植物学通报 2005, **22** (6): 697~702
Chinese Bulletin of Botany

研 究 简 报

低能 T_i^+ 注入棉花种子的深度 - 浓度分布的模拟计算①

王林香② 王世亨

(新疆大学物理系 乌鲁木齐 830046)

摘要 国内许多单位开展了低能离子注入植物种子的实验研究, 但在生物诱变机理方面却尚未有定论, 其中低能离子注入植物种子的深度-浓度分布成为研究的一个焦点问题。许多人直接用LSS理论得到的TRIM程序, 从理论上计算了低能重离子注入植物种子的深度-浓度的分布, 却发现计算结果与实验测量结果相差甚远, 于是得出LSS理论及TRIM程序不能直接用于计算离子注入非均匀、非致密、有孔道的植物种子这种特殊的靶材料的结论。针对这一研究课题, 在目前尚未有更加成熟完善的理论模型和计算方法的前提下, 为了便于计算, 本文根据植物种子的结构特点, 对靶材料棉花种子进行了处理, 并对LSS理论进行了修正, 用蒙特卡罗方法计算了初始能量为20keV的T_i^+注入棉花种子的深度-浓度分布, 得到了与实验结果符合较好的分布曲线, 初步的确定了低能离子注入植物种子深度-浓度分布的一种理论计算方法。

关键词 离子注入, LSS理论, 蒙特卡罗方法, 深度-浓度分布

Simulation and Calculation of the Penetration Depth and Concentration Distribution for Titanium ions with Low Energy Implanted into Dry Cotton seed

WANG Lin-Xiang② WANG Shi-Heng

(*Department of Physics, Xinjiang University*, Urumuqi, 830046)

Abstract Much experimental research into ions with low energy implanted into plant seeds has been conducted, yet the optimal mechanism to induce aberrance has not been found. One focus is depth-concentration distribution for ions with low energy implanted into the seeds. Many investigators have used LSS theory and the TRIM program directly to calculate the distribution of ions implanted into seeds but find that calculation results are not good for experimental results, so they conclude that LSS theory and TRIM program cannot be used directly for calculation of specific targets such as heterogeneous, incompact, loose and porous seeds. Aiming at this research task, we deal with these targets and correct LSS theory according to the distinguishing texture of plant seeds, using the Monte-Carlo method to calculate the penetration depth and concentration distribution for titanium ions with 20 keV energy implanted into dry

①新疆大学 21 世纪教研项目(20030106)资助。
②通讯作者。Author for correspondence. E-mail: wanglinxiang23@126.com
收稿日期: 2005-04-04 接受日期: 2005-07-05 责任编辑: 于昕

https://www.sciengine.com/doi/10.3724/CBB-t25-061

cotton seed. We find a better curve, with calculation results from theory matched with those calculated by experimentation and preliminarily obtain a computational method about depth-concentration distribution for ions with low energy implanted into seeds.

Key words Ion implantation, LSS theory, Monte-Carlo method, Depth-concentration distribution

伴随着离子束生物技术的广泛应用及重离子注入植物种子生物效应研究的逐步深入, 人们对形成各种生物效应的物理过程和诱变机理更加关注(北京师范大学低能核物理研究所, 1982; 余增亮等, 1991; 陆挺等, 1991, 1994), 面对当前国内的两种观点: 一种观点认为低能离子注入植物种子造成细胞损伤是次级效应, 是间接作用的结果(卫增泉等, 1993, 1995); 另一种观点认为, 低能重离子能够穿过种皮到达胚细胞,通过质量和能量沉积造成双重损伤诱发突变, 是直接作用的结果(余增亮, 1997; 苏一等, 1997; 朱光华等, 2001; 汪新福等, 2002; 朱光华等, 2002)。两种观点的焦点集中在低能重离子注入植物种子的深度-浓度分布曲线上。大量实验表明, 低能重离子注入植物种子的深度-浓度分布曲线是一个带有长尾巴的非对称高斯分布(汪新福等, 2002; 朱光华等, 2002)。许多人直接用 LSS(纵向静态稳定性)理论及 TRIM 程序计算低能重离子注入植物种子的深度-浓度的分布, 与实验结果差别甚远(Lu Ting *et al.*, 2001; 朱光华等, 2001, 2002; 汪新福等, 2002)。所以我们从统计物理学的观点出发, 全面分析低能重离子注入植物种子的深度-浓度分布曲线, 根据植物种子的特点, 对靶材料进行了处理, 并对LSS理论进行了修正, 用M-C(蒙特卡罗)方法模拟计算了的注入棉花种子的深度-浓度分布, 得到了与杨惠玲等(2004)实验结果符合较好的分布曲线。

