

## Метод расчета переноса потока ионизирующего излучения в многокомпонентных многослойных плоских преградах

Острик Афанасий Викторович, д.т.н., профессор  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
«Институт проблем химической физики РАН» (г. Черноголовка)  
Бугай Ирина Владимировна, к.т.н., доцент  
Государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
Московской области «Технологический университет» (г. Королев)

*Рассматривается вариант метода Монте-Карло для расчета переноса ионизирующего излучения с энергией квантов  $E_{ph}=1-200$ кэВ. Предлагается гибридный численно-аналитический метод расчета. При численной реализации каждой траектории фотопоглощение квантов учитывается аналитически, а остальные виды взаимодействий (комptonовское и релеевское рассеяния, флуоресценция) разыгрываются случайным образом. Приводятся результаты расчетов переноса излучения планковского спектра в многокомпонентных многослойных плоских преградах.*

**Ключевые слова:** моделирование, метод Монте-Карло, энерговыделение, комptonовское и релеевское рассеяния, флуоресценция, планковский спектр излучения.

**Введение.** Расчет переноса ионизирующего излучения (ИИ) с энергией квантов  $E_{ph}=1-200$ кэВ (рентгеновский диапазон спектра ИИ) имеет важное практическое значение [1-3]. В этом интервале при взаимодействии ИИ с веществом оказываются существенным представительный набор физических процессов: фотопоглощение и сопровождающая его флуоресценция (в случае больших атомных номеров химических элементов (ХЭ), начиная с  $Z \approx 40$ ); комptonовское и релеевское рассеяния. При этом, для низких энергий квантов ИИ (мягкое ИИ  $E_{ph}=1...10$ кэВ), массовый коэффициент фотопоглощения весьма велик уже при средних значениях  $Z$  и разыгрывать процессы фотопоглощения при численном моделировании отдельной траектории представляется бесперспективным. Для фотопоглощения требуется некоторый аналитический подход, эффективно реализуемый в методе плотностей столкновений [4]. Необходимость учета представительного набора видов взаимодействий имеет, конечно, и свои плюсы, поскольку в итоге получается численный код, применимый в значительно большем интервале изменений энергий квантов, вплоть до энергий  $E_{ph}=2m_0c^2 \approx 1,02$ МэВ, начиная с которых становится возможным рождение электрон-позитронных пар.

Не менее важным обстоятельством оказывается потребность в большом количестве данных о сечениях рассматриваемых видов взаимодействия. В частности, необходимы таблицы данных дифференциальных сечений комptonовского и релеевского рассеяний, интегрального сечения фотопоглощения, а также сечения её радиационной части — флуоресценции. Для фотопоглощения данные должны быть достаточно подробными (включать энергии фотонов, на которых имеют место скачки сечений фотопоглощения). Само наличие скачков вносит дополнительные трудности при интерполяции сечений для различных значений энергий квантов. Конечно, желательно иметь набор тестирующих эти данные ЭВМ-программ, среди которых особенно полезными оказываются те, которые проверяют согласованность данных из различных источников (например, интегралы дифференциальных сечений по углам рассеяния должны быть близки к полным сечениям, которые имеются у многих авторов).

Многокомпонентность и гетерогенность преграды вносят множество дополнительных особенностей [2, 3]. Отметим только, что очень полезными оказываются метод врезок и гибридный подход [2, 5], при котором перенос фотонов рассматривается для многокомпонентной гомонизированной преграды, а перераспределение энергии вторичным электронным излучением реализуется аналитически методом элементарной ячейки для гетерогенного включения.

Как и в других приложениях метода Монте-Карло, весьма важным является вопрос о алгоритмах численного моделирования каждой траектории так, чтобы она была наиболее информативна, но с наименьшими затратами времени ЭВМ на её розыгрыш. Основным принципом, обеспечивающим информативность, может служить запрет на окончание траектории при безрадиационном фотопоглощении или выходе из преграды. Для корректности такого запрета вводятся соответствующие веса колен траектории. Скорость реализации траектории во многом определяется быстротой поиска узлов интерполяции табличных данных. Авторами используется метод деления пополам. Этот метод, очевидно, не является наиболее эффективным, но он легко программируется и, как показывают расчеты, оказывается достаточным для рассматриваемого класса задач переноса. Ну и конечно, считывание, проверка и обработка данных с целью их адаптации к решаемой задаче должны быть сделаны предварительно перед циклом розыгрыша траекторий.

Получаемый в итоге численный код не гарантирован от ошибок. Важными этапами является его верификация и валидация. При верификации полезными и информативными оказываются организация различных счетчиков (например, счетчиков различных видов взаимодействий и на каких элементах они реализуются) и проведение сравнений с простыми моделями переноса (общую модель достаточно просто поставить в условия справедливости рассматриваемой простой модели). Для валидации численной модели и её кода в настоящее время в доступной литературе имеются достаточно много специально разработанных тестов и экспериментальных данных, полученных в хорошо контролируемых условиях проведения опытов.

Настоящая статья посвящена расчету переноса ИИ в гомонизированной многослойной плоской преграде с учетом основных процессов, имеющих место при взаимодействии квантов излучения с атомами вещества в рассматриваемом диапазоне спектра: фотопоглощения и флуоресценции, релеевского и комptonовского рассеяний.

**Последовательность вычислений методом Монте-Карло.** Предварительно перед основным циклом расчета траекторий производится считывание из баз данных требуемых интегральных и дифференциальных сечений взаимодействий для тех ХЭ, которые входят в состав слоев преграды. Затем определяются интегральные сечения для заданных массовых содержаний элементов по слоям. Для каждого слоя в соответствии с его составом строится единая по энергиям квантов сетка, на которой задаются интегральные сечения для фотопоглощения, со встроенными на ней энергиями скачков в этих сечениях. Поскольку в различные слои преграды могут входить одинаковые ХЭ, то во избежание дублирования дифференциальные сечения (угловые распределения рассеяний) считываются для ХЭ по информации об их содержании во всей преграде в целом. В свою очередь слои преграды разбиваются на подслои – детекторы, в которых накапливаются вклады от отдельных траекторий.

