

01;02

# Модельное дифференциальное сечение упругого рассеяния электронов на атомах для моделирования прохождения электронов в веществе методом Монте-Карло

© Е.Г. Шейкин

Санкт-Петербургский государственный университет,  
198904 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: egsh@pochta.ru

(Поступило в Редакцию 10 апреля 2009 г.)

Предложенное новое модельное дифференциальное сечение для описания упругого рассеяния электронов при моделировании прохождения электронов в веществе методом Монте-Карло. Данное дифференциальное сечение правильно описывает первое и второе транспортные сечения рассеяния, но характеризуется полным сечением упругого рассеяния, существенно меньшим реального значения полного сечения упругого рассеяния. Применение данного дифференциального сечения рассеяния позволяет значительно сократить число упругих столкновений, разыгрываемых при моделировании прохождения электронов в веществе методом Монте-Карло, и моделировать прохождение электронов высоких энергий в рамках модели индивидуальных столкновений.

## Введение

При моделировании методом Монте-Карло прохождения электронов высокой энергии в веществе обычно требуется проследить очень большое число столкновений отдельно взятого электрона с атомами вещества, так как средние относительные потери энергии электрона и угол его рассеяния в упругих и неупругих столкновениях с атомами вещества малы. Это является основной причиной, приводящей к использованию приближенных методов для моделирования пробегов электронов высокой энергии в известных программах, использующих метод Монте-Карло [1–3]. С этой целью используется так называемый метод укрупненных столкновений, имеющий различные модификации.

Сущность метода укрупненных столкновений состоит в том, что методом Монте-Карло моделируется изменение параметров электрона после прохождения значительно большего расстояния, чем длина пробега. Для моделирования параметров электрона, прошедшего данное расстояние, используются известные решения, полученные в теории многократного рассеяния в приближении неограниченной однородной среды. Так, в частности, в программе EGSnrc [1] в этих целях используется решение, полученное в работе [4]. В программе Geant4 [2] метод укрупненных столкновений базируется на решении, полученном в работе [5]. К недостаткам метода укрупненных столкновений следует отнести то, что используемые при моделировании решения из теории многократного рассеяния носят приближенный характер. В ряде случаев, особенно при исследовании движения электронов в неоднородной среде, существует неоднозначность в выборе параметров, определяющих конкретную реализацию метода укрупненных столкновений.

При моделировании движения электронов невысоких энергий в веществе или прохождении электронов че-

рез тонкий слой вещества обычно используется метод Монте-Карло в приближении индивидуальных столкновений. При этом траектория электронов в веществе прослеживается последовательно между актами упругого и неупругого рассеяния. Но и в этом случае при моделировании движения электронов используется ряд приближений. В частности, моделирование упругого рассеяния электронов проводится не строго, путем решения задачи рассеяния электрона в поле атома, а с использованием различных приближенных методов для задания дифференциального сечения упругого рассеяния.

В настоящей работе рассматриваются модельные дифференциальные сечения, обычно используемые для описания упругого рассеяния электронов на атомах вещества при моделировании переноса электронов в веществе методом Монте-Карло. Предлагается новое модельное дифференциальное сечение упругого рассеяния электронов, которое позволяет при моделировании движения электронов методом Монте-Карло эффективно описывать упругое рассеяние электронов высокой энергии, оставаясь в рамках модели индивидуальных столкновений.

## 1. Модельные дифференциальные сечения упругого рассеяния электронов на основе формулы Резерфорда с параметром экранирования

Для моделирования упругого рассеяния электронов методом Монте-Карло часто используется дифференциальное сечение, задаваемое формулой Резерфорда с параметром экранирования [6–10], которое может быть

представлено в виде

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

где  $\Omega$  — телесный угол,  $\theta$  — угол рассеяния,  $\eta$  — параметр экранирования,  $Z$  — заряд ядра атома,  $\beta = v/c$  — релятивистский фактор (отношение скорости электрона к скорости света),  $r_0$  — классический радиус электрона ( $r_0 \approx 2.818 \cdot 10^{-15}$  м). Нижний индекс SR (Screened Rutherford) в обозначении сечения упругого рассеяния  $\sigma_{SR}$  подчеркивает, что это сечение Резерфорда с эффектом экранирования. Часто используемый в моделировании параметр экранирования  $\eta$  в приближении Мольер (Moliere) определяется, согласно [10], соотношением:

$$\eta = 1.7 \cdot 10^{-5} Z^{2/3} \frac{1 - \beta^2}{\beta^2} \left[ 1.13 + 3.76 \frac{\alpha^2}{\beta^2} \right],$$

где  $\alpha = Z/137$ .

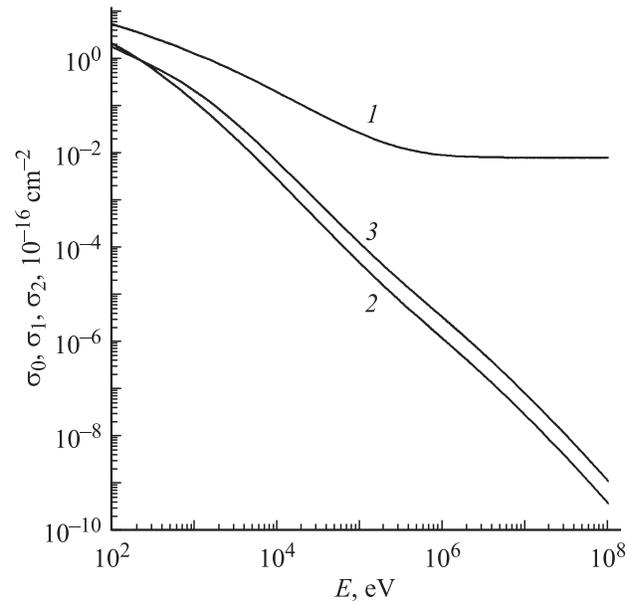
Дифференциальные сечения упругого рассеяния электронов на нейтральных атомах, рассчитанные при использовании атомного потенциала в приближениях TFD (Thomas–Fermi–Dirac) или DHF (Dirack–Hartree–Fock) [11–13], заметно отличаются от дифференциального сечения (1), особенно в области низких энергий электронов. Поэтому в настоящее время при моделировании прохождения электронов в веществе методом Монте-Карло для описания упругого рассеяния электронов обычно применяются модельные дифференциальные сечения, являющиеся модификацией сечения Резерфорда с эффектом экранирования. В частности, в работе [11] предлагается модифицировать дифференциальное сечение (1) введением корректирующего множителя. В этом случае дифференциальное сечение упругого рассеяния электронов  $d\sigma_{el}/d\Omega$  записывается следующим образом:

