



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 19 за 2023 г.



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

М.Е. Жуковский, М.Б. Марков,
С.В. Подоляко

О подготовке данных для
моделирования переноса
фотонов и электронов

Статья доступна по лицензии
[Creative Commons Attribution 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Жуковский М.Е., Марков М.Б., Подоляко С.В. О подготовке данных для моделирования переноса фотонов и электронов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2023. № 19. 24 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2023-19>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2023-19>

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. Келдыша
Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к

М.Е. Жуковский, М.Б. Марков, С.В. Подоляко

**О подготовке данных для моделирования
переноса фотонов и электронов**

Москва — 2023

М.Е. Жуковский, М.Б. Марков, С.В. Подоляко

О подготовке данных для моделирования переноса фотонов и электронов

Рассмотрены столкновения, которые испытывают фотоны и электроны с энергиями 100 эВ – 1 ГэВ при переносе в веществе: фотопоглощение, комптоновское и когерентное рассеяние фотонов, образование ими электрон-позитронных пар; упругое рассеяние электронов, ударная ионизация, тормозное излучение и возбуждение атомов среды. Представлен метод единого представления данных о сечениях в виде таблиц вероятностных распределений, аргументом которых является равномерно распределенная от нуля до единицы случайная величина. Таблицы используются математическими моделями переноса излучения для моделирования поглощения и рассеяния фотонов и электронов.

Ключевые слова: сечение, фотон, электрон, столкновение, рассеяние, энергия, импульс, случайная величина, распределение, вероятность

М.Е. Zhukovsiy, М.В. Markov, S.V. Podolyako

On the preparation of data for modeling of the photons and electrons transport

Collisions experienced by photons and electrons with energies of 100 eV - 1 GeV during transport in matter are considered: photoabsorption, Compton and coherent scattering of photons, the formation of electron-positron pairs by them; elastic scattering of electrons, impact ionization, bremsstrahlung and excitation of atoms of the medium. The method is presented for a unified presentation of cross-sectional data in the form of tables of probability distributions, the argument of which is always a random variable uniformly distributed from zero to one. Tables are used by mathematical models of radiation transfer to model the absorption and scattering of photons and electrons.

Key words: cross-section, photon, electron, collision, scattering, energy, momentum, random variable, distribution, probability

Содержание

Введение.....	3
1 Общий подход к построению таблиц.....	4
2 Взаимодействие фотонов с веществом	9
3 Взаимодействие электронов с веществом	14
4 Заключение	23
Библиографический список.....	23

Введение

Моделирование совместного переноса фотонов и электронов актуально как для исследований природных явлений, так и для важных технических приложений. Примерами являются атмосферные каскадные ливни космических частиц [1] и воздействие радиационных поясов Земли на космические аппараты [2].

Одним из средств, предназначенных для моделирования фотонов и электронов, является комплекс программ «Радиационное и ЭлектроМагнитное Поле» (РЭМП), разработанный в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН [3]. Комплекс обеспечивает моделирование распространения фотонов и электронов в сложной рассеивающей среде путем решения уравнения переноса в различных постановках. Рассеяние частиц моделируется в модели индивидуальных столкновений [4]. Для нестационарных постановок задач реализован статистический метод частиц [5].

Оба варианта подразумевают прямое моделирование отдельных столкновений частиц. Для этого обрабатываются данные по сечениям рассеяния частиц на атомах и молекулах. Одной из проблем, с которой приходится сталкиваться при использовании сечений рассеяния, являются различия в их представлении. Все полные и дифференциальные сечения рассеяния зависят от энергии падающей частицы. Дифференциальное сечение упругого рассеяния электронов, например, зависит, помимо этого, только от угла рассеяния. Использование дифференциального сечения некогерентного рассеяния фотонов в моделях переноса подразумевает задание энергий и углов рассеянного фотона и комптоновского электрона. Прямое использование для этого данных разнородных константных систем связано с проблемами различий в масштабах используемых величин, что влечет потерю либо превышение точности.

Единое представление сечений рассеяния обеспечивает Программа Расчета Вероятностных Распределений «Таблица» (ПРВР «Таблица»), включенная в состав комплекса РЭМП. Программа «Таблица» ставит в соответствие значению случайной величины, равномерно распределенной от нуля до единицы, угол вылета или энергию рассеянной частицы, а также коэффициент ее поглощения относительно данного процесса рассеяния. Для этого Программа предварительно обрабатывает имеющиеся данные о сечениях и трансформирует их в вероятностные распределения, аргументом которых всегда является равномерно распределенная от нуля до единицы случайная величина. Следует отметить, что доступные данные о сечениях могут иметь совершенно различные представления. В большинстве случаев это табличное представление в различных единицах измерения. Встречаются формульные представления, эмпирические зависимости, зависящие от параметров, и т.д.

В процессе моделирования программа решения уравнения переноса разыгрывает указанную случайную величину, программа «Таблица» интер-

полирует для полученного значения величину характеристики частицы и возвращает для выполнения дальнейшего расчета.

Данная работа представляет описание основного подхода к построению вероятностных распределений. Рассмотрены столкновительные процессы, актуальные для фотонов и электронов с энергиями 100 эВ – 1 ГэВ. Показано, как строятся вероятностные распределения на основе их сечений.

1 Общий подход к построению таблиц

Столкновительное взаимодействие частицы с веществом приводит к изменению ее импульса. Это изменение рассматривается как случайное событие. Возможно появление новых частиц. Вероятности взаимодействий различных типов пропорциональны пути dl , который проходит частица в материале, и микроскопическим сечениям σ_v , где v обозначает тип взаимодействия. Единицей измерения микроскопического сечения является 1 барн = 10^{24} см².

Если n – концентрация атомов вещества, то величины $\mu_v = n \cdot \sigma_v$ называются макроскопическими сечениями. Они определяют вероятность реализации соответствующих процессов на единице длины пути частицы, а их сумма, называемая полным макроскопическим сечением взаимодействия, – $\mu = \sum_v \mu_v$.

Вероятность того, что длина пробега частицы до первого столкновения (длина свободного пробега) превысит l , будет равна $P(l) = \exp\{-\mu l\}$. Величину μ также называют линейным коэффициентом ослабления.

Теория поглощения и рассеяния излучения в веществе для количественного описания столкновений использует следующие величины. Концентрация вычисляется по формуле $n = \rho / (A \cdot 1 \text{ а.е.м.})$, где ρ – плотность вещества, A – атомная масса, 1 а.е.м. = $1,660\,539\,066\,60(50) \cdot 10^{-24}$ г. Тогда $\mu = n \cdot \sigma(\text{барн}) = \rho \cdot \sigma(\text{барн}) / (A \cdot 1 \text{ а.е.м.})$, $\mu = \rho \cdot \sigma(\text{см}^2) \cdot 10^{-24} / (1,660539066 \cdot 10^{-24} A)$. Окончательно получаем:

$\mu = \rho \cdot \sigma^A (\text{см}^2/\text{г})$, где $\sigma^A(\text{см}^2/\text{г}) = \sigma(\text{см}^2) / (1,660539066 A)$ – массовое сечение.

Величины полных сечений и характер их зависимости от энергии иллюстрируют рисунки 1 и 2.

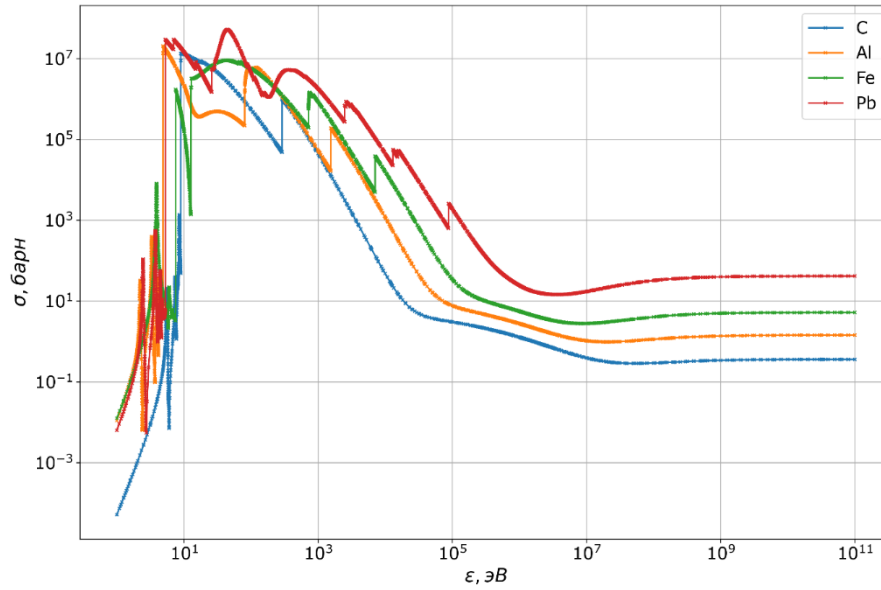


Рис. 1. График зависимости полных микроскопических сечений поглощения фотонов от энергии

Средняя длина свободного пробега будет $\bar{l} = \int_0^t tP(t)dt = 1/\mu$.

