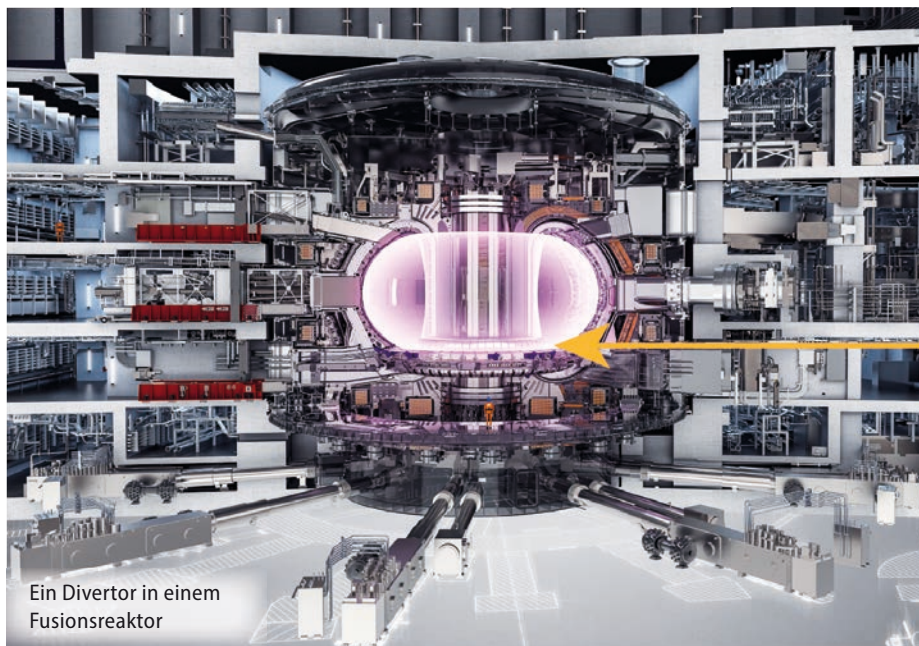
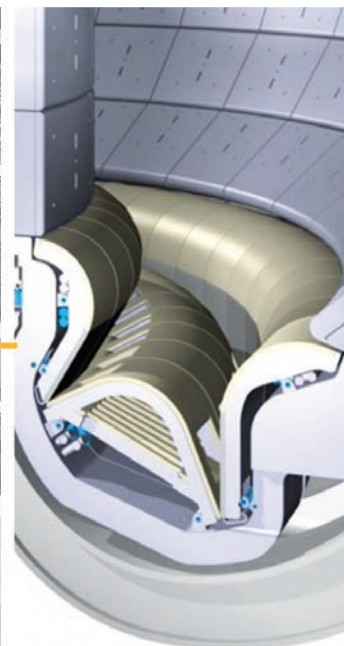


ITER



Ein Divertor in einem Fusionsreaktor



## Optimierte Herstellung

Multiphysikalische Modellierung hilft, Werkstoffe für den Einsatz in Fusionsreaktoren herzustellen.

Brianne Christopher

Um Fusionsenergie physikalisch und auch wirtschaftlich zu ermöglichen, sind Hochleistungs-Fusionsreaktoren zu entwickeln. Diese erfordern Hochleistungswerkstoffe. Um deren Herstellung zu optimieren, kommt die multiphysikalische Modellierung zum Einsatz.

In einem Fusionsreaktor leiten Divertoren Asche und andere Plasma-verunreinigungen aus dem Fusionsbehälter ab. Diese Komponenten müssen der rauesten Umgebung im gesamten Reaktor standhalten. Welches Material ist dafür die beste Wahl? Wolfram ermöglicht eine angemessene Betriebslebensdauer und kann enormen Teilchen- und Wärmeströmen, starkem Neutronenbeschuss sowie Plasmaerosion und thermischen Zyklen standhalten. Es besitzt eine hohe Wärmeleitfähigkeit, erzeugt keine Radioisotope mit langer Halbwertszeit und fängt, im Gegensatz zu anderen Materialien, nicht zu viel Wasserstoff ein.

Allerdings ist Wolfram meist spröde und kann in Verbindung mit Neutronenbeschuss und Überhitzung

während des Reaktorbetriebs weiter verspröden. Abhilfe kann Wolframfaser-verstärktes Wolfram ( $W_f/W$ ) schaffen. Dieses zähre Material besitzt eine Verbundstruktur, die Risse verhindert – ähnlich einer faserverstärkten Keramik.

