

高功率离子束辐照膜基双层靶温度场的数值研究*

吴 迪¹⁾ 官 野²⁾ 雷明凯^{3)†} 刘金远²⁾ 王晓钢²⁾ 刘 悦²⁾ 马腾才²⁾

1) (大连大学物理科学与技术学院, 大连 116622)

2) (大连理工大学三束材料改性重点实验室, 大连 116024)

3) (大连理工大学材料科学与工程学院, 表面工程实验室, 大连 116024)

(2008 年 7 月 12 日收到; 2009 年 11 月 21 日收到修改稿)

采用 TRIM 程序模拟高功率离子束与铝基钛膜双层靶的相互作用. 计算了束流在靶材内的能量沉积及分布情况, 并以此沉积能量为热源项, 采用有限差分方法求解非线性热传导方程, 得到了温度场的分布规律, 分析了不同离子流密度对界面物质状态的影响. 结果表明, 离子束电流密度在 100—200 A/cm² 之间取值时, 脉冲结束后界面处两种物质均达到熔融状态.

关键词: 高功率离子束, 双层靶, 温度场, 数值方法

PACC: 6180J, 0570, 5265

1. 引 言

高功率离子束(HPIB)单粒子携带能量较高(数十 keV 到数 MeV), 射程一般在 10 μm 范围内, 脉冲时间一般小于 1 μs. HPIB 加速器能够产生大面积、高能量、强束流的脉冲型离子束, 其功率密度可达 10⁹ W/cm² 量级. 在极短时间内, 高能离子与靶材发生作用, 短时高效地传输能量, 靶材表面迅速熔化甚至汽化, 导致材料表面的物理、化学性质发生显著变化. 近二十年来 HPIB 在材料领域的研究及应用越来越广泛.

HPIB 可对材料表面进行改性. 俄罗斯托姆斯克核物理研究所 Korotaev 等^[1] 研究了 HPIB 辐照下金属和合金在不同熔融温度时物体及表面结构相态和强化问题. Shulov 等^[2] 用 HPIB 对耐熔合金进行处理, 结果表明材料的抗疲劳强度、抗氧化性以及侵蚀性均得到提高. Remnev 等^[3] 研究了束流辐照的工业应用问题, 改性后钻头和其他工具表面层由于结构和化学改性导致耐磨性增加, 大幅度提高了其使用寿命. 国内在材料表面工程领域的 HPIB 技术研究主要集中于西北核技术研究所、北京大学、大连理工大学以及北京航空航天大学等单位^[4-6]. 大

连理工大学于 1999 年从俄罗斯引进 TEMP 型 HPIB 装置, 之后在此设备上开展了 HPIB 理论和实验方面的研究工作^[7-9]. 完成了对 HPIB 装置结构和特性的改进和优化, 同时在金属钛基体材料改性方面作了系统的实验和理论研究.

随着离子的注入, 高能离子束引起涂层原子与基体材料原子之间相互渗透和混合, 在界面区形成了一个过渡层, 形成混合界面, 使界面模糊, 大大增强了表面薄膜的结合力. 目前, 针对 HPIB 提高薄膜黏结性的研究工作还很少^[10,11].

当用 HPIB 辐照双层靶时, 离子能量会沉积在靶材内的某一深度处, 并呈规律性的空间分布, 沉积深度及分布状态与薄膜的厚度直接相关. 更为重要的是, 这种能量分布会影响到靶内两种材料的熔化或汽化过程, 并导致界面物质结合强度发生变化. 当离子束能量使得界面处两种物质熔化时, 可使不活泼和不相容的材料之间在界面处形成原子级混合, 出现附着力增强效应.

本研究结合 TEMP-6 离子束加速器, 采用国际上通用的离子束模拟 TRIM 程序研究 HPIB 与镀有钛膜的铝靶之间的相互作用. 根据脉冲束流模型模拟能量沉积的演化过程, 建立该过程的热力学模型, 分析计算温度场的分布状况以及演化过程.

