Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук

На правах рукописи

Мелузова Дарья Сергеевна

Моделирование ионного облучения кристаллических

и аморфных мишеней, включая материалы первой

стенки токамака-реактора

01.04.04 – Физическая электроника

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель д.ф.-м.н. Зиновьев Александр Николаевич

Научный консультант д.ф.-м.н. Шергин Андрей Петрович

Санкт-Петербург – 2021 год

Содержание

Введение							
1	Обзор литературы						
	1.1	Моделирование взаимодействия ионов с твёрдым телом					
		1.1.1	Приближение парных столкновений	15			
		1.1.2	Классический динамический подход	17			
		1.1.3	Метод траекторий	18			
		1.1.4	Выводы	19			
	1.2 Современное состояние исследований						
		1.2.1	Пробеги, энерговыделение и отражение	20			
		1.2.2	Каналирование	25			
		1.2.3	Определение параметров ионно-атомных потенциалов из				
			данных по поверхностному рассеянию	27			
		1.2.4	Распыление	29			
		1.2.5	Выводы	33			
	1.3 Цель и задачи диссертационной работы						
2	2 Методика моделирования взаимодействия атомных пучков с твердотельными мишенями						
	2.1 Структура мишени						
	2.2	.2 Начальные условия					
	2.3	Основной алгоритм					
		2.3.1	Метод ВСА	39			
		2.3.2	Метод траекторий	40			
	2.4	Критерии завершения расчёта					

	2.5	Потен	циалы взаимодействия	42	
	2.6	Элект	ронные тормозные способности	46	
	2.7	Тепло	вые колебания	47	
3	Исс	ледов	ание взаимодействия атомных пучков с твёрдым те-		
	лом	[48	
	3.1	Использование радужного рассеяния для характеризации поверх-			
		ности	кристалла	48	
		3.1.1	Основные термины и параметры	48	
		3.1.2	Сравнение с экспериментом	51	
		3.1.3	Амплитуда тепловых колебаний	52	
		3.1.4	Потенциал взаимодействия «налетающая частица - поверх-		
			НОСТЬ»	53	
		3.1.5	Выводы	56	
	3.2	Отраж	кение атомов H, D, T, He от аморфных мишеней	58	
		3.2.1	Влияние формы потенциала на коэффициенты отражения	59	
		3.2.2	Анализ зависимостей коэффициента отражения от энергии	61	
		3.2.3	Влияние структуры твёрдого тела	64	
		3.2.4	Выводы	65	
	3.3	Пробе	ги атомов H, D, He в аморфных мишенях	68	
		3.3.1	Основные понятия	68	
		3.3.2	Пробеги атомов в кремнии и вольфраме	69	
		3.3.3	Влияние формы потенциала на величину пробега	72	
		3.3.4	Распределения пробегов по глубине	73	
		3.3.5	Выводы	76	

3.4	Пробе	ги и пространственное распределение атомов H и D в кри-		
	сталли	ических мишенях в режиме каналирования	77	
	3.4.1	Пробеги атомов в Si(100)	77	
	3.4.2	Влияние энергии и угла падения атомов на распределения		
		пробегов по глубине в W(100)	79	
	3.4.3	Пространственное распределение атомных частиц в канале	80	
	3.4.4	Применение рассмотренных эффектов	82	
	3.4.5	Выводы	84	
3.5	Линей	ные потери энергии атомов H, D, T в аморфных мишенях .	85	
	3.5.1	Параметры моделирования	85	
	3.5.2	Характер энерговыделения	87	
	3.5.3	Энерговыделение в условиях токамака-реактора	91	
	3.5.4	Выводы	94	
3.6	Распы	ление мишени из аморфного вольфрама лёгкими ионами .	95	
	3.6.1	Особенности моделирования распыления аморфной мишени	95	
	3.6.2	Коэффициенты распыления. Сравнение с результатами		
		независимых измерений	96	
	3.6.3	Модель Back Scattering Sputtering	100	
	3.6.4	Выводы	102	
Заклю	чение]	103	
Цитируемая литература				

Введение

Актуальность темы

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 ИТЭР, 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, так как поступление в плазму сколько-нибудь значительного количества примесей приведет 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 следующим образом. Данные по отражению ионов изотопов водорода от бериллия отсутствуют, а для вольфрама и углерода они 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.

6

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.

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,

7

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

9

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.

Апробация работы и публикации

По результатам диссертационного исследования опубликованы 13 работ в рецензируемых научных журналах, индексируемых в Web of Science и Scopus:

- А1. Мелузова Д. С., Бабенко П. Ю., Шергин А. П., Зиновьев 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., Зиновьев 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/ \$1028096020030115.
- А4. Мелузова Д. С., Бабенко П. Ю., Шергин А. П., Зиновьев 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., Зиновъев А. Н., Мелузова Д. С., Шергин А. П. Аномальный коэффициент отражения ионов от кристалла в режиме поверхностного каналирования // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные 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., Зиновъев 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., Зиновьев 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., Зиновьев 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., Зиновъев 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.

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).

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

1 Обзор литературы

Взаимодействие ионов с твёрдым телом – обширный раздел с богатой историей – до сих пор является предметом интенсивных исследований, что отражается в трудах многочисленных международных конференций. Данную область сложно представить без компьютерного моделирования исследуемых процессов, повсеместно сопровождающего теоретическое и экспериментальное изучение различных явлений. В первой части обзора описаны основные принципы и методы моделирования, которые используются при изучении взаимодействия пучков ионов с твёрдым телом. Область применения данного раздела науки очень общирна и многогранна, поэтому во второй части обзора, где охарактеризовано современное состояние исследований, основное внимание ограничено актуальными для данной работы исследованиями взаимодействия изотопов водорода и гелия с материалами поверхностей, контактирующих с плазмой в токамаке.

1.1 Моделирование взаимодействия ионов с твёрдым телом

Существуют два основных подхода к моделированию ионной бомбардировки твёрдых тел: приближение парных столкновений (binary collision approximation, BCA) и классический динамический подход, который также называют методом молекулярной динамики (molecular dynamics, MD). Обзор базовых составляющих, на которых строится каждый из методов, можно найти в монографии [7]. Оба подхода широко применяются уже более 60 лет. Самая первая работа, выполненная с использованием MD, была опубликована в 1957 году – в ней описывалось моделирование релаксации в системах, состоящих из нескольких сотен частиц [8]. Также следует отметить работу 1960 года, в которой метод MD был применён для изучения радиационных повреждений [9]. ВСА был впервые использован для изучения пробегов [10] в 1958 году и распыления [11] в 1959 году. Применение компьютерного моделирования проложило дорогу для многочисленных открытий, первым из которых было открытие эффекта каналирования Робинсоном и Оеном [12] в 1963 году.

1.1.1 Приближение парных столкновений

В программах, основанных на приближении парных столкновений (BCA), движение атома в твёрдом теле рассматривается как последовательность парных столкновений с атомами мишени. В данном приближении атом движется по прямой линии между соударениями, испытывая при этом торможение на электронах мишени. При рассмотрении каждого парного соударения решается классическая задача рассеяния, и, таким образом, определяется угол рассеяния налетающего иона, а также энергия, переданная атому мишени. Данное приближение нарушается при низких энергиях, когда важны многочастичные эффекты. Для каждого случая порог применимости следует рассматривать отдельно. Как правило, чем меньше отношение массы налетающего атома к массе атома мишени, тем ниже по энергиям лежит порог. Грубая оценка порога лежит в области 1 кэВ, но для некоторых комбинаций атомов порог применимости доходит до десятков эВ: подробный пример анализа применимости ВСА можно найти в работе [13], где он проведён для мишени из кристаллического кремния. Полученные авторами оценки представлены на рисунке 1, где M_1 – масса налетающего атома, М₂ – масса атома мишени. Точки показывают энергии, при которых пробеги, рассчитанные в данной работе методами BCA и MD, начинают отличаться на 5%, а прямая линия соответствует верхнему пределу оценки. Авторы не дают



объяснения минимуму, который возник при $M_1 \approx M_2$.

Рис. 1: Зависимость предела применимости ВСА от отношения масс взаимодействующих атомов [13].

SRIM [14] является широко используемым пакетом программ, основанным на BCA. Впервые опубликованный в 1985 году и получающий периодические обновления, данный пакет использует, так называемый, универсальный потенциал. SRIM может быть использован для моделирования линейных каскадов, создаваемых первичным ионом любого типа, в аморфных мишенях из любого материала. Моделируемый энергетический диапазон доходит до 1 ГэВ. К недостаткам кода можно отнести отсутствие возможности расчёта рассеяния на кристаллических и поликристаллических мишенях, а также отсутствие возможности свободно менять рассеивающий потенциал и модель учёта неупругих потерь энергии при торможении на электронах. Как показано в работе [15], коэффициенты распыления, рассчитанные с помощью SRIM, могут быть менее достоверными, чем рассчитанные с помощью других кодов. Для моделирования расчета на кристаллической мишени следует отметить программу MARLOWE [16], которая имеется в свободном доступе. Был сделан ряд попыток создать программы для поликристаллической мишени, которые до сих пор не получили широкого распространения [17—19]. Создание кода, свободного от перечисленных недостатков, остаётся открытой проблемой.

1.1.2 Классический динамический подход

В основе моделирования с помощью классического динамического подхода, который также называют молекулярной динамикой (MD), лежит определение траекторий взаимодействующих частиц путём численного интегрирования уравнений движения Ньютона. Потенциалы взаимодействия, используемые для моделирования взаимодействия частицы с твёрдым телом в рамках MD, можно разделить на две большие группы: парные и многочастичные. При использовании парного потенциала результирующая сила, действующая на отдельный атом, является суммой сил взаимодействия с каждым соседним атомом. Сила взаимодействия двух атомов определяется дифференцированием потенциала взаимодействия, зависящего только от расстояния между атомами. При использовании многочастичного потенциала, потенциальную энергию невозможно представить как сумму по всем парам атомов, так как при расчёте взаимодействия учитываются вклады от всего окружения. Одним из классических многочастичных потенциалов является потенциал Терсоффа [20] – трёхчастичный потенциал, учитывающий угловые составляющие сил в явном виде. Широко используются потенциалы в рамках модели погружённого атома (embedded atom model, EAM) [21] – в выражение потенциальной энергии входит слагаемое, зависящее от локальной электронной плотности.

При выполнении молекулярно-динамических расчётов следует тщательно подбирать размер моделируемой системы (количество частиц), временной шаг, с которым выполняется интегрирование уравнений движения, а также общую продолжительность вычисления. Моделирование должно длиться достаточно долго для полноценного описания исследуемого процесса, но также необходимо, чтобы оно завершалось в адекватные сроки. Из этого следует, что для выполнения полноценных расчётов методом MD необходимы значительные вычислительные мощности, что можно посчитать значительным минусом данного подхода. Другой проблемой, с которой сталкиваются при молекулярно-динамических исследованиях, является накопление ошибок численного интегрирования, которое неизбежно при длительных вычислениях. Для минимизации данной проблемы требуется особо тщательный подбор алгоритма и параметров вычисления, дополненный контролем полной энергии системы [22].

Существует большое количество пакетов программного обеспечения для молекулярно-динамического моделирования. В качестве примера можно привести широко используемый пакет LAMMPS [23], находящийся в свободном доступе. Количество атомов, участвующих в расчёте, ограничивается только вычислительной мощностью используемого компьютера (на официальном сайте представлена сравнительная таблица времени вычисления по результатам запуска расчётов на десятки миллиардов атомов). Для ускорения расчётов в пакете предоставлена возможность производить вычисления с помощью видеокарты, а также поддерживаются параллельные вычисления. В LAMMPS реализовано большое количество моделей парных и многочастичных потенциалов, однако, при внедрении оригинальных моделей потенциалов приходится сталкиваться с высокой сложностью пакета.

1.1.3 Метод траекторий

Моделирование методом молекулярной динамики, в котором отслеживается движение только налетающего атома, в некоторых источниках называют

18

термином recoil interaction approximation (RIA) [24]. Этот термин не совсем точный, так как слово recoil обозначает выбитые атомы мишени, а их взаимодействие друг с другом в данном подходе не рассматривается. Отслеживаемый в моделировании атом может быть, первоначально, атомом мишени, но это не всегда так. При описании результатов данной работы отдано предпочтение названию «метод траекторий».

Как подтверждается работой [13], этот подход полезен для проверки расчётов BCA, а также для ускорения молекулярно-динамических расчётов. Несмотря на поверхностное сходство с методом BCA, преимущества перед ним вытекают из того, что в методе траекторий рассчитывается точная траектория частицы, а не проводится её аппроксимация асимптотами. Благодаря этому, по умолчанию, учитывается взаимодействие с несколькими атомами мишени одновременно, что делает метод траекторий более пригодным методом для моделирования процессов, при которых важны многочастичные эффекты, например, эффекта каналирования, а также позволяет проводить расчёты в энергетическом интервале, недоступном для BCA [25].

1.1.4 Выводы

В данном разделе были кратко охарактеризованы два метода моделирования взаимодействия атомных частиц с твёрдым телом, а также рассмотрены примеры программного обеспечения, основанного на описанных методах. Перечисленные недостатки существующих программ (SRIM, MARLOWE, LAMMPS) потребовали разработать собственный код для моделирования различных явлений и процессов в рамках изучаемой темы.

На основании сравнительного анализа двух базовых методов моделирования взаимодействия атомных частиц с твёрдым телом, с учётом плюсов и

19

минусов каждого из них, представляется целесообразным использовать для большинства задач в данной работе два подхода: метод BCA, когда условия не выходят за рамки его применимости, и, в остальных случаях, метод траекторий вследствие его преимущества перед общим методом MD по времени счёта.

1.2 Современное состояние исследований

1.2.1 Пробеги, энерговыделение и отражение

Исследование прохождения атомных частиц через твёрдое тело неизменно сопряжено с изучением тормозных способностей. Несмотря на большое количество существующих результатов, активно ведутся теоретические и экспериментальные работы по данной теме, а самые передовые достижения публикуются в сборниках Международного агентства по атомной энергии [26]. Использование достоверных данных по тормозным способностям является ключом к успешному моделированию прохождения ионов через вещество и правильной интерпретации возникающих эффектов.

В классической теории Линдхарда-Шарфа-Шиотта (ЛШШ) [27], описывающей торможение частиц в веществе, отдельно рассматриваются потери энергии при упругом рассеянии на ядрах атомов мишени и неупругих взаимодействиях с электронной системой (возбуждение и ионизация). Потери на ядрах принято обозначать $(dE/dx)_n$, а потери на электронах – $(dE/dx)_e$. Они связаны с ядерными и электронными тормозными способностями, $S_n(E)$ и $S_e(E)$, следующим образом:

$$\frac{dE}{dx} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_n + \left(\frac{dE}{dx}\right)_e = N(S_n(E) + S_e(E)),\tag{1}$$

где N – плотность мишени. Преобладание одного из механизмов потери энергии

над другим определяется энергией частицы. Для лёгких частиц с энергией до 200 эВ, таких как в пристеночной плазме токамака, доминируют ядерные тормозные способности. Пример зависимостей электронных и ядерных тормозных способностей от энергии представлен на рисунке 2.



Рис. 2: Зависимость электронных и ядерных тормозных способностей от энергии столкновения для D и T в бериллии и вольфраме (данные из [14]).

Ядерные тормозные способности зависят от используемого потенциала взаимодействия налетающей частицы и атомов мишени. При расчётах методом BCA их величина определяется из кинематики каждого акта рассеяния, а в молекулярно-динамических расчётах нет необходимости рассчитывать их отдельно. Широко используется полуэмпирический потенциал ZBL [28]. На нём базируются расчёты пакета SRIM, а также он используется для корректировки потенциалов в расчётах методом MD [29; 30]. Однако, сравнительная оценка [31] показывает, что данные SRIM значительно занижают величину ядерных тормозных способностей в энергетическом интервале, актуальном для данной работы. Электронные тормозные способности определяются по различным формулам в зависимости от энергии частицы. В области низких энергий помимо формулы, предложенной теорией ЛШШ, существует модель О.Б. Фирсова [32]. Формула Фирсова применима при близких значениях атомных номеров налетающей частицы и атома мишени (отличие не больше чем в три раза) – при выполнении этого условия результат теории Фирсова отличается от результата, получаемого в теории ЛШШ, не более чем на 30% [33].

