

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПУЧКА С МАТЕРИАЛАМИ НА ВЫХОДЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО УСКОРИТЕЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ

В.В.Ганн, О.В.Юдин, А.И.Жуков, М.А.Красноголовец  
ННЦ "ХФТИ", ХГТУРЭ

Развитие современных радиационных технологий связано с необходимостью проведения исследований взаимодействия частиц и излучений с материалами с учетом заданной геометрии облучаемого объекта, технологического режима облучения и требований радиационной безопасности производства для персонала и окружающей среды.

Данная работа имеет двоякую цель. С одной стороны, она является продолжением исследований фундаментальных проблем радиационной повреждаемости материалов ускоренными электронами, с другой - является частью программы научного сопровождения работ по технологическому применению мощных электронных пучков для модификации свойств материалов.

В настоящее время ускорители электронов широко используются в мировой практике получения материалов с новыми свойствами для электронной, медицинской и пищевой промышленности, в частности, для стерилизации изделий и консервирования продуктов длительного хранения. С целью научного сопровождения технологических работ был создан комплекс программ для компьютерного моделирования процессов взаимодействия пучка электронов с многослойными и многокомпонентными материалами в виде изделий конкретной формы [1]. С помощью этого комплекса были исследованы пространственные распределения энерговыделения [2], дефектообразования [3], температурных и термоупругих полей [4], процессы нагрева и охлаждения мишени при электронном облучении с учетом импульсности облучения, размеров и формы пучка, а также геометрии облучаемых объектов. Движение электронов в мишени моделировалось методом Монте-Карло [5], моделирование нестационарных температурных полей, а также полей механических и термоупругих деформаций проводилось методом конечных элементов [6] с учетом импульсности пучка и режима сканирования. Созданный комплекс программных средств был использован для оптимизации процесса облучения медицинских изделий на выходе технологического ускорителя электронов с целью достижения заданной степени однородности распределения поглощенной дозы при минимальных затратах энергии пучка.

Рассмотрим проблемы, возникающие при разработке технологического процесса стерилизации медицинского инструмента с использованием ускорителя электронов.

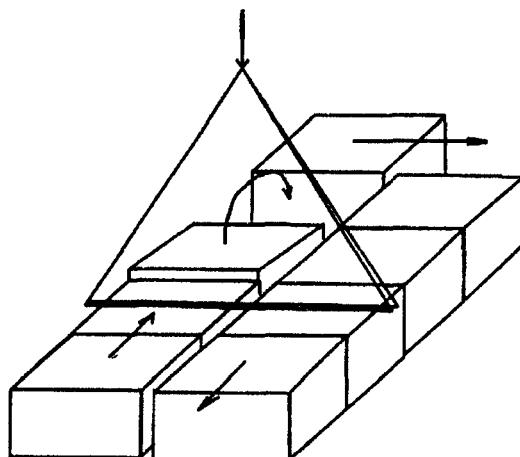


Рис. 1. Конструкция мишленного комплекса на выходе ускорителя электронов.

На рис. 1 показана конструкция мишленного комплекса и технологическая схема облучения. Электронный пучок падает сверху и сканирует упаковки с медицинским инструментом, которые двигаются по двум транспортерам во взаимно противоположных направлениях. Упаковки облучаются с одной стороны, в дальнем конце транспортера они переворачиваются и перемещаются на второй транспортер, вторично проходят под пучком и облучаются с другой стороны. Были рассмотрены упаковки в виде ящиков размерами  $49 \times 21 \times 29$  см со средней плотностью  $0,11-0,16$  г/см<sup>3</sup>, из материала, состоящего в основном из углерода, облучаемые сканирующим пучком электронов с энергиями 6-10 МэВ при пилообразной форме развертки с максимальным углом отклонения пучка 0,3 радиан. Параметры режима облучения приведены в табл. 1.

