

На правах рукописи

Михайлов Владислав Сергеевич

**Моделирование распыления и рассеяния при ионном
облучении бериллия и вольфрама – перспективных
материалов первой стенки токамака-реактора**

1.3.5 - Физическая электроника

Автореферат

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург — 2024

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук

Научный руководитель:

Зиновьев Александр Николаевич, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник - заведующий лабораторией, ФГБУН Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук

Научный консультант:

Шергин Андрей Петрович, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник, ФГБУН Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук

Официальные оппоненты:

Борисов Анатолий Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ ВО Московский авиационный институт

Карасёв Платон Александрович, доктор физико-математических наук, профессор, ФГАОУ ВО Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Ведущая организация:

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

Защита состоится « 20 » июня 2024 г. в 14.00 часов на заседании диссертационного совета ФТИ 34.01.03 ФГБУН Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук по адресу: 194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26.
E-mail: post@mail.ioffe.ru

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке ФГБУН Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук и на веб-сайте института <http://www.ioffe.ru>

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просьба выслать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета ФТИ 34.01.03.

Автореферат разослан « » 2024 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
к.ф.-м.н.

И. А. Горбунова

Общая характеристика работы

Актуальность темы

Изучение процессов рассеяния и распыления при ионном облучении твердого тела является фундаментальной научной задачей. Ионные пучки широко используются в микроэлектронике для диагностики и модификации твердого тела. Ионное распыление применяется при создании тонких пленок, очистки поверхности и в разнообразных методиках по анализу твердого тела. Рассеяние ионов широко используется при анализе состава и структуры поверхности.

Глубокое понимание процессов распыления и рассеяния является необходимым условием на пути к управляемому термоядерному синтезу (УТС). На сегодняшний день УТС является самым перспективным возобновляемым, безопасным и экологически чистым источником энергии. Однако от успешной реализации УТС нас отделяет внушительный ряд технологических и технических трудностей. Проект международного экспериментального термоядерного реактора ИТЭР, в котором активно участвует Россия, направлен на демонстрацию возможности коммерческого использования термоядерной реакции синтеза.

Уже сейчас понятно, что одной из основных проблем в успешной реализации проекта является взаимодействие высокоэнергетических потоков плазмы с элементами реактора. В качестве материала дивертора на установке ИТЭР планируется использовать вольфрам. В качестве материала первой стенки ранее планировалось использование бериллия. В настоящее время обсуждается возможность изготовления первой стенки из вольфрама. Топливом для термоядерной реакции выбрана смесь дейтерия и трития. Чрезвычайно интенсивные потоки быстрых атомов, ионов, нейтронов и электронов бомбардируют стенку токамака и дивертор. Это может приводить к их разрушению [1; 2], а также к поступлению распыленного материала в виде примесей в основной объем реактора [3–5]. Распыленные частицы вольфрама и бериллия способны достигнуть последней замкнутой магнитной поверхности (сепаратрисы), а затем проникнуть в центральную часть плазменного шнура, вызывая потери энергии на излучение, что, в свою очередь, может кардинально изменить режим работы реактора [6–8]. Показано [9], что при концентрации вольфрама в плазме всего в 0.2% невозможно достижения положительного выхода мощности при термоядерном синтезе, поскольку линейчатое излучение вольфрама будет приводить к большим потерям энергии.

Знание коэффициентов отражения изотопов водорода от стенок и дивертора реактора также важны для корректного учета баланса топлива, а данные об энергетических спектрах отраженных частиц важны для работы приборов корпускулярной диагностики ионов плазмы. На сегодняшний день экспериментальные данные по коэффициентам отражения и распыления вольфрама и бериллия крайне ограничены, приведены лишь в узком диапазоне энергий и углов падения атомов на поверхность. Стоит также отметить, что результаты экспериментальных измерений различных групп зачастую противоречат друг другу. Довольно подробная работа проведена по компьютерному моделированию коэффициентов распыления различных материалов группой [10]. Однако эти расчеты проведены в

рамках бинарного приближения с использованием KrC потенциала, что не всегда оправдано.

Целью данной работы является разработка численного метода для определения надежных коэффициентов отражения частиц и распыления вольфрама и бериллия при бомбардировке различными ионами, а также для определения энергетических и угловых спектров распыленных/отраженных частиц для широкого диапазона характеристик бомбардирующих ионов, а так же для различного состояния облучаемого материала. Работа является продолжением и развитием исследований, начатых в лаборатории атомных столкновений в твердых телах ФТИ им. Иоффе в 2017 году.

Для достижения поставленной цели были решены следующие **задачи**:

1. Разработка численного кода для расчета коэффициентов отражения и распыления при облучении твердого тела потоком атомов или ионов. Сравнение расчетов с имеющимися экспериментальными данными. Выбор оптимальных параметров модели: тормозные способности на электронах, межатомный потенциал, энергия сублимации и др.
2. Расчет коэффициентов распыления бериллия и вольфрама при облучении изотопами водорода (H, D, T) для широкого диапазона энергий (от пороговой области до 100 кэВ) и угла падения пучка (от нормального, до скользящего угла).
3. Расчет коэффициентов отражения от бериллия и вольфрама при облучении изотопами водорода (H, D, T) для широкого спектра энергий (от пороговой области до 100 кэВ).
4. Расчет энергетических и угловых спектров распыленных частиц бериллия и вольфрама.
5. Расчет энергетических и угловых спектров отраженных частиц изотопов водорода от бериллия и вольфрама.
6. Расчет коэффициентов распыления вольфрама и бериллия атомами возможных примесей в токамаке.
7. Исследование влияния шероховатости поверхности (путем выбора поверхностного потенциала) на коэффициенты отражения, а также на характеристики распыленных частиц.
8. Оценка влияния распыления первой стенки токамака реактора из бериллия и вольфрама потоками быстрых атомов дейтерия и трития, покидающих горячую зону плазму.

Научная новизна работы обусловлена использованием передовых подходов для моделирования процессов взаимодействия атомных частиц с твёрдым телом в сочетании с применением многочастичных потенциалов, разработанных в рамках теории функционала плотности. Также в работе учитываются современные представления о ядерных и электронных тормозных потерях, как быстрых частиц, так и частиц отдачи, покидающих твердое тело.

В проделанной работе впервые:

- Посчитаны коэффициенты распыления вольфрама и бериллия с использованием многочастичного DFT потенциала для широкого диапазона энергий налетающих частиц от порога распыления до 100 кэВ.
- Изучено влияние тормозных потерь на расчет коэффициентов распыления. Введена поправка на многократное рассеяние частиц в твердом теле, что позволяет значительно повысить точность вычислений коэффициентов распыления.
- Рассмотрены предельные случаи поверхностного потенциального барьера, что позволяет оценить изменение коэффициента распыления при различной шероховатости поверхности. Продемонстрировано сильное влияние поверхностного потенциала на результат расчета коэффициентов распыления, особенно для области энергий вблизи порога распыления.
- Проанализировано влияние поверхностного потенциала на угловые и энергетические характеристики распыленных частиц. Рассчитаны для двух типов поверхностного потенциала средние энергии распыленных частиц в зависимости от энергии налетающих ионов.
- С использованием полученных в работе коэффициентов распыления и зависимостей от угла падения и энергии бомбардирующих частиц, оценены потоки распыленных частиц первой стенки токамака при бомбардировке быстрыми нейтральными атомами дейтерия и трития, покидающими плазму.

Теоретическая и практическая значимость

Основными объектами для изучения в данной работе выбраны вольфрам и бериллий. Эти элементы особенно интересны как обращенные к плазме потенциальные материалы первой стенки термоядерных реакторов. Рассматриваемый энергетический диапазон бомбардирующих ионов перекрывает энергетический спектр, характерный для частиц плазмы в современных токамаках. Посчитанные коэффициенты распыления и отражения для случаев бомбардировки вольфрама и бериллия изотопами водорода, а также атомами характерных примесей в реакторе, могут быть использованы для совершенствования имеющихся моделей и кодов моделирования плазменных разрядов токамаков.

Отдельный интерес представляют полученные данные по характеристикам распыленных частиц. Энергетические и угловые спектры позволяют спрогнозировать динамику дальнейшего поведения распыленных частиц, что позволяет более точно описывать влияние примесей на разряд. Знание энергетических спектров отраженных частиц позволяет точнее проводить расчет баланса топлива в плазме токамака, а также обеспечивает повышение точности работы приборов корпускулярной диагностики ионной компоненты плазмы.