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = t_c^{-1} \frac{d\sigma_{SR}}{d\Omega}. \quad (2)$$

Корректирующий множитель  $t_c$  определяется в [11] так, чтобы дифференциальное сечение (2) правильно определяло транспортное сечение упругого рассеяния электронов. В работе [11] было отмечено, что при соответствующем подборе параметров экранирования модифицированное дифференциальное сечение в форме (2) может правильно моделировать не только транспортное, но и полное сечение упругого рассеяния. Но, согласно [11], и без дополнительного подбора параметра экранирования полное сечение упругого рассеяния в приближении (2) не сильно отличается от реальных значений полного сечения упругого рассеяния за исключением диапазона очень низких энергий. В работе [14] для описания упругого рассеяния электронов использовалось приближение (2), при этом  $t_c$  и параметр экранирования  $\eta$  подбирались таким образом, чтобы правильно моделировать полное и транспортное сечения упругого рассеяния.

В работе [15] используется модельное дифференциальное сечение упругого рассеяния электронов в следующей форме:

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{SR}}{d\Omega} \exp(\alpha - \beta\theta), \quad (3)$$



**Рис. 1.** Полное сечение и два первых транспортных сечения упругого рассеяния электронов на атомах Al в зависимости от энергии электрона. Цифры у кривых отвечают сечениям: 1 —  $\sigma_0$ , 2 —  $\sigma_1$ , 3 —  $\sigma_2$ .

где параметры  $\alpha$  и  $\beta$  вводятся таким образом, чтобы дифференциальное сечение упругого рассеяния (3) характеризовалось полным и транспортным сечениями упругого рассеяния, совпадающими с соответствующими значениями, рассчитанными в работе [16], при использовании атомного потенциала в приближении DHFS (Dirack–Hartree–Fock–Slater).

Модельное дифференциальное сечение для упругого рассеяния электронов, используемое в программе PENELOPE [3,17], может быть представлено в следующем виде:

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = \frac{\sigma_0}{2\pi} \left[ A \frac{2\eta(1+\eta)}{(1-\cos\theta+2\eta)^2} + (1-A) p_{ad}(\cos\theta) \right]. \quad (4)$$

Правая часть выражения (4) является суммой двух функций, входящих в выражение с разными статистическими весами  $A$  и  $1-A$  ( $0 \leq A \leq 1$ ) соответственно. Первая функция в выражении (4) пропорциональна сечению Резерфорда с параметром экранирования  $\eta$ . В качестве второй функции  $p_{ad}(\cos\theta)$  в работе [3] используется так называемое треугольное распределение  $(-2\cos\theta)\Theta(-\cos\theta)$ , где  $\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$  или дельта-функция  $\delta(\cos\theta - \langle \cos\theta \rangle)$ , где  $\langle \cos\theta \rangle$  — среднее значение косинуса угла упругого рассеяния.

Выражение (4) сформировано таким образом, что

$$\int (d\sigma_{el}/d\Omega) d\Omega$$

автоматически задает известную энергетическую зависимость полного сечения упругого рассеяния  $\sigma_0$ , т. е.

$$\sigma_0 = \int (d\sigma_{el}/d\Omega) d\Omega.$$

Параметры  $A$  и  $\eta$  в распределении (4) выбираются так, чтобы удовлетворить известные энергетические зависимости для первого и второго транспортных сечений  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$ . Сечения  $\sigma_0$ ,  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ , необходимые для таких расчетов, представлены, в частности, в работе [12], для рассеяния электронов с кинетической энергией от 100 eV до 1 GeV, на атомах с  $Z$  от 1 до 92. Отметим, что транспортные сечения  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$  в работе [12] выражаются через дифференциальное сечение упругого рассеяния следующим образом:

$$\sigma_1(E) = \int (1 - \cos \theta) \frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} d\Omega, \quad (5a)$$

$$\sigma_2(E) = \int \frac{3}{2} (1 - \cos^2 \theta) \frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} d\Omega. \quad (5b)$$

Энергетические зависимости сечений  $\sigma_0$ ,  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$  из работы [12] для упругого рассеяния электронов на атомах алюминия представлены на рис. 1. Можно видеть, что при значениях энергии электронов, превышающих 100 keV, полное сечение упругого рассеяния очень слабо зависит от энергии электрона и значительно превышает транспортные сечения. Это свидетельствует о том, что при высоких значениях энергии электрона каждый акт упругого рассеяния в среднем приводит к пренебрежимо малому отклонению траектории электрона от первоначального направления движения. В результате электрон с большой энергией может заметно отклониться от направления своего первоначального движения, только испытав очень большое число упругих соударений с атомами вещества. Это приводит к тому, что при моделировании движения электронов высоких энергий в модели индивидуальных столкновений приходится моделировать очень большое число упругих столкновений электронов с атомами вещества. При этом каждое такое столкновение характеризуется очень незначительным изменением параметров для сталкивающегося электрона.

Дифференциальные сечения упругого рассеяния (1)–(4), которые, согласно [6,7,11,14,15,17], могут быть успешно использованы для моделирования прохождения электронов через вещество в приближении индивидуальных столкновений, приводят к очень большим временным затратам на проведение расчетов при моделировании движения электронов высокой энергии. В этом случае используется обычно приближенный метод укрупненных столкновений. Результаты, полученные при использовании модели укрупненных столкновений, позволяют в ряде случаев получить хорошее согласие расчета с экспериментальными данными, даже при моделировании слоисто-неоднородной среды [18]. Но, согласно [10], существует неоднозначность в выборе параметров, определяющих конкретную реализацию метода

укрупненных соударений, в частности критического угла в [3] или длины, на которой формируется распределение многократного рассеяния в [1]. Кроме того, вообще говоря, не всегда очевидна применимость приближенных решений теории многократного рассеяния полученных в рамках однородной среды для описания прохождения электронов в неоднородной среде.