Розыгрыш каждой траектории проводится так, чтобы она не обрывалась при фотопоглощении или выходе кванта за пределы преграды. Это достигается введением статистических весов, изменяющихся после розыгрыша каждого свободного пробега. Вклады в детекторы от безрадиационного фотопоглощения (без образования флуоресцентного кванта) рассчитываются аналитически. При фотопоглощении с рождением флуоресцентного кванта, поглощенный квант заменяется флуоресцентным и траектория продолжается. Траектория обрывается лишь при уменьшении энергии кванта до  $E_{ph} < 1\text{кэВ}$  или снижении статистического веса до  $V < 10^{-4}$ .

Последовательность розыгрыша траектории показана на рис. 1. По заданному спектральному частичному распределению  $F_p(E_{ph})$  на поверхности преграды разыгрывается энергия фотона  $E_{ph}$ , которая находится из уравнения (для повышения эффективности программы входящий в это уравнение интеграл берется аналитически или численно перед циклом розыгрыша траекторий):

$$\int_{E_{ph\min}}^{E_{ph}} F_p(E) dE = \xi,$$

где  $\xi$  – случайное число, равномерно распределенное на отрезке [0,1]. Затем при известной энергии кванта разыгрывается длина свободного пробега и по ней определяется номер слоя, в который попал квант. По суммарным (за исключе-

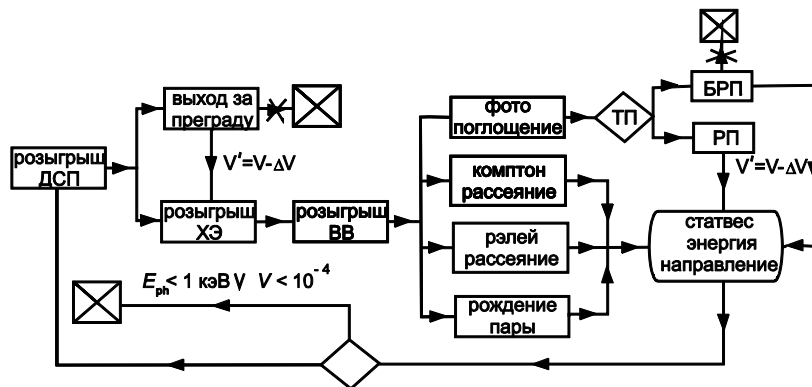


Рис. 1. Последовательность розыгрыша траектории (ДСП – длина свободного пробега; ВВ – вид взаимодействия; ТФ – тип фотопоглощения; БРП – безрадиационный переход; РП – радиационный переход)

нием безрадиационного фотопоглощения) интегральным сечениям взаимодействия каждого из ХЭ, входящих в этот слой, разыгрывается ХЭ, на котором реализовалось столкновение кванта. Розыгрыш проводится по стандартной схеме розыгрыша дискретной случайной величины [6] отрезок [0,1] разбивается по длине пропорционально интегральным сечениям ХЭ в слое, разыгрывается случайное число  $\xi \in (0,1)$  и в зависимости от того, в какое из разбиений оно попадет, и определяется ХЭ. Далее по интегральным сечениям взаимодействия (опять за исключением безрадиационного фотопоглощения) для найденного ХЭ разыгрывается вид взаимодействия аналогично тому, как определялся случайным образом ХЭ. При известных данных об энергии фотона, виде взаимодействия и ХЭ, на котором он реализуется, разыгрываются угол рассеяния  $\theta$  и азимутальный угол  $\psi$ . В свою очередь, по углам  $\theta, \psi$  и углу  $\phi_i$  (углу между прямолинейным участком траектории и перпендикуляром к плоской преграде) определяется новый текущий угол  $\phi'_i$ , а также рассчитываются новые значения энергии фотона  $E'_{ph}$  и статистического веса  $V'$  (см. далее). Затем, если  $E' > 1\text{кэВ}$  и  $V' > 10^{-4}$  разыгрывается новая длина свободного пробега и весь процесс розыгрыша колена траектории повторяется. В противном случае проводится розыгрыш следующей траектории до тех пор, пока не будет набрана заданная статистика (число моделируемых траекторий квантов).

**Прямая компонента излучения.** В низкоэнергетической области энергий квантов прямую компоненту излучения (часть квантов, которые не испытывают в преграде ни одного рассеяния и только фотопоглощаются без флуоресценции) целесообразно считать аналитически. Вероятность реализации траектории  $W_p$  без рассеяния и флуоресценции, а также доля энергии потока излучения  $W_E$  прямой компоненты вычисляются по соотношениям

$$W_p = \int_{E_{phmax}}^{E_{phmax}} F_p(E_{ph}) e^{-\tau_{s\Sigma}(E_{ph})/\cos\varphi} dE_{ph},$$

$$W_E = \int_{E_{phmax}}^{E_{phmax}} F_E(E_{ph}) e^{-\tau_{s\Sigma}(E_{ph})/\cos\varphi} dE_{ph}, \quad (1)$$

$$\tau_{s\Sigma}(E_{ph}) = \sum_{i=1}^N (\sigma_{ci}(E_{ph}) + \sigma_{ri}(E_{ph}) + \sigma_{ffi}(E_{ph})) m_i$$

где  $\tau_{s\Sigma} = \tau_{s\Sigma}(E_{ph})$  – оптическая толщина многослойной преграды по отношению ко всем рассматриваемым процессам взаимодействия кроме безрадиационного фотопоглощения;  $\sigma_{ff}(E_{ph})$  – часть массового сечения фотопоглощения с рождением флуоресцентного кванта ( $\sigma_f(E_{ph}) = \sigma_{ff}(E_{ph}) + \sigma_{fe}(E_{ph})$ );  $\rho_i, h_i, m_i$  – плотность, толщина и массовая толщина ( $m_i = \rho_i h_i$ )  $i$ -го слоя;  $N$  – число слоев преграды;  $\varphi$  – угол падения излучения на преграду.

