

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 80 за 2007 г.</u>



М. Е. Жуковский, М.В. Скачков Статистические модели электронной эмиссии. Модель «утолщённых траекторий»

ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

Статья доступна по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International

с () ву

*Рекомендуемая форма библиографической ссылки:* Жуковский М. Е., Скачков М.В. Статистические модели электронной эмиссии. Модель «утолщённых траекторий» // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2007. № 80. 26 с. https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2007-80

#### Введение

Математическое моделирование процессов взаимодействия ионизирующего излучения с объектами сложной геометрии и внутренней структуры имеет важное значение во многих приложениях. В частности, в рамках задач рентгеновской диагностики материалов и конструкций требуется определить и исследовать рентгеновские изображения объектов [1], изучении электромагнитного воздействия а при проникающего излучения необходимо проанализировать распределение потоков релятивистских электронов, возникающих в результате взаимодействия ионизирующего излучения с материалами объектов [2].

Математическое моделирование процессов трансформации проникающего излучения в материалах объектов проводилось в большом количестве работ. В одних работах используются и развиваются сеточные методы решения переноса излучения [3-5]. В разрабатываются уравнения других вычислительные алгоритмы, основанные на статистическом моделировании методом Монте-Карло процессов переноса и взаимодействия излучения с веществом [6,7]. Преимущество метода Монте-Карло перед альтернативными методами, основанными на численном решении кинетического уравнения, определяется удобством и приспособленностью этого метода к решению сложных граничных задач в многокомпонентных средах. Кроме того, метод Монте-Карло оказывается удобным построении при интегральных операторов связи между характеристиками исходного проникающего излучения и измеряемых в эксперименте величин, что дает возможность эффективного проведения массовых расчетов и решения обратных задач реконструкции характеристик исходного излучения ПО результатам экспериментальных измерений [8].

Эффективность применения метода Монте-Карло определяется В настоящее время, во-первых, развитием В самом методе способов уменьшения дисперсии расчетов; во-вторых, прогрессом в области создания быстродействующих многопроцессорных вычислительных систем.

С участием авторов настоящей статьи была разработана вычислительная методика [9], предназначенная для моделирования трансформации рентгеновского излучения в многокомпонентных объектах сложной геометрии и внутренней структуры. Эта методика включает в себя:

- Поверхностно ориентированное описание многокомпонентных объектов сложной формы, основанное на точном определении границ гомогенных составляющих внутренней структуры объекта и задании соответствующих разделяющих замкнутых оболочек. Такой способ описания строится с учетом принципа инвариантности максимально возможной части описания объектов относительно линейных преобразований координат;
- Эффективный алгоритм «трассировки» объекта для определения оптической толщины вдоль направления движения фотона, основанный на определении точек пересечения луча «источник-детектор» с разделяющими гомогенные части объекта поверхностями;
- Методика расчета трансформации рентгеновского излучения в объектах сложной формы с учетом спектрального состава ионизирующего излучения, а также эффектов фотопоглощения, комптоновского и рэлеевского рассеяния. Эта методика построена на основе явного выделения граничных поверхностей с использованием триангуляционных моделей в сочетании с методом Монте-Карло, допускающим эффективное распараллеливание на многопроцессорных вычислительных системах.

В работе [10] авторами разработано несколько приемов увеличения эффективности расчетов методом Монте-Карло для важных частных случаев постановок задач о трансформации рентгеновского излучения на основе принципа максимальной информационной ценности фотонных траекторий.

Статистическое моделирование переноса электронов и других заряженных частиц представляет значительно большую трудность, чем моделирование переноса фотонов. Взаимодействие нейтральных частиц с материалами объектов характеризуется небольшим числом независимых столкновений с атомами вещества и участками свободного и прямолинейного движения этих

частиц между столкновениями. При столкновении происходит один из возможных элементарных процессов взаимодействия (поглощение, упругое или неупругое рассеяние). Сечения этих процессов в настоящее время хорошо изучены и по ним имеются апробированные базы данных. Для заряженных частиц такой базы данных по сечениям элементарных процессов взаимодействия в настоящее время, по-видимому, нет [6]. Перенос электронов и других заряженных частиц происходит при постоянном действии кулоновских сил, приводящих к большому числу элементарных взаимодействий. Например, фотон в алюминии теряет энергию 500 кэВ, испытывая при этом около десяти столкновений, а электрон теряет ту же энергию, испытывая около  $10^5$  элементарных взаимодействий.

Для статистического моделирования переноса заряженных частиц широко используется теория многократного рассеяния. Основу этой теории составляют функция Гоудсмита–Саундерсона распределения углов упругого рассеяния частиц, прошедших некоторый путь  $\Delta t$  в веществе, линейная способность частицы функция Ландау распределения тормозная И энергетических потерь на пути  $\Delta t$ . Модели, использующие теорию многократного рассеяния, сталкиваются с необходимостью постоянно контролировать выбор параметра  $\Delta t$ , поскольку теория не применима как  $\Delta t \rightarrow 0$ , так и при больших значениях пути, пройденного при малых частицей в веществе.

