

ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА, ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЧАСТИЦЫ  
И ФИЗИКА ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

УДК 539.172.12; 539.172.2; 539.1.04

НЕУПРУГИЕ СТОЛКНОВЕНИЯ МЕДЛЕННЫХ ПРОТОНОВ  
И ЭЛЕКТРОНОВ В ВОДЕ

А. В. Багуля<sup>1</sup>, В. М. Гришин<sup>1</sup>, И. Н. Завестовская<sup>1,2</sup>, В. А. Рябов<sup>1</sup>

*В рамках модели фотоионизации рассчитаны интегральные характеристики, сечения и средние потери энергии, неупругих столкновений медленных протонов и электронов в воде. Дано сравнение расчетов с экспериментальными данными. Обсуждаются практические приложения модели.*

**Ключевые слова:** протон, электрон, фотоионизация, вода.

Протонная (ионная) терапия онкологических заболеваний требует точного пространственного моделирования ионизации биологических сред в области пика Брэгга, отвечающей кинетической энергии протона меньше примерно 10–20 МэВ. Вода является основной составляющей биологических материалов человеческого тела, поэтому ионизационные эффекты медленных заряженных частиц, прежде всего протонов и электронов в воде, обсуждались в ряде статей, см. обзор [1] и указанные там ссылки.

В работе [2] была предложена расширенная в область молекулярных возбуждений по диапазону передач энергии в одном неупругом столкновении модель фотоионизации (МФИ, photo-absorption ionization (PAI) model). В рамках МФИ среднее число неупругих столкновений  $d^2\bar{N}_{\parallel}/dx d\omega$  на единицу пути частицы  $x$  и на единицу передачи энергии в одном столкновении,  $\omega$ , имеет следующий вид [2]:

$$\frac{d^2\bar{N}_{\parallel}}{dx d\omega} = \frac{1}{\pi\beta^2} \frac{\alpha}{\hbar c} \left[ \frac{\epsilon_2(\omega)}{|\epsilon(\omega)|^2} \ln \left( \frac{2mv^2}{\omega} \right) + \frac{1}{\omega^2} \int_{\omega_{min}}^{\omega} \omega' \frac{\epsilon_2(\omega')}{|\epsilon(\omega')|^2} d\omega' \right], \quad (1)$$

где  $\alpha$  – постоянная тонкой структуры,  $\hbar$  – постоянная Планка, а  $\beta = v/c$  – отношение скорости частицы  $v$  к скорости света в вакууме  $c$ . Множитель  $\text{Im}\{-1/\epsilon(\omega)\} =$

<sup>1</sup> ФИАН, 119991 Россия, Москва, Ленинский пр-т, 53; e-mail: bagulyaav@lebedev.ru.

<sup>2</sup> НИЦ “Курчатовский институт”, 123182 Россия, Москва, пл. Академика Курчатова, 1.

$\epsilon_2(\omega)/|\epsilon(\omega)|^2$  называется функцией потерь энергии (ФПЭ, energy loss function – ELF) в оптическом приближении. Она связана с оптической диэлектрической проницаемостью среды  $\epsilon(\omega)$ , являющейся комплексной величиной, что отражает поглощение электромагнитных волн в широком диапазоне энергий (частот). Соотношение (1) отвечает продольным потерям энергии (||) из-за кулоновского взаимодействия, которое является основным механизмом потерь энергии медленных частиц.

В настоящей работе рассмотрены интегральные характеристики МФИ, сечения и средние потери энергии, которые имеют важное прикладное значение для описания замедления заряженных частиц в воде. Расчеты сравниваются с экспериментальными данными и обсуждаются возможные приложения модели.

Для получения интегральных характеристик неупругих соударений медленных заряженных частиц с водой соотношение (1) нужно проинтегрировать от величины  $\omega_{\min} = 10^{-3}$  эВ, которая определяется нижней границей рассматриваемого расширенного в область молекулярных возбуждений воды спектра передач энергии в одном неупругом столкновении до величины  $\omega_{\max}$ , ограниченной кинематикой столкновения протона или электрона с атомным электроном. Интегральное сечение получается прямым интегрированием (1) в указанных пределах, а средние потери энергии задаются интегралом от  $\omega d^2 N_{||}/dx d\omega$ . Интегрирование производится численно, поскольку ФПЭ известна из экспериментальных данных и задается массивом, длина которого ограничена необходимой точностью, в нашем случае порядка 3–5%, что в свою очередь определяется точностью оптических измерений коэффициентов преломления и поглощения в воде.

