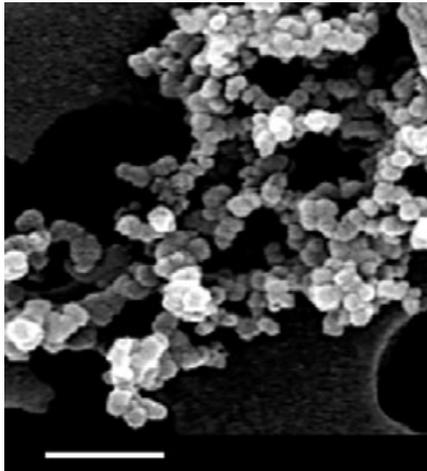


Nucléation de nanoparticules dans les Tokamak

A. Michau, S. Prasanna, A. Allouch, J. Mougnot, K. Hassouni

LSPM, CNRS - UPR 3407 CNRS, Université Sorbonne Paris Nord, Villetaneuse, France



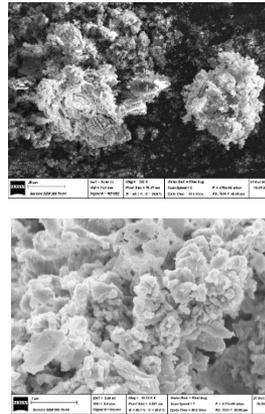
nanoparticules produites dans le plasma proche de la paroi.

Colloque FRFCM 19/05/2022

Motivations

- Formation de poussières

Observations sur WEST (IRFM)

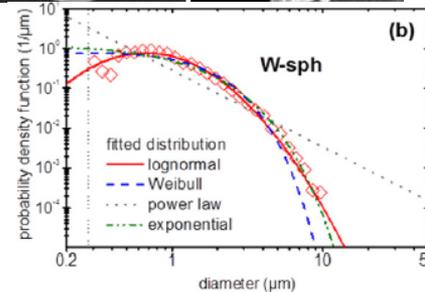
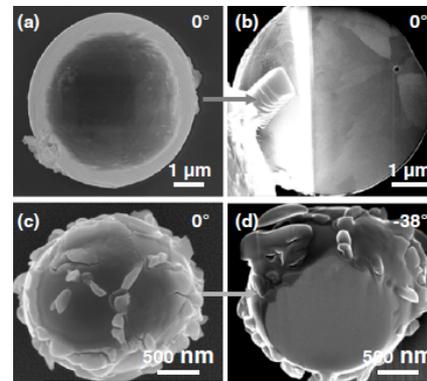
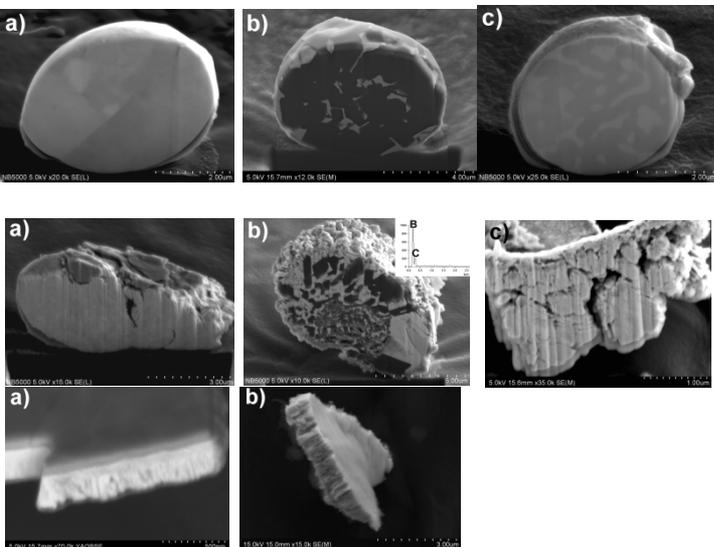


Nanoparticules contenant le matériau du divertor observées dans de nombreux tokamaks

Motivations

Formation de poussières :

Analyse **ex-situ** → production de **diverses structures micrométriques** à base de **W/B(/C)** dans ASDEX Upgrade



Conclusions :

- Observation de particules avec des tailles de 200 nm et plus.

