

## 氦在材料中基于扩散机理的热释放特征\*

李仁顺<sup>1)</sup> 周宇璐<sup>2)1)</sup> 张宝玲<sup>1)</sup> 邓爱红<sup>2)</sup> 侯 氢<sup>1)†</sup>

1) (四川大学原子核科学技术研究所辐射物理及技术教育部重点实验室, 成都 610064)

2) (四川大学物理科学与技术学院, 成都 610064)

(2010年6月18日收到; 2010年7月28日收到修改稿)

以随机扩散理论为基础, 研究该机理下材料中氦的热释放可能呈现的特征, 考察了氦的初始深度分布和扩散系数等因素对氦的热释放率的影响; 阐明了随机扩散模型下和脱附模型下的氦释放特征之异同; 指出对实验观察到的热解析谱的分析应和基底中氦的深度分布的分析以及氦的聚集状态的分析相结合, 才能对氦的热释放机理给出正确的理解和判断.

**关键词:** 随机扩散, 热释放, 氦

**PACS:** 66.30.J-, 61.72.-y, 61.80.Az

## 1. 引言

材料中的氦行为是核材料领域关注的重要问题. 以重要的储氦材料钛为例, 由于氦衰变会产生氦, 氦的扩散与聚集及氦的释放会影响到储氦元件的使用寿命<sup>[1-3]</sup>. 另外, 材料中的氦行为在纳米结构薄膜处理等技术领域, 近年来也同样受到关注<sup>[4-11]</sup>. 研究材料中氦行为和状态的实验方法有多种<sup>[12,13]</sup>, 如离子束分析方法, 正电子湮没法, 以及更直接的透射电镜观察等. 本文将涉及的是这些方法中的热解析法.

热解析法因其具有简单实用的优点, 而被广泛用于材料表面物理化学吸附和反应行为的研究. 对热解析谱的分析通常都基于化学脱附模型, 既对应某脱附通道, 热解析率可表示为<sup>[14]</sup>

$$R = N^m K_m^0 \exp\left(-\frac{E_a^{(c)}}{k_B T(t)}\right), \quad (1)$$

这里  $T(t)$  为基底温度, 是时间  $t$  的函数;  $E_a^{(c)}$  是该脱附通道的脱附激活能;  $N^m$  表示关键步骤中参与的氦原子数的影响因子;  $K_m^0$  为参与解析的氦原子的振动频率. 具体在氦的热解析实验方面, 人们观察到从室温开始逐渐对材料加热时氦的热解析谱中会出现数个释放峰<sup>[15-18]</sup>, 对这些释放峰的产生机理, 不同实验组可能给出不同理解, 但都以脱附模型为基

础. 例如, 一种观点认为, 晶体中的氦, 会通过自陷俘机理形成氦——空位复合物, 并聚集成团<sup>[19,20]</sup>. 同时, 由于材料中固有缺陷的存在, 或者氦引入时产生的缺陷也会导致氦的不同捕陷机理, 使氦处于不同的聚集状态. 当对材料加热, 各种状态下的氦原子动能增大到激活能时, 便会从材料中逃逸出来. 由于不同状态下的氦原子有不同激活能, 所以可认为热解析谱中不同释放峰位对应着不同状态下的氦原子的解析过程. 以氟化钛中氦的热解析谱为例, Vedenev 报道了氟化钛中氦的热解析结果, 其结果显示从室温到 1227 K 温区有五个  $^3\text{He}$  释放峰<sup>[15]</sup>, 认为这五个峰对应的氦原子状态分别是氟化钛表面晶粒内的  $^3\text{He}$ ,  $^3\text{He}$  泡、小的氦原子团簇、空穴中的  $^3\text{He}$  和晶界固溶液中的  $^3\text{He}$ . 王海峰等<sup>[16]</sup> 的实验则表明, 当从室温升高到 1300 K 时, 氦热解析谱存在四个释放峰, 认为这四个峰对应的氦的状态分别是贯穿至表面的氦泡、近表面的氦、体相中的氦泡和氦的小团簇. 值得注意的是, 热解析法是一种研究材料中氦行为的间接测量方法, 为解释氦的热解析谱所提出的各种微观机理并非直接的观察结果. 事实上, 氦在材料中具有一定的深度分布, 脱附模型在这里给出的只是一种唯象的数学描述, 而不是对真实物理过程的描述. 要理解实验中的热解析谱所反映的真实的物理过程, 有必要从理论上分别研究各物理过程产生的热解析特征.

