

文章编号: 1007-4627(2008)04-0342-05

入射粒子与靶相互作用中电子能损的高阶修正^{*}

朱宝珠^{1,2,3}, 张丰收^{1,2,4, #}, 罗飞^{1,2}, 李旻^{1,2}, 石颂剑^{1,2},
王雄^{1,2}, 赵强^{1,2}, 周宏余^{1,2}

(1 北京师范大学射线束技术与材料改性教育部重点实验室, 北京师范大学核科学与技术学院, 北京 100875;

2 北京市辐射中心, 北京 100875;

3 新疆大学物理科学与技术学院, 新疆 乌鲁木齐 830046;

4 兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心, 甘肃 兰州 730000)

摘要: 研究了在较高能入射离子(He离子、¹²C离子)与靶相互作用中电子能量损失的物理机制, 分别探讨了电子能量损失中的相对论修正、壳修正、密度修正以及Barkas效应和Bloch效应等修正的贡献, 发现壳修正、Barkas效应修正和Bloch效应修正在能量小于100 MeV时是重要的, 而相对论修正和密度修正是在能量大于100 MeV时起作用。加入各种修正项之后, 电子阻止本领的计算结果和实验值(ICRU49)符合更好。

关键词: 高阶修正; 壳修正; 密度修正; Barkas效应; Bloch效应

中图分类号: O571.6; Q7 **文献标识码:** A

1 引言

从20世纪30年代开始, 关于带电粒子对物质中的电子能量损失的研究一直是一个活跃的研究领域。近年来, 随着实验测量技术的发展, 已经可以精确地测量出电子阻止本领, 这也促使了人们对电子阻止本领的深入研究。人们对电子阻止本领不断地做出各种修正, 统称为高阶修正。在对于质子入射Ag靶的研究中发现, Barkas效应在入射粒子能量 $E < 10$ MeV时的仅有1.1%, 但是实验测出的入射粒子在靶中的Barkas效应修正却超过了15%之多^[1]。目前入射粒子为质子的研究开展得较多, 而对重离子的讨论则比较少, 人们预计在重离子与物质相互作用中, 高阶效应更重要。

本文系统地给出入射粒子与靶相互作用的各种修正, 并给出这些修正对于入射粒子在靶中的电子阻止本领中所占比重。本研究为探索重离子入射靶的剂量和深度提供了研究基础, 同时对研究辐射育种、重离子治癌和辐射防护也有重要的意义^[2, 3]。

2 理论模型

2.1 Bethe-Bloch理论及相对论修正、壳修正和密度修正

在20世纪30年代Bethe和Bloch^[4, 5]首先采用量子力学的微扰理论描述高速带电粒子与靶物质中原子的非弹性碰撞过程, 在能量较高的情况下计算电子能量损失时, 其能量损失主要用于激发或电离靶原子核外的电子, 在一阶Born近似下给出了高速带电粒子在靶物质中电子阻止本领的Bethe-Bloch(BB)公式为

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{m_e v^2} N Z_2 \ln \left(\frac{2m_e v^2}{I} \right), \quad (1)$$

其中, v 是入射离子的速度, N 是靶物质的原子密度, Z_1 和 Z_2 分别是入射离子与靶原子的电荷数, m_e 为电子的质量, I 为靶原子核外电子的平均激发能或电离能。在Bethe-Bloch公式中, 平均激发(电离)能 I 是一个关键的物理量, 靶原子的平均电离

* 收稿日期: 2008-01-21; 修改日期: 2008-03-03

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10575012, 10435020); 北京市教育委员会共建项目建设计划资助项目(XK100270454); 北京师范大学科研基金

