

氢、氘和氚离子在固体表面上的反射

罗 正 明

四川大学原子核科学技术研究所, 成都, 610064

1989 年 7 月 24 日收到

本文应用最近发展的离子输运双群模型计算了氢, 氘和氚离子在固体表面的反射系数. 与有关的实验资料和 Monte-Carlo 计算比较表明, 双群模型所取得的结果是合理的、可用的. 同时也表明了双群模型有可能成为研究离子在固体表面反射的有效的理论方法.

PACC: 7920N; 5240H; 6180J

一、引 言

研究氢及其同位素氘和氚从固体表面上的反射现象对于理解聚变等离子体与反应堆第一壁相互作用是十分重要的. 由于反射而重新进入等离子体的氢及其同位素重新参与聚变反应, 影响聚变燃料的再循环过程和能量平衡过程. 这一因素对未来聚变堆的等离子体模式化研究及效率分析无疑是重要的. 此外, 核分析技术也经常涉及轻离子的反射数据. 由于这一问题的重要性, 已经有不少的文献提供了很多的实验测量数据和理论计算结果. 有关氢和氘及其同位素反射数据的系统计算和编评的工作也陆续出现^[1-4]. 对研究轻离子反射而言, Monte-Carlo 方法取得了很大的成功^[5-7]. 目前国际上大部分反射系数的计算结果都取自 TRIM 程序或 MARLOWE 程序. 前者假定固体是非晶物质, 后者可应用于晶体物质. 至于解析理论, 单次碰撞理论可以应用于轻离子能量高于几十千电子伏的反射计算^[8-10]. 对于较低能量的轻离子, 入射离子与靶原子的多次碰撞过程变得重要, 单次碰撞理论逐渐失效. 在这种情况下由 Firsov 所发展的小角多次散射理论可以应用于计算在掠射情况下的反射系数^[11,12]. 但是小角多次散射理论不能应用于正入射和斜向入射的常见情况, 这是 Firsov 理论的主要缺点. 标准输运理论也曾应用于计算离子反射^[13-15]. 由于标准输运理论是一种矩法, 因此它比较适宜应用于无限均匀介质. 对于计算入射到半无限空间的离子反射而言, 标准输运理论很难处理有边界的离子反射问题. 因此, 就目前而论 Monte-Carlo 方法仍然是最广泛和最有用的计算离子反射的方法. 然而 Monte-Carlo 方法也有其自身的局限性. 首先是 Monte-Carlo 方法是非常耗费机时的, 尽管超级计算机 CRAY-1 应用于计算离子反射已经多年, 已发表轻离子反射数据仍然不充分. 特别是反射离子的角分布, 能谱分布, 已有的数据十分有限.

在本文中应用最近发展的轻离子输运两群模型计算氢, 氘, 氚离子在固体表面上的反射系数. 双群模型是带电粒子的解析输运理论. 它既可应用于电子输运^[23,24], 又可应

用于离子输运^[16,25,26]。借助于引入分群条件,将 Boltzmann 方程中的散射积分区分为大角部分和小角部分。相应地将 Boltzmann 方程分解为互耦的两个子 Boltzmann 方程。其一描述小角直向前离子的输运行为,另一个方程描述大角扩散离子的输运行为。前者应用小角近似即可求得分布函数,对于后者应用球谐近似即可得扩散离子的分布函数。与已有的解析输运理论相比,离子输运两群模型比较精确,相当灵活。特别是它能够自如地处理有表面和界面的离子输运问题,这是标准输运理论很难处理的问题。另一方面,双群模型又比 Monte-Carlo 方法具有高得多的计算效率,特别是计算反射粒子的角分布或能谱,应用 Monte-Carlo 方法,为了获得必要统计精度,抽样数常达 10^5 ,在这种情况下双群模型的计算效率比 Monte-Carlo 方法高达数千倍。因此,双群模型提供了应用一台中型计算机完成离子反射数据系统计算的现实可能性。在本文中给出氢,氘,氚垂直入射到碳,铝,铜和金上的粒子数反射系数。同时也要将我们计算的某些结果与实验数据和已有的 Monte-Carlo 结果进行比较。

二、反射离子输运量的定义

在给出反射离子输运量之前,首先给出离子分布函数的定义。按定义,分布函数 $f(x, \mu, t) dt d\mu$ 表示在 x 点,其运动方向在 μ 附近的立体角元 $d\mu$,其相对剩余径迹长度在 t 附近 dt 的离子注量。相对剩余径迹长度等于能量为 E 的离子径迹长度与初始能量为 E_0 的离子径迹长度之比。它是离子能量的单值函数。因此 $t = R(E)/R(E_0)$,

$$R(E) = \int_0^E (\rho_e + \rho_n)^{-1} dE', \quad (1)$$

ρ_n, ρ_e 分别是离子的核阻止本领和离子的电子阻止本领。要求的反射离子输运量有如下几种:

1. 粒子反射系数 R_n

$$R_n = 2\pi \int_0^1 dt \int_{-1}^0 \mu f(0, \mu, t) d\mu / N_0. \quad (2)$$

注意到,在固体表面上遭受到散射的离子不可能从真空进入固体,即

$$f(0, \mu, t) = 0 \quad \mu > 0, \quad (3)$$

这样

$$R_n = 2\pi \int_0^1 dt \int_{-1}^0 \mu f(0, \mu, t) d\mu / N_0 = \int_0^1 N_1(0, t) dt / N_0, \quad (4)$$

N_0 是入射离子数,通常取成 1; N_1 是在表面处遭受到散射的离子的微分流量,即边界处分布函数的一阶球谐矩。以下设 $N_0 = 1$ 。

2. 能量反射系数 R_E

$$R_E = 2\pi \int_0^1 dt \int_{-1}^0 \mu E(t) f(0, \mu, t) d\mu = \int_0^1 E(t) N_1(0, t) dt. \quad (5)$$

3. 反射离子的角分布

$$A(\mu) = 2\pi \int_0^1 \mu f(0, \mu, t) dt. \quad (6)$$

4. 反射离子的能谱

$$S(E) = 2\pi \int_{-1}^0 \mu f(0, \mu, E) d\mu = N_1(0, t) (\rho_n + \rho_e)^{-1} \cdot R_0^{-1}. \quad (7)$$

从方程(2),(4),(6)和(7)看到,为了求出反射离子输运量,需要知道表面处离子的分布函数,至少需要知道分布函数的头几个球谐矩。

三、弹性散射截面和阻止本领

如果将固体考虑为非晶态,即忽略固体晶体结构对离子输运的影响,则快离子在固体中的输运行为事实上只取决于离子和靶原子之间的弹性散射和离子引起原子电离的非弹性散射。一般而言,由非弹性散射所产生的角偏转很小而被忽略。此外,离子能量损失歧离因不很重要,而不考虑。

离子在原子库仑场的散射在本质上是经典的。量子力学的影响主要表现在原子中电子密度分布上,即原子位上。Lindhard 及其合作者找到了核弹性散射截面的一个普适形式^[27]

$$d\sigma = \frac{\pi a^2}{2} U^{-3/2} f(U^{1/2}) dU, \quad (8)$$

$$U = \frac{T}{\gamma E} \varepsilon^2, \quad \gamma = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2}, \quad (9)$$

$$\varepsilon = \left(\frac{M_1}{M_1 + M_2} \frac{a}{Z_1 Z_2 e^2} \right) E, \quad a = 0.8853(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2} a_0. \quad (10)$$

