

文章编号: 1001- 4322(2000)02- 0249- 05

强脉冲离子束辐照热-力学效应研究*

周 南, 牛胜利, 丁 升, 邱爱慈

(西北核技术研究所, 西安 710024)

摘 要: 采用自行研制的 Π SW 软件通过数值模拟方法研究了不同能量离子束辐照材料时的能量沉积及所产生的烧蚀、喷射冲量及热激波等效效应。

关键词: 离子束; 辐照效应; 热激波

中图分类号: O 571. 33 文献标识码: A

目前, 离子束辐照被广泛地应用于核物理、原子物理、等离子体物理和固体表面物理的各个领域, 研究和分析脉冲离子束辐照材料时所产生的效应是十分有意义的。当脉冲离子束辐照材料与结构时, 会产生与脉冲 X 射线和电子束辐照材料时类似的热-力学效应, 对于离子束在材料中的能量沉积已有较多研究^[1-4], 关于辐照产生的热激波等热-力学效应研究则尚未涉足。本文通过数值模拟研究分析了不同能量离子束辐照材料时所产生的熔融、汽化烧蚀和热激波传播等热-力学效应, 以揭示脉冲离子束辐照材料所产生的效应的基本特征, 为离子束辐照材料的改性与损伤以及模拟软 X 射线的辐照热-力学效应研究提供相关的理论基础。

1 离子在物质中的能量沉积

离子与物质的相互作用包括: (1) 与原子束缚电子的非弹性碰撞, (2) 与原子核的弹性碰撞, (3) 与原子核的非弹性碰撞。显然, 离子与物质相互作用的机理与电子是极其相似的。

离子与原子束缚电子的非弹性碰撞, 使物质原子产生激发或电离(形成 δ 电子), 这时, 离子损失其动能并将能量沉积在物质中。虽然从微观上看, 由激发、电离引起的能量损失是一个不连续过程, 但从宏观分析, 离子进入材料后的能量衰减是一种集体效应, 因此可以假定运动离子的能量损失是一连续过程, 并认为只有在激发状态下离子才将能量沉积在物质中, 而电离并不产生能量沉积。在离子能量沉积计算中, 采用与电子相似方式进行运输过程的模拟。

对离子的碰撞阻止本领我们有

$$\left(-\frac{dE}{ds}\right)_c = z^2 \frac{Z}{\rho A} k(\beta) \left[f(\beta) - \ln I - \frac{c_1}{Z} - \frac{\delta_1}{2} \right] \text{ (MeV} \cdot \text{cm}^2/\text{g}), \quad (1)$$

$$k(\beta) = 0.307/\beta^2, \quad f(\beta) = \ln[1.022 \times 10^6 \beta^2 / (1 - \beta^2)] - \beta^2$$

式中 z 为入射离子相对电荷, 对质子 $z=1$, Z 为物质的(等效)原子序数, A 为物质的(等效)原子量, β 为入射离子的相对速度 (v/c), δ_1 为密度效应对阻止截面的贡献, I 为物质原子的(等效)电离能, 以 eV 为单位, c_1 为考虑原子电子结合能的壳层修正, ρ 为物质密度。密度效应修正如下计算

$$\delta_1 = \begin{cases} 0, & x < x_0 \\ 4.606x + b + a(x_1 - x)^m, & x_0 \leq x \leq x_1 \\ 4.606x + b, & x > x_1 \end{cases} \quad (2)$$

其中 $x = 0.5 \log[\beta^2 / (1 - \beta^2)]$; a, b, m, x_0, x_1 是物质参数, 例如对于铝有: $I = 164\text{eV}, a = 0.0906, b = -4.21, m = 3.51, x_0 = 0.05, x_1 = 3.0$; 对于硅有: $I = 172\text{eV}, a = 0.075, b = -4.39, m = 3.39, x_0 = 0.1,$

