

文章编号: 1001-4322(2001)04-0456-05

强脉冲离子束辐照金属材料表面热力学效应计算

乐小云, 赵渭江, 颜 莎, 韩宝玺, 向 伟

(北京大学 重离子物理研究所, 北京 100871)

摘 要: 简要讨论了强脉冲离子束与金属靶材料相互作用的理论模型, 以此为基础应用数值计算的方法模拟计算了离子能量为 1.0 MeV 和 300 keV, 束流密度分别为 10 A/cm², 50 A/cm² 和 100 A/cm² 的质子束与金属铝靶材料相互作用时的热力学效应, 给出了铝在辐照后内部的温度分布、温度梯度分布, 以及温度变化速率(加热速率与冷却速率)、热激波的产生与传播过程及应力等模拟计算结果。

关键词: 强脉冲离子束; 热力学效应; 数值模拟; 材料表面改性

中图分类号: O 571.33 **文献标识码:** A

强脉冲离子束(IPB)技术是在研究轻离子惯性约束核聚变的过程中于七十年代末、八十年代初发展起来的^[1,2]。近年在其他领域,特别是在金属材料的表面改性、镀膜、纳米粉末的制造等方面显示良好的应用前景^[3]。IPB与激光、电子束等其他高能粒子束相比,具有明显特点^[4]:(1)IPB在拥有大束斑(约100cm²)的同时其能量在时间和空间上高度集中,如:材料改性常用300keV质子束的平均射程仅约1μm;(2)IPB具有极高的能量沉积耦合效率,几乎达到100%,其总转换效率(从电源插座到出束)可超过10%。

迄今为止,已有若干小组开展了对10⁴~10⁶A/cm²的超高强度强脉冲离子束与物质相互作用的数值模拟计算^[5~7],这种强度的IPB可进行等离子体研究或者模拟X射线、辐照效应,但不适用于材料表面改性应用。材料表面改性技术要求离子能量在几百keV,流强一般从几十到几百A/cm²,金属材料通常经历固态升温、熔融,或者气化等过程,此时前两个过程中IPB与材料间的热力学作用特性是不可忽略的。针对该参数范围的数值模拟计算对于了解、研究强脉冲离子束材料表面改性机理与发展这一工艺是非常有意义的,然而目前还没有相关的报道。

本文就材料表面改性技术的参数范围下,在计算了强脉冲能量快速沉积过程的基础之上,建立了考虑热传导因素的热激波计算理论模型,利用开发的STEPB程序模拟计算了铝靶受到IPB辐照后的热力学过程,获得了包括温度、应力、比容等的分布与变化情况。

1 理论模型

1.1 离子脉冲能量沉积分布

对于IPB而言,其特点是在极短的时间内产生并聚集大量的离子轰击材料表面。离子在轰击过程中将其能量传递给靶材料,其能损总体上分为两个部分:离子与靶原子中的电子相互作用的电子能损,以及离子与靶核相互作用的核能损。离子能损在能量较高时以核能损为主,但由于离子脉冲具有能谱结构,低能区占有相当比重,因此在计算能量沉积分布时,电子能损和核能损都需考虑在内。

根据实测数据拟合,单个离子脉冲的加速电压与束流强度符合脉冲函数

$$y = A \left[1 - \exp\left(-\frac{t-t_0}{t_1}\right) \right]^p \exp\left(-\frac{t-t_0}{t_2}\right) \quad (1)$$

式中:A, p, t₀, t₁, t₂系由实际加速电压与电流所决定的常数。图1展示了一典型的加速电压与离子束流

收稿日期: 2000-09-10; 修订日期: 2001-04-16

基金项目: 国家自然科学基金资助课题(19975003); 教育部博士点研究基金资助课题(98000151)

作者简介: 乐小云(1963-), 女, 博士生; E-mail: wjzhao@pku.edu.cn



强的曲线, 其中电流密度所对应的参数为: $A = 1.7248 \times 10^8$, $p = 4.55715$, $t_1 = 413.14$, $t_2 = 19.315$ 。图 2 给出了 300keV , $100\text{A}/\text{cm}^2$ 的 $IP\text{IB}$ 的能量密度的变化。

