

快离子辐照损伤能深度分布理论计算*

陈家超 陈克勤 马 峰

(中国科学院近代物理研究所, 兰州 730000)

摘 要

本文描述了一个用于计算快离子在无定形结构靶材料中引起的损伤能量分布的计算程序 HEDEP-1。程序中采用了 I. Manning 等发展的近似计算方法, 在处理入射离子与靶原子碰撞过程中考虑了核力影响, 在电子阻止本领计算中选用了最新发表的 J. F. Ziegler 等数据。程序适用的能量范围是较宽的, 从 L. S. S. 能区一直延伸到弹-核系统的库仑势垒以上, 可以计算单质和多至四种元素组成的均匀靶材料。

一、引 言

辐照损伤在深度分布上的不均性, 是离子辐照的一个特点, 对它的研究一直是辐照效应研究中的一个重要问题。早在 1972 年 Torrens 和 Robinson^[1] 提出辐照损伤的深度分布计算可以近似地转化为损伤能量的深度分布来计算。在入射离子能量不超过它与靶核的库仑势垒时是用 Rutherford 散射来处理辐照过程中的能量传递。到目前为止已经发表了几个计算程序^[2,3,13]。

近几年来世界上有几个大型重离子加速器陆续建成投入使用, 离子辐照效应的研究, 正在向高能区扩展, 比小型加速器的能量区域高得多, 离子能量完全可以超过库仑势垒高度。这时仅用库仑散射来处理问题是不够的, 应该考虑核力的效应。过去只有 Anderson 和 Soreuson^[15] (1972) 在研究轻离子辐照损伤时考虑了核力效应, 而常用的计算程序都未考虑。如 EDEP-1 程序^[3]只适用 $E \leq 25Z^{1/3}$ keV/amu, 不久前 T. Aruge^[4] 等将它的能量区域进行了扩展, 他们只在电子能量损失方面做了改进, TRIM^[2] 程序也还在不断的改进当中, 由于它是按照 Monte Carlo 原理来设计的, 对于较高能量的重离子辐照要获得好的统计精度, 需要耗费大量的机时, 因此这些程序都不适合于现在发展着的需要。我们根据 G. L. Kulcinski^[5] 等提出的, 并被 I. Manning 等发展的损伤能深度分布的计算方法编写了一个程序, 对散射函数做了一些改进, 并选用最新的电子阻止截面数据, 这个程序适合于计算快离子辐照的损伤能量深度分布, 取名为 HEDEP-1。

本文 1989 年 4 月 29 日收到。

* 中国科学院院内基金资助。

二、计算方法

1972年 Torrens 和 Robinson 给出辐照引起的位移损伤分布和损伤能量分布有如下关联式:

$$\int_0^{\infty} \rho(x) dx = \frac{K}{2E_d} \int_0^{\infty} S_D(x) dx,$$

其中, $\rho(x)$ 是位移原子密度在离子穿透深度 x 上的分布; $S_D(x)$ 是损伤能在离子穿透深度 x 上的分布; E_d 是平均位移阈能; K 是常数(一般情况下取 0.8).

在入射离子能量较高时 ($> 10^5 \text{eV}$), 位移原子的进一步运动对深度分布的影响很小, 因此, 如果忽略位移原子的进一步运动, 那末就有:

$$P(x) \approx S_D(x),$$

所以损伤深度分布的计算就转化为损伤能量的深度分布计算.

1. 损伤能量深度分布

首先, 我们考虑一个入射能量为 E , 原子序数和质量分别为 Z_1 和 M_1 的离子, 射入一个半无限空间无序结构靶, 靶原子密度为 N , 其原子序数和质量分别为 Z_2 和 M_2 , 那么损伤能深度分布为^[3]:

$$S_D(x) = \int_x^{\infty} f(x') S_L[E_1(x' - x)] \frac{dr(x' - x)}{dx'} dx' \quad (1)$$