Оценены потоки распыленных атомов бериллия и вольфрама при бомбардировке стенки быстрыми атомами дейтерия и трития. Эти данные могут быть использованы как

граничные условия в транспортных кодах при расчете поступления примесей в горячую область плазмы.

Учет влияния шероховатости поверхности вольфрама и бериллия при облучении ионами позволит более точно спрогнозировать временной ресурс работы реактора, а также позволит делать необходимые поправки на выбор режима работы, с учетом разрушения обращенного к плазме материала первой стенки реактора.

Методология и методы исследования

Использовались методы компьютерного моделирования процессов многократных столкновений атомов с твердым телом. Применялся анализ современного состояния знаний о потерях энергии при торможении частиц в веществе и о потенциале взаимодействия.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Повышение точности расчета коэффициентов распыления и рассеяния при бомбардировке твердых мишеней пучками атомов или ионов благодаря использованию DFT потенциалов с ямой для конкретных систем с уточнением параметров потенциальной ямы из спектроскопических данных. Введение поправки на электронное торможение путем учета отклонения длины траектории от проективного пробега.
2. Значения коэффициентов распыления, их угловые и энергетические зависимости при бомбардировке поликристаллического бериллия и вольфрама изотопами водорода и ионами примесей в плазме токамак-реактора. Случаи идеально гладкой мишени и мишени, состоящей из остриев. Энергетические и угловые спектры распыленных частиц.
3. Оценка потока распыленного материала при облучении стенки токамака ИТЭР из вольфрама и бериллия быстрыми нейтральными атомами, покидающими плазму.
4. Значения коэффициентов отражения при бомбардировке поликристаллических вольфрама и бериллия различными атомами, от H до W. Влияние на значения коэффициентов отражения применяемых моделей электронных тормозных способностей, поверхностного потенциала и структуры мишени. Энергетические спектры и угловые зависимости отраженных частиц на примере систем H, D-W.

Степень достоверности научных результатов

Достоверность полученных результатов обеспечена тем, что в процессе моделирования использовались самые современные и актуальные данные по взаимодействию ионов с твердым телом. Используемые потенциалы взаимодействия были получены методом теории функционала плотности. Также учитывались современные представления о неупругих тормозных способностях на электронах, имеющие сопоставление с рядом экспериментальных работ. Результаты моделирования в диссертационной работе сопоставлялись с имеющимися экспериментальными данными, а так же с результатами моделирования других научных коллективов. Для проверки точности работы используемого кода проводился расчет со

стандартными потенциалами взаимодействия, с целью получения результатов, схожих с результатами моделирования других широко используемых пакетов.

Апробация работы и публикации

По результатам исследования опубликованы 8 статей в рецензируемых научных журналах. 8 публикаций индексируются в Web of Science.

Основные результаты проведенного диссертационного исследования представлены на следующих международных конференциях: 29th international conference on atomic collisions in solids & 11th international symposium on swift heavy ions in matter (Helsinki, Finland, 2022); XXV/XXVI Международная конференция «Взаимодействие ионов с поверхностью» (Россия, Ярославль, 2021/2023); 52-я/51-я/50-я Тулиновская конференция по Физике Взаимодействия Заряженных Частиц с Кристаллами (Россия, Москва, 2023/2022/2021); А также в ряде всероссийских конференций: Всероссийская конференция и школа молодых ученых и специалистов VIII «Физические и Физико-Химические Основы Ионной Имплантации» (Россия, Казань, 2022); XXVII конференция «Взаимодействие Плазмы с Поверхностью» (Россия, Москва, 2024); Недели Науки ФизМех (Россия, Санкт-Петербург, 2023).

Личный вклад автора

Автором был усовершенствован имеющийся численный код для моделирования рассеяния частиц. Новая версия кода позволяет моделировать процесс распыления, учитывает каскадные эффекты, а также позволяет отслеживать параметры распыленных частиц. Автором был проведен ряд описанных в диссертации численных экспериментов с последующей обработкой полученных данных. Обсуждение и интерпретация полученных результатов проводилась совместно с научным руководителем и соавторами публикаций.

Основное содержание работы

В **введении** формулируется цель и задачи исследования, научную новизну и практическую значимость полученных результатов, а также обосновывает актуальность диссертационной работы. В введении также представлены положения, выносимые на защиту.

Первая глава состоит из обзора литературы по теме диссертационной работы. Описано современное представление физики взаимодействия ионов с твердым телом, проведен обзор текущего состояния исследований по ионному облучению вольфрама и бериллия - перспективных материалов первой стенки реакторов УТС.

Раздел 1.1 посвящен основам физики взаимодействия пучка ионов с твердым телом. В подразделе 1.1.1 подробно описан процесс физического распыления. Рассмотрены основные теории для описания процессов распыления. Кратко изложена теория Зигмунда для случая режима линейных каскадов [11]. Представлены источники актуальных экспериментальных данных, а также результатов моделирования распыления вольфрама и бериллия изотопами водорода и примесными частицами токамаков реакторов. В подразделе 1.1.2 описан процесс ионного рассеяния. Представлена литература о современных теориях, экспериментах и результатах компьютерного моделирования. Подраздел 1.1.3 посвящен тормозным способностям в твердом теле. Рассмотрены различные модели по описанию неупругих тормозных потерь на электронах. Описано определение упругих потерь на ядрах при моделировании в приближении парных столкновений. В подразделе 1.1.4 подробно изучены вопросы выбора межатомного потенциала взаимодействия для расчета упругих тормозных потерь. Рассмотрен широкий набор стандартных потенциалов, таких как: ZBL [12], KrC [13], потенциал Мольера [14], потенциал Ленца-Йенсена [15], потенциал Зиновьева [16]. Также рассмотрены современные потенциалы, полученные методом функционала плотности [17]. Проведено сравнение всех этих потенциалов с экспериментально полученными данными. В подразделе 1.1.5 на примере взаимодействия пучка протонов с Ag и He продемонстрировано сильное влияние зарядового состава пучка на определение тормозных способностей на электронах. В подразделе 1.1.6 освещен механизм торможения, связанный с возбуждением автоионизационных состояний. Таким образом, раздел 1.1 охватывает все основные физические процессы, которые важны при моделировании взаимодействия ионов с твердым телом.

Раздел 1.2 включает в себя описание базовых подходов моделирования взаимодействия ионных пучков с твердым телом. Рассмотрены методы приближения парных столкновений (BCA), метод молекулярной динамики, а также метод траекторий. Для каждого из методов дано описание принципов моделирования. Охарактеризованы широко используемые программы построенные на данных методах: SRIM [18], TrimSP [19], T-RBS [20], TRIDYN [21] OKSANA [22], MARLOWE [23], LAMMPS [24], IMD [25]. Приведены достоинства и недостатки этих программ, представлен ряд актуальных работ с использованием подобных кодов для моделирования взаимодействия ионов с вольфрамом и бериллием.

В разделе 1.3 обсуждается проблема нехватки надежных экспериментальных данных по взаимодействию ионных потоков с перспективными материалами реакторов УТС стоит

довольно остро. Использование разработанной программы с возможностью настройки широкого набора параметров физических процессов позволит получить необходимые данные по коэффициентам распыления и отражения, а также полный спектр характеристик распыленных и отраженных частиц, что позволяет более точно проводить дальнейший расчет их динамики в УТС реакторах.

Вторая глава содержит описание разработанного в диссертации кода для моделирования взаимодействия ионных пучков с твердым телом. Код программы написан на языке Fortran, основан на методе Монте-Карло с использованием приближения парных столкновений (ВСА). Данный код был создан с учётом недостатков существующих программ. Преимуществом использования разработанной программы является возможность варьирования всех задаваемых исходных параметров, а также возможность корректировки модели описания происходящих физических процессов.

Разделы 2.1 - 2.3 подробно излагают алгоритм программы. Описаны используемые формулы, методы учета структуры вещества, тепловых колебаний, а также метод учета шероховатости поверхности через тип используемого поверхностного потенциального барьера. Случаю идеально гладкой мишени соответствует плоскостной поверхностный потенциальный барьер, предельно шероховатой поверхности (состоящей из острий атомного размера) - соответствует сферический потенциальный барьер.

