

强流脉冲离子束与靶作用域值的研究

吴 迪 宫 野 刘金远 王晓钢

(大连理工大学三束材料改性国家重点实验室,大连 116024)

(2004 年 5 月 19 日收到,2004 年 12 月 13 日收到修改稿)

结合 Monte Carlo 方法和热力学方法,建立了脉冲离子束能量模型以及靶材相变温度模型.利用该模型可以确定产生喷发等离子体的域值,得到强流脉冲离子束与靶材作用过程中靶材温度的变化规律以及形成喷发等离子体的初始温度.

关键词:强流脉冲离子束,靶,域值,数值研究

PACC:5225,5265

1. 引 言

强流脉冲离子束(IPIB)可以由磁绝缘二极管(MID)产生^[1].其功率密度达到约 $10^9 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$ 量级,脉冲宽度在 10—1000 ns 范围.这样强的能量在极短的时间内与物质发生作用,可使物质表面迅速熔化甚至汽化,产生高温、高压及高密度的胶状等离子体,并向空间喷发.IPIB 可用于改变固体表面的特性^[2],如硬度、耐蚀性、摩擦等,也可以进行薄膜生长及纳米粉制备^[3-5].

IPIB 有许多优点,例如它由 MID 产生,采用脉冲方式能量利用率较高,设备可以做得紧凑占用体积小,成本相对较低,焦斑面积大,可以进行大面积薄膜制备,因其单离子能量高,因而传递给靶物质的能量效率大.IPIB 在材料工业领域里有广阔的应用前景.

近 10 多年来,很多研究小组^[6-8]对 IPIB 进行了实验及理论研究,但直到目前为止,尚未见到对离子与固体表面作用而使表面熔化还是汽化的能量阈值进行研究的报道.入射离子能量密度的大小,直接影响与靶材作用的效果.我们三束材料改性国家重点实验室从俄罗斯引进 TEMP6 设备,它与日本的 ETIGO^[9]设备不同.能量密度在 $1-50 \text{ J} \cdot \text{cm}^{-2}$ 之间,离子束打到靶上不会无条件汽化,有几种可能的结果:一是靶材表面不熔化只是温度升高,可以进行表面清洁;二是靶材表面熔化再固化,从而达到改性的目的;三是靶材表面汽化,可以进行薄膜生长及纳米粉的制备.能量密度阈值是确定熔化还是汽化的关

键.就汽化产生蒸发而言,能流密度大了会浪费能源,并且在薄膜生长过程中会带来较多的杂质微粒.IPIB 参数、靶的性质以及束流与靶材之间的相互作用对阈值将起决定性的作用,这就需要找出其中的规律.本文采用 Monte Carlo 方法和热力学相结合的方法研究 IPIB 与靶材之间的相互作用,建立了脉冲能量模型和相变温度模型.

2. 物理模型

2.1. 脉冲能量模型

IPIB 主要由束流离子种类、MID 电压、离子流密度及脉冲宽度所决定.不同类型的 IPIB 加速器产生的离子种类及份额不同. H^+ 射程比较长,可以进入靶材表面下的较深层,而同样能量的 C^+ 则只能进入靶材的浅层^[7].因而不同成分和份额的离子束对靶材将产生不同的作用效果.MID 的电压决定产生离子的能量,能量越高进入靶材越深,影响靶材的范围就越大.离子流密度决定到达靶材的离子的数目,与靶材到 MID 的距离有关,焦点附近的离子流密度最大.电压高、离子流强,功率密度自然就大,单位时间内 IPIB 传给靶材的能量也就高.可见,MID 电压与离子流密度是决定靶材熔化深度或汽化喷发物质多少的关键因素.

