

轻离子反射系数的标度公式*

罗正明 李泰华

四川大学原子核科学技术研究所, 成都 610064

1993年3月15日收到

最近发现,轻离子输运行为具有显著的标度特性,可用一个称为标度输运截面的参数来标定. 本文利用这个重要的性质,给出了以标度输运截面为自变量的轻离子粒子数反射系数和能量反射系数的普适拟合公式. 此公式具有非常好的单值对应关系,相比之下,经常应用的约化能 ϵ 作为标度参数的反射公式,因其分散度大而相形见绌.

PACC: 7290N; 5240H; 6180J

一、标度输运截面

H, D, T 和 He 等轻离子在表面上的粒子数反射系数 R_N 和能量反射系数 R_E 在聚变等离子体与壁的相互作用 (PSI) 研究中占有重要的地位^[1]. 寻找一个较精确描述反射系数的普适经验公式对聚变等离子体模式研究很有帮助. 因为它很容易嵌入描写聚变等离子体的能量平衡和粒子数平衡方程式中. 在这种意义上, 它比反射系数的数值本身更有意义.

目前国际上一般采用约化能量 ϵ 作为离子反射系数的标度参量 (自变量). 按定义, 约化能量为

$$\epsilon = 32.55 \frac{M_2}{M_1 + M_2} \frac{Z_1 Z_2 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}}{E} \quad (1)$$

M_1, Z_1, E 分别为入射离子的质量、核电荷数和入射能量. M_2, Z_2 为靶原子的质量和原子序数. 最早 Weissman 和 Sigmund 对每一种特定的轻离子, 如 H, D, T 和 He, 将其反射系数与 ϵ 作图, 发现它们具有相似的变化规律^[2]. 后来 Oen 和 Robinson, Eckstein 和 Verbeek 及 Tabata 等人试图在一定的误差范围内将 R_N 和 R_E 看成 ϵ 的单值函数^[3-5]. 结果表明对于同一的 ϵ , R_N 和 R_E 的最大值和最小值可达 3 至 4 倍. 分散性相当大. 当然, 这样的结果是不能令人满意的. 最近 Thomas 等人对一定范围的 μ ($\mu = M_1/M_2$), 研究 R_N 和 R_E 与 ϵ 的关联. 结果有明显改善^[6]. 但这意味着将 R_N 和 R_E 看成是 ϵ 和 μ 的二元函数. 问题仍然是是否存在着一简单参数, 它与 R_N, R_E 有良好的单值依赖关系?

本文作者之一曾提出应用离子标度输运截面 σ , 作为标度参量的观点^[7]. 对低能离

* 国家自然科学基金及中国核数据中心资助项目.

子来说,作者已经证明,把经过标度变换的玻耳兹曼方程作 P_1 近似,可以得到如下一组方程:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial N_0}{\partial s} + \frac{\partial N_1}{\partial x} &= 0, \\ -\frac{\partial N_1}{\partial s} + \frac{1}{3} \frac{\partial N_0}{\partial x} &= \sigma_s s^{-1+m} N_1, \end{aligned} \quad (2)$$

这里 N_0, N_1 为分布函数 $f(x, \mu, s)$ 的零级和 1 级球谐矩. $f(x, \mu, s) \approx [N_0(x, s) + 3\mu N_1(x, s)]/4\pi$. s 和 x 为入射离子的剩余径迹长度和深度(以入射离子的平均径迹长度 R_0 为单位). μ 为离子运动方向与 x 轴夹角的余弦. m 为常数, 为 0.233. 从方程组看出, N_0, N_1 在相同入射几何条件下, 其解仅依赖于 σ_s , 与入射离子和靶原子的种类及入射离子能量无直接关系. 这说明, 在 P_1 近似下, σ_s 单值地对应于离子分布函数. 离子输运行为的相似性是很明显的. 按定义, R_N, R_E 分别为

$$R_N = - \int_0^1 N_1(0, s) ds, \quad (3)$$

$$R_E = - \int_0^1 E(s) N_1(0, s) ds / E_0, \quad (4)$$

应与 σ_s 有很好的单值对应关系. E 为离子能量, E_0 为离子的初始能量. 按定义, σ_s 为标度输运截面, 为

$$\sigma_s = 2\pi R_0 N \int_{-1}^1 d\mu \sigma_N(E_0, \mu)(1 - \mu), \quad (5)$$

