

S781 白漆低能质子辐照损伤的模拟研究

王旭东¹, 程远¹, 李春东², 何世禹², 杨德庄², 顾鹏飞¹

(1. 北京科技大学 材料科学与工程学院, 北京 100083;

2. 哈尔滨工业大学 空间材料与工程实验室, 哈尔滨 150001)

摘要: 文章为研究低能质子与 S781 白漆的微观交互作用, 利用 SRIM-2003 软件模拟了 10~150 keV 质子辐照 S781 白漆过程, 计算了 S781 白漆及其 ZnO 颜料、粘结剂组分的核阻止本领、电子阻止本领、电离损失、位移损失以及质子的射程。结果表明, S781 白漆的电子阻止本领远大于核阻止本领, 辐照损伤以电离效应为主, 电离损失主要发生在 ZnO 颜料上。

关键词: 质子辐照; 白漆; 能量损失; 电离

中图分类号: V524.3; TB303

文献标识码: A

文章编号: 1673-1379(2010)06-0682-04

DOI: 10.3969/j.issn.1673-1379.2010.06.002

0 前言

氧化锌白漆具有低吸收-发射比 ($\alpha_s = 0.15 \sim 0.20$ 、 $\epsilon_H \geq 0.90$), 而且施工工艺简单、性能重复性好, 价格低廉, 因此经常作为热控涂层材料用于各类航天器的被动热控制^[1]。几十年来, 国内外对空间环境下氧化锌白漆的性能退化进行了大量研究, 分析了氧化锌白漆在各种辐照条件下的性能演化规律, 建立了性能退化的预测模型和软件并开展了空间搭载试验和地面综合辐照模拟试验^[2-8]。同时, 人们利用电子顺磁共振波谱^[9]、光致荧光光谱^[9-10]、X 射线光电子能谱^[11-13]和扫描电子显微镜^[11-13], 从物理学、材料学等不同方面研究了氧化锌白漆在空间环境下的辐照损伤机制, 获取了辐照诱发缺陷以及白漆成分和形貌变化的相关信息。但是, 空间环境下氧化锌白漆的辐照损伤是一个复杂的微观过程。氧化锌白漆是由氧化锌颜料和粘结剂组成的复杂非均质体系, 其辐照损伤(以空间带电粒子辐照为例)不仅仅涉及电离和位移等多种损伤形式, 而且还涉及带电粒子与颜料、与粘结剂、与颜料/粘结剂界面互不相同的交互作用过程。因此, 深入研究空间带电粒子与氧化锌白漆的微观交互作用, 对认识辐照损伤机制, 预测性能退化规律和研发新材料等具有重要的意义。

本文利用 SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) 软件, 模拟 10~150 keV 质子辐照 S781 白漆过程中质子与白漆各组分的交互作用。

1 计算模拟方法

SRIM 是基于 Monte Carlo 方法模拟入射粒子在靶材中输运过程的通用计算程序, 适用的粒子能量范围为 10 eV~2 GeV, 适用的靶材物质包括各种单质、化合物和复合多层材料。本文主要采用 SRIM-2003 中的“离子分布和损伤快速计算”(ion distribution and quick calculation of damage) 模型研究辐照过程中质子与 S781 白漆及其组分间的能量传递过程, 包括核阻止本领、电子阻止本领、射程和能量损失分布等。

计算模拟的对象为国产 S781 白漆, 颜料为平均粒径 300 nm 的氧化锌粉末, 粘结剂为有机硅树脂。根据 S781 白漆的组成, 并假定粘结剂对氧化锌颜料包覆均匀以及氧化锌颜料、粘结剂在白漆中分散均匀, 建立 S781 白漆结构模型: S781 白漆为层状结构, 每层均匀排列着直径 300 nm 的氧化锌颗粒及包覆于其周围的 70 nm 厚的粘结剂层(如图 1 所示)。

收稿日期: 2010-01-13; 修回日期: 2010-11-15

基金项目: 国家自然科学基金项目(项目编号: 50502006); 北京市科技新星计划(项目编号: 2008A029)

作者简介: 王旭东(1974—), 男, 工学博士, 副教授, 主要从事空间材料的辐照损伤及地面储存环境试验研究。

E-mail: xdwang@ustb.edu.cn.

