

УДК 530.132

МЕТОД КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ПРОХОЖДЕНИЯ ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ВЕЩЕСТВО

© 2023 г. Н. В. Новиков*

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
НИИЯФ им. Д.В. Скобельцына, Москва, 119991 Россия

*e-mail: nvnovikov65@mail.ru

Поступила в редакцию 10.10.2022 г.

После доработки 25.11.2022 г.

Принята к публикации 25.11.2022 г.

Проведено сравнение метода Монте-Карло с детерминистическими методами на основе решения транспортного уравнения и методом молекулярной динамики. Проанализированы возможности часто используемых программ общего назначения (SRIM, PENELOPE, MCNP, FLUKA и GEANT4) для моделирования методом Монте-Карло процессов прохождения частиц через вещество. Обсуждаются возможные направления дальнейшего развития метода Монте-Карло.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, SRIM, PENELOPE, MCNP, FLUKA, GEANT4.

DOI: 10.31857/S1028096023060122, **EDN:** DMNWKS

1. ВВЕДЕНИЕ

Задача прохождения частиц через вещество заключается в оценке изменения характеристик налетающей частицы и определения степени ее воздействия на материалы и структуру мишени. Актуальность этих исследований связана с широким применением ускоренных частиц для различных фундаментальных и прикладных задач, таких как:

- ускорительная техника;
- физика реакторов;
- эксперименты по обнаружению новых частиц в физике высоких энергий;
- моделирование процессов во вселенной и околоземном пространстве;
- сбои в работе электронной компонентной базы под действием излучения;
- создание материалов с новыми свойствами;
- использование электронной микроскопии для определения структуры образцов;
- радиационная защита при оценке поглощенной и эквивалентной доз облучения;
- оценка результатов лучевой терапии в томографии;
- радиационная химия в биохимических исследованиях воздействия излучения на ДНК.

Развитие ускорительной техники приводит к необходимости моделирования прохождения и отражения пучков заряженных частиц. Энергия частиц E в современных действующих и проекти-

руемых экспериментальных установках достигает 12 ГэВ в ускорительном комплексе NICA [1], 200 ГэВ в релятивистском коллайдере тяжелых ионов [2], 13 ТэВ (протоны) в большом адронном коллайдере [3, 4]. Использование современных ускорительных комплексов стимулирует развитие новых направлений фундаментальной физики, таких как поиск новых элементарных частиц.

Для энергетики актуальным продолжает оставаться описание нейтронно-физических процессов в активной зоне эксплуатируемых и проектируемых реакторов. В установках управляемого термоядерного синтеза особое внимание уделяется оценке воздействия потока ионов на конструкционные материалы и проблеме “первой стенки” этого реактора.

К источникам ионизирующего облучения в космическом пространстве кроме потока быстрых ионов с зарядом $Z (Z \leq 92)$ [5] относится также электромагнитное излучение вспышек сверхновых и нейтронных звезд, квазаров, γ -всплесков [6]. Энергия отдельных ионов, электронов и γ -квантов в галактических космических лучах может превышать 10^7 ГэВ [7]. Кроме того, на защитные покрытия материалов в околоземном пространстве также влияют потоки магнитосферной и ионосферной плазмы, тепловых нейтронов и микрометеоритов [8]. Моделирование этих потоков важно при эксплуатации и проектировании космических аппаратов.

Эксперименты по определению стойкости элементов радиоэлектронной базы проводятся для обеспечения стабильной работы космических аппаратов и авиационных радиоэлектронных комплексов [9]. Сбои в элементах памяти и микропроцессорах бортовых компьютеров при воздействии космических излучений могут существенно уменьшать срок их службы. Измерения спектральных характеристик поглощения и пропускания, а также свойств полупроводниковых материалов зависят от поглощенной дозы и мощности дозы ионизирующего излучения [10, 11].

В материаловедении радиационные эффекты используют для создания композиционных материалов с определенными свойствами [12]. Под воздействием радиационной среды происходит не только распыление материала мишени и изменение рельефа поверхности, но и повреждение облученного материала — появление в нем электронно-дырочных пар и точечных дефектов [13, 14], связанных с нарушением периодической структуры кристалла. С увеличением времени облучения накопление в материале избыточного заряда, а также вакансий, межузельных атомов и замещений может привести к образованию пустот, аморфизации отдельных областей и радиационно-индуцированной сегрегации в сплавах [15]. Как правило, локальные неоднородности в материалах ухудшают их характеристики, вызывая пластические деформации, набухание, появление пор и трещин. Однако контролируемое создание дефектов, их эволюция, перестройка и аннигиляция с учетом поглощенной дозы, температуры, межфазовых границ и морфологии образца являются инструментами для изменения свойств материала [15]. Выбирая подходящие сорта ионов, их энергию, заряд и флуенс, можно контролировать в образце распределение поглощенной дозы и концентраций дефектов, объем дислокаций, размер зерна и расположение фазовых границ [16]. Распределение поглощенной энергии и дефектов в поверхностных слоях облученной мишени зависит не только от их количества и толщин, но и последовательности их расположения [17]. В общем случае эволюция электронно-дырочных пар и первичных дефектов в облученном материале зависит от внешних электромагнитных полей, времени и температуры. Актуальность таких исследований связана с развитием методики легирования полупроводниковых материалов.

Компьютерное моделирование неблагоприятных эффектов ионизирующих излучений на клеточном и субклеточном уровнях и построение детерминированной теории выживания клеток после облучения остаются проблемами современных радиобиологических исследований [18]. Оценка рисков для здоровья человека от воздействия низких доз радиации (порядка нескольких мкЗв) важна для сотрудников атомных электростанций и ускорителей, медицинского персонала при работе на томографах, для населения в обла-

стях с повышенным радиационным фоном, а также при подготовке длительных пилотируемых миссий по исследованию космоса. При разложении химических соединений под действием ионизирующего излучения (радиолизе) вблизи трека ионизирующей частицы могут образовываться свободные радикалы, а также отдельные молекулы и молекулярные ионы, причем как в основном, так и возбужденных состояниях. Эти физико-химические эффекты, связанные с воздействием ионизирующего излучения на клетку, ее ядро, хромосомы и ДНК, могут смещать равновесие химических реакций, в также инициировать и катализировать реакции, которые в обычных условиях не происходят.

По способу решения задачи прохождения частиц в среде вычислительные методы разделяются на три направления — решение транспортного уравнения, метод молекулярной динамики и метод статистических испытаний (Монте-Карло). Если рассматривать воздействие налетающих частиц на мишень, то перечисленные методы описывают только первый этап, длительность которого совпадает с характерным временем пролета через нее одной первичной частицы. Процессы, связанные с неравновесными распределениями концентраций вторичных частиц и температур, рассматривают с помощью других методов [15, 19].

Транспортное уравнение описывает эволюцию распределения плотности потока первичных частиц в аморфной среде [20] и отражает многократное рассеяние частиц в различных областях фазового пространства, которое характеризуется координатами и скоростями частиц. Численное решение интегро-дифференциального уравнения проводят с дополнительными условиями на границе областей разного состава. Эти условия определяют наличие внешних источников и условия отражения частиц на границах. Трудности в решении интегрального уравнения могут быть связаны с трехмерной геометрией мишени, вычислением плотности потоков вблизи раздела двух сред, а также рождением и транспортом вторичных частиц. При получении упрощенного численного решения для многократного рассеяния первичной частицы слоем вещества используют ряд приближений [21, 22]. В описании процесса прохождения частиц через вещество пренебрегают взаимодействием частиц пучка друг с другом и с атомами отдачи. Считают, что рассеяние происходит только на неподвижных атомах, т.е. при отсутствии их теплового движения. В аппроксимации интеграла столкновений, который характеризует источник частиц в фазовом пространстве, используют величину транспортного сечения, которую вычисляют, усредняя дифференциальное микроскопическое сечение с потоком частиц по углу рассеяния. Величины транспортных сечений для упругого и неупругого рассеяния зависят не только от потенциала взаимодействия частиц и плотности материала, но и от потока частиц в

этой области мишени. Кроме того, для упрощения решения часто используют приближение непрерывного замедления, в котором частица при движении в среде может терять энергию только малыми порциями, не рассеиваясь. Для легких ионов и электронов такое приближение может быть слишком сильным допущением. Таким образом, транспортное уравнение учитывает как упругие, так и неупругие столкновения налетающей частицы, но оценка коэффициентов (транспортных сечений), необходимых для решения интегрального уравнения, в задаче с заданной геометрией и составом мишени может стать самостоятельной и достаточно сложной задачей.

