

04;13

Распыление вольфрама ионами бериллия и неона

© Д.С. Мелузова, П.Ю. Бабенко, А.Н. Зиновьев, А.П. Шергин

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

E-mail: dmeluzova@gmail.com

Поступило в Редакцию 29 июля 2020 г.

В окончательной редакции 11 сентября 2020 г.

Принято к публикации 12 сентября 2020 г.

Методом молекулярной динамики рассчитаны коэффициенты распыления и их угловые зависимости при бомбардировке вольфрама ионами Ве и Не. В случае Не имеется хорошее согласие с экспериментом. Полученные данные для случая Ве–W нужны для расчетов поступления примесей при бомбардировке ионами Ве материала дивертора — вольфрама в плазме токамака-реактора ИТЭР. Предложена модель, объясняющая универсальность поведения коэффициентов распыления в припороговой области при бомбардировке вольфрама легкими ионами.

Ключевые слова: распыление, бериллий, вольфрам, ИТЭР.

DOI: 10.21883/PJTF.2020.24.50422.18487

В качестве материала дивертора в токамаке ИТЭР планируется использовать вольфрам, а в качестве материала первой стенки — бериллий. Как показано в работах [1,2], атомы изотопов водорода, покидающие плазму, бомбардируют стенку, что приводит к заметному поступлению Ве в плазму. Концентрация Ве может достигать 2–4% от плотности плазмы. Двигаясь по сепаратрисе, атомы Ве ионизируются до ядер и, ускоряясь потенциалом плазма–стенка до энергий 300–800 eV [1], без заметного поглощения проходят слой диверторной плазмы и вызывают распыление дивертора. Поступление вольфрама в плазму заметно меняет характеристики разряда [3–6]. Если концентрация вольфрама достигнет летального значения 0.1%, всю энергию плазмы будет уносить излучение ионов примеси, и нужная температура не будет достигнута. В настоящее время отсутствуют экспериментальные данные о распылении вольфрама ионами бериллия. В ряде работ рассчитывается распыление вольфрама и различных химических соединений с вольфрамом [7–9] и моделируются потоки бериллия в плазме [2,10]. Получение данных о коэффициентах распыления вольфрама и их угловых зависимостях также является предметом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований [6,11–13]. В задачу настоящей работы входило провести расчеты распыления вольфрама ионами Ве и Не. В случае Не имеются надежные экспериментальные данные, что позволяет проверить правильность расчета.

Был разработан код для расчета распыления мишени из аморфного вольфрама. Расчеты коэффициента проводятся методом Монте-Карло с использованием принципов молекулярной динамики. Для описания взаимодействия между атомами мишени используется многочастичный потенциал, полученный в рамках модели погруженного атома в работе [14], с поправкой, учитывающей взаимодействие на близком расстоянии в соответствии с [15]. Для описания взаимодействия между налетающим атомом и атомами мишени использовался потенциал из

работы [16], рассчитанный в рамках теории функционала плотности. Атомная структура мишени выстроена как идеальное аморфное тело с использованием кода [17]. Расстояние между атомами выбрано так, чтобы плотность моделируемой мишени соответствовала реальной плотности вольфрама. Мишень представляет собой полусферу, состоящую из $\sim 0.5 \cdot 10^6$ атомов. Бомбардировке подвергается ее плоская часть, а на оставшуюся поверхность наложены жесткие граничные условия. В изучаемом энергетическом диапазоне (до 1 keV) атомы мишени не приобретают достаточную энергию для образования каскадов движущихся атомов, поэтому распыление проходит преимущественно в режиме прямого выбивания, что позволяет учитывать подвижность только малой доли атомов мишени.

Как уже упоминалось, для случая бомбардировки вольфрама неоном есть экспериментальные данные [18] (приведены на рис. 1, *a*).

Треугольниками на рисунке показаны результаты нашего расчета методом молекулярной динамики (MD). Видно хорошее согласие с экспериментальными данными. Также приведен расчет с помощью предложенной нами модели обратного распыления (back scattering sputtering, BSS), речь о которой пойдет далее. Расчет по формуле Ямамуры [19,20] дает заниженные значения коэффициента распыления и порога распыления. Программа ACAT [21] занижает порог распыления и завышает величину коэффициента распыления в области малых энергий. Программа SRIM [22] завышает величину порога распыления.