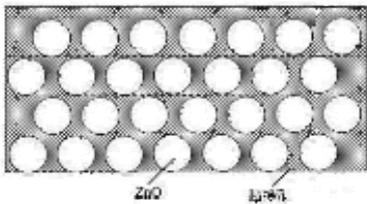


图1 S781 白漆结构模型

Fig. 1 Configuration model of S781 white paint

计算选定的质子能量分别为 10 keV、30 keV、50 keV、70 keV、90 keV、110 keV、130 keV、150 keV, 各能量下入射的质子数均为 10 000 个。

2 模拟结果与讨论

2.1 核阻止本领与电子阻止本领

质子辐照过程中, 入射质子不断地与路径上的 S781 白漆组分进行各种交互作用和能量传递。同时, 由于不断损失能量, 入射质子的速度逐渐减小而慢化, 直至最后损失全部能量而被 S781 白漆吸收。辐照过程中, 质子的能量损失可由阻止本领即单位路径上的能量损失 ($-dE/dx$) 描述。图 2 给出了不同能量质子辐照下 S781 白漆的核阻止本领和电子阻止本领。

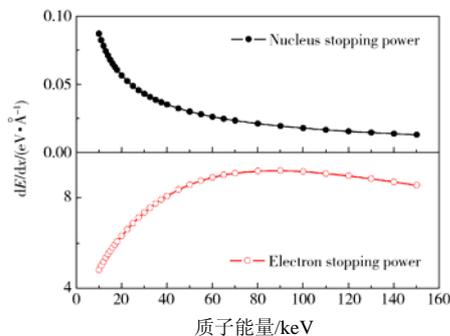


图2 S781 白漆的核阻止本领和电子阻止本领

Fig. 2 Nucleus stopping power and electron stopping power of S781 white paint

核阻止本领反映的是质子与 S781 白漆组分原子核碰撞时引发的弹性能量损失。由图 2 可见, 对于 10~150 keV 的质子, 核阻止本领 $< 0.1 \text{ eV}/\text{Å}$, 并随着质子能量的增加而下降。电子阻止本领反映的是质子与组分核外电子碰撞时引发的非弹性能量损失。由图 2 可见, 对于 10~150 keV 的质子, 电子阻止本领在 $4.8 \sim 9.2 \text{ eV}/\text{Å}$ 范围内; 随着质子能量的增加, 电子阻止本领先显著增强(对 90 keV 质子的电子阻止本领最强)而后缓慢下降。对比可见, S781 白漆对 10~150 keV 质子的电子阻止本

领远大于核阻止本领, 说明质子辐照过程中, 质子的能量损失主要是由质子与 S781 白漆组分核外电子间的交互作用引起的。

2.2 电离损伤与位移损伤

质子辐照过程中, 在入射质子沿其路径不断损失能量的同时, 使 S781 白漆各组分由于获得能量也在发生着各种物理变化。从辐照损伤效应看, 这些物理变化主要包括电离和位移。电离是指入射质子与 S781 白漆组分的核外电子发生非弹性碰撞而使电子脱离原子核的束缚成为自由电子的过程, 其辐照损伤表现为在 S781 白漆中引入过剩的空穴和电子密度, 与此相关的质子能量损失称为电离损失。位移是指入射质子与 S781 白漆组分的原子核发生弹性碰撞而使晶格原子脱离原有位置的过程, 其辐照损伤表现为在 S781 白漆中产生空位、间隙原子、弗伦克尔对、双空位或空位/杂质原子对等, 与此相关的质子能量损失称为位移损失。质子辐照下, S781 白漆的辐照损伤是以电离效应为主还是以位移效应为主, 这取决于入射质子的能量以及传递给白漆组分的能量的多少。图 3 分别给出了 S781 白漆中质子电离损失和位移损失的百分比。可见, 10~150 keV 质子辐照下, 93%~99% 的质子能量损失用于诱发 S781 白漆组分电离, 只有 0.01%~0.09% 的质子能量损失用于诱发 S781 白漆组分位移。并且在 10~150 keV 的质子能量范围内, 电离效应随着质子能量的增加而愈发显著, 而位移效应却是随着质子能量的增加而减弱。

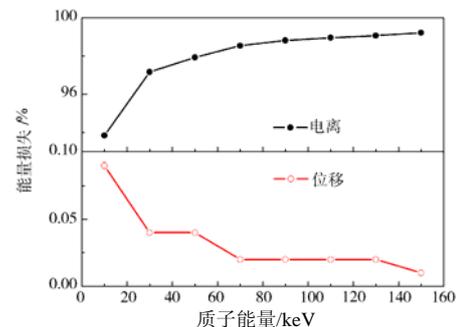


图3 S781 白漆中质子各种能量损失的百分比

Fig. 3 The percentage of various proton energy loss in S781 white paint

2.3 ZnO 颜料和粘结剂两种靶材特性对比

如前所述, 10~150 keV 质子辐照下, 就 S781 白漆整体而言, 电子阻止本领远大于核阻止本领,

辐照损伤以电离效应为主。但分别就 ZnO 颜料和粘结剂这 2 种白漆组分而言, 质子与它们的交互作用是有区别的, 因为它们对质子能量损失的贡献不同。计算模拟中, 我们同时建立了 ZnO 颜料和粘结剂的结构模型, 分别模拟了 ZnO 颜料和粘结剂的质子辐照过程, 研究了 ZnO 颜料和粘结剂的电子阻止本领以及质子在这两种靶材中的射程。

