

02;13

## Коэффициенты распыления бериллия изотопами водорода

© П.Ю. Бабенко, В.С. Михайлов, А.Н. Зиновьев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: zinoviev@inprof.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 17 ноября 2022 г.

В окончательной редакции 10 декабря 2022 г.

Принято к публикации 22 февраля 2023 г.

С помощью компьютерного моделирования получены коэффициенты распыления мишени из бериллия изотопами водорода в диапазоне энергий бомбардирующих частиц  $8\text{ eV}–100\text{ keV}$  и зависимости коэффициентов распыления от угла падения пучка. Полученные результаты позволяют оценить распыление первой стенки токамака ИТЭР и поступление примеси бериллия в горячую зону плазмы. Предложены формулы для оценки энергетического порога распыления и описания зависимости коэффициента распыления от угла падения пучка.

**Ключевые слова:** коэффициенты распыления, потенциал межатомного взаимодействия, изотопы водорода, бериллий.

DOI: 10.21883/PJTF.2023.08.55138.19432

Одна из приоритетных проблем — создание источников экологически чистой энергии, в частности термоядерного реактора. В строящемся токамаке ИТЭР, в создании которого Россия принимает активное участие, планируется выполнить первую стенку из бериллиевых пластин. При работе токамака стенка будет подвергаться облучению интенсивными потоками плазмы, быстрыми нейтральными атомами дейтерия и трития, покидающими плазму, а также нейтронами и излучением. Вопрос стойкости конструкционных материалов является решающим для успешной работы ИТЭР. В настоящее время экспериментальные данные о коэффициентах распыления дейтерием бериллия крайне неточны, а для трития отсутствуют. Информация об угловых зависимостях коэффициентов распыления еще более скудная.

Традиционные модели распыления в рассматриваемом случае столкновения легких частиц с мишенью не работают. В данном случае доминирует распыление поверхностных слоев потоком обратнорассеянных частиц [1]. Модель Зигмунда [2] дает значения, превышающие в 5 раз экспериментальные данные.

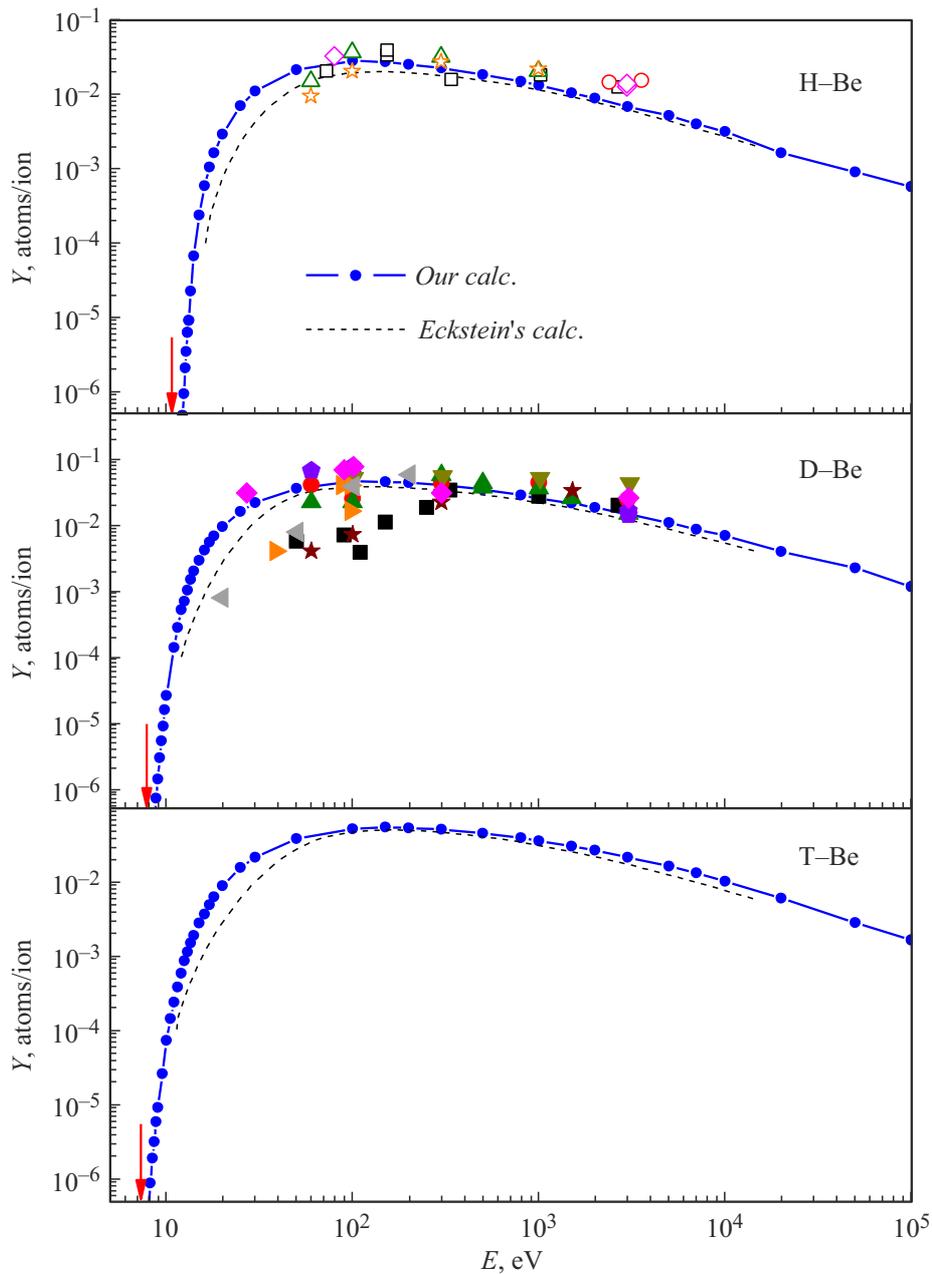
Следует отметить, что на результаты расчетов заметно влияет используемая модель потенциального барьера на границе твердое тело–вакуум [3]. Поверхностный потенциал может быть принят изотропным для сильно неровной поверхности или плоскостным для гладкой поверхности. На наш взгляд, большой разброс экспериментальных данных может быть связан с различным состоянием поверхности в рассматриваемых экспериментах. В наших расчетах мы использовали модель изотропного барьера, поскольку получаемые результаты лучше согласуются с экспериментальными данными.

В задачи настоящей работы входило получение надежных данных о коэффициентах распыления бериллия изотопами водорода — водородом, дейтерием, тритием — в широком диапазоне начальных энергий ( $8\text{ eV}–100\text{ keV}$ ).

Диапазон энергий характеризует энергии частиц в пристеночной плазме, а также энергии быстрых атомов, покидающих центральную зону плазмы. Также в задачи работы входило получение зависимости коэффициентов распыления от угла падения частиц на мишень.

Перейдем к описанию алгоритма расчета. При выборе потенциала для расчета рассеяния налетающей частицы на атомах мишени использовался опыт предшествующих работ по исследованию отражения атомов водорода от поверхности [4,5], прохождения пучка через тонкие пленки [6], а также по расчету ядерных тормозных потерь [7]. Было установлено, что парные потенциалы, полученные в рамках теории функционала плотности (DFT) с коррекцией глубины потенциальной ямы на данные спектроскопических измерений, хорошо согласуются с результатами экспериментов, полученными при изучении рассеяния в газовой фазе [8]. Данные о потенциале были взяты из работы [5]. 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. [9,10]). Важное значение имеет также модель, применяемая для описания электронных тормозных потерь. Хотя для энергий ниже  $10\text{ keV}$  экспериментальных данных о торможении атомов водорода в бериллии нет, мы использовали надежные экспериментальные данные для алюминия [11] с применением масштабирования на различие в электронной плотности бериллия и алюминия с помощью методики, предложенной в работе [12].

