

7378/92

342a + 349.1 +

Барашенков В. С.

Б2 - 7 - 92 - 381



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Б2 - 7 - 92 - 381

ДЕПОНИРОВАННАЯ ПУБЛИКАЦИЯ

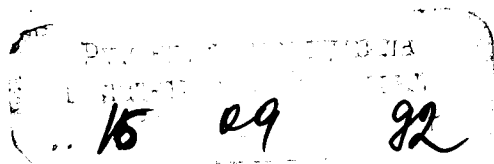
Дубна 1992

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ  
Лаборатория вычислительной техники и автоматизации

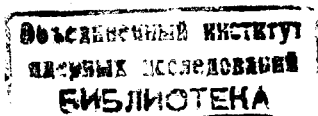
*Б2-7-92-381*

В. С. Барашенков

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГОВЫДЕЛЕНИЯ В ТРЕКАХ  
ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ



Дубна, 1992.



## Аннотация

Приведена программа, позволяющая рассчитывать временное и пространственное распределения энерговыделения внутри трека заряженной частицы с энергией  $E \approx 1-10^4$  МэВ/нуклон. Одновременно вычисляются удельные потери энергии этой частицей  $dE/dx$ . Программа позволяет исследовать зависимость энерговыделения от свойств мишени и типа первичной частицы.

MATHEMATICAL MODELLING OF ENERGY DEPOSITION  
INSIDE CHARGE PARTICLE TRACKS

V.S.Barashenkov

The computer code for calculation of space - time distributions of energy deposition inside a charge particle track is presented. In parallel the energy losses  $dE/dx$  for this particle are estimated. The code allows to investigate the dependence of energy deposition on the properties of target and the type of projectile.

Исследование радиационных повреждений, вызываемых в полимерных, сверхпроводящих и других материалах заряженными частицами с энергией  $E \approx 1-10^4$  МэВ/А (А - массовое число частицы) требует расчета энерговыделения  $\epsilon(R, T)$  на различных расстояниях R от центра трека и его изменения с течением времени T. Такой расчет в качестве модуля входит в более сложные пакеты программ, моделирующих структурные изменения вещества в поле сильно ионизирующего облучения.

В основу расчета положена полуфеноменологическая аппроксимация монте-карловских расчетов, подробно описанная в нашей работе<sup>/1/</sup>.

Ниже приводится программа DOSA, вычисляющая  $\epsilon(R, t)$  при условии, что соотношение "пробег-энергия"  $R = R(E)$  аппроксимируется степенной зависимостью  $R = k(E) E^{\alpha(E)}$  с кусочно-постоянными функциями  $k(E)$  и  $\alpha(E)$ .

В программе используются две неопределяемые в данной публикации стандартные программы: GAUSS - вычисление интеграла методом Гаусса и RZERO - нахождение нуля функции F(x).

В качестве примера приводится вычисление распределения  $\epsilon(R, T)$  и удельных петель энергии первичной частицей  $dE/dx$  для взаимодействия иона кремния с майларом  $C_5H_4O_2$ .

При используемых значениях параметров программа пригодна только для легких мишеней (вода, органические ткани, полимерные материалы, графит; при энергиях  $E/A \geq 5$  МэВ можно рассматривать алюминиевые и кремниевые мишени). В качестве бомбардирующей частицы могут быть протон и любые более тяжелые ионы. Согласие с экспериментом иллюстрируется таблицами I-П, где рассчитанные по нашей программе значения  $dE/dx$  сравниваются с табличными данными<sup>/2-4/</sup>.

Для расчета энерговыделения в более тяжелых средах (в частности, в ВТСП-керамиках) следует изменить значения параметров в соотношении "пробег-энергия" и в поправочной функции Z(R).

Таблица I

Сравнение рассчитанных значений  $dE/dx$  (МэВ/см) со стандартными табличными в случае легких сред.

Взаимодействие ионов  ${}^1_1\text{H}$ ,  ${}^{12}_6\text{C}$ ,  ${}^{107}_{47}\text{Ag}$  с графитом.

