

强流脉冲离子束辐照双层靶能量 沉积的数值模拟^{*}

宫野^{1)†} 张建红¹⁾ 王晓东¹⁾ 吴迪^{1)‡} 刘金远¹⁾
刘悦¹⁾ 王晓钢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) 大连工业大学信息科学与工程学院, 大连 116034)

(2007 年 8 月 6 日收到, 2008 年 2 月 19 日收到修改稿)

利用拟合实验测得的 TEMP II 型加速器磁绝缘二极管电压波形及其焦点附近束流密度曲线, 建立了 Gauss 分布模型. 采用 Monte Carlo 方法研究了强流脉冲离子束与铝材镀有不同厚度金膜的双层靶(金膜与铝材合称为双层靶)之间的相互作用, 模拟了能量沉积的演化过程和随不同金膜厚度的变化情况. 对脉冲离子束强化薄膜粘结性进行了探讨.

关键词: 强流脉冲离子束, 双层靶, 能量沉积, Monte Carlo 方法

PACC: 5225, 5265

1. 引 言

强流脉冲离子束(IPIB)加速器能够产生大面积、高能量、强束流的脉冲型离子束, 其功率密度可达 $10^9 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$ 量级. 因此, 它被广泛应用于材料表面改性、薄膜生长以及纳米粉制备等领域^[1-4]. IPIB 加速器中的磁绝缘二极管(MID)是实现这一技术的关键^[5]. 当 MID 阳极采用聚乙烯涂层时, 束流由 70% 的 H^+ 和 30% 的 C^+ 构成. 在极短时间内, 这些高能离子与靶材发生作用, 可使靶材表面迅速熔化或汽化. 因此, IPIB 可起到对材料表面改性的作用.

随着离子的注入, 高能离子束引起涂层原子与基体材料原子之间相互渗透和混合, 在界面区形成一个过渡层, 大大增强了表面薄膜的结合力. 有人把这个过程比喻为“离子束缝合”^[6]. 目前, 国内针对 IPIB 提高薄膜粘结性的研究工作还很少.

当 IPIB 辐照双层靶时, 离子能量会沉积在靶材内的某一深度处, 并呈现出规律性的空间分布. 沉积深度与分布状态与薄膜的厚度直接相关. 尤为重要是, 这种能量分布会影响到靶内两种材料的熔化

或汽化过程, 并导致界面物质结合强度发生变化.

本文结合三束材料改性国家重点实验室从俄罗斯引进的 TEMP II 型加速器实测的 MID 的加速电压波形及法拉第杯检测到的 MID 焦点处离子流密度波形, 对其进行拟合得到 Gauss 分布模型, 采用 Monte Carlo 方法研究了 IPIB 与铝材镀有不同厚度金膜的双层靶(金膜与铝材合称双层靶)之间的相互作用, 模拟了能量沉积的演化过程和随不同金膜厚度的变化情况^[7].

2. 物理模型及模拟方法

2.1. 脉冲能量模型

IPIB 的主要参数包括 MID 电压、离子流密度、束流离子种类以及脉冲宽度. 当 MID 阳极采用聚乙烯涂层时, 束流离子由 H^+ 和 C^+ 构成. 相同能量下, 由于 H^+ 射程比 C^+ 的射程大, 所以 C^+ 进入靶材的深度较浅, 而 H^+ 可以进入靶材内部较深的区域. 因此, 离子束组成成分和各自份额的不同将会影响到能量沉积的情况. 离子流密度和 MID 电压是决定靶

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10605008, 10010760807, 10160420799)资助的课题.

[†] E-mail: gongye@dlut.edu.cn

内能量沉积的主要因素,离子流密度直接决定到达靶材的离子数,而 MID 电压则决定产生的离子能量大小.离子流密度越大,电压越高,单位时间内脉冲离子束沉积到靶材的能量也就越高.

由于 IPIB 与靶材之间相互作用时间通常仅为几十纳秒.在这么短的时间内,通过实验方法来研究靶材内部的变化情况是很困难的,因此有必要建立相关模型进行数值模拟研究.

为研究能量沉积的演化过程,需要建立随时间变化的能量密度模型^[8].根据实验测得的 MID 的电压及其焦点附近离子流密度波形如图 1 所示,我们采用最小二乘法进行曲线拟合,得到 Gauss 型分布模型,拟合得到的曲线如图 2 所示. MID 电压 U 和离子流密度 J 分别为

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

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

式中 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 和 σ_2^2 分别为 MID 电压和束流密度时间分布方差.