* 国家重点基础研究发展计划(批准号:2008CB717801)、国家自然科学基金(批准号:10975026)和大连大学博士启动基金(批准号:SBQ200810)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: surfeng@dlut.edu.cn

2. 物理模型和控制方程

当磁绝缘离子二极管(MID)阳极采用聚乙烯涂层时,HPIB束流由70% H^+ 和30% C^+ 组成^[7]. 其与镀有金属钛膜的铝靶的作用过程是离子与靶材的作用过程,其中离子将能量沉积在铝基钛膜内而使表层及界面附近材料熔化. 根据建立的束流模型^[12],采用 Monte Carlo 方法数值计算该过程的能量沉积. 随着入射靶材离子注入量的增加,传给靶材的能量越来越多,此能量沉积在靶内导致其温度升高,特别是在表面附近. 表层以及界面处材料接收离子传给的能量后熔化,随后熔化层又因热传导效应快速凝固.

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双层靶内的演化规律,建立如下物理模型:

$$\rho_i C_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial x} \right) + E_{\text{tot}}(x, t) \quad (i = 1, 2), \quad (1)$$

$$E_{\text{tot}}(x, t) = E_s(x, t) - \beta E_{\text{ph}}, \quad (2)$$

$$E_{\text{ph}} = L_{i1} \delta(T_i(x, t) - T_{im}) + L_{iv} \delta(T_i(x, t) - T_{iv}), \quad (3)$$

其中 i 表示表层和内层材料, ρ_i , $C_i(T_i)$ 和 $\kappa_i(T_i)$ 分别为密度、热容及热导率, $E_s(x, t)$ 为能量沉积项, E_{ph} 为与熔化潜热及汽化潜热相关的项, L_{i1} 为熔化潜热, L_{iv} 为汽化潜热; β 为吸放热标识, 吸热时取 1, 放热时取 -1; δ 函数在温度达到熔点和沸点时为 1, 其他温度时为 0.

初始条件取为 $T_i(x, 0) = T_0$, 边界条件取为绝热边界条件, 在两种材料界面处设为理想接触, 有

$$T_1 = T_2, \\ -\kappa_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} = \kappa_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} \quad (x = l_0), \quad (4)$$

其中 l_0 为外层膜的厚度. 取室温为 20 °C. 采用有限差分方法求解.

3. 数值结果与分析

计算几何模型如图 1 所示, 表面层是厚度为 0.5 μm 的金属钛, 基体材料为铝, 计算中其厚度取为 4.5 μm . 辐照面积可达几个平方厘米, 可视为一维问题. 热物性参数取自文献[13].

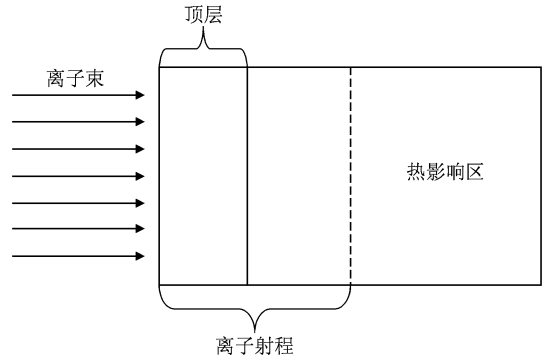


图 1 离子束辐照靶材结构图

保持脉冲宽度 120 ns 不变, 离子能量分布取自文献[12], 平均能量为 295 keV. 在 30—200 A/cm^2 范围内改变离子束电流密度, 能量沉积结果如图 2 所示. 离子束电流密度为 30 A/cm^2 时钛的表面沉积能量为 1 kJ/g , 在膜内随纵深减小. 在界面处金属铝内沉积能量小于 1 kJ/g . 然后约在 0.3 μm 内急剧减小, 接下来在 4 μm 内缓慢减小. 这是因为束流中既含有 C^+ 又含有 H^+ , C^+ 射程较短, 其能量主要沉积在 1 μm 之内, 而 H^+ 射程较长, 能量沉积较深.

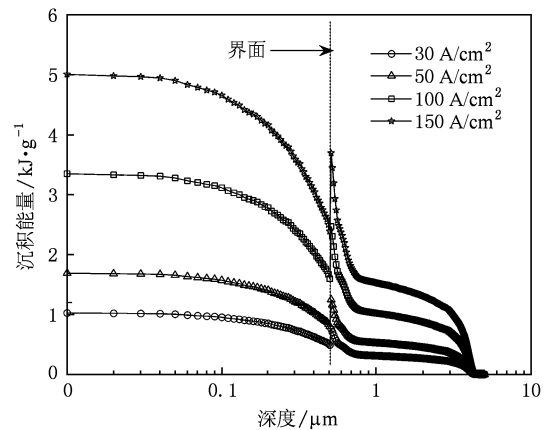


图 2 几种离子流密度的 HPIB 辐照双层靶脉冲结束后的能量沉积分布图

当离子束电流密度增加时, 膜内及基体内沉积能量均随之增加, 变化规律基本相同.

