

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
НАУКИ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ ИМ. А.Ф. ИОФФЕ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи

Михайлов Владислав Сергеевич

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

Специальность 1.3.5

«Физическая электроника»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

д.ф.-м.н.

Зиновьев Александр Николаевич

Научный консультант:

д.ф.-м.н., проф.

Шергин Андрей Петрович

Санкт-Петербург — 2024

Оглавление

	Стр.
Введение	5
Глава 1. Обзор литературы	13
1.1 Физика взаимодействия ионов с твердым телом	13
1.1.1 Ионное распыление	13
1.1.2 Ионное рассеяние	20
1.1.3 Тормозные способности в твердом теле	21
1.1.4 Межатомный потенциал взаимодействия	25
1.1.5 Учет зарядового состояния пучка	28
1.1.6 Механизм торможения, связанный с возбуждением автоионизационных состояний	32
1.2 Методы компьютерного моделирования	32
1.3 Выводы	35
Глава 2. Описание метода моделирования распыления и рассеяния при ионном облучении	36
2.1 Основной алгоритм	36
2.2 Трансляция ячейки	38
2.3 Поверхностный потенциальный барьер	39
2.4 Потенциал взаимодействия	40
2.5 Тормозные способности	42
Глава 3. Исследование процесса взаимодействия ионных пучков с твердым телом	48
3.1 Моделирование распыления бериллия изотопами водорода	48
3.1.1 Коэффициенты распыления бериллия изотопами водорода	48
3.1.2 Глубина выхода распыленных атомов	50
3.1.3 Вклад различных механизмов в распыление	52
3.1.4 Пороги распыления	53
3.1.5 Угловая зависимость коэффициента распыления Be	55
3.1.6 Энергетические спектры распыленных частиц	59
3.1.7 Угловые распределения распыленных частиц бериллия	61
3.1.8 Выводы	64

	Стр.
3.2 Моделирование распыления вольфрама изотопами водорода . . .	66
3.2.1 Коэффициенты распыления вольфрама изотопами водорода	66
3.2.2 Угловая зависимость коэффициента распыления W	68
3.2.3 Угловые распределения распыленных частиц вольфрама .	69
3.2.4 Энергетические распределения распыленных частиц вольфрама	71
3.2.5 Выводы	74
3.3 Моделирование распыления Бериллия и Вольфрама примесными частицами	76
3.3.1 Коэффициенты распыления Бериллия и Вольфрама примесными частицами	76
3.3.2 Анализ величины порогов распыления	78
3.3.3 Сравнения полученных коэффициентов распыления Be и W с данными других авторов	81
3.3.4 Средняя энергия распыленных частиц	84
3.3.5 Угловые распределения распыленных частиц	84
3.3.6 Выводы	89
3.4 Моделирование процесса отражения частиц при бомбардировке бериллия и вольфрама различными атомами	91
3.4.1 Коэффициенты отражения от Бериллия и Вольфрама . .	91
3.4.2 Сравнения полученных коэффициентов отражения с данными других авторов	96
3.4.3 Расчет энергетических спектров отраженных атомов водорода от поверхности вольфрама	100
3.4.4 Зависимость энергетического спектра отраженных частиц водорода от угла их вылета	106
3.4.5 Выводы	109
3.5 Расчет распыление стенки из бериллия и вольфрама быстрыми атомами D и T в токамаке ИТЭР	111
3.5.1 Выводы	116
Заключение	118

Список литературы	121
-----------------------------	-----

Введение

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 термо-

ядерном 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 также 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 бомбардировки 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 острий. 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 также 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

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).

Публикации

Список всех 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.

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.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 3 глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 134 страницы, включая 56 рисунков и 2 таблицы. Список литературы содержит 157 наименований.

Глава 1. Обзор литературы

1.1 Физика взаимодействия ионов с твердым телом

При бомбардировке твердого тела ускоренными ионами могут наблюдаться следующие эффекты:

- Ионно-электронная эмиссия. Выбивание электронов с поверхности мишени
- Имплантация. Внедрение иона под поверхность, в объем мишени.
- Нарушение структуры приповерхностного слоя, которое может выражаться как в появлении точечных дефектов, так и в нарушении баланса зарядов и стехиометрического состава компонентов мишени
- Рассеяние падающего иона. Этот эффект иногда называют отражением иона.
- Ионное распыление. Выбивание атомов мишени под действием ионной бомбардировки.

В данной диссертации подробно рассматриваются последние два эффекта, распыление и рассеяние при ионном облучении.

1.1.1 Ионное распыление

Впервые ионное распыление было открыто [11] как нежелательный эффект в газовом разряде, приводящий к эрозии металлических электродов. Однако основной интерес к исследованию ионного распыления вызвала возможность его применения для анализа поверхности, а также в микроэлектронном производстве для напыления тонких плёнок и травления рельефа [12].

Для описания скорости разрушения твердого тела под воздействием ионного потока используют коэффициент распыления Y , который определяется как среднее число эмитированных атомов твердого тела, приходящихся на одну бомбардирующую частицу.

$$Y = \frac{\text{число удаленных атомов}}{\text{число падающих атомов}} \quad (1.1)$$

Этот коэффициент распыления Y зависит от массы бомбардирующих частиц, их энергии и угла падения, а также от материала, его структуры и состояния поверхности мишени. При бомбардировке ионизированными молекулами из одного типа атомов, каждый первичный атом учитывается отдельно. Хотя для молекул из разного типа атомов зачастую рассматривают коэффициент распыления на одну молекулу. При самораспылении вещества, когда поверхность твердого тела бомбардируется таким же видом атомов, невозможно различить отраженный и распыленный атом. Поэтому коэффициент распыления состоит из суммы действительно распыленных частиц и отраженных бомбардирующих частиц.

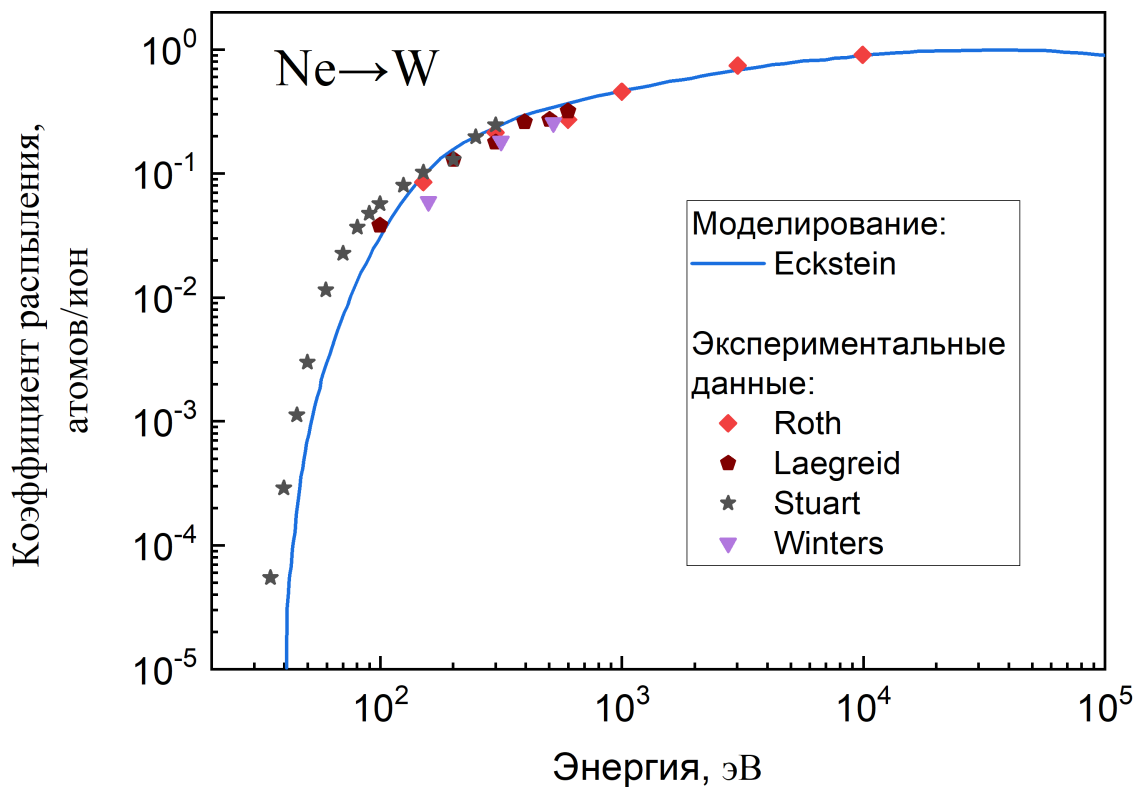


Рисунок 1.1 — Коэффициент распыления вольфрама атомами Ne в зависимости от энергии налетающих частиц. Линией обозначены результаты моделирования [10]. Точками отмечены экспериментальные данные. Ромбы - работа [13], пятиугольники - работа [14], звезды - работа [15], треугольники - работа [16]

Типичная зависимость коэффициента распыления от энергии падающих частиц на примере облучения вольфрама неона представлена на рисунке

(1.1). При распылении материала существует некоторая пороговая энергия. Бомбардирующие частицы с энергией ниже пороговой не вызывают никакого распыления. При превышении бомбардирующими частицами этой энергии коэффициент распыления Y резко возрастает. Однако при достаточно высокой энергии ионного пучка коэффициент распыления начинает падать, это связано с большей глубиной проникновения ионов в твердое тело и с меньшим выделением энергии вблизи поверхности распыляемой мишени. Значение пороговой энергии зависит от масс бомбардирующих и распыляемых частиц, а также от энергии сублимации материала мишени. Энергии сублимации U_{sub} в зависимости от атомной массы элемента представлена на (1.2). Видно, что значение U_{sub} могут меняться весьма значительно, что усиливает зависимости порогов распыления от выбора материала мишени.

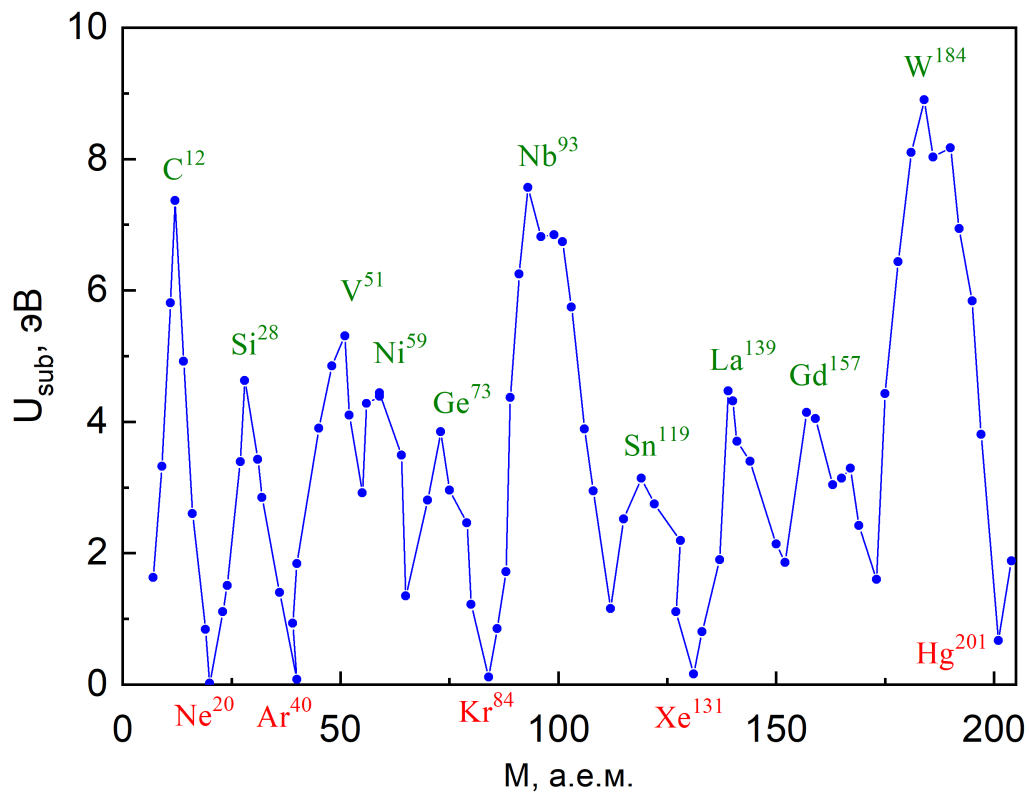


Рисунок 1.2 — Энергии сублимации в зависимости от атомной массы элементов [17]

При распылении аморфных твердых тел и поликристаллических материалов со случайной ориентацией микрокристаллов коэффициент распыления Y монотонно возрастает с ростом угла падения пучка, достигая своего максимального значения при угле $70^\circ - 80^\circ$. При распылении монокристалла коэффициент распыления Y может зависеть от ориентации падающего пучка

и кристаллической решетки. При облучении ионным пучком вдоль основных плотноупакованных осей кристалла коэффициенты распыления меньше, так как из-за эффекта каналирования [18] частиц значительно увеличивает свою длину пробега в кристалле, беспрепятственно проникает глубоко в мишень, не генерируя большого числа каскадных частиц.

Вопрос распыления многокомпонентных мишеней подробно изложен в работе [19]. Основным усложнением при распылении многокомпонентных мишеней является то, что компоненты необязательно распыляются стехиометрически. В связи с чем состав сплава может измениться в некотором интервале глубин под бомбардируемой поверхностью [20].

Распыление можно разделить на физическое и химическое [21]. Первое является следствием передачи кинетической энергии от бомбардирующей частицы атомам мишени. Второе – следствие химической реакции с образованием нестабильных химических соединений на поверхности. В данной диссертации рассматривается только физическое распыление.

Важное место в процессе физического распыления занимает явление каскада атомных столкновений. Общее представление о каскаде можно сформировать так: бомбардирующий ион выбивает атомы твердого тела из их равновесных положений, таким образом формируются атомы отдачи или первично выбитые атомы. При движении в веществе мишени эти первично выбитые атомы сталкиваются с другими атомами и, при условии наличия достаточной энергии, выбивают их; так продолжается до тех пор, пока энергия последующих выбитых атомов достаточна для выбивания из положения равновесия других атомов твердого тела; при определенных условиях часть выбитых атомов может покинуть мишень.

Можно выделить два механизма распыления частиц. Первый случай — режим линейных каскадов (1.3 Слева). Режим линейных каскадов характеризуется тем, что энергия, переданная от бомбардирующей частицы атомам мишени, является достаточной для создания каскадов выбитых атомов. Режим линейных каскадов характерен для энергий от килоэлектронвольт до мегаэлектронвольт.

Второй случай — режим первичного прямого выбивания (1.3 Справа). В этом режиме атомы получают от бомбардирующего иона достаточную энергию для распыления в вакуум, но недостаточную для создания каскада выбитых атомов. Распыление преимущественно происходит обратными рассеянными атома-

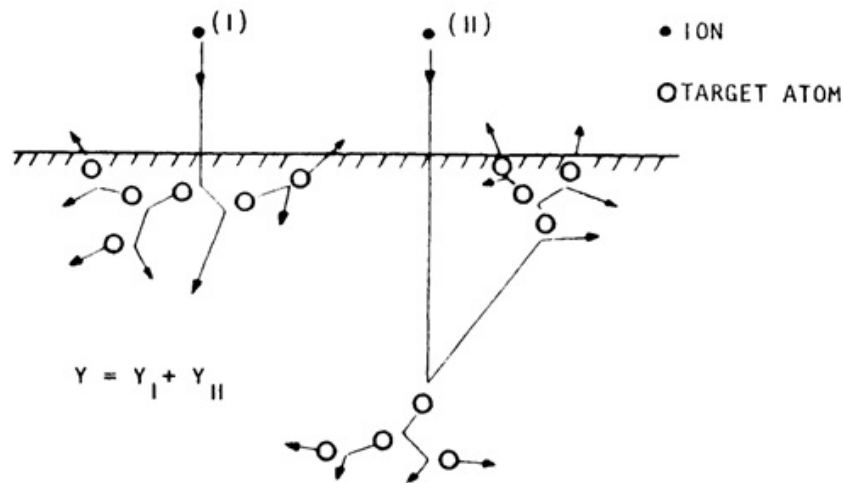


Рисунок 1.3 — Схематическое изображение режим линейных каскадов (I, слева) и первичного прямого выбивания (II, справа)

ми. Режим характерен для бомбардировки тяжелых атомов легкими ионами. Подавляющий вклад в распыление в таком случае вносит выбивание поверхностных атомов потоком обратно рассеянных частиц. В работе [22] предложена модель обратного распыления, которая довольно точно предсказывает величину коэффициента распыления при бомбардировке вольфрама ионами бериллия и неона. Это связано с тем, что легкий бомбардирующий ион воспринимает тяжелый атом вольфрама как практически неподвижный и легко отражается на большой угол, после чего водороду легче передать импульс другим атомам вольфрама в "нужном" направлении в сторону вакуума.

Отдельно можно выделить и третий режим распыления: режим тепловых пиков. Режиму характерна настолько высокая плотность каскадных частиц, что большинство частиц мишени находятся в каскадном движении в некоторой области теплового пика. Режим характерен для интенсивных пучков, для тяжелых ионов (больше 100 а.е.м.), а также для распыления молекулярными ионами с энергиями 1-100 кэВ любых мишеней.

Для теоретического расчета коэффициентов распыления на сегодняшний день самой полной и содержательной является теория Зигмунда [23], основанную на решении [24; 25] кинетического уравнения Больцмана.

Теория Зигмунда построена в следующих приближениях:

- каскады столкновений являются изотропными по направлениям
- линейное движение первичных атомов и атомов отдачи
- столкновения являются упругими

- столкновения происходят с покоящимися атомами (В промежутке между столкновениями атомы успевают полностью релаксировать).
- мишень не имеет строгой кристаллической структуры

В конечном итоге, Зигмунд получает следующее выражение для описания коэффициента распыления Y :

$$Y = \Lambda F_D$$

$$F_D = \alpha \left(\frac{M_1}{M_2}, \theta_0, E_0 \right) N S_n(E) \quad (1.2)$$

$$\Lambda = \frac{\Gamma_m}{8(1-2m)} \frac{1}{N C_m U_0^{1-2m}}$$

Здесь F_D — энергия первичного иона, поглощённая на единице глубины распыляемого слоя; α — безразмерная функция отношения массы атома мишени M_2 к массе бомбардирующей частицы M_1 , угла падения θ_0 , и энергии первичного иона E_0 ; $S_n(E)$ — средняя энергия, теряемая первичным ионом на единице пути в мишени, тормозная способность; Λ — константа, зависящая от свойств материала; U_0 — поверхностный потенциальный барьер; N — плотность атомов мишени; m и C_m — параметры сечения торможения, в случае кулоновского взаимодействия:

$$C_m = \frac{\pi}{2} \lambda_m a^2 \left(\frac{M_1}{M_2} \right)^m \left(\frac{2Z_1 Z_2 e^2}{a} \right)^{2m} \quad (1.3)$$

m — показатель в выражении потенциала межатомного взаимодействия вида $V(r) \sim r^{-1/m}$ (r — расстояние между центрами сталкивающихся атомов); m — медленно изменяется от 1 при высоких энергиях сталкивающихся частиц до 0 при очень низких энергиях; λ_m — безразмерная функция параметра m ; $Z_1 e$, $Z_2 e$ — заряды ядер сталкивающихся атомов; a — радиус экранирования:

$$a = \frac{0.859 a_0}{\sqrt{Z_1^{2/3}} + \sqrt{Z_2^{2/3}}} \quad (1.4)$$

где $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$ — Боровский радиус.

Также в своих работах Зигмунд получает следующую зависимость коэффициента распыления от угла:

$$Y \sim \cos^n \theta; \quad n = 1 + \frac{8}{3} N C_m^{3/2} \quad (1.5)$$

Несмотря на большое число приближений теории Зигмунда в работе [26] на примере распыления германия показано, что полученные экспериментальные данные по распылению подчиняются формулам (1.2) и (1.5).

Для описания угловой зависимости коэффициента распыления легких ионов следует также отметить эмпирические формулы Ямамура из работы [27], а также подгоночные формулы Экштайна [28; 29].

Наиболее полным обзором теоретических и экспериментальных работ является [12; 19]. Результаты моделирования и их сравнения с экспериментом для широкого набора мишеней и бомбардирующих частиц изложены в работе [10]. Отдельно стоит выделить сборник работ [30; 31] по данным о взаимодействии атомов плазмы с материалами, используемыми в термоядерных реакторах. В этих работах представлены экспериментально найденные коэффициенты распыления вольфрама и бериллия водородом и дейтерием. Экспериментальные данные по распылению тритием отсутствуют. Стоит отметить, что результаты измерения различных экспериментальных групп зачастую носят противоречивый характер. Это может быть связано с технической сложностью эксперимента и с зависимостью коэффициента распыления от множества параметров, таких как шероховатость облучаемого материала, его чистота и структура. Эти параметры могут меняться непосредственно во время облучения ионным пучком, что еще больше усложняет эксперимент и трактовку полученных результатов. Набор данных по распылению бериллия крайне ограничен, обусловлено это высокой токсичностью материала. По распылению бериллия хочется отметить работу [32], в которой коэффициенты распыления изотопами водорода и самим бериллием определяют экспериментально непосредственно из токамака JET. В работах [33; 34] на примере распыления бериллия дейтерием также показано, как коэффициент распыления зависит от шероховатости поверхности мишени. В работах [35; 36] проведен эксперимент по облучению вольфрама, бериллия и их смеси ионами дейтерия, азота и аргона. Азот и аргон может применяться [37] для понижения температуры плазмы у стенки реактора с целью избегания перегрева и разрушения материала дивертора.

В работах [3; 38–40] показано, что потоки высокоэнергетических частиц попадающие на обращенные к плазме элементы реактора приводят к поступлению примесей в плазменный объем. Примеси в токамаке могут также образовываться при напуске газа для охлаждения пристеночной области или для диагностики плазмы. Физика транспорта примесных частиц наиболее

полно изложена в работе [41]. Эти примеси способны сильно менять режим работы токамака [37; 42; 43], а также влиять на профили параметров плазмы. Существует также критическая концентрация в рабочем объеме реактора, при которой излучение примесей приведет к невозможности достижения необходимых температур для осуществления термоядерной реакции. Для токамака ИТЭР критическая концентрация бериллия в рабочем объеме составляет более 20% от плотности плазмы [9]. Для вольфрама эта концентрация составляет уже $\approx 0.1\%$. Для учета влияния примесей на разряд токамака широко используются методы моделирования [44–48]. Для вычисления глубины проникновения в плазму распыленных частиц с первой стенки токамака необходимо знать их энергетические и угловые спектры. В работе [49] угловые зависимости распыленных частиц для случая бомбардировки бериллия гелием были определены экспериментально. Для изотопов водорода экспериментальные данные по угловым и энергетическим характеристикам распыленных частиц, как правило, отсутствуют, и их необходимо получить. Эти данные нужны для более точного моделирования параметров пристеночной плазмы УТС реакторов.

1.1.2 Ионное рассеяние

Важной характеристикой процесса рассеяния ионов при облучении твердого тела является коэффициент рассеяния (отражения). Коэффициент отражения R_N определяется как отношение числа отраженных частиц к полному числу бомбардирующих ионов или атомов.

$$R_N = \frac{\text{число отраженных атомов}}{\text{число падающих атомов}} \quad (1.6)$$

Отдельный интерес представляют также энергетические и угловые зависимости коэффициента отражения, а также угловые распределения и энергетические спектры отраженных частиц.

Для описания рассеяния легких атомов в тяжелых мишенях ряд эмпирических формул предложен в работах [50–53]. В работе [54] предпринята попытка описания коэффициентов отражения через соотношение параметров длины пробега и транспортного сечения. Аналогичная попытка совершена в

недавней работе [55]. В книге [56] отдельная глава посвящена обсуждению возможных теоретических подходов описания рассеяния частиц на поверхности. Теория рассеяния для ионов средних энергий детально изложена в книге Е.С. Машковой [57].

Компьютерное моделирование широко используется для изучения рассеяния атомных частиц на поверхности и распыления материалов [56; 58]. Одним из наиболее популярных программ является код SRIM [59].

В работе [58] содержится наиболее полное сравнение экспериментальных данных и результатом моделирования коэффициента отражения ионов от твердого тела. Моделирование методом Монте-Карло энергетических и угловых характеристик отраженных частиц усложняется необходимостью высокой статистики вычислений.

Что касается работ по моделированию коэффициентов отражения от первой стенки термоядерных реакторов, хочется отметить работы с использованием методов молекулярной динамики [60; 61] и работу [62], где исследовалось влияние формы поверхности на коэффициенты отражения. В работе [63] приведены таблицы рассчитанных значений в диапазоне энергий от 10 эВ до 1 кэВ (для He до 50 кэВ), а также для 9 различных углов падения. В качестве материалов мишени выбраны Be, C и W как наиболее перспективные материалы первой стенки термоядерных реакторов. В качестве снарядов выбраны изотопы водорода (H, D, T), а также He, N, Ne и Ar. Отдельно рассматривалась самобомбардировка Be, C и W.

1.1.3 Тормозные способности в твердом теле

Физика распыления процесса тесно связана с явлением атомных столкновений и прохождением частиц через вещество. При ионном облучении твердого тела бомбардирующие частицы в процессе своего движения внутри мишени теряют свою кинетическую энергию. Часть энергии передается частицам твердого тела, а часть расходуется на возбуждение электронов мишени и ионизацию. Эти потери принято делить на ядерные (упругие) и электронные (неупругие) соответственно.

Вероятность передачи энергии в интервале от T до $T + dT$ от налетающей частицы мишени определяется формулой:

$$d\sigma(E, T) = \frac{d\sigma}{dT} dT \quad (1.7)$$

Величина $\frac{d\sigma}{dT}$ называется дифференциальным сечением передачи энергии. В таком случае торможение, приходящееся на один атом, можно записать как:

$$S = \int T \frac{d\sigma}{dT} dT \quad (1.8)$$

Здесь N — концентрация частиц мишени.

Важной характеристикой процесса торможения является тормозная способность, это средняя теряемая энергия на единицу пути, определяемая формулой:

$$-\frac{dE}{dx} = NS \quad (1.9)$$

Сечения торможения на электронах и атомах мишени можно приближенно рассматривать аддитивно.

$$\frac{dE}{dx} = \left(\frac{dE}{dx} \right)_n + \left(\frac{dE}{dx} \right)_e = -N(S_n(E) + S_e(E)) \quad (1.10)$$

Упругие и неупругие механизмы потерь различаются своей энергетической зависимостью. Для случая бомбардировки легкими частицами максимум сечения электронных потерь располагается в области 0.1 – 1.0 МэВ. Максимум сечения ядерных потерь располагается при гораздо меньших энергиях в диапазоне 0.1 – 10 кэВ.

Взаимодействия между заряженной бомбардирующей частице и электронами мишени очень сложны и поэтому довольно трудно поддаются теоретическому описанию. Электроны в мишени могут упруго сталкиваться со снарядом, возбуждаться, атомы мишени могут ионизироваться, а также сам налетающий ион может возбуждаться, ионизоваться и рекомбинировать [64]. Поэтому для описания неупругих потерь обычно используют полуэмпирические формулы описывающие тормозные способности как функцию энергии движущейся частицы в твердом теле. Для области низких энергий существует теория Линдхарда-Шарфа-Шютта (ЛШШ) [65]. В частности, в работе [66] предложена следующую формула для сечения неупругого торможения:

$$S_e = 8\pi e^2 a_0 \frac{Z_1^{7/6} Z_2}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{3/2}} \cdot \frac{v}{v_0} = C \cdot v \quad (1.11)$$

где $v_0 = e^2/\hbar$ — боровская скорость, v — скорость налетающей частицы. При выводе этой формулы параметры для выражения диэлектрической проницаемости подгонялись под экспериментальные данные. Формула (1.11) справедлива для скоростей $v < Z_1^{2/3} v_0$.

Для более тяжелых атомов (атомные номера бомбардирующих частиц сравнимы с номерами частиц мишени) разработана модель Фирсова [67]. Эта модель основана на использовании импульсного приближения движения ядер, а также на использовании приближения Томаса-Ферми для описания электронных оболочек. Фирсов получил для неупругой потери энергии ε [эВ] следующие выражение:

$$\varepsilon = \frac{(Z_1 + Z_2)^{5/3} \cdot 4,3 \cdot 10^{-8} \cdot v}{\left[1 + 3,1 \cdot (Z_1 + Z_2)^{1/3} \cdot 10^7 \cdot R_0(p)\right]^5} \quad (1.12)$$

где R_0 — расстояние наибольшего сближения, p — параметр удара. Единицы измерения: $[R_0] = \text{см}$, $[v] = \text{см/с}$.

Для сечения торможения S_e можно записать выражение:

$$S_e = 2\pi \int_0^{p_{max}} p \cdot \varepsilon(p, v) dp \quad (1.13)$$

Здесь p_{max} — среднее расстояние между атомами мишени.

Обе модели Линдхарда и Фирсова предсказывают (1.11, 1.12, 1.13) линейную зависимость сечения торможения от скорости налетающей частицы. Таким образом наглядно видно, что в рамках предложенной модели при больших скоростях движущейся частицы неупругие потери на электронах растут. Стоит отметить, что модели Линдхарда и Фирсова зачастую носят лишь оценочный характер, так как не учитывают оболочечную структуру атомов

Для области средних энергий налетающих частиц стоит отметить работу Ведела [68]. В работах Бете [69] и Блоха [70] впервые рассмотрены неупругие потери при высоких энергиях. Наиболее полный обзор экспериментальных данных, а также результатов моделирования и подгоночных формул для неупругих потерь содержится в книге [71].

В приближении парных столкновений зная потенциал взаимодействия между частицами, упругие потери на атомах можно рассчитать точно, как

следствие передачи энергии от налетающей частицы атомам твердого тела. При упругом столкновении иона массой M_1 с кинетической энергией E_0 и неподвижной частицей массы M_2 суммарная энергия и импульс сохраняются. В системе центра масс энергия T передаваемая снарядом атому, зависит от угла рассеяния θ (в системе центра масс) следующим видом:

$$T = \frac{4E_0M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2 \frac{\theta}{2} = T_{max} \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (1.14)$$

Максимальная передача энергии T_{max} происходит при лобовом столкновении ($\theta = \pi$). Для сферически симметричного потенциала взаимодействия $V(r)$ можно записать классический интеграл рассеяния в виде:

$$\theta = \pi - 2b \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \left[1 - \frac{V(r)}{E_c} - \frac{b^2}{r^2} \right]} \quad (1.15)$$

где b — прицельный параметр, E_c — энергия в системе центра масс, r — радиальная полярная координата, а r_{min} — расстояние наибольшего сближения.

Формула (1.14) определяет зависимость $\theta(T)$, а формула (1.15) определяет $b(\theta)$. Таким образом можно определить:

$$\sigma(E) = 2\pi b \frac{db}{d\theta} \frac{d\theta}{dT} \quad (1.16)$$

что вместе с формулой (1.8) дает нам сечение торможения, приходящееся на один атом S_n .

На рисунке 1.4 показана зависимость электронных и ядерных тормозных способностей от энергии движущейся частицы в твердом теле. Видно, что при больших энергиях электронные тормозные потери (ЭТС) многократно выше ядерных тормозных потерь (ЯТС). Спад значений ЭТС при энергиях выше МэВ связан с падением сечения ионизации и возбуждения атомов мишени. Дальнейший рост ЭТС при энергиях свыше ГэВ связан с релятивистскими эффектами.

Для случая Н- W ядерные тормозные потери малы, так как масса атома W много выше массы H , а значит и передаваемая при столкновении энергия, вычисляемая формуле (1.14) мала.

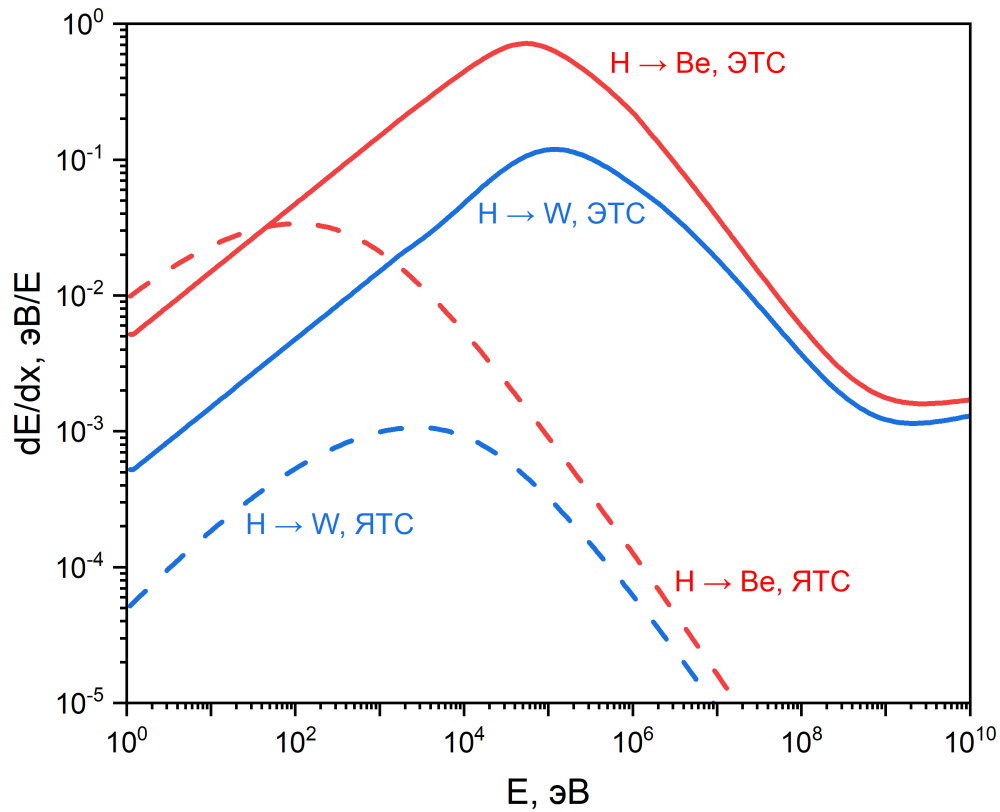


Рисунок 1.4 — Зависимость электронных и ядерных тормозных способностей от энергии движущейся частицы в твердом теле. Представлены случаи бомбардировки Be и W ионом водорода. Данные взяты из кода SRIM

1.1.4 Межатомный потенциал взаимодействия

Самым большим препятствием для определения упругих тормозных способностей через формулу (1.14) является определение потенциала взаимодействия $V(r)$. При высоких энергиях и малых межатомных расстояниях потенциал взаимодействия $V(r)$ сводится к отталкивающему кулоновскому взаимодействию между ядрами. На промежуточных энергиях, являющихся наиболее важными для ионной бомбардировки, происходит экранирование зарядов, что затрудняет точное описание этой энергетической области.

Широко используется метод представления $V(r)$ через функцию экранирования для кулоновского потенциала:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (1.17)$$

где a — длина экранирования. Размерность — атомные единицы. Использование приведенного радиуса r/a делает функцию $\Phi(r/a)$ во многих классических межатомных потенциалах независимой от заряда взаимодействующих частиц Z_1 и Z_2 .

Одной из наиболее часто используемых функций экранирования для моделирования атомных столкновений является функция, предложенная Циглером, Бирсаком и Литтмарком [64]. Авторы использовали приближение функционала плотности, чтобы найти межатомный потенциал между большим количеством случайно выбранных пар элементов с целью дальнейшего определения функции экранирования Φ . Такой подход позволил им согласовать так называемую универсальную функцию экранирования. Полученный ими потенциал носит название ZBL. Работа [72] посвящена сравнению экспериментальных данных о потенциалах. В ней сделан вывод, что модели с применением потенциала ZBL дают хорошее согласование с экспериментом. Таким образом, хорошее приближение для ядерных тормозных способностей можно получить из формулы (1.16), (1.14) и (1.15) используя универсальный межатомный потенциал ZBL.

Более современное сравнение теории и эксперимента были проведены в работе [75; 78]. Показано, что сечения рассеяния придерживаются некоторой единой универсальной кривой для различного диапазона энергий соударения. Авторы работы демонстрируют возможность получения параметров потенциала из эксперимента, с использованием процедуры, предложенной Фирсовым [79]. В работе [75; 78] путем анализа сечений рассеяния были получены точные потенциалы для ряда систем. Эти результаты расширяют существующую базу данных потенциалов, полученных экспериментально. Для лучшего соответствия с существующими экспериментальными данными, в работе предлагается новая аналитическая форма потенциала, именуемая потенциалом Зиновьева [75].

Отдельно стоит отметить широко используемые в моделировании потенциалы межатомного взаимодействия Мольера [80], Ленца-Йенсена [81], а также Kr-C потенциал [82].

Для более точного вычисления потенциал взаимодействия можно использовать расчеты *ab initio* (с лат. — «от начала») то есть решение задачи из первых основополагающих принципов без привлечения дополнительных эмпирических предположений. В расчетах *ab initio* уравнение Шредингера решается численно для интересующей системы. Наиболее популярным вариантом *ab initio* рас-

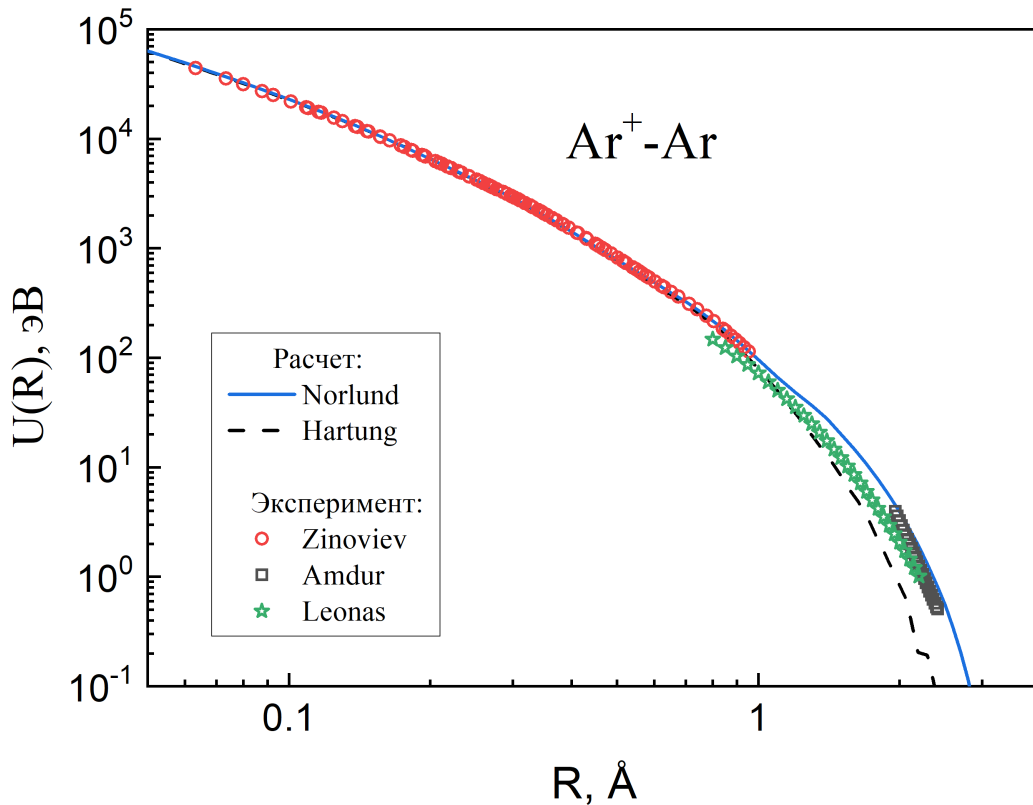


Рисунок 1.5 — Потенциал Аргон - Аргон. Сопоставление экспериментальных данных и расчета. Сплошной синей линией изображены результаты вычислений DFT потенциала из работы [73]. Пунктирная линия - вычисления из работы [74]. Точками отмечены экспериментальные данные. Кружки - работа [75], квадратики - работа [76], звездочки - работа [77]

четов в физике конденсированного состояния является теория функционала плотности (density functional theory, сокр. DFT) [83]. В работе [84] для набора пар элементов получены более точные значения потенциалов в рамках приближения DFT с использованием пакет программ DMol с расширенным набором волновых функций. На рисунке 1.5 представлены результаты [73] сравнения потенциалов, полученных в вышеописанном приближении DFT с экспериментом. Как видно из рисунка результаты расчета потенциала с использованием приближения DFT хорошо согласуются с экспериментом.

На рисунке 1.6 представлены расчеты потенциала в приближении DFT для различных систем в сопоставлении с другими популярными моделями потенциалов. Как видно из рисунка, при расстояниях $R/a_f > 7$ модели универсальных потенциалов не работают, поэтому целесообразно использовать DFT потенциалы для конкретных систем.

