文章编号：1000-5773(2010)05-0373-04

聚酯材料在脉冲电子束辐照下的动力学效应与材料参数*

汤文辉，陈 华

（国防科技大学理学院，湖南长沙 410073）

摘要：对聚酯材料在电子束辐照下的动力学效应进行了研究。采用 Monte Carlo 方法，计算了脉冲电子束在聚酯材料中的能量沉积；采用流体动力学方法，对聚酯材料在电子束辐照下的热击波和喷射冲量进行了数值模拟；采用将喷射冲量和热击波压力的数值结果与实验测量结果进行逼近的方法，得到了聚酯材料的升华能约为 1.1 kJ/g，Grüneisen 系数的常态值约为 0.2。

关键词：电子束；热击波；喷射冲量；聚酯；物态方程

中图分类号：O521.2 **文献标识码**：A

1 引 言

当电子束辐照材料时，由于电子与材料原子的相互作用，入射电子的动能被转化为材料的内能，形成从受光面向材料内部成指数规律下降的能量沉积。大量的热能在材料表层沉积，使得材料表层内部产生很高的压力和温度，指数规律的能量沉积又使温度和压力具有很大的空间梯度；另一方面，高温高压必然造成材料剧烈的绝热膨胀，如果辐照面物质发生汽化，则汽化物质将反向高速飞散，从而对未汽化的靶物质产生汽化反冲作用。通过这些因素的共同作用，最终在材料内部形成一个非定常的高温压力脉冲，即热冲击波，简称热击波。

本工作对聚酯材料在脉冲电子束作用下的动力学效应进行了数值模拟研究，并探讨了 Grüneisen 系数和升华能两个材料参数的间接确定方法。在数值模拟中，能量沉积用 Monte Carlo 方法计算，而材料在能量沉积作用下的动力学响应则采用 PUFF 方程进行描述，并采用流体动力学方法进行数值模拟。所有计算均由自行编制的程序 DRAM 完成。

2 计算方法

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，计算中还考虑了次级效应和密度修正效应等，具体计算公式可参见文献[1]。

在强脉冲电子束辐照条件下，材料表层将出现汽化（或升华），因此采用 PUFF 方程描述材料的热力学性质。在压缩区，PUFF 方程即是常用的 Grüneisen 方程

$$p = p_{\mathrm{H}} + \Gamma_0 \rho_0 (e - e_{\mathrm{H}}) \tag{1}$$

其中

$$p_{\mathrm{H}} = \frac{c_0^2 (v_0 - v)}{[v_0 - s(v_0 - v)]^2} \tag{2}$$

* **收稿日期**：2009-09-21；**修回日期**：2010-05-26

基金项目：国家自然科学基金(10672180)；高等学校博士学科点专项科研基金(20059998005)

作者简介：汤文辉(1964—)，男，博士，教授，主要从事高能粒子束辐照动力学和冲击波物理等研究.
E-mail：wenhuitang@163.com

$$e_{\mathrm{H}}=\frac{1}{2}p_{\mathrm{H}}(v_0-v) \tag{3}$$

式中：p 为压强；e 为比内能；c_0 和 s 为材料冲击波速度关系式 $D=c_0+su$ 中的常数；ρ 为密度；$v=1/\rho$，为比体积；Γ_0 为常态 Grüneisen 系数。PUFF 方程在膨胀区的形式为

$$p=\rho\left[H+(\Gamma_0-H)\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^n\right]\cdot\left\{e-e_s\left[1-\exp\left(\frac{N_0\rho_0}{\rho}(1-\rho_0/\rho)\right)\right]\right\} \tag{4}$$

式中：n 通常取 0.5；$H=\gamma-1$，γ 为气体的绝热指数；e_s 为材料的升华能；N_0 是材料常数，可根据下式进行计算

$$N_0=c_0^2/\Gamma_0 e_s \tag{5}$$

在数值计算中，一旦靶物质发生汽化，总的喷射冲量（或称为汽化反冲冲量）可表示为所有汽化反向运动物质的冲量之和[2]，即

$$I=\sum_{u_j<0,e_j>E_s}m_j\left|u_j\right| \tag{6}$$

式中：m_j 为第 j 个已汽化的粒子（或网格）质量，u_j 为相应的粒子速度。

3 材料参数的确定

由 PUFF 物态方程可知，要对材料在电子束辐照下的动力学效应进行模拟，需要知道材料的基本物态方程参数：ρ_0、c_0、s、Γ_0、e_s、γ。一般来说，ρ_0、c_0 和 s 较容易测量；γ 可由气体的分子结构决定，对于聚酯，汽化后成为双原子分子和多原子分子的混合气体，所以 γ 值可取 1.3～1.4；Γ_0 和 E_s 则是不容易测量的参数。作为一种近似，Γ_0 和 e_s 也可采用下面关系式进行估算[3]

$$\Gamma_0=2s-1 \tag{7}$$

$$e_s=\frac{1}{2}(c_0/s)^2 \tag{8}$$

然而，这种估算并不准确[4]。

对于压缩区，Grüneisen 方程的实质是反映点阵热能和热压之间的关系。在一般的碰撞冲击波中，在约 10 GPa 压力以下的冲击压缩范围内，冷压占绝对主要的份额，热压的份额则很小，即使 Γ_0 不是很准确也不会带来明显误差。但在能量沉积条件下，热压占的份额很大，如果 Γ_0 定得不准，必然给热击波的传播与衰减规律带来显著误差。

对于喷射冲量，它一方面对热击波的传播产生一定影响，更重要的是，它是研究结构响应的重要基础[5]。如果升华能参数定得不准确，汽化状态与气体运动就算不准，因而喷射冲量就会算不准。然而，初步调研表明，国内目前还不具备直接测量升华能的条件，因此要确定升华能数据，需要依赖其它实验数据。

我们拟采用材料在电子束辐照下的热击波压力和喷射冲量的实验数据来反演常态 Grüneisen 系数和升华能数据。也就是说，利用电子束的能谱和能通量等条件及材料的元素组成计算能量沉积，然后利用包含 PUFF 物态方程的自编流体动力学软件 DRAM，计算辐照面的喷射冲量和靶中的热击波压力，其中 Γ_0 和 e_s 的初值可根据(7)式和(8)式确定。通过不断调节 Γ_0 和 e_s 的值，使喷射冲量和热击波压力的计算值与实验测量值逼近。由于实验测量难免存在一定的误差，数值计算与实验的逼近也不可避免存在一定的截断误差，用这种方法得到的参数值或许不一定有很高的精度，但基本是可靠的。

4 计算结果

聚酯是一种常用的化工材料，主要由 C、H、O 三种元素组成，其元素的质量分数和原子数分数列于表 1。通过计算，得到了两种不同能谱电子束辐照下的能量沉积分布，如图 1 所示。

通过反复调试和比较，得到了聚酯的升华能约为 $e_s=1.1$ kJ/g，常态 Grüneisen 系数 Γ_0 的值约为 0.2。图 2 给出了聚酯中热击波的传播规律，其中电子束能通量为 237 J/cm^2，电子平均能量为 0.47 MeV。

表 1　聚酯材料的元素组分

Table 1　The element composition of polyester

Element	Mass fraction/(%)	Atom number fraction/(%)
C	62.5	45.45
O	33.3	18.18
H	4.2	36.36

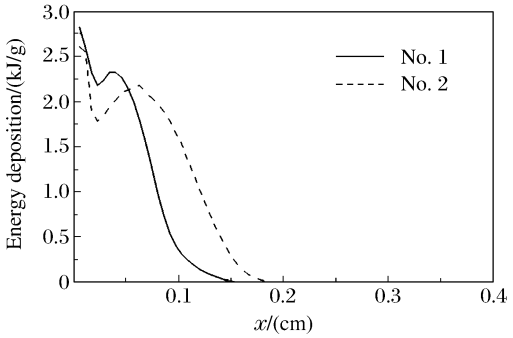


图 1　聚酯材料在两种不同能谱电子束辐照下的能量沉积

Fig. 1　Energy deposition distributions in polyester when radiated by electron beam with 2 kinds of energy

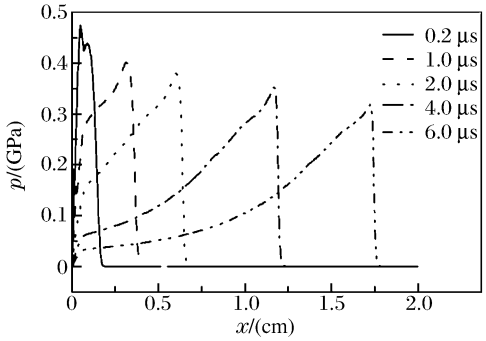


图 2　聚酯在电子束辐照下的热击波

Fig. 2　Thermal shock wave propagation in polyester induced by electron beam

表 2 给出了聚酯在电子束辐照下的喷射冲量和质量亏损的计算结果与实验结果,其中 Φ_0 为由实验得出的能通量,J_m 为质量亏损,I 为冲量。通过计算结果与实验结果的比较可知,冲量的计算值与实验值是基本吻合的。

表 3 给出了聚酯在电子束辐照下的热击波峰值压力的计算结果与实验结果,其中 p 为 1.32 cm 处的热击波压力(计算中靶的总厚度为 2.0 cm)。通过比较表明,压力的计算值与实验值基本一致。

表 2　聚酯在电子束辐照下的喷射冲量和质量亏损

Table 2　The blow off impulse and mass loss induced by electrom beam irradiating on polyester

No.	Φ_0/(J/cm^2)	Experimental results		Calculation results	
		J_m/(g)	I/(Pa·s)	J_m/(g)	I/(Pa·s)
1	234	0.089	709	0.106	718
2	256	0.112	759	0.146	749

表 3　聚酯在 1.32 cm 处的热击波峰值压力

Table 3　The peak pressure of thermal shock wave at 1.32 cm in polyester

No.	Φ_0/(J/cm^2)	p_{exp}/(GPa)	p_{cal}/(GPa)
1	237	0.369	0.366
2	306	0.444	0.432

5　结 束 语

对聚酯材料在脉冲电子束辐照下的热击波和喷射冲量传播进行了数值模拟。分析表明,材料的常态 Grüneisen 系数和升华能对于热击波和喷射冲量的确定非常关键,但这两个参数又难以直接测量。本研究采用数值模拟方法对热击波和喷射冲量的实验数据进行逼近,得到了聚酯的常态 Grüneisen 系数和升华能数据。这种获得材料参数的间接方法虽然不一定有很高的精度,但基本是可靠的,而且是在一定条件下解决问题的有效方法。

感谢西北核技术研究所林鹏副研究员提供了实验数据。

References:

[1] Tang W H, Zhang R Q. Numerical Research on the Destructibility of Pulsed Electron Beam to Materials [J]. High Power Laser and Particle Beams, 1997, 9(4): 617-622. (in Chinese)
汤文辉,张若棋. 脉冲电子束对材料破坏效应的数值研究 [J]. 强激光与粒子束, 1997, 9(4): 617-622.

[2] Zhao G M, Zhang R Q, Tang W H. The Blow off Impulse on Material due to Pulsed X-Ray Radiation [J]. Explosion and Shock Wave, 1996, 16(3): 259-265. (in Chinese)
赵国民,张若棋,汤文辉. 脉冲 X 射线辐照材料引起的汽化反冲冲量 [J]. 爆炸与冲击, 1996, 16(3): 259-265.

[3] Tang W H, Zhang R Q. Introduction to Theory and Computation of Equation of State [M]. 2nd ed. Beijing: Higher Education Press, 2008. (in Chinese)
汤文辉,张若棋. 物态方程理论及计算概论 [M]. 第 2 版. 北京:高等教育出版社, 2008.

[4] Ran X W, Tang W H. New Method for Calculating Cold Energy, Cold Pressure and Cohesive Energy of Solids [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2003, 17(1): 50-55. (in Chinese)
冉宪文,汤文辉. 一种计算固体冷能、冷压和结合能的新方法 [J]. 高压物理学报, 2003, 17(1): 50-55.

[5] Zhao G M. Investigations of Simulation Techniques for Studying Structural Response of Cylindrical Shells under Powerful Pulsed X-Ray Radiation [D]. Changsha: Graduate School of National University of Defense Technology, 1997. (in Chinese)
赵国民. 强脉冲 X 射线辐照下圆柱壳体结构响应的模拟技术研究 [D]. 长沙:国防科技大学研究生院, 1997.

The Dynamics Effect and Material Parameters of Polyester Radiated by Electron Beam

TANG Wen-Hui, CHEN Hua

(*College of Science, National University of Defense Technology, Changsha* 410073, *China*)

Abstract: The dynamics effect of polyester under electron beam radiation is studied. The energy deposition of electron beam in polyester is calculated by Monte Carlo methods. The thermal shock wave propagation and the blow off impulse of polyester are simulated by the hydrodynamic method. From the comparison between simulation and experimental results of blow off impulse and peak pressure of thermal shock, the obtained cohesive energy of polyester is about 1.1 kJ/g, and the value of Grüneisen parmeter at standard state is about 0.2.

Key words: pulsed electron beam; thermal shock wave; blow off impulse; polyester; equation of state