



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

ИФВЭ 2016–7

Е.Н. Савицкая, А.В. Санников

**Моделирование транспорта электронов
и позитронов в программе FAN15**

Направлено в АЭ

Протвино 2016

Аннотация

Савицкая Е.Н., Санников А.В. Моделирование транспорта электронов и позитронов в программе FAN15: Препринт ИФВЭ 2016–7. – Протвино, 2016. – 11 с., 4 рис., библиогр.: 25.

Представлено описание методики моделирования переноса электронов и позитронов энергией 1 кэВ – 10 МэВ, реализованной в программе FAN15. Учитывается многократное кулоновское рассеяние, флуктуации ионизационных потерь, образование δ -электронов, а также тормозных и рентгеновских фотонов. В расчетах тормозного излучения и испускания рентгеновских фотонов при релаксации ионизированных атомов используются библиотеки оцененных данных EEDL и EADL. Результаты расчета сравниваются с экспериментальными данными по энергетическим, угловым и дозовым распределениям электронов в различных поглотителях.

Abstract

Savitskaya E.N., Sannikov A.V. Electron and Positron Transport Simulation in the FAN15 Code: IHEP Preprint 2016–7. – Protvino, 2016. – p. 11, figs. 4, refs.: 25.

A description of the method of 1 кэВ – 10 МэВ electrons and positrons transport simulation, realized in the FAN15 code, is presented. Multiple Coulomb scattering, ionization loss fluctuations, δ -electrons as well as bremsstrahlung and roentgen photons production are taken into account. In the calculations of bremsstrahlung and roentgen photons production during ionized atoms relaxation the evaluated data libraries EEDL and EADL are used. Results of calculations are compared with experimental data on energy, angular and dose distributions of electrons in different absorbers.

Введение

Расчетные методы транспорта ионизирующих частиц широко применяются в задачах обеспечения радиационной безопасности, в исследованиях чувствительности детекторов частиц и в других приложениях. В работе [1] представлено описание программы переноса низкоэнергетических фотонов и нейтронов FAN15, основанной на использовании современных библиотек атомных и ядерных данных. Программа предназначена как для самостоятельного применения, так и в качестве низкоэнергетического блока программы переноса высокоэнергетических адронов HADRON [2], что позволяет моделировать транспорт нейтронов с энергией от 5 ГэВ до тепловых энергий, а фотонов – от 10 МэВ до 1 кэВ в сложных геометриях с произвольным составом веществ. Данная работа посвящена описанию физических методов и алгоритмов, используемых в программе FAN15 при моделировании методом Монте-Карло переноса электронов и позитронов с энергией до 10 МэВ, их взаимодействий с веществом и образования вторичных частиц.

Модель расчета

В задачах с источниками электронов и некоторых задачах с источниками фотонов требуется детальное моделирование энерговыделения электронов и позитронов в веществе с учетом транспорта e^+ и e^- , выбивания δ -электронов, испускания тормозных фотонов и переноса вторичных частиц. Движение заряженных частиц в веществе сопровождается огромным количеством упругих рассеяний частиц ядрами среды и взаи-

модействий с атомарными электронами. Поэтому аналоговое моделирование индивидуальных столкновений обычно применяется только в расчетах поверхностных эффектов и при прохождении очень тонких слоев вещества заряженными частицами. В остальных случаях применяют методы группировки столкновений.

В FAN15 используется гибридная модель, основанная на разделении всех соударений электронов на “близкие” и “далекие”. “Близкие” (катастрофические) столкновения приводят к значительным потерям энергии с выбиванием δ -электрона или излучением фотона с энергиями выше пороговых E_e^{cut} и E_γ^{cut} соответственно. Спектры δ -электронов имеют вид $\sim E_e^{-2}$, а тормозных фотонов $\sim E_\gamma^{-1}$, поэтому катастрофические столкновения редки. Длина пробега до них разыгрывается с использованием сечений этих взаимодействий. Между отдельными катастрофическими столкновениями электрон испытывает большое количество “далеких” столкновений с малыми передачами энергии. К ним относятся упругие рассеяния на малые углы, а также ионизационные и радиационные потери.