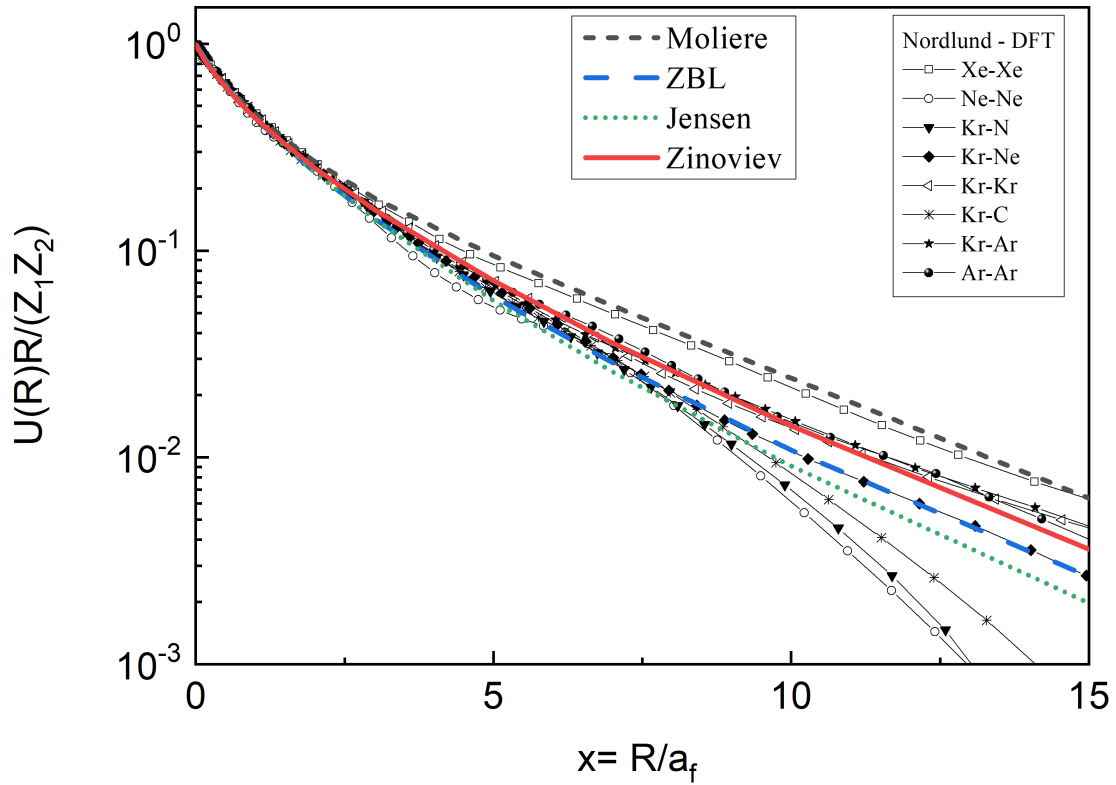


Рисунок 1.6 — DFT потенциалы взаимодействия, в сравнении с потенциалами, предложенными Мольером, ZBL, Йенсенем и Зиновьевым.

Точное вычисление межмолекулярных взаимодействий с использованием методов *ab initio* часто ограничивается вычислительными затратами. Недавнее появление возможностей машинного обучения может стать многообещающей альтернативой. В работе [85] показано, что модели машинного обучения могут не только точно оценивать энергии взаимодействия, но и прогнозировать гладкие и асимптотически правильные поверхности потенциальной энергии.

1.1.5 Учет зарядового состояния пучка

При рассмотрении процессов взаимодействия ионного пучка с твердым телом важным фактом является зарядовое состояние пучка. При движении частицы в твердом теле, она может испытывать процессы ионизации и рекомбинации, тем самым меня значение своего заряда. В работе [86] на примере систем

$p - He$ и $p - Ar$ было показано, что процессы рекомбинации и ионизации могут вносить большой вклад в электронные тормозные потери.

При прохождении пучка сквозь достаточно толстый слой мишени концентрацию атомов водорода n_0 в пучке можно описать формулой:

$$n_0 = \frac{\sigma_{ex}}{\sigma_{ex} + \sigma_{st}} \quad (1.18)$$

здесь σ_{ex} - сечение перезарядки, а σ_{st} - сечение обдирки.

Доля заряженных частиц определяется формулой:

$$n_+ = \frac{\sigma_{st}}{\sigma_{ex} + \sigma_{st}} \quad (1.19)$$

В работе [86] проведено сравнение двух вышеописанных формул с результатами эксперимента [87; 88]. Это сопоставление представлено на рисунке 1.7. Видно, что в работе наблюдается хорошее согласие экспериментальных данных и расчета с использованием формул 1.18, 1.19.

Из рисунка 1.7 видно, что зависимость зарядовой фракции пучка от его энергии существенно отличается для случая $p - Ar$ и $p - He$. Подобное разнообразие объясняется различным поведением σ_{ex} и σ_{st} для разных пар частиц при разных энергиях.

Учет процессов ионизации и рекомбинации важен для правильного расчета неупругих потерь на электронах. Энергия движущейся частицы может тратиться не только на продление потенциала ионизации, часть энергии также может забрать появившейся электрон. Связь сечения неупругих, электронных тормозных потерь S_e с сечениями n -кратной ионизации σ_n может быть описана следующей формулой:

$$S_e = \sum_n \sigma_n \sum_{k=1}^n (I_k + W_e) \quad (1.20)$$

Где I_k - потенциал k -кратной ионизации, W_e - среднее значение энергии, уносимое электроном. Для многократной ионизации суммирование необходимо проводить по соответствующим потенциалам ионизации, и учитывать все удаленные электроны.

В работе [86] также подробно проанализирован вклад отдельных каналов неупругих потерь энергии. На рисунке 1.8 на примере пар $p - Ar$ и p представлены вклады процессов перезарядки и ионизации как для частиц мишени,

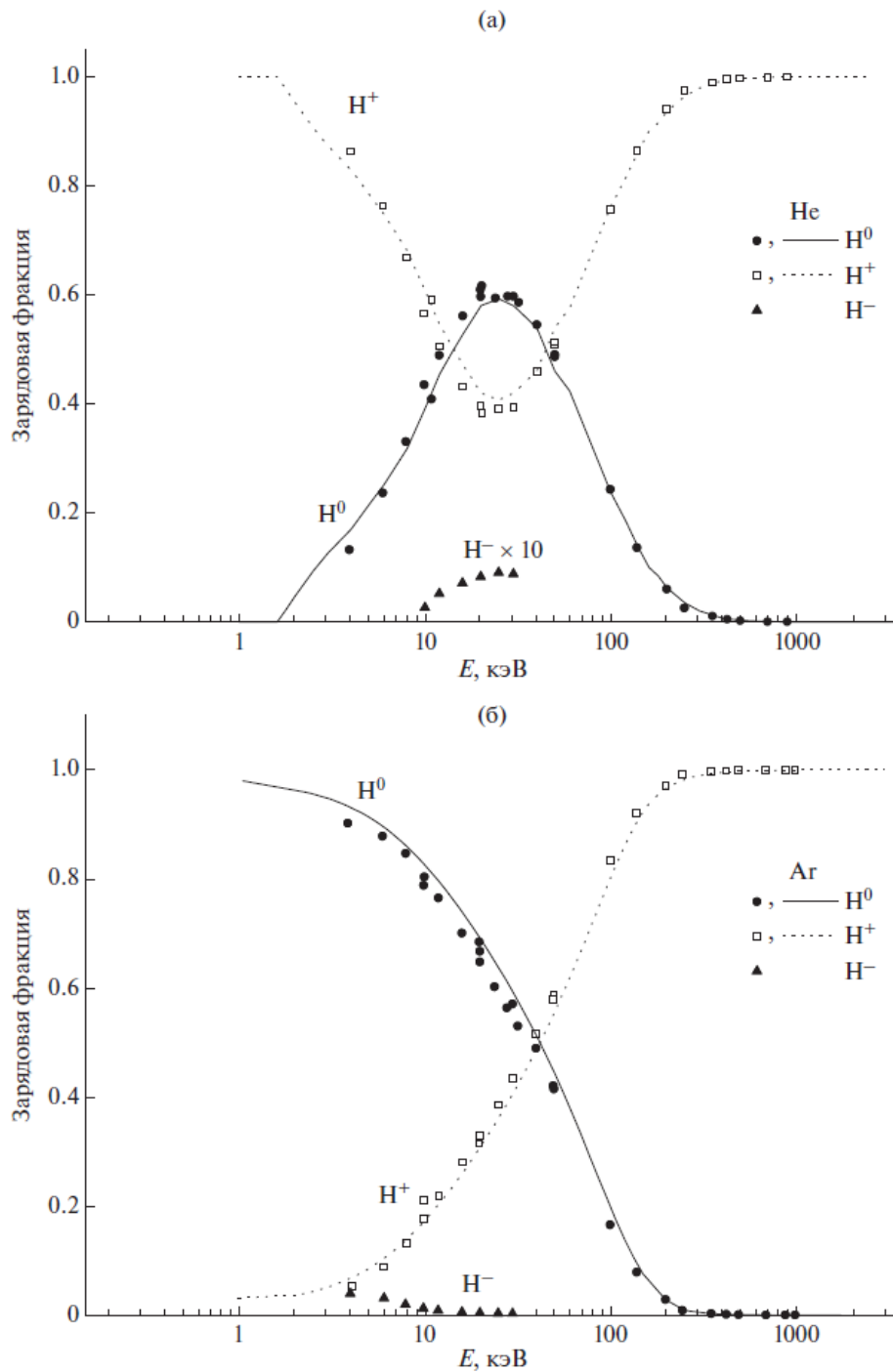


Рисунок 1.7 — Зависимость зарядовой фракции пучка от его энергии для случаев p-He (а) и p-Ar (б). Точками обозначены экспериментальные данные из работ [87; 88]. Линиями — вычисления с помощью формул 1.18, 1.19

так и для частиц пучка. Можно сделать вывод, что изменение зарядового состава пучка сильно влияет на точное определение тормозных способностей на электронах.

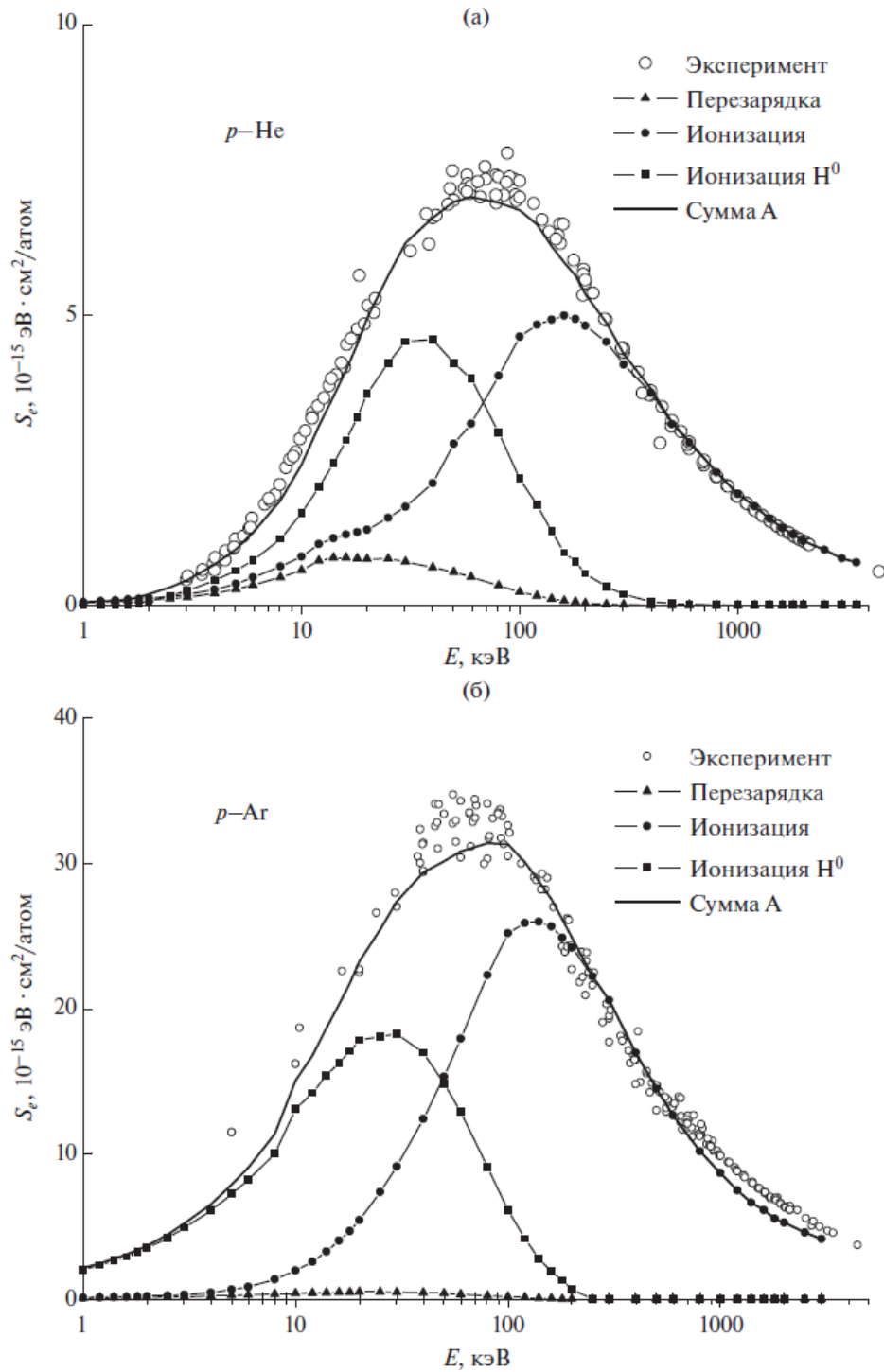


Рисунок 1.8 — Вклад различных элементарных процессов в сечения неупругих тормозных способностей для пар $p\text{-He}$ (а) и $p\text{-Ar}$ (б). Точкам стесывают экспериментальные данные из работы [89]. Линиями с точками отображены вклады процессов ионизации, обдирки и перезарядки. Сплошная линия (сумма А) - сумма всех вкладов в сечение торможения, с учетом энергии, отдаваемой электронам, рассчитанной по формуле 1.20.

1.1.6 Механизм торможения, связанный с возбуждением автоионизационных состояний

В работе [90] авторами предложена модель для расчета неупругих тормозных способностей с учетом перестройки электронных уровней в квазимолекуле. При сильном сближении сталкивающихся частиц, их электронные оболочки пересекаются, происходит выдвигание орбиталей на верхние вакантные уровни. При разлете сталкивающихся атомов возможно образование нескольких вакансий с возникновением автоионизационного состояния. Оно распадается путем Оже-перехода с дальнейшей ионизацией частиц.

В работе [90] также показано, что главным каналом неупругих потерь для столкновений кэВ-энергий является механизм выдвигания молекулярных орбиталей с последующим образованием автоионизационных состояний, а их оже-распад приводит к ионизации партнеров столкновения.

На рисунке 1.9, взятом из работы [90] представлены результаты вычислений электронных тормозных способностей для пары Ne-Ne и Ar-Ar. Наглядно видно, что предложенная авторами модель для случая Ne-Ne хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными. Экспериментальные данные для случая Ar-Ar отсутствуют.

Образование автоионизационных состояний при столкновениях медленных тяжелых ионов с твердым телом дает доминирующий вклад в электронную тормозную способность. К сожалению, при энергии столкновения менее 100 кэВ экспериментальные данные о тормозных способностях ионов средних масс отсутствуют, что затрудняет использование данной модели.

1.2 Методы компьютерного моделирования

Наиболее полно история первых работ в области моделирования взаимодействия ионного пучка с твердым телом описана в книге [58].

Среди методов моделирования взаимодействия ионов с твердым телом можно выделить два основных подхода:

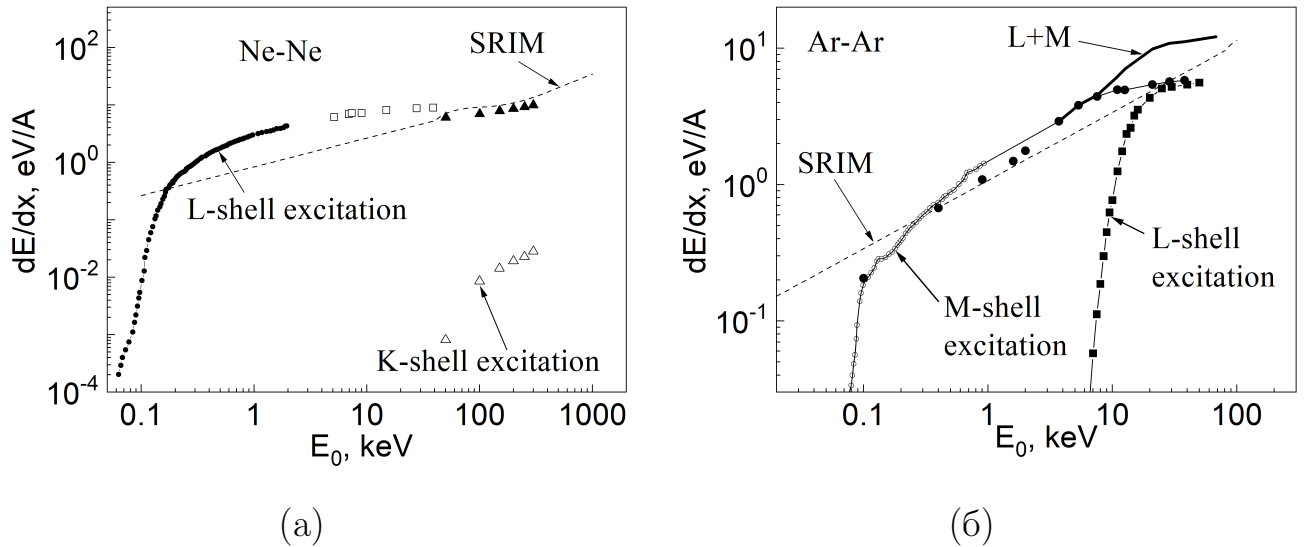


Рисунок 1.9 — Электронные тормозные способности для пары Ne-Ne (a) и Ar- Ar (b). Точками обозначен расчет с использованием сечений ионизации из работы [90]. Пунктиром - результаты кода SRIM. Сплошные треугольники - эксперимент для пары Ne-Ne. Полые треугольники - оценка авторов вклада ионизации К-оболочки. Для пары Ar-Ag закрасенными квадратами показан вклад ионизации L-оболочки. Толстая сплошная линия суммарный вклад ионизации L и M оболочек.

- Метод приближения парных столкновений (Binary collision approximation, сокращенно BCA).
- Метод молекулярной динамики (Molecular dynamics, сокращенно MD).

Одними из первых, кто реализовал метод приближения парных столкновений были Оен и Робенс [91]. В BCA методе частица перемещается в твердом теле, испытывая последовательность независимых парных столкновений с атомами образца. Метод работает в предположении, что между столкновениями частица движется по прямой траектории, испытывая торможение на электронах. В подходе BCA одиночное столкновение между движущейся частицей и покоящимся атомом мишени рассматривается путем вычисления классического интеграла рассеяния между двумя сталкивающимися частицами для прицельного параметра налетающей частицы. Решение интеграла дает угол рассеяния частицы, а также долю переданной энергии от налетающей частицы к атому мишени. Подобное BCA приближение неоправданно при низких энергиях движущейся частицы, когда важно учитывать многочастичные эффекты. Вопрос диапазона применимости BCA приближения на примере мишени кристаллического кремний подробно изучен в работе [92]. Одним из самых широко-используемых кодов по моделированию взаимодействия ионно пучка с мишенью в прибли-

жении ВСА является кода SRIM (The Stopping and Range of Ions in Matter) [59]. Этот код создан для моделирования тормозных способностей в веществе, а также для исследований в области имплантации ионов. Недостатком данного кода является использование „магических“ формул для описания рассеяния частиц, что приводит к неверным результатам при учете рассеяния на большие углы. Из-за этого распыление тяжелых мишеней легкими частицами, когда доминирует распыление обратно рассеянными частицами, кодом SRIM вычисляется некорректно. Существует модифицированная версия TrimSP [93], предназначена для исследования процесса ионного распыления. Также следует выделить ряд кодов, таких как T-RBS [94], TRIDYN [95], OKSANA [96]. Эти коды выдают более точные результаты по распылению поверхностей, что на примере случая скользящих углов падения ионов на гладкую аморфную мишень было продемонстрировано в работе [97]. Для исследования распыления кристаллической мишени стоит отметить код MARLOWE [98]. Объединяющим недостатком вышеперечисленных кодов является ограниченный набор используемых потенциалов взаимодействия частиц и типов учета неупругих тормозных способностей. Эти параметры зачастую являются основополагающими в моделировании взаимодействия ионов с твердым телом.

В методе молекулярной динамики траектории движений атомов и молекул определяются путем численного решения уравнений движения Ньютона для системы взаимодействующих частиц на коротких временных промежутках эволюции системы. Среди кодов MD следует выделить пакет LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [99], который находится в свободном доступе. Существует также и коммерческие коды, например IMD (ITAP Molecular Dynamics) [100]. Основным минусом метода молекулярной динамики являются высокие требования к вычислительной мощности.

Также можно выделить отдельный метод моделирования взаимодействия иона с твердым телом, в котором в приближении молекулярной динамики в твердом теле отслеживается движение только бомбардирующих частиц. Этот метод называют методом траекторий. В частности, этот метод использовался в работе [101] для рассмотрения каналирования частиц в кристалле.

В работе [92] продемонстрировано, как метод траекторий можно использовать для проверки результатов вычислений методом ВСА. Преимущество метода заключается в том, что в нем автоматически учитывается взаимодействие с несколькими частицами мишени, то есть многочастичные эффекты. В

качестве примера, стоит отметить работу [102], в которой с помощью методов траекторий было описано радужное рассеяние атомов инертных газов на поверхности кристаллов алюминия и серебра.

1.3 Выводы

Анализ современного состояния исследований в области физики взаимодействия атомных частиц с твердыми телами говорит об актуальности и важности данной тематики. Довольно остро стоит вопрос нехватки надежных экспериментальных данных по взаимодействию ионных потоков с перспективными материалами реакторов УТС. Отсутствие надежных измерений зачастую связано с технической сложностью необходимого эксперимента, а часть физических параметров, представляющая интерес для создания более точной теории взаимодействия ионов с поверхностью, вовсе недоступна для экспериментального определения. Таким образом возникает необходимость использования методом компьютерного моделирования. Достоверность результатов моделирования зависит от точности используемых физических параметров взаимодействия ионов с твердым телом, таких как потенциал взаимодействия и неупругие тормозные способности на электронах. Результаты моделирования позволяют получить полный спектр характеристик распыленных и отраженных частиц, что позволяет более точно проводить дальнейших расчет их динамики в УТС реакторах.

Глава 2. Описание метода моделирования распыления и рассеяния при ионном облучении

В ходе работы по моделированию распыления и рассеяния при ионном облучении использовалась разработанная нашей лабораторией программа. Код программы написан на языке Fortran, основан на методе Монте-Карло с использованием подхода приближения парных столкновений (ВСА). Преимуществом использования разработанной программы является возможность варьирования всех задаваемых исходных параметров, а также возможность корректировки модели описания происходящих процессов. Это позволяет использовать широкий спектр потенциалов взаимодействия частиц, в том числе записанных в табличном виде. Имеется возможность использования различных моделей учета электронных, неупругих потерь при движении частиц в твердом теле. Программа позволяет задавать различные типы поверхностного барьера, использовать различные структуры твердого тела, а также проводить моделирование взаимодействия пучка с тонкими пленками любых толщин. Еще одной отличительной чертой нашего кода является возможность отслеживания любых интересующих нас параметров системы в любой момент времени, что позволяет определять энергетические и угловые спектры распыленных и отраженных частиц, глубину проникновения и энерговыделение налетающих ионов, глубину образования распыленных частиц, а также оценивать число каскадных частиц. Далее в главе подробно изложены применяемые в моделировании методы описания взаимодействия частиц, а также выбор различных параметров взаимодействия частиц.

2.1 Основной алгоритм

Моделирование взаимодействия ионного потока с мишенью осуществляется в приближении парных столкновений (ВСА). В ВСА принято считать, что частица перемещается через материал, испытывая последовательность независимых парных столкновений с атомами мишени, а между столкновениями ион движется по прямой траектории. В начале рассматривается траектория налетающей частицы. При рассеянии налетающей частицы на атоме мишени угол

отклонения в системе центра масс вычисляется с помощью формулы (1.14). В это формуле наименьшее расстояние сближения r_{min} определяется как корень уравнения:

$$1 - \frac{V(r_{min})}{E_c} - \frac{b^2}{r_{min}^2} = 0 \quad (2.1)$$

Для устранения особенности при $r = r_{min}$ в знаменателе подынтегрального выражения в уравнении (1.14) в программе используется замена $r = r_{min}/\cos x$. Таким образом (1.14) преобразуется в уравнение следующего вида:

$$\theta = \pi - 2b \int_0^{\pi/2} \frac{\sin(x)dx}{r_{min} \left[1 - \frac{V(x)}{E_c} - \frac{\cos^2(x)b^2}{r_{min}^2} \right]} \quad (2.2)$$

Для убыстрения процесса вычислений численное интегрирование проводится с разложением по полиномам Гаусса с количеством узлов до 20. Таким образом, после решения уравнения (2.2) и (1.14), мы знаем новое направление движения частицы и потерянную ей энергию на соударение, а после перехода из системы центра масс в лабораторную систему мы можем определить новую скорость частицы. Далее для этой движущейся частицы определяется новый рассеивающий центр. Обозначим вектором \mathbf{r}_0 положение налетающей частицы, а вектором \mathbf{v} — ее скорость. Векторами \mathbf{r}_k обозначим положения атомов мишени. Тогда прицельный параметр для налетающей частицы с k -м атомом мишени равен:

$$b_{0k} = \text{mod} \left(\frac{[(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_k) \times \mathbf{v}]}{|\mathbf{v}|} \right) \quad (2.3)$$

Для атомов, находящихся в полусфере по направлению движения частицы, происходит отбор наименьшего прицельного параметра b_{0k} . Таким образом находится следующий атом мишени, на котором происходит рассеяние.

На первом этапе вычислений рассматривается движение бомбардирующих ионов в твердом теле. Эти частицы имеют определенную начальную энергию, а также фиксированный начальный угол падения. Частица будет двигаться в твердом теле и рассеиваться на атомах мишени, пока либо не потеряет всю свою энергию, либо не выйдет за пределы твердого тела. В последнем случае частица будет считаться отраженной. Угол вылета и энергия отраженной частиц записывается в отдельный массив данных.

Во время своего движения частица при столкновениях с атомами мишени передает им некоторую долю энергии (1.14), если эта переданная энергия выше

определенной энергии сублимации E_s , то координаты и скорости этого атомом мишени записываются в программе в отдельный массив каскадных частиц. После рассмотрения движения всех бомбардирующих ионов, программа начинает рассматривать движение атомов мишени из массива каскадных частиц с их начальными координатами и скоростями.

Движения каскадных частиц рассчитывалось аналогичным образом с использованием параметров многочастичных потенциалов. Вышедшие за границу твердого тела частицы мишени считаются распыленными. Для таких частиц также записываются углы и энергии вылета. В программе учитывается тот факт, что приведенные в движение атомы мишени также могут выбить новые каскадные частицы. Эти выбитые частицы также записываются в массив каскадных частиц.

Для обеспечения достоверной статистики минимальное число бомбардирующих ионов составляло 10^6 , однако в случае пороговой области энергий статистика могла достигать 10^8 частиц.

2.2 Трансляция ячейки

В программе реализовано моделирование взаимодействия ионного потока с двумя типами мишени: аморфной и кристаллической. Различие двух подходов сводится к различному принципу трансляции элементарной ячейки. После столкновения движущейся частицы с покоящейся частицей твердого тела, в полусфере по направлению движения частицы генерируется новая кристаллическая ячейка с центром в координатах покоящейся частицы, на которой произошло рассеяние. В случае рассмотрения аморфной мишени ориентация в пространстве новой элементарной ячейки происходит случайным образом. В случае кристаллической мишени никакого поворота элементарной ячейки не происходит, ячейка всегда остается ориентированной определенным, заданным образом. Происходит только ее параллельное смещение.

Поверхность твердого тела задается как случайный срез полученной структуры. Если ось z направлена перпендикулярно поверхности твердого тела (по направлению начальной скорости бомбардирующего под прямым углом иона), то координаты центрального атома первой элементарной ячейки зада-

ются по осям x , y , z случайно в интервале $\pm d$. Где d - постоянная решетки. После чего происходит срез по плоскости x , y , 0 , то есть отсекаются все атомы с координатой $z < 0$.

Для вольфрамовой мишени характерна кубическая объёмноцентрированная решетка с параметрами решетки $d = 3.165\text{\AA}$. Для бериллия кристаллическая решетка является гексагональной плотноупакованной с периодами 2.286\AA и 3.584\AA .

При каждом построении элементарной ячейки также учитывались тепловые колебания атомов мишени как смещение каждого атома решетки на случайную величину $\delta_{x,y,z}$:

$$\begin{aligned}\delta_x &= \sigma \sqrt{-2 \ln p_1} \cos(2\pi p_2) \\ \delta_y &= \sigma \sqrt{-2 \ln p_1} \sin(2\pi p_2) \\ \delta_z &= \sigma \sqrt{-2 \ln p_3} \sin(2\pi p_4)\end{aligned}\tag{2.4}$$

Здесь $P_{1,2,3,4}$ — случайные равномерно распределенные величины; $\delta_{x,y,z}$ — подчиняется распределению Гаусса; σ — амплитуда тепловых колебаний. Для вольфрама бралось $\sigma = 0,05\text{\AA}$, для бериллия $\sigma = 0,07\text{\AA}$.

2.3 Поверхностный потенциальный барьер

Для учета поверхностных сил связи вводится поверхностный потенциальный барьер P . В программе используется два типа поверхностных потенциалов: планарный P_{pl} и сферический P_{sp} .

$$P_{pl}(E_{out}, \theta) = \begin{cases} 1, & \text{если } E_{out} \cos^2(\theta_{out}) > U_{sub} \\ 0, & \text{если } E_{out} \cos^2(\theta_{out}) \leq U_{sub} \end{cases}\tag{2.5}$$

Планарный потенциальный барьер $P_{pl}(E_{out}, \theta)$ характерен для плоских тел. Он зависит от конечной энергии E_{out} и от угла вылета θ_{out} покидающей твердое тело частицы.

$$P_{sp}(E_{out}) = \begin{cases} 1, & \text{если } E_{out} > U_{sub} \\ 0, & \text{если } E_{out} \leq E_{out} \end{cases}\tag{2.6}$$

Сферический потенциальный барьер P_{sp} характерен для предельного случая тела, состоящего из остриев, когда частица находится на самом кончике острия, и любой энергии выше энергии сублимации U_{sub} достаточно, чтобы считать частицу распыленной. Условие P_{sp} не зависит от угла вылета частицы θ и является не таким строгим как условие P_{pl} . При моделировании движения каскадной частицы при прохождении ею границы раздела твердого тела и вакуума она проходит проверку на прохождение условия поверхностного или планарного барьера. Таким образом в нашей программе влияние шероховатости поверхности на коэффициент распыления учитывается только путем выбора потенциального барьера для двух предельных состояний поверхности.

2.4 Потенциал взаимодействия

В программе есть возможность использования различных потенциалов взаимодействия. Потенциал можно задавать как формульно, так и численно. Во втором случае используется набор значений величины потенциала от расстояния сближения. Значения функции интерполируются на весь диапазон используемых энергий.

На рисунке 2.1 представлены различные потенциалы для пары дейтерий – вольфрам. Потенциалы ZBL [64], Зиновьева [78], КrС [82] и Мольера [80] являются исключительно отталкивающими, потенциал DFT [73] обладает притягивающей ямой U_0 . При малых расстояниях, отталкивающая часть DFT потенциала согласуется с потенциалом Зиновьева. В этой же области Потенциалы ZBL, КrС и Мольера имеют менее резкий рост с уменьшением межъядерного расстояния.

В работе [73] было показано (рисунок 1.6), что результаты расчета потенциала в DFT приближении хорошо согласуются с экспериментом. Также было показано, что модель универсального потенциала при больших межъядерных расстояниях дает неверные результаты, и следует использовать расчет в DFT приближении для концертной системы.

Поэтому при решении задач данной работы использовался потенциал полученный в приближении теории функционала плотности DFT [103–106] с коррекцией на глубину потенциальной ямы U_0 [107]. Работы [108–110] исполь-

Таблица 1 — Используемые потенциалы DFT для комбинаций H, Be, W.

R, Å	H-Be	H-W	Be-Be	W-W
0.002	28542	519350	113963	25163700
0.004	14143	252649	56366	18620700
0.006	9343	164510	37165	12077700
0.008	6944	120688	27568	8816090
0.010	5504	94607	21813	6866690
0.012	4545	77350	17978	5573080
0.016	3346	55673	13189	3968720
0.02	2627	42856	10323	3018550
0.04	1196	18040	4635	1193700
0.06	726	10296	2791	645966
0.08	499	6683	1912	401452
0.12	283	3441	1084	192053
0.16	185	2039	705	107381
0.20	130	1292	491	65566
0.24	97.3	861	356	42384
0.32	59.3	436	200	19827
0.40	38.0	248	120	10277
0.50	22.0	132	68.4	4985
0.80	2.287	23.2	21.7	825
1.0	-1.546	5.93	12.2	291
1.2	-2.850	-0.92	6.81	108
1.4	-3.070	-3.64	3.62	41.92
1.6	-2.832	-4.52	1.86	16.58
2.0	-1.987	-4.21	0.631	1.79
2.4	-1.231	-3.16	0.348	-2.40
2.8	-0.724	-1.89	0.101	-2.82
3.5	-0.177	-0.637	-0.112	-1.91
4.0	-0.063	-0.299	-0.098	-1.11
5.0	-0.009	-0.099	-0.022	-0.397
6.0	-0.001	-0.059	-0.005	-0.169

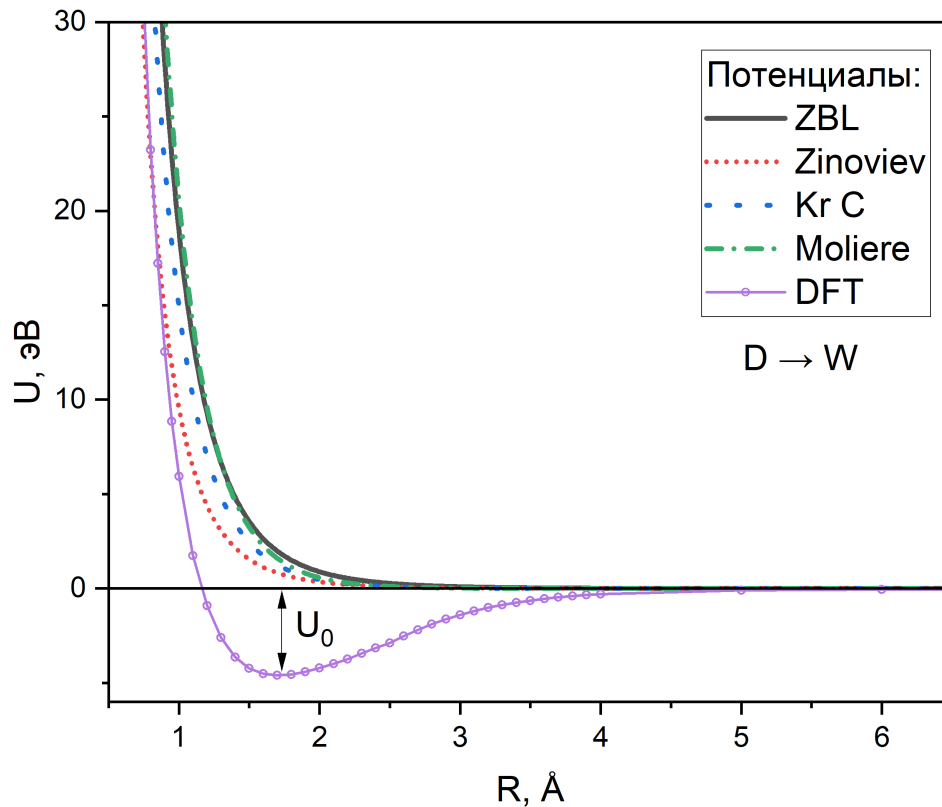


Рисунок 2.1 — Потенциал взаимодействия для пары Дейтерий – Вольфрам. Сравнение потенциалов DFT и потенциалов ZBL, Зиновьева, КгС и Мольера. U_0 - притягивающая яма в DFT потенциале.

зовались для учета экспериментальных данных о глубине ямы и положения минимума потенциальной энергии. Значение используемых потенциалов в зависимости от расстояния сближения в таблице (1).

Формулы для теоретического описания потенциалов межъядерного взаимодействия не содержат параметров массы частиц, что позволяет использовать одинаковые потенциалы для различных изотопов водорода.

2.5 Тормозные способности

Упругие потери энергии налетающих частиц и энергии частиц отдачи на атомах мишени для заданного потенциала рассчитываются точно воспользовавшись формулами ((1.8), (1.14) и (1.16)).

Неупругие потери энергии на электронах мишени учитывались как произведение электронной тормозной способности на длину свободного пробега между актами соударениями в твердом теле. При наличии надежных экспериментальных данных использовались 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 [111] с дальнейшим масштабированием на плотность электронов в рассматриваемой мишени. Методика масштабирования тормозных потерь на электронную плотность мишени подробно изложена в работе [112]. В этой работе было продемонстрировано, что неупругие тормозные потери водорода имеют некоторую универсальную зависимость от скорости ферми электронов проводимости. Демонстрация этой зависимости представлена на рисунке 2.2. Набор имеющихся экспериментальных данных придерживается некоторой прямой линии. Таким образом возможно предсказать тормозные способности, при отсутствии эксперимента на основе данных элементов используя универсальную кривую, приведенную на рисунке 2.2.

В работе [111] показано, что при энергиях налетающей частицы ниже 10 кэВ хорошо работает модель торможения на свободных электронах, в которой тормозная способность описывается пропорциональной скорости соударения.

В используемых данных по упругим потерям во внимание также принималась поправка на многократность соударения, подробно изложенная в работе [113]. Влияние многократности соударений на электронные тормозные способности заключается в следующем: для экспериментального определения неупругих потерь на электронах зачастую используют метод прохождения пучка через тонкие пленки. В следствии прохождения пучка через пленку он теряет часть своей энергии. Эту потерю можно определить путем измерения энергии прошедших частиц и вычитанием из нее начальной энергии пучка. Затем определенная потеря делится на толщину фольги L , в результате чего получается потеря энергии на единицу длины.

Однако как показано в работе [113], длина траектории L частицы в пленке может сильно точиться от толщины этой пленки d . На рисунке 2.3 изображено отношение L/d в зависимости от начальной энергии пучка E . Видно, что для энергий вблизи 1 кэВ величина L/d равна примерно 2-3, а с увеличением

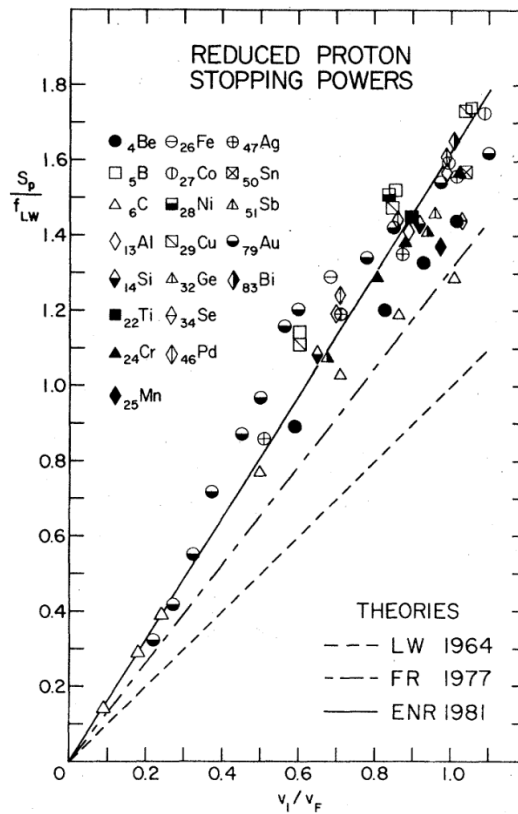


Рисунок 2.2 — Иллюстрации универсальной зависимости тормозных способностей водорода в различных мишенях. Рисунок взят из работы [112]. Скорость соударения V_i нормирована на скорость ферми V_f электрона проводимости. f_{LW} - коэффициент пропорциональности зависимости тормозной способности по теории [lindhard1964kg1] от отношения V_i/V_f .

