

12

Энергетические спектры распыленных атомов при бомбардировке твердотельных мишеней протонами

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

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: babenko@npd.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 10 октября 2024 г.

В окончательной редакции 11 ноября 2024 г.

Принято к публикации 26 ноября 2024 г.

Средняя энергия распыленных атомов и их энергетический спектр важны для расчета поступления примесей — материала первой стенки — в плазму. Рассмотрены энергетические характеристики распыленных атомов для случаев H–Be и H–W. Проведен расчет средней энергии распыленных частиц в зависимости от энергии бомбардирующих частиц. Учет энергетического спектра обратнорассеянных бомбардирующих ионов и анализ возможных механизмов распыления позволили достичь хорошего согласия с результатами компьютерного моделирования.

Ключевые слова: коэффициент распыления, средняя энергия распыленных частиц, ионная бомбардировка, токамак ИТЭР, бериллий, вольфрам.

DOI: 10.61011/PJTF.2025.06.59934.20145

Важным шагом в осуществлении управляемого термоядерного синтеза является международный проект по созданию токамака-реактора ИТЭР. Проблема стойкости первой стенки токамака-реактора является ключевой для успешной реализации проекта. Материалы первой стенки и дивертор (бериллий и вольфрам) во время работы реактора будут подвергаться воздействию интенсивных потоков плазмы, нейтронов и электромагнитного излучения. Облицовка стенки из бериллия успешно работала в токамаке JET [1]. В настоящее время широко обсуждается применение в токамаке ИТЭР стенки из вольфрама. Поступление в плазму примеси вольфрама в количестве 10^{-3} – 10^{-4} от концентрации плазмы вследствие радиационных потерь может не позволить реализовать термоядерную реакцию с планируемым КПД [2]. Для уменьшения поступления примесей в центральную зону плазмы планируется использовать дивертор и напуск газа для охлаждения пристеночной плазмы [3].

Проблема стойкости первой стенки в токамаке ИТЭР широко обсуждается [4–7]. Имеется множество обзоров, описывающих исследования процессов распыления; в частности, выделим обзоры [8,9]. Многими научными группами исследуются ориентационные эффекты, влияние структуры мишени, порогов распыления, вклад различных механизмов распыления [10–13].

В работах [14–16] были рассчитаны коэффициенты распыления Be и W изотопами водорода и атомами различных примесей. Эти данные были использованы для оценки потока примесей при использовании стенки из Be и W при бомбардировке потоком быстрых атомов D и T, покидающих центральную зону плазмы [16].

Энергетические характеристики распыленных атомов влияют на глубину проникновения распыленных частиц в плазму и являются важным краевым условием для

дальнейшего расчета переноса ионов примесей в плазме. Из последних работ по исследованию энергетических распределений и средних энергий распыленных частиц отметим работы [17,18].

Рассмотрим случаи распыления атомами водорода поверхностей из Be и W. Как показал анализ траекторий частиц [19], в рассматриваемых случаях высока вероятность обратного рассеяния частиц пучка и доминирует механизм распыления приповерхностных слоев потоком обратнорассеянных частиц пучка. Как показано в работе [19], каскадный механизм, предложенный Зигмундом [20], подключается только при больших энергиях соударения. Целью работы было предложить методику расчета энергетических спектров распыленных атомов при бомбардировке мишеней изотопами водорода на примере распыления Be и W — перспективных материалов для токамака реактора.

Энергетический спектр распыленных атомов может быть рассчитан с использованием данных о дифференциальных сечениях рассеяния налетающего иона атомов мишени в зависимости от угла рассеяния и энергии соударения. Энергия частицы отдачи и угол рассеяния частицы θ в СЦМ (в системе центра масс) связаны соотношением $E_2 = \gamma E_0 \sin^2(\theta/2)$, где $\gamma = 4M_1M_2/(M_1 + M_2)^2$. Здесь M_1 и M_2 — массы сталкивающихся атомов, а E_0 — начальная энергия. Энергетический спектр атомов отдачи пропорционален $d\sigma/dE_2$ и может быть выражен через дифференциальное сечение рассеяния $d\sigma/d\Omega$ в СЦМ. Учитывая, что $d\theta/dE_2 = 2/(\gamma E_0 \sin \theta)$, получаем

$$\frac{d\sigma}{dE_2} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \frac{d\Omega}{d\theta} \frac{d\theta}{dE_2} = \frac{4\pi}{\gamma E_0} \frac{d\sigma}{d\Omega}. \quad (1)$$