Настоящая работа посвящена описанию методики статистического моделирования переноса электронов в веществе и ее реализации при решении задач об электронной эмиссии с поверхности объектов, облучаемых ионизирующим излучением. Методика включает в себя ряд моделей, построенных по иерархическому принципу. При этом, пространственные и энергетические распределения, необходимые для расчетов в следующей модели, рассчитываются с использованием предыдущей.

Центральным звеном методики является модель утолщенных траекторий (МУТ). Преимущество этой модели заключается в отказе от использования

приближенных распределений теории многократного рассеяния при сохранении экономичности вычислений. Распределения для расчетов с использованием МУТ получают путем расчетов по модели индивидуальных соударений (МИС), которая, имея примерно одинаковую с МУТ точность, значительно проигрывает в быстродействии.

С помощью МУТ строятся распределения для расчетов по упрощенной инженерной модели электронной эмиссии с поверхности объекта под действием ионизирующего излучения. Эта модель теряет в точности по сравнению с МУТ, но выигрывает в быстроте расчетов.

#### §1. Физическая модель

Задача переноса электронов в веществе ставится при следующих достаточно общих предположениях:

- 1) рассеивающие центры среды (атомы) расположены случайно;
- электрон взаимодействует одновременно только с одним рассеивающим центром;
- 3) электроны не взаимодействуют между собой.

В достаточно чёткой этих предположениях можно говорить 0 пространственной локализации взаимодействия и прийти к понятию траектории частицы как некоторой ломаной, в точках излома которой взаимодействие происходит И изменение состояния частицы, т.е. направления её движения и энергии.

Дифференциальное сечение упругого рассеяния аппроксимировалось формулой Мота [6,7]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N \cdot Z \cdot (Z+1) \cdot r_e^2 \cdot (1-\beta^2)}{\beta^4 \cdot (1-\cos\theta+2\eta)^2} \cdot \left(1-\frac{\beta^2}{2} \cdot \frac{1-\cos\theta}{2} + \pi\alpha Z\beta \cdot \frac{1+\cos\theta}{2} \cdot \sqrt{\frac{1-\cos\theta}{2}}\right),$$

где 
$$\eta = 1.7 \cdot 10^{-5} \cdot Z^{2/3} \cdot (1 - \beta^2) \cdot \left[ 1.13 + 3.76 \cdot (Z \cdot \alpha / \beta)^2 \right] / \beta^2$$
 – параметр  
экранирования,  $\alpha$  – постоянная тонкой структуры,  $Z$  – заряд ядер атомов

среды, N – концентрация атомов среды,  $r_e$  – классический радиус электрона,  $\beta$  – отношение скорости электрона к скорости света,  $\theta$  – угол между направлениями движения электрона до и после столкновения.

Потери энергии электрона в процессе неупругих столкновений учитывались в приближении непрерывного замедления, т.е. предполагалось, что за пройденный путь  $\Delta t$  электрон теряет энергию

$$\Delta E = \int_{0}^{\Delta t} \left( -\frac{dE}{ds} \right) ds$$

где  $\left(-\frac{dE}{ds}\right)$  – линейная тормозная способность электрона, значения которой

для разных материалов и энергий электрона имеются, например, в базе данных на сайте <u>www.nist.gov</u>. Использование этого приближения обусловлено отсутствием у авторов доступа к апробированной базе данных по сечениям элементарных неупругих взаимодействий электронов с атомами среды.

Кроме приближения непрерывного замедления в некоторых расчётах использовалась функция Ландау распределения ионизационных потерь энергии электрона на пути  $\Delta t$ , заимствованная из теории многократного рассеяния [6,7]. Согласно Ландау, распределение потерь энергии  $\Delta E$  имеет следующий вид:

 $f(\Delta E)d(\Delta E) = \phi(\lambda)d\lambda,$ 

где

$$\lambda = \frac{\Delta E}{\xi} - \ln \left[ \frac{2\xi m v^2}{(1-\beta^2)I^2} \right] + \delta + \beta^2 - 1 + \gamma.$$

Здесь *т* и *v* – масса и скорость электрона,  $\delta$  – поправка на эффект плотности, *I* – средний потенциал ионизации атома,  $\gamma = 0.5772157..., e$  – заряд электрона,

$$\xi = \frac{2\pi e^4 NZ}{mv^2} \Delta t,$$
  
$$\phi(\lambda) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \sin(\pi \mu) e^{-\mu \ln \mu - \lambda \mu} d\mu.$$

#### §2. Математические модели переноса электронов в веществе

Как известно, метод Монте-Карло в задачах переноса частиц в веществе сводится к построению большого числа траекторий частиц, представляющих некоторые ломаные линии, прямолинейные участки которых соответствуют свободным пробегам до столкновений. Свободный пробег, результат (поглощение или рассеяние), а также характеристики столкновения электрона после столкновения (энергия и направление движения рассеянной частицы) разыгрываются из соответствующих вероятностных распределений. Результаты выборки из конечного числа траекторий обрабатываются статистическими методами. Результатом моделирования является распределение частиц, вылетевших из объекта, по энергии и направлению движения.

