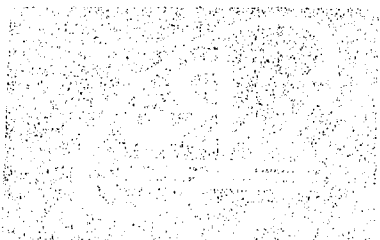


2118806283

АКАДЕМИЯ НАУК УССР



ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Препринт КИЯИ-86-43

КиУ: -- 86-43

Ю.Г.Здесенко, В.И.Третьяк

РАСЧЕТ ПО МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО УГЛОВЫХ
И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ЭЛЕКТРОНОВ,
ПРОШЕДШИХ ЧЕРЕЗ СЛОИ ВЕЩЕСТВА

(программа TRACK)

КИЕВ

Ю.Г.Здесенко, В.И.Третьяк

РАСЧЕТ ПО МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО УГЛОВЫХ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ
РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ЭЛЕКТРОНОВ, ПРОШЕДШИХ ЧЕРЕЗ СЛОИ ВЕЩЕСТВА
(программа TRACK)

Разработана программа, которая позволяет моделировать процессы взаимодействия электронов с веществом и может быть использована при планировании и проведении исследований 2β -распада атомных ядер с целью оптимизации экспериментальных методик и для обработки результатов измерений.

При расчете энергетических потерь электронов учитываются неупругие столкновения с атомными электронами среды, вызывающими возбуждение или ионизацию атомов (ионизационные потери), а также тормозное излучение, возникающее при ускорении электронов в электрических полях атомных ядер и оболочек (радиационные потери).

Проверка программы на экспериментальных данных показала ее применимость в широком диапазоне толщин и атомных номеров поглочителей.

A programme is worked out allowing to model the processes of electron interaction with substance and may be used at planning and making investigations of double-beta decay of atomic nuclei to optimize the experimental procedures and to analyse the measurement results.

On calculation the energy losses of electrons the non-elastic collisions are taken into consideration with atomic electrons of medium causing the excitation and atom ionisation (ionisation losses) and also the bremsstrahlung occurred at electron acceleration in electric fields of atomic nuclei and shells (radiation loss).

A programme control on experimental data showed its applicability within the wide range of thicknesses and atomic numbers of absorbers.

The calculation of angular and energy distribution of electrons, passed through the substance layers by Monte-Carlo method, (TRACK programme)

Yu.G.Zdesenko, V.I.Tretyak

Печатается по постановлению Ученого совета
Института ядерных исследований АН УССР

АКАДЕМИЯ НАУК УССР

Ю.Г.Здесенко, В.И.Третьяк

РАСЧЕТ ПО МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО УГЛОВЫХ
И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ЭЛЕКТРОНОВ,
ПРОШЕДШИХ ЧЕРЕЗ СЛОИ ВЕЩЕСТВА
(программа TRACK)

Введение

Прямые эксперименты по изучению β -распада атомных ядер основаны на непосредственной регистрации излучаемых в этом процессе электронов. Исследуемые нуклиды могут быть распределены в детекторе гомогенно, т.е. входить в состав рабочей среды детектора, или гетерогенно — в виде внешних по отношению к детектору образцов конечной толщины. В последнем случае корректная интерпретация экспериментальных результатов возможна только при тщательном учете процессов взаимодействия электронов с веществом образца, приводящим к потерям энергии и отклонению электронов от первоначального направления движения. Указанные эффекты могут вызывать искажение исходных энергетических и угловых распределений электронов и уменьшать эффективность регистрации в детекторе событий β -распада.

Описываемая в настоящей работе программа позволяет моделировать процессы взаимодействия электронов с веществом и может быть применена при обработке результатов исследований β -распада, а также других опытов, связанных с прохождением электронов через плотную среду.

I. Взаимодействие электронов с веществом

Электроны, двигаясь через вещество, теряют энергию и изменяют направление своего движения. Потери энергии происходят в неупругих столкновениях с атомными электронами среды, вызывающими возбуждение или ионизацию атомов (так называемые ионизационные потери), а также за счет тормозного излучения, возникающего при ускорении электронов в электрических полях атомных ядер и оболочек (радиационные потери). Нарушение прямолинейности движения электронов обусловлено соударениями с атомами среды и вызывает дополнительное увеличение энергетичес-

ких потерь за счет удлинения проходимого в веществе пути.

I.I. Многократное кулоновское рассеяние электронов

Возможны два подхода к моделированию прохождения электронов через вещество. Первый из них основан на разыгрывании каждого элементарного акта взаимодействия электрона с ядрами и электронными оболочками атомов среды и требует поэтому больших затрат машинного времени. Более экономичный способ состоит в том, что пройденный электроном путь разбивается на "элементарные" участки, длина которых в десятки или даже сотни раз превышает средний пробег между двумя последовательными соударениями, а координаты и энергия электронов на выходе из каждого участка вычисляются или разыгрываются по их входным значениям в соответствии с теориями, описывающими поведение электронов в слоях вещества конечной толщины.

В настоящей работе использован метод разбиения траектории на участки, а описание движения электронов в "элементарном" слое вещества основано на теории многократного кулоновского рассеяния, развитой в работах Мольера/1/, Гаудсмита и Саундерсона /2/, а также Бете /3/.

Согласно Мольеру/1/ плотность вероятности $\rho^N(\theta)$ отклонения электронов на угол θ от первоначального направления движения после прохождения слоя вещества толщиной ℓ определяется разложением:

$$\rho^N(\theta) = \frac{1}{\chi_c^2 B} \left\{ 2e^{-\delta^2} + \frac{f_1(\delta)}{B} + \frac{f_2(\delta)}{B^2} + \dots \right\}, \quad (1)$$

$$f_n(\delta) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty u J_0(\delta u) e^{-\frac{2u}{\delta}} \left(\frac{u^2}{4} \ln \frac{u^2}{4} \right)^n du, \quad (2)$$

$$\delta = \theta / \chi_c \sqrt{B}, \quad (3)$$

$J_0(\delta u)$ - функция Бесселя.

Первый член ряда (1) представляет собой гауссиан с дисперсией $\chi_c^2 B / 2$ и определяет многократное рассеяние на малые углы, а члены более высокого порядка дают поправки на одиночное и кратное рассеяние. Мольеровский угол χ_c^2 является мерой среднеквадратичного отклонения электрона от первоначального направления после прохождения слоя вещества ℓ и вычисляется следующим образом:

$$\chi_c^2 = 4\pi \cdot N_A \cdot e^2 \frac{Z(Z+1)\rho \cdot \ell}{A \cdot E(E+2m_0c^2)\beta^2} = 156914,9 \frac{Z(Z+1)\rho \cdot \ell}{A \cdot E(E+2m_0c^2)\beta^2}, \text{ рад}^2 \quad (4)$$

где E - кинетическая энергия электрона, кэВ; ρ - плотность вещества, г/см³; ℓ - толщина слоя, см; A, Z - атомная масса и атомный номер среды; $m_0c^2 = 511,0034$ кэВ - масса электрона;

$N_A = 6,022045 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹ - число Авогадро;

$e = 4,803242 \cdot 10^{-10}$ см^{3/2}·г^{1/2}·с⁻¹ - заряд электрона;

$$\beta^2 = v^2/c^2 = 1 - 1/(1 + E/m_0c^2)^2;$$

v, c - скорости электрона и света соответственно.