Распыленными являются частицы отдачи с энергией $E_2 > U_s$, где U_s — потенциальный барьер на границе

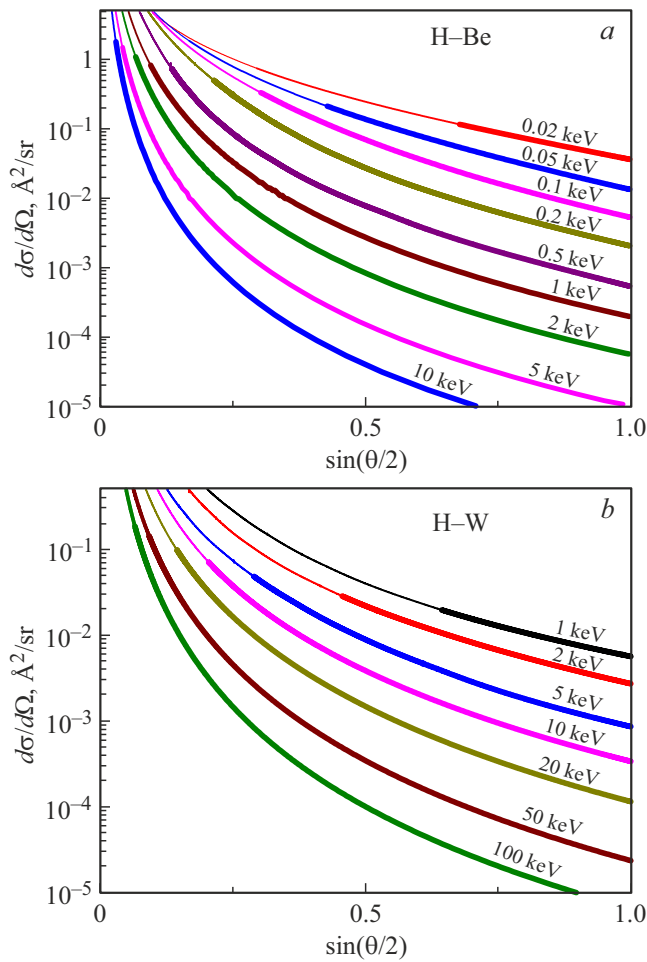


Рис. 1. Зависимость дифференциального сечения рассеяния в СЦМ для систем Н–Ве (а) и Н–W (b). Энергия соударения приведена у кривых. θ — угол рассеяния в СЦМ. Для углов $\theta > \theta_0$ происходит образование выбитых частиц с энергией больше порога. Для этого диапазона предложенные аппроксимационные зависимости (обозначены жирными кривыми) хорошо описывают сечения рассеяния.

твердое тело–вакуум (энергия сублимации). Это условие можно переписать в виде $\gamma E_0 \sin^2(\theta/2) > U_s$. Нас будет интересовать поведение сечения при углах больше порогового значения θ_0 , где $\theta_0 = 2 \arcsin([U_s/(\gamma E_0)]^{0.5})$. В рассматриваемом нами случае соударений Н–Ве и Н–W потенциал взаимодействия близок к экранированному кулоновскому потенциалу, поэтому сечение $d\sigma/d\Omega$ можно аппроксимировать в форме $d\sigma/d\Omega = A/\sin^n(\theta/2)$.

Сечения рассеяния мы рассчитывали с использованием потенциалов, полученных методом функционала плотности (DFT) [21]. Как видно из рис. 1, поведение сечений для углов больше порогового хорошо описывается предложенной аппроксимационной зависимостью. Параметры A и n для случаев Н–Ве и Н–W приведены в таблице.