энергии падающего пучка L/d стремится к единице. Подобный результат был получен с помощью компьютерного моделирования, экспериментальным образом подобные характеристик получить невозможно.

Таким образом, для определения электронных тормозных потерь методом прохождения пучка через фольгу, величину ослабления энергии необходимо делить на среднюю длину траектории, а не на толщину пленки.

На рисунке 2.4 из работы [113] приведены зависимости электронных тормозных потерь от энергии падающих частиц для системы H-Ag. Точками обозначены экспериментальные данные из базы NDS [114], штриховыми линиями - данные расчета кодом SRIM. Часть данных из базы NDS получены методом обратного рассеяния. Этот метод основан на измерении энергетических спектров обратно рассеянных частиц, что делает его нечувствительным к отношению L/d . Из рисунка 2.4 видно, что экспериментальные данные, полученные этим методом, существенно отличаются от данных, полученных путем анализа прохождения пучка через фольгу. При учете поправки L/d , экспериментальные данные двух методик определения тормозных способностей совпадают. Это вид-

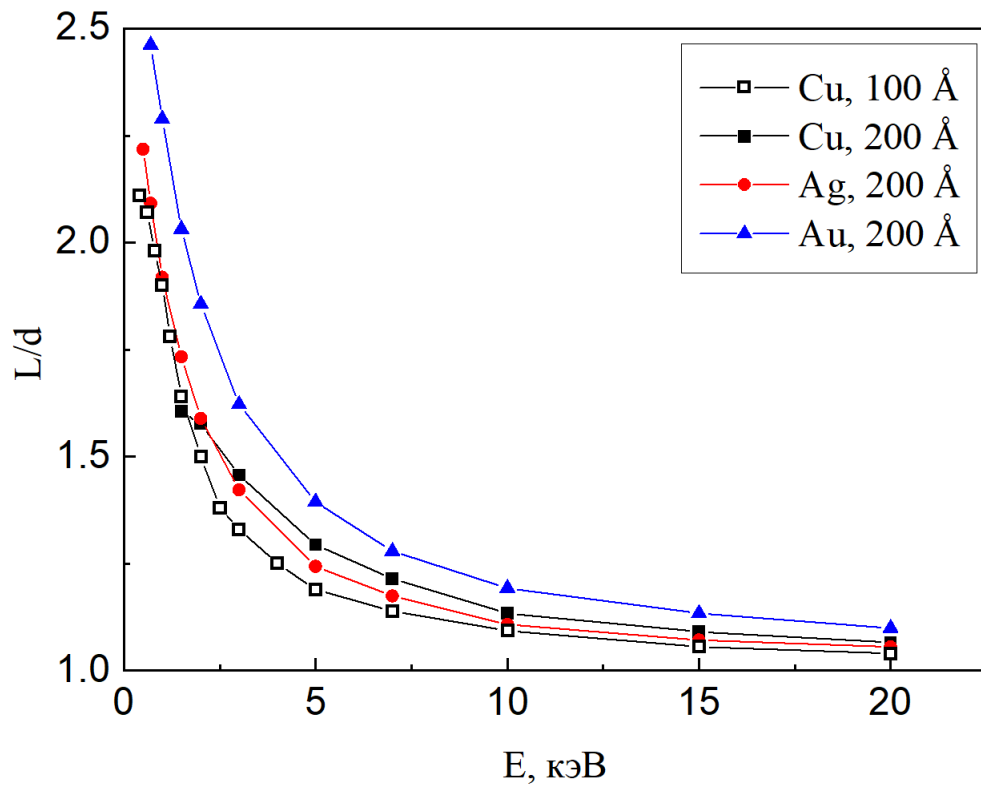
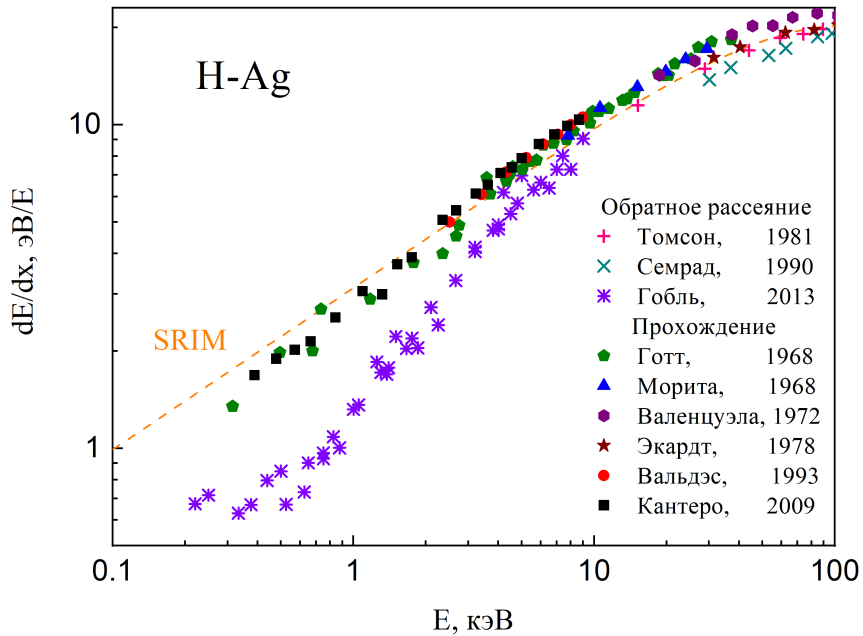


Рисунок 2.3 — Отношение средней длины траектории частиц L к толщине мишени d в зависимости от начальной энергии пучка. Приведены данные для мишеней из меди, серебра и золота. Для меди рассмотрена пленки толщиной 100 и 200 ангстрем.

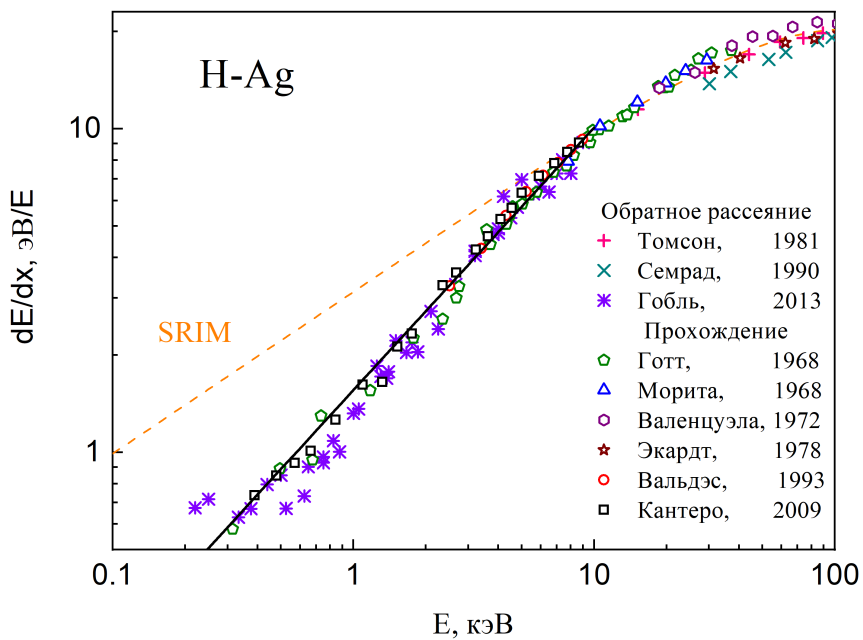
но из нижнего рисунка 2.4 (б). Также видно, что для малых энергий пучка код SRIM дает неправильные величины неупругих тормозных способностей.

Неупругие тормозные потери на электронах используемые при моделировании распыления вольфрама и бериллия представлены на рисунке (2.5). Неупругие потери при энергии налетающей частицы свыше 10 кэВ брались из SRIM, и в таком случае поправка на вихлявость не учитывалась, в силу ее незначительности при больших скоростях.

При моделировании движения каскадных частиц доминировали упругие, ядерные тормозные потери. Роль неупругих, электронных тормозных потерь в данном случае мала из-за относительно низких энергий каскадных частиц. Тем не менее мы также использовали тормозных способностей с поправкой на вихлявость для бериллия и вольфрама при движении каскадных частиц в мишени.



(а)



(б)

Рисунок 2.4 — Зависимость электронных тормозных потерь от энергии налетающих частиц для случая H-Ag. Точками обозначены экспериментальные данные из базы данных NDS [114]. Штриховая линия - расчет программы SRIM. Верхний рисунок (а) - данные на прохождение пленки пучком, не поправленные на отношение L/d . Нижний рисунок (б) - данные, поправленные на отношение L/d .

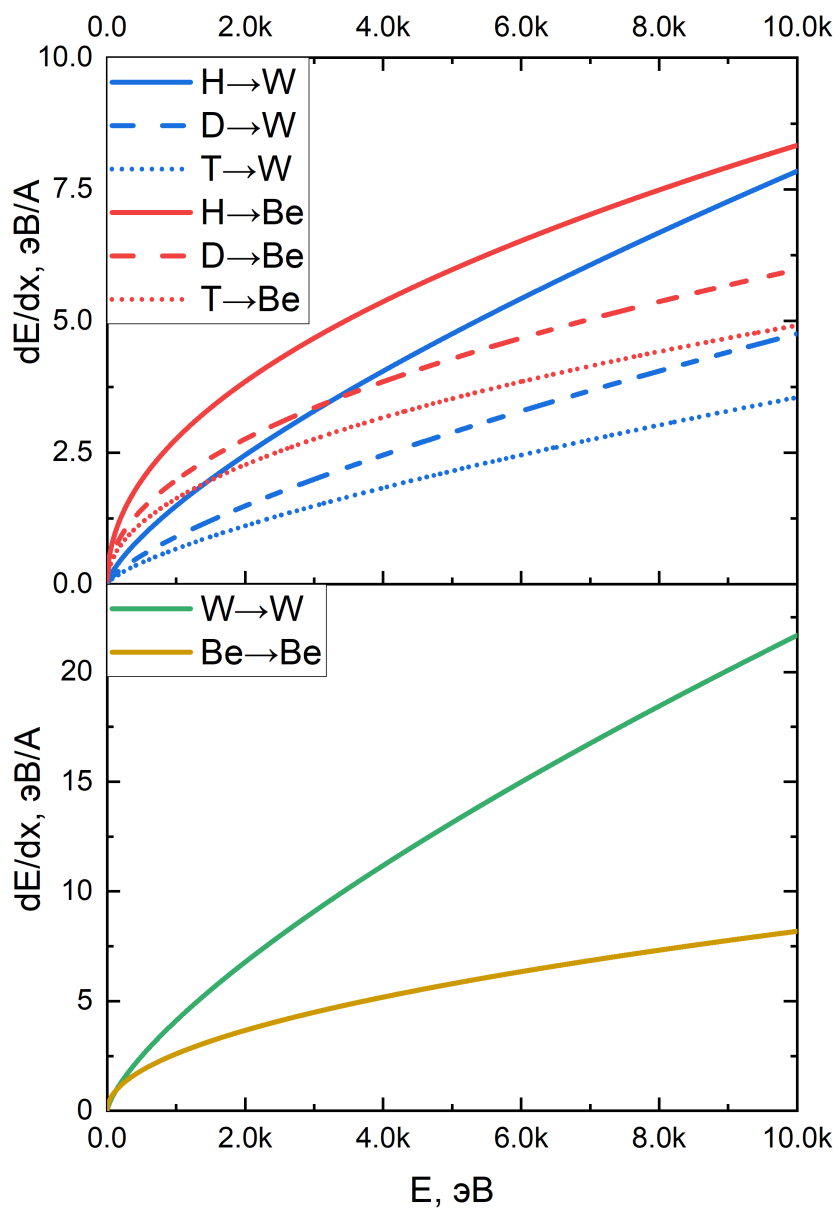


Рисунок 2.5 — Используемые в программе электронные тормозные потери в зависимости от энергии тормозящейся частицы

Глава 3. Исследование процесса взаимодействия ионных пучков с твердым телом

3.1 Моделирование распыления бериллия изотопами водорода

Данный раздел посвящен процессу распыления бериллиевой мишени под действием ионного пучка различных изотопов водорода. Основные результаты данного исследования опубликованы в работах [A1-A2]. Определены зависимости коэффициентов распыления от энергии и угла падения бомбардирующих частиц. Определены пороги распыления. Смоделированы угловые и энергетические спектры распыленных частиц, а также проанализирована глубина их образования. Все вышеуказанные вычисления проведены с учетом влияния различного типа поверхностного барьера.

Для набора необходимой статистики при расчете коэффициентов распыления бериллия изотопами водорода рассматривалось 10^6 налетающих частиц. Для области пороговой энергии число налетающих частиц было увеличено до $5 \cdot 10^7$.

При моделировании энергия сублимации бериллия составляла $E_s = 3.32$ эВ. Расчеты проводились для комнатной температуры мишени.

3.1.1 Коэффициенты распыления бериллия изотопами водорода

На рисунке 3.1 приведены расчеты коэффициентов распыления бериллия изотопами водорода в сравнении с экспериментальными данными [10] и расчетами группы Экштайна [31]. В работе [31] используется потенциал KrC, в то время как в нашей программе используется потенциал, рассчитанный в DFT приближении для конкретных пар взаимодействующих частиц с поправкой на экспериментальные данные о параметрах потенциальной ямы. Также наш расчет учитывает поправку на увеличение длины траектории вследствие множества столкновений для неупругих тормозных потерь. Далее эту поправку

будем называть "поправка на длину траектории". Это поправка сказывается при движении частиц с энергией ниже 10 кэВ.

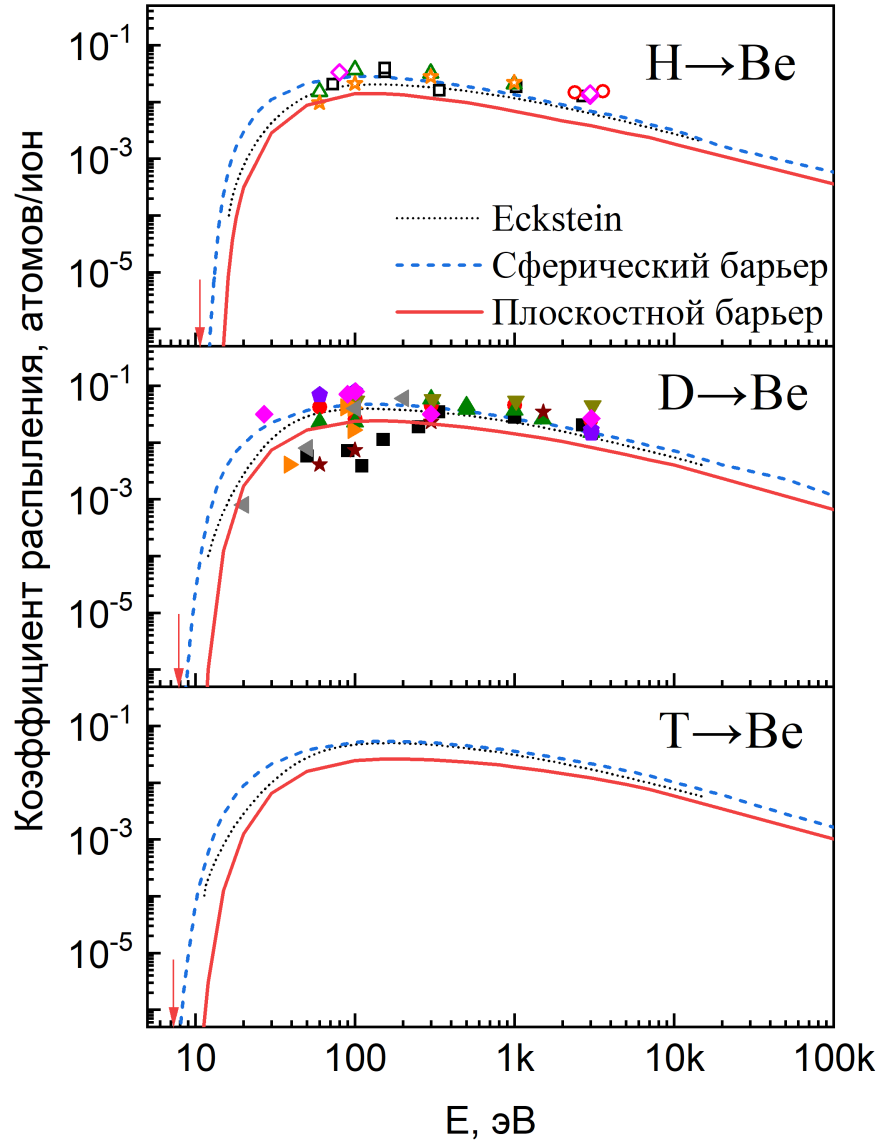


Рисунок 3.1 — Зависимость коэффициента распыления бериллия различными изотопами водорода от энергии налетающей частицы при нормальном падении пучка. Расчет для случая сферического барьера изображен синей линией, для плоскостного – красной. Штриховая черная линия – результаты моделирования Экштайна программой SDTrimSP [31]. Точками отмечены экспериментальные данные различных авторов из монографии [10]. Вертикальные стрелки указывают расположение порогов распыления, полученных с использованием формулы 3.3.

На рисунке 3.1 наши расчеты приведены для случая сферического барьера (при моделировании выполняется условие 2.6) и плоскостного барьера (2.5). Использование плоскостного барьера дает меньший коэффициент распыления

в силу строгости отбора распыленных частиц, что, в свою очередь, приводит к сдвигу порога распыления в сторону больших энергий.

Из рисунка 3.1 видно, что экспериментальные данные распыления бериллия водородом ниже 60 эВ отсутствуют, а для распыления дейтерием имеется сильный разброс экспериментальных значений коэффициента распыления. Особенно ярко выражен этот разброс в районе 100 эВ.

Сильный разброс экспериментальных значений может быть следствием различных состояний поверхности мишени при ионном облучении в экспериментах. Используемые нами два типа поверхностного потенциального барьера характеризуют два предельных случая шероховатости мишени. Сферический описывает случай максимально шероховатой (состоящая из остриев) поверхности, плоскостной – идеально гладкий случай. Множество экспериментальных данных лежат в области между этими двумя предельными случаями.

Экспериментальные данные по распылению бериллия тритием отсутствуют, но так как наша модель предсказывает систематическое изменение кривых коэффициента распыления для изотопов разных масс, то для случая T-Be можно использовать полученные данные с хорошей надежностью.

3.1.2 Глубина выхода распыленных атомов

На рисунке 3.2, представлена зависимость числа распыленных частиц от глубины их образования. Видно, что основной вклад в распыление вносят частицы нескольких поверхностных слоев, причем вклад первого поверхностного монослоя доминирует. Во время облучения мишени ионным пучком каскадные частицы могут образовываться и на более глубоких слоях, однако такие частицы не доходят до границы мишень–вакуум, а тратят всю свою энергию при движении.

На рисунке 3.3 представлена зависимость усредненной глубины образования распыленных частиц при распылении бериллия различными изотопами водорода. Наблюдается группировка данных для различных углов падения и различных изотопов при энергиях ниже 200 эВ. Видно, что имеет место увлечение средней глубины образования распыленных частиц с ростом энергии бомбардирующих частиц, а также с увеличением угла падения пучка. Одна-

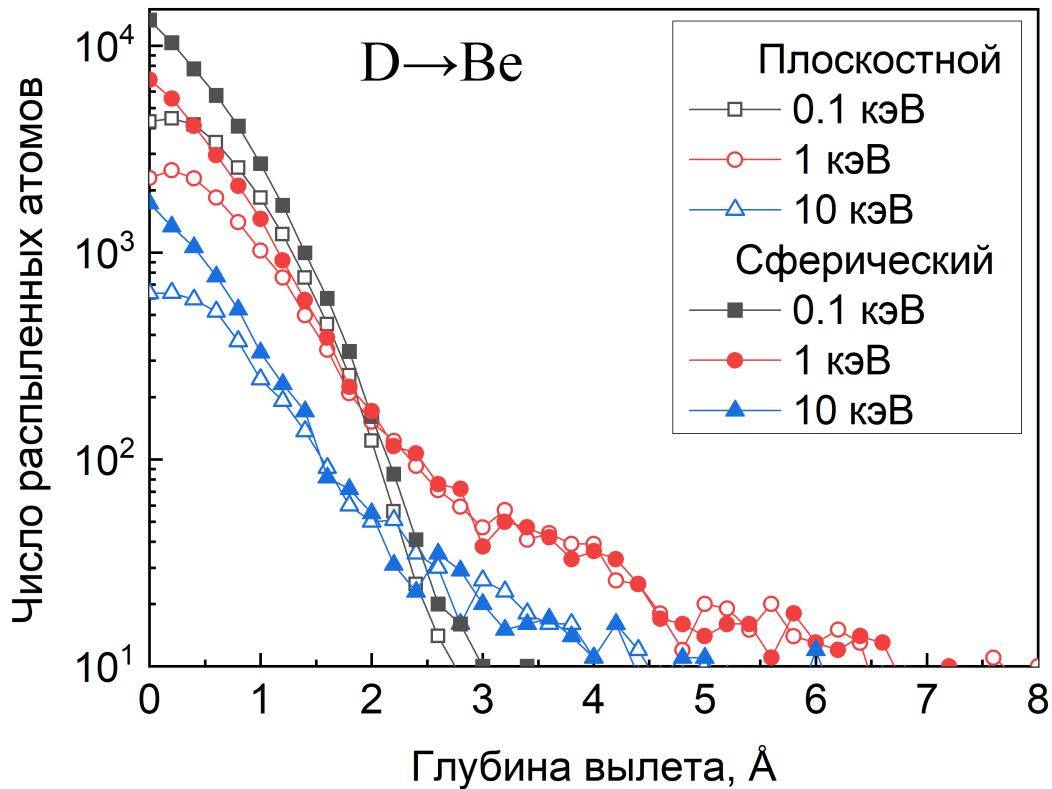


Рисунок 3.2 — Зависимость числа расплывшихся частиц от глубины их образования. Рассмотрен случай распыления бериллиевой мишени при нормальном падении ионов дейтерия. Представлены случаи нескольких энергий пучка. Приведены данные для плоскостного (открытые символы) и сферического (сплошные символы) барьера.

ко в рассматриваемом диапазоне энергий и углов средняя глубина вылета не превышает 3Å . Это результат также указывает на то, что основное распыление происходит в приповерхностных слоях мишени.

Традиционная модель распыления [24] предсказывает в 5 раз более высокие значения коэффициентов распыления, чем характерные экспериментальные результаты для пар H, D, T - Be. Это связано с тем, что каскадная модель Зигмунда в данном случае неприменима. Для случая столкновений легких частиц с тяжелыми следует применять модель распыления, основанную на распылении поверхностного слоя потоком обратно рассеянных частиц [115].

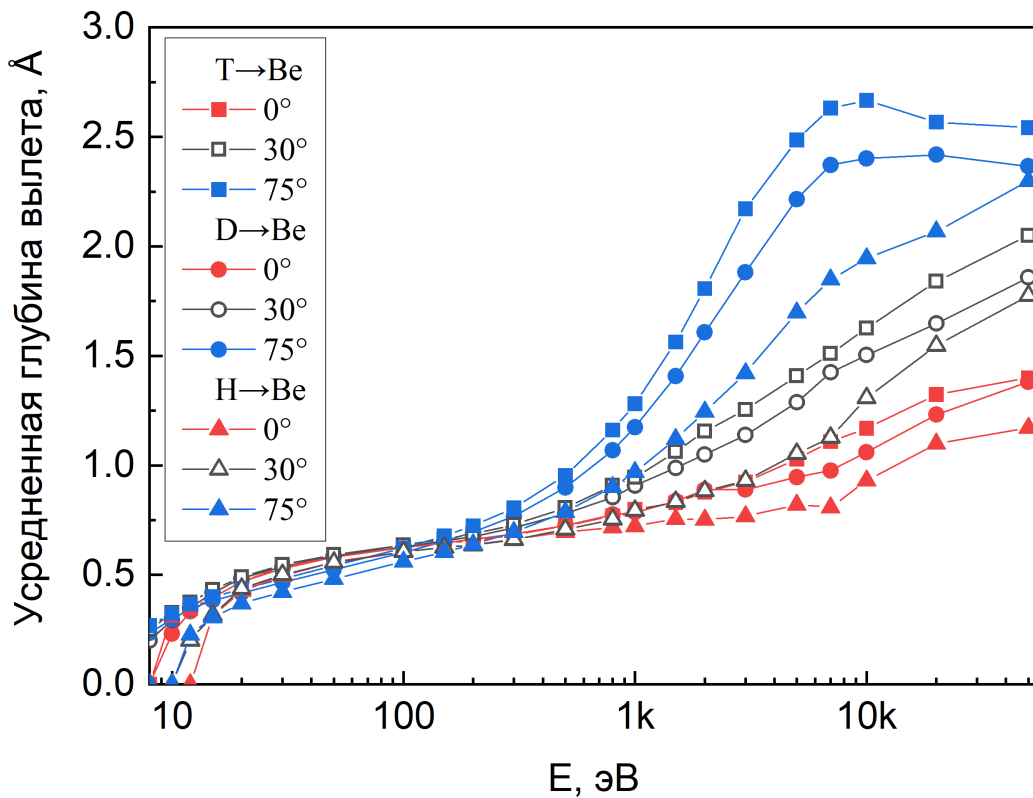


Рисунок 3.3 — Зависимость средней глубины образования распыленных частиц от энергии пучка. Представлены результаты моделирования распыления бериллия, изотопами H, D, T для случая сферического поверхностного барьера. Рассматриваемые углы падения: 0°, 30°, 75°.

3.1.3 Вклад различных механизмов в распыление

Используемый в диссертационном следовании уникальный компьютерный код позволяет оценить вклад различных механизмов в распыление. В начале рассмотрим вклады в распыление атомами, движущимися вглубь мишени и обратно рассеянных, движущихся в сторону поверхности.

На рисунке 3.4 верхняя кривая отражает суммарный вклад налетающих атомов, движущихся в обоих направлениях. Нижняя синяя кривая - вклад частиц, движущихся вглубь мишени. Очевидно, что вклад в распыление обратно рассеянных частиц доминирует. В обоих случаях учтена генерация вторичных атомов отдачи.

При исключении вторичной генерации быстрыми атомами отдачи получаем кривую с открытыми квадратиками. Таким образом, вклад в распыление каскадов, генерируемых быстрыми атомами отдачи весьма существенен.

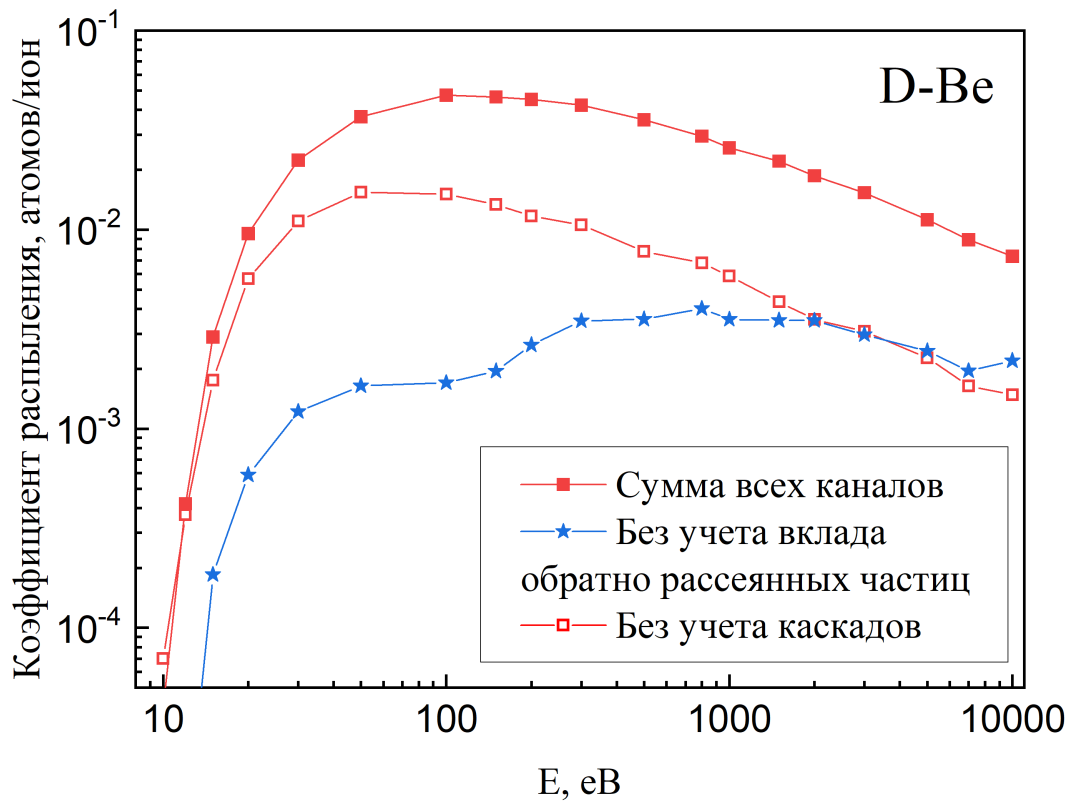


Рисунок 3.4 — Верхняя красная кривая — коэффициент распыления с учетом вклада каскадов. Красная кривая посередине — коэффициент распыления без учета вклада каскадов. Нижняя кривая, отмеченная звездочками — коэффициент распыления без учета вклада обратно рассеянных частиц первичного пучка.

3.1.4 Пороги распыления

Рассмотрим пороги распыления в модели, когда доминирующий вклад в распыление вносит распыление приповерхностных слоев потоком обратно рассеянных частиц. Переданную поверхностному атому энергию можно вычислить по формуле (1.15). Для того, чтобы этот поверхностный атом смог распылиться, переданная ему энергия должна превышать поверхностный барьер. Для сферического барьера соответствует условие (2.6), для плоскостного барьера

– (2.5). Энергия бомбардирующей частицы (с массой M_1) после однократного рассеяния на атоме мишени (с массой M_2) на угол θ в лабораторной системе координат можно записать как:

$$\frac{E_1}{E_0} = \left(\frac{M_1}{M_1 + M_2} \right)^2 \left[\cos(\theta) \pm \left[\left(\frac{M_2}{M_1} \right) - \sin^2(\theta) \right]^{0.5} \right]^2 \quad (3.1)$$

Здесь E_1 – средняя энергия обратно рассеянной частицы, E_0 – начальная энергия пучка.

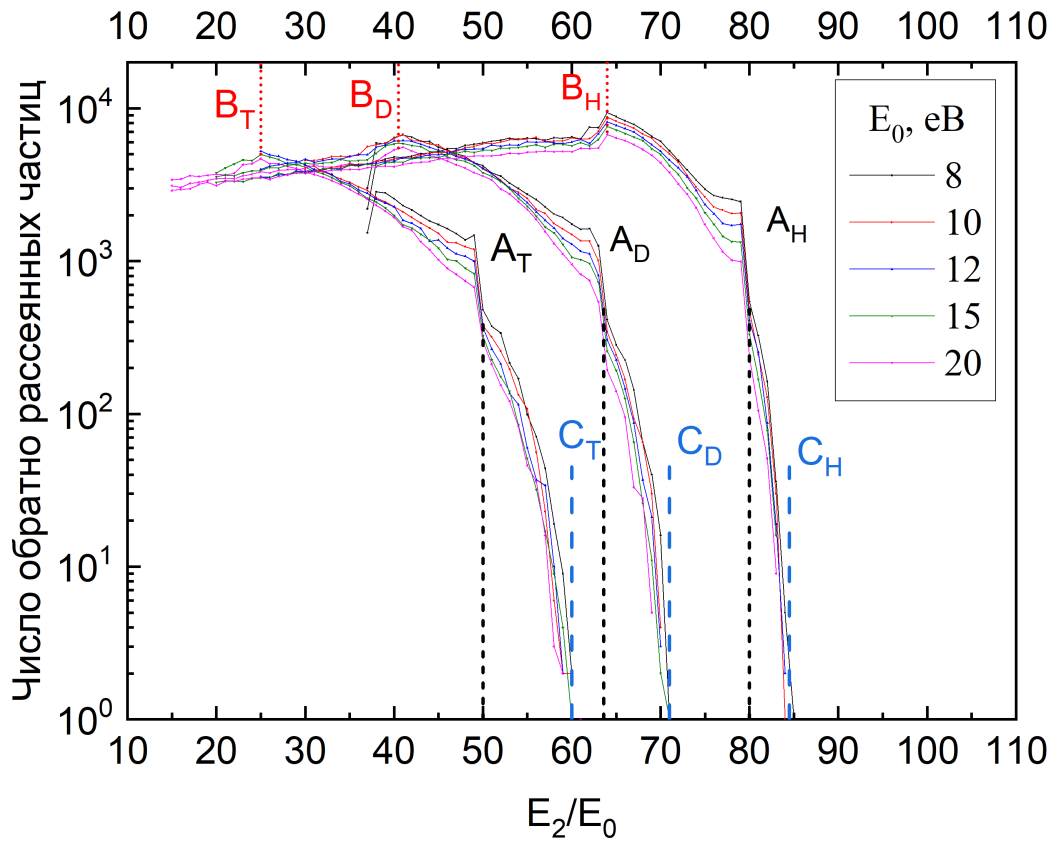


Рисунок 3.5 — Зависимость числа обратно рассеянных частиц от отношения их энергии к начальной. Рассмотрены различные (8-20 эВ) начальные энергии пучка. Зависимости представлены для облучения мишени Ве изотопами H, D, T.

На рисунке 3.5 представлены энергетические спектры обратно рассеянных частиц. Энергии всех данных нормированы на начальную энергию пучка. Рассмотрен случай небольших энергий в пороговой области.

Для того чтобы бомбардирующая частица смогла развернуться и полететь обратно в сторону поверхности, ей необходимо рассеяться на атоме мишени минимум на 90° . В этом случае ее максимально возможная энергия будет определяться выражением:

$$E_{90^\circ} = \frac{(M_2 - M_1)}{(M_1 + M_2)} E_0 \quad (3.2)$$

Эти положения на рисунке 3.5 обозначены линиями с индексом "А". Линиями с индексом "В" обозначены минимальные энергии частиц при однократном рассеянии на максимальный угол в 180° . Видно, что при энергиях соответствующим линиями "А" и "В" наблюдаются скачки интенсивности в спектре обратно рассеянных частиц. Это свидетельствует о весомой роли однократных соударений при распылении мишени в пороговой области энергий.

Отношение $\xi = E_1/E_0$ при учете многократного рассеяния возрастает. Для системы Н-Ве $\xi = 0.845$, для D-Ве $\xi = 0.71$, для Т-Ве $\xi = 0.60$. Это отношения ξ обозначены на рисунке 3.5 линиями с индексом "С". Учет многократного рассеяния увеличивает максимально возможное значение энергии обратно рассеянной частицы. Частица потеряет меньше энергии при нескольких поворотах на небольшой угол, чем при одном повороте на необходимый угол. Учитывая полученные значения ξ , для пороговой энергии E_{th} можно записать выражение:

$$E_{th} = E_s \frac{(M_1 + M_2)^2}{4M_1M_2\xi} \quad (3.3)$$

Здесь E_s - энергия сублимации материала мишени. Для систем Н, D, Т - Ве формула 3.3 дает значения порога распыления равными 10.91, 7.85 и 7.37 эВ соответственно. Эти значения нанесены на рисунке 3.1 вертикальными стрелочками. Видно, что результаты вычисления по формуле 3.3 хорошо согласуются с результатами моделирования коэффициента распыления бериллия.

3.1.5 Угловая зависимость коэффициента распыления Ве

Рассчитаны зависимости коэффициента распыления от угла падения пучка. Рассмотрены случаи бомбардировки изотопами Н, D, Т. Также проведено исследование влияния типа потенциального поверхностного барьера на форму угловой зависимости коэффициента распыления.

На рисунке 3.6 приведены результаты вычислений угловых зависимостей коэффициента распыления Y для систем Н-Ве, D-Ве и Т-Ве. Угол падения θ отсчитывается от нормали к мишени. Представленные значения нормированы на коэффициент распыления для угла падения $\theta = 0^\circ$. Данное представление

является удачным для изображения коэффициентов распыления для разных энергий и типов бомбардирующих изотопов.

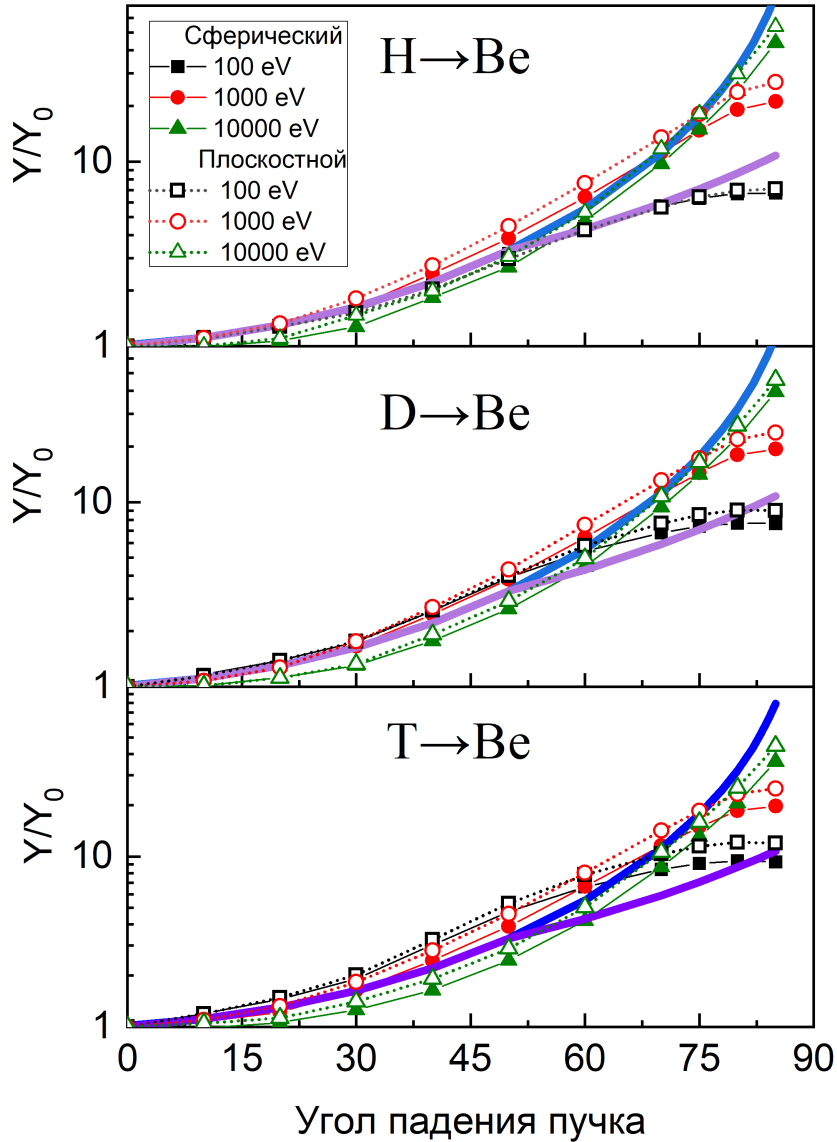


Рисунок 3.6 — Угловые зависимости коэффициента распыления Be при бомбардировке H, D, T. Представлены энергии 100, 1000, 10000 eV. Пунктиром обозначен расчет для плоскостного барьера, сплошной линией — для сферического барьера. Теоретические пределы зависимости распыления от угла обозначены двумя сплошными толстыми линиями.

Видно, что угловые зависимости коэффициентов распыления для различных изотопов водорода имеют схожее поведение. Коэффициенты распыления $Y(\theta)$ сильно растут с увеличением угла падения θ . Этот рост можно связать с двумя факторами:

- Рост $Y(\theta)$ можно связать с увеличением пути пучка в области приповерхностных слоев, откуда и происходит основной приток распыленных частиц. Увеличение длины траектории в первых слоях мишени с ростом угла падения θ растет как $1/\cos \theta$, но ограничено общим пробегом пучка.
- Отличие сечения рассеяния для необходимого минимального угла поворота частицы в сторону границы мишень-вакуум. При доминирующем вкладе обратно рассеянных частиц можно записать следующую зависимость:

$$\frac{Y(\theta)}{Y(0)} = \frac{1}{\cos(\theta)} \frac{\sigma(\theta_1 - \theta)}{\sigma(\theta_1)} \quad (3.4)$$

Где $\sigma(\theta)$ – дифференциальное сечение рассеяния на угол θ , а θ_1 – обозначает средний угол рассеяния для потока обратно рассеянных частиц.