При большой энергии налетающего иона (~ед. МэВ для лёгких ионов), когда электронные тормозные способности доминируют над ядерными, в графике зависимости потери энергии от глубины проникновения частицы возникает пик вблизи точки остановки. Данный пик носит название пика Брэгга (пример на рисунке 3). При прохождении быстрого иона через вещество основные потери энергии вызваны ионизацией атомов вещества. Сечение этого процесса обратно пропорционально квадрату скорости частицы, что приводит к появлению контрастного пика перед полной остановкой иона. Данное явление нашло при-



Рис. 3: Брэгговский пик пучка протонов с энергией 62 МэВ в воде [34].

менение в протонной терапии: опухоль в глубине тела получает основную дозу облучения, в то время как здоровые ткани, через которые проходит пучок, не подвергаются сильному воздействию [35].

Из-за широты области изучения прохождения атомных частиц через твёрдое тело имеет смысл ограничиться рассмотрением результатов по комбинациям атомных частиц и материалов мишени, актуальных для данной работы.

Пробеги атомов водорода и гелия в вольфраме, бериллии и углероде – материалах, которые подвергаются воздействию плазмы в токамаках – является предметом интенсивных исследований. Измерению распределения дейтерия по глубине в вольфраме и сплавах вольфрама посвящены многочисленные экспериментальные работы [36—38]. Отдельно можно выделить анализы распределения трития и дейтерия по глубине, выполненные по завершению второго этапа обширного эксперимента с имитацией стенки токамака-реактора ИТЭР (JET-ILW) и представленные в работах [39] и [40], соответственно. В работе [39] были исследованы образцы из Ве, контактировавшие с плазмой. Тритий был обнаружен глубоко в материале – на глубине до 100 мкм. В работе [40] были исследованы образцы поверхностей из С с тонкими слоями из W и Mo, контактировавшие с плазмой. Сравнительный анализ разных образцов в данной работе осложнён тем, что они подвергались разным по продолжительности и интенсивности нагрузкам. На основании полученных результатов данной работы затруднительно сделать прямые выводы о работе ИТЭР, где вольфрам будет основным материалом, так как в данном эксперименте основным материалом был углерод, покрытый различными комбинациями тонких слоёв из вольфрама и молибдена.

Несмотря на пристальное внимание, уделяемое вопросам взаимодействия атомных частиц с рассматриваемыми в данной работе материалами, экспериментальные данные часто ограничены. Так, например, экспериментальные данные

23

по коэффициентам отражения D от поверхности W и C немногочисленны [1; 2], а для поверхности Ве они вовсе отсутствуют. Ряд работ посвящён компьютерному моделированию взаимодействию рассматриваемых комбинаций пучков атомных частиц и мишеней. Например, в работе [41] приведены результаты обширного молекулярно-динамического моделирования бомбардировки различных граней кристаллического вольфрама ионами гелия с начальной энергией до 100 эВ. Авторами были получены угловые и энергетические распределения отражённых частиц и распределения пробегов по глубине для различных комбинаций параметров моделирования. Приводится сравнение с немногочисленными экспериментальными данными и эмпирическими формулами. Авторы делают выводы для работы токамака с гелиевой плазмой и отмечают острую необходимость в пополнении числа экспериментальных данных. Исследование того, как выбор потенциала влияет на моделирование отражения атомов дейтерия от кристаллического вольфрама, представлено в работе [42]. Авторы проводят моделирование методом MD с использованием двух многочастичных потенциалов для четырёх ориентаций кристалла с диапазоном начальных энергий атомов до 100 эВ. В работе представлены рассчитанные коэффициенты отражения и пробеги атомов в кристалле, а также проанализировано влияние потенциала взаимодействия на полученные результаты. Авторы обращают внимание на то, что для улучшения существующих моделей потенциалов взаимодействия атомов водорода с вольфрамом необходимы дополнительные экспериментальные данные.

1.2.2 Каналирование

Интересной областью изучения пробегов атомных частиц в твёрдом теле является прохождение ионов через кристалл и связанные с этим ориентационные эффекты.

Отправным пунктом в изучении ориентационных эффектов в твёрдых телах стало открытие Робинсоном и Оеном [12] явления каналирования в 1963 году благодаря численному моделированию проникновения ионов в кристалл. Предпосылкой для данного моделирования послужили различия в явлениях, возникающих при облучении аморфного и кристаллического твёрдого тела, которые были отмечены ранее в экспериментальных работах, таких как работа Дэвиса [43]. Теория каналирования была разработана Линдхардом [44] через два года после открытия явления.

Явление каналирования проявляется, когда падающий пучок ионов ориентирован под малым углом по отношению к атомной цепочке кристаллической решётки, в результате чего ионы испытывают скользящие столкновения с атомами, ограничивающими канал, и глубина проникновения пучка ионов заметно возрастает. Вскоре после открытия каналирование нашло применение в исследовании свойств кристаллической структуры материалов, таких как наличие дефектов, примесей и т.д. Большая часть экспериментов включает себя сканирование по углу, под которым пучок ионов падает на мишень – таким образом, требуется большое количество измерений для построения одномерного профиля. В настоящее время продолжается совершенствование более простых в исполнении методов проведения экспериментов по каналированию с использованием позиционно-чувствительных детекторов [45], позволяющих получать двумерную картину. Компьютерное моделирование каналирования является незаменимым инструментом для интерпретации экспериментальных данных [46], совершенствования экспериментальных подходов [47] и проведения численных экспериментов [48]. В настоящее время используется как моделирование методом молекулярной динамики, так и моделирование в приближении парных столкновений, при чём, как показывают оценки [49], при достаточно больших энергиях, BCA не уступает MD.

В обзоре [50] описана аналитическая оценка распределения ионов в канале на основе диаграмм эквипотенциальных контуров потенциала внутри канала (рисунок 4). Распределение пучка ионов в канале принимают независимым от глубины, что считается применимым начиная с глубины 100 – 200 нм. На рисунке 4 эквипотенциальный контур U_T определяется как сумма индивидуальных потенциалов соседних рядов атомов. Частица с определённым значением перпендикулярной составляющей энергии E_{\perp} будет находится в зоне, определяемой условием $U_T(r) \leq E_{\perp}$.



Рис. 4: (a) - Эквипотенциальные контуры для Не в направлении (100) вольфрама. Использован потенциал Мольера [51]. (b) - диаграмма потенциальных контуров, показывающая симметрию для атомных рядов. [50].

1.2.3 Определение параметров ионно-атомных потенциалов из данных по поверхностному рассеянию

Если пучок атомов, падающих на монокристалл под скользящим углом к поверхности, ориентирован вдоль атомной цепочки, то имеют место поверхностное каналирование и эффект фокусировки (эффект сжатия углового распределения рассеянных частиц) [52]. Большой интерес представляет возможность определения потенциала из данных по рассеянию на поверхности. Такой способ был предложен в работе В.И. Шульги [53], который предложил использовать значение энергии фокусировки в поверхностном полуканале для получения параметров потенциала и получил значение радиуса экранирования для системы Ar-Cu.

В своей работе В.И. Шульга отталкивался от того, что энергия фокусировки частиц в поверхностном полуканале сильно зависит от потенциала взаимодействия. Интенсивность рассеянных частиц и характер энергетического распределения при фокусировке в полуканале имеют характерные особенности, по которым можно экспериментально определить энергию фокусировки. В свою очередь, сравнивая полученные экспериментальные значения энергии фокусировки с расчётными, можно определить параметры потенциала взаимодействия. К сожалению, эти работы не получили дальнейшего развития.

При рассеянии атомов на поверхности может наблюдаться эффект сгущения траекторий рассеянных частиц вблизи определённого угла. Схематическое представление данного эффекта, носящего название радужного рассеяния, представлено на рисунке 5. Данный эффект наблюдается, когда в зависимости угла рассеяния от прицельного параметра, есть экстремумы. Сгущение траекторий приводит к появлению отчётливых пиков в угловом распределении рассеянных частиц.



Рис. 5: Схема геометрии рассеяния [54]. θ_{rb} – угол радужного рассенияния – указан прямыми линиями. Цвет показывает распределение рассеянных частиц, шкала от красного (высокая интенсивность) до синего (низкая).

Исследованию радужного рассеяния как инструмента для определения потенциала взаимодействия атома с поверхностью посвящён ряд экспериментальных и теоретических работ, среди которых стоит выделить [54—56] и [57; 58], соответственно. Помимо проверки применимости известных моделей парных потенциалов, на данный момент исследования ограничились описанием экспериментальных данных по радужному рассеянию варьированием параметров потенциала, предварительно задав его форму, как, например, в работе [54], где удалось получить неплохое согласие с экспериментом, проведя расчеты потенциала в приближении функционала плотности. Следующим логическим шагом в подобных исследованиях должно стать решение обратной задачи рассеяния – получение значения потенциала из обработки эксперимента без предварительного выбора его функциональной формы. Актуальность данной тематики очевидна, так как, развив методику получения потенциала «частица-поверхность» из данных по радужному рассеянию, удастся решить обратную задачу о получении потенциала из эксперимента и, накопив достаточное количество данных, будет возможно предложить модель потенциала с целью описания рассеяния для неизученных систем.

1.2.4 Распыление

Наиболее развитой аналитической теорией распыления является теория Зигмунда [59], которая описывает распыление в режиме линейных каскадов (рисунок 6) в аморфном теле. Данная теория базируется на приближённом решении уравнений переноса для особого потенциала взаимодействия вида $V(r) \sim r^{-1/m}$ (где $0 \leq m < 0.5$), причём торможением на электронах пренебрегают. Ямамура [60] и Экштайн [61] предоставили большое число коэффициентов распыления, рассчитанных с помощью программ, которые основаны на ВСА. Ямамура также является автором широко используемой эмпирической формулы угловой зависимости коэффициента распыления [62].



Рис. 6: Схемы режима первичного прямого выбивания (слева) и режима линейных каскадов (справа) [63].

На рисунке 7 представлена зависимость коэффициента распыления от энергии налетающих частиц. В области малых энергий существует пороговое значение, ниже которого распыление не происходит (единицы-десятки эВ). Зависимость имеет широкий максимум в районе десятков-сотен кэВ, а при дальнейшем росте энергии виден спад коэффициента распыления, связанный с большой глубиной проникновения бомбардирующих частиц и малым энерговыделением вблизи поверхности. Для лёгких ионов коэффициент распыления меньше, чем для тяжёлых. В целом, его значение варьируется от 0 до 100.



Рис. 7: Расчётные зависимости коэффициента распыления W от энергии налетающих ионов T и $^3{\rm He}$ [64].

В случае, если мишень имеет аморфную или поликристаллическую структуру, коэффициент распыления монотонно возрастает при отклонении от бомбардировки по нормали к поверхности. Точная величина угла, соответствующего максимуму коэффициента распыления, зависит от массы и энергии частицы. При бомбардировке монокристаллов также проявляется зависимость от направления падения частиц относительно кристаллической решётки: вдоль плотноупакованных осей кристалла коэффициенты распыления в 2-5 раз меньше, чем вдоль других направлений.

Обзор [64] – наиболее полный сборник теоретических и эксперименталь-

ных данных о коэффициентах распыления. В нём можно найти коэффициенты распыления вольфрама ионами водорода и дейтерия, полученные экспериментально. Для трития таких данных не представлено. Не представлены также коэффициенты распыления вольфрама ионами бериллия.

Как показано в работах [65; 66], атомы изотопов водорода, покидающие плазму, бомбардируют стенку, что приводит к заметному поступлению Ве в плазму. Концентрация Ве может достигать 2-4% от плотности плазмы. Двигаясь по сепаратрисе, атомы Ве ионизуются до ядер, и, ускоряясь потенциалом плазма – стенка до энергий 300-800 eV [65], без заметного поглощения проходят слой диверторной плазмы и вызывают распыление дивертора. Потоки бериллия в плазме моделировались в работах [66; 67]. Исследования [3; 68—70] показали, что характеристики разряда заметно меняются при поступлении вольфрама в плазму, и, если концентрация вольфрама в плазме станет равной 0.1%, нужная температура не будет достигнута.

Экспериментальные данные о распылении вольфрама ионами бериллия отсутствуют, но в ряде работ исследовано распыление вольфрама и различных химических соединений с вольфрамом. Среди них можно выделить работы [71; 72], где представлены результаты экспериментов по облучению вольфрама, бериллия и их смеси ионами аргона и азота, которые являются перспективными газами-примесями в плазме, а также дейтерия. В ходе экспериментов детектировались распылённые ионы при различных температурах нагрева образца и различной энергии пучка ионов (до 100 эВ). Ионы вольфрама или ионы, содержащие его, детектировать не удалось. Распыление вольфрама азотом также было исследовано в работе [73], где проведено моделирование методом MD с использованием нового потенциала взаимодействия N-W. Распыление карбида вольфрама медленными ионами дейтерия было промоделировано методом MD в работе [74]. Авторы рассматривали как кристаллическую, так и аморфную мишень. При длительном облучении авторы наблюдали аморфизацию поверхности. По итогам моделирования было подтверждено, что карбид вольфрама уступает чистому вольфраму в качестве материала для токамака-реактора из-за подверженности эрозии.

Данные о коэффициентах распыления вольфрама и их угловых зависимостях также являются предметом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований. Среди них выделяются результаты эксперимента на установке JET с имитацией стенки ИТЭР (JET-ILW), которые представлены в обзоре [3]. Данный эксперимент позволил впервые провести исследования взаимодействия плазма-стенка с комбинацией материалов, которая будет использована в ИТЭР (стенка из бериллия и дивертор из вольфрама). Исследование распыления вольфрама в данном эксперименте подтвердило правильность выбора вольфрама и бериллия в качестве материалов токамака-реактора ИТЭР, однако, результаты эксперимента можно считать лишь предварительными из-за ограниченного времени работы экспериментальной установки. В работе 6 с помощью молекулярно-динамического моделирования облучения поверхности W(110) была исследована зависимость повреждения поверхности мишени от направления и начальной энергии первично выбитого атома. Также показано, как дефекты на поверхности влияют на распыление: присутствие вакансий замедляет процесс распыления, а наличие междоузельных атомов ускоряет процесс. На основе результатов авторы выработали рекомендации для уменьшения повреждения стенки из вольфрама в токамаке-реакторе ИТЭР. В работе [5] представлен анализ распыления вольфрама внедрёнными в плазму примесными ионами. Авторами был проведён эксперимент, в котором поверхность поликристаллического вольфрама облучалась ионами криптона, и замерялись скорости

распылённых ионов W в направлении, параллельном нормали. Исследование показало, что, с одной стороны, скорость распылённых ионов слабо зависит от энергии бомбардирующего иона, но, с другой стороны, на неё влияют имеющие место неупругие процессы. Коэффициенты распыления вольфрама в условиях плазмы медленными ионами ксенона (с энергией до 125 эВ) были измерены экспериментально в работе [4].

1.2.5 Выводы

Анализ современного состояния исследований в области взаимодействия лёгких атомных частиц с различными материалами, в том числе контактирующими с плазмой в токамаках, убеждает в актуальности данной темы, а также необходимости дальнейших исследований. Нехватка экспериментальных данных по ряду важных фундаментальных процессов, часто обусловленная технической сложностью эксперимента, диктует необходимость проведения исследований методами компьютерного моделирования. Точность и достоверность численных экспериментов упирается в достоверность используемых данных о параметрах взаимодействия атомных частиц с твёрдым телом, таких как потенциалы «частица-поверхность». Как показано выше, для многих комбинаций атомов требуется уточнение потенциалов, поэтому развитие методик их определения также является актуальным вопросом.

