

Препринт ЕФН-989(39)-87

ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱԶԻ ԻՆՍՏԻՏՈՒՏ
ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
YEREVAN PHYSICS INSTITUTE



А.Р.АВАКЯН, ЯН ШИ

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦ
В ОРИЕНТИРОВАННОМ КРИСТАЛЛЕ С УЧЕТОМ
НЕКОГЕРЕНТНОГО РАССЕЯНИЯ

ЦНИИАтоминформ
ЕРЕВАН — 1987

ՅՓՄ-989 (39)-87

Հ. Բ. Ավագյան, Յան Օր

ԿՈՂՄՆՈՐՈՇՎԱԾ ԲՅՈՒՐՆԵՐՆԵՐՈՒՄ ՄԱՍՆԻԿՍԵՐԻ ՇԱՐՅՄԱՆ
ԲՎԱՅԻՆ ՄՈԳՆԵԼԱՎՈՐՈՒՄԸ, ՀԱՇՎԻ ԱՌՆՆԵԼՈՎ ԿՐԱՆՍ ՈՉ
ԿՈՇԵՐՆՆՍ ՏՐՈՒՄԸ

Աշխատանքում ներկայացված է բյուրեղային առանցքների կամ ճար-
թոլթյուղների դաշտում կանալացված կամ քվազի կանալացված լիցքա-
պորված մասնիկների անցման դինամիկայի և մետազայթման քննութագրերի
տեսական ուսումնասիրման մեթոդ, որը ճիմնվում է ստոխաստիկ շարժման
հավասարումների լուծման վրա և հաշվի է առնում մասնիկների ոչ
զոներնա բազմակի ցրումը միջավայրի առումների վրա: Ցվային մոդելա-
վորմամբ ստացված են խիստ ռեկասիվիստական էլեկտրոնների շարժման
և մետազայթման տարբեր քննութագրեր աղամանդի բյուրեղում ճարթ կանա-
լացման և քվազի կանալացման դեպքում:

Նրևանի ֆիզիկայի ինստիտուտ
Նրևան 1987



Центральный научно-исследовательский институт информации
и технико-экономических исследований по атомной науке
и технике (ЦНИИатоминформ) 1987 г.

УДК 539.12.17

А.Р.АВАКЯН, ЯН ШИ

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦ
В ОРИЕНТИРОВАННОМ КРИСТАЛЛЕ С УЧЕТОМ НЕКОГЕРЕНТНОГО
РАССЕЯНИЯ

В работе развит метод теоретического исследования динамики и характеристик излучения 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 частиц. Путем численного моделирования получены различные характеристики динамики и излучения ультрарелятивистских электронов при их плоскостном каналировании и квазиканалировании в кристалле алмаза.

Ереванский физический институт
Ереван 1987

Preprint EOM-989(39)-87

A.R. AVAKIAN, C. YANG

NUMERICAL SIMULATION OF MOTION OF PARTICLES IN AN ORIENTED
CRYSTAL WITH REGARD TO INCOHERENT SCATTERING

In this paper a method for theoretical investigation of the dynamics and characteristics of charged-particle radiation is developed at channeling and quasichanneling in the field of crystallographic axes or planes with regard to incoherent multiple scattering of particles on the atoms of the medium. This method is based on the solution of stochastic differential equations of motion of particles. By way of numerical simulation characteristics of the dynamics and radiation of ultrarelativistic electrons are obtained at their planar channeling and quasichanneling in a diamond crystal.

Yerevan Physics Institute

Yerevan 1987

I. 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. После усреднения по координатам задача сводится к решению уравнения Фоккера-Планка для функции распределения частиц по поперечной энергии в случае малых углов влета частиц относительно кристаллографических плоскостей или для функции распределения по поперечной энергии и продольному моменту - в случае осей [1-4].

Наряду с таким статистическим описанием существует еще другой метод, основанный на динамическом описании движения, а именно, на интегрировании уравнения движения частиц в поле атомов кристалла. Вариант такого метода, исходящий из бинарных столкновений частиц с атомами кристалла, использовался Ямамурой и Оцуки [5] для расчета спектров излучения электронов и позитро -

нов, влетающих в кристалл под малыми углами относительно кристаллографических осей.

При высоких энергиях частиц, когда длина пробега частиц в кристалле велика, необходимо учитывать большое число столкновений частиц с атомами кристалла, что непомерно увеличивает время расчета при использовании метода бинарных столкновений. В этом случае более подходящим является метод [6], 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 и характеристики излучения частиц при их плоскостном каналировании и квазиканалировании в кристаллах.

