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

Препринты ИПМ • Препринт № 60 за 2025 г.

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

А.В. Березин, М.Б. Марков,
Ф.С. Чухарев

Моделирование рассеяния фотонов и электронов методом частиц

Статья доступна по лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Березин А.В., Марков М.Б., Чухарев Ф.С. Моделирование рассеяния фотонов и электронов методом частиц // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2025. № 60. 24 с. EDN: GUIWBS
https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2025-60

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, М.Б. Марков, Ф.С. Чухарев

Моделирование рассеяния фотонов и электронов методом частиц

Москва — 2025

Березин А.В., Марков М.Б., Чухарев Ф.С.

Моделирование рассеяния фотонов и электронов методом частиц

Рассмотрены кванты проникающего излучения и образующиеся при их фотопоглощении и комптоновском рассеянии электроны отдачи. Получено условие стационарности процесса переноса. Пространственные и спектральные распределения квантов аппроксимированы дельта-функциями. Функция распределения представлена в виде наборов частиц с заданными координатами и импульсами. Уравнение переноса электронов рассмотрено в приближении средних потерь энергии при ударной ионизации и возбуждении среды, релаксации к изотропному распределению при упругом рассеянии. В результате построен алгоритм метода частиц, позволяющий вычислять энерговыделение и плотность тока электронов отдачи на разностной сетке.

Ключевые слова: квант, электрон, перенос, рассеяние, сечение

Andrey Vsevolodovich Berezin, Mikhail Borisovich Markov,
Fedor Sergeevich Chukharev

Modeling of Photon and Electron Scattering by the Particle Method

The penetrating radiation quanta and recoil electrons formed during their photoabsorption and Compton scattering are considered. The condition of stationarity of the transfer process is obtained. Spatial and spectral distributions of quanta are approximated by delta functions. The distribution function is presented as sets of particles with given coordinates and momenta. The electron transfer equation is considered in the approximation of average energy losses during impact ionization and excitation of the medium, relaxation to an isotropic distribution during elastic scattering. As a result, an algorithm of the particle method is constructed, allowing one to calculate the energy release and current density of recoil electrons on a difference grid.

Key words: quantum, electron, transfer, scattering, cross-section

Оглавление

Введение 3
1. Оценки сечений процессов рассеяния квантов и электронов отдачи 4
2. Кинетическое уравнение для квантов 5
3. Метод частиц для квантов 8
4. Кинетическое уравнение для электронов отдачи 16
5. Метод частиц для электронов 21
Заключение 23
Библиографический список 23

Введение

Исследование распространения квантов в рассеивающих средах сложной структуры является традиционной задачей математического моделирования. Эти исследования имеют приложения в таких актуальных областях как защита космических аппаратов от электризации тормозным излучением электронов радиационных поясов Земли и космическим гамма-излучением [1]. Свободные электроны отдачи, образующиеся при комптоновском рассеянии и фотопоглощении [2] квантов в конструкционных материалах, термализуются в диэлектриках. При этом формируется долгоживущий объемный электрический заряд. Он наводит в космическом аппарате электрическое поле, которое может стать причиной электростатических разрядов и паразитных токов в аппаратуре. Другой класс задач переноса возникает при проектировании рентгеновских томографов промышленных изделий. Здесь необходима оценка структуры рассеивающей среды по характеристикам падающего и проникшего излучений [3, 4]. Перенос квантов тормозного излучения в преградах исследуется для оптимизации электрофизических установок, используемых для исследований радиационных эффектов в перспективных материалах, например, высокоточных ускорителей электронов [5].

Перенос квантов и электронов отдачи моделируется путем численного решения кинетических уравнений различных типов [6-9]. Развиваются методы решения уравнений переноса излучения, основанные на разностной аппроксимации интегро-дифференциальных уравнений переноса, статистическом моделировании переноса и столкновений методами типа Монте-Карло. Большой объем вычислений, требующийся в общем случае для решения таких уравнений, приводит к тому, что выполнимыми оказываются вычислительные эксперименты только для геометрически простых объектов и спектров. Для эффективного решения практических задач необходимо использовать основанные на их специфике физические приближения и подходы к численному решению.

В данной работе рассматривается подход к моделированию плотностей мощности энерговыделения и тока электронов, возникающих в среде при переносе квантов и электронов. Рассматриваются кванты с энергиями 10–1000 кэВ. Кванты с такой энергией генерируются исследовательскими ускорителями электронов в режиме генерации тормозного излучения, рентгеновскими томографами промышленных изделий, электронами радиационных поясов, активными зонами ядерных реакторов и т.д. Считается, что кванты рассеиваются в среде с кусочно-постоянными свойствами. Она задается совокупностью прямоугольных ячеек. Для этого в области расчета строится прямоугольная разностная сетка, каждой ячейке которой ставится в соответствие материал с известными рассеивающими свойствами – элементным составом и плотностью. Значения выделенной энергии и плотности тока относятся к ячейкам сетки. В дальнейшем они могут использоваться для расчетов электромагнитного или теплового поля, дозовых нагрузок.

1. Оценки сечений процессов рассеяния квантов и электронов отдачи

Кванты проникающего излучения испытывают комптоновское и когерентное рассеяние, фотопоглощение, образуют электронно-позитронные пары. Сравнение зависимостей от энергии [эВ] коэффициентов поглощения [см^2/г] квантов за счет различных типов столкновений иллюстрирует рисунок 1. Выбраны элементы с существенно различными зарядами ядра атома.

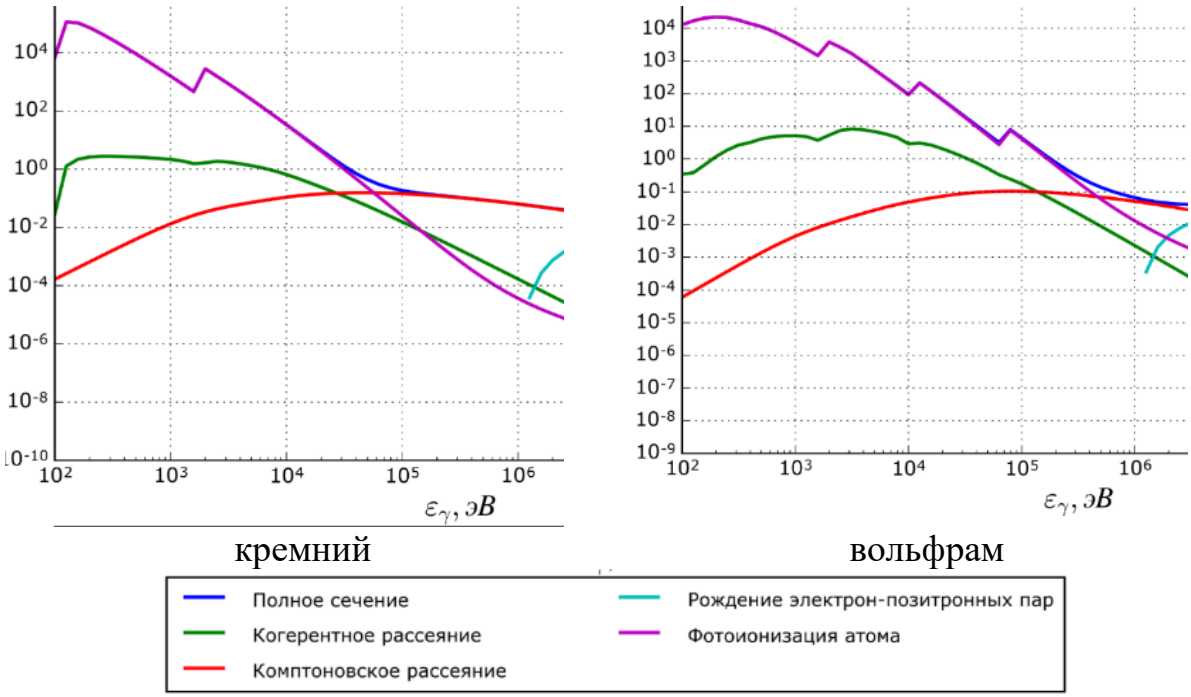
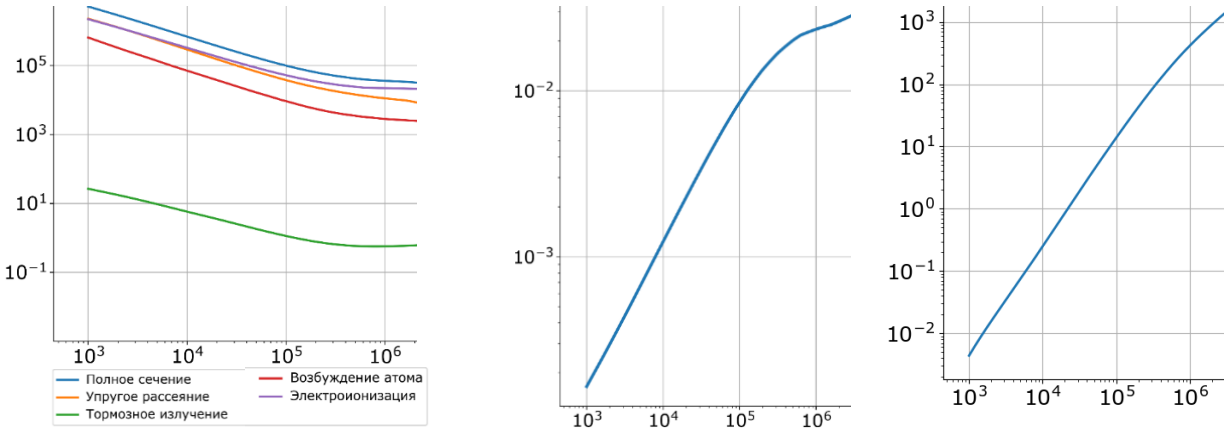


Рис. 1. Сечения процессов поглощения квантов

Основными столкновительными эффектами для квантов с энергиями в диапазоне от 10 кэВ до 1 МэВ являются фотопоглощение и комптоновское рассеяние. Оба эффекта сопровождаются образованием свободных электронов отдачи – фото- и комптоновских электронов с энергиями в том же диапазоне энергий (10 кэВ–1 МэВ). Электроны отдачи рассеиваются упруго, испытывают радиационное и ионизационное торможение (тормозное излучение и ударная ионизация), возбуждают атом рассеивающей среды. На рис. 2 представлены характеристики процессов рассеяния электронов в воздухе. Выбор воздуха обусловлен тем, что заполненные им полости присутствуют в сложных технических объектах. Кванты рассматриваемого диапазона энергий этих полостей «не замечают», а электроны имеют там максимальное время жизни.



массовые сечения рассеяния электронов | средний пробег электронов (см) | тормозной путь электронов (см)

Рис. 2. Характеристики процессов взаимодействия электронов с воздухом

Представленные данные свидетельствуют о следующем. Основными процессами рассеяния квантов являются фотоэффект и комптоновское рассеяние. Основными процессами рассеяния электронов отдачи являются ударная ионизация и упругое рассеяние. Тормозной путь электронов отдачи превышает пробеги электронов до первого столкновения более чем на три порядка. Представленные данные почерпнуты из базы данных и проиллюстрированы с помощью программы их обработки [10].

2. Кинетическое уравнение для квантов

Рассмотрим кинетическое уравнение для функции распределения квантов $f_\gamma = f_\gamma(t,\mathbf{r},\mathbf{p})$ в фазовом пространстве координат и импульсов $(\mathbf{r},\mathbf{p})$:

$$\frac{1}{c}\frac{\partial f_\gamma}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\mathbf{\Omega} f_\gamma\right) + \sigma_\gamma^t f_\gamma = \int \sigma_{\gamma\gamma}^c(\mathbf{p},\mathbf{p}') f_\gamma(\mathbf{p}') d\mathbf{p}' + Q_\gamma, \qquad (1)$$

где t – лабораторное время, c – скорость света, $\mathbf{v} \equiv v\mathbf{\Omega}$ – скорость.

Полное макроскопическое сечение поглощения квантов $\sigma_\gamma^t = \sigma_{comp} + \sigma_{ph}$ в уравнении (1) представляет собой сумму полных макроскопических сечений комптоновского σ_{comp} рассеяния и фотоэффекта σ_{ph}. Дифференциальное макроскопическое сечение $\sigma_{\gamma\gamma}^c(\mathbf{p},\mathbf{p}')$ описывает образование рассеянного кванта при комптоновском рассеянии. Символы $\mathbf{p},\mathbf{p}'$ означают импульсы образующегося и падающего квантов соответственно.

Уравнение (1) рассмотрим в декартовых координатах $\mathbf{r}=(x,y,z)$. В пространстве импульсов используем и декартовы и сферические координаты $\mathbf{p}=(p_x,p_y,p_z)=(p,\chi,\mu)$. Источник квантов сосредоточен на плоскости $z=0$:

$$Q_\gamma = N_\gamma F(t)\frac{S(\varepsilon)}{2\pi p^2}\delta(\mu-1)\delta(z), \tag{2}$$

где $\varepsilon(p)$ – энергия квантов, $N_\gamma = N_\gamma(x,y)$ – плотность потока квантов (1/см^2), $F(t)$ – зависимость интенсивности от времени (1/с), $S(\varepsilon)$ – начальный групповой спектр квантов. Функции $F(t)$ и $S(\varepsilon)$ нормированы:

$$\int_0^\infty F(t)dt = 1, \qquad \int_0^\infty S(\varepsilon)d\varepsilon = 1.$$

Рассмотрим ряд Неймана [11], выражающий точное решение уравнения (1) методом последовательных поколений:

$$f_\gamma = N_\gamma F\left(t-\frac{z}{c}\right)\frac{S(\varepsilon)}{2\pi p^2}\delta(\mu-1)\exp\left\{-\int_0^z \sigma_\gamma^t(x,y,z')dz'\right\} + \sum_{n=1}^\infty f_n, \tag{3}$$

где f_n – функция распределения квантов nого поколения. Для f_n справедливо уравнение

$$\frac{1}{c}\frac{\partial f_{n+1}}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{\Omega} f_{n+1}) + \sigma_\gamma^t f_{n+1} = \int \sigma_{\gamma\gamma}^c(\mathbf{p},\mathbf{p}')f_n(\mathbf{p}')d\mathbf{p}'. \tag{4}$$

В соотношениях (3), (4) присутствует функция распределения квантов нерассеянного излучения

$$f_0 = N_\gamma F\left(t-\frac{z}{c}\right)\exp\left\{-\int_0^z \sigma_\gamma^t(p,x,y,z')dz'\right\}\frac{S(\varepsilon)}{2\pi p^2}\delta(\mu-1). \tag{5}$$

Рассмотрим уравнение для функции распределения квантов первого поколения в однородной рассеивающей среде для монохроматического источника квантов с импульсом $\mathbf{p}_0$:

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + c\operatorname{div}(\mathbf{\Omega} f_1) + \sigma_\gamma^t c f_1 = N_\gamma F\left(t-\frac{z}{c}\right)\sigma_{\gamma\gamma}^c(\mathbf{p},\mathbf{p}_0)\exp\left\{-\sigma_\gamma^t z\right\}. \tag{6}$$

Решение задачи Коши для уравнения (6) с однородными начальными данными имеет вид

$$f_1 = N_\gamma \sigma_{\gamma\gamma}^c(\mathbf{p},\mathbf{p}_0)\times$$
$$\times\int_0^t dt' F\left(t' - \frac{z - c\Omega_z(t-t')}{c}\right)\exp\left\{-\sigma_\gamma^t\left(z - c\Omega_z(t-t')\right)\right\}.$$

Будем считать, что $F(0)=0$, а длительность импульса $F(t)$ и его фронта τ_s велики по сравнению с временем жизни кванта после столкновения в рассеивающей среде $1/\left(\sigma_\gamma^t c\right)$, то есть

$$\sigma_\gamma^t c\tau_s \gg 1.$$

Это справедливо для подавляющего числа актуальных задач моделирования переноса квантов в технических объектах.

