

УДК 537.534.9

ОТРАЖЕНИЕ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА И АТОМОВ ГЕЛИЯ ОТ ПОВЕРХНОСТИ ПЕРВОЙ СТЕНКИ ТОКАМАКА ИТЭР

© 2020 г. Д. С. Мелузова^а, *, П. Ю. Бабенко^а, А. П. Шергин^а, А. Н. Зиновьев^а

^аФизико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, 194021 Россия

*e-mail: dmeluzova@gmail.com

Поступила в редакцию 25.11.2019 г.

После доработки 20.01.2020 г.

Принята к публикации 25.01.2020 г.

Рассчитаны коэффициенты отражения при рассеянии изотопов водорода и атомов гелия на поверхности мишеней из аморфных бериллия, углерода и вольфрама, представляющих интерес для физики термоядерной плазмы. Результаты расчетов находятся в согласии с имеющимися экспериментальными данными. Анализируется изотопный эффект в отражении частиц от стенки. Для отражения атомов гелия наблюдается подобие кривых в зависимости коэффициента отражения от параметра Линдхарда.

Ключевые слова: коэффициенты отражения, изотопы водорода, гелий, бериллий, углерод, вольфрам, ИТЭР.

DOI: 10.31857/S1028096020070146

ВВЕДЕНИЕ

На токамаке ИТЭР планируется работа с дейтериево-третиевой плазмой. Как известно, в качестве материала дивертора в токамаке-реакторе ИТЭР выбран вольфрам. Углерод и бериллий считаются перспективными материалами для первой стенки реактора. Для исследования был выбран диапазон энергий падающих частиц (водорода, дейтерия, трития и гелия) от 100 эВ до 10 кэВ – типичных энергий частиц, отражающихся от стенки. Для выяснения роли изотопного эффекта были рассчитаны коэффициенты отражения атомов водорода, дейтерия и трития, рассеянных на Ве, С и W. Атомы гелия являются продуктами термоядерной реакции, поэтому были рассчитаны коэффициенты рассеяния атомов гелия на тех же мишенях.

Экспериментальные данные по коэффициентам отражения для Ве отсутствуют, а для С и W крайне ограничены [1, 2]. Компьютерное моделирование широко используется для изучения рассеяния атомных частиц на поверхности материалов [3]. Часто используемый код SRIM [4] основан на приближении парных столкновений (в дальнейшем именуемом ВСА – Binary Collision Approximation), которое было предложено в работе [5]. В ВСА рассматривается рассеяние падающей частицы от ближайшего атома мишени, и траектория частицы аппроксимируется ее асимптотами при сближении и разлете частиц. Критерии применимости приближения ВСА подробно

рассмотрены в монографии [3]. В наших работах [6, 7] метод ВСА использовался для расчета коэффициентов отражения и угловых распределений атомов дейтерия, рассеянных на различных гранях кристаллического вольфрама, с использованием потенциала отталкивания. Из других работ следует отметить расчеты коэффициентов отражения с использованием методов молекулярной динамики [8, 9] и работу [10], где исследовалось влияние формы поверхности на коэффициенты отражения. Имеется также большое количество статей, посвященных распылению материалов, образованию дефектов при бомбардировке изотопами водорода (например, [11]).

Наличие ямы в потенциале вызывает притяжение частиц на больших межъядерных расстояниях и влияет на коэффициенты отражения. Предварительные результаты наших расчетов для рассеяния атомов D на Ве, С и W были опубликованы в работе [12]. В задачу настоящей работы входило изучить различие в отражении для изотопов водорода, а также получить данные для атомов He.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Нами использовались два метода расчета: расчет в приближении ВСА и более точный метод, основанный на расчете траекторий частиц [13]. Этот метод свободен от упрощающих приближений, используемых в ВСА, и позволяет учитывать

