

Моделирование распыления поликристаллического бериллия атомами H, D, T

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

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

Поступило в Редакцию 25 января 2023 г.

В окончательной редакции 22 февраля 2023 г.

Принято к публикации 4 марта 2023 г.

Представлены результаты моделирования коэффициентов распыления поликристаллического бериллия изотопами водорода в диапазоне энергий соударения $8\text{ eV}–100\text{ keV}$ и их зависимостей от угла падения пучка на поверхность, необходимые для оценки распыления первой стенки из бериллия в токамаке ИТЭР. Показано сильное влияние формы поверхности на получаемые результаты. Рассмотрены предельные случаи плоского потенциального барьера (гладкая поверхность) и сферического потенциального барьера (поверхность, состоящая из острий). Установлено влияние каскадов соударений на коэффициент распыления. Получены зависимости средней глубины образования распыленной частицы от энергии бомбардирующих частиц при различных углах падения пучка на мишень. Рассчитаны энергетические спектры и угловые зависимости вылета распыленных частиц для различных энергий атомов бомбардирующего пучка. Показано, что наличие потенциальной ямы в системе налетающая частица — поверхность меняет характер зависимости коэффициента распыления от угла падения при малых углах скольжения.

Ключевые слова: коэффициенты распыления, энергетические и угловые распределения распыленных частиц, потенциал межатомного взаимодействия, изотопы водорода, бериллий.

DOI: 10.21883/JTF.2023.05.55467.12-23

Введение

Разработка экологически чистых и возобновляемых источников энергии входит в число приоритетных исследований в Российской Федерации. Управляемый термоядерный синтез является наиболее перспективным и безопасным источником возобновляемой энергии. В настоящий момент многие научные коллективы участвуют в международном проекте ИТЭР, предназначенном для демонстрации технической возможности получения термоядерной энергии. Одной из основных проблем, требующих решения, является взаимодействие высокотемпературной плазмы с поверхностью стенки реактора. Чрезвычайно интенсивные потоки быстрых атомов, ионов, электронов и нейтронов примет на себя бериллиевая стенка токамака, а также вольфрамовый дивертор. В свою очередь, распыленные частицы вольфрама и бериллия, попавшие в плазму, могут кардинально изменить режим работы реактора, а то и вывести установку из строя, поэтому большое внимание уделяется вопросу поступления примесей в реактор, в частности, эти вопросы рассматривались в работах [1–3]. Для расчетов параметров плазмы, а также для ряда экспериментальных диагностик токамака ИТЭР необходимо знать коэффициенты распыления частицами водорода, дейтерия и трития. В настоящее время экспериментальные данные по этим коэффициентам распыления сильно разнятся, и приведены лишь для узкого диапа-

зона параметров распыляющих частиц, а в случае трития отсутствуют. Имеются довольно подробные расчеты коэффициентов распыления различных материалов, выполненные в работах группы Экштайна [4,5] в рамках бинарного приближения с использованием потенциала КrC [6].

Распылению материалов, которые применяются в плазменных установках, посвящены также работы [7–12]. Большое внимание уделяется расчетам многочастичных потенциалов взаимодействия, которые нужны при моделировании коэффициентов распыления [13–18].

Целью настоящей работы является получение данных о коэффициентах распыления бериллия изотопами водорода для широкого диапазона начальных энергий $8\text{ eV}–100\text{ keV}$ на основе использования наиболее точных потенциалов межатомного взаимодействия, в том числе многочастичных, для описания рассеяния частиц. Представлялось важным также получить зависимости коэффициентов распыления от угла падения распыляющей частицы. Краткое изложение полученных результатов представлено в работе [17]. Для описания полученных зависимостей предложен и обсуждается вклад механизма распыления приповерхностных слоев потоком обратно рассеянных частиц.

Важной проблемой также является расчет угловых и энергетических характеристик распыленных частиц. Эта информация получена впервые и нужна для расчета проникновения распыленных атомов примеси в плазму.

1. Описание методики

Для расчетов использовался разработанный нами код, основанный на методе Монте-Карло. Мишень представляла собой набор микрокристаллов размером в одну элементарную ячейку бериллия, ориентированных в пространстве случайным образом. Учитывались тепловые колебания атомов мишени. Амплитуда колебаний рассчитывалась, согласно теории Дебая–Уоллера, из объемной температуры Дебая 1440°K [18] и принималась равной 0.059 Å, характерной для бериллия при комнатной температуре.

Процесс вычислений коэффициентов распыления условно можно разделить на два этапа. Первый этап: анализ траектории налетающей частицы. При упругом столкновении налетающая частица передает часть своей энергии частице мишени. Все частицы кристалла, которые получили энергию, выше поверхностной энергии связи $E_s = 3.32$ eV, попадают в отдельный массив данных о частицах отдачи, в котором записывается их положение в кристалле, их импульс и переданная энергия. На втором этапе вычислений рассматриваются траектории частиц отдачи из записанного массива. Частицы, вылетевшие в вакуум за пределы твердого тела и преодолевшие поверхностный барьер 3.32 eV, считаются распыленными. Частицы отдачи также могут передать необходимый импульс другим атомам мишени. Они также добавляются в массив частиц отдачи, что позволяет учесть полностью каскады столкновений.

Взаимодействие налетающих атомов изотопов водорода с атомами мишени из бериллия описывается в приближении парных столкновений. Как показал опыт предшествующих работ по описанию отражения атомов водорода от поверхности [19,20], прохождения пучка через тонкие пленки [21], по расчету ядерных тормозных потерь [22], получаемые результаты весьма чувствительны к выбору потенциала взаимодействия налетающей частицы с атомами мишени. Было установлено, что парные потенциалы, полученные в рамках теории функционала плотности с коррекцией глубины потенциальной ямы в соответствии с данными спектроскопических измерений, хорошо согласуются с данными экспериментов, полученными при изучении рассеяния в газовой фазе [23]. Данные о потенциале взаимодействия атомов водорода с бериллием брались из работы [24–25]. Различие в массах изотопов практически не сказывается на потенциале взаимодействия, так как коррекция приводит к небольшому изменению приведенной массы электрона. Это подтверждается спектроскопическими измерениями, показывающими, что параметры потенциальной ямы для разных изотопов различаются незначительно (см. [26,27]).