2.3.1 电子阻止本领

ZnO 颜料和粘结剂的电子阻止本领不同。图 4 给出了 10~150 keV 质子辐照下 ZnO 颜料和粘结剂的电子阻止本领, 为便于对比也重复给出了 S781 白漆的电子阻止本领。

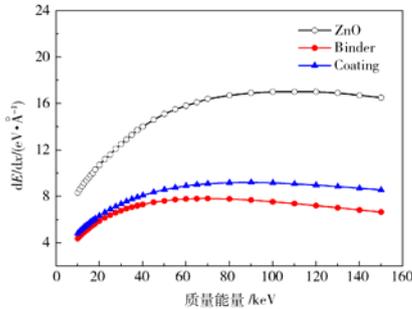


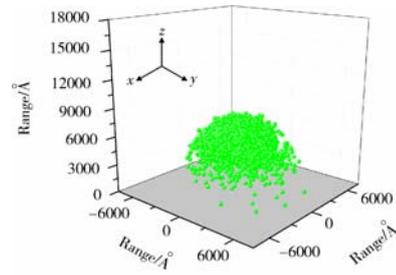
图 4 ZnO 颜料、粘结剂和 S781 白漆的电子阻止本领
Fig. 4 Electron stopping power in ZnO pigment, the binder and S781 white paint

由图 3 可以看出: ZnO 颜料的电子阻止本领最强, S781 白漆的次之, 粘结剂的最弱。说明 S781 白漆中, 相对于粘结剂, 质子与氧化锌颜料核外电子碰撞时引发的非弹性能量损失更大, 氧化锌颜料的电子阻止本领更强。ZnO 颜料和粘结剂电子阻止本领的差异是材料的固有属性, 是由它们的物理、化学性质决定的。此外, 对于 10~150 keV 的质子, 质子能量对 ZnO 颜料、粘结剂和 S781 白漆电子阻止本领的影响规律是相同的, 随着质子能量的增加, 电子阻止本领都是先有所增强而后缓慢下降, 并且三者都是对 90 keV 左右质子的电子阻止本领最强。这些影响规律的一致性更多地体现了入射质子及其能量的自身属性, 受靶材的影响很小。

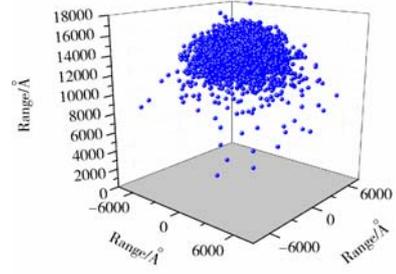
2.3.2 质子射程

质子在 ZnO 颜料和粘结剂中的射程不同。在经过与靶材原子核、核外电子的多次碰撞后, 质子在靶材中的终止位置相对于入射点 (0, 0, 0) 可由三维坐标描述。图 5 给出了 10000 个 90 keV 质子辐照下, 入射质子分别在 ZnO 颜料、粘结剂和 S781

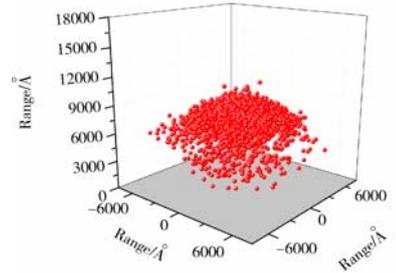
白漆中的终止位置。



(a) ZnO 颜料



(b) 粘结剂



(c) S781 白漆

图 5 90 keV 质子在 ZnO 颜料、粘结剂和 S781 白漆中的终止位置

Fig. 5 Final positions of 90keV protons in ZnO pigment, the binder and S781 white paint

图中 x - y 平面为靶材平面, $+z$ 轴为质子的入射方向。 x 、 y 轴坐标描述了质子终止位置在靶材平面上偏离入射点的程度。可见, 由于入射质子与靶材的多次碰撞, 质子在靶材中并不是沿着入射方向直线运动, 因此, 质子的终止位置在靶材平面上偏离了入射点。 z 轴坐标相当于质子在靶材中的射程。可见, 由于每个入射质子在靶材中的碰撞次数以及每次碰撞的能量损失都不是恒定的, 因此 10000 个质子在靶材中的射程是离散的。从平均射程来看, 90 keV 质子在 ZnO 颜料中的平均射程最小, 在 S781 白漆中的次之, 在粘结剂中的最大, 在 3 种靶材中的平均射程分别为 5 773Å、7 853Å 和 14 400Å。这也说明了质子辐照过程中 S781 白漆对入射质子的阻止更大程度来源于 ZnO 颜料, 粘结剂对入射