1 靶材料的处理及LSS理论的修正

1.1 靶材料的处理

考虑到目前国内在研究低能重离子注入植物种子的诱变机理方面没有更加成熟的理论, 所以我们根据LSS 理论的要求, 即靶材料是均匀和致密的, 同时考虑植物种子密度不均匀, 有大量的微小孔洞等特点, 对靶材料进行处 理 。

首先, 根据汪新福等(2002)的实验结果,我们将靶材料棉花种子分为25层, 每层厚1 μm, 同一层的密度$r(L)$认为是均匀的, 可以直接用LSS理论, 但不同层的$r(L)$是不同的, 以体现棉花种子密度的不均匀性, 整个靶的平均密度为棉花种子的密度(r = 1.4838 g/cm^3), 其表达式为:

$$r = 1/25 \sum_{i=1}^{25} r(L) \quad (1)$$

其次, 根据Lu Ting等(2001), 一般种子的生物组织内有16%的体积是直径为0.7 nm的孔洞.为了模拟该孔洞, 我们将分散的孔洞集中处理, 假定上述25层靶材料中有4层$r(L)$近似为零(空气的平均密度为1.30x10^{-3} g/cm^3, 该值与棉花种子的平均密度值相比较很小, 为了计算方便我们近似认为孔洞内的密度趋近于零, 假设当离子经过该层时不损失能量), 孔洞占靶材料总体积的 4/25。

1.2 LSS理论的修正

低能重离子入射到靶材料中的能量损失, 按照LSS理论,对单个入射离子,单位路程能量损失为:

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right) = -\left(\left(\frac{dE}{dx}\right)_n + \left(\frac{dE}{dx}\right)_e\right) = N[Sn(E) + Se(E)] \quad (2)$$

式中, E为入射离子在x点的能量, $\left(\frac{dE}{dx}\right)_n$是离子与核碰撞损失能量, $\left(\frac{dE}{dx}\right)_e$是离子与电子碰撞

https://www.sciengine.com/doi/10.3724/CBB-t25-061

损失能量, Sn(E)与Se(E)分别是原子核和电子的阻止截面, N 是单位体积内靶原子的平均数。在一级近似中, 认为生物体内的电子是自由电子气, Sn(E)和入射能量E无关; Se(E)与入射离子速度成正比, 见文献卫增泉等(1993)中的(1)到(4)式。而事实上, 核碰撞损失能量$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n$与入射能量$E$有关, 并非是常数, 因此我们对文献卫增泉等(1993)中的一级近似S_n^0进行修正, 通过函数拟合, 找到了核碰撞能量损失$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n$与离子能量$E$变化的函数关系如下:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = \rho(L) \times 10^9 \left(-0.6885 + 1.51\times 10^4/(2\pi)^{1/2} \times \sigma \left(0.795E + 0.8\right) \times \exp\left(-\left(\log\left(0.795E + 0.8\right) - \mu\right)^2/\left(2\times\sigma^2\right)\right)\right) \quad (3)$$

此函数关系是根据TRIM程序计算的T_i^+注入棉花种子的核碰撞能量损失$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n$的数据, 通过寻找函数关系拟合数据, 最终确定最佳参数μ和 s 的值(均为常数), 们对于不同的靶材料数值不同, $r(L)$和 E 的意义同前。

其次, 离子与靶原子碰撞过程中, 发生的质量沉积和电荷交换等过程十分复杂, 目前尚未有更加成熟完善的理论, 为了计算方便, 我们只考虑离子的能量损失。由于用LSS理论计算的总碰撞能量损失$\left(\frac{dE}{dx}\right)$较大, 碰撞几次离子就停止了, 与实验结果相差较大, 所以我们对$\left(\frac{dE}{dx}\right)$进行修正, 修正后为: $\left(\frac{dE}{dx}\right) = \frac{dE}{dx}\cdot w$, 修正系数w对于不同入射离子和不同靶材料是不同的, 通过计算结果与实验结果的比较, 最终确定最佳 w 的值。

