



СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

4301/83

22/883

10-83-366

Ю.Хеннигер, Б.Хорлбек

**STOPOW/82** – ПРОГРАММА РАСЧЕТА  
ТОРМОЗНЫХ СПОСОБНОСТЕЙ И ПРОБЕГОВ  
ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ  
С ЭНЕРГИЯМИ ОТ 1 кэВ ДО 10 ГэВ/а.е.м.

1983

## ВВЕДЕНИЕ

Со времени публикации первых работ Бора<sup>1,2/</sup>, Бете<sup>3,4/</sup> и Блоха<sup>5,6/</sup> о торможении быстрых заряженных частиц в веществе интерес к этой проблеме не уменьшается.

В настоящее время ассортимент ускоряемых ионов расширился вплоть до урана, а энергии простираются до нескольких ГэВ/а.е.м. В этой связи увеличивается потребность в данных о потерях энергии и пробегах ионов для определения параметров различных детекторов, а также для использования в технологии и исследованиях с тяжелыми ионами.

При вычислениях тормозной способности ионов с энергиями в несколько МэВ/а.е.м. и выше исходят из формулы Бете-Блоха<sup>3,6-8/</sup>, в которой тормозная способность частиц зависит от квадрата "эффективного заряда иона"  $Z_{\text{eff}}$  с поправками, зависящими от  $Z_{\text{eff}}$  более высоких степеней. Эти поправки для релятивистских и нерелятивистских ионов подробно рассмотрены в работе Алена<sup>9/</sup>.

Для более низких энергий используется теория Линдхарда<sup>10/</sup> в параметризации Вареласа и Бирсака<sup>11/</sup>. Параметризация учитывает экспериментальные данные для ряда элементов и позволяет делать интерполяцию на другие элементы среды.

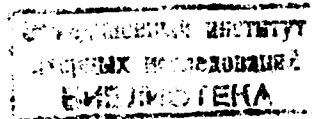
Весьма полные данные о потерях энергии и пробегах протонов и ионов гелия содержатся в монографиях Зиглера<sup>12,13/</sup>.

Наиболее удобной формой хранения и получения данных о тормозной способности  $S(T)$  и пробегах ионов  $R(T)$  является использование программы для ЭВМ, которая рассчитывает их для широкого набора ионов, материалов мишеней и диапазона энергии. Современная программа должна генерировать данные, погрешность которых сравнима с погрешностью экспериментальных данных.

Опубликованные ранее программы удовлетворяли этим требованиям лишь частично.

В программе RANGE Саламона<sup>7/</sup> учтены все релятивистские поправки, а также  $Z_{\text{eff}}^3$ -поправка. Оболочечная поправка вычисляется по простой приближенной формуле, что ограничивает применимость программы для энергий 8 МэВ/а.е.м. при вычислении  $S(T)$ .

Программа, разработанная Стьюардом<sup>14/</sup>, применима в диапазоне от 0,01 до 500 МэВ/а.е.м. Это один из наиболее удачно разработанных кодов, хотя в нем не учитываются релятивистские поправки и  $Z_{\text{eff}}^3$ -поправка. Вследствие этого ей присущи соответствующие погрешности. Опубликованные позже программы и каталоги<sup>15,16/</sup> по сравнению с программой Стьюарда имеют существенные недостатки, что вытекает из сравнения расчетов с экспериментальными данными<sup>17/</sup>.



Наиболее полным и экспериментально обоснованным следует считать каталоги Зиглера<sup>/12,13,18/</sup> для ионов от водорода до урана. Особенно ценна систематизация данных по ионизационным потенциалам, в частности, для разных агрегатных состояний вещества, а также по оболочечным поправкам. Однако формулы, описывающие зависимость  $S(T)$ , основаны на экспериментальных данных для ионов водорода и гелия.

Предлагаемая программа предназначена для расчета тормозных способностей и пробегов ионов от водорода до урана с энергиями от 200 кэВ/а.е.м. в любом аморфном веществе. В ней широко использованы данные каталогов Зиглера<sup>/12,13,18/</sup> с учетом всех поправок, перечисленных в работах Алена<sup>/9/</sup> и использованных в работе<sup>/7/</sup>.

## 2. ОСНОВНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ ПОЛОЖЕНИЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ТОРМОЗНОЙ СПОСОБНОСТИ В ПРОГРАММЕ STOPW

Определение тормозной способности проводится в трех интервалах энергии по отличающимся друг от друга методам вычисления.