作者简介: 朱宝珠(1983-), 男(汉族), 河南开封人, 硕士研究生, 从事离子与生物分子相互作用研究。

通讯联系人: 张丰收, E-mail: fszhang@bnu.edu.cn

能 $\ln I = \sum_j f_{j0} \ln(\hbar\omega_0)$, ω_0 为共振频率。利用经验可以近似地估计为 $I = I_0 Z_2$, 其中 I_0 大约是 10 eV 数量级, 对于原子序数小的靶物质 ($Z_2 < 13$), I_0 稍大, 约为 13 eV; 而对于原子序数较大的靶物质 ($Z_2 \geq 13$), I_0 较小, 此时的 I 可以写为 $I = 9.76 Z_2 + 58.8 Z_2^{-0.19}$ eV。

Fano 对 Bethe-Bloch 公式进行了各种展开^[6-9], 得到描述 Bethe-Bloch 的相对论修正以及其它修正:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{m_e v^2} N Z_2 L_0, \quad (2)$$

式中, $L_0 = \ln(2m_e v^2 / I) + L_{\text{relativistic}} + L_{\text{shell}} + L_{\text{density}}$, 其中 $L_{\text{relativistic}}$ 是相对论修正, L_{shell} 和 L_{density} 分别为壳层修正和密度修正。

对相对论修正, $L_{\text{relativistic}} = \ln(1/(1-\beta^2)) - \beta^2$, 其中 $\beta = v/c$ 。对壳修正 L_{shell} , 在 Bethe 理论的框架下, 能精确地给出在 Born 近似下的表达壳修正:

$$L_{\text{shell}} = \frac{1}{2} \sum_j \left\{ \int_{2m_e v^2}^{\infty} \frac{dQ}{Q} f_{j0}(Q) - \int_0^{(\hbar\omega_0)^2 / 2m_e v^2} \frac{dQ}{Q} [f_{j0}(Q) - f_{j0}(0)] \right\}, \quad (3)$$

其中, $Q = 2mv^2$, m 为入射粒子质量。对于上式, Walske^[10] 在指出随着入射速度的增加壳修正逐渐消失, 可以将壳修正展开成 $1/v$ 的形式。Fano^[11] 给出:

$$L_{\text{shell}} = -\frac{\langle v_e^2 \rangle}{v^2} - \frac{\langle v_e^4 \rangle}{v^4} + O\left(\frac{1}{v^4}\right), \quad (4)$$

式中, v_e 为电子轨道速度, $O(1/v^4)$ 是关于 $1/v^4$ 无穷小量。Sigmund 和 Haagerup^[12] 给出三维谐振子形式下 L_{shell} 的表示为

$$L_{\text{shell}} = -\frac{3}{4} \hbar\omega_0 - \frac{25}{2} \left(\frac{\hbar\omega_0}{2m_e v^2} \right)^2. \quad (5)$$

在 高能时, 相同能量的入射粒子, 在不同浓度溶液中的射程是不同的, 这种现象称为密度效应。对密度修正 L_{density} , 只有在能量比较高时才会有一些轻微的变化, 采用 Sternheimer^[13] 给出的密度修正为

$$L_{\text{density}} = \begin{cases} 0, & x < x_0 \\ \frac{1}{2} [4.606x - D + a(x_1 - x)^3], & x \in [x_0, x_1] \\ \frac{1}{2} (4.606x - D), & x > x_1 \end{cases}, \quad (6)$$

这里 x 为粒子的运动变化,

$$x = \log(\phi\eta) = \frac{\ln(\eta^2 \phi^2)}{4.606},$$

其中,
$$\phi^2 = 1 - \frac{1}{\eta^2}, \quad \eta = \frac{E}{m_0 c^2},$$

而
$$D = 1 + 2 \ln \frac{I}{h\nu_p},$$

$$h\nu_p = \sqrt{4\pi n_{\text{el}} r_e} \hbar c, \quad r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2},$$

$$a = \frac{4.606(x_a - x_0)}{(x_1 - x_0)^3}, \quad x_a = \frac{D}{4.606},$$

n_{el} 为物质的电子密度, $n_{\text{el}} = Z_2 (N_{\text{av}} \rho / A)$, A 为靶原子的原子量, N_{av} 为阿伏加德罗常数, ρ 为靶的质量密度。对于浓缩的介质有:

$$\begin{aligned} & I < 100 \text{ eV 时} \\ & \begin{cases} D \leq 3.681, & x_0 = 0.2, x_1 = 2, \\ D > 3.681, & x_0 = 0.326D - 1.0, x_1 = 2; \end{cases} \\ & I \geq 100 \text{ eV 时} \\ & \begin{cases} D \leq 5.215, & x_0 = 0.2, x_1 = 3, \\ D > 5.215, & x_0 = 0.326D - 1.5, x_1 = 3. \end{cases} \end{aligned} \quad (7)$$

2.2 高阶修正

从公式(1)和(2)看出, 电子阻止本领正比于入射粒子电荷数 Z_1 的平方。也就是说, 无论对于正离子还是负离子, 用 Bethe-Bloch 给出的电子阻止本领都相同。然而 Barkas 观察到具有相同入射速度的 π^- 粒子在固体中的穿行深度稍大于 π^+ 粒子的穿行深度, 这意味着 π^- 的能量损失比 π^+ 的能量损失小, 这种现象称为 Barkas 效应。Anderson 等人测量质子与反质子的能量损失时发现: 同等入射速度下反质子的能量损失约比质子的能量损失低 3%—19%。

考虑高阶修正后, 对于 Bethe-Bloch 公式的一般表述为

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi e^4 Z_2}{m_e v^2} Z_1^2 L, \quad L = L_0 + L_1 + L_2 + \dots. \quad (8)$$

对于方程(8)来说, 方程右边第 1 项 L_0 是 Bethe-Bloch 公式, 第 2 项 L_1 通常称为 Barkas 效应或者 Z_1^3 效应^[14], 而方程的第 3 项 L_2 称为 Bloch 效应或者 Z_1^4 效应。Barkas 效应修正和 Bloch 效应修正的具体表示如下。

对于Barkas修正有很多种形式^[15-17]，主要有3种。

(1) 若采用Lindhard屏蔽势函数，给出的Barkas效应的形式为^[1]

$$L_1 = \frac{2Z_1 e^2 \omega_0}{m_e v^3} L_0 \quad (9)$$

(2) Ashley等^[18-20]给出在远距离碰撞下的Barkas修正为

$$L_1 = \frac{3\pi Z_1 e^2 \omega_0}{2m_e v^3} \ln \left(\frac{v}{1.7\omega_0 a_{\omega_0}} \right) \quad (10)$$

其中 $a_{\omega_0} = (2\hbar m_e \omega_0)^{1/2.75}$ ，为远距离碰撞参数。

(3) 依据质子和反质子的实验数据给出的一种依赖于 Z_2 的Barkas修正经验公式为

$$L_1 = \frac{L_{low} L_{high}}{L_{low} + L_{high}} \quad (11)$$

这里， $L_{low} = 0.001E$ 和 $L_{high} = (1.5/E^{0.4}) + 45000/Z_2 E^{1.6}$ 。

对Bloch效应修正主要考虑近心碰撞的贡献。由于Born近似理论只能描述远距离碰撞的问题，而对于近心碰撞的问题，Born近似理论遇到困难，而Bloch理论能成功地弥补Born近似在近心碰撞问题上存在的缺点^[17]。Bloch利用半经典的方法讨论了散射截面，为了使计算阻止本领更精确，Bichsel提出了Bloch修正的参数形式，该修正后的参数形式更适合大范围的高速阻止数据^[21]：

$$L_2 = -y^2 [1.202 - y^2 (1.042 - 0.855y^2 + 0.343y^4)] \quad (12)$$

这里 $y = Z_1 \alpha / \beta$ ， α 为精细结构常数。

3 计算结果与讨论

本文主要讨论在能量较高的情况下，入射粒子与靶物质分别为Si和 Al_2O_3 之间相互作用中的能量损失，分别讨论了在一阶Born近似下给出的相对论修正、壳修正、密度修正，在二阶Born近似下Barkas效应修正和Bloch效应修正，以及不同修正在总的电子阻止本领中所起的作用。

对于入射粒子He与Si靶之间的相互作用，在能量大约为190 MeV时，相对论修正开始起作用；随着入射能量的增加，在能量小于1 GeV时，相对论修正在整个电子能损中占1%，而当能量是几个

GeV时，相对论修正更重要。对于密度修正来说，也是在能量较高的情况下发挥作用；在能量大约为180 MeV时，密度修正在电子阻止本领中开始起作用；在能量不超过1 GeV时，密度修正大约占整个电子阻止本领的1%，而当能量更高时，所占比例更高。与之不同的是，电子阻止本领中的壳修正是在能量相对较低的情况下起作用，在能量低于100 MeV时，壳修正占整个电子能损的10%之多；在能量大于150 MeV时，壳修正不起作用，这也就证明了壳修正在能量较低时的重要性(见图1)。

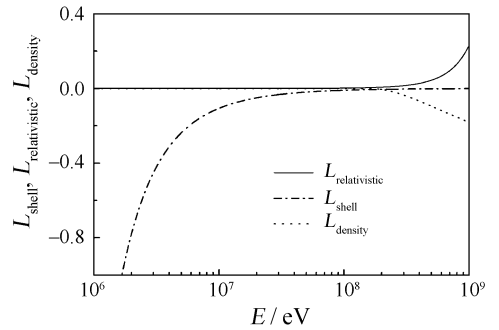


图1 He离子入射Si靶的壳修正、相对论修正和密度修正随入射能量的变化关系

下面讨论在Born二阶近似情况下的高阶修正。高阶修正分为两个部分：一是关于 Z_1^3 的Barkas效应修正；二是关于 Z_1 的Bloch修正。对Barkas效应修正，分别从理论和实验的角度讨论了几种关于Barkas效应修正的研究。通过计算发现，对于不同理论给出的Barkas修正，Lindhard采用屏蔽函数给出的计算值要比Ashley利用远距离碰撞下给出的计算值更好一些。虽然实验值很分散而且没有统计性，但是Lindhard理论和分散的实验值点更接近(见图2)。

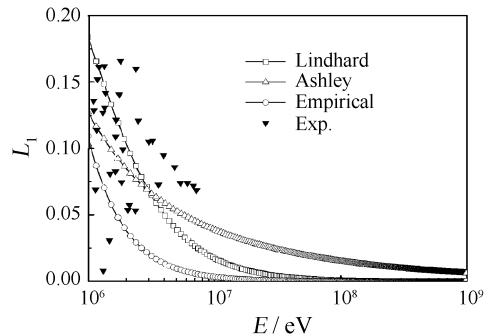


图2 入射He离子与Si靶相互作用时的Barkas修正、实验值随能量的变化关系^[22]

图3给出了不同入射粒子与Si靶之间的相互作用中各项修正与整个电子阻止本领(SP)的对比。图3(a)给出了He离子与Si靶之间的相互作用中各项修正与整个电子阻止本领的对比。发现Bloch修正在能量小于8 MeV时达到了7%之多,这也和入射粒子为质子时仅有0.1%有很大的差别。加入各种修正之后的电子阻止理论的结果和实验值符合得更好,这更显示了研究各种修正的必要性。对于高阶修正来说,Barkas效应和 Bloch修正只是在能量相对较低的情况下起作用,而能量在超过8 MeV时,高阶修正几乎不起作用(见图3(a))。同样也计算了重离子C入射Si靶在能量为10 MeV—1 GeV的电子阻止本领。研究发现,修正之后的Bethe-Bloch电子阻止本领适用的能量更高一些。在图3(b)中可以看出,对于高能离子的电子阻止本领来说,Barkas修正可以占整个电子阻止本领的9%,Bloch效应修正也可以占7%之多。由于重离子C的原子序数比He离子的原子序数大的原因,对于高阶修正,在大于40 MeV时开始趋近于零。

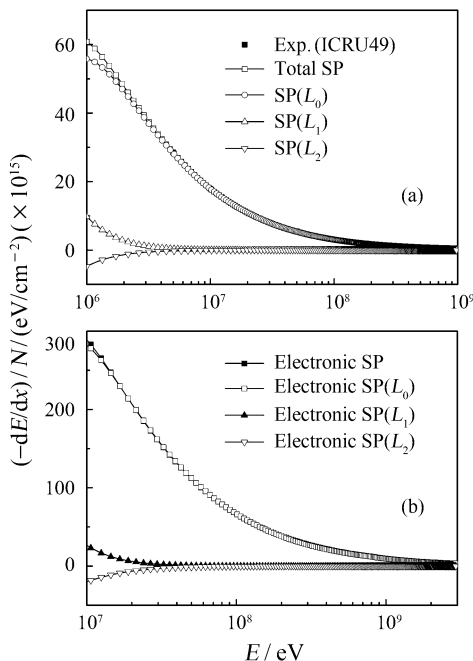


图3 不同入射粒子与Si靶之间的电子阻止本领(SP)随入射粒子能量的变化关系

(a) He离子入射Si靶^[23], (b) 重离子C入射Si靶。

图4给出了能量在1 MeV—1 GeV的 α 粒子与 Al_2O_3 相互作用中各修正项与整个电子阻止本领的对比。高能情况下,Barkas效应修正可以占到电子

阻止本领的13%之多,Bloch效应修正可以占到6%之多。对于高阶修正来说,Barkas效应和 Bloch修正只是在能量相对较低(能量不超过8 MeV)的情况下起作用,而能量超过8 MeV时,高阶修正几乎不起作用。发现加入各种修正之后的电子阻止理论值和实验值符合得更好,和实验值基本一致,说明了研究各种修正的必要性。

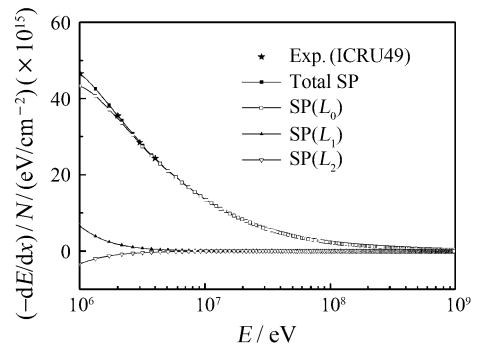


图4 He离子入射 Al_2O_3 靶时的电子阻止本领(SP)随入射粒子能量的变化关系

4 总结

本文系统研究了入射离子(He离子与C离子)与靶(Si和 Al_2O_3)之间相互作用的电子阻止本领的现有模型,分别讨论了入射粒子与靶核作用引起的相对论修正、壳修正、密度修正以及高阶修正 Barkas效应、Bloch效应对于电子阻止本领的影响。结果发现,在入射粒子与靶之间相互作用的电子阻止本领中,密度修正和相对论修正仅在能量较高时才发挥作用,而壳修正、Barkas效应和Bloch效应都是在能量相对较低的情况下发挥作用,壳修正最高可以达到整个电子阻止本领的10%,Barkas修正最高可以达到15%左右,而Bloch修正最高达到7%左右。通过计算发现,考虑了所有的修正之后的电子阻止本领和实验结果(ICRU49)符合得更好,这对以后研究重离子产生的生物学效应起着促进作用。对于研究生物育种、重离子治癌和辐射防护微观物理机制有重要意义。

参考文献(References):

- [1] Sigmund P. Particle Penetration and Radiation Effects. General Aspects and Stopping of Point Charges, Berlin: Springer, 2006, 180—268.

- [2] Zhang Fengshou. Nuclear Physics Review, 2006, **23**(1): 23(in Chinese).
(张丰收. 原子核物理评论, 2006, **23**(1): 23.)
- [3] Zhu Baozhu, Zhang Fengshou, Wang Zhiping, *et al.* Nuclear Physics Review, 2007, **24**(2): 138(in Chinese).
(朱宝珠, 张丰收等, 王志萍. 原子核物理评论, 2007, **24**(2): 138.)
- [4] Bethe H. Ann Physik, 1930, **5**: 324.
- [5] Bloch F. Ann Physik, 1933, **16**: 285.
- [6] Fano U. Annu Rev Nucl Sci, 1963, **13**: 1.
- [7] Fano U. Phys Rev, 1947, **72**: 26.
- [8] Fano U. Phys Rev, 1956, **102**: 385.
- [9] Fano U. Phys Rev, 1956, **103**: 1 202.
- [10] Walske M C. Phys Rev, 1952, **88**: 1 283.
- [11] Fano U. Ann Rev Nucl Sci, 1963, **13**: 10.
- [12] Sigmund P, Haagerup U. Phys Rev, 1989, **A34**: 892.
- [13] Ziegel J F. Physics Reference Manual December, 2005.
- [14] Mikkelen H, Esbensen H, Sigmund P. Nucl Instr and Meth, 1990, **B48**: 8.
- [15] Sigmund P. Advances in Quantum Chemistry, 2005, **48**: 7.
- [16] Khodyrev V A, Arnoldbik W M, Iferov G A, *et al.* Nucl Instr and Meth, 2000, **B191**: 164.
- [17] Paul H. Nucl Instr and Meth, 2006, **B247**: 166.
- [18] Ashley J C, Ritchie R H, Brandt W. Phys Rev, 1972, **B5**: 2 393.
- [19] Ashley J C, Ritchie R H, Brandt W. Phys Rev, 1973, **A8**: 2 404.
- [20] Ashley J C, Anderson V E, Ritchie R H, *et al.* Document 021195. New York: National Auxiliary Publication Service, 1974, 150—200.
- [21] Bichsel H. Phys Rev, 1990, **A41**: 3 642.
- [22] Janni J F. Atom Data Nucl Data Tables, 1982, 27.
- [23] Haul H. ICRU49: www-nds.iaea.or.at/stoppinggraphs.

Higher-order Corrections of Electronic Energy Loss in Interaction of Incident Particle with Targets^{*}

ZHU Bao-zhu^{1, 2, 3}, ZHANG Feng-shou^{1, 2, 4, #}, LUO Fei^{1, 2}, LI Yang^{1, 2}, SHI Song-jian^{1, 2}, WANG Xiong^{1, 2},
ZHAO Qiang^{1, 2}, ZHOU Hong-yu^{1, 2}

(1 *Key Laboratory of Beam Technology and Material Modification of Ministry of Education, College of Nuclear Science and Technology, Beijing Normal University, Beijing 100875, China;*

2 Beijing Radiation Center, Beijing 100875, China;

3 School of Physics Science and Technology, Xinjiang University, Urumqi 830046, China;

4 Center of Theoretical Nuclear Physics, National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou, Lanzhou 730000, China)

Abstract: The mechanisms of electronic energy loss in the process of incident particles interaction with Si and Al₂O₃ at proper energies are investigated. The contribution to the electronic energy loss from high-order corrections, such as the relativistic correction, the shell correction, the density correction, the Barkas-effect correction and the Bloch effect correction are discussed respectively. It is found that the shell correction, the Barkas-effect correction and the Bloch-effect correction are important at low energies, the relativistic correction and the density correction are important at high energies. The calculated results with these higher-order corrections are in good agreement with the experiment data (ICRU49).

Key words: higher-order correction; shell correction; density correction; Barkas effect; Bloch effect

* **Received date:** 24 Jan. 2008; **Revised date:** 3 Mar. 2008

* **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China(10575012, 10435020); Beijing Education Committee(XK100270454); Science Foundation of Beijing Normal University

Corresponding author: Zhang Fengshou, E-mail: fszhang@bnu.edu.cn