2 基本假设、计算流程及程序框图

2.1 基本假设

对低能重离子注入棉花种子深度-浓度分布的模拟计算基于以下假设: 1)由棉花各组分的分子式(S.K阿罗拉[印], (高健译), 1987), 计算得到棉花种子的平均质量数M2 ≈ 5.90 μ, 而T_i^+的平均质量数M1 ≈ 47.95 μ, M1>>M2, 故认为T_i^+与棉花原子碰撞后方向向前, 整个碰撞过程近似认为是二维碰撞过程。2)假定每次碰撞后T_i^+所走的步径△x是随机的, 且偏转角在范围($-\frac{\pi}{2}$, $\frac{\pi}{2}$)内是随机的。3)计算中只考虑入射离子的能量损失, 并假设碰撞过程中能量损失是随机的。

2.2 计算流程

M-C方法是一种统计试验方法, 它是利用随机数的统计规律进行计算的, 现在已经广泛应用于许多领域(裴鹿成等, 1980), 我们在M-C计算中为了保证一定的计算精度, 总共跟踪了10000个T_i^+, 每个T_i^+都以初始能量E0从靶材料棉花种子的第一层垂直入射, 并与靶原子发生碰撞而损失能量, 每次碰撞的能量损失△E和所走的路程△x以及在范围($-\frac{\pi}{2}$, $\frac{\pi}{2}$)内的偏转角都是随机的, 计算中是通过调用了辅程序ran1(idum)(William *et al*., 1997)获得的, 其中随机数是从 0~1 的均匀分布。如果离子经过多次碰撞后能量未消耗完, 它将进入下一层, 继续碰撞并损失能量, 若T_i^+进入的这一层正好为孔洞, 即$r(L)$趋近于零, 则T_i^+将不损失能量进入再下一层, 直到能量消耗完停在该层中, 记录每层靶材料中停留的T_i^+数, 便可得到T_i^+注入棉花种子的深度 - 浓度分布。

2.3 程序框图

根据以上分析和假设,得到计算程序框图见图 1。在计算框图中, Z1、M1 分别是注入离子的原子序数和质量数, CU(I)表示在每一层最终停留的离子个数, F(I)是关于25层靶材料密度参量的一个数组, (F(25): 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,

