

## Математическое моделирование энергосвечения РЭП в аморфном теле

В.С. Виноградов, О.Н. Третьякова, В.В. Чередов

*Исследование процессов прохождения пучков заряженных частиц через различные среды и связанных с этим явлений представляет интерес как для теоретических исследований, так и для практических приложений. В данной работе представлен алгоритм моделирования прохождения пучка релятивистских электронов (РЭП) через аморфные тела (среды с неупорядоченной атомной структурой). Для расчета нагрева тела в результате выделения энергии решается уравнение теплопроводности для цилиндрически симметричной мишени.*

Исследование свойств различных веществ с помощью электронных пучков и генерируемого ими электромагнитного излучения является наиболее распространенным и перспективным физическим методом. Варьируя параметры РЭП, можно получать электромагнитное излучение с заранее заданными характеристиками: длиной волны, поляризацией, интенсивностью и другими свойствами. Так, например, в рентгеновском диапазоне излучение применяется при исследовании электронной структуры твердых тел, жидкостей и газов, при анализе структуры упорядоченных и частично упорядоченных систем: кристаллов, макромолекул и т.д.

Задачи переноса электронов можно решать исходя из различных подходов. Во-первых, можно решать кинетическое уравнение переноса электронов. Этот путь при учете различных каналов взаимодействия электронов очень трудоемкий, особенно если мишень имеет границы сложной формы. Гораздо более удобен и естественен для решения такого рода задач метод статистических испытаний (метод Монте-Карло). Существует множество различных схем метода Монте-Карло, применяемых в решении задач переноса электронов и других видов излучения [1, 2]. Эти схемы различаются, во-первых, по способу выбора длин пробегов между двумя последовательными взаимодействиями и, во-вторых, по способу учёта потерь энергии при взаимодействии частиц с веществом.

В данной работе предусматривается схема, близкая к схеме индивидуальных соударений. Рассматриваются два основных механизма взаимодействия электронов с веществом: упругое рассеяние в экранированном поле ядер и ионизация атомов вещества. Упругое рассеяние в экранированном поле ядра, задаваемым потенциалом вида:

$$V = -\frac{Ze^2}{r} \Phi(r),$$

(1)

где  $\Phi(r)$  - функция экранирования [3]. Дифференциальное сечение рассеяния  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  на таком потенциале может быть описано формулой Резерфорда с параметром экранирования  $\eta$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_0^2 Z^2 (1 - \beta^2)}{\beta^4 (1 - \cos\theta + 2\eta)^2}, \quad (2)$$

где параметр экранирования имеет вид

$$\eta = 1,7 \cdot 10^{-5} Z^{2/3} \frac{1 - \beta^2}{\beta^2} \left[ 1,13 + 3,76 \frac{\alpha^2}{\beta^2} \right], \quad (3)$$

$d\Omega$  - элемент телесного угла, в который происходит рассеяние,  $\theta$  - угол рассеяния по отношению к предыдущему направлению,  $\beta = v/c$ ,  $v$  - скорость электрона,  $c$  - скорость света,

$\alpha = Z/137$  - постоянная тонкой структуры. Полное сечение упругого рассеяния вычисляется интегрированием дифференциального сечения рассеяния по всему допустимому диапазону углов рассеяния. Полное сечение ионизации вычисляется по формуле Гривинского [3]

$$\sigma_{ion}(E) = \rho \pi r_0 \sum_i n_i \left( \frac{R_\omega}{I_i} \right) \frac{I_i}{mc^2} \frac{1 + \frac{mc^2}{E}}{1 + 2 \frac{mc^2}{E}} \left( 1 + \frac{1}{3} \ln \frac{E}{I_i} \right), \quad (4)$$

где  $r_0$  - радиус первой борвской орбиты,  $R_\omega$  - постоянная Ридберга,  $mc^2$  - энергия покоя электрона,  $I_i$  - потенциал ионизации  $i$ -ой оболочки атома,  $n_i$  - количество электронов на  $i$ -ой оболочке,  $\rho$  - плотность материала.

Длина пробега между двумя последовательными парными взаимодействиями рассчитывается исходя из обратных сумм индивидуальных процессов столкновения

$$\lambda^{-1} = \lambda_{el}^{-1} + \lambda_{nel}^{-1}, \quad (5)$$

где  $\lambda_{el}$  - пробег по отношению к упругому рассеянию,  $\lambda_{nel}$  - пробег по отношению к ионизации.

Для расчета потерь энергии наиболее проста модель непрерывного замедления, основанная на выражении для средних потерь энергии на единице пути, рассчитываемых по формуле Бете-Блоха [3]. Соответственно, потери энергии на длине пути  $\Delta s$  определяются следующим образом

$$E_n - E_{n+1} = \left| \frac{dE}{ds} \right| (S_n - S_{n+1}), \quad (6)$$

где  $E_n$ ,  $E_{n+1}$  - энергии в точках траектории  $S_n$ ,  $S_{n+1}$ ,  $\Delta s = S_n - S_{n+1}$ ,

$$\frac{dE}{ds} = \frac{2\pi r_0}{\beta^2} \left( \frac{2N_A}{M} \right) mc^2 \left( \ln \frac{\varepsilon^2 (\varepsilon + 2mc^2)}{2I^2 mc^2} - (2\sqrt{1 - \beta^2} - 1 + \beta^2) + (1 - \beta^2) + \frac{1}{8} (1 - \sqrt{1 - \beta^2}) \right), \quad (7)$$

где  $I$  - средний потенциал ионизации для данного атома,  $M$  - молярная масса,  $\mathcal{E}$  - энергия электрона,  $N_A$  - число Авагадро.

