

文章编号: 1001-2486(2001)01-0105-05

高能离子在材料中输运的蒙特卡罗模拟*

王同权, 张若棋, 沈永平, 戴宏毅, 张文勇, 肖亚斌

(国防科技大学理学院, 湖南长沙 410073)

摘要: 利用蒙特卡罗方法对高能离子在材料中的输运进行了计算机模拟研究, 入射高能离子与靶材料的作用近似为核散射和电子作用两个独立的部分, 核散射能量损失采用经典两体碰撞近似, 通过对碰撞参数的随机抽样得到散射角, 电子能量损失高能时采用 Bethe - Bloch 公式, 低能时采用 Lindhard - Scharff 公式, 中能时采用插值公式。最后对高能铁离子入射于铝、硅材料的输运进行了模拟计算, 给出了模拟结果并进行了分析。

关键词: 蒙特卡罗方法; 高能离子; 辐射效应; 计算机模拟

中图分类号: P353.4; O483 **文献标识码:** A

The Monte Carlo Simulation of the High Energy Ions Transport in Materials

WANG Tong-quan, ZHANG Ruo-qi, SHEN Yong-pin, DAI Hong-yi, ZHANG Wen-yong, XIAO Ya-bin

(College of Science, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: This paper deals with the Monte Carlo Simulation of the transport of high energy ions in materials, The incident high energy ions interact with the target material in a way is approximate to the two unrelated mechanisms, nuclear scattering and electronic process. The energy loss of incident ions due to nuclear scattering is calculated using binary collision approximation. The impact parameter is sampled and scattering angle can be derived. The electronic energy loss of incident ions for the high energy is calculated by Bethe - Bloch formulation. Lindhard - Scharff formulation is used for low energy and the interpolation formulation is used for the medium energy region. Finally, the computer simulation of high energy ions transport in aluminum and silicon is made, and the results are presented and analyzed.

Key words: Monte Carlo simulation methods; high energy ions; radiation effects; computer simulation

高能离子在材料中的慢化和散射的计算机模拟已经在离子注入、辐射效应、溅射以及离子对于材料的透射和反射等研究中得到广泛的应用^[1~3]。蒙特卡罗方法模拟有一些独特的优点^[4], 它允许对弹性散射的严格处理以及对边界和界面的直观考虑, 并且很容易确定离子在运输过程中的能量和角分布等, 而其主要缺点在于耗时特性^[5], 因此常常需要在计算时间和计算精度之间进行权衡。本文利用蒙特卡罗方法对高能离子在材料中的输运过程进行模拟研究, 为空间高能粒子辐射对航天用电子学元器件的辐射损伤研究提供参考。

1 核散射和入射离子的能量损失

1.1 散射积分的拟合表达式

高能离子在材料中的输运过程中核散射的重要性在于它不仅使得入射离子慢化, 同时还决定着入射离子运动径迹, 在质心系下入射离子与靶核一次核散射后的散射角为^[3]:

$$\theta = \pi - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p dr}{r^2 \left[1 - \frac{V(r)}{E_c} - \left(\frac{p}{r} \right)^2 \right]^{1/2}} = \pi - 2 \int_{r_0}^{\infty} \frac{p dr}{r^2 \left[1 - \frac{V(r)}{E_c} - \left(\frac{p}{r} \right)^2 \right]^{1/2}} \quad (1)$$

其中 $V(r)$ 为入射离子与靶核的散射势, E_c 为质心系下两个粒子的总动能, r 为两个粒子的间距, p

* 收稿日期: 2000-09-25

基金项目: 国家部委基金资助项目(98J11.2.2.KG0126)

作者简介: 王同权(1970-), 男, 讲师, 在职博士生。

为碰撞参数, r_0 为两个粒子的最接近距离。

严格处理两体弹性散射就要求解经典散射积分式(1), 在入射离子能量较高或者需要跟踪大量离子“历史”时, 基于计算效率上的考虑, 这里采用一个简单的又能够使之保持一定精度的拟合解析表达式求得散射角 $\theta^{[3]}$:

$$\cos \frac{\theta}{2} = \frac{B + R_c + \Delta}{R_c + R_0} \quad (2)$$

其中 $B = p/a$, $R_0 = r_0/a$, $R_c = \rho/a$, $\Delta = \delta/a$, p 为两个粒子在距离最接近时的两者运动轨迹曲率半径之和, δ 为修正项, a 为屏蔽参数, 式中 R_c 、 R_0 都可以解析得到, 而 B 则可以通过对 P 的随机抽样得到, Δ 的取值采用 Biersack 的插值公式^[3]:

$$\Delta = A \frac{R_0 - B}{1 + G} \quad (3)$$

其中 $A = 2\alpha\epsilon B^\beta$ 和 $G = \gamma [(1 + A^2)^{1/2} - A]^{-1}$, 并且有

$$\begin{aligned} \alpha &= 1 + C_1 \epsilon^{-1/2} \\ \beta &= \frac{C_2 + \epsilon^{1/2}}{C_3 + \epsilon^{1/2}} \\ \gamma &= \frac{C_4 + \epsilon}{C_5 + \epsilon} \end{aligned} \quad (4)$$

其中的 $C_1 \sim C_5$ 为拟合参数。在 Moliere 势下拟合参数 $C_1 \sim C_5$ 如表 1 所示。

表 1 拟合参数 $C_1 \sim C_5$ 的值

Tab.1 The values of C_1 to C_5

C_1	C_2	C_3	C_4	C_5
0.6743	0.009611	0.005175	10.00	6.314

1.2 核散射能量损失

质心系下入射离子同靶原子的单次核散射后的能量损失为^[5]

$$T(\theta) = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_0 \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (5)$$

其中 M_1 、 M_2 分别为入射粒子和靶原子质量, E_0 为入射粒子初始动能, θ 为质心系下的入射离子的散射角(极角), 它与实验室系下的入射离子的散射角 ϕ 的关系为

$$\tan \phi = \frac{M_2 \sin \theta}{M_1 + M_2 \cos \theta} \quad (6)$$

而方位角 φ 在 0 到 2π 之间随机均匀分布, 因此可以抽样得到

$$\varphi = 2\pi R_n \quad (7)$$

其中 R_n 为随机数。在实际的计算中, 离子在材料中的输运以靶材料入射面的法线为参考方向。离子运动与参考方向的夹角为 α , 在第 i 次随机游动之后这个夹角的余弦为:

$$\cos \alpha_i = \cos \alpha_{i-1} \cos \phi_i + \sin \alpha_{i-1} \sin \phi_i \cos \varphi_i \quad (8)$$

2 自由程和碰撞参数的确定

2.1 碰撞参数的确定

设在长度为 L 的离子飞行路程中, 在半径为 $P \sim P + dP$, 与靶材料中某一个靶原子发生碰撞的几率为 $W_1(P) dP$, 则有:

$$w_1(p) dp = 2\pi p N L dp \quad (9)$$

其中 N 为靶材料中的原子数密度, 而在 $0 \sim P$ 之间没有与靶材料中靶原子的发生碰撞的几率为 $W_2(P)$ 则有:

$$w(p) = e^{-NL\pi p^2} \quad (10)$$

因此在长度为 L 的离子飞行路程中碰撞参数为 p 的碰撞几率为：

$$w(p) dp = w_1(p) w_2(p) dp = 2\pi NL p e^{-NL\pi p^2} dp \quad (11)$$

利用直接抽样，可得到：

$$p = \left[-\ln R_n / \pi NL \right]^{1/2} \quad (12)$$

2.2 自由程的确定

在高能情况下，按入射离子由于核散射导致平均偏转角为 5° 所飞行的路程确定所谓的“自由程” L 。由 Bohr - Williams 公式^[3]，利用 Moliere 散射势下的核阻止本领表达式，得到由于核散射导致的偏转角为 5° 时相应的自由程 L 为：

$$L = \frac{0.02 \left[1 + M_1/M_2 \right] \epsilon^2 + 0.052 \epsilon^{1.32}}{4\pi a^2 N \ln(1 + \epsilon)} \quad (13)$$

在这里引入了一个近似，认为离子经过长度为 L 的“自由程”飞行后，这个 5° 的偏转角源于入射离子与材料靶原子的多次散射的结果，而忽略其散射发生的实际位置，把散射位置归结在一个个“自由程”的终点处。但是在程序中还增加了一个判断，使得在 L 长度的飞行后，由于电子阻止导致的电子能量损失不能超过离子在这一自由程飞行之初所具有的能量的 5%，否则相应地减小 L 的值。

在低能情况下，自由程取为靶材料中靶原子平均距离。

3 入射离子的电子能量损失

这里采用电子能量损失和核散射能量损失互相独立近似，即此时忽略二者之间的关联，这样处理有两个原因：一方面考虑到计算效率问题，为了方便引入所谓的“自由程”，使得处理方便并且利于编程实现；另一方面更重要的原因在于目前缺乏完善的理论和实验数据来描述这二者的关联（主要是碰撞参数和电子能量损失的关系）。

