

УДК 533.9

ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА РАСПЫЛЕНИЯ ОТ ЭНЕРГИИ И УГЛА ПАДЕНИЯ БОМБАРДИРУЮЩЕЙ ЧАСТИЦЫ. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И СРЕДНЯЯ ЭНЕРГИЯ РАСПЫЛЕННЫХ ЧАСТИЦ НА ПРИМЕРЕ МИШЕНИ ИЗ ВОЛЬФРАМА

© 2024 г. П. Ю. Бабенко^{а, *}, В. С. Михайлов^а, А. П. Шергин^а, А. Н. Зиновьев^а^аФизико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

*e-mail: babenko@npd.ioffe.ru

Поступила в редакцию 16.06.2024 г.

После доработки 03.07.2024 г.

Принята к публикации 12.07.2024 г.

Дан обзор функциональных зависимостей для описания свойств атомных частиц, распыленных при ионной бомбардировке поверхности твердого тела. Рассмотрена зависимость коэффициентов распыления от энергии и угла падения бомбардирующей частицы. Приведены энергетические спектры и средние энергии распыленных частиц. На примере мишени из вольфрама и изотопов водорода в качестве снарядов предложены формулы для расчета рассматриваемых величин. Эти данные необходимы для оценки поступления распыленных атомов вольфрама в качестве примеси в горячую плазму с использованием транспортных кодов. При концентрации примеси вольфрама более критической невозможно осуществить управляемую термоядерную реакцию с планируемым энергетическим выходом в токамаке-реакторе ИТЭР. Коэффициенты распыления также играют важную роль при моделировании поступления примесей в плазменные установки в результате взаимодействия атомов водородного топлива с материалами дивертора и первой стенки.

Ключевые слова: ионная бомбардировка поверхностей, вольфрам, коэффициенты распыления, энергетические спектры распыленных частиц, токамак ИТЭР

DOI: 10.31857/S0367292124090026, **EDN:** DVJQUC

1. ВВЕДЕНИЕ

Реакция слияния дейтерия и трития, осуществляемая при наиболее низкой температуре, выбрана в международном проекте ИТЭР в качестве демонстрации возможности достижения термоядерного синтеза с положительным выходом. Однако уже с самого начала термоядерных исследований было ясно, что одной из основных преград на пути к управляемому термоядерному синтезу является проблема взаимодействия высокоэнергетических частиц плазмы с материалами первой стенки реактора. В качестве материала дивертора и стенки реактора в токамаке ИТЭР планируется использование вольфрама. Высокоэнергетические потоки изотопов водорода способны приводить к разрушению обращенных к плазме материалов и к поступлению нежелательных примесей в плазму. В работе [1] было продемонстрировано,

что для характерных сценариев ИТЭР количество образующихся частиц распыленного вольфрама весьма близко к критическим значениям. Современные расчеты критической концентрации вольфрама для условий ИТЭР с положительным выходом $Q > 10$ дают значение $1.9 \cdot 10^{-4}$ от плотности плазмы [2, 3]. Проблема использования вольфрама в качестве материала первой стенки и дивертора широко обсуждается [4–7].

Для корректного учета количества поступающего в плазму материала необходимо знать энергетические и угловые зависимости коэффициентов распыления $Y(E, \theta)$ вольфрама изотопами водорода. Из работы [8] видно, что экспериментальные данные по $Y(E, \theta)$ весьма ограничены, и зачастую носят противоречивый характер. Какие-либо данные по распылению вольфрама тритием отсутствуют.

Отдельный интерес представляет информация об энергиях распыленных частиц вольфрама. Эти данные позволяют спрогнозировать дальнейший транспорт примеси и оценить вероятность прохождения в центральную область плазмы. Экспериментальные данные по энергетическим спектрам распыленного вольфрама практически отсутствуют.

Данная работа посвящена обзору имеющихся моделей, описывающих зависимость коэффициентов распыления от энергии и угла падения бомбардирующей частицы, и предоставляет сводку функциональных зависимостей (формул) для описания энергетических характеристик распыленных частиц.

2. ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА РАСПЫЛЕНИЯ ОТ ЭНЕРГИИ БОМБАРДИРУЮЩЕЙ ЧАСТИЦЫ

На рис. 1 представлены имеющиеся экспериментальные данные и данные расчетов коэффициента распыления при различных энергиях соударения для системы дейтерий–вольфрам (D–W). Как видно из рис. 1, экспериментальные данные имеют большой разброс. Представлены

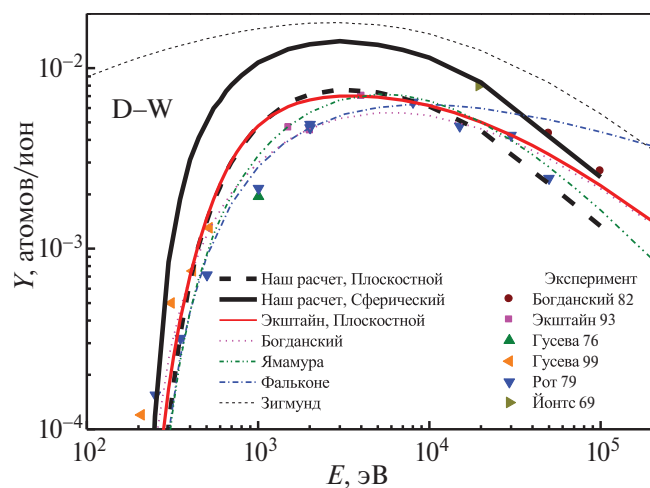


Рис. 1. Зависимость коэффициента распыления от энергии бомбардирующей частицы. Точки — эксперимент из работы [8]. Красная сплошная линия — расчет Экштайна для плоскостного поверхностного барьера из работы [8]. Черная жирная сплошная линия — наш расчет для сферического барьера. Черная жирная штриховая линия — наш расчет для плоскостного барьера. Тонкая штриховая линия — расчет по формуле Зигмунда. Пунктирная линия — расчет по формуле Богданского. Штрихпунктир-пунктирная линия — расчет по формуле Ямамуры. Штрихпунктирная линия — расчет по формуле Фальконе.

результаты компьютерного моделирования из работы [9]. Рассмотрены два предельных случая поверхностного потенциального барьера. Для поверхности, состоящей из острий атомного размера, применим сферический потенциальный барьер. В этом случае распыляются частицы с энергией E_{sp} , большей энергии сублимации U_s , то есть $E_{sp} > U_s$. Для плоской поверхности используется плоскостной потенциальный барьер и условие вылета меняется на $E_{sp} \cdot \cos^2 \theta_{sp} > U_s$, где θ_{sp} — угол вылета распыленной частицы относительно нормали к поверхности. Как видно из рис. 1, поверхностный потенциальный барьер, отражающий шероховатость поверхности, значительно влияет на коэффициент распыления и энергетический порог распыления. При воздействии плазмы на вольфрамовую стенку шероховатость поверхности может значительно меняться. И полученные нами значения для двух поверхностных потенциалов могут рассматриваться как предельные случаи изменения коэффициента распыления.