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10775101) 和国家 ITER 计划专项 (批准号: 2009GB106004) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: qhou@scu.edu.cn

本文目的是以扩散理论为基础,考察只有扩散的时候,材料中氦的热释放可能呈现的特征及其与氦的深度分布和扩散系数等因素的关系,并讨论了以扩散理论为基础氦的热释放率与升温速率的关系,以及根据此关系反演扩散激活能的可能性.

## 2. 模型与计算方法

由于氦具有闭壳层的电子结构,通常不溶于基底材料,因此氦原子(包括小氦原子团簇)可以在基底中较快的扩散<sup>[21]</sup>.当两个氦原子或氦团簇相遇,即可发生融合而形成大的氦团簇<sup>[22,23]</sup>.但如果基底材料中氦浓度较低,发生融合的概率很小,可认为氦在材料中作自由随机行走,当其行走到材料表面时就会从表面逃逸,不会再返回到材料中,即氦原子从材料中释放出去,而材料表面则可认为是一个吸收壁.假定的深度方向为  $z$  方向,表面在  $z=0$  处,根据随机行走理论,材料中  $(x_0, y_0, z_0)$  处的氦原子

在经历  $\Delta t$  时刻后运动到  $(x, y, z)$  处的概率可表示为<sup>[24]</sup>

$$P((x, y, z), \Delta t; (x_0, y_0, z_0)) = \frac{1}{(4\pi D\Delta t)^{\frac{3}{2}}} \left[ \exp\left(\frac{-(z-z_0)^2}{4D\Delta t}\right) - \exp\left(\frac{-(z+z_0)^2}{4D\Delta t}\right) \right] \times \exp\left[\frac{-((x-x_0)^2 + (y-y_0)^2)}{4D\Delta t}\right], \quad (2)$$

其中  $D$  为某一温度下所对应的扩散系数

$$D = D_0 e^{-Q/k_B T}, \quad (3)$$

$D_0$  为前因子,  $k_B$  为波尔兹曼常量,  $Q$  为扩散激活能,  $T$  为温度. 在热解析实验中,温度  $T$  随时间线性递增,即:  $T = T_0 + at$ , 这里  $T_0$  为初始温度,  $a$  为升温速率.

进而假定在  $t$  时刻氦的深度分布为  $n(z, t)$ , 由(2)式可以得到  $t + \Delta t$  时刻的深度分布为

$$n(z, t + \Delta t) = \int_0^\infty \left[ \frac{1}{2(\pi D\Delta t)^{\frac{1}{2}}} \left( \exp\left(\frac{-(z-z_0)^2}{4D\Delta t}\right) - \exp\left(\frac{-(z+z_0)^2}{4D\Delta t}\right) \right) \right] n(z_0, t) dz_0 \times \iint_{\substack{-\infty < x < \infty \\ -\infty < y < \infty}} \frac{1}{4\pi D\Delta t} \exp\left[\frac{-((x-x_0)^2 + (y-y_0)^2)}{4D\Delta t}\right] dx_0 dy_0 = \int_0^\infty \left[ \frac{1}{2(\pi D\Delta t)^{\frac{1}{2}}} \left( \exp\left(\frac{-(z-z_0)^2}{4D\Delta t}\right) - \exp\left(\frac{-(z+z_0)^2}{4D\Delta t}\right) \right) \right] n(z_0, t) dz_0. \quad (4)$$

从  $t$  时刻到  $t + \Delta t$  时刻间,基底中氦原子的变化量,即氦释放量则可表示为

$$\delta N(t, \Delta t) = \int_0^\infty n(z, t) dz - \int_0^\infty n(z, t + \Delta t) dz. \quad (5)$$

从氦的初始深度分布  $n(z, t=0)$  即  $n(z, 0)$  出发,对(4)和(5)式采用数值积分,可以得到各个时刻材料中氦的释放量或释放速率  $R(t) = \delta N(t, \Delta t) / \Delta t$ .