1.3 Цель и задачи диссертационной работы

Цель: разработка методов моделирования взаимодействия атомных пучков с твердым телом, позволяющих учитывать современные данные о потенциалах взаимодействия и механизмах потерь энергии при столкновении частиц, температурные эффекты и особенности строения мишени, а также проведение расчётов процессов рассеяния, пробегов, энерговыделения, ориентационных эффектов, распыления при ионном облучении кристаллических и аморфных мишеней, включая материалы первой стенки токамака-реактора.

Задачи:

- Разработать код для моделирования взаимодействия пучков ионов и атомов с твёрдым телом. К моделируемым процессам относятся: прохождение атомов через твёрдое тело, рассеяние, распыление. Моделирование выполняется в приближении парных столкновений и методом расчёта траекторий.
- Провести моделирование явления радужного рассеяния на поверхности различных кристаллов. Разработать процедуру получения информации о потенциале взаимодействия «налетающая частица - поверхность» из экспериментальных данных.
- Рассчитать коэффициенты отражения при рассеянии изотопов водорода и атомов гелия на поверхности мишеней из аморфных Ве, С, W. Оценить влияние глубины ямы в потенциале взаимодействия «налетающая частица - поверхность» на коэффициенты отражения.
- 4. Провести моделирование прохождения атомов H, D, He через аморфный

W, рассчитать пробеги данных атомов, а также проанализировать влияние модели потенциала взаимодействия «налетающая частица - твёрдое тело» на результаты моделирования.

- 5. Рассчитать пробеги атомов D в кристаллическом W в режиме каналирования, а также проанализировать эволюцию пространственного распределения каналируемого пучка частиц в кристалле.
- 6. Провести анализ распределения энерговыделения по глубине при бомбардировке мишеней из Be, C, W изотопами водорода, а также оценить накопление изотопов водорода в первой стенке токамака-реактора.
- 7. Рассчитать коэффициенты распыления W ионами Be, необходимые для расчётов поступления примесей в плазму токамака-реактора.

2 Методика моделирования взаимодействия атомных пучков с твердотельными мишенями

Для достижения наибольшей точности моделирования явлений, возникающих при облучении твёрдого тела пучком атомов, необходима возможность варьирования задаваемых исходных параметров, а также моделей описания происходящих процессов. В то же время, выполнение моделирования не должно выходить за разумные временные рамки. Для удовлетворения данных требований в данной работе был разработан код для моделирования облучения твёрдых тел атомными частицами. При разработке учитывались недостатки существующих популярных программ. В разработанном коде реализованы два подхода к моделированию: приближение парных столкновений (BCA) и метод траекторий. Общие критерии применимости данных методов описаны в разделе 1.1. Универсальность данного кода позволяет анализировать широкий ряд характеристик: пространственные распределения, пробеги и линейные потери энергии имплантированных частиц, а также угловые и энергетические распределения как отражённых, так и имплантированных частиц. Структура мишени может быть аморфной, поликристаллической или кристаллической, что позволяет анализировать в том числе и ориентационные эффекты. Далее представлено общее описание разработанных методик, а также некоторых важных параметров твёрдого тела, выбор которых значительно влияет на качество получаемых результатов. Методики, описанные в главе, опубликованы в статьях [A1—A5].

Для решений одной из задач данной работы был разработан дополнительный код, построенный на принципах молекулярной динамики, который позволяет проводить моделирование распыления аморфного твёрдого тела лёгкими атомами. Особенности данного кода, а также параметры моделирования
приведены в разделе 3.6.

2.1 Структура мишени

Охарактеризуем особенности описания различных мишеней:

- Кристалл расположение атомов определяется кристаллической решёткой, при этом задаётся элементарная ячейка, которая затем транслируется в трёхмерном пространстве; поверхность задаётся как грань кристалла, отвечающая условиям поставленной задачи.
- Поликристалл расположение атомов в пространстве задаёт кристаллическая решётка, как и в случае кристалла, но она ориентирована в пространстве случайным образом, а поверхность — это случайный срез получившейся структуры. Таким образом, поверхность приобретает шероховатость с выступами порядка постоянной решётки.
- Аморфное твёрдое тело учитывается ближний порядок, а именно, задаётся плотноупакованный кластер атомов, расстояние L между которыми определяется исходя из плотности рассматриваемого материала. Ориентация кластера в пространстве определяется случайным образом, и, следовательно, поверхность мишени – случайный срез данного кластера. По ходу движения атомной частицы в твёрдом теле кластер транслируется так, чтобы ниже поверхности частица была всегда окружена атомами твёрдого тела.

Координатная плоскость задаёт поверхность мишени. Как описано выше, в случае аморфного тела и поликристалла мы имеем случайно ориентированную в пространстве базовую структуру, положение которой относительно плоскости

поверхности задаётся по следующим правилам: координаты центрального атома базовой структуры лежат в интервалах $\pm D/2$ по осям x, y и z, где D соответствует постоянной решётки в случае поликристалла, а для аморфного тела $D \equiv L$. Затем задаётся случайный поворот в пределах 45° вокруг осей x, y, z, uвсе атомы, оказавшиеся выше поверхности, отбрасываются и не учитываются при моделировании.

Мишень ограничена только плоскостью поверхности и считается бесконечной в остальных направлениях. При моделировании обоими методами атомы твёрдого тела зафиксированы в пространстве.

2.2 Начальные условия

В ходе моделирования поочерёдно рассматриваются траектории большого числа частиц, необходимого для получения достаточной статистики, что, как правило, составляло $10^5 - 10^6$ частиц.

Выбор прицельных параметров зависит от условий задачи, но, в целом, он подчиняется следующей логике. Если мишень представляет собой кристалл, производится «сканирование» по маленькой площадке на поверхности твёрдого тела, стороны которой составляют $\sim d$, где d – постоянная решётки. Если мишень – поликристалл или аморфное тело, то, вследствие особенностей задания структуры мишени, атомы направляются в случайную точку на поверхности.

Угол, под которым направлена бомбардирующая частица, задаётся исходя из условий задачи, и может принимать любые необходимые значения.

2.3 Основной алгоритм

2.3.1 Метод ВСА

В данном методе продвижение атома рассматривается как последовательность парных соударений с атомами твёрдого тела. На каждом шаге моделирования происходит описание рассеяния налетающего атома на атоме мишени. Угол рассеяния атомной частицы определяется выражением

$$\theta = \pi - 2p \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr/r^2}{\sqrt{1 - U(r)/E - p^2/r^2}},$$
(2)

где r — расстояние между частицами, U(r) — потенциал взаимодействия, p — прицельный параметр, E — энергия налетающей частицы, r_0 — расстояние наибольшего сближения, которое является корнем уравнения $1-U(r_0)/E-p^2/r_0^2=0$. Заменой $r = r_0/\cos x$ устраняется особенность в знаменателе подынтегрального выражения и формула (2) преобразуется к виду

$$\theta = \pi - 2 \int_0^{\pi/2} \frac{p/r_0 \sin x dx}{\sqrt{1 - U(x)/E - p^2 \left(\cos x/r_0\right)^2}}.$$
(3)

Проводится численное интегрирование с использованием разложения по полиномам Гаусса с количеством узлов до 20.

Пересчет энергии и координаты частицы после соударения производится по формулам из работы [75]. Ядерные тормозные способности зависят от используемого потенциала, и учитываются непосредственно при рассмотрении кинематики конкретного столкновения. Электронные тормозные способности dE/dx необходимо учитывать отдельно, более подробно о них написано ниже.

Далее требуется выбрать следующий рассеивающий центр. Векторы \mathbf{x}_0 и \mathbf{v} определяют положение в пространстве и скорость налетающей частицы, векторы \mathbf{x}_j – координаты атомов мишени, и $\mathbf{b} = \mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_j$, тогда можно определить вектор $\mathbf{c} = [\mathbf{b} \times \mathbf{v}]/|\mathbf{v}|$. Его длина равна прицельному параметру p_{0j} . Для атомов мишени, которые расположены в передней полусфере относительно движущегося атома, проводится сопоставление значений p_{0j} – тот атом, для которого значение p_{0j} минимально, становится следующим рассеивающим центром. Для кристалла и поликристалла процедура определения угла рассеяния повторяется без какихлибо дополнительных действий, а в случае аморфной мишени кластер атомов строится заново: его новый центр совпадает с выбранным рассеивающим центром, и снова случайным образом производится поворот вокруг координатных осей.

2.3.2 Метод траекторий

При использовании данного метода рассматривается взаимодействие налетающей частицы со всеми соседними атомами, что позволяет учитывать многочастичные эффекты, но повышает время счета.

В основе метода - решение уравнений движения частицы

$$\frac{d\mathbf{x}_{0}/dt = \mathbf{v},}{\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{m}\mathbf{F} = \frac{1}{m}\sum_{j}\mathbf{F}_{j}\left(|\mathbf{x}_{0} - \mathbf{x}_{j}|\right)\frac{(\mathbf{x}_{0} - \mathbf{x}_{j})}{(|\mathbf{x}_{0} - \mathbf{x}_{j}|)}.$$
(4)

где \mathbf{x}_0 и \mathbf{v} — векторы, описывающие положение и скорость налетающей частицы, \mathbf{x}_j — координаты атомов мишени, m — масса налетающей частицы. Сила \mathbf{F}_j определяется как градиент потенциала взаимодействия между налетающей частицей и атомом мишени, и она направлена вдоль вектора $\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_j$. Таким образом, для каждого атома мишени определяются проекции силы \mathbf{F}_j по трем осям координат, а затем происходит суммирование по всем атомам мишени для получения результирующей силы \mathbf{F} . Для численного интегрирования был выбран метод Верле [76] в следующем виде:

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \mathbf{v}_n \Delta t + \mathbf{F}_n \left(\Delta t\right)^2 / (2m),$$

$$\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_n + \left(\mathbf{F}_{n+1} + \mathbf{F}_n\right) \Delta t / (2m).$$
 (5)

Здесь n — номер итерации. Шаг по времени $\Delta t = 0.05 r_{min}/|\mathbf{v}|$, где r_{min} — расстояние от налетающего атома до ближайшего атома мишени.

Изменение кинетической энергии частицы определяется по формуле

$$E_{n+1} = E_n - \frac{dE}{dx} |x_{n+1} - x_n| - Q,$$
(6)

где dE/dx — электронные тормозные способности, а Q - упругие потери энергии. Если для упрощения расчётов атомы мишени считаются неподвижными, необходимо учитывать поправку на упругие потери энергии. Упругие потери энергии определяются выражением

$$Q = 2E_n \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \left(1 - \cos \theta_{cm}\right), \tag{7}$$

где m_1 , m_2 — массы налетающей частицы и атома мишени, θ_{cm} — угол рассеяния в системе центра масс. Упругие потери учитываются автоматически, если учитывается движение атомов мишени.

Как и при использовании метода BCA, если рассматривается аморфная мишень, базовый кластер атомов периодически транслируется и поворачивается в пространстве случайным образом. В методе траекторий это происходит не на каждом временном шаге, а так, чтобы налетающий атом всегда был окружён атомами твёрдого тела (когда он движется внутри кластера).

2.4 Критерии завершения расчёта

При моделировании обоими методами общие условия завершения расчёта траектории атома определяются двумя параметрами E_{min} и l_{max} : расчёт прекращается, когда энергия атома становится меньше или равной E_{min} , или при отлёте на расстояние l_{max} выше поверхности. Как правило, величины этих парамеметров составляли: $E_{min} = 2$ эВ и $l_{max} = 3D$, где D - расстояние между ближайшими атомами, соответствующее типу мишени.

2.5 Потенциалы взаимодействия

Расчёты потенциала для изучаемых систем, которые были выполнены в рамках теории функционала плотности (DFT) для решения задач данной работы, показали наличие ямы в потенциале, которая приводит к притяжению частиц на больших межъядерных расстояниях. Как было продемонстрировано в работе [77] для 19 комбинаций атомов, использование теории функционала плотности для определения потенциала даёт результат, который лучше согласуется с экспериментальными данными, чем широко-используемые потенциалы Мольера [51] и ZBL [28], а также потенциал Зиновьева [78].

На рисунке 8 представлено сравнение потенциалов ZBL и Зиновьева, которые являются исключительно отталкивающими, с потенциалом, рассчитанным методом DFT. Отталкивающая часть потенциала DFT согласуется с формулой Зиновьева. Отталкивающая часть потенциала ZBL имеет менее резкий спад при росте межъядерного расстояния, чем потенциалы DFT и Зиновьева. И притягивающая яма, и отталкивающая часть потенциала влияют на сечение рассеяния.

Глубина потенциальной ямы связана с энергией диссоциации соответству-



Рис. 8: Сравнение потенциала, полученного методом DFT, с потенциалами ZBL [28] и Зиновьева [78] для комбинации D-W. U_0 - притягивающая яма в потенциале, предсказанная методом DFT.

ющей молекулы. Значения энергий диссоциации для молекул С–Н и Ве–Н составляют $U_0 = 3.50 \pm 0.03$ эВ и $U_0 = 2.34 \pm 0.022$ эВ, соответственно [79]. В работе [80] представлены межъядерные расстояния для двухатомных молекул. Для системы Н–С это расстояние составляет 1.1198 Å, а для системы Н–Ве 1.3431 Å. Положения минимумов зависимостей потенциала от межъядерного расстояния, рассчитанные методом DFT, хорошо согласуются с этими данными. Точность расчета U_0 с использованием метода DFT оценивается примерно в 1 эВ. Поэтому для притягивающей части потенциала результаты, полученные методом DFT, были нормализованы к экспериментальным значениям U_0 . Экспериментальные данные по энергии диссоциации для случая D–W в литературе отсутствуют. Результаты, полученные методом DFT (4.6 эВ), хорошо согласуются со значением $U_0 = 4.55$ эВ, рассчитанным в работе [81].

Теоретические формулы межатомных потенциалов не зависят от масс сталкивающихся частиц. Влияние массы изотопа проявляется только в изменении приведенной массы электрона. Это приводит к относительному увеличению потенциала на величину m_e/M , где m_e и M – массы электрона и изотопа соответственно. Поэтому можно ожидать, что относительная разница в потенциале составит около 0.05%. Согласно [79], глубина потенциальной ямы U_0 для систем С–Н и С–D практически совпадают (3.50 и 3.54 эВ). Положение минимумов для этих систем составляет 1.1198 и 1.119 Å [80]. Для Н–Ве и D–Ве минимумы расположены при 1.3431 и 1.3427 Å, соответственно. Это позволяет использовать потенциалы, которые были получены методом DFT для водорода, и для его изотопов.

При моделировании в данной работе использовались описанные здесь потенциалы DFT, которые опубликованы в работе [A2] (таблица 1). В некоторых случаях проводилось сравнение с потенциалом ZBL, так как это широкоиспользуемый потенциал, который применяется в коде SRIM [14]. Для решения ряда задач были использованы специфические потенциалы – они описаны в соответствующих разделах.

