

考虑溅射损失的 RF 共振法离子引出和收集

谢国锋 王德武 应纯同

(清华大学工程物理系 北京 100084)

(2004 年 8 月 18 日收到 2004 年 9 月 13 日收到修改稿)

采用 PIC-MCC 方法研究了 AVLIS 工程中一维 RF 共振法离子引出和收集过程,重点研究离子在收集板上造成的溅射损失以及离子的收集效率.模拟结果表明,RF 共振法与平行板静电场法相比,引出时间较短,碰撞损失和溅射损失较低,收集率较高.增加引出电压,可以缩短引出时间,降低碰撞损失,但是增加了溅射损失,使得收集率降低.增大磁场强度,使碰撞损失降低,溅射损失增加,收集率降低.

关键词:AVLIS, PIC-MCC, 离子引出, 溅射

PACC: 5265, 5235

1. 引 言

在原子蒸气激光同位素分离(AVLIS)工程中,快速低耗地将激光选择性电离产生的目标同位素离子引出并且收集是其核心问题.电子平衡流体模型, PIC-MCC 粒子模拟方法,以及结合电子平衡和粒子模拟的杂化方法被广泛地应用于模拟各种引出方法^[1-7](包括平行板静电场法、RF 共振法、 $j \times B$ 法),得到了引出时间、碰撞损失率的规律.在引出和收集过程中,目标同位素离子的损失途径有两种,即碰撞损失和溅射损失.碰撞损失是指目标同位素离子在引出的过程中,与非目标同位素原子发生共振电荷转移.溅射损失是指引出离子轰击收集板,使得已经收集到的离子发生溅射.以往的文献大多没有分析离子的溅射损失.朱红莲等^[8]应用 Sigmund 线性级联碰撞理论对收集过程的溅射损失进行了初步分析.谢国锋^[9]用 PIC-MCC 方法研究一维平行板静电场法的离子引出和收集过程,记录引出离子的能量分布和角度分布,将其代入 Trim 程序,分析不同引出条件下离子在收集板上造成的溅射损失对离子收集率的影响.本文将用 PIC-MCC 方法研究 RF 共振法研究不同引出条件下离子在收集板上造成的溅射损失对离子收集率的影响.

2. 模型和方法

RF 共振法的等效电路如图 1 所示,等离子体与电极板之间的鞘层等效为电容 C_s ,而等离子体则等效为并联的电容 C_p 和电感 L_p ,再与电容 C_s 串联.

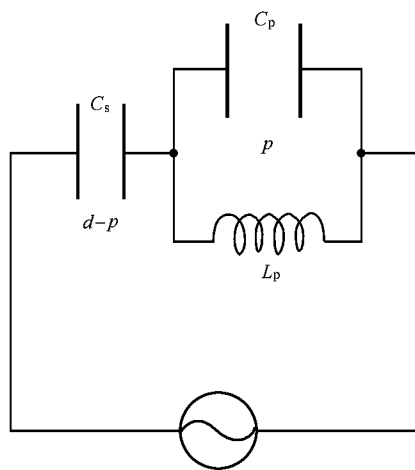


图 1 RF 共振等效电路图

等效电容和电感分别为

$$\begin{aligned} C_s &= \epsilon_0 \frac{A}{d-p}, \\ C_p &= \epsilon_0 \frac{A}{p}, \\ L_p &= \frac{p}{\epsilon_0 A (\omega_{pe}^2 + \omega_{pi}^2)}, \end{aligned} \quad (1)$$

式中, ω_{pe} 为电子等离子体频率, ω_{pi} 为离子等离子

体频率, d 为极板间距, p 为等离子体在 x 方向的宽度. 整个引出系统的等效阻抗为

$$Z = (j\omega C_s)^{-1} + \left(j\omega C_p + \frac{1}{j\omega L_p} \right)^{-1}. \quad (2)$$

调节 RF 源的频率, 使整个电路发生串联共振, 这时电路的阻抗为 0, 等离子体中的 RF 电流成为最大值, 因此有望实现离子的快速引出.

在外磁场 B 为 0 时, 可得共振频率^[10]

$$\omega_R = \omega_{pe} \sqrt{\frac{d-p}{d}}, \quad (3)$$

$f_R = \omega_R/2\pi$ 通常在 100MHz 量级.

在外磁场 B (z 方向) 不为 0 的条件下, 在磁场作用下低温等离子体的介电常数公式^[11]为

$$\frac{\omega_{H,L}^2}{\omega_{ce}^2} = \frac{1}{2}(1 + \eta) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(1 + \eta)^2 - \eta \sin^2 \varphi}, \quad (4)$$

其中

$$\eta = \frac{\omega_{pe}^2}{\omega_{ce}^2} \frac{d-p}{d} \quad (\eta > 0),$$

$$\varphi = \arctan(p/L), \quad (5)$$

式中, ω_{ce} 为电子回旋频率, L 为极板在 z 方向的长度, φ 为磁场方向和 RF 共振方向之间的角度. ω_H 和 ω_L 分别为(4)式取正号和负号时的共振频率. $f_H = \omega_H/2\pi$ 在数值上与 f_R 相当, $f_L = \omega_L/2\pi$ 通常为 10 MHz 量级. 随着离子的引出, 等离子体的密度慢慢降低, 将会使 η 值减小, 从而使共振的频率改变. 从(4)(5)式看出, ω_L 比 ω_H 对 η 的依赖要小得多, ω_H 随 η 减小而减小, 而当 $\eta > 1$ 时, 在离子引出过程中, ω_L 几乎不变. 值得注意, 只有在磁场 $B > 0$ 时 ω_L 才存在.

等离子体位于左右两块平行的电极中, 左边的电极加上 RF 电压, 右边的电极接地. 等离子体和收集板的几何尺寸如图 2 所示, U_{ac} 为外加 RF 电压的幅值, 离子在电磁场的作用下被左右极板收集. 如果没有特殊说明, 取 $D_x = 2\text{cm}$, $D_{px} = 2\text{cm}$, $X_0 = D_x/2$, $kT_e = 1.0\text{eV}$, $kT_i = 0.1\text{eV}$, 离子为 U^{235} , $m_i = 3.93e - 25\text{Kg}$, 蒸气原子密度 $n_a = 1 \times 10^{19} \text{m}^{-3}$, 目标同位素的丰度 $C = 1\%$, 外加磁场 $B = 0.005\text{T}$, 在激光选择性电离过程中, 设所有目标同位素全部被电离, 而所有非目标同位素则保持原子状态.

PIC-MCC 方法是一种粒子模拟方法, 它把长期以来用来模拟无碰撞等离子体的 PIC 方法和模拟粒子碰撞的 Monte Carlo 方法融合起来, 用来模拟考虑

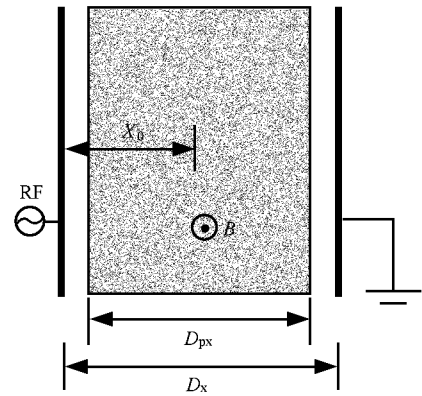


图 2 等离子体和收集板的几何尺寸

碰撞的带电粒子的运动, 这种方法对研究等离子体离子引出是非常适用的. 有关 PIC-MCC 的具体介绍, 可以参考文献 [12—14].

就关心的离子引出来说, 离子和原子间的电荷交换是影响目标同位素离子引出的最重要的碰撞类型, 所以在模拟中, 只考虑电荷交换. 电荷交换截面采用半经验公式^[15]. 采用零碰撞技术^[16]来减少处理碰撞的计算量.

$$\sigma = (a - b|g|v|)^2 \times 10^{-16} \text{cm}^2. \quad (6)$$

3. 模拟结果和分析

目标同位素离子在引出过程中, 与非目标同位素原子发生共振电荷交换, 造成碰撞损失. 引出的离子具有一定的能量, 轰击在收集板上, 可以造成溅射损失. 碰撞损失和溅射损失造成收集率下降. 本文用 Trim 程序计算引出离子的溅射效应, 所以首先要研究引出离子的能量和角度分布. 有关离子与固体相互作用的详细内容以及 Trim 程序的介绍可以参考文献 [17].