Алгоритм построения электронной траектории состоит из следующих этапов:

1. Разыгрывается длина пробега электрона из функции распределения

$$F(\Delta s) = 1 - \exp[-\tau(\Delta s)], \quad (8)$$

где

$$\tau(\Delta s) = \int_0^{\Delta s} \frac{ds}{\lambda_t(s)}, \quad (9)$$

$\lambda_t$  - свободный пробег до взаимодействия.

2. Вычисляются декартовы координаты точки  $i$ -го взаимодействия

$$\begin{aligned} x_i &= x_{i-1} + \Delta s_i \alpha_{i-1}; \\ y_i &= y_{i-1} + \Delta s_i \beta_{i-1}; \\ z_i &= z_{i-1} + \Delta s_i \gamma_{i-1}, \end{aligned} \quad (10)$$

где  $x_0, y_0, z_0$  - начальные координаты частицы;  $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$  - начальные направляющие косинусы вектора скорости частицы

$$\begin{aligned} \alpha_i &= \alpha_{i-1} \mu - (\beta_{i-1} \sin \varphi + \alpha_{i-1} \gamma_{i-1} \cos \varphi) \left( \frac{1 - \mu^2}{1 - \gamma_{i-1}^2} \right)^{1/2}; \\ \beta_i &= \beta_{i-1} \mu - (\alpha_{i-1} \sin \varphi + \beta_{i-1} \gamma_{i-1} \cos \varphi) \left( \frac{1 - \mu^2}{1 - \gamma_{i-1}^2} \right)^{1/2}; \\ \gamma_i &= \gamma_{i-1} \mu - (1 - \gamma_{i-1}^2) \cos \varphi \left( \frac{1 - \mu^2}{1 - \gamma_{i-1}^2} \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь  $\mu = \cos \theta$ ,  $\varphi$  - азимутальный угол, отсчитываемый от плоскости, проходящей через вектор  $\omega_{i-1} (\alpha_{i-1}; \beta_{i-1}; \gamma_{i-1})$  и ось OZ. Здесь  $\varphi$  разыгрывается из равномерного распределения:  $\varphi = 2\pi\xi$ , где  $\xi$  - случайная величина, принимающая значения от 0 до 1.

3. Проверяется, не произошло ли пересечение границы среды, заданной соответствующими уравнениями: плоскости, поверхности второго порядка или других поверхностей. Если пересечение произошло, начинается новая траектория, а старая сохраняется для дальнейшей обработки.

4. Для следующего атома сначала разыгрывается тип элементарного процесса: упругое рассеяние или ионизация.

5. Для данного процесса и данной энергии электрона определяется результат взаимодействия разыгрываем:

а) угла рассеяния при упругом взаимодействии из распределения

$$F(\theta < \theta_1) = \frac{1}{\sigma} \int_0^{\theta_1} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega,$$

(12)

вычисленного заранее и хранящегося в архиве данных;

б) потери энергии  $\Delta E$  в неупругих взаимодействиях из соответствующих дифференциальных распределений.

6. Определяется выполнение критерия обрыва траектории по энергии  $\varepsilon < \varepsilon_0$ , где  $\varepsilon_0$  - некоторая минимальная энергия электрона, при которой тепловыделением можно пренебречь. Если это условие выполняется, то начинается новая траектория.

При взаимодействии РЭП с твердотельной мишенью происходит её нагрев, неравномерный в продольном и радиальном направлениях. Так как время распространения тепла на расстояния порядка размеров мишени сравнимо с длительностью импульса (порядка  $10^{-3}$  с), то за счет теплопроводности температурное поле будет перераспределяться внутри мишени. Этот процесс описывается нестационарным уравнением теплопроводности, которое для цилиндрически симметричной мишени имеет вид

$$c\rho \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( kr \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial u}{\partial z} \right) + W(r, z, t),$$

(13)

где  $\rho$  - плотность материала,  $k$  - коэффициент теплопроводности,  $c$  - удельная теплоёмкость,  $W$  - тепловыделение РЭП. Граничные условия для уравнения записываются в виде:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial u}{\partial r} \right|_{r=R} = 0,$$

(14)

что соответствует отсутствию потока через боковую поверхность (тонкий диск), цилиндрической симметрии нагрева и изотропности мишени, и

$$\left. \frac{\partial u}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{\sigma u^4}{k}, \quad \left. \frac{\partial u}{\partial z} \right|_{z=L} = -\frac{\sigma u^4}{k},$$

(15)

что соответствует описанию излучения диска через торцевые поверхности как излучения абсолютно чёрного тела. Предполагается, что в начальный момент времени температурное поле внутри мишени однородно

$$u(r, z, 0) = u_0. \tag{16}$$

Решение уравнения (13) проводится численным методом, для чего выполняется дискретизация его и условий (14-16). Аппроксимация конечными разностями имеет второй порядок точности для уравнений, для начальных и граничных условий. Полученная система линейных уравнений

решается методом итерации с помощью программ библиотеки NAG Mark 9B. Итерации по времени выполняются до завершения действия импульса.