Величина B в (1) находится из решения уравнения

$$B - \ln B = \ln(\chi_c^2/\chi_0^2) + 1 - 2C, \quad (5)$$

где $C = 0,5772157$ - постоянная Эйлера, а χ_0 - так называемый критический угол, ограничивающий (из-за экранирования поля ядра полем электронных оболочек) минимальное отклонение, которое электрон может получить в единичном акте рассеяния.

Отношение χ_c^2/χ_0^2 представляет по своему физическому смыслу среднее число актов столкновений в слое вещества толщиной ℓ :

$$\frac{\chi_c^2}{\chi_0^2} = \frac{4\pi N_A}{A} \left(\frac{\hbar}{m_0c} \right)^2 \frac{Z^{1/2}(Z+1)\rho \cdot \ell \cdot 0,885^2}{\beta^2(1,13+3,76\alpha^2)} = 7821,579 \frac{Z^{1/2}(Z+1)\rho \cdot \ell}{A \cdot \beta^2(1+3,32743Z\alpha^2)}, \quad (6)$$

где $\alpha = \alpha_0 Z/\beta$, а $\alpha_0 = 1/137,0364$ - постоянная тонкой структуры.

В программе уравнение (5) решается методом Ньютона-Рафсона. Функция $\rho''(\theta)$ при $\delta < 10$ находится по разложению (1), где оставлены первые три члена (остальные дают поправку менее 1%).

Первый член вычисляется аналитически, второй и третий - путем линейной интерполяции табличных значений, приведенных в /3/. При $\delta \geq 10$ для нахождения $\rho''(\theta)$ применяется асимптотическая формула /3/:

$$\rho''(\theta) = \frac{2\chi_c^2/\theta^4}{1 - \frac{4}{\delta^2} \left(1 + \frac{2 \ln(0,4\delta)}{B} \right)} \quad (1-A)$$

Плотность вероятности (I) была получена Мольер^м в предположении о малости углов рассеяния и применима до $\theta \sim 30^\circ$. Гаудсмит и Саундерсон /2/ развили теорию, справедливую для любых углов, но в вычислительном плане она значительно превышает по трудоемкости теорию Мольера. Однако Бете /3/ удалось достаточно просто и с хорошей точностью выразить распределение Гаудсмита и Саундерсона $\rho^{GS}(\theta)$ через функцию Мольера: $\rho^M(\theta)$:

$$\rho^{GS}(\theta) = \rho^M(\theta) \cdot \sqrt{\frac{\theta}{\sin \theta}} \cdot \exp\left(\frac{\chi_c^2 B}{16}\right) + \frac{1}{24} \quad (7)$$

В работе /2/ при вычислении функции $\rho^{GS}(\theta)$ рассматривается не толщина слоя ρl , а действительная длина пути ρL , пройденного электроном в слое вещества. Благодаря изломанности траектории ρL всегда больше ρl и является случайной величиной. Плотность распределения приращения длины

$$\Delta = (\rho L - \rho l) / \chi_r \quad (8)$$

установлена в работе Янга /4/:

$$\rho(\Delta) = 2 \left(\frac{\omega \chi_r}{\rho l}\right)^2 \cdot Q(q), \quad (9)$$

где $q = 2\Delta \left(\frac{\omega \chi_r}{\rho l}\right)^2$;

$$\begin{aligned} \omega &= 2\rho \cdot c \beta / (m_0 c^2 \sqrt{4\pi/\mu_0}) = \sqrt{\frac{4\pi}{\mu_0}} \beta \sqrt{\mathcal{E}(\mathcal{E}+2)} = \\ &= 4,819557 \cdot 10^{-2} \beta \sqrt{\mathcal{E}(\mathcal{E}+2)}; \end{aligned}$$

$$\mathcal{E} = E / m_0 c^2;$$

χ_r - радиационная длина

$$\chi_r = \left(\frac{4\pi}{\mu_0} \frac{e^4}{m_0^2 c^4} N_A \frac{Z^2}{A} \ln\left(\frac{183}{Z}\right) \right)^{-1} = 716,4223 \frac{A}{Z^2 (5,209186 - \frac{1}{2} \ln Z)}, \text{ см} \quad (10)$$

p - импульс электрона, а функция $Q(q)$ с точностью до 1% может быть выражена в виде

$$Q(q) = \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{\pi}} q^{-3/2} (e^{-\frac{1}{4}} - 3e^{-\frac{9}{4}}) & , \quad q \leq 2 \\ \frac{\sqrt{\pi}}{4} e^{-\frac{\pi^2 q}{26}} & , \quad q > 2 \end{cases} \quad (11)$$

Найденная в соответствии с (8-II) действительная длина пути электрона ρL используется затем для вычислений угловых отклонений.

1.2. Потери энергии на ионизацию и возбуждение атомов среды

В соответствии с теорией Ландау /5/ плотность распределения ионизационных потерь энергии ΔE_u электрона при прохождении в веществе пути ρL равна

$$\rho(\Delta E_u) = \frac{1}{\xi} \varphi(\lambda), \quad (12)$$

где
$$\varphi(\lambda) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty+\delta}^{i\infty+\delta} \exp(\chi \ln \chi + \lambda \chi) d\chi, \quad (13)$$

$$\lambda = \frac{\Delta E_u}{\rho} - \ln \left(\frac{2m_0 c^2 \beta^2}{(1-\beta^2) I^2} \right) - 1 + C + \beta^2 + \delta, \quad (14)$$

$$\xi = \frac{2\pi N_A \cdot e^4}{m_0 c^2} \cdot \frac{Z \cdot \rho L}{A \beta^2} = 153,5360 \frac{Z \rho L}{A \beta^2}, \text{ кэВ} \cdot (15)$$

C - постоянная Эйлера; I - средний потенциал ионизации, кэВ;
 δ - поправка, учитывающая эффект поляризации среды при прохождении через нее заряженной частицы.

Подробные таблицы значений функции Ландау $\varphi(\lambda)$ представлены в работе /6/, а удобные формулы для аппроксимации $\varphi(\lambda)$ и функции, обратной к интегралу от $\varphi(\lambda)$, получены в /7/.

В распределении Ландау (13) не приняты во внимание резонансные эффекты передачи энергии электронным оболочкам атомов среды. В /8/ показано, что эти эффекты могут быть учтены путем свертки распределения (13) с гауссианом

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-\lambda^2/B^2), \quad (16)$$

где B - так называемый "резонансный" фактор

$$B^2 = 2 \cdot 10^{-2} \cdot Z^{4/3} \frac{\overline{\Delta E}_u}{\xi^2}, \quad (17)$$

а $\overline{\Delta E}_u$ - средние потери энергии на ионизацию, определяемые модифицированной формулой Бете-Блоха

$$\overline{\Delta E}_u = \xi \left(\ln \frac{\epsilon^2(\epsilon+2)}{2(I/m_0c^2)^2} + \frac{1+\epsilon^2/8-(2\epsilon+1)\ln 2}{(\epsilon+1)^2} - \delta \right), \quad (18)$$

$$\epsilon = E/m_0c^2. \quad (19)$$

В связи с трудностями, возникающими при выполнении свертки распределения (13) с гауссианом (16), Блунк и Лейзеганг /8/ предложили аппроксимировать функцию Ландау суммой четырех гауссианов, каждый из которых легко может быть свернут с (16). Финдлей и Дюсотой /9/ улучшили аппроксимацию $\varphi(\lambda)$, увеличив число гауссианов до девяти, и получили после свертки следующее выражение

$$\varphi(\lambda) = \sum_{i=1}^9 \frac{c_i \gamma_i}{(\gamma_i^2 + b^2)^{1/2}} \exp\left[-\frac{(\lambda - \lambda_i)^2}{\gamma_i^2 + b^2}\right]. \quad (20)$$

Значения коэффициентов c_i, λ_i, γ_i для вычисления (20) приведены в табл. I, взятой из /9/. Вид (17) и (20) показывает, что резонансные эффекты передачи энергии особенно существенны для тонких слоев и приводят к смещению максимума распределения ионизационных потерь и увеличению его дисперсии.

