На правах рукописи

Мелузова Дарья Сергеевна

Моделирование ионного облучения кристаллических

и аморфных мишеней, включая материалы первой

стенки токамака-реактора

01.04.04 – Физическая электроника

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2021 год

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

Научный руководитель:

Зиновьев Александр Николаевич, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник - заведующий лабораторией, ФТИ им. Иоффе

Научный консультант:

Шергин Андрей Петрович, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, профессор, ФТИ им. Иоффе

Официальные оппоненты:

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

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

Ведущая организация:

Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова

Защита состоится «27» мая 2021 г. в 14.00 часов на заседании диссертационного совета ФТИ 34.01.03 ФГБУН Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук по адресу: 194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26. E-mail: post@mail.ioffe.ru

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

Автореферат разослан « » 2021 г.

Отзывы и замечания по автореферату, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

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

А. В. Белашов

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования

Изучение процессов взаимодействия пучков ионов с твёрдым телом является фундаментальной научной задачей. Несмотря на значительный прогресс в данной области, достигнутый за последние годы, остаётся ряд нерешённых вопросов, имеющих принципиальное значение, обсуждению которых посвящены многочисленные международные конференции. Известно также, что облучение поверхности пучками ионов находит все более широкое практическое применение в науке и технике. Так, например, ионная имплантация применяется в качестве способа легирования материалов для улучшения их физических и химических свойств.

Одно из актуальных направлений в данной области, которое требует глубокого понимания физических процессов и в то же время обладает крайне перспективной практической значимостью – изучение взаимодействия плазмы с поверхностью. Крупным шагом в осуществлении управляемой термоядерной реакции является международная кооперация по созданию токамака ИТ-ЭР, в которой Россия принимает активное участие. Работа реактора будет происходить в условиях, когда материалы первой стенки и дивертора (бериллий, вольфрам, углерод) будут подвергаться воздействию чрезвычайно интенсивных потоков нейтронов, ионов, электронов и излучения. Проблема взаимодействия плазмы с перечисленными материалами является решающей для эффективной работы токамака-реактора, т.к. поступление в плазму сколько-нибудь значительного количества примесей приведет к затуханию термоядерной реакции.

Работа ИТЭР планируется на смеси дейтерия и трития. При бомбардировке первой стенки и дивертора частицами, покидающими плазму, будет происходить как внедрение частиц, так и их отражение. Внедрение изотопов водорода в материал первой стенки будет вызывать разогрев поверхностных слоев и образование дефектов. Отражение частиц эквивалентно дополнительному поступлению топлива в плазму и должно учитываться. Кроме того, данные о коэффициентах отражения и энергетических спектрах отраженных частиц важны для обеспечения работы приборов корпускулярной диагностики ионной компоненты плазмы и для расчета баланса топлива в плазме токамака.

Современная ситуация с экспериментальными данными обстоит следую-

щим образом. Данные по отражению ионов изотопов водорода от бериллия отсутствуют, а для вольфрама и углерода крайне ограничены [1; 2]. Данные о коэффициентах распыления вольфрама и их угловых зависимостях являются предметом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований [3— 6]. Также чрезвычайно актуальным представляется изучение закономерностей энерговыделения и образования дефектов в поверхностных слоях материалов первой стенки при бомбардировке частицами плазмы. Развитие методов моделирования позволяет восполнить указанные пробелы.

Целью настоящей работы являлась разработка методов моделирования взаимодействия атомных пучков с твердым телом, позволяющих учитывать особенности строения мишени и современные данные о характере взаимодействия атома с атомами твёрдого тела, а также проведение расчётов основных процессов, имеющих место при ионном облучении кристаллических и аморфных мишеней, включая материалы первой стенки токамака-реактора. Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

1. Разработка численных кодов для моделирования взаимодействия пучков ионов и атомов с твёрдым телом.

2. Проведение моделирования явления радужного рассеяния атомов на поверхности различных кристаллов, а также разработка процедуры получения информации о потенциале взаимодействия атома с поверхностью из экспериментальных данных.

3. Расчёт коэффициентов отражения изотопов водорода и атомов гелия от мишеней из бериллия, углерода и вольфрама, представляющих интерес для термоядерных исследований, и анализ полученных данных.

4. Анализ влияния вида потенциала на моделирование пробегов изотопов водорода и атомов гелия в аморфном вольфраме.

5. Анализ эволюции пространственного распределения каналируемого пучка при облучении кристаллического вольфрама изотопами водорода.

6. Исследование распределения энерговыделения по глубине при бомбардировке бериллия, углерода и вольфрама изотопами водорода и оценка накопления частиц плазмы в первой стенке токамака-реактора.

7. Расчёт коэффициентов распыления вольфрама ионами бериллия.