### Вычисление тормозной способности для $T \leq 1,5$ МэВ/а.е.м.

Вычисление сечения замедления  $s(T)$  при этих энергиях производится по формуле /1/:

$$s(T) = Z_{\text{eff}}^2 / Z_{\text{HE}}^2 s_{\text{HE}}(T) + s_n(T), \quad /1/$$

где:  $Z_{\text{eff}}$  и  $Z_{\text{HE}}$  - эффективные заряды падающих ионов и гелия соответственно;  $T$  - энергия в МэВ/а.е.м. Вычисление величины сечения замедления ионов гелия  $s_{\text{HE}}(T)$  и  $s_n(T)$  - ядерного сечения замедления проводится по формулам и с помощью данных, представленных в работах<sup>/13,18/</sup>. При этом в зависимости от агрегатного состояния мишени используются различные комплекты исходных данных. Вычисление эффективных зарядов ионов проводится с помощью уравнений работы<sup>/18/\*</sup>. Точность для энергий больше 200 кэВ/а.е.м. составляет  $\pm 5\%$ <sup>/18/</sup>. Так как программа предназначена для вычисления длины остаточного пробега для всех ионов с энергиями больше, чем 200 кэВ/а.е.м., необходимо распространить вычисление тормозной способности и на более низкие энергии, приблизительно до

\*Нужно заметить, что в уравнениях /9/, /10/ и /13/ работы<sup>/18/</sup> есть ошибка: отсутствует зарядовое число  $Z_1$  падающего иона в качестве множителя, и уравнение /11/ нужно представить как

$$\gamma = 1 + (0,007 + 0,00005 Z_2) \exp[-(7,6 - \ln(E/M_1))^2].$$

1 кэВ/а.е.м. При этом можно допустить незначительное увеличение ошибки, так как точность вычислений  $s(T)$  в этой области энергий имеет небольшое влияние на определение длины остаточного пробега.

Формулы для определения эффективного заряда ионов водорода, гелия и лития из работы<sup>/18/</sup> можно использовать при энергиях ионов до 1 кэВ/а.е.м.  $Z_{\text{eff}}$  стремится асимптотически к нулю при приближении значений энергии к нулю. В формуле для ионов с  $Z_1 > 3$  это не имеет места, в данном случае применяется эмпирическая формула Нортсклиффа<sup>/19/</sup>:

$$Z_{\text{eff}} = Z_1(1 - e^{-\kappa\beta}). \quad /2/$$

Параметр  $\kappa$  определяется из условия равенства выражения /2/ величины  $Z_{\text{eff}}$ , определенной по формуле Зиглера<sup>/18/</sup> при энергии иона 200 кэВ/а.е.м.,  $\beta$  - скорость иона в единицах скорости света. Значения величины  $\kappa$  описывались соотношением Пирса и Блэнна<sup>/20/</sup>

$$\kappa \approx 130 Z_1^{2,3}.$$

Точные измерения тормозной способности легких ионов в области энергий от 10 до 40 кэВ/а.е.м. показали согласие в пределах  $\pm 7\%$  с вычислениями по формуле Зиглера<sup>/21,22/</sup>.

### Вычисление тормозной способности для энергий иона в интервале $1,5 \leq T \leq 100$ МэВ/а.е.м.

Вычисление тормозной способности в этом интервале энергий проводится в программе по формуле Бете-Блоха<sup>/3/</sup>:

$$s(T) = \frac{e^4}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_2}{mc^2} \frac{Z_{\text{eff}}^2}{\beta^2} [L_{01} (1 + \frac{2Z_1 F(V)}{Z_2^{1,2}}) + L_{02} + B/k + G/2]. \quad /3/$$

Здесь  $k = \frac{e^4}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_2}{mc^2} \frac{Z_{\text{eff}}^2}{\beta^2}$  является фактором Бете в стандартном

виде, где имеют место следующие обозначения:  $e$  - заряд электрона,  $\epsilon_0$  - постоянная диэлектрической проницаемости в вакууме,  $mc^2$  - энергия покоя электрона,  $Z_2$  - атомный номер элемента мишени,  $L_{01}$  представляет собой нерелятивистский бете-терм

$$L_{01} = \ln(2mc^2 \beta^2 / I_{\text{adj}}) - C_{\text{adj}} / Z_2. \quad /4/$$

Через  $I_{\text{adj}}$  обозначается так называемый подгоночный ионизационный потенциал, через  $C_{\text{adj}}$  - подгоночная оболочечная поправка<sup>/24/</sup>. Для оболочечной поправки  $C_z$  и ионизационного потенциала  $I$  при всех