При распылении тяжелых мишеней легкими атомами доминирует распыление поверхностных слоев потоком обратно рассеянных частиц. В данном случае широко используемый код SRIM [10] дает неверные результаты, поскольку в коде используется неточная (магическая) формула для расчета рассеяния частиц на большие углы. В частности, расчеты с помощью кода SRIM дают неверные положения порогов распыления. В работах Экштайна для расчета распыления используется усовершенствованный код SDTrimSP [11]. На рис. 1 и далее в тексте мы приводим детальное сравнение наших расчетов с расчетами группы Экштайна [8].

На рис. 1 также приведены результаты компьютерного моделирования из работы Экштайна [8] для плоскостного потенциального барьера, а также теоретические кривые из работ Богданского [12], Фальконе [13] и Ямамуры [14]. Данные полученные с помощью формулы Зигмунда [15] уменьшены в 20 раз. Как видно из рис. 1, модель Зигмунда в данном случае неприменима.

В случае бомбардировки легкими частицами тяжелой мишени доминирует механизм распыления поверхностных слоев потоком обратно рассеянных бомбардирующих частиц. Теоретическое рассмотрение данного механизма приведено в работах [14, 16]. Модель Зигмунда не описывает зависимость коэффициентов распыления вблизи

энергетического порога и применима лишь в случае бомбардировки вольфрама ионами средних и тяжелых масс. Как видно из рис. 1, модель Фальконе при энергиях более 10^4 эВ дает завышенные значения коэффициента распыления. Остальные кривые удовлетворительно согласуются между собой и экспериментом.

2.1. Формула Зигмунда

Рассмотрим вначале формулу, предложенную Зигмундом [15], на базе которой создавались почти все последующие зависимости коэффициента распыления от энергии бомбардирующих ионов. В работе [15] коэффициент распыления рассчитан в предположении хаотичного рассеяния и замедления иона в бесконечной среде. В случае $M_2/M_1 < 1$ (здесь M_1 – атомная масса частицы снаряда, а M_2 – атомная масса атома мишени) роль налетающей частицы сводится к передаче энергии частицам мишени, далее развивается каскад соударений, в котором частица отдачи меняет импульс на движение в сторону поверхности и при этом имеет энергию больше порога распыления. Для коэффициента распыления в кэВ-диапазоне энергий и для тяжелых ионов и ионов средних масс при нормальном падении была предложена формула

$$Y(E_0) = \left(\frac{3}{4\pi^2} \right) \alpha \frac{S_n(E_0)}{C_0 U_s} = 0.042 \cdot \alpha \left(\frac{M_2}{M_1} \right) \frac{S_n(E_0)}{U_s} \quad (1)$$

Здесь $C_0 = 1.808 \text{ \AA}^2$ – коэффициент, был получен Зигмундом для потенциала Борна–Майера, α – коэффициент, зависящий от отношения M_2/M_1 (приведен в работе [15]), U_s – энергия сублимации для материала мишени (для вольфрама $U_s = 8.9$ эВ), $S_n(E_0)$ – сечение ядерного торможения, приходящееся на один атом, E_0 – энергия налетающей частицы.

Значения ядерных тормозных потерь для КгС потенциала [17] межатомного взаимодействия можно определить с помощью формул:

$$S_n(E_0) = 4\pi \cdot Z_1 Z_2 e^2 \cdot a_L \cdot \frac{M_1}{M_1 + M_2} \cdot s_n(E_0) \quad (2)$$

$$s_n^{K\kappa C}(\epsilon) = \frac{0.5 \cdot \ln(1 + 1.2288\epsilon)}{\epsilon + 0.1728\sqrt{\epsilon} + 0.008\epsilon^{0.1504}}$$

$$a_L = 0.88534 \cdot a_B \cdot \left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{-1/2},$$

$$\epsilon(E_0) = E_0 \cdot \frac{M_2}{M_1 + M_2} \cdot \frac{a_L}{Z_1 Z_2 e^2}$$

Здесь Z_1 и Z_2 – атомный номер частицы снаряда и частицы мишени, соответственно, e – заряд электрона, a_L – длина экранирования Линдхарда, ϵ – приведенная энергия, a_B – боровский радиус.

Следует отметить, что формула (1) не отражает пороговую зависимость коэффициента распыления. Еще раз подчеркнем, что формула Зигмунда применима для расчета коэффициента распыления в кэВ-диапазоне энергий для тяжелых ионов и ионов средних масс при нормальном падении.

Отметим, что в рассматриваемых ниже формулах Богданского, Ямамуры, Экштайна–Преусса как множитель входит зависимость сечения ядерного торможения от энергии бомбардирующей частицы $S_n = f(E_0)$.

2.2. Формула Богданского

В формуле Богданского добавлены члены для учета пороговой зависимости коэффициента распыления [12].

$$Y(E_0) = Q \cdot S_n^{K\kappa C}(\epsilon) \left(1 - \left(\frac{E_{th}}{E_0} \right)^{2/3} \right) \left(1 - \frac{E_{th}}{E_0} \right)^2 \quad (5)$$

В табл. 1 приведены параметры Q и E_{th} из работы [18] для мишени из вольфрама (W). Параметры получены подгонкой формулы (5) к экспериментальной зависимости $Y = f(E_0)$.

2.3. Формула Ямамуры

Эмпирическая формула Ямамуры [14] создана на основе большого количества экспериментальных данных:

Таблица 1. Параметры Q и E_{th} из формулы Богданского (5) для систем Н–W и D–W.

Система	E_{th} , eV	Q
H–W	428	$0.7 \cdot 10^{-2}$
D–W	178	0.0179

$$\begin{aligned}
Y(E_0) &= 0.042 \frac{Q(Z_2) \alpha^* \left(\frac{M_2}{M_1} \right)}{U_s} \\
\frac{S_n(E_0)}{1 + \Gamma k_e \epsilon^{0.3}} &\left[1 - \sqrt{\frac{E_{th}}{E_0}} \right]^s \\
\epsilon &= \frac{0.03255}{Z_1 Z_2 \left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{1/2}} \frac{M_2}{M_1 + M_2} E_0 (eV) \\
s_n^{TF}(\epsilon) &= \frac{3.441 \sqrt{\epsilon} \cdot \ln(\epsilon + 2.718)}{1 + 6.355 \sqrt{\epsilon} + \epsilon (6.882 \sqrt{\epsilon} - 1.708)} \\
k_e &= 0.079 \frac{(M_1 + M_2)^{3/2}}{M_1^{3/2} M_2^{1/2}} \frac{Z_1^{2/3} Z_2^{1/2}}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{3/4}} \\
S_n(E_0) &= \frac{84.78 Z_1 Z_2}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{1/2}} \frac{M_1}{M_1 + M_2} s_n^{TF}(\epsilon) \\
\Gamma &= \frac{W(Z_2)}{1 + \left(\frac{M_1}{7} \right)^3} \\
\alpha^* &= \begin{cases} 0.249 \left(\frac{M_2}{M_1} \right)^{0.56} + 0.0035 \left(\frac{M_2}{M_1} \right)^{1.5}, & \frac{M_2}{M_1} > 1 \\ 0.0875 \left(\frac{M_2}{M_1} \right)^{-0.15} + 0.165 \left(\frac{M_2}{M_1} \right), & \frac{M_2}{M_1} < 1 \end{cases} \\
E_{th} &= \begin{cases} 6.7 \frac{U_s}{\gamma}, & M_1 \geq M_2 \\ \left(1 + 5.7 \frac{M_1}{M_2} \right) \frac{U_s}{\gamma}, & M_1 \leq M_2 \end{cases}
\end{aligned}
\tag{6}$$

Параметры Q , W , s в формуле Ямамуры для систем водород-вольфрам (H–W), дейтерий-вольфрам (D–W) и тритий-вольфрам (T–W) приведены в табл. 2.

