

04;13

## Энерговыделение при бомбардировке атомами дейтерия поверхности вольфрама

© Д.С. Мелузова, П.Ю. Бабенко, М.И. Миронов, В.С. Михайлов, А.П. Шергин, А.Н. Зиновьев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: dmeluzova@gmail.com

Поступило в Редакцию 6 марта 2019 г.

В окончательной редакции 6 марта 2019 г.

Принято к публикации 19 марта 2019 г.

Рассчитано распределение энерговыделения (линейных потерь энергии) по глубине при бомбардировке атомами дейтерия мишени из вольфрама в широком диапазоне энергий налетающих частиц 100 eV–10 MeV. Показано, что в диапазоне энергий до 100 keV максимум энерговыделения вопреки сложившимся представлениям находится вблизи поверхности твердого тела. При энергии свыше 100 keV характер распределения меняется и появляется брэгговский максимум вблизи точки остановки частицы. Получено распределение энерговыделения по глубине в вольфраме для условий, типичных для токамака-реактора ИТЭР, что позволяет оценить нагрев стенки при бомбардировке атомами плазмы.

**Ключевые слова:** энерговыделение, линейные потери энергии, вольфрам, брэгговский максимум, токамак-реактор.

DOI: 10.21883/PJTF.2019.11.47827.17771

В 1903 г. У. Брэгг установил, что при торможении альфа-частиц в воздухе зависимость потери энергии от глубины проникновения имеет выраженный пик (названный пиком Брэгга) вблизи точки остановки частицы. Основные потери энергии при торможении частиц связаны с ионизацией атомов мишени. Сечение этого процесса растет с уменьшением энергии частицы. Поэтому частица теряет значительную часть энергии вблизи точки остановки. Это обстоятельство используется в протонной терапии злокачественных опухолей [1,2]. Как следствие, основная доза сосредоточена в пораженной ткани при минимальном облучении здоровых клеток, расположенных ближе к поверхности.

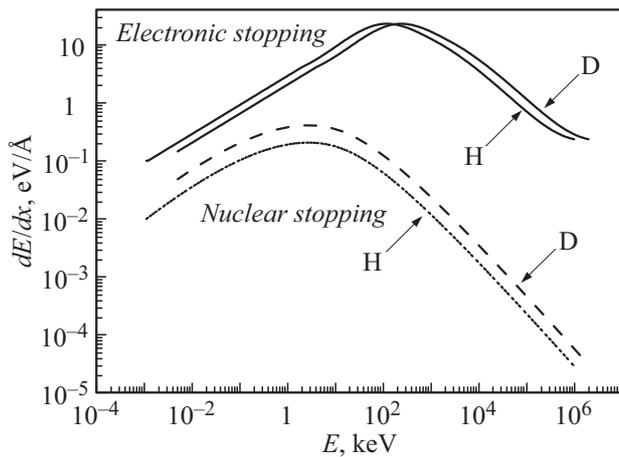
В токамаке-реакторе ИТЭР планируется работа с дейтериво-третиевой плазмой. В качестве основного материала дивертора, где будет происходить существенное энерговыделение, рассматривается вольфрам. Характерные энергии частиц плазмы будут лежать в диапазоне 100 eV–20 keV, т.е. значительно ниже энергий частиц, применяемых в ионной терапии. Работы, в которых анализируется распределение энерговыделения по глубине для указанных условий, отсутствуют. Поэтому были выбраны вольфрам в качестве объекта и диапазон энергий частиц 100 eV–10 MeV, чтобы проследить появление пика Брэгга.

Распределение энерговыделения по глубине связано с расчетом пробегов частиц в твердом теле. Обзор методов расчета и экспериментальных данных о пробегах и потерях энергии можно найти в [3,4]. Наиболее широко применяется код SRIM [5], в котором используется потенциал ZBL для описания рассеяния частиц. К сожалению, код SRIM напрямую не позволяет рассчитать распределение энерговыделения по глубине.

В приближении парных соударений (ППС) [3] траектория бомбардирующей частицы заменяется асимптотами траектории при сближении с атомом мишени и разлете частиц. В наших работах [6,7] проведено сравнение результатов расчетов коэффициентов отражения атомов водорода и дейтерия от поверхности вольфрама, получаемых при использовании метода ППС и более совершенного метода — метода расчета траекторий частиц. Было показано, что для рассматриваемого диапазона энергий оба метода дают близкие результаты. Поскольку использование ППС значительно ускоряет вычисления, в настоящей работе для расчета распределения линейных потерь энергии и пробегов по глубине материала мы использовали его модернизированную версию, описанную в работах [6,7].

На результаты вычислений серьезно влияет потенциал взаимодействия, применяемый для описания рассеяния частиц. На наш взгляд, наиболее точным является потенциал DFT [8], полученный в рамках приближения функционала плотности с использованием пакета Dmol для выбора базиса волновых функций. В работе [8] расчеты, выполненные с помощью данного метода, оказались в хорошем согласии с результатами, полученными из экспериментов по рассеянию частиц.

Для конкретного случая D–W отталкивательная часть потенциала хорошо согласуется с результатами, полученными по формуле из работы [9], при этом потенциал спадает значительно быстрее с ростом межъядерного расстояния, чем потенциал ZBL. Другое отличие — потенциал DFT предсказывает наличие притягивающей ямы в потенциале с глубиной 4.6 eV, что находится в согласии с независимыми расчетами [10]. Наличие потенциальной ямы влияет на траектории частиц и



**Рис. 1.** Потери энергии при торможении на электронах и ядрах водорода и дейтерия в вольфраме. Используются значения из базы данных [4].

существенно меняет результаты при низких начальных энергиях.

На рис. 1 представлены данные об электронных тормозных способностях, взятые из базы данных [4]. Для удобства расчетов эти данные были описаны следующими аналитическими зависимостями:

в диапазоне начальных энергий  $E = 1 \text{ eV} - 25 \text{ keV}$

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

в диапазоне  $E = 25 - 1000 \text{ keV}$

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

в диапазоне  $E = 1 - 10 \text{ MeV}$

$$\frac{dE}{dx} = \frac{2231.3 \ln(E/117.1)}{E^{0.86}}, \quad (3)$$

для  $E = 10 - 200 \text{ MeV}$

$$\frac{dE}{dx} = \exp[9.04 - 0.97 \ln(\ln E) - 0.61 \ln E]. \quad (4)$$

В формулах начальная энергия  $E$  задается в keV, а величины  $dE/dx$  выражены в eV/Å.

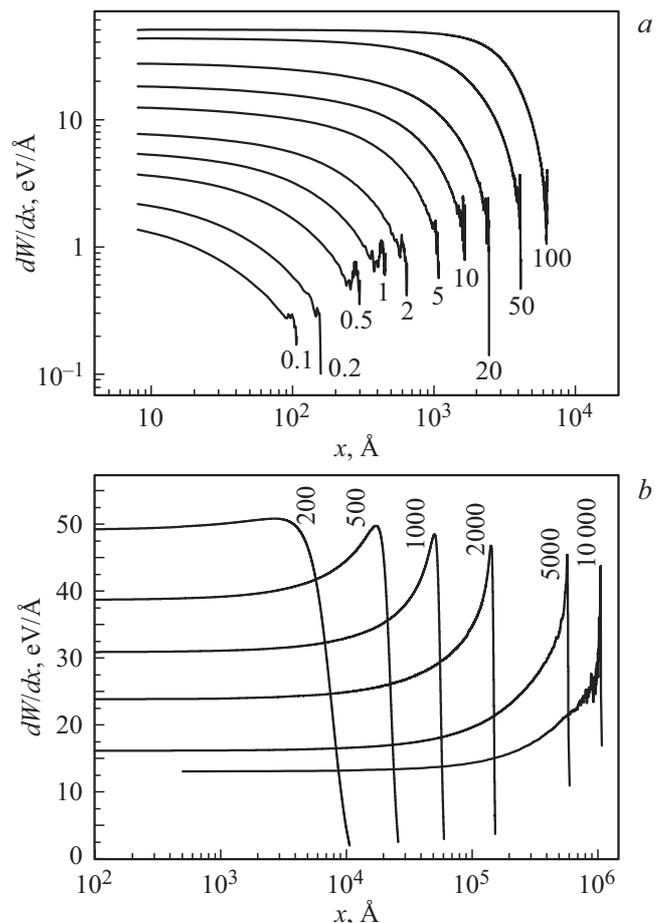
Следует отметить, что электронные тормозные способности для различных изотопов водорода совпадают при равной скорости соударения. На рис. 1 для сопоставления приведены также данные для ядерных тормозных способностей систем H-W и D-W. Ядерные тормозные способности возрастают пропорционально массе налетающей частицы. Как видно из рис. 1, в нашем случае электронные тормозные способности существенно превышают ядерные. Ядерные тормозные способности зависят от используемого потенциала. В наших расчетах

они учитывались непосредственно при рассмотрении кинематики конкретного столкновения, а угол рассеяния рассчитывался с использованием потенциала DFT.