Методы молекулярной динамики основаны на решении кинетического уравнения движения ансамбля взаимодействующих частиц в жидких, твердых или газообразных средах с помощью статистической механики. С использованием различных межатомных потенциалов и законов классической механики рассматривается взаимодействие кластера из налетающих частиц с мишенью, в которой может содержаться от десятков тысяч до миллионов частиц, взаимодействующих между собой. Отдельная частица в методах молекулярной динамики может быть электроном, атомом, молекулой, кластером или макроскопическим фрагментом материала. К преимуществу метода молекулярной динамики относится возможность решения равновесных и неравновесных задач [23]. Программа Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) [24] использует метод молекулярной динамики для описания эволюции процесса взаимодействия от времени и температуры, что позволяет оценить изменение коэффициентов диффузии, теплопроводности и вязкости материала. Методы молекулярной динамики обоснованно применимы в области энергии налетающих частиц, в которой упругие потери энергии доминируют. Неупругие столкновения в этом случае считают поправкой, которую обычно учитывают путем введения силы трения. Из-за слабого влияния неупругих процессов в методе молекулярной динамики в качестве вторичных частиц рассматривают только атомы отдачи, а образованием электронно-дырочных пар и процессах возбуждения пренебрегают.

Для решения задачи прохождения частиц через вещество метод Монте-Карло [25, 26] является методом статистических испытаний в приближении бинарных столкновений. Решение задачи моделирования потоков частиц в сложной мишени состоит из большого количества отдельных шагов, каждый из которых относительно хорошо может быть описан в вероятностном смысле, но взятые вместе, они не поддаются анализу детерминистическими методами из-за их многообразия и специфичности. Описание бинарного процесса взаимодействия каждой отдельной частицы источника с одним из атомов мишени основано на выборке случайных чисел, что аналогично

бросанию костей в азартных играх и рулетке — отсюда и название “Монте-Карло”. Метод состоит в том, чтобы фактически следовать за каждой из частиц на протяжении всей ее истории от рождения до поглощения или утечки из зоны регистрации. При увеличении статистики, т.е. количества рассмотренных историй частиц источника, центральная предельная теорема позволяет вычислить реалистичное распределение потоков первичных и вторичных частиц в различных областях мишени. Ограничение метода связано с диапазоном энергии, в котором известны упругие и неупругие сечения взаимодействия, и вычислительными ресурсами для получения требуемой точности результатов расчета. К достоинствам метода можно отнести широкий диапазон энергии первичных частиц, возможность описания рождения и транспорта вторичных частиц. В связи с этим результаты расчетов методом Монте-Карло можно рассматривать как “численный эксперимент”. Однако методы моделирования Монте-Карло могут потребовать больших вычислительных мощностей, особенно если это касается редких событий в небольшой зоне регистрации сложного трехмерного объекта.

2. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО

Компьютерное моделирование процессов прохождения частиц через вещество методом Монте-Карло основано на задании источника частиц, использовании дифференциальных сечений взаимодействия частиц с атомами мишени, а также на описании детекторов первичных и вторичных частиц. В источнике учтены параметры падающего на мишень пучка — тип частицы, ее энергия, заряд, разброс по энергии, длительность импульса и размеры пучка с учетом его угловой расходимости. Описание детектора включает задание составов, плотности материалов и границ раздела между ними.

Алгоритм в методе Монте-Карло основан на моделировании каждого бинарного столкновения одной налетающей частицы с одним атомом мишени. История первичной частицы описывается от момента ее попадания в область вблизи детектора до ее утечки из зоны регистрации или поглощения в ней. Сначала на основе данных о направлении скорости и энергии частицы и плотности окружающих материалов определяют координаты, где происходит следующее столкновение, потери энергии частицы и ее энергию E в точке столкновения. Далее происходит розыгрыш атома, входящего в состав материала, с которым налетающая частица взаимодействует. Для быстрых столкновений используют приближение, в котором пренебрегают молекулярными эффектами и считают, что сечения взаимодействия не зависят от присутствия соседних атомов. После установления атома мишени вычисляют канал реакции из отношения парциальных сече-

ний к полному сечению взаимодействия с этим атомом при энергии E . Затем из дифференциального сечения этой реакции вычисляют угол рассеяния θ . Если неупругое столкновение приводит к рождению вторичных частиц, то на этом этапе расчетов также вычисляют их количество, энергию и угол вылета. При описании всего многообразия реакций считают, что волновые функции, соответствующие различным конечным состояниям налетающей частицы и атома мишени, не интерферируют между собой. Это приводит к отсутствию корреляции дифференциальных сечений, соответствующих различным каналам реакции, что дает возможность независимо описывать сечения упругого и различных неупругих каналов реакции.

В методе статистических испытаний на каждом шаге используется генератор случайных чисел. Результат моделирования регистрируемой детектором величины получается путем усреднения всех событий по большому количеству историй первичной частицы [27]. При этом постулируют, что при наборе статистики не меняются условия проведения эксперимента — параметры пучка, геометрия и материалы детектора, а также набор используемых физических моделей, описываемых дифференциальными сечениями взаимодействия. Такие условия моделирования означают небольшую величину потока и флуенса налетающих частиц. Отдельно стоит вопрос о выборе и размере зоны регистрации детектором. Объем этой области ограничен не только проникающей способностью и угловым распределением первичных частиц, но и пробегами вторичных частиц. С одной стороны, в нейтронно-физических расчетах из-за большого пробега вторичных нейтронов для описания потока нейтронов в качестве зоны регистрации в общем случае нужна вся активная зона реактора или достаточно большой ее фрагмент с заданными граничными условиями частичного или полного отражения. С другой стороны, при описании прохождения заряженных частиц и электромагнитного излучения через среду важной становится только область в окрестности трека первичной частицы с размерами порядка угловой расходимости первичного пучка и пробега вторичных частиц (электронов, атомов отдачи в ионно-атомных столкновениях и фрагментов ядерной реакции). Поэтому, например, при моделировании воздействия заряженных частиц на один из фрагментов мишени совсем не обязательно детально задавать геометрию вдали от зоны регистрации. Часто бывает достаточно рассмотреть геометрию детектора в виде двумерной многослойной структуры с радиальным размером порядка пробега вторичных частиц.

В различных областях детектора регистрируют распределение по объему потоков частиц, поглощенной энергии, накопленного заряда или количество электронно-дырочных пар, а также ко-

личество частиц, проходящих через отдельные фрагменты поверхностей. Для расчета функционалов используют свертку потока частиц с произведением сечения неупругого рассеяния и дополнительной эмпирической функции, характеризующей вычисляемую величину. Такую процедуру применяют, например, для расчета неупругих потерь энергии заряженных частиц, поглощенной и эквивалентной доз. В расчетах потерь энергии нейтронов и фотонов в качестве дополнительной функции при свертке с сечением и потоком используют KERMA-факторы (KERMA — Kinetic Energy Released in Material).

