

强流脉冲离子束辐照靶材烧蚀效应二维数值研究

吴 迪^{1,2)} 宫 野¹⁾ 刘金远¹⁾ 王晓钢¹⁾ 刘 悦¹⁾ 马腾才¹⁾

1) 大连理工大学三束材料改性国家重点实验室, 大连 116024)

2) 大连轻工业学院数理系, 大连 116034)

(2005 年 4 月 20 日收到, 2005 年 6 月 13 日收到修改稿)

对强流脉冲离子束 (PIB) 辐照 Ti 靶的烧蚀效应进行了二维数值研究, 得到了表面烧蚀物质随脉冲时间的变化关系, 得出 TEMP II 型加速器产生的脉冲束流辐照靶材时引起的汽、液化均是从表面开始, 并且汽化过程中表面物质被层层烧蚀的结论, 同时, 得到中心区的平均烧蚀速度为 10m/s 数量级, 它远小于产生的烧蚀等离子体的喷发速度, 得到脉冲期间靶材内部不同位置烧蚀斑痕形状的时间演化过程, 以及束流中含有的离子种类份额不同时 PIB 辐照过程产生的不同效果.

关键词: 强流脉冲离子束, 靶, 烧蚀过程, 二维数值模拟

PACC: 6180J, 0570, 5265

1. 引 言

强脉冲束流如离子束、电子束及激光束, 与靶材的相互作用过程中, 在很短的时间内大量的能量沉积在其内, 使表面迅速升温, 以至使其熔化、汽化而产生等离子体喷发, 以及在靶内产生应力波、冲击波等物理现象, 起到对材料表面改性的作用^[1-4].

其中强流脉冲离子束 (PIB) 因其特殊的性能, 如单粒子携带能量高, 与靶材作用面积大, 及与靶材间能量交换效率高等, 20 年来在材料科学领域受到了广泛重视, 许多研究组从理论和实验上开展了一些研究工作^[5-9]. 日本长冈工程技术大学采用的是 ETIGO 设备, 其离子流密度比较大, 达到 $1\text{kA}/\text{cm}^2$ 量级, 束流成分为 H^+ , 在靶内的射程比较大, 其能量沉积在靶材的较深层. 在表层内对靶材进行加热, 使其熔化、汽化而喷发, 喷发物质可以达到几十微米. 而俄罗斯的 TEMP II 设备性能与之不同, 离子流密度一般为每平方厘米几百安培, 束流中既含有 H^+ 又含有 C^+ , 其能量沉积形式与 ETIGO 不同, 主要沉积在靶材的表面.

实际上, 由实验可知, 束流与靶材作用时, 存在空间分布情形. 在靶面上, 束流与其作用的中心位置处靶材获得的能量最多, 烧蚀过程中喷发掉的靶材物质在此处最深, 偏离中心越远处, 烧蚀的深度越浅, 所以采用一维模型存在不足, 不能很好地反映实

际的作用过程.

本文结合 TEMP II 型加速器的特点, 建立了束流与靶材作用的二维空间分布模型, 对 PIB 与靶材作用产生的热效应及烧蚀过程进行了数值研究.

2. 物理模型

2.1. 离子流模型

PIB 主要由束流离子种类, 磁绝缘二极管 (MID) 电压, 离子流密度及脉冲宽度所决定. 不同类型的 PIB 加速器产生的离子种类及份额不同. TEMP II 产生的束流由 H^+ 和 C^+ 组成, 其中 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. 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 PIB 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决定性因素.

通常采用平均能量密度研究 PIB 问题, 但要找出靶表面的瞬时温变及烧蚀问题, 必须采用随时间变化的能量密度模型. 根据对实验测得的 MID 的电

压及其焦点附近离子流密度波形进行拟合得到高斯分布规律,考虑束流在靶内的能量沉积分布为轴对称,故取靶面上任意方向为 y 轴正方向,指向靶内垂直靶面的方向为 x 轴正方向.电压和离子流密度分别为

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

$$J(y, t) = B \exp\left[-\frac{(y - y_0)^2}{2\sigma^2}\right] \times \exp\left[-\frac{(t - t_{0J})^2}{2\sigma_2^2}\right], \quad (2)$$

其中 y_0 为束流入射靶面中心点的 y 坐标. A 为 MID 峰值电压, B 为束流峰值电流密度, t_{0U} 为 MID 产生峰值电压时间, t_{0J} 为峰值电流到达靶上的时间. σ_1^2, σ_2^2 分别为 MID 电压及束流密度时间分布方差,而 σ^2 为靶面处电流空间分布方差.靶面 y 处吸收束流的功率密度为

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

其中 $\Delta t = t_{0J} - t_{0U}$.

在 $t \rightarrow t + dt$ 时间内入射到靶面上 y 处的离子数目设为 $dN(y, t)$,

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

这里 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

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

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

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

t 时刻 (x, y) 处沉积的总能量为

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

其中能量沉积项 $dE(x)/dx$ 由 TRIM 程序计算.

2.2. 二维热力学模型

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

将沉积在靶内的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,建立如下二维模型:

$$\rho \alpha(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\kappa(T) \frac{\partial T}{\partial y} \right)$$

$$+ E_{\text{tot}}(x, y, t), \quad (8)$$

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

$$E_{\text{ph}} = L_1 \delta(T(x, y, t) - T_m) + L_v \delta(T(x, y, t) - T_v), \quad (10)$$

其中 $\rho, C(T), \kappa(T)$ 分别为密度、热容及热导率, $E_s(x, y, t)$ 为能量沉积项, E_{ph} 为与熔解潜热及汽化潜热相关的项, L_1 为熔解潜热, L_v 为汽化潜热, T_m 和 T_v 分别为熔点和沸点. 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 $T(x, y, 0) = T_0$, 边界条件取为绝热边界条件, 纵向深度取 $50 \mu\text{m}$, 表面宽度取为 $50 \mu\text{m}$. 取室温为 20°C . 采用有限差分方法求解.

3. 数值结果与讨论

我们计算了 IPIB 烧蚀 Ti 靶的过程. 辐照靶面的范围为 50mm , 靶厚为 $50 \mu\text{m}$, σ 取为 6.25mm . MID 的阳极采用聚乙烯镀膜, 其产生的束流中 H^+ 含 70%, 而 C^+ 含 30%^[10]. 根据束流的分布求得离子的平均能量为 295keV , H^+ 入射 Ti 靶的最大射程为 $1.9 \mu\text{m}$, 而同能量密度的 C^+ 入射时, 射程仅为 $0.44 \mu\text{m}$. H^+ 影响靶材的深层性质, C^+ 则影响浅层.

当束流能量密度为 $15 \text{J}/\text{cm}^2$, 脉冲开始 16ns 时, 温度的空间分布如图 1 所示, 表面附近温度已经超过熔点, 即开始熔化, 出现固、液两相温度平台, 没有汽化发生. 脉冲结束后的温度空间分布如图 2 所示, 可以看出有相当一部分靶物质因烧蚀而喷发. 汽、液相变吸收了大量的能量, 其平台比固、液相变大得多. 液化比汽化要容易. 从图 3 看出, 束流射到靶面上 10ns 时, 中心区域开始熔化, 超过 40ns 时才汽化, 而且熔化和汽化的表面积也不相同. 脉冲结束时, 汽化区域直径达到 15mm , 液化区域直径则达到 30mm . 表面束流中心处经历了很短的时间完成了由熔点到沸点的升温过程, 相比之下汽液相变所需时间则超过了一倍.

图 4 是入射中心不同纵向深度处的状态随着脉冲时间的变化. 由图 4 可以看出超过 40ns 表面就开始汽化而产生喷发等离子体. 随着脉冲时间的增加, 喷发物的纵向深度也在增加. 接近 40ns 时, 液化层达到最深处, 约 $3 \mu\text{m}$. 之后不再加深. 这是由于 35ns 时, 入射的 H^+ 的能量最大, 因而其入射到靶材的深度也最大, 该时刻入射的离子数目也最多, 因此经历较短的时间即达到了熔点而开始液化; 与此同时,

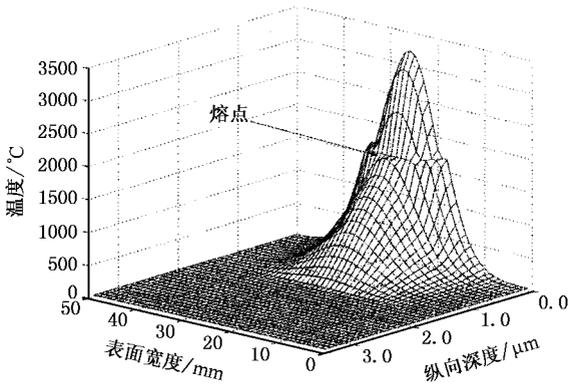


图 1 束流能量密度为 $10\text{J}/\text{cm}^2$ 脉冲开始后 16ns 时靶材温度空间分布图

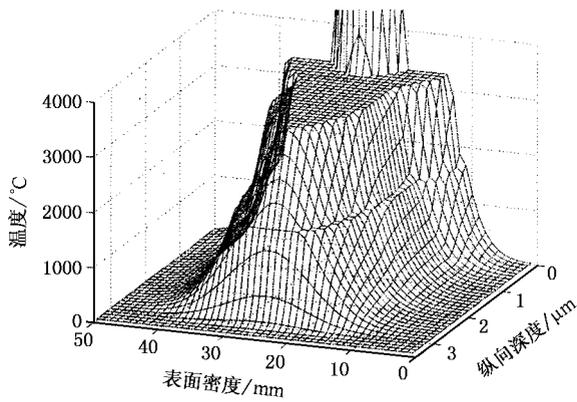


图 2 能量密度同图 1, 脉冲结束后靶材温度空间分布图

C^+ 的数目也达到极大值,但其能量主要沉积在表面,所以表面处开始汽化.其后入射的离子的能量减少,入射深度也随之减小,能量主要用于不同纵向深度处的汽、液相变,如符号‘○’所示区域.

脉冲结束时,靶内不同区域的状态可由图 5 清晰显示出来,符号‘△’所示区域为固液两相区,符号‘○’所示区域为汽液两相区,该区域很大,因为束流中 70% 为 H^+ ,其射程比较大,因而在靶内分布较广,对靶材加热时,虽然达到了沸点,靶材却不能吸收足够的汽化潜热而升华.只有在表层的区域,既吸收了 H^+ 在此沉积的能量,又吸收了 C^+ 在此沉积的能量,而且主要是 C^+ 的能量,使其完成汽液相变过程.其放大的等温面如图 6 所示.由图可见 $0.3\mu\text{m}$ 强的表面物质会烧蚀掉,偏离中心入射点的纵向烧蚀深度越来越浅.图 7 画出了几种偏离情形的烧蚀深度.26mm 曲线为中心入射点情形,24mm 为偏离中心 2mm 处的烧蚀速率曲线,22mm 为偏离 4mm 处的.可以看出 42ns 时表层中心位置开始喷发,而偏

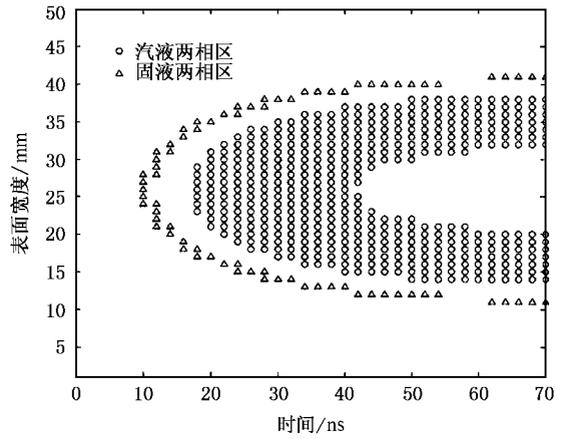


图 3 Ti 靶表面烧蚀痕迹时间演化图

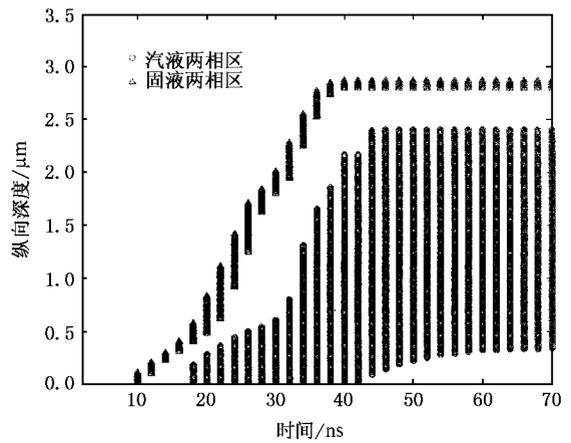


图 4 束流入射中心位置靶材内各点烧蚀情形时间演化图

离 2 mm 处在 2ns 后喷发,4mm 时,则在 10ns 后才开始喷发,并且脉冲结束后,喷发的深度也不相同.在喷发过程中,开始时喷发速度最大,尔后逐渐减小.这是由于喷发初期离子束流密度比较大的缘故.可以看出靶材物质是被层层烧蚀的,中心区域烧蚀的平均速度为 $10\text{m}/\text{s}$ 数量级.而产生的等离子体喷发速度数量级应为 $1\text{km}/\text{s}$ ^[9],脉冲时间为 70ns,此时间内被烧蚀的靶物质脱离靶面也只有 $0.3\mu\text{m}$ 左右(从 42ns 开始).42ns 以后入射的离子将继续与其作用.

TEMP II 加速器的 MID 阳极还可以用石墨,此时离子束中 C^+ 含量占 70%,而 H^+ 占 30%,同能量密度的束流,辐照后靶内不同位置处的状态如图 8 所示.其在靶内产生的热效应及烧蚀情形与聚乙烯阳极明显不同.脉冲结束后,其汽液两相区较小,而汽化喷发区明显增加.一是喷发表面积增加,这种情形喷发直径接近 20mm,二是纵向喷发最大深度增加,

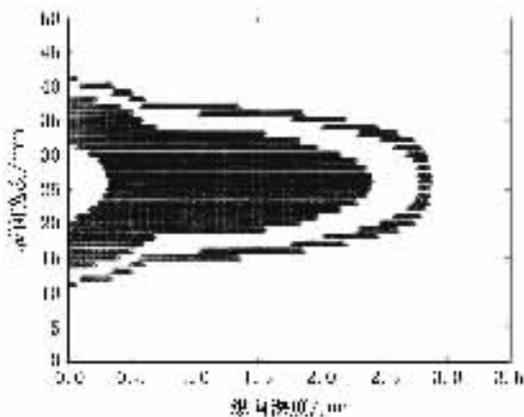


图 5 脉冲结束后,束流入射中心位置烧蚀切面图

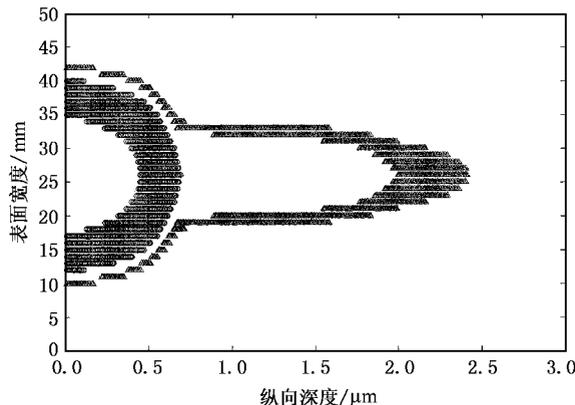


图 8 MID 采用石墨阳极时,同能量密度束流辐照 Ti 靶中心处烧蚀切面图

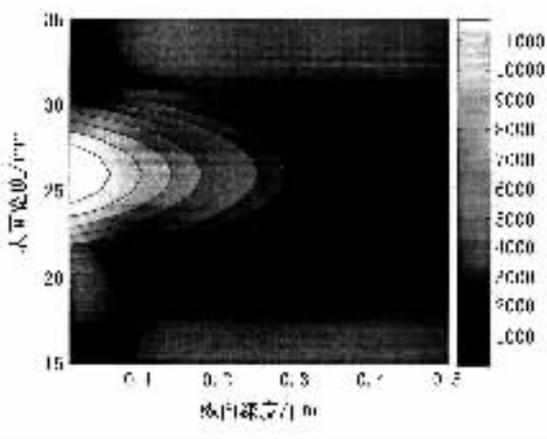


图 6 脉冲结束后,束流入射中心位置烧蚀切面等势图

接近 $0.5 \mu\text{m}$. 但纵向熔化深度相比之下变浅,由 $3.0 \mu\text{m}$ 变为 $2.5 \mu\text{m}$.

