

# 蒙特卡罗计算 $\gamma$ 射线在金红石 $\text{TiO}_2$ 中的位移损伤

报告人：鄂得俊

兰州大学核科学与技术学院

2019年8月19日

- ① 研究背景
- ② MCCM算法及其模型
- ③ 计算结果
- ④ 结论

# 1 研究背景

## ●材料辐照效应

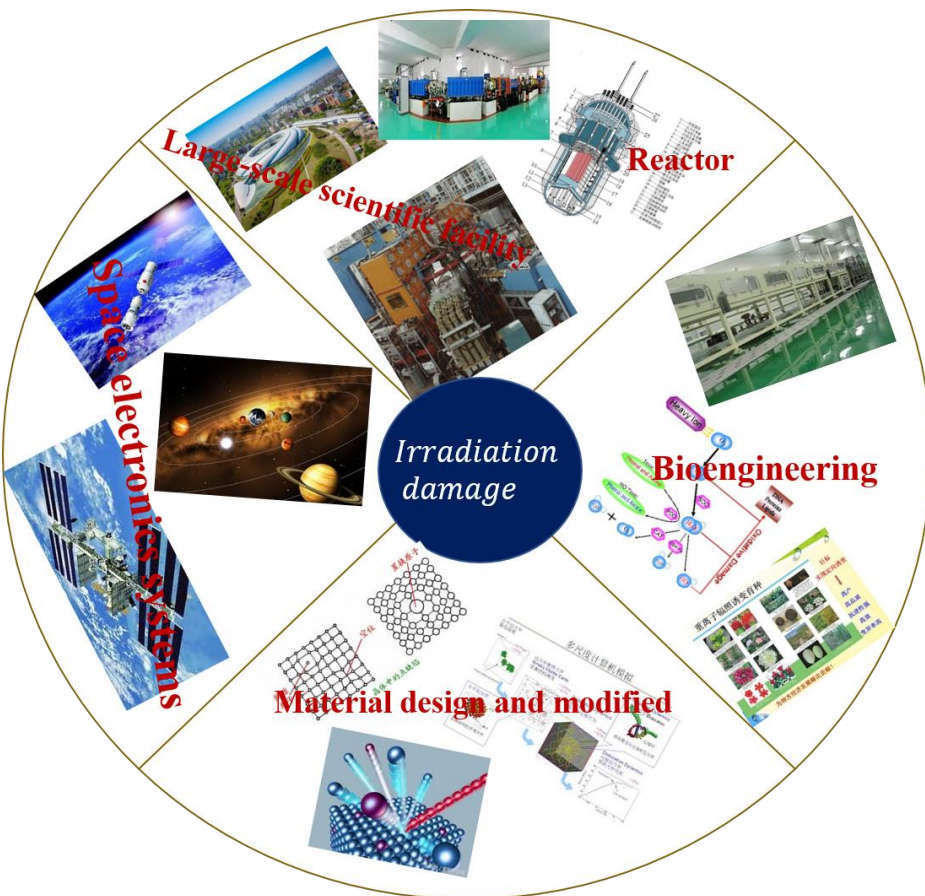


图 1 材料辐照效应的应用

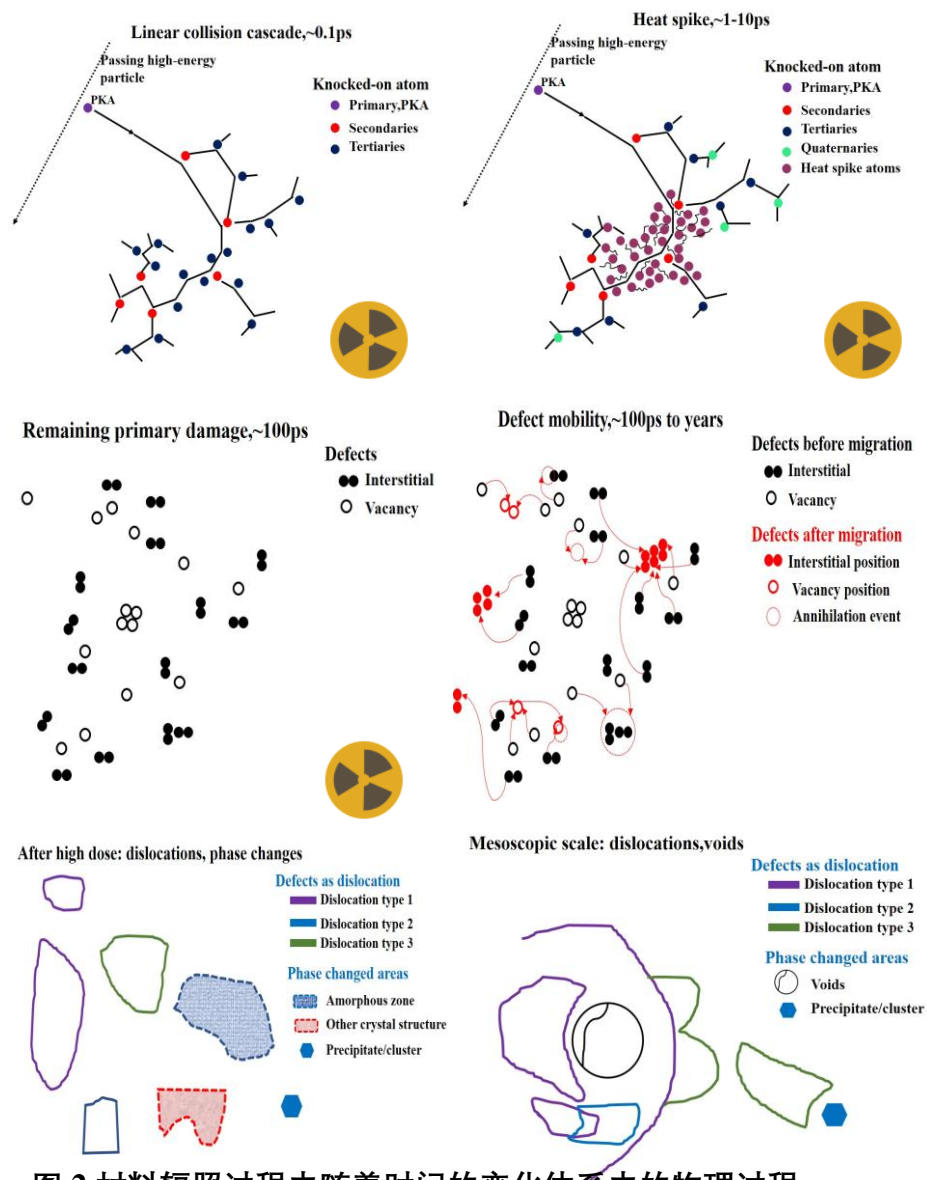
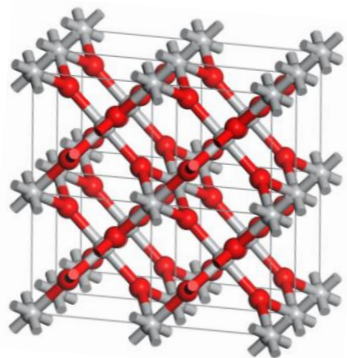


图 2 材料辐照过程中随着时间的变化体系中的物理过程

# 1 研究背景

## ● 二氧化钛（金红石）



TiO<sub>2</sub>是一种新型的第三代宽禁带半导体材料，在太阳能电池、自旋电子学器件和核材料领域具有重要的应用价值。

TiO<sub>2</sub>在未掺杂状态下就会表现出室温铁磁性，但是目前对室温铁磁性来源的尚不明确。

TiO<sub>2</sub>中磁性来源

γ射线辐照（实验）

γ射线辐照损伤程度的度量dpa（理论）

## ● 辐照损伤程度：dpa

The essence of the quantification of radiation damage in solids

$$\text{dpa} = t \int_0^E \int_{E_d}^{T_{mac}} \varphi(E) \left( \frac{d\sigma}{dE} \right)_i v(T)_i dT dE$$

# 1 研究背景

## ● Displacement per atom(dpa)

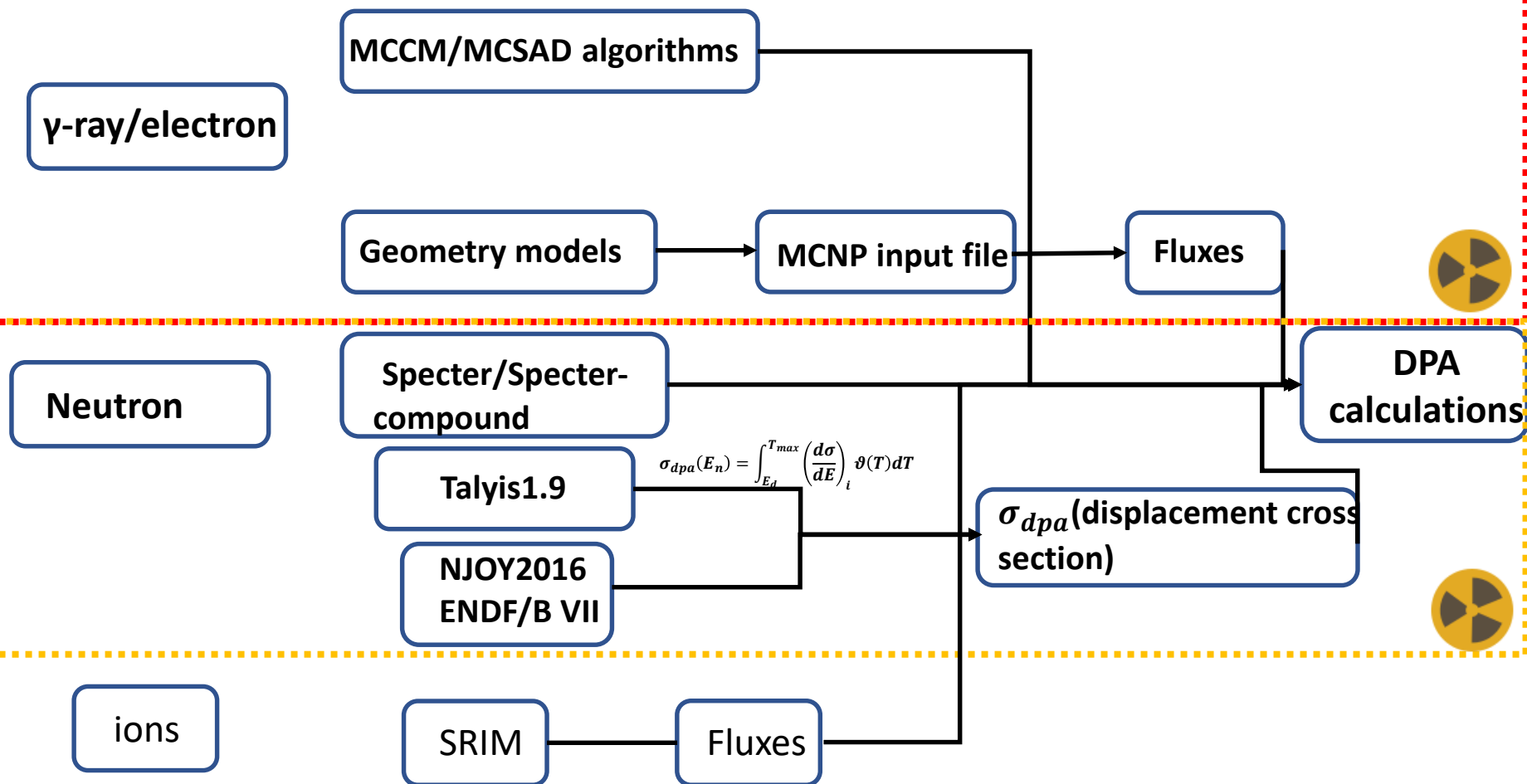


图3  $\gamma$ 射线/电子、中子和粒子辐照位移损伤量的计算

- 1 材料辐照损伤介绍