R, \mathring{A}	D-Be	D-C	D-W	He-Be	He-C	He-W
0.002	28541	42760	519350	57053	85464	1038000
0.004	14142	21161	252649	28253	42269	506794
0.01	5504	8204	94607	10974	16358	189581
0.02	2627	3892	42855	5223	7735	85897
0.04	1195	1755	18040	2366	3470	35935
0.1	367.4	536.6	4676	726.9	1055	9333
0.2	130.4	188.4	1292	260.1	365.5	2554
0.4	38.01	42.62	248.1	73.41	81.27	492.7
0.5	21.96	19.79	131.8	42.57	41.25	259.9
0.6	12.2	7.63	72.94	25.38	21.48	145.6
0.7	6.108	1.012	41.22	15.64	11.43	85.54
0.8	2.287	-1.603	23.23	10.08	6.26	51.81
0.9	-0.071	-2.769	12.54	6.89	3.56	31.78
1	-1.178	-3.310	5.93	5.05	2.13	19.38
1.1	-1.826	-3.500	1.743	3.93	1.329	11.54
1.2	-2.172	-3.488	-0.921	3.2	0.849	6.59
1.3	-2.321	-3.362	-2.610	2.63	0.546	3.51
1.4	-2.340	-3.175	-3.637	2.12	0.349	1.653
1.5	-2.275	-2.959	-4.227	1.624	0.221	0.571
1.6	-2.159	-2.712	-4.516	1.124	0.297	0.138
1.7	-2.012	-2.442	-4.599	0.833	0.288	-0.013
1.8	-1.849	-2.180	-4.552	0.661	0.238	-0.050
1.9	-1.681	-1.934	-4.411	0.519	0.179	-0.034
2	-1.515	-1.708	-4.215	0.401	0.125	-0.002
2.2	-1.204	-1.316	-3.744	0.23	0.048	0.048
2.4	-0.938	-1.002	-3.157	0.122	0.007	0.057
2.6	-0.722	-0.628	-2.529	0.059	0.044	
2.9	-0.463	-0.306	-1.627	0.012	0.016	
3	-0.378	-0.242	-1.398	0.005	0.009	
3.5	-0.135	-0.077	-0.637			
4	-0.048	-0.027	-0.299			
5	-0.007	-0.006	-0.099			
6	-0.001	-0.002	-0.058			

Таблица 1: Потенциалы DFT для комбинаций D,He–Be,C,W.

2.6 Электронные тормозные способности

При описании взаимодействия лёгких атомов с твёрдым телом важно учитывать неупругие потери энергии, которые испытывает налетающий атом. Зависимости электронных тормозных способностей от энергии для прохождения ионов водорода через исследуемые материалы представлены на рисунке 9.



Рис. 9: Зависимость электронных тормозных способностей от энергии при рассеянии изотопов водорода на вольфраме, углероде и бериллии [82].

Для решения задач данной работы использовались значения электронных тормозных способностей из базы данных [82]. Атомы, влетающие в твёрдое тело, становятся заряженными уже через несколько столкновений с атомами твёрдого тела, поэтому при моделировании процессов в данной работе использовались электронные тормозные способности для ионов, которые можно описать следующей зависимостью от энергии соударения:

$$\frac{dE}{dx} = A\left(\frac{E}{M}\right)^n \left(1 + B\frac{E}{M}\right). \tag{8}$$

Рассчитанные параметры аппроксимации для исследуемых систем приведены

в таблице 2. При использовании формулы (8) начальная энергия E выражена в кэВ, а dE/dx – в эВ/Å, M – масса изотопа водорода в а.е.м. Эта формула применима при энергиях от 100 эВ до 10 кэВ.

В изучаемом в данной работе энергетическом диапазоне важно учитывать и упругие, и неупругие потери энергии. Роль неупругих потерь растёт с увеличением энергии налетающей частицы.

Таблица 2: Параметры аппроксимации тормозной способности dE/dx для различных систем, полученные нами из анализа данных [82].

Система	A	n	В
H-Be	2.78	0.50	-0.0072
H-C	3.15	0.50	-0.0071
H-W	2.86	0.48	0.0067

2.7 Тепловые колебания

При моделировании учитывалось смещение атомов, обусловленное тепловыми колебаниями. Смещения $s_{x,y,z}$ задаются случайным образом для каждого атома решетки. Они подчиняются распределению Гаусса и определяются из равномерно распределенных случайных величин $p_{1,4}$ следующим образом:

$$s_x = \sigma \sqrt{-2 \ln p_1} \cos(2\pi p_2),$$

$$s_y = \sigma \sqrt{-2 \ln p_1} \sin(2\pi p_2),$$

$$s_z = \sigma \sqrt{-2 \ln p_3} \sin(2\pi p_4),$$

(9)

где σ – амплитуда тепловых колебаний атомов мишени. Для вольфрама использовалось значение амплитуды $\sigma = 0.05 \text{ Å}$, для берилия $\sigma = 0.09 \text{ Å}$, для углерода $\sigma = 0.07 \text{ Å}$. Учет тепловых колебаний крайне важен при расчете угловых зависимостей в случае рассеяния атомов поверхностью [83].

3 Исследование взаимодействия атомных пучков с твёрдым телом

3.1 Использование радужного рассеяния для характеризации поверхности кристалла

Ионная фокусировка и радужное рассеяние – интереснейшие явления, связанные с многократным рассеянием атомов на поверхности твёрдого тела. В данном разделе 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. Результаты рассматриваемого исследования опубликованы в работах [A6—A8].

3.1.1 Основные термины и параметры

Геометрия эксперимента продемонстрирована на рисунке 10. Коллимированный пучок атомов с энергией E_0 в диапазоне 1–100 кэВ с расходимостью менее 0.1 млрад падает на поверхность кристалла под углом $\alpha = 0.5 - 2^{\circ}$. Ось xсонаправлена с одной из кристаллографических осей, падающий пучок лежит в плоскости (x, z). Углы ϕ и δ характеризуют угловое распределение отражённых частиц.

Эффект концентрации траекторий рассеянных частиц вблизи определённого угла, возникающий при выполнении определённых условий, называют радужным рассеянием. Такая концентрация траекторий приводит к появлению отчётливых пиков в угловом распределении рассеянных частиц. Схематическое изображение данного эффекта приведено на рисунке 5 раздела 1.2.3.



Рис. 10: Схема геометрии рассеяния из работы [55]. α – угол падения налетающих частиц, ϕ – азимутальный угол рассеяния, δ – полярный угол рассеяния.

На рисунке 11 приведено распределение рассеянных частиц по углу ϕ при бомбардировке поверхности Al атомами Ar, в котором видна структура из трёх пиков. Радужное рассеяние в поверхностном полуканале вызывает появление боковых пиков в распределении. Рисунок 12 демонстрирует зависимость угла ϕ от прицельного параметра вдоль оси y, характерное для радужного рассеяния. Угол ϕ_r называют углом радужного рассеяния. При y = 0 угол рассеяния $\phi = 0$, и с ростом значения у растёт значение ϕ . Затем при значении y = d/2 (d – расстояние между двумя параллельными цепочками атомов в кристалле), значение ϕ снова равно нулю (из-за симметрии задачи о рассеянии на двух параллельных цепочках атомов). Это означает, что зависимость $\phi(y)$ имеет экстремум на участке y ={0, d/2}. Когда азимутальный угол равен ϕ_r производная $d\phi/dy = 0$, а спектр частиц $dN/d\phi \sim dy/d\phi$, изображённый на рисунке 11, имеет резкий максимум. Вследствие теплового движения атомов мишени и углового разброса атомов пучка, этот пик размывается.



Рис. 11: Угловое распределение атомов Ar с энергией 10 кэВ, рассеянных мишенью Al(111), по азимутальному углу ϕ . Пучок атомов направлен вдоль оси $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ под углом $\alpha = 2.35^{\circ}$. Расчёт методом BCA при T=0 и комнатной температуре и экспериментальные данные [54].



Рис. 12: Зависимость азимутального угла ϕ от прицельного параметра y (перпендикулярно атомной цепочке). Значения $y = 0, \pm d$ удовлетворяют условиям рассения на атомной цепочке, где d — расстояние между атомными цепочками в направлении y.

3.1.2 Сравнение с экспериментом

Расчёты проводились методом ВСА и, как видно на рисунке 11, при энергии 10 кэВ было достигнуто согласие полученных результатов с экспериментальными данными [54]. Однако, при более низких энергиях приближение ВСА не позволяет описать пики радужного рассеяния для комбинаций «налетающая частица – мишень» Ar-Al и Ar-Ag, и требуется применение метода траекторий.

На рисунке 13 приведено угловое распределение рассеянных атомов для комбинации Ar-Ag, полученное в результате моделирования методом траекторий



Рис. 13: Угловое распределение атомов Ar с энергией 2, 4, 8, 18 кэВ, рассеянных мишенью Ag(111), по азимутальному углу ϕ . Пучок атомов направлен вдоль оси $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ под углом $\alpha = 1.8^{\circ}$. Чёрные точки - экспериментальные данные [55], красная линия - расчёт методом траекторий, синяя линия (для $E_0 = 18$ кэВ) - расчёт методом BCA.

при различных значениях начальной энергии налетающих атомов. Видно хоропее согласие с экспериментальными данными [55]. В случае, когда начальная энергия составляет 18 кэВ, для сравнения также приведён результат моделирования методом ВСА – полученные данным методом значения углов радужного рассеяния больше экспериментальных значений. Пик при $\phi = 0$ дают две группы траекторий: частицы, движущиеся над цепочкой атомов y = 0, и частицы, движущиеся вблизи центра поверхностного канала y = d/2. Как показывает моделирование методом траекторий, при энергиях, больших 8 кэВ, значение y_{max} , соответствующее углу ϕ_r , сдвигается от значения d/4 в меньшую сторону, и частицы начинают испытывать более одного колебания при рассеянии в поверхностном канале. Это приводит к появлению траекторий типа "змейки", плотность траекторий вблизи оси канала повышается, и появляется дополнительный максимум вблизи $\phi = 0$. С ростом начальной энергии его интенсивность увеличивается, и спектр усложняется.

3.1.3 Амплитуда тепловых колебаний

Пренебрежение тепловыми колебаниями при моделировании приводит к тому, что спектр при $|\phi| > |\phi_r|$ резко обрывается. Благодаря тепловым колебаниям появляются крылья, которые хорошо описываются распределением Гаусса $N = A \cdot exp\{-(\phi - \phi_r)^2/2w^2\}$ с параметрами ϕ_r и w. Как показали расчёты, параметр w пропорционален закладываемой в моделирование амплитуде тепловых колебаний σ . Таким образом, проводя сравнение с экспериментальными данными, можно получить значение амплитуды тепловых колебаний: в случае Ar-Al $\sigma = 0.123 \pm 0.007 \text{Å}$, в случае Ar-Ag $\sigma = 0.120 \pm 0.013 \text{Å}$. Сравнение значений для левого и правого крыльев, а также сравнение данных при различных энергиях позволяет оценить методическую ошибку. Полученные данные, соответствующие тепловым колебаниям вдоль поверхности, удовлетворительно согласуются с результатами независимых измерений: $\sigma = 0.110 \pm 0.006 \text{\AA}$ для Al(110) [84] и $\sigma = 0.130 \pm 0.010 \text{\AA}$ для Ag(110) [85]. Так как амплитуды тепловых колебаний могут зависеть от ориентации поверхности, это сравнение носит качественный характер.



Рис. 14: Расчетные угловые распределения атомов Ar рассеянных поверхностью Ag(111) по азимутальному углу ϕ при различных амплитудах тепловых колебаний атомов кристалла σ . Начальная энергия атомов Ar 8 кэB, пучок направлен вдоль оси $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ под углом $\alpha = 1.8^{\circ}$.

3.1.4 Потенциал взаимодействия «налетающая частица - поверхность»

Сравнение угловых распределений при различных значениях амплитуды тепловых колебаний атомов кристалла приведены на рисунке 14. Как можно видеть, положение радужного пика зависит от значения тепловых колебаний, заложенного в моделирование. В работе [55] авторы предложили использовать зависимость значения угла радужного рассеяния ϕ_r от энергии бомбардирующих частиц для получения параметров потенциала. Продемонстрированная на рисунке 14 зависимость ϕ_r от величины тепловых колебаний также должна

учитываться. Как показано в данной работе, величину тепловых колебаний можно определить из экспериментальных данных, что позволяет устранить неопределённость в положении пика, связанную с тепловыми колебаниями.

На рисунке 15 показано сравнение зависимостей угла радужного рассеяния от энергии, рассчитанных с использованием потенциалов ZBL [28], Мольера [51] и Зиновьева [78]. Как видно на рисунке, при использовании данных моделей парного потенциала есть расхождение как в конкретных значениях радужного угла, так и в форме функциональной зависимости, если сравнивать с данными эксперимента, также представленными на рисунке. Следовательно, эксперимент нельзя объяснить простой подгонкой параметров потенциала.



Рис. 15: Значения угла радужного рассеяния при различных энергиях налетающих частиц для комбинации Ar-Ag(111): экспериментальные данные [55; 56], значения, рассчитанные с использованием разработанной формы потенциала и с использованием потенциалов ZBL [28], Мольера [51] и Зиновьева [78].

Для описания эксперимента была использована форма потенциала, предложенная в работе [86] для системы p - H. Такой потенциал представляет собой комбинацию экранированного кулоновского потенциала и экспоненциального

потенциала. Таким образом, потенциал был записан в виде:

$$U(R) = A \cdot e^{-\beta R} \cdot \left(\frac{1}{R} + B\right).$$
(10)

Поскольку для вычислений траекторий использовалась сила F = dU/dR, это выражение трансформировалось следующим образом:

$$F(R) = A \cdot \frac{e^{-\beta R}}{R^2} \cdot \left(1 + bR + cR^2\right) \tag{11}$$

и в такой форме использовалось для описания эксперимента.

Параметр A был получен нормировкой теоретической зависимости на экспериментальную в центре рассматриваемого энергетического интервала (4 – 6 кэВ). Параметры b и c были получены из условия минимума отклонения результатов расчёта на концах интервала ($E_0 = 270$ эВ и $E_0 = 70$ кэВ). Таким образом, для комбинации Ar-Ag(111) был получен следующий вид F(R), выраженный в атомных единицах:

$$F(R) = 192.2 \cdot \frac{\exp(-1.062R)}{R^2} \cdot (1 - 0.234R + 0.024R^2).$$
(12)

Зависимость ϕ_r от начальной энергии бомбардирующих частиц для комбинации Ar-Ag(111), полученная с использованием разработанного потенциала, представлена на рисунке 15. Видно хорошее согласие с экспериментальными данными.

Аналогично были получены потенциалы взаимодействия для комбинаций Ne-Al(001), Kr-Al(001), Ar-Al(001) и Ar-Al(111) – они представлены графически на рисунке 16. Положения радужного пика, полученные с использованием данных потенциалов хорошо согласуются с экспериментом, как можно видеть на рисунке 17, где представлены зависимости положения радужного пика от перпендикулярной составляющей энергии, полученные с использованием разработанных потенциалов, в случаях бомбардировки поверхности Al(001) атомами Ne, Ar и Kr. Углы θ_{rb} и ϕ_r связаны соотношением $\sin \theta_{rb} = \operatorname{tg} \phi_r \operatorname{ctg} \delta$.



Рис. 16: Величина потенциала взаимодействия атом-поверхность U(R) в зависимости от межатомного расстояния для комбинаций Ar-Ag(111), Ar-Al(111) и Ar-Al(001), Ne-Al(001), Kr-Al(001). Помимо расчёта с помощью разработанных потенциалов показаны расчёты для потенциалов ZBL [28], Зиновьева-Нордлунда [77] и Зиновьева [78].

3.1.5 Выводы

Данное исследование демонстрирует, что метод траекторий обеспечивает лучшее согласие с экспериментальными данными, чем метод BCA, и по этой причине лучше подходит для моделирования явления радужного рассеяния. 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».

Полученные потенциалы сильно отличаются от известных моделей парных потенциалов. Это различие зависит от ориентации кристалла, оно проявляется больше в случае плотно упакованной цепочки атомов и уменьшается при росте атомного номера налетающей частицы. На наш взгляд, это различие может быть связано с взаимодействием налетающей частицы с электронами металла – поле атома наводит в металле эффективный заряд отрицательного знака, что приводит к уменьшению отталкивания налетающей частицы от ионного остова кристалла.

Результаты моделирования, полученные с использованием предложенной формы двухчастичного потенциала, находится в согласии с экспериментальными данными.



Рис. 17: Положение пика радужного рассеяния в зависимости от $E_{\perp} = E_0 \cdot \sin^2 \alpha$ для столкновений атомов Ne, Ar и Kr с поверхностью Al(001), расчитанные с использованием разработанных потенциалов. Экспериментальные данные из работы [85].

3.2 Отражение атомов H, D, T, He от аморфных мишеней

В токамаке-реакторе атомы, отражённые от поверхностей, сталкиваются с ионами плазмы, и вследствие перезарядки происходит образование потока нейтральных атомов. Детектирование таких потоков используется для измерения температуры и изотопного баланса плазмы. Знание коэффициентов отражения также необходимо для анализа тепловой нагрузки на материалы дивертора и первой стенки. Экспериментальные данные по коэффициентам отражения от Ве отсутствуют, а для С и W они крайне ограничены [1; 2].

В ходе работы над данной темой были рассчитаны коэффициенты отражения при рассеянии изотопов водорода и атомов гелия на поверхности мишеней из аморфных бериллия, углерода и вольфрама. Диапазон энергий налетающих частиц 100 эВ – 10 кэВ был выбран для исследования, так как он соответствует типичным энергиям частиц плазмы. Моделирование проводилось методом ВСА, так как сравнение результатов двух методов показало, что для исследуемых систем в данном диапазоне энергий расчёт методом ВСА согласуется с расчётом методом траекторий. Был исследован и изотопный эффект: для этого были рассчитаны коэффициенты отражения атомов H, D, T от поверхностей из бериллия, вольфрама и углерода. Коэффициенты отражения гелия были рассчитаны, так как гелий является продуктом термоядерных реакций. Также для сравнения приведены коэффициенты отражения атомов D от поверхности поликристаллического и кристаллического W(100). Полученные результаты опубликованы в работах [А2—А4; А9].

3.2.1 Влияние формы потенциала на коэффициенты отражения

Было обнаружено неожиданно сильное влияние ямы в потенциалах взаимодействия на процессы отражения. На рисунке 18 представлены угловые зависимости коэффициента отражения при рассеянии изотопов водорода на аморфном бериллии, рассчитанные с использованием разных потенциалов: потенциала DFT (раздел 2.5), который обладает потенциальной ямой, и чисто отталкивающего потенциала ZBL [28]. Как видно из рисунка 18, наличие потенциальной ямы существенно сказывается на величинах коэффициентов отражения для углов скольжения $< 20^{\circ}$ при начальных энергиях порядка сотен эВ: хорошо видно изменение от практически стопроцентного отражения к заметному поглощению частиц поверхностью. При энергиях свыше 2 кэВ это различие незначительно.



Рис. 18: 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).

Для случая отражения дейтерия от поверхности углерода было проведено сравнение с существующими экспериментальными данными. На рисунке 19 видно хорошее согласие между экспериментом и результатами моделирования, проведённого с использованием DFT потенциала. Полученное согласие позволило рассчитать коэффициенты отражения для всех изучаемых комбинаций атомов H, D, T, He и мишеней Be, C, W. Во всех случаях результаты расчёта коэффициентов отражения зависят от используемого потенциала взаимодействия частиц. Расчеты с применением потенциала DFT с потенциальной ямой ранее не проводились. При энергиях соударения больших 1 кэВ, когда результаты слабо зависят от используемого потенциала, возможно сопоставление с результатами других расчётов. Коэффициенты отражения, полученные в рамках данной работы, удовлетворительно согласуются с независимыми расчетами [87—89]. В таблицах 3, 4, 5, 6 (в конце раздела 3.2) представлены рассчитанные коэффициенты отражения для комбинаций H,D-W и D-Be,C.



Рис. 19: Сравнение коэффициентов отражения атомов D, рассеянных от аморфного углерода, рассчитанных с использованием поетнциала DFT, с экспериментальными данными [2].

3.2.2 Анализ зависимостей коэффициента отражения от энергии

На рисунке 20 приведены данные о коэффициентах отражения H, D, T от Be, C, W при различных углах скольжения. Данные для различных изотопов близки, потому что для описания рассеяния используется один и тот же потенциал. При малых углах сечение рассеяния зависит только от энергии частиц, и разница в коэффициентах отражения при определённой энергии возникает из-за различия в тормозных способностях для различных изотопов. При больших углах рассеяния сечение рассеяния зависит от приведенной массы. Различие в приведенных массах для различных изотопов больше для легкой мишени. Это отражается на рисунке 20: для наиболее лёгкой мишени из Be различие в коэффициентах отражения для различных изотопов больше, чем для других мишеней. Видно, что данное различие уменьшается с ростом атомного номера мишени.

Для атомов гелия притягивающая яма в потенциале DFT составляет менее 0.02 эВ, поэтому она не должна существенно влиять на коэффициенты отражения. На рисунке 21 приведены рассчитанные коэффициенты отражения гелия от аморфных мишеней из Be, C и W в зависимости от параметра $E_{\perp} = E \cdot \sin^2 \alpha$, предложенного Линдхардом [44]. Для значений $E_{\perp} < 10$ эВ наблюдается универсальная зависимость для аморфных мишеней. При больших значениях E_{\perp} наблюдается подобие кривых.





(b)



Рис. 20: Коэффициенты отражения изотопов водорода в зависимости от энергии падающей частицы при углах падения α =5, 30 и 90°, отсчёт от поверхности. Мишени: (a) Be, (b) C, (c) W.



Рис. 21: Коэффициенты отражения атомов Не в зависимости от параметра $E_{\perp} = E \cdot \sin^2 \alpha$, где Е - энергия падающей частицы. Числа у кривых - энергия падающих частиц в кэВ. Мишени: (a) Ве, (b) С, (c) W.

3.2.3 Влияние структуры твёрдого тела

Разработанный код дал возможность проанализировать влияние структуры твёрдого тела на отражение. На рисунке 22 представлено сравнение угловых зависимостей коэффициентов отражения атомов D от поликристаллического и кристаллического W при различных энергиях налетающих частиц. Хорошо видно, как сильно структура поверхности влияет на величины коэффициентов отражения с ростом энергии. Для кристаллической мишени в зависимостях коэффициента отражения наблюдаются особенности, связанные с каналированием. Наиболее ярко проявляются особенности, соответствующие углам скольжения $\alpha = 26.6, 45, 63.4, 90^{\circ}$ – в данных направлениях проявляется эффект каналирования.



Рис. 22: Угловые зависимости коэффициента отражения атомов D от поликристаллического и кристаллического W при различных энергиях налетающих частиц. *α* - угол падения атомов D, отсчёт от поверхности.

3.2.4 Выводы

В результате моделирования методом BCA с применением DFT потенциала для описания взаимодействия между налетающей частицей и атомами твёрдого тела получены коэффициенты отражения атомов изотопов водорода и атомов гелия от аморфных поверхностей из вольфрама, углерода и бериллия. Правильное описание процесса отражения рассматриваемых комбинаций налетающих частиц и мишеней актуально в области термоядерных исследований.

Исследовано влияние формы потенциала взаимодействия на моделирование процесса отражения: показано сильное отклонение от стопроцентного отражения при энергиях порядка сотен эВ на малых углах скольжения при использовании потенциала DFT с притягивающей ямой. Применение данного потенциала для описания отражения при рассматриваемых условиях является предпочтительным, поскольку обеспечивает хорошее согласие результатов с экспериментальными данными.

Проведено сравнение зависимостей коэффициента отражения от энергии для 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.

	100 эВ	200 эВ	400 эВ	1000 эВ	2000 эВ	5000 эВ	10000 эВ
5°	0.765	0.812	0.827	0.834	0.808	0.763	0.723
10°	0.738	0.773	0.778	0.753	0.717	0.670	0.624
15°	0.707	0.726	0.725	0.691	0.661	0.601	0.550
20°	0.671	0.687	0.671	0.636	0.602	0.546	0.488
30°	0.595	0.60	0.584	0.551	0.510	0.448	0.385
40°	0.524	0.534	0.518	0.482	0.447	0.377	0.311
50°	0.491	0.494	0.476	0.435	0.398	0.326	0.257
60°	0.470	0.470	0.450	0.409	0.364	0.288	0.214
70°	0.463	0.465	0.446	0.396	0.348	0.266	0.190
80°	0.473	0.464	0.441	0.386	0.341	0.250	0.174
90°	0.463	0.461	0.438	0.375	0.329	0.244	0.173

Таблица 3: Коэффициенты отражения Н от аморфного W при различных начальных энергиях и углах падения (отсчёт от поверхности) налетающих частиц.

Таблица 4: Коэффициенты отражения D от аморфного W при различных начальных энергиях и углах падения (отсчёт от поверхности) налетающих частиц.

	100 эВ	200 эВ	400 эВ	1000 эВ	2000 эВ	5000 эВ	10000 эВ
5°	0.758	0.803	0.825	0.824	0.806	0.762	0.720
10°	0.736	0.767	0.768	0.745	0.716	0.664	0.621
15°	0.703	0.720	0.713	0.681	0.650	0.601	0.546
20°	0.659	0.674	0.663	0.631	0.598	0.539	0.482
30°	0.580	0.589	0.577	0.540	0.506	0.442	0.373
40°	0.515	0.518	0.508	0.471	0.446	0.371	0.304
50°	0.479	0.476	0.458	0.429	0.391	0.321	0.246
60°	0.456	0.458	0.442	0.398	0.359	0.282	0.210
70°	0.451	0.450	0.434	0.377	0.335	0.255	0.186
80°	0.454	0.453	0.430	0.377	0.331	0.246	0.172
90°	0.454	0.446	0.420	0.372	0.319	0.237	0.168

	100 эВ	200 эВ	400 эВ	1000 эВ	2000 эВ	3000 эВ	5000 эВ	10000 эВ
5°	0.546	0.614	0.644	0.637	0.620	0.600	0.572	0.519
10°	0.514	0.560	0.566	0.541	0.493	0.463	0.423	0.345
15°	0.474	0.505	0.494	0.453	0.398	0.364	0.307	0.230
20°	0.428	0.452	0.429	0.370	0.315	0.276	0.223	0.145
30°	0.338	0.341	0.317	0.257	0.194	0.159	0.114	0.056
40°	0.273	0.269	0.238	0.174	0.125	0.092	0.059	0.024
50°	0.236	0.220	0.191	0.125	0.080	0.056	0.031	0.012
60°	0.215	0.195	0.154	0.098	0.054	0.038	0.019	0.007
70°	0.203	0.181	0.135	0.077	0.041	0.024	0.014	0.005
80°	0.198	0.171	0.128	0.067	0.037	0.020	0.010	0.004
90°	0.199	0.167	0.123	0.062	0.035	0.019	0.010	0.003

Таблица 5: Коэффициенты отражения D от аморфного C при различных начальных энергиях и углах падения (отсчёт от поверхности) налетающих частиц.

Таблица 6: Коэффициенты отражения D от аморфного Be при различных начальных энергиях и углах падения (отсчёт от поверхности) налетающих частиц.

	100 эВ	200 эВ	400 эВ	1000 эВ	2000 эВ	5000 эВ	10000 эВ
5°	0.622	0.667	0.686	0.653	0.616	0.544	0.483
10°	0.576	0.588	0.566	0.511	0.459	0.374	0.292
15°	0.503	0.495	0.470	0.403	0.351	0.258	0.172
20°	0.435	0.416	0.381	0.317	0.260	0.170	0.098
30°	0.316	0.290	0.250	0.196	0.141	0.071	0.031
40°	0.225	0.202	0.171	0.124	0.079	0.032	0.012
50°	0.179	0.155	0.124	0.078	0.048	0.016	0.006
60°	0.154	0.127	0.095	0.055	0.030	0.009	0.004
70°	0.141	0.114	0.077	0.042	0.022	0.006	0.003
80°	0.135	0.105	0.071	0.035	0.017	0.005	0.003
90°	0.134	0.102	0.067	0.034	0.016	0.004	0.003

3.3 Пробеги атомов H, D, He в аморфных мишенях

Проблема радиационных повреждений материалов при контакте с плазмой является одной из важнейших практических проблем при создании токамакареактора. Достоверные данные о пробегах лёгких атомов в вольфраме, запланированном материале дивертора, отсутствуют. Знание пробегов атомов требуется для оценок образования дефектов и накопления изотопов водорода в материале.

При работе над данной темой были выбраны следующие комбинации «налетающая частица – мишень»: H-Si, D-W, H-W, He-W. В случае мишени из вольфрама экспериментальные данные по пробегам отсутствуют. Кремний был выбран в данном исследовании в качестве материала мишени с целью проверки применимости разработанного кода для расчёта пробегов, так как существует большое количество экспериментальных и расчётных данных по пробегам в кремнии [7; 90; 91]. Таким образом, имелась возможность убедиться в точности метода и параметров моделирования для рассматриваемой задачи. Моделирование проводилось в приближении ВСА и методом траекторий. Результаты данного исследования опубликованы в работе [А5].

3.3.1 Основные понятия

Полным пробегом частицы называют длину её пути, а проективным пробегом – проекцию полного пробега на выбранное направление, например, перпендикулярное поверхности. Вследствие многократности соударений имеет смысл говорить о распределении проективных пробегов по глубине. Далее термином «пробег» будет обозначаться среднее значение проективного пробега. Чтобы проиллюстрировать данные понятия, рассмотрим следующую геометрию: плоскость (y, z) задаёт поверхность мишени, ось x направлена вглубь мишени, налетающий атом движется сонаправленно оси x. Пусть налетающий атом остановился в интервале с координатами $[x_i, x_i + dx]$, тогда распределение пробегов задаётся следующим образом: $\omega_i = N_i/N_0$, где N_0 — полное число имплантированных частиц, N_i — число частиц с пробегом в рассматриваемом интервале с индексом i. Тогда средний пробег, т.е. среднее значение распределения пробегов, определяется как $x_{av} = \sum_i x_i \omega_i$.

Помимо перечисленных понятий далее также используются величины, изображённые на рисунке 23: положение пика С, правая и левая полуширина на полувысоте (RHW и LHW, соответственно).



Рис. 23: Распределение пробегов для системы H-Si, E=10 кэB; C – положение пика, RHW, LHW – правая и левая полуширина на полувысоте, соответственно.

3.3.2 Пробеги атомов в кремнии и вольфраме

Значения средних пробегов атомов водорода в аморфном кремнии при различных величинах начальной энергии бомбардирующих частиц, полученные с помощью моделирования методами BCA и траекторий, представлены на рисунке 24. На рисунке для сравнения также представлены табличные значения из SRIM [14] и экспериментальные данные [90; 91]. В ходе моделирования обоими метода-



Рис. 24: Зависимость среднего пробега от энергии налетающих частиц для комбинации H-Si: расчёты методами траекторий и BCA, табличные значения из SRIM, экспериментальные данные: треугольники – [90], кружки – [91].

ми использовался составной потенциал. Его отталкивающая часть представляет собой потенциал из работы [78], дополненный потенциальной ямой с глубиной 3.195 эВ и положением минимума 1.5 Å в соответствии со спектроскопическими данными [80]. Результаты обоих расчётов находятся в согласии друг с другом, а также с экспериментальными данными, особенно, при начальной энергии ≥ 20 кэВ. Для описания результатов моделирования хорошо подходит следующая формула:

$$x_{av} = 234 \cdot E^{0.775},\tag{13}$$

при этом x_{av} выражено в \mathring{A} , а энергия налетающих частиц Е – в кэВ.

На рисунке 25 представлены рассчитанные значения средних пробегов атомов D в мишени из аморфного W для различных значений начальной энергии бомбардирующих атомов, а также табличные данные из SRIM. Так же, как и для мишени из Si, моделирование проведено и методом BCA, и методом



Рис. 25: Зависимость среднего пробега от энергии налетающих частиц для комбинации D-W: расчёты методами траекторий и BCA, табличные значения из SRIM.

траекторий, и результаты для данной комбинации частица-мишень, полученные разными методами, тоже согласуются между собой. В расчётах обоими методами применялся потенциал DFT (раздел 2.5). Полученный результат описывается формулой

$$x_{av} = 144 \cdot E^{0.666} (1 + 0.00575 \cdot E), \tag{14}$$

при этом x_{av} выражено в Å, а энергия налетающих частиц E - в кэB.

Для мишени из вольфрама, как видно на рисунке 25, проявилось значительное различие между полученными результатами моделирования и таблицами пробегов SRIM. Менее значительное различие заметно и на рисунке 24 для мишени из кремния. Это указывает на то, что таблицы пробегов, приведённые в базе данных SRIM, нуждаются в корректировке.

Сравнительный анализ двух использованных в данной работе методик показал, что они одинаково хорошо подходят для расчёта пробегов лёгких

атомов в аморфном теле в рассматриваемом энергетическом диапазоне. Для дальнейшей работы над данной темой использовался код, построенный на методе BCA, вследствие его преимущества по скорости счёта.

3.3.3 Влияние формы потенциала на величину пробега

Было проведено сравнение средних пробегов атомов H, D, He в аморфном вольфраме, рассчитанных методом BCA с использованием трёх разных потенциалов: ZBL [28] и Зиновьева [78], которые являются чисто отталкивающими, а также потенциала DFT, обладающего притягивающей ямой. Значения, полученные при использовании первых двух потенциалов, практически совпадают. На рисунке 26, где представлено сравнение результатов для потенциалов ZBL и DFT, видно, что значения пробегов, полученные с использованием DFT потенциала, превышают значения, полученные с потенциалом ZBL. При начальной энергии бомбардирующих атомов равной 100 эВ это различие составляет 14, 17 и 23%



Рис. 26: 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).
для комбинаций H-W, D-W и He-W, соответственно. Как видно на рисунке 26, с ростом энергии влияние потенциала на результат моделирования ослабевает. Это можно объяснить следующим образом: от потенциала зависят величины ядерных потерь энергии, которые на несколько порядков меньше электронных потерь, вносящих основной вклад при торможении частиц в твердом теле.

Результаты, полученные с использованием потенциала DFT, могут быть описаны для комбинации H-W формулой

$$x_{av} = 122 \cdot E^{0.662} (1 + 0.00509 \cdot E), \tag{15}$$

и для комбинации He-W формулой

$$x_{av} = 79.3 \cdot E^{0.649} (1 + 0.00468 \cdot E), \tag{16}$$

при этом x_{av} выражено в \mathring{A} , а энергия налетающих частиц Е – в кэВ.

Как видно из формул, зависимости для комбинаций H-W, D-W и He-W весьма похожи и аппроксимируются аналогичными выражениями.

3.3.4 Распределения пробегов по глубине

На рисунках 27а и 27b представлены распределения пробегов для комбинаций H-Si и D-W, рассчитанные с использованием потенциалов с притягивающей ямой, упомянутых ранее. С помощью характеристик, приведённых в таблицах 7 и 8, можно построить распределения пробегов с помощью интерполяции без проведения расчёта.

Положение максимума C, зависящее от асимметрии пика, близко по значению к среднему пробегу x_{av} . Что касается значений полуширины, рисунок 28 демонстрирует, что отношения LHW/C и RHW/C уменьшаются с ростом

энергии, когда пик становится более ярко выраженным. При больших значениях энергии правая полуширина пика меньше левой.



Рис. 27: Распределения пробегов для комбинации (a) H-Si, (b) D-W при различных значениях энергии налетающих частиц (цифры у кривых в кэВ).



Рис. 28: Зависимость отношений LHW/C и RHW/C от энергии налетающих частиц для комбинаций H-Si и D-W.

Е, кэВ	x_{av}, \mathring{A}	C, \mathring{A}	LHW, \mathring{A}	RHW, \mathring{A}
0.1	40.8	33	26.3	34.5
0.2	68.3	58	45.8	54.8
0.5	134.6	125	98.2	99.5
1	227.9	238	179	143
2	391.5	438	279	193
5	809.5	938	406	262
10	1399	1599	487	308
20	2386	2678	572	318
50	4801	5153	616	362
100	8626	9170	640	376

Таблица 7: Параметры распределений пробегов по глубине для комбинации H-Si: x_{av} – средний пробег, C – положение пика, LHW и RHW – левая и правая полуширина пика на полувысоте.

Таблица 8: Параметры распределений пробегов по глубине для комбинации D-W: x_{av} – средний пробег, C – положение пика, LHW и RHW – левая и правая полуширина пика на полувысоте.

Е, кэВ	x_{av}, \mathring{A}	C, \mathring{A}	LHW, \mathring{A}	RHW, \mathring{A}
0.1	32.2	26.5	20.5	24
0.2	50	39.5	29.8	39.4
0.5	89.5	68	49.8	72
1	141	113	85	114
2	224	179	136	181
5	425	363	279	333
10	708	635	484	527
20	1218	1324	957	724
50	2572	2920	1546	1051
100	4575	5255	1899	1214

3.3.5 Выводы

Проведено сравнение расчётных значений пробегов изотопов водорода в аморфных кремнии и вольфраме, которые получены путём моделирования с использованием потенциалов с притягивающей ямой методами траекторий и BCA, а также табличных значений из SRIM и экспериментальных данных (для кремния). Результаты обоих использованных методов согласуются между собой. В случае кремния продемонстрировано согласие с экспериментальными данными. Сделан вывод о том, что для ускорения расчётов допустимо использование метода BCA для данных систем в диапазоне энергий E=0.1-100 кэB.

Для комбинаций H,D,He-W проведена оценка влияния притягивающей ямы в потенциале на результаты расчёта пробегов. При использовании потенциалов с ямой (DFT) и без ямы (ZBL) различие пробегов при энергии 100 эВ составляет 14, 17 и 23% для комбинаций H-W, D-W и He-W соответственно. С ростом энергии влияние притягивающей ямы ослабевает.

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.

3.4 Пробеги и пространственное распределение атомов Н и D в кристаллических мишенях в режиме каналирования

При изучении пробегов атомов в твёрдом теле нельзя не затронуть интересный частный случай – прохождение атомов через кристалл и связанный с этим эффект каналирования. В рамках данной работы были рассчитаны пробеги атомов Н и D в кристаллических кремнии и вольфраме, показано изменение характера распределения пробегов по глубине в зависимости от энергии атомов и проанализирована эволюция пространственного распределения атомов, захваченных в канал. Результаты работы над данной темой представлены в [A10].

3.4.1 Пробеги атомов в Si(100)

Как и при изучении пробегов атомных частиц в аморфных мишенях, на первом шаге исследования кремний был выбран в качестве материала мишени из-за наличия экспериментальных данных о пробегах и их распределении по глубине для того, чтобы убедиться в применимости метода и параметров моделирования для данной задачи. Подобные экспериментальные данные для вольфрама отсутствуют. Вольфрам хорошо подходит для изучения рассматриваемых процессов благодаря своей простой кристаллографической структуре (кубической объёмноцентрированной), и ожидалось что, большое различие в массах бомбардирующих атомов и атомов кристалла должно способствовать формированию более явного пространственного распределения частиц, захваченных в канал.

Моделирование проводилось методом расчёта траекторий с использованием потенциала DFT (раздел 2.5). Поверхность облучалась пучком атомов, имею-

щих одинаковые начальные энергии, для каждой имплантированной частицы фиксировался её проективный пробег.

Моделирование бомбардировки кремния Si(100) атомами водорода позволило убедиться в правильности выбранного метода и параметров. На рисунке 29 представлены значения среднего проективного пробега Н в Si(100) в зависимости от начальной энергии бомбардирующих частиц. В одном случае пучок атомов направлен строго перпендикулярно поверхности, а в другом – отклонён от нормали на 7°. На рисунке также приведены экспериментальные данные из работы [90]. Видно, что проведённый расчёт методом траекторий с использованием потенциала с притягивающей ямой хорошо согласуется с данными эксперимента.



Рис. 29: Зависимость среднего проективного пробега *x* от энергии налетающих частиц Е для комбинации H-Si(100) в случае перпендикулярного падения пучка (сплошная линия) и для отклонения на 7° (штриховая). Линия – расчёт, кружки – экспериментальные данные [90].

3.4.2 Влияние энергии и угла падения атомов на распределения пробегов по глубине в W(100)

В результате моделирования бомбардировки поверхности W(100) атомами D были получены распределения проективных пробегов по глубине при различных значениях начальной энергии налетающих частиц (рисунок 30). Пучок атомов D направлен перпендикулярно поверхности. На рисунке видно, что с ростом начальной энергии в распределении пробегов выделяются две компоненты: одна проявляется в результате случайного рассеяния атомных частиц в поверхностных слоях, а другая характеризует частицы, захваченные в канал. Данное расслоение наблюдалось экспериментально в работе [92] для комбинации K-W(111). Однако, рисунок 30 демонстрирует это явление более наглядно – компоненты лучше разделены благодаря тому, что в моделировании были использованы более лёгкие атомы дейтерия.



Рис. 30: Распределения пробегов по глубине для комбинации D-W(100) в случае ориентации пучка под углом 0° к нормали с энергией налетающих частиц в диапазоне 0.1-100 кэВ.

Для проверки правильности интерпретации появления двух составляющих в распределении пробегов по глубине были выполнены расчёты распределения пробегов по глубине для комбинации D-W(100) при различных углах падения налетающих частиц, отсчитываемых от нормали к поверхности. Результаты представлены на рисунке 31. Энергия налетающих частиц – 100 кэВ. При отклонении направления пучка от кристаллической оси на 0 – 6° происходит перестройка распределения пробегов частиц по глубине, при этом уменьшается доля частиц, захваченных в канал.



Рис. 31: Распределения пробегов для комбинации D-W(100) при различных углах падения налетающих частиц, отсчитываемых от нормали к поверхности кристалла. Энергия налетающих частиц – 100 кэВ.

3.4.3 Пространственное распределение атомных частиц в канале

Разработанный код даёт возможность построить пространственное распределение атомных частиц пучка внутри канала на любой глубине, тем самым можно проследить его изменение. Для того чтобы проследить эволюцию пространственной картины для одного канала, было проведено моделирование, в



Рис. 32: 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.

котором пучком частиц, направленным перпендикулярно поверхности, равномерно облучалась площадка размером $2d^2$, указанная пунктирным квадратом на рисунке 32, где центры незакрашенных областей соответствуют положению атомов кристалла, d = 1.58Å. На рисунке 32 приведены пространственные распределения каналируемых частиц при прохождении 1000, 3000, 7000 и 9000 Å. Цветовая шкала показывает количество частиц, зарегистрированных в каждой точке пространства. Было выполнено моделирование ~ 10^5 траекторий. Начальная энергия частиц – 100 кэВ. Такой энергии соответствует пробег ~ 10^4 Å. В расчёте учитывались тепловые колебания атомов решётки.

Интересным фактом явилось обнаружение возникновения чёткого пространственного распределения сформированного пучка каналируемых частиц. Видно, что на начальном этапе при прохождении 1000 \mathring{A} захваченные в канал частицы образуют характерное пространственное распределение пирамидальной формы с ориентацией углов «пирамиды» вдоль потенциальных долин (что согласуется с аналитическим предсказанием из работы [50]). Пространственное распределение частиц сохраняется до расстояния 7000 \mathring{A} . На глубине 9000 \mathring{A} наблюдается интенсивное перетекание частиц в соседние каналы. Вблизи точки остановки частиц пространственная структура пучка, захваченного в канал, разрушается. Образование чёткого пространственного распределения пучка каналированных частиц можно объяснить многократностью соударений частиц пучка с атомами решётки.

3.4.4 Применение рассмотренных эффектов

Можно предложить эксперимент, основывающийся на рассмотренных явлениях. Толщина мишени и энергия пучка налетающих частиц должны быть подобраны исходя из условия, что атомы вылетают из мишени после образова-

82

ния описанного пространственного распределения, но до его разрушения. На рисунках 33a и 33b представлены распределения вылетевших частиц по углу θ (отсчёт от нормали к поверхности) и азимутальному углу ϕ при начальной энергии 100 кэВ после прохождения 3000 Å внутри мишени. Распределение по углу θ даёт информацию о распределении потенциала в канале, а распределение по углу ϕ позволяет судить о строении кристалла, и может быть использовано для анализа топографии поверхностного слоя плёнки.



Рис. 33: Угловые распределение вылетевших частиц по углам: (а) θ (угол относительно нормали к поверхности), (b) ϕ (азимутальный угол). Толщина мишени 3000 \mathring{A} , начальная энергия налетающих частиц 100 кэВ.

3.4.5 Выводы

Рассчитаны пробеги атомов Н в мишени из Si(100) в режиме каналирования и в случае отклонения направления пучка от направления каналирования. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментом.

Рассчитаны пробеги атомов D в мишени из W(100) и проведён анализ их распределения по глубине. Показано, что в распределении пробегов проявляются две компоненты по мере роста начальной энергии налетающих частиц: одна связана со случайным рассеянием в поверхностных слоях, а другая – с каналированием частиц.

Обнаружено образование устойчивой пространственной структуры пучка частиц в канале и исследована трансформация данной структуры в зависимости от пройденного расстояния. Показано сохранение чёткого пространственного распределения вплоть до глубины, составляющей до 90% от пробега частицы.

Предложена схема эксперимента по анализу характеристик кристалла на основе угловых распределений вылетевших частиц, которые были захвачены в канал.

3.5 Линейные потери энергии атомов H, D, T в аморфных мишенях

Данный раздел посвящён изучению энерговыделения при прохождении изучаемых частиц через материалы. Результаты, описанные в данном разделе, опубликованы в работах [A11; A12].

3.5.1 Параметры моделирования

Для моделирования процессов энерговыделения при прохождении атома через аморфное твёрдое тело был выбран метод ВСА. Применение метода ВСА для моделирования рассеяния атомов Н и D на поверхности вольфрама дало результат, близкий к результату моделирования методом траекторий в рассматриваемом энергетическом диапазоне (раздел 3.2). Поэтому из-за преимущества метода ВСА по времени выполнения моделирования, данному методу было отдано предпочтение при работе над рассматриваемой задачей. Для описания взаимодействия налетающего атома с атомами твёрдого тела выбран потенциал DFT (раздел 2.5).

Моделирование проводилось в двух энергетических диапазонах:

- в широком диапазоне от 0.1 кэВ до 10 МэВ для комбинации H-W с целью проследить появление пика Брэгга,
- в более узком диапазоне от 0.1 до 50 кэВ для комбинаций D,T-W,Be,C для оценки энерговыделения в материалах токамака-реактора ИТЭР.

На рисунке 34 приведены данные об электронных и ядерных тормозных способностях для атомов водорода в вольфраме в зависимости от начальной энергии частиц, взятые из базы [82]. Электронные тормозные способности удобно



Рис. 34: Зависимость потерь энергии при торможении на электронах и ядрах для водорода и дейтерия в вольфраме. Значения из базы данных [82].

описать следующими аналитическими формулами.

В диапазоне начальных энергий Е = 1 эВ - 25 кэВ:

$$\frac{dE}{dx} = 2.858E^{0.49}(1+0.004E),\tag{17}$$

в диапазоне E = 25 - 1000 кэB:

$$\frac{dE}{dx} = \exp\left[1.936 - 0.853\ln E + 0.670\ln^2 E - 0.125\ln^3 E + 0.007\ln^4 E\right], \quad (18)$$

в диапазоне E = 1 - 10 МэВ:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{2231.3\ln\left(E/117.1\right)}{E^{0.86}},\tag{19}$$

для E = 10 - 200 MэB:

$$\frac{dE}{dx} = \exp\left[9.04 - 0.97\ln(\ln E) - 0.61\ln E\right].$$
(20)

В формулах начальная энергия E задается в кэВ, а величины dE/dx выражены в эВ/Å.

Ядерные тормозные способности возрастают пропорционально массе бомбардирующего атома и зависят от используемого потенциала. В методе ВСА они учитываются непосредственно при рассмотрении кинематики каждого конкретного столкновения. Рисунок 34 хорошо иллюстрирует то, что в рассматриваемых энергетических диапазонах электронные тормозные способности существенно превышают ядерные.