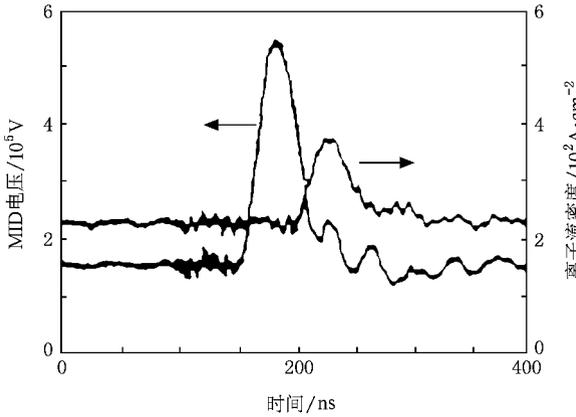


图 1 MID 电压及离子流密度随时间的变化关系

入射到靶上的束流功率密度 $P(t)$ 如图 3 所示. $P(t)$ 可表示为

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

式中 $\Delta t = t_{0J} - t_{0U}$ 是离子从 MID 出口后到达靶上的时间(延迟时间).

在 $t \rightarrow t + dt$ 时间内, 设入射到靶上的离子数为 dN , 则

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

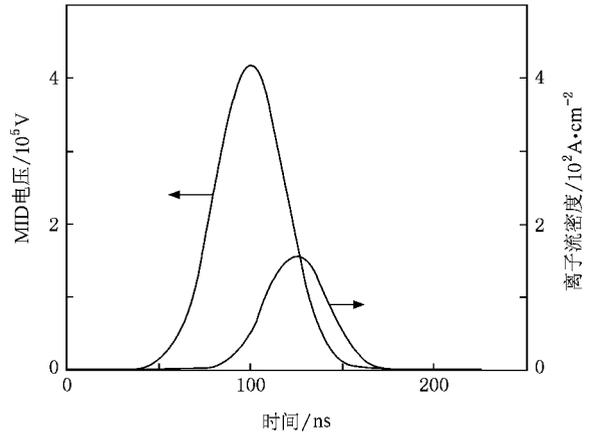


图 2 MID 电压和离子流密度的拟合曲线

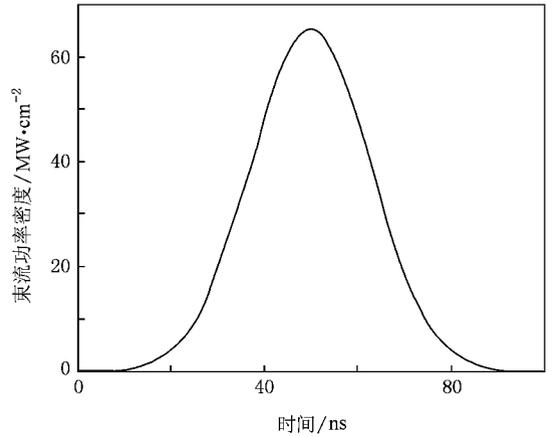


图 3 束流功率密度脉冲曲线

式中 q 为单离子电荷数.

在对离子束能量沉积的计算中,我们采用取平均值的方法,利用积分中值定理有

$$\begin{aligned} dN &= \int_{t-dt}^t \frac{J(t) \lambda dt}{q} = \frac{\bar{J}}{q} dt \\ &\cong \frac{J(t) \lambda dt}{q}. \end{aligned}$$

本文采用 Monte Carlo 方法模拟计算离子束能量沉积,首先考虑的是单个离子的情形.在 $t \rightarrow t + dt$ 时间内,入射到靶上单个离子的能量(动能)可表示为

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

入射到靶上单个离子沿纵向深度 x 沉积的能量分布为 $\frac{dE(x)}{dx}$.

设靶表面处 $x = 0$, 在 $t \rightarrow t + dt$ 时间内,有 dN

个离子与靶材相互作用,则 x 处沉积能量为

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

t 时刻 x 处沉积总能量为

$$E_s(x, t) \approx \int_0^t \frac{dE(x)}{dx} \frac{K(t)}{q} dt. \quad (7)$$

2.2. Monte Carlo 模拟

在模拟能量沉积时,我们采用国际上通用的 Trim 程序(Monte Carlo 方法).通过计算机模拟跟踪一定数量入射粒子的运动,粒子的位置、能量损失和次级粒子的各种参数都在跟踪过程中保存下来.最后进行统计处理,得到各种所需物理量的期望值和相应的统计误差.在计算过程中采用连续慢化假设,即入射离子与靶原子核的碰撞采用两体碰撞来描述.这一部分主要导致入射离子运动轨迹的曲折,能量损失来自于弹性能量损失部分,在两次两体碰撞之间认为入射离子与材料中的电子作用连续均匀地损失能量.两次两体碰撞之间的距离以及碰撞后的参数通过随机抽样得到.

3. 模拟结果及讨论

采用 Gauss 脉冲分布模型,在 IPIB 的束流离子由 70% 的 H^+ 和 30% 的 C^+ 组成、脉冲宽度为 70 ns、峰值电压为 300 kV、离子流密度峰值分别为 100 和 300 $A \cdot cm^{-2}$ 的情况下,对铝材镀有不同厚度金膜的 IPIB 能量沉积过程进行了数值模拟.模拟结果如图 4—图 11 所示.

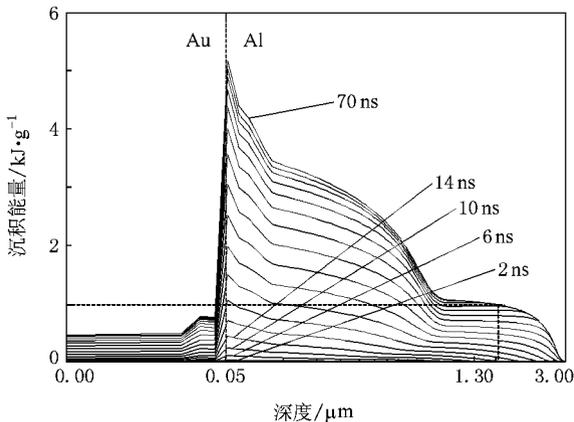


图 4 离子流密度为 100 $A \cdot cm^{-2}$ 、金膜厚度为 0.05 μm 时, IPIB 能量沉积的演化

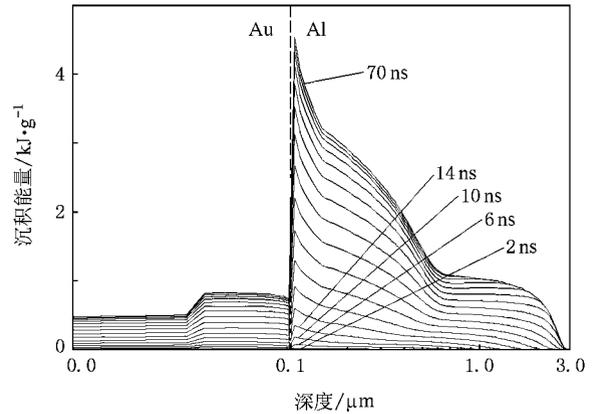


图 5 离子流密度为 100 $A \cdot cm^{-2}$ 、金膜厚度为 0.1 μm 时, IPIB 能量沉积的演化

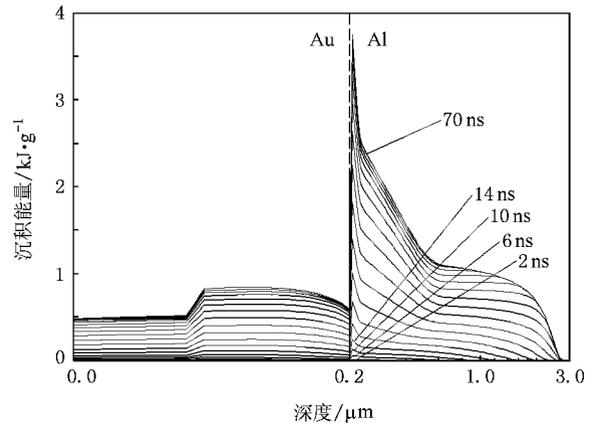


图 6 离子流密度为 100 $A \cdot cm^{-2}$ 、金膜厚度为 0.2 μm 时, IPIB 能量沉积的演化

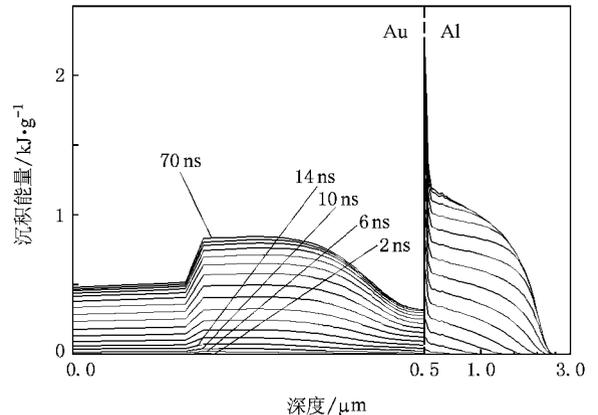


图 7 离子流密度为 100 $A \cdot cm^{-2}$ 、金膜厚度为 0.5 μm 时, IPIB 能量沉积的演化

当离子流密度为 100 $A \cdot cm^{-2}$ 时,束流入射到靶

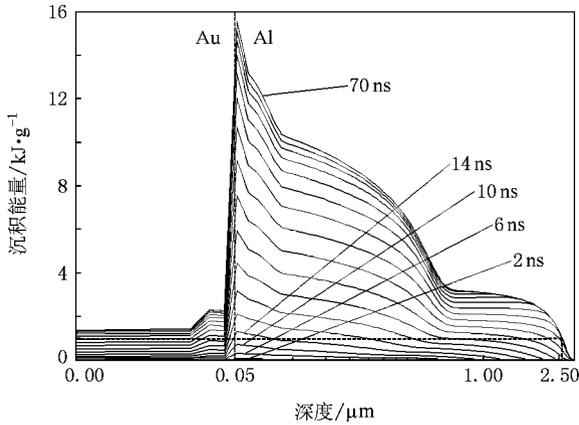


图 8 离子流密度为 $300 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 、金膜厚度为 $0.05 \mu\text{m}$ 时, IPIB 能量沉积的演化

