

The Computing and Simulation of Energy Loss Performance for Deuteron in Different Target

Meng Peng¹, Changlin Lan^{1,2*}, Tao Ye²

¹The School of Nuclear Science and Technology, Lanzhou University, Lanzhou Gansu

²Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing

Email: lanchl@lzu.edu.cn

Received: Jul. 27th, 2016; accepted: Aug. 11th, 2016; published: Aug. 16th, 2016

Copyright © 2016 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

Abstract

This paper calculated 100 MeV Deuteron energy loss characteristics in different target materials, according to the electron stopping power and nuclear stopping power theoretical formula of electronic particle interacting with target material. It also simulated the stopping power and range of Deuteron with same energy transporting in different target medium (Graphite, Aluminium, Iron is selected in this paper) by using the Monte Carlo software of Geant4. The results show a good agreement with SRIM simulation results and experimental data with 2% relative error. Geant4 results gave the energy deposition of Deuteron in different target and Bragg peak at the same time.

Keywords

Deuteron Transport, Stopping Power, Energy Deposition, Geant4

氘核与物质相互作用的能量损失特性 计算与模拟

彭 猛¹, 兰长林^{1,2*}, 叶 涛²

*通讯作者。

¹兰州大学核科学与技术学院, 甘肃 兰州

²北京应用物理与计算数学研究所, 北京

Email: lanchl@lzu.edu.cn

收稿日期: 2016年7月27日; 录用日期: 2016年8月11日; 发布日期: 2016年8月16日

摘 要

根据不同能量区间氘核与物质相互作用的电子阻止本领和核阻止本领公式, 计算给出了100 MeV氘离子在不同靶物质中能量损失特性, 利用蒙特卡罗程序Geant4模拟计算了上述能量区间的氘核在不同介质中的阻止本领与射程, 与SRIM程序计算结果比较误差在2%以内。同时给出了氘核在相应靶材料中的能量沉积和Bragg峰, 为氘核数据库的建立奠定基础。

关键词

模板, 氘核, 阻止本领, 能量沉积, Geant4

1. 引言

随着中子应用技术的发展, 利用氘核聚变反应加速器中子源引起各国核物理学家广泛研究兴趣, 其中氘核与靶材料相互作用的能量损失特性是首要解决的问题。同时, 解决人类未来能源问题的核聚变反应堆设计和运行中也涉及到很多氘核在材料中输运问题, 氢元素在真空室及包层、螺栓、等离子体器壁中的沉积浓度、扩散形成的位移损伤等严重影响着核材料的性能及稳定性, 反应堆的设计、运行都需要氘核与相关材料相互作用的精确数据[1]-[3], 尤其是氘核能量损失和能量沉积等相关方面数据。

目前关于带电粒子在不同介质中能量损失的相关核数据主要集中在电子、质子及用于生物治疗的重离子束, 对于其它带电粒子的专门研究较少: SRIM [4]程序可以用于简单的计算单一能量带电粒子在靶物质中的能量损失; National Institute of Standards and Technology(NIST) [5]的ESTAR、PSTAR和ASTAR数据库只提供了质子、 α 粒子及电子在部分靶材料中能量损失的相关核数据; MCNP程序用于模拟中子、电子、光子和部分带电粒子在靶物质中相互作用的输运过程; Electron-Gama Shower (EGS)程序用于模拟光子和质子在靶物质中相互作用的输运过程。对于氘离子与物质相互作用数据没有专门的计算程序和数据库可用。本文使用基于利用基于面向对象技术的 Geant4 [6]蒙特卡罗软件, 探索氘核在铝(石墨, 铝, 铁)靶中的辐照性能, 给出了100 MeV能量的氘核在不同靶物质(本文选取了石墨、铝、铁)中的阻止本领、射程、Bragg峰等相关数据, 并与SRIM计算结果及实验数据作对比分析, 为氘核的屏蔽防护及加速器中子源和聚变堆中的材料选择提供了参考, 也为建立氘核数据库奠定了基础。

2. 能量损失理论分析

带电粒子在输运过程中与靶材料发生相互作用损失能量, 主要包括与靶原子的核外电子的非弹性碰撞损失能量(即电子阻止)和与靶原子核弹性碰撞损失能量(核阻止)两部分。对于入射能量较高的带电粒子, 主要是通过电子阻止来损失能量, 随着入射粒子与靶物质相互作用, 能量逐渐损失, 当入射粒子的能量很低(入射粒子的速度远小于波尔速度)时, 核阻止的贡献占主要部分。带电粒子在单位长度内与靶原子碰撞而造成的能量损失称为阻止本领, 是描述带电粒子与物质相互作用的基本物理参数。

2.1. 氦核的电子阻止本领

当一束高能带电粒子入射到靶物质时，主要是与靶原子核外电子发生散射而损失能量。根据 Bethe 等人的量子理论，并考虑到相对论和其它修正因子，公式(1)、(2)分别为在 SRIM 和 Geant4 程序中氦核在 高能区电子阻止本领的表达式(即 Bethe-Bloch 公式)[7]-[9]，两者的主要区别为修正项不同。

$$\left(-\frac{dE}{dl}\right)_e = \left(\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{4\pi Z\rho N_A}{Am_e v^2} \left[\ln\left(\frac{2m_e v^2}{I}\right) - \ln(1-\beta^2) - \beta^2 - \frac{C}{Z} - \frac{\delta}{2} \right], v > v_0 Z^{2/3} \quad (1)$$

$$\left(-\frac{dE}{dl}\right)_e = \left(\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{4\pi Z\rho N_A}{Am_e v^2} \left[\ln\left(\frac{2m_e v^2 \gamma^2 T_{up}}{I^2}\right) - \beta^2 \left(1 + \frac{T_{up}}{T_{max}}\right) - \delta - \frac{2C}{Z} - F \right], v > v_0 Z^{2/3} \quad (2)$$

式中 ze 、 $v = c * \beta$ 为入射粒子的电荷($z = 1$)、速度； m_e 为电子的质量； I 为靶物质原子的平均激发能； A, Z, ρ 为靶核的质量数、质子数和靶核的密度； C/Z 为壳层修正项； δ 为极化效应修正项； v_0 为玻尔速度； $\gamma = E/m_e c^2$ ； E 为入射氦核能量； $\beta^2 = 1 - (1/\gamma^2)$ ； T_{up} 为在 Geant4 程序中一次电子阻止本领损失的最大能量与 Geant4 设置能量截断值之间最小值； F 为 Geant4 高阶修正项。

对于低能入射粒子，根据 Thomas-Fermi Theory 原子统计模型，Lindhard 和 Scharff 给出了电子阻止截面 S_e [7]为：

$$S_e = z^{1/6} * 8\pi e * 2a_0 \frac{zZ}{(z^{2/3} + Z^{2/3})^{3/2}} * \frac{v}{v_0}, v < v_0 z^{2/3} \quad (3)$$

$$\left(-\frac{dE}{dl}\right)_e = N * S_e \quad (4)$$

式中 a_0 表示玻尔半径； N 表示单位体积内的靶原子数。

介于低能区和高能区之间的入射粒子，目前还没有找一个很好的理论来描述电子阻止本领，根据 Varelas 和 Biersack 的理论[7]，采用内插法来得到氦核在中能区电子阻止本领的公式：

$$(S)^{-1} = (S_{LOW})^{-1} + (S_{HIGH})^{-1} \quad (5)$$

$$S_{LOW} = A_1 E^{A_2} \quad (6)$$

$$S_{HIGH} = \frac{A_3}{E} \ln\left(1 + \frac{A_4}{E} + A_5 E\right) \quad (7)$$

式中 A_1, A_2, A_3, A_4, A_5 为拟合参数，能量 E 的单位：MeV。对于低能区和高能区，SRIM 和 Geant4 都采用上述模型来描述粒子输运过程中电子阻止本领。

2.2. 氦核的核阻止本领

带电子粒子与靶材料相互作用时，主要与核外电子发生非弹性散射损失能量，当粒子的能量很低时，与靶核的弹性碰撞损失能量变得不能忽略不计。SRIM 程序采用 K.B. Winterbon 等人给出一个普适核阻止本领公式[7]——约化核阻止本领 $(-d\epsilon/d\rho)_n$ ：

$$\left(-\frac{d\epsilon}{d\rho}\right)_n = \begin{cases} \frac{\ln(1+1.1383\epsilon)}{2[\epsilon + 0.01321\epsilon^{0.21226} + 0.19590\epsilon^{0.5}]} & \epsilon \leq 30 \\ \frac{\ln \epsilon}{2\epsilon} & \epsilon > 30 \end{cases} \quad (8)$$

式中约化能量 ε 由下列公式计算出:

$$\varepsilon = \frac{32.53E}{zZ(1+M/m)(z^{0.23} + Z^{0.23})} \quad (9)$$

其中能量 E 的单位为 KeV, 核阻止截面 S_n 的计算公式:

$$S_n = \frac{8.462 * 10^{-15} zZ}{(1+M/m)(z^{0.23} + Z^{0.23})} \left(-\frac{d\varepsilon}{d\rho} \right)_n \text{ eV}/(\text{atom}/\text{cm}^2) \quad (10)$$

核阻止本领可以由核阻止截面 S_n 得出:

$$\left(-\frac{dE}{dx} \right)_n = N * S_n \quad (11)$$

Geant4 根据 Thomas-Fermi 和 Wentzel-Moliere 等人的理论, 给出带电粒子在输运过程中核阻止相互作用双微分截面(公式 12, 13), 在一次碰撞过程中核阻止损失的最大能量可由公式(14)求出, 如下:

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \left(\frac{zZe^2}{2p\beta c} \right)^2 \frac{1}{[A_s + \sin^2(\theta/2)]^2} \quad (12)$$

$$A_s = \left(\frac{\hbar}{2pa_t} \right)^2 \left[1.13 + 3.76 \times \left(\frac{\alpha zZ}{\beta} \right)^2 \right] \quad (13)$$

$$-\left(\frac{dE}{dx} \right)_n = 2n_A \pi (zZe^2)^2 \frac{E^2}{p^2 Mc^4} \left[\frac{A_s}{A_s + 1} - 1 + \ln \left(\frac{A_s + 1}{A_s} \right) \right] \quad (14)$$

式中 A_s 为屏蔽半径; \hbar 表示 Planck 常数; α 表示精细结构常数; $a_t = 0.88534 * a_0 / Z^{1/3}$, p 为氦核动能。

2.3. 氦核的电荷交换阻止能量损失

带电粒子与靶物质相互作用时, 还会和靶原子发生电荷交换造成能量损失, 这种能量损失叫电荷交换损失。带电粒子与靶原子相互作用过程中不断俘获和失去电子而使自己的电荷状态发生变化。在俘获过程中离子需要做功, 俘获电子可能处于激发态或者基态, 当俘获电子处于激发态时, 伴有辐射损失。由于离子之间的库仑相互作用, 电子可能被激发到更高能级甚至电离, 这些过程都伴随着能量损失。

根据 Bohr 的理论[10]分析, 失去电子截面(σ_l)和俘获电子截面(σ_c)为:

$$\begin{aligned} \sigma_l &= \pi a_0^2 z^{-1} Z^{1/3} * \frac{v_0}{v} \\ \sigma_c &= 4\pi a_0^2 z^5 Z^{1/3} * \left(\frac{v_0}{v} \right)^6 \end{aligned} \quad (15)$$

当入射粒子速度接近玻尔速度(v_0)时, 最大能量损失占总能量损失的 10%, 当入射粒子速度远小于玻尔速度时, 忽略不计。

3. Geant4 模拟

Geant4 是欧洲核子中心开发的基于面向对象的蒙特卡罗模拟软件包, 主要用于模拟粒子与靶物质相互作用, 在粒子物理、核物理、空间物理、辐射屏蔽效应、核探测器设计、医学研究等领域有着广泛的应用。相对于 MCNP、EGS 等商业软件来说, Geant4 主要优点是源代码完全开放, 我们可以根据实际需要

更改、扩充 Geant4 程序。

带电粒子在输运过程中涉及到的物理过程主要包括电磁相互作用和强相互作用。电磁相互作用包括多次库仑散射、电离、光电效应、韧致辐射、正负电子对湮灭等，强相互作用包括弹性散射、非弹性散射。在电磁相互作用过程中采用 G4MultipleScattering 来描述多次散射物理过程、采用 G4hIonization 来描述电离物理过程，在强子相互作用过程中采用 G4LElastic 来描述核阻止物理过程、采用 G4LEDeuteronInelastic 来描述电子阻止本领物理过程[11] [12]。

4. 蒙卡模拟结果及讨论

4.1. 阻止本领与射程

选取加速器和反应堆最常见具有代表性的三种材料石墨(C)、铝(Al)、铁(Fe)，利用蒙特卡罗程序 Geant4(版本号为 4.9.6)模拟了能量为 100 MeV 范围内氘核在三种材料中的阻止本领，与实验测量结果、理论公式计算和 SRIM(版本号为 2013)计算结果比较，如图 1 所示。

由图 1 可以看出，Geant4 模拟得到的电子阻止本领结果与 SRIM、实验数据[13]的结果误差较小，误差范围在 2% 以内符合得很好，模拟得到核阻止本领结果与 SRIM 符合得很好。影响误差的主要因素有两个：一是 SRIM 和 Geant4 对电子阻止本领公式的修正项不同，Geant4 在模拟输运过程中考虑了带电粒子多次库仑散射，在对计算结果稍有影响；二是 Geant4 利用氘核在单位靶厚度内损失的能量来计算阻止本领，选取适当的靶样品厚度也影响阻止本领计算结果。

带电粒子在输运过程中不断损失能量，待能量耗尽停留在靶物质中，粒子沿着入射方向所穿过最大的距离为入射粒子在该物质中的射程 R 。由于氘核相对于电子质量很大，与电子发生非弹性碰撞后运动方向几乎保持不变，带电粒子在物质中运动径迹近似是直线。粒子的射程可以由能量损失率从初始能量 E_0 到末端能量(等于零)的积分而得到。

图 2 为能量为 100 MeV 氘核不同介质中射程的 Geant4 与 SRIM 模拟计算结果。由图可以看出，Geant4 与 SRIM 结果误差在 2%，这是因为 Geant4 在模拟过程中考虑了带电粒子在输运过程中能量歧离和角度歧离的影响，而 SRIM 程序积分带电粒子阻止本领方式得到射程。

根据图 1 和图 2 的结果可以看出，Geant4 与 SRIM 模拟计算结果符合得很好，Geant4 在模拟计算带电粒子输运过程中不仅包括电子阻止能量损失和核阻止能量损失，还有带电粒子与靶核碰撞过程中多次

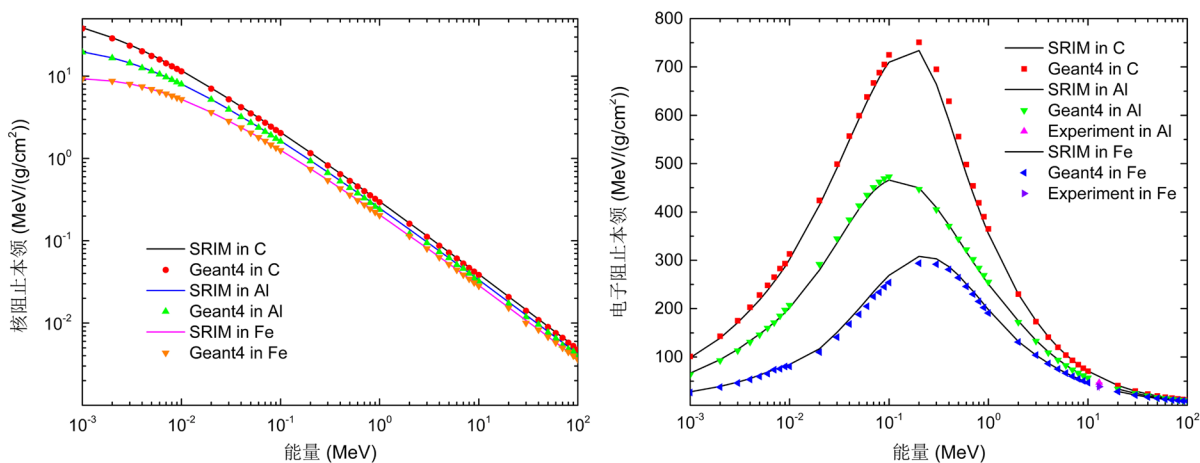


Figure 1. The stopping power of deuteron (left: electron stopping power; right: nuclear stopping power)

图 1. 氘核在不同介质中的阻止本领(左图为核阻止本领, 右图为电子阻止本领)

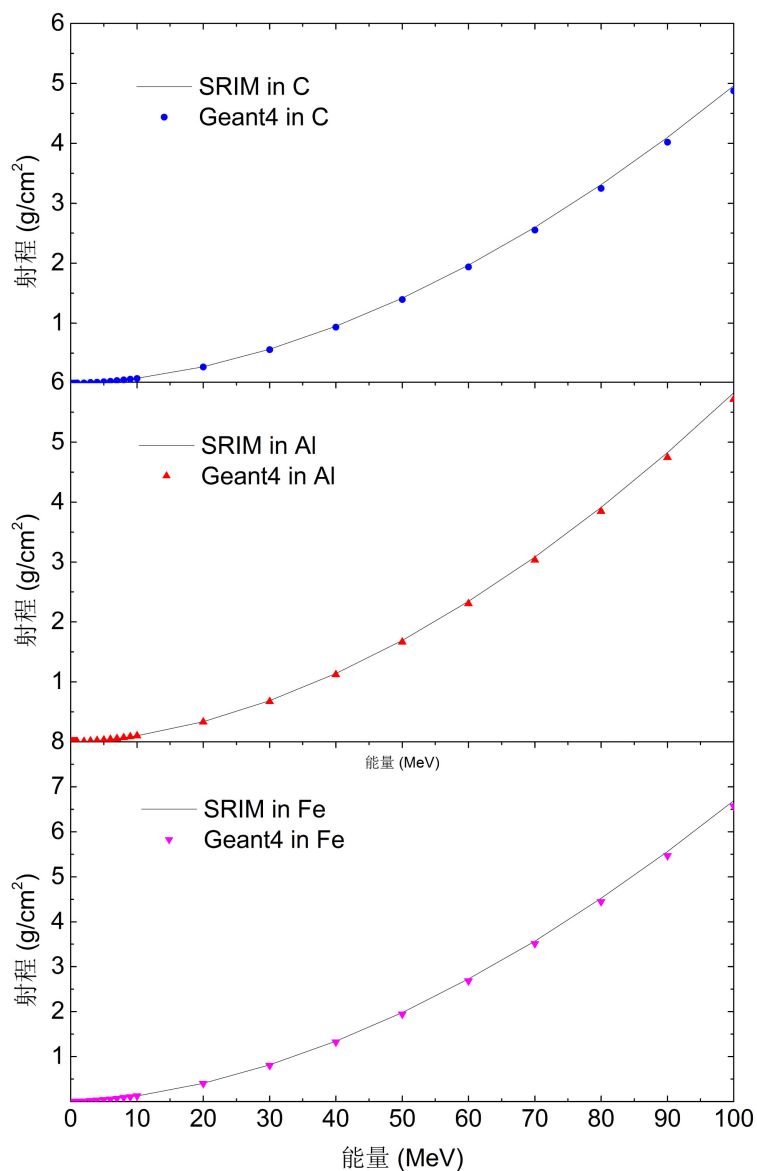


Figure 2. The range of deuteron in different medium

图 2. 氘核在不同介质中的射程

库仑散射，离子电离等物理过程，以及出射粒子能量、角度分布和歧离。相较 SRIM 而言，Geant4 结果更精确。根据 Varelas 和 Biersack 的理论，采用内插法计算了氘核在铝、石墨、铁三种材料中能区电子阻止本领(公式 5-7)中各项参数，结果如表 1 所示。

4.2. Bragg 峰

带电粒子在靶介质中运动时，与靶原子发生电离相互作用使靶原子电离并沿着其径迹产生离子对，随着剩余射程减小，比电离逐渐增加，带电粒子造成的电离损失也就越大，在剩余射程末端达到最大值，即 Bragg 峰。由于在坪区和峰区的传能线密度(LET)显著不同，医学上利用 Bragg 峰区高的 LET 值来实施重离子治疗肿瘤[14]。

图 3 描述了入射氘核粒子在铝介质、石墨介质、铁介质中由电离形成的 Bragg 曲线。由图可以看出，

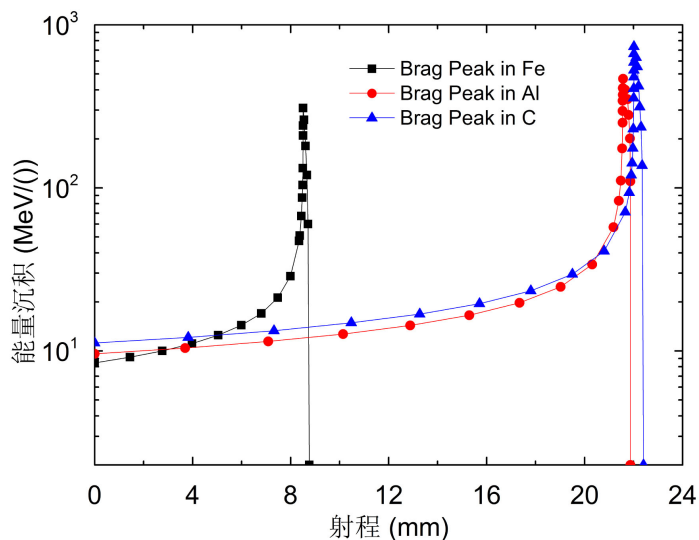


Figure 3. The Bragg-peak curve of deuterium in different medium

图 3. 氘核在不同介质中的 Bragg 峰曲线

Table 1. The parameter values of electron stopping power in relative medium energy range

表 1. 氘核在中能区电子阻止本领参数

数量	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5
铝	2157.5	0.5	135.9754	-0.6481	6.8865
石墨	3087.6	0.5	168.6203	-1.6595	7.0791
铁	864.0125	0.5	133.9251	0.0615	3.3315

靶材料不同影响入射粒子的能量沉积分布;不同入射能量的粒子在靶中形成的能量沉积 Bragg 峰也不同,主要原因在于带电粒子在靶中运动并与靶粒子发生碰撞是一个随机的过程,出射粒子的能量分布服从高斯分布,靶越厚,半高宽(FWHM)值越大,由电离形成的 Bragg 峰就越小。同时,带电离子与靶核的非弹性物理过程对能量沉积 Bragg 峰也有一定的影响。

5. 结论

本文依据带电粒子在靶材料中能量损失的理论分析,使用蒙特卡罗程序 Geant4 模拟计算了 100 MeV 能量的氘核在靶介质中运输信息,相关模拟结果与 SRIM 计算结果进行对比误差范围在 2% 以内,模拟计算结果为中子源研发、核反应堆材料辐射防护提供参考数据。本文在模拟计算过程中,仅考虑对入射粒子与靶核两体反应,忽略对于可能存在的三体反应,如果靶材料为晶体材料时,在模拟过程中还应考虑到晶体结构等对模拟结果的影响。

参考文献 (References)

- [1] 姜少宁, 万发荣, 龙毅, 等. 氦、氘对纯铁辐照缺陷的影响[J]. 物理学报, 2013, 62(16): 313-319.
- [2] 赵江涛. 利用强流氘离子注入及离子束分析方法研究氘在面向等离子体候选壁材料中的沉积行为[D]: [博士学位论文]. 兰州: 兰州大学, 2013.
- [3] Peng, S.X., Zhu, F., Wang, Z., et al. (2016) The Deuteron Accelerator Preliminary Design for BISOL. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, **376**, 420-424. <http://dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2016.01.008>

- [4] James Ziegler-SRIM&TRIM. <http://www.srim.org>
- [5] NIST: Introduction of ESTAR, PSTAR, and ASTAR. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/intro.html>
- [6] Geant4: A Toolkit for the Simulation of the Passage of Particles through Matter. <http://www.geant4.org/>
- [7] Ziegler, J.F. and Biersack, J.P. (1985) The Stopping Range of Ions in Matter. Springer-Verlag, New York. http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4615-8103-1_3
- [8] Physics Reference Manual. <http://geant4.web.cern.ch/geant4/UserDocumentation/UsersGuides/PhysicsReferenceManual/BackupVersions/V9.6/fo/PhysicsReferenceManual.pdf>
- [9] Boschini, M.J., Consolandi, C., Gervasi, M., *et al.* (2010) Nuclear and Non-Ionizing Energy-Loss for Coulomb Scattered Particles from Low Energy up to Relativistic Regime in Space Radiation Environment. *Proceedings of the 12th ICATPP Conference*, Como, 7-8 October 2010.
- [10] Ben-Hamu, D., Baer, A., Faldman, H., *et al.* (1997) Energy Loss of Fast Clusters through Matter. *Physical Review A*, **56**, 4786. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.56.4786>
- [11] Geant4 User's Guide for Toolkit Developers. <http://geant4.web.cern.ch/geant4/UserDocumentation/UsersGuides/ForApplicationDeveloper/BackupVersions/V9.6/fo/BookForAppliDev.pdf>
- [12] Physics Reference Manual. <http://geant4.web.cern.ch/geant4/UserDocumentation/UsersGuides/PhysicsReferenceManual/BackupVersions/V9.6/fo/PhysicsReferenceManual.pdf>
- [13] Shiomi-Tsuda, N., Sakamoto, N. and Ishiwari, R. (1994) Stopping Powers of Be, Al, Ti, V, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Mo, Rh, Ag, Sn, Ta, Pt and Au for 13 MeV Deuterons. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, **93**, 391-398. [http://dx.doi.org/10.1016/0168-583X\(94\)95624-3](http://dx.doi.org/10.1016/0168-583X(94)95624-3)
- [14] 谢朝, 邹炼, 侯氢, 郑霞. 质子束治疗中非均匀组织的等效水厚度修正研究[J]. 物理学报, 2013, 62(6): 483-487.

期刊投稿者将享受如下服务:

1. 投稿前咨询服务 (QQ、微信、邮箱皆可)
2. 为您匹配最合适的期刊
3. 24 小时以内解答您的所有疑问
4. 友好的在线投稿界面
5. 专业的同行评审
6. 知网检索
7. 全网络覆盖式推广您的研究

投稿请点击: <http://www.hanspub.org/Submission.aspx>