Для использования метода Монте-Карло не требуется, вообще говоря, формулировать математическую модель в виде уравнений. Но фактически всегда можно говорить о том, что с помощью этого метода решается один из вариантов кинетического уравнения. Кинетическое уравнение Больцмана в общем случае нестационарного переноса записывается в виде:

$$\frac{1}{v}\frac{d\Phi}{dt} + \mathbf{\Omega}\cdot\nabla\Phi + N\boldsymbol{\sigma}\cdot\Phi = N\int d\mathbf{\Omega}'\int dE'\frac{d^2\boldsymbol{\sigma}(E', E, \mathbf{\Omega}'\cdot\mathbf{\Omega})}{dEd\Omega}\Phi + S, \quad (1)$$

где  $\Phi(\mathbf{r}, \Omega, E, t)$  – дифференциальная плотность потока частиц в момент времени *t*, в точке с координатами **r** и движущихся в направлении  $\Omega$  с энергией *E*,  $S(\mathbf{r}, \Omega, E, t)$  – плотность источников,  $\sigma = \sum_{k} \sigma_{k}$  и

$$\frac{d^2 \sigma(E', E, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega})}{dEd\Omega} = \sum_k \frac{d^2 \sigma_k(E', E, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega})}{dEd\Omega} - \text{полное и дифференциальное}$$

сечения взаимодействия, индекс *k* указывает на конкретный элементарный процесс взаимодействия. Предполагается только бинарный характер соударения.

В стационарном случае и в приближении непрерывного замедления (частица теряет энергию малыми порциями, не рассеиваясь при этом) уравнение (1) переходит в уравнение Левиса – Спенсера [11,12]

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \Phi + N \sigma_{el} \cdot \Phi - \frac{\partial}{\partial E} \left[ \left( -\frac{dE}{ds} \right) \cdot \Phi \right] = N \int d\mathbf{\Omega}' \frac{d\sigma_{el}(E, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega})}{d\Omega} \Phi + S, (2)$$

где  $\left(-\frac{dE}{ds}\right)$  – линейная тормозная способность электрона,  $\sigma_{el}$  и  $\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega}$  – полное и дифференциальное сечения упругого рассеяния.

Далее в работе будут рассмотрены общие схемы метода Монте-Карло, которые будут формулироваться в виде статистических моделей переноса электронов в веществе. Эти статистические модели соответствуют математическим задачам для кинетического уравнения переноса (1) в стационарном случае или его упрощённого варианта (2).

### §3. Модель индивидуальных соударений (МИС)

МИС [6] является наиболее простой и очевидной моделью переноса частиц в веществе. В ней осуществляется прямое моделирование траекторий частиц, начальные координаты, энергия направление И движения которых выбираются разыгрываются соответствии с распределением ИЛИ В источников S. Считается, что в каждой узловой точке траектории (рис.1) происходит один из возможных элементарных процессов взаимодействия. Вероятность каждого из этих процессов пропорциональна его вкладу в полное сечение взаимодействия. Распределения угла рассеяния и потери энергии дифференциальными частицы описываются сечениями соответствующих элементарных процессов.



Алгоритм построения *i*-го звена траектории частицы в МИС имеет следующий вид:

1) розыгрыш пробега частицы в соответствии с законом ослабления

$$\Delta s_i = -\lambda_{i-1} \ln \gamma, \quad \lambda_{i-1} = (\sigma_{i-1}N)^{-1},$$

где  $\sigma_{i-1}$  – полное сечение взаимодействия электрона с веществом (см. формулу (1)) или полное сечение упругого рассеяния (см. формулу (2))  $\lambda$  – средний свободный пробег частицы в материале объекта,  $\gamma$  – случайное число, равномерно распределённое на отрезке [0,1];

2) вычисление координат точки взаимодействия:

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_{i-1} + \Delta S_i \mathbf{\Omega}_{i-1},$$

где  $\Omega_{i-1}$  – единичный вектор, указывающий направление движения частицы;