忽略碰撞参数和能量涨落对电子能量损失的影响，离子在经过 L 的“自由程”的飞行后，由于非弹性散射导致的电子能量损失为：

$$\Delta E = NLS_e(E) \quad (14)$$

其中 S_e 为电子阻止截面。

在低能情况下，电子阻止截面采用 Lindhard - Scharff 公式^[6]：

$$S_L = kE^{1/2} \quad (15)$$

其中

$$k = k_L = \frac{1.212 Z_1^{7/6} Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2} M_1^{1/2}} \quad (16)$$

在高能情况，采用 Bethe - Bloch 公式^[6]：

$$\left(-dE/dx \right)_e = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{m_e v_0^2} NZ \left[\ln \left(\frac{2m_e v_0^2}{I} \right) + \ln \left(\frac{1}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 - \frac{C}{Z_2} \right] \quad (17)$$

其中 Z_1 、 Z_2 分别为入射离子和靶原子的原子序数， e 为电子电荷， m_e 为电子质量， N 为靶原子数密度， v_0 为入射粒子的速度， β 为相对论因子， I 称为平均电离势， C 为壳修正参数，它是由于原子内壳层电子的速度等于甚至大于入射离子的速度引起的，常由实验来确定。

而在高能和低能之间的能区，电子阻止截面采用 Biersack 的插值方法得到^[3]。

4 算例及讨论

对于入射高能离子产生的电离密度的计算通过沉积于电子过程的能量损失推算得到（每 3.6eV 的能量产生一个电子 - 空穴对^[1]），对于次级粒子所引起的材料位移损伤，考虑到计算效率和计算精度问题，利用 Kinchin - Pease 模型计算。以下计算跟踪入射离子数为 10 000 个，图 1 为入射铁离子在铝

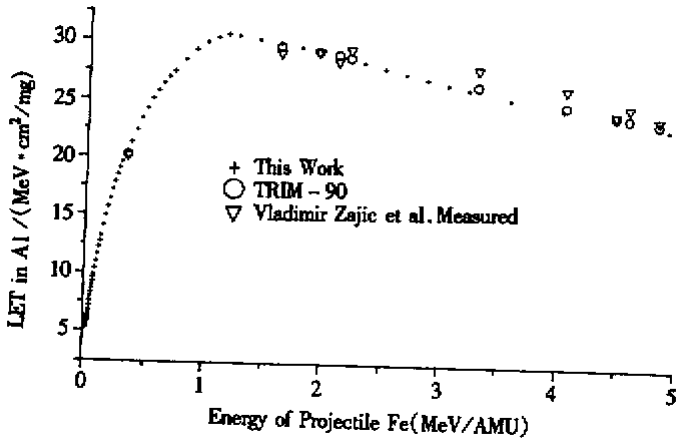


图 1 入射铁离子在铝中的 LET 与能量关系

Fig.1 The relation of the LET and the incident energy of the iron

中的 LET (线性能量转移) 与能量关系曲线和文献 7 的比较, 可以看出本文的工作与他们的模拟结果符合很好, 这为模拟程序的正确性提供了依据。图 2 为 20MeV 铁离子入射于硅材料中的沉积曲线, 其中的光滑曲线为计算值的高斯拟合, 而 Brice 等人在计算离子注入 (能量较低) 时的能量和射程分布时, 基本方程的建立就假设射程分布为高斯分布^[8], 所以从本文的模拟结果可以看出, Brice 等人的假设是合适的。

