

带电粒子运输的两群模型:回顾与总结

罗正明

(四川大学原子核科学技术研究所辐射物理及技术教育部重点实验室 成都 610064)

摘要 本工作系统地总结了到目前为止带电粒子运输的两群模型已经取得的进展,包括该模型的基本思想和概念,主要的数学公式和数值方法以及这个模型的各种应用。叙述了这个模型如何从描述中能电子运输中产生,逐步扩展到研究轻离子运输,任意质量的离子运输,原子级联碰撞和包括研究溅射在内的粒子表面发射而成为广泛有效的精确的带电粒子运输理论的发展过程。总计 15 个图给出了两群模型与已有的实验测量结果和其他理论资料所作的广泛比较,表明带电粒子运输的两群模型是一个功能很强并富有潜力的统一带电粒子运输理论。一些尚未解决的带电粒子运输问题也将在本工作未提到。

关键词 带电粒子运输, 两群模型, 分群条件

中图分类号 O571.33, TL99

1 引言

带电粒子运输的两群模型,按字面含义,是指射入介质的带电粒子束流可以分解为两组带电粒子:一组运动方向指向前方,称为向前运动的带电粒子群;另一组运动方向指向四面八方,称为扩散带电粒子群。Kellerer 教授为这新理论取名为两群模型(bipartition model)。新的理论命名不仅是准确、得当的,且可以从术语上与传统的中子运输多群理论(multi-group)区别开来。因为,两群模型与中子运输的多群理论在概念和算法上有很大区别。此后,该模型已广泛应用于离子运输、原子级联碰撞、溅射及高能电子运输。目前,该模型正被扩展到次电子发射的研究上。尽管该理论的每次扩展都不可避免地要引进某些新的概念、算法和技术,但两群模型的基本概念和分群条件仍然被保留下来,并被证明是取得成功的关键因素。到目前为止,作为一个精确的运输理论,两群模型的有效性已经涵盖了带电粒子运输的绝大多数问题。本工作中,对该理论到目前为止取得的进展作了系统的综述。同时,对正进行的工作和一些尚未解决的重要带电粒子运输问题也作了评述。

电子运输两群模型的提出已经有了 30 多年的历史^[1,2]。1965 年,在研究电子在固体介质中的运输理论时已经理解到,尽管矩法已在电子运输中取得重要进展,但它只能适用于计算电子在无限均匀介质中的运输^[3]。这一局限是矩法固有的,因而它影响到了矩法的适用性。因为,事实上大部分电子运输的重要问题都与表面和介面有关。因此,需要超越矩法而另辟

新的途径来研究电子运输问题。在分析当时流行的低阶球谐近似法处理电子运输问题精度不高的原因时,为了精确计算电子运输,有必要对基于库仑相互作用而产生的多次散射过程予以更仔细的考虑,而不是简单地采用中子或光子运输理论所采用过成功的低阶球谐近似(P_n 近似法);有必要在电子小角多次散射理论与电子在深度穿透过程中的扩散行为之间建立起一种联系,这就是原始的两群模型。文献[1]报道,从 1967 年完成的一篇内部报告中可以看出作者对该模型更详细的表述:

电子多次散射问题的困难主要是以下两方面的原因引起的:第一是电子库仑散射的极端各向异性,结果使得在其它方面得到广泛运用的球谐函数展开法在电子深度穿透问题上难以直接运用;第二是电子在完全被阻止以前经历了数目极多的散射次数。因此,在深穿透问题上小角近似不能运用。为了解决这两方面的困难,需要对电子散射行为作一些细致的分析。

设想有一束单向电子入射到介质中,它不断地遭受散射和损失能量。我们将遭受到多次散射的电子分成两组:一组是继续向前运动的电子,它们基本上保持原来的方向;另一组是从总电子束中扣出来的扩散电子,它们向四面八方运动。这些扩散电子作为次级电子源,它们的迁移行为可用电子迁移方程的 P_1 近似描述。向前运动电子不断受到散射而再行分离出次级电子源,扩散电子源也不断地从遭受散射的向前电子中分离出来。次级电子源的角分布由 $P_0(\cos\theta)$ 和 $P_1(\cos\theta)$ 来描述。($P_0(\cos\theta)$ 和 $P_1(\cos\theta)$ 分别是 0-阶和 1-阶勒让德多项式。) 它的强度可适当加以规定。

第一作者:罗正明,男,1940 年 11 月出生,1963 年毕业于北京清华大学工程物理系,实验核物理专业,研究员,博士生导师

收稿日期:初稿 2002-04-11,修回 2002-05-08

例如,可以要求次级电子源在 π 方向和 $\pi/2$ 方向上的强度正好等于向前运动电子经过散射达到上述方向的电子数。由于在向前运动电子中不断扣除大角散射的电子,因此其运动方向变化不大,可以应用小角近似。这样向前电子的分布函数,可以较准确地求出。从而,次级电子源分布也比较准确地被规定。虽然 P_1 近似也只能大致描写电子迁移行为。但是,在分布扩散电子源条件下,电子运动细节上的差别就因叠加而变得不明显。在这种情况下,我们可以预期,理论不会给结果带来多大的误差。

1967年应用这个初期的两群模型取得了令人鼓舞的结果^[1],它的精度接近矩法而显然比采用低价球谐近似法,诸如电子的年龄扩散近似法更好。同时,它可以计算斜入射电子在半无限均匀介质中的输运,这是矩法不能计算的。图1和图2给出了采用初期的两群模型算出的结果同实验以及矩法计算结果的比较^[3-5]。1983年,两群模型得到进一步发展并取得了其基本形式。其精度达到了一个精确的输运理论应该达到的水平^[6,7]。主要进展是提出了更精确、更普遍的分群条件;首次采用Lax-Wendroff格式解决了扩散电子的输运过程算法;取得了电子在自由表面上输运的边界条件。同时收集大量实验数据和Monte Carlo方法计算结果,从能量沉积,反射系数,反射能谱和穿透系数等多个方面检验了双群模型作为能区在10keV—5MeV的精确电子输运理论的正确性。

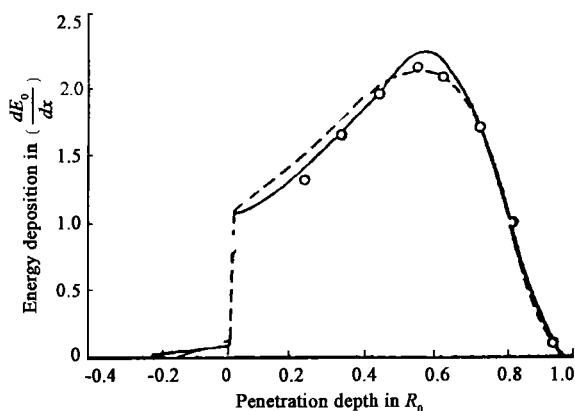


Fig.1 The ionization distribution resulted by a 0.5 MeV electron normally incident into beryllium. The solid line is the results given by the bipartition model^[1]. The dashed line is Spencer theory^[3]. The hollow circle is Frantz experimental data^[5].

1985年后,两群模型的研究取得了进一步的进展:首先,成功地应用该模型描述轻离子在固体靶中的穿透过程^[8];然后,将该模型应用于任意种类离子在固体中的输运过程研究^[9,10],以及应用于包含溅射在内的原子级联碰撞过程的研究^[11]。在电子输运情况下,已将两群模型扩展到放射治疗的高能区^[12,13]。并

且将电子输运两群模型从处理电子在1维非均匀介质中的输运扩展到了处理电子在3维非均匀介质中的输运。日前,我们正应用两群模型研究次电子发射现象。两群模型每一次扩展必然会伴随着一些新的概念、算法和技术的提出和扩展。主要有:(1)提出了窄能谱近似的概念;(2)提出了能量损失角关联算法及特征线方法;(3)完成了自由及位垒边界条件;(4)分群条件的进一步推广。每一项关键技术都解决了一些在两群模型发展过程中遇到的新问题。十分有趣的是它们不仅能与基本的分群条件相兼容,而且分群条件才是这些技术的可应用性的前提。这表明,两群模型的概念和分群条件才是这一模型的核心。另一方面,正是由于引入了这些重要的概念、算法和技术,才使两群模型达到了以往的解析带电粒子输运理论未能达到的应用范围和水平。

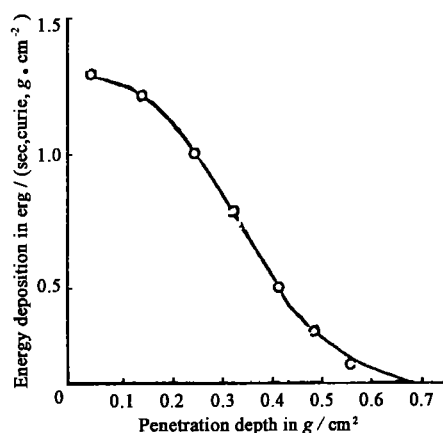


Fig.2 The energy deposition in spherical shells around a P^{23} point β -isotopes source in air. The solid line is the results given by the bipartition model. The hollow circle is Clark *et al.* experimental data^[4].