这里 M_1, M_2 分别是入射离子和固体原子的原子量; T 是在一次弹性碰撞中,离子损失的能量; Z_1, Z_2 分别是入射离子和固体原子的原子序数; a_0 是 Bohr 半径; ε 是约化能量。普适函数 $f(U^{1/2})$ 与原子位有关。Winterbon 发现 f 可以用一个简单的函数表示^[28]

$$f(U^{1/2}) = \frac{\lambda U^{1/2-m}}{[1 + (2\lambda U^{1-m})^q]^{1/q}}, \quad (11)$$

参数 λ, m, q 可以用数值拟合技术得到。不同的原子模型, λ, m, q 的数值不一样。最近由 Littmark 和 Ziegler 给出的结果是 $\lambda = 3.35, m = 0.233, q = 0.445$ 。这些参数也应用于本计算中^[29]。

氢及其同位素在固体中的阻止本领由两部分组成。第一部分是电子阻止本领。Ziegler 和 Andersen 已经提供了完整的数据和如下计算公式^[30]:

$$\rho_e = \begin{cases} A_1(E/M_1)^{1/2} & E/M_1 \leq 10 \text{ keV}; \\ \frac{A_2 A_3 (E/M_1)^{0.45} \ln \left(1 + \frac{A_4 M_1}{E} + A_5 \frac{E}{M_1} \right)}{A_2 (E/M_1)^{1.45} + A_3 \ln \left(1 + \frac{A_4 M_1}{E} + A_5 \frac{E}{M_1} \right)} & 10 \text{ keV} < E/M_1 < 1 \text{ MeV}; \\ \left(\frac{A_6}{\beta^2} \right) \left[\ln \left(\frac{A_7 \beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 - \sum_{i=0}^4 A_{i+8} \ln^i(E/M_1) \right] & \beta = v/c, E/M_1 > 1 \text{ MeV}, \end{cases} \quad (12)$$

参数 A_1, \dots, A_{12} 可以在文献 [30] 中找到。核阻止本领由 Wilson 和 Biersack 给

出^[51],为

$$\rho_n = 8.462N \frac{Z_1 Z_2 M_1}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})(M_1 + M_2)} \ln(1 + \varepsilon^{0.5}) / (\varepsilon + 0.1071\varepsilon^{0.375}), \quad (13)$$

N 是单位体积中的靶原子密度。在计算中应用了弹性散射截面和径迹长度的幂函数近似。这个近似自然会减低理论的精度,但是它却使理论变得比较简单而易于处理。此外,计算已经表明,采用这个近似,计算的离子射程分布和反射系数与实验结果和 Monte-Carlo 方法的计算数据仍然符合得很好。这表明,这一国际上常用的近似确实是可接受的。在计算中,假定

$$f(U^{1/2}) \sim \delta U^{1/2 - m_\delta}, \quad (14)$$

$$E \sim E_0 t^\nu, \quad (15)$$

应用最小二乘法可以确定参数 δ, m_δ, ν 。

四、轻离子运输的两群模型

轻离子运输的两群模型在文献[16]已经作了比较详细的介绍。在本文中仅简要地将有关公式给出并在适当之处予以说明。

首先研究连续慢化近似下的离子 Boltzmann 方程。在前面提到,作为分布函数的变量,离子的能量已经用它的相对剩余径迹长度 t 代替。于是有如下形式的 Boltzmann 方程^[16]:

$$-\frac{\partial f}{\partial t} + \mu \frac{\partial f}{\partial x} = K t^{-2m_\delta \nu} \int_{4\pi} d\mathbf{u}' [f(x, \mu, t) - f(x, \mu', t)] (1 - \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}')^{-m_\delta - 1} + \frac{1}{2\pi} \delta(x) \delta(1 - \mu) \delta(1 - t), \quad (16)$$

\mathbf{u} 是离子运动方向; μ 是 \mathbf{u} 与 x 轴夹角的余弦; x 是离子穿透深度,以入射离子的平均径迹长度为单位。方程(16)是在无限宽束的离子入射到半无限均匀固体的平板几何条件下写出的。 x 轴的原点在固体表面上。常数 K 是

$$K = N \delta 2^{m_\delta} a^2 (Z_1 Z_2 e^2 / a)^{2m_\delta} / 4 E_0^{2m_\delta}, \quad (17)$$

E_0 是离子入射时的初始能量。根据双群模型,将离子分布函数 f 划分为直向前离子分布函数 f_i 和扩散离子分布函数 f_d 。于是有

$$f(x, \mu, t) = f_i(x, \mu, t) + f_d(x, \mu, t). \quad (18)$$

它们分别满足两个互藕的子 Boltzmann 方程

$$-\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mu \frac{\partial f_i}{\partial x} = K t^{-2m_\delta \nu} \int_{4\pi} d\mathbf{u}' [f_i(x, \mu', t) - f_i(x, \mu, t)] (1 - \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}')^{-m_\delta - 1} - S_d(x, \mu, t) + \delta(x) \delta(1 - t) \delta(1 - \mu) / 2\pi, \quad (19)$$

$$-\frac{\partial f_d}{\partial t} + \mu \frac{\partial f_d}{\partial x} = K t^{-2m_\delta \nu} \int_{4\pi} d\mathbf{u}' [f_d(x, \mu', t) - f_d(x, \mu, t)] (1 - \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}')^{-m_\delta - 1} + S_d(x, \mu, t). \quad (20)$$

方程(19)和(20)通过引入分群条件而联系起来。分群条件按物理意义是

$$S_d(x, \mu_i, t) = Kt^{-2m\delta\nu} \int_{4\pi} d\mathbf{u}' [f_i(x, \mu', t) - f_i(x, \mu_i, t)] (1 - \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}')^{-m\delta-1} \quad (21)$$

$$i = 0, 1, \dots, m.$$

它表示,直向前离子在发生弹性散射时,散射到 $0, \dots, m$ 个大角方向的离子数正好等于扩散离子源 S_d 在上述大角方向的源强。这表明直向前离子因弹性散射产生的大角离子已被纳入扩散离子群而不再属于直向前离子群。其结果是两方面的。一方面直向前离子群因不断排除产生的大角离子,其角分布的小角性质得到保证。另一方面,新纳入扩散离子群的这些大角离子,因角分布比较各向同性,而保证了应用 P_N 近似的合理性。

将 f_i, f_d, S_d 展成 Legendre 多项式,有

$$f_i = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)P_l(\mu)A_l(x, t)/4\pi, \quad (22)$$

$$f_d = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)P_l(\mu)N_l(x, t)/4\pi, \quad (23)$$

$$S_d = \sum_{l=0}^m (2l+1)P_l(\mu)S_l(x, t)/4\pi. \quad (24)$$

注意,扩散离子源 S_d 仅由头 $m+1$ 个球谐矩组成。这是由于我们要求扩散离子源的角分布应比较各向同性这一物理要求所决定的。对方程(19)作小角近似,即因 $\mu \approx 1$,用一个平均 $\bar{\mu}$ 代替(19)式等号左边梯度项中之 μ 。于是得到

$$A_l(x, t) = \alpha_l(t) \delta \left(x - \int_t^1 \mu_a(t') dt' \right), \quad (25)$$

$$\alpha_l(t) = \begin{cases} - \sum_{l'=m+1}^{\infty} D_{ll'} \exp[-K\eta_l(1-t^{1-2m\delta\nu})/(1-2m\delta\nu)] & l \leq m, \\ \exp[-K\eta_l(1-t^{1-2m\delta\nu})/(1-2m\delta\nu)] & l > m, \end{cases} \quad (26)$$

$$\exp[-K\eta_l(1-t^{1-2m\delta\nu})/(1-2m\delta\nu)] \quad l > m, \quad (27)$$

η_l 满足下列递推公式:

$$(l+1 \sim m_\delta)\eta_{l+1} - (l+1+m_\delta)\eta_l - 4\pi 2^{-m\delta} = 0, \quad \eta_0 = 0. \quad (28)$$

