

# 基于 Geant4 的慢正电子束注入金属材料的模拟研究

孟飞, 潘子文, 叶邦角

(中国科学技术大学近代物理系, 安徽合肥 230026)

**摘要:** 用 Geant4 软件对慢正电子束注入金属材料的过程进行了模拟, 模拟计算了正电子垂直入射与倾斜入射金属材料的背散射系数, 得到了倾斜入射条件下正电子深度分布曲线及入射倾角与正电子背散射系数的关系曲线, 同时进一步分析了不同入射倾角条件下正电子在材料中的横向扩散行为, 模拟结果表明金属材料原子序数越小, 慢正电子束倾斜入射样品后其横向扩散越显著. 该模拟研究为慢正电子束对金属材料的实验和理论研究提供了参考数据.

**关键词:** 背散射系数; Geant4; 倾斜入射; 横向扩散

**中图分类号:** O572.32<sup>+</sup>2      **文献标识码:** A      doi: 10.3969/j.issn.0253-2778.2020.02.018

**引用格式:** 孟飞, 潘子文, 叶邦角. 基于 Geant4 的慢正电子束注入金属材料的模拟研究[J]. 中国科学技术大学学报, 2020, 50(2): 236-242.

MENG Fei, PAN Ziwen, YE Bangjiao. Simulation of the implantation of slow positron beams into metallic materials based on Geant4[J]. Journal of University of Science and Technology of China, 2020, 50(2): 236-242.

## Simulation of the implantation of slow positron beams into metallic materials based on Geant4

MENG Fei, PAN Ziwen, YE Bangjiao

(Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

**Abstract:** The processes of slow positron beam implantation into metals were studied by employing the Geant4 software. The backscattering coefficients of two patterns (i. e. normal incidence and oblique incidence) were calculated, and the distribution curves of positron implantation depth at oblique incidence and the relations between the backscattering coefficient and the incident angle were obtained. Further analysis of lateral diffusions of positrons at different angles was conducted. Simulations indicate that the lateral diffusions of slow positrons become more significant obliquely implanting into metals with smaller atomic numbers. The simulation can provide some useful referential data for the research of metals using slow positron beam technology.

**Key words:** backscattering coefficient; Geant4; oblique incidence; lateral diffusions

## 0 引言

随着慢正电子技术的成熟, 在材料分析科学领

域, 该技术已经成为最重要的手段之一. 为了得到正电子束流与固体靶相互作用的信息, 需要准确研究正电子在样品中的慢化过程<sup>[1-3]</sup>.

**收稿日期:** 2017-03-30; **修回日期:** 2017-05-24

**基金项目:** 国家自然科学基金(11475165)资助.

**作者简介:** 孟飞, 男, 1992年生, 硕士. 研究方向: 正电子谱学. E-mail: mf1992@mail.ustc.edu.cn

**通讯作者:** 叶邦角, 博士/教授. E-mail: bjye@ustc.edu.cn

已经有很多关于正电子的实验与模拟研究,研究内容包括背散射系数、平均注入深度和注入轮廓分布等.之所以会有大量关于这些性质的研究,是因为对正电子在固体材料中停止过程的定量描述,不仅能够用于可靠地分析由正电子谱学得到的缺陷分布数据,而且提供了描述电子注入的严格的测试形式,而这个测试形式对于很多谱学技术的数据判读有重要作用<sup>[4]</sup>.当正电子注入固体中,它会在几个皮秒内快速热化,随后这些正电子会与电子直接发生湮没或者形成一个被称为电子偶素的束缚体系<sup>[5]</sup>.事实上,热化的正电子并不会立刻湮没,而是会在热能下进行扩散,在扩散过程中被缺陷捕获或者与表面发生相互作用;正电子与电子湮没会发生在几百个皮秒之后.

