

8. *Belavin A.A., Polyakov A.M., Schwartz A.S., Tyupkin Yu.S.* // Phys. Lett. 1975. **59B**. P. 85.
9. *Schafer T., Shuryak E.* E-print: hep-ph/9610451.
10. *Derrick G.H.* // J. Math. Phys. 1964. **5**. P. 1252.
11. *Рубаков В.А.* Классические калибровочные поля. М.: УРСС, 1999.
12. *Славнов А.А.* Введение в квантовую теорию калибровочных полей. М.: Наука, 1978.
13. *Affleck I.* // Nucl. Phys. 1981. **B 191**. P. 429.
14. *Balitsky I., Yung A.* // Phys. Lett. 1986. **B168**. P. 113.

Поступила в редакцию
10.12.01

АТОМНАЯ И ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

УДК 539.172.3

ВОССТАНОВЛЕНИЕ СЕЧЕНИЙ ФОТОЯДЕРНЫХ ПРОЦЕССОВ В ИССЛЕДОВАНИЯХ С ТОРМОЗНЫМИ γ -ПУЧКАМИ

В.К. Гришин, Б.С. Ишханов, Г.С. Нефедов

(НИИЯФ)

E-mail: grishin@depni.npi.msu.su

Методом компьютерного моделирования показано, что путем прямого фитирования величины выхода реакции на основе оптимального выбора предполагаемой модели сечения удастся надежно восстановить его исходную величину. Обсуждаются общие критерии статистического моделирования, устойчивость и сходимость фитирования при различной статистической обеспеченности экспериментальных данных.

Введение

Тормозное излучение широко используется в различных фундаментальных и прикладных исследованиях [1]. Высокая интенсивность тормозных γ -пучков позволяет получать экспериментальные данные с необходимой статистической обеспеченностью. Однако проведение спектральных исследований с применением тормозного излучения осложнено тем, что энергетический спектр тормозного излучения чрезвычайно широк и простирается от весьма малых до предельных энергий, равных энергиям электронов, используемых для генерации излучения.

В качестве примера ниже рассматриваются исследования энергетической зависимости сечений фотоядерных процессов. В экспериментах используется следующая процедура. Проводится серия измерений с несколькими тормозными спектрами, имеющими постепенно возрастающие значения верхней границы, что позволяет последовательно «захватывать» в измерениях все более высокие энергетические области фотоядерных процессов и получать дополнительную (хотя и косвенную) информацию. При этом для каждого значения верхней границы тормозного излучения проводятся измерения полного количества наблюдаемых фотоядерных событий во всем интервале энергий γ -квантов (от пороговых до верхней границы).

Таким образом, в экспериментах на тормозном γ -пучке в исследуемой реакции непосредственно измеряется не сечение реакции $\sigma(E_\gamma)$, где E_γ — энергия γ -кванта, а совокупность так называемых

выходов реакции $y(E_i)$, которые представляют собой полное количество исследуемых событий для тормозных спектров с различными значениями верхних границ E_i ($i = 1, \dots, n$; $E_i < E_{i+1}$):

$$y(E_i) = \int_{E_{\text{thr}}}^{E_i} W(E_i, E_\gamma) \sigma(E_\gamma) dE_\gamma, \quad (1)$$

где E_{thr} — энергетический порог реакции, $W(E_i, E_\gamma)$ — функция энергетического спектра тормозного γ -излучения [2]*).

По совокупности выходов строится кривая суммарного выхода реакции в энергетическом интервале E_1, \dots, E_n , а затем производится восстановление сечения реакции.

К настоящему времени имеется несколько процедур восстановления сечения реакции, которые в основном сводятся к решению обратной задачи (подробнее см., напр., [2–6]). Эта операция, относящаяся по своей природе к классу некорректных задач, остается, несмотря на несомненные успехи, весьма трудоемкой и не всегда однозначной, особенно в области высоких энергий. Поэтому ниже анализируется другой подход, основанный на фитировании конечной кривой выхода путем оптимального перебора предполагаемых данных по сечению реакции.

*) Здесь не рассматривается ряд деталей, присущих конкретным исследованиям (тип реакции, разделение различных каналов реакции, влияние детектирующей системы и т. д.). Это тема следующей публикации.

Методом компьютерного моделирования показывается, что предложенная процедура восстановления обладает высокой эффективностью и устойчивостью.

Моделирование выхода фотоядерной реакции

Первым этапом моделирования является построение кривой выхода фотоядерной реакции. В качестве функции $W(E_i, E_\gamma)$ используется спектр тормозных фотонов, вычисленный согласно представлению Шиффа [2]. Модельное сечение выражается в виде суперпозиции m резонансов:

$$\sigma^{\text{mod}}(E_\gamma) = \sum_{k=1}^m \frac{\sigma_{0k} \Gamma_k^2}{(E_\gamma - E_{0k})^2 + \Gamma_k^2} \quad (2)$$

при $E_\gamma \geq E_{\text{thr}}$ и $\sigma^{\text{mod}}(E_\gamma) = 0$, если $E_\gamma < E_{\text{thr}}$. Здесь величины σ_{0k} , E_{0k} , Γ_k характеризуют высоту, положение и ширину резонансов.

Модельная «экспериментальная» кривая выхода вычисляется по формуле

$$y^{\text{mod}}(E_i) = \int_{E_{\text{thr}}}^{E_i} W(E_i, E_\gamma) \sigma^{\text{mod}}(E_\gamma) dE_\gamma + \delta y_i, \quad (3)$$

где δy_i описывает случайную погрешность выхода. Введение величины δy_i является необходимой поправкой, отражающей при моделировании случайный характер рассматриваемых процессов. В данном случае эта поправка задавалась с помощью случайного розыгрыша пуассоновского процесса со средним значением, определяемым первым слагаемым в правой части соотношения (3) [7]. Поскольку функция $W(E_i, E_\gamma)$, описывающая интенсивность исходного потока γ -излучения, здесь определяется с точностью до константы, то, варьируя последнюю, можно моделировать эксперименты с различной степенью статистической обеспеченности — см. рис. 1, где в качестве примера (используемого и далее) для построения кривой выхода применяется соотношение (2) при $m = 5$.

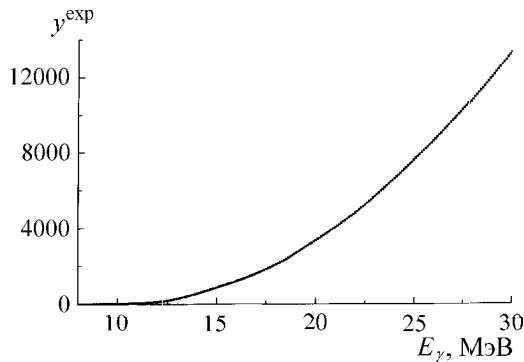


Рис. 1. Модельная «экспериментальная» кривая выхода при $m = 5$

Отметим, что обычно в экспериментах на тормозном γ -пучке величины E_i изменяются дискретно

с шагом порядка 0.1 МэВ. Поэтому наблюдаемая информация содержит до 300 точек в совокупном выходе реакции со статистической точностью 0.1% на верхнем участке кривой выхода.

Далее предполагалось, что «измерения» ведутся в энергетическом интервале E_γ от $E_{\text{thr}} = 5$ МэВ до $E_{\text{max}} = 30$ МэВ.

Восстановление сечений

Восстановление сечений реализуется путем прямого фитирования (подбора) параметров искомого сечения. Задача сводится к нахождению оптимальных параметров, при которых отличие фитируемой кривой выхода от экспериментальной будет минимальным. При этом $3m$ -параметры экспериментальной кривой (3) σ_{0k} , E_{0k} , Γ_k фиксировались, но в процессе восстановления сечения оставались «неизвестными». В качестве критерия оптимальности подбора параметров используется минимум функционала, равного сумме квадратов приведенных отклонений фитируемой и экспериментальной кривых (подробнее см. ниже). Для минимизации функционала использовался пакет программ MINUIT CERN [8].

В итоге проводится следующая процедура. Первый шаг — испытание исходной m' -гипотезы, согласно которой сечение имеет $m = m'$ резонансов, распределенных в упомянутом энергетическом интервале (обычно выбирается минимальное значение m' исходя из некоторой предварительной информации; при отсутствии таковой полагают $m' = 1$), и оптимизация начинается.

Эта операция в соответствии с пакетом программ MINUIT состоит из последовательности расчетных циклов со случайным выбором $3m'$ -параметров, в каждом из которых вычисляется «эмпирический» выход ($y^{\text{emp}}(m', E_i)$ по соотношению (3)), который затем сравнивается с $y^{\text{exp}}(E_i)$ с помощью функционала

$$F(3m') = \sum_{i=1}^{i=n} \frac{(y^{\text{emp}}(m', E_i) - y^{\text{exp}}(E_i))^2}{(\Delta y_i)^2}. \quad (4)$$

Последний определяет дисперсию отклонений (в единицах среднеквадратичного отклонения Δy_i) восстанавливаемой кривой выхода от экспериментальной. В качестве оценки $(\Delta y_i)^2$ выбирается величина $y^{\text{exp}}(E_i)$ (см. выше). Минимизация функционала является наиболее статистически обоснованным методом для достижения наилучшей аппроксимации в пределах m' -гипотезы [7]. Поэтому расчетные циклы продолжают до достижения минимума функционала $F(3m')$.

Следующий шаг — расширение гипотезы: $m' \rightarrow m' + 1$. Оптимизация повторяется, затем совершается следующее расширение: $m' + 1 \rightarrow m' + 2$ и т. д. Далее сравниваются величины $F(3m')$, $F(3(m' + 1))$, $F(3(m' + 2))$, ... и выбирается наиболее статистически обоснованное фитирование кривой $y^{\text{exp}}(E_i)$ — см. рис. 2, 3.

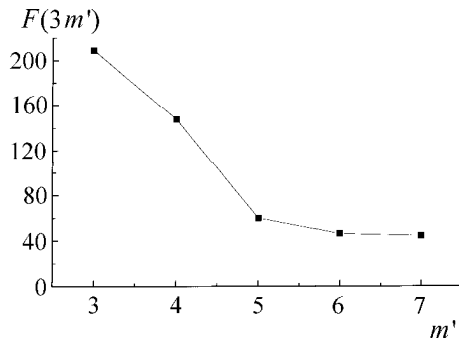


Рис. 2. Значения функционала (4) при фитировании экспериментальной кривой с $m = 5$ на различных шагах оптимизации

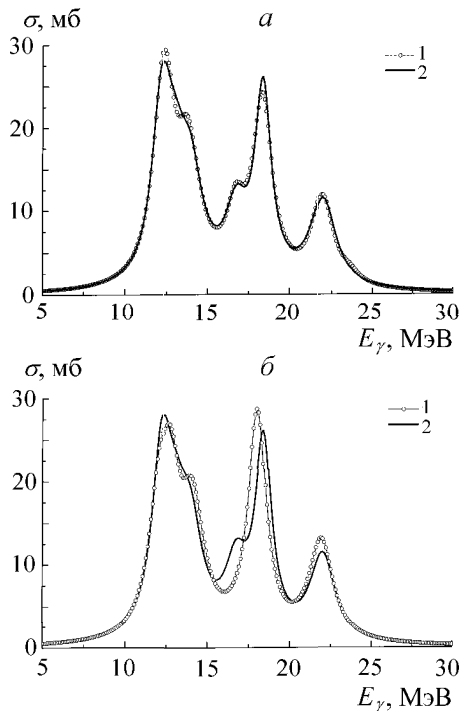


Рис. 3. Восстановленное (кривая 1) и заданное (кривая 2) сечения фотоядерной реакции при измерениях со статистической погрешностью 0.2% (а) и 2% (б)

Для этого необходимо убедиться, что на k -шаге очередное расширение не приводит к статистически значимому различию между $F(3(m' + k))$ и $F(3(m' + k + 1))$. Здесь можно воспользоваться следующим критерием. Поскольку полное количество точек измерения порядка 300, так что $n \gg 3m$, то отношение $F(3(m' + k))/F(3(m' + k + 1))$ представляет собой случайную переменную Фишера v^2 с примерно равными степенями свободы $f_{1,2} \simeq n$ (см., напр., [7]). Разброс этой величины, обусловленный статистическими флуктуациями, с вероятностью 0.68 определяется при $n \gg 1$ интервалом $[1 - \sqrt{(2/n)}, 1 + \sqrt{(2/n)}]$, а с вероятностью 0.95 — удвоенным интервалом. Если на очередном шаге фитирования указанное соотношение попадает в эти интервалы, то с соответствующей вероятностью «улучшение» описания является чисто случайным. Так, на рис. 2 величина функционала $F(3(m' + k))$

на последних шагах статистически значимо уже не улучшается.

Важнейшими моментами являются сходимость и устойчивость предложенной процедуры. Надежная сходимость была продемонстрирована путем многократного повторения полного цикла моделирования для одной и той же экспериментальной кривой (3). Столь же надежно фитирование проходило при экспериментальных кривых с различными случайными «зашумлениями» (т.е. при заданных значениях первых слагаемых в соотношении (3) проводились различные случайные розыгрыши величин δy_i).

Другая разновидность тестирования была направлена на выяснение влияния статистической обеспеченности эксперимента, т.е. величины относительных случайных погрешностей в измерениях, на эффективность восстановления (статистическая обеспеченность эксперимента моделировалась путем пропорционального изменения величины интенсивности γ -потока $W(E_i, E_\gamma)$). Тестирование подтвердило, что при обычно наблюдаемой в экспериментах точности (т.е. при ошибке порядка 0.1–0.2%) возможно надежное восстановление исходного сечения, в то время как при точности на порядок худшей (т.е. при ошибке 1–2%) эффективность восстановления заметно понижается — см. рис. 3 (а и б соответственно).

Заключение

Проведенное моделирование позволило устранить возможную неясность, насколько минимизация выбранного функционала, имеющего явно интегральный характер, позволяет выявить резонансную структуру сечения реакций. Полученные результаты свидетельствуют о том, что использованный пакет программ и выбранная процедура минимизации обладают высокой надежностью. Учитывая относительную простоту предложенной процедуры, можно рассматривать метод оптимального фитирования как весьма эффективный для обработки результатов фотоядерных и подобных исследований.

Авторы выражают благодарность В.И. Мокееву и И.Г. Персианцеву за обсуждение полученных результатов.

Литература

1. Findlay D.J.S. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 1990. **В50**. Р. 314.
2. Ишханов Б.С., Капитонов И.М. Взаимодействие электромагнитного излучения с атомными ядрами. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1979.
3. Тихонов А.Н. // ДАН СССР. 1963. **151**. С. 501; Тихонов А.Н., Шевченко В.Г., Галкин В.Я. и др. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1970. № 2. С. 208 (Moscow University Phys. Bull. 1970. No. 2).
4. Пытьев Ю.П. Методы анализа и интерпретации эксперимента. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1990.

5. Ефимкин Н.Г. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. М. (МГУ), 1993.
6. Dunford C.L. Nuclear Data Evaluation Methodology. World Sci. Publishing Co. Pte. Ltd. POBox 128, Faver Road, Singapore.

7. Гришин В.К., Живописцев Ф.А., Иванов В.А. Математическая обработка и интерпретация физического эксперимента. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1988.
8. URL: <http://www.infor.cern.ch/asdoc/minuit/>

Поступила в редакцию 14.12.01

УДК 537.534

ФОКУСИРОВКА ЧАСТИЦ АТОМНЫМИ ЛИНЗАМИ В КРИСТАЛЛАХ

В.И. Шульга

(НИИЯФ)

E-mail: shulga@anna19.npi.msu.su

В малоугловом приближении рассчитано рассеяние частиц при прохождении сквозь трех- и четырехатомные линзы. Получены аналитические выражения для энергии фокусировки этих систем для произвольного и ряда конкретных межатомных потенциалов (Борна–Майера и Мольера). Отмечена двужначность энергии фокусировки для линзы, имеющей форму прямоугольника. Показано, что энергия фокусировки правильной треугольной линзы совпадает с энергией фокусировки двухатомной линзы того же радиуса. Проведено сравнение с результатами других работ.

Введение

Фокусировка атомных траекторий играет важную роль во многих процессах при взаимодействии атомных частиц с кристаллами. Для частиц первичного пучка она ярко проявляется при рассеянии атомов и молекул поверхностными полуканалами кристаллической решетки, при переходах ось–плоскость каналированных частиц, служит одной из причин нарушения статистического равновесия частиц в каналах и т. д. В случае распыления кристаллов фокусировка атомов отдачи способствует появлению направленного преимущественного распыления (пятна Венера) и при определенных условиях может значительно усилить распыление атомов подповерхностного слоя кристаллической решетки.

Как известно, уже рассеяние на одном атоме приводит к сгущению траекторий позади рассеивающего центра, что связано с уменьшением угла рассеяния частиц с ростом прицельного параметра столкновения (радужное рассеяние). Эффект усиливается при рассеянии на двух и большем числе атомов, образующих фокусирующую линзу. При каналировании фокусирующие линзы формируются атомными цепочками (струнами Линдхарда).

Основной характеристикой фокусирующего действия атомной линзы является энергия фокусировки, т. е. энергия, при которой траектории падающих частиц сходятся в заданную точку или, наоборот, расходящийся пучок частиц преобразуется в параллельный. Для случая рассеяния на одном атоме задача сводится к вычислению радиуса тени атома, поскольку именно вблизи границы тени наблюдается

самое сильное сгущение траекторий (см., напр., [1]). В малоугловом приближении задача решается точно лишь для степенных ионно-атомных потенциалов [1, 2]. Имеется довольно точная аппроксимация радиуса тени, полученная с использованием потенциала Мольера [3].

Расчеты энергии фокусировки более сложных атомных систем первоначально проводились в связи с проблемами распыления и дефектообразования в кристаллах. Рассматривалась фокусировка кольцевыми трех- и четырехатомными линзами в предположении, что взаимодействие частиц описывается потенциалом Борна–Майера $V(R) = A \exp(-R/B)$, где A и B — константы, R — межатомное расстояние. Результаты этих работ, проводившихся в 1960-х годах, подробно изложены в монографии Томпсона [4].

Теория линзовой фокусировки для произвольного потенциала предложена в работах [5–8]. Наиболее подробно рассмотрены случаи рассеяния атомными цепочками, образующими структуру полуканала [5, 7], двухатомной линзой [6], а также линзой, имеющей форму ромба [8]. Как и в [1–4], в работах [5–8] углы рассеяния частиц рассчитывались в импульсном (малоугловом) приближении. Наиболее эффектный результат получен в случае рассеяния частиц поверхностными полуканалами [7], для которого энергию фокусировки удалось выразить непосредственно через ионно-атомный потенциал:

$$E_f = -2\pi b d^{-1} \frac{d}{dp} [pV(p)]_{p=a}. \quad (1)$$