

УДК 621.384.6

КОГЕРЕНТНАЯ РАДИАЦИОННАЯ ДИАГНОСТИКА ПАРАМЕТРОВ НАНОСТРУКТУР НА ЭЛЕКТРОННЫХ УСКОРИТЕЛЯХ

В. К. Гришин, Б. С. Ишханов, В. И. Шведунов, Н. Н. Насонов^{*})
(НИИЯФ)

E-mail: grishin@depni.pri.msu.ru

Обсуждается возможность обнаружения и диагностики параметров нанообъектов в веществе с помощью когерентного рентгеновского излучения, генерируемого при взаимодействии ускоренных электронов непосредственно с исследуемым объектом. Аналитически показывается, что наблюдение генерируемого излучения позволяет исследовать микроструктурные особенности нанообъекта. Основные выводы иллюстрируются на примере когерентного излучения релятивистских электронов на фуллерене.

1. Важнейшим условием применения нанотехнологий является надежная диагностика параметров наноструктур. Весьма перспективным методом подобной диагностики является использование жесткого электромагнитного излучения. Этот способ базируется на появлении резонансного отклика (при облучении исследуемого объекта потоком фотонов) в интенсивности рассеянных фотонов, длины волн которых оказываются кратными линейным размерам исследуемого микрообъекта. Традиционно применяемая здесь методика по существу представляет разновидность рентгеноструктурного анализа, которая обычно базируется на использовании пучка фотонов тормозного излучения, генерируемого с помощью пучка ускоренных электронов на специальной мишени-радиаторе. Присущий тормозному излучению недостаток — весьма широкий спектр излучения — может быть компенсирован с помощью дополнительной монохроматизации пучка фотонов (например, с помощью известной брэгговской процедуры на монокристаллах).

Ниже обсуждается одно из направлений по дальнейшему развитию радиационной диагностики — прямое использование механизма «электронный пучок → излучение» непосредственно в исследуемом веществе. Структурные свойства вещества, которое в этой схеме одновременно исполняет роль тормозного радиатора и исследуемого объекта, однозначно проявляются в характеристиках излучения. В такой схеме радиационная диагностика заметно расширяет свои возможности.

2. Тормозное излучение ускоренных электронов обусловлено как традиционным тормозным излучением (ТИ) на ядрах атомов мишени, так и поляризационным тормозным излучением (ПТИ) на электронах атомов мишени [1, 2]. При этом в обоих процессах могут наблюдаться когерентные явления,

непосредственно связанные со структурными особенностями вещества мишени. Если длина волны фотона, излучаемого ускоренным электроном, становится сравнимой с характерными атомными расстояниями вещества мишени (это наблюдается в рентгеновском диапазоне), то процесс излучения охватывает сразу несколько тормозных центров. Это стимулирует когерентную генерацию дополнительных фотонов, сформированных между собой и той же длины волны. В итоге в излучении будут наблюдаться когерентные максимумы, величины и длины волн которых будут резко зависеть от локальной концентрации вещества и его распределения в пространстве, т. е. от структуры вещества радиатора. Сказанное и составляет основу для структурной диагностики нанообъектов.

3. Отметим прежде всего, что суммарный поток генерируемых квантов и относительные вклады ТИ и ПТИ сильно зависят от угла излучения. Для достаточно быстрых заряженных частиц ТИ преобладает для малых углов, в то время как ПТИ остается заметным для больших углов наблюдения, включая заднюю полусферу [2]. Следовательно, наблюдение излучения под различными углами может представить информацию о структуре распределения как ядер, так и электронов в веществе.

Следует отметить также, что указанная методика позволяет получить дополнительную информацию о параметрах поперечного и продольного распределения вещества при использовании ускорительных установок с варьируемыми энергиями электронов. Последнее обстоятельство обусловлено различием в зависимости поперечных и продольных характеристик тормозного излучения от энергии падающих электронов. Дело в том, что процесс излучения фотона ускоренным электроном происходит на некоторой длине пролета электрона в среде

^{*}) Белгородский государственный университет, Белгород, Россия.

(называемой когерентной длиной излучения L_{coh}), на которой генерируемый фотон и генерирующий электрон пространственно разделяются. Все тормозные центры, «накрываемые» этой длиной, дают когерентный (синфазный) вклад в излучение с заданной длиной волны излучения (см., напр., [3, 4]). Когерентная длина максимальна при излучении вдоль скорости электрона вперед, достигая для фотона с длиной волны λ значения $L_{coh} = 2\lambda\gamma^2$, где γ — релятивистский фактор Лоренца для излучающего электрона, распространяющегося со скоростью v , равный $1/\sqrt{1-v^2/c^2}$ (сильная зависимость от энергии генерирующего электрона наблюдается также и при малых по отношению к его скорости углах излучения). При этом эффективный радиус поперечного взаимодействия быстрого электрона со средой растет пропорционально его релятивистскому фактору γ (см. ниже). Отмеченные обстоятельства и являются основанием для высказанных выше предположений.

Укажем еще одну важную особенность рассматриваемой методики. В отличие от обычных измерений по схеме рентгено-структурного анализа с применением монохроматизации фотонов для экспериментов с прямым механизмом «электронный пучок → излучение» не требуется использования интенсивных пучков ускоренных электронов. Напротив, более целесообразно применение весьма слабых ускоренных токов (до десятков–сотен наноампер), что вполне достаточно для набора статистического материала. При этом одновременно резко снижается радиационный фон, позволяя существенно облегчить условия проведения диагностики. Особенno перспективно применение для этой цели ускорителей с высоким фактором заполнения (так называемый *duty factor* [5]), близким к непрерывному режиму.

Следует упомянуть, что особенности излучения релятивистских частиц в веществе в последнее время активно исследуются в различных российских и зарубежных научных центрах, в том числе в НИИЯФ МГУ. Тем не менее исследования непосредственно нанообъектов (молекулярные ионы, фуллерены, нанотрубки, фуллериты и др.) только начинаются (упомянем, например, работы [6–8]).

4. Подтвердим сказанное выше аналитическими оценками на примере с обнаружением подобного нанообъекта. При этом ограничимся основными соотношениями, поясняющими наиболее характерные детали рассматриваемых процессов. Рассмотрим сначала излучение релятивистского электрона на атомных электронах вещества (ПТИ). Следуя традиционной процедуре, в которой ПТИ представляется как рассеяние поля быстрого заряда на электронах вещества [9–11], получаем следующее соотношение для спектрально-угловой плотности

энергии излучения:

$$\frac{dW_\omega}{d\Omega} = \frac{e^6}{8\pi^3 m^2 c^3 v^2} F_{\text{eff}}, \quad (1)$$

где W_ω — спектральная плотность излучения с частотой ω в элемент телесного угла $d\Omega$. Фактор

$$F_{\text{eff}} = \frac{v^2}{e^2} \left\langle \left| \sum_{s=1}^{Z_o} [\mathbf{n}' \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}_s)] \exp(-i\mathbf{q}_\omega \mathbf{r}_s) \right|^2 \right\rangle, \quad (2)$$

где Z_o — число электронов в объекте, определяет суммарный вклад всех его электронов, пространственное положение каждого из которых определяется радиусом \mathbf{r}_s . Вектор \mathbf{E}_ω — спектральная амплитуда поля быстрого электрона, распространяющегося со скоростью v . Здесь поле быстрого электрона представляется как пакет виртуальных волн [11]. Спектральная амплитуда виртуальной волны (учитываются лишь аксиально-симметричные относительно траектории электрона поперечная составляющая поля, поскольку величина продольной составляющей поля существенно меньше) с частотой ω и волновым вектором $\mathbf{k} = \omega\mathbf{v}/v^2$ на расстоянии b от траектории электрона имеет величину

$$E_\omega = \frac{e}{\pi b v} \zeta K_1(\zeta),$$

где $\zeta = \omega b / \gamma v$, K_1 — функция Магданальда; практически величина $\zeta K_1(\zeta) \sim 1$ при $\zeta \leq 1$, а затем при $\zeta \geq 1$ резко уменьшается. Поэтому соотношение

$$\frac{\omega b}{\gamma v} \simeq 1 \quad (3)$$

во многом определяет параметры рассматриваемого процесса ПТИ*. Так, радиус зоны поперечного действия поля релятивистского электрона оказывается порядка

$$R_\omega \simeq \frac{\gamma v}{\omega}. \quad (4)$$

Одновременно соотношение (4) позволяет также указать предельную частоту излучения при заданном размере пространства взаимодействия.

Далее, вектор $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$, где \mathbf{k}' — волновой вектор реального фотона (так что $k' = \omega/c$), излучаемого в направлении единичного вектора \mathbf{n}' . Скобки $\langle \rangle$ означают усреднение по возможным положениям всех электронов в нанообъекте.

Фактор (2) включает когерентный (пропорциональный Z_o^2) и некогерентный (пропорциональный Z_o) вклады электронов среды в суммарное излучение, которые описываются соответственно парными и квадратичными слагаемыми в сумме соотношения (2). Поскольку фактически в любом

* Вообще описанная процедура соответствует движению заряда в вакууме. В плотной мишени поле заряда испытывает влияние экранировки вещества. Ограничимся рассмотрением относительно слаборелятивистских электронов, когда релятивистский фактор частиц γ и область частот излучения ω удовлетворяют условию $\omega^2 > \gamma^2 \omega_o^2$ (здесь ω_o — плазменная частота вещества мишени; $\hbar\omega_o \approx 30-50$ эВ) и экранирующее действие вещества мишени невелико.

нанообъекте $Z_o \gg 1$, далее некогерентным вкладом пренебрегается.

В итоге при оценках можно ограничиться следующим соотношением, определяющим интенсивность когерентного излучения:

$$F_{\text{eff}} = \left(\int_{(\infty)} \frac{x \sin(q_x x) \cos(q_z z)}{x^2 + y^2} \zeta K_1(\zeta) \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right)^2 \cos^2 \psi, \quad (5)$$

где $\rho(\mathbf{r})$ — электронная плотность объекта. Здесь используется прямоугольная система координат $\mathbf{r} = (x, y, z)$, а $d\mathbf{r} = dx dy dz$. Ось z направлена вдоль скорости \mathbf{v} и проходит через центр объекта; вектор излучения \mathbf{n}' лежит в плоскости (x, z) под углом ψ по отношению к оси z . Тогда $q_x = \omega \sin \Psi / c$; $q_y = 0$; $q_z = -\omega(1/\beta - \cos \Psi) / c$, где $\beta = v/c$.

Как следует из соотношений (4) и (5), существуют оптимальные условия, при которых электроны объекта при заданных пространственных размерах последнего могут давать максимальный когерентный вклад в суммарный выход ПТИ. Так, продольные и поперечные размеры объекта и частота излучения должны соответствовать требованию, чтобы волны, рассеиваемые отдельными электронами, не гасили друг друга. В когерентном излучении участвуют электроны мишени, реально «накрываемые» полем быстрого электрона. Поэтому можно указать две характерные длины, определяющие объем, в пределах которого волны рассеяния исходного поля на электронах вещества дают синфазный вклад в ПТИ. Это так называемая продольная когерентная длина $L_{||} \sim \pi / |q_3|$ (упомянутая выше в п. 3), а также поперечная когерентная длина $L_{\perp} \sim \pi / q_1$. Эффект будет максимальным, если величина L_{\perp} и поперечные размеры объекта и частота излучения соответствуют условию (4).

5. Тот же самый метод виртуальных фотонов полезен для описания традиционного тормозного излучения (ТИ) (кстати, применительно к ТИ этот метод имеет весьма большой «стаж» [12]) и проведения сравнительного анализа. Следуя [9], можно рассматривать классическое ТИ быстрого заряда на ядре как рассеяние (в собственной системе отсчета K' заряда, где последний не имеет поступательной скорости, а ядро имеет скорость $-\mathbf{v}$) электромагнитного поля ядра. Таким образом, ТИ в K' -системе можно описать путем «инверсией» формул для ПТИ.