2. Стохастические дифференциальные уравнения

Движение частиц в кристалле с учетом их некогерентного рассеяния на тепловых колебаниях ядер и электронах среды можно моделировать с помощью стохастических дифференциальных уравнений (СДУ) (см., например, [7]). Пусть частица с массой покоя m_0 и лоренц-фактором γ движется под малыми углами относительно кристаллографических осей. Тогда движение частицы в поперечной плоскости (x, y) (ось z направлена вдоль указанных осей) можно описывать СДУ вида

$$\begin{aligned}
dv_x &= -\frac{\partial U(x,y)}{m\partial x} dt + \tilde{\sigma}_x(x,y) dW_1(t), \\
dv_y &= -\frac{\partial U(x,y)}{m\partial y} dt + \tilde{\sigma}_y(x,y) dW_2(t), \\
dx &= v_x dt, \\
dy &= v_y dt.
\end{aligned}
\tag{I}$$

Здесь $m = m_0 \gamma$ - релятивистская масса частицы; $U(x,y)$ - потенциальная энергия частицы в поле непрерывных осей:

$$U(x,y) = \frac{1}{d_z} \int_0^{d_z} U_{tot}(\vec{z}) dz,$$

$U_{tot}(\vec{z})$ - энергия частицы в кристалле, усредненная по тепловым колебаниям атомов, d_z - пространственный период кристаллической решетки вдоль оси z ; $dW_1(t)$ и $dW_2(t)$ - случайные величины, соответствующие так называемому винеровскому процессу (см. [7], гл.3). Поскольку $dW_i dW_j = \delta_{ij} dt$ (δ_{ij} - символ Кронекера), из (I) следует, что величины $\tilde{\sigma}_\alpha$ ($\alpha = x, y$) связаны со средними квадратами изменений поперечных компонент скорости

$$\tilde{\sigma}_\alpha^2 = \frac{\overline{\Delta v_\alpha^2}}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} (dv_\alpha)^2, \tag{2}$$

где интервал Δt усреднения такой, что за это время частица пролетает расстояние, значительно большее атомных размеров, но значительно меньшее расстояний, на которых потенциальная энергия частицы существенно изменяется.

По аналогии с [8] положим

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = c^3 \kappa (E_s/E)^2 L^{-1}(x, y), \quad (3)$$

где $E_s = 14,1$ МэВ [9], $E = mc^2$ - энергия частицы, $\kappa \approx [1 + 0,11 \times \lg(L_{cz}/L_R)]^2$, L_{cz} - толщина кристалла, L_R - радиационная длина,

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

Z - атомный номер, $L' = \ln 184,2 Z^{-1/3}$ и $L'' = \ln 1194 Z^{-2/3}$ - радиационные логарифмы, $\eta = 4,31 \cdot 10^{26} \text{ см}^{-2}$, $\rho_I(x, y)$ и $\rho_{II}(x, y)$ - плотности распределения соответственно ядер и электронов с условиями нормировки

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

d_x и d_y - пространственные периоды кристаллической решетки вдоль осей x и y . Заметим, что [9]

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

Аналогично, когда частица движется под малыми углами относительно кристаллографических плоскостей, ее поперечное движение можно описывать СДУ вида:

$$dv_x = -\frac{dU(x)}{m dx} dt + \sigma_x(x) dW_1(t), \quad (7)$$

$$dv_y = \sigma_y(x) dW_2(t),$$

$$dx = v_x dt,$$

$$dy = v_y dt.$$

Здесь оси x и y направлены соответственно перпендикулярно и параллельно кристаллографическим плоскостям, $U(x)$ - потенциальная энергия частицы в поле непрерывных плоскостей

$$U(x) = \frac{1}{d_z d_y} \int_0^{d_y} \int_0^{d_z} U_{\text{tot}}(\vec{z}) dz.$$

Дисперсия $\sigma_x^2(x)$ определяется формулой, аналогичной (3):

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = c^3 \kappa (E_s/E)^2 L^{-1}(x), \quad (8)$$

где

$$L^{-1}(x) = \frac{z^2 L' \rho_I(x) + z L'' \rho_{II}(x)}{d_y d_z \eta}, \quad (9)$$

$\rho_I(x)$, $\rho_{II}(x)$ - соответствующие одномерные плотности распределения

$$\rho_x(x) = \int_0^{d_y} \rho_x(x, y) dy. \quad (10)$$

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

$$\rho_I(x, y) = \frac{1}{d_x d_y} \left[1 + \sum' \nu_{mn} \exp(i \vec{g}_1 \vec{z}_1) \right], \quad (11)$$

$$\rho_{II}(x, y) = \frac{1}{d_x d_y} \left[1 + \sum' \mu_{mn} \exp(i \vec{g}_1 \vec{z}_1) \right],$$

где $\vec{g}_1 = \{2\pi m/d_x, 2\pi n/d_y\}$, $\vec{z}_1 = \{x, y\}$, суммирование проводится по всем $\vec{g}_1 \neq 0$.

