

13

Влияние размера кристаллита на коэффициенты распыления вольфрама изотопами водорода и аргоном

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

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

Поступило в Редакцию 4 июня 2024 г.

В окончательной редакции 13 августа 2024 г.

Принято к публикации 12 сентября 2024 г.

С помощью разработанного нами кода впервые получены коэффициенты распыления Y вольфрамовой мишени изотопами водорода и аргоном в диапазоне энергий бомбардирующих частиц 0.01–100 keV в зависимости от размера кристаллита и типа поверхностного потенциального барьера. Моделирование предсказывает, что при энергиях свыше 100 eV с ростом размера кристаллита наблюдается существенный рост коэффициента распыления, при этом основное изменение происходит при увеличении размера кристаллита от одной до двух постоянных решетки. Продемонстрировано сильное влияние выбора типа поверхностного барьера на результаты расчетов коэффициентов распыления. Полученные результаты необходимы для анализа поступления примеси вольфрама в горячую зону плазмы токамака.

Ключевые слова: коэффициенты распыления, потенциал межатомного взаимодействия, изотопы водорода, аргон, вольфрам, размер кристаллита.

DOI: 10.61011/PJTF.2025.02.59557.20009

Управляемый термоядерный синтез в настоящее время рассматривается как перспективный альтернативный источник энергии. На пути к его успешной реализации необходимо преодолеть ряд трудностей технологического и технического характера. Наиболее важная проблема связана с вопросами стойкости конструктивных элементов, обращенных к горячей плазме. Поверхность первой стенки и дивертора будет облучаться высокоэнергетическими потоками быстрых атомов, нейтронов и потоками плазмы. Взаимодействие высокоэнергетических потоков плазмы с первой стенкой и другими конструктивными элементами токамака-реактора может привести к распылению этих элементов, изменению их структуры и их разрушению [1,2], а также к поступлению примесей в рабочий объем реактора [3–6]. Особенно большая нагрузка будет оказываться на поверхность дивертора [7,8]. Распыленные частицы первой стенки могут достигнуть последней замкнутой магнитной поверхности (сепаратрисы) и проникнуть в центральную зону плазменного шнура, вызывая большие потери энергии на излучение.

В качестве материала дивертора в токамаке ИТЭР планируется использовать один из самых тугоплавких металлов — вольфрам, имеющий низкий коэффициент распыления и высокий энергетический порог для коэффициента распыления. Однако недостатком вольфрама является большой атомный номер $Z = 74$: излучение ионов вольфрама будет приводить к большим потерям энергии. При концентрации вольфрама всего $\sim 0.1\%$ [9] невозможно достичь высокого энергетического КПД при термоядерном синтезе.

Поступление примесей в плазму реактора может значительно менять режим работы токамака, поэтому

необходимо точно знать и контролировать потоки поступающих примесей. Для этого нужна информация о коэффициентах распыления вольфрама изотопами водорода, а также аргоном, который может добавляться в плазму для понижения ее температуры в пристеночной области. На данный момент эти коэффициенты измерены лишь для ограниченного диапазона энергий. Кроме того, зачастую измерения разных исследовательских групп носят противоречивый характер. Для трития экспериментальные данные отсутствуют.

В качестве материала первой стенки и дивертора планируется использовать поликристаллический вольфрам. Топология поверхности может значительно влиять на распыление первой стенки. В работе [10] было показано, что коэффициент распыления ионами He и Ag сильно меняется в зависимости от ориентации граней кристаллической решетки W. В работе [11] было показано, что коэффициент распыления вольфрама ионами Ga для различных ориентаций поверхности меняется в 8 раз. При этом средний коэффициент распыления для граней различных ориентаций отличается от данных для аморфного материала. Большое внимание уделяется распылению вольфрамового пуха — колончатых структур, формирующихся на поверхности при облучении интенсивными пучками ионов [12,13]. Было выявлено дополнительное глобальное снижение выхода распыления, которое авторы объясняют влиянием эффекта переосаждения между наноколоннами. Эти результаты подтверждают применимость нанокolonчатого вольфрама в качестве первого покрытия стенки токамака.

Зависимость коэффициентов распыления от размеров кристаллита ранее не изучалась, хотя влияние топологии поверхности на коэффициент распыления отмечалось

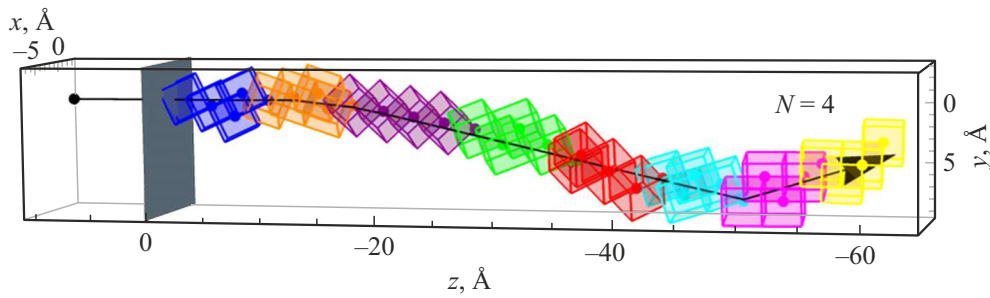


Рис. 1. Визуализация режимов работы программного кода $N = 4$ (размер зерна кристаллита равен четырем элементарным ячейкам). Для наглядности тепловые колебания отключены и кластеры-кубики не обрезаны слева, но во время моделирования происходило усечение всех атомов левее серой плоскости (с координатами $z < 0$). Цветные точки показывают, на каком атоме кластера происходит парное упругое столкновение. Кластеры в одном и том же зерне окрашены одинаковым цветом. Черная линия — траектория налетающего атома Ag с энергией 10 keV, стрелка указывает направление движения, Ag начинает движение в черной точке $(0, 0, 3a)$, a — постоянная решетки. Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи.

ранее (см., например, [10–13]). В задачи настоящей работы входило получение данных о коэффициентах распыления Y вольфрама аргоном и изотопами водорода (водородом, дейтерием, тритием) в широком диапазоне начальных энергий 0.01–100 keV для различных размеров кристаллита.

Для описания распыления частиц при ионной бомбардировке твердого тела использовался разработанный нами код, основанный на методе Монте-Карло и приближении парных взаимодействий [14].

Траектория налетающей частицы рассчитывается с использованием потенциалов, полученных в рамках теории функционала плотности [15]. Вносилась коррекция на параметры потенциальной ямы. Учитывалось торможение частиц в мишени. Ядерные тормозные способности, т.е. потери энергии, связанные с рассеянием на атомах мишени, рассчитывались точно исходя из законов сохранения энергии и импульса для используемого потенциала взаимодействия. Тормозные потери на электронах мишени в соответствии с рекомендациями работы [16] учитывались как произведение тормозной способности налетающей частицы на пройденное расстояние между столкновениями. Учитывались тепловые колебания атомов мишени, при этом амплитуда колебаний задавалась для комнатной температуры.

При столкновении налетающей частицы с атомами мишени образуются частицы отдачи, которые могут вылететь за границу поверхности, если преодолеют потенциальный барьер на границе твердое тело–вакуум. Учитывались также каскадные частицы, образующиеся при столкновениях частиц отдачи с атомами мишени.

Модель потенциального барьера на границе мишени заметно влияет на результаты расчетов. Эта модель зависит от топографии поверхности. Для сильно неровной поверхности, состоящей из острий атомного размера, поверхностный потенциал может быть принят изотропным (сферическим). В этом случае энергия распыленной частицы E_{out} должна быть больше энергии сублимации U_s . Для гладкой поверхности используется модель плос-

костного потенциала. В этом случае для распыленной частицы должно выполняться условие $E_{out} \cos^2 \theta > U_s$, где θ — угол вылета распыленной частицы, отсчитываемый от нормали к поверхности.

В реальных условиях работы токамака шероховатость поверхности может значительно меняться, поэтому мы рассчитывали коэффициенты распыления для рассмотренных выше двух предельных случаев.

Ранее в нашей работе [17] было показано, что выбор модели поверхностного потенциального барьера сильно влияет на коэффициент распыления.

Для описания мишени использовалась модель, в которой для учета корреляции в расположении ближайших соседей строился кластер атомов размером в одну постоянную решетки. Положение первого атома и ориентация кластера в пространстве выбирались случайным образом. После акта соударения строился следующий кластер, центр которого соответствовал положению атома, на котором произошло следующее рассеяние. В случае $N = 1$ ориентация этого кластера в пространстве выбиралась случайным образом. В случае $N \geq 2$ пространственная ориентация кластера сохранялась до тех пор, пока частица не провзаимодействует с заданным числом N кластеров. Затем ориентация кластера вновь выбирались случайным образом и вновь сохранялась до достижения значения N . Тем самым моделировалась поликристаллическая мишень с размером зерна кристаллита N , выраженным в числе элементарных ячеек. Размер кристаллита N варьировался от 1 до 100.

На рис. 1 приведена визуализация режима с $N = 4$ для случайно выбранной траектории.

На рис. 2 приведены результаты расчета коэффициента распыления Y в зависимости от энергии соударения при нормальном падении пучка на поверхность мишени для аргона. Штриховыми цветными линиями обозначен случай сферического барьера, сплошными цветными — планарного. Точки — экспериментальные данные различных авторов из монографии [18]. Серая штрихпунктирная линия — расчет группы Экштайна [18,19]. Циф-

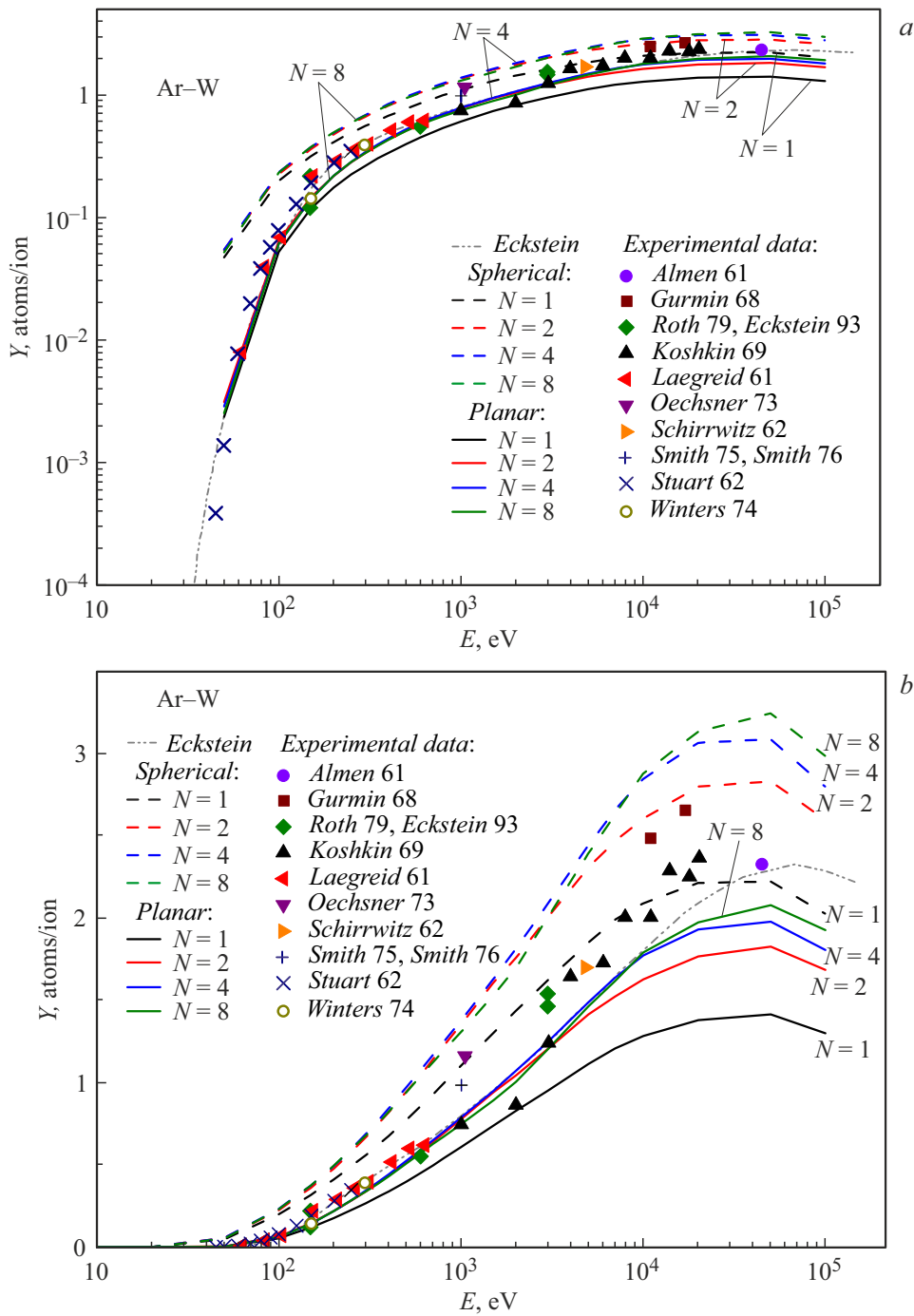


Рис. 2. Зависимости коэффициента распыления вольфрама от энергии соударения при нормальном падении пучка на мишень для аргона. Штриховые цветные линии — наш расчет для сферического барьера, сплошные цветные линии — наш расчет для планарного барьера, точки — экспериментальные данные, серая штрихпунктирная линия — расчет группы Экштайна. На фрагменте *b* результаты расчета представлены в линейном масштабе по оси ординат. Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи.

рами у кривых указан размер кристаллита N . На рис. 2, *b* использован линейный масштаб по оси ординат, чтобы подчеркнуть сильное влияние размера кристаллита на коэффициент распыления.

При увеличении числа N коэффициенты распыления в случае $Ar-W$ растут в обоих случаях потенциального

барьера вплоть до $N = 8$. Видно, что случай планарного барьера дает меньшие значения коэффициентов Y . При дальнейшем росте размера кристаллита $N > 8$ зависимость Y стремится к насыщению. Экспериментальные данные лучше согласуются с результатами моделирования для случая планарного барьера. Главным

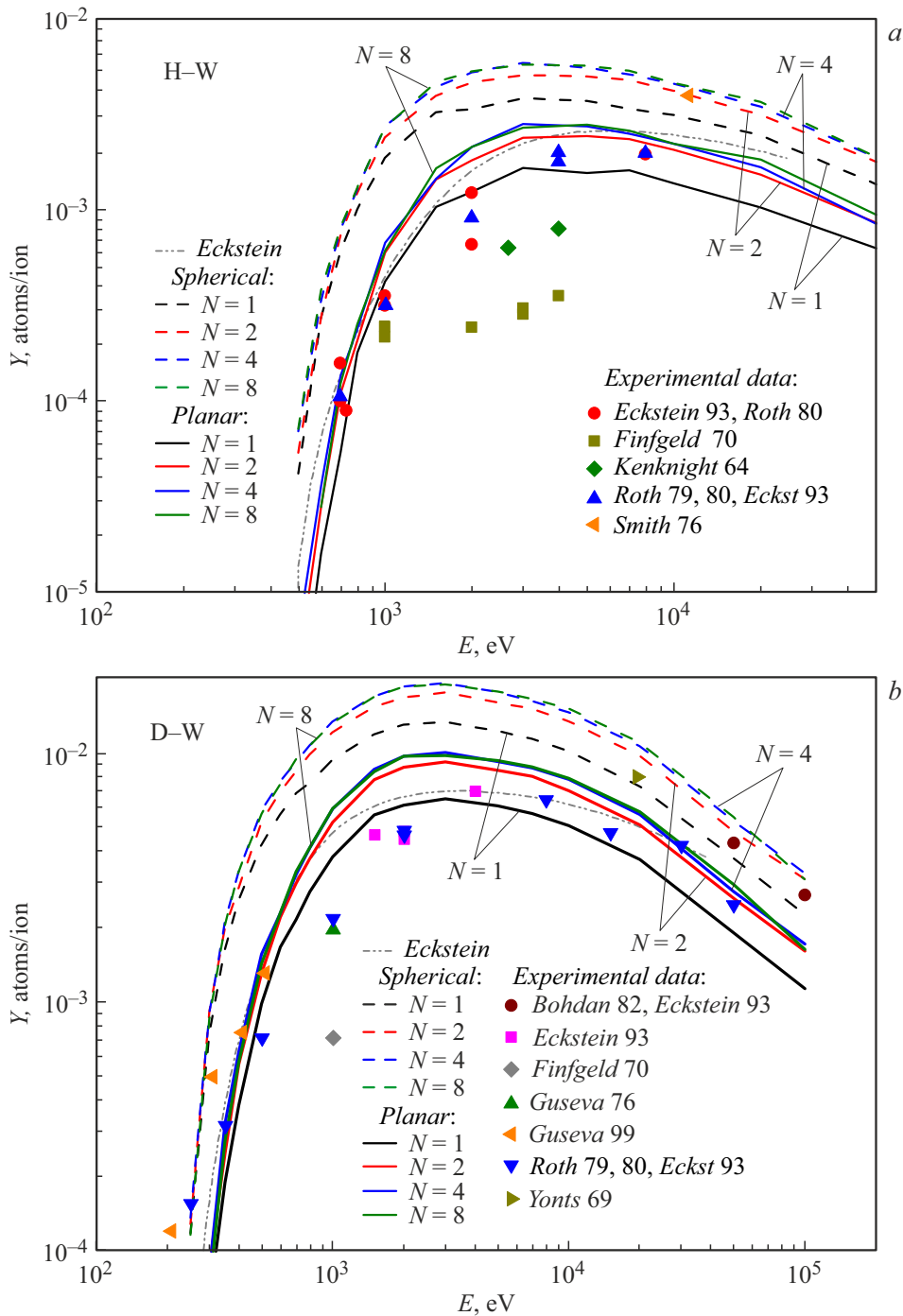


Рис. 3. Зависимости коэффициента распыления вольфрама от энергии соударения при нормальном падении пучка на мишень для изотопов водорода: *a* — H, *b* — D, *c* — T. Штриховые цветные линии — наш расчет для сферического барьера, сплошные цветные линии — наш расчет для планарного барьера, точки — экспериментальные данные, серая штрихпунктирная линия — расчет группы Экштайна. Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи.

обоснованием модели плоскостного потенциального барьера является наличие максимума в энергетическом распределении распыленных частиц. При сферическом поверхностном потенциале этот максимум должен появиться при энергии распыленных частиц, равной нулю, что не соответствует экспериментальным данным. При проведении измерения коэффициентов распыления в

случае вольфрама возможно приготовление достаточно гладкой поверхности. При интенсивном ионном облучении может возникнуть значительная шероховатость поверхности.

На рис. 3 приведены результаты расчета коэффициента распыления Y в зависимости от энергии соударения при нормальном падении пучка на поверхность мишени

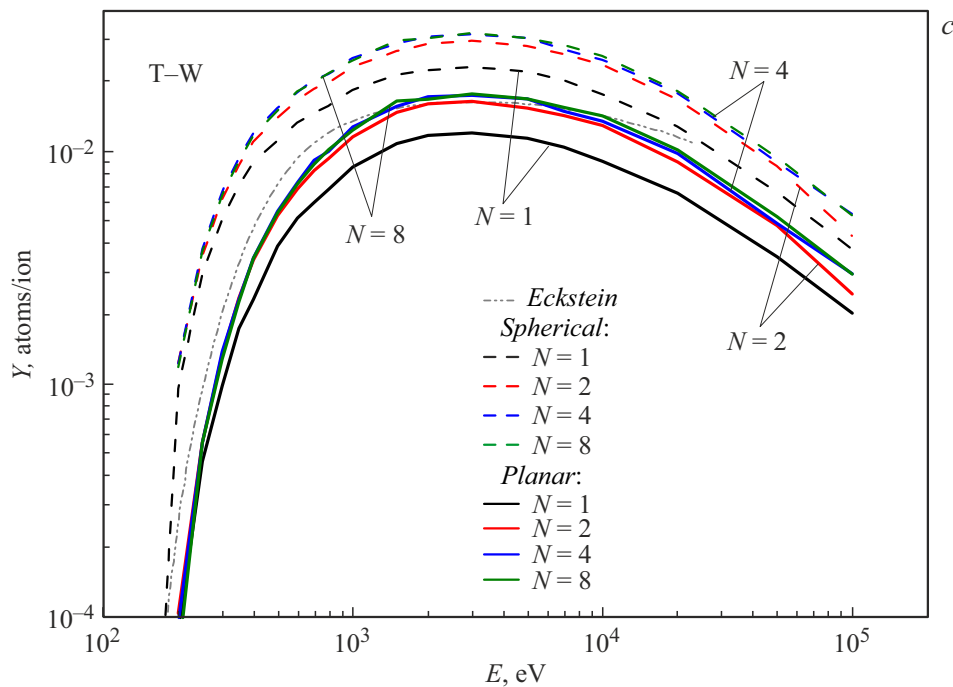


Рис. 3 (продолжение).

для изотопов водорода. При увеличении числа N коэффициенты распыления в случаях H–W, D–W, T–W также растут в обоих случаях потенциального барьера, но уже только вплоть до $N \approx 2$. Снова случай планарного барьера дает меньшие значения коэффициентов Y . При дальнейшем росте размера кристаллита $N \gtrsim 2$ зависимость Y стремится к насыщению. Экспериментальные данные, как и для случая Ar–W, лучше согласуются с результатами моделирования для случая планарного барьера.

Таким образом, установлено, что коэффициент распыления существенно зависит от размера кристаллита в мишени, при этом основное изменение происходит при увеличении размера кристаллита от $N = 1$ до $N = 2$, затем рост замедляется. На наш взгляд, полученные зависимости коэффициентов распыления от размера кристаллита в мишени могут быть связаны с проявлениями эффекта каналирования при выходе частиц отдачи из мишени. Результаты компьютерного моделирования подтверждают, что с ростом размера кристаллита растет глубина сбора распыленных атомов.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] J. Linke, J. Du, T. Loewenhoff, G. Pintsuk, B. Spilker, I. Steudel, M. Wirtz, *Matter Rad. Extrem.*, **4**(5), 056201 (2019). DOI: 10.1063/1.5090100
- [2] O. El-Atwani, S. Gonderman, M. Efe, G. De Temmerman, T. Morgan, K. Bystrov, D. Klenosky, T. Qiu, J.P. Allain, *Nucl. Fusion*, **54** (8), 083013 (2014). DOI: 10.1088/0029-5515/54/8/083013
- [3] S. Yamoto, X. Bonnin, Y. Homma, H. Inoue, K. Hoshino, A. Hatayama, R.A. Pitts, *Nucl. Fusion*, **57** (11), 116051 (2017). DOI: 10.1088/1741-4326/aa7fa6
- [4] R.D. Smirnov, S.I. Krashenninnikov, A.Yu. Pigarov, T.D. Rognien, *Phys. Plasmas*, **22** (1), 012506 (2015). DOI: 10.1063/1.4905704
- [5] F. Ding, G.-N. Luo, X. Chen, H. Xie, R. Ding, C. Sang, H. Mao, Z. Hu, J. Wu, Z. Sun, L. Wang, Y. Sun, J. Hu and the EAST Team, *Tungsten*, **1** (2), 122 (2019). DOI: 10.1007/s42864-021-00115-4
- [6] 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. Wiesen, *Nucl. Mater. Energy*, **20**, 100696 (2019). DOI: 10.1016/j.nme.2019.100696
- [7] B. Gao, R. Ding, H. Xie, L. Zeng, L. Zhang, B. Wang, C. Li, D. Zhu, R. Yan, J. Chen, *Fusion Eng. Des.*, **156**, 111616 (2020). DOI: 10.1016/j.fusengdes.2020.111616
- [8] J. Guterl, I. Bykov, R. Ding, P. Snyder, *Nucl. Mater. Energy*, **27**, 100948 (2021). DOI: 10.1016/j.nme.2021.100948
- [9] R.V. Jensen, D.E. Post, W.H. Grasberger, C.B. Tarter, W.A. Lokke, *Nucl. Fusion*, **17** (6), 1187 (1977). DOI: 10.1088/0029-5515/17/6/007
- [10] J. Jussila, F. Granberg, K. Nordlund, *Nucl. Mater. Energy*, **17**, 113 (2018). DOI: 10.1016/j.nme.2018.08.002

- [11] K. Schlueter, K. Nordlund, G. Hobler, M. Balden, F. Granberg, O. Flinck, T.F. da Silva, R. Neu, *Phys. Rev. Lett.*, **125** (22), 225502 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.225502
- [12] A. Lopez-Cazalilla, J. Jussila, K. Nordlund, F. Granberg, *Comput. Mater. Sci.*, **216**, 111876 (2023). DOI: 10.1016/j.commatsci.2022.111876
- [13] A. Lopez-Cazalilla, F. Granberg, K. Nordlund, C. Cupak, M. Fellinger, F. Aumayr, P.S. Szabo, A. Mutzke, R. Gonzalez-Arrabal, *Phys. Rev. Mater.*, **6** (7), 075402 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.6.075402
- [14] 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. Shergin, A.N. Zinoviev, *JETP*, **137** (3), 413 (2023). DOI: 10.1134/S106377612309011X].
- [15] A.N. Zinoviev, K. Nordlund, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B*, **406**, 511 (2017). DOI: 10.1016/j.nimb.2017.03.047
- [16] А.Н. Зиновьев, П.Ю. Бабенко, *Письма в 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].
- [17] V.S. Mikhailov, P.Yu. Babenko, A.P. Shergin, A.N. Zinoviev, *Plasma Phys. Rep.*, **50** (1), 23 (2024). DOI: 10.1134/S1063780X23601682
- [18] R. Behrisch, W. Eckstein, *Sputtering by particle bombardment* (Springer, Berlin, 2007). DOI: 10.1007/978-3-540-44502-9
- [19] R.E.H. Clark, *Atomic and plasma-material interaction data for fusion* (IAEA, Vienna, 2001), vol. 7, part B.