

مطالعه دینامیک کاشت یون دوتریوم در روش غوطه‌وری پلاسمایی در لایه نازک تیتانیوم مورد استفاده

در هدف دوتریومی

محمد آذرش، علیرضا گرائیلی*

پژوهشکده فیزیک و شتابگرها، پژوهشگاه علوم فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی: ۸۴۸۶-۱۱۳۶۵، تهران-ایران

چکیده: در این مقاله، مطابق با محاسبات نظری، یک طراحی برای افزایش چگالی دوتریوم در تیتانیوم بیش از مقدار اولیه آن ارائه شده است. در این طرح از پلاسمای دوتریوم برای غنی‌سازی استفاده می‌شود. هدف غنی‌سازی، دیسکی از جنس مس که پوششی از تیتانیوم بر روی آن انباشت شده است، می‌باشد. به‌منظور کاشت یون دوتریوم در این هدف، دیسک موردنظر در پلاسمای دوتریوم غوطه‌ور می‌شود. هدف به یک مدولاتور پر قدرت متصل و تحت تاثیر پالس‌های ولتاژ منفی آن می‌باشد. در هنگام اعمال پالس‌های منفی، یون‌های دوتریوم به سمت هدف شتاب گرفته و در آن نفوذ کرده و کاشت می‌شوند. به دلیل ضریب پخش کم در محیط تیتانیوم، یون‌های فرودی به سرعت به داخل منتشر نمی‌شوند، در نتیجه در آغاز فرآیند کاشت، در نزدیکی سطح هدف انباشته می‌شوند. معادله انتشار، توزیع پیش‌بینی شده یون‌ها را در داخل هدف توصیف می‌کند و مشخص شده است که غلظت دوتریوم در تیتانیوم را می‌توان در عرض چند هفته به‌طور قابل توجهی افزایش داد و چندین مرتبه از مقدار اولیه فراتر رفت.

کلیدواژه‌ها: هدف دوتریومی، مدل نظری، کاشت یون، چگالی پلاسمای.

Study of Deuterium Ion Implantation Dynamics in the Plasma Immersion Method for the Titanium Thin Film Used in the Deuterium Target

Abstract: In this study, a design is proposed, based on theoretical calculations, to increase the density of deuterium in titanium beyond its initial value. The enrichment plan involves using deuterium plasma. The enrichment target is a copper disc coated with titanium. To implant deuterium ions into this target, the disc is immersed in deuterium plasma. The target is connected to a high power modulator and subjected to its negative voltage pulses. When the negative pulses are applied, deuterium ions accelerate toward the target, penetrating and implanting into it. Due to the low diffusion coefficient in titanium, the incident ions do not diffuse quickly at first, so they accumulate near the target surface early in the implantation process. The diffusion equation describes the predicted distribution of ions inside the target, and it has been found that the deuterium concentration in titanium can be increased significantly within a few weeks, exceeding the initial value by several orders of magnitude.

Keywords: Deuterium target, Theoretical model, Ion implantation, Plasma density.

۱. مقدمه

یکی از اجزای اصلی استفاده شده در مولدهای نوترونی، هدف^۱ است. هدف مورد استفاده در این نوع مولدهای نوترونی معمولاً از لایه نازکی از فلز تشکیل شده است که قابلیت جذب مقادیر زیادی از اتم‌های دوتریوم و تریتیوم را دارد. این لایه نازک روی زیرلایه‌ای که اغلب از جنس مس یا اسکاندیم است، به روش انباشت در خلأ تولید می‌شود. بر اساس نتایج نظری و تجربی، عناصری مانند تیتانیوم بیشترین قابلیت تشکیل هیدرید فلزی را دارند. بنابراین لایه‌های نازک فلزی از جنس تیتانیوم، امکان نگهداری مقادیر زیادی از اتم‌های گاز دوتریوم و تریتیوم را فراهم می‌کنند [۱-۳].

ضخامت هدف به نوع استفاده از آن بستگی دارد. هر چه به بهره نوترونی بالاتری نیاز باشد باید ضخامت لایه جاذب را افزایش داد. بازده نوترون تولید شده اغلب به جنس زیرلایه، میزان گیراندازی دوتریوم و تریتیوم و همچنین توان توقف آن ماده، وابسته است. هرچه مقدار دوتریوم و تریتیوم گیر افتاده بیشتر باشد، احتمال وقوع واکنش همجوشی هسته‌ای بیشتری بین یون‌های ورودی و هسته‌های هدف وجود دارد. هنگامی که هدف تیتانیوم با باریکه‌ای از دوترون به شدت ۱ آمپر بمباران شود میانگین نوترون تولید شده در حدود 10^{14} نوترون بر ثانیه است. از زیرکونیوم و تیتانیوم به صورت هیدریدهای فلزی می‌توان در واکنش D-T در تولید نوترون استفاده کرد [۴-۵].

همان‌طور که ذکر شد، معمولاً از تزریق ایزوتوپ‌های هیدروژن در فلزات به عنوان هدف برای تولید نوترون استفاده می‌شود. تیتانیوم میل ترکیبی بالایی با ایزوتوپ‌های هیدروژن دارد و روش‌های مختلفی برای ذخیره‌سازی ایزوتوپ‌های هیدروژن در تیتانیوم مطالعه شده است [۶-۱۰]. کاشت یون به روش غوطه‌ورشدن در پلاسما یک روش موثر برای کاشت یون است که در اواسط دهه ۱۹۸۰ میلادی توسط کنراد^۲ و همکارانش ابداع شد. این روش با رفع محدودیت در راستای خط بودن مسیر کاشت، به‌عنوان یک روش جایگزین برای کاشت با پرتو یونی، محسوب می‌شود. در کاشت یون به روش غوطه‌ورشدن در پلاسما^۳، نمونه درون پلاسما غوطه‌ور می‌شود و یک ولتاژ منفی بالا مستقیماً به نمونه اعمال می‌شود. میدان الکتریکی حاصل از این ولتاژ، الکترون‌ها را در یک مدت زمان بسیار کم، تقریباً از مرتبه عکس فرکانس پلاسمایی

الکترون‌ها، از ماده هدف دور می‌کند و یک غلاف تهی از الکترون در اطراف ماده هدف باقی می‌گذارد. یون‌هایی که در غلاف باقی مانده‌اند به سمت ماده هدف شتاب می‌گیرند و در سطح آن کاشته می‌شوند. با کاشته شدن یون‌ها، چگالی آن‌ها در غلاف پلاسما کم می‌شود که باعث می‌شود غلاف به سمت داخل پلاسما حرکت کند تا یون‌های بیشتری را تحت پوشش قرار دهد [۱۱-۱۳]. داشتن یک دانش خوب از دینامیک غلاف پلاسما در کاشت یون به روش غوطه‌ورشدن در پلاسما بسیار مهم است. برای مثال سرعت گسترش غلاف به داخل پلاسما، دوز فرودی بر روی ماده هدف را تعیین می‌کند که یک عامل بسیار مهم در کاشت است.