Для того чтобы иметь возможность применять метод Монте-Карло для моделирования движения электронов высокой энергии, не прибегая к использованию приближенных решений теории многократного рассеяния, предлагается ввести новое модельное дифференциальное сечение упругого рассеяния, которое может быть эффективно использовано для моделирования движения электронов высокой энергии. Следует отметить, что модельное дифференциальное сечение будет эффективным только в том случае, когда оно будет правильно описывать транспортные сечения рассеяния, и при этом характеризоваться полным сечением упругого рассеяния, существенно меньшим полным сечением упругого рассеяния. В каком-то смысле такое модельное сечение можно рассматривать как аналог модели укрупненных столкновений, но оно позволит описывать упругое рассеяние электронов высокой энергии, оставаясь в рамках модели индивидуальных столкновений. Очевидно, что модельные дифференциальные сечения типа (2)–(4), являющиеся модификацией сечения Резерфорда, не могут быть использованы для построения нового модельного дифференциального сечения, так как они точно (3), (4) или приближенно (см. [11]) описывают полное сечение упругого рассеяния электронов на атомах вещества.

## 2. Новое модельное дифференциальное сечение упругого рассеяния

В настоящей работе предлагается следующее выражение для дифференциального сечения упругого рассеяния электронов:

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = \frac{\sigma_0^{\text{eff}}}{2\pi} \frac{n+1}{2} \left( \frac{1+\cos\theta}{2} \right)^n, \quad (6)$$

которое характеризуется двумя подгоночными параметрами  $\sigma_0^{\text{eff}}$  и  $n$ . Для большей общности рассмотрения и анализа моделирования полного и транспортных сечений упругого рассеяния электронов проанализируем две возможные стратегии при выборе параметров  $\sigma_0^{\text{eff}}$  и  $n$  в выражении (6).

В первом случае будем требовать, чтобы дифференциальное сечение (6) правильно моделировало полное сечение упругого рассеяния  $\sigma_0$  и первое транспортное сечение  $\sigma_1$ . При этом, естественно, в расчетах будет правильно моделироваться длина пробега электрона относительно процесса упругого рассеяния, а также среднее значение косинуса угла рассеяния при упругом столкновении электрона с атомом мишени. Среднее

значение квадрата косинуса угла упругого рассеяния в этом случае, вообще говоря, будет отличаться от реального.

Во втором подходе параметры  $\sigma_0^{\text{eff}}$  и  $n$  будем выбирать таким образом, чтобы дифференциальное сечение упругого рассеяния правильно моделировало первое и второе транспортные сечения  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ . Полное сечение упругого рассеяния электрона, а следовательно, и длина его пробега относительно процесса упругого рассеяния в этом случае, вообще говоря, будут отличаться от реальной величины.

Очевидно, что для модели (6) нахождение полного сечения упругого рассеяния  $\sigma_0 = \int (d\sigma_{\text{el}}/d\Omega) d\Omega$  приводит нас к соотношению  $\sigma_0 = \sigma_0^{\text{eff}}$ . Подставив (6) в (3), получим следующие выражения для транспортных сечений через параметры  $\sigma_0^{\text{eff}}$  и  $n$ :

$$\sigma_1 = \sigma_0^{\text{eff}} \frac{2}{n+2}, \quad (7a)$$

$$\sigma_2 = \sigma_0^{\text{eff}} \frac{6(n+1)}{n^2+5n+6}. \quad (7b)$$

Определим значения параметров  $\sigma_0^{\text{eff}}$  и  $n$  при использовании двух разных подходов к формированию модельного дифференциального сечения упругого рассеяния электронов в форме (6).

### 2.1. Модельное дифференциальное сечение, правильно моделирующее полное сечение и первое транспортное сечение. Приближение S0S1

Модельное дифференциальное сечение (6), которое правильно описывает полное сечение упругого рассеяния  $\sigma_0$ , и первое транспортное сечение  $\sigma_1$  будем называть модельным сечением в приближении S0S1. Очевидно, для этого приближения имеем  $\sigma_0^{\text{eff}} = \sigma_0$ . Используя формулу (7a), получим выражения для определения параметра  $n$  модельного сечения (6) в следующем виде:

$$n = 2 \left( \frac{\sigma_0}{\sigma_1} - 1 \right). \quad (8)$$

Второе транспортное сечение для приближения S0S1 с использованием уравнений (8) и (7b) может быть представлено в следующем виде:

$$\sigma_2^{\text{S0S1}} = 3\sigma_1 \frac{2 - \sigma_1/\sigma_0}{2 + \sigma_1/\sigma_0}. \quad (9)$$

На рис. 2 представлено отношение сечений  $\sigma_2^{\text{S0S1}}$  и  $\sigma_2$  в зависимости от энергии электронов. Второе транспортное сечение  $\sigma_2^{\text{S0S1}}$ , согласно рис. 2, заметно превышает транспортное сечение  $\sigma_2$  в диапазоне значений энергии электрона  $E < 10 \text{ keV}$ . При больших энергиях разница между значениями  $\sigma_2^{\text{S0S1}}$  и  $\sigma_2$  снижается с увеличением энергии электрона. При энергии электрона  $10^8 \text{ eV}$  относительная разность данных сечений составляет 1.3%.

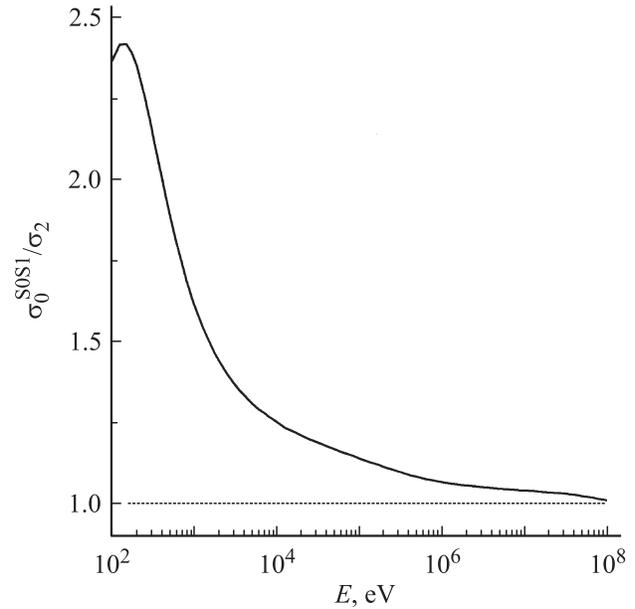


Рис. 2. Отношение сечений  $\sigma_2^{\text{S0S1}}/\sigma_2$  для упругого рассеяния электронов на атомах Al в зависимости от энергии электрона.

