

02

## Коэффициенты отражения частиц при бомбардировке бериллия и вольфрама различными атомами

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

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
194021 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: chiro@bk.ru

Поступило в Редакцию 27 июля 2023 г.

В окончательной редакции 6 сентября 2023 г.

Принято к публикации 17 сентября 2023 г.

С помощью компьютерного моделирования рассчитаны коэффициенты отражения частиц для мишеней из Ве и W в диапазоне энергий падающих атомов 10 eV–100 keV. В качестве налетающих частиц были выбраны атомы H, D, T, He, Be, C, N, O, Ne, Ar, W. Показано влияние на величины коэффициентов отражения выбора модели электронных тормозных потерь, поверхностного потенциального барьера и структуры мишени (кристалл, аморфное тело).

**Ключевые слова:** коэффициенты отражения, атомные частицы, бериллий, вольфрам, токамак ИТЭР.

DOI: 10.61011/JTF.2023.11.56484.192-23

### Введение

На токамаке ИТЭР планируется работа с дейтериево-третиевой плазмой. Как известно, в качестве материала дивертора в токамаке-реакторе ИТЭР выбран вольфрам. Бериллий считается перспективным материалом для первой стенки реактора. Исходя из этого, в настоящей работе исследовалось отражение частиц от бериллия и вольфрама. Отражение атомов от конструкционных материалов влияет на энергетический и материальный баланс плазмы. Отражение частиц также должно учитываться при ионной имплантации, так как влияет на количество имплантированных атомов.

Экспериментальные данные по коэффициентам отражения для Ве и W крайне ограничены [1,2].

К сожалению, нам неизвестна теоретическая формула для описания зависимости коэффициента отражения от энергии бомбардирующих частиц. В книге [3] отдельная глава посвящена обсуждению возможных теоретических подходов описания рассеяния частиц на поверхности. Для описания рассеяния легких атомов в тяжелых мишенях в работах [4–7] предложен ряд эмпирических формул. В работе [8] делается попытка описания коэффициентов отражения через соотношение длины пробега и транспортного сечения. Аналогичная попытка предпринята в недавней работе [9].

Компьютерное моделирование широко используется для изучения рассеяния атомных частиц на поверхности материалов [3,10]. Часто используемый код SRIM [11] основан на приближении парных столкновений (далее именуемом BCA — Binary Collision Approximation), которое было предложено в [12]. Из других работ следует отметить расчеты коэффициентов отражения с использованием методов молекулярной динамики [13,14] и работу [15], где исследовалось влияние формы поверх-

ности на коэффициенты отражения. В нашей работе [16] многократное рассеяние атомов водорода на поверхности металла использовалось для получения сведений о потенциале взаимодействия атом-поверхность.

Наличие ямы в потенциале приводит к притяжению частиц на больших межъядерных расстояниях и влияет на коэффициенты отражения. В наших работах [17–20] рассчитывались коэффициенты отражения изотопов водорода и гелия в диапазоне энергий 100 eV–10 keV. Атомы гелия являются продуктами термоядерной реакции, поэтому были рассчитаны коэффициенты рассеяния атомов гелия на тех же мишенях. В настоящей работе диапазон энергий налетающих частиц был расширен до 10 eV–100 keV. В расчетах использовались потенциалы, полученные в приближении функционала плотности (DFT) с коррекцией параметров потенциальной ямы на спектроскопические данные [21]. В задачу настоящей работы входило рассчитать коэффициенты отражения для изотопов водорода, а также получить данные для атомов He и различных атомов примесей, напуск которых может использоваться для охлаждения пристеночной плазмы.

### 1. Методика расчета

Расчеты были проведены с помощью разработанного нами кода [22], основанного на методе Монте-Карло. Для набора требуемой статистики обычно рассчитывался 1 миллион траекторий налетающих частиц со случайно выбранными начальными условиями с равномерным распределением по поверхности мишени. Траектория налетающей частицы в твердом теле рассматривается в приближении парных столкновений (BCA). В этом приближении рассеяние атомных частиц рассматривается как последовательность парных соударений с атомами

твёрдого тела. При этом траектория движения частицы заменяется асимптотами траектории. Критерии применимости приближения ВСА рассмотрены в монографии [10]. Наличие ближнего порядка при моделировании рассеяния на поликристаллической мишени учитывается следующим образом. Задаётся кластер атомов, случайно ориентированный в пространстве. Расстояние между атомами определяется из плотности мишени. При последующем соударении ориентация кластера в пространстве разыгрывается заново. Поверхность определяется как случайный срез первоначального кластера. Учитываются тепловые колебания атомов мишени. Вычисления проводились для комнатной температуры.