Потери энергии налетающих частиц и энергии частиц отдачи при упругом рассеянии для заданного потенциала рассчитываются точно из законов сохранения. Потери энергии при торможении на электронах мишени учитывались при каждом соударении как произведение элект-

ронной тормозной способности на длину траектории между соударениями.

Для энергий ниже 10 keV экспериментальных данных о торможении атомов водорода в бериллии нет. Использовались надежные экспериментальные данные для алюминия [28], которые показывают, что в рассматриваемом случае при энергиях соударения ниже 10 keV хорошо работает модель торможения частиц на свободных электронах, а тормозная способность пропорциональна скорости соударения. Применяя масштабирование на различие в плотности электронов в бериллии и алюминии с использованием методики, предложенной в работе [29], мы получили выражение: если энергия бомбардирующего пучка $E_0 < 10\,000$ eV, тогда

$$\frac{dE}{dx} \left[\frac{\text{eV}}{\text{Å}} \right] = 2.758 \cdot \left(\frac{E_0[\text{keV}]}{m_1} \right)^{0.4803}. \quad (1)$$

При энергиях выше 10 keV применялось более сложное выражение, полученное аппроксимацией данных базы данных SRIM [30]:

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dx} \left[\frac{\text{eV}}{\text{Å}} \right] &= 4.228 + 0.496 \cdot x - 9.91 \cdot 10^{-3} \cdot x^2 \\ &+ 8.604 \cdot 10^{-5} \cdot x^3 - 2.860 \cdot 10^{-7} \cdot x^4, \\ x &= \frac{E_0[\text{keV}]}{m_1}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь m_1 — масса изотопа водорода.

При расчете траекторий частиц отдачи использовались параметры многочастичных потенциалов, полученные в работах [24,25] с использованием теории функционала плотности. При рассмотрении траекторий атомов отдачи доминировали ядерные тормозные потери, связанные с многократным рассеянием на атомах мишени. Роль электронных тормозных потерь в данном случае мала. Тем не менее мы использовали данные из базы данных SRIM [30].

Для набора требуемой статистики мы рассматривали 10^6 налетающих частиц, а в случае расчета порогового поведения коэффициента распыления число налетающих частиц доходило до 10^8 .

Результаты расчета чувствительны к форме потенциального барьера на границе твердое тело–вакуум. Поверхностный потенциал может быть принят сферическим для сильно неровной поверхности, состоящей из острых атомного масштаба, или плоскостным для гладкой поверхности. В первом случае критерий вылета распыленной частицы состоит в требовании, чтобы энергия распыленной частицы E_b превышала поверхностную энергию связи E_s , а в случае плоскостного потенциала требуется выполнение условия $E_b \cdot \cos^2(\theta) > E_s$, здесь θ — угол вылета распыленной частицы. При интенсивном распылении стенки можно ожидать высокую шероховатость поверхности. Расчет с использованием

этих пределов характеризует влияние неровности поверхности на коэффициенты распыления. При распылении реальной поверхности коэффициенты распыления будут иметь значения между двумя рассмотренными предельными случаями.

2. Коэффициенты распыления бериллии изотопами водорода при нормальном падении пучка на мишень

На рис. 1 приведены коэффициенты распыления бериллии изотопами водорода в зависимости от энергии налетающих частиц. Наш расчет для сферического барьера — линии со сплошными кружками, линии с открытыми кружками — расчет для плоскостного барьера. Символы — экспериментальные значения коэффициента распыления разных авторов, а штриховая линия — усреднение расчетных данных из работ [4,5].

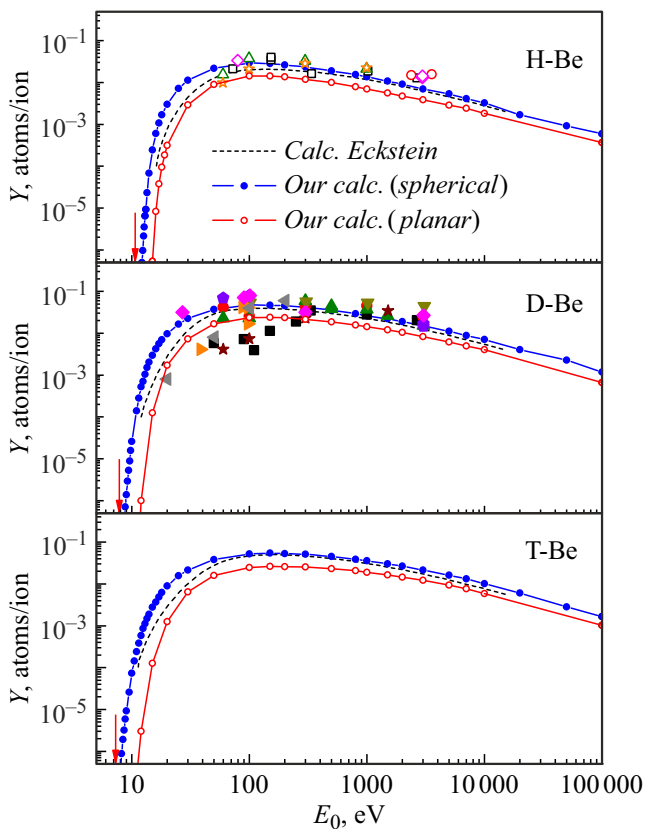


Рис. 1. Зависимость коэффициента распыления бериллии от энергии соударения при нормальном падении пучка на мишень для различных изотопов. Наш расчет для сферического барьера — линии со сплошными кружками, линии с открытыми кружками — расчет для плоскостного барьера. Точки — экспериментальные данные различных авторов из монографии [4]. Штриховая линия — расчет группы Экштайна программой SDTrimSP [5]. Стрелочками показано положение порогов распыления, полученное с помощью формулы (4).