Таблица 1. Вероятность реализации и доля энергии прямой компоненты

$T_{эф}$ , кэВ	C		Al		Fe		Pb	
	$W_p, \%$	$W_E, \%$	$W_p, \%$	$W_E, \%$	$W_p, \%$	$W_E, \%$	$W_p, \%$	$W_E, \%$
1,6	52,6	59,3	6,7	12,6	–	–	–	–
5	69,8	74,9	38,3	52,2	0,66	1,89	0,0016	0,0073
8	74,6	78,4	52,5	64,6	4,09	9,08	0,056	0,18

В таблице 1 представлены результаты расчета по формулам (1) для планковских спектров с  $T_{эф} = 1,6, 5, 8$ кэВ [1,3] и преград толщиной  $h = 0,5$ см из углерода, алюминия, железа и свинца. Видно, что выделение прямой компоненты и ее аналитический расчет имеют смысл для не слишком больших  $Z$  и с увеличением доли жестких квантов ИИ в спектре.

Для прямой компоненты параметры потока излучения  $q$ , перпендикулярного плоскости преграды, и приведенного удельного энерговыделения  $f$  (удельного энерговыделения на единицу плотности энергии падающего излучения) рассчитываются аналитически, интегрированием по спектру:

$$q(m) = \cos\varphi \int_{E_{phmax}}^{E_{phmax}} F_E(E_{ph}) e^{-\tau_{fe}(E_{ph}, m)/\cos\varphi} dE_{ph},$$

$$f(m) = -\frac{dq}{dm} = \int_{E_{phmax}}^{E_{phmax}} \sigma_{fe}(E_{ph}, m) F_E(E_{ph}) e^{-\tau_{fe}(E_{ph}, m)/\cos\varphi} dE_{ph}, \quad (2)$$

$$\tau_{fe}(E_{ph}, m) = \sigma_{feN+1}(E_{ph}) \Delta m_{N+1} + \sum_{i=1}^{N(m)} \sigma_{fei}(E_{ph}) m_i.$$

где  $\tau_{fe}(E_{ph}, m)$  – оптическое расстояние по отношению к безрадиационному фотопоглощению вдоль нормали к преграде от облучаемой поверхности до плоскости с текущей массовой координатой  $m$ ;  $N(m)$  – число слоев, предшествующих слою, в котором находится плоскость с координатой  $m$ ;  $\Delta m_{N+1}$  – массовое расстояние от нижней (облучаемый слой считается самым верхним с  $N=1$ ) границы  $N$ -го слоя до плоскости с координатой  $m$ .

**Разыгрыш длины свободного пробега.** Моделирование длины свободного пробега в преграде (из точки взаимодействия в плоскости с массовой координатой  $m$  до следующей точки взаимодействия  $m'$ ) проводится по соотношениям:

$$1 - e^{-\Delta\tau_{s\Sigma}(E_{ph}, m, m')/|\cos\varphi_t|} = (1 - e^{-\Delta\tau_{s\Sigma}(E_{ph}, m, M')/|\cos\varphi_t|}) \xi \quad (3)$$

$$M' = \begin{cases} M, & \text{где } \cos\varphi_t > 0 \\ 0, & \text{где } \cos\varphi_t < 0 \end{cases}$$

где  $\xi$  – случайное число, равномерно распределенное на  $[0,1]$ ;  $M$  – массовая толщина преграды;  $\Delta\tau_{s\Sigma}(E_{ph}, m, m')$  – оптическое расстояние между плоскостями с координатами  $m$  и  $m'$ . Из соотношения (3) определяется новая массовая координата плоскости  $m'$ , в которой находится точка взаимодействия кванта (заканчивается старое колено траектории).

Статистический вес траектории уменьшается: умножается на произведение вероятностей, что рассеивающее столкновение (комpton или релей или флуоресценция) произойдет, а безрадиационная часть фотопоглощения до момента столкновения – нет

$$V' = (1 - e^{-\Delta\tau_{s\Sigma}(E_{ph}, m, M')/|\cos\varphi_t|}) e^{-\Delta\tau_{fe}(E_{ph}, m, m')/|\cos\varphi_t|} V.$$

Вклад в поток на границе детектора с координатой  $m_t$  от безрадиационного поглощения на этом текущем колене траектории рассчитывается по соотношениям:

$$q(m_t) = \frac{E_{ph} V}{\langle E_{ph} \rangle} \cos\varphi \begin{cases} e^{-\frac{\Delta\tau_{fe}(E_{ph}, m, m_t)}{|\cos\varphi_t|}}, & \text{где } 0 \leq (m_t - m)\omega \leq |m - m'| \\ e^{-\frac{[\Delta\tau_{fe}(E_{ph}, m, m_t) + \Delta\tau_{s\Sigma}(E_{ph}, m, M')]}{|\cos\varphi_t|}}, & \text{где } |m - m'| \leq (m_t - m)\omega \leq |m - M'|. \end{cases} \quad (4)$$

где  $\omega = \text{sign}(\cos\varphi_t)$  – индекс (знак) направления движения ( $\omega=+1$  – влудь преграды,  $\omega=-1$  – навстречу падающему излучению).

