

Monte-Carlo-elvű részecsketranszport- számítási módszerek

IV. rész: Programozási vizsgafeladat

Monte-Carlo-módszerek

Fehér Sándor
BME Nukleáris Technikai Intézet

1.3. változat (2022.05.11.)

Jelen előadás kizárólag a BME BSc és MSc képzései támogatására,
a Monte-Carlo-módszerek tantárgy keretében készült.

© Copyright Dr. Fehér Sándor, BME NTI

Programozási vizsgafeladat

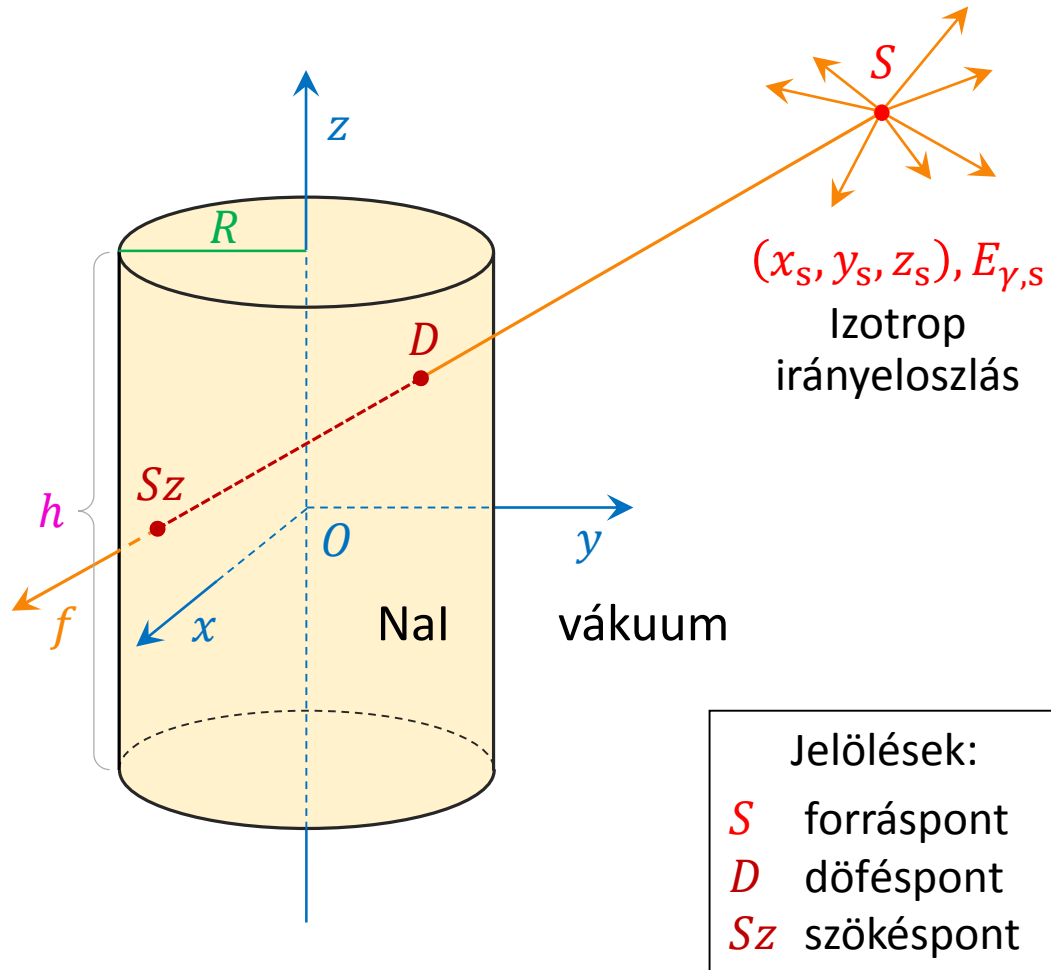
Tartalom

- Feladatkitűzés
- Geometriai számítások
 - a foton célzott irányú indítása a forráspontból
 - a forrásponttól az első ütközésig
 - további ütközés(ek) vagy kiszökés
 - szóródás utáni irány sorsolása
 - geometriai rutinok ellenőrzése
- Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása
 - fotoeffektus
 - Compton-szóródás
 - párkeltés
 - a Compton-szóródás szögeloszlása, a Klein-Nishina formula
 - a Compton-szóródás szögeloszlásának mintavételezése Kahn módszerével
- Hatáskeresztmetszet-táblázat összeállítása az XCOM programmal
- Mellékletek

Feladatkitűzés

Programozási vizsgafeladat

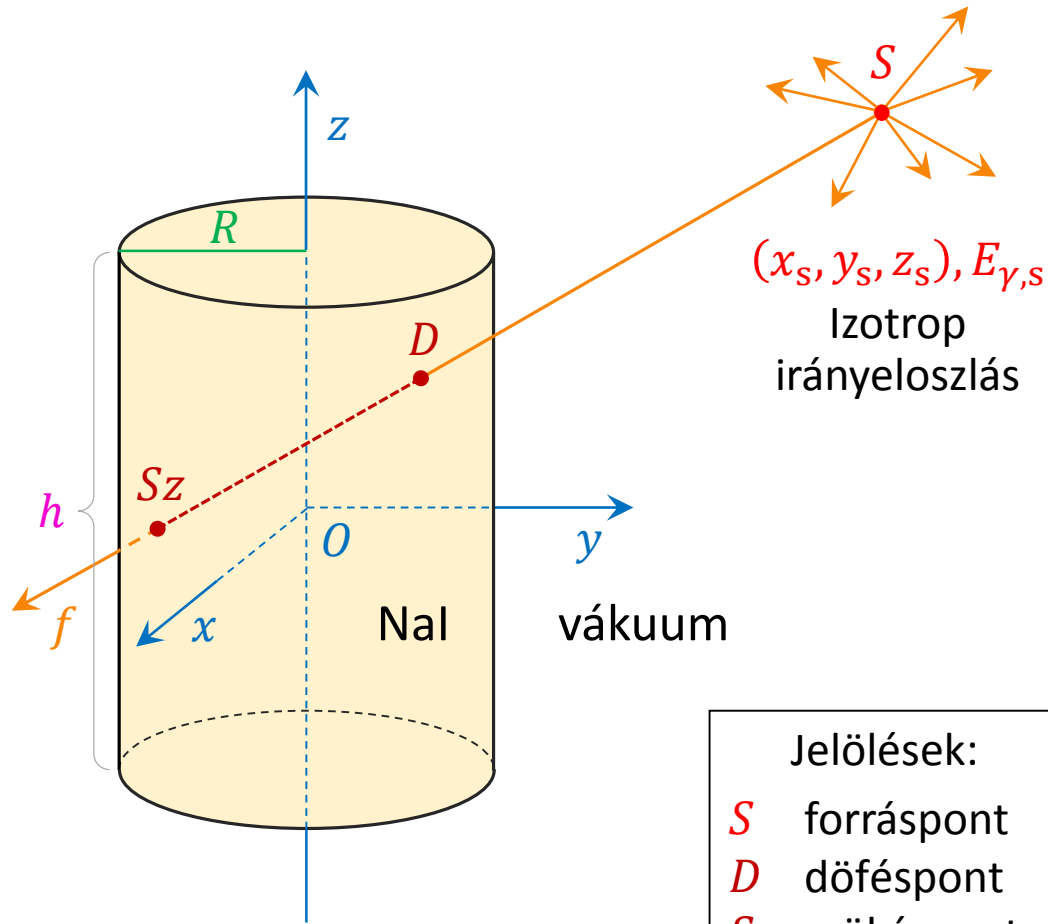
Feladatkitűzés



„Írjunk Monte-Carlo-módszeren alapuló programot, amely egy pontszerű gamma-forrás fotonjainak szcintillációs detektorban lezajló transzportfolyamatait szimulálja! ...”

Programozási vizsgafeladat

Feladatkitűzés



Jelölések:

S forráspont
 D döféspont
 Sz szökéspont

Inputadatok:

R, h a detektorhenger sugara, magassága [cm]
 ρ_{NaI} a nátriumjodid-kristály sűrűsége [g/cm³]
 (x_s, y_s, z_s) a forráspont helyének koordinátái [cm]
 $E_{\gamma,s}$ a (monoenergetikus) forrásfotonok energiája [MeV]
 E_{FWHM} a mérőlánc felbontóképességének félérték-szélessége [keV] (ld. a következő diát)

Számítandó mennyiségek (outputok):

- 1-5 s-onként frissülő 1024 csatornás impulzus-spektrum, váltható lineáris/logaritmikus ábrázolásban;
- az alábbi detektálási hatásfokok és relatív szórásuk*:

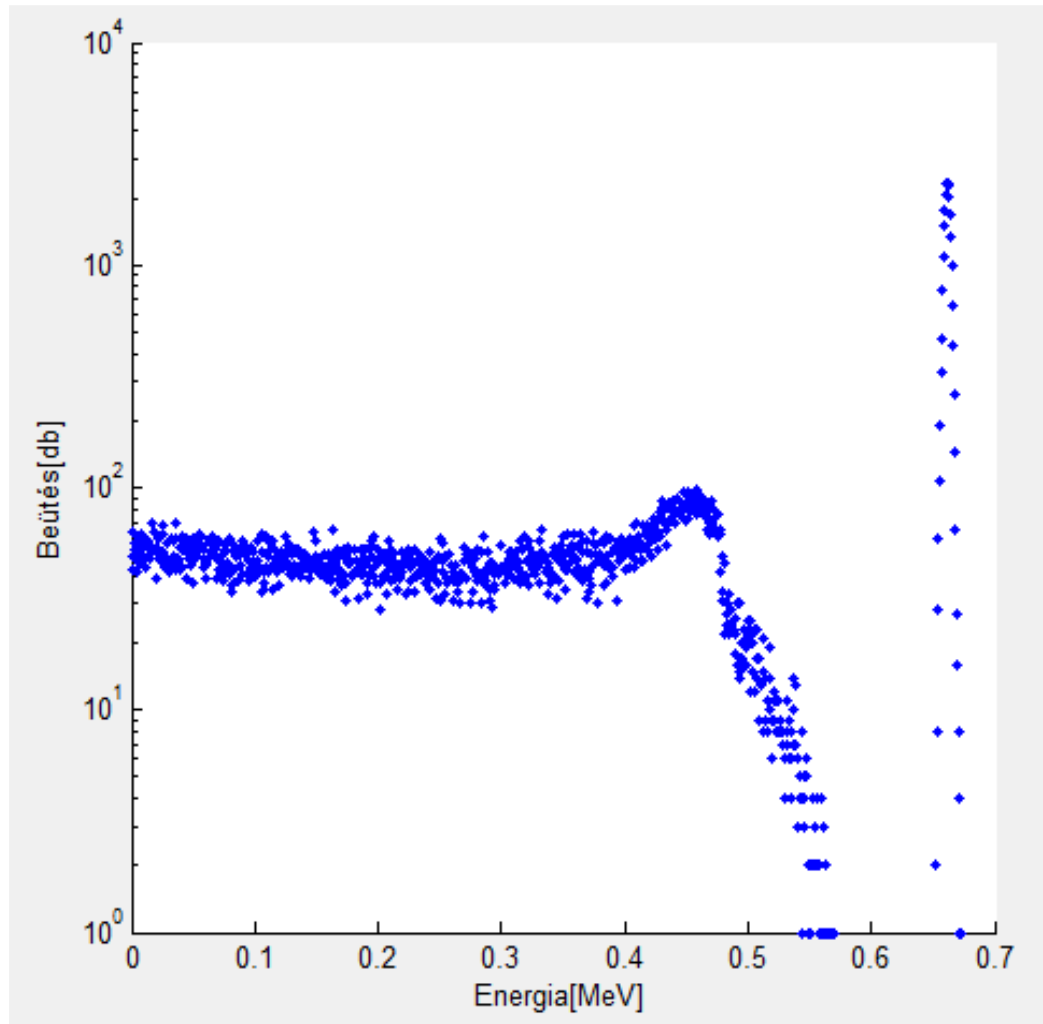
$$\eta_{\text{tot}} = \frac{E_{\text{det}}}{E_{\text{tot}}} \text{ és } \eta_{\text{int}} = \frac{E_{\text{det}}}{E_{\text{int}}},$$

ahol E_{det} a detektorban a töltött részecskéknek (e^- , e^+) átadott összes kinetikus energia (a „detektorban hagyott energia”), E_{tot} a forrásból a teljes 4π térszögbe kisugárzott fotonok, míg E_{int} a detektort elért fotonok összenergiája.

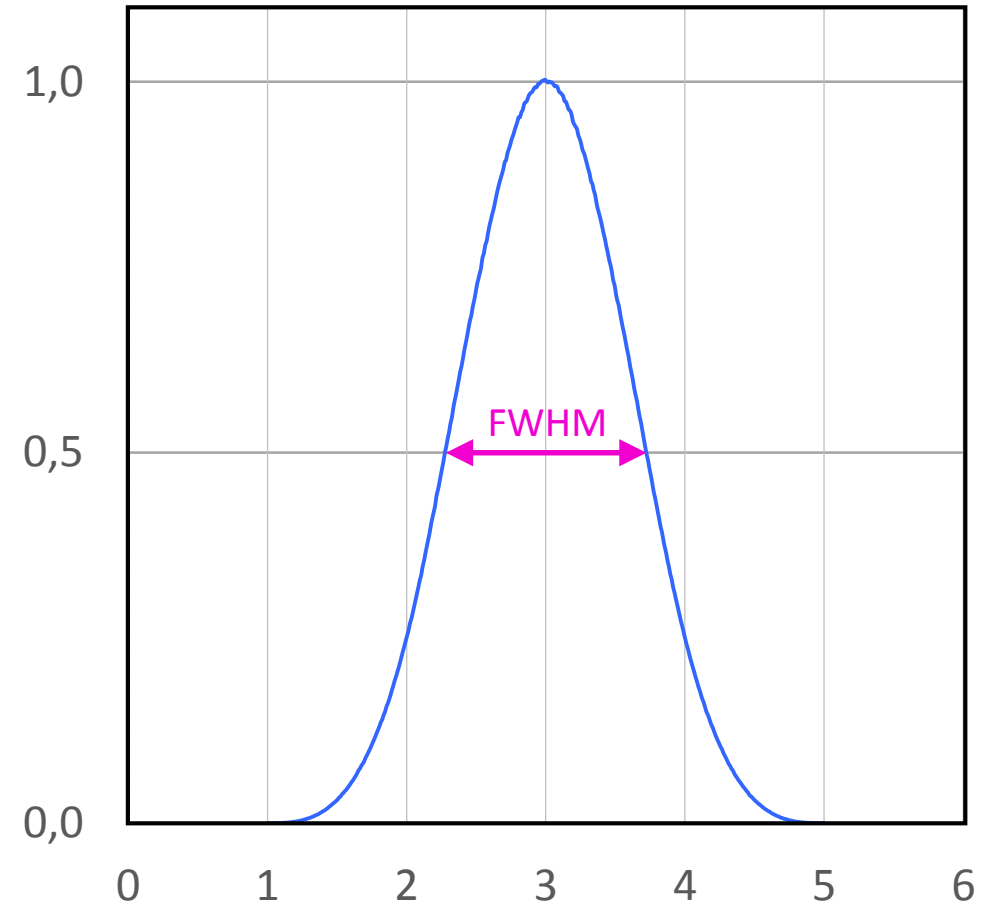
* Az MC-becslések szórásról ld. a jelen diasor 1. mellékletét!

Programozási vizsgafeladat

Feladatkitűzés



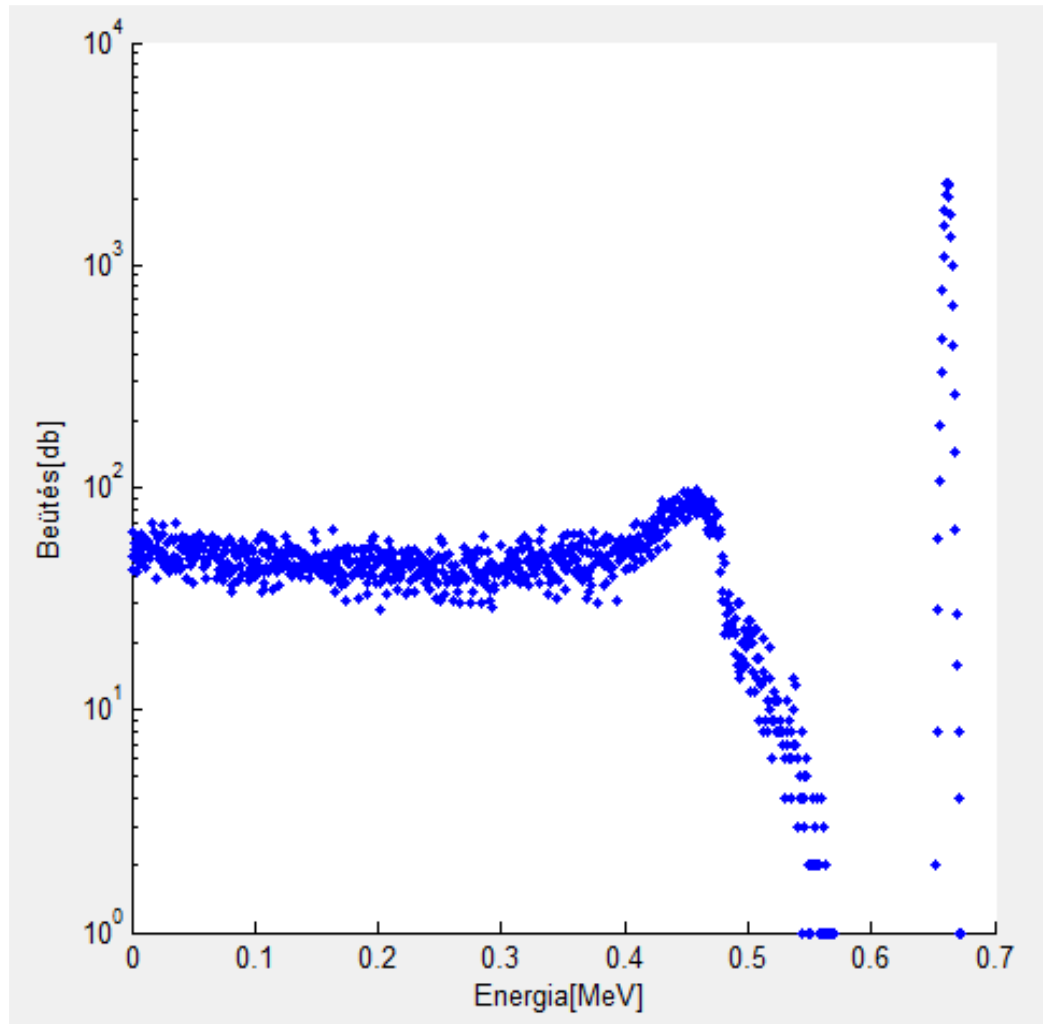
1024 csatornás spektrum ($E_{\gamma,s} = 661,7$ keV)



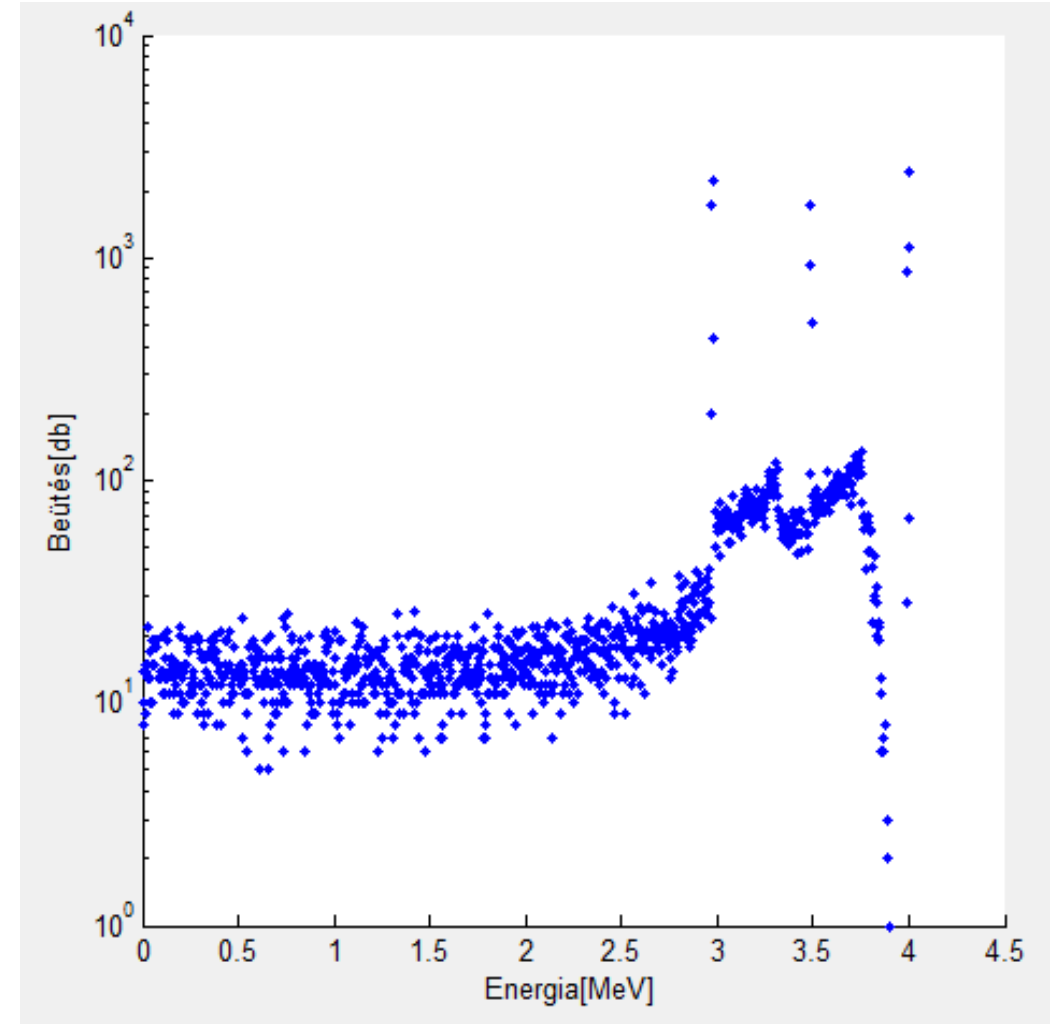
Félérték-szélesség értelmezése
(Full Width at Half Maximum)

Programozási vizsgafeladat

Feladatkitűzés



1024 csatornás spektrum ($E_{\gamma,s} = 661,7$ keV)



1024 csatornás spektrum ($E_{\gamma,s} = 4$ MeV)

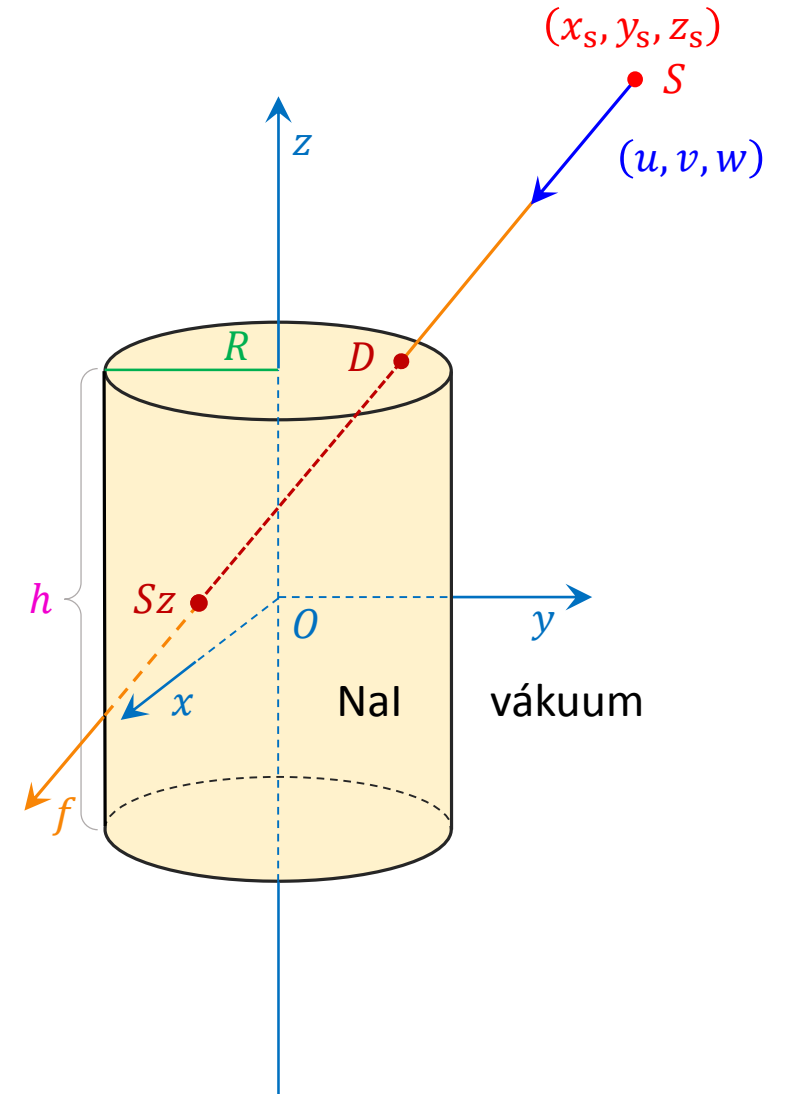
Programozási vizsgafeladat

Feladatkitűzés

A szimulációs programnak a fotonok makroszkopikus anyagban fellépő kölcsönhatásai közül az alábbiakat kell modelleznie:

- **fotoeffektus** (más néven: fotoelektromos abszorpció, fényelektromos jelenség, fotoelektromos hatás);
- **Compton-szóródás** (más néven: inkoherens szóródás, Compton-hatás, Compton-szórás);
- **Párkeltés** (más néven: párképződés).

A fenti folyamatokat jellemző energiafüggő makroszkopikus hatáskeresztmetszeteket az XCOM programmal lehet előállítani (ld. a 92-107. diákat). Az XCOM által generált táblázatot vagy fájlból kell beolvasnia a szimulációs programnak, vagy az adatok beépíthetők a forrásnyelvi programba is. A szimuláció energiatartományát az XCOM-ban adott alsó határtól (1 keV-től) 20 MeV-ig kell kiterjeszteni. Az XCOM alapértelmezésű energiaskálájával generált táblázatban nem szereplő energiaértékekre lineáris extrapolációval kell meghatározni a hatáskeresztmetszeteket.



Programozási vizsgafeladat

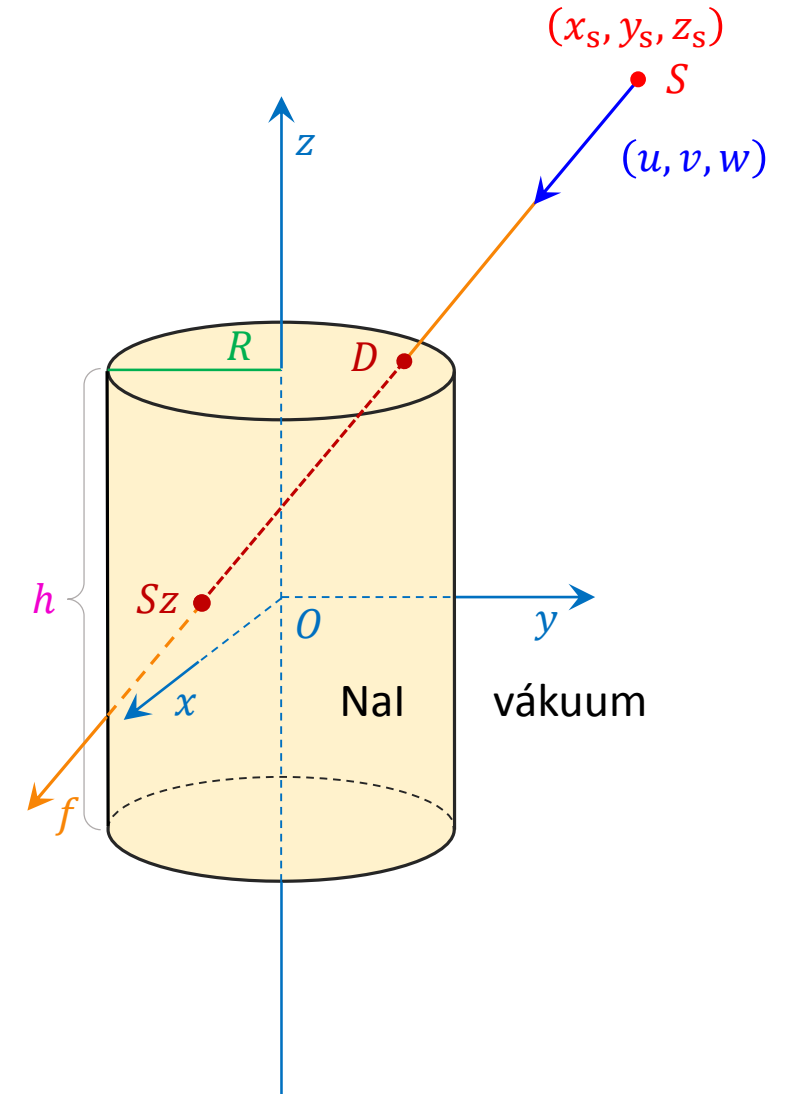
Feladatkitűzés

Megjegyzés:

A koherens szóródást (vagy más néven: Rayleigh-szórást) azért nem vesszük figyelembe, mert

- nem vezet töltött részecske felszabadulásához,
- elsősorban kisenergiájú fotonoknál jelentkezik,
- hatáskeresztmetszete minden fotonenergiánál legalább egy nagyságrenddel alacsonyabb a másik 3 reakcióénál.

A fentiek következtében a koherens szóródás elhanyagolható hatást gyakorol a szcintillációs kristállyal mérhető sokcsatornás spektrum alakjára és az ilyen mérések detektálási hatásfokára.



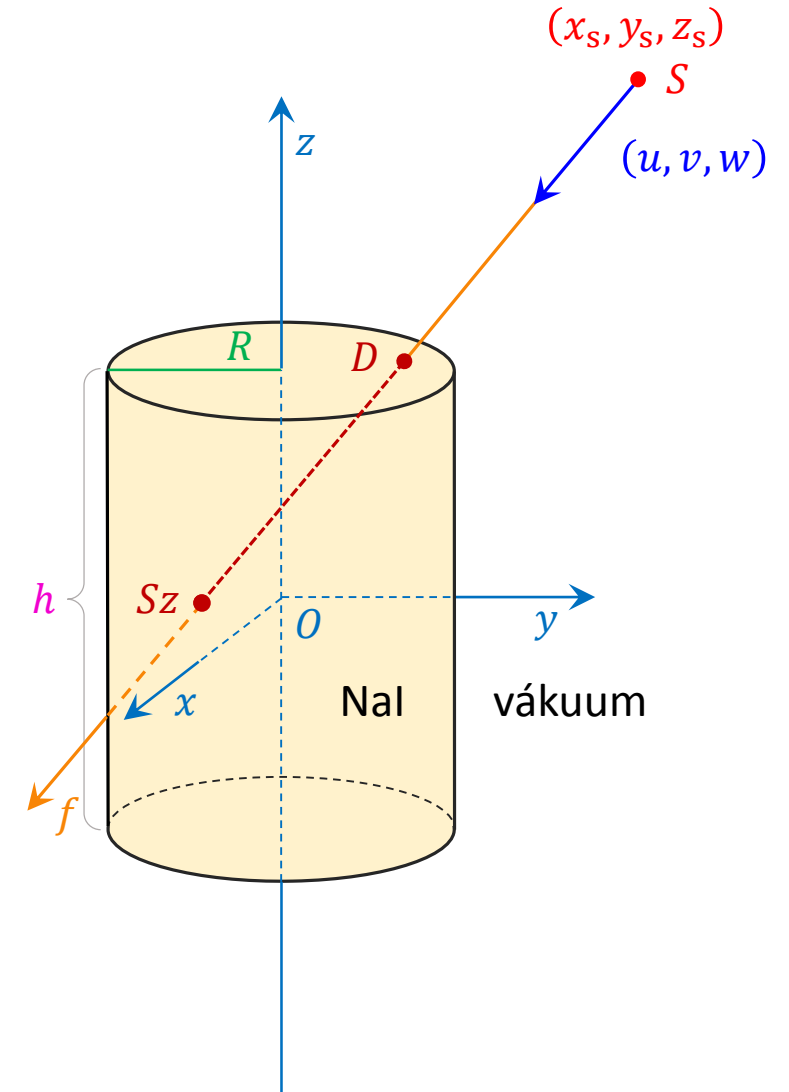
Programozási vizsgafeladat

Feladatkitűzés

A szimulációnál az alábbi **egyszerűsítő feltételezésekkel** élünk.

- 1) A valóságos mérési elrendezéseknél a szcintillációs kristályt körülvevő fém borításnak (a „toknak”) és a fényfelvillanásokat detektáló **fotoelektron-sokszorozónak**, továbbá a forrás és a detektor közötti **levegőnek** a **fotonok szóródására és elnyelődésére gyakorolt hatását elhanyagoljuk**. Úgy tekintjük, hogy a tömör nátriumjodid-kristály vákuumban foglal helyet.
- 2) A fotonok által a detektorban keltett **töltött részecskék** (e^- , e^+) a detektor méretéhez képest **elhanyagolható utat tesznek meg a kristályban**, ezért azok elmozdulását nem vesszük figyelembe*. Emiatt a párkeltésben keletkezett pozitron annihilációja is ott következik be, ahol a pozitron létrejött. A két, egyenként 511 keV-es annihilációs foton is erről a helyről indul (egymással ellentétes irányban, izotrop térbeli irányeloszlással).

* Ez az egyszerűsítés csak a teljes sűrűségű ($\rho_{\text{NaI}} \approx 3,7 \text{ g/cm}^3$) kristály esetében lenne elfogadható (ahol a töltött részecskék (e^- , e^+) átlagosan 1 mm-nél rövidebb utat tesznek meg), de a feltételezést kisebb sűrűségeknél is érvényesnek tekintjük. (A kristály sűrűségének input-adatként való specifikálásával a program tesztelését kívánjuk elősegíteni.)



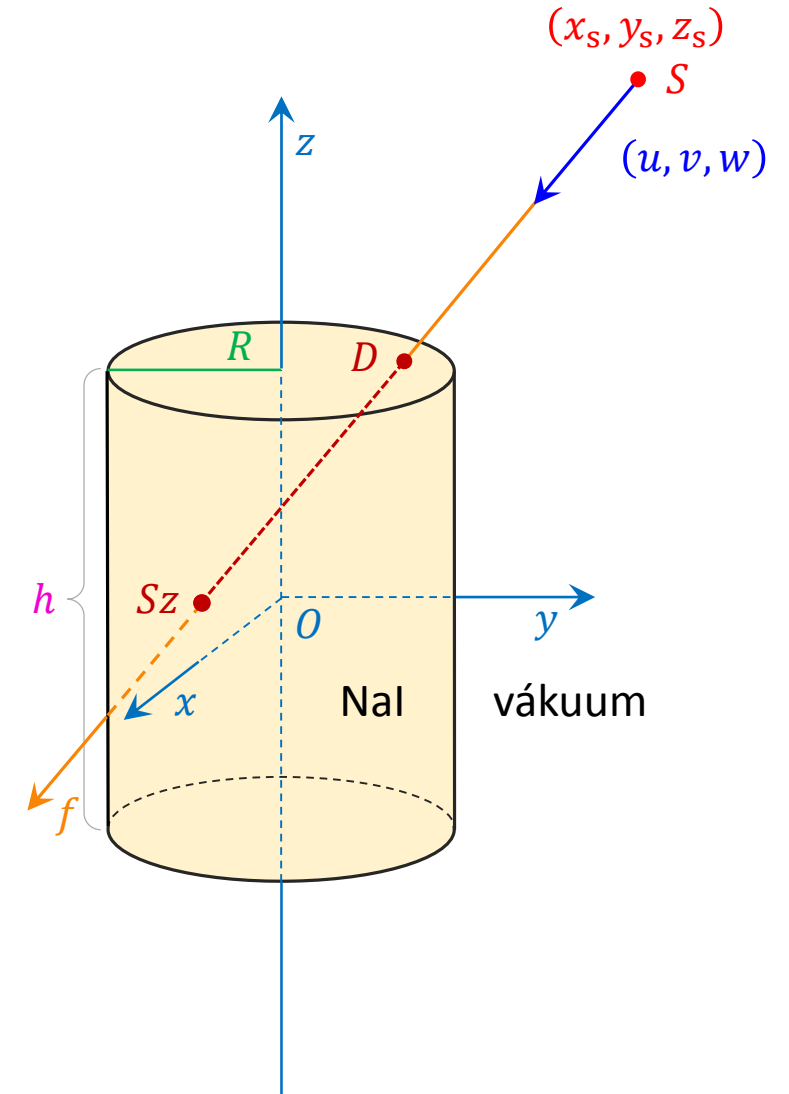
Programozási vizsgafeladat

Feladatkitűzés

2) folytatása:

A töltött részecskék elmozdulásának negligálása következtében nem jelentkezik az úgynevezett „falhatás” sem (amit a detektor széléhez közel keletkezett töltött részecskék kristályból való kiszökése okoz).

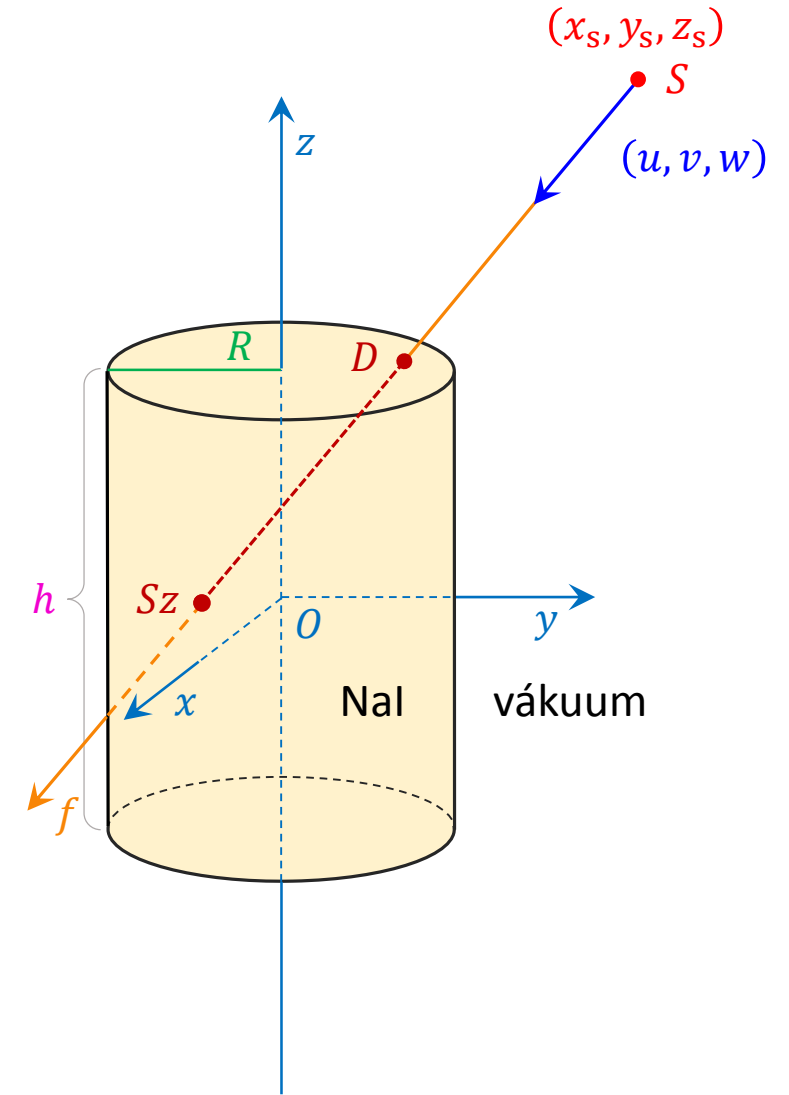
3) Mivel a fotoelektron-sokszorozóban egy-egy elektronlavina kialakulása sokkal hosszabb időt vesz igénybe, mint amekkora időtartam alatt **egy forrásfoton által** közvetlenül vagy közvetve **keltett töltött részecskék** okozta felvillanások bekövetkeznek, ezért úgy vesszük, hogy egy foton töltött „leszármazottai” által keltett fényfelvillanások **ugyanahhoz az elektromos impulzushoz járulnak hozzá**. Más szóval: egy foton töltött „leszármazottainak” kinetikus energiáit össze kell adnunk, mielőtt a sokcsatornás analizátorba bejegyzést tennénk (megemelnénk eggyel az elektromos impulzus nagyságának megfelelő csatorna tartalmát).



Programozási vizsgafeladat

Feladatkitűzés

- 4) Úgy tekintjük, hogy a detektorhoz tartozó fotoelektron-sokszorozó a szcintillációs fényfelvillanásokkal, illetve azok összintenzitásával (ld. a 3)-as pontot) arányos jelet ad. De mivel a valóságban ez az arányosság csak közelítőleg áll fenn, ezért **a detektorlánc véges felbontóképességének szimulálására a 3)-as pont szerint számított (összegzett) energiaértéket a sokcsatornás analízátorba való bejegyzés előtt „megszórjuk” („véletlenítjük”) egy nulla várható értékű, Gauss-eloszlású véletlen energiaértékkel**, amelynek szórását összhangba kell hozni az inputként megadott félérték-szélességgel (ld. a 2. mellékletet).



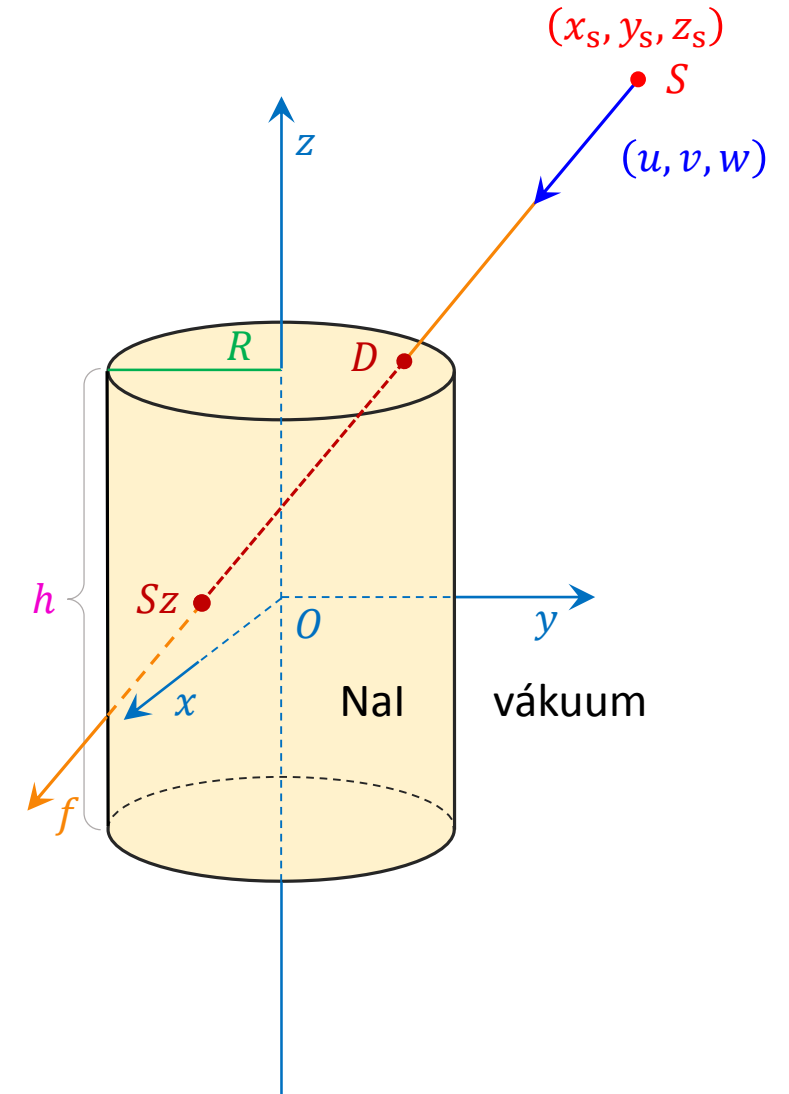
Programozási vizsgafeladat

Feladatkitűzés

A szimulációs programmal megoldandó konkrét számítási feladatok – a kiírástól függően – szemeszterről szemeszterre változhatnak, de alábbi követelmények állandónak tekinthetők:

- A felhasználói inputokat fájlból vagy billentyűzetről, esetleg grafikus felhasználói felületről is meg lehet adni. (Legegyszerűbb és egyben legpraktikusabb az inputfájl használata.)
- A csatornaszám–energia megfeleltetését úgy kell alakítani, hogy a teljesenergia-csúcs még teljes egészében (lecsengésével együtt) látszódjon a spektrum (jobb oldali) végén.
- Jelentősen növeli a program „élvezeti értékét”, ha a spektrum a program futása közben is látható, és időről-időre (1-5 másodpercenként) frissül. Célszerű a spektrumot fix magasságúra normálni. A függőleges skála lineáris/logaritmikus váltását is lehetővé kell tenni.
- A dokumentálhatóság érdekében a spektrumot a számítás végén szöveges fájlba is ki kell írni.

Javaslat: a programban – elsősorban a geometriai számítások miatt – „duplapontos” („8 bájtos”) változókat és műveleteket célszerű használni.



Geometriai számítások

Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a foton célzott irányú indítása a forráspontból

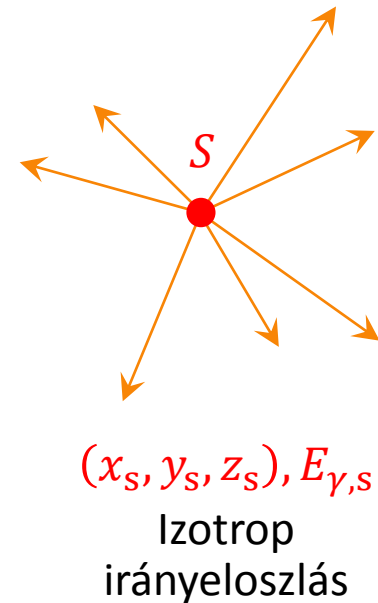
A következő diákon egy olyan szimulációs eljárást ismertetünk, amely a detektortól távolabb eső forráspont esetén a **foton célzott irányú indításával** jelentősen felgyorsíthatja a számítást.

A kitűzött feladat szerint

- a fotonok a forráspontból izotrop irányeloszlással indulnak, és
- a számítandó η_{tot} detektálási határfokhoz meg kell határoznunk a forrásból a 4π térszögbe kisugárzott fotonok teljes (összegzett) energiáját.

Mint látni fogjuk, annak vizsgálata, hogy egy, a forráspontból indult foton eléri-e a detektort (belejut-e a detektorba), jelentős számítási munkát igényel. Ugyanakkor a detektor méretéhez képest távoli forráspont esetében a 4π térszögbe kibocsátott fotonoknak csak igen kis hányada (gyakran mindössze néhány százaléka vagy ezreléke) indul a detektor felé. Így, ha a teljes 4π térszögbe indítjuk a fotonokat, a gépidő nagy része fölösleges geometriai számításokra megy el. Ezért ésszerűnek tűnik a forrásfotonokat két kategóriára osztani:

- 1) az egyikbe azokat sorolni, amelyeknek van esélyük, hogy a detektorba jussnak;
- 2) a másikba pedig azokat, amelyek biztosan nem érhetik el a detektort.

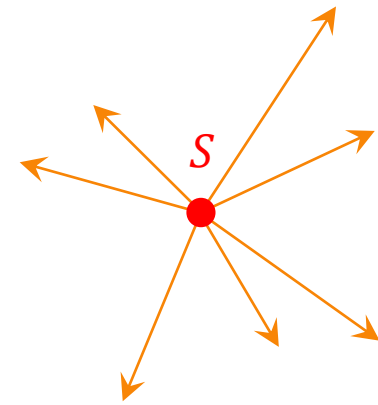


Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a foton célzott irányú indítása a forráspontból

Ha erre a szétválasztásra találunk logikus (célravezető) megoldást, akkor csak az 1) kategóriába tartozó fotonok útját kell követnünk, az esélytelenekkel nem kell foglalkoznunk, nem kell rájuk gépidőt pazarolnunk. Úgy is fogalmazhatunk, hogy egy ilyen megoldással „célirányosan” indítjuk a fotonokat a forráspontból. Arra azonban figyelni kell, hogy a két csoportba tartozó fotonok arányát könnyen ki lehessen számítani. Ez gyakorlatilag azt jelenti, hogy a két kategória megkülönböztetésére olyan kritériumot kell választani, amelynél az egyik és a másik csoport fotonjainak kibocsátási térszögét könnyűszerrel meg lehet határozni.

Egy ilyen eljárást mutatunk be a következő diákon, amelyet a továbbiakban *kúpra szűkített izotrop irányosorsolásnak* vagy *célzott irányú fotonindításnak* nevezünk.



$(x_s, y_s, z_s), E_{\gamma,s}$

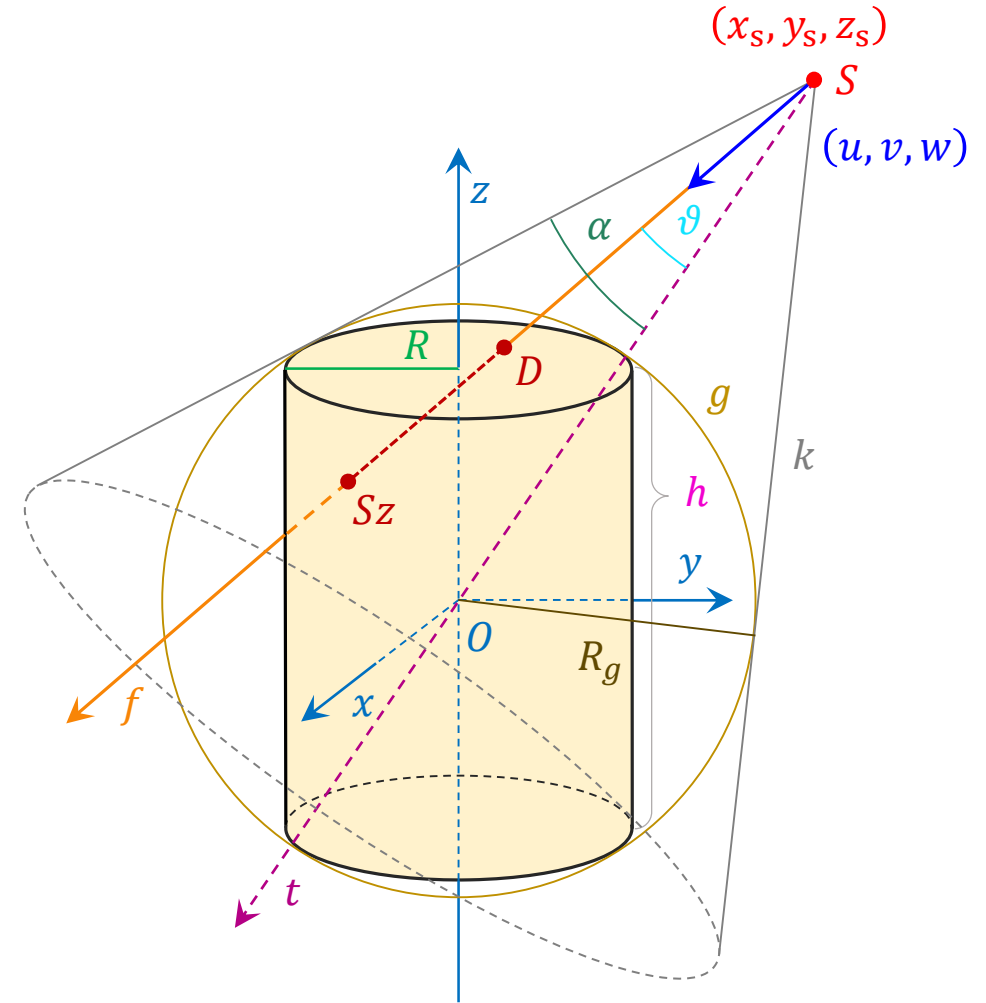
Izotrop
irányeloszlás

Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a foton célzott irányú indítása a forráspontból

A módszer lényege az, hogy csak azokat a fotonokat indítjuk el az S forráspontból, amelyek iránya belül esik az S csúcsú, a detektor-hengert peremén érintő gömböt érintő kúpon. A jobb oldali ábrán a hengert peremén érintő gömböt g -vel jelöltük, ezt érinti az S csúcsú, t tengelyű, α félnyílásszögű k kúp.

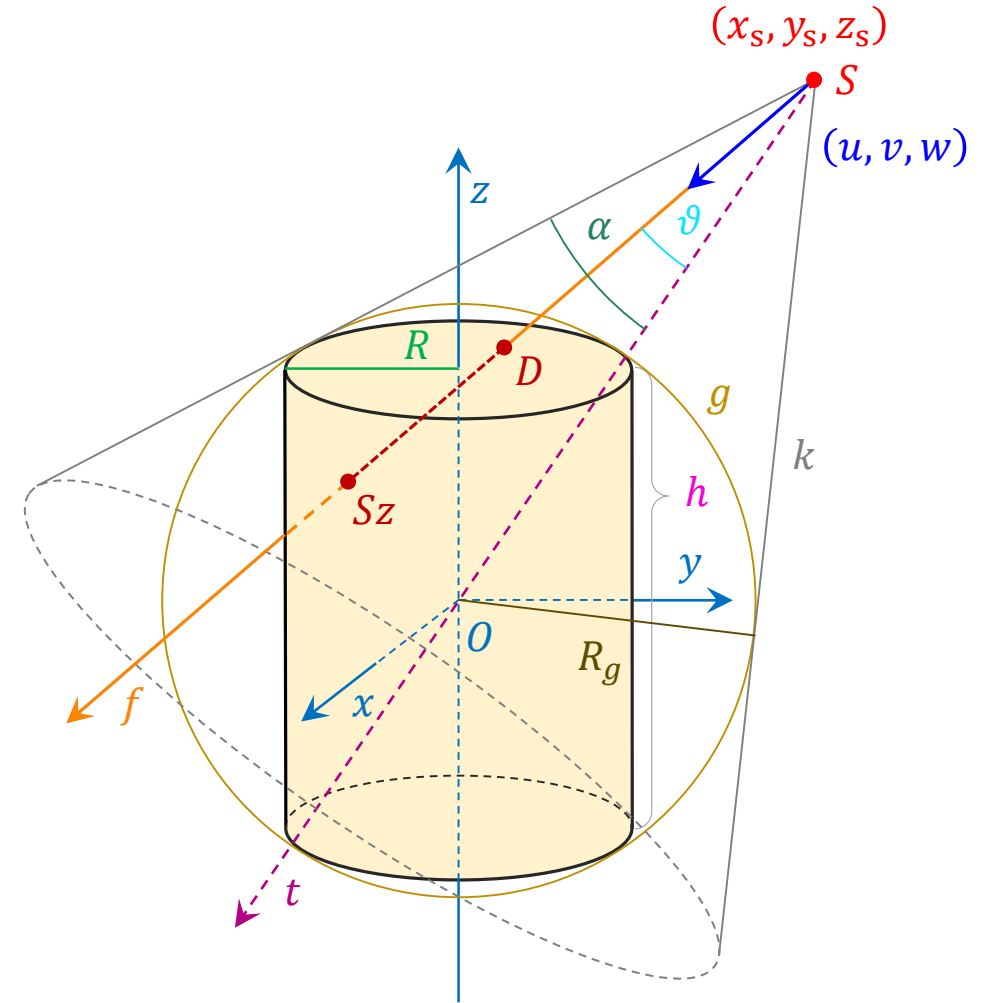
Nyilvánvaló, hogy azok a forrásfotonok, amelyeknek repülési iránya kívül esik ezen a kúpon, nem juthatnak be a detektorba. De természetesen a kúpon belül induló fotonok egy része is elkerüli a detektort. Emiatt fel szokott merülni a kérdés, hogy nem lehet-e valahogyan még tovább szűkíteni a szimulációhoz „célirányosan” kibocsátandó fotonok térszögét. A válasz az, hogy bizonyára lehet, csak nem éri meg. Ugyanis a forgásszimmetrikus kúpon belül igen egyszerű az izotrop irányorsolás, és ehhez képest mindenféle térszög-szűkítés kezelése jelentős többletidőigénnyel járhat.



Geometriai számítások – a foton célzott irányú indítása a forráspontból

A kúpra szűkített irányyorsolás azért is előnyös az egyéb „célirányos” megoldásokhoz képest, mert a kúp térszögét könnyen ki tudjuk számítani. Arkhimédész tétele értelmében ugyanis az α félnyílásszögű kúp térszöge $(1 - \cos \alpha) \cdot 2\pi$ szteradián (ld. az izotrop térbeli irány sorsolásával kapcsolatos diasort). Ha tehát csak a kúpon belül „lövöldözünk” fotonokat, akkor a 4π térszögbe elinduló fotonok $\mu = (1 - \cos \alpha)/2$ hányadát kell számítással követnünk. A szimulációs programunk ebből adódó hatékonyságnövekedése kis α -nál igen jelentős lehet. Ha távoli a forráspont vagy kisméretű a detektor, a program akár százszorosára is gyorsulhat a célzott fotonindításra való áttéréssel.

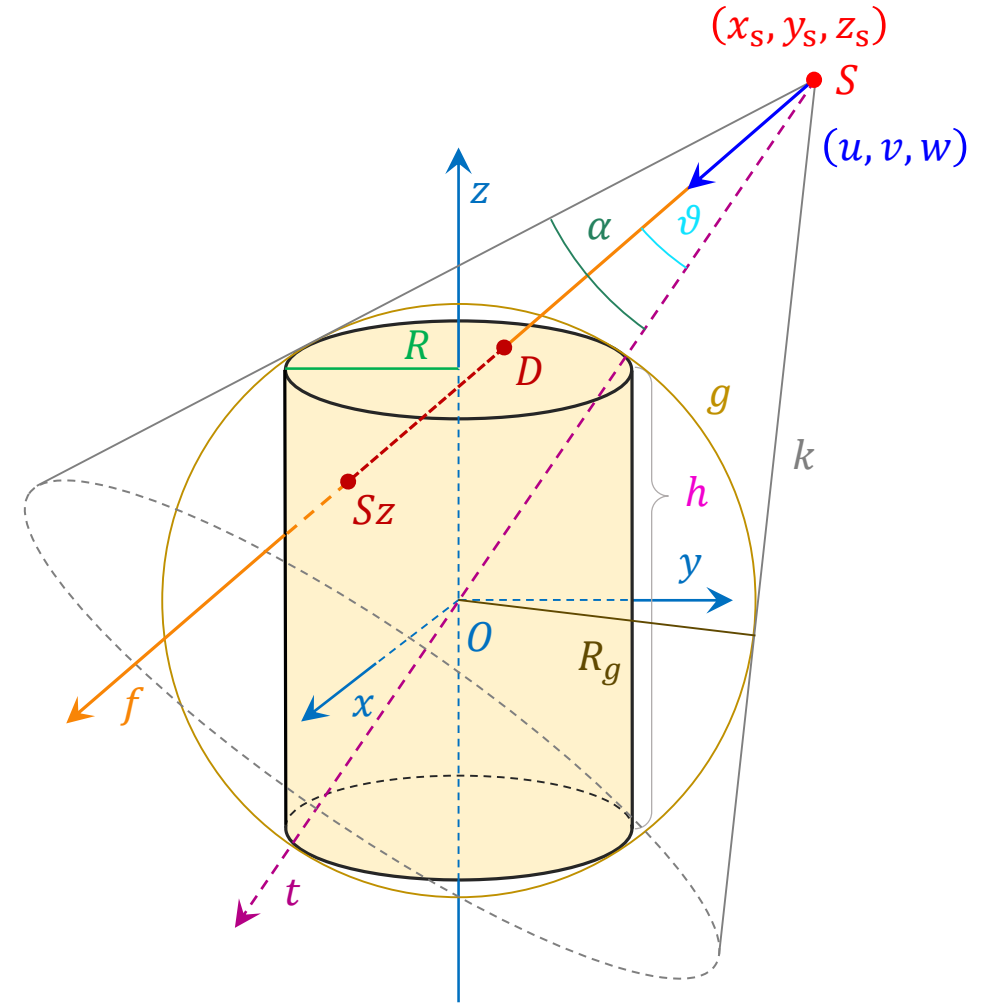
A μ értékét azért fontos tudnunk, mert ha csak a kúpon belüli fotonokat indítjuk el, akkor az ezekkel adódó η_{con} detektálási hatásfokot (definícióját ld. a következő dián) végül meg kell szoroznunk μ -vel, hogy a feladatkitűzés szerinti η_{tot} -ot megkapjuk.



Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a foton célzott irányú indítása a forráspontból

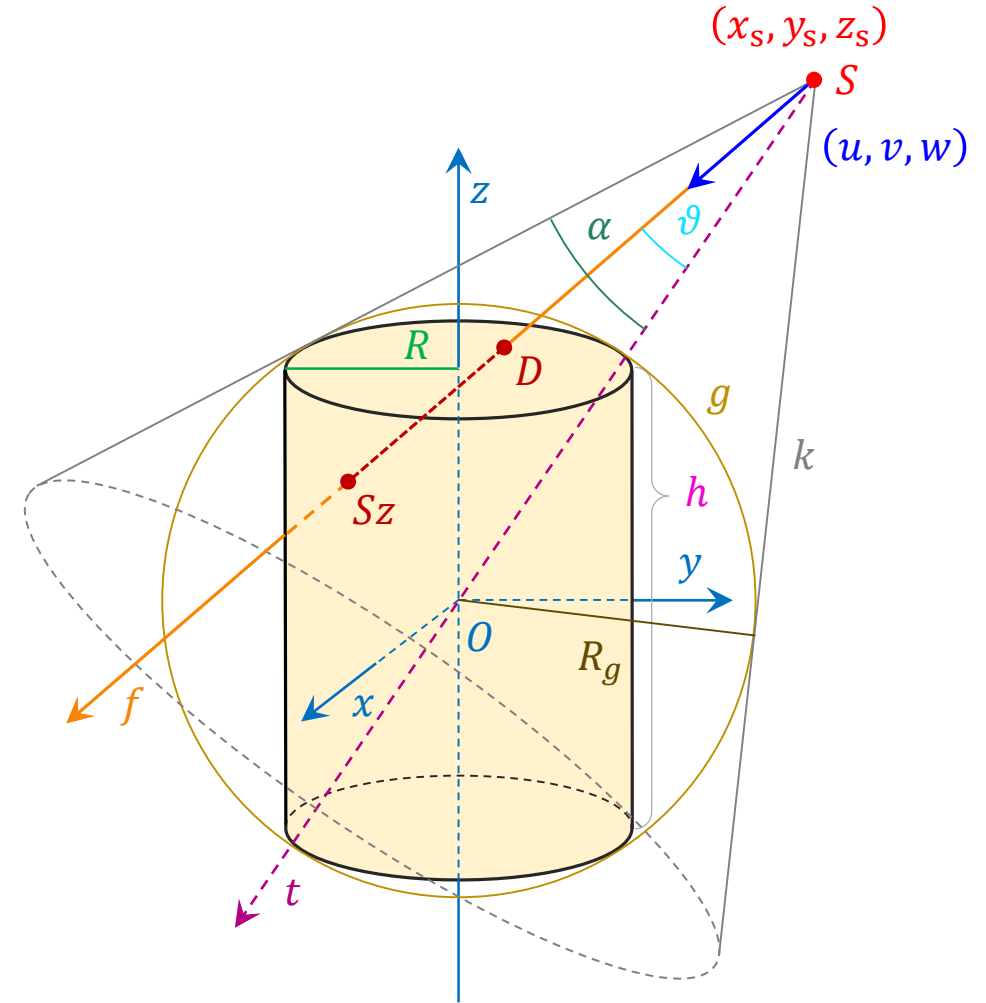
Figyelem! A kúpon belül indított fotonok η_{con} detektálási hatásfoka nem azonos a feladatkitűzés szerinti η_{int} hatásfokkal! Az $\eta_{\text{con}} = E_{\text{det}}/E_{\text{con}}$, ahol E_{con} a kúpba kibocsátott fotonok összenergiája (E_{det} definícióját ld. a feladatkitűzéssel foglalkozó 5. dián). A két hatásfok között a kúp térszöge (Ω_{con}) és a detektorhenger forráspontból mért térszöge (Ω_{det}) teremt kapcsolatot: $\eta_{\text{con}}/\eta_{\text{int}} = \Omega_{\text{det}}/\Omega_{\text{con}}$.



Geometriai számítások – a foton célzott irányú indítása a forráspontból

Előfordulhat, hogy az S forráspont olyan közel esik a detektorhoz, hogy belül van a detektort a peremén érintő g gömbön. Ilyenkor a most ismertetet **célzott irányú fotonindítási módszer** sajnos **nem alkalmazható**. Gömbön belüli forráspont esetében természetesen bármelyik 3-dimenziós izotrop iránytorsolási eljárás bevezethető, de meg lehet próbálkozni kifinomultabb technika kidolgozásával is.

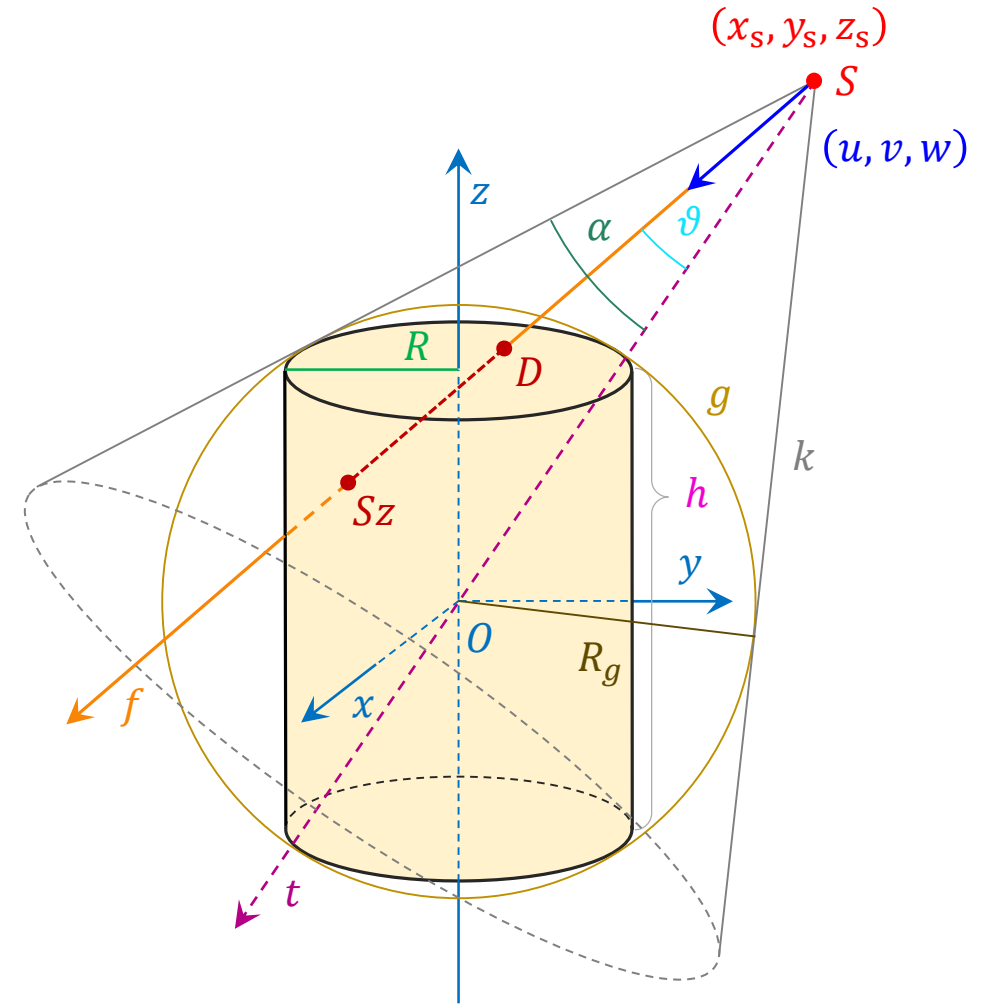
Ilyen megoldás lehet például az, hogy a 4π térszög helyett csak egy – a forráspont pozíciójának megfelelően választott – féltérbe sorsolunk irányt, és ezzel átlagosan a felére csökkentjük a repülési félegyenes hengerrel való találkozásának vizsgálatára fordítandó számítási időt. Féltő azonban, hogy a szofisztikáltabb módszer számítási időigénye összességében meghaladja a 4π térszögbe történő egyszerű irány-sorsolással operáló eljárását.



Geometriai számítások – a foton célzott irányú indítása a forráspontból

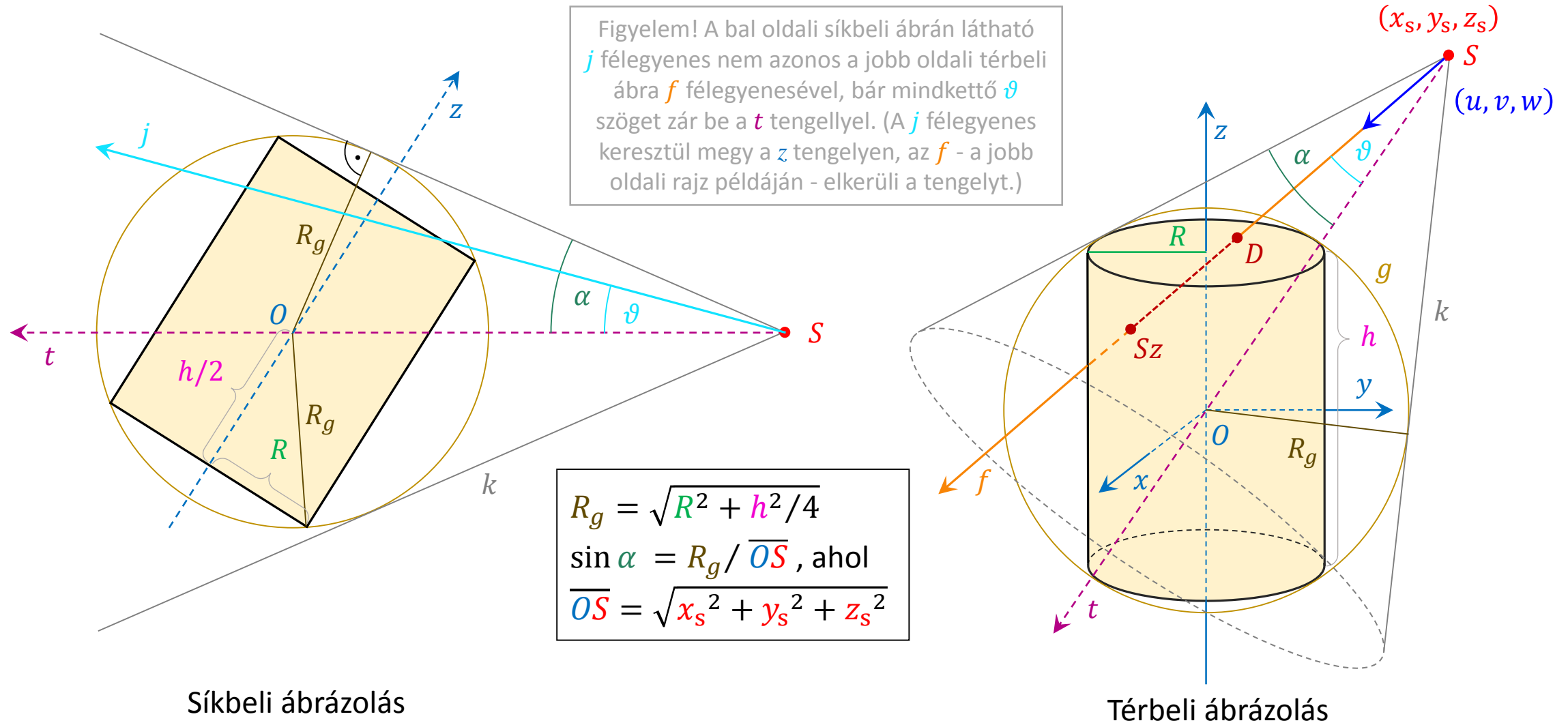
A „célirányos” fotonindítási módszer másik előnye az, hogy egy kúpon belül könnyen tudunk izotrop eloszlású irányokat sorsolni a 3-dimenziós irányorsorolási eljárásoknál megismert úgynevezett „szeletelő” módszer segítségével (amelynél az egységsugarú gömbből ekvidisztáns síkokkal vágunk ki infinitezimálisan vékony gömböveket). Ugyanis, ha nem a teljes 4π térszögbe, hanem csak egy 2α nyílásszögű kúpba szeretnénk izotrop irányokat sorsolni, akkor mindössze annyit kell tennünk, hogy nem az egész gömböt, hanem csak azt a gömbsüveget „szeleteljük” a tengelyére merőleges, egyenletes eloszlású véletlen síkokkal, amelyet a kúp vág ki a gömbből, amikor a kúp csúcsát a gömb középpontjába helyezzük. Mivel a kúp térszög-tartománya része a teljes 4π térszögnek, amelyre a „szeletelő” módszer „kiválóan működik”, ezért a kúpon belül is izotrop véletlen irányokat kapunk.

A következő dián megmutatjuk, hogyan lehet meghatározni a k kúp nyílásszögét a forráspont koordinátái és a detektor geometriai méretei alapján.



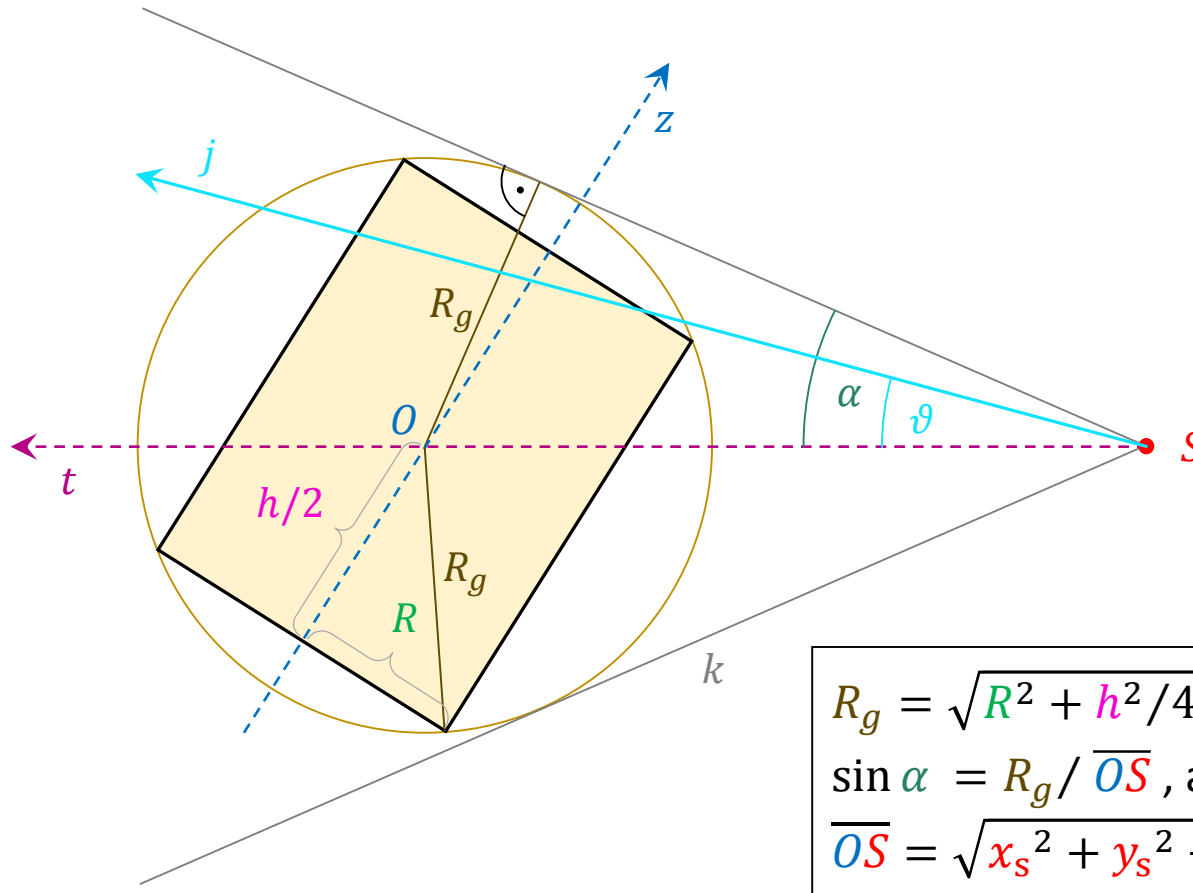
Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a foton célzott irányú indítása a forráspontból



Geometriai számítások – a foton célzott irányú indítása a forráspontból

Ha már ismerjük a kúp nyílásszögét (pontosabban a félnyílásszög (α) szinuszát), akkor a 3-dimenziós izotrop iránytorsolás „szeletelő” módszerét a teljes gömb helyett a 2α nyílásszögű kúp térszögébe eső gömbsüvegre alkalmazva tudunk izotrop irányt sorsolni. Ennek megmutatásához egyszerűsítsük a bal oldali ábrát!

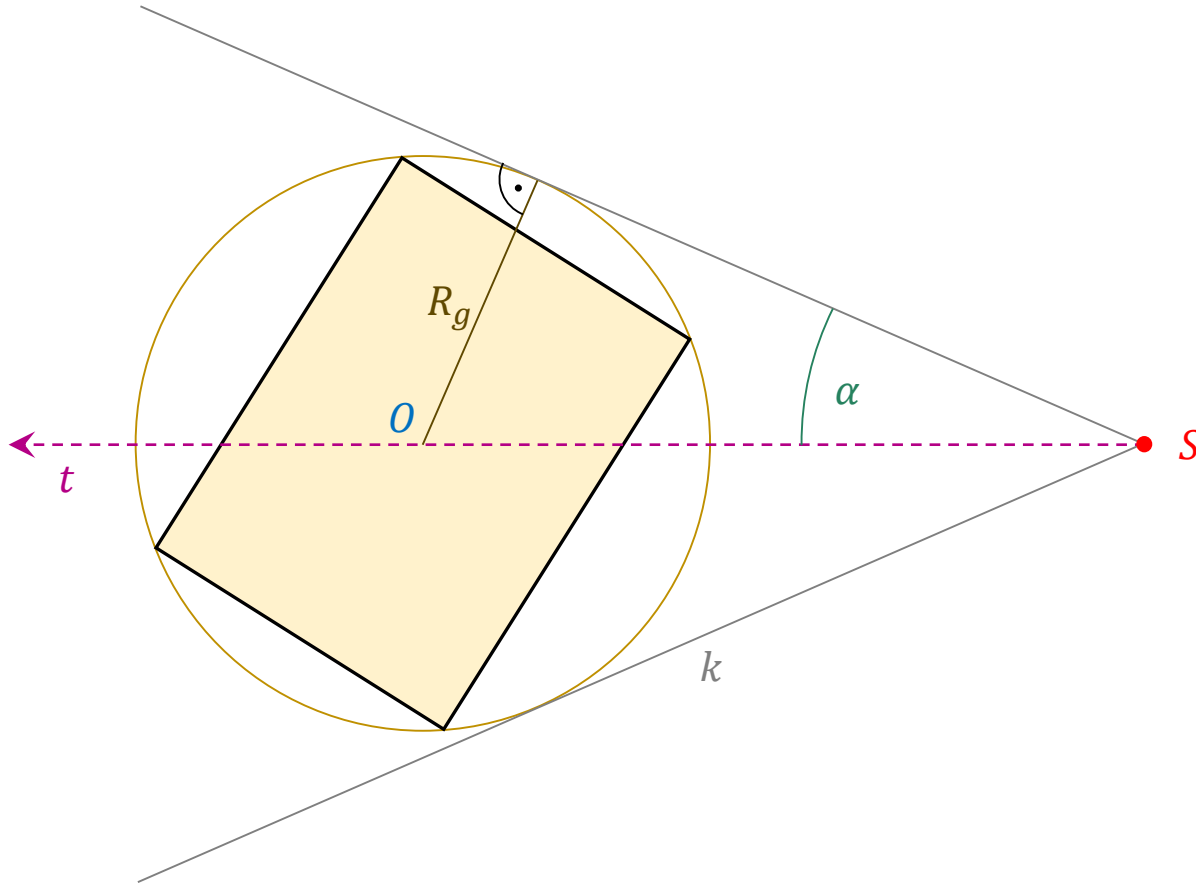


$$\begin{aligned} R_g &= \sqrt{R^2 + h^2/4} \\ \sin \alpha &= R_g / OS, \text{ ahol} \\ OS &= \sqrt{x_s^2 + y_s^2 + z_s^2} \end{aligned}$$

Programozási vizsgafeladat

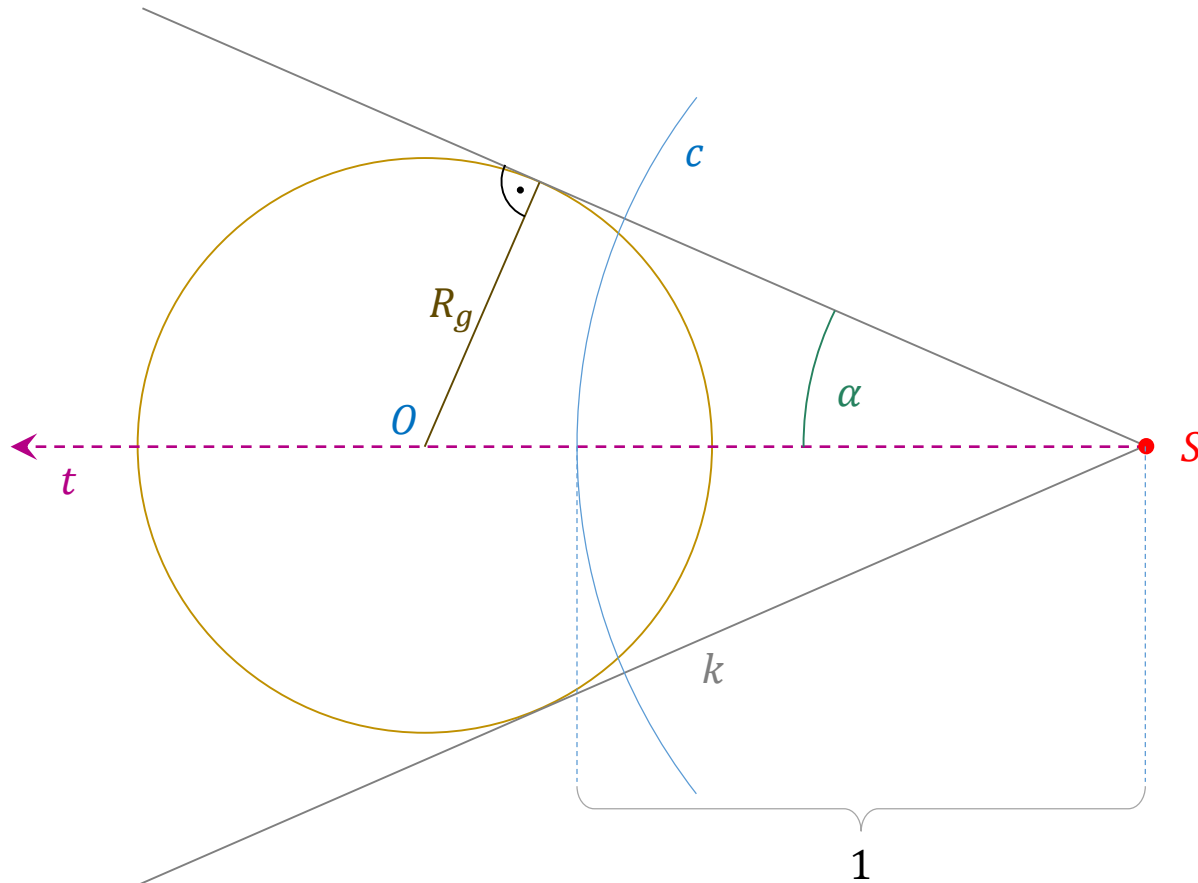
Geometriai számítások – a foton célzott irányú indítása a forráspontból

Egyszerűsítsük még tovább az ábrát!



Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a foton célzott irányú indítása a forráspontból

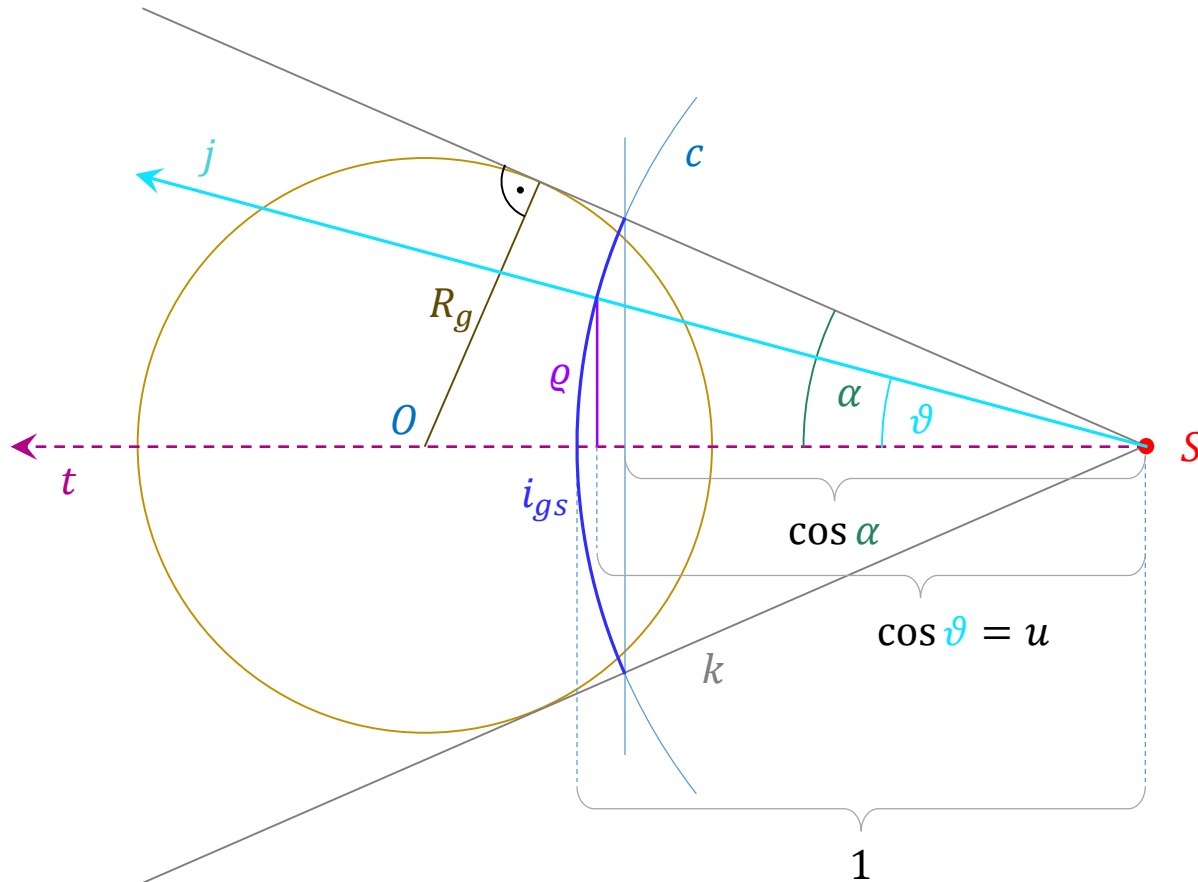


Az egyszerűsítés után ebbe az ábrába bele-
rajzoltuk az S középpontú, egységsugarú
gömbnek megfelelő c kör egy ívdarabját.

Az „egységsugarú” kapcsán megjegyezzük, hogy
ennél az ábrázolásnál az \overline{OS} távolság tényleges
értékét figyelmen kívül hagyhatjuk (nem kell
összemérnünk az egységnyi hosszal), mert az \overline{OS}
értéke nem befolyásolja a már meghatározott
nyílásszögű kúpon belüli iránytorsolás módszerét
(ld. a következő diákon).

Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a foton célzott irányú indítása a forráspontból



Az izotrop irányyorsorláshoz a bal oldali ábrán látható S középpontú, egységsugarú gömb k kúpon belüli gömbsüvegét (amelyet itt az i_{gs} körív jelöl) „szeleteljük” a t tengelyre merőleges, egyenletes eloszlású véletlen síkokkal. Az így adódó eseti gömbövhöz húzható iránynak a t tengelyhez mért ϑ szögét (annak koszinuszát) a $\sin \alpha$ ismeretében az alábbi algoritmussal határozhatjuk meg:

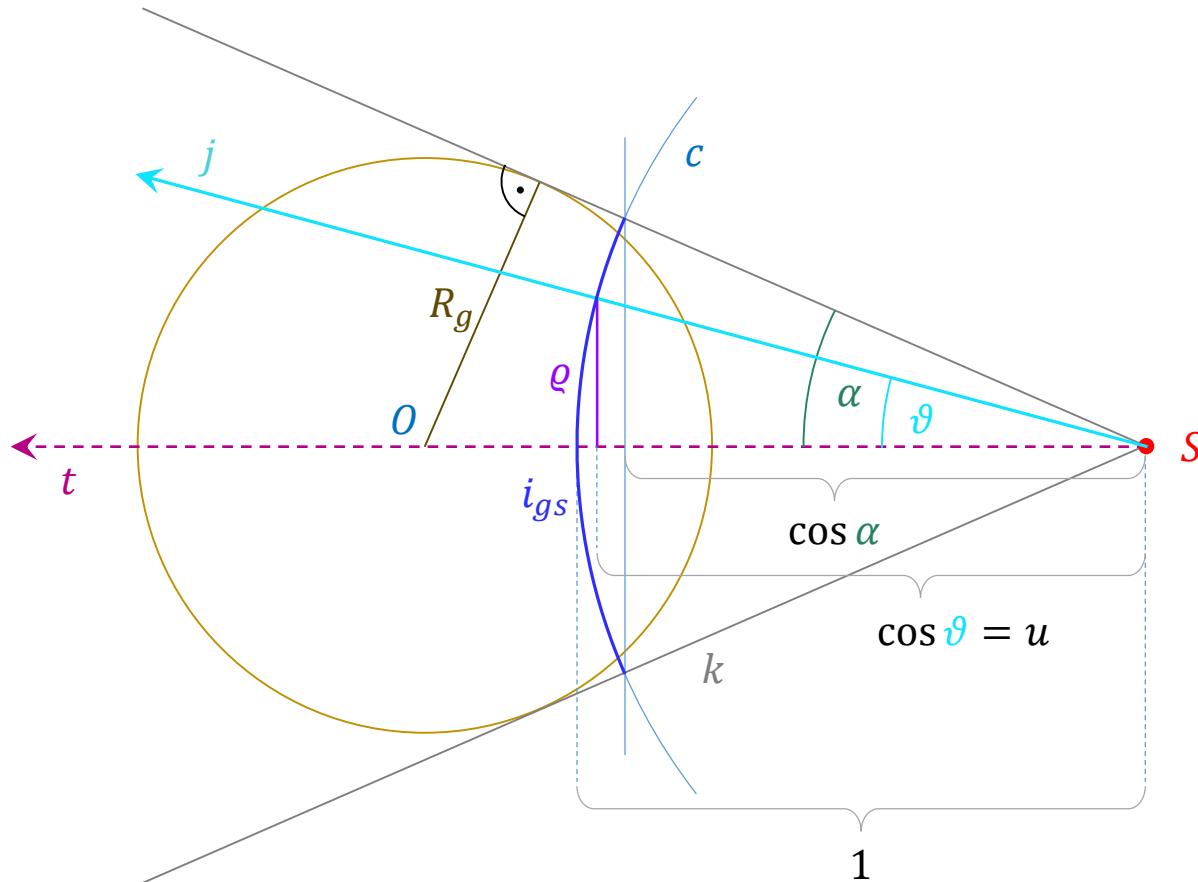
$$\cos \alpha = \sqrt{1 - \sin^2 \alpha}$$

$$u = \cos \alpha + (1 - \cos \alpha) \cdot r$$

$$\cos \vartheta = u,$$

ahol r egy kanonikus véletlenszám.

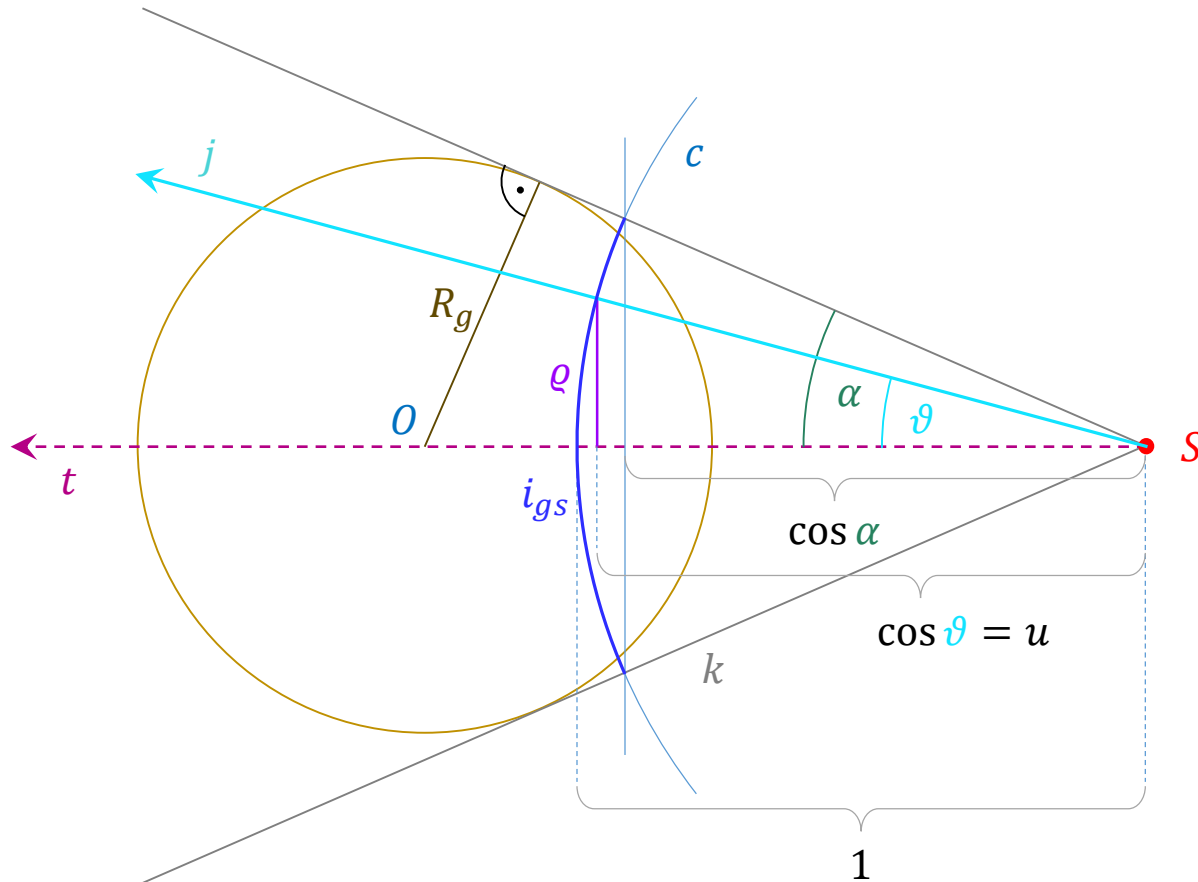
Geometriai számítások – a foton célzott irányú indítása a forráspontból



Ezzel az eljárással a \hat{j} véletlen iránynak a kúp tengelyéhez mért szögét (pontosabban annak koszinuszát) állítottuk elő. Ahhoz, hogy ebből egy 3-dimenziós irányvektorhoz jussunk, ki kellene sorsolni egy 0 és 2π közé eső egyenletes eloszlású azimutális szöget is a \hat{t} tengely körül (hasonlóan a 3-dimenziós izotrop irány sorsolásánál követett eljáráshoz), azután pedig megfelelő koordináta-transzformációval „be kellene forgatni a vektort a helyére” (azaz ki kellene számítani a vektor komponenseit az x - y - z koordináta-rendszerben).

Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a foton célzott irányú indítása a forráspontból



Mindezt a számítást azonban megtakaríthatjuk, ha a ϑ -t úgy tekintjük, mint egy „szóródás” eltérülési szögét, és a szóródás utáni 3-dimenziós véletlen irány meghatározására szolgáló (SZUVIR elnevezésű) algoritmust használjuk úgy, hogy a forráspontból az origóba mutató vektort vesszük eredeti (szóródás előtti) iránynak. (A szóródás utáni irány sorsolására szolgáló SZUVIR-eljárás leírását ld. a 49-57. diákon!)

Ez a megközelítés még azzal az előnnyel is jár, hogy magát a ϑ -t valójában nem is kell kiszámítanunk, mert a szóban forgó algoritmus a $\cos \vartheta$ -t igényli, az meg már rendelkezésünkre áll.

Programozási vizsgafeladat

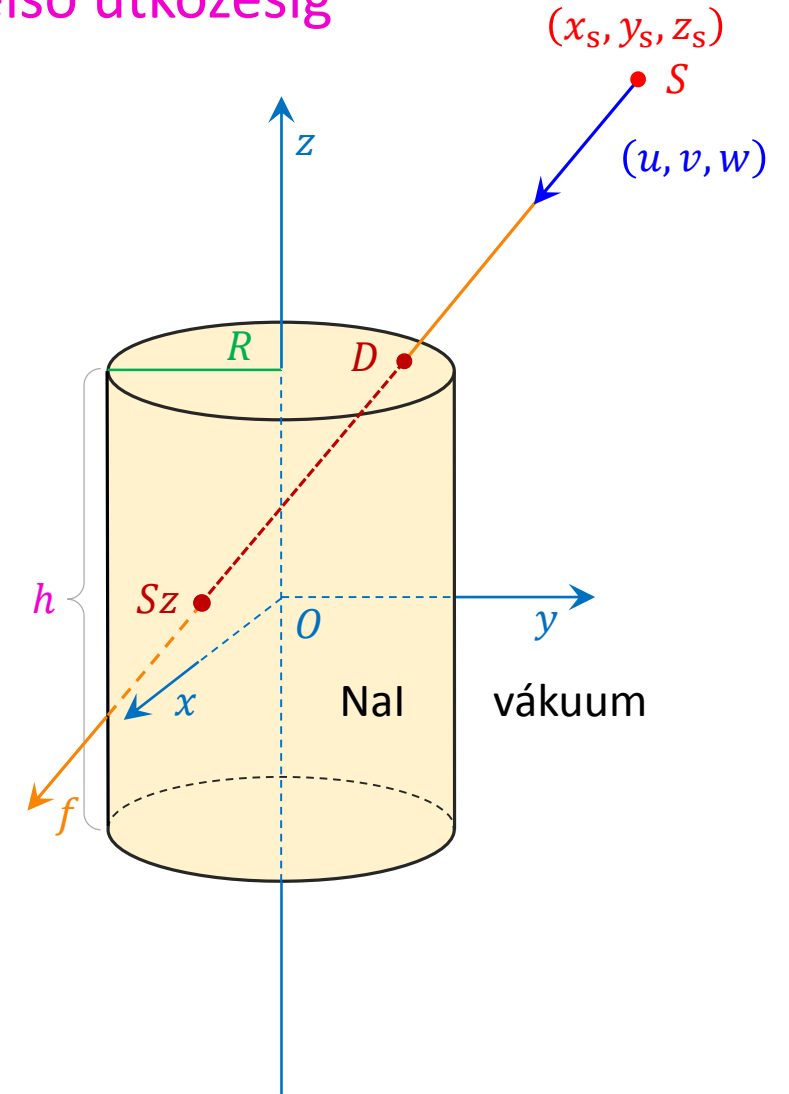
Geometriai számítások – a forrásponttól az első ütközésig

A következő diákon azokat a számítási módszereket tekintjük át, amelyekkel a fotonnak **a forrásponttól** a detektorban való **első** (potenciális*) **ütközésig** tartó életútját követhetjük.

A kitűzött szimulációs feladat megoldásához **a forráspontból induló minden egyes foton esetében először azt kell megvizsgálni, hogy az adott foton belejut-e a detektorba**. Ezt a kérdést tisztán geometriai (koordináta-geometriai) számítás segítségével meg tudjuk válaszolni. **Ehhez a számításhoz célszerű hozzákapcsolni annak az eldöntését (kisorsolását) is, hogy ha a foton belejutott a detektorba, akkor reakcióba lép-e a detektor anyagával** (bekövetkezik-e legalább egy ütközés), vagy a foton energialeadás nélkül keresztül repül a detektoron.

A fenti két kérdés természetesen sokféle számítási stratégia és módszer alkalmazásával megválaszolható. A következő diákon egy viszonylag egyszerű, hatékony eljárást ismertetünk, amelyet logikailag 5 lépésre oszthatunk.

* Értsd: esetleges, lehetséges.



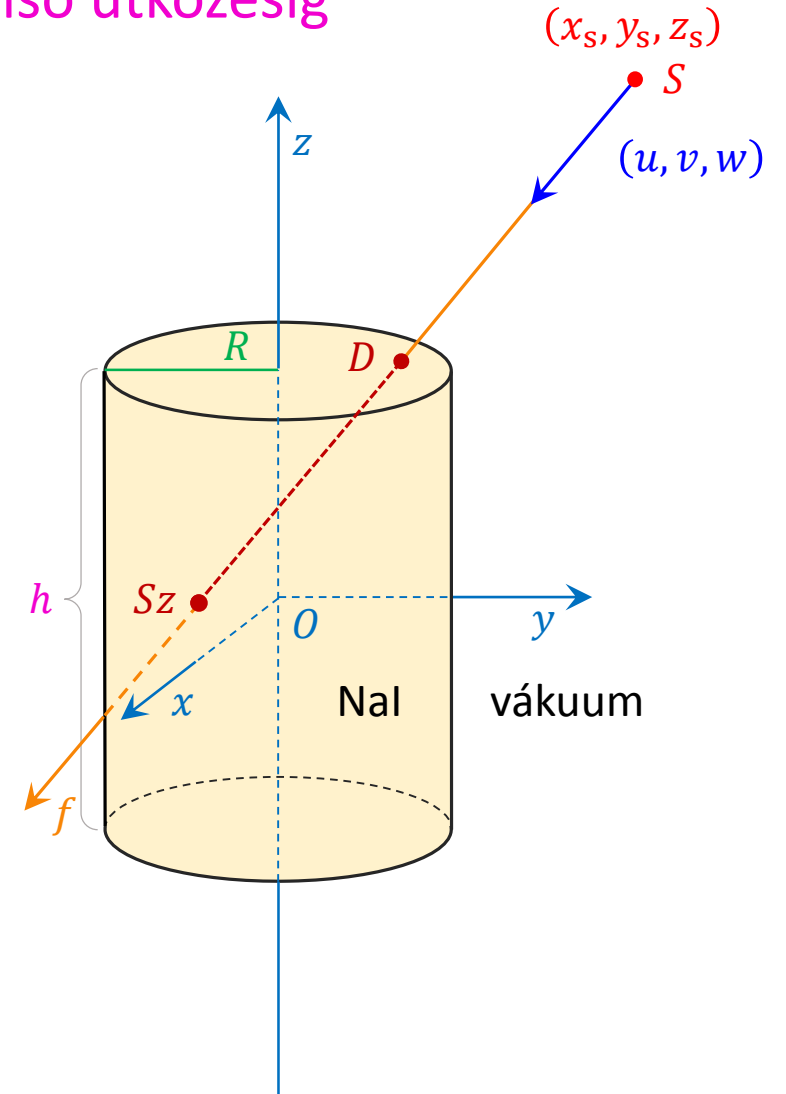
Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a forrásponttól az első ütközésig

A forrásponttól az első (potenciális) ütközésig tartó szimulációs lépések tartalmát röviden az alábbiak szerint foglalhatjuk össze:

- 1) A forráspontból induló foton (célzott, azaz a detektorhengert peremein érintő gömböt érintő kúpon belüli izotrop eloszlású véletlen) repülési irányának kisorsolása.
- 2) Annak vizsgálata, hogy a repülési félegyenes „beleszúr-e” abba a *végtelen hengerbe*, amelyet a (véges) detektorhenger z -tengely menti kiterjesztésével kapunk.
- 3) Ha a félegyenes átmegy a végtelen hengeren, akkor annak vizsgálata, hogy „beleszúr-e” a véges hengerbe is (azaz belejut-e a foton a detektorba).
- 4) Ha a foton „belejut a detektorba, akkor a döféspont és a szökéspont távolságának (azaz a foton által a kristályban ütközés nélküli esetben megtehető útszakasz hosszának) kiszámítása.
- 5) A foton forrásenergiájának megfelelő szabad úthossz sorsolása, majd összehasonlítása a 4)-ben meghatározott távolsággal annak eldöntése céljából, hogy reakcióba lép-e a foton a detektor anyagával.

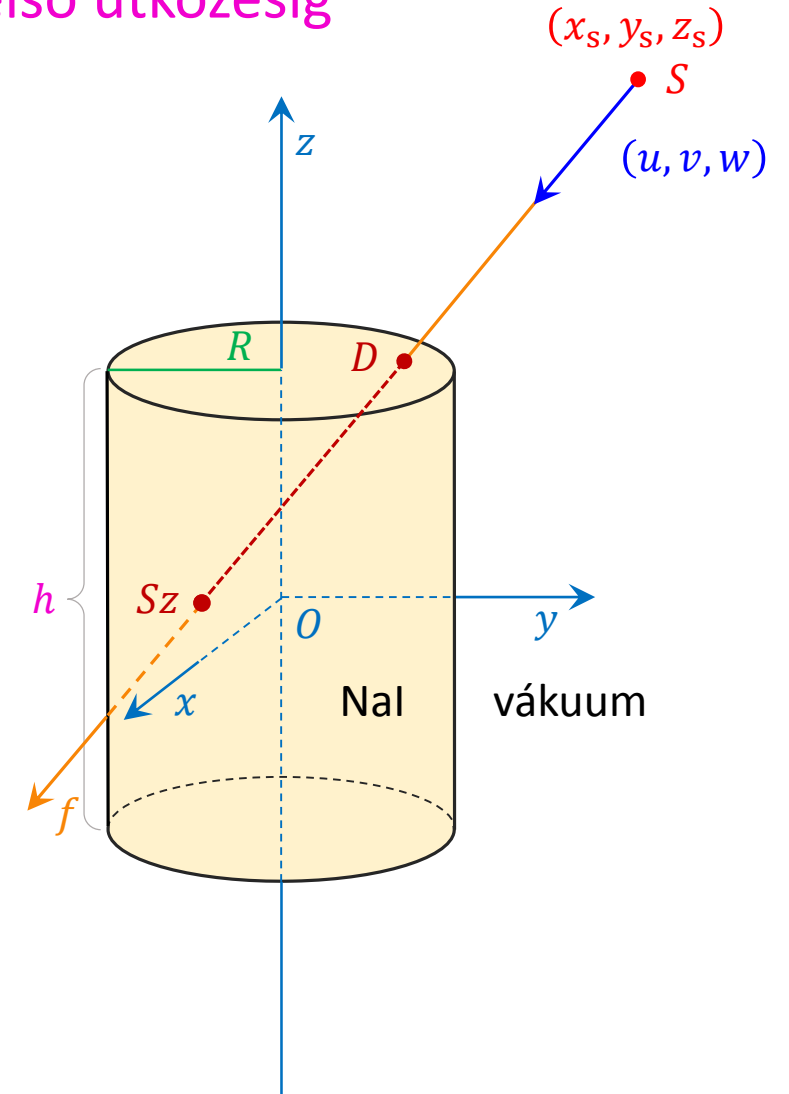
A következő diákon az egyes lépéseket részletezzük.



Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a forrásponttól az első ütközésig

- 1) Az első lépés az S forráspontból induló foton repülési irányának $((u, v, w))$ kisorsolása (izotrop irányeloszlású forrás feltételezésével). Ha a forráspont kívül esik a detektort peremein érintő gömbön, akkor az előzőekben (a geometriai számítások első részében) megismert célzott irányú fotonindítási technikát ajánlatos használni. Ha a forráspont belül van a gömbön, akkor a 20. dián vázoltak szerint lehet eljárni.

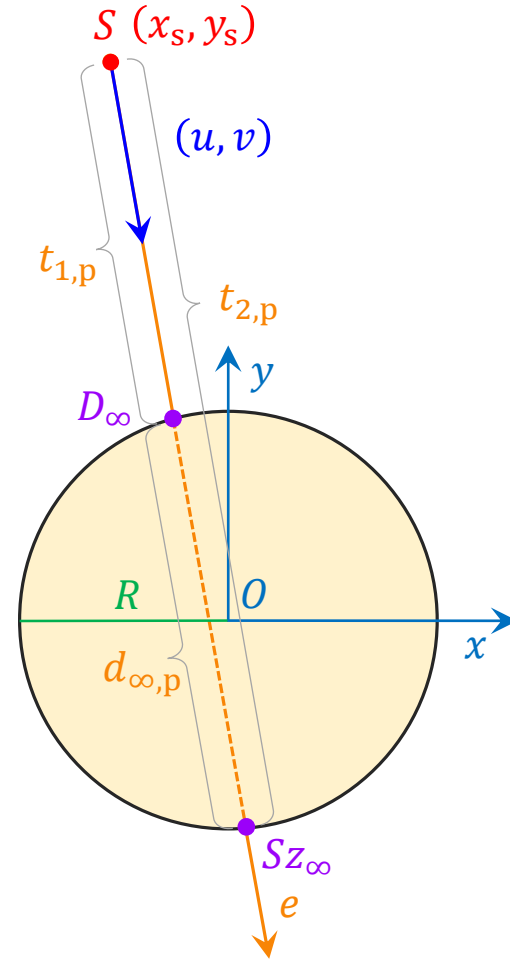


Programozási vizsgafeladat

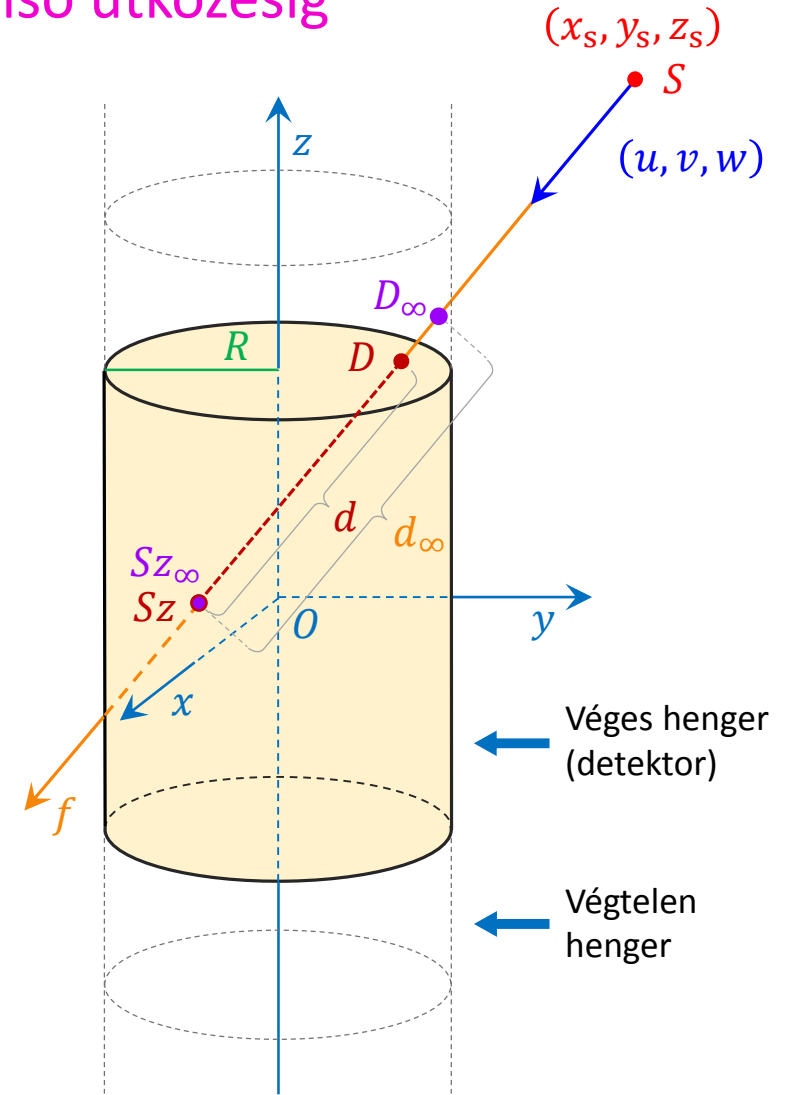
Geometriai számítások – a forrásponttól az első ütközésig

- 2) Ezután azt kell megvizsgálni, hogy az f repülési félegyenes „beleszúr-e” abba a *végtelen hengerbe*, amelyet a (véges) detektorhenger z -tengely menti kiterjesztésével kapunk. Ezt úgy tudjuk könnyen eldönteni, hogy ha repülési félegyenest és a (végtelen) hengert függőlegesen levetítjük az x - y síkra, és megnézzük, hogy az így keletkező síkbeli félegyenes (e) belemetsz-e a henger vetületébe, azaz az origó középpontú, R sugarú körbe (ld. a középső és a jobb oldali ábrát).

Megjegyzés: a síkbeli ábrázoláson a $t_{1,p}$, $t_{2,p}$ és $d_{\infty,p}$ távolságokban szereplő p index a síkra (plane) utal.



Síkbeli ábrázolás



Térbeli ábrázolás

Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a forrásponttól az első ütközésig

2) folytatása:

Azt, hogy a síkbeli félegyenes belemetsz-e a körbe, szintén koordináta-geometriai úton tudjuk kideríteni, az alábbi egyenletrendszer megoldásával:

$$x = x_s + u \cdot t, \quad (1)$$

$$y = y_s + v \cdot t, \quad (2)$$

$$x^2 + y^2 = R^2, \quad (3)$$

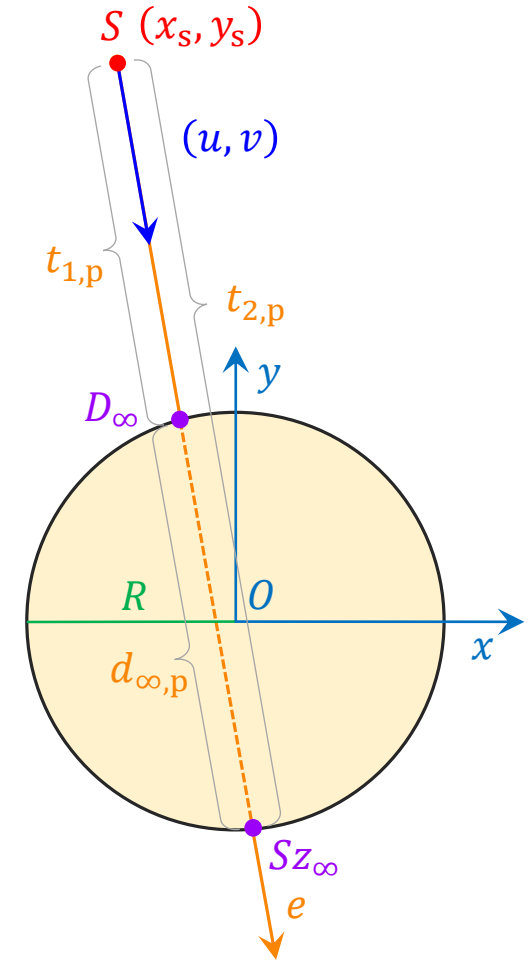
ahol (1) és (2) az egyenes ún. paraméteres egyenlet(rendszer)e, (3) pedig az origó középpontú, R sugarú kör egyenlete. Az (1) és (2) jobb oldalát a (3)-ba helyettesítve, a t paraméterre, mint távolságra, egy másodfokú egyenletet kapunk:

$$(u^2 + v^2)t^2 + (2x_s u + 2y_s v)t + (x_s^2 + y_s^2 - R^2) = 0, \quad (4)$$

amelynek megoldása:

$$t_{2,1} = \frac{-2(x_s u + y_s v) \pm \sqrt{4(x_s u + y_s v)^2 - 4(u^2 + v^2)(x_s^2 + y_s^2 - R^2)}}{2(u^2 + v^2)}. \quad (5)$$

Figyelem! Ha mindkét megoldás létezik, akkor az itteni – a szokásoshoz képest fordított – indexelés miatt a t_2 lesz a nagyobb (azaz $t_2 > t_1$).



Síkbeli ábrázolás

Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a forrásponttól az első ütközésig

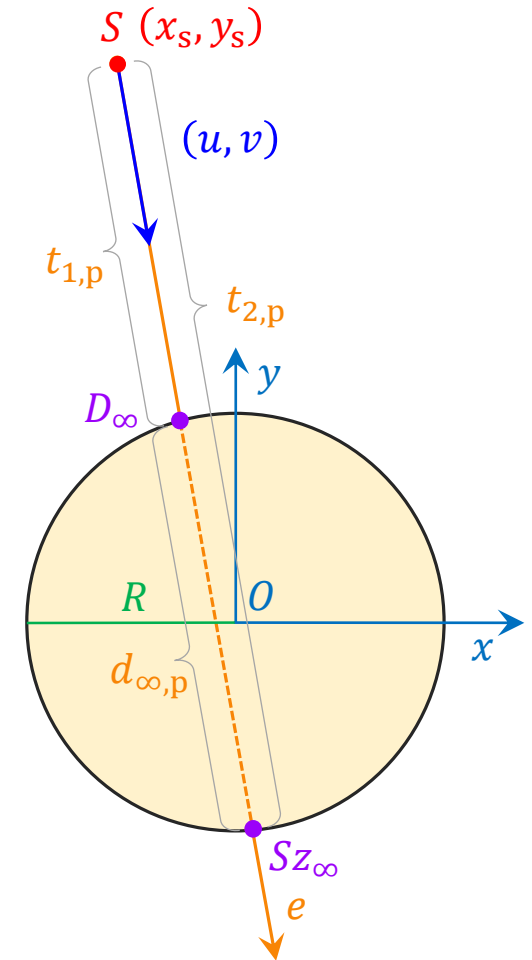
2) folytatása:

Arról, hogy a (4) egyenletnek van-e (valós) megoldása, és ha igen, akkor egy vagy kettő, továbbá az adódó (vagy éppen nem létező) megoldások mit jelentenek, a

$$d = 4(x_s u + y_s v)^2 - 4(u^2 + v^2)(x_s^2 + y_s^2 - R^2) \quad (6)$$

diszkrimináns vizsgálatával tájékozódhatunk az alábbiak szerint. Ha

- a) $d < 0 \rightarrow$ a félegyenes elkerüli a kört (végtelen henger);
- b) $d = 0 \rightarrow$ a félegyenes érinti a kört (végtelen henger);
- c) $d > 0$ és $t_1, t_2 > 0 \rightarrow$ **a félegyenes belemetsz a körbe (végtelen hengerbe), ilyenkor: $t_2 - t_1 = d_\infty$;**
- d) $d > 0$ és $t_1, t_2 < 0 \rightarrow$ a félegyenes elkerüli a kört (végtelen henger) (a félegyenes „másik fele” („tükörképe”, „negatív párja”) metsz bele a körbe);
- e) $d > 0$ és $t_1 < 0$ és $t_2 > 0 \rightarrow$ az **S** pont a körön (végtelen hengeren) belül helyezkedik el. Mivel a feladatkitűzés szerint a forráspont nem lehet a detektorban, ez az eset azt jelenti, hogy a forráspont a detektor alatt vagy fölött található (a végtelen hengerben).



Síkbeli ábrázolás

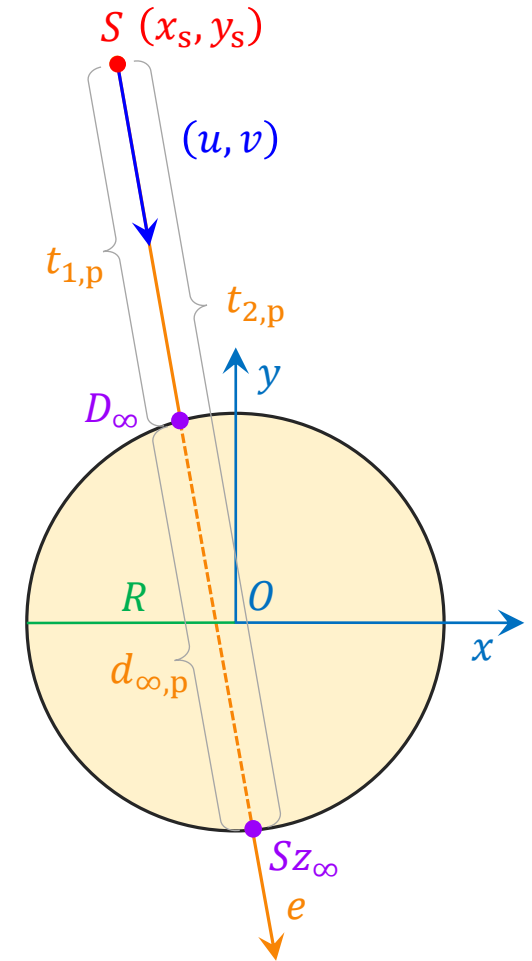
Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a forrásponttól az első ütközésig

2) folytatása:

A c) esetben, amikor az egyenletnek mindkét gyöke pozitív, a kisebb gyök (t_1) a forrásponttól a dőféspontig, a nagyobb (t_2) pedig a forrásponttól a szökéspontig való távolságot adja meg. Arra a kérdésre, hogy ez a síkbeli, vagy a térbeli távolság, egyszerű a válasz: ha az (1)-(2) egyenleteknél a térbeli irányvektor (u, v, w) első két komponensét (azaz (u, v) -t) használjuk irányvektorként normálás nélkül, akkor a gyökök a térbeli távolságot jelentik. Ha a síkbeli irányvektort 1-re normáljuk, és az így adódó $u' = u/\sqrt{u^2 + v^2}$ és $v' = v/\sqrt{u^2 + v^2}$ értékeket írjuk be az (1)-(2) egyenletekbe, akkor a síkbeli távolságokat ($t_{1,p}$, $t_{2,p}$, $d_{\infty,p}$) kapjuk*. (Utóbbiak $\sqrt{u^2 + v^2}$ -szeresei (ahol $\sqrt{u^2 + v^2} \leq 1$) a térbeli távolságoknak, azaz a síkbeliek kisebbek a térbeliekénél.) Célszerű a normálást elhagyni, azaz a térbeli távolságokat meghatározni, és a későbbiekben is azokkal számolni.

* A függőleges vagy „majdnem függőleges” térbeli irányok esetében ez a levetítéses technika nem használható, ezzel kapcsolatban ld. a következő dián szereplő megjegyzést!



Síkbeli ábrázolás

Programozási vizsgafeladat

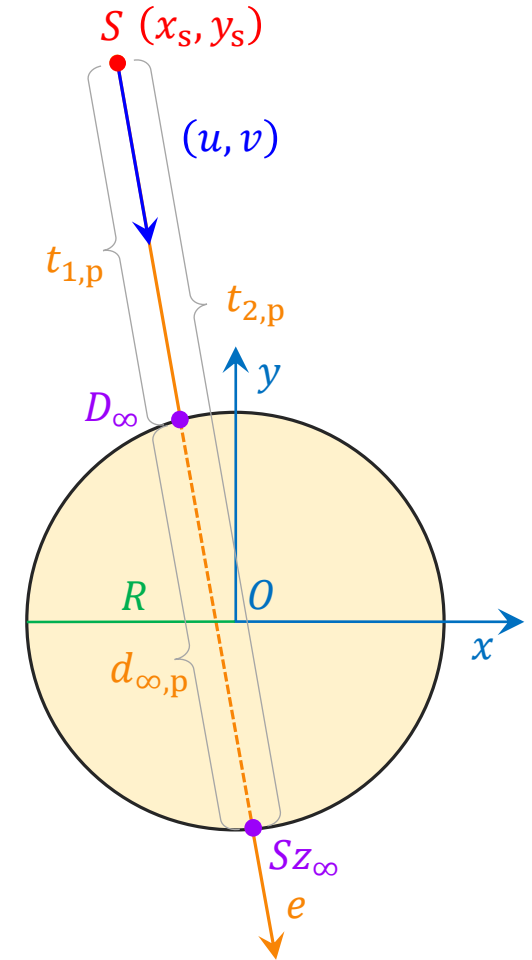
Geometriai számítások – a forrásponttól az első ütközésig

2) folytatása:

Megjegyzés:

A „teljesen függőleges” térbeli irány esetét ($u = v = 0, w = \pm 1$) a fentebb ismertetett levetítési eljárással nem lehet kezelni, mert $u = v = 0$ mellett az (1)-(2)-(3) egyenletrendszer elfajul. Természetesen a függőleges irányú félegyenes dőfés- és szökéspontjának távolságát nem is kell számítani, hiszen az egyenlő a detektor magasságával, de a függőlegességre való odafigyelés nem küszöbölhető ki. A nagyobb gondot az jelentheti, hogy ez a levetítési eljárás már akkor is numerikus nehézségekhez vezethet, ha az irány nem egészen, hanem csak „közelítőleg függőleges” (azaz ha a $\sqrt{(u^2 + v^2)}/w$ abszolút értéke nagyon kicsi, például kisebb 10^{-12} -nél*). Nyilvánvalóan ennek a kezelésére is lehet alkalmas algoritmust kidolgozni, de – Monte-Carlo-számításról lévén szó – a probléma egyszerűbben is elintézhető. Mivel a „teljesen függőleges” vagy ahhoz nagyon közeli irány előfordulása gyakorlatilag elhanyagolható valószínűségű, ezért ha ilyen irány adódna a sorsolásból, azt a numerikus nehézségek elkerülése érdekében nyugodtan figyelmen kívül hagyhatjuk (rejektálhatjuk), és sorsolhatunk újabb irányt. Ez a nagyon ritka rejektálás ugyanis a számítás végeredményét érdemben nem befolyásolja.

* Ilyen korlátot csak „duplapontos” („8 bájtos”) számításnál célszerű alkalmazni.



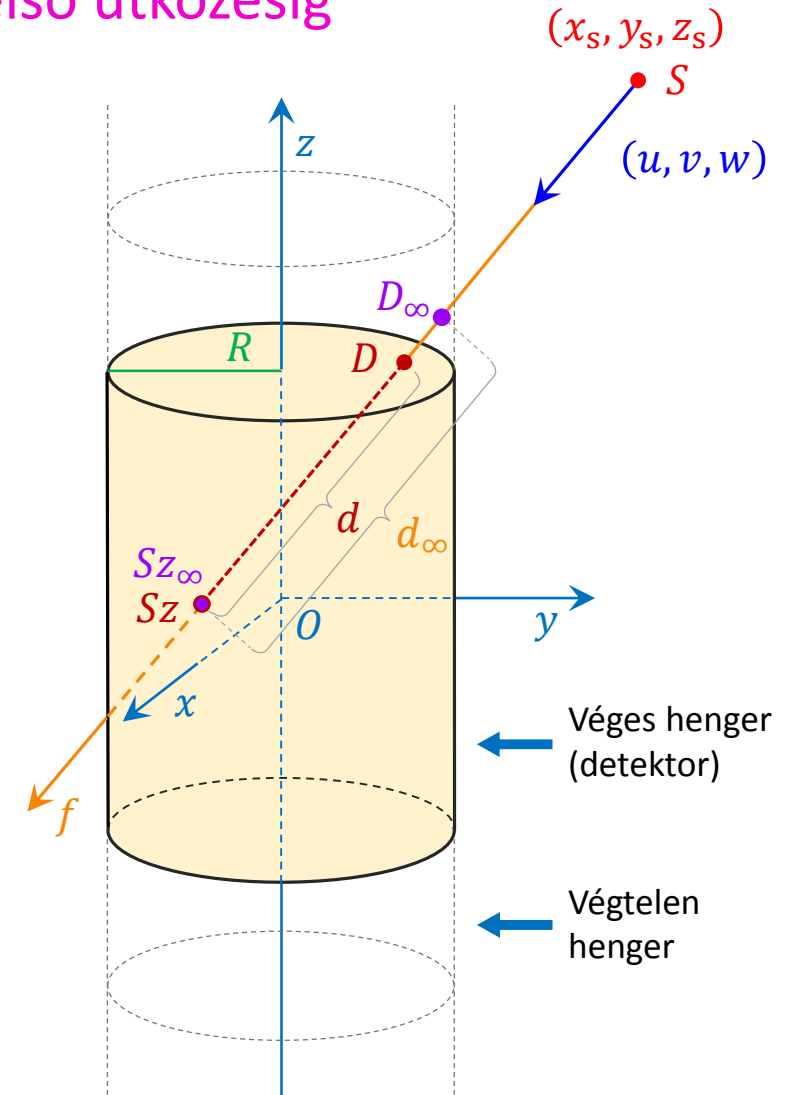
Síkbeli ábrázolás

Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a forrásponttól az első ütközésig

3) Ha a félegyenesnek és a végtelen hengernek van metszéspontja (döfés- és szökéspontja, D_∞ és Sz_∞), akkor a következő lépésben azt kell megvizsgálni, hogy a félegyenes „beleszúr-e” a véges hengerbe. Ehhez meg kell nézni, hogy a végtelen hengerrel való döfés- és szökéspont a véges henger felső (fedő-) és alsó (alap-) lapjához képest hova esik. Itt sokféle eset lehetséges. Például:

- 3.1) A végtelen hengerrel való döfés- és szökéspont (D_∞ és Sz_∞) is fölötte van a fedőlapnak. Ekkor a félegyenes elkerüli a véges hengert.
- 3.2) A végtelen hengerrel való döféspont (D_∞) a fedőlap fölé esik, a szökéspont (Sz_∞) az alaplappal és a fedőlap között helyezkedik el. Ekkor a véges henger döféspontja a fedőlapon, a szökéspontja a paláston található. (A jobb oldali ábra – példaként – egy ilyen esetet mutat.)
- 3.3) A végtelen hengerrel való döfés- és szökéspont (D_∞ és Sz_∞) is az alap- és fedőlap közé esik. Ekkor a félegyenes a paláston lép be, és a paláston lép ki a véges hengerből.
- 3.4) Stb.



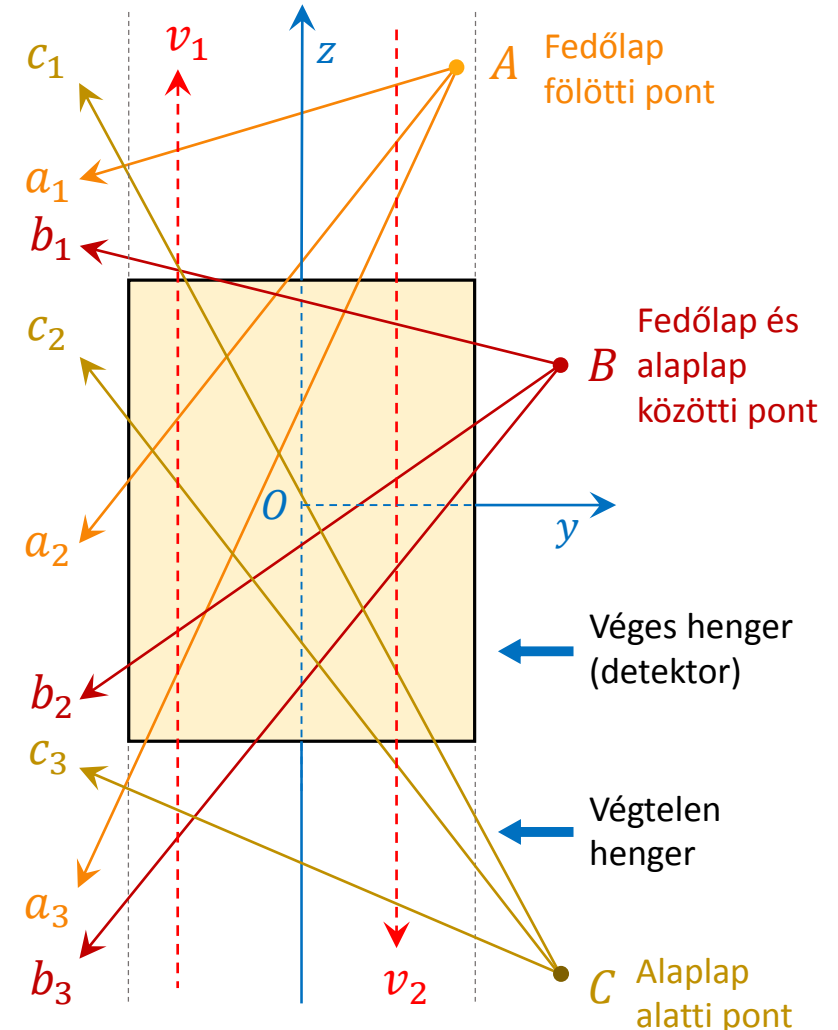
Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a forrásponttól az első ütközésig

3) folytatása:

A lehetséges eseteket mind végig kell gondolni, és a szimulációs programot ennek megfelelően kell kialakítani. Az elképzelhető esetek egyfajta csoportosítása a jobb oldali sematikus ábrán látható. Eszerint a forráspont alap-, illetve fedőlaphoz viszonyított helyzete (*A*, *B* és *C*) alapján három csoportba sorolhatjuk a félegyeneseket (ld. az ábrán, ahol példaképpen az *A* pontot a végtelen hengeren belülre, a másik kettőt pedig kívülre rajzoltuk.) A félegyenesek dőlés- és a szökéspontjainak lehetséges helyzete alapján pedig mindegyik csoportban háromféle – eltérő módon kezelendő – irányultságot különböztethetünk meg (ld. az ábrán a félegyenesek betűjelének indexelését). Az így adódó 3 x 3 különböző típusú félegyeneshez elvileg még hozzáadandó a 2 függőleges fél-egyenes (*v*₁ és *v*₂), habár az utóbbiakat – előfordulásuk elhanyagolható valószínűsége miatt – rejektálhatjuk is. Erre utal az ábrán a szaggatott vonallal való jelölés.

A fentebb példaként felsorolt 3 eset (azaz a 3.1, 3.2 és 3.3) rendre az a_1 , a_2 , b_2 félegyenesnek felel meg.

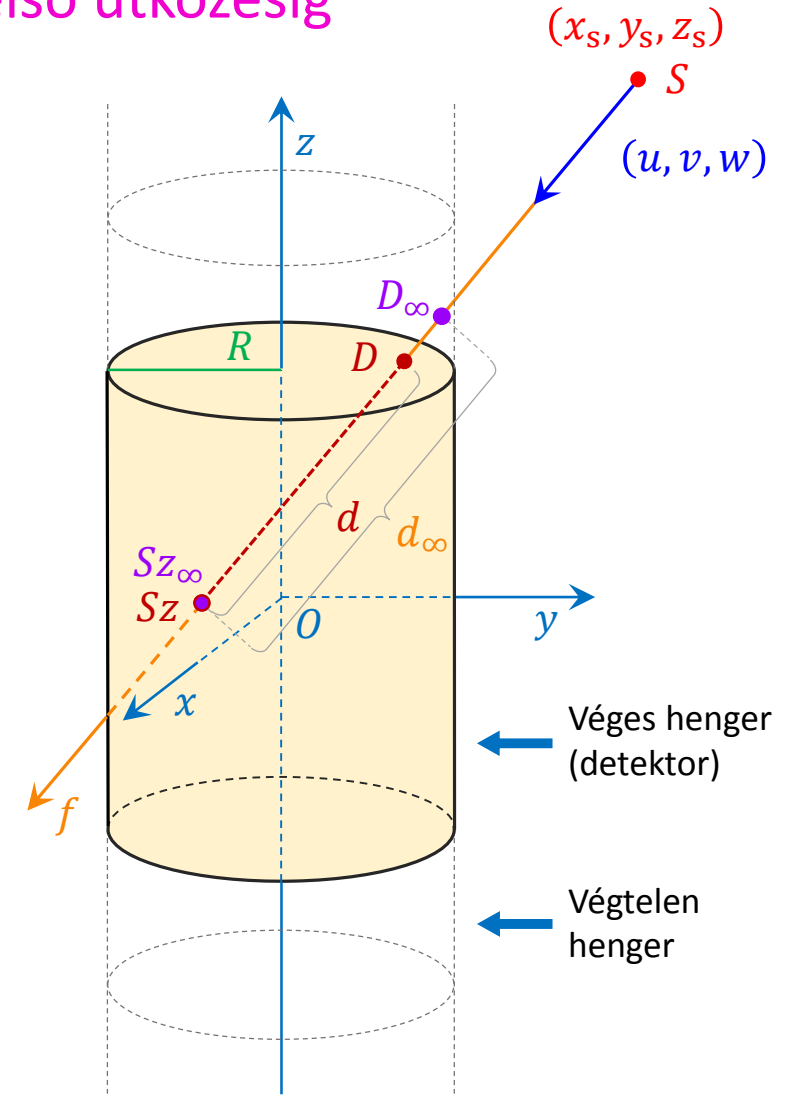


Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a forrásponttól az első ütközésig

3) folytatása:

Ha az S forráspontból indított f félegyenes elkerüli a véges hengert, akkor a vizsgált foton számítási ciklusa véget ért. Ilyenkor a foton kibocsátásának tényén túl más feljegyezni való nincs, új fotont (új ciklust) lehet indítani.

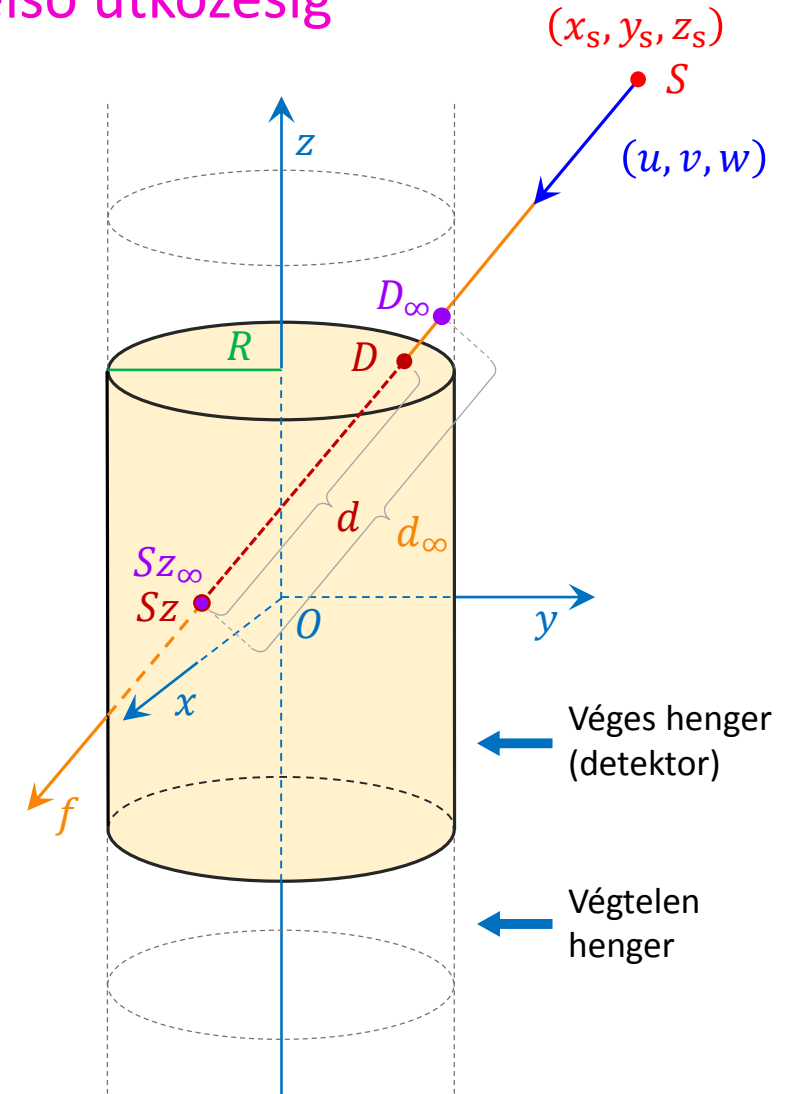


Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a forrásponttól az első ütközésig

- 4) Ha a félegyenes „beleszúr” a véges hengerbe (azaz a foton belejut a detektorba), akkor következő lépésként ki kell számítani a dőféspont és a szökéspont d távolságát, azaz a foton által a detektorhengerben ütközés nélküli esetben megtehető útszakasz hosszát.

A számításnál figyelemmel kell lenni arra, hogy ha a foton az alap- vagy a fedőlapon lép be, akkor a másodfokú egyenlet kisebbik gyökeként adódott t_1 távolság nem azonos a forrásponttól a véges hengerrel való dőféspontig húzódó \overline{SD} szakasz hosszával, hiszen ilyenkor a t_1 a forráspont és a végtelen hengerrel való dőféspont közötti $\overline{SD_\infty}$ távolságot jelenti. Az \overline{SD} távolságot úgy kapjuk meg, ha a t_1 -hez hozzáadjuk a végtelen hengeren belül, de a véges hengeren kívül megtett $\overline{D_\infty D}$ útszakasz hosszát. Ha a foton az alap- vagy a fedőlapon lép ki, hasonlóan kell eljárunk, azzal a különbséggel, hogy itt a t_2 -ből kell levonni a végtelen hengeren belül, de a véges hengeren kívül megtett úthosszat.



Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a forrásponttól az első ütközésig

4) folytatása:

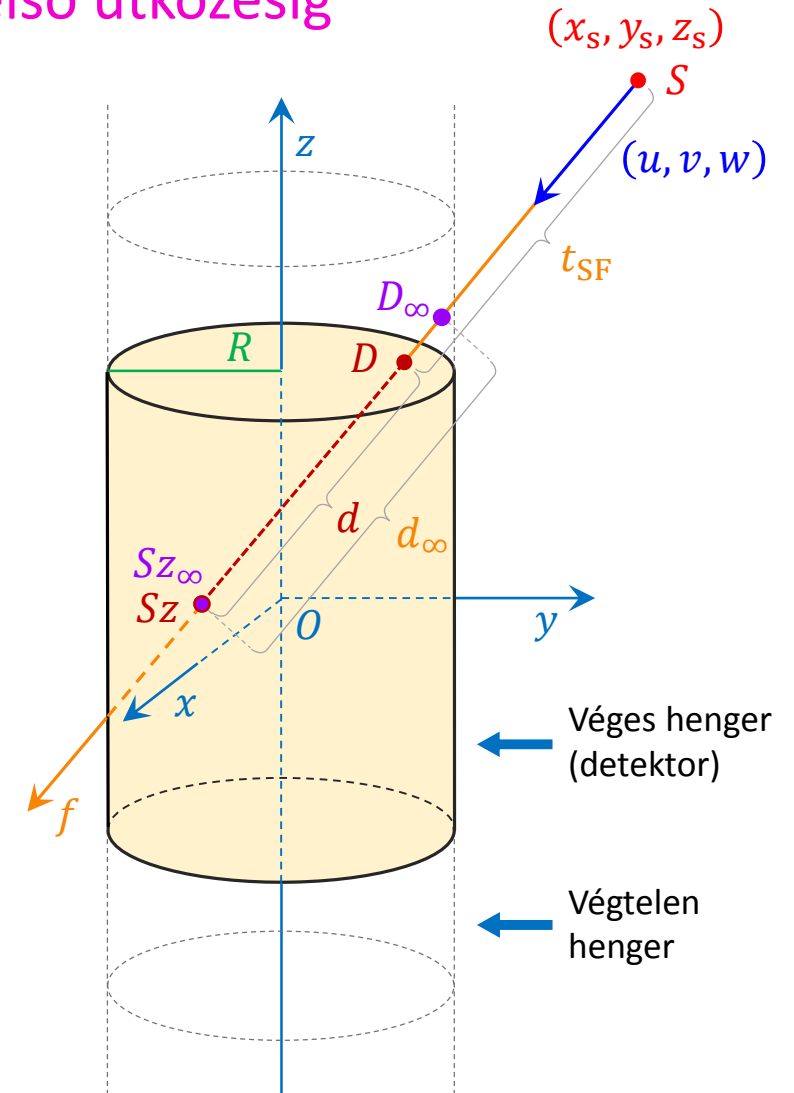
Ezeket az összeadásokat és kivonásokat azonban megtakaríthatjuk, ha a távolságok meghatározásához itt is az egyenes (most már térbeli egyenes) paraméteres egyenlet(rendszer)ét használjuk. Például a jobb oldali ábrán látható esetben az S és D pontok közötti t_{SF} távolság egyszerűen kiszámítható a

$$z_s + w \cdot t_{SF} = h/2 \quad (7)$$

egyenlet megoldásával. Ha a repülési félegyenes az alaplapot „szúrja át” (akár alulról, akár felülről), akkor az S forrásponttól a „szúrási” pontig húzódó t_{SA} távolságot az előzőhöz hasonlóan a

$$z_s + w \cdot t_{SA} = -h/2 \quad (8)$$

egyenlet megoldása szolgáltatja.



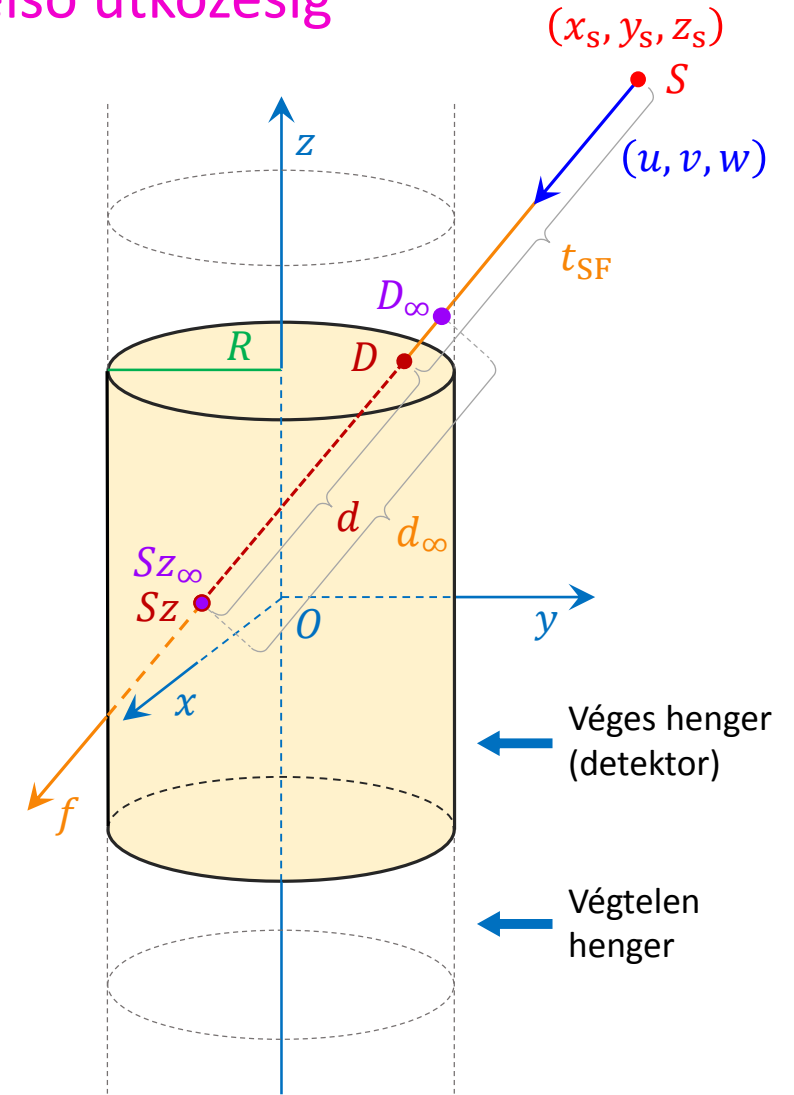
Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a forrásponttól az első ütközésig

4) folytatása:

Megjegyzés:

A „teljesen vízszintes” ($w = 0$) vagy ahhoz nagyon közeli irányú (például $|w| < 10^{-12}$) félegyenesek esetében a (7) és (8) egyenletek nem használhatók, illetve numerikus nehézségekhez vezethetnek. Ezért a vízszinteshez közeli irányokat célszerű ugyanazon a módon kezelni, ahogy azt a függőlegeshez közeli irányoknál leírtunk, azaz rejeztálhatjuk az ilyen eseteket (ld. a 36. diát).



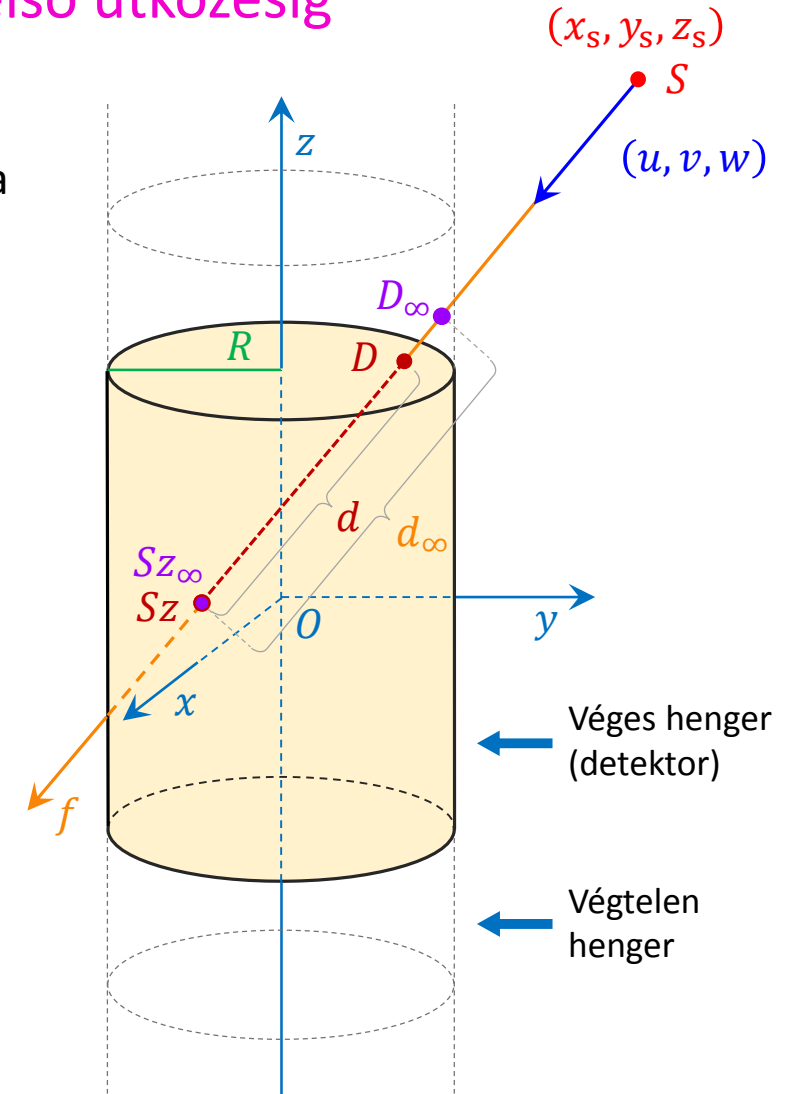
Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a forrásponttól az első ütközésig

- 5) A d meghatározása után d -t össze kell hasonlítani a foton energiájának megfelelően kiszámított $\lambda(E_{\gamma,s})$ szabad úthosszal ($\lambda = -[1/\Sigma_t(E_{\gamma,s})] \cdot \ln r$). Ha λ kisebb d -nél, akkor a foton ütközik a kristályban, egyébként energialeadás nélkül kiszökik a detektorból.

Ha ütközés történik, akkor meg kell határozni az ütközési pont helyét (x - y - z koordinátáit). Ehhez – a szimulációs program felépítésétől (szervezésétől) függően – szükség lehet a véges detektorba való belépés (döféspont) koordinátáinak (utólagos) kiszámítására is.

A döféspont helyét (koordinátáit) azért szükségtelen korábban meghatározni, mert a fotonnak a detektorba történő belépése után ütközés nélkül megtehető d útszakasz hosszát a döféspont koordinátáinak ismerete nélkül is ki lehet számítani. Ha a foton a (véges) detektor palástján lép be és a paláston lép ki, akkor d a másodfokú egyenlet megoldásaként adódott t_1 és t_2 gyökök különbségeként számítható: $d = t_2 - t_1$. Ha pedig a foton az alap- vagy fedőlapot is „átszúrja”, akkor a d a t_1 és t_2 gyökök, továbbá a (7) és (8) egyenletek felhasználásával határozható meg koordináták számítása nélkül.

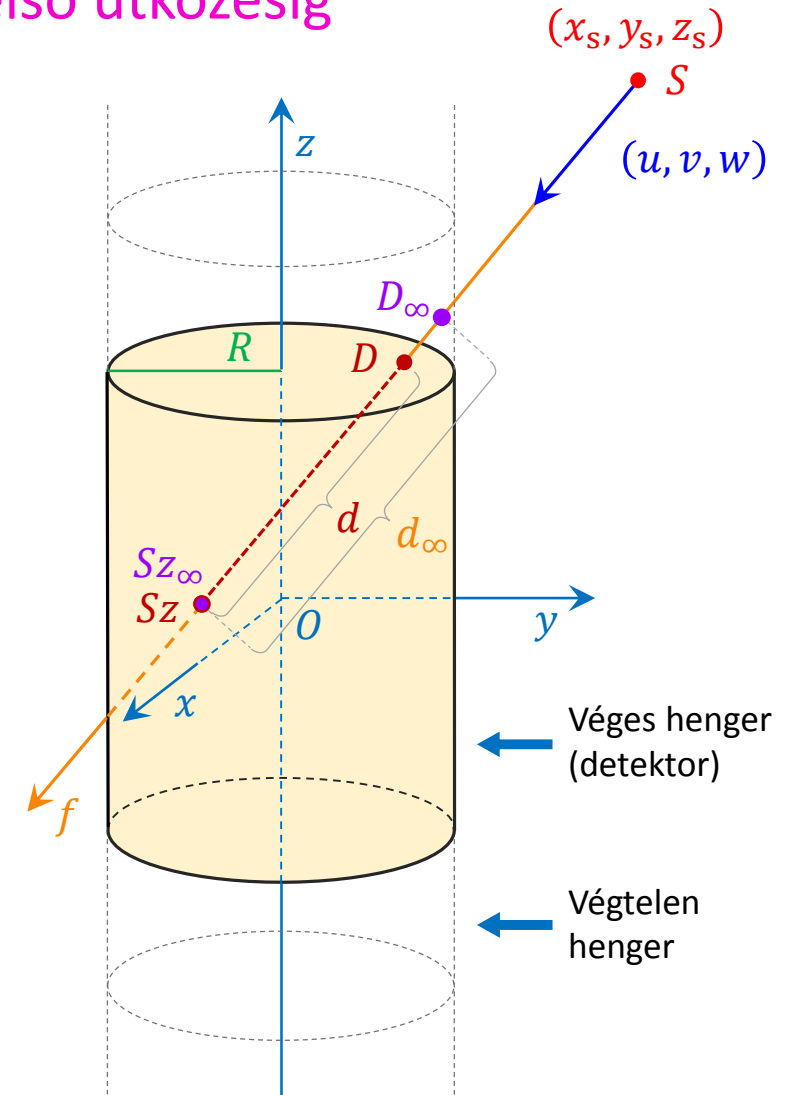


Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – a forrásponttól az első ütközésig

5) folytatása:

Ezzel a lépéssel a foton életútjának a forrásponttól az első ütközésig tartó szakasza véget ér, innen kezdve a fizikai modell alapján kisorsolt reakciók (történések) határozzák meg, hogy konkrétan milyen lépésekre és geometriai számításokra van szükség.



Programozási vizsgafeladat

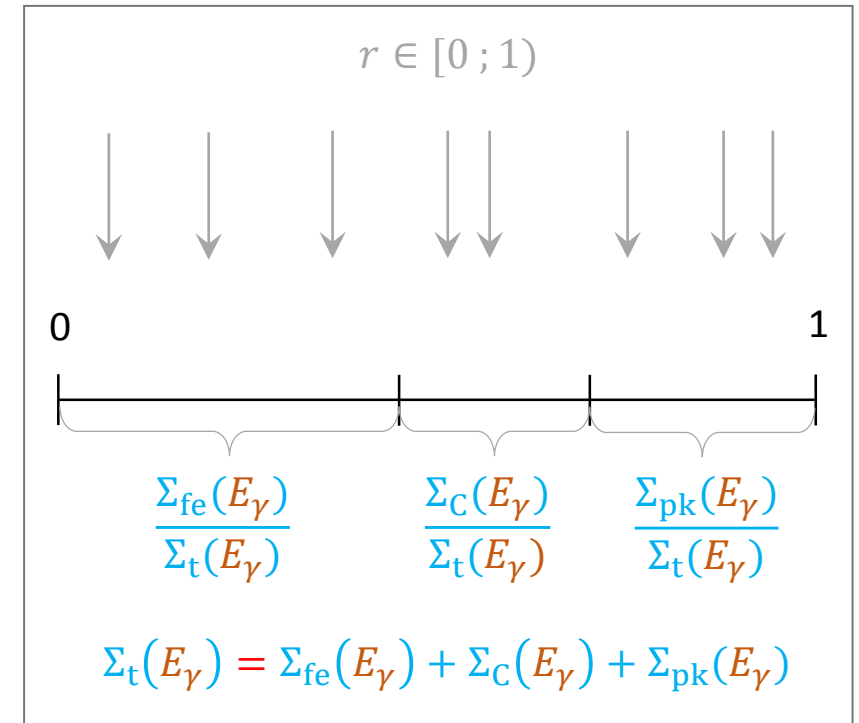
Az ütközés típusának sorsolása

Akár az első, akár egy további ütközésről van szó, az ütközés helyének (x - y - z koordinátáinak) meghatározása után ki kell sorsolni a lejátszódó reakció típusát. Ez azt jelenti, hogy a szimulációban figyelembe veendő háromféle reakciótípus hatáskeresztmetszetének arányában egy kanonikus véletlenszám segítségével dönteni kell arról, hogy fotoeffektus, Compton-szóródás vagy párkeltés játszódik-e le. A hatáskeresztmetszeteket a foton aktuális energiájának, E_γ -nak megfelelően, táblázatból határozhatjuk meg (ld. a hatáskeresztmetszetek számításáról szóló 92-107. diákat).

Figyelem! Az E_γ csak az első ütközésig azonos az a forrásenergiával, $E_{\gamma,s}$ -sel!

A táblázat alapján meghatározott $\Sigma_{fe}(E_\gamma)$, $\Sigma_C(E_\gamma)$ és $\Sigma_{pk}(E_\gamma)$ felhasználásával a jobb oldali séma szerint sorsolhatjuk ki az ütközési reakció típusát.

Ha a sorsolás fotoeffektust eredményez, akkor a foton életútja (trajektóriája) itt véget ér, új forrásfotont (számítási ciklus) lehet indítani.



Az ütközés típusának sorsolása

Programozási vizsgafeladat

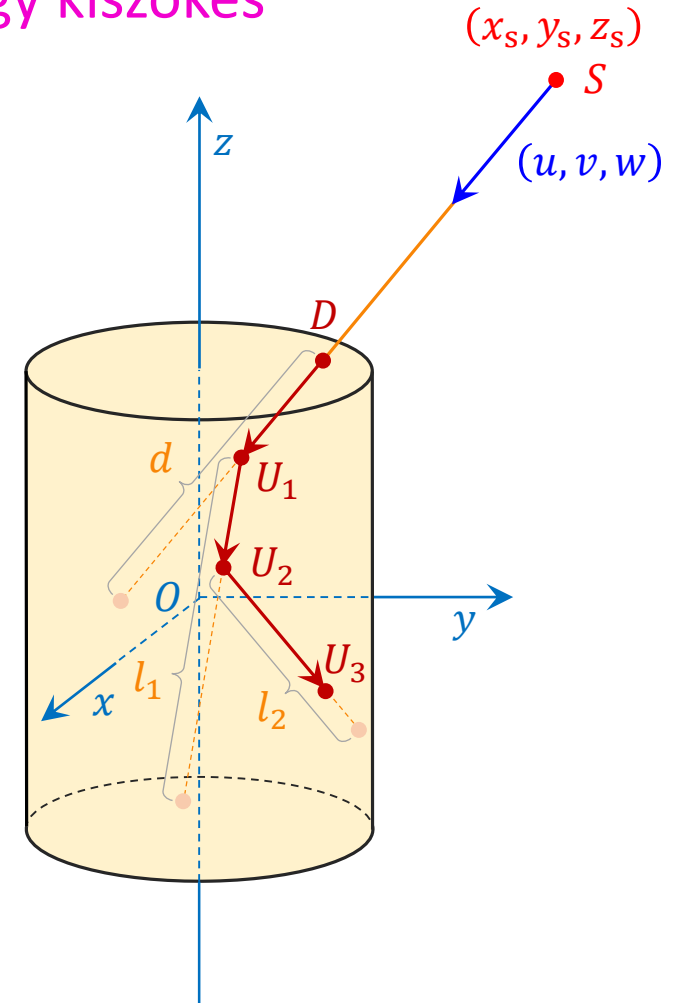
Geometriai számítások – további ütközés(ek) vagy kiszökés

Ha az ütközés Compton-szóródásra vagy párkeltésre vezet, akkor **a további geometriai számítások** alapvető **célja a szóródott foton, illetve annihilation leszármazottai következő ütközési helyének meghatározása, vagy a kiszökés megállapítása.**

A feladat jellegéből következik, hogy itt is az előzőekben megismert eljárást, azaz az x - y síkra történő levetítéssel keletkező egyenes és kör másodfokú egyenletrendszerének megoldására támaszkodó technikát célszerű használni. A forráspontból induló fotonok esetéhez képest ez az ütközési alkalmazás két eltérést mutat:

- egyrészt itt a „forráspont” (ahonnan a foton szóródással továbbindul, illetve az egyik, majd a másik annihilation foton elindul) a detektoron belül van;
- másrészt a foton megváltozott (új) irányba repül.

Az első eltérés miatt a másodfokú egyenletnek itt mindig két (valós) gyöke van, amelyek közül az egyik – az (5) képlet szerinti t_1 – negatív (vagy szélső esetben nulla), a másik – a t_2 – pozitív (vagy szélső esetben nulla). A foton további útjának számításához természetesen a pozitív gyököt kell használni.



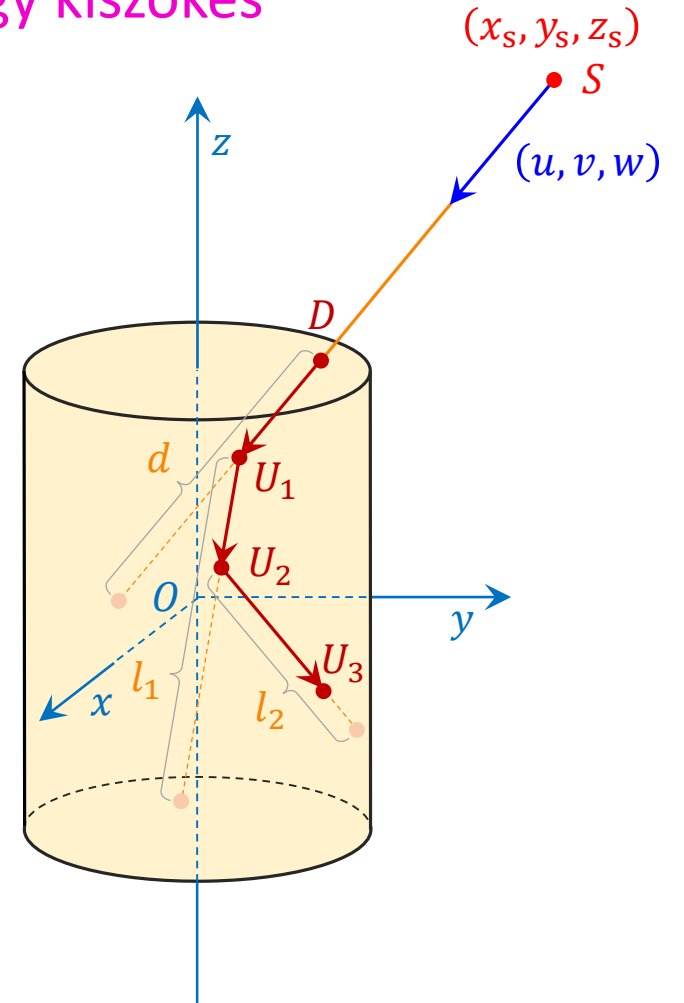
Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – további ütközés(ek) vagy kiszökés

Ha egy ütközési pontnál a foton Compton-szóródást szenved, akkor ki kell számítani, hogy a szóródott foton mekkora l_i utat tenne meg a detektorban, ha már nem lépne reakcióba a kristállyal. Ennek meghatározásához meg kell vizsgálni, hogy a szóródott foton végtelen hengerből való szökéspontja a véges henger palástjára esik-e. Ha igen, akkor $l_i = t_2$, ha nem, akkor az alap- vagy fedőlapon lévő szökéspontig húzódó távolságot a (7) és (8) egyenlet analógiájára lehet kiszámítani.

A kiszökési vizsgálathoz a kisorsolt $\lambda(E_\gamma)$ szabad úthosszat az ütközési helytől a véges hengerből való (potenciális) szökéspontig húzódó távolsággal (azaz l_i -vel) kell összehasonlítani.

Ha az ütközésnél párkeltés történik, akkor az ott keletkező két annihilációs foton életútját a Compton-szóródott fotonokéhoz hasonlóan kell követni. Azaz esetükben is ki kell számítani a keletkezésük helyétől a véges hengerből való (potenciális) szökéspontjukig tartó távolságot, és ezt kell összehasonlítani a kisorsolt szabad úthosszal.



Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – további ütközés(ek) vagy kiszökés

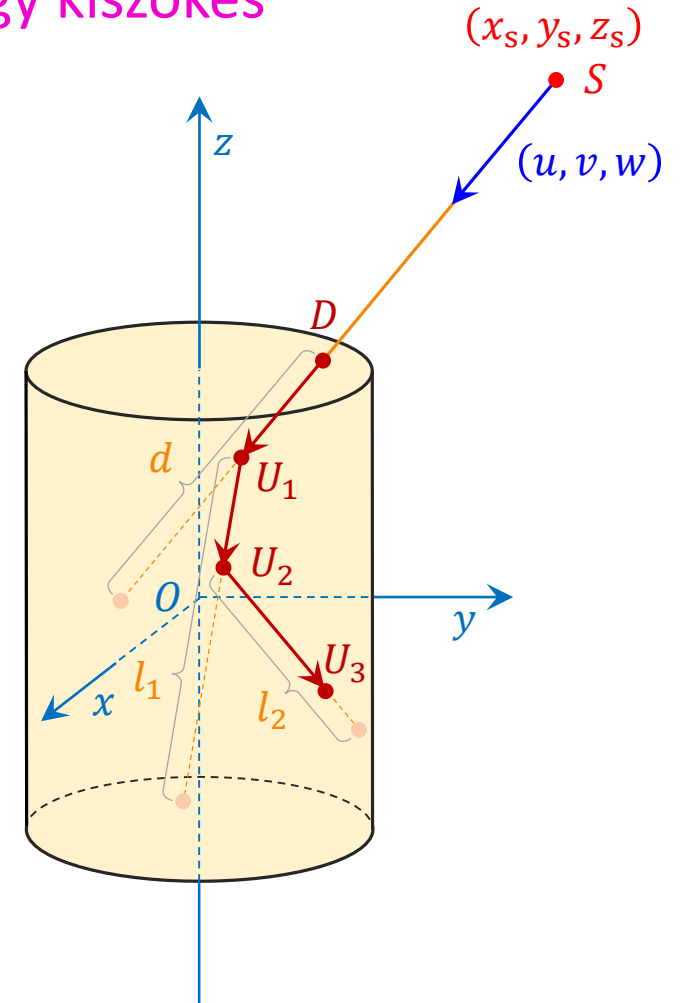
A forráspontból induló fotonok és az ütközés során szóródó (vagy annihilációval keletkező) fotonok útjának számítása között fennálló hasonlóságok miatt programozástechnikailag **célszerű egy olyan programszegmenst** (szubrutint, függvényt, eljárást) **kidolgozni, amely egyaránt használható a detektoron kívüli forráspontból vagy a detektoron belüli ütközési pontból induló fotonokra**. Egy ilyen „univerzális” eljárásnak logikailag az alábbi input- és outputadatokkal célszerű rendelkeznie:

Inputadatok:

- R, h a detektorhenger sugara, magassága
- (x_0, y_0, z_0) a forráspont vagy az ütközési pont helye (ahonnan a foton indul)
- (u, v, w) a foton repülési iránya (egyre normált vektor)

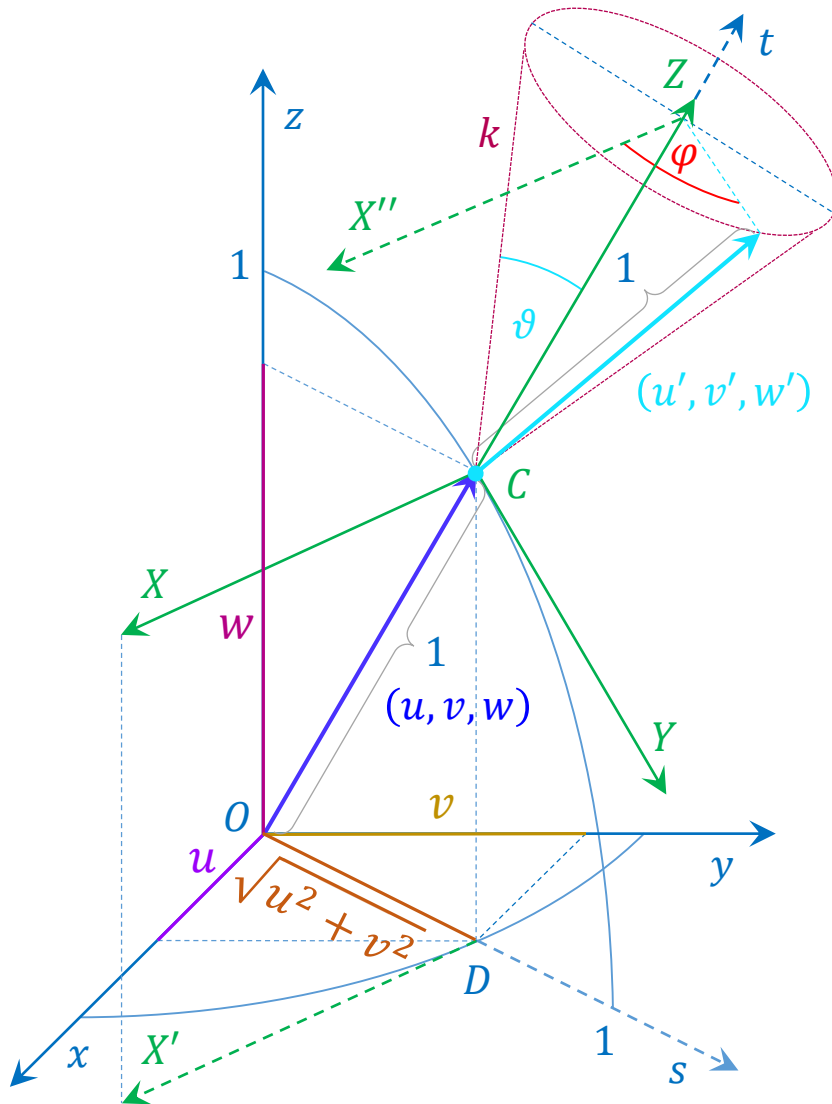
Outputadatok:

- t_1, t_2 a detektorhengerrel való döfés- és szökéspontig húzódó távolság
- (x_1, y_1, z_1) a detektorhengerrel való döféspont koordinátái (opcionális)
- (x_2, y_2, z_2) a detektorhengerrel való szökéspont koordinátái (opcionális)
- i_b benne van-e az indulási pont a hengerben ($i_b = 0$: kívül, $i_b = 1$: belül)
- i_s beleszúr-e a félegyenes a véges hengerbe ($i_s = 0$: nem, $i_s = 1$: igen)



Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – szóródás utáni irány sorsolása

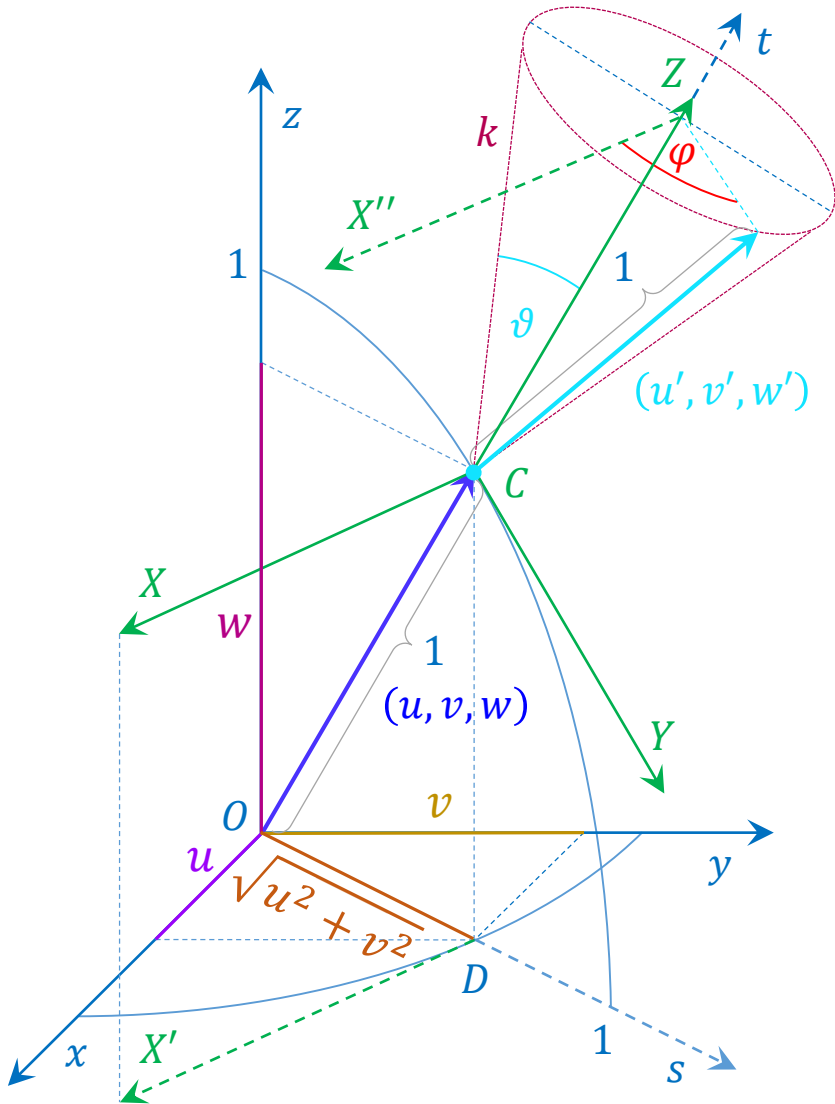


Kísérleti tapasztalatok szerint a szóródási jelenségek többségénél (köztük a Compton-szóródásnál is) az azonos eltérülési szögben szóródott részecskék azimutális eloszlása forgásszimmetriát mutat. Emiatt célszerű a forgásszimmetrikus szóródások Monte-Carlo-modellezéséhez egy olyan számítási modult kifejleszteni, amely az eltérülés θ szögének ismeretében a szórt részecske irányát egyenletes eloszlással sorsolja ki a beesési iránnyal megegyező t tengelyű, θ fél-nyílásszögű k kúp palástjának egységnyi hosszú alkotói közül (ld. a bal oldali ábrát). Az erre szolgáló eljárást a továbbiakban a szóródás utáni véletlen irány sorsolásának (röviden SZUVIR-eljárásnak) nevezzük.

A következő diákon a SZUVIR-eljárás összefüggéseit vezetjük le. Mint látni fogjuk, a szórt részecske mozgásirányának meghatározása lényegében egy 3×3 -as mátrix és egy 3 elemű vektor előállításából, majd ezek összeszorzásából áll.

Programozási vizsgafeladat

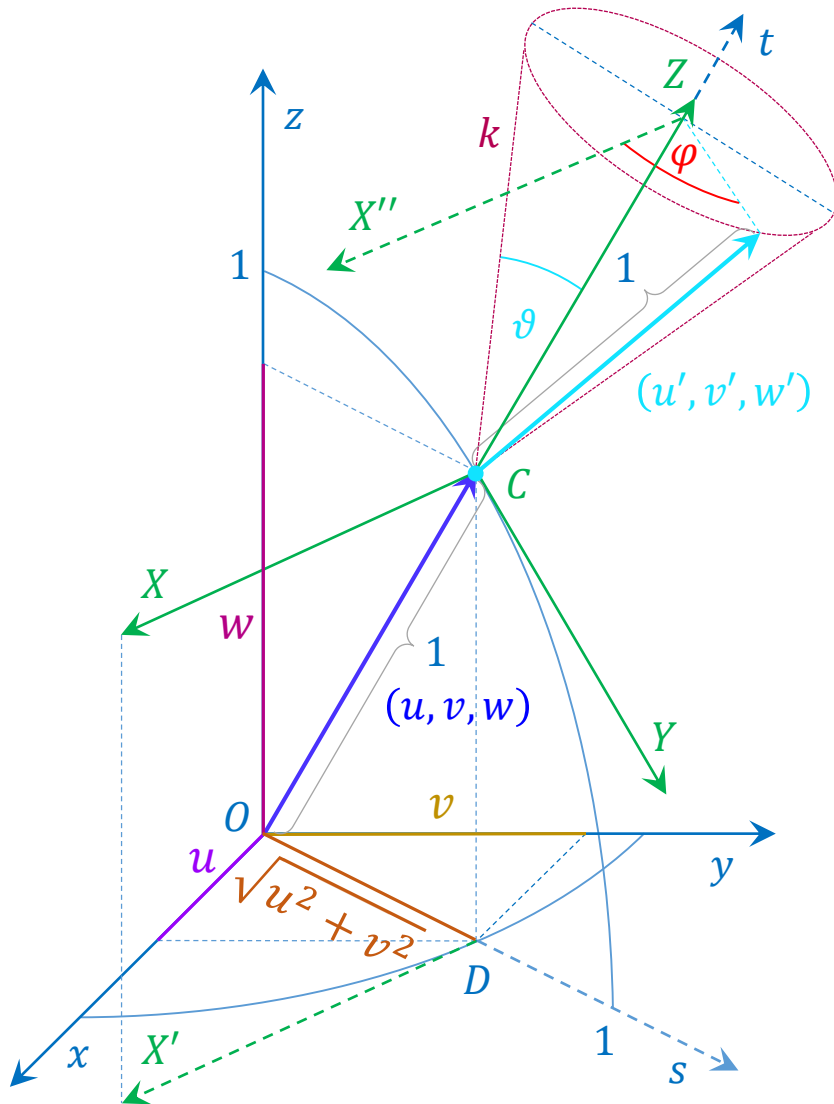
Geometriai számítások – szóródás utáni irány sorsolása



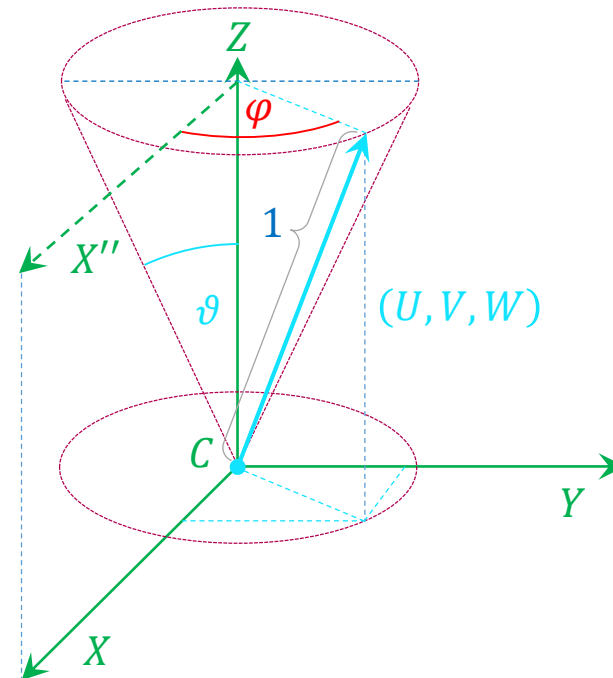
A bal oldali ábrán a részecske szóródás előtti mozgásirányát az (u, v, w) vektor, a szórt részecskéjét pedig az (u', v', w') vektor jelöli. (A komponensek az x - y - z koordinátarendszerben értendők.) A szóródás a C pontban következik be az ismertnek feltételezett ϑ eltérülési szöggel. Ahhoz, hogy az új irány u' , v' és w' komponensét kiszámíthassuk, vegyünk fel egy másik (szintén derékszögű és szintén jobbsodrású) koordinátarendszert, amelynek origója az ütközési pont! Az új koordinátarendszer tengelyeit az ábrán az X , Y és Z egységvektorok jelzik. (A továbbiakban az X , Y és Z betűket a tengelyirányok és az egységvektorok jelölésére is használjuk.) Látható, hogy a Z irány megegyezik a beeső részecske (u, v, w) mozgásirányával, az X tengely pedig párhuzamos az x - y síkkal. Az X' és X'' segédvektorok iránya azonos az X tengelyével. Az x - y síkon lévő s tengely az (u, v, w) beesési vektor x - y síkbeli vetületének irányába mutat.

Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – szóródás utáni irány sorsolása



Ábrázoljuk az új $X-Y-Z$ koordinátarendszerben a szóródás utáni vektort, amelynek itteni komponenseit jelölje U, V, W ! A 0 és 2π közé eső egyenletes eloszlású azimutális φ szöget mérjük a X'' vektor irányától! Ekkor φ -t és U, V, W -t a következőképpen számíthatjuk:



$$\varphi = 2\pi \cdot r$$

$$U = \sin \vartheta \cos \varphi$$

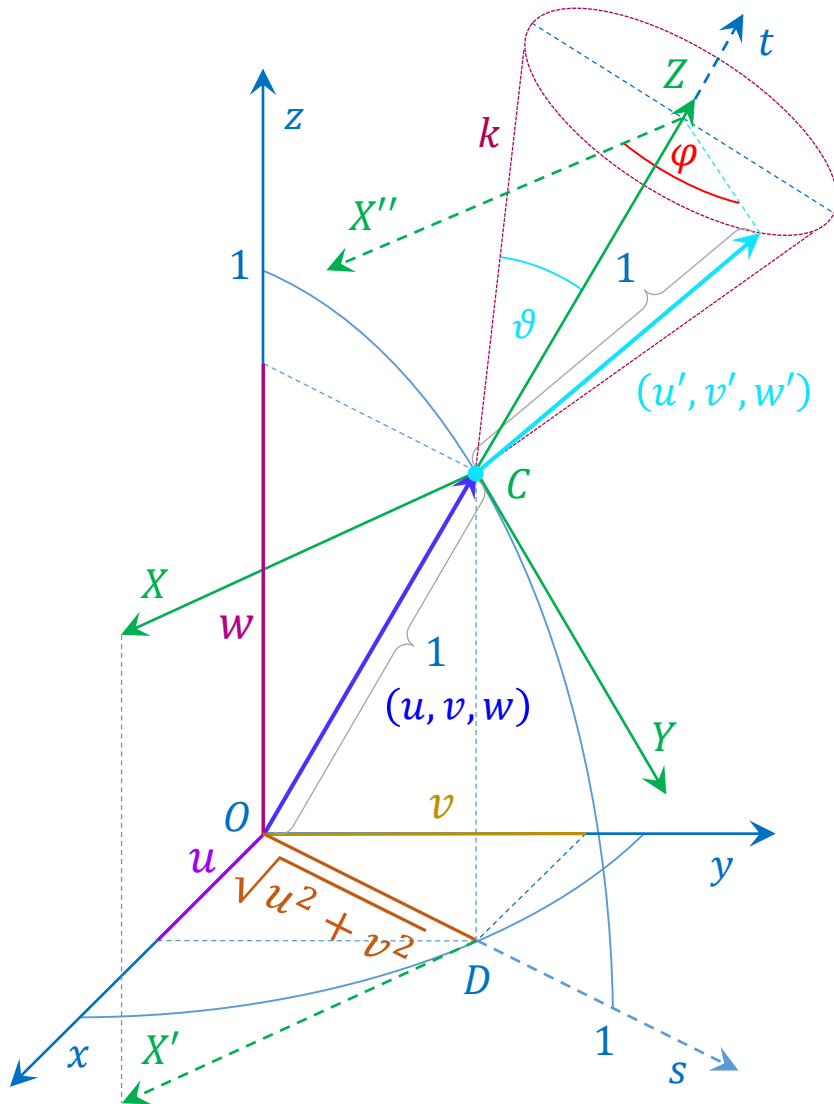
$$V = \sin \vartheta \sin \varphi$$

$$W = \cos \vartheta,$$

ahol r egy kanonikus véletlenszám.

Programozási vizsgafeladat

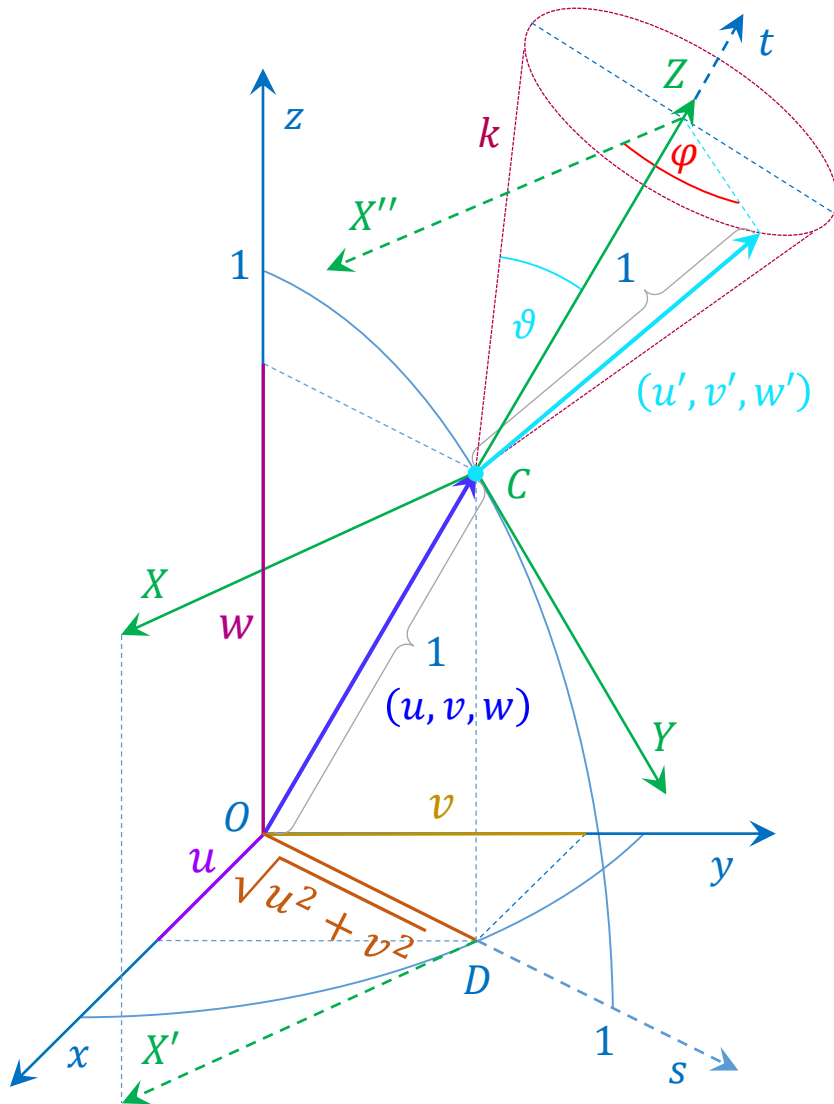
Geometriai számítások – szóródás utáni irány sorsolása



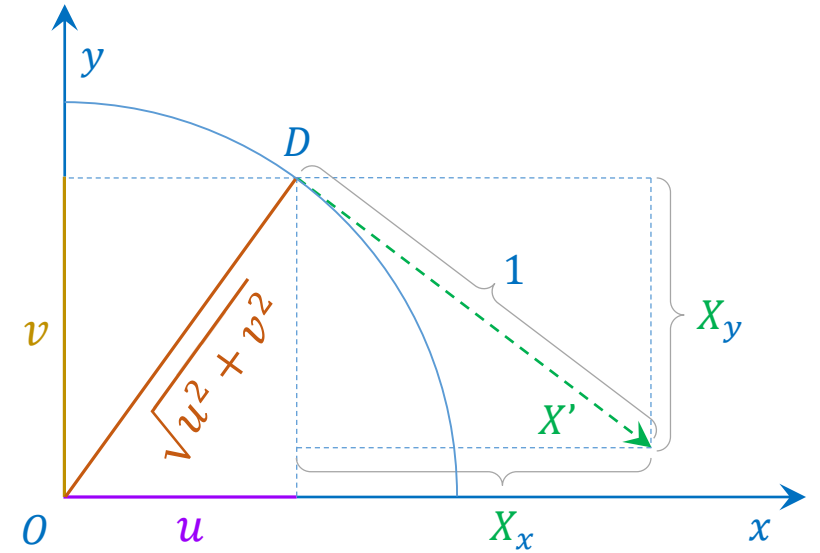
Ahhoz, hogy U, V, W -t átkonvertálhassuk az $x-y-z$ koordináta-rendszerbe, meg kell határoznunk az „nagybetűs” $X-Y-Z$ koordinátarendszer tengelyeinek irányába mutató egységvektorok (azaz az X, Y és Z) komponenseit az eredeti $x-y-z$ viszonyítási rendszerben. Ehhez az X és Y esetében egy-egy síkbeli segédábrát rajzolunk fel a következő két dián.

Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – szóródás utáni irány sorsolása



Segédábra az X vektor
 x - y - z komponenseinek
meghatározásához



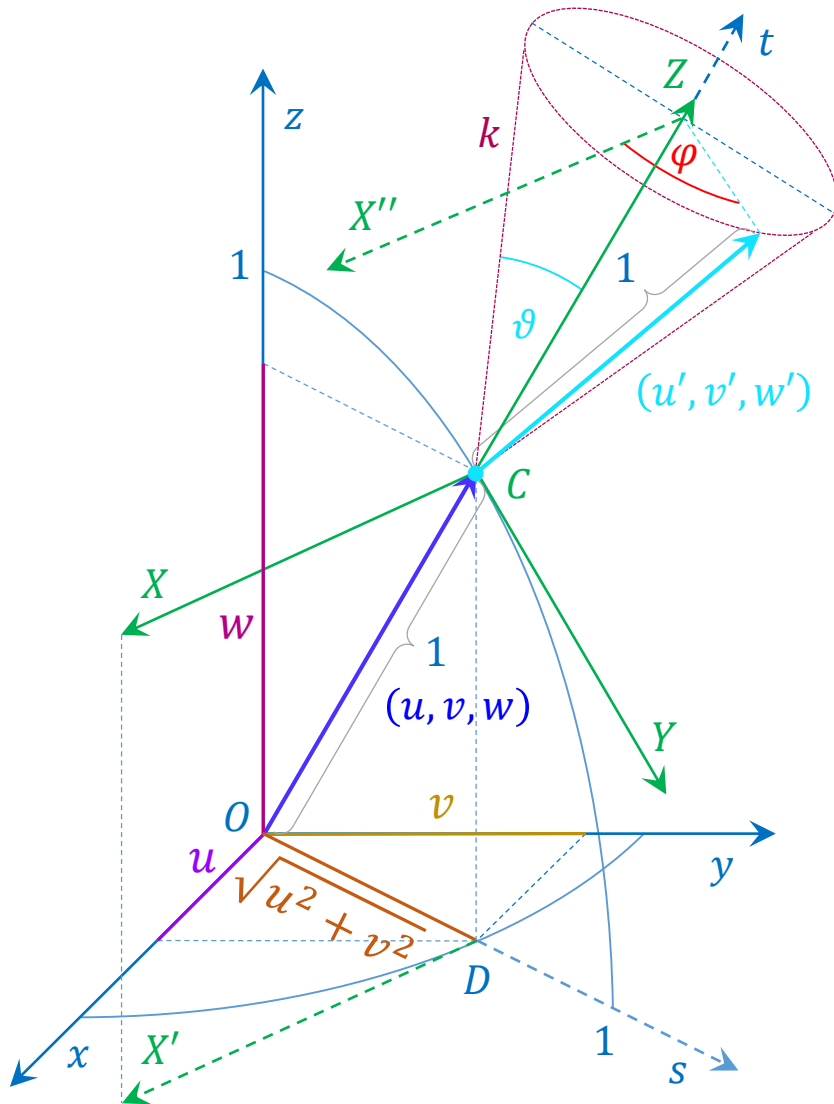
$$X_x = \frac{v}{\sqrt{u^2 + v^2}}$$

$$X_y = -\frac{u}{\sqrt{u^2 + v^2}}$$

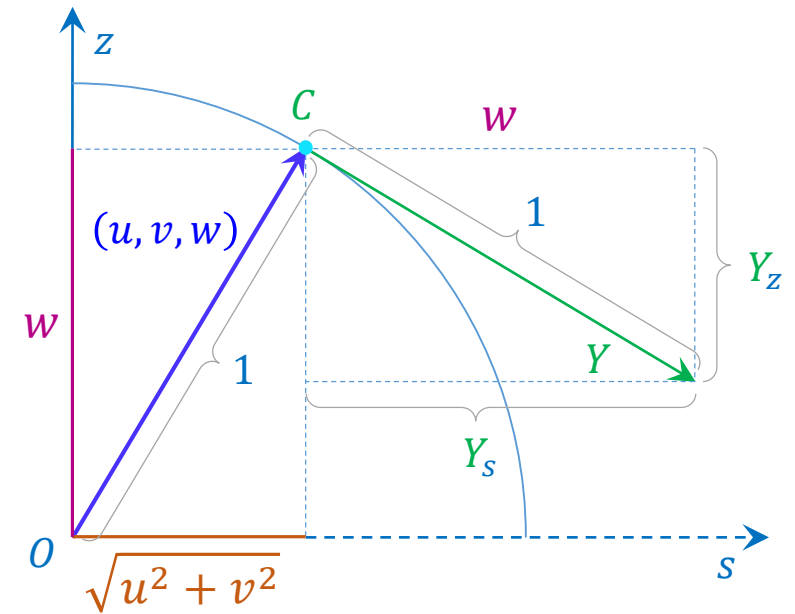
$$X_z = 0$$

Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – szóródás utáni irány sorsolása



Segédábra az Y vektor x - y - z komponenseinek meghatározásához



$$Y_s = w$$

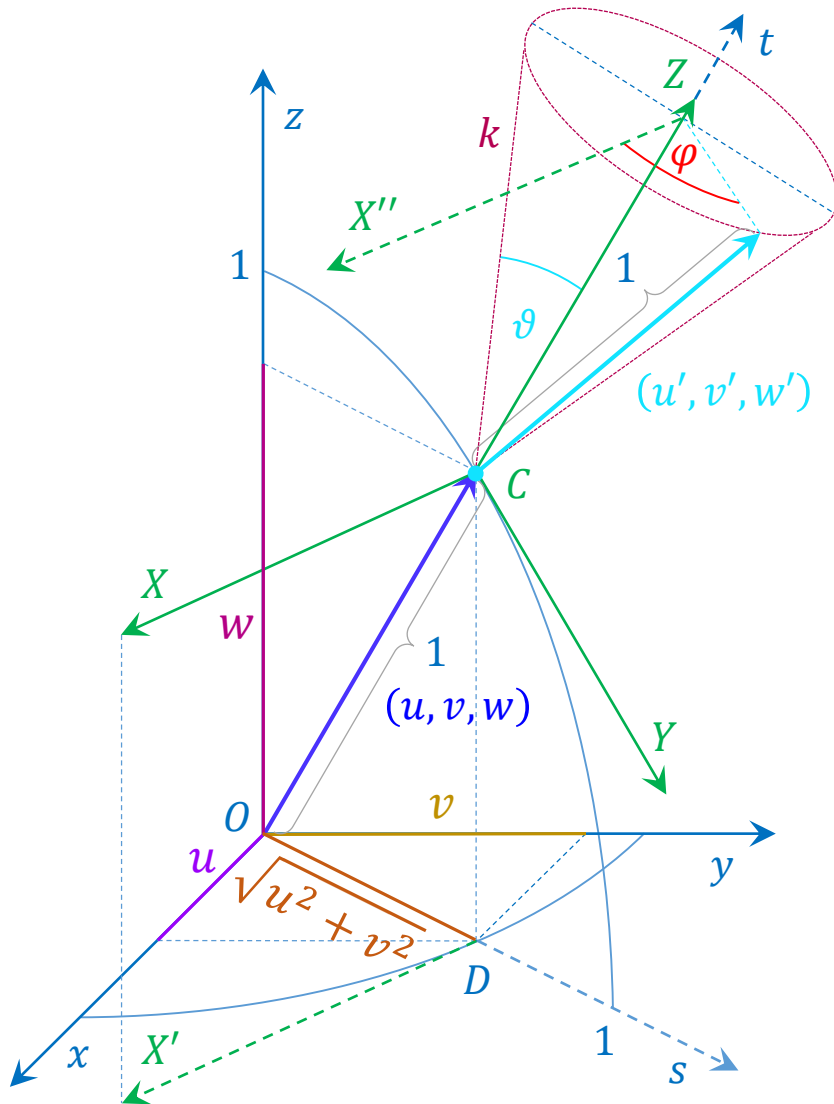
$$Y_x = Y_s \frac{u}{\sqrt{u^2 + v^2}} = \frac{u w}{\sqrt{u^2 + v^2}}$$

$$Y_y = Y_s \frac{v}{\sqrt{u^2 + v^2}} = \frac{v w}{\sqrt{u^2 + v^2}}$$

$$Y_z = -\sqrt{u^2 + v^2}$$

Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – szóródás utáni irány sorsolása



Az így meghatározott X - Y - Z vektorkomponensek segítségével U, V, W -t a következőképpen konvertálhatjuk át u', v', w' -re:

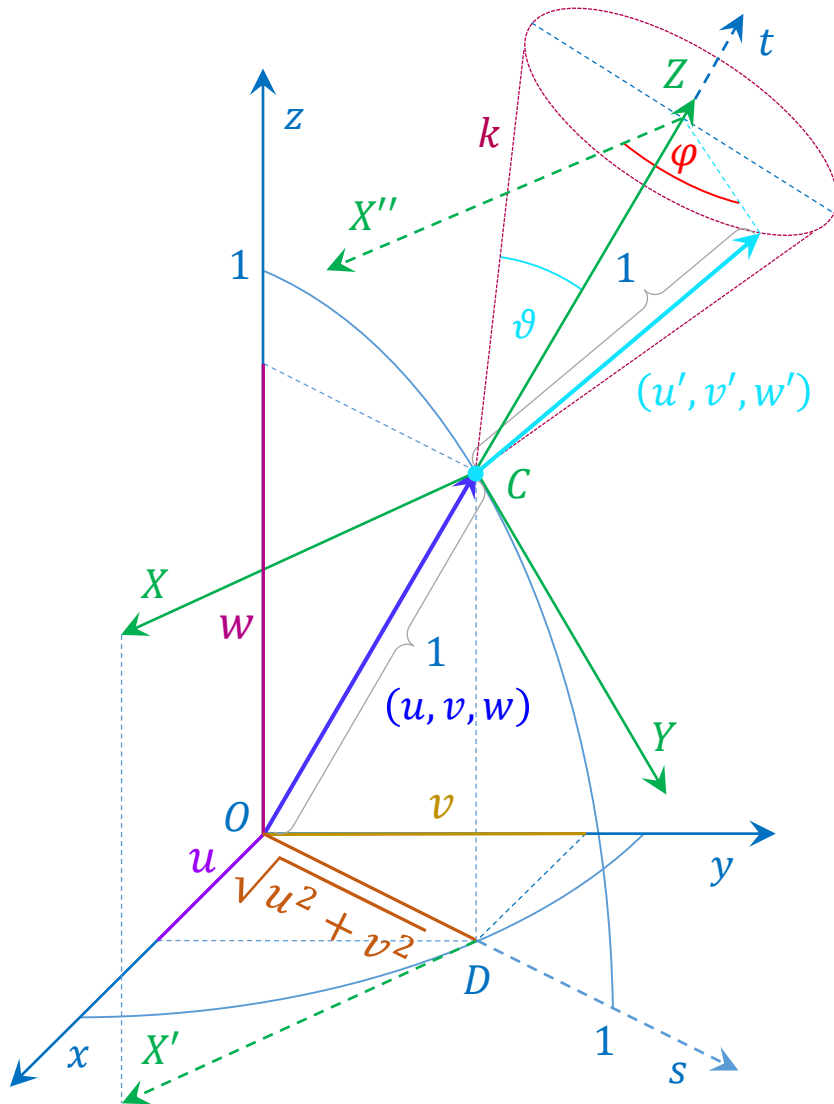
$$\begin{pmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_x & Y_x & Z_x \\ X_y & Y_y & Z_y \\ X_z & Y_z & Z_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \\ W \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_x & Y_x & Z_x \\ X_y & Y_y & Z_y \\ X_z & Y_z & Z_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix} \quad \text{ahol } \varphi = 2\pi \cdot r$$

$$\begin{pmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{v}{\sqrt{u^2 + v^2}} & \frac{u w}{\sqrt{u^2 + v^2}} & u \\ -\frac{u}{\sqrt{u^2 + v^2}} & \frac{v w}{\sqrt{u^2 + v^2}} & v \\ 0 & -\sqrt{u^2 + v^2} & w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix}$$

Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – szóródás utáni irány sorsolása



Az eredményül kapott eljárás input- és outputadatait tehát a következőképpen foglalhatjuk össze:

Input: $(u, v, w), \vartheta, r$

Output: (u', v', w')

Itt is érdemes megjegyezni, hogy az inputadatok közé ϑ helyett $\cos \vartheta$ -t is írhatnánk, ugyanis az eljárásban nem magára a szögre, hanem annak koszinuszára (és szinuszára) van szükség.

És tudjuk, hogy az irányyorsolási eljárások többsége (köztük a célzott irányú fotonindítási módszer is) a $\cos \vartheta$ -t közvetlenül szolgáltatja.

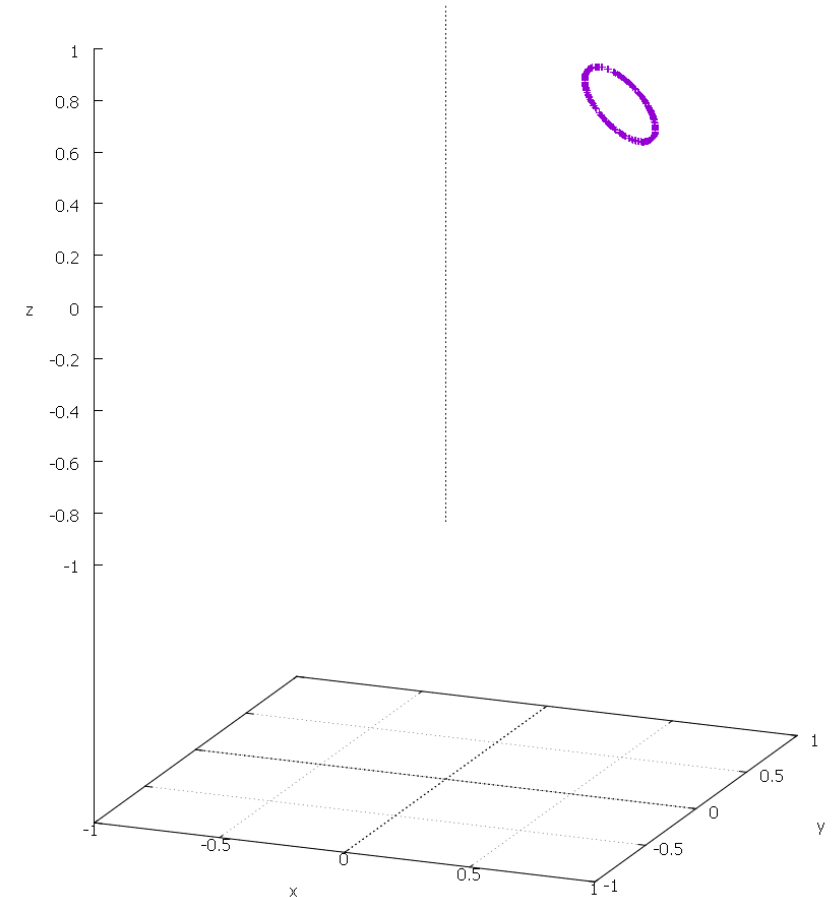
Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – geometriai rutinok ellenőrzése

A szimulációs programba történő beépítés előtt **ajánlatos a geometriai rutinokat ellenőrizni**. A Matlab fejlesztői környezet kényelmes megoldásokat biztosít ehhez a 3-dimenziós pont-halmazok ábrázolására nyújtott lehetőségeivel.

Mindenképpen célszerű ellenőrizni a **szóródás utáni véletlen irány sorsolására** írt (SZUVIR-) rutinunkat. Ezt úgy tehetjük meg, hogy választunk egy szóródás előtti irányt és egy eltérülési szöget, majd kellően nagy ciklusszámmal „megjáratva” a rutint, 3-dimenzióban ábrázoljuk a kisorsolt szóródási irányvektorok csúcspontjait. Ekkor egy – a jobb oldali ábrán láthatóhoz hasonló – „glóriát” (térbeli kör ellipszis alakú látványát) kell kapnunk, amelynek tengelye megegyezik a szóródás előtti iránnyal, mérete pedig a szóródási szög szinuszával arányos (azaz ha nagyobb a szög, nagyobb a „glória”, ld. példaként a következő diát).

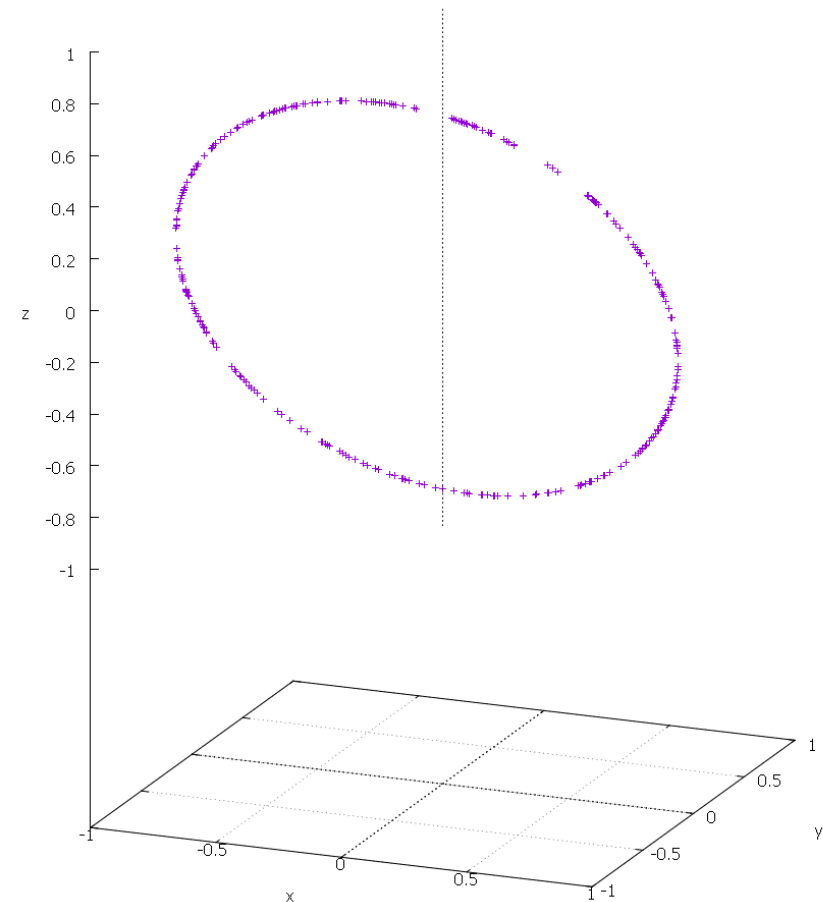
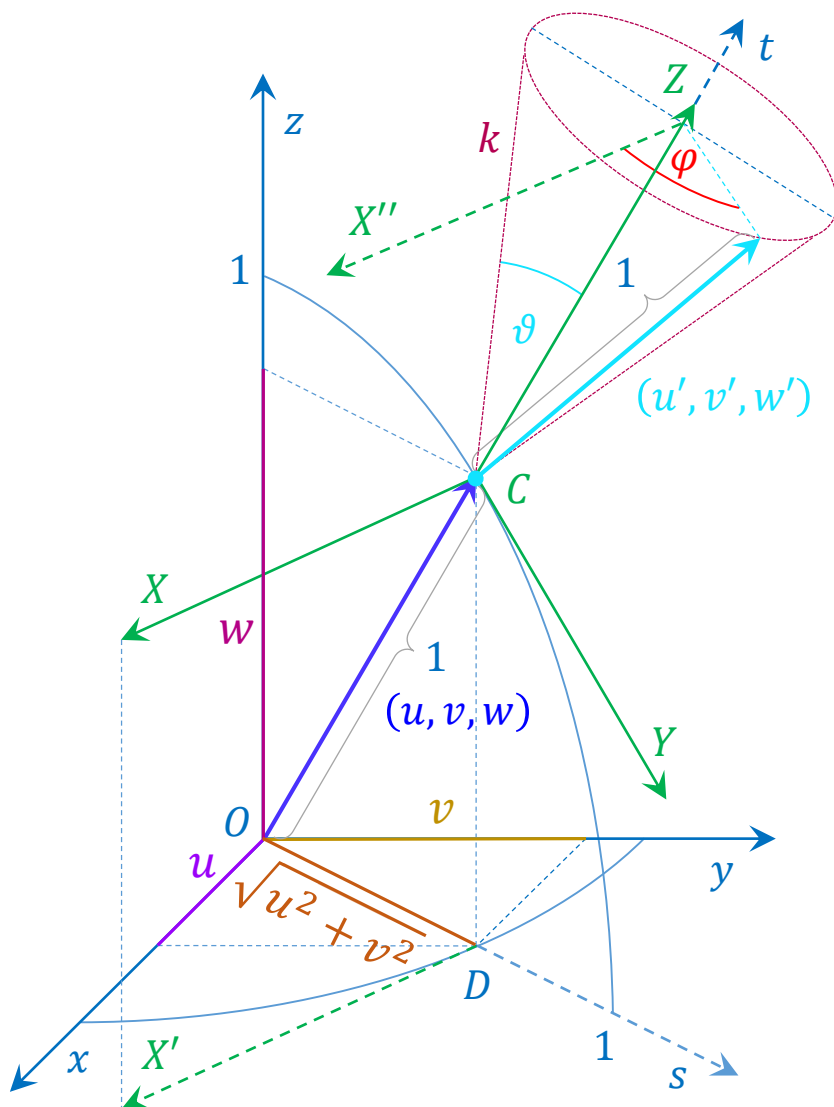
Megjegyzés: a jobb oldali ábrához használt SZUVIR-rutin nem csak egységvektort fogadott inputként. Ha az inputvektor hossza eltért 1-től, a rutin első lépésként lenormálta.



Az $(1; 0; 1)$ irányvektorhoz képes 10° -os eltérésű véletlen vektorok csúcsának megjelenítése

Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – geometriai rutinok ellenőrzése



A $(0; -1; -0,5)$ irányvektorhoz képes 80° -os eltérésű véletlen vektorok csúcsának megjelenítése

Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – geometriai rutinok ellenőrzése

Ajánlatos a forráspontból induló félegyenes véges hengerrel való dőfés- és szökéspontjának meghatározására szolgáló programrészeket is ellenőrizni. A következő három dián példaként egy ilyen integrált grafikus ellenőrzés eredményei láthatók. A tesztfeladat geometriai adatai a következők voltak:

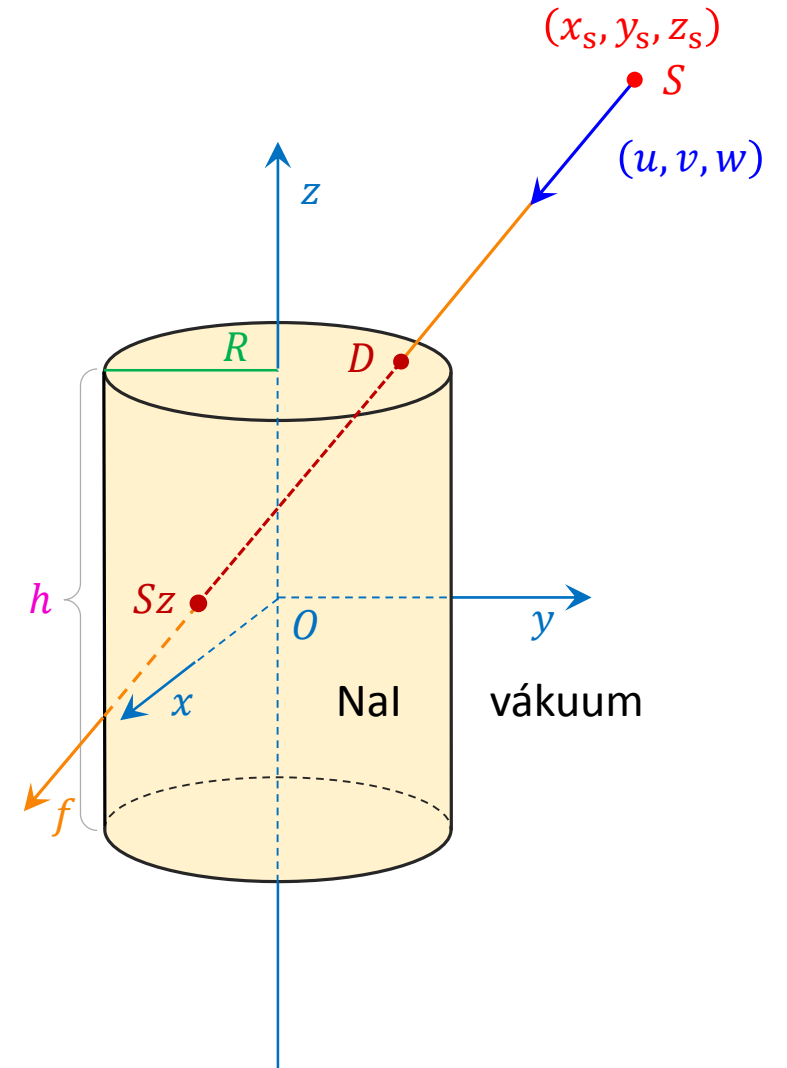
$$R = 3 \text{ cm},$$

$$h = 4 \text{ cm},$$

$$x_s = 4 \text{ cm},$$

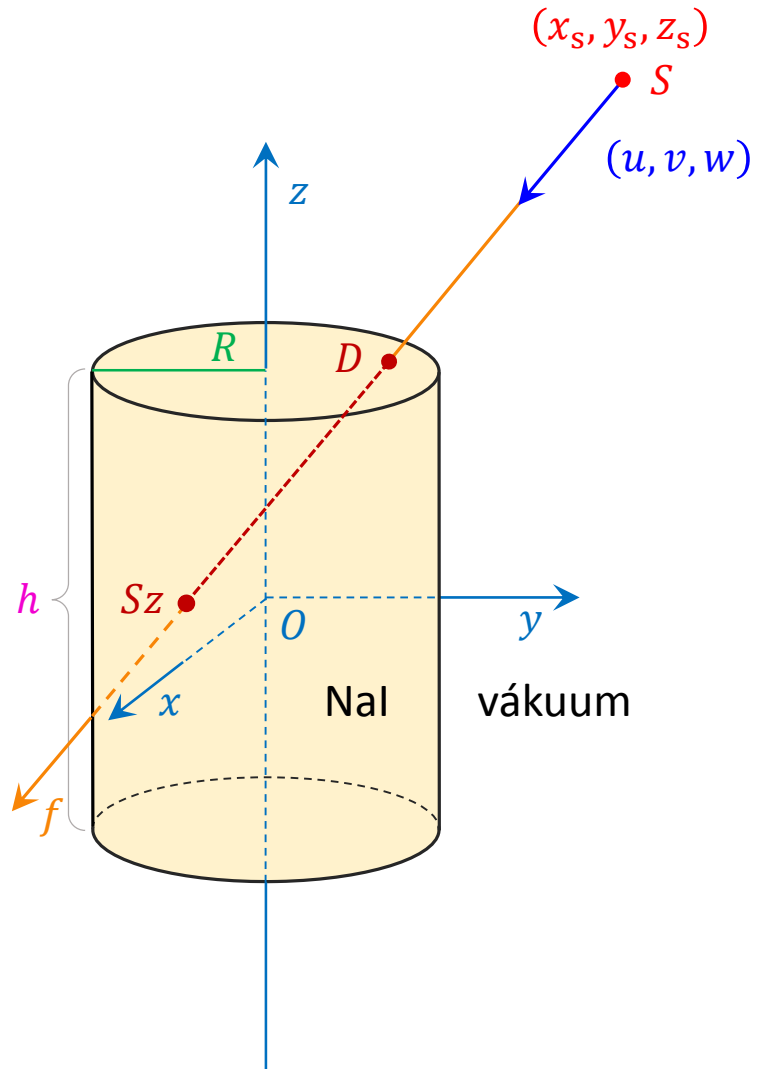
$$y_s = 4 \text{ cm},$$

$$z_s = 4 \text{ cm}.$$

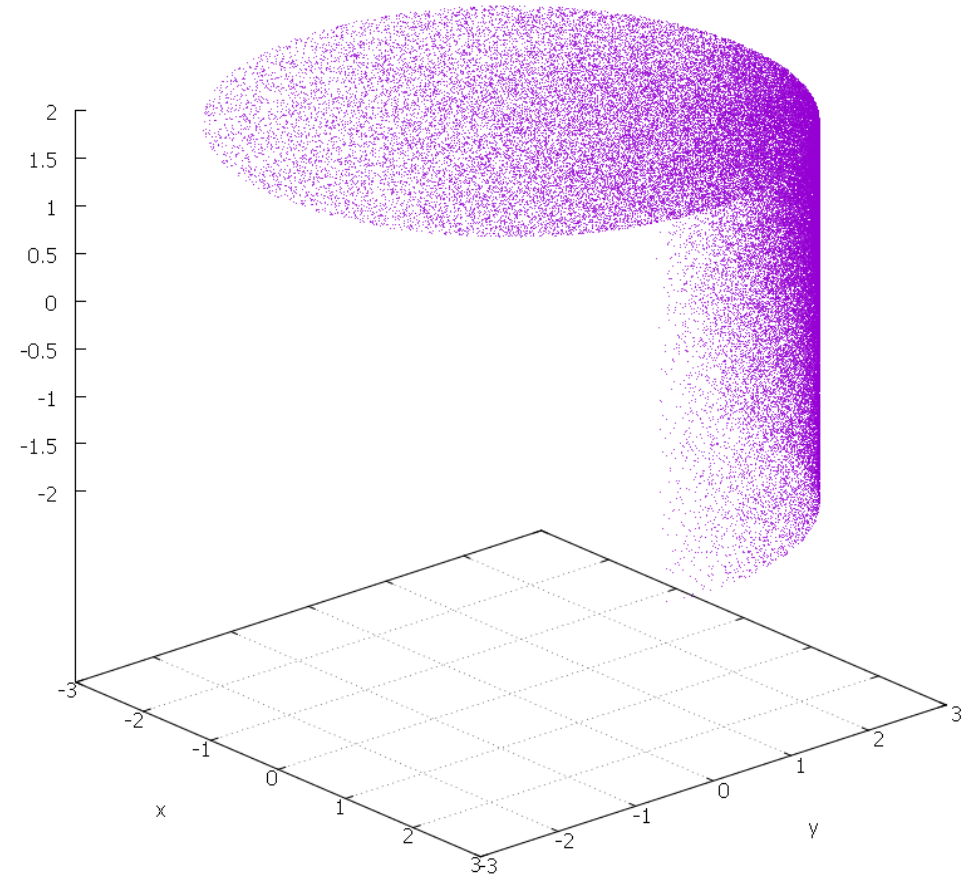


Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – geometriai rutinok ellenőrzése

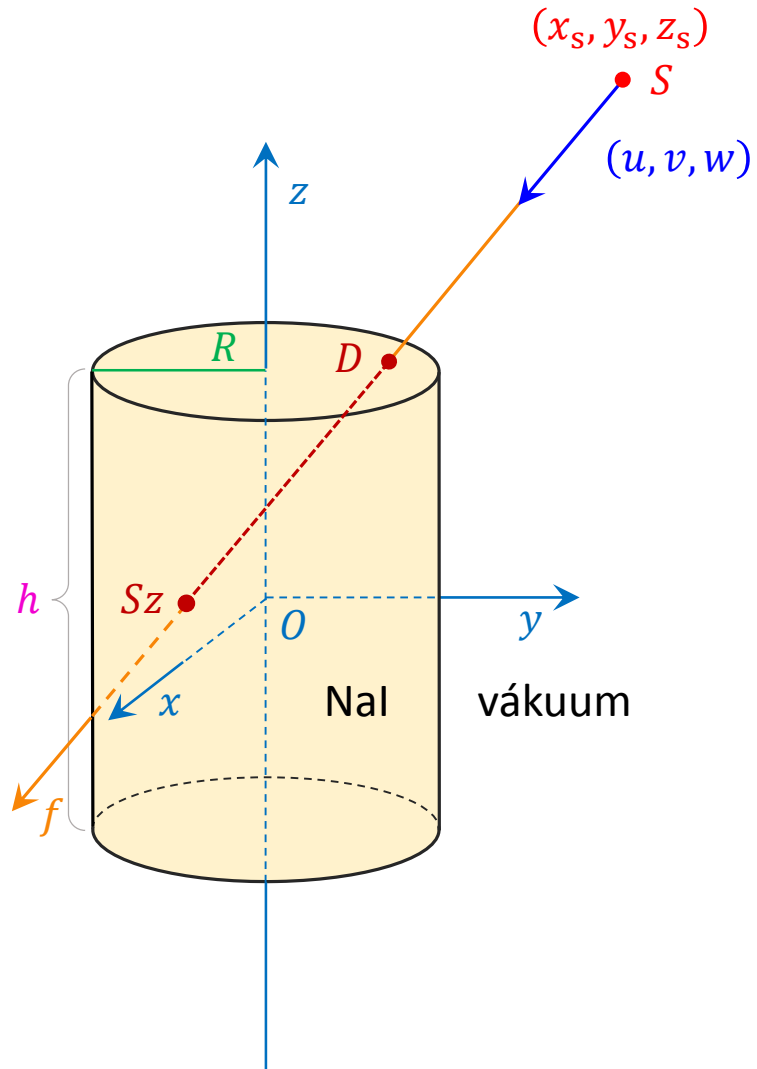


A döféspontok térbeli eloszlásának megjelenítése
(forráspont koordinátái: (4; 4; 4))

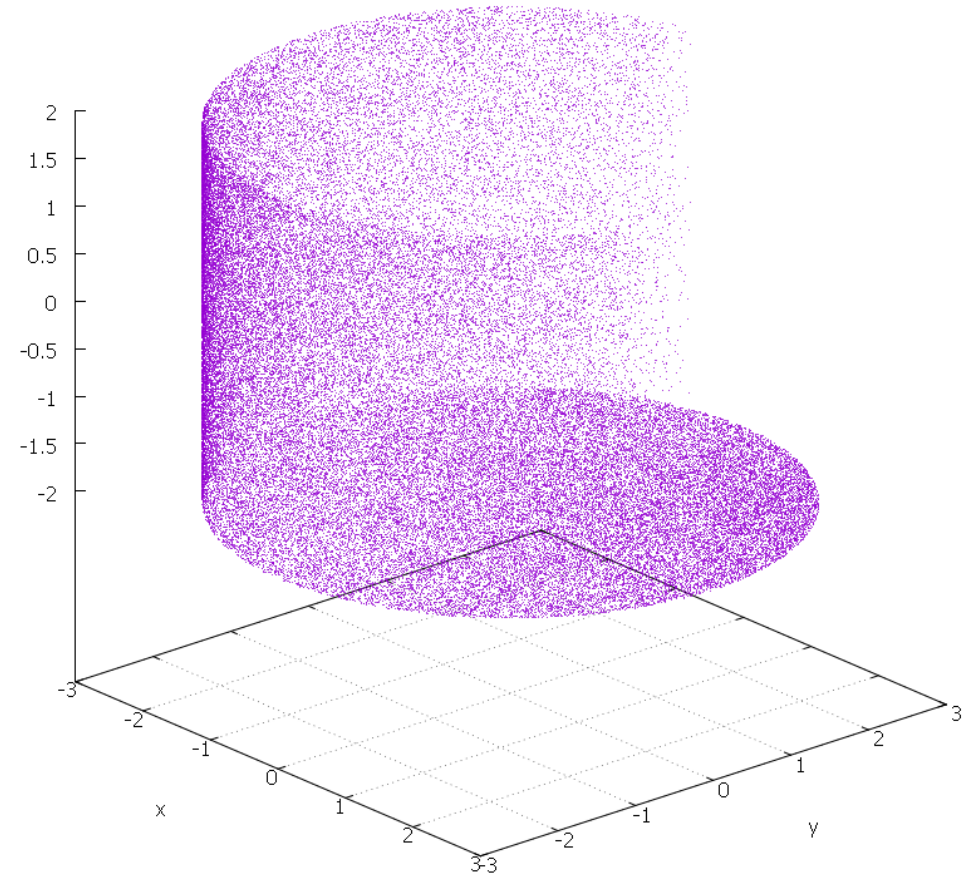


Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – geometriai rutinok ellenőrzése

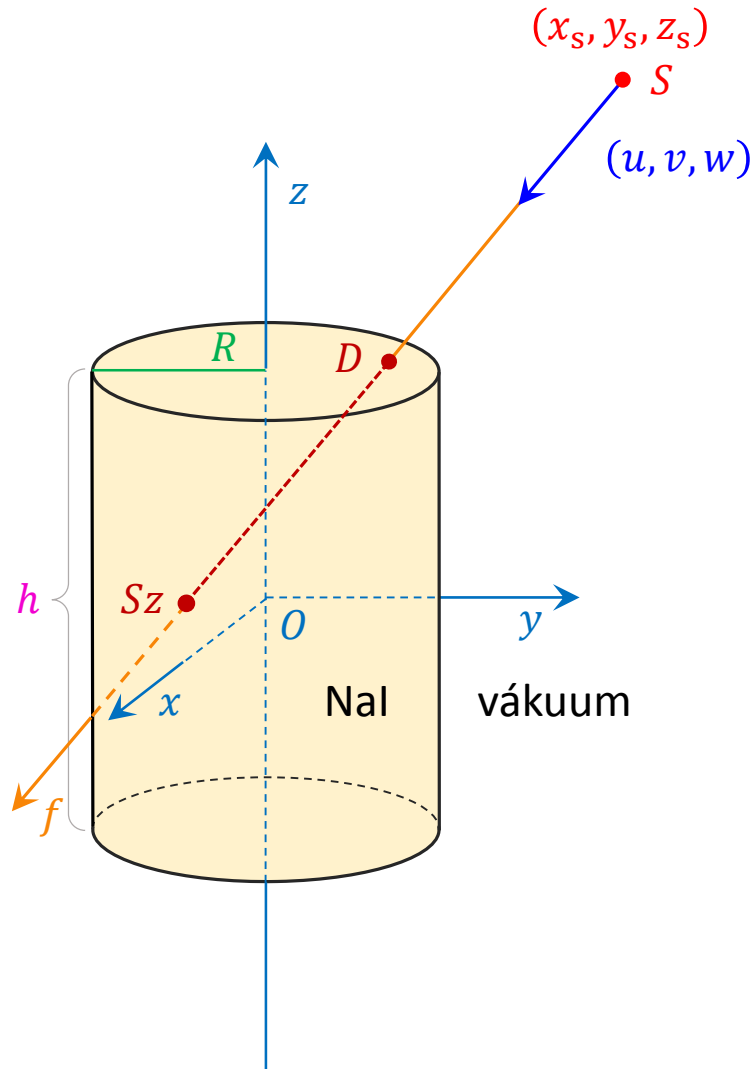


A szökéspontok térbeli eloszlásának megjelenítése
(forráspont koordinátái: (4; 4; 4))

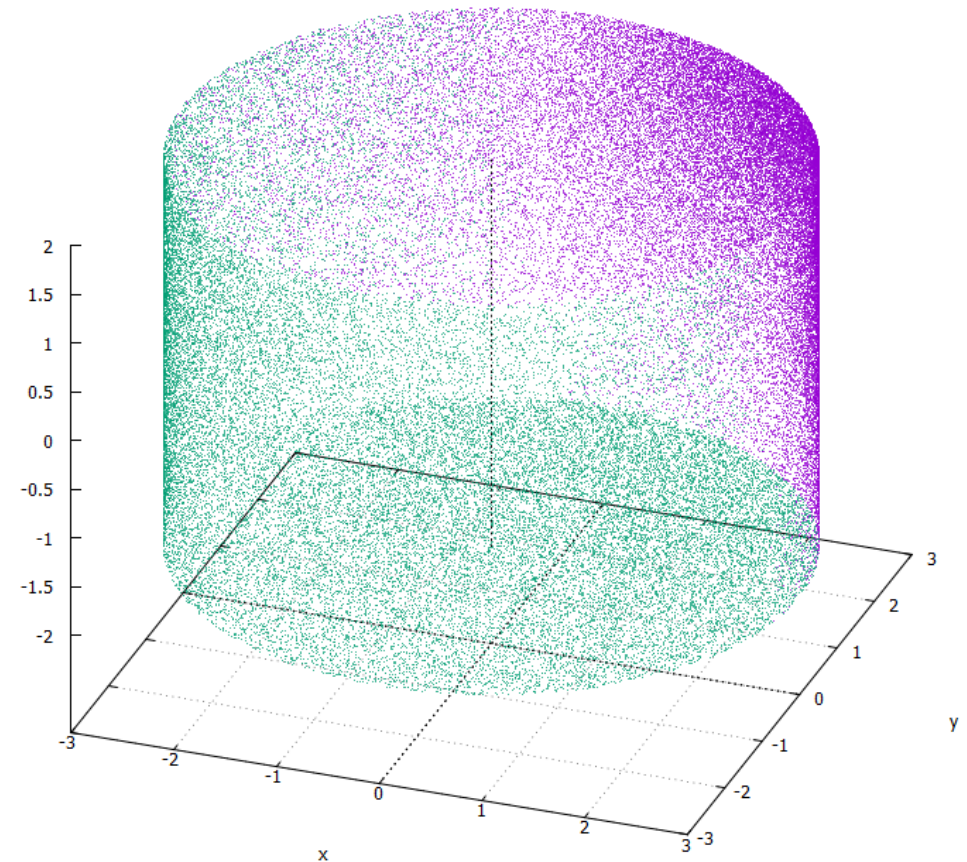


Programozási vizsgafeladat

Geometriai számítások – geometriai rutinok ellenőrzése



A döfés- és szökéspontok térbeli eloszlásának
együttes megjelenítése
(forráspont koordinátái: (4; 4; 4))

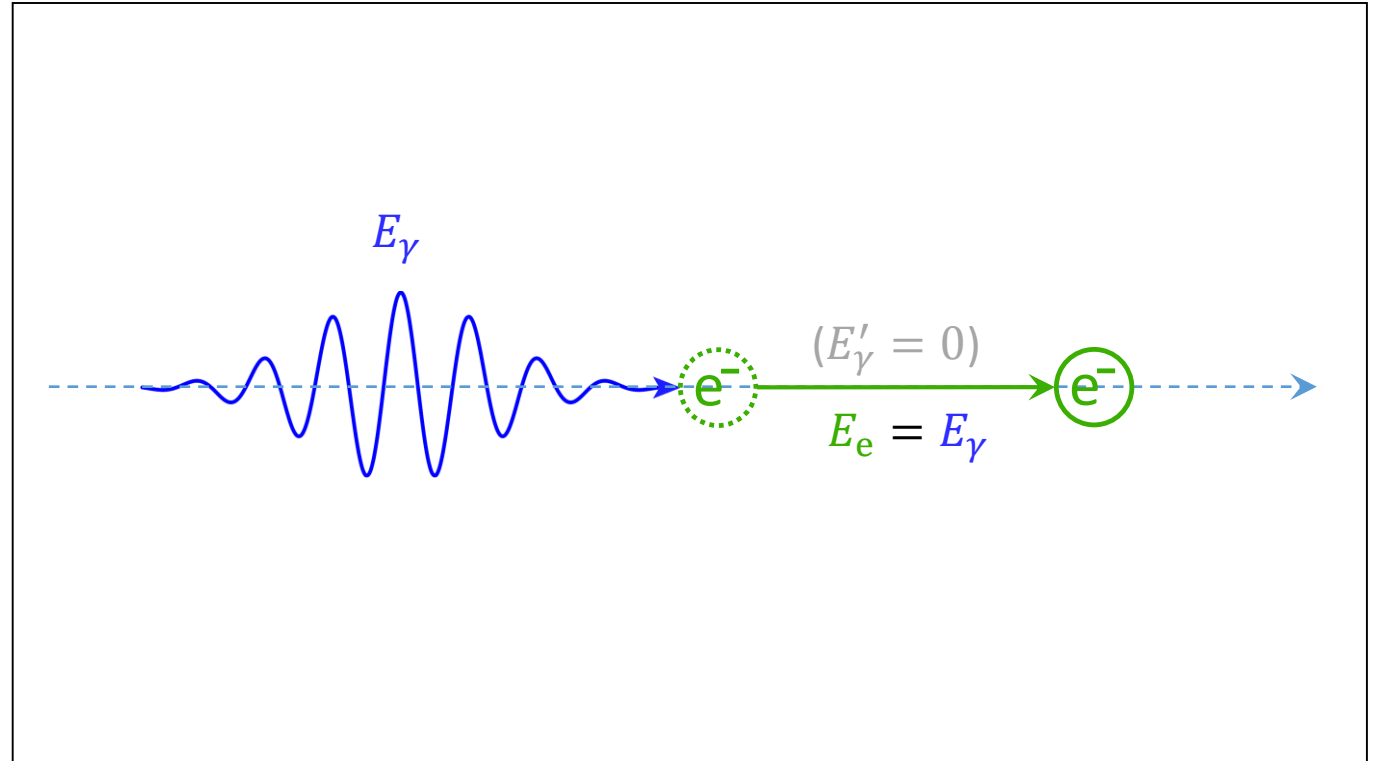


Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Fotoeffektus (fotoelektromos abszorpció)

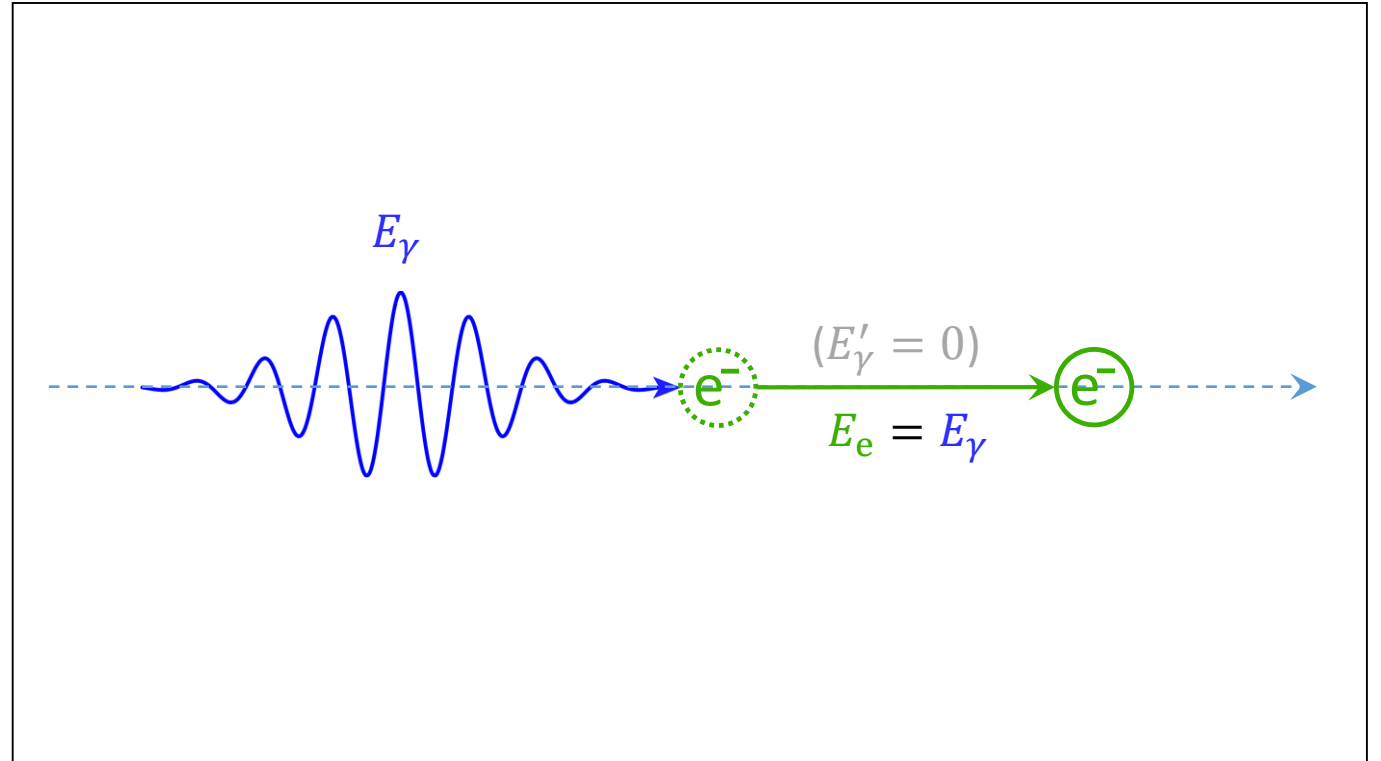
A **fotoeffektus** (fotoelektromos abszorpció) során egy küszöbszintnél nagyobb energiájú foton elektront lök ki az atomi elektronhéjról, miközben ő maga (a foton) megszűnik létezni. A jelenség kis fotonenergiáknál (elsősorban 50 keV alatt) jellemző. A kölcsönhatás folyamán a foton energiájának és impulzusának döntő részét a meglökött atomi elektron veszi át (ld. a jobb oldali ábrát). A foton energiájának egy kis töredéke (az atom tömegétől függően nagyságrendileg néhány százszázad vagy tízezred része) az atommag kinetikus energiáját módosítja.



Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Fotoeffektus (fotoelektromos abszorpció)

Mivel az elektron kötési energiája a foton energiájához képest általában elhanyagolható, a szimulációs modellünkben **azzal az egyszerűsítő feltételezéssel élünk, hogy a fotoeffektus szabad elektronon játszódik le, és így a beeső foton teljes energiáját és impulzusát az meglökött elektron viszi tovább.**

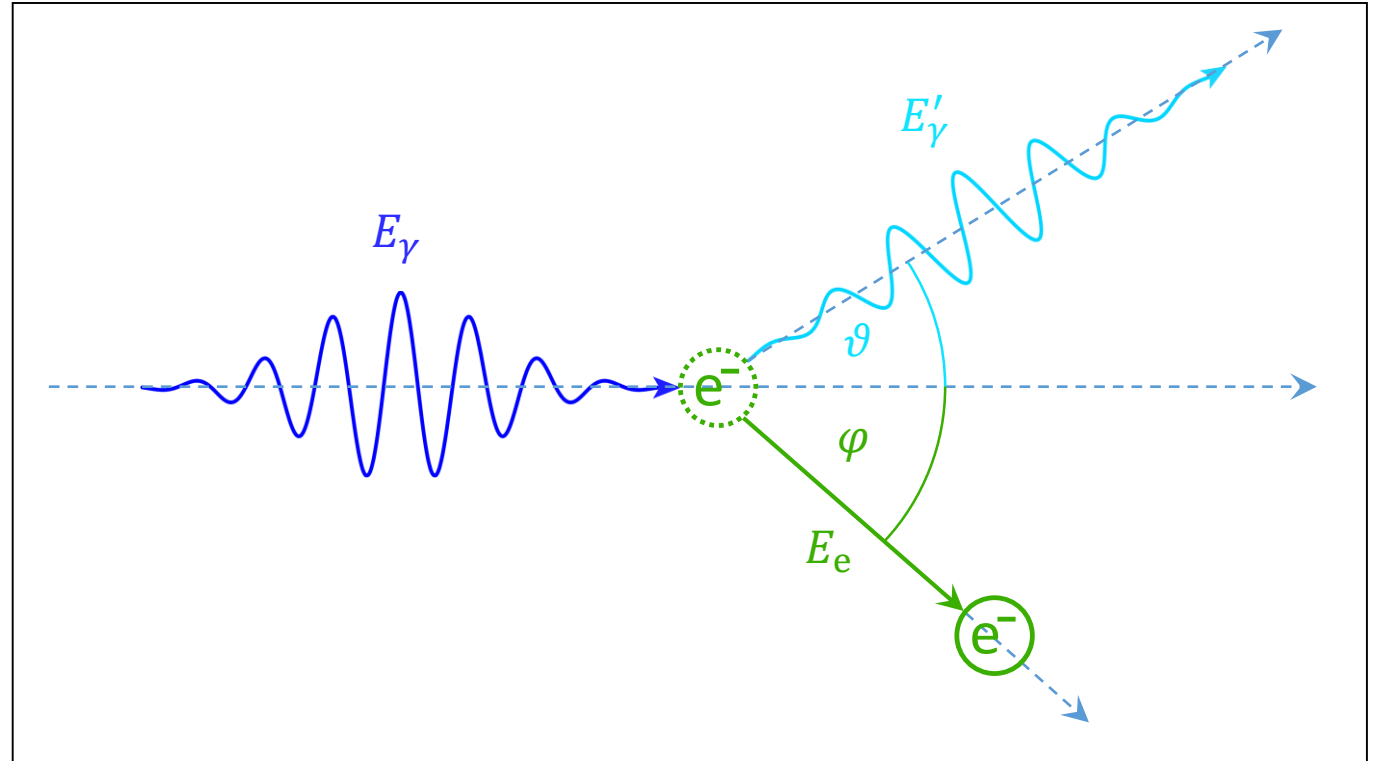


Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Compton-szóródás (inkoherens szóródás)

A **Compton-effektus** a foton „rugalmatlan” szóródása atomi elektronon [A. H. Compton*, 1923]. A jelenség főként közepes és nagyobb (tipikusan 50 keV – 2 MeV) energiájú fotonokra jellemző. A kölcsönhatás során a foton egy atomi elektronnal ütközik, amelynek energiája és impulzusa egy részét átadja, ő maga pedig megváltozott irányban, csökkent energiával és impulzussal, megnövekedett hullámhosszal repül tovább (ld. a jobb oldali ábrát).

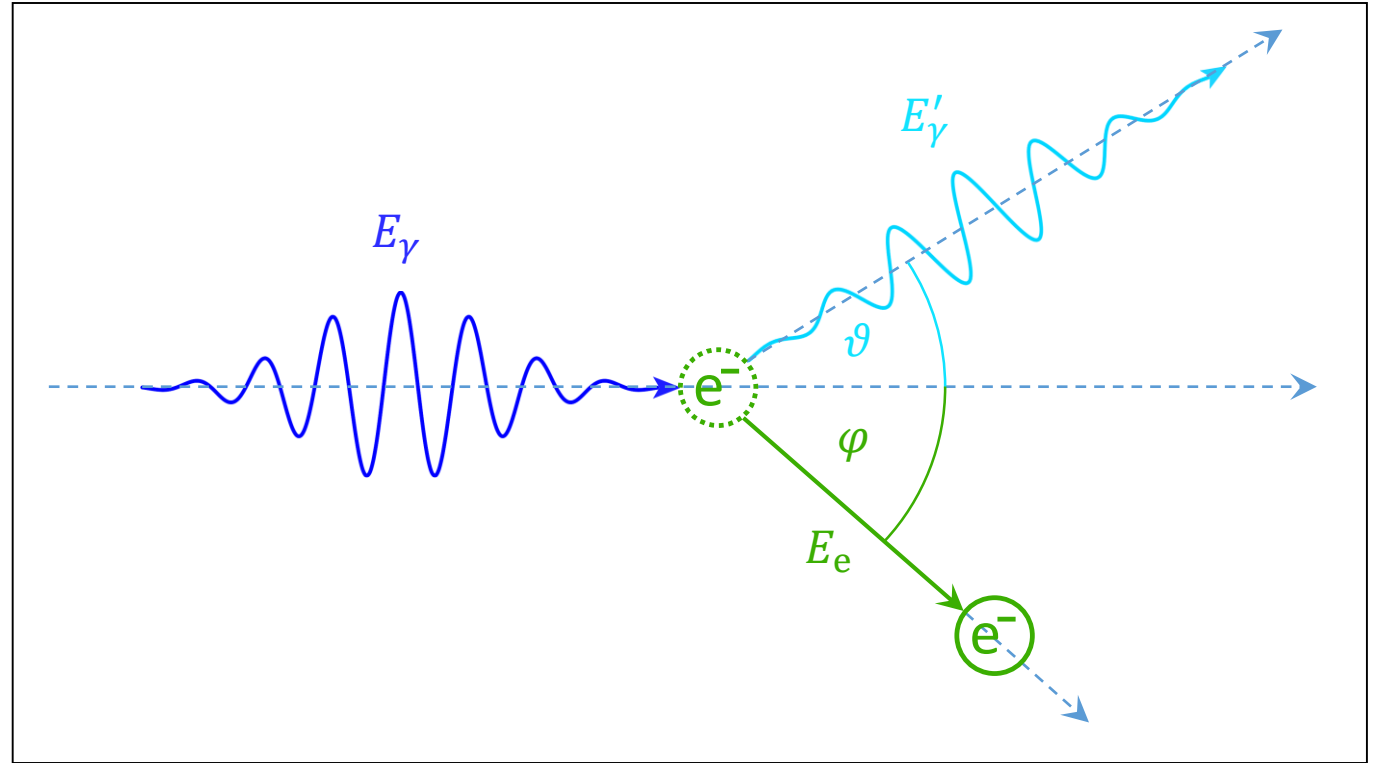
* A jelenséget Arthur H. Compton, amerikai fizikus mutatta ki és értelmezte 1923-ban. Eredményéért 1927-ben Nobel-díjat kapott.



Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Compton-szóródás (inkoherens szóródás)

Az elektron kötési energiáját elhanyagolhatónak tekintve, és az elektron relativisztikus tömegnövekedését is figyelembe véve, az energia- és impulzus-megmaradás törvénye alapján a ϑ szóródási szögnek és a foton ütközés során bekövetkező energia-csökkenésének arányára (E'_γ/E_γ) a következő összefüggés vezethető le (ld. a következő diát):



Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Compton-szóródás (inkoherens szóródás)

$$\frac{E'_\gamma}{E_\gamma} = \frac{1}{1 + \frac{E_\gamma}{m_e c^2} (1 - \cos \vartheta)}, \quad (9)$$

ahol

E_γ a beeső foton energiája,

E'_γ a szóródott foton energiája,

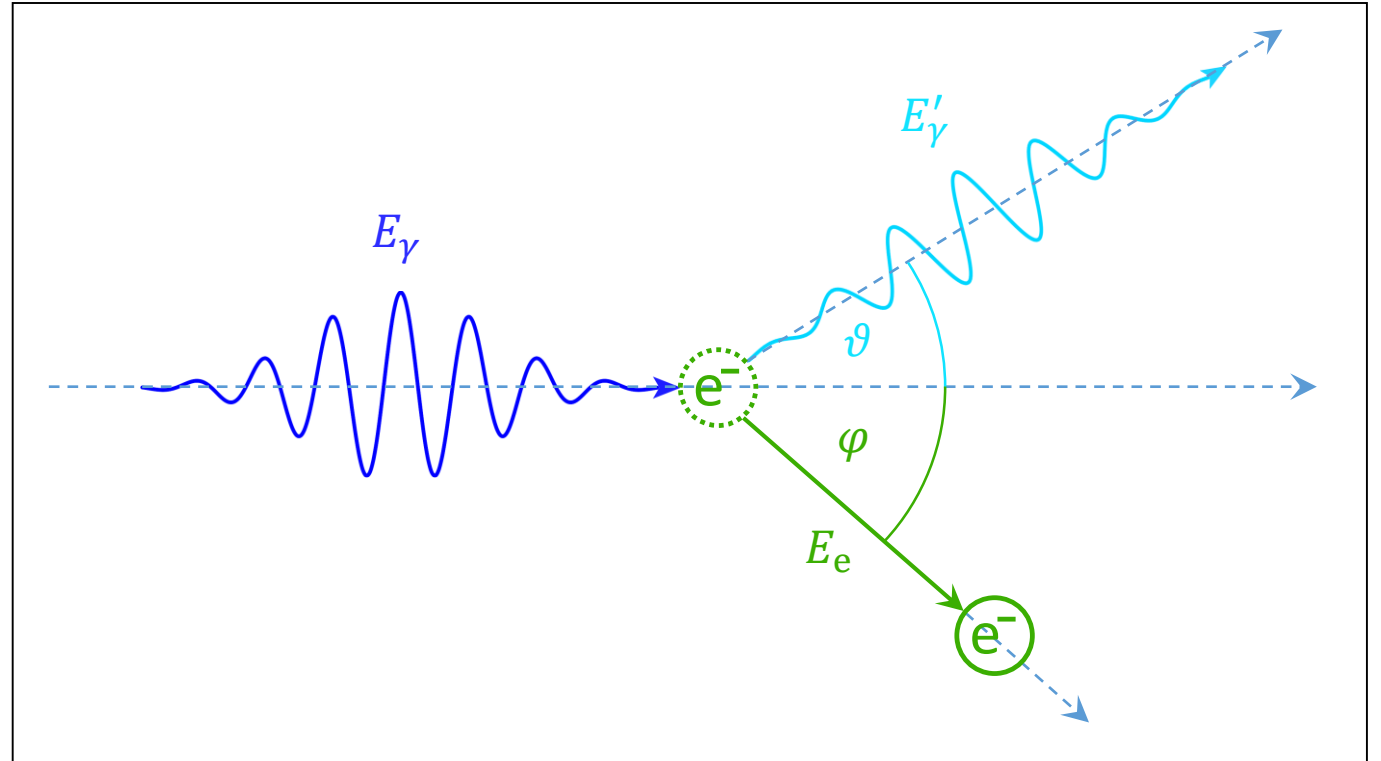
m_e az elektron nyugalmi tömege,
 c a vákuumbeli fénysebesség
($m_e c^2 = 511 \text{ keV}$),

ϑ a foton szóródási (eltérülési) szöge
($0 \leq \vartheta \leq \pi$).

A (9) összefüggést a továbbiakban *Compton-képletnek* nevezzük.

A meglökött elektron kinetikus energiája:

$$E_e = E_\gamma - E'_\gamma. \quad (10)$$



Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Compton-szóródás (inkoherens szóródás)

A Compton-szóródáson áteső foton jellemzésére – az energia mellett – szokták az úgynevezett Compton-hullámhosszat is használni, amelynek definíciója:

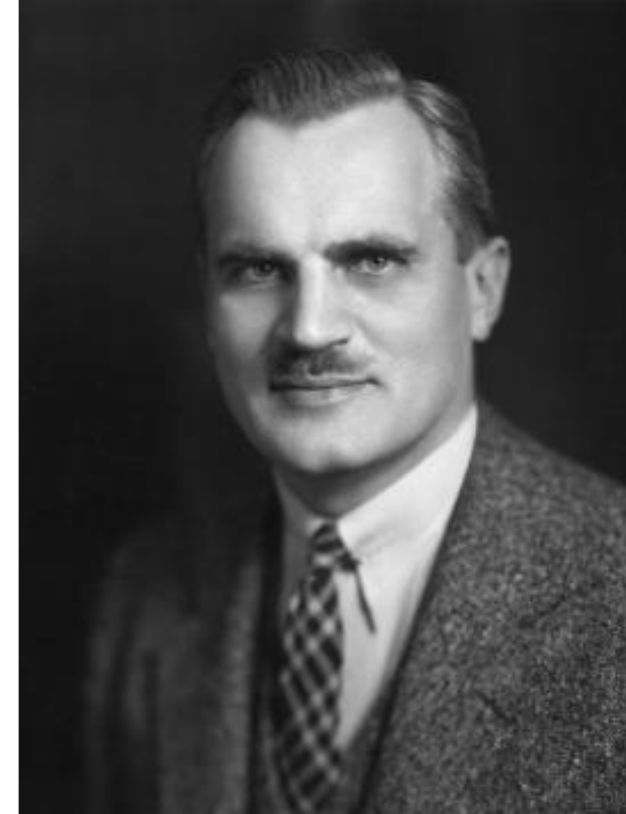
$$\lambda = \frac{m_e c^2}{E} = \frac{511 \text{ keV}}{E}, \quad (11)$$

ahol E a foton energiája. A λ tehát valójában nem hossz, hanem egy – a foton hullámhosszával arányos – mértékegység nélküli szám. Felhasználásával a (9) Compton-képlet az alábbi alakra írható át:

$$\frac{\lambda}{\lambda'} = \frac{1}{1 + \frac{1}{\lambda} (1 - \cos \vartheta)}, \quad (12)$$

ahonnan a foton Compton-hullámhosszának szóródáskor bekövetkező növekedése:

$$\lambda' - \lambda = 1 - \cos \vartheta. \quad (13)$$



Arthur Holly Compton
(1892-1962)

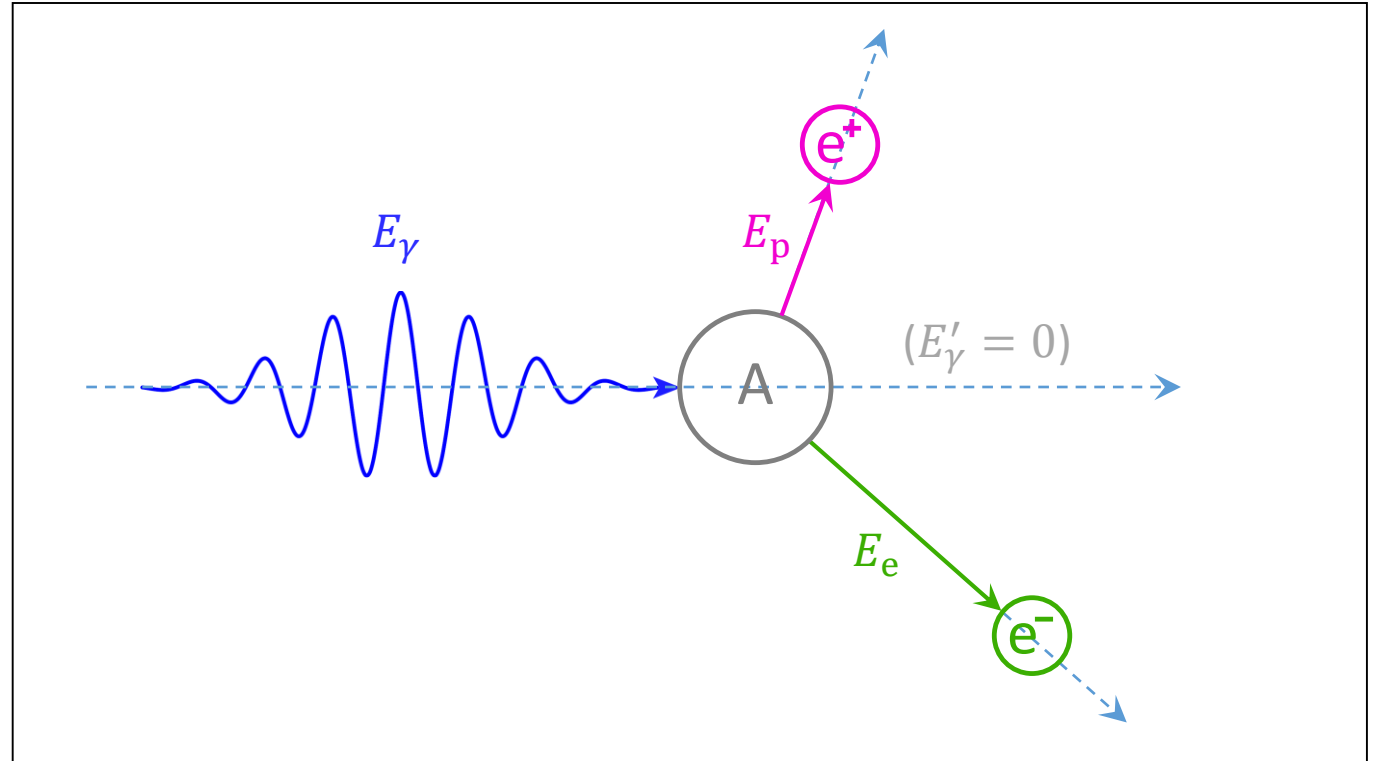
Nobel-díjas amerikai fizikus
(Kép forrása: photos.aip.org)

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Párkeltés (párképződés)

A **párkeltés** az a jelenség, amelynek során a foton „elektromágneses energiája nyugalmi tömeggel rendelkező anyaggá alakul”. A szimulációs feladatban a **párkeltés** azt jelenti, hogy a foton egy elektron-pozitron párt hoz létre, miközben ő maga (a foton) megszűnik létezni (ld. a jobb oldali ábrát).

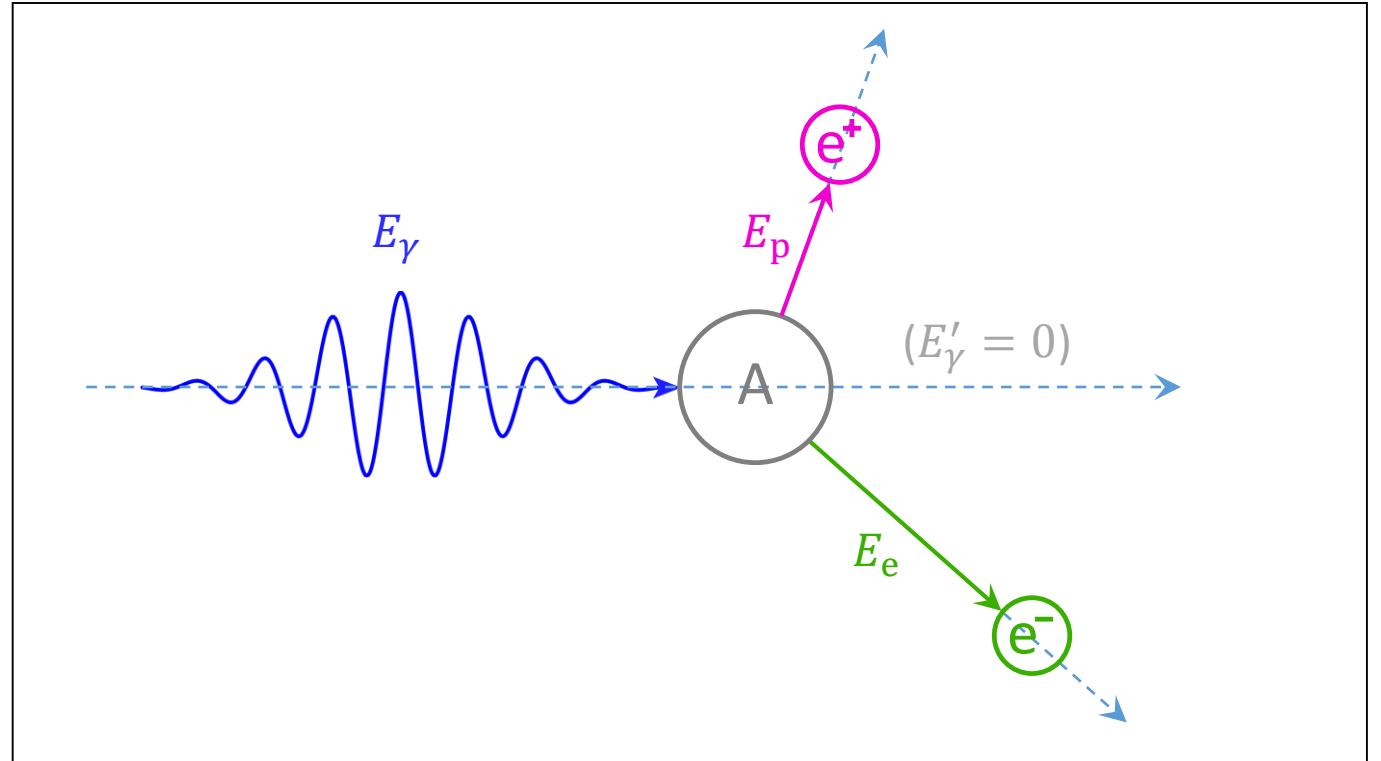
Az elektron-pozitron pár keltése küszöbreakció, csak 2 elektron nyugalmi tömegének megfelelő 1,022 MeV-nél nagyobb energiájú fotonok tudják kiváltani. Emelkedő fotonenergiával a párkeltés hatáskeresztmetszete gyorsan növekszik. A párkeltés az elektronok és az atommag elektromos terében egyaránt végbemehet.



Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Párkeltés (párképződés)

A beeső foton energiájának az elektron-pozitron pár „létrehozása” után maradó $E_\gamma - 1,022 \text{ MeV}$ része döntően a két töltött részecske kinetikus energiájára „fordítódik”, az atom, illetve atommag által elvitt néhány százszázrednyi energiahányad elhanyagolható.

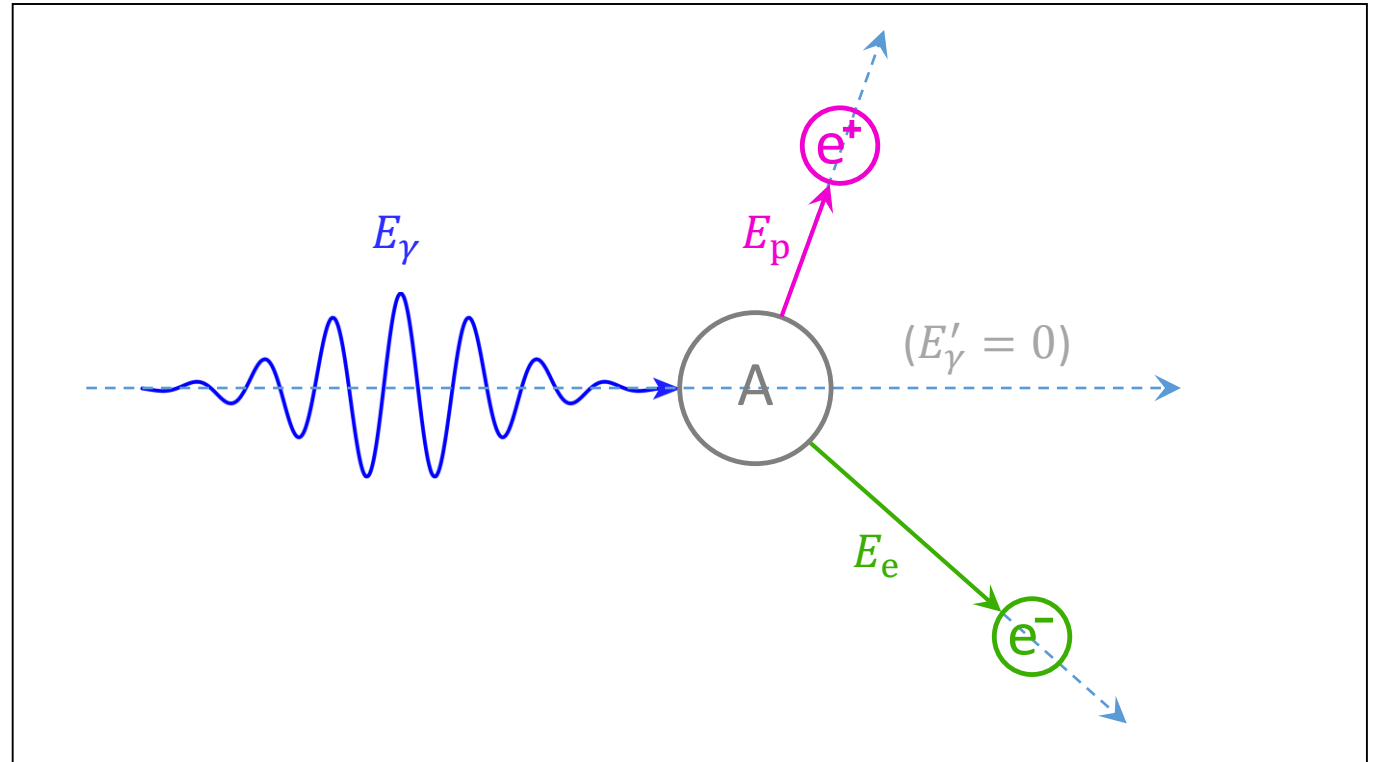


Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Párkeltés

A keletkező elektron és pozitron kinetikus energiáját külön-külön nem ismerjük (kiszámításukhoz háromtest-problémát kellene megoldanunk). De nincs is szükség a részecskék egyenkénti kinetikus energiájának ismeretére, mert a feladatkitűzésnél tett 3)-as számú egyszerűsítő feltételezés (ld. a 11. diát) szerint az elektron és pozitron lelassulása során keltett fényfelvillanások a fotoelektron-sokszorozóban ugyanahhoz az elektronlavinához (elektromos impulzushoz) járulnak hozzá. Elég tehát az elektron-pozitron pár kinetikus energiájának összegét ismerni. Ezt pedig ismerjük:

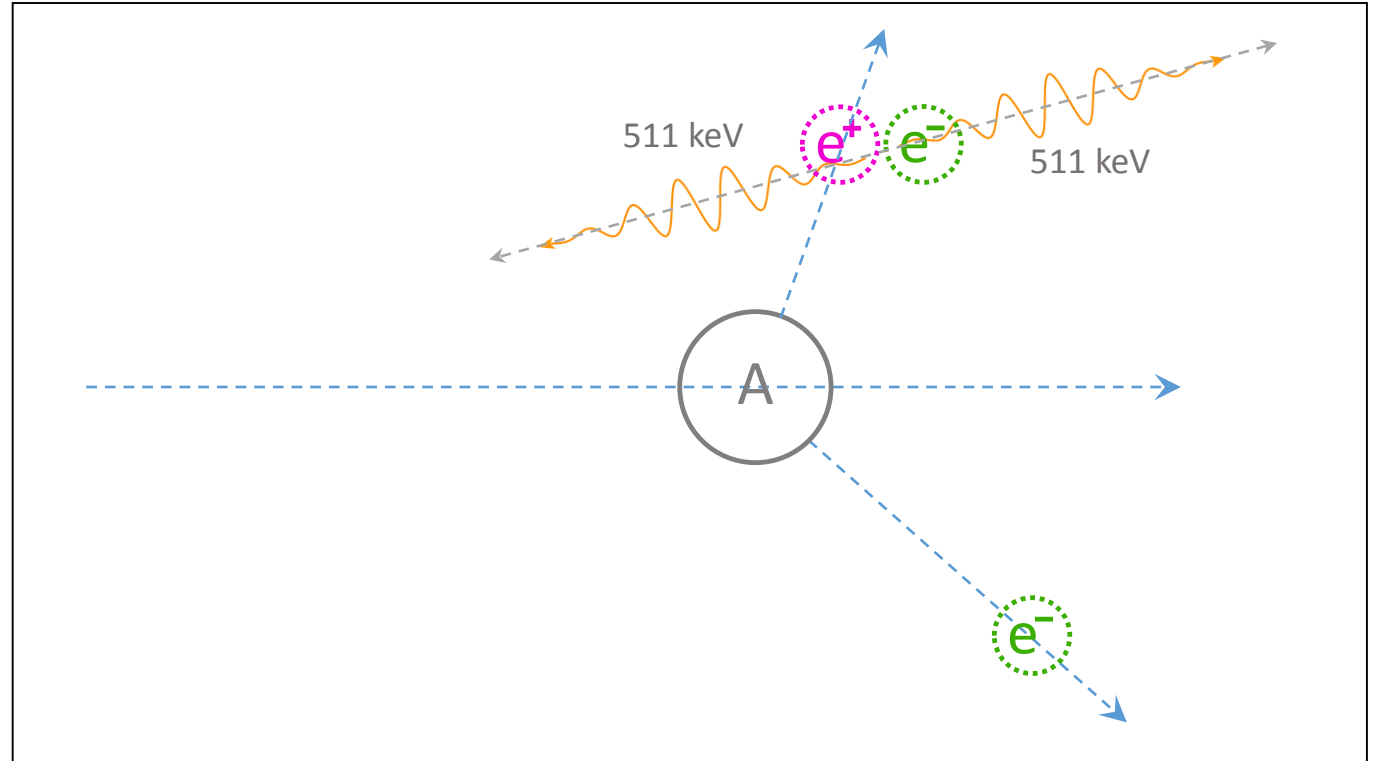
$$E_e + E_p = E_\gamma - 1,022 \text{ MeV}.$$



Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

A párkeltést követő annihiláció

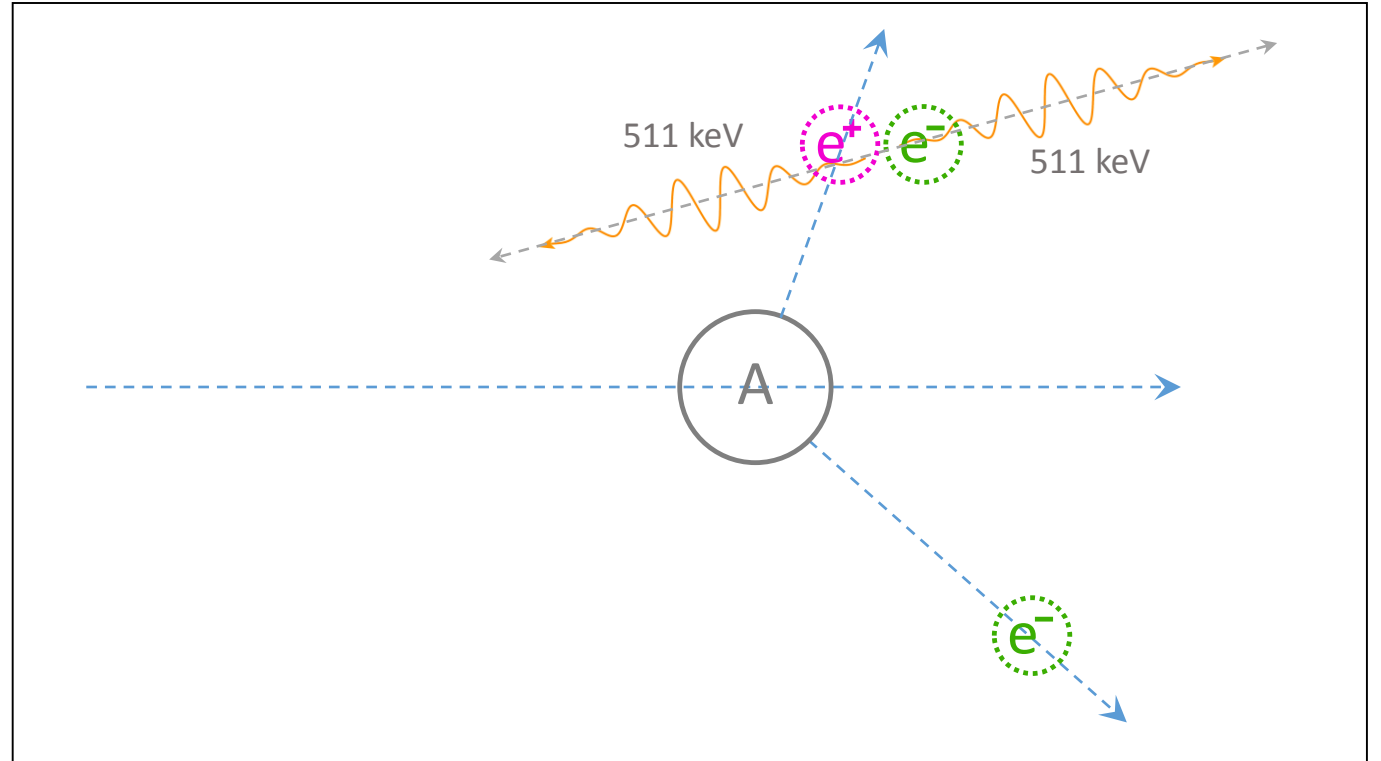
A mozgó pozitron a gerjesztések folytán energiát veszít, ennek következtében lassul, végül gyakorlatilag megáll. Ekkor a hirtelen megnövekedett kölcsönhatási valószínűség miatt **a pozitron egy „környékbeli” elektronnal annihilálódik**. Az **annihiláció** következtében a pozitron és az elektron megszűnik létezni, **a nyugalmi tömegüknek megfelelő energiát két, egymással ellentétes irányba induló, egyenként 511 keV-es gamma-foton viszi el**. (Ezért nevezik az annihilációt *szétsugárzásnak* is.) A fotonok azért indulnak egymással ellentétes irányba, mert az annihilálódó részecskéknek egyenként is nulla impulzusuk volt, és két foton együttes impulzusa így tud nulla maradni.



Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

A párkeltést követő annihiláció helye

A feladatkitűzés 2)-es egyszerűsítő feltételezése szerint (ld. a 10. diát) a detektorban keletkező töltött részecskék elhanyagolható utat tesznek meg a kristályban, ezért azok elmozdulását a szimulációban nem vesszük figyelembe. Ennek következtében – a jobb oldali ábrán látható situációtól eltérően – a szimulációban a pozitron annihilációja is ott következik be, ahol a pozitron létrejött (azaz az „A” jelű atom helyén). Így az annihilációs fotonok is erről a helyről indulnak (egymással ellentétes irányban, izotrop térbeli irányeloszlással).

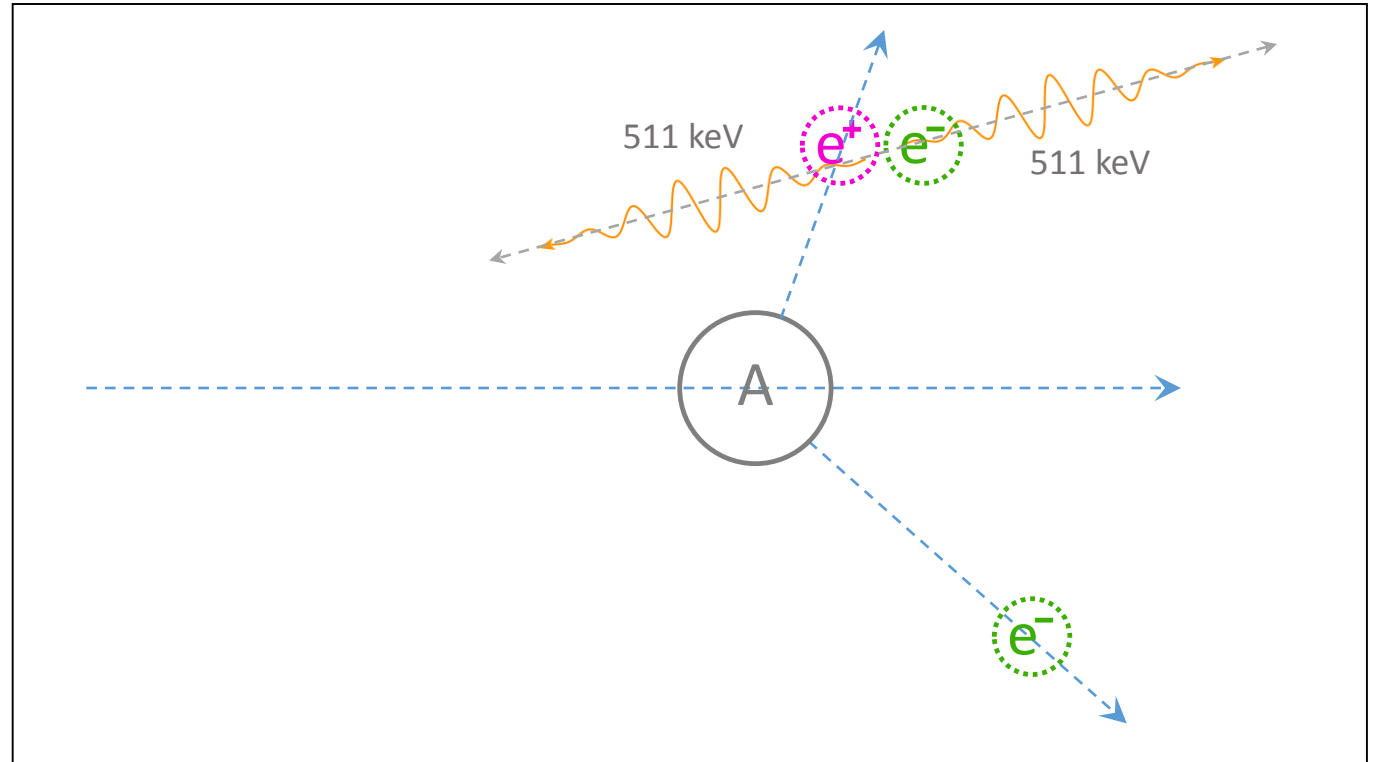


Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

A forrásfoton trajektóriájának kettéágazása párkeltésnél

Ha tehát párkeltés történik, akkor a szimulációs programnak – a két töltött részecske együttes kezdeti kinetikus energiájának feljegyzése (a megfelelő program-változóhoz történő hozzáadása) után – mindkét foton életútját végig kell játszania. A **forrásfoton trajektóriájának** ilyen **kettéágazása** csak egyszer következhet be, hiszen az annihilation fotonok energiája már nem elegendő egy újabb párkeltéshez.

Természetesen az annihilation fotonok által esetlegesen keltett töltött részecskék (elektronok) kinetikus energiáit is ki kell számítani, és ugyanahhoz a programváltozóhoz kell hozzáadni, amelyben a párkeltéshez vezető **forrásfoton** által kiváltott összes töltött részecske kinetikus energiáját gyűjtjük.

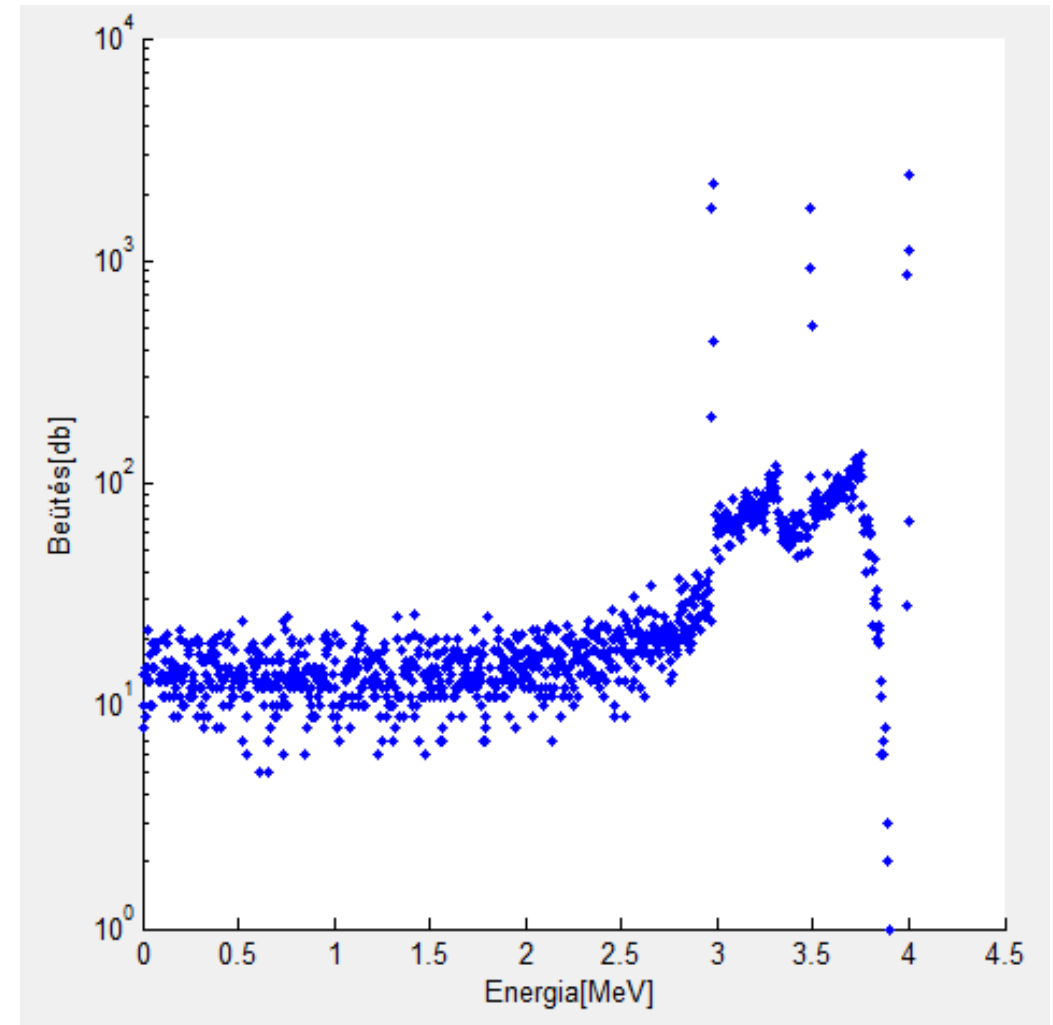


Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

A párkeltés következtében jelentkező kiszökési csúcsok

Ha kicsi a detektor, akkor elég nagy a valószínűsége annak, hogy az egyik vagy mindkét annihilációs foton mindenféle kölcsönhatás nélkül kiszökik a kristályból. Ha ez történik, akkor a forrásfoton által a detektorban leadott összes energia éppen 0,511 MeV-vel, vagy annak a kétszeresével, 1,022 MeV-vel kevesebb az eredeti forrásenergiánál. Az ilyen események gyakorisága miatt a spektrumban közelítőleg 1/2, illetve 1 MeV-vel a teljesenergia-csúcs (más néven: fotocsúcs) alatt egy-egy virtuális csúcs jelenik meg (ld. a jobb oldali ábrát). Ezeket egyszeres, illetve kétszeres **kiszökési csúcs**nak nevezzük. Ilyen csúcsok természetesen csak 1,022 MeV fölötti forrásenergiánál alakulhatnak ki. A csúcsok annál markánsabbak (magasabbak), minél nagyobb a forrásenergia.

A kiszökési csúcsok mérete és egymáshoz viszonyított aránya a detektor méretétől és alakjától is függ, ezért az arányok tanulmányozása jó lehetőséget teremt a program tesztelésére.



1024 csatornás spektrum ($E_{\gamma,s} = 4 \text{ MeV}$)

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

A Compton-szóródás szögeloszlása, a Klein-Nishina formula

A **Klein-Nishina-formula** [1929] a szabad elektronon szóródó gamma-foton differenciális szögleoszlását (más szóval: a Compton-szóródás eltérülési szögének valószínűsége-sűrűség-függvényét) adja meg a következő alakban:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} \alpha^2 r_c^2 P(E_\gamma, \vartheta)^2 [P(E_\gamma, \vartheta) + P(E_\gamma, \vartheta)^{-1} - \sin^2(\vartheta)], \quad (14)$$

ahol $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ a differenciális mikroszkopikus hatáskeresztmetszet,

$d\Omega$ az infinitezimális térszög-elem,

α a finomszerkezeti állandó ($\sim 1/137,04$),

ϑ a szóródási szög,

$r_c = \hbar/m_e c$ az elektron redukált Compton-hullámhossza
($\sim 0,38616$ pm),

$m_e = 511 \text{ keV}/c^2$,



Oskar Benjamin Klein
(1894-1977)

Svéd elméleti fizikus
(felvidéki gyökerekkel)
(Kép forrása: alchetron.com)

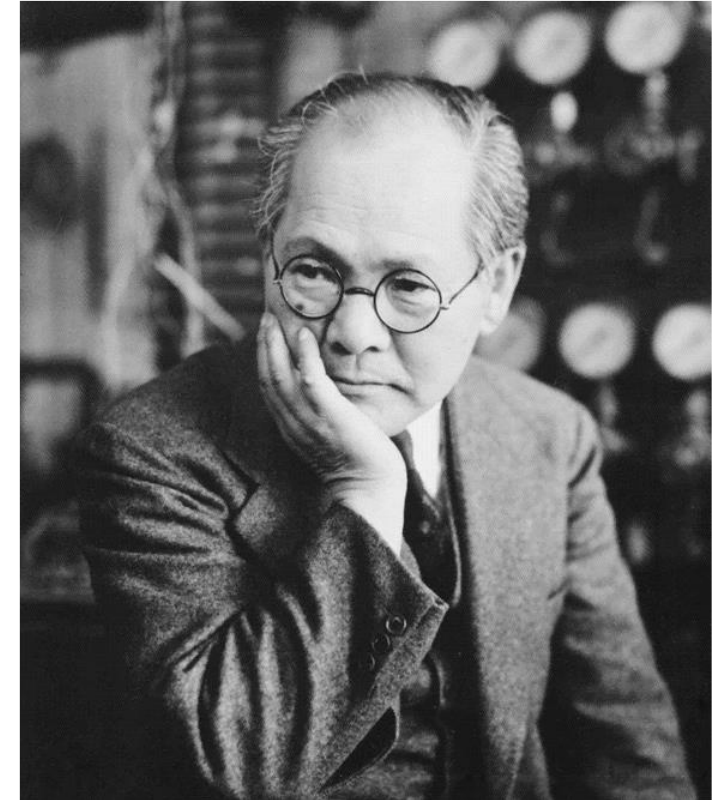
Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

A Compton-szóródás szögeloszlása, a Klein-Nishina formula

$P(E_\gamma, \vartheta)$ pedig a foton szóródás utáni és előtti energiájának aránya, ami megegyezik a (9) Compton-képletben szereplő aránnyal:

$$P(E_\gamma, \vartheta) = \frac{E'_\gamma}{E_\gamma} = \frac{1}{1 + \frac{E_\gamma}{m_e c^2} (1 - \cos \vartheta)} = \frac{\lambda}{\lambda'} = \frac{1}{X} . \quad (15)$$

Az itt bevezetett X mennyiség a $P(E_\gamma, \vartheta)$ reciproka (tehát a foton szóródás előtti és utáni energiájának aránya), ami ennél fogva egy 1-nél nagyobb érték. A Klein-Nishina-szögeloszlás mintavételezésére szolgáló eljárások többsége (köztük a későbbiekben bemutatásra kerülő Kahn-módszer is) az X -et sorsolják ki közvetlenül, és abból kell a $\cos \vartheta$ -t a (15) alapján meghatározni.



Yoshio Nishina
(1890-1951)

A modern fizikai kutatás
megteremtője Japánban
(Kép forrása: Wikipedia)

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

A Compton-szóródás szögeloszlása, a Klein-Nishina formula

A (14) **sűrűségfüggvény mintavételezésére** többféle módszert kifejlesztettek. Közülük kettőt használnak széleskörűen:

- 1) **Kahn** rejekciós **módszerét** [1954], amely minden fotonenergián működik, hatékonysága azonban 1 MeV fölött az energia növekedésével számottevően (10 MeV-ig a felére) csökken; **és**
- 2) **Koblinger** kompozíciós **módszerét** [1975], amely igen gyors, de csak 1,4 MeV-nél nagyobb energiájú fotonok esetében alkalmazható.

A fenti tulajdonságok miatt a Monte-Carlo-elvű részecske-transzport-programokba mindkét eljárást be szokták építeni, és 1,4 MeV alatt Kahn módszerét, fölötté pedig Koblinger módszerét **használják**.

Ha takarékosak akarunk lenni a fejlesztőmunkával, elég csak Kahn eljárását beprogramoznunk, az ugyanis minden energián használható.



Herman Kahn
(1922-1983)

Amerikai rendszerelméleti,
játékelméleti és stratégiai kutató
(Kép forrása: Wikipedia)

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

A Compton-szóródás szögeloszlása, a Klein-Nishina formula

A (14) **sűrűségfüggvény mintavételezésére** többféle módszert kifejlesztettek. Közülük kettőt használnak **széleskörűen**:

- 1) **Kahn** rejekciós **módszerét** [1954], amely minden fotonenergián működik, hatékonysága azonban 1 MeV fölött az energia növekedésével számottevően (10 MeV-ig a felére) csökken; **és**
- 2) **Koblinger** kompozíciós **módszerét** [1975], amely igen gyors, de csak 1,4 MeV-nél nagyobb energiájú fotonok esetében alkalmazható.

A fenti tulajdonságok miatt a Monte-Carlo-elvű részecske-transzport-programokba mindkét eljárást be szokták építeni, és 1,4 MeV alatt Kahn módszerét, fölötté pedig Koblinger módszerét **használják**.

Ha takarékosak akarunk lenni a fejlesztőmunkával, elég csak Kahn eljárását beprogramoznunk, az ugyanis minden energián használható.



Koblinger László
(1946-2019)

Villamosmérnök, fizikus,
Monte-Carlo-specialista,
sugárvédelmi szakértő

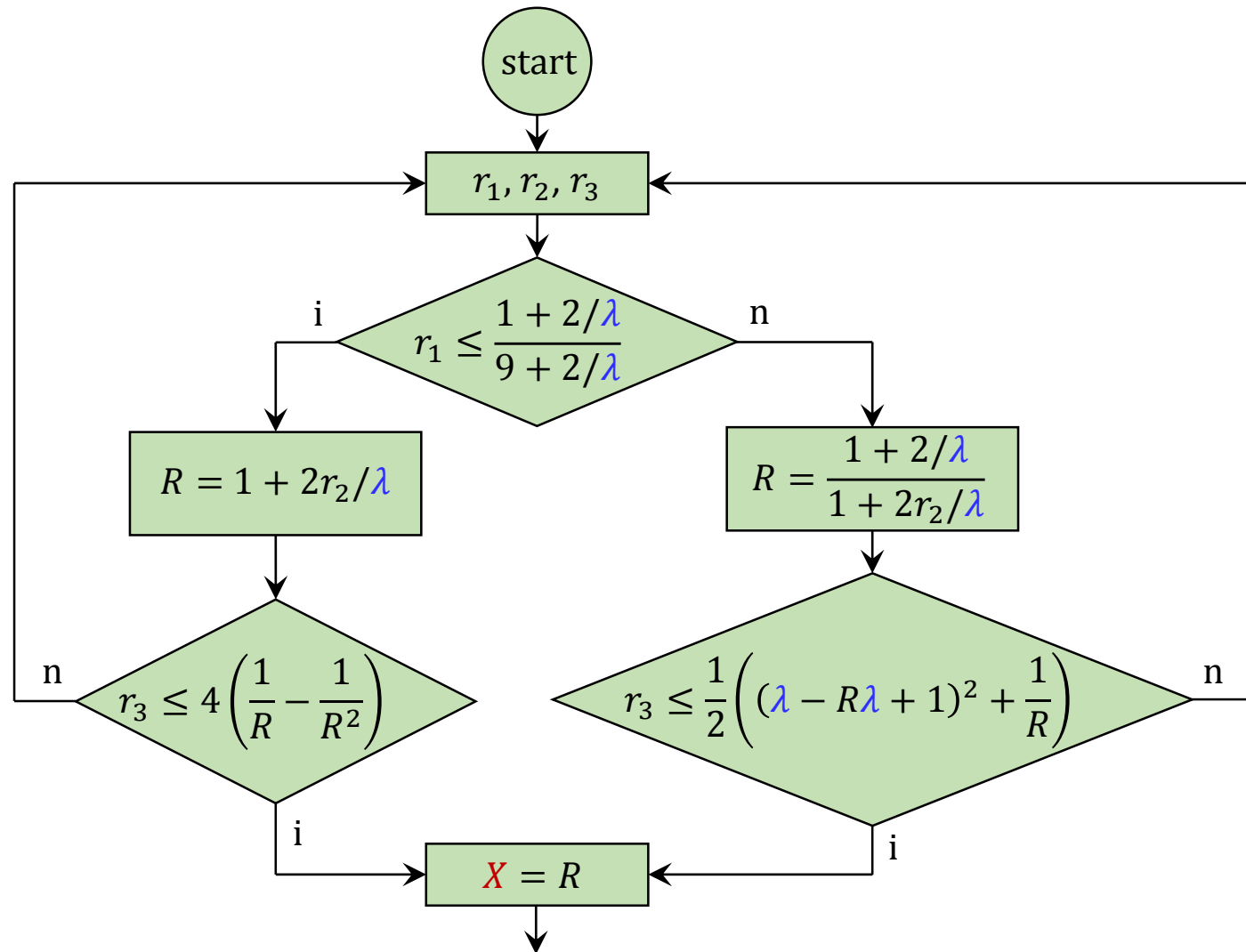
(Fotó: Fehér S.)

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Compton-szóródás szögeloszlásának mintavételezése Kahn módszerével

A jobb oldali ábrán a Compton-szóródás szögeloszlását leíró Klein-Nishina-formulának a mintavételezése szolgáló **Kahn-módszer** blokksémája látható. A rejekciós eljárás 3 kanonikus véletlenszámot igényel. A sémában szereplő λ a beeső foton Compton-hullámhossza (azaz $\lambda = \frac{511 \text{ keV}}{E_\gamma}$).

Az eljárás a hullámhossznak a szóródás során bekövetkező növekedési arányát szolgáltatja: $X = \lambda'/\lambda$, ahol λ a beeső foton, λ' pedig a szóródott foton Compton-hullámhossza.



Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

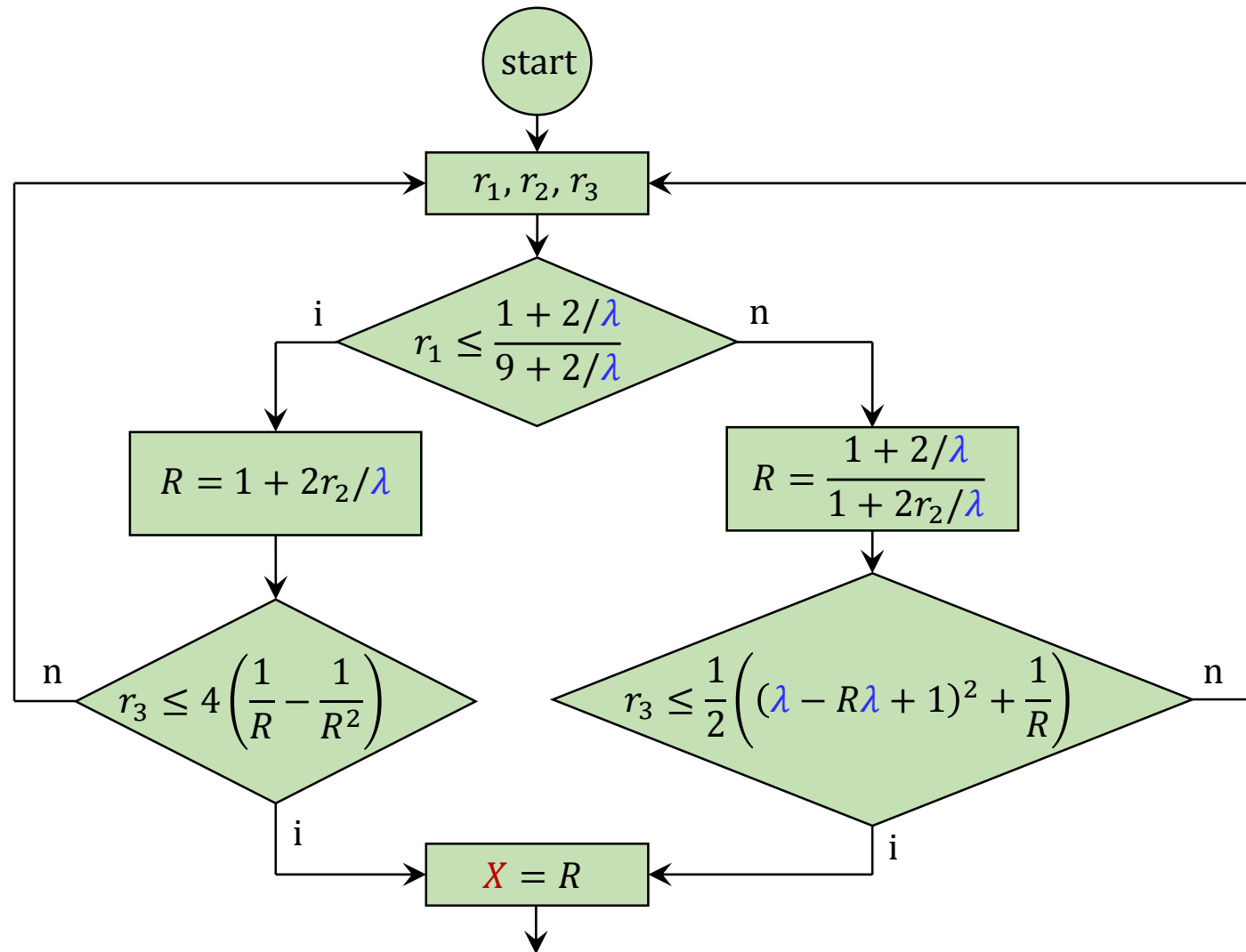
Compton-szóródás szögeloszlásának mintavételezése Kahn módszerével

Ha tehát kisorsolunk egy X értéket, akkor abból a (15) összefüggés alapján ki tudjuk számítani a ϑ szóródási szög koszinuszát:

$$\cos \vartheta = 1 + \lambda - \lambda X, \quad (16)$$

illetve magát a ϑ szöget is.

Utóbbira azonban nincs szükség, mert a szóródás utáni véletlen irány sorsolásához (a SZUVIR-eljáráshoz) éppen a $\cos \vartheta$ értékét kell megadni.

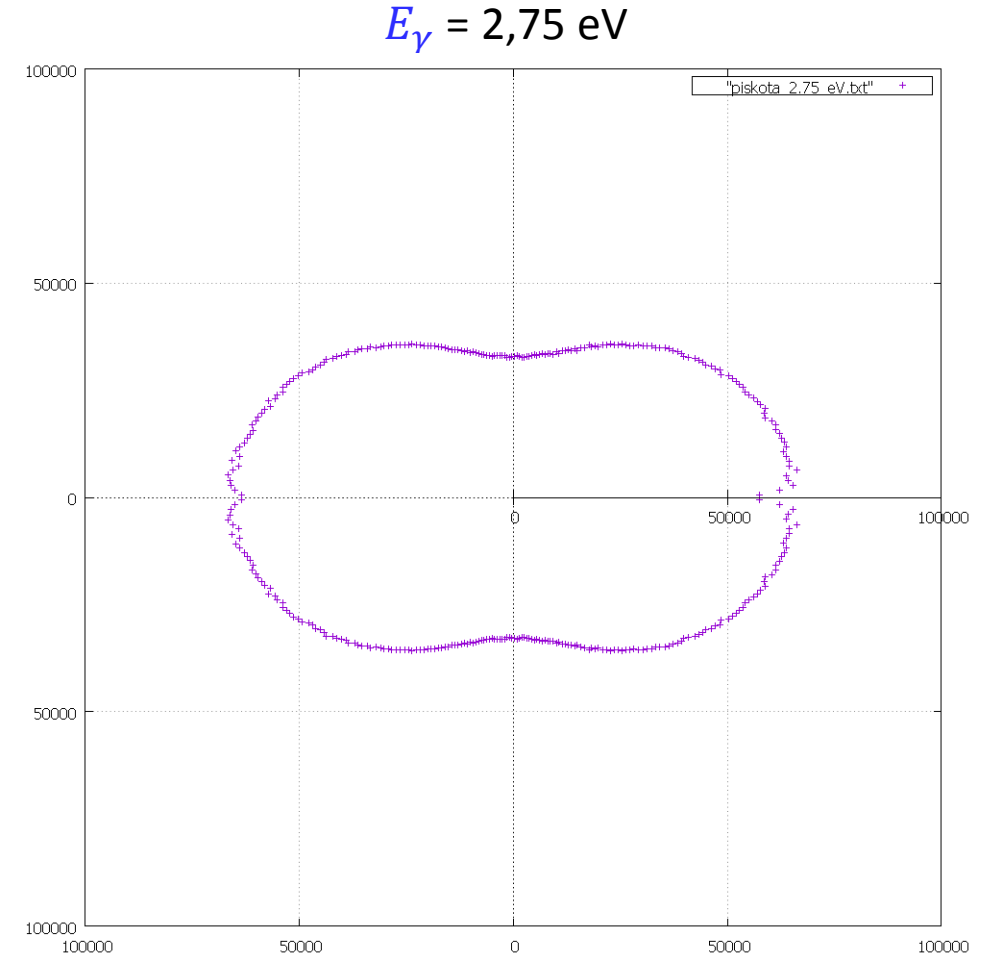


Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

A Kahn-módszer rutinjának ellenőrzése

A szimulációs programba történő beépítés előtt **ajánlatos a Kahn-eljárás rutinját ellenőrizni**. Ehhez célszerű néhány kiválasztott fotonenergián kellően nagy ciklusszámmal szóródási irányokat sorsolni, és azok eloszlását grafikusan megjeleníteni. Az ellenőrzéshez segítséget nyújthatnak a jelen és a következő diákon látható ábrák.

A Klein-Nishina-formula által leírt szögeloszlást többnyire egy olyan zárt térbeli felülettel (pontosabban annak 2-dimenziós metszetével) szokták ábrázolni, amelynek pontjai akkora távolságban vannak a szóródási ponttól, amekkora az adott felületi pont irányába történő térbeli szóródás valószínűsége (egységnyi térszögre vonatkoztatott differenciális hatáskeresztmetszete). Mivel a Compton-szóródás a beeső foton irányára – mint tengelyre – forgásszimmetrikus, ezért a szögeloszlást ábrázoló fenti felület is ilyen. Kis fotonenergiákon (1 keV alatt) ennek a 3-dimenziós forgásszimmetrikus felületnek a 2-dimenziós metszete hasonló a babapiskóta néven ismert sütemény alakjához (ld. a jobb oldali ábrát). Ezért magát a 3-dimenziós zárt felületet „nem hivatalosan” „*forgási piskotoidnak*” is szoktuk nevezni.

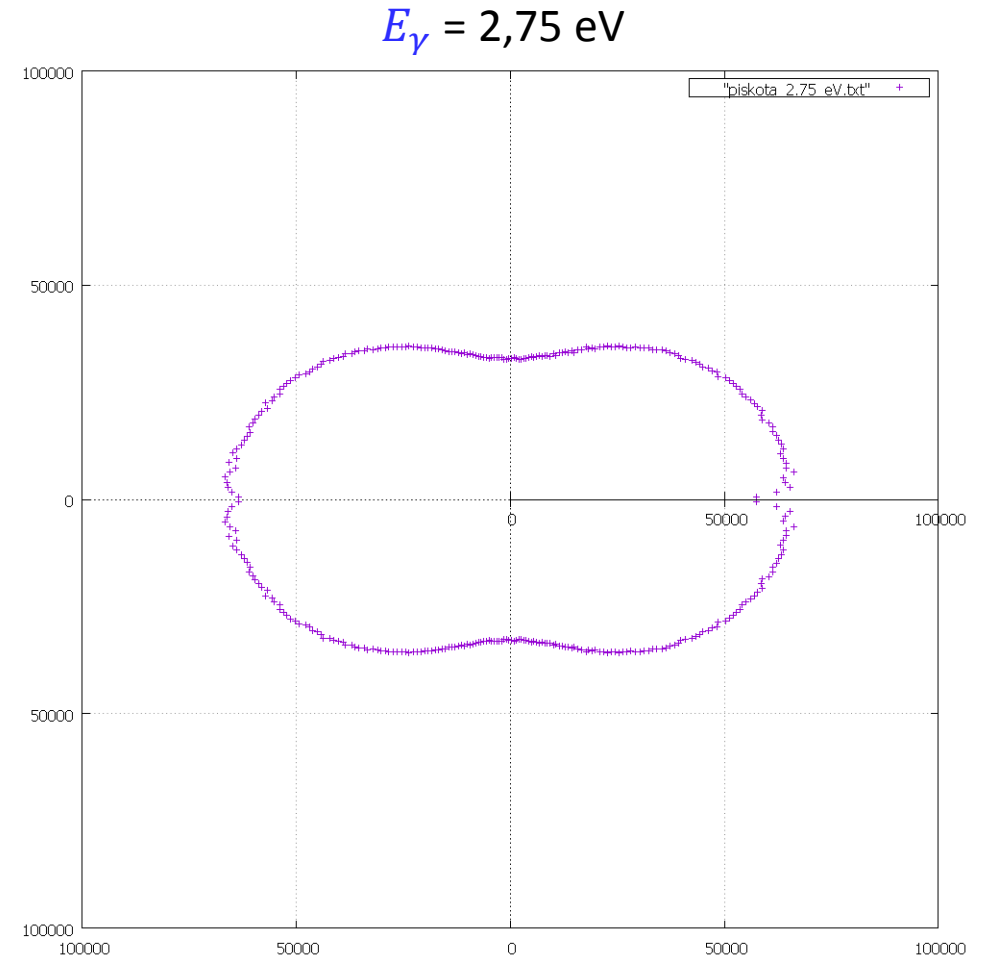


Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

A Kahn-módszer rutinjának ellenőrzése

Érdemes megfigyelni, hogy a jobb oldali ábrán a görbét alkotó pontok a vízszintes tengely közelében (azaz kisszögű előre-szóródásnál és nagyszögű visszaszóródásnál) itt-ott kilógnak a görbe vonalából. Ennek az az oka, hogy az ábrán látható görbe valós Monte-Carlo-számítások eredményei alapján készült (egy Kahn-rutin tesztelése során), és így magán viseli annak a törvényszerűségnek a hatását, hogy ahol kisebb a mintaszám, ott nagyobb a szórás. A 0° és 180° közeli eltérülési szögeknél pedig azért kisebb a mintaszám, mert a tengely közelében az eltérülési szög (ϑ) egységnyi változásához tartozó térszög-tartományok kisebbek, mint másutt. (A térszög-tartományok ugyanis az eltérülési szög (ϑ) szinuszával arányosak.)

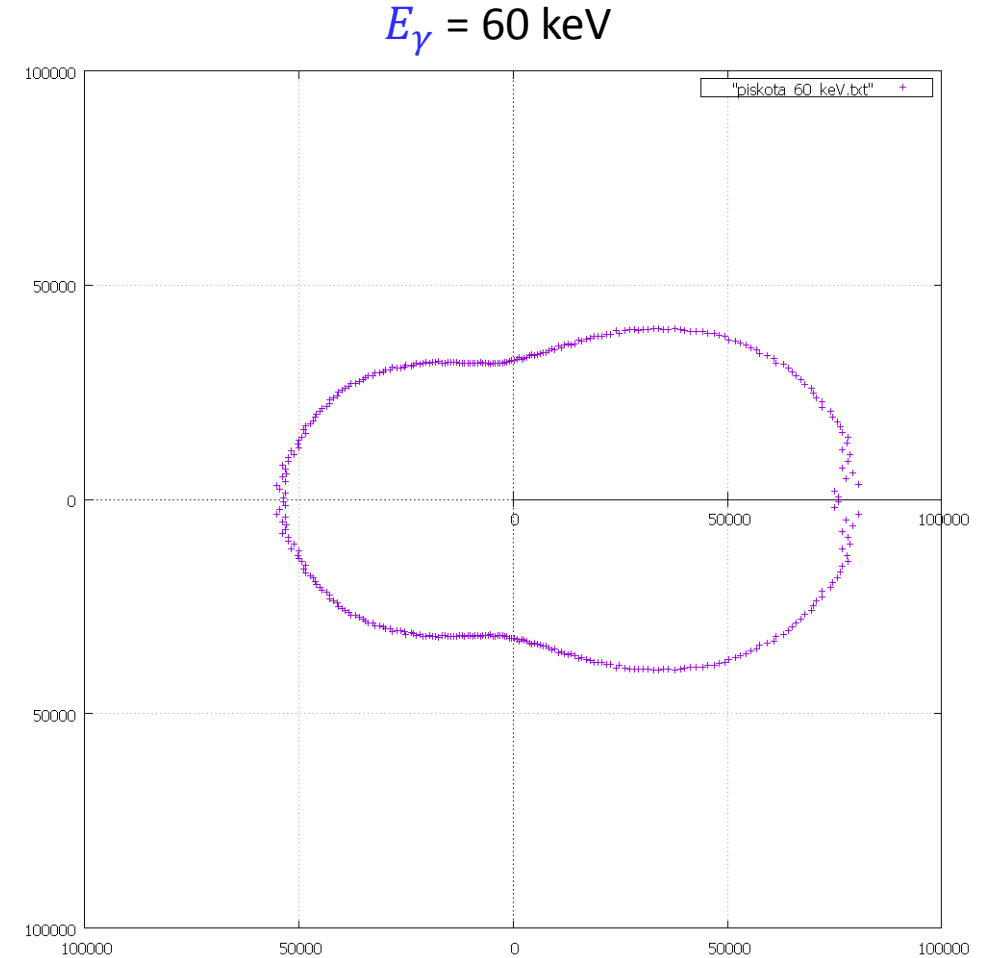
Megjegyzés: Az ábrán a vízszintes tengely alatti és fölötti pontokra megfigyelhető szimmetria nem a véletlen műve. A tesztelt program ugyanis – a probléma természetéből adódóan – csak 0° és 180° közötti eltérülési szögeket sorsolt, a görbét tükrözéssel tettük zárttá.



Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

A Kahn-módszer rutinjának ellenőrzése

A beeső foton energiájának növekedésével a piskóta alak kissé aszimmetrikussá válik: enyhe előreszóródás alakul ki (ld. a jobb oldali ábrát).

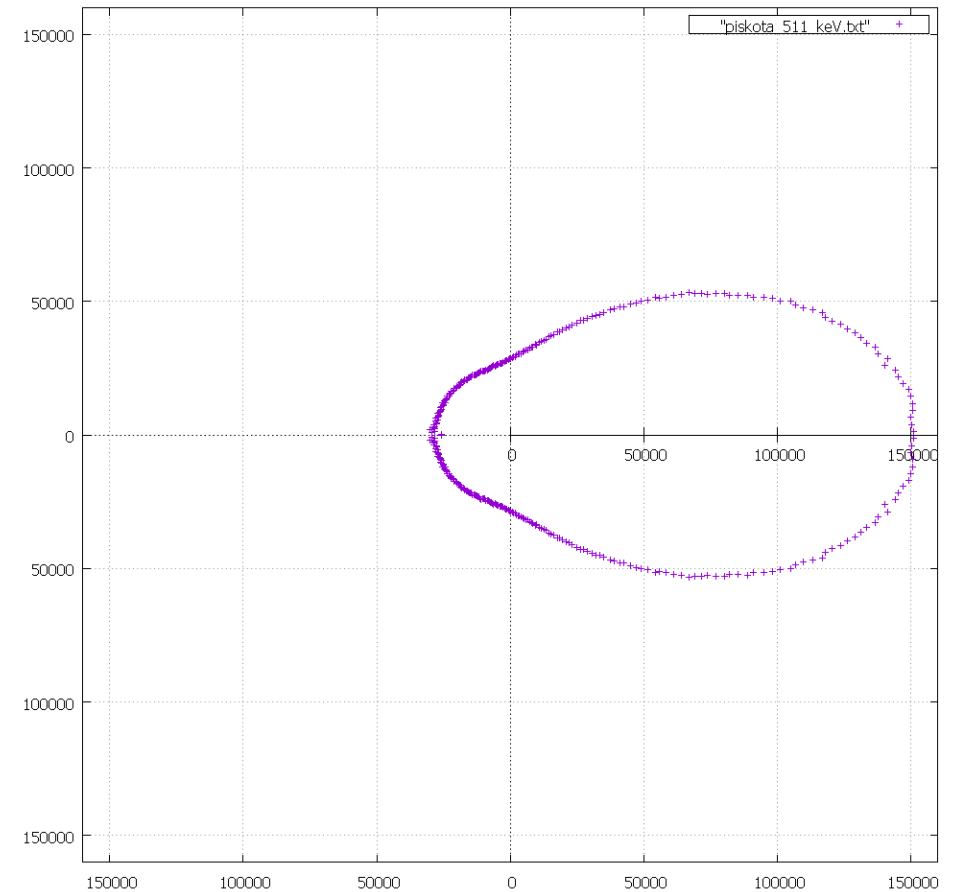


Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

A Kahn-módszer rutinjának ellenőrzése

A beeső foton energiájának további növekedésével az előreszóródás fokozódik (ld. a jobb oldali ábrát).

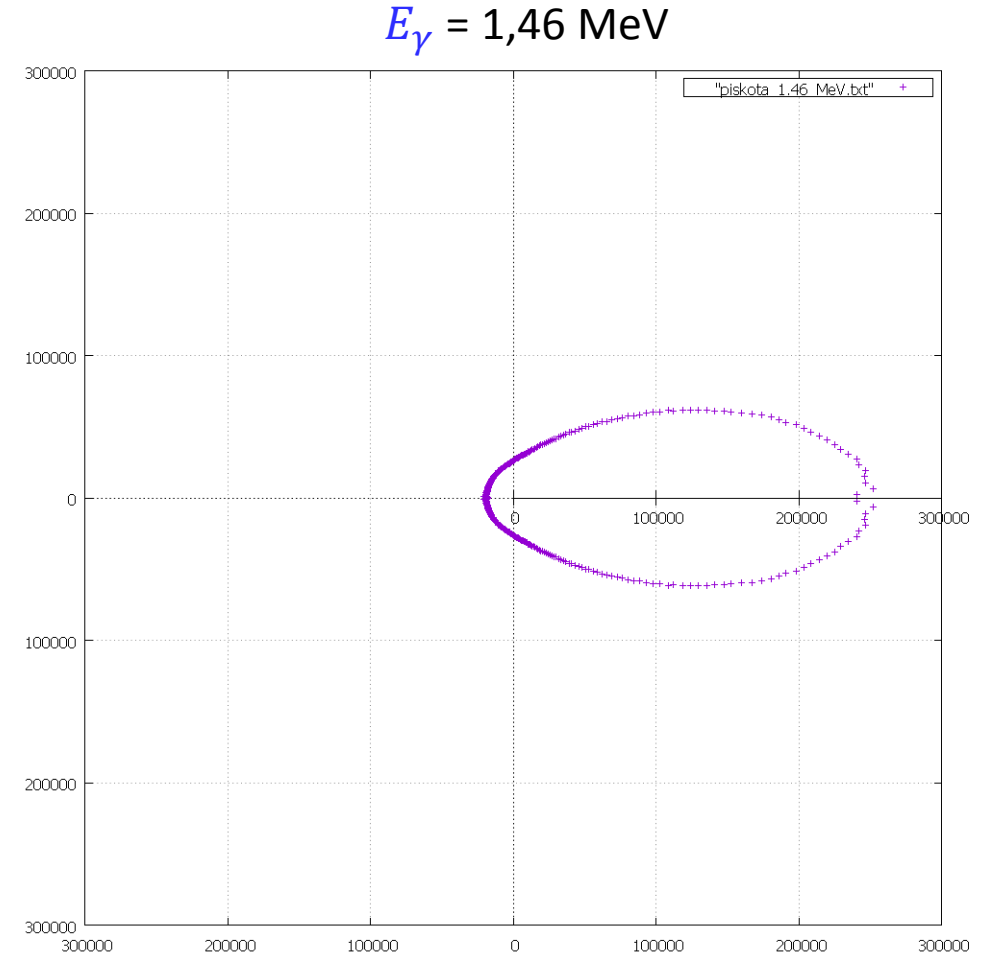
$$E_\gamma = 511 \text{ keV}$$



Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

A Kahn-módszer rutinjának ellenőrzése

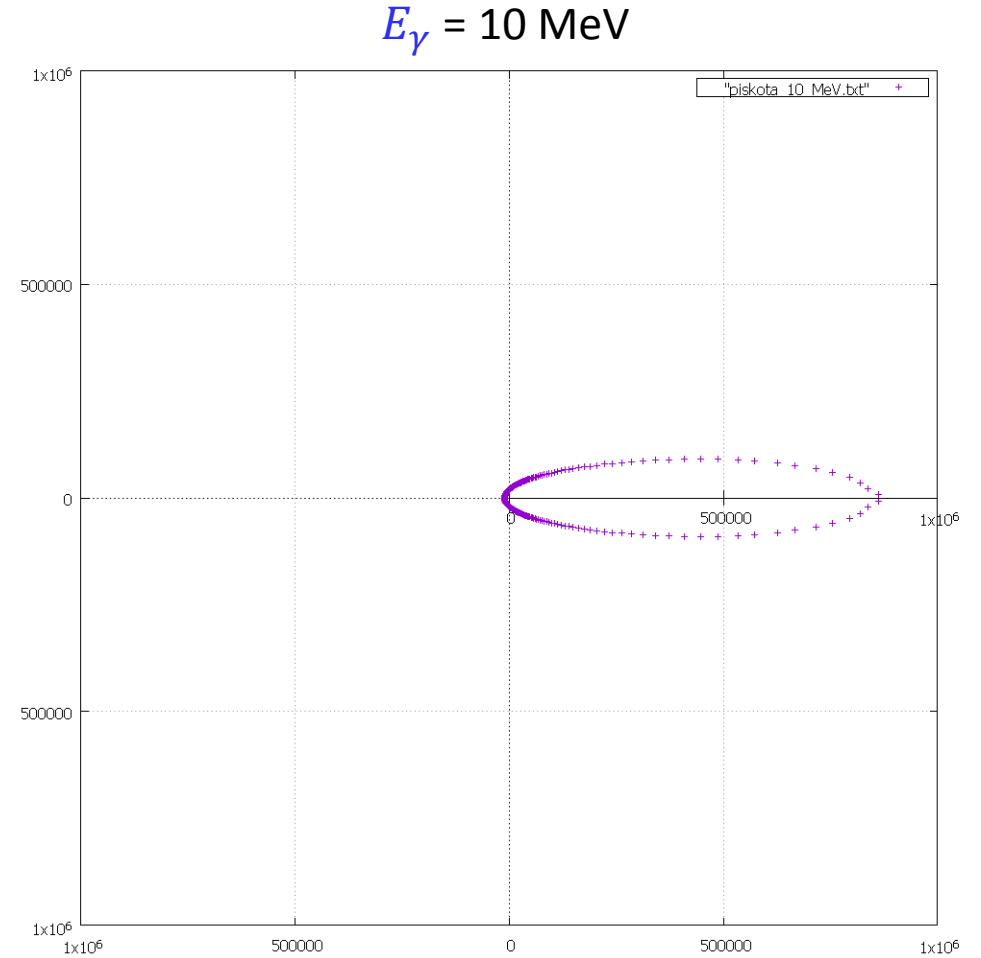
1 MeV körül a metszeti görbében a „behorpadás” eltűnik, az előreszóródás még dominánsabb lesz (ld. a jobb oldali ábrát).



Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

A Kahn-módszer rutinjának ellenőrzése

10 MeV-nél a visszafelé szóródás szinte megszűnik, majdnem minden foton előre szóródik, kis eltérülési szöggel (ld. a jobb oldali ábrát).

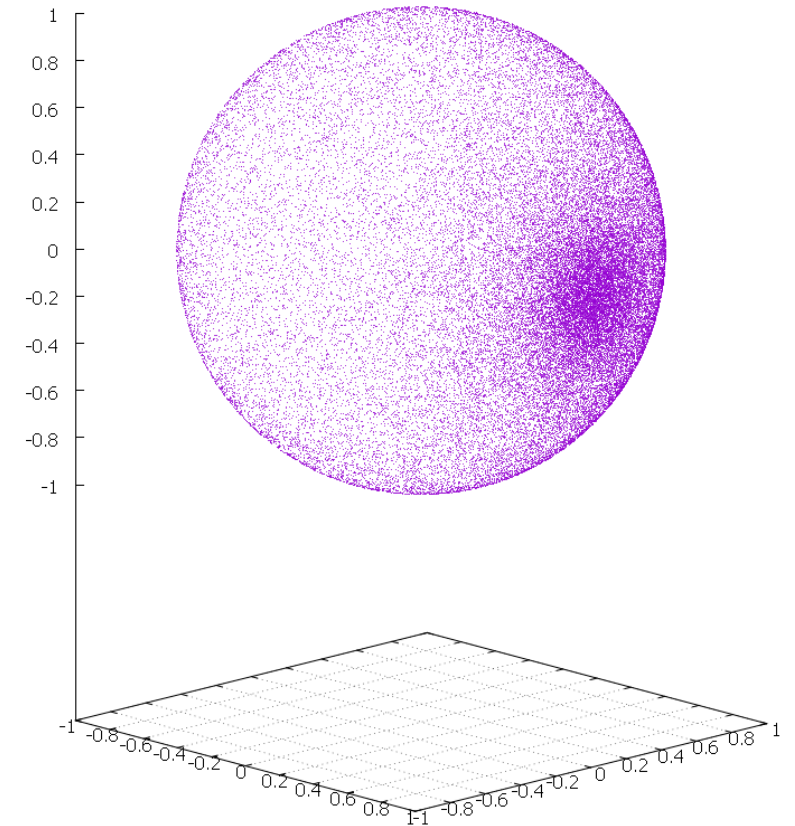


Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

A Kahn-módszer rutinjának ellenőrzése

$$E_\gamma = 10 \text{ MeV}$$

A jobb oldali ábra a 10 MeV-nél kialakuló markáns előreszóródást érzékelteti 3-dimenziós axonometrikus megjelenítéssel.






Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítása az XCOM programmal

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

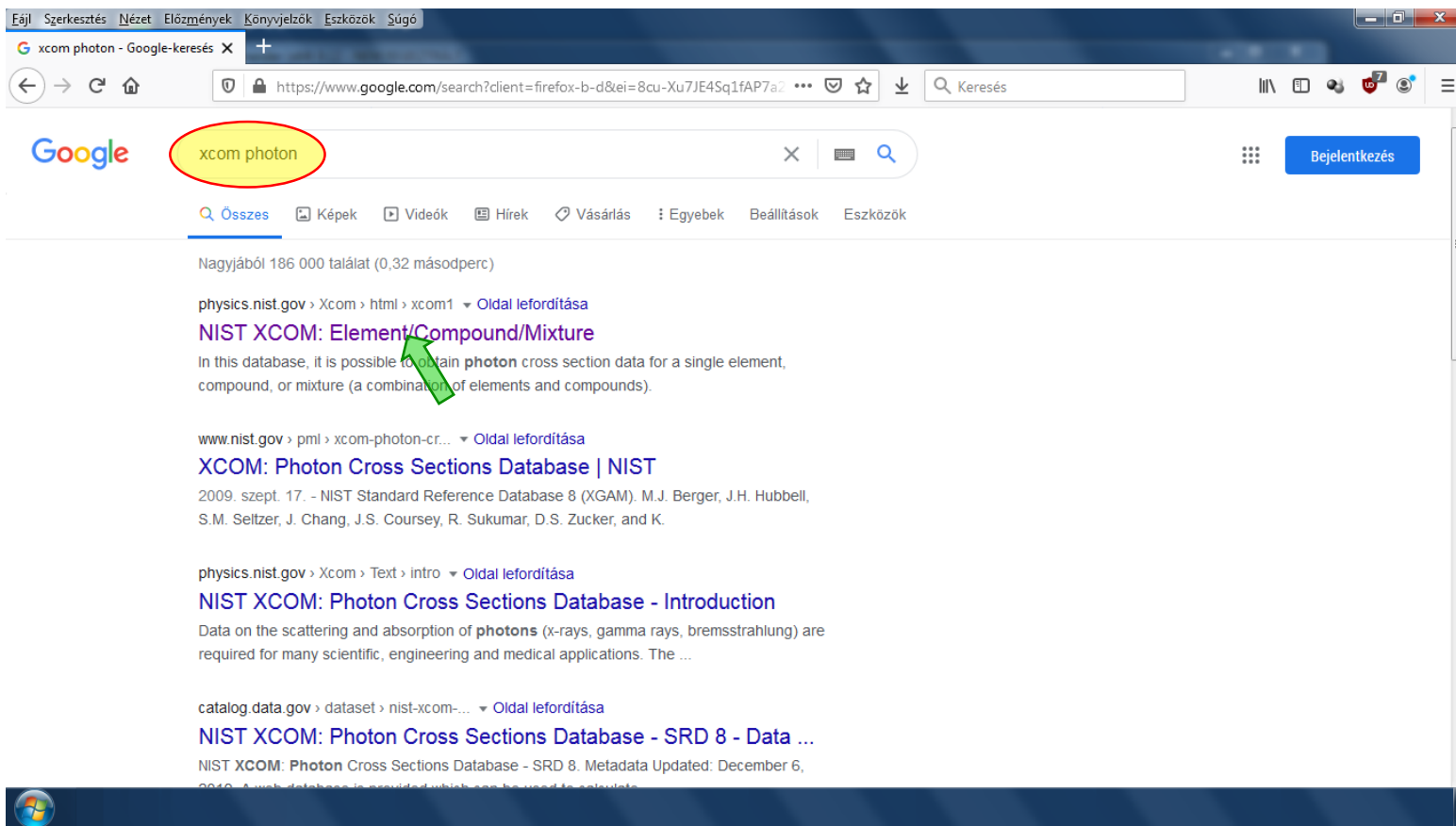
Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítása az XCOM programmal

A szimulációs programhoz szükséges makroszkopikus **hatáskeresztmetszeteket az** interneten elérhető **XCOM programmal állíthatjuk elő** a következő diákon bemutatott módon.

A képernyőmásolatokon a  jelzés szövegbeírást, a  nyíl opcióválasztást (kattintást) jelöl. A megfelelő beállítások után a  nyíllal jelzett gombra vagy helyre való rákattintással lehet továbblépni.

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítása az XCOM programmal



Az XCOM program eléréséhez a keresőbe az „xcom photon” kulcsszavakat célszerű beírni.

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítása az XCOM programmal

Fájl Szerkesztés Nézet Előzmények Könyvjelzők Eszközök Súgó

NIST XCOM: Element/Compound

← → ↻ ↺ 🔒 https://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html 🔍 Keresés

NIST
National Institute of
Standards and Technology
Physical Meas. Laboratory

XCOM

Element/Compound/Mixture Selection

In this database, it is possible to obtain photon cross section data for a single element, compound, or mixture (a combination of elements and compounds). Please fill out the following information:

[Help](#)

Identify material by:

- ☐ Element
- ☒ Compound
- ☐ Mixture

Method of entering additional energies: (optional)

- ☒ Enter additional energies by hand
- ☐ Additional energies from file (Note: Your browser must be file-upload compatible)

XCOM

Itt látható az XCOM program kezdőlapja. Ezen kell bejelölni a bennünket érdeklő anyag (NaI) összetételének megadási módját. Mivel a nátriumjodid-kristály sztöchiometriai összetétele adott (egy nátriumatomhoz egy jódatom tartozik), az anyagot vegyületként kezelhetjük. Ehhez a **„Compound”** opciót kell választani.

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítása az XCOM programmal

Fill out the form to select the data to be displayed:

[Help](#)

Formula for compound (e.g. H₂O for water): NaI

Optional output title: Natrium-jodid

Graph options:

- ☒ Total Attenuation with Coherent Scattering
- ☒ Total Attenuation without Coherent Scattering
- ☒ Coherent Scattering
- ☒ Incoherent Scattering
- ☒ Photoelectric Absorption
- ☒ Pair Production in Nuclear Field
- ☒ Pair Production in Electron Field
- ☐ None

Additional energies in MeV: (optional) (up to 100 allowed)

Note: Energies must be between 0.001 - 100000 MeV (1 keV - 100 GeV) (only 4 significant figures will be used). One energy per line. Blank lines will be ignored.

Energy Range:

Minimum: 0.001 MeV

Maximum: 20 MeV

Return to [previous](#) document.

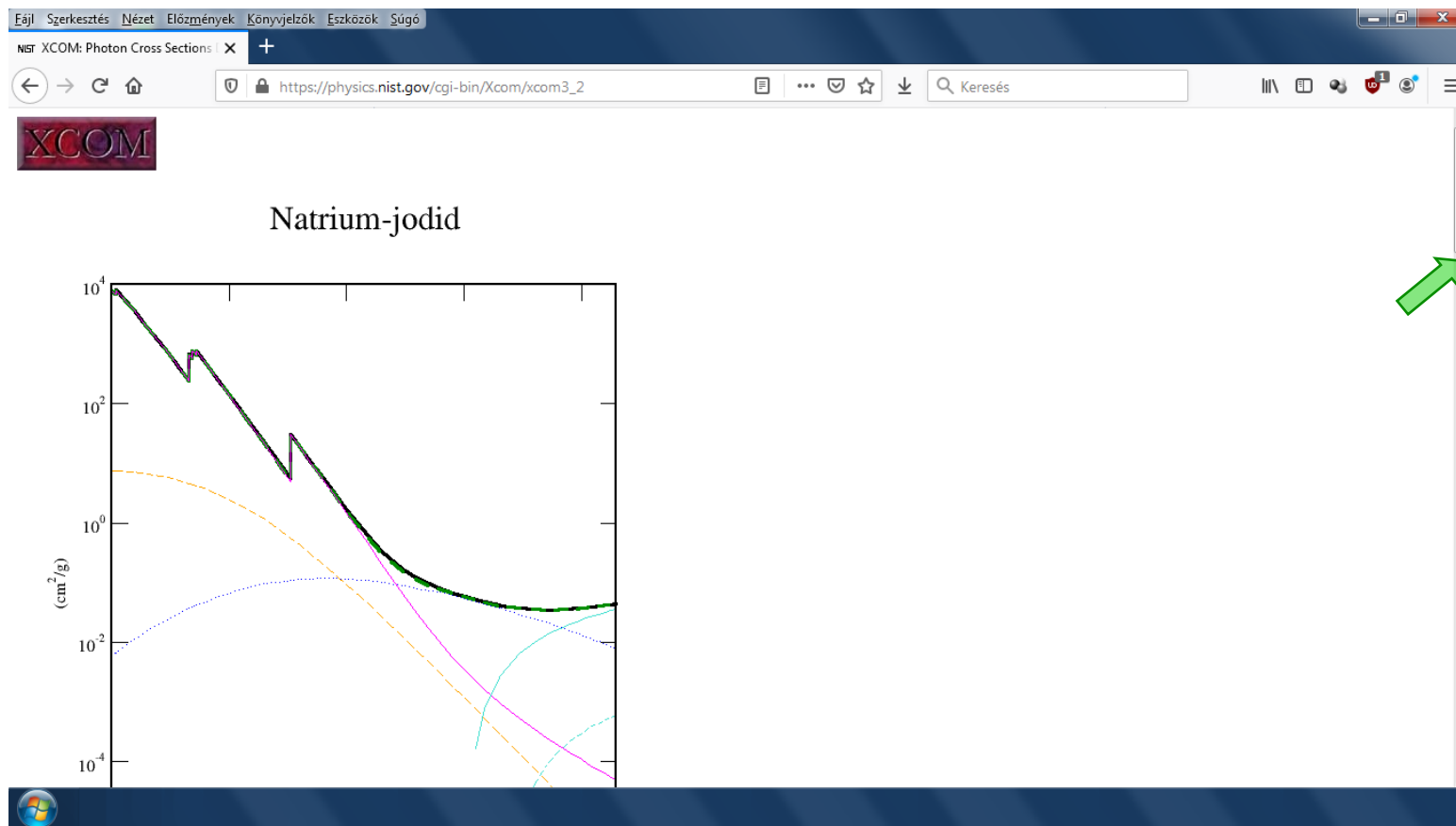
A 'Formula for compound' rubrikába a nátrium-jodid kémiai képletét (NaI) írjuk! Az output címének megadása nem kötelező, de hasznos lehet.

A 'Graph options'-nál megadhatjuk (bepipálhatjuk), hogy mely kölcsönhatások görbáját kívánjuk látni grafikusan egy fotonenergia-hatáskeresztmetszet diagramon. Érdeemes mindet bejelölni.

Az 'Energy Range' felső korlátjának – a feladatkitűzésben szereplő energiatartománynak megfelelően – 20 MeV-et adjuk meg!

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítása az XCOM programmal

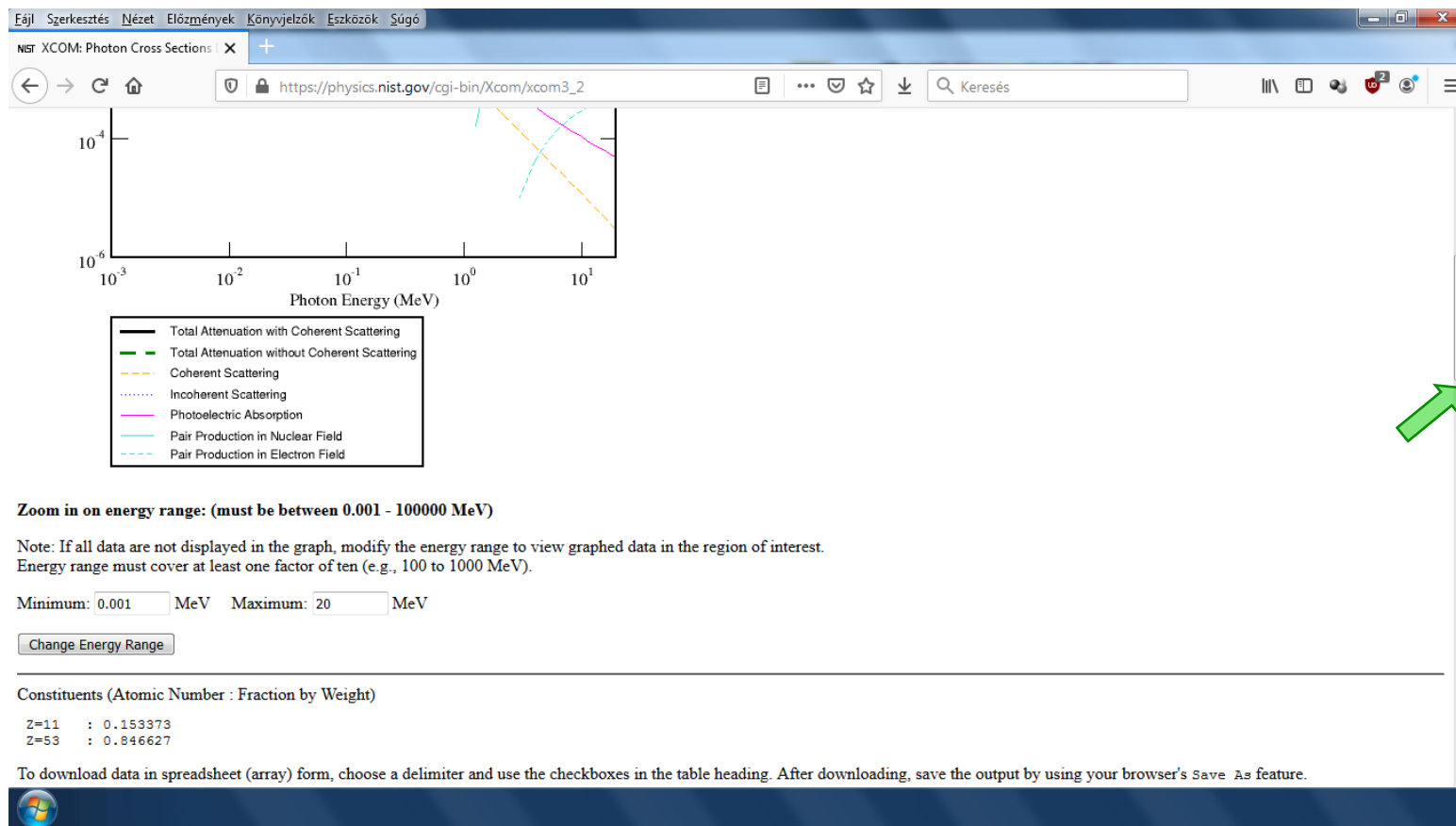


Ezen a diagramon a nátrium-jodid – mint vegyület – fotonokkal szemben mutatott hatáskeresztmetszete látható cm^2/g egységben a foton-energia függvényében az előző képernyőn kiválasztott (bepipált) kölcsönhatásokra. A burkoló görbén jól megfigyelhető a fotoeffektus hatáskeresztmetszetének bizonyos energiákon jelentkező ugrásszerű megnövekedése (amely a teljes hatáskeresztmetszet hasonló viselkedését vonja maga után).

A képen csak az ábra felső része látható. Az alsó rész a következő dián jelenik meg, és a görbék színének jelentése is ott olvasható le.

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

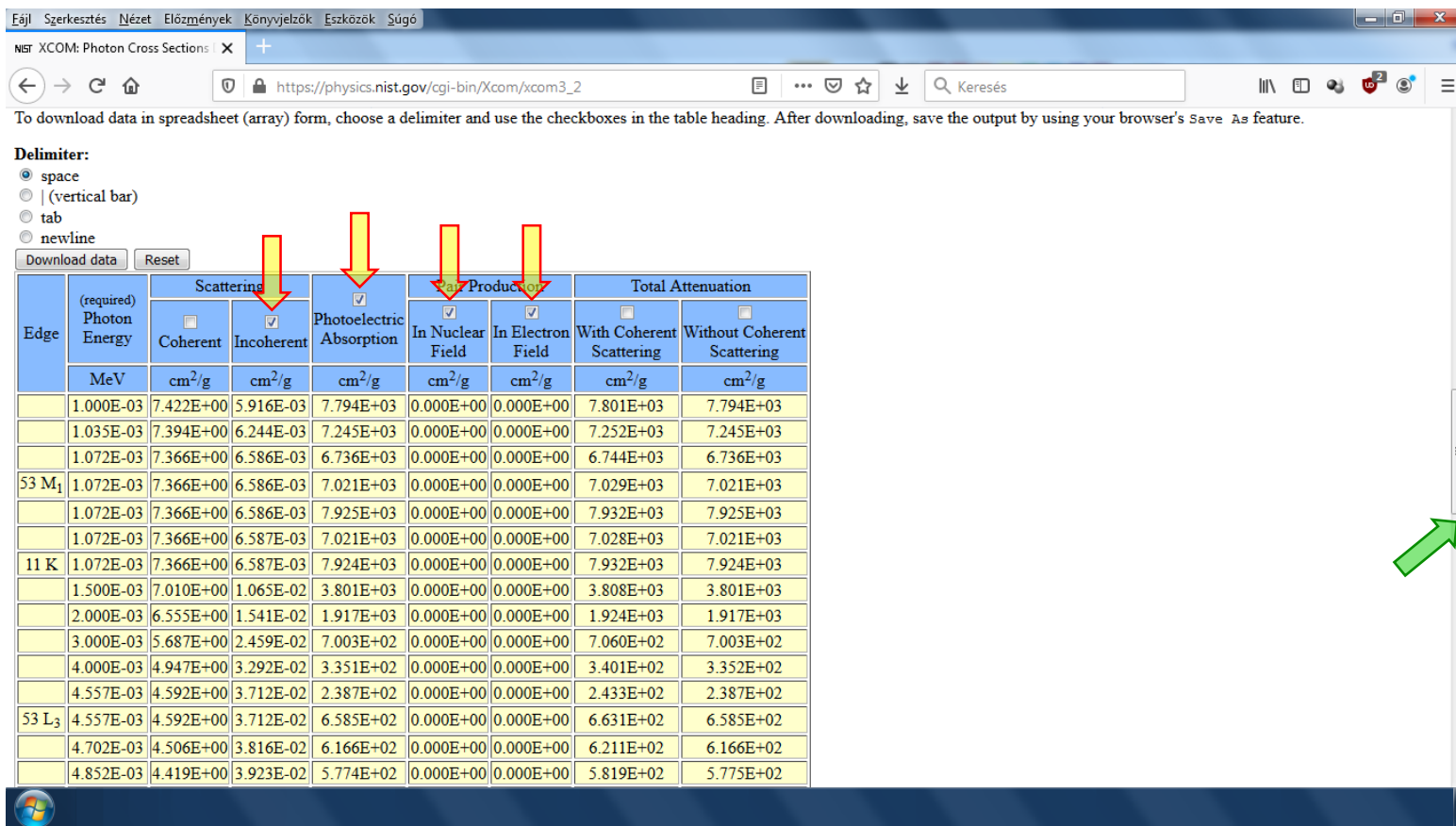
Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítása az XCOM programmal



Itt látható a diagram folytatása (alsó része) a jelölésekkel. Érdeemes észrevenni, hogy a diagram mindkét tengelye logaritmikus, és a függőleges tengelyen az osztások két dekádonként követik egymást.

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítása az XCOM programmal



To download data in spreadsheet (array) form, choose a delimiter and use the checkboxes in the table heading. After downloading, save the output by using your browser's Save As feature.

