

1—10 MeV/u 能区重离子在碳基薄膜表面的二次电子发射特性模拟*

王迪¹⁾ 陈伟^{1)†} 丁泽军²⁾ 马宗翔³⁾ 宋朝晖¹⁾ 王敏文¹⁾ 王忠明¹⁾

1) (西北核技术研究所, 强脉冲辐射环境模拟与效应全国重点实验室, 西安 710024)

2) (中国科学技术大学, 合肥微尺度物质科学国家研究中心, 合肥 230026)

3) (火箭军工程大学, 西安 710025)

(2026 年 1 月 22 日收到; 2026 年 2 月 25 日收到修改稿)

二次电子发射 (secondary electron emission, SEE) 是表面物理中的普遍现象, 其实验测量受表面状态、环境条件等因素影响, 精确表征存在一定难度. 本文基于蒙特卡罗模拟方法, 研究中低能重离子入射薄膜材料的 SEE 过程, 旨在为加速器装置中基于 SEE 的束流测量探测器的设计与应用提供理论指导. 以西安质子重离子应用装置中的薄膜探测器为背景, 利用 Geant4 最新拓展的 MicroElec 模块, 定量研究了 1—10 MeV/u 能区重离子在碳基薄膜上的二次电子产额 (secondary electron yield, SEY)、能量及角度分布特性, 并系统探讨了 SEY 与薄膜厚度、入射粒子能量损失率 (linear energy transfer, LET) 及入射角度的关系. 结果显示, 前向和背向 SEY 不一致性以及随薄膜厚度的变化均是由 δ 电子主导的; 总产额与 LET 在 $0.1\text{--}100\text{ keV}\cdot\text{cm}^2\cdot\mu\text{g}^{-1}$ 范围内呈近似线性关系, 与前人实验数据吻合良好; 前向和背向 SEY 随入射角度单调增大, 但前向增长慢于背向, 源于 δ 电子前向发射特性带来的非对称贡献. 本文的计算结果可为基于二次电子发射的薄膜探测器提供有价值的支撑与理论参考.

关键词: 二次电子发射, 重离子, 薄膜, 蒙特卡罗模拟

DOI: 10.7498/aps.75.20260113

CSTR: 32037.14.aps.75.20260113

1 引言

当载能粒子轰击固体材料时, 材料表面会发射出电子, 该现象称为二次电子发射 (secondary electron emission, SEE). SEE 广泛存在于微波器件、加速器系统、空间探测等诸多领域. 特别是在重离子加速器束流测量中, 二次电子已被广泛应用于丝阵探测器、法拉第筒及二次电子薄膜探测器等设备中^[1–4]. 一些探测器利用二次电子作为信号实现测量, 而另一些则需抑制其产生, 这些应用均以离子诱导的 SEE 为基础. 由于 SEE 特性实验研究条

件苛刻、变量多, 目前尚缺乏完整的特性数据, 现有评估主要依赖经验公式, 存在针对性不足的问题, 蒙特卡罗模拟方法在此方面展现出显著优势^[5–8].

西安质子重离子应用装置 (Xi'an 200 MeV Proton Application Facility, XiPAF) 是专用于单粒子效应试验的加速器装置, 目前正在升级改造为质子/重离子通用装置, 可提供最高能量约 10 MeV/u 的重离子和 200 MeV 的质子^[9]. 针对单粒子效应试验所需的低能量、低流强重离子束流, 目前仍缺乏成熟的在线监测方案. 基于 SEE 的薄膜探测器具有质量厚度小的天然优势, 是一种可能的解决方案. 重离子穿透薄膜使其前后表面发射二

* 国家自然科学基金青年科学基金 (批准号: 12405182) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: chenwei@nint.ac.cn

次电子, 通过倍增并测量这些电子信息, 可辅助实现束流参数的在线监测^[10]. 为推进该类型探测器的实际应用, 亟需通过蒙特卡罗模拟方法深入探究重离子诱导的 SEE 特性.

Geant4 的 MicroElec 模块通过引入介电函数理论处理非弹性散射、采用分波法计算弹性散射, 将电子输运的能量下限拓展至 eV 量级, 为精确模拟 SEE 的物理全过程提供了可能. 该模块在电子诱导的 SEE 产额方面已得到验证, 但在重离子诱导 SEE 的应用尚未见报道^[11,12]. 本文基于 Geant4 的 MicroElec 模块, 模拟了能量范围 1—10 MeV/u 的重离子在碳膜表面的二次电子发射, 并与经验公式进行比较, 最终获得相关特性参数及规律. 研究结果可为重离子加速器中二次电子探测器的设计提供重要参考.

2 理论模型

2.1 模型简介

重离子诱导的二次电子发射过程可分为 3 个主要物理阶段: 1) 入射重离子与靶原子非弹性碰撞, 产生初始次级电子, 这些电子来自于重离子直接电离的核外电子, 或者激发后退激产生的俄歇电子; 2) 初始次级电子在靶内进行级联输运, 包括低能弹性碰撞和非弹性碰撞, 其中非弹性散射会导致次级电子数量增加; 3) 次级电子在“真空-材料”界面经历量子隧穿过程并最终出射.

本文模拟基于 MicroElec 模块实现, 该模块由法国 CEA 于 2012 年首次开发, 主要用于模拟微电子器件中的电离辐射效应, 其特点在于能够模拟电子、质子、离子入射硅材料后低能次级电子的产生与输运, 基于离散过程模拟, 电子能量可低至 16.7 eV^[13,14]. 2021 年, Gibaru 等^[12]将 MicroElec 模块支持的材料从硅拓展至 11 种常用材料, 并增加了 SEE 物理模型, 最低电子能量可下探至 10 eV 以内. 与 Geant4 中的标准连续慢化近似模型相比, MicroElec 采用离散模型, 能够精细模拟每次碰撞事件, 考虑能量损失的随机性与次级粒子的产生,

因此在低能电子输运方面具有更高的物理精度. 表 1 对比了 Geant4 中几种电磁模型的特点.