Поляризационные явления, возникающие при прохождении электронов через плотную среду, наоборот, вызывают уменьшение ионизационных потерь. Так, для электронов с энергией 2 МэВ это уменьшение составляет 6,1% в графите и 3,6% в золоте /11/. Поляризационный эффект учитывается с помощью члена δ , входящего в (14) и (18). Процедура точного расчета величины δ , зависящей от энергии электронов и параметров среды, описана, например, в работах /10, 11/. Она является довольно громоздкой, в связи с чем предпочтительнее пользоваться следующими аппроксимационными формулами /10/:

Таблица 1

Коэффициенты для аппроксимации функции Ландау 9 гауссианами

i	c_i	λ_i	χ_i
1	0,0368	-1,480	0,737
2	0,0843	-0,738	0,947
3	0,0882	0,170	1,23
4	0,0647	1,33	1,68
5	0,0359	2,95	2,40
6	0,0164	5,39	3,68
7	0,0064	9,40	6,18
8	0,0021	16,8	12,3
9	0,0006	30,8	39,7

Таблица 2

Значения параметров для расчета поляризационных эффектов

Вещество	z	$-G_0$	χ_0	χ_1	a	m	δ_0
Алюминий	13	4,2395	0,1708	3,0127	0,08024	3,6345	0,12
Кремний	14	4,4351	0,2014	2,8715	0,14921	3,2546	0,14
Медь	29	4,4190	-0,0254	3,2792	0,14339	2,9044	0,08
Германий	32	5,1411	0,3376	3,6096	0,07188	3,3306	0,14
Молибден	42	4,8793	0,2267	3,2784	0,10525	3,2549	0,14
Серебро	47	5,0630	0,0657	3,1074	0,24585	2,6899	0,14
Золото	79	5,5747	0,2021	3,6979	0,09756	3,1101	0,14
Свинец	82	6,2018	0,3776	3,8073	0,09359	3,1608	0,14

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & , x \leq x_0 \text{ для непроводников} \\ \delta_0 \cdot 10^{2(x-x_0)} & , x \leq x_0 \text{ для проводников} \\ x \cdot 2 \ln 10 + a(x_1-x)^m + G_0, & x_0 < x < x_1 \\ x \cdot 2 \ln 10 + G_0 & , x \geq x_1, \end{cases} \quad (21)$$

где $X = e g p / m_0 c = \frac{1}{2} e g \{E(E+2)\}.$

Коэффициент G_0 зависит от характеристик среды, а δ_0, x_0, x_1, a, m являются подгруппочными параметрами и вычислены в /II/ на основе точной процедуры расчета $\delta(E)$. Значения этих параметров для некоторых Z приведены в табл. 2.

1.3. Радиационные потери энергии

В работе /12/ показано, что полные радиационные потери ΔE_p энергии, возникающие при ускорении электронов в кулоновских полях ядер и электронных оболочек атомов, могут быть описаны для тонких слоев формулой:

$$\begin{aligned} \Delta E_p &= \rho L \alpha_0 \left(\frac{e^2}{m_0 c^2}\right)^2 N_A \cdot \frac{Z^2}{A} (E + m_0 c^2) \Psi(E, Z) = \\ &= 3,489562 \cdot 10^{-4} \frac{Z^2 \rho L}{A} (E + m_0 c^2) \Psi(E, Z), \text{ кэВ} \quad (22) \end{aligned}$$

где безразмерная функция $\Psi(E, Z)$ выражает остаточную зависимость потерь от E и Z . Для Z от 1 до 100 и энергий от 3 кэВ до 10 ГэВ эта функция аппроксимируется с погрешностью менее 1% таким выражением

$$\Psi(E, Z) = d_2(Z) \left[1 + \sum_{i=2}^4 f_i(Z) (\ln E)^i \right] / \left[1 + \sum_{i=2}^4 h_i(Z) (\ln E)^i \right], \quad (23)$$

где E выражено в МэВ.

Значения коэффициентов d_2, f_i, h_i вычислены в /12/ и для некоторых веществ представлены в табл. 3. В качестве примера укажем, что доля потерь на тормозное излучение электронов с начальной энергией 2 МэВ, полностью затормозившихся в веществе, составляет в алюминии 1,45%, а в свинце - 10,8%.

Таблица 3

Коэффициенты для вычисления радиационных потерь энергии

Вещество	Z	d_1	$10 f_1$	$10 f_2$	$100 f_3$	$1000 f_4$	$10 h_1$	$10 h_2$	$100 h_3$	$1000 h_4$
Алюминий	13	6,4185	3,7066	2,0450	2,8750	1,0984	1,0366	0,6827	0,7722	0,5543
Кремний	14	6,4158	3,7512	2,0792	2,9122	1,1044	1,1117	0,7045	0,7656	0,5828
Медь	29	6,5754	3,9824	2,2837	3,7519	1,8370	1,8107	0,9027	1,0495	1,0547
Германий	32	6,6321	3,9452	2,1610	3,6100	1,8205	1,8973	0,8591	1,0309	1,0752
Молибден	42	6,8114	3,7627	2,1018	3,5145	1,7186	1,9752	0,9314	0,9992	1,1314
Серебро	47	6,9039	3,6530	2,0525	3,4650	1,6919	1,9877	0,9548	0,9977	1,1577
Золото	79	7,5138	2,2935	1,2341	2,4982	1,4316	1,3792	0,7574	0,8551	1,1199
Свинец	82	7,5720	2,0234	1,1091	2,3613	1,4037	1,1764	0,7059	0,8275	1,0978

1.4. Обратное рассеяние электронов от детектора

При построении функции отклика детектора и определении эффективности регистрации важное значение имеет учет обратного отражения электронов от детектора. Коэффициент обратного рассеяния электронов от толстых слоев вещества зависит от Z , энергии и угла падения θ . Кузьминых и Воробьев /13/ выразили эту зависимость в виде

$$g(Z, E, \theta) = k \cdot \theta^d + g(Z, E, 0), \quad (24)$$

где $g(Z, E, 0)$ - коэффициент отражения для случая нормального падения электронов, который определен в работе /14/

$$g(Z, E, 0) = a_1 / (1 + a_2 E^{a_3}),$$

где $a_1 = b_1 \exp(-b_2 Z^{-b_3}),$

$$a_2 = b_4 + b_5 Z^{-b_6},$$

$$a_3 = b_7 - b_8/Z.$$

(25)

Постоянные b_i приведены в табл. 4, которая позаимствована из /14/. Коэффициенты k и d , зависящие от Z и E , вычислены для некоторых поглотителей и энергий в работе /13/ и представлены в табл. 5.

2. Геометрия движения электронов

Основная система координат, которая используется в программе для построения траектории электронов, а также возможное расположение образца и детекторов изображены на рис. 1. Начало системы координат O_0 зафиксировано в центре плоско-параллельного образца, а ось $O_0 Z$ перпендикулярна его основанию. Направление движения электрона в произвольной точке траектории \vec{r} характеризуется углами θ и φ .