这里 N 为单位体积中的原子数, σ_N 为入射离子的弹性碰撞微分截面. 本文工作较过去的研究的新发展包括三方面: 1) 应用改进的轻离子输运双群理论, 系统地计算不同靶离子组合的 R_N 和 R_E . 2) 将过去研究 R_N 与 σ_s 的关系推进到研究 R_E 与 σ_s 的关系. 3) 取得了更好的离子反射系数的经验公式.

二、双群模型

轻离子输运的双群模型已经表明适合描述轻离子在固体中的穿透过程^[4]. 最近我们又进一步改进了较早的轻离子输运双群模型. 主要的改进是理论容许应用精确但比较复杂的弹性散射截面和较新的电子阻止本领理论, 放弃了较早期理论对弹性散射截面和电子阻止本领所作的幂函数近似. 这样就进一步改进了双群模型的计算精度.

我们已经计算了 0.1, 1.0, 10 keV 的 H, D, ^3He 和 ^4He 离子正入射到 C, Al, Ti, Fe, Ag, Mo, W 和 Au 所得到的粒子数反射系数, 能量反射系数以及相应的约化能量 ϵ 和标度输运截面 σ_s . 计算结果示于表 1.

三、结 果

利用表 1 中的数据, 将结果示于图 1 至图 4. 图 1 和图 2 示出 R_N, R_E 与 σ_s 的关系.

表 1

离子/靶	能 量 (keV)	ε	σ_t	R_N	R_E
H/C	0.1	0.2414	4.465	0.330	0.1420
	1.0	2.4140	1.275	0.1266	0.04066
	10.0	24.140	0.1408	0.0069	0.001546
H/Ti	0.1	0.0487	7.904	0.4381	0.2010
	1.0	0.4871	4.104	0.3097	0.1312
	10.0	4.7810	0.8311	0.08086	0.02233
H/Ni	0.1	0.0358	12.56	0.5317	0.2714
	1.0	0.3575	6.258	0.3929	0.1745
	10.0	3.5750	1.241	0.1240	0.03357
H/Au	0.1	0.0093	13.77	0.5418	0.2738
	1.0	0.0931	9.760	0.4708	0.2199
	10.0	0.9305	2.975	0.2462	0.08424
D/C	0.1	0.2242	3.266	0.2710	0.1101
	1.0	2.2420	1.196	0.1178	0.04105
	10.0	22.420	0.1713	0.008482	0.002096
D/Al	0.1	0.0912	6.146	0.3889	0.1722
	1.0	0.9123	2.539	0.2254	0.08557
	10.0	9.1230	0.3952	0.03177	0.007422
D/Ti	0.1	0.0477	8.801	0.4579	0.2144
	1.0	0.4774	4.226	0.3137	0.1291
	10.0	4.7740	0.7574	0.07249	0.01847
D/Fe	0.1	0.0387	11.65	0.5085	0.2551
	1.0	0.3866	6.158	0.3829	0.1763
	10.0	3.8660	1.248	0.1236	0.0376
D/Cu	0.1	0.0337	12.38	0.5208	0.2638
	1.0	0.3368	6.753	0.4017	0.1873
	10.0	3.3680	1.464	0.1447	0.04443
D/W	0.1	0.0101	17.51	0.5818	0.3111
	1.0	0.1008	12.41	0.5136	0.2596
	10.0	1.0080	3.847	0.2911	0.1120
D/Au	0.1	0.0093	17.04	0.5776	0.3068
	1.0	0.0926	12.28	0.5122	0.2572
	10.0	0.9258	3.99	0.2944	0.1131

离子/靶	能量 (kVe)	ϵ	σ_e	R_N	R_E
$^3\text{He}/\text{Ni}$	0.1	0.0168	8.222	0.4479	0.1974
	1.0	0.1682	4.994	0.3436	0.1364
	10.0	1.6820	1.425	0.1379	0.04287
$^3\text{He}/\text{Fe}$	0.1	0.0184	7.689	0.4352	0.1882
	1.0	0.1845	4.521	0.3252	0.1249
	10.0	1.8450	1.203	0.1172	0.03418
$^3\text{He}/\text{Mo}$	0.1	0.0102	5.675	0.3800	0.1504
	1.0	0.1016	3.975	0.3058	0.1112
	10.0	1.0160	1.386	0.1354	0.04023
He/C	0.1	0.0920	5.4000	0.3622	0.1392
	1.0	0.9200	1.569	0.1491	0.03893
	10.0	9.2000	0.2513	0.01165	0.002664
He/Ti	0.1	0.0222	10.14	0.4857	0.2269
	1.0	0.2222	5.428	0.3580	0.1409
	10.0	2.2220	1.259	0.1199	0.03554
He/Cu	0.1	0.0159	14.24	0.5471	0.2792
	1.0	0.1590	8.553	0.4446	0.1999
	10.0	1.590	2.391	0.2117	0.07712
He/W	0.1	0.0049	12.57	0.5274	0.2604
	1.0	0.0491	10.12	0.4806	0.2234
	10.0	0.4910	4.268	0.3118	0.1227

