

На правах рукописи

Нагель Михаил Юрьевич

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУР ОСАЖДАЕМЫХ
ПЛЕНОК И ОБРАЗОВАНИЯ ПЫЛИ В ПЛАЗМЕННЫХ УСТАНОВКАХ

01.04.04. – физическая электроника

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва - 2013

Работа выполнена в отделении физики плазмы института физики токамаков КЦЯТ НИЦ «Курчатовский институт».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
Мартыненко Юрий Владимирович

Официальные оппоненты: **Беграмбеков Леон Богданович**, доктор физико-математических наук, профессор.
Кафедра 21 «Физика плазмы»
Национального исследовательского
ядерного университета «МИФИ».

Рязанов Александр Иванович, доктор физико-математических наук, профессор.
Институт общей и ядерной физики,
Национальный исследовательский центр
«Курчатовский институт».

Ведущая организация: Московский государственный
университет имени М.В. Ломоносова,
физический факультет.

Защита диссертации состоится «25» июня 2013 г. в ____ час на заседании диссертационного совета Д 520.009.02 на базе НИЦ Курчатовский институт по адресу: 123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д.1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЦ Курчатовский институт.

Автореферат разослан «____» _____ 2013г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук

А.В. Демура

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы

В настоящее время существует значительный интерес к проблеме образования продуктов эрозии (пыли и осаждаемых пленок) в установках термоядерного синтеза. Пыль и осаждаемые пленки в токамаках играют, в основном, отрицательную роль, во-первых, в связи с накоплением дорогого и радиоактивного трития и, во-вторых, поскольку являются хорошими катализаторами при возможных прорывах воды в камеру установки и образовании взрывоопасного количества водорода.

Таким образом, продукты эрозии, образующиеся в термоядерных установках, создают серьезные проблемы для безопасности и экономичности реактора.

Поэтому, для создания термоядерного реактора необходимо знание о механизмах формирования пленок и пыли, их свойствах (температуре, рельефе пленок, заряде пылевых частиц), условиях образования пыли и пленок на стенках реактора, продолжительности их существования.

Кроме того, знание механизмов и условий образования осаждаемых пленок с тем или иным типом рельефа является важным для технологий нанесения покрытий, которые должны иметь определенный рельеф поверхности, в зависимости от назначения. Покрытия с защитными и износостойкими свойствами должны иметь гладкую поверхность. Для некоторых специальных задач, напротив, нужны пленки с как можно более развитым рельефом, например, для производства покрытий эндокардиальных кардиостимуляторов, катализаторов, газоанализаторов.

Цели работы

Целями работы является выяснение закономерностей образования и отшелушивания пленок, осаждаемых на поверхностях, контактирующих с плазмой и процессов образования, поведения и мобилизации пыли в

термоядерных установках с помощью теоретических исследований и численного моделирования. Для достижения указанных целей были поставлены следующие задачи:

1) Объяснение образования осаждаемых пленок с тем или иным типом рельефа в зависимости от условий осаждения и свойств подложки на основе роста из отдельных атомов, падающих на подложку и участвующих в процессе диффузии по ее поверхности.

2) Создание численного кода, позволяющего исследовать рост осаждаемых пленок из атомов, диффундирующих по поверхности.

3) Применение созданного численного кода для нахождения оптимальных условий осаждения и распыления при разравнивании поверхности диагностических зеркал токамака.

4) Объяснение роста структур типа «пуха» на вольфрамовых поверхностях, облучаемых ионами гелия на основе роста из отдельных атомов, выбиваемых при падении ионов. Применение численного кода для моделирования роста такой структуры.

5) Теоретическое изучение процессов мобилизации пыли и отшелушивания пленок, образующихся из продуктов эрозии на стенках плазменных установок. Определение размеров мобилизуемых частиц пыли и толщины отшелушиваемых пленок.

6) Определение свойств (заряда и температуры) наночастицы пыли в плазме с учетом процесса термоэлектронной эмиссии. Изучение возможности образования пыли при конденсации пара с учетом отличия температуры образующейся пылевой частицы от температуры пара.

Научная значимость

1) Предложена модель образования осаждаемых пленок в результате диффузии атомов по поверхности пленки. Создан численный код, позволяющий моделировать предложенные механизмы, с помощью него

посчитан размер зерна поликристаллической пленки, определены условия образования различных структур пленок: «столбов», «цветной капусты».

2) Предложена модель образования структур типа «пуха» на поверхности W , контактирующей с гелиевой плазмой на основе роста из отдельных атомов, выбиваемых ионами He^+ . Произведено численное моделирование предложенных механизмов, подтверждающее предположения модели. Объяснены основные закономерности образования «пуха»

3) Найдены условия мобилизации пыли и отрыва пленок с поверхностей, контактирующих с плазмой. Определены размеры пыли и пленок, при которых возможны данные процессы.

4) Найдены заряд и температура наночастицы в плазме с учетом термоэлектронной эмиссии в зависимости от параметров плазмы (температура, степень ионизации, концентрация).

5) Найдены условия образования частиц путем конденсации пара при отличии температуры частицы от температуры пара. Показано, что при типичных для токамаков значениях параметров плазмы, образование пыли путем конденсации невозможно.

Практическая значимость

1) Найдены условия осаждения атомов и свойства подложки, при которых образуются пленки с тем или иным типом рельефа: гладкие, столбчатые структуры, фрактальные структуры, что актуально как для проблемы термоядерного реактора, так и для производства технологических покрытий для целей медицины, химической промышленности.

2) Найдены условия мобилизации пыли и отрыва пленок, образующихся из продуктов эрозии на стенках плазменных установок.

3) Найдены условия разравнивания поверхности металлических диагностических зеркал токамака. Показано, что наиболее эффективное разравнивание достигается при отношениях скоростей напыления и распыления, близких к единице.

4) Найдены потенциал и температура пылевой наночастицы в плазме в зависимости от параметров плазмы. Найдены условия образования пыли путем конденсации. Показано, что при типичных для токамаков условиях такой механизм образования пыли невозможен.

Основные положения, выносимые на защиту:

1) Дано объяснение рельефа пленок, образующихся при осаждении, на основе роста структур из одиночных атомов, падающих на подложку и диффундирующих по ее поверхности. Определение размера минимального кластера фрактальной структуры: $r_{\min} = 2\sigma a^3/T$, где σ – поверхностное натяжение, T – температура поверхности, a – атомный размер.

2) Результаты расчета зависимости размера зерна d поликристаллической пленки, образующейся в результате осаждения на подложку и диффузии по ней атомов того же вещества от условий осаждения выполненного с применением созданного численного кода: $d \sim \phi^{-1/4} \div \phi^{-1/6}$, где $\phi = qa^4/D$, q – поток осаждаемых атомов на поверхность, D – коэффициент диффузии по поверхности.

3) Определенные значения параметров, характеризующих осаждение и свойства поверхности, при которых образуется тот или иной тип структур, наблюдаемых в токамаках, с помощью численного моделирования.

Для образования развитого рельефа поверхности – высоких объектов типа «столбов» требуется одновременное выполнение следующих условий:

а) Интервал температур подложки: $0.03 \cdot E_a < T < 0.7 \cdot E_a$, где E_a – энергия активации диффузии по поверхности пленки.

б) Для роста развитых структур относительный вклад χ соседних атомов второго порядка должен быть больше некоторого значения, зависящего от кристаллической структуры. Для простой кубической решетки: $\chi > 0.2$.

в) Отношение потока осаждаемых атомов к коэффициенту диффузии также должно принадлежать определенному интервалу: $10^{-11} < \varphi < 10^{-7}$, поток атомов должен быть направленным.

г) Необходимо условие предпочтительного закрепления диффундирующих атомов на вершинах растущих структур, например, наличие в потоке осаждаемых атомов небольшой доли примеси ($\alpha > 0.001$), с которыми атомы имеют большую энергию связи, или преимущественный рост выделенного кристаллографического направления.

Рост разветвленных структур типа «цветной капусты» может быть связан как с процессом осаждения (1), так и с процессом диффузии адатомов (2). Поток атомов должен быть изотропным. В первом случае (1) температура подложки должна быть мала (порядка комнатной). Кроме того, необходимо наличие начальной неровности. В случае (2), для образования подобных структур необходимо наличие в потоке атомов небольшой доли примесей: $\alpha > 0.001$, благодаря которым ускоряется образование зародышей ветвей и затрудняется отрыв атомов от них, а температура поверхности и поток атомов должны принадлежать определенным интервалам: $0.05E_a < T < 0.4E_a$:
 $10^{-11} < \varphi < 10^{-7}$.

4) Найденные условия, позволяющие добиться разравнивания поверхности диагностических зеркал при одновременном напылении атомов того же вещества и распылении. Показано, что отношение потоков атомов и ионов должно принадлежать некоторому интервалу, зависящему от материала поверхности, ее температуры и абсолютной величины потока. Оптимальное разравнивание достигается при значениях данного отношения, близких к единице.

5) Модель, объясняющая образование «пуха» на поверхности вольфрама при облучении его в гелиевой плазме за счет роста волосков пуха из адатомов, образующихся при бомбардировке ионами гелия. Результаты численного моделирования роста «пуха».

6) Теоретическая модель мобилизации пыли термоударом (при ELMax, срывах), а также отрыв пленки образовавшейся из продуктов эрозии в токамаках. Расчеты размеров пылинок мобилизуемых при потоках мощности характерных для ELMов, $r_{\min} \approx 0.1-1$ мкм и для срывов, $r_{\min} \approx 10$ нм.

Расчет скорости отлетающих пылинок: $v = 100 \text{ м/с} - 300 \text{ м/с}$. Расчет толщины пленки отслаивающейся при ELMax: $h \sim 1 \text{ мкм}$. Расчет размеров кусков (от долей мм до нескольких см), на которые рвется пленка вследствие быстрого нагрева.

7) Утверждение, что конденсации пара в виде пыли на поверхности не происходит, поскольку в условиях токамака пылинки соединяются и образуют пленку раньше, чем происходит их мобилизация.

8) Самосогласованное решение уравнений баланса заряда и энергии наночастицы в плазме с учетом термоэлектронной эмиссии, из которого были определены заряд частицы в плазме и ее температура.

9) Условия образования пылевых наночастиц путем конденсации пара, с учетом отличия температуры частицы T_p от температуры плазмы.

Апробация работы

Основные результаты представляемой работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях:

1) 35-я международная (Звенигородская) конференция по физике плазмы и УТС, 2008.

2) 51-я научная конференция МФТИ, Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук, г.2008.

3) 6-я Курчатовская молодежная школа, 2008.

4) 7-я Научно-техническая конференция «Молодежь в науке», г.Саров, 2008.

5) 36-я международная (Звенигородская) конференция по физике плазмы и УТС, 2009.

6) 7-я Курчатовская молодежная школа, 2009.

7) 8-я Курчатовская молодежная школа, 2010.

8) XIV конференция «Взаимодействие плазмы с поверхностью», МИФИ, 2011г.

9) 9-я Курчатовская молодежная школа, 2011.

10) XV конференция «Взаимодействие плазмы с поверхностью», МИФИ, 2012.

11) 10-я Курчатовская молодежная школа, 2012.

12) XVI конференция «Взаимодействие плазмы с поверхностью», МИФИ, 2013.

Публикации

По теме диссертации было опубликовано 6 статей в журналах, рекомендованных ВАК.

Объем и структура диссертации.

Данная диссертация содержит 116 страниц текста, включая 43 рисунка и библиографию из 85 наименований. Диссертация включает в себя введение, 6 глав и выводы.

Используемые термины и сокращения:

Адатом – адсорбированный атом. «Столбы», вискеры, «цветная капуста» - наноструктурные объекты, наблюдаемые в плазменных установках: «столбы» и вискеры представляют собой высокие, тонкие объекты, «цветная капуста» - фрактальную структуру. «Пух» - наноструктура, состоящая из длинных, тонких волосков. Ступеньки – выступы поверхности размером в один атом. ОДА – ограниченная диффузией агрегация. ELM – краевая неустойчивость плазмы.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обосновывается актуальность задачи, формулируются цели и задачи исследований, показаны новизна, научная и практическая ценность работы. Описаны защищаемые положения и данные об апробации, приводится структура диссертации.

В **главе 1** приведен обзор научных работ, посвященных вопросам образования пленок, пыли и других наноструктурных объектов (например, «пуха» на поверхности вольфрама) в плазменных установках.

Приведены экспериментальные результаты, характеризующие свойства (состав, размеры и т.д.) пленок и пылевых частиц в токамаках и других плазменных установках.

Описаны существующие на настоящий момент модели образования пленок на стенках токамака, а также, структур типа «пуха» на поверхности вольфрама, облучаемого ионами гелия.

Описаны изменения рельефа поверхности в результате распыления и напыления.

Глава 2 посвящена модели роста пленок с развитым рельефом на основе диффузии по поверхности и объединения отдельных адсорбированных атомов (адатомов).

Предложены механизмы роста пленок с различным рельефом: гладкие, глобулярные, столбчатые, с фрактальной структурой поверхности. Показано, что причиной появления развитой структуры пленки может являться появление устойчивых кластеров либо в результате флуктуационного образования зародышей критического размера, либо в результате присоединения к атомам примеси, играющих роль центров зарождения кластеров. При высоких температурах поверхности возможен перенос адатомов к более горячим элементам рельефа (к поверхности пленки) вследствие убывания энергии активации диффузии с ростом температуры. Это способствует образованию развитой структуры пленки, в результате чего могут расти столбчатые или разветвленные объекты. Кроме того, росту кластеров «вверх» может способствовать их кристаллическая структура: преимущественно растут кристаллы, у которых ось перпендикулярна грани с наименьшей плотностью (законы Шубникова и Бравэ), а также лучшее

закрепление на вершинах кластеров в силу большей кривизны (и следственно, большего количества ловушек для адатомов) таких участков поверхности.

Размер минимального кластера во фрактальной структуре определен из конкуренции диффузионного разравнивания и поверхностного натяжения и равен: $r_{\min} = 2\sigma a^3/T$, где σ – поверхностное натяжение, T – температура поверхности, a – атомный размер.

Произведено моделирование роста пленок на начальной стадии с помощью созданного численного кода, позволяющего рассчитывать процессы образования сложных многоатомных структур. Движение атомов описывается как термически активируемые переходы между дискретными положениями, что позволило моделировать многоатомные структуры. Энергии активации таких переходов выражалась через энергию сублимации материала пленок. Общая картина роста пленок рассчитана методом Монте-Карло. Предполагалось, что диффундирующие по поверхности адатомы участвуют в следующих процессах:

1) Объединение адатомов в кластеры. Для реализации такого процесса адатомы должны оказаться в соседних положениях. Образовавшийся кластер становится неподвижным и в течении некоторого времени он состоит из одного слоя атомов.

2) Движение адатомов по подложке вдоль границы кластера, это приводит к тому, что кластеры, состоящие из одного слоя атомов, через некоторое время принимают форму, близкую к круглой.

3) Объединение нескольких кластеров в один, более крупный, в результате роста кластеров.

4) Отрыв атомов с кластера обратно на подложку. Если кластер состоит из одного слоя адатомов, данный процесс заключается в отделении граничных атомов.

5) Взаимодействия адатомов с кластерами и между собой.

Получена зависимость размера зерна образующейся поликристаллической пленки от условий осаждения и свойств подложки, в

частности, от параметра $\phi = qa^4 / D$, где D - коэффициент диффузии адатомов по подложке, q - поток осаждаемых атомов, a – атомный размер. Выяснено, что для согласия с экспериментальными данными, адатомы должны отталкиваться друг от друга. Кулоновское отталкивание в данной модели характеризуется параметром $\alpha = Q^2 / aT$, где Q – заряд адатома, T - температура подложки. Для наилучшего согласия с экспериментом требуется $\alpha=0.5$ (рис.1). В работе рассчитаны возможные значения заряда адатомов, в предположении, что он обусловлен распределением электрона адатома над потенциальной ямой, которую образуют атомы подложки. Показано, что значение $\alpha=0.5$ соответствует $Q= 0.05 \cdot e$ (e – заряд электрона), то есть достигается при небольшом заряде адатома.

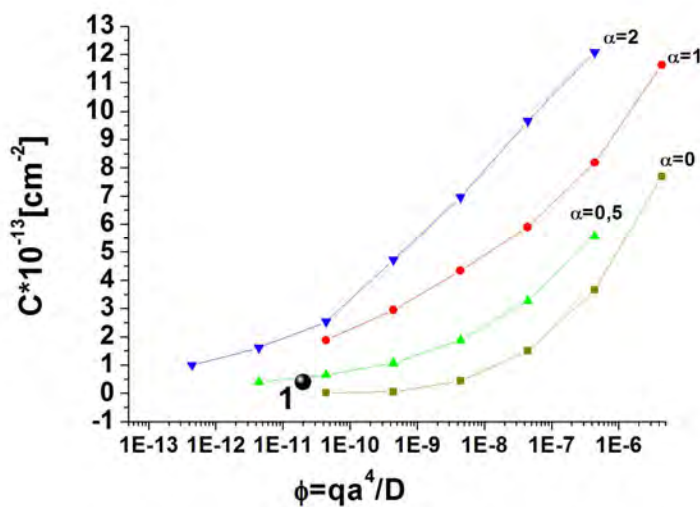


Рис.1. Зависимость числа кластеров от параметра ϕ с учетом отталкивания. Точка с цифрой 1 – концентрация кластеров, посчитанная из результатов эксперимента.

Для численного моделирования роста структур с развитым рельефом использовался тот же код, что и для «плоского» случая, который был дополнен процессами «запрыгивания» адатомов на уже существующие кластеры и диффузии по их поверхности. Кроме «запрыгивания» адатомов на кластер возможен и обратный процесс – переход атома с поверхности кластера

на подложку («спрыгивание»). Отношение вероятности таких процессов и вероятности прыжка на расстояние одной ячейки задавалось параметром p_z , зависящего от кристаллической структуры поверхности. В результате «запрыгивания» может появиться новый слой кластера, либо такой процесс может привести к образованию и росту нового зародыша на поверхности уже существующего кластера, на котором данный процесс может повториться, т.е. появляются развитые структуры. Считалось, что диффузия по поверхности кластеров протекает также как и диффузия адатомов по подложке. Вероятности перемещения диффундирующих по поверхности атомов на расстояние одной атомной ячейки определяются энергией активации диффузии E в данном положении, которая, в свою очередь, определяется энергией связи с соседними атомами U , а также, числом ближайших соседних атомов k_1 и числом соседних атомов второго порядка дальности k_2 , вклад которых при моделировании был взят с некоторым весом χ :

$$E = k_1 U + \chi k_2 U$$

Поток атомов на поверхность $q = 10^{16} \div 10^{22} [1/\text{см}^2 \text{ с}]$ задается одним из двух способов:

1) Поток осаждаемых атомов направленный: в большинстве случаев атомы осаждаются «сверху», так что их поток направлен по нормали к начальной поверхности подложки, кроме того рассмотрены случаи потока атомов под углом к поверхности.

2) Атомы осаждаются равновероятно со всех направлений из верхнего полупространства.

Процессы появления адатомов на подложке, отрыв атомов от участков структуры с наименьшей энергией связи (в «углах»), а также диффузия адатомов по поверхности, реализуются как в двухмерном (плоском) случае. Однако, отношение энергии связи атомов, находящихся в различных точках поверхности, к энергии активации диффузии, в трехмерном и двухмерном случаях отличается.

Выяснено, при каких значениях параметров, характеризующих осаждение и свойства поверхности, образуется тот или иной тип структур, наблюдаемых в токамаках. Показано, что при большей части значений параметров, характеризующих условия осаждения, образуются достаточно гладкие пленки. Однако существуют области значений параметров, допускающих развитый рельеф поверхности:

Для образования высоких объектов типа «столбов» требуется одновременное выполнение следующих условий:

А) определенный интервал отношений температуры подложки к энергии активации диффузии, при которых существенна диффузия адатомов, но мала скорость отрыва присоединенных к структуре атомов обратно на ее поверхность: $0.03E_a < T < 0.7E_a$, где E_a – энергия активации диффузии на гладкой поверхности.

Б) Относительный вклад χ соседних атомов второго порядка должен быть больше некоторого значения, зависящего, впрочем, от кристаллической структуры. Для простой кубической решетки $\chi > 0.2$. Большие значения χ увеличивают отношение высоты столба к толщине. Таким образом, на рельеф пленки существенно влияет ее материал.

В) Отношение потока осаждаемых атомов к коэффициенту диффузии: $\varphi_{min} < \varphi < 10^{-7}$, где нижняя граница $\varphi_{min} = 10^{-11}$ – минимальное значение параметра, исследованное при моделировании. Поток атомов должен быть направленным – рассмотрен случай нормального потока (образуются вертикальные «столбы») и случай потока, направленного под углом к подложке (образуются «столбы», угол наклона которых не может быть больше угла падения потока)

Г) Наличие механизмов затрудняющих отрыв атомов от вершин растущих структур обратно на поверхность, например, наличие в потоке атомов доли примеси $\alpha > 0.01$ или лучшее закрепление атомов на вершинах структур.

Рост разветвленных структур типа «цветной капусты» может быть связан как с процессом осаждения, так и с процессом диффузии адатомов. В первом случае требуется одновременное выполнение следующих условий:

А) Поток атомов должен быть изотропным, температура подложки мала (порядка комнатной).

Б) Необходимо наличие начальной неровности.

Во втором случае для образования подобных структур необходимо одновременное выполнение следующих условий:

А) Наличие в потоке осаждаемых атомов доли примеси $\alpha > 0.001$, благодаря которым ускоряется образование зародышей ветвей и затрудняется отрыв атомов от них.

Б) Температура поверхности и параметр, характеризующий поток атомов, должны принадлежать определенным интервалам: $0.05 E_a < T < 0.4 E_a$, $\varphi_{min} < \varphi < 5 \cdot 10^{-7}$.

В) Поток атомов должен быть изотропным.

Г) Значения параметра, характеризующего вклад взаимодействия с атомами соседями 2-го порядка: $\chi > 0.2$.

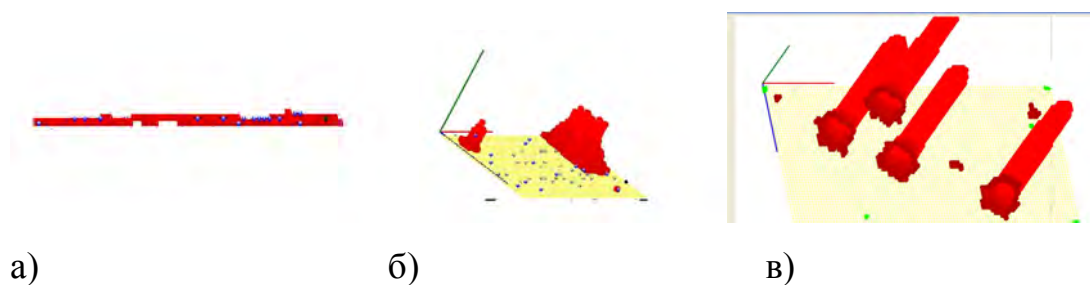
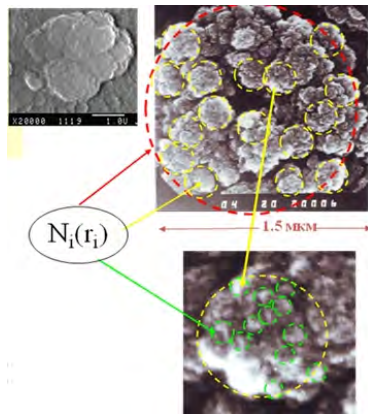
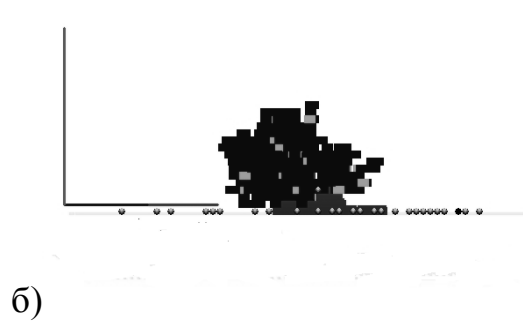
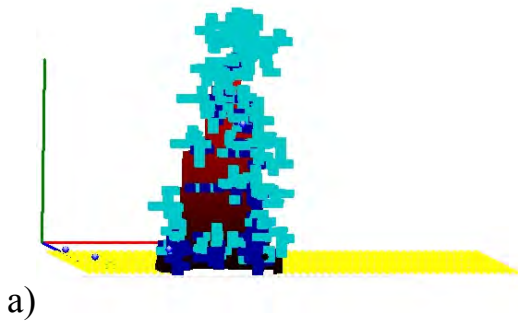


Рис.2. Вид поверхности после осаждения атомов без примесей в потоке, параметр $\varphi = 5 \cdot 10^{-6}$ (а) и при наличии доли атомов примеси $\alpha = 0.1$, $\varphi = 5 \cdot 10^{-8}$ – (б). Поверхность, полученная при преимущественном осаждении на вершины, $\varphi = 5 \cdot 10^{-7}$ (в). Температура подложки $T = 0.15 E_a$.



в)

Рис.3. Рельеф поверхности, полученной в результате осаждения при температуре поверхности $T=0,02E_a$ (а) и $T=0.1E_a$ (б). Структура типа «цветной капусты» в токамаке (в).

Полученные в результате численного моделирования структуры соответствуют пленкам, наблюдаемым в токамаках, а условия их образования качественно согласуются с режимами их осаждения в токамаке.

В главе 3 описаны модели мобилизации пыли и отрыва пленок, образующихся из продуктов эрозии на поверхности. В работе рассмотрена мобилизация пылинок в результате трех факторов: при резком нагреве – термоударе (при срыве плазмы или краевой неустойчивости), под действием вибраций, под воздействием ветра (потока газа или плазмы).

Отрыв пылинки от поверхности происходит, если энергия термонапряжения U превышает энергию сцепления пылинки с подложкой. Отрываются пылинки размер которых больше, чем $r_{\min} = \gamma(1-\mu)/\Delta(\alpha T)^2 E$, где α – коэффициент термического растяжения, T – температура, E – модуль

упругости, μ - коэффициент Пуассона материала пылинки, $\Delta(\alpha T)$ - разность αT в пылинке и подложке. При потоках мощности характерных для ELMов $r_{\min} \approx 0.1-1$ мкм, а для срывов $r_{\min} \approx 10$ нм. Рассчитана скорость отлетающих пылинок, которая составляет при $r \gg r_{\min}$ $v \sim 100$ м/с для тяжелых пылинок, $v \sim 300$ м/с для легких пылинок.

Рассчитаны условия отслаивания пленки от поверхности. Показано, что пленка отслаивается при толщине: $h > \gamma(1-\mu)/E\Delta(\alpha T)^2$, что при ELM составляет ~ 1 мкм. Отслоенная пленка рвется на куски из-за быстрого нагрева при размерах пленки $\ell > h\{2\pi^2 C(E\rho)^{1/2}/3NQ\}^{1/2}$ (C - теплоемкость пленки, ρ - ее плотность, N – концентрация атомов пленки, Q поток мощности на пленку). Оценки показывают, что размер пленки ℓ меняется от долей миллиметра до нескольких сантиметров.

В работе изучена возможность конденсации пара в виде пыли на поверхности. Образование пылинок происходит в результате объединения диффундирующих по поверхности атомов, осажденных на поверхность. Образовавшиеся пылинки могут быть мобилизованы в результате термоудара, однако оценки показывают, что в условиях токамака пылинки соединяются и образуют пленку раньше, чем происходит их мобилизация.

Глава 4 посвящена исследованию относительно нового наноразмерного объекта – структуре типа «пуха», растущей на поверхности вольфрама, облучаемого ионами гелия. На настоящий момент имеются следующие экспериментальные данные по таким структурам, описанные в главе 1:

1) Для образования пуха необходимо облучение ионами He^+ с энергией более 20- 30 эВ при температуре вольфрама в интервале: 1000 – 2000 К .

2) Толщина слоя пуха растет со временем t пропорционально $t^{1/2}$ и при плотностях ионного тока $10^{18} - 10^{19}$ $\text{He}^+/\text{см}^2\text{с}$ за время $t \sim 10^4$ с образуется слой пуха ~ 5 мкм. В предположении диффузионного роста толщины слоя пуха $h = (2D_{\text{eff}}t)^{1/2}$, эффективный коэффициент диффузии равен $D_{\text{eff}} = D_0 \exp(-E_{\text{eff}}/T)$, где энергия активации $E_{\text{eff}} = 0.7$ эВ, а множитель $D_0 \approx 10^{-8}$ $\text{см}^2/\text{с}$.

В работе предложена модель роста пуха, в которой полагается что пух на вольфраме, как и структуры в токамаках, образуется в результате роста из адатомов, но появляющихся на поверхности не при осаждении, а в результате ее бомбардировки ионами He^+ . Образование адатома на поверхности происходит в результате выбивания атома из поверхностного слоя, для этого требуется энергия $E_a \approx E_s/3$, где E_s , - энергия сублимации, определяющая порог распыления, который для He^+ и W составляет 107 эВ. Поэтому порог образования адатомов на поверхности составляет ~ 30 эВ и определяет энергетический порог ионов He^+ для образования структуры пуха. Когда структура пуха уже образовалась и экранирует исходную подложку, то ионы He создают адатомы непосредственно на волосках растущего пуха. Кроме создания адатомов роль облучения ионами гелия заключается в образовании «рваной» поверхности, возникающей при разрыве гелиевых пузырьков, а также в скапливании адатомов над пузырьками вследствие растяжения оболочек пузырьков. Эти факторы способствуют зарождению кластеров, служащих зародышами для волосков, растущих из атомов и формирующих структуру пуха.

Кинетика диффузии адатомов по волоскам в данной модели описывает зависимость толщины слоя пуха от времени в количественном согласии с экспериментами. Для эффективного коэффициента диффузии получено выражение: $D_{\text{eff}} = (q \cdot D)^{1/2} / RN$, где q – скорость образования адатомов на поверхности бомбардируемой ионами He^+ , R – радиус волоска пуха, N – концентрация атомов в волоске.

Затруднить образование пуха можно как меняя энергию ионов He^+ , так и прогревом вольфрама выше температуры распада кластеров и температуры интенсивного отрыва атомов от ступенек на вершинах волосков ($T > 2000\text{K}$). В условиях токамака такие нагревы могут происходить при ELM и срывах, что обеспечит очистку поверхности от пуха.

В работе произведено численное моделирование образования структур типа «пуха» на основе предложенных механизмов, с использованием

численного кода на основе описанного в главе 2, в результате чего были получены высокие, тонкие объекты, похожие на волосы «пуха» (рис.4), что подтвердило предположения модели.

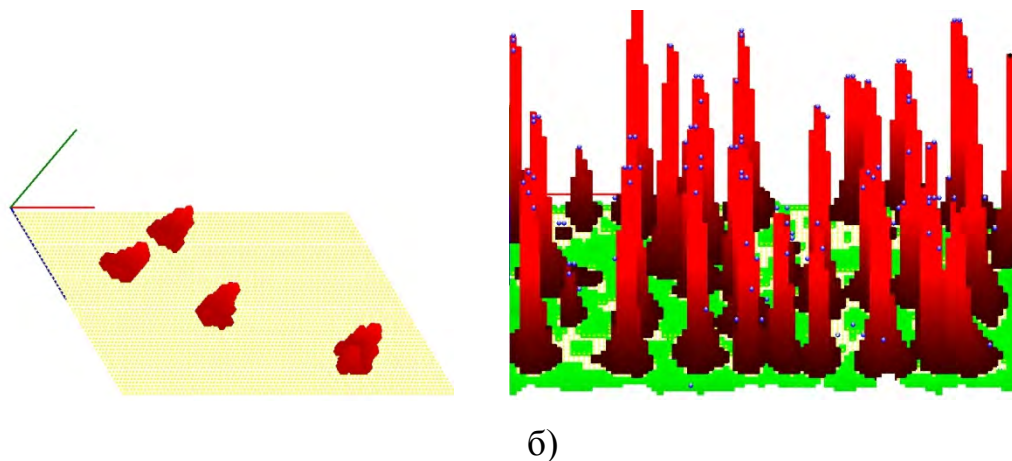


Рис.4. Моделирование роста структуры пуха. Начальные кластеры-зародыши (а), результат моделирования роста структуры при преимущественном закреплении атомов на вершинах структуры (б).

В главе 5 приведены результаты численного моделирования разравнивания поверхности молибденовых диагностических зеркал токамаков при распылении совместно с осаждением атомов того же вещества. При моделировании использовался численный код, созданный на основе кода, описанного в главе 2, дополненный процессом распыления поверхности ионами. Распыление моделируется образованием ямы размером равным одному атому. Скорость распыления различных участков поверхности зависит от угла падения φ , вероятность образования ямы определялась по формуле:

$$P(\varphi) = \left[\frac{1}{\cos\left(\frac{\varphi-5}{57,297}\right)} - \frac{0,01}{\cos\left(\frac{\varphi-5}{57,297}\right)} \right]^3$$

где φ измеряется в градусах.

Распыленные атомы могут переосаждаться на неровности поверхности с учетом диаграммы направленности вылета этих атомов $\sim \cos\theta$, где θ - угол вылета распыленного атома. Варьировались значение параметра V_h/V_p (V_h –

вероятность образования ямы при распылении, V_p – вероятность осаждения атома), а также параметры движения атомов по поверхности, зависящие от температуры. Моделирование проводилось как в 2D варианте, когда изучалась динамика на плоскости перпендикулярной поверхности образца, так и в 3D варианте, моделирующем реальную поверхность (рис.5).

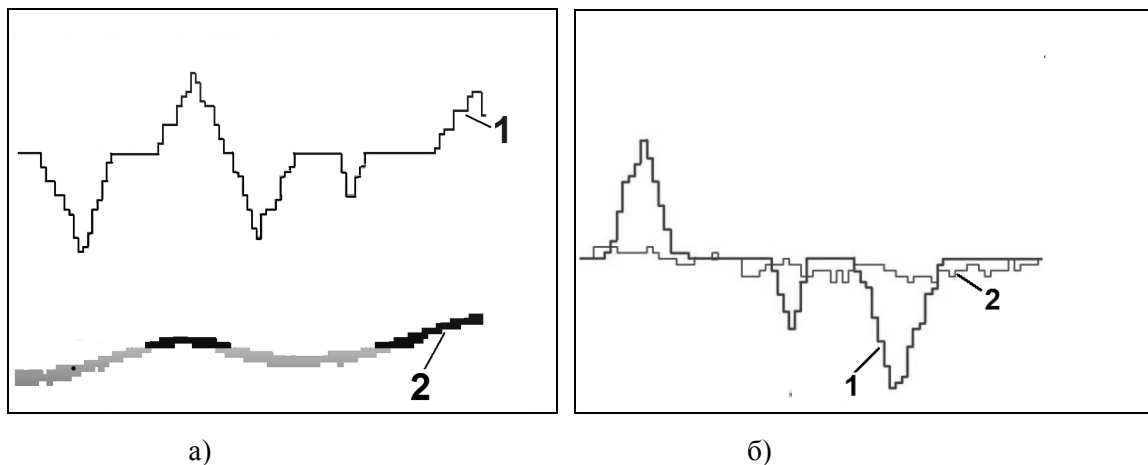


Рис. 5. Разравнивание поверхности при одновременном распылении и напылении при $V_n/V_p = 1$, $T = 640$ K в 2D модели – (а), при $V_n/V_p = 1$, $T = 500$ K в 3D модели – (б). Цифрой 1 отмечен начальный рельеф, цифрой 2 – конечный (для 3D модели конечный рельеф для ясности показан ниже начального).

Моделирование одновременного распыления и напыления собственного материала показало, что для сглаживания рельефа необходимо, чтобы скорости процессов распыления и напыления отличались не более чем в 2 раза. Результаты эксперимента, проведенного для проверки моделирования, качественно и количественно согласуются с результатами расчетов.

В главе 6 описано поведение наночастицы пыли в плазме. Заряд частицы определяется потоками электронов и ионов из плазмы на ее поверхность и термоэлектронной эмиссией. В работе исследован случай стационарного состояния частицы, когда ток на ее поверхность равен нулю. Температура частицы определяется из условия равенства нулю потока энергии. Поток

энергии зависит от заряда частицы, а плотность тока от температуры. Поэтому, уравнения баланса заряда и энергии решались самосогласованно.

Была показана возможность существования при определенных параметрах плазмы двух устойчивых состояний наночастицы: одно - с более низкой температурой и отрицательным потенциалом, и другое - с более высокой температурой и положительным потенциалом (Рис. 6). Реализация того или другого состояния определяется начальными условиями.

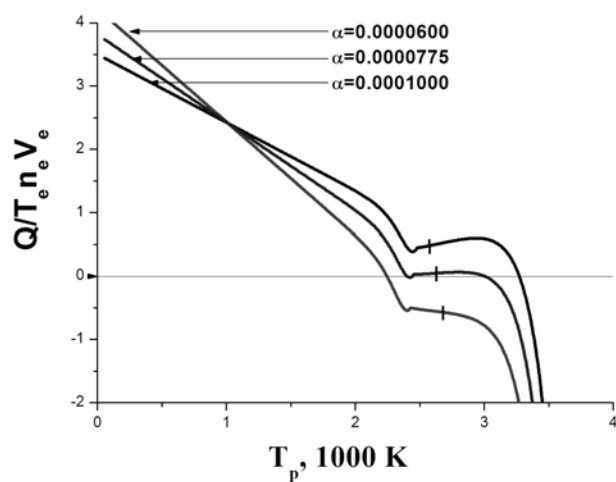
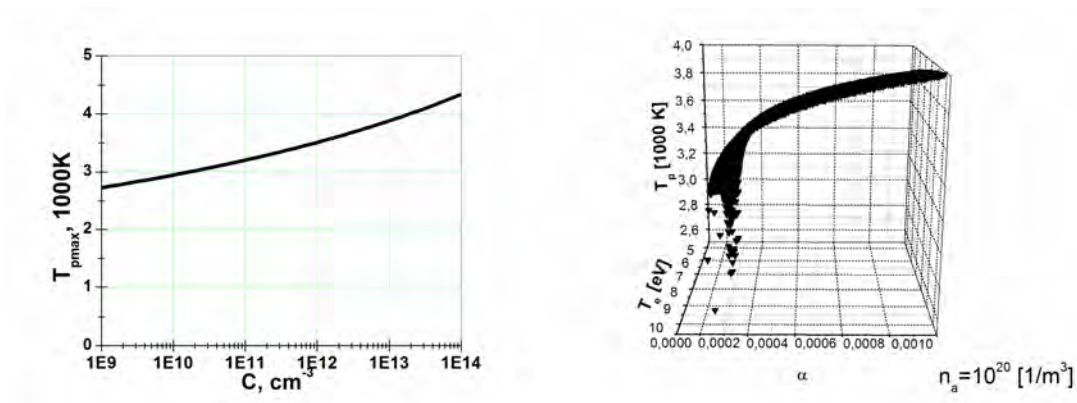


Рис.6. Зависимость потока энергии на частицу от ее температуры при температуре электронов плазмы $T_e = 5 \text{ эВ}$, концентрации плазмы $n_a = 10^{20} \text{ см}^{-3}$ для разных степеней ионизации α . Штрихами отмечены температуры, при которых потенциал частицы меняет знак.

В работе найдены критические степени ионизации плазмы как функции плотности и электронной температуры плазмы, начиная с которых возможен только положительный потенциал наночастиц. Найдено значение температуры T_p частицы, соответствующее равновесному состоянию наночастиц с положительным потенциалом, как функция степени ионизации плазмы и температуры плазменных электронов (рис.7).



а)

б)

Рис.7. а) Зависимость температуры T_{max} от концентрации атомов пара.
 б) Зависимость температуры устойчивого состояния положительно заряженной частицы от степени ионизации и температуры электронов плазмы при концентрации атомов водорода 10^{14} cm^{-3} .

Найдены условия образования пылевых частиц путем конденсации пара, находящегося в плазме, с учетом различия температуры частицы и пара.

Показано, что при температуре частицы больше критической, определяемой из условия: $T_p = H / \ln(N \cdot T_p^{1/2} / C \cdot T^{1/2})$, образование пыли путем конденсации невозможно. Здесь N – число атомов в единице объема частицы, H – энергия сублимации, C – концентрация пара, T – температура пара. Расчет при типичных значениях параметров плазмы токамака показал, что при требуемых для конденсации пара температурах частицы, степень ионизации плазмы $\alpha < 10^{-3}$ (Рис.5). Таким образом, образование пыли в токамаке путем конденсации пара невозможно.

Выводы:

1) Предложена модель роста осаждаемых пленок в результате диффузии адатомов, произведено численное моделирование процесса образования пленок с помощью созданного численного кода. Рассчитан размер зерна поликристаллической пленки в зависимости от условий осаждения. Получены условия образования пленок различных типов: гладких, глобулярных, столбчатых, фрактальных («цветной капусты»).

2) Предложена модель роста структур типа «пуха» на поверхности W , контактирующей с гелиевой плазмой, на основе роста из отдельных атомов, выбиваемых ионами He. Произведено численное моделирование, предложенных процессов, которое подтверждает предположения модели. Объяснены основные закономерности образования «пуха».

3) Получены условия мобилизации пыли и отрыва осажденных пленок с поверхностей, контактирующих с плазмой, размеры отрываемых пыли ($r > 1$ мкм) и пленок (толщина $h > 1$ мкм), скорости мобилизуемых пылинок ($v = 100$ м/с – 300 м/с).

4) Найдены условия разравнивания поверхности металлических диагностических зеркал токамака, с помощью численного моделирования изменения рельефа поверхности зеркала, при одновременном распылении и осаждении атомов того же вещества. Показано, что наиболее эффективное разравнивание достигается при отношениях скоростей напыления и распыления близких к единице.

5) Найдены заряд и температура наночастицы в плазме с учетом термоэлектронной эмиссии, в зависимости от параметров плазмы, условия образования частиц путем конденсации пара с учетом отличия температуры частиц от температуры пара. Показано, что при типичных параметрах плазмы токамаков образование пыли путем конденсации невозможно.

Публикации в журналах из перечня ВАК:

- 1) *Ю.В.Мартыненко, М.Ю.Нагель, М.А.Орлов.* Наночастица в плазме.// Физика плазмы. 2009.т.35. №6.с.542-546.
- 2) *Ю.В.Мартыненко, М.Ю.Нагель.* Образование пыли в токамаках.//ВАНТ.сер. Термоядерный синтез.2009.вып.3.с.39-44.
- 3) *Ю.В.Мартыненко, М.Ю.Нагель.* Образование развитого нанорельефа осаждаемых пленок.// Российские нано технологии. 2009.т.4. № 9-10.с.59-63.
- 4) *Ю.В.Мартыненко, М.Ю.Нагель.* Мобилизация пыли и отрыв пленок, образующихся из продуктов эрозии в токамаках.//Физика плазмы. 2012.№3. с.3118-3122.
- 5) *М.Ю.Нагель., Ю.В.Мартыненко.* Моделирование роста осаждаемых пленок.// Российские нанотехнологии. 2011. т.6.№9-10. с. 26 - 30.
- 6) *Ю.В.Мартыненко, М.Ю.Нагель.* Модель образования «пуха» на поверхности вольфрама. // Физика плазмы. 2012. т. 38. №12. с.1082-1086.

Прочие публикации:

- 1) *М.Ю. Нагель, Ю.В. Мартыненко, М.А. Орлов.*// Наночастица в плазме. Тезисы докладов 35-й международной (Звенигородской) конференции по физике плазмы и УТС. 2008.
- 2) *М.Ю. Нагель.*// Наночастица в плазме. Сборник тезисов 7-й Научно-технической конференции «Молодежь в науке». г.Саров.2008.

- 3) *М.Ю. Нагель, Ю.В. Мартыненко // Модель формирования структур в пленках осаждаемых в термоядерных установках. Тезисы докладов 36-й международной (Звенигородской) конференции по физике плазмы и УТС. 2009.*
- 4) *М.Ю. Нагель// Образование пыли в токамаках путем конденсации пара. Сборник аннотаций 7-й Курчатовской молодежной школы.2009.*
- 5) *М.Ю. Нагель, Ю.В. Мартыненко// Моделирование роста осаждаемых пленок. Тезисы докладов XIV конференции «Взаимодействие плазмы с поверхностью». МИФИ. 2011.*
- 6) *М.Ю. Нагель, Ю.В. Мартыненко// Модель образования «пуха» на поверхности вольфрама. Тезисы докладов XV конференции «Взаимодействие плазмы с поверхностью». МИФИ. 2012.*
- 7) *М.Ю. Нагель, Ю.В. Мартыненко, А.В. Рогов// Разравнивание поверхности диагностических зеркал при распылении с напылением. Тезисы докладов XV конференции «Взаимодействие плазмы с поверхностью». МИФИ. 2012.*
- 8) *М.Ю. Нагель, Ю.В. Мартыненко// Моделирование образования развитого рельефа осаждаемых пленок. Тезисы докладов XVI конференции «Взаимодействие плазмы с поверхностью». МИФИ. 2013.*