

На правах рукописи

КОГУТ Дмитрий Константинович

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦ
С МОРФОЛОГИЧЕСКИ НЕОДНОРОДНЫМИ
ПОВЕРХНОСТЯМИ ОБРАЩЁННЫХ К ПЛАЗМЕ
МАТЕРИАЛОВ**

Специальность 01.04.08 – физика плазмы

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук



Москва – 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего профессионального образования "Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ"

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук,
Трифонов Николай Николаевич

Официальные оппоненты: Афанасьев Виктор Петрович, доктор физико-математических наук, профессор, НИУ МЭИ
Мартыненко Юрий Владимирович, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник НИЦ «Курчатовский институт»

Ведущая организация: Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова (НИИЯФ МГУ), Москва

Защита состоится «27» марта 2013 г. в 17 час 00 мин. на заседании диссертационного совета Д 212.130.05 в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего профессионального образования "Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ" по адресу: 115409 Москва, Каширское шоссе 31, конференц-зал К-608 корпуса «К», тел. (499) 323-91-67, (499) 324-84-98.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЯУ МИФИ

Автореферат разослан « 25 » февраля 2013 г.

Просим принять участие в работе совета или прислать отзыв в двух экземплярах, заверенный печатью организации.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Стариков Р.С.

Общая характеристика работы

Актуальность работы

Международный термоядерный экспериментальный реактор (ИТЭР) – совместный проект России, стран Европы, США, Канады, Индии и Китая – призван продемонстрировать возможность получения энергии в управляемой термоядерной реакции. Во время разряда на стенки камеры токамака помимо нейтронов и электромагнитного излучения будут приходить потоки нейтралов перезарядки, а также ионов и распылённых атомов примесей из пристеночной плазмы. Процессы отражения и захвата данных частиц, осаждение примесей из разряда, физическое и химическое распыление материалов, обращённых к плазме (ОПМ), существенно влияют на время удержания плазмы в термоядерном реакторе (ТЯР).

Эрозия поверхности первой стенки ухудшает свойства материалов, сильно развитый рельеф может привести к повышенному захвату изотопов водорода в процессе со-осаждения примесей и увеличению последующего рециклинга. Морфологические неоднородности ОПМ включают не только особенности геометрии и шероховатости поверхности, но и компонентный состав приповерхностного слоя. Эти факторы могут оказывать существенное влияние на локальные характеристики взаимодействия плазмы с первой стенкой, в частности, на коэффициенты распыления и отражения. В процессе облучения морфология материалов изменяется, а, следовательно, меняются потоки частиц, вылетающих с первой стенки, влияющие на конфигурацию разряда в токамаке.

Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами реактора является одним из ключевых вопросов при создании ИТЭР. Серьёзной проблемой является накопление радиоактивного трития в ОПМ, в том числе в результате распыления и перепыления материала первой стенки, транспорта примесей в токамаке. Одним из факторов, влияющих на захват трития, является наличие неоднородностей на поверхности тайлов, таких как щели между элементами, трещины, осаждающиеся элементы пыли и расплавленного материала. Предполагается, что в реакторе ИТЭР в качестве ОПМ будут использоваться бериллий и вольфрам: бериллий – как материал для покрытия первой стенки, вольфрам – в диверторе. Известно, что при осаждении примеси Be/W на бериллиевую и вольфрамовую поверхность происходит захват изотопов водорода. В присутствии неоднородностей микрорельефа могут образовываться локальные зоны осаждения подобных примесей. Поэтому необходимо проводить комплексный анализ процессов, протекающих на

поверхности ОПМ, учитывать динамическое изменение микрорельефа и компонентного состава и проводить оценку накопления трития в данных условиях.

Ещё одна задача по изучению взаимодействия плазмы с поверхностью ОПМ связана с использованием металлических зеркал в оптических и лазерных диагностиках ИТЭР в качестве первичного элемента, обращённого к плазме. Эрозия высокоэнергетичными нейтралами перезарядки и осаждение примесей могут существенно повлиять на отражательную способность зеркал вследствие изменения состава поверхности. Деграция оптических свойств зеркал повлияет на качество сигнала и эффективность соответствующих диагностик. Следовательно, необходимо исследовать состояние поверхности зеркала в зависимости от характеристик потоков частиц в пристеночной плазме.

Одним из наиболее распространённых методов изучения упомянутых процессов является компьютерное моделирование. Существующие программы характеризуются областью применимости, балансом между точностью и временем расчёта, требуемыми вычислительными ресурсами.

Современные коды позволяют описывать эрозию материала, его перенос в плазме, осаждение, включая образование смешанных слоев. Спектр различных методов расчёта включает в себя как модель бинарных соударений (Монте-Карло коды TRIM, TRIDYN), так и ресурсоёмкий метод молекулярной динамики (МД). Однако в настоящее время не существует корректной модели для описания динамического изменения микрорельефа трёхмерной поверхности в процессе ионного облучения в масштабе, превышающем возможности расчёта в МД-коде. В случае двухмерной поверхности существует код SDTrimSP-2D, который основан на модели описания геометрии поверхности при помощи прямоугольных ячеек, что вызывает некоторые проблемы при моделировании взаимодействия частиц с мишенью.

На данный момент также не существует модели, которая в полной мере описывала бы процессы, происходящие в пристеночном слое ТЯР, однако, ведутся интенсивные разработки методов описания этих процессов. Наиболее известные комплексные коды, описывающие транспорт частиц в скрэп-слое токамака и взаимодействие плазмы с поверхностью ОПМ – это ERO, B2-EIRENE и его модификация для ИТЭР – SOLPS. Существенным ограничением для создания подобного кода является сложность сопряжения различных моделей в рамках единой программы, а также связанные с этим требования к вычислительным ресурсам. В частности, в вышеупомянутых кодах используются табличные TRIM-данные для описания взаимодействия плазмы с поверхностью. Следовательно, несмотря на учёт глобальных процессов переноса вещества в пристеночном слое плазмы и корректное вычисление

потоков частиц на стенку, развитие морфологических неоднородностей, таких как изменение микрорельефа и компонентного состава в масштабе отдельных участков тайлов первой стенки, не учитывается. Эти эффекты могут оказывать ярко выраженное влияние на процесс захвата дейтерия и трития в ОПМ, а также на функционирование диагностик плазмы в настоящих и будущих ТЯР.

Вышесказанное предопределило цель настоящей работы и решаемые при этом задачи. А именно: **цель работы** заключалась в модификации компьютерного кода SCATTER и исследование с его помощью взаимодействия частиц с морфологически неоднородными поверхностями обращённых к плазме материалов, а **основные задачи работы** включали в себя:

- сравнительное исследование влияния различных типов шероховатости поверхности на отражение и захват ионов изотопов водорода в элементах, обращённых к плазме ТЯР,
- исследование изменения компонентного состава ОПМ при облучении потоками частиц из пристеночной плазмы ТЯР на примере диагностического зеркала в ИТЭР.

На защиту выносятся следующие результаты, содержащие научную новизну:

1. Компьютерный код на основе программы SCATTER, позволяющий моделировать динамическое изменение двух- и трёхмерного микрорельефа, а также изменение компонентного состава поверхности мишени при ионном облучении с учётом отражения, распыления и переосаждения частиц.
2. Впервые предложенный алгоритм формирования модели шероховатой и пористой поверхности плазменно-напылённого вольфрама, а также показанное увеличение коэффициента внедрения дейтронов в такую поверхность по сравнению с гладкой.
3. Результаты впервые проведенного исследования влияния неоднородностей микрорельефа на поверхности бериллиевых тайлов ИТЭР на захват трития в процессе соосаждения Ве, а также полученные данные о накоплении трития в заданном участке первой стенки в зависимости от доли содержания примеси Ве в потоке падающих частиц.
4. Впервые разработанная модель переноса частиц на поверхность диагностического зеркала в цилиндрическом канале в экваториальном порту ИТЭР, продемонстрированное влияние аспектного соотношения канала на потоки частиц, падающих на зеркало, а также данные о модификации компонентного состава поверхности зеркала в процессе эксплуатации.

Научная и практическая значимость работы.

Разработанный компьютерный код позволяет моделировать развитие микрорельефа на поверхности мишени при ионном облучении с учётом отражённых и перепылённых частиц, а также изменение профиля концентраций компонентов мишени по глубине. Данный код может стать составной частью комплексного кода для моделирования взаимодействия плазмы с поверхностью ОПМ в ТЯР.

Результаты проведенных исследований при помощи компьютерного моделирования:

- дают возможность определить параметры накопления трития в обращенных к плазме элементах ИТЭР, в зависимости от типа шероховатости поверхности и доли содержания примеси Ве в пристеночном слое плазмы;
- позволяют уточнить требования к защитным конструкционным элементам для повышения операционного ресурса первого диагностического зеркала в ИТЭР.

Апробация работы.

Основные результаты диссертационной работы были представлены на десяти международных конференциях и симпозиумах, российской школе молодых специалистов, трёх научных сессиях МИФИ:

- Научных сессиях МИФИ 2006, 2007, 2009;
- Международных конференциях по взаимодействию ионов с поверхностью ВИП-2007 и ВИП-2009, Звенигород;
- XXXVII и XXXVIII международных конференциях по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами, 2007, 2008, МГУ, Москва;
- Второй Всероссийской молодёжной научно-инновационной школе «Математика и математическое моделирование», 2008, Саров;
- Международных симпозиумах по материалам, обращённым к плазме, и компонентам, применяемым в термоядерном синтезе, RFMC-12, 2009, Юлих, Германия, RFMC-13, 2011, Розенхайм, Германия;
- Международных конференциях по взаимодействию плазмы с поверхностью PSI-18, 2008, Толедо, Испания, PSI-19, 2010, Сан-Диего, США, PSI-20, 2012, Аахен, Германия;
- XVI конференция «Взаимодействие плазмы с поверхностью», 2013, НИЯУ МИФИ, Москва.

Основное содержание диссертации опубликовано в 16 печатных работах, из них 5 в журналах из перечня ведущих рецензируемых научных журналов ВАК РФ. Их список приведен в конце автореферата.

Объем и структура работы.

Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Работа содержит 120 страниц машинописного текста, 63 рисунка, 2 таблицы. Список литературы включает 113 наименований.

Содержание работы

Во введении обосновывается актуальность работы, формулируются цели и задачи исследования, представляются основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе рассмотрена аналитическая теория и методология компьютерного моделирования взаимодействия ионов с поверхностью твёрдого тела. Приведены сведения о существующих кодах для описания изменения микрорельефа и компонентного состава поверхности мишени в процессе облучения. Также рассмотрены комплексные коды для моделирования взаимодействия пристеночной плазмы с поверхностью ОПМ в ТЯР.

Во второй главе приведено детальное описание кода SCATTER, включая принцип работы алгоритма взаимодействия частиц с поверхностью в модели статического и динамического микрорельефа. Последняя включает в себя улучшенную автором двухмерную модель динамически изменяемой топографии при ионном облучении, а также впервые разработанную трёхмерную модель микрорельефа.

Третья глава посвящена исследованию отражения частиц от пористой поверхности ОПМ. В данном случае геометрическая структура мишени настолько сложна, что моделирование изменения микрорельефа в процессе ионного облучения не представляется возможным из-за требований к вычислительным ресурсам. В этом случае можно исследовать характеристики взаимодействия частиц с поверхностью в модели статического рельефа.

Влияние шероховатой и содержащей поры поверхности плазменно-напылённого вольфрама (ПНВ) на отражение и внедрение дейтерия было изучено при помощи кода SCATTER PTr. Данный материал используется в качестве ОПМ в современных ТЯР, например в виде покрытия графитовых тайлов в наиболее энергонапряженных областях дивертора токамака ASDEX-Upgrade. Покрытие ПНВ характеризуется исключительными

термомеханическими свойствами, а также возможностью самовосстановления *in situ* после плазменных срывов. В то же время недостатком пористой структуры ПНВ является более интенсивный захват изотопов водорода.

Для учёта влияния рельефа поверхности ПНВ на захват и отражение ионов было разработана модель формирования пористой поверхности. Технология получения ПНВ включает напыление на подложку каплей расплавленного металла, вводимого в высокотемпературную плазменную струю; при этом на подложке капли почти мгновенно застывают. Полученная структура в первом приближении может быть промоделирована совокупностью сферических частиц вольфрама микронных размеров, хаотически осаждающихся на поверхности. Такая модель качественно соответствует наличию характерных для ПНВ замкнутых полостей, а также соединенных с поверхностью открытых пор.

Моделирование взаимодействия с такой поверхностью ионов дейтерия с энергиями от 10 до 10^4 эВ показало более чем 2-х кратное увеличение коэффициента внедрения частиц в модельную поверхность при низких энергиях по сравнению с гладкой (Рис. 1). Для наклонного падения частиц существенное превышение поглощения дейтерия подобной поверхностью по сравнению с гладкой сохраняется вплоть до энергий выше десяти кэВ. С одной стороны, применение ПНВ уменьшает рециклинг рабочего газа над поверхностью, а с другой, может привести к существенно большему накоплению в этом материале трития, по сравнению с менее пористыми вольфрамовыми материалами с более гладкой поверхностью.

В четвёртой главе изучаются задачи, связанные с динамическим изменением двух- и трёхмерного микрорельефа поверхности ОПМ в процессе взаимодействия с плазмой. Для первоначальной апробации представленного алгоритма рассматривается модельная задача о модификации конусов и гребней при ионном облучении, а также показана валидация модели посредством сравнения с экспериментом и кодом SDTrimSP-2D.

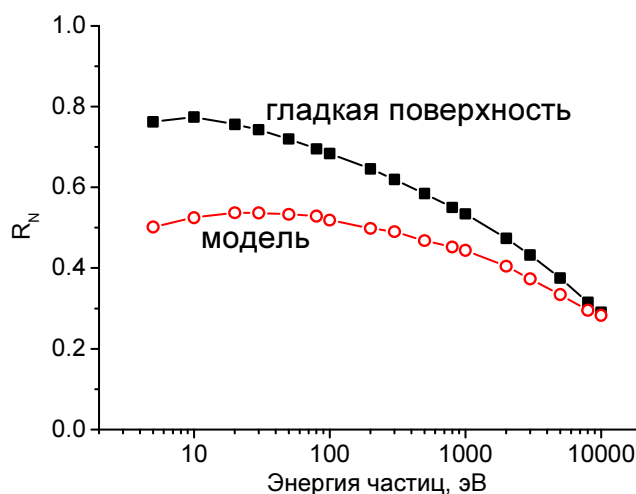


Рис. 1. Зависимость коэффициента отражения дейтронов при падении по нормали на гладкую и модельную поверхность вольфрамовой мишени от энергии частиц

Для верификации модели эволюции двухмерного микрорельефа было проведено сравнение с экспериментом по облучению прямоугольных гребней на поверхности кремния ионами аргона с энергией 6 кэВ [1].

На Рис. 2 показано изображение среза поверхности кремниевого образца, полученное при помощи сканирующего электронного микроскопа, соответствующее дозе облучения $2.0 \cdot 10^{17}$ см⁻² при нормальном падении Ar⁺. Красным отмечен модельный профиль, полученный при помощи кода SDTrimSP-2D, а зелёным – профиль, полученный в результате моделирования кодом SCATTER. Нижний край квадрата моделируемой области совмещён с маркером – границей между танталовым и кремниевым слоями на подложке. На вершине гребня и у подножия в модели SCATTER образуются острые углы, которые в эксперименте скруглены; одно из возможных объяснений – неучтённая радиационно-стимулированная поверхностная диффузия. Однако, несмотря на локальные отличия в масштабе нескольких нанометров, результаты моделирования в коде SCATTER хорошо согласуются с экспериментом и с результатами расчёта кода SDTrimSP-2D.

Особенности эволюции микрорельефа и захвата трития на поверхности бериллиевых тайлов в условиях со-осаждения примесей в ИТЭР рассматриваются впервые в рамках полученной модели. Для изучения модификации поверхности ОПМ в разряде токамака в модель был добавлен многокомпонентный источник частиц пристеночной плазмы с учётом одновременного осаждения примесей, в котором в качестве характеристик потоков, энергетических и угловых распределений падающих частиц задаются результаты расчёта кода B2-EIRENE (SOLPS).

Моделирование эрозии поверхности первой стенки с ямками и осаждёнными макрочастицами Be и W на ней показало, что наличие подобных неоднородностей микрорельефа приводит к накоплению трития в слое осаждённого Be даже в случае превалирования распыления над осаждением. Это связано с образованием локальных зон переосаждения распылённых

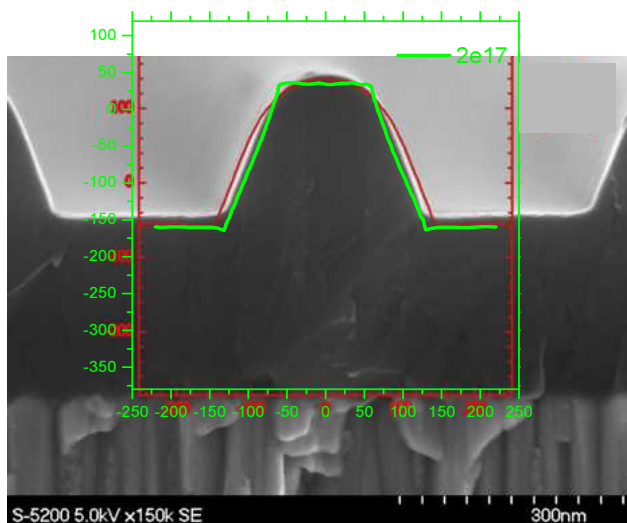


Рис. 2. Распыление кремниевого гребня при облучении ионами Ar⁺ (6 кэВ, нормальное падение) для флюенса $2.0 \cdot 10^{17}$ см⁻²: эксперимент [1] и моделирование SCATTER

1. I. Bizyukov *et al.*, Nucl. Instrum. Meth. B 268 (2010) 2631.

атомов. При этом ямки и микротрещины способствуют захвату трития в большей степени, чем макрочастицы примесей на поверхности тайлов.

На **Рис. 3** показана эволюция трёхмерной бериллиевой макрочастицы: начальный микрорельеф (а) и после облучения дозой 10^{21} см^{-2} нейтралов перезарядки D+T в случае осаждения 15% примеси Ве (b). Поверхность (b) смещена вниз для наглядности.

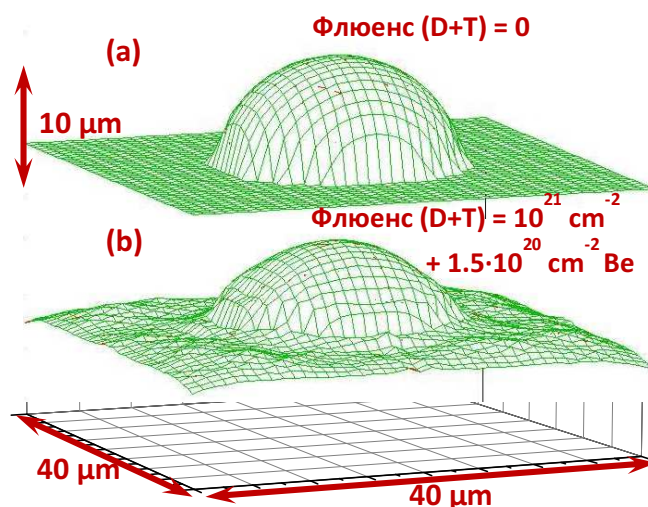


Рис. 3. Трансформация 3D макрочастицы Ве после облучения D+T дозой $10^{21} \text{ см}^{-2} + 15\% \text{ Ве}$

Кроме того, был рассмотрен технологический микрорельеф на бериллиевой поверхности, формируемый на этапе механической полировки тайла, и проведено моделирование облучения потоком нейтралов перезарядки D, T, He и ионов D^+ , T^+ с осаждением примесных атомов Ве, характерными для различных участков первой стенки ИТЭР. Показано, что качественный характер эволюции микрорельефа совпадает для разных условий. По достижении некоторой дозы облучения микрорельеф сглаживается, и в дальнейшем картина соответствует бомбардировке мишени с гладкой поверхностью. При изменении доли примеси Ве от 3% до 5% от падающего потока частиц происходит переход от эрозии мишени к осаждению и росту бериллиевой плёнки на поверхности. Существенное отличие шероховатой поверхности от гладкой состоит в том, что даже при малой доле примеси Ве происходит захват трития вследствие наличия локальных зон перепыления материала мишени.