3.1. 引出离子的能量和角度分布

图 3 是 RF 共振引出离子的能量分布和角度分布, 引出电压的幅值 $U_{ac} = 200\text{V}$. 从角度分布看, 引出离子接近垂直入射收集板. 引出离子的能量分布很宽, 这一点与平行板静电场法不同. 文献 [9] 讨论了平行板静电场法引出离子能量的特点, 如果引出电压 $U_d = -500\text{V}$, 那么引出离子的能量在 500eV 附近有个峰值, 大部分离子的能量分布在 500eV 左右.

图 4 分别给出了平行板静电场法 (a) 和 RF 共振

法 (b) 不同时刻引出离子的能量大小. RF 引出电压的幅值 $U_{ac} = 500V$, 平行板静电场法引出电压 $U_d = -500V$. 从图中看出, 对于平行板静电场法, 先引出的离子能量较低, 因为在平行板静电场法中极板间分为鞘层和屏蔽区两部分, 只有鞘层中的离子才能被电场加速, 从而引出. 先引出的能量较低的离子初始时应该处于鞘层的边缘(或者说极板附近), 刚开始时鞘层的电位要比 $500V$ 高, 约为 $600V$, 且在鞘层中大致成线性分布, 那么在极板附近的电位降小于 $500V$, 位于这个区域的离子引出后获得的动能小于 $500eV$. 后来引出的离子能量增加, 因为它们的初始位置更靠近屏蔽区, 因为在鞘层中电位降大致成线性分布, 越靠近屏蔽区, 与收集板之间的电位降越大, 引出离子的能量就越高. 更后来引出的离子能量

在 $500eV$ 上下抖动, 因为这时鞘层的电位降约为 $500V$. 从这也可以看出, 平行板静电场法的引出过程随着引出离子的增加, 等离子体密度降低, 鞘层不断变厚, 屏蔽区不断变窄(剥离过程).

而 RF 共振法先后引出的离子, 其能量大小是波动的, 为了更好地看出引出离子能量特性, 图 5 将图 4 中黑框部分放大. 从图 5 可以看出, 对于平行板静电场法, 引出离子的能量在 $500eV$ 附近不规则地抖动. RF 共振法因为在极板上施加的是正弦电压, 引出离子的能量是比较规则的正弦振荡. 另外, 如图 4 所示, RF 共振法引出离子的能量除了周期振荡外, 还被某个形状的曲线调制, 这是 RF 共振法引出离子能量完全不同于平行板静电场法的特点.

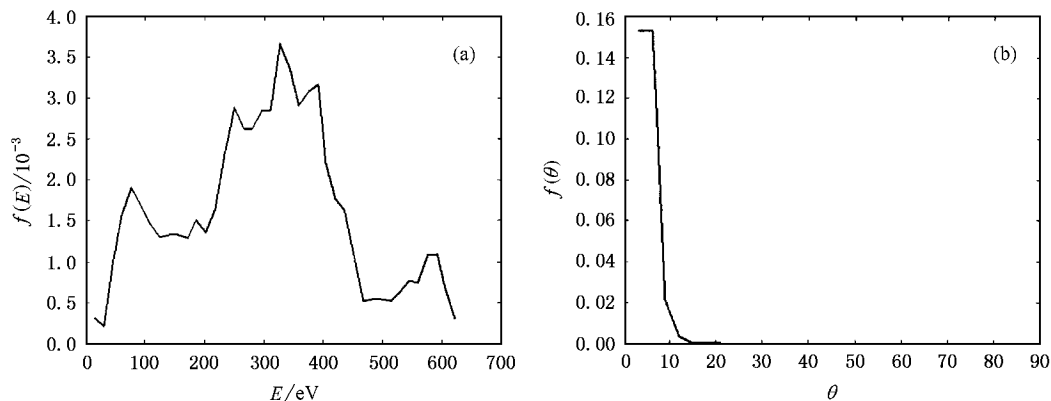


图 3 RF 共振引出离子的能量分布和角度分布

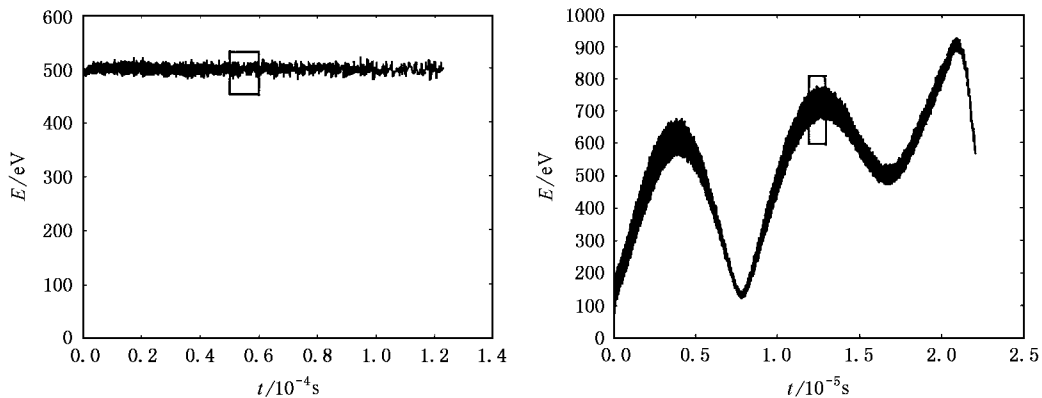


图 4 平行板静电场法和 RF 共振引出离子的能量随时间的分布

RF 共振法的引出离子能量随时间的分布出现如上特点, 应该从 RF 共振法鞘层电压的特点进行分析. 图 6 是 RF 共振法几个不同时刻两极板间的电位分布. 从图中可以看出, 左极板到 A 点, 右极板

到 B 点存在两个鞘层, 而 AB 两点之间也存在电场, 这是 RF 共振法与平行板静电场法不同. 平行板静电场法存在电场几乎为 0 的屏蔽区, 而 RF 共振法电场穿透了等离子体的屏蔽区. 模拟的结果表明,

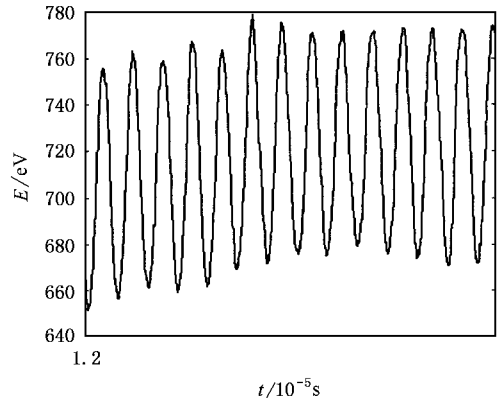
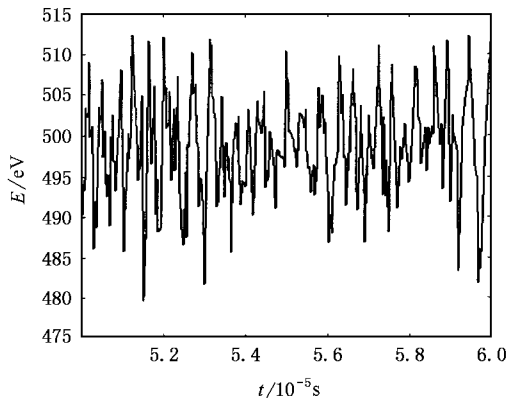


图 5 图 4 黑框中的放大

AB 之间各点的电位随时间做规则的正弦振荡,离子在这个区域被电场驱动是运动的,但是由于电位正弦振荡,时而加速,时而减速,离子在这个区域运动到达这个区域的边缘时获得的能量很有限,引出离子的能量主要来自鞘层.因为鞘层中各点的电位虽然也在振荡,但是鞘层的电位降始终为正(A, B 两点的电位始终高于左右极板),离子在鞘层中总是被加速.引出离子能量随时间的分布之所以出现图 4 中的特点,与鞘层的电位降有密切关系.图 7 表示鞘层电位降(A 点与左极板的电位差)随引出时间的分布.比较图 4 和图 7,引出离子能量随时间的分布与鞘层电位降随时间的分布是很相似的.另外需要指出的是,图 6 中 A 点和 B 点的位置也是周期变化的,时而靠近极板,时而远离极板,但随时间总的趋势是远离极板,也就是鞘层越来越宽.

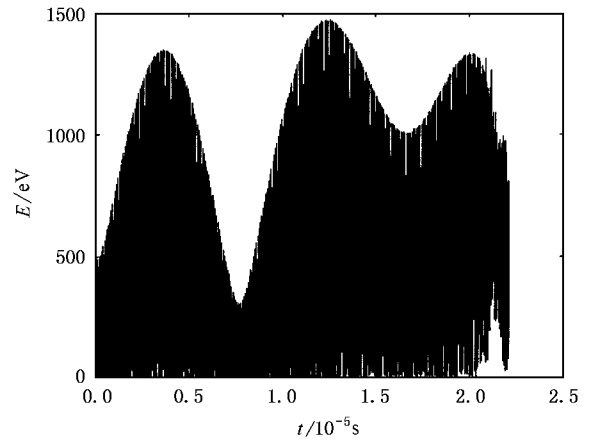


图 7 鞘层电位降随时间分布

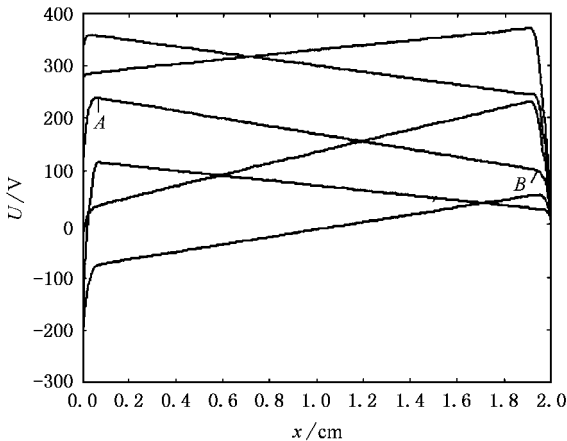


图 6 不同时刻极板间的电位分布

3.2. 不同引出电压的影响

表 1 给出了不同引出峰值电压下 RF 共振法离子引出的数据. RF 共振法引出,两个极板是对称的,引出离子的能量分布和角度分布是相同的,所以只研究一边.表中 S 表示碰撞损失率, Y 表示收集板的溅射产额, $C = (1 - S) \times (1 - Y)$ 表示收集率, T 表示引出时间.模拟数据表明,随着电压的增加,引出时间缩短,碰撞损失率降低,但是引出离子的能量增加使得溅射损失增加,收集率反而降低.

表 1 不同电压下引出和收集的数据

U_{ac}/V	$S/\%$	Y	$C/\%$	$T/\mu s$
100	17.2	0.134	71.7	64.5
200	15.4	0.205	67.3	35.2
300	14.2	0.277	62.0	28.5
500	13.7	0.365	54.8	22.3
700	11.9	0.455	48.0	19.9
1000	10.9	0.578	37.6	15.0

与文献 9 的平行板静电场法相比,在较低的电压下,RF 共振法就可以快速地将离子引出,例如 $U_{ac} = 200V$ 与 $U_d = -2000V$ 的情况,引出时间差不多.而 $U_{ac} = 200V$ 的情况下,RF 共振法的收集率达 67.3%,平行板静电场法 $U_d = -2000V$ 的情况,收集率只有 30.7%.可见,在引出时间相当的情况下,RF 共振法的溅射损失小,收集率高.

3.3. 磁场的影响

在 RF 共振方法中,改变磁场也可以影响引出

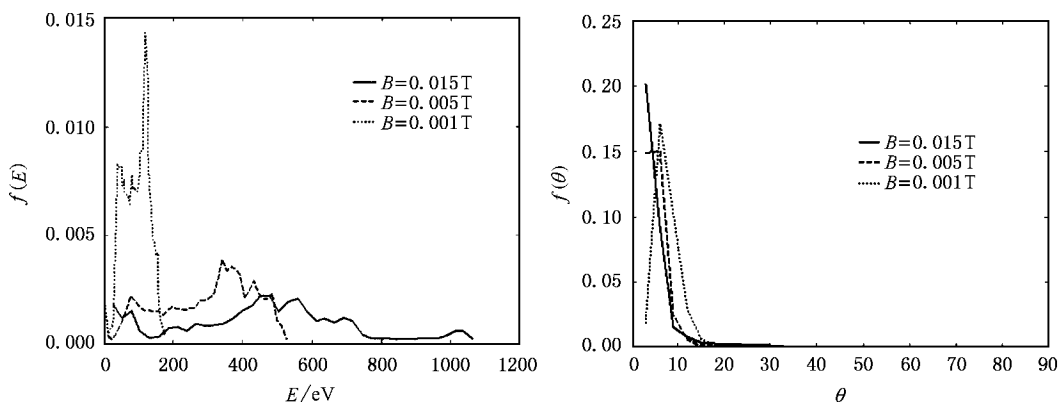


图 8 不同磁场引出离子的能量分布和角度分布

99%的离子所用的时间分布是 $95.3\mu s$, $35.2\mu s$ 和 $50.7\mu s$, 磁场为 0.015T 时引出时间反而比 0.005T 时大.但是引出 90% 离子所用的时间,磁场为 0.015T 时为 $12.9\mu s$, 磁场为 0.005T 时为 $28.2\mu s$.这是因为共振频率还和等离子体密度有关,磁场较大,当离子 90% 被引出,等离子体密度下降到 10% 时,振荡频率已经显著改变,共振不能持续,导致最后 10% 的离子引出时间拖得十分长.较小的磁场,引出的整个过程可以持续发生共振,所以虽然前 90% 的引出时间较长,但完全引出的时间反而较短.

表 2 给出了磁场上 RF 共振法离子引出的数据.由于磁场增加,引出离子的平均能量增加,所以溅射损失增加,尽管碰撞损失降低,但是总的收集率仍然降低.

表 2 不同磁场上引出和收集的数据

B/T	$S/\%$	Y	$C/\%$	$T/\mu s$
0.001	22.5	0.033	74.9	95.3
0.005	15.4	0.205	67.3	35.2
0.015	13.0	0.345	57.0	50.7

时间和收集率.图 4 分别是磁场 B 为 0.001, 0.005 和 0.015 时引出离子的能量分布和角度分布, $U_{ac} = 200V$.根据 (4) 式磁场大小与振荡频率直接有关,磁场越大,振荡频率越高.在这样的磁场大小下,电压的频率分别为 2.775MHz, 13.7MHz 和 37.8MHz.

从图 8 中可以看出磁场越大,引出离子的平均能量越高,更多的离子接近垂直入射.这表明 RF 共振时振荡的幅度与磁场大小有关,磁场越大,振荡越强烈.一般来说,引出离子的能量越高,引出时间应该越短,但是磁场对引出时间的影响有点不同.引出

另外,RF 共振法中电子温度、初始等离子体密度以及同位素丰度对引出和收集的影响,与文献 9 的平行板静电场法是相似的,这里不再赘述.需要指出的是,从分离效果看,要求引出时间比较短,碰撞损失和溅射损失都比较小,但是从模拟结果看,较短的引出时间和较小的溅射损失率在一定程度上是存在矛盾的.引出时间短,则引出离子的能量较高,溅射损失率较大.所以在选择引出系统的各种参数时,应该权衡利弊,合理选择.例如,如果用于电离金属原子蒸气的激光脉冲峰之间的时间间隔为 $50\mu s$,则引出电压峰值可选择 150—200V,磁场大小可选择 0.005T 左右.电压或磁场太小,都将使引出时间变长,造成激光的重复照射;电压或磁场太大,则造成溅射损失增加.

4. 结 论

用 PIC-MCC 方法重点模拟了 RF 共振法 AVLIS 工程中激光等离子体的引出,重点分析引出离子的能量分布以及造成的溅射损失,从而得到各种不同引出条件下的收集效率,得到以下结论:

1. RF 共振法与平行板静电场法相比,具有引出时间短,碰撞损失和溅射损失小,收集率高的优点.
2. 加大引出电压,将缩短引出时间,减小碰撞

损失,增加溅射损失,收集率降低.

3. 磁场增大使碰撞损失降低,溅射损失增加,收集率降低.

-
- [1] Yan M *et al* 1996 *Journal of Tsinghua University* (Sci & Tech) **36** 5 (in Chinese) [严 敏等 1996 清华大学学报(自然科学版) **36** 5]
- [2] Yan M *et al* 1998 *Chinese Journal of Nuclear Science and Engineering* **18** 68 (in Chinese) [严 敏等 1998 核科学与工程 **18** 68]
- [3] Xiong J G and Wang D W 1999 *Journal of Tsinghua University* (Sci & Tech) **39** 48 (in Chinese) [熊家贵、王德武 1999 清华大学学报(自然科学版) **39** 48]
- [4] Xiong J G and Wang D W 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2420 (in Chinese) [熊家贵、王德武 2000 物理学报 **49** 2420]
- [5] Xiong J G and Wang D W 2000 *Atomic Energy Science and Technology* **34** 307 (in Chinese) [熊家贵、王德武 2000 原子能科学与技术 **34** 307]
- [6] Zhu H L and Wang D W 2002 *Journal of Tsinghua University* (Sci & Tech) **42** 587 (in Chinese) [朱红莲、王德武 2002 清华大学学报(自然科学版) **42** 587]
- [7] Zhu H L and Wang D W 2001 *Journal of Tsinghua University* (Sci & Tech) **41** 15 (in Chinese) [朱红莲、王德武 2001 清华大学学报(自然科学版) **41** 15]
- [8] Zhu H L and Wang D W 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1338 (in Chinese) [朱红莲、王德武 2002 物理学报 **51** 1338]
- [9] Xie G F *et al* 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1543 (in Chinese) [谢国锋等 2005 物理学报 **54** 1543]
- [10] Ku V P T, Annaratone B A and Allen J E 1998 *J. Appl. Phys.* **84** (12) 6536
- [11] Matsui T, Tsuchida K and Tsuda S 1996 *Phys Plasmas* **3** 4367
- [12] Birdsall C K and Langdon A B 1985 *Plasma Physics via Computer Simulation*. McGraw-Hill, Inc.
- [13] Shao F Q 2002 *Plasma Particle Simulation* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [邵福球 2002 等离子体粒子模拟. 北京: 科学出版社]
- [14] Xu H, Chang W W and Zhuo H B 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 818 (in Chinese) [徐 涵、常文蔚、卓红斌 2004 物理学报 **53** 818]
- [15] Grossman M W and Shepp T A 1991 *IEEE Transactions on Plasma Science* **19** 1114
- [16] Vahedi V and Surendra M 1995 *Computer Physics Communications* **87** 179
- [17] Ziegler J F 1985 *The stopping and range of ions in solids* (Pergamon Press)

Ions extraction and collection using the RF resonance method and taking into consideration the sputtering loss

Xie Guo-Feng Wang De-Wu Ying Chun-Tong

(Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 18 August 2004; revised manuscript received 13 September 2004)

Abstract

One-dimensional ions extraction and collection using the RF resonance method is studied by PIC-MCC simulation. The energy and angle distribution of extracted ions is recorded and the sputtering loss is calculated. The results show that compared with parallel electrode method, RF resonance method has advantages such as shorter extraction time, lower collision loss and sputtering loss and higher collection ratio; the extraction time and collision loss are decreased with increasing extraction voltage, but the sputtering loss increases and collection ratio decreases; collision loss is decreased with increasing magnetic field, but the sputtering loss increases and collection ratio decreases.

Keywords: AV LIS, PIC-MCC, ion extraction, sputtering

PACC: 5265, 5235