月壤氦–3受热释放微观机理分析

姚晓宇[1]，任尔行[1]，杨 智[2]，崔明君[2]，沈 俊[1]
（1. 北京理工大学 机械与车辆学院，北京 100081；2. 广东工业大学 材料与能源学院，广州 510006）

摘 要：针对现有钛铁矿直接暴露于真空的开放体系模型难以表征表面无序层对氦–3跨界面迁移阻滞作用的问题，构建晶态钛铁矿核–非晶TiO_2包覆层嵌套模型，采用分子动力学方法研究300~2 300 K氦–3的跨层迁移和扩散行为。结果表明，在1 ns固定观测窗口内，氦–3累计迁出比例随温度升高显著增加，2 300 K时达到8.92%；非晶TiO_2中的有效扩散系数总体呈热激活增长趋势。由于本模型未显式设置真空自由表面，累计迁出比例表征原子尺度跨层迁移能力，而非工程尺度的提取率。研究表明，非晶TiO_2包覆层的无序致密结构会增加氦–3的扩散阻力，并与外部逸散驱动力缺失共同抑制其迁出，可为后续构建含真空边界的多尺度释放模型及筛选热处理条件提供微观依据。

关键词：氦–3资源提取；钛铁矿；非晶TiO_2；分子动力学模拟

中图分类号：V11 **文献标识码：**A **文章编号：**2096-9287(2026)04-0366-07

DOI:10.3724/j.issn.2096-9287.2026.20250148

引用格式：姚晓宇，任尔行，杨智，等. 月壤氦–3受热释放微观机理分析[J]. 深空探测学报（中英文），2026，13（4）：366-372.

Reference format: Yao X Y，Ren E X，Yang Z，et al. Study on microscopic mechanism for thermal release behavior of Helium-3 in lunar regolith[J]. Journal of Deep Space Exploration，2026，13（4）：366-372.

引 言

随着探月四期任务的开展，原位资源利用（In-Situ Resource Utilization，ISRU）已从概念讨论逐步走向机理验证与工艺方案设计。月壤氦–3是太阳风在地质时间尺度持续注入的产物，被认为具有一定的开发潜力。要评估热处理/真空脱附等提取方案，关键在于弄清氦–3在典型载体相中的迁移路径、扩散速率以及受热逸散机制。

氦–3被认为是先进聚变路线（如D–氦–3反应）潜在的燃料之一，其特点在于中子产额相对较低、能量密度高；但受限于点火条件、能量增益与工程实现等关键瓶颈，仍处于长期探索阶段[1-2]。因此，围绕氦–3在月壤中的赋存、迁移与受热释放机理开展基础研究，有助于为未来月球原位资源利用的工艺设计提供参数依据与约束条件。

与常规氦气（以氦–4为主）不同，地球上的氦–3来源主要包括宇宙尘注入、岩浆逸出及核反应副产物等，整体丰度极低，总储量约为500 kg，且分布分散，难以形成可规模化开发的集中资源[2]。相比之下，月球表层月壤在地质时间尺度持续接受太阳风注入，氦–3可在矿物缺陷、空间风化层以及玻璃/非晶相中累积；基于遥感反演与样品分析的估算，月壤中氦–3储量约为10^9 kg，具有潜在的开发价值[3-5]。

近年来，多国相继开展月球探测与样品返回任务，推动了月壤矿物组成、空间风化层结构与挥发分赋存的直接表征。“嫦娥五号”返回样品对月壤中玻璃相、钛铁矿等关键载体及其表面非晶化/缺陷特征提供了重要的观测依据，可用于校准微观模型并约束机理假设[6]。

随着深空探测从科学探测逐步走向原位资源利用概念验证，采集、分选、加热脱附与气体分离等工艺链条受到广泛关注。然而，氦–3在多相月壤载体（晶态矿物/非晶层/玻璃相）中的微观迁移规律及其与外部驱动力的耦合关系仍缺乏可直接外推的定量认识。现有研究已对氦–3在钛铁矿直接暴露于真空条件下的热释放开展分子模拟[7]，但开放边界下的宏观逸散驱动力与矿物表面非晶层的微观扩散阻力相互耦合，尚难分离评价非晶包覆层的作用。

