

文章编号: 1007-4627(2010)03-0341-05

# 模拟计算低能重离子注入彩棉种子的深度\*

黄旭初<sup>1,2</sup>, 侯娟<sup>1,2</sup>, 孙毅<sup>3, #</sup>, 刘效勇<sup>1,2</sup>, 井群<sup>1,2</sup>

(1 石河子大学生态物理重点实验室, 新疆 石河子 832000;

2 石河子大学师范学院物理系, 新疆 石河子 832000;

3 昌吉学院物理系, 新疆 昌吉 832004)

**摘要:** 采用蒙特卡罗方法, 模拟计算了 20 keV Ti<sup>+</sup> 注入彩棉种子的深度-浓度分布。核碰撞能量损失采用经典的两体碰撞理论, 电子能量损失用 Lindhard-Scharff 公式, 计算得到 Ti<sup>+</sup> 在彩棉种子中的最可几深度是 6.66  $\mu\text{m}$ , 与实验结果非常接近。表明理论模型建立相对合理, 为研究低能重离子与生物体之间的相互提供了理论基础。

**关键词:** 离子注入; 蒙特卡罗模拟; 种子; 深度-浓度分布

中图分类号: Q319.2

文献标识码: A

## 1 引言

离子束用于诱变育种、细胞加工和转基因等方面, 已经取得显著的进展<sup>[1, 2]</sup>。但是, 到目前为止, 这方面的理论研究尚不完善, 尤其是低能离子束生物效应的机理仍然很不清楚。问题的关键是质量、能量和电荷三位一体的低能离子怎样进入生物体, 进入生物体后沉积的深度-浓度分布规律, 以及沉积所造成的影响<sup>[3]</sup>。理论上对离子射程的计算主要是根据均匀物质建立的射程理论进行计算<sup>[4]</sup>。王超等用 LSS 理论计算 200 keV 的 V<sup>+</sup> 在花生种子中的射程只有 0.5  $\mu\text{m}$ <sup>[5]</sup>, 韩光武等用蒙特卡罗 (Monte Carlo) 方法模拟低能重离子 (能量小于 200 keV) 注入生物材料的射程小于 1.5  $\mu\text{m}$ <sup>[6]</sup>。在实验上由于实验仪器精度和测试方法的不同, 测量的最大深度也有所不同, 但根据目前文献报道可以确定 20—200 keV 的低能重离子注入植物种子的最大深度一般大于 10  $\mu\text{m}$ <sup>[7]</sup>。利用现有理论计算方法得到的结果与实验相差较大, 为此本文提出一个较接近于实际的生物靶模型和相对可靠的计算方法。

## 2 物理模型

植物种子的各个器官是由细胞组成, 将单个细

胞划分成细胞壁、细胞膜、细胞质、亚细胞颗粒 4 部分逐一计算 (见图 1)。细胞壁是以纤维素纤维为骨架, 以半纤维素、果胶和糖蛋白为基质, 通过共价键和非共价键的结合, 交叉形成一个高度复杂的网状结构, 厚度约为 1  $\mu\text{m}$ 。组成细胞壁骨架的纤

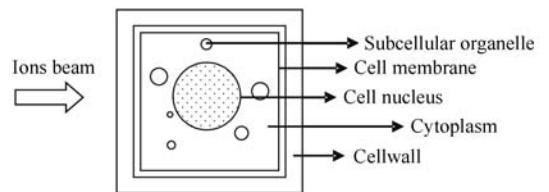


图 1 靶模型组成结构示意图

维素分子是由很多 D 葡萄糖残基 ( $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_5$ ) 彼此以  $\beta$ -1, 4-糖苷链连接而成<sup>[8]</sup>, 可以用  $(\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_5)_n$  来近似细胞壁的主要成份。根据细胞膜的“流体镶嵌”模型, 细胞膜是由膜磷脂的双分子层作为基本骨架, 膜蛋白镶嵌在双分子层表面形成, 厚度一般不超过  $1 \times 10^{-2} \mu\text{m}$ 。由此可以用膜磷脂近似细胞膜的主要成份, 分子式为  $\text{NC}_{41}\text{H}_{80}\text{O}_8\text{P}$ 。细胞质主要由细胞液包围着线粒体、内质网、高尔基体、维管与维丝、中心粒和叶绿体等细胞器组成, 可认为细胞质的主要成分是  $\text{H}_2\text{O}$ 。各种亚细胞颗粒 (随机细