Коэффициенты аппроксимации сечения рассеяния для систем Н–Ве и Н–W

Н–Ве			Н–W		
E_0 , eV	A	n	E_0 , eV	A	n
10	0.0656	2.97			
20	0.0371	3.05			
50	0.0143	3.32			
100	0.00576	3.53			
200	0.0022	3.60			
500	$6.02 \cdot 10^{-4}$	3.58			
1000	$2.09 \cdot 10^{-4}$	3.56	1000	0.00565	2.84
2000	$6.05 \cdot 10^{-5}$	3.67	2000	0.00286	3.01
5000	$1.15 \cdot 10^{-5}$	3.78	5000	0.00103	3.29
10 000	$3.68 \cdot 10^{-6}$	3.85	10 000	$4.37 \cdot 10^{-4}$	3.37
20 000	$6.79 \cdot 10^{-7}$	3.91	20 000	$1.78 \cdot 10^{-4}$	3.49
50 000	$1.08 \cdot 10^{-7}$	3.95	50 000	$4.68 \cdot 10^{-5}$	3.64
100 000	$2.68 \cdot 10^{-8}$	3.97	100 000	$1.49 \cdot 10^{-5}$	3.73

Предложенная аппроксимация удобна для получения энергетического спектра в аналитическом виде (с учетом того, что $\sin^2(\theta/2) = E_2/(\gamma E_0)$):

$$\frac{d\sigma}{dE_2} = \frac{4\pi}{\gamma E_0} \frac{A}{\sin^n(\frac{\theta}{2})} = \frac{4\pi A}{\gamma E_0 (\frac{E_2}{\gamma E_0})^{n/2}} = C E_2^{-n/2},$$

$$C = \frac{4\pi A}{(\gamma E_0)^{1-n/2}}. \quad (2)$$

Предложенная формула описывает энергетический спектр частиц отдачи при бомбардировке пучком легких атомов с энергией E_0 .

В рассматриваемых нами случаях доминирующий вклад в распыление вносит распыление поверхностных атомов потоком обратнорассеянных бомбардирующих ионов. Упрощенная формула для оценки коэффициента распыления для механизма выбивания поверхностных атомов потоком обратнорассеянных частиц может быть записана как [19]:

$$Y_{out} = \sigma(E_{th}, E_0) n_t R_N \lambda. \quad (3)$$

Здесь $\sigma(E_{th}, E_0)$ — сечение образования частиц отдачи с энергией больше U_s при энергии налетающей частицы E_0 , E_{th} — пороговая энергия распыления, n_t — плотность мишени, R_N — коэффициент отражения, λ — характерная глубина выхода распыленных частиц.

Формула (3) отличается функциональной зависимостью от параметров соударения от формулы Зигмунда [20]:

$$Y(E_0) = 0.042 \alpha \left(\frac{M_2}{M_1} \right) \frac{S_n(E_0)}{U_s}. \quad (4)$$

Здесь α — коэффициент, зависящий от отношения M_2/M_1 (приведен в работе [20]), $S_n(E_0)$ — сечение ядерного торможения, приходящееся на один атом. Формула Зигмунда применима для оценки коэффициента распыления при бомбардировке мишеней тяжелыми

ионами и ионами средних масс. Она не описывает случаи распыления легкими атомами более тяжелых мишеней, а также поведение коэффициента распыления вблизи порога.

Как следует из формулы (3), спектр распыленных атомов мишени будет пропорционален произведению сечения образования атомов отдачи с энергией E_2 на пробег этих атомов в материале мишени. Далее будем рассматривать средние энергии выбитых частиц внутри твердого тела. Если частица покидает поверхность, ей необходимо преодолеть поверхностный потенциальный барьер, примерно равный энергии сублимации U_s , т.е. чтобы получить среднюю энергию распыленных вылетевших частиц, нужно из расчетной величины вычесть U_s (для Be $U_s = 3.32$ eV, для W $U_s = 8.9$ eV [22]).

Из анализа данных о пробегах из базы SRIM [23] нами были получены зависимости для пробега атомов Be в мишени из Be

$$\lambda [\text{\AA}] = 0.841E_2 [\text{eV}]^{0.6}$$

и атомов W в мишени из W

$$\lambda [\text{\AA}] = 0.705E_2 [\text{eV}]^{0.379},$$

где E_2 — энергия выбитых атомов внутри мишени. Как было показано в работах [24–26], при расчете глубины пробега частиц в веществе на получаемый результат заметное влияние оказывают выбор потенциала и модель для расчета электронных тормозных потерь. В этих же работах дается сопоставление результатов расчета с различными версиями TRIM (TRansport of Ions in Matter) [23,27].