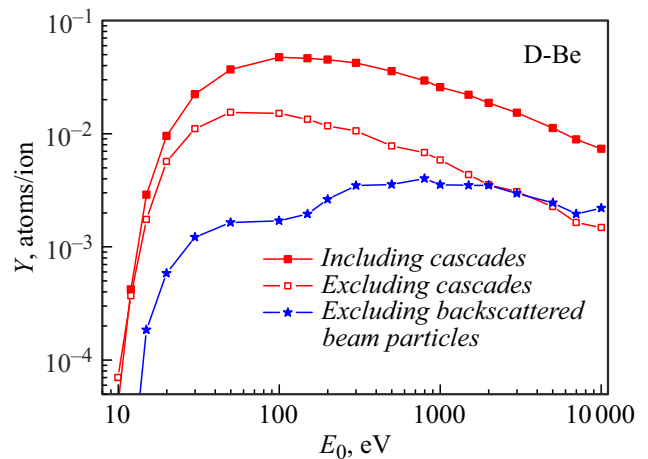


Рис. 2. Две верхние кривые демонстрируют коэффициент распыления с учетом и без учета вклада каскадов. Кривая, отмеченная звездочками, — вклад в распыление частицами пучка, летящими вглубь твердого тела, т.е. без учета вклада обратно рассеянных частиц первичного пучка.

Из рис. 1 видно, что экспериментальные данные для пары H–Be и энергий меньше 60 eV отсутствуют. Значения коэффициента распыления, рассчитанные с помощью нашей программы, лучше описывают экспериментальные данные, чем расчет группы Экштайна [4,5]. В случае распыления мишени из бериллия атомами дейтерия имеется большой массив экспериментальных данных. Как видно из рис. 1, при энергиях бомбардирующих частиц порядка 100 eV наблюдается очень большой разброс величин, полученных из эксперимента. Для системы T–Be экспериментальные данные о коэффициентах распыления отсутствуют, но так как наблюдается систематическое изменение в поведении кривых для разных изотопов водорода, можно использовать полученные нами расчетные данные.

Как видно из рис. 1, результаты, полученные для сферического потенциального барьера, лучше согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Использование плоскостного потенциального барьера приводит к уменьшению коэффициента распыления и сдвигу порога распыления. Большой разброс экспериментальных данных может быть связан с различным состоянием поверхности в рассматриваемых экспериментах. В наших расчетах мы использовали обе формы потенциального барьера, чтобы охарактеризовать зависимость коэффициента распыления от формы поверхности.

Традиционные модели распыления в рассматриваемом случае столкновения легких частиц с мишенью не работают. Модель Зигмунда [31] дает значения, превышающие в 5 раз экспериментальные данные. В рассматриваемом случае доминирует распыление поверхностных слоев потоком обратно рассеянных частиц.

Рассмотрим более детально модель распыления мишени легкими частицами пучка (водород, дейтерий и тритий). На рис. 2 представлены значения коэффициента распыления в случае учета каскадов, образуемых

частицами отдачи, и без учета каскадов. Видно, что вклад каскадов весьма существенен и его роль растет при увеличении начальной энергии. На том же рисунке звездочками представлен вклад в распыление частиц отдачи, образованных частицами пучка, движущимися вглубь мишени. Как правило, их вклад мал, и даже при больших энергиях не превышает 12–20%. Таким образом, основной вклад в распыление вносят обратно рассеянные частицы пучка.

На рис. 3, *a* представлена зависимость количества распыленных частиц от глубины образования распыленных частиц. Видно, что вклад в распыление вносят в основном частицы первых двух поверхностных слоев, причем вклад поверхностного монослоя доминирует.

На рис. 3, *b* представлена зависимость средней глубины образования распыленных частиц для различных изотопов. Имеет место группировка кривых для различных изотопов водорода и различных углов падения пучка

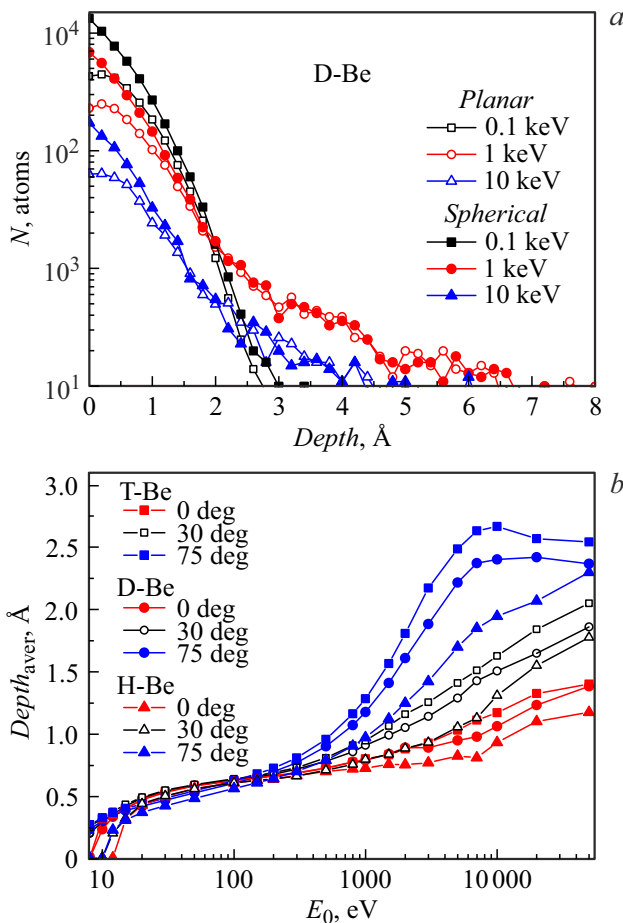


Рис. 3. *a* — зависимость числа распыленных частиц от глубины образования частицы отдачи при нормальном падении пучка на мишень при различных начальных энергиях. Приведены данные для сферического барьера (сплошные точки) и для плоскостного барьера (открытые точки). *b* — зависимость средней глубины образования распыленной частицы от начальной энергии при различных углах падения пучка на мишень. Приведены данные для сферического барьера.

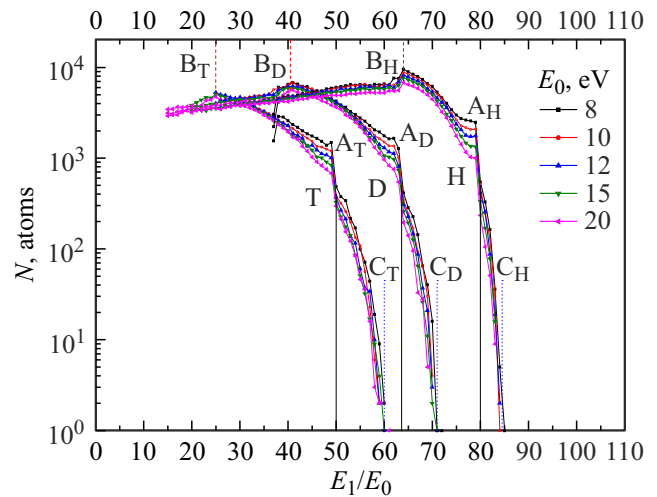


Рис. 4. Зависимость числа обратно рассеянных частиц с различными начальными энергиями от отношения энергии обратно рассеянной частицы к начальной энергии. Приведены кривые для рассеяния трех изотопов на бериллии. Наблюдается резкий спад при рассеянии изотопов на углы 90° (линии А) и 180° (линии В) при энергии, соответствующей однократному рассеянию, и высокоэнергетическая компонента, связанная с многократным рассеянием (линии С). Линии А, В, С (см. текст) отмечены буквами с обозначением соответствующего изотопа А_{Н, D, T}; В_{Н, D, T}; С_{Н, D, T}.

на мишень при энергиях менее 300 eV. При увеличении начальной энергии и возрастании угла падения пучка на мишень увеличивается средняя глубина образования распыленных частиц. Тем не менее для всех энергий средняя глубина менее 3 Å, что подтверждает наши представления о том, что имеет место распыление приповерхностных слоев потоком обратно рассеянных частиц.

Рассмотрим пороговые значения энергии, когда коэффициенты распыления стремятся к нулю. Как уже упоминалось, переданная поверхностному атому энергия $Q = \{4M_1M_2/(M_1 + M_2)^2\} \cdot E_1 > E_s$, т.е. должна превышать поверхностную энергию связи E_s , здесь M_1, M_2 — массы налетающей частицы и атома мишени, E_1 — средняя энергия обратно рассеянных частиц.

Энергия частицы после однократного рассеяния на угол θ в лабораторной системе координат описывается выражением:

$$\frac{E_1}{E_0} = \left(\frac{M_1}{M_1 + M_2} \right)^2 \left[\cos \theta \pm \left[\left(\frac{M_2}{M_2} \right)^2 - \sin^2 \theta \right]^{0.5} \right]^2 \quad (3)$$

На рис. 4 представлены энергетические спектры обратно рассеянных частиц при небольших начальных энергиях 8–20 eV. Для того чтобы частица пучка полетела в сторону поверхности, она должна рассеяться на атоме мишени в лабораторной системе координат минимум на 90° и ее максимальная энергия будет

составлять $(M_2 - M_1)/(M_1 + M_2) \cdot E_0$, где E_0 — начальная энергия. Эти положения для различных изотопов отмечены линиями с индексом А на рис. 4. Минимальные энергии частиц будут при однократном рассеянии на угол 180° — линии с индексом В на рис. 4. Как видно из рис. 4, при энергиях, отмеченных линиями, имеют место скачки интенсивности в спектре обратно рассеянных частиц при начальных энергиях в припороговой области. Это говорит о том, что в рассматриваемом случае роль однократных соударений весьма заметна.

При учете многократного рассеяния отношение $\xi = E_1/E_0$ возрастает и составляет 0.845 для системы H–Be, 0.71 для D–Be и 0.60 для системы T–Be (линии с индексом С на рис. 4). Многократное рассеяние увеличивает максимально возможное значение энергии обратно рассеянной частицы и отношение ξ . Учитывая полученные значения ξ , получаем для пороговой энергии выражение

$$E_{th} = E_s \frac{(M_1 + M_2)^2}{4M_1M_2\xi}. \quad (4)$$

Для систем H–Be, D–Be и T–Be получаем значения 10.91, 7.85 и 7.37 eV соответственно. Как видно из рис. 1, данные расчета с использованием формулы (4), согласуются с результатами компьютерного моделирования.

3. Зависимость коэффициента распыления от угла падения пучка на мишень

На рис. 5 приведены зависимости коэффициента распыления для систем H–Be, D–Be и T–Be от угла падения θ пучка на мишень, нормированные на значение коэффициента для угла падения $\theta = 0^\circ$ для двух типов барьера. Угол отсчитывается от нормали к поверхности. Данное представление уменьшает перекрытие кривых для разных начальных энергий и является удобным для анализа. Как видно из рис. 5, поведение кривых для разных изотопов похоже. Коэффициенты распыления сильно растут с увеличением угла падения. Этот рост связан с увеличением длины траектории пучка в области сбора распыленных частиц. Длина траектории при изменении угла падения пучка на мишень растет как $1/\cos\theta$, но ограничена пробегом пучка в мишени. Второй фактор, который может влиять на зависимость коэффициента распыления от угла падения, различие в сечении рассеяния в зависимости от угла поворота импульса скорости для обратно рассеянных частиц. В приближении, когда в распылении доминирует вклад обратно рассеянных частиц, можно ожидать зависимость

$$\frac{Y(\theta)}{Y(0)} = \frac{1}{\cos\theta} \frac{\sigma(\theta_1 - \theta)}{\sigma(\theta_1)}. \quad (5)$$

Здесь $\sigma(\theta)$ — дифференциальное сечение рассеяния на угол θ , θ_1 — средний угол рассеяния потока обратно