### 2.2. Модельное дифференциальное сечение, правильно моделирующее первое и второе транспортные сечения. Приближение S1S2

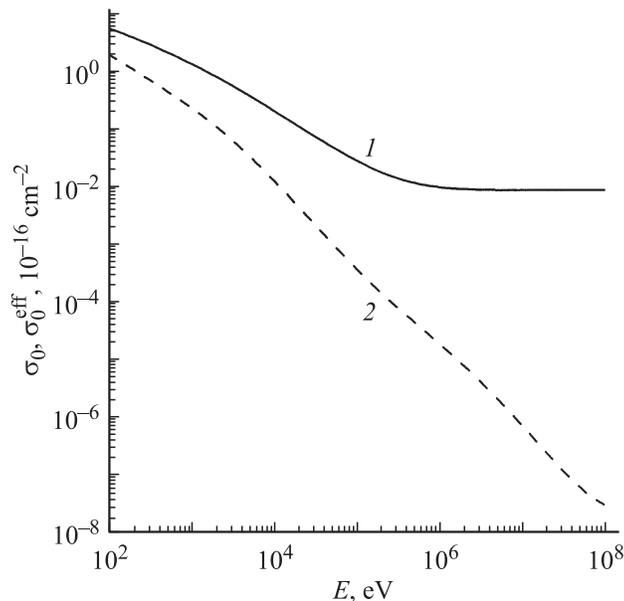
Модельное дифференциальное сечение (6), которое правильно описывает первое и второе транспортные сечения, будем называть модельным сечением в приближении S1S2. Согласно уравнениям (7), отношение транспортных сечений для модельного сечения (6) зависит только от параметра  $n$ . Это позволяет однозначно определить параметр  $n$  через отношение транспортных сечений следующим соотношением:

$$n = 3 \frac{\sigma_2/\sigma_1 - 1}{3 - \sigma_2/\sigma_1}. \quad (10a)$$

Величина эффективного сечения рассеяния  $\sigma_0^{\text{eff}}$  для приближения S1S2 определяется таким образом, чтобы удовлетворить абсолютное значение для первого, а следовательно и для второго, транспортных сечений. Используя (7a) и (10a), получим следующее выражение для эффективного значения полного сечения упругого рассеяния:

$$\sigma_0^{\text{eff}} = \frac{\sigma_1}{2} \frac{3 + \sigma_2/\sigma_1}{3 - \sigma_2/\sigma_1}. \quad (10b)$$

На рис. 3 проводится сравнение  $\sigma_0^{\text{eff}}$  для модельного сечения (6) в приближении S1S2 с полным сечением упругого рассеяния  $\sigma_0$  электронов на атомах Al. Видно, что эффективное сечение упругого рассеяния существенно меньше полного сечения упругого рассеяния. Таким образом, длина пробега электрона относительно упругого рассеяния при использовании модельного дифференциального сечения (6) в приближении S1S2



**Рис. 3.** Полное сечение  $\sigma_0$  (1) и эффективное полное сечение  $\sigma_0^{\text{eff}}$  для приближения S1S2 в модели (6) (2) упругого рассеяния электронов на атомах Al в зависимости от энергии электрона.

значительно превышает длину пробега электрона при использовании реального сечения упругого рассеяния. В результате использование дифференциального сечения (6) в приближении S1S2 должно привести к существенному сокращению числа упругих столкновений при моделировании прохождения электронов в веществе.

### 3. Прохождение электронов через плоскопараллельный слой вещества в модельной постановке задачи, учитывающей только процессы упругого рассеяния

Рассмотрим процесс прохождения электронов через плоскопараллельный слой вещества в модельной постановке задачи, полагая, что электроны, двигаясь в веществе, испытывают только упругое рассеяние на атомах мишени. Изменением энергии электрона в процессе рассеяния будем пренебрегать. В такой постановке задачи эффекты упругого рассеяния проявляются наиболее явно, что позволяет точнее оценить применимость модельного дифференциального сечения (6) для моделирования упругого рассеяния при прохождении электронов в веществе. Для описания процесса упругого рассеяния электронов при моделировании движения электронов в веществе будет использовано дифференциальное сечение упругого рассеяния (6) в приближениях S0S1 и S1S2. Результаты, полученные в этих приближениях, будут сравниваться между собой, а также с результатами, полученными при использовании дифференциального

**Таблица 1.** Отношение транспортной длины пробега к средней длине пробега для процесса упругого рассеяния электронов на атомах алюминия

Энергия электрона, keV	Модель (4); модель (6), приближение S0S1	Модель (6), приближение S1S2
1	10.5	1.79
10	70.4	4.16
10 <sup>2</sup>	558.8	7.38
10 <sup>3</sup>	7541	14.88
10 <sup>4</sup>	2.929 · 10 <sup>5</sup>	23.51

сечения в форме (4), которое будем считать эталонным, так как оно правильно моделирует  $\sigma_0$ ,  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ .

Для моделирования движения электронов в веществе методом Монте-Карло используем модель индивидуальных столкновений с применением стандартного алгоритма (см., например, [9,10]). Случайное значение длины свободного пробега электрона между последовательными актами упругого рассеяния  $\lambda_{el}$  выражается через среднее значение длины пробега  $\langle \lambda_{el} \rangle$  и случайную, равномерно распределенную в диапазоне  $[0, 1]$  величину  $\xi$  соотношением  $\lambda_{el} = \langle \lambda_{el} \rangle \ln(1/\xi)$  [19]. Средние значения длины свободного пробега для модели (6) в приближении S0S1 и для модели (4) имеют одинаковое значение:  $\langle \lambda_{el} \rangle = 1/N\sigma_0$ , где  $N$  — концентрация атомов в мишени. Для модели (6) в приближении S1S2 имеем  $\langle \lambda_{el} \rangle = 1/N\sigma_0^{\text{eff}}$ , где эффективное сечение упругого рассеяния  $\sigma_0^{\text{eff}}$  определяется выражением (10b).