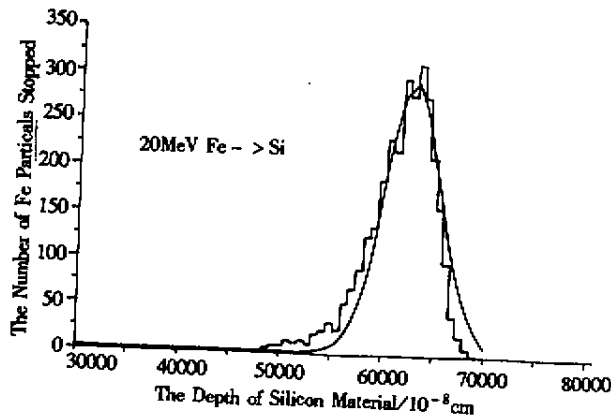


图 2 20MeV 铁离子在硅材料中的沉积曲线

Fig.2 The resident of 20MeV iron in silicon

图 3 为 10MeV 铁离子在硅中产生的电离密度分布图, 图 4 为 10MeV 铁离子在硅中形成的空位缺陷浓度分布图, 可以看出空位缺陷浓度最大值在硅材料的某一深度处, 与图 3 表示的电离密度分布不同, 这主要由于空位缺陷产生于入射铁离子与硅材料的原子过程, 随入射铁离子在硅材料中深入其能量不断下降, 原子过程重要性逐渐上升, 而电子过程重要性逐渐下降, 因此产生的空位缺陷浓度在硅材料深处有一个峰值, 而电离密度随铁离子的入射深度的增加不断下降。从图 3 和图 4 的比较可以得到结论, 离子辐射的电离损伤对于表面器件影响大, 而位移损伤对于体器件影响较大。

参考文献:

[1] 王同权等. 空间辐射环境中的辐射效应 [J]. 国防科技大学学报, 1999, 21 (4).
 [2] Lauriente M, Vampola A. L. Spacecraft Anomalies Due To The Radiation Environment [C]. 36th Aerospace Science Meeting & Exhibit, Jan 12, 1998.
 [3] J. F. Ziegler, et al. the Stopping and Range of Ions in Solids [M]. Pergamon Press, 1985.
 [4] 王同权等. 电子在材料中运输的蒙特卡罗模拟 [J]. 国防科技大学学报, 2000, 22 (1).

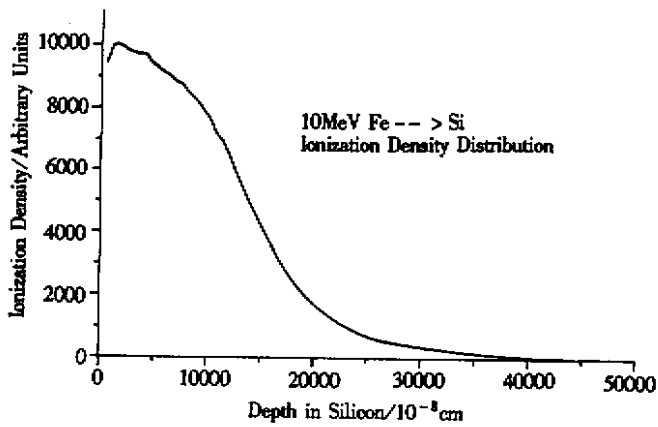


图3 10MeV 铁离子在硅中形成的电离密度分布

Fig.3 Ionization density distribution for 10MeV iron in silicon

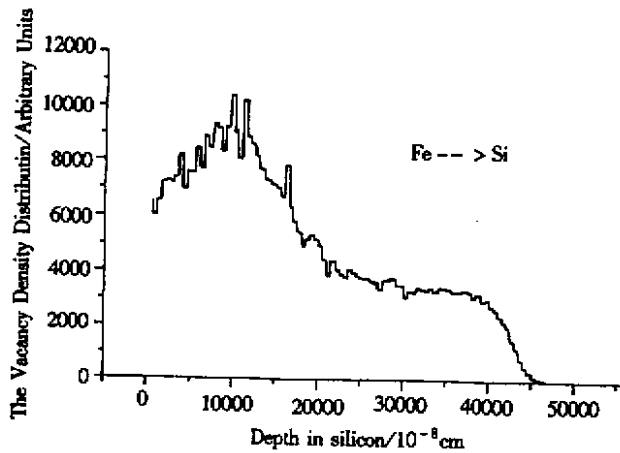


图4 10MeV 铁离子在硅中形成的空位缺陷分布

Fig.4 Displacement defect density distribution for 10MeV iron in silicon

- [5] 杜书华等. 运输问题的计算机模拟 [M]. 长沙: 湖南科技出版社, 1988.
- [6] Lindhard J, Scharff M. Range Concepts and Heavy Ion Ranges [J]. Phys. Rev. 1961, 124: 128.
- [7] Vladimir Zajic, Peter Thieberger. Heavy Ion Linear Energy Transfer Measurements During Single Event Upset testing of Electronic Devices [J]. IEEE Tran. Nucl. Sci., 1999, 40 (1).
- [8] Brice D K. Ion Implantation Range and Energy Deposition Codes COREL, RASE4, and DAMG2 [R]. SAND75-0622, 1975.

