

## ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА 1

### Исследование динамики углового распределения потока быстрых атомных частиц при транспортировке в твердотельных и газообразных мишенях

*Цель работы:* Изучение закономерностей многократного упругого рассеяния атомных частиц в твердых телах и плотной плазме и методики расчета угловых распределений рассеянных частиц. Ознакомление с процессом изотропизации пучка быстрых атомных частиц при его транспортировке в различных средах. Изучение эффекта поворота «тела яркости».

#### Теоретическое описание

*Модель рассеяния атомных частиц плоским слоем твердого тела или плотной плазмы*

Пусть на границу вещества падает поток атомных частиц (электроны, ионы, нейтроны и т.п.) с плотностью  $N_0$ . Изначально, поток частиц, взаимодействующий с веществом, ионы и электроны среды представляют собой систему, далекую от термодинамического равновесия. Эволюция такой системы в классическом приближении описывается кинетическим уравнением Больцмана. Если рассматривать только налетающие частицы, уравнение Больцмана в одночастичном приближении переходит в уравнение переноса частиц.

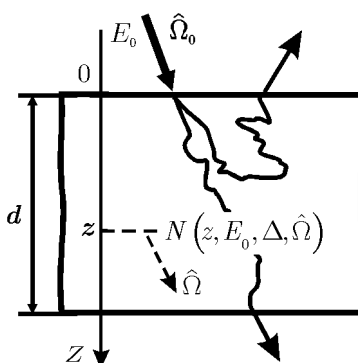


Рис. 1.1

В дальнейшем будем рассматривать задачу рассеяния моноэнергетического, мононаправленного, стационарного, широкого потока частиц плоским слоем вещества толщиной  $d$ , рассеивающие свойства которого не изменяются во всем объеме. Внутренние источники частиц отсутствуют. Направим ось  $OZ$  перпендикулярно верхней границе вглубь среды (рис. 1.1). Ноль совместим с верхней границей. Тогда буквой  $z$  обо-

значим координату на оси  $OZ$ . Поток частиц падает на поверхность с начальной энергией  $E_0$  в направлении  $\hat{\Omega}_0 = (\cos \theta_0 \quad \sin \theta_0 \quad 0)$ , где  $\theta_0$  - угол падения относительно оси  $OZ$ . Знаком « $\wedge$ » здесь и далее будем обозначать единичные вектора вдоль соответствующего направления. Направление движения частиц  $\hat{\Omega} = (\cos \theta \sin \varphi \quad \sin \theta \sin \varphi \quad \cos \varphi)$  определяется полярным  $\theta$  и азимутальным  $\varphi$  углами. При рассеянии в среде частицы будут изменять направление движения, терять энергию  $\Delta$ .

Введем обозначение  $N(z, E_0, \Delta, \hat{\Omega})$  для дифференциальной плотности потока частиц на глубине  $z$ , летящих в направлении  $\hat{\Omega}$  и потерявших энергию  $\Delta$ . Функция  $N(z, E_0, \Delta, \hat{\Omega})$  является решением уравнения переноса [1]:

$$\begin{aligned} \mu \frac{d}{dz} N(z, E_0, \Delta, \hat{\Omega}) + n_0 \sigma(E_0 - \Delta) N(z, E_0, \Delta, \hat{\Omega}) = \\ = n_0 \int_0^{\Delta} \int_{4\pi} N(z, E_0, \varepsilon, \hat{\Omega}') \omega(E_0 - \varepsilon, \Delta - \varepsilon, \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') d\Omega' d\varepsilon, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\mu = \hat{z} \cdot \hat{\Omega} = \cos \theta$  - косинус угла между направлением движения  $\hat{\Omega}$  и осью  $OZ$ ,  $\omega(\cdot)$  - дифференциальное сечение рассеяния, описывающее «элементарный» акт взаимодействия налетающей частицы со средой,  $\sigma(\cdot)$  - полное сечение рассеяния,  $n_0$  - концентрация атомов среды.

Так как моноэнергетический, мононаправленный, широкий пучок частиц (ПМ источник) падает только на верхнюю границу, то граничное условие для уравнения переноса (1) имеет вид:

$$\begin{cases} N(0, E_0, \Delta, \hat{\Omega}) = N_0 \delta(\Delta) \delta(\hat{\Omega}_0 - \hat{\Omega}), & \mu > 0, \\ N(d, E_0, \Delta, \hat{\Omega}) = 0, & \mu < 0, \end{cases} \quad (2)$$

где  $\delta(\cdot)$  -  $\delta$ -функция Дирака.

Если для газообразных тел нет особых проблем с определением того, что следует понимать под «элементарным» актом – это рассеяние на атоме или молекуле. Хотя это сами по себе сложные системы, тем не менее, если не по всем, то по основным характеристикам имеются достаточно полные экспериментальные данные, с которыми можно сопоставить результаты теоретических расчетов. Для твердого тела и плотной плазмы нелегко, а чаще невозможно,

выделить отдельный процесс в системе взаимодействующих частиц. В этих случаях прибегают к модельным представлениям, и об их справедливости судят косвенно, сопоставляя результаты расчетов различных характеристик с их экспериментальным определением.

Наиболее часто используемая модель взаимодействия частиц с твердым телом базируется на представлении о двух системах: системе ионов, внутренние оболочки которых практически не изменяются по сравнению с оболочками свободного атома, и газа квазисвободных электронов, образуемого в основном из валентных электронов. Это представление применимо для нормальных металлов и в известной мере к полупроводникам. Для переходных металлов требуется более детальное рассмотрение, например в рамках модели КЛО (коллективные-локализованные-оболочечные). В электронном газе нормальных металлов одночастичные и коллективные возбуждения электронов хорошо разделяются и описываются в рамках диэлектрической теории. Что касается ионизации и возбуждения, то здесь можно применять методы, используемые в теории для описания этих процессов на отдельных атомах, причем многие из них базируются на борновских приближениях.

Важнейшие понятия в теории рассеяния атомных частиц это – *упругое* (*elastic*) и *неупругое* (*inelastic*) рассеяния. Упругим рассеянием называют взаимодействием частицы с ядрами атомов среды, неупругим – с электронами среды.

Великий Э. Ферми первым показал, что для быстрых электронов допустимо представление сечения в виде:

$$\omega(E, \varepsilon, \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') = \omega_{el}(\hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') \delta(\varepsilon) + \omega_{in}(E, \varepsilon) \delta(\hat{\Omega} - \hat{\Omega}') \quad (3)$$

Из формулы (3) следует, что процессы упругого (*el*) и неупругого рассеяния (*in*) можно считать независимыми. Другими словами, в «элементарном» акте упругого рассеяния не происходит потерь энергии, происходит лишь изменение направления движения частицы. В «элементарном» акте неупругого рассеяния происходит лишь потеря энергии без изменения направления движения.

#### *Упругое многократное рассеяние*

Формула (3) указывает, что возможно разделение процесса рассеяния на два канала: упругий и неупругий. Цель настоящей работы – исследование процессов многократного упругого рассеяния. Поэтому в уравнении (1) мы опустим процессы неупругого рассеяния, и займемся исследованием только упругого рассеяния:

$$\mu \frac{d}{dz} N(z, \hat{\Omega}) + n_0 (\sigma_{el} + \sigma_{in}) N(z, \hat{\Omega}) = n_0 \int_{4\pi} N(z, \hat{\Omega}') \omega_{el}(\hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') d\Omega'. \quad (4)$$

