

电子束注入 PMMA 空间电荷分布的 Monte-Carlo 模拟与实验验证

宫斌¹ 张治文¹ 郑飞虎¹ 陈玲燕¹ 徐加强² 王传珊²

¹ (同济大学波耳固体物理研究所 上海 200092)

² (上海大学射线应用研究所 上海 201800)

摘要 精确控制和测量电子束注入样品后电荷量以及电荷的沉积分布,对于进行高压电力电缆材料的击穿以及航空器受到高能宇宙射线破坏的研究有着非常重要的意义。本工作结合空间电荷对固体电介质材料击穿影响的研究课题,利用 Monte-Carlo 方法模拟计算了电子束注入聚甲基丙烯酸甲酯 (PMMA) 样品中电荷的沉积分布,并通过激光感应压力波法 (LIPP) 对电子束注入后的 PMMA 进行测量;实验验证计算结果,吻合较好,为以后实验参数的设计提供了重要依据。

关键词 电子束注入, 空间电荷分布, Monte-Carlo 方法

中图分类号 TM215.1, O487, O572.21

一般电介质中存在大量的局域能级,当电介质处于较高电场下,由电极发射的电子、空穴或介质中的杂质离子产生迁移,并在迁移过程中被介质中的陷阱捕获从而形成了空间电荷。

电介质中的空间电荷影响了介质中的电场分布,使电场分布严重畸变,最终导致介质的局部击穿^[1]。可是有一些实验现象不是仅用电场畸变能够解释清楚的,比如聚合物在外加电场作用时,升高电场或保持电场恒定,在没有放电发生的前提下,降低电场时却发生放电击穿现象^[2],说明除了电场畸变以外还存在明显的非电场畸变作用^[3,4]。Blaise 认为是由于电荷的脱陷过程^[4,5],并从空间电荷储能角度提出了一种基于空间电荷的新的击穿模型^[4]。但是目前尚没有人通过实验的方法来研究电荷非电场畸变破坏机理及过程。

为了观察研究空间电荷的非电场畸变击穿机理、过程与影响因素,实验设计预先进行电子束注入空间电荷,然后通过人为针尖电极来诱发空间电荷快速放电过程。但是如何精确控制和测量沉积在样品中空间电荷的电荷量以及电荷沉积分布的位置,在研究过程中起着关键的作用。本工作利用 Monte-Carlo 方法模拟计算了电子束注入样品后空间电荷的沉积分布,通过实验测量进行比较验证,并对两者之间的差异加以分析。

1 实验材料和方法

根据实验装置的条件,样品聚甲基丙烯酸甲酯 (PMMA, polymethyl methacrylate) 的厚度为 2mm。

本文工作分两部分:第一部分是模拟计算,利用 Monte-Carlo 的方法模拟计算 0.5MeV (据相关资料^[6],电子束注入到样品深度为 1mm 左右的能量值大约为 0.5MeV) 电子束注入样品后的沉积分布;第二部分是实验测量,通过激光感应压力波法^[7] (LIPP method: laser induction pressure-pulse method) 对 0.5MeV 的电子束注入样品后空间电荷的沉积分布进行测量。

1.1 模拟计算

在电子辐照阻挡层的设计和电子输运问题中有很多半经验公式和模型^[8,9],但在计算模拟辐射源能谱分布和角分布比较复杂的特殊问题时, Monte-Carlo 方法模拟计算较为合适,而且电子的输运问题本身就是具有随机性。

1.1.1 模拟计算方法及模型建立 本计算模拟采用的是名为 PENELOPE 的 Monte-Carlo 模拟程序包^[10]。

不同的 Monte-Carlo 程序的特点主要由被模拟

国家自然科学基金 (50277026), 教育部科学技术研究重点项目 (02100), 国家重点基础研究发展规划项目 (2001CB610406), 上海市科委重点基础研究项目 (02JC14018) 资助

第一作者:宫斌,男,1980年10月出生,2002年毕业于南京化工大学材料系,现在同济大学攻读材料物理与化学硕士学位
通讯联系人:张治文

收稿日期:初稿 2004-03-15, 修回 2004-05-13

电子的能量范围所决定,对于低能电子(小于100keV),可以详细模拟电子所经历的每一次碰撞,这种模拟方法被称为详细的 Monte-Carlo 方法;对于高能电子,电子在每次碰撞所损失的能量很小(平均为几十个 eV),电子在被吸收之前要经历数十万,甚至上亿次的碰撞,要详细模拟每一次碰撞是不可能的,所以采用多次散射理论,把电子在给定步长中所经历的所有相互作用作为整体效应来处理,这种模拟方法被称为压缩的 Monte-Carlo 方法。

PENELOPE 的程序采用混合的 Monte-Carlo 方法^[11],它把压缩的 Monte-Carlo 方法与微分截面的解析解相结合,其散射模型是将数值的总截面和不同相互作用机制下解析的微分截面(对不同反应道)结合起来。在电子与物质发生的每次相互作用中,对于散射角(θ)或能量损失(W)大于给定的截止值 θ_s 和 W_c 的硬相互作用事件,用详细模拟的 Monte-Carlo 方法模拟;而对于 $\theta < \theta_s$ 和 $W < W_c$ 的软碰撞,用多次散射压缩的 Monte-Carlo 方法模拟。这样对于高能电子,随着 θ 和 W 的增加,微分截面下降很快,若选择适当的 θ_s 和 W_c 的值,使每个径迹中的硬碰撞次数为几百次,就可以实现对每次硬碰撞的详细模拟;另一方面,软碰撞产生的散射角和能量损失较小,对电子径迹的影响不大,用多次散射理论处理也比较准确。

PENELOPE 是模拟电子-光子簇射的 Monte-Carlo 软件包^[11],能量范围为 1keV 至几百 MeV,有很全面的数据库。主要用程序包中的 LAYER 程序,它用来模拟窄电子或者光子束在多层平板结构的材料中的输运过程。当各种密度和厚度的多层材料给定后,能量为 E_0 的初始粒子从样品表面垂直于样品入射(见图 1)。在本模拟计算中,Layer1 是厚度约 0.1 μ m 的镀铝电极,Layer2 是一定厚度的 PMMA。用混合 Monte-Carlo 方法进行碰撞的计算模拟,进行足够精确的抽样数(本模拟计算中取 10 万)后,统计出粒子被吸收概率和材料中电荷的沉积分布。

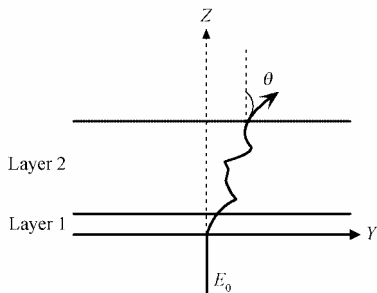


Fig.1 Sketch map of electron beam irradiation

1.1.2 模拟计算结果 利用 Monte-Carlo 方法计算了 0.5MeV 电子束注入厚度为 1mm 和 2mm 的 PMMA 后的电荷沉积分布(见图 2)。

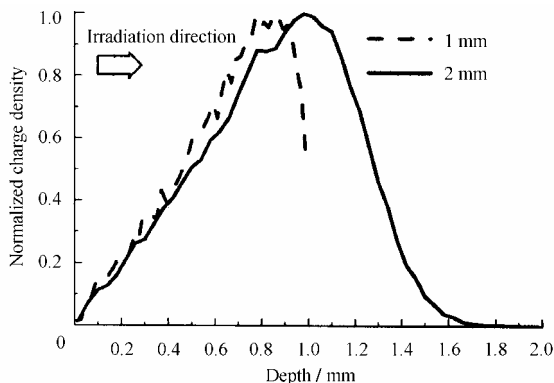


Fig.2 The simulating results for 1mm and 2mm PMMA in thickness
(The position of the two peaks is at 0.85mm and 0.98mm respectively)

1.2 实验测量

为了验证模拟计算的正确性,也为了有效地利用模拟计算的结果来设计不同能级电子束注入不同厚度材料中实验的参数,本文进行了样品中注入电荷深度分布的实验测量,两者吻合较好。

1.2.1 实验原理 LIPP 方法的基本原理是:大功率的激光脉冲作用在样品电极上产生一个很窄的高强度声脉冲,声脉冲在介质中以声速传播,破坏了介质内部原先弹性力和电荷电场力的平衡,引起介质中电荷的微小位移,电荷的微小位移又导致了介质电极上的感应电荷量的变化。因此,在外电路上可观测到电流(或者电压)信号的变化,从而获得介质中空间电荷分布的有关信息。其原理图见图 3^[12]。

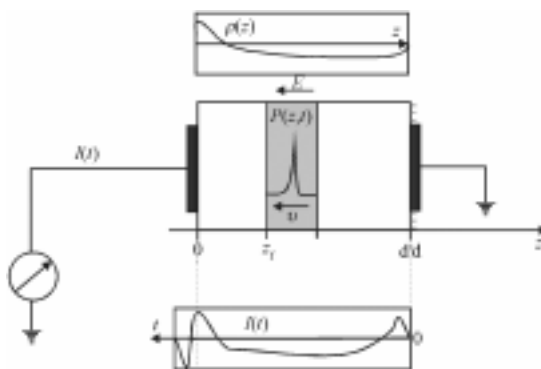


Fig.3 Principle schema of LIPP

对样品施加压力波后的短路电流可以用下面的式子表示:

$$I(t) = \frac{C_0}{Y} (1 + A) \int_0^d [E(z, t)] \frac{\partial P(z, t)}{\partial t} dz$$

式中, $I(t)$ 为短路电流, C_0 为样品的静态电容, Y 为样品的杨氏模量, A 是与材料性质有关的量, $E(z, t)$ 为样品中的电场, $P(z, t)$ 为在样品中传播的压力波, z 是压力波传播的距离, $0 < z < d$, z_f 是压力波的前沿位置, d 为样品的厚度, v 是压力波在介质中的传播速度, $\rho(z)$ 是电荷密度分布。如果压力波为一很窄的脉冲波, 压力波的脉冲宽为 τ , 高度 p_0 , 而且不考虑压力波在试样中的衰减与畸变, 则电流信号可以表示为:

$$I(t) = C_0 p_0 (1 + A) v^2 \tau \rho(z, 0) / (\epsilon_0 \epsilon_r Y)$$

即电流信号正比于空间电荷分布。

1.2.2 实验测量结果 电子束注入在上海计量测试技术研究院的加速器(先锋 GJ-2 型)上进行, 电子束能量 0.5MeV, 束流 1 μ A, 注入时间 10min; 样品是厚度为 2mm 的 PMMA, 双面镀铝电极, 电极厚度约 0.1 μ m。

利用 LIPP 方法测量 0.5MeV 电子束注入 2mm PMMA 后的空间电荷分布, 去除体内空间电荷在电极上的感应电荷峰, 经过归一化处理, 与模拟计算的 2mm PMMA 结果相比较(见图 4)。

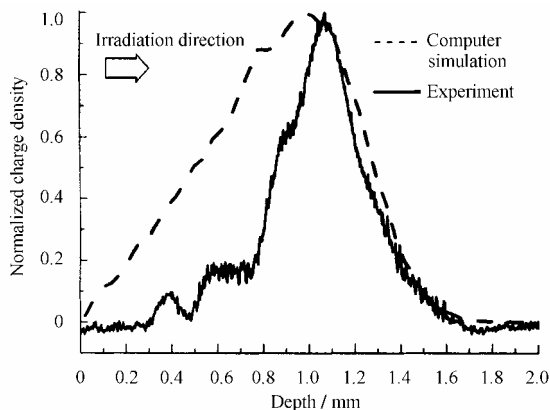


Fig.4 Comparison between the simulating and experimental results for 2mm thickness PMMA (The position of the two peaks is at 0.98mm and 1.09mm respectively)

2 讨论

图 2 中两种不同厚度的 PMMA 比较其沉积峰的位置, 2mm PMMA 沉积深度比 1mm PMMA 稍深, 这是因为厚度边界效应。与在介质内的迁移相比较, 电子穿透介质到达表面, 必须克服一个附加的逸出功, 相对难度较大, 能量较低电子可能就不能透过而沉积下来积累在边界处。随着电子的积累增加, 积累在边界处的电子对注入样品中电子有同性排斥阻碍作用, 从而大量的电子沉积在边界处而不能通过。相比之下, 2mm PMMA 在 1mm 深度

处不存在这样的边界效应, 仅仅是介质内部的阻挡作用, 故电子沉积较深。另外从 1mm PMMA 的电荷沉积分布可以看出, 0.5MeV 电子束辐照到 1mm PMMA 上不仅有电荷沉积而且有电荷穿透。图 2 可说明模拟计算本身的可行性。

比较图 4 中模拟计算和实验结果可知, 0.5MeV 电子束注入到 2mm PMMA 样品中利用 Monte-Carlo 方法模拟计算得到的电子沉积位置分布峰值在 0.98mm, 而实验测量得到的结果是 1.09mm, 比模拟计算稍大。分析其原因, 由于本实验中空间电荷分布的测量不是实时测量, 这造成了空间电荷在 PMMA 中的迁移运输从而使得电荷的沉积分布发生了变化。由于辐照电子能量较低, 辐照后的 PMMA 可以分为受辐照区域 (IR: irradiated region)、未受到辐照区域 (NIR: non-irradiated region), 还存在一个连续慢化近似过程 (CSDA: continuous slowing down approximation)^[13], 如图 5 所示。沉积在 PMMA 中的电子会进行一定的脱陷入陷迁移运动, 受辐照区域 (IR) 中的电子将既向表面和也向 NIR 中迁移, 由于辐射感应电导率^[14], IR 中电子的迁移率高于 NIR 中, 因此沉积在 PMMA 中的电子更容易从 IR 迁移到 PMMA 样品的表面, 而电子从 IR 向 NIR 深度方向迁移难度相对较大。即 IR 中电子(向表面)迁移(衰减)较快, NIR 中电子(向深度方向)迁移较慢, 结果便表现为宏观峰值向着 NIR 深度方向漂移, 峰值向深度方向发展。从图 4 中也可见, 实验测量得到的分布图中在峰位的前沿(即 IR)电荷有很大的衰减, 而在峰位的后沿(即 NIR)衰减很少, 图形吻合较好。

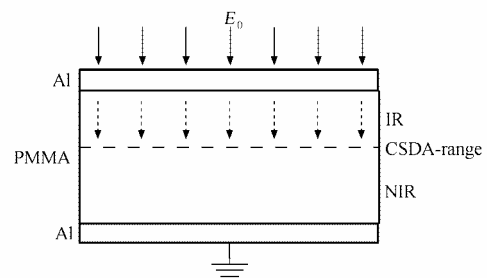


Fig.5 Geometry of the setup for electron-beam irradiation of PMMA

3 结论

模拟计算和实验测量的结果都表明 0.5MeV 电子束辐照 PMMA 样品, 电子束沉积位置分布峰在 1mm 左右, 对于 1mm 的 PMMA 电子有少量穿透; 对于 2mm 的 PMMA, 由于实际实验中辐照区的材料电导率会增加, 这导致了辐照区内电荷衰减较快, 电子沉积分布峰在 1.09mm。

由上述比较分析可见, Monte-Carlo 方法模拟计算结果和实验测量的结果两者吻合得很好。这充分说明利用 Monte-Carlo 方法模拟计算来辅助设计电子束辐照实验的可行性, 可以作为不同能级的电子束注入不同厚度材料实验参数设定的重要依据。

参考文献

- 1 Zhang Y W, Lewiner J, Alquié C, *et al.* IEEE Trans DEI, 1996, **3**(6): 778-883
- 2 Gressus C L, Valin F, Henriot M, *et al.* J Appl Phys, 1991, **69**(9): 6325-6333
- 3 Dissado L A, Mazzanti G, Montanari G C. IEEE Trans DEI, 1997, **4**(5): 496-506
- 4 Blaise G, Sarjeant W J. IEEE Trans DEI, 1998, **5**(5): 779-783
- 5 Blaise G, Gressus C L. Charge Trapping-detrapping Processes and Related Breakdown Phenomena, in HV Vacuum Insulation, Basic Concepts and Technological Practice, New York: Academic Press, 1995. 330-368
- 6 马崇智. 放射性同位素手册, 北京: 科学出版社, 1979. 446
MA Chongzhi. Handbook of Radioactive Isotope, Beijing: Science Press, 1979. 446
- 7 Alquié C, Dreyfus G, Lewiner J. Phys Rev Lett, 1981, **47**(20): 1483-1487
- 8 马崇智. 放射性同位素手册, 北京: 科学出版社, 1979. 392
MA Chongzhi. Handbook of Radioactive Isotope, Beijing: Science Press, 1979. 392
- 9 罗正明. 辐射研究与工艺学报, 2003, **21**(1): 1-17
LUO Zhengming. J Radiat Res Radiat Process, 2003, **21**(1): 1-17
- 10 Salvat F, Fernandez-Varea J M, Baro J *et al.* Informes Tecnicos CIEMAT, 1996, 799-804
- 11 罗文芸, 王传珊, 黄伟. 上海大学学报, 1999, **5**(3): 213-216
LUO Wenyun, WANG Chuanshan, HUANG Wei. J Shanghai Univ, 1999, **5**(3): 213-216
- 12 郑飞虎, 张冶文, 吴长顺, 等. 物理学报, 2003, **52**(5): 1137-1142
ZHENG Feihu, ZHANG Yiewen, WU Changshun, *et al.* Acta Phy Sin, 2003, **52**(5): 1137-1142
- 13 Sessler G M, Figueiredo M T, Leal Ferreira G F. IEEE Trans DEI, 2004, **11**(2): 192-202
- 14 Sessler G M. Electrets, Berlin: Springer-Verlag, 1987. 217-222

Computer simulation and experiment verification of space charge distribution in PMMA injected by electron beam

GONG Bin¹ ZHANG Yewen¹ ZHENG Feihu¹ CHEN Lingyan¹ XU Jiaqiang² WANG Chuanshan²

¹(Pohl Institute of Solid State Physics, Tongji University, Shanghai 200092)

²(Shanghai Applied Radiation Institute, Shanghai 201800)

ABSTRACT To control and measure depth profiles of charge deposition in the sample is of significance for researches of space charge break-down in high-voltage cable insulation and destruction of spacecraft by high-energy radiations. In this paper, Monte-Carlo simulation is used to get depth profiles of charge deposition in PMMA sample. Results of LIPP experimental measurement with EB irradiated PMMA ion experiments agree with the M-C simulation.

KEYWORDS Electron beam irradiation, Space charge distribution, Monte-Carlo simulation

CLC TM215.1, O487, O572.21