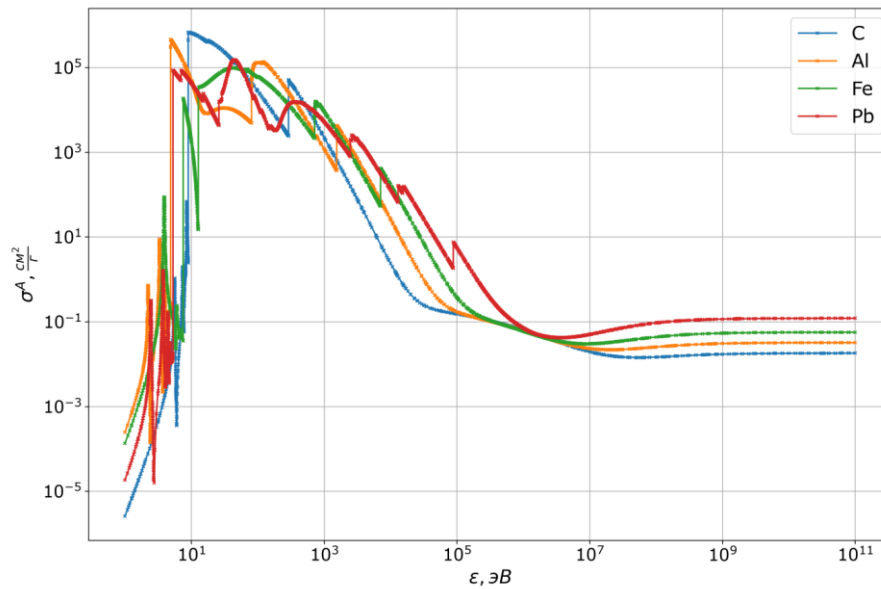


Рис. 2. График зависимости полных массовых сечений поглощения фотонов от энергии

Распределения частиц после взаимодействия описываются дифференциальными по углам и энергии сечениями $\sigma_v(\Omega', \varepsilon' | \Omega, \varepsilon)$. Они выражают вероятности того, что частица с направлением движения Ω и энергией ε на единице длины пути испытает рассеяние в единичный телесный угол около направления Ω' и приобретет энергию из единичного интервала около ε' .

Дифференциальные сечения для некоторых процессов приведены на рисунках 3 и 4.

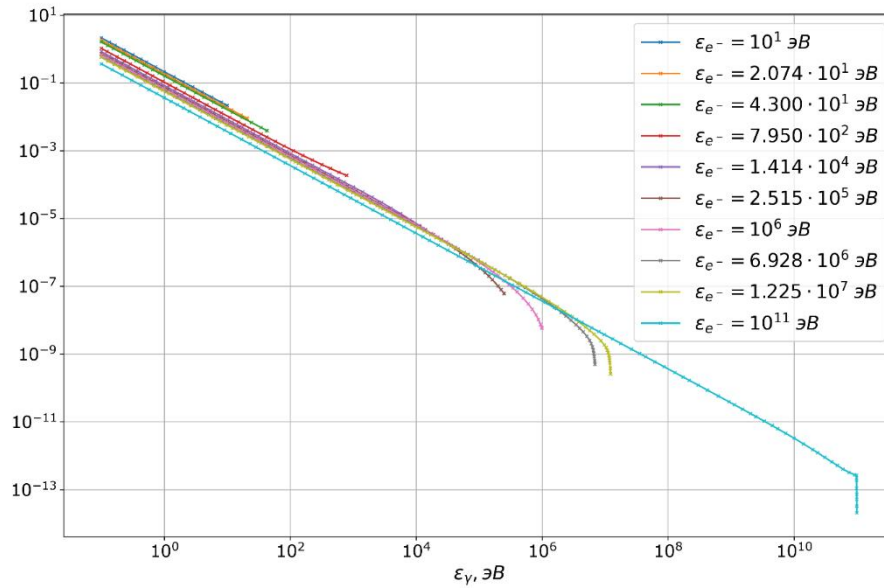


Рис. 3. Дифференциальные сечения энергии тормозного фотона для углерода $\sigma_{brem}(\epsilon_\gamma | \epsilon_e)$

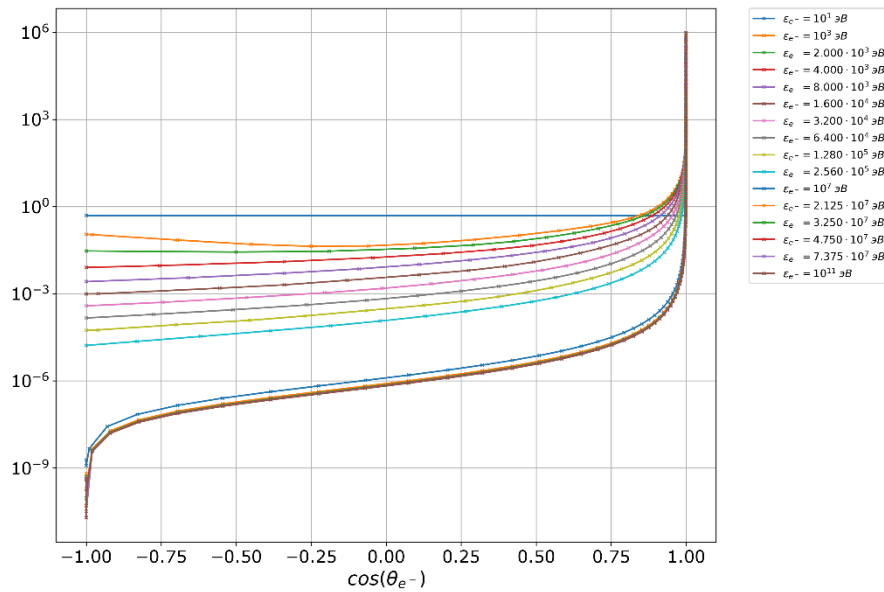


Рис. 4. Дифференциальные сечения для косинуса электрона при упругом рассеянии для железа $\sigma_{el}(\cos \theta | \epsilon_e)$

Алгоритмы, реализованные в комплексе РЭМП, предполагают следующую последовательность стохастического моделирования столкновений: розыгрыш точки и типа взаимодействия на основе их полных сечений и розыгрыш импульса частицы после взаимодействия [6, 7].

Розыгрыш точки следующего взаимодействия частицы определяется решением уравнения

$$-\ln \xi = \sum_{k=1}^n l_k + \mu_{n+1}(\varepsilon_0)(r - r_{n+1}), \quad (1)$$

где n – номер слоя, в котором произойдёт взаимодействие, r – координата точки взаимодействия внутри слоя, $l_k = \mu_k(\varepsilon_0)(r_{k+1} - r_k)$ – оптическая толщина k -го слоя для частицы с энергией ε_0 , r_k – точки пересечения траектории частицы с оболочками, μ_k – полные макроскопические сечения рассеяния частицы в веществе k -ого слоя, $\xi \in (0, 1)$ – равномерно распределенная случайная величина.

Следующим этапом является розыгрыш типа взаимодействия. Пусть рассматривается N типов взаимодействий с сечениями σ_i . Тогда полное сечение является суммой $\sigma_{all}(\varepsilon_0) = \sum_{i=1}^N \sigma_i(\varepsilon_0)$. Вычислим величину $p_k = \sum_{i=1}^k \sigma_i / \sigma_{all}$ и составим последовательность из N интервалов: $0, p_1, \dots, p_i, \dots, p_N = 1$. При попадании случайного числа $\xi \in (0, 1)$ в i -й интервал выбирается i -й тип взаимодействия.

После определения точки и типа разыгрывается само взаимодействие. Пусть фотон с энергией ε_γ испытывает когерентное рассеяние. В этом случае разыгрывается только новое направление движение фотона, а его энергия не изменяется. Для этого разыгрывается случайное число $\xi \in (0, 1)$ и находится новый косинус полярного угла частицы путём билинейной интерполяции функции $\cos \theta_\gamma^* = F_{Rel}^{-1}(\xi^* | \varepsilon_\gamma)$, где $F_{Rel}(\cos \theta_\gamma | \varepsilon_\gamma)$ – функция распределения косинуса полярного угла от энергии. В случае комптоновского рассеяния фотона разыгрывается косинус угла с использованием функции $\cos \theta_\gamma = F_{Comp}^{-1}(\xi | \varepsilon_\gamma)$, где $F_{Comp}(\cos \theta | \varepsilon_\gamma)$ – функция распределения косинуса полярного угла при комптоновском рассеянии. Далее по известной формуле вычисляются энергия рассеянного фотона и импульс комптоновского электрона. Если рассматривается тормозное рассеяние электрона, то энергия рождённого фотона разыгрывается путём билинейной интерполяции табличной функции $\varepsilon_\gamma = F_{Brem}^{-1}(\xi | \varepsilon_e)$, где $F_{Brem}(\varepsilon_\gamma | \varepsilon_e)$ – функция распределения энергии тормозного фотона от энергии электрона, ε_e – энергия электрона. Косинус угла рождённого фотона находится путём розыгрыша с использованием табличной функции $\cos \theta_\gamma = F_{Brem}^{-1}(\xi | \varepsilon_e)$, поскольку косинус угла и энергия тормозного фотона не связаны законом сохранения.

Сведения о сечениях процессов взаимодействия частиц с веществом обычно доступны как результаты экспериментов, оформленные в виде табличных данных, или как формулы. Основным источником для получения сечений и дифференциальных сечений является база данных

<https://www-nds.iaea.org/> IAEA Nuclear Data Services (Секция Ядерных Проблем МАГАТЭ).

Функции массового коэффициента ослабления σ^A , табличные функции распределения $F^{-1}(\xi | \nu)$, основанные на соответствующих дифференциальных сечениях процессов, подготавливаются предварительно. Сечения обрабатываются программой построения вероятностных распределений и поступают в вычислительные модули РЭМП в виде табличных данных, заданных на равномерной сетке.

Пусть x – значение величины τ , характеризующей состояние частицы. Если известна плотность распределения $f(x)$ (probability distribution function (PDF) – в англоязычной литературе) этой величины в данном физическом процессе, то распределение этой величины $F(x)$ (cumulative distribution function (CDF) – в англоязычной литературе) определяется интегралом $F(x) = \int_{-\infty}^x f(t) dt$. Величина $F(x)$ есть вероятность того, что значение τ будет меньше x : $F(x) = P(\tau < x)$.

Моделирование (разыгрывание) случайной величины ξ осуществляется методом «обратной функции» [8]: если $\xi \in (0,1)$ – равномерно распределенная случайная величина, а значения x случайной величины ξ удовлетворяют уравнению

$$\int_{-\infty}^x f(t) dt = \xi, \quad \xi \in (0,1), \quad (2)$$

то ξ имеет плотность распределения $f(x)$. Следовательно, x вычисляется как значения функции, обратной к $F(x)$: $x = F^{-1}(\xi)$.

Таким образом, для получения путем розыгрыша случайной величины характеристик частиц после взаимодействия используется уравнение (2). Среднее значение $\bar{x}$ вычисляется с помощью интеграла $\bar{x} = \int_0^1 F^{-1}(\xi) d\xi$.

Погрешность распределений зависит от точности исходных данных о сечениях и должна оцениваться с учетом дискретизации соответствующих областей фазового пространства, точности интегрирования в левой части уравнения и вычисления значений обратной функции $F^{-1}(\xi | \nu)$.

Очевидно, что эффективность использования табличных распределений зависит от способа получения значений в «промежуточных» точках, то есть в точках двумерной области (ξ, x) , не совпадающих с узлами таблиц. Наиболее простым способом с прогнозируемой погрешностью является линейная (билинейная) интерполяция. Поэтому естественным представляется табулировать функции от искомым распределений, которые изменяются в соответствующих областях фазового пространства по закону, близкому к линейному. Это достигается анализом функциональных зависимостей сечений процессов. В качестве независимой переменной при табуляции следует выбирать величину, которая позволяет пользоваться равномерными сетками. Степень дискретизации при этом определяется, с одной

стороны, минимизацией погрешности табличных данных, а с другой – минимизацией объема таблиц.

Рассмотрим в качестве первого примера угловое распределение фотоэлектронов, образующихся при фотоионизации атомов рассеивающей среды. Распределение описывается следующим дифференциальным сечением [12]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \alpha^4 r_e^2 \left(\frac{Z}{\epsilon} \right)^5 \frac{\beta^3}{g} \frac{1-\nu^2}{(1-\beta\nu)^4} \left[1 + \frac{1}{2} g(g-1)(g-2)(1-\beta\nu) \right], \quad (3)$$

где $\epsilon = \varepsilon/m_e c^2$, $g = 1 + \epsilon$; $\beta = \sqrt{\epsilon(\epsilon+2)}/(\epsilon+1)$; $\nu = \cos\theta$, ε – энергия фотоэлектрона, θ – угол между направлениями движения падающего фотона и фотоэлектрона, α – постоянная тонкой структуры, m_e – масса электрона, c – скорость света.

Рассмотрим сетки по энергии $\{\varepsilon_i\}_{i=1}^I : \varepsilon_{\min} = \varepsilon_1 < \dots < \varepsilon_i < \dots < \varepsilon_I = \varepsilon_{\max}$ и случайному числу $\{\xi_j\}_{j=1}^J : 0 = \xi_1 < \dots < \xi_j < \dots < \xi_J = 1$. Вероятностные распределения строятся в следующей последовательности. Для каждого значения энергии ε_i выбирается сетка $\{\nu_k\}_{k=1}^K : -1 = \nu_1 < \dots < \nu_k < \dots < \nu_K = 1$, обеспечивающая приемлемую точность задания сечения. Вычисляются выражения

$$f_{i,j}(\nu_j | \varepsilon_i) = \frac{1-\nu_j^2}{(1-\beta_i \nu_j)^4} \left[1 + \frac{1}{2} g_i(g_i-1)(g_i-2)(1-\beta_i \nu_j) \right], \quad (4)$$

проводится численное кумулятивное интегрирование:

$$F_{i,j}(\nu_j | \varepsilon_i) = \int_{\nu_0=-1}^{\nu_j} f_i^j(t | \varepsilon_i) dt. \quad (5)$$

Результат интегрирования нормируется на единицу путем деления $F_{i,k}$ на $F_{i,K}$. Путём интерполяции на заданную сетку $\{\xi_j\}_{j=1}^J$ вычисляется функция $\nu = F^{-1}(\xi | \varepsilon)$.

2 Взаимодействие фотонов с веществом

Фотоны с энергиями 100 эВ – 1 ГэВ испытывают при рассеянии в веществе когерентное и комптоновское (некогерентное) рассеяние и фотопоглощение, а также рожают электрон-позитронные пары. При когерентном рассеянии энергия фотона сохраняется, изменяется направление его движения. Комптоновское рассеяние приводит к появлению свободного электрона, уменьшению энергии и угловому рассеянию фотона. Фотопоглоще-

ние состоит в ионизации атома путем возбуждения и отрыва электрона с атомной оболочки. В поле ядра или атомарного электрона может образоваться электрон-позитронная пара. Во всех случаях предполагается, что рассеяние и поглощения фотонов не приводит к разрушению молекулярных связей. Поэтому молекулярные сечения вычисляются как взвешенная сумма соответствующих атомных сечений.

Дифференциальное по углу сечение **рэлеевского рассеяния** описывается формулой [14]:

$$\frac{\partial \sigma_R}{\partial \cos \theta} = T(\cos \theta) C^2(Z, \nu), \quad T(\cos \theta) = 0.5 \cdot r_e^2 \cdot (1 + \cos^2 \theta), \quad (6)$$

где $T(\cos \theta)$ – классическое сечение Томпсона когерентного рассеяния на свободном покоящемся электроне, θ – угол рассеяния r_e – классический радиус электрона; $C(Z, \nu)$ – атомный форм-фактор [14], $\nu = k\epsilon\sqrt{1 - \cos \theta}$ – параметр, имеющий размерность, обратную длине; $k = \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{m_e c^2}{hc} = 29,1445 \text{ см}^{-1}$; Z – атомный номер; ϵ – энергия фотона, m_e – масса электрона, c – скорость света, $\epsilon = \epsilon / m_e c^2$.

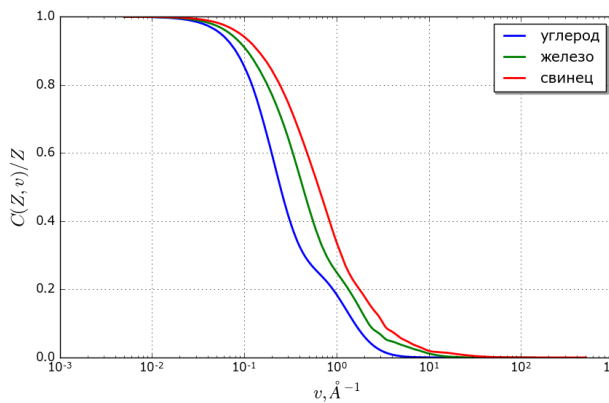


Рис. 5. График функции $C(Z, \nu)/Z$ для некоторых химических элементов

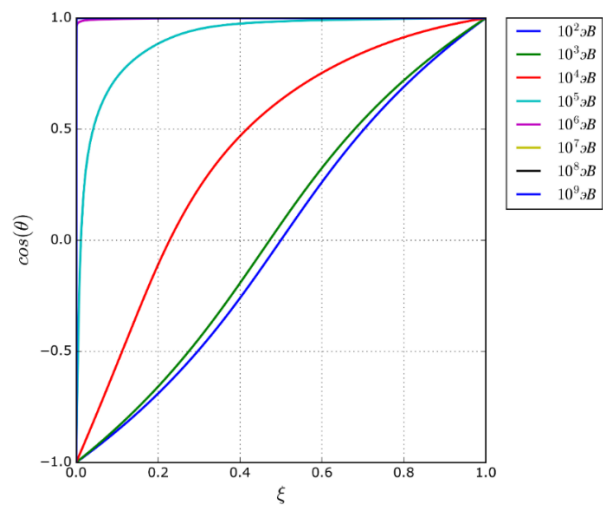


Рис. 6. Распределение фотонов по косинусу угла когерентного рассеяния в кремнии

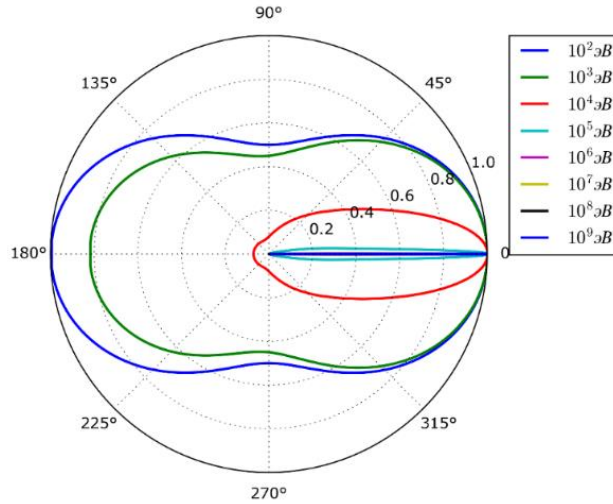


Рис. 7. Нормированная индикатриса когерентного рассеяния фотонов в кремнии

График функции $C(Z, \nu)$ для некоторых элементов приведен на Рис. 5.

Соотношение (6) справедливо для квантов, энергия которых значительно превышает энергию K -оболочки атома. При низких энергиях используется «аномальный» фактор рассеяния [14]. Однако при энергиях фотона, когда аномальный эффект становится существенным, вероятность когерентного рассеяния мала по сравнению с вероятностью фотопоглощения. Поэтому соотношение (6) является вполне удовлетворительным.

На основе уравнения (6) построена таблица $\cos \theta = T(\xi | \varepsilon)$ распределения угла когерентного рассеяния (Рис. 6). Сечение рэлеевского рассеяния уменьшается с увеличением энергии кванта излучения как $1/\varepsilon^2$ [15]. Поэтому сетка по энергии построенной таблицы выбиралась равномерной по переменной $s = \lg(\varepsilon/mc^2)$. Рис. 7 иллюстрирует индикатрису когерентного рассеяния в кремнии.

Моделирование **комптоновского рассеяния** требует энергетического или углового распределения фотонов после столкновения. Дифференциальное сечение этого процесса определяется формулой

$$\frac{\partial \sigma_c}{\partial \cos \theta} = I(Z, \nu) K(\varepsilon, \cos \theta),$$

$$K(\varepsilon, \cos \theta) = \pi r_0^2 \left(\frac{\varepsilon'}{\varepsilon} \right)^2 \left[\frac{\varepsilon'}{\varepsilon} + \frac{\varepsilon}{\varepsilon'} + \cos^2 \theta - 1 \right], \quad (7)$$

где $K(\varepsilon, \cos \theta)$ – сечение Кляйна-Нишины, $I(Z, \nu)$ – функция рассеяния [16, 17], которая модифицирует сечение Кляйна-Нишины при малых энергиях и больших Z .

В случае рассеяния на свободном покоящемся электроне энергия фотона после рассеяния вычисляется по формуле $\varepsilon' = \frac{\varepsilon}{1 + \varepsilon(1 - \cos \theta)}$.

На Рис. 8 приведен график зависимости функции рассеяния $I(Z, \nu) / Z$ для алюминия.

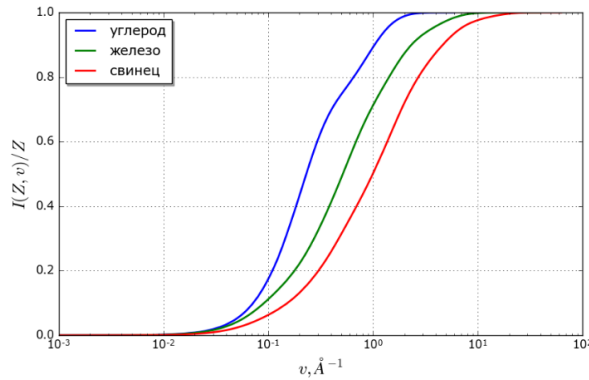


Рис. 8. График функции рассеяния для некоторых элементов

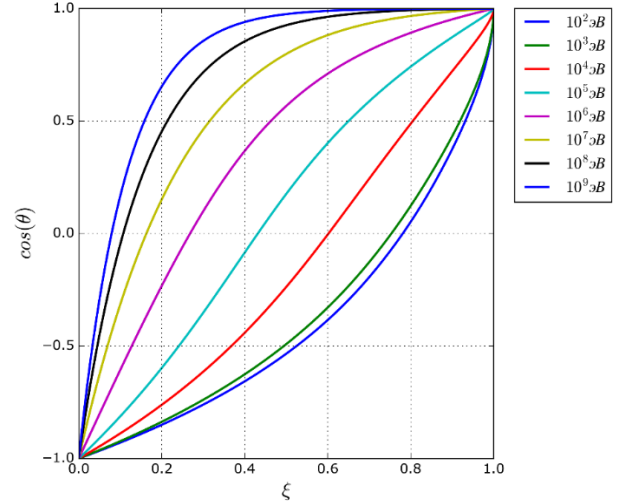


Рис. 9. Распределение угла комптоновского рассеяния в алюминии

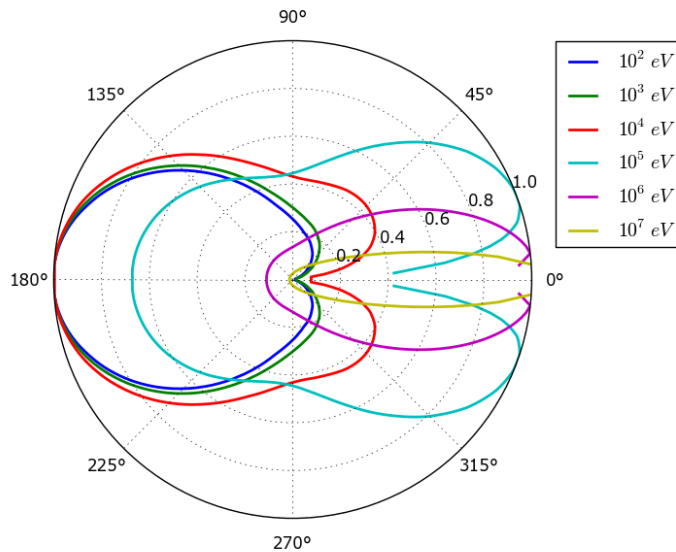


Рис. 10. Индикатриса некогерентного рассеяния фотонов в алюминии

Распределение косинуса угла комптоновского рассеяния в алюминии показано на рисунке 9. Оно построено с помощью модели (7) и формулы (5). Индикатриса некогерентного рассеяния для различных энергий фотонов изображена на рисунке 10. Использованы данные базы [10].

Формулы (7) для энергий фотона порядка или ниже энергии связи атомных электронов не применимы. Однако при малых энергиях вероятность некогерентного рассеяния мала не только по сравнению с вероятностями фотопоглощения и когерентного рассеяния. Поэтому приближение (7) вполне удовлетворительно.

Отметим, что при больших энергиях функция рассеяния $I(Z, \nu)$ стремится к Z , а при малых энергиях убывает как ε^n , $n > 3$ [16, 17]. Поэтому при построении распределений для косинуса угла рассеяния сетка по энергии выбиралась равномерной по переменной $s = \lg(\varepsilon)$. Энергия, полярный и азимутальный угол электрона вычисляются по формулам $\varepsilon_{e^-} = \varepsilon_\gamma - \varepsilon'_\gamma$,

$$\cos \theta_{e^-} = (\varepsilon_\gamma - \varepsilon'_\gamma \cdot \cos \theta_\gamma) / \sqrt{\varepsilon_\gamma^2 + \varepsilon'^2_\gamma - 2\varepsilon_\gamma \varepsilon'_\gamma \cos \theta_\gamma}, \quad \phi_{e^-} = \pi + \phi_\gamma.$$

При **фотоэффекте** возбужденный электрон покидает атом с энергией $\varepsilon - U_i$, где U_i – энергия связи i -й оболочки атома. Сечения фотопоглощения получены путем обработки данных из библиотеки The Livermore Evaluated Photon Data Library (EPDL97, [12, 18]). Сечение фотопоглощения обратно пропорционально n -й степени энергии фотона: $\sigma \sim \varepsilon^{-n}$, $n > 1$ [19]. Поэтому при построении таблицы сечений фотоэффекта сетка по энергии выбиралась равномерной по переменной $s = \lg(\varepsilon)$. Дифференциальное сечение фотопоглощения определяется формулой (3) [12].

Графики табулированных значений функции $\cos \theta_e(\xi)$ для алюминия приведены на рисунке 11, а индикатриса угла вылета фотоэлектрона на рисунке 12.

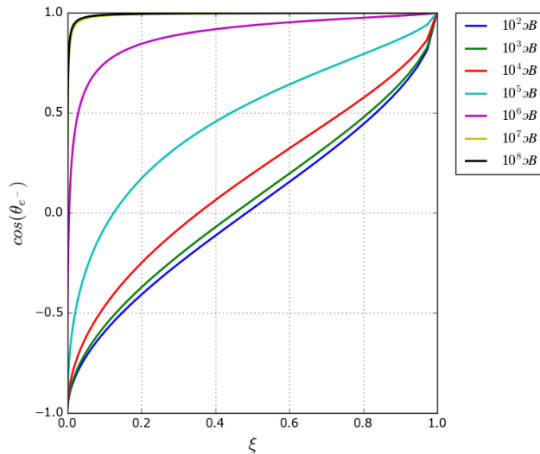


Рис. 11. Вероятностные распределения $\cos \theta$ для фотоэлектронов

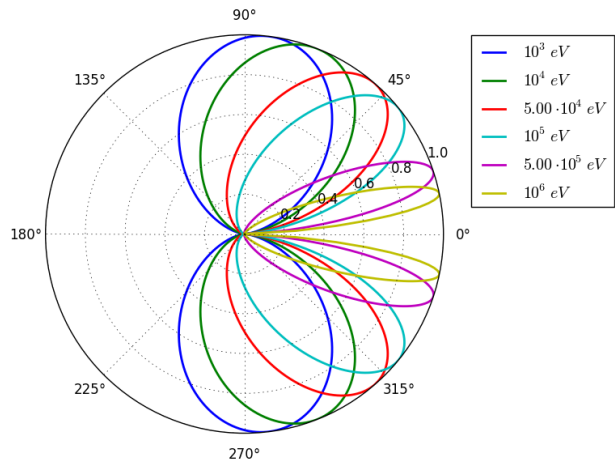


Рис. 12. Индикатрисы вылета фотоэлектронов для различных энергий

Если энергия фотона превышает удвоенную массу покоя электрона $\varepsilon_\gamma > 2m_e c^2$, то в поле ядра может произойти **рождение электрон-позитронной пары**. Полное сечение этого процесса табулировано в [9, 10]. Моделирование рождения пар проводится аналогично [12].

На Рис. 13 показаны энергетические распределения позитронов, рождающихся в паре с электроном.

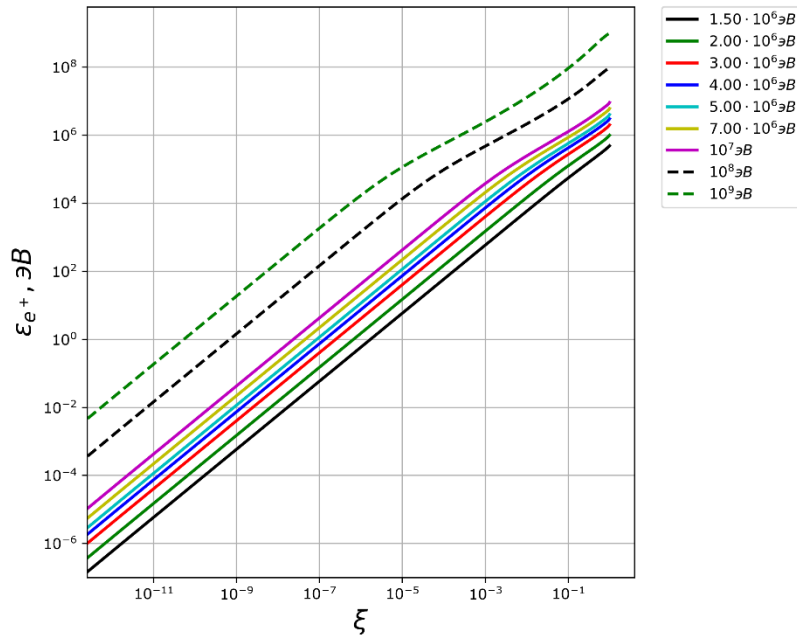


Рис. 13. Вероятностные энергетические распределения позитронов, рождающихся в паре с электроном в алюминии

Полярные углы вылета позитрона и электрона разыгрываются следующим образом [12]:

$$\cos \theta_{e^{\pm}} = \frac{2\xi - 1 + \beta_{\pm}}{(2\xi - 1)\beta_{\pm} + 1}, \quad \xi \in (0,1), \quad \beta_{\pm} = \frac{\sqrt{\epsilon_{\pm}(\epsilon_{\pm} + 2)}}{\epsilon_{\pm} + 1}, \quad \epsilon_{\pm} = \frac{\varepsilon_{\pm}}{m_e c^2}.$$

3 Взаимодействие электронов с веществом

Если взаимодействие нейтральных частиц характеризуется относительно редкими локализованными столкновениями, то перенос электронов происходит в присутствии дальнедействующих кулоновских сил, приводящих к огромному числу взаимодействий. Фотон с начальной энергией 0,5 МэВ теряет при движении в алюминии около 90% своей энергии в результате примерно 10 столкновений. Электрон с такой начальной энергией замедляется, теряя 90% кинетической энергии, претерпевая около 10^5 индивидуальных взаимодействий.

К основным процессам взаимодействия электронов с веществом относятся упругое рассеяние на атомах вещества, приводящее к отклонению электрона от первоначального направления движения; возбуждение и ударная ионизация атомов; радиационное торможение в кулоновском поле атома с генерацией фотона тормозного излучения.

Табулированные данные для сечений этих процессов представлены в базе данных National Nuclear Data Center, [9. 10].

Взаимодействие электронов с веществом описывают полное σ_{el} и дифференциальное по углу $d\sigma_{el}/d\cos\theta$ сечения упругого рассеяния; полное σ_{ion} и дифференциальное по переданной энергии $d\sigma_{ion}/d\varepsilon$ сечения ударной ионизации; полное σ_{br} и дифференциальное по переданной энергии $d\sigma_{br}/d\varepsilon$ сечения тормозного излучения; полное σ_{ex} сечение возбуждения атома и средние потери энергии $\Delta\varepsilon_{ex}$.

Сечения всех рассматриваемых процессов обратно пропорциональны некоторой степени энергии электрона $\sigma_v \sim \varepsilon^a$, $a \leq -1$. Удобно использовать отношение сечения к атомной массе σ_v/A . Поэтому для моделирования рассеяния электронов используется функция $F_v = \lg(\sigma_v/A)$.

Функция распределения угла **упругого рассеяния** строится с использованием данных для плотности распределения:

$$f_{el}(y|E) = \frac{1}{\sigma_{el}^0} \frac{d\sigma_{el}}{dy}, \quad \sigma_{el}^0 = \int_{-1}^1 \frac{d\sigma_{el}}{dy} dy.$$

Для качественного анализа распределения используется формула Резерфорда для дифференциального сечения упругого рассеяния: $d\sigma/d\mu \sim \varepsilon^{-2}(1-\mu)^{-2}$. Проводя интегрирование $\int_{-1}^y (d\sigma/dt) dt$ и решая уравнение (6), получим, что $\mu \sim \varepsilon^2 \xi - 1$ при $\xi \rightarrow 0$. Такая зависимость не позволяет использовать одну и ту же равномерную сетку по ξ для всех энергий электрона. В то же время $\lg(1+\mu) \sim \lg \varepsilon^2 + \lg \xi$. Тогда сетка по величине $\lg(\xi)$ может быть выбрана единой всех энергий электрона, поскольку производная $d \lg(1+y)/d \lg \xi$ не зависит от энергии.

Величиной, удобной для моделирования процесса упругого рассеяния электронов, является функция $F_{el}(\mu) \equiv \lg(1+\mu) = F(\lg \xi)$. Использование этой функции позволяет строить равномерные по $\lg(\xi)$ сетки независимо от энергии электрона. Путем обработки табулированных в ENDF значений величины $d\sigma_{el}/dy$ получены соответствующие распределения $F_{el}(\lg \xi)$.

На Рис. 14 изображены графики зависимости F_{el} от значений логарифма равномерно распределенной случайной величины $\xi \in (0,1)$ для алюминия и железа.

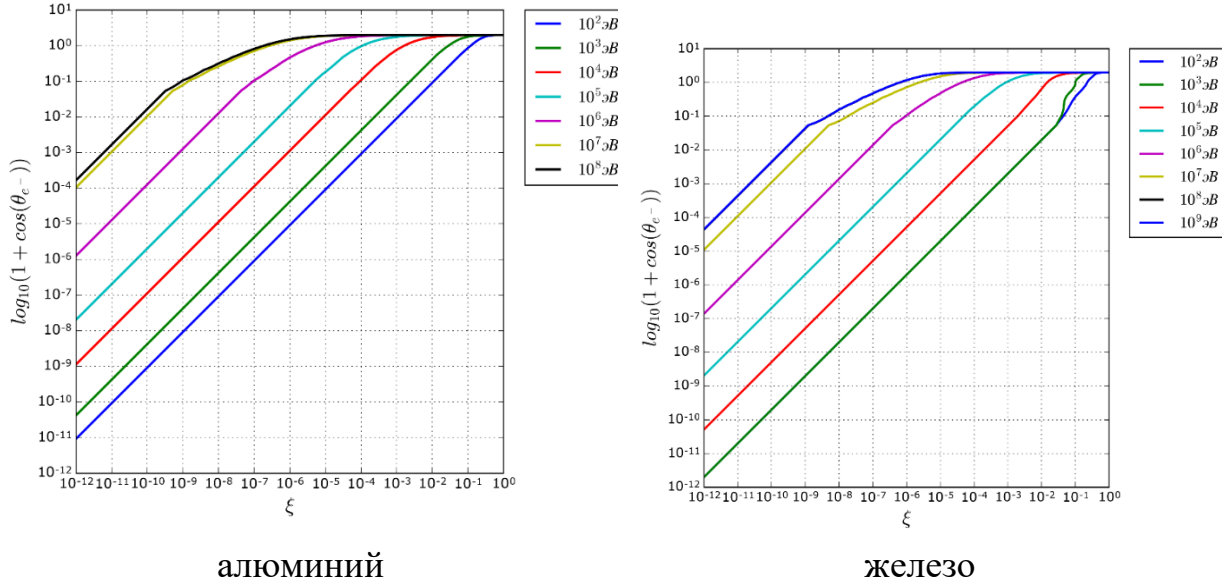


Рис. 14. Вероятностные распределения угла упругого рассеяния электрона

Заметим, что характер зависимости некоторых из рассматриваемых распределений от ξ обуславливает выбор в качестве независимой переменной $\lg(\xi)$. В этом случае при розыгрыше соответствующих случайных величин можно использовать равномерную сетку по независимой переменной. При этом минимальное значение ξ выбирается заведомо меньше величины N_ξ^{-1} , где N_ξ — максимальная длина отрезка последовательности случайных (псевдослучайных) чисел, используемого в процессе моделирования.

Дифференциальное по энергии фотона сечение **тормозного излучения** обратно пропорционально энергии фотона [21, 22]: $d\sigma_{br}/d\varepsilon_\gamma \sim 1/\varepsilon_\gamma$. Проводя соответствующие преобразования, получим: $\lg(\varepsilon_\gamma) \sim \xi$. Поэтому тормозное излучение удобно моделировать с помощью функции $F_{br} = \lg \varepsilon_\gamma$. На Рис. 15 представлен график этой функции для вольфрама.

Плотность распределения полярного угла вылета тормозного фотона получена в [23] и аппроксимирована в [24, 25] следующей формулой:

$$p(u) = C [\exp\{-au\} + ud \exp\{-3au\}], \quad u \in (0, u_{\max}),$$

где $a = 5/8$, $d = 27$, $u = \theta\varepsilon/mc^2$, $u_{\max} = \pi\varepsilon_\gamma/mc^2$.

Распределение азимутального угла изотропно: $\varphi = 2\pi\xi$.

На Рис. 16 изображено вероятностное распределение угла тормозного фотона. На 17 представлена индикатриса вылета тормозного фотона.

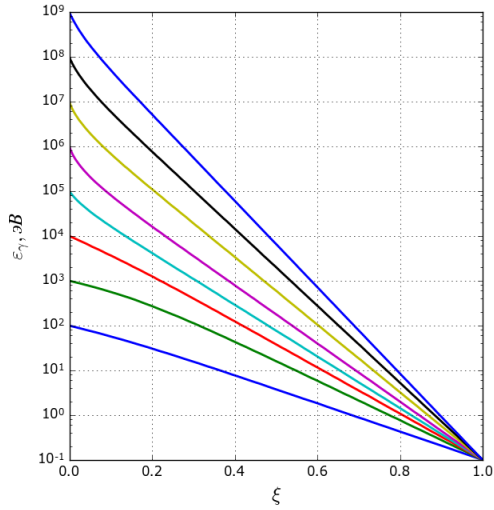


Рис. 15. Вероятностные распределения энергии тормозного фотона в вольфраме

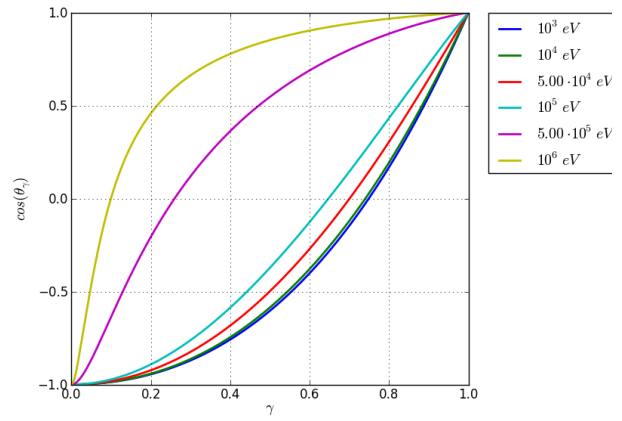


Рис. 16. Вероятностные распределения угла вылета тормозного фотона

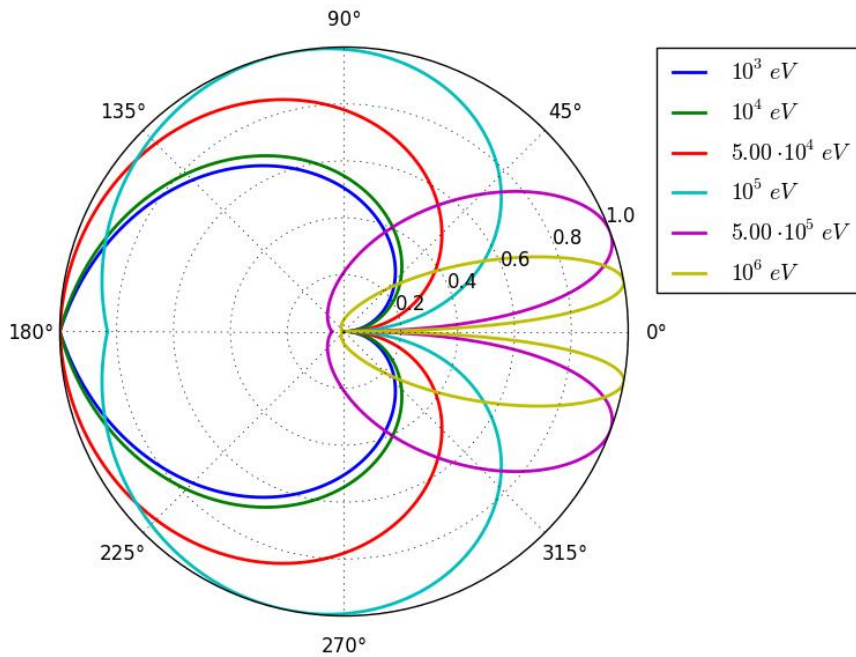


Рис. 17. Индикатриса вылета тормозного гамма-кванта

Процесс **аннигиляции позитрона с электроном** может сопровождаться рождением двух и более фотонов. Однако наиболее вероятным является процесс двухфотонной аннигиляции. Сечение этого процесса описывается формулой [12]:

$$\sigma = \frac{Z\pi r_e^2}{(k+1)} \left(\frac{(k^2 + 4k + 1) \ln(k + \sqrt{k^2 - 1})}{k^2 - 1} - \frac{k + 3}{\sqrt{k^2 - 1}} \right), \quad k = \frac{\varepsilon_+ + mc^2}{mc^2},$$

где ε_+ – кинетическая энергия позитрона.

Дифференциальное по энергии фотона сечение аннигиляции имеет вид [12]:

$$\frac{d\sigma}{dw} = \frac{Z\pi r_e^2}{(k-1)w} \left((k+1)^2 + 2k - w(k+1)^2 - \frac{1}{w} \right), \quad w = \frac{\varepsilon_\gamma}{\varepsilon_+ + 2mc^2}.$$

Из законов сохранения следует, что величина w может изменяться в пределах от $w_{\min} = \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{\frac{\varepsilon_+}{\varepsilon_+ + 2m_e c^2}} \right)$ до $w_{\max} = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{\frac{\varepsilon_+}{\varepsilon_+ + 2m_e c^2}} \right)$.

18 иллюстрирует распределения энергий фотона при двухфотонной аннигиляции позитрона. Энергия второго фотона определяется из закона сохранения.

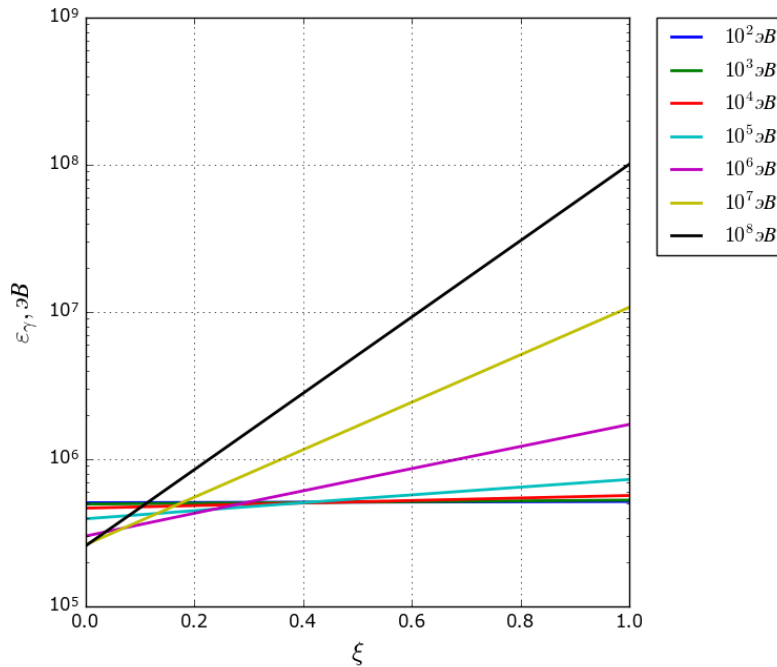


Рис. 18. Вероятностные распределения энергии фотона при двухфотонной аннигиляции позитрона

Направление движения фотонов определяется по формуле [12]:

$$\cos(\theta) = \frac{w(k+1) - 1}{w\sqrt{k^2 - 1}}.$$

Азимутальный угол разыгрывается из равномерного распределения.

Ударная ионизация состоит в отрыве атомарного электрона с его оболочки и переводе в непрерывный спектр. Энергия рассеивающегося электрона затрачивается на ионизацию оболочки и энергии двух рассеянных электронов. Стоит отметить, что электрон не может «выбить» электрон с оболочки, если его энергия меньше энергии связи на этой оболочке.

Условно после такого взаимодействия электрон с большей энергией считается первичным, или рассеянным, а с меньшей – вторичным, или

электроном отдачи. Средняя энергия связи для оболочек атома, или сколько налетающий электрон тратит энергии на «срыв» вторичного электрона с оболочки:

$$\varepsilon_{ion}^b(\varepsilon_0) = \sum_{j=1}^{N_{sh}} U_j \cdot \sigma_{ion}^j(\varepsilon_0) / \sum_{j=1}^{N_{sh}} \sigma_{ion}^j(\varepsilon_0), \quad (8)$$

где $\sigma_{ion}^j(\varepsilon_0)$ – сечение ионизации на j -й оболочке; N_{sh} – число оболочек атома, U_j – энергия связи атомарного электрона на j -й оболочке; ε_0 – энергия первичного электрона, $\varepsilon_{ion}^b(\varepsilon_0)$ – средние потери энергии на ионизацию.

Плотность распределения переданной вторичному электрону энергии определяется по следующей формуле:

$$f_j^{sec}(\varepsilon | \varepsilon_0) = \sigma_{ion}^j(\varepsilon_0) \sigma_{ion}^j(\varepsilon | \varepsilon_0) / \sum_{i=1}^{N_{sh}} \sigma_{ion}^i(\varepsilon_0), \quad (9)$$

где $\sigma_{ion}^j(\varepsilon | \varepsilon_0)$ – дифференциальное сечение, описывающее распределение энергии вторичного электрона на j -ой оболочке. Переданная вторичному электрону энергия может изменяться от 0 до $(\varepsilon_0 - U_j)/2$. Суммируя (8) и (9), получим распределение потерянной энергии первичным электроном:

$$\varepsilon_{ion}^{loss}(\varepsilon | \varepsilon_0) = \varepsilon_{ion}^b(\varepsilon_0) + f_j^{sec}(\varepsilon | \varepsilon_0). \quad (10)$$

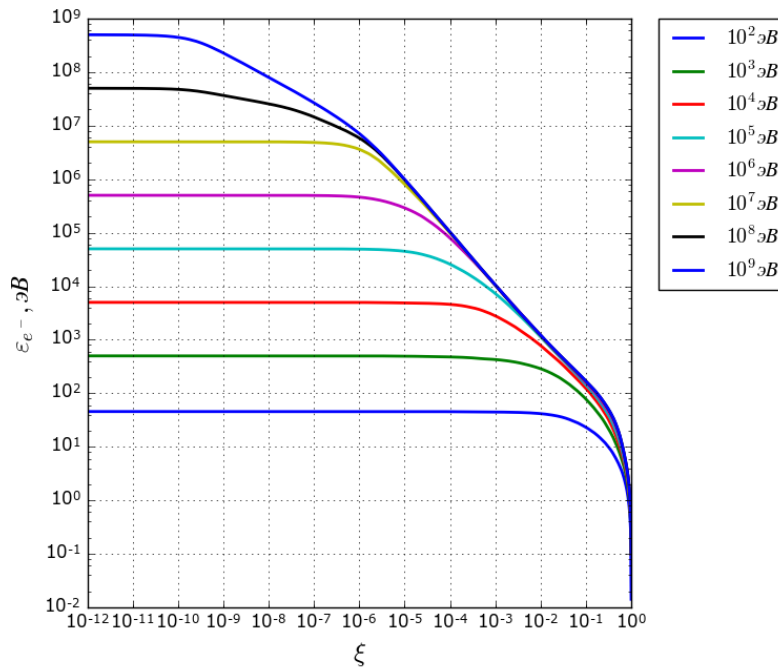


Рис. 19. Распределение энергии вторичного электрона после ионизации атома алюминия

С помощью (9) построены распределения энергии вторичного электрона.

Отметим, что дифференциальное сечение ионизации обратно пропорционально квадрату переданной вторичному электрону энергии [26]. Проведя соответствующие вычисления, получим, что уравнение (9) принимает вид: $1/\varepsilon \sim \xi$. Отсюда видно, что для моделирования процесса ионизации удобно использовать переменные $\lg \varepsilon$, $\lg \xi$.

На Рис. 19 изображены распределения энергии вторичного электрона при ионизации атома алюминия, то есть ионизационные энергетические потери налетающего электрона за вычетом энергии связи электрона в атоме.

Рассеянный и вторичный электроны разлетаются под углами относительно направления движения налетающего электрона. Пусть p – импульс налетающего электрона. Обозначим p_1 и $\varepsilon_1 = \varepsilon_0 - \varepsilon$ – его импульс и энергию после ионизации. Для первичного электрона $\varepsilon \leq \varepsilon_0/2$. Энергия и импульс вторичного электрона обозначаются $Q = (\varepsilon_0 - \varepsilon_b)$, где ε_b – средняя энергия связи электрона в атоме, и $q = p - p_1$.

Модуль импульса вторичного электрона q можно найти из соотношения $(cq)^2 = Q(Q + 2mc^2)$, где $(cp)^2 = \varepsilon_0(\varepsilon_0 + 2mc^2)$, $(cp_1)^2 = \varepsilon_1(\varepsilon_1 + 2mc^2)$.

Косинусы угла рассеяния первичного и вторичного электронов имеют вид:

$$\cos \theta = \frac{(cp)^2 + (cp_1)^2 - (cq)^2}{2(cp)(cp_1)}, \quad \cos \theta_r = \frac{(cp)^2 + (cq)^2 - (cp_1)^2}{2(cp)(cq)}.$$

Азимутальный угол направления движения одного из электронов (например, первичного) разыгрывается из равномерного распределения $\varphi = 2\pi\xi$, $\xi \in (0,1)$, а для другого вычисляется как $\varphi_r = \pi + \varphi$.

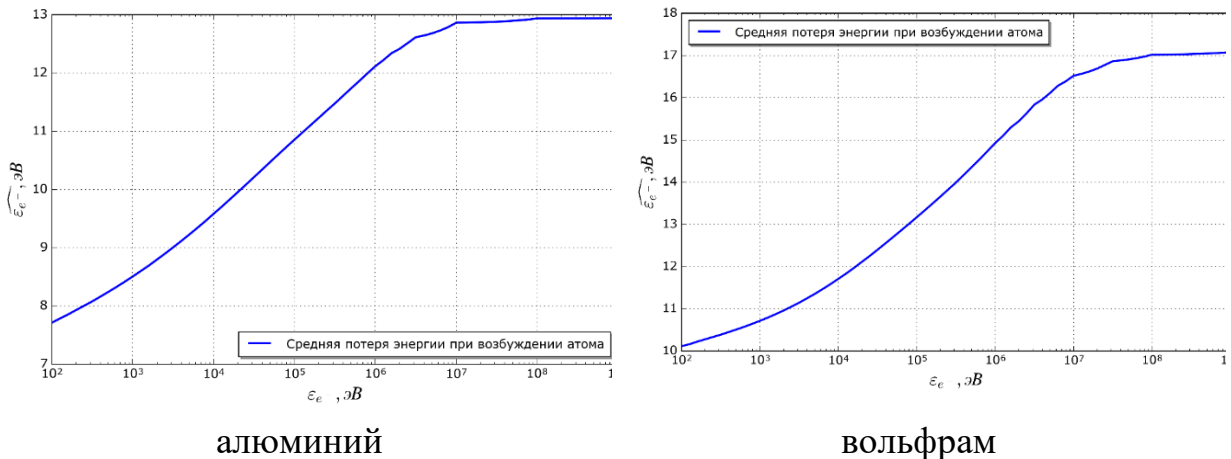


Рис. 20. Средние потери энергии электроном на возбуждение атома

Потери энергии на **возбуждение** учитываются в среднем. В базе <http://www.nndc.bnl.gov/> приведены значения потерь энергии на возбуждение. На приведены графики средних потерь энергии электрона на возбуждение атомов алюминия и вольфрама.

Качество построенных распределений проверено сравнением с данными о коэффициентах поглощения фотонов и тормозной способности электронов Национального института стандартов и технологий США (NIST) ESTAR database и [27].

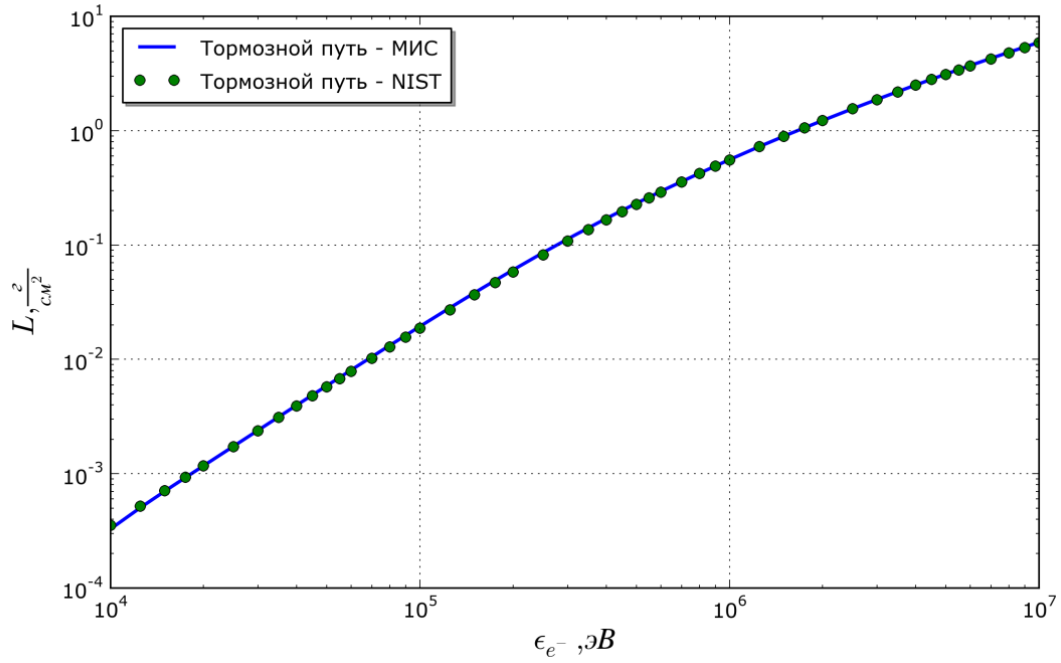


Рис. 21. Тормозной путь электронов в алюминии

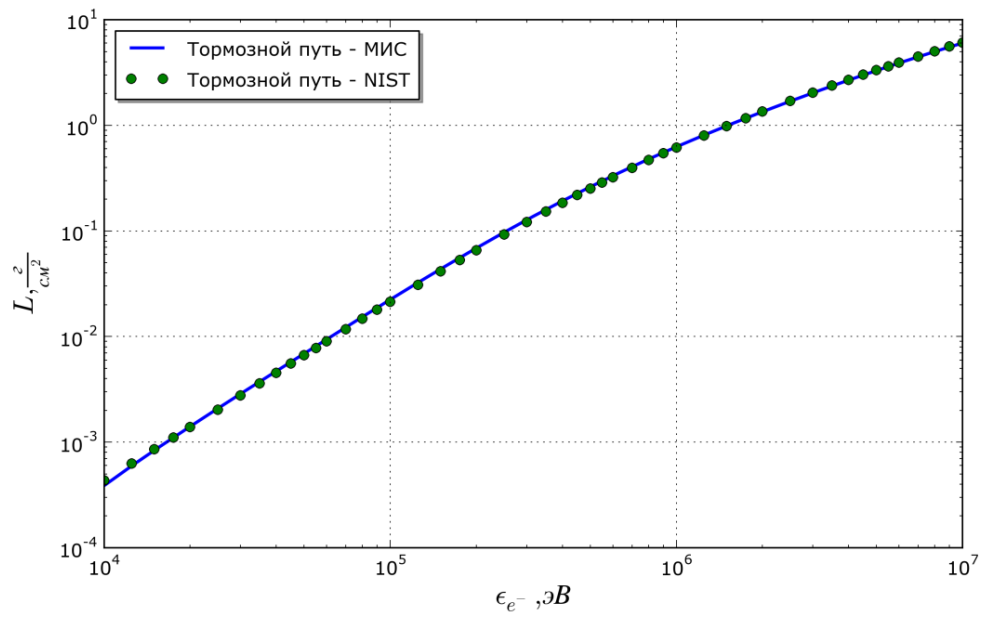


Рис. 22. Тормозной путь электронов в железе

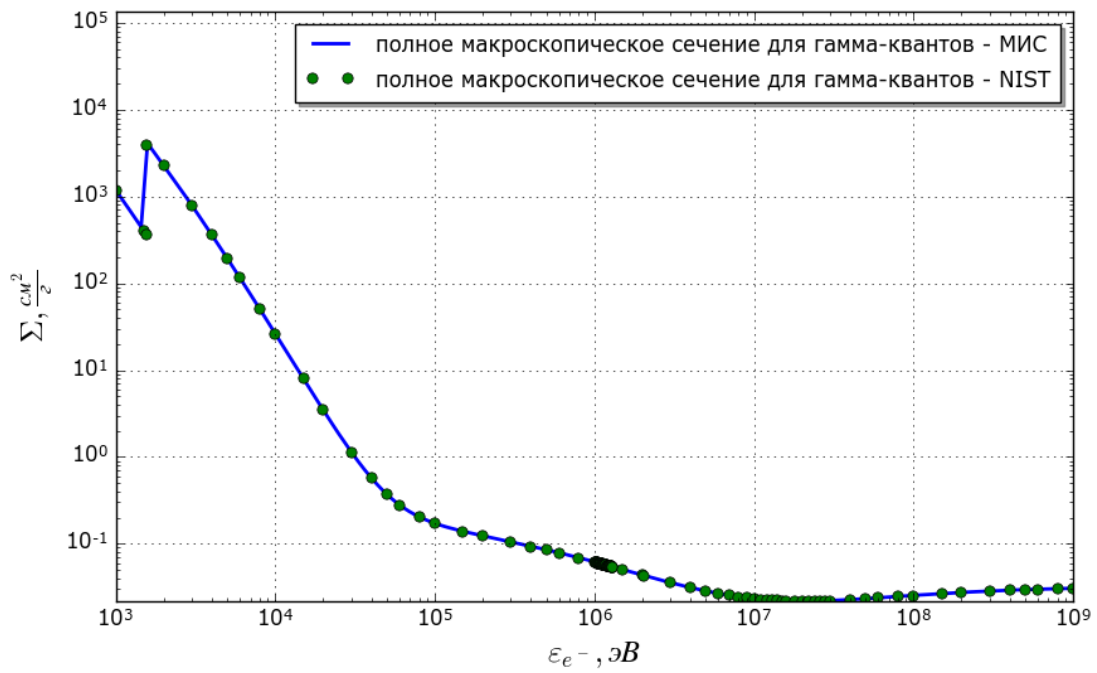


Рис. 23. Полное макроскопическое сечение поглощения фотонов в алюминии

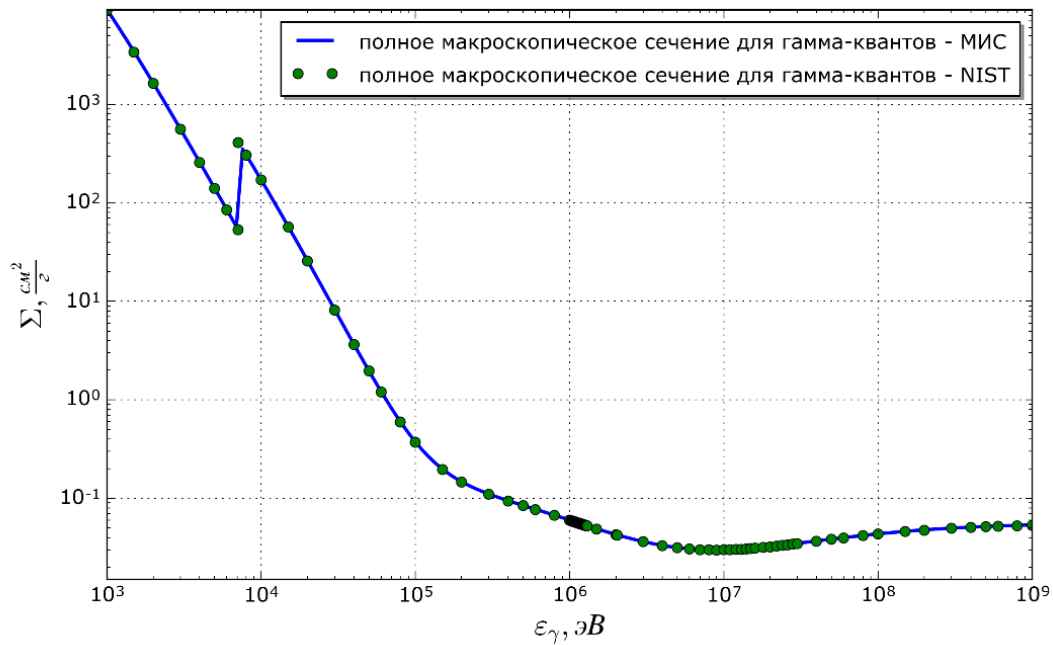


Рис. 24. Полное макроскопическое сечение поглощения фотонов в железе

На – 24 сплошной линией изображены результаты, полученные в рамках разработанной модели, а кружками отмечены данные из базы NIST.

4 Заключение

Разработан метод расчета вероятностных распределений коэффициентов поглощения фотонов и электронов при столкновениях в веществе, а также импульсов рассеянных частиц. Распределения строятся путем обработки верифицированных данных по сечениям соответствующих столкновительных процессов. Таблицы вероятностных распределений предназначены для детального моделирования процессов рассеяния и поглощения излучения.

Библиографический список

1. Гинзбург В.Л., Сыроватский С.И. Происхождение космических лучей, М.: АН СССР, 1963
2. Watkin's G. Radiation Damage in Semiconductors. N. Y.: Academic Press, 1965.
3. Марков М.Б., Березин А.В., Воронцов А.С. и др. Библиотека функций для вычисления параметров радиационных и электромагнитных полей / Свидетельство о государственной регистрации программы №2012660589. 23.11.2012.
4. Жуковский М.Е., Подоляко С.В., Усков Р.В. Модель индивидуальных соударений для описания переноса электронов в веществе // Математическое моделирование. 2011. т. 23, № 6, с. 147–160.
5. Berezin A.V. et al. Particle method for electrons in scattering medium // Mathematical Models and Computer Simulations. 2015. V. 55. №9. P. 1534-1546.
6. Березин А.В., Марков М.Б., Паротькин С.В. О методе частиц для электронов в неоднородной рассеивающей среде // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2021. Т. 61, № 9, стр. 1545-1555. DOI: 10.31857/S0044466921090064
7. Кольчужкин А.М., Учайкин В.В. Введение в теорию прохождения частиц через вещество. – М.: Атомиздат, 1978.
8. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973, 312 с.
9. <https://www.nndc.bnl.gov/sigma/>
10. <https://www.nndc.bnl.gov/endl-b8.0/download.html>
11. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/ESTAR.html>
12. PENELOPE – 2018: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport // Workshop Proceedings, Barcelona, Spain, 28 January – 1 February 2019.
13. Подоляко С.В., Лукьянова Е.Г. Численное моделирование трансформации рентгеновского излучения в объектах с учетом влияния факторов на угловое распределение фотонов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша РАН, 2004, № 6.
14. Hubbell J. H. and Overbo: «Relativistic Atomic Form Factors and Photon Coherent Scattering Cross Sections» J. Phys. Chem. Ref. Data 8, 69-105, (1979).

15. Baro J., Sempau J., Fernandez-Varea J.M. and Salvat F. @Analytical cross sections for Monte-Carlo simulating transport. // Radiat. Phys. Chem. Vol. 44, P. 531-552, 1994.
16. Hubbell J. H., Veigele W. J., Briggs E. A., Brown R. T., Cromer D. T. and Howerton R. J.: «Atomic Form Factors, Incoherent Scattering Functions, and Photon Scattering Cross Sections». J. Phys. Chem. Ref. Data 4, 471-538 (1975); erratum in 6, 615-616 (1977).
17. Grodstein G. W. X-Ray Attenuation Coefficients from 10 keV to 100 MeV // National, Bureau of Standards, Circular №583 (1957).
18. Cullen D.E., Hubbell J.H. and Kissel L.D., EPDL97: the Evaluated Photon Data Library, '97 Version, UCRL-50400, Vol. 6, Rev. 5, Lawrence Livermore National Laboratory (1997).
19. Interaction of gamma-radiation with matter. In Alpha-, Beta- and Gamma-ray Spectroscopy: Vol. 1. Edited by Kai Siegbahn. Published by North-Holland Publishing Company, Amsterdam, p. 37, 1965.
20. Berger M.J., Hubbell J.H., Seltzer S.M., Chang J., Coursey J.S., Sukumar R. and Zucker D.S. XCOM: Photon Cross Sections Database. URL: <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/Text/XCOM.html>
21. Seltzer Stephen M. Cross Sections for Bremsstrahlung Production and Electron Impact Ionization, in Monte Carlo Transport of Electrons and Photons, edited by Theodore M. Jenkins, Walter R. Nelson and Alessandro Rindi, (Plenum Press, New York, 1988) 81.
22. Bethe H. A. and Heitler W. On Stopping of Fast Particles and on the Creation of Positive Electrons // Proc. Roy. Soc. (London) A146, (1934) 83.
23. Davies H., Bethe H.A., (1954), Theory of bremsstrahlung and pair production. II. Integral cross section for pair production // Phys. Rev. 93, 788-795.
24. Urban L. in Geant3 writeup, section PHYS-211. Cern Program Library (1993).
25. Tsai Y.S. (1974), Pair production and bremsstrahlung of charged leptons // Rev. Mod. Phys. 46, 815-851.
26. Ландау Л.Д. О потерях энергии быстрыми частицами на ионизацию. – Собр. Трудов. Том 1. М.: «Наука», 1969.
27. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/ESTAR.html>