر بیش‌تری دارند. برای مثال، ذره‌های غبار C و Fe در دستگاه‌های هم‌جوشی طول عمر بیش‌تری خواهند داشت.

در این شرایط، برای محاسبه‌ی بازده تشکیل H_2 فرض می‌کنیم اتم‌های هیدروژنی که روی سطح غبار به طور شیمیایی جذب می‌شوند به دو دسته تقسیم می‌شوند: تعدادی از این اتم‌ها مستقیماً در جای‌گاه‌های جذب شیمیایی که پیش از این به وسیله‌ی اتم هیدروژن دیگری اشغال شده فرود می‌آیند و مولکول هیدروژن تشکیل می‌دهند (فرایند الی-رایدل)، و بخش دیگر این اتم‌ها وارد جای‌گاه‌های جذب شیمیایی خالی شده و با آهنگ $\mu_{cc}(H)$ تا نزدیک‌ترین مکان جذب شیمیایی روی سطح پخش و سپس با اتمی که در آن جای‌گاه به دام افتاده ترکیب شده و مولکول هیدروژن تشکیل می‌دهند (فرایند هایشل وود). هم‌چنین فرض می‌کنیم تمام مولکول‌های تشکیل شده سریعاً از سطح غبار کنده می‌شوند. بنابراین، معادله‌ی تحول زمانی برای اتم‌های هیدروژن جذب شده و مولکول‌های تشکیل شده را می‌توان چنین نوشت

$$\dot{H}_c = \phi_H - \nu \mu_{cc} H_c - \alpha_c H_c \quad (10)$$

$$\dot{H}_r = \mu_{cc} H_c \quad (11)$$

که در آن، ϕ_H شار مؤثر اتم‌های هیدروژن روی سطح، μ_{cc} تحرک اتم هیدروژن از جای‌گاهی که در آن قرار دارد به نزدیک‌ترین جای‌گاه جذب شیمیایی، $\alpha_c = f_c e^{\frac{-E_c}{kT}}$ آهنگ پس‌زنی اتم یا مولکول هیدروژن از جای‌گاه جذب شیمیایی و f_c ضریب نوسان اتم هیدروژن جذب شده است. برای محاسبه‌ی بازده تشکیل هیدروژن $(\mu = \frac{\nu N_{H_2}}{N_H})$ ، با استفاده از روش رانگ-کوتا از معادله‌های وابسته به زمان بالا انتگرال‌گیری کردیم تا به حالت پایا برسیم. مطابق شکل ۳، آهنگ تشکیل H_2 روی سطح غبار کربن بسیار سریع است، به عبارتی زمان رسیدن به حالت پایا خیلی کوتاه‌تر از طول عمر غبار است ($t_{ss} \ll 10^{-1} s$). با حل این معادله‌ها در شرایط پایدار، منحنی‌های بازده تشکیل H_2 برحسب شار اتم‌های هیدروژن، دمای سطح دانه و تعداد جای‌گاه‌های جذب روی سطح غبار در شکل ۴ رسم شد.



که در آن، ارتفاع سد بازپخش است $(E_{\text{dif}} \approx 0.75 E_{\text{des}})$. در پلاسمای منحرف کننده برای اتم‌های هیدروژن که روی سطح غبار کربنی با دمای $T_d \cong 700 \text{ K}$ جذب می‌شوند، $\tau_{\text{des}} \cong 10^{-4} \text{ s}$ و $\tau_{\text{dif}} \cong 10^{-12} \text{ s}$.

با مقایسه‌ی این زمان‌ها درمی‌یابیم که در پلاسمای منحرف کننده اتم‌های هیدروژنی که روی سطح غبار به طور شیمیایی جذب می‌شوند فرصت کافی برای بازترکیب شدن دارند. بنابراین، آهنگ تشکیل H_2 توسط تمام ذره‌های غبار را می‌توان چنین نوشت

$$R_{\text{H}_2} = \frac{1}{4} \psi_{\text{H}} n_d \eta \quad (15)$$

که در آن، چگالی عددی کل دانه‌های غبار در پلاسمای منحرف کننده است. در شکل ۵ آهنگ تشکیل H_2 روی سطح دانه‌ی کربن به صورت تابعی از دمای غبار برای چگالی‌های مختلف اتم هیدروژن و دانه‌هایی با اندازه‌های متفاوت رسم شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش دمای غبار آهنگ تشکیل H_2 افزایش می‌یابد. بنابراین، وقتی کربن به صورت ذره‌ی غبار در پلاسما وارد می‌شود، ماهیت پویای آن تغییر می‌کند و هر قدر هم که تعداد آن کم باشد تأثیر به سزایی در عملکرد پلاسما خواهد داشت. در واقع در پلاسمای منحرف کننده، غبار به عنوان چاهی برای اتم‌های یونیده و نایونیده‌ی هیدروژن عمل می‌کند، آن‌ها را می‌بلعد و مولکول هیدروژن تولید می‌کند. لذا، ذره‌های غبار به عنوان سطح‌های جاذب برای بازترکیب اتم‌های پراثری پلاسما و تشکیل مولکول‌های هیدروژن، انرژی را از محیط گرفته و منجر به سرد شدن و خاموشی پلاسما می‌شود. در واقع از طریق جذب اتم‌های هیدروژن روی سطح غبار و هم‌دمایی‌شان با سطح است که انرژی پلاسما هدر می‌رود و پلاسما تضعیف می‌شود.