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

коэффициентов ν_{mn} получаем

$$\nu_{mn} = \exp(-g_{\perp}^2 u_1^2 / 2). \quad (I2)$$

Коэффициенты μ_{mn} можно найти из плотности электронов, определяемой уравнением Пуассона. В приближении Мольера для потенциала изолированного атома после несложных вычислений можно получить

$$\mu_{mn} = \sum_{i=1}^3 \alpha_i \beta_i^2 (\beta_i^2 + g_{\perp}^2 a_{TF}^2)^{-1}, \quad (I3)$$

где α_i , β_i - константы Мольера, $a_{TF} = 0,4685 \cdot Z^{-1/3}$ (Å) - радиус Томаса-Ферми.

Нетрудно убедиться, что для распределений $\rho_I(x)$ и $\rho_{II}(x)$ (см. (II)) имеем

$$\rho_I(x) = \frac{1}{a_x} \left[1 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \nu_{m0} \cos g_x x \right], \quad (I4)$$

$$\rho_{II}(x) = \frac{1}{a_x} \left[1 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \mu_{m0} \cos g_x x \right],$$

где ν_{m0} и μ_{m0} определяются (I2) и (I3) с $n = 0$.

Часто бывает удобно описывать состояние частицы, движущейся под малыми углами относительно кристаллографических осей, с помощью поперечной энергии

$$\epsilon_{\perp} = \frac{m}{2} (v_x^2 + v_y^2) + U(x, y) \quad (I5)$$

и продольной компоненты момента импульса:

$$M_z = m (v_x y - v_y x). \quad (I6)$$

Воспользовавшись формулой Ито (см. [7], гл. 4), из (I) получаем СДУ

$$d\varepsilon_{\perp} = \frac{m}{2} (\sigma_x^2 + \sigma_y^2) dt + m(\sigma_x v_x dW_1 + \sigma_y v_y dW_2),$$

$$dM_z = \left(\frac{\partial U(x,y)}{\partial y} x - \frac{\partial U(x,y)}{\partial x} y \right) dt + mc(\sigma_x y dW_1 - \sigma_y x dW_2). \quad (I7)$$

Отсюда получаем

$$\overline{\frac{\Delta \varepsilon_{\perp}^2}{\Delta t}} = m\sigma^2 (\varepsilon_{\perp} - U(x,y)),$$

$$\overline{\frac{\Delta M_z^2}{\Delta t}} = \frac{m^2 c^2 \sigma^2}{2} (x^2 + y^2), \quad (I8)$$

$$\overline{\frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta t}} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} d\varepsilon_{\perp} = \frac{m}{2} (\sigma_x^2 + \sigma_y^2),$$

$$\overline{\frac{\Delta M_z \Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta t}} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} (dM_z d\varepsilon_{\perp}) = \frac{mc M_z \sigma^2}{2},$$

где $\sigma^2 = 2\sigma_{\alpha}^2$ ($\alpha = x, y$).

Аналогично, в случае движения под малыми углами относительно плоскостей из (7) получаем

$$d\varepsilon_{\perp} = \frac{m\sigma_x^2}{2} dt + m\sigma_x v_x dW_1, \quad (I9)$$

где

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{m v_x^2}{2} + U(x). \quad (20)$$

Отсюда

$$\overline{\frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta t}} = \frac{m\sigma_x^2}{2}, \quad \overline{\frac{\Delta \varepsilon_{\perp}^2}{\Delta t}} = 2m\sigma_x^2 (\varepsilon_{\perp} - U(x)). \quad (2I)$$