Для учета искривления траектории частицы за счет упругих рассеяний на малые углы в программе используется модель группировки малых передач энергии. Траектория электронов разбивается на малые фрагменты пути s_i , на каждом из которых электрон теряет в среднем одинаковую долю своей энергии: $E_{i+1} = kE_i$. В программе FAN15 по умолчанию $k = 0.99$. Значение k может быть изменено во входном файле задачи. Угол многократного рассеяния на фрагменте пути s_i разыгрывается с использованием распределения Мольер [3], полученного в малоугловом приближении:

$$f_M(\vartheta, s) \vartheta d\vartheta = 2 \exp(-\vartheta^2) + f_1(\vartheta)/B + f_2(\vartheta)/B^2 + \dots \quad (1)$$

Здесь угол многократного рассеяния θ входит в безразмерную величину $\vartheta = \theta / \sqrt{\chi_c^2 B}$.

Параметр B находится из решения трансцендентного уравнения:

$$B - \ln B = \ln(\Omega_0/1.167). \quad (2)$$

Обычно угловое распределение Мольер умножается на поправочный множитель $(\sin \theta / \theta)^{1/2}$, введенный Бете [4]. В FAN15 используется модификация поправки Бете, описанная в статье [5] и реализованная в программе FLUKA [6].

Функции $f_1(\vartheta)$ и $f_2(\vartheta)$ задаются в виде таблиц [4]. Параметры среды и длина пути s_i определяют среднее число столкновений $\Omega_0 = \chi_c^2 / \chi_a^2$ и характеристический угол многократного рассеяния χ_c :

$$\chi_c^2 = \frac{4\pi e^4 z^2}{(pv)^2} s_i \sum n_k Z_k (Z_k + 1), \quad (3)$$

где n_k – количество атомов k -го типа в 1 см³ вещества; z и Z_k – заряды частицы ($z = \pm 1$) и рассеивающего ядра; p и v – импульс и скорость частицы; e – заряд электрона. Угол экранирования кулоновского поля ядра k атомарными электронами χ_a^k рассчитывается по формулам:

$$\chi_a^k = \chi_0^k \sqrt{1.13 + 3.76a^2 f_s}, \quad \chi_0^k = \frac{1.13}{137} \left(\frac{m_e c}{p} \right) Z_k^{1/3}, \quad a = \frac{Z_k}{137\beta}, \quad (4)$$

где χ_0^k – угол экранирования в первом Борновском приближении, $f_s = \sqrt{E_e / (E_e + m_e c^2)}$ – эмпирическая поправка [7]. Угол экранирования для сложных веществ находится из формулы [8]:

$$\ln \chi_a = \left(\sum n_k Z_k^2 \ln \chi_a^k + \sum n_k Z_k \ln \chi_{el}^k \right) / \left(\sum n_k Z_k (Z_k + 1) \right), \quad (5)$$

где χ_{el}^k – поправка, учитывающая рассеяние на электронах атома k .

Длина отрезка s_i корректируется, если не выполняются условия применимости теории Мольер в формулировке [9]: $\ln(\Omega_0/1.167) \geq 1$ и $\chi_c^2 B \leq 1$. Первое условие ограничивает минимальное число столкновений, при котором разыгрывается многократное рассеяние. Второе условие обеспечивает соблюдение малоуглового приближения и определяет максимальную величину s_i . Координаты электрона после прохождения криволинейного отрезка пути s_i определяются случайным розыгрышем из распределения продольных и поперечных смещений, используемого в программе ETRAN [10].

Изменение энергии электрона на отрезке пути s_i в приближении непрерывного замедления определяется ограниченными линейными потерями энергии электронов на ионизацию и тормозное излучение в веществе:

$$\left(-\frac{dE}{dx} \right) = \sum_k n_k \varepsilon_k, \quad (6)$$

где ε_k – ограниченная атомная тормозная способность для атомов k -го типа:

$$\varepsilon_k = \varepsilon_{ion} + \varepsilon_{br} = \int_0^{E_e^{cut}} E_e \frac{d\sigma^{ion}}{dE_e} dE_e + \int_0^{E_\gamma^{cut}} E_\gamma \frac{d\sigma^{br}}{dE_\gamma} dE_\gamma. \quad (7)$$

Флуктуации ограниченных ионизационных потерь разыгрываются в конце отрезка s_i из интегральных функций усеченного распределения Ландау [9].

