МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПЫЛЕНИЯ Be ИОНАМИ D И Т МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Д.С. Тенсин\*, А.Н. Зиновьев, В.С. Михайлов

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

\*daria.tensin@gmail.com

С помощью молекулярно-динамического пакета LAMMPS рассчитаны энергетические и угловые зависимости коэффициентов распыления бериллия частицами плазмы. Эти данные позволяют сделать оценку распыления поверхностей, подвергающихся воздействию плазмы в токамаке-реакторе. Экспериментальные данные в исследуемом диапазоне энергий отсутствуют, наши данные согласуется с результатами независимых расчётов (рис. 1).

Для описания бериллиевой мишени был выбран многочастичный потенциал из работы [1]. Взаимодействие налетающих частиц с бериллием определяется потенциалом, полученным в рамках теории функционала плотности в нашей работе [2].



Рис.1 Зависимость коэффициента распыления Y от энергии налетающих частиц для D-Be. Чёрные точки – наш расчёт, пустые символы – результаты расчётов различных авторов из сборника [3]. Пунктирная кривая – фитирование расчётных данных [3].

1. Björkas С. et al // J. Phys.: Condens. Matter 2009 21 445002

2. Meluzova D.S et.al. // NIMB 2019 v.460 p.4.

3. Behrisch R., Eckstein W. Sputtering by Particle Bombardment Berlin Springer 2007.