

508309839

ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ ԻՆՍՏԻՏՈՒՏ
ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ФИ-595(82)-82

Ա.Ր.ԱՎԱԿՅԱՆ, Վ.Ի.ԳԼԵԲՈՎ, Վ.Վ.ԳՈԼՈՎԻՅՆԻՆ,
Ն.Կ.ՋԵՎԱԳՕ, ԿՈՄԻ

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАЕКТОРИЙ И ХАРАКТЕРИСТИК
ИЗЛУЧЕНИЯ ЧАСТИЦ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ В УСРЕДНЕННОМ
ПОТЕНЦИАЛЕ ОСЕЙ КРИСТАЛЛА

ԵՐԵՎԱՆ 1982 ԵՐԵՎԱՆ

БФН-595(82)-82

УДК 511.2:001.57:537.531.9

А.Р.АВАКЯН, В.И.ГЛЕБОВ*, В.В.ГОЛОВИЗНИН*,
Н.К.ЖЕВАГО*, ЯН ШИ

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАЕКТОРИЙ И ХАРАКТЕРИСТИК
ИЗЛУЧЕНИЯ ЧАСТИЦ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ В УСРЕДНЕННОМ
ПОТЕНЦИАЛЕ ОСЕЙ КРИСТАЛЛА**

Проведено численное моделирование движения электронов и позитронов высоких энергий в усредненном потенциале осей монокристалла, являющемся суммой потенциалов отдельных осей с данными индексами Миллера, вычисленных в модели Мольера-Эпитона. Представлены характерные траектории частиц разных типов, соответствующие истинно каналированному и квазиканалированному случаям. Приведены и проанализированы распределения частиц по углам вылета из кристалла.

Ереванский физический институт
Ереван 1982

* Институт атомной энергии им. И.В.Курчатова

EDM-595(82)-82

H.R.AVAKIAN, V.I.GLEBOV*, V.V.GOLOVIZNIN*,
N.K.ZHEVAGO*, C.YANG

NUMERICAL SIMULATION OF TRAJECTORIES AND CHARACTERISTICS
OF HIGH ENERGY PARTICLE RADIATION
IN AVERAGED POTENTIAL OF CRYSTAL AXES

The numerical simulation is carried out of the motion of high energy electrons and positrons in the averaged potential of the monocystal axes which is the sum of potentials of separate axes with given Miller indices calculated in the Moliere-Appleton model. Characteristic trajectories of particles of various types are presented corresponding to the true channeling and quasichanneling cases. Distributions of particles in angles of exit from the crystal are presented and analyzed.

Yerevan Physics Institute
Yerevan 1982

* I.V.Kurchatov Institute of Atomic Energy

ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

БФИ-595(82)-82

А.Р.АВАКЯН, В.И.ГЛЕБОВ, В.В.ГОЛОВИЗНИН,
Н.К.ЖЕВАГО, ЯН ШИ

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАЕКТОРИЙ И ХАРАКТЕРИСТИК
ИЗЛУЧЕНИЯ ЧАСТИЦ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ В УСРЕДНЕННОМ
ПОТЕНЦИАЛЕ ОСЕЙ КРИСТАЛЛА

Ереван 1982

© *Ереванский физический институт, 1982*

Введение

Излучению, возникающему при движении электронов и позитронов с энергией в несколько сот мегаэлектронвольт и выше под малыми углами к осям монокристаллов, посвящен ряд теоретических [1 - 5] и экспериментальных [6 - 10] работ.

При таких высоких энергиях движение частиц в кристалле можно рассматривать методами классической механики. В работе Кумахова [1], где впервые обращено внимание на эффект интенсивного излучения при каналировании, для осевого случая были даны лишь оценки интенсивности и характерных частот излучения. Эти оценки были получены с помощью аналогии осевого каналирования частиц в кристалле с их движением по спирали с постоянным радиусом кривизны в магнитном поле. Более детальный расчет спектрально-углового распределения излучения при осевом каналировании электронов был проведен позднее Базылевым, Глебовым и Жеваго [2], а также Кумаховым и Трикалиносом [3]. В этих работах использовались модельные потенциалы оси вида $U(\rho) = -d/\rho$ [2, 3] или $U(\rho) = \beta\rho^2$ [2], где ρ - расстояние до кристаллографической оси, d и β - подходящие параметры. Таким образом, траектории

каналированных электронов в поперечной по отношению к осям плоскости получались замкнутыми, но с переменным радиусом кривизны (эллиптическими). Модель потенциала $U(\rho) = \pm d/\rho$ использовалась Авакяном, Жеваго и Ян Ши [4] для расчетов спектров излучения от надбарьерных электронов и позитронов, у которых поперечные траектории оказывались гиперболическими.

Использование модельных потенциалов указанного вида позволяет провести аналитические расчеты различных характеристик излучения. Однако при этом не учитываются некоторые характерные особенности истинного потенциала.

Во-первых, истинный потенциал осей кристалла не обладает аксиальной симметрией. В особенности это относится к области, где расстояния до ближайших осей примерно одного порядка и поэтому модельные потенциалы $U(\rho)$ одной изолированной оси не описывают вида истинного потенциала кристалла, являющегося суммой потенциалов многих осей. Это приводит к тому, что в рамках указанных модельных потенциалов не удастся провести расчет излучения от гиперканалированных позитронов, а также учесть влияние прецессии орбит каналированных электронов на спектр излучения. Во-вторых, в рамках приближения изолированной оси невозможно учесть эффектов в переходной области от осевого к плоскостному каналированию, где становится важным учет взаимодействия частицы со многими осями.

В этих случаях приходится использовать численные методы расчета траекторий частиц в кристалле и различных характеристик излучения. Один из таких методов, основанный на бинарных столкновениях частицы с атомами кристалла, использовался недавно Ямамурой и Оцуки [11] для расчета спектров излучения электро-

нов и позитронов, входящих в кристалл под малыми углами к кристаллографическим осям. Этот метод расчета траекторий аналогичен тому, который был применен впервые Робинсоном и Оуэном [12], а затем и другими (см. напр., [13]) для ионов. Влияние тепловых колебаний атомов на движение частиц при этом учитывается заданием отклонений атомов от положения равновесия в момент пролета частицы через кристалл.

Недостатки метода бинарных столкновений проявляются при высоких энергиях частиц, когда длина их пробега в кристалле составляет сотни микрон. В этом случае становится необходимым учитывать относительно большое число столкновений, что непомерно увеличивает общее время расчета. С другой стороны, уменьшение числа разыгрываемых столкновений путем формального сокращения толщины кристалла делает расчет [11] неадекватным реальному эксперименту [9], поскольку характеристики излучения нелинейно зависят от толщины.

Более подходящим в случае высоких энергий частиц является метод, основанный на численном решении уравнений движения частиц в усредненном вдоль направления осей потенциала атомов кристалла. Этот потенциал получается в свою очередь в результате численных расчетов, основанных на определенном выборе модели потенциала отдельного атома и учитывающих в среднем тепловые колебания атомов. В рамках такого подхода удается учесть влияние отклонений истинного потенциала от среднего, которое служит причиной многократного рассеяния каналированных частиц. Метод истинного (не модельного) усредненного потенциала успешно использовался нами ранее [14] при расчетах потерь энергии электроном на излучение в переходной области от осевого к плоскост-

ному каналированию. В настоящей работе более детально излагаются основы этого метода, а также приводится ряд других результатов, полученных с его помощью.

I. Расчет усредненных потенциалов осей.

Потенциал цепочки атомов кристаллографической оси, усредненный вдоль направления оси

$$\Phi_0(\rho) = \frac{2}{d_R} \int_0^{\infty} \Psi(\sqrt{\rho^2 + x^2}) dx, \quad (1)$$

может быть получен в виде [15]

$$\Phi_0(\rho) = \frac{2Ze}{d_R} \sum_{j=1}^3 K_0\left(\frac{\beta_j \rho}{a_{TF}}\right) \alpha_j, \quad (2)$$

где ρ - расстояние до оси, если в качестве потенциала атома использовать приближение Мольера [16]

$$\Psi(r) = \frac{Ze}{r} \sum_{j=1}^3 \alpha_j \exp\left(-\frac{\beta_j r}{a_{TF}}\right). \quad (3)$$

Введены обозначения: Ze - заряд ядра атома, $\alpha_j = \{0,1; 0,55; 0,35\}$, $\beta_j = \{6,0; 1,2; 0,3\}$ - константы, $a_{TF} = 0,4685 \cdot Z^{-1/3}$ (А) - радиус Томаса - Ферми, d_R - расстояние между атомами в цепочке.

Эплтон и др. [17] в рамках модели (3) провели также дополнительное усреднение потенциала (1) по тепловым смещениям атомов оси Δ из положения равновесия с изотропным распределением смещений с плотностью вероятности

$$P(\Delta) = \frac{2\Delta}{u_1^2} \exp\left(-\frac{\Delta^2}{u_1^2}\right),$$

где u_1^2 - средний квадрат радиуса тепловых колебаний. Резу-

Результат вычисления усредненного потенциала оси $\Phi(\rho)$ представлен в работе [17] в виде двойного интеграла

$$\Phi(\rho) = \int_0^{\infty} P(\Delta) d\Delta \int_0^{2\pi} \Phi_0(\sqrt{\rho^2 + \Delta^2 - 2\rho\Delta \cos\theta}) d\theta, \quad (4)$$

где $\Phi_0(\rho)$ определяется выражением (2).

В более простых формах потенциал оси (4) был представлен затем Бэрнотом [13], Сото и др. [18] и авторами [4, 14]. В настоящей работе используется представление потенциала оси в виде [4, 14].

$$\Phi(\rho) = \frac{\sum e}{dR} \sum_{j=1}^3 \alpha_j \exp(q_j^2) \int_0^1 \exp\left(-\frac{\rho^2 t}{u^2} - \frac{q_j^2}{t}\right) \frac{dt}{t}, \quad (5)$$

где $q_j = \beta_j u / 2a_{TF}$, $u = (u_{\perp}^2)^{1/2}$. Причем для среднего квадрата амплитуды тепловых колебаний используется выражение Дебая

$$u_{\perp}^2 = \frac{6\hbar^2 N_A}{k_B} \frac{1}{A\theta_D} \left[\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^2 \int_0^{\theta_D/T} \frac{\xi d\xi}{\exp(\xi)-1} + \frac{1}{4} \right].$$

Разложив в (5) экспоненту $\exp(-\rho^2 t/u^2)$ в ряд и затем проинтегрировав по переменной t , получим разложение $\Phi(\rho)$ в ряд по степеням ρ/u :

$$\Phi(\rho) = \frac{\sum e}{dR} \sum_{j=1}^3 \alpha_j \exp(q_j^2) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} E_{m+1}(q_j^2) \left(\frac{\rho}{u}\right)^{2m}, \quad (5.1)$$

где $E_m(x) = \int_1^{\infty} \exp(-xt) t^{-m} dt$ - интегральная показательная функция, удовлетворяющая рекуррентным соотношениям

$$E_m(x) = [\exp(-x) - x E_{m-1}(x)] (m-1)^{-1}.$$

Представлением (5.1) удобно пользоваться в расчетах потенциала при не слишком больших $\rho \leq 3u$. В частности, из формулы (5.1) следует, что при $\rho = 0$ потенциал оси принимает значение

$$\Phi(0) = \frac{Ze}{d_R} \sum_{j=1}^3 \alpha_j \exp(q_j^2) E_1(q_j^2).$$

Этот результат был получен также Эптоном и др. [17] с помощью выражений (2) и (4).

При больших $\rho \gg u$ можно воспользоваться представлением потенциала оси в виде

$$\begin{aligned} \Phi(\rho) = \frac{Ze}{d_R} \sum_{j=1}^3 \alpha_j \exp(q_j^2) \left[2K_0\left(\frac{\beta_j \rho}{\alpha_{TF}}\right) - \right. \\ \left. - \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} E_{m+1}\left(\frac{\rho^2}{u^2}\right) q_j^{2m} \right], \end{aligned} \quad (5.2)$$

которое получается при разложении в (5) экспоненты $\exp(-q_j^2/t)$ в ряд Лорана и почленным интегрировании этого ряда. Второй член в квадратных скобках (5.2) при $\rho \gg u$ представляет поправки к потенциалу вследствие влияния тепловых колебаний.

Потенциал, в котором движется частица в кристалле $U(\vec{\rho})$, представляет собой суммарный потенциал всех кристаллографических осей, имеющих одинаковые индексы Миллера. Вблизи одной из этих осей, суммарный потенциал определяется в основном вкладом этой оси. В то же время, по мере удаления от оси растет

вклад соседних осей и при вычислении потенциала в этой области приходится суммировать вклады от довольно большого числа осей.

На рис. I показаны рассчитанные с помощью формулы (5) усредненные потенциалы осей с различными индексами Миллера для случая монокристалла кремния и температуры $T = 293^{\circ}$.

Хотя в настоящее время вследствие своей универсальности и относительной простоты потенциал Мольера (3) широко применяется в теоретических расчетах, следует иметь в виду, что модель Томаса-Ферми для легких атомов недостаточно точна. Эта неточность, естественно, отражается на осевых потенциалах, полученных на основе приближения Мольера для томас-фермиевского потенциала. Масштабы этой неточности можно оценить, сравнив потенциалы (5) с осевыми потенциалами с помощью более точных моделей атома. К ним прежде всего относятся модель Томаса-Ферми-Дирака, в рамках которой приближенный вид потенциала атома был найден Фирсовым [19], а также модель Хартри-Фока с учетом релятивистских эффектов, для которой известны две аппроксимации. Одна из них была предложена Коксом и Бонхэмом [20], другая - Дойлем и Тернером [21].

Потенциал Кокса-Бонхэма [20] имеет, как и потенциал Мольера вид суммы кубических потенциалов с экспоненциальной экранировкой. Однако радиус экранировки (параметры β_j) и коэффициенты α_j зависят теперь от атомного номера, как и их число, которое меняется от 6 до 10 в зависимости от Z . Нетрудно получить явный вид усредненного потенциала оси с помощью модели Кокса-Бонхэма. Для этого заметим, что каждое из слагаемых в суммах по j выражений (5.1) и (5.2) является результатом соответствующих усреднений для экранированного потенциала (3). Таким

образом, регулярный метод нахождения аналитического вида потенциала оси по известному виду атомного потенциала состоит в представлении последнего в виде суммы (ряда) кулоновских потенциалов с экспоненциальной экранировкой.

Потенциал Фирсова для атома имеет вид [19]

$$\psi(z) = \frac{Ze}{z} \frac{sh^2 \beta c}{sh^2 \beta (c + z/a_{TF})}, \quad (6)$$

где $\beta = 0,4 z^{-1/3}$, $c \approx 1,7$.

Его можно представить в виде ряда кулоновских потенциалов с экспоненциальной экранировкой

$$\psi(z) = \frac{4Ze}{z} sh^2 \beta c \sum_{n=1}^{\infty} n \exp(-2n\beta(c + z/a_{TF})).$$

Дойль и Тернер [21] аппроксимировали форм-фактор атома.

Соответствующий потенциал атома может быть представлен в виде

$$\psi(z) = \frac{Ze}{z} \sum_{j=1}^4 a_j E_z f\left(\frac{z}{b_j}\right), \quad (7)$$

где a_j, b_j - некоторые параметры, зависящие от атомного номера и найденные в работе [21], $E_z f(x)$ - дополнительная функция ошибок:

$$E_z f(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} \exp(-t^2) dt.$$

Усредненный потенциал оси, вычисленный с помощью (7), имеет вид

$$\Phi(\rho) = \frac{Ze}{d_R} \sum_{j=1}^4 a_j \left[E_1\left(\frac{\rho^2}{u^2 + b_j^2}\right) - E_1\left(\frac{\rho^2}{u^2}\right) \right].$$

Значение потенциала (8) в нуле определяется в этом случае равенством

$$\Phi(0) = \frac{Ze}{d_R} \sum_{j=1}^4 a_j \ln [1 + (b_j/u)^2].$$

В табл. I приведены значения глубины потенциальной ямы (для электрона), образованной осями монокристаллов. Расчет проводился с помощью обсуждавшихся выше моделей атомов [16, 19-21] с учетом изотропных тепловых колебаний. Различия в глубинах ямы составляют в некоторых случаях 15%. Это различие может заметно проявляться в спектрах излучения, что в принципе позволяет при сравнении с соответствующими экспериментальными данными установить точность того или иного приближения.

2. Уравнение движения частиц в усредненном потенциале осей

Как известно (напр., [22]), движение частицы в плоскости, ортогональной кристаллографическим осям, с точностью порядка $(U_0/E)^2$ описывается уравнением

$$\frac{E}{c^2} \frac{d^2 \vec{\rho}}{dt^2} \approx -\vec{\nabla} U(\vec{\rho}), \quad (9)$$

где E - энергия частицы, $U(\vec{\rho})$ - потенциальная энергия в точке нахождения частицы $\vec{\rho}$. При этом продольная скорость ультрарелятивистской ($E \gg mc^2$) частицы dz/dt определяется из уравнения

$$\frac{dz}{dt} \approx c \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[\left(\frac{mc^2}{E} \right)^2 + c^{-2} \left(\frac{d\vec{\rho}}{dt} \right)^2 \right] \right\}, \quad (10)$$

где C - скорость света.

Электромагнитное излучение частиц в кристалле приводит к уменьшению энергии частицы E . Как будет показано ниже путем численных расчетов [4], электромагнитные потери энергии ΔE электронами и позитронами высоких энергий ($E \geq 10$ ГэВ) в достаточно тяжелых и толстых монокристаллах могут составить значительную долю от первоначальной энергии частицы. В этом случае энергия частицы больше не является интегралом движения, как считалось при выводе уравнений (9) и (10). Несмотря на это, вид уравнений движения (9) и (10) сохраняется и при учете радиационной силы трения, с тем отличием, что теперь энергия частицы E зависит от времени согласно уравнению (напр. [23])

$$\frac{dE}{dt} = - \frac{2e^2}{3m^2c^3} \left(\frac{E}{mc^2} \right)^2 \left| \vec{\nabla} U(\vec{\rho}) \right|^2. \quad (II)$$

Такой результат связан с тем, что при разумных энергиях $E \ll 10^{18} - 10^{19}$ эВ в выражении для силы радиационного трения ([23], задача 2 к § 76)

$$\vec{f} = \frac{2e^3}{3mc^3} \gamma (\vec{v} \vec{\nabla}) \vec{E} + \frac{2e^4}{3m^2c^3} (\vec{v} \vec{E}) \vec{E} - \\ - \frac{2e^4}{3m^2c^3} \gamma^2 \vec{v} (\epsilon^2 - c^2 (\vec{E} \vec{v}))$$

$$(\epsilon \vec{E} = - \vec{\nabla} U(\vec{\rho}), \quad \gamma = E / mc^2)$$

оказывается существенной лишь продольная компонента последнего слагаемого.

Уравнение движения (9), (10) и (11) должны быть дополнены начальными условиями

$$\vec{\rho}(0) = \vec{\rho}_0, \quad Z(0) = 0, \quad (12)$$

$$\frac{d\vec{\rho}}{dt}(0) = \vec{v}_0, \quad E(0) = E_0,$$

где $\vec{\rho}_0, \vec{v}_0, E_0$ - поперечная координата, поперечная скорость и энергия частицы в момент входа частицы в кристалл.

Моделирование прохождения пучка частиц через кристалл состоит в многократном решении системы уравнений (9) - (11) при варьировании координаты точки входа, которая является случайной величиной с равновероятным распределением внутри плоской элементарной ячейки кристалла. Если пучок имеет существенный разброс по углам или энергиям, то эти параметры также могут варьироваться согласно конкретной ситуации. Решение уравнений (9) - (11) помимо траекторий частиц позволяет одновременно найти интегральные потери энергии на излучение в результате прохождения кристалла. Другие характеристики излучения, как, например, угловое распределение интегральных потерь, спектрально-угловое и спектральное распределения излучения, могут быть вычислены по найденным траекториям.

Согласно [23] (формула (73, II)) угловое распределение потерь энергии определяется равенством.

$$\frac{d^2 E}{dt d\Omega} = - \frac{e^2}{4\pi c^3} \left[\frac{2(\vec{n}\vec{W})(\vec{v}\vec{W})}{c(1-\vec{n}\vec{v}/c)^4} + \frac{W^2}{(1-\vec{n}\vec{v}/c)^3} - \frac{(1-v^2/c^2)(\vec{n}\vec{W})^2}{(1-\vec{n}\vec{v}/c)^5} \right], \quad (13)$$

где

$$\vec{W} = \left\{ \frac{d^2 \vec{p}}{dt^2}, -\frac{1}{c} \left(\frac{d\vec{p}}{dt} \cdot \frac{d^2 \vec{p}}{dt^2} \right) \right\} \quad (I4)$$

- ускорение частицы в момент времени t , $\vec{n} \approx \{\theta \cos \varphi, \theta \sin \varphi, 1 - \theta^2/2\}$
- единичный вектор в направлении излучения, $\vec{v} = \{d\vec{p}/dt, dz/dt\}$
- скорость частицы, которая находится из уравнений (9) и (10),
 $d\Omega = \theta d\theta d\varphi$ - дифференциал телесного угла.

Спектрально-угловое распределение $d^2 W/d\omega d\Omega$ энергии излучения частицей может быть найдено с помощью выражения [23]

$$\frac{d^2 W}{d\omega d\Omega} = \left(\frac{e\omega}{2\pi} \right)^2 \frac{1}{c^3} \left| [\vec{n} \times \vec{j}(\vec{k}, \omega)] \right|^2, \quad (I5)$$

где

$$\vec{j}(\vec{n}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{v} \exp \left\{ \frac{i\omega}{c} [\vec{n} \cdot \vec{r}(t) - (\theta^2 + r^2) ct/2 - \right. \\ \left. - \frac{1}{2c} \int_0^t \left(\frac{d\vec{p}}{dt} \right)^2 dt \right\} dt, \quad (I6)$$

Спектральное распределение излучения в общем случае находится последующим численным интегрированием (I5) по телесному углу.

3. Анализ получившихся траекторий

На рис. 2-7 представлены характерные траектории электронов и позитронов, движущихся в усредненном потенциале осей $\langle 110 \rangle$ алмаза, в зависимости от начальных условий. Крестами на этих рисунках показано равновесное положение атомов осей. Можно вы-

делить два типа траекторий.

Первый соответствует финитному поперечному движению электронов (рис.2,3) и позитронов (рис.5). В этом случае частицы являются истинно каналированными, так как их траектории заключены в пределах одного осевого канала. По сложившейся терминологии истинно каналированные электроны называют часто просто каналированными. При этом различают резетонное движение [24] с отличным от нуля орбитальным моментом относительно оси (рис.3) и вивонное движение с нулевым орбитальным моментом [25]. Особый случай возникает при движении вдоль осей $\langle 110 \rangle$ в кристаллических структурах типа алмаза. В этом случае оси располагаются парами (см.рис.6) и становится возможным финитное движение вокруг пары осей.

Истинно каналированные позитроны называют также гиперканалированными [26]. Такой тип траекторий положительных частиц был обнаружен еще в первых расчетах Робинсона и Оуэна [12].