## 3. 结果与讨论

### 3.1. 初始深度分布对氦热释放的影响

实验中将氦引入到材料中有很多种方法,例如中子辐照、磁控溅射、氦离子注入和氟化物衰变等等,其中比较常用的是氦离子注入方法和氟化物衰

变技术. 无论何种方法,氦在材料中都有一定的深度分布. 例如,用 keV—MeV 的氦离子轰击样品,可在样品 100 nm— $\mu\text{m}$  级深度范围内引入任意浓度的氦. 如果注入能量是单能,氦在材料中的深度分布呈 Pearson 分布,而氟化物样品在早期时氦的分布则可认为是均匀的.

为了考察氦的初始深度分布对其热释放的影响,我们首先模拟计算了氦注入能量分别为 1.5 MeV 和 2.0 MeV,基底为硅时的情形. 氦注入到基底中的深度分布采用离子输运双群模型计算得到<sup>[25]</sup>. 然后,以此深度分布作为初始的深度分布,计算氦的热释放率随时间的变化. 基底的初始温度为 300 K,升温速率 0.4 °C/s,这是热解析实验中可实现的. 氦在基底中的扩散系数的前因子和扩散激活能分别取为  $D_0 = 1.57 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ ,  $Q = 1.6 \times$

$10^{-19}$  J. 需要说明的是,本文主要探讨的是氮的热释放机理和特征,氮在材料中的扩散系数没有精确的实验或理论数据可得<sup>[26]</sup>,因此这里用的扩散系数只在数量级意义上准确.关于扩散系数取值对计算结果的影响,将在(3.2)节中讨论.

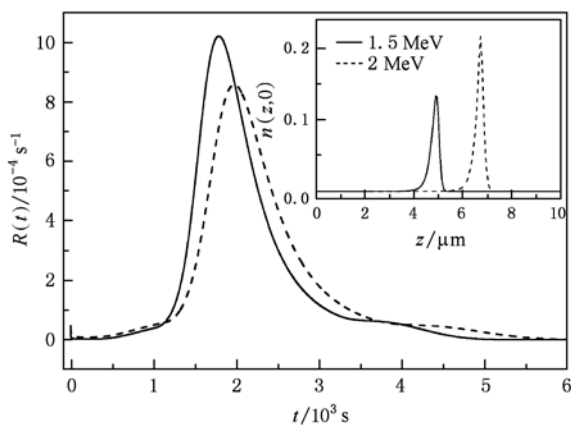


图1 注入能量为 1.5 MeV(实线)和 2.0 MeV(虚线)时,氮释放速率与时间的关系(插图为氮的初始深度分布)

图1展示了我们的计算结果.可以看出,氮的热释放随时间的变化关系大致可以分为三个阶段,第一个阶段是从开始到对材料加热到 1000 s 左右,在这个阶段氮的释放速率很小即意味着只有极少数的氮从材料中释放出来.第二个阶段是从 1000 s 到 4000 s,从 1000 s 开始已经有少量的氮从材料中释放,并且随着时间的增加释放量会随之增加,当加热到 2000 s 左右时氮的释放率达到最大出现了氮的释放峰,从 2000 s 开始氮的释放率会随着时间的增加而减少,到 4000 s 时只观察到少数的氮释放.第三个阶段是从 4000 s 到 6000 s,在这个阶段氮的释放速率很小并且随着时间的增加氮的释放率趋于 0.比较不同注入能量下的热释放率,可以看出,热释放峰出现的时间和初始的氮深度分布有关.1.5 MeV 注入条件下的热释放峰出现的时间要早于 2.0 MeV 注入条件下的热释放峰,1.5 MeV 注入条件下的热释放峰峰宽比 2.0 MeV 注入条件下的热释放峰稍窄.这是因为 1.5 MeV 注入条件的氮在材料中的分布要比注入能量为 2.0 MeV 时的更趋于材料的表面,当对材料进行加热时接近表面的氮原子会更快的从材料中释放出来,由于氮释放所需时间相对比较短,所以释放峰的峰宽相对较窄.