对靶材而言,热物性参数将影响其熔化或者汽化,从而影响材料的改性和薄膜制备.如果通过实验来研究 IPIB 的参数与靶材参数之间的关系将是一件庞大的工程,尤其是 IPIB 与靶材之间的相互作

用时间非常短,仅为数十纳秒,并且是在靶材内部发生作用的,所以要弄清靶材熔化或者汽化是十分困难的,这需要借助计算机进行数值模拟。

我们采用 Monte Carlo 方法进行能量沉积模拟。离子与靶材的相互作用主要是离子与靶物质的原子核及核外电子的作用过程,一种是离子把能量直接传递给原子,另一种是使其电离。对此过程能量损失(以下简称能损)可以分为两部分,分别为与电子作用的非弹性能损和与核作用的弹性能损,总能损为两者之和。高能量和低能量部分分别采用 Beth-Bloch 公式及 Linhard 公式,利用 Monte Carlo 方法进行模拟,计算能量在物质内的沉积。

通常采用平均能量密度研究 IPFB 问题,但要找出靶表面的瞬时温变必须采用随时间变化的能量密度模型。根据 MID 的电压及离子流密度变化规律(见图 1),建立高斯型分布模型,电压和离子流密度分别为

$$U = A \exp\left[-\frac{(t - t_{0U})^2}{2\sigma_1^2}\right], \quad (1)$$

$$J = B \exp\left[-\frac{(t - t_{0J})^2}{2\sigma_2^2}\right]. \quad (2)$$

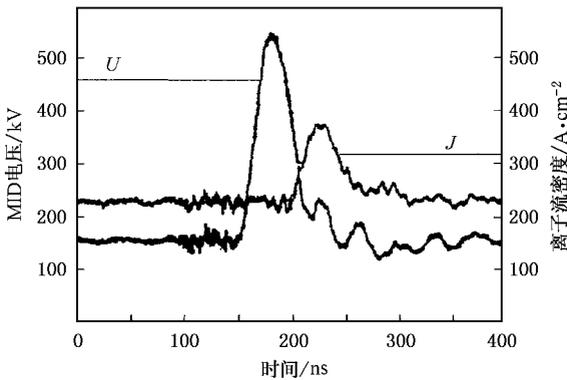


图 1 MID 电压及离子流密度随时间变化关系

图 2 为束流功率密度的脉冲波形。束流功率密度为

$$P(t) = U(t - \Delta t)J(t), \quad (3)$$

式中 $\Delta t = t_{0J} - t_{0U}$ 。

在 $t \rightarrow t + dt$ 时间内入射到靶上的离子数目设为 dN ,

$$dN = \frac{J(t) \lambda t}{q}, \quad (4)$$

式中 q 为单离子电荷数。在 $t \rightarrow t + dt$ 时间间隔内入射到靶上的离子能量为

$$E(t) = qU(t - \Delta t). \quad (5)$$

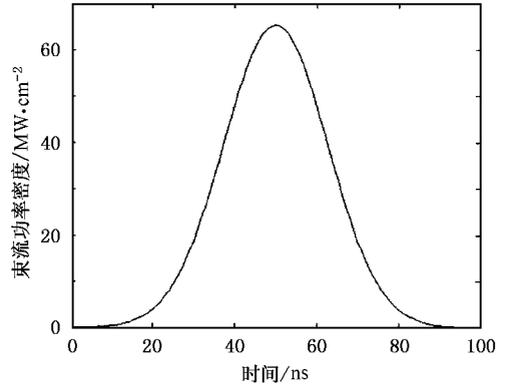


图 2 束流功率密度脉冲波形

设靶表面处 $x = 0$, 则 $t \rightarrow t + dt$ 时间内 x 处沉积能量为

$$dE_s(x, t) = \frac{dE(x)}{dx} dN. \quad (6)$$

在 t 时刻 x 处沉积的总能量为

$$E_s(x, t) = \int_0^t \frac{dE(x)}{dx} \frac{J(t)}{q} dt. \quad (7)$$

2.2. 相变温度模型

随着作用时间的增加,传给靶材的能量也就越来越多,而能量沉积在靶内会导致其温度发生变化,特别是在表面附近。

将沉积在靶内随时间变化的能量作为热源,采用热力学模型求解温度在靶内的演化规律,建立一维模型,

$$\rho C_v(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right) + E_{tot}(x, t), \quad (8)$$

$$E_{tot}(x, t) = E_s(x, t) - E_{ph}, \quad (9)$$

$$E_{ph} = L_{liq} \delta(T(x, t) - T_{melt}) + L_{vap} \delta(T(x, t) - T_{vap}) \quad (10)$$