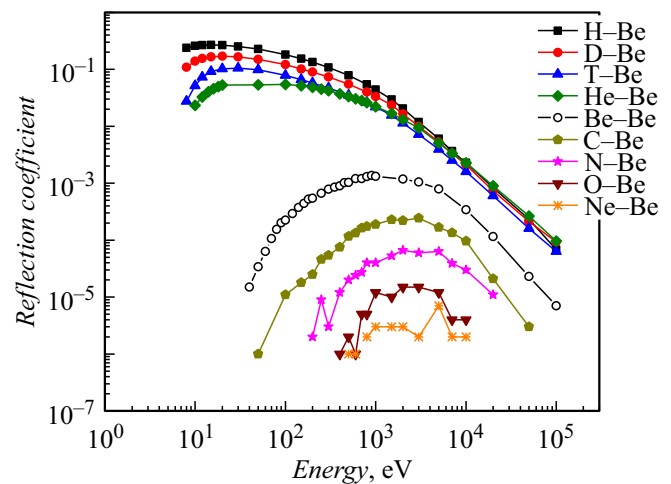
Траектории частиц отдачи вычислялись с использованием многочастичных потенциалов, полученных с использованием теории функционала плотности [23–27] с коррекцией глубины потенциальной ямы [28]. Коррекция проводилась с учетом экспериментальных данных о глубине ямы и положения минимума потенциальной энергии, полученных из спектроскопических измерений [29–32].

Для описания электронных тормозных потерь мы использовали надежные экспериментальные данные для алюминия [33] с применением масштабирования на различие в электронной плотности материала мишени бериллия или вольфрама и алюминия с использованием методики, предложенной в работе [34]. В данные вводилась поправка, связанная с многократностью соударений [35]. Величина потери энергии рассчитывалась как произведение длины траектории между последовательными столкновениями на параметр „потеря энергии на электронное торможение на единицу длины траектории“.

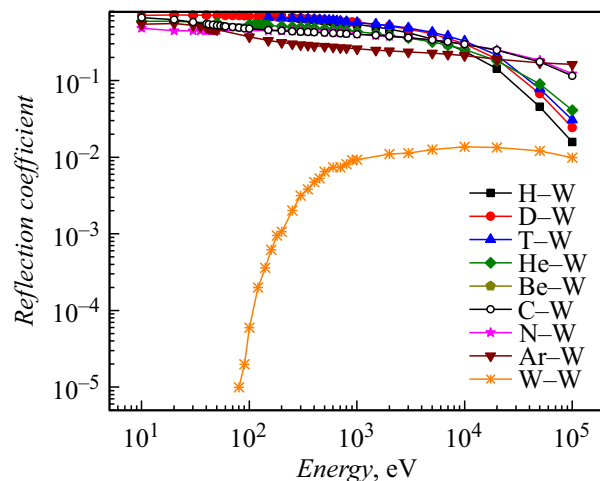
Отличие наших расчетов от более ранних состоит в следующем: используются более точные потенциалы взаимодействия, при рассеянии на большие углы вычисление угла рассеяния ведется точно без использования приближенных („магических“) формул, применяемых в программе SRIM. Учитывается влияние поверхностного потенциального барьера. В данные об электронных тормозных способностях вносится поправка на многократность соударений [35].

## 2. Результаты моделирования коэффициентов отражения

На рис. 1 представлены коэффициенты отражения H, D, T, He, Be, C, N, O, Ne при рассеянии на мишени из бериллия при энергиях налетающих частиц 10 eV–100 keV. Обращает на себя внимание группировка данных для систем с  $M_1 < M_2$  и  $M_1 > M_2$ , где  $M_1$  — масса налетающей частицы,  $M_2$  — масса атома мишени. Это не удивительно, так как в случае  $M_1 > M_2$  однократное рассеяние на углы, большие  $90^\circ$ , не происходит, и вклад в коэффициент отражения вносит только мно-



**Рис. 1.** Рассчитанные коэффициенты отражения частиц для мишени из бериллия в зависимости от энергии для налетающих атомов H, D, T, He, Be, C, N, O, Ne. Для системы Be–Be приведен расчет для плоскостного потенциального барьера.