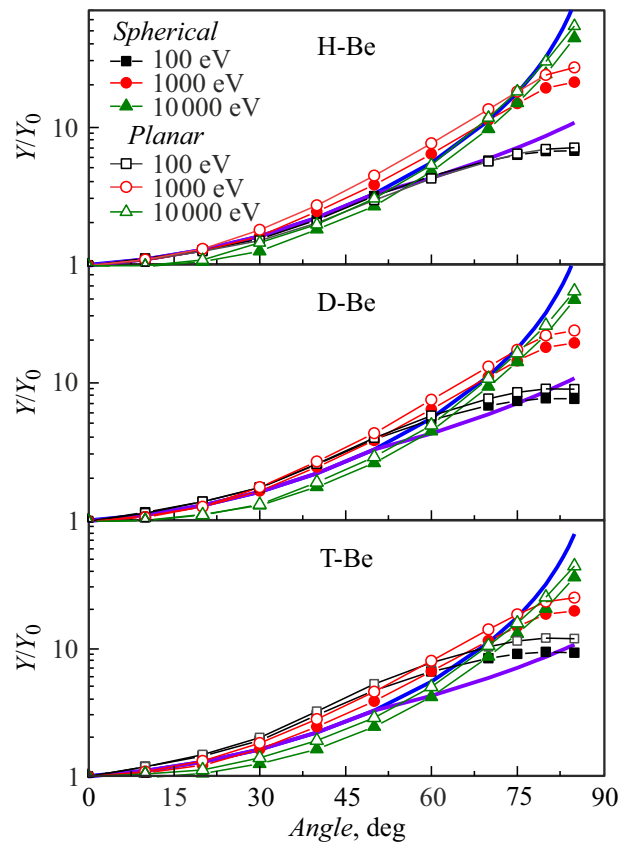


Рис. 5. Угловые зависимости коэффициента распыления бериллия для трех изотопов водорода для энергий 100, 1000, 10000 eV. Линии с открытыми символами — расчет для плоскостного барьера, со сплошными символами — для сферического барьера. Сплошными жирными линиями показаны теоретические пределы для угловых распределений.

рассеянных частиц. Как видно из рис. 5, предложенная простая зависимость подтверждается расчетными кривыми. Верхняя и нижняя теоретические кривые задают пределы изменения коэффициента, при этом нижняя кривая учитывает пробег в веществе частиц с энергией 100 eV.

Отличие кривых для двух типов барьеров показано на рис. 5. При представлении данных в нормированном виде отличие составляет порядка 20%.

На рис. 6 показана угловая зависимость коэффициента распыления для различных энергий первичного пучка. Расчет производился с использованием межатомного потенциала взаимодействия с ямой и без ямы. Из рис. 6 видно, что в случае чисто отталкивательного потенциала (без ямы) коэффициент распыления стремится к нулю при углах падения, близких к 90° . Такое поведение связано с эффектом блокировки.

При наличии потенциальной ямы эффект блокировки исчезает и при углах падения, близких к 90° , коэффициент распыления сильно не меняется.

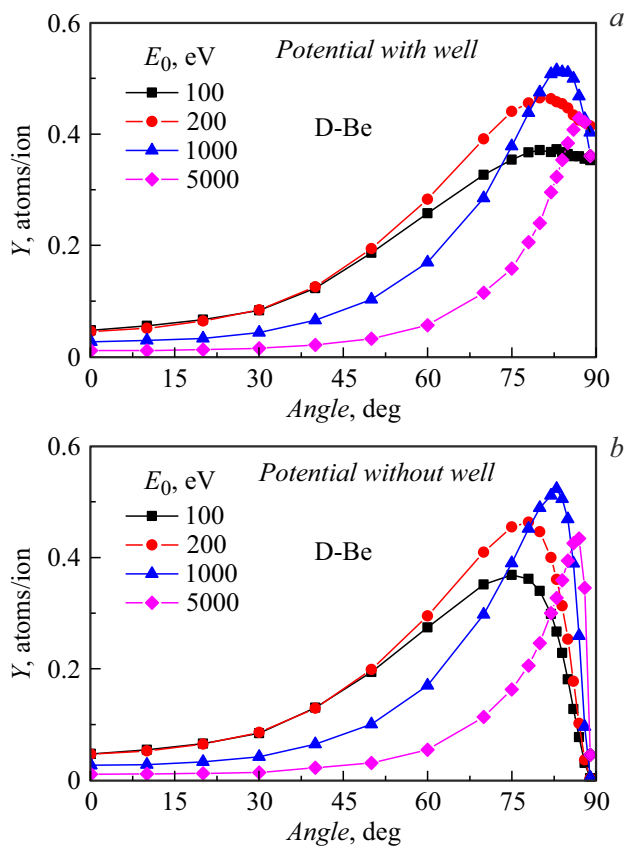


Рис. 6. Зависимость коэффициента распыления для четырех энергий первичного пучка от угла падения пучка на мишень при наличии ямы в потенциале (а) и при чисто отталкивательном потенциале без ямы (b) для системы D–Be.

4. Энергетические спектры распыленных частиц

С помощью нашей программы были рассчитаны энергетические спектры распыленных частиц. На рис. 7, а показаны спектры для системы D–Be и энергий бомбардирующих частиц в диапазоне 100–10 000 eV. Энергетический спектр резко падает с возрастанием энергии распыленной частицы E_{sp} . С ростом энергии бомбардирующих частиц спектр уширяется.

На рис. 7, b представлена зависимость средней энергии распыленных частиц от начальной энергии бомбардирующих частиц для различных углов падения пучка на мишень и различных изотопов. При малых углах падения пучка на мишень и энергий соударения меньше 1000 eV средняя энергия распыленных частиц растет пропорционально энергии бомбардирующих частиц и зависимость одинакова для различных изотопов. При возрастании угла падения пучка на мишень и увеличении энергии зависимость от массы изотопа проявляется, однако сохраняется группировка кривых для разных изотопов.