Мишень состояла из микрокристаллов бериллия размером в одну постоянную решетки, случайно ориентированных в пространстве. При пролете сквозь твердое тело налетающая частица при соударениях с атомами мишени создает частицы отдачи с энергиями, которые расчи-



**Рис. 1.** Зависимости коэффициента распыления от энергии бомбардирующих частиц. Приведены расчеты для систем H–Be, D–Be и T–Be. Жирная линия с точками — расчет с помощью нашей программы. Штриховая линия — расчет, а точки — эксперимент из работы [15]. Стрелками показаны положения порогов распыления, рассчитанные по формуле (1).

тываются из законов сохранения. Массив координат, энергий и векторов скорости частиц отдачи записывался. Частицы отдачи в свою очередь генерируют появление каскадных частиц, которые добавлялись в этот массив. Далее рассчитывались траектории частиц отдачи с применением многочастичных потенциалов, рассчитанных с использованием теории функционала плотности [13,14]. Частицы, вышедшие в вакуум за границу поверхности и преодолевшие поверхностный барьер, равный поверхностной энергии связи  $E_s = 3.32$  eV [13,14], считались распыленными. Как уже упоминалось, применялась мо-

дель изотропного поверхностного барьера. Учитывались тепловые колебания атомов мишени. Амплитуда колебаний принималась равной  $0.058$  Å, что соответствовало комнатой температуре. Обычно мы рассматривали  $10^6$  налетающих частиц для набора требуемой статистики, а в случае расчета порогового поведения коэффициента распыления число налетающих частиц доходило до  $10^8$ .

На рис. 1 представлены зависимости коэффициента распыления от энергии бомбардирующих частиц. Приведены расчеты для систем H–Be, D–Be и T–Be. Жирная линия с точками — расчет с помощью нашей програм-

мы. Точки — набор экспериментальных данных разных авторов, приведенный в монографии [15], а штриховая линия — расчет из работ [15,16].

Из рис. 1 для системы Н–Ве видно, что экспериментальные данные для энергий меньше 60 eV отсутствуют. Кривая, рассчитанная с помощью нашей программы, лежит чуть выше (ближе к имеющимся экспериментальным данным), чем расчет из работ Экштайна [15,16]. Для взаимодействия дейтерия с бериллием экспериментальных данных гораздо больше, однако для энергий порядка 100 eV имеется очень большой разброс данных эксперимента. На наш взгляд, на результаты эксперимента сильно влияет состояние поверхности, а также наличие окислов. В случае D–Ве результаты нашего расчета снова лежат выше, чем результаты расчета Экштайна [15,16]. В обоих случаях наш расчет согласуется с экспериментом в пределах разброса экспериментальных данных. Для системы Т–Ве экспериментальные данные отсутствуют, но, поскольку имеется систематика в поведении кривых для изотопов водорода, расчетные данные представляются надежными. Для энергий в диапазоне 10–300 eV для Н–Ве, 10–150 eV для D–Ве и 10–100 eV для Т–Ве наблюдается рост значений коэффициента распыления с ростом энергии. Далее с ростом энергии падающих ионов коэффициент распыления уменьшается.

В целом наши расчеты неплохо согласуются с расчетами группы Экштайна [15], при этом они лучше описывают экспериментальные данные. Важным шагом является применение наиболее точного потенциала DFT с учетом поправок на положение и глубину потенциальной ямы. Полученные данные существенно отличаются от данных Экштайна в припороговой области. Поскольку при взаимодействии плазма–стенка именно эта область энергий существенна, полученные данные для коэффициентов распыления позволяют более точно оценить распыление первой стенки частицами пристеночной плазмы.

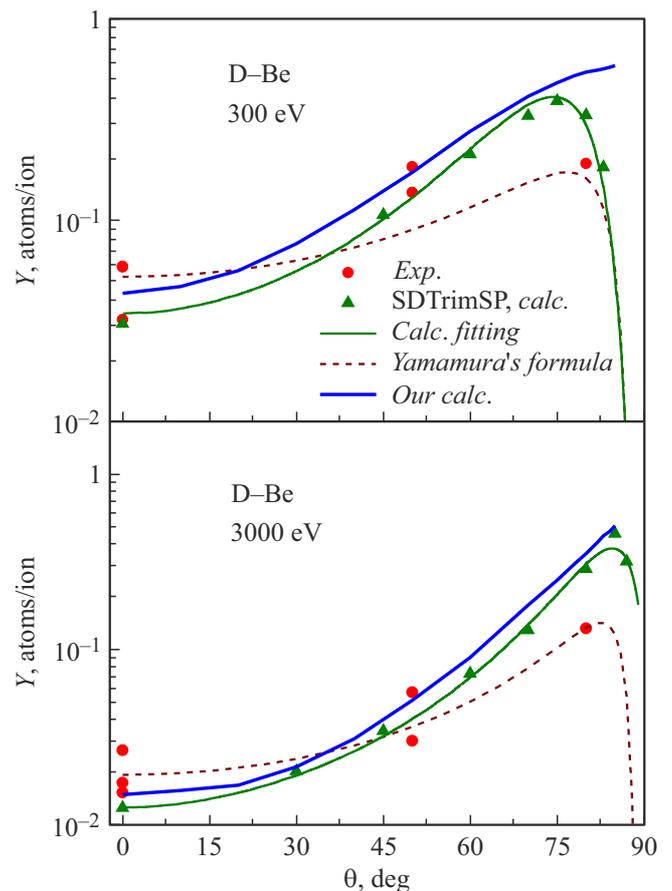
Представляют интерес пороговые значения энергии, когда коэффициенты распыления стремятся к нулю. В нашей работе [1] рассматривалась модель, хорошо применимая для области энергий вблизи порога, когда происходит распыление поверхностных атомов потоком обратнорассеянных бомбардирующих частиц. В этом случае переданная поверхностному атому энергия  $Q = \{4M_1M_2/(M_1 + M_2)^2\}E_1 > E_s$ , т.е. должна превышать поверхностную энергию связи  $E_s$  (здесь  $M_1, M_2$  — массы налетающей частицы и атома мишени,  $E_1$  — средняя энергия обратнорассеянных частиц). Для того чтобы налетающая частица полетела в сторону поверхности, она должна рассеяться на атоме мишени минимум на  $90^\circ$ , и ее максимальная энергия будет составлять  $(M_2 - M_1)/(M_1 + M_2)E$ , где  $E$  — начальная энергия. При учете многократного рассеяния это отношение  $\xi = E_1/E$  возрастает и составляет 0.845 для системы Н–Ве, 0.71 для D–Ве и 0.60 для системы

Т–Ве. Комбинируя оба условия, получаем для пороговой энергии выражение

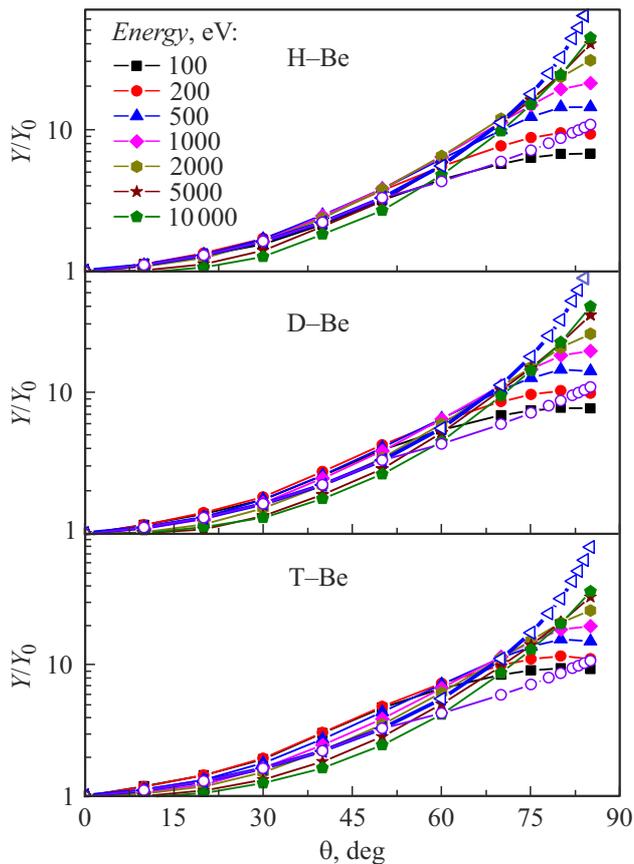
$$E_{th} = E_s \frac{(M_1 + M_2)^2}{4M_1M_2\xi}. \quad (1)$$

Для систем Н–Ве, D–Ве и Т–Ве получаем значения 10.91, 7.85 и 7.37 eV соответственно. Как видно из рис. 1, данные расчета с использованием формулы (1) согласуются с результатами компьютерного моделирования.

На рис. 2 показаны угловые зависимости коэффициента распыления для системы D–Ве при двух значениях энергии бомбардирующих частиц (300 и 3000 eV), рассчитанные нами. Расчет с помощью программы SDTrimSP и экспериментальные данные взяты из работы [17]. Штриховой линией показана оценка по формуле из работы Ямамуры и др. [18]. Видно, что экспериментальные данные весьма скудные. Наш расчет согласуется с экспериментальными данными в пределах ошибок эксперимента и с расчетом по программе



**Рис. 2.** Зависимости коэффициента распыления от угла падения пучка на мишень для системы D–Ве при значениях энергии бомбардирующих частиц 300 и 3000 eV. Жирная линия — расчет с помощью нашей программы. Расчет с использованием программы SDTrimSP и экспериментальные данные взяты из работы [17]. Штриховой линией показана оценка по формуле Ямамуры и др. из работы [18].



**Рис. 3.** Нормированные зависимости коэффициентов распыления от угла падения пучка на мишень для систем H–Be, D–Be и T–Be при различных начальных энергиях. Угол отсчитывается от нормали к поверхности. Кривые со светлыми символами — теоретические пределы.

SDTrimSP, но отличается от данных, получаемых по формуле Ямамуры.

На рис. 3 приведены зависимости коэффициента распыления от угла падения  $\theta$  пучка на мишень, рассчитанные нами для систем H–Be, D–Be и T–Be, нормированные на значение коэффициента для угла падения  $\theta = 0^\circ$ . Угол отсчитывается от нормали к поверхности. Такое представление уменьшает перекрытие кривых для разных начальных энергий и удобно для анализа. Как видно из рис. 3, поведение кривых для разных изотопов похоже. Они растут с увеличением угла падения относительно нормали к поверхности. Длина траектории пучка в области сбора распыленных частиц при изменении угла падения растет как  $1/\cos\theta$ , но ограничена пробегом пучка в мишени. Другим фактором, который может влиять на зависимость коэффициента распыления от угла падения, является различие в сечении рассеяния в зависимости от угла поворота импульса скорости для обратнорассеянных частиц. Таким образом, в приближении доминирования в распылении вклада распыления обратнорассеянными частицами можно ожидать зависи-

мость

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

где  $\sigma(\theta)$  — дифференциальное сечение рассеяния на угол  $\theta$ ;  $\theta_1$  — средний угол рассеяния для потока обратнорассеянных частиц. Как видно из рис. 3, предложенная простая зависимость подтверждается расчетными кривыми. Верхняя и нижняя теоретические кривые задают пределы изменения коэффициента, при этом нижняя кривая учитывает пробег в веществе частиц с энергией 100 eV.

В нашей работе [19] проводилась оценка поступления примеси бериллия в горячую зону плазмы при распылении стенки потоками быстрых атомов дейтерия и трития, покидающих центральную зону плазмы. Было показано, что это взаимодействие приводит к появлению примесей в количестве 2.5–4.2% от плотности плазмы. В настоящей работе рассчитаны коэффициенты распыления изотопами водорода бериллия в широком диапазоне начальных энергий (8 eV–100 keV). Получены зависимости коэффициентов распыления от угла падения пучка на мишень в диапазоне углов 0–85°. Вновь полученные данные позволяют уточнить эти оценки. Кроме того, необходимо учесть распыление стенки атомами пристеночной плазмы. Эта оценка весьма трудоемкая. Мы планируем проделать эту работу в будущем.

Авторами предложена формула для предсказания порога при распылении материалов легкими частицами, а также получена формула, качественно описывающая зависимость коэффициента распыления от угла падения пучка на мишень.