Вероятность катастрофического столкновения при замедлении электрона от энергии E_0 до E_1 в приближении непрерывного замедления равна

$$p(E_0, E_1) = 1 - \exp\left[-\int_{E_1}^{E_0} \frac{\Sigma(E)}{(-dE/dx)} dE\right], \text{ где} \quad (8)$$

$$\Sigma(E) = \sum_k n_k [\sigma_k^{ion}(E, E_e > E_e^{cut}) + \sigma_k^{br}(E, E_\gamma > E_\gamma^{cut})]. \quad (9)$$

Частичные сечения выбивания δ -электрона и испускания фотона тормозного излучения, отвечающие за вылет частиц с энергией больше пороговой E_p^{cut} ($p = e, \gamma$), определяются долей этих частиц в спектрах:

$$\sigma(E, E_p > E_p^{cut}) = \int_{E_p^{cut}}^{E_p^{max}} \frac{d\sigma}{dE_p} dE_p, \quad (10)$$

где $E_p^{max} = E$ для $p = \gamma$ и e^+e^- – взаимодействий. В случае e^-e^- – столкновений $E_p^{max} = E/2$ из-за неразличимости частиц.

Для процессов ионизации использовались спектры и сечения Мёллера [11] и Баба [12] для электронов и позитронов соответственно. Для тормозного излучения электронов – спектры, табулированные в работе [13], и сечения из библиотеки EEDL [14]. Различие тормозного излучения позитронов и электронов учтено введением поправок в частичные сечения тормозного излучения и ограниченные радиационные тормозные способности для позитронов методом, используемым в GEANT4 [15]. Направление вылета δ -электрона определяется законом сохранения импульса. Для электронов с энергиями выше 500 кэВ угловое распределение тормозных фотонов описывается аппроксимирующей функцией, полученной авторами GEANT4. Ниже 500 кэВ используются расчетные данные из работы [16]. Угловое распределение фотонов задается таблицами для шести энергий электронов от 1 до 500 кэВ и атомов с $Z = 1, 2, 8, 13, 47, 79$ и 92. Для

других атомов и энергий E_e применяется линейная интерполяция по Z и $\ln E_e$. Транспорт электронов, позитронов и фотонов моделируется до достижения их энергий пороговых величин, ниже которых они поглощаются локально. Минимальные энергии обрезания фотонов E_γ^{cut} и электронов (позитронов) E_e^{cut} , заданные в программе по умолчанию, равны 1 кэВ. В конце пробега позитрона из изотропного углового распределения разыгрывается вылет в противоположных направлениях двух аннигиляционных фотонов с энергиями 511 кэВ.

В программе предусмотрена возможность задания во входном файле энергий обрезания фотонов и электронов более 1 кэВ, что приводит к значительному снижению времени счета. Кроме того, есть возможность учета процессов релаксации ионизированных атомов, приводящих к вылету рентгеновских фотонов с энергиями выше пороговой с K - и L -оболочек. На базе библиотеки оцененных атомных данных EADL [14], создана вспомогательная библиотека, содержащая средние энергии фотонов с $E_\gamma > 1$ кэВ, испускаемых при снятии возбуждения атомов, и их суммарные выходы для всех атомов. Средние количества ионизаций K - и L -оболочек атомов k -го типа при замедлении электронов рассчитываются в приближении непрерывного замедления:

$$f_k^{K(L)}(E_0, E_1) = n_k \int_{E_1}^{E_0} \frac{\sigma_k^{K(L)}(E)}{(-dE/dx)} dE, \quad (11)$$

где $\sigma_k^{K(L)}$ – сечение ионизации K - или L -оболочки k -го атома из библиотеки EEDL.

Тестовые расчеты

Тестирование моделей и алгоритмов транспорта электронов в FAN15 проводилось с использованием большого количества экспериментальных распределений поглощенной энергии в различных веществах, а также спектров и угловых распределений электронов, прошедших через плоские поглотители либо отраженных от них. Ниже представлены некоторые из них [17-23], полученные для условий нормального падения электронов, в сравнении с результатами расчетов по FAN15. Данные [18, 21-23] взяты из статьи Бергера [24].

