

电子束加热过程中铁杂质对钆熔池特性影响的数值模拟研究

赖赣平, 李和平*, 姜东君, 周明胜

(清华大学 工程物理系, 北京 100084)

摘要: 原子蒸气激光同位素分离 (AVLIS) 技术可从天然钆中分离出 ^{160}Gd 同位素, 而 ^{160}Gd 经辐照可制得医用同位素 ^{161}Tb 。其中, 金属蒸发过程是 AVLIS 的一个重要环节, 而从工作环境中引入的铁杂质将影响熔池状态和蒸气品质。本研究考虑了金属蒸气反冲压力、表面张力、浮力、浓度梯度输运、活度等因素, 将“蒸发-活度-浓度梯度输运-VOF 自由液面”耦合用于 Gd-Fe 体系, 建立了电子束加热含铁杂质钆金属的熔池模型, 给出了金属锭上表面铁含量分布区域划分的判据, 得到了含铁杂质钆金属在电子束加热过程中的温度与铁含量等参数的空间分布。计算结果表明: 在本文研究的参数范围内, 随着电子束作用时长的增加, 金属锭上表面中心处温度先迅速上升后稳定在约 2600 K, 熔池表面扩张为近似椭圆形, 熔池表面凹陷深度逐渐增加至约 2 mm; 基于金属锭上表面 2200 K 等温线和未熔化金属边界, 可将熔池表面的铁含量分布划分为中心蒸发区域、过渡区域与未熔化区域三个区域; 初始铁含量的增大对过渡区的铁含量分布和所形成的钆金属蒸气纯度有显著影响, 当初始铁含量从 5 wt% 升高至 15 wt% 时, 对应于熔池表面温度 2200 K 时的钆蒸气中铁杂质含量从 8.2 wt% 升高至 36.5 wt%; 电子束功率对金属锭上表面温度与铁含量分布亦有显著影响, 当电子束功率从 10 kW 升高至 30 kW 时, 熔池上表面最高温度从约 2200 K 上升至约 2600 K, 中心蒸发区域的铁含量从约 0.8 wt% 降低至约 0.2 wt%, 且中心蒸发区域边界和过渡区域外边界明显向外扩张。基于不同初始铁含量和电子束功率的计算结果, 为了获得高品质的钆蒸气, 建议在实际生产中将 10 wt% 作为金属锭初始铁含量上限。

关键词: 钆; 铁杂质; 电子束加热; 熔池

中图分类号: TG146.4*53

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2017)02-0???-0?

1 引言

靶向放射性核素治疗是当今癌症治疗的重要方法之一^[1]。与已用于临床治疗的放射性核素 ^{177}Lu 相比, ^{161}Tb 不仅具有相近的半衰期长度和 β 射线粒子能量^[2], 而且还会发射出内转换电子和俄歇电子, 有利于微小病灶的清除^[3]。因此, ^{161}Tb 是具有应用潜力的医用放射性同位素^[4]。目前, ^{161}Tb 可通过反应堆辐照 ^{160}Gd 制得^[5], 而 ^{160}Gd 可使用原子蒸气激光同位素分离 (Atomic vapor laser isotope separation, AVLIS) 方法从天然钆中分离^[6]。AVLIS 利用电子束加热固态金属, 使之熔化形成液态熔池并产生金属蒸气; 之后采用激光使蒸气原子被选择性电离, 并利用外加电磁场将目标同位素离子引出和收集, 完成 ^{160}Gd 同位素的分离^[7]。因此, 维持金属蒸发过程的稳定是保证分离过程顺利进行的关键环节之一。然而, 在长时间的高温金属蒸气冲刷和腐蚀下, 蒸发装置的铁等金属元素会以杂质形式逐渐进入熔池, 导致熔池状态逐渐恶化, 进而降低金属蒸气的质量, 最终影响同位素的分离效率和效果。因此, 有必要就含铁杂质钆金属电子束加热过程的熔池行为开展研究。

数值模拟是研究电子束加热过程熔池行为的重要方

法之一。Westerberg 等人^[8,9]使用有限元法分别模拟了半圆柱形和圆盘形金属铝钎熔池的传热、流动及自由界面的特性。王永刚等人^[10]利用 Young-Laplace 方程研究了熔池自由表面的凹陷形状与温度分布的关系。肖踞雄等人^[11,12]研究了带有固-液界面的熔池传热特性, 并分析了电子束功率密度、束宽、坩埚尺寸以及掺入低熔点金属对蒸发量的影响。薄勇等人^[13-15]在数值模拟中综合考虑了熔池液面凹陷与金属蒸发过程, 得到了熔池流场和温度场图像以及金属蒸气密度、速度和温度分布。Matveichev 等人^[16]建立了金属钨的电子束加热三维模型, 并研究了置于其中的难熔金属材料棒对熔池流场的影响。Wen 等人^[17,18]则研究了电子束熔炼金属铝和多晶硅的过程, 分析了多种工艺参数对熔池的影响规律, 但未考虑液面形变。由此可见, 直到目前为止, 对电子束加热过程中含杂质熔池的深入研究依然相对较少。由于不同组分金属的蒸发速率不同, 在电子束加热过程中, 不同组分金属含量分布亦会随加热时间发生变化, 进而对熔池状态和蒸气品质产生影响。因此, 有必要针对电子束加热含杂质熔池的传热、流动及不同组分金属的分布特性开展深入的数值模拟研究。

本文综合考虑了含铁杂质钆金属钎电子束加热过程

收到初稿日期:

作者简介: 赖赣平, 男, 1998 年生, 硕士生, 清华大学工程物理系, 北京 100084, E-mail: lgp20@mails.tsinghua.edu.cn

中金属蒸气反冲压力、表面张力、浮力、浓度梯度输运、活度等因素，建立了耦合“蒸发-活度-浓度梯度输运-VOF 自由液面”的物理数学模型，给出了金属锭上表面铁含量分布区域划分的判据，研究了含铁杂质钎金属在电子束加热过程的熔池特性，并数值模拟结果给出了获得高品质钎蒸气的金属锭初始铁含量上限建议值。本研究结果可为电子束加热含杂质金属熔池行为研究以及电子束蒸发工艺优化、目标金属蒸气品质提升提供一定的参考。

2 物理数学模型

2.1 电子束加热装置简介与数值模拟基本假设

本文研究的电子束加热装置如图 1 所示。在接近真空的环境下，固态目标金属在水冷坩埚中受到电子束轰击加热而熔化形成液态金属熔池，熔池表面的液态金属进一步受热蒸发形成金属蒸气。金属熔池表面主要在金属蒸气反冲压力的作用下形成凹陷。电子束停止加热后，冷却凝固的液态金属与未熔化的固态金属之间将出现熔合线。

电子束加热过程是一个复杂的多物理场耦合过程，涉及材料的相变、流体的流动、热量的传递、多种力的相互作用等。本文数值主要采用如下假定：

(1) 熔池中的液态金属视为粘性不可压缩的牛顿流体，流动处于层流状态；

(2) 材料为各向同性，材料的热物性参数除密度、粘性系数、比热、热导率、表面张力、扩散系数为温度的函数外，其余参数均为常数；

(3) 由于本文研究所采用的电子束扫描频率为 100 Hz，因此，可忽略电子束扫描对金属表面液态熔池动态波动的影响^[19]，即将沿直线快速往复扫描的电子束近似为一矩形热源，其能量密度的空间分布在平行于扫描方向为均匀分布，在垂直于扫描方向为高斯分布^[8]。

