

Institute for Nuclear Research of the Russian Academy of Sciences Федеральное государственное бюджетное учреждение науки ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК



Н.М.Соболевский, Л.Н.Латышева

Модели и алгоритмы расчёта тормозных способностей dE/dX(E) в транспортном коде SHIELD

MOCKBA 2019 MOSCOW

Institute for Nuclear Research

of the Russian Academy of Sciences Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт ядерных исследований Российской академии наук



Н.М.Соболевский, Л.Н.Латышева

Модели и алгоритмы расчёта тормозных способностей dE/dX(E)в транспортном коде SHIELD



MOCKBA 2019 MOSCOW

Institute for Nuclear Research

of the Russian Academy of Sciences
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт ядерных исследований Российской академии наук



Н.М.Соболевский, Л.Н.Латышева

Модели и алгоритмы расчёта тормозных способностей dE/dX(E)в транспортном коде SHIELD

ПРЕПРИНТ ИЯИ РАН 1443/2019 НОЯБРЬ 2019 **MOCKBA** 2019

Institute for Nuclear Research of the Russian Academy of Sciences 60-th October Anniversary prospect 7a,

Moscow 117312, Russia Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт ядерных исследований Россиской академии наук проспект 60-летия Октября, 7а Москва, 117312

Н.М.Соболевский, Л.Н.Латышева Модели и алгоритмы расчёта тормозных способностей *dE/dX(E)* в транспортном коде SHIELD

Кратко описаны модели и алгоритмы расчёта тормозных способностей, используемые в транспортном коде SHIELD. Код применяется при моделировании взаимодействия адронов и ядер с веществом в контексте различных приложений. Требования к диапазону энергии снарядов и химическому составу вещества мишени зависят от задачи и существенно различаются. Предложен алгоритм расчёта тормозных способностей при низких энергиях (1 кэВ/А и ниже). Для повышения точности расчета привлекаются ICRU-рекомендованные данные. При моделировании переноса тяжёлых ионов подключается программа ATIMA. Изложение ориентировано на вычислительные аспекты расчета тормозных способностей, приводятся примеры.

ISBN 978-5-94274-334-5

© Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт ядерных исследований Российской академии наук, 2019 Institute for Nuclear Research of the Russian Academy of Sciences, 2019

N.V.Sobolevsky, L.N.Latysheva Models and algorithms for calculating the stopping power *dE/dX(E)*in the SHIELD transport code

Briefly described models and algorithms for calculating stopping powers used in the SHIELD transport code. The code is used in modeling the interaction of hadrons and nuclei with matter in the context of various applications. The requirements for the range of a projectile energy and to the chemical composition of a target material depend on the task and differ significantly. An algorithm for calculating the stopping power at low energies (1 keV/A and below) is proposed. To increase the accuracy of the calculation the ICRU-recommended data are used. When simulating the transfer of heavy ions, the ATIMA program is connected. The article is focused on the computational aspects of the calculation of stopping powers, examples are given.

Н.М.Соболевский, Л.Н.Латышева Модели и алгоритмы расчёта тормозных способностей *dE/dX(E)* в транспортном коде SHIELD Препринт 1443/2019 Ноябрь 2019

Подписано в печать 23.10.2019

Ф-т 60х84/8. Уч.-изд.л. 1,0. Зак. 22448 Тираж 45 экз. Бесплатно

> Печать цифровая Издательский отдел

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт ядерных исследований Российской академии наук

117312, Москва, проспект 60-летия Октября, 7а

1. Введение

При Монте-Карло моделировании взаимодействия частиц и ядер со сложными макроскопическими мишенями необходимо знать тормозные способности dE/dX(E) всех материалов мишени для всех заряженных частиц и ядерных фрагментов, фигурирующих в задаче. Данные dE/dX(E) необходимы для расчета зависимостей пробег-энергия R(E), оптическая толщина-энергия L(E), для построения спектров ЛПЭ (линейной передачи энергии) и других целей.