图 3 给出离子束电流密度为 100 A/cm^2 时脉冲期间的能量沉积演化结果. 可以看出无论是在钛膜内还是在铝靶中, 沉积能量均随辐照时间增加. 特点是辐照开始和近结束时能量沉积缓慢, 中期较快. 铝中沉积能量的峰值始终比钛膜中的小, 并且在铝中存在能量急剧减小现象. 在界面处钛内单位质量沉积能量比铝中小, 这主要是由于钛的密度比

铝的大得多,而其电子数密度比铝稍大,离子在钛中的高能传线密度(LET)值比铝稍大.

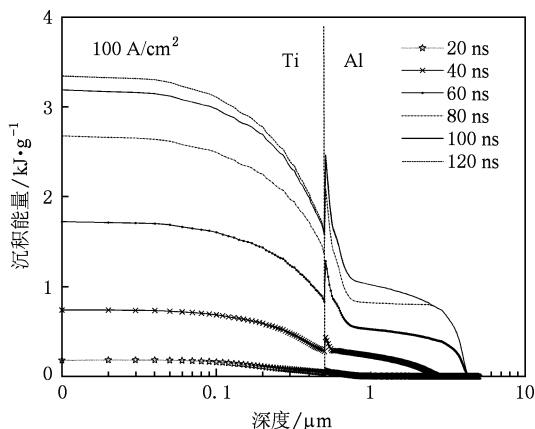


图3 离子流密度为 100 A/cm^2 时脉冲时间内 HPIB 辐照双层靶能量沉积演化图

图4给出了离子束电流密度为 50 A/cm^2 时脉冲期间的温度场演化结果.可见脉冲开始后 60 ns 时钛表层达到熔点,但金属熔化需吸收热量,此时因没有吸收足够的熔化潜热而被认为仍然处于固态,没有熔化;随着时间的增加,表层物质吸收足够的能量后开始熔化;脉冲结束后表层熔化厚度可达 $0.3 \mu\text{m}$,但界面处两种金属均未熔化.离子束电流密度为 150 A/cm^2 时,HPIB 辐照时脉冲期间温度场演化过程如图5所示.脉冲开始后 40 ns 时钛表层即达到熔点但仍处于固态,随着脉冲时间的增加吸收能量逐渐增加,当吸收足够的熔化潜热时开始熔化. 60 ns 时熔化深度已达界面,且发展到铝基内部.脉冲结束时铝基熔化深度可达 $3 \mu\text{m}$.

图6给出离子束电流密度在 $30\text{--}200 \text{ A/cm}^2$ 之间时脉冲结束后的膜基温度分布图谱.其中 $M(\text{Ti})$ 和 $M(\text{Al})$ 分别表示钛和铝的熔点, $B(\text{Ti})$ 和 $B(\text{Al})$ 分别表示钛和铝的沸点,离子束电流密度为 30 A/cm^2 时钛表层及铝表层均达到熔点,但未能吸收足够的熔化潜热,此时虽达到熔点但并未熔化. 50 A/cm^2 时界面处钛和铝均达熔点,但均没有吸收足够的熔化潜热而熔化,与离子束电流密度为 30 A/cm^2 相似,只是基体铝内达到熔点的区域(没能吸收足够的熔化潜热而熔化的深度)增加.当离子束电流密度增加到 100 A/cm^2 时,情况发生变化,脉冲结束后界面处两种物质均处于熔融状态,厚度大约为 $1 \mu\text{m}$ 的铝熔化,钛膜全部熔化.增加到 150 A/cm^2 时,铝的熔化厚度达到 $3 \mu\text{m}$. 200 A/cm^2 时界面处铝已

