

电子束辐照多层介质能量沉积规律的仿真研究

陈华, 汤文辉, 冉究文, 余金虎

(国防科学技术大学 理学院 技术物理研究所, 长沙 410073)

摘要: 电子束辐照多层介质能量沉积规律研究是进行脉冲电子束辐照动力学研究的基础, 同时它也是一个难点。文章利用改进的 SANDYL 程序构建模型, 计算了在 200 J/cm^2 能通量下, 具有不同平均入射动能的电子束辐照碳酚醛/铝/碳酚醛/铝 (C-ph/Al/C-ph/Al) 结构和铝/金/铝/金 (Al/Au/Al/Au) 结构时的能量沉积情况, 并由此得出电子束辐照多层介质时的能量沉积规律: 在能通量一定的情况下, 随着入射电子平均动能的增加, 其穿透能力逐渐增强, 但是沉积能量的峰值逐渐减小, 且峰值的位置逐渐向靶内层偏移; 在每层介质内部, 随着电子入射平均动能不同而呈现不同的能量沉积剖面; 在介质交界面处, 由于阻止本领的不同, 沉积的能量不连续。

关键词: 电子束; 多层介质; 能量沉积; 蒙特卡罗法

中图分类号: TB115

文献标识码: A

文章编号: 1673-1379(2009)06-0501-05

DOI: 10.3969/j.issn.1673-1379.2009.06.001

1 引言

脉冲 X 射线辐照热-力学效应的研究在现代国防科技中具有非常重要的意义。由于 X 射线辐照实验的困难性以及脉冲电子束辐照与 X 射线辐照热-力学效应的等效性, 故一般通过研究脉冲电子束辐照的热-力学效应来了解脉冲 X 射线辐照介质的热-力学效应规律, 而电子束辐照介质的能量沉积规律研究是进行其热-力学效应研究的基础。

国内外相关文献对电子束辐照介质的能量沉积规律进行了一定的研究: 汤文辉、张若棋^[1]研究了能通量为 1 J/cm^2 、具有不同入射动能的脉冲电子束辐照单层铝时的能量沉积规律。彭常贤、林鹏等^[2]分别用解析法、矩方法和 Monte Carlo 方法研究了单个电子以及多能电子束辐照单层硬铝时的能量沉积规律。杨海亮、邱爱慈等^[3]研究了不同入射角度下脉冲电子束辐照铝靶时的能量沉积规律。H. J. Fitting 等^[4]提出了多层薄层等效模型, 并用该模型研究了脉冲电子束辐照 Al/Ag/Au (三层厚度均在 nm 量级) 时的能量沉积规律。O. Kadri 等^[5]利用 GEANT4 程序分别计算了脉冲电子束辐照铝靶、钽靶和钨靶内的能量沉积规律, 并考虑了电子束入射角度为 $0^\circ \sim 60^\circ$ 时的情况。

虽然国内外相关文献对电子束辐照介质能量沉积规律进行了一系列的研究, 但是这些研究大多局限于单层介质内的能量沉积规律; Fitting 等所提出的多层薄层等效模型对于 nm 量级的薄层具有一定的适用性, 但对于每层介质的厚度都较大时就不再适用。电子束辐照多层介质时, 由于各介质层材料具有不同的阻止本领、散射系数等, 导致能量沉积比较复杂, 研究起来比较困难, 而在实际应用中, 多层介质的防护结构较常见, 因此对于电子束辐照多层介质的研究非常重要也非常迫切。

SANDYL 程序为美国 Sandia 实验室开发的计算复杂几何结构中粒子 (光子、电子) 输运和能量沉积的 Monte Carlo 程序包, 它是在 Livermore 实验室的 SORS 程序和 ETRAN 程序的基础上发展起来的^[6]。本文拟利用改进的 SANDYL 程序, 计算电子束辐照 C-ph/Al/C-ph/Al (C-ph 为碳酚醛) 结构和 Al/Au/Al/Au 结构时的能量沉积剖面, 并由此归纳电子束辐照多层介质结构时的能量沉积规律。