Удобно ввести *однократное альbedo* упруго-рассеянных частиц -  $\lambda = \sigma_{el} / (\sigma_{el} + \sigma_{in})$ , *безразмерную толщину*  $\tau = n_0 (\sigma_{el} + \sigma_{in}) z$  и *индикатрису рассеяния*  $x(\cos \gamma) = 2\omega_{el}(\cos \gamma) / \sigma_{el}$  - (коэффициент 2 следует из-за условия нормировки индикатрисы рассеяния  $\int_0^{2\pi} \int_0^\pi x_{el}(\cos \gamma) \sin \gamma d\gamma d\varphi / 4\pi = 1$ ),  $\cos \gamma = \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}'$  - косинус угла рассеяния. Тогда уравнение (4) можно записать в безразмерном виде

$$\mu \frac{d}{d\tau} N(\tau, \hat{\Omega}) + N(\tau, \hat{\Omega}) = \frac{\lambda}{4\pi} \int_{4\pi} N(\tau, \hat{\Omega}') x_{el}(\hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') d\Omega'. \quad (5)$$

Уравнение (5) в точности подобно уравнению переноса оптического излучения. В оптике функция  $N(\cdot)$  имеет смысл яркости излучения. Фундамент теории рассеяния оптического излучения заложен работами таких выдающихся ученых как В.А. Амбарцумяна, В.В. Соболева, С. Чандрасекара [2-4]. Решение граничной задачи уравнения переноса строилось на основе эвристических методов. Например, с помощью метода инвариантного погружения, впервые разработанного Амбарцумяном, были получены нелинейные интегральные уравнения Амбарцумяна-Чандрасекара. Решения этих уравнений представлены в виде рядов либо по функциям Амбарцумяна, либо по функциям Чандрасекара или по фундаментальным функциям Соболева. В случае изотропного рассеяния или рассеяния со слабо выраженной анизотропией были получены методы нахождения этих функций.

#### *Модельные индикатрисы рассеяния*

В случае рассеяния электронов или ионов индикатриса рассеяния сильно вытянута [5,6]. Необходимо учитывать до сотни членов ряда по полиномам Лежандра. Для фотонов ситуация более простая и поэтому лучше изучена. Индикатрисы, используемые при этом, имеют, как правило, два или три первых члена разложения по полиномам Лежандра. Однако, если фотоны рассеиваются в мутных средах (облака, вода), то индикатриса рассеяния так же становится явно вытянутой [7].

В теории переноса излучения [2-4] индикатрису рассеяния разлагают в ряд по сферическим функциям:

$$x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} x_l P_l(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}), \quad (6)$$

где  $P_l(\cdot)$  - полиномы Лежандра,  $x_l$  - коэффициенты разложения индикатрисы рассеяния в ряд по полиномам Лежандра. Косинус угла рассея-

ния можно выразить через полярные, азимутальные углы падения  $\theta_0$  и углы рассеяния  $(\theta, \varphi)$ :

$$\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega} = \cos \gamma = \cos \theta \cos \theta_0 + \sin \theta \sin \theta_0 \cos \varphi. \quad (7)$$

Используя выражение (7) и теорему сложения для полиномов Лежандра, получим разложение индикатрисы в виде ряда по нормированным присоединенным полиномам Лежандра  $\bar{P}_l^m(\cdot)$ :

$$x_{cl}(\cos \gamma) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=m}^{\infty} x_l \bar{P}_l^m(\cos \theta) \bar{P}_l^m(\cos \theta_0) \cos(m \varphi). \quad (8)$$

Индикатрисы рассеяния определяются как теоретически, путем расчетов, так и путем лабораторных измерений. Перечислим некоторые виды модельных индикатрис, наиболее часто употребляемых в теории переноса:

Название индикатрисы	Формула $x_{cl}(\cos \gamma)$	Коэффициенты $x_l$
сферическая <sup>1</sup>	2	2, $l = 0$ , 0, $l > 0$ .
Рэлеевская	$\frac{3}{4}(1 + \cos^2 \gamma)$	2, $l = 0$ , 0, $l = 1$ , 1, $l = 2$ , 0, $l > 2$ .
Хенли-Гринштейна	$\frac{1 - q^2}{(1 + q^2 - 2q \cos \gamma)^{3/2}}$	$2q^l$
Резерфорда	$\frac{2\eta(1 + \eta)}{(1 + 2\eta - \cos \gamma)^2}$	$-8\eta(\eta + 1)Q_l^1(1 + 2\eta)$
игольчатая или «прямо-вперед»	$2\delta(\cos \gamma - 1)$	2
«вперед-назад»	$2b\delta(\cos \gamma - 1) + \dots$ $+ 2(1 - b)\delta(\cos \gamma + 1)$	$2b + 2(1 - b)(-1)^l$

<sup>1</sup> Рассеяние с такой индикатрисой называется изотропным

Здесь  $q$  – параметр рассеяния Хеньи-Гринштейна ( $|q| < 1$ , чем ближе  $|q|$  к единице, тем эта индикатриса более вытянута: при  $q > 0$  вперед, при  $q < 0$  назад),  $\eta$  – параметр экранирования Резерфорда,  $b > 0$  – параметр, определяется условием нормировки,  $Q_l^{\dagger}(\cdot)$  – присоединенные полиномы Лежандра «второго рода».

Один из способов приближенного представления упругих индикатрис заключается в вычислении для реальной индикатрисы среднего косинуса рассеяния

$$\langle \cos \gamma \rangle = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \cos \gamma x_{el}(\cos \gamma) \sin \gamma d\gamma d\varphi / 4\pi \quad (9)$$

и замена этой индикатрисы модельной индикатрисой с параметрами дающей одинаковый средний косинус рассеяния.

Параметр рассеяния Хеньи-Гринштейна и параметр экранирования Резерфорда можно рассчитать, используя табличные данные для транспортного  $\sigma_{tr}$  и полного упругого  $\sigma_{el}$  сечений рассеяния [5,6]:

$$\begin{aligned} \langle \cos \gamma \rangle_{HG} &= q = 1 - \frac{\sigma_{tr}}{\sigma_{el}}, \\ \langle \cos \gamma \rangle_R &= (1 + 2\eta) \left( 1 - 2\eta \ln \frac{1 + \eta}{\eta} \right) = 1 - \frac{\sigma_{tr}}{\sigma_{el}}. \end{aligned} \quad (10)$$

#### *Закон Бугера*

Если при прохождении слоя вещества частицы не испытывают упругого рассеяния, то уравнение переноса (5) легко решается. При использовании игольчатой индикатрисы запишем уравнения переноса для частиц, движущихся «прямо-вперед»:

$$\mu \frac{d}{d\tau} N(\tau, \hat{\Omega}) = -(1 - \lambda) N(\tau, \hat{\Omega}). \quad (11)$$

Решение (11) с учетом граничного условия (2) имеет вид:

$$N(z, \hat{\Omega}) = N_0 \exp \left[ -(1 - \lambda) \frac{\tau}{\mu} \right] \delta(\hat{\Omega} - \hat{\Omega}_0). \quad (12)$$

Это решение называют законом Бугера.

*Классическое малоугловое приближение*

Уравнение (5) было впервые решено Гаудсмитом и Саундерсеном в 1940 г. Использовался метод сферических гармоник и малоугловое приближение.

**Метод сферических гармоник** состоит в том, что решение уравнения переноса (5) ищется в виде ряда по сферическим функциям:

$$N(\tau, \hat{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} N_l(\tau) P_l(\hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}_0). \quad (13)$$

В **малоугловом приближении** считается, что поток частиц движется вдоль первоначального направления, которое составляет угол  $\theta_0 = \arccos \mu_0$  с нормалью к границе слоя. Другими словами длина пути, пройденного частицами в слое, составляет величину  $\tau/\mu_0$  и не зависит от углов, на которые отклоняются частицы от первоначального направления.