Valkealahti 与 Nieminen<sup>[6-7]</sup>首次用蒙特卡洛模拟计算方法展示了半无限体的正电子注入轮廓分布,这个分布能够与高斯函数的导数符合得很好,我们称这个分布为 Makhovian 分布.他们研究了不同金属的正电子注入轮廓分布,使用的是 Makhovian 分布并且把它当作一个人射正电子能量以及其他变量的函数;本文所用的 Geant4 软件也是用蒙特卡洛模拟计算的. Seliger<sup>[8]</sup>研究了  $2\pi$  立体角的点源  $\beta$  射线在不同原子序数材料中的背散射和不同倾斜度的窄角背散射. Valkealahti 与 Nieminen<sup>[6-7]</sup>, Bentabet 和 Fenineche<sup>[9]</sup>, Massoumi<sup>[10-11]</sup>, Baker 等<sup>[12]</sup>, Aydin<sup>[13]</sup>, Ritley 等<sup>[14]</sup>使用了蒙特卡洛模拟研究了正电子背散射等多种性质. Chaoui 和 Bouarissa<sup>[31]</sup>从用理论推导粒子输运截面的方式计算了慢正电子束不同能量  $E(1\sim 10\text{ keV})$  和不同角度  $(0\sim 80^\circ)$  入射铝(Al)、铜(Cu)、银(Ag)和金(Au)的背散射系数. Ali 和 Rogers<sup>[15-16]</sup>以电磁簇射蒙特卡洛模拟结果为基准与实验测量带电粒子的背散射系数和能谱进行对比. Dryzek 等<sup>[17-18]</sup>用 Geant4 模拟了正电子的注入轮廓分布、背散射系数以及平均注入深度. Ning 等<sup>[19]</sup>用 Geant4 模拟了正电子湮没寿命谱的源修正. Bentabet 等<sup>[20]</sup>做了一个慢电子与慢正电子在固体薄膜材料中输运的对比性实验. Glazov 和 Pázsit<sup>[21]</sup>运用了一种新的方法,把不变量引入到正电子从材料表面的背散射研究中. Massoumi 等<sup>[22]</sup>直接测量了背散射正电子的角度与能量的双微分分布. Coleman 等<sup>[23]</sup>的研究表明总的背散射系数是原子序数  $Z(13\text{ 到 }82)$ ,入射能量  $E(1\sim 50\text{ keV})$  和入射角度  $(0^\circ\sim 65^\circ)$  的函数;本文所用的入射角度是  $10^\circ\sim 80^\circ$ . 研究人员关注了不同能量范围的正电子,

重点关注了  $0.5\sim 50\text{ keV}$  这一能区<sup>[23-27]</sup>.

有关正电子的研究不仅内容广泛,而且富有深度,但是,还未有关于倾斜入射条件下横向扩散行为的研究.本文使用了 Geant4 软件模拟了正电子注入金属材料与慢化过程,目的在于确认 Geant4 工具包对于正电子倾斜入射以及不同倾斜角横向扩散深度的研究是否有帮助.结果表明,模拟数据与实验数据符合得很好,为后续研究提供了参考数据.

## 1 Geant4 模拟

Geant4 是一个非常有用的工具包,它可以用来模拟粒子在物质中的传播过程.它包含了完善的功能,包括粒子追踪以及几何结构、物理模型和采样数的设置. Geant4 可用于模拟各种粒子(包括正电子与电子)在凝聚物中的行为.标准的电磁过程包含韧致辐射、正电子湮没、同步辐射和电离等<sup>[28]</sup>.

为了正确地模拟正电子在材料中的行为,首先需要选择合适的模型.当正电子进入到物质中,它会与原子核发生弹性散射,与电子发生非弹性散射,多次散射的过程是模拟中最重要的部分之一.在 Geant4 工具包中,有很多用于多次散射的模型,需要从中挑选出合适的模型.本文选用了黄世娟等<sup>[29]</sup>使用的模型.

本研究使用了最新版的 Geant4 工具包,采用直角坐标系,模拟了半无限长的金属材料铝(Al)和金(Au).样品沿  $X$  轴方向长  $100\text{ cm}$ ,沿  $Y$  轴方向宽  $100\text{ cm}$ ,沿  $Z$  轴方向厚  $10\text{ cm}$ ,正电子沿  $Z$  轴入射,坐标系原点在样品  $XY$  平面中心,样品的厚度  $10\text{ cm}$  远远大于注入深度,所以正电子不能穿过样品.每一次模拟均使用  $1\times 10^5$  个正电子,设置不同的入射角,收集不同入射角下的背散射系数、注入深度及横向扩散深度等信息,追踪每一个正电子直到湮没.需要指出的是,样品的晶格结构及细微结构效应(如沟道效应)并没有植入到 Geant4 中.

