Письма в ЖЭТФ, том 101, вып. 10, с. 799 – 804 © 2015 г. 25 мая

Квантовые особенности угловых распределений параметрического рентгеновского излучения релятивистских каналированных электронов в кристалле

К. Б. Коротченко[1]*, Ю. Л. Пивоваров*

Кафедра теоретической и экспериментальной физики, Национальный исследовательский томский политехнический университет, 634050 Томск, Россия

Поступила в редакцию 18 февраля 2015 г.

После переработки 6 апреля 2015 г.

Прогнозируется возникновение резких скачкообразных изменений (квантовый скачок) в угловом распределении параметрического рентгеновского излучения от каналированных электронов, связанное с появлением каждого нового квантового состояния каналированного электрона при соответствующем увеличении энергии электронного пучка.

DOI: 10.7868/S0370274X15100136

1. Введение. Последние экспериментальные результаты по угловым распределениям параметрического рентгеновского излучения (PXR) каналированных 255 МэВ электронов (PXRC)[2] [1] выявили отклонение от углового распределения обычного PXR (классическая теория без учета каналирования электронов). Наблюдаемые отклонения объясняются проявлением эффекта, связанного с "поперечным" форм-фактором каналированного электрона. Важны два параметра: угол падения электронов по отношению к кристаллографическим плоскостям и энергия электронного пучка. Последний из этих параметров определяет число поперечных связанных состояний – квантовых состояний при каналировании (или подбарьерных зон). Первый же отвечает за населенность этих состояний. В настоящей работе мы теоретически и численно изучали эволюцию угловых распределений PXRC с увеличением энергии электронного пучка для различных кристаллов и исследовали его квантовые особенности – изменение углового распределения PXRC с появлением каждого нового квантового состояния при каналировании.

2. Матричный элемент PXRC и его угловое распределение были впервые рассмотрены в работе [2]. Затем в работах [1, 3, 4] этот матричный элемент был модифицирован для того, чтобы учесть зонную структуру поперечных энергетических уровней каналированных электронов и избежать дипольного приближения. Как и в [1, 3, 4], мы будем использовать следующую формулу для углового распределения PXRC, испускаемого каналированным электроном, захваченным в квантовое состояние n:

$$dN^n_{\mathrm{PXRC}} = \frac{d^3 N_{nn}}{d\theta_x d\theta_y dz} = dN_{\mathrm{PXR}}\,|F_{nn}|^2. \qquad (1)$$

Здесь dN_{PXR} – обычное угловое распределение PXR:

$$dN_{\mathrm{PXR}} = \frac{\alpha\omega_{\mathrm{B}}}{16\pi c\sin^2\theta_{\mathrm{B}}}\left[\frac{\theta_x^2}{1+W_\pi^2}+\frac{\theta_y^2}{1+W_\sigma^2}\right], \qquad (2)$$

F_{nn} – матричный элемент, описывающий вероятность спонтанного внутризонного перехода (для зоны n) каналированного электрона с излучением фотона в Брэгговском направлении. Следуя [2], будем называть матричный элемент F_{nn} форм-фактором.

В уравнении (1) $\alpha = e^2/\hbar c$ – постоянная тонкой структуры, d – расстояние между плоскостями каналирования, $\theta_0 = \arctan(p_\perp/p_\parallel)$ – угол падения по отношению к кристаллографической плоскости, $p_\parallel = p_z$ и $p_\perp = \hbar k_y = p_y$ – продольная и поперечная компоненты импульса электрона, влетающего в кристалл.

Мы будем рассматривать PXRC при плоскостном каналировании и предположим, что плоскости каналирования параллельны плоскости (XZ), продольное движение электрона происходит вдоль оси Z, а поперечное связанное (каналированное) – в плоскости (YZ) вдоль оси Y.

---

[1] e-mail: korotchenko@tpu.ru

[2] Аббревиатура PXRC для параметрического рентгеновского излучения при каналировании была впервые введена в работе [2]). В русскоязычной литературе общепринятой аббревиатуры для такого вида излучения нет.