همان‌طور که پیش از این اشاره شد، در پلاسمای منحرف کننده به دلیل دمای بالایی که وجود دارد اتم‌هایی که به طور فیزیکی جذب می‌شوند سریعاً تبخیر شده و تنها اتم‌هایی که به طور شیمیایی جذب شده‌اند برای تشکیل H_2 روی سطح باقی می‌مانند. بنابراین باید زمان اقامت روی سطح (τ_{des}) ، برای اتم‌هایی که جذب شیمیایی شده و با سطح هم‌دمای می‌شوند بسیار طولانی‌تر از بازه‌ی زمانی بین برخوردهای موفق $(\Delta\tau)$ روی سطح غبار باشد $(\Delta\tau \ll \tau_{\text{des}})$. بازه‌ی زمانی بین برخوردهای مؤثر روی سطح برابر است با

$$\Delta\tau = (n_{\text{H}} v_{\text{H}} \sigma_d)^{-1} \quad (12)$$

و زمان تبخیر یا واجذب گرمایی برای اتم‌های هیدروژن روی سطح غبار، این است

$$\tau_{\text{des}} = f_i^{-1} \exp(E_{\text{des}} / kT_d) \quad (13)$$

به طوری که انرژی واجذب E_{des} چنین تعریف می‌شود

$$E_{\text{des}} = E_i - \frac{1}{4} hf_i$$

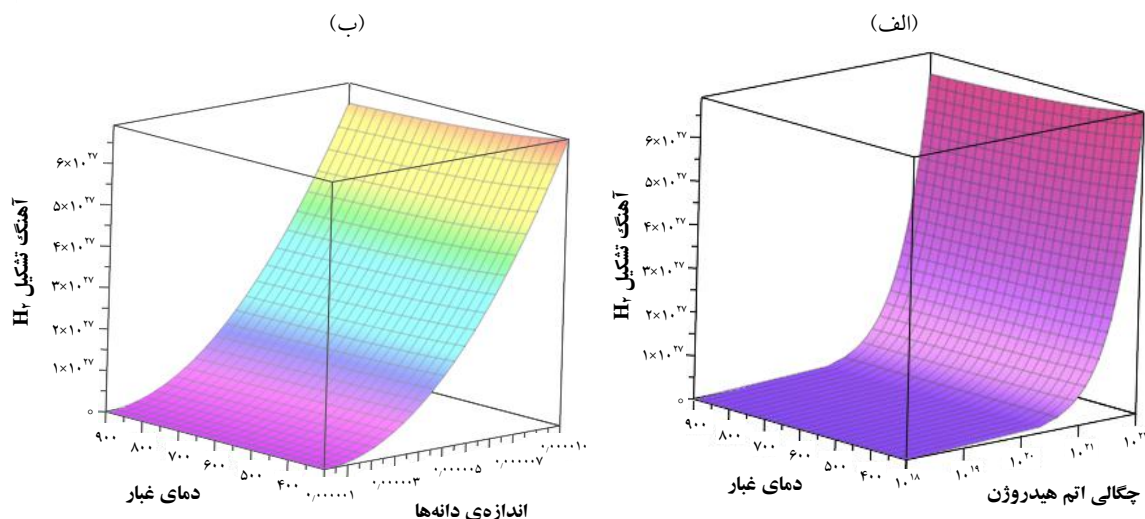
که در آن، E_i (E_p یا E_c) انرژی جای گاه جذب i و جمله‌ی دوم انرژی نقطه‌ی صفر است. در شرایط پلاسمای منحرف کننده، $\tau_{\text{des}} \cong 10^{-4} \text{ s}$ و $\Delta\tau \cong 10^{-14} \text{ s}$ مختلف در جدول ۲ داده شده است.