Вклад энерговыведения в детектор с координатой центра  $\bar{m}_t = m_t + \Delta m / 2$  определяется по соотношениям:

$$f(\bar{m}_t) = -\frac{dq}{dm_t} = \frac{E_{ph}V}{\langle E_{ph} \rangle} \sigma_{fe}(\bar{m}_t, E_{ph}) \frac{\cos \varphi}{|\cos \varphi_t|} \left\{ \begin{array}{l} e^{-\frac{\Delta \tau_{fe}(E_{ph}, m, \bar{m}_t)}{|\cos \varphi_t|}}, \text{ где } 0 \leq (\bar{m}_t - m)\omega \leq |m - m'| \\ e^{-\frac{[\Delta \tau_{fe}(E_{ph}, m, \bar{m}_t) + \Delta \tau_{s\Sigma}(E_{ph}, m, M')]}{|\cos \varphi_t|}}, \text{ где } |m - m'| \leq (\bar{m}_t - m)\omega \leq |m - M'| \end{array} \right. \quad (5)$$

Так как траектории разыгрываются лишь для части излучения без прямой компоненты, то после первого колена статистический вес меняется только вследствие фотопоглощения без флуоресценции (первое столкновение гарантировано)

$$V' = e^{-\Delta \tau_{fe}(E_{ph}, 0, m') / \cos \varphi} V.$$

Соответственно нет вкладов в детекторы при  $|m - m'| < |m - m_t| \leq |m - M'|$  и соотношения (4) и (5) для первого колена траекторий принимают вид:

$$q(m_t) = \frac{E_{ph}V}{\langle E_{ph} \rangle} \cos \varphi \left\{ \begin{array}{l} e^{-\frac{\Delta \tau_{fe}(E_{ph}, m, m_t)}{\cos \varphi}}, \text{ где } m_t \leq m' \\ 0, \text{ где } m' < m_t \leq M. \end{array} \right.$$

$$f(\bar{m}_t) = -\frac{dq}{dm_t} = \frac{E_{ph}V}{\langle E_{ph} \rangle} \sigma_{fe}(\bar{m}_t, E_{ph}) \left\{ \begin{array}{l} e^{-\frac{\Delta \tau_{fe}(E_{ph}, m, \bar{m}_t)}{|\cos \varphi_t|}}, \text{ где } \bar{m}_t \leq m' \\ 0, m' < \bar{m}_t \leq M. \end{array} \right.$$

Как уже отмечалось, после розыгрыша длины свободного пробега и прихода кванта в новую точку взаимодействия  $m'$  разыгрываются вид столкновения и номер химического элемента на котором оно реализуется. Определение угла  $\varphi'_t$  и нахождение новой энергии фотона  $E'_{ph}$  после взаимодействия в точке  $m'$  зависят от вида процесса и далее описывается для каждого из них.

**Комптоновское рассеяние.** При достаточно высоких энергиях квантов эффектами связности можно пренебречь, тогда дифференциальное сечение комптоновского рассеяния на свободных электронах описывается формулой Клейна – Нишины – Гамма [7-9]:

$$\left(\frac{d\sigma_c}{d\Omega}\right)_e = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{E'_{ph}}{E_{ph}}\right)^2 \left(\frac{E'_{ph}}{E_{ph}} + \frac{E_{ph}}{E'_{ph}} + \cos^2 \theta - 1\right), \frac{E'_{ph}}{E_{ph}} = \left[1 + \frac{E_{ph}}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)\right]^{-1} \quad (6)$$

где  $r_e = e^2 / m_e c^2$  – классический радиус электрона;  $(d\sigma_c / d\Omega)_e$  – электронное дифференциальное сечение рассеяния фотона под углом  $\theta$  в телесный угол  $d\Omega$ . Подставляя в (6) второе соотношение в первое получаем удобную для розыгрыша методом Неймана [6] косинуса угла рассеяния  $\cos \theta$  зависимость дифференциального сечения от начальной энергии кванта  $E_{ph}$  и  $\cos \theta$ .

$$\left(\frac{d\sigma_c}{d\Omega}\right)_e = \frac{r_e^2}{2} \frac{1}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]^2} \left[1 + \cos^2 \theta + \frac{\alpha^2 (1 - \cos \theta)^2}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)}\right], \alpha = \frac{E_{ph}}{m_e c^2}. \quad (7)$$

После розыгрыша  $\cos \theta$  новую энергию кванта  $E'_{ph}$  находим по энергии до рассеяния  $E_{ph}$  из второго соотношения (6).

При энергиях квантов сравнимых с энергией связи электронов в атоме необходимо учитывать эффект связности, вводя в распределение (6) поправочную функцию некогерентного рассеяния  $H(Z, X)$

$$\left(\frac{d\sigma_c}{d\Omega}\right)_a = \left(\frac{d\sigma_c}{d\Omega}\right)_e H(Z, X), X = \frac{1}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2}, \quad (8)$$

где  $(d\sigma_c / d\Omega)_a$  – атомное дифференциальное сечение неупругого рассеяния фотона;  $[\lambda] = \text{Å}$ ,  $[E_{ph}] = \text{кэВ}$  – длина волны рассеиваемого излучения. При расчетах, не требующих детального описания рассеянной компоненты излучения, можно принять [9,10]:

$$\frac{H}{Z} = 1 - e^{-5v}, v = \frac{2,21}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2} Z^{-2/3}.$$

И тогда из (8) получаем

$$\left(\frac{d\sigma_c}{d\Omega}\right)_a = Z \left(\frac{d\sigma_c}{d\Omega}\right)_e (1 - e^{-5v}). \quad (9)$$

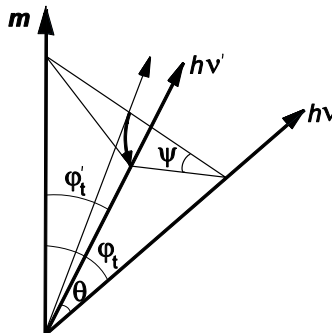


Рис. 2. Схема рассеяния кванта

При высоких требованиях по точности прогнозирования рассеянной компоненты ИИ использование (9) не правомерно и необходимо обращение к табличным данным по угловым распределениям комптоновского рассеяния в низкоэнергетичной области спектра [11,12]. При этом представляется естественным пользоваться формулой Клейна – Нишины – Тамма (6) в области энергий квантов, где табличные данные отсутствуют или недостоверны. В силу симметрии к повороту плоскости, проходящей через новое и начальное направления движения фотона, вокруг начального направления (предполагается отсутствие поляризации излучения) азимутальный угол  $\psi$  (см. рис. 2) разыгрывается равномерно на интервале  $(0, 2\pi)$ . Тогда новый текущий косинус угла между перпендикуляром к преграде и направлением движения кванта находится из соотношения

$$\cos \varphi'_t = \cos \varphi_t \cos \theta + \sin \varphi_t \sin \theta \cos \psi. \quad (10)$$

**Релеевское рассеяние.** Роль релеевского рассеяния при переносе излучения в конденсированных преградах незначительна. Аналогично случаю комптоновского рассеяния, учет связности осуществляется поправочным множителем – атомным форм-фактором  $F(Z, X)$

$$\left(\frac{d\sigma_r}{d\Omega}\right)_a = \left(\frac{d\sigma_r}{d\Omega}\right)_e F^2(Z, X), X = \frac{1}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2}, \quad (11)$$

$(d\sigma_r/d\Omega)_a$  – атомное дифференциальное сечение когерентного рассеяния фотона;  $(d\sigma_r/d\Omega)_e$  – электронное томсоновское дифференциальное сечение рассеяния фотона. Приближенное выражение для форм-фактора описывается формулой [9,10]:

$$F = Z(e^{-g} + 0,12) + \Delta F, g = \frac{5,91}{\lambda} \sin^2 \frac{\theta}{2} Z^{-1/3}, \quad (12)$$

где  $\Delta F$  – поправка на аномальное рассеяние в области края поглощения рассеивающего атома (вблизи  $K$ -края поглощения при  $\lambda > 1,1\lambda_K$   $\Delta F \approx -2$ ).

С ростом энергии кванта релеевское рассеяние происходит в направлении движения фотона в узком угле  $\Delta\theta$  [13]

$$\Delta\theta = 2 \arcsin \left[ \frac{0,026Z^{1/3}}{\alpha} \right], \alpha = E_{ph}/(m_e c^2) \quad (13)$$

и при отсутствии данных в этой области энергий  $E_{ph}$  можно ограничиться розыгрышем углов рассеяния в пределах  $\Delta\theta$ , предполагая угловое распределение равномерным в телесном угле.

Для более точного описания углового распределения релеевского рассеяния в низкоэнергетичной области энергий квантов необходимо обращаться к имеющимся табличным данным [14]. Энергия фотонов при релеевском рассеянии не меняется и  $E'_{ph} = E_{ph}$ .

**Флуоресценция.** Флуоресцентные кванты оказывают влияние на перенос ИИ в той области спектра, где преобладает фотопоглощение на  $K$  и  $L$  оболочках. Выход флуоресцентного излучения при удалении электрона из атома в результате фотопоглощения растет с зарядовым числом  $Z$  и глубиной оболочки (для  $K$ -оболочки при изменении  $Z$  от 20 до 80 доля реализации радиационного перехода растет от 0,13 до 0,95; для  $L$ -оболочки – от 0,01 до 0,38).

Направление флуоресцентного кванта разыгрывается из условий его изотропного выхода (при моделировании методом плотностей столкновений этот квант заменяет при розыгрыше траектории погибший при фотопоглощении фотон). Расчеты показывают, что для задач воздействия ИИ на элементы конструкции флуоресценцию имеет смысл рассматривать лишь для  $K$ -оболочек и, начиная с  $Na$  при  $Z \geq 12$  (при меньших номерах ХЭ  $K$ -скачок лежит вне рассматриваемой области  $E_{ph} \geq 1$  кэВ).

Энергия флуоресцентных квантов разыгрывается в соответствии с данными об относительных интенсивностях линий  $K$ -серии [11,15]. Считается, что флуоресцентные кванты излучаются атомом изотропно.

**Результаты расчетов.** При расчетах использовались данные по характеристикам взаимодействия квантов ИИ с химическими элементами из работ [11,12,14-16]. Рассматривался объект облучения в виде многослойного композитного пакета с защитными внешним слоем из резины, содержащей тяжелые элементы (дисперсный наполнитель из диоксида олова). Отметим, что этот пакет взят лишь в качестве расчетного примера и не имеет отношения к реальным элементам конструкции. Характеристики слоёв приведены в таблице 2 (взяты характерные для данного класса материалов массовые содержания ХЭ; незначительные добавки изъяты из состава).

Таблица 2. Плотность, толщина и массовый состав слоев преграды

материал	H	C	N	O	Si	S	P	Cl	Zn	Sn	$\rho$ , г/см <sup>3</sup>	h, мм
резина-защита	11	67	0,5	16	0,5	2			3		1,05	0,5мм
SnO <sub>2</sub>				21,23						78,77	7,0	
УП	3	88	2	7	-						1,5	2мм
ОП	5	70	10,5	12				2,5			1,3	5мм
резина-заполнитель	11	67	0,5	16	0,5	2			3		1,05	50мм

Гетерогенный материал защитного покрытия (резина + дисперсный наполнитель SnO<sub>2</sub>) гомонизирован (заменен в расчетах на однородный многокомпонентный с соответствующим пересчетом массового содержания элементов и плотности гетерогенного материала в целом). Рассматривалось два варианта защитного пакета с 5% (пакет-1) и 30% (пакет-2) массовыми содержаниями диоксида олова в резине-защите ( $\rho_{5\%} = 1,3475 \text{ г/см}^3$ ,  $\rho_{30\%} = 2,835 \text{ г/см}^3$ ).

Экранирующая способность пакета определяется суммарным сечением каждого вида взаимодействия на единицу площади (см<sup>2</sup>/см<sup>2</sup>). При значении этой безразмерной величины близкой к единице квант ИИ испытывает, по крайней

мере, одно взаимодействие соответствующего типа. В таблицах 3-6 представлены экранирующие способности для обоих рассматриваемых вариантов защитного пакета (резина-заполнитель считается защищаемым слоем, она в экранирующий пакет не включается) по вкладу химических элементов и по слоям для мягких и жестких планковских спектров ( $T_{эф}=1,6кэВ$ ,  $T_{эф}=8кэВ$ ). При  $T_{эф}=1,6кэВ$  интегральные сечения рассеяний оказываются малыми по сравнению с сечениями фотопоглощения, поскольку спектр ИИ – мягкий.

Такие таблицы являются весьма детальной и полезной характеристикой экранирующих свойств защитного пакета. Они наглядно представляют вклад каждого химического элемента и каждого слоя в экранирующую способность пакета и в результате какого вида взаимодействия реализуется это экранирование. Видно, что первый вариант пакета гарантировано обеспечивает экранирование от мягкого ИИ (итоговые сечения на единицу площади  $\hat{\sigma}_\Sigma = 39,72$  – на много превышают единицу). Основной вклад из ХЭ вносит углерод, поскольку его много в используемых материалах, а олова с большим  $Z$  в пакете-1 незначительное количество. Наибольшее экранирующее действие у третьего слоя т.к. он наиболее толстый, а защитный первый слой еще не обеспечивает экранирования из-за малого содержания олова. В случае жесткого ИИ пакет-1 не обеспечивает хорошего экранирования, т.к. суммарное сечение взаимодействия на единицу площади оказывается меньшим единицы (сечение на единицу площади  $\hat{\sigma}_\Sigma = 0,6276$ ).

Таблица 3. Экранирующая способность пакета-1 при  $T_{эф} = 1, 6кэВ$ 

по химическим элементам				
$Z$	$\hat{\sigma}_f$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_r$	$\hat{\sigma}_\Sigma$
1	0,00187	0,01439	0,00438	0,02064
6	18,07480	0,07606	0,29958	18,45044
7	2,91749	0,00667	0,03882	2,96298
8	6,55735	0,00892	0,07380	6,64007
14	0,09590	0,00002	0,00041	0,09632
16	0,54438	0,00009	0,00184	0,54630
17	7,76013	0,00102	0,02412	7,78527
30	0,49525	0,00008	0,00617	0,50150
50	2,70544	0,00009	0,01316	2,71869
$\hat{\sigma}_\Sigma$	39,15262	0,10732	0,46228	<b>39,72</b>
по слоям				
$N$ слоя	$\hat{\sigma}_f$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_r$	$\hat{\sigma}_\Sigma$
1	5,52496	0,00756	0,04662	5,57913
2	7,75055	0,03126	0,12184	7,90365
3	25,87878	0,06851	0,29386	26,24115
$\hat{\sigma}_\Sigma$	39,15429	0,10733	0,46231	<b>39,72</b>

Таблица 4. Экранирующая способность пакета-1 при  $T_{эф} = 8кэВ$ 

по химическим элементам				
$Z$	$\hat{\sigma}_f$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_r$	$\hat{\sigma}_\Sigma$
1	0,00001	0,01749	0,00028	0,01778
6	0,12144	0,12266	0,04328	0,28739
7	0,02096	0,01180	0,00528	0,03804
8	0,05002	0,01712	0,00960	0,07674
14	0,00100	0,00005	0,00007	0,00111
16	0,00617	0,00018	0,00032	0,00667
17	0,09146	0,00216	0,00424	0,09786
30	0,05544	0,00022	0,00110	0,05675
50	0,04208	0,00024	0,00290	0,04522
$\hat{\sigma}_\Sigma$	0,38858	0,17192	0,06706	<b>0,6276</b>
по слоям				
$N$ слоя	$\hat{\sigma}_f$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_r$	$\hat{\sigma}_\Sigma$
1	0,11662	0,01188	0,00784	0,13635
2	0,05332	0,04997	0,01731	0,12060
3	0,21869	0,11008	0,04192	0,37068
$\hat{\sigma}_\Sigma$	0,38863	0,17192	0,06707	<b>0,6276</b>

Таблица 5. Экранирующая способность пакета-2 при  $T_{эф} = 1, 6кэВ$ 

по химическим элементам				
-------------------------	--	--	--	--

$Z$	$\hat{\sigma}_f$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_r$	$\hat{\sigma}_\Sigma$
1	0,00202	0,01553	0,00473	0,02229
6	18,63460	0,07842	0,30886	19,02188
7	2,92438	0,00668	0,03891	2,96998
8	7,38915	0,01005	0,08316	7,48236
14	0,14866	0,00003	0,00063	0,14933
16	0,84391	0,00013	0,00285	0,84690
17	7,76013	0,00102	0,02412	7,78527
30	0,76776	0,00012	0,00957	0,77745
50	34,15180	0,00111	0,16619	34,31910
$\hat{\sigma}_\Sigma$	72,62243	0,11310	0,63901	<b>73,37</b>
<b>ПО СЛОЯМ</b>				
$N_{\text{слоя}}$	$\hat{\sigma}_f$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_r$	$\hat{\sigma}_\Sigma$
1	38,99555	0,01333	0,22338	39,23226
2	7,75055	0,03126	0,12184	7,90365
3	25,87878	0,06851	0,29386	26,24115
$\hat{\sigma}_\Sigma$	72,62488	0,11311	0,63908	<b>73,37</b>