Предложенные выше простые зависимости подтверждаются результатами моделирования нашей программы (рисунок 3.6). Два вышеописанных фактора роста коэффициента распыления с углом представлены на рисунке двумя жирными сплошными линиями. Нижняя кривая, отражающая первый фактор, построенная из расчета длины пробега в веществе характерного для налетающей частицы с энергией в 100 эВ.

Отличие кривых $Y(\theta)$ для плоскостного и сферического типов поверхностного барьера в представлении данных в нормированном виде отличается не более 20%. Зависимости $Y(\theta)$ имеют схожее поведение.

Отдельно было исследовано влияние наличия потенциальной ямы в потенциале межатомного взаимодействия на угловую зависимость коэффициента распыления $Y(\theta)$.

На рисунке 3.7 представлена угловая зависимость коэффициента распыления бериллия для различного набора энергий бомбардирующих частиц дейтерия. Расчет производился с использованием различных типов межатомного потенциала взаимодействия. В качестве потенциала с ямой использовался потенциал, посчитанный в приближении DFT. В качестве потенциала без ямы использовался универсальный потенциал ZBL. Видно, что для потенциала без ямы коэффициент распыления $Y(\theta)$ стремится к нулю при скользких углах падения. Такое поведение связано с эффектом блокировки [116]. При использовании в моделировании потенциала с потенциальной ямой эффект блокировки

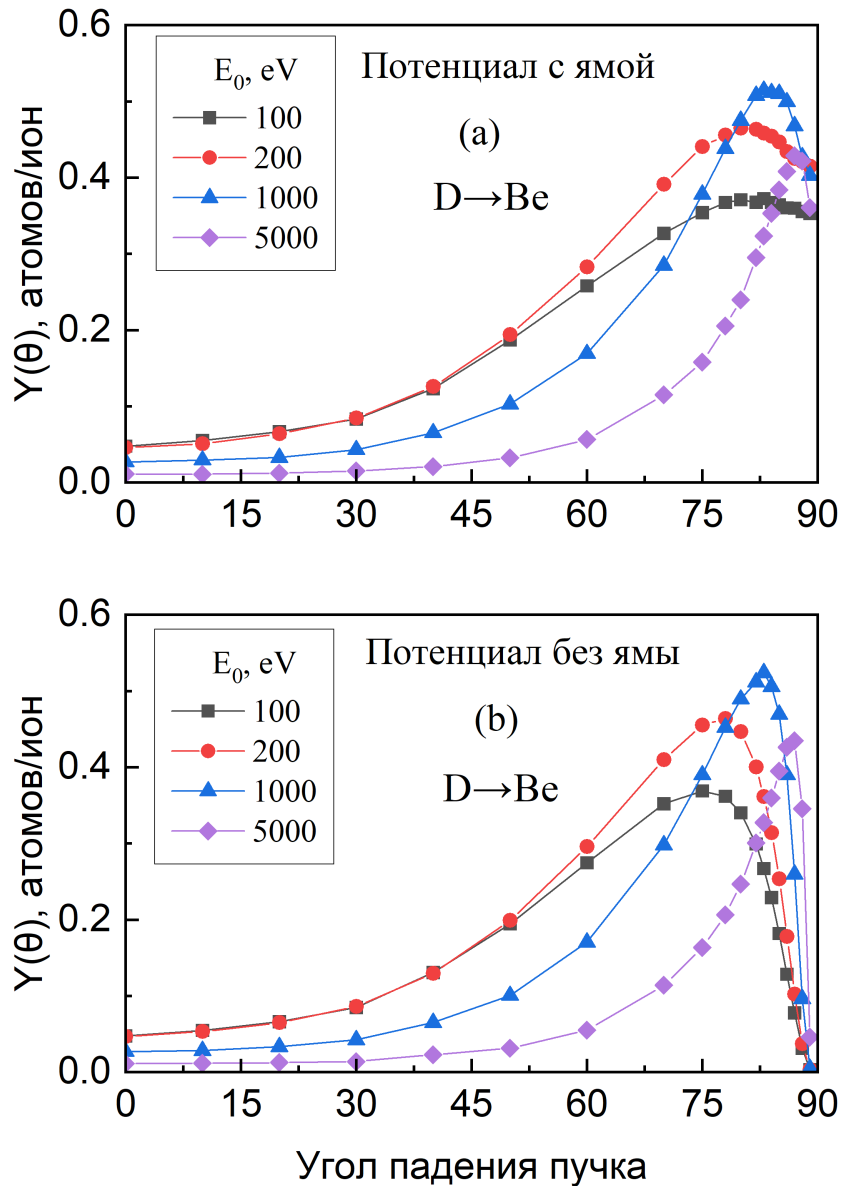


Рисунок 3.7 — Зависимость коэффициента распыления от угла падения пучка на мишень для пары D–Be. Верхний рисунок (a) соответствует расчету с использованием потенциала с барьером, нижний рисунок (b) - расчет с потенциалом без барьера.

исчезает. На малых углах потенциал начинает "затягивать" бомбардирующие частицы в объем мишени, и при скользящих углах коэффициент распыления не терпит сильных изменений. Резкого спада $Y(\theta)$ до нулевых значений вблизи угла падения в 90° не наблюдается.

3.1.6 Энергетические спектры распыленных частиц

Отдельный интерес представляет информация о самих распыленных частицах. Процедура экспериментального определения энергетических спектров распыленных частиц зачастую носит очень сложный технический характер, или вовсе не представляется возможной. В процессе моделирования в нашей программе имеется возможность отследить направление и величину скоростей распыленных частиц, и при достаточно большой статистике возможно определить их энергетический спектр.

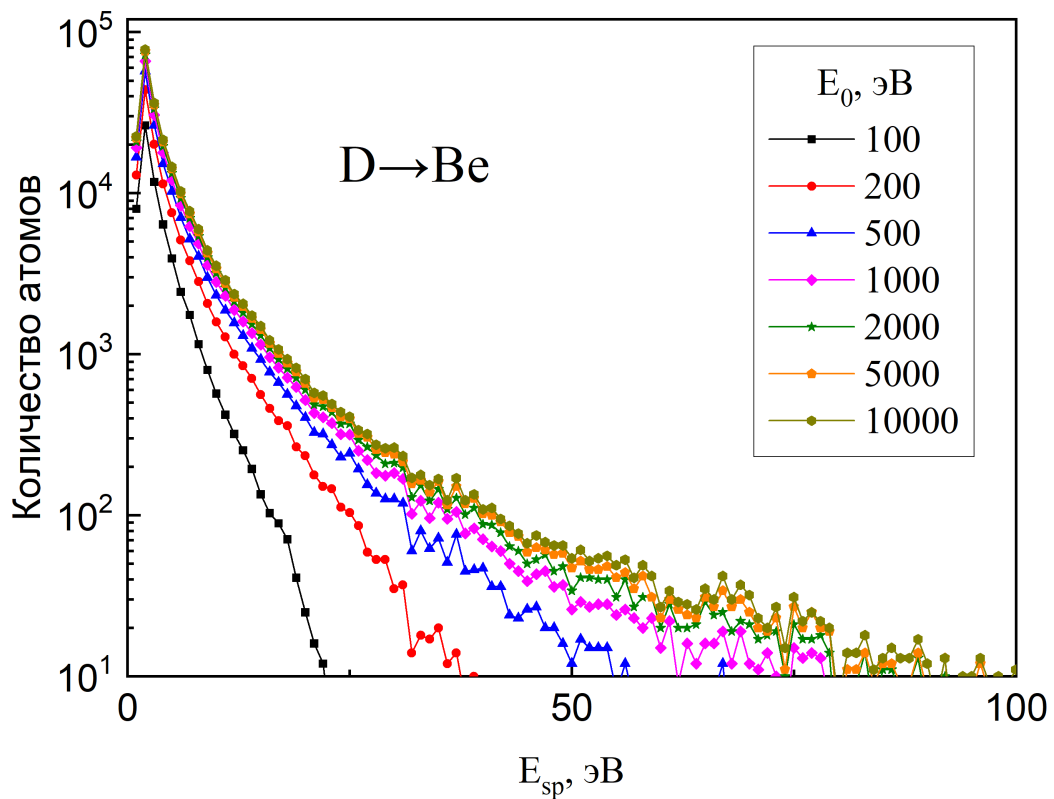
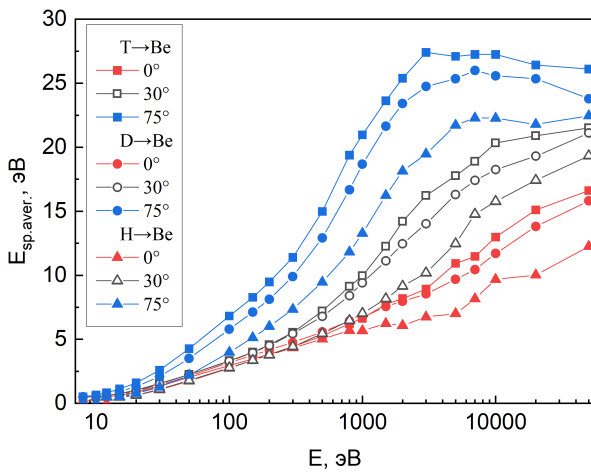


Рисунок 3.8 — Энергетические спектры распыленных частиц бериллия при различных энергиях бомбардирующих частиц дейтерия для случая сферического потенциального барьера.

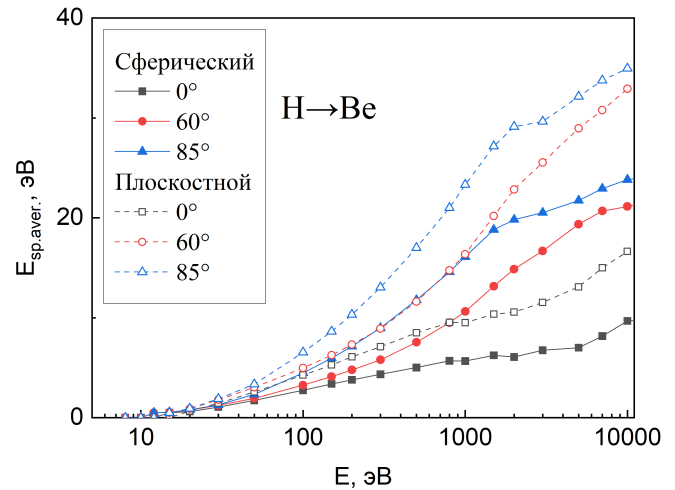
На рисунке 3.8 представлены энергетические спектры распыленного бериллия ионами дейтерия. Энергии распыляющих частиц лежат в диапазоне 100 эВ-10 КэВ. Энергетический спектр имеет ярко выраженный максимум в области низких энергий, и резко падает с увлечением энергии распыленной частицы E_{sp} . При увлечении начальной энергии бомбардирующих частиц, энергетический спектр распыленных частиц уширяется.

Колебания энергетических спектров во всех ниже представленных графиках в этом разделе связаны с недостаточной статистикой вычислений. Был взят достаточно узкий энергетический шаг (1 эВ) для спектра энергий распыленных частиц, что привело к подобным шумам. Несмотря на то, что во время расчетов число запускаемых частиц достигало 10^8 , количество распыленных частиц, с определенной энергией в диапазоне 1 эВ, могло быть недостаточным для гладкости общего вида спектра.

Во время моделирования наблюдались редкие распыленные частицы высоких энергий. При энергии распыляющего пучка в 10 кэВ, энергия распыленной частицы могла составлять несколько сотен электрон-вольт. Подобные быстрые частицы образуются обратно рассеянными изотопами водорода, которые передают большую часть кинетической энергии поверхностному слою мишени. При этом низкое количество таких случаев обусловлено тем, что бомбардирующая частица должна рассеяться обратно, и избежать столкновений, приводящих к потере энергии на пути к поверхностным слоям мишени. Также частица должно испытать почти лобовое столкновение, чтобы эффективность передачи энергии, вычисляемая по формуле (1.14), была максимальной.



(а)



(б)

Рисунок 3.9 — Зависимость средней энергии распыленной частицы $E_{sp,aver}$ от начальной энергии бомбардирующих частиц. (а) — бомбардировки Be изотопами H, D, T под различными углами падения на мишень. Случай сферического потенциального барьера. (б) — бомбардировка Be пучком H под различными углами падения на мишень. Случай сферического барьера представлен сплошными линиями, случай плоскостного барьера - прерывистыми линиями.

Более наглядной является информация не об энергетических спектрах распыленных частиц, а о зависимости их средних энергий. Эти зависимости для случая сферического потенциального барьера представлены на рисунке 3.9(а).

В случае падения пучка на мишень под прямым и 30° углом, в диапазоне энергий меньше 1000 эВ значение средней энергии распыленных частиц $E_{sp.aver}$ растет пропорционально энергии распыляющего пучка. В этом диапазоне энергий и углов различные изотопы водорода имеют схожую зависимость. Для больших углов падения (на графике видно на примере 75°) проявляется зависимость от массы распыляющих частиц. Так же зависимость от массы распыляющих частиц появляется при увеличении энергии пучка, однако в целом можно выделить некоторую группировку кривых для различных изотопов.

На рисунке 3.9(а) на примере распыления под углом в 75° наглядно видно, что средняя энергия распыленных частиц $E_{sp.aver}$ достигает некоторого плато. Начиная примерно с 5 кэВ для всех типов бомбардирующих изотопов рост $E_{sp.aver}$ не наблюдается.

Результаты сравнения расчетов средних энергий распыленных частиц для случая плоскостного и сферического барьеров представлены на рисунке 3.9(б). Средняя энергия для плоскостного барьера выше, чем для сферического. Объясняется это тем, что критерий плоскостного барьера является более строгим, из-за чего часть частиц малой энергии не считаются распыленными. Отсюда и более высокий средний показатель.

Если проводить связь между шероховатостью распыляемой поверхности и используемым в моделировании типом поверхностного потенциала, можно прийти к выводу, что в случае идеально гладкой поверхности средняя энергия распыленных частиц будет выше, чем в случае шероховатой мишени.

3.1.7 Угловые распределения распыленных частиц бериллия

Перейдем к анализу угловых распределений распыленных частиц. На рисунке 3.10 (а) представлен угловой спектр распыленных частиц для случая D-Be со сферическим потенциальным барьером. Линиями различного цвета изображены случаи различных энергий бомбардирующих частиц. Число распыленных

частиц проинтегрировано по всему азимутальному углу. По углу вылета интегрирование проводилось в интервале $\pm 2.5^\circ$.

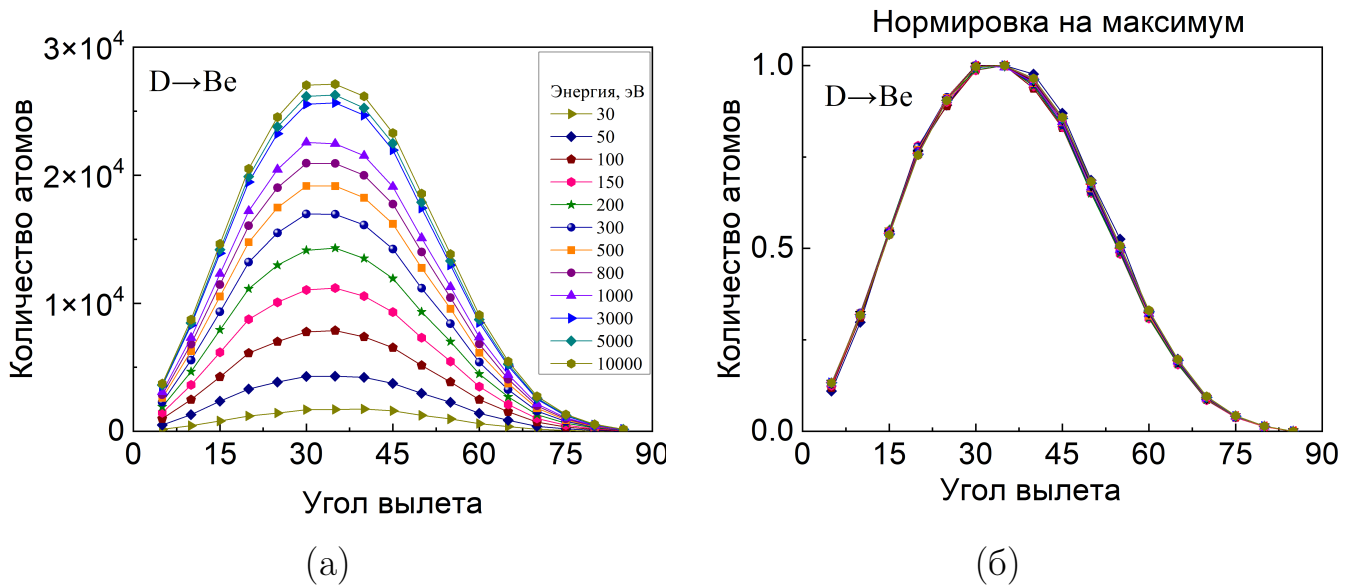


Рисунок 3.10 — (а) — Угловой спектр распыленных частиц для разных энергий бомбардирующего пучка. Расчет для пары D-Be, случай сферического потенциального барьера. (б) — те же данные, что и (а), но нормированные на максимальное значение интенсивности.

В случае сферического потенциального барьера распределение распыленных частиц по углу вылета имеет универсальный характер для различных энергий пучка. Это наглядно видно из рисунка 3.10 (б), на котором угловые спектры из 3.10 (а) нормированы на максимальное значение интенсивности. Эта универсальная форма спектра может быть обусловлена многократностью столкновений вылетевших частиц. Распределение имеет максимум интенсивности на углах $35^\circ - 40^\circ$. Аналогичные зависимости наблюдаются и в случае распыления другими изотопами.

На рисунке 3.11 также приведены результаты моделирования распыления бериллия водородом для случая плоскостного барьера. В случае плоскостного барьера наблюдается сдвиг угловой зависимости в сторону меньших углов распыления. Универсальная зависимость угловых спектров исчезает. Связаны эти два явления с критерием отбора распыленных частиц в случае плоскостного барьера (2.5), который (в отличие от сферического (2.6)) зависит от угла вылета распыленных частиц. Чем больше значение угла вылета частицы, тем сложнее ей преодолеть плоскостной поверхностный барьер. Отсюда и спад интенсивности в области больших значений углов распыления.

Для представления разницы углового распределения распыленных частиц различных изотопов водорода и углов падения пучка, была рассчитана зави-

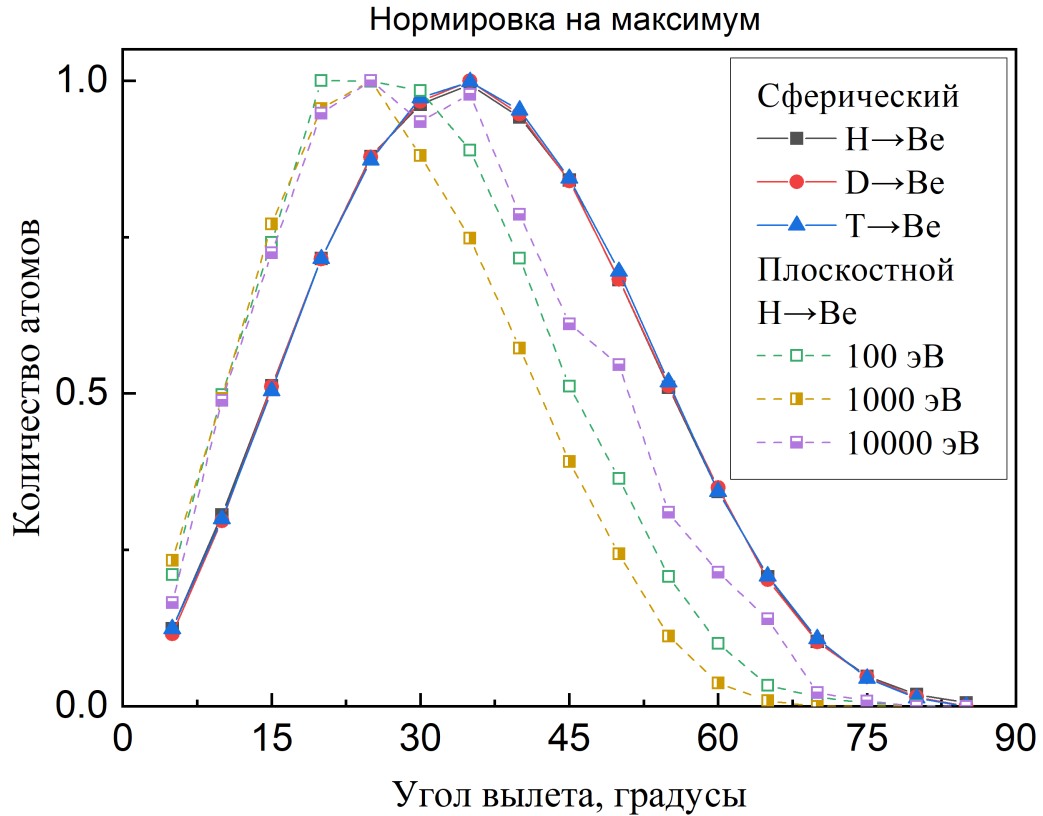


Рисунок 3.11 — Угловой спектр распыленных частиц для разных энергий бомбардирующих частиц. Расчет для пары H-Be, случай плоскостного потенциального барьера. Также приведены универсальные формы спектра для сферического барьера при распылении бериллия различными изотопами водорода. Все кривые нормированы на максимальное значение интенсивности.

симось среднего угла вылета распыленных частиц $\theta_{sp.aver}$ от энергии пучка. Результаты представлены на рисунке 3.12. Видно, что зависимость $\theta_{sp.aver}$ от типа распыляющего изотопа практически отсутствует. Максимальный средний угол характерен для малых энергий. Для случая высоких энергий распыляющего пучка (свыше 2 кэВ) зависимость $\theta_{sp.aver}$ от энергии практически исчезает.

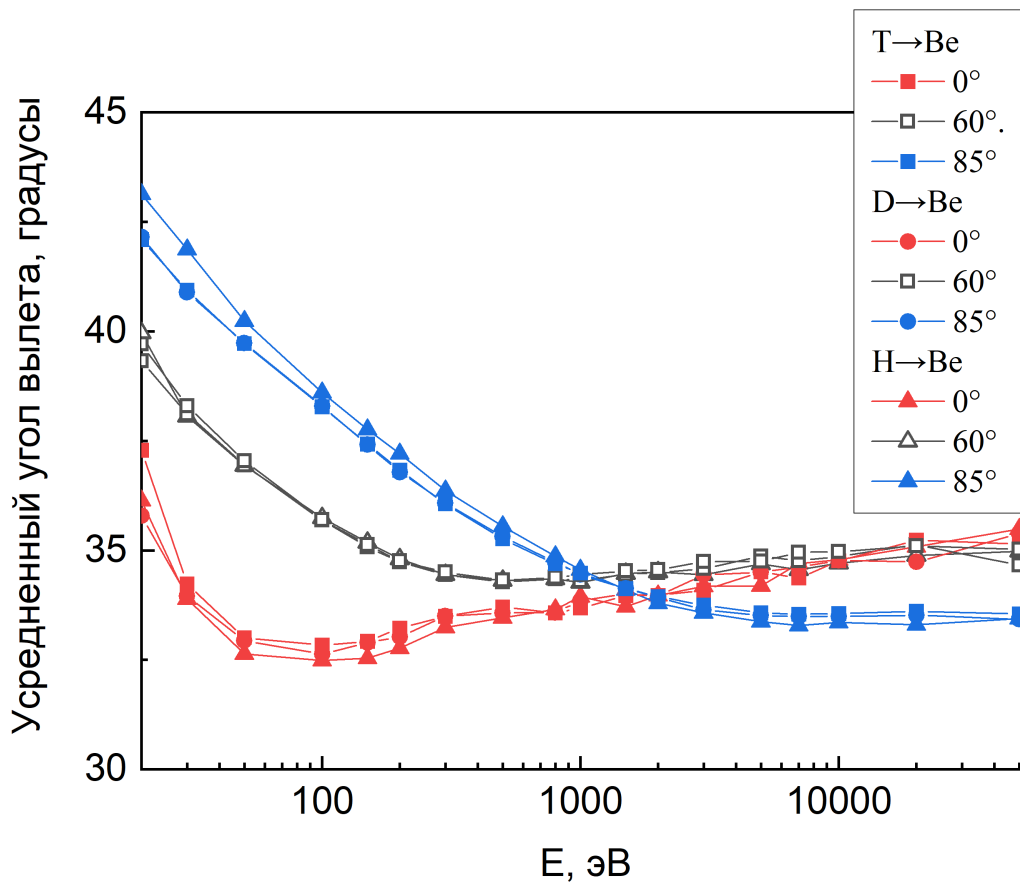


Рисунок 3.12 — Зависимость среднего угла вылета расплывших частиц $\theta_{sp.aver}$ от энергии бомбардирующих частиц для различных углов падения пучка. Представлен случай распыления бериллия различными изотопами водорода с использованием плоскостного поверхностного барьера.

3.1.8 Выводы

Нами были смоделированы коэффициенты распыления поликристаллического бериллия различными изотопами водорода в диапазоне энергий бомбардирующих частиц от 8 эВ до 100 кэВ, для широко диапазона угла падения пучка. Эти данные представляют особый интерес для моделирования распыления в токамаках с бериллиевой стенкой. Полученные угловые и энергетические спектры расплывших частиц позволят более точно моделировать динамику расплывшего бериллия в плазме, что, в свою очередь, оказывает большое влияние на параметры всего объема плазмы в токамаке.

В ходе работы были рассмотрены предельные случаи состояния поверхности мишени. Эти состояния определялись типом поверхностного потенциала. Идеально гладкой поверхности сопоставлялся плоскостной потенциальный барьер. Максимально шероховатой поверхности, состоящей из остриев - сферический потенциальный барьер. Обнаружено сильное влияние типа поверхностного потенциала на получаемые значения коэффициентов распыления, а также на угловые и энергетические спектры распыленных частиц. Таким образом предполагается сильная зависимость характеристик, распыленных части от состояния поверхности реактора, которое может меняться со временем его эксплуатации.

Также было проанализировано влияние каскадов соударений на величину коэффициента распыления. Продемонстрирован доминирующий вклад эффекта распыления обратно рассеянным пучком. Полученные зависимости средней глубины образования распыленной частицы в зависимости от энергии и угла падения распыляющего пучка. На примере D-Be проанализировано влияние наличия ямы в потенциале взаимодействия на результаты моделирования коэффициента распыления под скользящим углом.

3.2 Моделирование распыления вольфрама изотопами водорода

Данный раздел посвящен процессу распыления вольфрамовой мишени под действием ионного пучка различных изотопов водорода. Основные результаты данного исследования опубликованы в работе [А3]. Как и для случая моделирования бериллия, были определены зависимости коэффициентов распыления от энергии и угла падения бомбардирующих частиц. Также были проанализированы различные характеристики распыленных частиц вольфрама.

Для набора необходимой статистики при расчете коэффициентов распыления вольфрама изотопами водорода рассматривалось 10^6 налетающих частиц. Для области пороговой энергии и для корректного расчета спектра распыленных частиц число налетающих частиц могло быть увеличено до 10^8 . В случае распыления вольфрама достичь необходимой статистики сложнее, в силу маленького процентного числа распыленных частиц. При моделировании энергия сублимация вольфрама составляла $E_s = 8.9$ эВ. Расчеты проводились для комнатной температуры мишени.

3.2.1 Коэффициенты распыления вольфрама изотопами водорода

На рисунке 3.13 приведены результаты расчета коэффициентов распыления вольфрама в зависимости от энергии соударения бомбардирующих частиц при нормальном падении пучка на мишень для различных изотопов водорода. Сплошная красная линия обозначает расчет для плоскостного потенциально-го барьера. Синяя штрихованная линия - для сферического. Результаты для плоскостного барьера неплохо согласуются с экспериментальными данными из работ [13; 117–120]. Экспериментальные данные по распылению тритием отсутствуют. Черной пунктирной линией обозначены результаты моделирования группы Экштайна [10].

Расчет использованием плоскостного барьера дает меньшие значения коэффициентов распыления. Особенно в области пороговых энергий. Использование плоскостного барьера также приводит к смещению порога распыления

в сторону больших энергий. Значения коэффициентов распыления полученных экспериментально располагаются ближе к моделированию с плоскостным барьером (плоская поверхность). Расчет группы Экштайна лежит между расчетами с использованием плоскостного и сферического барьеров.

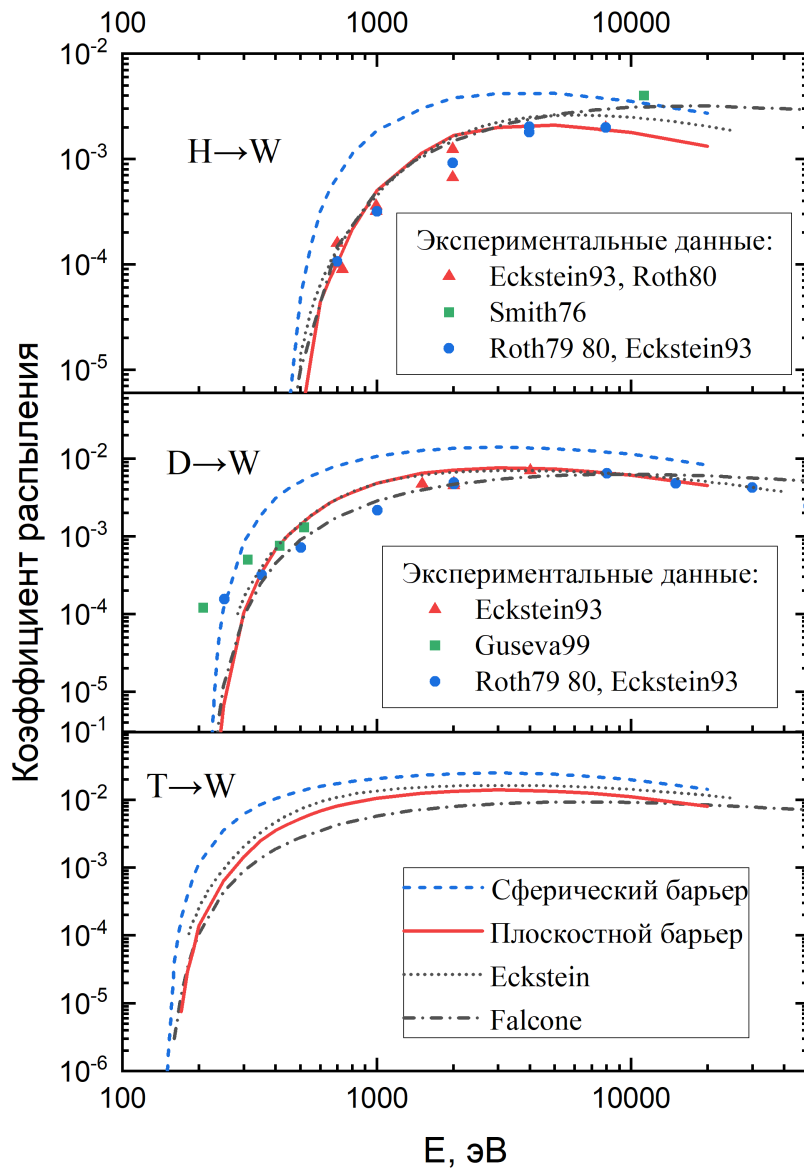


Рисунок 3.13 — Зависимости коэффициента распыления от энергии бомбардирующих частиц при нормальном падении пучка. Рассмотрен случай распыления вольфрама различными изотопами водорода. Штрихованная синяя линия - расчет для сферического потенциала. Красная сплошная линия - плоскостной потенциал. Точками отмечены экспериментальные данные. Черная пунктирная линия - результаты моделирования Экштайна. Черная тире точка линия - расчет Фальконе.

В работе [115] предложена формула для определения коэффициента распыления Y для мишеней, состоящих из тяжелых элементов, при бомбардировке легкими частицами:

$$\begin{aligned}
 Y &= 1.276 E_s^{-1} Q_1(Z_1, Z_2) Q_2(M_1, M_2) F(w), \\
 Q_1(Z_1, Z_2) &= \frac{Z_1 Z_2}{\sqrt{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}}}, \\
 Q_2(M_1, M_2) &= \frac{\mu - 1}{(1 + \mu)^2}, \\
 \mu &= \frac{M_1}{M_2}, \quad w = \frac{E_0}{E_{th}}, \\
 E_{th} &= \frac{E_s}{\gamma(1 - \gamma)}, \quad \gamma = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2},
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

где E_{th} – пороговая энергия распыления, E_0 – начальная энергия бомбардирующей частицы, E_s – энергия сублимации, Z_1 и Z_2 – заряды ядер сталкивающихся частиц, M_1 и M_2 – их массы.

Как видно на рисунке 3.13, наблюдается неплохое согласие результатов нашего расчета для случая плоскостного потенциала со значениями, полученными по формулам 3.2.1.

3.2.2 Угловая зависимость коэффициента распыления W

Зависимость коэффициента распыления от угла падения пучка также была промоделирована. Нулевой угол соответствует падению пучка на мишень под прямым углом. Результаты приведены на рисунке 3.14, где значения коэффициентов распыления Y нормированы на единицу, при падении под прямым углом. Расчет был проведен для случая плоскостного (рисунок справа) и сферического (рисунок слева) поверхностного барьера. В целом наблюдается некий универсальный характер для нормированных угловых зависимостей Y . Однако для малых энергий в случае использования плоскостного барьера наблюдается снижение Y при большом угле падения пучка. Это падение можно объяснить с помощью углового распределения распыленных частиц вольфрама (см. следующий раздел)

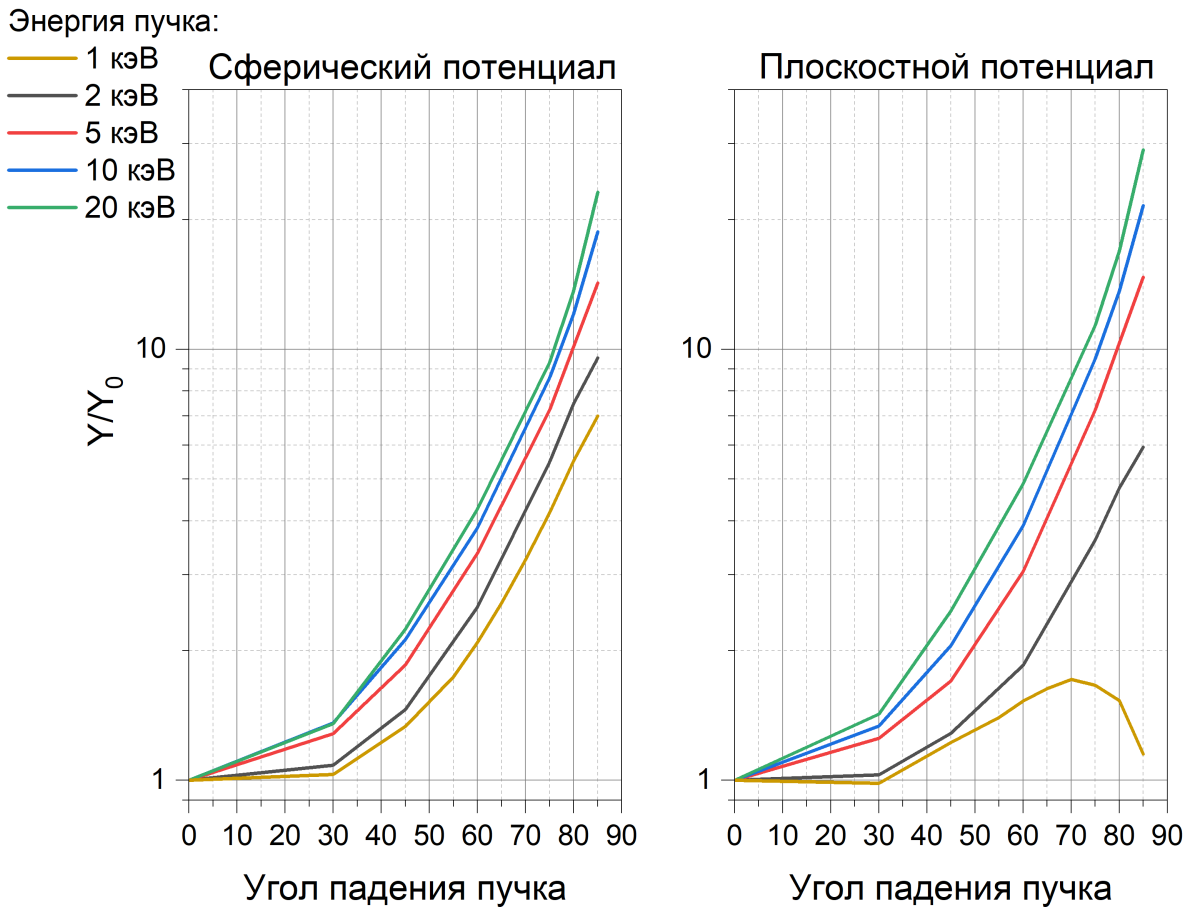


Рисунок 3.14 — Угловые зависимости нормированного коэффициента распыления вольфрама Y на коэффициент распыления под прямым углом падения пучка Y_0 . Представлен случай распыления водородом. Слева расположен расчет для сферического барьера, справа — для плоскостного барьера. Представлены энергии пучка 1, 2, 5, 10, 20 кэВ.

3.2.3 Угловые распределения распыленных частиц вольфрама

Для объяснения поведения зависимости коэффициентов распыления от угла падения пучка была промоделирована угловая зависимость распыленных частиц вольфрама. Результаты представлены на рисунке 3.15. Все расчеты проводились для одинакового числа налетающих частиц. Видно, что в случае сферического барьера (графики слева) при энергии пучка в 1кэВ (графики сверху) и при большом угле падения пучка (более 75°) наблюдается смещение углов вылета θ_{out} в сторону больших значений. Угол вылета $\theta_{out} = 0^\circ$ соответствует вылету под прямым углом из мишени. В случае сферического потенциального барьера никакого отсеивания частиц по θ_{out} не происходит, смещение в сторону больших θ_{out} происходит из-за того, что при малых энергиях пучка частица не успевает развернуться в сторону поверхности. В случае плос-

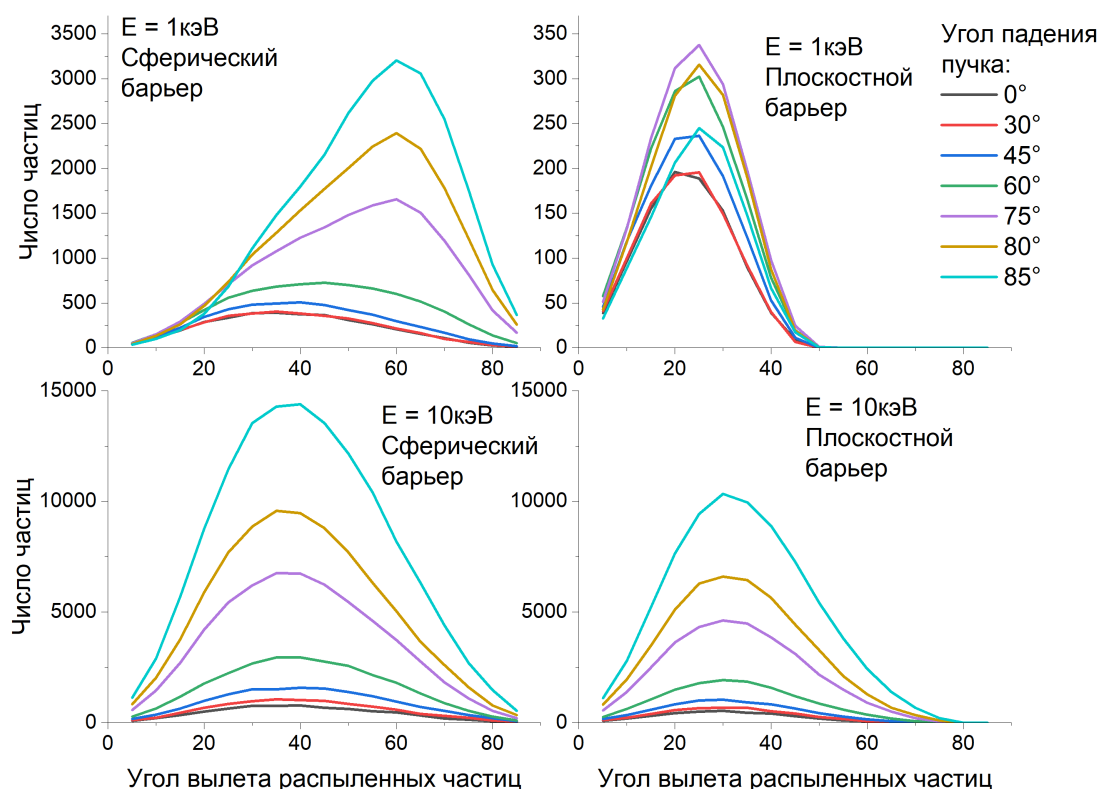


Рисунок 3.15 — Угловые спектры распыленных частиц вольфрама при бомбардировке водородом. Верхние два графика отображают расчет для энергии пучка в 1 кэВ, нижние два графика - для 10 кэВ. Случай сферического барьера представлен слева, плоскостного - справа. Разным цветом изображены различные углы падения распыляющих частиц

костного потенциального барьера условие 2.5 отсекает большую часть частиц с высоким значением θ_{out} . Результат этого отсеивания виден, если сравнить угловые спектры на рисунке 3.15 для пучка в 1 кэВ. Видно, что для плоскостного барьера число вылетевших частиц в десятки раз ниже (оси ординат имеют различный масштаб), и все они имеют маленький угол вылета (вылетают ближе к прямому углу). Этим объясняется падения коэффициента распыления для плоскостного потенциала, для пучка малой энергии со скользящим углом падения на рисунке 3.14. Особенно хорошо это видно для энергии в 1 кэВ и угла падения пучка свыше 70° .