Wolframfaser-verstärktes Wolfram lässt sich mittels chemischer Gasphasenabscheidung (Chemical Vapor Deposition, CVD) herstellen, die auch in der Halbleiterindustrie beliebt ist. Dabei werden Gasmoleküle an der Oberfläche eines beheizten Substrats adsorbiert und reagieren dann in einer Reaktionskammer. Durch ihre Wechselwirkung scheidet sich ein dünner, hochreiner Materialfilm auf dem Substrat ab. Forschende am Forschungszentrum Jülich und des Max-Planck-Instituts für Plasmaphysik haben diesen Prozess untersucht und optimiert.

### Modellierte CVD-Produktion

Einer der Schlüsselfaktoren für die  $W_f/W$ -Produktion mittels CVD ist die Wolfram-Abscheidungsrate. Dieser

Wert ist schwer vorherzusagen, da er von zahlreichen Parametern wie der Oberflächentemperatur und den Partialdrücken an den Reaktionsstellen abhängt, die wiederum von der Reaktorgeometrie, der Heiztemperatur, den Gasflussraten und der Gaszusammensetzung abhängen.

Bei der Vorhersage des CVD-Prozesses geht es vor allem darum, die Bildung von Poren im Wolframmaterial zu vermeiden. Während der Herstellung strömt Gas durch das Fasersubstrat, und Wolfram wird zwischen den Fasern abgeschieden, bis idealerweise der Bereich dazwischen aufgefüllt ist. Falls das sich abscheidende Wolfram Gasgebiete abdichtet, werden diese Gasgebiete von der Reaktanzufuhr abgeschnitten, sodass dort die Abscheidung stoppt und Poren zurückbleiben. Um die festigkeitsmindernde Porenbildung zu reduzieren, sind die Substratgeometrie und die Parameter des CVD-Prozesses anzupassen.

Das Ziel der Forschung am FZ Jülich war es, die Porosität in  $W_f/W$  zu reduzieren. Dafür galt es zunächst, die

Gleichung für die W-Abscheidungsrate zu finden. Die existierende Literatur über CVD für Wolfram ist teilweise widersprüchlich. Doch einem wissenschaftlichen Mitarbeiter am FZ Jülich gelang es, eine neue Ratengleichung für den CVD-Prozess zu finden, die diese Kontroversen auflöst.<sup>1)</sup>

Hierfür entwarf er einen experimentellen Einzelfaseraufbau mit gut bekannten Randbedingungen (Abb. 1). Mithilfe der COMSOL Multiphysics®-Software und einer Parameterstudie konnte die Ratengleichung abgeleitet werden. Diese diente dazu, die  $W_f/W$ -Produktion mit mehreren Fasern zu modellieren. Hierfür kam erneut COMSOL Multiphysics® zum Einsatz, gefolgt von einer Parameteroptimierung. Die resultierenden Parameter wurden erfolgreich experimentell eingesetzt.

### Ein Multiphysikmodell entwickeln

Der Einzelfaseraufbau erlaubte es zu untersuchen, wie schnell das Wolfram wächst und wie diese Wachstumsrate von der Temperatur und vom Partialdruck abhängt. In der neuen Ratengleichung variiert die Reaktionsordnung von Wolframhexafluorid ( $WF_6$ ) zwischen eins und null, abhängig von der Temperatur und vom  $WF_6$ -Partialdruck. Mithilfe numerischer Modellierung ließen sich die Fluidynamik der Gasgemische, die Wärmeübertragung der thermischen Verluste sowie die Chemie und die Ratengleichungen für die chemischen Reaktionen an der Abscheidungsfläche untersuchen.

Ein makroskaliges CVD-Reaktormodell lieferte die Partialdrücke als Input für mikroskalige instationäre Simulationen. Dazu wurden die auf benachbarten W-Fasern wachsenden W-Schichten sowie der Oberfläche-zu-Oberfläche-Kontakt der W-Schichten und die Porenbildung modelliert. Durch den Vergleich der Experimente für die Abscheiderate, die Porenstruktur und die relativen Dichten des CVD-Prozesses von  $W_f/W$  wurden diese Modelle validiert

1) L. Raumann, Modeling and validation of chemical vapor deposition for tungsten fiber reinforced tungsten, Dissertation, FZ Jülich (2020), <http://hdl.handle.net/2128/26033>

