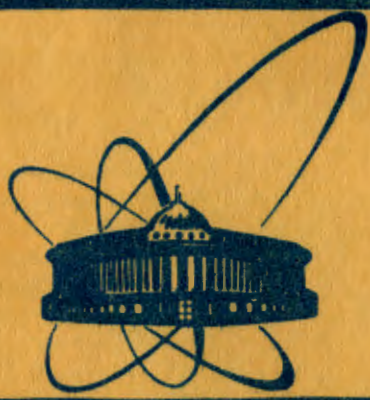


9/1-84



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
Дубна

252/84

1-83-729

Н.И.Зимин

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ
ПРОХОЖДЕНИЯ И ИЗЛУЧЕНИЯ
РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ
И ПОЗИТРОНОВ
ПРИ ОСЕВОМ КАНАЛИРОВАНИИ
В КРИСТАЛЛАХ

1983

Исследования рентгеновского и γ -излучения, возникающего при каналировании релятивистских электронов и позитронов в кристаллах, представляют значительный интерес из-за его высокой интенсивности, монохроматичности и направленности. Открывающиеся возможности практического использования этого нового типа излучения, предсказанного Кумаховым ^{/1/}, стимулировали многочисленные теоретические и экспериментальные исследования практически во всех крупных лабораториях /см. обзоры ^{/2-4/} и приведенную там библиографию/. В основном исследовалось излучение позитронов, каналированных кристаллографическими плоскостями, что обусловлено возможностью достаточно удовлетворительного описания взаимодействия с помощью гармонического потенциала и, как следствие, возможностью получения конечных результатов аналитическими методами. Оценочные расчеты характеристик излучения для осевого каналирования были выполнены только для модельных потенциалов вида A/ρ или $B\rho^2$ ^{/5,6/}. Поэтому в этих расчетах лишь приблизительно учитывалась зависимость потенциала от расстояния до кристаллографических осей и не принималась во внимание его асимметрия.

Расчет траекторий и характеристик излучения частиц в кристалле, основанный на методе бинарных столкновений ^{/7/} налетающей частицы с атомами кристалла, неэффективен при высоких энергиях и больших толщинах, так как непомерно растет время расчета.

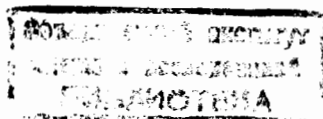
Более приемлемым является метод, разработанный в ^{/8/} на основе численного решения уравнений движения в усредненном вдоль направления движения потенциале кристаллографических осей.

С помощью процедуры, использованной Эпплтоном и др. ^{/9/}, можно рассчитать реальное усредненное потенциальное поле осей кристалла с учетом тепловых колебаний атомов, а также найти из уравнения Пуассона соответствующую электронную плотность в каждой точке кристалла, знание которой необходимо для учета многократного рассеяния. График потенциального поля для оси $\langle 111 \rangle$ кристалла кремния, рассчитанный с использованием экранировки, предложенной Дойлем и Тернером ^{/10/}, показан на рис. 1.

Система уравнений, описывающих движение и радиационные потери энергии ультррелятивистской частицы /используется релятивистская система единиц $\hbar = m_0 = c = 1$ /, имеет следующий вид:

$$E^2 \frac{d^2 \vec{\rho}}{dt^2} = - \vec{\nabla} U(\vec{\rho}),$$

$$\frac{dz}{dt} = \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[E^{-2} + \left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2 \right] \right\},$$



$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3} \alpha E^2 |\vec{\nabla} U(\vec{r})|^2 \quad /1/$$

Здесь E - энергия частицы, $U(\vec{r})$ - усредненная вдоль направления движения потенциальная энергия взаимодействия частицы с полем кристалла, $\vec{r} = \{x, y, z\}$ - поперечные и продольная координаты частицы, α - постоянная тонкой структуры.

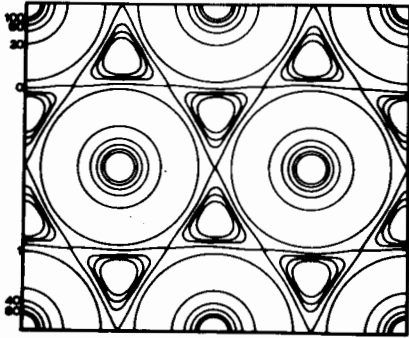


Рис.1. Эквипотенциальные линии поля кристаллографических осей $\langle 111 \rangle$ кремния, усредненного вдоль направления движения позитронов.

Для каждой частицы задаются начальные условия в виде

$$\begin{aligned} E(0) &= E_0, & z(0) &= 0, \\ \vec{r}(0) &= \vec{r}_0, & \dot{\vec{r}}(0) &= \dot{\vec{r}}_0. \end{aligned} \quad /2/$$

Отметим, что задание начальных условий в соответствующем виде позволяет простым способом учесть конкретные экспериментальные условия набора статистики. В эксперименте "Кристалл" /11/ с помощью дрейфовых камер определялись лишь углы входа позитронов e^+ и электронов e^- относительно кристаллографической оси с последующим отбором событий в заданной угловой области. Поэтому начальная координата $\vec{r}(0)$

разыгрывалась по равновероятному распределению, соответствующему случайной точке падения частицы на переднюю грань кристалла, а $\dot{\vec{r}}(0)$ - по реальному угловому распределению падающих частиц также с последующим отбором в задаваемой угловой области и учетом углового разрешения установки.

Система уравнений /1/ с начальными условиями /2/ численно интегрировалась последовательно на небольших участках траектории 2Δ . После каждого шага производился розыгрыш, с помощью которого учитывалось многократное рассеяние.

Многократное рассеяние каналированных электронов и позитронов является важным фактором, определяющим динамику потока частиц в канале, в том числе деканализирование и реканализирование /захват неканализированной частицы в процесс каналирования/. Его учет особенно актуален для кристаллов большой толщины. Причиной многократного рассеяния e^+ и e^- в идеальных кристаллах является рассеяние на тепловых колебаниях атомов и на электронах кристалла.

Учет рассеяния за счет тепловых колебаний осуществлялся с помощью метода, предложенного в работе Китагавы и Оцуки /12/. Основной вывод этой работы сводится к тому, что среднеквадратичный угол рассеяния $\langle \Delta\theta^2 \rangle^{1/2}$ на тепловых колебаниях атомов выражается через соответствующую величину для аморфного тела $\langle \Delta\theta^2 \rangle_{\Delta}^{1/2}$

и вероятность $P(r)$ отклонения атома от его положения равновесия относительно цепочки:

$$\begin{aligned} \langle \Delta\theta^2 \rangle_{\Delta}^{1/2} &= \langle \Delta\theta^2 \rangle_{\Delta}^{1/2} P(r), \\ P(r) &= \left(\frac{r_0}{u_{\perp}}\right)^2 \exp\left[-\left(\frac{r}{u_{\perp}}\right)^2\right], \end{aligned} \quad /3/$$

где r_0 - радиус канала, u_{\perp} - среднеквадратичная амплитуда поперечных тепловых колебаний атомов. Формула для расчета многократного рассеяния в аморфном теле хорошо известна /13/:

$$\langle \Delta\theta^2 \rangle_{\Delta}^{1/2} = \frac{20 \text{ МэВ/с}}{P\beta} \sqrt{\frac{2\Delta}{L_{\text{рад}}}} \left[1 + \frac{1}{9} \lg\left(\frac{2\Delta}{L_{\text{рад}}}\right) \right]. \quad /4/$$

Здесь $L_{\text{рад}}$ - радиационная длина, P , β - импульс и скорость частицы.

Среднеквадратичный угол многократного рассеяния частицы на e^- связан с потерями энергии на ионизацию соотношением

$$\langle \Delta\theta^2 \rangle_{\Delta}^{1/2} = \frac{1}{2} \frac{mc^2}{E^2} \overline{\Delta E}, \quad /5/$$

$\overline{\Delta E}$ учитывает долю потерь энергии при близких столкновениях. $\overline{\Delta E}$, пропорциональная реальной плотности электронов, рассчитывалась по формуле Бете-Блоха с учетом рассеяния e^- на e^- с помощью формулы Меллера, а e^+ на e^- - с помощью формулы Баба, а также с учетом эффекта плотности:

$$\frac{\overline{\Delta E}}{2\Delta} = 2\pi\alpha^2 n(r) \frac{(E+1)}{(E+2)^2} \left[\ln \frac{E^2(E+2)}{2I^2} + f^{\pm} - \delta \right], \quad /6/$$

$$f^- = \frac{1}{(E+1)^2} + \frac{1}{8} \left(\frac{E}{E+1}\right)^2 - \frac{2E+1}{(E+1)^2} \ln 2, \quad /7/$$

$$f^+ = 2 \ln 2 - \frac{E(E+2)}{12(E+1)^2} \left[23 + \frac{14}{E+2} + \frac{10}{(E+2)^2} + \frac{4}{(E+2)^3} \right]. \quad /8/$$

Здесь $n(r)$ - реальная плотность электронов в канале, найденная с помощью уравнения Пуассона, I - ионизационный потенциал кремния, f^- , f^+ - поправки, связанные с использованием формул Меллера или Баба, δ - поправка на эффект плотности.

Для каналированных частиц основную роль играет рассеяние на электронах канала, однако, если частица попадает в область вблизи цепочки атомов, многократное рассеяние за счет тепловых колебаний может на несколько порядков превышать рассеяние на электронах.

Если радиус-вектор $\vec{r}(t)$ заряженной частицы меняется во времени заданным образом, то энергия dW , излученная в элемент телесного угла $d\Omega$ в интервале энергии фотонов от E_{γ} до $E_{\gamma} + dE_{\gamma}$,

имеет вид

$$\frac{dw}{dE_\gamma d\Omega} = \frac{a}{4\pi^2} E_\gamma^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} [\vec{n} \times \dot{\vec{r}}(t)] e^{iE_\gamma [t - \vec{n}\vec{r}(t)]} dt \right|^2. \quad /9/$$

Для ультрарелятивистской частицы излучение направлено резко вперед, поэтому единичный вектор \vec{n} в направлении излучения можно записать в виде $\vec{n} = \{\theta \cos \phi, \theta \sin \phi, 1 - \theta^2/2\}$. Так как $\theta \ll 1$ и $v_x, v_y \ll v_z$, то $\vec{n} \times \dot{\vec{r}}(t) \approx \vec{v}_\perp - \dot{\vec{r}}_\perp / c$ с точностью до членов, линейных по малым величинам/. Здесь введены $\vec{n}_\perp = \{\theta \cos \phi, \theta \sin \phi, 0\}$, $\vec{v}_\perp = \{v_x, v_y, 0\}$. Проинтегрировав интеграл один раз по частям и произведя замену переменных $z = v_z t$, получим

$$\frac{dw}{dE_\gamma d\Omega} = \frac{a}{4\pi^2} \left| \int_0^{\ell} \vec{f}(z) e^{i\kappa(z)} dz \right|^2, \quad /10/$$

$$\vec{f}(z) = \frac{\vec{a}_\perp}{[(\vec{v}_\perp - \vec{n}_\perp)^2 + E^{-2}] - 2(\vec{v}_\perp - \vec{n}_\perp)((\vec{v}_\perp - \vec{n}_\perp) \cdot \vec{a}_\perp)}, \quad /11/$$

$$\kappa(z) = \frac{E_\gamma}{2} [z\theta^2 + \int_0^z (E^{-2} + v_x^2 + v_y^2) dz' - 2\vec{n}\vec{\rho}], \quad /12/$$

$\vec{\rho}$, \vec{a}_\perp - радиус-вектор и ускорение частицы в поперечной плоскости. Пределы интегрирования в /9/ заменены на интегрирование по кристаллу, так как вне кристалла ускорение \vec{a}_\perp равно нулю.

Для увеличения скорости счета спектрально-угловая плотность находилась по следующей процедуре. Интеграл в /9/ заменялся интегральной суммой по отдельным участкам траектории 2Δ , на которых проводилось численное интегрирование системы уравнений /1/. Так как величины 2Δ много меньше периода траектории, то скорость и ускорение считались на этом участке постоянными и определялись в его середине. В этой же точке определялись и остальные величины, необходимые для расчета спектрально-угловой плотности излучения. Необходимо провести интегрирование $e^{i\kappa(z)}$ аналитически, так как это быстроосциллирующая функция даже на участке 2Δ . Поэтому

$$\int_0^{\ell} \vec{f}(z) e^{i\kappa(z)} dz = \sum_{i=1}^N \vec{f}(z_i) \int_{z_i - \Delta}^{z_i + \Delta} e^{i\kappa(z)} dz. \quad /13/$$

Воспользовавшись тем же предположением о постоянстве скорости на участке 2Δ , величину $\kappa(z)$ можно заменить на

$$\kappa(z) = \phi(z_i) + \chi(z_i)[z - (z_i - \Delta)] \quad /14/$$

/константы $\phi(z_i)$ и $\chi(z_i)$ легко получить из /12// и аналитически проинтегрировать /13/:

$$\int_0^{\ell} \vec{f}(z) e^{i\kappa(z)} dz = \sum_{i=1}^N \vec{f}(z_i) \frac{2 \sin[\chi(z_i)\Delta]}{\chi(z_i)} e^{i[\phi(z_i) + \chi(z_i)\Delta]} \quad /15/$$

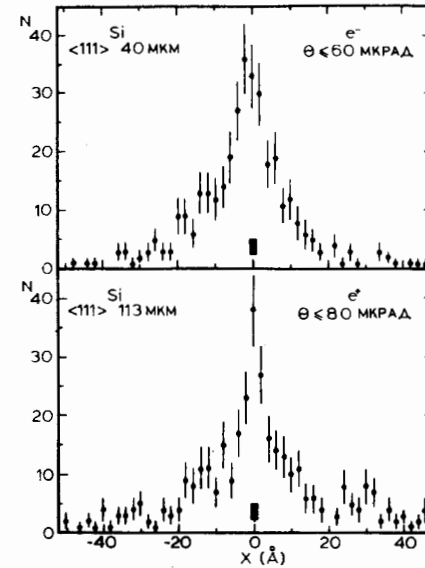


Рис.2. Координатные распределения электронов и позитронов на выходе из кристалла. ■ - область падения e^- и e^+ на кристалл.

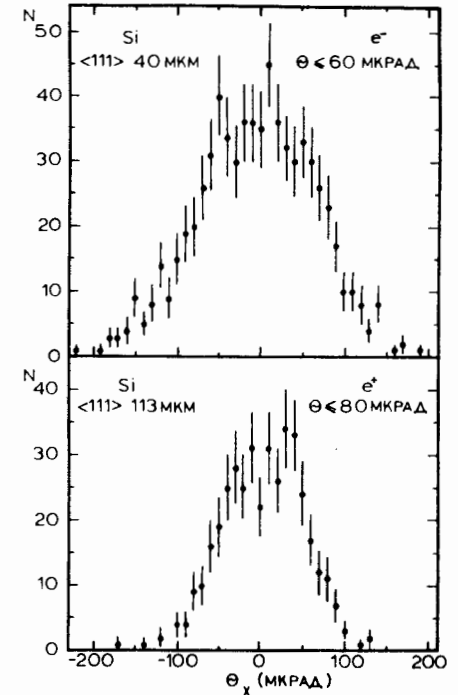


Рис.3. Угловые распределения электронов и позитронов на выходе из кристалла.

Для расчета спектральной плотности излучения найденная спектрально-угловая плотность /10/ численно интегрировалась по углу излучения фотонов θ и делилась на толщину кристалла ℓ .

На рис.2 и 3 показаны смоделированные координатные и угловые распределения электронов и позитронов с энергией 10 ГэВ, прошедших через кристалл, для конкретных экспериментальных условий /10/. Координатные распределения показывают, что лишь малая часть e^- и e^+ остается в пределах начальной элементарной ячейки после прохождения кристалла. Это связано как с тем, что лишь небольшая часть e^- захватывается в режим связанного с определенной осью движения /то есть имеют так называемые розетонные траектории/, еще меньшая часть e^+ захватывается в режим гиперканалирования, так и с деканализированием из-за многократного рассеяния. Ясно, что для корректного расчета характеристик излучения необходимо достаточно точное определение характеристик реальных траекторий e^- и e^+ в реальном поле кристалла с последующим усреднением по начальным условиям.

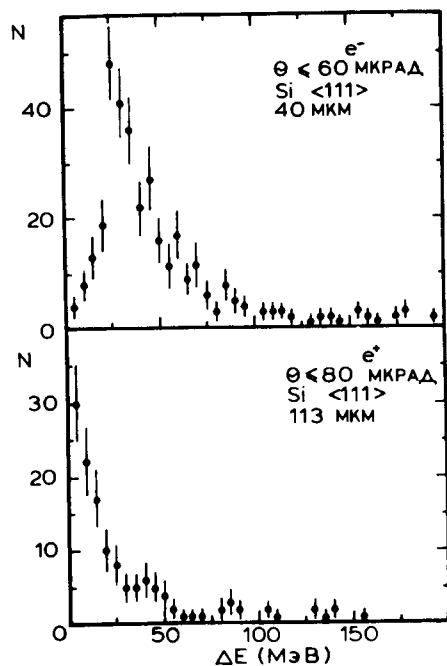
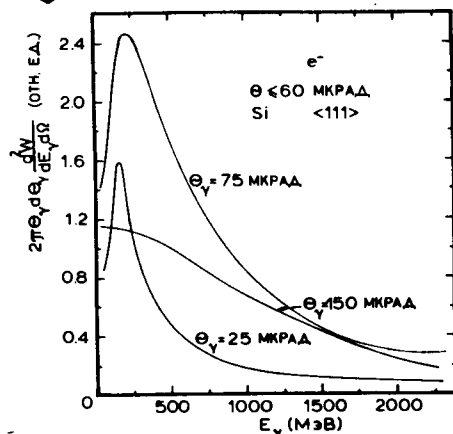


Рис.4. Спектральное распределение потерь энергии на излучение для электронов и позитронов с энергией 10 ГэВ.

Рис.5. Спектральная плотность излучения электронов для различных углов γ -квантов относительно направления оси.



Угловые распределения практически совпадают с экспериментальными, что свидетельствует о правильности /с точностью измерения углов/ учета многократного рассеяния. По формуле эти распределения отличаются от нормального, так как имеют более плоскую вершину.

На рис.4 представлены спектральные распределения потерь энергии на излучение, полученные с помощью интегрирования третьего уравнения системы /1/. Видно, что в условиях осевого каналирования позитроны теряют на излучение гораздо меньшую энергию, чем электроны. Это связано с тем, что позитроны из-за отталкивания в среднем гораздо больше времени проводят вдали от кристаллографических осей - в области, где градиент поля меньше. Этим объясняется и более слабое многократное рассеяние каналированных осью позитронов.

На рис.5 представлена спектральная плотность излучения, умноженная на элемент телесного угла $2\pi\theta d\theta$, для различных углов излучения фотонов. Этот рисунок иллюстрирует вклады в спектральную плотность излучения для различных энергий и углов γ -квантов относительно направления оси. На рис.6 и 7 представлена спектральная плотность излучения для e^- и e^+ , каналированных в кристалле кремния. При расчете учитывалось угловое разрешение установки с помощью дополнительного розыгрыша по нормальному распределению с $\sigma = 10$ мкрад. Рис.6 и 7 иллюстрируют

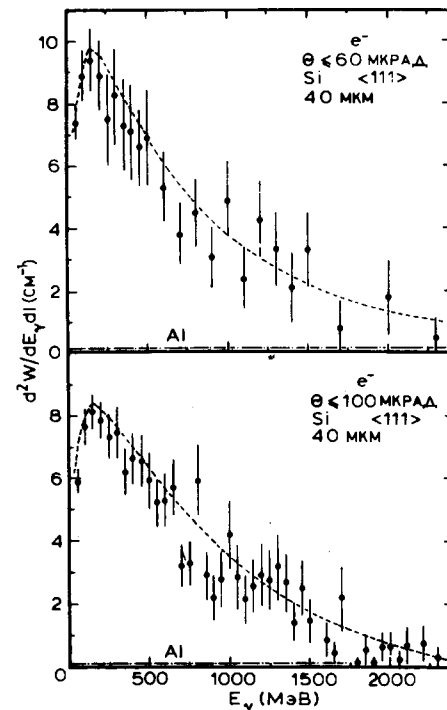


Рис.6. Спектральная плотность излучения электронов с энергией 10 ГэВ. Штриховая линия - результаты расчета, проведенного с помощью моделирования. Штрихпунктирная - уровень излучения в алюминиевой мишени эквивалентной толщины.

Рис.7. Спектральная плотность излучения позитронов с энергией 10 ГэВ. Обозначения - как на рис.6.