2.2 弹性碰撞与非弹性碰撞

非弹性碰撞是二次电子产生与输运的核心过程. MicroElec 模块采用基于 Lindhard 和 Ritchie 的复介电函数理论来描述入射粒子与靶原子的非弹性相互作用. 介电函数表征介质对外来电子所产生电磁场的响应, 基于介电理论可获得低能电子能量损失的精确描述. 该理论指出, 能量损失函数为介电函数虚部的倒数:

$$L(\hbar\omega, \mathbf{q}) = \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(\omega, \mathbf{q})} \right], \quad (1)$$

其中, L 为能量损失函数, $\varepsilon(\omega, \mathbf{q})$ 为介电函数, $\hbar\omega$ 和 $\mathbf{q}$ 分别为入射粒子对靶电子的能量和动量转移. 能量损失函数在动量转移 $\mathbf{q}$ 趋近于 0 时的极限为光学能量损失函数 (optical energy loss function, OELF), 而 OELF 可以由实验光学数据拟合得到, 因此在低能电子输运中常用 OELF 替代. 新版本 MicroElec 采用更精确的 Mermin 介电函数拟合 $L_{\text{optM}}(\hbar\omega, \mathbf{0})$, 进而得到微分截面:

$$\frac{d\sigma}{d\hbar\omega}(E, \hbar\omega) = \frac{Z_{\text{eff}}^2}{\pi N a_0 \frac{m_e}{M} E} \int_{q^-}^{q^+} L_{\text{optM}}(\hbar\omega, \mathbf{0}) \frac{dq}{q}, \quad (2)$$

其中 $q_{\pm} = \frac{\sqrt{2m_e}}{\hbar} (\sqrt{E} \pm \sqrt{E - \hbar\omega})$. 在 (2) 式中, N 为靶原子密度, a_0 为 Bohr 半径, m_e 和 M 分别为电子质量和入射粒子质量, E 为入射粒子的动能, Z_{eff} 为入射粒子的等效电荷, 其中质子和电子的 Z_{eff} 值为 1, 重离子的 Z_{eff} 值与靶材料类型和入射速度相关. 该模型适用于电子、质子及重离子的输运模拟.

在 MicroElec 模块中, 电子弹性碰撞过程采用分波法并基于 ELSEPA 程序计算截面, 从而在 0.1 eV 至高能的宽能量范围内, 使用统一模型为所有材料提供弹性截面. 相比之下, 传统用于计算弹性散射的卢瑟福屏蔽公式在电子能量低于 10 keV 且原子序数较高时适用性有限, 分波法在精度与普适性上更具优势.

表 1 Geant4 低能电磁物理模型的对比

Table 1. Comparison of low-energy electromagnetic models in Geant4.

模型名称	Standard	Low Energy EM	Livermore	Penelope	MicroElec
最低电子能量	1 keV	250 eV	约几十 eV	约 50 eV	约几 eV
模型类型	连续慢化近似	连续慢化近似	连续慢化近似	连续慢化近似	全离散

表 2 Geant4 MicroElec 模块中相互作用的执行能量范围
Table 2. Energy ranges implemented for interactions in the Geant4 MicroElec module.

粒子种类	相互作用	模型名称	Geant4执行能量范围
Electron	Elastic scattering	G4 MicroElecElasticModel_new	1.1 eV—0.5 MeV
Electron	Ionisation	G4 MicroElecInelasticModel_new	1.1 eV—0.01 MeV
Proton, ions	Ionisation	G4 MicroElecInelasticModel_new	100 eV/u—10 MeV/u

Geant4-v11.3.0 版本中 MicroElec 模块对各类相互作用的能量范围如表 2 所列.

2.3 界面相互作用

在“真空-材料”界面处, 晶体周期性势场因界面的不连续而被扰乱, 形成表面势垒. 金属中该势垒对应功函数 W , 绝缘体与半导体中对应电子亲和能 χ . MicroElec 模块将表面模拟为基于 OSMOSEE 程序模型的指数势垒, 并通过离散过程类 G4 MicroElecSurface 进行处理. 该模型可处理“真空-材料”与“材料-材料”界面, 支持多层结构模拟.

当电子与界面相互作用时, 若未穿透势垒, 则按光学反射定律被反射回材料内部. 若电子能量大于阈值能量 E_{th} (W 或 χ , 约几个 eV) 时, 则按照概率 P 出射, 根据平行于界面方向的动量守恒, 有

$$\sqrt{E} \sin \theta = \sqrt{E - E_{th}} \sin \theta', \quad (3)$$

其中 E 为电子出射前的动能, θ 和 θ' 分别为出射前后电子与表面法向的夹角. 透射概率为

$$P(\theta, E) = 1 - \frac{\sinh^2(\pi a(k_i - k_f))}{\sinh^2(\pi a(k_i + k_f))}, \quad (4)$$

式中 k_i 和 k_f 分别表示电子在材料和真空中的波矢,

$$k_i = \frac{\sqrt{(2m_0e)}}{\hbar} \sqrt{E \cos^2 \theta},$$

$$k_f = \frac{\sqrt{(2m_0e)}}{\hbar} \sqrt{(E - E_{th}) \cos^2 \theta'}.$$

3 计算过程

由于二次电子主要从表面几十纳米范围内发射, 因此理论上薄膜可制备得极薄. 在实现超薄厚度方面, 碳基薄膜具有独特优势, 适合作为透射型探测器材料, 对束流能量影响甚微. 此外, 碳基薄膜在重离子加速器中作为剥离膜和管道镀层亦广泛应用^[15,16], 故本文选取碳膜作为研究对象.

算例几何模型如图 1 所示, 靶为正方形薄膜,

材料为碳 (密度为 2.25 g/cm^3), 薄膜厚度为 d (沿 Z 方向), 粒子入射方向与 X - Y 平面的法线的夹角为 φ , 靶外围为真空环境. 图 2 展示了利用 Geant4 模拟的 1 个 5 MeV/u 碳粒子垂直入射 ($\varphi = 0$) 100 nm 碳膜的效果. 可见重离子穿透薄膜时, 前后表面均发射了二次电子, 且沿离子路径附近持续产生次级电子. 绝大多数次级电子能量较低, 在材料中穿透距离短; 另有一些穿透距离较长的高能次级电子, 即 δ 电子 (Sternglass^[17] 提出, 指重离子与靶原子核外电子近程碰撞产生的高能次级电子). Rothard 等^[18] 将能量高于 100 eV 的次级电子定义为 δ 电子, δ 电子不断地通过非弹性碰撞而级联产生新的次级电子, 对于速度大于 $Z_p^{2/3} v_0$ 的入射

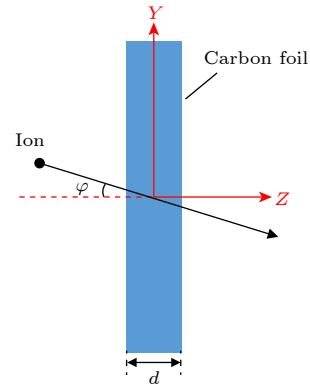


图 1 模拟计算的几何模型示意图
Fig. 1. Schematic of the geometric model for simulation.

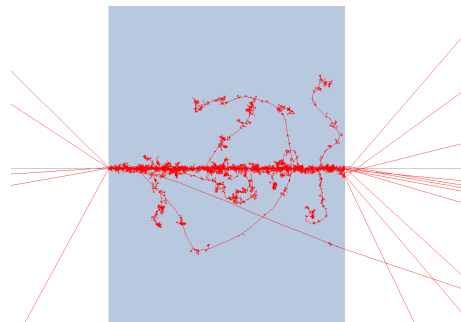


图 2 5 MeV/u 碳离子垂直入射 100 nm 碳膜的 SEE 模拟效果图
Fig. 2. Simulation of SEE from a 100 nm carbon foil bombarded vertically by a 5 MeV/u carbon ion.

