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

Препринты ИПМ • Препринт № 42 за 2024 г.

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

А.В. Березин, Ю.А. Волков,
Ш.А. Казымов, М.Б. Марков,
И.А. Тараканов

Модель непрерывного рассеяния фотонов в одномерном приближении

Статья доступна по лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Модель непрерывного рассеяния фотонов в одномерном приближении / А.В. Березин [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2024. № 42. 20 с. https://doi.org/10.20948/prepr-2024-42
https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2024-42

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

А.В. Березин, Ю.А. Волков, Ш.А. Казымов,
М.Б. Марков, И.А. Тараканов

Модель непрерывного рассеяния фотонов в одномерном приближении

Москва – 2024

Березин А.В., Волков Ю.А., Казымов Ш.А., Марков М.Б., Тараканов И.А.

Модель непрерывного рассеяния фотонов в одномерном приближении

Рассмотрено рассеяние фотонов в однородной преграде. Представлен алгоритм численного решения одномерного уравнения переноса фотонов в приближении одного столкновения на шаге по пространству. В приближении средних потерь энергии построен алгоритм вычисления плотности тока и энерговыделения электронов отдачи, образующихся при рассеянии фотонов. Эффективность моделей исследована путем сопоставления с результатами полного трехмерного моделирования переноса с прямым моделированием столкновений.

Ключевые слова: фотон, электрон, комптоновское рассеяние, фотоэффект, плотность тока, энерговыделение

Berezin A.V., Volkov Yu., A.Kazymov Sh.A., Markov M.B., Tarakanov I.A.

The model of continuous photon scattering in one-dimensional approximation

The scattering of photons in a homogeneous target is considered. An algorithm for the numerical solution of the one-dimensional photon transport equation in the approximation of one collision at a step in space is presented. In the approximation of average energy losses, an algorithm has been constructed for calculating the current density and energy release of recoil electrons formed during photon scattering. The effectiveness of the models is examined by comparing them with the results of full 3D transport simulations and direct collision simulations.

Key words: photon, electron, compton scattering, photoelectric effect, current density, energy release

Оглавление

Введение 3
1. Постановка задачи 4
2. Перенос фотонов в одномерном приближении 5
3. Приближения для электронов 8
4. Численный алгоритм моделирования непрерывного рассеяния фотонов 12
5. Результаты расчетов 17
Заключение 20
Библиографический список 20

Введение

Рассеяние фотонного проникающего излучения в диэлектрической преграде сопровождается формированием в ее объеме пространственно неоднородного стороннего электрического тока. Исследование электрического тока радиационного происхождения актуально для обеспечения радиационной стойкости электронно-компонентной базы космических аппаратов [1].

Механизм формирования стороннего электрического тока фотонами состоит в следующем. Фотоны испытывают столкновения, в том числе сопровождающиеся образованием в непрерывном спектре быстрых электронов отдачи. Это фотоэффект и комптоновское рассеяние, а также образование электронно-позитронных пар [2]. Если поток фотонов анизотропен, то, в соответствии с законом сохранения импульса, электроны отдачи также имеют выделенное направление движения и формируют электрический ток и электромагнитное поле. Электроны отдачи также испытывают столкновения: упругое рассеяние, возбуждение и ударную ионизацию рассеивающей среды, генерацию тормозного излучения [3,4]. Образуются вторичные электроны низкой энергии и положительно заряженные ионы и вакансии. Они дрейфуют под действием электрического поля, формируя ослабляющий его ток радиационной проводимости. Рекомбинация вторичных носителей заряда снижает радиационную проводимость.

Фотоны с энергиями порядка десяти кэВ при комптоновском рассеянии или фотопоглощении образуют электроны с энергиями того же порядка. В данном диапазоне энергий пробеги фотонов до первого столкновения существенно превосходят тормозной путь электронов [5].

Поля распространяющегося в плотной среде ионизирующего излучения моделируются функциями распределения фотонов $f_\gamma = f_\gamma\left(t,\mathbf{r},\mathbf{p}\right)$ и образующихся при их рассеянии электронов отдачи $f = f\left(t,\mathbf{r},\mathbf{p}\right)$ в фазовом пространстве $\left(\mathbf{r},\mathbf{p}\right) = \mathbb{R}^3_{\mathbf{r}} \times \mathbb{R}^3_{\mathbf{p}}$ координат $\mathbf{r} = \left(x,y,z\right)$ и классических импульсов $\mathbf{p} = \left(p_x, p_y, p_z\right)$. Эти функции в общем случае удовлетворяют уравнениям переноса фотонов и заряженных частиц [6,7]:

$$\frac{\partial f_\gamma}{\partial t} + \mathrm{div}_{\mathbf{r}}\left(c\mathbf{\Omega} f_\gamma\right) + \sigma^t_\gamma c f_\gamma = Q_\gamma\left(t,\mathbf{r},\mathbf{p}\right) + \int d\mathbf{p}'\sigma_{\gamma\gamma}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}'\right) c f_\gamma\left(\mathbf{p}'\right), \tag{1}$$

$$\begin{aligned} &\frac{\partial f}{\partial t} + \mathrm{div}_{\mathbf{r}}\left(\mathbf{v}f\right) + \sigma^t_e v f = \\ &= \int d\mathbf{p}'\sigma_{\gamma e}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}'\right) c f_\gamma\left(\mathbf{p}'\right) + \int d\mathbf{p}'\sigma_{ee}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}'\right) v' f\left(\mathbf{p}'\right), \end{aligned} \tag{2}$$

$$Q\left(t,\mathbf{r},\mathbf{p}\right) \equiv \int d\mathbf{p}'\sigma_{\gamma e}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}'\right) c f_\gamma\left(\mathbf{p}'\right),$$

где σ_γ^t и σ_e^t – полные макроскопические сечения рассеяния кванта и электрона, $\sigma_{\gamma\gamma}(\mathbf{p},\mathbf{p}')$ – дифференциальное макроскопическое сечение рассеяния кванта с образованием кванта, $\sigma_{\gamma e}(\mathbf{p},\mathbf{p}')$ – дифференциальное макроскопическое сечение рассеяния кванта с образованием электрона, $\sigma_{ee}(\mathbf{p},\mathbf{p}')$ – дифференциальное макроскопическое сечение рассеяния электрона с образованием электрона, $\mathbf{p}'$ и $\mathbf{p}$ – импульсы частиц до и после рассеяния соответственно, $\mathbf{j}$ – плотность электрического тока. Внешний источник квантов задается функцией $Q_\gamma = Q_\gamma(t,\mathbf{r},\mathbf{p})$ в правой части уравнения (1).