энергиях должно выполняться соотношение

$$\ln I + C_z / Z_2 = \ln I_{adj} + C_{adj} / Z_2 \quad /5/$$

с асимптотикой  $C_{adj}(\beta \rightarrow 1) \rightarrow 0$ . Значения для  $I_{adj}$  взяты из работы<sup>/18/</sup>. Значения  $C_{adj}$  вычисляются по методу, предложенному в<sup>/18/</sup> из соответствующих значений для замедления ионов водорода<sup>/12/</sup> в отдельности для каждого элемента мишени.  $L_{02}$  представляет собой релятивистский бете-терм<sup>/6/</sup>

$$L_{02} = \ln(1/(1-\beta^2)) - \beta^2 \quad /6/$$

$B$  - так называемая поправка Блоха в формализме Бете<sup>/5,6/</sup>. Для практических вычислений использовалось приближение Саламона в аналитической форме<sup>/7/</sup>.  $G$  - поправка Мотта, в форме полинома седьмой степени по  $Z_{eff}$ , предположенная в работе<sup>/25/</sup>. Поправка к формуле Бете-Блоха осуществляется слагаемым  $k/2 \cdot G$  по<sup>/25/</sup>. Поправочный множитель  $2 \cdot Z_{eff} T(V) / Z_2^{1/2}$  в выражении для  $L_{01}$  представляет собой коррекцию по  $Z_{eff}^3$ , где  $V = 137\beta((1-\beta)Z_2^{1/2})$ . При этом в качестве  $F(V)$  используется функция, определенная в работе<sup>/7/</sup>. Эта поправка важна для энергий меньше 10 МэВ/а.е.м. В энергетических интервалах  $T < 1,5$  МэВ/а.е.м. и  $1,5$  МэВ/а.е.м.  $< T < 100$  МэВ/а.е.м. сечение замедления  $s(T)$  вычисляется независимо для каждого элемента мишени. Для реальной мишени тормозная способность  $S(T)$  вычисляется с использованием правила Брэгга<sup>/26/</sup>:

$$S(T) = \sum_{j=1}^J \rho_{aj} s_j(T) \quad /7/$$

где  $\rho_{aj}$  обозначает атомную плотность и  $s_j$  - сечение замедления для  $j$ -того элемента.  $J$  является числом представленных в мишени элементов. Эффекты, связанные с типом химической связи, при этом не учитываются /например, для ионов в кристаллической решетке/. В принципе имеется возможность отдельного вычисления сечений замедления для изолированных атомов /газов/ с целью учета влияния химической связи. Для соединений  $WO_3$ ,  $BaF_2$ ,  $BaCl_2$  такое предположение было сделано исходя из результатов обработки экспериментально определенных данных<sup>/27/</sup>.

#### Вычисление тормозной способности для энергий $T > 100$ МэВ/а.е.м.

Вычисление тормозной способности для энергий ионов выше 100 МэВ/а.е.м. также проводится по формуле Бете-Блоха<sup>/3/</sup>. В отличие от расчетов для меньших энергий подгоночная оболочечная поправка  $C_{adj}$  практически не влияет на точность вычислений. Сред-

ний ионизационный потенциал определяется правилом Брэгга:

$$\ln(I_{adj}) = \sum_{j=1}^J \rho_{aj} \ln I_{adj}^j / \sum_{j=1}^J \rho_{aj} \quad /8/$$

Несмотря на малость поправки  $C_{adj}$ , она учитывается по формуле Валске<sup>/24/</sup> с использованием параметров Баркаса и Бергера<sup>/28/</sup>.

Для релятивистских энергий ионов необходимо учитывать поправку на эффект плотности  $\delta$  /явление поляризации мишени/<sup>/29/</sup>. Поправка к формализму Бете-Блоха осуществляется путем введения слагаемого  $(-k\delta/2)$ . В настоящих вычислениях используется обобщенная форма поправки плотности по Стернхеймеру и Пейерлсу<sup>/30/</sup>. При этом вычисления проводятся отдельно для твердых тел и для газов.

Число молекул газа в единице объема при нормальных условиях считалось таким же, как и для идеального газа.