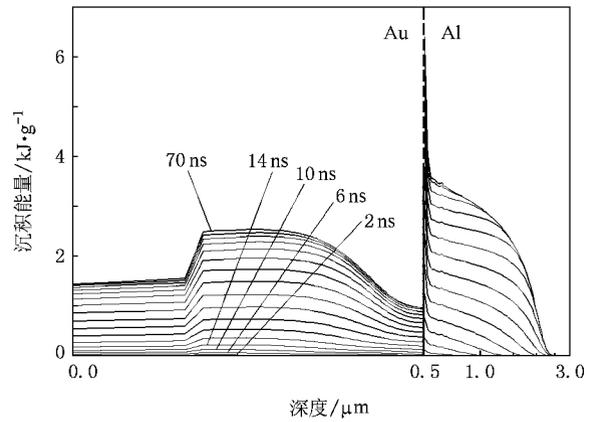


图 11 离子流密度为 $300 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 、金膜厚度为 $0.5 \mu\text{m}$ 时, IPIB 能量沉积的演化

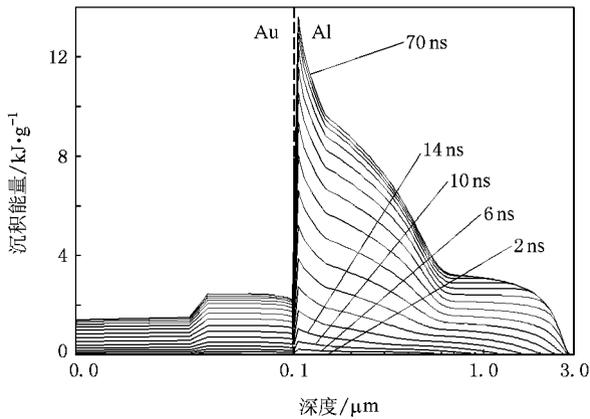


图 9 离子流密度为 $300 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 、金膜厚度为 $0.1 \mu\text{m}$ 时, IPIB 能量沉积的演化

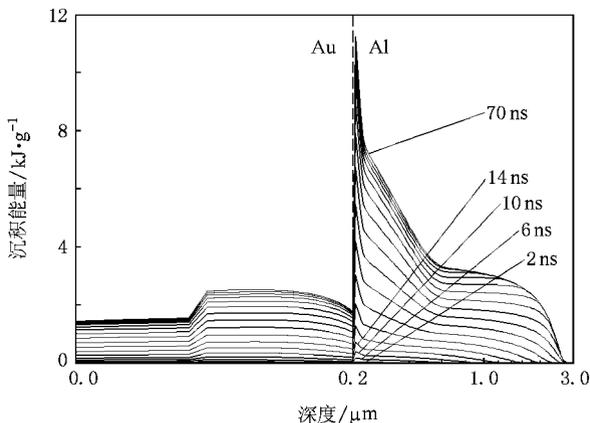


图 10 离子流密度为 $300 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 、金膜厚度为 $0.2 \mu\text{m}$ 时, IPIB 能量沉积的演化

生熔化,金膜厚度大于 $0.05 \mu\text{m}$ 时熔化深度可达 $1.3 \mu\text{m}$ 以上.由图 4—图 7 可以看出,随着金膜厚度的增加,铝材内所沉积的能量逐渐降低,在金膜与铝材交界处的沉积能量也在降低.同时,随着金膜厚度的增加,在金膜内沉积的总能量增加,但在单位厚度内沉积的能量先增加,尔后逐渐减少.由图 4—图 7 还可以看出,在金膜与铝材交界处沉积的能量最高,致使两种金属熔化,两种原子相互渗透混合,形成一个过渡的混合区.这就大大增强了薄膜的粘结性.