2 计算方法

2.1 基本原理

电子与物质的相互作用有4种类型: (1) 与原

收稿日期: 2009-08-31; 修回日期: 2009-09-28

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10672180)

作者简介: 陈华 (1984-), 男, 博士研究生, 工程力学专业。E-mail: chenhua1020@126.com。

子中电子的非弹性碰撞；(2) 与原子核的非弹性碰撞；(3) 与原子中电子的弹性碰撞；(4) 与原子核的弹性碰撞。

非弹性碰撞是电子在物体中能量损失的主要机制。入射电子与原子中电子的非弹性碰撞造成原子中电子的激发或电离；入射电子与原子核的非弹性碰撞导致入射电子本身的偏转并发出电磁辐射（韧致辐射），这时，入射电子动能的减少等于韧致辐射的能量。

当电子与原子核发生弹性碰撞时，入射电子被偏转但不辐射能量，仅失去保持碰撞粒子间动量守恒的能量。对于电子与电子的弹性碰撞，被传递的能量很小，通常不足以引起被轰击的电子激发。由于弹性碰撞主要只改变入射电子的方向，而不影响其能量的变化，所以在能量沉积计算中可以不予考虑。

计算时，采用 Monte Carlo 方法并结合 Moliere 多次散射理论和电子连续慢化近似计算电子的能量损失过程，同时计算中还考虑了次级效应和密度修正效应。

设 E 为入射到某一层的电子的初始动能，按照 Berger 的方法，电子每走一步，能量按对数减小。从第 n 步到第 $n+1$ 步的能量变化为

$$E_{n+1} = kE_n, \quad (1)$$

其中 $k = (1/2)^{1/m}$ ，即粒子走 m 步，能量减少一半。经验表明， m 取 6 或 8 较好。

电子在一个步长内沉积的能量为

$$\Delta E_D = \left(\frac{dE}{dS}\right)_1 \Delta S + (E_C), \quad (2)$$

其中 $(dE/dS)_1$ 是电子由于激发原子能所产生的能量损失，也称为限制阻止本领。

$$\left(\frac{dE}{dS}\right)_1 = \left(\frac{dE}{dS}\right)_t - \left(\frac{dE}{dS}\right)_e, \quad (3)$$

式中： $(dE/dS)_t$ 为运动电子损失的总能量； $(dE/dS)_e$ 为电离能量损失。

由(2)式可知，一个电子在一个步长内的能量沉积不等于它的能量损失，而是等于总的能量损失减去次级电子带走的能量，即只有激发损失才真正沉积在介质中。其中 E_C 是电子的截断能量，对其加括号是表示当 $E < E_C$ 时需要加上其值，而当 $E > E_C$

时不需要加上其值。

当电子束辐照混合物或者化合物（如碳酚醛）时，由于电子与物质的作用是原子过程，所以当电子在混合物（或者化合物）中运动时，只需求出混合物的等效原子序数 Z^* 、等效原子量 A^* 和等效平均电离能 I^* 即可。

电子的辐射能量损失与电离能量损失的相对数量由电子的初始能量和介质的种类决定。当辐射能量损失与电离能量损失相等时，入射电子所具有的能量称为临界能量。Bethe 和 Heitler 给出临界能量 E_{cr} 的近似计算公式为^[7]

$$E_{cr} = \frac{800}{1.2 + Z} (\text{MeV}). \quad (4)$$

当入射电子能量大于 E_{cr} 时，辐射能量损失是主要的，辐射阻止本领与原子序数的平方成正比。当入射电子能量小于 E_{cr} 时，碰撞能量损失是主要的，碰撞阻止本领与原子序数成正比。所以混合物的等效原子序数 Z^* 可按下式计算^[7]

$$Z^* = \begin{cases} \sum_i n_i Z_i, & E < E_{cr} \\ \frac{\sum_i n_i Z_i^2}{\sum_i n_i Z_i}, & E > E_{cr} \end{cases}. \quad (5)$$

等效原子量 A^* 的计算公式为^[7]

$$A^* = \sum_i n_i A_i. \quad (6)$$

等效平均电离能 I^* 为^[7]

$$\ln I^* = \frac{\sum (Z_i/A_i)^{n_i} \ln I_i}{\sum (Z_i/A_i)^{n_i}}, \quad (7)$$

其中： n_i 为第 i 种元素原子数目所占百分比； Z_i 为第 i 种元素的原子序数； A_i 为第 i 种元素的原子量； I_i 为第 i 种元素的电离能，MeV。

碳酚醛是化合物，计算电子束辐照碳酚醛的能量沉积时，需先根据(4)~(7)式分别求出其等效原子序数、等效原子量和等效平均电离能，然后才能得到能量沉积剖面。

2.2 计算模型

图 1 所示为计算模型在 yOz 平面的投影示意图，整个模型是半径分别为 R_1 和 R_2 ($R_1 < R_2$) 的球

以及底面半径分别为 R_3 和 R_4 ($R_3 < R_4$) 的圆柱嵌套在一起。图中由较粗的线段围成的区域为材料填充区, 在该区域内, 由 $z=0$ 到 $z=P_{70}$ 共计 71 个平行于 xOy 面的平面将该区域分为 70 个小区域 (数据 P_1, P_2, \dots, P_{70} 取值根据材料厚度的不同而改变), 在这个 70 个小区域内可以分别填充不同的介质, 这些介质可以是单质、化合物或者混合物, 即最多可以计算电子束辐照 70 层介质的情况。

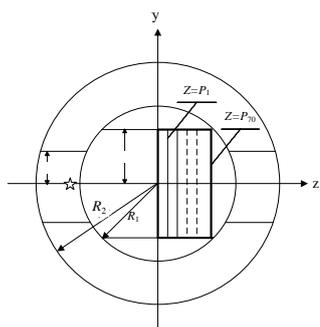


图 1 计算模型在 yOz 平面投影示意图
Fig. 1 The calculation model in the yOz plane

辐照源可以是点源、线源、面源、部分球壳或者部分椭圆边界形式, 设置在☆号所示的区域 (底面半径为 R_3 的圆柱和两个半径为 R_1 、 R_2 的球围成的区域)。为方便模拟计算, 当辐照源为点源时, 将其位置设置在 z 轴上; 当辐照源为面源、部分球壳或者部分椭圆时, 将其按 z 轴对称放置, 辐照源光斑的半径不大于 R_3 ; 除上述区域的其他封闭空间构成的区域内, 可以设置为真空或者根据试验情况设置为稀薄气体。

根据上述模型进行计算, 即可得到多层介质内部的能量沉积剖面。实际计算时, 还需设置电子的截断能量以及次级电子的跟踪情况等。因计算过程中不涉及材料的力学性质, 该程序对于各向同性和各项异性材料均适用。

2.3 界面处理和程序设计

计算电子束辐照多层介质的能量沉积时, 关键是各层介质交界面的处理。在界面处, 由于介质的不同, 其对电子的碰撞阻止本领和辐射阻止本领均不相同, 因而计算时要分别考虑。在用 Monte Carlo 方法抽样模拟时, 电子由介质 1 进入介质 2 与电子在介质 2 中散射后再进入介质 1 是按两个不同的过程处理。

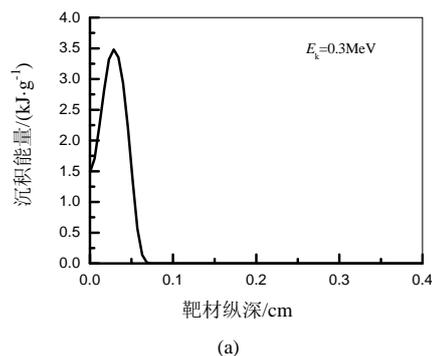
SANDYL 程序理论上最多可以计算电子束辐

照 70 层介质时的能量沉积情况, 但这往往需要较多的 CPU 时间且精度会下降。为此我们对程序进行了改进, 通过增加粒子在关键介质层中散射次数的权重来提高精度。同时针对 SANDYL 程序的输入文件中参数繁多且格式要求严格的缺点, 自行编制了输入文件制作程序 PSIP。