这里: $f(x')$ 为入射离子投影射程分布; $E_1(x' - x)$ 表示残留投影射程为 $(x' - x)$ 的离子平均能量; $R(x' - x)$ 为残留投影射程函数的路径射程; $S_L(E_1)$ 是入射离子的残留能量为 E_1 时, 走过单位路径长度所引起靶原子位移的能量. 它由公式(2)给出:

$$S_L(E_1) = N \int_{T_1}^{T_m} T \eta(T) \sigma(E_1, T) dT, \quad (2)$$

这里的变量 T 表示在弹性碰撞中传输给 PKA (初始敲出原子) 的能量. T_1 是能产生 PKA 的最小截止能量, 它的数值决定于靶材料. T_m 是在弹性碰撞中能传输给 PAK 的最大能量 ($T_m = 4M_1M_2E/[M_1 + M_2]^2$). $\sigma(E_1, T)$ 是能量为 E_1 的入射离子与靶原子发生弹性碰撞传输给 PAK 能量为 T 的微分截面. 系数 $\eta(T)$ 由 Robinson^[6] 给出:

$$\eta(T) = [1 + K_s g(\varepsilon)]^{-1}, \quad (3)$$

其中,

$$g(\varepsilon) = \varepsilon + 0.40244\varepsilon^{3/4} + 3.4008\varepsilon^{1/6}, \quad (4)$$

这里的 ε 是 PAK 能量 T 用 LSS 理论中无量纲能量单位表示的值. 常数 K_s 由表达式(5)给出:

$$K_s = 0.0793 Z_1^{1/6} \left(\frac{Z_1 Z_2}{Z} \right)^{1/2} \frac{M_2}{M_0^{3/2}}, \quad (5)$$

这里: $Z^{2/3} = Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}$, $M_0 = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$.

以上的计算表达式是在基于假设(1)能用投影射程分布和(2)可以忽略 PAK 的运动

对损伤能分布的影响下得到的,这在快离子入射情况下有令人满意的精度^[7]。

前面讨论了单元素靶情况,如果是多元素靶,只需按所含元素的原子数目线性叠加得到 $S_L(E)$, 同时公式(5)中 Z_2 和 M_2 分别用原子密度权重的平均原子序数 \bar{Z}_2 和质量 \bar{M}_2 代替即可。

虽然在推导损伤能分布计算公式时使用了无序结构靶假设,但 Torrens 和 Robinson^[4] 曾发现,就原子位移问题而论,三种典型的金属立方结构 (bcc, fcc, hcp) 的晶体效应是不重要的。实际上,当入射离子在远离晶轴方向射入晶态靶时,就我们现在所讨论的问题,可将晶态结构靶看成是无序结构靶。

2. 弹性碰撞微分截面

LSS 理论给出的弹性碰撞微分截面计算表达式为:

$$da(E, T) = \pi a^2 \epsilon_0^2 t^{-\frac{1}{2}} f(t^{1/2}) / (2T_m) dT, \quad (6)$$

其中, $a = 0.8853 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-\frac{1}{2}} a_0$, a_0 为 Bohr 半径; $t = \epsilon_0^2 T / T_m$, ϵ_0 为用 LSS 理论中无量纲能量单位表示的入射离子能量值。

Lindhard 等根据 Thomas-Fermi 势给出了核散射函数 $f(t^{1/2})$ 的数据表^[8] ($t^{1/2} \leq 20$) 和计算表达式

$$f(t^{1/2}) = \frac{1}{2t^{1/2}} \quad (t^{1/2} > 20),$$

而表达式

$$f(t^{1/2}) = \frac{1}{2t^{1/2}}, \quad (7)$$

就是非屏蔽库仑势核散射函数。但随着实验技术的发展,人们发现 $T-F$ 势给出的核阻止截面在低 $t^{1/2}$ 值端与实验比较有较大偏差^[9]。所以,在 $t^{1/2} \leq 20$ 时,我们的核散射函数的计算采用了夏日源^[10]等根据 Kalbitzer 等和 Chu 等工作推荐的表达式:

$$f_w(t^{1/2}) = \frac{2.54t^{1/4}}{[1 + (5.08t^{1/4})^{1/2}]^2}. \quad (8)$$

这个核散射函数与 Wilson 等^[11]提出的更为现实可靠的原子相互作用势(称为 WHB 势)符合很好。在 $t^{1/2} > 20$ 时,核散射函数仍使用表达式(7)计算。

