

质子辐照 Kapton/Al 的蒙特卡罗模拟

李瑞琦 李春东 何世禹 杨德庄

(哈尔滨工业大学空间材料与环境工程重点实验室, 哈尔滨 150001)

文 摘 采用蒙特卡罗方法 (MC方法), 模拟了质子辐照时质子的能量损失、射程、射程偏离及其产生的空位缺陷和电离能损分布。模拟结果表明: 入射能量在 10 ~ 300 keV 区间, Kapton/Al 对入射质子的阻止本领主要取决于电子阻止本领, 在 80 keV 出现峰值, 可作为地面模拟试验能量选取的参考; 质子在 Kapton/Al 中的射程分布可近似看作高斯分布, 质子射程及其偏离随能量增加而增加; 位移缺陷和电离作用是两个相对的过程, 低能时主要表现为位移缺陷, 高能时表现为电离作用。

关键词 质子辐照, Kapton/Al, 蒙特卡罗, 能量损失, 射程

Monte-Carlo Simulation of Kapton/Al by Proton Irradiation

Li Ruiqi Li Chundong He Shiyu Yang Dezhuang

(Key Laboratory of Space Materials & Environment Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001)

Abstract The distribution of energy loss, projected range, straggling, vacancies and ionization energy loss during proton irradiating is simulated by Monte-Carlo. Simulating results indicate that the electron stopping power is the main contribution to stopping power against the incident proton with an energy of 10 ~ 300 keV and a peak value of power occurs at 80 keV. This can be regarded as a reference for energy choosing in the simulation test on the ground. The distribution of range for proton in Kapton/Al is considered as the gauss distribution, and the proton range and its straggling is increased with the energy. The vacancy and ionization are two relative events and the vacancy event appear at low energy level while the ionization event appears at high energy level.

Key words Proton irradiation, Kapton/Al, Monte-Carlo, Energy loss, Range

1 引言

Kapton/Al 是在聚酰亚胺 (PI) 薄膜上真空镀膜得到的一类功能材料。作为柔性第二表面镜 (FOSR), 其 P 薄膜层对远红外辐射有强烈的吸收, 并可通过调节薄膜厚度来改变发射率的大小^[1]。这种柔性第二表面镜在国内外航天领域得到广泛应用, 并极有可能成为下一代长寿命空间飞行器被动热控措施的首选材料^[2~3]。对依靠自身特定的光学性能来满足服役要求的空间薄膜反射体而言, 空间辐照环境是对其性能影响最苛刻的外部因素。地球轨道空间辐射粒子, 尤其高份额的质子辐照是造成 Kapton/Al 热控涂层性能损伤的主要原因之一。Kapton/Al

光学性能的退化可导致航天器原有的热平衡遭到破坏, 造成航天器的可靠性下降, 工作寿命降低等严重后果^[4]。因此, 考察质子辐照条件下 Kapton/Al 性能变化是地面模拟试验中必不可少的一项工作。

蒙特卡罗方法 (MC) 可用来分析粒子在材料中的输运过程及效应, 是较为成熟和普遍认同的计算机模拟方法, 目前在空间辐照、离子注入以及核辐射等领域已得到广泛研究^[5~7]。高能粒子在金属材料中的运输模拟有一些研究, 但低能离子在有机聚合物或复合多层介质方面的模拟还比较少, 几乎未见报道^[8~9]。本文采用 MC 方法对质子辐照下的 Kapton/Al 进行了模拟, 模拟结果对地面模拟质子辐照实验

收稿日期: 2006 - 08 - 29; 修回日期: 2007 - 03 - 20

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (50431020)

