

强流脉冲离子束烧蚀等离子体向背景 气体中喷发的数值研究

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) (大连轻工业学院信息科学与工程学院, 大连 116034)

(2006 年 2 月 17 日收到, 2006 年 4 月 17 日收到修改稿)

强流脉冲离子束辐照靶材产生烧蚀等离子体向背景气体中传播与向真空中传播不同, 包括喷发等离子体与背景气体的相互作用. 本文建立了该过程的二维气体动力学模型, 计算了等离子体向压强范围从 10^{-6} 大气压到大气压背景气体中传播时的情况. 结果表明, 背景气体压强不同时, 等离子体传播的现象也不相同. 向真空中可以自由膨胀, 向大气压中膨胀受限. 当背景气压在千分之一大气压左右时, 等离子体在背景气体中形成“雪犁”状、羽状等离子体出现快速和慢速传播分离现象.

关键词: 强流脉冲离子束, 等离子体, 喷发过程, 二维数值模拟

PACC: 5225D, 6180J, 5235T, 5265

1. 引 言

强流脉冲离子束 (IPIB) 与强脉冲电子束、激光束一样, 近 20 年来在材料领域越来越受到重视^[1-6]. 它在极短的时间内 (几十 ns 到 $1 \mu\text{s}$) 把大量的能量 ($\sim 100 \text{ J/cm}^2$) 传递给靶材, 使靶材表面加热、熔化甚至汽化. 可以利用它进行材料表面改性、薄膜生长以及进行纳米粉的制备^[7-12]. 靶室中的背景气体对改性的结果影响很大, 有必要研究 IPIB 烧蚀等离子体向背景气体中的膨胀行为^[3]. IPIB 产生的等离子体向真空中的膨胀, 文献 [6, 12] 分别从理论和实验上作了研究. 激光产生的等离子体向真空和背景气体中膨胀的研究也有报道^[13-16], 文献 [16] 在实验中采用高速相机照相方法研究了激光诱导等离子体向背景气体中的膨胀. 但 IPIB 产生的等离子体向背景气体中的膨胀行为研究较少. 我们采用数值方法模拟计算了 IPIB 产生等离子体向不同背景压强下的膨胀. 与向真空中的膨胀不同, 等离子体向背景气体中膨胀情形比较复杂. 包括等离子体与背景气体的能量、动量交换, 使等离子体减速、衰减、扩散、产生激波等现象. 而且背景气体压强不同时, 产生的现象也不相同.

2. 物理模型

IPIB 与靶材相互作用时, 如果能量密度大于烧蚀阈值, 靶材表面会汽化, 产生高温、高压和高密度的喷发等离子体, 其喷发的方向由靶面烧蚀形状确定^[17]. 等离子体的粒子密度很高, 达到 $10^{19}/\text{cm}^3$, 平均自由程为微米量级, 此时可以将其视为连续流体^[18]. 可以向真空和低气压背景气体中自由膨胀. 当背景气体压强增加时, 等离子体与环境气体强烈地相互渗透、相互贯穿. 等离子体膨胀动力学由等离子体及背景气体共同确定, 其控制方程应为气体动力学质量、动量和能量守恒方程, 即

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \mathbf{V}) = - \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial (\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \mathbf{V}) = - \frac{\partial p}{\partial y}, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \mathbf{V} \right] \\ & = - \frac{\partial (up)}{\partial x} - \frac{\partial (vp)}{\partial y}. \end{aligned} \quad (4)$$

将等离子体视为理想气体, 满足状态方程^[13]

$$p = \rho (\gamma - 1) e, \quad (5)$$

其中 ρ 为粒子空间质量密度, p , e , γ 分别为压强、

比内能及比热容比, u, v 分别为粒子在 x 和 y 方向上的速度分量. 利用 FORTRAN 语言, 在 Compaq Visual Fortran 6.5 下编程, 采用有限差分方法解方程组(1)–(5), 采用 MATLAB 进行数据处理.