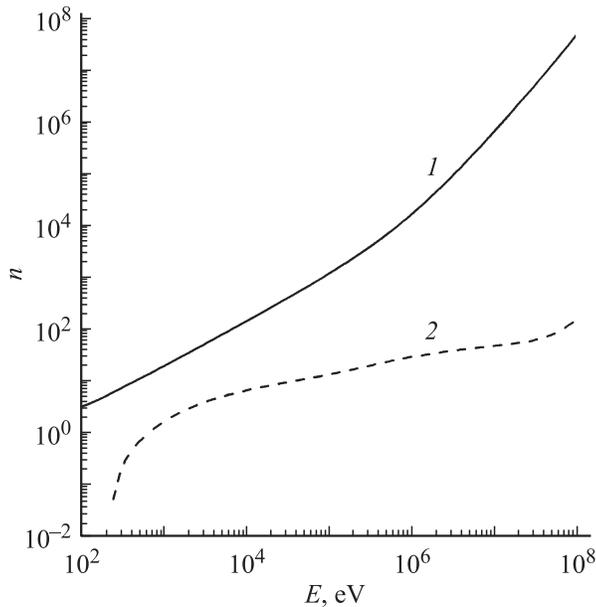
Знание функциональной зависимости дифференциального сечения упругого рассеяния от угла рассеяния позволяет выразить случайное значение угла упругого рассеяния через случайную величину  $\sigma$  с использованием закона преобразования случайных чисел [19]. Алгоритм определения случайного значения для угла упругого рассеяния в модели (4) через случайную величину  $\xi$  описан в [3]. Для дифференциального сечения (6) с использованием закона преобразования случайных чисел получаем

$$\cos \theta = 2\xi^{1/(n+1)} - 1. \quad (11)$$

Выражение (11) справедливо как для приближения S0S1, так и для S1S2. Различия в значениях случайного угла рассеяния для разных приближений будут обусловлены разными значениями параметра  $n$ , которые определяются выражениями (8) и (10а) соответственно.

Зависимости параметра  $n$  от энергии для рассматриваемых приближений представлены на рис. 4. Видно, что параметр  $n$  для приближения S0S1 во всем диапазоне значений энергии существенно больше параметра  $n$ , полученного для приближения S1S2. В результате приближение S0S1, в отличие от приближения S1S2, характеризуется ярко выраженным преимущественным рассеянием электронов на малые углы.

Отметим, что транспортная длина пробега  $\lambda_1 = 1/N\sigma_1$  одинакова как для модели (6) (в приближениях S0S1 и S1S2), так и для модели (4). Отношения  $\lambda_1/\langle \lambda_{el} \rangle$



**Рис. 4.** Показатель степени  $n$  модельного дифференциального сечения (6) для приближения S0S1 (1) и приближения S1S2 (2) для упругого рассеяния электронов на атомах Al в зависимости от энергии электрона.

для разных моделей упругого рассеяния представлены в табл. 1 при нескольких значениях энергии электрона. При этом отношение  $\lambda_1/\langle\lambda_{el}\rangle$  для модели (6) в приближении S0S1 и для модели (4) тождественно совпадают. Из таблицы видно, что для модели (4) отношение  $\lambda_1/\langle\lambda_{el}\rangle$  значительно больше, чем для модели (6) в приближении S1S2. Таким образом, число упругих столкновений, которое потребуется испытать электрону, чтобы пройти в веществе некоторое заданное расстояние, будет заметно меньшим в том случае, если будет использоваться для описания процесса упругого рассеяния модель (6) в приближении S1S2 вместо модели (4).

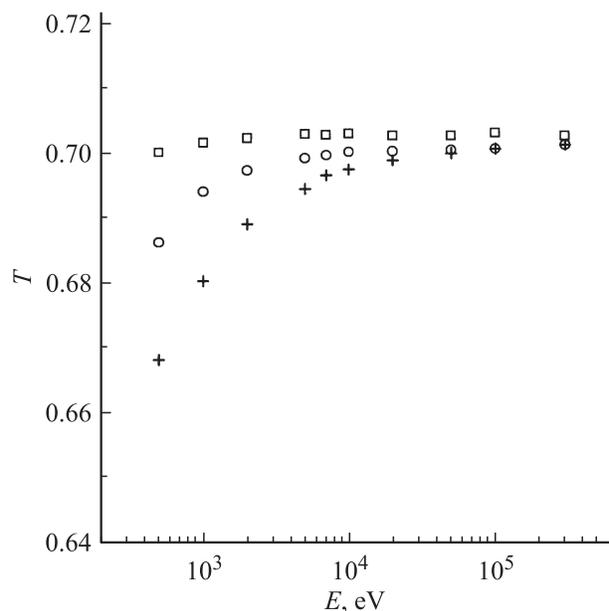
Результаты расчетов методом Монте-Карло прохождения электронов через плоскопараллельный слой алюминия, имеющий толщину  $d$ , равную одной транспортной длине пробега  $\lambda_1$ , представлены на рис. 5–8. Рассматривается моноэнергетический поток электронов, ортогональный поверхности алюминия. Так как транспортное сечение зависит от энергии электронов, то соответственно и толщина пленки в данном случае также зависит от энергии.

