

用双群模型研究表面位垒对 离子反射的影响*

罗 正 明¹⁾

四川大学原子核科学技术研究所, 成都, 610064

1990 年 1 月 31 日收到

低能离子在固体表面上反射, 对于理解等离子体与聚变堆第一壁相互作用是十分重要的。当离子能量低于千电子伏以下时, 表面位垒对离子反射的影响逐渐变得重要起来。本文应用轻离子输运双群模型, 考虑了直方表面位垒对输运方程边界条件的影响, 得到考虑了位垒影响的离子反射系数。结果表明, 当离子能量下降到 10 倍固体表面位能以下, 由于表面位能将引起轻离子反射系数明显减少。

PACC: 7920N; 5240H; 6180J

一、引 言

表面位能对次级原子发射的影响是显而易见的。因为大部分级联碰撞原子的动能都接近表面位能, 因此当它们穿越表面发射时将受到表面电场强烈的阻止。然而表面位垒对能量低于千电子伏的反射离子也可能发生重要的影响。由于表面位垒, 当反射离子穿越表面时, 只有当它的沿表面法向的动能足以克服表面位垒时, 它才能反射到真空中, 成为真正的反射离子。如果它们沿表面法向的动能不足以克服表面位能, 则它们将被表面位垒反弹回到固体内部。因此容易看到, 表面位垒的存在将导致反射离子数的减少和反射离子能量的下降。

从聚变研究的角度看, 轻离子从聚变堆表面反射的数据是十分重要的。这个问题是等离子体与表面相互作用研究中的基本问题之一。然而对于聚变堆边界冷等离子体来说, 它的能量大约是几十电子伏到几百电子伏。在这个能区内表面位垒的影响是不能忽略的。因此, 要获得正确的离子反射数据, 表面位垒对反射的影响必须考虑。

由于几百电子伏以下的轻离子反射系数的实验测量相当困难, 这一能区的反射系数的实验数据极少。最早的理论工作是 Jackson 应用 Monte-Carlo 程序 TAVERN 来估计表面位垒对反射的影响^[1]。他的研究表明, 表面位垒对低能离子反射是相当重要的。后来 Eckstein 和 Biersack 推广了 Jackson 的工作, 取得更广泛的结果^[2]。

已有的解析理论很难处理有边界的离子输运问题。尽管已经作了大量的努力并取得

* 国家自然科学基金资助的课题。

1) 中国高等科学技术中心。

一定的进展^[3-5],还没有一个解析理论能处理这一问题。

在本文中,将推广离子输运双群模型来处理表面位垒对轻离子反射的影响。在简单介绍双群模型以后,将给出直方位垒模型以及相应的边界条件。最后给出计算结果。

二、双群模型与直方位垒边界条件

离子双群模型文献[6]有详细叙述。在这里仅简单提一下结果,其目的使叙述保持连贯性而又尽可能简练。

根据离子输运两群模型,离子分布函数由直向前离子分布函数和扩散离子分布函数组成,

$$f(x, \mu, t) = f_i(x, \mu, t) + f_d(x, \mu, t). \quad (1)$$

应用小角近似,直向前离子分布函数 f_i 为

$$f_i(x, \mu, t) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} P_l(\mu) A_l(x, t), \quad (2)$$

$$A_l(x, t) = \delta\left(x - \int_t^1 \mu_a(t') dt'\right) \cdot \begin{cases} - \sum_{l'=m+1}^{\infty} D_{ll'} \exp[-k_e \eta_{ll'}(1 - t^{1-2m_{\lambda}v})] / (1 - 2m_{\lambda}v) & l \leq m; \\ \exp[-k_e \eta_{ll}(1 - t^{1-2m_{\lambda}v})] / (1 - 2m_{\lambda}v) & l > m, \end{cases} \quad (3)$$

式中 x 是以离子平均径迹长度为单位的深度, t 是离子相对剩余径迹长度, μ 是离子方向与 x 轴的夹角的余弦,其余的量与文献[6]定义一样。

对于扩散离子,在 P_n 近似下,它的球谐矩 N_l 满足一组双曲型方程组,

$$f_d(x, \mu, t) \approx \sum_{l=0}^n \frac{(2l+1)}{4\pi} P_l(\mu) N_l(x, t), \quad (4)$$

$$-\frac{\partial N_l}{\partial t} + \frac{1}{(2l+1)} \left[(l+1) \frac{\partial N_{l+1}}{\partial x} + l \frac{\partial N_{l-1}}{\partial x} \right] = -k_e \eta_{ll} t^{-2m_{\lambda}v} N_l + S_l \quad l \leq n. \quad (5)$$