достаточно хорошее согласие экспериментальных/11/ и расчетных данных как по форме кривой, так и по абсолютной нормировке. Максимум спектральной плотности излучения электронов /рис.6/ лежит в области энергий γ -квантов 100-200 МэВ и по величине примерно в 70 раз превосходит спектральную плотность в аморфном теле. В то же время максимум спектральной плотности излучения позитронов /рис.7/ лишь в 30 раз превышает спектральную плотность в аморфном теле и лежит в области 50-150 МэВ. Представленные кривые усреднены по траекториям приблизительно 500 электронов и позитронов.

Таким образом, показано, что с помощью численного нахождения траекторий движения e^- и e^+ в реальном поле кристалла удается сравнительно просто получить характеристики излучения каналированных осью частиц. При этом естественным образом учитываются многократное рассеяние на тепловых колебаниях атомов и электронах кристалла, усреднение по начальным условиям падения электронов и позитронов на кристалл, а также конкретные условия постановки и проведения эксперимента. Скорость расчета траекторий и характеристик излучения составляла приблизительно 5 мкм/с на ЭВМ CDC-6500, что достаточно приемлемо даже в случае кристаллов большой толщины. Достаточно хорошее согласие расчетов с экспери-

ментальными данными свидетельствует о правильности постановки задачи и примененных приближениях.

В заключение автор выражает глубокую благодарность М.А.Кумахову и Э.Н.Цыганову за поддержку, Н.К.Жеваго, В.И.Глебову и В.В.Головизнину за многочисленные детальные обсуждения и предоставление программы для расчета потенциального поля и электронной плотности в кристалле кремния.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kumakhov M.A. Phys.Lett., 1976, 57A, p.17; Кумахов М.А. ЖЭТФ, 1977, 72, с.1489.
2. Wedell R. phys.stat.sol.(b), 1980, 99, p.11.
3. Базылев А.И., Жеваго Н.К. УФН, 1982, 137, с.605.
4. Ахиезер А.И., Шульга Н.Ф. УФН, 1982, 137, с.561.
5. Базылев В.А., Глебов В.И., Жеваго Н.К. ЖЭТФ, 1980, т.78, с.62.
6. Кумахов М.А., Трикалинос Х.Г. ЖЭТФ, 1980, 78, с.1623.
7. Yamamura Y., Ohtsuki Y.H. Phys.Rev., 1981, B24, p.3430; Rad.Eff., 1981, 56, p.1.
8. Авакян А.Р. и др. Препринт ЕФИ-595/82/-82, Ереван, 1982.
9. Appleton B.R., Erginsoy C., Gibson W.M. Phys.Rev., 1967, 161, p.330.
10. Doyle P.A., Turner P.S. Acta Cryst., 1968, 24A, p.390.
11. Булгаков Н.К. и др. ОИЯИ, P1-83-640, 1-83-731, Дубна, 1983.
12. Kitagawa M., Ohtsuki Y.H. Phys.Rev., 1973, B8, p.3117.
13. Review of Particle Properties. CERN, Geneva, 1982.

Рукопись поступила в издательский отдел
20 октября 1983 года.

Зимин Н.И. 1-83-729
Моделирование процессов прохождения
и излучения релятивистских электронов и позитронов
при осевом каналировании в кристаллах

С помощью численного решения уравнений движения электронов и позитронов в усредненном в направлении осей $\langle 111 \rangle$ потенциале кристалла кремния проведено моделирование процессов движения и излучения каналированных электронов и позитронов с целью сравнения с экспериментальными данными. Показано, что каналированные осью электроны теряют на излучение гораздо большую энергию, чем позитроны. Максимальная спектральная плотность излучения электронов примерно в 70 раз превосходит уровень излучения в аморфной мишени, для позитронов превышение достигает 30 раз. Представлены характерные распределения координат и углов выхода электронов и позитронов из кристаллов.

Работа выполнена в Лаборатории высоких энергий ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Zimin N.I. 1-83-729
Simulation of Motion and Radiation Processes
of Relativistic Electrons and Positrons for Axis
Channeling in Crystals

Monte Carlo simulation has been carried out for processes of motion and radiation of channeled electrons and positrons. The orientation $\langle 111 \rangle$ axis of silicon crystal is used for the experimental data comparison. It is shown that channeled electrons have a more intensive radiation energy loss than positrons due to channeling. The maximum of spectral density is approximately 70 times more intense than ordinary bremsstrahlung for electrons and 30 times for positrons. The coordinate and angular distributions for electrons and positrons after passing through the crystals are presented.

The investigation has been performed at the Laboratory of High Energies, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой