

聚变装置不同壁处理涂层在氦粒子轰击下的物理溅射行为模拟研究*

黄向玫 胡毅 曹诚志

(核工业西南物理研究院, 成都 610225)

(2025年6月20日收到; 2025年7月15日收到修改稿)

聚变装置表面涂覆壁处理如锂化、硼化、硅化等形成的涂层在高能氦粒子的轰击下会因为物理化学溅射损失, 从而使壁条件变差, 影响等离子体放电性能. 为了评估不同壁涂层的溅射损失行为, 本文采用两体碰撞近似模型, 对以碳、钨为基材的锂、硼和硅涂层材料在氦粒子轰击下的物理溅射行为进行了模拟分析. 结果表明, 因锂具有低的表面结合能而硅具有高的原子序数, 锂和硅分别在一定入射条件下溅射产额最大. 对于双层靶, 钨基涂层的溅射产额在特定能量出现剧增, 主要是由于钨溅射阈值高, 入射粒子在钨界面被大量反射, 并且具有较高的能量. 最后, 由于靶表面成分会随着入射通量增加而变化, 涂层材料的溅射产额也随之变化. 本研究为聚变装置壁处理涂层寿命的评估提供数据支持, 并为壁处理涂层材料设计及处理策略提供了重要的理论参考.

关键词: 壁处理涂层, 溅射产额, 氦粒子轰击, 界面效应

PACS: 52.40.-w, 52.55.-s, 28.52.Fa

DOI: 10.7498/aps.74.20250805

CSTR: 32037.14.aps.74.20250805

1 引言

在聚变装置中, 等离子体与面向等离子体第一壁之间的相互作用是等离子体杂质的主要来源, 而等离子体中的杂质不仅会导致等离子体能量的辐射损失和聚变燃料的稀释, 还会影响等离子体的稳定性和整体约束性能^[1,2]. 通过对第一壁进行表面处理以控制等离子体与器壁之间的相互作用是提升聚变装置等离子体性能的必要手段之一^[3]. 第一壁原位表面涂覆壁处理技术如锂化^[4-6]、硼化^[7-9]、硅化^[10-12]等, 不仅可以抑制壁结构材料释放的重金属杂质, 同时有效吸附氧、碳等轻杂质, 显著改善等离子体性能. 研究表明, 第一壁原位表面涂

覆壁处理技术的应用使得聚变研究取得了很大进展^[11,13,14].

然而, 在边界等离子体的轰击下, 壁表面涂层难免会因物理溅射或化学刻蚀而损失, 其使用寿命有限, 通常需要定期对涂层进行补充以维持良好的壁条件^[15,16]. 而由于装置各位置的边界等离子体参数不同, 不同位置的涂层寿命也不尽相同. 现行装置中, 涂层的寿命往往由其在等离子体环境中暴露时间来衡量, 根据等离子体性能及杂质水平变化给出总体估计, 缺乏涂层区域性寿命分析以及涂层损失物理机制的相关探究. 评估壁处理涂层在不同的等离子体参数下的溅射行为对评估其使用寿命的区域分布, 对聚变装置开展表面涂覆壁处理的实施策略以及周期等具有重要意义.

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2022YFE03020003)、四川省自然科学基金 (批准号: 2024NFSFC0450, 2025ZNSFSC0383) 和中国核工业集团公司基础科研项目 (批准号: CNNC-JCYJ-202323) 资助的课题.

本文采用两体碰撞近似方法对常用的低原子序数 (低 Z) 壁处理涂层材料在氦粒子轰击作用下的物理溅射行为进行了模拟研究. 以聚变装置主要第一壁材料碳、钨作为基底材料, 对锂、硼、硅三种涂层材料在不同入射能量、入射角度和注入通量条件下的物理溅射产额进行了研究, 分析等离子体参数、涂层材料以及基底材料对溅射特性的影响, 为评估聚变装置不同区域不同壁处理涂层的寿命提供参考依据.

2 模拟方法

2.1 理论模型

SASAMAL (simulation of atomic scattering in amorphous material based on liquid model) 是 PEGASUS 低温等离子体与稀薄气体仿真软件的一个模块. 该模块采用动态蒙特卡罗方法模拟粒子入射到非晶靶材中的动态行为, 包括材料表面层的元素组成、粒子的溅射产额、掺杂深度分布、辐射损伤的深度方向分布等^[17].

在模型中, 入射离子与材料靶原子之间的碰撞采用两体碰撞近似描述, 即假设入射离子在固体中的运动轨迹由一系列两体碰撞过程决定, 通过依次求解每个两体碰撞过程来确定粒子的完整运动轨迹. 为了模拟溅射碰撞过程, 要确定离子的碰撞自由程、离子的能量损失以及碰撞后的运动方向等. 碰撞自由程为相邻两次碰撞之间粒子飞行的距离; 离子的能量损失包括与靶原子核的弹性能量损失以及与非弹性能量损失, 弹性能量损失亦为转移到靶原子的能量; 碰撞后的运动方向则由散射角决定. 由于离子与靶原子的碰撞是随机的, 以上参数为随机量. 离子与靶原子弹性碰撞的能量传递由 (1) 式表示^[18]:

$$T = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \cdot \sin^2(\theta/2), \quad (1)$$

式中, M_1 和 M_2 分别为入射粒子和靶原子的原子质量, θ 为散射角.

在 SASAMAL 程序中, 转移能量 T 以及散射角 θ 由一个 0—1 之间的随机数 R_n 根据 (2) 式确定:

$$R_n = \int_{t_{\min}}^t d\sigma / \int_{t_{\min}}^{t_{\max}} d\sigma, \quad (2)$$

$$d\sigma = \pi a^2 \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}), \quad (3)$$

$$a = 0.8853a_0(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}, \quad (4)$$

$$f(t^{1/2}) = \lambda T^{1/2-m} [1 + (2\lambda t^{1-m})^q]^{-1/q}, \quad (5)$$

$$t = \varepsilon T / T_{\max} = [\varepsilon \sin(\theta/2)]^2, \quad (6)$$

$$\varepsilon = \frac{aM_2}{Z_1Z_2e^2(M_1 + M_2)} E, \quad (7)$$

式中, $d\sigma$ 为微分核散射截面, 由 (3) 式定义; a_0 为玻尔半径, Z_1, Z_2 分别为入射粒子和靶原子的原子序数; e 为基本电荷; λ, m 和 q 为常数; t 为与转移能量 T 、散射角 θ 相关的参数, 由 (6) 式定义; t_{\min} 和 t_{\max} 分别对应最小、最大散射角.

通过分析反冲靶原子散射后的轨迹与材料表面的位置关系, 根据反冲粒子能量与表面阈能的关系统计溅射粒子的数目, 即可获得溅射产额. 溅射产额反映了在给定条件下材料表面原子被溅射出的数量, 它不仅受到靶材料的结构、成分及表面形貌的影响, 还与入射粒子的能量、电荷态和种类等密切相关.

SASAMAL 程序还可以用于分析入射通量对粒子行为的影响. 模型中将靶材料划分为一定厚度的均匀层, 追踪每次碰撞引起的层中原子数量变化, 并定期重新计算入射粒子的能量损失和碰撞距离. 当某一层原子数量降到预设下限时, 使相邻层吸收该层; 相反, 如果某一层原子数量大于预设上限时, 则分割该层为两层. 通过对靶材层数的动态分析, 实现对靶元素组成的深度分布以及溅射引起的表面损耗等现象随入射剂量的变化预测^[19].

2.2 模拟参数

当前聚变装置的主要燃料为氦气, 主要第一壁材料为碳、钨, 表面涂覆壁处理涂层为几十纳米到几百纳米的低 Z 材料锂、硼和硅, 因此本文重点对碳、钨两种基材上的锂、硼和硅涂层在氦粒子轰击下的物理溅射特性开展研究. 本文分别对单层靶材锂 (Li)、硼 (B)、硅 (Si) 以及双层靶材锂-碳 (Li-C)、硼-碳 (B-C)、硅-碳 (Si-C)、锂-钨 (Li-W)、硼-钨 (B-W)、硅-钨 (Si-W) 在不同氦粒子入射角度、能量和通量条件下, 靶表面层锂、硼、硅元素的溅射产额进行了分析. 模拟分析涉及的材料参数列于表 1.

表 1 模拟分析涉及的材料相关参数

Table 1. Related material parameters input for simulation.

材料	原子序数 Z	表面结合能 E_s/eV	移位能 E_d/eV	密度/ $(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	原子数密度/ $(\text{atom}\cdot\text{cm}^{-3})$
锂 Li	3	1.67	20	0.534	4.633×10^{22}
硼 B	5	5.73	20	2.350	1.309×10^{23}
石墨 C	6	7.41	25	2.253	1.130×10^{23}
硅 Si	14	4.70	13	2.321	4.977×10^{22}
钨 W	74	8.68	38	19.350	6.338×10^{22}
氘 D	1	—	—	—	4.270×10^{22}

3 结果与讨论

3.1 单层靶材的溅射产额

3.1.1 入射角度对溅射产额的影响

图 1 给出了两种靶厚 (薄靶 20 nm、厚靶 100 nm) 的锂、硼、硅三种靶材的溅射产额随入射角度变化的曲线. 可见, 对于这三种靶材, 溅射产额均先随着入射角度增加而增加, 并在大约 80° 达到最大值, 随后迅速下降. 这是由于当入射角较小时, 级联碰撞在靶内主要沿着纵向扩展; 随入射角增大, 碰撞逐渐平行靶面横向扩展, 从而增加了近表面层内的级联碰撞数量, 导致溅射产额增加. 然而当入射角过大时, 级联碰撞过于靠近靶面, 限制了碰撞的进一步扩展, 并且反射的入射粒子数量增加, 所以溅射产额又急剧减少 [20].

锂、硼、硅三种靶材不同靶厚的溅射产额曲线大致相同. 由于溅射发生在近表面层, 主要与近表面层的级联碰撞数量有关, 当级联碰撞主要发生在

近表面层时, 靶厚的影响不大.

在溅射产额增加区间 ($0^\circ\text{--}80^\circ$), 对三种材料的溅射产额进行了对比分析. 入射角度较小时, 溅射产额从大到小依次为硅、硼、锂, 这是由于溅射产额与原子壳层中电子的填充程度有关 [21], 一定范围内溅射产额随原子序数增加而增大. 随着入射角度的增加, 级联碰撞主要发生在靶近表面层; 由于质量轻的靶元素锂在碰撞过程获得能量更高, 并且其表面结合能低, 相应溅射阈值低, 因此锂的溅射产额最大.

3.1.2 入射能量对溅射产额的影响

锂、硼、硅三种靶材的溅射产额随入射能量变化的曲线如图 2 所示, 溅射产额随氘粒子能量的增加先增加, 达到最大值后随能量的继续增加而减小. 初始阶段, 级联碰撞数量随着能量增大而增加, 溅射产额增大; 当能量继续增大, 级联碰撞向靶内部扩展, 大部分能量在靶体中消耗, 此时注入效果起主导作用, 溅射效应被遏制, 导致溅射产额减小 [9].

当入射能量较低或入射角较大时, 入射粒子在靶中的射程较浅, 级联碰撞主要发生在靶近表面层, 因此不同厚度靶材的溅射产额相差不大. 而当入射能量较高或入射角较小时, 入射粒子的射程较深, 部分氘粒子会穿透薄靶而损失, 原本从深处反射回近表面层的氘粒子数因损失而减少, 使得薄靶的溅射产额低于厚靶.

当入射能量较低时, 由于锂的溅射阈值最小, 锂的溅射产额最大; 随着能量增加, 原子序数对溅射产额的影响起主导作用, 硅的溅射产额最大.

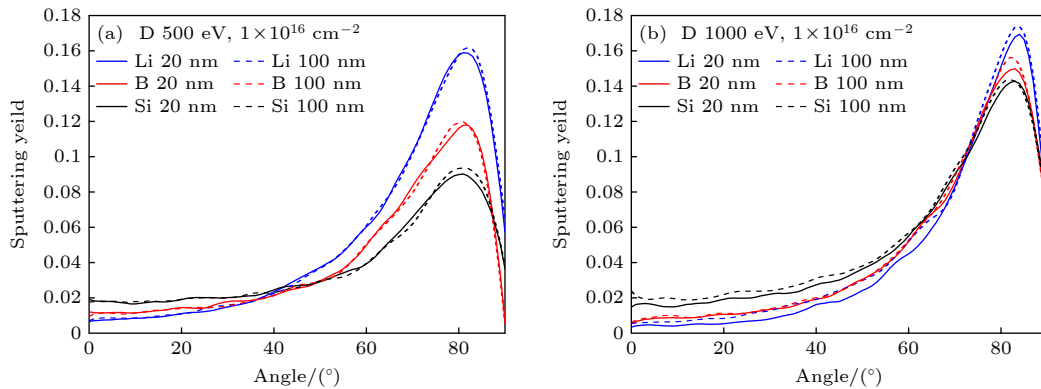


图 1 溅射产额随粒子入射角度变化曲线 (a) 入射氘粒子能量 500 eV; (b) 入射氘粒子能量 1000 eV
Fig. 1. Dependence of sputtering yield on injection angle: (a) Injection energy 500 eV; (b) injection energy 1000 eV.

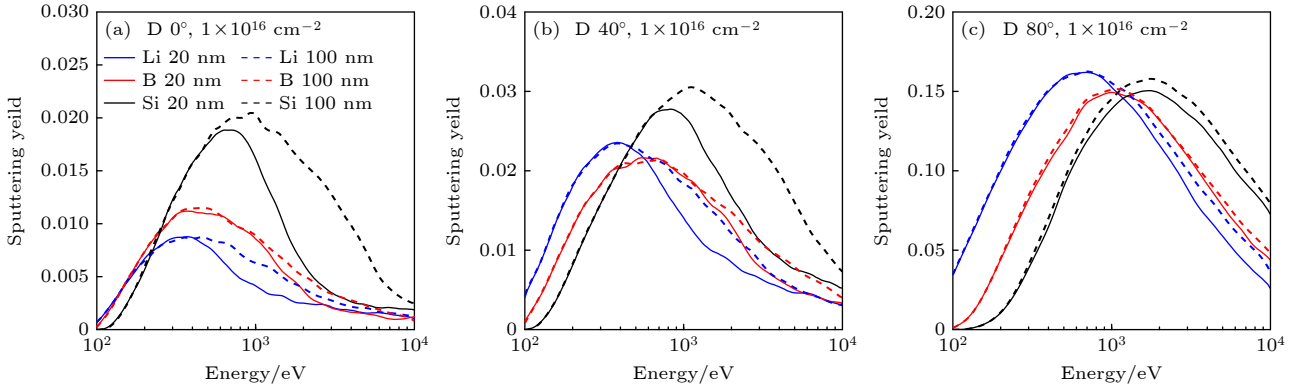


图 2 溅射产额随入射能量的变化曲线 (a) 氩粒子入射角度 0° ; (b) 氩粒子入射角度 40° ; (c) 氩粒子入射角度 80°

Fig. 2. Dependence of sputtering yield on injection energy: (a) Injection angle 0° ; (b) injection angle 40° ; (c) injection angle 80° .

3.1.3 入射通量对溅射产额的影响

图 3 为氩粒子入射能量为 500 eV 时, 三种靶材的溅射产额以及靶厚随入射通量变化的情况. 如图 3(a) 所示, 当入射通量从 $1 \times 10^{16}/\text{cm}^2$ 增加到 $1 \times 10^{18}/\text{cm}^2$, 溅射产额先呈减少趋势, 随后锂、硼的减少趋势逐渐减缓; 硅则在达到最小值后开始增加. 这是由于滞留在靶中的氩粒子使得靶表面层的材料成分发生变化, 改变了溅射产额.

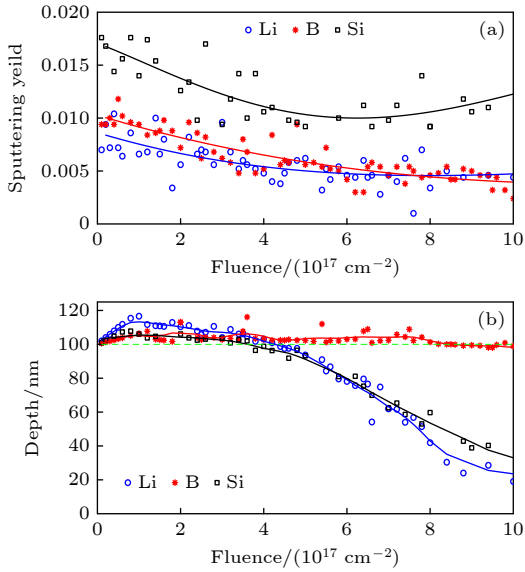


图 3 溅射产额 (a) 和靶厚 (b) 随入射通量的变化

Fig. 3. Dependence of (a) sputtering yield and (b) target thickness on injection fluence.

如图 3(b) 所示, 随着入射通量的增加, 三种靶材的厚度均先增加. 在通量约 $1 \times 10^{17}/\text{cm}^2$ 时锂、硅靶的厚度开始减少, 在达到约 $5 \times 10^{17}/\text{cm}^2$ 时减幅明显, 在 $1 \times 10^{18}/\text{cm}^2$ 时靶厚已经小于初始厚度的 1/2. 相比之下, 硼靶的厚度变化缓慢, 在通量约为 $1 \times 10^{18}/\text{cm}^2$ 时靶厚度基本保持和初始厚度相

当. 根据计算模型, 靶厚的变化取决于靶中的总原子数量, 而总原子数量同时受溅射靶粒子数以及滞留氩粒子数的影响. 对于不同靶材, 溅射产额以及氩粒子在靶中的分布深度和浓度均存在差异, 导致它们的厚度变化各不相同, 后续还需进一步分析来明确这些因素的具体影响.

3.2 双层材料的溅射产额

对于多层结构材料, 入射粒子在材料界面处可能会发生散射、反射等行为, 影响表面材料的溅射产额. 本节中构建了双层靶模型, 分别以钨和碳作为基底材料, 对锂、硼、硅作为表面层材料的溅射产额进行分析.

3.2.1 入射角度对溅射产额的影响

图 4 给出双层靶表面层溅射产额随入射角度变化的曲线, 其中基底厚度设为 100 nm, 表面层厚度设为 20 nm. 分析结果如下.

1) 碳基与钨基涂层的溅射产额对比: 在双层靶中, 到达界面的入射粒子一部分发生反射, 一部分则进入下一层材料. 由于钨的溅射阈值高, 在钨界面发生反射的氩粒子数将远高于碳界面. 比如, 以 500 eV 垂直入射的氩粒子束轰击钨和碳靶为例, 模拟分析得钨靶的氩反射率约为 66%, 而碳靶的反射率仅为 20%. 此外, 根据 (1) 式, 在碰撞过程中氩粒子传递给钨的能量约为 4%, 而传递给碳的能量约为 50%, 这意味着从钨界面反射的氩粒子携带的能量远高于从碳界面反射的粒子. 而另一方面, 由于碳的溅射阈值较低, 进入基底层氩粒子使得碳发生溅射, 意味着将有碳元素进入到表面层中. 这些作用共同影响了表面层的溅射产额.

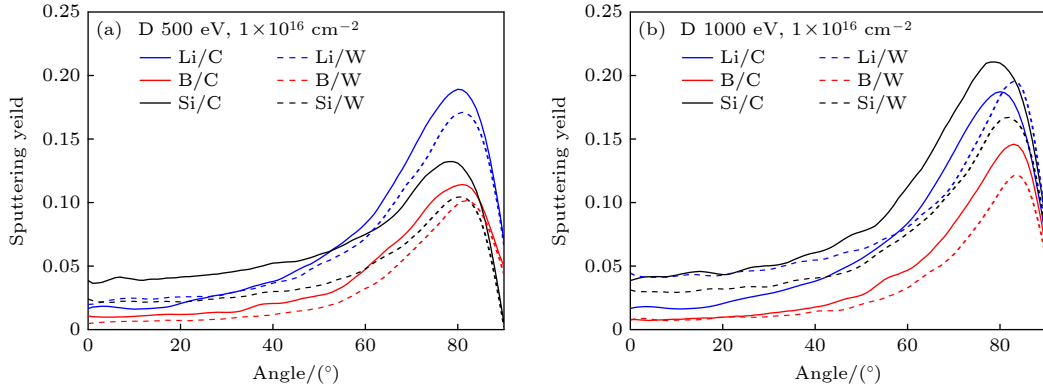


图 4 溅射产额随粒子入射角度变化曲线 (a) 入射氩粒子能量 500 eV; (b) 入射氩粒子能量 1000 eV
 Fig. 4. Dependence of sputtering yield on injection angle: (a) Injection energy 500 eV; (b) injection energy 1000 eV.

对于硼、硅表面层, 碳基涂层溅射产额高于钨基涂层. 那么, 对于硼、硅涂层而言, 溅射进入表面层的碳原子与之发生碰撞, 是碳基涂层溅射产额增加的主要原因.

对于锂涂层, 入射角较小时, 钨基涂层的溅射产额高于碳基涂层; 而当入射角度增大到一定程度后, 情况则相反. 当入射角较小时, 根据 LSS 理论, 入射粒子在固体中的浓度分布近似为其投影射程的正态分布^[22], 由于氩粒子的射程深 (采用 TRIM 计算 500 eV 氩粒子在锂中的射程为 38 nm, 超过了锂涂层厚度), 那么到达界面的氩粒子数量非常多 (>90%), 因此从钨基界面反射的氩粒子数也很多且粒子能量高, 大大增加了锂的溅射产额. 入射角增大后, 反射的氩粒子数量减少, 碳的溅射为锂涂层溅射产额增加的主要因素.

2) 钨基涂层的溅射产额: 钨基涂层溅射产额从大到小依次为锂、硅、硼 ($Y_{Li-W} > Y_{Si-W} > Y_{B-W}$). 相同入射能量条件下, 氩粒子在锂中的射程最深, 即到达钨界面的氩粒子数量最多, 反射回锂表面层的氩粒子数也最多, 从而大大增加了锂的溅射产额; 硅和硼则具有相似的入射粒子浓度分布, 而硅具有更低的表面结合能, 因此硅的溅射产额高于硼.

3) 碳基涂层的溅射产额: 当入射角较大且入射能量较低时, 入射氩粒子主要分布在近表面层, 溅射产额主要取决于靶元素的表面结合能, 溅射产额从大到小为锂、硅、硼 ($Y_{Li-C} > Y_{Si-C} > Y_{B-C}$). 在入射角较小或者入射能量较高时, 碳基涂层的溅射产额从大到小为硅、锂、硼 ($Y_{Si-C} > Y_{Li-C} > Y_{B-C}$). 与钨基涂层类似, 对于具有相似入射粒子浓度分布的硅和硼, 由于硅的表面结合能低于硼, 其溅射产额高

于硼; 而由于入射粒子在锂中的射程深, 氩粒子进入碳基底层深处使得注入作用大于溅射作用, 其溅射产额低于硅.

4) 锂、硼、硅的溅射产额对比: 硼的溅射产额最低, 锂和硅在一定入射条件下的溅射产额分别最大.

3.2.2 入射能量对溅射产额的影响

图 5 给出双层靶表面层溅射产额随入射能量变化的曲线, 其中基底层厚度设为 100 nm, 表面层厚度则分为薄层 20 nm 和厚层 100 nm 两种情况. 分析结果如下.

1) 碳基与钨基涂层的溅射产额对比: 入射能量较低时, 薄表面层的碳基涂层溅射产额高于钨基涂层. 然而随着入射能量的增加, 钨基涂层的溅射产额逐渐超过碳基涂层. 这说明能量较高时, 钨基界面的反射氩粒子进入表面层并发生级联碰撞为表面层溅射产额增加的主导原因.

钨基涂层的溅射产额在特定能量出现了急剧增加. 随着能量增加, 入射粒子在材料中的射程增加, 到达钨界面并被反射的氩粒子数也随着增加; 到达界面的粒子能量增加, 反射粒子的能量也随之增加. 如果反射粒子的能量刚好使得表面元素与之碰撞的过程中获得的能量大于其溅射阈值而发生溅射, 溅射产额将剧烈增加. 对于厚表面层, 由于界面位置更深, 界面处获得所需反射粒子数及能量的入射粒子浓度需要更深的射程, 因此溅射产额剧增现象发生的能量阈值更高. 在未达到溅射剧增的阈值时, 到达界面的氩粒子数量及能量不足以影响表面层的溅射产额, 此时钨基与碳基厚表面层的溅射产额保持一致.

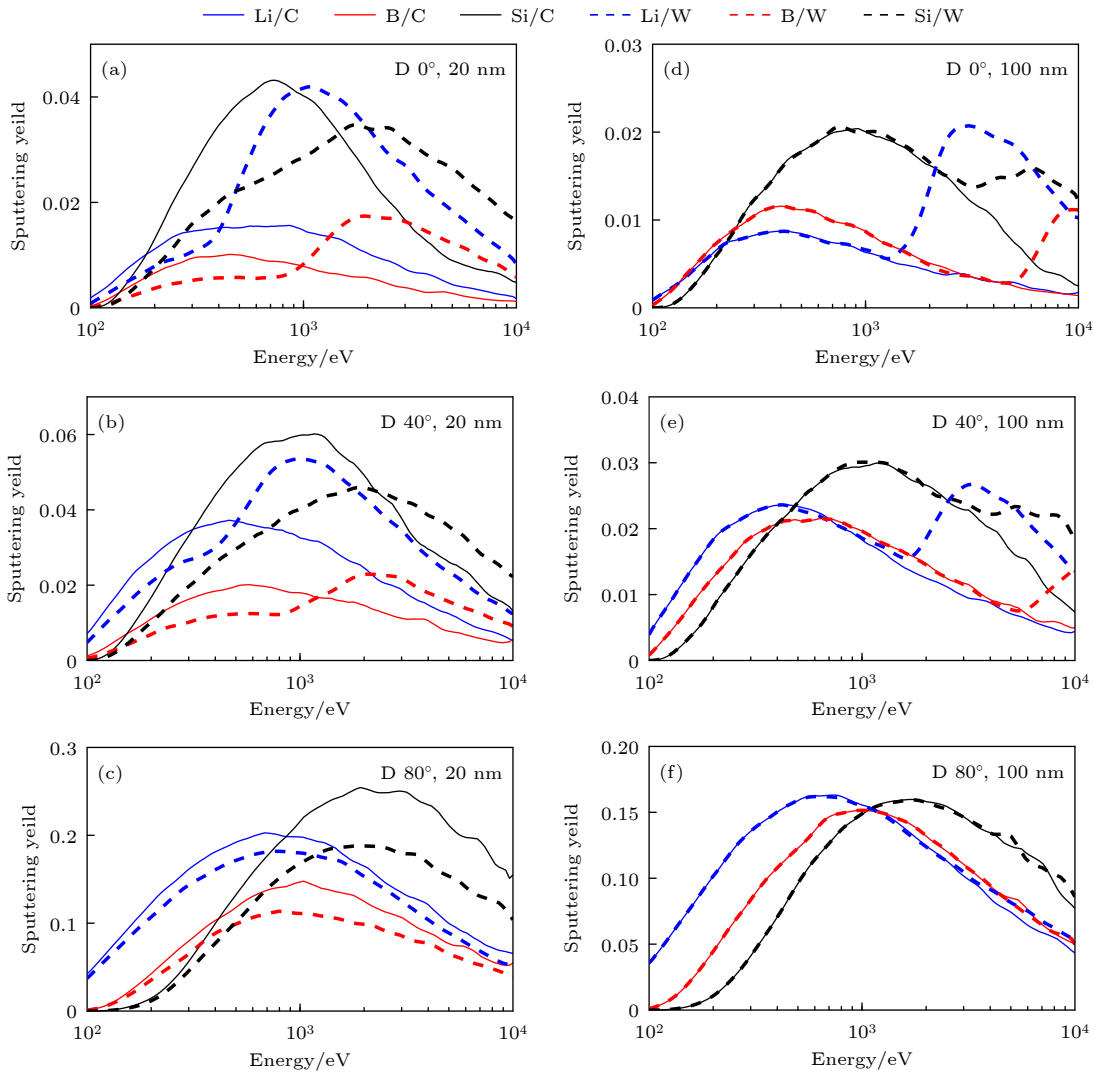


图 5 溅射产额随入射能量的变化曲线 (a) 氩粒子入射角度 0°, 涂层厚度 20 nm; (b) 氩粒子入射角度 40°, 涂层厚度 20 nm; (c) 氩粒子入射角度 80°, 涂层厚度 20 nm; (d) 氩粒子入射角度 0°, 涂层厚度 100 nm; (e) 氩粒子入射角度 40°, 涂层厚度 100 nm; (f) 氩粒子入射角度 80°, 涂层厚度 100 nm

Fig. 5. Dependence of sputtering yield on injection energy: (a) Injection angle 0°, coating thickness 20 nm; (b) injection angle 40°, coating thickness 20 nm; (c) injection angle 80°, coating thickness 100 nm; (d) injection angle 0°, coating thickness 100 nm; (e) injection angle 40°, coating thickness 100 nm; (f) injection angle 80°, coating thickness 100 nm.