Авторами данной работы разработаны численные методы решения задач для уравнений (1-2) в полной постановке [8] и с использованием различных приближений. Опыт эксплуатации разработанных программ на доступных суперкомпьютерах свидетельствует о следующем. Использование полной постановки для моделирования физических процессов в реальных технических объектах без использования существенных приближений не представляется возможным. Ограничения связаны с недостатком вычислительных ресурсов. Поэтому в данной работе разработан ряд простых приближенных решений кинетических уравнений. Приближения учитывают основы «точного» метода решения уравнений в полной постановке.

1 Постановка задачи

Численное решение задачи Коши для уравнений (1-2) базируется на статистическом методе частиц [9]. Он основан на рассмотрении функций распределения в пространстве обобщенных функций [8]. Решения представляются в виде конечных сумм, объединяющих фотоны и электроны в «частицы» с одинаковыми значениями координат и импульсов и весами. При таком описании в виде конечной суммы представляется и источник квантов $Q_\gamma = Q_\gamma(t,\mathbf{r},\mathbf{p})$. Столкновения частиц моделируются стохастически методом Монте-Карло на основе данных о сечениях рассеяния и поглощения. Движение частиц между столкновениями моделируются путем разностного решения уравнений движения.

Представим источник квантов виде конечной суммы:

$$Q_\gamma(t,\mathbf{r},\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^{N_0} Q_\gamma^i \delta\left(t - t_0^i\right)\delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0^i\right)\delta\left(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0^i\right), \qquad (3)$$

где $\mathbf{r}_0^i(t)$, $\mathbf{p}_0^i(t)$ – начальные координаты и импульсы фотонов, образовавшихся в моменты времени $t = t_0^i$.

Рассмотрение источников, представимых в виде конечной суммы (3), естественно для практических задач и не ограничивает применимость статистического метода частиц.

Представление источника в виде (3) означает, что в произвольный конечный момент времени функция распределения квантов, вычисляемая в пространстве обобщенных решений, также может быть представлена конечной суммой:

$$f_\gamma(t,\mathbf{r},\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^{N_\gamma(t)} f_\gamma^i \delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_\gamma^i(t)\right)\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_\gamma^i(t)\right). \tag{4}$$

Аналогично может быть представлена и функция распределения электронов:

$$f(t,\mathbf{r},\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^{N(t)} f^i \delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}^i(t)\right)\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}^i(t)\right). \tag{5}$$

В формулах (4,5) функции $\mathbf{r}_\gamma^i(t), \mathbf{p}_\gamma^i(t), \mathbf{r}^i(t), \mathbf{p}^i(t)$ выражают решения уравнений движения фотонов и электронов. Заметим, что пределы суммирования в формулах (3-5) не совпадают, а для функций распределения зависят от времени. Зависимость определяется в том числе количеством столкновений каждой частицы, рассматриваемым в соответствии с методом последовательных поколений [10] при моделировании рассеяния.

Рассмотрим уравнения (1-2) в рамках приближений.

2 Перенос фотонов в одномерном приближении

Пусть фотоны с одинаковым начальным импульсом $\mathbf{p}_\gamma^0 = \left(0,0,p_\gamma\right)$ излучаются в направлении нормали к плоскости $z=0$. Запишем источник в уравнении переноса фотонов в виде:

$$Q_\gamma(t,\mathbf{r},\mathbf{p}) = F(t)\delta(z)\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0^\gamma\right), \tag{6}$$

где $F(t)$ – число фотонов, излучаемое с единицы площади плоскости $z=0$ в единицу времени.

Источник (6) можно рассматривать как один из членов суммы типа (3).

Одномерное уравнение переноса фотонов имеет вид:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial f_\gamma}{\partial t} + c\frac{\partial f_\gamma}{\partial z} + \sigma_\gamma^t c f_\gamma = \\ &= F(t)\delta(z)\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0^\gamma\right) + \int d\mathbf{p}'\left(\sigma_{\gamma\gamma}^r(\mathbf{p},\mathbf{p}') + \sigma_{\gamma\gamma}^c(\mathbf{p},\mathbf{p}')\right) c f_\gamma(\mathbf{p}'), \end{aligned} \tag{7}$$

где $f_\gamma(t,\mathbf{r},\mathbf{p})$ – функция распределения квантов, $\sigma^r_{\gamma\gamma}(\mathbf{p}-\mathbf{p}',\mathbf{p}')$ – дифференциальное сечение рэлеевского рассеяния, $\sigma^c_{\gamma\gamma}(\mathbf{p}-\mathbf{p}',\mathbf{p}')$ – дифференциальное сечение комптоновского рассеяния с образованием рассеянного кванта, $\sigma^t_\gamma = \sigma^t_c + \sigma^t_r + \sigma^t_{ph} = 1/\lambda_c + 1/\lambda_r + 1/\lambda_{ph}$ – полное сечение поглощения фотона с энергией $\varepsilon(p)$; λ_c – длина пробега фотона до первого комптоновского рассеяния; λ_r – длина пробега фотона до первого рэлеевского рассеяния; λ_{ph} – длина пробега фотона относительно фотоэффекта.

Пусть после рассеяния кванты и электроны отдачи приобретают импульсы, равные средним по соответствующему дифференциальному сечению. То есть

$$\sigma^r_{\gamma\gamma}(\mathbf{p},\mathbf{p}') = \sigma^t_r(p')\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}'-\mathbf{p}^r(\mathbf{p}')\right), \text{ где } \mathbf{p}^r(\mathbf{p}') = \frac{1}{\sigma^t_r}\int \mathbf{p}d\mathbf{p}\sigma^r_{\gamma\gamma}(\mathbf{p},\mathbf{p}'),$$

$$\sigma^c_{\gamma\gamma}(\mathbf{p},\mathbf{p}') = \sigma^t_c(p')\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}'-\mathbf{p}^c(\mathbf{p}')\right), \text{ где } \mathbf{p}^c(\mathbf{p}') = \frac{1}{\sigma^t_c}\int \mathbf{p}d\mathbf{p}\sigma^c_{\gamma\gamma}(\mathbf{p},\mathbf{p}').$$

Рассмотрим решение (7) методом последовательных поколений. Решение f^0_γ для нерассеянных квантов имеет вид:

$$f^0_\gamma = \frac{1}{c}F\left(t-\frac{z}{c}\right)\exp\left\{-\sigma^t_\gamma z\right\}\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}^\gamma_0\right). \tag{8}$$

Функция распределения однократно рассеянных квантов подчиняется уравнению:

$$\frac{\partial f^1_\gamma}{\partial z} + \sigma^t_\gamma f^1_\gamma = \frac{1}{c}F\left(t-\frac{z}{c}\right)\times$$
$$\times\exp\left\{-\sigma^t_\gamma z\right\}\left(\sigma^t_r\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}^\gamma_0-\mathbf{p}^r\left(\mathbf{p}^\gamma_0\right)\right)+\sigma^t_c\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}^\gamma_0-\mathbf{p}^c\left(\mathbf{p}^\gamma_0\right)\right)\right).$$

Его решение имеет вид:

$$f^1_\gamma = F\frac{z}{c}\exp\left\{-\sigma^t_\gamma z\right\}\times$$
$$\times\left(\sigma^t_r\left(p^\gamma_0\right)\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}^\gamma_0-\mathbf{p}^r\left(\mathbf{p}^\gamma_0\right)\right)+\sigma^t_c\left(p^\gamma_0\right)\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}^\gamma_0-\mathbf{p}^c\left(\mathbf{p}^\gamma_0\right)\right)\right). \tag{9}$$

Суммируя (8) и (9), получим решение уравнения (7) в приближении однократного рассеяния:

$$\overline{f}_\gamma = \frac{F}{c}\exp\left\{-\sigma_\gamma^t z\right\}\left(\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0^\gamma\right)+\right.$$
$$\left.+\sigma_r^t\left(p_0^\gamma\right)z\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0^\gamma-\mathbf{p}^r\left(\mathbf{p}_0^\gamma\right)\right)+\sigma_c^t\left(p_0^\gamma\right)z\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0^\gamma-\mathbf{p}^c\left(\mathbf{p}_0^\gamma\right)\right)\right). \quad (10)$$

Рассмотрим баланс числа частиц в потоке фотонов, следующий из уравнения (7). Для этого проинтегрируем его по импульсу, считая все сечения независимыми от энергии фотона. Получим уравнение для концентрации фотонов n_γ:

$$\frac{\partial n_\gamma}{\partial t}+c\frac{\partial n_\gamma}{\partial z}+\sigma_\gamma^t c n_\gamma = F(t)\delta(z)+\sigma_r^t c n_\gamma+\sigma_c^t c n_\gamma .$$

Решение задачи Коши для данного уравнения с нулевыми начальными данными имеет вид

$$n_\gamma = \frac{1}{c}F\left(t-\frac{z}{c}\right)\exp\left\{-\sigma_{ph}^t z\right\}. \quad (11)$$

Данная формула отражает очевидный физический факт: комптоновское и когерентное рассеяния не изменяют числа частиц в потоке. Уменьшение концентрации обусловлено только фотопоглощением.

Приближение однократного рассеяния нарушает баланс. Концентрация фотонов, полученная интегрированием по импульсу приближенного решения (10), имеет вид:

$$\overline{n}_\gamma = \frac{F}{c}\exp\left\{-\sigma_\gamma^t z\right\}\left(1+\sigma_r^t\left(p_0^\gamma\right)z+\sigma_c^t\left(p_0^\gamma\right)z\right).$$

Учтем, что приближение однократного столкновения применимо при выполнении условий $\sigma_r^t\left(p_0^\gamma\right)z \ll 1$, $\sigma_c^t\left(p_0^\gamma\right)z \ll 1$, $\sigma_{ph}^t\left(p_0^\gamma\right)z \ll 1$. Заменим приближенно в уравнении (10) $\sigma_r^t\left(p_0^\gamma\right)z+\sigma_c^t\left(p_0^\gamma\right)z$ на $\exp\left(\sigma_r^t+\sigma_c^t\right)z-1$. Получим:

$$\overline{n}_\gamma \approx \frac{F}{c}\exp\left\{-\sigma_\gamma^t z\right\}\exp\left\{\left(\sigma_r^t+\sigma_c^t\right)z\right\} = \frac{F}{c}\exp\left\{-\sigma_{ph}^t z\right\},$$

что совпадает с (11). В дальнейшем используем такую замену при построении численного алгоритма.

3 Приближения для электронов

Следующее приближение следует из соотношения пробегов квантов и электронов. В рассматриваемом диапазоне энергий квантов и электронов отдачи при

их равном значении имеет место соотношение $\lambda \ll \lambda_\gamma$, где λ и λ_γ – длины пробегов электрона и кванта соответственно. Под длиной пробега кванта понимается пробег до первого столкновения. Под длиной пробега электрона понимается его тормозной путь λ^{un} до полной потери энергии за счет ударной ионизации и возбуждения среды и/или транспортный пробег до потери импульса (изотропизации) за счет упругих столкновений λ^{el}. В рассматриваемом диапазоне энергий электронов тормозной путь и транспортный пробег сопоставимы по величине. Приведенные соотношения иллюстрируют данные для углерода единичной плотности [11], приведенные в таблице:

Таблица 1

Энергия, МэВ	**Транспортная длина пробега электрона, см**	**Тормозной путь электрона, см**	**Пробег фотона до столкновения, см**
0.01	0,000308	0,000285	0,42
0.02	0,001125	0,000967	2,28
0.03	0,00225	0,00198	3,9
0.04	0,003735	0,00329	4,82
0.05	0,005625	0,00487	5,34
0.1	0,0189	0,0161	7,42
0.3	0,118125	0,095	9,38
0.5	0,27	0,2	11,47
0.8	0,5625	0,377	14,14
1	0,758025	0,499	15,72

Соотношение $\lambda_e \ll \lambda_\gamma$ означает, что в уравнении (2) главным является интеграл столкновений. Рассеяние электронов превалирует как над переносом, так и над взаимодействием с электромагнитным полем. В таком приближении уравнение (2) принимает вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sigma_e^t v f - \int d\mathbf{p}' \sigma_{ee}(\mathbf{p},\mathbf{p}') v' f(\mathbf{p}') = Q(t,\mathbf{r},\mathbf{p}). \qquad (12)$$

Уравнение (12) справедливо для гомогенной среды, рассеивающие свойства которой не меняются на масштабах пробегов электронов.

Рассмотрим интеграл столкновений в уравнении (12). Учтем специфику неупругого рассеяния электронов высокой энергии. Ударная ионизация атомов такими электронами состоит в передаче им части энергии и импульса атомарному

электрону рассеивающей среды. В результате в непрерывном спектре оказываются два электрона. Электрон с меньшей энергией называют вторичным, с большей – первичным или рассеянным. Сечение ударной ионизации резко убывает с ростом энергии, передаваемой падающим электроном вторичному [3]. Поэтому наиболее вероятны столкновения с малой передачей энергии. В результате электрон, условно называемый рассеянным, немного изменяет свой импульс, вторичный переходит в непрерывный спектр с малой энергией и практически изотропным угловым распределением. Эта особенность лежит в основе соответствующего приближения для интеграла столкновений – малой передачи энергии при ударной ионизации. Аналогично при упругом рассеянии электрона наиболее вероятно отклонение электрона на малый угол. Таким образом, первое столкновение существенно не изменяет ни энергию, ни импульс высокоэнергичного электрона. Для иллюстрации в таблице 2 собраны данные о различных видах пробегов электронов.