以上讨论了核力可以忽略时的情况,但随着入射离子能量的升高,其能量超过库仑势垒时,核力对散射截面的影响就不可忽略。此时,入射离子与靶核的弹性散射过程的精确处理可以采用光学模型,但光学模型的计算量非常大,同时,光学模型的参数选取也有一定困难,故我们在处理高能入射离子与靶核弹性散射过程时,选用了较为简单的锐截止模型^[12],该模型虽然简单粗糙,但就我们所关心的问题,结果还是好的。我们不准备在这里详细讨论锐截止模型,只给出我们所需要的计算表达式。用锐截止模型所得到的核散射函数为:

$$f_s(t^{1/2}) = \alpha(E, T) \frac{1}{2t^{1/2}}, \quad (9)$$

这里,

$$\alpha(E, T) = \left[\sin U^* + \frac{U'}{n^2} \sum_{l=0}^{l'} (2l+1) P_l(\cos \varphi) \sin V_l \right]^2 + \left[\cos U^* + \frac{U'}{n^2} \sum_{l=0}^{l'} (2l+1) P_l(\cos \varphi) \cos V_l \right]^2, \quad (10)$$

其中, $n = Z_1 Z_2 e^2 / \hbar v^2$; v 是入射离子与靶核之间的相对速度; $U^* = n \ln \sin^2 \phi / 2$; $U' = n \sin^2 \phi / 2$; $V_l = 2 \sum_{l''=1}^l \text{tg}^{-1}(n/l'')$; $P_l(\cos \phi)$ 为勒让德多项式。

质心系散射角 ϕ 与实验室系传输动能 T 之间由关系式 $\sin^2 \phi / 2 = T/T_m$ 联系。公式(10)中的 $\hbar l'$ 为经典偏转点所对应的角动量, 即方程:

$$E_{\text{CM}} = Z_1 Z_2 e^2 / R + \hbar^2 l'(l'+1) / 2mR \quad (11)$$

被满足时的角动量。其中, m 为约化质量; E_{CM} 为质心系能量; R 为核作用半径; e 为单位电荷电量。

这里有一个问题需要提出讨论, 那就是锐截止模型是在假设核外相互作用势是非屏蔽库仑势条件下推导出微分散射截面计算公式的, 当入射离子的能量小于碰撞系统的库仑势垒时, 其散射函数就是非屏蔽库仑核散射函数。而非屏蔽库仑势在小角度(也就是小 $l^{1/2}$) 散射时不适用早已被实验所证实。因此, 锐截止模型的使用范围应限于库仑势所适用的范围, 也就是在 $l^{1/2} > 20$ 时适用。这样一来, 在 $l^{1/2} \leq 20$ 时, 我们将仍用公式(8)来计算核散射函数, 这也是合理的。因为在小散射角的情况下, 入射离子对靶核的瞄准距离也就大, 核力的影响也就很小, 可以使用不考虑核力的 WHB 势原子相互作用模型。

最后, 在我们的程序中使用的核散射函数形式为:

$$f(l^{1/2}) = \begin{cases} \frac{2.54 l^{1/4}}{[1 + (5.08 l^{3/4})^{1/2}]^2}, & l^{1/2} \leq 20 \\ \alpha(E, T) \frac{1}{2 l^{1/2}}, & l^{1/2} > 20 \end{cases} \quad (12)$$

如果不考虑核力相互作用, 令 $\alpha(E, T) = 1$ 即可。

3. 射程分布与射程

我们假设投影射程分布函数是高斯分布:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta x} \exp\left(-\frac{(x - \bar{x})^2}{2(\Delta x)^2}\right). \quad (13)$$

在我们的计算中, 各种射程参数都是由子程序 RANGE 得到的, 这里只给出简要说明。子程序 RANGE 是在 Brice 程序 COREL^[13] 的基础上改进得到的。我们的主要改进是:

- (1) 核散射函数使用了考虑核力影响的(12)式。
- (2) 电子阻止本领计算使用了最新发表的 J. F. Ziegler^[14] 等数据。

三、结果与讨论

我们的 HEDEP-1 程序设计了两个计算公式, 分别使用了两个不同的核散射函数。

一个使用的是不考虑核力影响的 WHB 势原子相互作用所描写的核散射函数, 即 (12) 式中令 $\alpha \equiv 1$, 记为 WHB 方式。另一个使用的是考虑核力影响的结合锐截止模型 (Sharp Cut-off Model) 所给出的核散射函数, 即(12)式, 记为 SCM 方式。

表 1 给出了我们的 HEDEP-1 程序选用 WHB 方式对几个系统损伤峰位 x_d 和损伤峰半高宽 Δx_d 的计算结果, 同时也给出了它们与 TRIM 85 程序计算结果和实验结果比较^[4]。两个程序的损伤峰位结果符合很好, 它们与实验结果也较好符合。由于使用了更为精确的电子阻止本领数据, HEDEP-1 程序计算的 Ag 和 Ta 两靶中的损伤峰位更接近于实验值。对应的从表 1 中可看到 HEDEP-1 程序计算的损伤峰半高宽在 Ag 和 Ta 两靶中也与实验值有相对好的符合, 但两个程序所计算出的损伤峰半高宽都与实验值有一定差别。

为了研究核力对损伤能深度分布和总损伤能的影响, 我们还利用 HEDEP-1 程序选用 WHB 和 SCM 两种方式对 $C \rightarrow Fe$ 和 $Cl \rightarrow Fe$ 两个系统进行了计算, 结果见表 2。从表 2 中可看到, 总损伤能 E_{DT} 和损伤峰位 x_d 在采用 WHB 和 SCM 两种方式时结果是很相近的, 但损伤峰半高宽 Δx_d 在 WHB 和 SCM 两种方式下有明显不同。考虑核力后, 损伤峰半高宽有所减小, 并且在表 2 的能区范围内, 随着入射离子能量的增加, 其差异加大。在相同入射离子能量条件下, $C \rightarrow Fe$ 的损伤峰半高宽在两种方式下的差异大于 $Cl \rightarrow Fe$ 的差异。

我们认为, 由于快离子辐照材料时, 总损伤能只占总入射能量的千分之一左右, 而且

表 1 HEDEP-1(WHB) 计算的损伤峰位 x_d 和损伤峰半高宽 Δx_d 与 TRIM85 和实验结果的比较。

离子	能量 (MeV)	靶	$x_d(\mu m)$			$\Delta x_d(\mu m)$		
			EXP ^[4]	HEDEP-1	TRIM85	EXP ^[4]	HEDEP-1	TRIM85
C-12	90.3	Al	161.2	142.2	142.2	5	2.58	3.2
	89.2	Fe	67.1	58.7	59.5	5	1.34	1.2
	90.3	Ag	56.8	58.6	58.8	5	2.21	2.2
	90.3	Ta	45.5	46.8	47.5	3	2.53	1.2
Cl-35	150.6	Al	37.4	37.1	37.2	3	1.50	1.2
	150.6	Fe	15.8	16.2	16.3	2.5	1.01	1.0
	150.6	Ag	15.0	16.3	16.8	6	1.46	0.8
	150.6	Ta	13.4	13.6	14.1	3	1.72	0.8

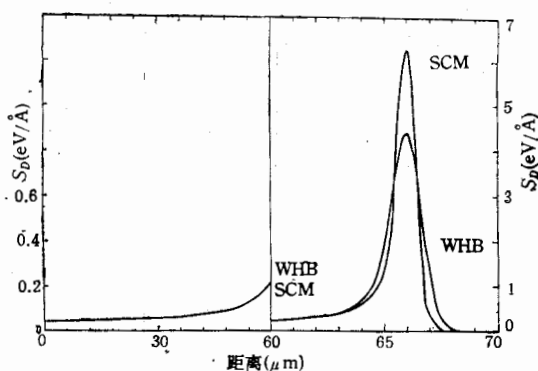


图 1 HEDEP-1程序在 WHB 和 SCM 两种方式下计算出的损伤能分布比较
靶: Fe 离子: ^{12}C 能量: 8MeV/amu

损伤能主要贡献于对应于低能的射程末端, 核力的影响只有在入射离子能量超过库仑势垒时才明显, 所以核力对总损伤能和损伤峰位影响很小。但入射离子能量超过库仑势垒之后, 大角度散射截面在核力作用下大幅度减小, 从而减小了离子的能量歧, 这样造成了

损伤峰半高宽的减小,并且随着能量的提高,核力的影响加强。为了说明核力对损伤能在深度 x 上分布的影响,我们给出了 8 MeV/amu ^{12}C 离子辐照 Fe 靶在 WHB 和 SCM 两种方式下的损伤能分布情况,见图 1。从图中看到,为了精确计算快离子辐照材料的初始损伤分布,核力的影响应该考虑。锐截止模型在入射离子能量稍超过库仑势垒时其结果比较好,但入射离子能量更高时,锐截止模型不能很好描写弹性散射情况,所以更高能量的快离子辐照条件下损伤能深度分布的变化需进一步研究。