Точные данные о распылении вольфрама атомами бериллия представляют большой интерес для термоядерных исследований, но экспериментальные данные о коэффициентах распыления в литературе отсутствуют. Рассчитанные нами для комбинации Ве–W коэффициенты распыления в зависимости от энергии налетающих частиц представлены на рис. 1, *b*. Имеется хорошее согласие наших данных с расчетами методом молеку-

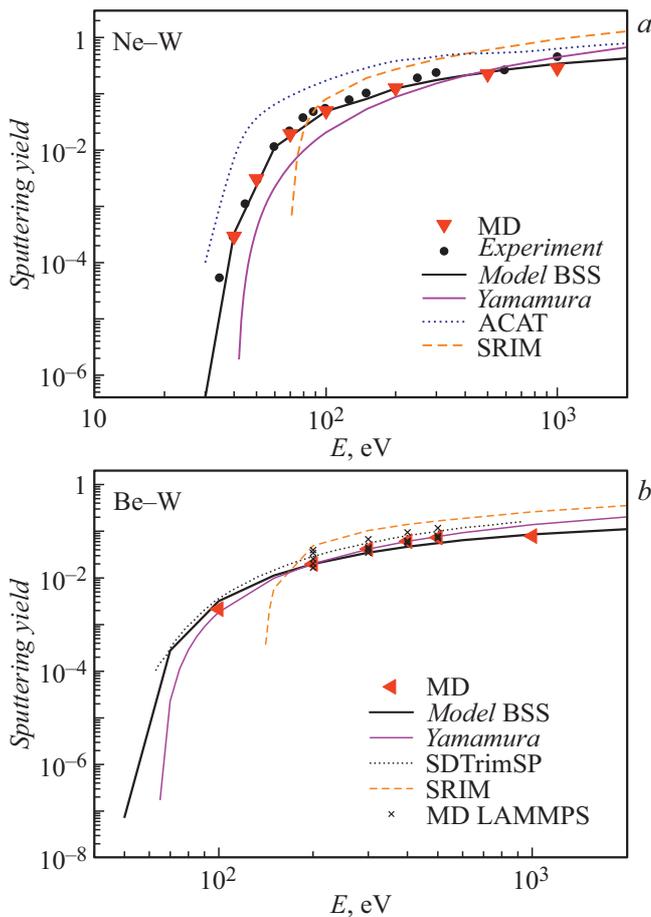


Рис. 1. Зависимости коэффициента распыления вольфрама от энергии бомбардирующих ионов неона (a) и бериллия (b).

лярной динамики программой LAMMPS из работы [23]. Также приведен расчет с использованием программы SDTrimSP из работы [6].

Для системы Ne–W нами также была рассчитана зависимость коэффициента распыления от угла падения при бомбардировке ионами с начальной энергией 200 eV и 1 keV. Результат представлен на рис. 2, a. Имеется хорошее согласие с расчетами Экштайна [24] с использованием программы TrimSP. Аналогичные зависимости получены также для бомбардировки вольфрама бериллием (рис. 2, b). В этом случае в литературе данные для сравнения отсутствуют. Зависимость для обеих исследованных систем имеет пик, который приходится на величину угла в интервале $60\text{--}80^\circ$ от нормали, что находится в согласии с теоретическими представлениями о характере данной зависимости [19,20].

Для анализа данных о распылении вольфрама легкими атомами можно предложить модель выбивания поверхностных атомов потоком обратно рассеянных частиц (BSS). Рассмотрим рассеяние частицы массой M_1 на частице верхнего слоя твердого тела с массой M_2 . Введем систему координат, направив ось x по направлению проекции скорости налетающей частицы на поверхность твердого тела, а ось z — перпендикулярно ему. Пучок

частиц облучает площадку на поверхности с размерами $d \times d$, где d — среднее расстояние между атомами поверхности, для случая $W d = 2.48 \text{ \AA}$. Введем вектор \mathbf{R} , соединяющий точку вылета частицы из предпоследнего слоя (координаты $(0,0,0)$) и положение облучаемого атома вольфрама (x_1, y_1, d) . Координата x_1 меняется в пределах $(d \sin \theta - d/2, d \sin \theta + d/2)$, а координата y_1 — в пределах $(-d/2, d/2)$.