Таблица 2 – Длина пробега электрона до первого столкновения в углероде

Энергия электрона, МэВ	**Упругое рассеяние, см**	**Транспортная длина пробега, см**	**Тормозное излучение, см**	**Возбуждение, см**	**Ударная ионизация, см**	**Тормозной путь, см**
0.01	$3{,}2\ 10^{-6}$	0,000308	0,21	$5{,}22\ 10^{-6}$	$2{,}72\ 10^{-6}$	0,000285
0.02	$6{,}3\ 10^{-6}$	0,001125	0,35	$1\ 10^{-5}$	$5\ 10^{-6}$	0,000967
0.03	$8{,}8\ 10^{-6}$	0,00225	0,47	$1{,}5\ 10^{-5}$	$7\ 10^{-6}$	0,00198
0.04	$1{,}1\ 10^{-5}$	0,003735	0,57	$1{,}9\ 10^{-5}$	$8{,}8\ 10^{-6}$	0,00329
0.05	$1{,}4\ 10^{-5}$	0,005625	0,66	$2{,}2\ 10^{-5}$	$1{,}1\ 10^{-5}$	0,00487
0.1	$2{,}6\ 10^{-5}$	0,0189	1,13	$4{,}1\ 10^{-5}$	$1{,}9\ 10^{-5}$	0,0161
0.3	$4{,}9\ 10^{-5}$	0,118125	1,82	$8{,}1\ 10^{-5}$	$3{,}3\ 10^{-5}$	0,095
0.5	$6{,}4\ 10^{-5}$	0,27	2,04	$1\ 10^{-4}$	$4\ 10^{-5}$	0,2
0.8	$7{,}8\ 10^{-5}$	0,5625	2,1	$1{,}2\ 10^{-4}$	$4{,}4\ 10^{-5}$	0,377
1	$8{,}6\ 10^{-5}$	0,758025	2,07	$1{,}3\ 10^{-4}$	$4{,}6\ 10^{-5}$	0,499

Электрон теряет энергию на масштабе тормозного пути, направленный поток электронов становится изотропным на масштабе транспортной длины пробега относительно упругого рассеяния. Значительные изменения как энергии, так и импульса накапливаются в результате большого числа столкновений – более тысячи для электрона с энергией порядка 100 кэВ.

Пусть после рассеяния фотона электрон отдачи приобретает фиксированный импульс. Это, например, может быть импульс, полученный усреднением по соответствующему дифференциальному сечению или в результате стохастического розыгрыша. Применим для моделирования неупругих столкновений приближение малой передачи импульса при ударной ионизации. Будем рассматривать импульс электрона не только в декартовой, но и в сферической системе координат $\mathbf{p}=(p,\chi,\mu)$, где χ — азимутальный угол, μ — косинус полярного угла. Запишем уравнение (12) в следующем виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t}-\frac{1}{p^2}\frac{\partial}{\partial p}\left(p^2\kappa(p)f\right)+\sigma_{el}^{trs}\nu f=q(t,\mathbf{r})\frac{\delta(p-p_0)}{4\pi p^2}\delta(\mu-\mu_0), \qquad (13)$$

где $\sigma_{el}^{trs}(p)$ – транспортное сечение упругого рассеяния электронов, $\kappa(p)$ – тормозная способность электрона, $\mathbf{p}_0=(p_0,\chi_0,\mu_0)$ – начальный импульс электрона, функция $q(t,\mathbf{r})$ определяет пространственно-временное распределение интенсивности генерации электронов при рассеянии фотонов.

Заметим, что под импульсом $\mathbf{p}_0$ может пониматься случайная реализация начального импульса комптоновского или фотоэлектрона.

Уравнение (13) использует приближение малых передач импульса при столкновениях. Упругие столкновения в уравнении (12) рассмотрены в приближении релаксации к изотропному распределению, а неупругие – в приближении непрерывного замедления.

Характеристика уравнения (13) определяется следующим образом [12]:

$$t-t'=\int_p^{p'}\frac{dp''}{\kappa(p'')}.$$

При $t'=0$ $p'=p^*(t,p)$, где величина $p^*(t,p)$ является корнем уравнения

$$t=\int_p^{p^*}dp''/\kappa(p'').$$

Решение уравнения (13) имеет вид

$$p^2\kappa(p)f=\frac{1}{4\pi}\delta(\mu-\mu_0)$$
$$\int_0^t dt'\kappa\left(p'(t,t',p)\right)q(t',\mathbf{r})\delta\left(p'(t,t',p)-p_0\right)\exp\left\{-\int_{t'}^{t}\sigma_{el}^{trs}\nu(p')dt''\right\}. \qquad (14)$$

Рассмотрим зависимость от t' подынтегральной функции в (14) в соответствии с исходными размерами задачи:

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t'}q(t',\mathbf{r}) \ll \frac{\partial}{\partial t'}\kappa\left(p'(t,t',p)\right),\\ &\frac{\partial}{\partial t'}q(t',\mathbf{r}) \ll \frac{\partial}{\partial t'}\exp\left\{-\int_{t'}^{t}\sigma_{el}^{trs}v(p')dt''\right\}.\end{aligned} \tag{15}$$

В соответствии с (15) $q(t',\mathbf{r})$ является медленно меняющейся функцией переменной t' и может быть вынесена за знак интеграла.

Выполним в (14) интегрирование по p'

$$p^2\kappa(p)\,f = \frac{q(t,\mathbf{r})}{4\pi}\delta(\mu-\mu_0)\exp\left\{-\int_{t'}^{t}\sigma_{el}^{trs}v(p')dt''\right\}\times$$
$$\times\Theta\left(p-p_0+\int_0^t\kappa\left(p(t')\right)dt'\right)\Theta(p_0-p).$$

Рассмотрим величину p^*. В соответствии с (14) $p^* = p+\int_0^t\kappa\left(p(t')\right)dt'$. Условие $p-p_0+\int_0^t\kappa\left(p(t')\right)dt'\geq 0$ указывает на следующее обстоятельство. Все электроны образуются с начальным значением импульса p_0. Электрон, образовавшийся в момент времени t, не может иметь импульс, меньший, чем электрон, образовавшийся в момент времени $t=0$. Значение времени $t=t_g$, являющееся корнем уравнения $p_0-\int_0^t\kappa\left(p(t')\right)dt'=0$, есть время жизни электрона с импульсом p_0 относительно неупругого рассеяния. В соответствии с принятыми приближениями это время мало по сравнению с длительностью импульса, и условие $p-p_0+\int_0^t\kappa\left(p(t')\right)dt'\geq 0$ эквивалентно условию $p\geq 0$. Проще говоря, в рамках принятого приближения электрон теряет импульс мгновенно. Тогда

$$\mathbf{j} = q(t,\mathbf{r})\frac{\mathbf{v}_0}{v}\int_0^{\varepsilon_0}\frac{d\varepsilon}{\kappa(\varepsilon)}\exp\left\{-\int_{\varepsilon}^{\varepsilon_0}\frac{\sigma_{el}^{trs}(\varepsilon'')}{\kappa(\varepsilon'')}d\varepsilon''\right\}, \tag{16}$$

где ε – энергия электрона.

Например, если положить $\sigma_{el}^{trs}(\varepsilon'')=\sigma_{el}^{trs}(\varepsilon_0)$, то

$$\mathbf{j} = q(t,\mathbf{r})\frac{\mathbf{v}_0}{v}\frac{1}{\sigma_{el}^{trs}(\varepsilon_0)}\left(1-\exp\left\{-\sigma_{el}^{trs}(\varepsilon_0)\lambda^{un}\right\}\right). \qquad (17)$$

Заметим, что $\lambda^{el} = 1/\sigma_{el}^{trs}$, и получим концентрацию электронов:

$$n = q(t,\mathbf{r})\int_0^{p_0}\frac{dp}{\kappa(p)}. \qquad (18)$$

Величина $\int_0^{p_0} dp/\kappa(p)$ есть время жизни электрона относительно неупругого рассеяния.

Теряемая энергия:

$$w(t,\mathbf{r}) = \int_0^{p_0} dp\varepsilon(p)\frac{\partial}{\partial p}\left(p^2\kappa(p)f^{00}\right) = q(t,\mathbf{r})\varepsilon(p_0). \qquad (19)$$

Результат (19) очевиден. Он гласит, что сколько энергии фотон передает электрону отдачи в точке его возникновения, столько электрон ее и теряет в той же точке и в тот же момент времени.

4 Численный алгоритм моделирования непрерывного рассеяния фотонов

Рассмотрим физико-геометрическую модель объекта, выполненного из материалов с заданными рассеивающими свойствами. Перпендикулярно плоскости XY по направлению оси *z* на объект падает излучение с заданным спектром и мощностью *N* [$1/\text{см}^2\text{с}$]. Геометрическая модель сопряжена с декартовой разностной сеткой. В ячейках сетки рассчитываются энерговыделение и плотность тока электронов отдачи. Рассмотрим одну ячейку декартовой сетки. Разобьем ее по *z* на *M* одинаковых подобластей с шагом *l*. Будем считать, что величина *l* мала по сравнению с длиной пробега фотона относительно любого из столкновительных процессов. На шаге *l* будет моделироваться формирование каскада фотонов в приближении однократного рассеяния. Исходный фотон с энергией ε и долей *N* при прохождении отрезка *l* образует 2 фотона. Первый с энергией ε и долей N_1, второй с измененной энергией (например, за счет комптоновского рассеяния) ε_C и долей N_2.

Для наглядности изложения рассмотрим монолинию фотонов с энергией $\varepsilon_\gamma(p_0^\gamma)$, падающих на объект под углом θ к оси z. При взаимодействии с веществом фотоны рассеиваются, теряя энергию и изменяя направление движения. Учитываются три основных процесса: рэлеевское рассеяние, фотоэффект и комптон-эффект.

Рассмотрим вычисление долей фотонов, испытавших столкновения: N_r – рэлеевское рассеяние, N_{ph} – фотопоглощение, N_c – комптон-эффект:

$$N_r = N\left(1-\exp\left\{-l/\lambda_r\right\}\right). \tag{20}$$

$$N_{ph} = N\left(1-\exp\left\{-l/\lambda_{ph}\right\}\right). \tag{21}$$

$$N_c = N\left(1-\exp\left\{-l/\lambda_c\right\}\right). \tag{22}$$

После вычисления долей определяется величина

$$N_1 = N - N_r - N_{ph} - N_c .$$

Если величина N_1 оказывается отрицательной, то величины N_r, N_{ph} и N_c пропорционально уменьшаются так, чтобы выполнилось условие $N_1 = 0$.

Таким образом, в результате моделирования нерассеянного кванта с энергией ε_γ и долей N на шаге l образуются три кванта:

испытавший рэлеевское рассеяние с энергией ε_γ, долей N_r, летящий под углом θ_γ^r;

испытавший комптоновское рассеяние с энергией ε_γ^c, долей N_c, летящий под углом θ_γ^c;

не испытавший рассеяния с энергией ε_γ, долей N_1, летящий в прежнем направлении.

Кроме того, образуются два электрона:

комптоновский электрон с энергией ε_e^c, долей N_c, летящий под углом θ_e^c;

фотоэлектрон с энергией ε_e^{ph}, долей N_{ph}, летящий под углом θ_e^{ph}.

Для сохранения баланса предполагается, что энергия, не переданная при столкновениях электронам и фотонам, уходит в энерговыделение. Баланс энергии имеет вид:

$$\varepsilon_\gamma N = \varepsilon_\gamma N_r + \varepsilon_\gamma^c N_c + \varepsilon_\gamma N_1 + \varepsilon_e^c N_e^c + \varepsilon_e^{ph} N_e^{ph} + E ,$$

где E – энергия, ушедшая в энерговыделение.

Опыт эксплуатации программы, реализующей рассматриваемый алгоритм, показал следующее. Усреднение угла рассеяния электрона при комптоновском

рассеянии и фотоэффекте для нерассеянных фотонов приводит к значительным погрешностям при вычислении энерговыделения и, особенно, плотности тока.

Поэтому введены дополнительные разбиения по углам вылета (и соответствующей им энергии) электронов и фотонов (последнее – только для Комптон-эффекта). Таким образом, при моделировании двух углов вылета при комптоновском рассеянии образуются:

два комптоновских фотона с энергиями $\varepsilon_{\gamma 1}^{c}$ и $\varepsilon_{\gamma 2}^{c}$, рассеянные под углами $\theta_{\gamma 1}^{c}$ и $\theta_{\gamma 2}^{c}$ с одинаковыми долями, равными $N_c/2$;

два комптоновских электрона с энергиями ε_{e1}^{c} и ε_{e2}^{c}, образующиеся под углами θ_{e1}^{c} и θ_{e2}^{c} с одинаковыми долями, равными $N_c/2$.

Для фотоэлектронов разбиения вводятся аналогично.

Также опыт эксплуатации программы показывает, что для существенного уменьшения погрешности при расчете плотности токов для моделирования комптоновского рассеяния достаточно задать 2-3 угла рассеяния. При фотоэффекте несколько углов вылета необходимо задавать, если нужно учитывать обратный ток электронов, против направления воздействия. Однако, чтобы получить удовлетворительное распределение фотонов высоких энергий по энергии, необходимо задавать большое количество (50-100) углов вылета при всех типах рассеяния. Результаты расчетов, иллюстрирующие эти утверждения, приведены в следующем разделе.

Показано, что учет рэлеевского рассеяния не приводит к существенным изменениям результатов расчета, а лишь замедляет вычисления. Это вывод подтверждается данными о коэффициентах поглощения фотонов за счет рассматриваемых столкновительных эффектов. Моделирование рассеянных фотонов использует метод «спрямленных» траекторий. Фотон, рассеянный на угол θ_γ, движется по направлению z, но его смещение на расстояние l засчитывается по формуле $l' = l/\cos\theta_\gamma$.

Формулы (20-22) принимают вид:

$$N_r = N\left(1-\exp\left\{-l'/\lambda_r\right\}\right);$$

$$N_{ph} = N\left(1-\exp\left\{-l'/\lambda_{ph}\right\}\right);$$

$$N_c = N\left(1-\exp\left\{-l'/\lambda_c\right\}\right).$$

Формула (23) не изменяется.

Каждый из рассеянных фотонов представляет собой целый конус фотонов, имеющих одинаковый средний косинус угла θ_γ с осью z (рисунок 1).

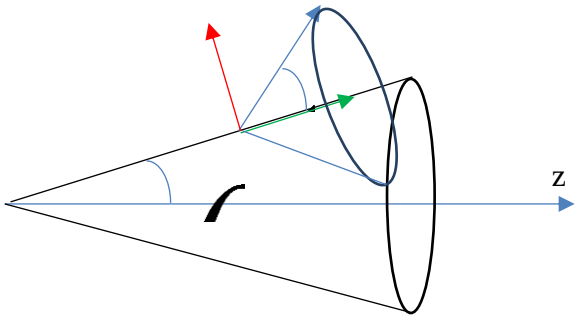

Рис. 1 – Рассеянные фотоны

Поэтому после второго рассеяния угол, равный θ_γ, сохраняется как средний для рассеянных фотонов. Но при втором рассеянии возникает средний угол второго рассеяния $\theta_{\gamma 2}$. Значения $\theta_{\gamma 2}$ зависят от процесса рассеяния. При рэлеевском рассеянии $\theta_{\gamma 2} = \theta_\gamma^r$, при комптон-эффекте $\theta_{\gamma 2} = \theta_\gamma^c$. Повторно рассеянный фотон разбивается на два фотона:

первый с весом, умноженным на $\cos\theta_{\gamma 2}$, продолжает движение по направлению породившего его фотона, образуя угол θ_γ с осью z (зеленый вектор на рисунке 1);

второй с весом, умноженным на $1-\cos\theta_{\gamma 2}$, утрачивает направление (красный вектор на рисунке 1) и далее не моделируется. Его энергия уходит на энерговыделение в данной ячейке.

Аналогичная процедура происходит и с электронами.

Таким образом, в результате моделирования рассеянного кванта с энергией ε_γ, долей N и углом θ_γ с осью z на шаге l образуются три кванта:

испытавший рэлеевское рассеяние с энергией ε_γ, долей $N_r' = N_r \cos\theta_\gamma^r$, летящий под углом θ_γ;

испытавший комптоновское рассеяние с энергией ε_γ^c, долей $N_c' = N_c \cos\theta_\gamma^c$, летящий под углом θ_γ;

не испытавший рассеяния с энергией ε_γ и долей N_1, летящий в прежнем направлении (под углом θ_γ).

Кроме того, образуются два электрона:

комптоновский электрон с энергией ε_e^c, долей $N_e^{c\prime} = N_c \cos\theta_e^c$, летящий под углом θ_γ;

фотоэлектрон с энергией ε_e^{ph}, долей $N_e^{ph\prime} = N_c \cos\theta_e^c$, летящий под углом θ_γ.

Для сохранения баланса вся остальная энергия уходит в энерговыделение. Баланс энергии:

$$\varepsilon_\gamma N = \varepsilon_\gamma N_r{}' + \varepsilon_\gamma^c N_c{}' + \varepsilon_\gamma N_1 + \varepsilon_e^c N_e^{c\prime} + \varepsilon_e^{ph} N_e^{ph\prime} + E,$$

где E – энергия, ушедшая в энерговыделение.

В результате комптоновского рассеяния и фотоэффекта образуются электроны с энергиями ε_e^c и ε_e^{ph} соответственно. Рассмотрим произвольный электрон с энергией ε_0, долей N_0 и углом с осью z, равным θ_e.

Электроны теряют энергию ε за счет неупругого рассеяния. Кроме того, они теряют выделенное направление движения за счет упругого рассеяния. Этот процесс будем моделировать за счет изменения доли N.

Рассмотрим движение электрона на шаге *l*. Его путь на этом шаге будет равен $l' = l/\cos\theta_e$. Энергия электрона будет уменьшаться за счет неупругих взаимодействий. Изменение энергии вычисляется по формуле Бете – Блоха:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_0 - l' \cdot S,$$

где ε_1 – новая энергия электрона, S – тормозная способность вещества.

Если $\varepsilon_1 < 0$, то следует положить $\varepsilon_1 = 0$, т.е. электрон потерял всю энергию.

Доля электрона изменяется за счет неупругого рассеяния:

$$N_1 = N_0\left(1 - \sigma_e^{trs} l'\right),$$

где N_1 – новая доля электрона.

Если $N_1 < 0$, то следует положить $N_1 = 0$, т.е. электрон полностью потерял выделенное направление движения. Для сохранения баланса вся остальная энергия уходит в энерговыделение. Баланс энергии:

$$\varepsilon_0 N_0 = \varepsilon_1 N_1 + E,$$

где E – энергия, ушедшая в энерговыделение.

Рассчитаем плотность мощности энергии, выделяемой в единице объема ячейки $\mathcal{E}$ – энерговыделением:

$$\mathcal{E} = N_\gamma E / \Delta z,$$

где N_γ – исходная мощность потока фотонов [1 / (см^{2}с)] – суммарная энергия, ушедшая в энерговыделение за счет всех эффектов.

Движущийся электрон создает в ячейке плотность тока:

$$j = -eWNz/\Delta z,$$

где N – доля электрона, z – смещение электрона вдоль оси z. При расчете доли электрона использовалась формула $N = (N_0 + N_1)/2$. Если электрон продолжил движение после шага моделирования ($\varepsilon_1 > 0$ и $N_1 > 0$), то смещение $z = l$. Если же электрон потерял всю свою энергию или изотропизовался, то смещение z рассчитывается по формуле:

$$z = \lambda \cos\theta_e,$$

где λ – полное смещение электрона. Эта величина рассчитывается из λ^{el} – транспортной длины пробега и λ^{un} – тормозного пути электрона. Для расчета полного смещения может использоваться одна из двух формул (17):

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda^{un}} + \frac{1}{\lambda^{el}} \text{ или } \lambda = \lambda^{el}\left(1 - \exp\left\{-\lambda^{un}/\lambda^{el}\right\}\right).$$

При достаточно малых l обе эти формулы дают близкий результат.

5 Результаты расчетов

Рассмотрим расчеты, выполненные в рамках разработанных одномерных моделей, и сравним их результаты с полученными статистическими методами путем суперкомпьютерных расчетов с помощью программного комплекса РЭМП. Результаты применения этого комплекса рассматриваются в качестве эталона – точного решения кинетических уравнений для фотонов и электронов. Исследуется сходимость функционалов решения – электрического тока электронов, энерговыделения и потоков фотонов, к точным решениям. При исследовании сходимости варьируются пространственное разбиение ячейки сетки, аппроксимация дифференциального по углу сечения образования электронов отдачи при комптоновском рассеянии и фотопоглощении – количество моделируемых углов. Выбрано два типа структуры рассеивающей среды: макромасштабная и гетерогенная. Рассматривалось рассеяние фотонов с энергиями 20 кэВ и 1.5 МэВ. Если специально не оговорено, то все результаты расчетов приведены к единичному падающему потоку фотонов 1 1/см^2.

В качестве макромасштабного объекта взята двухслойная геометрическая модель.

Целью расчетов является определение оптимальных параметров расчетов для разных энергий падающих фотонов и типов моделируемых объектов.

Рассмотрим рассеяние фотонов с энергией 20 кэВ. Результаты расчетов энерговыделения и потока электронов показали, что достаточно выбрать разбиение 5×10^{-5} см, аппроксимировать угловое распределение фотоэлектронов четырьмя значениями углов. Результаты расчетов не зависят от количества моделируемых углов комптоновских электронов. Это ожидаемо, поскольку комптоновское рассеяние фотонов с энергией 20 кэВ маловероятно. При полученных

параметрах расчетов сравнение их результатов с полной моделью РЭМП показало удовлетворительное совпадение (рисунок 2).

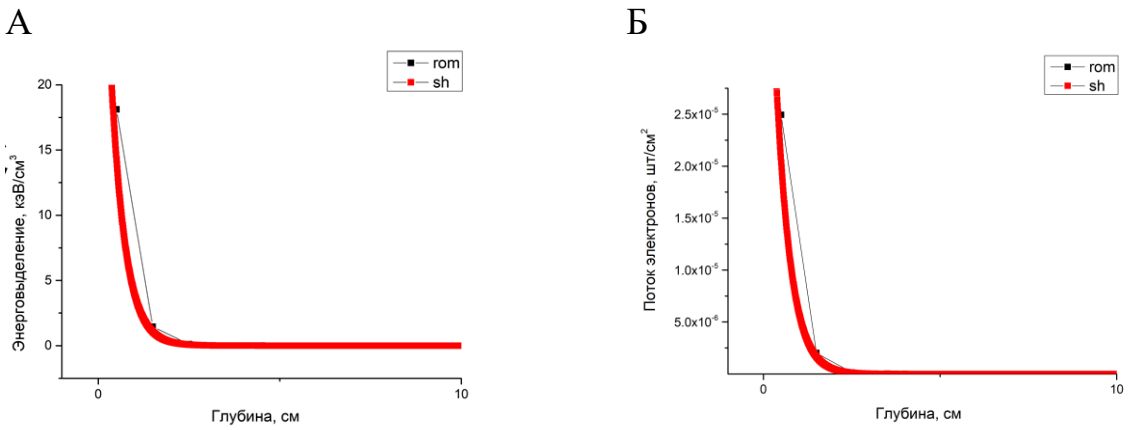

Рис. 2 – Сравнение энерговыделения (а) и потока электронов (б), рассчитанных по разработанному алгоритму (sh) и программе РЭМП (rom)

На рисунке 3 представлено сравнение результатов для потока фотонов.

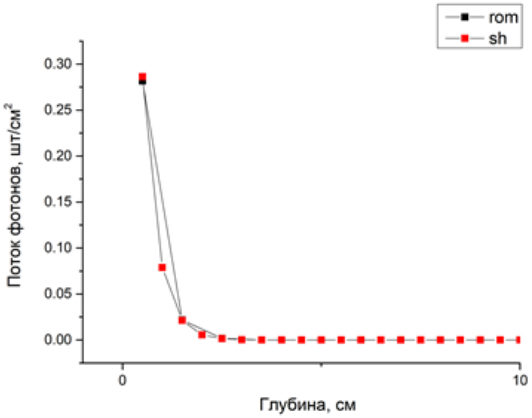

Рис. 3 – Сравнение потока фотонов, рассчитанного по разработанному алгоритму (sh) и программе РЭМП (rom)

Рассмотрим поток фотонов с энергией 1.5 МэВ. Результаты расчетов энерговыделения и потока электронов показали, что достаточно выбрать разбиение 0.01 см и 3 значения угла для комптоновских электронов. Результаты ожидаемо не зависят от количества моделируемых углов фотоэлектронов. Фотоэлектроны фотонами с энергией 1.5 МэВ практически не генерируются.

Кроме разбиения ячейки разностной сетки на результаты влияет и размер самой ячейки сетки. На рисунке 4 приведено сравнение результатов расчетов EnTok и РЭМП при оптимальном выборе параметров (разбиение 0.01 см, количество углов комптоновских электронов 3, количество углов фотоэлектронов 1). Ширина ячейки разностной сетки в этом расчете была равна 1 см.

А Б

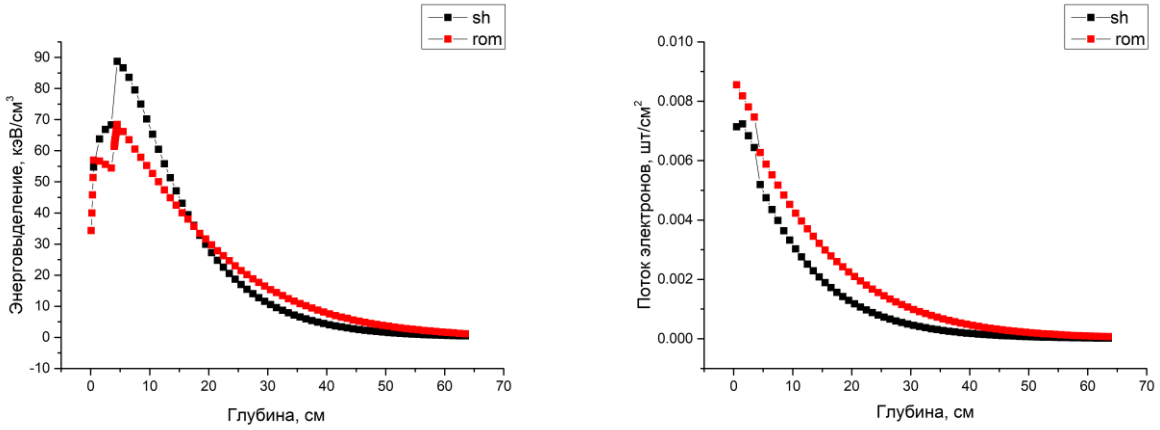

Рис. 4 – Сравнение энерговыделения (а) и потока электронов (б), рассчитанных по разработанному алгоритму (sh) и программе РЭМП (rom) при ширине ячейки разностной сетки 1 см

Результаты совпадают с удовлетворительной точностью.

Если при тех же оптимальных параметрах ячейку разностной сетки уменьшить до размеров 0.01 см, то результаты существенно сблизятся (рисунок 5).

А Б

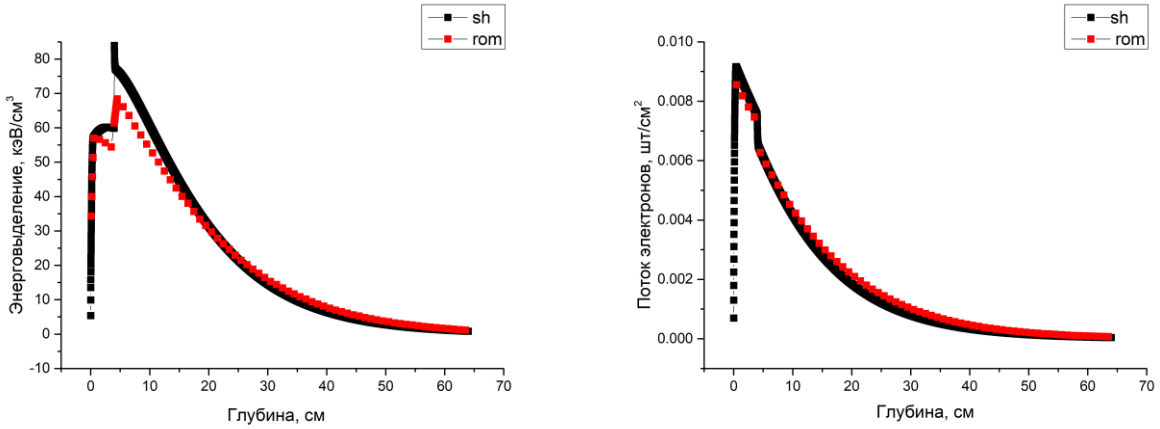

Рис. 5 – Сравнение энерговыделения (а) и потока электронов (б), рассчитанных по разработанному алгоритму (sh) и программе РЭМП (rom) при ширине ячейки разностной сетки 0.01 см

Заключение

Построенная модель совместного переноса фотонов и электронов использует ряд существенных приближений. Модель одномерная, неупругие столкновения рассматриваются в приближении средних потерь энергии, упругие – в приближении релаксации к изотропному распределению. Полная трехмерная модель, детально моделирующая все типы столкновений как фотонов, так и электронов, используется для проверки модели.

С одной стороны, огромный объем вычислений, требуемый для полноценного расчета, приводит к необходимости построения приближенных моделей для практических расчетов. С другой стороны, приближенная модель, разработанная в данной работе, может рассматриваться как элемент полной модели. Это возможно в силу линейности задачи переноса излучения в плотной среде. Линейность обеспечивает представление функций распределения в виде сумм (4-5). Полная модель в этом смысле может сводиться к многократному применению приближенных моделей с последующим суммированием результатов. Например, возможно рассмотреть несколько начальных энергий падающих квантов, углов их падения на выделенную область, начальных импульсов электрона отдачи и т.д. Это эффективно реализуемо на многопроцессорной вычислительной системе.

Библиографический список

1. Чумаков А.И. Действие космической радиации на интегральные схемы. – М.: Радио и связь, 1994.
2. Экспериментальная ядерная физика. / Ред. Э. Сегре, т. 1. – М.: Иностранная литература, 1958.
3. Мотт Н., Мэсси Г. Теория атомных столкновений. – М.: МИР, 1969.
4. Мэсси Г., Бархоп Е. Электронные и ионные столкновения. – М.: МИР, 1958.
5. Ахиезер А.И., Берестецкий В.Б. Квантовая электродинамика. – М.: Наука, 1969.
6. Кольчужкин А.М., Учайкин В.В. Введение в теорию прохождения частиц через вещество. - М.: Атомиздат, 1978.
7. Кейз К., Цвайфель П. Линейная теория переноса. М.: МИР,1972. 384 с.
8. Березин А. В., Марков М.Б., Паротькин С.В. О методе частиц для электронов в неоднородной рассеивающей среде // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 61:9 (2021), 1545–1555; A. V. Berezin, M. B. Markov, S. V. Parot'kin, “On the particle method for electrons in an inhomogeneous scattering medium”, Comput. Math. Math. Phys., 61:9 (2021), с.1521–1531.
9. Braun W., Hepp K. The Vlasov Dynamics and Its Fluctuations in the 1/N Limit of Interacting Classical Particles // Commun. math. Phys. 56, 1977.
10. Whittaker E.T., Watson G.N. A Course of Modern Analysis, Cambridge University Press, (1996).
11. 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, 019, 24 с.
12. Степанов В.В. Курс дифференциальных уравнений. М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1959.