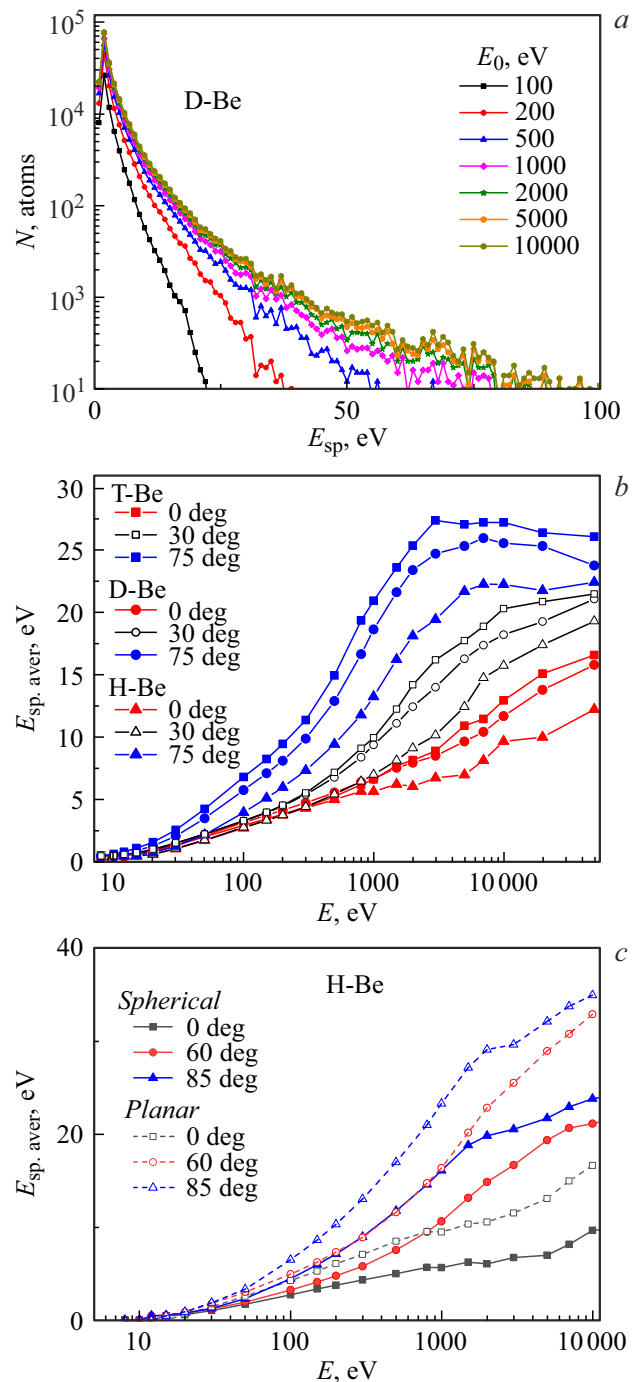


Рис. 7. а — энергетические спектры распыленных частиц для различных энергий атомов бомбардирующего пучка. Расчет для системы D–Be. б — зависимость средней энергии распыленной частицы от начальной энергии частиц пучка при различных углах падения пучка на мишень. Приведены данные для трех изотопов водорода H, D, T и сферического (spherical) барьера. в — зависимость средней энергии распыленной частицы от начальной энергии частиц пучка при различных углах падения пучка на мишень. Расчет приведен для системы H–Be и двух типов поверхностного барьера — сферического (spherical) и плоскостного (planar).