基于此，本文以钛铁矿表面空间风化形成的无序层为对象，构建晶态钛铁矿核–非晶TiO_2包覆层嵌套模

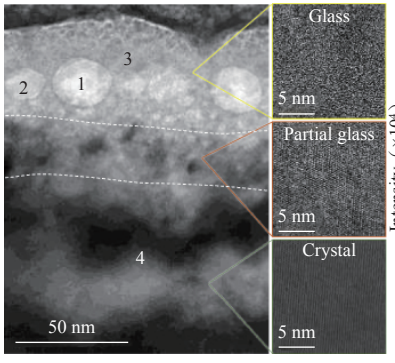
收稿日期：2025-12-24 修回日期：2026-04-30
基金项目：深空探测全国重点实验室2024年度开放基金（NKDSEL2024001）

型，研究不同温度下氦–3由晶态内核向非晶层及其外侧的跨界面迁移和扩散行为。需要说明的是，熔融–淬冷获得的非晶TiO_2是对钛铁矿表面无序相的简化表征，并不等同于含Si、Al、Ca、Mg等组分的月球硅酸盐玻璃。

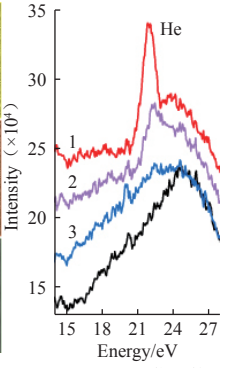
本文重点揭示温度和非晶包覆层对氦–3原子尺度迁移的影响，并讨论模型边界、时间尺度和高温结构演化带来的不确定性，为后续引入真空自由表面、真实月球玻璃组分及跨尺度外推提供基础。

1　月球氦–3的贮存形式

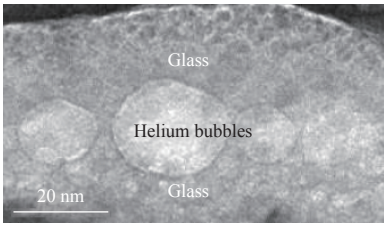
月壤中的玻璃相主要包括微陨石撞击形成的凝聚体（agglutinate）玻璃与火山玻璃珠/碎屑等，其含量随着成熟度、地质单元与粒度组分的不同有明显的变化。以“嫦娥五号”返回样品为例，如图1所示，TEM照片显示钛铁矿表面玻璃层中存在大量氦气泡[8]。同时，XRD/Rietveld分析表明，玻璃相含量约为10%～20%，钛铁矿含量约为4%～5%[6]。Apollo等任务样品中凝聚体/玻璃含量也呈现宽幅波动，常被用作成熟度与空间风化强度的指示量[9]。因此，本文虽以含玻璃/非晶相的月壤微结构为背景，但计算模型仅采用非晶TiO_2表征钛铁矿表面无序层，不将其等同于全部类型的月球玻璃。



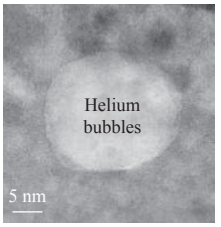
（a）聚焦离子束切出来的颗粒截面的高分辨TEM照片



（b）不同位置的电子能量损失谱



（c）含有大量氦气泡的玻璃层放大图像



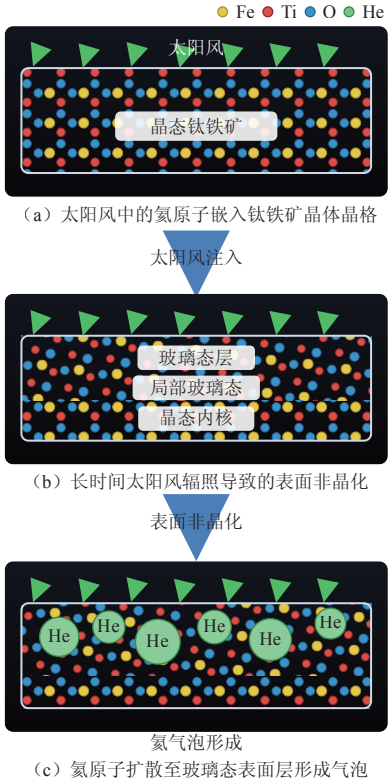
（d）玻璃中具有清晰界面的球形氦气泡

图 1　CE-5月壤钛铁矿颗粒表面玻璃层中He气泡的TEM图像和EELS曲线[9]

