

УДК 330.46:53

## МОДЕЛЮВАННЯ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРУ ЕЛЕКТРОНІВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Афанасьєва Л.М. к. техн.н., доцент кафедри вищої математики й ЕММ,  
Харківський національний економічний університет імені Семена Кузнеця, м. Харків,  
Україна

**Анотація** – розроблен алгоритм і програми для комп'ютерного моделювання методом Монте Карло експерименту по вимірі спектрів пружного і непружного розсіювання електронів.. Енергія електронів, що бомбардують, і ядра-мішені вибиралися таким чином, що задача розсіювання розв'язувалась в борновском наближенні.

**Ключові слова** — метод Монте Карло, спектр пружного і непружного розсіювання, борновском наближенні, електрон, позитрон, моделювання,

Для комп'ютерного моделювання проходження ядерних часток – нейтронів, протонів, електронів, позитронів і гама квантів високих енергій до 2000 року колективами вчених були створені комп'ютерні коди GEANT, MCNP, PENELOPE.

Алгоритм моделювання в PENELOPE заснований на моделі розсіювання, у якій комбінуються чисельні бази даних і аналітичні вираження для перетину взаємодії для різних процесів взаємодії електронів з ядрами й атомами речовини в діапазоні енергій електронів, що налітають, позитронів і гама квантів від декількох сотень еВ до енергій  $\approx 1$  ГэВ. Імітація проходження високоенергетичних електронів заснована на комбінації однократних зіткнень з відхиленнями на великі кути з великими втратами енергії і багаторазових зіткнень з малими втратами енергії і розсіюванні на малі кути.

Комп'ютерний код PENELOPE успішно застосовується в багатьох лабораторіях і комерційних фірмах світу для розрахунків енергетичних і кутових розподілів

гальмового випромінювання конвертерів, що опромінюються електронами заданої енергії. Іонізаційні втрати енергії релятивістських електронів описуються добре відомою (див., наприклад, Широков, Юдин) формулою Бете, яку він вивів на основі формули Мьоллера для розсіювання електрона на електроні. Формула враховує як релятивістські та спінові ефекти, так і ефекти обміну за рахунок нерозрізненності падаючих електронів та електронів мішені. Для ультрарелятивістських електронів ( $\beta \rightarrow 1$ ) формула для гальмівної здатності речовини спрощується, та її можна записати у вигляді

$$-\frac{dE}{dx} \approx \frac{2\pi e^4 n_e}{mc^2} \left\{ \ln \frac{(mc^2)^2}{2\bar{I}^2(1-\beta^2)^{3/2}} + \frac{1}{8} - \delta_E \right\}. \quad (1)$$

Тут  $\bar{I}$  – це середній іонізаційний потенціал атома, який зазвичай вважають таким, що дорівнює  $13,5 Z$  еВ,  $\delta_E$  – це поправка на ефект густини, який викликано ослабленням електромагнітного поля частинки, що рухається, внаслідок поляризації атомів гальмуючого середовища. Для релятивістських електронів

$$\delta_E \approx \left[ \ln(\hbar\omega_p)^2 / (1-\beta^2)\bar{I}^2 \right] - 1. \quad (2)$$

Роль цієї поправки є великою в діапазоні енергій, при яких проводяться дослідження структури ядер методом розсіювання електронів.

Якщо тепер до формули (1) для гальмівної здатності підставити вирази для  $\delta_E$  і  $\omega_p$ , то середня енергія збудження  $\bar{I}$  до кінцевого результату не входить. Таким чином, у

наближенні дуже великої енергії гальмівна здатність залежить від властивостей середовища лише через енергію плазмонів  $\hbar\omega_p$ , і, отже, лише від густини та частки  $Z/A$ .

Урахування поправки  $\delta_E$  значно придушує релятивістське зростання  $dE/dx$ , а переріз непружних зіткнень виходить на плато — плато Фермі.

Статистичний характер взаємодії іонізуючих частинок із речовиною призводить до того, що, по-перше, флюктує величина втрати енергії при кожному окремому зіткненні. Для релятивістських електронів мінімальна енергія дорівнює  $\hbar\omega_p$ , а максимальна —

$mc^2/(1-\beta^2)$ . А по-друге, флюктує і кількість самих зіткнень при проходженні шару скінченної товщини. Внаслідок цього спостерігається значний розкид втрат енергії електронів у реальних мішенях, що їх використовують в експерименті. Шар речовини  $x$  втрачає частку енергії, яка лежить в інтервалі між  $\Delta$  і  $\Delta+d\Delta$  (функцію  $f(x, \Delta)$  нормовано на одиницю). Диференціальна ймовірність втрати енергії виражається через універсальну функцію Ландау  $\varphi(\lambda)$

$$f(x, \Delta)d\Delta = \varphi(\lambda)d(\lambda) \quad (3)$$

безрозмірної змінної  $\lambda = \frac{\Delta - \Delta_0}{\xi}$ , де

$$\xi = x \frac{2\pi N_A e^4 \rho \cdot Z}{mc^2 \cdot \beta^2 \cdot A} \quad (4)$$

Величина  $\xi$  має сенс індивідуальної середньої втрати енергії при однократному зіткненні на шляху  $x$ ,  $\Delta_0$  — це найбільш імовірна втрата енергії на цьому шляху. Для релятивістських електронів, для яких ефект густини досягає граничної величини, найбільш імовірна втрата енергії не залежить від енергії електрона, і її можна представити у вигляді:

$$\Delta_0 = \xi \left[ \ln \left( \frac{x}{a_0} \right) + 0.37 \right], \quad (5)$$

де  $a_0 = \hbar^2 / me^2$  — це радіус борівської орбіти, а  $x$  — це фізична товщина мішені в см. Для практичного застосування формулу (5) можна ще більше спростити, якщо взяти до уваги, що для ядер середньої атомної ваги частка  $Z/A \approx 1/2$ :

$$\Delta_0 = 0.077(\rho \cdot x) \left[ \ln \frac{x}{a_0} + 0.37 \right] = 0.077(\rho \cdot x) [\ln x + 19.43] \quad (6)$$

Розподіл по енергіях у пучку електронів після проходження шару речовини мішені спотворюється за рахунок іонізаційних і радіаційних втрат енергії, а також втрат енергії при електрон-електронних зіткненнях. Для того, щоб знайти результуючий розподіл, використовують метод статистичних випробувань (метод Монте-Карло). Він полягає в наступному: знаючи енергетичний розподіл частинок у первинному пучку та розподіл втрат енергії в речовині, у випадковий спосіб розігрують значення енергії електрона, а потім — величину втрати енергії. Після багаторазового повторення цієї процедури дістають шуканий розподіл.

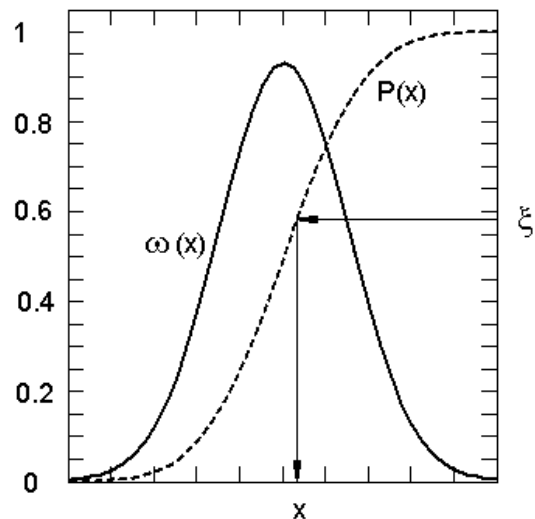


Рис.1. Вибір випадкового числа  $x$  з розподілу  $\omega(x)$  з використанням методу оберненого перетворення