Тормозные способности dE/dX(E), а также функции R(E) и L(E), вычисляются в коде SHIELD заранее, до начала Монте-Карло моделирования, и запоминаются в специальных массивах на достаточно подробной энергетической сетке. Затем, в процессе моделирования, тормозные способности и функции R(E) и L(E) вычисляются путем быстрой интерполяции в таблицах. Для сложных веществ применяется правило аддитивности Брэгга.

Общеизвестная формула Бете-Блоха для dE/dX(E) [1] достаточна для решения многих задач. Однако эта формула не применима при энергии ниже ~ 1 МэВ для протонов и нескольких МэВ/нуклон для легких ионов, т.к. не учитывает изменение зарядового состояния снаряда при низких энергиях.

Вместе с тем такое актуальное сейчас направление как адронная терапия в онкологии требует точных данных dE/dX(E) при низких энергиях, вплоть до ~ 10 кэВ/нуклон. Здесь применяются данные, рекомендованные ICRU (International Commission on Radiation Units and Measurements), использование которых фактически обязательно в адронной терапии. Рекомендованные ICRU данные табулированы в интервале энергий от 25 кэВ/нуклон до 1000 МэВ/нуклон, для снарядов от протона до аргона, и для порядка 60ти материалов, включая некоторые типы биологической ткани, тканеэквивалентные пластики, конструкционные материалы [2-4]. Это наиболее точные числовые данные для тормозных способностей в указанной области энергий и материалов, т.к. основаны на экспертной оценке экспериментальных данных.

Другое актуальное направление — оценка воздействия космического излучения на экипажи космических кораблей и электронику. Здесь также требуются данные dE/dX(E) при низких энергиях до ~ 10 кэВ/нуклон. Однако верхняя граница интервала энергий поднимается до $100~\Gamma$ эВ/нуклон, что соответствует общепринятому стандарту представления спектра галактических космических лучей (ГКЛ). При этом диапазон снарядов ГКЛ распространяется от протонов до ядер железа.

Далее будет описано как в коде SHIELD, с помощью модификации формулы Бете-Блоха при низких энергиях, а также подключения ICRU-рекомендованных данных (если они доступны), удаётся вычислить тормозные способности dE/dX(E) для любых материалов мишени и любых снарядов в требуемом диапазоне энергий.

Однако это не решает полностью проблему вычисления тормозных способностей dE/dX(E) в коде SHIELD, т.к. на основе формулы Бете-Блоха нельзя удовлетворительно описать потери энергии тяжелых ионов из-за сложной картины взаимного влияния чисто столкновительных флуктуаций (при столкновениях снаряда с электронами мишени) и флуктуаций зарядового состояния самого снаряда. Для таких задач используется программа ATIMA [5], которая при необходимости подключается к коду SHIELD (см. Раздел 4). Перечисленные выше вопросы рассматриваются более подробно далее.

2. Модификация формулы Бете-Блоха при низких энергиях

Исходным пунктом для дальнейших построений служит формула Бете-Блоха в её стандартном виде, см. например [1]

$$\frac{dE}{dX} = \rho K \frac{Z}{A} \frac{Z_p^2}{\beta^2} \left[\frac{1}{2} \ln \frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2 \cdot W_{\text{max}}}{I^2} - \beta^2 - \frac{\delta(\beta \gamma)}{2} \right]$$
(1)

Обозначения в уравнении (1) можно уточнить по ссылке [1]. Кратко они означают следующее: K=0.3071 — константа; ρ , Z, A — параметры среды; Z_p — заряд частицы в единицах заряда электрона; m_e — масса электрона; γ , β , c — обычные релятивистские обозначения; $W_{\rm max}$ — максимальная передача энергии электрону в отдельном столкновении; I — потенциал ионизации атома (эВ); $\delta(\beta\gamma)/2$ — поправка на эффект плотности при высоких энергиях.

При энергиях ниже ~1 МэВ для протонов, или нескольких МэВ/нуклон для легких ионов формула Бете-Блоха не применима, т.к. не учитывает эффекты перезарядки снаряда при его взаимодействии с электронами атомных оболочек. При дальнейшем снижении энергии значения тормозной способности, вычисленной согласно (1), сначала возрастают, а затем резко убывают и становятся отрицательными.