3. Моделирование траекторий

Численное моделирование траекторий частиц, движущихся в кристалле под малыми углами относительно кристаллографических плоскостей, проводится путем последовательного решения СДУ (7). Для этого на каждом участке траектории Δl частицы решаются уравнения (7) без учета стохастических членов. К значениям U_x и U_y в конце участка добавляются приращения $\Delta U_x = \sigma_x \Delta W_1$ и $\Delta U_y = \sigma_y \Delta W_2$, где случайные величины ΔW_α разбрасываются по гауссову распределению с математическим ожиданием, равным нулю, и дисперсией, равной $\Delta t = \Delta l / c$. Новые значения $U_x + \Delta U_x$ и $U_y + \Delta U_y$ (а также x , y в конце рассматриваемого участка) берутся в качестве начальных условий для решения уравнений (7) на следующем участке траектории. Имея в виду реальный пучок частиц, координату $x(0)$ при влете частицы в кристалл, считаем случайной, равномерно распределенной внутри элементарной ячейки, а координату $y(0)$ без ущерба общности считаем равной нулю. Компонента $U_x(0)$ определяется направлением и угловой расходимостью пучка частиц. Выбор длины участка Δl определяется тем, что на этой длине величина σ_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) имеет сложный хаотический вид. При

этом частицы неоднократно переходят из режима каналирования ($\epsilon_{\perp} < U_0$) в надбарьерный режим (квазиканалирования, $\epsilon_{\perp} > U_0$) и наоборот. Благодаря обратному захвату в канал доля каналированных частиц в пучке на данной глубине l проникновения уменьшается с глубиной l достаточно медленно (рис. I, 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 время как доля электронов, остающихся в исходных каналах, уменьшается с глубиной l очень быстро (рис. I, кривая 2) и становится ничтожно малой уже на глубине ~ 100 мкм (порядка "длины деканалирования").

4. Угол многократного рассеяния

Важной характеристикой траектории частицы является **средний** по большому участку траектории квадрата угла многократного рассеяния. Длину этого участка будем выбирать достаточно **большой**, чтобы частица успевала побывать на разных расстояниях от кристаллографической плоскости — как на наиболее, 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 $\varphi(x, \epsilon_{\perp})$ поперечной координаты x частицы с данной поперечной энергией ϵ_{\perp} с условием нормировки:

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

Для дезориентированного кристалла можно считать, что $\Psi(x, \varepsilon_{\perp}) = d_x^{-1}$. Тогда, имея в виду (8), (9) и (6), получаем, что средний квадрат угла многократного рассеяния частицы на единице длины пути принимает соответствующее значение для аморфного вещества.

$$\left\langle \frac{\overline{\Delta\theta_{\alpha}^2}}{\Delta l} \right\rangle_{\alpha} = \left\langle \frac{\overline{\Delta U_{\alpha}^2}}{c^3 \Delta t} \right\rangle_{\alpha} = \int_0^{d_x} \frac{\sigma_{\alpha}^2}{c^3 dx} dx = \frac{\kappa E_S^2}{E^2 L_R} \quad (22)$$

В случае же движения под малыми углами относительно кристаллографических плоскостей

$$\left\langle \frac{\overline{\Delta\theta_{\alpha}^2}}{\Delta l} \right\rangle_{c_2} = c^{-3} \int_0^{d_x} \sigma_{\alpha}^2 \Psi(x, \varepsilon_{\perp}) dx = \eta(\varepsilon_{\perp}) \left\langle \frac{\overline{\Delta\theta_{\alpha}^2}}{\Delta l} \right\rangle_{\alpha} \quad (23)$$

где

$$\Psi(x, \varepsilon_{\perp}) = \frac{1}{T U_x} = \frac{1}{cT} \sqrt{\frac{E}{2(\varepsilon_{\perp} - U(x))}} \quad (24)$$

T - период поперечных колебаний частицы.

Для позитрона с хорошей точностью можно ограничиться приближением параболического потенциала. Тогда для каналированных позитронов получаем [10]

$$\eta_{e^+}(\varepsilon_{\perp}) = 1 + (ZL' + L'')^{-1} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m J_0(m\pi \sqrt{\frac{\varepsilon_{\perp}}{U_0}}) (ZL' \gamma_{m0} + L'' \mu_{m0}), \quad (25)$$

где J_0 - функция Бесселя нулевого порядка, U_0 - глубина потенциальной ямы. Аналогично, для каналированных электронов, находящихся далеко от дна потенциальной ямы, получаем [11]

$$\eta_{e^-}(\varepsilon_{\perp}) = [ZL' \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_{\perp}}{U_0}} \ln \left(\frac{1 + \sqrt{\varepsilon_{\perp}/U_0}}{\sqrt{|\varepsilon_{\perp}/U_0 - 1|}} \right) \right)^{-1} + L''] / (ZL' + L''). \quad (26)$$

В общем случае не всегда легко удается найти аналитические выражения для $\eta_{e^+}(\epsilon_{\perp})$ и $\eta_{e^-}(\epsilon_{\perp})$ и их необходимо вычислять численным интегрированием согласно формуле (23) с учетом (8), (9), (14) и (24). 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 $\eta(\epsilon_{\perp})$ существенно зависит от поперечной энергии ϵ_{\perp} и может быть как больше, так и меньше единицы. Подавление некогерентного рассеяния электронов ($\eta_{e^-} < 1$) при поперечной энергии порядка высоты потенциального барьера $\epsilon_{\perp} \approx U_0$ объясняется "зависанием" электронов в области пространства, где плотность зарядов минимальна [11]. Противоположно этому, позитроны с $\epsilon_{\perp} \approx U_0$ "зависают" вблизи кристаллографических плоскостей, что приводит к усилению некогерентного рассеяния примерно в 3-4 раза по сравнению со случаем разориентированного кристалла.

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 вещество. 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 [12]. Проведенный расчет показывает, что указанная величина даже на весьма больших глубинах ($\sim 1 \div 2$ мм) все еще составляет 60 + 80% от соответствующей величины в случае аморфного вещества.

5. Характеристика излучения

Из полученных траекторий можно построить функцию распределения частиц по поперечной энергии $f(\epsilon_{\perp}, \ell)$ на данной глубине ℓ проникновения в кристалл.

Результирующий частотный спектр излучения $dW/d\omega$ пучка частиц можно получить, как обычно [13,14], усреднением спектра $dW(\epsilon_{\perp})/d\omega$ для частицы данной поперечной энергии ϵ_{\perp} по ϵ_{\perp}

$$\frac{dW}{d\omega} = \int \frac{dW(\epsilon_{\perp})}{d\omega} \bar{f}(\epsilon_{\perp}, L_c) d\epsilon_{\perp}, \quad (27)$$

где

$$\bar{f}(\epsilon_{\perp}, L_c) = L_c^{-1} \int_0^{L_c} f(\epsilon_{\perp}, \ell) d\ell \quad (28)$$

— средняя по толщине кристалла L_c функция распределения.

Результаты расчета (рис.3,4), проведенного с использованием потенциала Мольера и точной электродинамической формулы [12], учитывающей недипольность излучения и продольные колебания частиц, заметно отличаются от аналогичных результатов, полученных в более простой модели, не учитывающей различие некогерентного рассеяния в ориентированном кристалле и в аморфном веществе [14]. Некоторое расхождение с экспериментальными данными можно объяснить тем, что при толщинах кристалла в 1 мм и 1,7 мм вероятность образования двух и большего числа фотонов не мала (при $L_c = 1,7$ мм среднее число фотонов $\approx 1,3$), и в эксперименте [15] детектор мог зарегистрировать несколько одновременно испущенных фотонов как один фотон с суммарной энергией.

Это может привести к заметному сдвигу спектра в более жесткую область частот.

Формула (27) справедлива, вообще говоря, при условии, что на длине траектории частицы, существенной для формирования излучения, поперечная энергия частицы заметно не изменяется.

Однако результаты моделирования показали, что некогерентное рассеяние частицы может существенно изменить ее поперечную энергию уже на протяжении одного-двух периодов колебаний.

Действительно, среднее по траектории излучение поперечной энергии на единице длины пути в кристалле определяется формулой

$$\left\langle \frac{\Delta \bar{\epsilon}_\perp}{\Delta \ell} \right\rangle = \frac{m}{2cd_x} \int \sigma_x^2 \psi(x, \epsilon_\perp) dx = \frac{E \eta(\epsilon_\perp)}{2} \left\langle \frac{\Delta \theta_x^2}{\Delta \ell} \right\rangle. \quad (29)$$

В частности, в случае $E = 2$ ГэВ и $\Delta \ell = 3$ мкм (порядка одного периода колебаний в алмазе) для электронов, находящихся на дне потенциальной ямы, или позитронов с поперечной энергией порядка высоты потенциального барьера из (29) получаем, что $\langle \Delta \bar{\epsilon}_\perp \rangle / \epsilon_\perp \sim 10 \pm 20\%$. Можно также оценить среднее изменение квадрата поперечной энергии. Для приведенного примера $\langle \Delta \epsilon_\perp^2 \rangle^{1/2} / \epsilon_\perp$ составляет $10 \pm 15\%$.

Поэтому для более точного расчета частотно-углового распределения $d^3W/d\omega d\theta_x d\theta_y$ энергии излучения следует исходить из траекторий, полученных в результате моделирования, согласно известной формуле [16]

$$\frac{d^3W}{d\omega d\theta_x d\theta_y} = \frac{e^2 \omega^2}{4\pi^2 c^3} \left| \vec{n} \times \vec{j}(\vec{n}, \omega) \right|^2, \quad (30)$$

где $\vec{n} = \{ \theta_x, \theta_y, 1 - (\theta_x^2 + \theta_y^2)/2 \} = \{ \theta \cos \phi, \theta \sin \phi, 1 - \theta^2/2 \}$

- единичный вектор в направлении излучения,

$$\vec{J}(\vec{n}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{U} \exp \left\{ \frac{i\omega}{c} \left[\vec{n} \vec{z}_1(t) - (\theta^2 + \gamma^{-2}) \frac{ct}{2} - \int_0^t \left(\frac{d\vec{z}_1(t')}{dt} \right)^2 \frac{dt'}{2c} \right] \right\}. \quad (31)$$

Частотный спектр $dW/d\omega$ излучения можно рассчитать последующим численным интегрированием (30) по телесному углу.

Электромагнитные потери энергии $\Delta E = \int (dW/d\omega) d\omega$ электронов и позитронов высоких энергий ($E \geq 10$ ГэВ) в достаточно тяжелых и толстых кристаллах могут составлять значительную долю первоначальной энергии частицы. В этом случае уравнения (7) необходимо дополнить уравнением [16]

$$d\gamma = - \frac{2e^2 \gamma^2}{3m_0^3 c^5} |g \text{grad } U|^2 dt,$$

учитывающим изменение лоренц-фактора $\gamma = E/m_0 c^2$ частицы.

6. Связь СДУ с уравнением Фоккера-Планка

Функция распределения $f(\epsilon_{\perp}, \ell)$, используемая в (28), в действительности описывает некоторую совокупность (ансамбль) частиц. Более полно ансамбль частиц описывается функцией распределения в фазовом пространстве $\{x, y, v_x, v_y\}$. В случае плоскостного каналирования и квазиканалирования достаточно рассматривать переменные x и ϵ_{\perp} . Из системы СДУ, определяющих движение отдельных частиц, можно получить уравнение Фоккера-Планка для функции распределения $F(x, \epsilon_{\perp}, t)$. Если, как обычно, предположить:

$$F(x, \epsilon_{\perp}, t) = \Phi(x, \epsilon_{\perp}) f(\epsilon_{\perp}, ct), \quad (32)$$

то после усреднения по x уравнения для $F(x, \varepsilon_1, t)$ получаемого из СДУ (19), приходим к уравнению Фоккера-Планка для $f(\varepsilon_1, \ell)$, приведенному ранее [3]

$$\frac{\partial f}{\partial \ell} = -\frac{\partial}{\partial \varepsilon_1} \left(\left\langle \frac{\Delta \varepsilon_1}{\Delta \ell} \right\rangle f \right) + \frac{\partial^2}{2 \partial \varepsilon_1^2} \left(\left\langle \frac{\Delta \varepsilon_1^2}{\Delta \ell} \right\rangle f \right), \quad (33)$$

где угловые скобки означают усреднение по x с помощью функции $\Phi(x, \varepsilon_1)$. При наличии эргодичности функции распределения $\Phi(x, \varepsilon_1)$ для ансамбля и $\Psi(x, \varepsilon_1)$ для отдельной частицы (см. (24)) совпадают.