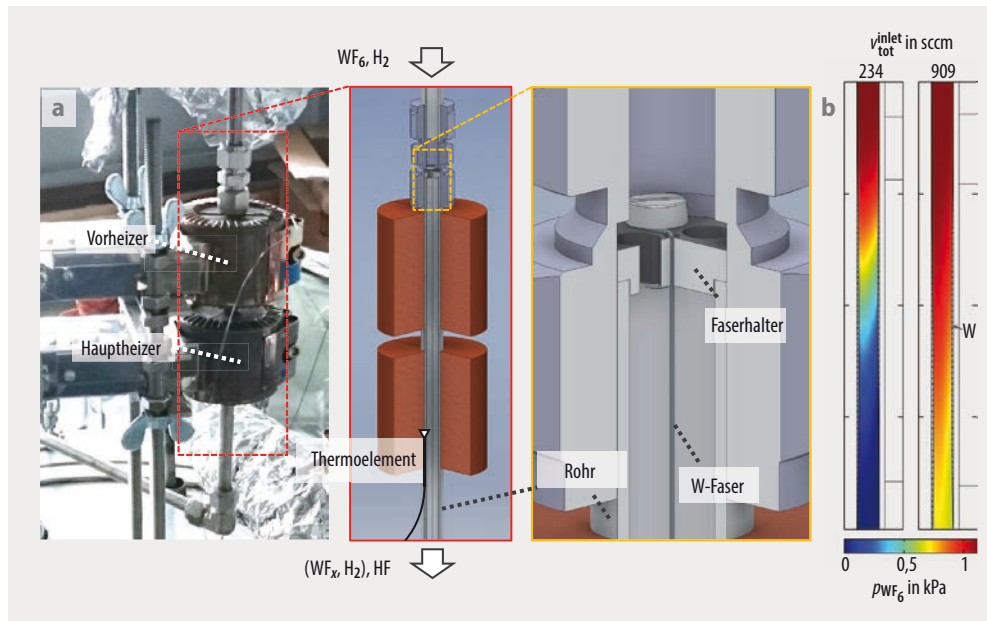


Abb. 1 a) Experimenteller Versuchsaufbau zur Ermittlung der neuen Ratengleichung für die Wolframabscheidung. b) Simulierte  $WF_6$  (Präkursor)-Partialdruckverläufe bei verschiedenen Gasflussraten.

(Abb. 2). Das Multifasermodell half, die simulierte und später die experimentelle Materialdichte zu verbessern.

Derzeit ist geplant, das validierte Modell auf eine 3D-Geometrie anzuwenden, um die  $W_f/W$ -Produktion weiter zu skalieren. Dazu ist ein neuer Ansatz nötig, bei dem das W-Gewebe auf eine beheizte Spule aufgewickelt und dabei direkt beschichtet wird. Dadurch ist das Stapeln der Gewebeschichten bei geschlossener Kammer möglich, sodass alle Gewebelagen in einem CVD-Prozess beschichtet werden können. Dies verringert die Gefahr der Kontamination.

Die Hoch-Skalierung des Produktionsprozesses bietet neue Perspektiven für die Fusionsenergie. Durch das verbesserte Verfahren ist es möglich eine Gewebelage in 30 Minuten statt fünf Stunden zu beschichten. Optimierte Produktionsprozesse für Hochleistungswerkstoffe machen Fusionsenergie sowohl möglich als auch kosteneffizient.

### Die Autorin

Brianne Christopher, Senior Content Manager, COMSOL, Inc.

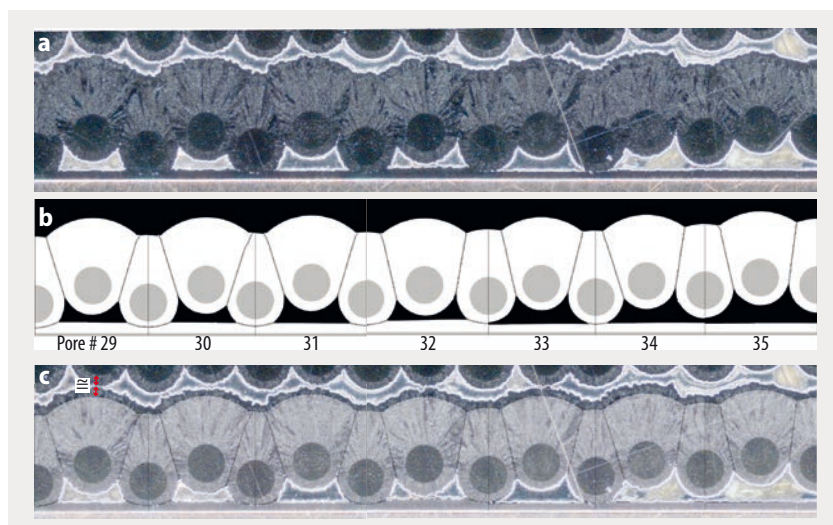


Abb. 2 Die experimentellen Ergebnisse der Porenbildung (a) stimmen sehr gut mit den Simulationen (b) überein. In c) sind beide Ergebnisse überlagert.