质子的阻止相对较小。

2.3.3 质子能量电离损失

ZnO 颜料和粘结剂的电离损失不同。图 6 给出了 90 keV 入射质子在 S781 白漆中的电离损失。可见, 在质子的入射路径上, 电离损失更多地发生在 ZnO 颜料上, 粘结剂上的电离损失较少。说明质子的电离损失主要是由入射质子与 ZnO 颜料核外电子的非弹性碰撞而导致的。此结果与前面关于 ZnO 颜料和粘结剂的电子阻止本领和射程结果是相符的, 即靶材的电子阻止本领越强, 质子电离损失越大, 射程越短。从 ZnO 颜料和粘结剂的电子阻止本领、射程和电离损失结果可以看出, 10~150 keV 质子辐照下 S781 白漆的电离损伤主要发生在 ZnO 颜料上。

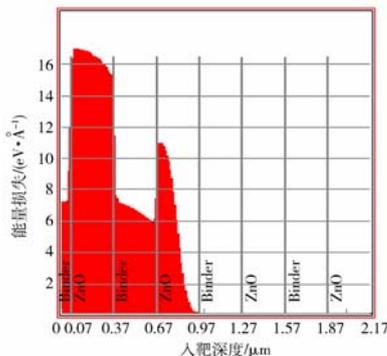


图 6 90 keV 质子辐照下 S781 白漆中的电离损失

Fig. 6 Ionization-related energy loss in S781 white paint by 90 keV proton radiation

3 结论

10~150 keV 质子辐照下, S781 白漆的电子阻止本领远大于核阻止本领, 辐照损伤以电离效应为主。但分别就 ZnO 颜料和粘结剂这 2 种白漆组分而言, 质子与它们的交互作用有所不同, ZnO 颜料的电子阻止本领更强, 电离损失主要发生在 ZnO 颜料上。

参考文献 (References)

[1] 闵桂荣. 卫星热控制技术[M]. 北京: 宇航出版社, 1991: 138-173

- [2] Fogdall L B, Leet S J, Wilkinson M C, et al. Effects of electrons, protons, and ultraviolet radiation on spacecraft thermal control materials, AIAA99- 3678[R]: 1-9
- [3] Mikhailov M M, Dvoretiskii M I. Thermal radiation characteristics of reflecting coatings based on zinc oxide for space systems under the conditions of the effect of earth's radiation belts[J]. Journal of Advanced Materials, 1995, 2(1): 41-49
- [4] 刘宇明, 冯伟泉, 丁义刚, 等. 辐照环境中 ZnO 类热控涂层性能退化预示模型研究[J]. 航天器环境工程, 2008, 25(1): 15-17
- [5] 冯伟泉, 丁义刚, 闫德葵, 等. 空间电子、质子和紫外综合辐照模拟试验研究[J]. 航天器环境工程, 2005, 22(2): 69-72
- [6] Feng Weiquan, Ding Yigang, Yan Dekui, et al. Space Combined Environment Simulation Test on α_s Degradation of GEO Satellite Thermal Control Coatings[J]. 航天器环境工程, 2007, 24(1): 27~31
- [7] 冯伟泉, 丁义刚, 闫德葵. 热控涂层近紫外 5000ESH 辐照 α_s 原位退化特性[J]. 航天器环境工程, 2003, 20(4): 13~18
- [8] 冯伟泉, 丁义刚, 闫德葵, 等. 地球同步轨道长寿命卫星热控涂层太阳吸收率性能退化研究[J]. 中国空间科学技术, 2005(2): 34~40
- [9] Wang Xudong, He Shiyu, Yang Dezhuang. Low-energy electron exposure effects on the optical properties of ZnO/K₂SiO₃ thermal control coating[J]. Journal of Materials Research, 2002, 17(7): 1766-1771
- [10] Claire Tonon, Carole Duvignacq, Gilbert Teyssedre, et al. Degradation of the optical properties of ZnO-based thermal control coatings in simulated space environment[J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2001, 34: 124-130
- [11] 刘宇明, 冯伟泉, 丁义刚, 等. S781 白漆在空间辐照环境下物性变化分析[J]. 航天器环境工程, 2007, 24(4): 235-238
- [12] 刘宇明. 空间环境中 S781 和 SR107 性能退化研究[J]. 航天器环境工程, 2008, 25(5): 435-437
- [13] 冯伟泉, 王荣, 丁义刚, 等. 低能质子对卫星热控涂层太阳吸收率的影响[J]. 中国空间科学技术, 2007(6): 42-47