На рис. 5 представлены энергетические зависимости коэффициента прохождения  $T$  электронов через слой алюминия  $d = \lambda_1$ . Численно коэффициент  $T$  определяется как отношение потока электронов, прошедших через слой вещества к потоку электронов, падающих на слой. В этих и последующих расчетах моделировалось  $10^7$  траекторий электронов. Отметим, что в рассматриваемой модельной постановке задачи энергия электронов не изменяется при движении в веществе, следовательно, все электроны выйдут из вещества. Те электроны, кото-

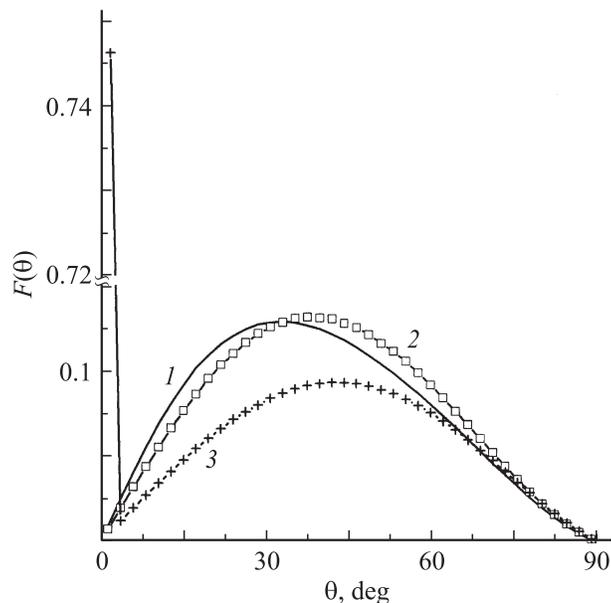
рые не прошли сквозь слой алюминия, выходят из него в результате обратного рассеяния. Из рис. 5 видно, что коэффициент прохождения электронов незначительно увеличивается с ростом энергии электронов, изменяясь для модели (4) от 0.686 при энергии 0.5 keV до 0.7 при энергии, превышающей 100 keV. Результаты, полученные при использовании приближения S1S2, практически точно совпадают с результатами, полученными для модели (4) при энергии электронов  $E > 50$  keV. Значения  $T$ , полученные для приближения S1S2, заметно меньше соответствующих значений для модели (4) при энергии электронов  $E < 10$  keV. Приближение S0S1 дает слегка завышенные значения для коэффициента прохождения электронов через слой во всем диапазоне энергий.

На рис. 6, 7 приведены угловые распределения  $F(\theta)$  электронов, прошедших через пленку толщиной  $d = \lambda_1$ , полученные при использовании разных моделей для описания упругого рассеяния электронов. Значение угла  $\theta$  отсчитывается от нормали к поверхности. Угловые распределения нормированы таким образом, что площадь под соответствующей кривой равна коэффициенту прохождения электронов через пленку. Отметим, что в ряде работ при представлении угловых распределений используется их нормировка на элемент телесного угла  $d\Omega = 2\pi \sin\theta$ , в этом случае максимум распределения достигается при значении  $\theta = 0$ .

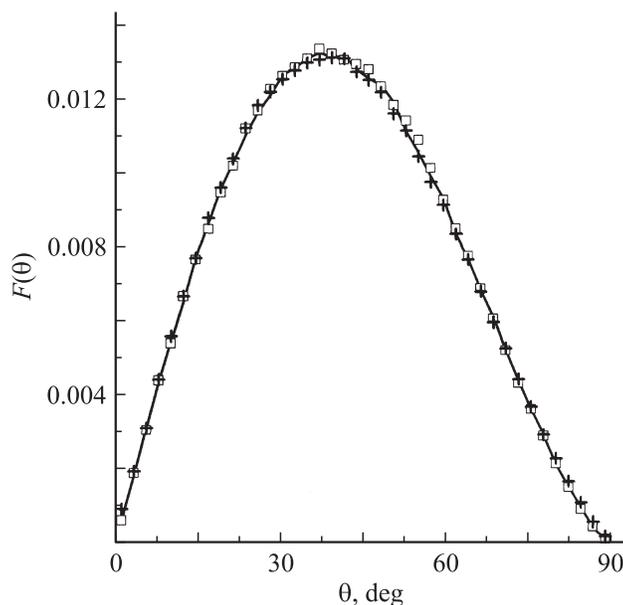
Согласно рис. 6, угловые зависимости для различных приближений сильно различаются при энергии электронов  $E = 1$  keV. Отличие результатов расчета с использованием модели (6) в приближении S0S1 от результатов расчета в модели (4) обусловлено тем, что



**Рис. 5.** Коэффициент прохождения электронов через слой Al толщиной  $d = \lambda_1$  в зависимости от энергии электрона, рассчитанный методом Монте-Карло при использовании разных моделей для описания упругого рассеяния электронов: модель (4) —  $\circ$ ; модель (6), приближение S0S1 —  $\square$ ; модель (6), приближение S1S2 —  $+$ .



**Рис. 6.** Угловые распределения электронов с энергией  $E = 1 \text{ keV}$ , прошедших через слой Al толщиной  $d = \lambda_1$ , рассчитанные методом Монте-Карло при использовании разных моделей для описания упругого рассеяния электронов: модель (4) — 1; модель (6), приближение S0S1 — 2; модель (6), приближение S1S2 — 3.



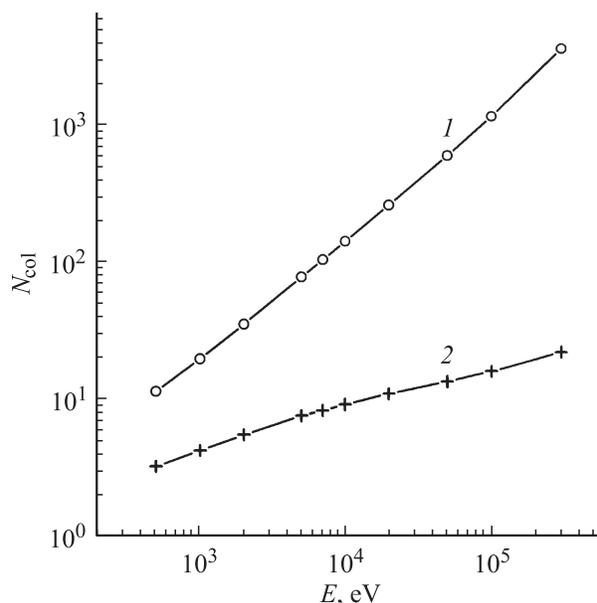
**Рис. 7.** Угловые распределения электронов с энергией  $E = 100 \text{ keV}$ , прошедших через слой Al толщиной  $d = \lambda_1$ , рассчитанные методом Монте-Карло при использовании разных моделей для описания упругого рассеяния электронов: модель (4) — сплошная кривая; модель (6), приближение S0S1 — □; модель (6), приближение S1S2 — +.