Форм-фактор F_{nn}, введенный в уравнении (1), для случая плоскостного каналирования может быть представлен как [1, 3, 4]

$$|F_{nn}| = \left| \int\limits_{-d/2}^{d/2} \phi_n^*(y) \exp(-\mathbf{i}\omega_\mathrm{B}\theta_y y/c)\phi_n(y)dy \right|. \quad (3)$$

Необходимо подчеркнуть, что фактически F_{nn} является функцией релятивистского фактора электрона $\gamma = E_\parallel/mc^2$ (где $E_\parallel$ – начальная энергия электрона, влетающего в кристалл): волновая функция $\phi_n(y)$ с поперечным волновым вектором k_y определяется из решения уравнения Шредингера с релятивистской массой γm (см., например, [5]).

Согласно [2]

$$W_\tau = \frac{1}{2\,|\chi_g|\,P_\tau}\left(R - \frac{|\chi_g|^2\,P_\tau^2}{R}\right),$$
$$R = \theta_x^2 + \theta_y^2 + \theta_\mathrm{kin}^2,\ \ \theta_\mathrm{kin}^2 = \gamma^{-2} + |\chi_0|\,,$$
$$P_\pi = \cos 2\theta_\mathrm{B},\ \ P_\sigma = 1,\ \ \tau = (\pi, \sigma), \quad (4)$$

где χ_0 и χ_g – фурье-компоненты диэлектрической восприимчивости кристалла, τ – вид поляризации PXRC-фотона (π- или σ-поляризация). Следуя [2, 6], мы ввели угловые координаты θ_x и θ_y, описывающие отклонение волнового вектора PXRC-фотона от брэгговского направления: $\theta_{x,y} = c(\boldsymbol{\kappa} - \boldsymbol{\kappa}_\mathrm{B})|_{x,y}\omega_\mathrm{B}^{-1} = cu_{x,y}\omega_\mathrm{B}^{-1}$ и $\mathbf{u} = (\theta_x, \theta_y)\omega_\mathrm{B}/c$ (см. рис. 1). Здесь $\omega_\mathrm{B} = cg/2\sin\theta_\mathrm{B}$ – частота рентгеновского фотона, удовлетворяющая условиям Брегга, $\boldsymbol{\kappa}_\mathrm{B} = \omega_\mathrm{B}\mathbf{v}/v^2 + \mathbf{g}$, $\mathbf{v}$ – вектор продольной скорости электрона (см. рис. 1), $g = |\mathbf{g}| = 2\pi/d_p$, d_p – расстояния между плоскостями дифракции.

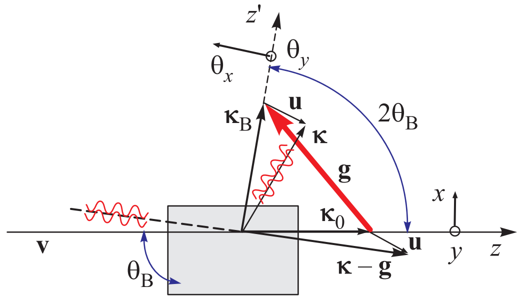

Рис. 1. Геометрия формирования PXRC: $\boldsymbol{\kappa}_0$ – волновой вектор каналированного электрона, $\boldsymbol{\kappa}$ – волновой вектор PXRC-фотона, $\mathbf{u}$ – вектор, описывающий отклонение PXRC-фотона от брэгговского направления (направление вектора $\boldsymbol{\kappa}_\mathrm{B}$), $\mathbf{g}$ – вектор обратной решетки

Нитта [2] предположил, что форм-фактор каналированных состояний, входящий в уравнение (1), приблизительно равен 1 (“дипольное приближение”):

$$|F_{nn}|^2 \simeq 1. \quad (5)$$

В таком случае согласно (1) разность между PXRC (для любого квантового состояния n) и PXR пренебрежимо мала. В противовес этому, как в наших работах [3, 4], мы не будем использовать приближение (5). Будем рассчитывать угловое распределение PXRC от всех электронов, захваченных в режим каналирования, используя формулы из [3, 4]:

$$\frac{d^3N_\mathrm{PXRC}}{d\theta_x d\theta_y dz} = dN_\mathrm{PXR}\sum_n P_n(\theta_0, k_y)|F_{nn}|^2. \quad (6)$$