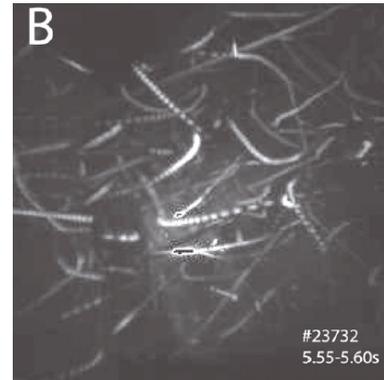
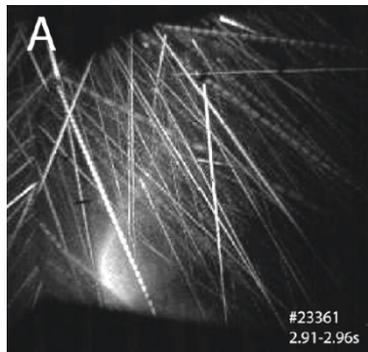
E. Fortuna-Zelesna et al. Phys. Scr. 2014 014066

Nucl. Fusion 54 073010

Motivations

Formation de poussières :

Visualisation **in-situ** par imagerie rapide → traces de particules micrométrique dans ASDEX Upgrade



Rode et al. Phys. Scr. 2009 014024

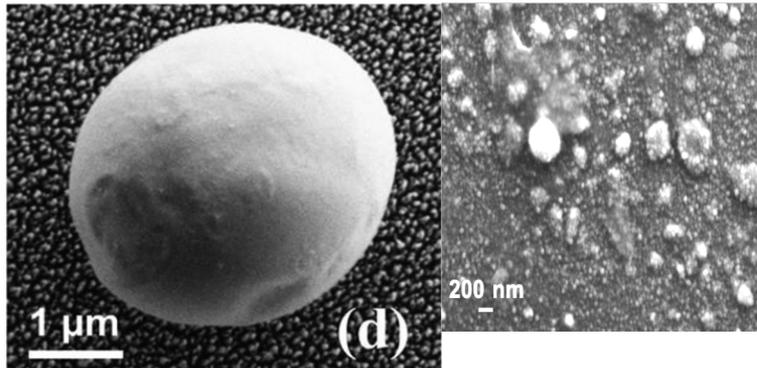
Conclusion :

- On peut 'voir' des particules micrométriques
- Pas de tailles inférieures (nanoparticules) : techniques de mesures ?

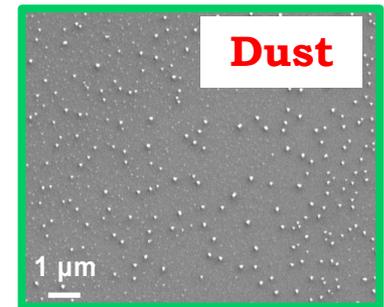
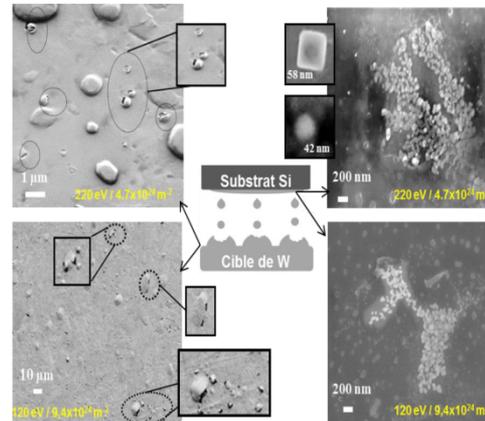
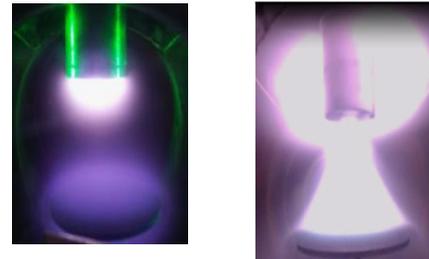
Motivations

- Travaux 'Labo' → La formation de **gouttelettes** lors d'évènements anormaux s'accompagne toujours de formation de **NP's**.