Модификация формулы Бете-Блоха с целью вычисления dE/dX(E) при низких энергиях, состоит из **двух шагов**, которые иллюстрируются ниже, на Рис. 2.

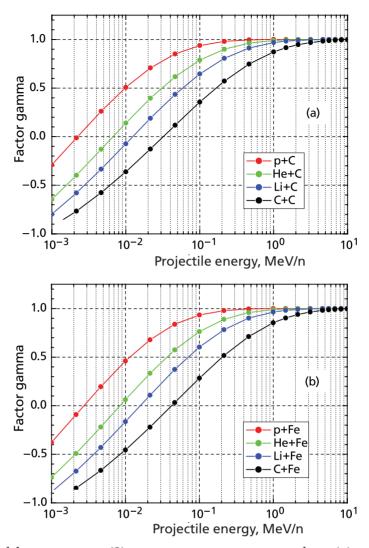
Первый шаг учитывает перезарядку, т.е. захват электронов снарядом при малых скоростях. В результате эффективный заряд снаряда снижается: $Z_p \to \gamma Z_p$, где $\gamma \le 1$. В работе [6] предложена простая эмпирическая формула для вычисления коэффициента γ , которая включает заряды снаряда Z_p и вещества среды Z, энергию снаряда E/A_p , а также числовые коэффициенты, полученные при фитировании экспериментальных данных для dE/dX(E)

$$\gamma = 1 - X_1 \cdot \exp\left[-X_2 \cdot (E/A_p)^{X3} \cdot Z_p^{-X4}\right]$$
 (2)

где: $X_1 = D + 1.658 \cdot \exp(-0.05170 \cdot Z_p);$ $D = 1.164 + 0.2319 \cdot \exp(-0.004302 \cdot Z);$ $X_2 = 8.144 + 0.09876 \cdot \ln Z;$ $X_3 = 0.3140 + 0.01072 \cdot \ln Z;$ $X_4 = 0.5218 + 0.02521 \cdot \ln Z.$

Рис. 1 иллюстрирует зависимость коэффициента γ от энергии для снарядов $^1H^{+1}, \, ^4He^{+2}, \, ^7Li^{+3}$ и $^{12}C^{+6}$ в графите и железе.

Как видно из Рис. 1, при энергиях снарядов в окрестности 10 кэВ/ нуклон коэффициент γ может убывать до нуля, а при дальнейшем уменьшении энергии — принимать нефизические отрицательные значения. Этот дефект формулы (2) объясняется тем, что она получена из анализа экспериментальных данных dE/dX(E) при заметно более высоких энергиях, выше 3 МэВ/А. Численные эксперименты с искусственным ограничением интервала значений γ показывают, что указанный дефект не влияет на результаты расчетов Монте-Карло. Результаты совпадают при прямом применении формулы (2) и при исключении отрицательных и близких к нулю значений γ условием: если $\gamma \leq \gamma_{\min}$, то



Puc.1. Коэффициент у, см. (2), для легких снарядов в графите (a) и железе (b)

 $\gamma \equiv \gamma_{\min}$, где $\gamma_{\min} = 0.1 \div 0.3$. На Рис. 1 видно также, что начиная с энергий 5–6 МэВ/нуклон и выше коэффициент $\gamma = 1$, т.е. при этих энергиях применима стандартная формула Бете-Блоха (1).

Итак, в результате первого шага — модификации формулы (1) путем замены $Z_p \to \gamma Z_p$, нефизический рост значений dE/dX(E) с уменьшением энергии устраняется, однако последующий выход в область отрицательных значений сохраняется, см. Рис. 2 ниже.

На втором шаге производится гладкая сшивка модифицированной формулы Бете-Блоха и формулы Линдхарда-Шарфа [7] для тормозных способностей в области энергий ниже ~1 МэВ/нуклон. Согласно этой формуле тормозная способность пропорциональна корню квадратному

из кинетической энергии снаряда: $dE/dX(E) \propto E^{1/2}$. Гладкость сшивки двух функций означает, что в точке сшивки равны сами функции и их первые производные.