با افزایش پهنای غلاف پلاسما، در نهایت غلاف به دیواره‌های محفظه خلأ رسیده و محفظه تهی از یون می‌شود. خاموش کردن ولتاژ منفی به‌طور لحظه‌ای یا به‌عبارت دیگر پالسی کردن ولتاژ، باعث می‌شود غلاف پلاسما منقبض و مجدداً یون‌ها در فضای غلاف پراکنند و در عمل تعداد یون کافی برای فرآیند کاشت یون در ماده هدف وجود داشته باشد. بنابراین آهنگ گسترش غلاف پلاسما مهم است زیرا می‌توان از برخورد میدان‌های الکتریکی مجاور ذرات باردار جلوگیری کرد که ممکن است به نایکنواختی دوز منجر شود. تا به حال مدل‌های تحلیلی و عددی گوناگونی برای توضیح دادن فیزیک غلاف پلاسما و دیگر پارامترهای کاشت در کاشت یون به روش غوطه‌ورشدن در پلاسما ارائه شده است [۱۴-۱۷].

به‌طور کلی در اکثر مطالعات نظری که تاکنون در زمینه غلاف پلاسما صورت گرفته با استفاده از توزیع بولتزمن برای الکترون‌ها، معادله پیوستگی برای یون‌ها، معادله حرکت برای الکترون‌ها و یون‌های سرد با صرف‌نظرکردن از اثرات یونیزاسیون و برخورد الکترون-ذرات خنثی، به‌همراه معادله پواسون به بررسی این ناحیه پرداخته شده است. سه روش غالب شامل مدل ذره‌ای، مدل سیالی و مدل جنبشی برای مدل‌سازی پدیده کاشت یون به روش غوطه‌وری در پلاسما وجود دارد. دسته اول شامل شبیه‌سازی‌های ذره در جعبه و دیگر کدهای مشابه می‌باشد [۱۸-۲۰]. مدل ذره‌ای یا ذره در جعبه، از رفتار جمعی ذرات باردار در پلاسما بهره می‌گیرد و به مدل‌سازی ویژگی‌های جنبشی هر یک از گونه‌های داخل پلاسما توسط پیکربندی فضایی ذرات نسبت به یکدیگر

¹ Target

² John R. Conrad

³ Plasma immersion ion implantation (PIII)

در قطعه هدف را به لحاظ تحلیلی و کیفی مورد بررسی قرار داده و تقریب نظری مطلوبی برای آن ارائه دهیم. بدین منظور می‌خواهیم به بررسی دینامیک پلاسمای ایجاد شده در طی هر پالس و تاثیر آن به قطعه هدف بپردازیم و با بررسی نتایج حاصل از این مدل با شهود فیزیکی به دست آمده از فرآیندهای کاشت که به روش متداول انجام شده‌اند، دامنه اعتبار مدل ارائه شده را به لحاظ کمی و کیفی تحلیل کنیم.

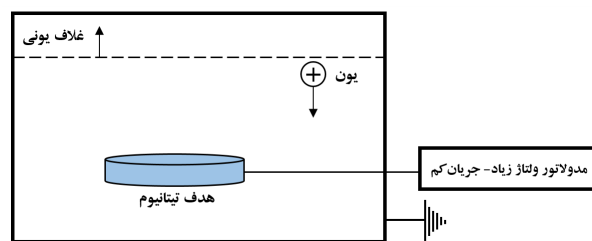
۲. جزئیات تجربی و نظری:

ذخیره‌سازی دوتریوم در لایه نازک تیتانیوم که بر روی زیرلایه‌ای از مس انباشت شده است، از جمله آزمایش‌هایی است که نتایج به دست آمده از آن در بررسی کارآیی مدل ارائه شده، مورد استفاده قرار می‌گیرد که تصویر و ساختار شماتیک آن به ترتیب در شکل ۲ آورده شده است. مجموعه هدف ارائه شده Ti/Cu با استفاده از روش کندوپاش با باریکه یونی تولید شده است. در این روش، سطح جامد با استفاده از یون‌های پرانرژی بمباران و مورد کندوپاش واقع شده و در شرایط دمایی و فشار مناسب بر سطح زیرلایه انباشت می‌شوند. تجهیزات مورد استفاده در این فرآیند، با استفاده از پمپ‌های مکانیکی و دیفیوژن، فشار اولیه‌ای به میزان $10^{-5} \times 4$ mbar را برای انباشت لایه‌های نازک تیتانیوم فراهم می‌کنند. این دستگاه قادر است یون‌های آرگون را یونیزه کرده و با انرژی ثابت به سمت هدف تیتانیومی گسیل نماید. در چشمه یونی فوق از یک کاتد حرارتی از جنس تنگستن جهت گسیل الکترون استفاده می‌شود. الکترون‌ها توسط میدان الکتریکی شتاب می‌گیرند. الکترون‌ها در مسیر خود به سمت آند (بدنه اطاقک تخلیه)، گاز آرگون موجود در محفظه تخلیه الکتریکی را یونیزه می‌کنند و بنابراین یک پلازما با چگالی مشخص شکل می‌گیرد. میدان مغناطیسی ایجاد شده توسط آهنرباهای موجود در دیواره محفظه تخلیه و روی درب آن میدان (Multi-Cusp) پلاسمای ایجاد شده را از دیواره محفظه مجزا می‌کند و زمان حرکت الکترون در محفظه تخلیه را افزایش می‌دهد. بنابراین یون‌های ایجاد شده توسط میدان الکتریکی قوی حاصل از یک سیستم شامل سه الکتروود مشبک از پلازما استخراج و به صورت پرتو یونی متمرکز به سمت هدف تیتانیومی گسیل می‌شوند.

چشمه مورد استفاده جهت کندوپاش، چشمه کافمن با انرژی ۲-۵ keV و حداکثر جریان باریکه‌ای ۵-۱۰ mA می‌باشد. شکل ۳ تصویری از دستگاه استفاده شده برای ساخت مجموعه Ti/Cu را نشان می‌دهد.

