



Narzędzia Komputerowe z Fizyki Jądrowej

# Wprowadzenie do SRIM/TRIM

Krzysztof Piasecki



# Wstęp do SRIM / TRIM

## Pakiet do szacowania:

- strat energii wiązki przechodzącej przez absorbent
- zasięgu jonów w materiale
- strat radiacyjnych w materiale

## Zawiera:

- Zestawienia pomiarów strat energii: [www.srim.org/SRIM/SRIMPICS/STOPPLOTS.htm](http://www.srim.org/SRIM/SRIMPICS/STOPPLOTS.htm)
- SRIM: kalkulator strat dla danego jonu i absorbenta
- TRIM: symulacja przejścia jonów przez absorbent

## Instalacja

### Windows

- Utwórz katalog SRIM-2013. Przejdź na niego.
- Pobierz [www.srim.org/SRIM/SRIM-2013-Std.e](http://www.srim.org/SRIM/SRIM-2013-Std.e)
- Do nazwy SRIM-2013-Std.e dodaj xe
- W katalogu SRIM-Setup uruchom MSVBvm50.exe
- Skopiuj \*.ocx do katalogu głównego SRIM-2013
- Uruchom SRIM.exe

### Linux + Wine

- `mkdir SRIM-2013 ; cd SRIM-2013`
- `wget www.srim.org/SRIM/SRIM-2013-Std.e`
- `mv SRIM-2013-Std.e{,xe}`
- `nice wine SRIM-2013-Std.exe`
- `cd SRIM-Setup ; wine MSVBvm50.exe`
- `cp *.ocx .. ; cd ..`
- `nice wine SRIM.exe`

## Znane problemy

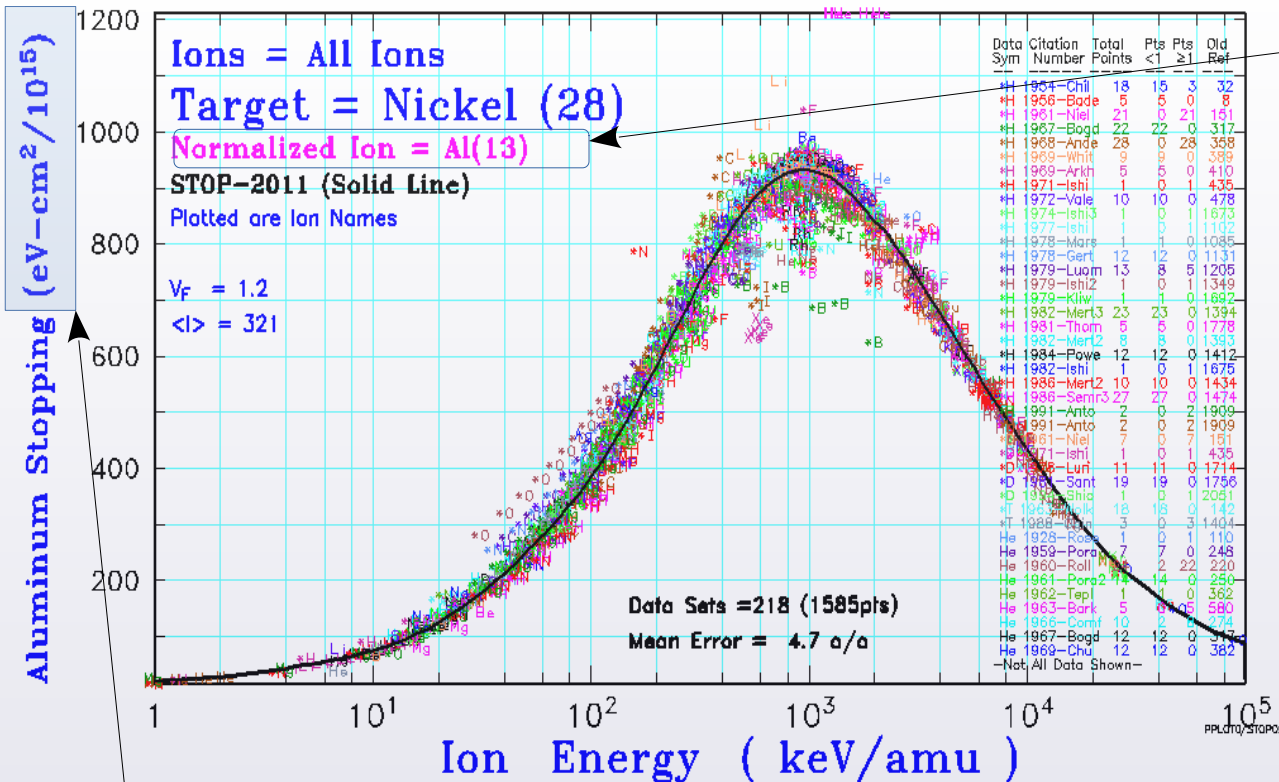
- [Windows] TRIM się zawiesza → [Zmień format daty na "Angielski \(Stany Zjednoczone\)"](#)
- [Linux] TRIM się zawiesza → w pliku `~/.wine/user.reg` zmienną `sDecimal` zmień z `"`, `"` na `."`
- Niedziałający komponent OCX: → znajdź komponent w SRIM-Setup ⊕ cmd jako admin ⊕ [zarejestruj go.](#)
- [Compound Dictionary] nieczytelne → [dodaj czcionkę](#) SRIM-2013/Linedraw.ttf (i uaktywnij)