PSIP 程序使用 Visual Basic 2008 语言编写, 采用模块化设计, 将 SANDYL 程序的近千个参数分为控制参数、能谱参数、几何模型参数、辐照源参数、曲面参数、平面参数、区域内物质填充参数和材料参数分别进行输入, 大大提高了计算的准确度和效率。

3 计算结果及分析

由碳酚醛、铝、金分别组成的四层结构 C-ph/Al/C-ph/Al 和 Al/Au/Al/Au 均是辐照防护结构, 我们利用 PSIP 程序和 SANDYL 程序对这两种结构在电子束辐照下的能量沉积剖面进行了仿真计算。图 2 是能通量为 200 J/cm^2 、具有不同入射平均动能 E_k 的电子束辐照 C-ph/Al/C-ph/Al 结构时的能量沉积剖面, 该结构中每层厚度均为 0.1 cm ; 图 3 是能通量为 200 J/cm^2 、具有不同入射平均动能 E_k 的电子束辐照 Al/Au/Al/Au 结构时的能量沉积剖面, 该结构中每层的厚度均为 0.05 cm 。两图中, 横坐标方向为靶的纵深, 纵坐标表示沉积的能量。计算时电子的截断能量取为 0.001 MeV 。计算模型为 $R_1=5.0 \text{ cm}$, $R_2=10.0 \text{ cm}$, $R_3=1.0 \text{ cm}$, $R_4=3.0 \text{ cm}$ 。辐照源近似为点源, 源发出的电子平行于 z 轴并沿 z 轴正向辐照靶材, 源的坐标为 $(0, 0, -5.01)$, 计算模型中的其他区域设置为真空。程序计算得到的数据为每个电子在单个网格区域内沉积的能量总和, 单位为 $\text{MeV}/(\text{e} \cdot \text{格})$ 。根据网格的宽度、物质密度、入射电子平均动能以及能通量, 能量沉积的单位可转换为 kJ/g 。



(a)

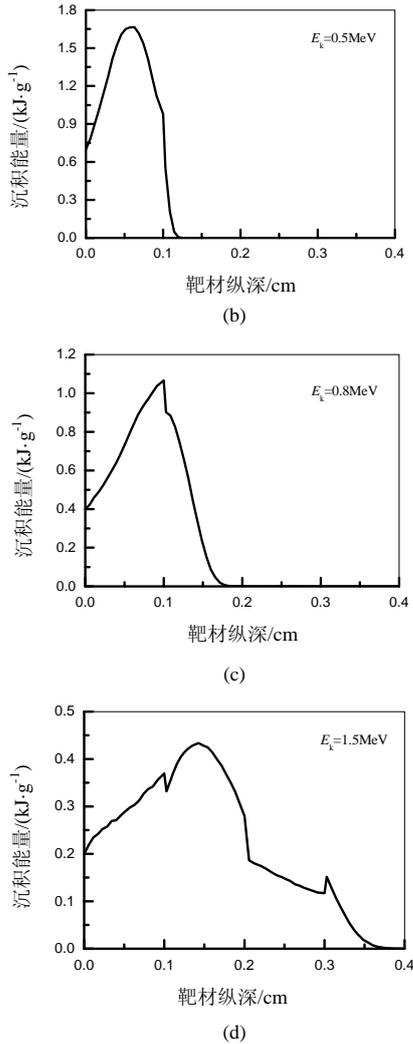


图2 能通量为 200 J/cm^2 、不同动能 E_k 的电子束辐照 C-ph/Al/C-ph/Al 结构时的能量沉积剖面
 Fig. 2 Energy deposition profile for electron beam of different E_k with energy flux of 200 J/cm^2 in C-ph/Al/C-ph/Al