本工作分5部分:本引言为第一部分。第2部分给出了基本算法;第3部分介绍了两群模型的发展与扩展;第4部分介绍了两群模型的一些重要应用。最后部分是总结,对两群模型作了简要的评价,同时也探讨了近期发展的前景。

2 两群模型的基本理论与算法

作为一个统一的带电粒子输运理论,两群模型原则上适用于各种能量的电子、质子、离子、及原子在非晶态介质中的输运过程。尽管对于每一类带电粒子,为了反映此类带电粒子同物质的相互作用的特征,有必要对模型做出一定程度的变更和调整。然而,在连续慢化近似(CSDA)成立的情况下,两群模型对于电子、质子和离子的输运描述具有同一的形式。早期两群模型的提示就是用于解决CSDA条件下的电子输运问题。显然,模型初始阶段所创立的许多算法构

成该理论的基础。而在 CSDA 近似的条件下, 两群模型具有相同的解结构和公式。因此, 只要 CSDA 成立, 则本节的结果是适用于描述各种带电粒子的输运行为。

2.1 CSDA 近似的 Boltzmann 方程

根据统计平衡原理, 描写带电粒子输运的 Boltzmann 方程可写为

$$\begin{aligned} \vec{u} \cdot \nabla f + [\Sigma_n(E) + \Sigma_e(E)]f(\vec{r}, \vec{u}, E) = N \int_E^{E_1} dE' \int_{4\pi} d\vec{u}' f(\vec{r}, \vec{u}', E') \sigma_n(E', E' - E, \vec{u} \cdot \vec{u}') \\ + N_e \int_E^{E_2} dE' f(\vec{r}, \vec{u}, E') \sigma_e(E', E' - E, \vec{u} \cdot \vec{u}') + S(\vec{r}, \vec{u}, E) \end{aligned} \quad (1)$$

式 (1) 中, $f(\vec{r}, \vec{u}, E)$ 是带电粒子的微分注量即分布函数。 $f(\vec{r}, \vec{u}, E)d\vec{u}dE$ 表示在点 $\vec{r}$ 的一群带电粒子, 其能量在 E 到 $E + dE$ 范围内, 方向在 $\vec{u}$ 到 $\vec{u} + d\vec{u}$ 所构成的立体角内穿过垂直于 $\vec{u}$ 的单位面积的带电粒子数; N 是单位体积内的靶原子数; N_e 是单位体积内的电子数; $S(\vec{r}, \vec{u}, E)d\vec{u}dE$ 是在 $\vec{r}$ 附近单位体积内所生成的带电粒子数, 其能量在 E 到 $E + dE$ 之间, 方向在 $\vec{u}$ 到 $\vec{u} + d\vec{u}$ 范围内。

$$E_1 = \begin{cases} E_0 & E > E_0(1 - \gamma_1) \\ E/(1 - \gamma_1) & E \leq E_0(1 - \gamma_1) \end{cases} \quad (2)$$

$$E_2 = \begin{cases} E_0 & E > E_0(1 - \gamma_2) \\ E/(1 - \gamma_2) & E \leq E_0(1 - \gamma_2) \end{cases} \quad (3)$$

式 (2-3) 中 $\gamma_1 = 4M_1M_2/(M_1 + M_2)^2$, $\gamma_2 = 4M_1m/(M_1 + m)^2$; M_1, M_2 和 m 分别为带电粒子、靶原子和电子的质量; E_0 为带电粒子的初始能量; $\sigma_n(E, T, \cos \theta)$ 为弹性散射微分截面, $\sigma_e(E, T, \cos \theta)$ 是非弹性散射微分截面。

$$\Sigma_n(E) = N \int_0^{\gamma_1 E} dT \int_{4\pi} d\vec{u} \sigma_n(E, T, \cos \theta) \quad (4)$$

$$\Sigma_e(E) = N_e \int_0^{\gamma_2 E} dT \sigma_e(E, T) \quad (5)$$

Boltzmann 方程的求解必须给出初始条件和边界条件。因为入射带电粒子已经作为源项考虑了, 通常, 初始条件取为零。而表面或界面处的边界条件是很重要的。下面给出自由边界条件的一般公式。对于凸的介质, 我们有

$$f(\Gamma, \vec{u}, E) = 0 \quad \text{如果 } \vec{u} \cdot \vec{n} \leq 0 \quad (6)$$

这里 Γ 代表边界, $\vec{n}$ 是该边界面上的法线。边界条件可以是位垒型、植入型和自由边界型三类。根据不同的问题还可以提出不同的边界条件。现在我们来研究式 (1) 中的一个非常重要和特殊的情形。当 $M_1 \ll M_2$ 或 $M_1 \gg M_2$ 时, 每一次弹性和非弹性碰撞后, 入射粒子的能量只有一小部分转移到靶原子或靶原子的电子上。带电粒子的阻止过程似乎象一颗弹丸逐步地将其能量损失在介质中以至最后在介质中停止下来, 这个过程称为连续慢化近似(Continuous Slowing Down Approximation, CSDA)。在这种情况下, 单位路程的平均能量损失率, 即阻止本领可用于描述带电粒子的能损过程。弹性或非弹性散射中能量传递的角关联可以用没有能量传递的散射和没有角偏转的能量传递过程来替换, 这就是 CSDA 的本质。尽管 CSDA 的物理图象相当清晰和简洁, 但要从三维笛卡尔空间中的 Boltzmann 方程中自然导出 CSDA 的带电粒子输运方程并不是一件容易的事情。相反地, 在 Fourier 象空间中导出 CSDA 却是直接而有效的。我们用 C_f 表示碰撞项, 即

$$C_f(\vec{r}, \vec{u}, E) = N \int_{4\pi} d\vec{u}' \int dE' f(\vec{r}, \vec{u}', E') \sigma(E', E' - E, \vec{u} \cdot \vec{u}') - \Sigma(E)f(\vec{r}, \vec{u}, E) \quad (7)$$

$$\sigma(E, T, \cos \theta) = \sigma_n(E, T, \cos \theta) + \sigma_e(E, T, \cos \theta) \frac{N_e}{N} \quad (8)$$

对 (7) 式进行 Fourier 变换, 我们有

$$\begin{aligned} C_f^*(\vec{r}, \vec{u}, p) = N \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipE} dE \int_{4\pi} d\vec{u}' \int dT [f(\vec{r}, \vec{u}', E) \sigma(E, T, \vec{u} \cdot \vec{u}') e^{-ipT} \\ - f(\vec{r}, \vec{u}, E) \sigma(E, T, \vec{u} \cdot \vec{u}')] \end{aligned} \quad (9)$$

对(9)式中的指数项作幂级数展开到一阶, 我们有

$$C_f^*(\vec{r}, \vec{u}, p) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipE} dE \left[N \int_{4\pi} d\vec{u}' \sigma(E, \vec{u} \cdot \vec{u}') [f(\vec{r}, \vec{u}', E) - f(\vec{r}, \vec{u}, E)] + \frac{\partial(f\rho)}{\partial E} \right] \quad (10)$$

则

$$C_f = N \int_{4\pi} d\vec{u}' \sigma(E, \vec{u} \cdot \vec{u}') [f(\vec{r}, \vec{u}', E) - f(\vec{r}, \vec{u}, E)] + \frac{\partial(f\rho)}{\partial E} \quad (11)$$

$$\sigma(E, \vec{u} \cdot \vec{u}') = \int_0^{r_1 E} dT \sigma(E, T, \vec{u} \cdot \vec{u}') \quad (12)$$

这样, CSDA 条件下带电粒子的 Boltzmann 方程为

$$\vec{u} \cdot \nabla f - \frac{\partial f \rho}{\partial E} = N \int_{4\pi} d\vec{u}' \sigma(E, \vec{u} \cdot \vec{u}') [f(\vec{r}, \vec{u}', E) - f(\vec{r}, \vec{u}, E)] + S(\vec{r}, \vec{u}, E) \quad (13)$$

式中, $\rho = \rho_n + \rho_e$ 是总阻止本领。 ρ_n 是核阻止本领, ρ_e 是电子阻止本领。为了对带电粒子的输运行为作比较研究, 有必要研究 (13) 式的标度变换性质。

首先让我们引入一个能量的单值函数: 相对剩余路径 $t(E) = R(E)/R(E_0)$, $R_0 = R(E_0)$, 这里 $R(E)$ 是能量为 E 的带电粒子的平均径迹长度, 则标度变换式为

$$\begin{cases} t(E) = \int_0^E dE' / \rho(E') R_0 \\ \vec{y} = \vec{r} / R_0 \end{cases} \quad (14)$$

相应地, 分布函数及带电粒子源变为

$$\begin{cases} f(\vec{y}, \vec{u}, t) = f(\vec{r}, \vec{u}, E) \rho R_0 \\ S(\vec{y}, \vec{u}, t) = S(\vec{r}, \vec{u}, E) \rho R_0 \end{cases} \quad (15)$$

这样, 经过标度变换 CSDA 条件下的带电粒子 Boltzmann 方程为

$$\vec{u} \cdot \nabla_y - \frac{\partial f}{\partial t} = R_0 N \int_{4\pi} d\vec{u}' \sigma(t, \vec{u} \cdot \vec{u}') [f(\vec{y}, \vec{u}', t) - f(\vec{y}, \vec{u}, t)] + S(\vec{y}, \vec{u}, t) \quad (16)$$

对于无限宽束的单能单向带电粒子束入射到均匀介质的情况, 我们有

$$\mu \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial t} = R_0 N \int_{4\pi} d\vec{u}' \sigma(t, \vec{u} \cdot \vec{u}') [f(x, \mu', t) - f(x, \mu, t)] + \delta(x) \delta(1-t) \frac{\delta(1-\mu)}{2\pi} \quad (17)$$

(17) 式中, x 是深度, 以平均射程为单位, $\mu = \cos \theta$ 是 $\vec{u}$ 的方向余弦, 其极轴与 x 轴同方向。这就是引入的标度电子输运方程

扩散粒子的分布函数 $f_d(x, \mu, t)$ 构成的, 即

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

2.2 分群条件

我们首先考查式 (17)。根据两群模型, 分布函数 $f(x, \mu, t)$ 是由向前粒子的分布函数 $f_s(x, \mu, t)$ 和

相应地, CSDA Boltzmann 方程也可分解为向前粒子输运方程 (19)

$$-\frac{\partial f_s}{\partial t} + \mu \frac{\partial f_s}{\partial x} = R_0 N \int_{4\pi} d\bar{u}' \sigma(t, \bar{u} \cdot \bar{u}') [f_s(x, \mu', t) - f_s(x, \mu, t)] - S_d(x, \mu, t) + \frac{1}{2\pi} \delta(x) \delta(1-t) \delta(1-\mu) \quad (19)$$

和扩散粒子输运方程 (20)

$$-\frac{\partial f_d}{\partial t} + \mu \frac{\partial f_d}{\partial x} = R_0 N \int_{4\pi} d\bar{u}' \sigma(t, \bar{u} \cdot \bar{u}') [f_d(x, \mu', t) - f_d(x, \mu, t)] + S_d(x, \mu, t) \quad (20)$$

向前粒子的碰撞项 C_{f_s} 定义为

$$C_{f_s}(x, \mu, t) = R_0 N \int_{4\pi} d\bar{u}' \sigma(t, \bar{u} \cdot \bar{u}') [f_s(x, \mu', t) - f_s(x, \mu, t)] \quad (21)$$

则分群条件可表示为

$$C_{f_i}(x, \mu_i, t) = S_d(x, \mu_i, t) \quad i = 0, 1, 2, \dots, m \quad (22)$$

这里, μ_i 是指定的第 i 个大角方向余弦, 共 $m+1$ 个大角方向余弦。分群条件 (22) 的意义是: 在选定的大角方向上扩散粒子源的强度恰好等于向前粒子经过单位路程因弹性和非弹性碰撞散射到同样的

$m+1$ 大角方向上的粒子数, 即把散射到大角方向上的向前粒子纳入了扩散粒子群。这正是在序言中论述的分群思想。将 f_s, f_d 和 S_d 按勒让德多项式展开, 我们有

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

$$f_d(x, \mu, t) = \sum_{l=0}^n (2l+1) P_l(\mu) N_l(x, t) / 4\pi \quad (24)$$

$$S_d(x, \mu, t) = \sum_{l=0}^m (2l+1) P_l(\mu) S_l(x, t) / 4\pi \quad (25)$$

这样经过简单计算, 分群条件 (22) 可写成

$$S_l(x, t) = -\varphi_l(t) A_l(x, t) - \sum_{l'=m+1}^{\infty} D_{ll'} \varphi_{l'} A_{l'}(x, t), \quad l = 0, 1, \dots, m \quad (26)$$

根据定义, (26) 式中, 散射参数 $\varphi_l(t)$ 为

$$\varphi_l(t) = 2\pi \int_{-1}^1 d\mu \sigma(t, \mu) [1 - P_l(\mu)] \quad (27)$$

$D_{ll'}$ 是分群系数^[6, 7]。将 (26) 式的结果代入到向前粒子 Boltzmann 方程中。因为 $C_{f_i}(x, \mu, t)$ 描述的由碰撞产生的大角粒子已经通过减去 $S_d(x, \mu, t)$ 而被转移到扩散粒子方程中去, 所以在向前粒子输运方程

中大角粒子已被排除, 小角近似成立。所谓小角近似就是用平均方向余弦 μ_a 代换方程 (19) 中剃度项的实际方向余弦 μ

$$\mu_a = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mu f_s(x, \mu, t) dx d\mu / \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 f_s(x, \mu, t) dx d\mu \quad (28)$$

于是我们有

$$-\frac{\partial A_l}{\partial t} + \mu_a \frac{\partial A_l}{\partial x} = - \sum_{l'=m+1}^{\infty} D_{ll'} \varphi_{l'}(t) A_{l'}(x, t) + \delta(x) \delta(1-t), \quad l \leq m \quad (29)$$

和

$$-\frac{\partial A_l}{\partial t} + \mu_a \frac{\partial A_l}{\partial x} = -\varphi_l(t) A_l(x, t) + \delta(x) \delta(1-t) \quad l > m \quad (30)$$

对(30)式进行 *Fourier* 变换, 最后获得如下解

$$A_l(x, t) = - \sum_{l'=m+1}^{\infty} D_{ll'} A_{l'}(x, t) \quad (31)$$

已经证明, 对于 $A_l (l \leq m)$, 我们有^[6, 7]

$$A_l(x, t) = \delta[x - \int_t^1 \mu_a(t') dt'] \alpha_l(x) \quad (32)$$

$$\alpha_l(x) = \begin{cases} - \sum_{l'=m+1}^{\infty} D_{ll'} \exp[-\mu_{l'}(x)] & l \leq m \\ \exp[-\mu_l(x)] & l > m \end{cases} \quad (33)$$

这里 μ_l 为

$$\mu_l(x) = \int_0^x \varphi_l \frac{dx'}{\mu_a} = \int_l^1 \varphi_l(t') dt' \quad (34)$$

2.3 Lax-Wendroff 格式

$A_l(x, t)$ 求出后, 由式(23)可以看出实际上就已经求出向前粒子的分布函数。进一步由式(26)可

求出 $S_l(x, t)$ 。对于扩散粒子, 由于它们的角分布是由低阶球谐矩组成, 所以可以应用 P_n 近似。在 P_n 近似条件下, 由式(20)我们有

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial N_l}{\partial t} + \frac{1}{2l+1} \left[(l+1) \frac{\partial N_{l+1}}{\partial x} + l \frac{\partial N_{l-1}}{\partial x} \right] + \varphi_l(t) N_l(x, t) \\ & = S_l(x, t) \quad (l = 0, 1, \dots, n) \end{aligned} \quad (35)$$

为了求解双曲型偏微分方程组(35), 可选择不同的离散格式。我们在计算中采用 Lax-Wendroff 的二阶

精度的显式格式 (explicit scheme), 引入下列符号

$$\mathbf{M}(x, E) = \begin{bmatrix} N_0 \\ \sqrt{3} N_1 \\ \vdots \\ \sqrt{2n+1} N_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}(x, E) = \begin{bmatrix} S_0 \\ \sqrt{3} S_1 \\ \vdots \\ \sqrt{2m+1} S_m \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (36)$$

$$A = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \dots & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \sqrt{\frac{1}{15}} & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{15}} & 0 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \frac{1}{\sqrt{(2n-1)(2n+1)}} \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{\sqrt{(2n-1)(2n+1)}} & 0 \end{bmatrix} \quad (37)$$

$$\Phi = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & \varphi_1 & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & \varphi_n \end{bmatrix} \quad (38)$$

方程式 (35) 可改写为矩阵形式

$$-\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial x} = -\Phi \mathbf{M} + \mathbf{S} \quad (39)$$

这样, 我们有以下二阶精度的 Lax-Wendroff 离散公式

$$M_{\mu}^{i+1,j} = \left\{ M_{\mu}^{i,j} + \frac{p}{2} A_{\mu\nu} (M_{\nu}^{i,j-1} - M_{\nu}^{i,j+1}) + \frac{p^2}{2} A_{\mu\nu}^2 (M_{\nu}^{i,j+1} - 2M_{\nu}^{i,j} + M_{\nu}^{i,j-1}) - \frac{\Delta t}{2} \phi_{\mu}^i \delta_{\mu\nu} M_{\nu}^{i,j} - \frac{\Delta t}{2} (S_{\mu}^{i+1,j} + S_{\mu}^{i,j}) \right\} / (1 + \Delta t B_{\mu}^{i+1} / 2) \quad (40)$$

$$A_{\mu\nu}^2 = \sum_{\lambda=0}^n A_{\mu\lambda} A_{\lambda\nu} \quad p = \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

Lax-Wendroff 式的稳定条件是 $p \leq 1$ 。Lax-Wendroff 格式是显式格式和条件稳定的。它的重要优点是计算效率高, 且简单。当然人们也可以选择其它的离散格式, 如 Crank 或 Nicolson 格式, 它们都是隐式格式, 是无条件稳定的。但计算效率较差。

2.4 边界条件与初始条件

为了用数值方法求解双曲型偏微分方程组, 必须给出初始条件和边界条件。边界条件对于解决有表面和介面的问题十分重要, 因为它们决定了能否精确地

解决表面和介面的粒子输运问题。已经证明, P_n 近似等效于粒子在 $n+1$ 个特征方向上的运动, 特征方向的方向余弦满足以下条件

$$P_{n+1}(\mu_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, n+1 \quad (41)$$

在表面上, 由于没有扩散粒子从外部入射, 所以扩散粒子在 $(n+1)/2$ 向内运动方向上的分布函数应等于零, 即 Mark 条件

$$f(0, \mu_i, t) = 0, \quad \mu_i > 0 \quad (42)$$

在另外 $(n+1)/2$ 个外向运动方向上, 沿 μ_i 方向的 Boltzmann 方程离散形式可写为

$$-\frac{\partial f_d(0, \mu_i, t)}{\partial t} + \mu_i \frac{\partial f_d(0, \mu_i, t)}{\partial x} = -\sum_{l=0}^n \frac{(2l+1)}{4\pi} \varphi_l(t) N_l(0, t) P_l(\mu_i) \quad (\mu_i < 0) \quad (43)$$

这样, 由方程 (42) 和 (43) 就确定了表面上带电粒子的球谐矩。无限远处的边界条件通常为条件, 因为扩散粒子不能到达那里。这样我们就能得出扩散粒子的球谐矩, 并进而确定了它们的输运量在空间的分布。加上向前粒子的分布函数和相应的输运量, 就获得了带电粒子总的分布函数和输运量。

2.5 一些典型结果

上述在 CSDA 近似的输运方程基础上提出的两群模型可以认为是一个精确的带电粒子输运理论, 其精度可与 Monte Carlo 法相当。当然, 在这种情况下 Monte Carlo 方法亦应采用 CSDA 近似, 比如早期 ETRAN 程序。该模型的能量适用范围为: 电子从 10 keV 到 1 MeV。离子在 $M_1 \ll M_2$ 或 $M_1 \gg M_2$ 的情况下, 能量从 10 eV—10 MeV。从图 3—图 8 可见, 两群模型不仅适用于电子输运, 同时也适用于离子输运; 它不仅能给出如能量沉积和反射系数一类的常见输运量, 也能给出反射电子和反射离子的角分布和能

谱, 甚至能给出某一方向上的反射电子能谱和反射离子能谱。事实上, 两群模型所得到的是带电粒子分布函数。因此, 从两群模型, 人们可以获得带电粒子的全部输运信息。

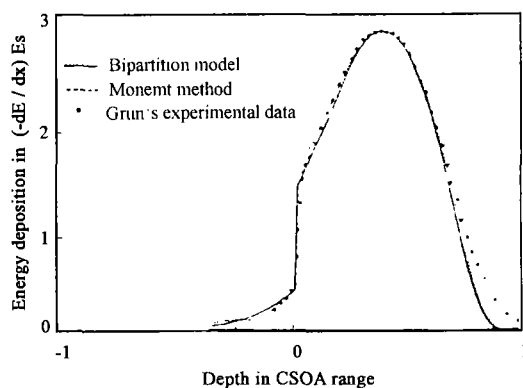


Fig.3 A comparison between energy deposition obtained by the bipartition model and Spencer's moment method, and Grun's experimental data for 32-KeV electrons in air^[14].

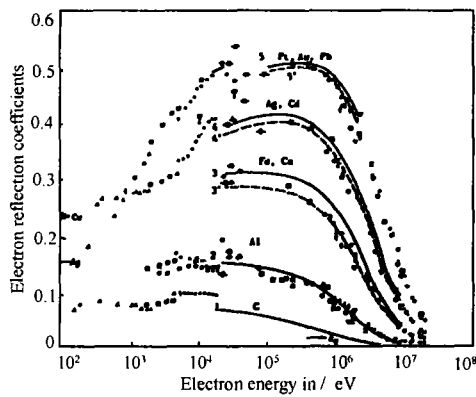


Fig.4 The dependence of reflection coefficients on electron energy and the atomic numbers of media. The solid lines 1, 2, 3, 4 and 5 are the calculation results for C, Al, Cu, tin, and Pb respectively. The dashed lines 3', 4', and 5' are the interpolation results for Fe, Ag, and Au^[7].

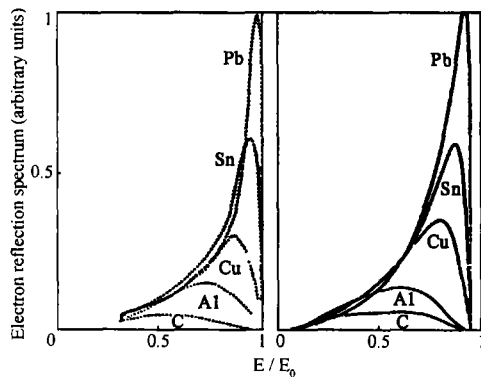


Fig.5 Comparison between the calculational spectra and the measured spectra by Bothe^[15]. The solid lines are the results given by bipartition model. The dashed lines are the data taken from Bothe's experiments.

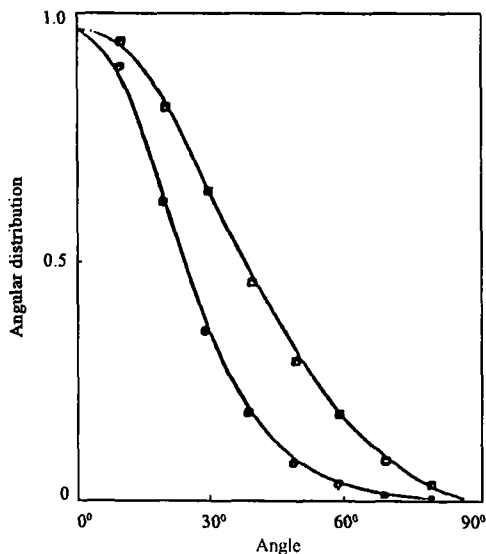


Fig.6 Angular distribution of 1.75 MeV electrons passing through two slabs of Al. The thickness are 0.132 and 0.26 g/cm² respectively. O, □ are Frank's data^[16].

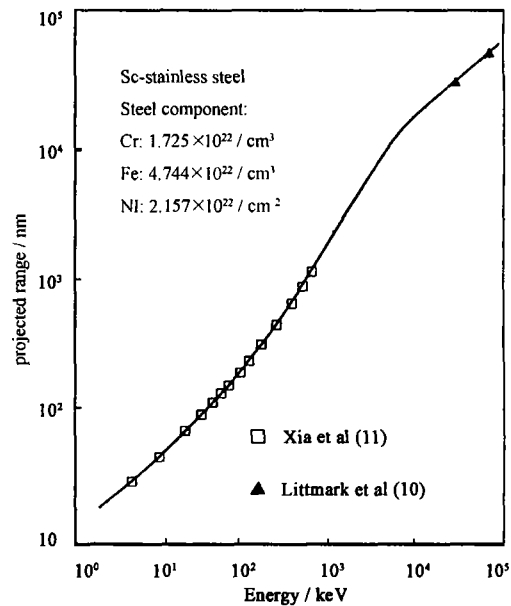


Fig.7 The projected range of Sc ions in stainless steel as a function of ion energy. ▲, □ are the data taken from Littmark^[17] and Xia^[18].

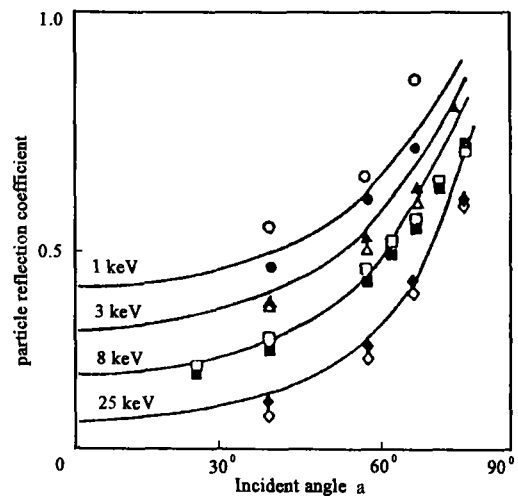


Fig.8 The particle reflection coefficients of ³He ions which are incident upon Ni with various incident angles. Solid lines are the results taken from the bipartition model. The other data are taken from Chen *et al*^[19].

3 两群模型的推广与改进

到目前为止, 两群模型已成功地扩展到能量范围很大的电子、离子、原子以及由它们引起的级联碰撞等带电粒子的输运过程。伴随两群模型的扩展, 有 4 种新的技术和方法起了重要的作用。

3.1 窄能谱近似

在CSDA近似范围内, 考查向前粒子的分布函数, 人们发现, 向前粒子的能谱是一个 δ 函数, 这表示向

前粒子的能量在某一深度下是一个单一的能量即与该深度对应的平均能量、能谱实际上未被展开。显然,这是 CSDA 条件下两群模型的一个缺陷。为了获得向前粒子精确的能谱,我们引入一个新概念,这就是窄能谱近似(Narrow Energy Spectrum Approximation, NESA)。窄能谱概念的引入是基于下面的物理判断:在入射粒子所穿透的大部分空间内,其能谱平均宽度与粒子在该深度的平均能量相比要小得多。在研究快粒子在等离子体中的慢化谱时首先应用了这一概念^[20]。特别是将这一概念应用于向前粒子时,这个近似的前提条件能得到更充分的保证。因为向前粒子由小角粒子组成,其路径十分接近直线。这样,在相同的深度上,向前粒子在给定的深度上所进过的路径长度几乎是相同的,这就大大减少了由于不同路径长度所引起的能谱展宽。在较深的深度上能谱宽度可能大于平均能量,但这时由于扩散粒子不断地从遭受大角

散射的向前粒子中分离出来,向前粒子数日已经减少到可以忽略的地步。因此,它对两群模型的计算精度不会产生显著的影响。

由于 NESA 概念的应用,就可以将入射粒子同靶原子之间的相互作用截面在平均能量附近展开。换言之,我们可以对向前粒子的 Boltzmann 方程采用微扰展开。对我们来说,最重要的结果是获得分布函数在平均能量上的 0 阶扰动解,也就是,可以用向前粒子平均能量对应的反应截面取代向前粒子的真实截面。这样就成功地简化了向前粒子的 Boltzmann 方程的解,从而得出一个普适的更简洁、准确、高效的描写带电粒子输运的两群模型。

由于 CSDA 不适于描述带电粒子的能谱,为了超越 CSDA,我们有必要考虑能损歧离(Energy loss straggling)。为此将式(9)的指数项按泰勒展开到高阶。对向前粒子的输运方程仍采用小角近似,我们有

$$\mu_a \frac{\partial A_l}{\partial x} = - \sum_{l'=m+1}^{\infty} D_{ll'} H_{l'}(x, E) + \delta(x) \delta(E - E_0) \quad l \leq m \quad (44)$$

$$\mu_a \frac{\partial A_l}{\partial x} = H_l(x, E) + \delta(x) \delta(E - E_0) \quad l > m \quad (45)$$

$$H_l(x, E) = N \int dE' \sigma(E', E' - E) P_l(\eta) A_l(x, E') - A_l(x, E) N \int dT \sigma(E, T) \quad (46)$$

$$\eta = \frac{M_1 + M_2}{2M_1} \sqrt{\frac{E}{E'}} + \frac{M_1 - M_2}{2M_1} \sqrt{\frac{E'}{E}} \quad (47)$$