Термин «линейные потери энергии» [93] используется для описания распределения энерговыделения по глубине. Линейные потери энергии обозначаются с помощью dW/dx и определяются как средние потери энергии частицей на интервале dx. В выполненных расчётах величина dx составляла 1Å, а результаты усреднялись для $5 \cdot 10^5$ промоделированных траекторий. Направление пучка атомов и ось x перпендикулярны поверхности.

В величину dW/dx входят и потери энергии при торможении на электронах, и потери при торможении на ядрах, но dW/dx больше их суммы. Это объясняется тем, что на своём пути атом испытывает многократные рассеяния на атомах твёрдого тела, и величина его полного пробега больше, чем пробег, спроецированный на ось x.

3.5.2 Характер энерговыделения

Кривые линейных потерь энергии, полученные в результате моделирования в широком диапазоне начальных энергий для комбинации H-W, представлены на рисунке 35. Из рисунка видно, что при энергиях ниже 100 кэВ характер распределения отличен от традиционных представлений, когда наблюдается Брэгговский пик вблизи точки остановки частицы. В рассматриваемом случае





Рис. 35: Зависимость энерговыделения (линейных потерь энергии) по глубине материала для атомов водорода при бомбардировке вольфрама. Цифры у кривых указывают начальную энергию в кэВ. (а) - диапазон энергий 0.1-100 кэВ, (b) - диапазон энергий 200-10000 кэВ.

максимум энерговыделения наблюдается вблизи поверхности, и с ростом глубины наблюдается спад энерговыделения. Это связано с тем, что при энергиях до 100 кэВ сечение тормозных потерь на электронах растёт с ростом энергии частицы. Брэгговский пик существенен только при энергиях более 500 кэВ, и его появление связано с изменением характера зависимости электронных тормозных способностей от энергии. Для комбинации H-W при энергиях более 100 кэВ величина dE/dx уменьшается с ростом энергии, что и вызывает появление Брэгговского пика вблизи точки остановки частицы. Примечательно то, что контрастность брэгговского пика растёт с ростом энергии бомбардирующего атома. При энергии 5 МэВ контрастность пика равна 2. Это означает, что значительная доля энерговыделения приходится на зону вблизи поверхности, что должно приниматься во внимание при использовании данного явления в медицине.

Аналогичные зависимости получены для всех изотопов водорода с начальными энергиями в интервале от 0.1 до 50 кэВ при бомбардировке мишеней из Ве, С и W. На рисунке 36 представлены линейные потери энергии для комбинации D-Be. Здесь виден аналогичный характер распределения энерговыделения по глубине с пиком вблизи поверхности.

Сравнение линейных потерь энергии в случае бомбардировки вольфрама различными изотопами водорода представлено на рисунке 37. Показаны результаты моделирования для начальной энергии 5 кэВ – ожидаемой средней энергии частиц плазмы в токамаке ИТЭР. Характер dW/dx для разных изотопов подобен. При малых x величина dW/dx больше для Н – это связано с тем, что при одинаковой энергии значение электронных тормозных способностей для Н больше, чем для D и T. По этой причине проективный пробег H при одной и той же начальной энергии меньше, чем для D и T.



Рис. 36: Зависимость энерговыделения (линейных потерь энергии) по глубине материала для атомов дейтерия при бомбардировке бериллия. Цифры у кривых указывают начальную энергию в кэВ. Диапазон энергий 0.1-50 кэВ.



Рис. 37: Энерговыделение при прохождении атомов H,D,T с энергией 5 кэВ через W.

3.5.3 Энерговыделение в условиях токамака-реактора

В плазме токамака ИТЭР при работе на смеси дейтерия и трития вследствие процессов перезарядки и фоторекомбинации будут образовываться быстрые атомы дейтерия и трития, покидающие плазму. Энергетические спектры этих атомов, покидающих плазму, были получены с использованием кода DOUBLE-MC, аналогичного расчетам, представленным в [94]. Код DOUBLE-MC моделирует формирование потоков нейтральных частиц из плазмы, образующихся при перезарядке ионов плазмы на нейтральной компоненте плазмы и на водородо- и гелиеподобных ионах примесей (Ве, С). Учитывается ослабление потока атомов при прохождении через плазму. При расчете радиального распределения нейтральной компоненты принимается во внимание следующие факторы: диффузия атомов образующихся вблизи первой стенки и образование нейтральных атомов в процессе фоторекомбинации. Процессы фоторекомбинации и ионизации определяют собственные концентрации ионов примесей в плазме. Ослабление потоков уходящих атомов происходит в результате ионизации электронным или ионным ударом, а также перезарядки на примесных ионах. DOUBLE-MC моделирует плазму с тремя основными компонентами, каждый из которых может быть изотопом водорода (H/D/T) или гелия (He³/He⁴). Также в моделируемой плазме могут присутствовать легкие примеси – бериллий и углерод. Метод Монте-Карло широко используется в программном коде, что значительно упрощает моделирование многокомпонентной плазмы.

Был проанализирован типичный («индуктивный») сценарий работы ИТЭР с мощностью термоядерного синтеза 500 МВт: плотность плазмы 10^{20} м⁻³, температура электронов в центре 27 кэВ, температура ионов в центре 23 кэВ. Предполагалось, что плазма состоит из 50% смеси дейтерия и трития, содержание углеродных примесей составляет 1%, а бериллия – 1%. Концентрация атомов на сепаратрисе принималась равной 2 · 10¹⁴ м⁻³, энергия атомов 170 эВ [95]. Профили плотности и распределения температуры плазмы взяты из [94].

Характерные энергетические спектры для разных углов вылета атомов дейтерия и трития представлены на рисунке 38. На рисунке 39 приведены зависимости энерговыделения от глубины проникновения на одну падающую частицу при облучении стенки потоком атомов дейтерия и трития, покидающих плазму с энергетическим спектром, представленным на рисунке 38. При расчете величин dW/dx также учтен вклад отраженных частиц. Как и в случае моноэнергетического пучка, максимум энерговыделения наблюдается вблизи поверхности, а характерная глубина связана со средней энергией частиц в спектре падающих атомов. Атомы трития, в среднем, проникают глубже в материал стенки, по сравнению с атомами дейтерия с той же энергией, что может приводить к их накоплению. Данное явление обусловлено тем, что электронные тормозные по-



Рис. 38: Типичный энергетический спектр атомов дейтерия и трития dN/dE, бомбардирующих первую стенку токамака. α – угол падения частиц на поверхность относительно нормали.

92



Рис. 39: Нормированное на одну падающую частицу распределение энерговыделения по глубине в: (a) W, (b) Be, (c) C, облучаемых типичным для токамака ИТЭР спектром атомов D и T, покидающих плазму.

тери для атомов T меньше, чем для атомов D, и, следовательно, пробег атомов T в материале больше, чем для атомов D с такой же начальной энергией.

3.5.4 Выводы

Рассчитано распределение линейных потерь энергии по глубине материала 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 для разных диапазонов начальных энергий: 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.

3.6 Распыление мишени из аморфного вольфрама лёгкими ионами

Как известно, вольфрам выбран в качестве материала дивертора в токамаке ИТЭР, а в качестве материала первой стенки - бериллий. В работах [65; 66] показано что, покидающие плазму атомы изотопов водорода бомбардируют стенку, и это вызывает значительное поступление Ве в плазму. Концентрация Ве может достигать 2-4% от плотности плазмы. Вследствие движения по сепаратрисе атомы Ве ионизуются до ядер, и, ускоряясь потенциалом плазма-стенка до энергий 300-800 эВ [65], проходят слой плазмы в диверторе и вызывают его распыление. В работах [3; 68—70] показано, что поступление вольфрама в плазму заметно меняет характеристики разряда. Если концентрация вольфрама достигнет критического значения 0.1%, нужная температура не будет достигнута, так как излучение ионов примеси будет уносить всю энергию плазмы. Экспериментальные данные о распылении вольфрама ионам бериллия отсутствуют. При работе над данной темой была поставлена задача провести расчеты распыления вольфрама ионами Ве и Ne, так как имеются надежные экспериментальные данные по распылению вольфрама неоном, что позволяет проверить правильность расчета. Результаты по данной теме опубликованы в работе [A13].

3.6.1 Особенности моделирования распыления аморфной мишени

Для моделирования распыления мишени из аморфного вольфрама был разработан код, основанный на принципах молекулярной динамики (MD). Для получения коэффициентов распыления используется метод Монте-Карло. Атомная структура мишени построена как идеальное аморфное тело с использованием кода [96]. Расстояние между атомами подобрано так, чтобы плотность моделируемой мишени соответствовала реальной плотности вольфрама. Учитывались атомы мишени, расположенные в полусфере, состоящей из ~ $0.5 \cdot 10^6$ атомов. Бомбардировке подвергалась её плоская часть. В изучаемом энергетическом диапазоне (до 1 кэВ) атомы мишени не приобретают достаточную энергию для образования каскадов движущихся атомов, поэтому распыление происходит, преимущественно в режиме прямого выбивания, что позволяет учитывать подвижность только малой доли атомов мишени. Это условие значительно ускоряет вычисления и сокращает время моделирования. Для описания взаимодействия между атомами мишени использован многочастичный потенциал в рамках модели погружённого атома [97], с поправкой, учитывающей взаимодействие на близком расстоянии, в соответствии с [98]. Для описания взаимодействия между бомбардирующим атомом и атомами мишени использовался потенциал DFT (раздел 2.5).

3.6.2 Коэффициенты распыления. Сравнение с результатами независимых измерений

На рисунке 40а представлено сравнение коэффициентов распыления вольфрама неоном, полученных в результате использования разработанного молекулярно – динамического кода, с экспериментальными данными [64] и результатами других расчётов. Видно хорошее согласие расчёта описанным методом с экспериментальными данными. Расчет по формуле Ямамуры [60] дает заниженные значения коэффициента распыления и порога распыления. Программа ACAT [99] занижает порог распыления и завышает величину коэффициента распыления в области малых энергий. Программа SRIM [14] завышает величину порога распыления. Разработанная в данном исследовании модель обратного распыления (BSS), результаты которой также приведены на рисунке, описана ниже.

Коэффициенты распыления, рассчитанные разработанным кодом для комбинации Be-W, представлены на рисунке 40b. Как упоминалось ранее, экспериментальные данные в этом случае отсутствуют. На рисунке видно хорошее согласие полученных результатов с расчётами программой LAMMPS из работы [100]. Также приведен расчёт программой SDTrimSP из работы [3].

Также были рассчитаны зависимости коэффициента распыления от угла бомбардировки при различных энергиях налетающих частиц. Результат в случае распыления вольфрама неоном представлен на рисунке 41а. Имеется хорошее согласие с расчетами Экштайна [101] с использованием программы TrimSP. Аналогичные зависимости для распыления вольфрама бериллием приведены на рисунке 41b. Для этой комбинации в литературе отсутствуют данные для сравнения. Зависимость для обоих исследованных систем имеет пик, который приходится на величину угла в интервале 60 – 80° от нормали, что находится в согласии с теоретическими представлениями о характере данной зависимости [60].



Рис. 40: Зависимость коэффициента распыления вольфрама от энергии бомбардирующих ионов (a) неона, (b) бериллия.



Рис. 41: Зависимость коэффициента распыления вольфрама ионами (a) неона, (b) бериллия от угла падения пучка. Угол отсчитывается от нормали к поверхности.

3.6.3 Модель Back Scattering Sputtering

Нами предложена модель выбивания поверхностных атомов потоком обратно рассеянных частиц (BSS – Back Scattering Sputtering) для анализа данных о распылении вольфрама легкими атомами. Рассмотрим рассеяние частицы массой M_1 на частице массой M_2 , которая принадлежит верхнему слою твердого тела. Пусть ось x сонаправлена с проекцией скорости налетающей частицы на поверхность твердого тела, а ось z - перпендикулярно. При соударении частица массой ₁ с энергией E_1 передает покоящейся частице массой ₂ энергию равную

$$Q = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \cdot E_1 \cdot \sin^2\left(\frac{\chi}{2}\right),$$
(21)

где χ - угол рассеяния в СЦМ. Максимальная энергия передаётся при лобовом столкновении. Для того, чтобы произошло распыление, компонента энергии, переданная атому вольфрама вдоль оси z, должна превышать энергию сублимации E_s , которая для вольфрама равна 8.45 эВ. С учётом этого значения можно получить пороговую величину энергии налетающих атомов E_1 , необходимую для распыления вольфрама (то есть такую, при которой $Q = E_s$): для Ne-W $E_{th} = 24$ эВ, для Be-W $E_{th} = 48$ эВ. Пороговому значению энергии E_{th} соответствует пороговое значение угла рассеяния χ_{th} . Таким образом, рассчитав энергетическое и угловое распределение обратно рассеявшихся первичных частиц и сканируя пучком по площадке $d \times d$, где d – среднее расстояние между атомами поверхности, можно отобрать число случаев, когда при соударении атому материала передаётся вдоль оси z энергия, превышающая энергию сублимации. Поделив число распыленных атомов на число первоначально падающих частиц, получаем коэффициент распыления.

Частицы с энергией меньше порога не вносят вклад в распыление. Средняя

энергия обратно рассеянных частиц, вносящих вклад в распыление, составляет примерно 50-60% от начальной энергии бомбардирующих частиц, что приводит к соответствующему сдвигу порога распыления.

В распыление может вносить вклад несколько поверхностных слоев вольфрама, поэтому следует учесть фактор R_p/d_l , где R_p – проективный пробег, а d_l – среднее расстояние между слоями вольфрама. На рисунке 40 приведено сопоставление расчетного значения коэффициента распыления по указанной модели с экспериментом и расчетом методом MD. На рисунке видно удовлетворительное согласие результатов. Преимущество данной модели – возможность оценки коэффициента распыления без трудоемких расчетов. Модель неприменима, когда $M_1 \approx M_2$, и при распылении под малыми углами, когда нужно учитывать взаимодействие налетающей частицы с совокупностью атомов мишени.

На рисунке 42 приведены коэффициенты распыления вольфрама ионами D, He, Be, Ne, рассчитанные с использованием разработанной модели. При рас-



Рис. 42: Зависимость коэффициента распыления вольфрама различными ионами в приведенных координатах.

чёте распыления ионами Ве использованы результаты моделирования методом MD, в остальных случаях – экспериментальные данные. Шкала энергий нормирована на величины пороговой энергии. Для нормирования по абсолютной шкале использован коэффициент $K = \sigma(\chi_{th})/d_l^2$ при $E/E_{th} = 4$. Здесь $\sigma(\chi_{th})$ – сечение рассеяния на угол, больший χ_{th} . Коэффициент K можно трактовать как вероятность выбивания атома вольфрама потоком обратно рассеянных частиц.

Из рисунка 42 видно, что предложенная модель хорошо описывает поведение коэффициентов распыления в пороговой области. Кривые, соответствующие ионам близких масс, близки между собой. Имеется возможность экстраполяции данных на неизученные случаи.

3.6.4 Выводы

Разработан молекулярно-динамический код для моделирования распыления аморфного вольфрама лёгкими ионами.

Рассчитаны коэффициенты распыления аморфного вольфрама ионами неона и бериллия в зависимости от энергии налетающих частиц и угла бомбардировки. В случае неона продемонстрировано хорошее согласие с экспериментальными данными.

Разработана модель аналитического расчёта коэффициентов распыления вольфрама лёгкими ионами, которая объясняет универсальность зависимостей коэффициентов распыления от энергии в припороговой области.

Заключение

В ходе работы над диссертационным исследованием были получены следующие важные результаты.

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 эB до 10 кэB 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 эB.

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.

104

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.
- Экштайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. — Москва : Мир, 1995.