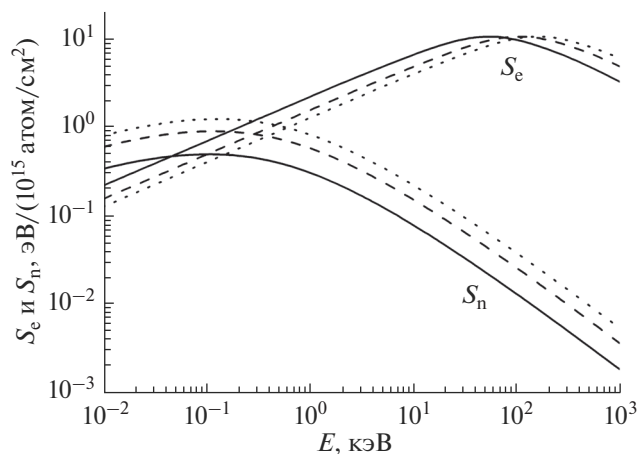


Рис. 1. Ядерные (S_n) и электронные (S_e) тормозные потери для различных изотопов водорода в Ве в зависимости от энергии соударения. Сплошная линия – H, штриховая линия – D, пунктирная линия – T.

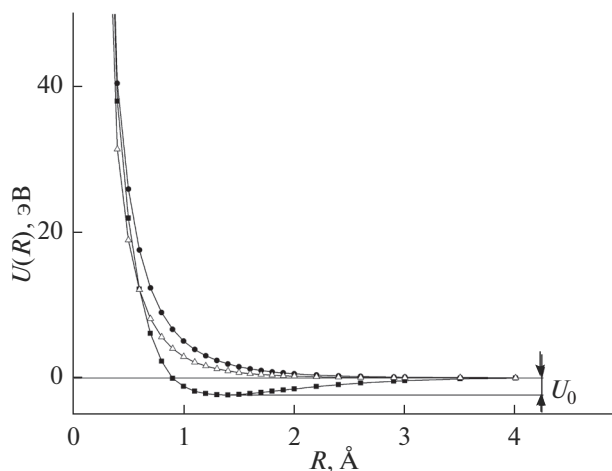


Рис. 2. Сравнение потенциала для случая D–Ве, рассчитанного методом DFT [12] – квадраты, с потенциалом ZBL [16] – треугольники и Зиновьева [17] – кружки. Метод DFT предсказывает наличие притягивающей ямы в потенциале. U_0 – глубина ямы.

одновременное взаимодействие падающей частицы с множеством атомов мишени. Расчеты с использованием данного метода более трудоемки. Детали используемых методик описаны в работе [14].

В расчетах учитывались тепловые колебания атомов решетки. Поскольку скорости налетающих частиц значительно больше тепловых скоростей движения атомов мишени, распределение атомов мишени по трем направлениям считалось случайным и описывалось гауссовским распределением с величинами колебаний 0.05 \AA для W, 0.07 \AA для C и 0.09 \AA для Ве. Для аморфных мише-

ней учитывалась корреляция в расположении ближайших соседних атомов.

Использовались значения электронных тормозных потерь, приведенные в базе данных NDS [15].

На рис. 1 приведены значения ядерных S_n и электронных S_e тормозных потерь для различных изотопов водорода в Ве (H, D, T). Для изотопов водорода $S_n(M_1) = S_n(\text{H}) \times M_1$, где M_1 – атомная масса изотопа водорода. Электронные тормозные способности S_e для случаев H, D, T зависят только от скорости соударения. Как видно из рис. 1, при энергиях меньших 1 кэВ существенно учитывать ядерные и электронные тормозные способности. При больших энергиях электронные тормозные способности доминируют. При малых энергиях суммарные тормозные способности больше для более тяжелого изотопа. При больших энергиях вследствие большей скорости соударения тормозные способности максимальны для водорода.

ПОТЕНЦИАЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Расчеты потенциала для систем H–Ве, C, W, выполненные методом DFT [12], показали наличие ямы в потенциале, что приводит к притяжению частиц на больших межъядерных расстояниях (рис. 2). На этом рисунке также представлены данные для потенциалов ZBL [16] и Зиновьева [17]. Наличие ямы в потенциале может влиять на сечения рассеяния и коэффициенты отражения.