می‌پردازد. مدل سیالی، پلازما را بر حسب کمیت‌های ماکروسکوپیک مانند چگالی، سرعت متوسط، انرژی متوسط و ... بررسی می‌کند. مدل جنبشی پایه‌ای‌ترین مدلی است که با آن می‌توان کاشت یون با روش غوطه‌وری در پلازما را توضیح داد که در نهایت به یک مشخصه انتشار بر حسب زمان و مکان منتج می‌شود. این مدل با کمک معادلات بنیادی در فیزیک و ابزار ریاضی، تابع توزیع را در نقاط مختلف بررسی می‌کند [۲۱-۲۴]. به‌طور تجربی نیز نشان داده شده است که کاشت یون تکنیکی موثر در تغییر دادن شمار زیادی از ویژگی‌های مکانیکی، الکتریکی و اپتیکی مواد باشد [۲۵-۲۶].

شکل ۱ یک نمایش شماتیک از یک آزمایش پیشنهادی برای غنی‌سازی دوتریوم در داخل هدف تیتانیومی را نشان می‌دهد. یک دیسک مسی با شعاع a انباشت شده با تیتانیوم در پلاسمای دوتریوم، درون یک محفظه استوانه‌ای زمین‌شده، غوطه‌ور می‌شود. پلازما با چگالی نوعی بین 10^9 cm^{-3} تا 10^{12} cm^{-3} توسط یک دستگاه تخلیه RF تولید می‌شود. هدف تیتانیومی به یک مدولاتور توان بالا که مجموعه‌ای از پالس‌های منفی یک تا ده میکروثانیه را ارائه می‌دهد، متصل شده است. توان پرتو یون فرودی روی سطح دیسک تیتانیوم یک فرآیند گرم‌ماز است که باید توسط یک سیستم خنک‌کننده حذف شود. به‌منظور تخمین تعداد یون‌های فرودی به هدف، دینامیک پلازما را هنگامی که پالس ولتاژ منفی به هدف اعمال می‌شود، بررسی می‌کنیم. در طول این پالس منفی، الکترون‌ها در مقیاس زمانی فرکانس پلازما، از هدف دفع می‌شوند و پشت یک غلاف یونی باقی می‌مانند.



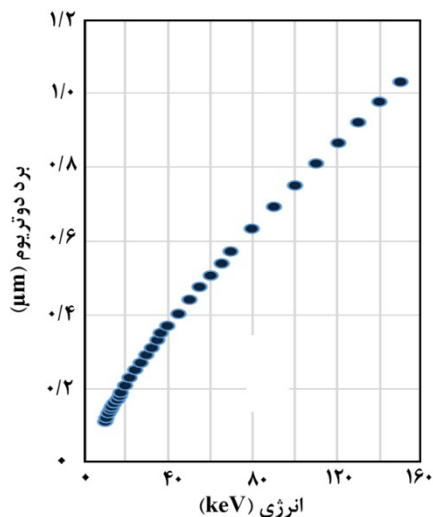
شکل ۱ شماتیک تکنیک غنی‌سازی چگالی دوتریوم در یک دیسک تیتانیومی با شعاع a و غوطه‌ور در داخل یک پلاسمای دوتریوم.

در فرآیندهای کاشت یون، میزان تغییر در خصوصیات اهداف کاشت‌شده، به‌طور قوی به میزان یون‌های کاشت‌شده و عمق نفوذ آن‌ها بستگی دارد. بنابراین اندازه‌گیری و کنترل شرایط کاشت و عمق نفوذ یون‌ها از جمله موضوعات مهمی در طراحی سیستم‌های کاشت یون هستند. به‌طور کلی در غلاف پلاسمایی، چگالی یون و عمق نفوذ به انرژی یون‌های فرودی مربوط می‌شود. اکنون با توجه به مقدمات ذکر شده برای توصیف فرآیندهای کاشت و لایه‌نشانی مبتنی بر روش (PIII)، قصد داریم در چارچوب یک مدل نظری، توزیع و نحوه یون‌های کاشت‌شده

عمق نفوذ بر حسب انرژی (یا ولتاژ) در فرم توانی رابطه ۳، ضرایب a و b را به ترتیب 0.207 و 0.7797 بدست می‌دهد.

$$d = av^b \quad (3)$$

که در آن d بر حسب میکرومتر و v بر حسب کیلوولت است.



شکل ۴ برد دوتریوم در تیتانیوم بر حسب انرژی دوتریوم

اکنون برای بررسی دینامیک پلاسما در لایه نازک سطحی می‌توان آهنگ تغییرات چگالی پلاسمای دوتریوم در تیتانیوم را به فرم معادله دیفرانسیل زیر در نظر گرفت:

$$\frac{dn_p}{dt} = \frac{I}{e\pi R^2} - \alpha n_p = \alpha\beta - \alpha n_p \quad (4)$$

که در آن α مشخصه اتلاف پخش و β چگالی اشباع شده دوتریوم می‌باشد که به صورت

$$\alpha = \frac{1}{C\pi R^2}, \quad \beta = \frac{IC}{ea} \quad (5)$$

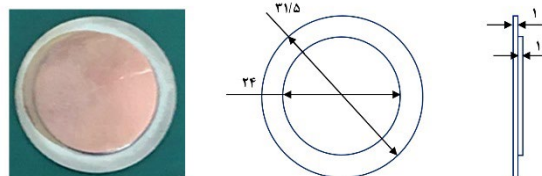
محاسبه می‌شوند که در آن C مقدار حل‌پذیری دوتریوم در تیتانیوم است و

$$\alpha\beta = \frac{I}{e\pi R^2} \quad (6)$$

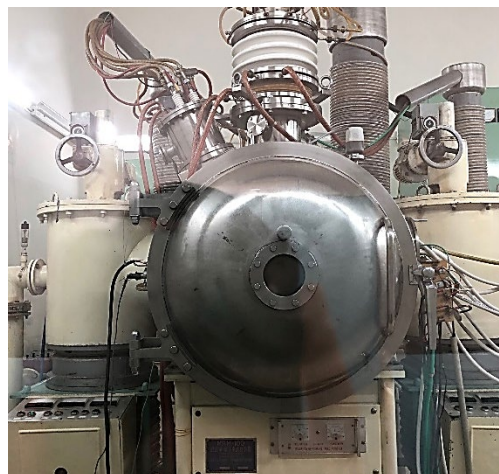
از رابطه (۵) قابل استنتاج است. با حل معادله دیفرانسیل (۴) جواب به شکل معادله

$$n_p(t) = \beta - (\beta - n_0)e^{-\alpha t} \quad (7)$$

حاصل می‌شود که در آن n_0 ($n_p(0) = n_0$) چگالی دوتریوم اولیه در تیتانیوم است. برای این که بتوان خواص زمانی و مکانی



