

Ս. Մ. ԴԱՐԲԻՆՅԱՆ, Կ. Ա. ԻՍՊԻՐՅԱՆ, Ա. Տ. ՄԱՐԳԱՐՅԱՆ

Բոռնի մոտավորությամբ ստացված են բանաձևեր էլեկտրոն-պոզիտրոնային զույգերի ֆոտոառաջացման կտրվածքների ամորֆ և ինտերֆերենցիոն մասերի համար, երբ կամայական էներգիայի ֆոտոնը տարածվում է բյուրեղազրական առանցքի ուղղությամբ: Հաշվված կտրվածքների էներգետիկ, սպեկտրալ և օրիննտացիոն կախումների հիման վրա ուսումնասիրված է նշված կոհերենտ պրոցեսի փորձնական հետազոտման հնարավորությունը:

B-TYPE COHERENT PHOTOPRODUCTION OF ELECTRON-POSITRON PAIRS IN CRYSTALS AND THE POSSIBILITY OF ITS EXPERIMENTAL INVESTIGATION

S. M. DARBINYAN, K. A. ISPIRYAN, A. T. MARGARYAN

Formulae for amorphous and interference parts of the cross-section for electron-positron pair production by photons of arbitrary energy are derived in the Born approximation. Using the calculated energy, spectral and orientation dependences of the cross-section, the possibility of experimental investigation of this B-type coherent process is analyzed for photons passing at zero angles with respect to the crystallographic axes.

Изв. АН Армянской ССР, Физика, т. 23, вып. 4, 183—189 (1988)

УДК 538.56;539.12

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦ В ОРИЕНТИРОВАННОМ КРИСТАЛЛЕ С УЧЕТОМ НЕКОГЕРЕНТНОГО РАССЕЯНИЯ

А. Р. АВАКЯН, ЯН ШИ

Ереванский физический институт

(Поступила в редакцию 9 июля 1987 г.)

Развит метод моделирования движения релятивистских заряженных частиц при каналировании и квазиканалировании в поле кристаллографических осей или плоскостей с учетом некогерентного многократного рассеяния частиц на атомах среды, основанный на решении стохастических дифференциальных уравнений движения частицы.

1. Введение

При исследовании динамики и частотно-угловых характеристик излучения заряженных частиц при их каналировании и квазиканалировании в реальных кристаллах весьма важно учитывать влияние некогерентного многократного рассеяния частиц на ядрах и электронах среды.

Учет указанного влияния можно проводить с помощью уравнения Фоккера—Планка для функции распределения частиц в фазовом пространстве [1, 2]. Другой, более последовательный, метод основан на динамическом описании движения. Вариант такого метода, исходящий из би-

нарных столкновений частиц с атомами кристалла, был использован Ямамурой и Оцуки [3].

При высоких энергиях частиц, когда длина пробега частиц в кристалле велика, более подходящим является метод [4], основанный на решении уравнений движения частиц в поле атомов кристалла, усредненном вдоль осей или плоскостей (поле «непрерывных» осей или «плоскостей»).

Однако поле непрерывных осей или плоскостей не описывает некогерентное рассеяние частиц. В настоящей работе сделана попытка описать это рассеяние путем учета отклонений истинного потенциала поля от усредненного и на основе численного расчета траекторий исследовать динамику частиц при их плоскостном каналировании и квазиканалировании в кристаллах.

2. Стохастические дифференциальные уравнения

Движение частиц в кристалле с учетом их некогерентного рассеяния на ядрах и электронах среды можно моделировать с помощью стохастических дифференциальных уравнений (СДУ) (см., например, [5]). Пусть частица с массой покоя m_0 и лоренц-фактором γ движется под малыми углами относительно кристаллографических плоскостей. Тогда движение частицы в поперечной плоскости $\{x, y\}$ (ось z направлена вдоль проекции средней скорости частицы $\langle v \rangle$ на кристаллографические плоскости) можно описать СДУ вида

$$\begin{aligned} dv_x &= - \frac{dU(x)}{m dx} dt + \sigma_x(x) dW_1(t), \\ dv_y &= \sigma_y(x) dW_2(t), \\ dx &= v_x dt, \quad dy = v_y dt. \end{aligned} \quad (1)$$

Оси x и y направлены соответственно перпендикулярно и параллельно кристаллографическим плоскостям, $m = m_0 \gamma$, $U(x)$ — потенциал непрерывных плоскостей,

$$U(x) = \frac{1}{S} \int_S U_{\text{tot}}(\mathbf{r}) d^2 \mathbf{r}',$$

$U_{\text{tot}}(\mathbf{r})$ — полный потенциал кристалла, усредненный по тепловым колебаниям атомов, \mathbf{r}' — двумерный радиус-вектор в плоскости y, z , S — площадь двумерной элементарной ячейки, $dW_1(t)$ и $dW_2(t)$ — случайные величины, соответствующие так называемому винеровскому процессу (см. [5], гл. 3). Поскольку $dW_1 dW_2 = \delta_{ij} dt$ (δ_{ij} — символ Кронекера), из (1) следует, что величины σ_α ($\alpha = x, y$) связаны со средними квадратами изменений поперечных компонент скорости:

$$\sigma_\alpha^2 = \frac{\overline{\Delta v_\alpha^2}}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} (dv_\alpha)^2, \quad (2)$$

где интервал Δt усреднения такой, что за это время частица пролетает расстояние, значительно большее атомных размеров, но значительно меньшее

расстояний, на которых потенциальная энергия существенно изменяется.

По аналогии с [6] положим

$$c_x^2 = \sigma^2 = c^3 k (E_s/E)^2 L^{-1}(x), \quad (3)$$

где $E_s = 14,1$ МэВ [7], $E = mc^2$, $k \approx [1 + 0,11] g (L_{cr}/L_R)^2$, L_{cr} — толщина кристалла, L_R — радиационная длина,

$$L^{-1}(x) = \frac{Z^2 L' \rho_I(x) + Z L'' \rho_{II}(x)}{d_y d_z \eta_0}, \quad (4)$$

Z — атомный номер, $L' = \ln(184,2 \cdot Z^{-1/3})$, $L'' = \ln(1194 \cdot Z^{-2/3})$, $\eta_0 = 4,31 \times 10^{26}$ см⁻², $\rho_I(x)$ и $\rho_{II}(x)$ — плотности распределения соответственно ядер и электронов, удовлетворяющие условиям нормировки

$$\int_0^{d_x} \rho_\alpha(x) dx = 1 \quad (\alpha = I, II), \quad (5)$$

d_x — пространственный период вдоль оси x . Заметим, что [7]

$$\frac{1}{d_x} \int_0^{d_x} L^{-1}(x) dx = L_R^{-1}. \quad (6)$$

Распределения $\rho_I(x)$ и $\rho_{II}(x)$ ядер и электронов в кристалле являются периодическими функциями x и поэтому могут быть разложены в ряды Фурье:

$$\rho_I(x) = \frac{1}{d_x} \left(1 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \nu_m \cos g_x x \right), \quad (7)$$

$$\rho_{II}(x) = \frac{1}{d_x} \left(1 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \mu_m \cos g_x x \right),$$

где $g_x = 2\pi m/d_x$.

Если ядра расположены по закону Гаусса с дисперсией, равной среднему квадрату u_1^2 амплитуды тепловых колебаний, для коэффициентов ν_m получаем

$$\nu_m = \exp(-g_x^2 u_1^2/2). \quad (8)$$

Коэффициенты μ_m можно найти из плотности электронов, определяемой уравнением Пуассона. В приближении Мольера для потенциала изолированного атома после несложных вычислений получаем

$$\mu_m = \sum_{l=1}^3 a_l \beta_l^2 (\beta_l^2 + g_x^2 a_{TF}^2)^{-1}, \quad (9)$$

где a_l , β_l — константы Мольера, $a_{TF} = 0,4685 \cdot Z^{-1/3}$ (А) — радиус Тома-са-Ферми.

Часто бывает удобно описывать состояние частицы с помощью поперечной энергии

$$\varepsilon_\perp = -\frac{mv_x^2}{2} + U(x). \quad (10)$$

Воспользовавшись формулой Ито (см. [5], гл. 4), из (1) получаем СДУ

$$d\varepsilon_{\perp} = \frac{m\sigma_x^2}{2} dt + m\sigma_x v_x dW_1(t), \quad (11)$$

откуда

$$\begin{aligned} \frac{\overline{\Delta\varepsilon_{\perp}^2}}{\Delta t} &= 2m\sigma_x^2(\varepsilon_{\perp} - U(x)), \\ \frac{\overline{\Delta\varepsilon_{\perp}}}{\Delta t} &= \frac{1}{\Delta t} \int_{\varepsilon}^{\varepsilon+\Delta\varepsilon} d\varepsilon_{\perp} = \frac{m\sigma_x^2}{2}. \end{aligned} \quad (12)$$

СДУ (1), а также формулы (4), (7) и др. нетрудно обобщить на случай движения частицы под малыми углами относительно кристаллографических осей.

3. Моделирование траекторий

Численное моделирование траекторий частиц, движущихся в кристалле под малыми углами относительно кристаллографических плоскостей, проводится путем последовательного решения СДУ (1). Для этого на каждом участке Δl траектории частицы решаются уравнения (1) без учета стохастических членов. К значениям v_x и v_y в конце участка добавляются приращения $\Delta v_x = \varepsilon_x \Delta W_1$ и $\Delta v_y = \varepsilon_y \Delta W_2$, где случайные величины ΔW_{α} разыгрываются по гауссовому распределению с математическим ожиданием, равным нулю, и дисперсией, равной $\Delta t = \Delta l/c$. Новые значения $v_x + \Delta v_x$ и $v_y + \Delta v_y$ (а также x , y в конце участка) берутся в качестве начальных условий для решения уравнений (1) на следующем участке траектории. Имея в виду реальный пучок частиц, координату $x(0)$ при влете частицы в кристалл считаем случайной величиной, равномерно распределенной внутри элементарной ячейки, а координату $y(0)$ без ущерба общности считаем равной нулю. Компонента $v_x(0)$ определяется направлением и угловой расходимостью пучка частиц. Выбор длины участка Δl определяется тем, что на этой длине величина ε_{α} ($\alpha = x, y$) не должна претерпевать существенных изменений. Другими словами, длина Δl должна быть намного меньше периода колебаний траектории. Чрезмерное уменьшение Δl нецелесообразно, так как это увеличивает время счета, но не улучшает, а может, наоборот, ухудшить точность счета из-за накопления погрешностей вычислений.

Вычисления показали, что проекции траекторий частиц на поперечную плоскость $\{x, y\}$ имеют сложный хаотический вид. При этом частицы неоднократно переходят из режима каналирования ($\varepsilon_{\perp} < U_0$) в надбарьерный режим (квазиканалирования, $\varepsilon_{\perp} > U_0$) и наоборот. Благодаря обратному захвату в канал, доля каналированных частиц в пучке на данной глубине l проникновения уменьшается с глубиной l достаточно медленно (рис. 1, кривая 1). Например, эта доля составляет $\sim 20\%$ для электронов с энергией 4,5 ГэВ на глубине 1 мм в случае плоскостей (110) кристалла алмаза. В то же время доля электронов, остающихся в исходных каналах, уменьшается с глубиной l очень быстро (рис. 1, кривая 2) и ста-

новится ничтожно малой уже на глубине ~ 100 мкм (порядка «длины деканализования»).

4. Угол многократного рассеяния

Важной характеристикой траектории частицы является средний по большому участку траектории квадрат угла многократного рассеяния. Длину этого участка будем выбирать достаточно большой, чтобы частица

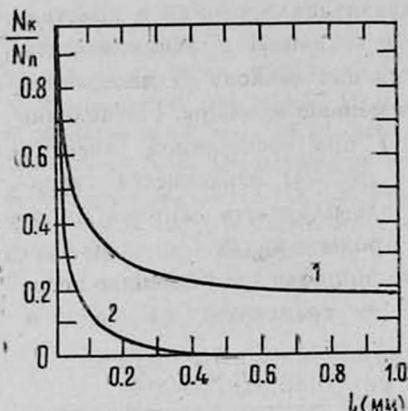


Рис. 1. Отношение числа каналированных частиц N_k к полному числу частиц N_n в зависимости от глубины проникновения l . Кривая 1 учитывает все каналированные частицы на данной глубине проникновения, кривая 2 — только те, которые остались в исходном канале.

успевала побывать на разных расстояниях от кристаллографической плоскости: как на наиболее удаленных, так и на наименее удаленных. Но, с другой стороны, на этой длине поперечная энергия частицы не должна еще существенно измениться. Указанным условиям удовлетворяет длина порядка периода колебаний.

Введем функцию распределения $\varphi(x, \varepsilon_{\perp})$ поперечной координаты x частицы с данной поперечной энергией ε_{\perp} , удовлетворяющую условию нормировки

$$\int_0^{d_x} \varphi(x, \varepsilon_{\perp}) dx = 1.$$

Для дезориентированного кристалла можно считать, что $\varphi(x, \varepsilon_{\perp}) = d_x^{-1}$. Тогда, имея в виду (3), (4) и (6), получаем, что средний квадрат угла многократного рассеяния частицы на единице длины пути принимает соответствующее значение для аморфного вещества:

$$\left\langle \frac{\Delta \theta_x^2}{\Delta l} \right\rangle_a = \left\langle \frac{\Delta v_n^2}{c^3 \Delta t} \right\rangle = \int_0^{d_x} \frac{\sigma_x^2}{c^3 d_x} dx = \frac{k E_s^2}{E^2 l R}. \quad (13)$$

В случае же движения под малыми углами относительно кристаллографических плоскостей имеем

$$\left\langle \frac{\Delta \theta_x^2}{\Delta l} \right\rangle_{cr} = c^{-3} \int_0^{d_x} \sigma_x^2 \varphi(x, \varepsilon_{\perp}) dx = \eta(\varepsilon_{\perp}) \left\langle \frac{\Delta \theta_x^2}{\Delta l} \right\rangle_a, \quad (14)$$

где

$$\varphi(x, \varepsilon_{\perp}) = \frac{1}{T v_x} = \frac{1}{cT} \sqrt{\frac{E}{2(\varepsilon_{\perp} - U(x))}}, \quad (15)$$

T — период поперечных колебаний частицы.

В общем случае не всегда легко удается найти аналитическое выражение для $\eta(\varepsilon_{\perp})$ и ее необходимо бывает вычислять численным интегрированием согласно формуле (14) с учетом (3), (4), (7) и (15). Расчет показывает (рис. 2), что средний квадрат угла многократного рассеяния частицы при ее плоскостном каналировании и квазиканалировании в кристалле значительно отличается от аналогичной величины в эквивалентном аморфном веществе. Величина $\eta(\varepsilon_{\perp})$ существенно зависит от поперечной энергии ε_{\perp} и может быть как больше, так и меньше единицы. Подавление некогерентного рассеяния электронов ($\eta < 1$) при поперечной энергии порядка высоты потенциального барьера ($\varepsilon_{\perp} \approx U_0$) объясняется «зависанием» электронов в области пространства, где плотность зарядов минимальна [8]. В противоположность этому позитроны с $\varepsilon_{\perp} \approx U_0$ «зависают» вблизи кристаллографических плоскостей, что приводит к усилению некогерентного рассеяния примерно в 3—4 раза по сравнению со случаем разориентированного кристалла.

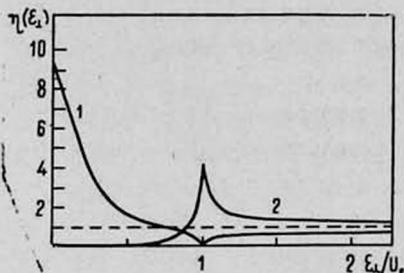


Рис. 2.

Рис. 2. Зависимость $\eta(\varepsilon_{\perp})$ от отношения ε_{\perp}/U_0 в случае электронов (кривая 1) и позитронов (кривая 2), каналированных плоскостями (110) алмаза. Кривые рассчитаны с помощью потенциала Мольера. Случаю дезориентированного кристалла ($\eta(\varepsilon_{\perp}) = 1$) соответствует штриховая кривая.

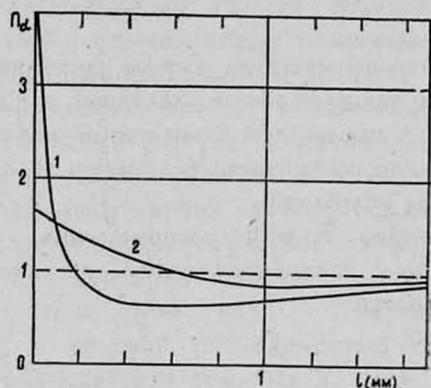


Рис. 3.

Рис. 3. Зависимость отношения Π_{α} средних квадратов угла многократного рассеяния пучка электронов в кристалле и в аморфном веществе от глубины проникновения l в кристалл. Электроны с энергией $E = 4,5$ ГэВ влетают параллельно плоскостям (110) алмаза. Кривая 1 соответствует случаю $\alpha = x$, кривая 2 — $\alpha = y$. В аморфном веществе $\Pi_{\alpha} = 1$ (штриховая кривая).

Указанная зависимость среднего квадрата угла многократного рассеяния на единице пути от поперечной энергии частиц приводит к существенному различию в угловой расходимости пучка частиц при их прохождении через ориентированный кристалл и эквивалентное аморфное веще-

ство. При малых глубинах проникновения расходимость пучка электронов больше в кристалле, а начиная с определенной глубины (150 мкм для электронов с энергией 4,5 ГэВ в плоскостях (110) алмаза) она становится меньше [9]. Проведенный расчет показывает, что указанная величина даже на весьма больших глубинах (1—2 мм) все еще составляет 60—80% от соответствующей величины в случае аморфного вещества (рис. 3).

ЛИТЕРАТУРА

1. Белошицкий В. В., Кумахов М. А. ДАН СССР, 212, 846 (1973).
2. Beloshitsky V. V., Trikalinos Ch. G. Rad. Eff., 56, 71 (1981).
3. Yamamura Y., Ohtsuki V. H. Rad. Eff., 56, 1 (1981).
4. Avakian H. R. et al. Rad. Eff., 82, 1 (1984).
5. Гардинер К. В. Стохастические методы в естественных науках. Изд. Мир, М., 1986.
6. Kitagawa M., Ohtsuki V. M. Phys. Rev., B8, 3117 (1973).
7. Review of Particle Properties. Phys. Lett., 111B (1986).
8. Авакян А. Р., Белошицкий В. В., Кумахов М. А. Письма в ЖТФ, 11, 641 (1985).
9. Авакян А. Р., Белошицкий В. В., Ян Ши. Препринт ЕФИ-831 (58)-85, Ереван, 1985.

ՈՒՂՂՈՐԴՎԱԾ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ՄԱՍՆԻԿՆԵՐԻ ՇԱՐԺՄԱՆ ԹՎԱՅԻՆ ՄՈՒԵԼԱՎՈՐՈՒՄԸ ՈՉ ԿՈՀԵՐԵՆՏ ՑՐՄԱՆ ՀԱՇՎԱՌՄԱՄԲ

Հ. Ռ. ԱՎԱԳՅԱՆ, ՅԱՆ ՇԻ

Աշխատանքում ներկայացված է իրացվորված մասնիկների դինամիկայի բնութագրերի տեսական հետազոտման մեթոդ բյուրեղային առանցքների կամ հարթությունների դաշտում կանալացման և քվազիկանալացման դեպքում: Մեթոդը հաշվի է առնում մասնիկների ոչ կոհերենտ բազմակի ցրումը միջավայրի ատոմների վրա և հիմնված է մասնիկների շարժման ստոխաստիկ դիֆերենցիալ հավասարումների լուծման վրա: Թվային մոդելավորման ճանապարհով ստացվել են ուլտրաբեղյառիվիստիկ էլեկտրոնների դինամիկայի տարբեր բնութագրեր նրանց հարթ կանալացման կամ քվազիկանալացման դեպքում արժաստի բյուրեղում:

COMPUTER SIMULATION OF PARTICLE MOTION IN ORIENTED CRYSTAL WITH DUE REGARD FOR INCOHERENT SCATTERING

H. R. AVAKYAN, CHI YANG

A method for computer simulation of the motion of relativistic charged particles at channeling and quasi-channeling in the field of crystallographic axes or planes is developed. The method allows for the incoherent multiple scattering of particles on the atoms of the medium and is based on solution of stochastic differential equations of motion. As a result of computer simulation, various characteristics of ultrarelativistic electrons motion at planar channeling and quasi-channeling in diamond crystal are obtained.