Таблица 6. Экранирующая способность пакета-2 при  $T_{eff} = 8\text{кэВ}$

<b>ПО ХИМИЧЕСКИМ ЭЛЕМЕНТАМ</b>				
$Z$	$\hat{\sigma}_f$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_r$	$\hat{\sigma}_\Sigma$
1	0,00001	0,01889	0,00030	0,01920
6	0,12521	0,12646	0,04462	0,29629
7	0,02101	0,01183	0,00529	0,03813
8	0,05636	0,01929	0,01082	0,08647
14	0,00155	0,00007	0,00010	0,00172
16	0,00957	0,00028	0,00049	0,01034
17	0,09146	0,00216	0,00424	0,09786
30	0,08594	0,00033	0,00170	0,08798
50	0,53114	0,00304	0,03667	0,57084
$\hat{\sigma}_\Sigma$	0,92224	0,18236	0,10423	<b>1,209</b>
<b>ПО СЛОЯМ</b>				
$N_{\text{слоя}}$	$\hat{\sigma}_f$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_r$	$\hat{\sigma}_\Sigma$
1	0,65033	0,02232	0,04501	0,71766
2	0,05332	0,04997	0,01731	0,12060
3	0,21869	0,11008	0,04192	0,37068
$\hat{\sigma}_\Sigma$	0,92234	0,18236	0,10424	<b>1,209</b>

Второй пакет экранирует ИИ в обоих случаях спектра (итоговые сечения на единицу площади  $\hat{\sigma}_\Sigma = 73,37$ ,  $\hat{\sigma}_\Sigma = 1,209$  для мягкого и жесткого ИИ, соответственно) Основной вклад в фотопоглощение из ХЭ теперь вместо углерода вносит олово, поскольку массовое содержание диоксида олова увеличено в первом слое по сравнению с первым пакетом в 6 раз (с 5% до 30%). Соответственно и экранирующее действие у первого слоя, содержащего олово, оказывается наибольшим, не смотря на его малую толщину (0,5мм) по сравнению с третьим слоем (5мм).

Согласно предварительному анализу экранирующей способности пакетов, приведем результаты расчетов удельного энерговыделения  $l$  (на единицу массы при единичной поверхностной плотности энергии) только для второго пакета (теперь в составы пакетов входит и резина-заполнитель, общее число слоев – 4), поскольку первый пакет с содержанием диоксида олова 5% не обеспечивает экранирования от жесткого ИИ. Эти результаты представлены на рис. 3-4 для ИИ планковского спектра с эффективными температурами  $T_{эф}=1,6$ ; 8кэВ и при перпендикулярном падении излучения на преграду. Черным цветом показаны распределения, полученные без учета флуоресценции, зеленым – с учетом. Крестиками отмечены распределения энерговыделения в прямой компоненте, треугольниками – в рассеянной, сплошными линиями – итоговые распределения. На границах слоев наблюдаются разрывы в распределениях энерговыделения, что обусловлено скачками в сечениях взаимодействия ИИ с материалами различных слоев преграды.

Из приведенных результатов следует, что вследствие флуоресценции в случае жесткого спектра  $T_{эф}=8\text{кэВ}$  энерговыделение перераспределяется вглубь преграды и поэтому в ряде случаев флуоресценцию необходимо учитывать (при облучении ИИ с мягким спектром  $T_{эф}=1,6\text{кэВ}$  доля флуоресцентных квантов оказывается малой и итоговые распределения с учетом и без учета флуоресценции практически совпадают, см. рис. 3). Также видно, что вклад рассеянной компоненты оказывается ведущим (массовая толщина пакета достаточно велика  $\Delta m=6,342\text{г/см}^2$ , чтобы обеспечить хотя бы одно рас-

сеяние; отдельный расчет прямой компоненты имеет смысл при массовых толщинах преграды до  $\Delta m = 0,5 \text{ г/см}^2$  и расчет необходимо вести, пользуясь детальными табличными данными для дифференциальных сечений рассеяния.

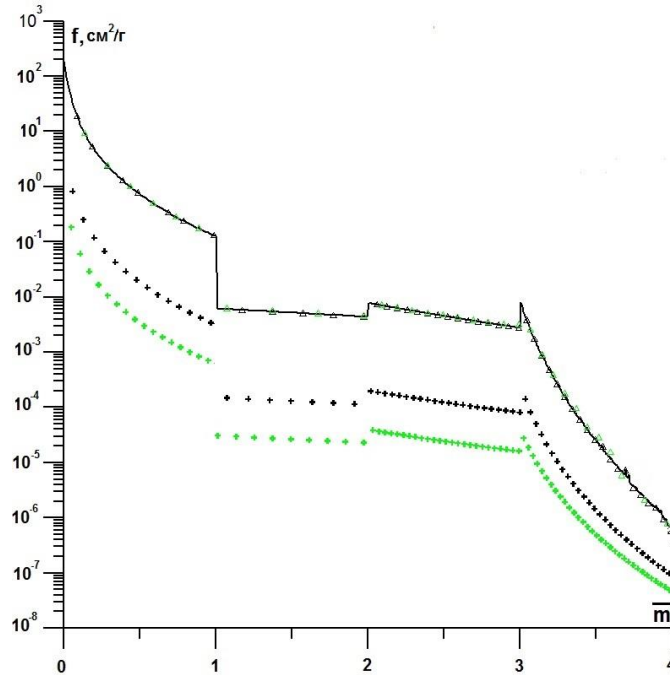


Рис. 3. Распределение приведенного удельного энерговыделения при облучении пакета-2 планковским спектром с  $T_{\text{эф}}=1,6 \text{ кэВ}$

