

文章编号: 1001-2486 (2000) 01-0081-04

电子在材料中输运的蒙特卡罗模拟*

王同权, 张树发, 王尚武, 沈永平

(国防科技大学理学院, 湖南 长沙 410073)

摘要: 介绍了电子输运问题的蒙特卡罗方法的基本原理和步骤。电子输运过程的模拟采用了“浓缩历史”蒙特卡罗方法, 电子随机游动步长根据能量步划分, 在每个电子游动步内, 电子的能量损失为非辐射(碰撞)能量损失和辐射(韧致辐射)能量损失之和, 其中非辐射能量损失通过对 Landau 公式的随机抽样得到, 辐射能量损失以及韧致辐射光子的产生通过利用 Bethe-Heitler 的随机抽样处理, 在每个电子游动步结束时电子的出射角的抽样利用 Gouddsmiit-Saunderson 多重散射公式, 电子-电子的散射利用 Moller 截面公式进行抽样。最后对电子在航天用合金铝板材料中的输运进行了模拟计算并给出了计算结果。

关键词: 电子输运; 蒙特卡罗方法; 合金铝; 能量损失; 韧致辐射; 多重散射

中图分类号: O562.5 文献标识码: A

Monte Carlo Transport of Electrons in Matter

WANG Tong-quan, ZHANG Shu-fa, WANG Shang-wu, SHEN Yong-ping

(College of Science, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: This paper introduces the basic principles and steps of the Monte Carlo Methods used in the electron transport calculation. The electron transport process is simulated by “condensed history” Monte Carlo method. The electron random walk path length is determined by the energy steps. For a single step, the electron energy loss is the total amount of the nonradiative (collisional) energy loss and radiative (bremsstrahlung) energy loss, the nonradiative energy loss in each step is sampled from Landau formulation, and the radiative energy loss and the production of bremsstrahlung photon is sampled from Bethe-Heitler formulation. The direction of electron at the end of each step is sampled from the Gouddsmiit-Saunderson multiple scattering formulation. The Moller cross section is used for the sampling of the electron-electron scattering. Finally the electron transport in the space used aluminum alloy, and plane materials is calculated and the results are presented.

Key words: electron transport; Monte Carlo Methods; aluminum alloy; energy loss; bremsstrahlung; multiple scattering

电子与中子(或光子)的输运行为具有本质的不同。中性粒子的输运行为以相对不频繁的独立碰撞之间的自由飞行为特征。与此相反, 电子的输运则以长程库仑相互作用为主而导致的大量小碰撞为特征。例如, 0.5 Mev 的中子在铝材料中能量降到 0.0625 Mev 大约经过 30 次左右的碰撞, 光子在同样的情况下只须经过 10 次以下的碰撞, 而电子要导致这样的能量损失则要经历大约 105 次独立的小碰撞^[1]。因此, 用单碰撞蒙特卡罗模拟方法处理电子输运问题, 由于其计算量巨大, 是不合适的, 而应采用“浓缩历史”蒙特卡罗方法^[2]。

1 电子游动步长的划分

电子的“浓缩历史”游动可以用一组有序参数集表示为

$$(0, E_0, t_0, \mathbf{u}_0, \mathbf{r}_0), (s_1, E_1, t_1, \mathbf{u}_1, \mathbf{r}_1), (s_2, E_2, t_2, \mathbf{u}_2, \mathbf{r}_2), \dots$$

其中 $s_n, E_n, t_n, \mathbf{u}_n, \mathbf{r}_n$ 分别为游动完第 n 步时的电子总迹径长度、能量、时间、运动方向和位置。在平均的意义上, 电子总迹径长度和能量的关系为

* 收稿日期: 1999-06-28

基金项目: 国家部委基金项目资助 (97J11.6.2.KG0140)