如图1的插图所示,本例中氮在基底中的初始分布集中在距表面 4.8  $\mu\text{m}$ (1.5 MeV)和 6.7  $\mu\text{m}$  的深度附近,深度分布的半高宽约 0.5  $\mu\text{m}$ .那么,如果

氮在基底中的分布是均匀的(对应于氟化物中氮),是否也有释放峰?图2展示了当氮在基底的初始分布是均匀的时候,氮的热释放随时间的变化关系.这里采用的扩散系数和升温速率与图1所示的情形相同.可以看出,当氮在基底中的初始分布是均匀的时候,和离子注入时的情形相比有大致相同的特征:在 1500 s 以前释放很少,在 2000 s 左右出现释放峰,峰宽为 3000 s 左右,在 4000 s 以后只有很少的氮释放.可见,氮通过扩散机理释放总会出现至少一个释放峰.根据(3)式可知当温度较低时扩散系数较小,氮只会很小的范围内扩散,因此在第一个阶段只有很小的释放率;在第二个阶段随着时间的增加扩散系数变大,氮在材料中的扩散越来越快,所以这时释放速率会越来越大,在 2000 s 时达到最大值,在 2000 s 以后虽然温度一直在增加扩散系数依然在变大,由于随着时间的增加越来越多的氮已经从材料中释放出去或向基底更深处扩散,因此释放速率越来越小以至趋于 0.

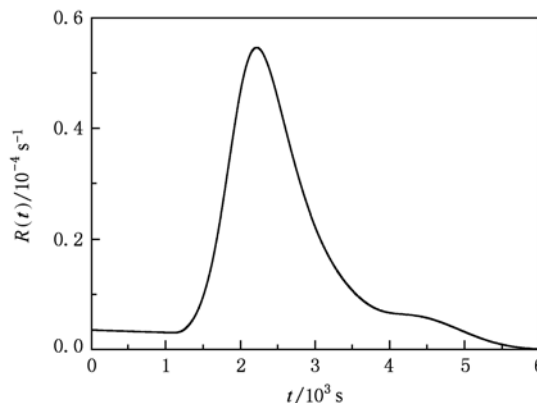


图2 材料中均匀分布氮的热释放速率与时间的关系

考虑到材料的离子束处理实验中,往往会采用不同能量档注入氮,从而在基底中产生分层的氮深度分布.在多层膜实验中,材料中的氮也会趋于在材料界面处聚集,氮的深度分布也是分层的.因此,在其他计算条件不变的情况下,我们进一步计算了氮的初始深度分布具有分层特征时的热释放率随时间的变化关系.

图3展示了相应计算结果.可以看出氮的热释放有两个释放峰(实线c),从释放峰出现的时间看第一个峰出现的比较早出现在 2000 s 左右,第二个峰出现在 3500 s 左右.从峰形上来看第一个峰的峰值要略小于第二个峰的峰值,第一个峰的峰宽要比第二个峰宽要略窄.图中还给出了氮的初始深度分

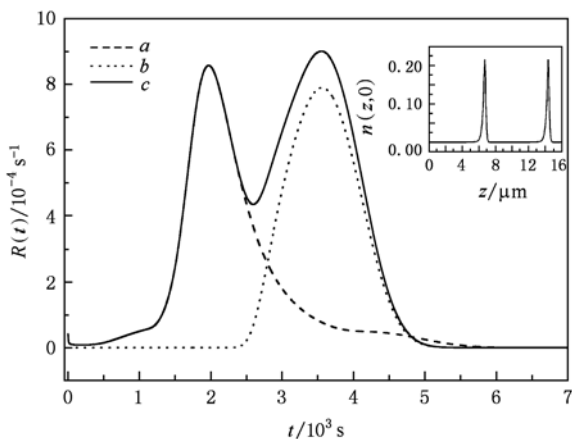


图3 氦的初始深度分布有两个高浓度区时(如插图所示)的氦释放速率与时间的关系(实线c). 虚线a:较浅处氦对释放速率的贡献;点线b:较深处氦对释放速率的贡献

布分别只有第一个峰和第二个峰时的热释放率(虚线a和点线b). 可以看出在2500 s以前曲线a与曲线c完全符合,这就说明曲线c中的第一个释放峰来自较浅处的氦的贡献. 在2500 s之后较深处的氦的对热释放率的贡献逐渐增加,可以明显看出c曲线的第二个释放峰是由两处氦原子共同形成的但主要贡献是第二处的氦原子. 在热解析实验中,经常会观察到若干个氦的释放峰并且经验的认为不同的释放峰相应代表着氦原子不同的解析过程,以上结果表明,当氦的初始深度分布有分层结构时,单纯的扩散机理也会导致若干个热释放峰,因此,对实验观察到的热解析谱的分析应和基底中氦的初始深度分布的分析相结合,才能对氦的热释放机理给出正确的理解和判断.