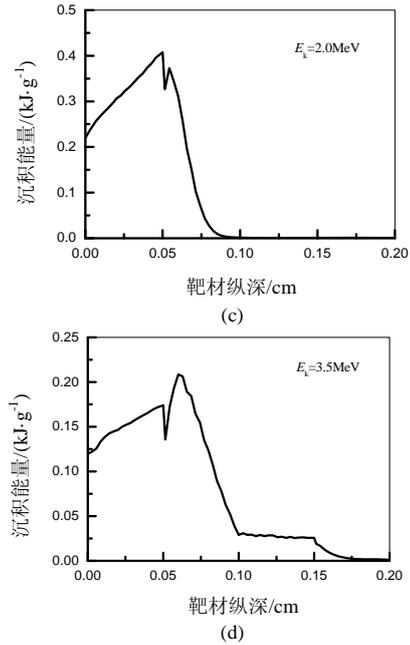
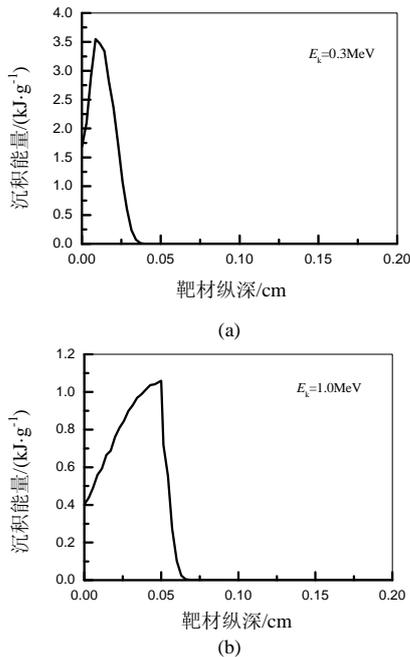


图3 能通量为 200 J/cm^2 、不同动能 E_k 的电子束辐照 Al/Au/Al/Au 结构时的能量沉积剖面
 Fig. 3 Energy deposition profile for electron beam of different E_k with energy flux of 200 J/cm^2 in Al/Au/Al/Au

从图2、图3中可以看出：

(1) 总体而言，在能通量一定的情况下，随着入射电子平均动能 E_k 的增加，其穿透能力逐渐增强，但是介质内所沉积能量的峰值逐渐减小，且峰值的位置逐渐向介质内层偏移。对于图2所示的C-ph/Al/C-ph/Al结构中的能量沉积剖面，当 $E_k=0.3 \text{ MeV}$ 时，入射电子不足以穿透第一层C/ph，能量主要沉积在第一层内；随着 E_k 逐渐增加至 0.5 MeV 和 0.8 MeV 时，电子穿透至第二层(Al)，同时能量沉积的峰值位置逐渐由第一层介质移至第二层介质，峰值逐渐减小；当 E_k 增大至 1.5 MeV 时，电子穿透整个多层介质结构，能量沉积的峰值位置进一步向第二层介质内偏移，且峰值变得更小。图3所示的Al/Au/Al/Au结构的能量沉积剖面具有类似的规律：当 $E_k=0.3 \text{ MeV}$ 时，电子没有穿透第一层介质，其能量主要沉积在第一层内；随着 E_k 增至 1.0 MeV 、 2.0 MeV ，峰值位置逐渐向第二层内偏移，峰值逐渐减小；当 E_k 增大至 3.5 MeV 时，电子穿透至第四层介质，同时峰值位置进一步向介质内部偏移，峰值变得更小。

之所以出现上述现象，是因为当入射电子平均动能较大时，它与介质内部电子、原子核的碰撞导致的偏转较小，电子能够经过相对较少次数的碰撞

即离开该部分介质, 因而在这段路程内沉积的能量较小; 随着电子的能量逐渐减小, 它与介质内电子和原子碰撞后的偏转角逐渐增大, 有时可能达到 180° , 这样电子在该部分介质内经过的路程较长, 碰撞次数较多, 所沉积的能量相对较多。