4

Научная новизна

• Исследование явления радужного рассеяния и развитие методики получения данных о потенциале взаимодействия «налетающая частица - поверхность» из экспериментальных данных показали, что взаимодействие атома с поверхностью описывается потенциалом, отличным от известных моделей парного потенциала.

• В результате моделирования рассеяния лёгких атомных частиц на поверхности мишеней из бериллия, углерода и вольфрама получен ряд величин, по которым ограничены или вовсе отсутствуют экспериментальные данные: коэффициенты отражения для большого числа комбинаций атомов и мишеней, а также коэффициенты распыления и их угловые зависимости для случая бомбардировки аморфного вольфрама ионами бериллия.

• Проведён подробный анализ влияния притягивающей ямы в потенциалах взаимодействия «налетающая частица - твёрдое тело» на процесс отражения атомов от твёрдого тела, а также оценено влияние ямы на величину пробега атома в аморфной мишени.

• Предложена оригинальная модель, объясняющая универсальность поведения коэффициентов распыления в припороговой области при бомбардировке вольфрама легкими ионами.

• Обнаружено, что при энергиях ниже 100 кэВ характер распределения энерговыделения по глубине при бомбардировке аморфной поверхности вольфрама атомами дейтерия отличен от традиционных представлений – максимум энерговыделения лежит вблизи поверхности облучаемого материала.

• Обнаружено, что в режиме каналирования образуется устойчивая пространственная структура пучка частиц, сохраняющаяся на большей части пути частиц в канале. Предложена схема эксперимента по исследованию топографии кристалла и определению характеристик каналирования на основе анализа угловых и энергетических распределений вылетевших частиц.

Практическая значимость

Одним из направлений данного исследования являлось моделирование взаимодействия атомных частиц с материалами, имеющими первостепенное значение для термоядерных исследований: вольфрамом, бериллием и углеродом. Исследуемые энергетические диапазоны включают в себя типичные энергии частиц плазмы в токамаке. При проведении расчётов коэффициентов отражения и распыления, пробегов и энерговыделения учитывалось частичное или полное отсутствие экспериментальных данных для некоторых актуальных комбинаций мишени и бомбардирующих её частиц, поэтому результаты моделирования могут быть использованы для восполнения существующих пробелов. Распределение энерговыделения по глубине мишени, рассчитанное для условий, типичных для токамака-реактора ИТЭР, позволило сделать крайне важный вывод о накоплении трития в первой стенке токамака-реактора.

Значительная часть работы также посвящена анализу моделей взаимодействия атомов с твёрдым телом – вопросу, который важен для совершенствования методов моделирования обсуждаемых процессов. Так, исследование радужного рассеяния на поверхности кристаллов и оценка влияния притягивающей части потенциалов взаимодействия на отражение и глубину проникновения атомных частиц позволили оценить применимость широко используемых моделей парных потенциалов.

Основные положения выносимые на защиту

1. Впервые полученные из анализа экспериментальных данных о радужном рассеянии атомов на поверхности различных кристаллов величины потенциалов взаимодействия налетающей частицы с поверхностью для комбинаций Ar–Ag(111), Ar–Al(111), Ne, Ar, Kr–Al(001), которые не могут быть описаны известными моделями парного потенциала.

2. Обнаружение сильного влияния притягивающей ямы в потенциалах взаимодействия «налетающая частица-поверхность» на процесс отражения атомов при энергиях менее 1 кэВ и оценка этого влияния на величину пробега атома в аморфных телах на основании расчёта коэффициентов отражения и пробегов при рассеянии изотопов водорода и атомов гелия от поверхности мишеней из аморфных бериллия, углерода и вольфрама.

3. Обнаружение образования устойчивой пространственной структуры пучка частиц, движущихся в кристалле и захваченных в канал, которая сохраняется вплоть до расстояний, составляющих до 90% от пробега частиц.

4. Значения коэффициентов распыления и их угловые зависимости при бомбардировке аморфного вольфрама ионами Ве и Ne. Модель, объясняющая универсальность зависимости коэффициентов распыления от энергии в припороговой области при бомбардировке вольфрама лёкими ионами.

Степень достоверности научных результатов

На достоверность полученных результатов указывает то, что при выполении моделирования в рамках диссертационного исследования при подборе

6

параметров моделирования были использованы самые современные и актуальные данные. Основные потенциалы взаимодействия, которые использовались в данной работе, были разработаны с использованием теории функционала плотности, которая является широко применяемым вычислительным методом расчёта электронной структуры молекул и конденсированного вещества; параметры данных потенциалов были сопоставлены с экспериментальными данными, а расчёты, выполненные с их использованием, хорошо согласуются с результатами экспериментов.