Подставляя (8) и (13) в (5), используя свойство ортогональности сферических функций, в малоугловом приближении получаем для коэффициентов  $N_l(\tau)$  диагональную систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\mu \frac{d}{d\tau} N_l(\tau) + N_l(\tau) = \frac{\lambda}{2} x_l N_l(\tau) \quad (14)$$

Решение системы (14) с граничным условием  $N_l(\tau) = 1$ , которое следует того, что  $N(0, \hat{\Omega}) = N_0 \delta(\hat{\Omega} - \hat{\Omega}_0)$ , и теоремы полноты сферических функций, имеет вид:

$$N_l(\tau) = N_0 \exp\left(-\left(1 - \frac{\lambda}{2} x_l\right) \frac{\tau}{\mu_0}\right) \quad (15)$$

Подставляя (15) в (13) получаем решение Гаудсмита и Саундерсена:

$$N(\tau, \hat{\Omega}) = N_0 \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \exp\left(-\left(1 - \frac{\lambda}{2} x_l\right) \frac{\tau}{\mu_0}\right) P_l(\hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}_0). \quad (16)$$

Решение (16) не может быть использовано для выполнения численных расчетов, поскольку включает сингулярное слагаемое, описывающее частицы прошедших в мишени путь  $\tau/\mu_0$  без рассеяний (12). Поэтому решение удобное для вычислений имеет вид:

$$\begin{aligned}
N(\tau, \hat{\Omega}) = N_0 \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} & \left\{ \exp\left[-\left(1 - \frac{\lambda}{2} x_l\right) \frac{\tau}{\mu_0}\right] - \right. \\
& \left. - \exp\left[-(1-\lambda) \frac{\tau}{\mu_0}\right] \right\} \times P_l(\hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}_0) + \\
& + N_0 \exp\left[-(1-\lambda) \frac{\tau}{\mu_0}\right] \delta(\hat{\Omega} - \hat{\Omega}_0).
\end{aligned} \tag{17}$$

Функция (17) описывает угловые распределения частиц прошедших слой вещества.

*Диффузионное малоугловое приближение*

Ситуация еще заметнее упрощается если воспользоваться диффузионным приближением для расчета коэффициентов разложения индикатрисы рассеяния:

$$x_l = 2 - 2l(2l+1)\alpha/3, \tag{18}$$

где  $\alpha = \sigma_{tr}/\sigma_{el} = 1 - x_1/2$ . Введем длину транспортного пробега  $l_{tr} = 1/\sigma_{tr} n_0$  и ограничимся первыми двумя слагаемыми ряда (16), что оправдано для больших толщин слоя  $d \gg l_{tr}$ :

$$N(\tau, \hat{\Omega}) = N_0 \left[ \frac{1}{2} + \frac{3}{2} \exp\left[-(1-\lambda + \alpha\lambda) \frac{\tau}{\mu_0}\right] \cos(\hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}_0) \right]. \tag{19}$$

*Малоугловое квазиоднократное приближение*

Представленные формулы (16), (19) справедливы, если процесс многократного упругого рассеяния происходит в безграничной среде. Решение граничной задачи для рассеяния в плоском слое методами инвариантного погружения [8] в малоугловом приближении, с использованием процедуры линеаризации приводит нас к формуле для угловых распределений прошедших слой частиц:



$$\begin{aligned}
N(\tau, \hat{\Omega}) = & \frac{\lambda \mu_0 \mu}{2} \sum_{l=0}^{\infty} \left( \frac{\lambda x_l \left( \exp\left(-\frac{\tau}{\mu}\right) - \exp\left(-\frac{1-\lambda x_l/2}{\mu_0} \tau\right) \right)}{\mu(1-\lambda x_l/2) - \mu_0} \right) + \\
& + \frac{\lambda x_l \left( \exp\left(-\frac{\tau}{\mu_0}\right) - \exp\left(-\frac{1-\lambda x_l/2}{\mu} \tau\right) \right)}{\mu_0(1-\lambda x_l/2) - \mu} \Bigg) P_l(\hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}_0)
\end{aligned} \tag{20}$$

На рис. 1.2 дано графическое представление решения (20). Волнистой линией показан процесс многократного упругого рассеяния частиц, который описывается решением Гаудсмита-Саундерсена, из которого исключены сингулярные слагаемые описывающие частицы, прошедшие сквозь слой и не испытавшие никаких неупругих рассеяний. Прямая линия описывает движение частицы от места влета или вылета до точки, в которой происходит акт сильного рассеяния без упругих рассеяний. Решение Гаудсмита-Саундерсена следует из формулы (20), если положить в ней  $\mu = \mu_0$ , оно описывает процесс рассеяния пучка частиц при движении прямо-вперед.

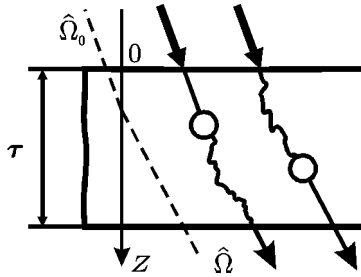


Рис. 1.2

Решение (20) описывает такое движение частиц, при котором на фоне многократных малоугловых рассеяний частица испытывает одно «сильное» рассеяние, меняющее траекторию движения. Такое приближение называют *квазиоднократным*.

При увеличении толщины слоя происходит изотропизация потока рассеивающихся частиц. Это приводит к тому, что при углах падения, отличных от нормального, максимум углового распределения прошедших слой частиц смещается в сторону нормали к поверхности. Это явление называют «поворотом тела яркости». В отличие от классического ма-

лоуглового приближения, квазиоднократное приближение позволяет описать «поворот тела яркости».

### **Подготовка к лабораторной работе**

1. Изучить теоретические основы лабораторной работы.
2. Подготовить, в соответствии с [5,6], исходные данные по расчету угловых распределений атомных частиц прошедших слой.
3. Подготовить и оцифровать экспериментальные данные угловых распределений атомных частиц из [9].
4. Подготовить программу расчета параметров по формулам (10) для модельных индикатрис рассеяния.
5. Подготовить программу расчета угловых распределений атомных частиц прошедших слой, используя приближения: а) классическое малоугловое (17), б) диффузионное малоугловое (19), в) квазиоднократное малоугловое (20).

### **Порядок выполнения лабораторной работы**

1. Получить у преподавателя расчетное задание.
2. Ввести в программу исходные данные, выбрать модельную индикатрису и приближение, по которым будут считаться угловые распределения, соответствующие заданию.
3. Выполнить расчет и графическое сопоставление с экспериментальными данными.
4. Проанализировать полученные данные, сделать заключение о режимах рассеяния в соответствующих диапазонах варьируемых параметров.
5. Используя формулу (20) построить угловые распределения рассеянных частиц для случая  $\mu_0 \neq 1$ , для различных толщин слоя.
6. Построить зависимость косинуса угла, при котором угловое распределение имеет максимум,  $\mu_{\max}$  от толщины слоя.
7. Оформить протокол лабораторной работы. Протокол должен содержать: описание расчетного задания, листинг результатов расчетов на ЭВМ, графики экспериментальных и расчетных зависимостей, заключение о режимах рассеяния в соответствующих диапазонах варьируемого параметра.

### ***Контрольные вопросы к лабораторной работе***

1. Дайте определение основным параметрам рассеяния: индикатрисы упругого рассеяния, альбедо однократного упругого рассеяния, безразмерная толщина.
2. Что определяет средняя длина транспортного пробега.
3. Напишите формулу Гаудсмитта-Саундерсена.
4. В чем суть диффузионного приближения.
5. В чем суть малоуглового приближения.
6. В чем суть квазиоднократного приближения.
7. Что определяет косинус угла, при котором угловое распределение имеет максимум,  $\mu_{\max}$  в эффекте «поворота тела яркости».