# 强流脉冲离子束辐照靶及其喷发的数值研究

吴 迪 宫 野 刘金远 王晓钢 刘 悦 马腾才

(大连理工大学三束材料改性国家重点实验室、大连 116024)(2005年6月27日收到 2005年11月13日收到修改稿)

利用拟合实测的 TEMP II 型加速器磁绝缘二极管(MID) 电压波形及其焦点附近束流密度曲线,建立了 Gaussian 分布模型 据此计算了与靶作用的离子的能量及数量,采用 Monte Carld(MC)方法计算了沉积在靶内的能量.并以此 作为热源,与流体动力学(HD)模型相结合,对不同的靶状态采用相应的状态方程,模拟计算了靶内压力演化情况; 同时对烧蚀产生的等离子体采用理想气体状态方程,结合 HD 方程组,模拟计算了喷发过程中压力的空间演化 过程.

关键词:强流脉冲离子束,Gaussian 模型,HD 方程,数值研究 PACC:5265,5225,3450D,5235T

## 1.引 言

强流脉冲离子束(IPIB)因其脉冲时间短 (~100ns),离子流密度大(~1kA/cm<sup>2</sup>)以及能量密 度高(~kJ/cm<sup>2</sup>)等性能 近 20 年来对其进行了广泛 而深入地研究1-51.其应用因为能量密度不同而异. 一般来讲,当能量密度小于1.J/cm<sup>2</sup>时,束流只是加 热靶材 靶内因出现温度差而产生应力波;在1到 10.J/cm<sup>2</sup> 之间时,靶表面将熔化,体积迅速膨胀,将 导致靶内产生激波:而当能量密度大于 101/cm<sup>2</sup> 时, 靶表面会汽化而产生高温、高压高密度等离子体,并 向真空中喷发,并且由于喷发物质的反冲作用在靶 内也会产生热激波 这将改变靶内深层物质的物理 性质.同时产生的喷发等离子体将在置于其中的基 片上生长薄膜,这与靶材到基片的距离有关,有的 地方能够成膜,而有的地方则不能<sup>[6]</sup>.因而有必要研 究 IPIB 与靶材作用的机理,找出二次离子的能量、 压力等的空间分布及其变化情况.

激光烧蚀产生的等离子体向真空中的膨胀进行 了大量的研究<sup>7—91</sup>.其中文献 7 采用流体动力学研 究方法 ,文献 8 进行了电荷分离效应的研究. IPIB 烧蚀的研究相对较少 ,文献 10 ]就烧蚀等离子体特 性进行了研究 ,但其能量沉积采用了随时间线性变 化模型.实际情形并非如此 ,为了得到真实的能量 沉积随时间的变化关系 ,我们采用 Monte Carld (MC) 方法进行了能量沉积模拟 ,并以此作为热源计算了 靶表面的能量及压力分布,将此值作为产生的等离 子体的初生态,对其向真空中膨胀进行了数值研究.

2. IPIB 辐照靶材

#### 2.1. 离子束模型及能量沉积

IPIB 由俄罗斯引进的 TEMP Ⅱ型加速器产生, 其剖面如图 1 所示. 束流引出后入射到靶材上,当 束流能量密度较大时,一般超过 10J/cm<sup>2</sup> 会产生喷 发等离子体,可以沉积到与靶平行放置的基片上进 行薄膜生长.



图 1 TEMP Ⅱ加速器 MID 及靶室剖面图

一般采用平均能量密度研究 IPIB 问题,但要找 出靶表面的瞬时能量沉积,必须采用随时间变化的 能量密度模型,根据 TEMP II 型离子加速器的 MID 产生的电压及其焦点附近离子流密度变化规律4〕, 建立 Gaussian 型分布模型,电压和离子流密度分 别为

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

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

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

$$dN = \frac{J(t)dt}{q}, \qquad (3)$$

其中 q 为单离子电荷数.在  $t \rightarrow t + dt$  时间间隔内入 射到靶材上的离子能量 E<sub>1</sub>(t)为

$$E_{i}(t) = qU(t - \Delta t), \qquad (4)$$

其中  $\Delta t = t_{01} - t_{011}$ ,为离子从产生到入射靶材上的 延迟时间.t时刻x处沉积的总能量为

$$E_{s}(x,t) = \int_{0}^{t} \frac{\mathrm{d}E(x)}{\mathrm{d}x} \mathrm{d}N , \qquad (5)$$

其中 dE/dx 为靶内距离表面 x 处沉积的能量.在几 万到百万电子伏特的能量范围内 离子与靶的作用 应该包括离子与核的弹性散射以及离子与电子的非 弹性散射作用 沉积能量为

$$dE(x,t) dx = S_n + S_e$$
, (6)  
(6)式右侧第一项为核阻止本领,第二项为电子阻止  
本领.利用 Trim 程序(MC 方法)计算能量在物质内  
的沉积.