Fig. 1　TEM images and EELS spectra of helium bubbles in surface glass layer of an ilmenite grain from Chang’e-5 lunar soil[9]

在月壤氦–3的潜在载体中，钛铁矿（$FeTiO_3$）、凝聚体玻璃及其空间风化层被认为是重要的挥发分俘获与储存介质。太阳风离子在月壤颗粒表层（纳米至亚微米尺度）持续注入并诱导缺陷形成，使He等惰性气体可在缺陷、纳米孔洞或玻璃/非晶相中滞留[9-12]。为聚焦钛铁矿表面无序层对He迁移的影响，本文选择“晶态钛铁矿核 + 非晶TiO_2包覆层”作为代表性结构单元。

太阳风注入、钛铁矿表面非晶化以及He在非晶层中滞留的连续过程如图2所示。已有样品观测显示，钛铁矿等矿物表面可出现与空间风化相关的非晶化层，其厚度与结构随辐照剂量和深度变化；该类非晶化层可能改变He的局域束缚态与扩散通道，进而影响热释放动力学[9,13-14]。



（a）太阳风中的氦原子嵌入钛铁矿晶体晶格

（b）长时间太阳风辐照导致的表面非晶化

（c）氦原子扩散至玻璃态表面层形成气泡

图 2　钛铁矿表面氦气捕获与滞留过程示意图[9]

Fig. 2　Schematic illustration of helium trapping and retention at ilmenite surface[9]

月壤玻璃相不仅记录了撞击熔融与空间风化过程，也可能通过致密无序网络和纳米孔洞影响He的滞留与热释放行为[8-10]。需要指出的是，CE-5采样点位于风暴洋北部年轻月海玄武岩区（P58单元），其FeO与TiO_2含量相对较高（TiO_2含量约4.5%～5.7%），与月球高地或低钛古老月海存在差异[6,15]。本文以该区域富Ti玄武质月壤中的钛铁矿表面无序层为结构背景，但不直接模拟整体月壤矿物组成。

2 月壤中氦–3的热释放行为

在月球表面的极端真空与强辐射环境下，以质子、氦离子为主的太阳风长期持续注入，是驱动月壤颗粒结构演化与氦–3富集累积的关键过程。针对特定地质单元，其太阳风累积注入剂量会随暴露时长不断增加，并进而诱发月壤颗粒内部缺陷与表层非晶结构层发生持续性演化[8,12]。

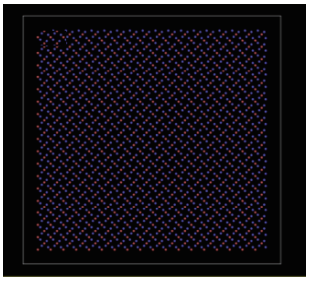
这一结构演变过程在钛铁矿（$FeTiO_3$）中表现得尤为典型，且与氦–3的储存行为紧密相关。在太阳风初始风化阶段，钛铁矿表面保持完整晶态，晶格排列规则且原子扩散通道稳定，此时太阳风中的氦–3离子可借助晶格缺陷缓慢注入钛铁矿内部，暂时储存在晶格间隙中，形成初始的氦–3储备[9]。随风化进程持续推进，太阳风高能粒子的轰击强度与累积剂量增加，钛铁矿表层晶格承受的能量超出其结构稳定阈值，周期性的有序结构被彻底破坏，原子排列从长程有序转向短程无序，逐步转变为非晶TiO_2。在此晶格破坏的动态过程中，钛铁矿晶体内部此前植入的氦–3原子因原有储存位点消失而大量释放；但非晶TiO_2具有无序密堆的原子结构，其内部缺乏晶体中规则的晶格扩散通道，氦–3原子的扩散系数大幅降低，无法像在晶体中那样通过晶格扩散实现长距离逃逸，只能在非晶TiO_2层内部进行短距离迁移。随着释放的氦–3原子不断聚集，当局部氦–3浓度达到临界值时，便在非晶TiO_2层内形成丰富的氦气泡，这些气泡成为氦–3在月壤中稳定储存的关键载体[9]，钛铁矿表面氦–3捕获与滞留的过程如图2所示。

基于上述月壤样品中He的赋存特征，氦–3既可能位于钛铁矿晶格缺陷和间隙位点，又可能滞留于其表面非晶层或相邻玻璃相中[9]。本文仅针对前两类结构，采用晶态钛铁矿核–非晶TiO_2包覆层模型研究氦–3的跨界面迁移。

