

脉冲电子束对材料破坏效应的数值研究

汤文辉 张若棋

(国防科技大学应用物理系, 长沙, 410073)

摘 要 利用Monte Carlo方法计算了电子束的能量沉积, 用流体动力学方程计算了热击波的传播, 所用物态方程为GRAY三相物态方程, 全部计算均由程序DRAM ID完成。讨论了波的传播规律, 并给出了铝材迎光面反冲速度峰值及比质量亏损与电子束的入射通量和能量之间的关系。

关键词 电子束 冲击波 能量沉积 数值模拟

当固体靶受到脉冲电子束的辐照时, 其表层中会沉积大量能量, 能量沉积率可达到 $10^{10} \text{J} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ 以上。在能量沉积区域, 材料处于高温高压状态, 因此一部分或全部的被加热材料将以气体形式从迎光面反冲。由于动量守恒, 将在剩余的固体靶中产生一冲量载荷, 并进而产生一压力脉冲即热击波。

我们对铝靶在脉冲电子束作用下的热力学响应进行了研究。在数值模拟中, 能量沉积用Monte Carlo方法计算, 材料的动力学响应则是通过质量、动量和能量三个守恒方程的联立求解来计算。材料的热力学状态用GRAY三相物态方程^[1]进行描述, 固态的本构关系采用简单的弹塑模型。所有计算均由我们自行编制的程序DRAM ID完成。

1 计算方法

1.1 能量沉积

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。电子历史的终止能量取为8keV。计算中还考虑了次级效应和密度修正效应等。

设 E 为电子动能, 按照Berger^[2]的方法, 电子每走一步, 能量按对数减小。从第 n 到第 $n+1$ 步的能量变化为

$$E_{n+1} = K E_n \quad (1)$$

其中 $K = (1/2)^{1/m}$ 。因此粒子每走 m 步, 能量降低一半, 经验表明, m 取8或16比较好。

电子的轨迹步长为

$$\Delta S = \int_{E_{n+1}}^{E_n} \left[-\frac{1}{\rho} \left(\frac{dE}{dS} \right)_t \right]^{-1} dE \quad (2)$$

式中方括号内的量为运动电子在单位质量坐标内损失的总能量,

$$-\frac{1}{\rho} \left(\frac{dE}{dS} \right)_t = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{dE}{dS} \right)_c - \frac{1}{\rho} \left(\frac{dE}{dS} \right)_r \quad (3)$$

(3)式右边第一项为一个电子在通过单位质量厚度时由于碰撞所损失的能量。

国防科技基础研究基金资助课题

1997年8月21日收到原稿, 1997年10月9日收到修改稿。

汤文辉, 男, 1964年9月出生, 博士, 副教授。

$$-\frac{1}{\rho} \left(\frac{dE}{dS} \right)_c = \frac{2\pi N_A e^4 Z}{m v^2 A} \left\{ \ln \left[\frac{m v^2 E}{2I^2 (1 - \beta^2)} \right] - (2\sqrt{1 - \beta^2} - 1 + \beta^2) \ln 2 + 1 - \beta^2 + \frac{1}{8} (1 - \sqrt{1 - \beta^2})^2 - \delta \right\} \quad (4)$$

式中, m 为电子静止质量; v 为电子速度; c 为光速; Z 为原子序数; A 为原子量; N_A 为 Avogadro 常数; I 为原子的平均电离能 (MeV); e 为元电荷; δ 为电子密度效应的修正因子; $\beta = v/c$ 。(3) 式右边第二项为一个电子在经过单位质量厚度时由于韧致辐射而损失的能量

$$-\frac{1}{\rho} \left(\frac{dE}{dS} \right)_r = \frac{N_A m c^2 (\tau + 1)}{A} \sigma_r \quad (5)$$

当 $E \ll m c^2$ 时

$$\sigma_r = \frac{16}{3} \alpha Z^2 r_0^2 \quad 0.039 Z^2 r_0^2 \quad (6)$$

当 $m c^2 \ll E \ll m c^2 / \alpha Z^{1/3}$ 时

$$\sigma_r = 4\alpha \left\{ \ln [2(\tau + 1)] - \frac{1}{3} \right\} Z^2 r_0^2 \quad (7)$$

当 $E \gg m c^2 / \alpha Z^{1/3}$ 时

$$\sigma_r = 4\alpha \left[\ln [183 Z^{1/3}] + \frac{1}{18} \right] Z^2 r_0^2 \quad (8)$$