E МэВ/ /А	${}^1_1\text{H}$		${}^{12}_6\text{C}$		${}^{107}_{47}\text{Ag}$	
	расч.	табл.	расчет.	табл.	расчет.	табл.
1	504	569/2/ 509/3/	$1,25 \cdot 10^4$	$1,44 \cdot 10^{4/2/}$	$1,44 \cdot 10^5$	$1,48 \cdot 10^{5/2/}$
2,5	252	272/2/ 269/3/	$7,96 \cdot 10^3$	$8,96 \cdot 10^{3/2/}$ $8,64 \cdot 10^{3/4/}$	$1,41 \cdot 10^5$	$1,41 \cdot 10^{5/2/}$ $1,88 \cdot 10^{5/4/}$
5	146	160/2/ 159/3/	$5,03 \cdot 10^3$	$5,66 \cdot 10^{3/2/}$ $5,48 \cdot 10^{3/4/}$	$1,27 \cdot 10^5$	$1,23 \cdot 10^{5/2/}$ $1,68 \cdot 10^{5/4/}$
10	83,8	92/2/ 92/3/	$3,0 \cdot 10^3$	$3,28 \cdot 10^{3/2/}$ $3,26 \cdot 10^{3/4/}$	$1,05 \cdot 10^5$	$9,65 \cdot 10^{5/2/}$ $1,29 \cdot 10^{5/4/}$
100	14,1	14,6/2/	509	53/4/	$3,03 \cdot 10^4$	$3,09 \cdot 10^{4/4/}$
500 <sub>3</sub>	5,6	5,5/2/	202	202/4/	$1,24 \cdot 10^4$	$1,23 \cdot 10^{4/4/}$
10 <sup>3</sup>	4,6	4,4/2/				
10 <sup>4</sup>	4,3	4,5/2/				

Таблица II

Сравнение рассчитанных значений  $dE/dx$  (МэВ/см) со стандартными табличными в случае взаимодействия протонов с алюминием и германием.

E МэВ/А	${}^1_1\text{H} + \text{Al}$		${}^1_1\text{H} + \text{Ge}$	
	расчет.	табл.	расчет.	табл.
1	588	463/3/	1080	642/2/ 612/3/
2,5	293	255/3/	543	367/2/ 380/3/
5	170	155/3/	314	234/2/ 239/3/
10	97,6	91,2/3/	180	144/2/ 145/3/
100 <sub>3</sub>	16,5	15,4/3/	30,3	25,7/3/
10 <sup>3</sup>	5,3	4,8/3/	9,7	8,2/3/
10 <sup>4</sup>	4,9	4,8/3/	9,0	8,4/3/