2) 锂、硼、硅的溅射产额对比: 当入射能量较低时, 级联碰撞主要发生在近表面层, 表面结合能低的锂溅射产额最大; 随着能量增加, 原子序数高的硅溅射产额增加至最大; 随着能量继续增加, 钨基锂涂层的溅射产额剧增使得锂的溅射产额在一定能量区间再次高于硅。

3.2.3 入射通量对溅射产额的影响

图 6 为氩粒子入射能量为 500 eV 时, 双层靶表面层的溅射产额随入射通量的变化情况, 其中基材层厚度设为 100 nm, 表面层厚度设为 20 nm, 分析如下。

1) 与单层材料的行为类似, 硼的溅射产额随入射通量增加而缓慢减少, 而锂和硅表现为先减少后增加的趋势. 这主要与表面成分的变化有关, 随着入射通量的增加, 靶表面成分的变化使得表面层溅射产额减少. 随后, 随着氩粒子进一步深入钨、碳层, 原子密度和靶组分的变化再次影响了溅射产额。

2) 双层靶的厚度出现了明显增加. 如图 6(c) 和图 6(d) 所示, 靶厚首先迅速线性增加到一个最大值, 随后硼-钨/碳靶厚度基本保持不变, 而锂、硅-钨/碳靶厚度逐渐减小。

靶厚增加意味着滞留氩粒子数大于溅射靶原子数, 靶厚减少则反之. 随着入射通量增加, 氩粒

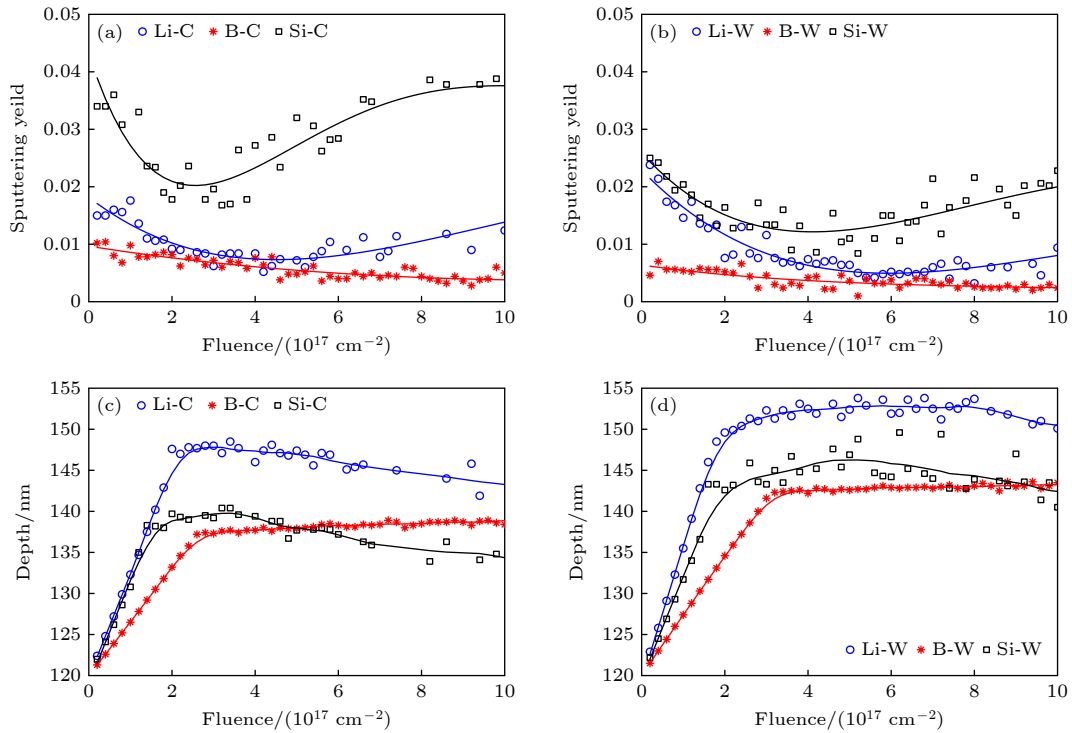


图6 溅射产额及靶材厚度随入射通量的变化情况 (a) 碳基靶溅射产额变化; (b) 钨基靶溅射产额变化; (c) 碳基靶厚度变化; (d) 钨基靶厚度变化

Fig. 6. Dependence of sputtering yield and target thickness on injection fluence: (a) Sputtering yield of carbon substrates; (b) sputtering yield of tungsten substrates; (c) thickness of carbon substrates; (d) thickness of tungsten substrates.

子在靶内的不断累积使得靶厚增加; 而后随着表面氦元素含量增加, 锂、硅溅射产额增加, 当溅射原子数量超过滞留原子数量时, 靶厚开始减小. 硼-钨/碳靶的厚度基本保持不变, 意味其溅射原子数量与滞留原子数量在一定程度上达到了平衡.

4 结论

本文采用两体碰撞近似模拟方法, 研究了锂、硼、硅三种低 Z 材料在氦粒子轰击作用下的溅射产额随入射角度、入射能量以及入射通量的变化情况.

在不同入射角度和入射能量区间, 锂、硼、硅的溅射产额大小关系不同: 由于锂的表面结合能最低, 当入射能量较低或入射角较大时, 锂的溅射产额最大; 而由于硅的原子序数最大, 当入射能量较高或入射角较小时, 硅的溅射产额最大. 在聚变装置表面涂覆壁处理应用中, 由于装置不同区域等离子体的参数不同, 不同涂层材料的溅射产额以及寿命也不同. 因此, 可以根据等离子体轰击角度和能量分布对装置不同区域针对性选择合适的涂层材料.