- Pomoc: plik SRIM ReadMe (English-2011).rtf

## Zestawienia strat energii w internecie

- [www.srim.org/SRIM/SRIMPICS/STOPPLOTS.htm](http://www.srim.org/SRIM/SRIMPICS/STOPPLOTS.htm)

→ ukazuje wykresy *straty energii na jednostkę drogi* (“specific energy loss”) [jonu X w dowolnej tarczy] – albo – [dowolnego jonu w tarczy X]



Wartości  $dE/dx$  dla każdego z jonów wiązki zostały unormowane do przypadku jonu  $^{13}\text{Al}$ , w oparciu o przybliżenie wzoru **Bethe-Blocha** :

$$-\frac{dE}{dx} \sim \frac{M Z^2}{E_{Kin}} \Bigg|_{Jonu} \sim \frac{Z^2}{E_{Kin} / A} \Bigg|_{Jonu}$$

Aby odzyskać  $dE/dx$  dla naszego jonu, należy przeliczyć:

$$-\frac{dE}{dx} \Bigg|_{Jon X} = -\frac{dE}{dx} \Bigg|_{^{13}\text{Al}} \times \left( \frac{Z_{Jon X}}{Z_{Al}} \right)^2$$

- Jednostka  $dE/dx$  jest nietypowa:  $[\text{eV} / \text{cm}^2 / 10^{15}]$ .  
Wartość  $dE/dx$  jest podana na jednostkę  $N_{S1}$ , czyli na 1 atom w tarczy o przekroju  $1 \text{ cm}^2$ .
- Jak policzyć  $N_{S1}$  dla naszej tarczy?

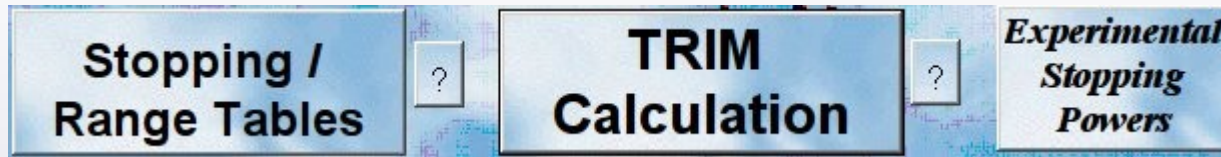
① Dla tarczy o danej  $A$  oraz  $\rho$ , koncentracja  $n$  :

$$\frac{n}{N_A} = \frac{\rho}{u}$$

② Liczba  $N_{S1}$  atomów w tarczy o grubości  $x$  i przekroju  $S_1 = 1 \text{ cm}^2$  :  $N_{S1}(x) = n \cdot x$

## Menue główne

SRIM, czyli kalkulator strat energii



(zestaw danych dostępny tylko w wersji pro)