- проверка вылета частицы из объекта, вычисление вклада частицы в плотность потока, угловые и энергетические распределения частиц на границе объекта (регистрация частицы);
- 4) розыгрыш вида взаимодействия, вероятность каждого из которых есть

$$p_k = \sigma_{i-1}^{(k)} / \sigma_{i-1},$$

где  $\sigma_{i-1}^{(k)}$  – сечение взаимодействия *k*-го типа;

 розыгрыш потери энергии частицы или вычисление потери энергии по схеме непрерывного замедления:

$$\Delta E_i = -\int_{0}^{\Delta s_i} \frac{dE}{ds} ds, \quad \frac{dE}{ds} = \left(\frac{dE}{ds}\right)_{col} + \left(\frac{dE}{ds}\right)_{rad};$$

 розыгрыш полярного угла рассеяния частицы в точке взаимодействия из распределения

$$F(\theta < \theta^*) = \frac{1}{\sigma_i^{(k)}} \int_0^{\theta^*} \frac{d\sigma_i^{(k)}}{d\Omega} d\Omega,$$

где  $d\sigma_i^{(k)}/d\Omega$  – дифференциальное сечение рассеяния при *k*-м взаимодействии;

- 7) розыгрыш азимутального угла рассеяния  $\phi^* = 2\pi\gamma$ ;
- 8) определение нового направления движения рассеянной частицы  $\Omega_i$  в заданной системе координат.

Модель индивидуальных соударений (МИС) широко используется при моделировании нейтронных и фотонных траекторий. Применение МИС для заряженных частиц связано с большими затратами машинного времени, поскольку взаимодействие заряженных частиц обычно сопровождается малыми углами рассеяния и небольшими передачами энергии, а также очень большим числом соударений.

#### §4. Модель укрупнённых соударений (МУС)

Для описания движения электронов в веществе широко используется модель укрупненных соударений (МУС) [6]. При построении МУС предполагается, что на каждом из звеньев укрупненной траектории частицы происходит большое число индивидуальных соударений. Распределения углов рассеяния и потерь энергии в конце каждого из звеньев траектории берутся из теории многократного рассеяния. Распределения этой теории являются приближенными и имеют ограниченную область применимости. Длина звена траектории не разыгрывается, а выбирается определенным образом в соответствии с областью применимости теории многократных Чтобы избежать соударений. систематических погрешностей, вычислительные схемы МУС приходится тщательно сопоставлять с результатами расчетов по более детальной МИС.



Рис.2

Алгоритм построения *i*-го звена траектории электрона (рис.2) в МУС имеет следующий вид:

- 1) выбор криволинейного шага траектории  $\Delta t(E_{i-1});$
- розыгрыш угла многократного рассеяния θ<sup>\*</sup>(Δt,γ) из распределения Гоудсмита – Саундерсона:

$$F(\Delta t, \cos \theta^*) = \sum_{l=0}^{\infty} \left( l + \frac{1}{2} \right) \cdot \exp(-\Delta t \cdot G_l) \cdot P_l(\cos \theta^*),$$
$$G_l = 2\pi N \int_{-1}^{1} \frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} \cdot [1 - P_l(\mu)] \cdot d\mu,$$

где  $d\sigma_{el}/d\Omega$  – дифференциальное сечение упругого рассеяния,  $P_l(\mu)$  – полином Лежандра, N – плотность атомов среды;

- 3) вычисление или розыгрыш прямолинейного шага траектории  $\Delta s(\Delta t, \theta^*)$  и радиального смещения  $\rho(\Delta t, \theta^*)$  каким-либо приближённым способом;
- 4) розыгрыш азимутального угла рассеяния  $\phi^* = 2\pi\gamma$ ;
- 5) определение новых координат электрона  $\mathbf{r}_{i}$ ;
- 6) регистрация электрона, если он вылетел из объекта;
- розыгрыш потери энергии из интегральных распределений Ландау,
  Блунка Лейзеганга или вычисление энергии электрона E<sub>i</sub> по схеме непрерывного замедления;
- 8) определение нового направления движения электрона  $\Omega_i$  в заданной системе координат.

МУС значительно экономичнее МИС по вычислительным затратам. является расчётах МУС Недостатком наличие В систематической обусловленной приближениями погрешности, теории многократного рассеяния и использованием приближённых формул для вычисления прямолинейного шага траектории  $\Delta s(\Delta t, \theta^*)$  и радиального смещения  $\rho(\Delta t, \theta^*)$  (см. рис.2).