粒子 (Z_p 为入射离子核电荷数, v_0 为玻尔速度, $v_0 = 1$ a.u.), δ 电子级联产生的低能电子与重离子直接电离产生的低能电子对能量沉积的贡献是相当的.

通过提取从表面出射的电子信息, 可进一步分析二次电子发射特性. 定义从薄膜入射面出射的电子为背向二次电子, 从出射面出射的为前向二次电子. 首先模拟 5 MeV/u 碳离子垂直入射 1 μm 碳膜的情况, 模拟离子数量为 10000 个. 图 3 展示了表面出射二次电子的位置分布, 其中入射面与出射面的 Z 坐标分别为 +500 nm 和 -500 nm. 可以看出, 与背向二次电子相比, 前向二次电子具有更深的分布范围, 说明前向高能二次电子比例更高. 绝大多数二次电子在表面几十 nm 以内发射的, 越靠近界面数量越多. 本例中, 前向与背向二次电子产额 (secondary electron yield, SEY) 分别为 9.4 和 5.0.

统计前向和背向二次电子在低能段和全能量段的能谱, 分别如图 4 和图 5 所示. 图 4 显示, 50 eV 以内的低能二次电子能谱形状与峰值位置

具有典型的“真二次电子”特征. 图 5 中, 前向与背向二次电子的高能 ($E > 50$ eV) 占比分别约为 42% 和 15%, 与图 3 所反映的前向、背向次级电子能量规律一致. 此外, 在图 5 所示的全能谱中, 标注了从低能端累积电子数量分别达到总产额 90%, 95% 及 99% 所对应的能量位置参考线, 便于更直观地展示电子的能量分布.

二次电子发射的角度分布是其另一重要特征. 出射二次电子的立体角微分产额随极角 θ 的分布近似符合余弦规律, 即沿表面法线方向的单位立体角内产额最大, 公式表示为

$$\frac{d\gamma}{d\Omega}(\theta) = \left. \frac{d\gamma}{d\Omega} \right|_{\theta=0} \cos \theta, \quad (5)$$

其中 γ 为产额、 Ω 为立体角, θ 为出射电子与表面法线的夹角^[19]. 本文计算采用 (3) 式, 根据次级电子出射前一步的能量和方向信息得到出射后的极角 θ . 图 6 为归一化后的前向与背向二次电子角度分布与标准余弦曲线的对比, 可见模拟结果与理论预期基本相符.

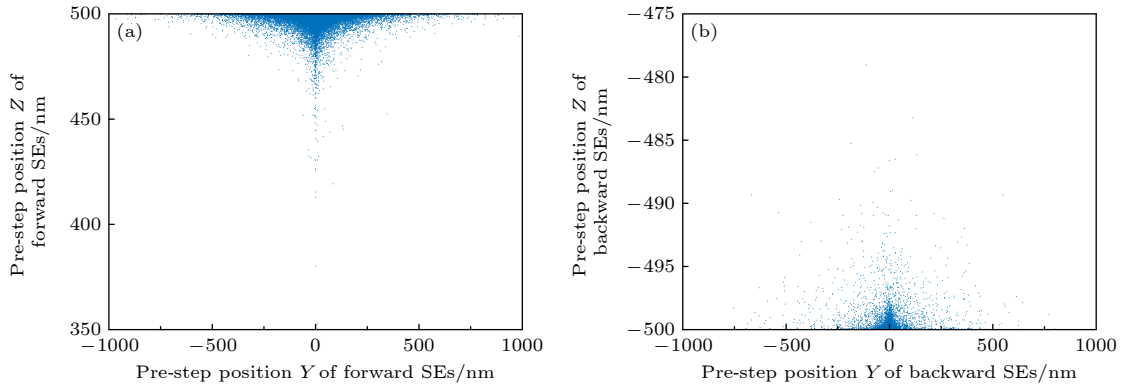


图 3 表面出射二次电子的位置分布 (a) 前向; (b) 背向

Fig. 3. Spatial distribution of secondary electrons (SEs) emitted from the surfaces: (a) Forward direction; (b) backward direction.

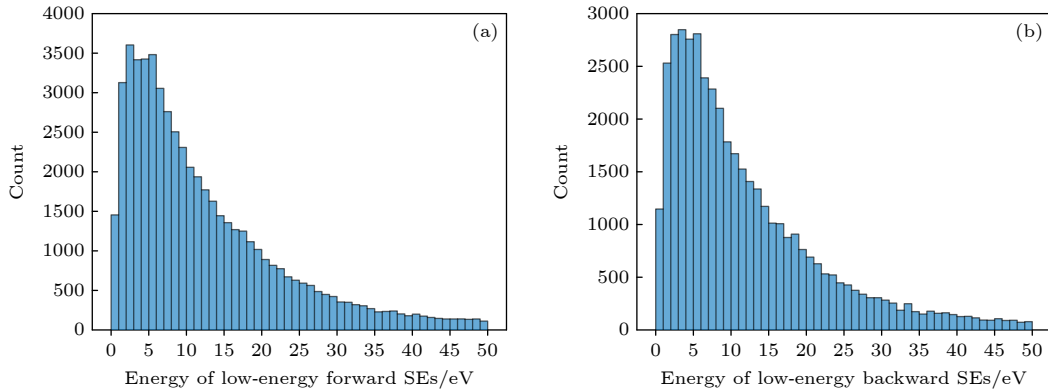


图 4 低能段 ($E < 50$ eV) 二次电子的能谱分布 (a) 前向; (b) 背向

Fig. 4. Energy spectrum distribution of low-energy ($E < 50$ eV) SEs: (a) Forward direction; (b) backward direction.

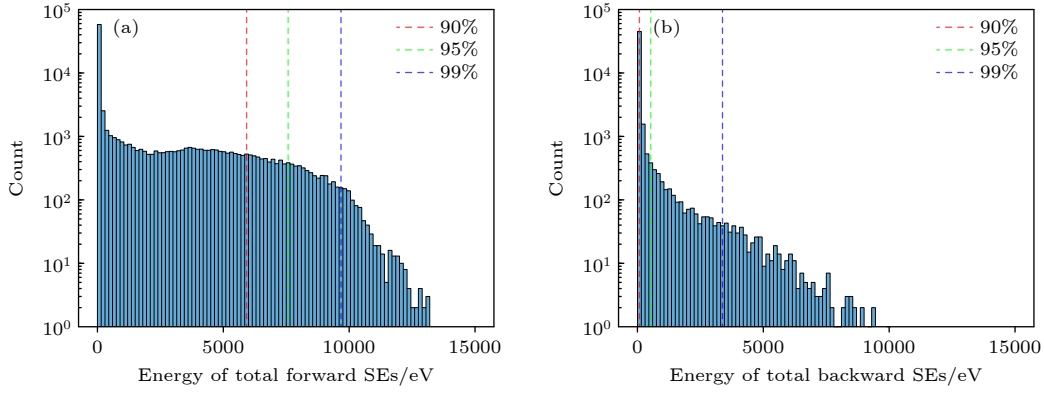


图 5 二次电子的全能谱分布 (a) 前向; (b) 背向

Fig. 5. Full energy spectrum distribution of SEs: (a) Forward direction; (b) backward direction.