Угловые отклонения, испытываемые электроном при прохождении "элементарного" слоя, наиболее просто вычислять в системе координат, начало O_i которой расположено в точке вхождения электрона в очередной слой i , а ось $O_i Z$ направлена по вектору скорости частицы. В связи с этим в программе введена последовательность таких координатных систем O_i (рис. 2) и разработана процедура пересчета углов и

Таблица 4

Параметры для определения коэффициента отражения электронов при нормальном падении

b_1	b_2	b_3	b_4	b_5	b_6	b_7	b_8
1,15	8,35	0,525	0,0185	15,7	1,59	1,56	4,42

Таблица 5

Значения параметров для расчета коэффициента отражения электронов при произвольном угле падения

Вещество	Z		Энергия, кэВ		
			500	1000	2000
Алюминий	13	k	0,209	0,211	0,203
		d	2,118	2,174	2,258
Медь	29	k	0,186	0,200	0,209
		d	1,982	2,000	2,044
Золото	79	k	0,112	0,127	0,148
		d	1,901	1,901	1,923
Свинец	82	k	0,112	0,125	0,148
		d	1,935	1,919	1,926

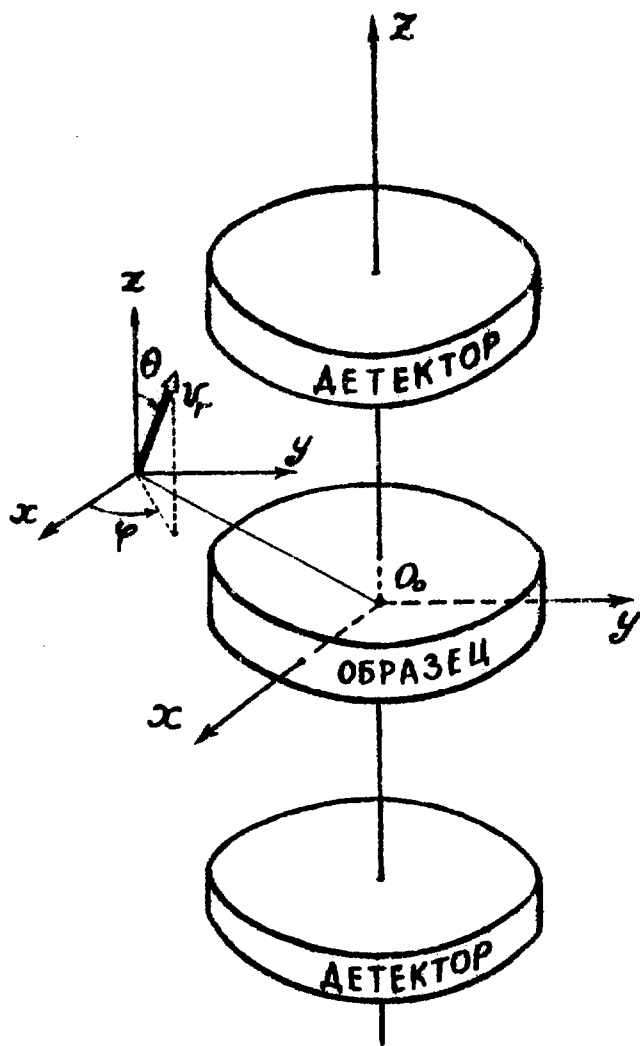


Рис. 1. Основная система координат и возможное расположение образца и детекторов

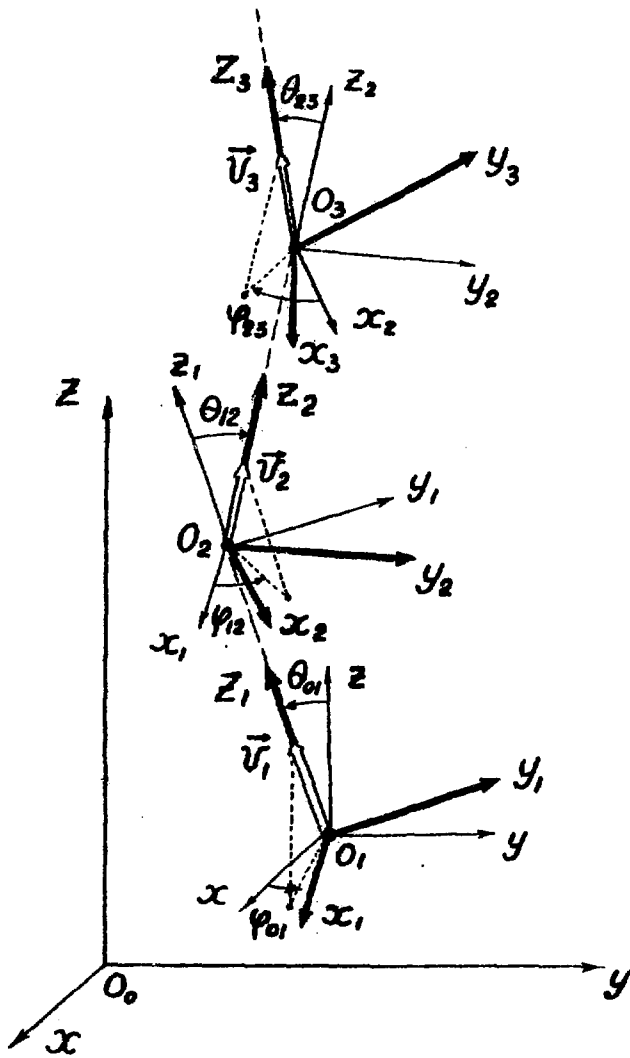


Рис. 2. Последовательность систем координат для моделирования траектории электрона

координат в любой из систем O_i к фиксированной системе O_0 .

Рассмотрим движение электрона, который излучен из точки O_1 в направлении $\theta_{01}, \varphi_{01}$ (здесь и в дальнейшем первый индекс в обозначениях углов и координатных векторов указывает систему, в которой они измерены, а второй - порядковый номер точки O_i). После прохождения расстояния $O_1 O_2 = \rho l$ электрон получает отклонение, которое в системе O_1 выражается углами $\theta_{12}, \varphi_{12}$. Известны также координаты \vec{r}_{12} точки O_2 в системе O_1 : $\vec{r}_{12} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho e \end{pmatrix}$.

Координаты \vec{r}_{02} точки O_2 в системе O_0 связаны с \vec{r}_{12} соотношением

$$\vec{r}_{02} = \vec{r}_{01} + A_{01} \cdot \vec{r}_{12}, \quad (26)$$

где A_{01} - матрица преобразований, позволяющая по координатам частицы в системе O_1 вычислить координаты в системе O_0 . Для получения ориентации системы O_1 систему O_0 нужно повернуть на угол φ_{01} вокруг оси $O_0 z'$, а затем на угол θ_{01} вокруг оси $O_0 y'$, что и определяет вид матрицы A_{01}

$$A_{01} = \begin{pmatrix} \cos \theta_{01} \cdot \cos \varphi_{01} & -\sin \varphi_{01} & \sin \theta_{01} \cdot \cos \varphi_{01} \\ \cos \theta_{01} \cdot \sin \varphi_{01} & \cos \varphi_{01} & \sin \theta_{01} \cdot \sin \varphi_{01} \\ -\sin \theta_{01} & 0 & \cos \theta_{01} \end{pmatrix} \quad (27)$$

Соотношение (26) справедливо для любой точки O_m , т. е.

$$\vec{r}_{0m} = \vec{r}_{01} + A_{01} \cdot \vec{r}_{1m}. \quad (28)$$

На следующем шаге электрон оказывается в точке O_3 с координатами \vec{r}_{13} . Переход к системе O_1 осуществим по аналогии с (26)

$$\vec{r}_{13} = \vec{r}_{12} + A_{12} \cdot \vec{r}_{23}, \quad (29)$$

а затем, используя (28), найдем координаты O_3 в системе O_0

$$\vec{r}_{03} = \vec{r}_{01} + A_{01} \cdot \vec{r}_{13} = \vec{r}_{01} + A_{01} \cdot \vec{r}_{12} + A_{01} \cdot A_{12} \cdot \vec{r}_{23}.$$

Продолжая эти вычисления для последующих точек, получим, что на шаге $m+1$ координаты точки O_{m+1} в системе O_0 находятся так:

$$\vec{r}_{0,m+1} = \vec{r}_{01} + A_{01} \cdot \vec{r}_{12} + A_{01} \cdot A_{12} \cdot \vec{r}_{23} + \dots + A_{01} \cdot A_{12} \cdot A_{23} \dots A_{m-1,m} \cdot \vec{r}_{m,m+1} \quad (30)$$

В (30) все члены $\bar{\Gamma}_{k, k+1}$ имеют вид $\begin{pmatrix} \theta \\ \varphi \end{pmatrix}$, а

$$A_{i, i+1} = \begin{pmatrix} \cos \theta_{i, i+1} \cos \varphi_{i, i+1} & -\sin \varphi_{i, i+1} & \sin \theta_{i, i+1} \cos \varphi_{i, i+1} \\ \cos \theta_{i, i+1} \sin \varphi_{i, i+1} & \cos \varphi_{i, i+1} & \sin \theta_{i, i+1} \sin \varphi_{i, i+1} \\ -\sin \theta_{i, i+1} & 0 & \cos \theta_{i, i+1} \end{pmatrix} \quad (31)$$

С другой стороны, аналогично (28) можно записать, что

$$\bar{\Gamma}_{0, m+1} = \bar{\Gamma}_{0m} + A_{0m} \bar{\Gamma}_{m, m+1}, \quad (32)$$

где A_{0m} характеризует направление скорости частицы в точке O_m :

$$A_{0m} = \begin{pmatrix} \cos \theta_{0m} \cos \varphi_{0m} & -\sin \varphi_{0m} & \sin \theta_{0m} \cos \varphi_{0m} \\ \cos \theta_{0m} \sin \varphi_{0m} & \cos \varphi_{0m} & \sin \theta_{0m} \sin \varphi_{0m} \\ -\sin \theta_{0m} & 0 & \cos \theta_{0m} \end{pmatrix} \quad (33)$$

Сравнивая (30) и (32), получаем, что

$$A_{0m} = A_{01} A_{12} A_{23} \dots A_{m-1, m} \quad (34)$$

или
$$A_{0m} = A_{0, m-1} \cdot A_{m-1, m}.$$

Вычисляя по мере продвижения электрона матрицу A_{0m} с помощью (34) и приравнивая ее правой части выражения (33), можно однозначно определить углы $\theta_{0m}, \varphi_{0m}$, характеризующие направление движения частицы на выходе из произвольного слоя в координатной системе O_0 . Аналогично соотношение (30) позволяет выразить координаты любой точки траектории электрона в исходной системе координат.

Примечание. Направление движения частицы можно характеризовать тремя направляющими косинусами $\cos \alpha_{x, y, z}$, равными проекциям единичного вектора скорости на соответствующие оси. Выразим, используя развитый выше формализм, косинусы $\cos \alpha_{x, y, z}$ на входе в i -тый слой через косинусы $\cos \alpha_{x, y, z}$ предыдущего слоя и полученные в нем отклонения $\theta_{i, i+1}; \varphi_{i, i+1}$. Поскольку в правой декартовой системе координат

$$\cos \alpha_x^{i+1} = \cos \varphi_{0,i+1} \cdot \sin \theta_{0,i+1}$$

$$\cos \alpha_y^{i+1} = \sin \theta_{0,i+1} \cdot \sin \varphi_{0,i+1}$$

$$\cos \alpha_z^{i+1} = \cos \theta_{0,i+1},$$

для решения этой задачи необходимо вычислить матрицу $A_{0,i+1}$ (33), характеризующую в системе O_0 направление скорости в точке O^{i+1} углами $\theta_{0,i+1}$; $\varphi_{0,i+1}$. В соответствии с (34)

$$A_{0,i+1} = A_{0i} \cdot A_{i,i+1},$$

где A_{0i} , $A_{i,i+1}$ имеют вид (31). Выполнив умножение и взяв соответствующие члены результирующей матрицы, получим:

$$\cos \alpha_x^{i+1} = \cos \alpha_x^i \cos \theta_{i,i+1} + \frac{\sin \theta_{i,i+1}}{\sqrt{1 - \cos^2 \alpha_x^i}} \left(\cos \alpha_x^i \cos \alpha_z^i \cos \varphi_{i,i+1} - \cos \alpha_y^i \sin \varphi_{i,i+1} \right),$$

$$\cos \alpha_y^{i+1} = \cos \alpha_y^i \cos \theta_{i,i+1} + \frac{\sin \theta_{i,i+1}}{\sqrt{1 - \cos^2 \alpha_x^i}} \left(\cos \alpha_y^i \cos \alpha_z^i \cos \varphi_{i,i+1} + \cos \alpha_x^i \sin \varphi_{i,i+1} \right),$$

$$\cos \alpha_z^{i+1} = \cos \alpha_z^i \cos \theta_{i,i+1} - \sqrt{1 - \cos^2 \alpha_x^i} \cdot \sin \theta_{i,i+1} \cos \varphi_{i,i+1}.$$

Эти выражения с точностью до обозначений совпадают с формулами преобразований направляющих косинусов, приведенными, например, в работе /15/.

3. Порядок работы программы

Для выполнения моделирования необходимо ввести следующие исходные данные:

3.1. Форма и размеры образца, детектора и их взаимное расположение;

3.2. Плотность, атомная масса, атомный номер образца и детектора;

3.3. Координаты \vec{F} точечного источника электронов или распределение вероятностей $\Phi(\vec{F})$ излучения электронов в заданном объеме пространства;

3.4. Исходные углы или распределение вероятностей $\Phi(\theta)$, $\Phi(\varphi)$ излучения электронов источником в заданном интервале углов θ, φ ;

3.5. Начальная энергия электронов E или распределение вероятностей $\Phi(E)$ испускания электронов в зависимости от энергии;

3.6. Толщина "элементарного" слоя или число столкновений в "элементарном" слое или относительная доля энергии, которую электрон теряет в "элементарном" слое;

3.7. Аппаратурная функция отклика детектора при регистрации моноэнергетических электронов в заданном интервале энергий $\Phi(E, E)$;

3.8. Энергетическая калибровка детектора, а также начальный и конечный номера каналов, в которых будет моделироваться спектр;

3.9. Число N разыгрываемых событий и два числа, служащих базой счетчика случайных чисел.

Распределения вероятностей по пунктам 3.3 - 3.7 могут быть заданы формулами, таблицами или в алгоритмическом виде.

Кроме перечисленных начальных условий, необходимо указать, для каких частиц - прошедших через образец или отраженных от него, - будут рассчитываться угловые и энергетические распределения.