Для того, щоб розіграти можливі значення  $X_i$  безперервної випадкової величини  $X$  з заданою в інтервалі  $(X_{min}, X_{max})$  функцією щільності ймовірності  $\omega(x)$ , спочатку будують інтегральний (кумулятивний) розподіл:

$$P(x) = \int_{X_{min}}^x \omega(t) dt.$$

$P(x)$  змінюється в межах  $(0,1)$ . Потім, для випадкового числа  $\xi_i$ , що належить інтервалу  $(0,1)$ , розв'язують рівняння  $\xi_i = P(x_i)$  відносно змінної  $x$ . Оскільки  $P(x)$  – це зростаюча функція, то для розв'язання цього рівняння будують обернену функцію  $P^{-1}(\xi)$  та здобувають величину  $x_i = P^{-1}(\xi_i)$ , що належить інтервалу  $(X_{min}, X_{max})$ . Це є рівняння для вибірки величини  $x$  з розподілу  $\omega(x)$ . Обрана в такий спосіб випадкова величина відповідає заданій функції розподілу (рис.1). Вибірка значень із заданого розподілу щільності ймовірності здійснювалася в такий спосіб. Для розподілів втрат енергії при електрон-електронних зіткненнях і втрат енергії на гальмівне випромінювання легко здобути в явному вигляді інтегральні розподіли ймовірності:

$$P_{rad}(x) = \frac{1}{N_{rad}} \int_{\delta}^x \varphi_{rad}(k) dk = \frac{\ln x - \ln \delta}{\ln E_c - \ln \delta}$$

$$P_{coll}(x) = \frac{1}{N_{coll}} \int_{\delta}^x \varphi_{coll}(k) dk = \frac{x - \delta}{x} \frac{\delta}{E_c - \delta}$$

Звідси дістають співвідношення для вибірок:

$$\left. \begin{aligned} \Delta_{rad} &= \delta \cdot \exp(\xi \cdot \ln(E_c / \delta)) \\ \Delta_{coll} &= \frac{E_c \delta}{E_c - \xi(E_c - \delta)} \end{aligned} \right\}$$

де  $\xi$  – це випадкове число з інтервалу  $(0,1)$ ,  $N_{rad}$  і  $N_{coll}$  – це нормувальні константи,  $\delta$  і  $E_c$  – це мінімальне та максимальне значення втрат енергії.  $N_{rad}$  і  $N_{coll}$  для тонких шарів речовини набувають значень, менших за одиницю; вони є ймовірністю того, що величина втраченої енергії перевищує мінімальне значення, яке дорівнює  $\delta$ .

Використовуючи вказані вище рівняння вибірок, була розроблена програма "РЕППШ", за допомогою якої можна було моделювати розподіл електронів заданої енергії с заданим розподілом у первинному пучку після проходження слоя речовини (товщина слоя обмежена умовою  $d < 0.01$  р.д).

Результати імітації порівнянні з результатами, які було здобуто за допомогою програми PENELOPE. Добра узгодженість результатів обох розрахунків підтвердила наше припущення щодо справедливості використання умови повної екраніровки ядра атомними електронами та наближення однократних зіткнень для опису радіаційних втрат енергії.

#### Список використаної літератури

1. Д. Худсон. Статистика для фізиків. – М.: Мир, 1970 – 296 с.
2. Berger M.J., "Applicability of the condensed-random walk Monte Carlo method in high Z materials", Radiate.Phys.Chem.,1998,53,191-203,
3. Zheng-Ming L. and A.Brahme, "An overview of the transport theory of charged particles", Radiate.Phys.Chem.,1993, 41,673-703.
4. PENELOPE – a code system for Monte

#### Автор

Афанасьєва Л.М, доцент, Харківський національний економічний університет імені Семена Кузнеця  
(lydia.afa@gmail.com)

Тези доповіді надійшли 9 лютого 2017 року.  
Опубліковано в авторській редакції.