از طرفی اتم هیدروژن جذب شده روی سطح غبار می‌تواند از طریق جنب و جوش‌های گرمایی روی آن پخش شود. در طی فرایند پخش، سطح غبار انرژی اتم هیدروژن را جذب می‌کند و به تدریج انرژی متوسط اتم کاهش می‌یابد. بنابراین، زمان لازم برای پخش اتم هیدروژن روی سطح غبار این است

$$\tau_{\text{dif}} = f_i^{-1} \exp(E_{\text{dif}} / kT_d) \quad (14)$$

جدول ۲. مشخصات فیزیکی سطح‌های مختلف [۱۲]

A(Å)	α (Å)	v_c (s^{-1})	v_p (s^{-1})	E_{sc} (K)	E_{sp} (K)	E_s (K)	E_{chem} (K)	E_{phys} (K)	سطح
۲	۳	3×10^{13}	3×10^{12}	۳۵۰۰	۱۰۰	۲۰۰	۷۰۰۰	۷۲۰	کربن بی‌شکل
۲	۱.۵	3×10^{13}	3×10^{12}	۳۵۰۰	۱۰۰	-۲۳۰۰	۷۰۰۰	۷۲۰	گرافیت



شکل 5. (الف) آهنگ تشکیل H_2 روی سطح دانه‌ی کربن به شعاع $1\mu m$ به صورت تابعی از دمای غبار و چگالی اتم هیدروژن و (ب) دانه‌هایی با اندازه‌های مختلف.

پی‌نوشت‌ها

1. Physisorption
2. Chemisorption
3. Divertor plasma in Tokamak
4. A medium-sized Tokamak at General Atomics, USA
5. Large Helical Device (LHD)
6. Amorphous
7. Desorption
8. Quantum tunneling
9. Thermal hopping
10. Langmuir-Hinshelwood (LH)
11. Eley-Rideal (ER)
12. Plasma facing components

مرجع‌ها

- [1] J. Koppers, The hydrogen surface chemistry of carbon as a plasma facing material, Surf. Sci. Rep. 22 (1995) 249.
- [2] V. Philipps, J. Roth, A. Loarte, Key issues in plasma-wall interactions for ITER: a European approach, Plasma Phys. Cont. Fusion, 45 (2003) A17.
- [3] S.I. Krasheninnikov, A.Yu. Pigarov, R.D. Smirnov, T.K. Soboleva, Theoretical aspects of dust in fusion devices, Contrib. Plasma Phys, 50 (2010) 410-425.
- [4] X. Sha, B. Jackson, D. Lemoine, Quantum studies of eley-rideal reactions between H atoms on a graphite surface, J. Chem. Phys, 116 (2002) 7158.
- [5] T. Zecho, A. Guettler, X. Sha, B. Jackson, J. Kueppers, Abstraction of D chemisorbed on graphite (0001) with gaseous H atoms, Chem. Phys. Lett, 366 (2002) 188-195.
- [6] A.Yu. Pigarov, S.I. Krasheninnikov, Modeling of dust- particle behavior for different materials in plasmas, Phys. Plasmas, 14 (2007) 052504.
- [7] L. Hornekuer, E. Rauls, W. Xu, Z. Sljivancanin, R. Otero, I. Steensgaard, E. Luegsgaard, B. Hammer, F. Besenbacher, Clustering of chemisorbed H(D) atoms on the graphite (0001) surface due to preferential sticking, Phys. Rev. Lett, 97 (2006) 186102.
- [8] L. Hornekuer, Z. Sljivancanin, W. Xu, R. Otero, E. Rauls, I. Steensgaard, B. Hammer, F. Besenbacher, Metastable structures and recombination pathways for atomic hydrogen on the graphite (0001) surface, Phys. Rev. Lett, 96 (2006) 156104.
- [9] L. Jeloica, V. Sidis, DFT investigation of the adsorption of atomic hydrogen on a cluster-model graphite surface, Chem. Phys. Lett, 300 (1999) 157-162.
- [10] Y. Ferro, F. Marinelli, A. Allouche, C. Brosset, Density functional theory investigation of H adsorption on the basal plane of boron-doped graphite, J. Chem. Phys, 118 (2002) 8124.
- [11] A. Messiah, Quantum mechanics, Amsterdam: North-Holland (1961).



[12] S. Cazaux, A.G. Tielens, ERRATUM: H₂ formation on grain surfaces, *ApJ*, 604 (2004) 222.

[13] C. Thomas, T. Angot, J. Layet, Investigation of D (H) abstraction by means of high resolution electron energy loss spectroscopy, *Surf. Sci.*, 602 (2008) 2311-2314.

[14] S. Morisset, F. Aguillon, M. Sizun, V. Sidis, Wave-packet study of H₂ formation on a graphite surface through the Langmuir-Hinshelwood mechanism, *J. Chem. Phys.*, 15 (2005) 194702.

[15] N. Ohno, N. Ezumi, S. Takamura, S.I. Racheninnikov, A.Yu. Pigarov, Experimental evidence of molecular activated recombination in detached recombining plasmas, *Phy. Rev. Lett.*, 81 (1998) 818-821.

[16] J. Winter, Dust in fusion devices-a multi-faceted problem connecting high- and low-temperature plasma physics, *Plasma Phys. Control. Fusion*, 46 (2004) B583.

Archive of SID