(2) 一般而言, 当入射电子足以穿透多层时, 在每一层内能量沉积规律如下: 由辐照面开始第一层(或者几层)介质内沉积的能量持续增加; 中间某层(或者某几层)介质内沉积的能量会形成一个峰值, 此时该层内的能量沉积规律和电子束辐照单层介质时的相似^[7]; 最后一层(或者几层内)介质内沉积的能量持续衰减, 如 C-ph/Al/C-ph/Al 结构中 $E_k=1.5$ MeV 和 Al/Au/Al/Au 结构中 $E_k=3.5$ MeV 的情况。

随着入射电子平均动能大小的改变, 能量沉积的峰值还可能出现在交界面附近, 如 C-ph/Al/C-ph/Al 结构中 $E_k=0.8$ MeV 和 Al/Au/Al/Au 结构中 $E_k=1.0$ MeV 的情况; 有时能量沉积在中间某层内达到峰值后随即迅速衰减为零(即电子没有穿透该层), 如 Al/Au/Al/Au 结构中 $E_k=2.0$ MeV 的情况。

(3) 介质交界面处, 由于各层介质的阻止本领不同, 导致交界处能量沉积剖面不连续。一般情况下, 当电子的动能足够大时, 会在阻止本领大的介质内沉积较多的能量; 但若电子穿透阻止本领较小的介质层后再进入阻止本领较大介质层时剩余能量较少(不足以穿透阻止本领较大的介质层), 则在阻止本领大的介质层内沉积的能量反而较少, 如 Al/Au/Al/Au 结构中, 虽然 Au 的阻止本领大于 Al 的, 但是当电子动能 $E_k=1.0$ MeV、 $E_k=2.0$ MeV 时, 在第二层介质 Au 中沉积的能量反而小于沉积在第一层介质 Al 中的。

4 结束语

本文详细介绍了计算电子束辐照多层介质能

量沉积剖面的方法。在对 SANDYL 程序适当修改的基础上, 构建模型并计算了能通量为 200 J/cm^2 且具有不同入射平均动能的电子束辐照两种防护结构的能量沉积情况, 并在此基础上总结得出了电子束辐照多层介质时的能量沉积规律: 总体而言, 在能通量一定的情况下, 随着入射电子平均动能的增加, 其穿透能力逐渐增强, 但是沉积能量的峰值逐渐减小, 且峰值的位置逐渐向靶内层偏移; 在每层介质内部, 随着电子入射平均动能不同而呈现不同的能量沉积剖面; 在介质交界面处, 由于阻止本领的不同, 沉积的能量不连续。

能量沉积剖面是计算电子束辐照热-力学效应的基础。课题组下一步的研究是利用得到的能量沉积数据计算辐照引起的多层介质内部各层的质量亏损、各层内的压力分布、层间空气间隙对计算结果的影响, 以及利用程序计算多维各向异性物质热-力学效应。

参考文献 (References)

- [1] Tang Wenhui, Zhang Ruoqi. Thermomechanical response of aluminum to pulsed electron beam [J]. Journal de Physique Supplement C3, 1997: 623-628
- [2] 彭常贤, 林鹏, 唐玉志. 电子束在材料中的能量沉积和热击波特性的[J]. 计算物理, 2003, 20(1): 51-58
- [3] 杨海亮, 邱爱慈, 张嘉生, 等. 不同入射角度下强流脉冲电子束能量沉积剖面 and 束流传输系数模拟计算[J]. 强激光与粒子束, 2002, 14(5): 778-782
- [4] Fitting H J, et al. Electron beam excitation in thin layered samples [J]. Journal of electron spectroscopy and related phenomena, 2007, 159(1-3): 46-52
- [5] Kadri O, et al. GEANT4 simulation of electron energy deposition in extended media[J]. Nucl Instr and Meth in Phys Rev Section B, 2007, 258(2): 381-387
- [6] Colbert H M. SANDYL: a computer program for calculating combined photon-electron transport in complex systems[M]. Sandia Laboratories, Livermore Analytical Division 8341, 1974
- [7] 周南, 乔登江. 脉冲束辐照材料动力学[M]. 北京: 国防工业出版社, 2002: 505-526