Во всех исследованиях в данной работе проводилось сопоставление с независимыми экспериментальными и/или расчётными данными. При отсутствии экспериментальных данных для исследуемой комбинации атом-мишень проводилось предварительное моделирование с хорошо изученой мишенью (или атомом) с целью подтверждения корректности используемых методов и параметров.

Апробация работы и публикации

По результатам исследования опубликованы 13 статей в рецензируемых научных журналах. 13 публикаций индексируются в Web of Science.

Основные результаты проведённого исследования представлены на следующих международных конференциях: 27th International Conference on Atomic Collisions in Solids, (Lanzhou, China, 2016), 28th International Conference on Atomic Collisions in Solids (Caen, France, 2018), Международная Тулиновская конференция по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва, 2017, 2018, 2019), International Conference on Ion Surface Interactions (Москва, 2017, 2019), International Conference on Advances and Applications in Plasma Physics (Санкт-Петербург, 2019).

Доклады по теме диссертационного исследования трижды награждались дипломами международных конференций. В 2019/20 учебном году в период работы над диссертационным исследованием Мелузова Д.С. была получателем Стипендии Правительства РФ для аспирантов.

Личный вклад автора

Автором был усовершенствован численный код для моделирования рассеяния частиц на твёрдом теле в приближении парных столкновений, самостоятельно разработаны численные коды, основанные на методах траекторий и молекулярной динамики, позволяющие проводить моделирование прохождения атомных частиц через твёрдое тело и его распыление, соответственно. Автором были проведены описанные в работе численные эксперименты, а также обработаны и обобщены полученные данные. Обсуждение и интерпретация полученных результатов проводилась совместно с научным руководителем и соавторами публикаций.

Структура и объём диссертации

Диссертация состоит из введения, трёх глав и заключения. Общий объём – 116 страниц. Диссертация содержит 42 рисунка, 8 таблиц. Список литературы включает 101 наименование.

Содержание работы

Введение обосновывает актуальность диссертационной работы, содержит цель и задачи исследования, научную новизну и практическую значимость полученных результатов, а также положения, выносимые на защиту.

Первая глава представляет собой обзор литературы по теме диссертационной работы. В ней охарактеризованы методы моделирования взаимодействия пучков атомных частиц с твёрдым телом, а также описано современное состояние исследований в области взаимодействия изотопов водорода и гелия с материалами поверхностей, контактирующих с плазмой в токамаке.

В разделе 1.1 описаны базовые подходы к моделированию взаимодействия атомных частиц с твёрдым телом [7]: приближение парных столкновений (ВСА) и классический динамический подход (молекулярная динамика, MD). В начале раздела приведены краткие исторические сведения о разработке методов. Для каждого из методов дано описание принципов моделирования и условий применимости. Охарактеризованы широко используемые программы (SRIM [8], MARLOWE [9], LAMMPS [10]), построенные на данных методах, приведены достоинства и недостатки этих программ. Помимо базовых методов ВСА и MD описан частный случай метода MD, который в некоторых источниках называют recoil interaction approximation (RIA) [11], но в данной работе отдано предпочтение названию «метод траекторий». В конце раздела сделаны выводы об актуальности разработки кода для моделирования взаимодействия атомных частиц с твёрдым телом, свободного от недостатков существующих программ, а также обоснован выбор методов BCA и траекторий в качестве основных методов моделирования, используемых в данной работе.

В разделе 1.2 представлен обзор наиболее актуальных результатов ис-

следований в областях, представляющих интерес для данной работы. В *п.1.2.1* рассмотрено описание тормозных потерь в рамках теории Линдхарда-Шарфа-Шиотта [12], и проведён обзор результатов экспериментального и теоретического изучения таких вопросов, как глубина проникновения ионов гелия и изотопов водорода в материалы из вольфрама, бериллия и углерода, распределение энергии, передаваемой материалам атомными частицами, а также отражение атомных частиц от поверхности рассматриваемых материалов. Несмотря на то, что перечисленные вопросы являются предметом интенсивных исследований, экспериментальные данные зачастую немногочисленны или вовсе отсутствуют. В п.1.2.2 охарактеризована актуальность изучения явления каналирования и роль компьютерного моделирования в данных исследованиях. В *п.1.2.3* рассмотрена проблема получения информации о взаимодействии налетающего атома с поверхностью из экспериментальных данных: описана основополагающая работа В.И. Шульги [13], в которой он предложил использовать значение энергии фокусировки в поверхностном полуканале для получения параметров потенциала, а также современные работы, исследующие возможности использования явления радужного рассеяния для решения данной задачи. В *п.1.2.4* приведены источники, содержащие данные о коэффициентах распыления, полученные как экспериментально, так и путём расчёта. Проведён обзор работ, посвящённых экспериментальным и теоретическим исследованиям распыления вольфрама ионами термоядерной плазмы и примесными ионами. Отмечено отсутствие экспериментальных данных по распылению вольфрама бериллием, хотя, как показано в работе [14], поступление атомов бериллия в плазму токамака и их последующее ускорение приводит к распылению дивертора. В *п.1.2.5* сделано обобщающее заключение по обзору современного состояния исследований. Дальнейшее изучение перечисленных проблем остаётся актуальной задачей вследствие нехватки экспериментальных данных для ряда фундаментальных процессов. Для достоверного численного изучения вопросов взаимодействия атомов с твёрдым телом необходимо уточнение ряда параметров, в частности, потенциалов взаимодействия.