#### §5. Модель утолщённых траекторий (МУТ)

В настоящей работе для описания движения электронов в веществе предлагается модель утолщенных траекторий (МУТ) [13]. Идея МУТ аналогична МУС, но в отличие от МУС в МУТ не используются приближенные распределения многократных теории соударений. Вычислительная схема МУТ аналогична МИС. В ней также сначала производится розыгрыш длины прямолинейного участка траектории, а затем энергии и направления движения рассеянной частицы. Все распределения, необходимые для розыгрышей, получают заранее численно по МИС в задаче о рассеянии электронов, движущихся вдоль трубки (рис.3), толщина которой является ключевым параметром модели. В этой задаче вклад электрона в распределения на границе трубки вычисляется при выполнении одного из трёх условий: 1)  $\rho \ge n \cdot \lambda$ , где n – заданное целое число,  $\lambda$  – средний свободный пробег электрона; 2)  $\cos \theta^* < 0$  (электрон начал движение в обратном направлении); 3)  $Z \ge Z_{max}$ .



Рис.3

Таким образом, получают 1) функцию распределения электронов по координате и начальной энергии  $F_1(z,E_0)$ , 2) функцию распределения электронов по координате, косинусу угла рассеяния и начальной энергии  $F_2(z,\cos\theta^*,E_0)$ , 3) функцию распределения электронов по координате, конечной энергии и начальной энергии  $F_3(z,E,E_0)$  или среднюю конечную энергию электронов  $\overline{E}(z,E_0)$  (для схемы непрерывного замедления). Эти распределения используются для розыгрышей всех необходимых величин в алгоритме построения *i*-го звена «утолщённой» траектории электрона (рис.4), который имеет следующий вид:

- 1) розыгрыш пробега электрона  $\Delta s_i(E_{i-1},\gamma)$ ;
- 2) вычисление координат *i*-го узла траектории

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_{i-1} + \Delta s_i \mathbf{\Omega}_{i-1};$$

- 3) розыгрыш энергии электрона в *i*-м узле траектории E<sub>i</sub>(E<sub>i-1</sub>, Δs<sub>i</sub>, γ)
  (для схемы непрерывного замедления энергия электрона находится по таблице E<sub>i</sub>(Δs<sub>i</sub>, E<sub>i-1</sub>));
- 4) розыгрыш азимутального угла рассеяния  $\phi^* = 2\pi\gamma$ ;
- 5) смещение *i*-го узла траектории в поперечном направлении на полуширину траектории *n* · λ<sub>i</sub>, проверка вылета электрона из объекта;
- 6) розыгрыш косинуса полярного угла рассеяния  $\theta^*(E_{i-1}, \Delta s_i, \gamma);$
- определение направления движения рассеянного электрона Ω<sub>i</sub> в заданной системе координат;
- 8) определение расстояния  $\Delta s$  от *i*-го узла траектории до границ объекта в направлении движения электрона  $\Omega_i$ . Если  $\Delta s \leq \Delta s_{\max}(E_i)$ , то:
- а) находится энергия электрона, вылетевшего из объекта, также как в п.3;
- б) электрон регистрируется с весом  $W(\Delta s, E_i) < 1$ , равным вероятности прохождения электроном расстояния  $\Delta s$ .





Рис.5





МУТ реализована на многопроцессорной вычислительной системе с распределенной памятью MBC-15000. В качестве примера рассмотрена модельная задача о прохождении плоскопараллельного потока электронов с

начальной энергией 2 МэВ через железную (Fe) пластину толщиной 0.5 мм. Результаты расчетов по МУТ сравнивались с результатами расчетов, полученных с использованием МИС. На рис.5 представлен график плотности распределения электронов, прошедших пластину, по энергии, а на рис.6 – плотности распределения электронов по косинусу полярного угла вылета из пластины. Кривые на графиках соответствуют МИС, МУТ с полутолщиной траектории n=10, МУТ с полутолщиной траектории n=30, МУТ с полутолщиной траектории n=100. Здесь полутолщина траектории измеряется в средних свободных пробегах электрона в материале мишени. Отношение прошедшего пластину потока электронов к падающему потоку равно 0,6.

На рис.5,6 видно, что кривые практически не различимы. Существенное различие наблюдается во времени расчётов. Время расчётов на 200 процессорах MBC-15000 приведено во втором столбце следующей таблицы.

	Среднее	Время счёта на	Время, затраченное на
	число	200 проц., мин.	получение распределений
	звеньев		для МУТ в результате
	траектории		расчётов по МИС на 200
	электрона		проц., мин.
МИС	3916.62	150	
МУТ, <i>n</i> =10	31.15	3.15	190
МУТ, <i>n</i> =30	15.57	1.7	400
МУТ, <i>n</i> =100	7	0.85	830

Согласно таблице, наблюдается почти линейная зависимость времени расчёта от среднего числа звеньев траектории электрона в МУТ, указанного в первом столбце таблицы. Время расчётов по МИС во много раз превышает время расчётов по МУТ. В третьем столбце указано время, затраченное на получение распределений для МУТ в результате предварительного расчета по МИС на 200 процессорах. Это время растёт с ростом толщины «утолщённой» траектории и связано с ростом среднего числа

индивидуальных столкновений электронов на одном звене траектории в МУТ. График зависимости среднего числа столкновений на одном звене траектории в МУТ от энергии электрона для рассматриваемых толщин траекторий приведён на рис.7. Кривая, отмеченная крестиком, соответствует МУТ с полутолщиной траектории n=10, кривая с треугольником – МУТ с n=30, кривая с кружочком – МУТ с n=100.

Обращает на себя внимание тот факт, что время, затраченное на получение распределений для МУТ, сравнимо или превышает время расчётов по МИС (150 мин) и составляет значительную величину даже на современном суперкомпьютере. Вместе с тем очевидно и преимущество МУТ перед МИС, которое заключается в том, что трудоёмкий расчет распределений для МУТ проводится только один раз для конкретного материала (например, железа). В дальнейшем эти распределения в виде двумерных и трёхмерных таблиц могут многократно использоваться при решении различных задач переноса частиц в веществе.



Рис.7.

## §6. Упрощённая инженерная модель электронной эмиссии из плоского приграничного слоя объекта под действием ионизирующего излучения

Под действием ионизирующего рентгеновского или γ-излучения на поверхности объектов формируются потоки релятивистских электронов. Как правило, пробеги электронов в материале объекта много меньше его

размеров. Поэтому можно считать, что из объекта вылетают электроны, образовавшиеся в его тонком приграничном слое. В связи с этим можно упростить статистическую модель переноса электронов в приграничном материале объекта, если заранее получить функцию распределения вылетающих электронов по глубине рождения h, начальной энергии  $E_0$ , начальному направлению движения  $\theta_0$ , конечной энергии E и конечному направлению движения  $\theta$  (рис. 8). Такую модель будем называть в дальнейшем «инженерной».

Функция распределения  $F(h, E_0, \theta_0, E, \theta)$  оказывается в этом случае пятимерной и требует огромного количества памяти для хранения таблицы её значений. Дальнейшим упрощением указанной инженерной модели является переход к распределениям вероятности вылета  $P(h, E_0, \theta_0)$  и средней энергии  $\overline{E}(h, E_0, \theta_0)$  электрона, вылетающего из объекта. При этом, пятимерная функция распределения заменяется на две трёхмерные таблицы. Такое упрощение не дает возможности получить угловые распределения электронов эмиссии, а также не учитывает разброс энергий этих электронов, который тем больше, чем меньше вероятность вылета электрона.

Указанные таблицы построены для железа в результате серии расчётов по МУТ.



Рис. 8



Рис. 9



Рис. 10

На рис. 9 – 10 приведены графики фрагмента таблиц, относящегося к электрону с энергией 1 МэВ, образовавшегося на разных глубинах *h* от поверхности объекта. По оси абсцисс отложен косинус угла между направлением движения электрона и внутренней нормалью к поверхности объекта. По осям ординат отложены вероятность вылета из объекта и средние потери энергии. Линия с разрывом соответствует нулевой глубине h=0. Соседние кривые отвечают ближайшим значениям параметра h, отличающимся друг от друга на 0,05 от максимального расстояния, которое может пройти электрон в железе, теряя энергию в приближении непрерывного замедления.

Значительного улучшения описанной простейшей инженерной модели удается добиться введением искусственного среднеквадратичного отклонения (дисперсии):

 $\sigma = \overline{E} \cdot \sqrt{p \cdot (1-p)}$ , где p - вероятность вылета из объекта (весовой коэффициент электрона). Потери энергии электрона разыгрываются при этом по формуле

$$E = \overline{E} + \sqrt{2} \cdot \sigma \cdot \operatorname{erfinv}\left\{(2\gamma - 1) \cdot \operatorname{erf}(\overline{E} / \sigma \sqrt{2})\right\},\$$

где  $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{x} \exp(-t^2) dt$  - функция ошибок,  $\operatorname{erfinv}(x)$  - обратная

функция ошибок. Предложенная аппроксимация энергетического распределения электронов не следует из каких-либо априорных данных. Её применимость и работоспособность проверяются эмпирически с помощью вычислительных экспериментов.

# §7. Электронная эмиссия на границе объекта под действием ионизирующего излучения

С использованием рассмотренных моделей переноса электронов в веществе был построен алгоритм статистического моделирования эмиссии электронов с граничных поверхностей объектов, облучаемых ионизирующим излучением. В основу разработанного алгоритма положен принцип максимальной информационной ценности фотонных траекторий с точки зрения минимизации дисперсии получаемых статистических оценок характеристик электронных потоков. Некоторые особенности построенного алгоритма рассмотрены ниже.

Перенос фотонов излучения в веществе хорошо описывается моделью индивидуальных соударений (МИС), которая для многокомпонентных объектов сложной геометрии и внутренней структуры реализована, например, в работе [9]. Рождением электронов сопровождается два типа рассматриваемых взаимодействий фотонов излучения с веществом: фотоэлектрическое поглощение и комптоновское рассеяние фотона.

При комптоновском рассеянии фотона рождается электрон со следующими параметрами:

– кинетическая энергия электрона:  $E = E_{\gamma} - E'_{\gamma}$ , где  $E_{\gamma}$  и  $E'_{\gamma}$  – энергии фотона до и после рассеяния соответственно;

 полярный угол движения электрона в системе координат, связанной с первоначальным движением фотона:

$$\cos\theta'_e = \frac{E_{\gamma} - E'_{\gamma} \cdot \cos\theta'_{\gamma}}{p_E}, \qquad p_E = \sqrt{E(2m_ec^2 + E)},$$

где  $\cos \theta'_{\gamma}$  – косинус угла рассеяния фотона;

– азимутальный угол движения электрона:  $\varphi'_e = \pi + \varphi'_{\gamma}$ , где  $\varphi'_{\gamma}$  – азимутальный угол рассеяния фотона;

При фотоэлектрическом поглощении фотона рождается электрон со следующими параметрами:

– кинетическая энергия электрона:  $E = E_{\gamma} - E_{0}$ , где  $E_{\gamma}$  – энергии фотона до поглощения,  $E_{0}$  – энергия связи К-оболочки в атоме вещества;

 полярный угол движения электрона в системе координат, связанной с первоначальным движением фотона, разыгрывается с использованием углового распределения:

$$f(x,v) = f_{o}(v) \cdot \frac{1-x^{2}}{(1-vx/c)^{4}}, \quad x = \cos\theta'_{e}, \quad f_{o}(v) = \left[\int_{-1}^{1} f(x,v)dx\right]^{-1},$$

где *v* – скорость электрона с энергией *E*, *c* – скорость света;

– азимутальный угол движения электрона разыгрывается по формуле:

 $\varphi'_e = 2\pi\gamma$ .

Таким образом, в узловой точке траектории фотона может родиться комптоновский или фото-электрон. Пробег электрона много меньше размеров объекта, поэтому ЛИШЬ незначительная часть электронов, рождённых в тонком приграничном слое объекта, даст сколько-нибудь заметный вклад в формирование электронного потока на его границе. необходимо Следовательно, модифицировать алгоритм Монте-Карло, изменив статистику рождения электронов.

направлении

Естественным шагом В ЭТОМ «полезного» участка y границы объекта продолжении каждого на звена траектории фотона. На рис. 11 таким полезным участком является отрезок  $[h_1, h_2]$ . Расстояние от любой точки отрезка  $[h_1, h_2]$  до границы объекта не превышает максимального



является

выделение

расстояния *d* (определяемого тормозной способностью электрона), которое может пройти электрон с известной начальной энергией в приграничном материале объекта. Точку рождения электрона можно разыгрывать на этом отрезке. Для этого используется условная плотность распределения точек взаимодействия фотона на отрезке:

$$\frac{dn}{dz} = \mu \cdot \exp\left\{-\int_{h_1}^{z} \mu \cdot dz'\right\} \cdot \left(1 - \exp\left\{-\int_{h_1}^{h_2} \mu \cdot dz'\right\}\right)^{-1}, \quad z \in [h_1, h_2]$$

полученная в соответствии с законом ослабления. Здесь  $\mu$  – коэффициент ослабления излучения в веществе, пропорциональный полному сечению взаимодействия фотона. Можно считать, что в точке взаимодействия фотона рождается два электрона, начальные веса которых имеют вид:

$$q_{e}^{(ph)} = W_{\gamma} \cdot p_{ph} \cdot \left( \exp\left\{-\int_{0}^{h_{1}} \mu \cdot dz'\right\} - \exp\left\{-\int_{0}^{h_{2}} \mu \cdot dz'\right\} \right),$$
$$q_{e}^{(c)} = W_{\gamma} \cdot p_{c} \cdot \left( \exp\left\{-\int_{0}^{h_{1}} \mu \cdot dz'\right\} - \exp\left\{-\int_{0}^{h_{2}} \mu \cdot dz'\right\} \right).$$

Здесь разность экспоненциальных функций можно трактовать как вероятность взаимодействия фотона на отрезке  $[h_1, h_2]$ ,  $p_{ph}$  – вероятность фотоэлектрического поглощения,  $p_c$  – вероятность комптоновского рассеяния фотона,  $W_{\gamma}$  – вес фотона до взаимодействия.

Для анализа эффективности рассмотренных статистических моделей переноса электронов проведены расчёты электронных потоков, образующихся при облучении квадратной железной (*Fe*) пластины –10см < *x*,*y* < 10см, 0 < *z* < 0,5см.



Рис.12

Схема вычислительного эксперимента представлена на рис.12.

В расчетах использовался точечный источник фотонов с энергией 500 кэВ и 100 кэВ. Расстояние от верхней границы пластины до источника 100 см; диаметр пятна засветки на верхней грани пластины – 5 см; детектор имеет размеры 2х2 см и расположен вплотную к нижней грани пластины. Детектор измеряет энергию электронов.

Результатом расчетов является нормированное энергетическое распределение электронов (фото- и комптоновских), т.е. функция  $f_e(E)$ ,

причем 
$$\int_{0}^{E_{\text{max}}} f(E) dE = 1.$$

На рис. 13, 14 изображены графики спектральных зависимостей электронов, полученные при использовании трех моделей: МУТ (на рисунках

– MUT), инженерной модели без дисперсии (Ray1), инженерной модели с дисперсией (Ray2) и результаты расчетов по MCNP [7], использующей МУС.

Сравнительный анализ результатов показывает, что инженерная модель без дисперсии дает неудовлетворительный результат, в то время как использование этой же модели с дисперсией позволяет получать спектры, близкие к результатам расчетов по МУТ и МСNP.

Отметим, что первый максимум спектра (около 25 кэВ при использовании фотонов с энергией 100 кэВ и около 250 кэВ для источника с энергией 500 кэВ) обусловлен главным образом комптоновскими электронами, а второй максимум (соответственно 90 и 490 кэВ) – фотоэлектронами.

Приведем в заключение оценки эффективности предложенных моделей. Расчеты по МУТ требуют примерно в 30-40 раз меньше времени, чем по MCNP, а по инженерной модели – примерно в 20 раз меньше, чем по МУТ при использовании одного и того же количества фотонных историй.



Рис.13 Спектры электронов, инжектируемых с нижней границы объекта



Рис.14 Спектры электронов, инжектируемых с нижней границы объекта

Заключение. Построены статистические модели переноса электронов, которые позволяют проводить эффективное моделирование процессов транспорта электронов в веществе на современных многопроцессорных вычислительных системах.

#### Литература

- Неразрушающий контроль. Россия. 1900-2000 гг.: Справочник. Под ред.
  В.В.Клюева. 2-ое изд., исправ. и доп. М.: Машиностроение, 2002.
- С.Н. Ганага, Л.Н. Здуход, С.В. Пантелеев, Ю.В. Парфенов, О.Ф. Тарасов, А.В. Шапранов, Электродинамическое действие ионизирующих излучений // Физика ядерного взрыва под ред. В.М. Лоборева, т.2, с. 107.
- 3. Р.М. Шагалиев и др. Математическое моделирование и методики решения многомерных задач переноса частиц и энергии, реализованные в комплексе САТУРН-3. // Вопросы атомной науки и техники, серия: Матем. моделирование физических процессов. 1999, вып. 4, с. 20-26.
- Л.П. Басс, О.В. Николаева, В.С. Кузнецов, А.В. Быков, А.В. Приезжев, А.А. Дергачев. Моделирование распространения оптического излучения в фантоме биологической ткани на суперЭВМ MBC1000/M. // Матем. моделирование. 2006, т.18, №1, с. 29-42.
- 5. Т.А. Сушкевич. Математическое моделирование переноса излучения. М., 2005, 661 с.
- А.Ф. Аккерман. Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. М., 1991, 200 с.
- J.F.Briesmeister (ed.). *MCNP* A General Monte Carlo N-Particle Transport Code. LANL Report LA-13709-M, Los Alamos, 2000.
- М.Е. Жуковский, С.В. Подоляко, М.В. Скачков, Г.-Р. Йениш. О моделировании экспериментов с проникающим излучением // Матем. моделирование. 2007, т.19, №1, с. 29-42.

- В.П.Загонов, М.Е.Жуковский, С.В.Подоляко, М.В.Скачков, Г.-Р.Тиллак, К.Беллон. Применение поверхностно ориентированного описания объектов для моделирования трансформации рентгеновского излучения в задачах вычислительной диагностики. // Матем. моделирование. 2004, т.16, №5, с.103-116.
- М.Е. Жуковский, М.В. Скачков, А.А. Егорушкин. Модификации метода Монте-Карло в задачах о трансформации ионизирующего излучения. Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2005, № 85.
- 11. Levis H.W. // Phys. Rev. 1950, Vol. 78, № 3, p. 526-533.
- 12. Spencer L.V. // Ibid. 1955, Vol. 98, № 6, p. 1597-1611.
- 13. М.В. Скачков. Модель «утолщенных траекторий» для описания движения электронов в веществе и ее реализация на МВС-5000М. Международный семинар «Супервычисления и математическое моделирование». Саров, 2006, с. 91-92.