Таблица 1

Мощность пучка электронов	10 кВт
Энергия пучка электронов	6-10 МэВ
Разброс энергии в пучке	0,1 МэВ
Диаметр пучка электронов	2 см
Расходимость пучка	0,01 радиан
Амплитуда сканирования	0,3 радиан
Частота сканирования	3,1 гц
Частота импульсов	300 гц
Расстояние до объекта	80 см
Скорость объекта	4 см/сек
Высота объекта	49 см
Толщина объекта	29 см
Плотность объекта	0,11-0,16 г/см <sup>3</sup>

Основной задачей оптимизации технологического процесса является подбор параметров пучка и режима облучения, которые обеспечили бы однородность пространственного распределения поглощенной дозы на уровне не хуже 15%. Выбор режимов облучения может быть произведен эмпирическим путем, однако это требует постановки большого количества дорогостоящих контрольных экспериментов, поэтому в данной работе оптимизация значений параметров пучка и режимов облучения проводилась методом компьютерного моделирования.

Режим сканирования пучка должен обеспечивать однородность энерговыделения в мишени вблизи ее поверхности. При малых углах развертки наиболее подходящей является пилообразная форма зависимости угла отклонения пучка  $\phi$  от времени  $t$ , состоящая

из прямолинейных отрезков типа  $\phi = kt$ , как это показано на рис. 2. При больших углах развертки для достижения однородности следует использовать более сложную форму развертки, состоящую из криволинейных отрезков функции  $\phi = \arcsin(th(kt))$ . Вдоль поверхности мишени возникает также периодическая неоднородность энерговыделения, которая определяется конечными размерами пучка  $d$ , скоростью движения объекта  $v$  и частотой сканирования  $v_{ск}$  пучка. Эта неоднородность максимальна вблизи точек поворота развертки пучка, ее величина определяется формулой:

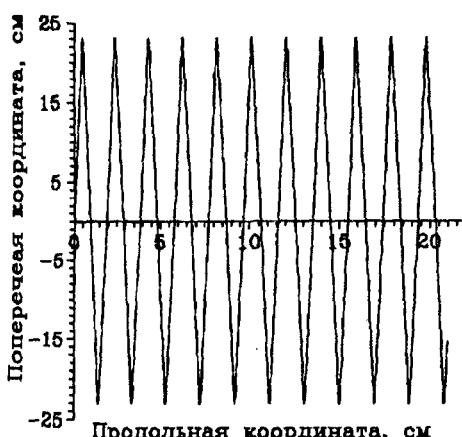


Рис. 2. Картина развертки электронного пучка на поверхности мишени.

$$\frac{\Delta I}{I} = \left( \frac{v}{8v_{ok}d} \right)^2$$

Для рассматриваемого режима облучения эта неоднородность составляет 0,6%.

На рис.3 изображено распределение поглощенной дозы в мишени плотностью 0,12 г/см<sup>3</sup> после однократного облучения пучком электронов с энергией 8 МэВ. Из рис.3 видно, что распределение поглощенной дозы по мишени неоднородно, причем неоднородность возрастает с глубиной. Это связано с несимметричным расположением мишени относительно оси пучка, с большой угловой расходимостью пучка и краевыми эффектами ухода частиц через боковые грани упаковки.