В <u>разделе 1.3</u> сформулированы цель и задачи диссертационного исследования.

Вторая глава содержит описание кода для моделирования взаимодействия атомных пучков с твердотельными мишенями. Данный код был создан с учётом недостатков существующих программ, в нём реализованы два подхода

9

к моделированию: ВСА и метод траекторий. Универсальность кода позволяет анализировать широкий ряд величин, характеризующих взаимодействие атомных частиц с твёрдым телом. Методики, описанные в главе, опубликованы в статьях [A1—A5].

В <u>разделах 2.1-2.4</u> охарактеризованы разработанные методики описания различных типов мишеней (кристалл, поликристалл и аморфное твёрдое тело), начальные условия и условия завершения моделирования, подробно описаны выработанные алгоритмы моделирования методами BCA и траекторий.

В разделах 2.5-2.7 описан ряд параметров, выбор которых значительно влияет на результат моделирования. Потенциал взаимодействия частицы с твёрдым телом - наиболее важный параметр. Как было продемонстрировано в работе [15], использование теории функционала плотности (DFT) для определения потенциала даёт результат, который лучше согласуется с экспериментальными данными, чем широко-используемые модели парных потенциалов (рис. 1). В разделе 2.5 аргументировано использование оригинальных потенциалов DFT при выполнении моделирования в данной работе. В разделах 2.6-2.7 описаны используемые значения и методики учёта электронных тормозных способностей и тепловых колебаний атомов твёрдого тела.



Рис. 1: Сравнение потенциала, полученного методом DFT, с потенциалами ZBL [16] и Зиновьева [17] для комбинации D-W. U_0 - притягивающая яма в потенциале, предсказанная методом DFT.

Третья глава содержит результаты моделирования и анализа различных процессов, имеющих место при ионном облучении кристаллических и аморфных мишеней, включая материалы первой стенки токамака-реактора.

В разделе 3.1 рассмотрены методы описания радужного рассеяния на примере рассеяния атомов Ar на поверхности кристаллов Al(111) и Ag(111), а также исследованы возможности использования данного эффекта для определения параметров поверхности и взаимодействия атомов с твёрдым телом. Анализ структуры пиков, возникающих при радужном рассеянии, позволяет достаточно точно определить величину тепловых колебаний атомов поверхности, а с помощью использования зависимости значения радужного угла от начальной энергии бомбардирующих частиц также можно определить параметры потенциала взаимодействия «налетающий атом – поверхность». С помощью разработанного метода рассчитаны амплитуда тепловых колебаний: для Al $\sigma = 0,123 \pm 0,007$ Å и для Ag $\sigma = 0,120 \pm 0,013$ Å - значения согласуются с результатами независимых измерений. Получены потенциалы взаимодействия для комбинаций Ar-Ag(111), Ar-Al(111), Ar-Al(001), Ne-Al(001), Kr-Al(001). Результаты моделирования, полученные с использованием предложенной формы двухчастичного потенциала, находятся в согласии с экспериментальными данными. Результаты опубликованы в статьях [А6—А8].

Раздел 3.2 посвящён изучению отражения атомов H, D, T, He от аморфных мишеней из W, Be, C. Понимание процесса отражения атомов от поверхностей в токамаке-реакторе играет важную роль при определении параметров плазмы и для анализа тепловой нагрузки на материалы. Экспериментальные данные по коэффициентам отражения от Ве отсутствуют, а для С и W они крайне ограничены [1; 2]. Проанализировано влияние формы потенциала взаимодействия на моделирование процесса отражения: обнаружено неожиданно сильное влияние ямы в потенциалах взаимодействия на результат, которое проявляется при энергиях порядка сотен эВ (рис. 2). Получены коэффициенты отражения для всех изучаемых комбинаций атомов H, D, T, Не и аморфных мишеней Ве, С, W, расчёт проведён с использованием DFT потенциала с ямой. Диапазон энергий налетающих частиц 100 эB ÷ 10 кэВ был выбран для исследования, так как он соответствует типичным энергиям частиц плазмы. Сравнение с результатами независимых расчётов, которое возможно при энергиях > 1 кэВ, когда выбор потенциала слабо влияет на результат, показало удовлетворительное согласие с полученными значениями. Проведено сравнение зависимостей коэффициента отражения от энергии для всех изотопов водорода при различных углах скольжения, и показано влияние тормозных способностей на процесс отражения. Также проведён анализ

характера зависимости коэффициента отражения от параметра Линхарда E_{\perp} в случае отражения атомов Не от изучаемых поверхностей. Результаты опубликованы в статьях [A2—A4; A9].