https://www.sciengine.com/doi/10.3724/CBB-t25-061

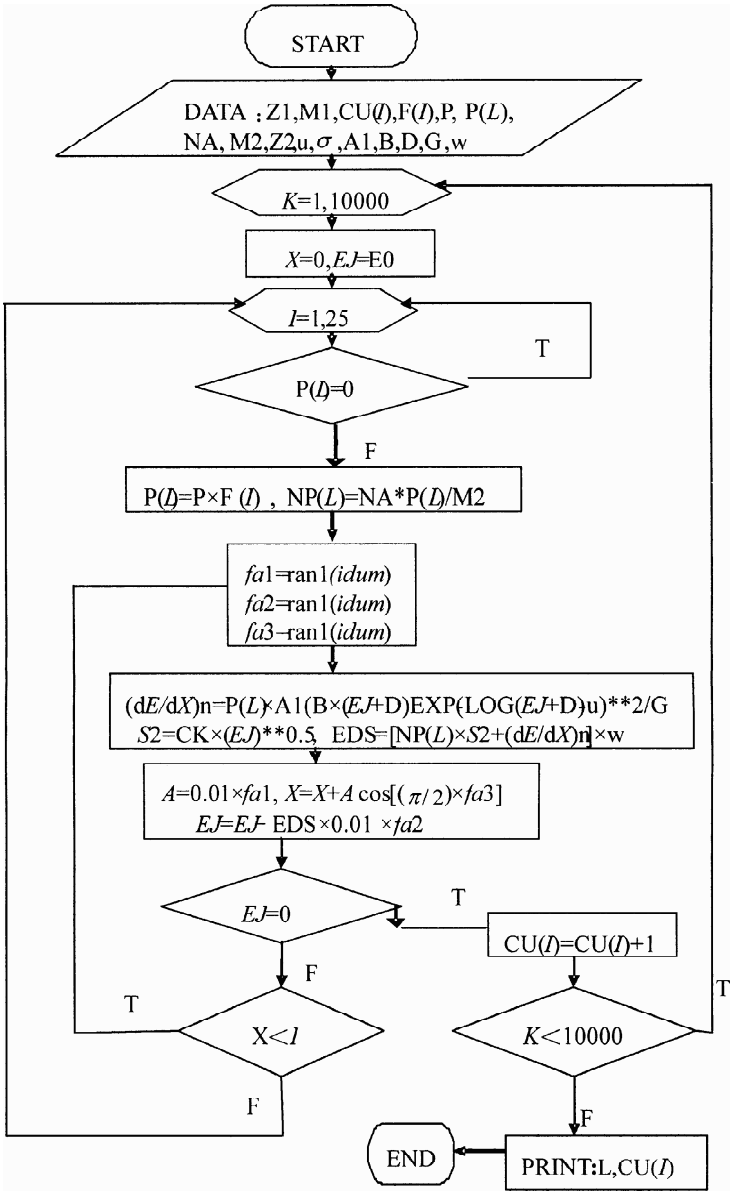


图 1　低能 T_i^+ 注入棉花种子的深度-浓度分布的计算程序

Fig. 1　Programme of simulation and calculation of the penetration depth and concentration distribution for titanium ions with low energy implanted into dry cotton seed

1×10^{-6}, 0.0018, 1.5, 2.8, 2.5, 3.0, 2.5, 1.2, 3.9)，P(*L*)=F(*I*)*P, P**是棉花种子的平均密度值**, NA**是阿伏加德罗常数**, C、H、O、N **分别表示棉花原子中这几种元素的质量百分含量**, P(L)**是每一层靶材料的密度**, A1、B、D、G **是拟合函数**(3)**式中的对应系数**, S2**表示电子阻止截面**, μ**和**σ **即为**(3)**式中的参量**, EDS**表示总的碰撞能量损失**, N(*L*)**表靶原子核密度**, *A***表示离子每次碰撞后所走的路程**, *X***表示离子的位置**, CU(*I*)**表示每一层的统计计数。**K **循环**

https://www.sciengine.com/doi/10.3724/CBB-t25-061

表示10 000个离子的循环, I循环表示离子的层循环, 最终通过判断离子的能量是否为零, 进行每一层的离子数的统计计数。

3 理论计算结果及实验数据

3.1 计算结果

表1是程序计算和文献(杨惠玲等, 2004)实验分别得出的20 keV T_i^+注入棉花种子的有关最可几深度、半宽度(FWHM)以及最大深度的结果, 通过比较, 我们可以看出计算结果与实验结果得到的最可几深度以及最大深度的值比较接近。图2是20keV T_i^+注入棉花种子的深度-浓度分布曲线,为了将程序计算结果与实验测量结果进行比较, 两条曲线均按照峰值(离子数达到的最大值)进行了归一。

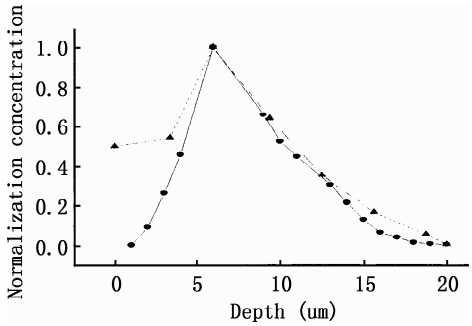


图2 20 keV T_i^+的注入棉花种子的深度-浓度分布

Fig. 2 The depth and concentration Distribution for Titanium ions with 200 keV energy implanted into the cotton seed by computation -●-是程序计算结果;-▲-是文献杨惠玲等(2004)的实验结果

3.2 结果分析

由表1和图2看出, M-C计算结果与文献杨惠玲等(2004)实验结果基本符合, 最可几深度Ro和最大深度Rmax符合较好, 曲线后沿也基本符合, 但两条曲线前沿符合较差, 所以半高宽(FWHM)计算值偏小。分析曲线前沿符合不太好的原因可能有两点: 首先我们在实验测量中发现样品注入表面堆积了大量的注入离子, 就像整个注入面镀了一层金属离子, 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, X=0处的数据很难测准, 测量值往往偏高, 测量零点的取法对其影响很大; 其次从计算角度来看, 计算机建模与实验过程并不完全相同, 即使反复调试参数得到的X=0处的离子浓度也极低, 调整不好将影响整个曲线的走向和峰值位置。由以上分析不难看出, X=0处的离子浓度, 测量值偏高, 计算值偏低, 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。

4 结束语

大量的工作证明: 离子与植物种子等非致密物质相互作用不能直接用LSS理论来解决, 也不能用TRIM程序来计算(汪新福等, 2002), 在尚未看到与实际符合较好的理论的基础上, 我们依据LSS理论的同时考虑植物种子的结构特点, 对靶材料棉花种子进行了处理, 并对LSS理论进行了修正, 用M-C方法模拟计算了20keV的T_i^+注入棉花种子的深度-浓度分布,

表 1 M-C计算和文献杨惠玲等(2004)实验分别得到的20keV T_i^+注入棉花种子的深度-浓度分布

Table 1 The depth and concentration Distribution for Titanium ions with 200 keV energy implanted into the cotton seed by computation using Monte-Carlo method and experiment of literature (Yang *et al*., 2004) separately

	FWHM	The depth of the largest concentration (Ro)	The largest depth(Rmax)
Computational result (μm)	6.0	8.0	20
Experimental result (μm)	6.0	12.16	21

https://www.sciengine.com/doi/10.3724/CBB-t25-061

得到了与文献杨惠玲等(2004)实验测量结果符合较好的曲线。

本工作设计的计算模型比较粗糙,计算结果也是初步的,等计算模型进一步完善后,可计算不同能量的其他离子注入植物种子的深度-浓度分布,尤其是通过理论计算可以得到实验上很难测量的N^+离子注入植物种子的深度-浓度分布,同时利用模型的进一步优化,可得到更好的计算结果。因此我们认为本工作对于离子注入植物种子深度-浓度分布的计算是一个良好的开端,为研究离子注入生物体靶材料的物理机理提供了一种初步的理论计算方法。

参 考 文 献

北京师范大学低能核物理研究所 (1982) 离子注入原理与技术. 北京出版社, 北京, pp. 5-28

陆挺, 卫俊智, 朱凤绥 (1991) 离子注入引起植物变异的研究. 北京师范大学学报(自然科学版), **27:** 421-426

陆挺, 谢立青, 朱凤绥 (1994) 离子注入植物种子的生物效应研究. 核技术, **17:** 443-448

陆挺, 周宏余, 汪新福 (2001) 离子注入植物引起生物效应的机理. 北京师范大学学报(自然科学版), **32:** 227-229

裴鹿成, 张孝泽 (1980) 蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的运用. 科学出版社, 北京, 338-389

苏一, 李毅, 辛华 (1997) 绿豆种胚中离子注入深度的研究. 核技术, **20:** 718-721

汪新福, 陆挺, 周宏余 (2002) 低能注入花生种子的深度研究. 原子能科学技术, **36:** 531-534

卫增泉, 韩光武 (1995) 低能重离子注入麦胚引起身深层细胞损伤的一种可能机制. 核技术, **18:** 90-93

卫增泉, 刘玉岩, 王桂林 (1993) 低能重离子注入小麦胚内的作用范围. 辐射研究与辐射工艺学报, **11:** 16-18

杨惠玲, 范兆田, 骆建敏 (2004) 低能注入植物种子的深度 - 浓度的初步研究. 新疆大学学报(自然科学版), **21:** 50-154

余增亮, 邱励俭, 霍裕平 (1991) 离子注入生物效应及育种研究发展. 安徽农学院学报, **18:** 251-257

余增亮 (1997) 离子束与生命科学——一个新研究领域. 物理, **26:** 333-338

朱光华, 周宏余 (2002) 低能离子注入种子的浓度 - 深度分布测定. 第三次全国离子束工程学大会及第一次国际学术研讨会论文集. 乌鲁木齐, pp. 38-40

朱光华, 周宏余, 汪新福 (2001) PIXE、SEM 与切片技术相结合研究低能离子注入种子的浓度 - 深度分布. 核技术, **24:** 456-460

S.K 阿罗拉[印](高健译)(1987) 豆类的化学和生物化学. 科学出版社, 北京, pp. 98-105

Lu Ting, Yu WeiZhong, Zhou HongYu (2001) Positron Annihilation Study on Surface Structure of Biological Samples Implanted by Ions with low Energy. *Chinese Physics*, **10:** 145-147

William H Press (1997) Numerial recipes in Fortran 77. The art of scientific computing. Library of congress cataloguing in Publication Data, Beijing, pp. 746-750

https://www.sciengine.com/doi/10.3724/CBB-t25-061