شکل ۲ مجموعه هدف Ti/Cu تصویر شماتیک و تصویر واقعی (واحدها میلی‌متر می‌باشد)



شکل ۳ دستگاه کندوپاش مورد استفاده جهت انباشت لایه نازک تیتانیوم

با توجه به هندسه ساختاری قطعه هدف در شکل ۲، جریان دریافتی سطح قطعه هدف ناشی از برخورد یون‌ها در مدت زمان هر پالس را می‌توان به صورت

$$I_m = \frac{en_p}{\tau} \pi a R^2 \quad (1)$$

در نظر گرفت که در آن e بار الکترون، n_p چگالی پلاسما، a ضخامت لایه سطحی تیتانیوم، R شعاع لایه سطحی و τ مدت زمان هر پالس است. از این رو می‌توان جریان میانگین یون‌ها را به صورت

$$I = NI_m \tau \quad (2)$$

تخمین زد، که در آن N تعداد پالس در هر ثانیه است.

برای بررسی میزان عمق نفوذ یون‌های دوتریوم در لایه نازک تیتانیوم، یون‌های دوتریوم با انرژی‌های مختلف از ۱۰ keV تا ۱۵۰ keV در نظر گرفته شده است. با استفاده از کد SRIM، طول توقف کامل دوتریوم‌ها در لایه نازک تیتانیوم محاسبه و نمودار برد دوتریوم بر حسب انرژی یون‌های فرودی در شکل ۴ آورده شده است. در ادامه برای بررسی رفتار برد یون‌ها بر حسب تابعی از انرژی، برون‌یابی صورت گرفته است. با برون‌یابی میزان

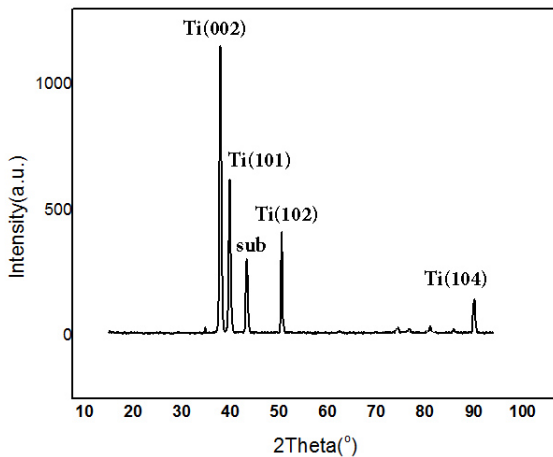
$$1) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \left(1 - \exp\left(-D \frac{n^2 \pi^2}{a^2} t\right)\right) = n_0 + \alpha \beta t F(x, t) \quad (13)$$

خواهد بود. که در آن $f(x, t)$ تابع پخش نوعی^۱ و $F(x, t)$ تابع پخش^۲ می‌باشد.

۳. نتایج و بحث:

۳.۱ بلورنگاری نمونه هدف:

طیف بلورنگاری مربوط به هدف ساخته شده در شکل ۵ نشان داده شده است. با استفاده از کارت استاندارد به شماره ۱۲۹۴-۰۴۴-۰۰) طیف پراش نمونه هدف، دارای چهار قله با جهت‌گیری‌های $Ti(002)$ ، $Ti(101)$ ، $Ti(102)$ و $Ti(104)$ به ترتیب در زاویه‌های $38/42$ ، $40/17$ ، $53/00$ و $92/73$ درجه می‌باشد. همچنین مطابق با کارت استاندارد به شماره ۱۳۲۶-۰۸۵-۰۱) یک قله $(Cu(111))$ در زاویه $43/31$ درجه، مربوط به زیرلایه در طیف پراش هدف قابل مشاهده است که دلیل آن نفوذ پرتوهای ایکس به عمق نمونه است. با توجه به ضخامت لایه هدف و این موضوع که عمق نفوذ پرتوهای ایکس در فلزات بین ۳ تا ۵ میکرون است، نفوذ پرتو ایکس به زیرلایه و ثبت صفحات مس محتمل می‌باشد.



شکل ۵. طیف بلورنگاری مربوط به مجموعه هدف

۳.۲ تحلیل تابع پخش

نمودار رفتارهای زمانی و مکانی تابع $F(x, t)$ به ترتیب در شکل‌های ۶ و ۷ آمده است. در شکل ۶ با بررسی چهار مقدار مربوط به برد دوتریوم شامل $1/0.3$ و $692/0$ ، $808/0$ ، $921/0$ m رفتار زمانی تابع $F(x, t)$ در عمق‌های مختلف (x) بر مبنای عمق

چگالی پلاسما را به صورت همزمان بررسی کرد، از معادله پیوستگی برای چگالی پلاسما که به فرم کلی زیر است، استفاده می‌شود:

$$\frac{\partial n_p(x, t)}{\partial t} - \nabla \cdot (D(x, t) \nabla n_p(x, t)) = S(x, t) \quad (8)$$

که در آن $D(x, t)$ ضریب پخش و $S(x, t)$ تابع منبع می‌باشد. که هر دو تابعیت مکانی و زمانی دارند [۲۷].