当 $E \sim m c^2$ 时, σ_r 没有解析表达式。式中 α 为精细结构常数; $r_0^2 = \left(\frac{e^2}{m c^2} \right)^2$; $\tau = \frac{E}{m c^2}$ 。电子在一个步长内沉积的能量为

$$\Delta E_b = \left(\frac{dE}{dS} \right)_i \Delta S + (E_c) \quad (9)$$

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

$$\left(\frac{dE}{dS} \right)_i = \left(\frac{dE}{dS} \right)_t - \left(\frac{dE}{dS} \right)_e \quad (10)$$

其中 $(dE/dS)_e$ 为电离能量损失。(9) 式的意思是, 一个电子在一个步长内的能量沉积并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地沉积在介质中。(9) 式中的 E_c 是电子的切断能量, 用括号括上, 表示当 $E < E_c$ 时, 需要加上, 当 $E > E_c$ 时不需要加上。

1.2 物态方程

材料在沉积大量能量的情况下将发生熔化甚至汽化, 所以我们采用 GRAY 三相物态方程来描述材料的热力学状态。GRAY 物态方程的基本思想是将状态划分为固-液和气-液两大相区。在固-液相区, 热力学状态又被细分为固相、熔化相、液相和热液相四个相区, 并采用液态金属的定标规律模型描述物态。在气-液相区采用修正的 van der Waals 方程描述物态。固-液相区物态方程的基本公式为

$$E(T, \rho) = E_c(\rho) + E_a(T, \rho) + E_e(T, \rho) + E_{ma}(T, \rho) \quad (11)$$

$$p(T, \rho) = p_c(\rho) + p_a(T, \rho) + p_e(T, \rho) + p_{ma}(T, \rho) \quad (12)$$

式中 ρ 为密度; T 为温度; E_c 和 p_c 分别为冷能和冷压; E_a 和 p_a 分别为原子热振动对物态方程的贡献; E_e 和 p_e 分别为电子热运动对能量和压强的贡献。这三项的具体形式可参阅文献 [1] 或 [3]。 E_{ma} 和 p_{ma} 分别为考虑熔化相变后对能量和压强的修正, 它们在不同相区有不同的形式:

(1) 对于 $T < T_m - \delta T$ 的情况(固相):

$$E_{ma} = p_{ma} = 0 \quad (13)$$

(2) 对于 $T_m - \delta T < T < T_m + \delta T$ 的情况(熔化相):

$$E_{ma} = U(T - v\delta T)(\Delta S - \alpha) \quad (14)$$

$$p_{ma} = U\rho T_m(2\gamma - 2/3)(\Delta S - \alpha) \quad (15)$$

(3) 对于 $T_m + \delta T < T < T_g$ 的情况(液相):

$$E_{ma} = T_m[\Delta S - \frac{\alpha}{2}(1 + \frac{T^2}{T_m^2})] \quad (16)$$

$$p_{ma} = \rho T_m(2\gamma - 2/3)[\Delta S - \frac{\alpha}{2}(1 + \frac{T^2}{T_m^2})] \quad (17)$$

(4) 对于 $T > T_g$ 的情况(热液相):

$$E_{ma} = T_m[\Delta S + \frac{\alpha}{2}(\frac{T_g^2}{T_m^2} - 1)] - \alpha\frac{T_g}{T_m}T \quad (18)$$

$$p_{ma} = \rho T_m(2\gamma - 2/3)[\Delta S + \frac{\alpha}{2}(\frac{T_g^2}{T_m^2} - 1)] - (2\gamma - 2/3)\rho\alpha\frac{T_g}{T_m}T \quad (19)$$

其中 U 为固液混合相区液相的份额; T_m 为熔化温度; γ 为 Gruneisen 系数; $2\delta T$ 为保持体积不变, 材料完全转变为液态与开始熔化的温度差; ΔS 为熔化熵; α 为液态比热随温度线性减小的关系式^[1]

$$C_v = 3R - \alpha T/T_m, \quad T_m < T < T_g \quad (20)$$

中的常数, 其中 R 为普适气体常数. 当温度升高到 T_g 时, 液态比热等于理想气体的比热. 当温度进一步升高时, 液态比热将保持理想气体的比热不变, 这种状态在 GRAY 物态方程中被称为热液态.

在液气共存区, van der Waals 方程的描述是不正确的, 为此, 我们采用 Maxwell 方法进行了修正.