Средняя энергия выбитых атомов внутри твердого тела рассчитывается как

$$\langle E_{sp}(E_0) \rangle = \frac{\int_{U_s}^{\gamma E_0} \frac{d\sigma}{dE_2}(E_0, E_2) \lambda(E_2) E_2 dE_2}{\int_{U_s}^{\gamma E_0} \frac{d\sigma}{dE_2}(E_0, E_2) \lambda(E_2) dE_2}. \quad (5)$$

Следует учесть поправку на энергетический спектр обратнорассеянных ионов dN/dE . Энергетические спектры рассеянных ионов приведены на рис. 2. Данные для случая H–W взяты из работы [28], а для случая H–Be рассчитаны нами. Усреднение значений с учетом энергетического спектра рассеянных ионов проводилось по формуле

$$\langle E_{sp}^{\text{cor}} \rangle = \frac{\int_{E_{\text{th}}}^{E_0} \langle E_{sp}(E) \rangle \frac{dN}{dE}(E) dE}{\int_{E_{\text{th}}}^{E_0} \frac{dN}{dE}(E) dE}. \quad (6)$$

На рис. 3 показаны также данные расчета средней энергии без коррекции (5) и с коррекцией (6) на спектр обратнорассеянных частиц.

С использованием компьютерных программ [14,15] для систем H–Be и H–W нами были рассчитаны относительные вероятности вкладов в распыление различных механизмов [19]. При движении частицы внутри

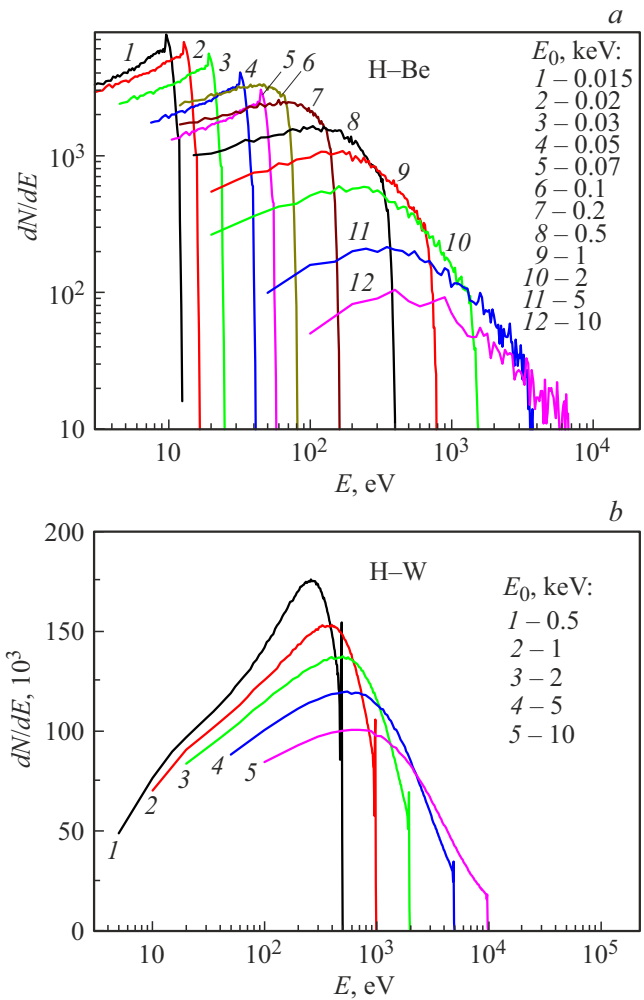


Рис. 2. Энергетические спектры dN/dE обратнорассеянных частиц для систем H–Be (a) и H–W (b) для разных энергий соударения E_0 . E — энергия обратнорассеянных частиц.

мишени (обозначение *in*) возможно как выбивание атомов первичными ионами (механизм PKA-*in*), так и образование вторичных частиц вследствие каскада соударений первично выбитых частиц с атомами мишени (механизм SKA-*in*). В случае распыления обратнорассеянными частицами (рассеянная частица движется в сторону поверхности) также можно выделить два канала: первичное выбивание атома мишени (механизм PKA-*out*) и канал, связанный с образованием каскадных частиц (SKA-*out*).

При малых энергиях доминирует прямое выбивание приповерхностных атомов потоком обратнорассеянных частиц. В этом случае энергия выбитого атома соответствует расчету по формуле (6). Вклад этого процесса в среднюю энергию мы оцениваем как произведение вероятности процесса PKA-*out* на среднюю энергию, рассчитанную с учетом энергетического спектра обратнорассеянных атомов.

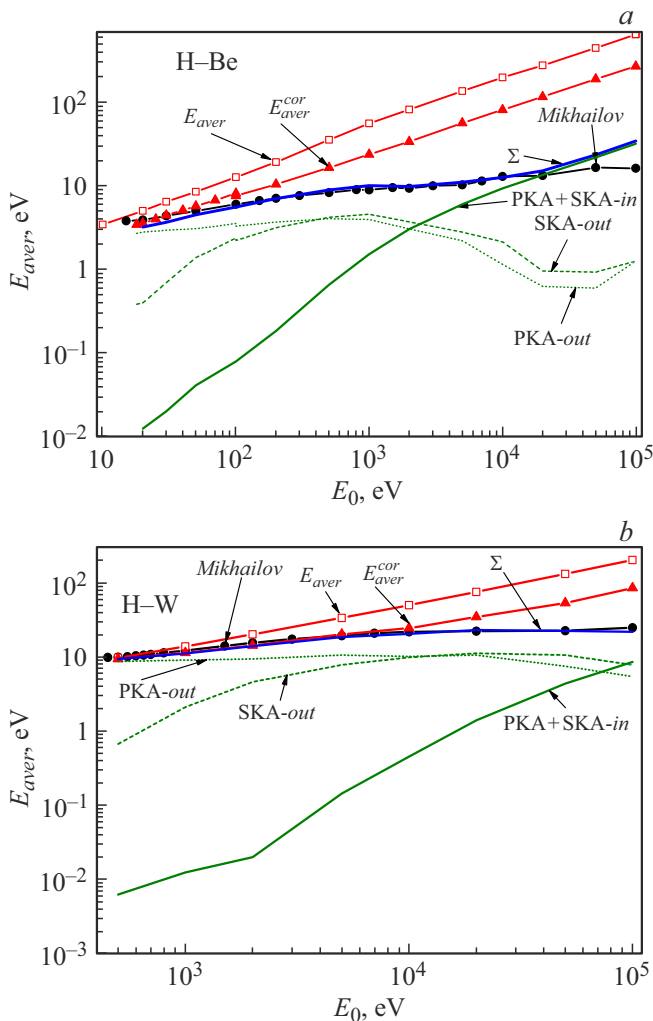


Рис. 3. Средняя энергия распыленных частиц для случаев H–Be (a) и H–W (b). Кривая с квадратами (обозначена символом E_{aver}) — расчет по формуле (5). Кривая с треугольниками (обозначена символом E_{aver}^{cor}) — расчет по формуле (6) с учетом спектра обратнорассеянных частиц. Черные точки (*Mikhailov*) — результаты компьютерного моделирования распыления [14,15]. При малых энергиях доминирует вклад каналов PKA-out и SKA-out, т.е. распыление поверхностных слоев потоком обратнорассеянных частиц. При больших энергиях подключаются каналы, связанные с каскадным механизмом Зигмунда (PKA+SKA-in). Суммарная кривая (обозначена символом Σ) хорошо согласуется с результатами компьютерного моделирования (*Mikhailov*).

Далее подключается канал, связанный с каскадными частицами, образованными первично выбитыми частицами мишени (SKA-out). Оценки показывают, что при соударении энергия выбитой частицы уменьшается в 1.3–1.5 раза по сравнению с каналом PKA-out.

При больших энергиях подключается каскадный механизм, предложенный Зигмундом [20], канал (PKA+SKA-in). В этом случае частица пучка с энергией E_0 передает энергию выбитым частицам мишени. Эта энергия может быть рассчитана по формуле (5). Далее

происходят соударения между частицами мишени, и часть частиц разворачивает направление импульса в сторону поверхности. Это реализуется после трех-пяти соударений. При этом средняя энергия частиц мишени по нашим оценкам, уменьшается в 10–20 раз. На рис. 3 приведены относительный вклад перечисленных каналов в среднюю энергию выбитых частиц и их сумма. Как видно из рис. 3, имеется удовлетворительное согласие суммарной кривой с результатами расчета средней энергии распыленных атомов, приведенного в работах [14,15] методом компьютерного моделирования распыления мишени при ионной бомбардировке.