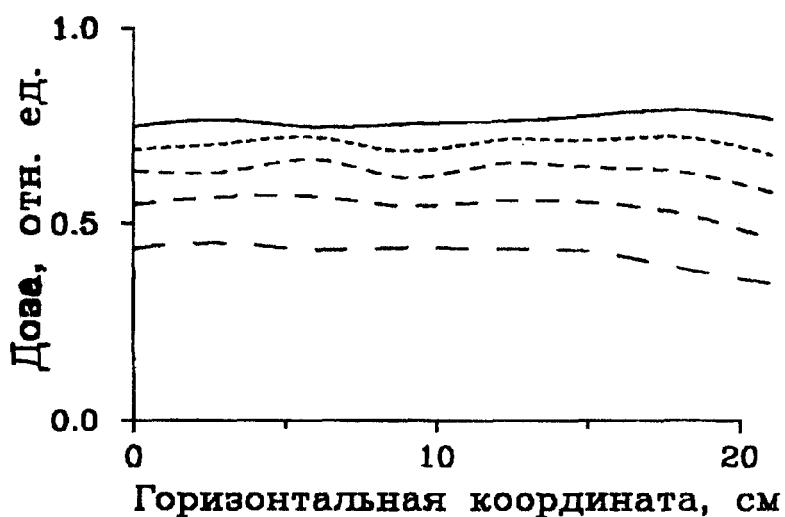


Рис. 3 Распределение поглощенной дозы при одностороннем облучении электронами с энергией 8 МэВ на поверхности мишени (сплошная линия), на глубинах 1/4, 1/2, 3/4 толщины и на задней стенке мишени (штриховая линия), размер штриха увеличивается с глубиной.

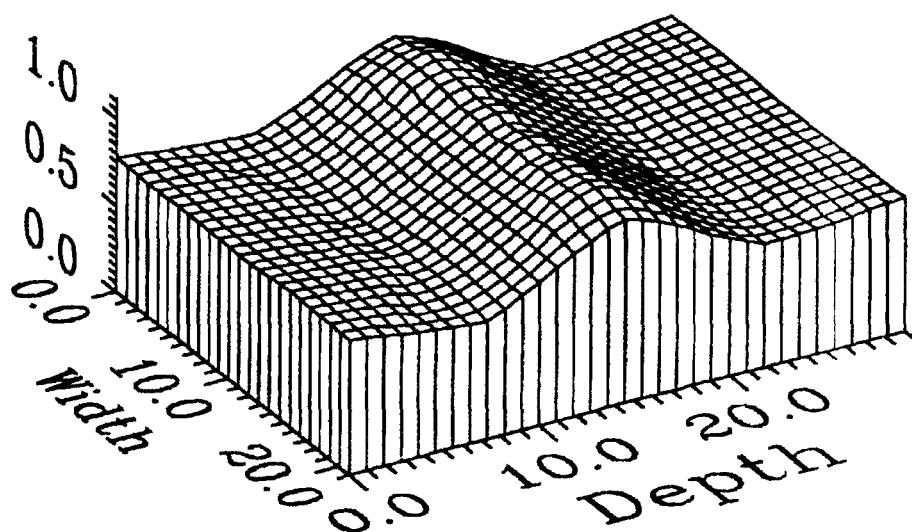


Рис.4 Распределение поглощенной дозы при двустороннем облучении электронами с энергией 6 МэВ мишени с плотностью 0,12 г/см<sup>3</sup>.

При облучении с двух сторон распределение дозы в мишени более однородно, как это видно из рис. 4. Оставшаяся неоднородность может быть устранена подбором параметров облучения.

метров пучка для каждого вида облучаемых объектов и усложнения технологической схемы облучения, в частности, путем установки боковых отражателей рассеянного излучения. В табл. 2 представлена зависимость коэффициента неоднородности поглощенной дозы от энергии пучка и плотности материала для выбранной толщины мишени, геометрии пучка и схемы облучения. Компьютерное моделирование позволяет также определить коэффициенты использования мощности пучка в рассмотренных случаях, рассчитанные значения также приведены в табл. 2.

Таблица 2.

Степень неоднородности поглощенной дозы при облучении мишени с обеих сторон при наличии отражателей (в числителе) и коэффициент использования мощности пучка (в знаменателе, %)

Энергия МэВ	Плотность $\text{г}/\text{см}^3$					
	0,11	0,12	0,13	0,14	0,15	0,16
6	23/100	24/100	23/100	22/100	25/100	15/100
7	8/92	14/100	19/100	24/100	23/100	22/100
8	5/81	6/85	9/96	14/100	19/100	22/100
9	4/73	4/78	6/85	7/89	9/96	13/100
10	3/65	3/70	4/80	5/83	7/88	9/94

Для ряда приложений (где важен интегральный эффект облучения) достаточно знать лишь усредненные по времени характеристики, в других случаях, когда оказываются важными термические и термоупругие эффекты, необходимо учитывать импульсный характер облучения.

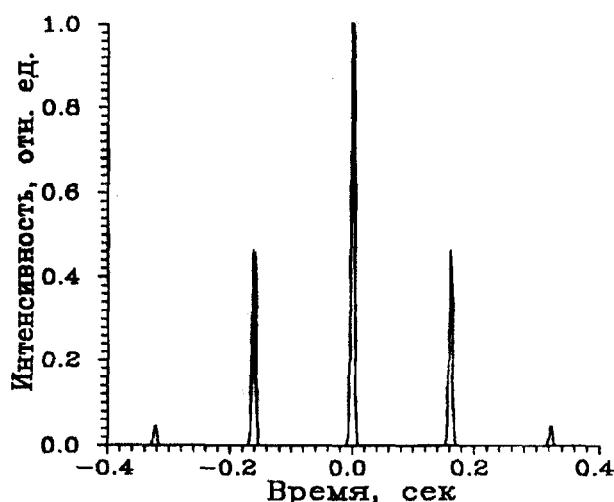


Рис.5. Зависимость интенсивности облучения от времени.

В рассматриваемом случае имеется три источника нестационарности облучения: первый связан с временем пребывания в заданной точке упаковки под пучком ( $\sim 1$  с), второй - с частотой сканирования (3,1 Гц) и третий - с частотой следования импульсов ускорителя (300 Гц). Зависимость интенсивности излучения в фиксированной точке на поверхности мишени от времени показана на рис.5. Таким образом, пространственное распределение и временная зависимость интенсивности излучения (а следовательно, и поглощенной дозы) имеют сложный характер.

Моделирование нестационарных температурных полей, а также полей механических и термоупругих деформаций проводилось с использованием как стандартных методов теории сплошных сред, так и численного метода конечных элементов, с учетом импульсности пучка и режима сканирования. На рис.6 показана зависимость от времени температуры внутри сферического кристалла, охлаждаемого с поверхности потоком воды, при включении пучка и после достижения стационарного режима. Из рисунка видно, что имеет место заметный перепад температур между внутренней областью и поверхностью кристалла, а также наблюдаются скачки температуры, обусловленные импульсностью пучка и характером сканирования.

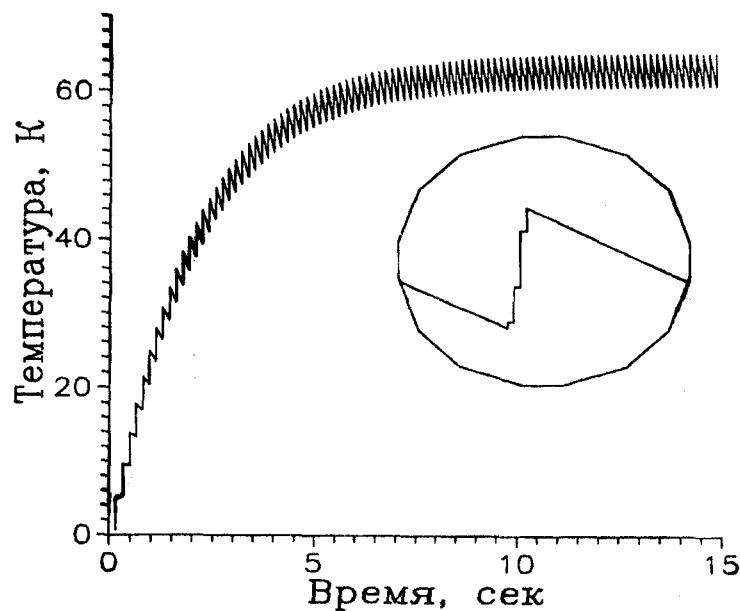


Рис. 6. Превышение температуры в центре кристалла радиуса 1 см над температурой поверхности. Величина скачков температуры  $\Delta T=4,4$  К. На врезке - тонкая структура скачка.