Для больших энергий пучка распределение θ_{out} распыленных частиц имеет более схожий вид для двух типов сферических барьеров. Среднее значение угла вылета лежит в диапазоне от 30° до 40° , что соответствует результатам моделирования для распыления бериллия 3.12.

Отсюда и схожие формы зависимостей коэффициента распыления от угла падения пучка для двух разных поверхностных барьеров 3.14 при больших энергиях.

3.2.4 Энергетические распределения распыленных частиц вольфрама

Выбор поверхностного барьера имеет сильное влияние на значения энергетических спектров распыленных частиц. Энергетические спектры представлены на рисунке 3.16. Все расчеты проводились с одинаковым числом бомбардирующих частиц. Для сферического и плоскостного типа барьера при малых энергиях характерны сильные различия энергетических спектров. Плоскостной барьер вызывает провал числа частиц, распыляемых с малой энергией. Как и для случая бериллия, это объясняется зависимостью $\cos^2(\theta)$ в условии 2.5.

В работе [121] для случая плоскостного барьера приведена формула расчета энергетического спектра распыленных частиц:

$$N(E) \sim \frac{E}{(E + E_s)^{5/2}} \ln \frac{\gamma(1 - \gamma)E_0}{E + E_s} \quad (3.6)$$

Обозначения приняты такими же как и в формуле 3.2.1. На рисунке 3.17 продемонстрировано удовлетворительное согласие полученных нами данных с результатами расчетов по формуле 3.6. При энергиях спектра свыше 6 эВ эта формула дает значения схожие с нашими результатами, однако предсказывает сильно завышенные значения для спектра при меньших энергиях.

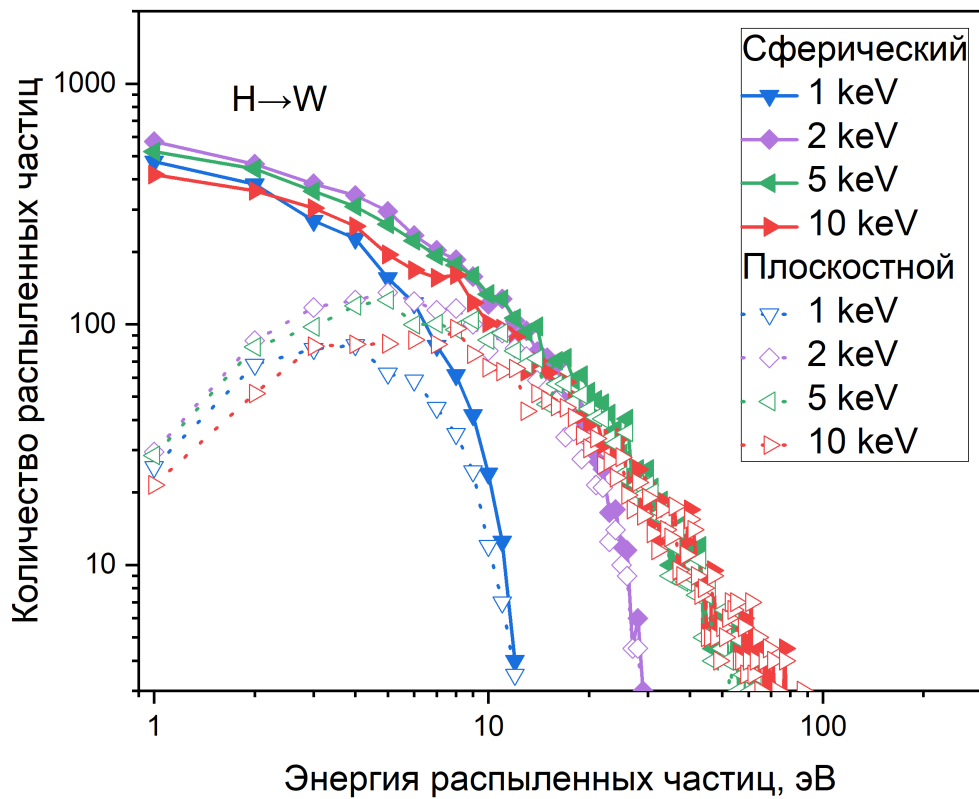


Рисунок 3.16 — Энергетические спектры распыленных частиц вольфрама. Случай плоскостного барьера обозначен пунктирными линиями. Случай сферического барьера - сплошными. Представлены результаты вычислений для различных энергий пучка.

Имея сведения об энергетических спектрах, можно вычислить среднюю энергию распыленных частиц. Подобная информация является более подходящей для расчета вероятности прохождения распыленных частиц первой стенки через приповерхностный плазменный слой или через буферный слой нейтрального газа в области дивертора.

На рисунке 3.18 представлены результаты моделирования средней энергии распыленных частиц $E_{sp.aver}$ вольфрама. Значения средних энергий для плоскостного барьера ожидаемо выше. $E_{sp.aver}$ распыленных частиц растет вместе с энергией и массой бомбардирующих частиц.

Форма кривой зависимости $E_{sp.aver}$ от энергии пучка для случая вольфрама несколько отличается, от случая бериллия, представленного на рисунках 3.9(a). Вольфрам имеет более резкий спад величины $E_{sp.aver}$ с уменьшением энергии.

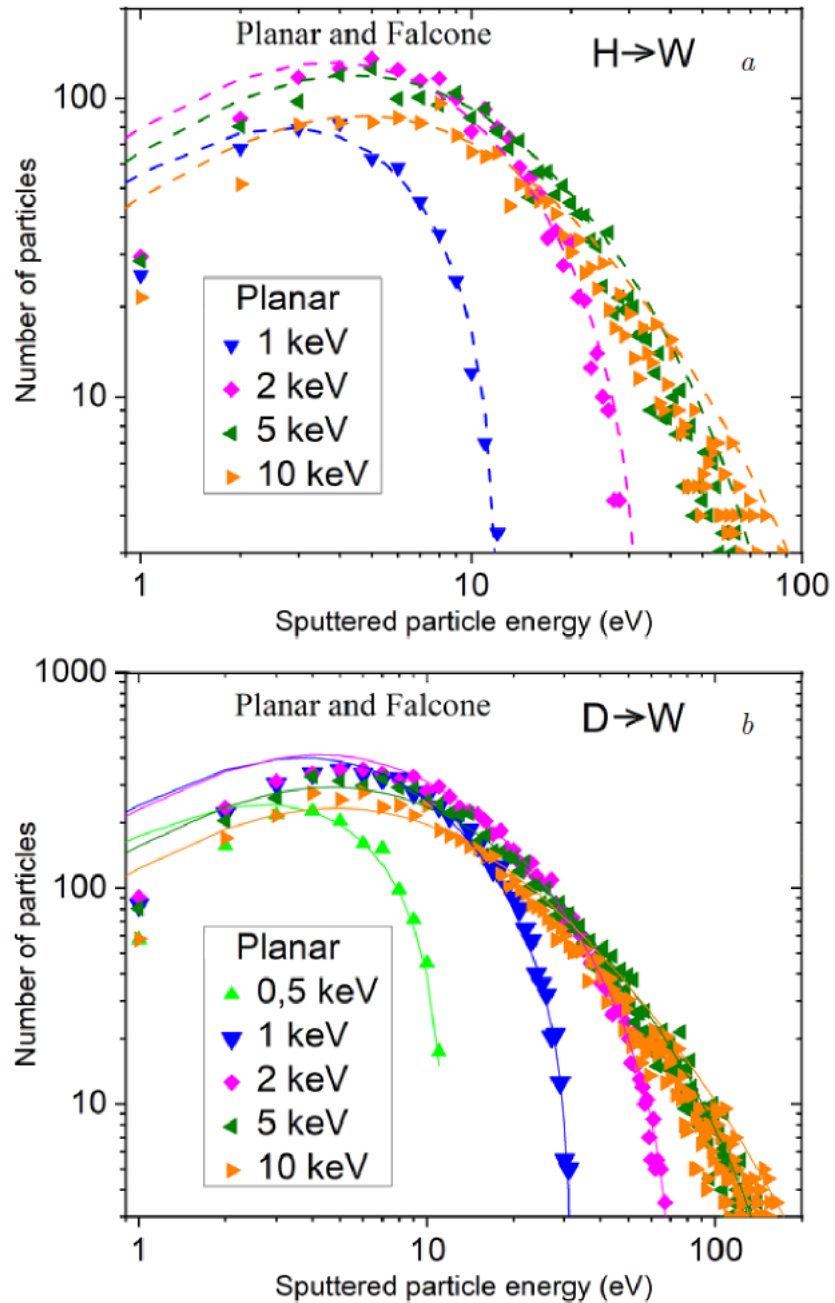


Рисунок 3.17 — Энергетические спектры распыленных частиц вольфрама для плоскостного барьера. (a) - случай распыления водородом, (b) - распыления дейтерием. Сплошными линиями показаны результаты расчетов с использованием формулы Фальконе 3.2.1

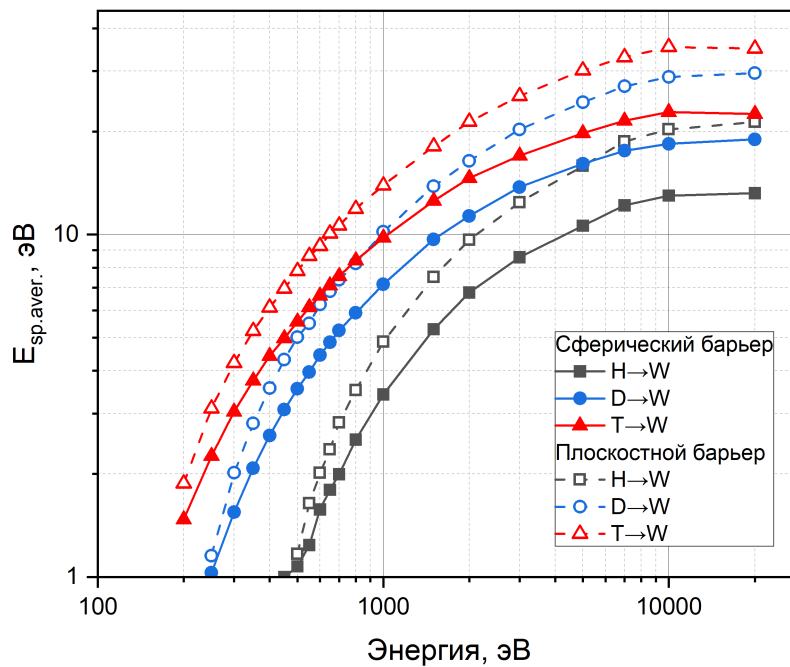


Рисунок 3.18 — Зависимость средней энергии распыленной частицы $E_{sp,aver}$ от начальной энергии бомбардирующих частиц. Представлен случай бомбардировки W изотопами H, D, T, под прямым углом падения на мишень. В расчете использовался сферический потенциальный барьер.

3.2.5 Выводы

На примере распыления вольфрама различными изотопами водорода была продемонстрирована чувствительность величины коэффициента распыления к выбору типа поверхностного потенциала. Были получены коэффициенты распыления для двух предельных случаев состояния поверхности распыляемой мишени. Абсолютно гладкая (случай плоскостного барьера) и мишень, состоящая из остриев атомного размера (случай сферического барьера). Результаты плоскостного барьера в большей степени согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

Также показано, что модель Фальконе из работы [115], хорошо согласуется с полученными нами зависимостями коэффициентов распыления от энергии и массы бомбардирующих частиц. А формула Фальконе из [121] - с энергетическими спектрами распыленных частиц, полученных нами для случая плоскостного барьера.

Полученные угловые и энергетические распределения распыленных частиц вольфрама для случая облучения изотопами водорода необходимы для точных расчетов количества поступления примесей в плазму реактора. Особенно эти данные интересны для токамаков, у которых и дивертор, и стенка реактора состоят из вольфрама. Характеристики распыленных частиц позволяют оценить их вероятность прохождения в центральную область плазмы, так как от величины энергии распыленной частицы зависит ее способность преодоления слоя пристеночной плазмы или слабо-ионизированного, холодного газа в буферной зоне вблизи дивертора.

Особый интерес представляет чувствительность коэффициента распыления и параметров распыленных частиц к шероховатости поверхности. Во время работы реактора обращенные к плазме материалы подвергаются воздействию высокоинтенсивных тепловых потоков плазмы. Это может привести к изменению состояния поверхности стенок реактора, а также его дивертора. Поверхность может стать более шероховатой, что, как показано в работе, повлечет к увлечению коэффициента распыления, а также к уменьшению порога распыления материалов. Также с ростом шероховатости материала ожидается спад средней энергии распыленных частиц и изменение их угловых спектров. Таким образом, полученные данные позволяют оценить возможные изменения параметров работы реактора в случае долгосрочного его использования.

3.3 Моделирование распыления Бериллия и Вольфрама примесными частицами

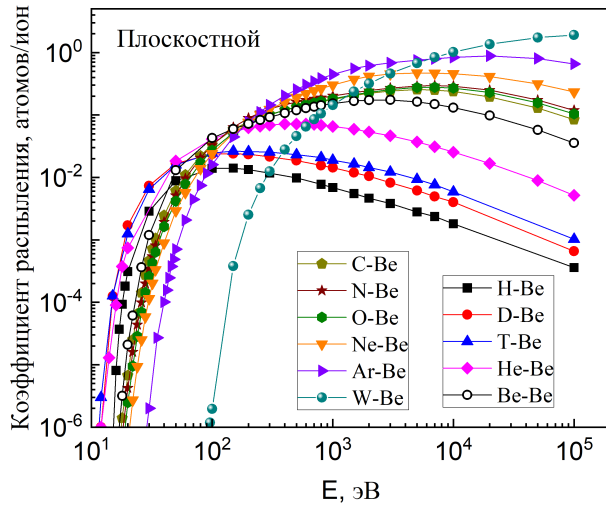
Данный раздел посвящен результатам вычислений коэффициентов распыления вольфрама и бериллия примесными частицами, характерными для реакторов типа токамак. В качестве распыляющих частиц рассмотрены атомы: He, Be, C, N, O, Ne, Ar, W. Рассмотрен случай распыления пучком под прямым углом падения к мишени. Диапазон энергий составляет от 1 эВ до 100 кэВ. Также рассмотрены случаи сферического и плоскостного поверхностного барьера. Определены средние энергии и угловые распределения распыленных Be и W. Основные результаты данного исследования опубликованы в работах [A4-A5].

Выбор рассматриваемых бомбардирующих частиц обусловлен тем, что He будет поступать в реактор как продукт термоядерной реакции, источником C, N, O является восстановление этих частиц из карбидов нитридов или окислов при взаимодействии потоков водорода с обращенными к плазме материалами реактора. N₂, Ne, Ar могут специально напускать как холодный буферный газ для понижения нагрузки от плазменных потоков на поверхность реактора. Be и W - попадает как нежелательная примесь во время распыления первой стенки реактора.

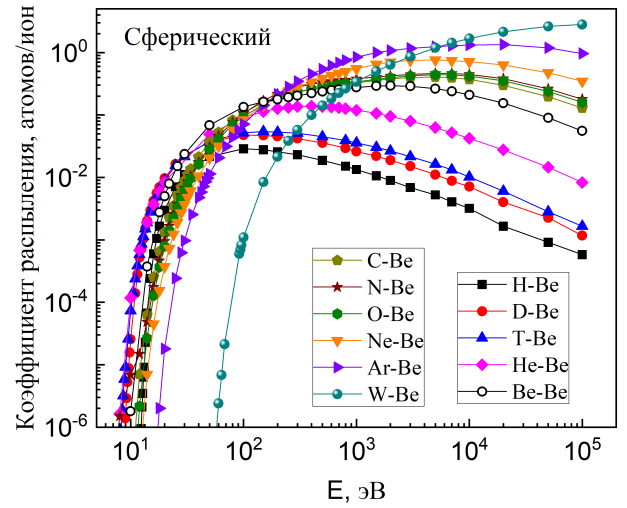
Расчеты коэффициентов распыления вольфрама и бериллия бомбардирующими частицами, рассматриваемыми в этом разделе представлены в работе [10; 31]. В этих работах проводился расчет в приближении ВВС с использованием КгС потенциала. Наши результаты используют более современные представления о потенциале межатомного взаимодействия с использованием DFT потенциалов [103–106].

3.3.1 Коэффициенты распыления Бериллия и Вольфрама примесными частицами

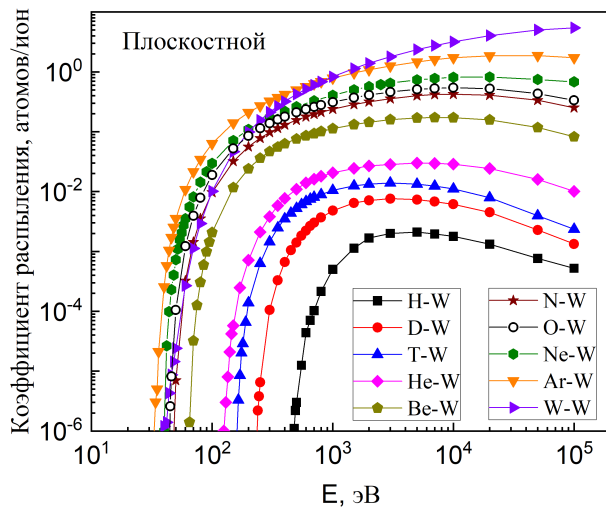
На рисунке 3.19 представлены рассчитанные зависимости коэффициентов распыления от энергии бомбардирующих частиц для мишени из бериллия (а,б) атомами H, D, T, He, C, N, O, Ne, Ar и из вольфрама (в,г) атомами H, D, T,



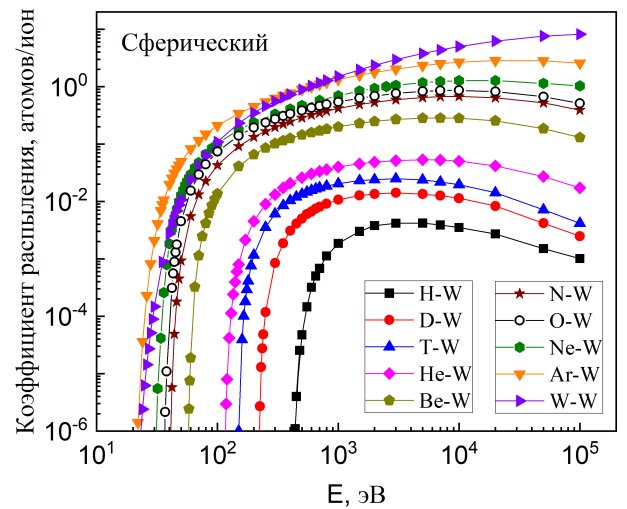
(а)



(б)



(в)



(г)

Рисунок 3.19 — Коэффициенты распыления для мишени из бериллия (а,б) атомами H, D, T, He, C, N, O, Ne, Ar и вольфрама (в,г) атомами H, D, T, He, C, N, O, Ne, Ar, W. Случай распыления под нормальным углом падения. Слева представлены случаи плоскостного барьера (а,в) справа - сферического барьера (б,г).

He, C, N, O, Ne, Ar, W. Рассмотрен случай распыления под нормальным углом падения пучка на мишень. Представлены случаи плоскостного и сферического барьера. Видно, что моделирование с использованием сферического барьера для любых пар элементов дает больший коэффициент распыления на всем диапазоне энергий, чем расчет с использованием плоскостного барьера.

На примере распыления бериллия 3.19 (а,б) видно, что зависимости коэффициентов распыления для случая $M_1 > M_2$ и $M_1 < M_2$ сильно отличаются, где M_1 - масса бомбардирующей частицы, M_2 - масса атома мишени. С изменением массы M_1 меняется и положение порога распыления E_{th} . Особенно это хорошо видно на примере пары W-Be, где из-за высокого значения M_1 для вольфрама, порог распыления бериллия сильно смещен в область больших энергий.

Случаям $M_1 > M_2$ и $M_1 < M_2$ характерна различная физическая модель распыления. При случае распыления легкими частицами тяжелых мишеней ($M_1 < M_2$), доминирует механизм распыления обратно рассеянными частицами. Теория этого случая изложена в работе Фальконе [115]. При распылении тяжелыми частицами мишеней из легких атомов ($M_1 > M_2$), бомбардирующему иону сложнее развернуть свое направление движения на обратное. В распыление основной вклад дают каскады столкновений атомов мишени. Этот случай подробно описывается в работах Зигмунда [24].

Данные по распылению вольфрама на рисунке 3.19 (в,г) соответствует случаю $M_1 < M_2$ (кроме пары W-W). Видно, что при увлечении M_1 растет коэффициент распыления. В отличии от расчетов случая $M_1 > M_2$ (3.19 (а,б)), при распылении более легкими частицами положение порога распыления E_{th} смещается вправо с уменьшением M_1 .

Сравнение рисунков 3.19 (а,б) и 3.19 (в,г) показывает существенность вклада фактора M_1/M_2 на форму зависимости коэффициента распыления от энергии бомбардирующей частицы.

3.3.2 Анализ величины порогов распыления

Отдельный интерес представляет величина энергии, при которой коэффициент распыления Y стремится к нулевому значению, то есть порог распыления E_{th} .

Рассмотрим сначала случай $M_1 < M_2$, то есть случай распыления легкими ионами. Для распыления верхнего слоя мишени, переданная ему энергия Q должна превышать потенциальный барьер. В случае Сферического потенциального барьера величина Q просто должна быть больше энергии сублимации E_{th} . Это возможно при выполнении условия:

$$Q = \gamma E_1 = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_1 > E_s \quad (3.7)$$

Здесь E_1 - максимально возможная энергия обратно рассеянной бомбардирующей частицы.

Для того, чтобы бомбардирующая частица могла распылить атом мишени, ей необходимо развернуться на угол от 90° до 180° . Зависимость энергии частицы после рассеяния E_1 с начальной энергией E_0 при развороте на угол θ определяется формулой 3.1.

Таким образом, энергия частица при повороте на 90° определяется выражением:

$$E_{90^\circ} = \frac{(M_2 - M_1)}{(M_1 + M_2)} E_0 \quad (3.8)$$

А при повороте на 180° :

$$E_{180^\circ} = \frac{(M_2 - M_1)^2}{(M_1 + M_2)^2} E_0 \quad (3.9)$$

Из чего следует, что величина θ для поворота в 90° и 180° равна соответственно:

$$Q_{90^\circ} = \gamma E_{90^\circ} = \gamma(1 - \gamma)^{0.5}, \quad Q_{180^\circ} = \gamma E_{180^\circ} = \gamma(1 - \gamma) \quad (3.10)$$

Тогда для пороговой энергии при повороте на 90° и 180° в случае сферического барьера справедливо условие:

$$E_{th}(90^\circ) > \frac{E_s}{\gamma(1 - \gamma)^{0.5}}, \quad E_{th}(180^\circ) > \frac{E_s}{\gamma(1 - \gamma)} \quad (3.11)$$

Подобные утверждения были сделаны в работе [122].

На рисунке 3.20 видно, что расчет для случая плоскостного барьер и диапазона $M_2/M_1 > 4$ хорошо согласуется с условием разворота на 180° . Для описания данных с использованием сферического барьера больше подходит условие двойного поворота на 90°

В области $M_2 > M_1$ механизм распыления потоком обратно рассеянных ионов не работает, так как масса бомбардирующей частицы больше, чем масса атома мишени, и по формуле 3.1 обратное рассеяние в сторону границы мишень-вакуум невозможно. Вклад в распыление вносят каскадные частицы, которые получают при первом соударении с бомбардирующей частицей энергию $Q = \gamma E_0$, после чего начинают движение вглубь мишени. Для разворота обратно (на $90^\circ - 180^\circ$) ей необходимо совершить несколько соударений (одного соударения недостаточно, так как имеет место соударение частиц равной массы). На рисунке 3.20 видно, что эмпирически подобранная зависимость $E_{th}/E_s = 6/\gamma$ хорошо описывает имеющиеся данные для случая $M_2 < M_1$.

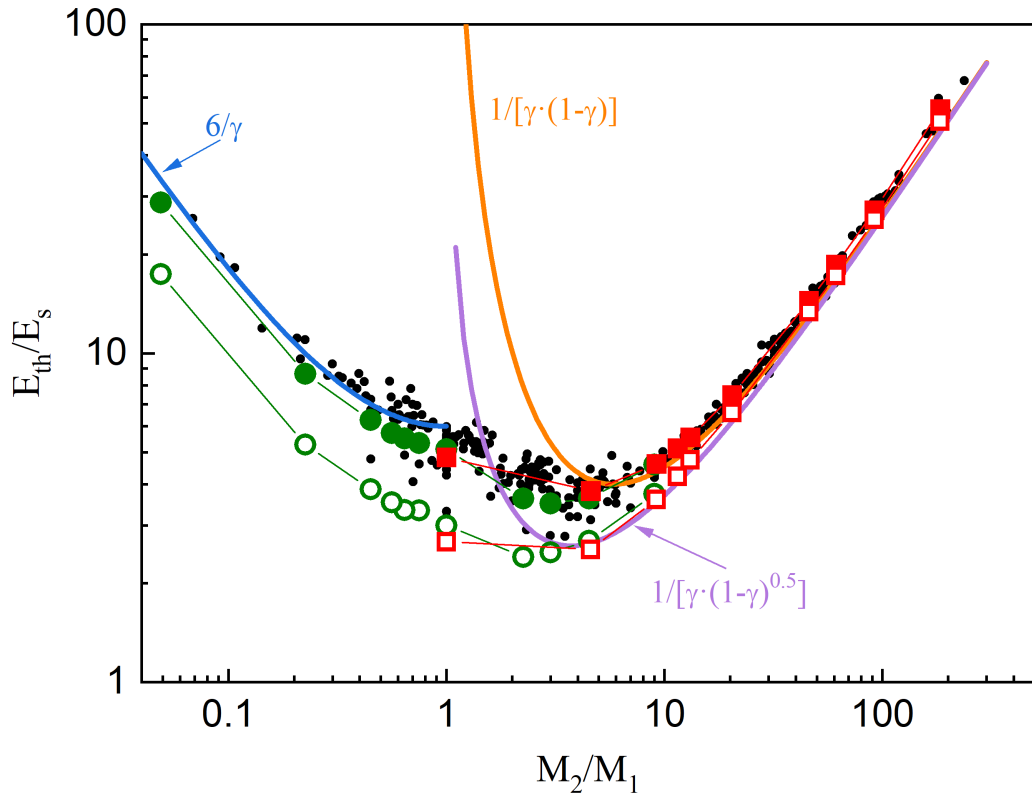
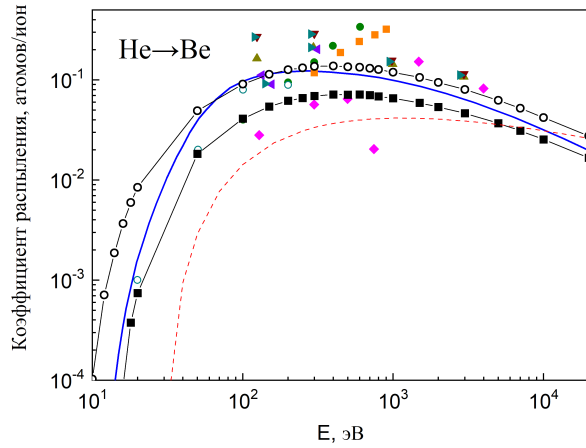


Рисунок 3.20 — Зависимость отношения пороговой энергии E_{th} к энергии сублимации E_s от соотношения массы мишени M_2 к массе налетающей частицы M_1 . Полученные нами значения при распылении Ве отмечены зелеными кружками, при распылении W - квадратами. Пустые точки соответствуют случаю сферического барьера, закрашенные - случаю плоскостного барьера. Данные из работы [10] обозначены маленькими черными точками. Линии аппроксимации описаны в тексте.

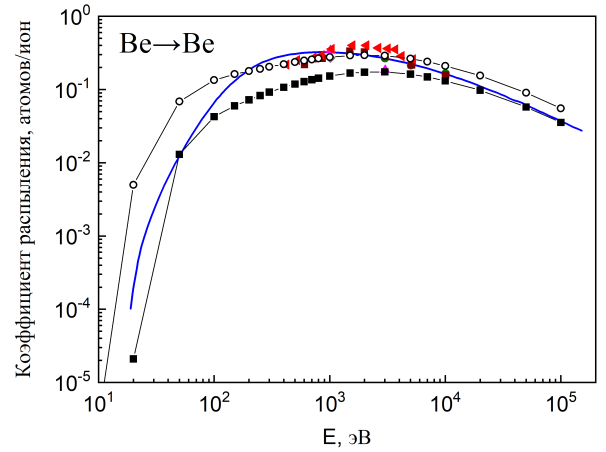
3.3.3 Сравнения полученных коэффициентов распыления Ве и W с данными других авторов

В этом разделе приведено сопоставление полученных зависимостей коэффициентов распыления от энергии бомбардирующих частиц для случая распыления под прямым углом. Случаи распыления бериллия атомами He, Be, O, Ne, Ar приведены на 3.21. Случай распыления вольфрама атомами He, Be, O, Ne, Ar и W приведены на 3.22. Представлены данные для плоскостного (линия с квадратами) и сферического (линия с кружками) типа поверхностного барьера. Синими линиями обозначены расчет из работы Экштайна [31]. Точками отмечены экспериментальные данные из монографии [10]. Красной штриховой линией для случае $M_1 < M_2$ обозначены результаты вычислений с использованием формул 3.2.1 из работы Фальконе [115]. Можно отметить, что для пары He-Be в области энергий ниже 1 кэВ использование формулы 3.2.1 дает заниженный коэффициент распыления. Это связано с тем, что массы Be и He не сильно отличаются. Для случая распыления W формула 3.2.1 неплохо описывает зависимость коэффициента распыления от энергии для диапазона энергий от порога до 3 кэВ, но дает сильно заниженные значения при высоких энергиях.

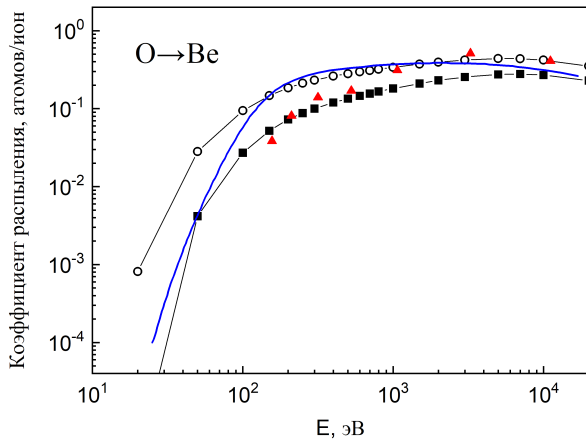
Прослеживается общая тенденция, что экспериментально полученные данные и расчет группы Экштайна располагаются посреди двух предельных случаев, полученных нами. Расчет из работ [10] и наш расчет с плоскостным барьером имеют схожие значения. Для пар He-Be и He-W характерен сильный разброс имеющихся экспериментальных значений коэффициента распыления. В основном экспериментальные данные группируются вдоль полученных значений нашего расчета с использованием плоскостного барьера, характерного для гладких мишеней. Возможно, что подобная группировка экспериментальных данных связана с высоким качеством поверхности изучаемых образцов. Данные эксперимента для Be-Be и Ar-Be лежат ближе к нашему расчету с использованием сферического поверхностного барьера. Для всех экспериментальных данных отсутствуют значения коэффициента распыления в области пороговых энергий. Пороги распыления E_{th} , полученные в работе [10] больше схожи с нашими E_{th} для планарного барьера.



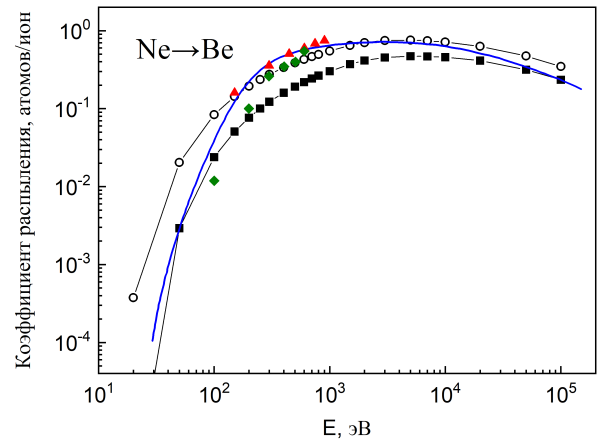
(а)



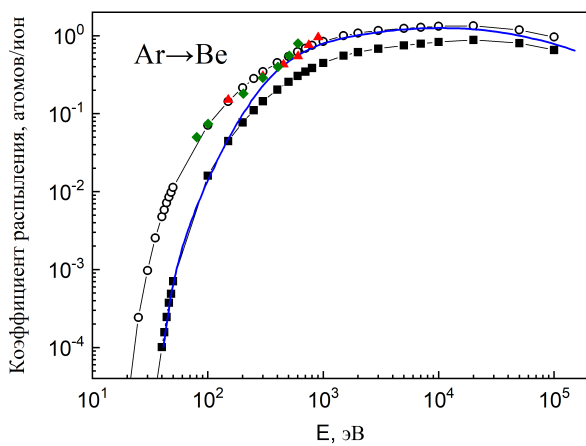
(б)



(в)

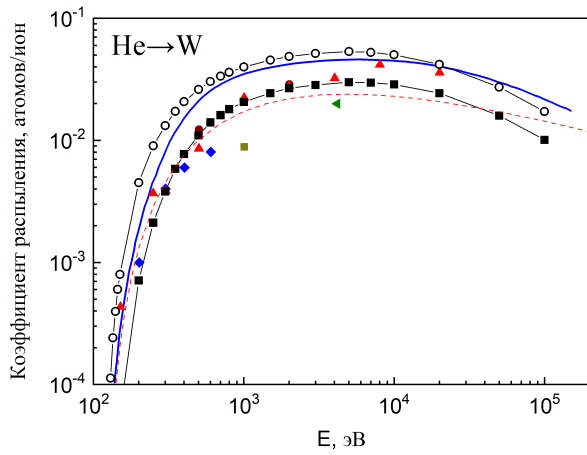


(г)

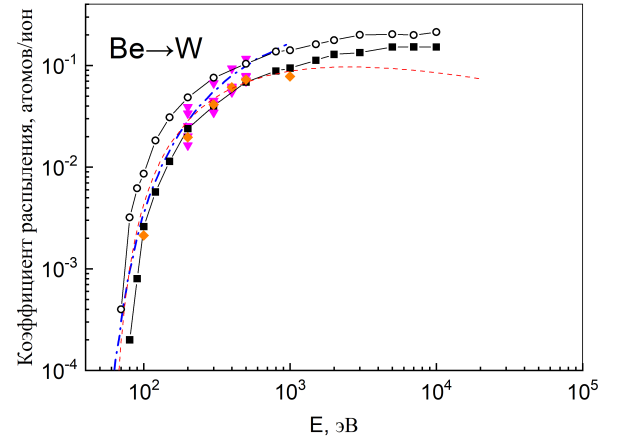


(д)

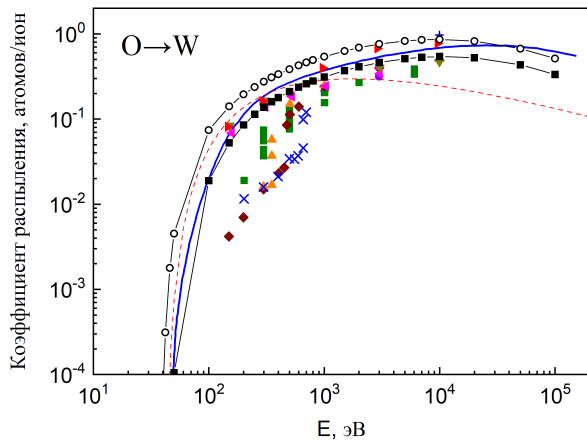
Рисунок 3.21 — Коэффициент распыления Be атомами: а) He, б) Be, в) O, г) Ne, д) Ar в зависимости от энергии пучка. Линия с квадратами - расчет для плоскостного барьера. Линия с кружками - расчет для сферического барьера. Синяя линия - расчет из работы [31]. Точками отмечены экспериментальные данные из монографии [10]. Красная штриховая линия - формула 3.2.1 из работы [115]



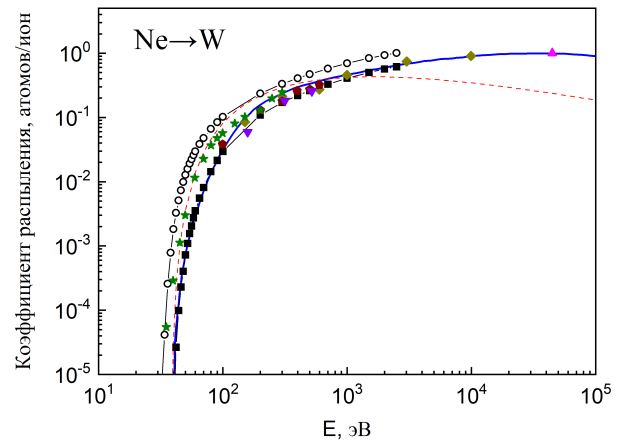
(а)



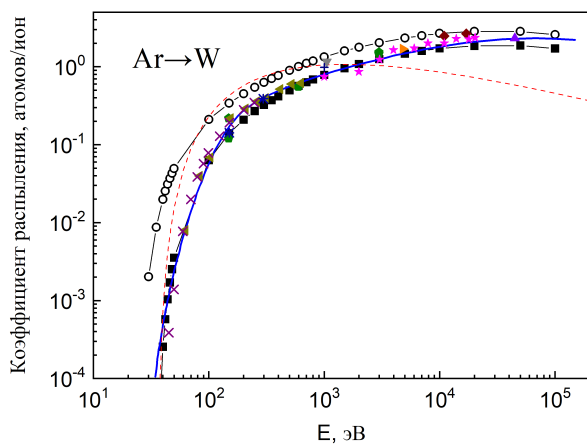
(б)



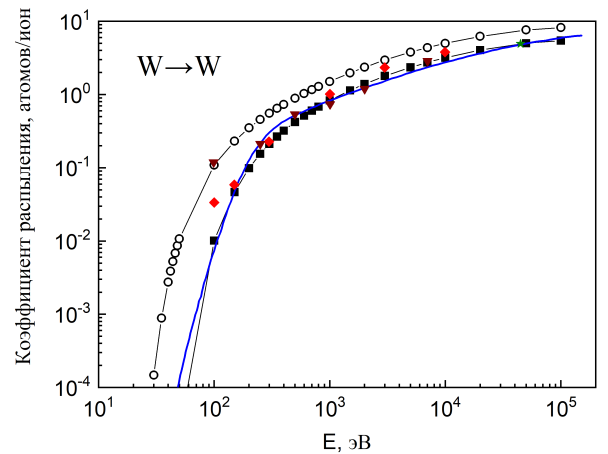
(в)



(г)



(д)



(е)

Рисунок 3.22 — Коэффициент распыления вольфрама атомами: а) He, б) Be, в) O, г) Ne, д) Ar е) W. Линия с квадратами - расчет для плоскостного барьера, с кружками - для сферического барьера. Синяя линия - расчет из [31]. Точки - экспериментальные данные из [10]. Красная штриховая линия - формула 3.2.1 из работы [115]. Для пары Be-W ромбами и треугольниками обозначены результаты MD расчетов [22; 123], штрих-пунктир расчет SDTrimSP [124]

Для случая Be-W экспериментальные данные отсутствуют. Имеется неплохое согласие с расчетами методом молекулярной динамики [22; 123], а также с результатами расчета программой SDTrimSP [124].

3.3.4 Средняя энергия распыленных частиц

На рисунке 3.23 представлены результаты расчетов зависимостей средней энергии распыленных частиц $E_{sp.aver}$ от энергии бомбардирующих частиц. Рассмотрены случаи распыления бериллия атомами: He, Be, O, Ne, Ar, а также распыления вольфрама атомами: He, Be, O, Ne, Ar, W. Расчеты проводились с плоскостным и сферическим потенциальными барьерами. Видно, что с ростом энергии бомбардирующих частиц, растет и величина $E_{sp.aver}$. При энергиях распыления свыше 10 кэВ рост $E_{sp.aver}$ замедляется. Также величина $E_{sp.aver}$ растет с массой распыляющих частиц.

Для плоскостного поверхностного барьера, как и в изложенном выше случае распыления вольфрама и бериллия изотопами водорода, $E_{sp.aver}$ выше, чем для сферического барьера, так как некоторая часть частиц низкой энергии не считаются распыленными (из-за более строго условия на распыления 2.5), и не уменьшают величину $E_{sp.aver}$. При энергиях бомбардирующих частиц выше 1 кэВ отношение $E_{sp.aver}$ для плоскостного и сферического барьера лежат в диапазоне 1.53-1.61 для бериллиевой мишени и 1.45-1.49 для вольфрамовой мишени. Это отличие возникает из за отсутствия угловой зависимости в виде $\cos^2 \theta$ у условия отбора распыленных частиц (2.5) для сферического поверхностного барьера. Из этого можно сделать вывод, что среднее значение $E_{sp.aver}$ усредненное с учетом углового распределения распыленных частиц равно 0.66-0.71. Это дает оценку среднего угла вылета распыленной частицы $\theta_{sp.out} = 33^\circ - 36^\circ$.

3.3.5 Угловые распределения распыленных частиц

Перейдем к описанию угловых характеристик распыленных частиц для случая распыления вольфрама и бериллия примесными частицами реактора.

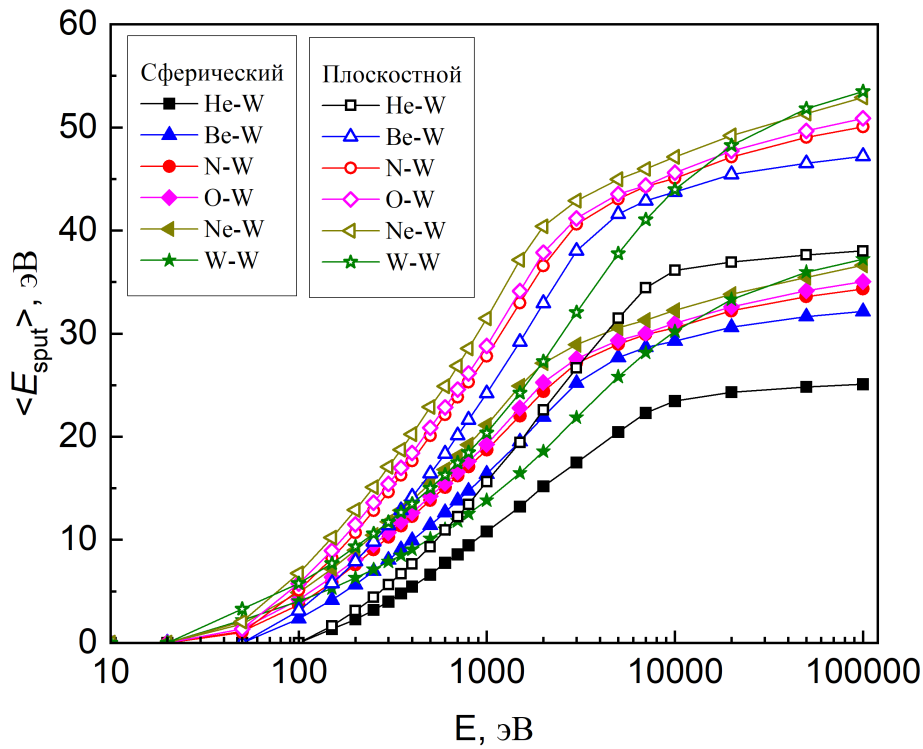
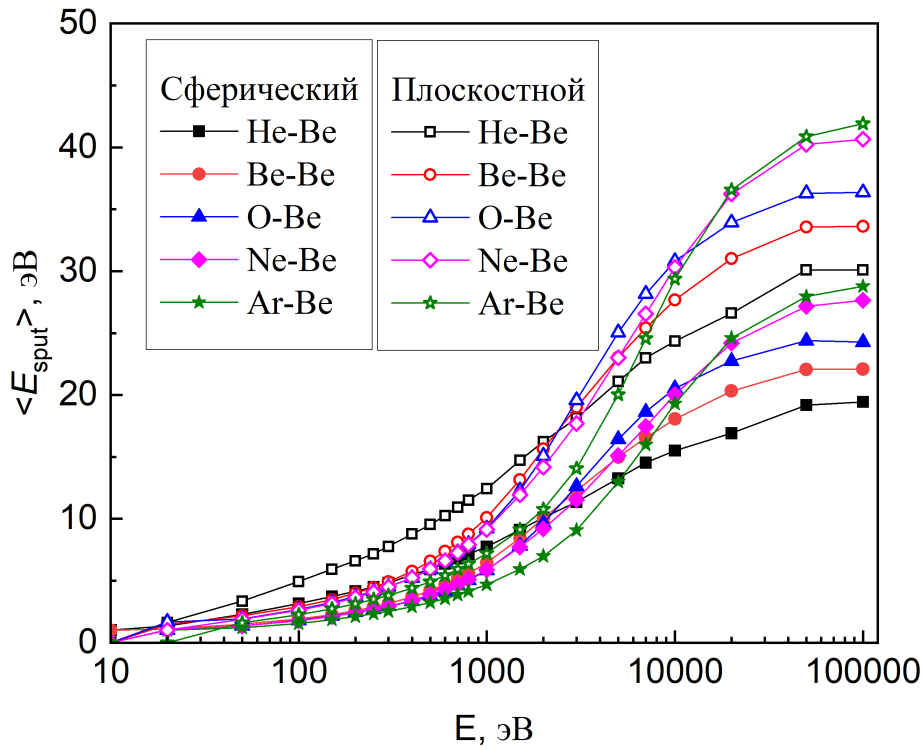


Рисунок 3.23 — Зависимость средних энергий распыленных частиц от энергии бомбардирующей частицы примеси токамака. График сверху — распыление Be, снизу — W. Сплошные точки - случай плоскостного поверхностного барьера, открытые точки - сферического барьера.

Как и в случае описания угловых характеристик при распылении изотопами водорода, воспользуемся нормированием угловых зависимостей на значения максимума. Результаты вычислений для сферического поверхностного потенциала представлены на рисунке 3.24, для случая плоскостного потенциала на рисунке 3.25.

В случае сферического барьера при энергиях пучка выше 1 кэВ угловые зависимости распыленных частиц носят универсальный характер. Это характерно для всех исследуемых пар ион – поверхность.

Из рисунка 3.24 видно, что для сферического барьера максимум угловой зависимости расположен при угле вылета $\theta_{out} = 35^\circ$. Некоторые отличия наблюдаются лишь для энергий пучка вблизи порога распыления. Сравнение случаев He-Be (а) и He-W (б) демонстрируют универсальность угловой зависимости от массы атома мишени, а сравнение случаев He-W (б) и W-W (в) - от массы бомбардирующего иона.

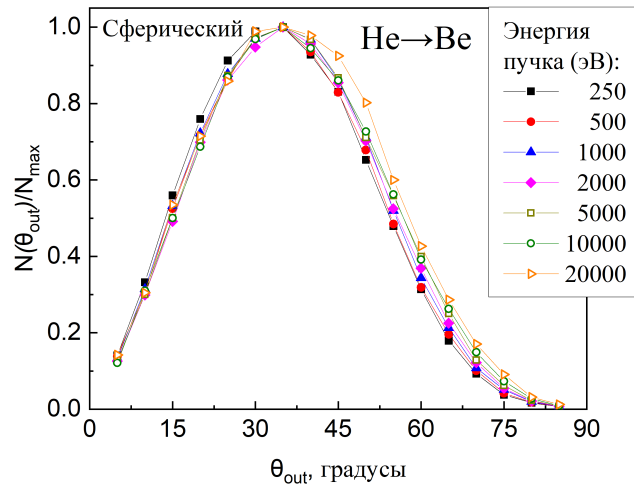
Так как для сферического потенциального поверхностного барьера отсутствует какая-либо зависимость от угла распыляемой частицы, рисунок 3.24 отражает распределение по углу и для частиц до выхода из твердого тела.

Для случая распыления W-W со сферическим барьером 3.24 (в), при энергиях бомбардировки вблизи пороговых величин (50-100 эВ), максимум угловой зависимости смещается к углу $\theta_{out} = 60^\circ - 75^\circ$, из чего можно сделать вывод, что основной вклад в распыление при таких малых энергиях вносят двух-трехкратные столкновения с суммарным углом отклонения бомбардирующей частицы в $105^\circ - 120^\circ$.

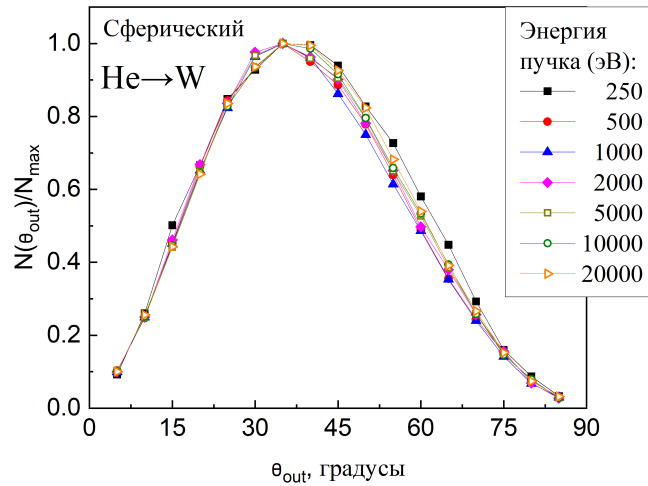
В случае плоскостного поверхностного барьера (рисунок 3.25), угловая зависимость уже не является универсальной. Это связано с угловой зависимостью в виде $\cos^2 \theta_{out}$ в условии отбора распыленных частиц плоскостного барьера 2.5. С увеличением энергии распыляющего пучка, угловое распределение становится более схожим с формой, характерной для случая сферического барьера.

В случае распыления W-W вклад одноактного рассеяния отсутствует, так как при равных массах частиц рассеяние на угол больше 90° невозможно.

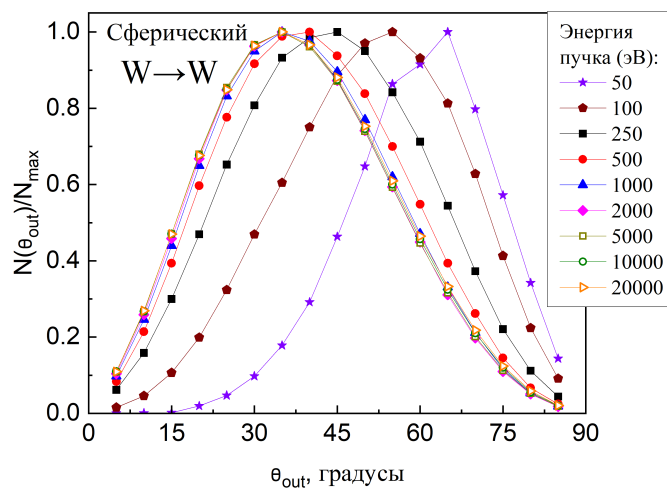
В связи с угловой зависимостью в виде $\cos^2 \theta_{out}$ в условии отбора распыленных частиц для случая плоскостного поверхностного барьера 2.5 для энергий вблизи порога распыления происходит смещение спектра распыленных частиц в область вылета под нормальным углом к поверхности. Значение θ_{out} смещается ближе к 70° . Таким образом распыление частицы происходит по-



(а)

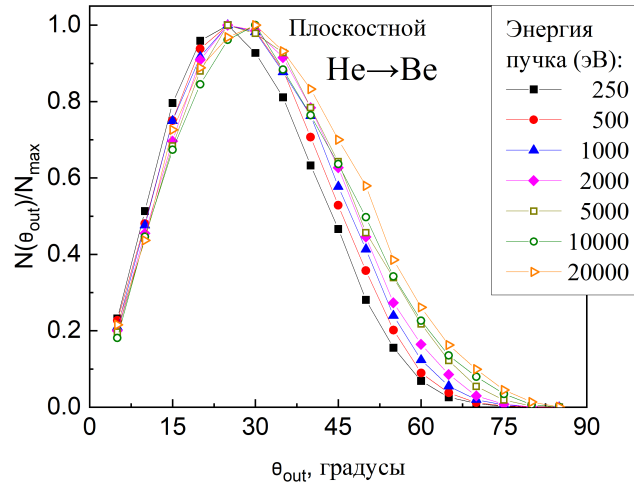


(б)

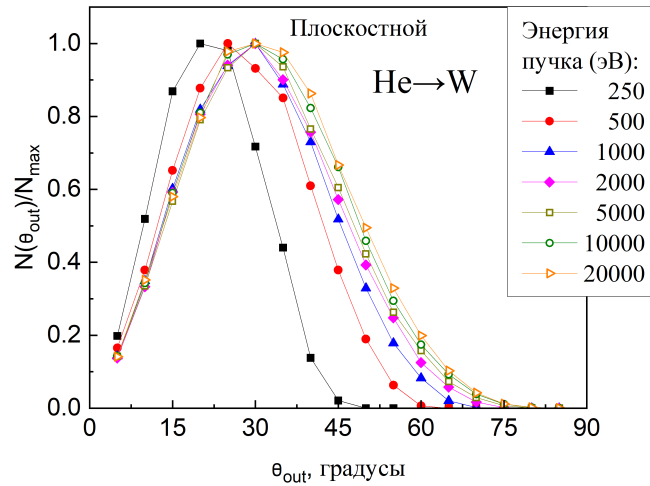


(в)

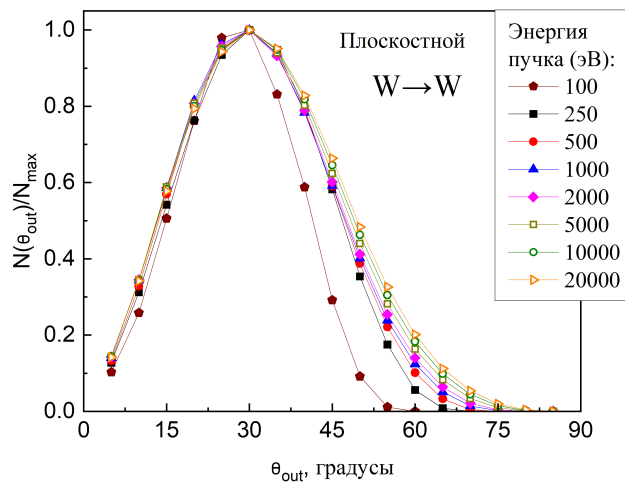
Рисунок 3.24 — Угловые распределения распыленных частиц для сферического поверхностного потенциального барьера, нормированные на максимальное значение: а) He-Be; б) He-W; в) W-W.



(а)



(б)



(в)

Рисунок 3.25 — Угловые распределения распыленных частиц для плоскостного поверхностного потенциального барьера, нормированные на максимальное значение: а) He-Be; б) He-W; в) W-W.

сле многократного рассеяния с набором большого суммарного угла разворота траектории на 160° , что, в свою очередь, приводит к большой потере энергии бомбардирующей частицы.

Разница в суммарном угле разворота траектории распыленной частицы при многократных соударениях приводит к изменению отношения пороговой энергии к энергии сублимации E_{th}/E_s для случая сферического и плоскостного барьера. Это наглядно видно на рисунке 3.20.

Рассмотрим случай трехкратного рассеяния для пары W-W ($M_2/M_1 = 1$) для пояснения. При однократном соударении и отклонении на угол θ энергия частицы становится равной $E_2 = E_0 \cos^2(\theta)$, в случае трех соударений и повороте на тот же угол θ , энергия частиц становится равной $E_4 = E_0 \cos^6(\theta/3)$.

При энергиях распыления вблизи порога для случая сферического барьера достаточный суммарный угол отклонения $\theta_\Sigma = 120^\circ$, и тогда максимально возможная энергия частицы распыления после трех соударений равна $E_4 = E_0 \cos^6(\theta_\Sigma/3) = E_0 \cdot 0.202$. Для случая плоскостного барьера $\theta_\Sigma = 160^\circ$, $E_4 = E_0 \cdot 0.045$, то есть потеря энергии в этом случае почти в 4 раза больше. Этим объясняется разница в отношении E_{th}/E_s для различных типов барьера.

3.3.6 Выводы

Проведено моделирование коэффициентов распыления бериллия и вольфрама атомами He, Be, C, N, O, Ne, Ar, W в диапазоне энергий бомбардирующих частиц 10 эВ - 100 кэВ. Подобные распыляющие частицы являются характерными для реакторов типа токамак. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными и с расчетами других групп. Через использование различных типов поверхностных потенциальных барьеров выявлено сильное влияние типа поверхности на величину коэффициента распыления. Результаты для плоскостного (идеально гладкая поверхность) и для сферического (поверхность, состоящая из остриев атомного размера) поверхностного барьера определяют два предельных случая, которые задают некоторый диапазон величин для коэффициентов распыления. Имеющиеся экспериментальные данные лежат в этом “коридоре” значений в соответствии с шероховатостью поверхности распыляемой мишени. Полученные данные необ-

ходимы для более точной оценки распыления примесями первой стенки и диверторных пластин токамака ИТЭР.

Как и в вышеизложенных параграфах 3.1 и 3.2, помимо самих коэффициентов распыления были получены угловые и энергетические спектры распыленных частиц. Эти данные помогут учесть вклад примесных частиц для точных расчетов количества поступления примесей в плазму ректора.

Набор исследуемых пар элементов позволяет рассмотреть два случая распыления: случай, когда масса распыляющего атома больше массы атома мишени ($M_1 > M_2$) и обратный случай, когда масса распыляющего атома меньше ($M_1 < M_2$). Видно, что для этих двух случаев характерны различные зависимости коэффициентов распыления от величины энергии распыляющего пучка. Для рассчитанных случаев $M_1 > M_2$ и $M_1 < M_2$ характерны и различные зависимости порога распыления в зависимости от массы распыляющей частицы M_1 .

3.4 Моделирование процесса отражения частиц при бомбардировке бериллия и вольфрама различными атомами

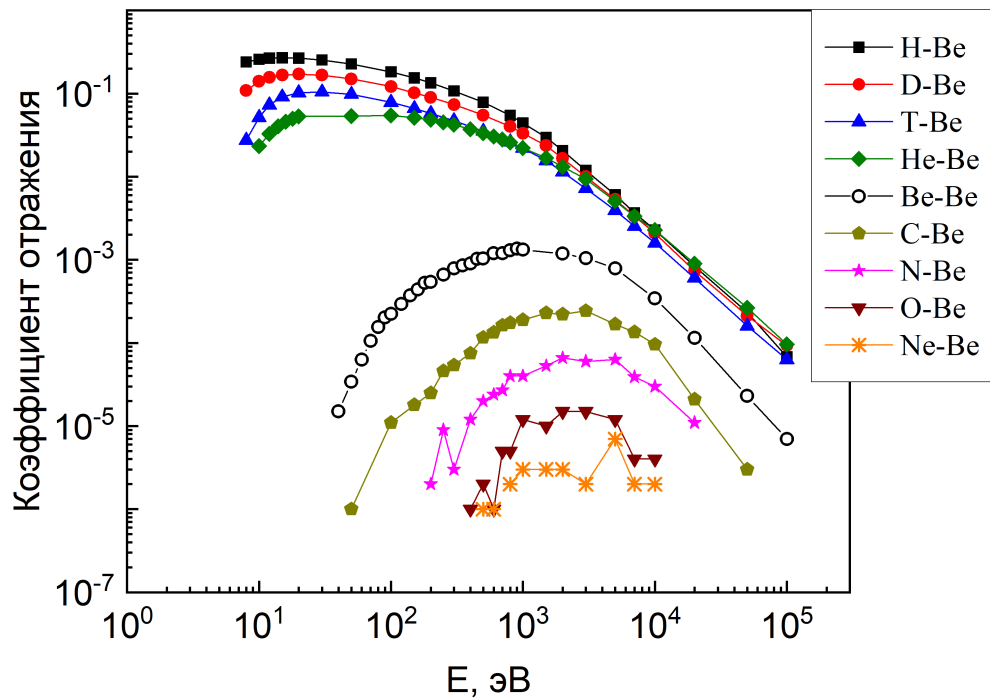
В этом разделе изложены результаты расчетов коэффициентов отражения бомбардирующих частиц для мишеней из Be и W. Рассмотренный диапазон энергий налетающих атомов составляет 10 эВ - 100 кэВ. В качестве налетающих частиц были рассмотрены: H, D, T, He, Be, C, N, O, Ne, Ar, W. Основные результаты данного исследования опубликованы в работах [А6-А7]. Выбор рассматриваемых наборов мишеней и бомбардирующих частиц, как и в случае распыления, обусловлен интересом в области УТС. Be и W - характерные материалы первой стенки современных термоядерных реакторов, изотопы водорода - используемое топливо для осуществления термоядерной реакции, He - продукт этой реакции, Be, C, N, O, Ne, Ar, W - возможные примеси в плазме реакторов.

3.4.1 Коэффициенты отражения от Бериллия и Вольфрама

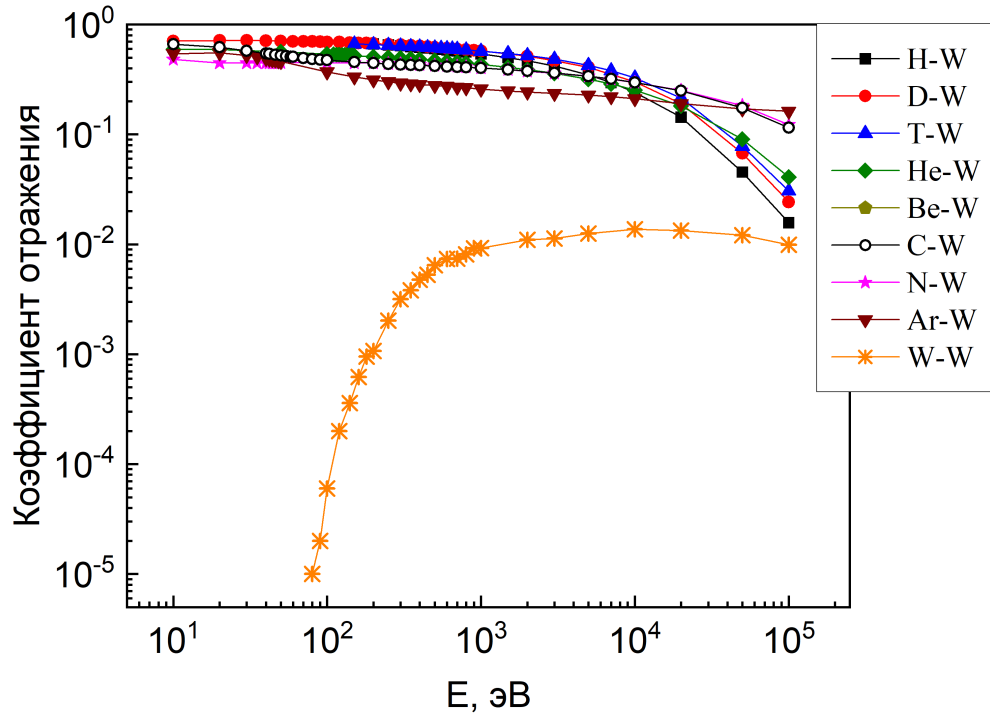
На рисунке 3.26 (а) представлены результаты моделирования коэффициентов отражения ионов H, D, T, He, Be, C, N, O, Ne при рассеянии на бериллиевой мишени при энергиях бомбардирующих частиц 10 эВ - 100 кэВ.

Можно выделить группировку данных для случаев $M_1 < M_2$ $M_1 > M_2$, где M_1 - масса бомбардирующего иона, M_2 - масса атома мишени. Подобное разделение весьма ожидаемо, ведь для $M_1 > M_2$ однократное рассеяние и с дальнейшим отражением невозможно, так как частица за одно столкновение не способна развернуться на угол больше 90° . Отражение возможно только с помощью многократных столкновений. С ростом величины M_1 происходит уменьшение коэффициента отражения.

На рисунке 3.26 (б) представлены результаты моделирования коэффициентов отражения ионов H, D, T, He, Be, C, N, Ar, W при рассеянии на вольфрамовой мишени при энергиях бомбардирующих частиц 10 эВ - 100 кэВ. Для рассматриваемого набора распыляющих элементов только для W-W условие $M_1 < M_2$ не выполняется. Видно, что значения коэффициента распыления для W-W резко падают, по сравнению с остальными случаями. Это также



(a)



(б)

Рисунок 3.26 — Коэффициенты отражения частиц от мишени из бериллия (а) и из вольфрама (б) в зависимости от энергии бомбардирующих частиц. Для случая Be-Be и W-W приведены расчеты с использованием плоскостного потенциального барьера

связано с фактором запрета однократного рассеяния на угол больше 90° при $M_1 = M_2$.

Интерпретация результатов для случая рассеяния одинаковых частиц нуждается в пояснении. На рисунке 3.26 для случаев Be-Be и W-W представленные коэффициенты учитывают только отраженные налетающие частицы. В эксперименте для подобного случая невозможно отличить распыленную частицу от отраженной, однако, такая опция имеется в численном моделировании.

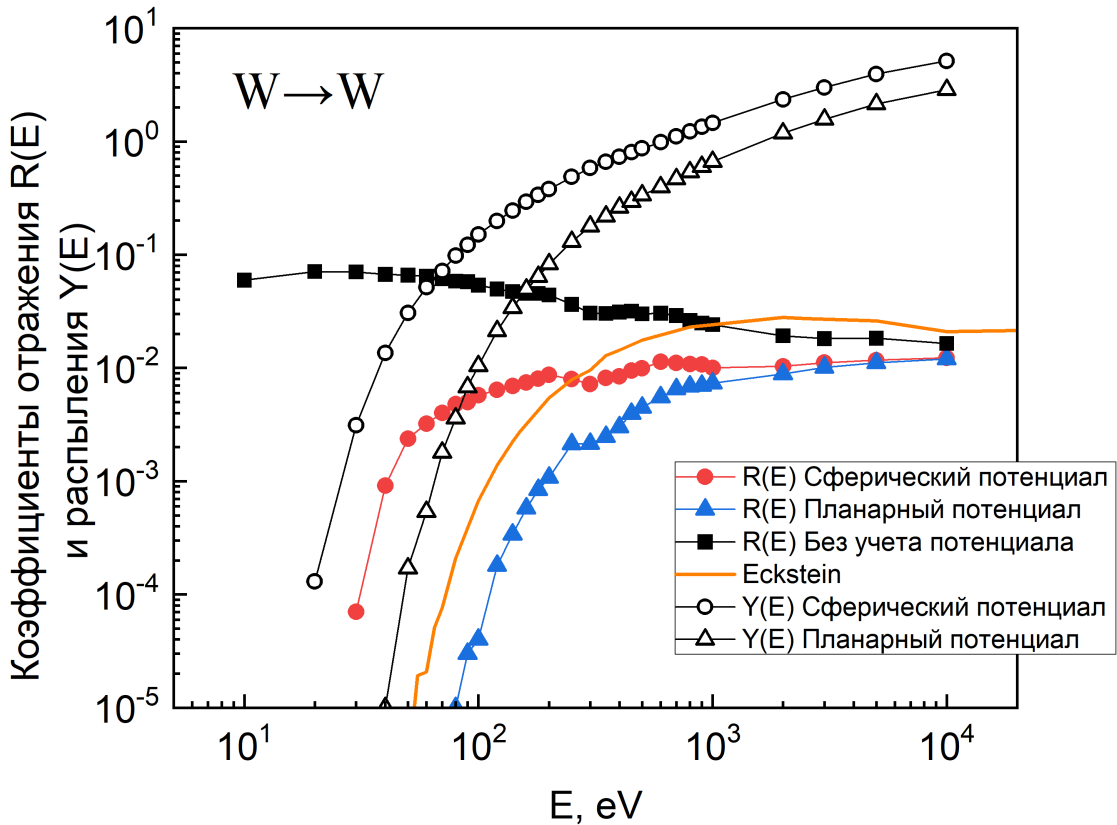


Рисунок 3.27 — Зависимости коэффициентов отражения $R(E)$ и распыления $Y(E)$ от энергии бомбардирующих частиц для системы W-W. $Y(E)$ отображены открытыми кружками для случая сферического поверхностного барьера, открытыми треугольниками для случая плоскостного. $R(E)$ отображены заполненными кружками для сферического поверхностного барьера, заполненными треугольниками для случая плоскостного. Квадратами отображены результаты вычисления $R(E)$ без учета барьера. Линией показан расчет из работы [125] для случая плоскостного барьера

На рисунке 3.27 представлены результаты вычисления коэффициентов распыления и отражения для системы W-W. В этой системе в потенциале взаимодействия имеется притягивающая яма, вследствие чего возникает

потенциальный барьер у поверхности. Необходимо учитывать ускорение подлетающей к мишени бомбардирующей частицы в этом барьере. Торможение отраженной частицы в поверхностном барьере при ее выходе из границы твердого тела учитывается через 2.5 и 2.6 для случая планарного и сферического потенциалов соответственно.

Из рисунка 3.27 видно насколько существенно влияние наличия поверхностного барьера на зависимость коэффициента отражения от энергии налетающей частицы. В особенности в области низких энергий, где без учета поверхностного потенциала исчезает пороговая зависимость. В сравнении с коэффициентом распыления, в случае W-W коэффициент отражения имеет примерно в 100 раз меньшие значения, хотя расположение порогов примерно совпадают. Полученные нами коэффициенты отражения для пары W-W с учетом плоскостного поверхностного барьера удовлетворительно согласуются с результатами, полученными в работе Экштайна [125].

Для случая пары H-W также использовался потенциал взаимодействия с ямой глубиной 4.6 эВ. Ускорение при подлете и замедление при вылете из мишени осуществлялось путем ускорения и замедления энергией 4.6 эВ вместо энергии сублимации. На рисунке 3.28 представлены результаты вычисления коэффициента отражения $R(E)$ от энергии бомбардирующих частиц для системы H-W. Представлено сравнение двух наших моделей с использованием различных данных по неупругим потерям на электронах. В одном случае тормозные способности брались из пакета SRIM, в другом случае учитывалась поправка на искривление траектории из работы [113]. На графике 3.28 также продемонстрировано влияние учета тормозного барьера вблизи границы мишени на значения $R(E)$. Видно, что учет поверхностного барьера сильно меняет внешний вид кривых вблизи диапазона малых энергий. Полученные значения $R(E)$ группой Экштайна в работе [50] согласуются с нашим расчетом без учета поверхностного барьера с использованием неупругих потерь с коррекцией на многократные соударения.

Значения коэффициента отражения $R(E)$ полученные в работе [126] ниже на 30%, чем в [50]. Причиной этого является использование в [126] тормозных способностей из базы данных SRIM. Повторенный нами расчет с теми же тормозными потерями на электронах совпадает с результатами из работы [126]. В работе [113] было продемонстрировано, что данные по электронным тормозным способностям из базы SRIM представлены на единицу длины проективного

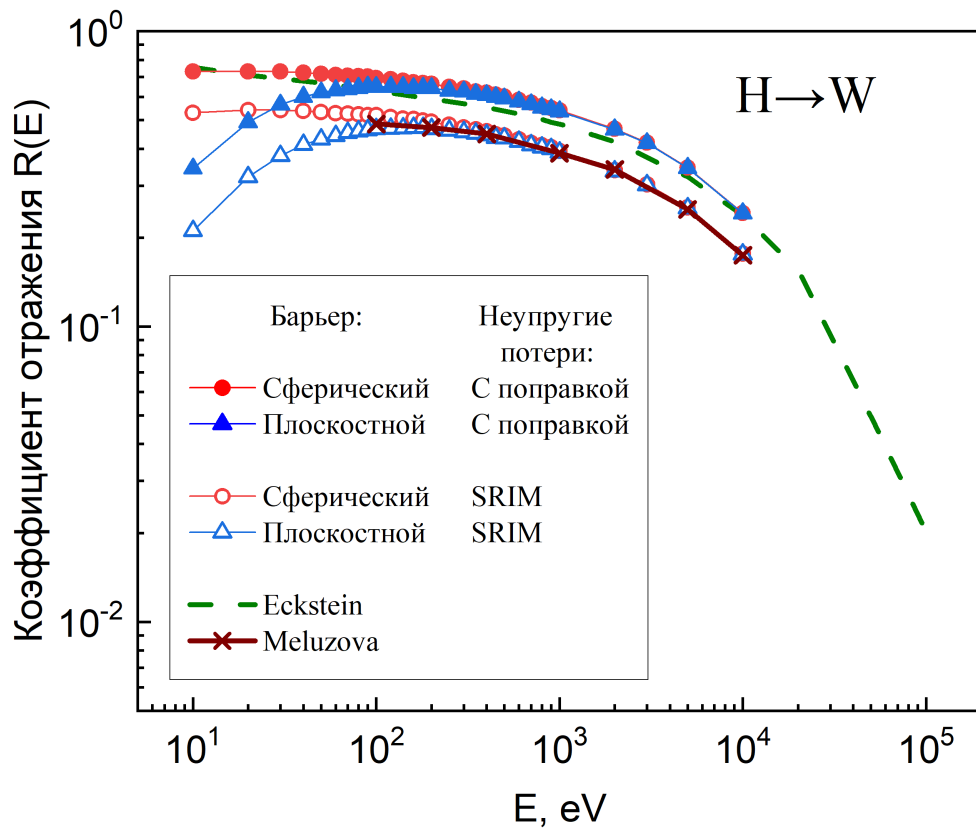


Рисунок 3.28 — Зависимость коэффициента отражения $R(E)$ от энергии бомбардирующей частицы для системы H-W. Приведено сравнение двух наших моделей с различными используемыми неупругими потерями: данные пакета SRIM - открытые точки; расчет с корректировкой на многократность соударений [113] - сплошные точки; кружки - сферический барьер; треугольники - плоскостной барьер; пунктирная кривая - расчет Экштайна из работы [50]; кресты - расчет из работы [126].

пробега, а при энергиях соударения менее 10 кэВ для корректного их использования необходимо вносить поправку на искривление траектории в процессе движения частиц. Величины этих электронных тормозных способностей изображены на графике 3.29.

Модифицированные данные для диапазона энергий ниже 17 кэВ хорошо описываются зависимостью $dE/dx = 1.489 \cdot E^{0.722}$, где неупругие потери dE/dx измеряются в единицах эВ/Å, а энергия движущейся частицы E в кэВ. Как видно из 3.28, используемая модель электронных тормозных способностей значительно влияет на значения коэффициентов отражения частиц.

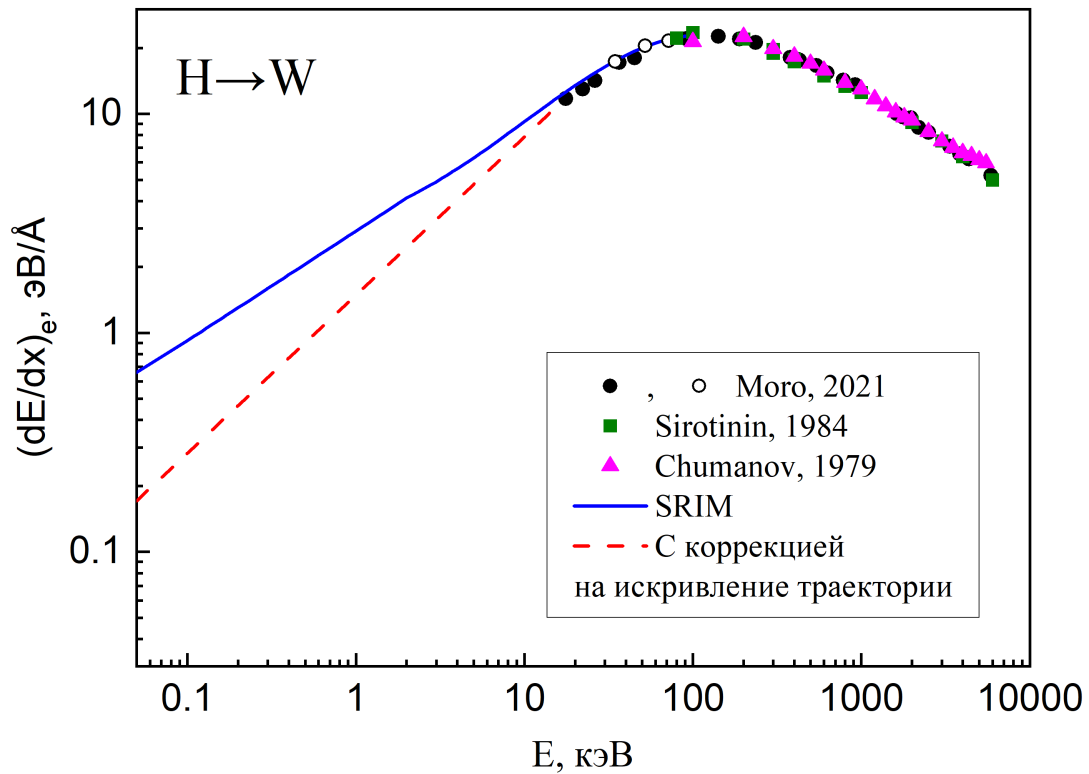


Рисунок 3.29 — Зависимость электронных тормозных потерь $(dE/dx)_e$ от энергии соударения E для системы H-W. Точки - экспериментальные данные из работ [127–129]. Сплошная линия - данные из пакета SRIM. Пунктирная линия - модифицированные данные из [113]

3.4.2 Сравнения полученных коэффициентов отражения с данными других авторов

Ниже представлены сравнения рассчитанных нами коэффициентов отражения с имеющимися экспериментальными данными, а также с результатами компьютерного моделирования других коллективов. Рассмотрены пары D-W, He-W, Ar-W.

На рисунке 3.30 видно, что наш расчет для случая D-W расположен чуть выше эксперимента и почти совпадает с результатами расчета пакетами SDTrimSP, MARLOWE и PTr (для гладкой мишени). Также наблюдается некоторое согласие с результатами MD моделирования пакетом PARCAS. Из рисунка 3.31 следует, что результаты нашего расчета для пары Ar-W лежат вблизи результатов моделирования в работах [50; 130; 131], однако располагаются чуть ниже.

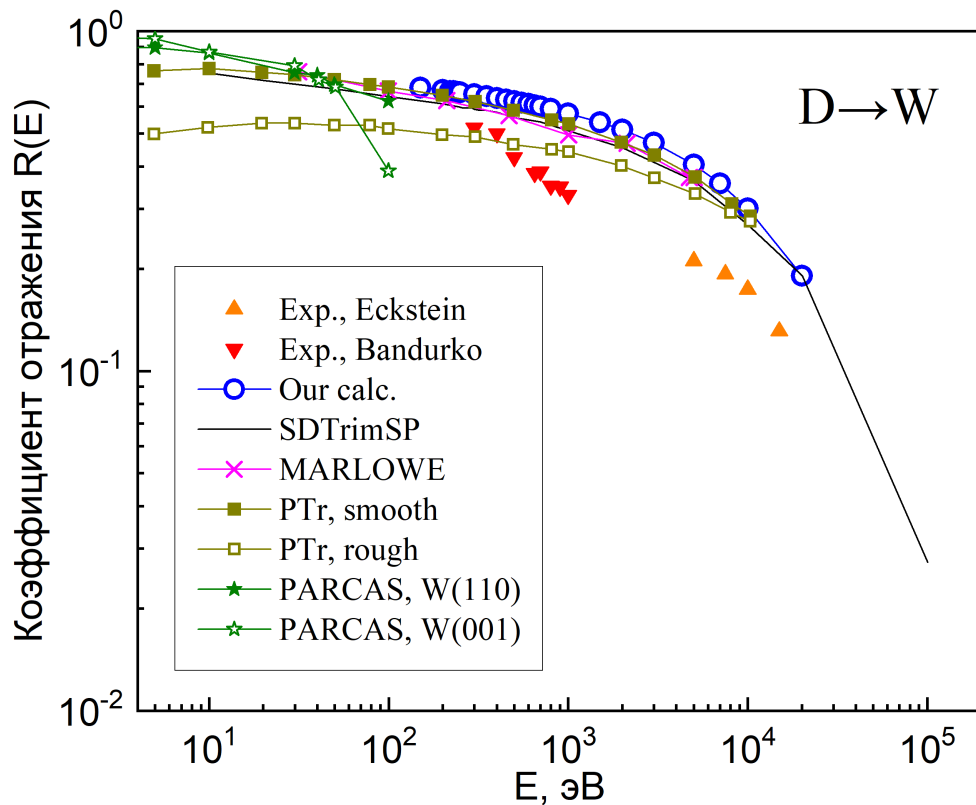


Рисунок 3.30 — Зависимости коэффициентов отражения от энергии налетающих частиц для системы D-W. Экспериментальные данные: треугольники вверх - данные из [132]; треугольники вниз - [133]. Синие пустые кружки - наш расчет. Линия - расчет SDTrimSP из работы [50]. Крестики - расчет программы MARLOWE [132]. Квадратики - результаты расчета программой PTr [62]: заполненные - гладкая поверхность, пустые - шероховатая поверхность. Звезды - расчет программой PARCAS [60]: заполненные - кристалл W(110), пустые - кристалл W(001);

На рисунках 3.32 и 3.33 представлены случаи отражения гелия от аморфной и кристаллической мишени. Из рисунка 3.33 видно, что наш расчет для аморфной мишени вольфрама лежит между экспериментально полученными значениями из работ [132; 134]. Также можно сказать, что наши результаты неплохо согласуются с результатами моделирования программами SDTrimSP, ACAT, MARLOWE (аморфная мишень) и PTr (для гладкой поверхности). Результаты расчета программы TAVERN сильно выделяются среди всех остальных результатов.

На рисунке 3.33 представлены данные для случая кристаллических мишеней. В этом случае коэффициенты отражения намного ниже. Это связано с тем, что при определенной, фиксированной ориентации кристалла налетающие

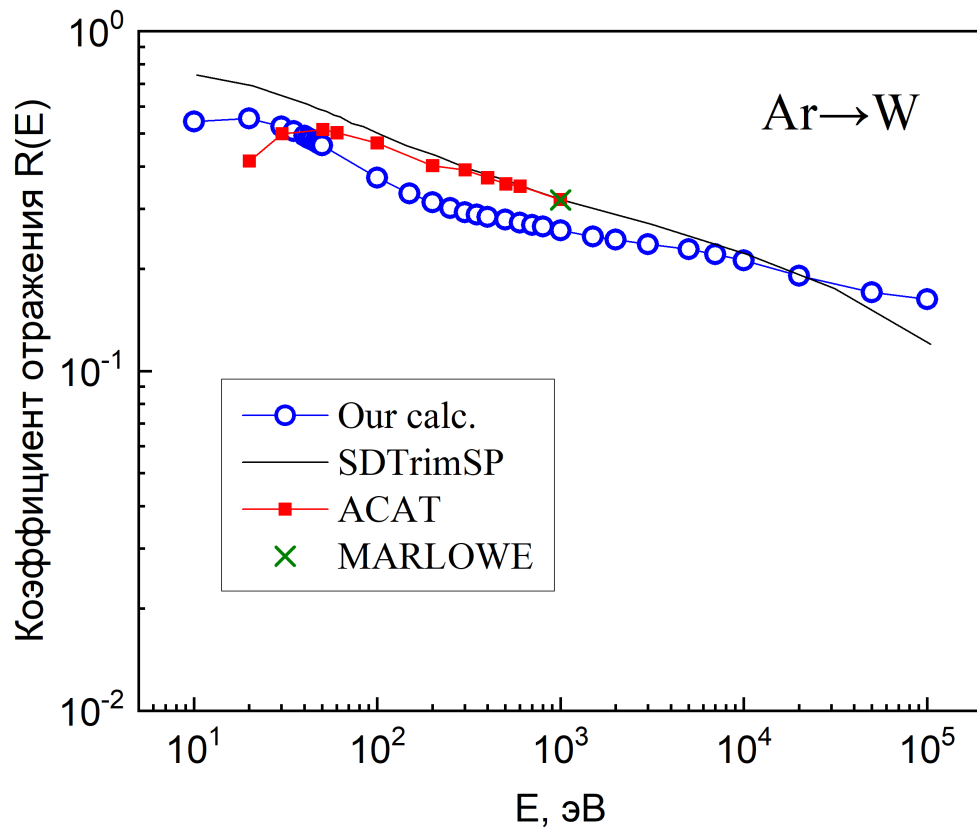


Рисунок 3.31 — Зависимости коэффициентов отражения от энергии налетающих частиц для системы Ar-W. Синие пустые кружки - наш расчет. Линия - расчет программой SDTrimSP из работы Экштайна [50]. Квадраты - расчет программой ACAT [130]. Звезда - расчет программой MARLOWE [131].

частицы проходят глубже в мишень вследствие эффекта каналирования. На рисунке 3.33 наблюдается удовлетворительное согласие с экспериментальными данными из работы [135]. Данные расчетов различными пакетами программ практически совпадают.

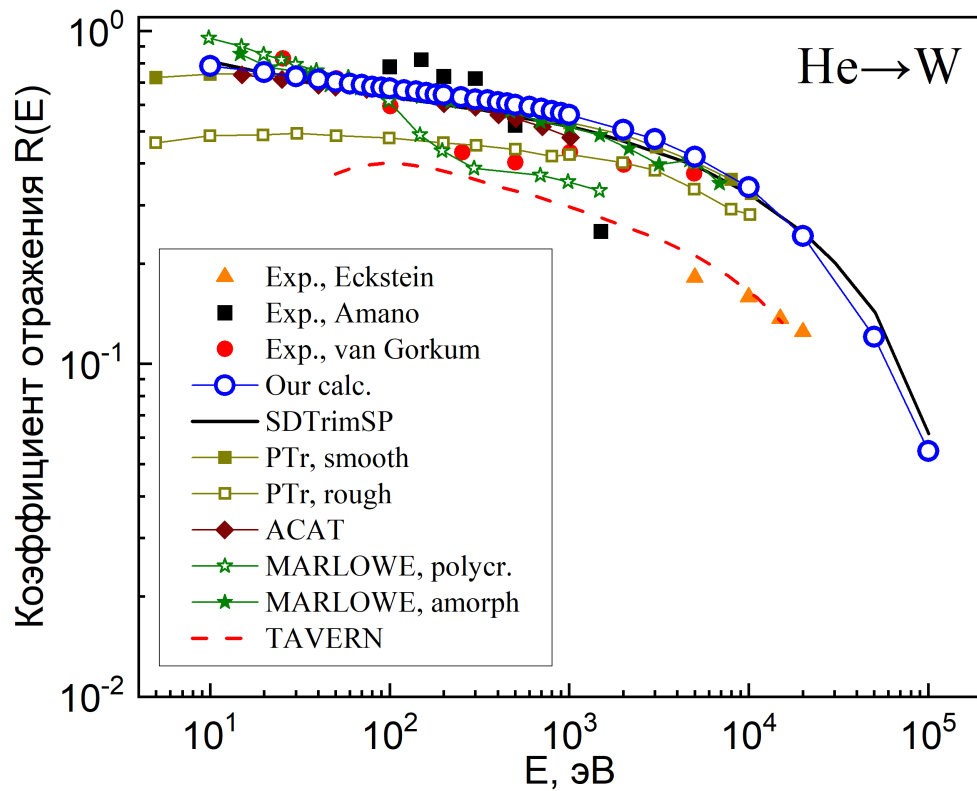


Рисунок 3.32 — Зависимости коэффициентов отражения от энергии налетающих частиц для системы He-W. Треугольники вверх Экштайн [132], квадраты - Аmano [134], кружки - Ван Горкум [135]. Синие пустые кружки - наш расчет для аморфной мишени. Линия - расчет программой SDTrimSP из работы Экштайн [50]. Квадратики - расчет программой PTr [62]: заполненные - гладкая поверхность, пустые - шероховатая поверхность. Ромбы - расчет программой ACAT [130]. Звездочки - расчет программой MARLOWE [136]: заполненные - аморфный W, пустые - поликристаллический W. Штриховая линия - расчет программой TAVERN [137].

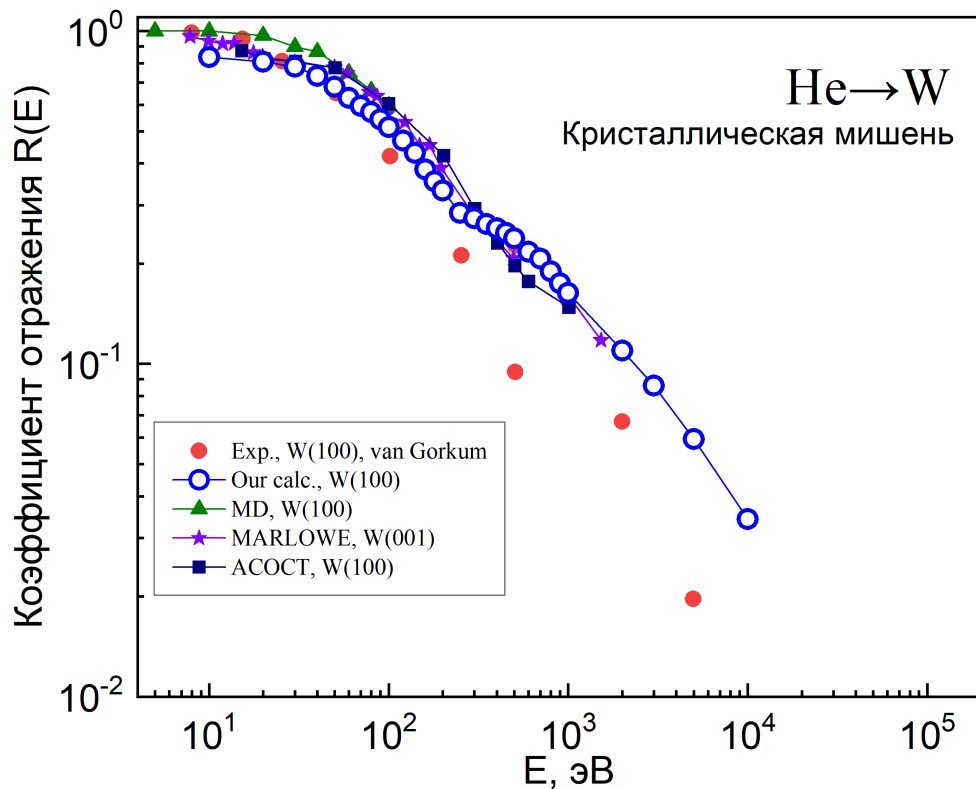


Рисунок 3.33 — Зависимости коэффициентов отражения от энергии налетающих частиц для системы He-W. Случай кристаллической мишени. Красные закрашенные кружки - эксперимент Ван Горкум [135]. Синие пустые кружки - наш расчет для кристаллической мишени W(100). Сплошные треугольники - расчет программой на основе метода молекулярной динамики Боровиков [138] для мишени W(100). Звездочки - расчет программой MARLOWE [136] для ориентации W(001). Квадратики - расчет программой ACOCT (версия ACAT для кристаллических мишеней) [130] для ориентации W(100).

3.4.3 Расчет энергетических спектров отраженных атомов водорода от поверхности вольфрама

Разработанный нами код позволяет отслеживать характеристики отраженных частиц. В этом разделе представлены результаты моделирования энергетических характеристик отраженных частиц при распылении вольфрамовой мишени водородом и дейтерием с энергиями от 100 эВ до 10 кэВ.

Для описания поведения формы энергетических спектров отраженных частиц можно предложить упрощенную модель. На рисунке 3.34 схематично изображен процесс однократного рассеяния частицы твердым телом. Пучок

бомбардирующих частиц падает под прямым углом на мишень. На участке x_0 (движение налетающей частицы в глубину мишени) происходит торможение частиц. Пусть концом отрезка x_0 является рассеяние частицы на угол β , а затем пучок частиц продолжает свое торможение на участке x_1 (обратное движение частицы к поверхности мишени). В подобной модели вместо веера частиц, рассеявшихся на первом и втором участке, рассматривается некоторая средняя траектория. Подобное упрощение приводит к погрешностям, связанным с неполным учетом многократного рассеяния.

Нас будет интересовать энергетический спектр частиц для заданного угла рассеяния β , а также этот спектр всех отраженных частиц, проинтегрированный по всем углам отражения.

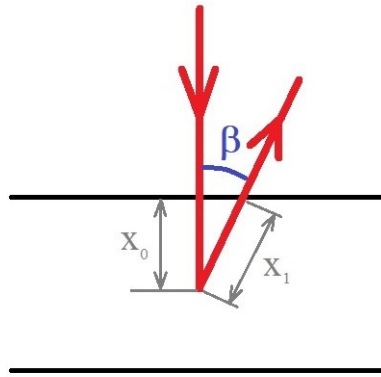


Рисунок 3.34 — Схема однократного рассеяния частицы твердым телом

Рассмотрим энергетический спектр частиц, рассеянных под углом β с энергией E . Начальная энергия бомбардирующей частицы E_0 . Тогда энергия пика однократного рассеяния E_1 при рассеянии частицы на угол $\theta = 180^\circ - \beta$ определяется формулой 3.1. Значение E_1 определяет положение в спектре пика, связанного с однократным рассеянием на атомах поверхности. Положение этого пика зависит от массы бомбардирующей частицы M_1 , и массы атомов мишени M_2 .

Ослабление интенсивности пучка, связанное с рассеянием частиц, происходит на всем участке движения частицы. Это ослабление можно описать выражением:

$$\frac{dN}{dx} = -n_{target} \cdot \sigma_{tr}(E[x]) \cdot N(x) \quad (3.12)$$

Здесь σ_{tr} — транспортное сечение, n_{target} — плотность мишени.

Таким образом пучок за время всего своего движения ослабевает на величину:

$$\frac{N(x)}{N_0} = F(x) = \exp \left[-n_{target} \int_0^x \sigma_{tr}(E|x|) dx \right] \quad (3.13)$$

Здесь N_0 – начальная интенсивность пучка, верхний предел интегрирования $x = x_0 + x_1$ – пройденное частицей суммарное расстояние. Функция $F(x)$ – фактор ослабления начальной интенсивности пучка.

При учете многократности рассеяния среднее расстояние, которые проходят частицы, больше, чем проективный пробег. Необходимая коррекция на вихлявость частиц описана в работе [113].

Будем рассматривать рассеянные частицы на интервале ΔE . Тогда количество частиц, рассеянных под углом θ в телесный угол $d\Omega$ в интервале ΔE определяется формулой:

$$\frac{d^2 N}{dE d\Omega} \cdot \Delta E = N_0 \cdot F(x) \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, E[x_0]) \cdot n_{target} \cdot \frac{dx_0}{dx} \cdot \frac{dx}{dE} \cdot \Delta E \quad (3.14)$$

Здесь $d\sigma/d\Omega(\theta, E[x_0])$ - дифференциальное сечение рассеяния на угол θ для энергии частицы, прошедшей расстояние x_0 .

Так как поставленная нами задача обладает некоторой симметрией поворота вокруг перпендикуляра к мишени, при описании энергетического спектра частиц, вылетевших под определенным углом θ , будем интерпретировать величину:

$$P(\theta, E) = \frac{1}{N_0} \cdot \frac{d^2 N(\theta, E)}{dE d\Omega} \cdot \Delta E \cdot 2\pi \cdot \sin\theta \cdot \Delta\theta \quad (3.15)$$

В нашем расчете разрешение по энергиям было принято $\Delta E = 0.01 \cdot E_0$, а по углу $\Delta\theta = 5^\circ$.

Таким образом, число частиц, вылетевших в верхнюю полусферу P_1 равно:

$$P_1(E) = \int_{\pi/2}^{\pi} \frac{1}{N_0} \cdot \frac{d^2 N(\theta, E)}{dE d\Omega} \cdot 2\pi \cdot \sin(\theta) d\theta \quad (3.16)$$

Распределение числа отраженных частиц в некоторый угол θ опишем формулой:

$$Y(\theta) = 2\pi \cdot \sin(\theta) \int_0^{E_0} \frac{d^2 N(\theta, E)}{dE d\Omega} dE \quad (3.17)$$

Величину dx_0/dx без учета поправок на многократность рассеяния можно представить как:

$$\frac{dx_0}{dx} = \frac{1}{1 + \frac{1}{\cos \beta}} \quad (3.18)$$

Если неупругие потери на электронах представить в виде:

$$\frac{dE}{dx} = A \cdot E^\alpha \quad (3.19)$$

То из 3.18 и 3.19 можно получить выражение, связывающее длину траектории частицы в мишени с ее энергией вылета:

$$E(x) = \left\{ -A \cdot (1 - \alpha) \cdot x + E_0^{1-\alpha} \right\}^{\frac{1}{1-\alpha}} \quad (3.20)$$

Используя 3.20 можно определить энергию $E(x_0)$ в точке поворота траектории x_0 . Полученная величина $E(x_0)$ позволяет определить сечение рассеяния.

Таким образом в рамках предложенной упрощенной модели можно вынести ряд предположений:

1. В энергетическом спектре отраженных частиц при некоторой энергии E_1 должен располагаться пик, связанный с однократным рассеянием на поверхности.
2. С уменьшением энергии отраженной частицы E энергетический спектр должен сначала возрастать, из-за роста dx/dE при уменьшении E . При более глубоком проникновении в мишень характерно уменьшение энергии E , что приводит и к уменьшению энергии $E(x_0)$ в точке поворота траектории x_0 , а также к росту сечения рассеяния. С увеличением угла β длина траектории до разворота x_0 уменьшится, если общая длина траектории фиксирована. Таким образом энергия при развороте $E(x_0)$ приближается к начальной энергии налетающей частицы E_0 , а значит, из-за уменьшения роста сечения рассеяния, наклон спектра должен уменьшаться. В дальнейшем ослабление интенсивности пучка приведет к падению интенсивности спектра, и в нем будет наблюдаться широкий максимум.
3. С увеличением начальной энергии E_0 транспортное сечение падает, а значит пик будет смещаться к меньшим энергиям.
4. Предполагается обнаружение универсальной формы для энергетических спектров отраженных частиц, налетающих под различными

углами к мишени, так как значения функции ослабления не зависят от угла рассеяния.

5. Угловая зависимость частиц будет пропорциональна $\sin \beta \cdot \cos \beta$, где β - угол вылета частицы. Первый член $\sin \beta$ отражает увеличение телесного угла сбора частиц при росте β , а второй $\cos \beta$ - отражает уменьшение отрезка x_0 , на котором происходит рассеяние частиц.

На рисунке 3.35 представлены результаты моделирования энергетических спектров отраженных частиц. Рассмотрен случай бомбардировки вольфрамовой мишени атомами водорода. Разные линии соответствуют различным начальным энергиям налетающих частиц E_0 . Энергетические спектры $P_1(E/E_0)$ представлены в зависимости от отношения вылетевших частиц E к E_0 . Спектры просуммированы по всем углам вылета.

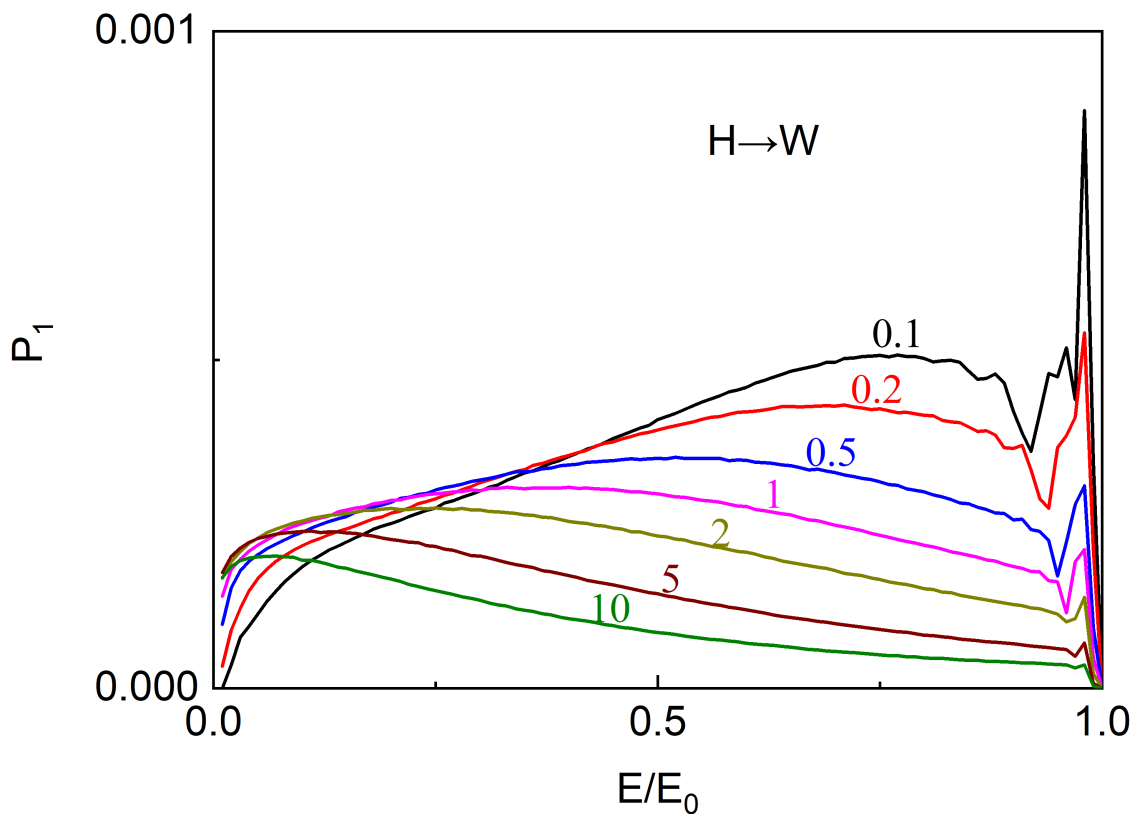


Рисунок 3.35 — Энергетические спектры отраженных частиц для случая бомбардировки вольфрамовой мишени атомами водорода. E/E_0 - отношение энергии отраженной частицы к ее начальной энергии. Начальная энергия обозначена у кривых цифрами в кэВ.

На рисунке 3.35, наблюдается пик, связанный с рассеянием на первом монослое. В этом случае энергия отраженной частицы E практически равна ее

начальной энергии E_0 . Особенно ярко выражен этот пик для случая малых E_0 (0.1, 0.2 кэВ).

Как и предсказывалось в предложенной нами модели в спектре отраженных частиц наблюдается максимум, который сдвигается при увлечении начальной энергии влево. Этот сдвиг связан с уменьшением сечений рассеяния при увлечении начальной энергии E_0 и, соответственно, с уменьшением роли фактора ослабления пучка частиц $F(x)$ (3.13).

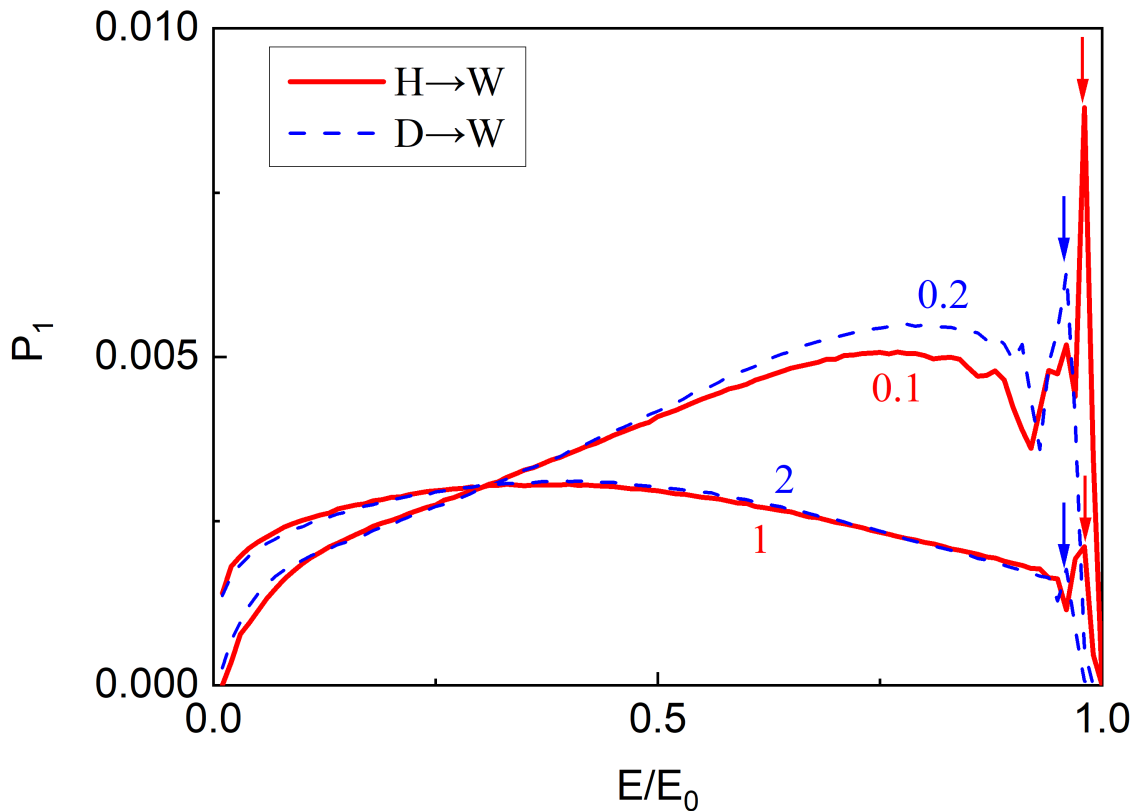


Рисунок 3.36 — Энергетические спектры отраженных частиц для случая бомбардировки вольфрамовой мишени атомами водорода и дейтерия. E/E_0 - отношение энергии отраженной частицы к ее начальной энергии. Начальная энергия обозначена у кривых цифрами в кэВ.

Расчет положения пиков по формуле 3.1 обозначены вертикальными стрелками.

На рисунке 3.36 приведено сравнение энергетических спектров отраженных частиц для случаев бомбардировки поверхности вольфрама атомами водорода и дейтерия.

Видно, что спектры практически совпадают, это обусловлено тем, что атомам водорода и дейтерия характерны практически одинаковые потенциалы взаимодействия, а потери энергии при торможении на электронах зависят

только от скорости. Наблюдается лишь отличие в интенсивности пика однократного рассеяния. Положение полученных пиков совпадает с расчетами, по формуле 3.1.

3.4.4 Зависимость энергетического спектра отраженных частиц водорода от угла их вылета

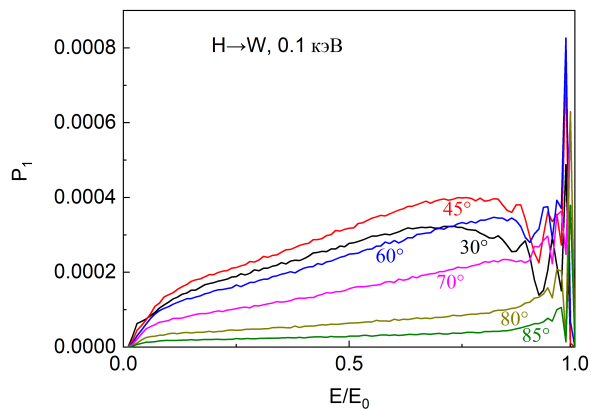
Результаты моделирования спектров отраженных частиц при бомбардировке вольфрама атомами водорода разных энергий приведены на рисунке 3.37. Представлены энергетические спектры для определенных углов вылета частиц (градус угла подписан возле кривых).

На примере бомбардировки с энергией $E_0 = 5$ кэВ, рисунок 3.37 (а), видно, что для углов вылета $30^\circ - 60^\circ$ наблюдает рост кривой спектра. Этот рост был предсказан нашей моделью и связан с ростом dx/dE , а также с ростом сечения рассеяния при уменьшении энергии частицы во время движения в мишени. В рамках предложенной нами модели нужно понимать, что большая потеря энергии соответствует более глубокому прохождению начального потока, то есть увеличению отрезка x_0 (3.34). Описанная ранее модель рассматривает пучок на всей траектории движения частиц в мишени как некоторый веер траекторий. Красная линия на рисунке 3.34 отображает некоторую средней траекторию.

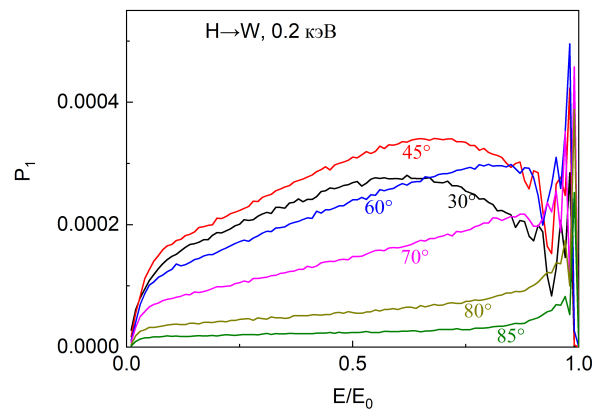
Предсказание нашей упрощенной модели о подобии спектров для разных углов вылета выполняется только в небольшом диапазоне этих углов $30^\circ - 45^\circ$. При увеличении угла вылета β , как и предсказывалось в нашей модели, наклон спектра уменьшается. При $\beta > 80^\circ$ спектр становится практически равномерным, чего модель не предполагает. Причиной этого может быть сильно влияние многократности рассеяния, которое не учитывается в упрощенной модели.

При повышении начальной энергии (3.34 (а-е)) наблюдается смещение широкого пика в спектре в область меньших энергий отраженных частиц. Связано это с возрастанием роли фактора неупругих потерь при движении в твердом теле. При этом характер спектра тоже меняется и в зависимости от угла вылета отраженной частицы.

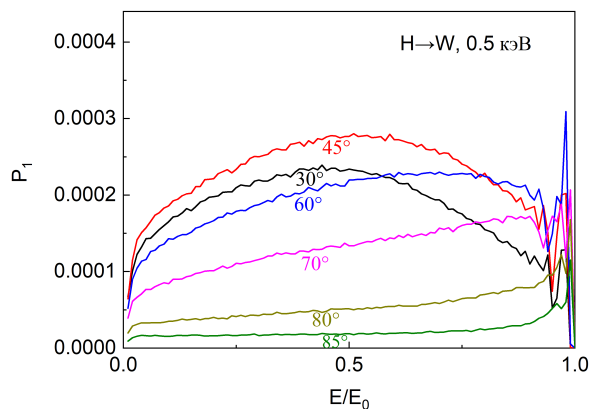
Экспериментальных данных по измерению энергетических или угловых спектров отраженных от вольфрама частиц водорода практически нет. Име-



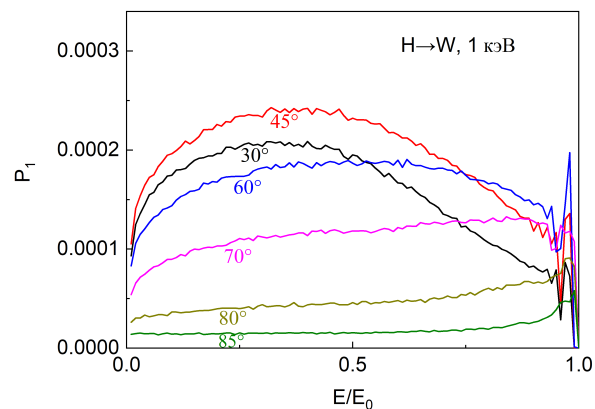
(a)



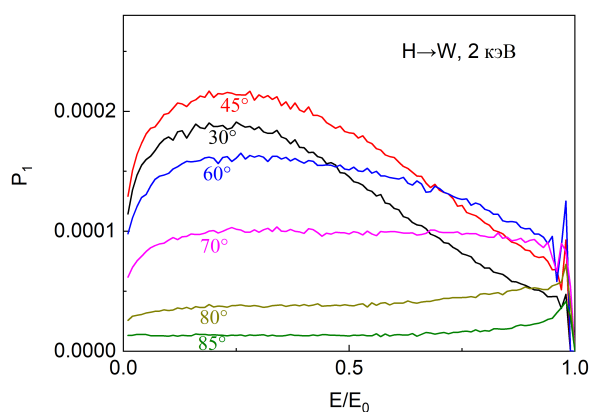
(б)



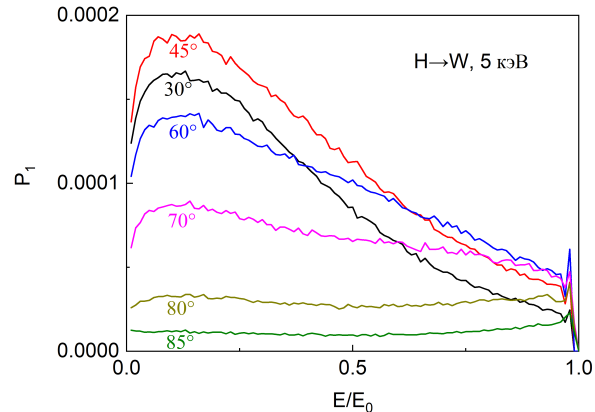
(в)



(г)



(д)



(e)

Рисунок 3.37 — Коэффициенты отражения для пары H-W. Рассмотрены случаи различных энергий пучка. Цветом обозначены его углы падения.

ется только набор измерений заряженной компоненты отраженных частиц, но подобный эксперимент не подходит для сравнения с результатами моделирования, так как при рассматриваемом диапазоне энергий в спектре доминирует нейтральная компонента [139].

Однако, имеются экспериментально измеренные энергетические спектры отраженных частиц водорода от золотой мишени [140]. 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 3.38 представлено сравнение нашего результата моделирования с экспериментом. Спектры нормированы при энергии 7 кэВ. Имеется неплохое согласие данных.

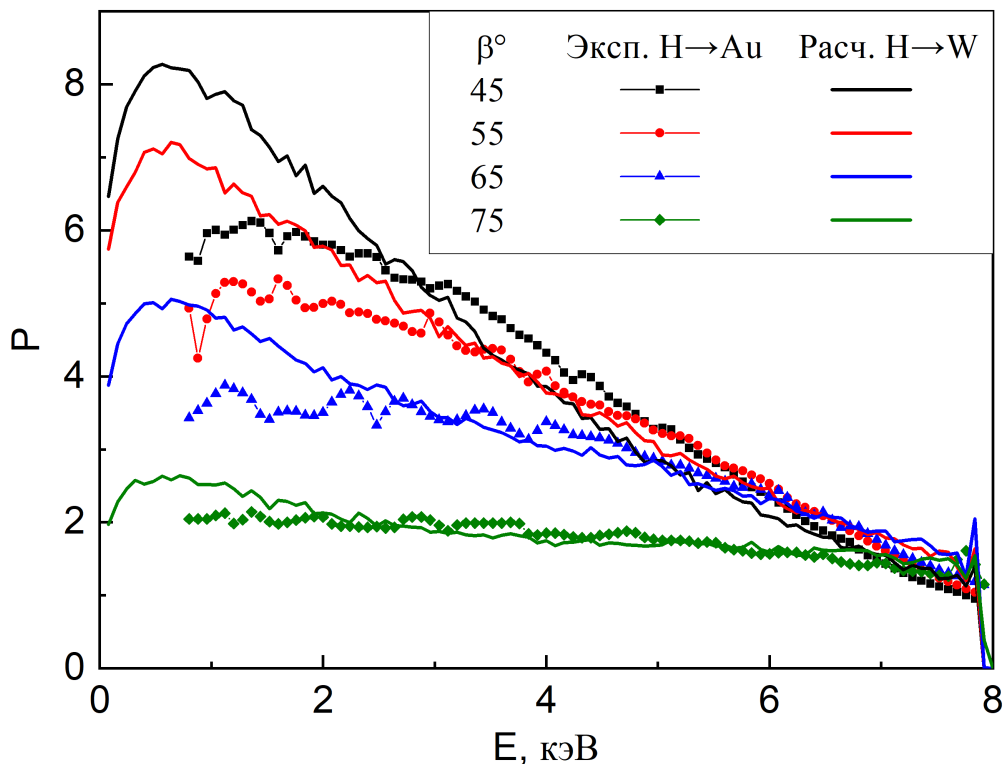


Рисунок 3.38 — Сравнение наших расчетов энергетических спектров отраженных частиц для случая Н-W и экспериментальных данных для Н-Au (пучок с энергией 8 кэВ) из работы [140].

На рисунке 3.39 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 модели. Также наблюдается хорошее согласие с экспериментальными данными об угловом распределении частиц для случая H-Au [140].

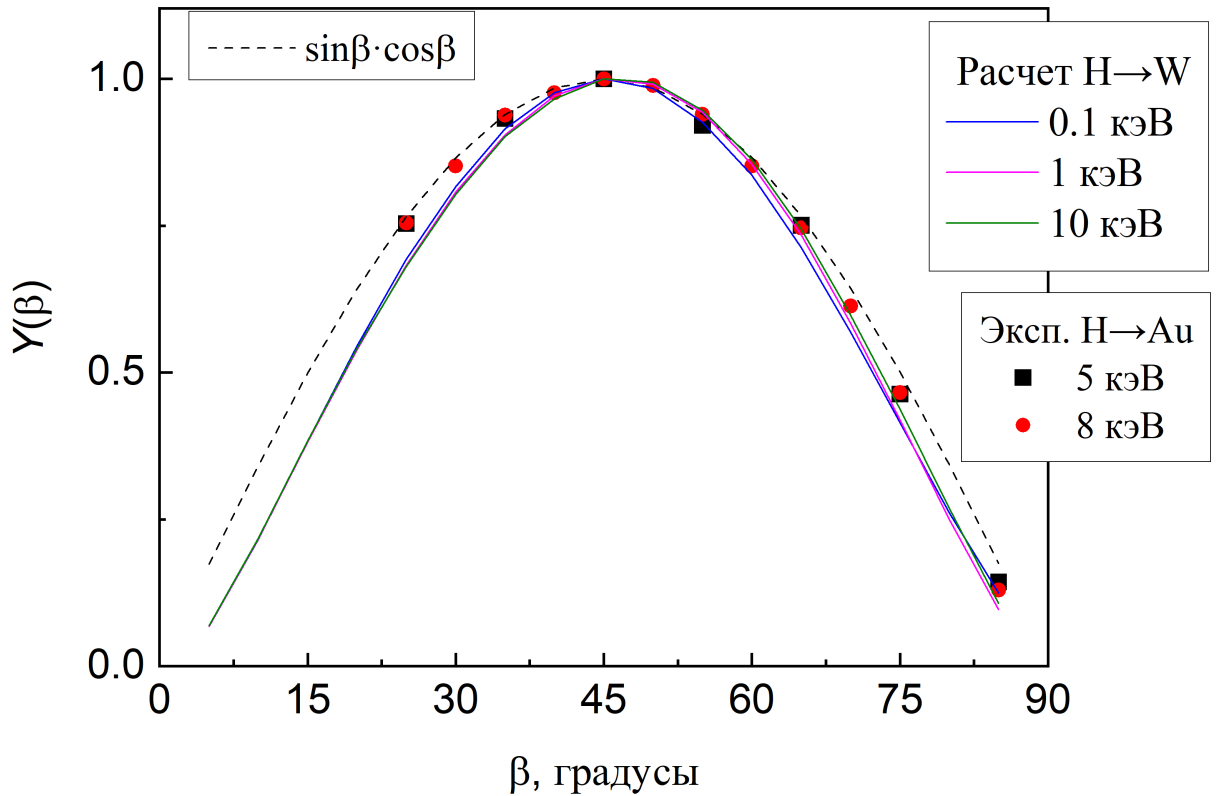


Рисунок 3.39 — Угловые спектры отраженных частиц. Сплошными линиями представлены результаты расчета для широкого диапазона энергий. Экспериментальные данные [140] по отражению атомов водорода от золота представлены точками. Предсказанная в модели зависимость $\sin(\beta) \cdot \cos(\beta)$ представлена штриховой линией. Все данные нормированы на значение при угле $\beta = 45^\circ$.

3.4.5 Выводы

Рассчитаны коэффициенты отражения при бомбардировке под прямым углом падения пучка атомов: H, D, T, He, Be, C, N, O, Ne, Ar, W в диапазоне энергий, составляющем 10–100 кэВ. Рассмотрена бериллиевая и вольфрамовая мишень. Для случая, когда масса бомбардирующей частицы M_1 больше массы атома мишени M_2 наблюдается резкое снижение коэффициента отражения.

Это связано с отсутствием вклада однократного рассеяния. Продемонстрирована чувствительность расчетов к используемой модели неупругих тормозных потерь на электронах, а также к используемому типу поверхностного потенциального барьера. Кристаллические и аморфные мишени также обладают различными значениями коэффициентов отражения.

Для случая облучения водородом и дейтерием вольфрамовой мишени отдельно проведены расчеты энергетических и угловых распределений отраженных частиц. Продемонстрировано подобие энергетических спектров при бомбардировке изотопами различных масс с равными скоростями. Полученные угловые зависимости вылетевших частиц практически не зависят от начальной энергии и могут быть описаны функцией пропорциональной $\cos(\beta) \sin(\beta)$, где β - угол отражения частиц.

Для случая $M_1 < M_2$ рассмотрена модель доминирования однократных столкновений, которая позволяет качественно предсказать ряд зависимостей отраженных частиц. В частности эта модель предсказывает появление максимума в энергетическом спектре отраженных частиц, а так же его сдвиг с изменением начальной энергии бомбардирующих частиц. Для более точного описания угловой зависимости предложенная модель нуждается в коррекции на учет эффекта многократных рассеяний.

Проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными в тех случаях, где это представлялось возможным. Наблюдается удовлетворительное согласие.

Полученные данные позволяют более точно определять энергетический, примесный и топливный баланс при расчете сценариев работы термоядерных реакторов.

3.5 Расчет распыление стенки из бериллия и вольфрама быстрыми атомами D и T в токамаке ИТЭР

Основные результаты данного исследования опубликованы в работах [А5, А8].

На данный момент одной из основных проблем на пути к достижению термоядерной реакции с положительным энергетическим выходом является взаимодействие высокоэнергетической плазмы с материалами первой стенки реактора токамака. Это приводит к разрушению материала и образованию нежелательных примесей, которые могут проникнуть в объем плазмы реактора. При значительной концентрации примесей вследствие больших радиационных потерь достижение критерия Лоусона [141] становится невозможным, и термоядерная реакция с положительным выходом энергии неосуществима. В работе [9] показано, что для примесей элементов с низким зарядовым числом Z (кислород) критической концентрацией является величина в 3%, для элементов со средним Z (железо) - 1%, для элементов с высоким Z (вольфрам) - всего 0.2%.

Но подобные летальные концентрации не являются единственным ограничением для примеси в реакторе. Есть и другие стимулы для изучения динамики, процесса образования и контроля примесей. Существует более тонкое их влияние на эффективность удержания энергии плазмы, чем просто источник высоких значений радиационных потерь. Например, в работе [142] показано, что наличие примесей ограничивает максимальное значение достижимой электронной плотности в токамаке.

Существует ряд программ для оценки поступления примесей распыленного материала стенки в плазму [143; 144]. Эти коды учитывают воздействие плазмы на стенку с учетом сложных пристеночных профилей плазмы и ее неравновесностью, а также со всей геометрией камеры и учетом магнитных полей. В этой работе проведена оценка проникновения примесей, вызванных распылением энергичными нейтральными атомами дейтерия (D) и трития (T) покидающих горячую центральную область плазмы. Рассмотрение только нейтрального потока частиц из плазмы позволяет дать нижнюю оценку образования распыленных частиц со стенки реактора.

При наших расчетах распыления стенки анализировался типичный сценарий [145] работы ИТЭР с термоядерной мощностью 500 МВт: плотность плазмы

составляла $8.6 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$, температура электронов в центре $T_e = 27 \text{ кэВ}$, температура ионов в центре $T_i = 23 \text{ кэВ}$. Предполагалось, что плазма состоит из 50%-ной смеси дейтерия и трития, содержание примеси углерода – 1%, примеси бериллия – 1%. Концентрацию атомов на сепаратрисе принимали равной $2 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-3}$, а энергию атомов принимали равной температуре ионов на сепаратрисе $T_a = 170 \text{ эВ}$ [146]. Профили распределения плотности плазмы и температуры взяты из работы [145].

Расчеты энергетических спектров атомов дейтерия и трития, покидающих плазму, проводились с использованием программы DOUBLE-МС [147; 148].

Потоки нейтральных атомов рассчитывались для геометрии, представленной на рисунке 3.40. Точка наблюдения расположена на расстоянии $r = 8.5 \text{ м}$ от центральной оси тора и на высоте $z = 0.5 \text{ м}$ относительно плоскости экватора. Угол θ — угол между направлением на центр тора и линией наблюдения. Угол φ отсчитывается от горизонтальной плоскости.

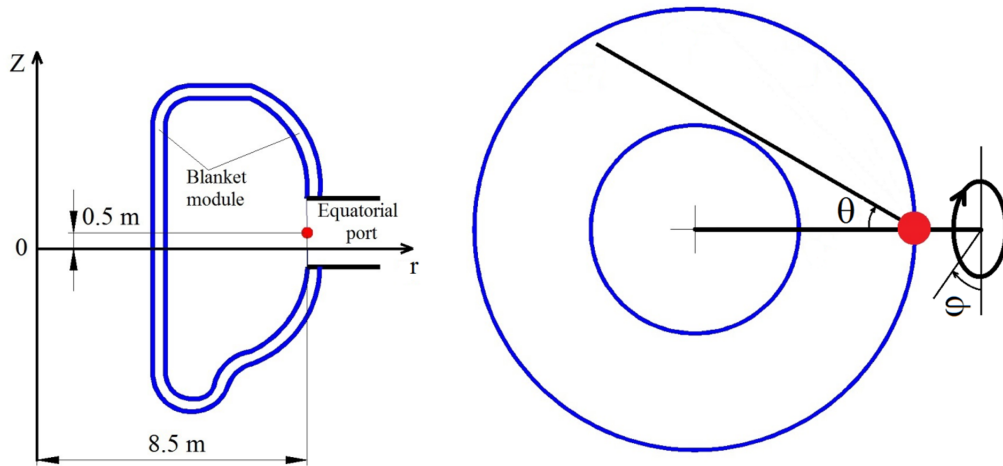


Рисунок 3.40 — Геометрическая схема расчета энергетических спектров частиц с помощью кода DOUBLE-МС. Точка наблюдения обозначена красным кружком.

На рисунке 3.41 представлены энергетические спектры dN/dE атомов дейтерия и трития, бомбардирующих первую стенку токамака, полученные с использованием кода DOUBLE-МС. Видно, что в спектре присутствуют частицы в широком диапазоне энергий, а максимум распределения лежит в районе 1 кэВ. При увеличении угла θ интенсивность потока покидающих плазму атомов растёт, и спектр смещается в сторону меньших энергий.

Распыление стенки реактора нейтральными частицами, покидающими плазму, можно рассчитать следующим образом:

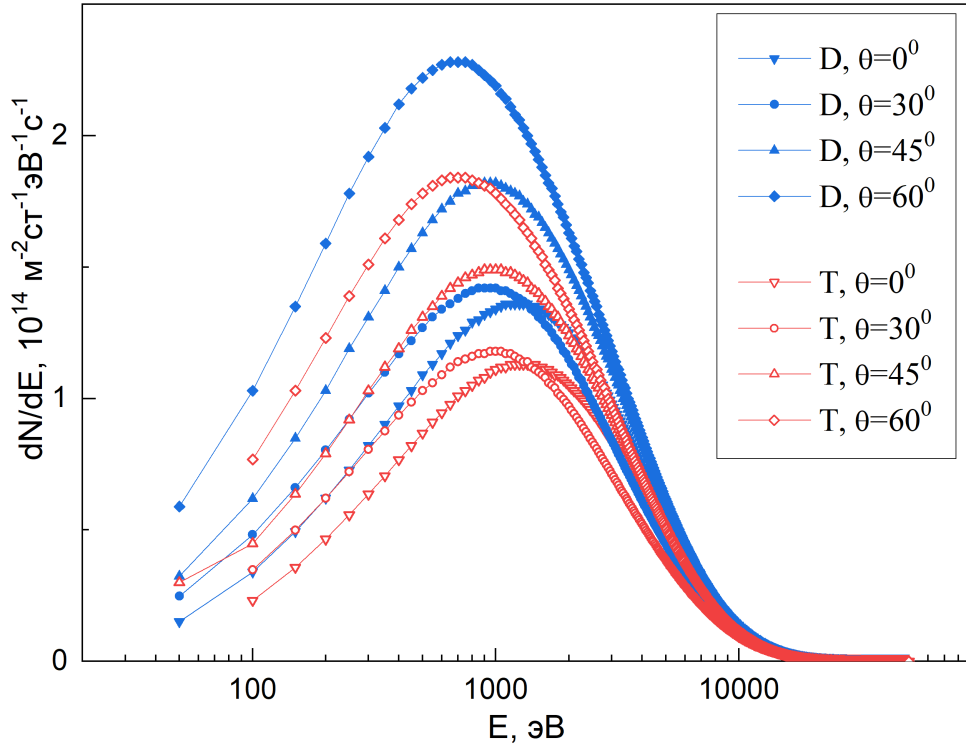


Рисунок 3.41 — Типичный энергетический спектр dN/dE атомов дейтерия и трития, бомбардирующих первую стенку токамака. θ — угол падения относительно нормали к поверхности, $\varphi = 0^\circ$. Спектры получены с помощью программы DOUBLE-MC.

$$\frac{d\Gamma_n}{dE} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{dN_n(E, \theta, \varphi)}{dE d\Omega} \cdot Y_n(E, \theta) \cdot \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\varphi \quad (3.21)$$

Здесь N_n — число нейтральных атомов, падающих на стенку токамака, $Y_n(E, \theta)$ — коэффициент распыления материала стенки в зависимости от энергии и угла падения θ .

На рисунке 3.42 представлены рассчитанные суммарные вклады быстрых атомов D и T в распыление стенки из Be и W для различных поверхностных потенциальных барьеров. 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.

Для расчета потоков распыленных частиц Γ_n , выбитых из стенки, необходимо проинтегрировать энергетический спектр, умноженный на коэффициент распыления, по энергии и углу падения падающих частиц:

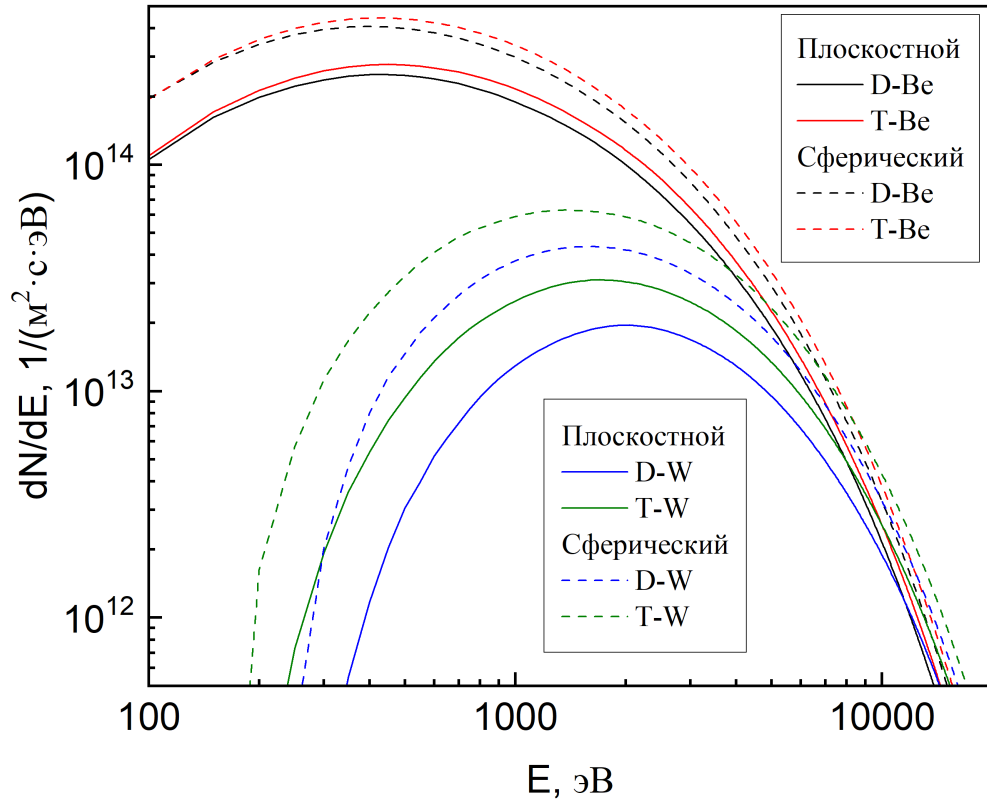


Рисунок 3.42 — Зависимость вклада в распыление стенки (Be и W) быстрых атомов D и T от их энергии. Сплошные линии - плоскостной барьер, штриховые линии - сферический барьер.

$$\Gamma_n = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{dN_n}{dE d\Omega} \cdot Y_n(E, \theta) \cdot \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\varphi \cdot dE \quad (3.22)$$

Полученные значения Γ_n для случая Вольфрамовой и Бериллиевой стенки представлены в таблице 2. Приведены потоки распыленных частиц стенки нейтральными атомами дейтерия Γ_D и трития Γ_T , а также их сумма $\Gamma_{D,T}$. Рассмотрены случаи использования коэффициентов распыления для плоскостного и сферического поверхностного потенциала.

В таблице также представлено отношение суммарного числа распыленных частиц первой стенки N_{sput} (расчитанное 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 [149] и вольфрама [150]. Площадь поверхности первой стенки в расчетах принята $S = 937\text{м}^2$, рабочий объем реактора $V = 838\text{м}^3$. Время удержания частиц в плазме взято равным $\tau = 3\text{с}$, средняя плотность плазмы взята равной $n_e = 1 \cdot 10^{20}\text{м}^{-3}$.

Таблица 2 — Потоки распыленных атомов для различных материалов стенки, создаваемые быстрыми атомами D и T. Потоки даны в единицах - частиц/(м² · с).

		Γ_D	Γ_T	$\Gamma_{D,T}$	$N_{sput}/N_e, \%$	$n_{\text{крит}}$
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	$\approx 0,2\%$

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.

Полученное в вышеописанном приближении число распыленных частиц Be является недостаточным для достижения летальной концентрации $n_{\text{крит}}(Be) = 25\%$ [149] в реакторе.

Для случая вольфрамовой стенки наша оценка распыленных частиц меньше, но ее теоретически может быть достаточно для преодоления летальной концентрации $n_{\text{крит}}(W) = 0,2\%$ [150].

Однако стоит отметить, что полученные данные определяют лишь количество распыленных частиц. Процесс дальнейшего их транспорта - отдельный вопрос, на который могут ответить современные коды по моделированию динамики примесей в реакторах. Но очевидно, что до центра плазмы дойдет лишь малая часть распыленных атомов стенки.

Оценим ослабление потока распыленных частиц бериллия и вольфрама при прохождении пристеночного слоя плазмы. Возьмем характерные профили температуры $T_e(x)$ и концентрации $n_e(x)$ плазмы из работы [151].

Ослабление потока при прохождении расстояния L можно определить по формуле:

$$\eta = \exp \left[- \frac{\int_0^L n_e(x) R[T_e(x)] dx}{v_{at}} \right] \quad (3.23)$$

Здесь в качестве участка, на котором происходит ослабление пучка принято расстояния до сепаратрисы $L = 10\text{см}$. v_{at} - средняя скорость распыленных частиц. Ее значение бралось из раздела 3.3.4 как пересчет из средней энергии

распыленных частиц. $R[T_e(x)]$ - скоростной коэффициент ионизации, вычисляемый по формуле:

$$R[T_e(x)] = \langle \sigma_i \cdot v_e \rangle \quad (3.24)$$

Здесь σ_i - сечение ионизации, v_e - скорость электрона. Усреднение $\langle \sigma_i \cdot v_e \rangle$ проводилось в предположении максвелловского распределения скоростей электронов v_e для концертной электронной температуры T_e . Значения $R(T_e)$ для Ве были взяты из работы [152], а значения $R(T_e)$ для W были рассчитаны с использованием сечения ионизации из работы [153].

Наши расчеты показали, что распыленные частицы для типичных параметров плазмы ИТЭР будут практически полностью ионизованы вблизи стенки реактора. Для случая бериллиевой стенки поток распыленных частиц ослабевает в e раз при прохождении всего 5 см вглубь реактора. Для вольфрама подобное ослабление происходит на расстоянии 2 см. На пути до сепаратрисы поток распыленного бериллия будет ослаблен в $\eta = 6.7 \cdot 10^{-3}$ раза, а для вольфрама - в $\eta = 1.5 \cdot 10^{-34}$ раза. Таким образом в наших предположениях распыленные атомы ионизируются, не достигнув района сепаратрисы. Однако стоит отметить, что мы учитывали распыление только нейтральными частицами, покидающих объем плазмы. Существует множество других источников распыления: ионный поток, плазменные неустойчивости, перераспыление, поток примесей. Для более точных расчетов динамики распыленных частиц следует использовать широкий спектр транспортных кодов [44; 146; 154–157].

3.5.1 Выводы

Для характерного разряда ИТЭР были проведены расчеты числа распыленных частиц вследствие облучения стенки реактора потоком быстрых нейтральных атомов из центральной области плазмы. Рассмотрены случаи стенки из вольфрама и бериллия, а также коэффициенты распыления, полученные с различными типами поверхностного барьера. Использование в расчетах сферического поверхностного барьера (характерного для шероховатых тел) дает почти в 2 раза более интенсивный поток распыленных частиц, чем с использованием плоскостного барьера (характерного для гладких тел). Показано, что

большая часть потока распыленных атомов стенки будет ионизирована на пути к сепаратрисе и не достигнет области центральной плазмы. Стоит отметить, что наши результаты представляют лишь граничные условия потока распыленных частиц, дальнейшую их динамику стоит моделировать с использованием специальных транспортных кодов.

Заключение

В ходе диссертационного исследования были достигнуты следующие важные результаты:

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 характери-

- стики 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. Про моделировано 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 реакторов.
 6. Для характерного разряда ИТЭР с использованием полученных в работе коэффициентов распыления и характеристик распыленных частиц был рассчитан поток частиц, распыленных вследствие облучения стен-

ки 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 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. — ЯНВ. — 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. — Дек. — 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. *Grove W. R.* // *Phil. Mag.* — 1853. — Т. 203, № 5.
12. *Behrisch R.* *Sputtering by Particle Bombardment I.* — Berlin, 1981.
13. *Sputtering of Be and BeO by light ions / J. Roth [и др.]* // *Journal of Nuclear Materials.* — 1979. — Т. 85. — С. 1077—1079.
14. *Laegreid N., Wehner G.* *Sputtering yields of metals for Ar⁺ and Ne⁺ ions with energies from 50 to 600 eV* // *Journal of Applied Physics.* — 1961. — Т. 32, № 3. — С. 365—369.
15. *Stuart R., Wehner G.* *Sputtering yields at very low bombarding ion energies* // *Journal of Applied Physics.* — 1962. — Т. 33, № 7. — С. 2345—2352.
16. *Winters H. F., Horne D.* *Energy transfer to a tungsten lattice by ion bombardment* // *Physical Review B.* — 1974. — Т. 10, № 1. — С. 55.
17. *Kittel C.* *Introduction to solid state physics.* — John Wiley & sons, inc, 2005.
18. *Gemmell D. S.* *Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals* // *Rev. Mod. Phys.* — 1974. — ЯНВ. — Т. 46, № 1. — С. 129—227.
19. *Behrisch R.* *Sputtering by Particle Bombardment II.* — Berlin, 1983.
20. *Andersen H. H.* *Advances in Ion Implantation.* — London : Academic Press, 1983.
21. *Roth J.* *Chemical sputtering* // *Sputtering by Particle Bombardment II: Sputtering of Alloys and Compounds, Electron and Neutron Sputtering, Surface Topography.* — 2005. — С. 91—146.
22. *Sputtering of Tungsten by Beryllium and Neon Ions / D. S. Meluzova [и др.]* // *Technical Physics Letters.* — 2020. — Дек. — Т. 46, № 12. — С. 1227—1230.
23. *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.
24. *Sigmund P.* *Theory of sputtering. I. Sputtering yield of amorphous and polycrystalline targets* // *Physical review.* — 1969. — Т. 184, № 2. — С. 383.

25. *Sigmund P.* Mechanisms and theory of physical sputtering by particle impact // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 1987. — Т. 27, № 1. — С. 1—20.
26. Распыление полупроводников ионами высоких энергий / Б. ' Мерзук [и др.] // Учен. зап. физ. фак-та Моск. ун-та. — 2019. — № 2.
27. *Yamamura Y.* A simple analysis of the angular dependence of light-ion sputtering // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 1984. — Т. 2, № 1. — С. 578—582.
28. *Eckstein W.* Sputtering yields // Vacuum. — 2008. — Т. 82, № 9. — С. 930—934. — Selected Papers from the 18th Ion Surface Interactions Conference, Zvenigorod, Russia, 24-28 August 2007.
29. *Eckstein W., Preuss R.* New fit formulae for the sputtering yield // Journal of Nuclear Materials. — 2003. — Т. 320, № 3. — С. 209—213.
30. Atomic and plasma-material interaction data for fusion Vol 13. — International Atomic Energy Agency (IAEA) : IAEA, 2007. — PLASMA PHYSICS AND FUSION TECHNOLOGY.
31. Atomic and Plasma–Material Interaction Data for Fusion. — Vienna : INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, 2001. — (Atomic and Plasma–Material Interaction Data for Fusion ; 7/B).
32. Measurements of beryllium sputtering yields at JET // Т. 415. 1 SUPPL. — Elsevier B.V., 08.2011.
33. Angular dependence of the sputtering yield of rough beryllium surfaces / M. Küstner [и др.] // Journal of nuclear materials. — 1999. — Т. 265, № 1/2. — С. 22—27.
34. Erosion of beryllium under high-flux plasma impact / R. P. Doerner [и др.] // Journal of Nuclear Materials. — 2013. — Т. 438, SUPPL.
35. Collisions of low-energy ions Ar⁺ and N₂⁺ with room-temperature and heated surfaces of tungsten, beryllium, and a mixed beryllium–tungsten thin film / A. Keim [и др.] // International Journal of Mass Spectrometry. — 2013. — Ноябрь. — Т. 354/355. — С. 78—86.

36. Collisions of low-energy Ar⁺, N₂⁺, and D₂⁺ ions with room-temperature and heated surfaces of mixed beryllium-tungsten thin films of different composition / M. Harnisch [и др.] // International Journal of Mass Spectrometry. — 2014. — Май. — Т. 365/366. — С. 316—323.
37. Impurity seeding for tokamak power exhaust: From present devices via ITER to DEMO // Plasma Physics and Controlled Fusion. — 2013. — Дек. — Т. 55, вып. 12.
38. Light impurity transport in JET ILW L-mode plasmas / N. Bonanomi [и др.] // Nuclear Fusion. — 2018. — Янв. — Т. 58, № 3. — С. 036009.
39. Experimental estimation of tungsten impurity sputtering due to Type I ELMs in JET-ITER-like wall using pedestal electron cyclotron emission and target Langmuir probe measurements / C. Guillemaut [и др.] // Physica Scripta. — 2016. — Янв. — Т. 2016, T167. — С. 014005.
40. Intra-ELM tungsten sputtering in JET ITER-like wall: analytical studies of Be impurity and ELM type influence / I. Borodkina [и др.] // Physica Scripta. — 2017. — Т. 2017, T170. — С. 014065.
41. *Angioni C.* Impurity transport in tokamak plasmas, theory, modelling and comparison with experiments. — 07.2021.
42. Long-term evolution of the impurity composition and impurity events with the ITER-like wall at JET / J. W. Coenen [и др.] // Nuclear Fusion. — 2013. — Июль. — Т. 53, вып. 7.
43. *Mandrekas J., Stacey J. W.* An impurity seeded radiative mantle for ITER // Nuclear Fusion. — 1995. — Июль. — Т. 35, № 7. — С. 843.
44. SOLPS-ITER modelling of ITER edge plasma with drifts and currents / E. Kaveeva [и др.] // Nuclear Fusion. — 2020. — Т. 60, № 4. — С. 046019.
45. *Leonov V., Zhogolev V.* Simulation of high-Z impurity behaviour for ITER operational scenarios using the ZIMPUR impurity code // Plasma physics and controlled fusion. — 2005. — Т. 47, № 6. — С. 903.
46. WALLDYN simulations of global impurity migration in JET and extrapolations to ITER / K. Schmid [и др.] // Nuclear Fusion. — 2015. — Май. — Т. 55, вып. 5.

47. Gyrokinetic simulations of impurity, He ash and alpha particle transport and consequences on ITER transport modelling // Nuclear Fusion. — 2009. — Т. 49, вып. 5.
48. Impact of W on scenario simulations for ITER // Nuclear Fusion. — 2015. — ИЮНЬ. — Т. 55, вып. 6.
49. Measurement of sputtered beryllium yield and angular distribution during nanostructure growth in a helium plasma / E. M. Hollmann [и др.] // Journal of Applied Physics. — 2017. — СЕНТ. — Т. 122, вып. 11.
50. *Eckstein W.* Reflection (backscattering) IPP 17/12 // Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Garching, Germany. — 2009. — С. 73.
51. Data Compendium for Plasma-Surface Interactions / R. A. Langley [и др.] // Nucl. Fusion. — 1984. — ЯНВ. — Т. 24, S1. — С. 001.
52. Backscattering coefficients of H, D, and He ions from solids / T. Tabata [и др.] // At. Data Nucl. Data Tables. — 1983. — МАЙ. — Т. 28, № 3. — С. 493—530.
53. *Thomas E. W., Janev R. K., Smith J.* Scaling of particle reflection coefficients // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. — 1992. — ИЮЛЬ. — Т. 69, № 4. — С. 427—436.
54. *Simović R. D., Vukanić J.* Reflection coefficients of low-energy light ions for the power form of the interaction potential // Radiat. Phys. Chem. — 2011. — МАРТ. — Т. 80, № 3. — С. 310—317.
55. *Afanas'ev V., Lobanova L. G., Shulga V.* Reflection of Light Ions from a Solid Surface: Analytical Model and Computer Simulation // J. Surf. Invest. — 2023.
56. *Курнаев В. А., Машкова Е. С., Молчанов В. А.* Отражение легких ионов от поверхности твердого тела. — Энергоатомиздат, 1985.
57. *Машкова Е., Молчанов В.* Рассеяние ионов средних энергий поверхностями твердых тел. — Москва : Атомиздат, 1980.
58. *Eckstein W.* Computer simulation of ion-solid interactions. Т. 10. — Springer Science & Business Media, 2013.
59. James Ziegler - SRIM & TRIM. — 11.2022. — URL: <http://www.srim.org> ; [Online; accessed 15. Jan. 2024].

60. *Maya P.* Molecular dynamics studies of sticking and reflection of low-energy deuterium on single crystal tungsten // *Journal of Nuclear Materials*. — 2016. — Т. 480. — С. 411—419.
61. MD simulations of low energy deuterium irradiation on W, WC and W₂C surfaces / A. Lasa [и др.] // *J. Nucl. Mater.* — 2012. — Окт. — Т. 429, № 1. — С. 284—292.
62. *Kogut D., Trifonov N., Kurnaev V.* Simulation of deuterium reflection from plasma-sprayed tungsten // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. — 2008. — Т. 72. — С. 969—970.
63. *Eckstein W.* Sputtering, reflection and range values for plasma edge codes. — 1998.
64. *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.
65. *Linhard J.* Approximation method in classical scattering by screened Coulomb fields // *Kgl. Danske Vidensk. Selsk. mat.-fys. Medd.* — 1968. — Т. 36, № 10. — С. 3—32.
66. *Lindhard J., Scharff M.* Energy dissipation by ions in the keV region // *Physical Review*. — 1961. — Т. 124, № 1. — С. 128.
67. *Firsov O.* A Qualitative Interpretation of the Mean Electron Excitation Energy in Atomic Collisions // *JETP*. — 1959. — Т. 9, № 5. — С. 1076.
68. Theoretical Description of the Stopping Power of Light Ions in the Intermediate Energy Range / E. Kührt [и др.] // *physica status solidi (b)*. — 1985. — Т. 127, № 2. — С. 633—639.
69. *Bethe H.* *Ann. Phys.(Leipzig)* // *Ann. Phys.(Leipzig)*. — 1930. — Т. 5. — С. 325.
70. *Bloch F.* The slow down of rapidly moving particles in the their passing through solid matter // *Ann Phys (Leipzig)*. — 1933. — Т. 16. — С. 285—320.
71. *Ziegler J. F.* The Stopping and Ranges of Ions in Matter: Handbook of Stopping Cross-Sections for Energetic Ions in All Elements. Т. 5. — Elsevier, 2013.

72. *O'Connor D., Biersack J.* Comparison of theoretical and empirical interatomic potentials // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 1986. — Т. 15, № 1. — С. 14—19.
73. *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.
74. Total differential scattering cross section of Ar+-Ar at 15 to 400 keV / Н. Hartung [и др.] // Physics Letters A. — 1987. — Т. 119, № 9. — С. 457—461.
75. *Зиновьев А.* Потенциалы межатомного взаимодействия при соударении частиц с энергиями 1- 300keV // Журнал технической физики. — 2008. — Т. 78, № 1. — С. 15—20.
76. *Amdur I., Mason E. A.* Scattering of High-Velocity Neutral Particles. III. Argon-Argon // The Journal of Chemical Physics. — 2004. — Дек. — Т. 22, № 4. — С. 670—671.
77. *Леонас В. Б.* Исследования короткодействующих межмолекулярных сил // Усп. физ. наук. — 1972. — Т. 107, № 5. — С. 29—56.
78. *Zinoviev A. N.* Interaction potentials for modeling of ion-surface scattering // Т. 269. Вып. 9. — 05.2011. — С. 829—833.
79. *Фурсов О.* Вычисление потенциала взаимодействия атомов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1957. — Т. 33, № 3. — С. 696—699.
80. *Molière G.* Z. f. Naturforsch. — 1947.
81. *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.
82. *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.

83. *Martin R. M.* Electronic structure: basic theory and practical methods. — Cambridge university press, 2020.
84. *Nordlund K., Runeberg N., Sundholm D.* Repulsive interatomic potentials calculated using Hartree-Fock and density-functional theory methods // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 1997. — Т. 132, № 1. — С. 45—54.
85. AP-Net: An atomic-pairwise neural network for smooth and transferable interaction potentials / Z. L. Glick [и др.] // The Journal of Chemical Physics. — 2020. — Июль. — Т. 153, № 4. — С. 044112.
86. *Зиновьев А., Бабенко П.* Вклад элементарных процессов при атомных столкновениях в электронные тормозные способности // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2021. — № 6. — С. 94—108.
87. *Barnett C. F., Reynolds H. K.* Charge Exchange Cross Sections of Hydrogen Particles in Gases at High Energies // Phys. Rev. — 1958. — Янв. — Т. 109, вып. 2. — С. 355—359.
88. *Stier P. M., Barnett C. F.* Charge Exchange Cross Sections of Hydrogen Ions in Gases // Phys. Rev. — 1956. — Авг. — Т. 103, вып. 4. — С. 896—907.
89. *Montanari C., Dimitriou P.* The IAEA stopping power database, following the trends in stopping power of ions in matter // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 2017. — Т. 408. — С. 50—55. — Proceedings of the 18th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions (HCI-2016), Kielce, Poland, 11-16 September 2016.
90. Contribution of molecular orbital promotion to inelastic energy losses in ion-solid collisions / A. N. Zinoviev [и др.] // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. — 2020. — Март. — Т. 467. — С. 140—145.
91. *Oen O. S., Holmes D. K., Robinson M. T.* Ranges of Energetic Atoms in Solids // J. Appl. Phys. — 1963. — Февр. — Т. 34, № 2. — С. 302—312.
92. *Hobler G., Betz G.* On the useful range of application of molecular dynamics simulations in the recoil interaction approximation // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. — 2001. — Июнь. — Т. 180, № 1. — С. 203—208.

93. SDTrimSP Version 6.00 / A. Mutzke [и др.]. — 2019.
94. *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.
95. *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.
96. *Shulga V. I.* Depth distributions of sputtered atoms // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. — 1999. — Апр. — Т. 152, № 1. — С. 49—59.
97. *Шульга В. И.* Комментарий к программе компьютерного моделирования SRIM // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2019. — № 6. — С. 109—112.
98. *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.
99. Molecular Dynamics. — 02.2024. — URL: <https://www.sandia.gov/ccr/focus-area/molecular-dynamics> ; [Online; accessed 3. Feb. 2024].
100. *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.
101. Channeling of hydrogen isotopes in gold and tungsten / D. S. Tensin [и др.] // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. — 2023. — Июль. — Т. 540. — С. 33—37.
102. Радужное рассеяние атомов инертных газов на поверхности кристаллов алюминия и серебра / П. Бабенко [и др.] // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2019. — Т. 155, № 4. — С. 612—619.
103. *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.

104. *Björkas C., Nordlund K.* Variables affecting simulated Be sputtering yields // *Journal of Nuclear Materials*. — 2013. — Т. 439, № 1. — С. 174–179.
105. Computational study of tungsten sputtering by nitrogen / A. Lyashenko [и др.] // *Journal of Nuclear Materials*. — 2020. — Т. 542. — С. 152465.
106. Interatomic potentials for the Be–C–H system / C. Björkas [и др.] // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2009. — Окт. — Т. 21, № 44. — С. 445002.
107. *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.
108. *Luo Y.-R.* Comprehensive handbook of chemical bond energies. — CRC press, 2007.
109. Bond dissociation energies in simple molecules / B. d. Darwent [и др.]. — US Government Printing Office Washington, DC, 1970.
110. *Радциг А., Смирнов Б.* Справочник по атомной и молекулярной физике. (Атомиздат, Москва, 1980). 31. — 1985.
111. 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.
112. *Mann A., Brandt W.* Material dependence of low-velocity stopping powers // *Physical Review B*. — 1981. — Т. 24, № 9. — С. 4999.
113. *А. Н. Зинovieв, 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.
114. IAEA Nuclear Data Services. — 04.2021. — URL: <https://www-nds.iaea.org>; [Online; accessed 1. Feb. 2024].
115. *Falcone G., Gullo F.* Sputtering by light-ion bombardment // *Physics Letters A*. — 1987. — Т. 125, № 8. — С. 432–434.
116. *Пустовит А.* Теоретическая зависимость пороговой энергии распыления мишени от угла падения первичных ионов // *Письма в ЖТФ*. — 2023. — Т. 49, № 1.

117. *Roth J., Bohdansky J., Martinelli A.* Low energy light ion sputtering of metals and carbides // *Radiation Effects*. — 1980. — Т. 48, № 1–4. — С. 213–219.
118. *Smith Jr J. N., Meyer Jr C., Layton J.* Sputtering measurements on controlled thermonuclear reactor materials using Auger electron spectroscopy // *Nuclear Technology*. — 1976. — Т. 29, № 3. — С. 318–321.
119. Распыление вольфрама, окиси вольфрама и перемешанных слоев вольфрама–углерод ионами дейтерия в припороговой области энергий / М. Гусев [и др.] // *Журнал технической физики*. — 1999. — Т. 69, № 9. — С. 137–142.
120. Sputtering data / W. Eckstein [и др.]. — 1993.
121. *Фальконе Д.* Теория распыления // *Усп. физ. наук*. — 1992. — Т. 162, № 1. — С. 71–117.
122. The sputtering mechanism for low-energy light ions / R. Behrisch [и др.] // *Applied physics*. — 1979. — Т. 18. — С. 391–398.
123. *Yang X., Hassanein A.* Atomic scale calculations of tungsten surface binding energy and beryllium-induced tungsten sputtering // *Applied Surface Science*. — 2014. — Т. 293. — С. 187–190.
124. *Brezinsek S.* Plasma-surface interaction in the Be/W environment: Conclusions drawn from the JET-ILW for ITER // *Journal of Nuclear Materials*. — 2015. — Т. 463. — С. 11–21. — PLASMA-SURFACE INTERACTIONS 21.
125. *Eckstein W.* Calculated sputtering, reflection and range values. — 2002.
126. Отражение изотопов водорода и атомов гелия от поверхности первой стенки токамака ИТЭР / Д. Мелузова [и др.] // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. — 2020. — № 7. — С. 98–103.
127. Experimental electronic stopping cross section of tungsten for light ions in a large energy interval / М. Moro [и др.] // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. — 2021. — Т. 498. — С. 1–8.

128. Proton energy loss in solids / E. Sirotinin [и др.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 1984. — Т. 4, № 3. — С. 337—345.
129. On the determination of energy losses by charged particles from the backscattered energy spectra / V. Y. Chumanov [и др.] // physica status solidi (a). — 1979. — Т. 53, № 1. — С. 51—62.
130. *Yamamura Y.* Particle reflection and its energy spectrum from solid surfaces with adsorbate atoms // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 1988. — Т. 33, № 1—4. — С. 429—431.
131. *Oen O. S., Robinson M. T.* Ion backscattering from layered targets. — 1984.
132. *Eckstein W., Verbeek H.* Data on light ion reflection : тех. отч. / Max-Planck-Institut fuer Plasmaphysik. — 1979.
133. Low energy hydrogen and helium ions backscattering from surfaces with structure / V. Bandurko [и др.] // Journal of nuclear materials. — 1990. — Т. 176. — С. 630—634.
134. *Amano J., Seidman D.* Experimental determination of the particle reflection coefficients of low-energy (100–1500 eV)/sup 3/He and/sup 4/He atoms from the (110) plane of tungsten // J. Appl. Phys.;(United States). — 1981. — Т. 52, № 11.
135. *Van Gorkum A., Kornelsen E.* The entrance probability and range of helium in W (100) for energies 8eV to 5000 eV as measured by thermal desorption spectrometry // Radiation Effects. — 1980. — Т. 52, № 1/2. — С. 25—33.
136. *Robinson M. T.* The reflection of low energy helium atoms from tungsten surfaces // Journal of Nuclear Materials. — 1981. — Т. 103. — С. 525—529.
137. *Jackson D., Eckstein W.* The scattering of keV H and He ions from tungsten and tungsten oxide // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. — 1982. — Т. 194, № 1—3. — С. 671—675.
138. *Borovikov V., Voter A. F., Tang X.-Z.* Reflection and implantation of low energy helium with tungsten surfaces // Journal of Nuclear Materials. — 2014. — Т. 447, № 1—3. — С. 254—270.

139. *Eckstein W.* Charge-state fractions of hydrogen backscattered from gold // Phys. Rev. B. — 1976. — Т. 14, № 8. — С. 3231—3237.
140. *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.
141. *Lawson J.* Some criteria for a useful thermonuclear reactor // Atomic Energy Research Establishment. — 1955.
142. A new look at density limits in tokamaks / M. Greenwald [и др.] // Nucl. Fusion. — 1988. — Дек. — Т. 28, № 12. — С. 2199.
143. Modelling of beryllium erosion–redeposition on ITER first wall panels / S. Carpentier [и др.] // J. Nucl. Mater. — 2011. — Авг. — Т. 415, 1, Supplement. — S165—S169.
144. Modelling of tritium retention and target lifetime of the ITER divertor using the ERO code / A. Kirschner [и др.] // J. Nucl. Mater. — 2007. — Июнь. — Т. 363—365. — С. 91—95.
145. Assessment of neutral particle analysis abilities to measure the plasma hydrogen isotope composition in ITER burning scenarios / V. I. Afanasyev [и др.] // Plasma Phys. Controlled Fusion. — 2013. — Март. — Т. 55, № 4. — С. 045008.
146. Finalizing the ITER divertor design: The key role of SOLPS modeling / A. S. Kukushkin [и др.] // Fusion Eng. Des. — 2011. — Дек. — Т. 86, № 12. — С. 2865—2873.
147. 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.
148. DOUBLE-MC Code: Modeling of Neutral Fluxes from Plasma / M. I. Mironov [и др.] // Plasma Phys. Rep. — 2021. — Янв. — Т. 47, № 1. — С. 18—27.
149. *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.

150. *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.
151. *Makarov S., Kaveeva E.* SOLPS-ITER modeling of beryllium trace impurity in ITER // MATEC Web of Conferences. Т. 245. — EDP Sciences. 2018. — С. 13002.
152. Recommended Data on the Electron Impact Ionization of Light Atoms and Ions / K. L. Bell [и др.] // J. Phys. Chem. Ref. Data. — 1983. — Окт. — Т. 12, № 4. — С. 891—916.
153. *Kwon D.-H., Rhee Y.-J., Kim Y.-K.* Ionization of W and W⁺ by electron impact // Int. J. Mass Spectrom. — 2006. — ИЮНЬ. — Т. 252, № 3. — С. 213—221.
154. On mechanisms of impurity leakage and retention in the tokamak divertor / I. Y. Senichenkov [и др.] // Plasma Phys. Controlled Fusion. — 2019. — Март. — Т. 61, № 4. — С. 045013.
155. Soledge2D-Eirene simulations of the Pilot-PSI linear plasma device compared to experimental data / K. Jesko [и др.] // Contrib. Plasma Phys. — 2018. — ИЮЛЬ. — Т. 58, № 6—8. — С. 798—804.
156. Structure of the classical scrape-off layer of a tokamak / V. Rozhansky [и др.] // Plasma Phys. Controlled Fusion. — 2018. — ЯНВ. — Т. 60, № 3. — С. 035001.
157. W transport and accumulation control in the termination phase of JET H-mode discharges and implications for ITER / F. Köchl [и др.] // Plasma Phys. Controlled Fusion. — 2018. — ИЮНЬ. — Т. 60, № 7. — С. 074008.