Второй тип представляют инфинитные в поперечной плоскости траектории электронов (рис.5) и позитронов (рис.7). Электроны с инфинитными траекториями мы будем далее называть надбарьерными или квазиканалированными. Позитроны с инфинитными траекториями, но такими, что их поперечная энергия ϵ не достаточна для проникновения частиц в область тепловых колебаний атомов оси, называют каналированными [26]. Однако излучение

от таких позитронов по своим свойствам отличается от излучения истинно каналированных частиц и близко к излучению квазиканалированных электронов. Поэтому при анализе излучения их можно отнести к классу квазиканалированных [4]. С другой стороны, для таких позитронов близкие столкновения с атомами оси

подавлены и по этому признаку они ближе к гиперканализованным позитронам. Наконец, позитроны с поперечными энергиями ϵ , превосходящими высоту потенциального пика, называют надбарьерными или квазиканализованными.

Если увеличивать угол входа частиц по отношению к осям, сохраняя достаточно малым угол по отношению к кристаллографическим плоскостям, то мы в конце концов приходим к плоскостному каналированию частиц. Однако существует довольно широкая область углов по отношению к осям, где каналирование не является чисто плоскостным или чисто осевым. Типичный вид соответствующих траекторий для позитронов представлен на рис.6. Здесь рассеяние позитрона на осях приводит к изменению первоначального направления проекции импульса частицы на плоскость (100) на противоположное. При этом частица все время остается в плоскостном канале. Рассеяние на осях может приводить также к выбыванию частиц из плоскостного канала. Зависимость доли выбывших частиц от угла входа по отношению к осям исследована нами в работе [14].

4. Распределение по углам вылета частиц из кристалла

Частицы, рассеянные осями, обладают характерным распределением по поперечным компонентам конечных скоростей U_x , U_y (углам выхода из кристалла). При переходе частицы через границу кристалла сохраняется поперечная скорость (см. (12)), а следовательно и кинетическая энергия поперечного движения. Поэтому имеет место равенство

$$\frac{E \theta_0^2}{2} = \epsilon - U(\vec{p}_0), \quad (17)$$

где θ_0 - угол входа по отношению к оси, ε - поперечная энергия частицы в кристалле. При движении частицы в кристалле сохраняется поперечная энергия ε . На выходе из кристалла имеет место равенство, аналогичное (17);

$$\frac{E \theta_f^2}{2} = \varepsilon - U(\vec{\rho}_f), \quad (18)$$

где θ_f и $\vec{\rho}_f$ - угол и координата выхода частицы из кристалла. Исключая ε с помощью (17) и (18), получаем

$$\frac{E \theta_f^2}{2} = \frac{E \theta_0^2}{2} + U(\vec{\rho}_0) - U(\vec{\rho}_f).$$

Таким образом, даже если угол входа фиксирован, угол выхода может меняться в пределах

$$\theta_{f \min} < \theta_f < (\theta_0^2 + 2\tilde{U}/E)^{1/2}$$

$$\theta_{f \min} = \begin{cases} (\theta_0^2 - 2\tilde{U}/E)^{1/2} \\ 0 \end{cases}$$

$$\theta_0 > (2\tilde{U}/E)^{1/2}$$

$$\theta_0 < (2\tilde{U}/E)^{1/2},$$

где \tilde{U} - максимальная разность потенциальных энергий для двух точек элементарной ячейки. Однако, вследствие воронкообразного вида потенциала, наиболее вероятная разность $U(\vec{\rho}_0) - U(\vec{\rho}_f)$ существенно меньше максимально возможной. Поэтому углы выхода θ_f группируются преимущественно вблизи θ_0 . Чем больше θ_0 , тем меньше относительная ширина допустимых углов вылета. Это видно из сравнения рис.9 и II, где каждой из 500 точек соответствует электрон, имеющий определенное значение проекций скоростей U_x и U_y на выходе из кристалла. При этом $\theta_f = (U_x^2 + U_y^2)^{1/2}/c$. Начальному углу падения θ_0 соответствует точка с координатами $U_x = 0$, $U_y = 1,5 \cdot 10^{-4}$ с на рис.9

и $v_x = 0$, $v_y = 3 \cdot 10^{-4}c$ на рис. II.

Азимутальное распределение поперечной скорости частиц на выходе из кристалла зависит от угла поворота частицы в поперечной плоскости при взаимодействии с каждой осью, а также от числа таких взаимодействий (толщины кристалла). Например, при толщине кристалла алмаза $l = 5$ мм, угле падения $\theta_0 = 1,5 \cdot 10^{-4}$ и энергии $E = 10$ ГэВ ни один из 500 разыгранных электронов не успевает повернуться в плоскости, ортогональной осям $\langle 110 \rangle$, на угол, близкий к π (рис. 9). При большей толщине в 20 мм появляется уже заметная доля таких электронов (рис. 10). Однако, если увеличить угол входа до $3 \cdot 10^{-4}$, то взаимодействие электрона с осью ослабевает и даже при толщине кристалла в 20 мм азимутальный угол поворота не достигает величины π (рис. II).

Скорость установления азимутальной симметрии в обсуждаемых распределениях зависит также от знака заряда частицы. Это видно из сравнения рис. 9 и 14, 10 и 15, которые соответствуют электронам и позитронам при прочих одинаковых условиях. При углах входа $\theta_0 = 1,5 \cdot 10^{-4}$, что лишь немногим превосходит критический угол для осевого каналирования электронов $\theta_L^{(s)} = 1,4 \cdot 10^{-4}$, большая часть позитронов имеет поперечные энергии, близкие к высоте потенциального барьера. Такие позитроны рассеиваются сильнее, чем электроны, у которых при таком угле влета поперечные энергии отстоят достаточно далеко от дна потенциальной ямы. Вместе с тем, по мере увеличения поперечной энергии позитронов связь ямы потенциала их рассеяние быстро уменьшается. Именно группа позитронов с такими поперечными

энергиями дает заметный максимум в плотности точек (рис. I4 и I5), соответствующих направлению входа частиц в кристалл. Для электронов зависимость угла рассеяния от поперечных энергий в соответствующем данному θ_0 интервале не столь сильная и плотность точек на аналогичных рис. 9 и 10 более равномерная.

При нулевом угле входа $\theta_0 = 0$ каналированные электроны совершают одномерные поперечные колебания в азимутально симметричной яме вдоль направления, соединяющего точку входа и ось. Поэтому картина в распределении конечных скоростей (рис. I2) получается азимутально симметричной практически для любых толщин. Для гиперканализованных позитронов соответствующая потенциальная яма не обладает аксиальной симметрией и картина в распределении на рис. I6 отражает асимметрию потенциальной ямы (см. рис. I).

Разброс пучка частиц по начальным углам входа θ приводит к размытию колец, приведенных на рис. 9-II, I4-I5 вдоль радиального направления. Такого рода кольца наблюдались в экспериментах с хорошо коллимированными пучками нерелятивистских ионов [26], а также ультрарелятивистских протонов и π - мезонов [27,28].

Таблица I
Глубина потенциальной ямы (эВ) для электронов в кристаллах
(температура - 293° К)

Z	ось 100				ось 110				ось 111			
	M	K-B	L-T	Φ	M	K-B	K-T	Φ	M	K-B	K-T	Φ
C	63	61	90	84	103	97	109	105	105	104	115	105
Si	89	80	85	87	114	101	108	113	112	102	106	108
Ge	157	172	145	150	203	231	193	196	196	213	180	186
Al	85	66	76	81	126	98	115	118	46	38	42	45
Ni	254	259	244	246	371	376	351	356	140	145	137	137
Cu	225	202	211	216	329	291	302	313	123	113	119	120
Rh	386	391	373	371	558	562	535	533	215	219	211	209
Pd	337	333	325	322	489	478	465	463	188	186	183	181
Ag	275	277	263	259	400	396	376	374	152	157	148	145
Ir	832	-	788	809	1169	-	1121	1153	471	-	449	461
Pt	552	-	517	524	794	-	736	752	310	-	293	296
Au	437	-	404	410	630	-	578	588	244	-	228	231
Pb	214	-	188	193	309	-	270	276	119	-	105	108

Таблица I (продолжение)

V	23	232	253	228	222	152	169	153	148	273	296	267	260
Cr	24	313	308	306	304	208	208	208	205	368	360	357	355
Fe	26	313	263	303	302	208	177	205	203	368	307	354	353
Nb	41	353	317	336	334	237	213	228	227	413	371	392	390
Mo	42	490	483	471	472	331	329	322	323	572	563	548	549
Ta	73	652	-	606	619	444	-	419	426	759	-	706	720
W	74	642	-	791	609	576	-	547	559	978	-	918	939

М - модель Мольева (5)

К-Б - модель Кокса - Бонхама [20]

Д-Г - модель Дойля - Тернера [21] (формула (8))

Ф - модель Фирсова [19]

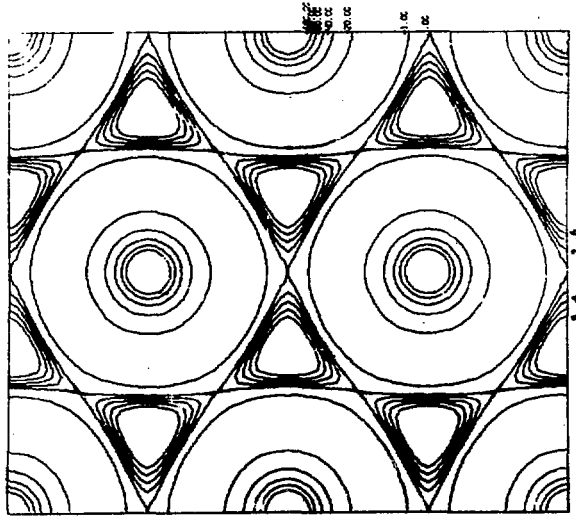


Рис. 1а

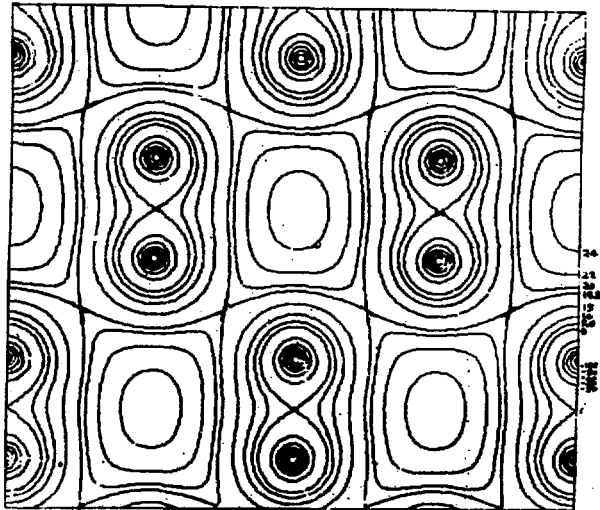


Рис. 1б

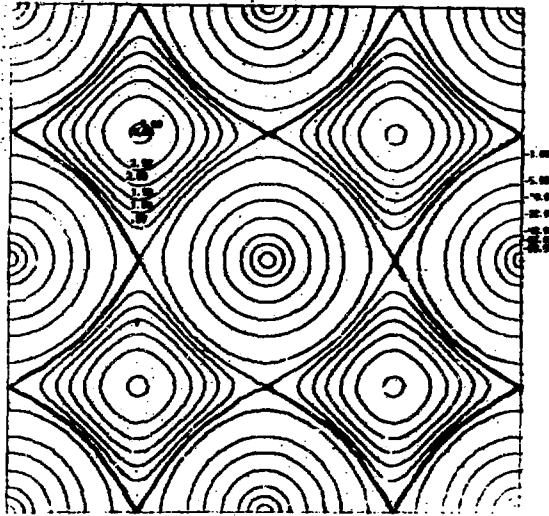


Рис. 1в

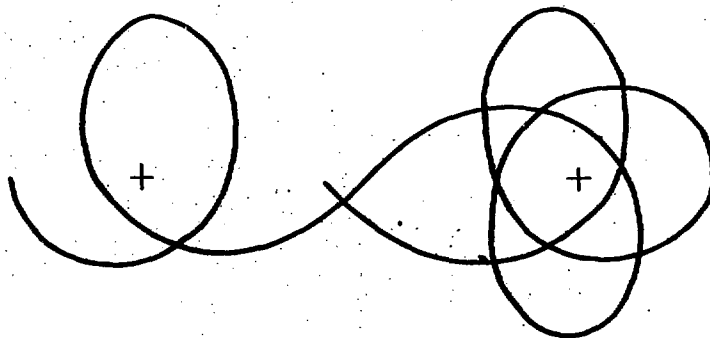


Рис. 2

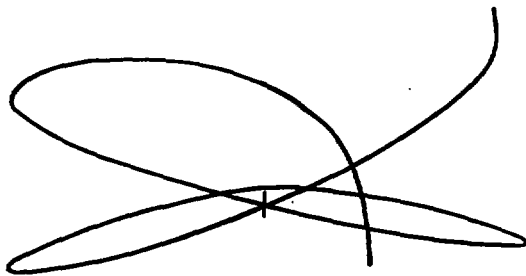


Рис. 3

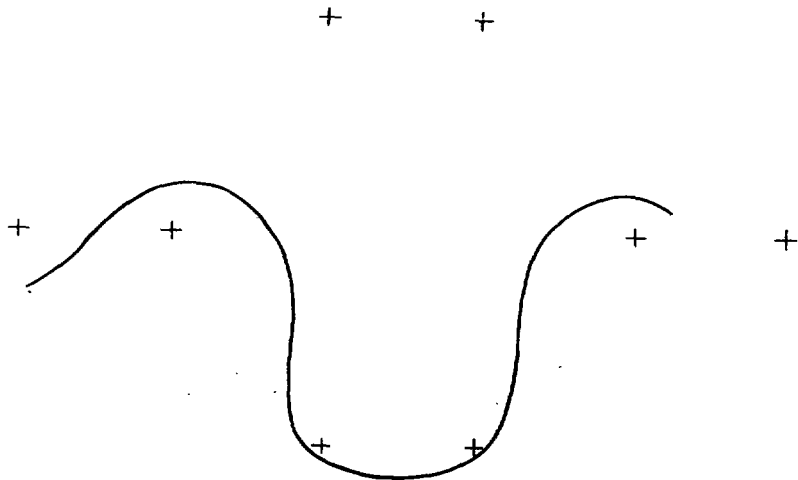


Рис. 4

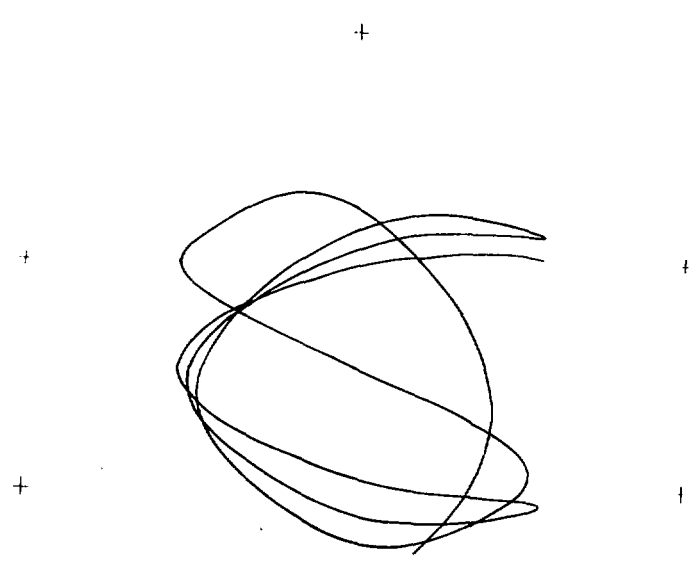


Рис. 5

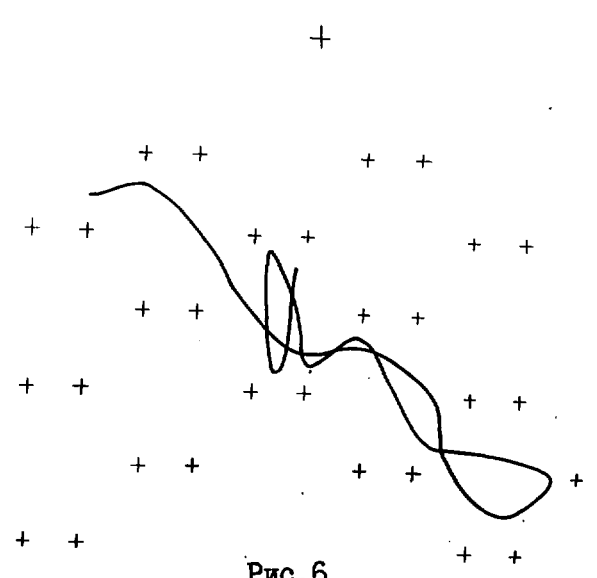


Рис. 6

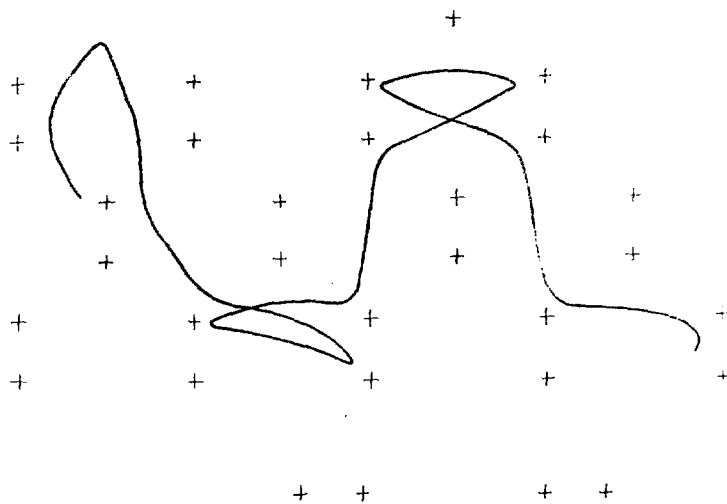


Рис.7

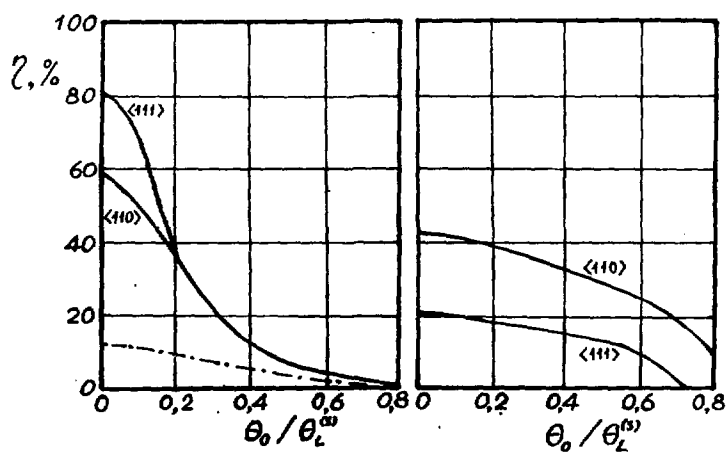


Рис.8

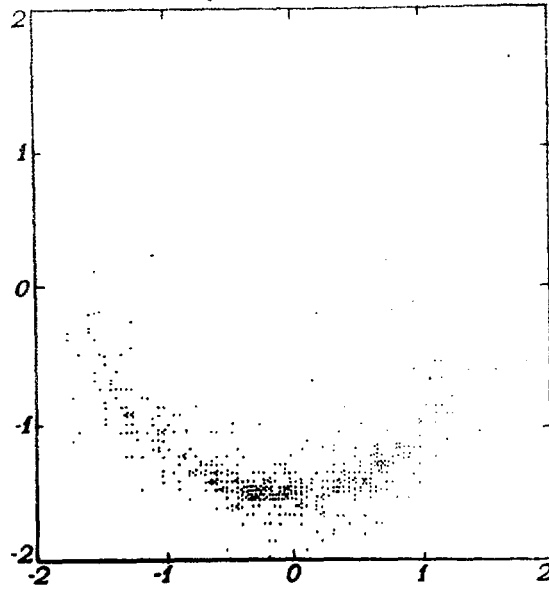


Рис.9

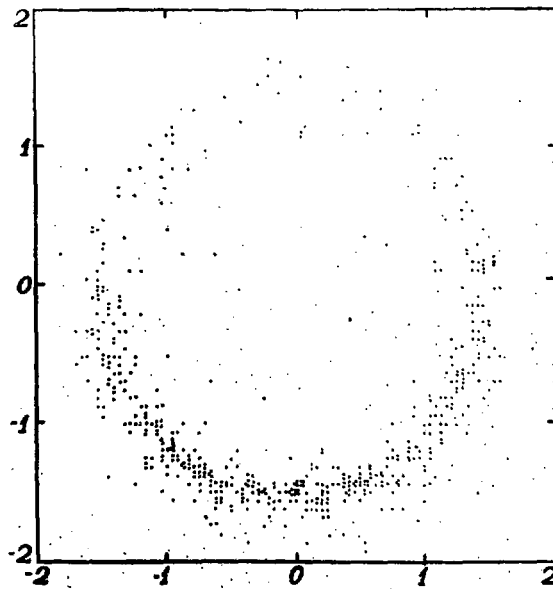


Рис.10

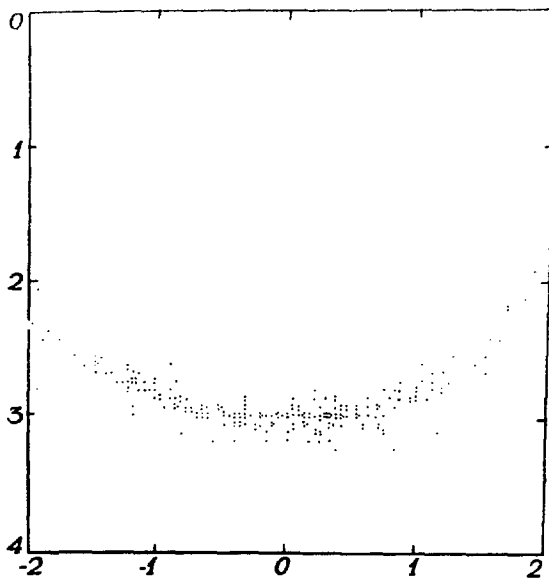


Рис. II

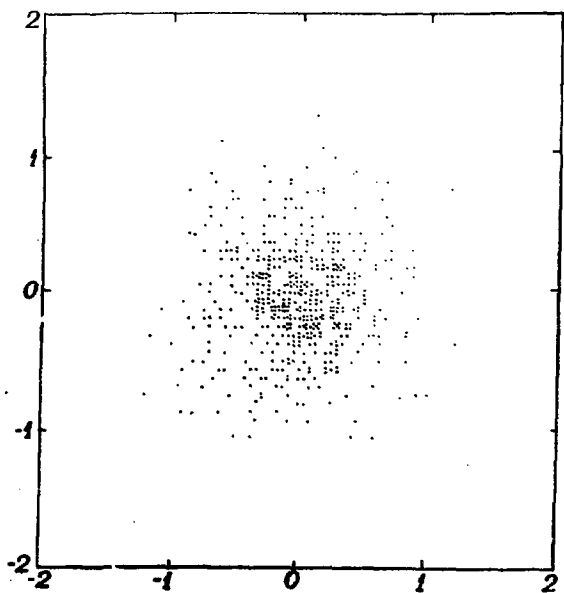


Рис. I?

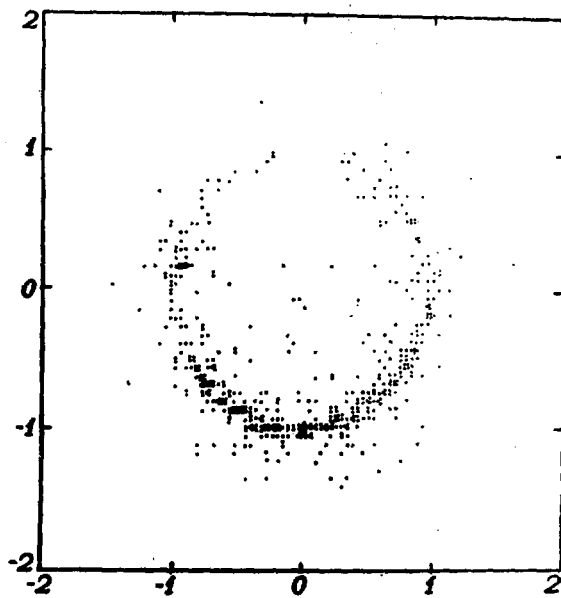


Рис. 13

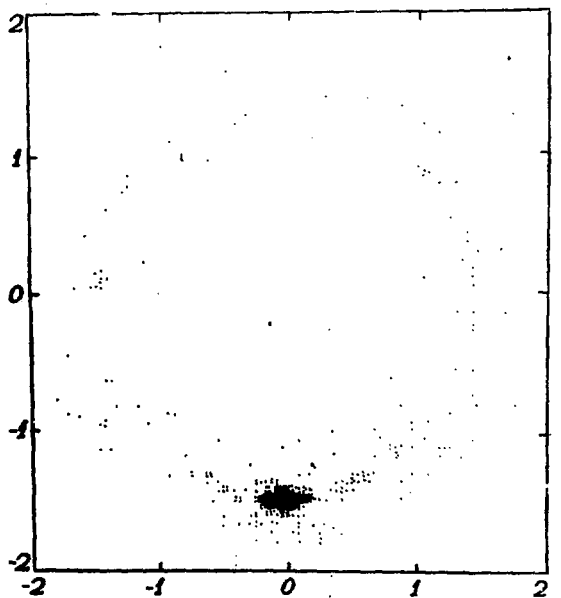


Рис. 14

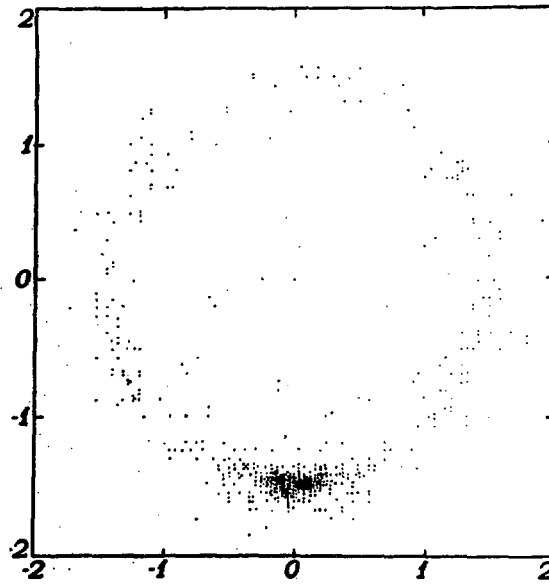


Рис. 15

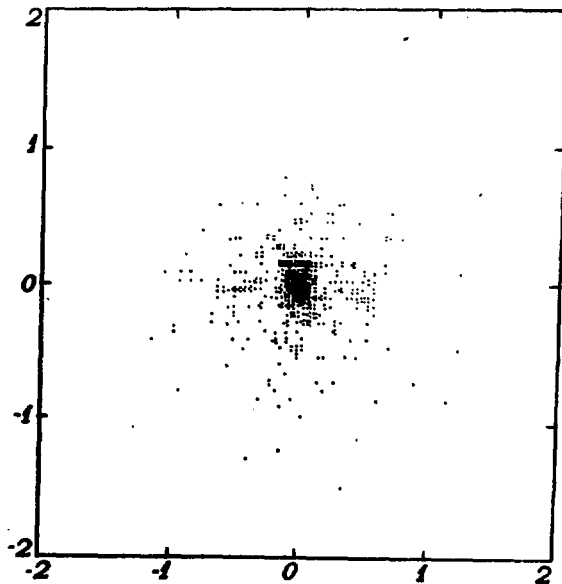


Рис. 16

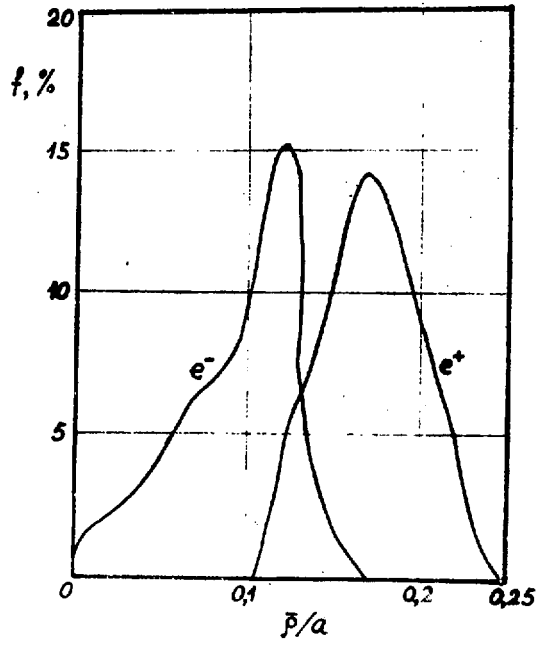


Рис. I7

ПОДПИСИ К РИСУНКАМ

Рис.1 Потенциальная энергия электрона в поле осей кристалла кремния при температуре 293° . Расчет произведен на основе модели Мольера с учетом изотропных колебаний атомов кристалла. Элементарная ячейка обозначена штриховыми линиями. Цифры у кривых соответствуют значениям потенциальной энергии в эВ.

а). для осей $\langle 111 \rangle$; б). для осей $\langle 110 \rangle$; в). для осей $\langle 100 \rangle$.

Рис.2 Проекция траектории электрона с энергией $E_0 = 10$ ГэВ на поперечную плоскость (110) в кристалле алмаза толщиной 20 мкм. Крестами обозначены оси $\langle 110 \rangle$. Случай каналирования вокруг двух осей.

Рис.3 То же, что на рис.2. Случай каналирования вокруг одной оси.

Рис.4 То же, что на рис.2. Случай надбарьерного движения.

Рис.5 То же, что на рис.2. Для позитрона. Случай гиперканалирования. Толщина кристалла равна 40 мкм.

Рис.6 То же, что на рис.5. Случай каналирования в плоскости (001) .

Рис.7 То же, что на рис.6. Случай надбарьерного движения.

Рис.8 Зависимость доли истинно каналированных электронов (левый график) и позитронов (правый график) в кристалле кремния от отношения угла θ_0 входа частицы относительно оси кристалла к критическому углу $\theta_L^{(s)}$ Линдхарда для осевого каналирования. Штрих-пунктирная

кривая указывает долю электронов, каналированных вокруг одной оси $\langle 110 \rangle$, сплошная кривая с индексами $\langle 110 \rangle$ -

- суммарную долю электронов, каналированных как вокруг одной, так и вокруг двух ближайших осей $\langle 110 \rangle$.

Рис.9 Распределение скоростей электронов с энергией $E_0 = 10$ ГэВ. После прохождения через кристаллическую пластину алмаза толщиной $\ell = 5$ мкм. При влете в кристалл электроны имели одинаковую скорость, находясь в плоскости (110) и составляющую угол $\Theta_0 = 1.5 \cdot 10^{-4}$ рад относительно кристаллографической оси $\langle 110 \rangle$. Поперечные координаты влета электронов хаотически распределены по плоской элементарной ячейке. По осям диаграммы отложены компоненты скоростей электронов при выходе из кристалла в единицах 10^{-4} с. Диаграмма построена по данным 500 электронов. Критический угол для осевого каналирования $\Theta_c^{(s)} \approx 1.4 \cdot 10^{-4}$ рад.

Рис.10 То же, что на рис.9, для электронов, $\ell = 20$ мкм, $\Theta_0 = 1.5 \cdot 10^{-4}$ рад, ось $\langle 110 \rangle$.

Рис.11 То же, что на рис.10, при $\Theta_0 = 3 \cdot 10^{-4}$ рад.

Рис.12 То же, что на рис.10, при $\Theta_0 = 0$.

Рис.13 То же, что на рис.9, для случая, когда скорость влета электронов находилась в плоскости (011) и составляла $\Theta_0 = 10^{-4}$ рад относительно оси $\langle 100 \rangle$. Толщина кристалла $\ell = 10$ мкм.

Рис.14 То же, что на рис.9, для позитронов, $\ell = 5$ мкм, $\Theta_0 = 1.5 \cdot 10^{-4}$ рад, ось $\langle 110 \rangle$.

Рис.15. То же, что на рис.9, для позитронов, $\ell = 20$ мкм, $\Theta_0 = 1.5 \cdot 10^{-4}$ рад, ось $\langle 110 \rangle$.

Рис.16 То же, что на рис.9, для позитронов, $l = 20$ мкм, $\theta_0 = 0$, ось $\langle 110 \rangle$.

Рис.17 Относительное число f частиц, у которых среднее расстояние до ближайшей оси $\langle 100 \rangle$ находится между $\bar{\rho}$ и $\bar{\rho} + \Delta \bar{\rho}$. Значения $\bar{\rho}$ даны в единицах стороны a элементарного куба решетки алмаза ($a = 3,567 \cdot 10^{-8}$ см). Угол входа частиц в кристалл относительно оси $\langle 100 \rangle$ равен 0. В данном случае $0 \leq \bar{\rho} \leq 0,25 a$, $\Delta \bar{\rho} = 0,01 a$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кумахов М.А. Теория излучения заряженных частиц в кристалле при каналировании.- ЖЭТФ, 1977, т.72, с.1494.
2. Базылев В.А., Глебов В.И., Жеваго Н.К. Спектральное распределение излучения при плоскостном и осевом каналировании ультррелятивистских электронов.- ЖЭТФ, 1980, т.78, с.62-80.
3. Kumakhov M.A., Trikalinos C.G. Higher Harmonics of Spontaneous Radiation of Ultrarelativistic Channeled Particles.- Phys.Stat.Sol.,ser.b, 1980, vol.99, p.449-462.
4. Avakian A.L., Yang C., Zhevago N.K. Radiation from Electrons and Positrons Scattered by Crystal Strings.- Radiat. Effects, 1981, vol.56, p.39-46, ЖЭТФ, 1982, т.82, с.504.
5. Шульга Н.Ф., Когерентный и магнитно - тормозной эффекты в излучении релятивистских частиц, движущихся в кристалле вблизи кристаллографической оси.- Письма в ЖЭТФ, 1980, т.32, с.179 - 182.
6. Мирошниченко И.И., Мерри Д.Д., Авакян Р.О., Фигут Т.Х. Экспериментальные исследование радиации релятивистских каналированных позитронов.- Письма в ЖЭТФ, 1979, т.29, с.786-790, ЖЭТФ, 1982, т.82, вып.6, с.1825-1833.
7. Аганьянц А.О., Вартанов Ю.А., Вартапетян Г.А., Кумахов М.А., Трикалинос Х., Яралов В.Я. Излучение каналированных электронов с энергией 4,7 ГэВ в алмазе. Письма в ЖЭТФ, 1979, т.29, с.554-556.

8. Kalinin B.N., Kaplin V.V., Potylitsin et al. Radiation of Channelled 800 MeV Electrons in Diamond Crystals.-Phys. Lett. 1979, vol.70A, p.447-449.
9. Adishchev Y.N., Kaplin V.V., Potylitsin P. et al. Variation of γ -ray Spectra with the Energy of Channelled Electrons.- Phys.Lett., 1980, vol.75A, p.316-318.
10. Ганенко В.Б., Генденштейн Л.Э., Мирошниченко И.И. и др. Структура в ориентационных зависимостях и спектры излучения при прохождении ультрарелятивистских электронов через монокристаллы алмаза и кремния.- Письма в ЖЭТФ, 1980, т.32, с. 397-401.
11. Yamamura Y., Ohtsuki Y.H. Computer Studies on Radiation of Axially Channelled Electrons.- Rad.Eff., 1981, vol.56, p.1-10. Computer Simulation of Radiation of Axially Channelled Electrons.- Phys.Rev., 1981, vol.24B, N.6, p.3430-3441.
12. Robinson M.T., Oen O.S. Computer Studies of the Slowing Down of Energetic Atoms in Crystals.- Phys.Rev., 1963, vol.132, p.2383-2398.
13. Barrett J.H. Monte Carlo Channeling Calculations.-Phys. Rev., 1971, vol.B3, N.5, p.1527-1547.
14. Авакян А.Р., Глебов В.И., Жеваго Н.К., Ян Ши. Явление минимума радиационных потерь энергии релятивистских электронов в кристалле.Препринт ЕФИ-514(1)-82, Ереван, 1982.

15. Lehmann G., Leibfried G. Long-Range Channeling Effects in Irradiated Crystals.- J. of Appl. Phys., 1963, vol. 34, N. 9, p. 2821-2836.
16. Moliere G. Theori der strehlung schneller gelander teilchen.- Z. Naturforsch, 1947, Bd 2a, S. 133-145.
17. Appleton B.R., Erginsoy C., Gibson W.M. Channeling Effects in the Energy Loss of 3 - 11 MeV Protond in Silicon and germanium.- Phys. Rev., 1967, vol. 161, N. 2, p. 330-349.
18. Sato K., Koiwa M., Hirabayashi M., Yamaguchi S. An Ion Channeling Study of NbO Crystals.- Rad. Eff., 1981, vol. 54, N. 3, 4, p. 227-234.
19. Firsov O.B. The Simplified Thomas-Fermi-Dirac Equation and Approximation of Its Calculation for an Atomic Potential.- Rad. Eff., 1982, vol. 61, N. 1, p. 73-81.
20. Cox H.L., Bonham R.A. Elastic Electron Scattering Amplitudes for Neutral Atoms Calculated Using the Partial Wave Method at 10, 40, 70 and 100 kV for $Z = 1$ to $Z = 54$.- J. of Chem. Phys., 1967, vol. 47, N. 1, p. 2599-2602
21. Doyle P.A., Turner P.S. Relativistic Hartree-Fock x-ray Electron Scattering Factors.- Acta Cryst., 1968, vol. 24A, p. 390-397
22. Базылев В.А., Жеваго Н.К. Генерация интенсивного электромагнитного излучения релятивистскими частицами. УФН, 1982. т. 137, вып. 4, с. 605-662.

23. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля, М.:Наука, 1967
24. Bell F., Kreiner H.J., Sismann R. Bound States of Swift Negative Particles in Crystals.- Phys.Lett., 1972, vol.38A, p.373-374.
25. Nip. H.C.H., Daghish R.L., Chang A.P.M., Kelly F.C. Localized States of Energetic Electrons in Crystal Lattices.- Phys.Lett., 1971, vol.34A, p.257-258.
26. Gemmell D.S. Channeling and Related Effects in the Motion of Charged Particles Through Crystals.- Rev.Mod.Phys., 1974, vol.46, N.1, p.129-227.
27. Uggerhoj E. Channeling in the GeV - Region.- Nucl.Instr. and Meth., 1980, vol.170, p.105-114,
28. Andersen S.K., Fich O., Golovchenko J.A. Influence of Channeling on Scattering of 2 - 15 GeV/c Protons, π^+ and π^- Incident on Si and Ge Crystals.- Nucl.Phys., 1980, vol.167B, p.1-41.

Рукопись поступила 13 сентября 1982 г.

Редактор Л.П.Мукаян
Тех.редактор А.С.Абрамян

Заказ 644

ВФ-04063

Тираж 299

Препринт ЕФИ

Формат издания 60x84/16

Подписано к печати 30/ХП-82г. 2,5 уч.изд.л.Ц. 37 к.

Издано Отделом научно-технической информации
Ереванского физического института, Ереван 36, Маркаряна 2

индекс 3624