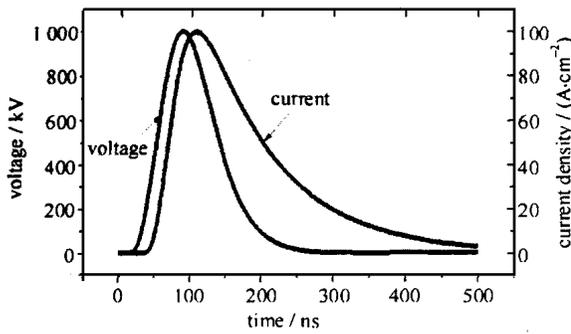


Fig. 1 Fitted voltage and current curve

图 1 拟合的加速电压与电流密度曲线

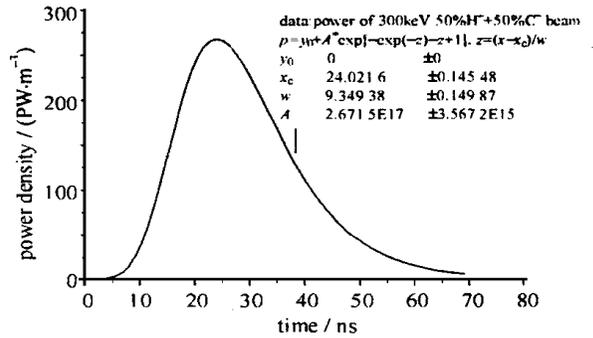


Fig. 2 Power density of 300keV , $100\text{A}/\text{cm}^2$ $H^+ + C^+$ beam

图 2 300keV , $100\text{A}/\text{cm}^2$ 的 $H^+ + C^+$ 离子束能量密度

具有连续能量谱的 $IP\text{IB}$, 束流密度极高, 故设束中的离子数能以统计的方式进行采样, 从而保证:

- (1) 选择足够小的时间间隔, 以使其间离子的能量取平均值 $E_i(t) = qeV(t)$, q 为离子电荷态, $V(t)$ 为加速电压, $E_i(t)$ 为离子能量;
- (2) 使用国际通用的 $TRIM$ 程序计算离子在靶中的能量沉积分布。

基于以上假设, 对每一时间间隔 dt , $IP\text{IB}$ 在靶表面某一深度 x 处厚为 dx 区间内的能通量 f 为

$$f = \int_0^\tau \left(\frac{dE_i}{dx} \right)_{x,t} \frac{J(t)}{eq} dt dx \quad (2)$$

式中: $(dE_i/dx)_{x,t}$ 为 $TRIM$ 程序所模拟计算的离子能损分布, 与时间相关; $J(t)$ 为离子束流密度; τ 为离子脉冲宽度。经过计算的 $IP\text{IB}$ 能量沉积分布见文献[4]。

由于通过辐射带走的能量很小, 忽略不计。故可认为 $IP\text{IB}$ 在与靶材料的相互作用过程中, 其能量全部转换为热能, 成为一种热源作用于靶的表面层。在下面计算 $IP\text{IB}$ 辐照靶材料时所产生的热力学效应中, 采用由(2)式所决定的 f 作为方程中的输入热源。

1.2 热力学方程

$IP\text{IB}$ 辐照材料时, 高密度的能量在极短时间内于材料表面深至十几微米范围内的快速沉积, 在材料表面以及内部产生非常强的热力学效应: (1) 固态材料表面的升温与熔融产生热应力(热激波) p_1 ; (2) 材料表面的气化与烧蚀, 形成反冲脉冲从表面喷射出去, 同时产生压缩波 p_2 向材料内部传播。因此整个过程 $IP\text{IB}$ 所沉积的总能量 Q 和所产生的压力 p 为

$$Q = Q_1 + Q_2, \quad p = p_1 + p_2 \quad (3)$$

式中: Q_1, Q_2 分别为对应产生上述两种应力波的能量分量。在超高强度 $IP\text{IB}$ 的作用下, 由于此时以气态和等离子态过程为主, 第一项基本上可忽略不计, 第二项占主导作用; 而对于材料改性所应用的束流功率密度区间 ($10 \sim 10^2 \text{A}/\text{cm}^2$), 第一项压力要占很大的比重, 而第二项则视气化过程比例大小予以相应的考虑。