$D_{ll'}$ 称为分群系数,按定义

$$D_{ll'} = (2l'+1)\Delta_{ll'}/(2l+1)\Delta, \quad (29)$$

$$\Delta_{ll'} = \begin{vmatrix} 1 & \mu_0 & \cdots & P_{l-1}(\mu_0) & P_{l'}(\mu_0) & \cdots & P_m(\mu_0) \\ 1 & \mu_1 & \cdots & P_{l-1}(\mu_1) & P_{l'}(\mu_1) & \cdots & P_m(\mu_1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & \mu_m & \cdots & P_{l-1}(\mu_m) & P_{l'}(\mu_m) & \cdots & P_m(\mu_m) \end{vmatrix}, \quad (30)$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & \mu_0 & \cdots & P_{l-1}(\mu_0) & P_l(\mu_0) & \cdots & P_m(\mu_0) \\ 1 & \mu_1 & \cdots & P_{l-1}(\mu_1) & P_l(\mu_1) & \cdots & P_m(\mu_1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & \mu_m & \cdots & P_{l-1}(\mu_m) & P_l(\mu_m) & \cdots & P_m(\mu_m) \end{vmatrix}. \quad (31)$$

相应地,得到扩散离子源的球谐矩 $S_l(x, t)$

$$S_l(x, t) = \delta \left(x - \int_t^1 \mu_a(t') dt' \right) \left[-Kt^{-\alpha m\delta\nu} \eta_l \alpha_l - \sum_{l'=m+1}^{\infty} Kt^{-\alpha m\delta\nu} \eta_{l'} D_{ll'} \alpha_{l'} \right]. \quad (32)$$

这里 $\mu_a(t)$ 是平均直向前离子的方向余弦,即

$$\mu_0(t) = \int_0^1 \mu f_1(x, \mu, t) d\mu / \int_0^1 f_1(x, \mu, t) d\mu = \alpha_1(t) / \alpha_0(t). \quad (33)$$

对于扩散离子, 由于其角分布比较各向同性, 应用 P_N 近似是合理的. 对方程(20)取 P_N 近似, 得到一组双曲型方程

$$-\frac{\partial N_l}{\partial t} + \frac{1}{2l+1} \left[(l+1) \frac{\partial N_{l+1}}{\partial x} + l \frac{\partial N_{l-1}}{\partial x} \right] = -K \eta_l t^{-2m_0^p} N_l + S_l$$

$$l = 0, 1, \dots, n. \quad (34)$$

为了定解, 给出相应的初始和边界条件如下:

初始条件:

$$N_l(x, t) = 0 \quad \text{当 } t = 1. \quad (35)$$

边界条件由内边界条件和表面边界条件组成. 内边界条件:

$$N_l(x, t) = 0 \quad \text{当 } x = 1. \quad (36)$$

表面边界条件由 Mark 条件和补充表面边界条件组成. Mark 条件是^[22]

$$f_d(0, \mu_j, t) = 0 \quad j = 0, 1, \dots, (n-1)/2, \quad (37)$$

式中 μ_j 是 $n+1$ 阶 Legendre 多项式的正根, 即

$$P_{n+1}(\mu_j) = 0 \quad \mu_j > 0. \quad (38)$$

补充表面边界条件是

$$\frac{\partial f_d}{\partial t} = \mu_j \frac{\partial f_d}{\partial x} + K t^{-2m_0^p} \sum_{l=0}^n (2l+1) \eta_l P_l(\mu_j) N_l(0, t) / 4\pi$$

$$j = (n+1)/2, \dots, n. \quad (39)$$

这里 μ_j 是 $n+1$ 阶 Legendre 多项式的另一半负根, 即

$$P_{n+1}(\mu_j) = 0 \quad \mu_j < 0. \quad (40)$$

方程组(34)及相应的边界和初值条件(35)–(40)式联合即可取得 $N_l(x, t)$ 的数值解. 在计算时具有二阶精度的 Lax-Wendroff 格式应用于(39)式的离散化计算中^[33]. 下面将对初始和边界条件给予一个简要的说明. 初始条件(35)式表明, 所有的入射离子都属于直向前离子群. 内边界条件是根据在连续慢化近似下, 离子的最大穿透深度不能大于离子的平均径迹长度这一物理要求. Mark 条件表明, 扩散离子不可能来自真空. 而补充表面边界条件实际上就是将方程(20)与方程(34)的混合形式应用于表面及次一层的节点上, 这样就使递推运算成为封闭的从而实现由大 t 值逐级向小 t 值的 $N_l(x, t)$ 的数值计算.

五、计算结果

应用文中所述方法, 已经计算了氢、氘及氚离子在碳、铝、铜和金上的反射系数. 离子的能量从 10 eV 到 20 keV. 这是聚变研究感兴趣的能区. 计算结果(见图 1–12). 它们相应于这三种离子垂直入射到所给固体的入射条件. 图 1, 图 3, 图 4 和图 5 是按 Tabata 的图绘上我们的计算结果(实线)与相应的实验结果和 Monte-Carlo 计算结果所作的比较^[17–22, 34]. 从上面与实验结果和 Monte-Carlo 计算结果比较中, 看到两群模型的计算结

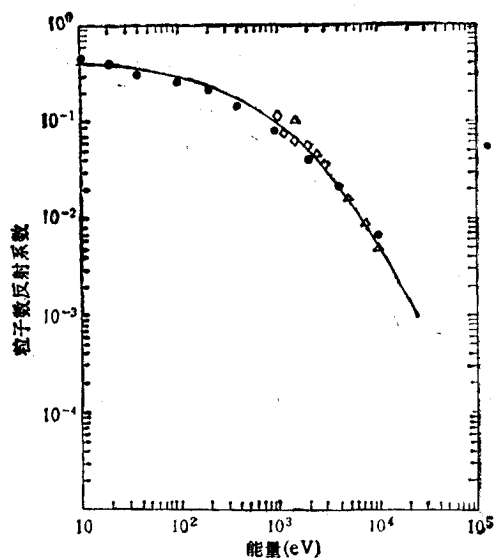


图1 氢离子在碳表面的反射系数 Δ 为 Eckstein^[17] 的实验结果; \diamond 为 Overburg^[18] 的实验结果; \bullet 为 Eckstein^[17] 的 Monte-Carlo 计算结果