### 3. ПОСТРОЕНИЕ ПРОГРАММЫ

Основные части программы, такие, как ввод данных, внутренний поток данных, вывод данных и передача их к вызывающей программе, были осуществлены самой программой STOPW/80<sup>/31/</sup>, в которую включены атомные данные всех встречающихся в природе элементов, в том числе их естественный изотопный состав. Это позволяет до минимума сократить число входных данных. Мишень может быть химическим соединением. В качестве вводимых данных указываются лишь порядковые номера атомов мишени и число атомов элемента в формуле соединения. Для смесей вводится массовый вклад каждого вещества в смесь и плотность вещества. Если элемент имеет изотопный состав, отличающийся от естественного, необходима информация о массовом числе или усредненном массовом числе в случае смесей нуклидов. Так как программа учитывает эффекты, связанные с составом мишени, необходима информация о ее агрегатном состоянии. Полное описание необходимых входных данных представлено в виде комментария в начале программы. При выводе данных тормозную способность можно получить в единицах массовой тормозной способности или как сечение замедления.

Вычисление длины остаточного пробега проводится известным способом путем интегрирования по энергии обратной величины тормозной способности. Отдельное вычисление длины остаточного пробега и глубины проникновения в настоящей программе не проводится потому, что при энергиях выше нескольких МэВ/а.е.м. разница между этими величинами меньше, чем точность настоящих вычислений.

Для физики детекторов излучения и для радиобиологии часто представляют интерес специфические величины, получаемые как производные от величин  $S(T)$  и  $R(T)$ , такие, как первичная ионизация и ЛПЭ, а также параметры бомбардирующей частицы, например,  $Z_{eff}^2 / \beta^2$ . В настоящей программе предусмотрена возможность вычис-

ления и этих величин. Пользователь имеет возможность выбрать до 9 таких функций.

Кроме того, в программу включена подпрограмма для определения переноса тяжелых заряженных частиц через плоские слои вещества. Программа написана на языке ФОРТРАН-IV для ЭВМ типа CDC-6500.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Bohr N. Philos.Mag., 1913, 25, p.10.
2. Bohr N. Philos.Mag., 1915, 30, p.581.
3. Bethe H. Ann.Phys., 1930, 5, p.325.
4. Bethe H. Z.Phys., 1932, 76, p.293.
5. Bloch F. Ann.Phys. (Leipzig), 1933, 16, p.285.
6. Bloch F. Z.Phys., 1933, 81, p.363.
7. Salomon M.H. Lawrence Berkeley Laboratory Report No. LBL-10446/UC-34d, 1980.
8. International Commission on Radiation Units and Measurements, Linear Energy Transfer. ICRU Report 16, Washington, 1970, and ICRU, Basic Aspects of High Energy Particle Interactions and Radiation Dosimetry. ICRU Report 28, Washington, 1978.
9. Ahlen S.P. Rev.Mod.Phys., 1980, 52, p.121.
10. Lindhard J., Scharff M., Schiøtt H.E. KGL.Danske Videnskab. Selskab.Mat.Fys.Medd., 1963, 33, No.14.
11. Varelas C., Biersack J.P. Nucl.Instr. and Meth., 1970, 79, p.213.
12. Anderson H.H., Ziegler J.F. Hydrogen Stopping Power and Ranges of Ions in Matter. Pergamon, New York, 1977.
13. Ziegler J.F. Helium Stopping Powers and Ranges in All Elemental Matter, vol.4 of the Stopping and Ranges of Ions in Matter. Pergamon, New York, 1977.
14. Steward P.G. Lawrence Berkeley Lab., University of California, Berkeley, Report No.UCRL-18127.
15. Armstrong T.W., Chandler K.C. Oak Ridge National Lab., Report No.ORNL-4869, Oak Ridge 1973 and Nucl.Instr. and Meth., 1973, 113, p.313.
16. Northcliffe L.C., Schilling R.F. Nucl.Data, 1970, A7, p.233.
17. Bimbot R. et al. Nucl.Instr. and Meth., 1978, 152, p.161.
18. Ziegler J.F. Handbook of Stopping Cross-Sections for Energetic Ions in All Elements, vol.5 of the Stopping and Ranges of Ions in Matter. Pergamon, New York, 1980.
19. Northcliffe L.C. Ann.Rev.Nucl.Sci., 1963, 13, p.67.
20. Pierce T.E., Blann M. Phys.Rev., 1968, 173, p.390.
21. Mertens P. Phys.Rev., 1979, A19, p.1442.
22. Mertens P., Kirst Th. Nucl.Instr. and Meth., 1980, 168, p.33.
23. Mertens P., Kirst Th. Nucl.Instr. and Meth., 1982, 194, p.57.