Раздел 2.4 описывает потенциал взаимодействия частиц с твёрдым телом - наиболее важный параметр при моделировании. На примере работы [16] было продемонстрировано, что результаты расчетов с использованием потенциала полученного в приближении теории функционала плотности (DFT) хорошо согласуются с экспериментом. Также было показано, что модель универсального потенциала при больших межъядерных расстояниях дает неверные результаты, поэтому при решении задач данной работы использовался потенциал, полученный в приближении DFT [26–29] с коррекцией параметров потенциальной ямы [30]. Работы [31–33] использовались для учета экспериментальных данных о глубине ямы и положения минимума потенциальной энергии.

В разделе 2.5 описаны используемые значения и методики учёта электронных тормозных потерь. При наличии надежных экспериментальных данных использовалась аппроксимация измеренных тормозных способностей. При отсутствии для конкретной пары мишени и бомбардирующего иона данных о торможении атомов использовались надежные экспериментальные измерения для алюминия из работы [34] с дальнейшим масштабированием на плотность электронов в рассматриваемой мишени. В используемых данных по неупругим потерям во внимание также принималась поправка на отличие длины траектории от проективного пробега, подробно изложенная в работе [35].

Третья глава содержит основные результаты диссертационной работы по моделированию распыления и рассеяния при облучении пучками ионов бериллиевых и вольфрамовых мишеней.

Раздел 3.1 содержит результаты по моделированию распыления бериллия изотопами водорода. Расчитаны коэффициенты распыления Y для широкого диапазона энергий E (Рисунок 1). Рассмотрены случаи сферического и плоскостного поверхностно барьера. Проведено сравнение с экспериментальными данными [10] и с расчетами группы Экштай-

на [36], в которых в качестве потенциала взаимодействия использовался КгС потенциал. Экспериментальные данные по распылению для случая Т-Ве отсутствуют. Удовлетворительное согласие наших результатов расчета с экспериментальными данными в случае Н, D-Ве, позволяет также быть уверенными в достоверности полученных результатов для пары Т-Ве.

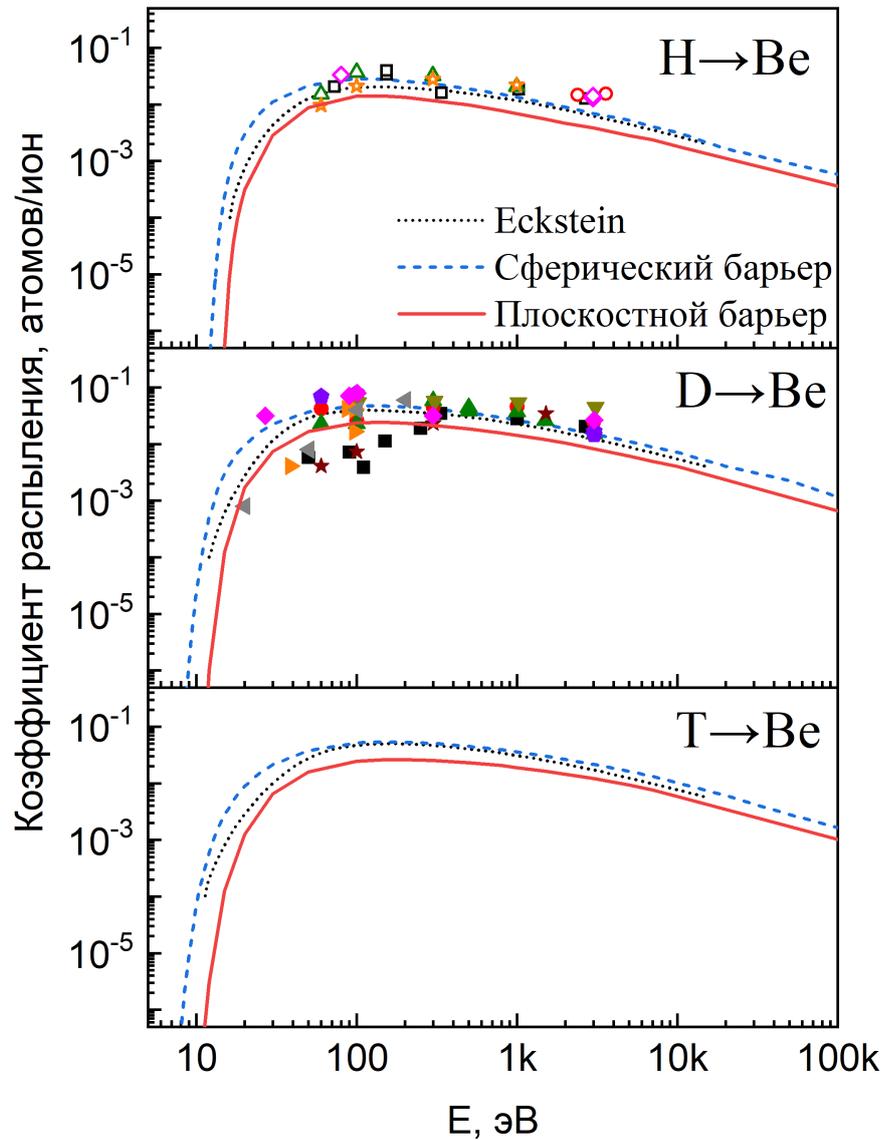


Рисунок 1 — Зависимость коэффициента распыления бериллия различными изотопами водорода от энергии налетающей частицы при нормальном падении пучка. Расчет для случая сферического барьера изображен синей штриховой линией, для плоскостного — красной сплошной. Пунктирная черная линия — результаты моделирования Экштайна программой SDTrimSP [36]. Точками отмечены экспериментальные данные различных авторов из монографии [10].

Подразделы 3.1.2 – 3.1.4 посвящены изучению самого процесса распыления. Для случаев Н, D, Т - Ве проведен анализ глубины образования распыленных частиц. Показано, что

в основном происходит распыление приповерхностного слоя атомов. Изучен вклад в распыление двух типов атомов: движущимися вглубь мишени и обратно рассеянных, движущихся в сторону поверхности. Установлен доминирующий вклад в распыление приповерхностных слоев потоком обратно рассеянных частиц для случая H,D,T - Be.

В работе, в подразделе 3.1.5 были получены также угловые зависимости коэффициента распыления $Y(\theta)$ (Рисунок 2). Представленные значения нормированы на коэффициент распыления для угла падения $\theta = 0^\circ$ (под прямым углом к мишени). Данное представление является удачным для изображения коэффициентов распыления для разных энергий и типов бомбардирующих изотопов. Показано, что использование различных типов поверхностного потенциала дает схожие зависимости $Y(\theta)$.

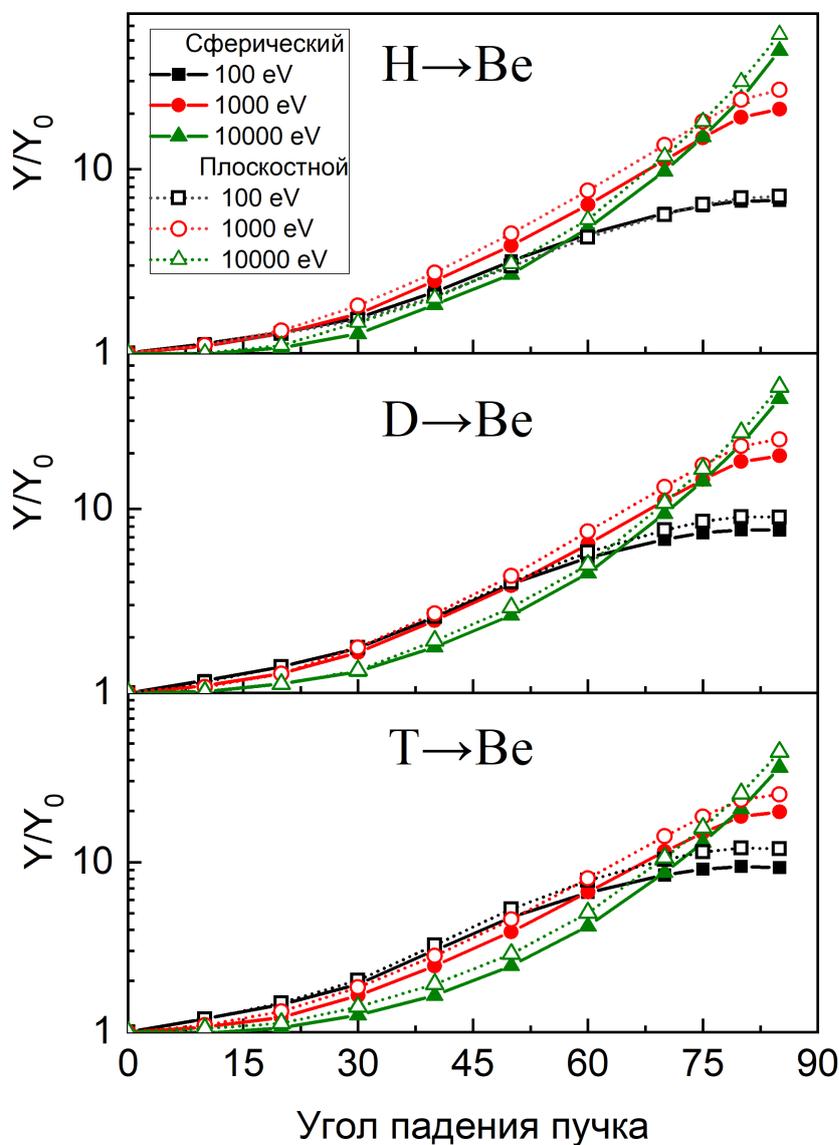


Рисунок 2 — Угловые зависимости коэффициента распыления Be при бомбардировке H, D, T. Представлены энергии 100, 1000, 10000 eV. Пунктиром обозначен расчет для плоскостного барьера, сплошной линией — для сферического барьера.

