

# 利用离子输运的标度特性计算离子 在固体中的射程分布\*

侯 氢 罗 正 明

(四川联合大学, 原子核科学与技术研究所辐射物理中心, 成都 610064)

(1994年3月8日收到)

利用低能轻离子在固体中的输运量可近似由离子标度输运截面单值描述这一标度特性<sup>[1]</sup>, 取得了计算低能轻离子在重靶中射程分布的普适公式. 具体地, 在用离子输运双群模型计算得到射程分布前四阶矩后, 建立这些与标度输运截面之间的近似单值对应关系, 在此基础上, 拟合得到计算射程分布的前四阶矩以及射程分布的公式. 通过与实验值和 Monte Carlo 计算结果的比较, 检验了本文给出的普适公式. 利用本文的结果可以较好描述低能轻离子在固体中的射程分布, 同时又有很高的计算效率.

PACC: 7920N; 5240H; 6180J

## 1 引 言

近年来, 人们通过对离子输运 Boltzmann 方程进行仔细的理论分析, 发现离子在固体中的输运行为具有标度性质, 即离子输运量可由一个名为标度输运截面的参量确定<sup>[1-3]</sup>. 对于不同的离子-靶-能量组合, 只要对应的标度输运截面相同, 则其输运量, 如反射系数、射程分布, 也相等或近似相等. 离子输运的标度性质使我们可以得一些简单的解析表达式来计算所关心的离子输运量, 如射程分布等, 而避免耗费机时的离子输运数值模拟计算. 这在离子注入等应用领域有重要意义. 例如, 在离子注入实验中, 往往希望能对离子的射程分布很快作出估计, 由于可能涉及很宽范围的离子-靶-能量组合, 简单快速同时又有较好精度的射程分布计算方法就具有重要价值. 本文正是利用离子输运的标度性质, 在由离子输运双群模型计算得到的大量射程分布数据基础上, 拟合得到射程分布前四阶矩与标度输运截面之间的关系式. 利用这组关系式可以容易地计算入射离子在固体中的射程分布. 通过与实验和 Monte Carlo 计算的比较表明, 由本文给出的计算方法可较好描述低能轻离子的射程分布, 同时又有很高的计算效率.

## 2 理论计算与结果

在文献[1-3]中, 已对离子输运的标度特性作了详细的理论分析和讨论, 本文在此不

\* 四川省青年科学基金资助的课题.

再赘述,而只是简单总结已得到的结论。本文的主要目的是利用离子输运的标度特性,得到射程分布的解析计算式,并通过与实验和 Monte Carlo 结果的比较,检验所得计算式的适用性。

根据文献 [2], 当离子-靶-能量组合满足: 1) 入射离子质量  $M_1 \ll$  靶原子质量  $M_2$ ; 2) 入射能量在低能区时, 离子输运的 Boltzmann 方程经标度变换后可化为仅含一个参量  $\sigma_t$  的输运方程。条件 1) 可对 Boltzmann 方程中的碰撞项作连续慢化近似, 条件 2) 可对 Boltzmann 方程中的弹性碰撞截面作幂函数近似。在这样的近似下, 经标度变换后的 Boltzmann 方程仅含一个参量  $\sigma_t$ , 其定义为

$$\begin{aligned} \sigma_t &= 2\pi R_0 N \int_{-1}^1 d\mu \sigma_N(E_0, \mu)(1 - \mu) \\ &\approx R_0 \left( \frac{M_2}{M_1} \frac{\rho_N}{2E_0} + \frac{2M_2 - M_1}{8M_1} \frac{Q}{E_0^2} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

其中  $N$  为单位体积中的原子数,  $R_0$  为径迹长度,  $E_0$  为入射能量。  $\sigma_N$  为入射离子弹性微分截面,  $\rho_N(E_0)$  为能量是  $E_0$  时的核阻止本领,  $Q(E_0)$  为能量是  $E_0$  时的能量歧离。已经证明, 对于低能轻离子输运, 对应于不同的离子-靶-能量组合, 只要相应的  $\sigma_t$  相等, 则离子输运 Boltzmann 方程的解也相等或近似相等, 由 Boltzmann 方程的解所决定的各输运量也应近似相等。

