

04;13

Ядерные тормозные способности изотопов водорода и гелия в бериллии, углероде и вольфраме

© А.Н. Зиновьев, П.Ю. Бабенко[¶]

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

[¶] E-mail: babenko@npd.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 25 февраля 2020 г.

В окончательной редакции 11 июня 2020 г.

Принято к публикации 11 июня 2020 г.

Рассчитаны ядерные тормозные способности изотопов водорода и гелия в материалах Be, C, W, перспективных для использования в качестве первой стенки токамака реактора. Показано, что присутствие притягивающей ямы в потенциале значительно влияет на зависимость ядерных тормозных способностей от энергии соударения. Использование потенциалов, рассчитанных в приближении функционала плотности с притягивающей ямой, позволило получить более точные значения ядерных тормозных способностей для изотопов водорода, которые при малых энергиях отличаются на 27–60% от табличных данных. Результаты для разных изотопов водорода хорошо описываются универсальной кривой.

Ключевые слова: ядерные тормозные способности, изотопы водорода, гелий, бериллий, углерод, вольфрам, токамак-реактор.

DOI: 10.21883/PJTF.2020.18.49997.18265

Теоретические и экспериментальные работы по исследованию тормозных способностей атомных частиц в веществе в настоящее время ведутся широким фронтом (см., например, работы [1–6]) и входят в число приоритетных сообщений на международных конференциях по взаимодействию ионов с веществом [7–9]. Широкое международное сотрудничество по данной теме поощряется Международным агентством по атомной энергии (IAEA), которое регулярно публикует сборники новейших теоретических и экспериментальных достижений [10].

Для описания торможения частиц в веществе используется подход, развитый в работе [11], который различает потери энергии, связанные с упругим рассеянием налетающей частицы на ядрах атомов мишени (ядерные тормозные способности, ЯТС), и электронные тормозные способности (ЭТС), связанные с возбуждением и ионизацией электронной системы. Для легких частиц при энергиях выше нескольких keV доминируют ЭТС. В пристеночной плазме токамака, где энергии частиц составляют 10–200 eV, доминируют ЯТС. Понимание взаимодействия частиц плазмы с первой стенкой токамака является одной из основных проблем, которые необходимо решить для успешной работы токамака-реактора.

В работе [12] для описания рассеяния частиц был предложен потенциал, получивший название ZBL, который используется в имеющем широкое распространение коде SRIM [13]. Из других известных потенциалов часто используются потенциалы Мольера [14] и Ленца–Йенсена [15]. В работе [16] было показано, что ЯТС, вычисленные с помощью потенциала ZBL, могут значительно отличаться от имевшихся в то время экспериментальных данных. Был предложен потенциал,

получивший название Kг–С [16], лучше описывающий эксперимент.

В [17] были проанализированы данные о потенциалах, полученных из обработки эксперимента по рассеянию частиц, и предложен потенциал, наилучшим образом описывающий эксперимент. В работе [18] проводилось сравнение экспериментальных данных о потенциалах с расчетами, выполненными в приближении функционала плотности (DFT) с использованием пакета программ DMol для выбора базиса используемых волновых функций, и было достигнуто хорошее согласие с экспериментом (далее будем называть эти потенциалы DFT-потенциалами).

Ядерные тормозные способности удобно рассчитывать в системе центра масс (СЦМ), чтобы избежать многозначности зависимости угла рассеяния θ от параметра удара p , которая обычно имеет место при рассеянии на потенциалах с потенциальной ямой. Далее в настоящей работе будем использовать сечение тормозных потерь S_n , которое связано с тормозной способностью dE/dR выражением

$$S_n = \frac{dE}{dR} \frac{1}{N} = \int_0^\infty 2\pi p T[\theta(p)] dp. \quad (1)$$

Здесь N — плотность мишени. Потеря энергии при соударении $T[\theta]$ выражается формулой

$$T[\theta(p)] = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2 \left[\frac{\theta(p)}{2} \right], \quad (2)$$