Моделирование каждого из событий осуществляется программой в следующей последовательности

3.10. Разыгрываются координаты точки вылета электрона в соответствии с распределением $\Phi(F)$, заданным в пункте 3.3;

3.11. Разыгрываются углы вылета $\theta_{01}, \varphi_{01}$ электрона из источника по распределениям $\Phi(\theta), \Phi(\varphi)$ из пункта 3.4;

3.12. Разыгрывается значение начальной энергии электрона на основе распределения $\Phi(E)$, заданного в 3.5;

3.13. Вычисляются координаты вхождения электрона в образец в случае, если источник электронов расположен вне образца;

3.14. На основе данных по пункту 3.6 определяется толщина "элементарного" слоя ρl . Электрон, находящийся у границы образца, может до выхода из него пройти путь, меньший ρl . В этом случае толщина "элементарного" слоя принимается равной реальному пути;

3.15. В соответствии с распределением (9) разыгрывается действительное значение длины пути ρL , проходимого электроном в "элементарном" слое;

3.16. На основе распределения (7) разыгрывается угол $\theta_{i, i+1}$, на который отклонится электрон после прохождения i -го слоя;

3.17. Разыгрывается значение угла $\varphi_{i, i+1}$, который считается равномерно распределенным в интервале $[0, 2\pi]$;

Поскольку распределение (7) корректно описывает рассеяние электронов при числе столкновений не менее 30 - 40 /16/, в программе принято, что электрон не изменяет направление движения, если вблизи границы образца он испытал менее 10 столкновений, число которых определяется по формуле (6).

3.18. В соответствии с распределением (12) разыгрывается значение ионизационных потерь энергии ΔE_u , испытываемых электроном при прохождении слоя. Учитываются резонансные эффекты [17], (20) и поляризация среды (21);

3.19. По формулам (22) и (23) вычисляются радиационные потери энергии электрона ΔE_p ;

3.20. Определяется энергия электрона E_{i+1} на выходе из слоя

$$E_{i+1} = E_i - \Delta E_u - \Delta E_p. \quad (36)$$

3.21. Вычисляются координаты и направление движения электрона на выходе из слоя в основной системе координат, для чего используются соотношения, полученные в разделе 2;

3.22. Пункты 3.14 - 3.21 повторяются до тех пор, пока электрон не выйдет из образца или потеряет в нем всю энергию;

В итоге, после завершения процедуры моделирования траектории частицы в образце оказываются вычисленными координаты и направление вылета электрона из образца, а также его энергия E_k .

3.23. На основе данных о форме и размерах детектора определяются координаты и направление скорости электрона в точке вхождения в детектор. Электроны, не попавшие в детектор, подсчитываются;

3.24. Рассчитывается коэффициент отражения $\gamma(E_k, \theta_k)$ электрона с энергией E_k от детектора при угле падения, определенного в 3.23. Расчет осуществляется по методике, изложенной в 1.4. Затем разыгрывается случайное число, равномерно распределенное в интервале $[0, 1]$. Если это число меньше значения $\gamma(E_k, \theta_k)$, электрон считается отразившимся от детектора под углом, равным углу падения, и при попадании в образец его траектория прослеживается опять согласно 3.13 - 3.23. Если случайное число больше $\gamma(E_k, \theta_k)$, электрон считается попавшим в детектор и оставившим в нем энергию E_k . Траектория электрона в детекторе не моделируется.

3.25. На основе заданной в 3.7 функции отклика детектора разыгрывается амплитуда импульса, соответствующая оставленной в детекторе энергии E_k . Затем по калибровочной зависимости из 3.8 определяется номер канала амплитудного спектра, в котором будет зарегистрировано рассматриваемое событие.

Процедура моделирования полностью повторяется N раз по заданному числу излученных электронов.

- В программе предусмотрено представление следующей информации;
- количество электронов, зарегистрированных детектором, отразившихся от детектора;
 - числа электронов, не достигших образца, не вышедших из образца, не попавших в детектор;
 - энергетическое распределение электронов, зарегистрированных детектором, а также полученный из него с учетом функции отклика детектора амплитудный спектр;
 - угловое распределение электронов, вышедших из образца.

4. Проверка программы

Проверка программы осуществлялась путем моделирования угловых и энергетических распределений электронов, полученных на образцах с разными Z и толщинами, а также при различной энергии /17 - 20/.

На рис. 3 точками показаны экспериментальные угловые распределения электронов с начальной энергией E_0 после прохождения через фольги из алюминия (100 мг/см² - $E_0 = 1,0$ МэВ) /18/, меди (51,1 мг/см² - $E_0 = 1,75$ МэВ) /17/, золота (370 мг/см² - $E_0 = 2,5$ МэВ) /18/. Результаты моделирования представлены на этом же рисунке в виде гистограмм. На рис. 4 приведены экспериментальные и расчетные энергетические спектры электронов, прошедших через слои алюминия (100 мг/см² - $E_0 = 1,0$ МэВ) и золота (150 мг/см² - $E_0 = 1,0$ МэВ, 370 мг/см² - $E_0 = 2,5$ МэВ). Измерения выполнены в /18/. И наконец, на рис. 5 изображены спектры электронов, прошедших через образцы алюминия значительно меньшей толщины: 4,42 мг/см² - $E_0 = 481,7$ и 975,7 кэВ /20/; 8,8 мг/см² - $E_0 = 624$ кэВ /19/. На всех рисунках указаны интервалы углов вылета θ , в пределах которых электроны попадают в образец. Рис. 3 - 5 демонстрируют хорошую согласованность результатов моделирования с экспериментальными данными.

Таким образом, разработанная программа позволяет рассчитывать угловые и энергетические распределения электронов, прошедших через слои вещества, в достаточно широком диапазоне толщин и атомных номеров поглотителей. Программа может быть использована при планировании и проведении исследований 2β -распада атомных ядер с целью оптимизации применяемых экспериментальных методик и для обработки результатов измерений.

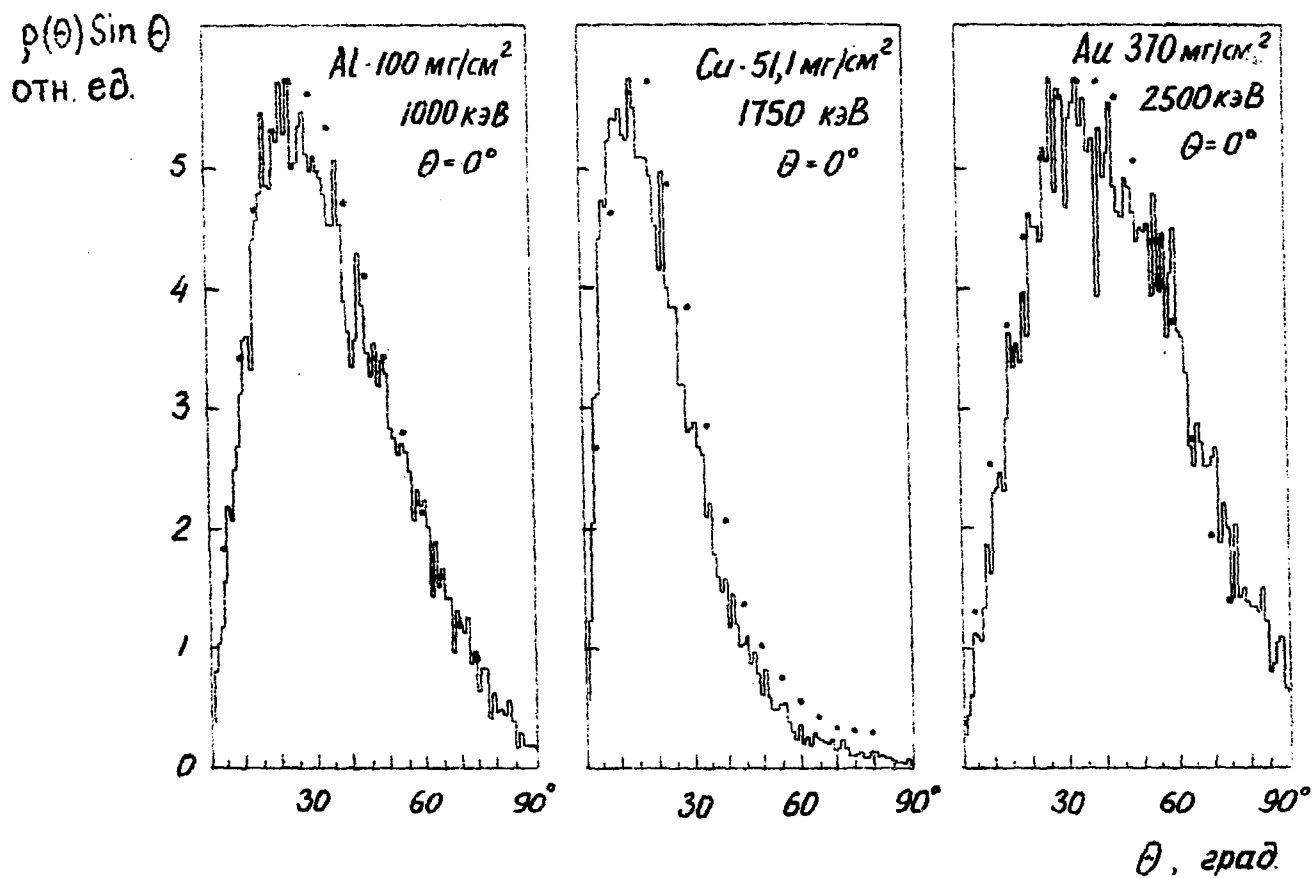


Рис. 3. Угловые распределения электронов, прошедших через фольги из алюминия, меди и золота

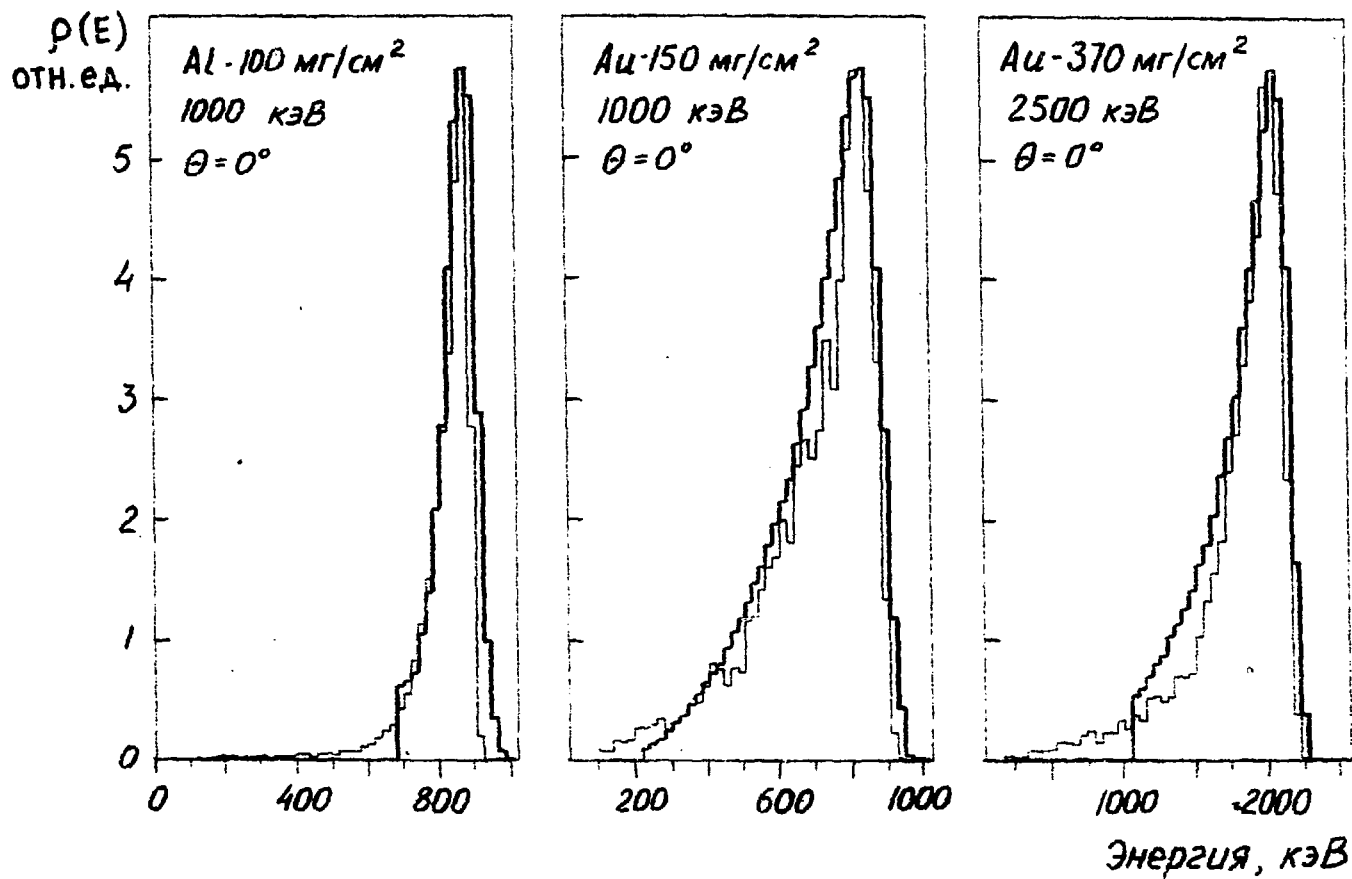


Рис. 4. Энергетические спектры электронов на выходе из образцов алюминия и золота. Жирная линия - эксперимент, тонкая - расчет

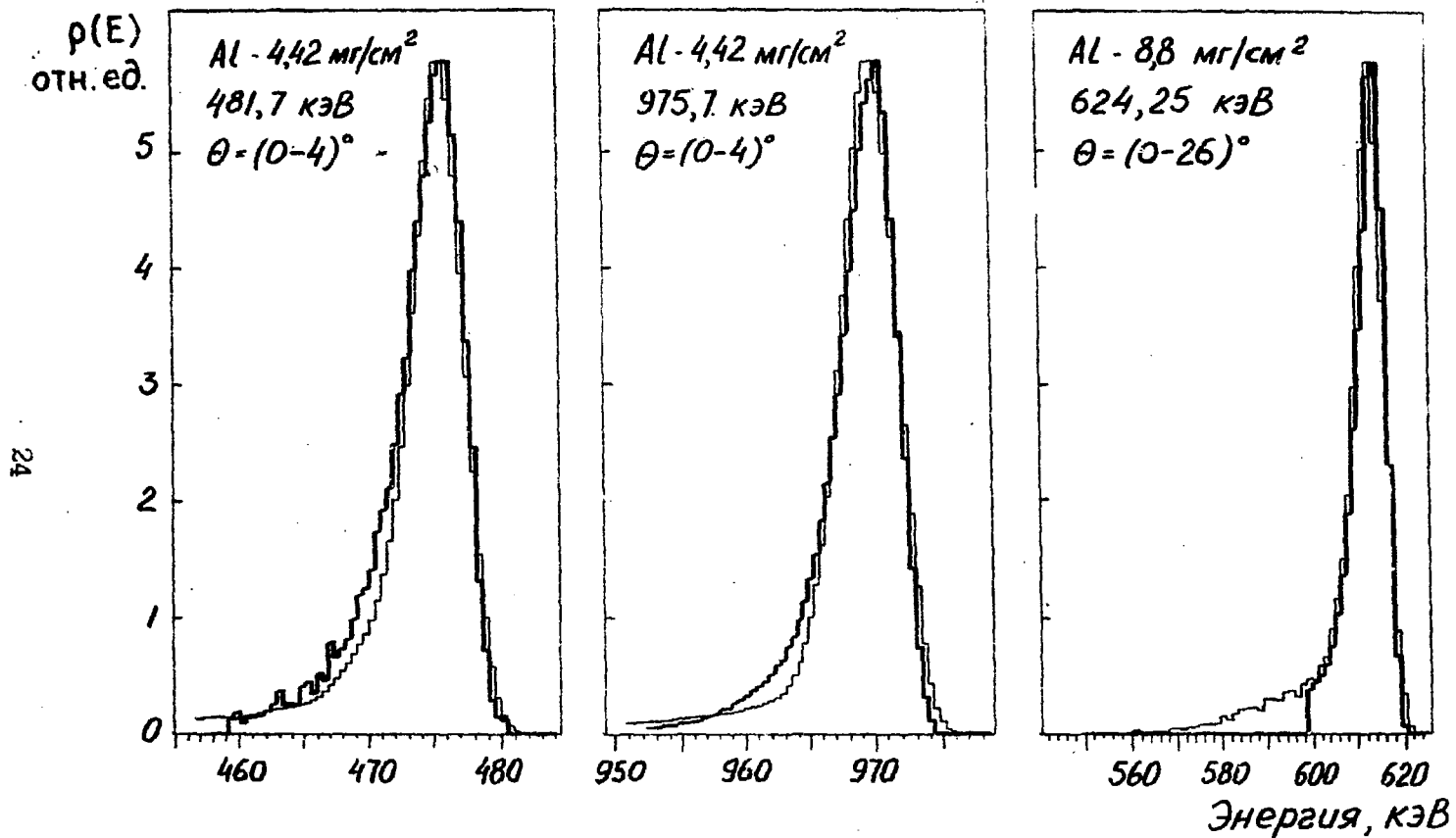


Рис. 5. Энергетические спектры электронов после прохождения алюминиевых фольг.
 Жирная линия - эксперимент, тонкая - расчет

Список использованной литературы

1. Moliere G. Theorie der Streuung schneller geladener. Teilchen I. Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld. -Z.Naturf., 1947, v.2a, p.133-145.
Moliere G. Theorie der Streuung schneller geladener. Teilchen II. Mehrfach- und Vielfachstreuung. -Z.Naturf., 1948, v.3a, p.78-97.
2. Goudsmith S.A., Saunderson J.L. Multiple Scattering of Electrons. -Phys.Rev., 1940, v.57, p.24-29, 1940, v.58, p.36-42.
3. Bethe H.A. Moliere's Theory of Multiple Scattering. -Phys.Rev., 1953, v.89, p.1256-1266.
4. Yang C.N. Actual Path Length of Electrons in Foils. -Phys. Rev., 1951, v.84, p.599-600.
5. Ландау Л.Д. О потерях энергии быстрыми частицами на ионизацию. - Собрание трудов, т.I, М., Наука, 1969, с. 482-490.
6. Borsch-Supan W. On the Evaluation of the Function $\varphi(\lambda) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} e^{u\lambda v + \pi u} du$ for Real Values of λ . -J.Res.Natl.Bur.Standards, 1961, v.65B, p.245-250.
7. Tabata T., Ito R. Approximations to Landau's Distribution Functions for the Ionization Energy Loss of Fast Electrons. -Nucl.Instrum. and Methods, 1979, v.158, p.521-523.
8. Blunck O., Leisegang S. Zum Energieverlust schneller Elektronen in dunnen Schichten. -Z.Physik, 1950, v.128, p.500-505.
9. Findlay D.J.S., Dusautoy A.R. Improvements to the Blunck-Leisegang Energy Loss Straggling Distribution. -Nucl.Instrum. and Methods, 1980, v.174, p.531-533.

10. Sternheimer R.M. The Density Effect for the Ionization Loss in Various Materials. -Phys.Rev., 1952, v.88, p.851-859.
11. Sternheimer R.M., Berger M.J., Seltzer S.M. Density Effect for the Ionization Loss of Charged Particles in Various Substances. -At.Data Nucl.Data Tables, 1984, v.30, p.261-271.
12. Seltzer S.M., Berger M.J. Procedure for the Calculating the Radiation Stopping Power for Electrons. -Int.J.Appl. Radiat.Isot., 1982, v.33, p.1219-1226.
13. Kuzminikh V.A., Vorobiev S.A. Backscattering Coefficients Calculation of Monoenergetic Electrons and Positrons. -Nucl.Instrum. and Methods, 1975, v.129, p.561-563.
14. Tabata T., Ito R., Okabe S. An Empirical Equation for the Backscattering Coefficients of Electrons. -Nucl.Instrum. and Methods, 1971, v.94, p.509-513.
15. Grosswendt B., Waibel E. Determination of Detector Efficiencies for Gamma Ray Energies up to 12 Mev. II. Monte Carlo Calculations. -Nucl.Instrum. and Methods, 1975, v.131, p.143-156.
16. Vande Putte D.W. Assessment of the Capabilities of Monte Carlo Electron Transport Models Using the Continuous Slowing Down Approximation. -Nucl.Instrum. and Methods, 1982, v.203, p.367-375.
17. Frank H. Zur Vielfachstreuung und Ruckdiffusion schneller Elektronen nach Durchgang durch dicke Schichten. -Z.Naturf., 1959, v.14a, p.247-261.
18. Rester D.H., Derrickson J.H. Electron Transmission Measurements for Al, Sn and Au Targets at Electron Bombarding

Energies of 1.0 and 2.5 Mev. -J.Applied Physics, 1971,
v.42, N2, p.714-721.

19. Spalek A. Energy and Angular Distributions of Electrons
Emitted from Spectrometer Sources: Monte Carlo Calcula-
tions. -Nucl.Instrum. and Methods, 1982, v.198, p.399-402.

20. Ц.Вывов и др. О чувствительности эксперимента по поиску
двойного безнейтринного бета-распада с помощью ИЦД.

- Препринт ОИЯИ, Р6-84-554, Дубна, 1984.

Рукопись поступила в редакционную
группу 01.10.86 г.

Юрий Георгиевич Здесенко
Владимир Ильич Третьяк

РАСЧЕТ ПО МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО УГЛОВЫХ
И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ЭЛЕКТРОНОВ,
ПРОШЕДШИХ ЧЕРЕЗ СЛОИ ВЕЩЕСТВА
(программа TRACK)

Редакторы: Л.П.Малашкина
Н.А.Солдатенко

Подписано к печати 3.12.86 г.

БФ 27790

Бумага офсетная

Усл.-печ.л.-1,75

Изд.МКИИ-86-43

Печать офсетная

Уч.-изд.л. -0,8

Тип.заказ № 44

Формат бумаги 60x90/16

Тираж 200 экз.

Цена 6 коп.

СКТБ с ЭИ Института ядерных исследований АН УССР
252028, Киев-28, проспект Науки, 113