为了用数值方法解方程组(5)还须给出初始条件和边界条件。初始条件和内边界条件与文献[6]一样,但表面边界条件与文献[6]不同,因为在现在条件下必须考虑表面位垒。当考虑固体表面位垒时,固体表面对反射的离子来说就不再是自由界面,因而文献[6]中的边界条件就不再正确。根据现代表面理论,表面大体上可以看成是一个偶极层,表面电荷对固体内部电场的影响大约在几埃到十几埃的深度范围,这个深度通常要比轻离子径迹长度小得多。除非离子能量非常低。这样有可能采用最简单的表面位垒模型——直方位垒模型^[7]。应当指出,在 Jackson 和 Eckstein 的研究中他们也是采用直方位垒模型。

根据直方位垒模型,表面电荷对固体内部是不产生电场的。只是到了表面,反射离子受到一个集中的 δ 函数型式的向内的力使位能上升到 U 。直方位垒模型实际上把固体表面看成弹性壁。直方位垒模型的最大好处是它并不改变离子在固体中的 Boltzmann 方程,改变的只是表面边界条件。这样就极大地简化了问题,使之易于求解。

表面位垒引起的表面边界条件的改变主要表现在表面离子角分布的变化上。图1表明表面位垒如何改变了边界上的反射离子角分布。当一个能量为 E 的离子从固体内部运

动到固体表面时,只有当它在表面法线方向的动能超过表面位能 U 时,它才能克服表面位垒进入真空成为实际的反射离子。这样可以定义一个与反射离子能量 E 有关的临界角 θ_c 及相应的临界角余弦 μ_c

$$\mu_c = -\cos\theta_c(E) = \begin{cases} (U/E)^{1/2} & E \geq U; \\ 1 & E < U. \end{cases} \quad (6)$$

当反射离子的角度大于临界角 θ_c 时,它将逃离固体表面,成为实际的反射离子。而当反射离子的角度小于临界角 θ_c 时,它们将被表面位垒反弹回到固体中,因此,在固体表面上观察,反射离子角分布就不同于自由表面时角分布^[8],由于反弹回的反射离子,在 $\pi - \theta_c$ 和 $\pi/2$ 之间就有离子存在。Mark 条件必须修改^[9,10]。由于上述因素,当考虑表面位垒时的边界条件即为

$$f_d(0, \mu_j, t) = 0 \quad \mu_c \leq \mu_j < 1, \quad (7)$$

$$f_d(0, \mu_j, t) = f_d(0, -\mu_j, t) \quad 0 \leq \mu_j < \mu_c, \quad (8)$$

$$\frac{\partial f_d}{\partial t} = \mu_j \frac{\partial f_d}{\partial x} + k_e t^{-2m_1 v} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \eta_l P_l(\mu_j) N_l(0, t) / 2\pi \quad -1 \leq \mu_j < 0, \quad (9)$$

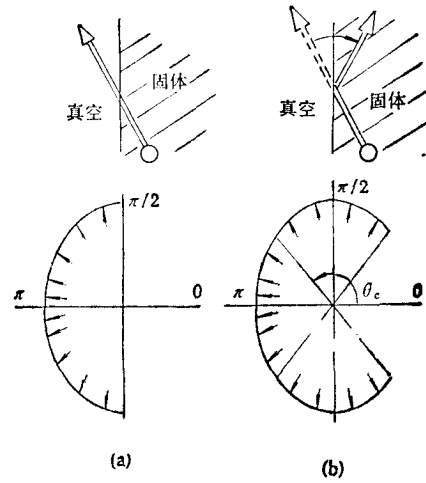
式中 μ_j 是 Legendre 多项式 $P_{n+1}(\mu)$ 的 j 个根,即