2.2. 靶内热激波的传播

的

随着作用时间的增加,传递给靶材的能量也就 越来越多,而此能量主要沉积在表面附近,在很短的 时间内靶材吸收大量能量而使体积迅速膨胀,导致 激波的产生,一般采用流体动力学方程来描述等离 子体的喷发过程<sup>10]</sup>即

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x} v + v \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 , \qquad (7)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = 0 , \qquad (8)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + v \frac{\partial e}{\partial x} + \frac{p}{\rho} \frac{\partial v}{\partial x} = \alpha E_s(x, t), \qquad (9)$$

$$p = p(\rho, e), \qquad (10)$$

其中  $\rho$ , v, p, e 分别为密度、速度、压强及比内能,  $\alpha$ 为标识符号,有能量沉积时取1,向真空中膨胀时取 0.(10) 武根据靶材经历不同的状态采用相应的状态 方程,建立有限差分格式,可解上述方程,

#### 2.3. 等离子体向真空中喷发

通常情况下,当离子流能量密度大于 10.J/cm<sup>2</sup> 时 靶材表面会因为辐照而汽化 ,产生高温、高压及 高密度等离子体 而靶室是抽真空的 形成的等离子 体必然要向真空中喷发,等离子体密度达到 10<sup>19</sup>— 10<sup>20</sup> cm<sup>-3</sup> 量级,其平均自由程较小,可视为连续流 体[11],建立一维平面模型,将等离子体作为理想气 体处理,在喷发过程中,质量、动量及能量守恒,采用 HD 方程(7)(8)(9) 描述,只是在方程(9)的右侧  $\Pi_{\alpha} = 0$ 因为该过程没有热源,其辐射能量因等离 子体温度小(约 50-100eV)而忽略<sup>[11]</sup>.状态方程 取为

$$p = (\gamma - 1) \rho e. \qquad (11)$$

解(7)(8)(9)及(11)式可以得到等离子体喷 发规律.

### 3. 计算结果与分析

计算了 IPIB 入射 AI 靶的情形.

根据 Gaussian 模型,当入射离子束能量密度为 5.J/cm<sup>2</sup> 时,入射到靶材上的束流功率密度以及靶吸 收能量谱示于图 2 中.可以看出,随着作用时间的 增加 靶材吸收的能量愈来愈多.

当 IPIB 能量密度分别为 5J/cm<sup>2</sup> 及 10J/cm<sup>2</sup>, 束 流密度分别为 150A/cm<sup>2</sup>及 350A/cm<sup>2</sup> 时,入射 Al 靶 的束流能量沉积图谱如图 3 所示.其中 MID 阳极采 用聚乙烯镀膜,其束流中 H<sup>+</sup> 含量为 70%<sup>[12]</sup>,而 C<sup>+</sup> 含量为 30% 脉宽为 70ns. 可以看出脉冲结束后 ,二 者表层沉积能量有很大不同.对 Al 靶而言, 当沉积 能量超过 1kJ/g 时将熔化,而超过 13kJ/g 时会产生 汽化.所以低能量密度束流入射时靶材表面会液 化,而高能量密度束流入射时表面会有汽化现象发 生,会产生喷发等离子体.

取 MC 方法求得的能量沉积为热源项,解由 (7)(8)(9)(10)组成的方程组,得到靶内压力分 布图谱.当能量密度为 5J/cm<sup>2</sup>时,结果如图 4 所示. Al 靶内没有产生汽化,不会产生喷发等离子体,但 有液化现象发生 因固液相变而产生激波在靶内传 播 0.1µs 时波峰约为 8MPa. 而能量密度为 10J/cm<sup>2</sup>, 结果如图 5 所示. 靶表面开始汽化,此种情况下, 0.1µs时激波峰值近 18MPa,在 5mm 处约衰减为



图 2 束流功率密度与靶能量吸收密度图



图 3 离子流密度为 150A·cm<sup>-2</sup>和 350A·cm<sup>-2</sup>能量沉积图

10MPa.由于激波的作用,靶物质较深处(大于离子 射程)物理性质会发生变化<sup>[2]</sup>,而沉积到靶表面的离 子只能改变浅层的物理性质。



图 4 压力分布图(能量密度为 5J·cm<sup>-2</sup>)

当能量密度为 10.J/cm<sup>2</sup>时,产生了喷发等离子



图 5 压力分布图(能量密度为 10J·cm<sup>-2</sup>)

体.脉冲结束后,靶内产生的等离子体压力峰值为 80MPa,以此作为喷发等离子体的初值条件,解喷发 方程组(7)(8)(9)(11),得到压力在真空靶室中 的演化曲线,如图6所示,分别给出了5,10,30及 80µs时压力空间分布曲线.等离子体向真空中喷发 时速率达 km/s量级,而后逐渐减小.喷发等离子体 压力减小非常快,5µs时压力峰值超过1.2MPa,30µs 时已减小为0.25MPa.压力随空间距离变化也很快, 传播几个厘米时,已经接近10kPa.能量也迅速衰 减,因而在基片离靶材较近时,离子会入射到基片的 深处而不能成膜;较远时,能量较小,喷发离子不能 与基片物质吸附到一起形成薄膜.所以只有基片与 靶的距离在一定范围内时才能生长薄膜.

图 7 给出了距离靶材表面 2cm 空间处压力的时间演化图谱.在约 30µs 时迅速达到极大值,而后又迅速衰减,这说明大量离子在某时刻迅速到达空间 某点,因而 IPIB 有快速成膜的特点.





图 7 等离子体空间 2cm 处压力时间演化图

### 4.结 论

根据模拟计算结果,得出如下结论:

1. 束流中的离子本身只改变靶材浅层物理性
 质,而 IPIB 产生的激波则改变深层性质.

2.随着 IPIB 能量密度的增加, 靶内沉积的能量 也增加, 表面处增加得较快而且沉积较多的能量. 因而 IPIB 入射 Al 靶时, 液化与汽化均从表面开始.

3.激波在靶内传播时衰减得比较缓慢,随着入射的 IPIB 束流密度的增加压力峰值亦增加.

4.喷发等离子体的压力在真空中传播时衰减得 较快.

5.大量的喷发物质几乎同时到达空间某处,因 而 IPIB 辐照成膜具有速度快的特点.

- [1] Piekoszewski J, Werner Z, Szymczyk W 2001 Vacuum 63 475
- [2] Zhao W J, Yan S, Le X Y, Han B X, Xue J M, Wang Y G 2000 Nuclear Technique 23 689 (in Chinese)[赵渭江、颜 莎、乐小 云、韩宝玺、薛建明、王宇钢 2000 核技术 23 689]
- [3] Yatsui K , Kang X D , Sonegawa T , Masugata K 1994 Phys. Plasmas 1 1730
- [4] Wu D, Gong Y, Liu J Y, Wang X G 2005 Acta Phys. Sin. 54
  1636 (in Chinese) [吴 迪、宫 野、刘金远、王晓钢 2005 物 理学报 54 1636]
- [5] 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]

- [6] Mei X X, Xu J, Ma T C 2002 Acta Phys. Sin. 51 1875 (in Chinese)[梅显秀、徐 军、马腾才 2002 物理学报 51 1875]
- [7] Ho J R , Grigoropoulos C P , Humphrey J A C 1996 J. Appl. Phys.
  79 7205
- [8] Mora P 2003 Phys. Rev. Lett. 90 185002-1
- [9] Ellegaard O, Nedelea T, Schou J, Urbassek H M 2002 Appl. Surf. Sci. 197-198 229
- [10] Kang X D , Masugata K , Yatsui K 1994 Jpn. J. Appl. Phys. 33 1155
- [11] Singh R K , Narayan J 1990 Phys. Rev. B 41 8843
- [12] Zhu X P, Lei M K, Dong Z H, Ma T C 2003 Rev. Sci. Instrum. 74 47

## Numerical study of dynamic effects and evaporation of target material under irradiation of intense pulsed ion beam

Wu Di Gong Ye Liu Jin-Yuan Wang Xiao-Gang Liu Yue Ma Teng-Cai

( State Key Laboratory of Materials Modification by Laser, Ion and Electron Beams, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China) ( Received 27 June 2005; revised manuscript received 13 November 2005)

#### Abstract

Gaussian distribution models of voltage wave form of MID of TEMP [] accelerator and IPIB density near the MID focus region have been built according to the results of experiments. The energy deposited in the target were calculated by using Monte Carlo method based on these models. Then we use them as thermal sources in hydrodynamic equations , and simulate the evolution process of pressure transported in target based on different kinds of state equations of material. The pressure evolution profile of plasma generated by IPIB irradiated Al target with high enough beam energy density has also been calculated by combining the ideal gas model of plasma and HD equations.

**Keywords**: intense pulsed ion beam , Gaussian model , hydrodynamic equations , numerical method **PACC**: 5265 , 5225 , 3450D , 5235T