24. Walske M.C. Phys.Rev., 1952, 88, p.1283 and 1956, 101, p.940.
25. Ahlen S.P. Phys.Rev., 1978, A17, p.1236.
26. Bragg W.H., Kleeman R. Phil.Mag., 1905, 10, p.318.
27. Trehan P.N., Armitage B.H. Nucl.Instr. and Meth., 1981, 179, p.21.
28. Barkas W.H., Berger M.J. In: Studies of Penetration of Charges Particles in Matter. Natl. Acad.Sci.Publ., 1964, p.1133.
29. Fermi E. Phys.Rev., 1940, 57, p.485.
30. Sternheimer R.M. Phys.Rev., 1952, 88, p.851; Phys.Rev., 1953, 91, p.256; Phys.Rev., 1954, 93, p.351; Phys.Rev., 1956, 103, p.511; Phys.Rev., 1966, 145, p.247; Phys.Rev., 1967, 164, p.349; Sternheimer R.M., Peierls R.F. Phys.Rev., 1971, B3, p.3681.
31. Henniger J., Horlbeck B. Program STOPOW/80. TU Dresden, 1980 (unpublished).

Рукопись поступила в издательский отдел  
3 июня 1983 года.



## НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

|               |   |            |
|---------------|---|------------|
| ДЗ-11787      | Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.   | 3 р. 00 к. |
| Д13-11807     | Труды III Международного совещания по пропорциональным и дрейфовым камерам. Дубна, 1978.  | 6 р. 00 к. |
|               | Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/   | 7 р. 40 к. |
| Д1,2-12036    | Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978  | 5 р. 00 к. |
| Д1,2-12450    | Труды XII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.   | 3 р. 00 к. |
|               | Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/  | 8 р. 00 к. |
| Д41-80-13     | Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979            | 3 р. 50 к. |
| Д4-80-271     | Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.  | 3 р. 00 к. |
| Д4-80-385     | Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.  | 5 р. 00 к. |
| Д2-81-543     | Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981  | 2 р. 50 к. |
| Д10,11-81-622 | Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980                      | 2 р. 50 к. |
| Д1,2-81-728   | Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.  | 3 р. 60 к. |
| Д17-81-758    | Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.   | 5 р. 40 к. |
| Д1,2-82-27    | Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.  | 3 р. 20 к. |
| Р18-82-117    | Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981. | 3 р. 80 к. |
| Д2-82-568     | Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.  | 1 р. 75 к. |
| Д9-82-664     | Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.   | 3 р. 30 к. |
| ДЗ,4-82-704   | Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.   | 5 р. 00 к. |

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:  
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79  
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Хеннигер Ю., Хорлбек Б. 10-83-366  
STOPOW/82 - программа расчета тормозных способностей и пробегов тяжелых ионов с энергиями от 1 кэВ до 10 ГэВ/а.е.м.

Создана программа STOPOW/82, предназначенная для расчета тормозных способностей и пробегов ионов вплоть до урана в энергетическом интервале 1 кэВ/а.е.м. - 10 ГэВ/а.е.м. в любом аморфном веществе. Программа основана на данных каталога Зиглера и теоретическом обзоре Алена. В вычислениях учитываются поправки:  $Z_{\text{eff}}^8$ , оболочечная, релятивистские поправки Блоха, Мотта и поправка на эффект плотности. Предусмотрена возможность вывода 9 различных функций, производных от тормозных способностей и пробегов, например, первичной ионизации и ЛПЭ, а также параметров иона, таких, как  $\beta$ ,  $Z_{\text{eff}}^2/\beta^2$ . Программа написана на фортране в версии для ЭВМ CDC-6500. Управление ею требует минимального количества входных данных. Она предназначена для широкого круга прикладных и исследовательских задач.

Работа выполнена в Отделе радиационной безопасности и радиационных исследований ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Henniger J., Horlbeck B. 10-83-366  
STOPOW/82 Program for Calculations of Stopping Powers and Ranges for Heavy Ions in the Energy Interval 1 keV to 10 GeV/a.m.u.

The program STOPOW/82 is created to calculate the stopping power and range of ions up to uranium in the energy range 1 keV/a.m.u. - 10 GeV/a.m.u. in any amorphous matter. The program is based on Ziegler's catalogue data and Ahlen's theoretical treatments. The  $Z_{\text{eff}}^8$  relativistic Bloch and Mott corrections and corrections on density effect are taken into account in the calculations. An opportunity of 9 different functions removal, derivative on the stopping power and range, for example, primary ionization and LET, and also of ion parameters, such as  $\beta$ ,  $Z_{\text{eff}}^2/\beta^2$  is foreseen. The program is written in FORTRAN language in version for the CDC-6500 computer. The program needs a minimized input also for compound targets. So it is useful for many problems in applied sciences and experimental physics.

The investigation has been performed at the Department of Radiation Safety and Radiation Researches, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой.