

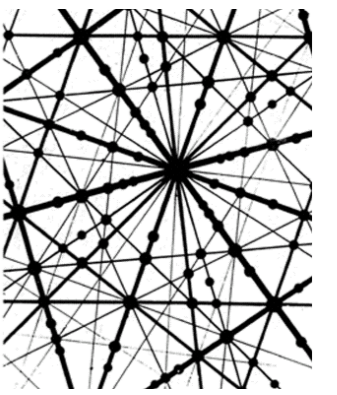
Моделирование распыления Ве ионами D и T методом молекулярной динамики

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

Москва, МГУ им М.В. Ломоносова, 24-26 мая 2022



Д.С. Тенсин, А.Н. Зиновьев, В.С. Михайлов
 ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия
 e-mail: daria.tensin@gmail.com



Аннотация

С помощью молекулярно-динамического пакета LAMMPS рассчитана энергетическая зависимость коэффициентов распыления бериллия атомами дейтерия. Наши данные согласуются с результатами независимых экспериментов. Помимо проведения молекулярно-динамического расчёта была предложена модель оценки коэффициентов распыления. Её эффективность продемонстрирована на основе сопоставления с экспериментальными данными и результатами независимых расчётов. Исследование коэффициентов распыления таких материалов как бериллий и вольфрам имеет практическое применение для оценки воздействия частиц плазмы на стенки токамака-реактора.

Для описания бериллиевой мишени был выбран многочастичный потенциал формы Абея – Терсоффа – Бреннера из работы [1]. Взаимодействие налетающих частиц с бериллием определяется потенциалом, полученным в рамках теории функционала плотности в нашей работе [2]. Данный потенциал имеет притягивающий характер на межъядерном расстоянии порядка нескольких единиц Ангстрем. Параметры притягивающей ямы в этом потенциале соответствуют параметрам соответствующей двухатомной молекулы. В предыдущих работах было показано, что использование данного потенциала даёт результаты согласующиеся с экспериментальными данными по отражению частиц от поверхности лучше, чем при использовании стандартных моделей двухчастичных потенциалов.

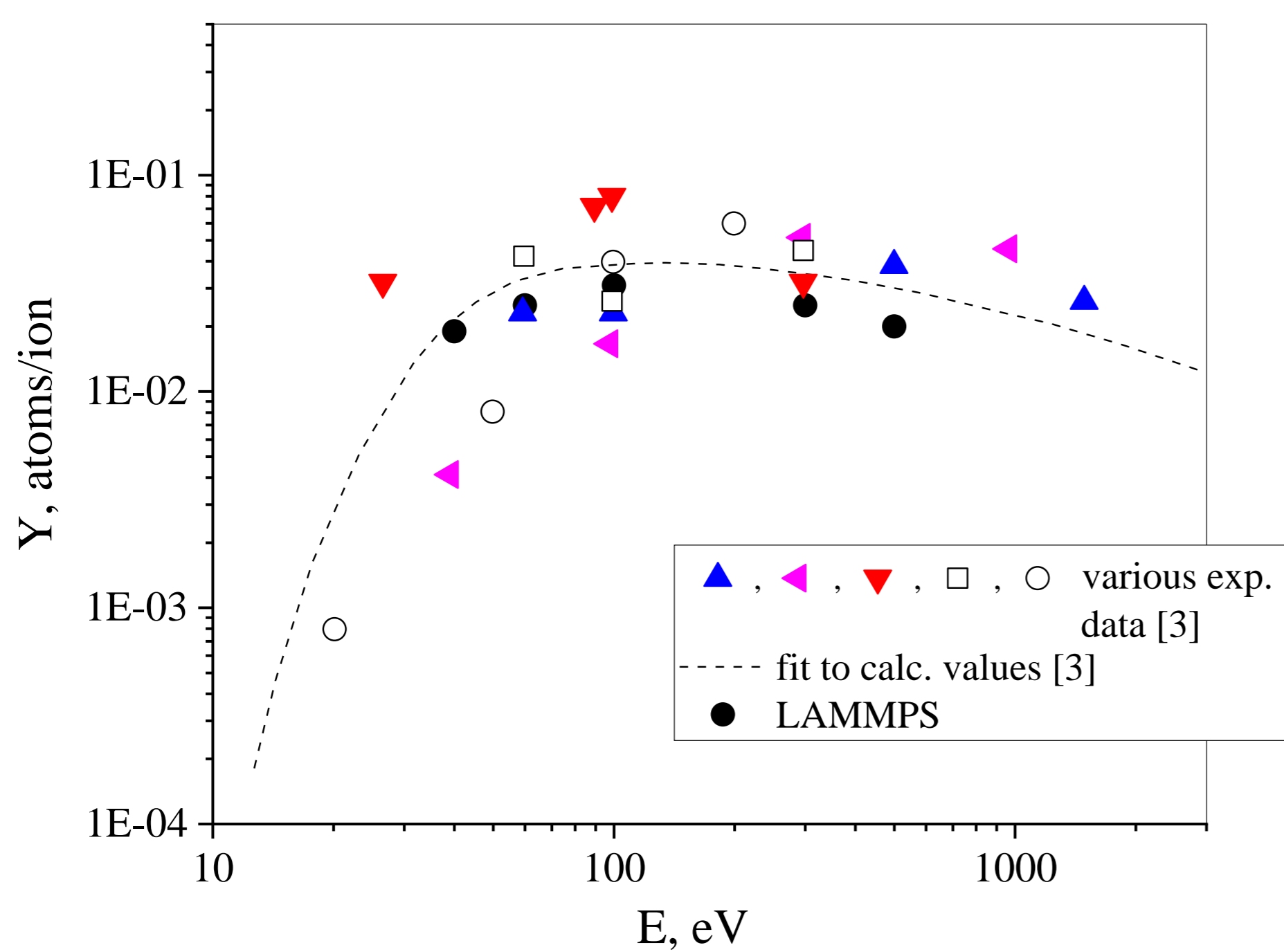


Рис. 1. Зависимость коэффициента распыления Ве от энергии бомбардирующих атомов D. Чёрные точки – наш расчёт, цветные и пустые символы – экспериментальные данные из сборника [3]. Пунктирная кривая – фитирование расчётных данных [3].

Выводы

Полученные данные по коэффициентам распыления позволят сделать оценку распыления поверхностей, подвергающихся воздействию плазмы в токамаке-реакторе. Развитие методик получения аналитических оценок и проведения расчётов методом молекулярной динамики с использованием наиболее достоверных потенциалов взаимодействия особенно важно для комбинаций частица-мишень, для которых экспериментальные данные в отсутствуют или ограничены в актуальных диапазонах энергий.

Литература

1. Björkas C. 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.

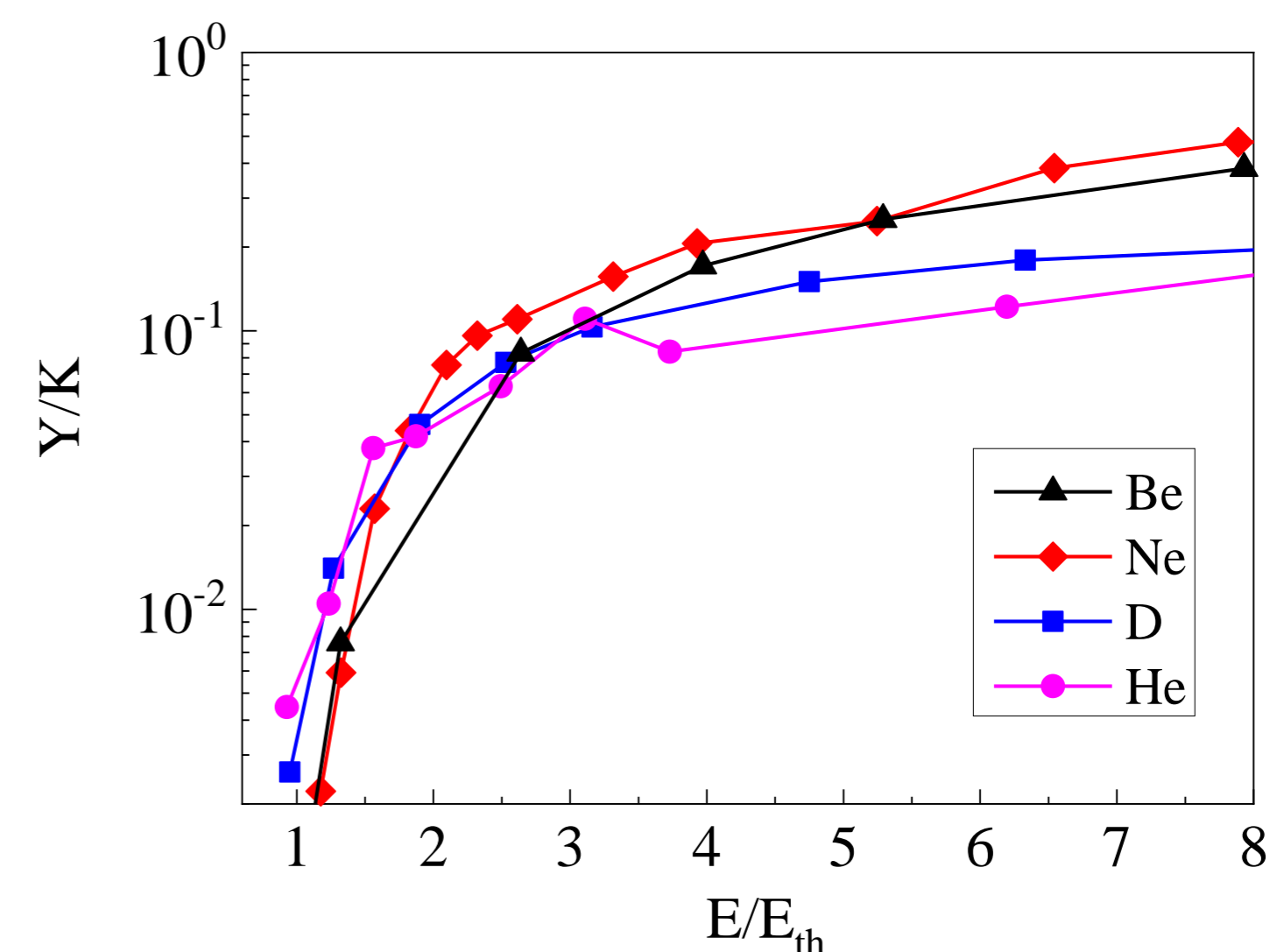


Рис. 2. Зависимости коэффициента распыления вольфрама различными ионами в приведенных координатах, полученные с использованием нашей модели.

На рис. 2 показан результат применения модели распыления потоком обратно рассеянных частиц для оценки коэффициентов распыления. 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 2, наша модель хорошо описывает поведение коэффициентов распыления в пороговой области. Кривые для ионов близких масс близки между собой. Имеется возможность экстраполяции данных на неизученные случаи.

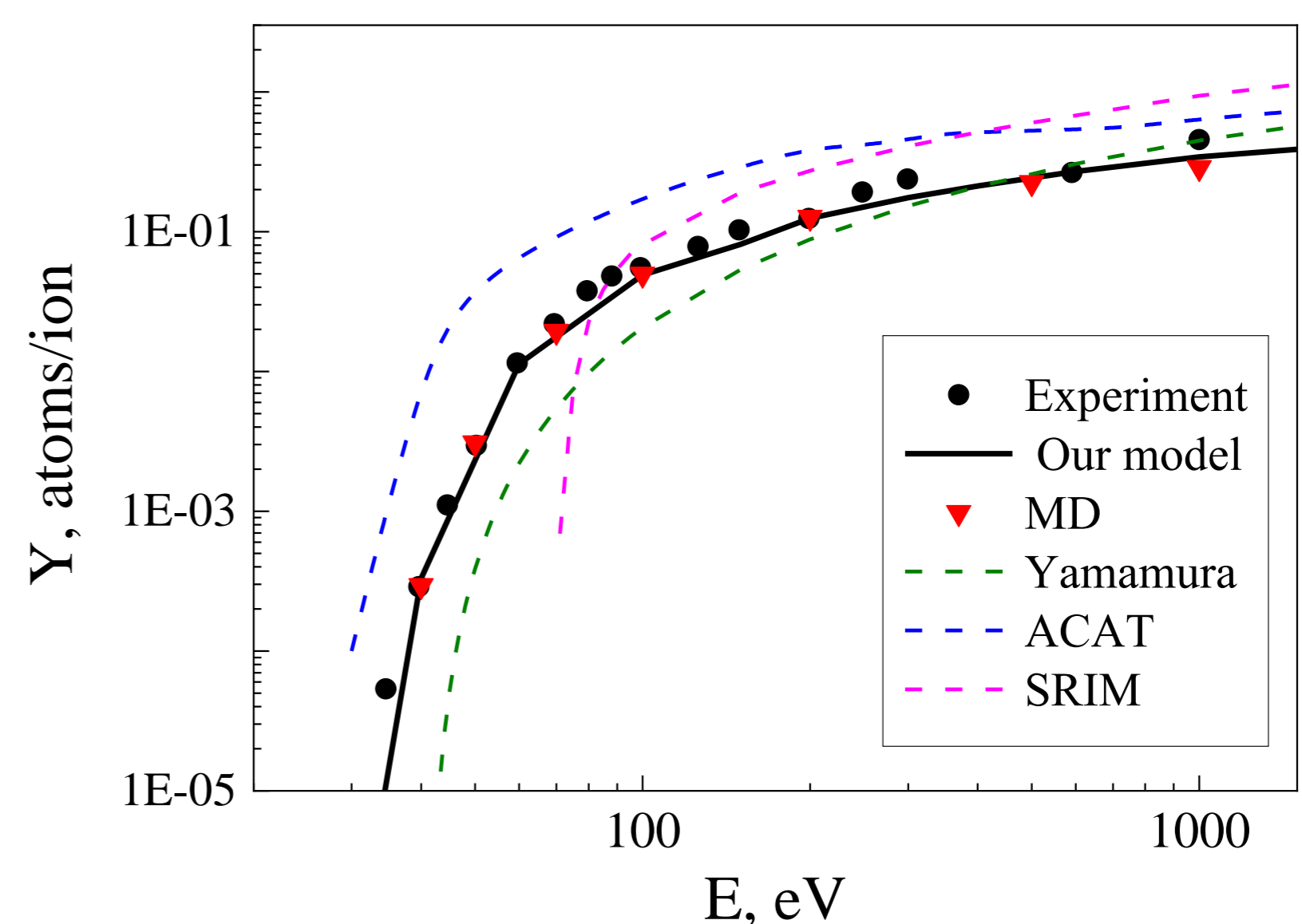


Рис. 3. Зависимость коэффициента распыления вольфрама от энергии бомбардирующих ионов неона.