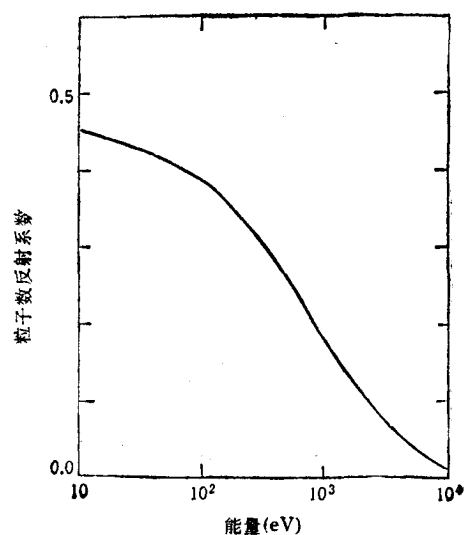


图2 氢离子在铝表面上的反射系数

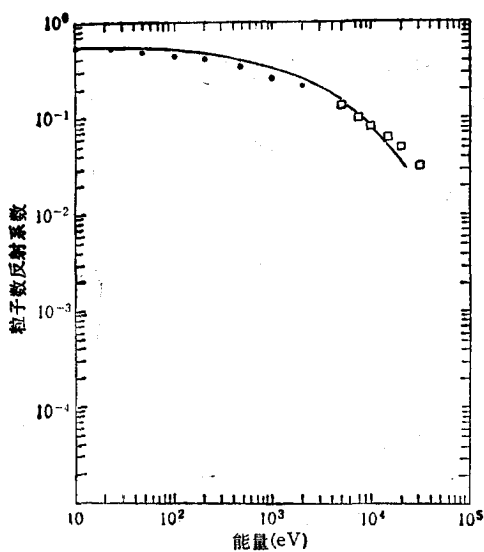


图3 氢离子在铜表面上的反射系数 \square 为 Sidenius^[19] 的实验结果; \bullet 为 Takeuchi^[21] 的 Monte-Carlo 计算结果

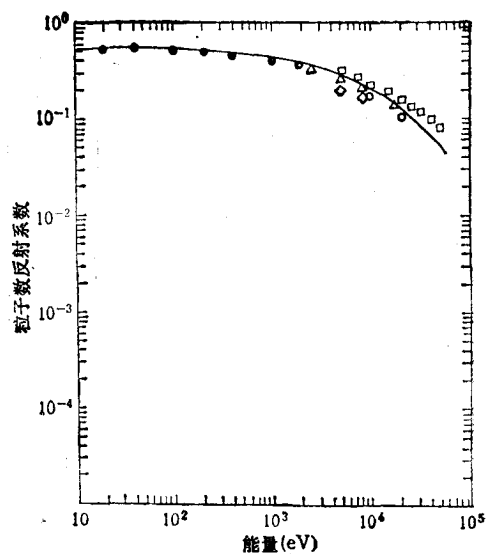


图4 氢离子在金表面的反射系数 Δ 为 Eckstein^[17] 的实验结果; \square 为 Sidenius^[19] 的实验结果; \diamond 为 Verbeek^[20] 的实验结果; \bullet 为 Eckstein^[17] 的 Monte-Carlo 计算结果

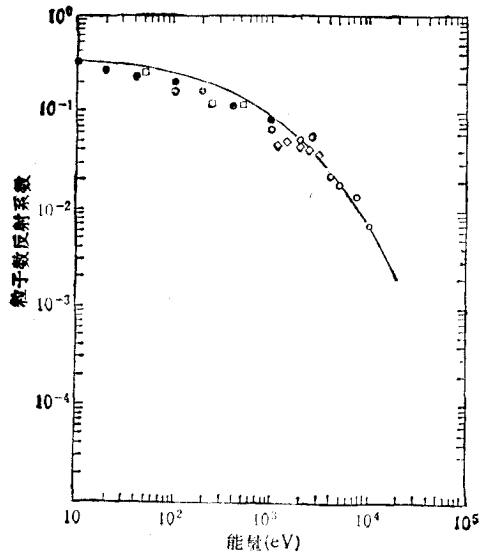


图5 氘离子在碳表面的反射系数 ○为 Eckstein^[17] 的实验结果; ◇为 Overburg^[18] 的实验结果; □为 Staudenmaier^[21] 的实验结果; ●为 Eckstein^[17] 的 Monte-Carlo 计算结果

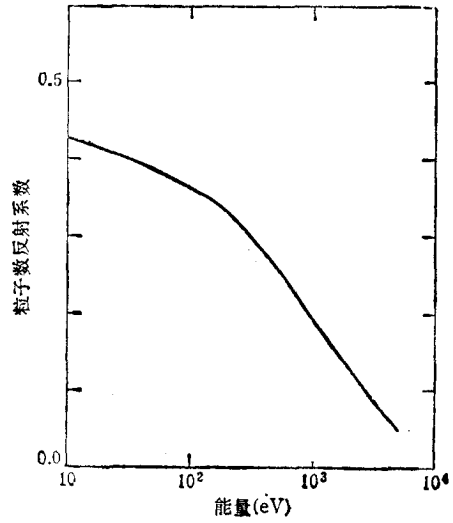


图6 氘离子在铝表面的反射系数

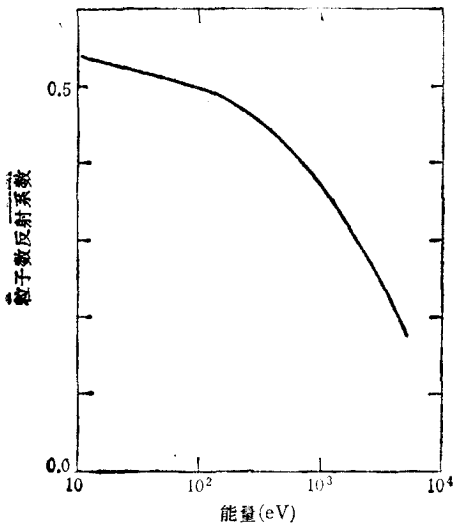


图7 氘离子在铜表面的反射系数

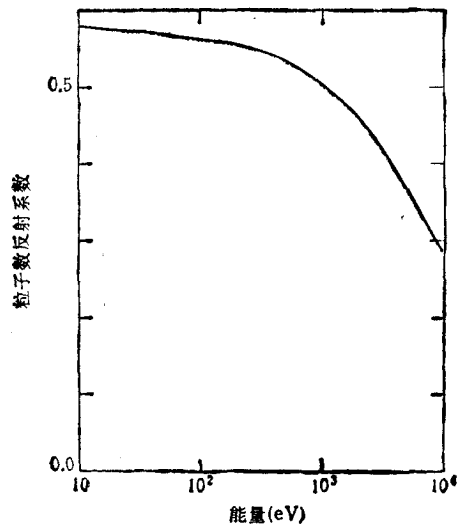


图8 氘离子在金表面的反射系数

果在一个比较宽的能区内能给出较好的结果。因此,轻离子运输的两群模型有可能成为一种有效的计算轻离子反射系数的方法。图13和图14给出1 keV的氢离子入射到铜上的反射离子角分布和能谱及能谱的角关联。从图13可以看出,不同能量的人射离子其角分布是相似的。从图14可以看出,反射离子在不同角度下的能谱是相似的,因而导致

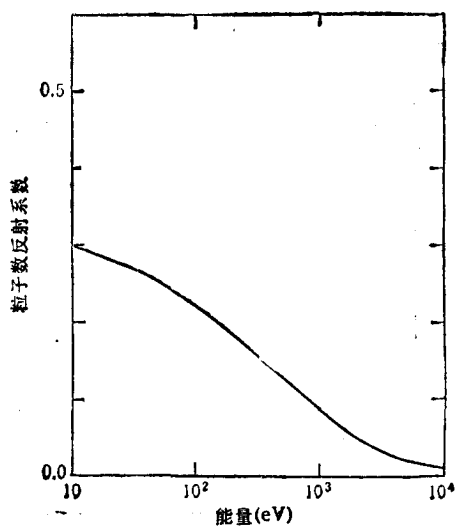


图9 氦离子在碳表面的反射系数

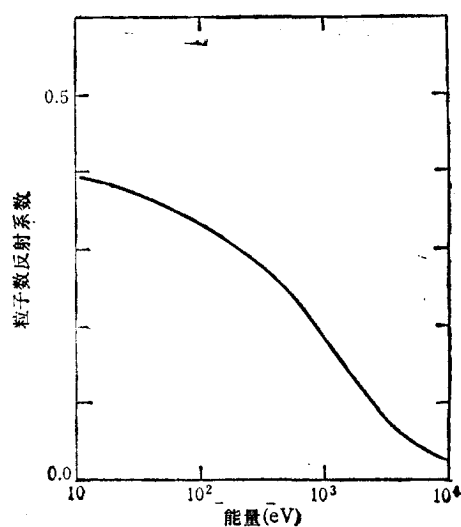


图10 氦离子在铝上的反射系数

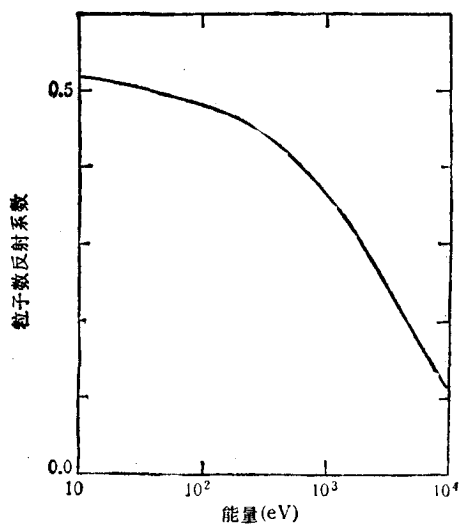


图11 氦离子在铜表面的反射系数

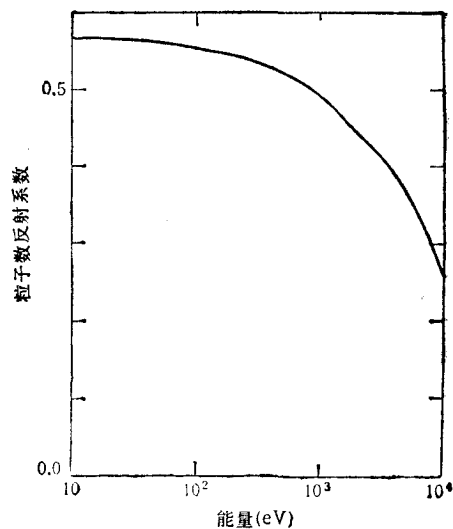


图12 氦离子在金表面的反射系数

总的能谱与在不同角度的能谱彼此相似的结论。这一点也许对反射现象的标度性质的研究有益处。总之,为了进一步发展离子输运两群理论的潜力,给出离子输运过程更精确的描述,获得更精确的离子弹性散射截面和电子阻止本领数据是很有用的。最近 Ziegler 等人给出大量离子弹性散射截面和电子阻止本领的系统计算结果。另外采用比幂函数近似更好的散射参数的计算方法也是重要的。这些无疑在未来改进的离子双群输运理论中都

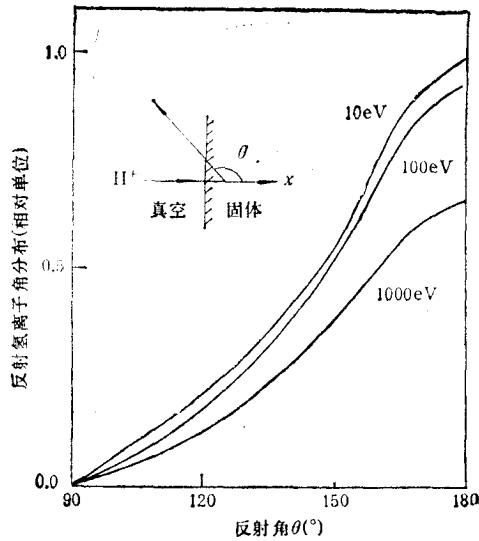


图 13 反射氢离子角分布

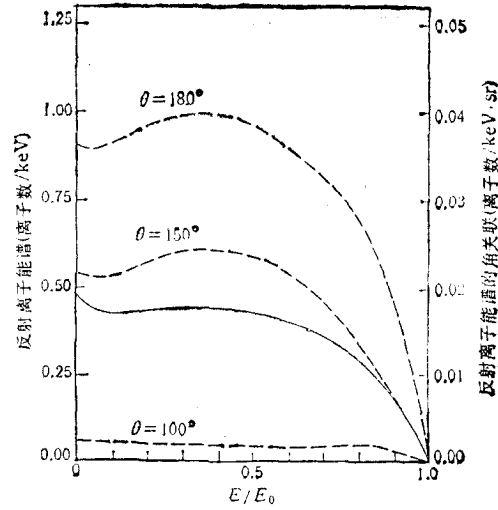


图 14 反射氢离子的能谱(实线)和能谱的角关联(虚线) 入射离子能量为 1 keV

是有吸引力的课题。

本课题得到中国原子核数据中心的资助。

- [1] W. Eckstein and H. Verbeek, *Nucl. Fusion*, Special Issue, (1984), 12.
- [2] E. W. Thomas, ORNL-6088-vol. 3, (1985).
- [3] E. S. Mashkova, *Radiat. Eff.*, **54**(1981), 1.
- [4] T. Tabata, R. Ito, Y. Itikawa, N. Ito and K. Morita, *Atomic Data and Nuclear Tables*, **28**(1983), 493.
- [5] M. T. Robinson and J. M. Torrrens, *Phys. Rev.*, **B9**(1974), 5008.
- [6] D. P. Jackson, *J. Nucl. Mater.*, **93/94**(1980), 507.
- [7] J. P. Biersack and L. G. Haggmark, *Nucl. Instrum. and Methods*, **174**(1980), 257.
- [8] G. M. McCracken and N. J. Freeman, *J. Phys. B*, **2**(1969), 661.
- [9] W. Eckstein and J. P. Biersack, *Z. Phys. A*, **310**(1983), 1.
- [10] K. Morita, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **22**(1983), 1112.
- [11] O. B. Firsov, E. S. Mashkova, V. A. Molchanov and V. A. Snisar, *Nucl. Instrum. and Methods*, **132**(1976), 247.
- [12] V. S. Remisovich, M. I. Riaganov and I. S. Filinin, *Sov. Phys. JETP*, **78**(1980), 2954.
- [13] K. B. Winterbon, P. Sigmund and J. B. Sanders, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd., **37**(1970), 14.
- [14] J. Bottiger and K. B. Winterbon, *Radiat. Eff.*, **19**(1973), 7.
- [15] U. Littmark and A. Gras-Marti, *Appl. Phys.*, **16**(1978), 247.
- [16] Luo Zhengming and Wang Shiming, *phys. Rev.*, **B36**(1987), 1885.
- [17] W. Eckstein and H. Verbeek, Max-Planck Inst. Plasma Phys. Rep. IPP 9/32, (1979).
- [18] S. H. Overburg *et al.*, *J. Nucl. Mater.*, **93&94**(1980), 529.
- [19] G. Sidenius and T. Lenskjaer, *Nucl. Instrum. and Methods*, **132**(1976), 673.
- [20] H. Verbeek, W. Eckstein and R. S. Bhattacharya, *J. Appl. Phys.*, **51**(1980), 1783.
- [21] G. Staudenmaier *et al.*, *J. Nucl. Mater.*, **84**(1979), 149.
- [22] W. Takeuchi and Y. Yamamura, *Radiat. Eff.*, **71**(1983), 53.
- [23] Luo Zhengming, *Phys. Rev.*, **B32**(1985), 812.
- [24] Luo Zhengming, *Phys. Rev.*, **B32**(1985), 824.
- [25] Luo Zhengming, *Nucl. Instrum. and Methods*, **B33**(1988), 102.
- [26] Luo Zhengming, *Nucl. Instrum. and Methods*, **B33**(1988), 125.