对于不同基底材料碳和钨, 三种涂层材料的溅射产额同样存在差异. 碳基和钨基涂层的溅射产额分别在一定入射角度或能量区间最大, 主要是由于碳的溅射以及钨界面的氦粒子反射均会导致表面层溅射产额增加. 对于钨基涂层, 当入射粒子能量使得钨界面反射的氦粒子数量足够多且碰撞能量足以使表面元素发生溅射时, 钨基涂层的溅射产额剧烈增加. 那么对于未来聚变装置钨第一壁, 在等离子体轰击能量较高的区域应适当增加壁处理涂层厚度, 以缓解涂层材料的溅射剧增现象.

在入射通量方面, 随着入射通量的增加, 靶表面成分的变化使得靶元素的溅射产额随之改变. 随着溅射粒子数与滞留粒子数的变化, 靶厚度也随之变化. 在 $1 \times 10^{16} - 1 \times 10^{18} / \text{cm}^2$ 通量范围, 单层硼靶的厚度基本保持不变, 而锂、硅靶厚度在略微增加后迅速减少; 双层硼靶厚度先增加后基本不变, 而锂、硅靶的厚度增加到最大值后又逐渐减小. 可见, 相较于锂、硅, 硼涂层性能更稳定, 更适用于未来的长稳态运行聚变装置.

综上所述, 入射粒子特性、入射参数以及靶元素特性等均会影响壁处理涂层溅射产额, 其中的作

用机理以及影响机制尚不清晰, 后续仍需开展更深入的探讨与研究, 以进一步优化聚变装置壁处理涂层技术的材料设计及处理策略。

参考文献

- [1] Zhu Y K 2010 *Vacuum Science and technology in Nuclear Engineering* (Beijing: Atomic Energy Press) pp160–177 (in Chinese) [朱毓坤 2010 核真空科学技术 (北京: 原子能出版社) 第 160—177 页]
- [2] Pitts R A, Loarte A, Wauters T, Dubrov M, Gribov Y, Köchl F, Pshenov A, Zhang Y, Artola J, Bonnin X, Chen L, Lehnen M, Schmid K, Ding R, Frerichs H, Futtersack R, Gong X, Hagelaar G, Hodille E, Hobirk J, Krat S, Matveev D, Paschalidis K, Qian J, Ratynskaia S, Rizzi T, Rozhansky V, Tamain P, Tolias P, Zhang L, Zhang W 2025 *Nucl. Mater. Energy* **42** 101854
- [3] Winter J 1996 *Plasma Phys. Controlled Fusion* **38** 1503
- [4] Kaita R 2019 *Plasma Phys. Controlled Fusion* **61** 113001
- [5] Skinner C H, Allain J P, Bell M G, Friesen F Q L, Heim B, Jaworski M A, Kugel H, Maingi R, Rais B, Taylor C N 2011 *Phys. Scr.* **T145** 014020
- [6] Sun Z, Maingi R, Hu J S, Xu W, Zuo G Z, Yu Y W, Wu C R, Huang M, Meng X C, Zhang L, Wang L, Mao S T, Ding F, Mansfield D K, Canik J, Lunsford R, Bortolon A, Gong X Z 2019 *Nucl. Mater. Energy* **19** 124
- [7] Cheng Y X, Zhang L, Hu A L, Shigeru Morita S, Zhang W M, Zhou C X, Mitnik D, Zhang F L, Ma J Y, Li Z W, Cao Y M, Liu H Q 2024 *Nucl. Mater. Energy* **41** 101744
- [8] Rohde V, Balden M, Krieger K, Neu R, ASDEX Upgrade Team 2025 *Nucl. Mater. Energy* **43** 101923
- [9] Masuzaki S, Shoji M, Nespoli F, Lunsford R, Motojima G, Yajima M, Tokitani M, Oishi T, Kawate T, Goto M 2025 *Nucl. Mater. Energy* **42** 101843
- [10] Samm U, Bogen P, Esser G, Hey J D, Hintz E, Huber A, Könen L, Lie Y T, Mertens P, Philipps V, Pospieszczyk A, Rusbüldt D, Seggern J, Schorn R P, Schweer B, Tokar' M, Unterberg B, Vietzke E, Wienhold P, Winter J 1995 *J. Nucl. Mater.* **220-222** 25
- [11] Duan X R, Cao Z, Cui C H, Cai X, Sun H H, Ding X T, Pan Y D, Wang M X, Yang Q W, Song X M, HL-2A Team 2007 *J. Nucl. Mater.* **363-365** 1340
- [12] Effenberg F, Abe S, Sinclair G, Abrams T, Bortolon A, Wampler W R, Laggner F M, Rudakov D L, Bykov I, Lasnier C J, Mauzey D, Nagy A, Nazikian R, Scotti F, Wang H Q, Wilcox R S, the DIII-D Team 2023 *Nucl. Fusion* **63** 106004
- [13] Xu W, Hu J, Sun Z, Maingi R, Zhang L, Yu Y W, Li C L, Zuo G Z, Qian Y Z, Huang M, Meng X C, Gao W, Duan Y M, Chen Y J, Wang K, Lin X D, Gao X 2020 *Plasma Phys. Controlled Fusion* **62** 085012
- [14] Sereida S, Brezinsek S, Wang E, Barbui T, Brakel R, Buttenschön B, Gorjaev A, Hergenbahn U, Höfel U, Jakubowski M, Knieps A, König R, Krychowiak M, Kwak S, Liang Y, Naujoks D, Pavone A, Rasinski M, Rudischhauser L, Ślęczka M, Svensson J, Viebke H, Wauters T, Wei Y, Winters V, Zhang D, the W7-X team 2020 *Nucl. Fusion* **60** 086007
- [15] Dibon M, Rohde V, Stelzer F, Hegele K, Uhlmann M, ASDEX Upgrade Team 2021 *Fusion Eng. Des.* **165** 112233
- [16] Tramontin L, Antoni V, Bagatin M, Boscarino D, Cattaruzza E, Rigato V, Zandolin S 1999 *J. Nucl. Mater.* **266-269** 709
- [17] Miyagawa Y, Nakadate H, Djurabekova F, Miyagawa S 2002 *Surf. Coat. Technol.* **158-159** 87
- [18] Miyagawa Y, Miyagawa S 1983 *J. Appl. Phys.* **54** 7124.
- [19] Miyagawa Y, Ikeyama M, Saito K, Massouras G, Miyagawa S 1991 *J. Appl. Phys.* **70** 7289
- [20] Shao Q Y, Huo Y K, Chen J X, Wu S M, Pan Z Y 1991 *Acta Phys. Sin.* **40** 659 (in Chinese) [邵其璠, 霍裕昆, 陈建新, 吴士明, 潘正瑛 1991 物理学报 **40** 659]
- [21] Lu F 2022 *Technology and Application of Vacuum Coating* (Beijing: Chemical Industry Press) pp149–153 (in Chinese) [陆峰 2022 真空镀膜技术与应用 (北京: 化学工业出版社) 第 149—153 页]
- [22] Shao Q Y, Pan Z Y 1995 *Acta Phys. Sin.* **44** 479 (in Chinese) [邵其璠, 潘正瑛 1995 物理学报 **44** 479]