На рисунке представлено распределение температуры вдоль трубки  $T(z)$ , где  $z$  - продольная координата, с внутренним диаметром 0,01 см и толщиной стенки 0,005 см для различных материалов мишени. Из анализа этих результатов видно, что наиболее интенсивный нагрев происходит для трубок из более тяжелых элементов. Максимальная температура нагрева для вольфрама  $T=4650$  К, для молибдена  $T=2774$  К и для бериллия  $T=2185$  К при следующих характеристиках пучка: энергия электронов пучка 100 кэВ, плотность тока 0,1 А/см<sup>2</sup>, разброс угла падения 0,1 рад, длительность импульса  $10^{-3}$  сек.

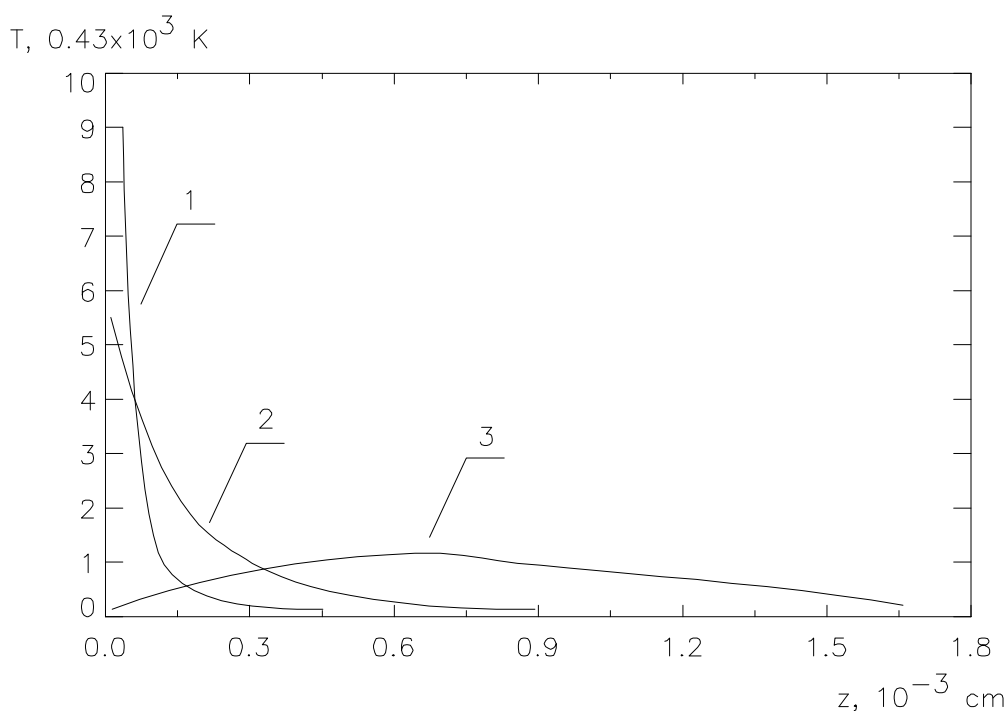


Рис. 1. Распределение температуры по длине цилиндрической мишени для различных материалов: 1 - вольфрам, 2 - молибден, 3 - бериллий.

Предложенный метод учета теплопроводности позволяет рассмотреть динамику температурного поля в облучаемой мишени, а также получить распределение температуры после окончания действия пучка.

### Литература

1. Аккерман А.Ф. Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. М.: Энергоатомиздат, 1991. -190 с.
2. Аккерман А.Ф., Никитушев Ю.М. Решение методом Монте-Карло задач переноса быстрых электронов в веществе. Алма-Ата: Наука, 1972. – 324 с.

3. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений. М: Мир, 1969. – 742 с.

---

#### СВЕДЕНИЯ О СОАВТОРАХ

Виноградов Владимир Сергеевич, доцент кафедры физики Московского авиационного института (государственного технического университета); к. ф.-м. н.; Телефон: 158-48-24, e-mail: [vin42@rambler.ru](mailto:vin42@rambler.ru)

Третьякова Ольга Николаевна, профессор кафедры физики Московского авиационного института (государственного технического университета), к. ф.-м. н.; Телефон: 158-86-98, 8(916)542-03-18, e-mail: [tretiyakova\\_olga@mail.ru](mailto:tretiyakova_olga@mail.ru)

Чередов Владимир Викторович, с.н.с. кафедры вычислительной математики и программирования Московского авиационного института (государственного технического университета); Телефон: 190-61-61, e-mail: [cheredov@mail.ru](mailto:cheredov@mail.ru)