$$P_{n+1}(\mu_j) = 0 \quad j = 1, \dots, (n+1). \quad (10)$$

用边界条件(7),(8)和(9)式代替文献[6]中自由边界条件,得到了考虑表面位垒对离子反射影响的计算结果。

三、计算结果与讨论

应用上述理论,计算了 H, D 和 T 离子垂直入射到 C, Al, Cu 和 Au 上。离子能量分别是 0.01, 0.02, 0.05, 0.1, 0.2, 0.5, 1.0, 2.0, 5keV。图 2、图 5 给出计算结果。作为比较,也给出不考虑表面位垒的计算结果。图 4 给出 H^+ 入射到 Cu 壁上的反射系数随能量的变化。在图 4 中为了比较,也画出应用 TCIS 程序计算出的 H^+ 反射系数与能量的关系^[11]。TCIS 是一种 TRIM 型的 Monte-Carlo 程序,应用它可以对本文计算结果作一个印证。在这两种计算中,都取表面位能为 5eV。Jackson 和 Eckstein 也应用过类似的表面位能值。发现本文的结果与 TCIS 的结果是相似的。从所有这些计算都可看到,当入射离子能量比表面位能大很多时,表面位垒对反射离子的阻挡作用就逐渐重要起来,随着入射离子能量的下降,这种阻挡作用越来越大,以致当能量下降到可与表面位能相比较时,大部份反射离子都不能穿越表面,进入真空,导致反射系数急剧下降。因此,本文得



(a) 自由边界上反射离子角分布 (b) 位垒边界上反射离子角分布
图 1 两种边界对反射离子角分布的影响

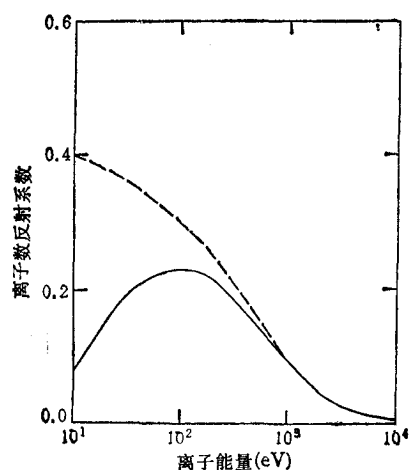


图2 H^+ 入射到C上的反射系数 实线为位垒边界所得反射系数 虚线为自由边界所得反射系数

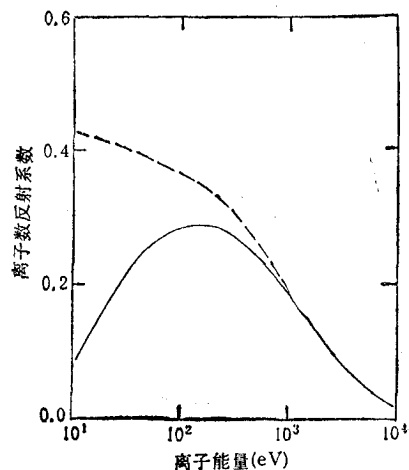


图3 D^+ 入射到Al上的反射系数 图注同图2

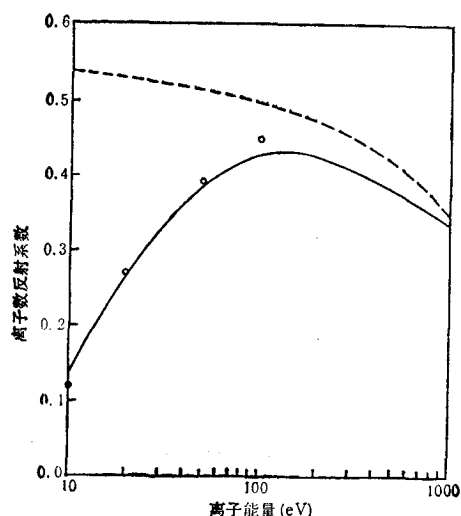


图4 H^+ 入射到Cu上的反射系数 实线为考虑表面位垒后的 H^+ 反射系数; $\circ$ 为 Monte-Carlo 计算结果 (表面位能 5eV); 虚线为自由表面的双群模型计算结果

