

риллия, перешедшего в раствор из образцов № 2 и 3, в 5—8 раз ниже, чем из образцов другого состава. По некоторым характеристикам, в первую очередь, морозостойкости и водонепроницаемости составы № 1 и 4 хуже образцов состава № 2 и 3, поэтому не могут быть рекомендованы для иммобилизации бериллия. Состав № 3, характеризующийся отсутствием водоотделения и большей подвижностью смеси, может быть рекомендован для иммобилизации отходов с высоким содержанием бериллия в растворимой форме. При этом бериллий гарантированно остается в объеме и не выходит на поверхность. Высокая морозостойкость состава № 3 гарантирует надежное удержание бериллия в течение не менее 100 лет даже при надземном размещении отходов. Более простой и дешевый состав № 2 может быть использован при захоронении большого объема бериллийсодержащих отходов в подземных хранилищах, не промерзающих в зимнее время.

Таким образом, разработанные два состава (№ 2 и 3) цементобетонной смеси, содержащие полимерные суперпластификаторы из класса поликарбоксилатов, обладают высокой прочностью, высокими морозостойкостью, водонепроницаемостью и стойкостью к выщелачиванию бериллия. Они могут быть рекомендованы для

иммобилизации бериллия в течение длительного периода.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки России по Соглашению № 14.579.21.0097 (уникальный кодовый идентификатор RFMEFI57915X0097) в рамках федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014—2020 годы».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Бетоны.** Методы определения прочности по контрольным образцам. ГОСТ 10180—90. М.: Стандартинформ, 2006. 31 с.
2. **Методы** испытаний бетонной смеси. Ч. 8. Самоуплотняющаяся бетонная смесь. Испытание на распыл. DIN EN 12350-8:2010. Берлин: Beuth Verlag GmbH, 2010. 10 с.
3. **Бетоны.** Методы определения водонепроницаемости. ГОСТ 12730.5—84. М.: Стандартинформ, 2007. 12 с.
4. **Смеси** бетонные. Технические условия. М.: Стандартинформ, 2011. 16 с.
5. **Бетоны.** Методы определения морозостойкости. ГОСТ 10060—95. М.: Минстрой России, 1997. 27 с.
6. **Отходы** радиоактивные цементированные. Общие технические требования. ГОСТ Р 51883—2002. М.: Изд-во стандартов, 2002. 7 с.

Поступила в Редакцию 27.06.16

УДК 539.124

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ И ПОЗИТРОНОВ ПО ПРОГРАММЕ FAN15

Савицкая Е.Н., Санников А.В. (ГНЦ ИФВЭ НИЦ «Курчатовский ин-т», г. Протвино)

Программа FAN15 [1] была создана для расчета переноса низкоэнергетических фотонов энергией до 10 МэВ и нейтронов энергией ниже 20 МэВ. Настоящая работа посвящена описанию физических методов и алгоритмов, используемых в программе FAN15 при моделировании методом Монте-Карло переноса электронов и позитронов энергией до 10 МэВ, их взаимодействия с веществом и образования вторичных частиц.

Модель расчета. В задачах с источниками электронов и некоторых задачах с источниками фотонов требуется детальное моделирование энерговыделения электронов и позитронов в веществе с учетом их переноса, выбивания δ -электронов, испускания тормозных фотонов и

переноса вторичных частиц. Движение заряженных частиц в веществе сопровождается большим числом актов упругого рассеяния частиц ядрами среды и взаимодействия с атомарными электронами. Поэтому аналоговое моделирование индивидуальных столкновений обычно применяется только в расчетах поверхностных эффектов и при прохождении очень тонких слоев вещества заряженными частицами. В остальных случаях применяют методы группировки столкновений.