Вектор скорости \mathbf{v} имеет компоненты $(v \sin \theta, 0, v \cos \theta)$. Используя векторное произведение, получаем положение вектора $\mathbf{N} = [\mathbf{V} \times \mathbf{R}]$, перпендикулярного плоскости рассеяния. Величина вектора $N = vR \sin \alpha$, где v и R — модули соответствующих векторов, а α — угол между векторами. Значение прицельного параметра ρ можно определить исходя из соотношения $\rho = R \sin \alpha = N/v$. С помощью известных формул классической механики можно рассчитать значение угла рассеяния χ в системе центра масс, соответствующее рассеянию при параметре удара ρ . Как известно, покоящаяся до столкновения частица с массой M_2 вылетает под углом $\theta_2 = (\pi/2 - \chi/2)$ в плоскости рассеяния. Введем нормализованные векторы $\mathbf{e}_1 = (1/v)\mathbf{V}$,

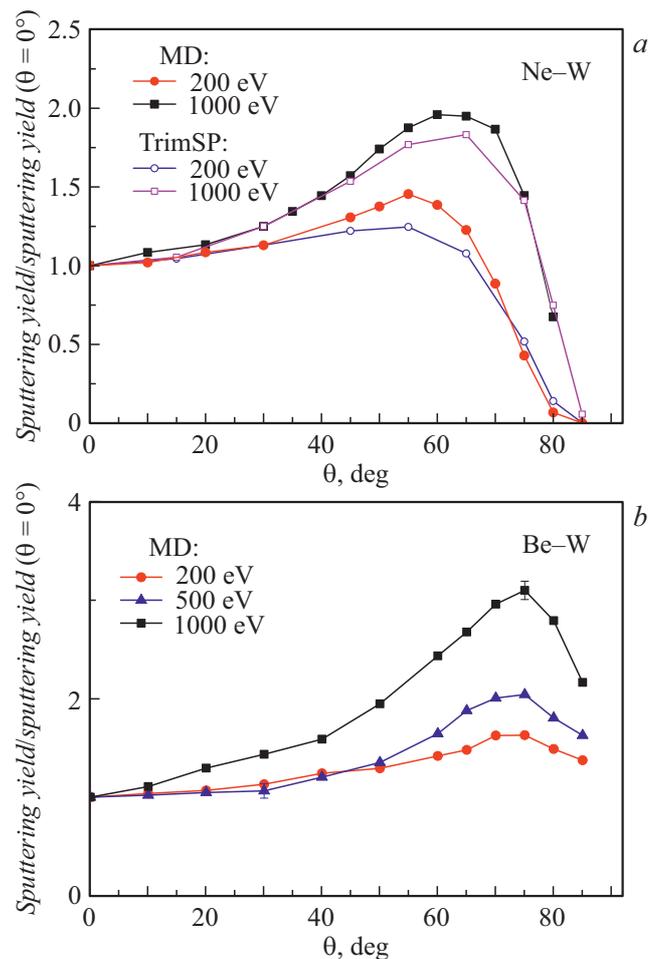


Рис. 2. Зависимости коэффициента распыления вольфрама ионами неона (a) и бериллия (b) от угла падения пучка. Угол отсчитывается от нормали к поверхности.

$\mathbf{e}_2 = 1/(\rho v)\mathbf{N}$ и вектор $\mathbf{e}_3 = [\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2]$. Частица отдачи после рассеяния имеет компоненту скорости $v_2 \cos \theta_2$ вдоль вектора \mathbf{e}_1 и компоненту $v_2 \sin \theta_2$ вдоль вектора \mathbf{e}_3 . Таким образом, компонента скорости частицы отдачи вдоль оси z может быть вычислена по формуле $v_{2z} = v_2 \cos \theta_2 e_{1z} + v_2 \sin \theta_2 e_{3z}$.