### Финансирование работы

П.Ю. Бабенко и В.С. Михайлов выражают благодарность за поддержку работы в рамках гранта Российского научного фонда № 22-22-20081 (<https://rscf.ru/project/22-22-20081/>), а также в рамках гранта Санкт-Петербургского научного фонда в соответствии с соглашением № 22/2022 от 14 апреля 2022 г.

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] Д.С. Мелузова, П.Ю. Бабенко, А.Н. Зиновьев, А.П. Шергин, Письма в ЖТФ, **46** (24), 19 (2020). DOI: 10.21883/PJTF.2020.24.50422.184872 [D.S. Meluzova, P.Yu. Babenko, A.N. Zinoviev, A.P. Shergin, Tech. Phys. Lett., **46** (12), 1227 (2020). DOI: 10.1134/S1063785020120226].
- [2] P. Sigmund, Phys. Rev., **184**, 383 (1969). DOI: 10.1103/PhysRev.184.383
- [3] В. Экштайн, Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела (Мир, М., 1995).

- [4] П.Ю. Бабенко, А.Н. Зиновьев, В.С. Михайлов, Д.С. Тенсин, А.П. Шергин, Письма в ЖТФ, **48** (14), 10 (2022). DOI: 10.21883/PJTF.2022.14.52862.19231 [P.Yu. Babenko, A.N. Zinoviev, V.S. Mikhailov, D.S. Tensin, A.P. Shergin, Tech. Phys. Lett., **48** (7), 50 (2022). DOI: 10.21883/TPL.2022.07.54039.19231].
- [5] D.S. Meluzova, P.Yu. Babenko, A.P. Shergin, K. Nordlund, A.N. Zinoviev, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B, **460**, 4 (2019). DOI: 10.1016/j.nimb.2019.03.037
- [6] П.Ю. Бабенко, А.Н. Зиновьев, Д.С. Тенсин, ЖТФ, **92** (11), 1643 (2022). DOI: 10.21883/JTF.2022.11.53436.151-22
- [7] A.N. Zinoviev, P.Yu. Babenko, K. Nordlund, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B, **508**, 10 (2021). DOI: 10.1016/j.nimb.2021.10.001
- [8] A.N. Zinoviev, K. Nordlund, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B, **406**, 511 (2017). DOI: 10.1016/j.nimb.2017.03.047
- [9] Б.П. Никольский, *Справочник химика* (Химия, Л., 1966).
- [10] Y.R. Luo, *Comprehensive handbook of chemical bond energies* (CRC Press, Boca Raton, 2007).
- [11] D. Primetzhofer, S. Rund, D. Roth, D. Goebel, P. Bauer, Phys. Rev. Lett., **107**, 163201 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.163201
- [12] A. Mann, W. Brandt, Phys. Rev. B, **24**, 4999 (1981). DOI: 10.1103/PhysRevB.24.4999
- [13] C. Bjorkas, N. Juslin, H. Timko, K. Vortler, K. Nordlund, K. Henriksson, P. Erhart, J. Phys.: Condens. Matter, **21**, 445002 (2009). DOI: 10.1088/0953-8984/21/44/445002
- [14] М.В. Прокофьев, В.В. Светухин, М.Ю. Тихончев, Изв. Самар. НЦ РАН, **15** (4), 1024 (2013).
- [15] R. Behrisch, W. Eckstein, *Sputtering by particle bombardment* (Springer, Berlin, 2007). DOI: 10.1007/978-3-540-44502-9
- [16] R.E.H. Clark, *Atomic and plasma-material interaction data for fusion* (IAEA, Vienna, 2001), vol. 7, part B.
- [17] W. Eckstein, C. Garcia-Rosales, J. Roth, W. Ottenberger, *Sputtering data*, IPP report 9/82 (IPP, Garching, 1993).
- [18] Y. Yamamura, Y. Itikawa, N. Itoh, *Angular dependence of sputtering yields of monatomic solids* (IPPJ, Nagoya, 1983), IPPJ-AM-26.
- [19] P.Yu. Babenko, M.I. Mironov, V.S. Mikhailov, A.N. Zinoviev, Plasma Phys. Control. Fusion, **62**, 045020 (2020). DOI: 10.1088/1361-6587/ab7943