Однако в реальной ситуации следует учитывать рассеяние суммарного поля всех зарядов нанообъекта, включая, помимо ядер, его электроны. В результате вследствие взаимного экранирования должно наблюдаться сильное подавление интенсивности ТИ в низкочастотной области излучения (см. также [9]). Лишь начиная с частот, когда длина волны излучения становится меньше среднего расстояния

между частицами нанообъекта, возможно появление ТИ (но уже слабо когерентного).

В итоге, возвращаясь в лабораторную систему координат K , здесь можно отметить два обстоятельства — эффект экранирования электронами поля ядра и сужение лучевого конуса ТИ. Это сужение описывается формулой

$$\sin \psi = \frac{\sin \psi'}{\gamma(1 + v \cos \psi' / c)}, \quad (6)$$

где ψ и ψ' — углы излучения в K - и K' -системах соответственно. Для ТИ, генерируемого с помощью релятивистских электронов, вся область излучения в K' в переднюю полусферу сужается в лабораторной системе в конус с углом раствора $\psi \sim 1/\gamma$. Заметим при этом, что под этим углом интенсивность когерентного ТИ минимальна (см. соотношение (6)). Тем не менее подтверждается отмеченная выше возможность получения различной информации о структуре нанообъекта при измерении рентгеновского излучения для малых и больших углов эмиссии фотонов.

6. Проиллюстрируем сказанное конкретными численными оценками ПТИ релятивистского электрона на таком интересном нанообъекте, как фуллерен, где в ПТИ проявляется ряд дополнительных интерференционных эффектов. Как известно, фуллерены представляют собой мультиатомную молекулу, состоящую из десятков—сотен атомов одного или нескольких сортов и расположенных в одном или нескольких тонких слоях этого нанообъекта [13]. Размеры однослойных фуллеренов составляют порядка 1 нм. Так, наиболее распространенный сферический фуллерен C_{60} имеет диаметр 0.7 нм.

Результаты численного моделирования фактора F_{eff} для ПТИ на сферическом фуллерене C_{60} с диаметром $d = 0.7$ нм представлены на рис. 1, где указаны зависимости величины фактора F_{eff} (последняя здесь и на последующем рисунке указывается в относительных единицах и рассчитывается на один электрон нанообъекта) от энергии излучаемых фотонов для двух модельных случаев. Кривая 1 относится к случаю однослойного тонкостенного фуллерена, кривая 4 рассчитана для фуллерена, имеющего внутренние вкрапления атомов того же сорта.

Поскольку ПТИ является итогом интерференционного сложения сигналов излучения от всех атомов объекта, здесь прослеживается следующая характерная закономерность. В низкочастотной области, когда длина волны λ излучения больше размеров объекта (их величины сравниваются при энергии фотона $E_{\omega} \sim 2$ кэВ), все электроны фуллерена излучают практически «в унисон», что приводит к появлению резкого когерентного пика ПТИ. При больших энергиях фотонов (и, следовательно, при меньших длинах волн) излучающие электроны, расположенные в противоположных частях фуллерена,