В настоящей работе расчеты средней энергии приведены для сферического потенциального барьера. Как показано в работе [16], при энергиях соударения свыше 1 keV отношение средних энергий частиц для плоскостного и сферического барьеров практически не меняется и лежит в интервале 1.53–1.61 для системы H–Be и 1.45–1.49 для H–W.

Таким образом, предложенный вариант расчета средней энергии распыленных атомов позволяет ускорить вычисления, установить вклад различных механизмов распыления, а также установить влияние на среднюю энергию распыленных атомов энергетического спектра обратнорассеянных частиц.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] A.R. Field, F.J. Casson, D. Fajardo, C. Angioni, C.D. Challis, J. Hobirk, A. Kappatou, H.-T. Kim, E. Lerche, A. Loarte, J. Mailloux and JET Contributors, Nucl. Fusion, **63**, 016028 (2023). DOI: 10.1088/1741-4326/aca54e
- [2] T. Pütterich, E. Fable, R. Dux, M. O'Mullane, R. Neu, M. Siccino, Nucl. Fusion, **59**, 056013 (2019). DOI: 10.1088/1741-4326/ab0384
- [3] R.A. Pitts, X. Bonnin, F. Escourbiac, H. Frerichs, J.P. Gunn, T. Hirai, A.S. Kukushkin, E. Kaveeva, M.A. Miller, D. Moulton, V. Rozhansky, I. Senichenkov, E. Sytova, O. Schmitz, P.C. Stangeby, G. De Temmerman, I. Veselova, S. Wiesenz, Nucl. Mater. Energy, **20**, 100696 (2019). DOI: 10.1016/j.nme.2019.100696
- [4] Ch. Luo, L. Xu, L. Zong, H. Shen, Sh. Wei, Fusion Eng. Des., **190**, 113487 (2023). DOI: 10.1016/j.fusengdes.2023.113487
- [5] T. Abrams, E.A. Unterberg, D.L. Rudakov, A.W. Leonard, O. Schmitz, D. Shiraki, L.R. Baylor, P.C. Stangeby, D.M. Thomas, H.Q. Wang, Phys. Plasmas, **26**, 062504 (2019). DOI: 10.1063/1.5089895
- [6] K. Soni, L. Moser, C. Porosnicu, R. Antunes, R. Arredondo, P. Dinca, R. Steiner, L. Marot, E. Meyer, J. Nucl. Mater., **564**, 163671 (2022). DOI: 10.1016/j.jnucmat.2022.153671
- [7] G. De Temmerman, K. Heinola, D. Borodin, S. Brezinsek, R.P. Doerner, M. Rubel, E. Fortuna-Zalesna, C. Linsmeier, D. Nishijima, K. Nordlund, M. Probst, J. Romazanov, E. Safi, Th. Schwarz-Selinger, A. Widdowson, B.J. Braams, H.-K. Chung, C. Hill, Nucl. Mater. Energy, **27**, 100994 (2021). DOI: 10.1016/j.nme.2021.100994