Неоднородное распределение температуры вызывает в материале термоупругие напряжения. Циклический характер этих напряжений может приводить к усталости материала и развитию трещин.

Для оценки влияния электронного облучения на свойства материалов пакет программ был дополнен блоком расчета количества радиационных дефектов (дозы повреждений в смещениях на атом), образованных в материале при различных режимах облучения [3].

Полное сечение образования радиационных дефектов электронами с энергией  $E$  рассчитывалось по формуле:

$$\sigma_D(E) = \int_{E_d}^{T_{\max}(E)} dT \frac{d\sigma(E, T)}{dT} v(T),$$

где  $E_d$  - пороговая энергия смещения,  $T$  энергия ядра отдачи,  $T_{\max}$  - максимальная переданная энергия,  $\frac{d\sigma(E, T)}{dT}$  - сечение упругого рассеяния электрона на ядре;  $v(T)$  - каскадная функция, определяющая количество радиационных дефектов, образованных ядром отдачи с энергией  $T$ . Сечение упругого рассеяния рассчитывалось по формуле Мак-Кинли и Фешбаха, каскадная функция - в соответствии с ТРН-стандартом.

На рис.7 представлены зависимости сечений образования радиационных дефектов в Al, Cu и Mo от энергии электронов.

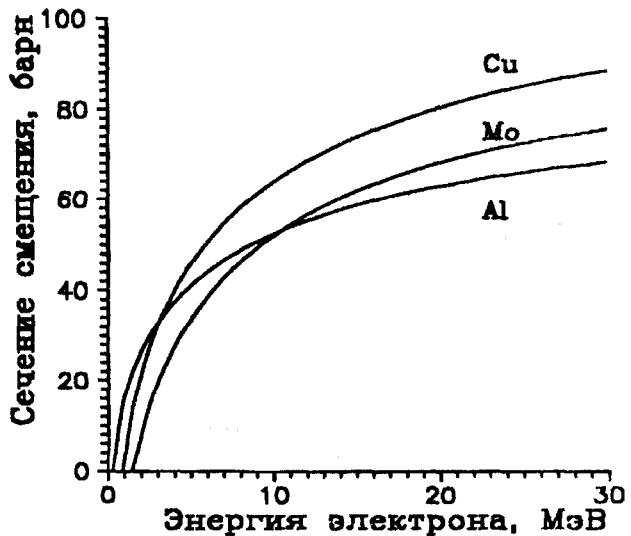


Рис.7. Энергетические зависимости сечений дефектообразования в Al, Cu и Mo при электронном облучении.

Созданный комплекс программных средств позволяет моделировать широкий круг явлений, возникающих при облучении объектов на выходе технологического ускорителя электронов, и может быть использован для метрологического обеспечения радиационных технологий и оптимизации процессов направленного изменения свойств облучаемых материалов.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Ганн В.В. Расчет дозы повреждений в облученных многокомпонентных и многослойных материалах//ФММ. -1996. -Т.81, -Вып.3. -С. 22-26.
2. Ганн В.В., Емец Н.Л. Тепловыделение и дефектообразование в сборках образцов, облучаемых высокоэнергетическими электронами//Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. -1986. -Вып. 1(38). -С. 64-65.
3. Ганн В.В., Юдин О.В. Дефектообразование в высокотемпературных сверхпроводниках при электронном облучении//Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. -1989. -Вып. 1(48). -С. 63-66.
4. Ганн В.В., Жуков А.И., Блажевич С.В. Исследование термоупругих напряжений, возникающих в никеле при импульсном облучении высокоэнергетическими электронами//Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. -1983. -Вып. 4(27). -С. 75-78.
5. Борковский М.Я. Программа "SHOWEР" моделирования электронно-фотонных ливней в веществе//Препринт ЛИЯФ. -1979. -№ 426.
6. Жуков А. И. Расчет температурных полей в кристаллах, выращиваемых по методу Чохральского//Препринт ХФТИ 92- 17. -Харьков: Изд-во ХФТИ, 1992. -13 с.