Глубина потенциальной ямы связана с энергией диссоциации соответствующей молекулы. Значения энергий диссоциации для молекул C–H и Ве–H составляют $U_0 = 3.50 \pm 0.03 \text{ эВ}$ и $U_0 = 2.34 \pm 0.022 \text{ эВ}$ соответственно [18]. В работе [19] представлены межъядерные расстояния для двухатомных молекул. Для системы H–C это расстояние составляет 1.1198 \AA , а для системы H–Ве 1.3431 \AA . Рассчитанные методом DFT позиции минимумов в зависимости потенциала от межъядерного расстояния хорошо согласуются с этими данными. Точность расчета U_0 с использованием метода DFT оценивается примерно в 1 эВ. Поэтому для притягивающей части потенциала мы нормализовали результаты, полученные методом DFT, к экспериментальным значениям U_0 .

Мы не нашли экспериментальных данных по энергии диссоциации для случая D–W в литературе. Результаты, полученные методом DFT (4.6 эВ), хорошо согласуются со значением $U_0 = 4.55 \text{ эВ}$, рассчитанным в [20].

Теоретические формулы для межатомных потенциалов не зависят от масс сталкивающихся частиц. Влияние массы изотопа проявляется только в изменении приведенной массы электрона. Это приводит к относительному увеличению

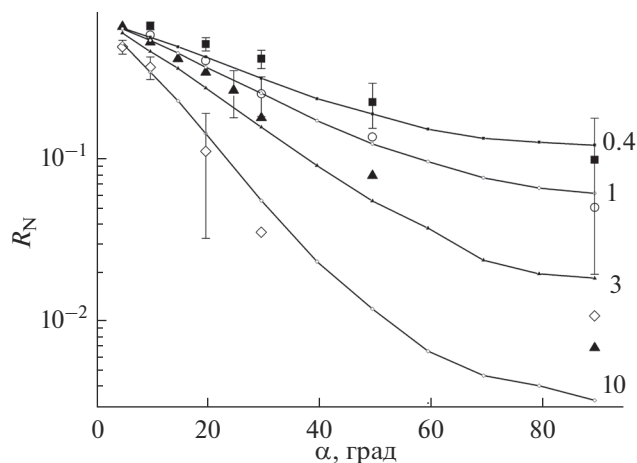


Рис. 3. Сравнение рассчитанных коэффициентов отражения для атомов D, рассеянных от аморфного углерода с экспериментальными данными [2]. Кривые — наш расчет. Цифры около расчетных кривых — энергия бомбардирующих частиц в кэВ. Экспериментальные данные обозначены точками: квадраты — 0.4; кружки — 1; треугольники — 3; ромбы — 10 кэВ.

потенциала на величину m_e/M_1 , где m_e и M_1 — массы электрона и изотопа соответственно. Поэтому мы ожидаем, что относительная разница в потенциале составит около 0.05%. Отметим, что относительная разница между потенциалом ионизации водорода и дейтерия составляет менее 0.03%. Согласно [18], глубины потенциальной ямы U_0 для систем C–H и C–D практически совпадают (3.50 и 3.54 эВ). Положение минимумов для этих систем составляет 1.1198 и 1.119 Å [19]. Для H–Be и D–Be минимумы расположены при 1.3431 и 1.3427 Å соответственно. Это позволяет использовать для описания рассеяния для случаев D–Be, D–C, D–W полученные методом DFT потенциалы для систем H–Be, H–C, H–W. Рекомендуемые значения потенциалов представлены в нашей работе [12].

ВЛИЯНИЕ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЫ НА КОЭФФИЦИЕНТЫ ОТРАЖЕНИЯ

В работе [12] отмечалось различие в коэффициентах отражения при учете наличия потенциальной ямы для кристаллических мишеней. На рис. 3 представлена зависимость коэффициента отражения при рассеянии изотопов водорода на аморфном бериллии. При использовании DFT-потенциала имеется потенциальная яма глубиной 2.34 эВ (рис. 1). Для потенциала ZBL яма отсутствует. Как видно из рис. 3, наличие потенциальной ямы существенно сказывается на величинах коэффициентов отражения для углов скольжения: $\alpha < 20^\circ$ при энергиях соударения 100–500 эВ. При энергиях свыше 2 кэВ это различие незначительно.