作者简介: 李瑞琦, 1970 年出生, 博士研究生, 主要从事空间环境与功能材料交互作用方面的研究工作

条件的确定以及材料损伤的微观机理分析将具有重要的指导意义。

2 蒙特卡罗模拟

MC方法^[10]通过计算机模拟跟踪一大批入射粒子在介质中输运和碰撞的过程,粒子的位置、能量损失以及次级粒子的各种参数都在整个过程中跟踪存储。MC方法是建立在二元碰撞基础之上的,主要适用于模拟能量在 keV 以上的离子在固体中的散射过程,它不仅可以模拟离子的运动历史,同时也可以模拟出固体中反冲原子的运动历史,并由此可以确定移位原子的空间分布及靶原子的溅射情况。

在模拟程序中,采用了如下基本假设:(1)固体是一个非晶靶,即原子在靶中的排列是随机的;(2)入射离子同固体中单个原子的相互作用被看成是一个二体碰撞过程,忽略周围原子的影响;(3)核散射和电子阻止被认为是两个独立的过程。

2.1 碰撞过程

具有一定能量的带电粒子入射到固体表面,一方面它将同表面层附近的原子发生弹性和非弹性碰撞而不断损失能量(当入射粒子的能量损失到某一临界值时,将停止在固体表面层内);另一方面,固体中的原子通过同入射粒子的碰撞而获得能量,并做反冲运动。初始反冲原子与其他静止的原子碰撞会产生新的反冲原子,进而形成一系列原子的级联运动。入射离子与靶材原子碰撞过程见图 1。

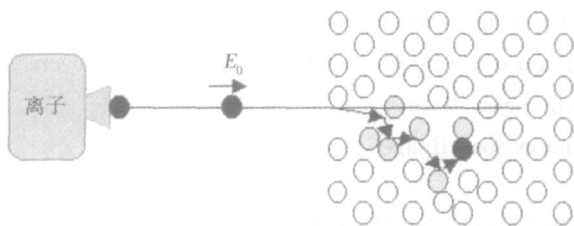


图 1 入射离子与靶材原子碰撞示意图

Fig 1 Scheme of collision between incident ions and atoms in target

2.2 能量损失的计算

通常用阻止本领 $(-dE/dx)$ 来描述载能离子在固体中穿行单位长度 dx 内的能量损失。入射离子的能量损失可以分为两部分:一部分用于靶原子核的反冲运动,另一部分用于激发或电离靶原子核外的电子,分别对应于核阻止本领 $(-dE/dx)_n$ 和电子阻止本领 $(-dE/dx)_e$ 。

近似地认为这两种能量损失过程是独立的,入射粒子在单位路径上的总能量损失(总阻止本领)为:

$$(-dE/dx) = (-dE/dx)_n + (-dE/dx)_e \quad (1)$$

对于核碰撞过程,入射粒子的能量损失是不连续

的,而且其运动轨迹具有明显的角偏转,由此可以造成原子的移位运动。入射粒子同靶原子核每发生一次碰撞,其能量损失为:

$$T = \frac{4m_1m_2E_0}{(m_1+m_2)^2} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (2)$$

通过 Rutherford 微分散射截面,可导出粒子在固体中穿行长度为 x 时,其能量损失为:

$$\left(-dE/dx\right)_n = N \int_0^{\tau_{\max}} \frac{p(m_1+m_2)^2}{m_1m_2E_0 \sin^2\theta} \left| \frac{dT}{d\theta} \right| d\theta \quad (3)$$

式中, m_1 、 m_2 分别为入射粒子和靶原子质量, E_0 为初始能量; θ 为质心系下的散射角, p 为碰撞参数, N 为靶原子密度。

对于电子阻止本领的计算,由于涉及到入射粒子同靶原子核外电子的多体相互作用过程,计算过程要复杂得多。在 MC 模拟过程中, Ziegler 等人给出了如下简便的电子阻止本领的经验公式:

$$\left(-dE/dx\right)_e = S_p N \quad (4)$$

入射能量 $E > 25$ keV/amu 时,电子阻止截面 S_p 为:

$$S_p = S_l S_h / (S_l + S_h) \quad (5)$$

式中, S_l 为低速质子的阻止截面, S_h 为高速质子的阻止截面,且有:

$$S_l = aE^b + cE^d, S_h = (e/E^f) \ln(g/E + hE) \quad (6)$$

式中, a, b, c, d, e, f, g, h 均是常数,对不同的靶它们的取值不同。

入射能量 $E < 25$ keV/amu 时,阻止截面为:

$$S_p = k(E/25)^{0.45} \quad (Z_2 > 6) \quad (7)$$

$$S_p = k(E/25)^{0.25} \quad (Z_2 < 6) \quad (8)$$

式中, k 为常数, Z_2 为靶原子的核电荷数。

2.3 射程的计算

离子入射到材料表面,它在固体中的轨迹不是一条直线,而是一条折线。离子在固体中实际穿行的路程称为总射程,用 R 表示, R_p 定义为离子的总射程 R 在其入射速度方向的投影, R_p 为射程偏离,其大小与离子在固体中的能量损失状况有关,即与核阻止本领和电子阻止本领有关。离子在固体的总射程可以表示为:

$$R = \int_0^{E_0} \frac{dE}{-dE/dx} = \int_0^{E_0} \frac{dE}{NS(E)} \quad (9)$$

MC 方法通过离子的碰撞自由程、实验坐标系中的散射角、速度的方位角、能量损失等物理量知道离子在固体中的历史,再对不同离子的运动历史进行统计平均,得到离子在固体中的浓度分布 $N_i(x)$,进而可以确定出离子的投影射程。

3 模拟结果与分析

以上述原理为基础,采用 MC 模拟方法在微机上了进行了模拟计算,在计算中假设单能 10 ~ 300 keV 质

子垂直入射于无限大平板无定型 Kapton/A1材料中,通过跟踪 10^4 个离子历史,分别记录弹性能量损失和非弹性能量损失、射程及射程偏离等。

3.1 质子能量对 Kapton/A1 阻止本领的影响

图 2 为质子辐照后 Kapton/A1 阻止本领与入射质子能量关系曲线,可以看出,在入射能量 10 ~ 300 keV 区间, Kapton/A1 对入射质子的核阻止本领比电子阻止本领小 2 个数量级,电子阻止本领曲线与总阻止本领曲线几乎重合,说明在此能量区间 Kapton/A1 对入射质子的阻止本领主要来自于电子阻止本领的贡献。这一点也可以从模拟得到的质子在 Kapton/A1 中的运动轨迹得到印证,绝大部分入射质子的运动轨迹没有发生明显的角偏转。还可以看到,入射质子能量在 10 ~ 80 keV,核阻止本领随能量的增大快速降低,大于 80 keV 时,降低趋势趋于平缓;入射质子能量在 10 ~ 80 keV,电子阻止本领随能量的增加而增加,在 80 keV 出现峰值,而后随能量增加呈现下降的趋势。能量损失的峰值对应辐照效应的最强点,所以入射能量 80 keV 附近应作为质子辐照 Kapton/A1 地面模拟试验重点考察的能量范围。

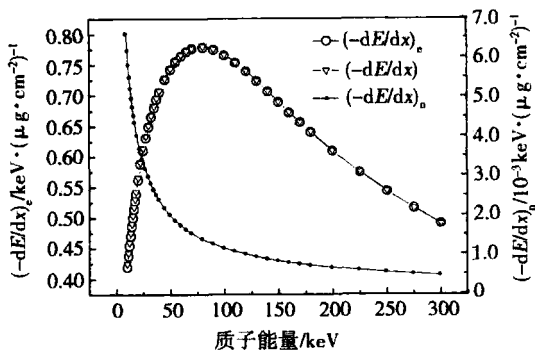


图 2 质子辐照后 Kapton/A1 阻止本领与入射质子能量关系
Fig 2 Relationship between stopping power and proton energy for Kapton/A1 after proton irradiation

3.2 质子能量对其浓度与射程分布的影响

图 3 给出了不同能量质子辐照后质子在 Kapton/A1 中的浓度与射程分布关系,可以看出,即使对同一入射能量的质子它们在 Kapton/A1 中的穿行深度是不同的,其终止位置(即穿行深度)在入射方向上有一定空间分布,可近似看作高斯分布,这是由质子同材料中的原子碰撞过程的随机性决定的。对于一定能量入射质子,最高沉积浓度对应着质子的平均射程,即高斯分布曲线峰值点处。随着质子能量的增加,质子向 Kapton/A1 的更深处运动,射程分散程度变大,质子最高沉积浓度变小,表现为高斯分布曲线的峰高变小而半峰宽逐渐增大。

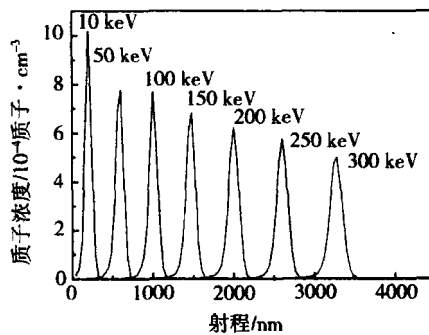


图 3 不同能量质子在 Kapton/A1 中的浓度与射程分布
Fig 3 Profiles of concentration and target depth for protons with various energies in Kapton/A1

3.3 质子能量对 Kapton/A1 射程及其偏离的影响

图 4 为质子辐照后 Kapton/A1 射程及其偏离与入射质子能量的关系曲线。由图 4 可见,质子辐照 Kapton/A1 时,质子射程随能量增加而增加,呈线性递增;射程偏离也随着能量的增加而增加,横向偏离(入射截面沿 x 轴方向)的值整体上略高于纵向偏离(入射截面沿 y 轴方向)。在 10 ~ 50 keV 能量区间,质子射程偏离的变化略大, $E > 50$ keV, 质子射程偏离的变化变小,这可能是因为质子能量增高后,使其直接穿过表面区的长度增加而损失较多能量,使得质子能量损失差距变小,这样入射质子的射程偏离的变化就变小。

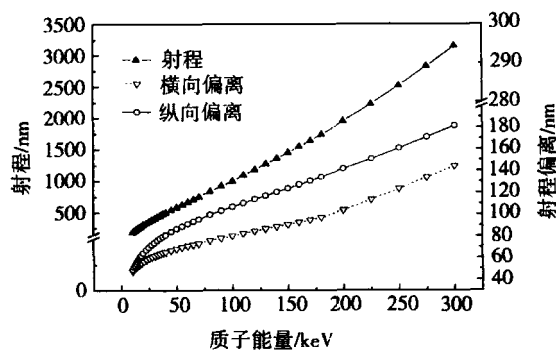


图 4 质子辐照后 Kapton/A1 射程及其偏离与入射质子能量的关系

Fig 4 Relationship between projected range, straggling and ion energy for Kapton/A1 after proton radiation

3.4 质子能量对其空位分布和电离能量损失的影响

图 5 为不同能量质子在 Kapton/A1 中空位分布曲线,可以看出随着入射质子在 Kapton/A1 中的穿透,产生的位移缺陷先增加后下降,在入射质子射程深度附近产生的位移缺陷浓度最大,这主要是由于位移缺陷的产生源于入射粒子于材料原子之间的弹性散射(核阻止本领)。低能时弹性散射占主要地位,

导致较多位移缺陷的产生,高能时非弹性散射(电子阻止本领)占主要地位,入射粒子主要以非弹性散射通过对靶材料的电离和激发损失能量,如图6所示。在80 keV能量范围内,入射粒子与材料原子之间电离作用的能量损失,随着入射深度的增加逐渐下降,在靶材表面获得电离能量损失的最大值;能量再增高时,入射质子的穿透能力大大增强,相对削弱了它与靶材原子间的散射作用,使得质子在靶材一定深度处才达到电离能量损失的峰值。

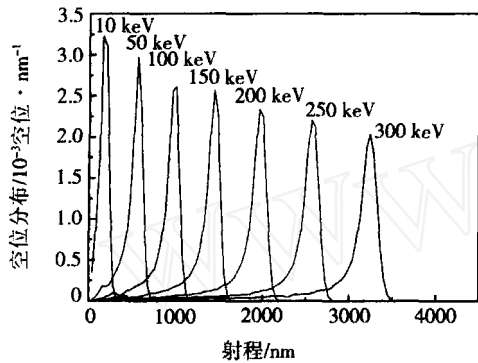


图5 不同能量质子在Kapton/A1中空位分布

Fig 5 Profiles of vacancies for protons with various energies in Kapton/A1

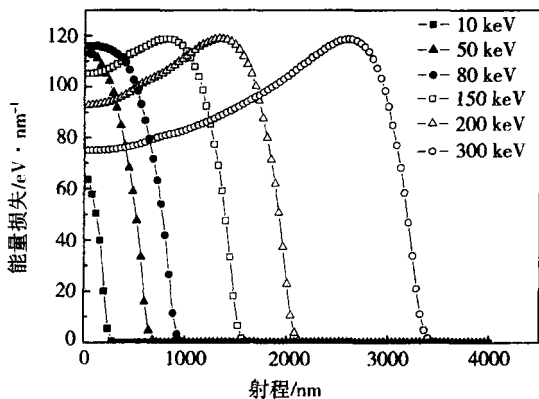


图6 不同能量质子在Kapton/A1中电离能量损失分布

Fig 6 Profiles of ionization energy loss for protons with various energies in Kapton/A1

4 结论

在入射能量10~300 keV区间, Kapton/A1对入射质子的阻止本领主要取决于电子阻止本领,核阻止本领随能量的增大快速降低,电子阻止本领随能量的增加先增加后下降,在80 keV出现峰值;质子在Kapton/A1中的射程分布可近似看作高斯分布,随着质子能量的增加,高斯分布曲线的峰高变小而半峰宽逐渐增大,质子射程及其偏离随能量增加而增加;位移缺陷和电离作用是两个相对的过程,低能时主要表现为位移缺陷,高能时表现为电离作用。

参考文献

- 1 高慎斌. 卫星制造技术(下). 北京:宇航出版社, 1998
- 2 Kanner H S, Stuckey C I, Davis D W. Recession curve generation for space shuttle solid rocket booster thermal protection system coatings AIAA 2002 - 3334
- 3 Li Chundong, Yang Dezhuang, He Shiyu. Effect of electron exposure on optical properties of aluminized polyimide film. Journal of Materials Research, 2002; 17(9): 2 442 ~ 2 444
- 4 李春东, 杨德庄, 何世禹. 电子辐照能量对Kapton/A热控涂层光学性能的影响. 强激光与粒子束, 2003; 15(8): 741 ~ 742
- 5 Miyagawa Y, Nakadate H, Djurabekova F. Dynamic-sasamal: simulation software for high-dose ion implantation. Surface and Coatings Technology, 2002; 158(159): 87 ~ 93
- 6 王同权, 沈永平, 张若棋. 空间辐射效应的蒙特-卡罗模拟. 强激光与粒子束, 2000; 12(3): 339 ~ 341
- 7 陈世彬, 张义门, 陈雨生. 质子和1 MeV中子在硅中能量沉积的模拟计算. 高能物理与核物理, 2001; 25(4): 365 ~ 370
- 8 Dinter H, Leuschner A, Tesch K. The field of scattered radiation in the tunnel of the proton storage ring HERA: measurements and calculations. Nuclear Instrument and Methods in Physics Research A, 1999; 438: 560 ~ 572
- 9 孙友梅, 朱智勇, 金运范. 高能¹³⁶Xe离子辐照聚酰胺亚胺化学改性的电子能损效应. 核技术, 2004; 27(3): 213 ~ 216
- 10 Ziegler J F, Biersack J P, Littmark U. The stopping and range of ions in solids Vol 1. New York: Pergamon Press, 1985

(编辑 李洪泉)