M_1 и M_2 — массы сталкивающихся частиц, $\theta(p)$ — угол рассеяния в СЦМ,

$$\theta(p) = \pi - 2p \int_{r_0}^\infty \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{U(r)}{E_{\text{СЦМ}}} - \frac{p^2}{r^2}}}. \quad (3)$$

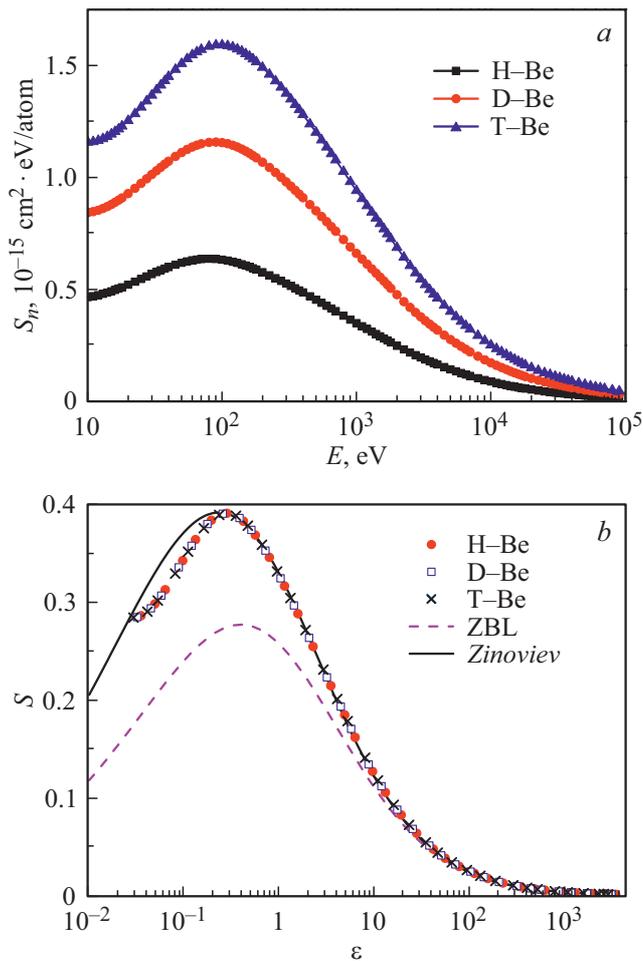


Рис. 1. *a* — рассчитанные ядерные тормозные способности для изотопов водорода в бериллии. *b* — сравнение вычисленных данных об ЯТС при столкновениях изотопов водорода с бериллием в универсальных координатах. Данные хорошо описываются единой кривой. Представлено сравнение с результатами, получаемыми при использовании потенциалов Зиновьева [17] и ZBL [12].

Здесь $U(r)$ — потенциал взаимодействия, $E_{CM} = EM_2/(M_1 + M_2)$ — энергия соударения в СЦМ, r_0 — корень уравнения

$$1 - \frac{U(r_0)}{E_{CM}} - \frac{p^2}{r_0^2} = 0. \quad (4)$$

Для описания рассеяния часто используются различные типы экранированных кулоновских потенциалов, которые могут быть записаны в виде

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right), \quad (5)$$

Z_1 и Z_2 — заряды ядер сталкивающихся частиц, a — длина экранирования. В этом случае можно ввести универсальные координаты $\epsilon = E/\epsilon_0$ и $S = S_n/S_0$ (где $\epsilon_0 = (Z_1 Z_2 e^2/a)(M_1 + M_2)/M_2$, $S_0 = \pi a^2 \epsilon_0 4M_1 M_2 / (M_1 + M_2)^2$), предложенные в [11,16]. Для потенциалов, описываемых

формулой (5), данные для различных систем описываются универсальной кривой.

Выбор длины экранирования a зависит от типа потенциала. Для потенциала ZBL $a_{ZBL} = 0.8853/(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})$. Используются атомные единицы. Для потенциала Kr–C [16] и потенциала, предложенного в работе [17], применяется длина экранирования Фирсова [19] $a_F = 0.8853/(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}$. Для потенциалов Мольера [14] и Ленца–Йенсена [15] используется длина экранирования, предложенная Линдхардом [11]: $a_L = 0.8853/(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3}$.

Как уже упоминалось, потенциалы взаимодействия, рассчитанные в DFT-приближении с использованием пакета программ DMol [18] для получения набора молекулярных волновых функций, дают лучшее согласие с экспериментом, чем ранее использовавшиеся потенциальные модели [12,14–16]. Расчеты потенциала для систем H–Be, H–C, H–W [20], выполненные упомянутым выше методом, показали наличие ямы в потенциале, что приводит к притяжению частиц на больших расстояниях. Отталкивающая часть этого потенциала хорошо согласуется с формулой Зиновьева [17]. Отталкивающая часть потенциала ZBL уменьшается медленнее с увеличением межъядерных расстояний.

Глубину потенциальной ямы U_0 можно также определить по более точным данным об энергии диссоциации молекул. Для систем C–H и Be–H $U_0 = 3.50 \pm 0.03$ и 2.340 ± 0.022 eV [21] соответственно. Положения минимумов в потенциале, рассчитанные методом DFT, совпали с данными спектроскопических измерений [22]. С использованием этих данных полученные значения потенциала для притягивающей части корректировались следующим образом: функциональная зависимость от межъядерного расстояния в области потенциальной ямы остается такой же, как было рассчитано, но масштаб энергии был пропорционально скорректирован для получения экспериментального значения глубины потенциальной ямы U_0 .

Потенциалы взаимодействия для различных изотопов водорода практически совпадают. Различие в массах сталкивающихся частиц влияет только на величину приведенной массы электрона, а кулоновское взаимодействие электрона с ядрами остается тем же самым. Глубина потенциальной ямы U_0 и положение минимума для систем C–H и C–D отличаются в третьем знаке [21,22]. Аналогичная ситуация для систем H–W, D–W, T–W и H–Be, D–Be, T–Be. Рекомендуемые значения потенциалов для рассматриваемых систем опубликованы в работе [20].

Расчеты проводились для диапазона начальных энергий $E = 10\text{--}10^6$ eV. При энергии 10 eV длина волны де Бройля $\lambda = 0.09$ Å. Характерная длина изменения потенциала при этой энергии определяется параметрами потенциальной ямы и составляет 1–1.5 Å для рассматриваемых систем. В получаемую величину S_n вносят основной вклад параметры удара, для которых $\theta > p/\lambda$. Вклад малых углов рассеяния, где это условие

нарушается, составляет менее 2%. При меньших энергиях необходимо квантовое рассмотрение рассеяния, поскольку понятие траектории исчезает.

Расчитанные ядерные тормозные способности для изотопов водорода в Ве представлены на рис. 1, *a*. Различие в тормозных способностях для разных изотопов обусловлено пропорциональностью фактора $T[\theta(p)] \sim M_1 M_2 / (M_1 + M_2)^2$. Как и следовало ожидать, в универсальных координатах кривые для различных изотопов совпадают (см. рис. 1, *b*). На рис. 1, *b* приведено сравнение полученных данных с результатами, получаемыми при использовании потенциала Зиновьева и ZBL. Как видно из рисунка, при малых энергиях $\epsilon < 1$ отличие полученных результатов от табличных данных кода SRIM, где используется потенциал ZBL, достигает 27–60%, т. е. весьма существенно. Согласие с расчетами с использованием потенциала Зиновьева заметно лучше. Наличие притягивающей ямы в потенциале обуславливает отклонение от универсальной кривой при малых ϵ . При $\epsilon > 10$ предсказания различных теоретических моделей совпадают.

На рис. 2 представлено сопоставление полученных данных для систем (H, D, T)–Be, C, W. Данные для разных изотопов совпадают. Данные для потенциала ZBL приведены для системы H–C, где длины экранирования Фирсова и ZBL практически одинаковы. Как видно из рисунка, табличные данные кода SRIM значительно занижают ЯТС. Наличие ямы в потенциале проявляется во всех случаях в виде отклонений от кривой, рассчитанной с использованием потенциала без притягивающей ямы. Смещение положений перегиба кривой при малых значениях ϵ в универсальных координатах связано с фактором ϵ_0 . Для рассматриваемых систем параметр ϵ_0 составляет 284 eV для случая H–Be, 456 eV для случая H–C и 10 334 eV для случая H–W. Отклонение прояв-

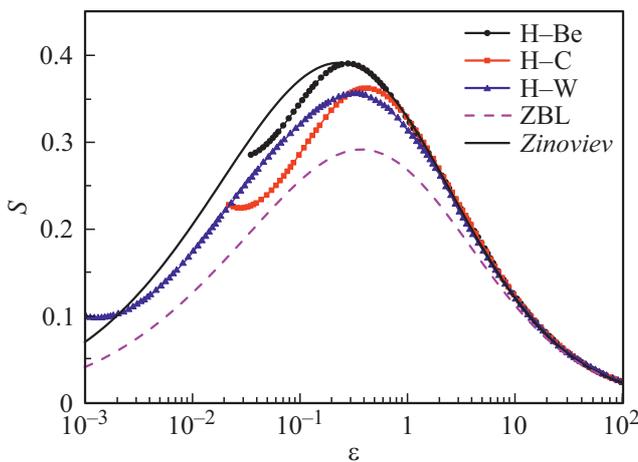


Рис. 2. ЯТС для столкновений изотопов водорода с мишенями из бериллия, углерода и вольфрама. В универсальных координатах данные для различных изотопов совпадают, но зависят от материала мишени. Приведено сопоставление с результатами расчетов при использовании потенциалов Зиновьева [17] и ZBL [12].

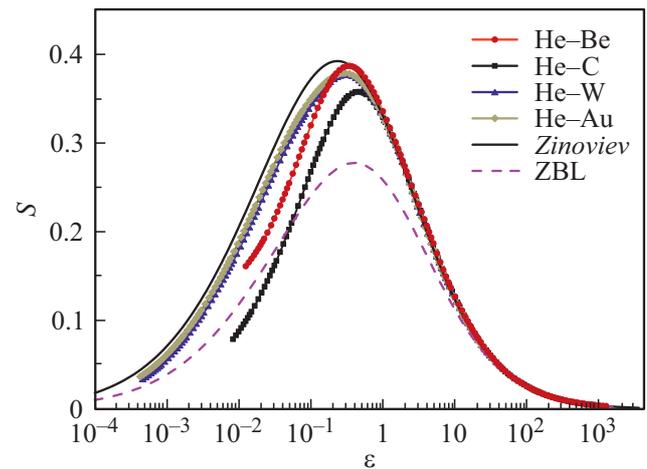


Рис. 3. ЯТС для столкновений атомов гелия с Be, C, W и Au в универсальных координатах. Представлены также расчеты с использованием потенциалов Зиновьева [17] и ZBL [12].

ляется при значениях $\epsilon = U_0 / \epsilon_0 \sim 1$, где U_0 — глубина ямы.

На рис. 3 представлены ядерные тормозные способности для атомов гелия. В этом случае притягивающая яма в потенциале практически отсутствует. Для тяжелых элементов имеется хорошее согласие с результатами расчета с использованием потенциала [17]. Данные, полученные с использованием DFT-потенциала, дают более точный результат. Как и для изотопов водорода, в случае атомов He табличные данные кода SRIM значительно занижают ЯТС при малых энергиях.

Таким образом, рассчитаны ЯТС для изотопов водорода и гелия при соударениях с Be, C, W — материалами, перспективными для использования в качестве первой стенки токамака-реактора.

Использование DFT-потенциалов с коррекцией параметров потенциальной ямы, основанной на данных спектроскопических измерений, позволило получить более точные результаты, которые отличаются на 27–60% от табличных данных. Показано влияние потенциальной ямы на ЯТС при малых энергиях соударения. Данные для различных изотопов водорода хорошо описываются универсальной кривой.

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] *Sigmund P., Schinner A.* // J. Appl. Phys. 2020. V. 127. N 16. P. 164302. DOI: 10.1063/5.0005292.127
- [2] *Montanari C.C., Miraglia J.E.* // Phys. Rev. A. 2017. V. 96. N 1. P. 012707. DOI: 10.1103/PhysRevA.96.012707
- [3] *Paul H., Sanchez-Parcerisa D.* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2013. V. 312. P. 110–117. DOI: 10.1016/j.nimb.2013.07.012
- [4] *Jedrejic D., Greife U.* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2018. V. 428. P. 1–8. DOI: 10.1016/j.nimb.2018.04.039
- [5] *Naqvi S.R., Possnert G., Primetzhofer D.* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2016. V. 371. P. 76–80. DOI: 10.1016/j.nimb.2015.09.048
- [6] *Parfitt W.A., Jackman R.B.* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2020. V. 478. P. 21–23. DOI: 10.1016/j.nimb.2020.05.015
- [7] *Paul H.* // AIP Conf. Proc. 2013. V. 1525. P. 309–313. DOI: 10.1063/1.4802339
- [8] *Montanari C.* Stopping power, experimental trends and open subjects, with focus on the low to intermediate energy region // Abstract book of the 28 Int. Conf. on atomic collisions in solids (ICACS-28). Caen, France, 2018. INV02-119.
- [9] *Sigmund P., Kuzmin V., Schinner A.* Reciprocity analysis of electronic stopping of slow ions // Abstract book of the 28 Int. Conf. on atomic collisions in solids (ICACS-28). Caen, France, 2018. TO1.2-O1-82.
- [10] Improvement of the reliability and accuracy of heavy ion beam analysis. Technical reports series. N 485 / Ed. A. Simon. Vienna: IAEA, 2019. 198 p.
- [11] *Linhard J., Nielsen V., Scharff M.* // Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 1968. V. 36. N 10. P. 1–32.
- [12] *Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U.* The stopping and range of ions in solids. Ser. Stopping and range of ions in matter. V. 1. N.Y.: Pergamon, 1985. 321 p.
- [13] *Ziegler J.F., Biersack J.P.* SRIM [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.srim.org>
- [14] *Moliere G.* // Z. Naturforsch. A. 1947. V. 2. N 3. P. 133–145. DOI: 10.1515/zna-1947-0302
- [15] *Jensen H.Z.* // Z. Phys. 1932. V. 77. N 11–12. P. 722–745. DOI: 10.1007/BF01342151
- [16] *Wilson W.D., Haggmark L.G., Biersack J.P.* // Phys. Rev. B. 1977. V. 15. N 5. P. 2458–2468. DOI: 10.1103/PhysRevB.15.2458
- [17] *Зиновьев А.Н.* // ЖТФ. 2008. Т. 78. В. 1. С. 15–20. [Пер. версия: 10.1134/S1063784208010039].
- [18] *Zinoviev A.N., Nordlund K.* // Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. B. 2017. V. 406. P. 511–517. DOI: 10.1016/j.nimb.2017.03.047
- [19] *Фирсов О.Б.* // ЖЭТФ. 1958. Т. 34. В. 2. С. 447–452.
- [20] *Meluzova D.S., Babenko P.Yu., Shergin A.P., Nordlund K., Zinoviev A.N.* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2019. V. 460. P. 4–9. DOI: 10.1016/j.nimb.2019.03.037
- [21] *Darwent D.* Bond dissociation energies in simple molecules. Catholic University of America, 1970. 60 p. NSRDS-NBS.31.
- [22] *Никольский Б.П.* Справочник химика. Т. 1. Л.: Химия, 1966. 1072 с.