Литература

1. Барашенков В.С. Сообщение ОИЯИ, P7-92-365, Дубна, 1992.
2. Northcliffe L.C., Schilling R.F. Nucl. Data Tables. 1970, v.A7, p.233.
3. Janni J.F. Atom and Nucl. Data Tables. 1982, v.27, p.344.
4. Hubert F. et al. Atom and Nucl. Data Tables. 1990, v.46, p.1.

```

PROGRAM RAD(INPUT,OUTPUT)
CALCULATION OF
1) RADIAL AND TIME DISTRIBUTION OF ENERGY DEPOSITED AROUND
PARTICLE TRACK D(R,T),
2) TIMES (TSTART AND TEND) OF THE BEGINNING AND THE END
OF ENERGY DEPOSITION AT POINT F,
3) IONIZATION ENERGY LOSS OF PRIMARY PARTICLE DEDY

REGIME=0. - CALCULATION OF ALL ABOVE MENTIONED QUANTITIES
REGIME=1. - CALCULATION OF DE/DX ONLY. IN THIS CASE
R AND T ARE ANYONES, FOR EXAMPLE F=10.

DIMENSION R(20),T(15),GT(10),AT(10),ZT(10),TSTART(15),
* TEND(15),D(15,15)
INPUT OF NR RADIAL POINTS
* DATA R/1.E-8,5.E-8,1.E-7,5E-7,1.E-6,1.E-6,1.E-5,5.E-5,
1.E-4,5.E-4,1.E-3,5.E-3,1.E-2,5.E-2,1.E-1,
INPUT OF NT TIMES (IF NT IS GREATER 6 ONE HAS TO EXTEND
THE OUTPUT TABLE BY MEANS OF FORMATS 7 AND 9)
DATA T/1.E-19,1.E-18,1.E-17,1.E-16,1.E-15,1.E-5/
NR=15 NT=6

REGIME=1
PROJECTILE MASS AND CHARGE NUMBERS
A=40. Z=18.
PROJECTILE PARTICLE ENERGY ( MEV/A )
E=15.
TARGET DENSITY ( G/CM3 )
DT=6.4
NUMBER OF NUCLEAR COMPONENTS IN THE TARGET
NCT=4
TARGET NUCLEAR COMPONENT PARAMETERS
CT(I)- NUMBER OF NUCLEI OF TYPE I, AT(I) AND ZT(I) -- THEIR
MASS AND CHARGE NUMBERS
CT(1)=1. $ AT(1)=88.9 $ ZT(1)=39.
CT(2)=2. $ AT(2)=137.3 $ ZT(2)=56.
CT(3)=3. $ AT(3)=61.5 $ ZT(3)=29.
CT(4)=7. $ AT(4)=16. $ ZT(4)=8.
PRINT 1,A,Z,E,DT
1 FORMAT (/10X,7PROJECTILE PARTICLE MASS A=#,F7.2 /
* 10X,3I-#-.8X,3H-#-.3X,7CHARGE Z=#,F6.2 /
* 10X,3I-#-.8X,3H-#-.3X,7ENERGY E=#,F8.2,4 MEV/A# /
/ 10X,7TARGET DENSITY DT=#,F6.2,7 G/CM3)
PRINT 2:
20 FORMAT (/10X,7TARGET NUCLEAR COMPONENT PARAMETERS#)
DO 3 I=1,NCT
PRINT 2,I,CT(I),AT(I),ZT(I)
3 FORMAT (10X,13,7 NUMBER,MASS,CHARGE = #,F4.0,F9.1,78.1)
CONTINUE
IF (REGIME .GT. 0.) GO TO 12
DO 5 K=1,NR
DO 5 L=1,NT
5 CALL DCSE (REGIME,R(K),T(L),F,A,Z,NCT,CT,AT,ZT,DT,TSTART(K),
* TEND(K),D(K,L),DEDY)
PRINT 6:
60 FORMAT (/15X,38(1H=) /
10X,7R,CM#-.5X,7TSTART,SEK#,7X,7TEND,SEK#
* /15X,3(12X,10(1H-)))
DO 7 K=1,NR
PRINT 6,R(K),TSTART(K),TEND(K)
6 FORMAT (15X,5E12.5)
PRINT 7: (T(I),I=1,8)
70 FORMAT (15X,38(1H=),//28X,7D(R,T),ERG/CM3# /2X,72(1H-)/
* 2X,7R CM/T,SEK#,6E10.3/2X,7-(1H-))
DO 8 K=1,NR
PRINT 8,R(K),(D(K,L),L=1,6)
9 FORMAT (2X,7E10.3)
PRINT 9:
90 FORMAT (2X,72(1H=))
12 CALL DCSE (1.,1.,1.,1.,E,A,Z,NCT,CT,AT,ZT,DT,XX,YY,ZZ,DEDY)
10 PRINT 11,DEDY
11 FORMAT (/15X,7IONIZ. ENERGY LOSS =#,E12.3,7MEV/CM)
STOP $ END

```





```

60 CCONTINUE
C TSTART=TK(1) * TEND=TK(2)
C CALCULATION OF ENERGY OF ELECTRONS ARRIVED TO POINT 2
C AT TIME T
Y1=1.
C CHECK OF TIME
IF(T .LT. TK(1)) GO TO 8
IF(T .GT. TK(2)) GO TO 15
CG=TMAX
AG=(RS/AK)**(1./ALF)
CALL RZRF0(AG,EG,EBT,PT,1,E-4,100,FT)
Y1=(1.-(RS+TETA)/(AK*EBT**ALF+TETA))**(1./ALF)
15 CC=(R-EX)/OX
X=1.
IF(R .LT. EX .OR. CC .GT. 15.) GO TO 33
X=AX*CC*EXP(-CC)
33 CCONTINUE
14 CCONTINUE
8 DCS=CC*(Y-Y1)*(1.-X)/(1.+TETA/RS)
91 CCONTINUE
IF(REGIME .LT. 1.) RETURN
RMAX=RMAX/DT
TETA=TETA/DT
DEDX=2.*3.1416*1.E6/1.602*100*GAUSS(EG1,0.,RMAX,1E-4)
RETURN * END
FUNCTION FT 73/73-2 CPT=1 FTN 4.8+538