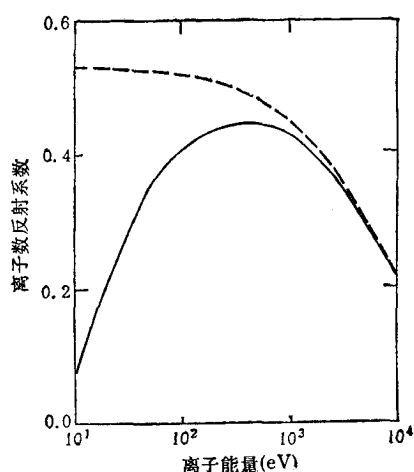


图5 H^+ 入射到Au上的反射系数 图注同图2

到了与 Jackson 相似的结论: 固体表面位垒对低能离子反射的影响的确是十分重要。这个结论对研究等离子体与聚变堆第一壁相互作用来说有重要的指导意义, 它清楚地表明, 应用普通自由界面的离子输运计算得到的反射系数, 不能可靠地估计反射离子流, 因而在聚变等离子体模式化研究中, 应采用有表面位垒影响的反射系数。

讨论两个有关的问题。首先, 从这些计算中可以推测到样品表面细微的不平和织纹有可能明显地影响到低能离子的反射。当表面的不平度和织纹结构与低能离子的平均投影射程相差不多时, 表面不平就有可能影响到离子的反射。这意味着, 一些尺度仅为几十

到几百埃的表面微起伏就可能显著改变反射系数。从此可以推测, 对能量大约几十电子伏到几百电子伏的低能离子, 其反射系数的测量值将强烈地依赖表面的微细结构, 因而变得不确定。因为对于不同的实验室很难制作表面微细结构也十分相似的样品, 这意味着, 在样品制作的标准化问题解决以前, 低能离子反射系数测定数据可能会出现较大的分散度。

讨论的第二个问题是表面位垒对斜入射离子反射的影响。推测在这种情况下表面位垒对离子反射的影响有可能变得更强。因为在斜向射入的情况下, 有较多的反射离子的运动方向是沿着靠近平行于表面方向, 这些离子通常在沿表面外法线方向只有较小的动能, 容易满足反转条件 $E_n \leq U$ 。因此, 在斜向入射的条件下, 离子反射系数有可能减少得较多。

- [1] D. P. Jackson, *Radiation Effects*, **49**(1980), 233.
- [2] W. Eckstein and J. P. Biersack, *Appl. Phys.*, **A38**(1985), 123.
- [3] J. Bottiger *et al.*, *Radiation Effects*, **11**(1971), 69.
- [4] U. Littmark and A. Gras-Marti, *Appl. Phys.*, **16**(1978), 247.
- [5] H. M. Urbassek and M. Vicanek, to be published in *Appl. Phys. A*.
- [6] Luo Zhengming and Wang Shiming, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 1885.
- [7] Luo Zhengming, *Nucl. Instrum. and Meth.*, **B33**(1988), 102.
- [8] Luo Zhengming, *Phys. Rev.*, **B32**(1985), 824.
- [9] R. D. Richtmyer *et al.*, *Difference Method for Initial Value Problems*, Interscience, New York, (1967), p. 235.
- [10] J. C. Mark, Natural Resource Council of Canada, Report No. MT-92, (1944), (unpublished); MT-97, (1945), (unpublished).
- [11] Cui Fuzai and Li Hengde, *Nucl. Instrum. and Meth.*, **B7/8**(1985), 650.

A STUDY OF THE INFLUENCE OF A SURFACE BARRIER OF SOLIDS ON ION REFLECTION BY BIPARTITION MODEL

LUO ZHENG-MING

Institute of Nuclear Science and Technology, Sichuan University, Chengdu, 610064

(Received 31 January 1990)

ABSTRACT

It is very important to evaluate the reflection of low energy ion from a surface of solid for understanding the interaction between plasma and the first wall in a fusion reactor. When ion energy is lower than 1 keV, the influence of the surface barrier of solids on ion reflection gradually becomes important. In the present paper, the influence of the surface barrier of solids on ion reflection has been evaluated by extending the bipartition model for light ion transport to the case of the boundary with a rectangular surface barrier. Our computational results have shown that surface barrier can remarkably reduce the ion reflection coefficient, when ion energy decreases down to less than 10 times surface potential energy of the solids.

PACC: 7920N; 5240H; 6180J