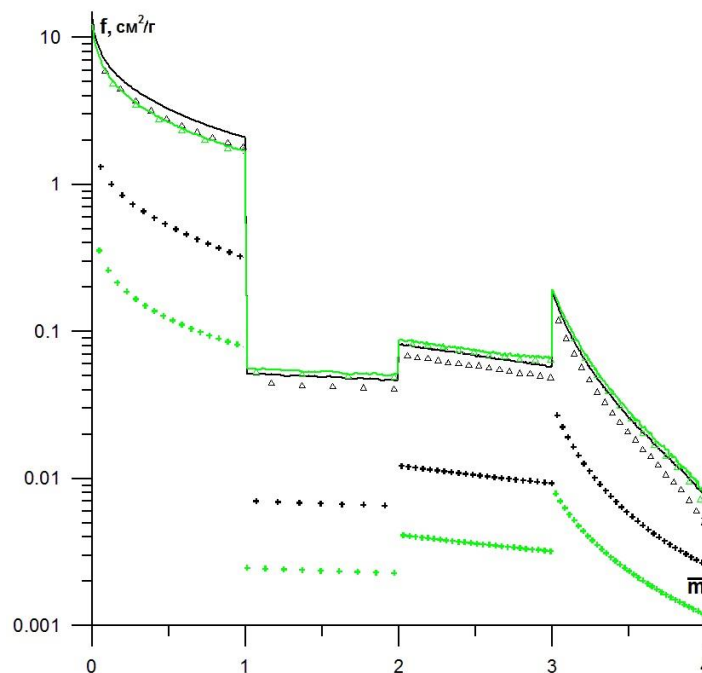


Рис. 4. Распределение приведенного удельного энерговыделения при облучении пакета-2 планковским спектром с  $T_{\text{эф}}=8 \text{ кэВ}$

### Выводы

Таким образом, можно сделать следующие выводы:

- разработан численный код для расчета переноса ИИ методом Монте-Карло (методом плотностей столкновений) с учетом всех основных процессов взаимодействия (фотопоглощения и флуоресценции; комптоновского и релеевского рассеяний) квантов ИИ с многокомпонентными материалами многослойной композитной преграды;
- методика адекватно описывает процессы комптоновского и релеевского рассеяний, вследствие использования детальных таблиц для соответствующих форм-факторов;
- методика обладает высокой расчетной точностью, благодаря реализованному в ней гибриднему подходу, при котором вклады прямой компоненты и безрадиационного поглощения рассчитываются аналитически;
- методика имеет высокую эффективность (малое расчетное время, затрачиваемое на розыгрыш отдельной траектории), что обусловлено рядом вычислительных подходов, используемых в программе (вынос всех предварительных вычис-



лений за рамки розыгрыша траектории; недопущение обрыва траектории, вследствие фотопоглощения или выхода кванта за пределы преграды; использование эффективных численных процедур интерполяции сечений взаимодействия; проведение интерполирования сечений на общей для всех ХЭ сетке энергий квантов ИИ с внесением в эту сетку энергий скачков фотопоглощения и т.д.);

- предложенный подход к оценке экранирующих свойств преграды по её суммарному сечению каждого из типов взаимодействий на единицу площади облучаемой поверхности (безразмерный параметр) по ХЭ и по слоям позволяет проводить проектирование и предварительную оптимизацию преграды без расчетов переноса ИИ;

- проведенные расчеты профилей энерговыделения в преграде показали влияние на его параметры флуоресценции, а также основной вклад рассеянной компоненты в заполнителе.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (№ 16-08-01065-а, 18-08-00964-а).

### Литература:

1. Физика ядерного взрыва: в 2-х томах. 2 - М.: Наука. Физматлит, 1997. 256 с.
2. Острик А.В. Термомеханическое действие рентгеновского излучения на многослойные гетерогенные преграды в воздухе.—М.: НТЦ «Информтехника», 2003. 160 с.
3. Бакулин В.Н., Острик А.В. Комплексное действие излучений и частиц на тонкостенные конструкции с гетерогенными покрытиями. - М.: . Физматлит, 2015. 288с.
4. Berger M.J. Reflection and transmission of gamma radiation by barriers: Monte Carlo calculation by a collision-density method //J. Res. Natl Bur. Stand. 1955, 55 343–50.
5. Грибанов В.М., Острик А.В., Ромадинова Е.А. Метод оценки энерговыделения в компонентах облучаемого рентгеновским излучением сферопластика с учетом перераспределения энергии электронами //Межотраслевой научно-технический журнал "Конструкции из композиционных материалов", 2009. Вып. 1. С. 40-47.
6. Соболев И.М. Метод Монте-Карло. М.: Наука. 1968. 64с.
7. Фано У., Спенсер Л., Бергер М. Перенос гамма излучения. — М.: Госатомиздат, 1963. — 95с.
8. Блохин М. А. Физика рентгеновских лучей.-М.: Гитл. - 1953.
9. Павлинский Г.В. Основы физики рентгеновского излучения. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. 240с.
10. Бахтияров А.В., Пшеничный Г.А. Формулы для приближенного вычисления дифференциальных сечений рассеяния рентгеновского излучения малой энергии //аппаратура и методы рентгеновского анализа. Л.: Машиностроение. 1973. Вып. 12. С. 68–72.
11. Блохин М.А., Швейцер И.Г. Рентгеноспектральный справочник.—М.: «Наука» 1982. 376с.
12. J.H. Hubbell, Wm. J. Veigele, E.A. Briggs, R.T. Brown, D.T. Cromer, R.J. Howerton Atomic Form Factors, Incoherent Scattering Functions, and Photon Scattering Cross Sections //Phys. Chern. Ref. Data, Vol. 4, No. 3, pp. 471-538 (1975).
13. Альфа-, бета- и гамма-спектроскопия. Под ред. К. Зибмана. Перев. с англ. Вып. I. М.: Атомиздат. 1968. 568с.
14. J.H. Hubbell, I. Overbo Relativistic Atomic Form Factors and Photon Coherent Scattering Cross Sections //Phys. Chern. Ref. Data, Vol. 8, No. 1, pp. 69-105 (1979).
15. J.H. Hubbell, P.N. Trehan, N. Singh et al. A Review, Bibliography, and Tabulation of K, L, and Higher Atomic Shell X-Ray Fluorescence Yields //Phys. Chern. Ref. Data, Vol. 23, No. 2, pp. 339-364 (1994).
16. Немец О.Ф., Гофман Ю.В. Справочник по ядерной физике. Киев "Наукова думка", 1975, 415с.