Интегральные характеристики и средние потери энергии вычислялись в рамках программного пакета Geant4 [3–5], который предоставляет широкий набор вспомогательных средств (единицы измерения, методы численного интегрирования, удобные контейнеры с быстрым поиском и т. п.).

На рис. 1 показаны интегральные сечения неупругих столкновений протонов (слева) и электронов (справа) в воде. Гистограммы – расчет по МФИ. Точки слева эксперимент: треугольники [6], кружки [7], квадраты [8]. Точки справа: кружки [9], треугольники [10], квадраты [11].

На рис. 2 показаны средние потери энергии в неупругих взаимодействиях протонов (слева) и электронов (справа) в воде. Гистограммы – расчет по МФИ. Точки слева: кружки [12]. Точки справа: квадраты [13], кружки [14], перевёрнутые треугольники [15], звёздочки [16], треугольники [17]. МФИ удовлетворительно описывает сечения и средние потери энергии для протонов и электронов за исключением области меньше 20 кэВ

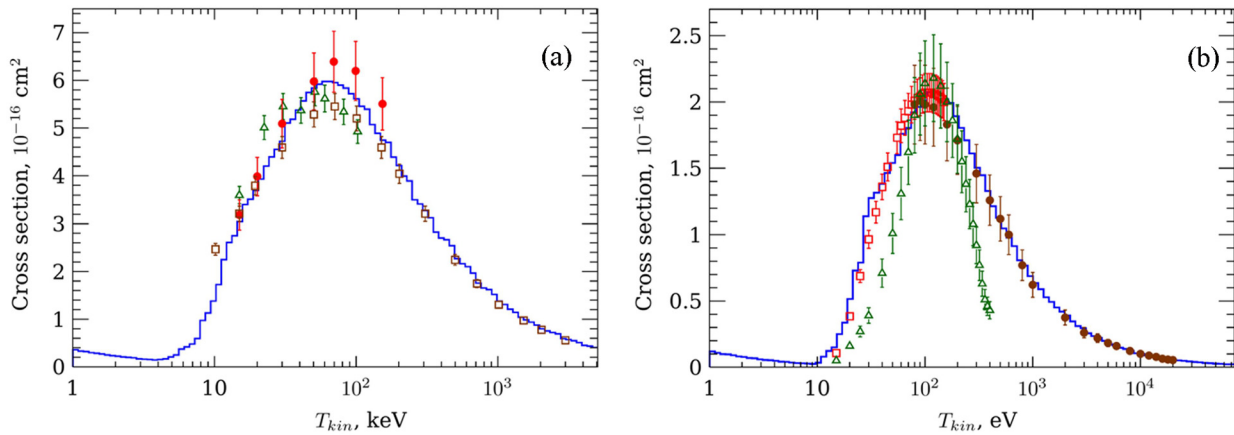


Рис. 1: Интегральные сечения неупругих взаимодействий протонов (слева) и электронов (справа) в воде. Гистограммы – расчет по МФИ. Точки слева эксперимент: треугольники [6], кружки [7], квадраты [8]. Точки справа: кружки [9], треугольники [10], квадраты [11].

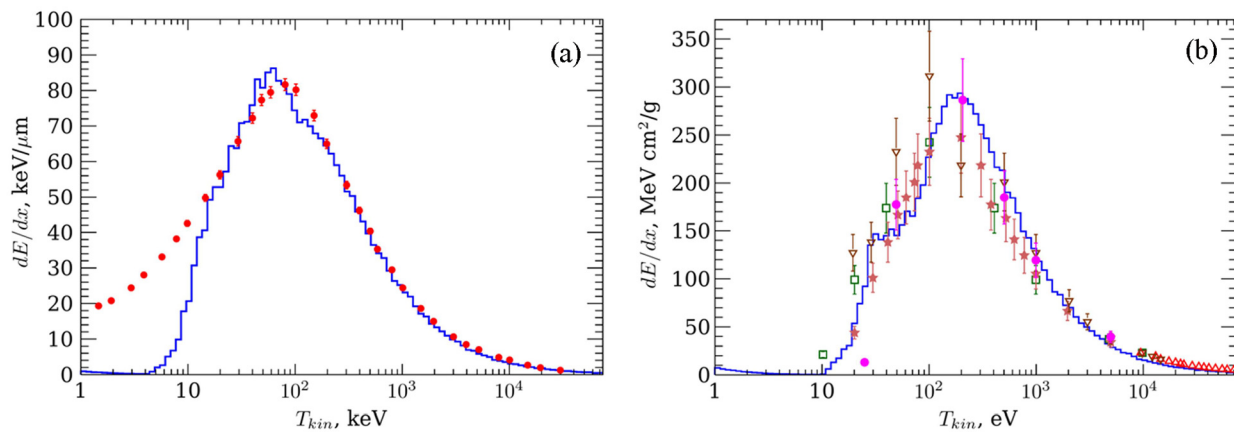


Рис. 2: Средние потери энергии в неупругих взаимодействиях протонов (слева) и электронов (справа) в воде. Гистограммы – расчет по МФИ. Точки слева: кружки [12]. Точки справа: квадраты [13], кружки [14], перевернутые треугольники [15], звездочки [16], треугольники [17].