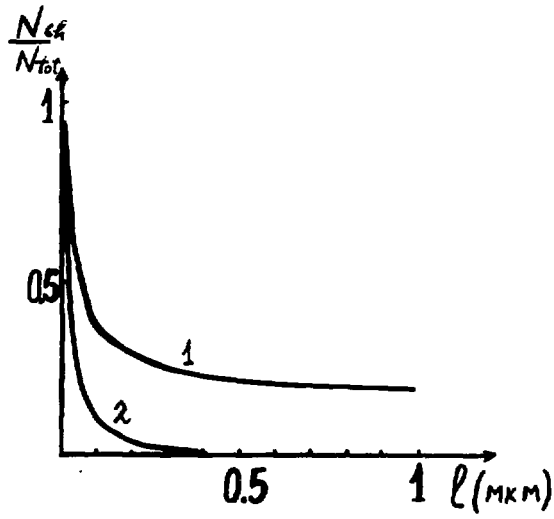


Рис. I

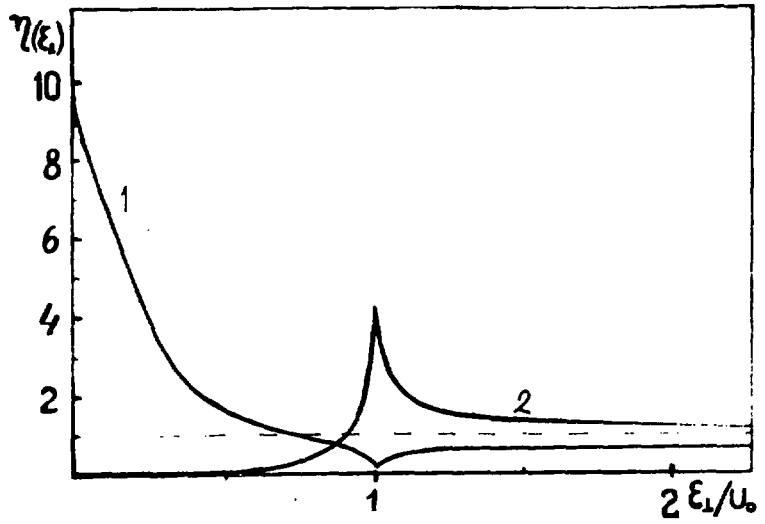


Рис. 2

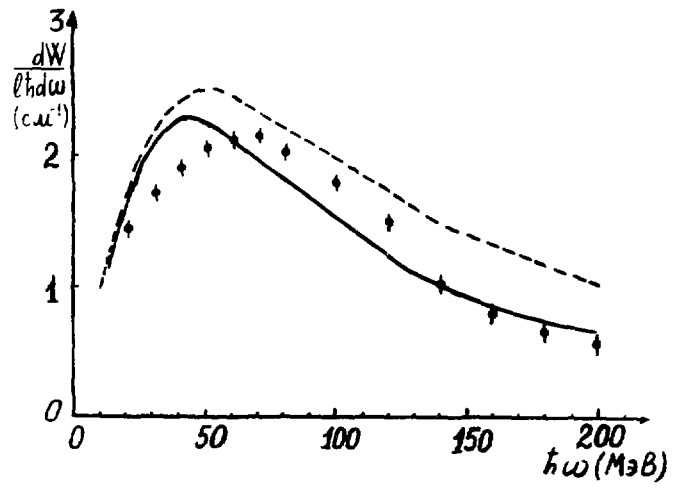


Рис. 3

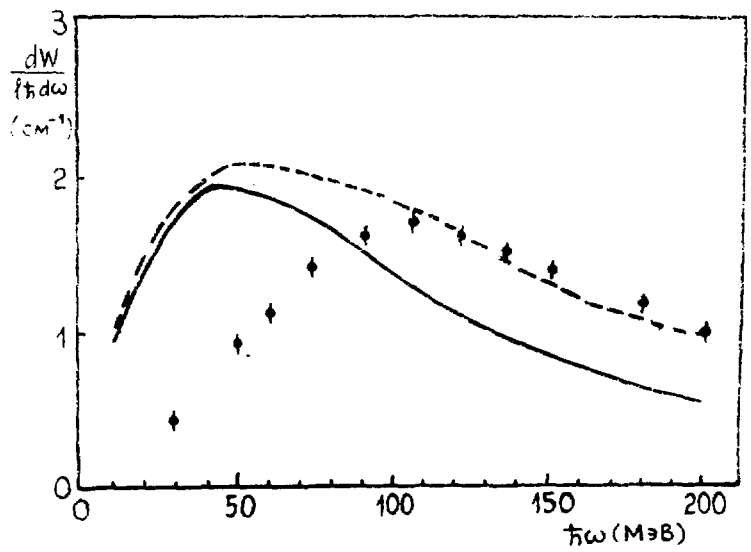


Рис. 4

ПОДПИСИ К РИСУНКАМ

Рис.1 Отношение числа каналированных частиц N_{ch} к полному числу частиц N_{tot} в зависимости от глубины проникновения ϱ . Кривая 1 учитывает все каналированные частицы на данной глубине проникновения. Кривая 2 - только те, которые остались в исходном канале.