### 3.2. 扩散系数对氦热释放的影响

前面提到,由于没有精确氦扩散系数可得,这里采用的扩散系数只有数量级上的意义. 因此,有必要考察氦的热释放率对其扩散系数的依赖性,即所谓敏感性研究. 在(3)式中,温度是实验可控参数,这里要考察的是扩散系数前因子  $D_0$  和扩散激活能  $Q$  对热释放的影响.

首先,我们固定扩散激活能  $Q = 1.6 \times 10^{-19}$  J, 升温速率仍为  $a = 0.4^\circ\text{C}/\text{s}$ , 氦的初始深度分布用2.0 MeV注入能量下氦在硅中的深度分布. 因为在前面我们已经对  $D_0 = 1.57 \times 10^{-7}$   $\text{m}^2/\text{s}$  时进行了模拟,并且讨论了这种情况下的热释放特征,所以我们以  $D_0 = 1.57 \times 10^{-7}$   $\text{m}^2/\text{s}$  为参照观察分别将  $D_0$

扩大、缩小2倍计算热释放率与时间的关系,以考察前因子  $D_0$  的影响. 计算结果如图4所示. 可以看出,当  $D_0$  缩小2倍( $D_0 = 7.85 \times 10^{-8}$   $\text{m}^2/\text{s}$ ),由于  $D_0$  变小扩散系数相应变小,热释放速率变慢,从而使得释放峰出现的时间会相对晚一点,与  $D_0 = 1.57 \times 10^{-7}$   $\text{m}^2/\text{s}$  的情形相比,释放峰滞后140 s,同时峰值会变小而峰宽变宽. 反之,当把  $D_0$  扩大2倍,释放峰出现的时间会提前160 s,峰值会变大,但峰宽会变窄.

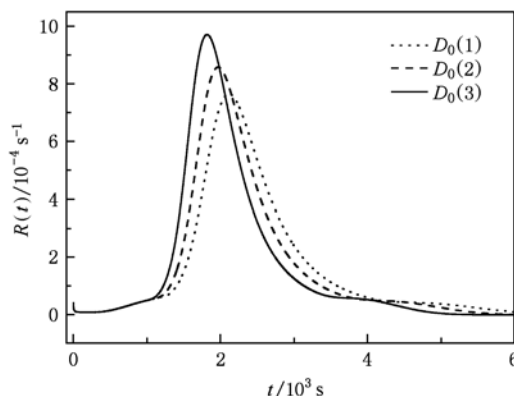


图4 用不同前因子  $D_0$  计算得到的热释放率. 实线为  $D_0 = 7.85 \times 10^{-8}$   $\text{m}^2/\text{s}$ ;虚线为  $D_0 = 1.57 \times 10^{-7}$   $\text{m}^2/\text{s}$ ;点线为  $D_0 = 3.14 \times 10^{-7}$   $\text{m}^2/\text{s}$

其次,我们固定扩散系数前因子为  $D_0 = 1.57 \times 10^{-7}$   $\text{m}^2/\text{s}$ ,其他条件不变的情况下,分别计算了扩散激活能  $Q$  分别为  $8.0 \times 10^{-20}$  J,  $1.6 \times 10^{-19}$  J 和  $3.2 \times 10^{-19}$  J 时热释放率与时间的关系. 图5展示了计算结果. 这里我们以  $Q = 1.6 \times 10^{-19}$  J 的情形为参照,通过图5看出将激活能扩大一倍时,释放峰会晚3000 s出现,峰值变小,峰宽变宽. 而激活能缩小一

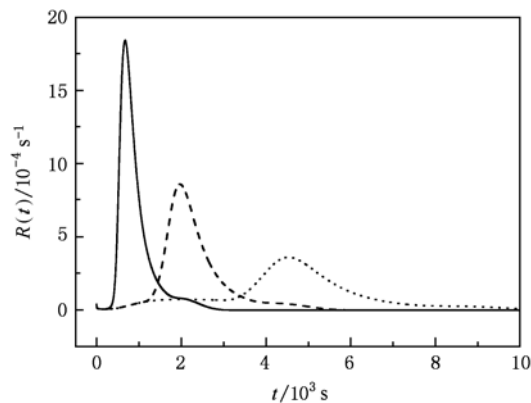


图5 用不同激活能  $Q$  计算得到的热释放率. 实线为  $Q = 8.0 \times 10^{-20}$  J;虚线为  $Q = 1.6 \times 10^{-19}$  J;点线为  $Q = 3.2 \times 10^{-19}$  J

倍时,释放峰出现的时间会早 1000 s 出现,峰值变大,峰宽变窄. 释放峰出现的时间与扩散激活能呈非线性关系,当扩散激活能较大,释放峰出现的时间与扩散激活能有较敏感的依赖关系.

Chen 等<sup>[21]</sup>曾用分子动力学模拟了氦原子、氦二聚体和三聚体在钛基底中的扩散行为,其模拟结果显示三者的扩散系数可以有数倍到数量级的差别. 本文关于氦释放率对扩散系数的敏感性研究表明,由氦释放峰的位置足以分辨出由氦原子、氦二聚体和三聚体引起的氦释放. 可以预期,基底中不同构形的氦团簇通过扩散机理释放也可产生多个可分辨的热释放峰.

### 3.3. 热释放率与升温速率的关系

前面提到,实验中对热解析谱的分析通常都以化学脱附模型为基础,根据该模型,热释放峰对应的温度  $T_p$  与升温速率  $a$  和脱附激活能  $Q_d$  之间存在关系

$$2\ln T_p - \ln a = Q_d/k_B T_p + A, \quad (6)$$

这里  $A$  为常数. 本文基于随机扩散模型的计算结果表明热释放峰对应的温度 ( $T_p = T_0 + a \cdot t_p$ ) 与氦的初始深度分布有关,在随机扩散模型下由(6)式表示的关系是否合适?

我们以注入能量分别为 0.4, 1.5 和 2.0 MeV, 氦在硅中深度分布作为初始分布,升温速率  $a$  以 0.2°C/s 为间隔,计算了  $a$  取值从 0.2°C/s 到 2.0°C/s 的热释放率. 扩散系数前因子和扩散激活能分别取为  $D_0 = 1.57 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ ,  $Q = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$ . 如图 6 展示了得到的  $2\ln T_p - \ln a$  与  $1/T_p$  的关系.

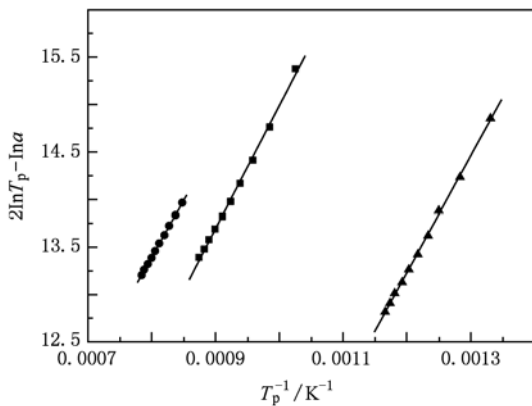


图 6 改变升温速率所得到的  $2\ln T_p - \ln a$  与  $1/T_p$  的关系. ▲: 注入能量 0.4 MeV; ■: 注入能量 1.5 MeV; ●: 注入能量 2.0 MeV; 实线: 拟合曲线

可以看出,通过这三种情况下得到的  $2\ln T_p - \ln a$  都于与  $1/T_p$  呈很好的线性关系,根据(6)式可以计算得到相应激活能  $Q$ ,分别为  $1.69 \times 10^{-19} \text{ J}$ (注入能量 0.4 MeV),  $1.79 \times 10^{-19} \text{ J}$ (注入能量 1.5 MeV) 和  $1.85 \times 10^{-19} \text{ J}$ (注入能量 2.0 MeV),和设定的扩散激活能 ( $Q = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$ ) 显然不同,氦的初始分布越深,这一偏差越大. 由此可见,  $2\ln T_p - \ln a$  与  $1/T_p$  是否是线性关系并不能作为判断氦释放机理是否为化学脱附的依据. 当基底中的氦具有一定的深度分布时,由(6)式得到的激活能只能视为表征氦释放的一个经验参数,不是真实物理过程所对应的物理量. 同时,我们也看到,当氦的初始分布接近表面时,例如注入能量为 0.4 MeV 时,由(6)式得到的激活能与扩散激活能接近,表明此时的氦释放已可近似视为表面脱附.

## 4. 结 论

本文研究了随机扩散机理下材料中氦的热释放可能呈现的特征及其与氦的深度分布和扩散系数等因素的关系. 研究发现氦的热释放与氦在基底中的初始深度分布有关,当初始深度分布有分层结构时,氦的热释放可能表现为多个热释放峰;当基底中不同构形的氦团簇因其扩散系数不同时也可产生多个热释放峰. 该结果对实验的指导意义在于:在分析实验观察到的热解析谱时,应结合对基底中氦的初始深度分布的分析以及氦的聚集状态的分析,才能对氦的热释放机理给出正确的理解和判断. 最近, Wright 等<sup>[27]</sup>采用核分析和热释放实验研究了氦在聚变堆壁材料 W 中的滞留和热释放,也表明了热解析实验和深度分布测量相结合的必要性. 另外,本文的研究结果还表明:热解析实验中,随机扩散机理下有和化学脱附机理下相似的热释放峰-升温速率关系,但是只有当氦的初始深度分布较浅,基于化学脱附模型由热释放峰-升温速率推算得到的脱附激活能可认为是氦的扩散激活能;而当氦的初始深度分布较深时,由此得到脱附激活能只是一个唯象的拟合参数,要由热释放峰-升温速率关系反演具有物理意义的扩散激活能,需考虑氦的扩散过程.

关于氦的扩散系数的实验测量目前只有很少的报道,最近 Becquart<sup>[28,29]</sup>用从头计算得到的氦原子在 W 中的扩散激活能与实验值有数量级的差别.

本文关于扩散系数对氦热释放的影响的研究表明,扩散激活能和扩散系数前因子对氦热释放峰的峰位和峰形有明显的影响,换句话说,氦热释放谱对扩散系数是敏感的,因而有可能通过氦热释实验来反演氦在材料中的扩散系数:首先用能量为 MeV 以上氦离子束低剂量注入基底(MeV 以上的能量使氦有较深的深度分布,在常温下可以滞留在基底中;低剂量使氦原子或团簇间发生融合的概率很小),

然后在不同升温条件下测量热释放谱,并用本文的方法计算热释放理论谱,通过调整计算中所用的扩散激活能和扩散系数前因子,使计算得到的热释放谱和实验谱符合最好,从而反演出氦在基底中的扩散系数.

感谢中国工程物理研究院龙兴贵、周晓松等的有益讨论.

- [1] Hirooka Y, Miyake M, Sano T 1981 *J. Nucl. Mat.* **96** 227
- [2] Zheng S X, Luo S Z, Liu Z Y, Long X G, Wng P L, Peng S M, Liao X D, Liu N 2004 *Acta. Phys. Sin.* **53** 555 (in Chinese) [郑思孝、罗顺忠、刘仲阳、龙兴贵、王培禄、彭述明、廖小东、刘宁 2004 物理学报 **53** 555]
- [3] Wang J, Hou Q 2009 *Acta. Phys. Sin.* **58** 6408 (in Chinese) [汪俊、侯氢 2009 物理学报 **58** 6408]
- [4] Cowgill D F 2005 *Fus. Sci. Technol.* **48** 539
- [5] Morishita K, Sugano R, Wirth B D 2003 *J. Nucl. Mat.* **323** 243
- [6] Henriksson K O E, Nordlund K, Krashennnikov A, Keinonen J 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 163113
- [7] Ao B Y, Yang J Y, Wang X L, Hu W Y 2006 *J. Nucl. Mat.* **350** 83
- [8] Liu T J, Wang Y X, Pan Z Y, Jiang X M, Zhou L, Zhu J 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 1261
- [9] Djurabekova F G, Domingos R, Cerchiara G, Castin N, Vincent E, Malerba L 2007 *Nucl. Instrum. Methods Res. B* **255** 8
- [10] Zhang Y, Zhang C H, Zhou L H, Li B S, Yang Y T 2010 *Acta. Phys. Sin.* **59** 4130 (in Chinese) [张勇、张崇宏、周丽宏、李炳生、杨义涛 2010 物理学报 **59** 4130]
- [11] Zhang H H, Zhang C H, Li B S, Zhou L H, Yang Y T, Fu Y C 2009 *Acta. Phys. Sin.* **58** 3302 (in Chinese) [张洪华、张崇宏、李炳生、周丽宏、杨义涛、付云翀 2009 物理学报 **58** 3302]
- [12] Fink D 1988 *Radiat. Eff.* **106** 231
- [13] Ullmaier H 1983 *Radiat. Eff.* **78** 10
- [14] Xu Y B 1992 *Introduction to Surface Physics* (Hang Zhou: Zhejiang University Press) p133 (in Chinese) [徐亚伯 1992 表面物理导论(杭州:浙江大学出版社)第 133 页]
- [15] Vedenev A I, Lobanov V N, Starovoitova S V 1996 *J. Nucl. Mat.* **233-237** 1189
- [16] Wang H F, Peng S M, Zhou X S, Cheng G J, Wang W D, Long X G, Yang B F 2008 *Atomic Energy Science and Technology* **42** 49 (in Chinese) [王海峰、彭述明、周晓松、程贵钧、王维笃、龙兴贵、杨本福 2008 原子能科学技术 **42** 49]
- [17] Peng S M, Zhou X S 2009 *Atomic Energy Science and Technology* **43** 43 (in Chinese) [彭述明、周晓松 2009 原子能科学技术 **43** 43]
- [18] Cheng G J, Wang W D, Yang B F, Long X G, Peng S M, Luo S Z 2005 *Atomic Energy Science and Technology* **39** 373 (in Chinese) [程贵钧、王维笃、杨本福、龙兴贵、彭述明、罗顺忠 2005 原子能科学技术 **39** 373]
- [19] Wilson W D, Bisson C L, Baskes M I 1981 *Phys. Rev. B* **24** 5616
- [20] Wang J, Hou Q, Sun T Y, Wu Z C, Long X G, Wu X C, Luo S Z 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 1666
- [21] Chen M, Hou Q, Wang J, Sun T Y, Long X G, Luo S Z 2008 *Solid. State. Commun.* **148** 178
- [22] Xie Z, Hou Q, Wang J, Sun T Y, Long X G, Luo S Z 2008 *Acta. Phys. Sin.* **57** 5159 (in Chinese) [谢朝、侯氢、汪俊、孙铁英、龙兴贵、罗顺忠 2008 物理学报 **57** 5159]
- [23] Hou Q, Zhou Y L, Wang J, Deng A H 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 084901
- [24] Chandrasekhar S 1943 *Rev. Mod. Phys.* **15** 3
- [25] Luo Z M, Hou Q, Teng L J 1996 *Nucl. Instrum. Methods Res. B* **115** 497
- [26] Evans J H 2004 *J. Nucl. Mat.* **334** 40
- [27] Wright G M, Mayer M, Ertl K, Saint-Aubin G de, Rapp J 2010 *Nucl. Fusion.* **50** 075006
- [28] Becquart C S, Domain C 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 196402
- [29] Wagner A, Seidman D N 1979 *Phys. Rev. Lett.* **42** 515

## Thermal release of helium in materials induced by random-walk mechanism \*

Li Ren-Shun<sup>1)</sup> Zhou Yu-Lu<sup>2)1)</sup> Zhang Bao-Ling<sup>1)</sup> Deng Ai-Hong<sup>2)</sup> Hou Qing<sup>1)†</sup>

1) (*Key Laboratory for Radiation Physics and Technology Ministry of Education, Institute of Nuclear  
Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610064, China*)

2) (*Department of Physics, Sichuan University, Chengdu 610064, China*)

(Received 18 June 2010; revised manuscript received 28 July 2010)

### Abstract

Based on the theory for random-walk with an absorption wall, the characteristics of thermal release of helium in materials are studied. The influences of the initial depth distribution and the diffusion coefficient of helium in materials on the thermal release are investigated. A comparison is made between the thermal releases induced by the random-walk mechanisms and the thermal desorption mechanisms. It is pointed out that the initial depth distribution and the states that Helium atoms stay in are required for the correct understanding of experimental observations of thermal releases of helium in materials.

**Keywords:** stochastic-diffusion, thermal release, helium

**PACS:** 66.30.J-, 61.72.-y, 61.80.Az

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10775101) and the National Magnetic Confinement Fusion Program of China (Grant No. 2009GB106004).

† Corresponding author. E-mail: qhou@scu.edu.cn