Рис. 2: Коэффициенты отражения различных изотопов водорода с энергией 100 эВ от мишени из Ве в зависимости от угла падения (отсчитывается от поверхности) при использовании потенциалов DFT (с ямой) и ZBL (яма отсутствует).

В разделе 3.3 описано моделирование прохождения атомов H, D, He через аморфные мишени. Достоверные данные о пробегах перечисленных атомов в аморфном вольфраме отсутствуют. Знание пробегов атомов требуется для оценки образования дефектов в токамаке-реакторе и накопления изотопов водорода в материале. С целью проверки применимости разработанного кода для расчёта пробегов, на первом шаге исследования были проведены расчёты пробегов атомов в кремнии (рис. 3), так как по ним существует большое количество экспериментальных и расчётных данных, согласие с которыми было выявлено при расчёте пробегов с использованием составного потенциала с притягивающей ямой. С использованием DFT потенциала были рассчитаны значения средних пробегов атомов H, D, He в мишени из аморфного W для различных значений начальной энергии бомбардирующих атомов, предложены формулы для описания полученных результатов, также проведена оценка влияния притягивающей ямы в потенциале на результаты расчёта пробегов (рис. 4). Для комбинаций H-Si и D-W выявлено отличие полученных результатов от значений из таблиц пробегов, приведённых в базе данных SRIM,

что позволяет сделать вывод от том, что таблицы SRIM нуждаются в корректировке. Получены распределения пробегов по глубине для исследуемых комбинаций бомбардирующих частиц и мишеней в энергетическом диапазоне 0.1-100 кэВ. Для D-W и H-Si полученные распределения описаны характеристиками, позволяющими построить распределения пробегов по глубине, не прибегая к расчётам. Результаты опубликованы в статье [A5].



Рис. 3: Зависимость среднего пробега от энергии налетающих частиц для комбинации H-Si: расчёты методами траекторий и BCA, табличные значения из SRIM, экспериментальные данные: треугольники – [18], кружки – [19].



Рис. 4: Сравнение расчётных зависимостей среднего пробега от энергии налетающих частиц для комбинаций H-W, D-W, He-W, полученных с использованием потенциалов DFT (сплошные линии) и ZBL (штриховые линии).

В <u>разделе 3.4</u> представлены результаты моделирования явления каналирования в кристаллических мишенях. Рассчитаны пробеги атомов H и D в Si(100) и W(100). Показано изменение характера распределения пробегов по глубине в зависимости от энергии атомов, а именно то, что с ростом начальной энергии в распределении пробегов выделяются две компоненты: одна – проявление случайного рассеяния атомных частиц в поверхностных слоях, а другая характеризует частицы, захваченные в канал (рис. 5). Проанализирована эволюция пространственного распределения атомных частиц, захваченных в канал: показано сохранение чёткого пространственного распределения вплоть до глубины, составляющей до 90% от пробега частицы (рис. 6). Предложена схема эксперимента по анализу характеристик кристалла на основе угловых распределений вылетевших частиц, которые были захвачены в канал. Результаты опубликованы в статье [А10].



Рис. 5: Распределения пробегов по глубине материала для комбинации D-W(100) в случае ориентации пучка под углом 0° к нормали с энергией налетающих частиц в диапазоне 0.1-100 кэВ.

<u>Раздел 3.5</u> содержит исследование распределения энерговыделения по глубине аморфных мишеней при бомбардировке атомами H, D, T. Рассчитано распределение линейных потерь энергии по глубине при облучении материалов из Be, C, W изотопами водорода. Показано, что основное энерговыделение происходит в поверхностных слоях материала. В случае бомбардировки вольфрама протонами показано резкое различие распределений энерговыделения



Рис. 6: Зависимость пространственного распределения частиц, захваченных в канал, от пройденного расстояния на глубине 1000, 3000, 9000 Å для комбинации D-W(100), начальная энергия 100 кэВ. На осях – расстояние в Å. Цветовая шкала показывает количество частиц, зарегистрированных в каждой точке пространства. Пунктирный квадрат – область облучения пучком D, соответствующая одному каналу кристалла.