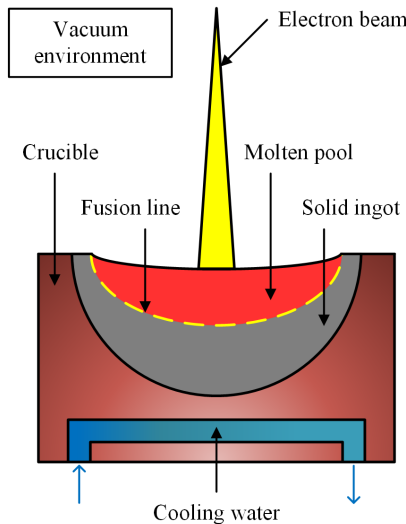


图 1 电子束加热过程示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the electron beam heating process

2.2 基本控制方程

本文数值模拟需要求解的基本控制方程包括如下的质量、动量和能量守恒方程^[20]：

(1) 质量守恒方程：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

(2) 动量守恒方程：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{S}_M \quad (2)$$

(3) 能量守恒方程：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} h) = \nabla \cdot \left(\frac{k}{C_p} \nabla h \right) + S_E \quad (3)$$

其中， $\mathbf{u}$ [m s^{-1}] 为液态金属流速， t [s] 为时间， p [Pa] 为压强， ρ [kg m^{-3}]、 μ [$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$]、 k [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$]、 C_p [$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$] 和 h [J kg^{-1}] 分别为材料的密度、粘性系数、热导率、比热和比焓； $\mathbf{S}_M$ 为动量方程的源项，包含重力项、浮力项、表面张力项、金属蒸气反冲压力项和糊状区域动量损失源项； S_E 为能量方程的源项，包含电子束热源项、辐射散热项和蒸发散热项。

由于在电子束加热过程中，固体合金中不同组分的蒸发速率不同，从而导致熔池中不同组分并非均匀分布。因此，需求解溶质组分（即铁杂质）的浓度方程：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_m) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_m) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_m) \quad (4)$$

其中， Y_m 为溶质在合金中的质量分数， D [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$] 为溶质在溶剂（即液态钎金属）中的扩散系数，其数值可通过 Wilke-Chang 公式计算得到^[21]。

另外，由于在电子束加热过程中熔池表面形态在重力、浮力、表面张力和金属蒸气反冲压力的作用下发生变化，因此，在本文数值模拟中采用 VOF（Volume of fluid）算法对熔池表面进行追踪^[22, 23]，即：

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} F) = 0 \quad (5)$$

其中， F 为流体体积分数函数。 F 的取值介于 0~1 之间。当 $F=0$ 时，网格内为真空；当 $F=1$ 时，网格由流体完全填充。

金属蒸气反冲压力 p_r 采用如下模型^[24]进行计算：

$$p_r = 0.54 P_0 \exp \left(\Delta H_{lv} M \frac{T - T_{lv}}{RT T_{lv}} \right) \quad (6)$$

其中， P_0 ($= 1.013 \times 10^5 \text{ Pa}$) 为标准大气压， T [K] 为温度， ΔH_{lv} [J kg^{-1}]、 M [kg mol^{-1}]、 T_{lv} [K] 分别为材料的蒸发潜

热、摩尔质量和沸点, $R (= 8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1})$ 为理想气体常数。

固-液相变的糊状区域则使用焓-孔隙率方法进行计算^[25], 即定义液相体积分分数 f_L 为^[26]:

$$f_L = \begin{cases} 0 & T < T_s \\ \frac{T - T_s}{T_l - T_s} & T_s < T < T_l \\ 1 & T > T_l \end{cases} \quad (7)$$

其中, T_s [K] 和 T_l [K] 分别为材料的固相线和液相线温度。

流体在糊状区域的流动则使用 Darcy 定律进行描述, 即^[27]:

$$\mathbf{S} = -C \frac{(1 - f_L)^2}{f_L^3 + \theta} \mathbf{u} \quad (8)$$

其中, $\mathbf{S}$ 为糊状区域动量损失源项, C [$\text{kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$] 为糊状区域常数 (本文取 $C = 10^6 \text{ kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$), θ 为避免分母为 0 的极小数 (本文取 $\theta = 0.001$)。

利用焓-孔隙率方法, 可以定义材料的比焓 h 为^[28]:

$$h = h_{\text{ref}} + \int_{T_{\text{ref}}}^T C_p dT + f_L \Delta H_f \quad (9)$$

其中, h_{ref} [J kg^{-1}] 和 T_{ref} [K] 分别为材料参考焓和对应的参考温度, ΔH_f [J kg^{-1}] 为材料熔化潜热。

2.3 初值条件和边值条件

本文数值模拟研究以质地均匀的钕铁合金为研究对象, 材料的初始铁含量范围为 (5 ~ 15) wt%, 初始温度为环境温度 (300 K)。电子束功率范围为 10 ~ 30 kW。数值模拟采用半球形水冷坩埚, 直线形电子束扫描热源作用于金属锭上表面。定义垂直于电子束扫描方向为 x 方向, 平行于电子束扫描方向为 y 方向, 竖直向上为 z 方向, 金属锭上表面中心为坐标原点 O 。为简化计算模型, 金属模拟区域为实际半球形金属锭的 1/4, 如图 2 所示。图 2a 和图 2b 分别为计算模型的三维示意图和三维计算域。1/8 球体 $O-ABC$ 为金属模拟区域, 平面 OAC 、 OBC 分别为垂直与平行于电子束扫描方向的对称面 (即 xOz 平面与 yOz 平面), 球面 ABC 为坩埚壁面, 平面 OAB 为金属锭初始上表面。半球形坩埚半径为 48 mm, 电子束扫描热源扫描区域长度与宽度分别为 15 mm 和 4 mm。金属锭初始上表面上方的扇形空间 $OAB-O'A'B'$ 为真空模拟区域, 真空模拟区域高度为 10 mm。

本研究基于 FLUENT 软件进行二次开发, 计算域网格划分采用六面体网格, 并对电子束热源作用区域的网格进行了局部加密, 网格总数为 416000, 时间步长为 0.001 s。在数值模拟中, 采用连续表面力 (Continuum

Surface Force, CSF) 模型实现表面张力的离散, 采用 SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) 算法对压力-速度耦合进行求解; 以 10^{-6} 为收敛判据, 通过计算迭代过程中各求解变量的相对残差判断迭代计算的收敛性。

电子束沿直线快速往复扫描近似形成一稳定的长方形热源, 其能量密度 q_b [W m^{-2}] 在平行于扫描方向 (y 方向) 服从均匀分布, 在垂直于扫描方向 (x 方向) 则服从高斯分布^[8], 即:

$$q_b = \frac{\eta Q_b}{\sqrt{2\pi} \sigma_b L_b} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_b^2}\right) \quad (10)$$

其中, η 为电子束热效率 (本文取 $\eta = 0.85$), Q_b [W] 为电子束功率, σ_b [m] 为高斯热源分布参数 (本文取 $\sigma_b = 0.013 \text{ m}$), L_b [m] 为 y 方向总扫描长度。

熔池表面的能量传递包括电子束加热、辐射散热与蒸发散热^[29], 其能量平衡满足如下条件:

$$k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = q_b - q_r - q_v \quad (11)$$

$$q_r = \sigma_{\text{SB}} \varepsilon (T^4 - T_0^4) \quad (12)$$

$$q_v = \omega \Delta H_{\text{lv}} \quad (13)$$

其中, $\mathbf{n}$ 为熔池自由表面法向量, q_r [W m^{-2}] 为辐射散热, q_v [W m^{-2}] 为蒸发散热, $\sigma_{\text{SB}} (= 5.67 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4})$ 为 Stefan-Boltzmann 常数, ε 为材料表面辐射率 (本文取 $\varepsilon = 0.6$), $T_0 = 300 \text{ K}$ 为环境温度, ω [$\text{kg m}^{-2} \text{ s}^{-1}$] 为材料蒸发速率, 对于多组元的合金材料, $\omega = \sum_i \omega_i$ 。

铁杂质掺入金属钕后, 在活度的作用下, 钕与铁的蒸发将受到抑制。在合金材料的蒸发过程中, 组元 i 的实际蒸发速率 ω_i [$\text{kg m}^{-2} \text{ s}^{-1}$] 可使用 Langmuir 公式进行计算^[30], 即

$$\omega_i = \alpha_i p_i^* \sqrt{\frac{M_i}{2\pi RT}} \quad (14)$$

其中, p_i^* [Pa] 为组元 i 的饱和蒸气压, M_i [kg mol^{-1}] 为组元 i 摩尔质量, α_i 为组元 i 的活度, 可根据 Miedema 模型^[31]由体系内组元 i 在不同温度和组分条件下的组元活度系数 γ_i 计算得到, 即

$$\alpha_i = x_i \gamma_i \quad (15)$$

其中, x_i 为组元 i 的摩尔分数。另外, 坩埚壁面采用水冷散热, 冷却水带走的热量与壁面流出的热量相平衡。在 Miedema 模型中使用到的钕和铁的相关模型参数可

从文献[32]中查询得到。

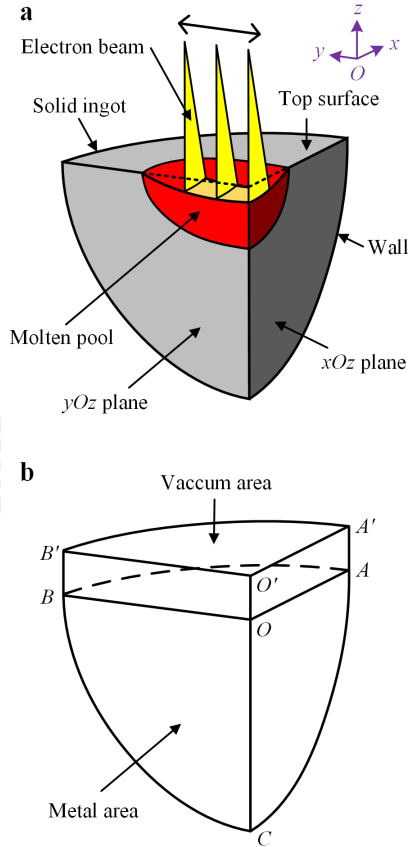


图 2 计算模型三维示意图(a)和三维计算域(b)

Fig. 2 Schematic diagram of the 3D calculation model (a) and the 3D computational domain (b)

2.4 金属材料属性

金属钆和铁的热物性参数如表 1 所示^[33]。金属钆和铁的密度 (ρ)、粘性系数 (μ)、比热 (C_p)、热导率 (k)、表面张力 (σ)、饱和蒸气压 (p^*) 均为材料温度 (T) 的函数[式(16)~(21)]^[34-42], 即

$$\rho = \rho_0 [1 - \beta(T - T_0)] \quad (16)$$

$$\mu_{\text{Gd}} = 1.7 \times 10^{-3} \exp\left(\frac{1.4 \times 10^4}{RT}\right) \quad (17)$$

$$\mu_{\text{Fe}} = 0.001 \times 10^{-0.7209 + \frac{2694.95}{T}} \quad (18)$$

$$C_{p,\text{Gd}} = 131 + 0.08T \quad (19)$$

$$C_{p,\text{Fe}} = 824 \quad (20)$$

$$k_{\text{Gd}} = -6.4 + 1.393 \times 10^{-2}T \quad (21)$$

$$k_{\text{Fe}} = 4.69799 + 0.0151T \quad (22)$$

$$\sigma_{\text{Gd}} = 0.822 - 9.7 \times 10^{-5}(T - T_{\text{m,Gd}}) \quad (23)$$

$$\sigma_{\text{Fe}} = 1.888 - 0.285 \times 10^{-3}(T - T_{\text{m,Fe}}) \quad (24)$$

$$p_{\text{Gd}}^* = 133.322 \times 10^{\frac{8.09461}{T-273.15} - \frac{18125.4084}{210.6}} \quad (25)$$

$$p_{\text{Fe}}^* = 133.322 \times 10^{\frac{8.37930}{T-273.15} - \frac{16213.5121}{88.52}} \quad (26)$$

其中, ρ_0 [kg m^{-3}] 为对应于 T_0 温度时的金属的密度, β [K^{-1}] 为金属热膨胀系数, T_{m} [K] 为金属熔点, 液态铁的比热视为常数^[43]。

表 1 金属钆和铁的热物性参数^[33]

Table 1 Thermophysical properties of Gd and Fe^[33]

Element	Parameter	Symbol	Value
Gd	Melting point [K]	$T_{\text{m,Gd}}$	1586
	Boiling point [K]	$T_{\text{b,Gd}}$	3546
	Latent heat of fusion [J kg^{-1}]	$\Delta H_{\text{f,Gd}}$	6.39×10^4
	Latent heat of vaporization [J kg^{-1}]	$\Delta H_{\text{v,Gd}}$	2.29×10^6
	Density @ 300 K [kg m^{-3}]	$\rho_{0,\text{Gd}}$	7.90×10^3
	Coefficient of thermal expansion [K^{-1}]	β_{Gd}	9.40×10^{-6}
Fe	Melting point [K]	$T_{\text{m,Fe}}$	1811
	Boiling point [K]	$T_{\text{b,Fe}}$	3134
	Latent heat of fusion [J kg^{-1}]	$\Delta H_{\text{f,Fe}}$	2.47×10^5
	Latent heat of vaporization [J kg^{-1}]	$\Delta H_{\text{v,Fe}}$	6.26×10^6
	Density @ 300 K [kg m^{-3}]	$\rho_{0,\text{Fe}}$	7.87×10^3
	Coefficient of thermal expansion [K^{-1}]	β_{Fe}	1.18×10^{-5}

2.5 实验验证

由于金属钆的熔点和沸点均较高(表 1), 受实验条件的限制, 在我们实验室现有的实验装置条件下尚无法开展金属钆的长时间稳定蒸发实验。而与钆相比, 金属铈具有低熔点和高沸点(分别为 1071 和 3716 K)^[33]的特点, 比较容易开展长时间稳定蒸发实验, 从而易于捕捉金属铈中的熔合线位置信息。因此, 本小节仅开展了纯金属铈的电子束加热过程数值模拟和电子束加热实验, 初步定性验证本文 2.2-2.4 节所建立的物理数学模型的可靠性。