- [27] J. Lindhard, M. Scharff, and H. E. Schiott, *K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.*, **33**(1963), 14.
[28] K. B. Winterbón, *Radiat. Eff.*, **13**(1972), 215.
[29] U. Littmark and J. F. Ziegler, *Phys. Rev.*, **A23**(1981), 64.
[30] H. Andersen and J. F. Ziegler, *Hydrogen Stopping Power And Ranges in All Elements*, Edited by Ziegler, Pergamon, New York, (1977). Vol. 3.
[31] W. D. Wilson *et al.*, *Phys. Rev.*, **B15**(1977), 2458.
[32] J. C. Mark, National Resource Council of Canada Rept. No. MT-92(1944); MT-97(1945).
[33] A. R. Mitchell, *Computational Methods in Partial Differential Equation*, Wiley, New York, (1969), p. 169.
[34] W. Eckstein and J. P. Biersack, *Z. Phys. A*, **310**(1983), 1.

THE REFLECTION OF H^+ , D^+ AND T^+ FROM SURFACE OF SOLIDS

LUO ZHENG-MING

Institute of Nuclear Science and Technology, Sichuan University, Chengdu, 610064

(Received 24 July 1989)

ABSTRACT

In the present paper, the reflection coefficients of H^+ , D^+ and T^+ of various energies from surface of solids have been calculated by means of the recently-developed bipartition theory of light ion transport. A comparison of the results with relevant experiments and the Monte-Carlo results shows a good agreement. These results also show that the bipartition theory of light ion transport is an effective theoretical method for investigation of ion reflection from surface of solids.