فرض می‌شود ضریب پخش ثابت باشد $(D(x, t) = D)$ و با توجه به این که متناسب با عمق و مقدار نفوذ یون‌ها در ماده هدف می‌توان به تحلیل دینامیکی چگالی پلاسما پرداخت، باید تابع منبع را در محاسبات به گونه ای لحاظ کرد که این شهود فیزیکی برآورده شود. از این رو فرم موثر تابع منبع به صورت

$$S(x, t) = SH(d - x)H(t) \quad (9)$$

در نظر گرفته می‌شود که در آن $H(x)$ تابع پله‌ای هویساید است و تابع منبع با فرض داشتن رفتار هموار و مقدار پایا برای جریان به صورت

$$S = \frac{I(t)}{ed\pi R^2} = \frac{It_1}{ed\pi R^2} = \frac{\alpha\alpha\beta t_1}{d} \quad (10)$$

می‌باشد که در آن

$$t_1 = \frac{1}{N} \quad (11)$$

است. t_1 یک مدت زمان نوعی برای سیستم می‌باشد که متناسب با آهنگ تعداد پالس تعیین می‌شود. اکنون با انجام برخی ساده‌سازی‌ها و حل معادله (۸) (پیوست را ببینید)، جواب برای $n_p(x, t)$ و $N_p(x, t)$ به صورت:

$$n_p(x, t) = n_0 + \alpha\beta t_1 \left(1 + \sum_n \left(\frac{2}{n\pi}\right) \left(\frac{2a \sin^2\left(\frac{n\pi d}{2a}\right)}{d}\right) + (-1)^n - 1 \right) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \exp\left(-D \frac{n^2 \pi^2}{a^2} t\right) = n_0 + \alpha\beta t_1 f(x, t) \quad (12)$$

9

$$N_p(x, t) = n_0 + \alpha\beta t \left(1 + \sum_n \frac{2a^2}{Dtn^3\pi^3} \left(\frac{2a \sin^2\left(\frac{n\pi d}{2a}\right)}{d}\right) + (-1)^n - \right)$$

² Diffusion Function

¹ Typical Diffusion Function

کارآیی و صحت مدل به کار رفته، تصدیق می‌شود (شکل ۶). همچنین با در نظر گرفتن زمان واهلش $t = \frac{1}{\alpha}$ به عنوان تقریبی از زمان‌های به حد کافی بزرگ، فرم دقیق‌تر

$$F(x, t) \sim \frac{N_p(x, t) - n_0}{\beta} \quad (17)$$

حاصل می‌شود و زمانی که چگالی پلاسما به حد اشباع برسد، رابطه (۱۷) به رابطه (۱۶) تقلیل پیدا می‌کند.

نکته جالب توجه دیگری که وجود دارد این است که کوچک بودن شاخص حل‌پذیری و به تبع آن رفتار خطی تابع پخش، نشان‌دهنده این است که در یک مدت زمان طولانی، فرآیند کاشت باید اعمال شود تا مقدار چگالی دوتریوم به حد اشباع برسد که پژوهش‌های انجام شده نشان می‌دهند که در عمل نیز چنین است و برای رسیدن به حد اشباع، گاهی اوقات لازم است تا فرآیند کاشت تا چند هفته نیز ادامه یابد [۲۸].

همچنین با توجه به شکل ۷، با تحلیل رفتار مکانی تابع $F(x, t)$ در زمان‌های مختلف، یک رفتار هموار را مشاهده می‌کنیم، مقدار $F(x, t)$ ، از مقدار یک شروع می‌شود و تقریباً در عمق $x = \frac{d}{2}$ به بیشینه مقدار خود می‌رسد و در عین حال که در قسمت عمده عمق کاشت، یک مقدار بیشینه تقریباً ثابت دارد، با گذشت زمان در عمق‌های نزدیک به d باز هم مقدار یک به خود می‌گیرند. که با شهود فیزیکی سازگار است. مجدداً مطابق با شکل ۴ یون‌ها در هر پالس در محدوده انرژی معینی انرژی می‌گیرند و متناسب با آن محدوده انرژی معین، می‌توانند تا محدوده عمق معینی نفوذ کنند. بنابراین انتظار داریم عمده چگالی دوتریوم در محدوده عمق d متمرکز شده باشد که به‌طور طبیعی در نمودارها نیز مشهود است. همچنین مشاهده می‌شود دامنه منحنی‌های مربوط به زمان‌های کوچک، بزرگتر از دامنه مربوط به منحنی‌هایی است که زمان بزرگتری دارند و دلیل آن این است که در زمان‌های اولیه با توجه به این که یون‌های دوتریوم در فضاهای خالی و تهی‌جایی‌های شبکه بلوری ماده هدف جای می‌گیرند، به‌همین دلیل دامنه توابع پخش بزرگ است. اما با گذشت زمان با توجه به اشباع شدن فضاهای خالی و تهی‌جایی‌های شبکه بلوری ماده هدف از دوتریوم، دامنه توابع پخش کوچک می‌شود. که این رفتار در حالت مربوط به رفتار زمانی توابع پخش نیز بیان شد.

نفوذ معین (d) هر نمودار، مشاهده می‌شود که مقدار $F(x, t)$ ، از اعداد بزرگتر از یک ($1 < F(x, t)$) شروع می‌شود و با گذشت زمان به عدد یک همگرا می‌شوند که در نمودارهای رفتار زمانی، زمان به ω_{pi}^{-1} بهنجار شده است (ω_{pi} فرکانس پلاسمایی یون می‌باشد). همگرا شدن به عدد یک، مطابق با شهود فیزیکی است، چون یون‌ها در هر پالس در محدوده انرژی معینی، انرژی می‌گیرند و مطابق شکل ۴ متناسب با آن محدوده انرژی معین، می‌توانند تا محدوده عمق معینی نفوذ کنند. در زمان‌های اولیه با توجه به این که یون‌های دوتریوم در فضاهای خالی و تهی‌جایی‌های شبکه بلوری ماده هدف جای می‌گیرند، به‌همین دلیل مقادیر توابع پخش بزرگتر از یک است، ($1 < F(x, t)$) اما با گذشت زمان با توجه به اشباع شدن فضاهای خالی و تهی‌جایی‌های شبکه بلوری ماده هدف از دوتریوم، مقدار تابع پخش به عدد یک همگرا می‌شود. ($F(x, t) \approx 1$). که در این صورت با توجه به رابطه (۱۳) خواهیم داشت:

$$N_p(x, t) = n_0 + \alpha \beta t F(x, t) \approx n_0 + \alpha \beta t \quad (14)$$

که نشان می‌دهد رفتار چگالی پلاسما برحسب زمان در زمان‌های به حد کافی بزرگ، خطی است. به عبارت دیگر افزایش چگالی پلاسما پس از گذشت یک مدت زمان معین، یک فرم خطی به خود می‌گیرد. همچنین چنانچه مقدار شاخص حل‌پذیری دوتریوم در تیتانیوم (C) بسیار کوچک باشد. با توجه به معادله (۵) کوچک بودن شاخص حل‌پذیری باعث می‌شود مقدار شاخص اتلاف پخش (α) بزرگ باشد. از دیدگاه ریاضی، بزرگ بودن α این امکان را می‌دهد که با استفاده از بسط تیلور مرتبه اول، معادله (۷) به فرم خطی زیر تبدیل شود:

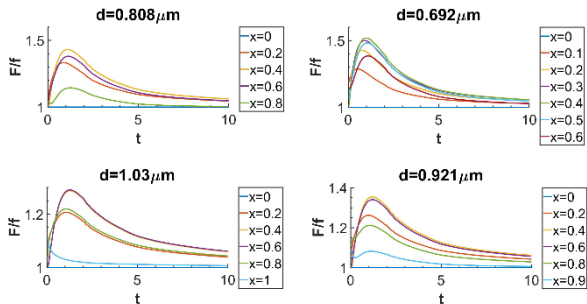
$$\begin{aligned} n_p(t) &\approx \beta - (\beta - n_0)(1 - \alpha t) \\ &= n_0 + \alpha \beta t \left(1 - \frac{n_0}{\beta}\right) \end{aligned} \quad (15)$$

با مقایسه دو معادله (۱۴) و (۱۵)، مقدار دقیق‌تر تابع پخش برای زمان‌های به حد کافی بزرگ، به صورت مجانبی:

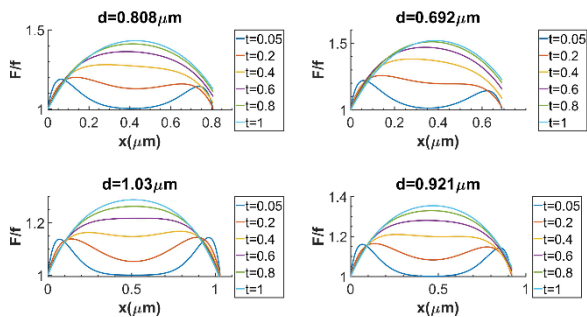
$$F(x, t) \sim \left(1 - \frac{n_0}{\beta}\right) \quad (16)$$

به دست می‌آید و با توجه به این که مقدار چگالی اولیه دوتریوم در تیتانیوم (n_0) در مقایسه با مقدار اشباع شده (β) بسیار کوچک و قابل اغماض است، پس $F(x, t) \approx 1$ خواهد بود. در نتیجه

گرفتن طیف پیوسته یون‌ها در یک زمان پیوسته بررسی می‌کند، بنابراین بدیهی است که در زمان‌های بزرگ، به‌طور میانگین مشخصه پخش $F(x, t)$ بزرگتر از مشخصه پخش $f(x, t)$ باشد.



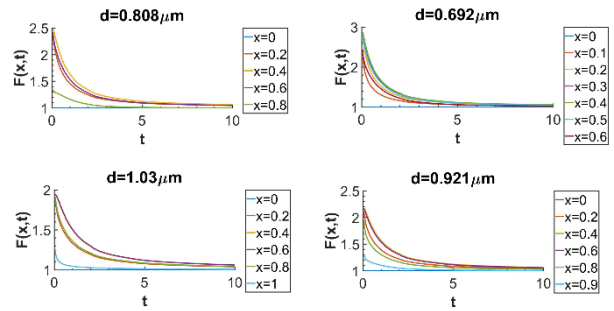
شکل ۸. رفتار زمانی نسبت $F(x, t)$ بر $f(x, t)$ برای مقادیر مختلف برد یون دوتریوم در لایه نازک تیتانیوم: $0.692, 0.808, 0.921, 1.03 \mu\text{m}$ و $d=0.12$



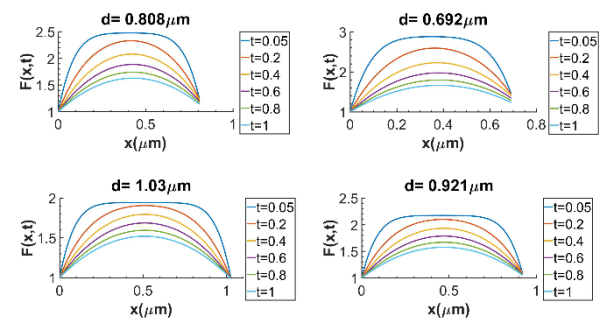
شکل ۹. رفتار مکانی نسبت $F(x, t)$ بر $f(x, t)$ برای مقادیر مختلف برد یون دوتریوم در لایه نازک تیتانیوم: $0.692, 0.808, 0.921, 1.03 \mu\text{m}$ و $d=0.12$

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله، طرحی برای مطالعه دینامیک یون‌های دوتریوم کاشت شده در داخل لایه نازک تیتانیوم ارائه شده است. یک نمونه دیسک مسی با پوششی از تیتانیوم که با غلظت بالایی از یون‌های دوتریوم غنی شده باشد، می‌تواند به ساخت هدف دوتریومی با کاربردهای بسیار مفید منجر شود. در این طرح غنی‌سازی، از کاشت یون به روش غوطه‌وری پلاسمایی استفاده شده است، طوری که هدف ساخته شده در پلاسمای دوتریوم غوطه‌ور می‌شود. به‌خاطر ضریب نفوذ کوچک دوتریوم در تیتانیوم، یون‌های فرودی به سرعت انتشار پیدا نمی‌کنند و به‌موجب آن نزدیک سطح هدف تجمع می‌کنند. قابل انتظار است که کاشت طولانی‌مدت یون‌های دوتریوم، غلظت دوتریوم را نسبت به مقدار اولیه افزایش دهد. در ادامه رفتار زمانی و مکانی توزیع یون‌های دوتریوم در عمق نفوذهای مختلف بررسی شده است به‌صورتی که کاشت یون به روش غوطه‌وری پلاسمایی را به‌صورت نظری و در حد امکان در قالب یک مدل ریاضی مورد مطالعه قرار داده‌ایم. در این مدل، دینامیک پلاسمای دوتریوم با استفاده از معادله پیوستگی مورد



شکل ۶. رفتار زمانی تابع پخش کاشت برای مقادیر مختلف برد یون دوتریوم در لایه نازک تیتانیوم: $0.692, 0.808, 0.921, 1.03 \mu\text{m}$ و $d=0.12$



شکل ۷. رفتار مکانی تابع پخش کاشت برای مقادیر مختلف برد یون دوتریوم در لایه نازک تیتانیوم: $0.692, 0.808, 0.921, 1.03 \mu\text{m}$ و $d=0.12$

در شکل (۸) که مربوط به رفتار زمانی نسبت $F(x, t)$ بر $f(x, t)$ است. در همه عمق‌ها پس از رشد صعودی تابع و رسیدن به یک مقدار بیشینه، در ادامه افت از مقدار بیشینه و همگرا شدن به عدد یک را مشاهده می‌شود. که دلیل آن پیوسته بودن زمان t برای $F(x, t)$ و ثابت بودن زمان نوعی t_1 برای $f(x, t)$ است که باعث می‌شود متناسب با فرم تحلیلی توابع، مقدار $F(x, t)$ بزرگتر از $f(x, t)$ باشد. ولی در عین حال چون هر دو تابع توصیف کننده پخش در طی فرآیند کاشت هستند، بدیهی است که پس از اشباع شدن چگالی پلاسمای دوتریوم، مقدار هر دو تابع و همچنین نسبت آن‌ها به عدد یک میل کند که این کاملاً در شکل (۸) مشهود است.