Микрорельеф поверхности существенно влияет на отражение частиц. При переходе от шероховатой поверхности к сглаженной в процессе облучения коэффициент отражения нейтралов дейтерия от бериллия возрастает с 29% до 34%. Для идеально гладкой поверхности коэффициент отражения дейтерия при данных условиях составляет 43%.

Поскольку бериллий характеризуется малой растворимостью и низким коэффициентом диффузии водорода, а температура поверхности первой стенки ИТЭР недостаточно высока для транспорта внедренного трития вглубь материала, можно предположить, что основной механизм захвата T – это осаждение примесей Ве на поверхность ОПМ. Для оценки интенсивности накопления трития используется эмпирическая формула, основанная на экспериментальных данных с установки PISCES-B.

Наиболее критической закономерностью накопления трития является ярко выраженная зависимость от процентного содержания примеси Ве в потоке падающих частиц (Рис. 4). Увеличение доли примеси всего на один процент для шероховатой поверхности приводит к увеличению захвата трития в 1.3 раза, при этом интенсивность накопления меняется с ростом дозы облучения.

Отличия в накоплении трития для экваториальной области на внешней и внутренней стенке токамака несущественны. Однако в верхнем диагностическом порту благодаря наличию источника низкоэнергетичных нейтралов D и T (система газонапуска), данный процесс протекает более интенсивно.

Разумной оценкой допустимой локальной концентрации примесей в пристеночной плазме в экваториальной области ИТЭР с точки зрения выполнения требований безопасности по величине накопленного трития представляется 4% содержание примесей Ве в потоке падающих частиц. В качестве рекомендации предлагается развитие и оптимизация методов кондиционирования стенок токамака в тлеющем или ИЦР разряде, поскольку распыление плёнок на поверхности тайла позволит освободить большую часть захваченного трития в процессе очистки между рабочими импульсами.

В пятой главе представлены задачи, связанные с изменением компонентного состава мишени в процессе облучения частицами плазмы. Для этого в код SCATTER был добавлен алгоритм динамической модификации состава поверхности при ионной бомбардировке TRIDYN. Благодаря использованию оригинального адаптивного метода определения эквивалентного флюенса на одну итерацию моделирования данный код сочетает быстрдействие и точность расчетов.

В качестве примера рассмотрена задача по удалению примесных углеводородных пленок с вольфрамовой поверхности в аргоновом разряде, что необходимо для регенерации захваченного трития при наличии примесей углерода в камере ТЯР. Показано, что изменение обратного потока

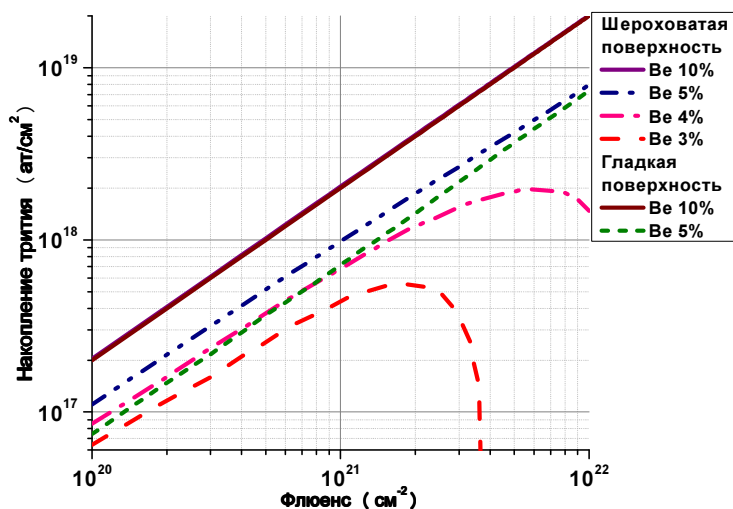


Рис. 4. Накопление трития (ат/см²) в процессе соосаждения Ве как функция от флюенса для гладкой и шероховатой поверхности ОПМ в области экваториального порта ИТЭР.

распылённого углерода на поверхность с 10% до 30% от потока ионов Ar^+ с энергией 500 эВ не приводит к существенному замедлению процесса очистки.

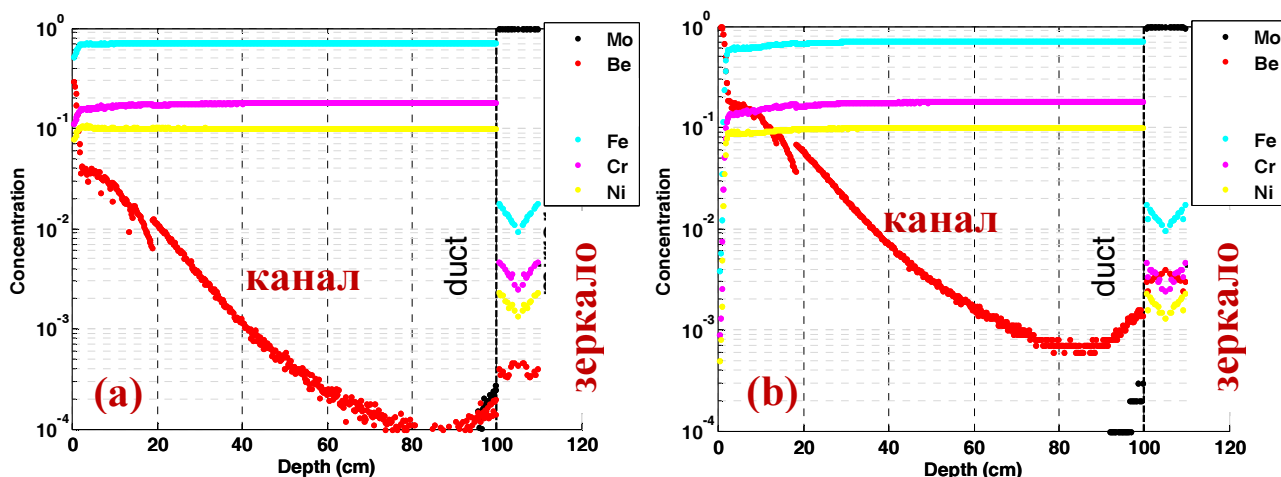


Рис. 5. Профиль относительных концентраций компонентов вдоль канала с аспектным соотношением $L/D = 10$ и на зеркале в случае облучения $D, He+0.1\% Be$ (a) и $D, He+1\% Be$ (b) от потока нейтралов: доза 10^{20} см^{-2} .

Осаждение Be на поверхность первого зеркала в ИТЭР было исследовано в рамках задачи по оценке операционного ресурса данных зеркал для нормального функционирования оптической диагностики. Первые зеркала будут изготовлены из молибдена и установлены в защитном конструкционном элементе (стальном канале) в диагностическом порту ИТЭР. Данный защитный канал предохраняет зеркало от воздействия ионов пристеночной плазмы вследствие их наклонного падения. Однако нейтралы перезарядки и термализованные атомы примесей, распылённые с первой стенки токамака, могут достигнуть поверхности зеркала. При этом осаждение примесей приводит к существенной деградации отражательных свойств зеркала, в то время как эрозией молибдена в данных условиях можно пренебречь. Следовательно, представляет интерес изучение изменения состава поверхности зеркала в процессе облучения в разряде токамака при помощи компьютерного моделирования.

На первом этапе модель зеркала была представлена одним расчётным модулем SCATTER в режиме TRIDYN. Начальные угловые энергетические распределения и величины потоков частиц, падающих на зеркало, были рассчитаны в коде B2-EIRENE для цилиндрического защитного канала с аспектным соотношением $L/D = 10$ в экваториальном порту ИТЭР. Во всех рассмотренных случаях осаждение примеси бериллия на поверхность молибденового зеркала превалирует над эрозией, несмотря на то, что при аналогичных условиях мишень из чистого бериллия распыляется. Этот эффект обусловлен наличием зоны перемешивания компонентов Be и Mo, что отличает используемый код от более простых моделей. Атомы Be имплантируются на

глубину порядка 2 нм благодаря облучению нейтралами перезарядки с высокой энергией.

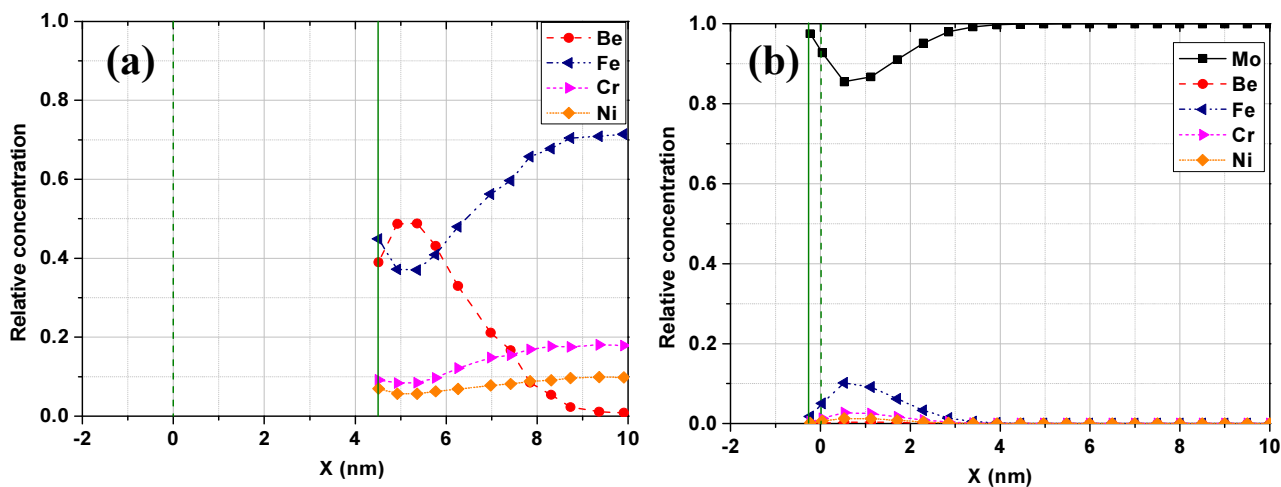


Рис. 6. Профиль концентраций компонентов по глубине у входной апертуры канала с аспектным соотношением $L/D = 10$ (a) и на зеркале (b) в случае облучения D, He+0.1% Be от потока нейтралов: флюенс 10^{21} см $^{-2}$.

На втором этапе была впервые рассмотрена полноценная модель транспорта частиц в защитном канале с использованием множества модулей SCATTER в режиме TRIDYN, что позволило учесть эволюцию потоков частиц, падающих на зеркало, вследствие изменения состава поверхности на соседних конструктивных элементах. Для этого был разработан код для моделирования переноса частиц D, He, Be в трёхмерном цилиндрическом канале при облучении экваториального порта потоками, характерными для ИТЭР. Код учитывает отражение, распыление и переосаждение распылённых атомов. Начальные угловые, энергетические распределения и величины потоков частиц, падающих на первую стенку ИТЭР, были рассчитаны в коде B2-EIRENE.

На **Рис. 5** представлены профили относительной концентрации компонентов вдоль канала с аспектным соотношением $L/D = 10$ и на зеркале после облучения флюенсом нейтралов D, He 10^{20} см $^{-2}$ для случая 0.1% примеси Be (a) и 1% Be (b) от падающего потока. Большая часть атомов Be осаждается вблизи входной апертуры канала, что обусловлено угловым и энергетическим распределением данных частиц. С ростом дозы облучения за счёт процессов отражения и перепыления примесь Be попадает вглубь канала, при этом её относительная концентрация на зеркале не превышает $5 \cdot 10^{-4}$ после облучения флюенсом 10^{20} см $^{-2}$. Следует отметить, что кроме бериллия на зеркало осаждаются атомы железа, хрома и никеля, распылённые со стенок стального канала, причём относительная концентрация атомов Fe выше, чем у остальных примесей: 0.01 после облучения дозой 10^{20} см $^{-2}$. Увеличение доли Be в падающем потоке не влияет на содержание примеси Fe на поверхности зеркала,

но приводит к соответствующему увеличению концентрации Ве на поверхности зеркала.

На **Рис. 6** показан профиль относительной концентрации компонентов по глубине у входного отверстия канала с $L/D = 10$ (а) и на поверхности зеркала (б) после облучения потоком нейтралов D, He с флюенсом 10^{21} см⁻² и примесью 0.1% Ве. В начале расчёта граница поверхности зеркала находится в точке 0 нм, налетающие частицы движутся с левой стороны; текущее положение границы обозначено вертикальной линией. Вблизи входного отверстия (**Рис. 6а**) наблюдается интенсивное распыление материала стенки. На поверхности зеркала (**Рис. 6б**) осаждение примесей превалирует над эрозией; при этом толщина формируемой плёнки не превышает 1 нм, однако примесные атомы имплантированы на глубину 1-2 нм. Таким образом, образуется вышеупомянутая динамическая зона перемешивания компонентов мишени, что может затруднить последующую очистку поверхности зеркала от примесей с применением *in situ* методов.

По итогам моделирования можно сделать вывод о том, что защитный канал с отношением длины к диаметру $L/D = 10$ существенно увеличивает рабочий ресурс зеркала в диагностическом порту. При заданной оценке потока Ве в 0.1% от потока дейтронов большая часть падающего бериллия (70%) оседает вблизи входной апертуры канала, на глубине до 10 см, поэтому транспорт примеси вглубь канала длиной 100 см невелик. Коэффициент уменьшения потока Ве на зеркало по сравнению с потоком на первую стенку составляет 14000. Уменьшение аспектного соотношения канала L/D до 5 или до 2 существенно увеличивает потоки атомов Fe и Ве, падающих на зеркало, что приводит к более высоким темпам осаждения примесей. Таким образом, защитный канал играет важную роль в снижении потоков частиц, падающих на зеркало.

Основные результаты работы

1. Разработан код на основе программы SCATTER, позволяющий моделировать динамическое изменение трёхмерного микрорельефа поверхности мишени при ионном и плазменном облучении с учётом отражения, распыления и переосаждения частиц. В том числе: улучшена модель двухмерного микрорельефа, добавлена модель изменения компонентного состава поверхности, предложен алгоритм динамического изменения шага, что позволило улучшить производительность программы в несколько раз, добавлена модель многокомпонентного источника частиц плазмы пристеночного слоя ТЯР с учётом одновременного осаждения примесей.

2. Разработан алгоритм формирования модели шероховатой и содержащей поры поверхности плазменно-напылённого вольфрама. Показано более чем 2-х кратное увеличение по сравнению с гладкой поверхностью коэффициента внедрения дейтронов в такую поверхность при нормальном падении с энергиями меньше 100 эВ.
3. Показано, что наличие неоднородностей микрорельефа на поверхности бериллиевых тайлов ИТЭР, таких как ямки, макрочастицы, а также технологическая шероховатость, приводит к накоплению трития в осаждённом Ве даже в случае превалирования распыления над осаждением.
4. Показано, что наиболее критической закономерностью накопления трития при соосаждении Ве на шероховатую поверхность является ярко выраженная зависимость от процентного содержания примеси Ве в потоке падающих частиц. Оценена допустимая локальная концентрация примесей Ве в пристеночном слое плазмы в экваториальной области ИТЭР с точки зрения выполнения требований безопасности по величине накопленного трития (4%).
5. Разработана модель транспорта частиц на поверхность диагностического зеркала в трёхмерном цилиндрическом канале в экваториальном порту при облучении потоками, релевантными для установки ИТЭР. Показано, что во всех рассмотренных случаях осаждение примеси на поверхность молибденового зеркала превалирует над эрозией. Показано, что при заданной оценке примесей Ве в 0.1% от потока дейтронов ресурс зеркала составит не менее 10^6 с для защитного канала с отношением длины к диаметру $L/D = 10$, при этом на поверхности зеркала кроме атомов Ве присутствуют атомы Fe, распылённые со стенок канала.

Работы автора по теме диссертации

1. Когут Д.К., Курнаев В.А., Трифонов Н.Н., Моделирование динамического изменения состава поверхности вольфрама при ионном облучении с учетом осаждения примесей углерода // Сборник научных трудов XXXVII международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами, 29-31 мая 2007 г., Москва, МГУ. С.90.
2. Когут Д.К., Курнаев В.А., Трифонов Н.Н., Моделирование отражения дейтерия от плазменно-напыленного вольфрама // Сборник научных трудов XVIII международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью ВИП-2007», 24-28 августа 2007 г., Звенигород, Россия. Т.1. С.296.

3. Когут Д.К., Белогорцев Г.А., Трифонов Н.Н., Курнаев В.А., Моделирование изменения рельефа поверхности за счёт распыления и перепыления // Сборник научных трудов XXXVIII международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами, 27-29 мая 2008 г., Москва, МГУ. С.107.
4. V. Kurnaev, G. Belogortsev, D. Kogut, K. Moshkunov, N. Trifonov, Modeling of erosion and deposition in gaps and cracks // Book of abstracts of the 18th PSI Conference, 26-30 May 2008, Toledo, Spain. P. 353.
5. Когут Д.К., Трифонов Н.Н., Курнаев В.А., Моделирование изменения рельефа поверхности за счёт распыления и перепыления // Сборник тезисов докладов Второй Всероссийской молодёжной научно-инновационной школы «Математика и математическое моделирование», 14-16 октября 2008 г., Саров. С.10.
6. Трифонов Н.Н., Когут Д.К., Курнаев В.А., Моделирование динамического изменения состава поверхности вольфрама при ионном облучении с учетом осаждения примесей углерода // «Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования», 2008. №3. С.7-10 (Trifonov N.N., Kogut D.K., Kurnaev V.A., Simulation of Dynamic Changes in the Surface Composition of Tungsten under Ion Irradiation with Regard to Carbon Impurity Deposition // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2008. V.2, I.2, P. 175-177)
7. Когут Д.К., Курнаев В.А., Трифонов Н.Н., Моделирование отражения дейтерия от плазменно-напыленного вольфрама // «Известия РАН. Серия физическая», 2008. Т.72. №7. С.1024-1026.
8. D. Kogut and N. Trifonov, Modelling of erosion and deposition in cracks and dust particles on beryllium surface // Book of abstracts of the 12th International Workshop on Plasma Facing Materials and Components for Fusion Applications, 11-14 May 2009, Juelich, Germany. P. 48.
9. Когут Д.К., Курнаев В.А., Трифонов Н.Н., Моделирование изменения микрорельефа поверхности мишени при ионном облучении // Сборник научных трудов XIX международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью ВИП-2009», 21-25 августа 2009 г., Звенигород, Россия. Т.1. С.296.
10. N. Trifonov, D. Kogut, Modeling of erosion and deposition in gaps, cracks and dust particles on beryllium tile surface // Book of abstracts of the 19th International Conference on Plasma Surface Interactions (PSI-2010), 24-28 May 2010, San-Diego, US. P. 363.

11. V.A. Kurnaev, D.K. Kogut, N.N. Trifonov, Modeling of erosion and deposition in pits and dust particles on beryllium tile surface // Journal of Nuclear Materials, 2011. V. 415, I.1, S.1, P. S1119-S1122.
12. D. Kogut and N. Trifonov, Simulation of first mirror surface composition change under ITER relevant irradiation // Book of abstracts of the 13th International Workshop on Plasma Facing Materials and Components for Fusion Applications, 9-13 May 2011, Rosenheim, Germany. P. 229.
13. Когут Д.К., Трифонов Н.Н., Котов В., Численное моделирование изменения состава поверхности первого зеркала при облучении потоками частиц, характерными для установки ИТЭР // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Термоядерный синтез, 2011. Вып. 4, с. 60-64.
14. D. Kogut, N. Trifonov and V. Kurnaev, Simulation of the First Mirror Surface Composition under ITER Relevant Particle Irradiation // Book of abstracts of the 20th International Conference on Plasma Surface Interactions (PSI-2012), 21-25 May 2012, Aachen, Germany. P2-027.
15. D.K. Kogut, N.N. Trifonov, V.A. Kurnaev, Modeling of the first mirror surface composition under ITER relevant particle irradiation // Journal of Nuclear Materials, 2013, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2013.01.155>.
16. Д.К. Когут, Н.Н. Трифонов, В.А. Курнаев, Особенности эволюции микрорельефа и захвата трития на поверхности бериллиевых тайлов в условиях соосаждения примесей в ИТЭР // Сборник научных трудов XVI конференции «Взаимодействие плазмы с поверхностью», 1-2 февраля 2013 г., НИЯУ МИФИ, Москва. С. 53.