- Alder B. J., Wainwright T. E. Studies in Molecular Dynamics. I. General Method // The Journal of Chemical Physics. — 1959. — T. 31, № 2. — C. 459— 466.
- Gibson G. B., Goland A. N., Milgram M., Vineyard G. H. Dynamics of radiation damage // Phys. Rev. - 1960. - T. 120. - C. 1229-1253.
- Бредов М. М., Ланг И. Г., Окунева Н. М. Моделирования движения атомов твердого тела // ЖТФ. — 1958. — Т. 3. — С. 228.
- Goldman D. T., Harrison D. E., Coveyou R. R. A Monte Carlo calculation of high-energy sputtering // Tech. Rpt. ORNL 2729. — Oak Ridge, 1959.
- Robinson M. T., Oen O. S. The channeling of energetic atoms in crystal lattices // Applied Physics Letters. - 1963. - T. 2, № 2. - C. 30-32.
- Hobler G., Betz G. On the useful range of application of molecular dynamics simulations in the recoil interaction approximation // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2001. T. 180, № 1. C. 203-208.
- 14. Ziegler J. F., Biersack J. P. http://srim.org.
- Hofsäss H., Zhang K., Mutzke A. Simulation of ion beam sputtering with SDTrimSP, TRIDYN and SRIM // Applied Surface Science. - 2014. - T. 310. - C. 134-141.
- 16. http://oecd-nea.org/tools/abstract/detail/psr-0137.
- 17. Thomas G. E., Beckers L. J., Vrakking J. J., De Koning B. R. Ion beam epiplantation // Journal of Crystal Growth. 1982. T. 56, № 3. C. 557-575.

- Hautala M. Nuclear stopping in polycrystalline materials: range distributions and Doppler-shift attenuation analysis // Phys. Rev. B. — 1984. — Т. 30, вып. 9. — С. 5010—5018.
- Koponen I., Hautala M. The effect of the size of microcrystals on range distributions // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. - 1988. - T. 33, № 1. - C. 112-116.
- 20. Tersoff J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponen systems // Phys. Rev. B. — 1989. — Т. 39, вып. 8. — С. 5566—5568.
- 21. Daw M. S., Foiles S. M., Baskes M. I. The embedded-atom method: a review of theory and applications // Materials Science Reports. 1993. T. 9, № 7. C. 251-310.
- Norman G. E., Podlipchuk V. Y., Valuev A. A. Equations of Motion and Energy Conservation in Molecular Dynamics // Molecular Simulation. – 1993. – T. 9, № 6. – C. 417–424.
- 23. http://lammps.sandia.gov.
- 24. 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.
- 25. Beardmore K. M., Grønbech-Jensen N. Efficient molecular dynamics scheme for the calculation of dopant profiles due to ion implantation // Phys. Rev. E. 1998. Т. 57, вып. 6. С. 7278-7287.
- Improvement of the Reliability and Accuracy of Heavy Ion Beam Analysis. —
 Vienna : International Atomic Energy Agency, 2019.

- 27. 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.
- Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U. The Stopping and Range of Ions in Solids. — New York : Pergamon, 1985.
- Stoller R. E. Primary Radiation Damage Formation // Comprehensive Nuclear Materials. — Oxford : Elsevier, 2012. — C. 293—332.
- 30. Nordlund K., Zinkle S. J., Sand A. E. [и др.]. Improving atomic displacement and replacement calculations with physically realistic damage models // Nature Communications. — 2018. — Т. 9. — С. 1084.
- Зиновьев А. Н., Бабенко П. Ю. Ядерные тормозные способности изотопов водорода и гелия в бериллии, углероде и вольфраме // ЖТФ. — 2020. — Т. 46. — С. 23.
- 32. Фирсов О. Б. Качественная трактовка средней энергии возбуждения электронов при атомных столкновениях // ЖЭТФ. 1959. Т. 36. С. 1517—1523.
- Лизунов Ю. Д., Рязанов А. И. Исследование торможения заряженных частиц и образование точечных радиационных дефектов при ионном облучении материалов. — Москва : ЦНИИатоминформ, 1988.
- 34. Cirrone P., Cuttone G., Lojacono P., Nigro S., Mongelli V., Patti I., Privitera G., Raffaele L., Rifuggiato D., Sabini M., Salamone V., Spatola C., Valastro L. A 62MeV proton beam for the treatment of ocular melanoma at Laboratori Nazionali del Sud-INFN // Nuclear Science, IEEE Transactions on. 2004. T. 51. C. 860-865.
- 35. Taheri-Kadkhoda Z., Björk-Eriksson T., Nill S. [и др.]. Intensity-modulated radiotherapy of nasopharyngeal carcinoma: a comparative treatment planning study of photons and protons // Radiat. Oncol. — 2008. — Т. 3. — С. 4.
- 36. Tokunaga K., Takayama M., Muroga T., Yoshida N. Depth profile analyses of implanted deuterium in tungsten by secondary ion mass spectrometry // Journal of Nuclear Materials. — 1995. — T. 220—222. — C. 800—804.
- 37. Qiao L. [и др.]. Experimental measurement of deuterium concentration and depth profiling in tungsten by radio frequency glow discharge optical emission spectroscopy // Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy. 2020. Т. 173. С. 105975.
- Suchoňová M. [и др.]. Determination of deuterium depth profiles in fusionrelevant wall materials by nanosecond LIBS // Nuclear Materials and Energy. — 2017. — Т. 12. — С. 611—616.
- 39. Pajuste E., Kizane G., Igaune I., Avotina L., Contributors J. Comparison of the structure of the plasma-facing surface and tritium accumulation in beryllium tiles from JET ILW campaigns 2011–2012 and 2013–2014 // Nuclear Materials and Energy. — 2019. — T. 19. — C. 131—136.
- 40. Lahtinen A. [и др.]. Deuterium retention in the divertor tiles of JET ITER-Like wall // Nuclear Materials and Energy. — 2017. — Т. 12. — С. 655— 661.
- 41. Borovikov V., Voter A. F., Tang X.-Z. Reflection and implantation of low energy helium with tungsten surfaces // Journal of Nuclear Materials. 2014. T. 447, № 1. C. 254—270.

- 42. Maya P. N. Molecular dynamics studies of sticking and reflection of low-energy deuterium on single crystal tungsten // Journal of Nuclear Materials. 2016. T. 480. C. 411—419.
- Davies J. A., Friesen J., McIntyre J. D. A radiochemical technique for studying range energy relationships for heavy ions of kev energies in aluminum // Canadian Journal of Chemistry. — 1960. — T. 38. — C. 1526.
- 44. Lindhard J. Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles // Kongel. Dan. Vidensk. Selsk. , Mat. -Fys. Medd. — 1965. — T. 34, № 14.
- 45. Miranda P. A., Wahl U., Catarino N., Ribeiro da Silva M., Alves E. Performance of resistive-charge position sensitive detectors for RBS/Channeling applications // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2014. T. 760. C. 98-106.
- 46. Raatz N., Scheuner C., Pezzagna S., Meijer J. Investigation of Ion Channeling and Scattering for Single-Ion Implantation with High Spatial Resolution // physica status solidi (a). - 2019. - T. 216, № 21. - C. 1900528.
- 47. Nordlund K., Djurabekova F., Hobler G. Large fraction of crystal directions leads to ion channeling // Phys. Rev. B. 2016. Т. 94, вып. 21. С. 214109.
- Дикий Н. П., Игнатьева Т. А. Применение метода каналирования заряженных частиц в кристаллах для исследования сплавов Мо-Re // Физика твердого тела. — 2006. — Т. 1. — С. 25.
- 49. Hobler G., Nordlund K. Channeling maps for Si ions in Si: Assessing the binary collision approximation // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. – 2019. – T. 449. – C. 17–21.

- Feldman L. C., Mayer J. W., Picraux S. T. Particle distributions within the channel // Materials Analysis by Ion Channeling. — San Diego : Academic Press, 1982. — C. 61—87.
- 51. Moliere G. Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I. Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld // Zeitschrift für Naturforschung A. Berlin, Boston, 1947. T. 2, № 3. C. 133–145.
- 52. *Машкова Е. С., Молчанов В. А.* Рассеяние ионов средних энергий поверхностями твердых тел. — Москва : Атомиздат, 1980.
- 53. Шульга В. И. Использование полуканальной фокусировки для проверки и определения параметров ионно-атомных потенциалов // ЖТФ. 1982. Т. 52, № 3. С. 534.
- 54. *Tiwald P.* [и др.]. Interaction potentials for fast atoms in front of Al surfaces probed by rainbow scattering // Phys. Rev. B. 2010. Т. 82, вып. 12. С. 125453.
- 55. Schüller A. [и др.]. Interatomic potentials from rainbow scattering of keV noble gas atoms under axial surface channeling // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2005. T. 230, № 1. С. 172-177.
- 56. Schüller A., Winter H. Interatomic potentials between noble gas and Ag atoms from axial surface channeling // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2007. T. 261, № 1. C. 578-581.
- 57. Danailov D. [и др.]. Test of the interatomic potential in the eV-region by glancing-angle scattering of He-atoms from Fe(0 0 1) // Applied Surface Science. 2001. Т. 171. С. 113-119.

- 58. Takeuchi W. Computational study on interatomic potentials to dynamic effects in rainbow scattering under axial channeling at Al(001) surface // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2019. T. 440. C. 68-74.
- 59. Sigmund P. Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets // Phys. Rev. — 1969. — Т. 184, вып. 2. — С. 383— 416.
- 60. 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.
- Eckstein W., García-Rosales C., Roth J., Ottenberger W. Sputtering Data, Report IPP 9/82. - 1993.
- Yamamura Y. A simple analysis of the angular dependence of light-ion sputtering // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. - 1984. - T. 2, № 1. - C. 578-582.
- Распыление твёрдых тел ионной бомбардировкой. Т. 1 / под ред. Бериша. — Москва : Мир, 1984.
- Behrisch R., Eckstein W. Sputtering by Particle Bombardment. Springer, Berlin, Heidelberg, 2007.
- 65. 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.
- Makarov S., Kaveeva E. SOLPS-ITER modeling of beryllium trace impurity in ITER // MATEC Web Conf. - 2018. - T. 245. - C. 13002.

- 67. Kukushkin A. S. [и др.]. Finalizing the ITER divertor design: The key role of SOLPS modeling // Fusion Engineering and Design. 2011. Т. 86, № 12. С. 2865—2873.
- 68. Köchl F. [и др.]. W transport and accumulation control in the termination phase of JET H-mode discharges and implications for ITER // Plasma Physics and Controlled Fusion. — 2018. — Т. 60, № 7. — С. 074008.
- 69. Abrams T. [и др.]. Impact of ELM control techniques on tungsten sputtering in the DIII-D divertor and extrapolations to ITER // Physics of Plasmas. 2019. Т. 26, № 6. С. 062504.
- 70. Bobkov V. [и др.]. Tungsten Sputtering during ICRF in ASDEX Upgrade // AIP Conference Proceedings. — 2007. — Т. 933, № 1. — С. 83—86.
- 71. Keim A., Harnisch M., Scheier P., Herman Z. Collisions of low-energy ions Ar+ and N2+ with room-temperature and heated surfaces of tungsten, beryllium, and a mixed beryllium-tungsten thin film // International Journal of Mass Spectrometry. - 2013. - T. 354/355. - C. 78-86.
- 72. Harnisch M., Keim A., Scheier P., Herman Z. Collisions of low-energy Ar+, N2+, and D2+ ions with room-temperature and heated surfaces of mixed beryllium-tungsten thin films of different composition // International Journal of Mass Spectrometry. - 2014. - T. 365/366. - C. 316-323.
- Lyashenko A., Safi E., Polvi J., Djurabekova F., Nordlund K. Computational study of tungsten sputtering by nitrogen // Journal of Nuclear Materials. – 2020. – T. 542. – C. 152465.
- 74. Träskelin P., Juslin N., Erhart P., Nordlund K. Molecular dynamics simulations of hydrogen bombardment of tungsten carbide surfaces // Phys. Rev. B. 2007. Т. 75, вып. 17. С. 174113.

- 75. Robinson M. T., Torrens I. M. Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-collision approximation // Phys. Rev. B. – 1974. – Т. 9, вып. 12. – С. 5008–5024.
- 76. Verlet L. Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules // Phys. Rev. — 1967. — Т. 159, вып. 1. — С. 98—103.
- 77. 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.
- 78. Zinoviev A. Interaction potentials for modeling of ion-surface scattering // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. - 2011. - T. 269, № 9. - C. 829–833.
- 79. Darwent B. Bond Dissociation Energies in Simple Molecules. -1970.
- 80. Никольский Б. П. Справочник химика. Т. 1. Ленинград : Химия, 1966.
- Anders L. W., Hansen R. S., Bartell L. S. Molecular orbital investigation of chemisorption. I. Hydrogen on tungsten (100) surface // The Journal of Chemical Physics. - 1973. - T. 59, № 10. - C. 5277-5287.
- 82. Nuclear Data Section of the IAEA. http://nds.iaea.org/stopping/.
- 83. Бабенко П. Ю., Зиновъев А. Н., Шергин А. П. Фокусировка при рассеянии частиц на поверхности // Письма в ЖЭТФ. 2015. Т. 101, № 12. С. 940—944.
- 84. Göbel H., Blanckenhagen P. von. Temperature dependence of interlayer spacings and mean vibrational amplitudes at the Al(110) surface // Phys. Rev. B. 1993. Т. 47, вып. 4. С. 2378-2388.

- Narasimhan S. Reversed anisotropies and thermal contraction of fcc (110) surfaces // Phys. Rev. B. — 2001. — Т. 64, вып. 12. — С. 125409.
- Yu. V. Gott. Interaction of the Particles with the Substance in Plasma Investigations. — Moscow : Atomizdat, 1978.
- 87. Lasa A., Björkas C., Vörtler K., Nordlund K. MD simulations of low energy deuterium irradiation on W, WC and W₂C surfaces // Journal of Nuclear Materials. - 2012. - T. 429, № 1. - C. 284-292.
- Maya P. Molecular dynamics studies of sticking and reflection of low-energy deuterium on single crystal tungsten // Journal of Nuclear Materials. — 2016. — T. 480. — C. 411—419.
- Когут Д. К., Трифонов Н. Н., Курнаев В. А. Моделирование отражения дейтерия от плазменно-напыленного вольфрама // Известия РАН. Серия физическая. — 2008. — Т. 72, № 7. — С. 1024—1026.
- 90. 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.
- 91. 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.
- 92. Мейер Д., Эриксон Л., Девис Д. Ионное легирование полупроводников. Москва : Мир, 1973.
- Клёнов Г. И., Хорошков В. С. Адронная лучевая терапия: история, статус, перспективы // УФН. — 2016. — Т. 186, № 8. — С. 891—911.

- 94. Afanasyev V. I., Mironov M. I., Nesenevich V. G., Petrov M. P., Petrov S. Y. Assessment of neutral particle analysis abilities to measure the plasma hydrogen isotope composition in ITER burning scenarios // Plasma Physics and Controlled Fusion. 2013. T. 55, № 4. C. 045008.
- 95. Kukushkin A., Pacher H., Kotov V., Pacher G., Reiter D. Finalizing the ITER divertor design: The key role of SOLPS modeling // Fusion Engineering and Design. - 2011. - T. 86, № 12. - C. 2865-2873.
- 96. https://users.cecs.anu.edu.au/u9300839/.
- 97. Marinica M.-C., Ventelon L., Gilbert M. R., Proville L., Dudarev S. L., Marian J., Bencteux G., Willaime F. Interatomic potentials for modelling radiation defects and dislocations in tungsten // Journal of Physics: Condensed Matter. - 2013. - T. 25, № 39. - C. 395502.
- 98. Sand A., Dequeker J., Becquart C., Domain C., Nordlund K. Non-equilibrium properties of interatomic potentials in cascade simulations in tungsten // Journal of Nuclear Materials. - 2016. - T. 470. - C. 119-127.
- 99. 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.
- 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.
- 101. Eckstein W. Sputtering, reflection and range values for plasma edge codes.
 IPP report 9/117. 1998.