Используя соотношения $\theta_2 = (\pi/2 - \chi/2)$, $e_{1z} = \cos \theta$, получаем

$$v_{2z} = v_2 \sin(\chi/2) \cos \theta + \cos(\chi/2) \sin \theta e_{2y}.$$

Величина v_2 связана со скоростью соударения v соотношением $v_2 = 2M_1 v / (M_1 + M_2) \sin(\chi/2)$. При лобовом ударе частица массой M_1 передает частице массой M_2 энергию, равную

$$E_{th} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2\left(\frac{\chi}{2}\right) > E_s, \quad (1)$$

где χ — угол рассеяния в системе центра масс, E_s — энергия сублимации. При $\chi = \chi_{th}$ имеем $E_{th} = E_s$. Для распыления материала компонента энергии, переданная атому вольфрама вдоль оси z , должна превышать энергию сублимации E_s , равную 8.45 eV для вольфрама. Как видно из этой формулы, при лобовом соударении легкая частица передает атому вольфрама малую часть своей энергии, и пороговая энергия составляет для случая Ne–W $E_{th} = 24$ eV, для случая Be–W $E_{th} = 48$ eV. Таким образом, рассчитав энергетическое и угловое распределение обратно рассеявшихся первичных частиц и сканируя пучком по площадке, упомянутой ранее, можно отобрать число случаев, когда соударение передает атому материала вдоль оси z энергию, превышающую энергию сублимации. Нормируя число распыленных атомов на число первоначально падающих частиц, получаем коэффициент распыления.

Частицы с энергией меньше порога не вносят вклад в распыление. Средняя энергия обратно рассеянных частиц, вносящих вклад в распыление, составляет примерно 50–60% от начальной энергии бомбардирующих частиц, что приводит к соответствующему сдвигу порога распыления.

Поскольку в распыление может вносить вклад несколько поверхностных слоев вольфрама, следует учесть фактор R_p/d_l , где R_p — проективный пробег, а d_l — среднее расстояние между слоями вольфрама. На рис. 1 приведено сопоставление значения коэффициента распыления, рассчитанного по указанной модели, с экспериментом и расчетом методом МД. Имеется неплохое согласие. Преимущество данной модели — возможность оценки коэффициента распыления без трудоемких расчетов. Модель неприменима при распылении материала ионами с массой, сравнимой с массой атомов мишени, когда существенна роль каскадных процессов, и распылении под малыми углами, когда нужно учитывать взаимодействие налетающей частицы с совокупностью атомов мишени.

На рис. 3 представлены зависимости коэффициентов распыления вольфрама ионами D, He, Be, Ne. Для Be

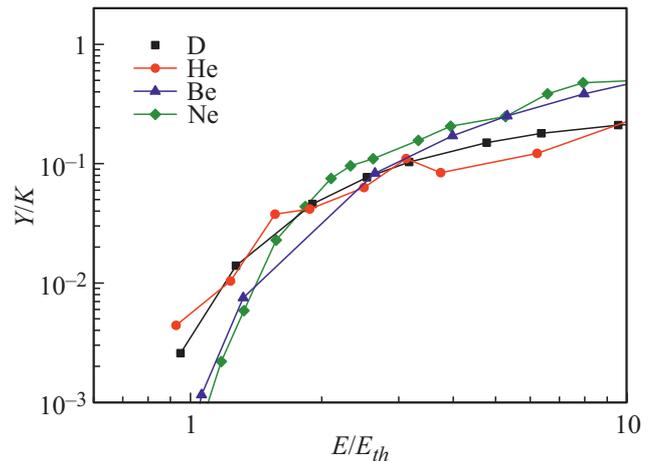


Рис. 3. Зависимость коэффициента распыления вольфрама различными ионами в приведенных координатах.

использованы расчетные данные (МД), в остальных случаях — экспериментальные. Шкала энергий нормирована на величины пороговой энергии. Для нормирования по абсолютной шкале использован коэффициент $K = \sigma(\chi_{th})/d_l^2$ при $E/E_{th} = 4$. Здесь $\sigma(\chi_{th})$ — сечение рассеяния на угол, больший χ_{th} . Коэффициент K можно трактовать как вероятность выбивания атома вольфрама потоком обратно рассеянных частиц.

Как видно из рис. 3, предложенная модель неплохо описывает поведение коэффициентов распыления в пороговой области. Обращает на себя внимание то, что кривые для ионов близких масс практически совпадают. Имеется возможность экстраполяции данных на неизученные случаи.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования 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] Babenko P.Yu., Mironov M.I., Mikhailov V.S., Zinoviev A.N. // Plasma Phys. Control. Fusion. 2020. V. 62. P. 045020. DOI: 10.1088/1361-6587/ab7943
- [2] Makarov S., Kaveeva E. // ECE-2018. MATEC Web Conf. 2018. V. 245. P. 13002. DOI: 10.1051/mateconf/201824513002
- [3] Köchl F., Loarte A., de la Luna E., Parail V., Corrigan G., Harting D., Nunes I., Reux C., Rimini F.G., Polevoi A., Romanelli M. and JET Contributors // Plasma Phys. Control. Fusion. 2018. V. 60. P. 074008. DOI: 10.1088/1361-6587/aabf52