PACC: 7920N; 5240H; 6180J

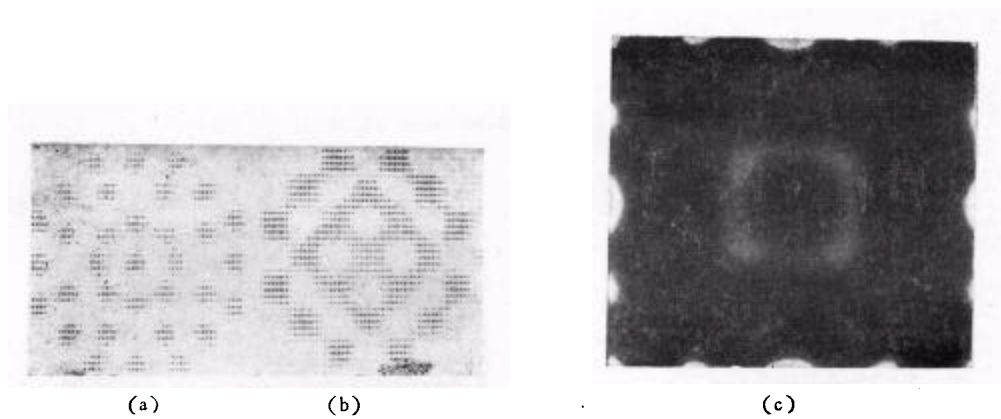


图 3

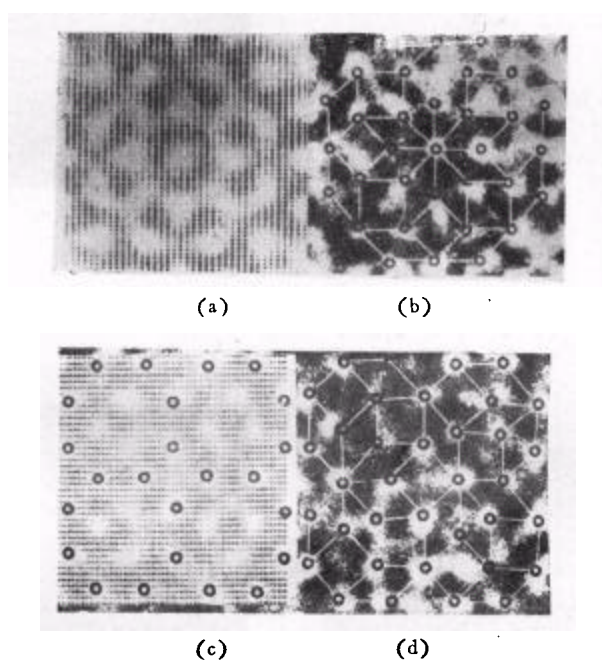


图 4

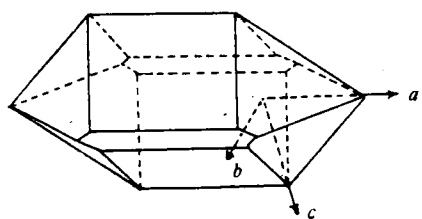


图1 TAM 单晶形态和晶体学方向

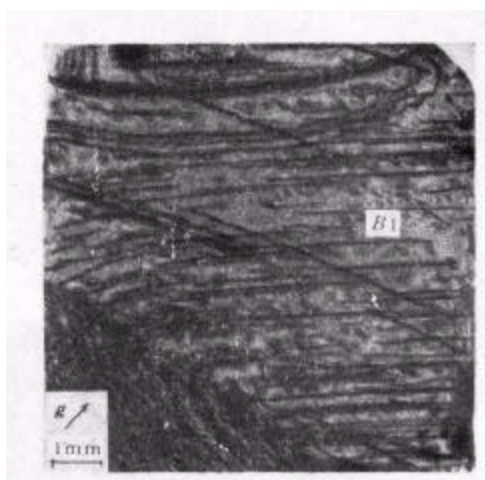


图3 图题同图2 (202) 反射, MoK α_1 辐射

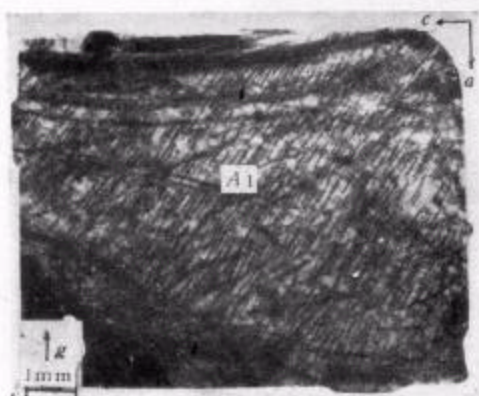


图2 TAM 单晶 S₁ 样品 Lang 形貌 ($\bar{2}20$) 反射, MoK α_1 辐射

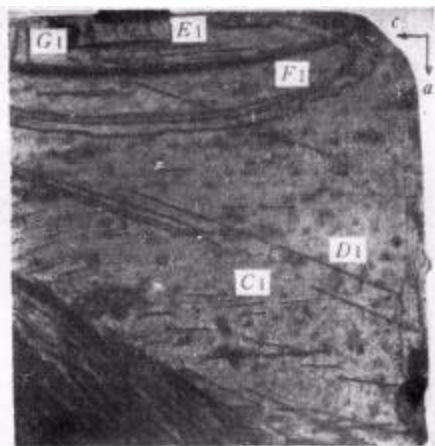


图4 图题同图2 (200) 反射, MoK α_1 辐射

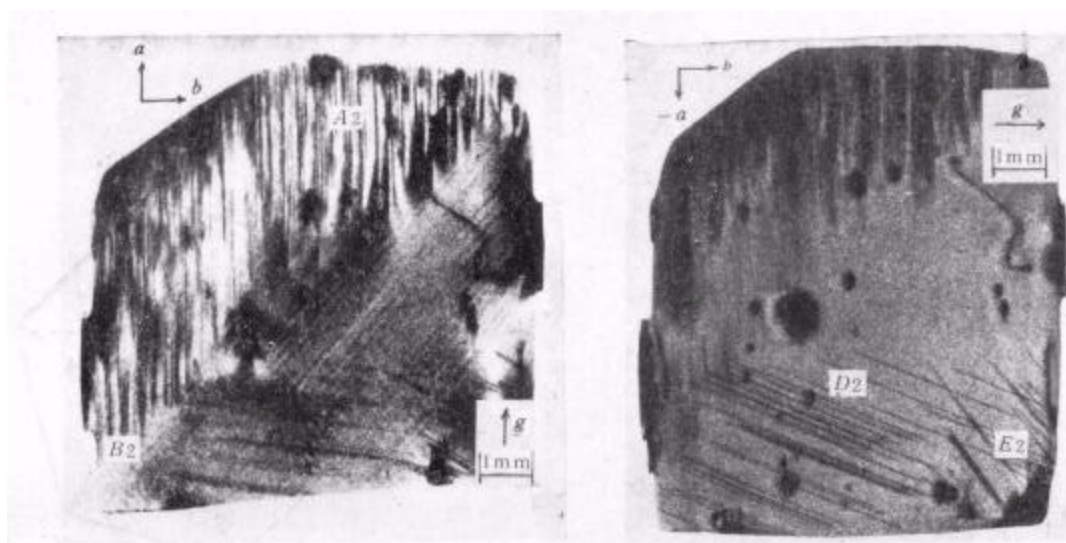


图 5 TAM 单晶 S_2 样品 Lang 形貌图 (202) 反射, MoK_{α_1} 辐射
图 7 图题同图 5 (020) 反射 MoK_{α_1} 辐射 (调换入射面和出射面后)

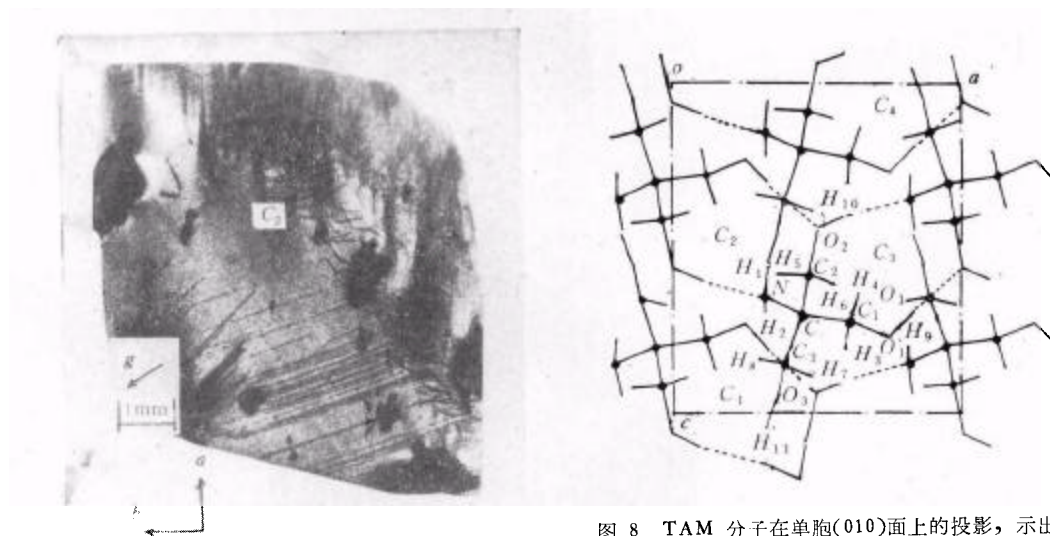


图 6 图题同图 5 ($\bar{1}11$) 反射, MoK_{α_1} 辐射 (调换入射面和出射面后)

图 8 TAM 分子在单胞(010)面上的投影, 示出结构隧道 C_n 和沿 c 轴分子层的 ABAB... 堆砌层序

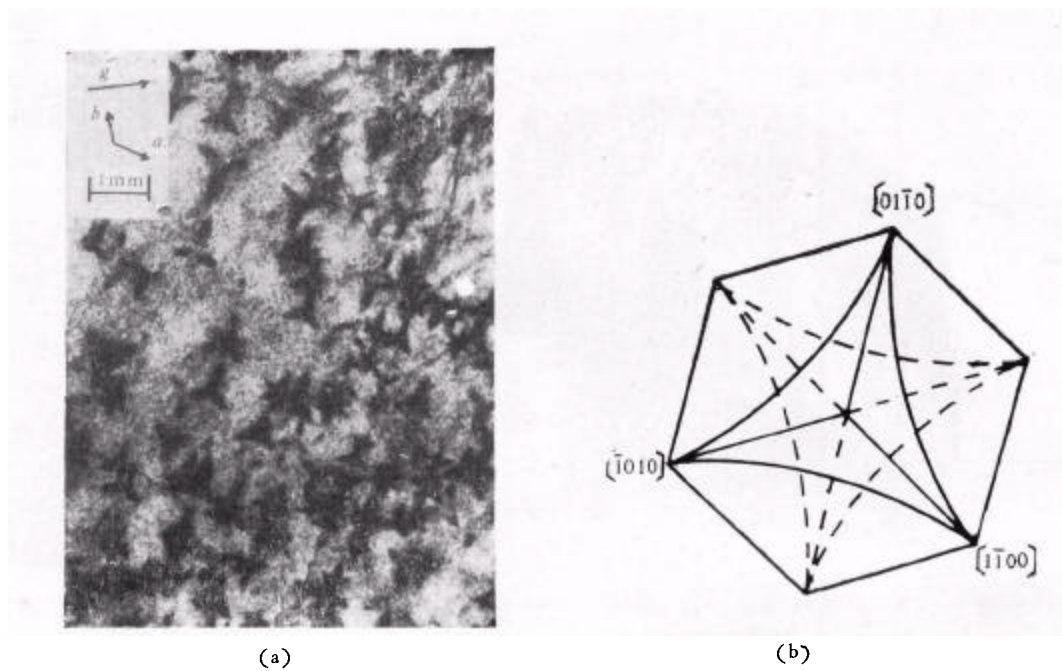


图 1 BBO-1 包裹物 X 射线形貌衬度 (0001)晶片, $(30\bar{3}0)$ 反射, AgK_{α_1} 辐射

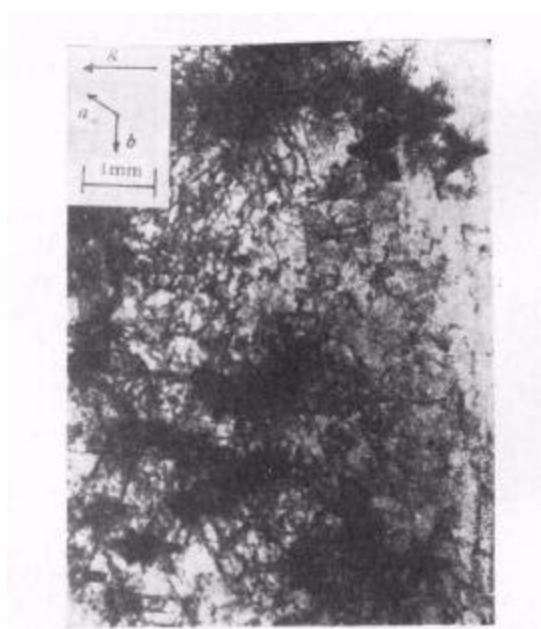


图 2 BBO-2 包裹物 X 射线形貌衬度 (0001)晶片, $(30\bar{3}0)$ 反射, AgK_{α_1} 辐射

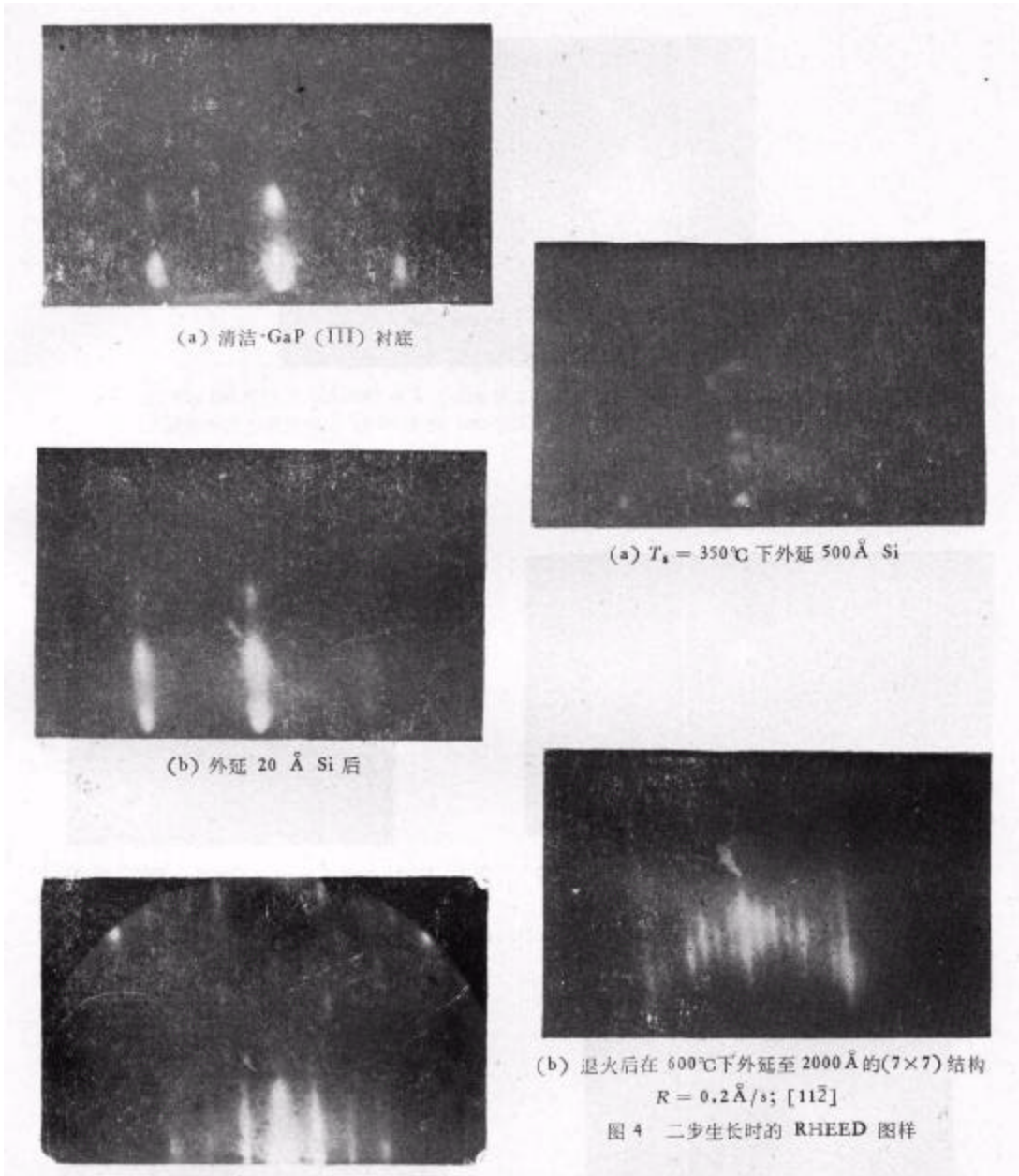


图 3 单步生长时的 RHEED 图样变化

$T_s = 450^\circ\text{C}$; $R = 0.2 \text{ \AA/s}$; $[11\bar{2}]$

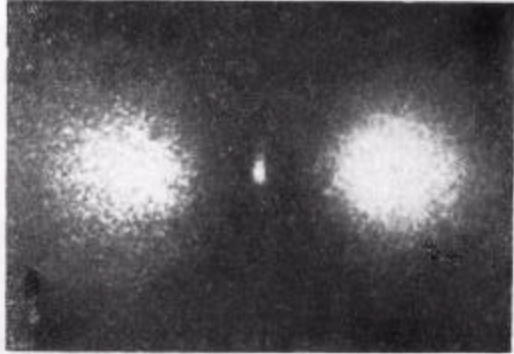


图2 18°C时拍摄的 $o \rightarrow e$ 衍射照片(晶体2之A点) $\lambda = 4880 \text{ \AA}$, 功率为 200 mW; 掺 Fe 浓度为 450 ppm; 屏幕至晶体距离为 100 cm; 时间 > 3 s; 出射光路中加 e 偏振片



图3 42°C时拍摄的 $o \rightarrow e$ 衍射照片 实验条件同图2



图4 72°C时拍摄的 $o \rightarrow e$ 衍射照片 实验条件同图2



图5 80°C时拍摄的 $o \rightarrow e$ 衍射照片 实验条件同图2



图11 $o \rightarrow e$ 衍射照片(晶体1之A点) 全部实验条件与文献[1]的图 1(b)相同, 但文献[1]中入射 e 光, 此处入射 o 光, 黑条长 5 cm