2.4. Формула Экштайна–Преусса

На наш взгляд наилучшая подгоночная формула предложена в работе Экштайна и Преусса [19], с помощью которой авторы описывали свои расчетные данные (расчет производился с помощью программы SDTrimSP). Следует отметить, что в работе 2003 года приведена формула с ошибкой. Правильная формула доступна в работе [20]

$$\begin{aligned}
Y(E_0) &= q \cdot s_n^{KrC}(\epsilon) \frac{\left(\frac{E_0}{E_{th}} - 1 \right)^\mu}{\frac{\lambda}{\omega(\epsilon)} + \left(\frac{E_0}{E_{th}} - 1 \right)^\mu}, \\
\omega(\epsilon) &= \epsilon + 0.1728 \sqrt{\epsilon} + 0.008 \cdot \epsilon^{0.1504}
\end{aligned}
\tag{7}$$

с ядерными тормозными потерями для потенциала KrC.

Пороговая энергия E_{th} и значения q , λ и μ являются подгоночными параметрами. Параметры λ , q , μ и E_{th} для систем H–W, D–W и T–W приведены в табл. 3.

Формула Экштайна–Преусса хорошо описывает наш расчет для энергий менее 10 кэВ, при больших энергиях имеется различие.

2.5. Формула Фальконе

Для случая плоского потенциального барьера имеется теоретический расчет Фальконе [13]. В работе Фальконе предложена формула для вычисления коэффициента распыления Y тяжелых

Таблица 2. Параметры Q , W , s и E_{th} в формуле Ямамуры для систем H–W, D–W и T–W.

Система	Q	W	s	E_{th} , eV
H–W	0.72	2.14	2.8	426.683
D–W	0.72	2.14	2.8	222.134
T–W	0.72	2.14	2.8	154.052

Таблица 3. Параметры λ , q , μ и E_{th} в формуле Экштайна–Преусса для систем H–W, D–W и T–W.

Система	λ	q	μ	E_{th} , eV
H–W	1.0087	0.0075	1.2046	457.42
D–W	0.3583	0.0183	1.4410	228.84
T–W	0.2870	0.0419	1.5802	153.8842

мишеней при бомбардировке легкими частицами низких энергий в виде

$$Y = 1.276 \cdot U_s^{-1} \cdot \frac{Z_1 Z_2}{\left(Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}} \right)^{\frac{1}{2}}} \cdot \frac{\mu - 1}{(1 + \mu)^2} \cdot F(w) \quad (8)$$

$$Q_1 = \frac{Z_1 Z_2}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{1/2}}, Q_2 = \frac{\mu - 1}{(1 + \mu)^2}, \mu = \frac{M_2}{M_1}$$

$$Y = 1.276 \cdot U_s^{-1} \cdot Q_1 \cdot Q_2 \cdot F(w)$$

здесь Z_1 и Z_2 – заряды ядер сталкивающихся атомов, $\mu = M_2/M_1$.

$$F(w) = \frac{\ln w + 3w^{-1/2} - \left(3w^{\frac{3}{2}} \right)^{-1} - 8/3}{w^{1/2}},$$

$$w = \frac{E_0}{E_{th}}, E_{th} = \frac{U_s}{\gamma(1-\gamma)}, \gamma = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}$$

Пороговая энергия распыления обозначена – E_{th} , E_0 – энергия налетающего атома.

2.6. Коэффициенты распыления для систем Н–W и Т–W

На рис. 2а и 2б представлены зависимости коэффициента распыления от энергии налетающей частицы для систем Н–W и Т–W.

В случае Н–W формула Богданского подогнана под экспериментальные данные и следовательно, хорошо их описывает. Зависимость Ямамуры очень похожа на зависимость Богданского. Данные Экштайна–Преусса лежат между нашими расчетами для плоскостного и сферического поверхностного барьера. Формула Фальконе дает завышенные значения для больших энергий.

Для системы Т–W экспериментальных данных нет. Расчет Экштайна–Преусса лежит между двумя нашими предельными случаями. Формула Ямамуры дает заниженные значения коэффициента распыления. Формула Фальконе плохо описывает зависимость для больших энергий.

Мы рекомендуем использовать формулу Экштайна–Преусса для описания зависимости коэффициента распыления от энергии бомбардирующих частиц при энергиях менее 10 кэВ.

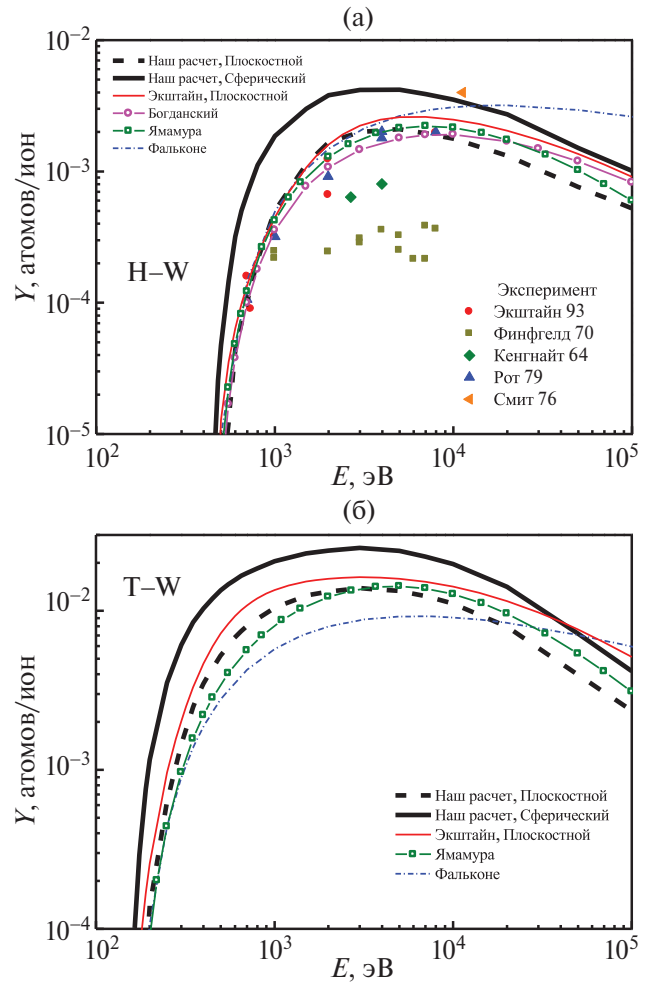


Рис. 2. Зависимость коэффициента распыления от энергии бомбардирующей частицы. Системы: Н–W (а) и Т–W (б). Наш расчет для сферического барьера – сплошная жирная линия и плоскостного – штриховая жирная линия. Расчет группы Экштайна – сплошная тонкая красная линия. Расчет по формуле Фальконе – штрихпунктирная линия. Формула Богданского – линия с открытыми кружками. Формула Ямамуры – открытые квадратики. Экспериментальные данные из работы [8] – точки.