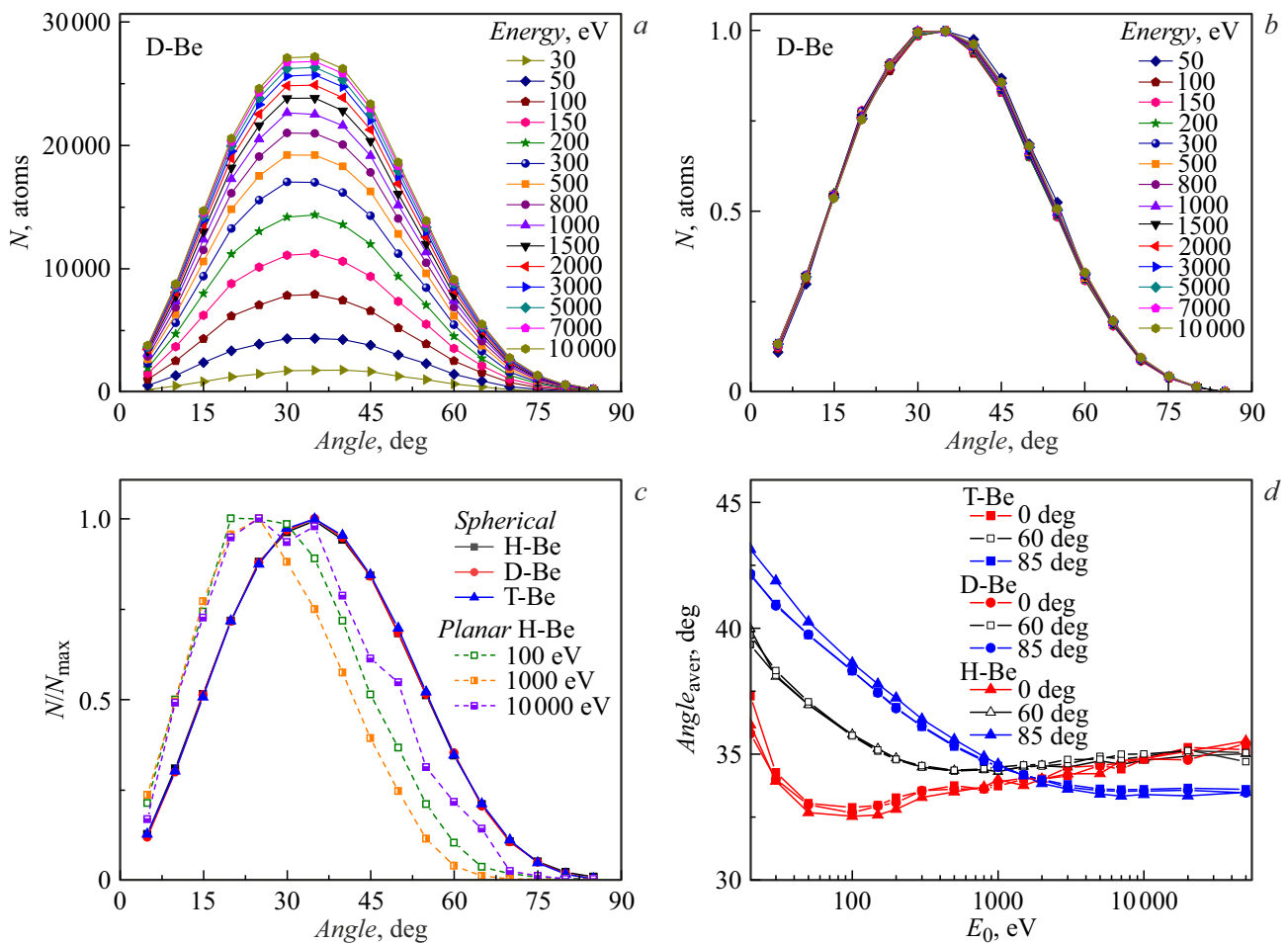


Рис. 8. *a* — распределение распыленных частиц по углу вылета при разных начальных энергиях бомбардирующих частиц для сферического барьера. Расчет для системы D–Be. Приведено количество вылетевших частиц, проинтегрированное по азимутальному углу и по углу вылета в диапазоне $\pm 2.5^\circ$. *b* — данные рис. 8, *a* нормированы на максимум интенсивности. Нормированная зависимость интенсивности потока распыленных частиц от угла вылета носит универсальный характер. *c* — приведена та же зависимость для различных изотопов. Для сферического барьера универсальная зависимость сохраняется для различных изотопов. Для плоскостного барьера наблюдается сдвиг угловой зависимости. *d* — зависимость среднего угла вылета распыленных частиц от энергии пучка для разных углов падения пучка на мишень и различных изотопов.

Для случая поверхностного барьера средняя энергия распыленных частиц возрастает (рис. 7, *c*) в связи с более жестким критерием отбора распыленных частиц.

5. Угловые распределения распыленных частиц

На рис. 8, *a* представлено распределение распыленных частиц по углу вылета при разных начальных энергиях бомбардирующих частиц для сферического барьера. Расчет для системы D–Be. Приведено количество вылетевших частиц, проинтегрированное по азимутальному углу и по углу вылета в диапазоне $\pm 2.5^\circ$. Из рис. 8, *a* видно, что угловое распределение имеет максимум для углов $\sim 35\text{--}40^\circ$. Аналогичные зависимости имеют место и для других изотопов.

На рис. 8, *b* приведены те же данные, что и на рис. 8, *a*, нормированные на максимум интенсивности. Зависимость вылета распыленных частиц от угла вылета носит универсальный характер. На наш взгляд, это обусловлено многократностью столкновений вылетевших частиц.

На рис. 8, *c* приведена зависимость для различных изотопов. Для сферического барьера и различных изотопов универсальная зависимость сохраняется. Для плоского потенциального барьера универсальная зависимость исчезает и имеет место сдвиг среднего угла вылета в сторону меньших углов, при этом с ростом энергии величина сдвига уменьшается. Оба явления связаны с критерием отбора вылетевших частиц.

Чтобы выявить разницу в угловом распределении вылета распыленных частиц для разных изотопов и углов падения пучка на мишень, мы рассчитали зависимость

среднего угла вылета от энергии бомбардирующих частиц (рис. 8, *d*). Как видно из рис. 8, *d*, изотопная зависимость среднего угла вылета практически отсутствует, при этом средний угол вылета максимален для малых энергий. При больших энергиях средний угол вылета практически одинаковый при падении пучка под углом 0° и 60° . Для угла падения 85° средний угол вылета распыленных частиц заметно меньше.

Заключение

Представлены результаты моделирования коэффициентов распыления поликристаллического бериллия изотопами водорода в диапазоне энергий соударения $8\text{ eV}–100\text{ keV}$ и их зависимости от угла падения пучка на поверхность, необходимые для оценки распыления первой стенки из бериллия в токамаке ИТЭР.

Показано сильное влияние формы поверхности на получаемые результаты. Рассмотрены предельные случаи плоского потенциального барьера (гладкая поверхность) и сферического потенциального барьера (поверхность, состоящая из острий). На наш взгляд, сильный разброс в имеющихся экспериментальных данных связан с различием в состоянии поверхности, в особенности при бомбардировке поверхности интенсивным пучком ионов. При измерениях коэффициентов распыления весовым методом обычно используются именно пучки с большой интенсивностью.

Промоделировано влияние каскадов соударений на коэффициент распыления. Получены зависимости средней глубины образования распыленной частицы от энергии бомбардирующих частиц при различных углах падения пучка на мишень. Рассчитаны энергетические спектры и угловые зависимости вылета распыленных частиц для различных энергий атомов бомбардирующего пучка. Данная информация важна для оценки поступления частиц в плазму.

Показано, что наличие потенциальной ямы в системе налетающая частица–поверхность, меняет характер зависимости коэффициента распыления от угла падения при малых углах скольжения.

В нашей работе [32] для типичных параметров токамака ИТЭР было проведено моделирование распыления стенки из бериллия потоками быстрых атомов дейтерия и трития, покидающих плазму. Полученное значение поступления распыленных атомов Ве составило $6.5 \cdot 10^{17}$ atoms/s с квадратного метра стенки. При типичных параметрах удержания ионов в плазме это составит 2.5–4.2% от концентрации ионов в плазме. Столь значительное содержание ионов Ве в районе сепаратрисы может привести к увеличению распыления дивертора из W многозарядными ионами Ве.