2 结果

我们在本节给出铝在电子束作用下的有关计算结果. 计算中, 铝的物态方程参数取自文献 [1], 并假定电子束的辐照时间为 $0.12\mu\text{s}$, 辐射源的能量流历史为等腰三角形.

图1给出了入射通量为 $1\text{J}/\text{cm}^2$ 时铝中的能量沉积剖面, 其中 E_k 为入射电子能量. 图1(a)中的不同曲线对应于入射电子的不同能量(入射角度均为 0°), 图1(b)中的不同曲线对应于 1MeV 入射电子的不同入射角度. 从图1可知, 随着入射电子能量的增大, 能量沉积深度增大, 能量剖面变得平滑. 若入射电子的入射角度增大, 则能量沉积深度减小, 能量剖面变得陡峭, 所沉积的总能量也减少. 作为一种近似, 在靶足够厚的情况下, 总的沉积能量 Φ_t 与入射角 θ 余弦的四分之一次密成正比, 即 $\Phi_t = \Phi_0 \cos^{1/4}\theta$ 其中 Φ_0 为入射通量.

对于入射能量为 0.2 和 2MeV 的电子, 热击波在铝中的传播如图2所示, 其中 σ 为法向应力. 可以看出, 这种热击波在形态上是一个压缩波后紧跟一个拉伸波. 计算给出, 对于 0.2MeV 的入射电子, 表层中有 0.1mm 已汽化, 0.02mm 为液气共存状态, 0.02mm 为液态. 而对于 2MeV 的入射电子, 表层无熔化和汽化发生. 所以, 我们认为电子束产生热击波的机理主要为以下两种: 当表层无汽化时为热膨胀, 此时压缩波后紧跟一较强的拉伸波; 当表层发生剧烈汽化时为汽化反冲, 此时压缩波后无位伸波. 但由于电子束的穿深一般较大, 所以在汽化反冲诱

导热击波的同时, 往往还伴随有热膨胀的作用, 此时表现为压缩波后紧跟一较弱的拉伸波. 因

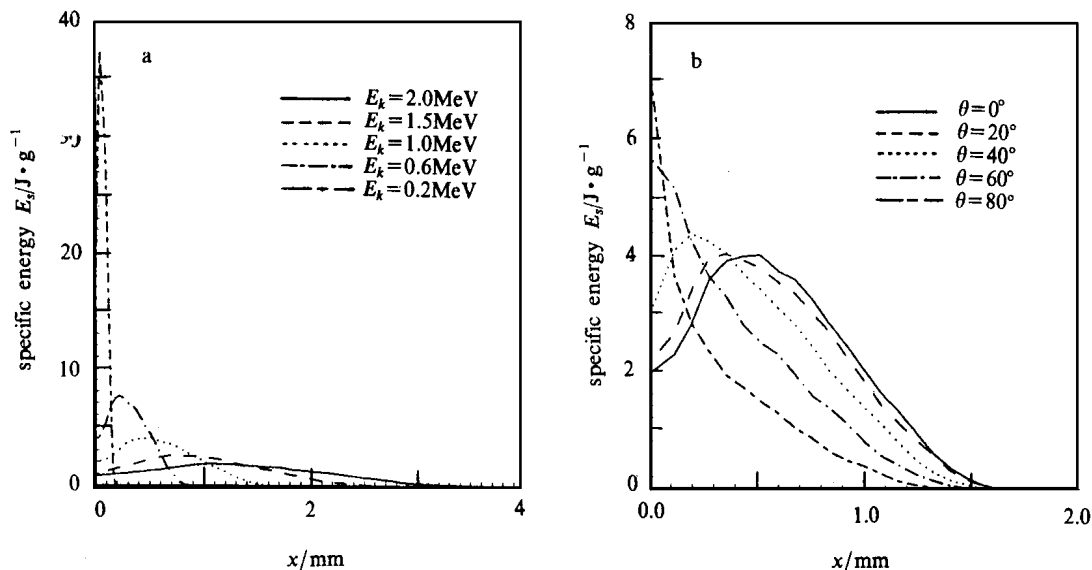


Fig 1 Energy deposition profiles in aluminum for different electron energies (a) and for different incident angles(b), normalized to 1J/cm² incident fluence, where E_k is the incident electron energy

图1 铝中的能量沉积剖面, 入射通量为1J/cm², 其中 E_k 为入射电子能量

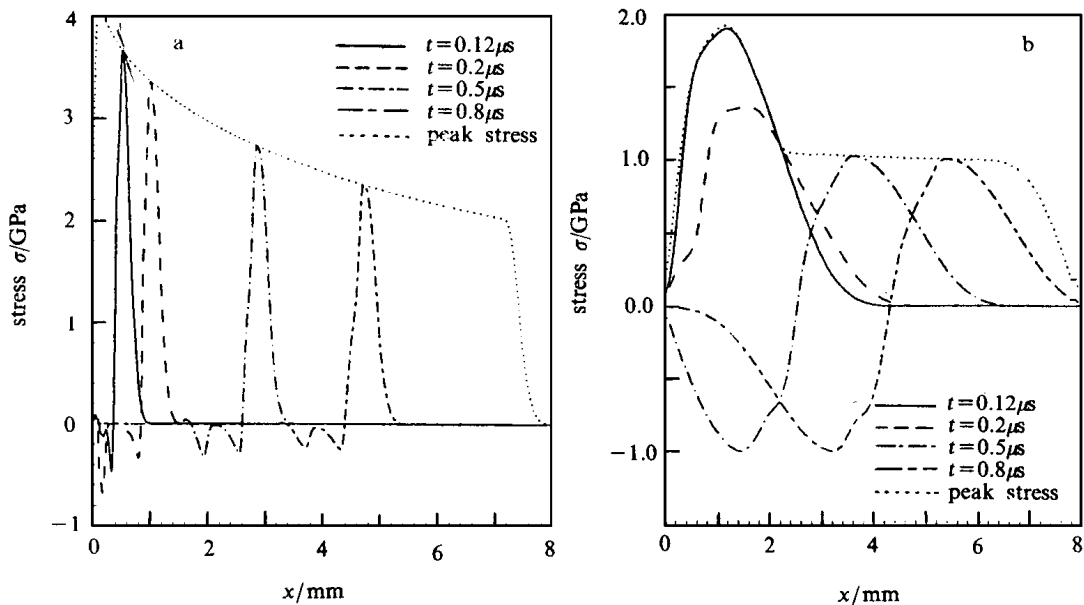


Fig 2 Propagation of stress wave in aluminum exposed to an incident fluence of 200J/cm² for (a) 0.2 MeV electrons and for (b) 2 MeV electrons

图2 铝中的热击波, 入射通量为200J/cm², (a) E_k = 0.2 MeV, (b) E_k = 2 MeV

此, 电子束产生的热击波波形与飞片打靶或炸药加载产生冲击波有明显的差别, 同时也有别于脉冲 X 射线产生的热击波^[4]. 如果电子能量较低, 应力波宽度较窄, 压缩波的幅度较大, 峰值

应力的衰减较快, 而拉伸波则较弱。当入射电子能量增大时, 压缩波变弱, 峰值应力的衰减较慢, 拉伸波增强。该拉伸波可以导致材料发生动态损伤甚至层裂破坏。

图3给出了迎光面粒子速度峰值随入射通量的变化, 其中实验数据取自文献[5]。当电子能量较大时(例如2MeV), 迎光面反冲速度峰值近似与入射通量成正比。与此不同, 当电子能量较小时, 迎光面反冲速度峰值随入射通量非线性增大。我们认为这一现象来源于以下原因: 当电子能量较大时, 能量沉积深度较大, 能沉剖面较平缓(参见图(1)), 所以即使入射通量足够大, 迎光面附近所吸收的能量也不足以使材料熔化或汽化。随着电子能量的减小, 能沉剖面将越来越陡, 迎光面附近所吸收能量增大, 所以当入射通量增大时, 迎光面处的材料将逐步进入熔化态、液态甚至气态。由于固体原子间较强的相互作用, 固态迎光面的速度总是较小, 且以前后振荡方式运动。当迎光面材料汽化后, 表面反冲速度将迅速增大到某一较大值。

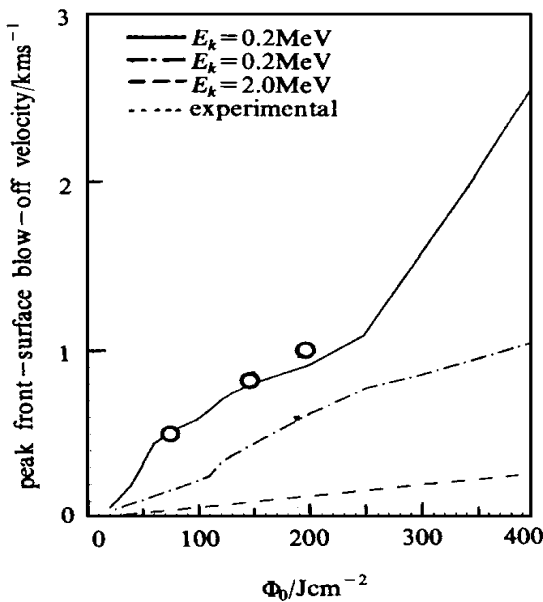


Fig 3 Peak front surface blow-off velocity vs incident fluence, where the experimental results are cited from Oswald et al [5] for 0.2 MeV electrons

图3 迎光面粒子速度峰值随入射通量的变化
其中的实验数据取自文献[5]

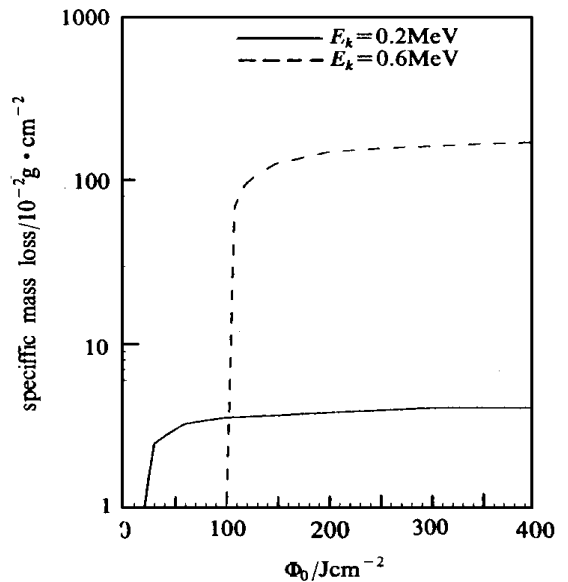


Fig 4 Specific mass loss as a function of incident fluence

图4 比质量亏损随入射通量的变化

比质量(单位长度的质量)亏损(汽化和液化的质量之和)与入射通量的关系如图4所示。可以看出, 质量亏损随入射通量的变化是非线性的。如果将质量亏损外推到零可得到相应的入射通量阈值。计算结果表明, 这个阈值强烈地依赖于电子能量。对于给定的电子能量, 当入射通量增大时, 比质量亏损迅速达到某一渐近值, 且这一渐近值等于能量沉积区域所包含的质量。从图4可以看出, 发生质量亏损的入射通量阈值和比质量亏损的渐近值都随入射电子能量的增大而增大。

3 结 论

铝在脉冲电子束辐照下将产生热击波,该热击波是压缩-拉伸复合波。对于给定的电子能量和材料,只有在一定的入射通量下才会使材料出现质量亏损。当入射通量增大时,比质量亏损将趋于某一渐近值,这一渐近值为能量沉积区域所包含的材料质量。

参 考 文 献

- 1 Royce E B. GRAY, a three phase equations of state. Lawrence Livermore Laboratory, Report No. UCRL-51121, 1971
- 2 Berger M J. Methods in Computational Physics. New York: Academic, 1963, Vol 1: 135~ 215
- 3 徐锡申,张万箱.实验物态方程导引.北京:科学出版社,1986
- 4 汤文辉,张若棋,赵国民.高压物理学报,1995,9(2): 107~ 111
- 5 Oswald Jr R B, McLean F B, Schallhorn D R, Oldham TR. *J Appl Phys*, 1993, **44**: 3563~ 3574

NUMERICAL RESEARCH ON THE DESTRUCTIBILITY OF PULSED ELECTRON BEAM TO MATERIALS

Tang Wenhui, and Zhang Ruoqi

Department of Applied Physics, National University of Defense Technology, Changsha, Hunan, 410073

ABSTRACT The energy deposition of electron beam and the wave propagation in aluminum are calculated by using Monte Carlo methods and the hydrodynamic equations, respectively. The equation-of-state (EOS) used in the calculation is the GRAY three phase EOS, all the calculation is performed by the program DRAMID. The relations between the peak front surface blow-off velocity, specific mass loss and incident fluence and electron energy for aluminum are discussed.

KEY WORDS pulsed electron beam, shock wave, energy deposition, numerical simulation