Далее принимаем, что:

- (1) модифицированная формула Бете-Блоха справедлива от максимума кривой dE/dX(E) вверх по энергии (см. Рис. 2), а также вниз по энергии до некоторой точки сшивки $\mathbf{E}_{\mathrm{sew}}$, которая будет найдена далее;
 - (2)ниже точки сшивки \mathbf{E}_{sew} справедлива формула Линдхарда-Шарфа

$$dE/dX(E) = C \cdot E^{1/2}. (3)$$

Для удобства обозначим модифицированную формулу Бете-Блоха как f(E) = dE/dX(E). Условие гладкости сшивки приводит к системе двух уравнений, позволяющих определить два неизвестных — точку сшивки $E_{\rm sew}$ и константу C

$$C \cdot E^{1/2} - f(E) = 0$$
,

$$C/2 \cdot E^{-1/2} - f'(E) = 0.$$

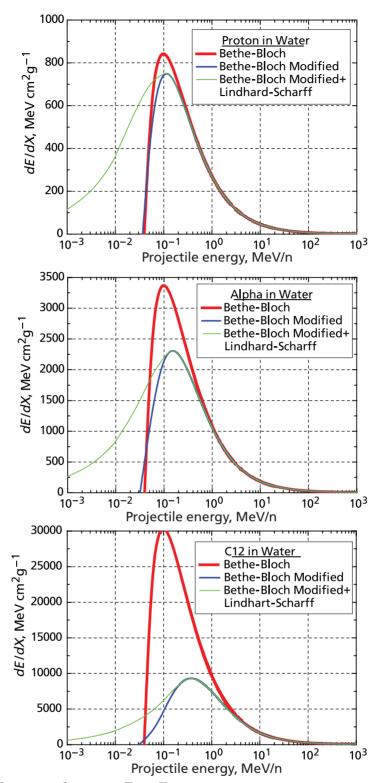
Исключая отсюда константу C получаем уравнение для нахождения точки сшивки $\mathbf{E}_{\mathrm{sew}}$

$$2f'(E)-f(E)/E=0. (4)$$

После определения точки сшивки E_{sew} из уравнения (4) находится константа C

$$C = f(E_{\text{sew}}) / E_{\text{sew}}^{1/2}$$
 (5)

Процедура сшивки состоит в поиске на оси энергий точек, в которых указанные функции удовлетворяют определенным условиям. Поиск производится методом «золотого сечения» согласно алгоритму, описанному в [8], в разделе 8.1. Подпрограмма поиска находит последовательно: энергию $E_{\rm zero}$, при которой модифицированная формула Бете-Блоха обращается в ноль; энергию максимума $E_{\rm extr}$ модифицированной формулы Бете-Блоха; и, наконец, энергию сшивки $E_{\rm sew}$ формул Линдхарда-Шарфа и модифицированной формулы Бете-Блоха, решая уравнение (4) на интервале [$E_{\rm zero}$, $E_{\rm extr}$].



Puc.~2. Модификация формулы Бете-Блоха на примере протонов, α-частиц и ионов углерода в воде. Красный цвет — расчёт dE/dX(E) по формуле (1). Синий цвет — расчёт по формуле (1) с модификацией заряда снаряда $Z_p \to \gamma Z_p$, где $\gamma \le 1$ (2). Зелёный цвет — тормозные способности dE/dX(E) как результат сшивки модифицированной формулы Бете-Блоха и формулы Линдхарда-Шарфа (3)

В результате можно вычислить таблицу тормозных способностей на энергетической сетке, которая может быть определена фактически от нулевой энергии и до максимальной энергии, которая в коде SHIELD равна 1000 ГэВ/нуклон.

Рис. 2 иллюстрирует вышеизложенные шаги по модификации формулы Бете-Блоха и расчету тормозных способностей на примере протонов, α -частиц и ионов 12 С в воде, в области энергий от 1 кэВ/нуклон до 1 ГэВ/нуклон. Вода используется для иллюстрации здесь и ниже, как материал, часто фигурирующий в расчетах по адронной терапии.