Рис.2 Зависимости $\eta(\epsilon_{\perp})$ от отношения ϵ_{\perp}/U_0 поперечной энергии к глубине потенциальной ямы в случаях электронов (кривая 1) и позитронов (кривая 2), каналированных плоскостями(110) алмаза. Кривые рассчитаны с помощью потенциала Мольера. Случаю дезориентированного кристалла ($\eta(\epsilon_{\perp}) = 1$) соответствует штриховая кривая.

Рис.3 Спектр излучения электронов (сплошная кривая) с энергией $E = 4,5$ ГэВ при каналировании плоскостями (110) алмаза толщиной $L_c = 1$ мм. Точки соответствуют эксперименту [15], штриховая кривая - расчету [14].

Рис.4 То же, что и на рис.3, при $L_c = 1,7$ мм.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Белошицкий В.В., Кумахов М.А. Многократное рассеяние каналированных ионов в кристалле. Плоскостное каналирование. ДАН СССР, 1973, т.212, № 3-5, с.846-847.
2. Белошицкий В.В., Кумахов М.А. Многократное рассеяние электронов при аксиальном каналировании. ЖЭТФ, 1982, т.82, № 2, с.462-472.
3. Beloshitsky V.V., Trikalinos Ch.G. Passage and radiation of relativistic channeled particles. Rad.Eff., 1981, vol.56, p.71.
4. Baier V.N., Katkov V.H., Strakovenko V.M. Radiation of relativistic electrons at planar channeling in thick crystals.- Phys.stat.sol., 1983, vol.118(b), p.1.
5. Yamamura Y., Ohtsuki V.H. Computer studies on radiation of axially channeled electrons.-Rad.Eff., 1981, vol.56, p.1-10.
6. Avakian H.R. et al. Computer simulation of trajectories and characteristics of high energy particle radiation in averaged potential of crystal axes.- Rad.Eff., 1984, vol.82, N 1-2, p.1.
7. Гардинер К.В. Стохастические методы в естественных науках. М.: Мир, 1986.
8. Kitagawa M., Ohtsuki V.M. Modified dechanneling and diffusion coefficients.- Phys.Rev., 1973, vol.88, N.7, p.3117-3123.
9. Review of Particles Properties.- Phys.Lett., 1986, vol.111B.

10. Авакян А.Р., Ян Ши. Влияние некогерентного многократного рассеяния на частотный спектр излучения релятивистских частиц при их плоскостном каналировании в кристаллах. Препринт ЕФИ-892(43)-86, Ереван, 1986.
11. Авакян А.Р., Белошицкий В.В., Кумахов М.А. Подавление многократного рассеяния при плоскостном каналировании отрицательных частиц. Письма в ЖТФ, 1985, т. II, с.35.
12. Авакян А.Р., Белошицкий В.В., Ян Ши. Излучение и многократное рассеяние электронов высоких энергий при планарном каналировании. Препринт ЕФИ-831(58)-85, Ереван, 1985.
13. Базылев В.А., Белошицкий В.В. и др. Излучение каналированными позитронами в непрерывном потенциале плоскостей кристалла. ЖЭТФ, 1981, т.80, вып.2, с.608-626.
14. Байер В.Н., Катков В.М., Страховенко В.М. Недипольное излучение электронов при плоскостном каналировании. Препринт ИЯФ, Новосибирск, 1984.
15. Авакян Р.О., Авакян Э.О., Аветисян А.Э. и др. Излучение электронов высоких энергий вблизи кристаллографических осей и плоскостей. Препринт ЕФИ-704(19)-84, Ереван, 1984.
16. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. М.: Физматгиз, 1982.

Рукопись поступила 13 мая 1987 г.

The address for requests:
Information Department
Yerevan Physics Institute
Markaryan St., 2
Yerevan, 375036
Armenia, USSR

А.Р.АВАКЯН, ЯН ШИ

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦ В ОРИЕНТИРОВАННОМ
КРИСТАЛЛЕ С УЧЕТОМ НЕКОГЕРЕНТНОГО РАССЕЯНИЯ

Редактор Л.П.Мукаян

Технический редактор А.С.Абрамян

Подписано в печать 30/УП-67

ВФ-02524 Формат 60x84/16

Облетная печать. Уч.изд.л. I,5

Тираж 299 экз. Ц. 22 к.

Зак.тип. 505

Индекс 3624

Отпечатано в Ереванском физическом институте

Ереван 36, Маркаряна 2

индекс 3624



ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