для разных диапазонов начальных энергий (рис. 7): для энергий менее 100 кэВ максимальное энерговыделение происходит вблизи поверхности, для энергий свыше 200 кэВ наблюдается брэгговский пик. Контрастность брэгговского пика при E < 10 МэВ невелика. Вне пика имеет место заметное энерговыделение, что должно учитываться в медицинских исследованиях. Рассчитано энерговыделение на одну падающую частицу при облучении указанных материалов атомами с широким энергетическим спектром, характерным для токамака ИТЭР. Показано, что атомы трития, в среднем, проникают глубже в материал стенки, чем атомы дейтерия, что может приводить к их накоплению. Результаты опубликованы в статьях [A11; A12].



Рис. 7: Распределение энерговыделения (линейных потерь энергии) по глубине материала для ионов Н при бомбардировке W. Цифры у кривых указывают начальную энергию в кэВ. (а) - диапазон энергий 0.1-100 кэВ. (b) - диапазон энергий 200-10000 кэВ.

В <u>разделе 3.6</u> описаны результаты изучения распыления мишени из аморфного вольфрама лёгкими ионами. Для моделирования распыления был разработан специальный код, основанный на принципах молекулярной динамики (MD) и оптимизированный под специфику поставленной задачи. Рассчитаны коэффициенты распыления вольфрама ионами Ne с целью сравнения с существующими экспериментальными данными и проверки правильности расчёта. Основной задачей был расчёт коэффициентов распыления вольфрама бериллием, по которым отсутствуют экспериментальные данные. Для обоих комбинаций были получены зависимости коэффициента отражения от энергии налетающих частиц (рис. 8) и от угла падения. В случае Ne продемонстрировано согласие с экспериментальными данными [20]. Разработана модель аналитического расчёта коэффициентов распыления вольфрама лёгкими ионами (модель BSS - рис. 8), которая объясняет универсальность зависимостей коэффициентов распыления от энергии в припороговой области. Результаты опубликованы в статье [A13].



Рис. 8: Зависимость коэффициента распыления вольфрама от энергии бомбардирующих ионов (а) неона, (b) бериллия. Помимо результатов расчёта методом MD и с помощью модели BSS приведены расчёты по формуле Ямамуры [21] и программой SRIM, а также результаты, полученные с помощью ACAT [22], SDTrimSP [3] и LAMMPS [23]. Экспериментаьные данные для Ne-W – [20].

В Заключении перечислены основные результаты работы:

1. Разработан численный код для моделирования взаимодействия пучков ионов и атомов с твёрдым телом, который успешно применен для моделирования следующих процессов: прохождение атомов через кристалл и аморфное твёрдое тело, рассеяние, распыление.

2. Определены амплитуды тепловых колебаний атомов в кристалических Al и Ag – это сделано с помощью анализа структуры пиков в угловом распределении отражённых частиц, которые возникают при радужном рассеянии атомов на поверхности кристалла. Полученные значения амплитуд тепловых колебаний находятся в согласии результатами независимых измерений. С помощью использования зависимости значения радужного угла от начальной энергии бомбардирующих частиц получены потенциалы взаимодействия для комбинаций Ar-Ag(111), Ar-Al(111), Ar-Al(001), Ne-Al(001), Kr-Al(001), которые хорошо описывают эксперимент и значительно отличаются от известных моделей парного потенциала.

3. Получены коэффициенты отражения для всех комбинаций атомов H, D, T, He и аморфных поверхностей Be, C, W в диапазоне энергий от 100 эВ до 10 кэВ при различных углах падения налетающих частиц. Проанализировано влияние формы потенциала взаимодействия на моделирование процесса отражения: обнаружено неожиданно сильное влияние притягивающей ямы в потенциале на результат при энергиях порядка сотен эВ.

4. Рассчитаны пробеги атомов H, D, He в аморфных Si и W, а также проанализировано влияние модели потенциала взаимодействия «налетающая частица - твёрдое тело» на результаты моделирования. Предложены формулы для описания полученных результатов. Получены распределения пробегов по глубине в энергетическом диапазоне 0.1-100 кэВ. Для комбинаций D-W и H-Si полученные распределения описаны характеристиками, позволяющими построить распределения пробегов по глубине, не прибегая к расчётам.

5. В результате моделирования явления каналирования в кристаллических мишенях рассчитаны пробеги атомов H и D в Si(100) и W(100), показано изменение характера распределения пробегов по глубине в зависимости от энергии атомов и проведён анализ эволюции пространственного распределения каналируемого пучка в W(100), который показал образование чёткой пространственной структуры каналируемого пучка, сохраняющейся на 90% пути частиц в канале.