В FAN15 используется гибридная модель, основанная на разделении всех соударений электронов на «близкие» и «далекие». «Близкие» (катастрофические) столкновения приводят к значительной потере энергии с выбиванием

δ -электрона или излучением фотона энергией выше заданной пороговой $E_e^{\text{пор}}$ и $E_\gamma^{\text{пор}}$ соответственно. Спектры δ -электронов имеют вид $\sim E_e^{-2}$, тормозных фотонов E_γ^{-1} , поэтому катастрофические столкновения редки. Длина пробега до них моделируется с использованием сечений этих взаимодействий. Между отдельными катастрофическими столкновениями электрон испытывает большое число «далеких» столкновений с малой передачей энергии. К ним относятся упругое рассеяние на малые углы, а также ионизационные и радиационные потери.

Для учета искривления траектории частицы за счет упругого рассеяния на малые углы в программе используется модель группировки малых передач энергии. Траектория электрона разбивается на малые фрагменты пути s_i , на каждом из них электрон теряет в среднем одинаковую долю своей энергии: $E_{i+1} = \alpha E_i$. В программе FAN15 по умолчанию $\alpha = 0,99$. Значение α может быть изменено во входном файле задачи. Угол многократного рассеяния на фрагменте пути s_i моделируется с использованием распределения [2], полученного в малоугловом приближении:

$$f_m(\vartheta, s) \vartheta d\vartheta = 2\exp(-\vartheta^2) + f_1(\vartheta)/B + f_2(\vartheta)/B^2 + \dots$$

Здесь угол многократного рассеяния θ входит в безразмерную величину $\vartheta = \theta/\sqrt{\chi_c^2 B}$. Параметр B находится из решения трансцендентного уравнения

$$B - \ln B = \ln(\Omega_0/1,167).$$

Обычно угловое распределение [2] умножается на поправочный множитель $(\sin\theta/\theta)^{1/2}$, введенный в работе [3]. В FAN15 используется модификация поправки [3], описанная в статье [4] и реализованная в программе FLUKA [5].

Функции $f_1(\vartheta)$ и $f_2(\vartheta)$ задаются в виде таблиц [3]. Параметры среды и длина пути s_i определяют среднее число столкновений $\Omega_0 = \chi_c^2/\chi_a^2$ и характеристический угол многократного рассеяния χ_c :

$$\chi_c^2 = \frac{4\pi e^4 z^2}{(pv)^2} s_i \sum n_k Z_k (Z_k + 1),$$

где e — заряд электрона; p , v — импульс и скорость частицы соответственно; n_k — число атомов k -го типа в 1 см^3 вещества; $z = \pm 1$, Z_k — заряд частицы и рассеивающего ядра соответственно. Угол экранирования кулоновского поля ядра k атомарными электронами χ_a^k рассчитывается по формулам

$$\chi_a^k = \chi_0^k \sqrt{1,13 + 3,76a^2 f_s};$$

$$\chi_0^k = \frac{1,13}{137} \left(\frac{m_e c}{p} \right) Z_k^{1/3}; \quad a = \frac{Z_k}{137\beta},$$

где $f_s = \sqrt{E_e/(E_e + m_e c^2)}$ — эмпирическая поправка [6]; χ_0^k — угол экранирования в первом борновском приближении. Угол экранирования для сложных веществ находится по формуле [7]

$$\ln \chi_a = \left(\sum n_k Z_k^2 \ln \chi_a^k + \sum n_k Z_k \ln \chi_{el}^k \right) / \sum n_k Z_k (Z_k + 1),$$

где χ_{el}^k — поправка, учитывающая рассеяние на электронах атома k .

Длина отрезка s_i корректируется, если не выполняются условия применимости теории [2] в формулировке [8]: $\ln(\Omega_0/1,167) \geq 1$, $\chi_c^2 B \leq 1$. Первое условие ограничивает минимальное число столкновений, при котором моделируется многократное рассеяние. Второе условие обеспечивает соблюдение малоуглового приближения и определяет максимальный отрезок пути s_i . Координаты электрона после прохождения криволинейного отрезка пути s_i моделируются из распределения продольных и поперечных смещений, используемого в программе ETRAN [9].

Изменение энергии электрона на отрезке пути s_i в приближении непрерывного замедления определяется ограниченными линейными потерями энергии электронов

$$\left(-\frac{dE}{dx} \right) = \sum_k n_k \varepsilon_k,$$

где $\varepsilon_k = \varepsilon_n + \varepsilon_{\text{торм}} = \int_0^{E_e^{\text{пор}}} E_e \frac{d\sigma_n}{dE_e} dE_e + \int_0^{E_\gamma^{\text{пор}}} E_\gamma \frac{d\sigma_{\text{торм}}}{dE_\gamma} \times$
 $\times dE_\gamma$ — ограниченная тормозная способность атомов k -го типа, включающая потери энергии на ионизацию ε_n с передачей энергии электронам ниже пороговой $E_e < E_e^{\text{пор}}$ и тормозное излучение $\varepsilon_{\text{торм}}$ с испусканием фотонов энергией

$E_\gamma < E_\gamma^{\text{пор}}$. Флуктуации ограниченных ионизационных потерь моделируются в конце отрезка s_i из интегральных функций усеченного распределения Ландау [8].

Вероятность катастрофического столкновения при замедлении электрона от энергии E_0 до E_1 в приближении непрерывного замедления

$$p(E_0, E_1) = 1 - \exp \left[- \int_{E_1}^{E_0} \frac{\Sigma(E)}{(-dE/dx)} dE \right],$$

где макроскопическое сечение катастрофических столкновений

$$\Sigma(E) = \sum_k n_k \left[\sigma_k^{\text{и}}(E, E_e > E_e^{\text{пор}}) + \sigma_k^{\text{торм}}(E, E_\gamma > E_\gamma^{\text{пор}}) \right].$$

Частичные сечения выбивания δ -электрона и испускания фотона тормозного излучения, отвечающие за вылет частиц энергией больше пороговой $E_i^{\text{пор}}$ ($i = e, \gamma$), определяются долей этих частиц в спектрах:

$$\sigma^{\text{и(торм)}}(E, E_i > E_i^{\text{пор}}) = \int_{E_i^{\text{пор}}}^{E_i^{\text{max}}} \frac{d\sigma^{\text{и(торм)}}}{dE_i} dE_i,$$

где $E_i^{\text{max}} = E$ для $i = \gamma$ и e^+e^- -взаимодействий. В случае e^-e^- -столкновений $E_i^{\text{max}} = E/2$ из-за неразличимости частиц.

Для процессов ионизации использовали спектры и сечения [10] и [11] для электронов и позитронов соответственно, для тормозного излучения электронов — спектры, табулированные в работе [12], и сечения из библиотеки EEDL [13]. Различие тормозного излучения позитронов и электронов учтено введением поправок в частичные сечения тормозного излучения и ограниченные радиационные тормозные способности для позитронов методом, используемым в GEANT4 [14]. Направление вылета δ -электрона определяется законом сохранения импульса. Для электронов энергией более 500 кэВ угловое распределение тормозных фотонов описывается аппроксимирующей функцией [14]. Для электронов энергией ниже 500 кэВ используются расчетные данные [15]. Угловое распределение фотонов задается таблицами для шести значений энергии электронов от 1 до 500 кэВ и атомов с $Z = 1, 2, 8, 13, 47, 79$ и 92. Для других атомов и значений энергии E_e применяется линейная интерполяция по Z и $\ln E_e$.

Перенос электронов, позитронов и фотонов моделируется до достижения пороговой энергии, ниже которой они поглощаются локально. Минимальная пороговая энергия фотонов $E_\gamma^{\text{пор}}$

и электронов (позитронов) $E_e^{\text{пор}}$, заданная в программе по умолчанию, равна 1 кэВ. В конце пробега позитрона из изотропного углового распределения моделируется вылет в противоположных направлениях двух аннигиляционных фотонов энергией 511 кэВ.

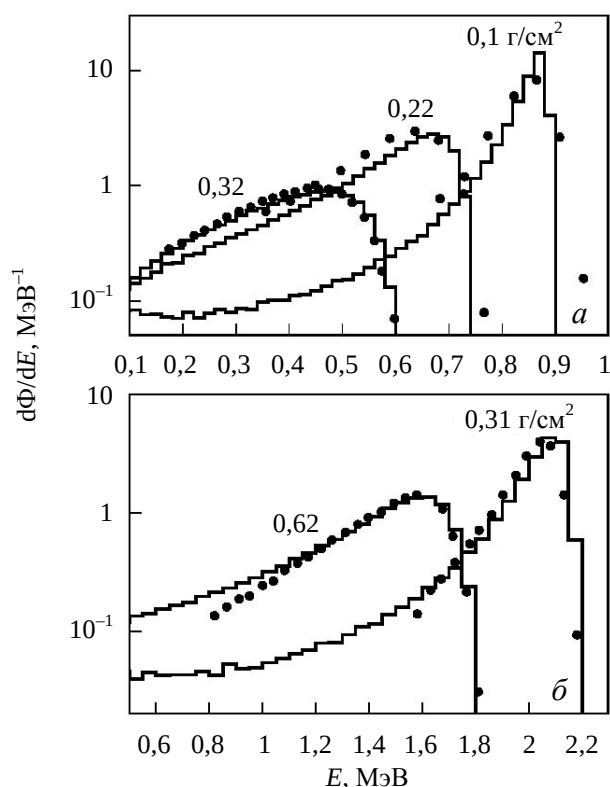
В программе предусмотрена возможность задания во входном файле пороговой энергии фотонов и электронов более 1 кэВ, что приводит к значительному снижению времени счета. Кроме того, есть возможность учета процессов релаксации ионизированных атомов, приводящих к вылету рентгеновских фотонов энергией выше пороговой с K - и L -оболочек. На базе библиотеки оцененных атомных данных EADL [13] создана вспомогательная библиотека для всех атомов, которая содержит суммарный выход и среднюю энергию фотонов с $E_\gamma > 1$ кэВ, испускаемых при снятии возбуждения K - и L -оболочек. Среднее число ионизаций K - и L -оболочек атомов k -го типа при замедлении электронов рассчитывается в приближении непрерывного замедления

$$f_k^{K(L)}(E_0, E_1) = n_k \int_{E_1}^{E_0} \frac{\sigma_k^{K(L)}(E)}{(-dE/dx)} dE,$$

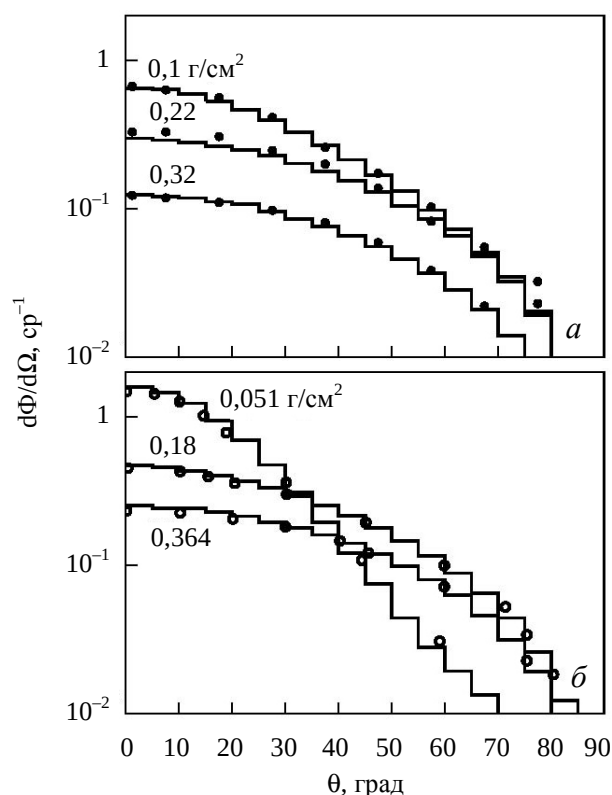
где $\sigma_k^{K(L)}$ — сечение ионизации K - или L -оболочки k -го атома из библиотеки EEDL.

Тестовые расчеты. Модели и алгоритмы переноса электронов в FAN15 тестировали с использованием большого числа экспериментальных данных о распределении поглощенной дозы в разных веществах, а также спектре и угловом распределении электронов, прошедших через плоские поглотители либо отраженных от них. На рис. 1—4 показаны некоторые из них [16—22], полученные для условий перпендикулярного падения электронов, в сравнении с расчетами по программе FAN15. Данные [17, 20—22] взяты из статьи [23].

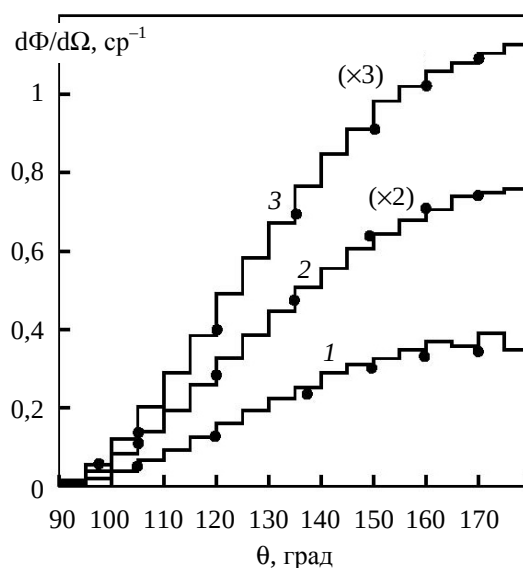
В целом наблюдается удовлетворительное согласие расчетов по программе FAN15 с экспериментальными данными. Отдельные расхождения с экспериментом могут быть следствием как использования приближенных моделей пе-



Р и с. 1. Спектр электронов начальной энергией 1 (а) и 2,5 МэВ (б), прошедших сквозь слой алюминия разной толщины при перпендикулярном падении: ● — эксперимент [16]; гистограмма — расчет по программе FAN15



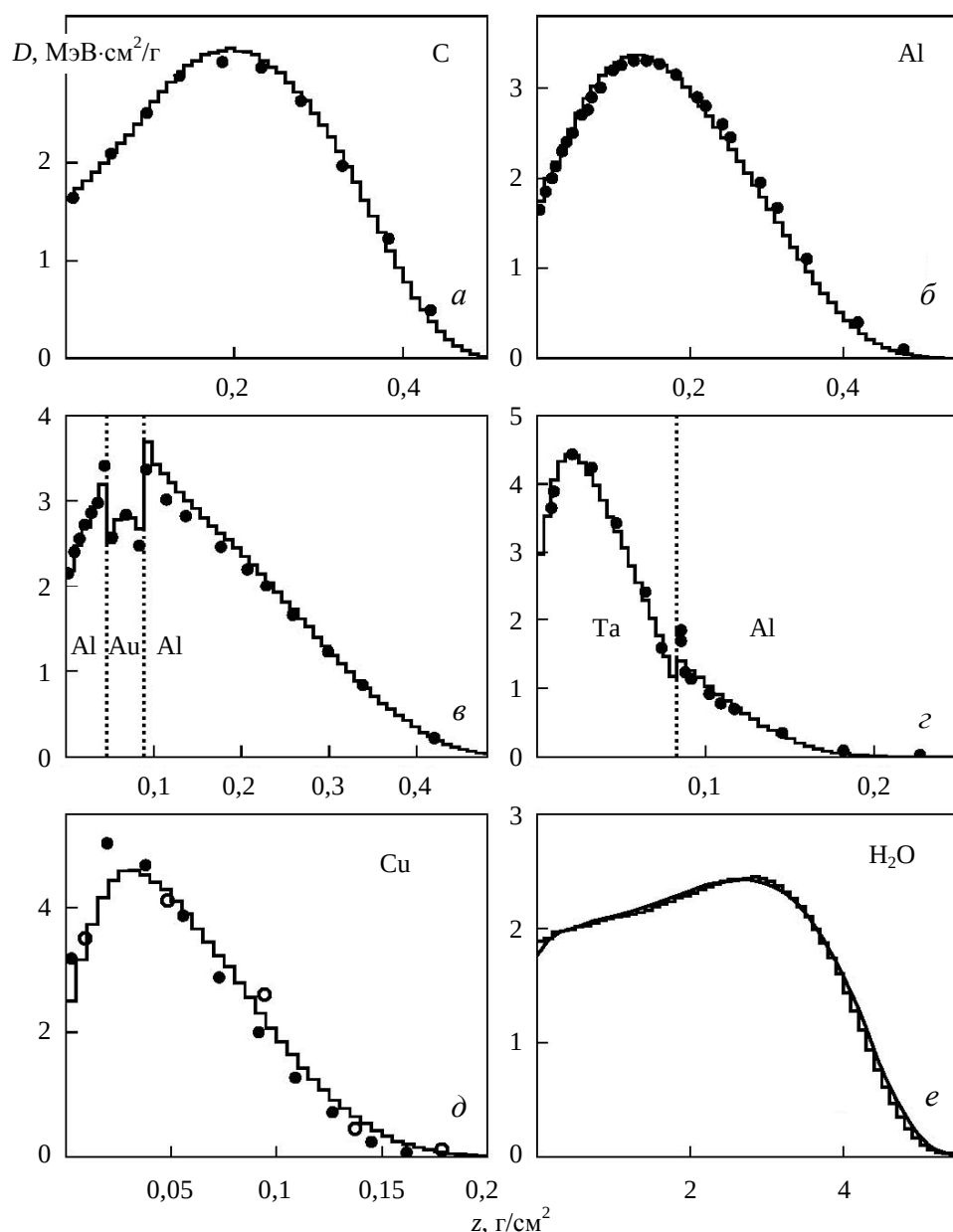
Р и с. 2. Угловое распределение электронов энергией выше $E_{\min}$, прошедших сквозь слой алюминия ($E_e = 1$ МэВ, $E_{\min} = 100$ кэВ) (а) и меди ($E_e = 1,75$ МэВ, $E_{\min} = 150$ кэВ) (б) разной толщины: ●, ○ — эксперимент [16] и [17] соответственно; гистограмма — расчет по программе FAN15



Р и с. 3. Угловое распределение электронов энергией 1,75 МэВ, отраженных от слоев алюминия толщиной 545 мг/см² (1), меди (364 мг/см²) (2) и свинца (463 мг/см²) (3) при $E_{\min} = 150$ кэВ: ● — эксперимент [17]; гистограмма — расчет по программе FAN15

реноса электронов, так и экспериментальных погрешностей. Второе объяснение представляется более вероятным. Так, рассчитанные в работе [23] по программе ETRAN спектры электронов за алюминиевыми поглотителями различной толщины при энергии 1 МэВ близки к расчетам по программе FAN15, показанным на рис. 1. Расчетное и экспериментальное распределение поглощенной дозы электронов энергией 1 МэВ в трехслойном поглотителе Al/Au/Al, показанное на рис. 4, в, обнаруживает небольшое расхождение вблизи границы Au/Al. Анализ моделирования этого эксперимента по программам EGS4, FLUKA и MCNP показал [24], что, несмотря на разные модели переноса электронов, во всех случаях наблюдается похожее различие с экспериментом. Возможные систематические ошибки в экспериментальных данных показывает сравнение двух экспериментов о распределении поглощенной дозы электронов в меди (см. рис. 4, д).

Заключение. В разработанной модели расчета переноса электронов и позитронов энергией от 1 кэВ до 10 МэВ, дополняющей перенос низкоэнергетических фотонов и нейтронов в программе FAN15, учитывается многократное кулоновское рассеяние, флуктуации ионизационных потерь, образование δ -электронов, а также тормозных и рентгеновских фотонов. В программе используются библиотеки оцененных



Р и с. 4. Экспериментальное глубинное распределение поглощенной дозы электронов энергией 1 [18] (а, б, в), 0,5 [19] (г), 0,5 [20, 21] (д), 10 МэВ [22] (е) в разных материалах при перпендикулярном облучении: гистограмма — расчет по программе FAN15

данных EEDL и EADL в расчетах тормозного излучения и испускания рентгеновских фотонов при релаксации ионизированных атомов. Расчетное спектральное и угловое распределение электронов за разными поглотителями, а также глубинное распределение поглощенной дозы электронов в разных материалах удовлетворительно согласуется с экспериментом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Савицкая Е.Н., Санников А.В. Программа FAN15 для расчета переноса низкоэнергетических фотонов и нейтронов в произвольных средах: Препринт ИФВЭ 2016-4, 2016.

2. Moliere G. Theorie der Streuung Schneller Geladener Teilchen II: Mehrfach- und Vielfachstreuung. — Z. Naturforsch., 1948, v. 3a, p. 78.
3. Bethe H. Moliere's theory of multiple scattering. — Phys. Rev., 1953, v. 89, p. 1256—1266.
4. Ferrari A., Sala P., Guaraldi R., Padoani F. An improved multiple scattering model for charged particles transport. — Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res., 1992, v. B71, p. 412—426.
5. Ferrari A., Sala P., Fasso A., Ranft J. FLUKA: a Multi-Particle Transport Code. SLAC-R-773, 2005.
6. Seltzer S. An overview of ETRAN Monte Carlo methods. — In: Monte Carlo Transport of Electrons and Photons. NY: Plenum Press, 1988, p. 153.
7. Scott W. The theory of small-angle multiple scattering of fast charged particles. — Rev. Mod. Phys., 1963, v. 35, p. 231—313.
8. Аккерман А.Ф. Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. М.: Энергоатомиздат, 1991.
9. Seltzer S. Electron-photon Monte Carlo calculations. — Appl. Rad. Isot., 1991, v. 42, p. 917—941.
10. Möller C. Zur Theorie des Durchgang Schneller Elektronen durch Materie. — Ann. Phys., 1932, v. 14, p. 568.
11. Bhabha H. The scattering of positrons by electrons with exchange on Dirac's theory of the positron. — Proc. Roy. Soc., 1936, v. A154, p. 195.
12. Seltzer S., Berger M. Bremsstrahlung energy spectra from electrons with kinetic energy 1 keV — 10 GeV incident on screened nuclei and orbital electrons of neutral atoms with $Z = 1—100$. — At. Data Nucl. Data Tables, 1986, v. 35, p. 345—418.
13. EPICS2014: Electron Photon Interaction Cross Sections (Version 2014). IAEA-NDS-218, Rev. 0, 2014.
14. Physics Reference Manual. Version: GEANT4 9.5.0. CERN, 2011.
15. Kissel L., Quarles C., Pratt R. Shape functions for atomic field bremsstrahlung from electrons of kinetic energy 1—500 keV on selected neutral atoms $1 \leq Z \leq 92$. — At. Data Nucl. Data Tables, 1983, v. 28, p. 381—460.

16. **Rester D., Derrickson J.** Electron transmission measurements for Al, Sn, and Au targets at electron bombarding energies of 1.0 and 2.5 MeV. — J. Appl. Phys., 1971, v. 42, p. 714—721.
17. **Frank H.** Zür Vielfachstreuung und Ruckdiffusion Schneller Elektronen Nach Durchgang Durch Dicke Schichten. — Z. Naturforsch., 1959, v. 14a, p. 247.
18. **Lockwood G., Miller G., Halbleib J.** Electron energy deposition in multilayer geometries. — IEEE Trans. Nucl. Sci., 1976, v. NS-23, p. 1862—1866.
19. **Miller G., Lockwood G., Halbleib J.** Improved calorimetric method for energy deposition measurements. — Ibid., v. NS-21, p. 359—365.
20. **Aiginger H., Gonauser E.** Messung der beim beschuß von dicken targets mit 0.5, 1 und 2 MeV elektronen entsenden ionisationsverteilungen. — Atomkernenergie, 1967, v. 13, p. 33.
21. **Trump J., Graaff R., Cloud R.** Cathode rays for radiation therapy. — Amer. J. Roentgenol. Rad. Therapy Nucl. Med., 1940, v. 43, p. 728—734.
22. **Brahme A., Hulten G., Svensson H.** Electron depth absorbed dose distribution for a 10 MeV clinical microtron. — Phys. Med. Biol., 1975, v. 20, p. 39.
23. **Berger M.** ETRAN — experimental benchmarks. — In: Monte Carlo Transport of Electrons and Photons. NY: Plenum Press, 1988, p. 183.
24. **Ferrari A., Padoani F., Paul D.** Comparison of MCNP and alternative codes for an electron transport problem. — In: Use of MCNP in Radiation Protection Dosimetry. Bologna, 1996, p. 193.

Поступила в Редакцию 12.05.16

УДК 612.014.481+616.001.28

МИКРОДОЗИМЕТРИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ КОЭФФИЦИЕНТА ЭФФЕКТИВНОСТИ ДОЗЫ И МОЩНОСТИ ДОЗЫ

Сакович В.А. (НТЦ радиационно-химической безопасности и гигиены ФМБА России, Москва)

Одной из проблем Рекомендаций МКРЗ [1] является определение коэффициента эффективности дозы и мощности дозы (далее коэффициента эффективности). Это понятие МКРЗ определяет как экспертно оцененный параметр, который объясняет обычно сниженную биологическую эффективность (на единицу дозы) радиационного воздействия малой дозы и малой мощности дозы, если ее сравнивать с эффективностью высокой дозы и высокой мощности дозы. Такое толкование позволяет определять коэффициент эффективности по радиобиологическим экспериментам разного типа и эпидемиологическим наблюдениям, что может давать его значение в очень широком диапазоне. Действительно, эффект обусловлен соотношением мощности дозы и скорости разных стадий формирования радиационного вреда от внутриклеточных эффектов и до развития опухоли и поэтому в разной степени формируется на указанных стадиях.

Практическое применение коэффициента эффективности однозначно. МКРЗ рассчитала пожизненный радиационный риск, используя, в основном, данные о заболеваемости и смертности от рака, полученные для когорты японцев, подвергшихся атомному взрыву [2]. Для этого линейную дозовую зависимость заболеваемости и смертности от рака, наблюдаемую в диапазоне

0,2—2 Гр, МКРЗ экстраполирует в область меньшей дозы, где данные считаются статистически недостоверными, и делит ее на коэффициент эффективности [2, 3]. При этом его значение МКРЗ принимает равным двум. По сути, МКРЗ предполагает, что при дозе менее 0,1 Гр дозовая зависимость является нелинейной и становится линейной при дозе более 0,2 Гр. Поскольку линейную дозовую зависимость естественно связывать с однократным попаданием излучения в чувствительную область клетки, то линейная дозовая зависимость должна бы начинаться с бесконечно малой дозы. Поэтому численное значение используемого коэффициента эффективности остается предметом дискуссии [4].

В настоящей статье рассматривается модель гипотетического процесса, при наличии которого при дозе менее 0,1 Гр могла бы существовать нелинейная дозовая зависимость. Эта модель заключается в следующем. При событии передачи энергии излучения веществу чувствительной области клетки (так называемое попадание) образуются различные продукты облучения. При некотором попадании в чувствительную область возникает первичное повреждение ДНК, которое вызывает мутацию. В результате первичного повреждения определенного редкого участка ДНК (протоонкогена) может возникнуть рак. Продукты облучения взаимодействуют с