В диссертационной работе отдельно было продемонстрировано влияние наличия ямы в потенциале межатомного взаимодействия на зависимость $Y(\theta)$. При использовании потенциала без ямы при углах падения выше 80° (вблизи скользящего угла) наблюдалось падение коэффициента распыления до нуля. Для расчетов с использованием потенциала с ямой такого явления не наблюдалось.

Отдельное внимание в диссертации посвящено описанию характеристик распыленных частиц бериллия. Получены их энергетические и угловые спектры. Рассчитаны средние энергии и углы вылетевших частиц от энергии и угла падения пучка. Рассмотрены случаи идеально гладкой, и максимально шероховатой поверхности. Для второго случая наблюдается универсальная форма угловой зависимости распыленных частиц для различных энергий падения пучка (Рисунок 3). В случае гладкой мишени подобная зависимость не обнаружена.

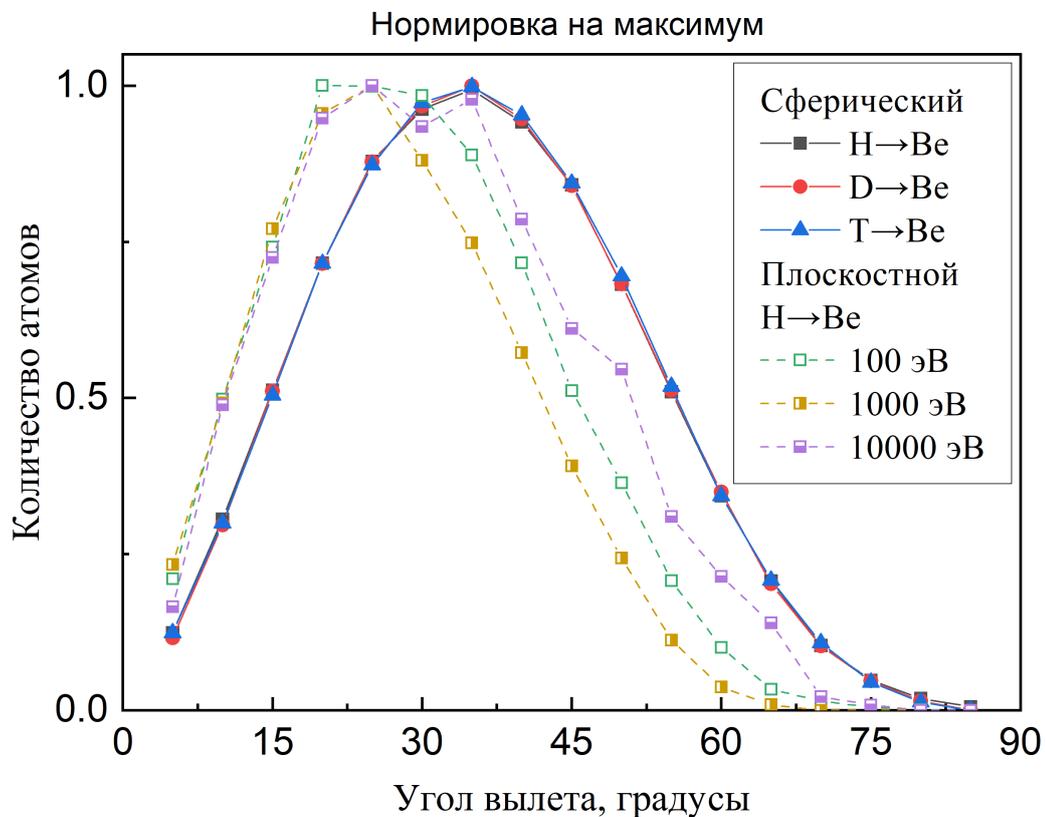


Рисунок 3 — Угловой спектр распыленных частиц для разных энергий бомбардирующих частиц. Расчет для пары Н-Ве. Все кривые нормированы на максимальное значение интенсивности.

Раздел 3.2 посвящен процессу распыления вольфрамовой мишени под действием ионного пучка различных изотопов водорода. Как и для случая моделирования бериллия, были определены зависимости коэффициентов распыления от энергии и угла падения бомбардирующих частиц. Также были проанализированы различные характеристики распыленных атомов вольфрама.

На рисунке 4 изображены полученные коэффициенты распыления Y вольфрама изотопами водорода под прямым углом падения пучка. Результаты группы Экштайна [10] лежат

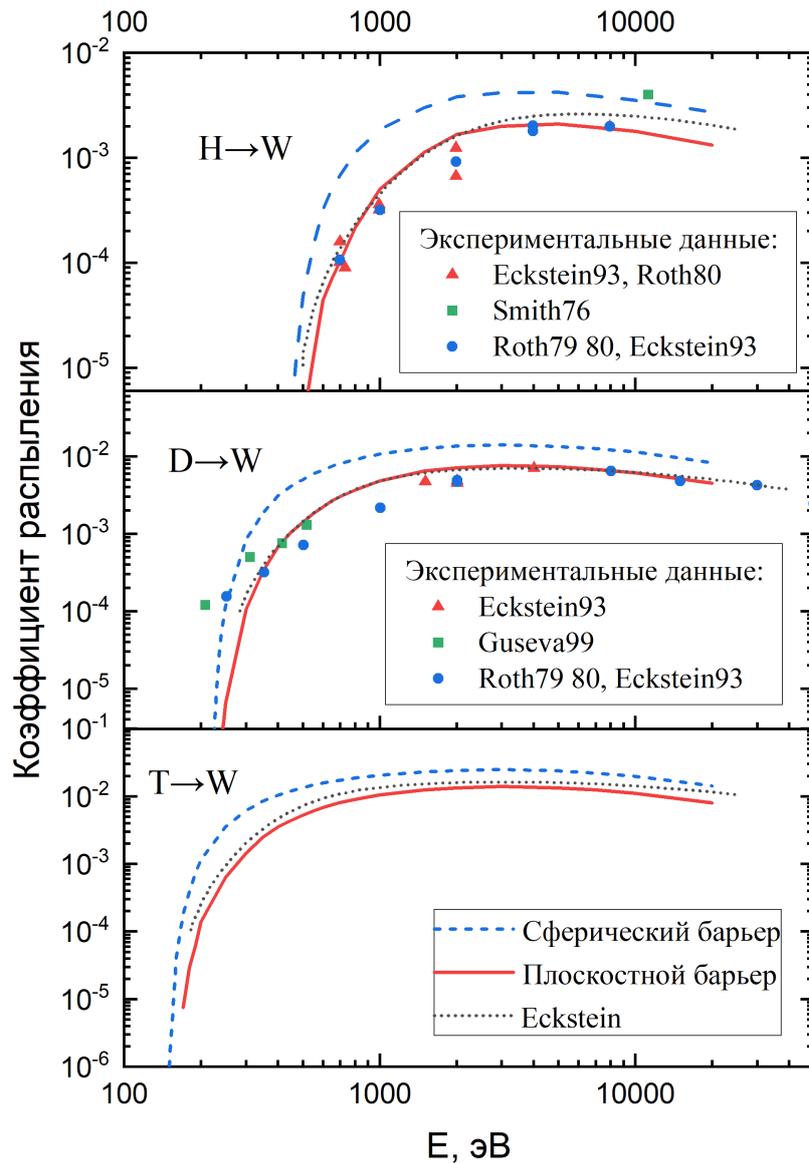


Рисунок 4 — Зависимости коэффициента распыления от энергии бомбардирующих частиц при нормальном падении пучка. Рассмотрен случай распыления вольфрама различными изотопами водорода. Штрихованная синяя линия - расчет для сферического потенциала. Красная сплошная - плоскостной потенциал. Точками отмечены экспериментальные данные. Пунктирная черная линия - результаты моделирования Экштайна.