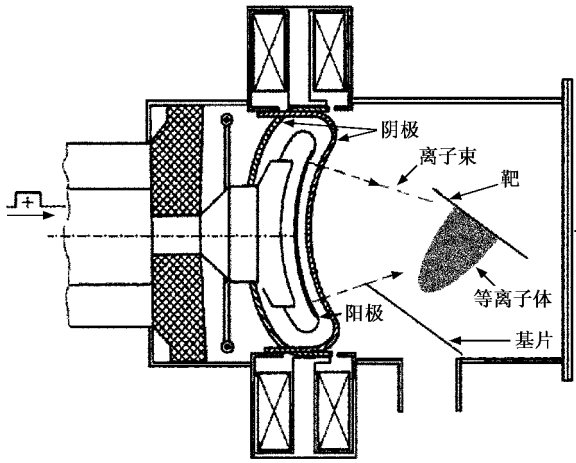


图1 TEMP 加速器 MID 及靶室截面图

3. 数值结果与讨论

强流脉冲离子束与 Ti 靶作用时, 脉冲(70 ns)结束后不再产生等离子体^[17]. 尔后等离子体将喷发, 是微秒数量级的. 产生喷发等离子体的烧蚀宽度为 12 mm, 在此范围内, 取等离子体密度 $3.39 \times 10^{19} / \text{cm}^3$, 并设其均匀分布在靶的烧蚀面内, 初始温度取 Gaussian 分布: $T = T_0 \exp(-\frac{y^2}{2\sigma})$, 其中 $T_0 = 1.29 \times 10^4 \text{ K}$, $\sigma = 3.7 \text{ mm}$, 在边缘等离子体喷发方向与靶面法向夹角取 $\theta = 8^\circ$, x 方向速度分量 $v_{0x} = v_0 \cos\theta$, y 方向速度分量 $v_{0y} = v_0 \sin\theta$, v_0 为 $5.66 \times 10^5 \text{ cm/s}$, 未电离气体 γ 一般取 $5/3$, 此处对等离子体取 1.2 ^[12].

将这些数据代入等离子体膨胀动力学方程, 模拟计算背景气压由 10^{-1} Pa 变化到 10^5 Pa 范围内的情

况. 图 2 至图 6 分别给出了背景气体压强为 10^{-1} Pa , 10 Pa , 10^2 Pa , 10^3 Pa , 及 10^5 Pa 时等离子体传播图形. 从图 2 可见向 10^{-1} Pa 背景气体中传播时可以看成是向真空中的自由传播, 毫无阻挡. 当压强增加达到 10^{-1} Pa 时, 由图 3 可以看出等离子体在背景气体中产生扰动, 但影响不是很大. 当压强增为千分之一时, 情况发生了显著变化, 等离子体在背景气体中形成“雪梨”状, 由图 4 清晰可见. 此时等离子体羽形成快速移动部分和在近表面慢速移动部分, Harilal 等通过照相的方法研究激光辐照时观察到了此种现象^[16]. IPIB 烧蚀等离子体在此种条件下也会产生该现象. 等离子体与背景气体发生强烈的相互作用, 二者相互贯穿, 等离子体在界面处被减速, 这应该是与背景气体相互作用的结果, 等离子体在此将动量和能量传递给背景气体, 导致其自身的动量和能量减少, 而背景气体获得了能量和动量, 因为其密度比等离子体的要小, 并且在此产生激波, 因而形成了快速移动部分. 图 7 中作出了此种情况的压强等势图, 前沿是弦月状的, 后面是椭球状的.

激光烧蚀时, 只限于靶面上一点, 而 IPIB 烧蚀斑痕面积较大, 其喷发方向性要好一些, 并且产生的等离子体要多, 因而与激光相比在基片上成膜的面积大、效率高^[19].