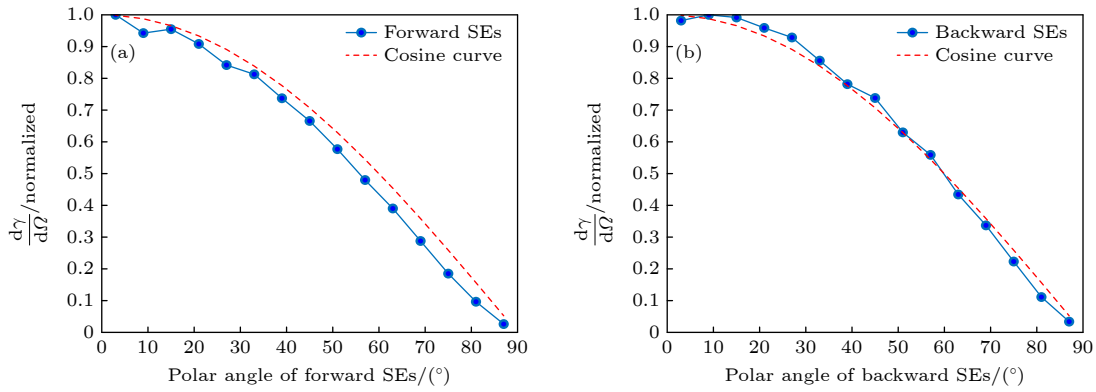


图 6 二次电子立体角微分产额随极角的变化 (a) 前向; (b) 背向

Fig. 6. Polar-angle-differential yield distribution of SEs: (a) Forward direction; (b) backward direction.

此外, 对本算例中重离子产生的初始次级电子进行统计, δ 电子贡献的能量沉积占总沉积的 57.5%. 通过对重离子能量进行统计, 得到平均每个碳离子在 $1\ \mu\text{m}$ 碳膜中沉积能量为 535 keV, 利用 SRIM 程序^[20] 计算的电离能量沉积为 564 keV, 两者偏差在 10% 以内.

4 规律分析

4.1 产额与薄膜厚度关系

保持碳离子能量为 5 MeV/u 不变, 改变碳膜厚度 (5 nm—30 μm), 研究 SEY 随厚度的变化, 结果如图 7 所示. 图 7(a) 表明, 随着薄膜厚度增大, 前向与背向 SEY 均呈上升趋势. 在 5—600 nm 区间内, 前向 SEY 增长尤为迅速. 此现象与高能次级电子 (δ 电子) 在材料中的扩散长度密切相关, Rothard 等^[18] 的理论推导对此已有阐述. 图 7(b) 展示了高能电子 ($E > 50\ \text{eV}$) 比例随薄膜厚度的变化, 其趋势与 SEY 变化相对应. 在薄膜厚度较薄时

(<600 nm), 高能电子比例随厚度增大而快速上升, 这是由于 δ 电子能够贯穿薄膜并逸出表面. 当厚度超过 δ 电子的扩散长度后, 高能电子比例趋于饱和, 此时 δ 电子的贡献已达到上限. 值得注意的是, 当厚度大于 5 μm 后, 前向 SEY 的再次缓慢上升, 主要归因于 5 MeV/u 的碳离子在膜内显著减速, 导致其线性能量损失率 (linear energy transfer, LET) 增大, 即初始次级电子数量增多. 此外, 当厚度超过 10 μm 时, 前向高能电子比例因离子在膜内持续减速而明显下降; 而背向高能电子比例基本保持稳定, 这是因为在背向电子出射的深度范围内, 离子能量尚未发生显著降低.

对于 5 MeV/u 的碳离子, 其与靶原子相互作用产生的最大次级电子能量由下式给出:

$$E_{\max} = 2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2 \approx 11\ \text{keV}, \quad (6)$$

其中 c 为光速, β 和 γ 分别为重离子的相对速度和洛伦兹因子^[21]. 图 8 展示了通过 MicroElec 模块模拟得到的、由 5 MeV/u 碳离子直接产生的初始次

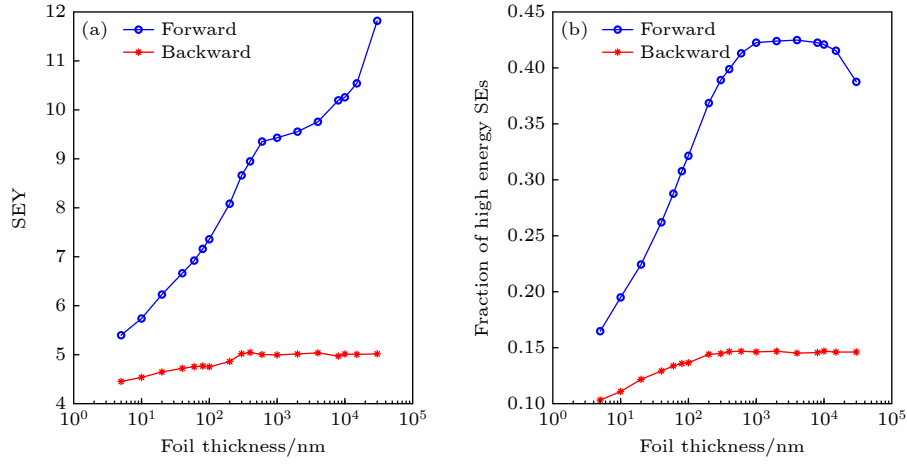


图 7 (a) 二次电子产额及 (b) 高能电子比例随薄膜厚度的变化
Fig. 7. (a) SEY and (b) proportion of high-energy SEs as a function of foil thickness.

级电子能量分布, 其中模拟的入射碳离子数量为 10000 个, 薄膜厚度为 100 nm. 可见, 低能电子占绝大多数, 产生极高能量 (接近 $E_{\max}$) 电子的概率极低. 文献 [22] 利用该模块计算了 10 eV—10 keV 电子在多种材料中的透射率, 对于 11 keV 的电子, 其扩散长度可达微米量级.