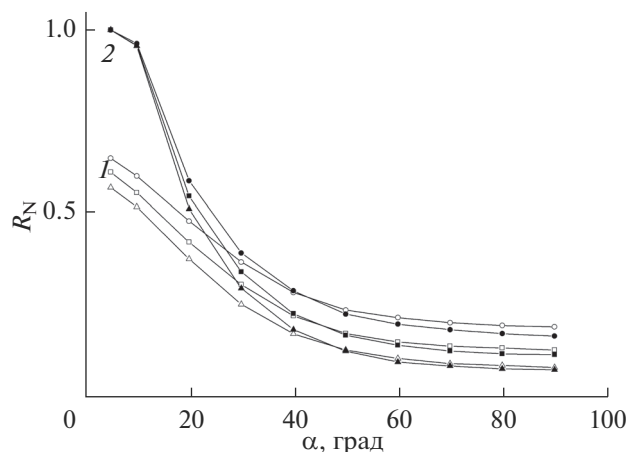


Рис. 4. Зависимость коэффициентов отражения различных изотопов водорода от Be с энергией 100 эВ от угла скольжения при использовании потенциалов DFT (с ямой) — 1 и ZBL (яма отсутствует) — 2. Обозначения изотопов водорода: водород — кружки; дейтерий — квадраты; тритий — треугольники.

Для случая D–C существуют экспериментальные данные о коэффициентах отражения, измеренные с применением методики ядерных реакций [2]. Как видно из рис. 4, существует хорошее согласие между экспериментом и нашими расчетами, полученными с использованием DFT потенциала с потенциальной ямой.

Опираясь на этот факт, мы рассчитали коэффициенты отражения для бомбардирующих частиц H, D, T, He и мишеней Be, C, W. Как показано на рис. 4, результаты расчета коэффициентов отражения зависят от используемого потенциала взаимодействия частиц. Расчеты с применением DFT-потенциала с потенциальной ямой ранее не проводились. Сопоставление возможно при энергиях соударения более 1 кэВ, когда результаты слабо зависят от используемого потенциала. Наши результаты удовлетворительно согласуются с независимыми расчетами [8–10].

ВЛИЯНИЕ ИЗОТОПНОГО ЭФФЕКТА НА КОЭФФИЦИЕНТЫ РАССЕЯНИЯ

На рис. 5 приведены значения коэффициентов отражения в зависимости от энергии падающей частицы при углах скольжения $\alpha = 5^\circ, 30^\circ$ и 90° для систем H, D, T–Be, C, W. Данные для различных изотопов близки, потому что для описания рассеяния используется один и тот же потенциал. Сечения рассеяния для малых углов в этих случаях зависят только от энергии частиц. Разница возникает из-за различия в тормозных способностях при рассматриваемых энергиях. При больших углах рассеяния, существенных в нашем случае, сечения рассеяния зависят от приведенной массы.