در شکل (۹) نیز که مربوط به رفتار مکانی نسبت $F(x, t)$ بر $f(x, t)$ است. با بررسی نمودارها، شاهد کمینه مقدار نسبت برای زمان کوچک و بیشینه مقدار نسبت برای زمان بزرگ در عمق تقریبی $x = \frac{d}{2}$ هستیم. به گونه‌ای که قسمت‌های ابتدایی و انتهایی در زمان‌های مختلف شبیه به هم هستند، اما کمینه نسبت برای زمان‌های کوچک و بیشینه مقدار برای زمان‌های بزرگ در قسمت میانی نمودارها وجود دارد. علت آن این است که $f(x, t)$ به‌طور عمده، پخش در طی هر پالس را توصیف می‌کند اما $F(x, t)$ پخش را به‌صورت کلی‌تر و با در نظر

Hydrogen Desorption Performances of MgH₂. Int. J. Hydrogen Energy, **40**, 16338–16346 (2015).

10. B. Sakintuna, F. Lamari Darkrim, M. Hirscher, *Metal Hydride Materials for Solid Hydrogen Storage: A Review*. Int. J. Hydrogen Energy, **32**, 1121–1140 (2007).
11. N. Huang, G.J. Wan, Y. Leng, Y.X. Leng, H. Sun, P. Yang, J.Y. Chen, J. Wang, P.K. Chu, *Deformation behavior of titanium nitride film prepared by plasma immersion ion implantation and deposition*, Surf. Coat. Technol. **156** 170–175 (2002).
12. T. Lu, Y. Qiao, X. Liu, *Surface modification of biomaterials using plasma immersion ion implantation and deposition*, Interface Focus **2**, 325–336 (2012).
13. B. Briehl, H. Urbassek, M. Zeitschrift, *Simulation of sheath dynamics and current nonuniformity in plasma immersion ion implantation of a patterned surface*, J. Appl. Phys. **210** 434 (2022).
14. F. B. Yeh, *A semi-analytical method to study the temperature evolutions of a slab and a semi-infinite target for plasma immersion ion implantation*, Int. J. Heat Mass Transfer, **50** 789-798 (2007).
15. A. Andres, *Fundamental of pulsed plasmas for materials processing*, Surf. Coat. Technol. **183** 301-311 (2004)
16. Y. Chen, C. Xu, C. Wng, M. Bilek, X. Cheng, *An effective method to optimize plasma immersion ion implantation: Sensitivity analysis and design based on low-density polyethylene*, Plasma Process. Polym. **19** 210 (2022).
17. S. Mandl, G. Thorwarth, B. Stritzker, B. Rauschenbach, *Two-dimensional texture and sheath evolution in metal plasma immersion ion implantation*, Surf. Coat. Technol. **200** 589-593 (2005)
18. N. Akhlaghipour, A. R. Niknam, D. omaizi, *Particle in cell simulations of the pulsed plasma sheath: Dependence on pulse parameters*, J. Electrostatics. **117** 103723-103733 (2022).
19. J. Sun, C. Sang, T. Stirner, D. Wang, *Characteristics of plasma immersion ion implantation with a nanosecond rise-time pulse: particle-in-cell simulations*, Appl. Phys. **43** 275201-275228 (2010).
20. Y. X. Huang, X. B. Tian, S. Q. Yang, K. Y. Fu, P. K. Chu, *Particle-in-cell numerical simulation of non-uniform plasma immersion ion implantation*, Surf. Coat. Technol. **201** 5458-5462 (2007)
21. N. Navab Safa, H. Ghomi, A. R. Niknam, *Plasma immersion ion implantation characteristics with q-nonextensive electron velocity distribution*, **223** J. Plasma Phys. 981-996 (2015).

مطالعه گرفته است و با ارائه یک تابع پخش که در بطن این مدل قرار دارد، دینامیک پلاسما دوتریوم در طی مدت زمان هر پالس و با تاکید بر طیف پیوسته‌ای از پالس‌ها، مورد مطالعه قرار داده شد. علاوه بر سازگاری قابل قبول نتایج به دست آمده از مدل در بررسی رفتار تابع پخش با شهود فیزیکی حاکم بر فرآیند کاشت، یک رفتار هموار و پایدار توسط تابع پخش در قسمت عمده عمق کاشت یون نیز پیش‌بینی شده است. همچنین افزایش چگالی پلاسما پس از گذشت یک مدت زمان معین، یک فرم خطی برحسب زمان خواهد داشت.

مراجع

1. C. Monnin, A. Ballanger, E. Sciora, A. Steinbrunn, P. Alexandre, G. Pelcot, *Characterization of deuteride titanium targets used in neutron generators*, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A, **453**, 493-500, (2000).
2. S. Falabella, V. Tang, J.L. Ellsworth, J.M. Mintz, *Protective overcoatings on thin-film titanium targets for neutron generators*, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A, **736**, 107–111, (2014).
3. V.M. Bystritsky, G.N. Dudkin, M. Filipowicz, Yu.Zh. Tuleushev, E.A. Zhakanbaev, *Targets of deuterides TiD₂, ZrD₂, NbD, and CrD₂ with different structures used in experiments on the study of pd and dd reactions at astrophysical energies*, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A, **810**, 80–85, (2016).
4. C.H. Lee, B. Oh, D. Chang, D. Jang, S.Y. In, J. Park, K. Hong, *Classical and quantum mechanics*, Gen. Phys. , **46**, S71 (2014).
5. E. M. Gunnerson, G. James, *On the efficiency of the reaction H₃(d,n)He₄ in Titanium Tritide bombarded with Deuterons*, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A, **8**, 173-184, (1960).
6. D. Mandrino, I. Paulin; S. kapin, *Scanning electron microscopy, X-Ray Diffraction and Thermal Analysis Study of the TiH₂ Foaming Agent*, Mater. Charact. **72**, 87–93 (2012).
7. M. Ma, L. Liang, L. Wang, W. Xiang, X. Tan, Y. Wang, Y. Cheng, B. Tang, *Phase Transformations of Titanium Hydride in Thermal Desorption Process with Different Heating Rates*. Int. J. Hydrogen Energy **40**, 8926–8934 (2015).
8. C. Wang, Y. Zhang, Y. Wei, S. Xiao, Y. Chen, L. Mei, *XPS Study of the Deoxidization Behavior of Hydrogen in TiH₂ Powders*. Powder Technol. , **302**, 423–425 (2016).
9. Y. Zhang, X. Zhuang, Y. Zhu, L. Li, J. Dong, N. Wan, *Synergistic Effects of TiH₂ and Pd on*