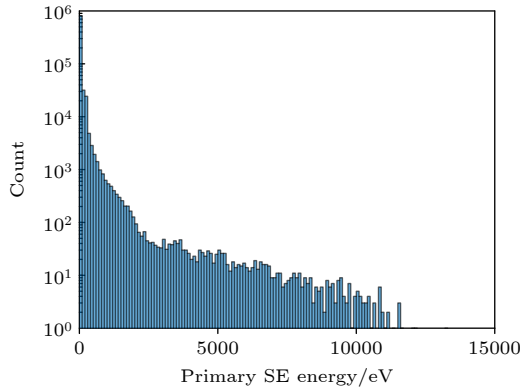


图 8 5 MeV/u 碳离子在碳膜中产生的初始次级电子能量分布
Fig. 8. Energy distribution of primary SEs generated by a 5 MeV/u carbon ion in the carbon foil.

为进一步揭示高能电子的作用, 对表面出射二次电子所对应的径迹顶点位置分布进行了统计 (图 9). 图 9 中分别标注了累积顶点数量达到总数量 90%, 95% 及 99% 所对应的深度位置参考线, 其中累积方向均为从表面向内. 结果显示, 前向高能二次电子的最大扩散长度约 1500 nm, 而背向则约 500 nm, 直接印证了前后发射特性的不对称性.

综合以上分析可知: 在前向, 当薄膜厚度小于

约 600 nm 时, SEY 的快速增长主要源于离子路径上产生的高能 δ 电子能够直接穿越薄膜并逸出表面. 厚度超过 600 nm 后, 此贡献趋于饱和, SEY 增长平缓. 在背向, 由于高能电子需反向穿越部分材料, 其有效贡献区域较浅, 故 SEY 在厚度约 300 nm 后即开始趋缓, 与图 9 所示扩散特征一致.

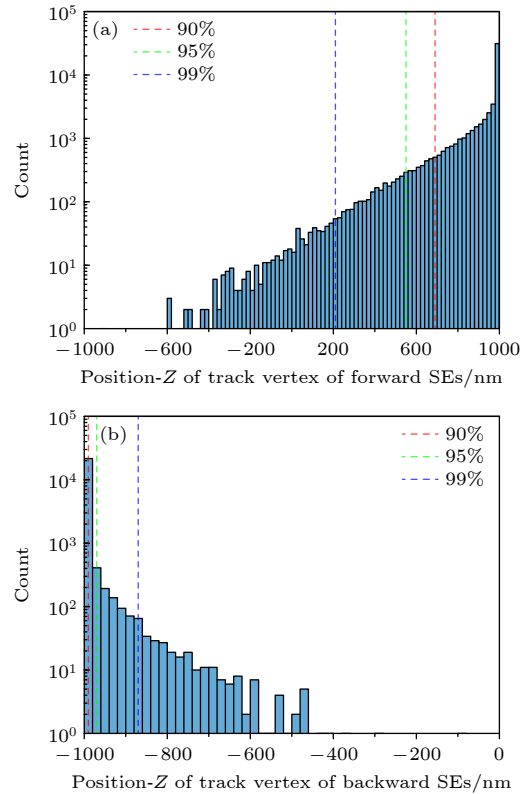


图 9 二次电子径迹顶点的深度分布 ($d = 2 \mu\text{m}$) (a) 前向; (b) 背向
Fig. 9. Depth distribution of SE track vertices ($d = 2 \mu\text{m}$): (a) Forward direction; (b) backward direction.

4.2 产额与入射粒子能量损失率 (LET) 的关系

XiPAF 可提供 H, He, C, Ar, Kr, Bi 等多种离子, 覆盖了较宽的 LET 值范围. 在 MicroElec 模块中, 重离子的非弹性散射截面 σ_M 通过其有效电荷 Z_{eff} 的平方, 与同速度质子的截面 σ_{m_p} 相关联, 具体表示为

$$\sigma_M(E) = Z_{\text{eff}}^2 \sigma_{m_p} \left(\frac{m_p}{M} E \right), \quad (7)$$

其中 m_p 和 M 分别为质子和重离子的质量, E 为重离子的动能. 为系统研究 SEY 与离子参数的关系, 并便于与 Rothard 等^[23] 整理的实验数据对比, 本文模拟了 H, He, C, Ar, Kr, Bi 六种离子, 在 1, 5, 9 MeV/u 三种能量下垂直入射 100 nm 碳膜的过程. 本节选择 100 nm 厚度, 与 Rothard 等^[23] 实验中所用的碳膜厚度保持一致, 从而确保模拟与实验的可比性. Rothard 等^[23] 的研究表明, 对于碳膜薄靶, 离子诱导的二次电子总产额 γ_T 主要由其电子阻止本领 ($\frac{dE}{dx}$, 即 LET) 决定, 并在一定范围内存在近似线性关系:

$$\gamma_T \approx A \frac{dE}{dx}, \quad (8)$$

其中系数 A 是 SEY 与 LET 值的比例系数, 主要与靶材料相关.

表 3 汇总了关于能量沉积的关键模拟结果, 包括碳材料表面 LET 值、SRIM 计算的粒子在碳材料中的射程、MicroElec 与 SRIM 分别计算的能量沉积及其比值. 由于 100 nm 的厚度远小于射程, 因此表 3 中 SRIM 计算的能量沉积由 LET 值与质量厚度相乘得到, 而在 Geant4 中, 通过粒子入射薄膜前后的能量差异得到能量沉积.

由表 3 可见, 随着离子核电荷数增加及速度降低, MicroElec 与 SRIM 计算得到的能量沉积差异呈增大趋势, 尤以 1 MeV/u 的 Bi 离子最为显著 (偏差约 23%). 结合 (7) 式分析, 该差异主要源于两个程序采用了不同的等效电荷计算模型. 为获得更贴近实际物理图像的结果, 本研究以广泛验证的 SRIM 程序能量沉积数据为基准, 对 MicroElec 模块直接计算的二次电子产额进行了修正. 修正后的总二次电子产额与离子 LET 值的关系如图 10 所示. 线性拟合斜率为 5.11, 该结果与 Rothard 等^[23] 实验得到的拟合值存在约 30% 的差异.

表 3 不同离子在碳膜中能量沉积的模拟结果对比 ($d = 100 \text{ nm}$)
Table 3. Comparison of simulated energy deposition for various ions in carbon foil ($d = 100 \text{ nm}$).