- [4] *Abrams T., Unterberg E.A., Rudakov D.L., Leonard A.W., Schmitz O., Shiraki D., Baylor L.R., Stangeby P.C., Thomas D.M., Wang H.Q.* // *Phys. Plasmas*. 2019. V. 26. P. 062504. DOI: 10.1063/1.5089895
- [5] *Bobkov V.I., Bilato R., Braun F., Dux R., Herrmann A., Kallenbach A., Neu R., Noterdaeme J.M., Pütterich Th., and ASDEX Upgrade Team* // *AIP Conf. Proc.* 2007. V. 933. P. 83–88. DOI: 10.1063/1.2800554
- [6] *Brezinsek S.* // *J. Nucl. Mater.* 2015. V. 463. P. 11–21. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2014.12.007
- [7] *Keima A., Harnisch M., Scheier P., Herman Z.* // *Int. J. Mass Spectrom.* 2013. V. 354–355. P. 78–86. DOI: 10.1016/j.ijms.2013.06.002
- [8] *Harnisch M., Keima A., Scheier P., Herman Z.* // *Int. J. Mass Spectrom.* 2014. V. 365–366. P. 316–323. DOI: 10.1016/j.ijms.2014.02.013
- [9] *Träskelin P., Juslin N., Erhart P., Nordlund K.* // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 75. P. 174113. DOI: 10.1103/PhysRevB.75.174113
- [10] *Kukushkin A.S., Pacher H.D., Kotov V., Pacher G.W., Reiter D.* // *Fusion Eng. Design.* 2011. V. 86. P. 2865–2873. DOI: 10.1016/j.fusengdes.2011.06.009
- [11] *Doerner R.P.* // *J. Vac. Sci. Technol. A.* 2005. V. 23. P. 1545–1547. DOI: 10.1116/1.2110385
- [12] *Nogami K., Sakai Y., Mineta S., Kato D., Murakami I., Sakaue H.A., Kenmotsu T., Furuya K., Motohashi K.* // *J. Vac. Sci. Technol. A.* 2015. V. 33. P. 061602. DOI: 10.1116/1.4928250
- [13] *Hua X., He H., Ding W., Ding R., Chen J., Pan B.* // *Chin. J. Chem. Phys.* 2017. V. 30. P. 77–82. DOI: 10.1063/1674-0068/30/cjcp1607138
- [14] *Marinica M.-C., Ventelon L., Gilbert M.R., Proville L., Dudarev S.L., Marian J., Bencteux G., Willaime F.* // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2013. V. 25. P. 395502. DOI: 10.1088/0953-8984/25/39/395502
- [15] *Sand A.E., Dequeker J., Becquart C.S., Domain C., Nordlund K.* // *J. Nucl. Mater.* 2016. V. 470. P. 119–127. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2015.12.012
- [16] *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
- [17] <https://users.cecs.anu.edu.au/~u9300839/>
- [18] *Behrisch R., Eckstein W.* *Sputtering by particle bombardment.* Berlin: Springer, 2007. 526 p.
- [19] *Yamamura Y., Tawara H.* // *Atom. Data Nucl. Data Tabl.* 1996. V. 62. P. 149–253. DOI: 10.1006/adnd.1996.0005
- [20] *Yamamura Y., Itikawa Y., Itoh N.* *Angular dependence of sputtering yields of monatomic solids.* Report IPPJ-AM-26. Nagoya, 1983.
- [21] *Nakamura H., Saito S., Ito A.M.* // *J. Adv. Simulat. Sci. Eng.* 2016. V. 3. P. 165–172. DOI: 10.15748/jasse.3.165
- [22] *Ziegler J.F., Biersack J.P.* *SRIM* [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.srim.org>
- [23] *Yang X., Hassanein A.* // *Appl. Surf. Sci.* 2014. V. 293. P. 187–190. DOI: 10.1016/j.apsusc.2013.12.129
- [24] *Eckstein W.* *Sputtering, reflection and range values for plasma edge codes.* IPP report 9/117. Garching, 1998.