3. КОЭФФИЦИЕНТ РАСПЫЛЕНИЯ ЧАСТИЦ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ УГЛА ПАДЕНИЯ ПУЧКА НА МИШЕНЬ

Экспериментальными данными для угловой зависимости коэффициента распыления для мишени из W крайне ограничены [8]. Удобно рассматривать угловую зависимость коэффициента распыления для величины $Y(\theta)/Y(0^\circ)$, т. е. нормируя коэффициент распыления $Y(\theta)$ на значения коэффициента распыления для нормального падения (рис. 3).

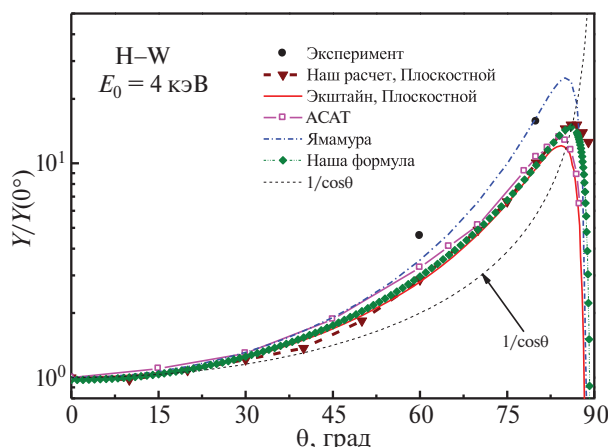


Рис. 3. Зависимость коэффициента распыления от угла падения пучка на мишень. Рассмотрена система Н–W. Энергия налетающей частицы $E_0 = 4$ кэВ. Угол падения пучка на мишень θ отсчитывается от нормали к поверхности. Черные сплошные кружки – экспериментальные данные из работы [8]. Линия с треугольниками – наш расчет для плоскостного барьера. Сплошная красная линия – моделирование программой SDTrimSP [8]. Линия с пустыми квадратами – расчет программой ACAT. Штрихпунктирная линия – формула Ямамуры [14]. Ромбики – расчет по формуле Зиновьева (10). Штриховая линия – зависимость $1/\cos\theta$.

На рис. 3 приведено сопоставление экспериментальных данных с данными различных расчетов. При изменении угла падения пучка на мишень изменяется длина области вблизи поверхности, для которой происходит сбор распыленных атомов. Эта длина меняется приблизительно как $1/\cos\theta$. Естественно, эта длина не может быть больше пробега налетающей частицы в твердом теле. Как видно из рис. 3, зависимость $1/\cos\theta$ не полностью отражает зависимость коэффициента распыления от угла. В модели распыления поверхности потоком обратно рассеянных частиц в зависимости от угла падения пучка на мишень меняется средний угол разворота потока обратно рассеянных частиц. Если при нормальном падении угол разворота составляет порядка 180° , то при угле падения θ он уменьшается на значение $180^\circ - \theta$. Соответственно растет и сечение рассеяния. В работе [21] была предложена формула

$$\frac{Y(\theta)}{Y(0^\circ)} = \frac{1}{\cos\theta} \frac{\sigma(\theta_{av.BS} - \theta)}{\sigma(\theta_{av.BS})} = f(\theta) \quad (9)$$

Здесь $\sigma(\theta)$ – дифференциальное сечение рассеяния на угол θ , $\theta_{av.BS}$ – средний угол рассеяния потока обратно рассеянных частиц. Чтобы учесть эффект насыщения длины сбора частиц при

скользящих углах падения мы добавили в формулу фактор, учитывающий это насыщение.

$$\frac{Y(\theta)}{Y(0^\circ)} = f(\theta) \cdot \exp\left(-\frac{f(\theta)}{L}\right) \quad (10)$$

где L – отношение проективного пробега налетающей частицы в веществе к характерной длине сбора по глубине распыленных атомов. Как видно из рис. 3, удается неплохо описать экспериментальные данные и данные компьютерного моделирования.

В литературе имеются и другие эмпирические зависимости, описывающие функцию $f(\theta)$. Зависимость коэффициента распыления от угла, полученная Ямамурой, дана в работе [18]

$$\frac{Y(\theta)}{Y(0^\circ)} = (\cos\theta)^{-f} \exp\left(f \left[1 - (\cos\theta)^{-1}\right] \cos\theta_{opt}\right) \quad (11)$$

$$f = \sqrt{U_s} \left(0.94 - 1.33 \cdot 10^{-3} \left(\frac{M_2}{M_1} \right) \right),$$

$$\theta_{opt} = \frac{\pi}{2} - a_L \sqrt[3]{n} \left(2\varepsilon \sqrt{\frac{U_s}{\gamma E_0}} \right)^{-0.5}$$

Для рассматриваемого случая Н–W и $E_0 = 4$ кэВ: $Y(0^\circ) = 0.00201$, $f = 2.074$, $\theta_{opt} = 85.15^\circ$ и $n = 0.06333$ атомов/Å³. Зависимость Ямамуры не противоречит экспериментальным данным (см. рис. 3).

Как видно из рис. 3, результаты компьютерного моделирования для двух типов поверхностного потенциального барьера [9], расчеты группы Экштайна (код SDTrimSP), расчет группы Ямамуры (код ACAT) хорошо согласуются между собой. Формула Ямамуры дает похожую зависимость, но значения больше на 20%.

Существуют подробные расчеты угловых зависимостей коэффициента распыления от угла падения пучка на мишень для систем Н–W, D–W и Т–W (приведены в работе [8]). В этой работе использовалась следующая зависимость коэффициента распыления от угла падения пучка на мишень:

$$\frac{Y(E_0, \theta_0)}{Y(E_0, 0)} = \left\{ \cos \left[\left(\frac{\theta_0}{\theta_0^*} \frac{\pi}{2} \right)^c \right] \right\}^{-f} \exp \left\{ b \left[1 - \frac{1}{\cos \left[\left(\frac{\theta_0}{\theta_0^*} \frac{\pi}{2} \right)^c \right]} \right] \right\} \quad (12)$$

$$\theta_0^* = \pi - \arccos \sqrt{\frac{1}{1 + \frac{E_0}{E_{sproj}}}} \geq \frac{\pi}{2}$$

В работе [8] приведены значения параметров b , c , f в формуле (10) для систем Н–W, D–W и Т–W. Авторы работы [8] для этих случаев предполагали параметр $E_{sproj} = 1$ эВ.

На рис. 4 сопоставлены результаты расчетов Экштайна с расчетами по нашей программе. Как видно из рис. 4, для углов падения θ менее 75–80° имеется хорошее согласие.

Обращаем ваше внимание, что при углах падения пучка на мишень близких к 90° (угол отсчитывается от нормали к поверхности), т. е. для скользящего падения, поведение коэффициента распыления от угла зависит от наличия ямы в потенциале. В работах Экштайна использовался чисто отталкивательный потенциал KrC. Из-за эффекта блокировки при скользящих углах падения коэффициент распыления стремится к нулю. Наши расчеты показали, что учет потенциальной ямы в системах Н–W, D–W и Т–W приводит к тому, что эффект блокировки отсутствует и коэффициент распыления постоянен, т. е. не зависит от угла при значениях угла падения пучка на мишень более 85°.

На наш взгляд, использование формулы Ямамуры или Экштайна для зависимости коэффициента распыления от угла падения пучка

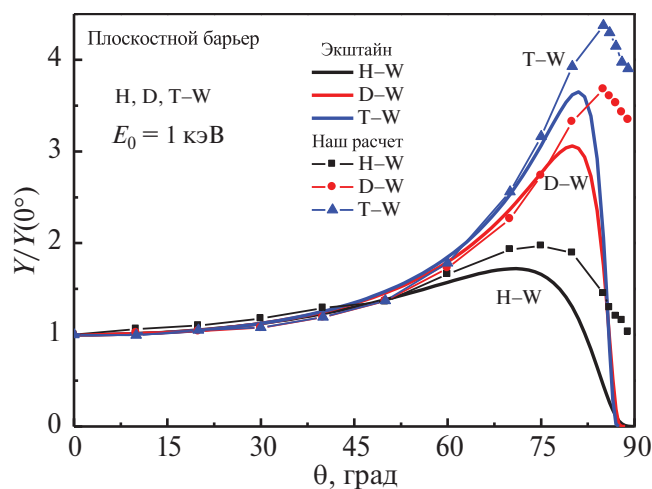


Рис. 4. Зависимость коэффициента распыления, нормированного на величину при нормальном падении, от угла падения. Системы Н–W, D–W и Т–W. Начальная энергия бомбардирующих частиц $E_0 = 1$ кэВ. Линии – расчет группы Экштайна. Линии с символами – наш расчет. Рассмотрен случай плоскостного барьера.

на мишень менее 80° не приведет к большим ошибкам.

4. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ РАСПЫЛЕННЫХ ЧАСТИЦ

На границе твердое тело–вакуум возникает потенциальный барьер. Выбор барьера существенно влияет на энергетические спектры распыленных частиц. При малых энергиях наблюдается сильное отличие в энергетических спектрах для случаев сферического и плоскостного барьеров. Это объясняется тем, что при сферическом барьере все частицы, обладающие энергией выше энергии сублимации $E_{sp} > U_s$, вылетают с поверхности, а для плоскостного барьера произведение энергии частицы на квадрат косинуса угла вылета должно превышать энергию сублимации $E_{sp} \cdot \cos^2 \theta_{sp} > U_s$.

В литературе чаще всего ссылаются на формулу Томпсона [22] для энергетических спектров распыленных частиц:

$$N(E_{sp}) \sim \frac{E_{sp}}{(E_{sp} + U_s)^3} \quad (13)$$

здесь E_{sp} – энергия распыленной частицы.

В работе Фальконе [16] приведены формулы для расчета энергетического спектра распыленных атомов для плоскостного барьера:

$$N(E_{sp}) \sim \frac{E_{sp}}{(E_{sp} + U_s)^2} \ln \frac{\gamma(1-\gamma)E_0}{E_{sp} + U_s}, \quad (14)$$

$$\gamma = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2}$$

здесь E_0 – энергия налетающей частицы, M_1 и M_2 – массы сталкивающихся частиц.

Экспериментальные данные об энергетических спектрах распыленных частиц при бомбардировке мишеней из вольфрама изотопами водорода отсутствуют.

На рис. 5 представлены экспериментальные данные по распылению мишени из серебра атомами аргона [23]. При использовании формул (13) и (14) энергия сублимации для мишени из серебра $U_s = 2.95$ эВ [24]. Согласие расчета по формулам и эксперимента можно улучшить, используя значение $U_s = 2.2$ эВ.

На рис. 6 приведены наши расчеты энергетических спектров распыленных частиц – точки и расчет по формуле Фальконе (14) – линии.

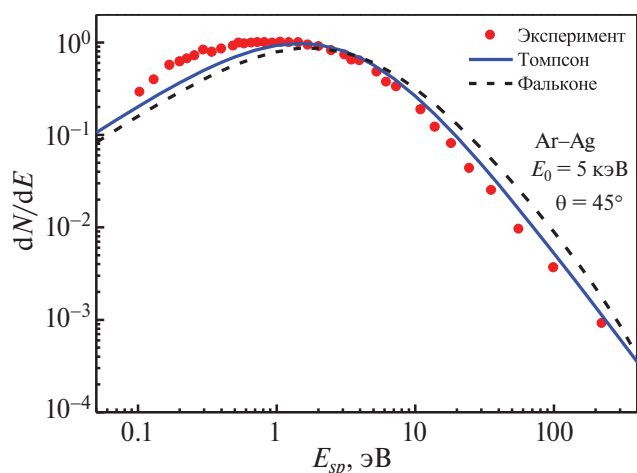


Рис. 5. Энергетический спектр распыленных частиц. Начальная энергия атомов аргона $E_0 = 5$ кэВ. Угол падения пучка на мишень $\theta = 45^\circ$. Точки – эксперимент из работы [23]. Линии – расчет по формулам Томпсона (13) – (сплошная линия) и Фальконе (14) – (штриховая линия).

Имеется удовлетворительное согласие данных нашего моделирования с расчетом по формулам для случая плоскостного барьера (см. рис. 6).

Отметим, что в отличие от формулы Томпсона, формула Фальконе учитывает зависимость энергетического спектра от массы иона. При подгонке нужно вводить нормирующий коэффициент.

5. ДАННЫЕ ПО СРЕДНИМ ЭНЕРГИЯМ РАСПЫЛЕННЫХ ЧАСТИЦ

Средние энергии распыленных частиц [9] приведены на рис. 7 в случае плоскостного и сферического барьеров для систем Н–W, D–W и Т–W. Как видно из рис. 7, средняя энергия в случае плоскостного барьера больше чем в случае сферического, что связано с более жестким критерием для отбора распыленных атомов.

Информацию о средней энергии распыленных частиц можно получить из величины коэффициента распыления Y и коэффициента распыления энергии (полная энергия распыленных частиц, отнесенная к начальной энергии налетающей частицы – sputtered energy coefficient) Y_E :

$$\bar{E}_{sp} = \frac{Y_E}{Y} E_0 \quad (15)$$

В препринте [25] приведены таблицы с величинами Y и Y_E . На рис. 8 показан наш расчет средней энергии распыленных частиц для плоскостного потенциального барьера и систем

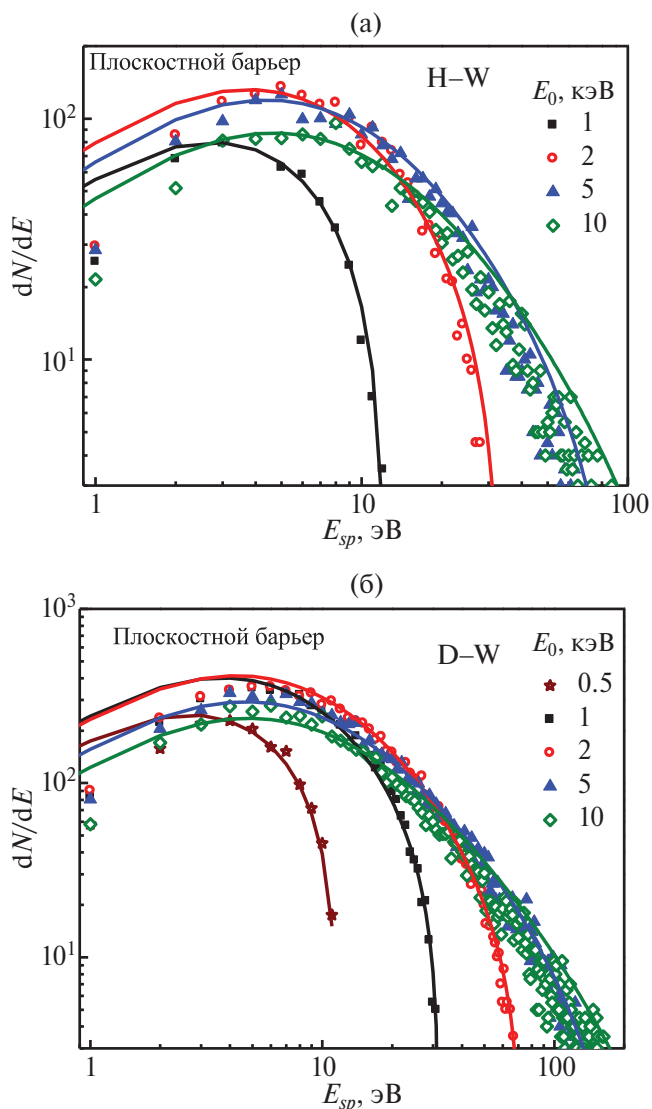


Рис. 6. Энергетические спектры распыленных частиц, рассчитанные с помощью нашей программы. Случай плоскостного поверхностного барьера. Приведены результаты для различных энергий бомбардирующего пучка. а – Н–W; б – D–W. Точки – наш расчет. Линии – расчет по формуле Фальконе (14).

Н–W, D–W и Т–W. На этом же рисунке представлены данные, полученные с помощью формулы (15) на основе расчетов группы Экштайна [25]. Видно, что оба расчета качественно согласуются.

Фальконе [26] предлагает следующую формулу для средней энергии распыленных частиц:

$$\bar{E}_{sp} = 2U_s g(w) \quad (16)$$

$$g(w) = \frac{\ln w + 2w^{-1} - \frac{w^{-2}}{2} - \frac{3}{2}}{(1 - w^{-1})^2}, w = \frac{E_0}{E_{th}}$$

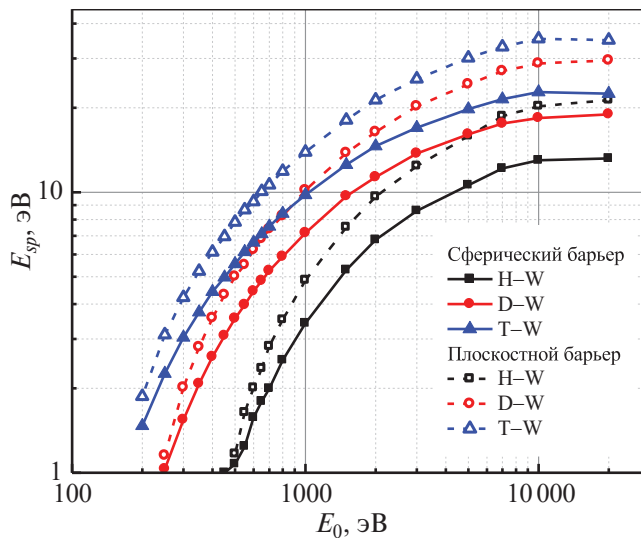


Рис. 7. Средняя энергия распыленных частиц в зависимости от энергии бомбардирующего пучка. Расчет нашей программой для плоскостного и сферического барьера. Рассмотрены системы: H–W, D–W и T–W. Рисунок из работы [9].

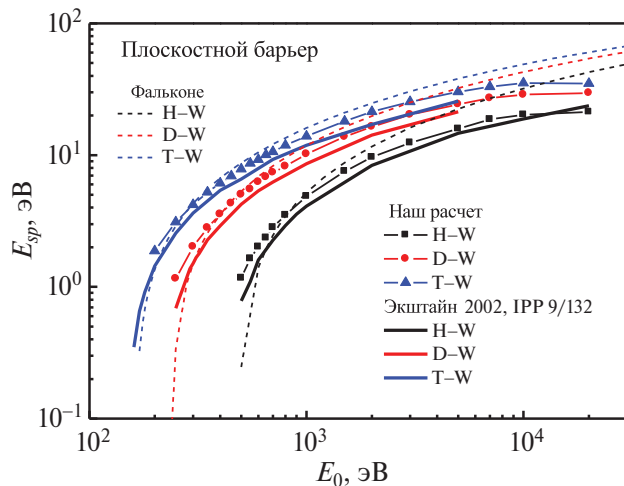


Рис. 8. Средняя энергия распыленных частиц в зависимости от энергии бомбардирующего пучка. Наш расчет – значки. Обработка данных расчета Экштайна – линии. Системы: H–W, D–W и T–W. Плоскостной поверхностный барьер. Дополнительно, приведено сравнение с формулой Фальконе (16) – штриховая линия. Использовались значения пороговых энергий, полученные с помощью нашей программы.

Таблица 4. Параметры A , B и E_{th} в формуле (17).

Система	A	B	E_{th} , eV
H–W	0.40938	6.59221	479.88
D–W	–0.4378	7.87302	236.21
T–W	–1.94753	9.09855	161.06

В табл. 4 приведены значения пороговой энергии распыления E_{th} , полученные в нашем расчете и в расчете Экштайна для мишени из W. Как видно из рис. 7, формула Фальконе сильно завышает энергию распыленных частиц при больших энергиях соударения (использовались значения порогов из табл.4).

Мы рекомендуем использовать результаты нашего расчета, которые хорошо описываются формулой

$$E_{sp} = A + B \cdot \ln\left(\frac{E_0}{E_{th}}\right) \quad (17)$$

Параметры A , B и E_{th} приведены в табл. 4.

Результаты сопоставления данных нашего расчета с аппроксимационными кривыми приведены на рис. 9.

6. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ПОРОГИ РАСПЫЛЕНИЯ

Важным параметром при расчете распыления первой стенки в токамаке является пороговая энергия распыления E_{th} . В нашей работе [27], проведен анализ поведения порогов для различных случаев. Было предложено использовать параметр $P(M_2/M_1) = \gamma E_{th}/U_s$, где $\gamma = 4M_1M_2/(M_1 + M_2)^2$, M_1 – масса налетающей частицы, а M_2 – масса атома мишени, U_s – энергия сублимации. Зависимость параметра P от отношения M_2/M_1 приведена на рис. 10.

Экспериментальные данные о значениях пороговых энергий крайне ограничены. Приведены

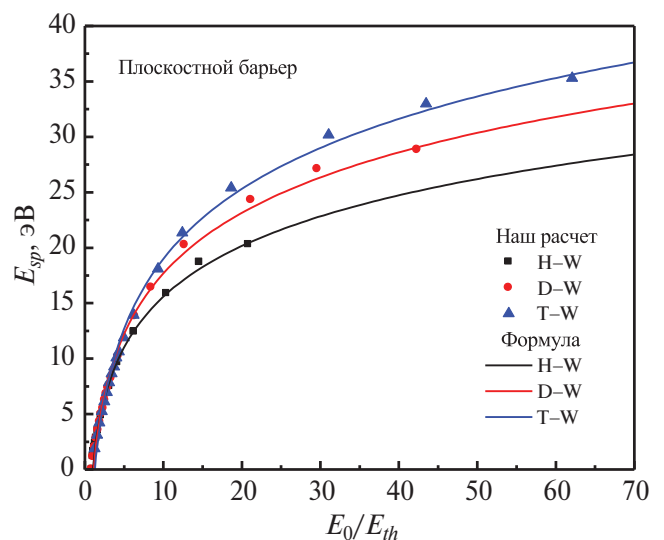


Рис. 9. Средняя энергия распыленных частиц в зависимости от отношения энергии соударения к пороговой энергии. Точки – результаты нашего расчета. Линии – расчет по формуле (17).

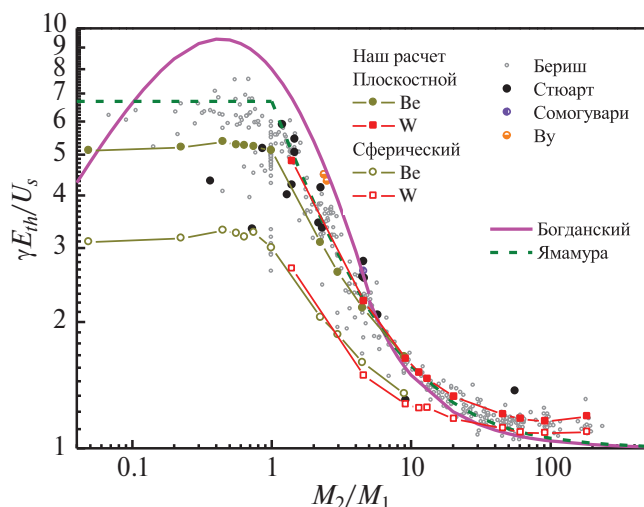


Рис. 10. Зависимость параметра $\gamma E_{th}/U_s$ от отношения масс M_2/M_1 .

данные (закрашенные точки) из работ: Стюарт [28], Сомогувари [29], Ву [30]. Расчетные данные для плоскостного поверхностного барьера, обозначенные открытыми точками, взяты из работы [8]. Пороги определялись как экстраполяция компьютерного расчета с помощью формулы Экштайна–Преусса и характеризуются большим разбросом. Точки с линиями – наш расчет для мишеней из Ве и W для плоскостного и сферического поверхностных барьеров. Эти данные для двух разных мишеней хорошо согласуются. Пороги для сферического барьера значительно ниже, что связано с условием вылета распыленной частицы.

В работе Богданского [31] предложено выражение для пороговой энергии

$$E_{th} = \begin{cases} 8 \frac{U_s}{\left(\frac{M_2}{M_1}\right)^{2.5}}, & \frac{M_2}{M_1} \leq 3 \\ \frac{U_s}{\gamma(1-\gamma)}, & \frac{M_2}{M_1} \geq 3 \end{cases} \quad (18)$$

Выражение для пороговой энергии, используемое в формуле Ямамуры [14]

$$E_{th} = \begin{cases} 6.7 \frac{U_s}{\gamma}, & \frac{M_2}{M_1} \leq 1 \\ \left(1 + 5.7 \frac{M_1}{M_2}\right) \frac{U_s}{\gamma}, & \frac{M_2}{M_1} \geq 1 \end{cases} \quad (19)$$

Как видно из рис. 10, формула Богданского (18) применима только для $5 < M_2/M_1 < 30$. Формула Ямамуры не очень хорошо описывает данные в диапазоне $M_2/M_1 < 1$ и для $M_2/M_1 > 60$.

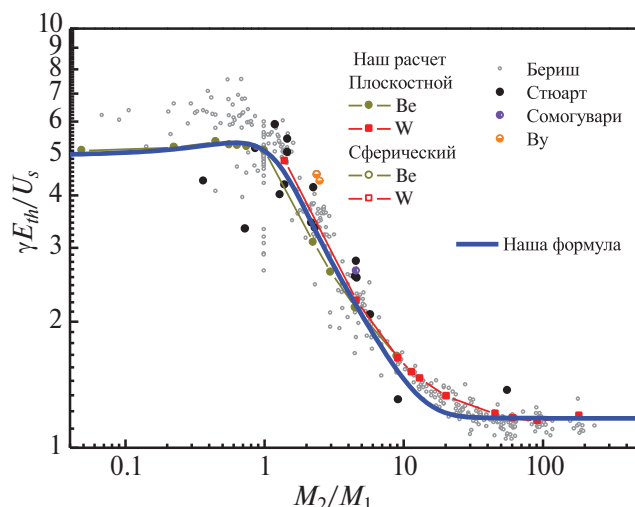


Рис. 11. Зависимость параметра $\gamma E_{th}/U_s$ от отношения масс M_2/M_1 .

В нашей работе [27] показано, что при $M_2/M_1 < 1$ доминирует каскадный механизм, предложенный Зигмундом. Роль налетающей частицы сводится к передаче энергии атому мишени. Необходимо 5–6 столкновений атомов мишени, чтобы атом мишени поменял направление импульса и летел в сторону поверхности.

В области $M_2/M_1 > 1$ вблизи порога доминирует механизм распыления, связанный с выбиванием поверхностных атомов потоком обратно рассеянных первичных частиц, при этом в области $1 < M_2/M_1 < 10$ необходимо учитывать 2–3-кратные столкновения. В области $M_2/M_1 > 10$ необходимо учитывать поправку потерь энергии на торможение на электронах мишени [27]. Это переключение механизмов распыления при $M_2/M_1 = 1$ объясняет наличие “полочки” при $M_2/M_1 < 1$, что качественно согласуется с моделью Ямамуры.

Для описания зависимости параметра Р от отношения масс M_2/M_1 мы предлагаем формулу (см. синюю жирную линию на рис. 11)

$$\frac{\gamma E_{th}}{U_s} = \frac{2.24}{1 + 0.763 \cdot \left(\frac{M_2}{M_1} - 0.751\right)^2} + 2.24 \cdot \exp\left(-0.22 \left(\frac{M_2}{M_1}\right)\right) + 1.176 \quad (20)$$

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При описании коэффициента распыления вольфрама изотопами водорода в зависимости от энергии бомбардирующих частиц менее 10 кэВ

мы рекомендуем использовать формулу Экштайна—Преусса.

Использование формул Ямамуры или Экштайна для зависимости коэффициента распыления от угла падения пучка на мишень менее 80° допустимо и не приведет к большим ошибкам. При больших углах падения необходимо учитывать поправку на наличие ямы в потенциале межатомного взаимодействия. Зависимость коэффициента распыления от угла падения качественно определяется двумя факторами: увеличением области сбора распыленных частиц и возрастанием сечения для обратно рассеянных первичных частиц, а также ограничением области сбора пробегом частиц в веществе.

Для описания энергетических спектров распыленных частиц можно рекомендовать формулу Фальконе.

Для оценки средней энергии распыленных частиц мы рекомендуем пользоваться данными компьютерного моделирования и предложенными в настоящей работе аппроксимационными зависимостями.

Для пороговой энергии распыленных частиц в зависимости от отношения масс взаимодействующих частиц предлагается использовать формулу, приведенную в данной работе.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Mikhailov V.S., Babenko P.Yu., Shergin A.P., Zinoviev A.N.* // Plasma Physics Reports. 2024. V. 50. № 1. P. 23.
doi: 10.1134/S1063780X23601682
2. *Field A.R., Casson F.J., Fajardo D., Angioni C., Challis C.D., Hobirk J., Kappatou A., Kim Hyun-Tae, Lerche E., Loarte A., Mailloux J.* // Nucl. Fusion. 2023. V. 63, P. 016028.
doi: 10.1088/1741-4326/aca54e
3. *Pütterich T., Fable E., Dux R., O'Mullane M., Neu R., Siccino M.* // Nucl. Fusion. 2019. V. 59 № 5. P. 056013.
doi: 10.1088/1741-4326/ab0384
4. *Loarte A., Pitts R.A., Wauters T., Nunes I., Köchl F., Polevoi A.R., Kim S.-H., Lehnen M., Artola J., Chen L., Pinches S.D., Bai X., de Vries P., Carvalho I., Dubrov M., Gribov Y., Schneider M., Zabeo L.* // ITER Technical Report. ITR-24-004. 2024.
5. *Pitts R.A., Bonnin X., Escourbiac F., Frerichs H., Gunn J.P., Hirai T., Kukushkin A.S., Kaveeva E., Miller M.A., Moulton D., Rozhansky V., Senichenkov I., Sytova E., Schmitz O., Stangeby P.C., De Temmerman G., Veselova I., Wiesen S.* // Nucl. Mater. Energy. 2019. V. 20, P. 100696.
doi: 10.1016/j.nme.2019.100696
6. *Gao B., Ding R., Xie H., Zeng L., Zhang L., Wang B., Li Ch., Zhu D., Yan R., Chen J.* // Fusion Eng. Des. 2020. V. 156, P. 111616.
doi: 10.1016/j.fusengdes.2020.111616
7. *Guterl J., Bykov I., Ding R., Snyder P.* // Nucl. Mater. Energy. 2021. V. 27, P. 100948.
doi: 10.1016/j.nme.2021.100948
8. *Behrisch R., Eckstein W.* Sputtering by Particle Bombardment. Berlin: Springer, 2007.
doi: 10.1007/978-3-540-44502-9
9. *Михайлов В.С., Бабенко П.Ю., Шергин А.П., Зиновьев А.Н.* // ЖЭТФ. 2023. Т. 164. В. 3. С. 478.
doi: 10.31857/S004445102309016X
10. *Ziegler J.F., Biersack J.P.* SRIM. <http://www.srim.org>.
11. *Экштайн В.* Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. М.: Мир, 1995.
12. *Bohdansky J.* // Nucl. Instr. Meth. B. 1984. V. 2. № 1–3. P. 587.
doi: 10.1016/0168-583X(84)90271-4
13. *Falcone G., Gullo F.* // Phys. Lett. A. 1987. V. 125. № 8. P. 432.
doi: 10.1016/0375-9601(87)90178-2
14. *Yamamura Y., Tawara H.* // At. Data Nucl. Data Tables. 1996. V. 62. № 2. P. 149.
doi: 10.1006/adnd.1996.0005
15. *Sigmund P.* // Phys. Rev. 1969. V. 184. № 2. P. 383.
doi: 10.1103/PhysRev.184.383
16. *Фальконе Д.* // УФН. 1992. Т. 162. В. 1. С. 71.
doi: 10.3367/UFNr.0162.199201c.0071
17. *Wilson W.D., Haggmark L.G., Biersack J.P.* // Phys. Rev. B. 1977. V. 15. № 5. P. 2458.
doi: 10.1103/PhysRevB.15.2458
18. *Eckstein W., Garcia-Rosales C., Roth J., Ottenberger W.* Sputtering Data. IPP report 9/82, Garching: IPP, 1993.
19. *Eckstein W., Preuss R.* // J. Nucl. Mater. 2003. V. 320. № 3. P. 209.
doi: 10.1016/S0022-3115(03)00192-2
20. *Eckstein W.* // Vacuum. 2008. V. 82. № 9. P. 930.
doi: 10.1016/j.vacuum.2007.12.004
21. *Бабенко П.Ю., Михайлов В.С., Шергин А.П., Зиновьев А.Н.* // ЖТФ. 2023. Т. 93. В. 5. С. 709.
doi: 10.21883/JTF.2023.05.55467.12-23
22. *Томпсон М.У.* // УФН. 1988. Т. 156. В. 3. С. 513.
doi: 10.3367/UFNr.0156.198811d.0513
23. *Wahl M., Wucher A.* // Nucl. Instr. Meth. B. 1994. V. 94. № 1–2. P. 36.
doi: 10.1016/0168-583X(94)95655-3
24. *Kittel C.* Introduction to Solid State Physics. 8th edition. N.Y.: Wiley, 2005.

25. *Eckstein W.* Calculated Sputtering, Reflection and Range Values. IPP report 9/132. Garching : IPP, 2002.
26. *Falcone G.* // *Phys. Rev. B.* 1988. V. 38. № 10. P. 6398. doi: 10.1103/PhysRevB.38.6398
27. *Бабенко П.Ю., Михайлов В.С., Зиновьев А.Н.* // *Письма в ЖТФ.* 2024. Т. 50 В. 12. С. 3. doi: 10.61011/PJTF.2024.12.58055.19851
28. *Stuart R.V., Wehner G.K.* // *J. Appl. Phys.* 1962. V. 33. № 7. P. 2345. doi: 10.1063/1.1728959
29. *Somogyvari Z., Langer G.A., Erdelyi G., Balazs L.* // *Vacuum.* 2012. V. 86. № 12. P. 1979. doi: 10.1016/j.vacuum.2012.03.055
30. *Wu Sh.-M., van de Kruijs R., Zoethout E., Bijkerk F.* // *J. Appl. Phys.* 2009. V. 106. № 5. P. 054902. doi: 10.1063/1.3149777
31. *Bohdansky J., Roth J., Bay H.L.* // *J. Appl. Phys.* 1980. V. 51. № 5. P. 2861. doi: 10.1063/1.327954

**DEPENDENCE OF SPUTTERING COEFFICIENT ON ENERGY
AND ANGLE OF INCIDENCE OF BOMBARDING PARTICLE.
ENERGY SPECTRUM AND AVERAGE ENERGY OF SPUTTERED PARTICLES
USING THE EXAMPLE OF A TUNGSTEN TARGET**

P. Yu. Babenko^{a,*}, V. S. Mikhailov^a, A. P. Shergin^a, A. N. Zinoviev^a

^a*Ioffe Institute, St. Petersburg, Russian Federation*

^{*}*e-mail: babenko@npd.ioffe.ru*

The work provides an overview of the functional dependencies (formulas) for describing the properties of atomic particles sputtered during ion bombardment of the surface of a solid body. The dependence of sputtering coefficients on the energy and angle of incidence of the bombarding particle is considered. The energy spectra and average energies of sputtered particles are presented. Using the example of a target made of tungsten and hydrogen isotopes as projectiles, formulas for calculating the quantities under consideration are proposed. These data are necessary to estimate the entry of sputtered tungsten atoms as an impurity into a hot plasma using transport codes. When the tungsten impurity concentration is more than critical, it is impossible to carry out a controlled thermonuclear reaction with the planned energy output in the ITER tokamak reactor. Sputtering coefficients also play an important role in modeling the entry of impurities into plasma installations as a result of the interaction of hydrogen fuel atoms with the materials of the divertor and the first wall.

Keywords: sputtering coefficients, energy spectra of sputtered particles, ITER tokamak, tungsten