- 2 MCCM算法及其模型
- 3 计算结果
- 4 结论

# 2 MCCM算法及其模型

## ● 计算模型

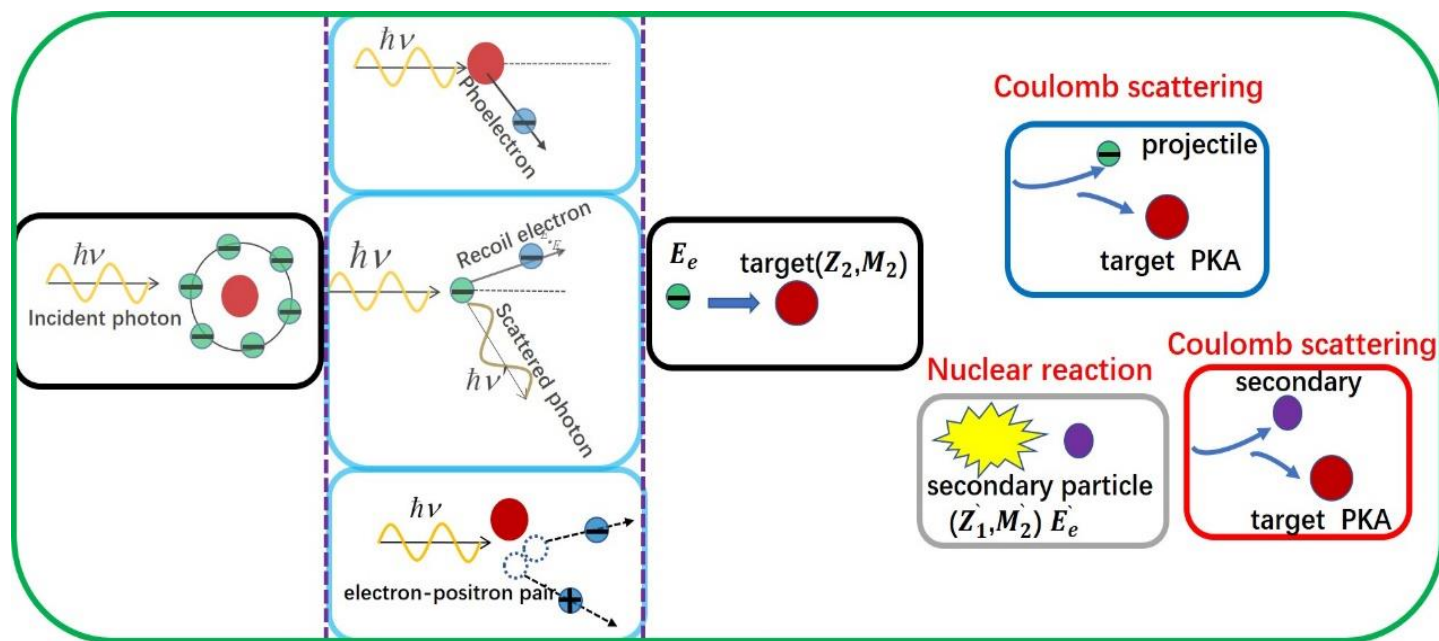
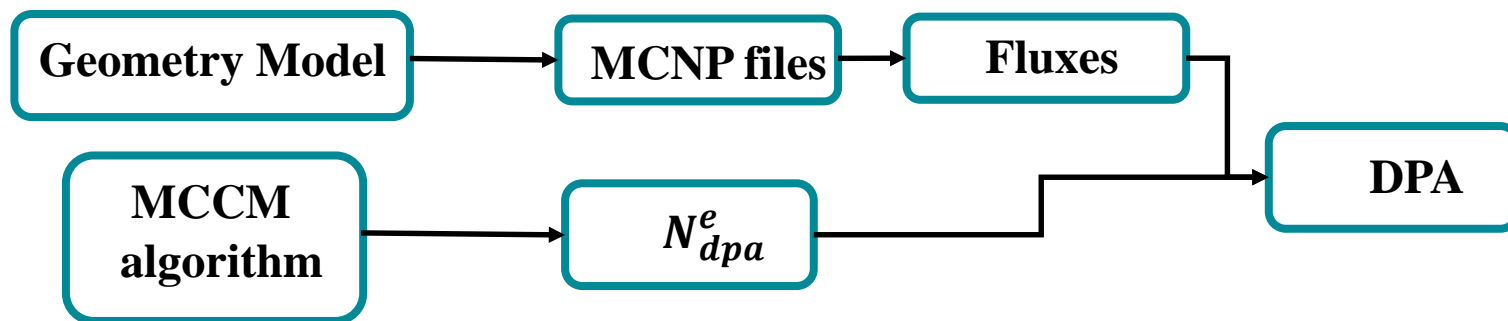


图 4  $\gamma$ 射线与物质作用过程示意图

## ● 计算流程



# 2 MCCM算法及其模型

## ● MCCM 算法

$$N_{\text{dpa}} = \sum_k (n_k \sum_i N_{\text{dpa},k}^e(E)_i \phi(E_i, z) \Delta E_i)$$

## ● MCNP 模拟

## ● MCNP simulations

$$N_{\text{dpa}}^e(E) = \int_{E_c}^E N_a \sigma_{\text{dpa}}(E') \frac{1}{\left(-\frac{dE'}{dx}\right)} dE'$$

### ● Dpa cross section

$$\sigma_{\text{dpa}}(E) = \sigma_{\text{PKA}}(E) \vartheta(T)$$

### ● PKA cross section

$$\sigma_{\text{PKA}}(E) = \frac{\pi Z_a^2 r_0^2}{\beta^4 \gamma^2} \left\{ \left( \frac{T_m}{T_d} - 1 \right) - \beta^2 \ln \left( \frac{T_m}{T_d} \right) \pm \pi \alpha \beta \left[ 2 \left( \sqrt{\frac{T_m}{T_d}} - 1 \right) - \ln \left( \frac{T_m}{T_d} \right) \right] \right\}$$

### ● Electron stopping range

$$-\frac{dE}{dx} = 2\pi N_a Z_m^2 r_0^2 \left( \frac{mc^2}{\beta^2} \right) \left\{ \ln \left( \frac{mc^2 \beta^2 \gamma^2 E}{2I^2} \right) - \frac{1}{\gamma^2} \left[ 1 + (2\gamma - 1) \ln 2 + \frac{1}{8} (\gamma - 1)^2 \right] \right\}$$

### ● Damage function[major]

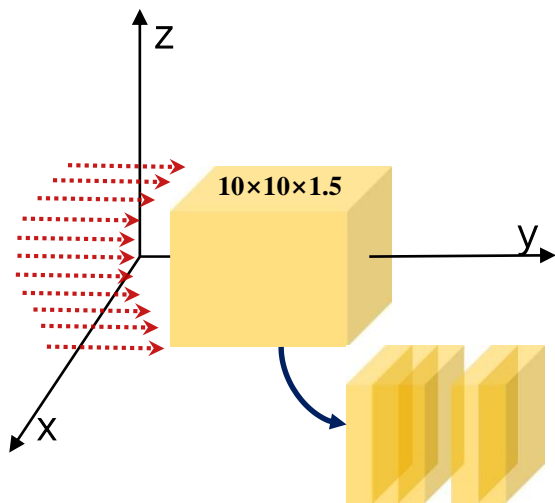


图 5 能量为1.25-10MeV的γ射线辐照单晶TiO<sub>2</sub>的模型示意图



# 2 MCCM算法及其模型

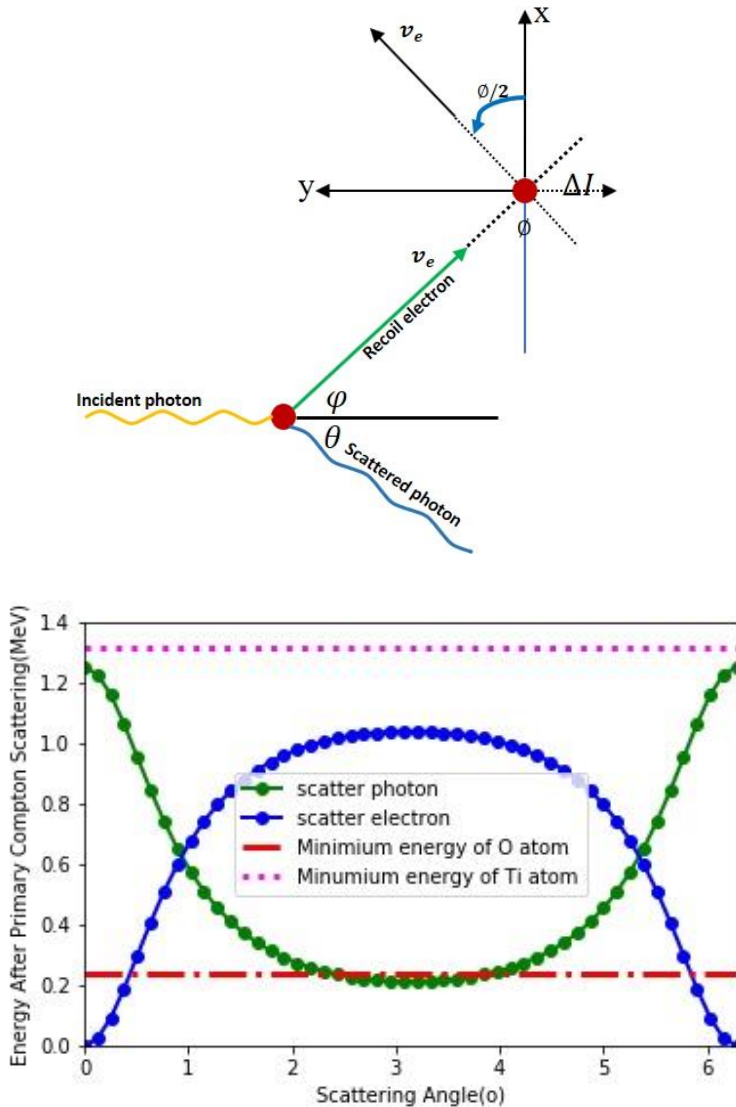


图 6  $^{60}\text{Co}$ 康普顿散射过程中的能量关系

指导实验

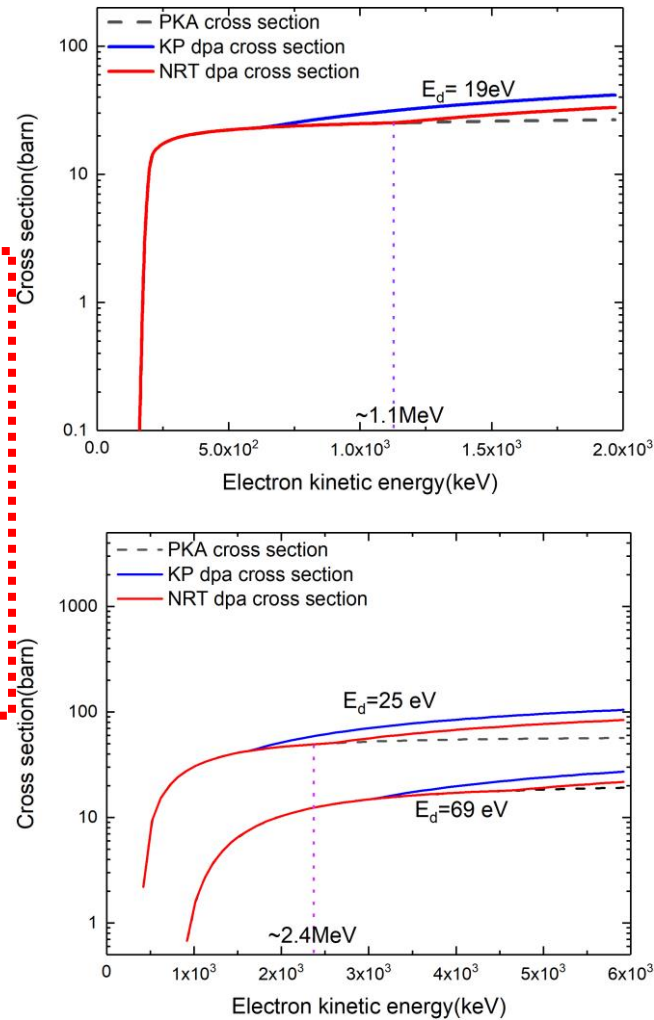


图 7  $\text{TiO}_2$ 中Ti和O的初级离位原子和位移损伤原子截面

# 2 MCCM算法及其模型

## ● Damage function[major]

### ● NRT model

$$N_d(T_d) = \begin{cases} 0 & T_d < E_d \\ 1 & E_d < T_d < \frac{2E_d}{0.8} \\ \frac{0.8T_d}{2E_d} & \frac{2E_d}{0.8} < T_d < \infty \end{cases}$$



### ● Replacements-per-atom model

$$N_d(T_d) = \begin{cases} 0 & T_d < E_d \\ 1 & E_d < T_d < \frac{2E_d}{0.8} \\ \frac{0.8T_d}{2E_d} \xi_{\text{rpa}}(T_d) & \frac{2E_d}{0.8} < T_d < \infty \end{cases}$$