ARC



Décharge lumineuse



K. Ouaras et al. JNM 2016
K. Ouaras et al PoP 2017

Gouttelettes → nanoparticules↑↑↑↑

→ Blister burst et/ou pulvérisation

Motivations

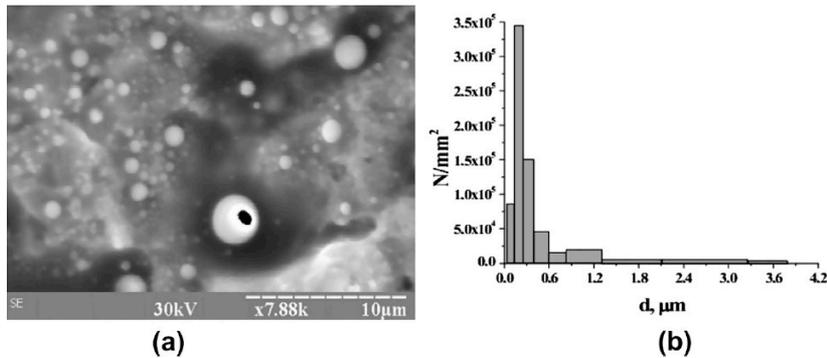


Fig. 3. SEM image tungsten surface (a) and size distributions (b) of re-solidified particles in crack volumes after 310 pulses of 0.75 MJ/m².

Même constat chez les collègues du
National Institute for Laser,
Plasma and Radiation
Physics(Roumanie)

Fusion de tungsten sous laser de
puissance

Goutelettes → nanoparticules

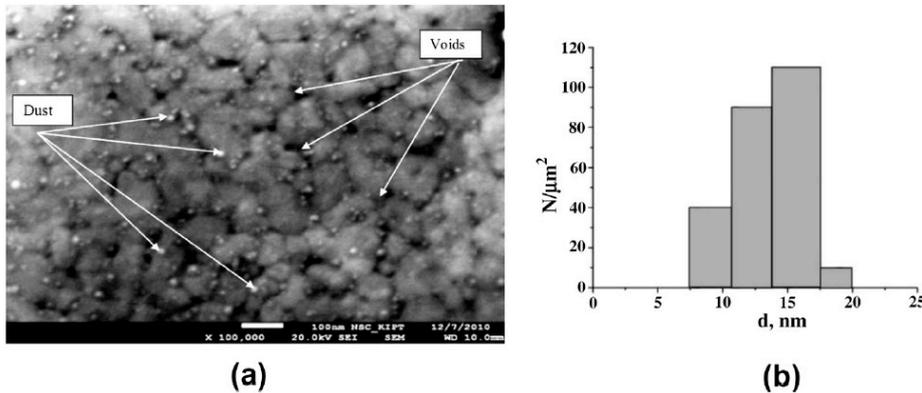


Fig. 5. SEM image (a) and size distribution (b) of re-deposited particles on the tungsten surface exposed plasma of 0.45 MJ/m².

Motivations : Problématiques des NPS

Pourquoi est-il important de comprendre et limiter la formation de poussières et plus particulièrement des petites, NPs :

- **Impacts possibles :**

- Problème de sécurité : réduction de H_2O en H_2 ou accumulation → **explosion**
- Problème de sécurité/pollution →
 - forte concentration → **pollution atmosphérique**
 - ad- ou ab-sorber du tritium → **pollution radioactive**
- Elles peuvent intervenir, même en transitoire, dans la marche/stabilité/confinement du plasma (**disruptions, nature des impuretés, etc.**)

- **Effet de taille :**

- Processus de surface d'autant plus important que la taille des particules est petite ⇔
surface spécifique = surface/volume $\propto 1/r$ [m^2/m^3]

Objectif

- Evaluer la possibilité de formation, éventuellement transitoire, de nanoparticules par IPS
- Que devient le tungstène une fois émis des surfaces ?
 - sous forme atomique : pulvérisation (régime détaché ou semi-détaché)
 - Sous forme de gouttelettes : évènements anormaux
- Quelles sont les mécanismes d'évolution du tungstène selon les conditions rencontrées dans le plasma de bord ?

Formations des Nps

Flux de **10 MW/m²** attendus sur le divertor en régime permanent avec des flux transitoires de **100 MW/m²**

⇒ **Erosion du divertor** = libération d'atomes de W

⇒ Transport dans le réacteur

⇒ Agrégation de la vapeur de W

⇒ Formation de poussières (solide ou liquide entre 1 nm et 1 mm) en volume

⇒ **Fonte locale de la paroi** = libération de goutte liquide

⇒ Transport

⇒ Vaporisation suivie d'agrégation

⇒ Formation de poussières

⇒ **Rupture de couches co-déposées instables** = libération de 'flake'

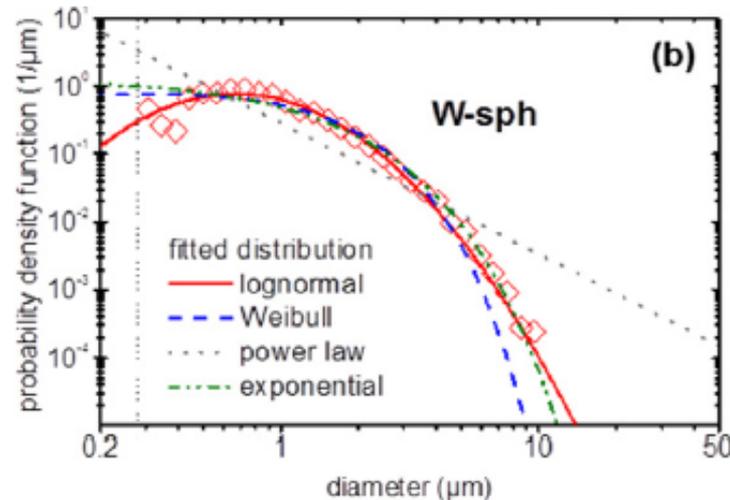
⇒ Noyau de nucléation de poussières

objectifs scientifiques

- Comprendre les **mécanismes de formation de poussières de tungstène et de Béryllium** dans différents régimes de plasmas :

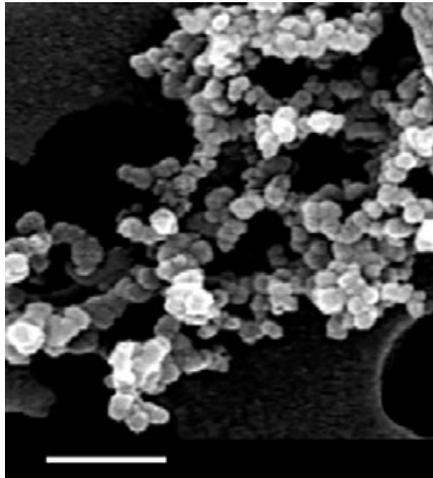
En particulier : Y a-t-il formation de **nanoparticules** 10-100 nm

Nanoparticules \Leftrightarrow **surface spécifique** $\uparrow\uparrow \Leftrightarrow$ problème de **sécurité** $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$

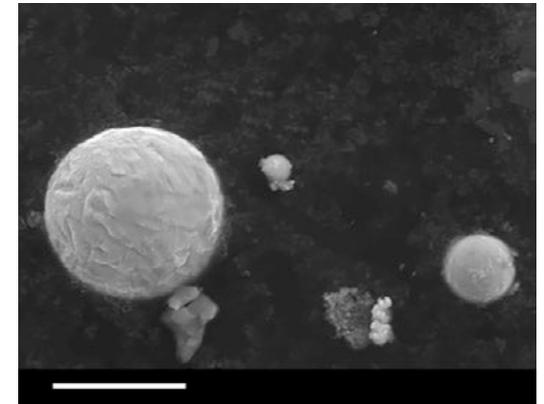


Travaux en cours au LSPM

Emission de W gazeux



Ejection de gouttes+évaporation



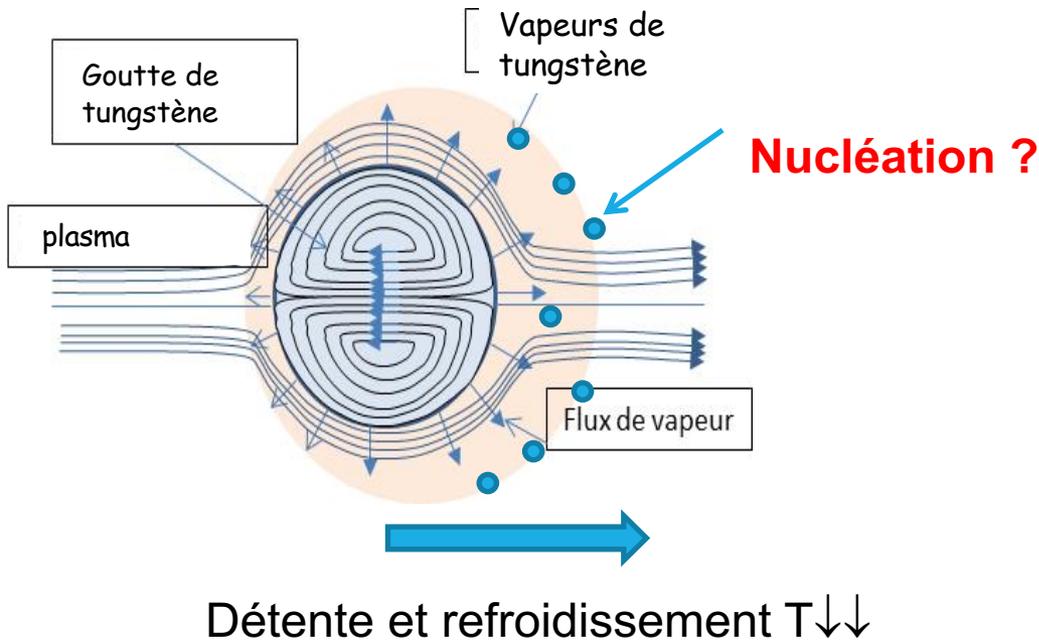
Nucléation en phase gazeuse (plasma de bord)
?

→ Développement de modèles décroissance moléculaire et dynamique d'aérosol

Outils : Thermodynamique/nucléation, croissance moléculaire/nucléation, charge des particules, coagulation, croissance par collage de surface, transport, fusion, évaporation, fragmentation, etc.

Formation de NP en présence de gouttelettes

- **Condensation** dans les **nuages de vapeurs** autour de **gouttelettes** émises en phase gazeuse lors **d'évènements anormaux** : disruptions (Coll. IRFM)



Scénario analysé :

- 1- Emission de gouttes liquides
- 2- Evaporation autour de la goutte
- 3- Détente des vapeurs → sursaturation
- 4- Nucléation de NPs
- 5- Croissance/coagulation

Outils d'étude :

- Modèles de transport
- Théories de la nucléation homogène
- Dynamique d'aérosols

Formation de NP en présence de fortes pulvérisations :régile semi-détaché ou détaché

Scénario analysé :

Présence de gaz rares multi-chargés → augmentation de la pulvérisation →
émission d'atome, voie cluster de la paroi → devenir de ces clusters -
croissance moléculaire ? → nucléation ?

Plasma de bord → ionisation → clusters chargés !

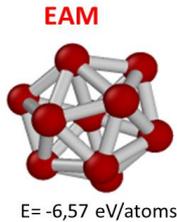
→ Développement de modèles de croissance moléculaire de W/Be

$W_n^{m+} + W^{p+} \rightarrow W_{n+1}^{(m+p)+}$ cinétique non connue

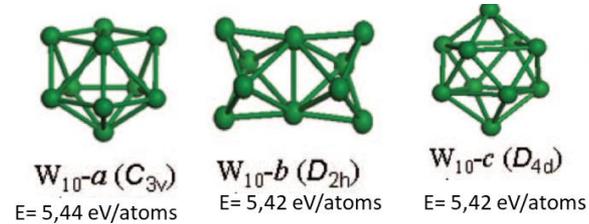
Pour les neutres des données existent produites en DM classique, on a donc
commencé par là

Détermination des structures neutres et chargées stables ↔ cibles de collisions dans les processus de croissance

Analyse par DM classique n'est pas adaptée



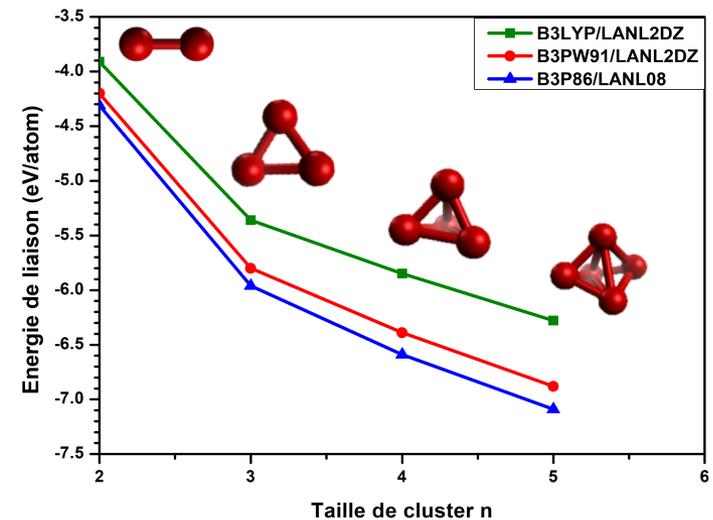
≠



isomère obtenu pour W_{10} par DM classique (EAM)