Расчеты методом Монте-Карло в детальном режиме, когда учитывается каждое столкновение, оправданы только в случае с малым сечением взаимодействия, например, $\sigma \sim 10^{-24}$ см² при взаимодействии нейтрона с ядром атома. Для электромагнитных процессов сечение взаимодействия составляет $\sigma \sim 10^{-16}$ см², и количество столкновений на единице длины трека становится значительным. Моделирование каждого столкновения в этом случае становится непрактичным из-за увеличения времени расчетов и оправдано только для тонких мишеней или в материалах с низкой плотностью. Для преодоления этой вычислительной трудности в методе Монте-Карло используют модель, в которой эффект от множества взаимодействий описывается на основе теории многократного рассеяния. Если столкновение происходит при больших прицельных параметрах (малых переданных импульсах), то флуктуации потерь энергии частицы в среде описываются распределением Гаусса. Когда переданный атому мишени импульс превышает порог образования δ -электрона, в распределении флуктуаций потерь энергии при малой толщине мишени могут появляться дискретные пики, а для описания потерь энергии используют модель на основе распределения Ландау. Эти две модели разброса потерь энергии заряженных частиц при многократном рассеянии являются в некотором смысле альтернативными. Асимметричное распределение Ландау симметричным не станет даже при увеличении толщины мишени и количества столкновений. Отметим, что большие потери энергии первичной частицы в распределении Ландау еще не означают аномально большой поглощенной энергии в этой области мишени, так как этот избыток энергии уносят δ -электроны, которые, как правило, поглощаются в другой области мишени.

Программы на основе метода Монте-Карло отличаются между собой типом первичной частицы, диапазоном ее энергии, возможностью учета рождения и транспорта вторичных частиц, степенью детализации геометрии мишени. В табл. 1 приведены основные параметры рассмотренных в этом обзоре некоторых программ на основе метода Монте-Карло. Нижний предел энергии частицы в электромагнитных процессах ограничен приближением бинарных столкновений, которое

Таблица 1. Параметры программ на основе метода Мотне-Карло

Программа	Первичные частицы	E_{\min} , кэВ	E_{\max} , ГэВ	Вторичные частицы	Геометрия детектора
SRIM	AZ ($Z \leq 92$)	1	10	Атомы отдачи	До 20 слоев
PENELOPE	γ, e^{\pm}	0.1	1	γ, e^{\pm}	3D ^a
MCNPX	n	10^{-8}	0.02	n, γ	3D ^b
	γ	1	100	γ, e^{-}	
	e^{-}	1	1	γ, e^{-}	
	p	1000	0.15		
FLUKA	AZ	100	20000	Все частицы	3D ^a
	n	10^{-8}	0.02	n, γ	
	γ	1	10^7	γ, e^{-}	
	e^{-}	150	10^6	γ, e^{-}	
GEANT4	Адроны	1000	10^5	Все частицы	3D ^a
	$\gamma, e^{\pm}, \mu^{\pm}$	1	10^5		
	ν	1000	10^8		

Примечание. 3D^a – трехмерная геометрия с учетом поверхностей третьего порядка, 3D^b – 3D^a + копирование и клонирование сложных фрагментов.

начинает выполняться, когда энергия частицы значительно превышает энергию связи валентных электронов и превышает сотни электрон-вольт. Поэтому в большинстве программ на основе метода Монте-Карло нижний предел энергии ионов, электронов и фотонов $E_{\min} \geq 1$ кэВ. В этом диапазоне энергия первичной частицы E превышает значение, характерное для тепловых колебаний атомов мишени, а результат моделирования методом Монте-Карло не зависит от температуры. Здесь также предполагается, что сечения взаимодействия описываются плавными функциями от энергии E без узких резонансов. Особый случай расчетов методом Монте-Карло представляет моделирование взаимодействия тепловых нейтронов, для которых диапазон энергии ограничен значением $E_{\min} = 10^{-5}$ эВ [28]. Столь низкое значение при взаимодействии нейтрона с ядром атома не нарушает условия применимости приближения бинарных столкновений, так как нейтрон с электронными оболочками атома не взаимодействует. В диапазоне энергии $E < 1$ МэВ в сечении взаимодействия нейтрона с ядром имеется большое количество разрешенных и неразрешенных резонансов, что приводит к необходимости подготовки сечений с учетом их зависимости от температуры.

Кроме программ, перечисленных в табл. 1, существует большое количество специализированных программ, настроенных на решение методом Монте-Карло задач определенного класса и для определенного вида мишеней. Эти специфические программы имеют ограниченную область применения, но их целевая направленность поз-

воляет упростить пользователю задание входных данных, сделать удобным формат представления результатов расчета и оптимизировать время расчета. В качестве примеров можно привести программы MARLOWE [29, 30] и OKSANA [31], которые предназначены для расчета распыления кристаллических и аморфных мишеней при бомбардировке ионами с небольшими неупругими потерями энергии [32].

3. МОДЕЛЬ ПРОХОЖДЕНИЯ ИОНОВ В ПРОГРАММЕ SRIM

Программа SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) [33] оценивает упругие и неупругие потери энергии ионов [34] с энергией от 1 кэВ до 10 ГэВ и зарядом ядра $Z = 1-92$. На основе этих данных SRIM в многослойной (до 20 слоев) мишени моделирует угловые и энергетические распределения отраженных от поверхности и прошедших через многослойную мишень первичных ионов, их пробеги, распределения распыленных атомов, а также первичных дефектов по глубине слоя облученного материала. Программа распространяется бесплатно.

Упругие потери S_N энергии вычисляются теоретическими методами для ZBL-потенциала [34]. Неупругие потери энергии S_e в программе SRIM определяются на основе эмпирических методов, теоретических моделей [35] и большого количества экспериментальных данных [36]. В случае быстрых столкновений ($S_N \ll S_e$) потери энергии ионов приводят преимущественно к образованию электронно-дырочных пар, а в случае мед-

ленных столкновений ($S_N > S_e$) – к образованию дефектов в облученном материале.

В программе SRIM считают, что заряд иона q ($0 \leq q \leq Z$) по мере его замедления равен равновесному значению \bar{q} , которое связано с отношением потерь энергии этого иона и протона [37]. Эта упрощенная модель описания эволюции зарядового состояния иона не включает этап установления равновесного зарядового распределения. Отчасти такое упрощение связано с трудностями в измерении зарядовых распределений ионов в твердых мишенях [35] и ограниченным объемом экспериментальных данных [38]. Поправки к неупругим потерям энергии S_e можно вычислить только для ионов в состоянии, близком к равновесному $q \approx \bar{q}$ [39], когда сечения потери и захвата ионом одного электрона значительно превышают сечения процессов с двумя и более активными электронами. Теоретических методов описания неупругих потерь энергии ионов S_e с произвольным зарядом q и энергией E еще нет.

Разброс потерь энергии ионов, прошедших слой мишени, в программе SRIM описывает модель Гаусса. Ширина этого распределения сначала линейно возрастает с увеличением толщины мишени, затем достигает насыщения и потом уменьшается до нуля, когда глубина слоя становится соизмеримой с пробегом иона [40].

Для учета молекулярных эффектов при торможении ионов в многокомпонентных соединениях программа SRIM использует поправки к правилу Брэгга [41]. Измеренное торможение ионов в соединении обычно менее чем на 20% отличается от предсказанного правилом Брэгга [42]. Эксперименты показали, что эффект неаддитивности тормозной способности многокомпонентной смеси уменьшается с увеличением массы атомов [36]. Наиболее сильно эти особенности, связанные силами Ван-дер-Ваальса, проявляются в молекулярных мишенях, содержащих атомы H, C, N, O, F, S и Cl. Например, вклад атомов углерода в тормозную способность углеводородов значительно зависит от типа химической связи (одинарной, двойной или тройной).