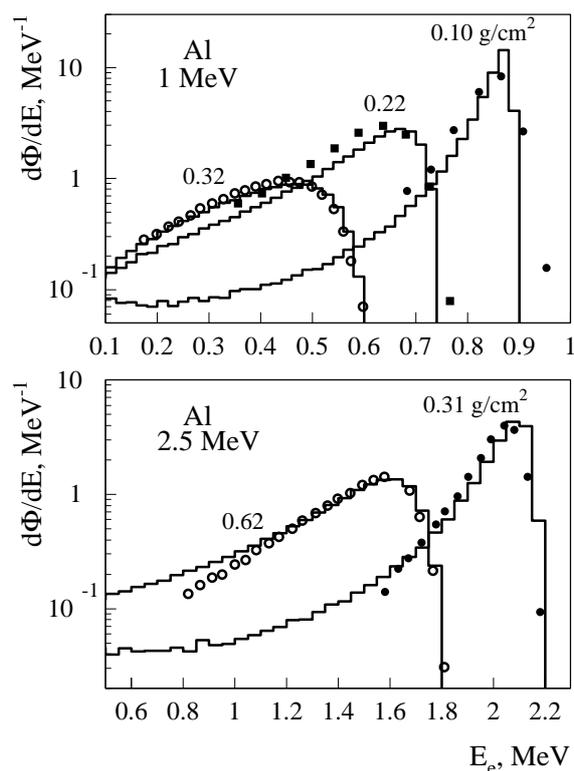


Рис. 1. Спектры электронов, прошедших сквозь слои алюминия различной толщины при нормальном падении электронов. Точки – экспериментальные данные [17, 18], гистограммы – расчет по FAN15.

Спектры электронов с начальными энергиями 1 и 2.5 МэВ за алюминиевыми поглотителями различной толщины показаны на рис. 1. На рис. 2 приведены угловые распределения электронов за алюминиевыми и медными защитами различной толщины при энергиях электронов 1 и 1.75 МэВ соответственно. Угловые распределения электронов с начальной энергией 1.75 МэВ, отраженных от свинцового, медного и алюминиевого барьеров, представлены на рис. 3. На рис. 4 показаны глубинные дозовые распределения электронов с энергиями от 0.5 до 10 МэВ в различных поглотителях, в том числе гетерогенных.

В целом наблюдается удовлетворительное согласие расчетов по FAN15 с экспериментальными данными. Отдельные расхождения с экспериментом могут быть как следствием использования приближенных моделей транспорта электронов, так и следствием экспериментальных погрешностей. Второе объяснение представляется более вероятным. Так, рассчитанные в работе [24] по программе ETRAN спектры электронов за алюминиевыми поглотителями различной толщины при энергии 1 МэВ близки к

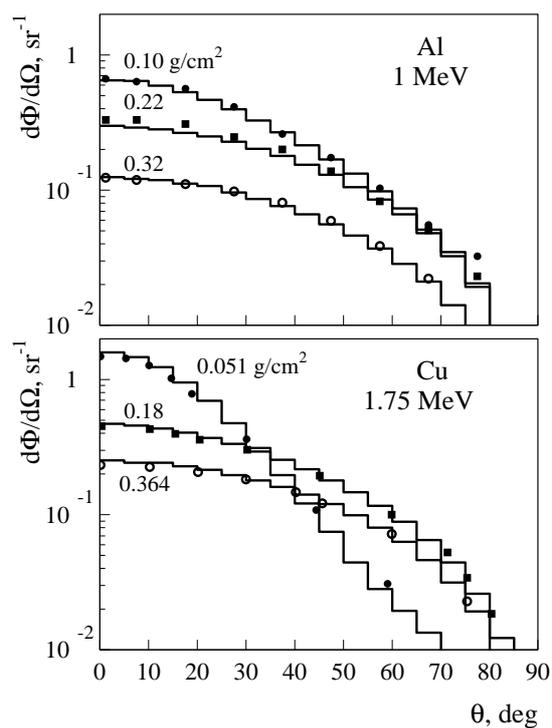


Рис. 2. Угловые распределения электронов с энергиями выше E_{min} , прошедших сквозь слои алюминия ($E_{min} = 100$ кэВ) и меди ($E_{min} = 150$ кэВ) различной толщины. Точки – экспериментальные данные [17, 18]. Гистограммы – расчет по FAN15.