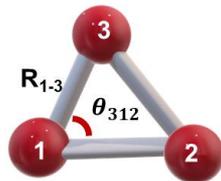
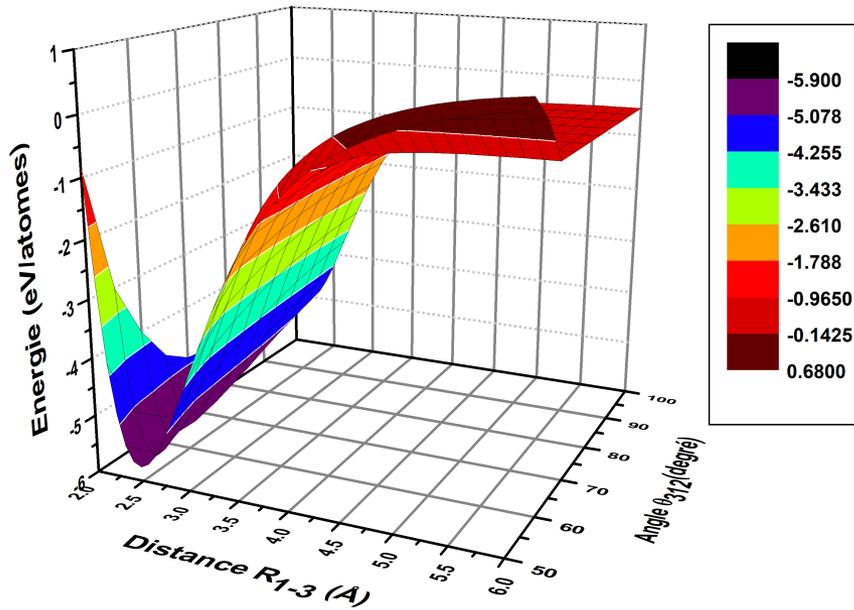
structures obtenues par DFT

**Développement d'une approche par
DFT et TD-DFT
Avec des PPC**

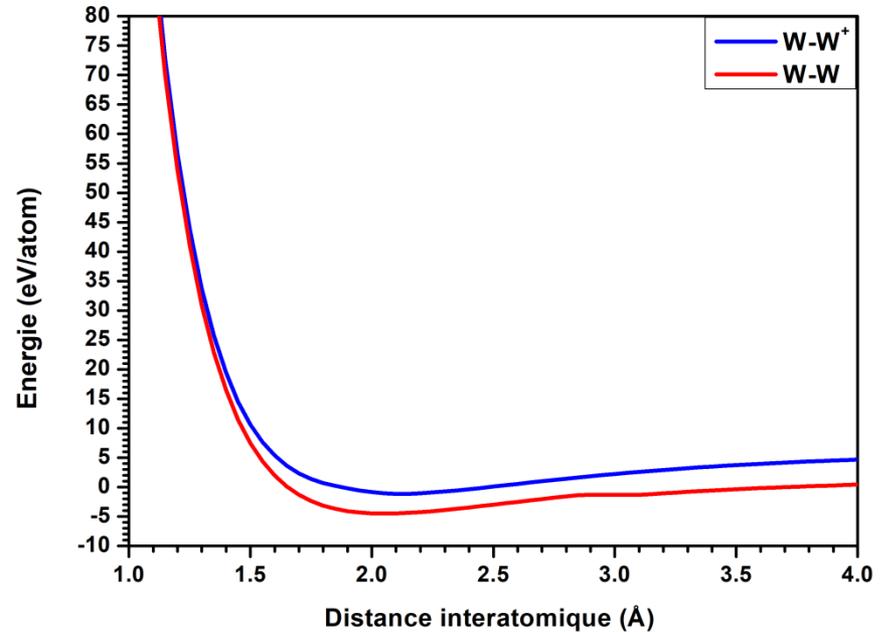


Construction des surfaces de potentiel d'interaction – exp : W^+-W_2

B3P86/LANL2DZ



B3P86/LANL2DZ



Conclusion

- Projet actuellement en cours
- Très peu de choses connues notamment sur les données collisionnelles $\rightarrow W_{n=20} ??$
- Nécessité de collaboration \rightarrow conditions plasmas - transitoires
- \rightarrow modèles simplifiés, type 'impuretés+' pour les codes de simulations plasma



Merci

LSPM – CNRS-UPR3407
Université Sorbonne Paris Nord
99 Av J. B Clément
93430 Villetaneuse
France

www.lspm.cnrs.fr

Tel: +33 1 49 40 34 54

Contacts :

khaled.hassouni@lspm.cnrs.fr

Armelle.michau@lspm.cnrs.fr

Swaminathan.prasanna@lspm.cnrs.fr