$IP\text{IB}$ 的束斑一般达 $1 \sim 100\text{cm}^2$, 相对于离子在深度方向的作用范围非常大, 可以忽略边缘的不均匀性, 从而采用 Lagrange 坐标下的一维弹塑性流体力学方程计算所产生的应力与温度的变化

$$C_v \rho \frac{\partial T}{\partial t} + (p_T + p_s) \frac{\partial x}{\partial t} = Q(r, t) + \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (4)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -V_0 \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (5)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{F_0} \frac{\partial F}{\partial t} \quad (6)$$

式中: ρ 为材料质量密度; r 为 Lagrange 坐标; $F = V/\sqrt{V_0}$, V 为比容; u 为粒子速度; $Q(r, t)$ 为热源; λ 为热传导系数; $\gamma(V)$ 为材料的 Grüneisen 系数。方程中压力 $p = p_0 + p_s$ 由静水压与偏压两项组成。静水压 $p_0 = p_x + p_T$, 其中 p_x 为冷压, p_T 为热压, $p_x = -dE_x/dV$, $p_T(V, T) = \gamma(V)/\sqrt{E_T}$, E_x 为材料的势能, E_T 为

材料的热能, $E = E_x + E_T$ 则为材料的比内能。材料的比内能或者压力与材料状态参量的关系由其状态方程所决定。由于在整个作用过程中, 材料经历了不同的状态, 因此在计算中需要随时根据其具体状态采用相应的状态方程。

我们采用有限差分离散上面的方程, 自行建立了 STEP B 程序, 进而对金属铝受到 IP B 辐照时的热力学效应进行了模拟。

2 计算结果与讨论

2.1 超快加热以及温度分布

在本文模拟计算中, 为了简化, 我们采用方波形式的脉冲, 即在一个脉冲里维持一常量的加速电压与束流。

对于 1 MeV 的 IP B, 当电流仅为 50 A/cm^2 时, 铝靶表面下 $11 \mu\text{m}$ 处的加热速率已经达到 $1.5 \times 10^{10} \text{ K/s}$, 而冷却速率也已达 $10^8 \sim 10^9 \text{ K/s}$ 的量级, 甚至当温度降为 610 K 时, 冷却速率还保持在 $8 \times 10^7 \text{ K/s}$, 如图 3 所示。另外图 3 中在 $t = 47 \text{ ns}$ 时出现温度快速下降而形成一尖峰, 之后在 $t = 60 \text{ ns}$ 又有一极大值出现。可作如下解释: 伴随热源不断提供能量, 表面附近的温度迅速上升, 直至脉冲结束 (46 ns) 时, 热源停止提供能量。但由于存在热传导, 更靠近表面的热量通过导热的方式传导过来, 因此此处的温度在这时并未停止升温, 其加热速率仍然保持在 10^{10} K/s 的数量级。但是随着拉伸应力波带走一部分能量, 表面温度下降, 之后温度继续持续上升至最高值 (随后的加热速率迅速下降, 但仍维持在 10^9 K/s 的量级), 才开始降温过程。

图 4 展示了在 4 个不同时刻该铝靶内部温度分布及其温度梯度的分布情况, 从中可以看到, 在 IP B 的作用下, 靶材料内部的温度梯度亦相当高, 如当 $t = 46 \text{ ns}$ 时, 温度梯度可至 $1.7 \times 10^8 \text{ K/m}$, 而当 $t = 500 \text{ ns}$ 时, 温度梯度仍达到 $2.5 \times 10^7 \text{ K/m}$ 。

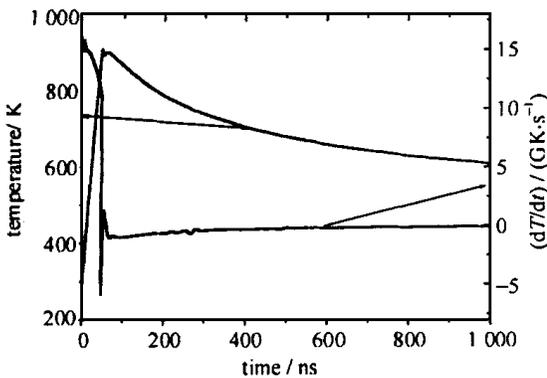


Fig 3 Temperature and its rate at depth = $11 \mu\text{m}$ in Al target irradiated with 1 MeV, 50 A/cm^2 , $\tau = 46 \text{ ns}$ H^+ ion beam