при низких значениях энергии электронов, согласно рис. 2, приближение S0S1 очень плохо моделирует второе транспортное сечение. Расхождение расчетов для

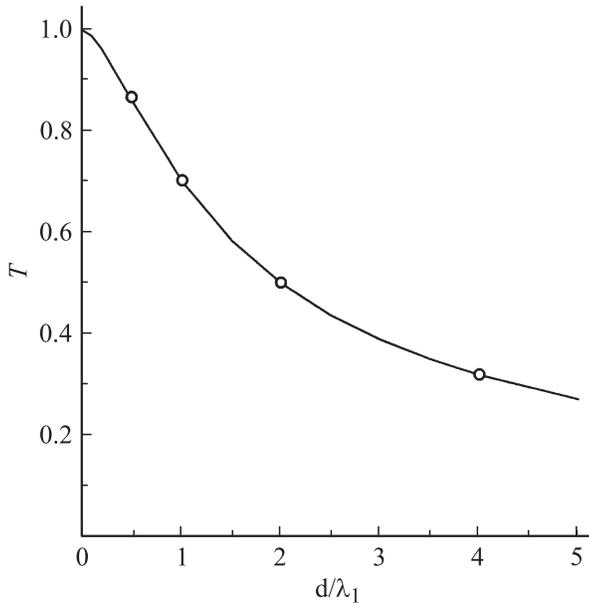
модели (4) и для приближения S1S2 обусловлено тем, что в этих условиях средняя длина пробега электронов относительно процесса упругого рассеяния сравнима с толщиной пленки. В результате при использовании модельного дифференциального сечения упругого рассеяния (6) в приближении S1S2 большая часть электронов проходит через слой толщиной  $d = \lambda_1$  без столкновений с атомами среды, что и обеспечивает резкий максимум соответствующего углового распределения в области малых углов.

Результаты, представленные на рис. 7, показывают, что угловой спектр электронов с энергией  $E = 100 \text{ keV}$ , прошедших через слой алюминия толщиной  $d = \lambda_1$ , практически совпадает для всех используемых приближений, что свидетельствует о допустимости использования как приближения S0S1, так и S1S2, для моделирования упругого рассеяния электронов высокой энергии. Но несомненно, приближение S1S2 представляет значительно больший интерес для моделирования электронов методом Монте-Карло, так как обеспечивает необходимый результат при значительно меньших временных затратах на проведение расчета.

На рис. 8 сравнивается среднее число упругих столкновений, испытываемых электроном в слое алюминия толщиной  $d = \lambda_1$ , с момента его попадания в слой до его выхода из слоя либо в результате прохождения насквозь, либо в процессе обратного рассеяния. Результаты, представленные на рис. 8, наглядно демонстрируют, что модель упругого рассеяния (6) в приближении S1S2 требует рассматривать значительно меньшее число упругих



**Рис. 8.** Среднее число упругих столкновений, испытываемое электроном в слое алюминия толщиной  $d = \lambda_1$ , с момента его попадания в слой до его выхода из слоя в зависимости от энергии электрона при использовании разных моделей для описания упругого рассеяния электронов: модель (4) — 1; модель (6), приближение S1S2 — 2.



**Рис. 9.** Коэффициент прохождения электронов с энергией  $E = 10$  keV в зависимости от толщины слоя Al, рассчитанный методом Монте-Карло при использовании разных моделей для описания упругого рассеяния электронов: модель (4) — кружочки; модель (6), приближение S1S2 — сплошная кривая.

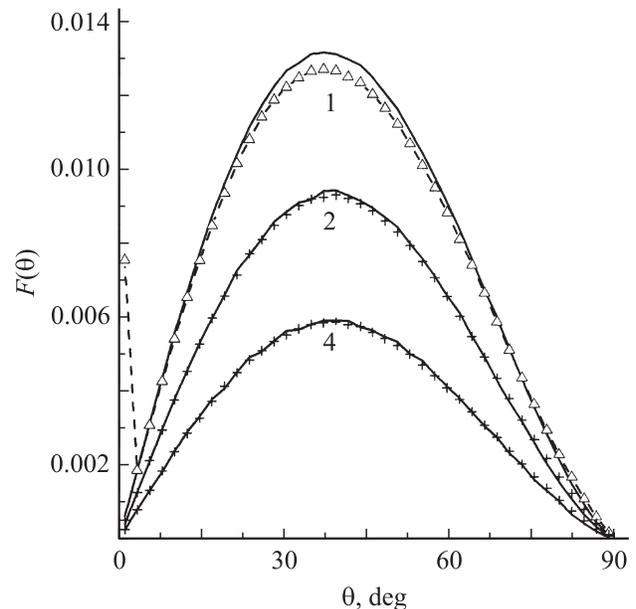
соударений электронов с атомами вещества при прохождении слоя заданной толщины, чем модель (4).

На рис. 9 показана зависимость коэффициента прохождения электронов через слой алюминия от толщины слоя, полученная для модели упругого рассеяния (6) в приближении S1S2 и для модели (4). Незначительное различие коэффициентов прохождения электронов через слой при использовании разных приближений наблюдается только при малых значениях толщины слоя  $d/\lambda_1 < 2$ .

Результаты, представленные на рис. 10, показывают угловой спектр электронов с энергией  $E = 10$  keV, прошедших через плоскопараллельные слои алюминия разной толщины. При значении  $d/\lambda_1 = 1$  угловой спектр электронов, полученный для модели (6) в приближении S1S2, заметно отличается от углового спектра, рассчитанного для модели (4). В этом случае, согласно данным, представленным в табл. 1, для приближения S1S2 имеем  $\lambda_1/\langle\lambda_{el}\rangle = 4.16$ , а следовательно,  $d/\langle\lambda_{el}\rangle = 4.16$ . При таком соотношении между толщиной слоя и средней длиной пробега электроны, проходящие данный слой без столкновений, существенно влияют на угловой спектр. Для более толстых слоев  $d/\lambda_1 = 2$  и 4 угловые спектры, рассчитанные при использовании двух разных приближений, практически совпадают.