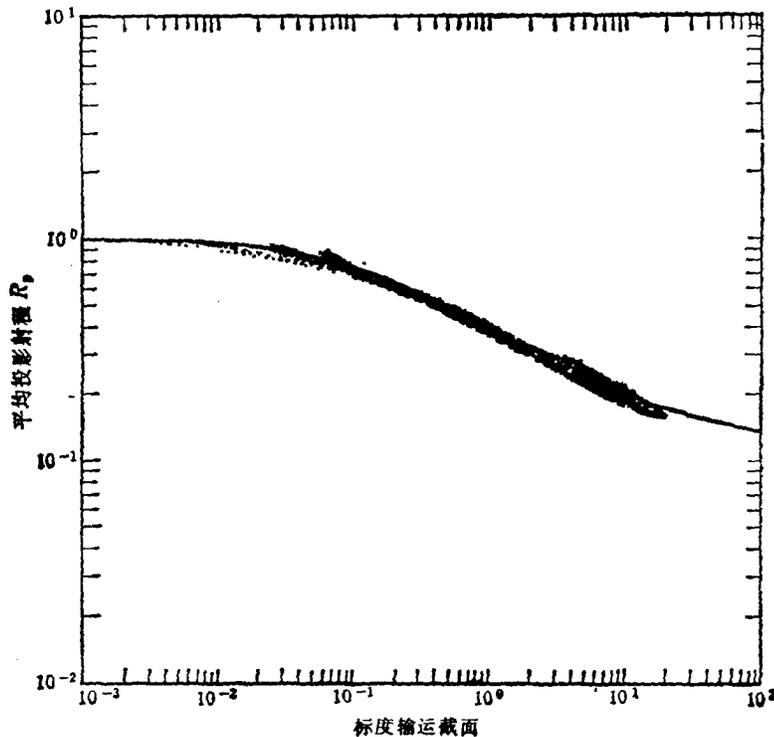


图 1 平均投影射程  $R_p$  与标度输运截面的关系 数据点由双群模型得到; 实线为拟合曲线((6)式)

本文是过去工作的进一步发展和推广。为了进一步检验离子输运的标度特性, 本文用离子输运的双群模型计算了能量在  $0.01-1 \times 10^3 \text{keV}$  的 H, D, T, He, Li, Be, C, N, O, Ne 离子在 C, Al, Cu, Mo, Ag, W, Au, Pb, U 中的射程分布及其前四阶矩与标度输运截面之间的关系。包含的离子-靶-能量组合约 3500 个。需要指出的是, 虽然离子输运的标度特性是在连续慢化近似和弹性碰撞截面的幂函数近似基础上发现的, 但在本文的计算中, 采用了改进的离子输运双群模型<sup>[4]</sup>。在改进的双群模型中, 放弃了散射参数的幂函数近似, 而代之以更精确的散射参数计算并且还考虑了连续慢化近似所没考虑的能量损失角关联, 因此有更高的计算精度。计算结果, 仍然表明离子输运具有良好的标度特性, 这件事表明了离子标度特性的普遍性。

图 1—4 展示了射程分布的前四个矩函数与标度输运截面的对应关系。按定义

$$R_p = \int_0^1 x R(x) dx / \int_0^1 R(x) dx, \quad (2)$$

$$\Delta R_p = \left[ \int_0^1 (x - R_p)^2 R(x) dx / \int_0^1 R(x) dx \right]^{1/2}, \quad (3)$$

$$\beta^{1/3} = \left[ \int_0^1 (x - R_p)^3 R(x) dx / \int_0^1 R(x) dx \right]^{1/3}, \quad (4)$$

$$\gamma^{1/4} = \left[ \int_0^1 (x - R_p)^4 R(x) dx / \int_0^1 R(x) dx \right]^{1/4}, \quad (5)$$