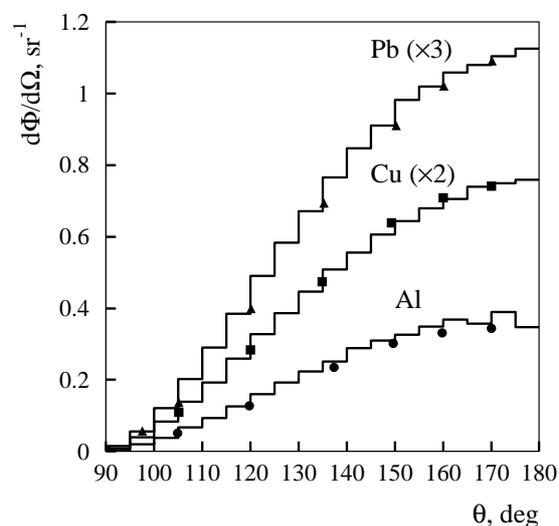


Рис. 3. Угловые распределения электронов с энергией 1.75 МэВ, отраженных от слоев алюминия толщиной 545 мг/см^2 , меди (364 мг/см^2) и свинца (463 мг/см^2) при $E_{min} = 150$ кэВ. Точки – эксперимент [18]. Гистограммы – расчет по FAN15.