\* 收稿日期: 2009-12-11; 修改日期: 2010-01-12

\* 基金项目: 昌吉学院院级基金项目资助 (08YJYB012)

作者简介: 黄旭初 (1978-), 男 (汉族), 四川眉山人, 讲师, 硕士研究生, 从事离子束与生物工程研究; E-mail: hxuchu@163.com

# 通讯联系人: 孙毅, E-mail: gghels@163.com

胞器)分布在细胞质内,亚细胞颗粒的大小一般在 1—5  $\mu\text{m}$  之间,其各元素的原子比可以通过靶材料内蛋白质和脂肪的组成与含量得到。

实验测得彩棉种子的组成与含量分别为:水份 6.1%、脂肪 33.4%、蛋白质 38.5%、碳水化合物 14.6%、纤维素 2.1%和无机盐 5.3%。根据蛋白质与脂肪的组成和含量,计算出亚细胞颗粒的分子组成近似为(忽略碳水化合物、无机盐) $\text{C}_{16}\text{H}_{30}\text{N}_3\text{O}_5$ 。根据细胞结构建立的靶模型见表 1,如果离子能够穿过这 4 个区域将进入下一个循环。

表 1 模型的主要参数

区域	直径/ $\mu\text{m}$	结构	分子组成	密度 /( $\text{g}/\text{cm}^3$ )
细胞壁	1	纤维素微纤丝	$\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_5$	1.33
细胞膜	$1 \times 10^{-2}$	膜磷脂	$\text{NC}_{11}\text{H}_{80}\text{OP}$	0.92
细胞质	20	水	$\text{H}_2\text{O}$	1.0
亚细胞器	0.1—10	蛋白质及脂肪	$\text{C}_{16}\text{H}_{30}\text{N}_3\text{O}_5$	1.35

### 3 计算方法

#### 3.1 核碰撞能量损失

根据经典的两体碰撞理论,粒子同靶原子的单次散射后能量转移为

$$T(\theta_c) = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_0 \sin^2\left(\frac{\theta_c}{2}\right), \quad (1)$$

其中,  $M_1$  和  $M_2$  分别为入射离子和靶原子的质量,  $E_0$  为入射粒子的初始能量,  $\theta_c$  为质心系下的入射粒子的散射角。若散射截面为  $d\sigma = 2\pi p dp$ , 靶材料的原子密度为  $N$ , 那么当该粒子在固体中穿行长度为  $\Delta x$  时,可以得到核能遥的表示式:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_n = N \int_0^{T_{\max}} T d\sigma(T) = NS_n(E_0), \quad (2)$$

其中  $S_n$  表示核阻止截面,由下式给出:

$$S_n = \int_0^{T_{\max}} \frac{4\pi T}{T_{\max}} \frac{p}{\sin(\theta_c)} \left| \frac{dp}{d\theta_c} \right| dT. \quad (3)$$

根据 Lindhard 等<sup>[9]</sup>引入约化变量的方法,可以将核阻止本领表示成约化阻止本领的形式:

$$S_n = \frac{8.462 \times 10^{-15} Z_1 Z_2}{(1 + m_2/m_1)(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} S_n(\epsilon), \quad (4)$$

其中  $S_n(\epsilon)$  和  $\epsilon$  分别为约化阻止本领和约化能量:

$$S_n(\epsilon) = \epsilon \int_0^\infty \sin^2\left(\frac{\theta_c}{2}\right) dB^2, \quad B = \frac{p}{a_U} \quad (5)$$

( $a_U$  普适屏蔽长度),

$$\epsilon = \frac{a_U}{Z_1 Z_2 e^2} \frac{m_2}{m_1 + m_2} E_0. \quad (6)$$

由此,通过数值计算可以得到离子在不同区域的核阻止本领。

#### 3.2 电子碰撞能量损失

由于涉及到入射粒子同靶原子核外电子的多体相互作用过程,计算过程较为复杂,这里采用 Lindhard-Scharff 经验公式<sup>[10]</sup>计算:

$$\Delta E_e = NL(N)S_e(E), \quad (7)$$

其中  $S_e(E)$  为电子阻止本领:

$$S_e(E) = \frac{1.212 Z_1^{6/7} Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2} M_1^{1/2}} E^{1/2}, \quad (8)$$