* 国家自然科学基金资助课题(19975037)
1999年6月24日收到原稿, 2000年3月16日收到修改稿。
周 南, 男, 1941年8月出生, 研究员

$x_1 = 3 Q_0$ 。设入射离子的能量密度为 (J/cm^2) ，则入射离子数 N 为 $N = \Phi/E_0$ ， E_0 为单个离子的初始能量，而能量沉积为

$$E_d = [\Phi/\rho E_0]dE/dx [J \cdot g^{-1}] \tag{3}$$

为说明不同离子与材料相互作用时的能量沉积特征，利用 Trim 95 程序^[1]，我们计算了单个 H^+ 、 C^+ 及混合束 $H^+ (50\%) + C^+ (50\%)$ 辐照铝和硅等材料的能量沉积剖面。计算结果表明，在所考虑的 $E_0 = 0.5 MeV \sim 10 MeV$ 能量范围，能量沉积的贡献主要是离子与原子束缚电子的相互作用，其它相互作用的贡献很小，不足 1%，可以忽略。不同材料的能量沉积剖面大体是相似的。图 1 分别给出了上述三种单个粒子在铝中的能量沉积剖面。不同离子辐照铝和硅时的最大射程 δ 随离子能量的变化如图 2 所示。由图 1、图 2 可以看出，对于不同的离子辐照，能量沉积剖面的形状有很大差异。

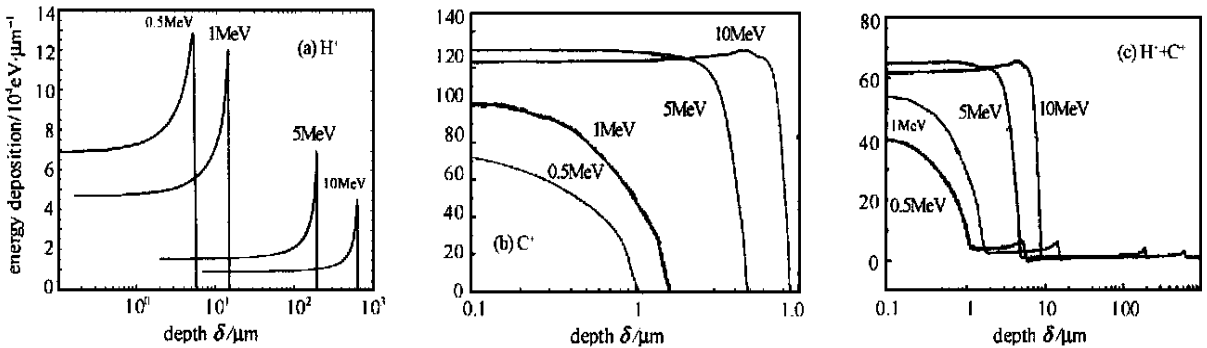


Fig. 1 The energy deposition profile of ions with different energy in Al

图 1 不同能量质子在铝中的能量沉积剖面

对于质子辐照见图 1(a)，当能量比较低时，能量沉积剖面比较缓慢地单调上升，对于高能质子，则从表面开始存在一近于常值的能量沉积区。随着射程增加，在接近最大射程处能量沉积剖面迅速增加，并在最大射程附近达到峰值后骤然下降，形成陡峭的沉积剖面。随着质子能量的增加，其峰值逐渐非线性下降，辐照表面处的能量沉积密度 E_1 下降，且比对应的峰值下降得更为迅速。峰值处的能量沉积比值 k 亦逐渐下降。 k 值定义为

$$k = \int_0^\delta (E_d - E_1) dr / \int_0^\delta E_d dr \tag{4}$$

对于 C^+ 离子辐照，见图 1(b)，当离子能量较低时，能量沉积剖面呈单调下降。随着离子能量的增加，当 $E_0 = 5 MeV$ 时从表面也开始出现近于均匀的能量沉积区，然后比较迅速地下降，形成较为陡峭的能量沉积剖面，但比质子要平缓；此外，与质子不同，辐照表面处的能量沉积密度起初逐渐上升，达到某一值后，离子能量继续增加时辐照表面处的能量沉积密度反而逐渐下降，且能量沉积剖面呈缓慢的单调增加，在最大射程附近达到峰值。

