

# $H_2^+$ 团簇与固体相互作用的 Monte Carlo 模拟<sup>y</sup>

杨朝文, 缪竞威, 杨百方, 师勉恭, 刘晓东

(四川大学辐射物理及技术教育部重点实验室, 四川大学物理科学与技术学院, 四川 成都 610064)

**摘 要:** 讨论了  $H_2^+$  团簇在物质中的作用过程, 包括库仑爆炸过程、尾流势的影响和与靶原子的近碰撞等. 开发成功了一套适用于不同靶材料的 Monte Carlo 模拟程序, 模拟计算了  $H_2^+$  通过碳膜后出射粒子的能谱和角分布, 并与实验结果进行了比较.

**关键词:** 团簇; 库仑爆炸; Monte Carlo 模拟

中图分类号: O561.2 文献标识码: A

## 1 引言

由于团簇与物质相互作用的复杂性, 目前还没有形成比较完善的描述团簇与物质相互作用的理论. 一般认为, 团簇与物质相互作用时, 存在有区别于单离子与物质相互作用的特殊效应, 或称团簇效应<sup>[1]</sup>. 这种效应不仅与团簇自身的组成, 空间立体结构, 速度和作用介质等诸多因素有关<sup>[2,3]</sup>, 而且, 由于粒子在介质中的能量损失、电荷交换、多次散射, 以及团簇在物质中所特有的库仑爆炸和尾流势等<sup>[4,5]</sup>, 使得团簇效应随团簇在介质中的不断深入而不同. 因此, 对于由两个以上粒子组成的团簇与物质的相互作用过程, 从理论上进行解析计算有时几乎是不可能的. 于是, 计算机模拟如 Monte Carlo 方法就被经常使用.

然而, 有关 MeV 能量团簇与物质相互作用的 Monte Carlo 模拟研究不多. 1975 年, Gemmell 等<sup>[6]</sup>测量了 4 MeV 的  $^4HeH^+$  在 (111) 平面沟道条件下穿过 535 Å 厚的金晶体后的库仑爆炸碎片的角度分布, 以及 2 MeV 的  $^4HeH^+$  和  $H_3^+$  通过不同厚度的碳膜后在 0° 方向上的出射质子能谱, 并用计算机进行了模拟研究. 1994 年, Farizon 等<sup>[7]</sup>采用 Monte Carlo 方法模拟了  $H_n^+$  ( $n = 2, 3-21$ , 奇数) 在碳膜中的相互作用. 他们将  $H_n^+$  看成是以  $H_3^+$  为核心、周围聚集  $H_2$  分子构成的比较弱的集合体, 并假设质子之间的间距  $R_{ij}$  服从高斯分布, 而且将靶看成是许多平行薄

层的叠加. 但是, 在他们的模拟计算中并未考虑尾流势的影响. 1999 年, 王友年等<sup>[8]</sup>也用 Monte Carlo 方法模拟了  $H_2^+$  在固体中穿行时库仑爆炸图形的演化, 但其结果无法用实验验证.

有鉴于此, 本文讨论了  $H_2^+$  团簇在物质中的作用过程, 包括库仑爆炸过程、尾流势的影响和与靶原子的近碰撞等. 开发成功了一套适用与不同靶材料的 Monte Carlo 模拟程序. 用此程序计算了  $H_2^+$  通过不同厚度碳膜后出射粒子的能谱和角分布, 得到了和实验一致的结果. 用该程序可以研究团簇立体结构、尾流势形式、晶体温度、入射方向等对团簇与固体相互作用的影响.

## 2 团簇与物质的相互作用过程

快分子离子或团簇离子进入固体膜后, 由于电子被剥离, 将发生库仑爆炸. 一般文献讨论的库仑爆炸及其出射粒子的能量分布和角分布是在一种理想的情况下得到的结果. 也就是说, 团簇粒子之间的库仑爆炸不受其它因素的影响. 完全将库仑势能转变成了动能. 实际的情况并非如此. 在介质膜中, 库仑爆炸是一个逐步的过程, 在这一过程中, 粒子要经历与靶电子的碰撞损失能量, 与靶核的碰撞改变方向, 还要受到组成团簇的其它粒子的尾流势的影响, 从而受到额外的横向和纵向的作用力, 等等. 因此, 粒子之间的间距是逐步增加的, 库仑势能是

<sup>y</sup> 收稿日期: 2002 - 03 - 05; 修改日期: 2002 - 06 - 17

\* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(19975034, 19975033, 10175041)

作者简介: 杨朝文(1963-), 男(汉族), 四川西充人, 教授, 从事核物理、原子分子碰撞及交叉学科研究.

逐步释放出来的。

由于尾流势<sup>[9]</sup>的存在, 做空间关联运动的离子之间要互相影响。最重要的是横向尾流力, 它将影响出射粒子的角分布, 横向尾流力对后面粒子产生的影响更为重要。

另外, 带电离子在介质中要损失能量并改变方向。根据 Lindhard 势<sup>[10]</sup>, 离子在介质中损失的能量和改变的方向与碰撞参量有关。

因此, 在进行 Monte Carlo 模拟时, 不仅要考虑到库仑爆炸、尾流势的影响, 同时还要考虑与碰撞参量有关的能量损失和方向的变化。而且, 这些因素互相影响。但影响的程度有多大, 很难用解析式表达, 必须通过模拟计算进行定量分析。

### 3 靶材料原子点阵模型

在实验中, 常用的靶材料不外乎两种: 晶体和随机均匀分布的无定形靶。为了使模拟程序具有通用性, 我们考虑下述 4 种靶原子点阵:

- (1) 简单立方,
- (2) 面心立方,
- (3) 体心立方,
- (4) 金刚石。

经过抽象, 可以将靶材料看成是很多个小立方体构成的, 每一个小立方体包含一个靶原子核, 这个核处于小立方体空间的中心。这些小立方体的不同堆积方式就构成了不同的晶体结构。

由于热振动, 靶原子核并非固定不动的, 而是在其平衡位置附近不断的发生振动。偏离平衡位置的分布可以采用高斯分布, 分布参数的值可以用 Debye 理论进行计算<sup>[10]</sup>。

### 4 模拟跟踪过程

根据上述的靶原子点阵模型, 入射离子在靶材料中的行为过程实质上可以看成是一个又一个接连不断地经过单个靶原子所在的小立方体空间。因此, 如果完全跟踪离子在靶中的全过程, 将得到各种有意义的物理量。

当粒子入射到靶上时, 必然落入一个小立方体的表面上某点。这一点可以随机产生。其分布应是均匀的。一旦这一点确定后, 其后的过程将根据入射粒子方向、速度、受力情况等确定。

一个离子进入靶中, 将与靶中的原子发生接连不断的碰撞。一方面由于与电子的碰撞而损失能量, 同时由于与靶原子核的碰撞而改变方向。尾流势的存在也可能改变粒子能量和方向。与碰撞参量有关的能量损失和方向变化可以采用半经典处理, 假设当碰撞参量  $b$  大于某一值  $b_0$  时, 将不损失额外的能量, 也不改变方向; 当碰撞参量  $b$  小于  $b_0$  时, 认为此时将发生额外的能量损失和方向的改变。无论哪种情况, 都可以求出粒子出射速度和方向及其轨迹与小立方体表面的交点, 从而可以确定粒子进入下一个小立方体的初始条件。这样不断重复直到粒子离开靶的后表面。

对于团簇离子, 以时间轴为准, 并行跟踪团簇中的各个离子。如模拟跟踪  $H_2^+$  中两个质子的情况: 先确定最前面质子在靶表面的坐标位置, 后根据两质子间距初始值, 确定后一个质子在靶上的入射点。任何时候, 粒子都处于受某个靶原子影响的立体空间内, 此时, 模拟这个粒子从该靶原子空间表面进入到离开的全过程, 得到离开这个靶原子空间的出射点、速度、方向、能量等, 暂时保存并作为计算进入下一个靶原子空间初始条件的依据。这一过程飞行时间为  $\Delta t_i$ , 总的飞行时间为  $t = \sum \Delta t_i$ , 如果大于另一个粒子总的飞行时间, 立即跟踪另一个粒子。重复直到两个质子都离开靶的后表面。

这样跟踪的优点是计算比较准确, 能得到许多有意义的物理量及其分布规律。但缺点是计算费时间。模拟跟踪 10 000 个  $H_2^+$  在 3  $\mu\text{m}$  厚的金刚石结构的晶体中的过程, 用 Pentium II650 M 档次微机, 需用 CPU 时间约 3 h, 如果计算 10 000 个  $H_3^+$ , 需 CPU 时间约 6.5 h。

### 5 模拟结果

已有的团簇能损实验数据大多用碳膜测量, 为了与实验结果进行比较, 在此仅模拟团簇在碳膜中的情况。为了简单起见, 在此仅模拟  $H_2^+$  通过碳膜后的能量分布与角分布。

对于无定形碳膜, 可以将其简单视为立方晶体, 只不过晶体点阵中的原子在其所在空间随机均匀分布, 并不处于中心。根据碳膜的密度  $\rho$ , 可以算出晶体点阵常数  $d$ , 或者说每个靶原子平均所占

空间体积的尺度:

$$d = \left| \frac{12}{N_A \rho} \right|^{1/3} \quad (1)$$

根据文献[11], 取碳膜的平均密度为  $1.65 \text{ g/cm}^3$ , 可以得到  $d = 2.3 \text{ \AA}$ . 模拟计算中, 取  $\text{H}_2^+$  团簇质子之间初始间距为  $1.19 \text{ \AA}$  [12].

由于库仑爆炸和尾流势的作用, 穿过薄膜后的团簇粒子碎片的能量分布和角度分布将不同于单粒子的情况. 因此通过对能量和角度分布的实验测量, 可以分析研究团簇与物质相互作用的过程.

图 1 所示为缪竞威等[12]报道的实验结果:  $1.915 \text{ MeV H}_2^+$  通过碳膜后库仑爆炸碎片的能量分布. 为了与实验结果比较, 模拟计算了相同条件下的出射粒子分布. 图 2 为在束流方向上 ( $\pm 0.1^\circ$ ) 的能量分布模拟计算结果, 由图可见, 模拟计算结果与实验结果符合得很好. 低能端计数较高, 这是尾

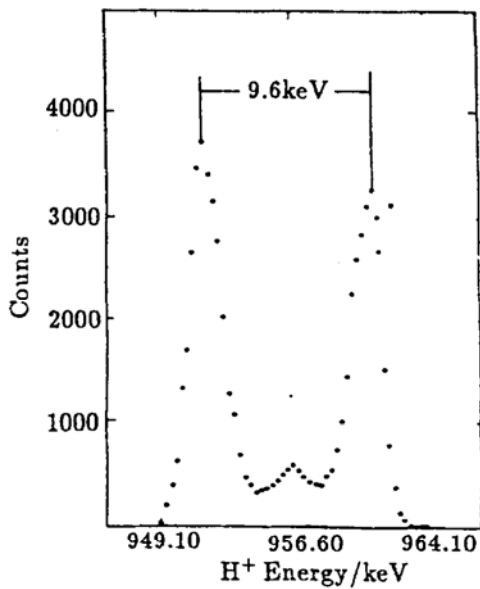


图 1  $1.915 \text{ MeV H}_2^+$  通过  $3 \mu\text{g/cm}^2$  碳膜后在  $0^\circ$  方向库仑爆炸碎片分布实验结果 [12]

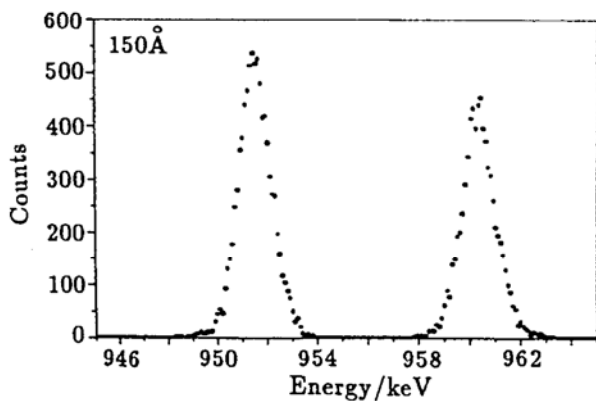


图 2  $1.915 \text{ MeV H}_2^+$  通过  $150 \text{ \AA}$  碳膜后碎片后在  $0^\circ$  方向能谱 Monte Carlo 模拟结果

流力的贡献. 计算中取碳的平均价电子为 2. 比较图 2 和图 1 会发现, 图 1 实验结果所示在两个主要峰中间, 存在一个小峰, 这是  $\text{H}_2^+$  分离为中性粒子的结果, 但在模拟计算时没有考虑这种情况, 因此在图 2 中, 模拟结果没有这样一个小峰.

图 3 是  $700 \text{ keV/amu}$  的  $\text{H}_2^+$  通过不同厚度碳膜后在束流方向 ( $\pm 0.1^\circ$  范围内) 的出射质子能谱. 从图可见, 随着膜厚度的增加, 能损增大, 在束流方向库仑爆炸峰计数逐渐减少, 这是由于多次碰撞的结果.

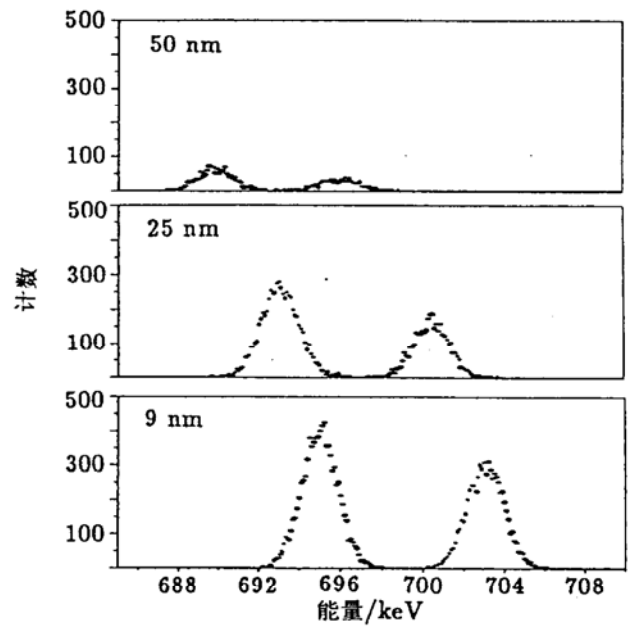


图 3  $700 \text{ keV/amu}$  的  $\text{H}_2^+$  通过不同厚度碳膜后在束流方向 ( $\pm 0.1^\circ$  范围内) 的出射质子能谱

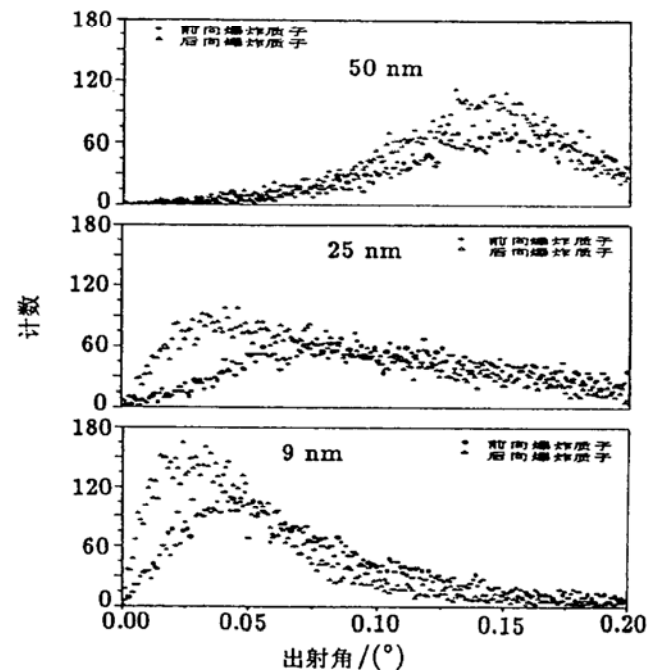


图 4  $\text{H}_2^+$  通过不同厚度碳膜后出射质子角分布的模拟结果

图 4 是 700 keV/amu 的  $H_2^+$  通过不同厚度碳膜后出射粒子的角分布. 由图可见, 处于后面的质子, 由于受尾流势的作用, 明显地偏向束流方向. 随着

膜厚度的增加, 出射质子的角分布范围明显增大. 这是一个合理的结果, 因为随着膜厚度的增加, 碰撞次数增多, 离子方向改变增大.

## 参 考 文 献:

- [1] Levi Setti R, Lam K, Fox T R.  $H_2^+$  Traversing Ultra Thin Carbon Foils: Cluster Effects in the Energy Loss at 12.5 and 25 keV/amu[J], Nucl Instr and Meth, 1982, **194**: 281.
- [2] Remillieux J. Interaction of Fast Molecular Ions with Solids[J]. Nucl Instr and Meth, 1980, **170**: 31.
- [3] Gemmell D S. The Collision Induced Fragmentation of Fast Molecular Ions in Solids and Gases[J]. Nucl Instr and Meth, 1980, **170**: 41.
- [4] Zajfman D, Both G, Kanter E P, *et al.* Multiple Scattering of MeV Atomic and Molecular Ions Traversing Ultrathin Films[J]. Phys Rev, 1990, **A41**(5): 2 482.
- [5] Sigmund Peter. Scaling Laws Governing the Multiple Scattering of Diatomic Molecules under Coulomb Explosion[J]. Phys Rev, 1992, **A46**(5): 2 596.
- [6] Gemmell D S, Remillieux J, Poizat J C, *et al.* Evidence for an Alignment Effect in the Motion of Swift Ion Clusters Through Solids[J]. Phys Rev Lett, 1975, **34**(23): 1 420.
- [7] Farizon M, de Castro Faria N V, Farizon Mazuy B, *et al.* Interaction of Hydrogen  $H_n^+$  Clusters with Thin Carbon Foils[J]. Phys Rev, 1994, **A45**(4): 3 192.
- [8] 王友年. 快速  $H_2^+$  在固体中穿行时产生的动力学相互作用力及库仑爆炸图形的演化[J]. 物理学报, 1999, **48**(6): 100.
- [9] Ritchie R H, Brandt W, Echenique P M. Wake Potential of Swift Ions in Solids[J]. Phys Rev, 1976, **B14**(11): 4 808.
- [10] Gemell D S. Channeling and Related Effects in the Motion of Charged Particles Through Crystals[J]. Rev Mod Phys, 1974, **46**(1): 129.
- [11] Neelavathi V H. Atomic Collisions in Solids[M]. New York: Plenum, 1975, 289.
- [12] Miao J W, Yang B F, Hao S Z, *et al.* Internuclear Separations from Foil Breakup of Fast  $H_2^+$ ,  $H_3^+$ ,  $D_2^+$  and  $D_3^+$  Molecules[J]. Nucl Instr and Meth, 1986, **B13**: 181.

## Monte Carlo Simulation for the Interaction of Swift $H_2^+$ Clusters with Solid Films\*

YANG Chaowen, MIAO Jingwei, YANG Beifang, SHI Mian gong, LIU Xiaodong

(Key Laboratory of Radiation Physics and Technology of Ministry of Education,

Institute of Physics Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

**Abstract:** The interaction process including Coulomb explosion, wake potential, and close collision with target atoms have been discussed in detail. A Monte Carlo program suitable for simulating cluster ions in both amorphous and crystal targets has been developed. The energy distribution and outgoing angle distribution are calculated by the program and compared with experimental results.

**Key words:** cluster; Coulomb explosion; Monte Carlo simulation

\* **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China(19975034, 19975033, 10175041)