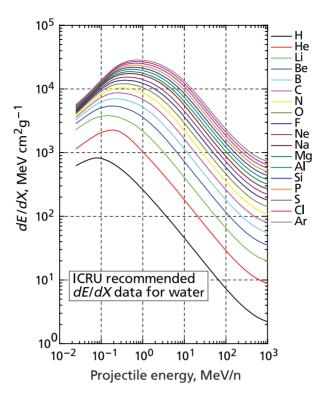
3. Тормозные способности в коде SHIELD и ICRU-рекомендованные данные

При запуске кода SHIELD всегда вычисляются тормозные способности согласно процедуре, изложенной выше в Разделе 2, для всех снарядов и всех материалов в данной задаче. Это — тормозные способности кода SHIELD по умолчанию. Естественно возникает вопрос о точности этих данных.

Данные по умолчанию могут корректироваться с помощью ICRU-рекомендованных данных, если таковые имеются. Как отмечалось во Введении, рекомендованные ICRU данные — это наиболее точные данные из существующих, т.к. они основаны на экспертной оценке экспериментальных данных. В этом разделе поясняется, как данные по умолчанию кода SHIELD могут быть скорректированы с помощью данных ICRU, а также сопоставляются оба типа данных.

Код SHIELD при запуске предлагает пользователю заменить данные по умолчанию на ICRU-рекомендованные данные для каждого материала в задаче. При положительном ответе пользователя данные по умолчанию заменяются на данные ICRU из предварительно подготовленных файлов. Замена производится на интервале энергий от 25 кэВ/нуклон до 1000 МэВ/нуклон, на котором определены данные ICRU. При этом делается перенормировка данных по умолчанию на значения данных ICRU в граничных точках указанного интервала.

На Рис. 3 в качестве примера представлена рекомендованная ICRU тормозная способность воды для ионов-снарядов от протона до аргона.



Puc. 3. ICRU-рекомендованные данные для тормозной способности воды

Возвращаясь к вопросу о точности тормозных способностей кода SHIELD по умолчанию надо заметить, что область энергий ниже ~1 МэВ/нуклон продолжает оставаться предметом исследований и уточнений. Разные компьютерные коды и таблицы данных ICRU разных лет [3,4] дают несколько отличающиеся значения тормозных способностей при низких энергиях, что иллюстрирует Рис. 4.

Как видно из Рис. 4, данные кода SHIELD по умолчанию при низких энергиях вполне вписываются в общую картину, и могут быть скорректированы данными ICRU при необходимости. Программа SRIM общеизвестна, код ATIMA обсуждается ниже.

В заключение данного раздела продемонстрируем тормозные способности кода SHIELD по умолчанию, используемые при моделировании радиационных условий в космическом пространстве (на примере воды).

Заметим, что в процессе Монте-Карло моделирования, функции пробег-энергия R(E) и оптическая толщина-энергия L(E) для разных изотопов одного и того же элемента, корректируются с учетом массового числа иона-снаряда. Пусть, например, заранее вычислены и хранятся данные dE/dX(E), R(E) и L(E) для иона 12 С. Но если надо транспортировать

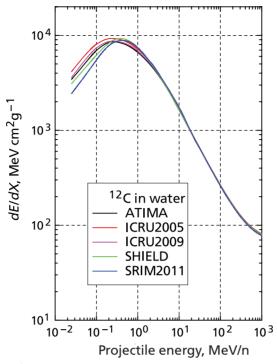
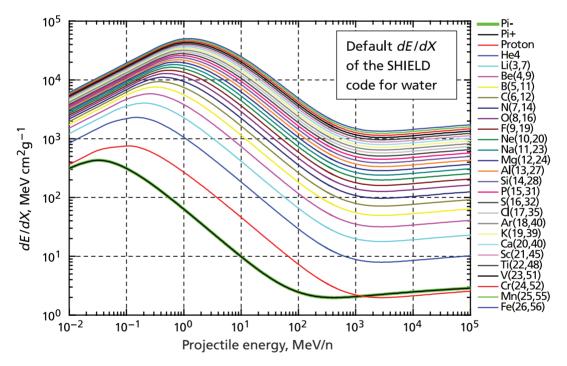


Рис. 4. Тормозная способность воды для ионов углерода из разных источников данных



Puc. 5. Тормозные способности воды для моделирования переноса снарядов ГКЛ

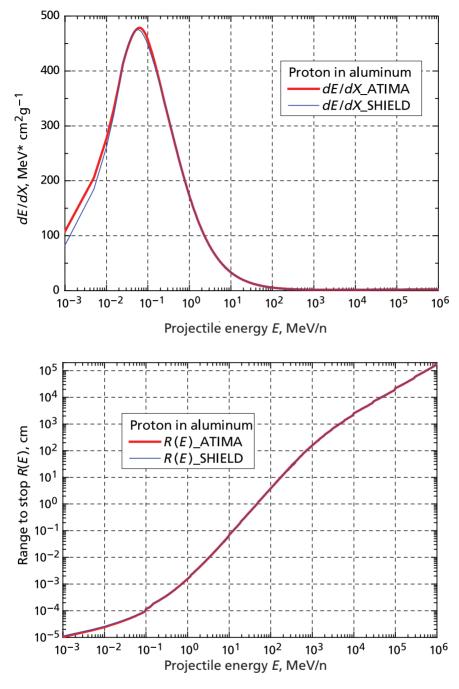
ион 11 С, то функции R(E) и L(E) для него корректируются автоматически с учетом разницы массовых чисел.

4. Вычисление тормозных способностей в коде **SHIELD** с использованием программы **ATIMA**

Программа ATIMA (ATomic Interaction with MAtter) разработана в GSI (Германия) для расчёта различных физических величин, характеризующих прохождение нуклонов и ядер через вещество. При этом возможность ядерных реакций не учитывается, рассматривается только замедление снаряда из-за ионизационных потерь энергии. Диапазон снарядов — от протонов до тяжелых ионов при энергиях от 1 кэВ/н до 450 ГэВ/н. АТІМА позволяет рассчитывать тормозные способности dE/dX(E), флуктуации потерь энергии, длину пробега, страгтлинг пробегов и др. Программа свободно распространяется, доступна с начала 2000-х годов. Исходная версия АТІМА написана на Фортране, имеется С-версия САТІМА. Скачать программу и получить подробную информацию о ней можно по ссылке [9]. Функционирует on-line версия АТІМА [10].

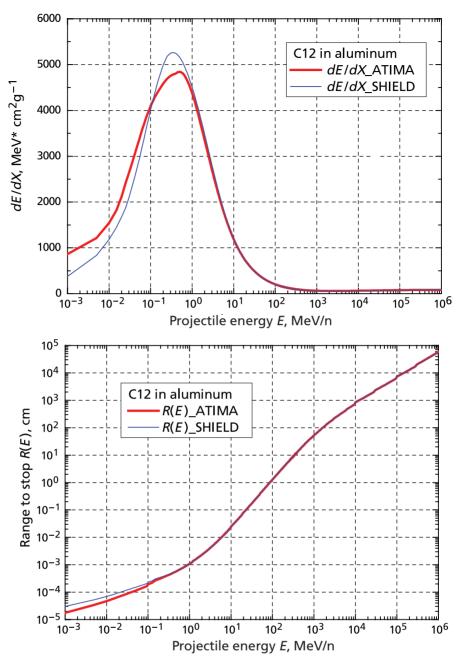
Во Введении отмечалось, что формула Бете-Блоха не позволяет вычислять тормозные способности для тяжелых ионов из-за сложной картины взаимного влияния чисто столкновительных флуктуаций и флуктуаций зарядового состояния иона-снаряда. Флуктуации потерь энергии полностью ионизованным ионом обусловлены статистической природой столкновений с электронами мишени (столкновительные флуктуации). Для частично ионизованных снарядов имеют место флуктуации зарядовых состояний самого иона, вызванные процессами захвата электронов и их потери (флуктуации перезарядки). Влияние столкновительных флуктуаций и флуктуаций перезарядки на результат расчета тормозных способностей dE/dX(E) зависит от заряда материала мишени, от энергии и заряда снаряда. Подробно эти вопросы рассматриваются в работе [5] и в цитируемых в ней статьях.

В приложениях, в которых фигурируют сравнительно лёгкие ионы-снаряды и материалы мишени, например в адронной терапии, применение ATIMA не требуется. Подход, описанный выше в Разделе 2, с привлечением ICRU-рекомендованных данных, позволяет вычислить тормозные способности с необходимой точностью. Однако при моделировании переноса тяжелых ионов-снарядов, например $^{197}_{79}$ Au, $^{208}_{82}$ Pb, $^{238}_{92}$ U, использование ATIMA необходимо. В таких случаях



 $Puc.\ 6.$ Тормозная способность и зависимость пробег-энергия для протона в алюминии. Данные dE/dX(E) по умолчанию корректировались ICRU-рекомендованными данными

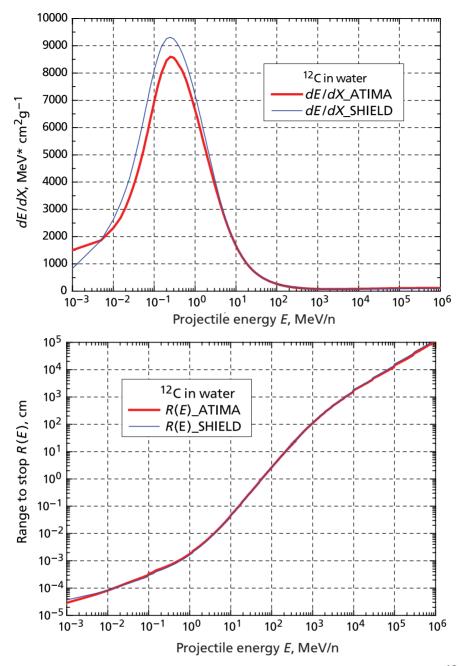
к коду SHIELD подключается программа ATIMA. При этом код SHIELD использует только тормозные способности dE/dX(E), вычисляемые с помощью ATIMA. Необходимость использования ATIMA при переносе ионов $^{238}_{92}$ U обсуждалась, в частности, в нашей работе [11].



 $Puc.\ 7.\$ Тормозная способность и зависимость пробег-энергия для ионов $^{12}{
m C}$ в алюминии. Данные dE/dX(E) по умолчанию корректировались ICRU-рекомендованными данными

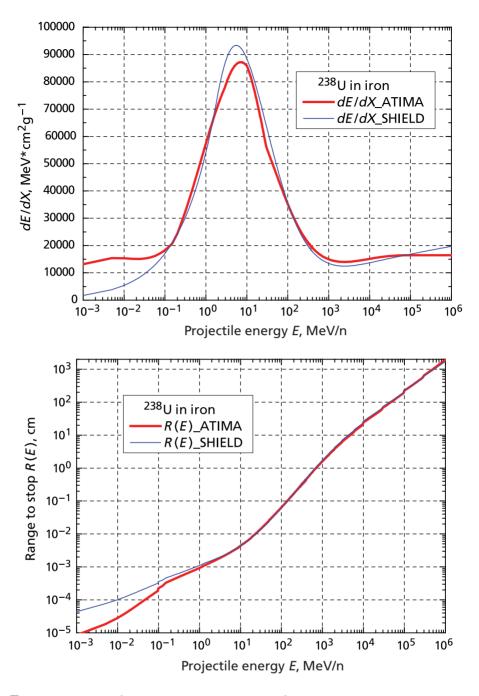
Ниже, в иллюстративных целях, приводятся рисунки, на которых сравниваются тормозные способности dE/dX(E) и длины пробегов R(E), вычисленные с использованием:

(1) тормозных способностей по умолчанию кода SHIELD;



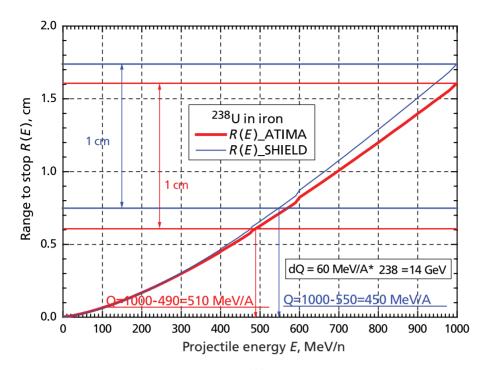
Puc.~8.~ Тормозная способность и зависимость пробег-энергия для ионов $^{12}{\rm C}$ в воде. Данные dE/dX(E) по умолчанию корректировались ICRU-рекомендованными данными

- (2) то же с корректировкой с помощью ICRU-рекомендованных данных;
 - (3) тормозных способностей программы АТІМА.



 $Puc.\ 9.\$ Тормозная способность и зависимость пробег-энергия для ионов урана в железе. Представлены данные dE/dX(E) по умолчанию кода SHIELD

Следующий рисунок демонстрирует необходимость использования программы ATIMA при моделировании переноса тяжелых ионов. На Рис. 10 показана зависимость пробег-энергия R(E), та же самая, что на Рис. 9, но при энергии до 1000 МэВ/нуклон и в линейном масштабе по обеим осям координат. Как следует из Рис. 10, разница



Puc.~10. Сравнение энерговыделения иона 238 U с энергией $1000~{
m MeV/A}$ в слое железа толщиной 1 см. После прохождения слоя ион имеет энергию либо $490~{
m MeV/A}$ (ATIMA) либо $550~{
m MeV/A}$ (SHIELD по умолчанию). Разница в энерговыделении в слое равна $60~{
m MeV/A}$, или $\sim 14~{
m GeV}$

в энерговыделении в слое железа толщиной 1 см при прохождении ядра $^{238}{\rm U}$ с энергией 1 ГэВ/нуклон составляет 60 MeV/A, или около 14 GeV.

Литература

- 1. M.Tanabashi et al. (Particle Data Group). REVIEW OF PARTICLE PHYSICS. Phys. Rev. **D98** (2018) 030001.
- doi: 10.1103/PhysRevD.98.030001
- STOPPING POWERS AND RANGES OF PROTONS AND ALPHA PARTICLES. ICRU Report 49, 1993. https://doi.org/10.1093/jicru/os25.2.Report49
- 3. STOPPING OF IONS HEAVIER THAN HELIUM. ICRU Report 73, 2005. https://doi.org/10.1093/jicru/ndi001
- 4. P. Sigmund A. Schinner, H. Paul. Errata and Addenda for ICRU Report 73, Stopping of Ions Heavier than Helium, 2009. http://icru.org/images/pdf/errata_and_addenda.pdf
- H.Weick, H.Geissel, C.Scheidenberger et al. Drastic Enhancement of Energy-Loss Straggling of Relativistic Heavy Ions due to Charge-State Fluctuations. Phys. Rev. Lett. 85 (2000) 2725. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.85.2725

6. F.Hubert, R.Bimbot, H.Gauvin. Semi-Empirical Formulae for Heavy Ion Stopping Powers in Solids in the Intermediate Energy Range.

Nucl. Instr. Meth. **B36** (1989) 357-363.

doi: 10.1016/0168-583X(89)90339-X

- 7. В.Экштайн. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. М.: Мир, 1995.
- 8. М.Базара, К.Шетти. Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы. М.: Мир, 1982.
- 9. http://web-docs.gsi.de/~weick/atima
- 10. http://web-docs.gsi.de/~weick/atima/atima14.html
- 11. A.A.Golubev, A.V.Kantsyrev, V.E.Luckjashin, A.Fertman, A.V.Kunin, V.V.Vatulin, A.S.Gnutov, Y.V.Panova, H.Iwase, E.Mustafin, D.Schardt, K.Weyrich, N.M.Sobolevskiy, L.N.Latysheva. Measurement of the Energy Deposition Profile for 238U Ions with Specific Energy 500 and 950 MeV/u in Stainless Steel and Copper Targets.

Nucl. Instr. Meth. **B263** (2007) 339-344. https://doi.org/10.1016/j.nimb.2007.06.023 Для заметок

Для заметок