图 3 铝靶内 $11 \mu\text{m}$ 处的温度及其变化速率

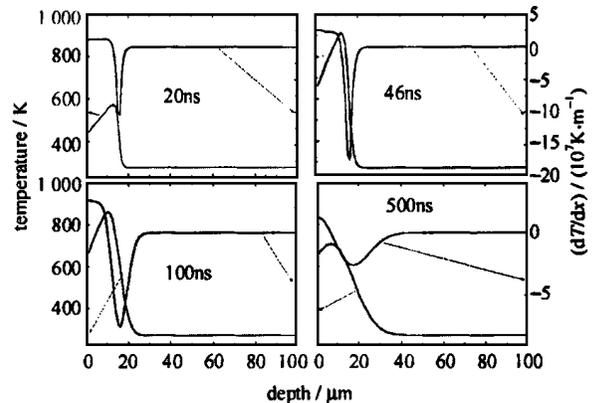


Fig 4 Temperature and its gradient at various time in Al target irradiated with 1 MeV, 50 A/cm^2 , $\tau = 46 \text{ ns}$ H^+ ion beam

图 4 1 MeV 50 A/cm^2 , $\tau = 46 \text{ ns}$ H^+ 离子束辐照

A1 后靶内温度及其梯度分布

图 5 完整地展示了 300 keV , 100 A/cm^2 的 IP B 与铝靶作用过程中铝表面层内的温度变化过程。从图 5 可清晰地看到温度的迅速变化, 刚开始降温后, 铝表面层首先出现速率极高 (10^9 K/s) 的快速冷却过程, 之后冷却速率趋缓, 逐渐向室温趋近。在开始出现的高速冷却过程的持续时间并不很长, 但是其冷却速率非常之高, 可以判断这会在加热过程中所导致的某些非平衡态或其他状态“冻结”起来, 产生出特殊的效果, 比如表面非晶态、孔洞、波纹状的花纹等, 从而影响到表面性质的变化。这些现象已经为一些实验所观察到^[8]。

图 6 给出了 1 MeV, 10 A/cm^2 (15, 40, 100 ns) 和 1 MeV, 50 A/cm^2 (20, 40 ns) 的两组 IP B 辐照铝靶时, 铝靶内部 $10 \mu\text{m}$ 处温度的变化。在相同流强的 IP B 的作用下, 温度的变化与脉宽的增加相一致: 脉宽 (能通量) 越高, 温度也越高, 但温升速率并没有明显的改变, 只是与温度相关的降温速率稍微有些增

加。比较 $10\text{A}/\text{cm}^2, 100\text{ns}$ 与 $50\text{A}/\text{cm}^2, 20\text{ns}$ 的两种 IPB 的计算结果, 发现尽管两者的能通量相同, 但是由于温升速率的差异, 导致后者比前者获得更高的温度并能更长时间的维持之 ($\Delta T = 2\text{K}$ 时, δt 分别为 6ns 与 14ns), 但温度差别不是非常的大 ($\Delta T_{\text{max}} = (561 - 551)\text{K} = 10\text{K}$)。说明不同的流强(即不同的脉冲功率)对于温度的影响主要体现在升温速率的改变上。然而, 当 IPB 比较弱时, 对升温速率的影响相对比较小, 因为这时材料所到达的最高温度不是很高, 只有当脉冲比较强时, 对升温速率影响的差别才会显著起来。

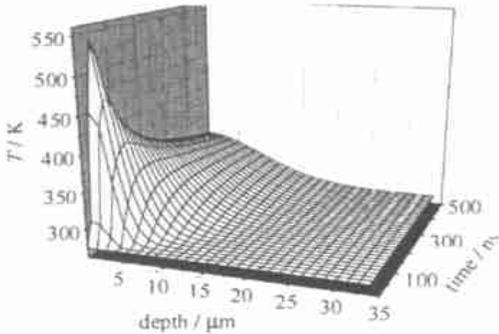


Fig 5 Temperature near the surface when H^+ beam with spectrum of $300\text{keV } 100\text{A}/\text{cm}^2$ impinges into Al target
图 5 $300\text{keV}, 100\text{A}/\text{cm}^2 \text{H}^+$ IPB 辐照铝表面附近的温度分布