对于 $H^+ + C^+$ 混合离子束，见图 1(c)，能量沉积剖面大体可以分为两个区域，其中，第一个区域在物质表层，为 C^+ 离子影响区，其长度约为 $\delta/2$ ，第二个区域位于物质里层，为 H^+ 质子影响区，其能量密度很小。显然，混合束的能量沉积剖面大体与 C^+ 相近，主要由 C^+ 控制。

综合而论，离子束的能量沉积比 X 射线和电子束有较好的均匀性和阶跃性。

利用 H^+ 、 C^+ 及 $H^+ + C^+$ 的能量沉积数值模拟结果，我们拟合得到它们在铝和硅材料中的最大射程 δ 与其能量 E_0 的函数关系如下。

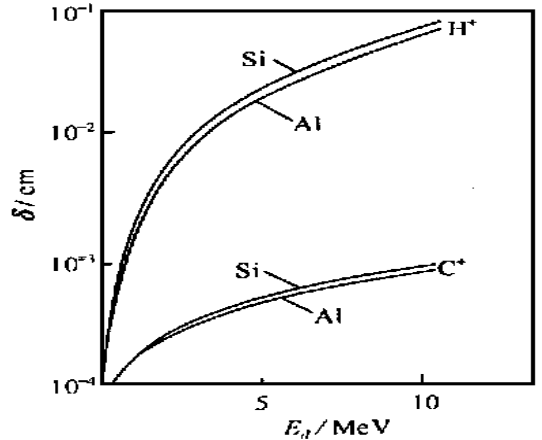


Fig. 2 The range of the proton in Al and Si

图 2 质子在铝和硅中的射程

对于铝

$$\delta[\text{cm}] = \begin{cases} \exp(\ln 10 E_0 [\text{MeV}])^{1.225} \times 10^{-4}, & (\text{H}^+, \text{H}^+ + \text{C}^+) \\ (8.0 E_0 [\text{MeV}] + 6.1) \times 10^{-5}, & (\text{C}^+) \end{cases} \quad (5)$$

对于硅

$$\delta[\text{cm}] = \begin{cases} \exp(\ln 10 E_0 [\text{MeV}])^{1.22} \times 1.204 \times 10^{-4}, & (\text{H}^+, \text{H}^+ + \text{C}^+) \\ (8.4 E_0 [\text{MeV}] + 6.5) \times 10^{-5}, & (\text{C}^+) \end{cases} \quad (6)$$

2 离子辐照热-力学效应的数值计算

对于离子的一维辐照, 材料的力学响应满足通常的连续介质弹塑性流体力学方程组。在拉格朗日坐标 r 下, 一维平面弹塑性流体力学方程组为

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{V}{V_0} \right) \\ \frac{\partial u}{\partial t} = - V_0 \frac{\partial}{\partial \alpha} (\sigma + q) \\ \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + (\sigma + q) \frac{\partial V}{\partial \alpha} = E_p \\ p = p(V, \epsilon) \\ \sigma = p + S \end{cases} \quad (7)$$

式中 α 、 p 、 u 、 ϵ 、 ∂ 分别为物质质点的应力、流体静压、速度、比内能及比容, q 为数值计算中的人造粘性, E_p 为离子辐照所附加的外能源项, 对于矩形脉冲辐照有 $E_p = E_d/t_0$, t_0 为辐照脉宽。