当离子流密度增加到 $300 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 时,能量沉积情况如图 8—图 11 所示.

将图 8—图 11 与图 4—图 7 相对照可以看出,离子流密度增加到 $300 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 时的能量沉积情形与离子流密度为 $100 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 的情形类似,即随着金膜厚度增加,铝材内沉积的能量逐渐降低,金膜内沉积的总能量增加.当增加离子束流密度时,离子数量增加,在同一位置上沉积的能量增大,尤其在金膜与铝材交界处表现得最为明显.此时熔化深度增加可达 $2.5 \mu\text{m}$ 以上.

4. 结 论

当束流离子由 70% 的 H^+ 和 30% 的 C^+ 组成时,从上述模拟结果及分析可得到如下结论:

- 1) 随着金膜厚度增加,铝材内沉积的能量逐渐降低,在金膜与铝材交界处沉积的能量也在降低.
- 2) 当增加离子束流密度时,离子数量增加,在同一位置上沉积的能量也增大,尤其在金膜与铝材交界处表现得最为明显.此时熔化深度也增加.

材的深度可达 $3 \mu\text{m}$ 左右(见图 4).此时,靶表面会发

3 靶表面沉积能量较少,纵向深度沉积能量较多.随着金膜厚度的增加,在金膜内沉积的总能量增加,但在单位厚度内沉积的能量先增加,尔后逐渐减少.

由此可见,可以通过改变膜厚和离子束流密度、MID 电压等方法,控制沉积能量的大小,从而实现对接合处紧密程度的控制.

- [1] Meli C A , Grabowski K S , Hinshelwood D D , Stephanakis S J , Rej D J , Waganaar W J 1995 *J. Vac. Sci. Technol. A* **13** 1182
- [2] Le X Y , Zhao W J , Yan S , Han B X , Xiang W 2001 *High Power Laser and Particle Beams* **13** 456 (in Chinese) [乐小云、赵渭江、颜 莎、韩宝玺、向 伟 2001 强激光与粒子束 **13** 456]
- [3] Zhu X P , Lei M K , Ma T C 2003 *Nucl. Instrum. Meth. B* **211** 69
- [4] Zhou N , Niu S L , Ding S , Qiu A C 2000 *High Power Laser and Particle Beams* **12** 249 (in Chinese) [周 南、牛胜利、丁 升、邱爱慈 2000 强激光与粒子束 **12** 249]
- [5] Zhu X P , Lei M K , Dong Z H , Ma T C 2003 *Rev. Sci. Instrum.* **74** 47
- [6] Hu C X 2001 *A Manual on Surface Treatment Technology* (Beijing : Beijing University of Technology Press) (in Chinese) [胡传 2001 表面处理技术手册 (北京 : 北京工业大学出版社)]
- [7] Kashine K , Yazawa M 2002 *Jpn. J. Appl. Phys.* **41** 4014
- [8] 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]

Numerical simulation on the energy deposition of double-layer target irradiated by intense pulsed ion beam *

Gong Ye^{1)†} Zhang Jian-Hong¹⁾ Wang Xiao-Dong¹⁾ Wu Di¹⁾²⁾ Liu Jin-Yuan¹⁾
Liu Yue¹⁾ Wang Xiao-Gang¹⁾ Ma Teng-Cai¹⁾

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

2) *School of Information Science and Engineering , Dalian University of Industry , Dalian 116034 , China*)

(Received 6 August 2007 ; revised manuscript received 19 February 2008)

Abstract

Gaussian distribution models of voltage wave form of magnetically insulated diode (MID) of TEMP II accelerator and intense pulsed ion beam (IPIB) density near the MID focus region have been built according to the results of experiments. Interaction of IPIB with a double-layer aluminum target coated by a thin film of gold has been studied using Monte Carlo method. The spatial and temporal evolution of deposited energy is obtained , the states of deposited energy for the different gold thickness are discussed , and the enhanced adhesion at interfaces by IPIB is investigated.

Keywords : intense pulsed ion beam , double-layer target , energy deposition , Monte Carlo method

PACC : 5225 , 5265

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10605008 , 10010760807 , 10160420799).

† E-mail : gongye@dlut.edu.cn