

0

Генерация излучения в рентгеновском диапазоне при плоскостном каналировании релятивистских электронов в кристаллах

© Ю.А. Башмаков,^{1,2} Т.В. Бондаренко,¹ С.М. Полозов¹

¹ Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“,
115409 Москва, Россия

² Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН,
119991 Москва, Россия
e-mail: SMPolozov@mephi.ru

(Поступило в Редакцию 9 апреля 2015 г. В окончательное редакции 17 декабря 2015 г.)

Развита классическая модель излучения релятивистских электронов в кристалле, использующая форму потенциала, максимально приближенную к реальной. Выполнено численное моделирование динамики электронов с энергиями 20–25 MeV при их каналировании в кристаллах. Рассмотрен сопровождающий такое движение процесс генерации электромагнитного излучения. Показано, что для указанного диапазона энергий электронов это излучение попадает в рентгеновскую область спектра с характерными энергиями фотонов вплоть до 40 keV. Оценивается выход излучения. На основе полученных результатов сформулированы требования к параметрам электронного пучка. Показано хорошее согласие результатов численного моделирования с полученными ранее аналитическими результатами и экспериментальными данными.

Введение

Аналитическому и экспериментальному исследованию излучения релятивистских электронов и позитронов при каналировании в кристаллах посвящен целый ряд работ [1–6]. Эффект каналирования заряженной частицы в кристалле заключается в том, что частица пересекает кристалл, двигаясь вдоль основных кристаллографических осей (осевое или аксиальное каналирование) или параллельно выделенным кристаллическим плоскостям (плоскостное каналирование). Такое движение сопровождается излучением, которое для ультрарелятивистской частицы ($\gamma \gg 1$, γ — лоренц-фактор, $\gamma = 1/(1 - \beta^2)^{1/2}$, где $\beta = v/c$ — относительная скорость частицы) направлено вперед с характерным углом испускания $\theta \sim \gamma^{-1}$. В случае плоскостного каналирования электрон совершает малые одномерные поперечные колебания, а в продольном направлении движется с релятивистской скоростью [7]. В случае аксиального каналирования траектория электрона определяется аксиальносимметричным кулоновским полем кристаллической оси, что делает ее похожей на траекторию в спиральном ондуляторе [8].

Излучение релятивистских электронов при каналировании в настоящее время только начинает использоваться в прикладных целях. Вместе с тем существует достаточно большое количество задач, например медицинских, требующих наличия монохроматического источника излучения. Использование монохроматического рентгеновского источника приводит к повышению качества изображения и в дополнение к этому — к снижению суммарной дозы, полученной пациентом.

К сожалению, квазимонохроматический спектр рентгеновского излучения трудно получить с помощью современных стандартных высоковольтных рентгеновских трубок. Поэтому для генерации монохроматического

рентгеновского излучения для медицинской диагностики к настоящему времени предложено несколько альтернативных методов: синхротронное или ондуляторное излучение [9], обратное комптоновское рассеяние [10], характеристическое излучение [11] и излучение в кристаллах (излучение при каналировании, когерентное тормозное излучение, параметрическое рентгеновское излучение и другие) [3].

Принципиальная схема источника квазимонохроматического рентгеновского излучения, основанного на излучении при каналировании и рентгеновском оптическом фильтре (применяется для подавления фона некогерентного тормозного излучения, возникающего при прохождении электронов через кристалл), представлена в работе [12]. Основными компонентами источника являются линейный ускоритель электронов, кристаллическая мишень, установленная в гониометре, система фильтрации рентгеновского излучения и две нагрузки — одна для пучка электронов, вторая для высокоэнергетического рентгеновского излучения. Ускоренный пучок электронов, проходя через кристалл, генерирует излучение при каналировании, а также сопутствующее фоновое тормозное излучение. Для того чтобы избежать попадания использованного электронного пучка на поликапиллярную оптическую систему и пациента, электронный пучок отклоняется магнитной системой на поглотитель, в качестве которого может быть использован цилиндр Фарадея. Рентгеновское излучение, выходящее из кристалла, проходит через поликапиллярную оптику, в результате чего излучение с энергией ниже определенного значения направляется на исследуемый объект, а высокоэнергетическое излучение проходит без отклонения и попадает на поглотитель рентгеновского излучения. Результаты оценки эффективности такой системы и расчета снижения дозовой нагрузки на пациента приведены в работе [13].

Исследование излучения релятивистских электронов при каналировании в кристалле в рамках классической электродинамики

В настоящее время для аналитического описания этого эффекта используются как классический, так и квантовый подходы. Использование методов классической электродинамики, предложенных в работах [2,5,6], достаточно эффективно для практического использования и сравнения с данными эксперимента.

Рассмотрим основные особенности использования классического подхода.

При плоскостном каналировании в кристалле частица может двигаться вдоль различных кристаллографических плоскостей [5]. Движение можно описать с использованием обобщенного потенциала $U(x)$, где x — поперечная координата, отсчитываемая от центральной плоскости канала. Как правило, $U(x)$ является четной, гладкой, медленно меняющейся периодической функцией с периодом $2d$, равным ширине канала: $U(-x) = U(x)$, $U(x + 2dk) = U(x)$, $k = 1, 2, 3, \dots$ целые числа. Обозначим величину потенциала на границе канала как U_0 . В этом случае удобно провести аппроксимацию потенциала степенным полиномом:

$$U(x) = U_0 \sum_{n=0}^N a_n \left(\frac{x}{d}\right)^n, \quad |x| < d, \quad (1)$$

коэффициенты которого a_n могут быть приближенно определены аналитически или найдены из экспериментальных данных. В работе [8], например, используется аппроксимация полиномом четвертой степени, что обеспечивает хорошую точность построения потенциала. На рис. 1 показано распределение потенциала,

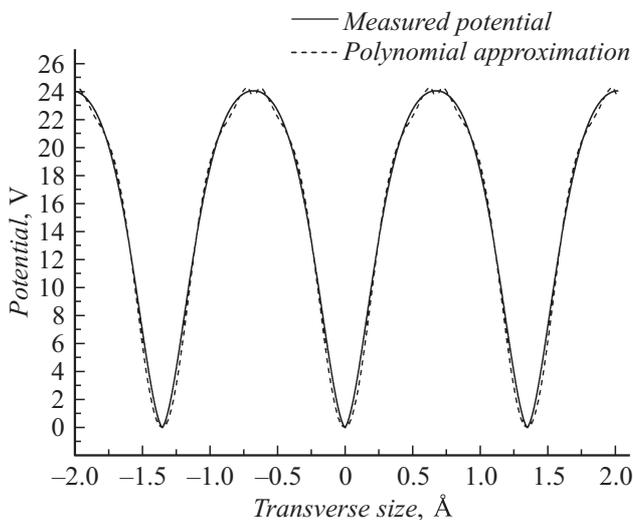


Рис. 1. Распределение потенциала поперек плоскости $\langle 110 \rangle$ в кристалле алмаза [3] и его полиномиальная аппроксимация.

образованного плоскостями $\langle 110 \rangle$ в кристалле алмаза [3] и его полиномиальные аппроксимации. Потенциал описывался с использованием следующих коэффициентов разложения: $U_0 = 30$ V, $a_2 = 4.7$, $a_4 = -12.4$, $a_6 = 16.4$, $a_8 = -9.7$, $a_{10} = 1.9$ при полной ширине канала, равной $d = 1.34$ Å. Данная аппроксимация, как видно из рисунка, с высокой точностью описывает распределение поля, полученное экспериментально. Расхождение потенциала с полиномиальным разложением было оценено через критерий согласия Пирсона, который составляет $\chi^2 = 1.048$.

Электрон при движении в канале совершает поперечные периодические колебания относительно центральной плоскости канала. При условии, что амплитуда колебаний значительно меньше, чем полуширина канала, период колебаний с хорошей точностью может быть выражен формулой

$$\Omega_n = \sqrt{2} \cdot \Omega_0, \quad \Omega_0 = \frac{c}{d} \sqrt{\frac{2eU_0}{\varepsilon}}, \quad (2)$$

где $\varepsilon = m_0c^2/\gamma$ — полная энергия электрона. Как видно, частота поперечных колебаний зависит от лоренц-фактора как $\gamma^{-1/2}$ [5,6].

Если амплитуда поперечных колебаний частицы становится близкой к полуширине канала, частота колебаний начинает зависеть от их амплитуды. При этом движение частицы становится ангармоническим и, как следствие, в фурье-представлении колебаний частицы появляются высшие гармоники основной частоты. Это обстоятельство играет важную роль при рассмотрении спектра генерируемого излучения.

Частота излучения k -й гармоники, распространяющейся под углом θ относительно оси канала, в дипольном приближении для релятивистского движения может быть записана как [5]

$$\omega_k = \frac{2k\Omega\gamma^2}{1 + \theta^2\gamma^2}, \quad \theta \ll 1, \quad \gamma \gg 1. \quad (3)$$

При этом излучение с максимальной частотой распространяется строго вдоль оси канала. Мощность потерь частицы на излучение вычисляется по формуле

$$P = \frac{2e^2 \langle E^2 \rangle \gamma^2}{3mc^2}. \quad (4)$$

Здесь $\langle E^2 \rangle$ — среднееквадратичное значение амплитуды электрического поля, взятое вдоль траектории движения частицы. В общем виде спектрально-угловое распределение генерируемого излучения определяется как сумма [6]

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\omega d\theta} = \frac{e^2}{\pi^2 c} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|\mathbf{a}_k(\omega, \theta, \phi)| \sin^2(\pi K \sigma_k)}{\Omega^2 \sigma_k^2}, \quad (5)$$

где вектор

$$\mathbf{a}_k = \frac{\Omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\Omega} \mathbf{a}(t) e^{-k\Omega t} dt,$$

$$a(t) = [n[n - \beta]\beta] (1 - n\beta)^2 \times \exp \left[-\frac{i\omega}{c} (n_x x + n_y y + n_z \delta z) \right],$$

$$\sigma_k(\omega, \theta) = \Omega^{-1} [\omega(1 - n_z \beta_z) - k\Omega], \quad \beta = \frac{d\beta}{dt},$$

$n_x = \sin \theta \cos \varphi$, $n_y = \sin \theta \sin \varphi$, $n_z = \cos \theta$, θ — угол между единичным вектором в направлении излучения \mathbf{n} и осью канала z , φ — угол между вектором \mathbf{n} и плоскостью (x, y) , вектор $\mathbf{a}_k(\omega, \theta, \varphi)$ определяет зависимость излучения от вида колебаний частицы и их амплитуды.

Для дипольного случая при ультрарелятивистских скоростях электронов уравнение для спектрального и углового распределений может быть упрощено и спектр излучения может быть с учетом

$$\mathbf{a}_k = \frac{[\mathbf{n}[\mathbf{n} - \beta]\beta_k]}{(1 - \mathbf{n}\beta)^2}, \quad \dot{\beta}_k = \frac{\Omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\Omega} \dot{\beta} e^{ik\Omega t} dt,$$

$$\sigma_k = \Omega^{-1} [\omega' - k\Omega]$$

записан как

$$\frac{d\varepsilon}{d\xi} = \frac{8e^2\gamma^4}{c\Omega} \times \sum_{k=E(\xi+1)}^{\infty} |\dot{\beta}_k|^2 \times \frac{\sin^2(\pi K(u\xi - k))}{(u\xi - k)^2} \frac{1}{u^2} \left(1 - \frac{2}{u} + \frac{2}{u^2} \right) du, \quad (6)$$

где $\xi = \omega/2\Omega\gamma^2$.

Для очень большого числа периодов, как это имеет место в реальных кристаллах, уравнение (6) может быть упрощено и переписано в виде

$$\frac{d\varepsilon}{d\xi} = \frac{8\pi^3 e^2 K \gamma^4}{c\Omega} \sum_{k=E(\xi+1)}^{\infty} |\dot{\beta}_k|^2 \frac{\xi}{k^2} \left(1 - \frac{2\xi}{k} + \frac{2\xi^2}{k^2} \right) du. \quad (7)$$

На рис. 2, *a* показан общий вид фазовых траекторий электронов, движущихся в кристалле с гармоническим потенциалом (1) для угла расходимости 3 mrad. На рис. 2, *b* показаны фазовые траектории, полученные в ходе численного моделирования, видны траектории электронов, захваченных в режим каналирования и деканалированных (угол расходимости пучка электронов 30 mrad).

Программа для численного моделирования

Численное моделирование динамики частиц в поперечном электростатическом поле производится с помощью программного пакета BEAMDULAC-CR. Уравнения, определяющие поведение частиц в такой системе, записываются следующим образом:

$$\frac{d\gamma}{dt} = 0, \quad \frac{dz}{dt} = v_z, \quad \frac{dv_x}{dt} = -e \frac{\partial U(x)}{\partial x}, \quad \frac{dx}{dt} = v_x. \quad (8)$$

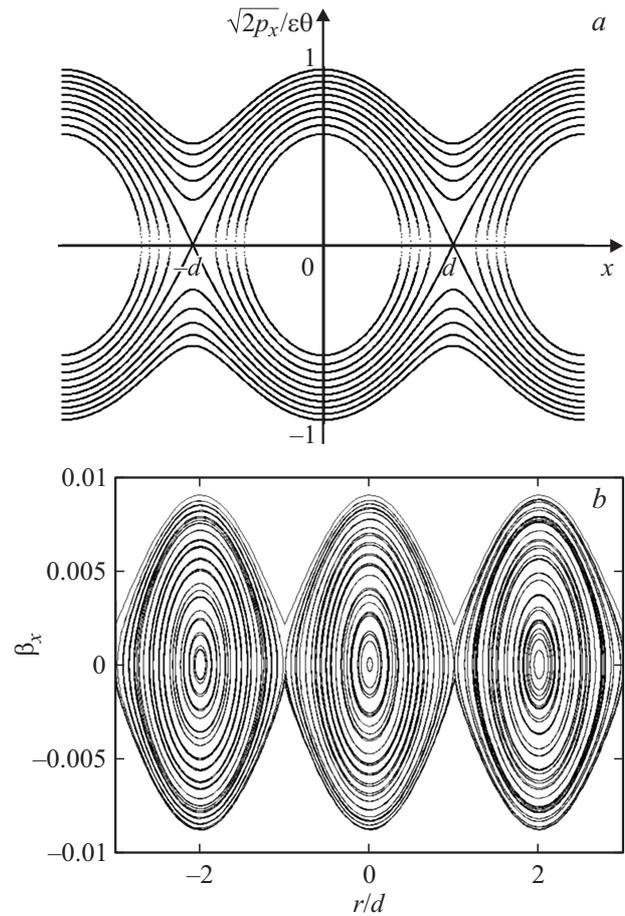


Рис. 2. Фазовые траектории, электронов, движущихся в идеальном кристалле, рассчитанные аналитически (*a*) и численно (*b*) по экспериментальным данным из работы [3].

Численное моделирование проводилось с использованием специально разработанной версии программы BEAMDULAC-CR [14]. Пакет программ BEAMDULAC [15,16] разрабатывается в МИФИ начиная с 1999 г. и изначально был предназначен для моделирования динамики интенсивных пучков в линейных ускорителях и каналах транспортировки. Уравнения движения решаются методом Рунге–Кутты четвертого порядка. В качестве независимой переменной используется время. При разработке версии BEAMDULAC-CR для моделирования динамики электронов в кристалле было использовано несколько основных модулей пакета. Для формирования начального распределения частиц в фазовом пространстве используется вариант блока инжекции, генерирующий распределение Капчинского–Владимирского. Далее с использованием формы обобщенного потенциала (1) задается электрическое поле в кристалле и проводится численное интегрирование уравнений движения (8). Затем результаты расчета динамики проходят обработку, которая выполняется только для частиц, захваченных в режим каналирования. Сначала определяются период осцилляций частиц и число колебаний, происходящих на длине кристалла.

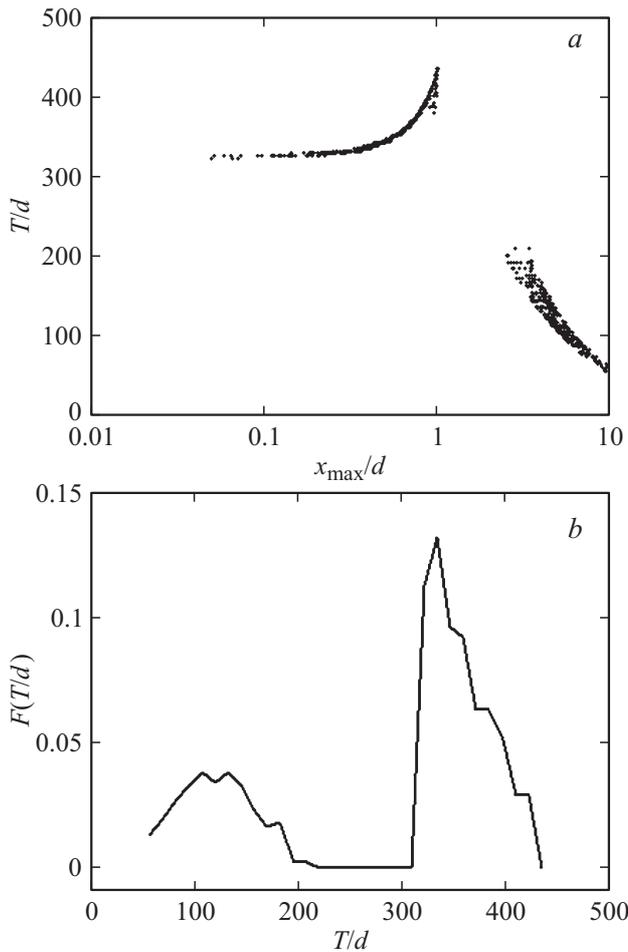


Рис. 3. Зависимость периода колебаний электронов в кристалле (T/d) от амплитуды колебаний (x_{\max}/d).

Период определяется как расстояние между двумя нулями траектории частицы $|\tilde{x}(z) - \langle x \rangle|$. Далее зависимость ($\beta_r(z)$) для каждой захваченной частицы раскладывается в ряд с помощью быстрого преобразования Фурье [17] и с использованием формулы [6]

$$\langle \delta W_{\text{rad}} \rangle = \frac{r_0 l_{\text{cr}} \gamma^2}{3W_0} \langle E_{\text{ch}} \rangle^2, \quad (9)$$

определяются потери энергии каждого электрона на излучение, а также число излученных фотонов на один электрон. В формуле (9) $\langle E_{\text{ch}} \rangle$ — усредненное значение электрического поля, действующего на электрон, l_{cr} — длина кристалла, $W_0 = mc^2$ — энергия покоя, $r_0 = e^2/4\pi\epsilon_0 m^2 c^4 = 1.82 \cdot 10^{-15}$ м.

Тестирование программы и результаты моделирования

Сначала для тестирования программы были использованы данные из работы [3]. Моделирование проводилось для кристалла алмаза длиной $55 \mu\text{m}$ (при большей длине

наблюдается существенное влияние многократного рассеяния) при $U_0 = 30$ В, $a_2 = 4.7$, $a_4 = -12.4$, $a_6 = 16.4$, $a_8 = -9.7$, $a_{10} = 1.9$, $d = 0.67 \text{ \AA}$ и энергии пучка электронов 21 MeV. Результаты моделирования (фазовые траектории частиц, энергетические спектры и квантовый выход) приведены в работе [14]. Для таких параметров пучка и кристалла максимум энергетического спектра пучка наблюдается при энергии фотонов 33 keV. Были определены оптимальные начальные параметры пучка. В частности, было проведено исследование зависимости доли деканализованных электронов от максимального угла между траекторией электронов и плоскостью кристалла θ_m на влете. Показано, что при $\theta_m = 3 \cdot 10^{-3}$ доля деканализованных электронов составляет около 7%, а при $\theta_m = 10 \cdot 10^{-3}$ достигает уже 30%. Также программа BEAMDULAC-CR позволяет получить важную зависимость периода колебаний электронов в кристалле T от амплитуды колебаний x_{\max} (см. рис. 3, сравнить с рис. 4 из работы [2]). На рис. 3, *a* видны периоды колебаний как электронов, захваченных в режим каналирования, так и деканализованных. На рис. 3, *b* показано распределение доли электронов, имеющих различные значения периода колебаний. Видно, что большее число захваченных частиц имеет примерно одинаковый период осцилляций.

Далее для тестирования программы были использованы экспериментальные результаты, полученные на ускорителе DALINAC в Техническом университете г. Дармштадт (Германия) [18]. Аппроксимация обобщенного потенциала для этого эксперимента показана на рис. 1. Толщина кристалла алмаза составляла $55 \mu\text{m}$. Проведенное с использованием программы BEAMDULAC-CR численное моделирование показало отличное совпадение результатов с данными эксперимента. Максимум энергетического спектра наблюдается при энергии 8.4 keV для моделирования и при 8.46 keV для эксперимента при энергии электронов, движущихся вдоль кристаллографической плоскости $\langle 110 \rangle$, равной 8.5 MeV. Ширина спектра излучения на полувысоте для эксперимента составляет ± 0.4 keV, для моделирования ± 0.8 keV. На рис. 2, *b* показан общий вид фазовых траекторий электронов в кристалле, рассчитанных при моделировании.

Таким образом, проведенное численное моделирование показывает, что разработанные методы моделирования, алгоритмы и программа дают возможность исследовать движение частиц при каналировании в кристалле с высокой точностью и обеспечивают хорошее согласие с теорией и результатами эксперимента.

Далее программа была использована при разработке проекта источника монохроматического рентгеновского излучения высокой яркости с энергией 30–40 keV для медицинских приложений [12], описанного выше.

Исследование динамики частиц в кристалле алмаза проводилось для пучка с энергией в диапазоне 20–25 MeV, необходимой для генерации излучения при каналировании с энергией фотонов 30–40 keV. Моделирование проводилось при параметрах поперечного распределения потенциала, представленного полиномом

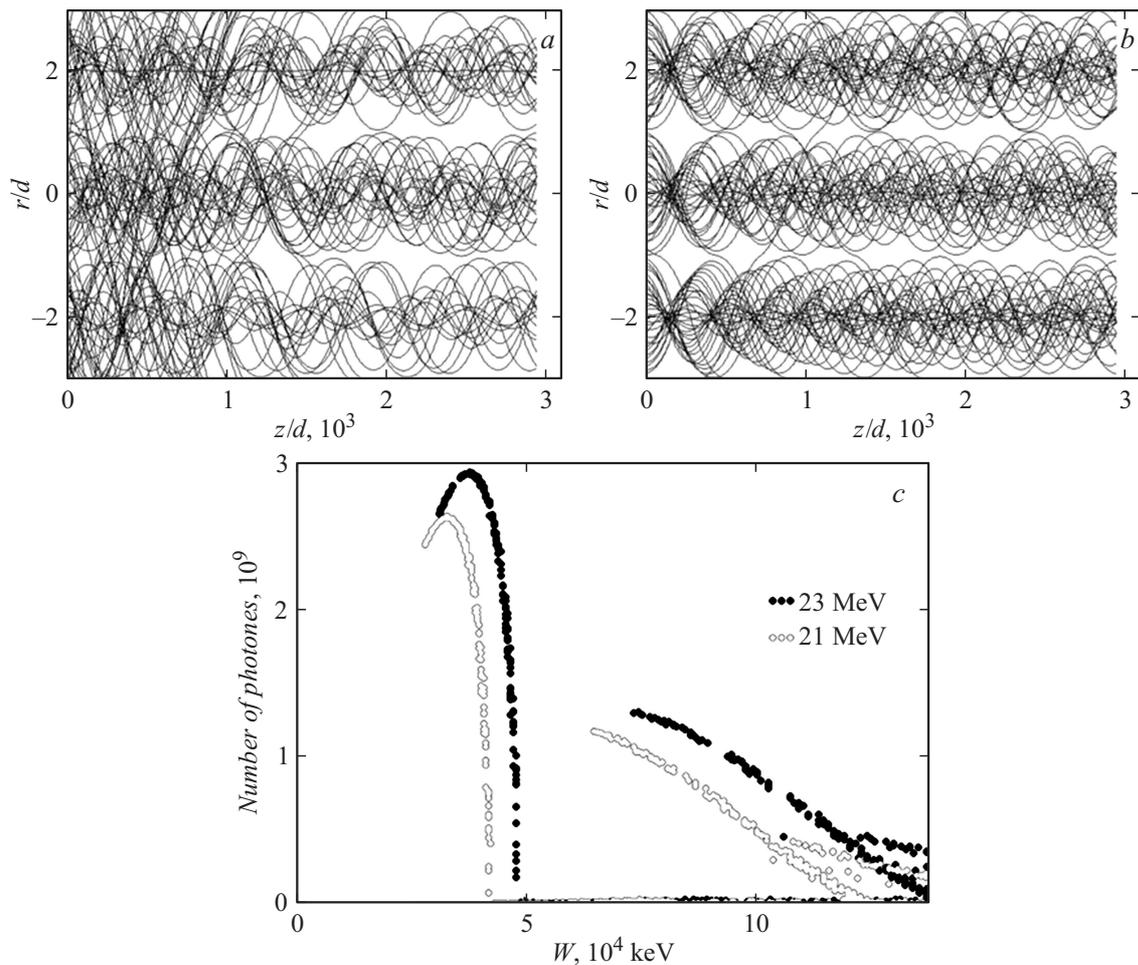


Рис. 4. Результаты моделирования динамики электронов в кристалле алмаза для энергии электронов 21 и 23 MeV: траектории электронов на плоскости (z, x) для пучка электронов с расходимостью 3 mrad (*a*) и 10 mrad (*b*) и полный спектр излученных фотонов (*c*).

(рис. 1). Толщина кристалла была выбрана равной $55 \mu\text{m}$, так как в кристаллах большей толщины существенным становится влияние многократного рассеяния электронов, наблюдаемое в экспериментальных работах [18]. Предельная толщина ограничивает поток генерируемых фотонов. Результаты моделирования представлены на рис. 4: траектории электронов на плоскости (z, x) (*a*) и (*b*) для энергии 21 MeV с разными углами расходимости электронного пучка, а также полные спектры фотонов для двух энергий электронов 21 и 23 MeV (*c*). Пик вероятности излучения находится при энергии $E_{CR} = 33 \text{ keV}$, а полная ширина спектра на полувысоте $\delta E_{CR} = \pm 7.2 \text{ keV}$ для энергии электронов 21 MeV. Для 23 MeV максимум спектра наблюдается при 37 keV , ширина спектра на полувысоте $\pm 8.6 \text{ keV}$. Ширина спектра в три раза превышает теоретические оценки, которые можно сделать, используя известные зависимости энергии излучения при каналировании от энергии частиц $E_{CR} \sim \gamma^{3/2}$, $\delta E_{CR} \sim \gamma^2$ [17].

Как видно из рис. 4, *a* и *b*, некоторые частицы не захватываются в режим каналирования (рис. 4, *a* ил-

люстрирует случай с большой долей деканализованных электронов). На рис. 5 изображена зависимость количества деканализованных частиц от угла расходимости

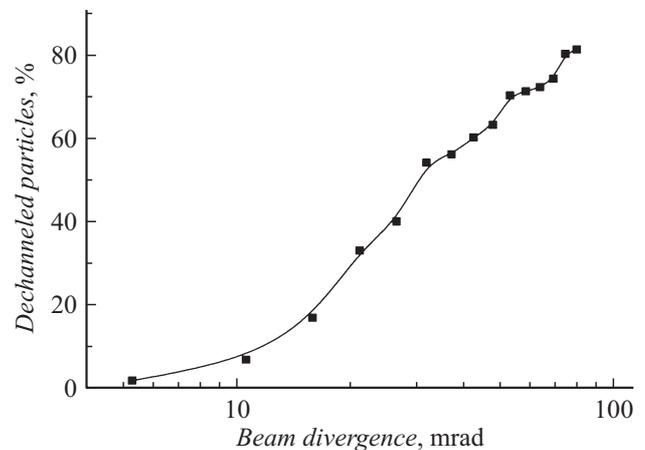


Рис. 5. Зависимость доли деканализованных частиц от угловой расходимости пучка электронов.

пучка электронов при влете в кристалл. Как видно из графика, при угловой расходимости более 10 mrad доля деканализованных частиц превышает 30% и они будут вносить большой вклад в общий спектр излучения.

Заключение

В настоящей работе развита численная модель, описывающая динамику электронов при каналировании в кристалле и сопровождающую этот процесс генерацию электромагнитного излучения. Дано описание специально разработанной для этой цели программы BEAMDULAC-CR. Численное моделирование выполнено в рамках классической электродинамики. Приведены основные использованные аналитические соотношения. Выполнено тестирование программы. Показано хорошее согласие полученных результатов с теоретическими оценками и экспериментальными данными.

Для разрабатываемого медицинского источника квазимонохроматического излучения [12] проведено исследование динамики электронов и генерации излучения в кристалле алмаза. Были определены характеристики излучения в требуемом спектральном диапазоне 30–40 keV и сформулированы требования к параметрам пучка электронов. Исследован случай плоскостного каналирования электронов с двумя довольно близкими энергиями: 21 и 23 MeV. Показано, что при энергии 21 MeV максимум в спектре излучения приходится на 33 ± 2.4 keV (33 ± 7.2 при численном расчете), а при увеличении энергии электронов до 23 MeV он смещается к 37 ± 2.9 keV (и 33 ± 8.6 соответственно). Показано, что если сформировать пучок электронов с узким энергетическим спектром ($\Delta E/E \sim 1\%$) и угловой расходимостью меньше критического угла каналирования (~ 1 mrad), то при среднем токе пучка, равном 1 mA, может быть получено около $1.5 \cdot 10^{13}$ фотонов в сек.

Список литературы

- [1] Kumakhov M.A. // Phys. Lett. A. 1976. Vol. 57. P. 17.
- [2] Bashmakov Yu.A., Bessonov E.G. // Rad. Eff. 1982. Vol. 66. P. 85.
- [3] Kein R.K., Kephert J.O., Pantell R.H. et al. // Phys. Rev. B 1985. Vol. 31. N 1. P. 68–92.
- [4] Dabagov S.B., Zhevago N.K. // Rivista del nuovo cimento. 2008. Vol. 31. N 9. P. 491.
- [5] Алферов Д.Ф., Башмаков Ю.А., Черенков П.А. // УФН. 1989. С. 389.
- [6] Алферов Д.Ф., Башмаков Ю.А., Бессонов Е.Г. / Препринт ФИАН-72-23. 1972.
- [7] Lindhard J. // Kgl. Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd. 1965. Vol. 34. P. 14.
- [8] Алферов Д.Ф., Башмаков Ю.А., Бессонов Е.Г. // ЖТФ. 1976. Т. 46. С. 2392.
- [9] Suortti P., Thomlinson W. // Phys. Med. Biol. 2003. Vol. 48. R 1.
- [10] Achterhold K., Bech M., Schleede S. et al. // Natur. Sci. Rep. 2013. Vol. 3.
- [11] Schweizer B., Eckenbach W., Harding G. et al. // Nucl. Sci. Symp. Conf. Rec. 2003. IEEE. Vol. 4. P. 3004–3008.
- [12] Bashmakov Yu.A., Bondarenko T.V., Polozov S.M., Sharikov G.B. / Proc. of RuPAC'2012. P. 406.
- [13] Бондаренко Т.В. Исследование дозовой нагрузки при использовании источника каналированного излучения для ангиографии / Сб. трудов 17-я Междунар. телекоммуникационная конф. молодых ученых и студентов „Молодежь и наука“. Ч. 2. 2014. С. 101–102.
- [14] Bashmakov Yu.A., Polozov S.M. // Problems of Atomic Science and Technology. Series Nuclear Physics Investigations. 2014. Vol. 3. N 91. P. 134–137.
- [15] Masunov E.S., Polozov S.M. // NIM A. 2006. Vol. 558. P. 184.
- [16] Masunov E.S., Polozov S.M. // Phys. Rev. ST AB. 2008. Vol. 11. P. 074201.
- [17] Acosta E., Llovet X., Salvat F. // Appl. Phys. Lett. 2002. Vol. 80. P. 3228–3330.
- [18] Genz H., Froening L., Hoffmann-Stascheck P. et al. // Phys. Rev. B. 1996. Vol. 53. N 14. P. 8922–8936.