Степень первичных радиационных дефектов в единице объема в программе SRIM оценивается в количестве смещений на атом (сна), которое вызывает один первичный ион. Ион в упругом столкновении передает часть своего импульса атому мишени, и если величина этого импульса превышает пороговое значение ϵ_d , то атом мишени может покинуть узел кристаллической решетки. Порог для образования точечного дефекта для большинства материалов составляет $\epsilon_d = 15\text{--}50$ эВ [15], а энергия выбитых атомов может достигать сотен электрон-вольт [33], что делает их источником каскада упругих столкновений и наряду с первичным ионом еще одной причиной рождения новых дислокаций. Когда энергия первичного иона и выбитых атомов в атомном каскаде

уменьшается до значения, близкого к ϵ_d , при взаимодействии с атомом мишени они могут потерять всю энергию и занять одну из имеющихся вакансий в кристаллической решетке. Такой механизм замены в облученном материале тоже считается дефектом или дислокацией [33], плотность распределения которых выражается отношением количества сна к толщине слоя. В режиме полных каскадов (“Full Cascades”) программа SRIM позволяет провести моделирование каскада атомных столкновений, регистрируя все события, которые происходят с каждым из вторичных атомов. Для расчета количества точечных дефектов в программе SRIM есть также упрощенный метод расчета на основе модели Кинчина–Пиза [43]. Этот метод без детального рассмотрения атомных каскадов оценивает приближенную зависимость количества вакансий от величины переданной атому мишени энергии в первом столкновении с ним налетающего иона. В этом случае расчеты каскада упругих столкновений по сравнению с режимом полных каскадов становятся на порядок быстрее, но не учитывают распределение выбитых атомов и процесс замены атома мишени в узлах кристаллической решетки. Эволюцию во времени первичных дефектов и электронно-дырочных пар в облученном материале, которая связана с процессами их дрейфа, диффузии, рекомбинации после их формирования, программа SRIM не рассматривает.

Преимущество SRIM по сравнению с методами молекулярной динамики [24] состоит в учете не только упругих (со всем атомом мишени), но и неупругих (с электронами атома) столкновений в процессе замедления ионов. Это позволяет описать всю историю замедления быстрого иона с энергией E от нескольких ГэВ до энергии, где начинают проявляться эффекты теплового движения атомов мишени.

4. ПРОГРАММА PENELOPE

Программа PENELOPE (PENetration and Energy LOss of Positrons and Electrons in matter) [44] предназначена для моделирования в трехмерной мишени траекторий электронов, позитронов и фотонов с энергией от 100 эВ до 1 ГэВ. Первичные частицы испускаются из точечного источника с заданным энергетическим спектром и равномерным распределением направления вылета по отношению к оси пучка.

При взаимодействии фотонов с атомами учитывают рэлеевское и комптоновское рассеяние, фотоэлектрический эффект и образование электронно-позитронных пар. Фотоядерные реакции в программе PENELOPE не рассматривают. При рассеянии фотонов также принимают во внимание поляризационные эффекты и доплеровское уширение при комптоновском рассеянии. Моделирование транспорта электронов основано на учете упругого и неупругого рассеяния электро-

нов и позитронов, генерации тормозного излучения, процессах ионизации внутренних оболочек атома мишени и аннигиляции позитронов. В описании генерации рентгеновских лучей и оже-электронов в результате ионизации применяют релятивистское борновское приближение с использованием обобщенной силы осциллятора и базы данных сечений для K -, L - и M -оболочек атомов мишени.

Программа PENELOPE реализует алгоритм “смешанного” моделирования разброса потерь энергии [44], в котором сочетается моделирование “жестких” и “мягких” столкновений. “Жесткие” события приводят к рассеянию первичной частицы на большие углы, их описывают путем детального моделирования, а эффект многих “мягких” взаимодействий описывают моделью многократного рассеяния.

Детектор задают комбинаторной геометрией с помощью суперпозиции однородных бесструктурных областей, ограниченных плоскостями и поверхностями третьего порядка (цилиндрами, конусами, сферами, эллипсоидами и так далее). Регистрируют количество частиц и их энергию.

Отметим, что программа PENELOPE допускает также моделирование траекторий электронов и позитронов во внешних статических магнитных и электрических полях.

5. ПРОГРАММА MCNP

Программа MCNP (Monte-Carlo N-Particle) [45], созданная в Лос-Аламосе (США), является основным теоретическим инструментом для моделирования нейтронно-физических процессов в активной зоне реактора не только в подкритическом, но и надкритическом режиме, когда количество вторичных частиц возрастает в каждом последующем поколении. Первоначально программа была ориентирована для моделирования транспорта нейтронов с энергией в диапазоне до 20 МэВ. В качестве ядерных данных использовали оцененные сечения [46]. В поздних версиях программы была добавлена возможность моделирования транспорта фотонов (MCNP4), электронов (MCNP5), протонов (MCNPX) и некоторых ионов (MCNP6), а диапазон энергии первичных частиц расширен до 150 МэВ. Начиная с 2000–2003 гг. программа MCNP не распространяется в России даже на платной основе с условиями лицензирования. По оценкам разработчиков ресурсы, затраченные на создание этой программы, на момент 2000–2003 гг. составили приблизительно 500 человек/лет.

Нижняя граница диапазона энергии составляет 10^{-5} эВ для нейтронов, 1 кэВ для фотонов и электронов, 1 МэВ для ионов. Для задания трехмерной мишени используют комбинаторную геометрию, когда границы объектов определяют с помощью операций объединения и пересечения

различных объектов, а в описании границ используют поверхности третьего порядка. При задании сложных объектов с повторяющимися элементами и многоуровневой иерархией допускается применение операции переноса, поворота, копирования и клонирования. Для просмотра и тестирования трехмерной геометрии рекомендуется дополнительно использовать специальную программу.

В определении точечного, поверхностного или объемного источника частиц применяют независимые или взаимосвязанные распределения вероятности по энергии, времени, координатам в пространстве и направлению вылета частиц.

Результат моделирования транспорта нейтронов в значительной степени зависит от точности представления сечений. В области энергии нейтронов $E_n < 1$ МэВ учитывают разрешенные и неразрешенные резонансы в сечениях. Библиотеки дифференциальных и полных сечений взаимодействия нейтронов, а также KERMA-факторы готовят с помощью специальных программ [47] для заданной температуры. При представлении зависимости сечения от энергии $\sigma(E)$ в виде групповых констант $\sigma_j = \sigma(E_j)$ возможен учет влияния потерь энергии $E_i \rightarrow E_j$ на элементы групповой матрицы сечений $\sigma_{ij} = \sigma(E_i \rightarrow E_j)$ [47], которая описывает не только среднее значение сечения, но зависимость погрешности сечения от энергии. При задании некоторых материалов (вода, графит, BeO , ZrH) возможно подключение термализационной данных о молекулярных эффектах и связях атомов в кристаллической решетке. Эти поправки к дифференциальным сечениям взаимодействия важны для описания транспорта тепловых нейтронов. Программа MCNP вычисляет величины, связанные с током и потоком частиц через поверхность, поглощенную энергию и эквивалентную дозу, среднюю длину трека частицы и количество столкновений в единице объема.

6. ПРОГРАММА FLUKA

Программу FLUKA (FLUktuierende KAskade) [48, 49] создавали для моделирования экспериментов и приложений в области физики высоких энергий. Нижняя граница диапазона энергии первичных частиц соответствует порогу ядерной реакции (табл. 1). Программа распространяется бесплатно с плавающей по времени лицензией. Для редактирования трехмерной геометрии и визуализации результатов расчета FLUKA использует специальный интерфейс [50].

Программа FLUKA вычисляет количество и распределение столкновений, в которых трек первичной частицы разделяется на несколько новых треков. Такое событие, обусловленное рождением вторичных частиц, выглядит в экспериментах с фотоэмульсией как расщепление трека первичной частицы и связано с сечением неупру-

гого взаимодействия с ядром атома. Транспорт вторичных частиц моделируют для легких частиц с $Z \leq 2$. Тяжелый вторичный ион с $Z > 2$ в программе FLUKA рассматривают только как модельную частицу со средними значениями заряда ядра Z и массы A .