ближе к нашему расчету с использованием плоскостного поверхностного барьера. Экспериментально полученные значения Y расположены ниже расчетов. Исключение составляет эксперимент группы Гусевой. Это может быть связано с качеством обработки поверхности мишени.

Рассчитанные угловые зависимости коэффициента распыления для вольфрама имеют схожее с бериллием поведение.

Подразделы 3.2.3 – 3.2.4, по аналогии со случаем бериллия, посвящены характеристикам распыленных частиц. На рисунке 5 представлены энергетические спектры распыленных

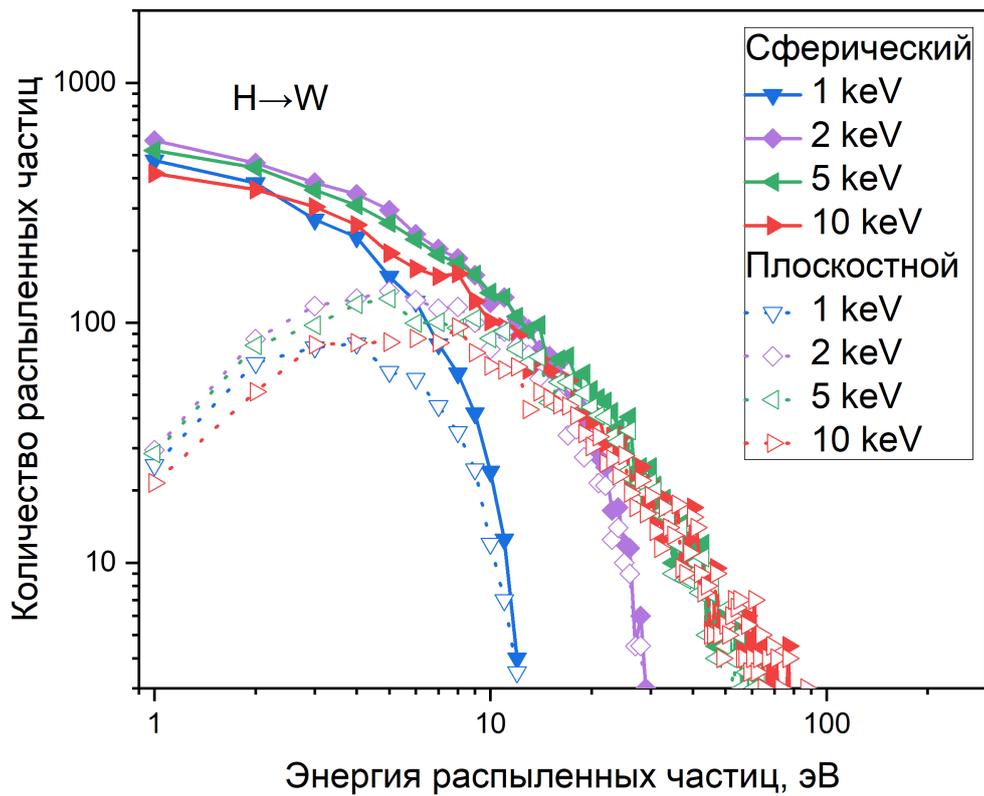


Рисунок 5 — Энергетические спектры распыленных частиц вольфрама. Случай плоскостного барьера обозначен пунктирными линиями. Случай сферического барьера - сплошными. Представлены результаты вычислений для различных энергий пучка.

атомов вольфрама. Все расчеты проводились с одинаковым числом бомбардирующих частиц. Для сферического и плоскостного типа барьера при малых энергиях характерны сильные различия энергетических спектров. Плоскостной барьер препятствует выходу частиц, распыляемых с малой энергией. Таким образом, в случае гладкой мишени ожидается более высокая средняя энергия распыленных частиц.

Также были рассчитаны средние энергии распыленных частиц вольфрама. Подобная информация является более удобной для расчета вероятности прохождения распыленных частиц первой стенки токамаков через приповерхностный плазменный слой, или через буферный слой нейтрального газа в области дивертора.

Раздел 3.3 содержит результаты расчета коэффициентов распыления бериллия и вольфрама атомами He, Be, C, N, O, Ne, Ar, W в диапазоне энергий бомбардирующих частиц 10 эВ - 100 кэВ. Рассматриваемый набор частиц охватывает характерные для токамаков примеси. В диссертации проведено подробное сравнение полученных результатов с экспериментальными данными и с расчетами других групп. Наблюдается неплохое согласие.

В качестве примера такого сравнения представлен случай облучения вольфрама гелием (Рисунок 6). Лучшее согласие с экспериментом наблюдается у нашего расчета с применением плоскостного барьера (гладкая мишень). Расчет со сферическим барьером да-

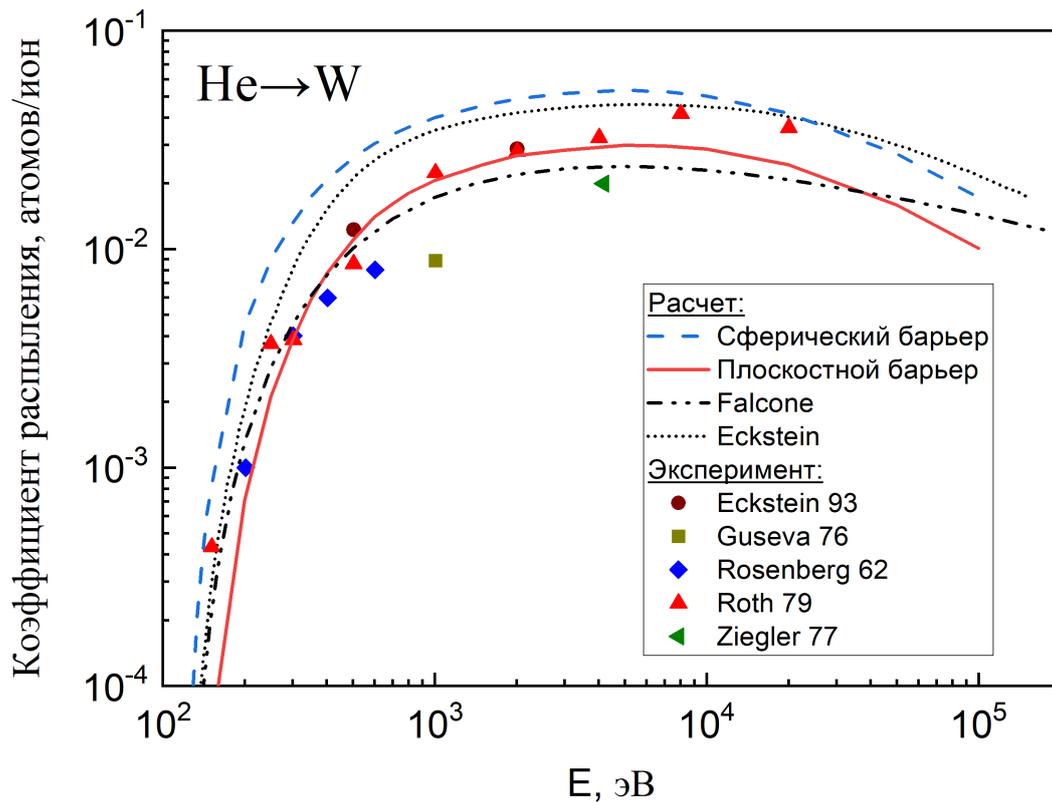


Рисунок 6 — Зависимость коэффициента распыления вольфрама от энергии бомбардирующих частиц неона при нормальном падении пучка. Штрихованная синяя линия - расчет для сферического потенциала. Красная сплошная - плоскостной потенциал. Точками отмечены экспериментальные данные. Пунктирная черная линия - результаты моделирования Экштайна. Штриховая черная линия - модель Фальконе.

ет некоторый верхний предел (мишень состоящая из остриев). Также наблюдается хорошее согласие с моделью Фальконе [37]. Эта модель описывает распыление потоком обратно рассеянных частиц, что характерно для случая бомбардировки тяжелых элементов легкими.

В диссертации был проведен анализ порогов распыления для всех примесных атомов, а также посчитаны угловые и энергетические спектры распыленных частиц.

Раздел 3.4 посвящен моделированию процесса отражения частиц при бомбардировке бериллия и вольфрама различными атомами. Расчитаны коэффициенты отражения частиц от мишени из бериллия и вольфрама в зависимости от энергии бомбардирующих частиц. В работе была продемонстрирована чувствительность расчетов к используемой модели неупругих тормозных потерь на электронах. Показано, что учет поправки на отличие проективного и линейного пробега в неупругих потерях дает рост коэффициента отражения около 20%. В работе было проведено сравнение полученных коэффициентов отражения с имеющимися экспериментальными данными. При отсутствии эксперимента, сравнение проводилась с расчетами других авторов. Наблюдается удовлетворительное согласие.

В диссертации проведен расчет энергетических и угловых спектров отраженных атомов водорода от поверхности вольфрама. Также предложена модель в приближении

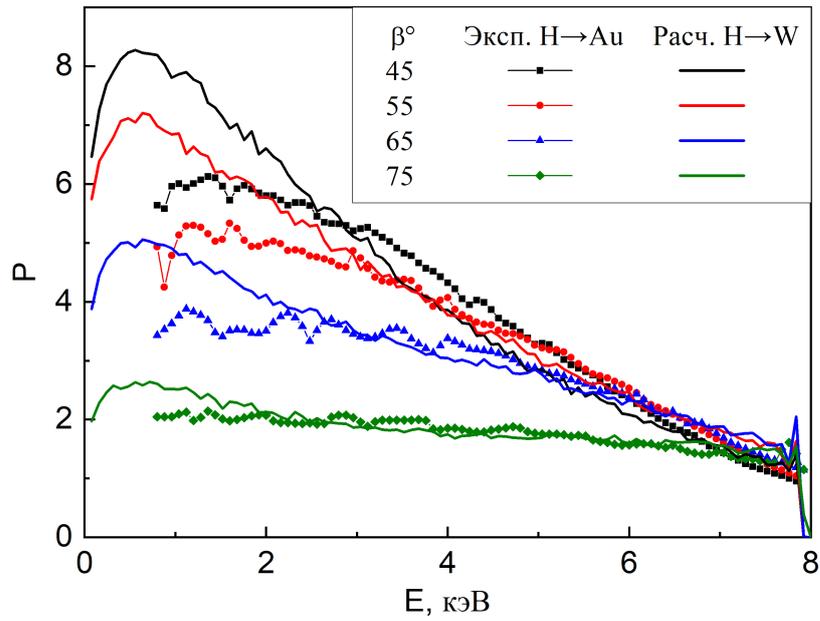


Рисунок 7 — Сравнение наших расчетов энергетических спектров отраженных частиц для случая H-W и экспериментальных данных для H-Au (пучок с энергией 8 кэВ).

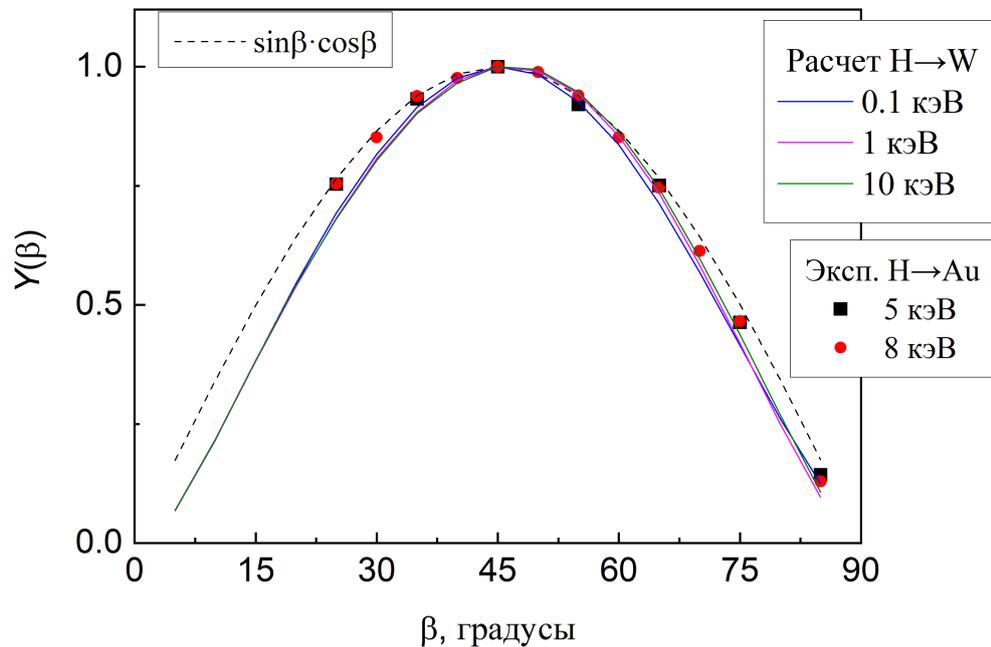


Рисунок 8 — Угловые спектры отраженных частиц. β - угол вылета относительно нормали. Сплошными линиями представлены результаты расчета. Экспериментальные данные по отражению атомов водорода от золота представлены точками. Предсказанная в модели зависимость $\sin\beta \cdot \cos\beta$ представлена штриховой линией. Все данные нормированы на значение при угле $\beta = 45^\circ$.

однократного рассеяния, которая позволяет описать поведение этих спектров. Проведено сравнение наших расчетов энергетических спектров отраженных частиц для случая H-W с экспериментальными данными для H-Au [38]. Массы и атомные номера золота и вольфрама близки по значению друг к другу, что, свидетельствует о подобии потенциалов взаимодействия и, соответственно, сечений рассеяния. Золото и вольфрам - металлы, а это означает подобие зависимости электронных тормозных потерь от энергии. Все это позволяет использовать эти экспериментальные данные по золоту для сравнения наших результатов моделирования.

На рисунке 7 представлено сравнение нашего результата моделирования с экспериментом. Спектры нормированы при энергии 7 кэВ. Имеется неплохое согласие данных.

На рисунке 8 представлена угловая зависимость отраженных частиц для широкого диапазона начальных энергий $E_0 = 0.1 - 10$ кэВ. Полученные моделированием данные описываются универсальным распределением, которое близко к зависимости $\sin \beta \cdot \cos \beta$, предсказываемой в предложенной в диссертации модели. Наблюдается хорошее согласие с экспериментальными данными об угловом распределении частиц для случая H-Au [38].

В целом, полученные в разделе 3.4 данные позволяют более точно определять энергетический, примесный и топливный баланс при расчете сценариев работы термоядерных реакторов.

Раздел 3.5 включает в себя расчет распыление стенки из бериллия и вольфрама быстрыми атомами D и T, покидающих горячую центральную область плазмы в токамаке ИТЭР. Это позволяет дать оценку образования распыленных частиц со стенки.

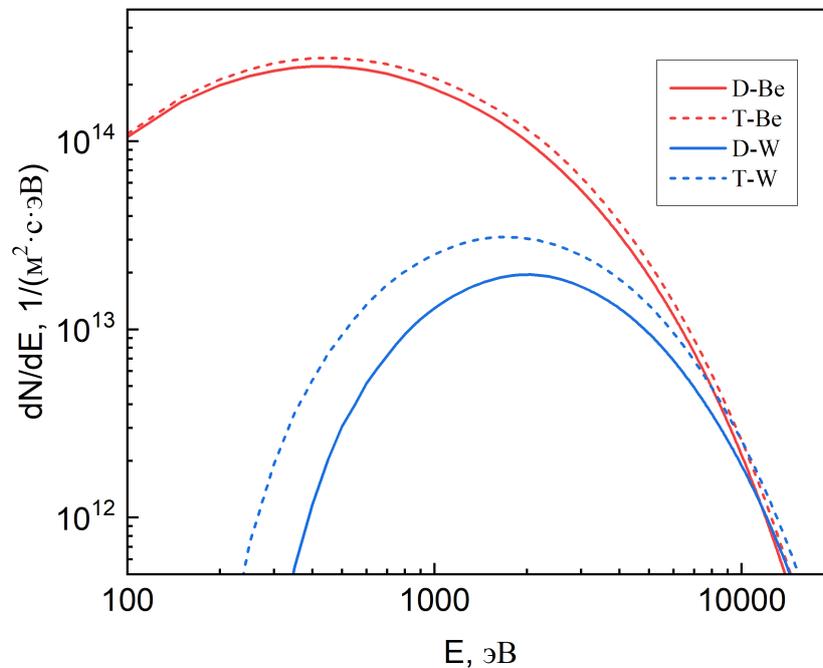


Рисунок 9 — Зависимость вклада в распыление стенки (Be и W) быстрых атомов D и T от их энергии. Сплошные линии - плоскостной барьер, штриховые линии - сферический барьер.

Расчеты энергетических спектров атомов дейтерия и трития, покидающих плазму, проводились с использованием программы DOUBLE-МС [39].

На рисунке 9 представлены рассчитанные суммарные вклады быстрых атомов D и T в распыление стенки из Be и W с использованием плоскостного поверхностного барьера. Видно, что основной вклад в распыление Be вносят частицы с энергиями от 100 до 2000 эВ, а в распыление стенки из W основной вклад вносят частицы с энергиями от 500 до 4000 эВ. Наблюдаемое значительное смещение энергетических спектров к большим энергиям для случая W связано с большими значениями порогов распыления.

Таблица 1 — Поток распыленных атомов для различных материалов стенки, создаваемые быстрыми атомами D и T. Поток даны в единицах - атомов/(м² · с).

		Γ_D	Γ_T	$\Gamma_{D,T}$	$N_{sput}/N_e, \%$	$n_{крит}$
Be	Плоскостной	$5.24 \cdot 10^{17}$	$5.99 \cdot 10^{17}$	$1.12 \cdot 10^{18}$	3.82	$\approx 25\%$
	Сферический	$8.22 \cdot 10^{17}$	$9.27 \cdot 10^{17}$	$1.75 \cdot 10^{18}$	5.96	$\approx 25\%$
W	Плоскостной	$9.60 \cdot 10^{16}$	$1.46 \cdot 10^{17}$	$2.42 \cdot 10^{17}$	0.824	$\approx 0,2\%$
	Сферический	$1.97 \cdot 10^{17}$	$2.78 \cdot 10^{17}$	$4.76 \cdot 10^{17}$	1.62	$\approx 0,2\%$

В таблице 1 приведен поток распыленных частиц стенки нейтральными атомами дейтерия Γ_D и трития Γ_T , а также их сумма $\Gamma_{D,T}$. Поток представлен в единицах - атомов/(м² · с). Видно, что поток распыленных частиц для бериллиевой стенки токамака ИТЭР намного больше, чем распыление со схожими потоками нейтральных частиц для вольфрамовой стенки. Это связано с меньшими значениями коэффициента распыления вольфрама, а также с более высоким порогом распыления.

Также в таблице представлено отношение суммарного числа распыленных частиц первой стенки N_{sput} (рассчитанное как произведение $\Gamma_{D,T}$ на площадь стенки реактора и время удержания частиц в плазме) к общему числу частиц плазмы N_e . В последнем столбце представлены значения критической концентрации для бериллия [40] и вольфрама [41].

Полученные нами характеристики угловых и энергетических распределений распыленных атомов позволили оценить глубину проникновения распыленных атомов в пристеночный слой плазмы. Вследствие ионизации электронами глубина проникновения атомов составляет 2 см для вольфрама и 5 см для бериллия. Это означает, что основная часть потока распыленных частиц будет ионизирована вблизи поверхности. Таки образом полученная нами оценка потока примесей носит характер граничного условия на поверхности стенки для последующего расчета транспорта примеси в горячую зону плазмы.

В **заключении** перечислены основные результаты работы:

1. Усовершенствован имеющийся код для моделирования процессов взаимодействия ионных пучков с твердым телом. Добавлены учет каскадных эффектов и рассмотрение динамики движения частиц твердого тела, что позволило моделировать распыление в процессе облучения. Также добавлена возможность учета шероховатости поверхности распыляемой мишени путем использования в расчете соответствующего типа поверхностного барьера. Модель основывается на современных представлениях о потенциалах взаимодействия и об электронных тормозных способностях.
2. Для бериллиевой и вольфрамовой мишени проводились серии модельных расчетов взаимодействия с пучком изотопов водорода: H, D, T. Определены коэффициенты распыления для широкого (10 эВ – 100 кэВ) диапазона энергий бомбардирующих частиц и рассчитана угловая зависимость этих коэффициентов распыления. Все расчеты были проведены для двух предельных случаев состояния поверхности: для идеально гладкой мишени, с использованием плоскостного поверхностного барьера, и для максимально шероховатой мишени (состоящей из острий атомного размера), с использованием сферического поверхностного барьера. Наблюдается неплохое согласие полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными, что говорит о состоятельности подхода моделирования. Продемонстрирована чувствительность результатов к используемым величинам неупругих тормозных способностей на электронах, а также к типу потенциала взаимодействия частиц. На примере пары D - Be продемонстрировано значительное влияние наличия ямы в потенциале взаимодействия на угловую зависимость коэффициента распыления.
3. Для бериллиевой и вольфрамовой мишени при облучении различными изотопами водорода определены угловые и энергетические характеристики распыленных частиц для широкого диапазона энергий и углов падения бомбардирующих ионов. Продемонстрировано значительное влияние типа поверхностного барьера на поведение распыленных частиц. Определены средние энергии распыленных атомов, что может быть использовано в расчетах прохождения распыленных частиц в центральную область плазмы и расчета проникновения через слой пристеночной плазмы или слабо ионизированного, холодного газа в буферной зоне вблизи дивертора.
4. Промоделировано облучение бериллиевой и вольфрамовой мишени ионами He, Be, C, N, O, Ne, Ar, W (характерные для токамаков примесные частицы). Определены коэффициенты распыления от энергии бомбардирующих частиц. Рассмотрены случаи двух типов поверхностных барьеров. Получены угловые и энергетические спектры распыленных частиц. Продемонстрировано разделение полученных результатов для исследуемых пар элементов на два характерных случая: масса распыляющей частицы M_1 выше массы атома мишени M_2 и наоборот. Показано,

что для этих двух случаев характерны различные зависимости коэффициентов распыления от величины энергии распыляющего пучка.

5. Рассчитаны коэффициенты отражения от Be и W при облучении под прямым углом пучками H, D, T, He, Be, C, N, O, Ne, Ar, W. Для случая $M_1 < M_2$ предложена модель доминирующих однократных столкновений, которая позволяет качественно предсказать ряд зависимостей отраженных частиц. Проведенное сравнение с имеющимися экспериментальными данными указывает на неплохое согласие с результатами моделирования коэффициентов отражения. Полученные данные могут быть использованы для расчетов примесного и топливного балансов при моделировании сценариев работы термоядерных реакторов.
6. Для характерного разряда ИТЭР с использованием полученных в работе коэффициентов распыления и характеристик распыленных частиц был рассчитан поток частиц, распыленных вследствие облучения стенки реактора потоком быстрых нейтральных атомов из центральной области плазмы. Рассмотрены случаи гладкой и максимально шероховатой стенки из вольфрама и бериллия. Проведена оценка фактора ослабления потока распыленных частиц в результате ионизации. Более точную оценку проникновения распыленных частиц вглубь плазмы необходимо моделировать с использованием специальных транспортных кодов.

Список публикаций автора по теме диссертации:

- A1. *Бабенко П.Ю., Михайлов В.С., Зиновьев А.Н.* Коэффициенты распыления бериллия изотопами водорода // Письма в журнал технической физики. — 2023. — Т. 49, № 8. — С. 42.
- A2. *Бабенко П.Ю., Михайлов В.С., Шергин А.П., Зиновьев А.Н.* Моделирование распыления поликристаллического бериллия атомами H, D, T // Журнал технической физики. — 2023. — Т. 93, № 5. — С. 709.
- A3. *Михайлов В.С., Бабенко П.Ю., Шергин А.П., Зиновьев А.Н.* Влияние выбора поверхностного барьера на расчет коэффициентов распыления вольфрама изотопами водорода // ЖЭТФ. — 2023. — Т. 164, № 3. — С. 478.
- A4. *Михайлов В.С., Бабенко П.Ю., Зиновьев А.Н.* Коэффициенты распыления вольфрама легкими примесям // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2024. — Т. 18, № 3. — С. 321.
- A5. *Михайлов В.С., Бабенко П.Ю., Шергин А.П., Зиновьев А.Н.* Коэффициенты распыления бериллия и вольфрама различными атомами от водорода до вольфрама // Физика плазмы. — 2024. — Т. 50, № 1. — С. 12.
- A6. *Михайлов В.С., Бабенко П.Ю., Тенсин Д.С., Зиновьев А.Н.* Энергетические спектры атомов водорода, отраженных от поверхности вольфрама // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2023. — № 2. — С. 95–101.
- A7. *Михайлов В.С., Бабенко П.Ю., Шергин А.П., Зиновьев А.Н.* Коэффициенты отражения частиц при бомбардировке бериллия и вольфрама различными атомами // Журнал технической физики. — 2023. — Ноябрь. — Т. 93, № 11. — С. 1533.
- A8. *P.Yu. Babenko, M.I. Mironov, V.S. Mikhailov, A.N. Zinoviev* Evaluation of Be fluxes into the ITER tokamak plasma due to sputtering of the first wall by D and T atoms leaving the plasma // Plasma Phys. Controlled Fusion. — 2020. — March. — V. 62, № 4. — p. 045020.

Список литературы

1. Challenges for plasma-facing components in nuclear fusion / J. Linke [и др.] // *Matter and Radiation at Extremes*. — 2019. — Август. — Т. 4, № 5. — С. 056201.
2. Ultrafine tungsten as a plasma-facing component in fusion devices: effect of high flux, high fluence low energy helium irradiation / O. El-Atwani [и др.] // *Nuclear Fusion*. — 2014. — Июнь. — Т. 54, № 8. — С. 083013.
3. Dust generation in tokamaks: Overview of beryllium and tungsten dust characterisation in JET with the ITER-like wall / M. Rubel [и др.] // *Fusion Engineering and Design*. — 2018. — Т. 136. — С. 579–586. — Special Issue: Proceedings of the 13th International Symposium on Fusion Nuclear Technology (ISFNT-13).
4. Tungsten dust impact on ITER-like plasma edge / R. D. Smirnov [и др.] // *Physics of Plasmas*. — 2015. — Январь. — Т. 22, № 1. — С. 012506.
5. *Ding F.* Plasma–tungsten interactions in experimental advanced superconducting tokamak (EAST) // *Tungsten*. — 2019. — Август. — Т. 1. — С. 122–131.
6. Physics basis for the first ITER tungsten divertor / R. Pitts [и др.] // *Nuclear Materials and Energy*. — 2019. — Т. 20. — С. 100696.
7. Plasma-facing components damage and its effects on plasma performance in EAST tokamak / B. Gao [и др.] // *Fusion Engineering and Design*. — 2020. — Т. 156. — С. 111616.
8. On the prediction and monitoring of tungsten prompt redeposition in tokamak divertors / J. Guterl [и др.] // *Nuclear Materials and Energy*. — 2021. — Т. 27. — С. 100948.
9. Calculations of impurity radiation and its effects on tokamak experiments / R. Jensen [и др.] // *Nuclear Fusion*. — 1977. — Декабрь. — Т. 17, № 6. — С. 1187.
10. *Behrisch R.* Sputtering by particle bombardment Experiments and computer calculations from threshold to MeV energies. — Germany : Springer, 2007. — CONDENSED MATTER PHYSICS, SUPERCONDUCTIVITY AND SUPERFLUIDITY.

11. *Sigmund P.* Six decades of atomic collisions in solids // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 2017. — Т. 406. — С. 391—412.
12. *Biersack J. P., Ziegler J. F.* The Stopping and Range of Ions in Solids // Ion Implantation Techniques / под ред. H. Ryssel, H. Glawischnig. — Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1982. — С. 122—156.
13. *Wilson W. D., Haggmark L. G., Biersack J. P.* Calculations of nuclear stopping, ranges, and straggling in the low-energy region // Phys. Rev. B. — 1977. — Март. — Т. 15, вып. 5. — С. 2458—2468.
14. *Molière G.* Z. f. Naturforsch. — 1947.
15. *Jensen H.* Die Ladungsverteilung in Ionen und die Gitterkonstante des Rubidumbromids nach der statistischen Methode // Zeitschrift für Physik. — 1932. — Т. 77, № 11/12. — С. 722—745.
16. *Zinoviev A. N., Nordlund K.* Comparison of repulsive interatomic potentials calculated with an all-electron DFT approach with experimental data // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 2017. — Сент. — Т. 406. — С. 511—517.
17. *Martin R. M.* Electronic structure: basic theory and practical methods. — Cambridge university press, 2020.
18. James Ziegler - SRIM & TRIM. — 11.2022. — URL: <http://www.srim.org> ; [Online; accessed 15. Jan. 2024].
19. SDTrimSP Version 6.00 / A. Mutzke [и др.]. — 2019.
20. *Biersack J. P., Steinbauer E., Bauer P.* A particularly fast TRIM version for ion backscattering and high energy ion implantation // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. — 1991. — Июль. — Т. 61, № 1. — С. 77—82.
21. *Möller W., Eckstein W.* Tridyn — A TRIM simulation code including dynamic composition changes // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 1984. — Т. 2, № 1. — С. 814—818.
22. *Shulga V. I.* Depth distributions of sputtered atoms // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. — 1999. — Апр. — Т. 152, № 1. — С. 49—59.

23. *Robinson M. T., Torrens I. M.* Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-collision approximation // *Physical Review B*. — 1974. — Т. 9, № 12. — С. 5008.
24. Molecular Dynamics. — 02.2024. — URL: <https://www.sandia.gov/ccr/focus-area/molecular-dynamics> ; [Online; accessed 3. Feb. 2024].
25. *Stadler J., Mikulla R., Trebin H.-R.* IMD: a software package for molecular dynamics studies on parallel computers // *International Journal of Modern Physics C*. — 1997. — Т. 8, № 05. — С. 1131–1140.
26. *Granberg F., Byggmästar J., Nordlund K.* Molecular dynamics simulations of high-dose damage production and defect evolution in tungsten // *Journal of Nuclear Materials*. — 2021. — Т. 556. — С. 153158.
27. *Björkas C., Nordlund K.* Variables affecting simulated Be sputtering yields // *Journal of Nuclear Materials*. — 2013. — Т. 439, № 1. — С. 174–179.
28. Computational study of tungsten sputtering by nitrogen / A. Lyashenko [и др.] // *Journal of Nuclear Materials*. — 2020. — Т. 542. — С. 152465.
29. Interatomic potentials for the Be–C–H system / C. Björkas [и др.] // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2009. — Окт. — Т. 21, № 44. — С. 445002.
30. *Zinoviev A., Babenko P., Nordlund K.* Nuclear stopping powers for DFT potentials // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. — 2021. — Т. 508. — С. 10–18.
31. *Luo Y.-R.* Comprehensive handbook of chemical bond energies. — CRC press, 2007.
32. Bond dissociation energies in simple molecules / B. d. Darwent [и др.]. — US Government Printing Office Washington, DC, 1970.
33. *Радциг А., Смирнов Б.* Справочник по атомной и молекулярной физике. (Атомиздат, Москва, 1980). 31. — 1985.
34. Electronic excitations of slow ions in a free electron gas metal: evidence for charge exchange effects / D. Primetzhofer [и др.] // *Physical Review Letters*. — 2011. — Т. 107, № 16. — С. 163201.

35. *A. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко.* Влияние многократности соударений на измерения электронных тормозных потерь при столкновениях атомных частиц с твердым телом // Письма в ЖЭТФ. — 2022. — Т. 115, вып. 9. — С. 603—606.
36. Atomic and Plasma–Material Interaction Data for Fusion. — Vienna : INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, 2001. — (Atomic and Plasma–Material Interaction Data for Fusion ; 7/B).
37. *Falcone G., Gullo F.* Sputtering by light-ion bombardment // Physics Letters A. — 1987. — Т. 125, № 8. — С. 432—434.
38. *Verbeek H., Eckstein W., Bhattacharya R. S.* Angular and energy distributions of H and He atoms backscattered from gold // J. Appl. Phys. — 1980. — Т. 51, № 3. — С. 1783—1789.
39. Neutral particle analysis on ITER: present status and prospects / V. I. Afanasyev [и др.] // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A. — 2010. — Сент. — Т. 621, № 1. — С. 456—467.
40. *Gervids V., Kogan V.* Dependence of the radiation losses of a thermonuclear plasma on the atomic number of the impurity and the temperature // ZhETF Pisma Redaktsiiu. — 1975. — Т. 21. — С. 329.
41. *Meade D.* Effect of high-Z impurities on the ignition and Lawson conditions for a thermonuclear reactor // Nuclear Fusion. — 1974. — Апр. — Т. 14, № 2. — С. 289.