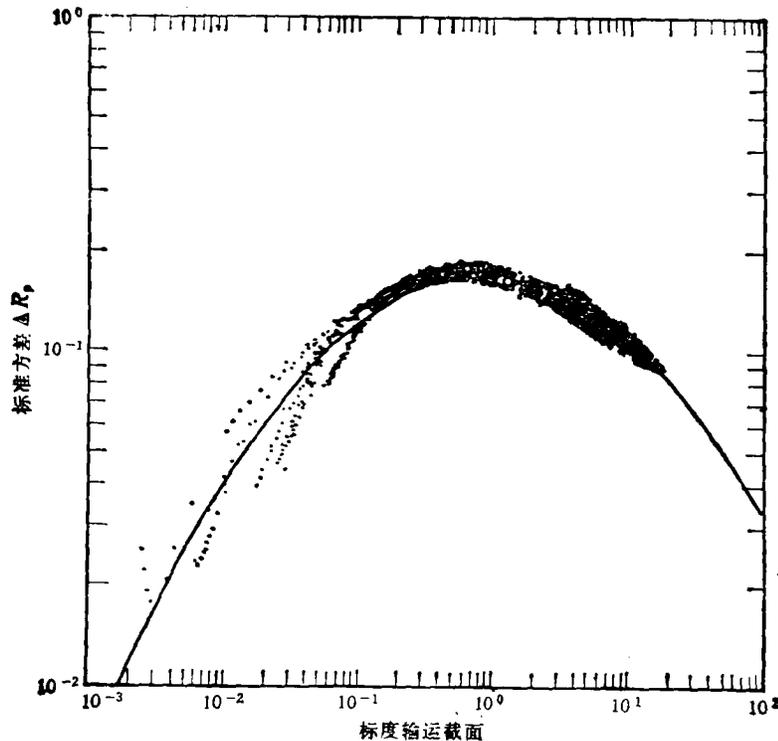


图 2 标准方差  $\Delta R_p$  与标度输运截面的关系 数据点由双群模型得到; 实线为拟合曲线((7)式)

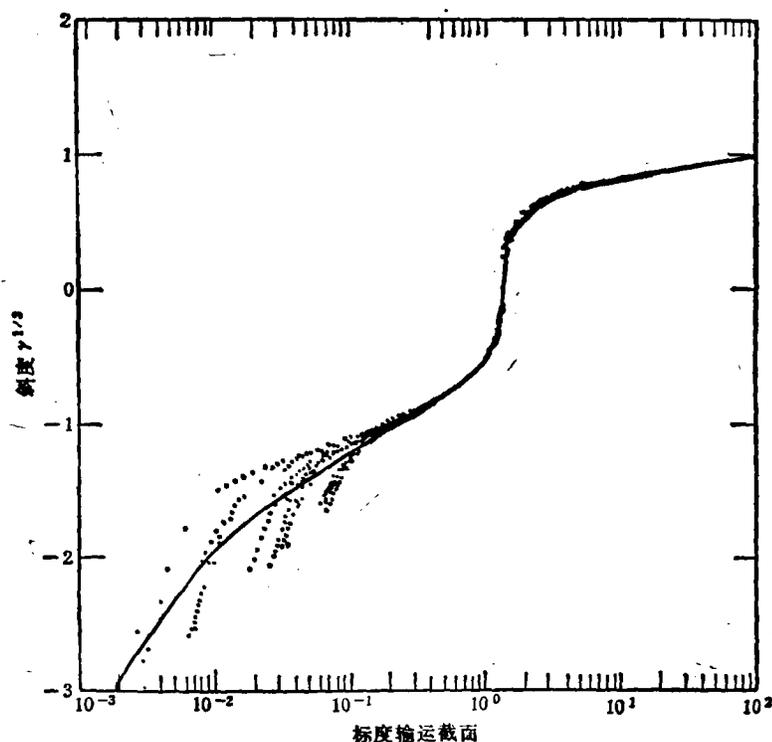


图3 斜度  $\gamma^{1/3}$  与标度输运截面的关系 数据点由双群模型得到; 实线为拟合曲线((8)式)