金属铈的热物性参数如表 2 所示^[33]。其中, 金属铈的密度(ρ)采用与式(16)相同的计算方法, 粘性系数(μ)、表面张力(σ)和饱和蒸气压(p^*)随材料温度(T)变化的函数关系如式(27)~(29)所示^[42, 44], 比热(C_p)和热导率(k)则由文献[45]中的数据表进行线性插值获得。

本小节是对金属铈进行模拟,因此,无需对 2.2 节中的浓度方程进行求解,同时将活度取为 1,其余参数和边界条件与含铁杂质钕金属所采用的物理数学模型相同。

$$\mu_{\text{Ce}} = 0.01154 \times 10^{-3} \exp\left(\frac{50.471 \times 10^3}{RT}\right) \quad (27)$$

$$\sigma_{\text{Ce}} = 0.751 - 0.071 \times 10^{-3} (T - T_{\text{m,Ce}}) \quad (28)$$

$$p_{\text{Ce}}^* = 133.322 \times 10^{\frac{8.54474}{T-273.15} - \frac{20813.1074}{231.68}} \quad (29)$$

表 2 金属铈的热物性参数^[33]

Table 2 Thermophysical properties of cerium^[33]

Element	Parameter	Symbol	Value
Ce	Melting point [K]	$T_{\text{m,Ce}}$	1071
	Boiling point [K]	$T_{\text{b,Ce}}$	3716
	Latent heat of fusion [J kg ⁻¹]	$\Delta H_{\text{f,Ce}}$	3.90×10^4
	Latent heat of vaporization [J kg ⁻¹]	$\Delta H_{\text{v,Ce}}$	2.95×10^6
	Density @ 300 K [kg m ⁻³]	$\rho_{0,\text{Ce}}$	6.77×10^3
	Coefficient of thermal expansion [K ⁻¹]	β_{Ce}	6.31×10^{-6}

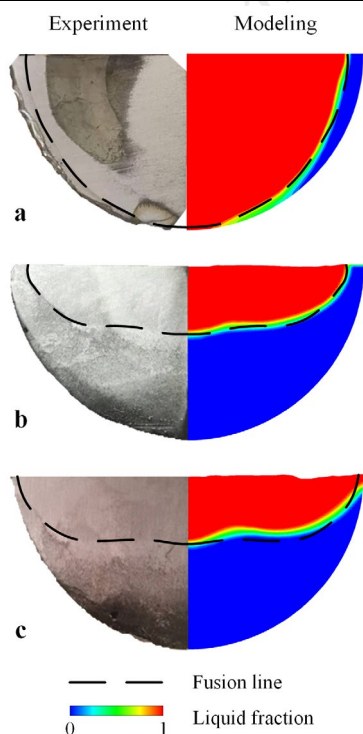


图 3 实验观察(左)与计算预测(右)的铈金属熔合线位置对比: 上表面(a)、 xOz 平面(b)、 yOz 平面(c)

Fig. 3 Comparisons between the experimentally observed (left) and numerically predicted (right) fusion lines for cerium: top surface (a), xOz plane (b), yOz plane (c)

图 3a ~ 3c 分别给出了金属铈上表面、 xOz 平面和 yOz 平面内计算得到的金属熔合线形状和位置与实验结果的对比。图中左半侧为实验结果,黑色虚线为实验得到的熔合线位置;右半侧为液相体积分数的模拟结果,并取 $f_L = 0.5$ 为计算得到的熔合线位置。可以看到,数值模拟与实验测量得到的熔合线形状和位置定性一致,这在一定程度上定性验证了本文所建立的电子束加热模型的可靠性。在今后的实验中,我们将深入开展含铁杂质的钕金属长时间稳定蒸发实验,并与数值模拟结果进行对比分析,进一步验证本文所建立的描述合金材料蒸发特性的物理数学模型的可靠性。

3 结果与讨论

3.1 典型工况的数值模拟结果

维持熔池的长时间稳定蒸发是电子束加热过程的重要目标之一。电子束作用时长对熔池形态、温度场分布、铁含量变化等均有显著影响。本节选取 5 wt% 的初始铁含量、30 kW 的电子束功率作为含铁杂质钕金属电子束加热过程的典型工况参数,研究了熔池特性随电子束加热时间的变化规律。

由于在电子束加热过程中,熔池表面将产生凹陷,因此以考虑表面凹陷的实际真空-流体界面作为模拟过程中的金属铈上表面。典型工况下金属铈上表面中心处的温度随电子束作用时长的变化曲线如图 4 所示。可以看到,随着电子束作用时长的逐渐增加,金属铈上表面中心处的温度起初迅速升高,至 120 s 左右到达拐点,并在之后的长时间内缓慢增长并最终稳定在约 2600 K。这是由于固态金属铈上表面中心处受到电子束扫描热源的直接作用,在短时间内吸收大量的热量,使得温度急速升高并超过金属熔点,导致表层金属熔化形成熔池。当加热至约 120 s 时,金属熔池的形态基本稳定,与周围环境的热量交换亦趋于平衡,因此中心处温度增长放缓,温度曲线出现拐点。此处需要说明的是,当电子束作用时长达到 120 s 之后,金属熔池状态虽已基本稳定,但液态金属表面的微小起伏等因素会导致温度的数值波动,因此,我们将某模拟时间点前后 3 s 范围内的平均值作为该时间点的温度值。

固-液界面形貌可以在一定程度上表征金属铈上表面的熔池形貌。图 5 给出了对应于不同电子束作用时长的金属铈上表面固-液界面位置。可以看到,在电子束加热初期,熔池形状呈长方形,与直线形电子束扫描热源直接作用范围基本吻合;随着电子束作用时长逐渐增加,熔池边缘逐渐向四周扩展,熔池面积逐渐扩大,熔池形状向椭圆形演变;熔池的扩张速度先快后慢;熔池的扩张距离与扩张方向相关,在 y 方向上的扩张距离仅

约为 6 mm, 而在 x 方向上的扩张距离达到约 12 mm; 在 5400 s 时, 熔池大小已基本达到稳定, 此时熔池形状近似呈椭圆形。

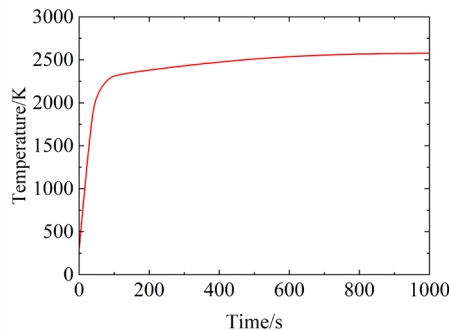


图 4 金属锭上表面中心处的温度随电子束作用时长的变化曲线
Fig. 4 Variation of temperature at the center point of the top surface of the metal ingot with electron beam heating time

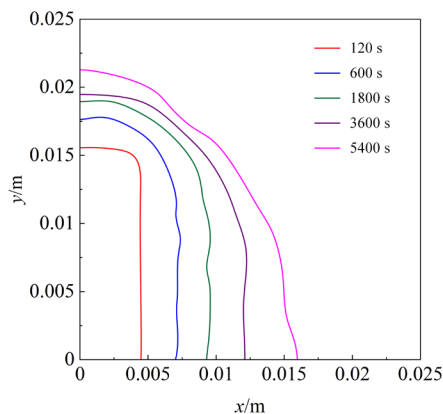


图 5 不同电子束作用时长下的金属锭上表面固-液界面位置的计算结果
Fig. 5 Calculated solid-liquid interface on the top surface of the metal ingot at different electron beam exposure durations