Перенос заряженных частиц описывают с помощью оригинального алгоритма многократного кулоновского рассеяния с учетом ядерных форм-факторов [51] и методом однократного рассеяния. Флуктуации потерь энергии моделируют с помощью распределения Ландау. В описании ядерных реакций используют модель оптического потенциала, для аппроксимации вещественной и мнимой частей которого применяют несколько вариантов параметров потенциальной ямы в зависимости от энергии налетающей частицы E и ее массы A . Учитывают также каскады внутриядерных столкновений, которые приводят к перераспределению импульса первичной частицы между нуклонами в ядре. Каскад заканчивается образованием ядра в предравновесном состоянии, когда первичная частица и вторичные фрагменты покидают ядро или поглощаются. Адронные взаимодействия при энергии ниже нескольких ГэВ моделируют посредством резонансного образования и распада возбужденного ядра [52–54]. В области энергии столкновения $E > 5$ ГэВ/нуклон используются модели Грибова–Глаубера [55, 56] и кварк-глюонной струны [57].

7. ПРОГРАММА GEANT4

7.1. Среда программирования GEANT4

Набор библиотек GEANT4 (GEometry ANd Tracking 4) на языке программирования C++ [58] используют для создания программ компьютерного моделирования процессов прохождения частиц через вещество на основе метода Монте-Карло. Программное обеспечение GEANT4 разработано благодаря широкому международному сотрудничеству сообщества физиков и является скорее не готовым к использованию приложением, а “набором инструментов” для его создания. Использование GEANT4 требует некоторых навыков работы с языком программирования C++, чтобы объединить различные части инструментария и классы данных в программу. Объектно-ориентированная структура в C++ позволяет добавлять в приложение новые компоненты, не затрагивая другую часть существующего кода и управлять данными, относящимися к разным моделям. Создание приложения в GEANT4 сводится к написанию программ на языке C++, которая связывает различные имеющиеся компоненты между собой. Используют инструменты для задания трехмерной геометрии всей мишени и детектора, характеристики материалов, из которых они состоят, при необходимости описывают электромагнитные поля и подключают различные па-

кеты данных физических процессов. Дистрибутив GEANT4 содержит несколько десятков готовых к использованию программ и наборов данных к ним. Каждая из этих программ в GEANT4 имеет свое описание, различные наборы возможных физических моделей, а также может отличаться допустимым диапазоном входных значений, синтаксисом задания входных параметров и форматом представления результатов расчета. Важным преимуществом GEANT4 и большей части приложений на ее основе является то, что они распространяются бесплатно.

В качестве налетающих частиц GEANT4 использует ионы, мезоны, лептоны, γ -кванты, нейтроны и другие элементарные частицы. Нижняя граница энергии частиц может достигать 10^{-5} эВ для нейтронов, ~ 250 эВ для γ -квантов, 1 кэВ для электронов и позитронов и 1 МэВ для остальных частиц. Верхняя граница диапазона энергии в большинстве случаев достигает значения 100 ТэВ (для мюонов и нейтрино до 1 ПэВ). При учете столь широкого диапазона энергии для описания взаимодействия налетающей частицы с атомом необходимо несколько моделей.

Программа GEANT4 может использовать данные других программ – дифференциальные сечения для фотонов и электронов (PENELOPE), библиотеки оцененных данных [46] для нейтронов и фотонов, потери энергии ионов [34], базы данных для индуцированного частицами рентгеновского излучения (PIXE) [59], возбужденных уровней ядер (RIPL) [60]. Преимущество GEANT4 по сравнению с программами, упомянутыми выше, состоит в возможности проведения расчетов с помощью одного и того же приложения, но для разных наборов данных. Например, транспорт электронов и фотонов можно описывать с использованием одного из наборов баз данных и сечений GEANT4, а можно применить модель и данные программы PENELOPE. Тогда сравнение этих двух вариантов расчета для одной и той же геометрии и составов материалов позволяет определить чувствительность результатов расчета к используемым моделям и данным. Особенно это важно для взаимодействия частиц с ядром атома, так как имеется более десятка комбинаций различных моделей с различными допустимыми диапазонами параметров.

7.2. Потери энергии ионов

Флуктуации потерь энергии заряженных частиц при электромагнитном взаимодействии в GEANT4 имеют непрерывную и дискретную составляющие. В тонкой мишени из-за рождения δ -электронов распределение потерь энергии асимметрично, но при увеличении толщины слоя асимметрия распределения Ландау уменьшается (но не пропадает). Неупругие потери энергии ионов с энергией $E > 1$ МэВ/нуклон в GEANT4 описывают моделью, учитывающей возможность

рождения в одном столкновении нескольких ($N_e \geq 0$) δ -электронов с энергией $E_e \geq 1$ кэВ и нескольких ($N_\gamma \geq 0$) фотонов с $E_\gamma \geq 1$ кэВ:

$$X(E, Z) + A \rightarrow X(E', Z) + A^{q+} + N_e e^-(E_e) + N_\gamma \gamma(E_\gamma).$$

Такой подход, пренебрегающий медленными электронами и фотонами, дает возможность в случае быстрых ионно-атомных столкновений оценить вклады различных фрагментов реакции в неупругие потери энергии:

$$S_e(E, Z) = S_e^X(E, Z) + S_e^e(E, Z) + S_e^\gamma(E, Z) \text{ для } E > 1 \text{ МэВ/нуклон,}$$

где $S_e^X(E, Z)$, $S_e^e(E, Z)$, $S_e^\gamma(E, Z)$ – неупругие потери энергии ионов отдачи, δ -электронов и быстрых γ -квантов соответственно.

7.3. Упругое рассеяние

Упругое рассеяние адронов описывают моделью GHEISHA [61], которая основана на параметризации экспериментальных сечений и применима во всем диапазоне энергии. Вычисления с помощью этой модели характеризуются высокой скоростью, но данные для больших углов рассеяния могут быть завышены. Кроме того, используют оптическую модель связанных каналов для взаимодействия нуклонов и нуклидов с массой $A = 24-122$ или рассеяние в модели Глаубера [62] для всех долгоживущих адронов с энергией $E > 1$ ГэВ. Свойства ядер описываются энергией Ферми, радиусом ядра, кулоновским барьером и параметром деформации. Модель кирального фазового объема CHIPS (Chiral Invariant Phase Space) [63, 64] для описания упругого рассеяния адронов, γ -квантов и электронов любой энергии использует распределение Вудса–Саксона для промежуточных и тяжелых ядер и распределение Гаусса для легких ядер. Это позволяет учесть такие особенности дифференциальных сечений, как дифракционные минимумы.

7.4. Неупругое рассеяние

Классификацию физических моделей неупругого взаимодействия адронов с ядром по механизмам и времени протекания можно разделить на несколько групп.

1. В случае налетающих адронов с энергией $E < 200$ МэВ взаимодействие происходит со всем ядром или с фрагментом ядра из нескольких нуклонов. Время протекания реакции в этой области энергии обычно сравнимо с временем пролета налетающей частицы через ядро $t \sim 10^{-22}$ с.

2. Для описания образования и распада возбужденного ядра в предравновесном состоянии в столкновении частиц с энергией 50 МэВ/нуклон <

$< E < 10$ ГэВ/нуклон используют модель квантовой молекулярной динамики (QMD – Quantum Molecular Dynamics) [65], которая была разработана специально для GEANT4. Ядро в ней рассматривают как среду, в которой после каждого столкновения добавляются новые частицы и дырки (экситоны). Распад ядра в виде эмиссии нуклонов и легких кластеров описывается механизмами испарения, ферми-распада ($A < 17$), мультифрагментации ($Z > 8$, $A > 16$), деления тяжелых ядер на два фрагмента ($A > 65$) и моделью скалывания. Ядро переходит в состояние равновесия, когда вероятности увеличения и уменьшения числа экситонов становятся примерно равными, а энергия возбуждения распределяется между оставшимися нуклонами.

