

1. 多重散乱に関する EGS4 と EGS5 の扱いの違い

(1) EGS4 での扱い

EGS4 では、多重散乱のステップサイズ(直線距離 (s):デフォルトのサイズあるいは ESTEPE による制限)に対して、ステップ移動後に、多重散乱モデルを使用して、ステップ移動後に、「直線距離から曲線距離 (t) の導出」、 \leftarrow 「多重散乱による方向の変化 (Θ, ϕ)」、 \leftarrow 「位置の変位 ($\Delta x, \Delta y$)」を求める。移動後の電子のエネルギーは、曲線距離に阻止能を掛けた値を「付与エネルギー」として引いたものになる。(s, t, $\Theta, \phi, \Delta x, \Delta y$ については、[1] の Fig.2.8 参照)

直線移動距離 電子の移動距離 (曲線距離)

(2) EGS5 での扱い

EGS5 では、当該物質の当該エネルギーに対する $K_I(t)$ 値 (Characteristic distance 又はステップサイズでのエネルギー損失に対応(EfracH と EfracL を使用)) から、乱数を使用して MS-hinge ポイントに対応する $\xi K_I(t)$ を決定し、 $\xi K_I(t)$ に対応する MS-hinge ポイントまでの電子の移動距離 t_1 と、 $(1-\xi)K_I(t)$ から MS-hinge ポイントから多重散乱ステップの最後までまでの距離 t_2 を求める。MS-hinge ポイントで、多重散乱モデルに基づき、電子は方向を変える。 t_1 と t_2 は電子の移動距離(EGS4 での曲線距離に対応する)で、この移動に伴うエネルギー付与は、 t_1 又は t_2 に阻止能を掛けたものである。(ξK_I については[1]の Fig.2.10 参照)

2. energy hinge と boundary crossing の関係

(1) エネルギー損失ステップ (図1の transport step) の途中で境界が無い場合

Previous energy hinge (hinge 1)から next energy hinge (hinge2)の間を考える。

(1) hinge1 から、現在のエネルギー損失ステップの最後までエネルギー損失

deresid (図1の DERESD1)

(2) denstep=deresid により、denstep を設定する。

(3) 次のエネルギー損失ステップで、hinge2 までの移動に対応するエネルギー損失量

deinitial (=rnow * detot) (図1の DEINITIAL2)

(4) hinge1 から hinge2 までの移動に対応するエネルギー損失量

denstep=denstep+deninitlal (図1の DERESID1+DEINITIAL2)

(5) 次のエネルギー損失ステップで、hinge2 からエネルギー損失ステップの最後までに対応するエネルギー損失量 deresid (=detot-deinitial) (図1の DERESID2)

(6) エネルギー付与量 (edep) は、電子の移動毎に計算し、ausgab を介してスコアできるようになっている。

(2) Energy hinge ポイント間で、リージョン境界が生じた場合

(1) Energy hinge ポイント間で、リージョン境界が生じた場合には、粒子はリージョン境界まで移動する。この移動に伴うエネルギー付与量を denstep から引く。denstep は、図1の DENSTEP に対応する量である。

(2) hinge1 で設定した電子のエネルギー $e(np)$ は、エネルギー損失ステップ1に対応するエネルギー損失を、hinge1 で引いた値である。図1の A の場合は、移動距離が想定したエネルギー損失ステップより短いことから、境界からエネルギー損失ステップの最後までまでの距離に対応す

るエネルギー損失 (denstep-deinitial) を $e(np)$ に加えた値が、境界での電子のエネルギーとなる(この場合の、denstep は、図 1 の A)DENSTEP 及び図 2 の DENSTEP1 に対応する。また、deinitial は図 1 及び 2 の DEINITIAL2 に対応する。) 一方、B の場合は、次の energy hinge ステップに入っているが、energy hinge ポイントに達していないことから、energy hinge ステップの最初から境界までの距離に相当するエネルギー損失 (deinitial-denstep) を $e(np)$ から引いた値が、境界での電子のエネルギーとなる(この場合の、denstep は、図 1 の B)DENSTEP 及び図 2 の denstep2 に対応する。また、deinitial は図 1 及び 2 の DEINITIAL2 に対応する。) いずれの場合も、境界での電子のエネルギーは、

$$e(np) = e(np) - (\text{deinitial} - \text{denstep})$$

となる。

- (3) 上記の様な電子のエネルギー情報は、ausgab でのみ必要であるので、粒子の移動に伴い call される (iarg=0 及び iarg=5) の ausgab の前で、上記の計算に基づき電子のエネルギーを計算し、ausgab の後で、元のエネルギーに戻しておけば、エネルギー損失ポイント間のどの位置で、粒子の移動に伴う ausgab が call されても、また、その様なケースがいくつあっても、その時点までのエネルギー付与に対応した電子のエネルギーを求めることができる。

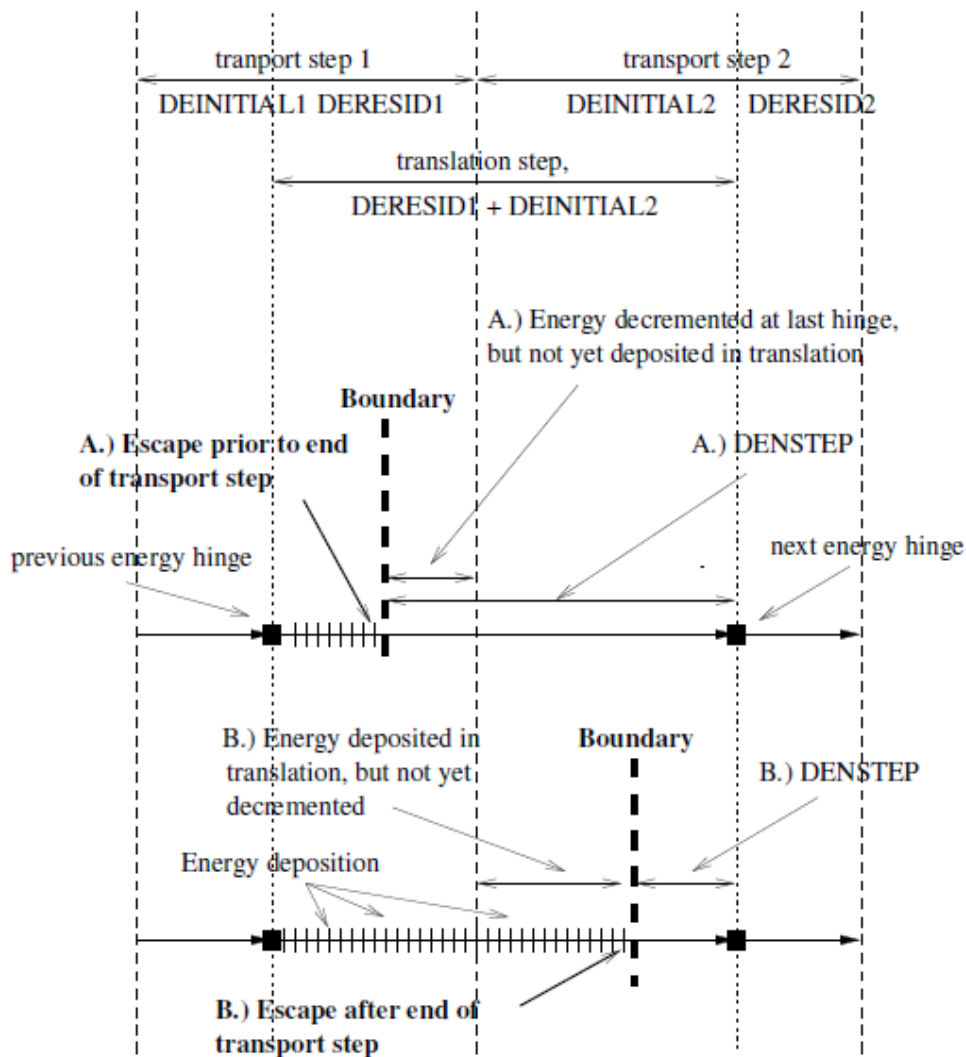


図 1

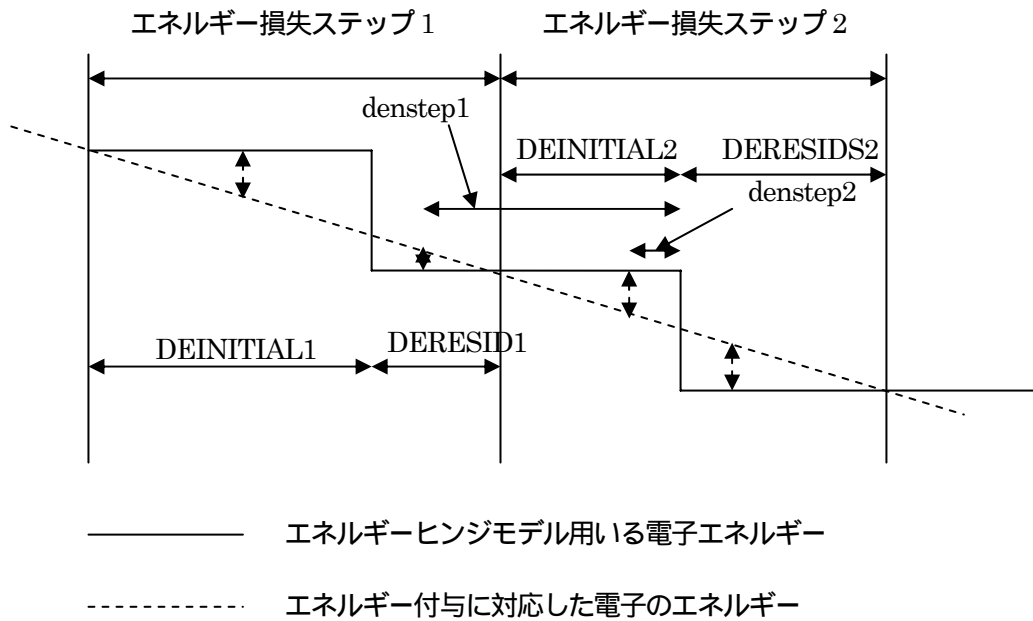


図 2

3 . エネルギー損失ポイントと MS-hinge の関係

3 . 1 MS-hinge ポイント間にエネルギー損失ポイントが無い場合

MS-ステップ内での MS-hinge の位置は、電子のエネルギーを e_1 とすると、 e_1 に対応する $K_1(e_1)$ と乱数 ξ_1 より決められた scattering strength $\xi_1 K_1(e_1)$ に対応する t_1 である。電子のエネルギーが変わらないとすると、

$$\xi_1 K_1(e_1) = \xi_1 \int_0^{t_1} G_1(t') dt' = \xi_1 G_1(e_1) \int_0^{t_1} dt' = \xi_1 G_1(e_1) t_1 \rightarrow t_1 = \frac{\xi_1 K_1(e_1)}{G_1(e_1)}$$

となる。

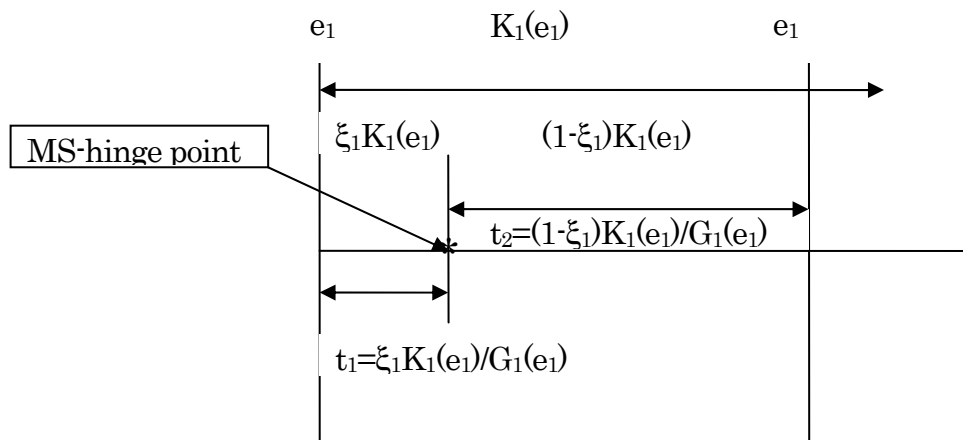


図 3

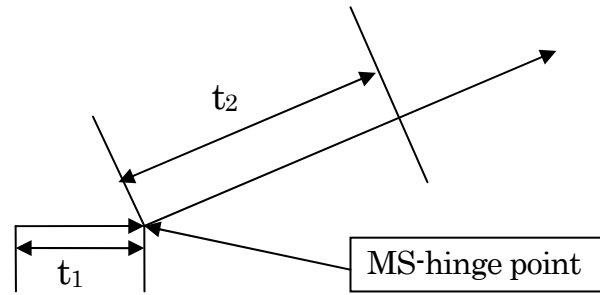


図4

連続する2つのMS-ステップを考えると図5、6の様になる。

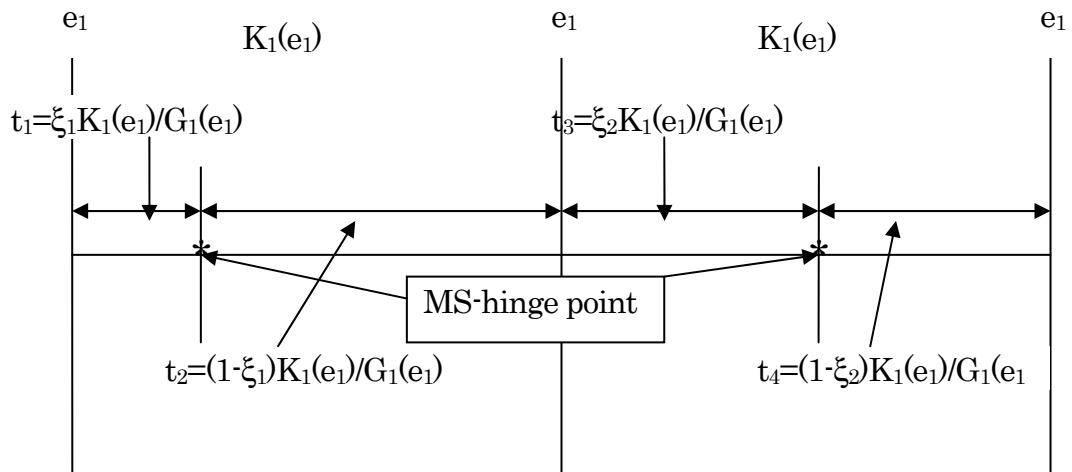


図5

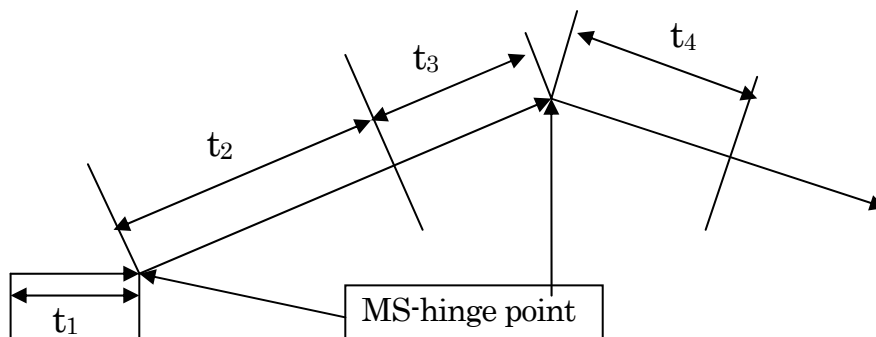


図6

3 - 2 MS-hinge ポイント間でエネルギー損失ポイントがある場合

MS-hinge ポイント間でエネルギー損失ポイントがある場合の計算方法は次のようなものである。

- (1) エネルギー損失ポイントでは、エネルギー損失ステップ間での全エネルギー損失を行い、新しい粒子のエネルギーは、次式の $e(np)$ となる。

$$e(np) = e_{ie} \cdot de (= de_{initial} + de_{resid})$$

- (2) MS-hinge ポイント間 (t_1) で、エネルギー損失ポイントが生じた場合は、新しいエネルギー ($e_2 = e(np)$) に対応した scattering power $G_1(e_2)$ を求め、以下の関係から次の MS-hinge までの新しい距離 (t_2) を再計算して、使用する。

$$K_1 = \int_0^{t_2} G_1(t') dt' = \int_0^{t_1} G_1(e_1) dt' + \int_{t_1}^{t_2} G_1(e_2) dt' = G_1(e_1)t_1 + G_1(e_2)(t_2 - t_1)$$