其中,  $Z_1$  和  $Z_2$  分别为入射原子和靶原子的核电荷数。

#### 3.3 射程的计算

近似认为核碰撞能量损失和电子碰撞能量损失相互独立,那么入射粒子在单位路径上的总能量损失为

$$\begin{aligned} \left(-\frac{dE}{dx}\right) &= \left(-\frac{dE}{dx}\right)_n + \left(-\frac{dE}{dx}\right)_e \\ &= N(S_n + S_e). \end{aligned} \quad (9)$$

根据布拉格提出的阻止本领具有线性叠加的特性,对于具有相当于  $A_m B_n$  组成的混合物其阻止本领由下式给出:

$$S^{A_m B_n} = mS^A + nS^B, \quad (10)$$

其中,  $S^A$  和  $S^B$  分别是 A 原子和 B 原子的阻止本领。分别计算 C, H, O 和 N 元素总的核阻止截面  $S_n$  和电子阻止本领  $S_e$ , 可得到入射粒子在生物材料中的总阻止本领  $S$ 。若用  $R$  表示粒子在靶材料中的实际穿行路程,  $R_p$  为粒子的总射程  $R$  在其入射方向的投影,  $\Delta R_p$  为射程偏离,那么粒子在靶材料中的总射程可以表示为

$$R = \int_0^{E_0} \frac{dE}{-dE/dx} = \int_0^{E_0} \frac{dE}{NS(E)}. \quad (11)$$

### 3.4 碰撞参数和自由程的确定

在低能情况下，碰撞自由程  $L(N)$  可以近似为原子间的平均间距，若每个单位步长距离  $S_i$  是随机的，则直接抽样可以得到碰撞步长，表示为  $S_i = -L(N) \times \ln \xi_1$ ，其中  $N$  表示靶原子密度， $\xi_1$  表示  $[0, 1]$  之间的随机数。在程序设计中，通过长度为  $L(N)$  的飞行路程中随机抽样得到可能发生碰撞的碰撞参数  $p = [-\ln \xi_2 / \pi N L(N)]^{1/2}$ ，其中  $\xi_2$  表示  $[0, 1]$  之间的随机数。

### 3.5 散射角和方位角的确定

入射离子在靶材料中的散射角与微分散射截面  $d\sigma$  有关，由碰撞参数通过数值计算可以得到相应的散射角，但散射角应满足一定的范围  $[\theta_{\min}, \pi]^{[11]}$ ，其中  $\theta_{\min}$  的大小由下式决定：

$$\sigma_{\tau} = \int_{\theta_{\min}}^{\pi} d\sigma(\theta) = N^{-2}, \quad (12)$$

其中， $N$  为单位体积中的靶原子数。

方位角  $\Psi$  为 0 到  $2\pi$  之间随机分布，因此可抽样得到： $\Psi = 2\pi \xi_3$ ，其中  $\xi_3$  为 0 到 1 之间的随机数。

## 4 计算结果与分析

根据上述原理，采用蒙特卡罗方法模拟计算  $Ti^{+}$  注入彩棉种子，近似认为注入离子与靶原子在经过自由程碰撞后平均偏转角小于  $5^{\circ}$ ，当离子能量小于 5 eV 终止循环。通过跟踪 5000 个离子，分别记录弹性能量损失和非弹性能量损失及射程。

### 4.1 能量对阻止本领的影响

根据带电粒子在靶材料中的能量损失机制，在 高能部分是核碰撞能量损失，低能部分是电子碰撞能量损失，计算出 20—200 keV 的  $Ti^{+}$  注入彩棉种子阻止本领和能量之间的关系如图 2 所示。

通过计得到靶模型 4 个区域内阻止截面和能量之间的关系(图 2)。从图中可以看出，随能量的增加核阻止本领逐渐减弱，电子阻止本领逐渐加强，这与离子在固体材料中的能量损失机制基本一致。通过对比核阻止本领和电子阻止本领的数量级，可以看出当能量增加到 200 keV 时，电子阻止本领仍然比核阻止本领小 2 个数量级左右，说明在此能量区间靶材料对  $Ti^{+}$  的阻止本领主要来自于核阻止本

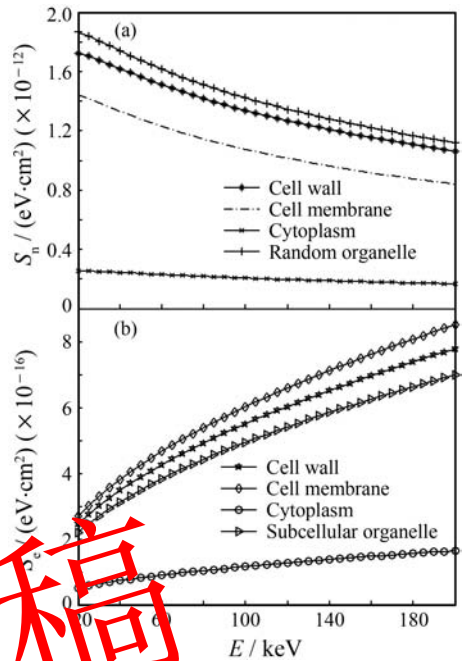


图 2 阻止本领和能量的相互关系

(a) 核阻止本领和能量的关系；(b) 电子阻止本领和能量的关系。

领，故在射程计算中忽略电子碰撞能量损失的影响。离子在细胞壁、细胞膜和随机细胞器中的核阻止与电子阻止随能量的变化关系相差不大，在细胞质区域核阻止与电子阻止相对较小，这与不同区域内靶材料的组成相关。由于随机细胞器主要由蛋白质和脂肪组成，在很小的体积内蛋白质结构近似于晶体结构，因此在这个区域内对离子的射程影响最为明显。然而在细胞质内是由水构成的，离子在这个区域内受到的阻止作用就相对小一些。

### 4.2 能量沉积与射程分布

图 3 给出了 20 keV  $Ti^{+}$  在靶模型中 4 个不同区域内的能量沉积分布曲线。从图中看出，4 条曲线的总体趋势一致，在射程的末端均存在一个尖锐的 Bragg 峰，但在不同区域 Bragg 峰的高度和位置有较大差异，也即射程末端沉积的能量多少不同。对单个细胞，细胞壁和细胞膜占整个细胞的比例较少，能量沉积可以忽略不计。随着入射深度的增加离子能量沉积也逐渐增加，分别在 8.85 和 11.97  $\mu m$  处形成 Bragg 峰，表明在细胞质和随机细胞器区域能量沉积作用较为明显。

根据文献[12]用能量色散 X 射线谱仪进行微区成分分析，测得 20 keV  $Ti^{+}$  注入彩棉种子的深度-浓度分布。为了将计算结果与实验结果<sup>[12]</sup> 进行

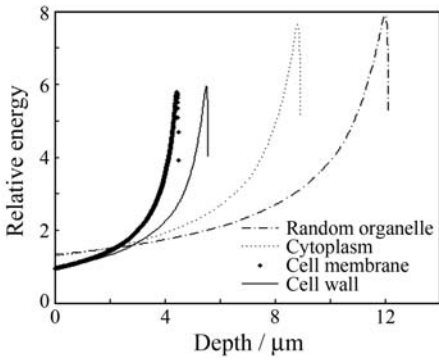


图 3 Ti<sup>+</sup>注入彩棉种子的能量沉积分布曲线

对比,对曲线进行了归一化处理(各个深度的离子数除以峰值处的离子个数)(见图4)。从图中看出,离子的浓度分布计算结果与试验结果基本一致。两条曲线在中间部分吻合较好,在曲线的前端和尾部与实验结果出现了一些差异。从假设模型来看,在0—5 μm之间是属于细胞壁和细胞膜及细胞质的较浅区域,物质组成相对均匀,纤维丝之间组成的网状结构给离子进入细胞内部提供了条件,因此离子在这个区间内不容易沉积下来,同时计算中忽略了级联碰撞及离子之间的相互作用,认为离子始终向前不会发生大角度的偏转,这使得计算结果略低于实验值。在35—45 μm区间由水和随机细胞器组成,这时离子已经穿过细胞核,由于随机细胞器在一定的概率范围内随机出现,并且体积也随机变化,使得离子在这个区间的浓度分布出现了较大的波动。本文计算出20 keV的Ti<sup>+</sup>注入彩棉种子的最可几射程是6.66 μm,实验测得最可几射程为6.61 μm。计算结果与实验结果非常接近,浓度分布得基本一致,说明本文的模型建立相对合理。从

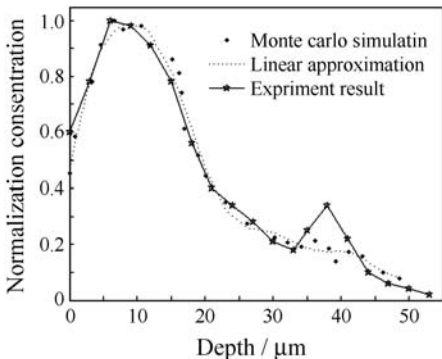


图4 20 keV Ti<sup>+</sup>注入彩棉种子的深度-浓度分布(实验数据参考文献[7])

个峰,对此还不能解释存在的原因,推测可能是计算中忽略了级联碰撞、电荷交换及其他一些次级因素的影响。要使计算结果与实验更为吻合,一方面需要在计算中考虑更多的影响因素,另一方面还需要对生物靶材料的结构作更多分析。

与其它计算方法相对比,TRIM程序<sup>[13]</sup>和多组元匀相靶模型<sup>[4]</sup>的计算方法在植物种子中的穿透深度都不会超过1 μm的距离,明显与实验结果有较大的差异,本文建立的靶模型相对简单,计算采用经典的两体碰撞理论和Lindhard-Scharff公式,并通过靶材料的改进取得了较好的计算结果。

### 5 结语

通过理论计算表明,20 keV的Ti<sup>+</sup>在彩棉种子中的最可几射程是6.66 μm,最大射程可以达到48.56 μm,大部分离子停留在细胞质区域,能量沉积也主要发生在细胞质和随机细胞器区域,在不考虑X射线、电荷交换及其他一些次级作用的基础上,离子不太可能穿过单个细胞。有研究表明,低能重离子对植物种子有明显的诱变作用<sup>[14]</sup>,这说明仅用核碰撞能量损失来解释离子束与生物体之间的相互作用是不合适的,电荷交换及碰撞产生的生物效应可能是诱变的主要原因。本文建立的靶模型过程中忽略了细胞之间的胞间联丝,胞间联丝通道的直径一般约为20—40 nm,若考虑胞间联丝的作用会使离子最大深度有所增加,但不会超过1—2个细胞的范围。模型中对亚细胞颗粒的组成作了近似处理,在对各种细胞器的成分和结构不是很清楚的情况下,从计算结果上看还是相对合理,但需要对靶材料做大量的实验测定。用线性叠加的办法算出的阻止本领对于金属化合物来说与实验符合较好,对其他化合物应考虑化学键效应,所以在计算生物材料的过程中,要使理论与实验更为接近还必须对靶材料的组成与分子结构做更深入的研究。

### 参考文献 (References):

[1] Yu Zengliang, Qiu Lijian, Huo Yuping. Journal of Anhui Agricultural College, 1991, **18**(4): 251(in Chinese).  
(余增亮, 邱励俭, 霍裕平. 安徽农学院学报, 1991, **18**(4): 251.)

[2] Lu Ting, Wei Funzhi, Zhu Fengsui, et al. Journal of Beijing

实验结果上看到,在35—45 μm离子浓度分布有一

- Normal University (Natural Science), 1991, **27**(4): 421 (in Chinese).  
(陆挺, 卫俊智, 朱凤绥, 等. 北京师范大学学报(自然科学版), 1991, **27**(4): 421.)
- [3] Wei Zengquan, Han Guangwu, Li Qiang, *et al.* Acta Biophysica Sinica, 1996, **12**(2): 315 (in Chinese).  
(卫增泉, 韩光武, 李强, 等. 生物物理学报, 1996, **12**(2): 315.)
- [4] LU Xiaogui, Luo Liaofu. Acta Biophysica Sinica, 2006, **22**(1): 57 (in Chinese).  
(吕晓桂, 罗辽复. 生物物理学报, 2006, **22**(1): 57.)
- [5] Wang Chao, Lu Ting, Zhong Hongyu, *et al.* Acta Biophysica Sinica, 2001, **17**(2): 351 (in Chinese).  
(王超, 陆挺, 汪新福, 等. 生物物理学报, 2001, **17**(2): 351.)
- [6] Hang Guangwu, Ma Shouwu, Wei Zengquan, *et al.* Nuclear techniques, 2002, **18**(12): 759 (in Chinese).  
(韩光武, 马受武, 卫增泉, 等. 核技术, 1995, **18**(12): 759.)
- [7] Liu Feng, Wang Yugang, Xue Jianming, *et al.* Acta Biophysica Sinica, 2002, **18**(1): 117 (in Chinese).  
(刘峰, 王宇钢, 薛建明, 等. 生物物理学报, 2002, **18**(1): 117.)
- [8] Wang Kunren, Xue Shaobai, Liu Huitu. Cell Biology (in Chinese). Beijing: Public of Beijing Normal University, 1998, 175—178.  
(汪仁, 薛绍白, 柳惠图. 细胞生物学(第2版). 北京: 北京师范大学出版社, 1998: 175—178.)
- [9] Lindhard J, Scharff M, Schlitt H E. Mat Fys Medd Dan Vid Selsk, 1963, **33**(14): 1.
- [10] Ziegler J F, Biersack J P, Littmark U. The Stopping and Range of Ions in Solids. New York: Pergamon Press, 1985, **1**: 100—150.
- [11] Pei Lucheng. Computer Random Simulation, Changsha: Public of Hunan Science and Technology, 1989, 611—617 (in Chinese).  
(裴鹿成. 计算机随机模拟. 长沙: 湖南科学技术出版社, 1989, 611—617.)
- [12] Yang Huiling, Wang Shiheng, Fan Zhaotian, *et al.* Journal of Xinjiang Normal University (Natural Science), 2005, **24**(2): 44 (in Chinese).  
(杨惠玲, 王世亨, 范兆田, 等. 新疆师范大学学报(自然科学版), 2005, **24**(2): 44.)
- [13] Wang Xinfu, Lu Ting, Zhou Hongyu, *et al.* Atomic Energy Science and Technology, 2002, **36**(6): 531 (in Chinese).  
(汪新福, 陆挺, 周宏余, 等. 原子能科学技术, 2002, **36**(6): 531.)
- [14] Liu Zhifang, Shao Junming, Tang Zhangxiong, *et al.* Journal of Nuclear Agricultural Sciences, 2006, **20**(1): 1 (in Chinese).  
(刘志芳, 邵俊明, 唐掌雄, 等. 核农学报, 2006, **20**(1): 1.)

## Simulation of Penetration Range Distribution of Ion Beam with Low Energy Implanted in Colored Cotton Seeds\*

HUANG Xu-chu<sup>1,2</sup>, HOU Juan<sup>1,2</sup>, SUN Yi<sup>3, #</sup>, LIU Xiao-yong<sup>1,2</sup>, JIN Qun<sup>1,2</sup>

(1 Key Laboratory of Biophysics, Shihezi University, Shihezi 832000, Xinjiang, China;

2 Physics Department of Normal College, Shihezi University, Shihezi 832000, Xinjiang, China;

3 Physics Department of Changji University, Changji 832004, Xinjiang, China)

**Abstract:** The depth and density distribution of 20 keV Ti<sup>+</sup> implanted into colored cotton seeds is simulated by the Monte Carlo method. The energy loss of incident ions due to nuclear scattering is calculated by using binary collision approximation, and the electronic energy loss is calculated by Lindhard-Scharff formulation. On the basis of some theoretical considerations of the target material, the most probable depth of 20 keV Ti<sup>+</sup> implanted into colored cotton seeds is calculated to be 6.66 μm, which agrees with experimental results. This indicates that the model is appropriate to calculate the depth and density distribution of the low energy ions implanted in plant seeds.

**Key words:** ion implantation; Monte Carlo simulation; seed; depth-concentration distribution

\* Received date: 11 Dec. 2009; Revised date: 12 Jan. 2010

\* Foundation item: Foundation of Changji University(08YJYB012)

# Corresponding author: Sun Yi, E-mail: gghels@163.com