Таким образом, можно сделать вывод о применимости предложенного модельного дифференциального сечения упругого рассеяния (6) в приближении S1S2 для моделирования упругого рассеяния при прохождении электронов в веществе в том случае, если толщина слоя вещества не слишком мала. Согласно результатам,

представленным в табл. 1, а также на рис. 7 и 10, можно приближенно ограничить область применимости данной модели условием  $d/\langle\lambda_{el}\rangle \geq 8$ . Здесь  $\langle\lambda_{el}\rangle$  — средняя длина пробега электрона относительно процесса упругого рассеяния для приближения S1S2, определяемая соотношением:  $\langle\lambda_{el}\rangle = 1/N\sigma_0^{\text{eff}}$ , где эффективное сечение  $\sigma_0^{\text{eff}}$  задается уравнением (10b). Минимальная толщина слоя вещества, обеспечивающая применимость приближения S1S2 для описания упругого рассеяния электронов, была оценена с использованием соотношения  $d_{\text{min}} = 8\langle\lambda_{el}\rangle$  для нескольких материалов с использованием данных о транспортных сечениях из работы [12]. Результаты оценки представлены в табл. 2 для разных значений энергий электрона. Из таблицы видно, что минимальная толщина увеличивается с ростом энергии. Для тяжелых элементов минимальная толщина  $d_{\text{min}}$  значительно меньше, чем для легких. Подчеркнем, что результаты, приведенные в табл. 2, носят оценочный характер. Точные ограничения на пределы применимости модели для каждого конкретного материала могут быть получены только при более детальном анализе с учетом того, что в реальности энергия электронов при их движении в веществе будет уменьшаться. Так как при уменьшении энергии электронов величина  $d_{\text{min}}$  также уменьшается, то значения минимальной толщины слоя, приведенные в табл. 2, можно рассматривать как оценку сверху.



**Рис. 10.** Угловые распределения электронов с энергией  $E = 10$  keV, прошедших через слои Al разной толщины, рассчитанные методом Монте-Карло при использовании разных моделей для описания упругого рассеяния электронов: модель (4) — сплошная кривая, модель (6), приближение S1S2 — крестики и треугольники. Толщина слоя, выраженная в транспортных длинах пробега  $d/\lambda_1$ , указана у кривых.

**Таблица 2.** Оценка минимальной толщины слоя вещества для применимости модели упругого рассеяния (6) в приближении SIS2

Материал	Энергия, keV	$d_{\min}$ , $\mu\text{m}$	Материал	Энергия, keV	$d_{\min}$ , $\mu\text{m}$
Be	10	4.17	Ag	10	0.271
	100	161		100	4.88
	1000	3270		1000	87.8
Al	10	1.18	Au	10	0.188
	100	39.2		100	2.78
	1000	769		1000	47.2
Cu	10	0.292	U	10	0.206
	100	6.96		100	3.08
	1000	132		1000	52.4

## Заключение

Таким образом, предложено новое модельное дифференциальное сечение упругого рассеяния (6) в приближении SIS2, которое правильно описывает первое и второе транспортные сечения и характеризуется полным сечением упругого рассеяния, существенно меньшим, чем реальное значение полного сечения упругого рассеяния. Сопоставление результатов моделирования методом Монте-Карло прохождения электронов через слой вещества при использовании данного дифференциального сечения и дифференциального сечения (4), которое правильно моделирует  $\sigma_0$ ,  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ , показало, что результаты, полученные с использованием разных моделей, практически совпадают при условии, если толщина слоя превышает некоторое минимальное значение  $d_{\min}$ .

Применение нового модельного дифференциального сечения рассеяния приводит к значительному сокращению числа упругих столкновений, испытываемых при прохождении электронов в веществе. Это позволит моделировать прохождение электронов высоких энергий методом Монте-Карло, оставаясь в рамках модели индивидуальных столкновений.

## Список литературы

- [1] Kawrakow I, Rogers D.W.O. // NRCC report PIRS-701 (<http://www.irs.inms.nrc.ca/EGSnrc/EGSnrc.html>).
- [2] Physics Reference Manual, Version: geant4 9.2 (19 December, 2008) (<http://geant4.web.cern.ch/geant4/UserDocumentation/UsersGuides/PhysicsReferenceManual/fo/PhysicsReferenceManual.pdf>).
- [3] Salvat F, Fernandes-Varea J.M., Sempau J. // Workshop Proc. Barcelona, Spain, 4–7 June 2006, OECD 2006, NEA N 6222. (<http://www.nea.fr/html/science/pubs/2006/nea6222-penelope.pdf>).
- [4] Kawrakow I, Bielajew A.F. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 1998. Vol. B134. N 3–4. P. 325–336.
- [5] Lewis H.W. // Phys. Rev. 1950. Vol. 78. N 5. P. 526–530.
- [6] Shimizu R, Kataoka Y, Ikuta T, Koshikawa T, Hashimoto H. // J. Phys. D: Appl. Phys. 1976. Vol. 9. N 1. P. 101–114.
- [7] Dapor M. // Phys. Rev. B. 1992. Vol. 46. N 2. P. 618–625.
- [8] Akkerman A., Barak J., Emfietzoglou D. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 2005. Vol. B227. N 3. P. 319–336.
- [9] Shimizu R, Ze-Jun D. // Reports on Progress in Physics. 1992. Vol. 55. N 4. P. 487–531.
- [10] Аккерман А.Ф. Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. М.: Энергоатомиздат, 1991. 200 с.
- [11] Lilequist D, Salvat F, Mayol R, Martinez J.D. // J. Appl. Phys. 1989. Vol. 65. N 6. P. 2431–2438.
- [12] Mayol R, Salvat F. // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1997. Vol. 65. N 1. P. 55–154.
- [13] Jablonski A, Salvat F, Powell C.J. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2004. Vol. 33. N 2. P. 409–451.
- [14] Sheikin E.G., Sukhomlinov V.S. // AIAA Paper 2008-1369. 44<sup>th</sup> Aerospace Sci. Meeting and Exhibit. Reno, 2006.
- [15] Bentabet A., Bouarissa N. // Appl. Phys. A. 2007. Vol. A88. N 2. P. 353–358.
- [16] Dapor M. // J. Appl. Phys. 1996. Vol. 79. N 11. P. 8406–8411.
- [17] Sempau J, Fernandes-Varea J.M., Acosta E, Salvat F. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 2003. Vol. B207. N 2. P. 107–123.
- [18] Kim H.K., Kum O. // J. of the Korean Phys. Soc. 2006. Vol. 49. N 4. P. 1640–1651.
- [19] Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973. 312 с.