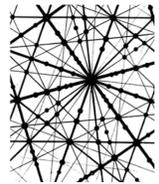


Влияние размера кристаллита на коэффициенты распыления и отражения



Аннотация

С помощью разработанного нами кода впервые получены коэффициенты распыления Y и отражения R_n вольфрамовой мишени аргоном в диапазоне энергий бомбардирующих частиц 0.01-100 keV в зависимости от размера кристаллита, выраженного в числе элементарных ячеек N , и типа поверхностного потенциального барьера. При энергиях свыше 100 eV с ростом размера зерна наблюдается существенный рост коэффициента распыления. Зависимость коэффициента отражения наблюдается в широком диапазоне N . Обнаружено сильное влияние выбора типа поверхностного барьера на результаты расчетов коэффициентов распыления. Полученные результаты необходимы для анализа поступления примеси вольфрама в горячую зону плазмы токамака.

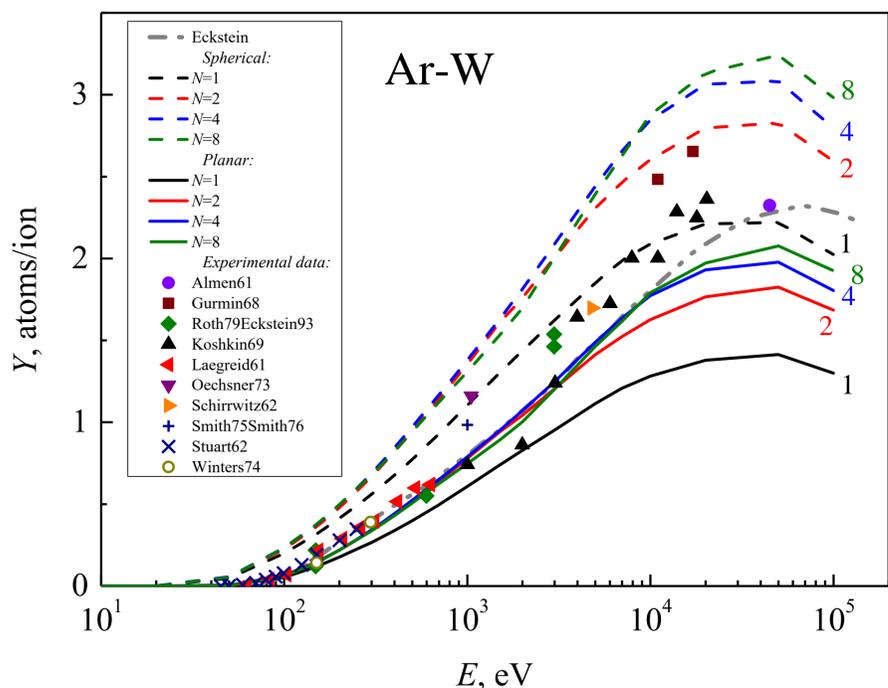


Рис. 1. Зависимость коэффициента распыления от энергии соударения при нормальном падении пучка на мишень. Наш расчет для сферического барьера — штриховые цветные линии, сплошные цветные линии — расчет для планарного барьера. Цифрами у кривых показан размер кристаллита N . Точки — экспериментальные данные [1]. Серая штрихпунктирная линия — расчет группы Экштайна [1, 2].

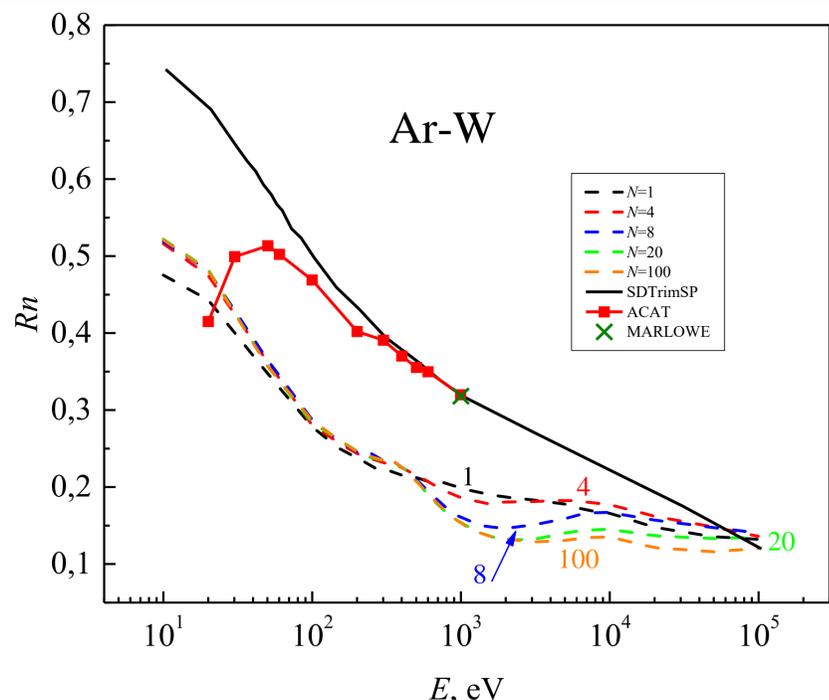


Рис. 2. Зависимость коэффициента отражения от энергии соударения при нормальном падении пучка на мишень. Штриховые цветные линии — наш расчет. Цифрами у кривых показан размер кристаллита N . Черная линия — расчет программой SDTrimSP из работы Экштайна [3]. Квадраты — расчет программой ACAT [4]. Звезда — расчет программой MARLOWE [5].

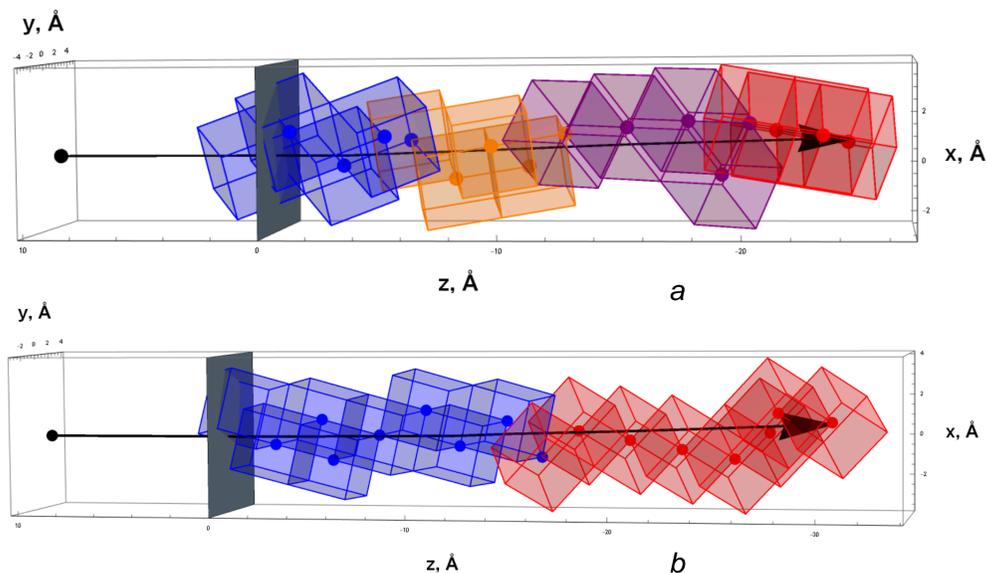


Рис. 3. Визуализация режимов работы кода. *a*: $N = 4$ (размер зерна кристаллита равен четырем элементарным ячейкам), *b*: $N = 8$ (размер зерна — восемь элементарных ячеек). Для наглядности тепловые колебания отключены. Цветные точки — на каком атоме кластера происходит парное упругое столкновение. Кластеры в одном и том же зерне окрашены в единый цвет. Черная линия — траектория налетающего Ar. Во время моделирования происходило усечение всех атомов левее серой плоскости (с координатами $Z < 0$)

Для описания процессов распыления и отражения при ионной бомбардировке твердого тела использовался разработанный нами код [6], который учитывает новейшие представления о потенциалах взаимодействия и современные данные о ядерных и электронных тормозных способностях. Учет шероховатости поверхности мишени происходил через выбор потенциального поверхностного барьера.

Плоскостной барьер:

(соответствует идеально гладкой поверхности)
 $E_{out} \cos^2 \theta > U_{sub}$

Сферический барьер:

(соответствует поверхности из остриев атомного размера)
 $E_{out} > U_{sub}$

U_{sub} — энергия сублимации

E_{out} — энергия распыленной частицы

θ — угол вылета частицы

Мишень представляла из себя последовательную очередность кластеров атомов размером в одну постоянную решетки. Положение первого кластера и его ориентация в пространстве выбирались случайным образом.

После акта соударения строился следующий кластер, центр которого соответствовал положению атома, на котором произошло дальнейшее рассеяние. В случае $N = 1$ ориентация этого кластера в пространстве менялась случайным образом каждый раз при построении. В случае $N \geq 2$ пространственная ориентация кластера сохранялась для N актов соударения. Затем ориентация кластера вновь выбирались случайным образом и вновь сохранялась в течение N соударений. Тем самым моделировалась поликристаллическая мишень с размером зерна кристаллита N , выраженным в числе элементарных ячеек.

ВЫВОДЫ

- Показано, что при увеличении числа N коэффициенты распыления в случае Ar-W растут в обоих случаях потенциального барьера вплоть до $N = 8$. При энергиях свыше 100 eV с ростом размера зерна кристаллита наблюдается существенное увеличение коэффициента распыления. При дальнейшем росте размера кристаллита $N > 8$ зависимость Y стремится к насыщению. Предполагается, что полученные зависимости коэффициентов распыления от размера кристаллита в мишени связаны с проявлениями эффекта каналирования при выходе частиц отдачи из мишени.
- Продемонстрировано влияние выбора типа поверхностного барьера на результаты расчетов коэффициентов Y . Экспериментальные данные лучше согласуются с результатами моделирования плоскостного барьера.
- Обнаружено, что коэффициент отражения также зависит от размера кристаллита. Эта зависимость наблюдается вплоть до режима $N = 100$, затем исчезает.

1. R. Behrisch, W. Eckstein. Sputtering by Particle Bombardment (Springer, Berlin, 2007). DOI: 10.1007/978-3-540-44502-9

2. R.E.H. Clark, Atomic and Plasma-Material Interaction Data for Fusion. v.7, Part B (IAEA, Vienna, 2001).

3. W. Eckstein. Reflection (Backscattering). IPP-17-12 (IPP, Garching, 2009).

4. Y. Yamamura. NIMB, 33(1-4), 429 (1988). DOI: 10.1016/0168-583X(88)90599-X

5. O.S. Oen, M.T. Robinson. AIP Conf. Proc., 111(1), 171 (1984). DOI: 10.1063/1.34417

6. В.С. Михайлов, П.Ю. Бабенко, А.П. Шергин, А.Н. Зиновьев, ЖЭТФ, 164 (3), 478 (2023). DOI: 10.31857/S004445102309016X