$$t_2 - t_1 = \frac{K_1 - G_1(e_1)t_1}{G_1(e_2)}$$

- (3) エネルギー損失ポイント以降のエネルギー付与は、新しいエネルギーに対応する阻止能を用いて求めることになる。

エネルギー損失ポイントの位置により扱いが異なる 2 つの場合があるので、以下にそれぞれの場合について具体的な計算手順をのべる。

- (1) 次の Ms-ステップの間で、次の MS-hinge の前にエネルギー損失ポイントが生じた場合

エネルギー損失ポイントで、新たな電子のエネルギー (e_2) に対応した $G_1(e_2)$ を求める。MS-ステップの最初からエネルギー損失ポイントまでの距離 (t_3') に対応する $K_1'(e_1)$ をもとめ、 $K_1'(e_1)$ と $G_1(e_2)$ を使用してエネルギー損失ポイントから MS-hinge ポイントまでの移動距離 (t_4) を計算する。また、 $G_1(e_2)$ を使って、MS-hinge ポイントから MS-ステップの終わりまでの距離を再計算する (t_5)。

$$K_1'(e_1) = t_3' \times G_1(e_1)$$

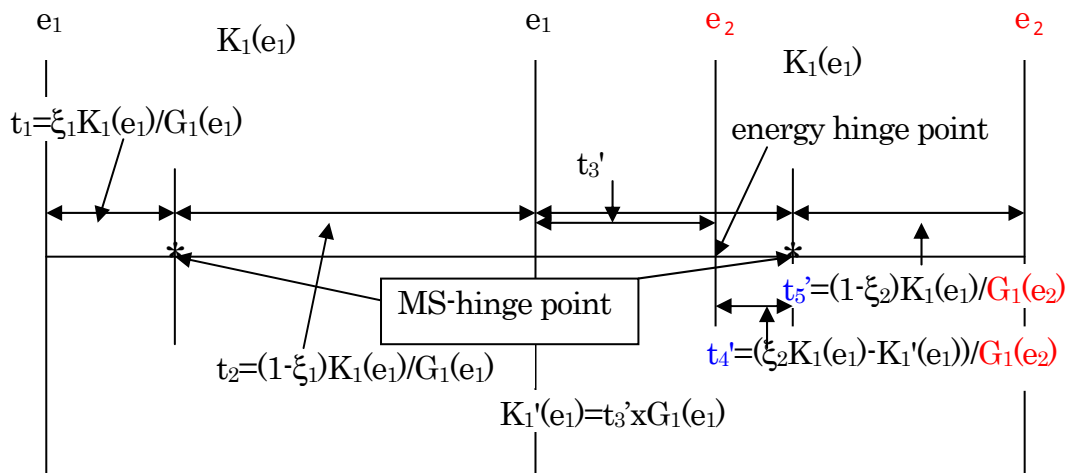


図 7

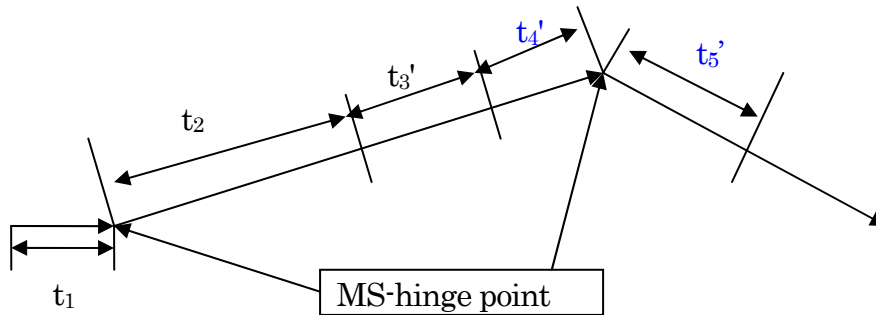


図 8

- (2) 最初の Ms-hinge ポイント後、MS-ステップ内でエネルギー損失ポイントが生じた場合
 (1) の場合と同様に、エネルギー損失ポイントで新たな電子のエネルギー (e_2) に対応した $G_1(e_2)$ を求め、 $G_1(e_2)$ を使用して MS-ステップの最後まで移動距離 (t_3') を再計算する。次の MS-ステップで、新たな Ms-hinge ポイントの決定する際には、 $K_1(e_2)$ を使用して行う。

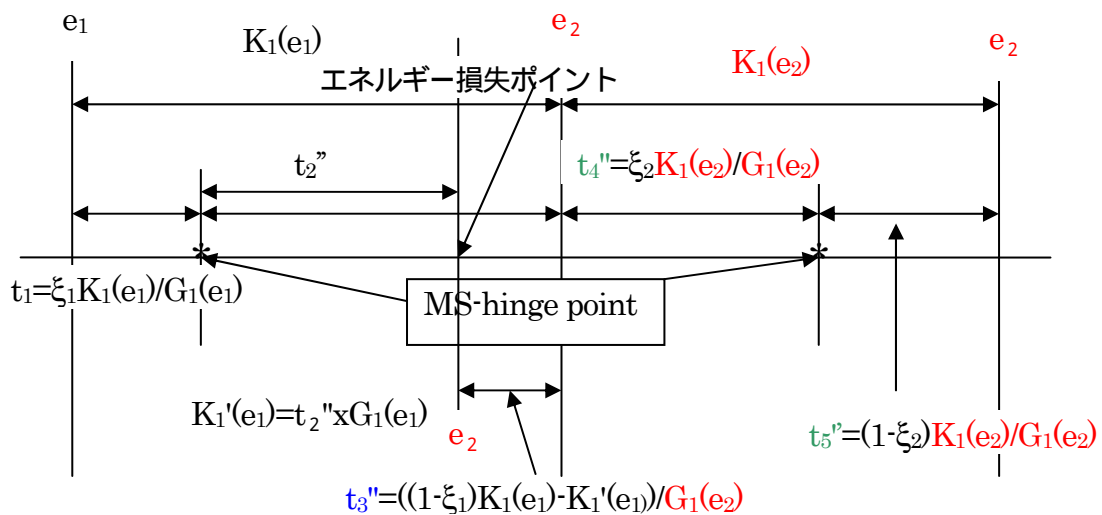


図 9

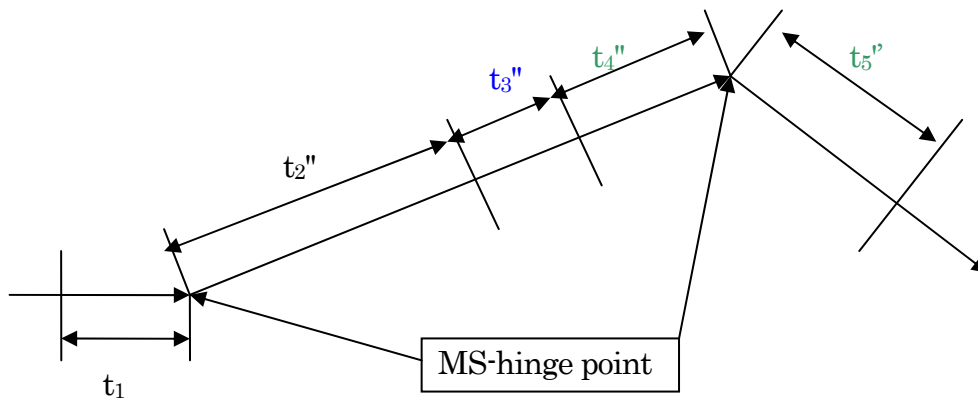


図 1 0

(3) MS-hinge ポイント間に リージョン境界がある場合

新たなリージョンで物質が変わるか、同じ物質でも密度が変わる場合には、 $G_1(e_1)$ を再計算するが、再計算に使用する電子のエネルギーとしては、 e_1 を使用する。

4 . エネルギー損失 hinge, MS-hinge とハードコリジョン

エネルギー損失ステップや MS-hinge ステップの途中で、ハードコリジョン (制動輻射やモラー散乱) が生じた場合には、それまでの電子の移動に伴うエネルギー付与に対応した反応前の電子のエネルギーを

$$e(np)=e(np)-(deinitial-denstep)$$

により求め、 $e(np)$ に対する反応として、二次粒子のエネルギー及び方向をサンプリングする。その後、新しい粒子に対して、改めてエネルギー損失ポイントと MS-hinge ポイントを決定する。

引用文献

[1] H. Hirayama, Y. Namito, A.F. Bielajew, S.J. Wilderman and W.R. Nelson, “*The EGS5 Code System*”, SLAC-R-730 (2005) and KEK Report 2005-8 (2005).