для протонов. Следует отметить заметный разброс экспериментальных данных, связанный с различными методиками измерения этих характеристик, в частности измерений в парах воды с последующим пересчетом плотности в жидкое состояние. МФИ предсказывает небольшой рост сечения и средних потерь энергии для протонов и электронов с кинетической энергией менее 5 кэВ и 10 эВ, соответственно.

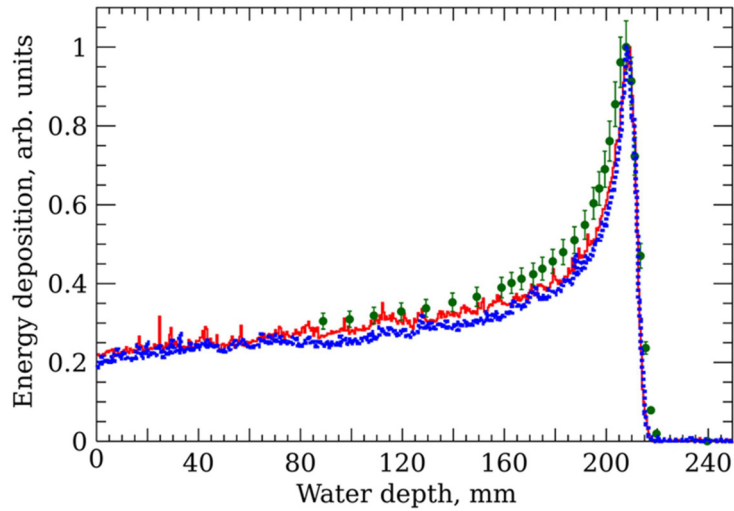


Рис. 3: Кривая поглощения протонов с энергией 177 МэВ в воде. Кривые: сплошная МФИ, прерывистая *Geant4\_em\_standard\_opt0*. Точки: эксперимент [18].

На рис. 3 показана кривая поглощения, т. е. зависимость энерговыделения от глубины проникновения заряженной частицы в материал, для протонов с начальной кинетической энергией 177 МэВ в воде, нормированной на максимум кривой (пик Брэгга). Энерговыделение моделировалось в последовательных слоях воды каждый толщиной 0.5 мм. Кривые: сплошная – расчет по МФИ, прерывистая – результат применения набора электромагнитных процессов *Geant4\_em\_standard\_opt0* программного пакета *Geant4*. Точки: эксперимент [18]. Вклад ядерных взаимодействий описывался в обоих случаях бинарным каскадом [19], который показывает удовлетворительное описание кривых Брэгга [20]. МФИ несколько лучше описывает область плато кривой Брэгга, тогда как в области максимума кривые практически неразличимы. Обе кривые предсказывают более узкий пик Брэгга по сравнению с экспериментальными данными. Отметим, что стандартное *Geant4\_em\_standard\_opt0*, описание неупругих столкновений протонов и электронов в воде предусматривает использование параметризации экспериментальных данных [12, 15, 17], тогда как МФИ использует аппроксимацию диэлектрической проницаемости в широкой  $10^{-3}$  эВ –  $10^2$  кэВ области передач энергии.

Использование оптических данных для воды в инфракрасном, видимом и ультрафиолетовом диапазонах позволяют расширить описание ФПЭ из области атомных частот в область молекулярных возбуждений. Нижняя граница ФПЭ около  $10^{-3}$  эВ соответствует примерно длине волны электромагнитного излучения 100 мкм. Это качественно

отвечает характерному максимальному размеру клетки человека, линейный размер которой распределен в интервале до примерно 100 мкм с максимумом в районе 10 мкм. Таким образом можно перекрыть широкий диапазон передач энергии при неупругих столкновениях медленной заряженной частицы (протона, электрона) с водой, включая характерные размеры молекул и клеток человека.

Из рис. 1 для интегральных сечений неупругих взаимодействий  $\sigma_{in}$  можно определить, что длины свободного пробега  $\lambda = 1/(\sigma_{in}N_{at})$ , где  $N_{at}$  – число атомов среды, относительно неупругих столкновений протонов и электронов в воде находятся на уровне долей нанометра в минимуме. Это означает, что протоны и электроны с кинетической энергией порядка 100 кэВ и 100–200 эВ, соответственно, будут испытывать неупругие столкновения на длинах, близких к расстоянию между молекулами воды. Таким образом открывается возможность прецизионного, на клеточном уровне, моделирования неупругих столкновений медленных протонов и электронов в воде, учитывая, что МФИ, в отличие от ряда других моделей, предсказывает еще и спектр передач энергии в одном столкновении согласно (1). Такое моделирование находит широкую область применения в биологии и медицине.

МФИ была реализована как C++ класс с интерфейсом, принятым в программном пакете Geant4, что позволило получить кривую Брэгга на рис. 3. Обсуждается включение МФИ в программный пакет Geant4.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения № 075-15-2025-453 от 30.05.2025.

#### Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] A. V. Solov'yov (editor), *Nanoscale insights into ion-beam cancer therapy* (Springer, Cham, 2017), p. 1-60.
- [2] А. В. Багуля, В. М. Гришин, И. Н. Завестовская, В. А. Рябов, Письма в ЖЭТФ **120**(6), 465 (2024). DOI: 10.1134/S002136402460246X.
- [3] S. Agostinelli, J. Allison, K. Amako, et al. (Geant4 Collaboration), Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **506**, 250 (2003). DOI: 10.1016/S0168-9002(03)01368-8.
- [4] J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, et al. (Geant4 Collaboration), IEEE Trans. Nucl. Sci. **53**, 270 (2006). DOI: 10.1109/TNS.2006.869826.
- [5] J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, et al. (Geant4 Collaboration), Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **835**, 186 (2016). DOI: 10.1016/j.nima.2016.06.125.

- [6] H. Luna, A. L. F. de Barros, J. A. Wyer, et al., Phys. Rev. **A75**, 042711 (2007). DOI: 10.1103/PhysRevA.75.042711.
- [7] M. A. Bolorizadeh, M. E. Rudd, Phys. Rev. A **33**, 888 (1986). DOI: 10.1103/PhysRevA.33.888.
- [8] M. E. Rudd, T. V. Goffe, R. D. DuBois, L. H. Toburen, Phys. Rev. A **31**, 492 (1985). DOI: 10.1103/PhysRevA.31.492.
- [9] J. Schutten, F. J. de Heer, H. R. Moustara, et al., J. Chem. Phys. **44**, 3924 (1966). DOI: 10.1063/1.1726553.
- [10] O. J. Orient, S. K. Srivastava, J. Phys. B: Mol. Phys. **20**, 3923 (1987). DOI: 10.1088/0022-3700/20/15/036.
- [11] N. L. Djuric, L. M. Cadez, M. V. Kurepa, Int. J. Mass Spectr. and Ion Proc. **83**, R7 (1988). DOI: 10.1016/0168-1176(88)80038-7.
- [12] ICRU Report No. 90, Key data for ionizing-radiation dosimetry: measurement standards and applications (Bethesda, MD, 2016).
- [13] C. J. Kutcher, A. E. S. Green, Radiat. Res. **67**, 408 (1976). DOI: 10.2307/3574338.
- [14] J. A. LaVerne, S. M. Pimblott, Radiat. Res. **141**, 208 (1995). DOI: 10.2307/3579049.
- [15] ICRU, Report No. 16, Linear Energy Transfer (Washington, DC, 1970).
- [16] H. G. Paretzke, GSF-Bericht, 24/88 (GSF, Neuherberg, 1988).
- [17] ICRU, Report No. 37, Stopping powers for electrons and positrons (Bethesda, MD, 1984).
- [18] E. Pedroni, S. Scheib, T. Bohringer, et al., Phys. Med. Biol. **50**, 541 (2005). DOI: 10.1088/0031-9155/50/3/011.
- [19] G. Folger, V. N. Ivanchenko, J. P. Wellisch, Eur. Phys. J. **A21**, 407 (2004). DOI: 10.1140/epja/i2003-10219-7.
- [20] А. В. Багуля, М. С. Владимиров, В. Н. Иванченко, Н. И. Старков, Краткие сообщения по физике ФИАН **36**(5), 3 (2009). DOI: 10.3103/S1068335609050017.

Поступила в редакцию 29 сентября 2025 г.

После доработки 23 октября 2025 г.

Принята к публикации 24 октября 2025 г.