Simulation study of physical sputtering behavior of different wall conditioning layers in fusion devices under deuterium particle bombardment*

HUANG Xiangmei HU Yi CAO Chengzhi

(*Southwestern Institute of Physics, Chengdu 610225, China*)

(Received 20 June 2025; revised manuscript received 15 July 2025)

Abstract

Wall conditioning coatings—lithium (Li), boron (B) and silicon (Si)—introduced by lithiumization, boronization, or siliconization, serve as a critical strategy for suppressing fuel recycling and reducing impurity fluxes from the wall of a tokamak. These techniques directly improve plasma initiation, reproducibility, energy confinement, and operational stability in fusion devices. However, these coatings undergo both physical and chemical sputtering by boundary plasma bombardment. This erosion behavior critically determines coating lifetime and, consequently, long-pulse plasma performance. To evaluate the influence of physical sputtering on coating durability and to compare material-specific differences, binary collision approximation (BCA) simulations are conducted to investigate the physical sputtering behaviors of Li, B, and Si coatings. Carbon (C) and tungsten (W) substrates are also modeled to assess interface effects. The results reveal the significant differences in sputtering yields between Li, B, and Si in incident angles and deuterium energies. Owing to its low surface binding energy, lithium exhibits the highest sputtering yield at large angles and low energies, while silicon, with the highest atomic number, presents the highest sputtering yield at small angles and high energies. Sputtering yields of carbon-based and tungsten-based coatings vary with angle and energy, driven by their differences of deuterium backscattering and substrate sputtering at the interface. Notably, for tungsten-based coatings, the sputtering yields increase dramatically at specific energies. This occurs because tungsten's high surface binding energy causes incident deuterium atoms to reflect off the tungsten interface and then collide with coating elements. Consequently, when the energy transferred to the surface element is higher than its sputtering threshold, the sputtering yield increases. Additionally, increasing incident fluence modifies the target composition, leading to corresponding changes in the sputtering yields of coating materials. In summary, coating materials should be selected according to the expected angle distribution and energy distribution of the incident plasma particles. To suppress the abrupt yield increase observed in tungsten substrates at specific energies, the coatings must be sufficiently thick. These findings provide a theoretical basis for selecting conditioning materials and optimizing wall conditioning strategies in fusion devices.

Keywords: wall conditioning layers, sputtering yield, deuterium implantation, interface effect

PACS: 52.40.-w, 52.55.-s, 28.52.Fa

DOI: [10.7498/aps.74.20250805](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250805)

CSTR: [32037.14.aps.74.20250805](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250805)

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2022YFE03020003), the Natural Science Foundation of Sichuan Province, China (Grant Nos. 2024NFSF0450, 2025ZNSFSC0383), and the China National Nuclear Corporation Basic Research Project (Grant No. CNNC-JCYJ-202323).

聚变装置不同壁处理涂层在氘粒子轰击下的物理溅射行为模拟研究

黄向玫 胡毅 曹诚志

Simulation study of physical sputtering behavior of different wall conditioning layers in fusion devices under deuterium particle bombardment

HUANG Xiangmei HU Yi CAO Chengzhi

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 195201 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250805

CSTR: 32037.14.aps.74.20250805

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250805>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

LaAlO₃/SrTiO₃界面增强光伏效应

Enhanced photovoltaic effect in LaAlO₃/SrTiO₃ interface

物理学报. 2021, 70(8): 086802 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201330>

非均匀混合下氘氚聚变反应速率的理论研究

Investigation on the fusion reaction rate of deuterium and tritium under heterogeneous mixing

物理学报. 2023, 72(1): 015201 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221197>

氘氚冰籽晶的形核行为

Crystal nucleation behavior of deuterium tritium ice

物理学报. 2022, 71(2): 025203 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211018>

中国聚变工程试验堆上新经典撕裂模和纵场波纹扰动叠加效应对alpha粒子损失影响的数值模拟

Numerical simulation of synergistic effect of neoclassical tearing mode and toroidal field ripple on alpha particle loss in China Fusion Engineering Testing Reactor

物理学报. 2021, 70(11): 115201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201972>

CFETR参数下粒子慢化过程的数值模拟

Numerical simulation of particle slowing-down process under CFETR scenario

物理学报. 2023, 72(21): 215209 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230700>

ITER装置中等离子体旋转和反馈控制对电阻壁模影响的数值研究

Numerical study of effect of plasma rotation and feedback control on resistive wall mode in ITER

物理学报. 2021, 70(4): 045201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201391>