Характерная скорость изменения функции $F(t)$ определяется величиной τ_s. Характерное время спада экспоненты $\exp\left\{-\sigma_\gamma^t\left(z - c\Omega_z(t-t')\right)\right\}$ как функции t' определяется временем жизни кванта $1/\left(\sigma_\gamma^t c\right)$. Поэтому с точностью до членов порядка $1/\left(\sigma_\gamma^t c\tau_s\right)$

$$f_1 \approx N_\gamma \frac{\sigma_{\gamma\gamma}^c(\mathbf{p},\mathbf{p}_0)}{\sigma_\gamma^t c\Omega_z} F\left(t - \frac{z}{c}\right)\exp\left\{-\sigma_\gamma^t z\right\}\left(1 - \exp\left\{-\sigma_\gamma^t c\Omega_z t\right\}\right).$$

Величина $\exp\left\{-\sigma_\gamma^t c\Omega_z t\right\}$ существенно убывает уже на фронте импульса. Поскольку функция $F(t)$ равна нулю в начальный момент времени и плавно возрастает с течением времени, с хорошей точностью:

$$f_1 \approx N_\gamma \frac{\sigma_{\gamma\gamma}^c(\mathbf{p},\mathbf{p}_0)}{\sigma_\gamma^t c\Omega_z} F\left(t - \frac{z}{c}\right)\exp\left\{-\sigma_\gamma^t z\right\}. \qquad (7)$$

Формула (7) показывает, что запаздыванием квантов, испытавших одно столкновение, можно пренебречь. Очевидно, что данный факт имеет место для квантов любого поколения.

Используя полученный вывод, вернемся к рассмотрению уравнения (1). Представим функцию распределения в виде произведения

$$f_\gamma \equiv \overline{f}_\gamma(\mathbf{r},\mathbf{p}) F\left(t - \frac{z}{c}\right)$$

и подставим в (1):

$$\frac{1}{c}\overline{f}_\gamma(\mathbf{r},\mathbf{p})\frac{\partial}{\partial t}F\left(t-\frac{z}{c}\right)+\operatorname{div}\left(\mathbf{\Omega}\overline{f}_\gamma(\mathbf{r},\mathbf{p})F\left(t-\frac{z}{c}\right)\right)+$$
$$+\sigma_\gamma^t\overline{f}_\gamma(\mathbf{r},\mathbf{p})F\left(t-\frac{z}{c}\right)=F\left(t-\frac{z}{c}\right)\int\sigma_{\gamma\gamma}^c(\mathbf{p},\mathbf{p}')\overline{f}_\gamma(\mathbf{r},\mathbf{p})d\mathbf{p}'+ \tag{8}$$
$$+N_\gamma F\left(t-\frac{z}{c}\right)\frac{S(\varepsilon)}{2\pi p^2}\delta(\mu-1)\delta(z).$$

Проинтегрируем уравнение (8) по переменной t от z/c до бесконечности. Получим стационарное уравнение:

$$\operatorname{div}\left(\mathbf{\Omega}\overline{f}_\gamma(\mathbf{r},\mathbf{p})\right)+\sigma_\gamma^t\overline{f}_\gamma(\mathbf{r},\mathbf{p})=$$
$$=\int\sigma_{\gamma\gamma}^c(\mathbf{p},\mathbf{p}')\overline{f}_\gamma(\mathbf{r},\mathbf{p}')d\mathbf{p}'+N_\gamma\frac{S(\varepsilon)}{2\pi p^2}\delta(\mu-1)\delta(z). \tag{9}$$

3. Метод частиц для квантов

Источник (2) моделирует генерацию импульса квантов с плоскости $z=0$ в направлении ее нормали. Распространение квантов рассматривается в прямоугольной области D, содержащей модель объекта. Введем на грани области D, соответствующей плоскости $z=0$, разбиение непересекающимися открытыми прямоугольниками d_{ij} с центрами в точках $x=x_i$, $y=y_j$. Обозначим $N_{ij}=\int_{d_{ij}}N_\gamma(x,y)dxdy$. Поставим в соответствие функции $N_\gamma=N_\gamma(x,y)$ обобщенную функцию [12,13]:

$$N_\gamma(x,y)\delta(z)\to\delta(z)\sum_{ij}N_{ij}\delta(x-x_i)\delta(y-y_j). \tag{10}$$

Аппроксимируем начальный спектр квантов в декартовой системе координат:

$$\frac{S(\varepsilon)}{2\pi p^2}c\delta(\mu-1)=cS(\varepsilon(p_z))\delta(p_x)\delta(p_y)$$

$$S(\varepsilon(p_z))\to\sum_k s_k\delta(p_z-p_k), \tag{11}$$

где $s_k = c\int_{\Delta_k} S\left(\varepsilon\left(p_z\right)\right)dp_z$. Интегрирование ведется по непересекающимся интервалам Δ_k, составляющим покрытие области начального распределения импульса квантов, причем $p_k \in \Delta_k$. Введем вектор $\mathbf{p}_k = \left(0, 0, p_k\right)$, учтем замены (10) и (11). Тогда источник квантов в уравнении (9) можно представить в виде конечной суммы с «единым» индексом суммирования:

$$\sum_{i=1}^{N} Q_i \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i\right)\delta\left(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i\right), \tag{12}$$

где $Q_i = N_{ij} s_k$, $\mathbf{r}_i = \left(x_i, y_j, 0\right)$.

В силу представления источника в виде суммы (12) и линейности уравнения (9), его решение представимо в виде конечной суммы

$$\overline{f}_\gamma\left(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}\right) = \sum_{i=1}^{N} f_i\,, \tag{13}$$

причем для ее слагаемых справедливо уравнение:

$$\begin{gathered}\operatorname{div}\left(\mathbf{\Omega} f_i\left(\mathbf{r}, \mathbf{p}\right)\right) + \sigma_\gamma^t f_i\left(\mathbf{r}, \mathbf{p}\right) = \\ = \int \sigma_{\gamma\gamma}^c\left(\mathbf{p}, \mathbf{p}'\right) f_i\left(\mathbf{r}, \mathbf{p}'\right) d\mathbf{p}' + Q_i \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i\right)\delta\left(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i\right)\end{gathered}. \tag{14}$$

Рассмотрим решение уравнения (14) методом последовательных поколений. Уравнение (14) для нерассеянного излучения, то есть нулевого члена ряда Неймана [11], имеет вид

$$\frac{\partial f_i^0}{\partial z} + \sigma_\gamma^t f_i^0 = Q_i \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i\right)\delta\left(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i\right). \tag{15}$$

Решение краевой задачи для уравнения (15) с однородным граничным условием имеет вид

$$f_i^0 = Q_i \exp\left\{-\int_0^z dz' \sigma_\gamma^t\left(p_i, \mathbf{r}\right)\right\}\delta\left(x - x_i\right)\delta\left(y - y_j\right)\delta\left(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i\right). \tag{16}$$

Для квантов, испытавших одно комптоновское рассеяние, справедливо следующее уравнение:

$$\operatorname{div}\left(\mathbf{\Omega} f_i^1\right)+\sigma_\gamma^t f_i^1 =$$
$$= Q_i \delta\left(x-x_i\right)\delta\left(y-y_j\right)\exp\left\{-\int_0^z dz'\sigma_\gamma^t\left(p_i,\mathbf{r}'\right)\right\}\sigma_{\gamma\gamma}^c\left(\mathbf{p},\mathbf{p}_i\right). \tag{17}$$

Аппроксимируем правую часть уравнения (17) аналогично заменам (10), (11).

Рассмотрим P_i – множество импульсов $\mathbf{p}$ в евклидовом пространстве $\mathbb{R}_{\mathbf{p}}^3$, которые может принимать импульс рассеянной частицы, образующейся при столкновении падающей частицы с импульсом $\mathbf{p}_i$. Множество P_i ограничено в силу закона сохранения энергии: любая точка $p \in P_i$ принадлежит шару с радиусом p_i.

Рассмотрим сигма-алгебру подмножеств множества P_i. На элементах данной сигма-алгебры зададим сигма-аддитивную меру Ξ с плотностью $\sigma_{\gamma\gamma}^c\left(\mathbf{p},\mathbf{p}_i\right)$ [14], то есть такую, что

$$\sigma_{\gamma\gamma}^c\left(\mathbf{p},\mathbf{p}_i\right)d\mathbf{p} = d\Xi,\ \int_{P_i}\sigma_{\gamma\gamma}^c\left(\mathbf{p},\mathbf{p}_i\right)d\mathbf{p} = \int_{P_i} d\Xi = \sigma_{comp}^t\left(\mathbf{p}_i\right). \tag{18}$$

Пусть A_k – непересекающиеся подмножества множества P_i, такие, что для любых $k' \neq k''$ пересечение $A_{k'} \cap A_{k''} = \varnothing$. Пусть данные подмножества образуют покрытие множества P_j, то есть $P_j = \bigcup_{k=1}^{K} A_k$. Пусть для всех k выполнено условие

$$\Xi\left(A_k\right) = \sigma_{comp}^t / K\ . \tag{19}$$

Рассмотрим

$$\mathbf{p}_k = \int_{A_k}\mathbf{p}\,d\Xi \Big/ \Xi_k \tag{20}$$

и обобщенную функцию

$$\sum_{k=1}^{K}\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_k\right). \tag{21}$$

Действие обобщенной функции (21) на элемент основного пространства имеет вид

$$\left\langle \phi, \sum_{k=1}^{K} \delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_k\right) \right\rangle = \sum_{k=1}^{K} \phi\left(\mathbf{p}_k\right). \tag{22}$$

Рассмотрим следующее представление дифференциального сечения рассеяния $\sigma_{\gamma\gamma}^{c}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}'\right)$ в интеграле столкновений уравнения (9):

$$\sigma\left(\mathbf{p},\mathbf{p}'\right) = \sum_{k=1}^{K} \Xi_k \delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_k\left(\mathbf{p}'\right)\right) = \frac{\sigma_{comp}^{t}}{K} \sum_{k=1}^{K} \delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_k\left(\mathbf{p}'\right)\right). \tag{23}$$

Интегрирование (23) по конечным состояниям рассеивающейся частицы дает полное макроскопическое сечение поглощения:

$$\int d\mathbf{p}\, \sigma_{\gamma\gamma}^{c}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}'\right) = \sum_{k=1}^{K} \Xi_k = \sigma_{comp}^{t}\left(\mathbf{p}'\right). \tag{24}$$

Обобщенная функция (23) действует на функцию основного пространства следующим образом:

$$\left\langle \phi\left(\mathbf{p}\right), \sigma_{\gamma\gamma}^{c}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}'\right) \right\rangle = \left\langle \phi\left(\mathbf{p}\right), \sum_{k=1}^{K} \Xi_k \delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_k\left(\mathbf{p}'\right)\right) \right\rangle = \frac{\sigma_{comp}^{t}}{K} \sum_{k=1}^{K} \phi\left(\mathbf{p}_k\left(\mathbf{p}'\right)\right). \tag{25}$$

Представим $\sigma_{\gamma\gamma}^{c}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}'\right)$ в виде произведения $\sigma_{\gamma\gamma}^{c}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}'\right) \equiv \sigma_{comp}^{t} w_{\gamma\gamma}^{c}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}'\right)$. Тогда функцию $w_{\gamma\gamma}^{c}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}'\right)$ можно рассматривать как плотность вероятности – плотность меры Ξ / σ_{comp}^{t}. В данной терминологии

$$\left\langle \phi\left(\mathbf{p}\right), w_{\gamma\gamma}^{c}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}'\right) \right\rangle = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \phi\left(\mathbf{p}_k\left(\mathbf{p}'\right)\right). \tag{26}$$

В данной формуле левая часть – математическое ожидание функции $\phi\left(\mathbf{p}\right)$ случайной величины $\mathbf{p}$, распределенной с плотностью вероятности $w_{\gamma\gamma}^{c}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}'\right)$, правая – среднее арифметическое ее равновероятных значений. Кроме того, правая часть формулы (25) представляет собой вариант частичной суммы, аппроксимирующей интеграл

$$\int d\mathbf{p}\, \phi\left(\mathbf{p}\right) \sigma_{\gamma\gamma}^{c}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}'\right) \tag{27}$$

методом прямоугольников. Вариант эффективен, если функция $\sigma_{\gamma\gamma}^{c}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}'\right)$ интегрируется аналитически.

Построенное представление дифференциального сечения позволяет построить распределение по импульсу в правой части уравнения (17)) следующим образом:

$$\sigma_{\gamma\gamma}^{c}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}_i\right)\to\frac{\sigma_{comp}^{c}\left(\mathbf{p}_i\right)}{K}\sum_{k=1}^{K}\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_k\left(\mathbf{p}_i\right)\right). \tag{28}$$

Построим также источники фото- и комптоновских электронов, образующихся при рассеянии квантов нулевого поколения:

$$\begin{gathered}Q_i^e=Q_i\delta\left(x-x_i\right)\delta\left(y-y_j\right)\exp\left\{-\int_0^z dz'\sigma_\gamma^t\left(p_i,\mathbf{r}'\right)\right\}\times\\ \times\left(\sigma_{comp}^t w_{\gamma e}^c\left(\mathbf{p},\mathbf{p}_i\right)+\sigma_{ph}^t w_{\gamma e}^{ph}\left(\mathbf{p},\mathbf{p}_i\right)\right)\end{gathered}. \tag{29}$$

Обратимся к аппроксимации пространственного распределения в правой части (17), то есть функции:

$$\exp\left\{-\int_0^z dz'\sigma_\gamma^t\left(p_i,\mathbf{r}'\right)\right\}. \tag{30}$$

Для этого введем разбиение отрезка – пересечения оси z с множеством D – на открытые непересекающиеся интервалы $\left(z_m,z_{m+1}\right)$. На каждом из интервалов функцию $\sigma_\gamma^t\left(p_i,x_i,y_i,z'\right)$ будем считать постоянной и равной $\sigma_{\gamma im}^t$. Это эквивалентно однородности материала рассеивающей среды в пределах одной разностной ячейки. Пусть такое же условие справедливо и для разбиений по x и y во всех плоскостях $z=z_m$. Таким образом, определена сеточная модель расчетной области и рассеивающей среды – декартова прямоугольная разностная сетка, состоящая из ячеек с вершинами в точках $x=x_i,\ y=y_j,\ z=z_m$. Полученную сетку будем рассматривать как физико-геометрическую модель сложной рассеивающей среды и детектирующую систему одновременно. Это означает, что каждая ячейка соответствует однородному материалу с заданными рассеивающими свойствами, а измеряемые функционалы функций распределения вычисляются как средние по ячейкам.

Разобьём интервал $\left(z_m,z_{m+1}\right)$ на одинаковые подынтервалы равной длины $l\ll 1/\sigma_{\gamma ijm}^t$, где $\sigma_{\gamma im}^t\equiv\sigma_\gamma^t\left(p_i,x_i,y_j,z_m\right)$.

Рассмотрим на интервале $\left(z_m, z_{m+1}\right)$ один из подынтервалов $\left(z, z+l\right)$. Обозначим $N\left(z\right) \equiv \exp\left\{-\int_0^z dz' \sigma_\gamma^t\left(p_i, \mathbf{r}'\right)\right\}$.

Тогда $N\left(z+l\right) \equiv \exp\left\{-\int_0^{z+l} dz' \sigma_\gamma^t\left(p_i, \mathbf{r}'\right)\right\}$. Доля квантов, не испытавших столкновений на отрезке $\left(z, z+l\right)$:

$$N\left(z+l\right) = \exp\left\{-\int_0^z dz' \sigma_\gamma^t\left(p_i, \mathbf{r}'\right) - \sigma_{\gamma im}^t l\right\} = N\left(z\right)\exp\left\{-\sigma_{\gamma im}^t l\right\}. \qquad (31)$$

Доля квантов, испытавших комптоновское рассеяние, равна относительному количеству квантов первого поколения, рожденных на отрезке $\left(z, z+l\right)$:

$$\begin{aligned} N_c &= \int_z^{z+l} dz'' \sigma_{cim}^t \exp\left\{-\int_0^{z''} dz' \sigma_\gamma^t\left(p_i, \mathbf{r}'\right)\right\} = \\ &= \int_z^{z+l} dz'' \sigma_{cim}^t \exp\left\{-\int_0^z dz' \sigma_\gamma^t\left(p_i, \mathbf{r}'\right) - \int_z^{z''} \sigma_{\gamma im}^t dz'\right\} = \\ &= N\left(z\right)\sigma_{cim}^t \int_z^{z+l} dz'' \exp\left\{-\sigma_{\gamma im}^t\left(z''-z\right)\right\} = N\left(z\right)\frac{\sigma_{cim}^t}{\sigma_{\gamma im}^t}\left(1-\exp\left\{-\sigma_{\gamma im}^t l\right\}\right). \end{aligned} \qquad (32)$$

Доля квантов, испытавших фотопоглощение, равна относительному количеству фотоэлектронов, рожденных на отрезке $\left(z, z+l\right)$:

$$N_{ph} = N\left(z\right)\frac{\sigma_{phim}^t}{\sigma_{\gamma im}^t}\left(1-\exp\left\{-\sigma_{\gamma im}^t l\right\}\right). \qquad (33)$$

Сложим:

$$\begin{aligned} N_c + N_{ph} + N_1 &= N\frac{\sigma_{cim}^t}{\sigma_{\gamma im}^t}\left(1-\exp\left\{-\sigma_{\gamma im}^t l\right\}\right) + \\ &+ N\frac{\sigma_{phim}^t}{\sigma_{\gamma im}^t}\left(1-\exp\left\{-\sigma_{\gamma im}^t l\right\}\right) + N\exp\left\{-\sigma_{\gamma im}^t l\right\} = N \end{aligned}, \qquad (34)$$

где $\sigma_{cim}^t \equiv \sigma_{comp}^t\left(p_i, x_i, y_i, z_m\right)$, $\sigma_{\gamma im}^t \equiv \sigma_\gamma^t\left(p_i, x_i, y_i, z_m\right)$.

Учитывая уравнение (32), построим источник квантов первого поколения в следующем виде:

$$\operatorname{div}\left(\mathbf{\Omega} f_i^1\right)+\sigma_\gamma^t f_i^1 =$$
$$=Q_i\delta\left(x-x_i\right)\delta\left(y-y_i\right)\delta\left(z-z_{im}^*\right)\sum_{km}\frac{\Xi_m}{\sigma_{comp}^t\left(\mathbf{p}_i\right)}N_c\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_k\left(\mathbf{p}_i\right)\right), \qquad (35)$$

где $z_{im}^* \in \left(z_m, z_{m+1}\right)$, $m=1,\ldots,M$.

Таким образом, в результате комптоновского рассеяния вместо одного падающего кванта с номером i образуется $K\times M$ рассеянных квантов с весами $\Xi_m Z_{im}/\sigma_{comp}^t\left(\mathbf{p}_i\right)$, причем $\sum_{km}\Xi_m Z_{im}/\sigma_{comp}^t\left(\mathbf{p}_i\right)=1$.

Рассмотрим важное обстоятельство. Выражения (31)-(34) можно построить для каждого отрезка, пересекающего ячейку сетки, а не только $\left(z_m, z_{m+1}\right)$. Отрезок не обязан быть параллельным какой-либо оси координат. Существенно лишь, что он целиком находится внутри ячейки и сечения всех процессов в его точках не меняются. Параметр разбиения – длина l подынтервала – может выбираться разным для разных ячеек сетки. Минимальная величина l является параметром метода и зависит от размеров ячеек и плотности материалов. Внутри ячейки на траектории фотона всегда укладывается целое число участков одинаковой длины l, но не менее одного участка. На рисунке 3 синими точками показаны участки движения фотона, красными – точки, к которым относим рождение вторичных фотонов.

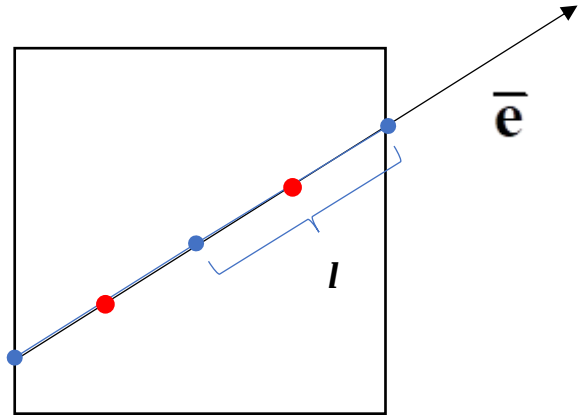


Рис. 3. Траектория кванта в ячейке

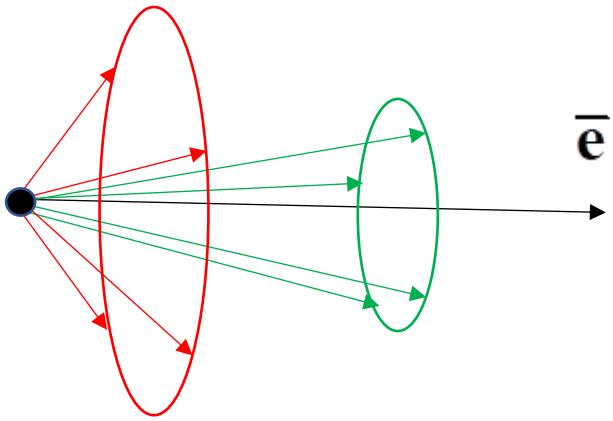


Рис. 4. Направления движения рассеянных квантов

Таким образом, в результате распространения «квантов с долей N» на интервале l образуются:

кванты, испытавшие комптоновское рассеяние, с общей долей N_c;

кванты, не испытавшие рассеяния, с долей N_1, летящие в прежнем направлении;

комптоновские электроны с долей N_c, равной доле испытавших комптоновское рассеяние фотонов;

фотоэлектроны с долей N_{ph}.

При получении формул (31)-(34) для долей мы пренебрегли в целях упрощения изложения индексами, обозначающими номер ячейки сетки, в которой рассматривается процесс переноса.

Рассмотрим распределение квантов, испытавших комптоновское рассеяние, с общей долей N_c по импульсу в соответствии с формулой (28). Сохраним индекс i для обозначения импульса падающего кванта:

$$\begin{gathered}\frac{\sigma_{comp}^{t}(\mathbf{p}_i)}{K}\sum_{k=1}^{K}\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_k(\mathbf{p}_i)\right)= \\ =\frac{\sigma_{comp}^{t}(p_i)}{4\pi K}\sum_{k=1}^{K}\frac{\delta\left(p-p_k(p_i)\right)}{p^2}\delta\left(\mu-\mu_k(p,p_i)\right)\end{gathered}. \tag{36}$$

Дифференциальное сечение рассеяния симметрично относительно направления движения падающего электрона. В формуле (36) зависимость от азимутального угла χ входит в нормировочный коэффициент как множитель $1/2\pi$. Для моделирования азимутального рассеяния необходимо аппроксимировать постоянную функцию $1/2\pi$ с помощью набора дельта-функций, аналогично тому, как это делалось выше для всех гладких функций:

$$\begin{gathered}\frac{\sigma_{comp}^{t}(\mathbf{p}_i)}{K}\sum_{k=1}^{K}\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_k(\mathbf{p}_i)\right)\to \\ \to\frac{\sigma_{comp}^{t}(p_i)}{4\pi KL}\sum_{k=1}^{K}\frac{\delta\left(p-p_k(p_i)\right)}{p^2}\delta\left(\mu-\mu_k(p,p_i)\right)\sum_{n=0}^{L}\delta\left(\chi-\frac{2\pi n}{L}\right)\end{gathered}. \tag{37}$$

Зенитный угол рассеяния однозначно связан с модулем импульсов падающего и рассеянного квантов.

Таким образом, на отрезке l каждый квант порождает $K\times L$ квантов следующего поколения. На рисунке 4 приведен пример при $K=2$, $L=4$. Красным и зеленым цветом показаны направления движения рассеянных квантов при различных значениях θ.

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

$$\varepsilon_\gamma N=\varepsilon_{\gamma C}N_c+\varepsilon_\gamma N_1+\varepsilon_{ePh}N_{Ph}+\varepsilon_{eC}N_c+E,$$

где E – энергия, ушедшая в энерговыделение.

Каждый из квантов следующего поколения имеет энергию $\varepsilon_\gamma^c = \varepsilon\left(p_k\right) = cp_k$, направление движения $\bar{\mathbf{e}}_1$, образующее углы θ_γ^k и $\chi_n = 2\pi n/L$ с направлением исходного фотона $\bar{\mathbf{e}}$, и долю $N = N_C/\left(KL\right)$. Индекс k определяет зенитный угол и энергию кванта, индекс n – азимутальный угол. Квант, не испытавший столкновения на отрезке l, сохраняет долю N_1 и энергию $\varepsilon_\gamma = cp_i$.

Моделирование кванта прекращается, когда он покидает расчетную область. Кроме того, введены два дополнительных параметра модели: минимальная доля и максимальное поколение кванта, сохраняемого в расчете. Кванты, доля которых падает ниже заданной или испытавшие число столкновений, превышающее предельное, поглощаются с выделением энергии в соответствующей ячейке.

4. Кинетическое уравнение для электронов отдачи

Рассмотрим кинетическое уравнение для функции распределения электронов, образующихся при комптоновском рассеянии и фотопоглощении квантов:

$$\begin{gathered}\frac{\partial f}{\partial t} + \mathrm{div}_{\mathbf{r}}\left(\mathbf{v}f\right) + \sigma_e^t\left(\mathbf{r}, p\right)vf - \int d\mathbf{p}'\sigma_{ee}\left(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{p}'\right)v'f\left(\mathbf{p}'\right) = \\ = \int d\mathbf{p}'\left[\sigma_{\gamma e}^c\left(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{p}'\right) + \sigma_{\gamma e}^{ph}\left(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{p}'\right)\right]cf_\gamma\left(\mathbf{p}'\right)\end{gathered}, \tag{38}$$

где σ_e^t – полное макроскопическое сечение рассеяния электрона; $\sigma_{\gamma e}^c\left(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{p}'\right)$, $\sigma_{\gamma e}^{ph}\left(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{p}'\right)$ – дифференциальные макроскопические сечения образования электронов при комптоновском рассеянии и фотопоглощении квантов, $\sigma_{ee}\left(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{p}'\right)$ – дифференциальное макроскопическое сечение рассеяния электрона с образованием электрона.

В результате фотоэффекта квант излучения поглощается атомом с излучением атомарного электрона в непрерывный спектр. Полное сечение фотоэффекта имеет следующий вид [2]:

$$\begin{gathered}\sigma_{ph}^t = 2\pi Z^5\alpha^4 r_e^2 \frac{(\gamma^2-1)^{\frac{3}{2}}}{(\gamma-1)^5} \times \\ \times\left[\frac{4}{3} + \frac{\gamma(\gamma-2)}{\gamma+1}\left[1 - \frac{1}{2\gamma\sqrt{\gamma^2-1}}1n\left(\frac{\gamma+\sqrt{\gamma^2-1}}{\gamma-\sqrt{\gamma^2-1}}\right)\right]\right]\end{gathered}, \tag{39}$$

где r_e – классический радиус электрона, Z – заряд ядра рассеивающего вещества, α – постоянная тонкой структуры $\gamma = 1 + \varepsilon / mc^2$, ε – кинетическая энергия падающего кванта, m – масса электрона, c – скорость света.

В нерелятивистском пределе, пренебрегая членами порядка $\left(\varepsilon / mc^2\right)^2$, получим из (39):

$$\sigma_{ph}^{t} = \frac{8}{3}\pi Z^5 \alpha^4 r_e^2 \left(\varepsilon / mc^2 + 2\right)^{3/2} \left(\varepsilon / mc^2\right)^{-7/2} . \tag{40}$$

Вторым важным эффектом взаимодействия фотонов рентгеновского излучения со средой является комптоновское рассеяние. Полное сечение комптоновского рассеяния имеет вид [2]

$$\sigma_{cs}^{t} = 2\pi Z r_e^2 \cdot \left\{ \frac{\gamma}{(\gamma-1)^3} \left[\frac{2\gamma^2}{2\gamma-1} - \ln(2\gamma-1) \right] + \frac{\ln(2\gamma-1)}{2\gamma-2} - \frac{3\gamma-2}{(2\gamma-1)^2} \right\}. \tag{41}$$

Дифференциальное сечение образования электронов отдачи при комптоновском рассеянии имеет вид

$$\sigma_{cs}\left(\varepsilon_\gamma, \varepsilon_\gamma - \varepsilon\right) Z \cdot \delta\left(\left\langle \mathbf{\Omega}_\gamma, \mathbf{\Omega} \right\rangle - \mu_e\left(\varepsilon_\gamma, \varepsilon\right)\right), \tag{42}$$

где ε_γ, ε – энергии падающего фотона и электрона отдачи соответственно, $\left\langle \mathbf{\Omega}_\gamma, \mathbf{\Omega} \right\rangle$ – скалярное произведение единичных векторов в направлении падающего фотона $\mathbf{\Omega}_\gamma$ и электрона отдачи $\mathbf{\Omega}$, Z – заряд атома рассеивающего вещества, $\delta(\bullet)$ – функция Дирака.

В формуле (42) фигурирует дифференциальное сечение комптоновского рассеяния [2]:

$$\sigma_{cs}\left(\varepsilon_\gamma, \varepsilon_\gamma'\right) = \frac{\pi r_e^2}{\varepsilon_\gamma'} \left(\frac{\varepsilon_\gamma}{\varepsilon_\gamma'} + \frac{\varepsilon_\gamma'}{\varepsilon_\gamma} + \left(\frac{mc^2}{\varepsilon_\gamma} - \frac{mc^2}{\varepsilon_\gamma'} \right)^2 - 2\left(\frac{mc^2}{\varepsilon_\gamma} - \frac{mc^2}{\varepsilon_\gamma'} \right) \right) \tag{43}$$

и угол вылета электрона отдачи при комптоновском рассеянии, косинус которого выражается следующим образом:

$$\mu_e\left(\varepsilon_\gamma', E\right) = \frac{mc^2 + \varepsilon_\gamma'}{\varepsilon_\gamma'} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon + 2mc^2}} , \tag{44}$$

где $\varepsilon_\gamma{}'$ – энергия рассеянного кванта, m – масса электрона, c – скорость света, r_e – классический радиус электрона.

Энергия фотоэлектронов определяется разностью энергии падающего фотона и потенциала ионизации К-оболочки атома рассеивающего материала. Направление движения фотоэлектрона определяется дифференциальным сечением фотоэффекта [2]:

$$\sigma_{ee}^{ph} = \frac{2^5 Z^5 \alpha^4 r_e^2 \beta^3 \left(1-\beta^2\right)^3 \left(1-\left\langle \mathbf{\Omega}_\gamma, \mathbf{\Omega} \right\rangle^2\right)}{\left(1-\sqrt{1-\beta^2}\right)^5 \left(1-\beta\left\langle \mathbf{\Omega}_\gamma, \mathbf{\Omega} \right\rangle\right)^4} \times$$
$$\times \left\{ \frac{(1-\sqrt{1-\beta^2})^2}{2(1-\beta^2)^{3/2}} \cdot (1-\beta\left\langle \mathbf{\Omega}_\gamma, \mathbf{\Omega} \right\rangle) + \left[1 - \frac{(1-\sqrt{1-\beta^2})(1-\beta\left\langle \mathbf{\Omega}_\gamma, \mathbf{\Omega} \right\rangle)}{2\left(1-\beta^2\right)} \right] \right\}, \quad (45)$$

где $\beta \equiv v / c$ – отношение скорости фотоэлектрона к скорости света, α – постоянная тонкой структуры, $\gamma = 1 + \varepsilon_\gamma / mc^2$.

Полные сечения комптоновского рассеяния и фотоэффекта имеют вид

$$\sigma_c^t = 2\pi Z r_e^2 \cdot \left\{ \frac{1+\gamma}{\gamma^3} \cdot \left[\frac{2\gamma\left(1+\gamma\right)}{1+2\gamma} - \ln\left(1+2\gamma\right) \right] + \frac{\ln\left(1+2\gamma\right)}{2\gamma} - \frac{1+3\gamma}{\left(1+2\gamma^2\right)} \right. ; \quad (46)$$

$$\sigma_{ph}^t = 2\pi Z^5 \alpha^4 r_e^2 \frac{(\gamma^2-1)^{\frac{3}{2}}}{(\gamma-1)^5} \times$$
$$\times \left[\frac{4}{3} + \frac{\gamma(\gamma-2)}{\gamma+1} \left[1 - \frac{1}{2\gamma\sqrt{\gamma^2-1}} ln\left(\frac{\gamma+\sqrt{\gamma^2-1}}{\gamma-\sqrt{\gamma^2-1}} \right) \right] \right]. \quad (47)$$

Вид сечений (46)(47) показывает, что начальные угловые распределения электронов отдачи вытянуты в направлении движения квантов. Для фотоэффекта средний косинус угла вылета электрона составляет величину порядка β, для комптоновского рассеяния – 0.6-0.8. Импульсы квантов и электронов отдачи жестко связаны. Это обусловлено двумя обстоятельствами. Во-первых, энергии падающих квантов существенно превышают потенциал ионизации рассеивающего вещества. Наиболее вероятным результатом рассеяния является образование кванта и электрона отдачи с энергиями, также существенно превышающими потенциал ионизации. В результате рассеивающее вещество как

бы исключается из энергетического баланса. Для падающего кванта и рассеивающих частиц сохраняются энергия и импульс.

Рассмотрим интеграл столкновений в уравнении (38). Столкновения электронов в рассматриваемом диапазоне энергий удобно оценивать следующим образом. 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 [10], приведенные в таблице 1. Здесь же представлены пробеги квантов с аналогичными энергиями до первого столкновения. Это лишний раз показывает, что пробеги квантов существенно превосходят пробеги электронов.

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	0,002250	0,001980	3,90
0,04	0,003735	0,003290	4,82
0,05	0,005625	0,004870	5,34
0,10	0,018900	0,016100	7,42
0,30	0,118125	0,095000	9,38
0,50	0,270000	0,200000	11,47
0,80	0,562500	0,377000	14,14
1,00	0,758025	0,499000	15,72

Ударная ионизация состоит в передаче части энергии и импульса атомарному электрону рассеивающей среды. В результате в непрерывном спектре оказываются два электрона. Электрон с меньшей энергией условно называют вторичным, с большей – первичным или рассеянным. Сечение ударной ионизации резко убывает с ростом передаваемой энергии [2]. Поэтому наиболее вероятны столкновения с малой передачей энергии. В результате рассеянный электрон немного изменяет свой импульс, а вторичный переходит в непрерывный спектр с малой энергией и практически изотропным угловым распределением. Эта особенность лежит в основе приближения 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	$8{,}8\ 10^{-6}$	0,002250	0,47	$1{,}5\ 10^{-5}$	$7\ 10^{-6}$	0,001980
0,04	$1{,}1\ 10^{-5}$	0,003735	0,57	$1{,}9\ 10^{-5}$	$8{,}8\ 10^{-6}$	0,003290
0,05	$1{,}4\ 10^{-5}$	0,005625	0,66	$2{,}2\ 10^{-5}$	$1{,}1\ 10^{-5}$	0,004870
0,10	$2{,}6\ 10^{-5}$	0,018900	1,13	$4{,}1\ 10^{-5}$	$1{,}9\ 10^{-5}$	0,016100
0,30	$4{,}9\ 10^{-5}$	0,118125	1,82	$8{,}1\ 10^{-5}$	$3{,}3\ 10^{-5}$	0,095000
0,50	$6{,}4\ 10^{-5}$	0,270000	2,04	$1\ 10^{-4}$	$4\ 10^{-5}$	0,200000
0,80	$7{,}8\ 10^{-5}$	0,562500	2,10	$1{,}2\ 10^{-4}$	$4{,}4\ 10^{-5}$	0,377000
1,0	$8{,}6\ 10^{-5}$	0,758025	2,07	$1{,}3\ 10^{-4}$	$4{,}6\ 10^{-5}$	0,499000

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.

По этим причинам будем рассматривать интеграл столкновений в уравнении (38) в приближенном виде:

$$\begin{aligned} &\sigma_e^t(\mathbf{r},p)vf - \int d\mathbf{p}'\sigma_{ee}(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{p}')v'f(\mathbf{p}') \to \\ &\to -\frac{1}{p^2}\frac{\partial}{\partial p}\left(p^2\kappa(\mathbf{r},p)f\right) + \sigma_{el}^{trs}(\mathbf{r},p)vf \end{aligned}, \qquad (48)$$

где $\sigma_{el}^{trs}(\mathbf{r},p)=1/\lambda^{el}$ – транспортное сечение упругого рассеяния электронов, $\kappa(\mathbf{r},p)$ – тормозная способность электрона.

5. Метод частиц для электронов

Рождение электронов отдачи можно моделировать аналогично квантам на основе источника (29) $\sigma_{comp}^{t} w_{\gamma e}^{c}(\mathbf{p},\mathbf{p}_i)+\sigma_{ph}^{t} w_{\gamma e}^{ph}(\mathbf{p},\mathbf{p}_i)$:

$$\frac{\sigma_{comp}^{t}(\mathbf{p}_i)}{K}\sum_{k=1}^{K}\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_k^c(\mathbf{p}_i)\right)\to$$

$$\to\frac{\sigma_{comp}^{t}(p_i)}{4\pi KL}\sum_{k=1}^{K}\frac{\delta\left(p-p_k^c(p_i)\right)}{p^2}\delta\left(\mu-\mu_k^c(p,p_i)\right)\sum_{n=0}^{L}\delta\left(\chi-\frac{2\pi n}{L}-\pi\right),$$

$$\frac{\sigma_{ph}^{t}(\mathbf{p}_i)}{K}\sum_{k=1}^{K}\delta\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}_k^c(\mathbf{p}_i)\right)\to$$

$$\to\frac{\sigma_{ph}^{t}(p_i)}{4\pi KL}\sum_{k=1}^{K}\frac{\delta\left(p-p_k^{ph}(p_i)\right)}{p^2}\delta\left(\mu-\mu_k^{ph}(p,p_i)\right)\sum_{n=0}^{L}\delta\left(\chi-\chi_n^e\right)$$

с помощью формул (31)-(34), построенных для долей квантов, испытавших взаимодействие на отрезке l.

На отрезке l каждый квант порождает $K\times L$ фотоэлектронов и $K\times L$ комптоновских электронов. Каждый комптоновский электрон имеет энергию $\varepsilon_e^c=mc^2\left(1-\sqrt{1+p_k^{c2}/m^2c^2}\right)$, направление движения $\overline{\mathbf{e}}_e^c$, образующее углы θ_e^k и $\chi_e^n=\pi+\chi_n$ с направлением исходного кванта, долю $N=N_c/(KL)$. Каждый фотоэлектрон имеет энергию $\varepsilon_e^{ph}=mc^2\left(1-\sqrt{1+p_k^{ph2}/m^2c^2}\right)$, направление движения $\overline{\mathbf{e}}_e^{ph}$, образующее углы θ_{ph}^k и χ_{ph}^n с направлением исходного кванта, долю $N=N_{ph}/(KL)$.

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

$$\varepsilon_\gamma N=\varepsilon_{\gamma C}N_C+\varepsilon_\gamma N_1+\varepsilon_{ePh}N_{Ph}+\varepsilon_{eC}N_C+E,$$

где E – энергия, ушедшая в энерговыделение.

Каждый из квантов следующего поколения имеет энергию $\varepsilon_\gamma^c=\varepsilon(p_k)=cp_k$, направление движения $\overline{\mathbf{e}}_1$, образующее углы θ_γ^k и $\chi_n=2\pi n/L$ с направлением исходного фотона $\overline{\mathbf{e}}$, долю $N=N_C/(KL)$. Индекс k определяет зенитный угол и

энергию кванта, индекс n – азимутальный угол. Квант, не испытавший столкновения на отрезке l, сохраняет долю N_1 и энергию $\varepsilon_\gamma = cp_i$

Рассмотрим фото- или комптоновский электрон с энергией ε_0, долей N_0, двигающийся в направлении $\bar{\mathbf{e}}_e\left(e_{ex}, e_{ey}, e_{ez}\right)$. Модель столкновений, обусловленная приближением (38), предполагает, что электроны теряют начальную энергию за счет неупругого рассеяния. Кроме того, электроны теряют импульс (направленность движения) за счет упругого рассеяния. Этот процесс моделируется изменением начальной доли.

Рассмотрим движение электрона на шаге l, полагая $l \ll \lambda^{un}$. Энергия электрона будет уменьшаться за счет неупругих взаимодействий. Изменение энергии вычисляется по формуле Бете–Блоха:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_0 - l \cdot \kappa, \tag{49}$$

где ε_1 – новая энергия электрона [эВ], κ – тормозная способность вещества[эВ/см].

Если $\varepsilon_1 < 0$, то следует положить $\varepsilon_1 = 0$. Это означает, что электрон потерял всю свою энергию.

Доля электрона изменяется за счет неупругого рассеяния:

$$N_1 = N_0\left(1 - \sigma_{el}^{trs}\left(\mathbf{r}, p\right) l\right), \tag{50}$$

где N_1 – новая доля электрона.

Формулы (49), (50) аппроксимируют характеристики уравнения (38) с интегралом столкновений (39) с первым порядком точности, если выполнены условия $l \ll \lambda^{un}$, $l \ll \lambda^{el}$.

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

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

где E – выделенная энергия [эВ].

Плотность энерговыделения [эВ/см^3]:

$$\omega = E / \Delta V,$$

где ΔV – объем ячейки сетки.

Движущийся электрон создает в ячейке плотность тока j [СГСЭ/см^{2}с]:

$$\mathbf{j} = -e\left(N_0 + N_1\right) F\left(t - z/c\right) l \mathbf{e}_e / 2\Delta V,$$

где e – заряд электрона. Если электрон потерял всю свою энергию или изотропизовался, то его пробег l кладется равным полному смещению электрона $\lambda_{c.}$ [см]. Эта величина рассчитывается по одной из двух формул:

$$\frac{1}{\lambda_c} = \frac{1}{\lambda^{un}} + \frac{1}{\lambda^{el}}, \ldots\ldots\ldots\ldots \lambda_c = \lambda^{el}\left(1 - \exp\left\{-\frac{\lambda^{un}}{\lambda^{el}}\right\}\right).$$

При достаточно малых смещениях обе эти формулы дают близкий результат.

Заключение

Использование дельта-аппроксимаций позволяет построить алгоритм решения уравнений переноса, аналогичный методу частиц [15]. Распределения квантов и электронов отдачи представляются в виде конечных сумм частиц с заданными координатами, импульсами и весами. Алгоритм вычисления текущих значений параметров частиц реализован на параллельном суперкомпьютере в технологиях OpenMP и MPI. По эффективности разработанный метод превосходит методы дискретных ординат и Монте-Карло при решении ряда практических задач с определенными спектральными характеристиками. Эффективность достигается априорным анализом сечений рассеяния и размеров неоднородностей рассеивающей среды.

Библиографический список

1. Садовничий Д.Н., Тютнев А.П., Милёхин Ю.М., Дорофеев А.Н., Саенко В.С., Пожидаев Е.Д. Электризация полимерных диэлектриков потоками электронов на геостационарной орбите // Перспективные материалы, 2004. №2. С. 15-19.
2. Гайтлер Л. Квантовая теория излучения. М.: Иностранная литература, 1956.
3. ГОСТ 20426–82. Контроль неразрушающий. Методы дефектоскопии радиационные. Область применения. М.: ГК СССР по стандартам, 1982.
4. Вайнберг И. А., Вайнберг Э. И. Критерии выбора универсального компьютерного томографа для отработки технологии и сертификации ответственных промышленных изделий // В мире НК. 2011. № 2 (52). С. 20–25.
5. Иващенко Д.М., Федоров А.А. Российские ускорители электронов, использующиеся в качестве моделирующих установок // Вопросы атомной науки и техники, серия «Физика радиационного воздействия на радиоэлектронную аппаратуру». 2002. Вып. 3. С. 120-128.
6. Базаров И.П., Николаев П.Н. Теория систем многих частиц. М.: Изд-во МГУ, 1984. 312 с.
7. Силин В.П. Введение в кинетическую теорию газов. М.: Наука, 1971. 339 с.

8. Кольчужкин А.М., Учайкин В.В. Введение в теорию прохождения частиц через вещество. М.: Атомиздат, 1978.
9. Кейз К., Цвайфель П. Линейная теория переноса. М.: Мир,1972. 384 с.
10. 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://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2023-19
11. Whittaker E.T., Watson G.N. A Course of Modern Analysis. Cambridge University Press, 1996.
12. Гельфанд И.М., Шилов Г.Е. Обобщенные функции и действия над ними. М.: Добросвет, 2000.
13. Шилов Г.Е. Математический анализ. Второй специальный курс. М.: Изд-во МГУ, 1984.
14. Лоэв М. Теория вероятностей. М.: Иностранная литература, 1962. 719 с.
15. Braun W., Hepp K. The Vlasov Dynamics and Its Fluctuations in the 1/N Limit of Interacting Classical Particles // Commun. Math. Phys., 1977. № 56.