3. В области энергии $0.3 < E < 10$ ГэВ/нуклон налетающая частица взаимодействует с отдельными нуклонами в ядре, что приводит к внутриядерным каскадам на этапе образования возбужденного ядра. Внутриядерный каскад основан на бинарном рассеянии нуклонов в поле оптического потенциала и принципе Паули. В классической модели внутриядерного каскада [66] нуклоны в ядре считают свободными, а ядро рассматривают как ферми-газ. Эта модель была уточнена методами квантовой молекулярной динамики для представления ядра в виде взаимодействующих нуклонов [67], когда в области энергии $E = 0.3-3$ ГэВ/нуклон учитывают коллективные эффекты для распределения плотности в ядре, а также образование и распад резонансов. Кроме того, в случае столкновений с ядрами ионов, состоящих из нескольких нуклонов ($A < 19$), в области энергии $E < 2$ ГэВ/нуклон используют внутриядерный каскад Льежа (INCL – Intranuclear Cascade Model of Liège) [68] – только активные нуклоны участвуют в его образовании и распространении, а также в образовании резонансов и отражении на границе ядра.

4. В случае взаимодействия с ядром быстрых адронов ($E > 10-50$ ГэВ/нуклон) все частицы представляют как стационарные состояния одномерной материальной системы, которая называется кварк-глюонной струной. Считают, что кварки и дикварки взаимодействуют друг с другом в глюонном поле, которое не рассеивается в пространстве. Струны могут взаимодействовать с нуклонами, что можно интерпретировать как возбуждение большого числа гармонических осцилляторов с кратными частотами. Изломы струны интерпретируют как испускание глюонов в ядре, которые сначала распадаются на пару кварк–антикварк, а затем происходит процесс адронизации в соответствии с моделями фрагментации (FRITIOF) ($10 < E < 20$ ГэВ) [69] или кварк-глюонной струнной модели (QGSM) ($9.5 < E < 25$ ГэВ) [70, 71].

7.5. Фотоны в GEANT4

При прохождении фотонов в среде программа GEANT4, как и PENELOPE, учитывает рэлеевское и комптоновское рассеяние, фотоэлектрический эффект и процесс рождения пар. Модель дискретной фотоионизации представляет сечения для каждой атомной оболочки и отвечает за образование электромагнитного каскада с флуоресценцией и эмиссией оже-электронов. Модели учитывают линейную поляризацию первичного γ -кванта и зависимость комптоновского рассеяния от спина. В релятивистском случае GEANT4 описывает излучение Черенкова с учетом его порогового характера и направленности. Модель внутриядерных каскадов для γ -квантов с энергией $E < 30$ МэВ учитывает некоторые коллективные ядерные эффекты, такие как гигантский дипольный резонанс.

7.6. Лептоны в GEANT4

При описании транспорта электронов и позитронов наряду с упругим и неупругим рассеянием учитывают тормозное излучение, ионизацию атома мишени и аннигиляцию позитронов. Процесс релаксации возбужденного атома или иона мишени после выбивания одного из электронов внутренней оболочки может привести к испусканию фотонов и оже-электронов. Для характеристики рентгеновского излучения, индуцированного частицами, применяют базу данных PIXE [59], а выход рентгеновских лучей описывают моделью Брандта и Лапицкого [72]. Программа GEANT4 позволяет смоделировать движение релятивистских электронов и позитронов во внешнем электромагнитном поле.

Лептоны не участвуют в сильном взаимодействии, но из-за волновых свойств релятивистских частиц при их прохождении ядро может перейти в предравновесное состояние с последующим распадом. Программа PENELOPE эти процессы не учитывает. В GEANT4 для релятивистских γ -квантов и лептонов рекомендуется использовать две комбинации моделей — каскада Бертини при $E < 3.5$ ГэВ и модели кварк-глюонной струны (QGS), $E > 3$ ГэВ или каскада Бертини ($E < 10$ ГэВ) и струнной модели FTF ($E > 10$ ГэВ).

7.7. Микродозиметрия в GEANT4

Проект GEANT4-DNA [18] был создан для моделирования биологических повреждений, вызванных ионизирующим излучением на клеточном и субклеточном уровнях. Для этого описывают взаимодействия электронов, а также легких атомов и ионов ($Z \leq 2$) в жидкой воде как основном компоненте биологической материи. Энергию моделируемых электронов отслеживают до уровня возбуждения молекулы воды (~8 эВ), а энергию тяжелых частиц — до 100 эВ. Доминиру-

ющими процессами образования вторичных частиц в этой области энергии являются упругое рассеяние электронов и ионизация атомов. Для реализации в методе Монте-Карло моделей выживания клеток в микродозиметрии используют геометрию в субмикродозиметровом масштабе, когда задают ядра отдельных клеток, а в нанодозиметрии задают структуру и состав молекулы ДНК.

8. ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО

В перспективе развития расчетов, основанных на методе Монте-Карло, можно выделить несколько направлений, которые связаны с улучшением физических моделей и расширением их диапазона, с учетом влияния погрешности используемых данных и стохастичности взаимодействия на результат расчетов, с унификацией задания геометрии мишени и зоны регистрации, оптимизацией вычислительных ресурсов для сокращения времени расчетов.

Продолжается работа по верификации используемых физических процессов и уточнению значений дифференциальных и полных сечений взаимодействия первичных частиц и потерь их энергии, а также состава, количества, распределений вторичных частиц. Особенно это важно для области на границах допустимого диапазона энергии и относится прежде всего к области низкой и сверхвысокой энергии первичных частиц. В случае низких энергий актуальным остается описание воздействия вторичных частиц на материал мишени. Считают, что доминирующими причинами повреждения молекулы ДНК в радиобиологии являются не потери энергии первичного ионизирующего излучения, а скорее процессы, связанные с воздействием на химические связи образовавшихся молекулярных радикалов, их диффузией и взаимодействием с атомами [18]. Современные модели Монте-Карло еще пока не учитывают такие физико-химические процессы.

Сейчас программы, использующие метод Монте-Карло, основаны на алгоритме, в котором информация о сечениях взаимодействия в виде функций $\sigma(E, \theta)$ загружается на стадии инициализации расчетов и далее в процессе моделирования уже не обновляется. В таком подходе частично теряется стохастичность процесса взаимодействия, так как при любом следующем столкновении той же частицы с этой энергией используют тот же набор данных. Кроме того, формат данных в виде функции $\sigma(E, \theta)$ не отражает зависимость погрешности сечения от энергии столкновения E и угла рассеяния θ . Однако уже сейчас в нейтронных расчетах зависимость дисперсии групповых сечений $\sigma_{ij} = \sigma(E_i \rightarrow E_j)$ от энергии можно учитывать с помощью ковариационной матрицы [47], диагональные элементы которой соответствуют дисперсии сечения $\sigma(E)$. Что же касается стохастичности процесса взаимодействия адрона с яд-

ром, то один из вариантов учета этого эффекта состоит в развитии технологии использования файлов “random” [73], приготовленных с помощью программы TALYS [74]. В этом случае при каждом столкновении будут использованы сотни и даже тысячи наборов данных с небольшими вариациями параметров потенциала [75]. Для каждого столкновения выбор данных будет разыгрываться, что обеспечит стохастичность этого процесса и зависимость дисперсии сечений взаимодействия от энергии. Такой алгоритм розыгрыша с технологией хранения, анализа и управления массивами данных большого объема может стать обобщением классического метода Монте-Карло.

Задание трехмерной геометрии является неотъемлемой частью большинства приложений для моделирования физических процессов методом Монте-Карло. Это один из наиболее трудоемких элементов подготовки расчетов. Как правило, для визуализации заданной геометрии используют вспомогательные программы. В то же время часто бывает так, что одно и то же описание геометрии необходимо использовать в нескольких приложениях с разными механизмами моделирования или разными данными и моделями. Для аккуратного сравнения результатов моделирования, полученных с помощью различных приложений, перспективным является переход на универсальный формат задания трехмерной геометрии. Один из вариантов задания расположения отдельных твердых тел и материалов состоит в использовании инструментов автоматизированного проектирования и специализированного языка, например Geometry Description Markup Language (GDML) [76]. В будущем также может оказаться важным задание текстуры, локальных неоднородностей в облученных материалах и границ раздела между ними.

Увеличение вычислительной мощности связано с увеличением производительности графических процессоров, развитием технологии распределенных вычислений в виде многопоточности, более эффективным управлением памятью и улучшением методов визуализации данных.

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В обзоре рассмотрены программы общего назначения для моделирования процессов прохождения частиц через вещество методом Монте-Карло. Преимущество метода Монте-Карло по сравнению с методом молекулярной динамики состоит в возможности использования при бинарных столкновениях комбинации различных теоретических моделей упругих и неупругих взаимодействий в широком диапазоне энергии. Кроме того, возможность задания практически неограниченного количества материалов в рамках трехмерной геометрии с многоуровневой иерархией позволяет задавать сложные объекты типа

целого космического аппарата или активной зоны реактора. Именно эти две ключевые особенности дают основания считать результаты расчетов на основе метода Монте-Карло “вычислительным экспериментом”. Однако метод молекулярной динамики по сравнению с Монте-Карло более точно описывает упругое взаимодействие одной налетающей частицы или целого ансамбля частиц с большим фрагментом мишени из нескольких тысяч атомов. Такие упругие процессы столкновения кластеров в модели бинарных столкновений адекватно описать сложно. К недостатку метода Монте-Карло относят необходимость использования больших вычислительных ресурсов. Многие современные программы для оптимизации расчетов применяют алгоритмы распараллеливания вычислений, относящиеся к разным историям одной и той же налетающей частицы, а при завершении расчетов делают статистическую обработку всех независимых событий, несмотря на то, на каком процессоре шел расчет истории. Тем не менее даже при такой оптимизации расчеты сложных трехмерных мишеней методом Монте-Карло для получения достаточной точности в случае отдельных фрагментов мишени могут проходить неделями и даже месяцами. В отношении вычислительных ресурсов учет многократного рассеяния методами численного решения транспортного уравнения намного эффективнее, но требует настройки транспортных сечений под каждую мишень определенного состава и геометрии.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики (проект “Ядерная и радиационная физика”).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Nuclotron-Based Ion Collider fAcility (NICA). <https://nica.jinr.ru/ru/>
2. Adams J., Aggarwal M.M., Ahammed Z. et al. // Nucl. Phys. A. 2005. V. 757. P. 102. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2005.03.085>
3. Aad G., Abajyan T., Abbott B. et al. (ATLAS Collaboration) // Phys. Lett. B. 2012. V. 716. P. 1. <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2012.08.020>
4. Chatrchyan S., Khachatryan V., Sirunyan A.M. et al. (CMS Collaboration) // Phys. Lett. B. 2012. V. 716. P. 30. <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2012.08.021>
5. Модель космоса. Т. II. Воздействие космической среды на материалы и оборудование космических аппаратов / Ред. Новиков Л.С. М.: Изд-во НИИЯФ МГУ, 2007. 1145 с.
6. Рубин С.Г. Устройство нашей Вселенной. Фрязино: Век-2, 2006, 312 с.
7. Панасюк М.И. Странники Вселенной или эхо Большого взрыва. Фрязино: Век-2, 2005. 184 с.

8. *Акишин А.И.* Космическое материаловедение. М.: НИИЯФ МГУ, 2007. С. 209.
9. *Чумаков А.И.* Действие космической радиации на интегральные схемы. М.: Радио и связь, 2004. 320 с.
10. *Зебрев Г.И.* Радиационные эффекты в кремниевых интегральных схемах высокой степени интеграции. М.: НИЯУ МИФИ, 2010. 148 с.
11. *Танеро К.И., Улимов В.Н., Членов А.М.* Радиационные эффекты в кремниевых интегральных схемах космического применения. М.: Изд-во БИНОМ Лаборатория знаний, 2014. 302 с.
12. *Zhang Y., Weber W. J.* // Appl. Phys. Rev. 2020. V. 7. P. 041307.
<https://doi.org/10.1063/5.0027462>
13. *Lindhard J., Nielsen V., Scharff M. et al.* // Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 1963. V. 33. № 10. P. 1.
14. *Лейман К.* Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов. М.: Атомиздат, 1979. 295 с.
15. *Nordlund K.* // J. Nucl. Mater. 2019. V. 520. P. 273.
<https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2019.04.028>
16. *Chen S., Tamagno P., Bernard D. et al.* // Results Phys. 2020. V. 7. P. 03023.
<https://doi.org/10.1016/j.rinp.2020.103023>
17. *Novikov N.V., Chechenin N.G., Shirokova A.A.* // Rad. Eff. Defects Solids. 2021. V. 176. P. 1107.
<https://doi.org/10.1080/10420150.2021.2007915>
18. *Incerti S., Baldacchino G., Bernal M. et al.* // Int. J. Model. Simul. Sci. Comput. 2010. V. 1. P. 157.
<https://doi.org/10.1142/S1793962310000122>
19. *Комаров Ф.Ф.* // УФН. 2017. Т. 187. С. 465.
<https://doi.org/10.3367/UFNr.2016.10.038012>
20. *Lewis H.W.* // Phys. Rev. 1950. V. 78. P. 526.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.78.526>
21. *Калашников Н.П., Ремизович В.С., Рязанов М.И.* Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах. М.: Атомиздат, 1980. 272 с.
22. *Аккерман А.Ф.* Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. М.: Энергоатомиздат, 1991. 200 с.
23. *Wood W.W., Parker F.R.* // J. Chem. Phys. 1957. V. 27. P. 720.
<https://doi.org/10.1063/1.1743822>
24. *Plimpton S.* // J. Comput. Phys. 1995. V. 117. P. 1.
<https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>
25. *Ulam S.M., Neumann J.* // Bull. Amer. Math. Soc. 1947. V. 53. P. 1120.
26. *Metropolis N., Ulam S.* // J. Am. Stat. Assoc. 1949. V. 44. № 247. P. 335.
27. *Соболь И.М.* Метод Монте-Карло. М.: Наука, 1968. 80 с.
28. *Brown D.A., Chadwick M.B., Capote R. et al.* // Nucl. Data Sheets. 2018. V. 148. P. 1.
<https://doi.org/10.1016/j.nds.2018.02.001>
29. *Robinson M.T., Torrens I.M.* // Phys. Rev. B. 1974. V. 9. P. 5008.
30. *Robinson M.T.* // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. P. 10717.
31. *Shulga V.I.* // Rad. Eff. Defects Solids. 1984. V. 82. P. 169.
32. *Шульга В.И.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2019. № 6. С. 109.
<https://doi.org/10.1134/S0207352819060131>
33. *Ziegler J.F., Ziegler M.D., Biersack J.P.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2010. V. 268. P. 1818.
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.02.091>
34. *Ziegler J.P., Biersack J.P., Littmark U.* The Stopping and Range of Ions in Solids. N.Y.: Pergamon Press, 1985.
35. *Белкова Ю.А., Новиков Н.В., Теплова Я.А.* Экспериментальные и теоретические исследования процессов взаимодействия ионов с веществом. М.: НИИЯФ МГУ, 2019. 233 с.
36. *Paul H.* Stopping Power Graphs. www.exphys.unilinz.ac.at/stopping/.
37. *Brandt W., Kitagawa M.* // Phys. Rev. B. 1982. V. 25. P. 5631.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.25.5631>
38. *Novikov N.V.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2021. V. 506. P. 1.
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2021.09.002>
39. *Novikov N.V.* // Rad. Phys. Chem. 2021. V. 189. P. 109699.
<https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2021.109699>
40. *Новиков Н.В., Теплова Я.А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2020. № 3. С. 32.
<https://doi.org/10.31857/S1028096020030140>
41. *Bragg W.H., Kleeman R.* // Phil. Mag. 1905. V. 10. P. 318.
42. *Sigmund P.* Particle Penetration and Radiation Effects. Volume 2: Penetration of Atomic and Molecular Ions. N.Y.–Dordrecht–London: Springer Cham Heidelberg, 2014. 602 p.
43. *Kinchin G.H., Pease R.S.* // Rep. Prog. Phys. 1955. V. 18. P. 1.
<https://doi.org/10.1088/0034-4885/18/1/301>
44. *Sempau J., Fernandez-Varea J.M., Acosta E., Salvat F.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2003. V. 207. P. 107.
[https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(03\)00453-1](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(03)00453-1)
45. *Goorley T., James M., Booth T., Brown F. et al.* // Nucl. Technol. 2012. V. 180. P. 298.
<https://doi.org/10.13182/NT11-135>
46. *Chadwick M.B., Oblozinsky P., Herman M. et al. (CSEWG Collaboration)* // Nucl. Data Sheets. 2006. V. 107. P. 2931.
<https://doi.org/10.1016/j.nds.2006.11.001>
47. *MacFarlane R.E., Muir D.W.* The NJOY Nuclear Data Processing System. Version 91, Los Alamos National Laboratory Report LA-12740-M. 1994.
48. *Ferrari A., Sala P.R., Fasso A., Ranft J.* FLUKA: a Multi-Particle Transport code. CERN-2005-10, INFN/TC 05/11, SLAC-R-773. 2005.
www.fluka.org/fluka.php
49. *Battistoni G., Cerutti F., Fasso A., Ferrari A., Muraro S., Ranft J., Roesle S., Sala P.R.* // AIP Conf. Proc. 2007. V. 896. P. 31.
<https://doi.org/10.1063/1.2720455>
50. *Vlachoudis V.* FLAIR: FLUKA Advanced Interface. <http://www.fluka.org/flair>

51. *Ferrari A., Sala P.R., Guaraldi R., Padoani F.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1992. V. 71. P. 412. [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(92\)95359-Y](https://doi.org/10.1016/0168-583X(92)95359-Y)
52. *Ferrari A., Sala P.R.* // Proc. Workshop on Nuclear Reaction Data and Nuclear Reactors Physics, Design and Safety / Eds. Gandini A., Reffo G. 1998. V. 2. P. 424.
53. *Collazuol G., Ferrari A., Guglielmi A., Sala P.R.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2000. V. 449. P. 609. [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(00\)00152-2](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(00)00152-2)
54. *Bohlen T.T., Cerutti F., Chin M.P.W. et al.* // Nucl. Data Sheets. 2014. V. 120. P. 211. <https://doi.org/10.1016/j.nds.2014.07.049>
55. *Glauber R.J., Matthiae G.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1970. V. 21. P. 135. [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(70\)90511-0](https://doi.org/10.1016/0550-3213(70)90511-0)
56. *Gribov V.N.* // Sov. Phys. JETP. 1969. V. 29. P. 483.
57. *Capella A., Sukhatme U., Tan C.-I., Tran J.* // Phys. Rep. 1994. V. 236. P. 225. [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(94\)90064-7](https://doi.org/10.1016/0370-1573(94)90064-7)
58. *Allison J., Amako K., Apostolakis J. et al.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2016. V. 835. P. 186. <http://dx.doi.org/10.1016/j.nima.2016.06.125> (geant4.web.cern.ch)
59. *Campbell J.L., Hopman T.L., Maxwell J.A., Nejedly Z.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2000. V. 170. P. 193. [https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(00\)00156-7](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(00)00156-7)
60. *Capote R., Herman M., Obložinsky P. et al.* // Nucl. Data Sheets. 2009. V. 110. P. 3107. <https://doi.org/10.1016/j.nds.2009.10.004>
61. *Fesefeldt H.C.* Simulation of Hadronic Showers, Physics and Application. Technical Report PITHA 85-02. 1985. <https://inspirehep.net/literature/17633>
62. *Glauber R.J.* // High Energy Physics and Nuclear Structure / Ed. Devons S. New York: Plenum Press, 1970. P. 207.
63. *Degtyarenko P.V., Kossov M.V., Wellisch H.P.* // Eur. Phys. J. A. 2000. V. 8. P. 217. <https://doi.org/10.1007/s100500070108>
64. *Kossov M.V.* // Eur. Phys. J. A. 2002. V. 14. P. 265. <https://doi.org/10.1140/epja/i2001-10211-3>
65. *Niita K., Chiba S., Maruyama T., Maruyama T., Takada H., Fukahori T., Nakahara Y., Iwamoto A.* // Phys. Rev. C. 1995. V. 52. P. 2620. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.52.2620>
66. *Bertini H.W.* // Phys. Rev. 1963. V. 131. P. 1801. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.131.1801>
67. *Folger G., Ivanchenko V., Wellisch J.P.* // Eur. Phys. J. A. 2004. V. 21. P. 407. <https://doi.org/10.1140/epja/i2003-10219-7>
68. *Boudard A., Cugnon J., David J.-C., Leray S., Mancusi D.* // Phys. Rev. C. 2013. V. 87. P. 014606. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.87.014606>
69. *Nilsson-Almqvist B., Stenlund E.* // Comput. Phys. Commun. 1987. V. 43. P. 387. [https://doi.org/10.1016/0010-4655\(87\)90056-7](https://doi.org/10.1016/0010-4655(87)90056-7)
70. *Kaidalov A.B.* // Phys. Lett. B. 1982. V. 116. P. 459. [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(82\)90168-X](https://doi.org/10.1016/0370-2693(82)90168-X)
71. *Andersson B., Gustafson G., Ingelman G., Sjostrand T.* // Phys. Rep. 1983. V. 97. P. 31. [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(83\)90080-7](https://doi.org/10.1016/0370-1573(83)90080-7)
72. *Brandt W., Lapicki G.* // Phys. Rev. A. 1981. V. 23. P. 1717. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.23.1717>
73. *Rochman D., Koning A.J., Sublet J.Ch., Fleming M. et al.* // EPJ Web Conf. 2017. V. 146. P. 02006. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201714602006>
74. *Koning A.J., Rochman D.* // Nucl. Data Sheets. 2012. V. 113. P. 2841. <https://doi.org/10.1016/j.nds.2012.11.002> (<http://www.talys.eu>)
75. *Koning A., Delaroche J.* // Nucl. Phys. A. 2003. V. 713. P. 231. [https://doi.org/10.1016/S0375-9474\(02\)01321-0](https://doi.org/10.1016/S0375-9474(02)01321-0)
76. *Chytraccek R., McCormick J., Pokorski W., Santin G.* // IEEE Trans. Nucl. Sci. 2006. V. 53. P. 2892. <https://doi.org/10.1109/TNS.2006.881062>

Monte Carlo Computer Simulation Method for Solving the Problem of Particle Passage through Matter

N. V. Novikov*

Moscow State University, Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Moscow, 119991 Russia

*e-mail: nvnovikov65@mail.ru

The Monte Carlo method is compared with the deterministic methods based on the solution of the transport equation and the molecular dynamics methods. The capabilities of commonly used general-purpose programs (SRIM, PENELOPE, MCNP, FLUKA, and GEANT4) for Monte Carlo simulation of the processes of particle passage through matter are analyzed. Possible ways for further development of the Monte Carlo method are discussed.

Keywords: Monte Carlo method, SRIM, PENELOPE, MCNP, FLUKA, GEANT4.