6. Показано преобладание энерговыделения вблизи поверхности мишени при бомбардировке аморфных поверхностей Ве, С, W изотопами водорода с энергиями до 100 кэВ и дальнейшим появлением брэгговского пика в распределении энерговыделения по глубине при энергиях ≥ 200 кэВ. На основе полученных распределений рассчитано энерговыделение на одну падающую частицу при облучении указанных материалов атомами с широким энергетическим спектром, характерным для токамака ИТЭР. Сделан вывод о возможном накоплении трития в первой стенке токамака-реактора.

7. Рассчитаны зависимости коэффициентов распыления W ионами Ne и Ве от энергии и угла падения налетающих частиц. Разработана модель аналитического расчёта коэффициентов распыления вольфрама лёгкими ионами, объясняющая универсальность зависимостей коэффициентов распыления от энергии в припороговой области.

18

Список публикаций

- А1. Мелузова Д. С., Бабенко П. Ю., Шергин А. П., Зиновъев А. Н. Моделирование рассеяния частиц на аморфных и поликристаллических мишенях // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2019. — № 4. — С. 74—78. — DOI: 10.1134/ S0207352819040127.
- A2. Meluzova D. S., Babenko P. Y., Shergin A. P., Nordlund K., Zinoviev A. N. Reflection of hydrogen and deuterium atoms from the beryllium, carbon, tungsten surfaces // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. 2019. T. 460. C. 4-9. DOI: 10.1016/j.nimb.2019. 03.037.
- А3. Мелузова Д. С., Бабенко П. Ю., Шергин А. П., Зиновъев А. Н. Влияние глубины потенциальной ямы на отражение атомов дейтерия от поверхности вольфрама // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2020. — № 3. — С. 84—88. — DOI: 10.1134/S1028096020030115.
- А4. Мелузова Д. С., Бабенко П. Ю., Шергин А. П., Зиновъев А. Н. Отражение изотопов водорода и атомов гелия от поверхности первой стенки токамака ИТЭР // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2020. № 7. С. 98—103. DOI: 10.31857/S1028096020070146.
- А5. Мелузова Д. С., Бабенко П. Ю., Шергин А. П., Зиновьев А. Н. Пробеги атомов водорода, дейтерия, гелия в аморфных кремнии и вольфраме // Журнал технической физики. 2020. Т. 90, № 1. С. 155—160. DOI: 10.21883/JTF.2020.01.48678.89-19.
- A6. Babenko P. Y., Meluzova D. S., Shergin A. P., Zinoviev A. N. Many-particle interactions and rainbow effects in grazing scattering of Ar atoms on the Al(111), Ag(111) crystals // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. 2017. T. 406. C. 460-464. DOI: 10.1016/j.nimb.2016.12.040.
- А7. Бабенко П. Ю., Зиновьев А. Н., Мелузова Д. С., Шергин А. П. Аномальный коэффициент отражения ионов от кристалла в режиме поверхностного каналирования // Поверхность. Рентгеновские, синхро-

тронные и нейтронные исследования. — 2018. — № 6. — С. 7—12. — DOI: 10.7868/S0207352818060021.

- А8. Бабенко П. Ю., Мелузова Д. С., Солоницына А. П., Шергин А. П., Зиновьев А. Н. Радужное рассеяние атомов инертных газов на поверхности кристаллов алюминия и серебра // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2019. — Т. 155, № 4. — С. 612—619. — DOI: 10.1134/S0044451019040047.
- A9. Babenko P. Y., Deviatkov A. M., Meluzova D. S., Shergin A. P., Zinoviev A. N. Reflection coefficients of particles scattered at surfaces: H, D-W, H, Ar-Al and D-C, Ar-Ge // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. 2017. T. 406. C. 538-542. DOI: 10.1016/j. nimb.2016.12.043.
- А10. Мелузова Д. С., Бабенко П. Ю., Шергин А. П., Зиновъев А. Н. Пространственное распределение каналируемых ионов и пробеги изотопов водорода в кристаллическом кремнии и вольфраме // Письма в Журнал технической физики. — 2020. — Т. 46, № 5. — С. 34—37. — DOI: 10.21883/PJTF.2020.05.49106.18034.
- А11. Мелузова Д. С., Бабенко П. Ю., Миронов М. И., Михайлов В. С., Шергин А. П., Зиновъев А. Н. Энерговыделение при бомбардировке атомами дейтерия поверхности вольфрама // Письма в Журнал технической физики. — 2019. — Т. 45, № 11. — С. 51—54. — DOI: 10.21883/PJTF.2019.11.47827.17771.
- A12. Meluzova D., Babenko P., Mironov M., Mikhailov V., Shergin A., Zinoviev A. Energy release in Be, C and W due to irradiation with D and T atoms // AIP Conference Proceedings. 2019. T. 2179, № 1. C. 020018. DOI: 10.1063/1.5135491.
- А13. Мелузова Д. С., Бабенко П. Ю., Зиновьев А. Н., Шергин А. П. Распыление вольфрама ионами бериллия и неона // Письма в Журнал технической физики. — 2020. — Т. 46, № 24. — С. 19—22. — DOI: 10.21883/PJTF.2020.24.50422.18487.

Цитируемая литература

- Bandurko V. V., Koborov N. N., Kurnaev V. A., Sotnikov V. M., Zabeyda O. V. Low energy hydrogen and helium ions backscattering from surfaces with structure // Journal of Nuclear Materials. — 1990. — T. 176/177. — C. 630—634.
- Chen C. K., Scherzer B. M. U., Eckstein W. Trapping and reflection coefficients for deuterium in graphite at oblique incidence. // Appl. Phys. A. - 1984. - T. 33. - C. 265-268.
- Brezinsek S. Plasma-surface interaction in the Be/W environment: Conclusions drawn from the JET-ILW for ITER // Journal of Nuclear Materials. — 2015. — T. 463. — C. 11—21.
- Doerner R. P. Low-energy sputtering yields of tungsten and tantalum // Journal of Vacuum Science & Technology A. - 2005. - T. 23, № 6. -C. 1545-1547.
- Nogami K., Sakai Y., Mineta S., Kato D., Murakami I., Sakaue H. A., Kenmotsu T., Furuya K., Motohashi K. Level-energy-dependent mean velocities of excited tungsten atoms sputtered by krypton-ion bombardment // Journal of Vacuum Science & Technology A. - 2015. - T. 33, № 6. -C. 061602.
- Hua X.-m., He H.-y., Ding W.-y., Ding R., Chen J.-l., Pan B.-c. Theoretical Simulations of Irradiation-Induced Sputtering at Tungsten Surface // Chinese Journal of Chemical Physics. — 2017. — T. 30, № 1. — C. 77—82.
- 7. Экштайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. Москва : Мир, 1995.
- 8. Ziegler J. F., Biersack J. P. http://srim.org.
- 9. http://oecd-nea.org/tools/abstract/detail/psr-0137.
- 10. http://lammps.sandia.gov.
- Nordlund K., Kuronen A. Molecular dynamics simulation of ion ranges at keV energies // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. - 1996. - T. 115, № 1. - C. 528-531.

- Lindhard J., Nielsen V., Scharff M. Approximation method in classical scattering by screened coulomb fields. // Kgl. Dan. Vidensk. Selsk. , Mat. -Fys. Medd. - 1968. - T. 36. - C. 1-32.
- Шульга В. И. Использование полуканальной фокусировки для проверки и определения параметров ионно-атомных потенциалов // ЖТФ. – 1982. — Т. 52, № 3. — С. 534.
- 14. Babenko P. Y., Mironov M. I., Mikhailov V. S., Zinoviev A. N. 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 Physics and Controlled Fusion. — 2020. — T. 62, № 4. — C. 045020.
- Zinoviev A., Nordlund K. Comparison of repulsive interatomic potentials calculated with an all-electron DFT approach with experimental data // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. - 2017. - T. 406. - C. 511-517.
- Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U. The Stopping and Range of Ions in Solids. — New York : Pergamon, 1985.
- 17. Zinoviev A. Interaction potentials for modeling of ion-surface scattering // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. - 2011. - T. 269, № 9. - C. 829– 833.
- Ligeon E., Guivarc'h A. Hydrogen implantation in silicon between 1.5 and 60 kev // Radiation Effects. — 1976. — T. 27, № 3/4. — C. 129—137.
- Weiser M., Behar M., Kalbitzer S., Oberschachtsiek P., Fink D., Frech G. A four-moments analysis of ¹H range profiles in Si // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 1987. — T. 29, № 3. — C. 587—590.
- Behrisch R., Eckstein W. Sputtering by Particle Bombardment. Springer, Berlin, Heidelberg, 2007.
- Yamamura Y., Tawara H. Energy dependence of ion-induced sputtering yields from monatomic solids at normal incidence // Atomic Data and Nuclear Data Tables. - 1996. - T. 62, № 2. - C. 149-253.
- Nakamura H., Saito S., Ito A. Sputtering Yield of Noble Gas Irradiation onto Tungsten Surface // Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering. — 2016. — Янв. — Т. 3. — С. 165—172.

23. Yang X., Hassanein A. Atomic scale calculations of tungsten surface binding energy and beryllium-induced tungsten sputtering // Applied Surface Science. -2014. - T. 293. - C. 187-190.