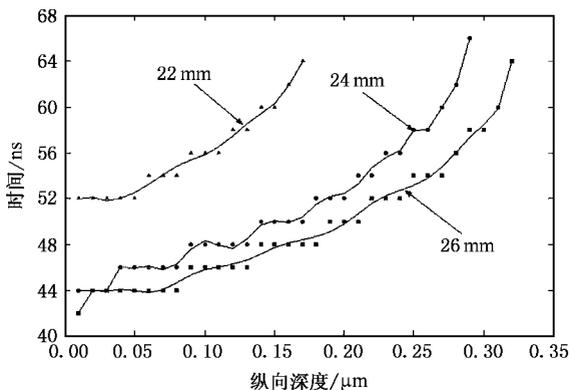


图 7 束流入射中心及距中心 2mm 和 4mm 处靶材内部烧蚀时间演化图

4. 结 论

通过计算束流入射到靶材上的热力学演化过程,得知靶物质开始汽化后,入射的离子继续与其作用,使其获得更高的能量,使得粒子间相互作用增强,导致产生喷发现象.束流入射靶材中心区域的平均烧蚀速度为 10m/s 数量级,其喷发速度远大于入射离子对其产生的烧蚀速度.

喷发粒子的线度很小,应为 0.1nm 数量级,由图 3 可见,一个脉冲内,随着烧蚀时间的增加,喷口面积增加缓慢,到 60ns 以后几乎不再增加,对喷发粒子而言,烧蚀区在该过程中由锅形变成了深井.刚开始喷发时,靶物质向四周散去,但很快大量的粒子就会像井喷一样沿着几乎与靶面垂直的方向喷射出去.这与实验中观察到的现象一致.

加速器采用不同 MID 阳极时烧蚀情形不同,相同的能量密度下,石墨阳极会产生更多的喷发物质,适于薄膜生长及纳米粉的合成,而聚乙烯则更适于对靶材的深层改性.

喷发从脉冲时间过半开始,速率开始喷发时大,尔后减小.

TEMP II 型加速器产生的 IPIB 传递给靶材表面的能量最多,因而靶材的熔、汽化均从表面开始.这与 ETIGO 设备不同^[11].

- [1] Zheng R L , Chen H , Liu J 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 554 (in Chinese) [郑瑞伦、陈 洪、刘 俊 2002 物理学报 **51** 554]
- [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] Le X Y , Zhao W J , Yan S *et al* 2002 *Surf. Coat. Technol.* **158-159** 14
- [6] Kang X D , Masugata K , Yatsui K 1994 *Jpn. J. Appl. Phys.* **33** 1155
- [7] Zhou N , Niu S L , Ding S *et al* 2000 *High Power Laser 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、邱爱次、张嘉生 等 2004 物理学报 **53** 406]
- [9] Zhang J L , Tan C , Wang W C , Wang Y N 2004 *Vacuum* **73** 673
- [10] Zhu X P , Lei M K , Dong Z H 2003 *Rev. Sci. Instrum.* **74** 47
- [11] Harada N , Yazawa M , Kashine K *et al* 2001 *Jpn. J. Appl. Phys.* **40** 960

Two-dimension numerical research on the ablation of target irradiated by intense pulsed ion beam

Wu Di^{1,2)} Gong Ye¹⁾ Liu Jin-Yuan¹⁾ Wang Xiao-Gang¹⁾ Liu Yue¹⁾ Ma Teng-Cai¹⁾

¹ *State Key Laboratory of Materials Modification by Laser , Ion and Electron Beams , Dalian University of Technology , Dalian 116024 , China)*

² *Dalian Institute of Light Industry , Dalian 116034 , China)*

(Received 20 April 2005 ; revised manuscript received 13 June 2005)

Abstract

Two-dimension numerical research has been carried out on the ablation of metal Ti target irradiated by intense pulsed ion beam (IPIB) produced by TEMP II accelerator. Spatial and temporal evolution of the ablation process of the target during the pulse time has been obtained. Melting and evaporation processes begin from the surface of the target and the ablation process of target is layer by layer while the target is irradiated by IPIB. Meanwhile , we have also obtained the result that the average ablation velocity in center region of the target is about 10m/s , which is far lower than the ejection velocity of the plume plasma formed during the pulse time. The effects have been compared for different ratios of two kinds of ions in the pulsed beams produced by using different kinds of materials as the anode of magneto-isolated diodes during the irradiation time.

Keywords : intense pulsed ion beam , target , ablation process , two-dimension numerical method

PACC : 6180J , 0570 , 5265