

# ВЛИЯНИЕ ВЫБОРА ПОВЕРХНОСТНОГО БАРЬЕРА НА РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ РАСПЫЛЕНИЯ ВОЛЬФРАМА ИЗОТОПАМИ ВОДОРОДА

*В. С. Михайлов\**, *П. Ю. Бабенко*, *А. П. Шергин*, *А. Н. Зиновьев*

*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук  
194021, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 27 марта 2023 г.,  
после переработки 24 апреля 2023 г.  
Принята к публикации 24 апреля 2023 г.

С помощью разработанного нами кода получены коэффициенты распыления вольфрамовой мишени изотопами водорода в диапазоне энергий бомбардирующих частиц 50 эВ–100 кэВ, а также зависимости коэффициентов распыления от угла падения пучка на мишень и энергетические и угловые распределения распыленных частиц. Продемонстрировано сильное влияние выбора типа поверхностного барьера на результаты расчетов коэффициентов распыления, а также на характеристики распыленных частиц. Полученные результаты позволяют более точно оценивать поступление примеси вольфрама в горячую зону плазмы токамака.

DOI: 10.31857/S004445102309016X

EDN: KFFRJV

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Управляемый термоядерный синтез (УТС) на сегодняшний день является перспективным альтернативным источником энергии. Однако на пути к его успешной реализации стоит внушительный ряд трудностей технологического и технического характера. Одной из основных проблем является взаимодействие высокоэнергетических потоков плазмы с первой стенкой и другими конструктивными элементами токамака-реактора, которое может привести к его разрушению [1, 2], а также к поступлению примесей в рабочий объем реактора [3–5]. Особенно остро стоит вопрос о взаимодействии высокоэнергетических атомов примесей с поверхностью дивертора [6, 7]. Распыленные частицы дивертора достигают последней замкнутой магнитной поверхности (сепаратрисы), а затем проникают в центральную часть плазменного шнура, вызывая потери энергии на излучение.

В качестве материала дивертора в токамаке ИТЭР выбран вольфрам, самый тугоплавкий из ме-

таллов. Однако недостатком вольфрама является высокое зарядовое число  $Z = 74$ . В работе [8] показано, что при концентрации вольфрама всего  $\sim 0.1\%$  термоядерный синтез невозможен, поскольку излучение ионов вольфрама будет приводить к большим потерям энергии на излучение и к невозможности достичь нужных температур для осуществления УТС.

Наличие примесей в плазме реактора может значительно менять режим работы токамака, поэтому необходимо точно знать потоки поступающих примесей. Для этого необходимо знать коэффициенты распыления вольфрама изотопами водорода. На данный момент эти коэффициенты измерены лишь для ограниченного диапазона энергий и углов бомбардирующих атомов, к тому же зачастую измерения разных исследовательских групп носят противоречивый характер. Также следует отметить полное отсутствие экспериментальных данных для трития.

Особый интерес представляет анализ возможного влияния типа поверхностного барьера на коэффициенты распыления, а также на характеристики распыленных атомов. Понятно, что на практике ситуация будет кардинальным образом различаться для конструкционных элементов только что введенного в строй реактора и реактора, проработавшего значительное время, элементы конструкции ко-

\* E-mail: chiro@bk.ru

торого подверглись значительной эрозии вследствие распыления. В работе рассмотрено влияние состояния поверхности на коэффициенты распыления для двух предельных случаев: планарного и сферического барьеров.