Здесь $P_n(\theta_0, k_y)$ – вероятность того, что электрон, влетевший в кристалл, будет захвачен на подбарьерный уровень n (начальная заселенность n-го энергетического уровня), которая определяется как

$$P_n(\theta_0, k_y) = \frac{1}{d}\left| \int\limits_{-d/2}^{d/2} \exp(\mathbf{i}k_y\theta_0 y)\phi_n(y)dy \right|^2. \quad (7)$$

Согласно уравнению (6) угловое распределение PXRC содержит две ключевые величины: форм-фактор $|F_{nn}|$ и начальную заселенность $P_n(\theta_0, k_y)$ n-го квантового состояния при каналировании. Формула (6) означает, что даже если все $|F_{nn}|^2 = 1$, угловое распределение PXRC должно отличаться от PXR, поскольку общая начальная заселенность всех подбарьерных состояний меньше 1 (исключая случай θ_0):

$$\sum_n P_n(\theta_0, k_y) < 1. \quad (8)$$

3. Как мы уже отмечали выше, целью нашей работы является изучение изменений в угловых распределениях параметрического рентгеновского излучения каналированных электронов (PXRC), связанных с появлением каждого нового квантового состояния при каналировании вследствие увеличения энергии электронного пучка. Если угол падения относительно кристаллографических плоскостей $\theta_0 = 0$, то только релятивистский фактор γ определяет количество связанных квантовых состояний при каналировании, входящих в уравнение (6).

Ниже мы будем называть **квантовым скачком** совокупность явлений, происходящих в условиях, при которых количество квантовых состояний при каналировании увеличивается вследствие возрастания энергии (релятивистского фактора γ) электронов. В случае (220)-каналирования в Si такая ситуация возникает, например, когда $\gamma \rightrightarrows 465 \to 467$ (см.

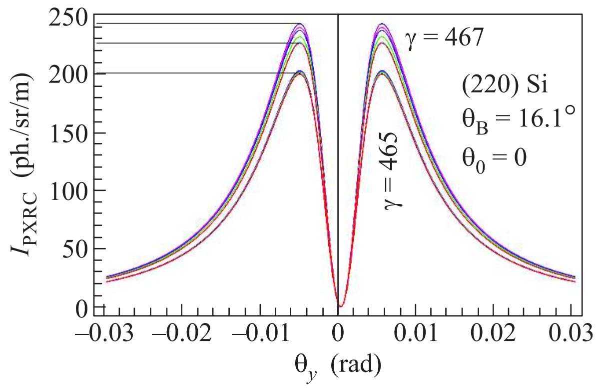

Рис. 2. Угловое распределение интенсивности PXRC вблизи квантового смещения: до ($\gamma \simeq 465$) и после ($\gamma \simeq 467$)

рис. 2). Соответственно из численного решения уравнения Шредингера с релятивистской массой в периодическом потенциале плоскостей (220) Si, выполненного согласно процедуре, описанной в [7, 8], получим, что это квантовые состояния с $n = 13$ и 14. Угловое распределение PXRC, рассчитанное по формуле (6), представлено на рис. 2. Видно, что основная разница значений интенсивностей PXR и PXRC возникает в максимумах, в то время как поведение крыльев распределений почти совпадает. Поэтому мы сосредоточимся именно на данном различии.

Для количественного описания различий PXR и PXRC заметим, что согласно [2] угловое распределение PXR достигает максимума в тех точках $\theta_y^{\max}$ в плоскости $\theta_x = 0$, для которых $W_\sigma \approx 0$. Согласно [9] из уравнений (2) и (4) можно получить оценку

$$\theta_y^{\max} \approx |\chi_0 + \chi_g - \gamma^{-2}|. \tag{9}$$

Из уравнения (6) несложно получить формулу для максимумов углового распределения интенсивности PXRC вдоль угловой координаты θ_y (при условии $\theta_x = 0$):

$$I_{\rm PXRC}^{\max} = I_{\rm PXR}^{\max} \sum_n P_n(\theta_0, k_y)|F_{nn}|^2, \tag{10}$$

$$I_{\rm PXR}^{\max} = \frac{\alpha\omega_{\rm B}}{16\pi c \sin^2\theta_{\rm B}} \frac{(\theta_y^{\max})^2}{1 + W_{\max}^2}, \tag{11}$$

где

$$W_{\max} = \frac{1}{2|\chi_g|}\left(R_{\max} - \frac{|\chi_g|^2}{R_{\max}}\right),$$

$$R_{\max} = (\theta_y^{\max})^2 + \gamma^{-2} + |\chi_0|. \tag{12}$$

Угловые распределения PXRC, описываемые уравнениями (6) и (10), представляют собой не одиночные линии, а достаточно широкие зоны. На графиках (см. рис. 3–5) максимумов угловых распределений PXRC мы будем изображать это

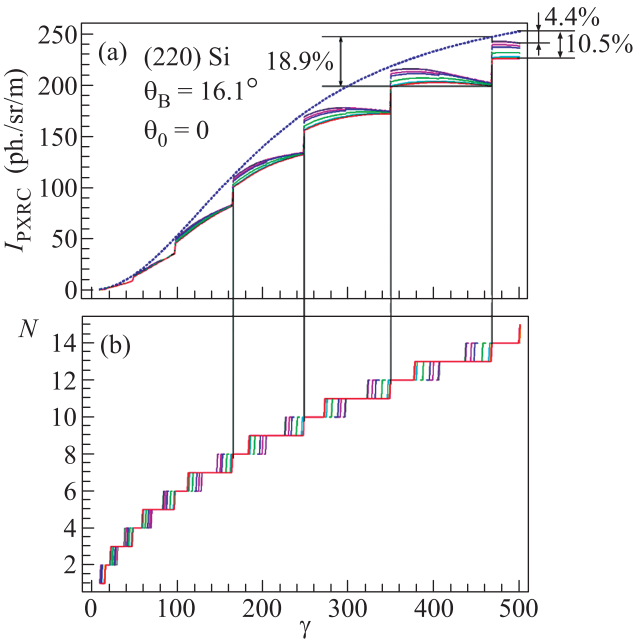

Рис. 3. (a) – Максимумы (вдоль плоскости $\theta_x = 0$) PXRC и PXR (пунктирная линия) как функция γ при (220) Si каналировании (дифракция на плоскостях (111)). (b) – Количество N связанных состояний при каналировании как функция γ

одинадцатью линиями (внутри каждой зоны), соответствующими десяти значениям (в пределах первой зоны Бриллюэна) поперечного волнового вектора k_y электрона при плоскостном каналировании.

Первые измерения разницы между PXRC и PXR [1] в SAGA-LS ($\gamma = E_\parallel/mc^2 \approx 499$) показали, что эта величина составляет около 6–8 %. По нашим расчетам, она может оказаться намного больше, если проводить измерения вблизи "квантового скачка", т.е. при значениях энергии электронного пучка, при которых появляется каждый новый **нечетный** уровень подбарьерной энергии (зоны).

На рис. 3 релятивистские факторы γ, соответствующие "квантовым скачкам", отмечены вертикальными линиями. Видно, что для 255 МэВ электронов (т.е. при $\gamma \approx 499$: экспериментальные условия, существующие на SAGA-LS) относительная разность между максимумами угловых распределений PXR и PXRC

$$\Delta = \frac{I_{\rm PXR}^{\max} - I_{\rm PXRC}^{\max}}{I_{\rm PXR}^{\max}} \tag{13}$$

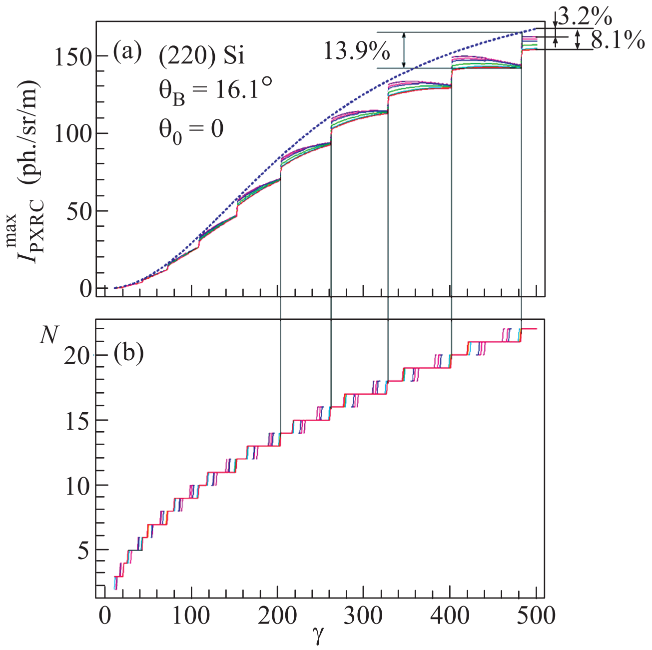

Рис. 4. (a) – Максимумы (вдоль плоскости $\theta_x = 0$) PXRC и PXR (пунктирная линия) как функция γ при (220) C каналировании (дифракция на плоскостях (111)). (b) – Количество N связанных состояний при каналировании как функция γ

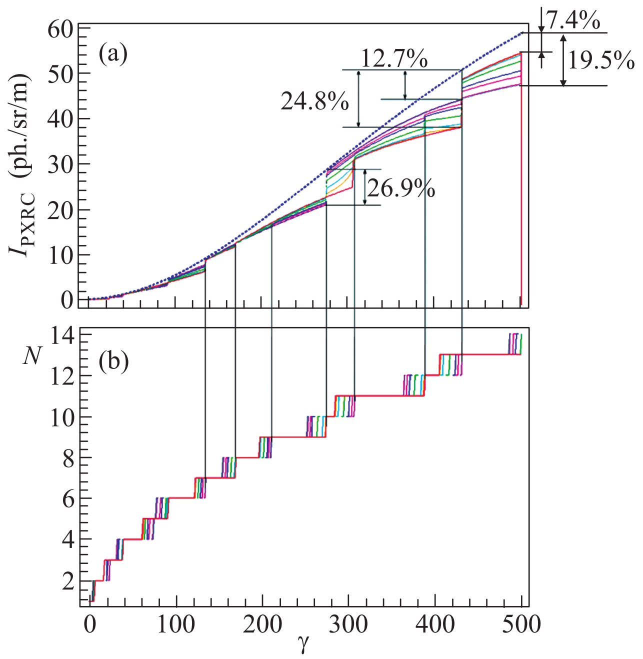

Рис. 5. (a) – Максимумы (вдоль плоскости $\theta_x = 0$) PXRC и PXR (пунктирная линия) как функция γ при (111) LiF каналировании (дифракция на плоскостях (220)). (b) – Количество N связанных состояний при каналировании как функция γ

изменяется от 4.4 до 10.5 % в зависимости от положения точек перехода внутри энергетических зон.

При этом для электронов с энергией, соответствующей ближайшему "квантовому скачку" ($\gamma \approx 466$), относительная разность Δ достигает много большей величины, $\Delta \approx 18.9\,\%$. Это можно использовать при подготовке новых экспериментальных исследований PXRC.

4. Как показано в п. 2, угловые распределения PXRC зависят от числа квантовых состояний при каналировании, их начальных заселенностей и форм-факторов, которые, в свою очередь, могут зависеть от типа кристалла. Поэтому мы изучили явление "квантовых скачков" в PXRC для двух других кристаллов: C (алмаз) и LiF.

На рис. 4 приведены результаты расчетов $I_{\mathrm{PXRC}}^{\mathrm{max}}$ для PXRC при (220)-каналировании в кристалле алмаза (C).

Видно, что при условиях эксперимента на SAGA-LS ($\gamma \approx 499$) относительная разность Δ угловых распределений PXR и PXRC при (220) C каналировании меньше, чем при (220) Si каналировании (дифракция на плоскостях (111)): $\Delta \in (3.2\,\%, 8.1\,\%)$. Для (220) C каналирования электронов с энергией, соответствующей ближайшему "квантовому скачку" ($\gamma \approx 479, n \rightrightarrows 21 \to 22$), относительная разность Δ достигает величины $\Delta \approx 13.9\,\%$. Меньшее (по сравнению с Si) значение Δ в случае (220) плоскостного каналирования в C можно понять, если переписать определение (13), принимая во внимание уравнение (10):

$$\Delta = 1 - \sum_n P_n(\theta_0, k_y)|F_{nn}|^2. \qquad (14)$$

За счет меньшей глубины потенциальной ямы при (220) C каналировании величины начальных заселенностей $P_n(\theta_0, k_y)$ и форм-факторов $|F_{nn}|$ оказываются больше, чем при (220) Si каналировании. Поэтому величина Δ уменьшается.

Таким образом, при (220) Si и (220) C плоскостном каналировании:

- для электронов с энергией, немного превышающей энергию **"квантового скачка"** (например, $\gamma > 466$ для Si и $\gamma > 479$ для C), разброс величин относительной разности Δ значителен (например, $\Delta \in (4.4\,\%, 10.5\,\%)$ для Si и $\Delta \in (3.2\,\%, 8.1\,\%)$ для C), но $I_{\mathrm{PXRC}}^{\mathrm{max}}$ только слегка отличается от $I_{\mathrm{PXR}}^{\mathrm{max}}$ (как следствие зонной структуры энергетических уровней);

- для электронов с энергией, немного меньшей энергии **"квантового скачка"** (например, $\gamma < 466$ для Si и $\gamma < 479$ для C), разброс значений относительной разности Δ практически исчезает, но $I_{\mathrm{PXRC}}^{\mathrm{max}}$ существенно отличается от $I_{\mathrm{PXR}}^{\mathrm{max}}$.

График $I^{\max}_{\mathrm{PXRC}}$ для случая (111)-каналирования в LiF значительно сложнее, если PXRC образуется за счет дифракции виртуальных фотонов на плоскостях (220) (см. рис. 5). Конечно, это обусловлено тем, что потенциальная яма, соответствующая условиям (111) LiF каналирования, состоит из двух потенциальных ям различной глубины (детали плоскостного каналирования в LiF см. в [10–13]).

В этом случае при условиях эксперимента на SAGA-LS ($\gamma \approx 499$) относительная разность Δ угловых распределений PXR и PXRC лежит в диапазоне $\Delta \in (7.4\,\%, 19.5\,\%)$, что значительно больше, чем для (220) Si и (220) C. При (111) LiF каналировании электронов с энергией, соответствующей ближайшему "квантовому скачку" ($\gamma \approx 430$), Δ лежит в диапазоне $\Delta \in (12.7\,\%, 24.8\,\%)$. Более того, при "квантовом скачке" в окрестности $\gamma \approx 278$ диапазон значений относительной разности Δ достигает еще большей величины: $\Delta \in (20.0\,\%, 26.9\,\%)$.

Таким образом, при (111) LiF условиях каналирования (дифракция на плоскостях (220)):

- каждый "полный" (двойной) квантовый скачок состоит из двух "простых" квантовых скачков, соответствующих двум соседним потенциальным ямам различной глубины (см., например, область $\gamma \in (278, 430)$ на рис. 4a);
- для электронов с энергией, немного меньшей левого конца двойного "квантового скачка" (например, при $\gamma < 278$), относительная разность Δ характеризуется малым разбросом, но $I^{\max}_{\mathrm{PXRC}}$ значительно отличается от $I^{\max}_{\mathrm{PXR}}$;
- для электронов с энергией, соответствующей середине двойного "квантового скачка", относительная разность Δ характеризуется значительным разбросом (как следствие зонной структуры энергетических уровней) и $I^{\max}_{\mathrm{PXRC}}$ заметно отличается от $I^{\max}_{\mathrm{PXR}}$. В этой точке максимум PXRC (т.е. $I^{\max}_{\mathrm{PXRC}}$) меньше максимума PXR (т.е. $I^{\max}_{\mathrm{PXR}}$).

Итак, явление "квантовых скачков" в PXRC при (111) плоскостном каналировании в кристалле LiF по сравнению с (220) плоскостным каналированием в кристаллах Si и C имеет свои специфические особенности, которые делают кристалл LiF очень перспективным для будущих экспериментов по PXRC.

5. Заключение.

1. Теория и численные расчеты показывают сильную корреляцию между числом подбарьерных квантовых состояний при каналировании в периодическом потенциале кристаллических плоскостей и амплитудой отклонения углового распределения PXRC от PXR. Амплитуда каждого последующего "квантового скачка" в угловом распределении PXRC **увеличивается** с **увеличением** энергии электронного пучка.

2. Амплитуда "квантовых скачков" PXRC сильно зависит от типа кристалла: она значительно больше при (111)-каналировании в кристалле LiF, чем при (220)-каналировании в кристаллах Si и C (алмаз).

Говоря о возможности экспериментального обнаружения эффекта, заметим, что угловая расходимость пучка приводит к заселению большего числа поперечных квантовых состояний, обладающих различной четностью, по сравнению со случаем нулевого угла влета $\theta_0 = 0$ относительно плоскостей каналирования. Поэтому при увеличении угла влета (расходимости) интенсивность PXRC может сначала немного возрастать. Однако с дальнейшим увеличением расходимости все большее количество электронов заселяет надбарьерные состояния и эффект "квантовых скачков" PXRC исчезает.

Угловая расходимость хорошо коллимированного пучка электронов в экспериментах по каналированию (используемого, например, на ускорительном комплексе SAGA LS) обычно существенно меньше критического угла каналирования. Поэтому она не должна влиять на экспериментальное обнаружение предсказываемого эффекта. Действительно, в первом эксперименте по обнаружению PXRC влияние расходимости пучка оказалось некритичным (см. [1]).

Авторы выражают благодарность доктору Y. Takabayashi за стимулирующие дискуссии о возможных экспериментальных исследованиях прогнозируемых "квантовых скачков" в PXRC на ускорительном центре SAGA LS.

1. K. B. Korotchenko, Yu. L. Pivovarov, and Y. Takabayashi, JETP Lett. **95**(8), 433 (2012).
2. R. Yabuki, H. Nitta, T. Ikeda, and Y. H. Ohtsuki, Phys. Rev. B **63**, 174112 (2001).
3. K. B. Korotchenko, Yu. L. Pivovarov, and Y. Takabayashi, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **309**, 25 (2013).
4. K. B. Korotchenko and Yu. L. Pivovarov, J. Phys.: Conf. Ser. **517**, 012019 (2014).
5. V. V. Beloshitskii and M. A. Kumakhov, Sov. Phys. JETP **47**(4), 652 (1978).
6. V. G. Baryshevsky, I. D. Feranchuk, and A. P. Ulyanenkov, *Parametric X-Ray Radiation in Crystals. Theory, Experiment and Applications* (2005).

7. K. B. Korotchenko, Yu. L. Pivovarov, and T. A. Tukhfatullin, Int. J. Mod. Phys. A **25**(1), 157 (2010).
8. K. B. Korotchenko, E. I. Fiks, Yu. L. Pivovarov, and T. A. Tukhfatullin, J. Phys.: Conf. Ser. **236**, 012016 (2010).
9. K. B. Korotchenko and Yu. P. Kunashenko, Rad. Phys. Chem. **109**, 83 (2015).
10. R. H. Pantell, H. Park, R. L. Swent, J. O. Kephart, R. K. Klein, S. Dats, and B. L. Berman, IEEE Trans. Nucl. Sci. **30**(4), 3150 (1983); R. L. Swent, R. H. Pantell, H. Park, J. O. Kephart, R. K. Klein, S. Datz, R. W. Fearick, and B. L. Berman, Phys. Rev. B **29**(1), 52 (1984).
11. O. V. Bogdanov, A. A. Evdokimov, K. B. Korotchenko, Yu. L. Pivovarov, and T. A. Tukhfatullin, J. Phys.: Conf. Ser. **236** , 012033 (2010).
12. O. V. Bogdanov, K. B. Korotchenko, Yu. L. Pivovarov, and T. A. Tukhfatullin, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B **266**, 3858 (2008).
13. K. B. Korotchenko, Yu. L. Pivovarov, and T. A. Tukhfatullin, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B **266**, 3753 (2008).