Delimiter:

- ☒ space
- ☐ | (vertical bar)
- ☐ tab
- ☐ newline

Edge	(required) Photon Energy	Scattering		Photoelectric Absorption	Pair Production		Total Attenuation	
		<input type="checkbox"/> Coherent	<input checked="" type="checkbox"/> Incoherent		<input checked="" type="checkbox"/> In Nuclear Field	<input checked="" type="checkbox"/> In Electron Field	<input type="checkbox"/> With Coherent Scattering	<input type="checkbox"/> Without Coherent Scattering
	MeV	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g
	1.000E-03	7.422E+00	5.916E-03	7.794E+03	0.000E+00	0.000E+00	7.801E+03	7.794E+03
	1.035E-03	7.394E+00	6.244E-03	7.245E+03	0.000E+00	0.000E+00	7.252E+03	7.245E+03
	1.072E-03	7.366E+00	6.586E-03	6.736E+03	0.000E+00	0.000E+00	6.744E+03	6.736E+03
53 M ₁	1.072E-03	7.366E+00	6.586E-03	7.021E+03	0.000E+00	0.000E+00	7.029E+03	7.021E+03
	1.072E-03	7.366E+00	6.586E-03	7.925E+03	0.000E+00	0.000E+00	7.932E+03	7.925E+03
	1.072E-03	7.366E+00	6.587E-03	7.021E+03	0.000E+00	0.000E+00	7.028E+03	7.021E+03
11 K	1.072E-03	7.366E+00	6.587E-03	7.924E+03	0.000E+00	0.000E+00	7.932E+03	7.924E+03
	1.500E-03	7.010E+00	1.065E-02	3.801E+03	0.000E+00	0.000E+00	3.808E+03	3.801E+03
	2.000E-03	6.555E+00	1.541E-02	1.917E+03	0.000E+00	0.000E+00	1.924E+03	1.917E+03
	3.000E-03	5.687E+00	2.459E-02	7.003E+02	0.000E+00	0.000E+00	7.060E+02	7.003E+02
	4.000E-03	4.947E+00	3.292E-02	3.351E+02	0.000E+00	0.000E+00	3.401E+02	3.352E+02
	4.557E-03	4.592E+00	3.712E-02	2.387E+02	0.000E+00	0.000E+00	2.433E+02	2.387E+02
53 L ₃	4.557E-03	4.592E+00	3.712E-02	6.585E+02	0.000E+00	0.000E+00	6.631E+02	6.585E+02
	4.702E-03	4.506E+00	3.816E-02	6.166E+02	0.000E+00	0.000E+00	6.211E+02	6.166E+02
	4.852E-03	4.419E+00	3.923E-02	5.774E+02	0.000E+00	0.000E+00	5.819E+02	5.775E+02

Itt jelenik meg a számunkra fontos hatáskeresztmetszet-táblázat. A táblázat fejlécében kiválasztható (bepipálható), hogy a lementendő táblázatban mely hatáskeresztmetszetek szerepeljenek. Az **„Incoherent”** elnevezés a Compton-szóródást jelenti, a párkeltés (**„Pair Production”**) hatáskeresztmetszete pedig két oszlopra van szétválasztva: az atommag, illetve az elektronok elektromágneses terében történő párkeltésére. (Itt még csupa nulla látszik az oszlopokban, de a következő dián az 1,022 MeV-nél nagyobb energiáknál már megjelennek a nullától különböző értékek.)

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítása az XCOM programmal



6.000E-01	3.238E-03	6.822E-02	1.079E-02	0.000E+00	0.000E+00	8.225E-02	7.901E-02
8.000E-01	1.840E-03	6.012E-02	5.588E-03	0.000E+00	0.000E+00	6.755E-02	6.571E-02
1.000E+00	1.184E-03	5.413E-02	3.491E-03	0.000E+00	0.000E+00	5.881E-02	5.762E-02
1.022E+00	1.134E-03	5.355E-02	3.323E-03	0.000E+00	0.000E+00	5.801E-02	5.687E-02
1.250E+00	7.607E-04	4.846E-02	2.240E-03	1.634E-04	0.000E+00	5.162E-02	5.086E-02
1.500E+00	5.293E-04	4.407E-02	1.604E-03	7.594E-04	0.000E+00	4.697E-02	4.644E-02
2.000E+00	2.985E-04	3.764E-02	9.761E-04	2.575E-03	0.000E+00	4.149E-02	4.119E-02
2.044E+00	2.858E-04	3.717E-02	9.415E-04	2.751E-03	0.000E+00	4.115E-02	4.087E-02
3.000E+00	1.329E-04	2.963E-02	5.178E-04	6.518E-03	1.036E-05	3.681E-02	3.668E-02
4.000E+00	7.480E-05	2.472E-02	3.428E-04	1.001E-02	4.228E-05	3.519E-02	3.512E-02
5.000E+00	4.787E-05	2.135E-02	2.535E-04	1.303E-02	8.417E-05	3.477E-02	3.472E-02
6.000E+00	3.325E-05	1.887E-02	2.000E-04	1.563E-02	1.291E-04	3.487E-02	3.484E-02
7.000E+00	2.443E-05	1.697E-02	1.647E-04	1.795E-02	1.739E-04	3.528E-02	3.526E-02
8.000E+00	1.871E-05	1.544E-02	1.398E-04	2.004E-02	2.173E-04	3.585E-02	3.584E-02
9.000E+00	1.478E-05	1.420E-02	1.212E-04	2.193E-02	2.589E-04	3.652E-02	3.650E-02
1.000E+01	1.197E-05	1.315E-02	1.069E-04	2.366E-02	2.983E-04	3.723E-02	3.722E-02
1.100E+01	9.896E-06	1.227E-02	9.565E-05	2.526E-02	3.356E-04	3.796E-02	3.795E-02
1.200E+01	8.315E-06	1.150E-02	8.648E-05	2.673E-02	3.708E-04	3.870E-02	3.869E-02
1.300E+01	7.085E-06	1.084E-02	7.888E-05	2.811E-02	4.040E-04	3.943E-02	3.943E-02
1.400E+01	6.111E-06	1.025E-02	7.249E-05	2.937E-02	4.355E-04	4.013E-02	4.013E-02
1.500E+01	5.321E-06	9.737E-03	6.706E-05	3.054E-02	4.654E-04	4.082E-02	4.081E-02
1.600E+01	4.677E-06	9.271E-03	6.240E-05	3.163E-02	4.939E-04	4.146E-02	4.146E-02
1.800E+01	3.696E-06	8.471E-03	5.472E-05	3.362E-02	5.462E-04	4.269E-02	4.269E-02
2.000E+01	2.994E-06	7.811E-03	4.873E-05	3.540E-02	5.942E-04	4.386E-02	4.385E-02

[Return to selection page.](#)

Miután megnéztük a táblázat második részét is, menjünk vissza az elejére!

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítása az XCOM programmal

Fájl Szerkesztés Nézet Előzmények Könyvtárak Eszközök Súgó

NIST XCOM: Photon Cross Sections

https://physics.nist.gov/cgi-bin/Xcom/xcom3_2

To download data in spreadsheet (array) form, choose a delimiter and use the checkboxes in the table heading. After downloading, save the output by using your browser's Save As feature.

Delimiter:

- ☒ space
- ☐ | (vertical bar)
- ☐ tab
- ☐ newline

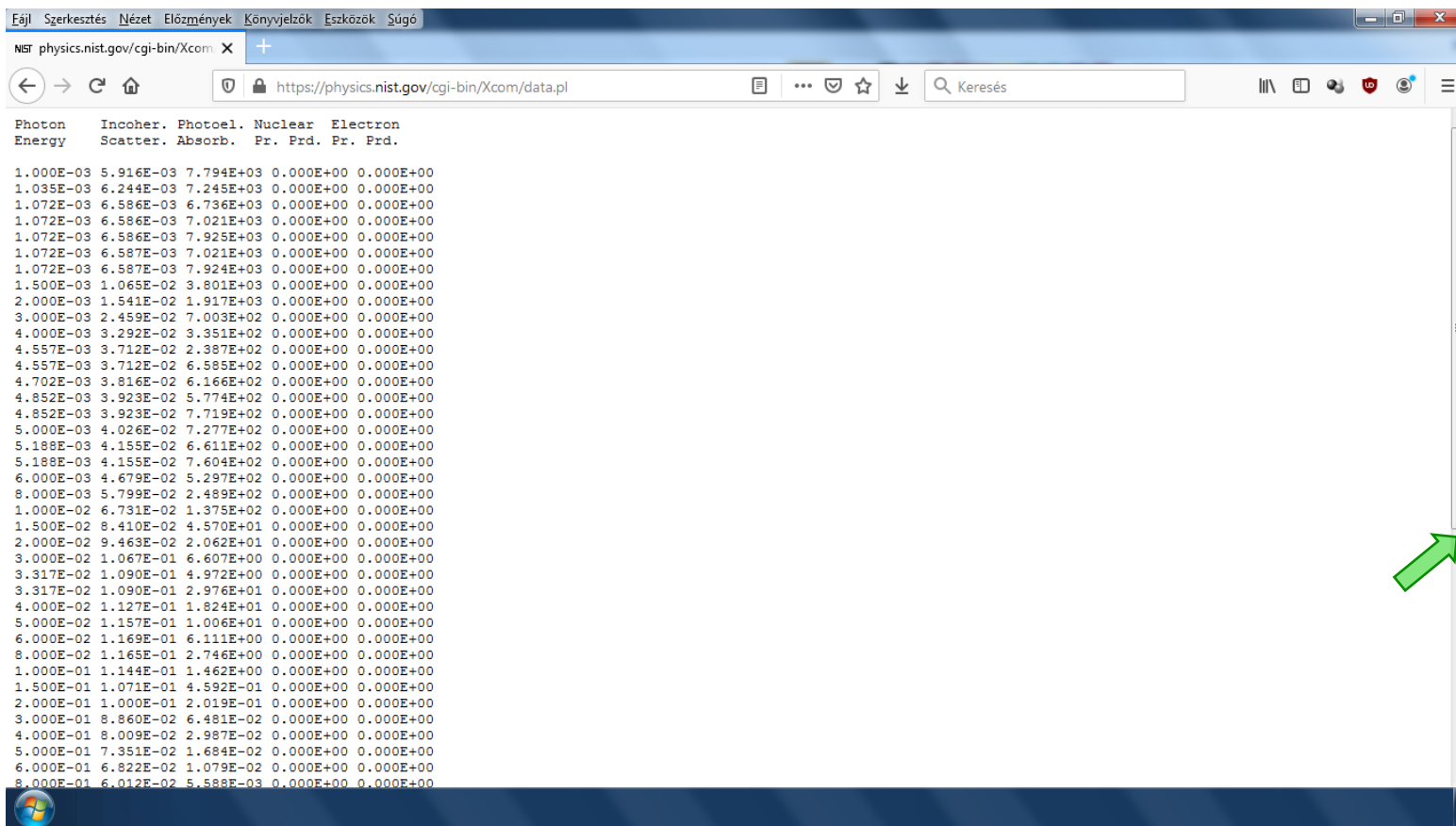
Download data Reset

Edge	(required) Photon Energy	Scattering		<input checked="" type="checkbox"/> Photoelectric Absorption	Pair Production		Total Attenuation	
		<input type="checkbox"/> Coherent	<input checked="" type="checkbox"/> Incoherent		<input checked="" type="checkbox"/> In Nuclear Field	<input checked="" type="checkbox"/> In Electron Field	<input type="checkbox"/> With Coherent Scattering	<input type="checkbox"/> Without Coherent Scattering
	MeV	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g
	1.000E-03	7.422E+00	5.916E-03	7.794E+03	0.000E+00	0.000E+00	7.801E+03	7.794E+03
	1.035E-03	7.394E+00	6.244E-03	7.245E+03	0.000E+00	0.000E+00	7.252E+03	7.245E+03
	1.072E-03	7.366E+00	6.586E-03	6.736E+03	0.000E+00	0.000E+00	6.744E+03	6.736E+03
53 M ₁	1.072E-03	7.366E+00	6.586E-03	7.021E+03	0.000E+00	0.000E+00	7.029E+03	7.021E+03
	1.072E-03	7.366E+00	6.586E-03	7.925E+03	0.000E+00	0.000E+00	7.932E+03	7.925E+03
	1.072E-03	7.366E+00	6.587E-03	7.021E+03	0.000E+00	0.000E+00	7.028E+03	7.021E+03
11 K	1.072E-03	7.366E+00	6.587E-03	7.924E+03	0.000E+00	0.000E+00	7.932E+03	7.924E+03
	1.500E-03	7.010E+00	1.065E-02	3.801E+03	0.000E+00	0.000E+00	3.808E+03	3.801E+03
	2.000E-03	6.555E+00	1.541E-02	1.917E+03	0.000E+00	0.000E+00	1.924E+03	1.917E+03
	3.000E-03	5.687E+00	2.459E-02	7.003E+02	0.000E+00	0.000E+00	7.060E+02	7.003E+02
	4.000E-03	4.947E+00	3.292E-02	3.351E+02	0.000E+00	0.000E+00	3.401E+02	3.352E+02
	4.557E-03	4.592E+00	3.712E-02	2.387E+02	0.000E+00	0.000E+00	2.433E+02	2.387E+02
53 L ₃	4.557E-03	4.592E+00	3.712E-02	6.585E+02	0.000E+00	0.000E+00	6.631E+02	6.585E+02
	4.702E-03	4.506E+00	3.816E-02	6.166E+02	0.000E+00	0.000E+00	6.211E+02	6.166E+02
	4.852E-03	4.419E+00	3.923E-02	5.774E+02	0.000E+00	0.000E+00	5.819E+02	5.775E+02

A 'letöltendő' (pontosabban: a képernyőn kijelzendő) táblázathoz célszerű a szóközt megjelölni elválasztó karakterként. Ezután a 'Download data' gombra kattintással lehet kérni a táblázat text formátumú megjelenítését.

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítása az XCOM programmal

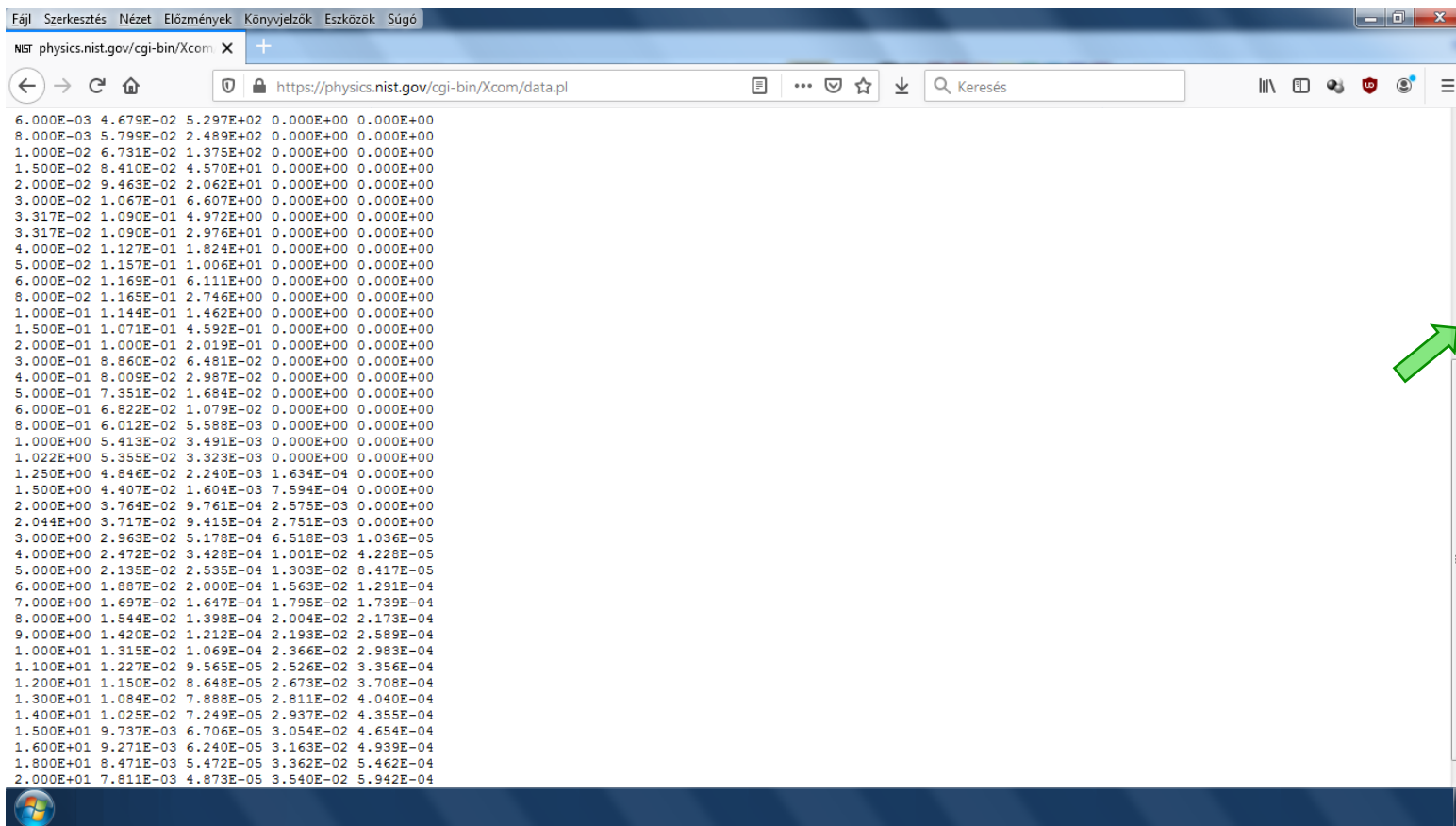


Photon Energy	Incoher. Scatter	Photoel. Absorb.	Nuclear Pr.	Electron Pr.
1.000E-03	5.916E-03	7.794E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.035E-03	6.244E-03	7.245E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.586E-03	6.736E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.586E-03	7.021E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.586E-03	7.925E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.587E-03	7.021E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.587E-03	7.924E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.500E-03	1.065E-02	3.801E+03	0.000E+00	0.000E+00
2.000E-03	1.541E-02	1.917E+03	0.000E+00	0.000E+00
3.000E-03	2.459E-02	7.003E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.000E-03	3.292E-02	3.351E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.557E-03	3.712E-02	2.387E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.557E-03	3.712E-02	6.585E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.702E-03	3.816E-02	6.166E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.852E-03	3.923E-02	5.774E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.852E-03	3.923E-02	7.719E+02	0.000E+00	0.000E+00
5.000E-03	4.026E-02	7.277E+02	0.000E+00	0.000E+00
5.188E-03	4.155E-02	6.611E+02	0.000E+00	0.000E+00
5.188E-03	4.155E-02	7.604E+02	0.000E+00	0.000E+00
6.000E-03	4.679E-02	5.297E+02	0.000E+00	0.000E+00
8.000E-03	5.799E-02	2.489E+02	0.000E+00	0.000E+00
1.000E-02	6.731E-02	1.375E+02	0.000E+00	0.000E+00
1.500E-02	8.410E-02	4.570E+01	0.000E+00	0.000E+00
2.000E-02	9.463E-02	2.062E+01	0.000E+00	0.000E+00
3.000E-02	1.067E-01	6.607E+00	0.000E+00	0.000E+00
3.317E-02	1.090E-01	4.972E+00	0.000E+00	0.000E+00
3.317E-02	1.090E-01	2.976E+01	0.000E+00	0.000E+00
4.000E-02	1.127E-01	1.824E+01	0.000E+00	0.000E+00
5.000E-02	1.157E-01	1.006E+01	0.000E+00	0.000E+00
6.000E-02	1.169E-01	6.111E+00	0.000E+00	0.000E+00
8.000E-02	1.165E-01	2.746E+00	0.000E+00	0.000E+00
1.000E-01	1.144E-01	1.462E+00	0.000E+00	0.000E+00
1.500E-01	1.071E-01	4.592E-01	0.000E+00	0.000E+00
2.000E-01	1.000E-01	2.019E-01	0.000E+00	0.000E+00
3.000E-01	8.860E-02	6.481E-02	0.000E+00	0.000E+00
4.000E-01	8.009E-02	2.987E-02	0.000E+00	0.000E+00
5.000E-01	7.351E-02	1.694E-02	0.000E+00	0.000E+00
6.000E-01	6.822E-02	1.079E-02	0.000E+00	0.000E+00
8.000E-01	6.012E-02	5.588E-03	0.000E+00	0.000E+00

A táblázat fejléce egy kisebb elcsúszást mutat a számoszlopokhoz képest, de a fejlécre később úgysem lesz szükségünk. Ellenőrizzük a táblázat második felét ...

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítása az XCOM programmal

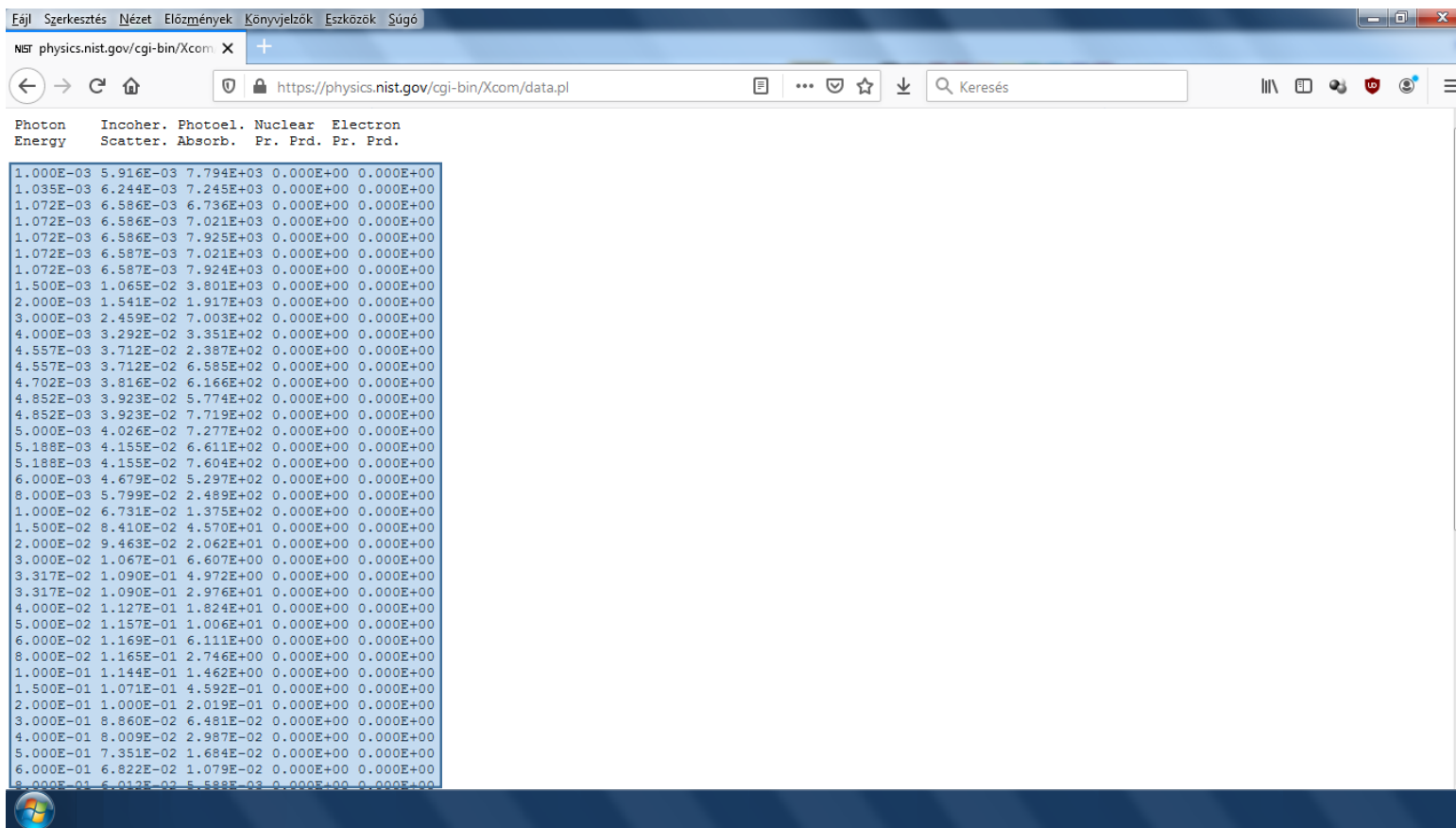


6.000E-03	4.679E-02	5.297E+02	0.000E+00	0.000E+00
8.000E-03	5.799E-02	2.489E+02	0.000E+00	0.000E+00
1.000E-02	6.731E-02	1.375E+02	0.000E+00	0.000E+00
1.500E-02	8.410E-02	4.570E+01	0.000E+00	0.000E+00
2.000E-02	9.463E-02	2.062E+01	0.000E+00	0.000E+00
3.000E-02	1.067E-01	6.607E+00	0.000E+00	0.000E+00
3.317E-02	1.090E-01	4.972E+00	0.000E+00	0.000E+00
3.317E-02	1.090E-01	2.976E+01	0.000E+00	0.000E+00
4.000E-02	1.127E-01	1.824E+01	0.000E+00	0.000E+00
5.000E-02	1.157E-01	1.006E+01	0.000E+00	0.000E+00
6.000E-02	1.169E-01	6.111E+00	0.000E+00	0.000E+00
8.000E-02	1.165E-01	2.746E+00	0.000E+00	0.000E+00
1.000E-01	1.144E-01	1.462E+00	0.000E+00	0.000E+00
1.500E-01	1.071E-01	4.592E-01	0.000E+00	0.000E+00
2.000E-01	1.000E-01	2.019E-01	0.000E+00	0.000E+00
3.000E-01	8.860E-02	6.481E-02	0.000E+00	0.000E+00
4.000E-01	8.009E-02	2.987E-02	0.000E+00	0.000E+00
5.000E-01	7.351E-02	1.684E-02	0.000E+00	0.000E+00
6.000E-01	6.822E-02	1.079E-02	0.000E+00	0.000E+00
8.000E-01	6.012E-02	5.588E-03	0.000E+00	0.000E+00
1.000E+00	5.413E-02	3.491E-03	0.000E+00	0.000E+00
1.022E+00	5.355E-02	3.323E-03	0.000E+00	0.000E+00
1.250E+00	4.846E-02	2.240E-03	1.634E-04	0.000E+00
1.500E+00	4.407E-02	1.604E-03	7.594E-04	0.000E+00
2.000E+00	3.764E-02	9.761E-04	2.575E-03	0.000E+00
2.044E+00	3.717E-02	9.415E-04	2.751E-03	0.000E+00
3.000E+00	2.963E-02	5.178E-04	6.518E-03	1.036E-05
4.000E+00	2.472E-02	3.428E-04	1.001E-02	4.228E-05
5.000E+00	2.135E-02	2.535E-04	1.303E-02	8.417E-05
6.000E+00	1.887E-02	2.000E-04	1.563E-02	1.291E-04
7.000E+00	1.697E-02	1.647E-04	1.795E-02	1.739E-04
8.000E+00	1.544E-02	1.398E-04	2.004E-02	2.173E-04
9.000E+00	1.420E-02	1.212E-04	2.193E-02	2.589E-04
1.000E+01	1.315E-02	1.069E-04	2.366E-02	2.983E-04
1.100E+01	1.227E-02	9.565E-05	2.526E-02	3.356E-04
1.200E+01	1.150E-02	8.648E-05	2.673E-02	3.708E-04
1.300E+01	1.084E-02	7.888E-05	2.811E-02	4.040E-04
1.400E+01	1.025E-02	7.249E-05	2.937E-02	4.355E-04
1.500E+01	9.737E-03	6.706E-05	3.054E-02	4.654E-04
1.600E+01	9.271E-03	6.240E-05	3.163E-02	4.939E-04
1.800E+01	8.471E-03	5.472E-05	3.362E-02	5.462E-04
2.000E+01	7.811E-03	4.873E-05	3.540E-02	5.942E-04

... majd menjünk vissza a táblázat elejére ...

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítása az XCOM programmal



The screenshot shows the XCOM program interface, which is a web-based application for calculating cross-sections. The interface includes a menu bar at the top with options like 'Fájl', 'Szerkesztés', 'Nézet', 'Előzmények', 'Könyvtárak', 'Eszközök', and 'Súgó'. Below the menu bar is a browser window with the address bar showing 'https://physics.nist.gov/cgi-bin/Xcom/data.pl'. The main content area displays a table of cross-section data. The table has five columns: 'Photon Energy', 'Incoher. Scatter', 'Photoel. Absorb.', 'Nuclear Pr. Prd.', and 'Electron Pr. Prd.'. The data is presented in scientific notation, with values ranging from 1.000E-03 to 6.000E-01. The table is scrollable, and the data is organized into rows corresponding to different energy levels and materials.

Photon Energy	Incoher. Scatter	Photoel. Absorb.	Nuclear Pr. Prd.	Electron Pr. Prd.
1.000E-03	5.916E-03	7.794E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.035E-03	6.244E-03	7.245E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.586E-03	6.736E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.586E-03	7.021E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.586E-03	7.925E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.587E-03	7.021E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.587E-03	7.924E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.500E-03	1.065E-02	3.801E+03	0.000E+00	0.000E+00
2.000E-03	1.541E-02	1.917E+03	0.000E+00	0.000E+00
3.000E-03	2.459E-02	7.003E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.000E-03	3.292E-02	3.351E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.557E-03	3.712E-02	2.387E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.557E-03	3.712E-02	6.585E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.702E-03	3.816E-02	6.166E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.852E-03	3.923E-02	5.774E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.852E-03	3.923E-02	7.719E+02	0.000E+00	0.000E+00
5.000E-03	4.026E-02	7.277E+02	0.000E+00	0.000E+00
5.188E-03	4.155E-02	6.611E+02	0.000E+00	0.000E+00
5.188E-03	4.155E-02	7.604E+02	0.000E+00	0.000E+00
6.000E-03	4.679E-02	5.297E+02	0.000E+00	0.000E+00
8.000E-03	5.799E-02	2.489E+02	0.000E+00	0.000E+00
1.000E-02	6.731E-02	1.375E+02	0.000E+00	0.000E+00
1.500E-02	8.410E-02	4.570E+01	0.000E+00	0.000E+00
2.000E-02	9.463E-02	2.062E+01	0.000E+00	0.000E+00
3.000E-02	1.067E-01	6.607E+00	0.000E+00	0.000E+00
3.317E-02	1.090E-01	4.972E+00	0.000E+00	0.000E+00
3.317E-02	1.090E-01	2.976E+01	0.000E+00	0.000E+00
4.000E-02	1.127E-01	1.824E+01	0.000E+00	0.000E+00
5.000E-02	1.157E-01	1.006E+01	0.000E+00	0.000E+00
6.000E-02	1.169E-01	6.111E+00	0.000E+00	0.000E+00
8.000E-02	1.165E-01	2.746E+00	0.000E+00	0.000E+00
1.000E-01	1.144E-01	1.462E+00	0.000E+00	0.000E+00
1.500E-01	1.071E-01	4.592E-01	0.000E+00	0.000E+00
2.000E-01	1.000E-01	2.019E-01	0.000E+00	0.000E+00
3.000E-01	8.860E-02	6.481E-02	0.000E+00	0.000E+00
4.000E-01	8.009E-02	2.987E-02	0.000E+00	0.000E+00
5.000E-01	7.351E-02	1.694E-02	0.000E+00	0.000E+00
6.000E-01	6.822E-02	1.079E-02	0.000E+00	0.000E+00
8.000E-01	6.012E-02	5.588E-03	0.000E+00	0.000E+00

... és jelöljük ki (egérrel áthúzva) az érdeemi részt! Ezután Ctrl-C – Ctrl-V-vel másoljuk az 5 számszlopot egy textfájlba, amelyet a szimulációs programnál használunk majd fel!

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítása az XCOM programmal

1.000E-03	5.916E-03	7.794E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.035E-03	6.244E-03	7.245E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.586E-03	6.736E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.586E-03	7.021E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.586E-03	7.925E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.587E-03	7.021E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.587E-03	7.924E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.500E-03	1.065E-02	3.801E+03	0.000E+00	0.000E+00
2.000E-03	1.541E-02	1.917E+03	0.000E+00	0.000E+00
3.000E-03	2.459E-02	7.003E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.000E-03	3.292E-02	3.351E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.557E-03	3.712E-02	2.387E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.557E-03	3.712E-02	6.585E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.702E-03	3.816E-02	6.166E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.852E-03	3.923E-02	5.774E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.852E-03	3.923E-02	7.719E+02	0.000E+00	0.000E+00
5.000E-03	4.026E-02	7.277E+02	0.000E+00	0.000E+00
5.188E-03	4.155E-02	6.611E+02	0.000E+00	0.000E+00
5.188E-03	4.155E-02	7.604E+02	0.000E+00	0.000E+00
6.000E-03	4.679E-02	5.297E+02	0.000E+00	0.000E+00
8.000E-03	5.799E-02	2.489E+02	0.000E+00	0.000E+00
1.000E-02	6.731E-02	1.375E+02	0.000E+00	0.000E+00
1.500E-02	8.410E-02	4.570E+01	0.000E+00	0.000E+00
2.000E-02	9.463E-02	2.062E+01	0.000E+00	0.000E+00
3.000E-02	1.067E-01	6.607E+00	0.000E+00	0.000E+00
3.317E-02	1.090E-01	4.972E+00	0.000E+00	0.000E+00
3.317E-02	1.090E-01	2.976E+01	0.000E+00	0.000E+00
4.000E-02	1.127E-01	1.824E+01	0.000E+00	0.000E+00
5.000E-02	1.157E-01	1.006E+01	0.000E+00	0.000E+00
6.000E-02	1.169E-01	6.111E+00	0.000E+00	0.000E+00
8.000E-02	1.165E-01	2.746E+00	0.000E+00	0.000E+00
1.000E-01	1.144E-01	1.462E+00	0.000E+00	0.000E+00
1.500E-01	1.071E-01	4.592E-01	0.000E+00	0.000E+00
2.000E-01	1.000E-01	2.019E-01	0.000E+00	0.000E+00
3.000E-01	8.860E-02	6.481E-02	0.000E+00	0.000E+00
4.000E-01	8.009E-02	2.987E-02	0.000E+00	0.000E+00
5.000E-01	7.351E-02	1.684E-02	0.000E+00	0.000E+00
6.000E-01	6.822E-02	1.079E-02	0.000E+00	0.000E+00

Vegyük észre, hogy az így kapott táblázat első oszlopának 3., 4., 5., 6. és 7. sorában ugyanaz a fotonenergia-érték (1,072 keV) szerepel! Az ismétlődést az okozza, hogy a nátrium-jodidban a fotoeffektus hatáskeresztmetszete ennek az energiának a közvetlen közelében két szakadást (felfelé ugrást) is mutat. Ezek a szakadások olyan közel esnek egymáshoz, hogy a 4 értékes jegyre kijelzett energiaskálán ugyanahhoz az számértékhez tartoznak. Annak érdekében, hogy ez az ismétlődés a későbbiekben ne zavarja a hatáskeresztmetszeteknek a táblázat alapján történő interpolálását, **töröljük ki az 1,072 keV fotonenergiához tartozó 5 sorból a 3 középsőt (azaz a táblázat 4., 5. és 6. sorát)!**

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítása az XCOM programmal

1.000E-03	5.916E-03	7.794E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.035E-03	6.244E-03	7.245E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.586E-03	6.736E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.072E-03	6.587E-03	7.924E+03	0.000E+00	0.000E+00
1.500E-03	1.065E-02	3.801E+03	0.000E+00	0.000E+00
2.000E-03	1.541E-02	1.917E+03	0.000E+00	0.000E+00
3.000E-03	2.459E-02	7.003E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.000E-03	3.292E-02	3.351E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.557E-03	3.712E-02	2.387E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.557E-03	3.712E-02	6.585E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.702E-03	3.816E-02	6.166E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.852E-03	3.923E-02	5.774E+02	0.000E+00	0.000E+00
4.852E-03	3.923E-02	7.719E+02	0.000E+00	0.000E+00
5.000E-03	4.026E-02	7.277E+02	0.000E+00	0.000E+00
5.188E-03	4.155E-02	6.611E+02	0.000E+00	0.000E+00
5.188E-03	4.155E-02	7.604E+02	0.000E+00	0.000E+00
6.000E-03	4.679E-02	5.297E+02	0.000E+00	0.000E+00
8.000E-03	5.799E-02	2.489E+02	0.000E+00	0.000E+00
1.000E-02	6.731E-02	1.375E+02	0.000E+00	0.000E+00
1.500E-02	8.410E-02	4.570E+01	0.000E+00	0.000E+00
2.000E-02	9.463E-02	2.062E+01	0.000E+00	0.000E+00
3.000E-02	1.067E-01	6.607E+00	0.000E+00	0.000E+00
3.317E-02	1.090E-01	4.972E+00	0.000E+00	0.000E+00
3.317E-02	1.090E-01	2.976E+01	0.000E+00	0.000E+00
4.000E-02	1.127E-01	1.824E+01	0.000E+00	0.000E+00
5.000E-02	1.157E-01	1.006E+01	0.000E+00	0.000E+00
6.000E-02	1.169E-01	6.111E+00	0.000E+00	0.000E+00
8.000E-02	1.165E-01	2.746E+00	0.000E+00	0.000E+00
1.000E-01	1.144E-01	1.462E+00	0.000E+00	0.000E+00
1.500E-01	1.071E-01	4.592E-01	0.000E+00	0.000E+00
2.000E-01	1.000E-01	2.019E-01	0.000E+00	0.000E+00
3.000E-01	8.860E-02	6.481E-02	0.000E+00	0.000E+00
4.000E-01	8.009E-02	2.987E-02	0.000E+00	0.000E+00
5.000E-01	7.351E-02	1.684E-02	0.000E+00	0.000E+00
6.000E-01	6.822E-02	1.079E-02	0.000E+00	0.000E+00

Az így megmaradó táblázat első oszlopa a fotonenergiát, a második a Compton-szóródásnak, a harmadik a fotoeffektusnak, a negyedik és az ötödik együtt a párkeltésnek a hatáskeresztmetszetét tartalmazza. Ezt a táblázatot célszerű úgy átalakítani, hogy a negyedik és ötödik oszlopot soronként összeadjuk, és az összegből képezzük az új negyedik oszlopot, majd a háromféle hatáskeresztmetszet értékét soronként összeadva a teljes hatáskeresztmetszet írjuk az új ötödik oszlopba. (A következő két dia bal oldalán az így átalakított táblázat első és második fele látható.) Ezzel az átalakítással biztosíthatjuk a hatáskeresztmetszetek konzisztenciáját, vagyis azt, hogy a teljes hatáskeresztmetszet pontosan a másik három összege legyen, ami a reakciótípus sorsolásánál fontos követelmény.

(Ha a háromféle reakciótípus hatáskeresztmetszetének összege eltér a teljes hatáskeresztmetszettől, akkor a 45. dián szereplő reakciósorsolási eljárás megghiúsulhat, vagy a szabad úthossz sorsolása hamis (inkonzisztens) eredményre vezethet.)

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítás az XCOM programmal

1.000E-03	5.916E-03	7.794E+03	0.000E+00	7.794E+03
1.035E-03	6.244E-03	7.245E+03	0.000E+00	7.245E+03
1.072E-03	6.586E-03	6.736E+03	0.000E+00	6.736E+03
1.072E-03	6.587E-03	7.924E+03	0.000E+00	7.924E+03
1.500E-03	1.065E-02	3.801E+03	0.000E+00	3.801E+03
2.000E-03	1.541E-02	1.917E+03	0.000E+00	1.917E+03
3.000E-03	2.459E-02	7.003E+02	0.000E+00	7.003E+02
4.000E-03	3.292E-02	3.351E+02	0.000E+00	3.351E+02
4.557E-03	3.712E-02	2.387E+02	0.000E+00	2.387E+02
4.557E-03	3.712E-02	6.585E+02	0.000E+00	6.585E+02
4.702E-03	3.816E-02	6.166E+02	0.000E+00	6.166E+02
4.852E-03	3.923E-02	5.774E+02	0.000E+00	5.774E+02
4.852E-03	3.923E-02	7.719E+02	0.000E+00	7.719E+02
5.000E-03	4.026E-02	7.277E+02	0.000E+00	7.277E+02
5.188E-03	4.155E-02	6.611E+02	0.000E+00	6.611E+02
5.188E-03	4.155E-02	7.604E+02	0.000E+00	7.604E+02
6.000E-03	4.679E-02	5.297E+02	0.000E+00	5.297E+02
8.000E-03	5.799E-02	2.489E+02	0.000E+00	2.490E+02
1.000E-02	6.731E-02	1.375E+02	0.000E+00	1.376E+02
1.500E-02	8.410E-02	4.570E+01	0.000E+00	4.578E+01
2.000E-02	9.463E-02	2.062E+01	0.000E+00	2.071E+01
3.000E-02	1.067E-01	6.607E+00	0.000E+00	6.714E+00
3.317E-02	1.090E-01	4.972E+00	0.000E+00	5.081E+00
3.317E-02	1.090E-01	2.976E+01	0.000E+00	2.987E+01
4.000E-02	1.127E-01	1.824E+01	0.000E+00	1.835E+01
5.000E-02	1.157E-01	1.006E+01	0.000E+00	1.018E+01
6.000E-02	1.169E-01	6.111E+00	0.000E+00	6.228E+00
8.000E-02	1.165E-01	2.746E+00	0.000E+00	2.863E+00
1.000E-01	1.144E-01	1.462E+00	0.000E+00	1.576E+00

A keretezett sorpárok a fotoeffektus hatáskeresztmetszetének szakadását írják le.

A szimulációban a detektorba jutó foton energiája kétféleképpen változhat meg:

- 1) vagy Compton-szóródás során,
- 2) vagy párkeltésnél áttételesen, azáltal, hogy a két új annihilation foton energiája (ami egyenként 0,511 MeV) különbözni fog a párkeltést kiváltó foton energiájától.

Ha a megváltozott fotonenergia nem szerepel a táblázatunk első oszlopában (szinte biztos, hogy nem fog szerepelni), akkor – a feladatkitűzésnek megfelelően – lineáris interpolációval határozzuk meg az új energiaértékhez tartozó hatáskeresztmetszeteket!

(A logaritmikus energiaskálán való interpolálás logikusabb volna, de ennek jóval nagyobb a gépidőigénye. A rövidebb futásidő és a számítási eredmények összehasonlíthatósága érdekében maradtunk a feladatkitűzés során a lineáris interpoláció mellett. Ugyancsak az összehasonlíthatóságot segíti, ha a táblázatot az XCOM alapértelmezésű energiaskálájával generáljuk, azaz nem definiálunk semmilyen pótlólagos energiaértéket a 95. dián látható inputfelületen.

Gamma-sugárzás és anyag kölcsönhatása

Hatáskeresztmetszet-táblázat előállítás az XCOM programmal

1.000E-01	1.144E-01	1.462E+00	0.000E+00	1.576E+00
1.500E-01	1.071E-01	4.592E-01	0.000E+00	5.663E-01
2.000E-01	1.000E-01	2.019E-01	0.000E+00	3.019E-01
3.000E-01	8.860E-02	6.481E-02	0.000E+00	1.534E-01
4.000E-01	8.009E-02	2.987E-02	0.000E+00	1.100E-01
5.000E-01	7.351E-02	1.684E-02	0.000E+00	9.035E-02
6.000E-01	6.822E-02	1.079E-02	0.000E+00	7.901E-02
8.000E-01	6.012E-02	5.588E-03	0.000E+00	6.571E-02
1.000E+00	5.413E-02	3.491E-03	0.000E+00	5.762E-02
1.022E+00	5.355E-02	3.323E-03	0.000E+00	5.687E-02
1.250E+00	4.846E-02	2.240E-03	1.634E-04	5.086E-02
1.500E+00	4.407E-02	1.604E-03	7.594E-04	4.643E-02
2.000E+00	3.764E-02	9.761E-04	2.575E-03	4.119E-02
2.044E+00	3.717E-02	9.415E-04	2.751E-03	4.086E-02
3.000E+00	2.963E-02	5.178E-04	6.528E-03	3.668E-02
4.000E+00	2.472E-02	3.428E-04	1.005E-02	3.512E-02
5.000E+00	2.135E-02	2.535E-04	1.311E-02	3.472E-02
6.000E+00	1.887E-02	2.000E-04	1.576E-02	3.483E-02
7.000E+00	1.697E-02	1.647E-04	1.812E-02	3.526E-02
8.000E+00	1.544E-02	1.398E-04	2.026E-02	3.584E-02
9.000E+00	1.420E-02	1.212E-04	2.219E-02	3.651E-02
1.000E+01	1.315E-02	1.069E-04	2.396E-02	3.722E-02
1.100E+01	1.227E-02	9.565E-05	2.560E-02	3.796E-02
1.200E+01	1.150E-02	8.648E-05	2.710E-02	3.869E-02
1.300E+01	1.084E-02	7.888E-05	2.851E-02	3.943E-02
1.400E+01	1.025E-02	7.249E-05	2.981E-02	4.013E-02
1.500E+01	9.737E-03	6.706E-05	3.101E-02	4.081E-02
1.600E+01	9.271E-03	6.240E-05	3.212E-02	4.146E-02
1.800E+01	8.471E-03	5.472E-05	3.417E-02	4.269E-02
2.000E+01	7.811E-03	4.873E-05	3.599E-02	4.385E-02

Ne tévesszük szem elől, hogy az XCOM program sűrűség szerinti fajlagos hatáskeresztmetszeteket határoz meg cm^2/g egységben! Ahhoz, hogy az XCOM adataiból valódi, $1/\text{cm}$ dimenziójú hatáskeresztmetszetek legyenek, a táblázatban szereplő értékeket be kell szorozni a nátriumjodid-kristály sűrűségével (amelyet a feladatkitűzés szerint inputadatként kell kezelünk).

Megjegyezzük, hogy az $1/\text{cm}$ dimenzió valójában csak a teljes hatáskeresztmetszet esetében fontos, amelynek felhasználásával a szabad úthosszat sorsoljuk (a $\lambda = -[1/\Sigma_t(E_\gamma)] \ln r$ képlet szerint). A reakciótípus sorsolásánál az XCOM fajlagos adatait vagy a valódi hatáskeresztmetszeteket egyaránt használhatjuk. Arra azonban ügyelni kell, hogy a háromféle hatáskeresztmetszet ugyanolyan egységben legyen a sorsoláshoz szükséges relatív arányok kiszámításánál (az 1-re normálásnál) (ld. a 45. diát).

Mellékletek

1. melléklet

A Monte-Carlo-számítás eredményeinek statisztikai bizonytalansága

A Monte-Carlo-számítások eredményeit – a módszer sajátosságából eredően – statisztikai bizonytalanság terheli. A bizonytalanság fölmérése a legtöbb esetben a számítási feladat elengedhetetlen része.

A Monte-Carlo-számítások eredményeinek statisztikai értékelésére ugyanazokat az elveket, fogalmakat és módszereket alkalmazhatjuk, mint amelyeket egy méréssorozat kiértékelésénél szoktunk. A Monte-Carlo-számításban megbecsülni kívánt fizikai mennyiség ciklusonként kiszámított véletlen értékeit úgy tekinthetjük, mintha azok a vizsgált mennyiség egy-egy mérésének eredményei lennének. Méréselméletből ismert, hogy ha több mérési eredmény áll rendelkezésünkre, akkor azok átlagának kisebb a szórása. Itt az *átlag szórása* alatt a *mintaátlagnak a becsült mennyiség várható értékétől való átlagos négyzetes eltérése* gyökét értjük, amelyet a következőképpen számíthatunk ki:

$$\hat{D}(X) = \sqrt{\frac{\overline{X^2} - \bar{X}^2}{n}}, \quad (\text{M.1.1})$$

ahol X a meghatározni kívánt fizikai mennyiségből (mint valószínűségi változóból) ciklusonként vett minta értéke, n pedig a minták (ciklusok) száma. Az (M.1.1)-ben a felülvonás átlagolást jelent.

2. melléklet

Gauss-eloszlás félérték-szélessége és szórása közötti kapcsolat

A nulla várható értékű Gauss-eloszlás sűrűségfüggvénye:

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}, \quad (\text{M2.1})$$

aminek értéke $x = 0$ -nál: $p(0) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}$. Keressük meg, hogy milyen

x_f -nél lesz a sűrűségfüggvény értéke $p(0)$ fele! Az erre vonatkozó egyenlet: $e^{-\frac{x_f^2}{2\sigma^2}} = \frac{1}{2}$, ennek megoldása: $x_f = \pm\sqrt{2\ln 2}\sigma$.

Ha az FWHM félérték-szélesség Gauss-eloszlásra vonatkozik, akkor $\text{FWHM} = 2|x_f|$, vagyis $\text{FWHM} = 2\sqrt{2\ln 2}\sigma$, azaz

$$\text{FWHM} = \sqrt{8\ln 2}\sigma. \quad (\text{M2.2})$$

Eszerint tehát Gauss-eloszlás esetében egy adott FWHM-nek megfelelő szórást az alábbi képlettel számíthatjuk ki:

$$\sigma = \frac{\text{FWHM}}{\sqrt{8\ln 2}} \approx \frac{\text{FWHM}}{2,3548}. \quad (\text{M2.3})$$