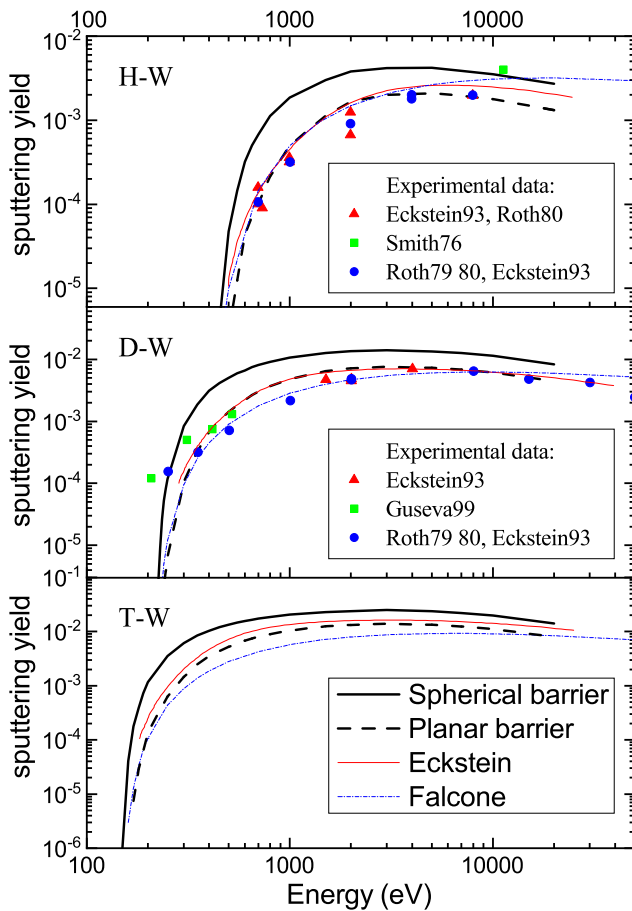


Рис. 1. Зависимости коэффициентов распыления вольфрама от энергии соударения при нормальном падении пучка на мишень для изотопов водорода. Сплошными и штриховыми линиями обозначены результаты нашего моделирования для случаев сферического и планарного барьера соответственно. Точки — экспериментальные данные. Красными тонкими линиями обозначены результаты моделирования Экштайна, синими штрихпунктирными линиями — расчет Фальконе.

## 2. ОПИСАНИЕ МЕТОДИКИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Расчеты были проведены с помощью разработанного нами кода, основанного на методе Монте-Карло. Мишень представляла собой набор случайно ориентированных относительно друг друга микроструктур вольфрама размером в одну элементарную ячейку. Движение частицы в твердом теле

рассматривалось либо пока ее энергия не окажется меньше  $1\text{ эВ}$ , либо пока частица не выйдет обратно за границу твердого тела вследствие многократного рассеяния. При соударении налетающей частицы с атомами мишени образуются быстрые частицы отдачи. Эти частицы также могут добавить новые каскадные частицы в массив, если передадут им энергию выше энергии сублимации  $E_s$ . Координаты и импульсы всех «задетых» атомов кристалла, получившие энергию свыше энергии сублимации  $E_s = 8.9\text{ эВ}$ , записывались в массив. После окончания расчета траектории бомбардирующей частицы происходит расчет движения выбитых частиц вольфрама с координатами и компонентами скорости, считываемыми из массива.

При выборе потенциала для расчета рассеяния налетающей частицы на атомах мишени использовался опыт предшествующих работ [9–12]. Было показано, что парные потенциалы, полученные в рамках теории функционала плотности с коррекцией глубины потенциальной ямы в соответствии с данными спектроскопических измерений, хорошо согласуются с данными экспериментов, полученными при изучении рассеяния в газовой фазе [13]. Данные о потенциале брались из работы [10]. Различие в массах изотопов практически не сказывается на потенциале взаимодействия, так как коррекция приводит к небольшому изменению приведенной массы электрона. Это подтверждается тем, что параметры потенциальной ямы для разных изотопов различаются незначительно (см. [14, 15]).

Ядерные тормозные потери налетающей частицы при столкновениях с атомами кристалла рассчитывались точно непосредственно в программе. Тормозные потери на электронах мишени в соответствии с рекомендациями работы [16] учитывались как произведение тормозной способности налетающей частицы на пройденное расстояние между столкновениями.

При расчете учитывались тепловые колебания атомов кристалла вольфрама при комнатной температуре.

В случае поверхности, состоящей из «остриев», распыленная частица должна преодолеть сферический потенциальный барьер и ее энергия вылета  $E_{out}$  должна превышать энергию сублимации  $E_s$ . В случае плоской поверхности (планарный барьер) перпендикулярная к поверхности составляющая кинетической энергии должна быть больше энергии сублимации  $E_s$ , т.е.  $E_{out} \cos^2(\theta) > E_s$ , где  $\theta$  — угол вылета частицы. Таким образом, условие отбора распыленных частиц для планарного барьера

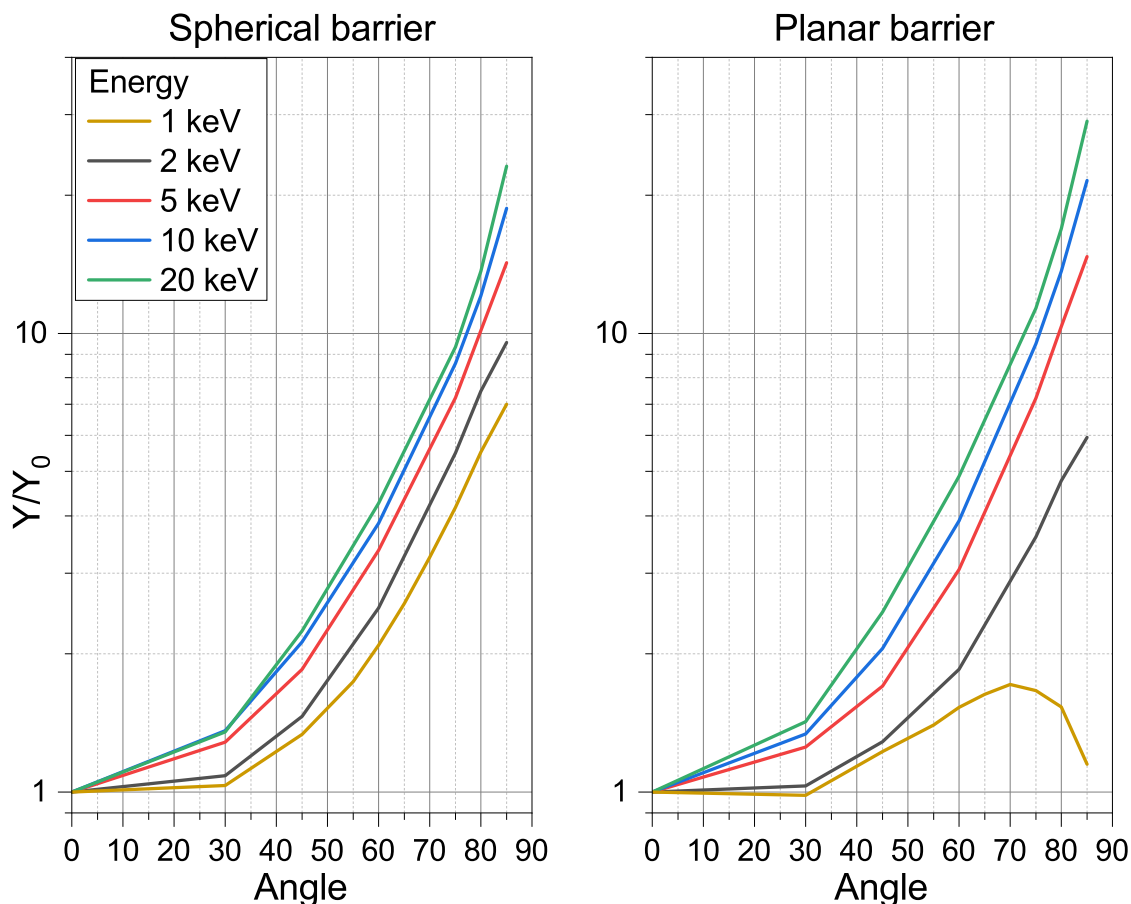


Рис. 2. Зависимости коэффициента распыления вольфрама водородом от угла падения пучка для сферического и планарного барьеров. Значения нормированы на коэффициент распыления для нормального падения

является более строгим, чем условие для сферического барьера.

Выбор типа поверхностного барьера может быть обусловлен шероховатостью распыляемого материала, это позволяет рассмотреть влияние состояния поверхности на коэффициенты распыления для двух предельных случаев.

Обычно рассматривалось 2 млн траекторий налетающих частиц. В случаях расчетов коэффициентов распыления вблизи пороговой области статистика достигала 25 млн.

### 3. КОЭФФИЦИЕНТЫ РАСПЫЛЕНИЯ ВОЛЬФРАМА ИЗОТОПАМИ ВОДОРОДА

На рис. 1 приведены результаты расчета коэффициента распыления вольфрама в зависимости от энергии соударения при нормальном падении пучка на мишень для различных изотопов водорода. Сплошной линией обозначен случай сферического барьера, штриховой линией — планарного. Символы — экспериментальные значения коэффициента

распыления из работ [17–21]. Приведены данные компьютерного моделирования Экштайна [22].

Видно, что случай планарного барьера дает меньшие значения коэффициентов распыления. Особенно эта разница ощутима в пороговой области, при этом использование планарного барьера приводит к смещению порога. Экспериментальные данные лучше согласуются с результатами модели планарного барьера (плоская поверхность). Результаты расчетов Экштайна лежат между рассмотренными нами предельными случаями.

Авторы работы [23] предложили формулу для вычисления коэффициента распыления  $Y$  тяжелых мишеней при бомбардировке легкими ионами низких энергий в виде

$$Y = 1.276 E_s^{-1} Q_1(Z_1, Z_2) Q_2(M_1, M_2) F(w). \quad (1)$$

Здесь  $E_s$  — энергия сублимации,  $Z_1$  и  $Z_2$  — заряды ядер сталкивающихся атомов,  $M_1$  и  $M_2$  — атомные массы сталкивающихся частиц,

$$Q_1(Z_1, Z_2) = \frac{Z_1 Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}},$$

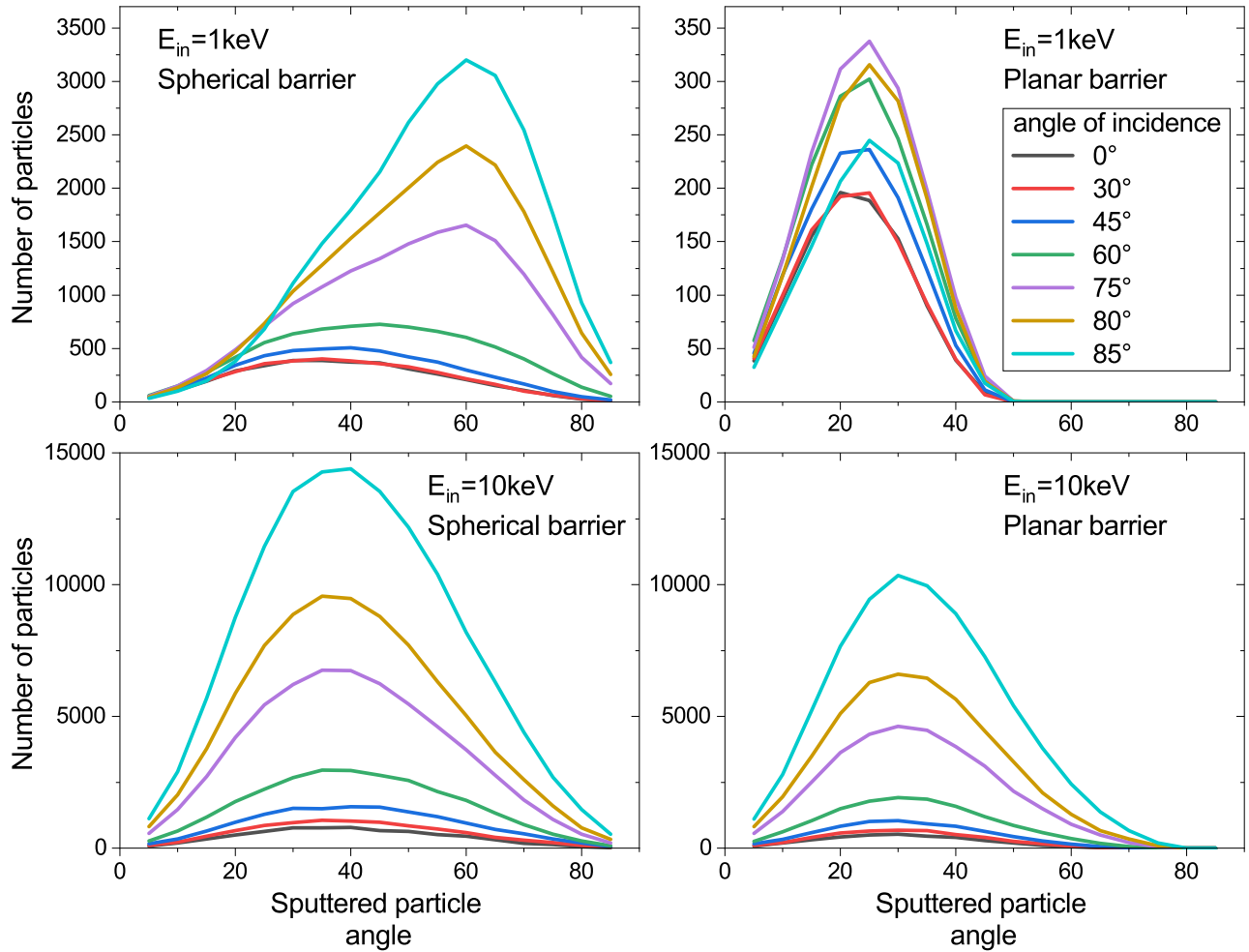


Рис. 3. Угловые распределения распыленных частиц. Представлен случай распыления вольфрама водородом. Верхние два графика отображают угловые спектры для энергии налетающих частиц 1 кэВ, нижние два графика — для энергии 10 кэВ. Представлены случаи сферического барьера (графики слева) и планарного барьера (справа)

#### 4. ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТОВ РАСПЫЛЕНИЯ ВОЛЬФРАМА АТОМАМИ ВОДОРОДА ОТ УГЛА ПАДЕНИЯ ПУЧКА НА МИШЕНЬ

На рис. 2 приведены зависимости коэффициента распыления вольфрама водородом от угла падения пучка на мишень. Значения нормированы на единицу при угле падения пучка  $\theta_{in} = 0^\circ$  (падение под прямым углом). Слева представлены результаты для сферического барьера, справа — для планарного барьера. Видно, что в целом нормированные угловые зависимости носят универсальный характер. Однако при малых энергиях в случае планарного барьера наблюдается уменьшение коэффициентов распыления при больших значениях угла падения  $\theta_{in}$ .

Это уменьшение легко объяснить тем, что в случае планарного барьера для большей доли частиц не выполняется условие  $E_{out} \cos^2(\theta) > E_s$ .

$$Q_2(M_1, M_2) = \frac{\mu - 1}{(1 + \mu)^2},$$

$$F(w) = \frac{\ln w + 3w^{-1/2} - (3w^{3/2})^{-1} - 8/3}{w^{1/2}},$$

$$\mu = \frac{M_1}{M_2}, \quad w = \frac{E_0}{E_{th}},$$

$$E_{th} = \frac{E_s}{\gamma(1 - \gamma)}, \quad \gamma = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2},$$

где  $E_{th}$  — пороговая энергия распыления,  $E_0$  — энергия налетающего иона.

Как видно из рис. 1, наблюдается неплохое согласие результатов расчета для планарного потенциала с результатами теоретической работы [23]. Некоторое различие имеется при больших энергиях.

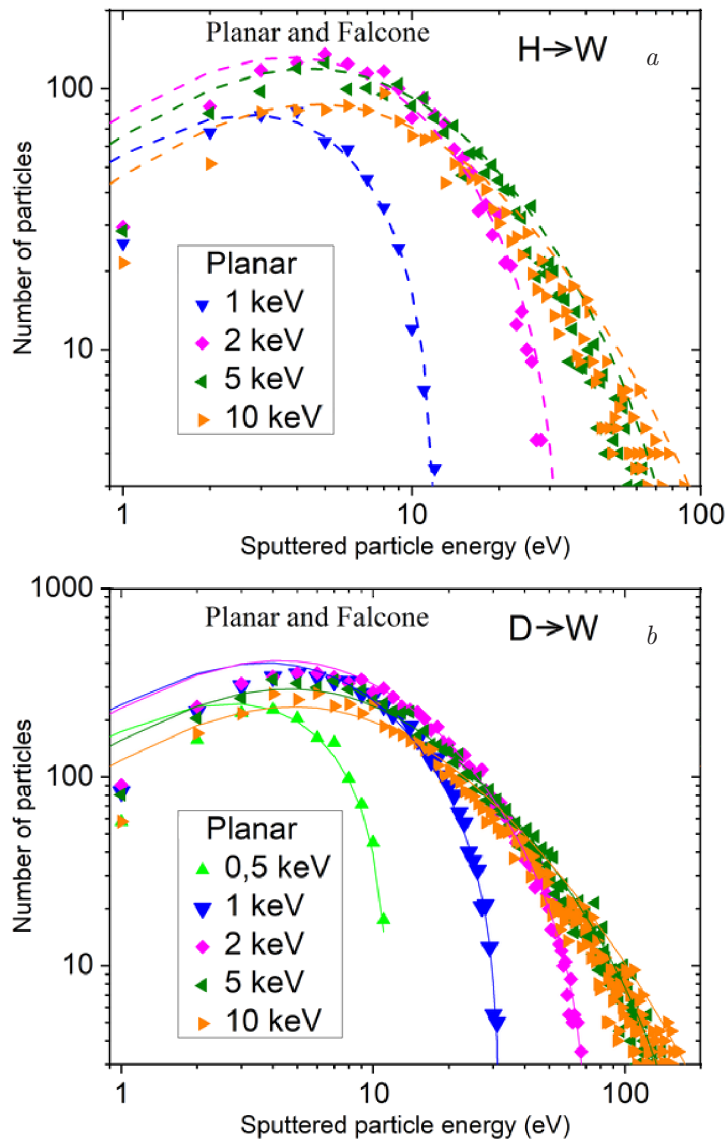


Рис. 4. Энергетические спектры распыленных частиц для планарного барьера. *a* — случай  $H \rightarrow W$ , *b* — случай  $D \rightarrow W$ . Сплошными линиями показаны результаты расчетов с использованием формулы Фальконе (1)

Аналогичные зависимости получены нами и для других изотопов водорода.

### 5. УГЛОВЫЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАСПЫЛЕННЫХ ЧАСТИЦ

Угловые и энергетические распределения распыленных частиц при бомбардировке вольфрама изотопами водорода необходимы при расчете поступления примесей в плазму, так как именно они определяют вероятность прохождения слоя пристеночной плазмы или буферного объема слабо ионизованного газа при напуске газа вблизи дивертора.

Из рис. 3 видно, что в случае сферического барьера при энергии соударения 1 кэВ и больших уг-

лах падения угловые спектры распыленных частиц смещены в сторону больших углов, т.е. перпендикулярная составляющая скорости вылета частицы мала. Из-за этого при выборе планарного барьера для большей доли частиц не выполняется условие  $E_{out} \cos^2(\theta) > E_s$ . Этим объясняется общее уменьшение интенсивности распыленных частиц на рис. 2 и рис. 3. В случае планарного барьера число вылетевших частиц при  $\theta_{in} = 85^\circ$  почти в 10 раз ниже, чем в случае сферического барьера (все расчеты проводились с одинаковым количеством налетающих частиц). Для планарного барьера имеет место смещение углового распределения в область малых углов, что связано с критерием отбора распыленных частиц.

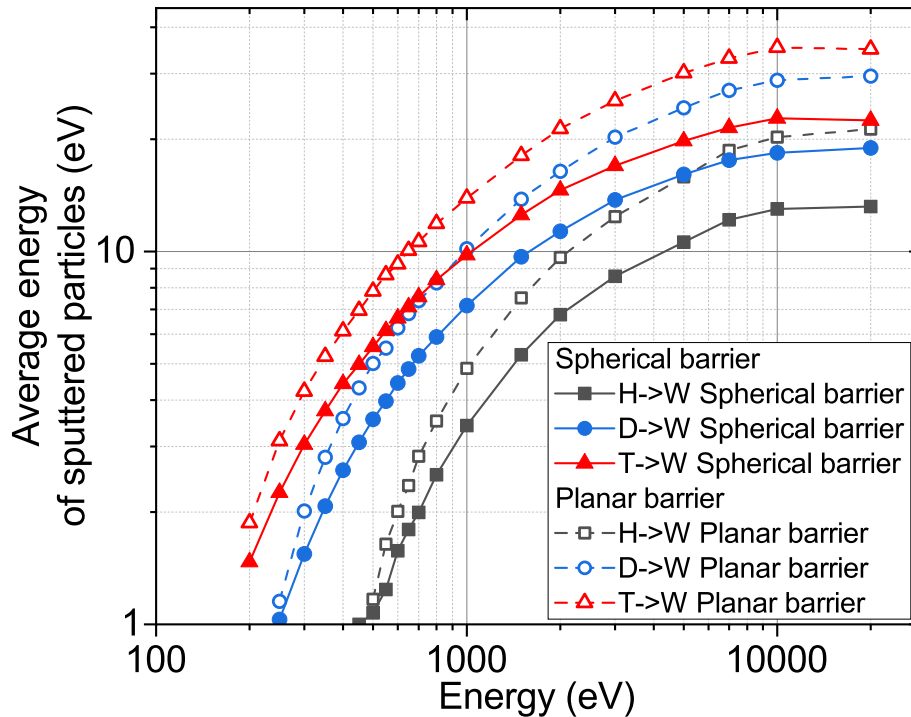


Рис. 5. Зависимость средних энергий распыленных частиц вольфрама от энергии налетающей частицы для различных изотопов водорода. Случай расчета для сферического барьера обозначен сплошными линиями, случай планарного барьера — штриховыми линиями

### 6. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ РАСПЫЛЕННЫХ ЧАСТИЦ

Выбор барьера также существенно влияет на энергетические спектры распыленных частиц. При малых энергиях наблюдается сильное различие энергетических спектров для случаев сферического и планарного барьеров. Это объясняется тем, что в случае сферического барьера все частицы, обладающие энергией, большей энергии сублимации, вылетают с поверхности, а для планарного барьера именно величина  $E_{out} \cos^2(\theta)$  должна превышать энергию сублимации.

В работе Фальконе [24] приведены формулы для расчета энергетического спектра распыленных атомов для планарного барьера:

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

Здесь  $E_0$  — энергия налетающей частицы. Имеется удовлетворительное согласие данных нашего моделирования с результатами расчетов по формулам для случая планарного барьера (см. рис. 4).

Как видно из рис. 4, приведенная формула Фальконе (2) неплохо описывает эволюцию энергетических спектров распыленных частиц в зависимости от энергии соударения для двух изотопов.

Используя полученные спектры, можно рассчитать среднюю энергию распыленных частиц. Эта информация необходима для расчета вероятности прохождения распыленной частицы через слой приповерхностной плазмы или буферного слоя вблизи дивертора.

Как видно из рис. 5, средняя энергия распыленных частиц растет с увеличением энергии налетающих частиц. С ростом массы изотопа энергия, переданная распыленным частицам, также растет, что является следствием законов сохранения энергии и импульса. В случае планарного барьера энергия распыленной частицы больше по сравнению со случаем сферического барьера из-за более строгого критерия отбора распыленных атомов по энергии.

### 7. ВЫВОДЫ

Показано, что коэффициенты распыления вольфрама изотопами водорода весьма чувствительны к выбору поверхности и поверхностного потенциального барьера. Получены значения коэффициентов для двух предельных случаев состояния поверхности — гладкой и состоящей из острий. Как и ожидалось, результаты для планарного барьера (плоская поверхность) удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. Показано, что



модель, предложенная Фальконе, неожиданно хорошо описывает как зависимость коэффициентов распыления от энергии бомбардирующей частицы и массы изотопа, так и энергетические спектры распыленных частиц в случае планарного барьера.

Полученные угловые и энергетические распределения распыленных атомов, а также их средние энергии позволят рассчитывать поступление примеси вольфрама в плазму с учетом прохождения частиц через буферный слой у дивертора или прохождение приповерхностного слоя плазмы при использовании стенки из вольфрама.

### ЛИТЕРАТУРА

1. J. Linke et al., *Matter Rad. Extrem.* **4**, 056201 (2019).
2. O. El-Atwani et al., *Nucl. Fusion* **54**, 083013 (2014).
3. S. Yamoto et al., *Nucl. Fusion* **57**, 116051 (2017); R. D. Smirnov, S. I. Krashennnikov, A. Yu. Pigarov, and T. D. Rognlien, *Phys. Plasmas* **22**, 012506 (2015).
4. F. Ding, G. N. Luo, X. Chen et al., *Plasma-Tungsten Interactions in Experimental Advanced Superconducting Tokamak (EAST)*, *Tungsten* **1**, 122 (2019).
5. R. A. Pitts et al., *Nucl. Mater. Energy* **20**, 100696 (2019).
6. Binfu Gao et al., *Fusion Engin. Design* **156**, 111616 (2020).
7. J. Guterl, I. Bykov, R. Ding, and P. Snyder, *Nucl. Mater. Energy* **27**, 100948 (2021).
8. R. V. Jensen, D. E. Post, W. H. Grasberger et al., *Nucl. Fusion* **17**, 1187 (1977).
9. П. Ю. Бабенко, А. Н. Зиновьев, В. С. Михайлов, Д. С. Тенсин, А. П. Шергин, *ПЖТФ* **48**, 10 (2022).
10. D. S. Meluzova, P. Yu. Babenko, A. P. Shergin, K. Nordlund, and A. N. Zinoviev, *Nucl. Instr. Meth. B* **460**, 4 (2019).
11. П. Ю. Бабенко, А. Н. Зиновьев, Д. С. Тенсин, *ЖТФ* **92**, 1643 (2022).
12. A. N. Zinoviev, P. Yu. Babenko, and K. Nordlund, *Nucl. Instr. Meth. B* **508**, 10 (2021).
13. A. N. Zinoviev, and K. Nordlund, *Nucl. Instr. Meth. B* **406**, 511 (2017).
14. Б. П. Никольский, *Справочник химика*, Химия, Ленинград (1966).
15. Y. R. Luo, *Comprehensive Handbook of Chemical Bond Energies*, CRC Press, Boca Raton (2007).
16. А. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 603 (2022).
17. W. Eckstein, C. Garcia-Rosales, J. Roth, and W. Ottenberger, *Sputtering Data*, Report IPP 9/82, Garching: MPG (1993).
18. J. Roth, J. Bohdanský, and W. Ottenberger, *Data on Low Energy Light Ion Sputtering*, Report IPP 9/26, Garching: MPG (1979).
19. J. Roth, J. Bohdanský, and A. P. Martinelli, *Radiat. Eff.* **48**, 213 (1980).
20. J. N. Smith, Jr., C. H. Meyer, Jr., and J. K. Layton, *Nucl. Technol.* **29**, 318 (1976).
21. М. И. Гусева, А. Л. Суворов, С. Н. Коршунов, Н. Е. Лазарев, *ЖТФ* **69**, 137 (1999).
22. R. Behrisch and W. Eckstein, *Sputtering by Particle Bombardment*, Springer, Berlin (2007).
23. G. Falcone and F. Gullo, *Phys. Lett. A* **125**, 432 (1987).
24. Д. Фальконе, *УФН* **162**, 71 (1992).