作者简介: 王同权 (1979), 男, 讲师, 在职博士生。

$$E_{n-1} - E_n = - \int_{s_{n-1}}^{s_n} \frac{dE}{ds} ds \quad (1)$$

其中 $-dE/ds$ 为总阻止本领, 它的具体数值与具体材料以及电子能量有关。电子游动迹径的长度集 $\{s_n\}$ 的选取利用了以下公式

$$\frac{E_n}{E_{n-1}} = k \quad (2)$$

其中 k 为常数, 通常取为 $k = 2^{-1/8}$, 这样的取值导致平均每步的能量损失为 8.3%。

经由(1)、(2)式子计算出的与能量相关的电子游动步称为主步或能量步, 其步长为 $s = s_n - s_{n-1}$, 整个电子的浓缩游动就是由一个个这样的能量步构成。为了使计算精度进一步提高, 通常又把能量步进一步细分为许多子步, 每个长度为 s 的能量步分成为 m 个子步, 每个子步的长度为 s/m 。电子的散射角和次级粒子的产生在这些子步的基础上进行随机抽样。其中 m 的选取将根据介质材料(平均原子序数 Z) 而定, 通常利用经验公式得到合适的值。

2 浓缩历史随机游动

在电子输运计算的开始, 所有的相关数据一般已经预先计算出或从电子数据文件读入并加以处理, 这些数据包括电子能量网格、阻止本领、电子射程、能量步长、子步长和散射角分布几率、次级粒子产生分布几率。虽然电子的能量网格和电子步长由(1)、(2)式选定, 但是能量涨落、韧致辐射光子的产生以及材料几何边界的插入或时间截断问题都将导致电子能量与(2)式得到的 $\{E_n\}$ 序列的偏离。此时部分随机游动抽样的必要参数将通过插值方法求得。

在每个随机游动的能量步的开始, 首先抽样得到碰撞能量损失率。每个能量步内的子步数 m 由经验公式计算出。在大多情况下, 这 m 个子步都在当前能量步内, 这时保持当前的能量损失率值, 但是当电子的能量已经降低到该能量步的能量下限或电子已经到达了材料的几何边界时, 子步数将可能被减少, 在这种情况下或已经完成了 m 个子步的游动并进入新的能量步时, 能量损失率将重新抽样。

除了能量损失和涨落的计算之外, 电子游动历史的细致模拟为基于子步上的随机抽样。通过应用 Goudsmit-Saunderson 多重散射理论进行散射角分布的随机抽样, 得到每个子步结束时电子的运动新方向。基于当前的能量损失率和子步长度, 从每个子步出射的电子能量可计算得到。最后, 次级粒子从相应的几率分布中抽样得到, 这些次级粒子包括荧光 x 射线、击落电子和韧致辐射光子。

电子游动子步的长度由总阻止本领通过(1)式计算得到, 但是子步的出射电子能量的计算基于非辐射阻止本领, 所以还要加上辐射阻止本领部分。这里把辐射阻止本领部分作为一种反常过程处理, 即把韧致辐射光子的产生进行随机抽样, 当在某一个子步中产生韧致辐射光子时, 电子从这一子步出射的能量再减去光子能量, 从而把电子的辐射能量损失计入, 相对于非辐射阻止本领, 辐射阻止本领只不过是随机抽样的方法处理。

3 碰撞阻止本领

Berger 给出了限制阻止本领, 即单位距离内由能量转移分数小于 ϵ 的碰撞导致的能量损失形式为^[3,4]

$$- \left(\frac{dE}{ds} \right)_{\epsilon} = NZ \frac{2\pi e^4}{mv^2} \left[\ln \frac{E^2(\tau+2)}{2I^2} + f^-(\tau, \epsilon) - \delta \right] \quad (3)$$

其中

$$f^-(\tau, \epsilon) = -1 - \beta^2 + \left(\frac{\tau}{\tau+1} \right)^2 \frac{\epsilon^2}{2} + \frac{2\tau+1}{(\tau+1)^2} \ln(1-\epsilon) + \ln[4\epsilon(1-\epsilon)] + \frac{1}{1-\epsilon} \quad (4)$$

ϵ 为相对电子动能 E 的能量转移分数, β 为相对论因子, τ 为以电子静止能量为单位的电子动能, δ 为密度修正因子(与材料的极化有关)。 Z 为材料的平均原子序数, N 为材料的原子数密度, e 、 m 、 v 分别为电子的电荷、静止质量和电子运动速度。