其中  $x$  为以径迹长度  $R_0$  为单位的穿透深度,  $R(x)$  为射程分布.  $R_p$  和  $\Delta R_p$  分别为以  $R_0$  为单位的平均投影射程和射程的标准方差.  $\gamma$  为射程分布的斜度, 当  $\gamma > 0$ , 表示射程分布的峰值位置小于  $R_p$ ; 反之, 当  $\gamma < 0$ , 表示射程分布峰值位置大于  $R_p$ .  $\beta$  为射程分布的陡度, 反应射程分布在峰值附近变化的快慢. 对应于小  $\beta$  值,  $R(x)$  在峰值附近有较陡的变化; 反之, 则变化较平缓.  $\sigma_t$  值由(1)式计算得到.

由图1-4可以看出, 尽管涉及到较宽的离子-靶-能量组合, 在  $\sigma_t > 0.1$  的区域内  $R_p, \Delta R_p, \gamma$  和  $\beta$  与  $\sigma_t$  有很好的单值对应关系. 在  $\sigma_t < 0.1$  的区域, 各输运量数据点则表现出较大离散度. 如前所述, 离子输运的标度特性是在连续慢化近似和弹性碰撞截面的幂函数近似基础上得到, 本文在双群模型计算中放弃了散射参数的幂函数近似, 并考虑了连续慢化近似所没考虑的能量由损失角关联. 通常, 小  $\sigma_t$  对应高入射能量, 因此在  $\sigma_t$  较小的区域, 输运量与  $\sigma_t$  的单值对应关系变差. 但庆幸的是,  $\sigma_t > 0.1$  的区域已覆盖大部分应用感兴趣的离子-靶-能量组合.

根据图1-4的双群模型计算结果, 本文用最小二乘法得到  $R_p, \Delta R_p, \gamma$  和  $\beta$  的解析拟合式如下:

$$R_p = 0.5 \left\{ 1 - \exp \left\{ \frac{-0.38983424}{[\ln(1 + \sigma_t)]^{0.45}} \right\} + \frac{1}{1 + 2.110102 \ln(1 + \sigma_t)} \right\}, \quad (6)$$

$$\Delta R_p = \exp \{ -0.072668 \ln^2(1 + \sigma_t) - 0.0228576 \ln(1 + \sigma_t) - 1.78108 \}, \quad (7)$$