## 2 结果与拓展

### 2.1 背散射系数

背散射系数是正电子在材料中最重要的参数之一.带电粒子的背散射系数定义为带电粒子入射到半无限长样品上散射回样品上方半球内的概率<sup>[15]</sup>.黄世娟等<sup>[29]</sup>和 Lai 等<sup>[30]</sup>模拟得到了垂直入射的正电子背散射系数与入射正电子能量的关系.图 1 给出了本工作的模拟结果与前人文献中的实验数据与理论数据的对比.从图中可知,本工作的模拟结果与 Coleman

等<sup>[23]</sup>的实验数据以及 Chaoui 和 Bouarissa<sup>[31]</sup>的理论数据符合得很好. 当入射正电子能量低于 10 keV, 背散射系数随能量迅速增长, 而当能量高于 10 keV, 背散

射系数随能量增长的速度变缓, 最后几乎保持不变. 比较铝和金的背散射系数可知, 在相同入射正电子能量下, 金的背散射系数均大于铝的.

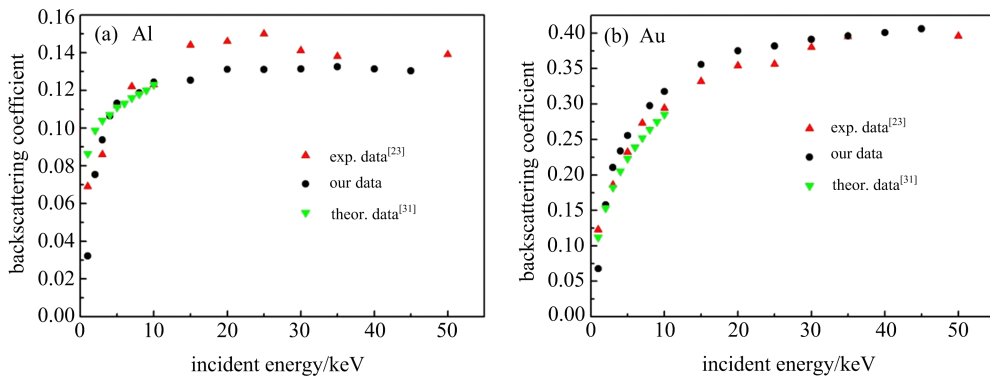


图 1 铝和金背散射系数与入射正电子能量关系图

Tab. 1 Relations between energies of incident positrons and backscattering coefficients of Al and Au

2.2 倾斜入射

节 2.1 使用 Geant4 模拟了不同能量正电子垂直入射金和铝材料的背散射系数, 模拟结果和实验及理论计算符合得较好, 验证了 Geant4 用于模拟正电子入射材料背散射的可行性. 本节将在此基础上进一步模拟研究正电子以一定倾角斜入射金属材料的情况. 图 2 呈现了不同入射角的铝和金的背散射系数. 图 2(a) 表明, 模拟数据与文献<sup>[23]</sup>的实验数据几乎完全重合. 图 2(b) 和 (c) 表明, 当入射角较小

或较大时, 模拟数据与实验数据符合得比较好, 但入射角在 30°~40°附近的模拟数据与实验数据差距较大. 此差距或可由沟道效应解释, 当入射角较小或较大, 沟道效应并不是特别显著, 所以对实验结果影响较小甚至可以忽略, 而当带电粒子倾斜入射到晶体表面且入射方向接近某一主晶轴或主晶面时, 沟道效应就会显著增加, 导致背散射系数明显减小; 然而模拟中无法引入沟道效应, 因此与实验结果存在较大偏差.

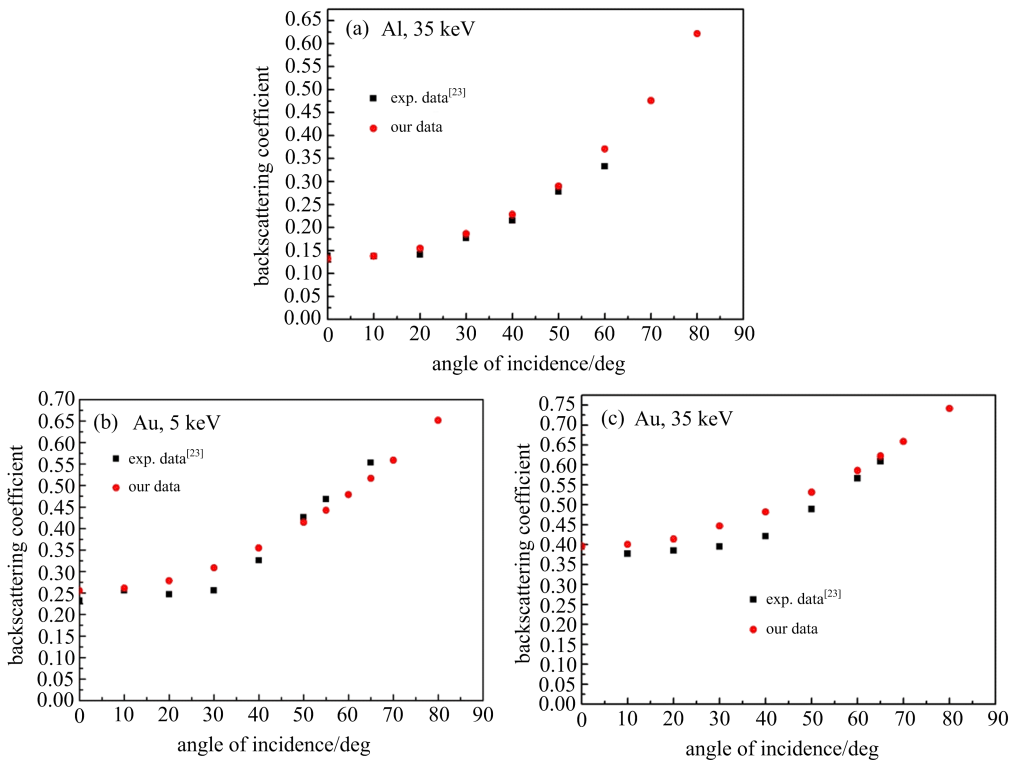


图 2 铝和金背散射系数与入射角关系图

Fig. 2 Relations between the incident angles and backscattering coefficients of Al and Au

### 2.3 横向扩散深度与纵向注入深度

在倾斜入射的情况下,本文研究了横向扩散深度与纵向注入深度. 横向扩散深度定义为入射正电子沿 X 轴和 Y 轴的扩散深度,纵向注入深度是入射正电子沿 Z 轴的注入深度. 入射角的倾斜方向是沿着 Y 轴的,定义沿 X、Y 和 Z 轴的行程为 X 深度、Y 深度和 Z 深度.

#### 2.3.1 X 深度

图 3 呈现了铝和金中不同入射能量的正电子在不同入射角下的 X 深度分布. 从图中可知,当入射

角相同时,无论材料为铝或金,入射正电子能量为 5 keV 时的总计数大于能量为 35 keV 的总计数,计数越大,表示背散射越少,背散射系数也就越小. 当入射能量与入射角相同时,铝的总计数大于金的,即铝的背散射系数小于金的. 图 2(b)和(c)表明,当入射正电子能量不同,而入射角与材料相同时,5 keV 时的背散射系数小于 35 keV 的,这与图 3 的结果一致. 图 3 表明,倾斜入射时的计数分布是轴对称的,这是因为入射方向沿 Y 轴有一个分量,但沿 X 轴无分量.

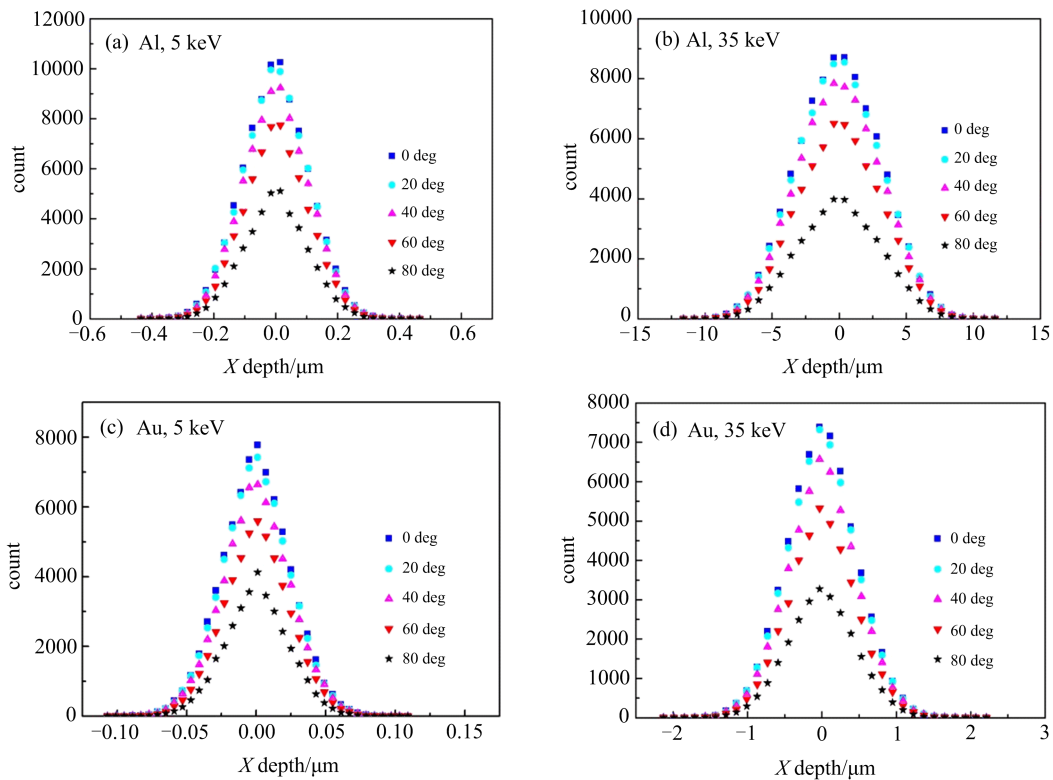


图 3 铝和金的计数与 X 深度分布图

Fig. 3 X depth distributions of positrons in Al and Au

#### 2.3.2 Y 深度

图 4 呈现了铝和金中不同入射能量的正电子在不同入射角下的 Y 深度分布,结果表明,Y 深度的分布中心发生了偏移,偏移方向沿着 Y 轴正方向,而且偏移量随着入射角的增大而增大. 对比图 4(a)和(b)或者(c)和(d)可知,当材料与入射角相同时,入射正电子能量为 35 keV 时的偏移量大于 5 keV 时的;对比图 4(a)和(c)或者(b)和(d)可知,当入射正电子能量与入射角相同而材料不同时,偏移量随着金属原子序数的增大而减小. 这是因为入射正电子动量沿着 Y 轴正方向有一个分量,Y 深度分布中心会向 Y 轴正方向发生偏移;正电子的能量越高,

则分量越大,发生的偏移就会越大;铝的原子序数与密度均小于金的,因此相同动量分量的正电子在铝中走过的路程更长,偏移量更大,这与图 4 的结果吻合.

#### 2.3.3 Z 深度

图 5 呈现了铝和金中不同入射能量的正电子在不同入射角下的 Z 深度分布,结果表明,Z 深度分布中心发生了偏移,偏移量随着入射角的增大而减小. 对比图 5(a)和(b)或者(c)和(d)可知,Z 深度分布中心随着入射正电子能量的增大而增大,即偏移量随着能量的增大而增大. 对比图 5(a)和(c)或者(b)和(d)可知,当入射正电子能量与入射角相同而

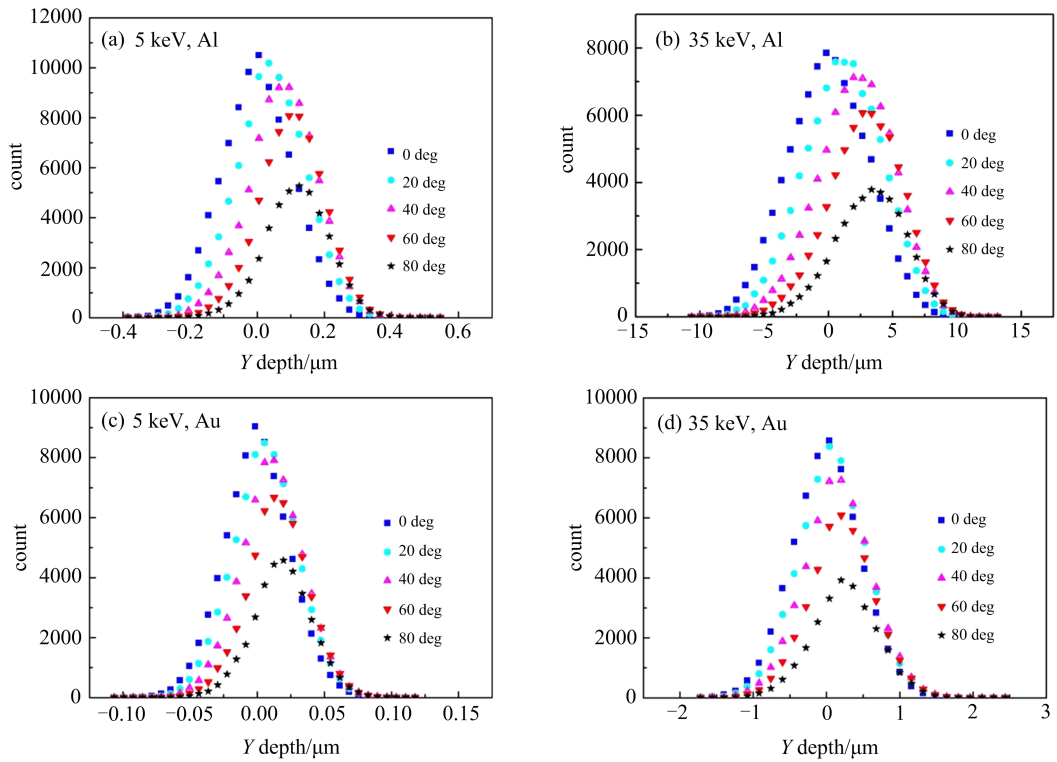


图 4 铝和金的计数与 Y 深度分布图

Fig. 4 Y depth distributions of positrons in Al and Au

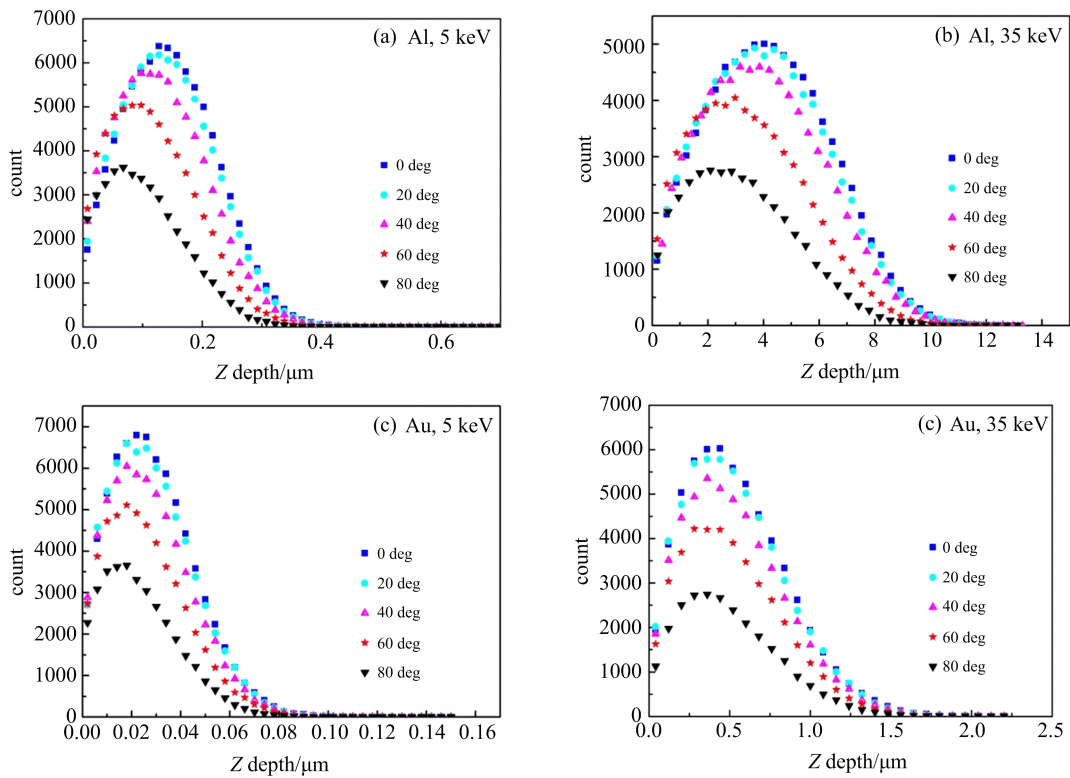


图 5 铝和金的计数与 Z 深度分布图

Fig. 5 Z depth distributions of positrons in Al and Au

材料不同时,偏移量随着材料原子序数的增大而减小.这是因为入射正电子动量沿  $Z$  轴有一分量,随着入射角的增大,动量沿  $Z$  轴的分量变小,导致偏移量减小;入射正电子能量越大,则沿  $Z$  轴的动量分量越大,偏移量越大;铝的原子序数与密度均小于金,因此相同动量分量的正电子在铝中走过的路程更长,偏移量更大.

### 3 结论

本文使用 Geant4 软件模拟了单能正电子垂直入射与倾斜入射两种情况下注入到金属材料的过程,将模拟得到的垂直入射与倾斜入射背散射系数与前人工作的实验数据对比,结果表明二者符合得很好,验证了模拟的正确性.进一步研究了倾斜入射条件下的  $X$ 、 $Y$  和  $Z$  深度分布,通过对模拟结果的分析明确了正电子动能、入射方向以及金属材料原子序数都会影响正电子在三个方向的深度分布.将来我们还会扩展 Geant4 软件在非金属以及复合材料方面的应用,通过模拟方法定量计算慢正电子束注入不同样品的背散射情况,确定相关谱仪(主要是多普勒展宽谱仪和寿命谱仪)所测数据的信噪比,为优化谱仪的空间摆放提供依据.

#### 参考文献 (References)

- [ 1 ] 韩荣典,叶邦角,翁惠民,等. 慢正电子束技术的应用与发展[J]. 物理学进展, 1999, 19(3): 305-330.  
HAN Rongdian, YE Bangjiao, WENG Huimin, et al. Application and development of slow positron technique [J]. Progress in Physics, 1999, 19(3): 305-330.
- [ 2 ] SCHULTZ PETER J, LYNN K G. Interaction of positron beams with surfaces, thin films, and interfaces[J]. Rev Mod Phys, 1988, 60(3): 701-779.
- [ 3 ] BENTABET A, BOUARISSA N. Positron backscattering from an Al target: Analytical calculation and Monte Carlo simulation[J]. Surf Interface Anal, 2007, 39(5): 377-380.
- [ 4 ] COLEMAN P G, BAKER J A, CHILTON N B. Experimental studies of positron stopping in matter: The binary sample method [J]. J Phys: Condens Matter, 1993, 5(43): 8117-8128.
- [ 5 ] ASOKA-KUMAR P, LYNN K G. Implantation profile of low-energy positrons in solids[J]. Appl Phys Lett, 1990, 57(16): 1634-1636.
- [ 6 ] VALKEALAHTI S, NIEMINEN R M. Monte-Carlo calculations of keV electron and positron slowing down in solids[J]. Appl Phys A, 1983, 32(2): 95-106.
- [ 7 ] VALKEALAHTI S, NIEMINEN R M. Monte-Carlo calculations of keV electron and positron slowing down in solids. II [J]. Appl Phys A, 1984, 35(1): 51-59.
- [ 8 ] SELIGERH H. The backscattering of positrons and electrons[J]. Phys Rev, 1952, 88(2): 408-412.
- [ 9 ] BENTABET A, FENINECHE N E. Backscattering coefficients for low energy electrons and positrons impinging on metallic thin films: Scaling study [J]. Appl Phys A, 2009, 97: 425-430.
- [10] MASSOUMI G R, LENNARD W N, SCHULTZ P J, et al. Electron and positron backscattering in the medium-energy range[J]. Phys Rev B, 1993, 47(17): 11007-11018.
- [11] MASSOUMI G R, HOZHABRI N, JENSEN K O, et al. Positron and electron backscattering from solids[J]. Phys Rev Lett, 1992, 68(26): 3873-3876.
- [12] BAKER J A, CHILTON N B, JENSEN K O, et al. Material dependence of positron implantation depths [J]. Appl Phys Lett, 1991, 59(23): 2962-2964.
- [13] AYDIN A. Monte-Carlo calculations of positron implantation profiles in silver and gold[J]. Radiat Phys Chem, 2000, 59(3): 277-280.
- [14] RITLEY K A, LYNN K G, GHOSH V J, et al. Low-energy contributions to positron implantation [J]. J Appl Phys, 1993, 74(5): 3479-3496.
- [15] ALI E S M, ROGERS D W O. Benchmarking EGSnrc in the kilovoltage energy range against experimental measurements of charged particle backscatter coefficients [J]. Phys Med Biol, 2008, 53(6): 1527-1543.
- [16] ALI E S M, ROGERS D W O. Energy spectra and angular distributions of charged particles backscattered from solid targets[J]. J Phys D: Appl Phys, 2008, 41(5): 055505.
- [17] DRYZEK J, HORODEK P. GEANT4 simulation of slow positron beam implantation profiles [J]. Nucl Instrum Method Phys Res B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2008, 266(18): 4000-4009.
- [18] DRYZEK J, SIEMEK K. The "accumulation effect" of positrons in the stack of foils, detected by measurements of the positron implantation profile [J]. J Appl Phys, 2013, 114(22): 224901.
- [19] NING Xia, CAO Xingzhong, LI Chong, et al. Modification of source contribution in PALS by simulation using Geant4 code [J]. Nucl Instrum Method Phys Res B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2017, 397: 75-81.
- [20] BENTABET A, FENINECHE N E, LOUCIF K. A comparative study between slow electrons and positrons transport in solid thin films [J]. Appl Surf

- Sci, 2009, 255:7580-7585.
- [21] GLAZOV L G, PÁZSIT I. Applications of invariant embedding: Positron backscattering from surfaces[J]. Nucl Instrum Method Phys Res B, 2004, 215(3-4): 509-524.
- [22] MASSOUMI G R, HOZHABRI N, LENNARD W N, et al. Doubly differential positron-backscattering yields [J]. Phys Rev B, 1991, 44(7): 3486-3489.
- [23] COLEMAN P G, ALBRECHT L, JENSEN K O, et al. Positron backscattering from elemental solids[J]. J Phys: Condes Matter, 1992, 4(50): 10311-10322.
- [24] BAKER J A, COLEMAN P G. Measurement of coefficients for the back-scattering of 0.5-30 keV positrons from metallic surfaces[J]. J Phys C: Solid State Phys, 1988, 21(23): L875-L880.
- [25] BAKER J A, CHILTON N B, JENSEN K O, et al. Median penetration depths and implantation profiles for low energy positrons in Al [J]. J Phys: Condens Matter, 1991, 3(22): 4109-4114.
- [26] MAKINEN J, PALKO S, MARTIKAINEN J, et al. Positron backscattering probabilities from solid surfaces at 2-30 keV [J]. J Phys: Condens Matter, 1992, 4(36): L503-L508.
- [27] BAKER J A, CHILTON N B, COLEMAN P G. Stopping of 10-50 keV positrons in aluminum[J]. Appl Phys Lett, 1991, 59(2):164-166.
- [28] AGOSTINELLI S, ALLISON J, AMAKO K, et al. Geant4: A simulation toolkit [J]. Nucl Instrum Method Phys Res A, 2003, 506(3): 250-303.
- [29] HUANG Shijuan, PAN Ziwen, LIU Jiandang, et al. Simulation of positron backscattering and implantation profiles using Geant4 code[J]. Chin Phys B, 2015, 24(10):107803.
- [30] LAI Xin, JIANG Xiaopan, CAO Xingzhong, et al. Simulation of positron backscattering on Al, Cu, Ag and Au targets using GEANT4 code[J]. Surf Interface Anal, 2016, 49(5):457-463.
- [31] CHAOUI Z, BOUARISSA N. Positron and electron backscattering from elemental solids in the 1-10 keV energy range[J]. J Phys: Condens Matter, 2004, 16(6):799-808.