碰撞的总能量损失可以由(3)、(4)式在 $\varepsilon = 1/2$ 的情况下计算出 ($\varepsilon = 1/2$ 是由于碰撞之后出射的是两个全同粒子, 设碰撞之后能量较高者为入射粒子, 所以总有 $\varepsilon \leq 1/2$)。可得用来预定每个能量步开始时的碰撞阻止本领公式:

$$-\left(\frac{dE}{ds}\right) = \frac{10^{24} \alpha^2 h^2 c^2 Z}{2\pi m c^2 \beta^2} \{ \ln[\tau^2(\tau + 2)] - C_2 + C_3 - \beta^2 + C_4 \left(\frac{\tau}{\tau + 1}\right)^2 - \delta \} \quad (5)$$

其中 α 为精细结构常数, 并且

$$C_2 = \ln(2I^2) \quad C_3 = 1 - \ln 2 \quad C_4 = 1/8 + \ln 2 \quad (6)$$

4 能量涨落

由于每个能量步代表的是许多次独立的随机碰撞的累积结果, 能量损失率的涨落是必然的, 因此能量损失将不是一个简单的平均值 T , 而有一个几率分布 $f(s, T)dT$, 由此几率分布可以抽样得到游动步长为 s 的能量损失 T , Landau 得到能量损失分布几率可表达为^[5]:

$$f(s, T)dT = \phi(\lambda)d\lambda \quad (7)$$

其中

$$\lambda = \frac{T}{\zeta} - \ln \left[\frac{2\zeta m v^2}{(1 - \beta^2)I^2} \right] + \delta + \beta^2 - 1 + \gamma, \quad \zeta = \frac{2\pi e^4 N Z}{m v^2} s \quad (8)$$

γ 为 Euler 常数 ($\gamma = 0.5772157$), 而

$$\phi(\lambda) = \frac{1}{2\pi i} \int_{x-i\infty}^{x+i\infty} e^{\mu \ln \mu + \lambda \mu} d\mu \quad (9)$$

其中 x 为一用来限定积分线的正实数。

5 散射角

每个子步游动之后的散射角的随机抽样, 对于能量小于 0.256 Mev 的电子, 其微分散射截面从 Riley^[6] 制作的数据表获取, 对高能电子, 微分散射截面由 Mott 截面和 Rutherford 截面利用下式^[1] 得到:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^2}{p^2 v^2 (1 - \mu + 2\eta)^2} \left[\frac{(\frac{d\sigma}{d\Omega})_{\text{Mott}}}{(\frac{d\sigma}{d\Omega})_{\text{Rutherford}}} \right] \quad (10)$$

其中 p 为电子的动量, η 为屏蔽因子:

$$\eta = \frac{1}{4} \left(\frac{\alpha m c}{0.885 p} \right)^2 Z^2 \left[1.13 + 3.76 \left(\frac{\alpha Z}{\beta} \right)^2 \sqrt{\frac{\tau}{\tau + 1}} \right] \quad (11)$$

当只跟踪电子的部分子步时, 也有必要对子步长比原来预定的子步长小的 Goudsmit-Saunderson 分布进行计算。在处理这个问题时, 首先考虑 0 散射角的几率, 然后用插值方法得到角分布。特别地, 假如 $P_Z(1)$ 为对于整个子步的 0 散射角几率, w 为电子实际游动的子步分数, 因此 $[P_Z(1)]^w$ 也就是对于这个部分子步游动的 0 散射角几率, 若 0 散射角事件没有发生, 则全子步的 Goudsmit-Saunderson 分布用来抽样得到一个散射角余弦 μ , 而对于实际游动的部分子步的散射角余弦为 $\mu_p = 1 - (1 - \mu)w$ 。

6 韧致辐射

对于韧致辐射的随机抽样 Bethe-Heitler 公式, 在每个电子游动子步都进行韧致辐射光子抽样, 韧致辐射产生几率用来判断是否有韧致光子产生。若有, 则由光子能量分布抽样光子能量, 由光子角分布抽样光子相对于电子运动方向的光子发射角, 而电子的运动方向不变。这是由于电子的散射方向都已经被考虑到多重散射之中, 但是在子步结束时电子的能量还要减去抽样光子的能量, 这是因为划分能量步长时用的电子能量损失是基于非辐射过程的。

7 击落电子

电子-电子散射的 Moller 截面^[7] 为:

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \frac{C}{E} \left\{ \frac{1}{\varepsilon^2} + \frac{1}{(1-\varepsilon)^2} + \left(\frac{\tau}{1+\tau} \right)^2 - \frac{2\tau+1}{(1+\tau)^2} \frac{1}{\varepsilon(1-\varepsilon)} \right\} \quad (12)$$

对于能量损失的计算, 感兴趣的是所有可能的能量转移, 然而对于次级电子输运的抽样, 只需那些能量转移大于能量截断值对应的 ε_c 的次级电子, 而抽样得到的能量转移小于 ε_c 的次级电子将不被跟踪, 因此有:

$$\sigma(\varepsilon_c) = \int_{\varepsilon_c}^{1/2} \frac{d\sigma}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (13)$$

即得:

$$\sigma(\varepsilon_c) = \frac{C}{E} \left\{ \frac{1}{\varepsilon_c} + \frac{1}{1-\varepsilon_c} + \left(\frac{\tau}{1+\tau} \right)^2 \left(\frac{1}{2} - \varepsilon_c \right) - \frac{2\tau+1}{(1+\tau)^2} \ln \frac{1-\varepsilon_c}{\varepsilon_c} \right\} \quad (14)$$

因此产生 $\varepsilon > \varepsilon_c$ 的次级电子归一化分布为:

$$g(\varepsilon, \varepsilon_c) d\varepsilon = \frac{1}{\sigma(\varepsilon_c)} \frac{d\sigma}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (15)$$

在每个电子游动子步, 用 $\sigma(\varepsilon_c)$ 随机判断是否有次级电子产生, 若有则从(15)式随机抽样得到次级电子能量, 利用动量守恒得到次级电子相对于入射电子运动方向的夹角, 从而得到次级电子散射角。但这时入射电子的能量和运动方向不改变, 因为入射电子的能量和散射角都已归结于多重散射公式中。

8 算例

利用蒙特卡罗模拟计算了不同能量的电子对于 2 mm 合金铝平板材料的能量沉积(图 1) 和能量反射率、能量穿透率(表 1), 计算中跟踪电子数为 300 000 个, 在 P 300 微机上的计算时间约为 30 min。从图 1 可以看出电子的能量沉积相对于穿透深度有一个峰值。随着入射电子的能量增高, 能量反射率逐渐下降, 能量穿透率明显上升。在卫星或空间飞行器的抗辐射加固研究中涉及的地球轨道辐射环境中, 外辐射带中电子的最高能量达 7 MeV, 而在内辐射带中电子的最高能量为 5 MeV^[8], 此时, 从表 1 可以发现, 电子能量穿透率已经达到相当高的程度, 并且对应于高能电子的能量沉积曲线也较为平坦, 所以可以想象, 即使不断地增加合金铝的厚度, 屏蔽效果也是不理想的, 因此对卫星或空间飞行器内部的电子学系统的抗辐射加固处理是非常必要的。

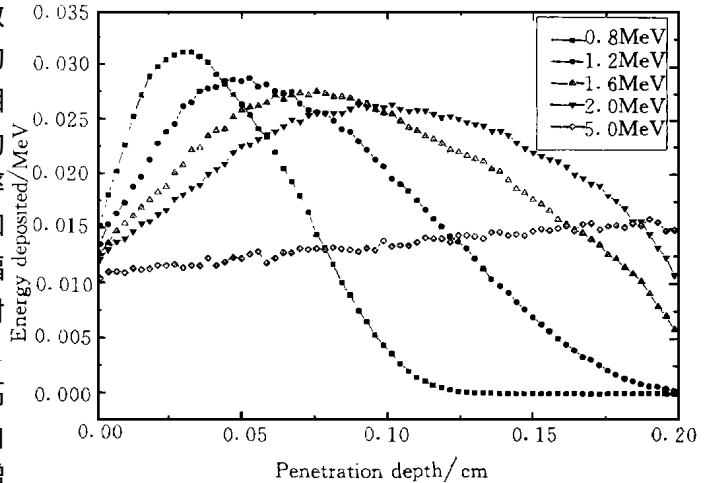


图 1 电子在合金铝材料中的能量沉积

Fig. 1 The energy deposition of electron in aluminum alloy

表 1 电子的能量反射率和能量穿透率

Tab 1 The energy reflectivity and the energy transmission of electron

电子能量(MeV)	0.8	1.2	1.6	2.0	5.0	7.0
能量反射率(%)	6.168	4.983	3.969	3.339	0.395	0.034
能量穿透率(%)	0.0	0.052	6.923	21.62	79.26	86.20

(下转第 110 页)

间其线性关系还是很好的,即逸出 NH_3 量与被吸收的 NH_3 量成一定的线性关系,这就可以作为逸出气 NH_3 的化学吸收光度法的定量依据。

以一定量的四水合钼酸铵热解所逸出的 NH_3 量,分别进行化学吸收光度法与 TG-GC 法多次重复测定,求其相对标准差 (r. s. d),以考查分析方法的精密性。其结果是:化学吸收光度法, NH_3 量 0.37mg, r. s. d= 7.8%, $n = 8$; TG-GC 法, NH_3 量 1.67mg, r. s. d= 4.3%, $n = 8$ 。这一结果表明, TG-GC 法精密性远优于化学吸收光度法,这是因为前者采用自动气体取样器取样与进样,系统误差小,而后者是手工作配液、显色、测量等操作,系统误差大,重现性肯定差一些。

表 1 是用不同方法测定结果的比较,表明当逸出 NH_3 量小于 0.8 mg 时,吸收光度法测定误差在 $\pm 6\%$ 以内;而当逸出 NH_3 量较大时,采用 TG-GC 法较好,不仅误差小 ($< \pm 4\%$),而且操作手续简便,没有繁琐的化学试液配制等操作。但是,由于 GC 的 TCD 灵敏度不高,且气体进样量又不可能太大,因此对低浓度的逸出 NH_3 ,只能采用化学吸收光度法测定。

表 1 四水合钼酸铵热分解逸出 NH_3 的测定结果

Tab. 1 Determination results of evolved NH_3 from thermal decomposition of ammonium molybdate tetrahydrate

Sample size/mg	TG weight loss (NH_3) /mg	CAP method		TG-GC method	
		found/mg	error/%	found/mg	error/%
1.2	0.10	0.094	- 6.0		
4.5	0.37	0.356	- 4.0		
7.8	0.64	0.620	- 3.1		
14.2	0.84			0.86	+ 2.4
20.3	1.67			1.65	- 1.2
30.6	2.54			2.62	+ 3.2

3 结论

(1) 用化学吸收光度法和 TG-GC 联用法测定热分析逸出气 NH_3 简便、快捷、准确,前者当逸出 NH_3 量在 0.4 mg 以上时,测定误差在 $\pm 4\%$ 以内,后者测定误差较前者略小。

(2) 化学吸收光度法操作较 TG-GC 法繁琐,测量精度亦较差,但具有测定低浓度,小量逸出 NH_3 的优点。

(3) TG-GC 联用法操作简便,测定误差小,精度高,但不能测定低浓度小量逸出 NH_3 ,一般逸出 NH_3 量应不低于 0.8 mg。

参考文献:

- [1] Wiesemann H G. Thermal Analysis, wiley, New York, 1959: 229-231.
- [2] 杜廷发,张世进. 湖南大学学报, 1997 (5): 74-75.

(上接第 84 页)

参考文献:

- [1] Briesmeister F. MCNP-A General Monte Carlo N-Particle Transport Code Version 4B [R]. LA-12625-M, March 1997.
- [2] 杜书华等. 运输问题的计算机模拟 [M]. 长沙: 湖南科技出版社, 1989.
- [3] Cobert H M. A Computer Program for Calculating Combined Photon-Electron Transport in Complex Systems [R]. SLI-74-0012, April 1974
- [4] Berger M J. Methods in Computational Physics [M]. Academic Press, 1963, 1.
- [5] Landau L. On the Energy Loss of Fast Particles by Ionization [J]. J. Phys. USSR 8 (1944) 201.
- [6] Riley M E, MacCallum C J, Biggs F. Theoretical Electron-Atom Elastic Scattering Cross Sections Selected Elements, 1 keV to 256 keV [R]. Atom. Data and Nucl. Dat Tables 1975, 15: 443.
- [7] Moller C. Zur Theorie des Durchgang schneller Elektronen durch Materie [J]. Ann. Physik. 1932, 14: 568.
- [8] 王同权等. 空间辐射环境中的辐射效应 [J]. 国防科技大学学报, 1999, 21 (4).