图 8 画出了等离子体喷发 $5.0 \mu\text{s}$ 时的速度矢量空间分布图. 当等离子体传播到某一轴向位置时, 离轴越远其速度越小, 但径向速度分量越大, 传播时等离子体离靶面越远其速度的径向分量越小. 所以等离子体喷发具有良好的方向性. 压强再增加到 10^3 Pa 时, 如图 5 所示, 看不到等离子体羽的分离现象. 当压强达到 10^5 Pa 时, 如图 6 所示, 等离子体移动受限, 其前沿移动速度明显比其他情况慢, 这一点可以从图中清楚看出.

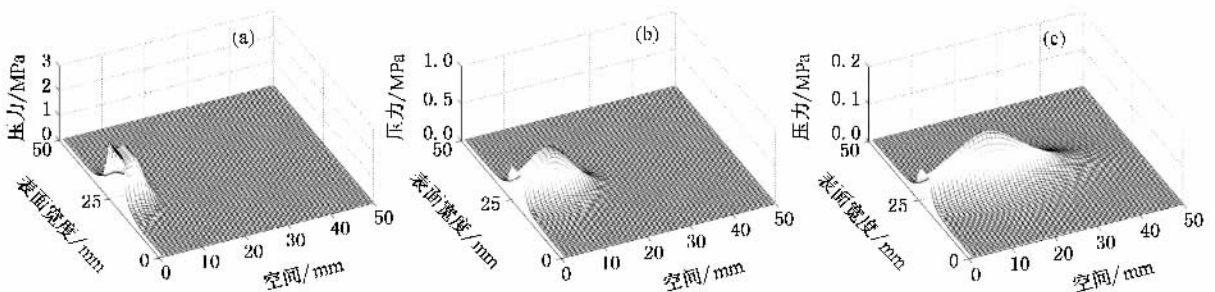


图2 IPIB 烧蚀等离子体向真空中喷发压强时空演化图 (a) 脉冲结束后 $2.06 \mu\text{s}$ (b) $3.64 \mu\text{s}$ (c) $6.97 \mu\text{s}$

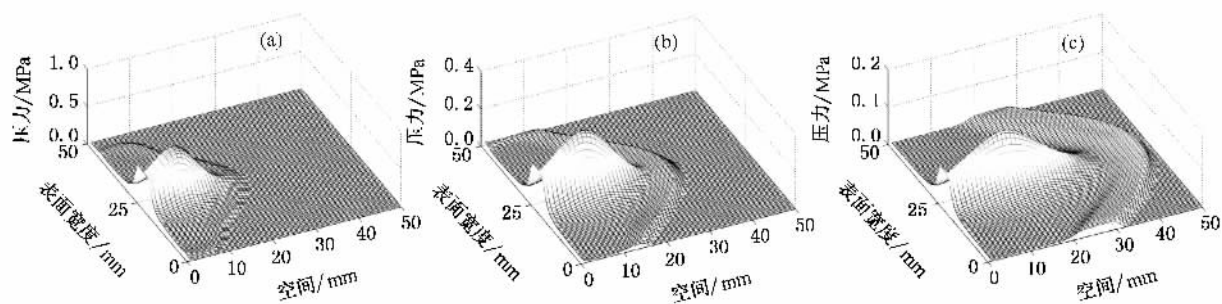


图3 IPIB烧蚀等离子体向 10 Pa 背景气体中喷发压强时空演化图 (a)脉冲结束后 $3.64\ \mu\text{s}$ (b) $5.00\ \mu\text{s}$ (c) $6.97\ \mu\text{s}$