### ● Athermal recombination corrected displacements per atom model

$$N_d(T_d) = \begin{cases} 0 & T_d < E_d \\ 1 & E_d < T_d < \frac{2E_d}{0.8} \\ \frac{0.8T_d}{2E_d} \xi_{\text{arcdpa}}(T_d) & \frac{2E_d}{0.8} < T_d < \infty \end{cases}$$

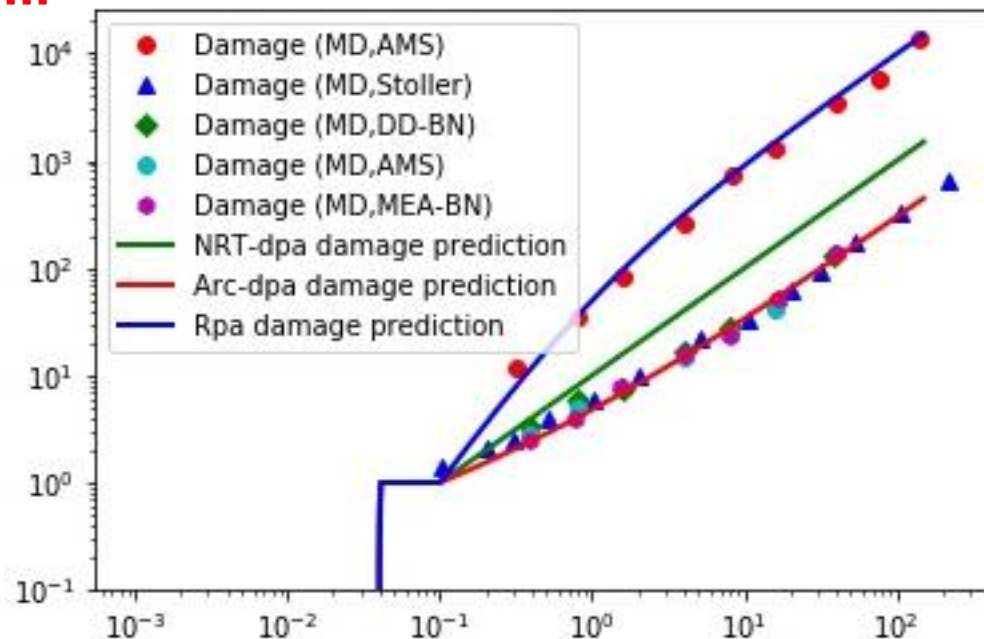


Fig. Illustration of the improvement obtained with the new arc-dpa and rpa equations for Fe

Nordlund K, Zinkle S J, Sand A E, et al. Improving atomic displacement and replacement calculations with physically realistic damage models[J]. Nature communications, 2018, 9(1): 1084.

- 1 材料辐照损伤介绍
- 2 MCCM算法及其模型
- 3 计算结果
- 4 结论

# 3 计算结果

● MCNP5计算

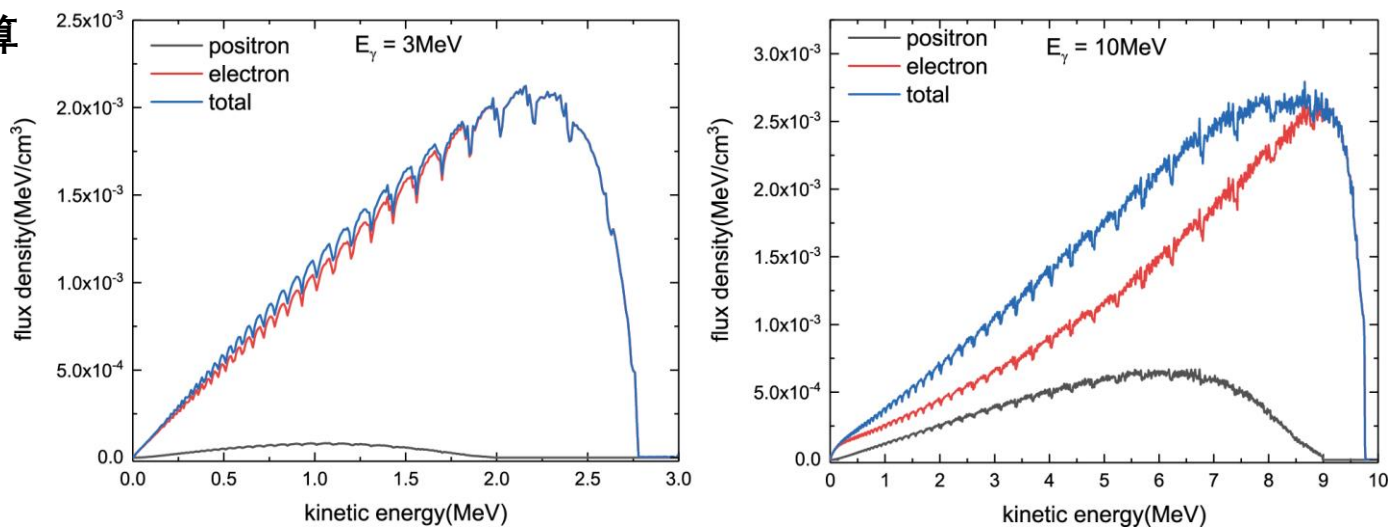


图 8 不同能量（左-3 MeV 右-10MeV）下单位体元中粒子能量与其通量分布的关系

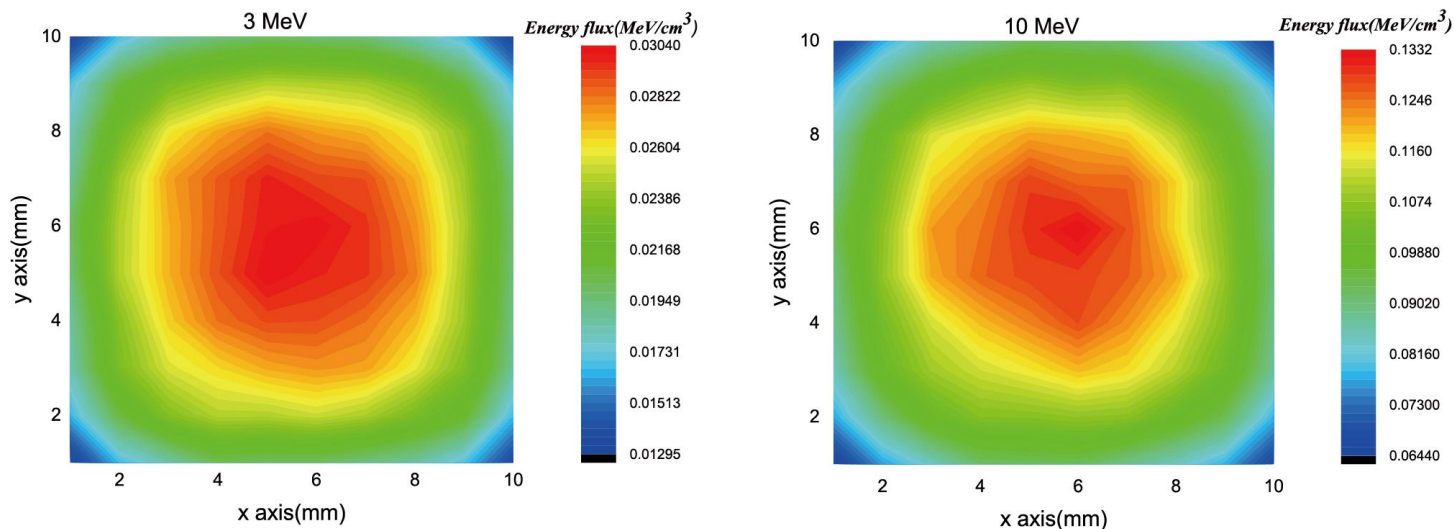


图 9 电子通量在XY平面内的分布情况

# 3 计算结果

## ● DPA 计算

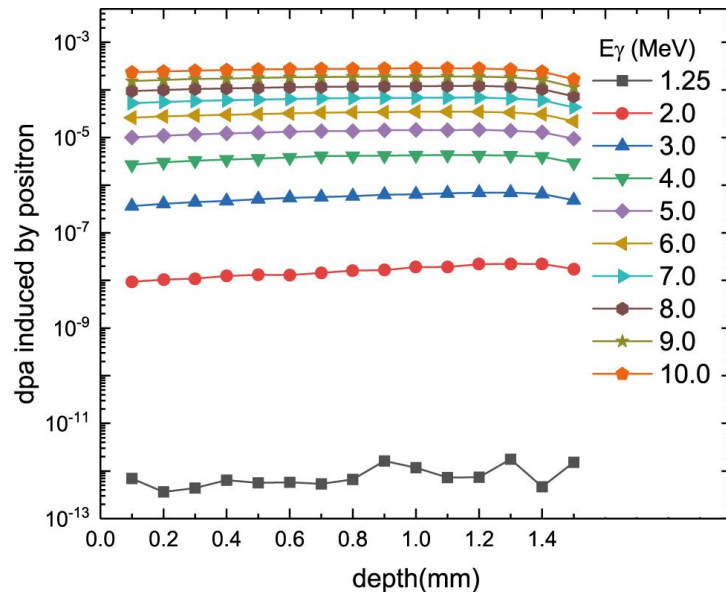
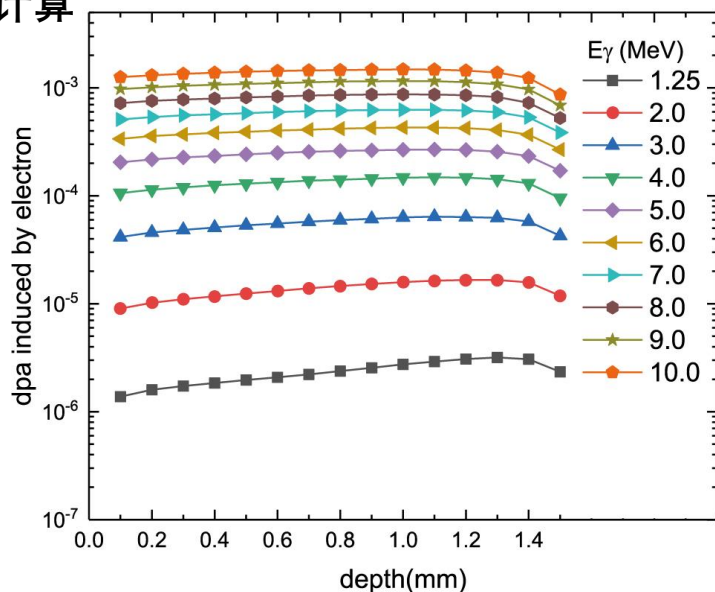


图 10 不同能量下电子（左）和正电子（右）产生的dpa的深度分布

- $E_\gamma=1.25$  MeV时，发生电子对的几率很小，正电子的dpa几乎可以忽略不计
- dpa整体上呈现先上升后下降的趋势
- **PHITS,UCDPA**(EGS4)规律相似

# 3 计算结果

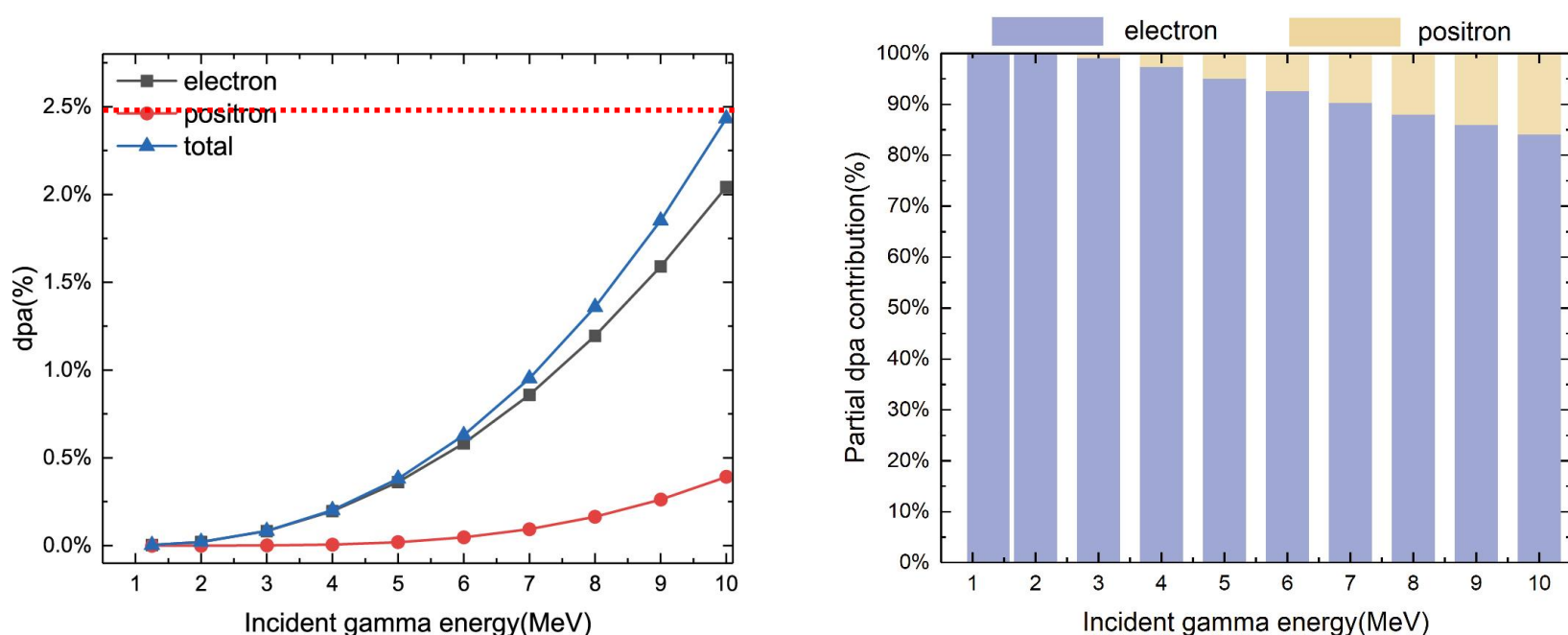


图 11 不同能量下样品中电子和正电子以及总的dpa的数目（左）和电子和正电子对于总的dpa的分布关系（右）

- $E_\gamma=10\text{MeV}$ ,材料中位移原子数达到了2.5%
- 随着能量的增大,正电子份额逐渐增加,在 $E_\gamma=10\text{ MeV}$ ,正电子dpa所占dpa为16%左右
- 缺陷复合和热复合效应

- 1 材料辐照损伤介绍
- 2 MCCM算法及其模型
- 3 计算结果
- 4 结论与展望

# 4 结论与展望

- 研究了 $\gamma$ 射线产生的电子、正电子和总的通量谱和空间分布特性
- 利用MCCM算法得到了金红石 $\text{TiO}_2$ 中dpa随着深度的变化曲线，对于实验上研究缺陷及其缺陷浓度对材料磁、光、电性质有一定的指导作用
- 不同能量下 $\gamma$ 射线产生的dpa的大小
- 考虑到缺陷复合和热复合效应，如何考虑常见的化合物中的缺陷过程
- 化合物的离位碰撞总截面的计算



报告完毕,  
感谢大家