## SRIM Menue

Dołożenie nowych typów atomów do absorbenta

**Ion** Symbol: Al Name: Aluminum Atomic Number: 13 Mass (amu): 26,982 Ion Energy Range (keV): 10000 - 10000

**Target** Target Description: Aluminum in Nickel Density (g/cm3): 08.89550 Gas Tgt.:

Delete Element	Symbol	Name	Atomic Number	Weight (amu)	Stoich	Atom %
X	PT Ni	Nickel	28	58,69	1	100.00

Stopping Power Units: MeV / (mg/cm2)

Compound Correction: 1

Buttons: Calculate Table, Clear All, Main Menu, Quit, Problem Solving

$E_{kin}$  jonu [keV]

Uwaga: nie  $E_{kin}/A$

Limit:  $E_{kin}/A \leq 10 \text{ GeV}$

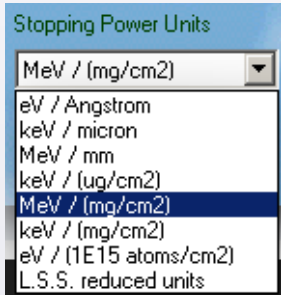
Jeśli tarcza jest gazem

Substancje złożone

Skład stechiometryczny, np:  $H_2 \rightarrow \text{Stoich} = 2$

Podaj wyniki

Wybór jednostek



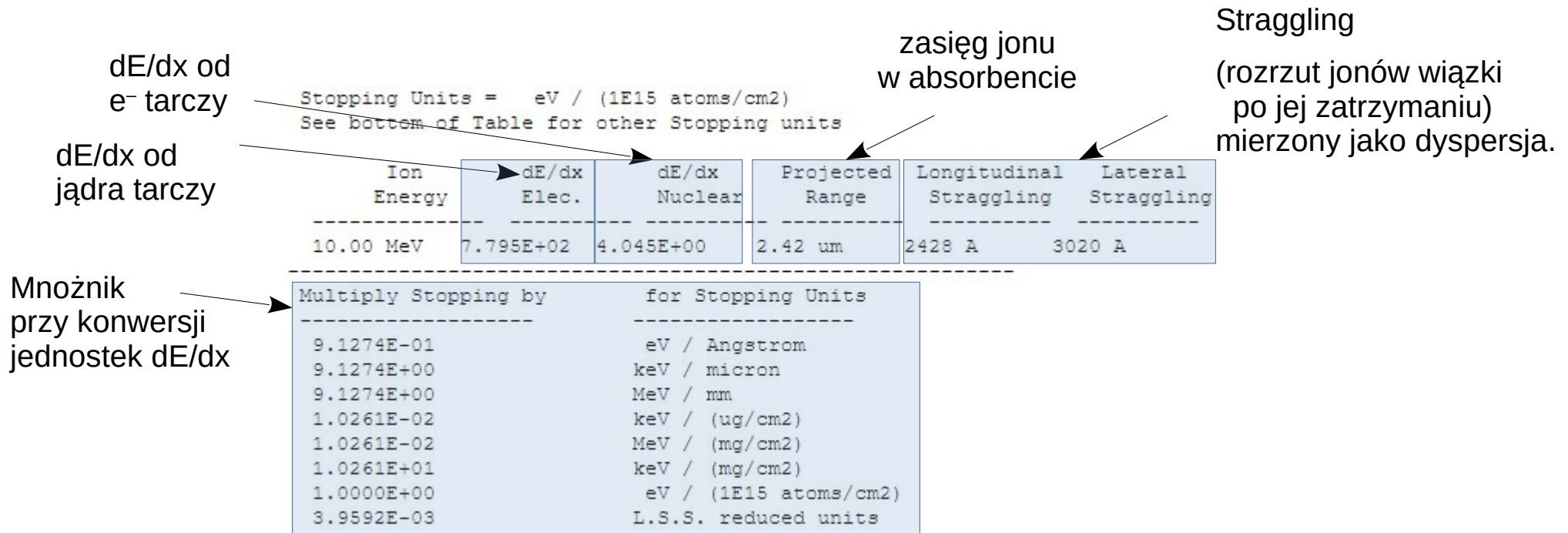
$$[\rho x] = \text{g/cm}^2$$

$$P_{\text{int}} = \sigma_R \frac{(\rho x)_T}{A_T} N_A$$

$$N(x) = N_0 \exp(-n_T \sigma x_T)$$

Przy substancjach złożonych: poprawka do Reguły Bragga

# SRIM – wyniki



[ Link ]

## SRIM – substancja złożona

Common Compounds

Common Name	Density (g/cm3)	Atomic Stoichiometry (Atoms/Molecule or Percent)
Inconel-600	8.43	Cr-15, Fe-9, Ni-76
Indium nitride (ICRU-488)	6.81	In-1, N-1
Indium oxide (ICRU-490)	7.18	In-2, O-3
Indium Phosphide (ICRU-492)	4.81	In-1, P-1
★ Iso-Butane, (ICRU-493) (gas)		H-10, C-4
★ Iso-octane (ICRU-494)	0.688	C-8, H-18
★ Kapton Polyimide Film (ICRU-179)	1.42	H-10, C-22, N-2, O-5
★ Kapton Polyimide Film (ICRU-179)	1.42	H-2.63, C-69.1, N-7.3, O-20.92
★ Lexan, Makrofol, Polycarbon (ICRU-219)	1.20	H-14, C-16, O-3
★ Lexan, Makrofol, Polycarbonate (ICRU-219)	1.20	H-14, C-16, O-3
LiF Crystal	2.635	Li-1, F-1
Lithium Fluoride Crystal (ICRU-185)	2.635	Li-1, F-1

★ indicates availability of special bond correction \*  
% = Mass % shown instead of Atomic %

Add to Target Close Help

Stopping Correction for Target Chemistry and Phase  
\*\*\*\*\* Correction assumes Ion = Al(13) \*\*\*\*\*

Bonding Correction to Stopping = 1.037 = 3.72%

-----  
Assumed Density = 0.00125 g/cm3

Chemical Formula

\* Targets with special bonding corrections to stopping are discussed in "J. F. Ziegler and J. Manoyan, Nucl. Inst. Meth., B35, 215 (1988)."  
This table may be rearranged or added to -- edit the file COMPOUND.DAT.

### • Szereg kategorii

- NUCLEAR PHYSICS MATERIALS
- COMMON IMPLANTATION COMPOUNDS
- COMMON TARGET MATERIALS
- PLASTICS / POLYMERS
- METAL ALLOYS
- NUMBERED COMPOUNDS (99-277) from ICRU F
- BIOLOGICAL MATERIALS (Human)
- BIOLOGICAL MATERIALS (Misc.)
- LIQUIDS / GASES

### • Reguła Bragga:

dla substancji złożonej z atomów A i B,

$$\frac{dE}{dx} = \frac{dE}{dx}\bigg|_A + \frac{dE}{dx}\bigg|_B$$

→ Przybliżenie mające poprawki.

[☆] dla tak oznaczonych substancji Srim uwzględnia poprawki wg modelu CAB

### • Przykład: Al+Isobutan

Target Description: Aluminum in Iso-Butane (ICRU-493)

Density (g/cm3): 0.00125

Gas Tgt.

Add Element Compound Dictionary Restore Last Target

Delete Element	Symbol	Name	Atomic Number	Weight (amu)	Stoich	Atom %
X	PT H	Hydrogen	1	1.008	10	71.43
X	PT C	Carbon	6	12.011	4	28.57

Gęstość dla  $p = 1$  atm.

Jeśli  $p$  inne, trzeba przeskalować gęstość.

Uwaga: dla izobutanu przy  $p = 1$  atm, błąd (!)  
Powinno być:  $\rho = 0,00251$  g/cm<sup>3</sup>

Stechiometria dla C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>



# TRIM Menu

## Typ symulacji:

1. Pominięte zniszczenia tarczy i emisja jej atomów
2. Pełna symulacja
3. Emisja atomów z tarczy

**ION DATA**

Symbol	Name of Element	Atomic Number	Mass (amu)	Energy (keV)	Angle of Incidence
PT	Nickel	28	57.94	10000	0

**TARGET DATA**

**Target Layers**

Layer Name	Width	Density (g/cm <sup>3</sup> )	Compound	Corr	Gas
X L1	10 um	2.702	1		

**Input Elements to Layer**

Symbol	Name	Atomic Number	Weight (amu)	Atom Stoich or %	Damage (eV) Disp	Latt	Surf
X PT	Aluminum	13	26.98	1	100.1	25	3

**Special Parameters**

Name of Calculation: Ni (10000) into L1  
 Stopping Power Version: SRIM-2008  
 AutoSave at Ion #: 10000  
 Total Number of Ions: 9999  
 Random Number Seed:   
 Plotting Window Depths: Min 0, Max 100000  
 Special "XYZ File" Increment (eV): 0

**Output Disk Files**

- Ion Ranges
- Backscattered Ions
- Transmitted Ions/Recoils
- Sputtered Atoms
- Collision Details

**Buttons:** Resume saved TRIM calc., Save Input & Run TRIM, Clear All, Calculate Quick Range Table, Main Menu, Problem Solving, Quit.

jeśli więcej warstw absorbenta

grubość absorbenta

jeśli tarcza jest gazem

Liczba jonów do symulacji

Zakres osi na wykresie. UWAGA: X = oś wiązki.

Pliki wyjściowe, które wygeneruje TRIM.

Ważna opcja: "Transmitted Ions/Recoils" → plik `transmit.txt`

Wykresy drukowane w trakcie symulacji (zmiennalne w locie)

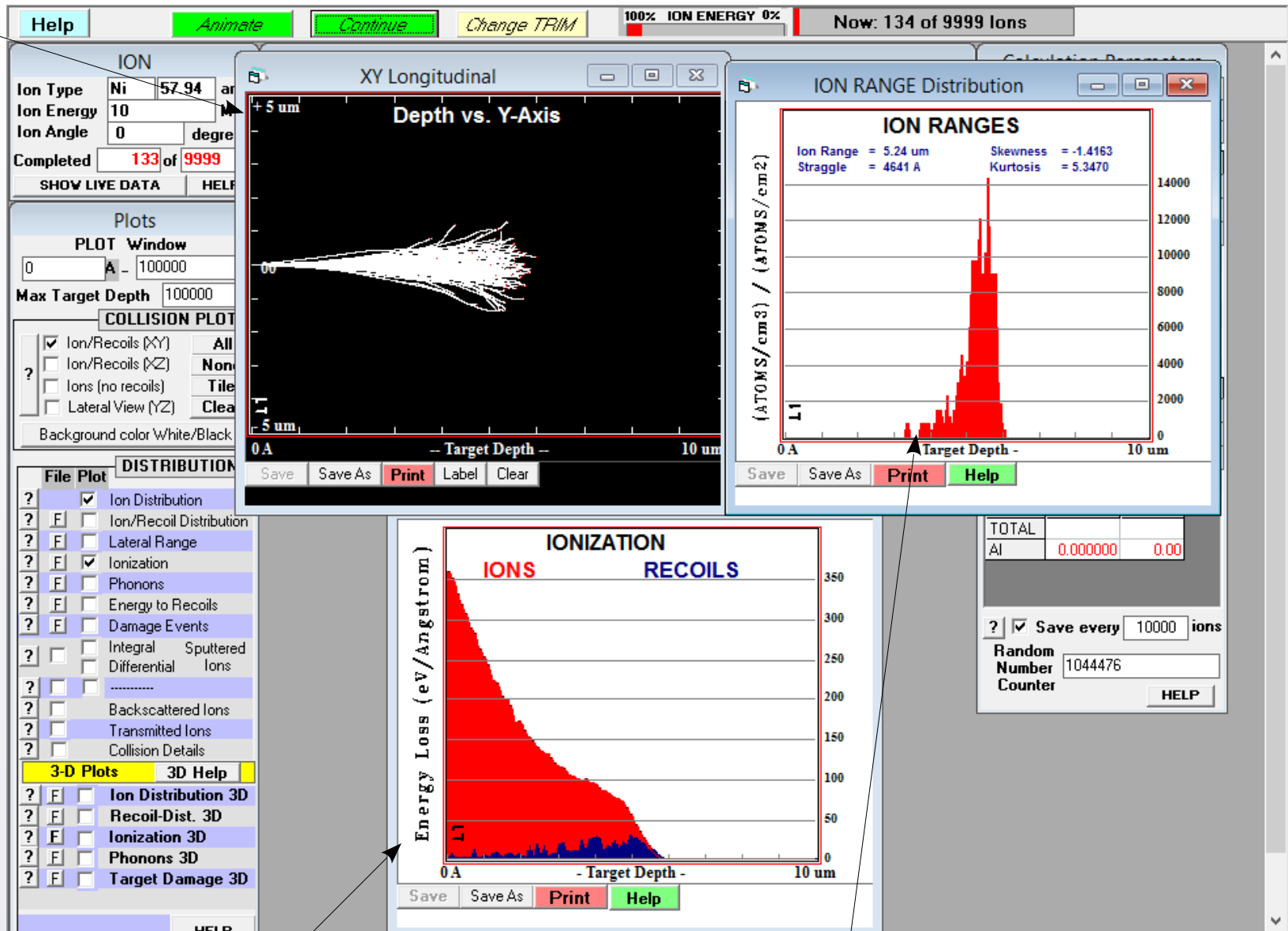
Substancje złożone (Menu "Compounds")

Symuluj!

# TRIM – okno symulacji

Śledzenie przechodzenia jonów przez absorbent

Wybór:  
– wykresów  
– plików wyjściowych



Profil  $\langle dE/dx \rangle$  w funkcji  $x$

Zmienny, bo  $E$  się zmienia wzdłuż drogi.

Rozkład zasięgów jonów



# Trim: Stragglng wiązki

**Stragglng:** rozrzut energii jonów w wyniku przejścia przez absorbent  
(np. wiązki przez tarczę/degrader lub cząstek rozproszonych przez okno detektora)

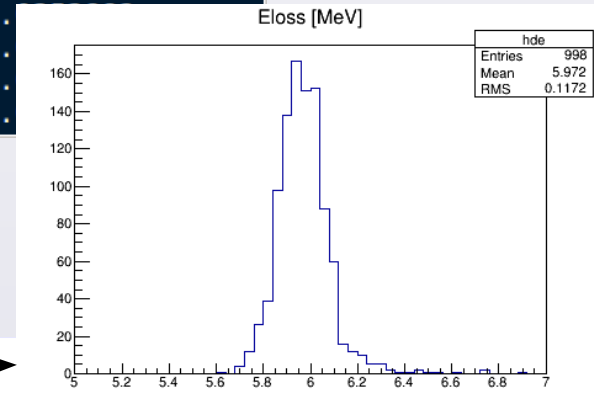
0. Zakładamy, że przynajmniej część jonów przechodzi p/absorbent

W TRIM:

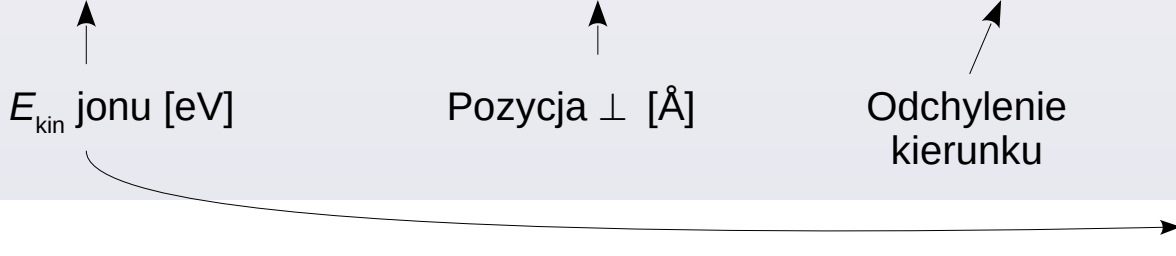
1. Włącz [Output Disk Files] → [Transmitted Ions/Recoils] →  , a następnie wybierz “1”
2. Po symulacji: odczytaj plik transmit.txt w folderze Srim Outputs .

```

===== SRIM-2013.00 =====
=====
===== TRANSMIT.txt : File of Transmitted Ions =====
= This file tabulates the kinetics of ions or atoms leaving the target. =
= Column #1: S= Sputtered Atom, B= Backscattered Ion, T= Transmitted Ion. =
= Col.#2: Ion Number, Col.#3: Z of atom leaving, Col.#4: Atom energy (eV). =
= Col.#5-7: Last location: X= Depth into target, Y,Z= Transverse axes. =
= Col.#8-10: Cosines of final trajectory. =
= *** This data file is in the same format as TRIM.DAT (see manual for uses).=
===== TRIM Calc.= Al(10 MeV) ==> Layer 1( 1 um) =====
  Ion Atom  Energy          Depth      Lateral-Position      Atom Direction
  Numb Numb  (eV)              X(A)           Y(A)           Z(A)           Cos(X) Cos(Y) Cos(Z)
T    1  13  .3983746E+07    1000064E-02    .2971E+03     .4864E+03     .9767120  .1769064  .1213995
T    2  13  .4071823E+07    1000190E-02   -.1117E+03     .3788E+03     .9963755  .0134767  .0839890
T    3  13  .4099861E+07    1000121E-02   -.5497E+01    -.1227E+03     .9991514  -.0411854  .0005086
T    4  13  .4098159E+07    1000217E-02   -.3030E+03     .8463E+02     .9986100  -.0427266  .0308636
T    5  13  .3947297E+07    1000098E-02    .2790E+03    -.7825E+02     .9653103  -.1829261  -.1863174
T    6  13  .3987888E+07    1000197E-02   -.1563E+02    -.8668E+01     .9989632  -.0410004  .0197849
T    7  13  .4131337E+07    1000161E-02    .1038E+03    -.3660E+03     .9990785  .0113496  -.0413915
T    8  13  .4141843E+07    1000133E-02    .4241E+02    -.2878E+03     .9992457  .0294721  .
T    9  13  .4048078E+07    1000050E-02   -.1080E+03     .8655E+02     .9978623  -.0515206  .
T   10 13  .3798280E+07    1000108E-02    .1461E+04     .5658E+03     .9552314  .2949221  .
T   11 13  .4052493E+07    1000137E-02    .1921E+03     .4439E+03     .9943126  .0437691  .
    
```



Po przejściu p/absorbent:



## Trim: śledzenie strat energii na drodze

TRIM potrafi wypisać kolejne akty oddziaływania w ośrodku, podając dla każdej interakcji: miejsce zajścia, energię jonu i lokalną wartość straty energii na jednostkę długości.

W TRIM:

1. Włącz [Output Disk Files] → [Collision Details] →
2. Po symulacji: plik `collison.txt` (posiada literówkę w nazwie) w folderze `Srim Outputs`.

Przykład dla jednego jonu. Linie o kolejnych oddziaływaniach wyglądają w stanie surowym tak:

```
...
Ion      Energy      Depth      Lateral Distance (A)  Se      Atom      Recoil      Target Target Target Target
Numb     (keV)       (A)        Y Axis      Z Axis   (eV/A)     Hit  Energy(eV) DISP.  VAC.  REPLAC INTER
-----
300001319.97E+03337875.E-033-4930.E-063 5782.E-0630772.053  C 333617.E-0330000000001.0003      3      3
300001319.93E+03364043.E-033-2281.E-053 1614.E-0530771.363  0 318512.E-0230000000002.0913      3      3
300001319.90E+03311632.E-023-1204.E-043-1444.E-0530770.633  C 310026.E-0230000000001.1613      3      3
300001319.81E+03322070.E-023-2379.E-043-4559.E-0530768.883  C 313711.E-0230000000001.5683      3      3
300001319.77E+03327281.E-023-3026.E-043-9741.E-0630768.123  C 339293.E-0330000000001.0003      3      3
...
```

Plik jest jednak źle sformatowany (występują nadmierne "3"). Po korekcie powinny wyglądać tak:

```
...
Ion      Energy      Depth      Lateral Distance (A)  Se      Atom
Numb     (keV)       (A)        Y Axis      Z Axis   (eV/A)     Hit
-----
1  19.97E+03  7875.E-03  -4930.E-06  5782.E-06  772.05  C
1  19.93E+03  64043.E-03 -2281.E-05  1614.E-05  771.36  0
1  19.90E+03  11632.E-02 -1204.E-04 -1444.E-05  770.63  C
1  19.81E+03  22070.E-02 -2379.E-04 -4559.E-05  768.88  C
1  19.77E+03  27281.E-02 -3026.E-04 -9741.E-06  768.12  C
...
```