式中 ρ , $C_v(T)$, $\kappa(T)$ 分别为密度、定容热容及热导率, $E_s(x, t)$ 为能量沉积项, E_{ph} 为与熔解潜热及汽化潜热相关的项, L_{liq} 为熔解潜热, L_{vap} 为汽化潜热。 δ 函数在温度达到熔点和沸点时为 1, 其他温度时为零。

初始条件为

$$T(x, 0) = T_0(x). \quad (11)$$

边界条件为

$$\frac{\partial T(0, t)}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial T(L, t)}{\partial x} = 0, \quad (12)$$

式中, L 为靶的厚度, 初始温度取为室温 $25\text{ }^\circ\text{C}$. 取绝热边界条件, 采用有限差分方法解方程组(8)–(12).

3. 计算结果及讨论

3.1. 能量沉积分布

我们对脉冲宽度 $\tau = 70\text{ ns}$ 的 H^+ 和 C^+ 以及 $70\% \text{H}^+ + 30\% \text{C}^+$ 的离子束沉积在 Al 中的情况进行了数值模拟. 当离子源只含有 H^+ 时, 对于 $150\text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}$ 的离子流而言, 其入射到靶材的深度可达 $4.5\text{ }\mu\text{m}$ (见图 3), 入射能量密度为 $4.6\text{ J}\cdot\text{cm}^{-2}$. 此时靶表面只会熔化, 深度可达 $3.5\text{ }\mu\text{m}$ 以上, 可以求出与其相当的离子平均能量为 295 keV . 为便于比较, 图 3 同时给出了采用方波脉冲的能量沉积情况. 从图 3 可见, 能量沉积深度接近 $3\text{ }\mu\text{m}$, 表面的熔化深度两者相差 $1\text{ }\mu\text{m}$ 左右.

当离子束只由 C^+ 组成时, 采用高斯脉冲分布与方波脉冲分布模型, 其模拟结果如图 4 所示. 从图 4 可以看出, 此能段结果差别不大.

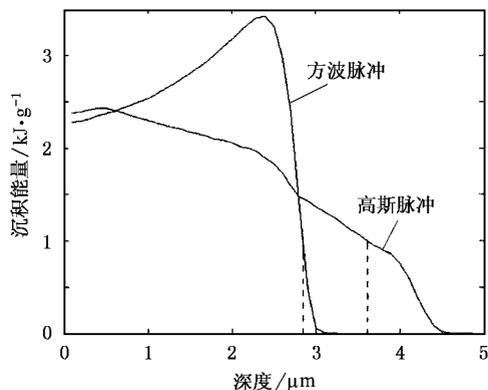


图 3 高斯和方波脉冲 H^+ 离子束能量沉积对比图

采用混合离子束时 (H^+ 占 70% , C^+ 占 30%), 能谱如图 5 所示. 这种情况下, 熔化区为 $3\text{ }\mu\text{m}$, 不会产生汽化, 即 Al 靶表面不会蒸发.

增加离子流密度, 使其达 $350\text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}$ 时, 其能量沉积如图 6 所示. 此时熔化深度增加, 超过 $4\text{ }\mu\text{m}$, 表面能量沉积达 $13\text{ kJ}\cdot\text{g}^{-1}$, 超过此值时表面将汽化. 也就是离子二极管电压峰值超过 400 kV 或离子束流密度超过 $350\text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}$ 时, 都会产生汽化使靶表

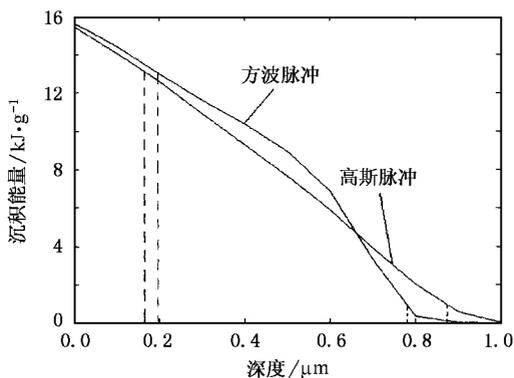


图 4 高斯和方波脉冲 C^+ 离子束能量沉积对比图

面物质喷发, 即离子流密度为 $350\text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}$ 时, 能产生喷发的域值电压为 400 kV , 此时能量密度为 $10.5\text{ J}\cdot\text{cm}^{-2}$.

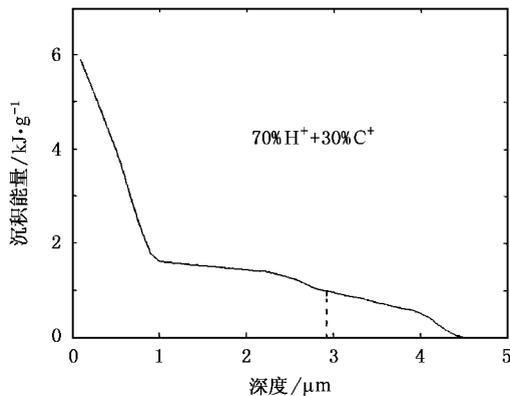


图 5 密度为 $150\text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}$ 单束离子流能量沉积图

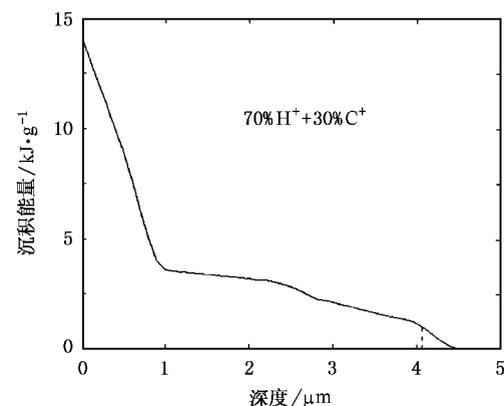


图 6 密度为 $350\text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}$ 单束离子流能量沉积图

当二极管电压峰值为 500 kV 时, 能量沉积如图 7 所示. 此时熔化深度为 $5.5\text{ }\mu\text{m}$, 汽化深度达 200 nm .

束流含离子种类不同,入射靶材的深度及传给靶材的能量分布也不同(见图 7)。只含 H^+ 时入射较深但表面能量低,因而其温度较低;只有 C^+ 时,此能段 C^+ 入射深度不到 $1 \mu m$,但传给靶材表面能量较高;当含有两种离子时,含量不同传递能量效果也不同。所以应根据不同的目的选用不同的离子源材料。

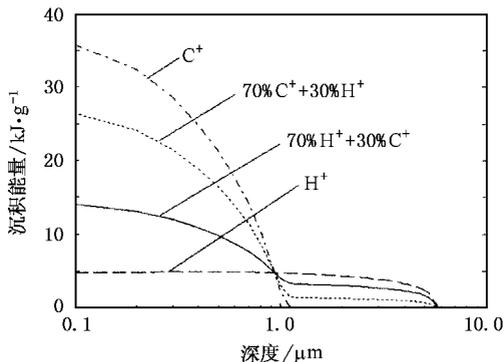


图 7 MID 电压为 500 kV 时不同离子的能量沉积图

3.2. 温度演化

利用能量沉积结果以及靶材吸收随时间变化的能量作为靶内变化的热源。其沉积能量时空演化如图 8 所示,时间间隔为 4 ns。开始和结束时,由于二极管电压上升沿和下降沿的作用,离子获得的能量较低因而入射深度较浅,这与采用方波得到结果不同。当入射能量为 $12 J \cdot cm^{-2}$, $70\% H^+ + 30\% C^+$ 入射时,靶温度演化如图 9 所示,脉冲结束后表面层 200 nm 的 Al 被烧蚀掉,其温度可达 $3000 \text{ }^\circ C$ 以上。由图 7 可以看出, C^+ 占到 70% 时,将有近 $1 \mu m$ 的 Al 会被烧蚀而产生等离子体。

4. 结 论

利用高斯分布模型可以计算出不同时刻不同位置处的能量沉积图,比方波模型更接近实际情况。特别是 MID 上升和下降电压导致离子能量分布,较低能量离子与靶物质作用时,能量沉积在靶材表面,

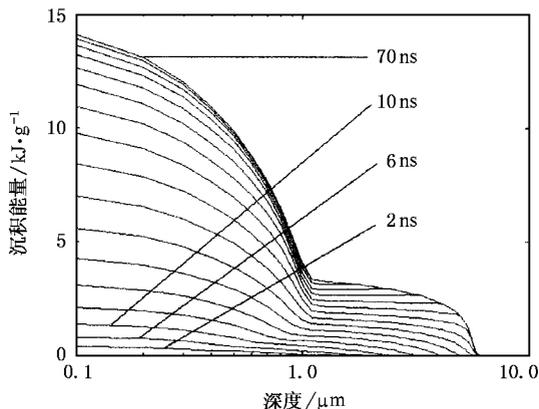


图 8 靶材沉积能量时空演化图

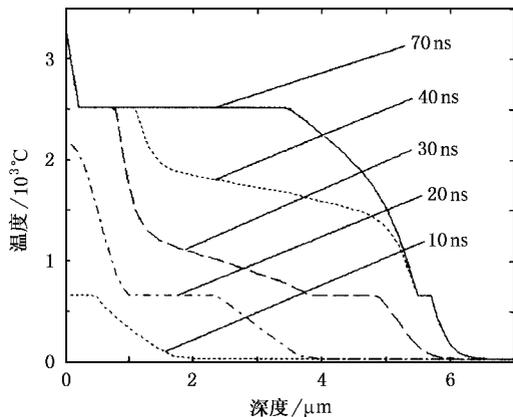


图 9 Al 靶温度随纵向深度的变化

较高时能量沉积在靶材的较深处。

在所研究的能量范围内, H^+ 与 C^+ 能量沉积图有很大差别。 H^+ 沉积在靶材的较深处,而且单离子能量越高就越深, C^+ 则主要沉积在靶的表层。当离子束由两者混合组成时,能量沉积图谱由其组成份额确定。当一束离子由 $70\% H^+ + 30\% C^+$ 组成时,靶表面沉积能量较少,纵向深度能量沉积较多,适于进行靶材改性研究。当离子束由 $30\% H^+ + 70\% C^+$ 组成时,其能量主要分布在靶材的表面,会使表面温度迅速升高,适于作薄膜生长研究。

利用该模型可以确定产生喷发等离子体的阈值,计算离子束入射靶材的温度分布。

- [1] Zhu X P , Lei M K , Dong Z H 2003 *Rev. Sci. Instrum.* **74** 47 1155
- [2] Mei X X , Xu J , Ma T C *et al* 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1875 (in Chinese) [梅显秀、徐 军、马腾才等 2002 物理学报 **51** 1875]
- [3] Piekoszewski J , Werner Z , Szymczyk W *et al* 2001 *Vacuum* **63** 475
- [4] Jiang W H , Ide K Kitayama S *et al* 2001 *Jpn. J. Appl. Phys.* **40** 1026
- [5] Rej D J , Davis H A , Remnev G E *et al* 1997 *J. Vac. Sci. Technol. A* **15** 1089
- [6] Kang X D , Masugata K , Yatsui K 1994 *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**
- [7] Zhou N , Niu S L , Ding S *et al* 2000 *High Power Laser and Particle Beams* **12** 249 (in Chinese) [周 南、牛胜利、丁 升等 2000 强激光与粒子束 **12** 249]
- [8] Yang H L , Qiu A C , Zhang J S *et al* 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 406 (in Chinese) [杨海亮、邱爱慈、张嘉生等 2004 物理学报 **53** 406]
- [9] Yatsui K , Kang X D , Sonogawa T *et al* 1994 *Phys. Plasmas* **1** 1730

Study on irradiation threshold of a target irradiated by an intense pulsed ion beam

Wu Di Gong Ye Liu Jin-Yuan Wang Xiao-Gang

(State Key Laboratory of Materials Modification by Laser , Ion and Electron Beams , Dalian University of Technology , Dalian 116024 , China)

(Received 19 May 2004 ; revised manuscript received 13 December 2004)

Abstract

A pulsed voltage of magnetically insulated diode and pulsed ion beam and temperature evolution of the target including phase transition models have been built by combining Monte Carlo method and thermodynamical method. The melting and evaporating threshold of the target can be calculated , and the temperature of the target and the ablation plasma can also be determined.

Keywords : intense pulsed ion beam , target , threshold , numerical method

PACC : 5225 , 5265