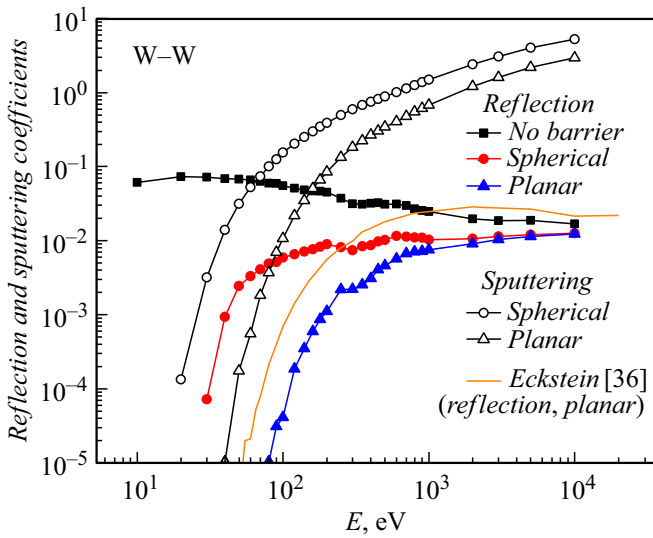


**Рис. 2.** Рассчитанные коэффициенты отражения частиц для мишени из вольфрама в зависимости от энергии для налетающих атомов H, D, T, He, Be, C, N, Ar, W. Данные для системы W–W приведены для плоскостного потенциального барьера.

гократное рассеяние. Имеет место также уменьшение коэффициента отражения с ростом  $M_1$ .

На рис. 2 представлены коэффициенты отражения атомов H, D, T, He, Be, C, N, Ar, W от поверхности вольфрама. В данном случае только для столкновений W–W не выполняется условие  $M_1 < M_2$ . Как видно из рис. 2, коэффициент отражения для случая W–W резко падает из-за запрета однократного рассеяния на углы, большие  $90^\circ$ .

Расчет для случая соударения одинаковых частиц нуждается в пояснении. При компьютерном моделировании можно маркировать налетающую частицу и отследить ее вылет из поверхности. В эксперименте отличить распыленную частицу от отраженной невоз-

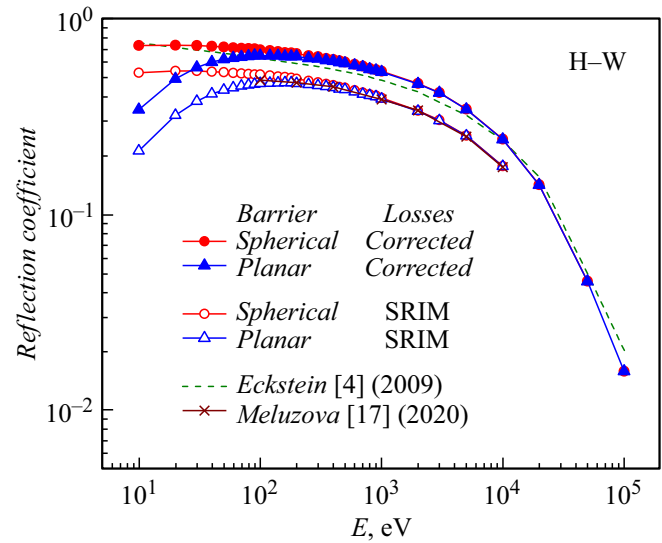


**Рис. 3.** Система W–W. Сопоставление коэффициентов отражения и распыления для сферического и плоскостного поверхностных барьеров, а также для случая отсутствия барьера (отражение). Линией показан расчет коэффициента отражения из работы [36] для случая плоскостного барьера.