粒子种类	能量/(MeV·u ⁻¹)	LET/(keV·cm ² ·μg ⁻¹)	碳中射程/μm	MicroElec 能量沉积/keV	SRIM能量 沉积/keV	比值/% (MicroElec/SRIM)
H	1	0.230	12.37	5.00	5.18	96.4
	5	0.0711	179.21	1.58	1.60	98.5
	9	0.0447	503.57	1.02	1.00	101.6
He	1	0.942	13.34	19.08	21.19	90.1
	5	0.285	179.34	6.17	6.41	96.1
	9	0.179	503.84	3.96	4.02	98.5
C	1	6.00	8.42	121.59	135.00	90.1
	5	2.51	68.60	53.00	56.41	94.0
	9	1.57	178.97	35.59	35.42	100.5
Ar	1	25.5	9.02	479.60	574.65	83.5
	5	16.1	44.93	345.77	362.25	95.5
	9	11.9	97.02	266.70	267.08	99.9
Kr	1	50.1	11.54	932.76	1127.25	82.7
	5	45.1	42.25	901.96	1013.85	89.0
	9	37.5	78.66	784.13	842.63	93.1
Bi	1	97.7	15.63	1690.70	2198.25	76.9
	5	116	47.92	2254.60	2619.00	86.1
	9	106	81.34	2234.30	2380.50	93.9

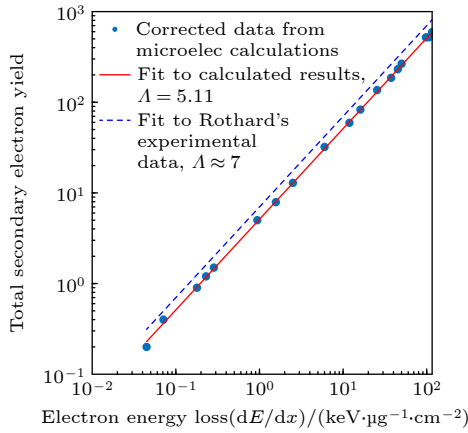


图 10 100 nm 碳膜二次电子总产额与离子 LET 值的关系
Fig. 10. Total SEY from a 100 nm carbon foil as a function of ion LET.

该差异主要来源于模拟与实验条件的不同: 本模拟采用理想均匀的碳膜模型, 未考虑实验实际存在的表面粗糙度、平整度等因素; 同时, 实验中自支撑碳膜的厚度存在制备误差, 而 SEY 在 100 nm 附近对厚度变化敏感 (图 7), 微小的厚度偏差会导致测量值明显波动. 此外, Rothard 等 [23] 的研究指出重离子 SEY 的实验不确定度可达 2 倍, 本研究的差异远低于该范围, 说明结果在实验误差内一致. 因此, 尽管模拟未完全复现实验条件, 但通过与 SRIM 能量沉积对比并参考实验不确定度, 本文结果可为薄膜探测器设计提供可靠依据.

4.3 产额与入射粒子角度关系

前人实验研究表明, 重离子 SEY 随离子入射角度 φ 的增大而显著增大, 这是由于入射角度增大时, 离子在材料近表面区域的轨迹长度增大, 导致

表面附近的次级电子数量增加. 经验公式为

$$\gamma(\varphi) = \gamma(0) (\cos \varphi)^{-f}, \quad (9)$$

其中 f 为与入射离子相关的拟合参数, 取值范围通常在 0.5—1.5 之间 [19].

保持薄膜厚度 100 nm、碳离子能量 5 MeV/u 不变, 改变离子入射角度 (0° — 80°), 模拟得到的前向与背向 SEY 如图 11 所示. 模拟结果显示, 随着入射角度增大, 前向与背向 SEY 均单调增大, 与 (9) 式描述的经验趋势一致. 此外, 当入射角度趋近 90° (掠入射) 时, 前向与背向的几何条件趋于对称, 二者的 SEY 及高能电子比例也相应趋于一致.

在图 11(a) 中进行非线性最小二乘拟合, 得到前向和背向拟合系数 f 分别为 0.95 和 1.12, 均在经验公式的取值范围内. 对于 MeV/u 量级的重离子, 电子能损远大于核能损, 离子在薄膜内近似作直线运动, 路径长度满足 $L = d/\cos \varphi$, 因此前向和背向拟合系数的不同, 反映了其对入射角度敏感性的本质差异. 在背向, δ 电子需经大角度散射方能逸出, 生成位置越近表面, 其“掉头”出射概率随运输距离缩短而非线性剧增, 导致背向 SEY 增长快于纯几何路径增长. 而在前向, 入射角度增大虽使 δ 电子总产额增大, 但是 δ 电子抵达出射面所需的角同步增大, 透射概率下降, 使前向 SEY 增长慢于纯几何路径增长; 同时, 随着入射角度增大, 离子在薄膜出射面附近的能量持续降低, 会对 SEY 增大有一定贡献, 但是对于本算例, 在 85° 入射时, 离子路径不超过 $1.2 \mu\text{m}$, 仍远小于碳离子射程, 其 LET 值几乎不变, 该贡献可以忽略.

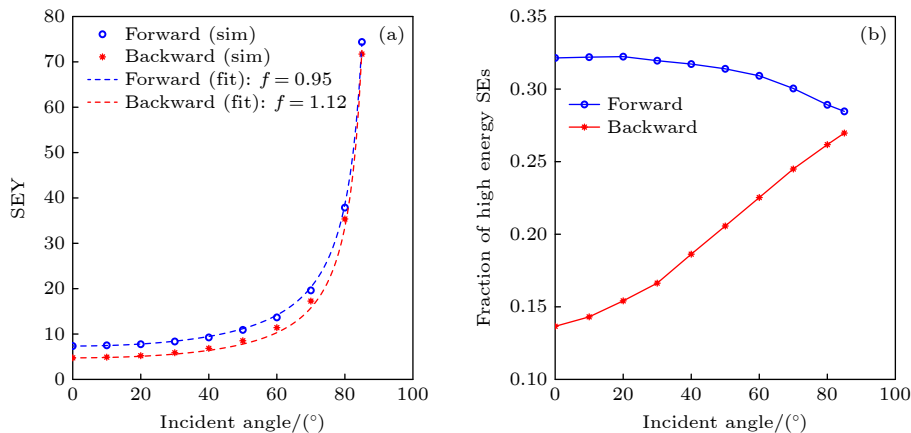


图 11 (a) 二次电子产额及 (b) 高能电子比例随入射角度的变化
Fig. 11. (a) SEY and (b) proportion of high-energy electrons as a function of incident angle.

图 12 进一步统计了不同入射角度下、出射二次电子径迹顶点位于表面 2 nm 内的比例. 结果显示: 随着入射角度增大, 背向比例由 94.1% 单调下降至 82.7%, 表明更深位置的 δ 电子逸出贡献增强, 而前向比例则由 76.7% 单调上升至 81.3%, 这一相反趋势直观反映了 δ 电子前向发射特性的主导作用.

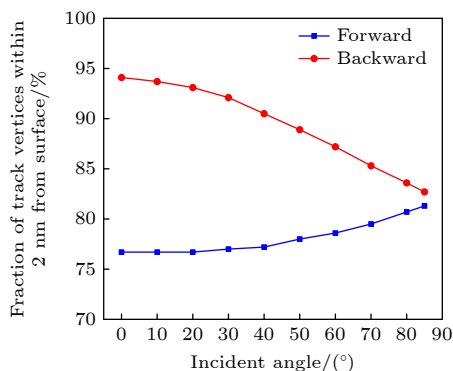


图 12 径迹顶点位于表层 2 nm 内的出射二次电子比例随入射角的变化

Fig. 12. Proportion of emitted SEs whose track vertices lie with 2 nm of the surface versus incident angle.

5 结 论

二次电子发射是束流探测器中信号产生的核心物理过程, 其特性直接影响探测器的测量精度与性能. 本文基于 Geant4 的 MicroElec 模块, 首次将该拓展模块应用于重离子诱导二次电子发射的模拟研究, 系统探讨了中低能重离子在碳基薄膜上的二次电子发射特性. 研究结果表明:

1) 模拟获得的二次电子能谱、角度分布以及薄膜两侧 SEY 趋势等特性与理论预期相符, 交叉验证了 MicroElec 模块在相关模拟中的物理准确性.

2) SEY 随碳膜厚度增加而上升, 并在厚度达到约 600 nm (前向) 和 300 nm (背向) 后增长趋缓, 这一特征与高能 δ 电子的扩散长度直接相关, 揭示了 δ 电子级联过程薄膜两侧 SEY 不一致性的主导机制.

3) 通过对 H 至 Bi 六种离子的模拟, 发现薄膜总 SEY 与入射离子的 LET 值在 0.1—100 keV·cm²·μg⁻¹ 范围内呈现良好的线性关系, 验证了经典理论在宽离子种类与能量范围内的趋势. 同时发现 MicroElec 计算的离子能量沉积与 SRIM 数据存在偏差, 这个

偏差随着离子核电荷数增加及速度降低而增大, 深层原因在于两者使用了不同的等效电荷计算模型. 基于 SRIM 数据修正后的 SEY 拟合系数与 Rothard 实验值的偏差好于 30%.

4) SEY 随入射角度增大而单调增大, 但前向与背向对入射角度的敏感性存在本质差异, 这是由 δ 电子的前向性引起的. 在掠入射时, 前、背向发射趋于一致.

同时应当指出, 本研究所采用的 MicroElec 模块, 与当前主流的蒙特卡罗模拟工具一样, 在处理入射重离子时均基于“等效电荷”模型^[12,24]. 该模型将重离子的电荷态简化为一个仅与速度和靶材相关的等效值, 而未考虑离子在入射及穿靶过程中动态的电荷剥离与俘获过程对二次电子激发的可能影响. 已有实验研究表明, 不同初始电荷态重离子的 SEY 存在一定的差异^[25]. 这是因为重离子在进入靶材料后, 需要穿越一定的厚度才能达到核外电子剥离与俘获的动态平衡, 而这一厚度与二次电子的主要出射深度 (表面十纳米内) 在空间上是可比的. 目前, 由于电荷态交换的截面数据稀缺、物理模型复杂, 且完整模拟的计算代价高昂, 如何实现其精确描述已成为本领域面临的共同挑战.

尽管如此, 本研究仍验证了 MicroElec 模块可作为研究中低能离子与物质相互作用、模拟二次电子发射的有效工具. 所获得的系统性数据与规律, 可为基于二次电子发射的薄膜探测器设计, 特别是用于低能、低流强重离子束流的在线监测应用, 提供重要的理论依据与数据参考.

参考文献

- [1] Harasimowicz J, Welsch C, Fernandez-Hernando J, Cosentino L, Finocchiaro P, Pappalardo A 2011 *Proceedings of IPAC2011 San Sebastián, Spain, September 4–9, 2011* TUPC162
- [2] Liu T, Mao R S, Yuan Y J, Huang C, Yao L P, Yao Z E, Xu Z G, Li P, Feng Y C, You Y Y, Yang H R, Duan L M, She Q S, Kang X C, Ding J J, Lu Z W, Li J, Chen Y C, Li S P, Li M, Liu X T, Ren H, He P L 2021 *Nucl. Instrum. Meth. A* **999** 165212
- [3] Strehl P 2006 *Beam Instrumentation and Diagnostics* (Berlin, Heidelberg: Springer)
- [4] Zhang Y W, Guo G, Xiao S Y, Yin Q, Yang X Y 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 012901 (in Chinese) [张艳文, 郭刚, 肖舒颜, 殷倩, 杨新宇 2022 *物理学报* **71** 012901]
- [5] Fernandez-Coppel J, Wirz R, Marian J 2024 *J. Appl. Phys.* **135** 083301
- [6] Guo P, Mao S F, Zou Y B, Yang T F, Miao H, Ding Z J 2024 *Results Phys.* **58** 107472

- [7] Feng W, Schultz J, Wolf D, Pylypenko S, Gemming T, Weinel K, Jácome L A, Büchner B, Lubk A 2025 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **58** 085102
- [8] Yang W J, Li Y D, Liu C L 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 087901 (in Chinese) [杨文晋, 李永东, 刘纯亮 2013 物理学报 **62** 087901]
- [9] Wang Z M, Wang M W, Yan Y H, Wang B C, Yang Y, Wang D, Liu W L, Wang M C, Lu W, Ye W B 2024 *Mod. Appl. Phys.* **15** 40402 (in Chinese) [王忠明, 王敏文, 闫逸花, 王百川, 杨业, 王迪, 刘卧龙, 王茂成, 吕伟, 叶文博 2024 现代应用物理 **15** 40402]
- [10] Wang D, Chen W, Wang Z M, Wang M W, Yan Y H, Wang B C 2024 *The 13th International Beam Instrumentation Conference (IBIC 2024)* Beijing, China, September 9–13, 2024 p297
- [11] Agostinelli S, Allison J, Amako K, Apostolakis J, Zschesche D 2003 *Nucl. Instrum. Meth. A* **506** 250
- [12] Gibaru Q, Inguibert C, Caron P, Raine M, Lambert D, Puech J 2021 *Nucl. Instrum. Meth. B* **487** 66
- [13] Valentin A, Raine M, Gaillardin M, Paillet P 2012 *Nucl. Instrum. Meth. B* **287** 124
- [14] Valentin A, Raine M, Sauvestre J E, Gaillardin M, Paillet P 2012 *Nucl. Instrum. Meth. B* **288** 66
- [15] Angelucci M, Novelli A, Spallino L, Liedl A, Cimino R 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 032030(R)
- [16] Qiwen Fan, Bo Meng, Hua Wang, Rong Zhang 2024 *Nucl. Phys. Rev.* **41** 491 (in Chinese) [樊启文, 孟波, 王华, 张榕 2024 原子核物理评论 **41** 491]
- [17] Sternglass E J 1957 *Phys. Rev.* **108** 1
- [18] Rothard H, Caraby C, Cassimi A, Gervais B, Grandin J P, Jardin P, Jung M, Billebaud A, Chevallier M, Groeneveld K O 1995 *Phys. Rev. A* **51** 3066
- [19] Hasselkamp D, Rothard H, Groeneveld K O, Kemmler J, Winter H 1992 *Springer Tracts Mod. Phys.* **123** 151154
- [20] Ziegler J F, Ziegler M D, Biersack J P 2010 *Nucl. Instrum. Meth. B* **268** 1818
- [21] Shwartz, Boris A 2008 *Particle Detectors* (Cambridge University Press)
- [22] Gibaru Q, Inguibert C, Belhaj M, Raine M, Lambert D 2021 *Appl. Surf. Sci.* **570** 151154
- [23] Rothard, Kroneberger, Clouvas, Veje, Lorenzen, Keller, Kemmler, Meckbach, Groeneveld 1990 *Phys. Rev. A* **41** 2521
- [24] <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/PhysicsReferenceManual/BackupVersions/V11.3b/html/index.html> [2026-1-21]
- [25] Clouvas A, Katsanos A, Farizon-Mazuy B, Farizon M, Gaillard M J 1991 *Phys. Rev. B* **43** 2496

Simulation of secondary electron emission characteristics from carbon foils bombarded by 1–10 MeV/u heavy ions^{*}

WANG Di¹⁾ CHEN Wei^{1)†} DING Zejun²⁾ MA Zongxiang³⁾
SONG Zhaohui¹⁾ WANG Minwen¹⁾ WANG Zhongming¹⁾

1) (National Key Laboratory of Intense Pulsed Radiation Simulation and Effect, Northwest Institute of Nuclear Technology, Xi'an 710024, China)

2) (Hefei National Research Center for Physical Sciences at Microscale, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

3) (Rocket Force University of Engineering, Xi'an 710025, China)

(Received 22 January 2026; revised manuscript received 25 February 2026)

Abstract

Secondary electron emission (SEE) is a fundamental surface phenomenon, but its accurate experimental characterization remains challenging due to high sensitivity to surface conditions and environmental factors. This study utilizes the Monte Carlo simulation method to investigate the SEE process induced by medium- and low-energy heavy ions incident on thin foils, aiming to provide theoretical guidance for the design and application of SEE-based beam diagnostic detectors in accelerator facilities. Taking the thin foil detector for the Xi'an 200 MeV Proton Application Facility (XiPAF) as the application background, we utilize the recently extended MicroElec module of Geant4 to quantitatively study the secondary electron yield (SEY), energy spectra, and angular distributions from carbon foils bombarded by heavy ions in the energy range of 1–10 MeV/u. The relationships between SEY and foil thickness, linear energy transfer (LET), and incident angle are systematically explored. Key findings are as follows:

^{*} Project supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12405182).

[†] Corresponding author. E-mail: chenwei@nint.ac.cn

1) The evolution of forward and backward SEY with foil thickness, as well as their asymmetry, is dominated by δ electron transport. Specifically, forward SEY increases rapidly with thickness up to ~ 600 nm and then saturates, while backward SEY saturates at a smaller thickness (~ 300 nm), consistent with the different escape depths of δ electrons.

2) For a 100 nm carbon foil, the total SEY exhibits an approximately linear dependence on the incident ion's LET over three orders of magnitude ($0.1\text{--}100\text{ keV}\cdot\text{cm}^2\cdot\mu\text{g}^{-1}$). After normalizing the simulated yields with SRIM-calculated energy deposition, the fitted SEY-LET coefficient deviates by less than 30% from the experimental data compiled by Rothard et al., which is well within the reported experimental uncertainty (a factor of two).

3) With increasing incident angle, both forward and backward SEY increase monotonically, but their sensitivities differ: power-law fitting yields $f = 0.95$ for forward emission and $f = 1.12$ for backward emission in $\gamma(\varphi) = \gamma(0)(\cos\varphi)^{-f}$. This disparity originates from the forward-peaked angular distribution of δ -electrons and their asymmetric transport in the foil, corroborated by the depth distribution of emitted-electron track vertices.

The simulated electron energy spectra and angular distributions agree well with theoretical expectations. The energy deposition calculated by MicroElec shows a deviation from SRIM results (up to 23% for low-energy heavy ions), which is attributed primarily to the different effective-charge models adopted by the two codes.

This study demonstrates that the Geant4-MicroElec module is an effective tool for simulating heavy-ion-induced SEE in the medium- and low-energy regime. The systematic data and physical insights obtained here provide valuable references for the design of thin-foil detectors, particularly for online monitoring of low-energy heavy-ion beams.

Keywords: secondary electron emission, heavy ions, thin foil, Monte Carlo simulation

DOI: [10.7498/aps.75.20260113](https://doi.org/10.7498/aps.75.20260113)

CSTR: [32037.14.aps.75.20260113](https://cstr.net.cn/resultDetail.do?id=CSTR:32037.14.aps.75.20260113)



1—10 MeV/u能区重离子在碳基薄膜表面的二次电子发射特性模拟

王迪 陈伟 丁泽军 马宗翔 宋朝晖 王敏文 王忠明

Simulation of secondary electron emission characteristics from carbon foils bombarded by 1–10 MeV/u heavy ions

WANG Di CHEN Wei DING Zejun MA Zongxiang SONG Zhaohui WANG Minwen WANG Zhongming

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 120102 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20260113

CSTR: 32037.14.aps.75.20260113

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20260113>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

非晶态碳薄膜对金属二次电子发射的影响

Effect of amorphous carbon film on secondary electron emission of metal

物理学报. 2024, 73(4): 047901 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231604>

氧化铝表面二次电子发射抑制及其在微放电抑制中的应用

Secondary electron emission suppression on alumina surface and its application in multipactor suppression

物理学报. 2023, 72(10): 107901 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222404>

体空位缺陷对氧化铝二次电子发射特性的影响分析

Analysis of effect of bulk vacancy defect on secondary electron emission characteristics of Al_2O_3

物理学报. 2024, 73(15): 157902 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240577>

超低频/射频联合驱动容性耦合等离子体中二次电子效应的模拟

Numerical investigation of the secondary electron effect in capacitively coupled plasmas driven by ultra-low frequency/radio frequency sources

物理学报. 2025, 74(13): 135203 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250341>

SiGe合金和SiGe/Si异质结构质子位移损伤的蒙特卡罗模拟

Monte Carlo simulations of proton-induced displacement damage in SiGe alloys and SiGe/Si heterostructures

物理学报. 2025, 74(16): 162401 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250162>

含复杂近邻的二维正方格子键渗流的蒙特卡罗模拟

Monte Carlo simulation of bond percolation on square lattice with complex neighborhoods

物理学报. 2022, 71(6): 066401 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211757>