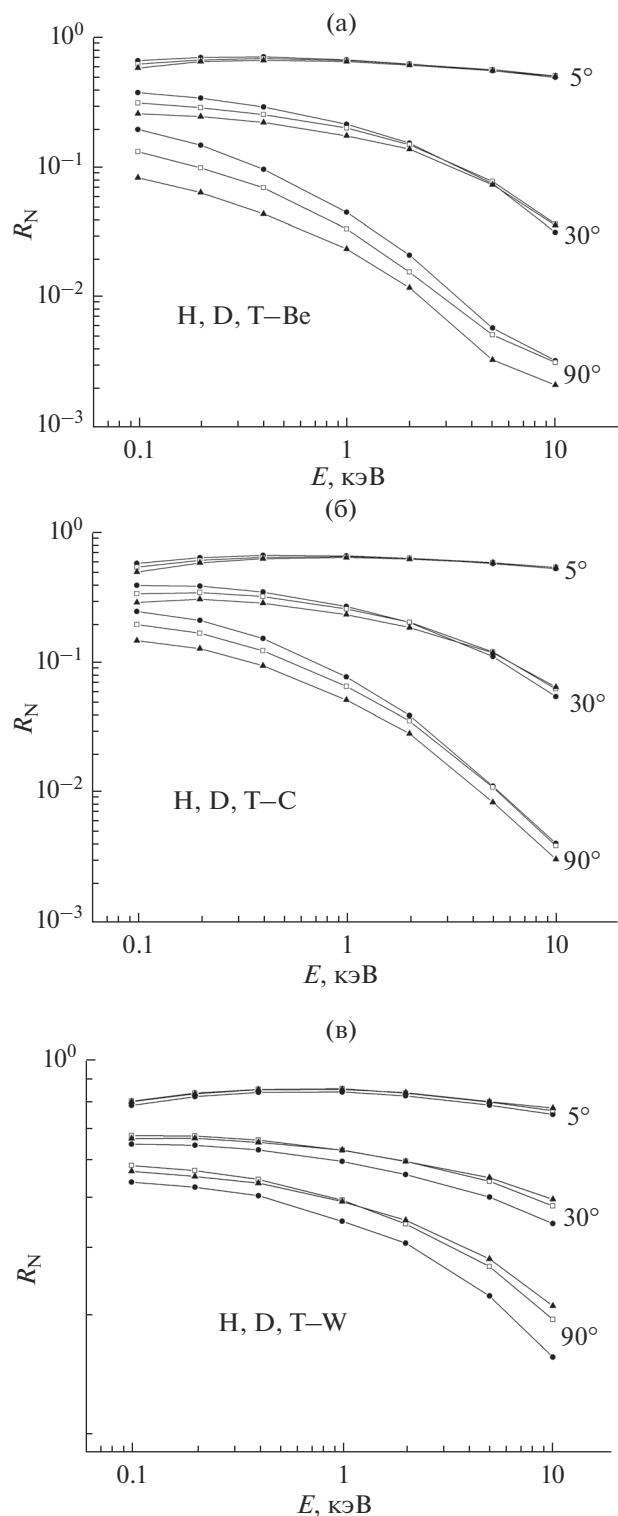


Рис. 5. Коэффициенты отражения изотопов водорода в зависимости от энергии падающей частицы при углах скольжения $\alpha = 5^\circ, 30^\circ$ и 90° : а – H, D, T–Be, б – H, D, T–C, в – H, D, T–W. Обозначения изотопов водорода: водород – кружки, дейтерий – квадраты, тритий – треугольники.

