

低能 N⁺ 注入植物种子射程分布的模拟计算*

王林香^{1;1)} 祝恒江¹ 王世亨² 王先明¹

1 (新疆师范大学物理系 乌鲁木齐 830054)

2 (新疆大学物理系 乌鲁木齐 830046)

摘要 伴随着离子束生物技术的广泛应用, 国内许多单位开展了低能离子注入植物种子的实验研究. 其中关于低能离子注入植物种子诱变的物理机理, 集中在离子注入的深度-浓度分布上. 一些单位直接使用纵向非静态 (LSS) 理论和 TRIM 程序来计算低能离子注入植物种子的深度-浓度分布, 却发现计算结果与实验测量结果相差甚远. 所以在对植物种子靶材料进行处理和对 LSS 理论进行修正的基础上, 在二维近似情况下, 用蒙特卡罗方法分别模拟计算了 200keV V⁺ 和 20keV Ti⁺ 注入花生和棉花种子的射程分布, 得到了与实验结果较符合的曲线. 在此模型基础上, 计算了同样初始条件和理论计算模型下无法从实验上测量的 N⁺ 注入植物种子的射程分布, 初步地为低能 N⁺ 注入植物种子射程分布提供了一种理论计算方法.

关键词 离子注入 LSS 理论 蒙特卡罗模拟 射程分布

1 引言

离子束生物技术是 20 世纪 80 年代中期兴起的一种新的诱变技术. 1987 年, 余增亮等人率先开展了低能 N⁺ 注入水稻诱发变异获得成功, 揭开了离子束生物工程的研究序幕^[1, 2]. 现在, 国内有关 N⁺ 注入植物种子的实验研究已取得了一定的成果, 尤其是在 N⁺ 注入生物体后产生的各种生物效应的研究上取得了可喜的成绩. 但是, 有关 N⁺ 注入植物种子的射程分布还无法从实验上测量得到. 所以本文要根据植物种子的特点初步地建立低能 N⁺ 注入植物种子射程分布的理论计算方法.

2 理论模型的建立

为了计算方便, 在文献 [3] 中, 我们已经对植物种子靶材料进行了分层处理和分散的孔洞集中处理, 在该研究的基础上, 本文对 LSS 理论^[4] 一级近似中的电子能损 S_n^0 (见文献 [5]) 进行修正, 使用 TRIM 程序分别计算 V⁺, Ti⁺ 和 N⁺ 注入花生种子和棉花种子的核

碰撞能量损失数据, 通过选择高斯对数函数对计算数据进行拟合, 可确定最佳参数 μ 和 σ 的值 (均为常数), 它们对于不同的靶材料数值不同. 由此得到它们的核碰撞能量损失 $\left(\frac{dE}{dx}\right)_n$ 与注入离子能量 E 变化的函数关系如下:

1) V⁺ 注入花生

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = \rho(L) \times 10^9 \left\{ -0.513 + 1.54 \times 10^4 / \right. \\ \left. ((2\pi)^{1/2} \sigma (0.74E + 0.65)) \times \right. \\ \left. \exp \left[-(\lg(0.74E + 0.65) - \mu)^2 / (2\sigma^2) \right] \right\}, \quad (1)$$

2) Ti⁺ 注入棉花

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = \rho(L) \times 10^9 \left\{ -0.6885 + 1.51 \times 10^4 / \right. \\ \left. ((2\pi)^{1/2} \sigma (0.795E + 0.8)) \times \right. \\ \left. \exp \left[-(\lg(0.795E + 0.8) - \mu)^2 / (2\sigma^2) \right] \right\}, \quad (2)$$

2006 - 04 - 23 收稿

* 新疆大学 21 世纪教研项目 (20030106) 资助

1) E-mail: wanglinxiang23@126.com

3) N⁺注入花生

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = \rho(L) \times 10^7 \left\{ 0.84 + 1.2 \times 10^4 / \right. \\ \left. ((2\pi)^{1/2} \sigma (0.74E + 2.65)) \times \right. \\ \left. \exp[-(\lg(76.9E + 0.65) - \mu)^2 / (2\sigma^2)] \right\}, \quad (3)$$

4) N⁺注入棉花

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = \rho(L) \times 10^7 \times 5 \times 0.889 \left\{ 0.62 \times 10^4 / \right. \\ \left. ((2\pi)^{1/2} \times \sigma (0.68E + 1.7)) \times \right. \\ \left. \exp[-(\lg(12.9E + 4.15) - \mu)^2 / (2\sigma^2)] \right\}, \quad (4)$$

式中 $\rho(L)$ 表示靶材料的密度, E 表示离子的能量. 电子碰撞引起能量损失与入射离子能量的关系式不变, 见文献[5].

其次, 由于用LSS理论计算离子与靶材料总碰撞能量损失 $\frac{dE}{dx}$ 时, 发现碰撞几次离子就停止了, 与实验结果相差较大, 为了符合实验结果, 我们对 $\frac{dE}{dx}$ 进行修

正, 修正后 $\frac{dE}{dx} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_0 \cdot w$, 通过与实验结果比较, 最终确定最佳 w 的值, w 对于不同入射离子和不同靶材料是不同的.

3 计算参数的选取

实验测得的花生种子的平均密度 ρ 为 1.1002g/cm^3 , 由花生各组分的分子式^[6] 计算得到元素 C, H, O 和 N 的原子质量比分别是 0.3175, 0.5940, 0.0125 和 0.0759, 由此得到花生种子的平均原子序数 Z_2 为 3.19, 平均质量数 M_2 为 5.79u, 而 V⁺ 的原子序数 Z_1 为 23, 质量数 M_1 为 50.94u. 同理, 实验测得棉花的种子的密度 $\bar{\rho}$ 为 1.4838g/cm^3 , 由棉花各组分的分子式^[6], 计算得到元素 C, H, O 和 N 的原子质量比分别是 0.3076, 0.5864, 0.0765 和 0.0295, 由此得到棉花种子的平均原子序数 Z_2 为 3.25, 平均质量数 M_2 为 5.0u, 而 Ti⁺ 的原子序数为 22, 质量数为 47.95u. V⁺ 和 N⁺ 注入花生种子的初始能量 E_0 为 200keV, 初始位置 $X=0\mu\text{m}$. Ti⁺ 和 N⁺ 注入棉花种子的初始能量 E_0 为 20keV, 初始位置 $X=0\mu\text{m}$. N⁺ 的原子序数 Z_1 为 7, 质量数 M_1 为 14u. 在计算中, $F(I)$ 是关于靶材料密度参数的一个数组 (二维情况下, 花生种子密度参数 $F(I)$: 3.1, 2.17, 1×10^{-6} , 0.2758, 0.01621, 1×10^{-6} , 0.00822,

0.006, 0.005105, 1×10^{-6} , 0.00485, 0.0045, 0.004, 0.0038, 1.5, 0.5, 1.4, 1.0, 0.1, 1×10^{-6} , 1.4, 1.0, 0.5, 2.0, 3.9; 棉花种子密度参数 $F(I)$: 2.82, 1.8, 1.7, 1.42, 1×10^{-6} , 0.029, 1×10^{-6} , 0.0115, 1×10^{-6} , 0.008, 0.007, 0.006, 0.005, 0.004, 0.0033, 0.0029, 1×10^{-6} , 0.0018, 1.5, 2.8, 2.5, 3.0, 2.5, 1.2, 3.9), $P(L) = F(I) \cdot P_0$, P_0 是花生种子或棉花种子的平均密度值, $P(L)$ 是每一层靶材料的密度. 为模拟实验条件, 计算中 V⁺, Ti⁺ 和 N⁺ 以一定的初始能量垂直入射花生样品表面, 追踪入射的离子总数为 10000 个. 根据种子中孔洞占总体积的 16%^[7], 我们在计算中取种子样品的厚度为 $25\mu\text{m}$, 将其分为 25 层, 每层厚为 $1\mu\text{m}$, 其中空洞占 4 层.

4 基本假设及计算

4.1 基本假设

1) 假设离子与花生中原子碰撞后基本上向前运动, 但存在一个不太大的偏转角 θ (离子碰撞后的运动方向与初始方向的夹角), 假设每次碰撞后离子的偏转角 θ 在 $\left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ 范围内是随机的, 整个碰撞过程被近似认为是二维碰撞过程.

2) 假定每次碰撞后离子所走的步径 Δl 在选定的 (0—0.01 μm) 范围内是随机的.

3) 计算中只考虑入射离子的能量损失, 且能量损失是随机的.

4.2 计算流程

图 1 给出了计算流程框图. 计算中设计了 3 个循环, 首先是离子抽样, 它表示 10000 个离子的循环; 其次是离子在靶材料中的层循环, 其中在一维假设中包括离子运动固定步长的步径循环, 在一维和二维假设中都是通过判断离子是否通过该层而进行层的循环; 最终通过判断离子的能量是否为零, 确定粒子的位置并进行每一层的离子数的统计. 根据蒙特卡罗方法中的马尔科夫过程^[8], 在某层靶材料中能量为 $E_J(X_J)$ 的注入离子在 X_J 点与靶原子碰撞后到达 X_{J+1} 点, 其能量 $E_{J+1}(X_{J+1})$ 和深度 X_{J+1} 可表示成以下形式:

$$E_{J+1}(X_{J+1}) = E_J(X_J) - \Delta E(X_J), \quad (5)$$

$$X_{J+1} = X_J + \Delta X_J, \quad (6)$$

在二维近似下:

$$\Delta E(X_J) = \left[\left(\frac{dE}{dx}\right)_J \cdot \Delta l \right] \cdot f a_1, \quad (7)$$

$$\Delta X_J = (\Delta l \cdot f a_2) \cdot \cos\left(\frac{\pi}{2} f a_3\right),$$

上式中 $\Delta l=0.01\mu\text{m}$, fa , fa_1 , fa_2 , fa_3 均为调用 $\text{ran1}(\text{idum})^{[9]}$ 的辅程序产生的随机数, $\text{ran1}(\text{idum})$ 产生的随机数在 0—1 均匀分布.

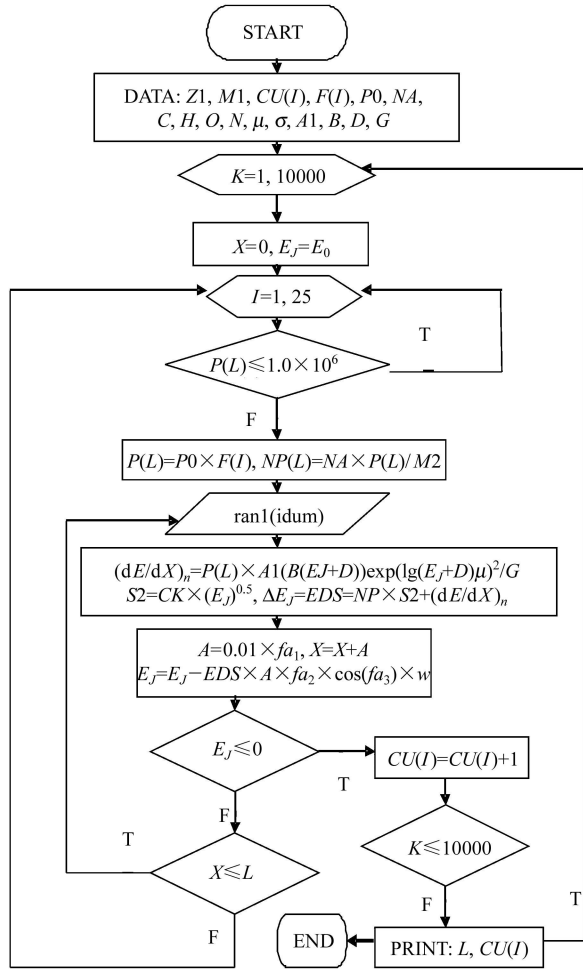


图 1 计算流程框图

5 模拟结果与分析

5.1 结果比较

以上在二维假设下, 分别模拟计算了 200keV V⁺

注入花生和 20keV Ti⁺ 注入棉花种子的射程分布, 得到了与实验结果较符合的曲线(见图 2). 为了将计算数据与实验数据进行比较, 图 2 中所有的曲线均按照峰值进行了归一(即: 用所得到每层的离子个数除以峰值处的离子个数).

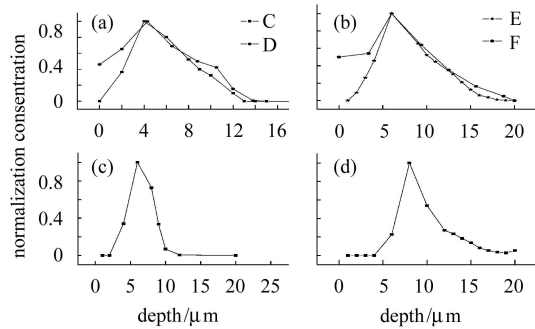


图 2 二维假设计算和实验分别得到的低能离子注入植物种子的射程分布

(a) 200keV V⁺ 注入花生种子的射程分布, (b) 20keV Ti⁺ 注入棉花种子的射程分布, (c) 200keV 的 N⁺ 注入花生种子的射程分布, (d) 20keV 的 N⁺ 注入棉花种子的射程分布. 曲线 C 和 E 是二维假设下模拟计算的结果, 曲线 D 和 F 分别是文献 [10, 11] 的实验结果.

在此模型基础上, 我们在同样初始条件和理论计算模型下计算了目前无法从实验上测量的 N⁺ 注入棉花种子的射程分布. 为了便于比较, 表 1 分别给出了 V⁺, Ti⁺ 和 N⁺ 等注入离子浓度最大值所对应的射程, 即最可几射程 R_0 , 曲线的半高宽 (FWHM), 离子达到靶材料中的最大射程 R_{max} . 由表 1 可见二维近似计算的有关 V⁺ 和 Ti⁺ 注入植物种子最可几射程 R_0 和最大射程 R_{max} 与实验测量结果符合较好. 从图 2 可以看出模拟计算得到的曲线与实验得到曲线后沿基本符合, 但曲线前沿符合较差, 所以 FWHM 计算值偏小. 由于实验上暂时还无法测量的 N⁺ 注入植物种子的射程分布, 所以本文的计算结果是初步的, 计算模型还有待于进一步的优化, 以便计算结果更加接近真实情况.

表 1 计算和实验分别得到的低能离子注入植物种子有关参量比较

parameter			$R_0/\mu\text{m}$	FWHM/ μm	$R_{\text{max}}/\mu\text{m}$
200keV V ⁺	peanut seed	computational result	4	6	14
		experimental result	4.25	8.6	13.6
20keV Ti ⁺	cotton seed	computational result	6	8	20
		experimental result	6.0	12.16	21
200keV N ⁺	peanut seed		6	4	12
20keV N ⁺	cotton seed		8	3	20

5.2 讨论

以上计算结果和实验结果得到的曲线前沿符合不好的原因可能有以下几点:

1) 从实验测量中发现, 样品注入面堆积了大量的注入离子, 因此用扫描电子显微镜-能量色散 X 射线能谱仪 (SEM-EDS) 测量注入离子深度-浓度分布时, 测量零点的取法对其影响很大, $X=0$ 处的数据很难测准, 往往偏高.

2) 从模拟计算过程中, 发现通过调整各个参量使得 $X=0$ 处出现离子沉积非常困难, 调整不好将影响整个曲线的走向和峰值位置.

3) 从计算的模型来看, 对靶材料进行分层和空洞集中处理是一种近似, 由此建立的靶材料模型与实际的种子结构还是有差异的, 所以导致计算值与实验值有一定的差别.

4) 另外种子的结构千差万别, 种子密度参数 $F(I)$ 的调整对模拟计算的结果影响较大, 计算和实验结果具有一定的特殊性, 所以计算模型还要进一步优化,

以便能使其具有普遍的适用性.

由以上几点分析不难看出, $X=0$ 处的离子浓度测量值偏高, 计算值偏低, 且我们设计的靶材料的模型比较粗糙, 与真实情况下的植物种子存在差别, 故导致两条曲线的前沿符合的不太好, 进而影响了 FWHM 的符合程度. 如果仅从曲线后沿半高宽来比较, 由图 2 可以看出两曲线还是符合的比较好的.

6 结束语

本文考虑了植物种子的特点, 同时对 LSS 理论进行了修正, 在二维假设模型的基础上设计了计算程序, 用 Monte Carlo 方法模拟计算了 200keV V^+ 和 20keV Ti^+ 分别注入花生和棉花种子的射程分布, 计算结果与实验结果符合较好, 在此模型基础上计算了实验上暂时无法测量的 N^+ 注入植物种子的射程分布, 为研究低能 N^+ 注入植物种子射程分布提供了一种初步的理论计算方法.

参考文献(References)

- 1 YU Zeng-Liang. Chinese Physics, 1997, **26**(6): 333—338 (in Chinese)
(余增亮. 物理, 1997, **26**(6): 333—338)
- 2 WEI Zeng-Quan et al. Nucl. Instrum. Methods, 1995, **95**: 371
- 3 WANG Lin-Xiang, WANG Shi-Heng. Journal of Xinjiang University (Natural Science Edition), 2005, **22**(2): 172—177 (in Chinese)
(王林香, 王世亨. 新疆大学学报(自然科学版), 2005, **22**(2): 172—177)
- 4 Linddand J et al. Dan. Vid. Selsk, 1964, **34**: 1
- 5 WEI Zeng-Quan, LIU Yu-Yan, WANG Gui-Lin et al. Journal of Radiation Research and Radiation Processing, 1993, **11**(2): 14—15 (in Chinese)
(卫增泉, 刘玉岩, 王桂林等. 辐射研究与辐射工艺学报, 1993, **11**(2): 14—15)
- 6 Aluora S K(India). Chemistry and Biochemistry of the Bean. Translated by Gao Jian. Beijing: Science Press, 1987 (in Chinese)
(阿罗拉 S K(印). 豆类的化学和生物化学. 高健译. 北京: 科学出版社, 1987)
- 7 LU Ting et al. Chinese Physics, 2001, **10**(2): 145
- 8 PEI Lu-Cheng, ZHANG Xiao-Ze. Monte-Carlo Method and Application of it on Measurement of Particle Transport Problem. Beijing: Science Press, 1980 (in Chinese)
(裴鹿成, 张孝泽. 蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的运用. 北京: 科学出版社, 1980)
- 9 William H Press et al. Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing. Beijing: Library of Congress Cataloguing in Publication Data, 1997
- 10 WANG Xin-Fu, LU Ting et al. Atomic Energy Science and Technology, 2002, **36**(6): 531—534 (in Chinese)
(汪新福, 陆挺等. 原子能科学技术, 2002, **36**(6): 531—534)
- 11 YANG Hui-Ling, FAN Zhao-Tian, LUO Jian-Min et al. Journal of Xinjiang University (Natural Science Edition), 2004, **21**(2): 150 (in Chinese)
(杨惠玲, 范兆田, 骆建敏等. 新疆大学学报(自然科学版), 2004, **21**(2): 150)

Simulation of the Penetration Range Distribution for Nitrogen Ions Implanted into the Plant Seed at Low Energy^{*}

WANG Lin-Xiang^{1;1)} ZHU Heng-Jiang¹ WANG Shi-Heng² WANG Xian-Ming¹

1 (Department of Physics, Xinjiang Normal University, Urumuqi 830054, China)

2 (Department of Physics, Xinjiang University, Urumuqi 830046, China)

Abstract Following the widespread application of ion beam biological technology, more experimental researches on low energy ion impletation into plant seeds has been conducted. In the studies of the physical mechanism, the emphasis are put on the depth and concentration distribution of the ions implanted into the seeds at low energy. The calculations directly using the LSS theory and the TRIM program for the distribution of ions implanted into seeds at low energy are not in agreement with the experimental results. With considering targets and correctting LSS theory according to the distinguishing texture of plant seeds, we calculated the penetration range distribution for vanadium ions implanted into peanut seed at 200keV and for titanium ions energy implanted into the cotton seed at 20keV in two dimension approximation by using the Monte-Carlo method. The calculation results are in agreemante with experiments. After implated into the peanut seed or the cotton seed, the nitrogen ion range distribution, which could not be measured so far, was also calculated with the same initial condition and theory model. This could be a preliminary method for calculation of the range distribution of nitrogen implated into seeds at low energy.

Key words ion implantation, LSS theory, Monte-Carlo simulation, range distribution

Received 23 April 2006

^{*} Supported by Xinjiang University 21st Century Research Projects Funding (20030106)

1) E-mail: wanglinxiang23@126.com