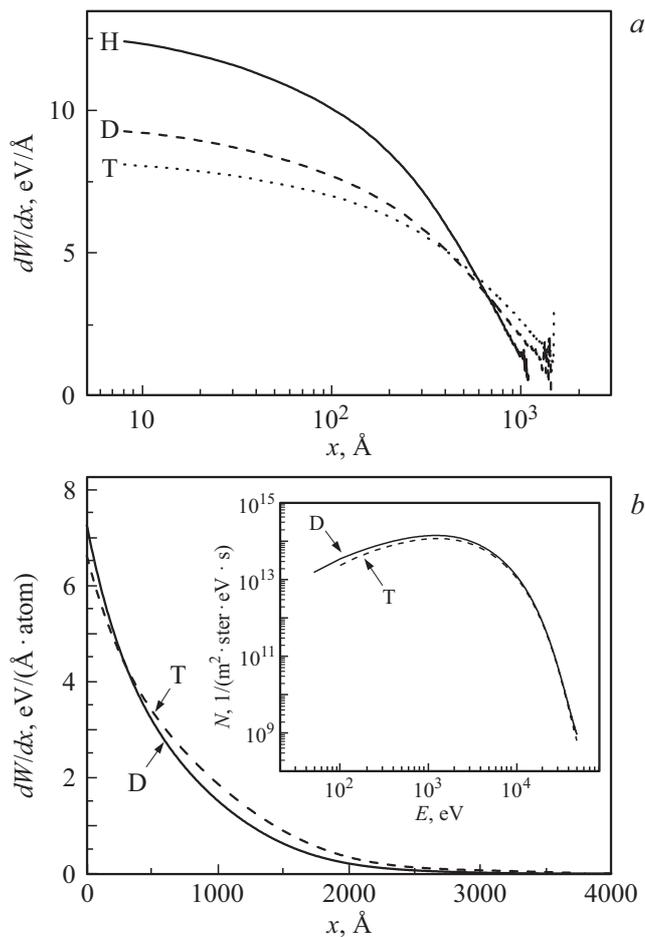
Для описания распределения энерговыделения по глубине часто используется термин „линейные потери энергии“  $dW/dx$  [1], которые определяются как средние потери энергии частицы на интервале  $dx$  (в наших расчетах величина  $dx$  составляла  $1 \text{ Å}$ , а результаты усреднялись для  $5 \cdot 10^5$  рассмотренных траекторий). Предполагается, что направление пучка и ось  $x$  перпендикулярны поверхности.

Результаты расчетов энерговыделения (линейных потерь энергии)  $dW/dx$  по глубине материала представлены на рис. 2. Величина  $dW/dx$  включает потери энергии при торможении на электронах и ядрах. Вследствие многократного рассеяния величина проецированного на ось  $x$  пробега меньше полного пробега частиц, поэтому величина  $dW/dx$  больше суммы потерь энергии на электронах и ядрах.

Как следует из рис. 2, а, при энергиях ниже  $100 \text{ keV}$  характер распределения отличается от традиционных пред-



**Рис. 2.** Энерговыделение (линейные потери энергии) по глубине материала для ионов водорода при бомбардировке вольфрама. Числа около кривых — начальная энергия (в keV). а — диапазон энергий 0.1–100 keV, б — диапазон энергий 200–10 000 keV.



**Рис. 3.** *a* — энерговыведение (линейные потери энергии) по глубине материала для различных изотопов водорода при начальной энергии 5 keV, *b* — нормированное на одну падающую частицу распределение энерговыведения по глубине в вольфраме, облучаемом типичным для токамака ИТЭР спектром атомов дейтерия и трития, покидающих плазму [11] (показан на вставке).

ставлений. Максимум энерговыведения наблюдается вблизи поверхности, и с ростом глубины происходит спад энерговыведения. Это связано с тем, что при энергиях до 100 keV сечение тормозных потерь на электронах растет с ростом энергии частицы. При энергиях порядка 100 keV распределение по глубине уплощается, а при дальнейшем росте начальной энергии в распределении энергии по глубине появляется брэгговский пик вблизи точки остановки частиц (рис. 2, *b*). Следует отметить, что контрастность брэгговского пика растет с ростом энергии. При энергии 5 MeV контрастность пика не превышает 2, значительное энерговыведение происходит в приповерхностных слоях, и это должно учитываться в медицинских приложениях.

Результаты расчетов для случая столкновений ионов различных изотопов водорода с вольфрамом представлены на рис. 3, *a* для энергии 5 keV — ожидаемой средней энергии частиц в токамаке ИТЭР. Поведение  $dW(x)/dx$

для изотопов водорода подобно. При малых  $x$  величина  $dW/dx$  больше для водорода, что связано с большим значением электронных тормозных способностей при одинаковой энергии. С этим же связано и то, что проективный пробег водорода при одной и той же начальной энергии меньше, чем для дейтерия и трития.

В плазме токамака ИТЭР при работе на смеси дейтерия и трития вследствие процессов перезарядки и фоторекомбинации будут образовываться атомы, покидающие плазму. Типичный энергетический спектр атомов дейтерия и трития  $dN/dE$ , бомбардирующих первую стенку токамака, был рассчитан в работе [11] (см. вставку на рис. 3, *b*). Для такого энергетического спектра мы рассчитали зависимость энерговыведения от глубины, нормируя результат на одну падающую частицу (рис. 3, *b*). Отражение частиц от стенки было учтено нами при расчете величин  $dW/dx$ . Как и в случае моноэнергетического пучка, максимум энерговыведения 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, что может приводить к накоплению трития в первой стенке токамака-реактора.

Сформулируем основные выводы.

1. Рассчитано распределение энерговыведения по глубине материала при бомбардировке вольфрама протонами в широком диапазоне начальных энергий.

2. Показано резкое различие распределений энерговыведения для разных диапазонов начальных энергий: для энергий менее 100 keV максимальное энерговыведение происходит вблизи поверхности, для энергий свыше 200 keV наблюдается брэгговский пик. Это объясняется различием в энергетической зависимости электронных тормозных способностей: при энергиях ниже 100 keV тормозная способность растет, а при энергиях свыше 100 keV падает с ростом начальной энергии частицы.

3. Рассчитано распределение энерговыведения по глубине для условий, типичных для токамака-реактора ИТЭР, что позволяет оценить нагрев приповерхностных слоев при бомбардировке стенки атомами, покидающими плазму. Предсказывается, что при бомбардировке поверхности атомами дейтерия и трития при ожидаемом одинаковом спектре частиц по энергии атомы трития будут имплантироваться глубже, чем атомы дейтерия, что может вызвать накопление трития в первой стенке токамака-реактора.

4. Контрастность брэгговского максимума при  $E < 10$  MeV невелика, и наличие заметного энерговыведения вне пика должно учитываться в медицинских исследованиях.

### Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ для Федерального государственного бюджетного учреждения

науки Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе  
Российской академии наук.

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] Кленов Г.И., Хорошков В.С. // УФН. 2016. Т. 186. № 8. С. 891–911. DOI: 10.3367/UFNr.2016.06.037823
- [2] Durante M., Paganetti H. // Rep. Prog. Phys. 2016. V. 79. N 9. P. 096502. DOI:10.1088/0034-4885/79/9/096702
- [3] Эжитайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. М.: Мир, 1995. 321 с.
- [4] Paul H. IAEA NDS. <https://www-nds.iaea.org/stopping>
- [5] Ziegler J.F., Biersack J.P. SRIM. <http://www.srim.org>
- [6] Бабенко П.Ю., Зиновьев А.Н., Мелузова Д.С., Шергин А.П. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2018. № 6. С. 7–12. DOI: 10.7868/S0207352818060021
- [7] Babenko P.Yu., Deviatkov A.M., Meluzova D.S., Shergin A.P., Zinoviev A.N. // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2017. V. 406. P. 538–542. DOI: 10.1016/j.nimb.2016.12.043
- [8] Zinoviev A.N., Nordlund K. // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2017. V. 406. P. 511–517. DOI: 10.1016/j.nimb.2017.03.047
- [9] Zinoviev A.N. // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2011. V. 269. N 9. P. 829–833. DOI: 10.1016/j.nimb.2010.11.074
- [10] Anders L.W., Hansen R.S., Bartell L.S. // J. Chem. Phys. 1973. V. 59. N 10. P. 5277–5287. DOI: 10.1063/1.1679870
- [11] Afanasyev V.I., Chernyshev F.V., Kislyakov A.I., Kozlovski S.S., Lyublin B.V., Mironov M.I., Melnik A.D., Nesenevich V.G., Petrov M.P., Petrov S.Ya. // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A. 2010. V. 621. N 1-3. P. 456–467. DOI: 10.1016/j.nima.2010.06.201