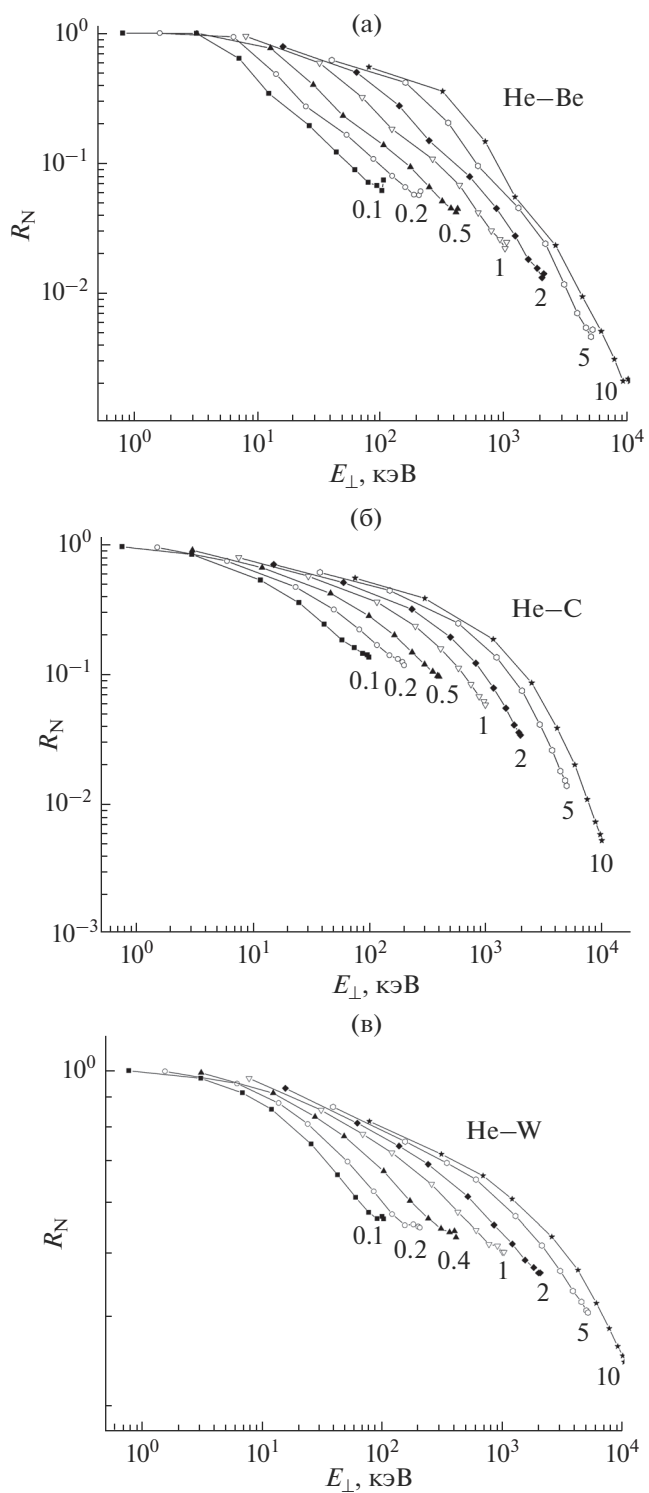


Рис. 6. Коэффициенты отражения для атомов He в зависимости от параметра E : $E_\perp = E \sin^2 \alpha$. Числа на кривых являются энергиями падающих частиц: а – He–Be; б – He–C; в – He–W.

Различие в приведенных массах для различных изотопов, больше для легкой мишени. Как видно из рис. 5, различие в коэффициентах отражения для различных изотопов также больше для наиболее легкой мишени из Ве и уменьшается с ростом атомного номера мишени.

КОЭФФИЦИЕНТЫ ОТРАЖЕНИЯ АТОМОВ ГЕЛИЯ

В случае He притягивающая яма в DFT-потенциале составляет менее 0.02 эВ и не должна существенно сказываться на коэффициентах отражения. В работе [7] нами было показано, что при рассеянии на кристаллической мишени удобно использовать параметр $E_{\perp} = E \sin^2 \alpha$, предложенный Линдхардом [21]. Для кристаллической мишени при углах рассеяния менее 20° наблюдалась универсальная зависимость [7]. На рис. 6 представлены результаты наших расчетов коэффициентов отражения для аморфных мишеней (систем He–Ве, С, W) в зависимости от параметра E_{\perp} . Для значений $E_{\perp} < 10$ эВ наблюдается универсальная зависимость и для аморфных мишеней. Для больших значений E_{\perp} наблюдается подобие кривых.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассчитаны коэффициенты отражения, важные для описания взаимодействия частиц плазмы в ИТЭР с материалами первой стенки. Получены данные для H, D, T, He для мишеней из Ве, С, W в широком диапазоне энергий 100–10000 эВ. Результаты расчетов находятся в согласии с имеющимися экспериментальными данными.

Показано, что использование полученного методом DFT потенциала с притягивающей ямой существенно влияет на величины коэффициентов отражения в диапазоне энергий 100–1000 эВ при малых углах рассеяния.

При больших углах наблюдается проявление изотопного эффекта в рассеянии различных изотопов водорода, при этом величина эффекта связана с различием в приведенных массах сталкивающихся частиц, а также различием в величинах тормозных потерь для различных изотопов. Изотопный эффект практически отсутствует при малых углах рассеяния.

При рассеянии атомов гелия наблюдается подобие кривых для зависимости коэффициента отражения от параметра Линдхарда.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bandurko V.V., Koborov N.N., Kurnaev V.A. et al.* // J. Nucl. Mater. 1990. V. 176–177. P. 630. [https://doi.org/10.1016/0022-3115\(90\)90118-7](https://doi.org/10.1016/0022-3115(90)90118-7)
2. *Chen C.K., Scherzer B.M.U., Eckstein W.* // Appl. Phys. A 1984. V. 33. Iss. 4. P. 265. <https://doi.org/10.1007/BF00614669>
3. *Eckstein W.* Computer Simulation of Ion-Solid Interactions. Berlin: Springer, 1991. 296 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-73513-4>
4. *Ziegler J.F., Biersack J.P.* SRIM – <http://www.srim.org>.
5. *Robinson M.T., Torrens I.M.* // Phys. Rev. B. 1974 V. 9. Iss. 12. P. 5008. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.9.5008>
6. *Babenko P.Yu., Deviatkov A.M., Meluzova D.S., Shergin A.P., Zinoviev A.N.* // NIMB 2017. V. 406. P. 538. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2016.12.043>
7. *Бабенко П.Ю., Зиновьев А.Н., Мелузова Д.С., Шергин А.П.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2018. № 6. С. 7. <https://doi.org/10.7868/S0207352818060021>
8. *Lasa A., Björkas C., Vörtler K., Nordlund K.* // J. Nucl. Mater. 2012. V. 429. P. 284. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2012.06.012>
9. *Maya P.N.* // J. Nucl. Mater. 2016. V. 480. P. 411. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2016.08.007>
10. *Козум Д.К., Трифонов Н.Н., Курнаев В.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2008. Т. 72. № 7. С. 1024.
11. *Skinner C.H., Haasz A.A., Alimov V.Kh., Bekris N., Causey R.A., Clark R.E.H., Coad J.P., Davis J.W., Doerner R.P., Mayer M., Pisarev A., Roth J., Tanabe T.* // Fusion Sci. and Techn. 2008. V. 54. P. 891. <https://doi.org/10.13182/FST54-891>
12. *Meluzova D.S., Babenko P.Yu., Shergin A.P., Nordlund K., Zinoviev A.N.* // NIMB. 2019. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2019.03.037>
13. *Babenko P.Yu., Meluzova D.S., Shergin A.P., Zinoviev A.N.* // NIMB. 2017. V. 406. P. 460. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2016.12.040>
14. *Мелузова Д.С., Бабенко П.Ю., Шергин А.П., Зиновьев А.Н.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2019. № 4. С. 74. <https://doi.org/10.1134/S0207352819040127>
15. *Paul H.* Nuclear Data Section of the IAEA – <https://www-nds.iaea.org/stopping/>
16. *Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U.* The Stopping and Range of Ions in Solids. The Stopping and Range of Ions in Matter. V. 1. New York: Pergamon, 1985. https://doi.org/10.1007/978-1-4615-8103-1_3
17. *Zinoviev A.N.* // NIMB. 2011. V. 269. Iss. 9. P. 829. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.11.074>
18. *Darwent B.* Bond Dissociation Energies in Simple Molecules. NSRDS-NBS. 31. 1970.
19. *Nikolsky B.P.* Handbook of Chemist. V. 1. Leningrad: Chemistry Publ. House, 1966.
20. *Anders L.W., Hansen R.S., Bartell L.S.* // J. Chem. Phys. 1973. V. 59. Iss. 10. P. 5277. <https://doi.org/10.1063/1.1679870>
21. *Линдхард Й.* // УФН. 1969. Т. 99. Вып. 2. С. 249. <https://doi.org/10.3367/UFN.0099.196910c.0249>

Reflection of Hydrogen Isotopes and Helium Atoms from the Surface of the Tokamak ITER First Wall

D. S. Meluzova^{1, *}, P. Yu. Babenko¹, A. P. Shergin¹, A. N. Zinoviev¹

¹*Ioffe Institute, Politekhnicheskaya st., 26, St. Petersburg, 194021 Russia*

**e-mail: dmeluzova@gmail.com*

The reflection coefficients are calculated for the scattering of hydrogen isotopes and helium atoms on the surface of amorphous beryllium, carbon, and tungsten targets of interest to the physics of thermonuclear plasma. The results demonstrate good agreement with the available experimental data. The isotope effect in the reflection of particles from the wall is analyzed. For the reflection of He atoms, a similarity of the curves is observed in the dependence of the reflection coefficient on the Lindhard parameter.

Keywords: reflection coefficients, hydrogen isotopes, helium, beryllium, carbon, tungsten, ITER.