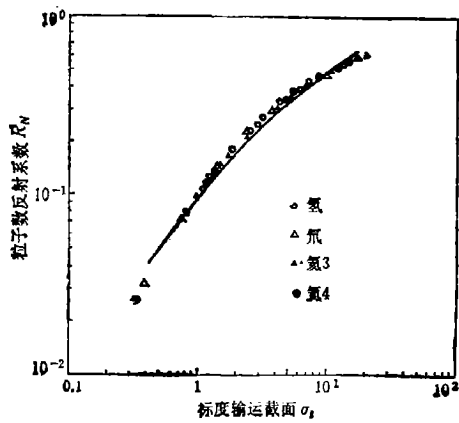


图1 粒子数反射系数与标度输运截面的依赖关系
它们之间有理想的单值对应关系

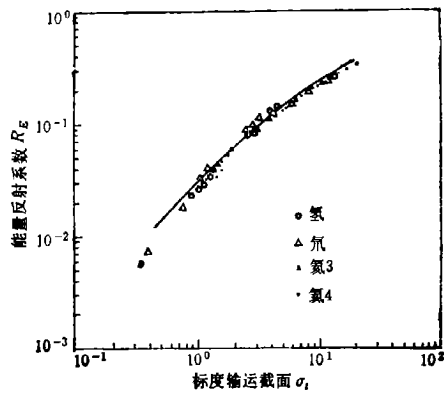


图2 能量反射系数与标度输运截面的依赖关系
它们之间有良好的单值对应关系

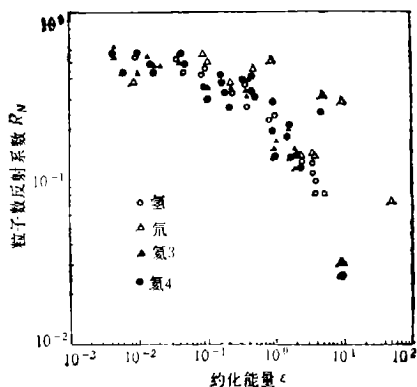


图3 粒子数反射系数与约化能量的依赖关系
数据分散度比较大,单值对应关系不明显

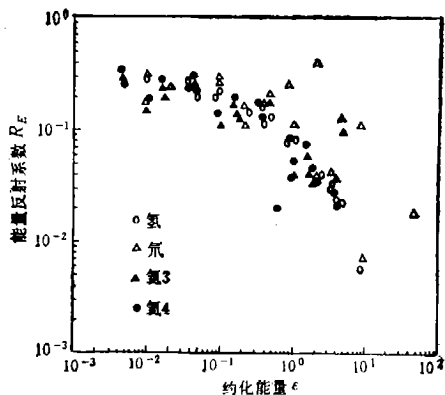


图4 能量反射系数与约化能量的依赖关系
数据分散度比较大,单值对应关系不明显

图3和图4示出 R_N, R_E 与 ϵ 的关系。从图1可以看到 R_N 与 σ_i 呈现出极好的单值依赖性。这是相当理想的结果。特别是与图3 R_N 和 ϵ 的依赖关系相比,适成鲜明对照。后者的数据分散性相当大。对于同一 ϵ 的不同靶离子组合,最大的 R_N 与最小的 R_N 相差4倍左右,证实了 Eckstein 等人的结果。图1的结果有力地支持了 σ_i 作为最主要的标度参数的看法。

从图2可以看到 R_E 与 σ_i 也呈现出良好的单值依赖关系,虽然比 R_N 的分散性大一些。一般来说,对同一 σ_i 的不同靶离子组合,最大的 R_E 与最小的 R_E 相差不到30%,个别的方地方达40%。这比较 R_E 与 ϵ 的依赖关系来说,具有不可比拟的优势。因为对于同一 ϵ 来说,最大的 R_E 与最小的 R_E 经常相差3倍以上。 R_E 较 R_N 对 σ_i 有较大的分散性是合理的。从方程(4)可以看到,积分中的因子 $E(s)$ 对不同的初始能量 E_0 ,有不同的与 s 依赖关系,这就增加了 R_E 数据对 σ_i 的分散性。

图3和图4为利用表1中的数据,研究 R_N, R_E 与 ϵ 的关系。结果可以看出 R_N, R_E 与 ϵ 呈现出相当大的分散性,这些结果与已发表的资料基本一致。

对图1和图2中的数据,我们应用最小二乘法得到如下经验公式:

$$R_N = 1 - \exp(-0.09883\sigma_i + 0.003125\sigma_i^2), \quad (6)$$

$$R_E = 1 - \exp(-0.03250\sigma_i + 0.00069\sigma_i^2). \quad (7)$$

在图1和图2中,我们已经用实线将拟合公式(6),(7)表达出来。(6)和(7)式表明了反射系数与标度输运截面的单值联系,它们与具体的离子种类、能量和固体原子种类没有直接关系,具有理想的普适性。

- [1] R. A. Langley, et al., *Nucl. Fusion Special Issue*, (1984), 9.
- [2] R. Weissman, P. Sigmund, *Radiat. Effects*, 19(1973), 7.
- [3] O. S. Oen, M. T. Robinson, *Nucl. Instr. and Meth.*, 132(1976), 647.
- [4] W. Eckstein et al., *Nucl. Fusion Special Issue* (1984), 12.
- [5] T. Tabata, et al., *Nucl. Instr. and Meth.*, E9(1985), 113.
- [6] E. W. Thomas et al., *Nucl. Instr. and Meth.*, B69(1992), 427.

- [7] Luo Zhengming, *Nucl. Instr. and Meth.*, **B48**(1990), 444.
[8] Luo Zhengming and Wang Shiming, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 1885.

SCALING FORMULAE OF REFLECTION COEFFICIENT FOR LIGHT IONS

LUO ZHENG-MING LI TAI-HUA

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

(Received 15 March 1993)

ABSTRACT

Recently, it has been found that the transport behavior of light ions possesses obvious scaling property and can be scaled by using a parameter called scaled transport cross-section. According to this important property, we present the universal fitting formulae for the particle reflection coefficient and the energy reflection coefficient. The argument of these formulae is the scaled transport cross-section. Compared with the reflection formulae, in which the reduced energy ε is taken as a scaled parameter, our formulae show excellent single value corresponding relation.

PACC: 7290N; 5240H; 6180J