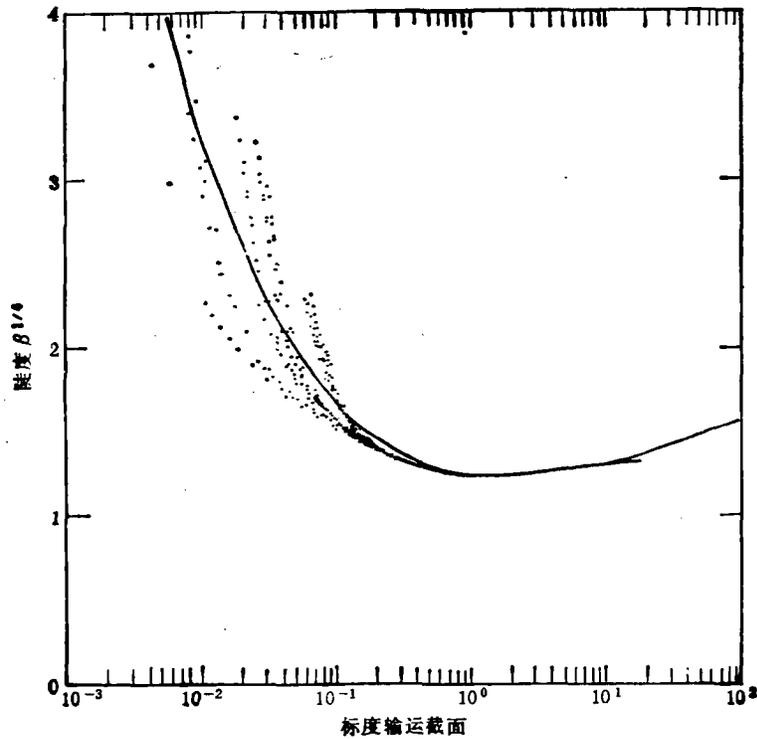


图 4 陡度  $\beta^{1/4}$  与标度运输截面的关系 数据点由双群模型得到; 实线拟合曲线((9)式)

$$\gamma^{1/3} = \{0.050828 \ln^2(\sigma_t) + 0.118773 \ln(\sigma_t) + 1.23660\} \times \exp[-0.132716 \ln(\sigma_t)], \quad (8)$$

$$\beta^{1/4} \begin{cases} = \left| \frac{\ln(\sigma_t) - 0.335121}{4.51653} \right|^{0.230431}, & \sigma_t \geq 1.32313; \\ = - \left| \frac{\ln(\sigma_t) - 0.339432}{1.86664} \right|^{3.405202} - \left| \frac{\ln(\sigma_t) - 0.684912}{6.49059} \right|^{3.505630}, & \sigma_t < 1.32. \end{cases} \quad (9)$$

图 1—4 中实线由(6—9)式所得。可以看出, 拟合曲线可较好描述双群模型的计算结果。

由(6—9)式给出的射程分布前四阶矩, 可得到离子在固体中的射程分布。射程分布可由 Pierson IV 型分布函数描述<sup>[5]</sup>, 即射程分布满足如下微分方程;

$$\frac{dR(x)}{dx} = \frac{(z-a)}{b_0 + b_1 z + b_2 z^2} R(x), \quad (10)$$

$$b_0 = -\frac{(\Delta R_p)^2(4\beta - 3\gamma^2)}{A} \quad b_1 = -\frac{(\Delta R_p)(\beta + 3)\gamma}{A},$$

$$b_2 = -\frac{(2\beta - 3\gamma^2 - 6)}{A},$$

$$A = 10\beta - 12\gamma^2 - 18, \quad a = b_1,$$

其中  $z = (x - R_p)$ 。由(10)式可得

$$\text{当 } b_1^2 - 4b_0b_2 < 0,$$

$$\ln R(x) = \frac{1}{2b_2} \ln |b_0 + b_1x + b_2x^2| - \frac{(b_1/b_2 + 2a)}{(4b_2b_0 - b_1^2)^{\frac{1}{2}}} \arctan \frac{2b_2x + b_1}{(4b_2b_0 - b_1^2)^{\frac{1}{2}}}; \quad (11a)$$

当  $b_1^2 - 4b_0b_2 > 0$ ,

$$\ln R(x) = \frac{1}{2b_2} \ln |b_0 + b_1x + b_2x^2| - \frac{(b_1/b_2 + 2a)}{(4b_2b_0 - b_1^2)^{\frac{1}{2}}} \ln \left| \frac{2b_2x + b_1 - (b_1^2 - 4b_2b_0)^{\frac{1}{2}}}{2b_2x + b_1 + (b_1^2 - 4b_2b_0)^{\frac{1}{2}}} \right|; \quad (11b)$$

当  $b_1^2 - 4b_0b_2 = 0$ ,

$$\ln R(x) = \frac{1}{2b_2} \ln |b_0 + b_1x + b_2x^2| - \frac{(b_1/b_2 + 2a)}{(2b_2x + b_1)}. \quad (11c)$$

由(6—9)和(11)式,本文计算了  $H^+ \rightarrow Si$ ,  ${}^3He^+ \rightarrow Nb$  和  $B^+ \rightarrow Si$  的射程分布. 图 5 展示 30eV 的  $H^+$  在 Si 中的射程分布,其中实线为本文计算结果. 与 Monte Carlo 计算结果<sup>[6]</sup>相比符合很好,这表明在低入射能量的情形,由(6—11)式可很好地描述离子射程分布. 图 6 展示 1keV 的  $H^+$  在 Si 中的射程分布,与 Demond 等的实验结果<sup>[7]</sup>相比,本文计算结果的峰值位置偏小,但从分布函数的形状上看符合较好. 图 7 展示 4keV 的  ${}^3He^+$  在 Nb 中的射程分布,在峰值两侧,本文计算与 Behrisch 等的实验结果<sup>[8]</sup>符合很好,峰值位置也符合很好,但实验结果有更长的“尾巴”. 图 7 中还展示了相应的 Monte Carlo 计算结果<sup>[9]</sup>. Monte Carlo 计算的峰值位置比实验值偏大. 相比之下,本文计算结果与实验值有更好的符合. 图 8 展示 30keV 的  $B^+$  在 Si 中的射程分布. 在峰值左侧,本文计算可很好描述 Hofker 等的实验结果<sup>[5]</sup>,与图 7 类似地,在峰值右侧,本文计算结果比实验值有更陡的下降.

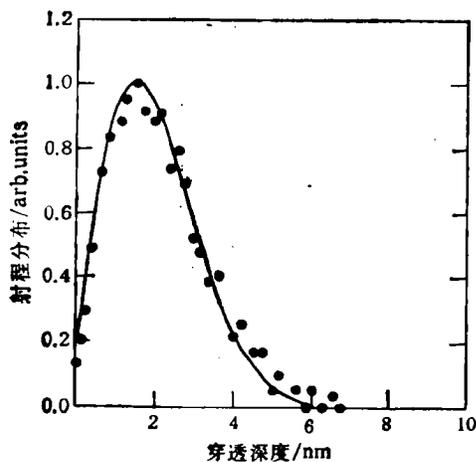


图 5 30eV 的  $H^+$  在 Si 中的射程分布 实线由(6—11)式得到;  $\circ$  为文献[6]中的 TRIM 计算结果

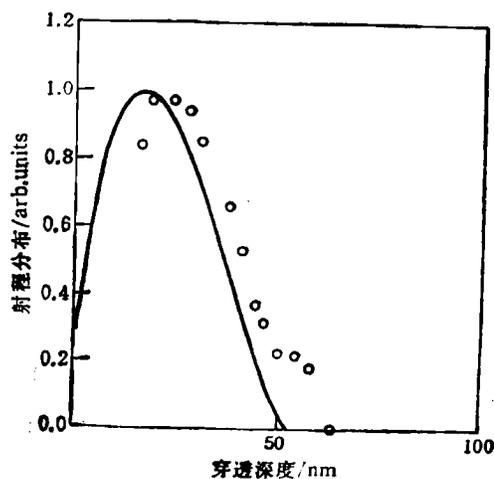


图 6 1keV 的  $H^+$  在 Si 中的射程分布 实线由(6—11)式得到;  $\bullet$  为 Demond 等的实验结果<sup>[7]</sup>

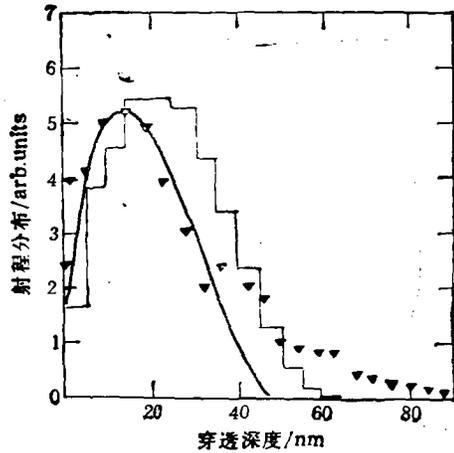


图7 4keV的 $^3\text{He}^+$ 在Nb中的射程分布 实线由(6-11)式得到;▲为 Behrisch 等的实验结果<sup>[8]</sup>,阶梯线为 Monte Carlo 计算结果<sup>[9]</sup>

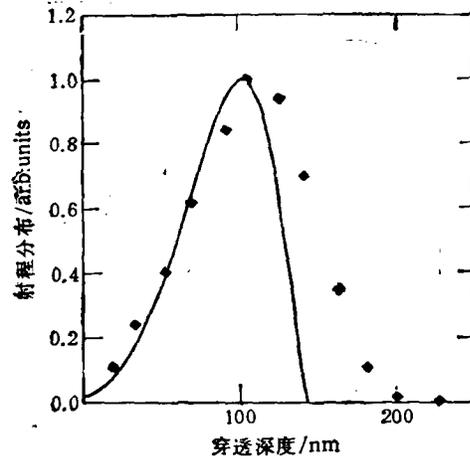


图8 30keV的 $\text{B}^+$ 在Si中的射程分布 实线由(6-11)式得到;◆为 Hofker 等的实验结果<sup>[5]</sup>

### 3 总 结

本文用改进的离子运输双群模型, 计算了离子在固体中射程分布的前四阶矩。在此基础上, 利用离子运输的标度特性, 总结出一组计算射程分布前四阶矩函数的经验拟合公式。由这些拟合公式, 本文分别计算了  $30\text{eV H}^+ \rightarrow \text{Si}$ ,  $1\text{keV H}^+ \rightarrow \text{Si}$ ,  $4\text{keV } ^3\text{He}^+ \rightarrow \text{Nb}$ ,  $30\text{keV B}^+ \rightarrow \text{Si}$  的射程分布。通过与各实验值或 Monte Carlo 计算结果比较表明, 本文给出的拟合表达式可较好描述低能离子在固体中的射程分布, 同时可避免复杂而耗费机时的离子运输数值模拟计算, 使计算效率大大提高。在一个普通微机上, 计算一个离子-靶-能量组合的射程分布只需一秒的时间。因此, 本文所提出的射程分布算法无疑是一种快速而有较好精度的方法。

- [1] Luo Zhengming, *Nucl. Instr. and Meth.*, B48 (1990), 444.
- [2] 罗正明、侯氢, *物理学报*, 43(1994), 505.
- [3] 罗正明、李泰华, *物理学报*, 43(1994), 118.
- [4] Luo Zhengming and Hou Qing, *J. Appl. Phys.*, 74 (1993), 6007.
- [5] W. K. Hofker, D. P. Oosthoek, N. J. Koeman and H. A. DeGrefte, *Nucl. Instr. Meth.*, 24 (1975), 223.
- [6] P. F. Sanchez., D. Fink, P. F. Fichtner and J. P. Biersack, *Nucl. Instr. Meth.*, B19/20 (1987), 28.
- [7] F. J. Demond, S. Kalbitzer, H. Mannsperger and G. Muller, *Nucl. Instr. Meth.*, 168 (1980), 69.
- [8] R. Behrisch, J. Bottizer, W. Eckstein, U. Littmark, J. Rothand B. M. U. Scherzer, *Appl. Phys. Lett.*, 27 (1975), 199.
- [9] J. P. Biersack and L. G. Haggmark, *Nucl. Instr. Meth.*, 174 (1980), 257.

## CALCULATIONS OF RANGE DISTRIBUTIONS BY USING THE SCALING PROPERTY OF ION TRANSPORT

HOU QING LUO ZHENG-MING

*(Center for Radiation Physics, Institute of Nuclear Science and Technology,  
Sichuan Union University, Chengdu 610064)*

(Received 8 March 1994)

### ABSTRACT

Based on the fact that the transport quantities of light-ion in solids can be described by a parameter called the scaled transport cross section [Acta Physica Sinica, **43** (1994), 505], the universal expressions for the first four moments of range distribution have been obtained by fitting the data calculated by the bipartition model. To test the expressions, the comparison with experimental data and Monte Carlo data has been made. The comparison shows that the expressions obtained in the present paper can give good description to the range distributions of low energy ions in solids.

**PACC:** 7920N; 5240H; 6180J