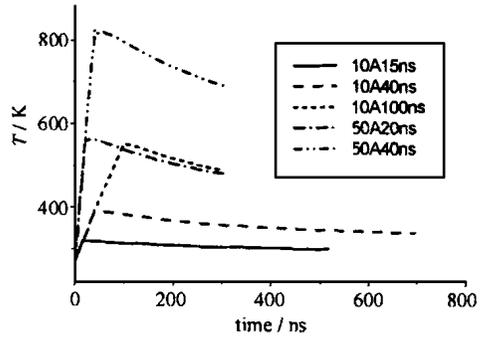


Fig 6 Temperature at the depth of $10\mu\text{m}$ beneath the Al surface irradiated by IPB of 1MeV , various $J (\text{A}/\text{cm}^2)$ & τ
图 6 不同参数的 H^+ IPB 辐照下在铝表面下 $10\mu\text{m}$ 处的温度

2.2 热应力与热激波

另外极高的温度变化速率与温度梯度会导致非常强的热应力的出现, 如图 7, 图 8 所示。图 7 给出了 $1\text{MeV}, 50\text{A}/\text{cm}^2$ 的 IPB 辐照铝靶时在铝表面层存在的热应力分布, 该应力分布是与在该区域内的温度分布相一致的。表面被分割为拉伸-压缩-拉伸三个不同的区域, 随着升温与冷却速率的变化, 此应力也经历着快速增加、快速降低与缓慢平衡的过程, 应力峰值达到 10^8Pa , 甚至更高。

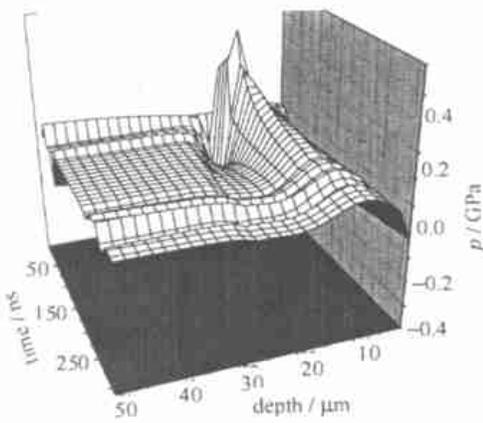


Fig 7 Stress near the surface when $1\text{MeV}, 50\text{A}/\text{cm}^2$ H^+ beam impinges into Al target

图 7 $1\text{MeV}, 50\text{A}/\text{cm}^2 \text{H}^+$ IPB 辐照铝靶后表面附近的应力

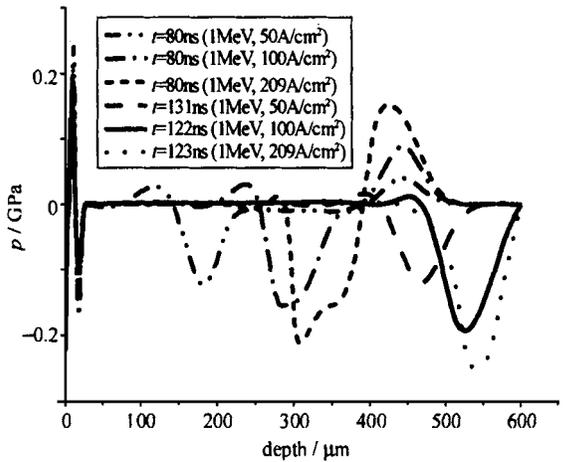


Fig 8 Reflection of shock at the back of Al irradiated by $1\text{MeV } \text{H}^+$ beam with various current density
图 8 经 1MeV 氢离子束辐照后铝靶内激波在样品背面的反射