表 2 HEDEP-1 程序选用 WHB 和 SCM 两种方式在各种入射离子能量下对 $\text{C} \rightarrow \text{Fe}$ 和 $\text{Cl} \rightarrow \text{Fe}$ 两个系统的损伤峰位 x_d 、损伤峰半高宽 Δx_d 及总损伤能 E_{DT} 的计算结果

系统	能 量 (MeV/amu)		1.0	4.0	8.0	10	20
	$\text{Cl} \rightarrow \text{Fe}$	x_d (μm)	WHB	4.08	14.9	34.2	45.9
SCM			4.08	14.9	34.3	46.0	124.1
Δx_d (μm)		WHB	0.90	1.01	1.23	1.37	2.25
		SCM	0.90	1.00	1.09	1.16	1.48
E_{DT} (MeV)		WHB	0.54809	0.64703	0.72009	0.74936	0.87371
		SCM	0.54809	0.64659	0.71978	0.74972	0.87661
$\text{C} \rightarrow \text{Fe}$	x_d (μm)	WHB	4.44	23.6	65.9	93.7	292.5
		SCM	4.44	23.7	66.0	93.8	292.6
	Δx_d (μm)	WHB	0.64	0.95	1.64	2.53	6.59
		SCM	0.64	0.85	1.06	1.95	5.35
	E_{DT} (MeV)	WHB	0.09001	0.11545	0.13884	0.14907	0.19530
		SCM	0.09001	0.11554	0.13876	0.14856	0.19273

参 考 文 献

- [1] T. M. Torrens and M. T. Robinson, USAEC Report CONF-710601, 1972, p739.
- [2] J. P. Biersack and L. G. Haggmark, *Nucl. Instr. Meth.*, **174**(1980), 257.
- [3] I. Manning and G. P. Mueller, *Comp. Phys. Comm.*, **7**(1974), 85.
- [4] T. Aruga, K. Nakata and S. Takamwra, *Nucl. Instr. Meth.*, **B33**(1988), 748.
- [5] G. L. Kulcinski, J. J. Laidler and D. G. Doran, *Rad. Eff.*, **7**(1975), 195.
- [6] M. T. Robinson, Nuclear Fusion Reactor (British Nuclear Energy Society, London, 1971), p. 410.
- [7] D. K. Brice, *J. Appl. Phys.*, **46**(1975), 3385.
- [8] J. Lindhard et al., *Mat. Fys. Mecl. Dan. Vid. Selk.*, **36**(1963), 1.
- [9] S. Kalbitzer and H. Oetzmann, *Rad. Eff.*, **47**(1980) 57.
- [10] 夏日源等,物理学报, Vol.32(1983),423.
- [11] W. D. Wilson, L. G. Haggmark and J. P. Biersack, *Phys. Rev.*, **B15**(1977), 2458.
- [12] J. S. Blair, *Phys. Rev.*, **95**(1954), 1218.
- [13] D. K. Brice, Ion Implantation Range and Energy Deposition Codes: COREL, RASE4 and DAMGZ, SAND 75-0622.
- [14] J. F. Ziegler et al., The Stopping Power and Range of Ions in Solids, Pergaman Press, 1985.
- [15] H. H. Andersen. H. Sorensen, Radiation Effects, **14**(1972), 49—66.

The Calculation of Depth Distribution for Swift Ion-Radiated damage Energy

CHEN JIACHAO CHEN KEQIN MA FENG

(Institute of Modern Physics, Academia Sinica, Lanzhou 730000)

ABSTRACT

A computer program HEDEP-1, written by FORTRAN 77 and run on microcomputer, was developed in order to calculate the depth distribution for swift ion-radiated damage energy in the amorphous materials. The approximation method developed by I. Manning et al. was used in the program. The effects of nuclear force as treating incident ions collision with target atoms were considered. The data of electronic stopping powers given by J. F. Ziegler were used. HEDEP-1 can accept complex targets made up of component materials with elements up to four different kinds and all ions in periodic table of the elements with energy up to 100 MeV/amu.