- [8] R. Behrisch, W. Eckstein, *Sputtering by particle bombardment* (Springer, Berlin, 2007). DOI: 10.1007/978-3-540-44502-9
- [9] Н.Н. Андрианова, А.М. Борисов, М.А. Овчинников, *Избранные труды Е.С. Машковой и В.А. Молчанова* (Изд-во МГУ, М., 2024). DOI: 10.31453/kdu.ru.978-5-00247-005-1-2024-144
- [10] K. Schlueter, K. Nordlund, G. Hobler, M. Balden, F. Granberg, O. Flinck, T. F. da Silva, R. Neu, *Phys. Rev. Lett.*, **125**, 225502 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.225502
- [11] F. Duensing, F. Hechenberger, L. Ballauf, A.M. Reider, A. Menzel, F. Zappa, T. Dittmar, D.K. Bohme, P. Scheier, *Nucl. Mater. Energy*, **30**, 101110 (2022). DOI: 10.1016/j.nme.2021.101110
- [12] A. Lopez-Cazalilla, F. Granberg, K. Nordlund, C. Cupak, M. Fellinger, F. Aumayr, W. Hauptstra, P.S. Szabo, A. Mutzke, R. Gonzalez-Arrabal, *Phys. Rev. Mater.*, **6**, 075402 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.6.075402
- [13] P. Phadke, A.A. Zameshin, J.M. Sturm, R. van de Kruijs, F. Bijkerk, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B*, **520**, 29 (2022). DOI: 10.1016/j.nimb.2022.03.016
- [14] П.Ю. Бабенко, В.С. Михайлов, А.П. Шергин, А.Н. Зиновьев, *ЖТФ*, **93** (5), 709 (2023). DOI: 10.21883/JTF.2023.05.55467.12-23 [P.Yu. Babenko, V.S. Mikhailov, A.P. Shergin, A.N. Zinoviev, *Tech. Phys.*, **68** (5), 662 (2023). DOI: 10.21883/TP.2023.05.56074.12-23].
- [15] В.С. Михайлов, П.Ю. Бабенко, А.П. Шергин, А.Н. Зиновьев, *ЖЭТФ*, **164** (3), 478 (2023). DOI: 10.31857/S004445102309016X [V.S. Mikhailov, P.Yu. Babenko, A.P. Shergina, A.N. Zinoviev, *JETP*, **137** (3), 413 (2023). DOI: 10.1134/S106377612309011X].
- [16] В.С. Михайлов, П.Ю. Бабенко, А.П. Шергин, А.Н. Зиновьев, *Физика плазмы*, **50** (1), 15 (2024). DOI: 10.31857/S0367292124010022. [V.S. Mikhailov, P.Yu. Babenko, A.P. Shergin, A.N. Zinoviev, *Plasma Phys. Rep.*, **50** (1), 23 (2024). DOI: 10.1134/S1063780X23601682].
- [17] N. Mahne, M. Sekada, M. Panjan, *Coatings*, **13**, 1448 (2023). DOI: 10.3390/coatings13081448
- [18] V.I. Shulga, *Vacuum*, **230**, 113644 (2024). DOI: 10.1016/j.vacuum.2024.113644
- [19] А.Н. Зиновьев, П.Ю. Бабенко, В.С. Михайлов, А.В. Смаев, *ЖТФ*, **94** (11), 1787 (2024). DOI: 10.61011/JTF.2024.11.59094.240-24 [A.N. Zinoviev, P.Yu. Babenko, V.S. Mikhailov, A.V. Smaev, *Tech. Phys.*, **69** (11), 1653 (2024)].
- [20] P. Sigmund, *Phys. Rev.*, **184** (2), 383 (1969). DOI: 10.1103/PhysRev.184.383
- [21] 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
- [22] C. Kittel, *Introduction to solid state physics*, 8th ed. (Wiley, N.Y., 2005).
- [23] J.F. Ziegler, J.P. Biersack. SRIM. <http://www.srim.org>
- [24] V.I. Shulga, W. Eckstein, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B*, **145**, 492 (1998). DOI: 10.1016/S0168-583X(98)00626-0
- [25] V.I. Shulga, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B*, **152**, 49 (1999). DOI: 10.1016/S0168-583X(98)00955-0
- [26] А.Н. Зиновьев, П.Ю. Бабенко, В.С. Михайлов, Д.С. Тенсин, *Поверхность. Рентгеновские синхротронные и нейтронные исследования*, № 6, 38 (2024). DOI: 10.31857/S1028096024060059 [A.N. Zinoviev, P.Yu. Babenko, V.S. Mikhailov, D.S. Tensin, *J. Surf. Investig.*, **18** (3), 654 (2024). DOI: 10.1134/S1027451024700265].
- [27] W. Eckstein, *Calculated sputtering, reflection and range values*, IPP report 9/132 (IPP, Garching, 2002).
- [28] В.С. Михайлов, П.Ю. Бабенко, Д.С. Тенсин, А.Н. Зиновьев, *Поверхность. Рентгеновские синхротронные и нейтронные исследования*, № 2, 95 (2023). DOI: 10.31857/S1028096023020061 [V.S. Mikhailov, P.Yu. Babenko, D.S. Tensin, A.N. Zinoviev, *J. Surf. Investig.*, **17** (1), 258 (2023). DOI: 10.1134/S1027451023010330].