为揭示离子束辐照材料所产生的热-力学效应特征, 利用自行研制的适于模拟计算不同脉冲束(包括 X 射线, 电子束, 激光和离子束等)辐照的 ITSW 软件^[5], 数值模拟计算了不同脉冲质子束 ($E_0 = 0.5 \text{ MeV} \sim 10 \text{ MeV}$, $\Phi = 50 \text{ J/cm}^2 \sim 418 \text{ J/cm}^2$, 脉宽 $t_0 = 0.1 \mu\text{s}$ 的矩形脉冲)辐照铝靶的热-力学效应。结果表明, 对于 $0.5 \text{ MeV} \sim 1 \text{ MeV}$ 质子, 能量沉积区小于软 X 射线与相同能量的电子束, $5 \text{ MeV} \sim 10 \text{ MeV}$ 质子的能量沉积区大于软 X 射线, 但小于电子束。与 X 射线, 电子束辐照相似, 当质子束辐照材料时同样会产生多种热-力学效应, 包括被辐照表面的熔融、汽化烧蚀, 由烧蚀材料向外喷射产生冲量、热激波以及由此可能产生的材料前后表面的层裂等。材料的烧蚀质量 ($\Phi = 200 \text{ J/cm}^2$) 随质子能量的变化及冲量随辐照能量密度的变化如图 3、图 4 所示。图 5 给出了能量 $E_0 = 1 \text{ MeV}$ 、 5 MeV 的质子 ($\Phi = 418 \text{ J/cm}^2$) 辐照的热激波波形及其传播。显然, 质子束辐照材料时所产生的热-力学效应与 X 射线、电子束的辐照效应是大体相似的。

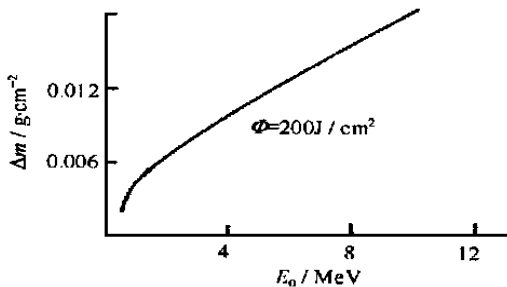


Fig. 3 The blow-off mass of Al target vs the proton energy

图 3 铝的喷射质量与质子能量的关系

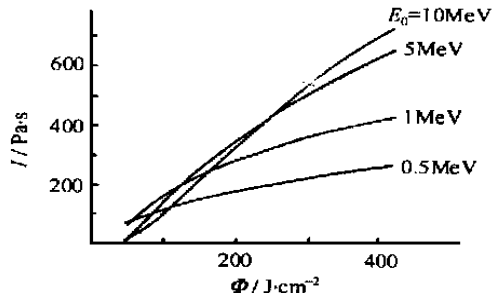


Fig. 4 The blow-off impulse of Al target vs the proton fluence

图 4 铝的喷射冲量与质子能量密度的关系

由图 5 可以看出, 虽然辐照条件(时间谱形状, 脉宽及能量密度)相同, 但初始热激波的波形及峰值依赖于质子能量, 这与热激波产生的机理密切相关。事实上, 由数值模拟计算结果的分析知道, X 射线、电子束及离子束辐照材料时热激波的形成机理有以下几种: 辐照时材料中能量急剧的非均匀沉积引起材料近乎瞬时的非均匀性热膨胀, 导致冲击热应力的产生; 表层材料的熔融喷射产生的反冲; 表层汽化

(也包括熔融)材料的喷射产生的反冲。对于较低能量的质子辐照($E_0=0.5\text{ MeV}$ 、 1.0 MeV),由于材料以汽化为主,而熔融喷射对反冲的贡献很小,因此将只存在由冲击热应力与汽化反冲压缩冲击波形成的单一热激波(图5(a))。当质子能量为 5 MeV 时,由于这时内层材料汽化出现较强的热激波,而表层以熔融为主(图5(b)),因而其热激波出现两个波峰:前面是与汽化喷射及冲击热应力相关的较强的热激波,后面紧跟与熔化及冲击热应力相关的较弱的热激波,最后是在凝聚态的熔化自由面反射形成的较强的负拉伸波。这与软X射线辐照时前面为较弱的与熔化及冲击热应力相关的热激波,后面紧跟较强的与汽化及冲击热应力相关的热激波不同,此时在气态的自由面上反射的负拉伸波极弱。当质子能量进一步增加时,材料以熔融喷射为主,这时也将只存在由冲击热应力及熔化反冲产生的单一压缩波,后面紧跟着在凝聚态的熔化自由面反射的很强的拉伸波。

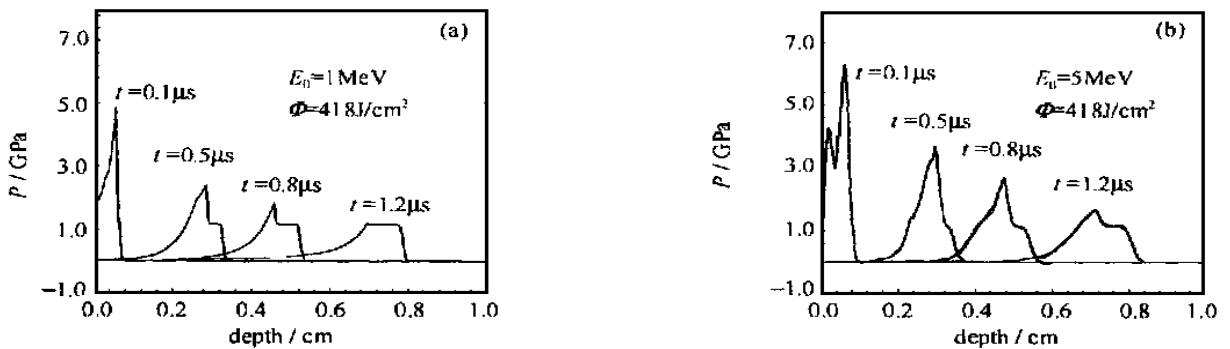


Fig 5 Evolution of the thermal shock wave in an Al target irradiated by the single energy proton

图5 单能质子辐照铝靶时热激波的形成

此外,由图5(b)还可以看出,对于所给出的辐照能量密度,当质子能量较小时前表面不出现层裂,这与软X射线辐照相似。当质子能量 $E_0=5\text{ MeV}$ 时,由于在辐照表面反射的负拉伸波足够强,导致前表面产生层裂,这与硬X射线辐照是一致的。

3 实际辐照实验热-力学效应数值模拟计算

当具有能谱分布的实际脉冲质子辐照材料时,其热-力学效应的计算要比单能质子复杂,实际测量出的二极管脉冲离子束的电压 V 和电流 I 的实际波形 $V-t$ 与 $I-t$ 近于三角形^[2]。本文考虑了两种实际情况,一种是具有能谱分布的脉冲质子束辐照(最高能量分别为 1 MeV 、 1.5 MeV 、 2 MeV),另一种是 $\text{H}^+ + \text{C}^+$ (各占50%)的混合束辐照。

对质子辐照,不同能量密度的质子辐照铝时的热激波如图6所示。由计算结果我们可以得出:对于所给定的辐照条件,能量沉积剖面一般是单调下降的,质子峰值能量及能量密度对能量沉积剖面 and 热激波波形有很大影响。当质子的峰值能量为 $E_0=2\text{ MeV}$ 时,由于表面以熔融为主,因而出现较强的负拉伸波;当 $E_0=1.5\text{ MeV}$ 时,表面以汽化为主,不出现或只出现极弱的负拉伸波。出现负拉伸波是有条件的,一般来说,只有当最高质子能量较高、能量密度较低时才可能出现负拉伸波结构。对于 $\text{H}^+ + \text{C}^+$ 的混合束辐照,当最高峰值能量分别为 1 MeV 和 2 MeV 时,数值计算得到的热激波如图7所示。显然,峰值能量的影响十分显著。

4 结束语

由不同能量离子(包括单能质子、实际辐射能谱)辐照铝的数值模拟计算结果我们可以得出,当离子束辐照材料时,同样会产生复杂的与X射线和电子束辐照相似的热-力学效应,包括材料表面的烧蚀、冲量和热激波等,并可采用相同方法予以研究。

在 $0.5\text{ MeV} \sim 10\text{ MeV}$ 的质子能量范围,虽然热激波与X射线和电子束辐照大体相似,由于能量沉积的特点不同,致使热激波波形也有其自身的特点。与X射线和电子束辐照不同,对低能离子,在一定的能量密度下热激波有可能出现双波峰结构,或存在应力平台。

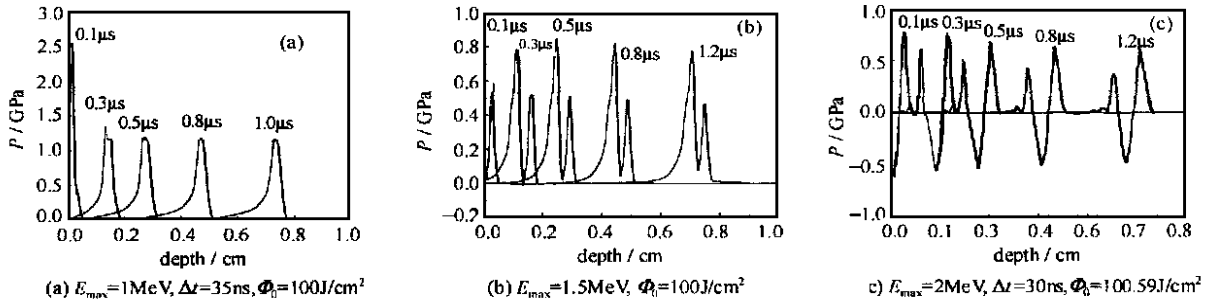


Fig 6 Evolution of the thermal shock wave in an Al target irradiated by the proton beam with energy spectrum

图 6 具有能谱的质子束辐照铝靶时热激波的形成

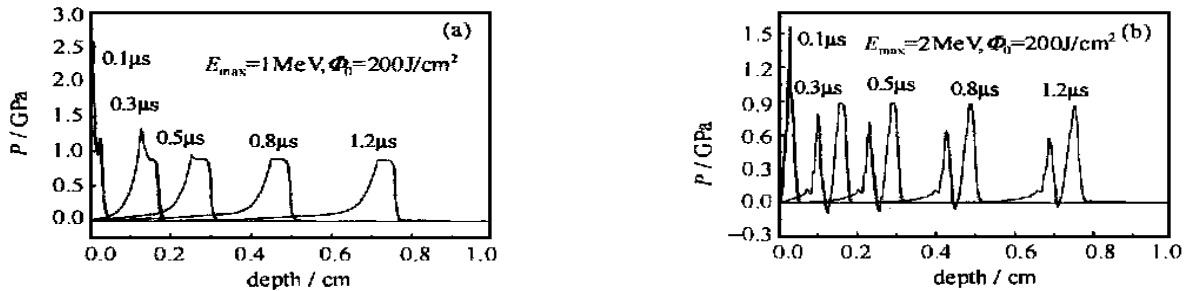


Fig 7 Evolution of the thermal shock wave in an Al target irradiated by the H⁺ + C⁺ proton beam with energy spectrum

图 7 具有能谱的 H⁺ + C⁺ 束辐照铝靶时热激波的形成

参考文献:

[1] Zreger J F, Biersaok J P, et al The Stopping and Range of Ions in Solids[M]. New York: Pergamon Press, New York, 1985.
 [2] 赵渭江, 颜莎, 等. 对于具有一定波形的脉冲质子束在铝靶中的能量沉积计算[R]. 北京: 北京大学等离子体研究所, 1998.
 [3] 赵渭江, 颜莎, 等. 强脉冲离子束能量沉积计算[R]. 北京: 北京大学等离子体研究所, 1998.
 [4] 杜书华, 等. 输运问题的数值模拟[M]. 长沙: 湖南科学技术出版社, 1989.
 [5] 周南, 丁升. 电子束辐照效应的数值模拟[J]. 计算物理, 1995, 12(3): 301~ 308

STUDY ON THERMAL-MECHANICAL EFFECTS CENERATED BY STRONG PULSE ION BEAM

ZHOU Nan, NIU Sheng-li, DING Sheng, QIU Airci

(Northwest Institute of Nuclear Technology, P. O. Box 69-15, Xi'an, 710024)

ABSTRACT: In this paper, the thermal-mechanical effects generated by the pulse ion beam with different energy are numerically studied using ITSW code. The characteristics of the effects, such as energy deposition, ablation, blow-off impulse and thermal shock wave, are obtained.

KEY WORDS: ion beam; radiation effect; thermal shock wave