对(45)式作傅里叶变换,得

$$B_l(X, p) = \int_{-\infty}^{\infty} A_l(X, E) e^{ipE} dE \quad (48)$$

$$A_l(X, E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} B_l(X, p) e^{-ipE} dp \quad (49)$$

用 NESA 概念,我们可以把这种类型的积分变换表达为:

$$K_l^*(x, p) = \int_{-\infty}^{\infty} A_l(x, E) K(E) e^{ipE} dE \approx K(E_a) B_l(x, p) \quad (50)$$

$$E_a = \int_0^{E_0} A_0(x, E) E dE / \int_0^{E_0} A_0(x, E) dE \approx E_0 - \int_0^x \frac{\rho dx}{\mu_a} \quad (51)$$

那么,我们有

$$-ip\rho B_l + \mu_a \frac{\partial B_l}{\partial x} = B_l \int_0^{E_a} \sigma(E_a, T) [P_l(\eta) e^{-ipT} - 1] dT + \delta(x) \exp(ipE_0) \quad (52)$$

(52) 式事实上是 Landau-Vavilov 方程的一种推广形式^[21,22]。如果假定 $P_l(\eta)=1$, $\mu_a=1$ 则式 (52) 就变为 Landau-Vavilov 方程。与 Landau 理论不同的是,

在我们的条件下, $P_l(\eta)$ 的存在表明从理论上已经考虑到了散射效应。由于 $\sigma(E_a, T)$ 中小能量传递 T 的几率很大, 因此可以采用高斯近似。

$$P_l(\eta)e^{-ipT} - 1 \approx P_l(\eta) - 1 - ipT - \frac{1}{2}p^2T^2 \quad (53)$$

采用上面近似的本质是忽略能量转移的角关联, 这对向前粒子的情形是允许的。因此, 我们有

$$A_l(x, E) = \sqrt{\frac{1}{4\pi\omega}} \exp\left[-\mu_l(x) - \frac{(E - E_a)^2}{4\omega}\right] \quad l > m \quad (54)$$

和

$$\omega(E) = N \int_0^E dT \sigma(E, T) T^2 \quad (55)$$

在 $l < m$ 的情况下, 我们相应得到

$$A_l(x, E) = -\sqrt{\frac{1}{4\pi\omega}} \exp\left[-\frac{(E - E_a)^2}{4\omega}\right] \left(\sum_{l'=m+1}^{\infty} D_{ll'} \exp[-\mu_{l'}(x)]\right) \quad l \leq m \quad (56)$$

如有必要, 可以对 (52) 式的指数项按泰勒级数展开到三阶以上, 于是就能得到类似于 Vavilov 给出的结果。

3.2 能量转移的角关联及特征线方法

当将两群模型扩展到研究重离子输运过程时, $\nu = M_1/M_2$ 之值会大于 0.1, 且随着 ν 值的增加 CSDA 近似的有效性会降低。在 $M_1/M_2 \gg 0.1$ 的情况下, 必须考虑弹性碰撞下能量转移同散射角的关系。

为了描述能量转移的角关联, 我们研究的一个重要步骤是采用特征线方法处理扩散离子的输运方程。已经证明: 在 CSDA 近似下特征线方法等效于 Mark 边界条件下的球谐展开法^[23]。但特征线方法还能处理发生弹性散射情况下的能量转移的角关联, 而球谐近似不能。这是因为, 当 $\nu \approx 1$ 时, 偏转到大角方向的粒子会失去其大部分动能。因此, 对扩散离子源的公式应作如下修正。

$$S_d(x, \mu, E) \approx \delta(E - E_\theta) \sum_{l=0}^m \frac{(2l+1)}{4\pi} S_l(x) P_l(\mu) \quad (57)$$

$$E_\theta = E_a \left(\frac{M_1}{M_1 + M_2} \pm \frac{1}{M_1 + M_2} \sqrt{M_2^2 - M_1^2(1 - \mu)^2} \right)^2 \quad (58)$$

对 (20) 式采用 P_n 近似, 我们有

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \rho_e N_l}{\partial E} + \frac{1}{(2l+1)} \left[(l+1) \frac{\partial N_{l+1}}{\partial x} + l \frac{\partial N_{l-1}}{\partial x} \right] &= S_l(x, E) \\ + N \int_E^{E/(1-\gamma)} dE' \sigma_n(E', E' - E) P_l(\eta) N_l(x, E') - N_l(x, E) \int_0^E dT N \sigma_n(E, T) & \quad l \leq n \end{aligned} \quad (59)$$

(59) 式同 (20) 式的主要差别在于, (59) 式已经包含了碰撞过程中能量转移的角关联。在 $M_1/M_2 \leq 1$ 情况下, 低阶球谐近似既不利于描写碰

撞项具有的 δ 函数的奇异性, 也不适用于处理扩散离子源 $S_d(x, \mu, E)$ 。采用特征线方法, 这一问题就自然解决了。为此, 将双曲型方程组写为矩阵式。引入变

换矩阵 U , 据定义

$$U = \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3}P_1(\mu_0) & \cdot & \sqrt{2n+1}P_n(\mu_0) \\ 1 & \sqrt{3}P_1(\mu_1) & \cdot & \sqrt{2n+1}P_n(\mu_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \sqrt{3}P_1(\mu_n) & \cdot & \sqrt{2n+1}P_n(\mu_n) \end{bmatrix} \quad (60)$$

可以证明, U 具有一个基本性质

$$UAU^{-1} = \Lambda, \quad \Lambda_{ij} = \mu_i \delta_{ij}, \quad P_{n+1}(\mu_i) = 0 \quad (61)$$

这里, μ_i 是 $P_{n+1}(\mu)$ 的第 i 个特征根。将 (52) 式乘以 U , 我们有

$$-\frac{\partial \rho_e(E)\mathbf{F}}{\partial E} + \Lambda \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = N \int_x^{E/(1-\gamma)} dE' \sigma(E', E' - E) Q\mathbf{F} - \mathbf{F}N \int_0^E d\tau \sigma(E, \tau) + \mathbf{S}_d \quad (62)$$

式中,

$$\mathbf{F} = U\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \sum_{l=0}^n (2l+1)P_l(\mu_0)N_l(x, E) \\ \sum_{l=0}^n (2l+1)P_l(\mu_1)N_l(x, E) \\ \vdots \\ \sum_{l=0}^n (2l+1)P_l(\mu_n)N_l(x, E) \end{bmatrix} = 4\pi \begin{bmatrix} f_d(x, \mu_0, E) \\ f_d(x, \mu_1, E) \\ \vdots \\ f_d(x, \mu_n, E) \end{bmatrix} \quad (63)$$

$$\mathbf{S}_d = U\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \sum_{l=0}^m (2l+1)P_l(\mu_0)S_l(x, E) \\ \sum_{l=0}^m (2l+1)P_l(\mu_1)S_l(x, E) \\ \vdots \\ \sum_{l=0}^m (2l+1)P_l(\mu_n)S_l(x, E) \end{bmatrix} = 4\pi \begin{bmatrix} S_d(x, \mu_0, E) \\ S_d(x, \mu_1, E) \\ \vdots \\ S_d(x, \mu_n, E) \end{bmatrix} \quad (64)$$

$$Q = UPU^{-1} \quad (65)$$

$N\sigma Q$ 实际上是弹性散射的转移几率矩阵; (62) 式实际上是扩散离子沿特征线方向 $\mu = \mu_i$ 的输运方程。应用特征线法就可以得到方程 (62) 的解。

3.3 原子碰撞级联与位垒边界条件

Sigmund^[24,25]曾提出了一个很好的溅射模型, 成为现代溅射理论的基础, 他的模型已成功地用于 Monte Carlo 方法模拟溅射过程^[26]。但是建立在向后离子输运方程(Backward Boltzmann Equation)基础上的 Sigmund 溅射理论有一些固有的缺点, 妨碍它在精确描述原子碰撞级联, 特别是定量溅射理论上进一步发挥作用。明显的原因是向后离子输运方程只适用于无

限均匀的介质, 而溅射意味着表面和边界的存在。

从输运理论的观点来分析溅射现象, 必须考虑两个问题: 一是如何精确计算表面附近的初级入射粒子的分布函数, 它决定了级联原子的源强度; 另一个问题是如何确定位垒表面的边界条件。两群模型能很好地解决这两个问题^[27,28]。在 1991 年由国际原子能机构组织的第一届等离子体与壁相互作用引起的腐蚀 CRP 专家会议上, 作者报告了他的基于两群模型的溅射理论概要^[29,30]。事实上级联原子的输运方程同初级带电粒子的输运方程类似。只是在这情况下源项包含了以下两部分: (1) 由入射初级带电粒子与靶原子碰撞直接产生的位移原子成了第一代级联原子; (2) 由上一代级联原子与固体原子的碰撞而产生的新一代的

级联原子。假定原子的平均位移能量为 E_d ，这样级联原子的 Boltzmann 方程就变为

$$-\frac{\partial \rho_e^a f^a(x, \mu, E)}{\partial E} + \mu \frac{\partial f^a(x, \mu, E)}{\partial x} = N \int_E^{E_0} dE' \int_{4\pi} d\bar{u}' f^a(x, \mu', E') \sigma_n^{aa}(E', E' - E) \times \quad (66)$$

$$\delta(\bar{u} \cdot \bar{u}' - \sqrt{E/E'}) / 2\pi - N f^a(x, \mu, E) \int_0^E d\tau \sigma_n^{aa}(E, \tau) + S^{ia}(x, \mu, E) + S^{aa}(x, \mu, E)$$

$$S^{ia}(x, \mu, E) = N \int_{(E+E_d)/\gamma_1}^{E_0} dE' \int_{4\pi} d\bar{u}' f(x, \mu, E') \sigma_n^{ia}(E', E + E_d, \bar{u} \cdot \bar{u}') \quad (67)$$

$$S^{aa}(x, \mu, E) = N \int_{E+E_d}^{E_0-E_d} dE' \int_{4\pi} d\bar{u}' f^a(x, \mu, E') \sigma_n^{aa}(E', E + E_d, \bar{u} \cdot \bar{u}') \quad (68)$$

这里, $S^{ia}(x, \mu, E)$ 为初级入射粒子所产生的次级级联原子源; $S^{aa}(x, \mu, E)$ 是较高能量的级联原子与靶原子弹性碰撞所产生的新一代级联原子源。 σ_n^{ia} 的上角标 ia 和 σ_n^{aa} 的上角标 aa 分别代表初始离子与

靶原子之间的弹性碰撞和级联原子与靶原子之间的弹性碰撞截面; $\rho_e^a(E)$ 是级联原子的电子阻止本领。由于级联原子的角分布接近各向同性, 因此 P_n 近似在这里也是适用的, 即

$$f^a(x, \mu, E) \approx \sum_{l=0}^n \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mu) N_l^a(x, E) \quad (69)$$

$$S^{ia}(x, \mu, E) \approx \sum_{l=0}^n \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mu) S_l^{ia}(x, E) \quad (70)$$

$$S^{aa}(x, \mu, E) \approx \sum_{l=0}^n \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mu) S_l^{aa}(x, E) \quad (71)$$

式中, $N_l^a(x, E)$ 是 $f^a(x, \mu, E)$ 的 l 阶球谐矩。 $N_l^a(x, E)$ 由以下方程组决定

$$-\frac{\partial \rho_e^a N_l^a(x, E)}{\partial E} + \frac{1}{2l+1} \left[(l+1) \frac{\partial N_{l+1}^a(x, E)}{\partial x} + l \frac{\partial N_{l-1}^a(x, E)}{\partial x} \right] \quad (72)$$

$$= -\varphi_l^a(E) N_l^a(x, E) + S_l^{ia}(x, E) + S_l^{aa}(x, E) \quad l \leq n$$

$$S_l^{ia}(x, E) = N \sigma^{ia}(E_0, E + E_d) P_l \left(\frac{M_1 + M_2}{2M_1} \sqrt{\frac{M_1(E + E_d)}{M_2 E_0}} \right) + N \int_{(E+E_d)/\gamma}^{E_0} dE' \times \quad (73)$$

$$\sigma^{ia}(E', E + E_d) P_l \left(\frac{M_1 + M_2}{2M_1} \sqrt{\frac{M_1(E + E_d)}{M_2 E'}} \right) N_l^i(x, E')$$

$$S_l^{aa}(x, E) = N \int_{E+E_d}^{E_0-E_d} dE' N_l^a(x, E) \sigma_n^{aa}(E', E + E_d) P_l \left(\sqrt{\frac{E + E_d}{E'}} \right) \quad (74)$$

式中, S_l^{ia} 和 S_l^{aa} 分别代表式 (73) 和 (74) 中源项的第 l 阶球谐矩; φ_l^a 是级联原子的散射参数。

由于级联原子能量较低, 因此应考虑表面位垒效应。这样, 式 (65) 中的边界条件就会同自由边界条

件有相当的区别。在自由表面情况下可采用 Mark 边界条件; 对位垒表面情况, 我们已经采用平面位垒模型来处理表面位垒效应。在我们的模型中, 通过引入临界角 θ_c 来表示表面位垒效应。 θ_c 取决于

$\cos \theta_c = \mu_c = -\sqrt{U_0/E}$, 式中 U_0 是表面结合能。在 $\mu_c < \mu < 0$ 的角度范围内, 级联原子将受到表面位垒作用从内部运动到表面上又被表面位垒反射到固体

中。只有当级联原子的运动处于 $-1 < \mu < \mu_c$ 角度范围时, 才能克服表面位垒进入真空中。这样 Mark 边界条件就要改写为如下形式

$$\begin{cases} f^a(0, \mu_i, E) = f^a(0, -\mu_i, E) & 0 < \mu_i < -\mu_c \\ f^a(0, \mu_i, E) = 0 & -\mu_c < \mu_i < 1 \end{cases} \quad (75)$$

(75) 式中, $\mu_i (i = 0, 1, \dots, n)$ 是勒让德多项式 $P_{n+1}(\mu)$ 的根。采用 (75) 式的边界条件解出了 (72) 式后, 就可由下式得到溅射产额

$$Y = \int_0^{\gamma E_0} dE n_1^a(0, E) \quad (76)$$

3.4 高能电子输运—分群条件的进一步扩展

采用两群模型计算高能电子输运, 有些因素不同于采用该模型计算中能电子 (10keV—1MeV) 的输运。例如: 一个重要的因素是电子的韧致辐射会引起反冲电子。在中能区 CSDA 近似是适用的, 因为韧致辐射引起的能量损失不是一个重要因素, 将辐射能量损失过程看成是一个连续慢化过程不会引起大的误差, 即使不那么合理。而在高能区却不能把韧致辐射过程当作连续慢化过程来处理。因为, 韧致辐射发生时, 韧致辐射的反冲电子的能量可以从 0 变化到电子初始能量, 而且发射高能光子几率也不小, 这时就不能采用 CSDA 近似。为考虑到这一因素, 当向前电子发生韧致辐射时, 我们可以把发射光子产生的反冲电子以及发生弹性碰撞而产生的人角散射电子均当成是扩散电子源。自然两种扩散电子的性质是有区别的; 对后者, 它们的角分布相对是各向同性的, 而对前者, 它们的角分布与向前粒子相同, 只是它们的能谱分布范围很宽。显然, 由于把韧致辐射的反冲电子当作扩散电子来处理, 向前电子的窄能谱 (NESA) 特性就得到保证, 进而就能够获得向前粒子精确的分布函数。而由于能获得向前粒子精确的分布函数, 也就为获得精确的扩散粒子分布函数, 进而精确解决高能电子输运创造了条件。

4 应用

我们应用两群模型已经处理的一些重要的应用问题有: (1) 辐射治疗; (2) 聚变技术中的粒子—表面相互作用; (3) 电子碰撞引起的内壳层电离截面的测量; (4) PIXE 分析及表面分析; (5) 辐射加工过程中的剂量计算。

4.1 辐射治疗中的剂量计算

应用两群模型精确计算人体中电子剂量的分布

实际上分为两个步骤: 第一步, 是将模型从中能区 (即 10keV—1MeV) 扩展到辐射治疗能区范围内 (1—50MeV)。如上所述, 在这一能区范围内, 必须充分考虑到以下因素: 由韧致辐射引起的反冲电子的输运过程; 能量损失的歧离以及次级电子的输运。目前这一工作在理论上的扩展和数值算法已经大体上完成了。计算结果表明这种扩展是成功的。第二步, 是应用两群模型精确地计算在三维非均匀介质中电子的输运过程。电子输运的两群模型从一维到三维的推广过程是直接的。目前已完成了三维非均匀介质中电子剂量的算法。两群模型应用于辐射治疗的引人注目的优点是计算速度快。在一台 586 电脑上计算一维情况下的电子剂量只需短短的几秒钟, 这比通用的 Monte Carlo 法快得多。图 9 给出了应用两群模型计算得出的不同能量的电子在铜中的能量沉积。现在, 应用两群模型计算放射治疗能区的电子输运已取得很好的结果。由双群模型与 Fermi-Eyges 理论相结合而形成的混合笔束模型已经成功地应用在放射治疗的临床应用上, 它可以计算电子束在三维非均匀介质中的剂量分布, 精度和灵活性都好。特别是计算速度可以很好满足临床需要。图 10 给出了由混合笔束模型计算的 15cm×15cm 射野的 20MeV 电子束在含有长方体空腔的水中的剂量分布与测量的剂量分布的比较。计算结果表明混合笔束模型可以应用于精度较高的三维非

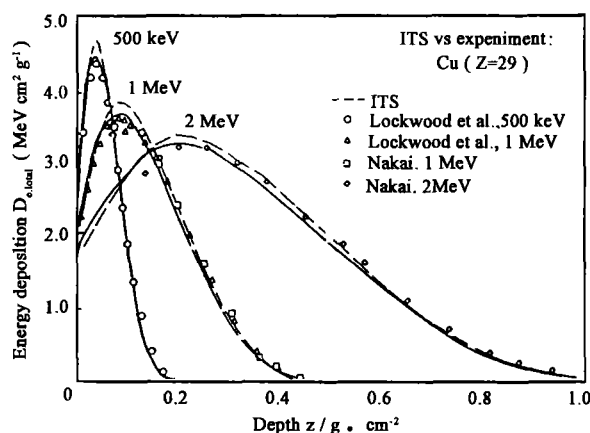


Fig.9 Energy deposition of 0.5, 1 and 2 MeV electrons in Cu. solid lines are the results given by bipartition model. Dashed line are the data taken from ITS/TIGER; $\circ, \square, \Delta$ are the experimental data (Lockwood et al.^[31], Nakai et al.^[32]).

均匀介质中电子束剂量的计算^[33]。

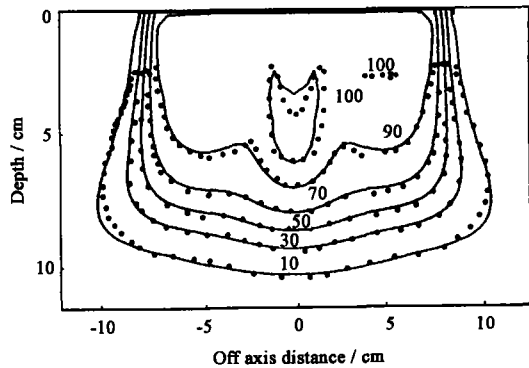


Fig.10 Comparison of transverse plane dose distributions beneath a 1-cm-thick air cavity located at depth of 1 cm from the surface of water phantom for 20-MeV beam, 15cm×15cm field at 100cm SSD. The dots are from Shiu *et al*^[34] and the lines are the results calculated by the hybrid pencil beam model^[33].

4.2 与核聚变有关的粒子—表面相互作用

粒子与表面相互作用 (PSI) 是聚变技术中最重要的问题之一。PSI 所涉及的课题很多, 其中, 粒子的反射和溅射是最基本、最重要的。例如, 由于氢、氦以及它们的同位素轰击产生的溅射而引起的材料腐蚀是聚变技术中的十分突出的问题, 因为它与第一壁的寿命及杂质的控制紧密相关。此外, 离子反射对聚变等离子体的能量和粒子平衡也会产生重要的影响。我们研究组曾同国际原子能机构 (IAEA) 开展了一项合作课题, 将两群模型应用于 PSI 的研究, 该课题从 1990 年到 1995 年。这项合作研究取得了两项重要进展: (1) 改进了两群模型, 使其更可靠, 特别是在 M_1 (离子质量) $\ll M_2$ (靶原子质量) 的情况下^[38]。(2) 提出了一个基于两群模型的溅射理论^[39]。

在离子反射研究方面, 我们编写出了 PANDA-U 程序并用以系统地计算了入射角度为 0° 、 15° 、 30° 、 45° 、 60° 和 75° 时, 能量为 0.01—100keV 的 H, D, ^3He , ^4He 离子在 Be、B、C、Al、Si、Ti、Ni、Fe、Cu、Mo、W 和 Au 上粒子反射系数, 能量反射系数和反射粒子能谱。采用两群模型计算所给出的结果的精度和蒙特卡洛模拟的结果相当。图 11 给出了部分计算结果。

在溅射产额计算方面, 我们给出了用 H、D、T、He 离子轰击碳和镍靶的部分溅射产额数据。在最近一次 CRP 会议上, 我们报告了用 H, D, T 离子轰击铜靶的溅射产额与入射角的关联。图 12 给出了我们的计算结果同实验数据和蒙特卡洛模拟计算数据的比较。他们在理论上的误差范围内是符合的。表明我们提出的溅射理论具有定量的精度。

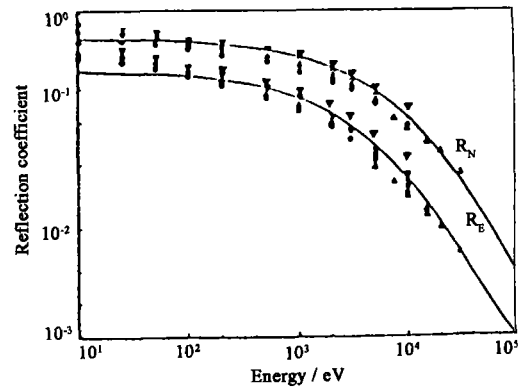


Fig.11 The particle and energy reflection coefficients of H ions normally incident into Cu. Solid lines are the results given by bipartition model. $\bullet$, $\blacktriangledown$, $\blacklozenge$ are taken from Takeuchi^[35], Δ , $\diamond$ are from Sdenius *et al*^[36].

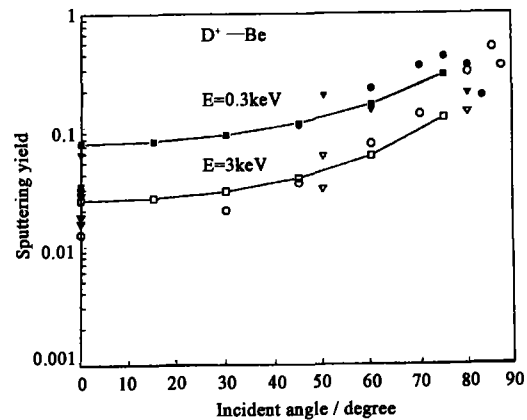


Fig.12 Angular dependence of sputtering yield for the bombardment of Be with D ions on the incident angles. Solid lines are the results given by bipartition model^[40], ∇ , $\blacktriangledown$, $\blacksquare$, $\square$ are the data taken from Eckstein^[37].

4.3 电子轰击引起的 K 壳层电离截面测量

电子轰击引起的原子 K 壳层电离截面的测量不仅在于了解电子与原子的相互作用上, 而且在许多高技术应用上如 X 射线表面微分析和 Auger 电子谱仪在等离子体诊断, 在激光与粒子束聚变研究等都具有重要意义。然而, 迄今为止, 已有的 K 壳层电离截面数据不多^[41]。特别是在电离阈能区 ($1 \leq U_k \leq 4$, $U_k = E/E_k$, E 是电子能量, E_k 是靶原子 K 壳层电子的电离阈能) 很少。测量主要难点包括白支撑薄靶的制备, 因为薄靶条件要求靶厚仅几百埃, 即使在科技高度发达的今天, 对大多数元素而言, 要制备白支撑薄靶仍是一个十分困难的问题。为解决这一难题, 我们发展了一种新的测量方法^[42]。新方法不采用白支撑薄靶, 而是采用厚衬底薄靶技术。采用真空镀膜技术能方便地制出这种薄靶。新方法的

关键是通过用两群模型计算得出的反射电子能谱估算和校正厚衬底反射电子在薄靶中再电离产生的靶原子的特征X射线数目。图13给出了测量结果, 给出了我们测量的Ni和Cr元素的结果与Drawin经验公式计算结果的比较^[43], 和Hink和Pockman等对Mn元素的测量结果^[44, 45]。从图13中可见, 对于Ni元素, 我们的测量结果同Jessenberger等^[28]的测量结果符合得好, 同Drawin经验公式算出的结果也在允许的程度范围内相符合。

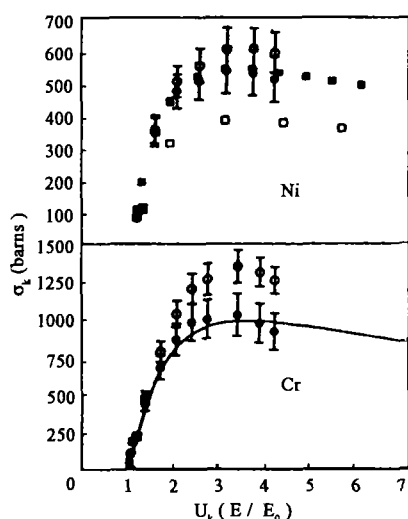


Fig.13 Uncorrected (○) and corrected (●) Ni and Cr K-shell ionization cross sections by electron impact. Experimental data for Ni are also shown by full squares ■ and open squares □, respectively. Solid line is the results of Drawin's empirical formula for Cr^[43].

4.4 PIXE 分析

通过测量不同能量和不同入射角度的离子束轰击样品所产生的X射线来获得痕量元素的浓度分布是一种很有意义的工作。在参考文献[46]中, 我们发展了一种PIXE剖面分析的新方法。该方法首先采用离子运输两群模型计算X射线产额的空间分布。两群模型比较Monte Carlo方法的重要的优点之一是其计算速度快得多。然后, 我们应用Tikhonov的规则化法求解与痕量元素剖面有关的Fredholm第一类方程, 给出了满足测量精度的合理结果。图14是Frontier等给出的Zn在银中的浓度剖面以及我们采用两群模型计算的结果比较^[47, 48]。

4.5 辐射加工

在固体材料和薄膜的辐射加工中, 人们往往需要计算电子束在多层介质中的能量沉积。到目前为止, 计算在多层材料中的电子能量沉积采用的算法有Monte Carlo方法、相空间时间演化法以及球谐近似

法。我们是采用电子运输两群模型来处理这一问题。我们已采用该法计算了0.3MeV电子穿过Ti窗、空气层、涂层及各种衬层材料中的剂量分布^[49]。已计算出的电子在Ti-Air-MAR-Fe, Ti-Air-MFA-Gypsum和Ti-Air-Nylon-Gypsum的能量沉积曲线。图15中给出的是Ti-Air-MAR-Fe的计算能量沉积。计算结果表明, Ti窗和空气间隙对0.3MeV电子束在MAR, MFA和MYLDN等材料中的剂量分布影响相当大。因此, 在材料的辐射加工中有必要进行仔细的电子运输计算以获得精确的剂量分布。

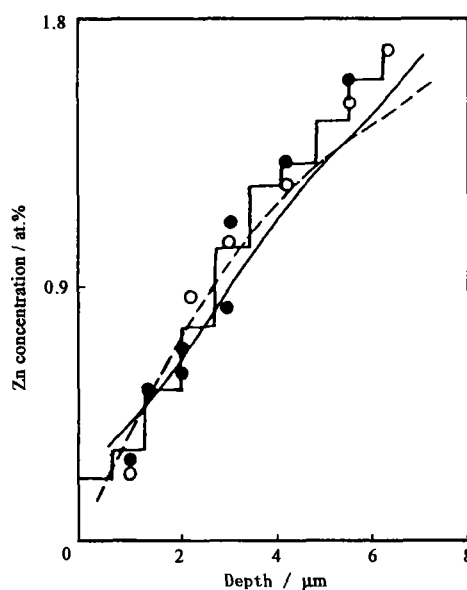


Fig.14 The profile of Zn concentration in a sample, calculated by regularization method (solid line and dashed line). As a comparison, the profile (step curve) calculated by Brissaud et al and EMP measured profile (○, ●) given by Frontier et al. are also shown in the same figure^[47, 48].

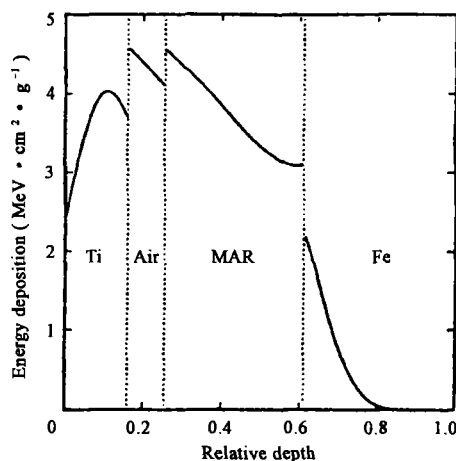


Fig.15 The energy deposition of 0.3-MeV electron beam in Ti-Air-MAR-Fe calculated by using bipartition model^[49].

5 结论

以上讨论对带电粒子运输的两群模型理论的原理, 算法和应用给出了一个系统的表述。两群模型提出 30 多年来, 一直用来研究不同种类的带电粒子的输运行为, 并证明是成功的。传统的带电粒子解析输运理论在处理输运问题时总会遇到某些一直未能解决的问题例如边界和界面的处理, 这就阻碍了其发展, 限制了其应用范围。而伴随着两群模型的发展, 这个模型当然也遇到了很多困难, 然而与传统的解析理论不同的是, 这些难题都一个一个地解决了。因此, 从输运理论的应用范围和适应性而论, 两群模型也许在带电粒子运输的解析理论是灵活性和功能最强的理论。在这些方面它可以和 Monte Carlo 方法相比较。另一方面, 同蒙特卡洛方法相比较, 两群模型的计算速度比后者快得多, 而其计算精度则与 Monte Carlo 法相当。这些特点就使两群模型有可能具有广阔而重要的应用。目前, 两群模型尚有待发展的两个课题: 一个是应用该模型研究表面粒子的发射行为, 特别是研究次电子发射问题, 辐射物理界已研究该问题多年, 但迄今成效不大; 另一个是应用该模型计算电子、质子在三维非均匀介质中的剂量分布, 该问题在放射治疗的发展中具有十分重要的意义。

总之, 带电粒子运输的两群模型的提出和发展已表明该模型是一个能够在复杂条件下精确、高效、应用广泛的带电粒子输运理论。因此, 可以预期, 两群模型将在更广泛和重要的领域中得到应用。

致谢 该项系统研究工作得到德国洪堡基金会, 国家自然科学基金会 (5860313, 1870739, 1880729, 5880018, 59071035, 19375032, 39470227, 19874045, 10075033), 国家 863 计划项目 (863-715-23-05-05), 核工业基金 (Y92294934901), 瑞典癌基金会, 美国 NCI (#2R01CA41490-09A2) 和国际原子能机构 (IAEA) (No5738/RB, No5738/R1/RB, No5738/R2/RB, No5738/R3/RB, No5738/R4/RB, No.8064/RB, No.8064/R1/RB) 的多年支持, 在此谨致以衷心的感谢。

参考文献

- 1 罗正明. 原子能科学技术资料选编, 第一辑, 1976, 77-100
LUO Z M. Atomic Energy Science and Technology, 1976, 1, 77-100
- 2 LUO Z M. Radiat Res, 1982, 92, 1-15
- 3 Spencer L V. Theory of Electron Transport, Phys Rev, 1955, 98:1597-1612
- 4 Clark R K, Brar S S, Marinell L D. Radiology, 1955, 64: 94-98
- 5 Franz F. Private Communication Quoted From Ref.[3], 1955
- 6 LUO Z M. Phys Rev, 1985, B32:812-823
- 7 LUO Z M, Phys Rev, 1985, B32:824-836
- 8 LUO Z M, WANG S M. Phys Rev, 1987, B36:1885-1893
- 9 LUO Z M, HOU Q, TENG L J. NIM, 1996, B115:497-500
- 10 LUO Z M, BAI Y S, WANG S M. NIM, 1990, B48:435-438
- 11 LUO Z M, HOU Q, TENG L J, NIM, 1997, B135:149-153
- 12 LUO Z M, Brahme A. Proceedings of X ICCR, 1990, 29-33
- 13 LUO Z M, Brahme A. Phys Rev, 1992, B46:15739-15752
- 14 Gruen A E Z. Naturf, 1957, 14a:247-254
- 15 Bothe W, Ann. Phys(Leipzig), 1949, 6:44-52
- 16 Frank H Z. Naturforsch, 1959, 14a:247-258
- 17 Littmark U, Ziegler J F. Handbook of Range Distribution For Energetic Ions In All Elements, Pergmon Press, New York, 1980
- 18 夏山源, 杨洪, 谭春雨等. 物理学报, 1983, 32(4):23-445
XIA R Y, YANG H, TAN C Y *et al.* Acta Phys Sin, 1983, 32(4):423-445
- 19 CHEN C K *et al.* Appl Phys, 1983, A31:37-42
- 20 罗正明, 腾礼坚. 物理学报, 1982, 31(9):1166-1174
LUO Z M, TENG L J. Acta Phys Sin, 1982, 31(9): 1166-1174
- 21 Landau L. J Phys. USSR, 1944, 8:201-204
- 22 Vavilov P V. JETP, 1957, 5:749-751
- 23 Richtmyer R D. Difference Method For Initial-value Problems, Interscience, New York, 1967, 218-258
- 24 Sigmund P. Phys Rev, 1969, 184:383-408
- 25 Sigmund P. Sputtering by Particle Bombardment I, Editor: R. Behrisch, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1981, 9-73
- 26 Biersack J P, Eckstein W. Appl Phys, 1984, A34:73-88
- 27 LUO Z M. NIM, 1988, B33:102-104
- 28 罗正明. 物理学报, 1990, 39(12):2019-2024
LUO Z M. Acta Phys Sin, 1990, 39(12):2019-2024
- 29 LUO Z M. The Reflection of H^+ , D^+ , T^+ , $^3He^+$ and He^+ from A Surface of solids, Report at 1st IAEA research coordinate meeting on plasma-interaction induced erosion of fusion reactor materials, Vienna, Austria, 1991
- 30 LUO Z M. An Outline of Sputtering Theory Based on the Bipartition Model for Ion Transport, Report at 1st IAEA research coordinate meeting on plasma-interaction induced erosion of fusion reactor materials, Vienna, Austria, 1991
- 31 Lockwood *et al.* Calorimetric measurement of electron energy deposition in extended media-theory vs experiment. Report SAND79-0414, Sandia Labs. 1980
- 32 Nakai Y *et al.* Energy dissipation of electron beams in matter:

- IV. Measurement of electron energy dissipation in polystyrene by using ionization chamber. *Ann Rep Jpn Assoc Radiat Res Polymers*, 1965, **6**:7-11
- 33 LUO Z M, Jette D, Walker S. *Med Phys*, 1998, **25**(10): 1954-1963
- 34 Shiu A S, Tung S, Hogstrom K R. *Med Phys*, 1992, **19**(3): 623-636
- 35 Takeuchi W, Yamamura Y. *Radiat Eff*, 1983, **71**:53-68
- 36 Sidennius G, Lenskjaer T. *NIM*, 1976, **132**:673-677
- 37 Eckstein W *et al.* *Sputtering data*, IPP 9/82, 1993
- 38 LUO Z M, WU W F, HOU Q, Reflection of Light Ions From Heavy Element Targets, *J Appl Phy*, **75**(8):1994, 3789
- 39 LUO Z M, HOU Q, TENG L J. The Bipartition Model Calculations of Sputtering Yields For H^+ , D^+ , T^+ and He^+ Ion Bombardments on Surfaces. *Nucl. Instrum. And Meth*, 1996 **B115**:497-500
- 40 LUO Z M, HOU Q, TENG L J. A Sputtering Calculation: Angular Dependence of Sputtering Yields, *Nucl. Instrum. and Meth*. 1998, **B135**:149
- 41 LONG X G *et al.* *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 1990, **45**: 353-372
- 42 LUO Z M, AN Z, LI T H *et al.* *J Phys B: At Mol Opt Phys*, 1996, **29**:4001-4004
- 43 Drawin H Z. *Phys*, 1961, **164**:513-522
- 44 Jessenberger J, Hink W Z. *Physik*, 1975, **A274**:331-337
- 45 Pockman L T *et al.* *Phys Rev*, 1947, **71**:330-335
- 46 LUO Z M. *J Phys.D:Appl Phy*, 1990, **23**:184-193
- 47 Frontier J P *et al.* *NIM*, 1986, **B14**: 348-357
- 48 Brissuad I. *NIM*, **B12**: 1985, 235-246
- 49 An Zhu *et al.*, *RAD. TECH. ASIA'93 Proceedings*, 1993, 580-583

AN OVERVIEW OF THE BIPARTITION MODEL FOR CHARGED PARTICLE TRANSPORT

LUO Zhengming

(Laboratory of Radiation Physics and Technology under Ministry of Education, and Institute of Nuclear Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610064)

ABSTRACT The paper gives a review on progresses in the past four decades in bipartition model studies. Its basic ideas and concepts, main mathematical formulae and numerical methods, and its relevant applications are described. The model has been extended from a transport theory for electrons of medium energy range to a unified and accurate transport theory of charged particles, covering ion transport, atomic cascade collision, particle emissions in surface sputtering, and penetration of electrons of radiation therapy energy range. The 15 figures give an extensive comparison between the results given by using the bipartition model and the data taken from other theories and experimental measurements, which shows that the bipartition model is an accurate, powerful and unified transport theory of charged particles. Problems remaining to be solved with the bipartition model are discussed in the paper.

KEYWORDS Transport for charged particles, Bipartition model, Partition condition

CLC O571.33, TL99