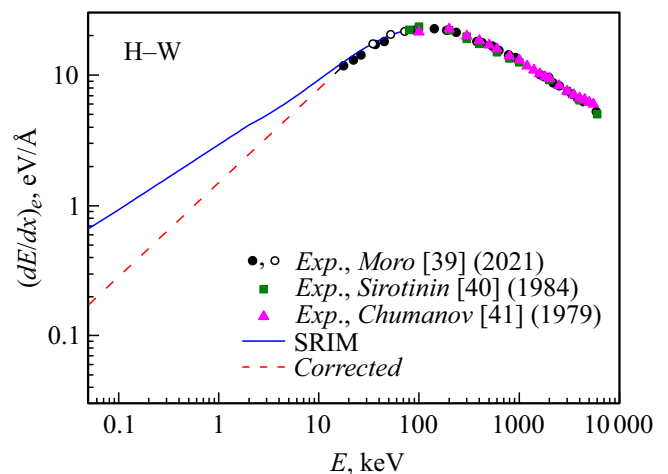
можно. Для симметричных систем ( $M_1 = M_2$ ) однократное соударение не приводит к вылету частицы из мишени. Энергетический спектр отраженных частиц характеризуется большим количеством частиц с малой энергией. Для системы W–W имеется яма в потенциале, что приводит к возникновению потенциального барьера у поверхности. При наличии потенциального барьера следует учитывать ускорение налетающей частицы потенциальным барьером при вхождении в твердое тело и наличие поверхностного барьера при ее вылете. В случае сферического барьера для поверхности, состоящей из острий, энергия налетающей частицы  $E_0$  должна превышать энергию сублимации  $E_s$ . В случае плоскостного барьера для гладкой поверхности должно выполняться условие  $E_0 \cdot \cos^2 \theta > E_s$ , где  $\theta$  — угол вылета частицы относительно нормали к поверхности. Как видно из рис. 3, наличие поверхностных барьеров существенно меняет поведение коэффициентов отражения при малых энергиях и приводит к наличию порогов. Коэффициенты распыления примерно в 100 раз превышают коэффициенты отражения. Пороги для этих двух процессов практически совпадают (при нормировке кривых). Полученные нами данные для отражения в случае плоскостного поверхностного барьера удовлетворительно согласуются с результатами расчетов Экштайна [36].

В случае столкновений H–W также имеется яма в потенциале глубиной 4.6 eV, и ускорение частиц при входе в мишень и замедление при вылете проводилось путем замены энергии сублимации на величину глубины потенциальной ямы.

Как видно из рис. 4, учет наличия поверхностных барьеров заметно меняет ход кривых при малых энергиях соударения. Расчет Экштайна совпадает с нашим расчетом для случая отсутствия поверхностного барьера и при использовании модифицированной модели неупругих потерь энергии. Данные из работы [17] лежат ниже на 30%. Как оказалось, это связано с использованием разных моделей учета электронных тормозных потерь. Мы повторили расчет с использованием данных из базы SRIM, который совпал с данными Мелузовой из работы [17]. В нашей работе [35] было показано, что в базе SRIM представлены данные



**Рис. 4.** Коэффициенты отражения для системы H–W. Приведен расчет для двух моделей электронных тормозных потерь: пакета SRIM и зависимости, скорректированной с учетом многократности соударений [35], для сферического и плоскостного барьеров. Для сравнения показаны расчеты Экштайна [4] и Мелузовой [17].



**Рис. 5.** Зависимость электронных тормозных потерь от энергии соударения для системы H–W. Точки — данные экспериментальных работ [38-40]. Сплошная линия — данные из пакета SRIM. Штриховая линия — модифицированные данные.

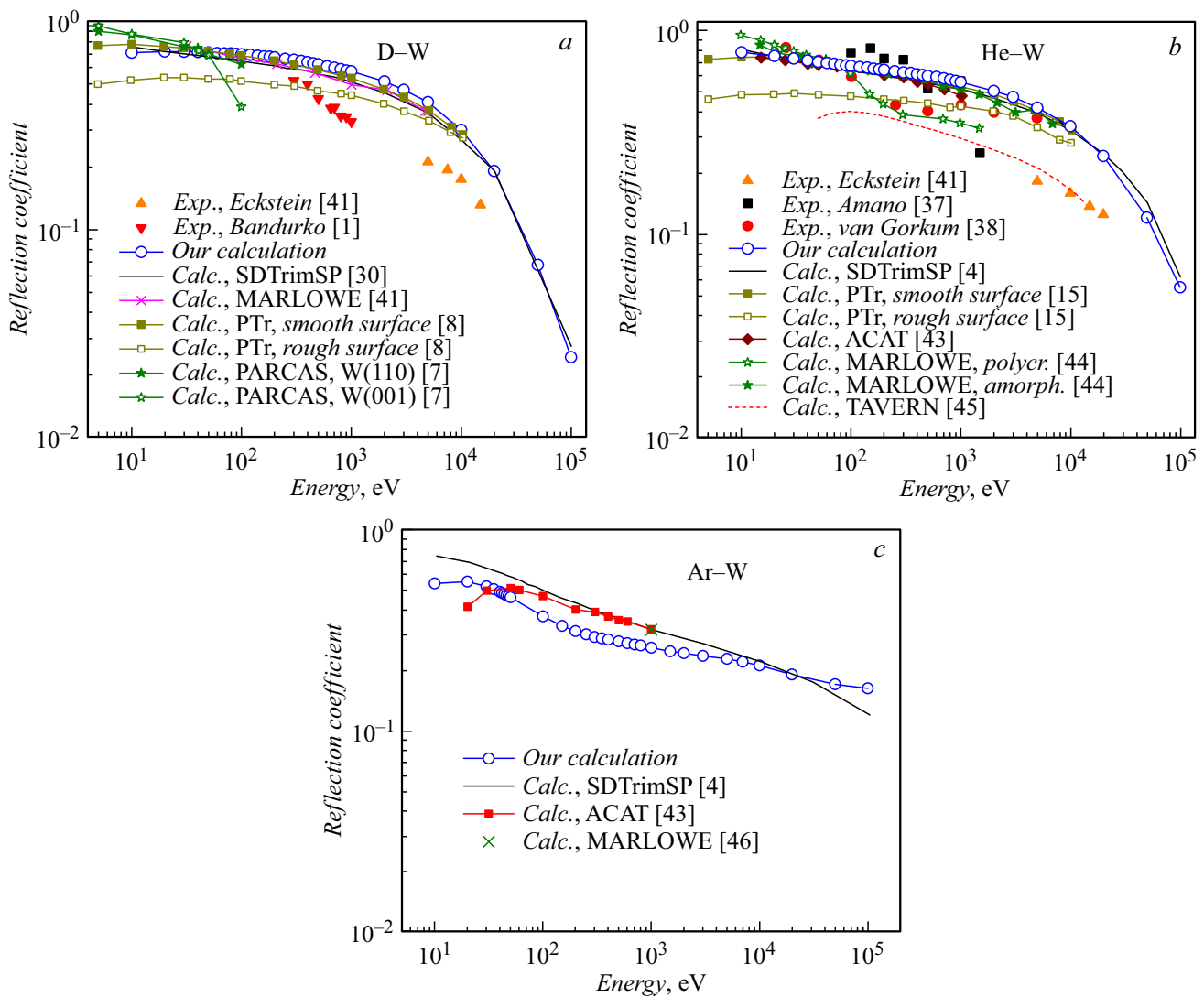


Рис. 6. Коэффициенты отражения для систем D–W (a), He–W (b) и Ar–W (c).

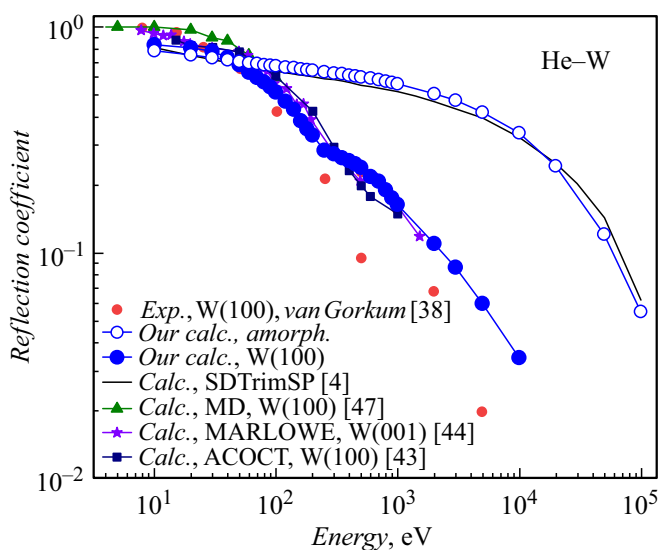
для тормозной способности на единицу длины проективного пробега. При энергиях соударения менее 10 keV в эти данные необходимо вносить поправку, связанную с искривлением траектории вследствие многократности соударений. Данные об электронных тормозных способностях для этих моделей представлены на рис. 5.

Модифицированные данные для энергии менее 17 keV хорошо описываются зависимостью  $dE/dx = 1.488 \cdot E^{0.722}$ , при этом  $dE/dx$  выражены в единицах eV/Å, а  $E$  — в keV. Как видно из рис. 4, изменение электронных тормозных способностей заметно влияет на величину коэффициента отражения частиц.

Как видно из рис. 6, a, наш расчет для системы D–W лежит выше экспериментальных данных и практически совпадает с расчетами кодами SDTrimSP, MARLOWE и PTr (для гладкой мишени). Также наши данные неплохо согласуются с расчетами программой PARCAS

(расчет методом молекулярной динамики). Из рис. 6, b следует, что наш расчет для системы He–W лежит между экспериментальными данными Экштайна и Аmano и ниже расчетов программы SDTrimSP, ACAT, MARLOWE (аморфная мишень) и PTr (для гладкой поверхности). Расчет программой TAVERN лежит ниже наших данных. Для системы Ar–W наш расчет лежит ниже данных, полученных с помощью кодов SDTrimSP, ACAT и MARLOWE.

Как показывает рис. 7, данные для кристаллической и аморфной мишеней различаются. В случае кристаллической мишени вследствие эффекта каналирования налетающие частицы проходят глубже в мишень, и их выход из мишени затруднен, что является причиной резкого падения коэффициента отражения. Для кристаллической мишени имеется удовлетворительное согласие с экспериментом [38]. Данные расчетов различными программами совпадают.



**Рис. 7.** Система He–W. Коэффициенты отражения для кристаллической и аморфной мишени. Программа ACOCT представляет собой версию ACAT для кристаллических мишеней.

## Заключение

Рассчитаны коэффициенты отражения при бомбардировке мишеней из Be и W атомами H, D, T, He, Be, C, N, O, Ne, Ar, W в широком диапазоне энергий налетающих атомов 10 eV–100 keV. В случае  $M_2 > M_1$  коэффициенты отражения резко падают, что связано с отсутствием вклада однократного рассеяния. Показано, что учет поверхностного потенциального барьера сильно влияет на коэффициенты отражения частиц. Особенно сильно это сказывается в случае  $M_2 > M_1$ . При энергиях частиц 0.5–1 keV различие становится менее заметным.

Учет современных представлений об электронных тормозных потерях также заметно влияет на результаты моделирования. На примере системы H–W показано, что коррекция электронных тормозных потерь на многократность соударений приводит к изменению коэффициента отражения в 1.5 раза во всем диапазоне рассматриваемых энергий.

Общезвестно, что на результаты расчетов также значительно влияет структура мишени (кристалл, аморфное тело). Это различие продемонстрировано на примере системы He–W.

В случае, когда имеются экспериментальные данные, представленные расчеты удовлетворительно согласуются с экспериментом и другими расчетами. Отличие представленных расчетов от более ранних состоит в следующем: используются более точные потенциалы взаимодействия, при рассеянии на большие углы вычисление угла рассеяния ведется точно без использования приближенных („магических“) формул. Учитывается влияние поверхностного потенциального барьера. В данные об электронных тормозных способностях вносится поправка на многократность соударений.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] V.V. Bandurko, N.N. Koborov, V.A. Kurnaev, V.M. Sotnikov, O.V. Zabeyda. *J. Nucl. Mater.*, **176–177**, 630 (1990). DOI: 10.1016/0022-3115(90)90118-7
- [2] R.D. Kolasinski, N.C. Bartelt, J.A. Whaley, T.E. Felter, W.R. Wampler. *Fundamental hydrogen Interactions with Beryllium: a Magnetic Fusion Perspective*. SNL Report № SAND2012-2323 (Sandia National Laboratories, Albuquerque, 2012)
- [3] В.А. Курнаев, Е.С. Машкова, В.А. Молчанов. *Отражение легких ионов от поверхности твердого тела* (Энергоатомиздат, М., 1985)
- [4] W. Eckstein. *Reflection (Backscattering)*. IPP-17-12 (IPP, Garching, 2009)
- [5] R.A. Langley, J. Bohdansky, W. Eckstein, P. Mioduszewski, J. Roth, E. Taglauer, E.W. Thomas, H. Verbeek, K.L. Wilson. *Nucl. Fusion*, **24**, S9 (1984). DOI: 10.1088/0029-5515/24/S1/001
- [6] T. Tabata, R. Ito, Y. Itikawa, N. Itoh, K. Morita. *Atomic Data and Nucl. Data Tables*, **28** (3), 493 (1983). DOI: 10.1016/0092-640X(83)90004-9
- [7] E.W. Thomas, R.K. Janev, J. Smith. *J. Nucl. Mater.*, **69** (4), 427 (1992). DOI: 10.1016/0168-583X(92)95298-6
- [8] R.D. Simovic, J. Vukanic. *Radiat. Phys. Chem.*, **80**, 310 (2011). DOI: 10.1016/j.radphyschem.2010.11.003
- [9] В.П. Афанасьев, Л.Г. Лобанова, В.И. Шульга. *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, **1**, 86 (2023). DOI: 10.31857/S102809602301003X [V.P. Afanas'ev, L.G. Lobanova, V.I. Shulga. *J. Surf. Investig.*, **17** (1), 78 (2023). DOI: 10.1134/S1027451023010032]
- [10] В. Экштайн. *Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела* (Мир, М., 1995) [W. Eckstein. *Computer Simulation of Ion-Solid Interactions* (Springer, Berlin 1991)]
- [11] J.F. Ziegler, J.P. Biersack. SRIM — <http://www.srim.org>
- [12] M.T. Robinson, I.M. Torrens. *Phys. Rev. B*, **9** (12), 5008 (1974). DOI: 10.1103/PhysRevB.9.5008
- [13] A. Lasa, C. Björkas, K. Vörtler, K. Nordlund. *J. Nucl. Mater.*, **429** (1–3), 284 (2012). DOI: 10.1016/j.jnucmat.2012.06.012
- [14] P.N. Maya. *J. Nucl. Mater.*, **480**, 411 (2016). DOI: 10.1016/j.jnucmat.2016.08.007
- [15] Д.К. Когут, Н.Н. Трифонов, В.А. Курнаев. *Изв. РАН. Сер. физ.*, **72** (7), 1024 (2008). [D.K. Kogut, N.N. Trifonov, V.A. Kurnaev. *Bull. Russ. Academy Sci.: Phys.*, **72** (7), 969 (2008). DOI: 10.3103/S1062873808070241]
- [16] 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]

- [17] Д.С. Мелузова, П.Ю. Бабенко, А.П. Шергин, А.Н. Зиновьев. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, **7**, 98 (2020). DOI: 10.31857/S1028096020070146 [D.S. Meluzova, P.Yu. Babenko, A.P. Shergin, A.N. Zinoviev. J. Surf. Investig., **14**, 738 (2020). DOI: 10.1134/S102745102004014X]
- [18] П.Ю. Бабенко, А.Н. Зиновьев, А.П. Шергин. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, **8**, 48 (2019) DOI: 10.1134/S020735281908002X [P.Yu. Babenko, A.N. Zinoviev, A.P. Shergin. J. Surf. Investig., **13**, 712 (2019). DOI: 10.1134/S1027451019040207]
- [19] D.S. Meluzova, P.Yu. Babenko, A.P. Shergin, K. Nordlund, A.N. Zinoviev. NIMB, **460**, 4 (2019). DOI: 10.1016/j.nimb.2019.03.037
- [20] P.Yu. Babenko, A.M. Deviatkov, D.S. Meluzova, A.P. Shergin, A.N. Zinoviev. NIMB, **406**, 538 (2017). DOI: 10.1016/j.nimb.2016.12.043
- [21] A.N. Zinoviev, P.Yu. Babenko, K. Nordlund. NIMB, **508**, 10 (2021). DOI: 10.1016/j.nimb.2021.10.001
- [22] Д.С. Мелузова, П.Ю. Бабенко, А.П. Шергин, А.Н. Зиновьев. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, **4**, 74 (2019). DOI: 10.1134/S0207352819040127 [D.S. Meluzova, P.Yu. Babenko, A.P. Shergin, A.N. Zinoviev. J. Surf. Investig., **13**, 335 (2019). DOI: 10.1134/S1027451019020332]
- [23] F. Granberg, J. Byggmästar, K. Nordlund. J. Nucl. Mater., **556**, 153158 (2021). DOI: 10.1016/j.jnucmat.2021.153158
- [24] C. Bjorkas, K. Nordlund. J. Nucl. Mater., **439**, 174 (2013). DOI: 10.1016/j.jnucmat.2013.04.036
- [25] A. Lyashenko, E. Safi, J. Polvi, F. Djurabekova, K. Nordlund. J. Nucl. Mater., **542**, 152465 (2020). DOI: 10.1016/j.jnucmat.2020.152465
- [26] 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
- [27] М.В. Прокофьев, В.В. Светухин, М.Ю. Тихончев. Изв. Самарского НЦ РАН, **15** (4), 1024 (2013).
- [28] A.N. Zinoviev, P.Yu. Babenko, K. Nordlund. NIMB, **508**, 10 (2021). DOI: 10.1016/j.nimb.2021.10.001
- [29] Y.R. Luo. *Comprehensive Handbook of Chemical Bond Energies* (CRC Press, Boca Raton, 2007)
- [30] B. Darwent. *Bond Dissociation Energies in Simple Molecules* (U.S. National Bureau of Standards, 1970)
- [31] А.А. Радциг, Б.М. Смирнов. *Справочник по атомной и молекулярной физике* (Атомиздат, М., 1980) [A.A. Radzig, B.M. Smirnov. *Reference Data on Atoms, Molecules, and Ions* (Springer, Berlin, 1985) DOI: 10.1007/978-3-642-82048-9]
- [32] Б.П. Никольский. *Справочник химика* (Химия, Л., 1966)
- [33] D. Primetzhofer, S. Rund, D. Roth, D. Goebel, P. Bauer. Phys. Rev. Lett., **107** (16), 163201 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.163201
- [34] A. Mann, W. Brandt. Phys. Rev. B, **24** (9), 4999 (1981). DOI: 10.1103/PhysRevB.24.4999
- [35] А.Н. Зиновьев, П.Ю. Бабенко. Письма ЖЭТФ, **115** (9), 603 (2022). DOI: 10.31857/S1234567822090105 [A.N. Zinoviev, P.Yu. Babenko. JETP Lett., **115** (9), 560 (2022). DOI: 10.1134/S0021364022100526]
- [36] W. Eckstein. *Calculated Sputtering, Reflection and Range Values* (IPP, Garching, 2002)
- [37] J. Amano, D.N. Seidman. J. Appl. Phys., **52** (11), 6934 (1981). DOI: 10.1063/1.328647
- [38] A.A. van Gorkum, E.V. Kornelsen. Rad. Eff., **52** (1–2), 25 (1980). DOI: 10.1080/00337578008210013
- [39] M.V. Moro, P.M. Wolf, B. Bruckner, F. Munnik, R. Heller, P. Bauer, D. Primetzhofer. NIMB, **498**, 1 (2021). DOI: 10.1016/j.nimb.2021.04.010
- [40] E.I. Sirotnin, A.F. Tulinov, V.A. Khodyrev, V.N. Mizgulin. NIMB, **4**, 337 (1984). DOI: 10.1016/0168-583x(84)90577-9
- [41] V.Y. Chumanov, S.Z. Izmailov, G.P. Pokhil, E.I. Sirotonin, A.F. Tulinov. Phys. Status Solidi A, **53**, 51 (1979). DOI: 10.1002/pssa.2210530104
- [42] W. Eckstein, H. Verbeek. *Data on Light Ion Reflection* (IPP, Garching, 1979)
- [43] Y. Yamamura. NIMB, **33** (1–4), 429 (1988). DOI: 10.1016/0168-583X(88)90599-X
- [44] M.T. Robinson. J. Nucl. Mater., **103**, 525 (1981). DOI: 10.1016/0022-3115(82)90652-3
- [45] D.P. Jackson, W. Eckstein. Nucl. Instr. Meth., **194** (1–3), 671 (1982). DOI: 10.1016/0029-554X(82)90602-4
- [46] O.S. Oen, M.T. Robinson. AIP Conf. Proc., **111** (1), 171 (1984). DOI: 10.1063/1.34417
- [47] V. Borovikov, A.F. Voter, X.-Z. Tang. J. Nucl. Mater., **447** (1–3), 254 (2014). DOI: 10.1016/j.jnucmat.2014.01.021