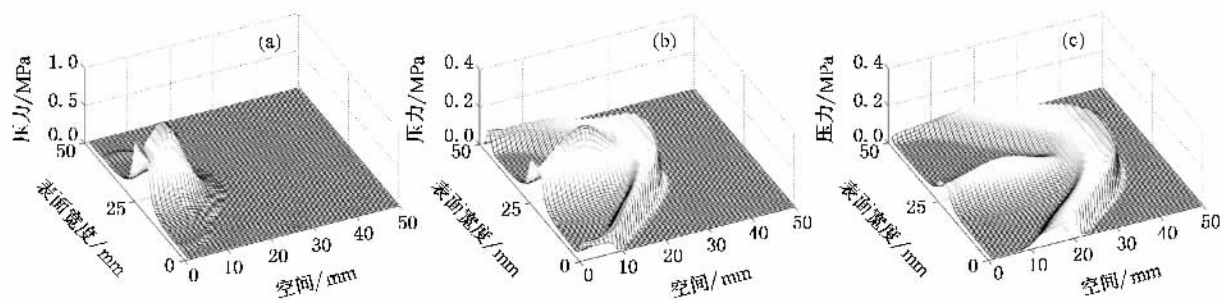


图4 IPIB烧蚀等离子体向 10^2 Pa 背景气体中喷发压强时空演化图 (a)脉冲结束后 $3.64\ \mu\text{s}$ (b) $5.00\ \mu\text{s}$ (c) $6.97\ \mu\text{s}$

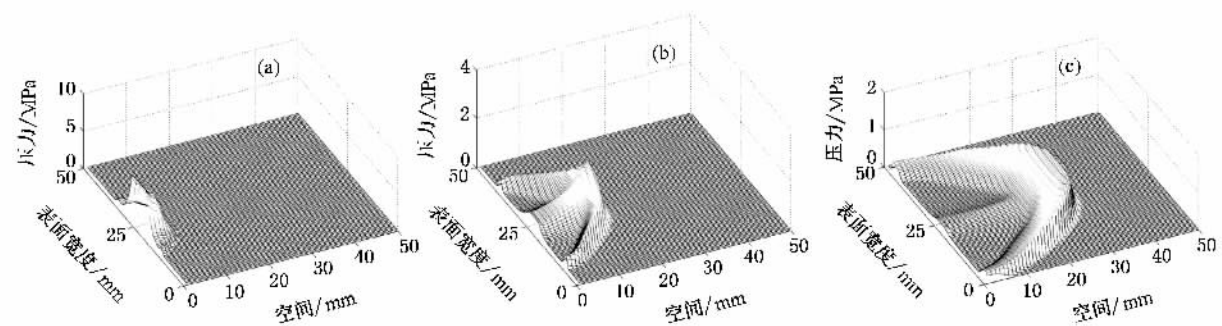


图5 IPIB烧蚀等离子体向 10^3 Pa 背景气体中喷发压强时空演化图 (a)脉冲结束后 $1.48\ \mu\text{s}$ (b) $3.64\ \mu\text{s}$ (c) $6.97\ \mu\text{s}$

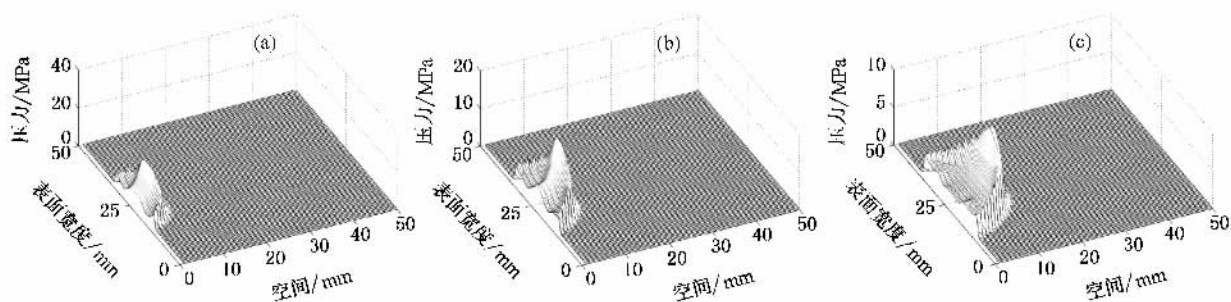


图6 IPIB烧蚀等离子体向 10^5 Pa 背景气体中喷发压强时空演化图 (a)脉冲结束后 $2.30\ \mu\text{s}$ (b) $3.64\ \mu\text{s}$ (c) $6.97\ \mu\text{s}$