电子束作为唯一的输入热源, 越长的作用时间意味着向金属锭中输入的能量越多。输入的能量除通过熔池表面辐射散热和蒸发散热以及通过水冷坩埚传热外, 其余能量均被金属锭吸收, 从而使得金属锭温度升高并熔化形成熔池。在电子束加热初期, 热量集中于电子束与金属锭直接作用的区域, 此处迅速达到熔点并熔化, 因此熔池形状近似呈长方形。而未被电子束加热的区域温度仍处于环境温度 (300 K) 附近, 从而在熔池边缘出现了明显的温度梯度。由于输入金属锭的能量大于以各种途径损失的能量, 金属锭进一步熔化, 导致熔池面积持续增大。随着金属锭上表面高温区域增加, 熔池表面辐射散热和蒸发散热也随之上升, 导致熔池边缘扩展速度逐渐放缓, 并最终在约 5400 s 时, 输入与输出金属锭的能量基本平衡, 熔池边缘在此时基本达到稳定。熔池表

面流体在表面张力、金属蒸气反冲压力、Marangoni 效应的共同作用下从熔池中心向四周流动, 直到熔池边缘发生回流进入熔池内部, 并沿着熔池固-液界面返回熔池中心。对于半球形水冷坩埚, 由于采用了沿 y 方向扫描的直线形电子束扫描热源, 从而使得熔池在 x 方向上能够相比于 y 方向得到更为充分的拓展, 最终在金属锭上表面形成近似椭圆形的熔池形状。

图 6 给出了不同电子束作用时长对应的 xOz 平面内金属锭上表面位置, 图中黑色虚线为金属锭初始上表面位置。可以看到, 在电子束加热开始后, 熔池表面中心出现凹陷, 而靠近外侧的区域则会出现一定的隆起; 随着加热时间的增加, 熔池中心凹陷深度逐渐增大, 最大深度可达约 2 mm。这是由于在电子束加热过程中, 熔池表面的液态金属大量蒸发形成金属蒸气, 并产生金属蒸气反冲压力作用于熔池表面。在浮力、表面张力、金属蒸气反冲压力等的共同作用下, 熔池中心表面形成稳定的凹陷。其中, 金属蒸气反冲压力是影响熔池中心凹陷深度的主要因素。由式(6)可知, 随着熔池温度 T 的升高, 金属蒸气反冲压力迅速增大, 因此熔池中心的凹陷深度与该位置的熔池温度呈正相关。结合图 3 的计算结果可知, 由于中心处的熔池温度上升速度先快后慢, 因此, 中心处的金属上表面凹陷深度也随之先快速增加再逐渐放缓并最终稳定。

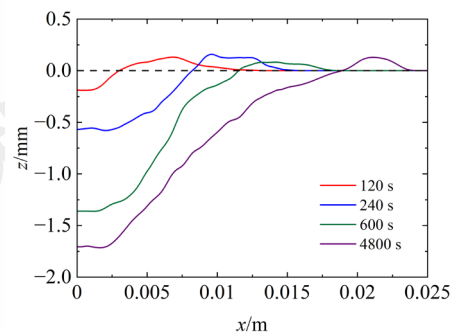


图 6 不同电子束作用时长下的 xOz 平面内金属锭上表面位置的计算结果
Fig. 6 Calculated top surface of the metal ingot in the xOz plane at different electron beam exposure durations

图 7 给出了对应于图 5、6 的 xOz 平面内金属锭上表面铁含量分布, 其中, 黑色虚线为金属锭的初始铁含量 (5 wt%)。可以看到, 熔池内的铁含量明显低于初始值, 熔池温度越高, 铁含量越低; 随着电子束作用时长的增加, 铁含量逐渐降低直至稳定在一个很低的数值 (约 0.2 wt%); 与此同时, 出现铁含量显著降低的区域 (如 < 1 wt%) 在 x 方向亦逐渐增大。

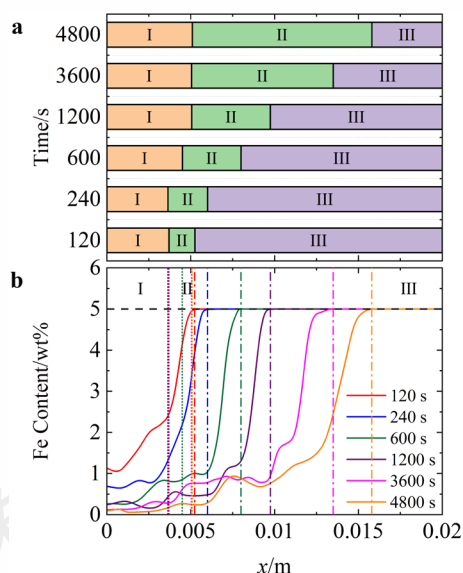


图7 不同电子束作用时长下的 xOz 平面内金属锭上表面铁含量分布的区域划分(a)和计算结果(b): 中心蒸发区域 (I)、过渡区域 (II) 与未熔化区域 (III)

Fig. 7 Zone delineations (a) and calculated distributions (b) of the iron content at the top surface of the metal ingot in the xOz plane at different electron beam exposure durations: central evaporation zone (I), transition zone (II), and unmelted zone (III)

金属锭上表面的铁含量分布主要受到电子束作用时长、熔池表面温度和溶质浓度梯度运输的影响。在电子束加热过程中, 熔池表面伴随有强烈的金属蒸发。由式(14)、(25)、(26)可知, 由于铁的饱和蒸气压高于钆, 因此, 铁比钆更容易转变为蒸气离开熔池表面, 使得熔池表面的铁含量降低。从图7可以看到, xOz 平面内金属锭上表面铁含量的分布基本上可以划分为3个区域: 中心蒸发区域 (I)、过渡区域 (II) 与未熔化区域 (III)。在图7a中, 给出了上述三个区域在不同加热时刻的空间分布的变化, 而在图7b中, 则分别采用虚线和点划线标识了区域I和II、II和III之间的分界。在本文研究中, 以熔池表面温度为2200 K的位置作为中心蒸发区域与过渡区域的分界位置; 也就是说, 在中心蒸发区域内, 熔池的表面温度均超过2200 K。由于在此温度下, 金属锭总蒸发速率中铁的蒸发速率占比远高于5%, 因此, 随着电子束作用时长的增加, 中心蒸发区域内的铁含量迅速降低, 直至整体均降至0.2 wt% @ 4800 s附近并趋于稳定。在图7中, 以未熔化金属边界作为过渡区域与未熔化区域的分界位置; 相应地, 过渡区域处于中心蒸发区域和未熔化区域之间, 此处的铁含量从约0.2 wt%迅速升至初始值(5 wt%)。在此区域内, 随着熔池表面温度逐渐下降, 钆和铁的蒸发速率均有所降低。而且受组元活度(α)的影响, 铁的蒸发受到更强的抑制, 金属

锭总蒸发速率中铁蒸发速率占比逐渐接近5%。相应地, 熔池当地表面温度对铁含量的影响减弱, 而浓度梯度输运则起着更为主要的作用。在熔池内部, 液态金属受到浓度梯度的作用, 将铁从浓度高的熔池边缘向熔池中心方向输运。随着电子束作用时长的增加, 过渡区域的范围逐渐扩大, 其外边界可扩张至约16 mm处并直至达到稳定。而在未熔化区域, 铁含量则保持在初始值(5 wt%)。

3.2 初始铁含量对熔池特性的影响

蒸发装置在高温金属蒸气的长时间冲刷和腐蚀下, 其中的铁等金属元素将随回流液态金属逐渐进入坩埚, 复用金属锭的铁含量可达15 wt%以上。在电子束功率为30 kW时, 图8和9分别给出了不同初始铁含量条件下, 在电子束作用时长为1200 s时 xOz 平面内金属锭上表面的温度和铁含量分布。可以看到, 不同的初始铁含量对熔池温度场的影响并不显著, 而对金属锭上表面处的铁含量分布的影响则比较大, 特别是对过渡区域铁含量分布的影响最为显著。这是因为在过渡区域, 铁含量均以很大的增长速率从中心蒸发区域约0.2 wt%的铁含量迅速攀升至各自的初始值, 从而使得在过渡区域空间范围基本一致的情况下, 初始铁含量越大, 过渡区域的铁含量变化越剧烈。

本节数值计算结果表明, 当熔池达到稳定后, 熔池表面除过渡区域外, 不同初始铁含量的金属锭上表面铁含量均大致相等, 中心蒸发区域的铁含量均约为0.2 wt%; 也就是说, 初始铁含量不会对铁含量分布的区域划分范围产生明显影响, 进而也就不会对稳定后的熔池表面温度产生显著影响。而在过渡区域, 随着初始铁含量的增加, 剧烈的成分变化导致当地流体的物性参数显著变化, 从而使得液态金属流场更加复杂和不稳定, 进而影响金属蒸气的稳定产生。

由此可见, 过高的初始铁含量对电子束加热过程的影响体现在两个方面: 在电子束加热初期, 中心蒸发区域内绝大部分的铁以金属蒸气的形式混入钆金属蒸气中, 由式(14)可知, 随着初始铁含量从5 wt%升高至15 wt%, 对应于熔池表面温度2200 K时的钆金属蒸气中的铁杂质含量从8.2 wt%上升至36.5 wt%, 钆金属蒸气中过高的铁杂质含量将导致同位素分离质量的降低。而当中心蒸发区域的铁基本蒸发完毕后, 过渡区域极大的铁含量空间梯度使得熔池固-液不稳定, 以至于影响稳定的金属蒸气流产生。因此, 在实际的工业应用中, 为了保证激光同位素分离的质量, 一方面, 需将金属锭的初始铁含量控制在较低的范围内, 根据本节的计算结果, 建议将金属锭的初始铁含量上限设定为10 wt%; 另一方面, 对于含有铁等易蒸发杂质的金属锭, 可以待熔池稳

定、中心蒸发区域杂质含量稳定在较低水平时，再进行金属蒸气的激光光电离和离子引出。

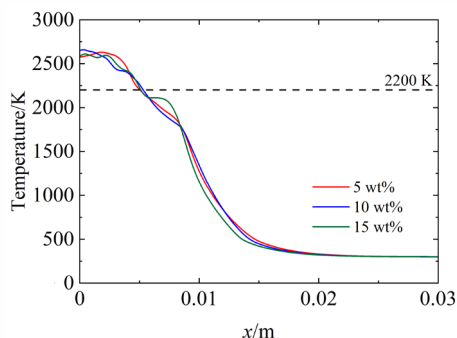


图8 不同初始铁含量下的 xOz 平面内金属锭上表面温度分布的计算结果

Fig. 8 Calculated temperature distributions on the top surface of the metal ingot in the xOz plane at the electron beam exposure duration of 1200 s with different initial iron contents

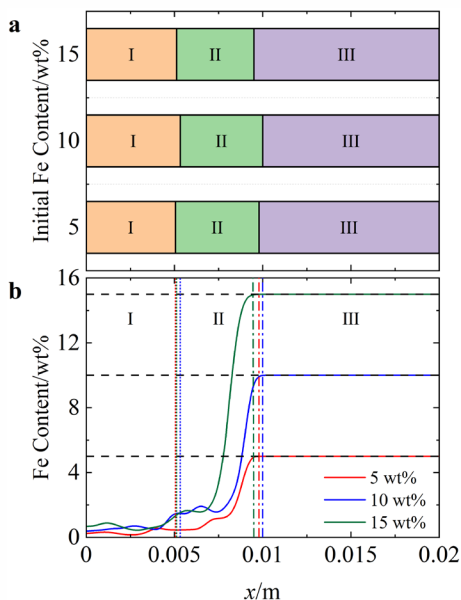


图9 不同初始铁含量下 xOz 平面内金属锭上表面铁含量分布的区域划分(a)和计算结果(b): 中心蒸发区域 (I)、过渡区域 (II) 与未熔化区域 (III)

Fig. 9 Zone delineations (a) and calculated distributions (b) of the iron content on the top surface of the metal ingot in the xOz plane at the electron beam exposure duration of 1200 s with different initial iron contents: central evaporation zone (I), transition zone (II), and unmelted zone (III)

3.3 电子束功率对熔池特性的影响

电子束作为系统唯一的能量输入源，其功率大小对金属熔池特性具有显著的影响。图 10 和 11 分别给出了不同电子束功率条件下，对应于电子束作用时长 1200 s 时 xOz 平面内金属锭上表面的温度和铁含量分布。可以

看到，电子束功率对金属锭上表面温度和铁含量分布均有显著影响。一方面，更高的电子束功率致使金属锭上表面获得更高的表面温度。在电子束直接作用区域，随着电子束功率逐渐升高，中心蒸发区域的最高温度从约 2200 K 上升至约 2600 K。同时，更高的电子束功率也使得熔池表面范围进一步扩大。另一方面，随着电子束功率的逐渐上升和金属锭上表面中心蒸发区域表面温度的升高，会使得铁元素活度亦明显增大，铁蒸发量占比升高，铁含量的稳定值随着电子束功率升高而逐渐降低，从约 0.8 wt% 降低至约 0.2 wt%。不同电子束功率明显改变了中心蒸发区域和过渡区域的范围，电子束功率越高，中心蒸发区域的范围越大，过渡区域外边界距离金属锭几何中心越远。随着电子束功率从 10 kW 升高至 30 kW，中心蒸发区域边界从约 2 mm 处扩张至约 5 mm 处，而过渡区域外边界则从约 7 mm 处扩张至约 10 mm 处。

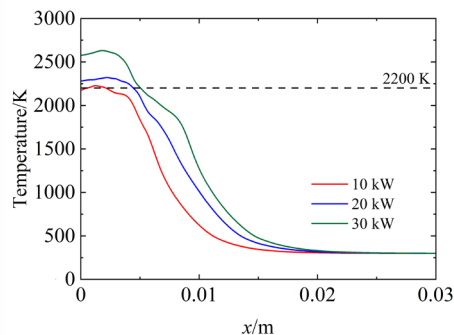


图10 不同电子束功率下 xOz 平面内金属锭上表面温度分布的计算结果

Fig. 10 Calculated temperature distributions on the top surface of the metal ingot in the xOz plane at the electron beam exposure duration of 1200 s with different electron beam powers

由此可见，通过改变电子束功率，不仅可以在一定范围内控制金属锭表面的熔池大小和表面温度，进而达到调控金属蒸气蒸发速率的目的，而且可以在一定程度上控制中心蒸发区域的铁含量，从而调控金属蒸气中的杂质含量。因此，在实际的激光同位素分离工艺中，可以通过合理加载电子束功率，实现对金属熔池特性的有效调控。例如，在电子束加热初期，为尽快降低中心蒸发区域的铁含量，可在保证设备正常运行的情况下，迅速提升电子束的加载功率；而当金属熔池稳定后，则可通过调控电子束功率，对熔池中心区域最高温度、熔池表面大小和蒸发速率等参数进行调控。

4 结论

本研究考虑了电子束加热过程中金属蒸气反冲压力、表面张力、浮力、Marangoni 效应、浓度梯度输运、活度等效应的耦合作用，建立了电子束加热含铁杂质钎

金属传热与流动特性的物理数学模型, 研究了不同工况下的金属熔池特性, 主要得到如下结论:

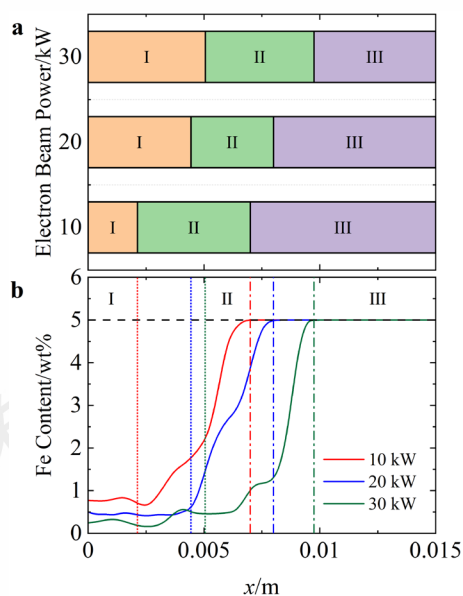


图 11 不同初始铁含量下 xOz 平面内金属锭上表面铁含量分布的区域划分(a)和计算结果(b): 中心蒸发区域 (I)、过渡区域 (II) 与未熔化区域 (III)

Fig. 11 Zone delineations (a) and calculated distributions (b) of the iron content on the top surface of the metal ingot in the xOz plane at the electron beam exposure duration of 1200 s with different initial iron contents: central evaporation zone (I), transition Zone (II), and unmelted zone (III)

(1) 在初始铁含量 5 wt%、电子束功率 30 kW 的典型工况下, 随着电子束作用时长的增加, 金属锭上表面中心处的温度先迅速增加并在约 120 s 时达到拐点, 之后缓慢增长至约 2600 K; 熔池表面不断扩张, 形状从长方形变为近似椭圆形。在金属蒸气反冲压力的作用下, 熔池表面中心产生凹陷, 凹陷深度逐渐增加至约 2 mm, 且凹陷深度与电子束作用时长呈正相关。熔池表面的铁含量分布可依据金属锭上表面 2200 K 等温线和未熔化金属边界分为三个区域: 中心蒸发区域、过渡区域和未熔化区域。中心蒸发区域的铁含量在电子束开始轰击金属锭后迅速下降, 直至整体均降至 0.2 wt% 附近并趋于稳定; 过渡区域的铁含量具有很大的空间梯度, 从约 0.2 wt% 跃升至初始值 5 wt%; 而未熔化区域的铁含量则保持为初始值 5 wt%。

(2) 在电子束加热初期, 初始铁含量的升高会导致钎金属蒸气中铁杂质含量的升高, 当初始铁含量从 5 wt% 上升至 15 wt% 时, 对应于熔池表面温度 2200 K 的铁杂质含量从 8.2 wt% 上升到 36.5 wt%。而当金属熔池稳定后, 虽然初始铁含量对金属锭上表面温度分布的影响很小, 但对过渡区域的铁含量分布则有显著影响; 初

始铁含量越高, 过渡区域铁含量空间梯度越大, 越不利于产生稳定的液态熔池。因此, 建议在实际的生产工艺中, 将 10 wt% 作为金属锭的初始铁含量上限值。

(3) 电子束功率对金属锭上表面温度分布和铁含量分布均有显著影响。在其他参数保持不变的条件下, 随着电子束功率从 10 kW 升高至 30 kW, 金属锭上表面最高温度从约 2200 K 升高至约 2600 K, 中心蒸发区域的铁含量从约 0.8 wt% 降至约 0.2 wt%; 相应地, 中心蒸发区域边界从约 2 mm 处扩张至约 5 mm 处, 过渡区域外边界则从约 7 mm 处扩张至约 10 mm 处。

参考文献 References

- [1] Liu Jiayue(刘嘉月), Guo Xiaoyi(郭晓轶), Zhu Hua(朱 华) et al. *Progress in Pharmaceutical Sciences*(药学进展)[J], 2024, 48(3): 186
- [2] Alcocer-Ávila M E, Ferreira A, Quinto M A et al. *EJNMMI Physics*[J], 2020, 7(1): 33
- [3] Hindié E, Zanotti-Fregonara P, Quinto M A et al. *Journal of Nuclear Medicine*[J], 2016, 57(5): 759
- [4] Chen Zhengguo(陈正国), Yang Xia(杨 夏), Xiao Liming(肖力铭) et al. *Journal of Isotopes*(同位素)[J], 2024, 37(5): 500
- [5] Wang Ruyu(王茹玉), Li Yanjun(李燕君), Zeng Songbai(曾松柏) et al. *Journal of Isotopes*(同位素)[J], 2024, 37(4): 394
- [6] Haynam C A, Comaskey B J, Conway J et al. *Laser Isotope Separation: Vol. 1859*[C]. SPIE, 1993: 24
- [7] Li Heping(李和平), Wang Peng(王 鹏), Wang Xin(王 鑫) et al. *High Voltage Engineering*(高电压技术)[J], 2015, 41(9): 2825
- [8] Westerberg K W, McClelland M A, Finlayson B A. *UCRL-JC-116997; CONF-941128-8*[R]. Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL), Livermore, CA (United States), 1994
- [9] Westerberg K W, McClelland M A, Finlayson B A. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*[J], 1998, 26(6): 637
- [10] Wang Yonggang(王永刚), Ying Chuntong(应纯同), Wang Dewu(王德武) et al. *Chinese Journal of Nuclear Science and Engineering*(核科学与工程)[J], 1994, 14(2): 117
- [11] Xiao Juxiong(肖踞雄), Wang Dewu(王德武). *Journal of Tsinghua University (Science and Technology)*(清华大学学报(自然科学版)) [J], 1999, 39(10): 56
- [12] Xiao Juxiong(肖踞雄), Wang Dewu(王德武). *Journal of Tsinghua University (Science and Technology)*(清华大学学报(自然科学版)) [J], 2000, 40(2): 15
- [13] Bo Yong(薄 勇), Wang Dewu(王德武), Ying Chuntong(应纯同). *Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2002, 51(7): 1535
- [14] Bo Yong(薄 勇), Wang Dewu(王德武), Ying Chuntong(应纯

- 同). *Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2003, 52(4): 883
- [15] Bo Yong(薄 勇), Wang Dewu(王德武), Ying Chuntong(应纯同). *Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2004, 53(6): 1887
- [16] Matveichev A, Jardy A, Bellot J P. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*[J], 2016, 143(1): 012019
- [17] Wen S, Zhao F, Li Y *et al. Vacuum*[J], 2024, 222: 112972
- [18] Zhao Fei(赵 非). *Numerical Simulation and Low Energy Consumption Process Study of Electron Beam Melting for Polycrystalline Silicon*(电子束熔炼多晶硅过程的数值模拟及低能耗工艺研究)[D]. Yangzhou: Yangzhou University, 2025
- [19] Weng Zhaozhi(翁兆志). *Study on the Effect of EB Furnace Melting TA10 Alloy Electron Gun Process Conditions on Ingot Solidification Process*(EB 炉熔炼 TA10 合金电子枪工艺条件对铸锭凝固过程影响研究)[D]. Kunming: Kunming University of Science and Technology, 2023
- [20] Brent A D, Voller V R, Reid K J. *Numerical Heat Transfer*[J], 1988, 13(3): 297
- [21] Miyabe K, Isogai R. *Journal of Chromatography A*[J], 2011, 1218(38): 6639
- [22] Cho J, Farson D F, Milewski J O *et al. Journal of Physics D: Applied Physics*[J], 2009, 42(17): 175502
- [23] Yang Ziyong(杨子酉), Fang Yuchao(房玉超), He Jingshan(何景山). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2021, 50(3): 881
- [24] Von Allmen M, Blatter A. *Laser-beam interactions with materials: physical principles and applications: Vol. 2*[M]. Berlin, Heidelberg: Springer, 1995
- [25] Niezgoda-Żelasko B. *Procedia Engineering*[J], 2016, 157: 114
- [26] Liu C, He J. *Vacuum*[J], 2016, 132: 70
- [27] Kittusamy R K, Rajagopal V, Felix P G. *International Journal of Heat and Mass Transfer*[J], 2023, 206: 123940
- [28] Yang Z, Fang Y, He J. *Vacuum*[J], 2020, 175: 109256
- [29] Gong Jianfeng(宫建锋), Li Liquan(李俐群), Meng Shenghao(孟圣昊). *Transactions of the China Welding Institution*(焊接学报)[J], 2022, 43(11): 50
- [30] You X, Shi S, Tan Y *et al. Vacuum*[J], 2019, 169: 108920
- [31] Miedema A R, de Châtel P F, de Boer F R. *Physica B+C*[J], 1980, 100(1): 1
- [32] Ding Xueyong(丁学勇), Fan Peng(范 鹏), Luo Lihua(罗利华) *et al. Thermodynamic Model of Alloy Melt, Predicted Values, and Software Development*(合金熔体的热力学模型、预测值及其软件开发)[M]. Northeastern University Press, 1998
- [33] Lide D R. *CRC Handbook of Chemistry and Physics (84th Edition)*[M]. CRC Press, 2004
- [34] Ye Xiaohu(叶晓虎), Chen Xi(陈 熙). *Chinese Journal of Lasers*(中国激光)[J], 2002, A29(9): 855
- [35] Ishikawa T, Okada J T, Paradis P F *et al. International Journal of Thermophysics*[J], 2010, 31(2): 388
- [36] Assael M J, Kakosimos K, Banish M *et al. Journal of Physical and Chemical Reference Data*[J], 2006, 35(1): 285
- [37] Savvatimskiy A I, Onufriev S V, Konyukhov S A *et al. Journal of Physics: Conference Series*[J], 2019, 1281(1): 012068
- [38] *NIST-JANAF Thermochemical Tables*[DB/OL]. Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology. <https://janaf.nist.gov> (Access on March 15, 2026)
- [39] Samoshkin D A, Agazhanov A S, Stankus S V. *Journal of Physics: Conference Series*[J], 2020, 1677(1): 012176
- [40] Pottlacher G. *Journal of Non-Crystalline Solids*[J], 1999, 250-252: 177
- [41] Wille G, Millot F, Rifflet J C. *International Journal of Thermophysics*[J], 2002, 23(5): 1197
- [42] Satyro M A, Yaws C L. *The Yaws Handbook of Vapor Pressure (Second Edition)*[M]. Gulf Professional Publishing, 2015
- [43] Savvatimskiy A I, Onufriev S V. *High Temperature*[J], 2018, 56(6): 933
- [44] Li J, Ishikawa T, Okada J T *et al. Journal of Materials Research*[J], 2009, 24(7): 2449
- [45] Savchenko I V, Samoshkin D A, Stankus S V. *Journal of Engineering Thermophysics*[J], 2020, 29(1): 42

Modeling for the Effect of Iron Impurities on the Characteristics of Gadolinium Molten Pools During Electron Beam Heating Process

Lai Ganping, Li Heping*, Jiang Dongjun, Zhou Mingsheng

(Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: The isotope ^{160}Gd can be separated from natural gadolinium using atomic vapor laser isotope separation (AVLIS) technique; and then, ^{160}Gd can be used to produce the medical isotope ^{161}Tb through irradiation. Metal evaporation process is one of the critical steps in AVLIS, and the introduction of iron impurities from the working environment can affect the characteristics of the molten pool and the vapor quality. In this study, a

molten pool model for gadolinium containing iron impurities during electron beam heating is established by employing an “evaporation–activity–concentration gradient transport–VOF free surface” coupling model with considering the effects of metal vapor recoil pressure, surface tension, buoyancy force, transport due to species concentration gradient and activity. Based on this new model, a criterion for dividing the iron content distribution regions at the molten pool surface is established, and the distributions of temperature and iron content in the molten pool of a Gd-Fe system are obtained. In the parameter range studied in this paper, the modeling results show that: With the lasting of electron beam exposure duration, the temperature at the center point of the top surface of the metal ingot rises rapidly at first, and then stabilizes at approximately 2600 K, while the molten pool surface expands into an approximately elliptical shape, and the depth of the surface depression gradually increases to about 2 mm. The distribution of iron content at the molten pool surface can be divided into three regions, i.e., the central evaporation zone, transition zone, and unmelted zone, with the isotherm of 2200 K and the boundary of unmelted metal on the top surface of the metal ingot as a criterion. The initial iron content has significant influences on the iron content distributions in the transition zone and the purity of the gadolinium vapor; with the increase of the initial iron content from 5 to 15 wt%, the iron impurity content in the gadolinium vapor increases from 8.2 to 36.5 wt% corresponding to the surface temperature of 2200 K of the molten pool. There also exist obvious influences of the electron beam power on both the temperature distribution and iron content distribution on the top surface of the metal ingot. With increasing the electron beam power from 10 to 30 kW, the maximum surface temperature at the top surface of the metal ingot increases from approximately 2200 to 2600 K, while the iron content in the central evaporation zone decreases from about 0.8 to 0.2 wt%, and simultaneously, the boundary of the central evaporation zone and the outer boundary of the transition zone both expand outward noticeably. Based on the modeling results under different initial iron contents and electron beam powers, it is recommended that 10 wt% of the initial iron content in the Gd-Fe metal ingot can be set as the upper limit for obtaining high-quality gadolinium vapors in actual applications.

Key words: gadolinium; iron impurity; electron beam heating; molten pool

Corresponding author: Li Heping, Ph. D., Professor, Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, P. R. China, E-mail: liheping@tsinghua.edu.cn