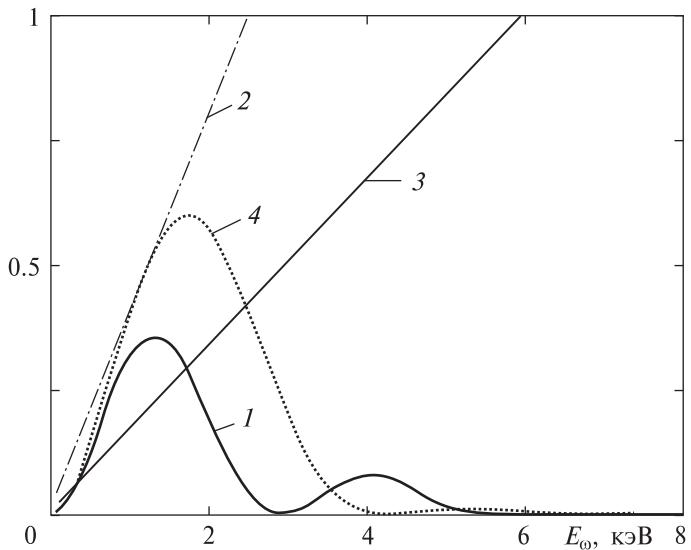


Рис. 1. Зависимость параметров ПТИ быстрых электронов с релятивистским фактором $\gamma = 10$ от энергии фотонов на сферическом фуллерене с диаметром $d = 0.7$ нм для различных распределений его атомов для угла излучения $\psi = \pi/4$: кривые 1, 4 — факторы F_{eff} для однослойного фуллерена и фуллерена с внутренним вкраплением атомов; кривые 2, 3 — поперечные и продольные приведенные фазы $q_1 d/2\pi$ и $q_3 d/2\pi$ соответственно

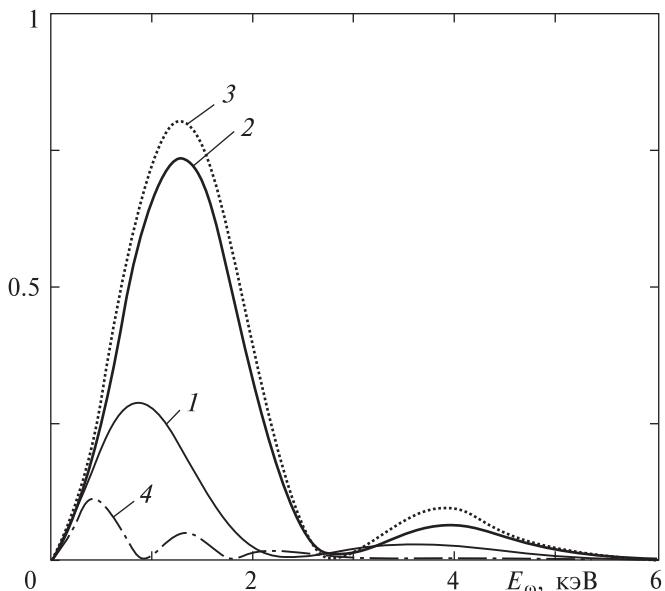


Рис. 2. Зависимость фактора F_{eff} ПТИ быстрых электронов с различными релятивистскими факторами γ от энергии фотонов на сферическом однослойном фуллерене C_{60} с диаметром $d = 0.7$ нм: кривые 1, 2, 3 — для угла излучения $\psi = \pi/4$ и $\gamma = 10, 50, 100$ соответственно; кривая 4 — для угла излучения $\psi = 3\pi/4$ и $\gamma = 10$

оказываются во взаимно гасящих фазах, что приводит к подавлению ПТИ. Минимум величины F_{eff} наблюдается при $q_3 d_{\text{eff}} \approx \pi$, где d_{eff} — эффективное расстояние между центрами распределений элек-

тронов в передней и задней областях фуллерена ($d_{\text{eff}} < d$). Для первого случая минимум фактора F_{eff} приходится на энергию порядка 3 кэВ, для второго — порядка 4 кэВ. В последнем случае проявляется еще одно обстоятельство — более близкое в среднем положение электронов фуллерена к траектории налетающей частицы и, следовательно, более сильное воздействие ее поля, что и отражается в более высокой амплитуде сигнала на кривой 4. Далее «игра фаз» (изменение фаз указывают линии 2 и 3) приводит к появлению осцилляции интенсивности ПТИ с постепенным затуханием их амплитуд.

На рис. 2 указаны величины фактора F_{eff} для однослойного фуллерена C_{60} в зависимости от энергии излучаемых фотонов при различных релятивистских факторах быстрых электронов для углов излучения $\psi = \pi/4$ (кривые 1–3) и $\psi = 3\pi/4$ (кривая 4). Из сравнения кривых 1–3 видно насыщение амплитуды когерентного пика фактора F_{eff} при увеличении релятивистского фактора γ , что вполне соответствует обсуждаемым представлениям о характере излучения релятивистского электрона. Здесь продольная когерентная длина излучения L_{\parallel} при энергии фотона порядка 1 кэВ становится сравнимой с диаметром фуллерена уже при релятивистском факторе порядка десятка. Заметное возрастание пика, связанное с ростом L_{\parallel} при больших значениях релятивистского фактора (в то время как в L_{\perp} подобная зависимость не просматривается), может произойти лишь в более сложных системах, например в цепочке фуллеренов, когда возрастающая когерентная длина постепенно «охватывает» соседние объекты. Подтверждение сказанному следует также из сравнения кривых 2 и 4. При излучении под углом $\psi = 3\pi/4$ величина q_3 заметно возрастает и L_{\parallel} убывает. Поэтому амплитуда когерентного сигнала резко затухает, а период осцилляций его амплитуды уменьшается.

Таким образом, приведенные численные оценки, несмотря на модельный характер рассмотренных примеров, подтверждают высказанные качественные предположения о возможностях когерентной радиационной диагностики нанообъектов. Подчеркнем, что амплитуда когерентного излучения релятивистских электронов на нанообъекте пропорциональна квадрату числа его электронов, так что, например, для фуллерена C_{60} интенсивность ПТИ в 60^2 раз превышает уровень подобного сигнала на одиночном атоме углерода. Вопросы более детального изучения структуры вещества, содержащего нанообъекты, анализа более сложных нанокомплексов и др. требуют дальнейшего исследования.

7. В заключение укажем, что подобные теоретические и экспериментальные исследования в настоящее время планируется провести на базе недавно вступившего в строй 70 МэВ разрезного микротрона НИИЯФ МГУ. Этот ускоритель нового поколения позволяет получать релятивистские элек-

троны в варьируемом диапазоне энергий 6–70 МэВ с высоким качеством ускоренных пучков [14], что обеспечивает проведение широких исследований различных механизмов излучения и их применение (так, помимо упомянутой тематики укажем, например, [15]).

Настоящая работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ (НШ-5365.2006.2) и РФФИ (гранты 05-02-17648, 06-02-16714).

Литература

1. *Ter-Mikaelian M.L.* High Energy Electromagnetic Processes in Condensed Media. N.Y.: Wiley, 1972.
2. *Amus'ia M., Buimistrov V., Zon B.* et al. Polarization bremsstrahlung of particles and atoms. N.Y.: Plenum Press, 1992.
3. *Базылев В.А., Жеваго Н.К.* // УФН. 1982. **137**, № 4. С. 605.
4. *Болотовский Б.М.* // Труды ФИАН СССР. 1984. **140**. С. 94.
5. *Baglin J.E.E., Bureau A.J., Cook B.C.* et al. // Proc. of Intern. Conf. on Particle Accelerators «PAC 1973» // IEEE Trans. Nuc. Sci. NS-20. P. 932.
6. *Grishin V.K.* // Nucl. Instr. and Methods in Phys. Res. B. 2005. **227**, N 1–2. P. 82.
7. *Grishin V.K.* // Proc. of Intern. Conf. «PAC 2005» (Knoxville, Tennessee, USA, May 16–20, 2005). <http://snsappol.sns.ornl.gov/pac05>, RPAP018.
8. *Nasonov N., Kaplin V., Uglov S.* et al. // Nucl. Instr. and Methods in Phys. Res. B. 2005. **227**, N 1–2. P. 41.
9. *Ахиезер А.И., Берестецкий И.Б.* Квантовая электродинамика. М., 1969.
10. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория поля. М. 1960.
11. *Panofsky W.K.H., Phillips M.* Classical Electricity and Magnetism. Cambridge, Mass.: Addison-Wesley.
12. *Fermi E.* // Z. f. Phys. 1924. **29**. P. 315.
13. *Фиалков А.С.* Углеродные соединения и композиты на его основе. М., 1997.
14. *Shvedunov V.I., Ermakov A.N., Gribov I.V.* et al. // Nucl. Instr. and Methods in Phys. Res. A. 2005. **550**. P. 39.
15. *Балдин А.Н., Внуков И.Е., Гришин В.К.* и др. // Тез. докл. XXXVI Межд. конф. «Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами». 2005. МГУ. С. 80.

Поступила в редакцию
01.09.06