Полученные в настоящей работе подробные данные о коэффициентах распыления и зависимостей от угла падения частиц пучка на мишень, а также об энергетических и угловых зависимостях вылета распыленных

частиц дают надежную базу для оценки поступления примеси бериллия в плазму.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] K. Schmid. Nucl. Fusion, **48** (10), 105004 (2008). DOI: 10.1088/0029-5515/48/10/105004
- [2] A.S. Kukushkin, H.D. Pacher, V. Kotov, G.W. Pacher, D. Reiter. Fusion Eng. Des., **86** (12), 2865 (2011). DOI: 10.1016/j.fusengdes.2011.06.009
- [3] P.Yu. Babenko, M.I. Mironov, V.S. Mikhailov, A.N. Zinoviev. Plasma Phys. Control. Fusion, **62** (4), 045020 (2020). DOI: 10.1088/1361-6587/ab7943
- [4] R. Behrisch, W. Eckstein. *Sputtering by Particle Bombardment* (Springer, Berlin, 2007), DOI: 10.1007/978-3-540-44502-9
- [5] R.E.H. Clark. *Atomic and Plasma-Material Interaction Data for Fusion* (IAEA, Vienna, 2001), v. 7, Part B.
- [6] W.D. Wilson, L.G. Haggmark, J.P. Biersack. Phys. Rev. B, **15** (5), 2458 (1977). DOI: 10.1103/PhysRevB.15.2458
- [7] E. Salonen, K. Nordlund, J. Keinonen, C.H. Wu. J. Nucl. Mater., **313–316**, 404 (2003). DOI: 10.1016/S0022-3115(02)01397-1
- [8] K. Nordlund, C. Björkas, K. Vörtler, A. Meinander, A. Lasa, M. Mehine, A.V. Krashennikov. Nucl. Instr. Meth. B, **269** (11), 1257 (2011). DOI: 10.1016/j.nimb.2010.12.080
- [9] M.I. Airila, C. Björkas, A. Lasa, A. Meinander, K. Nordlund, K. Vörtler. J. Nucl. Mater., **438**, S589 (2013). DOI: 10.1016/j.jnucmat.2013.01.123
- [10] X. Yang, A. Hassanein. Appl. Surf. Sci., **293**, 187 (2014). DOI: 10.1016/j.apsusc.2013.12.129
- [11] Д.С. Мелузова, П.Ю. Бабенко, А.Н. Зиновьев, А.П. Шергин. Письма в ЖТФ, **46** (24), 19 (2020). DOI: 10.21883/PJTF.2020.24.50422.18487
- [12] A. Lopez-Cazalilla, J. Jussila, K. Nordlund, F. Granberg. Comput. Mater. Sci., **216**, 111876 (2023). DOI: 10.1016/j.commatsci.2022.111876
- [13] C. Björkas, K. Nordlund, S. Dudarev. Nucl. Instr. Meth. B, **267** (18), 3204 (2009). DOI: 10.1016/j.nimb.2009.06.123
- [14] X.-C. Li, X. Shu, Y.-N. Liu, Y. Yua, F. Gao, G.-H. Lu. J. Nucl. Mater., **426** (1–3), 31 (2012). DOI: 10.1016/j.jnucmat.2012.03.039
- [15] M.-C. Marinica, L. Ventelon, M.R. Gilbert, L. Proville, S.L. Dudarev, J. Marian, G. Bencteux, F. Willaime. J. Phys. Condens. Matter., **25**, 395502 (2013). DOI: 10.1088/0953-8984/25/39/395502
- [16] A.E. Sand, J. Dequeker, C.S. Becquart, C. Domain, K. Nordlund. J. Nucl. Mater., **470**, 119 (2016). DOI: 10.1016/j.jnucmat.2015.12.012
- [17] П.Ю. Бабенко, В.С. Михайлов, А.Н. Зиновьев. Письма в ЖТФ, (2023).
- [18] В. Экштайн. *Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела* (Мир, М., 1995)
- [19] П.Ю. Бабенко, А.Н. Зиновьев, В.С. Михайлов, Д.С. Тенсин, А.П. Шергин, Письма в ЖТФ, **48**, 10 (2022). DOI: 10.21883/PJTF.2022.14.52862.19231

- [20] D.S. Meluzova, P.Yu. Babenko, A.P. Shergin, K. Nordlund, A.N. Zinoviev. Nucl. Instr. Meth. B, **460**, 4 (2019). DOI: 10.1016/j.nimb.2019.03.037
- [21] П.Ю. Бабенко, А.Н. Зиновьев, Д.С. Тенсин. ЖТФ, **92** (11), 1643 (2022). DOI: 10.21883/JTF.2022.11.53436.151-22
- [22] A.N. Zinoviev, P.Yu. Babenko, K. Nordlund. Nucl. Instr. Meth. B, **508**, 10 (2021). DOI: 10.1016/j.nimb.2021.10.001
- [23] A.N. Zinoviev, K. Nordlund. Nucl. Instr. Meth. B, **406**, 511 (2017). DOI: 10.1016/j.nimb.2017.03.047
- [24] 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
- [25] М.В. Прокофьев, В.В. Светухин, М.Ю. Тихончев. Изв. Самарского НЦ РАН, **15**, 1024 (2013).
- [26] Б.П. Никольский. *Справочник химика* (Химия, Л., 1966)
- [27] Y.R. Luo. *Comprehensive Handbook of Chemical Bond Energies* (CRC Press, Boca Raton, 2007)
- [28] D. Primetzhofer, S. Rund, D. Roth, D. Goebl, P. Bauer. Phys. Rev. Lett., **107**, 163201 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.163201
- [29] A. Mann, W. Brandt. Phys. Rev. B, **24**, 4999 (1981). DOI: 10.1103/PhysRevB.24.4999
- [30] J.F. Ziegler, J.P. Biersack. SRIM. <http://www.srim.org>
- [31] P. Sigmund. Phys. Rev., **184**, 383 (1969). DOI: 10.1103/PhysRev.184.383
- [32] P.Yu. Babenko, M.I. Mironov, V.S. Mikhailov, A.N. Zinoviev. Plasma Phys. Control. Fusion, **62**, 045020 (2020). DOI: 10.1088/1361-6587/ab7943