与表面相对缓慢变化的应力相对应, 在材料内部还出现了热激波, 图 8 展示了三种 1MeV 质子在不同参数下辐照铝靶形成的内部热激波及其在背面反射的情况。它们的流强分别为 $50\text{A}/\text{cm}^2, 100\text{A}/\text{cm}^2, 209\text{A}/\text{cm}^2$, 但控制脉冲宽度以维持相同的能通量。图中给出了热激波分别在 80ns 和 131ns 时的波形, 从中可得到: 除了表面应力以外, 在材料内部还传播着热激波; 在相同能通量的情况下, 流强越强(即脉冲功率越高), 波的幅值越大, 波速越快。由于控制了参数, 使在这三种 IPB 作用下, 铝的表面并未熔融, 因此此时出现的是固态热应力(热激波), 而没有气化或烧蚀后粒子反冲所带来的压力波。在此热激波(压缩波)后紧跟着一个负向的拉伸波, 并且由于在自由背面的反射, 此负向拉伸波在某一时刻(图中

的 ^{131}In s) 被增强, 甚至可以超过材料的屈服强度与抗拉强度而影响材料的性能。

3 结 论

IPB 辐照材料表面引起极其强烈的温度效应, 即使材料在没有熔融的情况下也是如此: 温度变化速率达 10^{10}K/s , 温度梯度亦达到 10^8K/m ; 在相同离子能量的条件下, IPB 的脉冲功率密度影响材料表面的升温速率, IPB 的能通量则影响材料表面的最高温升; 另外剧烈的温度效应还会导致非常强的热应力(材料表面)与热激波(材料内部)的出现, 而且 IPB 与材料的这些作用跟离子束的强度以及能通量有着密切的关系。

参考文献:

- [1] VanDevender J P, Cook D L. Inertial confinement fusion with light ion beams[J]. *Science*, 1986, **232**: 831—836
- [2] Zhao H W, Wei B W, Lin Z W, et al. Development of ECR ion sources in China[J]. *Rev Sci Instrum*, 2000, **71**(2): 646—649.
- [3] Rej, D J, Davis H A, Olson J C, et al. Material processing with intense pulsed ion beams[J]. *J Vac Sci Technol A*, 1997, **15**(3): 1089—1097.
- [4] Le X Y, Yan S, Zhao W J, et al. Computer simulation of thermal-mechanical effects of high-intensity pulsed ion beams on a metal surface[J]. *Surface and Coatings Technology*, 2000, **128**: 381—386
- [5] Boiko V I, Kishkin V P, Shamanin IV. On extreme dynamic parameters of a powerful ion beam-metallic target system [J]. *Phys Stat Sol (B)*, 1991, **165**(75): 75—80
- [6] Schmidt S C, Holmes N C. Shockwaves in condensed matter[A]. David L Hanson, M Keith Matzen. Study of Ion Beam Driven Shockwaves in Metals[C]. Holland: Elsevier Science Publishers B V, 1988. 777—780
- [7] 周南, 牛胜利, 丁升, 等. 强脉冲离子束辐照热-力学效应研究[J]. 强激光与粒子束, 2000, **12**(2): 249—253. (Zhou N, Niu S L, Ding S, et al. Study on thermal-mechanical effects generated by strong pulse ion beam. *High power laser and particle beams*, 2000, **12**(2): 249—253)
- [8] Korotaev A D, Ovchinnikov S V, Pochivalov Yu I, et al. Structure-phase states of the metal surface and under-surface layers after the treatment by powerful ion beams[J]. *Surface and Coatings Technology*, 1998, **105**(1, 2): 84—90

Calculation of thermal-mechanical effects on the surface of metallic targets irradiated by intense pulsed ion beams

LE Xiao-yun, ZHAO Wei-jiang, YAN Sa, HAN Bao-xi, XIANG Wei
(Institute of Heavy Ion Physics, Peking University, Beijing 100871, China)

Abstract In this paper, a model for the interaction of intense pulsed ion beams (IPB) with metallic targets is briefly described. Then the thermal-mechanical effects on the aluminum target irradiated by the IPB with ion energy of 300keV and 1.0MeV, current density of 10, 50, 100A/cm² are simulated numerically. The calculation results, i.e., the stress, temperature, temperature gradient distributions, heating and cooling rates and elastic waves and shocks are presented and discussed.

Key words intense pulsed ion beam; thermal-mechanical effects; computer simulation; surface modification of materials