$$\begin{cases} n_p(0,0) = n_0 + \alpha\beta t_1 \\ n_p(a,0) = n_0 + \alpha\beta t_1 \\ n_p(x,0) = n_0 + \frac{\alpha\alpha\beta t_1}{d} H(d-x) \end{cases} \quad (A5)$$

به فرم جواب

$$n_p(x,t) = n_0 + \alpha\beta t_1 + \sum_n a_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \exp\left(-D \frac{n^2 \pi^2}{a^2} t\right) \quad (A6)$$

که در آن a_n به صورت

$$\begin{aligned} a_n &= \alpha\beta t_1 \left(\frac{2}{a}\right) \int_0^a \left(\frac{a}{d} H(d-x) - 1\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \\ &= \alpha\beta t_1 \left(\frac{2}{n\pi}\right) \left(\frac{2a \sin^2\left(\frac{n\pi d}{2a}\right)}{d} + (-1)^n - 1\right) \end{aligned} \quad (A7)$$

است، می‌رسیم که در این صورت برای چگالی پلاسما خواهیم داشت

$$\begin{aligned} n_p(x,t) &= n_0 + \alpha\beta t_1 \left(1 + \sum_n \left(\frac{2}{n\pi}\right) \left(\frac{2a \sin^2\left(\frac{n\pi d}{2a}\right)}{d} + (-1)^n - 1\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \exp\left(-D \frac{n^2 \pi^2}{a^2} t\right)\right) \end{aligned} \quad (A8)$$

اما در حالت کلی بهتر است برای لحاظ نمودن پیوستگی جریان یون‌ها، رابطه (A8) را به صورت

$$\begin{aligned} N_p(x,t) &= n_0 + \alpha\beta \int_0^t dt' \\ &+ \sum_n \alpha\beta \left(\frac{2}{n\pi}\right) \left(\frac{2a \sin^2\left(\frac{n\pi d}{2a}\right)}{d} + (-1)^n - 1\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \int_0^t dt' \exp\left(-D \frac{n^2 \pi^2}{a^2} t'\right) \end{aligned} \quad (A9)$$

بازنویسی کرد. در این صورت $N_p(x,t)$ به فرم

$$\begin{aligned} N_p(x,t) &= n_0 + \alpha\beta t \left(1 + \sum_n \frac{2a^2}{D t n^3 \pi^3} \left(\frac{2a \sin^2\left(\frac{n\pi d}{2a}\right)}{d} + (-1)^n - 1\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \left(1 - \exp\left(-D \frac{n^2 \pi^2}{a^2} t\right)\right)\right) \end{aligned} \quad (A10)$$

به دست می‌آید.

22. S. Novak, R. Hrach, J. Palack, V. Hrachov, T. Ibehej, *Study of dynamic processes in multi-component low-temperature plasmas*, Vacuum, **612** 32149-32164 (2019).

23. M. Khoram, H. Ghomi, N. Navab Safa, *Ion temperature and gas pressure effects on the magnetized sheath dynamics during plasma immersion ion implantation*, J. Plasma Phys., **23**, 033511-033520 (2016).

24. J. Moreno, A. Khodae, D. Okerstrom, M. P Bradley, Lenaic Couedel, *Time-resolved evolution of plasma parameters in a plasma immersion ion implantation source*, J. Plasma Phys., **28** (12) 123523-123538 (2021).

25. M. Cisternas, H. Bhuyan, M.J. Retamal, N. Casanova-Morales, M. Favre, U.G. Volkmann, P. Saikia, D.E. Diaz-Droguett, S. Mandl, D. Manova, N. Moraga, A. Chandia-Cristi, A. Alvarez, F. Guzman, *Study of nitrogen implantation in Ti surface using plasma immersion ion implantation & deposition technique as biocompatible substrate for artificial membranes*, Mater. Sci. Eng. C **113** 111002-111011 (2020).

26. L. A. Luiz, B. C. E. Kurelo, G. B. Souza, J. Andrade, C. E. Bruno, *Effect of nitrogen plasma immersion ion implantation on the corrosion protection mechanisms of different stainless steels*, Mater.Today **28** 102655-102665 (2021).

27. Frank E. Harris, *Mathematics for Physical Science and Engineering: Symbolic Computing Applications in Maple and Mathematics*, 2014.

28. H. S. Uhm, W. M. Lee, *High concentration of deuterium in palladium from plasma ion implantation*, Phys. Fluids B, **3** 3188 (1991).

پیوست:

حل معادله پیوستگی

با ساده‌سازی رابطه (A) و با فرض ثابت بودن ضریب پخش $D(x,t) = D$ معادله

$$\frac{\partial n_p(x,t)}{\partial t} - D \nabla^2 n_p(x,t) = S(x,t) \quad (A1)$$

حاصل می‌شود. با انتخاب فرم دکارتی برای عملگر لاپلاسین و فرم

$$S(x,t) = \frac{\alpha\alpha\beta t_1}{d} H(d-x)H(t) \quad (A2)$$

برای تابع منبع که در آن $H(x)$ تابع پله ای هویساید است و به صورت

$$H(x) = \begin{cases} 1 & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (A3)$$

رفتار می‌کند، معادله

$$\begin{aligned} \partial_t n_p(x,t) - D \partial_x^2 n_p(x,t) &= \frac{\alpha\alpha\beta t_1}{d} H(d-x)H(t) \end{aligned} \quad (A4)$$

به دست می‌آید. با حل معادله (A4) به روش تفکیک متغیرها و با لحاظ کردن شرایط مرزی و اولیه