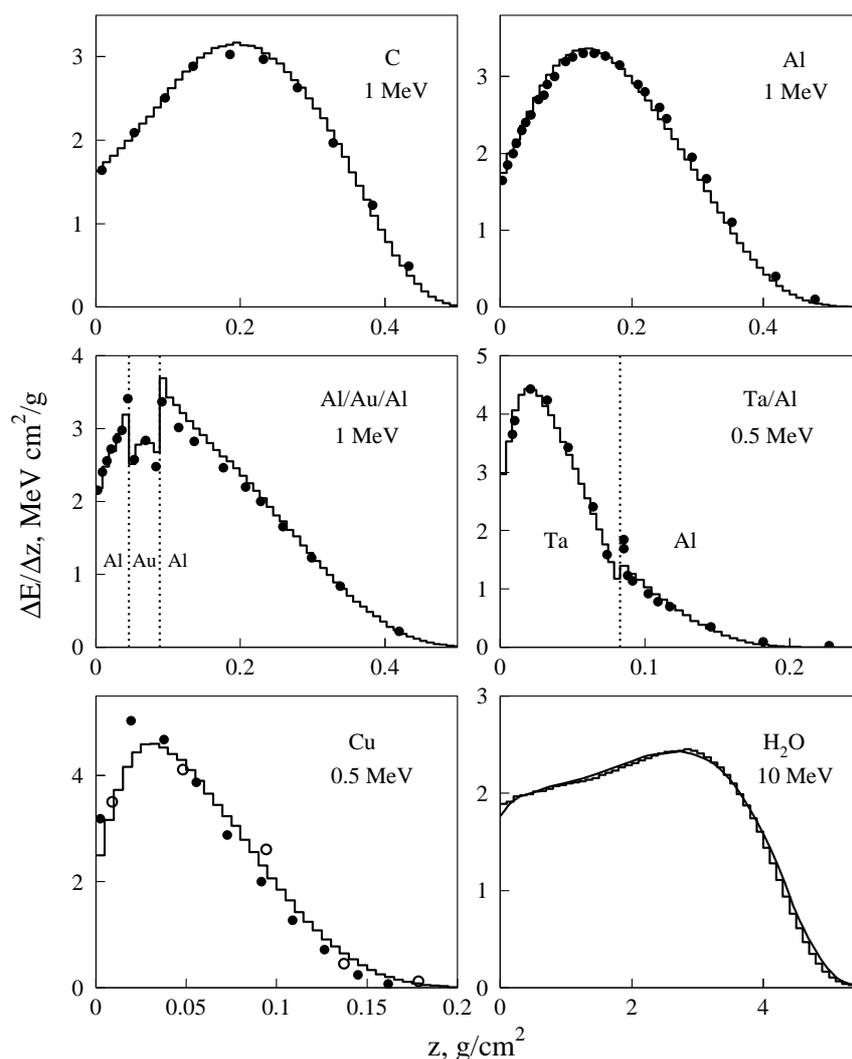


Рис. 4. Глубинные распределения поглощенной энергии электронов в различных материалах при нормальном облучении. Точки – экспериментальные данные: C, Al, Al/Au/Al (1 МэВ) [19]; Ta/Al (0.5 МэВ) [20]; Cu (0.5 МэВ) [21, 22]. Сплошная линия для H₂O (10 МэВ) – экспериментальные данные [23]. Гистограммы – расчет по FAN15.

результатам нашего расчета, показанным на рис. 1. Результаты расчета и эксперимента по глубинному дозовому распределению электронов с энергией 1 МэВ в трехслойном поглотителе Al/Au/Al, приведенные на рис. 4, обнаруживают небольшое расхождение вблизи границы Au/Al. Представленный в статье [25] анализ результатов моделирования этого эксперимента по программам EGS4, FLUKA и MCNP показал, что, несмотря на разные модели транспорта электронов, во всех случаях имеет место похожее различие с экспериментом. Величину возможных систематических ошибок в эксперимен-

тальных данных демонстрируют результаты сравнения двух экспериментов по глубинному дозовому распределению электронов в меди (рис. 4).

Заключение

Разработана модель расчета переноса электронов и позитронов с энергией от 1 кэВ до 10 МэВ, дополняющая транспорт низкоэнергетических фотонов и нейтронов в программе FAN15. Учитывается многократное кулоновское рассеяние, флуктуации ионизационных потерь, образование δ -электронов, а также тормозных и рентгеновских фотонов. В программе используются библиотеки оцененных данных EEDL и EADL в расчетах тормозного излучения и испускания рентгеновских фотонов при релаксации ионизированных атомов. Результаты расчета показывают удовлетворительное согласие в сравнении с экспериментальными данными по спектрам и угловым распределениям электронов за различными поглотителями, а также по глубинным дозовым распределениям электронов в различных материалах.

Список литературы

- [1] Е.Н. Савицкая, А.В. Санников. *Программа FAN15 для расчета переноса низкоэнергетических фотонов и нейтронов в произвольных средах*. Препринт ИФВЭ 2016-4. Протвино, 2016.
- [2] A.V. Sannikov, E.N. Savitskaya. *Physics of the HADRON code: recent status and comparison with experiment*. Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. **A450**, 127-137 (2000).
- [3] G. Moliere. *Theorie der Streuung Schneller Geladener Teilchen II: Mehrfach- und Vielfachstreuung*. Z. Naturforsch. **3a**, 78 (1948).
- [4] H. Bethe. *Moliere's Theory of Multiple Scattering*. Phys. Rev. **89**, 1256-1266 (1953).
- [5] A. Ferrari, P.R. Sala, R. Guaraldi and F. Padoani. *An Improved Multiple Scattering Model for Charged Particles Transport*. Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. **B71**, 412-426 (1992).
- [6] A. Ferrari, P.R. Sala, A. Fasso and J. Ranft. *FLUKA: A Multi-Particle Transport Code*. SLAC-R-773 (2005).