```

```

C FUNCTION FT(X,I)
C CALCULATION OF MIN ENERGY IN POINT 2 AT THE GIVEN TIME
COMMON/TT/ALF,TL,AK

```

```

COMMON/TTT/RR,DT,CL
EXTERNAL FG
X1=1.
V=RR/(AK*X**ALF)
IF(V .GE. 1.) GO TO 1
X1=X*(1.-V)**(1./ALF)
1 CCONTINUE
EPS=1.E-6
FT=TL-GAUSS(FG,X1,X,EPS)*
*ALF*AK/DT/CL
RETURN * END
FUNCTION FG 73/73-2 CPT=1 FTN 4.8+538

```

```

C FUNCTION FG(X)
COMMON/TT/ALF,TL,AK
AM=511.
FG=X**(ALF-3./2.)*(X+AM)/SQRT(X+2.*AM)
RETURN * END
FUNCTION FG1 73/73-2 CPT=1 FTN 4.8+538

```

```

C FUNCTION FG1(X)
COMMON/TT/ALF,TL,AK
COMMON/T1/RMAX,TETA
COMMON/T2/AX,EX,OX
Y=((RMAX-X)/(RMAX+TETA))**(1./ALF)
FG1=Y/(X+TETA)
CC=(X-EX)/OX
Z=1.
IF(X .LT. EX .OR. CC .GT. 15.) GO TO 8
Z=AX*CC*EXP(-CC)
FG1=FG1*(1.+Z)
RETURN * END
8

```

PROJECTILE PARTICLE MASS A= 40.00  
 -Z- -Z- CHARGE Z= 18.00  
 -Z- -Z- ENERGY E= 15.00 MEV/A

TARGET DENSITY DT= 6.40 G/CM3

TARGET NUCLEAR COMPONENT PARAMETERS:

1	NUMBER, MASS, CHARGE =	1.	88.9	39.
2	NUMBER, MASS, CHARGE =	2.	137.3	56.
3	NUMBER, MASS, CHARGE =	3.	63.5	29.
4	NUMBER, MASS, CHARGE =	7.	16.0	8.

```

=====
      R,CM      TSTART,SEK      TEND,SEK
-----
.10000E-07    .96945E-18    .29712E-16
.50000E-07    .48473E-17    .91684E-16
.10000E-06    .96948E-17    .14896E-15
.50000E-06    .48482E-16    .45976E-15
.10000E-05    .96985E-16    .74712E-15
.50000E-05    .48576E-15    .23883E-14
.10000E-04    .97361E-15    .37541E-14
.50000E-04    .49578E-14    .11644E-13
.10000E-03    .10175E-13    .19000E-13
.50000E-03    0.            .
.10000E-02    0.            0.
.50000E-02    0.            0.
.10000E-01    0.            0.
.50000E-01    0.            0.
.10000E+00    0.            0.
=====
  
```

D(R, T), ERG/CM3

CM/T, SEK	.100E-18	.100E-17	.100E-16	.100E-15	.100E-14	.100E-14
.100E-07 0.		.141E+08	.347E+12	.382E+13	.382E+13	.382E+13
.500E-07 0.	0.		.687E+19	.561E+12	.561E+12	.561E+12
.100E-06 0.	0.		.530E+17	.949E+11	.223E+12	.223E+12
.500E-06 0.	0.	0.		.114E+09	.948E+11	.948E+11
.100E-05 0.	0.	0.		.236E+06	.106E+11	.106E+11
.500E-05 0.	0.	0.	0.		.257E+17	.250E+18
.100E-04 0.	0.	0.	0.		.120E+15	.618E+07
.500E-04 0.	0.	0.	0.			.228E+16
.100E-03 0.	0.	0.	0.			.504E+15
.500E-03 0.	0.	0.	0.			0.
.100E-02 0.	0.	0.	0.			0.
.500E-02 0.	0.	0.	0.			0.
.100E-01 0.	0.	0.	0.			0.
.500E-01 0.	0.	0.	0.			0.
.100E+00 0.	0.	0.	0.			0.

ICNIZ. ENERGY LOSS = .471E+05 MEV/CM

*Handwritten signature*