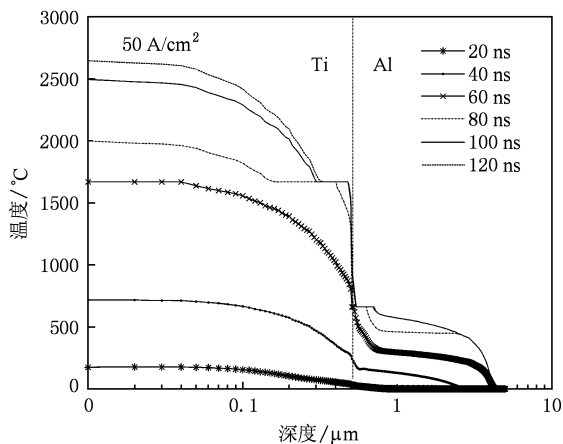


图4 离子流密度为 50 A/cm^2 时脉冲时间内 HPIB 辐照双层靶的温度场演化规律

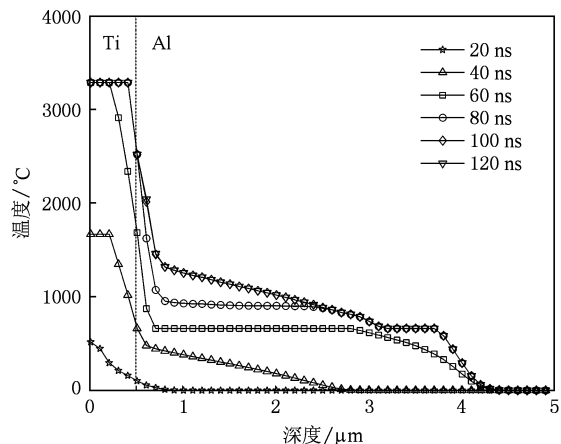


图5 离子流密度为 150 A/cm^2 时脉冲时间内 HPIB 辐照双层靶的温度场演化规律

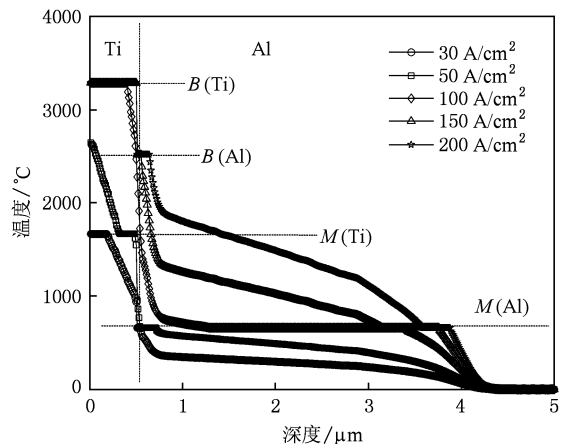


图6 几种离子流密度的 HPIB 辐照双层靶脉冲结束后的温度场分布图

经达到沸点.

可见离子束电流密度在 $100\text{--}200\text{ A/cm}^2$ 之间取值时, 脉冲结束后瞬间界面处两种物质均处于熔融状态, 会形成界面物质的熔融态混合, 增强膜基的结合强度, 其机理尚需进一步研究.

4. 结 论

根据计算可得以下结论:

1) 当钛膜厚度为 $0.5\text{ }\mu\text{m}$ 时, 其内沉积能量随

纵深减小, 金属铝内沉积能量随纵深先在 $0.3\text{ }\mu\text{m}$ 内急剧减小, 接下来在 $4\text{ }\mu\text{m}$ 内缓慢减小.

2) 在界面附近金属钛内单位质量沉积能量比铝中要小.

3) 当脉冲宽度为 120 ns 、离子的平均能量约为 300 keV 、离子束电流密度在 $100\text{--}200\text{ A/cm}^2$ 之间取值时, 脉冲结束后瞬间界面处两种物质均处于熔融状态, 并且没有汽化现象发生.

4) 可以采用该模型计算其他种类双层靶 HPIB 辐照过程热分析问题.

- [1] Korotaev A D, Ovchinnikov S V, Pochivalov Y I, Tyumentsev A N, Shchipakin D A, Tretjak M V, Isakov L F, Remnev G E 1998 *Surf. Coat. Technol.* **105** 84
- [2] Shulov V K, Nochovnaya N A, Remnev G E 1998 *Mater. Sci. Eng. A* **243** 290
- [3] Remnev G E, Isakov I F, Opekounov M S, Matvienko V M, Ryzhkov V A, Struts V K, Grushin I I, Zakoutayev A N, Potyomkin A V, Tarbokov V A, Pushkaryov A N, Kutuzov V L, Ovsyannikov M Y 1999 *Surf. Coat. Technol.* **114** 206
- [4] Zhao W J, Yan S, Le X Y, Han B X, Xue J M, Wang Y G, Remnev G E, Opekounov M S, Isakov I F, Grushin I I 2000 *Nucl. Technol.* **23** 689 (in Chinese) [赵渭江、颜 莎、乐小云、韩宝玺、薛建明、王宇钢、Remnev G E, Opekounov M S, Isakov I F, Grushin I I 2000 *核技术* **23** 689]
- [5] Yang H L, Qiu A C, Zhang J S, He X P, Sun J F, Peng J C, Tang J P, Ren S Q, Ouyang X P, Zhang G G, Huang J J, Yang L, Wang H Y, Li H Y, Li J Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 406 (in Chinese) [杨海亮、邱爱慈、张嘉生、何小平、孙剑锋、彭建昌、汤俊萍、任书庆、欧阳晓平、张国光、黄建军、杨 莉、王海洋、李洪玉、李静雅 2004 *物理学报* **53** 406]
- [6] Yan S, Le X Y, Zhao W J, Xue J M, Wang Y G 2005 *Surf. Coat. Technol.* **193** 69
- [7] Zhu X P, Lei M K, Ma T C 2003 *Nucl. Instrum. Meth. B* **211** 69
- [8] Zhu X P, Lei M K, Dong Z H, Miao S M, Ma T C 2003 *Surf. Coat. Technol.* **173** 105
- [9] Wu D, Gong Y, Liu J Y, Wang X G, Liu Y, Ma T C 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 398 (in Chinese) [吴 迪、宫 野、刘金远、王晓钢、刘 悦、马腾才 2006 *物理学报* **55** 398]
- [10] Davis H A, Wood B P, Munson C P, Bitteker L J, Nastasi M A, Rej D J, Waganaar W J, Walter K C, Coates D M, Schleinitz H M 1998 *Mater. Chem. Phys.* **51** 213
- [11] Gong Y, Zhang J H, Wang X D, Wu D, Liu J Y, Liu Y, Wang X G, Ma T C 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5095 (in Chinese) [宫 野、张建红、王晓东、吴 迪、刘金远、刘 悦、王晓钢、马腾才 2008 *物理学报* **57** 5095]
- [12] Wu D, Liu C, Zhu X P, Lei M K 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 1266
- [13] Warren M R, James P H, Ejup N G 1985 *Handbook of Heat Transfer Fundamentals* (Second Edition) (New York: McGraw Hill)

Numerical study on the evolution of temperature of double-layer target irradiated by high power ion beam*

Wu Di¹⁾ Gong Ye²⁾ Lei Ming-Kai^{3)†} Liu Jin-Yuan²⁾ Wang Xiao-Gang²⁾ Liu Yue²⁾ Ma Teng-Cai²⁾

1) (College of Physical Science and Technology, Dalian University, Dalian 116622, China)

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

3) (Surface Engineering Laboratory, School of Materials Science and Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

(Received 12 July 2008; revised manuscript received 21 November 2009)

Abstract

The interaction between high power ion beam and the double-layer target system consisting of Ti film and Al substrate was simulated by TRIM Code. The evolution of energy distribution in the double-layer target irradiated by high power ion beam (HPIB) was obtained. Using the deposited energy in the target as the thermal source term in the nonlinear thermal conduction equations, finite differential method was used to solve the equations. And one-dimensional spatial and temporal evolution of the temperature of the Ti/Al double-layer target irradiated by HPIB during a pulse was obtained. The effect of the ion beam current density on the phase state of the film substrate interface was analyzed. The results show that both Ti and Al are melted at the interface when the ion beam current density is between 100 and 200 $\text{A}\cdot\text{cm}^{-2}$.

Keywords: high power ion beam, double-layer target, temperature field, numerical method

PACC: 6180J, 0570, 5265

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2008CB717801), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10975026), and the Doctoral Foundation of Dalian University, China (Grant No. SBQ200810).

† Corresponding author. E-mail: surfeng@dlut.edu.cn