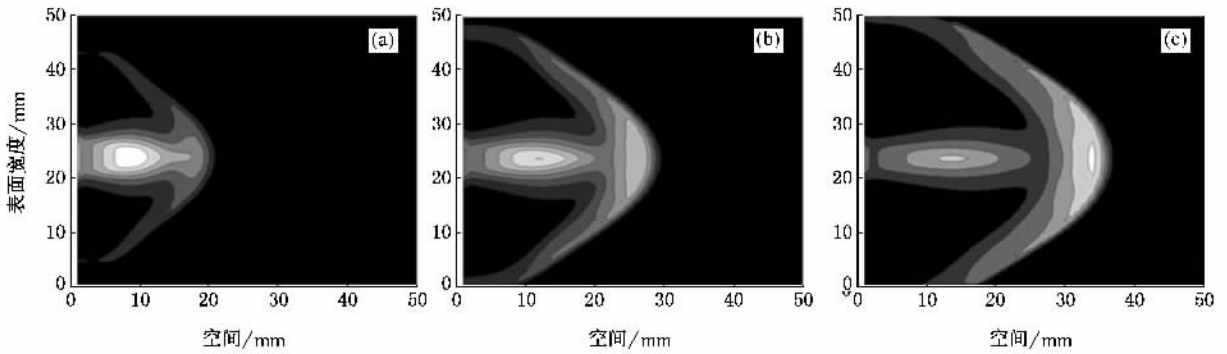


图 7 IPIB 烧蚀等离子体向 10^2 Pa 背景气体中喷发压强等势图 (a)脉冲结束后 $3.64 \mu\text{s}$ (b) $5.00 \mu\text{s}$ (c) $6.31 \mu\text{s}$

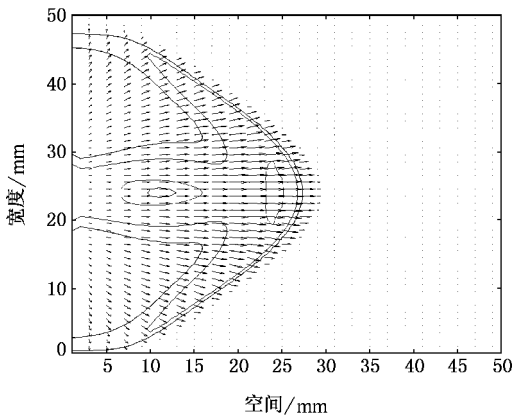


图 8 脉冲结束后 $5.0 \mu\text{s}$ 时等离子体向 10^2 Pa 背景气体中喷发等势图及速度矢量图

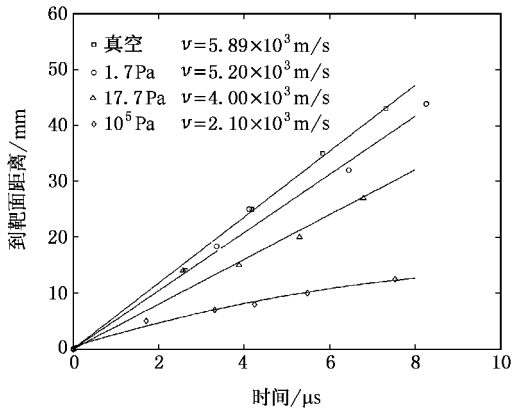


图 9 几种不同背景气压下等离子体传播距离与时间的关系

图 9 给出了不同背景压强下等离子体传播最远距离与传播时间的关系. 其中的速率 v 取的是等离子体喷发前沿到达某一位置时的平均速率, 该值比等离子体中心移动速率要大. 对 10^5 Pa 下传播情况作了二次曲线拟合, 其他情况作了线性拟合. 可以看出, 等离子体前沿在真空中传播得最快, 在大气压下最慢; 背景气体压强越小, 同一时刻喷发等离子体 (非背景气体) 传播得越远.

4. 结 论

根据建立的二维 IPIB 烧蚀等离子体向背景气体中喷发模型计算得到下列结果:

1. 背景气体压强为 10^{-1} Pa 时可以将其视为真空, 烧蚀等离子体在此环境中可以自由膨胀;
2. 背景气体压强达到 10^5 Pa 时, 等离子体喷发受限;
3. 当背景气体压强在 10^2 Pa 左右时, 喷发等离子体在背景气体中产生激波, 出现“雪梨”状现象, 等离子体羽分离成前沿快速移动和近表面慢速移动部分;
4. 背景气体压强越低, 喷发等离子体传播得越快, 相同时间内传播的距离也越远.

[1] Meli C A, Grabowski K S, Hinshelwood D D et al 1995 *J. Vac. Sci. Technol. A* **13** 1182
 [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] Rej D J, Davis H A, Remnev G E et al 1997 *J. Vac. Sci. Technol. A* **15** 1089
 [4] Remnev G E, Isakov I F, Opekounov M S et al 1997 *Surf. Coat. Technol.* **96** 103

- [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] Zhang J L , Tan C , Wang W C , Wang Y N 2004 *Vacuum* **73** 673
- [7] Davis H A , Johnston G P , Olson J C , Rej D J , Waganaar W J *et al* 1998 *J Appl. Phys.* **85** 713
- [8] Le X Y , Zhao W J , Yan S *et al* 2002 *Surf. Coat. Technol.* **158-159** 14
- [9] Shulov V A , Nochovnaya N A 1999 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **148** 154
- [10] Struts V K , Zakoutaev A N , Matvienko V M , Petrov A V *et al* 2002 *Surf. Coat. Technol.* **158-159** 494
- [11] Jiang W H , Ide K , Kitayama S *et al* 2001 *Jpn. J. Appl. Phys.* **40** 1026
- [12] Yatsui K , Kang X D , Sonogawa T *et al* 1994 *Phys. Plasmas* **1** 1730
- [13] Ho J R , Grigoropoulos C P , Humphrey J A C 1996 *J. Appl. Phys.* **79** 7205
- [14] Mora P 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 185002
- [15] Ellegaard O , Nedelea T , Schou J , Urbassek H M 2002 *Appl. Surf. Sci.* **197-198** 229
- [16] Harilal S S , Bindhu C V , Tillack M S *et al* 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 2380
- [17] Wu D , Gong Y , Liu J Y , Wang X G *et al* 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 398 (in Chinese) [吴 迪、宫 野、刘金远、王晓钢等 2006 物理学报 **55** 398]
- [18] Singh R K , Narayan J 1990 *Phys. Rev. B* **41** 8843
- [19] Wood B P , Henins I , Reass W A *et al* 1995 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **96** 429

Numerical research on intense pulsed ion beam ablation plasma expansion into ambient gases

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

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

2 \times Dalian Institute of Light Industry , Dalian 116034 , China)

(Received 17 February 2006 ; revised manuscript received 17 April 2006)

Abstract

The mechanisms are different for intense pulsed ion beam ablation plasma expanding into ambient gas of different pressure or into vacuum. The former is complicated by the interaction between plasma and the ambient gas. The 2D gas dynamical model has been built to describe the process , and the plasma expansion into ambient gas of pressures from 10^{-6} atmosphere to 1 atmosphere have been calculated. The results show that the phenomena of plasma expanding into ambient gases vary as the pressure changes. It can expand into vacuum freely , but into atmosphere its movement is confined. And the ejection into ambient gas of one thousandth atmosphere or so is special , the ' snowplow ' phenomenon is observed and the plume plasma splits into fast- and slow-moving parts.

Keywords : intense pulsed ion beam , plasma , ejection process , two-dimension numerical method

PACC : 5225D , 6180J , 5235T , 5265