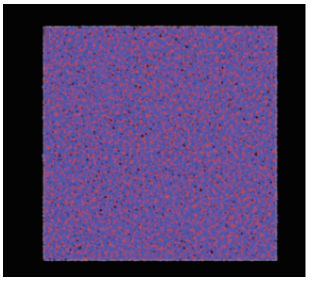
3 分子动力学模拟研究方法

3.1 晶态钛铁矿−非晶TiO_2嵌套模型

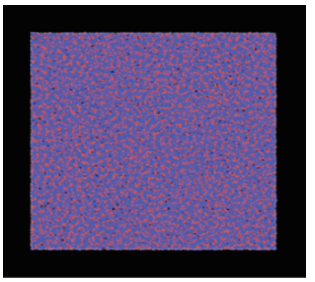
本研究以钛铁矿颗粒及其表面非晶化层为原型，首先构建尺寸为6 × 6 × 6 nm的TiO_2基体，并通过高温熔融–淬冷退火获得非晶TiO_2结构[16-17]（图3）。该方法用于生成短程有序、长程无序的可控网络，并不等同于太阳风或微陨石作用下的实际非晶化过程，也不代表含多组分硅酸盐的月球玻璃。在非晶TiO_2基体中嵌入直径约4 nm的球形晶态钛铁矿颗粒，形成“晶态钛铁矿核–非晶TiO_2包覆层”嵌套模型（图4）。为表征太阳风注入后He在近表层富集的特征，He–3原子以间隙占位方式置入钛铁矿晶格，其径向位置r服从以$r \approx R - 0.3$ nm为均值、$\sigma \approx 0.2$ nm为标准差的截断高斯分布（R为颗粒半径），从而在稀释极限内形成靠近颗粒表层的非均匀初始分布。He–3总数及浓度等参数见3.2节。



（a）TiO_2晶体



（b）升温至2 500 K



（c）淬冷至30 K形成非晶TiO_2

图 3 非晶TiO_2模型的熔融–淬冷构建过程

Fig. 3 Construction of amorphous TiO_2 model using melt-quench method

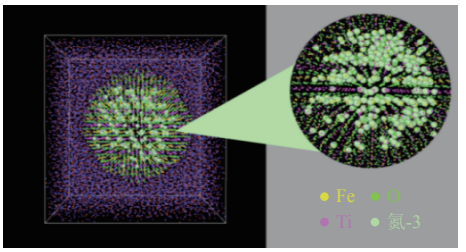


图 4 晶态钛铁矿–非晶TiO_2嵌套模型

Fig. 4 Nested model of a crystalline ilmenite core and an amorphous TiO_2 coating

3.2 模拟工况设置

本研究使用 LAMMPS 软件进行分子动力学模拟，结合 OVITO 进行可视化与轨迹分析。为提升可重

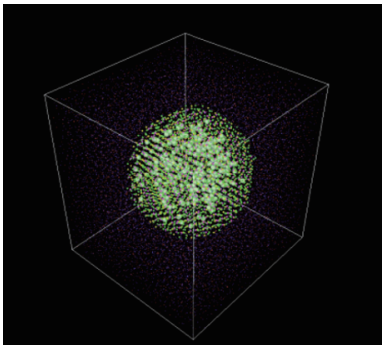
复性，关键模拟设置与参数主要有以下几个方面。

1）力场与相互作用：Fe–Ti–O相互作用采用针对$FeO–TiO_2$体系验证的Buckingham + Coulomb势参数[18]；He–Fe相互作用采用Juslin和Nordlund给出的Fe–He对势[19]；He–O/He–Ti相互作用采用Lennard-Jones形式，参数取自UFF通用力场并经一致化处理[20]。静电相互作用采用PPPM方法求解，计算精度设为1×10^{-5}。

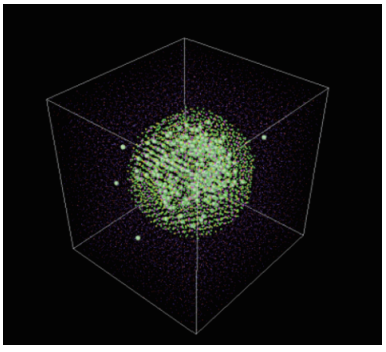
2）边界与积分：体系在3个方向均采用周期性边界条件；时间步长Δt = 1 fs，邻居表每10步更新一次，Buckingham势和Lennard-Jones势的截断半径均为10 Å。由于未设置真空自由表面，本模型不描述He进入真空后的持续逸散，仅统计其相对于颗粒中心跨越预设包覆层边界的迁移事件。

3）系综与控温：能量最小化采用共轭梯度算法；随后在NVT系综下使用Nosé–Hoover热浴控温（温控阻尼Tdamp = 0.1 ps）以保证温度稳定。He–3初始数目N = 200（对应原子分数约0.8%），用于保证统计量并避免高浓度诱导的非物理团聚。

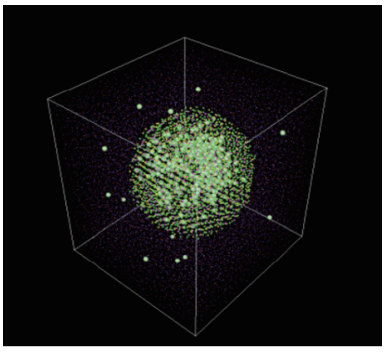
4）升温策略：从280 K线性升温至目标温度（300～2 300 K），升温时间0.4 ns；到达目标温度后恒温保持0.6 ns以实现结构与能量平衡（如图5所示）。需要指出，纳秒尺度升温远快于工程过程，该设置用于加速采样热激活过程；其带来的时间尺度偏差与高温段（>～1 800 K）可能的相变影响将在4.3节作为不确定性来源讨论。



（a）初始结构



（b）0.4 ns内从280 K升温至1 700 K热释放行为



（c）1 700 K保持0.6 ns热释放行为

图 5　280 K升温至1 700 K氦–3释放规律可视图

Fig. 5　Visualization of helium-3 release during heating from 280 K to 1 700 K

5）迁出判据与扩散系数：以钛铁矿颗粒中心为坐标原点，将He–3原子由钛铁矿核迁入非晶TiO_2层并进一步首次越过预设包覆层外边界的原子数占总He–3原子数的比例定义为“累计释放率”。该指标本质上是固定观测窗口内的累计跨层迁出比例，用于比较不同温度下的相对迁移能力，不等同于开放真空体系中的宏观释放率或工程提取率。扩散系数依据Einstein关系由*MSD*–*t*曲线在线性扩散区间拟合获得；为避免弹道区间影响，仅对t>0.1 ns且*MSD*随t近似线性的区间进行线性回归。

4　结果与讨论

4.1　氦–3累计释放率

如图6所示，在T < 900 K时，固定1 ns观测窗口内的累计释放率变化较小，表明He–3主要受局域束缚和较低扩散能力限制，难以跨越非晶包覆层。当温度升高至900～1 700 K时，累计释放率明显上升，表现出热激活迁移特征。本文采用连续指数函数描述该指标的温度敏感性；鉴于累计释放率是有限时间内的迁出比例而非本征速率常数，该拟合仅用于比较变化趋势，不据此直接提取唯一活化能或判定唯一迁移机理。

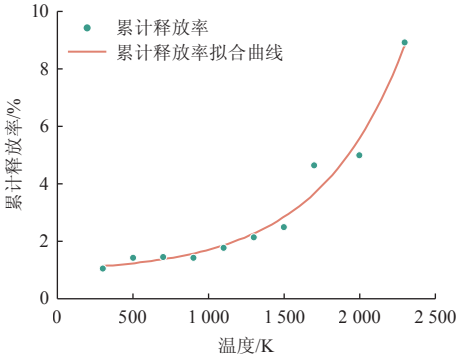


图 6　氦–3累计释放率与加热温度关系

Fig. 6　Cumulative He-3 release fraction as a function of heating temperature

当温度超过2 000 K时，累计释放率进一步升高，并在2 300 K达到8.92%。然而，该温区内钛铁矿和非

晶TiO_2可能发生明显的结构松弛、重排甚至相变，经验势的不确定性也随之增大。因此，2 000 K以上结果主要用于表征高温强化迁移的趋势，本文的核心机理讨论仍聚焦于结构相对稳定的≤1 700 K温区。

需要强调的是，本文结果与Song等针对“钛铁矿直接暴露于真空”的开放体系模拟[7]在模型结构和边界条件上均存在差异，二者的释放比例不能直接作定量比较。Song等的开放体系同时具有自由表面和外部逸散通道，而本文采用周期性边界及非晶TiO_2包覆层。因此，本研究中较低的累计释放率应理解为非晶包覆层扩散阻力与缺少开放逸散边界共同作用的结果，不能据此单独量化非晶层的抑制贡献。

从工程角度看，上述结果提示机械破碎、表面剥离或缩短扩散路径可能有利于He–3由矿物内部向外迁移，并可在外部真空抽吸作用下转化为更高的宏观逸散通量。但该推断尚未由本文模型直接验证，仍需在相同边界条件下设置裸露钛铁矿与非晶包覆钛铁矿对照组，并结合真空热释放实验进一步确认。

4.2 氦–3在非晶TiO_2中的扩散行为

在升温过程中，部分He–3原子由钛铁矿近表层间隙位点迁入非晶TiO_2层。为定量表征其在非晶层中的迁移能力，本文根据均方位移（Mean Square Displacement，MSD），采用式（1）计算有效扩散系数。

$$D=\lim_{t\to\infty}\frac{MSD(t)}{2dt} \tag{1}$$

其中：$MSD(t)$为t时刻的均方位移；d为空间维度。

He–3在非晶体TiO_2层中的有效扩散系数随温度的变化如图7所示。扩散系数由MSD–t曲线的近线性区间拟合得到，反映He–3进入正常扩散阶段后的平均迁移能力。结果显示，扩散系数随温度升高总体呈热激活增长趋势，可用Arrhenius形式$D=D_0\cdot\exp(-E_a/k_BT)$其中，$D_0$为扩散前因子，$E_a$为扩散活化能，$k_B$为玻尔兹曼常数，$T$为绝对温度，来进行经验表征。考虑到温度点数量、纳秒尺度轨迹长度及高温结构演化的不同因素影响，本文不将该拟合解释为唯一扩散机理，对于$T>1\,800$ K的数据，仅作趋势性讨论。

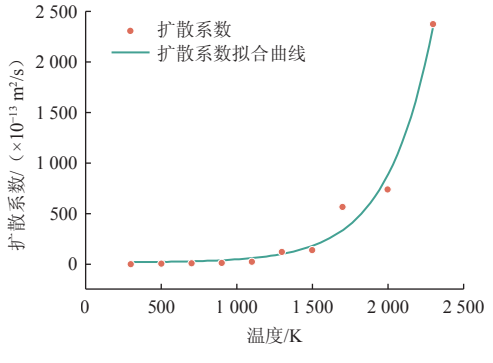


图 7 He–3在非晶TiO_2层中的有效扩散系数随温度的变化

Fig. 7 Temperature dependence of the effective diffusion coefficient of He-3 in amorphous TiO_2 layer

4.3 模型假设与不确定性讨论

月壤氦–3的热处理释放涉及空间风化层结构、非晶相扩散阻力和外部逸散驱动力等多因素耦合。本文模型仍存在以下假设与局限。

1）模型范围与边界条件：本文以非晶TiO_2简化表征钛铁矿表面无序层，未包含多组分月球硅酸盐玻璃，也未设置真空自由表面和持续抽吸边界。因此，文中累计释放率仅用于描述He–3跨越包覆层的相对迁移能力，不能直接等同于实际月面热处理的提取率。

2）势函数适用性：Fe–Ti–O体系及He的相关相互作用采用文献[18-20]中的经验势组合。经验势函数对高温相变、化学反应和电荷转移的描述存在固有限制，尤其在接近熔融或分解温区时可能引入较大偏差。因此，本文对高温段仅作趋势性分析，后续应采用反应力场或第一性原理分子动力学对关键温区进行交叉验证。

3）时间尺度与升温速率：纳秒尺度线性升温属于加速动力学采样，可用于捕捉热激活迁移事件，但无法直接对应秒至小时量级的工程过程。本文通过固定观测窗口比较不同温度下的相对变化，工程尺度外推仍需结合动力学蒙特卡洛、加速分子动力学或连续介质传质模型。

4）高温结构演化：当$T>1\,800$ K时，钛铁矿及非晶相可能出现显著结构重排甚至相变。鉴于本文采用周期性边界和经验势，且未显式描述熔融后的宏观流动与分解反应，高温段结果主要用于识别强化加热对迁移趋势的影响，定量结论应以≤1 700 K的相对稳定温区为主。

5）初始赋存状态：样品中观察到的He气泡通常对应高剂量注入和长期演化后的纳米孔洞或气体团聚结构，而本文将He–3以稀释间隙占位形式分布于钛铁矿近表层，代表较早期的原子尺度迁移阶段。后续应在更高注入剂量和更长时间尺度下模拟He团聚、空位耦合及气泡成核过程。

5 结 论

本文构建了晶态钛铁矿核–非晶TiO_2包覆层嵌套模型，并采用分子动力学方法研究不同温度下He–3的跨层迁移与扩散行为。在固定1 ns观测窗口内，累计释放率随温度升高显著增加，2 300 K时达到8.92%；He–3

在非晶TiO_2中的有效扩散系数总体呈热激活增长趋势。非晶TiO_2的无序致密结构会增加He–3的扩散阻力，但由于本文未设置真空自由表面，较低的累计释放率应归因于非晶包覆层阻力与缺少开放逸散边界的共同作用，不能直接等同于实际提取效率。结果提示，缩短扩散路径或破坏表面包覆层可能有利于后续真空热释放，但该工程推断仍需对照模拟和实验验证。后续研究将引入真实多组分月球玻璃、开放真空边界和更长时间尺度，并通过裸露/包覆钛铁矿对照模型及热释放实验验证，以实现从原子尺度迁移参数向工程提取过程的可靠外推。

参考文献

[1] Crawford I A. Lunar resources：a review[J]. Progress in Physical Geography：Earth and Environment，2015，39(2)：137-167.

[2] Olson A D S. Lunar helium-3：mining concepts，extraction research，and potential ISRU synergies[C]//Proceedings of ASCEND 2021. Las Vegas，Nevada：AIAA，2021.

[3] Fa W Z，Jin Y Q. Quantitative estimation of helium-3 spatial distribution in the lunar regolith layer[J]. Icarus，2007，190(1)：15-23.

[4] Fa W Z，Jin Y Q. Global inventory of Helium-3 in lunar regoliths estimated by a multi-channel microwave radiometer on the Chang-E 1 lunar satellite[J]. Chinese Science Bulletin，2010，55(35)：4005-4009.

[5] Wang Z Z，Li Y，Jiang J S，et al. Lunar surface dielectric constant，regolith thickness，and He-3 abundance distributions retrieved from the microwave brightness temperatures of CE-1 lunar microwave sounder[J]. Science China Earth Sciences，2010，53：1365-1378.

[6] Li C L，Hu H，Yang M F，et al. Characteristics of the lunar samples returned by the Chang'E-5 mission[J/OL]. National Science Review，2022，9(2)：nwab188. https://academic.oup.com/nsr/article/9/2/nwab188/6397035?login=true.

[7] Song H Q，Zhang J，Sun Y Q，et al. Theoretical study on thermal release of helium-3 in lunar ilmenite[J/OL]. Minerals，2021，11(3)：319. https://www.mdpi.com/2075-163X/11/3/319.

[8] Li A，Chen X，Song L J，et al. Taking advantage of glass：capturing and retaining the helium gas on the Moon[J]. Materials Futures，2022，1(3)：035101.

[9] Heiken G H，Vaniman D T，French B M. Lunar Sourcebook：a user's guide to the Moon[M]. Cambridge：Cambridge University Press，1991.

[10] Cymes B A，Burgess K D，Stroud R M. Helium reservoirs in iron nanoparticles on the lunar surface[J/OL]. Communications Earth & Environment，2024，5：189. https://www.nature.com/articles/s43247-024-01349-z.pdf.

[11] Zhao R，Shen L Q，Chang C，et al. Lunar glass[J/OL]. Acta Physica Sinica，2023，72(23)：236101. https://wulixb.iphy.ac.cn/article/pdf/preview/10.7498/aps.72.20231238.pdf.

[12] Shukla S，Tolpekin V，Kumar S，et al. Investigating the retention of solar wind implanted helium-3 on the Moon from the analysis of multi-wavelength remote sensing data[J/OL]. Remote Sensing，2020，12(20)：3350. https://www.mdpi.com/2072-4292/12/20/3350.

[13] Guo Z，Li C，Li Y，et al. Nanophase iron particles derived from fayalitic olivine decomposition in Chang'E-5 lunar soil：Implications for thermal effects during impacts[J/OL]. Geophysical Research Letters，2022，49(5)：e2021GL097323. https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1029/2021GL097323.

[14] Li C，Guo Z，Li Y，et al. Impact-driven disproportionation origin of nanophase iron particles in Chang'e-5 lunar soil sample[J]. Nature Astronomy，2022，6：1156-1162.

[15] Tian H C，Wang H，Wu F Y，et al. Non-KREEP origin for Chang'e-5 basalts in the Procellarum KREEP Terrane[J]. Nature，2021，600：59-63.

[16] Zhang S Z，Wu Y K. Investigating the crystallization behavior of TiO_2 during annealing：Molecular dynamics simulations[J/OL]. AIP Advances，2023，13(8)：085226. https://pubs.aip.org/aip/adv/article/13/8/085226/2907912/Investigating-the-crystallization-behavior-of-TiO2.

[17] Yang S P，Liu L，Liu Y，et al. A molecular simulation study on the sintering mechanism of TiO_2[J]. Journal of the American Ceramic Society，2023，106：4488-4498.

[18] Fan H L，Chen D F，Liu P，et al. Structural and transport properties of FeO-TiO_2 system through molecular dynamics simulations[J]. Journal of Non-Crystalline Solids，2018，493：57-64.

[19] Juslin N，Nordlund K. Pair potential for Fe–He[J]. Journal of Nuclear Materials，2008，382：143-146.

[20] Rappé A K，Casewit C J，Colwell K S，et al. UFF，a full periodic table force field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations[J]. Journal of the American Chemical Society，1992，114：10024-10035.

作者简介：

姚晓宇(1995–)，男，副研究员，硕士生导师，主要研究方向：混合工质热物性、相变及临界现象、地外资源利用。

通信地址：北京理工大学机械与车辆学院(100081)

E-mail：yaoxiaoyu22@bit.edu.cn

沈俊(1979–)，国家高层次领军人才，教授、博士生导师，主要研究方向：磁制冷、新型制冷与极低温技术、综合能源系统协同优化及应用。**本文通信作者**。

通信地址：北京理工大学机械与车辆学院(100081)

电话：(010)68916953

E-mail：jshen@bit.edu.cn

Study on Microscopic Mechanism for Thermal Release Behavior of Helium-3 in Lunar Regolith

Yao Xiaoyu[1]，Ren Erxing[1]，Yang Zhi[2]，Cui Mingjun[2]，Shen Jun[1]

（1. School of Mechanical Engineering，Beijing Institute of Technology，Beijing 100081，China；
2. School of Materials and Energy，Guangdong University of Technology，Guangzhou 510006，China）

Abstract：The problem that the retarding effect of the disordered surface layer on helium-3 cross-interface migration is difficult to characterize in an open system where He-3-bearing ilmenite in lunar regolith is directly exposed to vacuum. In this paper，a nested model consisting of a crystalline ilmenite core and an amorphous TiO_2 coating was constructed，and molecular dynamics simulations were performed over 300–2 300 K to examine the cross-layer migration and diffusion of helium-3. Within a fixed 1 ns observation window，the cumulative outward-migration fraction increased markedly with temperature and reached 8.92% at 2 300 K；the effective diffusion coefficient of helium-3 in amorphous TiO_2 also exhibited a thermally activated increase. Because no vacuum free surface was explicitly included，the reported cumulative fraction represents atomic-scale migration across the coating rather than engineering-scale extraction efficiency. The results indicate that the dense disordered amorphous TiO_2 layer increases diffusion resistance and，together with the absence of an external escape driving force，suppresses helium-3 migration. hese findings provide a microscopic basis for the subsequent construction of multiscale release models incorporating vacuum boundaries and for the screening of heat treatment conditions.

Keywords：Helium-3 extraction；ilmenite；amorphous TiO_2；molecular dynamics simulation

Highlights：

- A nested model consisting of a crystalline ilmenite core and an amorphous TiO_2 coating was constructed.
- The cumulative outward-migration fraction of helium-3 showed a thermally activated increase with temperature.
- The amorphous TiO_2 coating was shown to impede the cross-layer migration of helium-3.

[责任编辑：杨晓燕，英文审校：宋利辉]