

Д.К. КУТОВ, Е.Д. МАРЕНКОВ, В.А. КУРНАЕВ, К. NORDLUND¹
Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
¹*University of Helsinki, Finland*

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ НАПЫЛЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ПЛЕНОК НА ВОЛЬФРАМ

Взаимодействие плазмы со стенками токамаков является одной из активно развивающихся областей в физике термоядерных реакторов. Особое значение эти проблемы приобретают в связи с реализацией международного проекта ИТЭР. Облучение материалов стенки ионами плазмы приводит к их эрозии, при этом распыленные частицы попадают в плазму и переосаждаются на другие компоненты стенки. Это приводит к росту на них пленок из переосажденного материала, имеющих довольно сложную структуру и влияющих на процессы дальнейшего взаимодействия плазмы со стенкой. Поэтому необходимы экспериментальные и расчетные исследования свойств таких пленок.

В настоящей работе мы представляем результаты моделирования роста углеродной (C) пленки на поверхности вольфрама (W) с помощью метода молекулярной динамики (МД) в коде PARCAS [0].

Первым этапом такого расчета является получение поверхности, готовой для облучения ионами. Моделирование поверхности происходило в две стадии. На первой стадии мы составили поверхность из элементарных объемно-центрированных кубических ячеек (их количество соответственно $20 \times 20 \times 10$ в X, Y и Z направлениях; количество атомов 8000; размер бокса $63,41 \times 63,41 \times 31,71$ Å) и применили периодические граничные условия по всем направлениям. Затем эту поверхность релаксировали при температуре 300K 7 пс. На второй стадии были убраны периодические граничные условия по Z направлению и поверхность снова релаксировалась при температуре 300K 7 пс.

Отражение является одним из основных процессов, контролирующих рост пленки. Кроме того, для ионов C и D известны как расчетные, так и экспериментальные данные по коэффициентам отражения от W. Поэтому полезно сравнить значения коэффициента отражения, получающиеся в PARCAS, с этими результатами.

При моделировании отражения и напыления фиксировались два нижних атомных слоя бокса, и велся контроль температуры для двух атомных слоев, лежащих выше фиксированных. Для моделирования отражения каждый новый запуск частицы производился на чистую поверхность без

взаимодействия с предыдущей. Чтобы набрать статистику, производилось по 1000 запусков для каждой величины энергии. Далее полученные данные мы сравнили с результатами эксперимента [Ошибка! Источник ссылки не найден.], моделирования в другом МД коде [Ошибка! Источник ссылки не найден.] и расчетом в программе SRIM [Ошибка! Источник ссылки не найден.].

Отражение С от W (угол налета частиц $\alpha = 0^\circ$, диапазон энергий 1-200 эВ). На Рис. 1 представлены результаты расчетов. Видно, что наш расчет в коде PARCAS качественно совпадает с результатами, приведенными в [Ошибка! Источник ссылки не найден.]. Обе кривые имеют максимум, хотя его положение немного отличается. По порядку величины положение максимума соответствует предсказываемому теорией [0] энергии $3E_s$, где E_s – энергия связи налетающих частиц с поверхностью. Для пары C-W имеем $3E_s \sim 25,5$ эВ [0]. Результаты же расчета в коде SRIM приводят к качественно иной зависимости, не имеющей максимума. Это противоречит как расчетам в МД, так и теоретическим представлениям [0]. Следовательно, можно заключить, что потенциал парных соударений, используемый в SRIM, приводит к неправильным результатам для взаимодействия с поверхностью ионов низких энергий.

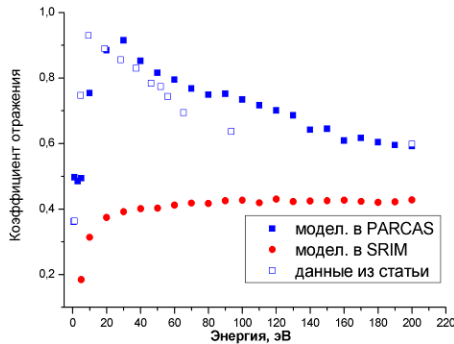


Рис. 1 График сравнения коэффициентов отражения C от W при $\alpha = 0^\circ$ в программах PARCAS, SRIM и статье [Ошибка! Источник ссылки не найден.]

Отражение D от W (угол налета частиц $\alpha = 0^\circ, 60^\circ, 75^\circ$, диапазон энергий 1-100 эВ). Зависимости коэффициентов отражения D от W для этого случая представлены на Рис. 2.

На всех расчетных кривых коэффициент отражения имеет максимум, соответствующий энергии 1 – 5 эВ. Величина E_s для пары D-W составляет около 1эВ [Ошибка! Источник ссылки не найден.]. Поэтому положение максимума снова соответствует теории [0].

Соответствующие экспериментальные данные были взяты из [Ошибка! Источник ссылки не найден.]. Они представлены на Рис. 2 пустыми маркерами. Учитывая величину ошибки измерений, составляющей порядка 15%, можно утверждать, что расчеты в МД коде PARCAS, выполненные нами, находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными результатами для скользящих углов падения. При углах, приближающихся к нормальному падению, различие с экспериментом увеличивается.

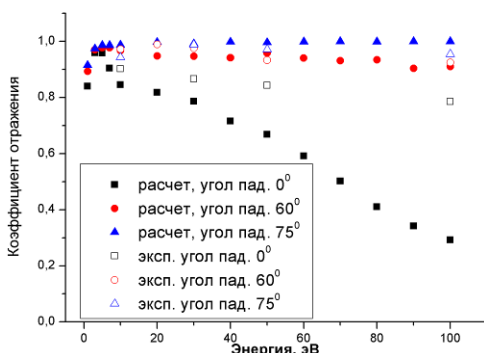


Рис. 2 График сравнения коэффициентов отражения D от кристаллического W при $\alpha = 0^\circ, 60^\circ, 75^\circ$ в программе PARCAS с экспериментом [Ошибка! Источник ссылки не найден.]

Таким образом, сравнение величин для коэффициентов отражения показало, что моделирование в коде PARCAS взаимодействия ионов D и C с W дает удовлетворительные результаты в интересующем нас диапазоне энергий. Все наблюдающиеся отличия могут быть объяснены следующим: во-первых, не вполне точным соответствием между потенциалом взаимодействия частиц, используемым в моделировании, с реальным потенциалам; во-вторых, отличием экспериментального состояния поверхности от идеального кристалла, которым является подложка в моделировании.

Вторым этапом работы было моделирование напыления углеродной пленки на поверхность вольфрама. Напыление пленки производилось на

две поверхности, полученные из боксов, состоящих из 8000 ($63,41 \times 63,41 \times 31,71 \text{ \AA}$) и 32000 ($126,83 \times 126,83 \times 31,71 \text{ \AA}$) атомов. Процедура подготовки поверхности идентична описанной выше. Напыление производилось при нормальном падении частиц углерода с энергией 3 эВ. Данная энергия была выбрана с учетом величины коэффициента отражения, который при такой энергии еще не достигает максимума. Кроме того, она соответствует реальным энергиям падающих частиц, которые используются в экспериментах.

На Рис. 3 показаны напыленные углеродные пленки на оба бокса.

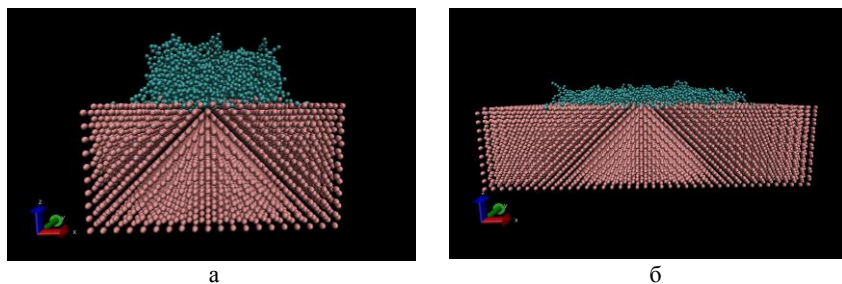


Рис. 3 Моделирование напыления углеродных пленок на поверхности W различных размеров: а – бокс из 8000 атомов; б – бокс из 32000 атомов

В процессе роста пленки было замечено, что осаждение С на поверхности вольфрама приводит к изменениям в структуре его поверхности (некоторые атомы вольфрама оказываются вытесненными со своих мест). После напыления пленки было рассчитано отношение sp^3/sp^2 для получившихся пленок. Для обеих пленок это отношение составило $\sim 0,2$, то есть обе пленки имеют аморфную структуру.

- [1] K. Nordlund et al, Phys. Rev. B. 57(13) (1998) 7556.
- [2] Z. Yang et al, J. Nucl. Mater. 390–391 (2009) 136.
- [3] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, M.D. Ziegler, SRIM, The Stopping and Range of Ions in Solids, SRIM Co., Chester, MD, USA, 2009.
- [4] V.V. Bondurko, V.A. Kurnaev. Vacuum 44(9) (1993) 937.
- [5] Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Вводный том III. Под ред. В.Е. Фортова. Москва «Наука» 2000 г., ст. 101-104.