

Моделирование распыления W ионами Ne и Be методом молекулярной динамики

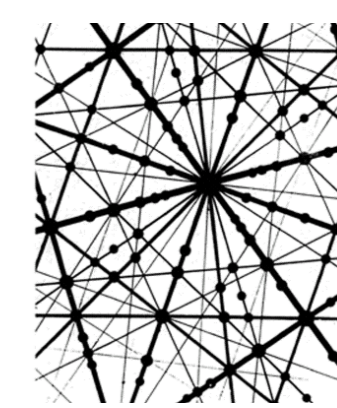
50-я Международная Тулиновская конференция по Физике Взаимодействия Заряженных Частиц с Кристаллами

Москва, МГУ им М.В. Ломоносова, 25-27 мая 2021



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

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия
e-mail: dmeluzova@gmail.com



Аннотация

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

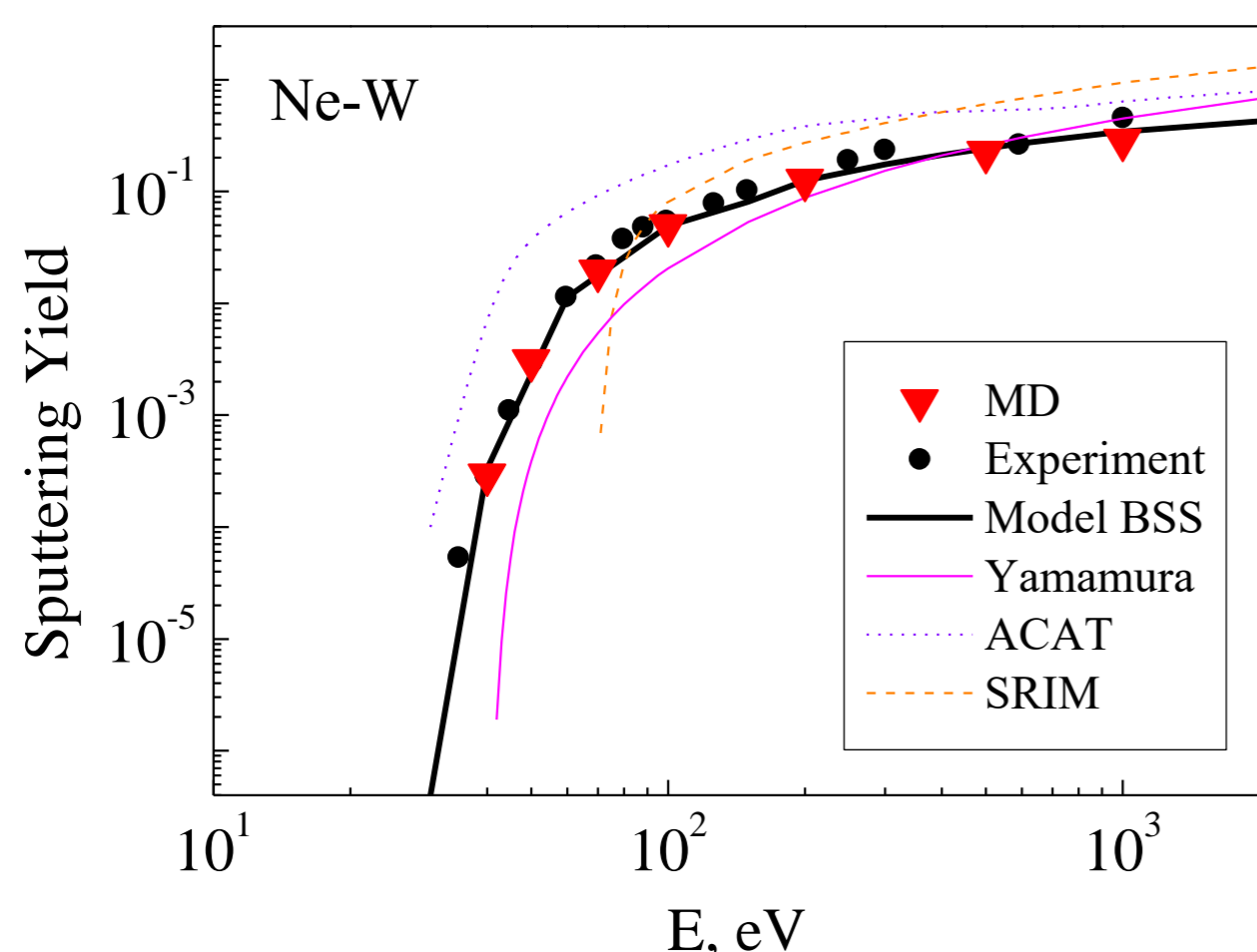


Рис. 1. Зависимость коэффициента распыления вольфрама от энергии бомбардирующих ионов неона. Модель выбивания поверхностных атомов потоком обратно рассеянных частиц (BSS – Back Scattering Sputtering).

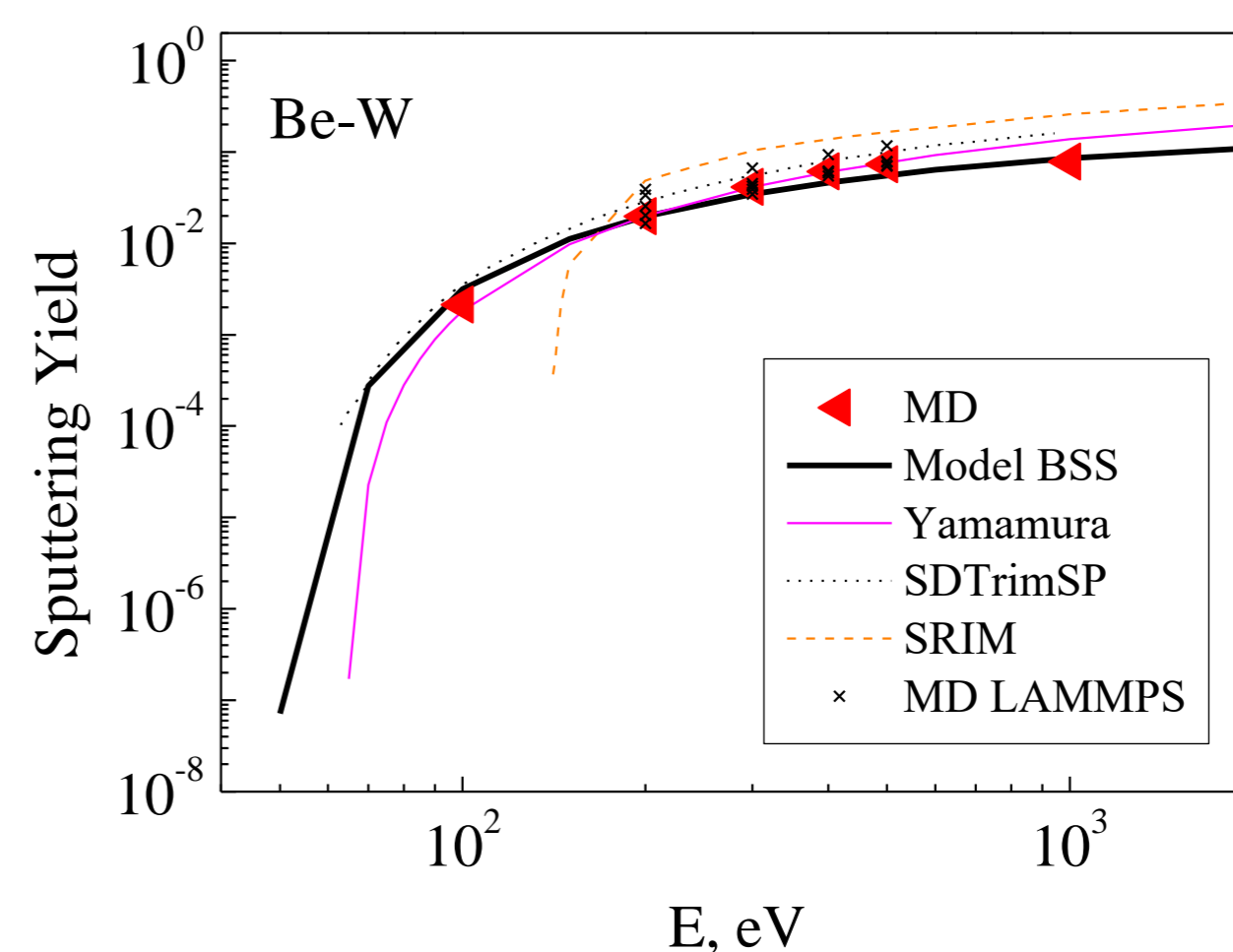


Рис. 2. Зависимость коэффициента распыления вольфрама от энергии ионов бериллия.

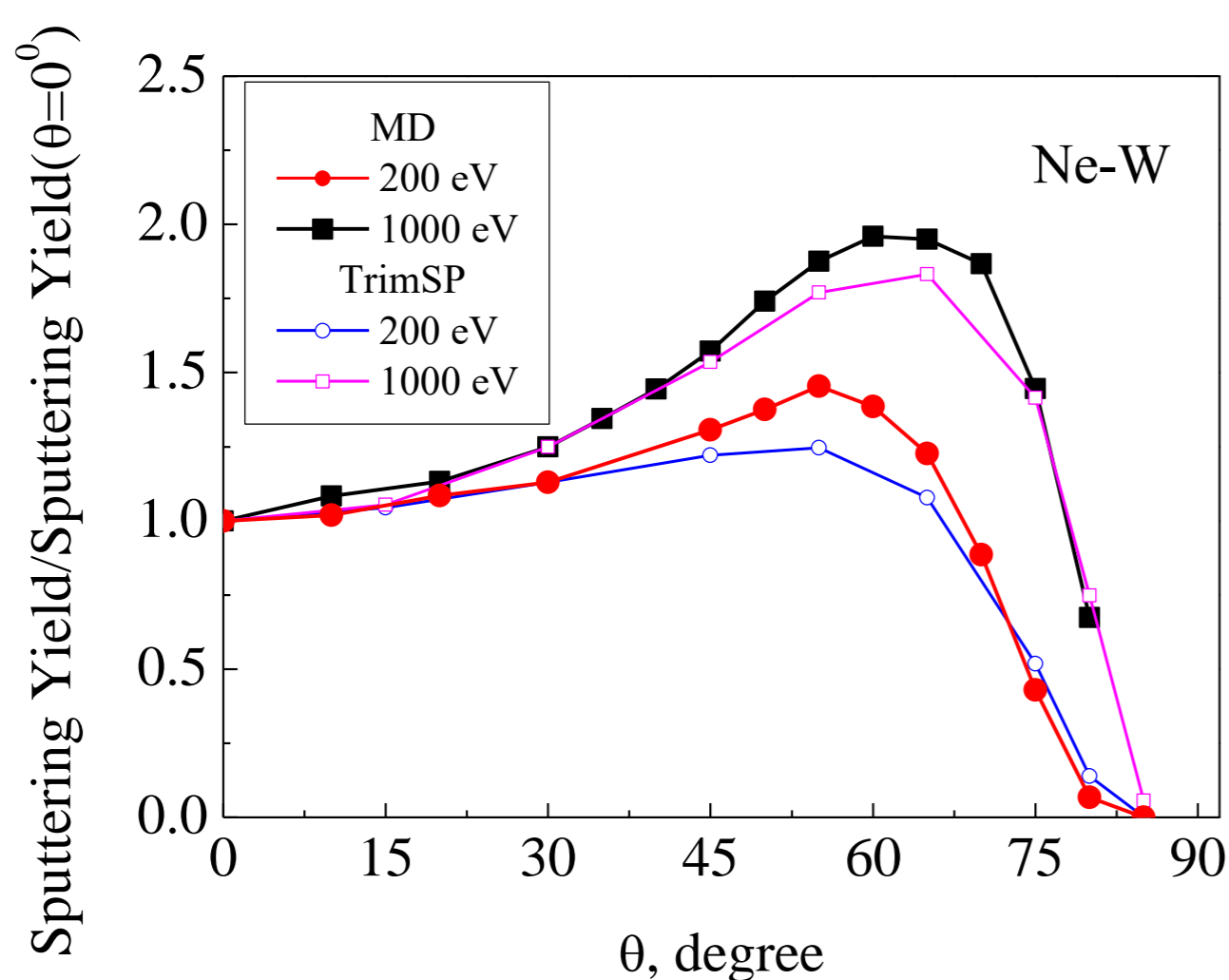


Рис. 3. Зависимость коэффициента распыления вольфрама ионами неона от угла падения пучка. Угол отсчитывается от нормали к поверхности.

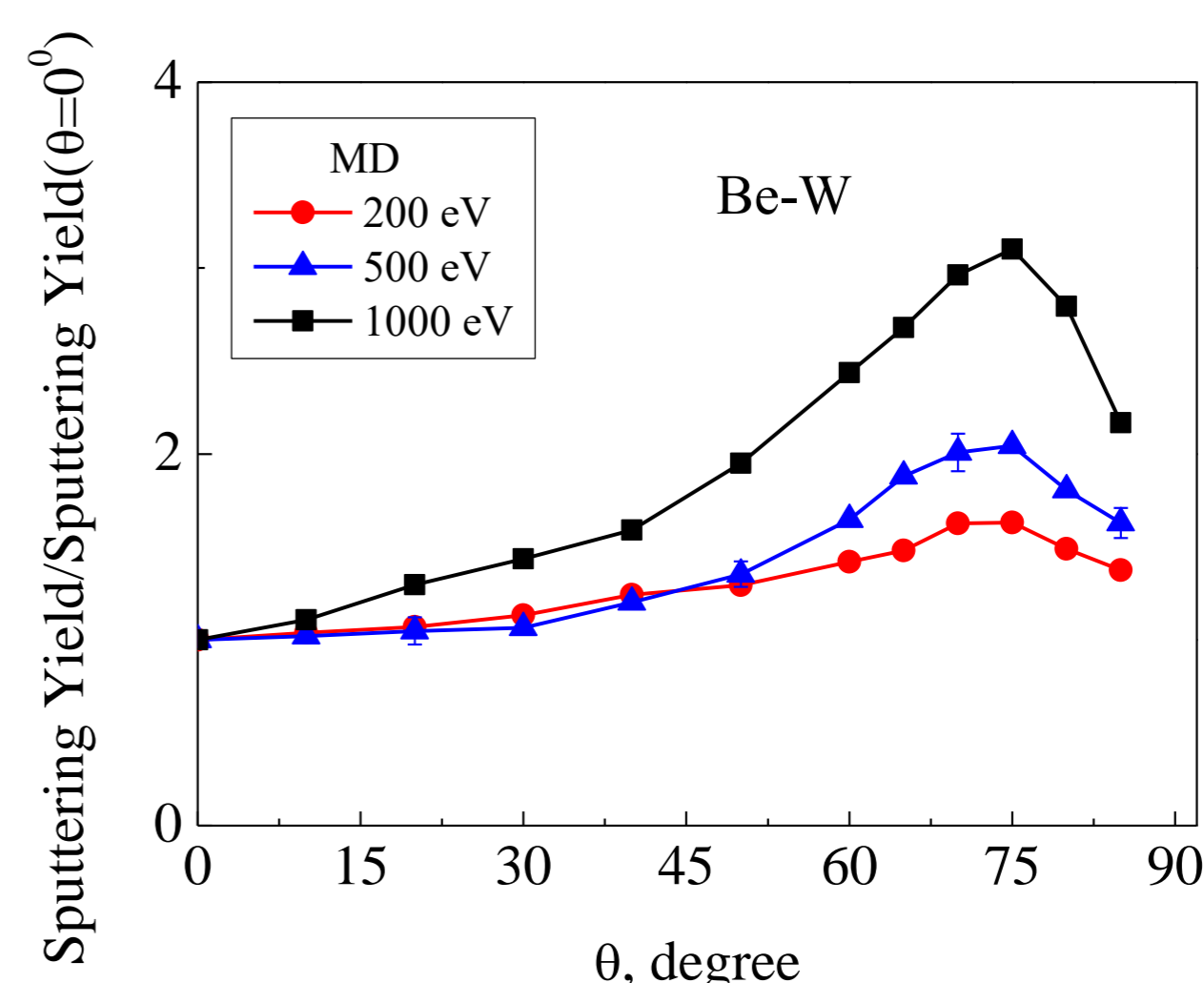


Рис. 4. Зависимость коэффициента распыления вольфрама ионами бериллия от угла падения пучка.

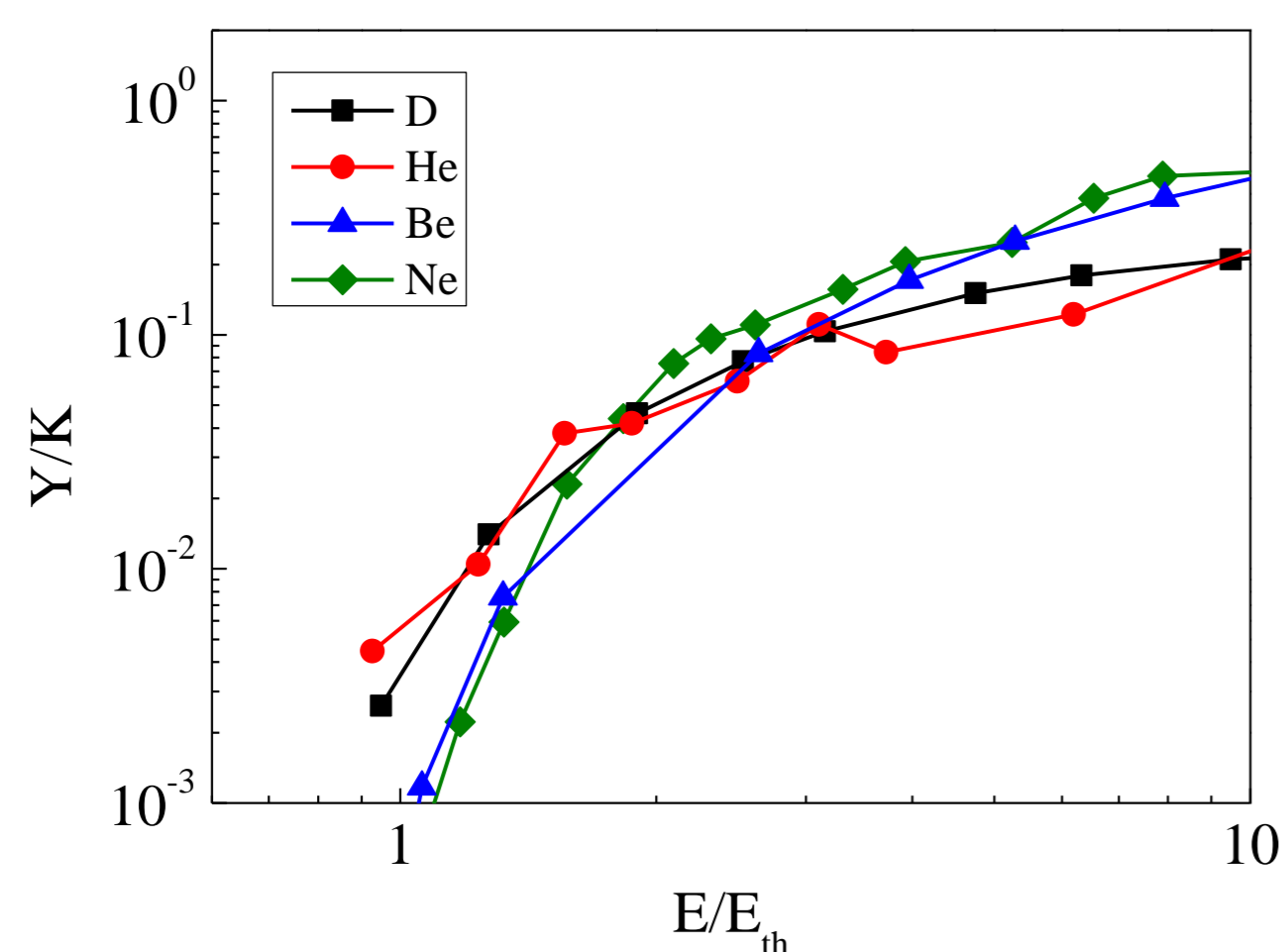


Рис. 5. Зависимость коэффициента распыления вольфрама различными ионами в приведенных координатах.

На рис. 5 представлены зависимости коэффициентов распыления вольфрама ионами D, He, Be, Ne. Для Be использованы расчетные данные, в остальных случаях - экспериментальные. Шкала энергий нормирована на величины пороговой энергии. Для нормирования по абсолютной шкале использован коэффициент $K = \sigma(\chi_{th})/d^2$ 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 рисунка 5, предложенная модель неплохо описывает поведение коэффициентов распыления в пороговой области. Обращает на себя внимание практически совпадение кривых для ионов близких масс. Имеется возможность экстраполяции данных на неизученные случаи.

Выводы

Методом молекулярной динамики рассчитаны коэффициенты распыления и их угловые зависимости при бомбардировке вольфрама ионами Be и Ne. В случае Ne имеется хорошее согласие с экспериментом.

Полученные данные для случая Be-W нужны для расчетов поступления примесей при бомбардировке ионами Be материала дивертора – вольфрама в плазме токамака-реактора ИТЭР.

Предложена модель, объясняющая универсальность поведения коэффициентов распыления в припороговой области при бомбардировке вольфрама легкими ионами.

Литература

1. Ziegler J.F., Biersack J.P. SRIM – <http://www.srim.org>.
2. Yamamura Y., Tawara H. // At. Data Nucl. Data Tables 1996. V. 62. P. 149; Yamamura Y., Itikawa Y., Itoh N. Angular dependence of sputtering yields of monatomic solids. IPPJ-AM report 26. Nagoya. 1983.
3. ACAT - Nakamura H., Saito S., Ito A.M. // J. Adv. Simulat. Sci. Eng. 2016. V. 3. P. 165.
4. SDTrimSP - Brezinsek S. // J. Nucl. Mater. 2015. V. 463. P. 11-21.
5. MD LAMMPS - Yang X., Hassanein A. // Appl. Surf. Sci. 2014. V. 293. P. 187.
6. Мелузова Д.С. И др. // ПЖТФ. 2020. Т.46. С.19.