- [7] S.M. Seltzer. *An Overview of ETRAN Monte Carlo Methods*. In “Monte Carlo Transport of Electrons and Photons”, edited by T.M. Jenkins, W.R. Nelson, and A. Rindi, Plenum Press, New York, 1988, p. 153.
- [8] W.T. Scott. *The Theory of Small-Angle Multiple Scattering of Fast Charged Particles*. Rev. Mod. Phys. **35**, 231-313 (1963).
- [9] А.Ф. Аккерман. *Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе*. Москва, Энергоатомиздат, 1991.
- [10] S.M. Seltzer. *Electron-photon Monte Carlo calculations*. Appl. Radiat. Isot. **42**, 917-941 (1991).
- [11] C. Möller. *Zur Theorie des Durchgang schneller Elektronen durch Materie*. Ann. Physik **14**, 568 (1932).
- [12] H.J. Bhabha. *The Scattering of Positrons by Electrons with Exchange on Dirac's Theory of the Positron*. Proc. Roy. Soc. **A154**, 195 (1936).
- [13] S.M. Seltzer and M.J. Berger. *Bremsstrahlung Energy Spectra from Electrons with Kinetic Energy 1 keV - 10 GeV Incident on Screened Nuclei and Orbital Electrons of Neutral Atoms with $Z=1-100$* . At. Data Nucl. Data Tables **35**, 345-418 (1986).
- [14] <https://www-nds.iaea.org/epics2014/>
- [15] Physics Reference Manual. Version: geant4 9.5.0 (2nd December, 2011).
- [16] L. Kissel, C.A. Quarles and R.H. Pratt. *Shape Functions for Atomic Field Bremsstrahlung from Electrons of Kinetic Energy 1-500 keV on Selected Neutral Atoms $1 \leq Z \leq 92$* . At. Data Nucl. Data Tables **28**, 381-460 (1983).
- [17] D.H. Rester and J.H. Derrickson. *Electron Transmission Measurements for Al, Sn, and Au Targets at Electron Bombarding Energies of 1.0 and 2.5 MeV* J. Appl. Phys. **42**, 714-721 (1971).
- [18] H. Frank. *Zur Vielfachstreuung und Rückdiffusion schneller Elektronen nach Durchgang durch dicke Schichten*. Z. Naturforsch. **14a**, 247 (1959).
- [19] G.J. Lockwood, G.H. Miller and J.A. Halbleib. *Electron Energy Deposition in Multi-layer Geometries*. IEEE Trans. Nucl. Sci. **NS-23**, 1862-1866 (1976).
- [20] G.H. Miller, G.J. Lockwood, and J.A. Halbleib. *Improved Calorimetric Method for Energy Deposition Measurements*. IEEE Trans. Nucl. Sci. **NS-21**, 359-365 (1974).

- [21] H. Aiginger and E. Gonauser. *Messung der beim Beschuss von dicken Targets mit 0.5, 1 und 2 MeV Elektronen entstehenden Ionisationsverteilungen*. Atomkernenergie **13**, 33 (1967).
- [22] J.G. Trump, R.J. Van de Graaff and R.W. Cloud. *Cathode Rays for Radiation Therapy*. Amer. J. Roentgenol. Rad. Therapy Nucl. Med. **43**, 728-734 (1940).
- [23] A. Brahme, G. Hulten and H. Svensson. *Electron Depth Absorbed Dose Distribution for a 10 MeV Clinical Microtron*. Phys. Med. Biol. **20**, 39 (1975).
- [24] M.J. Berger. *ETRAN – Experimental Benchmarks*. In “Monte Carlo Transport of Electrons and Photons”, edited by T.M. Jenkins, W.R. Nelson, and A. Rindi. Plenum Press, New York, 1988, p. 183.
- [25] A. Ferrari, F. Padoani, D. Paul. *Comparison of MCNP and Alternative Codes for an Electron Transport Problem*. In “Use of MCNP in Radiation Protection Dosimetry”, edited by G. Gualdrini and L. Casalini, Italian Agency for New Technology, Energy and Environment, Bologna, Italy, 1996, p. 193. ISBN 88-8286-000-1.

Рукопись поступила 25 апреля 2016 г.

Е.Н. Савицкая, А.В. Санников

Моделирование транспорта электронов и позитронов в программе FAN15.

Препринт отпечатан с оригинала-макета, подготовленного авторами.

Подписано к печати 27.04.2016. Формат 60 × 84/16. Цифровая печать.

Печ.л. 0, 94. Уч.– изд.л. 1,24. Тираж 80. Заказ 10. Индекс 3649.

ФГБУ ГНЦ ИФВЭ НИЦ «Курчатовский институт»

142281, Московская область, г. Протвино, пл. Науки, 1

www.ihep.ru; библиотека <http://web.ihep.su/library/pubs/all-w.htm>

Индекс 3649

ПРЕПРИНТ 2016-7,
ФГБУ ГНЦ ИФВЭ НИЦ «Курчатовский институт», 2016
