



DOI: 10.5862/JPM.218.17

УДК 538.911; 539.1.03

*Р.Г. Полозков¹, В.К. Иванов¹,
Г.Б. Сушко², А.В. Король^{2,3}, А.В. Соловьев²*

¹Санкт-Петербургский политехнический университет
Петра Великого, Российская Федерация;

²Научно-исследовательский центр мезобионаносистем (MBN),
Франкфурт-на-Майне, Германия;

³Санкт-Петербургский государственный морской университет,
Российская Федерация

КАНАЛИРОВАНИЕ УЛЬТРАРЕЛЯТИВИСТСКИХ ПОЗИТРОНОВ В ИЗОГНУТЫХ КРИСТАЛЛАХ АЛМАЗА

В работе представлены результаты численного моделирования процесса каналирования ультрарелятивистских позитронов в прямых и изогнутых кристаллах алмаза. Траектории заряженных частиц внутри кристаллов вычислены с использованием недавно разработанного модуля пакета прикладных программ – MBN Explorer package. Получены параметры каналирования и спектры излучения позитронов, падающих с энергией 855 МэВ вдоль кристаллографической плоскости (110) для различных радиусов кривизны кристалла.

УЛЬТРАРЕЛЯТИВИСТСКИЙ ПОЗИТРОН, ИЗОГНУТЫЙ КРИСТАЛЛ АЛМАЗА, КАНАЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, СПЕКТР ИЗЛУЧЕНИЯ.

Введение

Процессы взаимодействия заряженных частиц с веществом, в частности с кристаллами, уже многие годы являются предметом исследования как экспериментаторов, так и теоретиков. Особое внимание уделяется процессу каналирования частиц, когда заряженные частицы под влиянием электростатического поля атомов решетки могут пробегать значительные расстояния вдоль кристаллографических плоскостей или осей [3]. При этом траектории движения положительно заряженных частиц обычно сосредоточены в межатомной области, поскольку поле ионов для них имеет отталкивающий характер, в то время как отрицательно заряженные частицы двигаются вдоль ионных цепочек. Стабильность движения частиц вдоль каналов определяется малым значением энергии поперечного движения, не превышающим высоты электростатического барьера.

Каналирование может также происходить в изогнутых кристаллах, и это явление

используется для поворота релятивистских пучков ускоренных частиц. Стабильность движения в таком искривленном канале достигается при дополнительном условии, согласно которому радиус кривизны R должен значительно превышать критическую величину R_c [4].

Захваченная в канал частица испытывает осцилляции в плоскости, поперечной направлению ее распространения, что приводит к так называемому излучению при каналировании [5]. Интенсивность этого излучения зависит от энергии частицы, от типа кристалла и от расположения кристаллографической плоскости или оси. Появление такого излучения при каналировании частиц в прямых кристаллах достаточно хорошо изучено (см., например, работы [6 – 13]).

При каналировании в искривленном кристалле, помимо поперечных осцилляций, происходит движение частицы вдоль изогнутой центральной линии канала. Последнее приводит к излучению синхротронного типа [14 – 20]. Поэтому полный

спектр излучения, который формируется заряженной ультрарелятивистской частицей, содержит особенности как его каналирующей, так и синхротронной составляющих излучения. Условие стабильного каналирования $R \gg R_c$ [4, 21] соответствует тому, что радиус кривизны кристалла значительно больше радиуса кривизны осцилляционного движения в канале. Поэтому синхротронное излучение вносит вклад в низкочастотную часть спектра, тогда как осцилляции определяют его высокочастотную часть.

Исследование синхротронного излучения представляет большой интерес в связи с концепцией кристаллического ондулятора [22, 23]. Создание такого ондулятора может привести к новому источнику монохроматического излучения в диапазоне энергий от сотен кэВ до 1 – 10 ГэВ. Интенсивность и характерные частоты излучения могут быть различными в зависимости от типа и энергии каналирующих частиц, от вида кристалла и параметров периодически искривленного канала (подробнее см. обзор [23]).

В связи с этим в последние годы в ряде лабораторий проводятся эксперименты по измерению параметров каналирования и характеристик спектров излучения ультрарелятивистских позитронов [24 – 26] и электронов [27, 28]. Кристаллические ондуляторы, созданные на основе суперрешеток $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ и используемые в экспериментах, изготавливаются методами молекулярной эпитаксии [29, 30]. Планируется также создание ондуляторов на основе кристаллов алмаза.

Теоретическую поддержку проводимых и планируемых экспериментов следует обеспечивать на основе процедуры, которая бы позволяла моделировать траектории частиц внутри кристалла как в каналирующем, так и надбарьерном режимах. Недавно созданный на основе молекулярной динамики универсальный пакет программ MBN Explorer [2] позволяет рассчитывать траектории заряженных частиц в различных упорядоченных и аморфных средах. Пакет прошел проверку путем сравнения полученных результатов по каналированию электронов и позитронов в прямых

кристаллах Si(110) и аморфном кремнии с имеющимися экспериментальными данными и с расчетами, проведенными в рамках других теоретических моделей [1]. Развитая методика вычисления недавно была использована для моделирования процесса каналирования электронов и позитронов в изогнутых и периодически изогнутых каналах Si(110) и Si(111) [31–33].

Целью настоящей работы является теоретический анализ процесса каналирования высокоэнергичных позитронов в прямых и изогнутых кристаллах алмаза C(110). С использованием пакета MBN Explorer вычислены параметры каналирования и спектры излучения для пучка позитронов с энергией $E = 855$ МэВ и для разных радиусов кривизны кристалла.

Моделирование процесса каналирования

Для получения трехмерных траекторий движения частиц в кристаллической среде используется молекулярная динамика, реализуемая в пакете MBN Explorer [2]. Однако стандартный молекулярно-динамический алгоритм был дополнен двумя особенностями [1], относящимися к задаче каналирования. Во-первых, для описания движения частиц больших энергий были использованы релятивистские уравнения движения. Во-вторых, при пошаговом построении траектории осуществлялось динамическое моделирование кристаллической среды. Ниже будет дано пояснение только к основным моментам этой процедуры. Более детальное описание представлено в работе [1].

В рамках классической механики движение со скоростью \mathbf{v} ультрарелятивистской частицы с зарядом q и массой m во внешнем электростатическом поле $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ описывается уравнением

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} = q\mathbf{E}, \quad (1)$$

где $\mathbf{p} = m\gamma\mathbf{v}$ – релятивистский импульс, причем $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$,

$$\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2} = \varepsilon/mc^2 \gg 1$$

– так называемый лоренц-фактор, ε – энергия частицы, c – скорость света.

Уравнение (1) решается при $t \geq 0$ и на-

чальных условиях на входе частицы в кристалл: $\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}_0$ и $\mathbf{v}(0) = \mathbf{v}_0$.

Электростатическое поле вычисляется как градиент потенциала

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}},$$

где электростатический потенциал $U(\mathbf{r})$ рассматривается как сумма атомных потенциалов

$$U(\mathbf{r}) = \sum_j U_{at}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (2)$$

причем \mathbf{R}_j – радиус-вектор j -го атома, U_{at} – атомный потенциал, который рассматривается в приближении Мольера [34].

Формально сумма в уравнении (2) вычисляется по всем атомам кристалла. Однако с учетом быстрого падения величины атомного потенциала на расстояниях

$$\rho_j = |\mathbf{r} - \mathbf{R}_j| \gg a_{TF}$$

от ядра (томас-фермиевский радиус a_{TF} взят для оценки среднего атомного радиуса), удобно ввести радиус обрезания ρ_{max} , за пределами которого вкладом потенциала можно пренебречь. В связи с этим, для произвольного положения частицы \mathbf{r} сумму в равенстве (2) можно ограничить количеством атомов, попадающих в сферу радиуса ρ_{max} , а это существенно ускоряет вычисления.

Вычисление координат атомов, попадающих внутрь сферы ρ_{max} , выполняется с помощью следующего алгоритма [1]. Рассмотрим каналирование вдоль кристаллографической плоскости с индексами Миллера (klm). На первом шаге кристаллическая решетка конструируется в пространственном ящике объемом $L_x \times L_y \times L_z$, линейные размеры которого выбираются произвольно. Пусть ось z ориентирована вдоль направления пучка налетающих частиц и параллельна плоскости (klm), тогда как ось y направлена перпендикулярно к этой плоскости. Радиус-векторы $\mathbf{R}_j^{(0)}(0)$ узлов решетки ($j = 1, 2, \dots, N$) генерируются в соответствии с типом ячейки Браве кристалла с использованием предопределенных трансляционных векторов. Как только узловые точки определены, радиус-

векторы атомных ядер находятся с учетом среднего смещения Δ_j от положения узлов вследствие температурных колебаний. При этом декартовы компоненты смещения $\Delta_{j\alpha}$ ($\alpha = x, y, z$) определяются нормальным распределением:

$$w(\Delta_{j\alpha}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}u_T} \exp\left(-\frac{\Delta_{j\alpha}^2}{2u_T^2}\right), \quad (3)$$

где u_T – среднеквадратичная амплитуда тепловых колебаний атомов. Значения u_T для различных кристаллов при комнатной температуре приведены в работе [35].

Решение уравнения (1) с помощью указанной выше программы начинается в момент времени $t=0$, когда частица (позитрон) входит в кристалл при $z=0$. Начальные значения x_0, y_0 поперечных координат выбираются случайным образом в интервалах $\Delta x = 2d, \Delta y = d$, где d – межплоскостное расстояние. Начальная скорость $\mathbf{v}_0 = (v_{0x}; v_{0y}; v_{0z})$ преимущественно ориентирована вдоль оси z , т. е. выполняется условие

$$v_{0z} \sim c \gg v_{0x}; v_{0y}.$$

Перпендикулярные компоненты начальной скорости $v_{0x}; v_{0y}$ выбираются на входе в кристалл с учетом направления и расходимости пучка.

Для получения траектории в кристалле конечной длины L используется следующая процедура. Частица движется внутри смоделированного ящика, взаимодействуя с атомами внутри сферы обрезания. Как только расстояние, пройденное частицей, достигает границы сферы обрезания $l \sim \rho_{max}$, формируется новый пространственный ящик того же размера, как предыдущий, центр которого примерно совпадает с координатами нахождения частицы. Чтобы обеспечить непрерывность и согласованность действия сил $q\mathbf{E}$, положение атомов в области пересечения объемов предыдущего и нового ящиков не изменяется. В остальной части нового ящика положение атомов заново формируется по описанной выше схеме.

Для рассмотрения движения частицы в изогнутых кристаллах, в построенных ящиках старые координаты узлов (x, y, z) трансформируются в новые (x', y', z') по следующему правилу:

$$\begin{cases} x' = x; \\ y' = y + \delta y(z); \\ z' = z, \end{cases} \quad (4)$$

где параметр

$$\delta y(z) = R - \sqrt{R^2 - z^2} \approx \frac{z^2}{2R} \quad (5)$$

определяет форму изогнутого кристалла. Последнее уравнение справедливо, когда радиус кривизны существенно больше длины кристалла, т. е. $z \leq L \ll R$.

Каналирование в изогнутом кристалле возможно, если центробежная сила $F_{cf} = \rho v/R \approx \varepsilon/R$ меньше максимальной силы F_{max} , возникающей от межплоскостного потенциала [4]. Для количественной характеристики этого условия часто вводят параметр кривизны C :

$$C = \frac{F_{cf}}{F_{max}} = \frac{\varepsilon}{RF_{max}}. \quad (6)$$

Для прямого кристалла $C = 0$. Значение $C = 1$ соответствует критическому (минимальному) радиусу кривизны $R_c = \varepsilon/F_{max}$, при котором потенциальный барьер между каналами исчезает [4]. Значение максимальной силы F_{max} можно оценить в рамках модели непрерывного межплоскостного потенциала [3]. Для канала (110) в алмазе эта оценка дает значение $F_{max} \approx 7$ ГэВ/см при комнатной температуре [21].

Радиационное излучение при каналировании

По полученным траекториям заряженных частиц в прямых и изогнутых кристаллах можно получить спектральное распределение излучения. Так, для набора из N_0 траекторий спектральное распределение излучения, испущенного в конус $\theta \leq \theta_0$ вдоль первоначального направления пучка, определяется по формуле

$$\frac{dE(\theta \leq \theta_0)}{\hbar d\omega} = \frac{1}{N_0} \sum_{j=1}^{N_0} \int_0^{2\pi} \int_0^{\theta_0} \left(\frac{d^3 E_j}{\hbar d\omega d\Omega} \right) d\Omega, \quad (7)$$

где $d^3 E_j / \hbar d\omega d\Omega$ – спектрально-угловое распределение излучения, испущенного частицей, движущейся по j -й траектории. Суммирование проводится по всем вычисленным траекториям и учитывает вклад в

спектр как каналирующих, так и не каналирующих частиц, которые выходят из канала вследствие рассеяния на атомах кристалла.

Для вычисления подынтегрального выражения $\left(\frac{d^3 E_j}{\hbar d\omega d\Omega} \right)$ В.Н. Байер и В.М. Катков развили квазиклассическое приближение, детали которого можно найти в работе [34]. Такое приближение применимо во всем диапазоне энергий испускаемых фотонов, за исключением предельно высокоэнергетического «хвоста» спектра, где

$$\frac{(\varepsilon - \hbar\omega)}{\varepsilon} \ll 1.$$

В рамках квазиклассического приближения спектральное распределение энергии, которая излучается ультрарелятивистской частицей в направлении n , определяется следующим выражением [34]:

$$\begin{aligned} \frac{d^3 E_j}{\hbar d\omega d\Omega} &= \alpha \frac{q^2 \omega^2}{8\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 e^{i\omega(\psi(t_2) - \psi(t_1))} \times \\ &\times \left[(1 + (1 + u^2)) \left(\frac{\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2}{c^2} - 1 \right) + \frac{u^2}{\gamma^2} \right], \end{aligned} \quad (8)$$

где $\alpha = e^2/\hbar c$ – постоянная тонкой структуры, q – заряд частицы в единицах элементарного заряда, $\mathbf{v}_{1,2} = \mathbf{v}(t_{1,2})$ – скорости частицы в моменты времени $t_{1,2}$, $\psi(t) = t - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}(t)/c$ – фазовая функция.

Величины ω' и u учитывают радиационную отдачу:

$$\omega' = (1 + u)\omega, \quad u = \frac{\hbar\omega}{\varepsilon\hbar\omega}.$$

В классическом пределе имеем

$$u \approx \hbar\omega/\varepsilon \rightarrow 0, \quad \omega' \rightarrow \omega,$$

и формула (8) переходит в известную формулу классической электродинамики [19, 20].

Уравнение (8) позволяет вычислять спектр излучения для каждой траектории, смоделированной в рамках алгоритма, описанного выше. В настоящей работе вычисления проводились для кристалла алмаза длиной $L = 25$ мкм, излучение интегрировалось по углу $\theta_0 = 2,4$ мрад, существенно превышающему естественный эмиссионный угол $\gamma^{-1} \sim 0,6$ мрад.

Каналирование и эмиссионные спектры позитронов в алмазе C(110)

Универсальный пакет программ MBN Explorer использовался для вычисления траектории позитронов с энергией 855 МэВ, падающих на прямые и изогнутые кристаллы алмаза длиной $L = 25$ мкм вдоль кристаллографической плоскости (110). С целью набора статистики для каждого значения радиуса кривизны R вычислялось несколько тысяч траекторий.

Полученные траектории анализировались для определения различных характеристик каналирующих частиц и для вычисления спектра излучения. Параметры каналирования, определенные в работе [1], представлены в таблице.

Несмотря на то условие, что изначально пучок позитронов направляется вдоль плоскости (110), не все частицы на входе в кристалл захватываются в режим каналирования. Каналирующими считаются лишь частицы, испытывающие, по крайней мере, одно полное колебание в направлении, перпендикулярном оси канала. Анализ вычисленных траекторий позволяет найти параметр захвата A , который определяется как отношение числа частиц N_{acc} , захваченных в канал на входе в кристалл, к полному числу падающих частиц N_0 :

$$A = \frac{N_{acc}}{N_0}. \quad (9)$$

Как видно из данных таблицы, параметр

захвата весьма близок к единице для случаев прямого и слабоизогнутых кристаллов, но затем с ростом кривизны канала он падает весьма быстро. Для $R = 0,8$ см только 23 % налетающих позитронов захватывается в канал. Заметим, что критический радиус для указанной энергии позитронов составляет 0,12 см.

Другие параметры, приведенные в таблице, характеризуют так называемую длину деканалирования [1], т. е. среднее расстояние, проходимое позитроном в режиме каналирования. Параметр L_p определяется как среднее расстояние, пробегаемое захваченной частицей в канале от момента входа в кристалл до момента вылета из канала. Другими словами, усреднение происходит по расстоянию, преодолеваемому захваченной частицей в первом сегменте каналирования. Из представленных результатов видно, что для прямого кристалла это расстояние лишь немного меньше длины кристалла. Это означает, что позитрон, захваченный в канал на входе, пробегает практически весь кристалл, находясь в одном канале. С ростом кривизны кристалла вплоть до значения $C = 0,1$ величина L_p практически не меняется, а с дальнейшим ростом параметра C она уменьшается. Заметим, что приведенная статистическая погрешность, обусловленная конечным значением числа N_0 симулированных траекторий, соответствует доверительной вероятности, равной 0,999.

Таблица

Значения параметров, характеризующих каналирование пучка позитронов с энергией 855 МэВ вдоль плоскости (110) в алмазе

C	R , см	N_0	A	L_p , мкм	L_{ch} , мкм
0,00	∞	2253	0,95	$24,5 \pm 0,4$	$23,8 \pm 0,4$
0,05	2,440	2271	0,92	$24,6 \pm 0,4$	$22,7 \pm 0,4$
0,08	1,530	2260	0,89	$24,6 \pm 0,4$	$22,1 \pm 0,4$
0,10	1,220	2272	0,89	$24,6 \pm 0,4$	$21,9 \pm 0,4$
0,30	0,407	3446	0,70	$23,6 \pm 0,4$	$16,5 \pm 0,6$
0,50	0,244	3891	0,50	$22,6 \pm 0,5$	$11,3 \pm 0,7$
0,80	0,153	6688	0,23	$19,4 \pm 0,7$	$4,4 \pm 0,5$

Обозначения: C , R – параметр и радиус кривизны, соответственно; N_0 – число траекторий; A – параметр захвата; L_p , L_{ch} – средние значения длины деканалирования по первому сегменту и каналирования по всем траекториям, соответственно.

Столкновения частицы с атомами кристалла могут приводить также к процессу, обратному деканалированию. Действительно, в результате столкновения поперечная энергия надбарьерной частицы может уменьшиться на величину, достаточную для захвата частицы в канал. Такой процесс называется реканалированием.

Частица, вылетевшая из канала за счет столкновений, либо просто теряется как каналирующая, либо может быть захвачена в другой канал и продолжить распространение вдоль следующего канала. Последний процесс также называется реканалированием. Поэтому часто вводят еще одну длину деканалирования, которую получают усреднением по всем сегментам каналирования [1]. Однако в силу малой длины кристалла процесс реканалирования дает небольшой вклад и практически не влияет на среднюю длину пробега частицы в канале.

Более общим является параметр L_{ch} , который определяет длину деканалирования позитрона, усредненную по всем траекториям налетающих частиц. Эта величина достаточно быстро уменьшается с ростом значения S , причем за счет двух факторов: падения числа частиц, захваченных в канал, и уменьшения длины деканалирования L_p .

Полученные траектории заряженных частиц позволяют по формулам (7), (8) вычислить спектр их излучения. Результирующие спектры излучения, полученные усреднением по всем вычисленным траекториям, представлены на рис. 1 и 2.

Следует отметить две особенности, которые проявляются в спектрах излучения.

Максимумы кривых в окрестности 3 – 4 МэВ связаны с излучением каналирующих позитронов, которые испытывают поперечные осцилляции при распространении в канале. В этой области частот основной вклад в спектр вносят сегменты траекторий частицы, движущейся в одном канале, причем интенсивность излучения пропорциональна длине такого сегмента. Для случая прямого кристалла (кривая 1) максимум имеет наибольшее значение, однако с увеличением кривизны кристалла его величина становится меньше. Уменьшение длины деканалирования L_p и параметра захвата A с ростом кривизны кристалла являются основной причиной падения интенсивности излучения в этой области спектра [34]. Пока кривизна невелика и средняя длина пробега в канале примерно равна длине кристалла (см. таблицу и рис. 1), высота максимума уменьшается незначи-

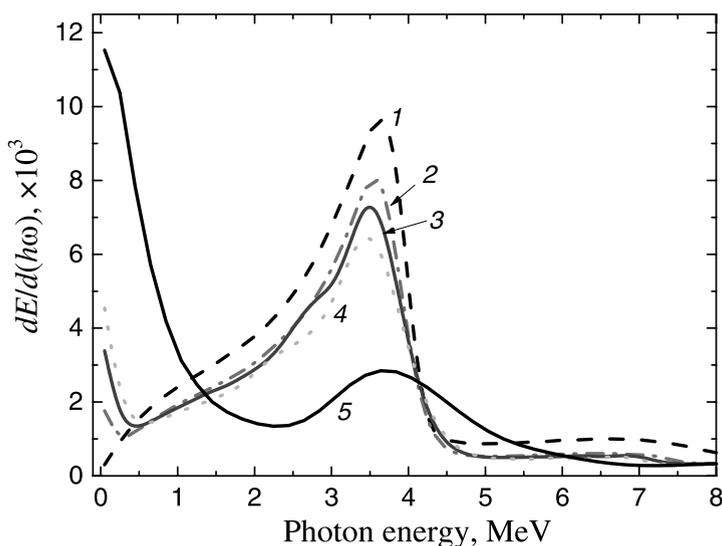


Рис. 1. Спектры излучения позитронов, распространяющихся с энергией 855 МэВ в кристалле алмаза (110) с различной кривизной S : 0 (кривая 1), 0,05 (2), 0,08 (3), 0,10 (4), 0,30 (5). Длина кристалла $L = 25$ мкм

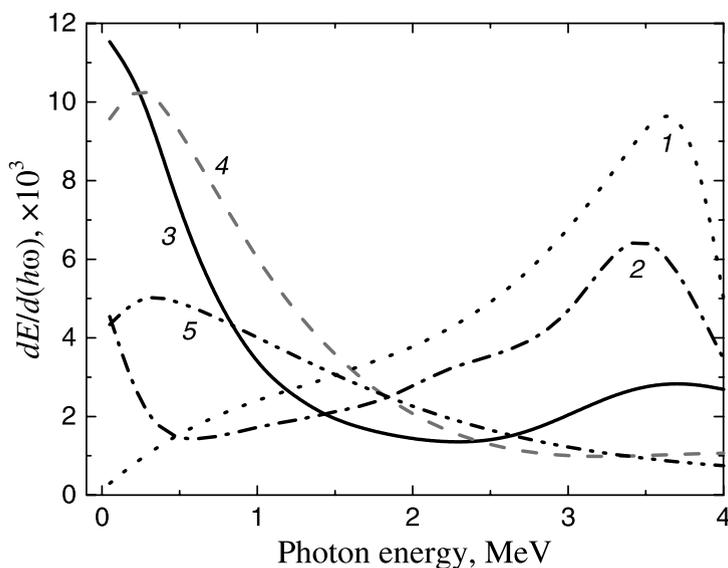


Рис. 2. «Синхротронная» часть спектра излучения каналирующих позитронов в кристалле алмаза (110) для разных параметров кривизны C : 0 (кривая 1), 0,1 (2), 0,3(3), 0,5 (4), 0,8 (5)

тельно. Однако, для радиуса $R = 0,4$ см ($C = 0,3$, кривая 5 на рис. 1), его высота падает в пять раз, а при $C = 0,8$ максимум при 3 – 4 МэВ практически исчезает.

Другая особенность спектра излучения связана с проявлением максимума в низкочастотной области при каналировании в изогнутых кристаллах. Его возникновение связано с синхротронным излучением каналирующей частицы, которая испытывает не только поперечные осцилляции, но и движется вдоль оси искривленного канала. Излучение в этой области спектра отсутствует естественным образом для прямого кристалла, но с ростом параметра кривизны C сначала возникает, а затем растет по интенсивности (см. рис. 1).

На рис. 2 область синхротронного излучения показана для больших значений параметра C в более крупном масштабе. С ростом значения C синхротронный максимум также возрастает, и при $C = 0,3$ доминирует в полном спектре излучения. Однако в дальнейшем с ростом параметра кривизны максимум уменьшается по высоте, смещаясь при этом в сторону больших энергий (кривые 4, 5 на рис. 2). Снижение интенсивности связано с уменьшением числа частиц, захватываемых в канал. Увеличение же параметра кривизны

C или уменьшение ее радиуса R приводит к смещению спектрального максимума в область более высоких частот.

Заключение

Проведено компьютерное моделирование процесса каналирования ультрарелятивистских позитронов в прямых и изогнутых кристаллах алмаза. Пучок позитронов с энергией 855 МэВ направлялся вдоль кристаллографической плоскости алмаза (110) с вариацией радиусов кривизны кристалла. Вычисление траекторий частиц выполнено в рамках приближения Монте-Карло с использованием недавно разработанного пакета программ. Полученные траектории позволили определить основные параметры процесса каналирования позитронов в кристаллах длиной 25 мкм, а также численно проанализировать интенсивности их тормозного излучения (траектории использовались как входные данные для указанного численного анализа). Виртуальный эксперимент показал, что спектр излучения каналирующих позитронов в изогнутых кристаллах обогащается синхротронной составляющей, которая при некоторых значениях параметра кривизны кристалла доминирует в спектре.

Полученные результаты представляют интерес в качестве теоретической поддержки реальных экспериментальных измерений каналирования позитронных пучков, а также для возможной разработ-

ки новых источников когерентного излучения.

Работа поддержана проектом CUTE-IRSES Европейской комиссии (grant GA-2010-269131).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Sushko G.B., Bezchastnov V.G., Solov'yov I.A., Korol A.V., et al.** Simulation of ultra-relativistic electrons and positrons channeling in crystals with MBN EXPLORER // *J. Comp. Phys.* 2013. Vol. 252. Pp. 404–418.
- [2] **Solov'yov I.A., Yakubovich A.V., Nikolaev P.V., et al.** MesoBioNano explorer—A universal program for multiscale computer simulations of complex molecular structure and dynamics // *J. Comp. Chem.* 2013. Vol. 33. Pp. 2412–2439.
- [3] **Lindhard J., Winther A.** Stopping power of electron gas and equipartition rule // *Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.* 1965. Vol. 34. Pp. 1–64.
- [4] **Tsyganov E.N.** Estimates of cooling and bending processes for charged particle penetration through a monocrystal. Fermilab Preprint TM-682. Fermilab, Batavia 1976; Fermilab Preprint TM-684. Fermilab, Batavia, 1976.
- [5] **Kumakhov M.A.** On the theory of electromagnetic radiation of charged particles in a crystal // *Phys. Lett.* Vol. 57A. 1976. Pp. 17–18.
- [6] **Andersen H.H., Rehn L.E. (eds.)**. Channeling and other crystal effects at relativistic energy // *Nucl. Instrum. Methods B.* 1996. Vol. 119 (Topical Issue). Pp. 1–315.
- [7] **Bak J., Ellison J.A., Marsh B., et al.** Channeling radiation from 2 to 20 GeV/c electrons and positrons (II): Axial case // *Nucl. Phys. B.* 1988. Vol. 302. Pp. 525–558.
- [8] **Bazylev V.A., Zhevago N.K.** Intense electromagnetic radiation from relativistic particles // *Sov. Phys. Usp.* 1982. Vol. 25. Pp. 565–595.
- [9] **Carrigan A., Ellison J. (eds.)**. Relativistic Channeling, New York: Plenum, 1987.
- [10] **Kumakhov M.A., Komarov F.F.** Radiation from Charged Particles in Solids, New York: AIP, 1989.
- [11] **Saenz A.W., Überall H.** Calculation of electron channeling radiation with a realistic potential // *Nucl. Phys.* Vol. A372. 1981. Pp. 90–108.
- [12] **Uggerhøj E.** Some recent experimental investigations of photon emission and shower formation in strong crystalline fields // *Radiat. Eff. Defects Solids.* Vol. 25. 1993. Pp. 3–21.
- [13] **Uggerhøj U.I.** The interaction of relativistic particles with strong crystalline fields // *Rev. Mod. Phys.* 2005. Vol. 77. Pp. 1131–1171.
- [14] **Kaplin V.V., Vorobiev S.A.** On the electromagnetic radiation of channeled particles in a curved crystal // *Phys. Lett.* Vol. 67A. 1978. Pp. 135–137.
- [15] **Taratin A.M., Vorobiev S.A.** Quasi-synchrotron radiation of high-energy positrons channeled in bent crystals // *Nucl. Instrum. Methods B.* 1989. Vol. 42. Pp. 41–45.
- [16] **Arutyunov V.A., Kudryashov N.A., Samsonov V.M., Strikhanov M.N.** Radiation of ultrarelativistic charged particles in a bent crystal // *Nucl. Phys. B.* 1991. Vol. 363. Pp. 283–300.
- [17] **Taratin A.M.** Particle channeling in a bent crystal // *Phys. Part. Nucl.* 1998. Vol. 29. Pp. 437–462.
- [18] **Solov'yov A.V., Schäfer A., Greiner W.** Channeling process in a bent crystal // *Phys. Rev. E.* 1996. Vol. 53. Pp. 1129–1137.
- [19] **Landau L.D., Lifshitz E.M.** Course of Theoretical Physics, Vol.2. The Classical Theory of Fields. Oxford: Pergamon Press, 1971.
- [20] **Jackson J.D.** Classical Electrodynamics. Hoboken, New Jersey, USA: Wiley, 1999.
- [21] **Biryukov V.M., Chesnokov Yu.A., Kotov V.I.** Crystal Channeling and its Application at High-Energy Accelerators. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1996.
- [22] **Korol A.V., Solov'yov A.V., Greiner W.** Coherent radiation of an ultrarelativistic charged particle channelled in a periodically bent crystal // *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* 1998. Vol. 24. Pp. L45–L53.
- [23] **Korol A.V., Solov'yov A.V., Greiner W.** Channeling and Radiation in Periodically Bent Crystals. 2nd Edition. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2014.
- [24] **Baranov V.T., Bellucci S., Biryukov V.M. et al.** Preliminary results on the study of radiation from positrons in a periodically deformed crystal // *Nucl. Instrum. Methods.* 2006. Vol. 252. Pp. 32–35.
- [25] **Backe H., Krambrich D., Lauth W., Buonomo B., Dabagov S.B., Mazzitelli G., Quintieri L., Lundsgaard Hansen J., Uggerhøj U.I., Azadegan B., Dizdar A., Wagner W.** Future aspects of X-ray emission from crystal undulators at channeling

of positrons // Nuovo Cimento C. 2011. Vol. 34. Pp. 175–180.

[26] **Backe H., Kunz P., Lauth W., Rueda A.** Planar channeling experiments with electrons at the 855 MeV Mainz Microtron MAMI // Nucl. Instrum. Method Phys. Res. B. 2008. Vol. 266. Pp. 3835–3851.

[27] **Backe H., Krambrich D., Lauth W., Lunds-gaard Hansen J., Uggerhøj U.I.** X-ray emission from a crystal undulator – Experimental results at channeling of electrons // Nuovo Cimento C. 2011. Vol. 34. Pp. 157–165.

[28] **Backe H., Krambrich D., Lauth W., Andersen K.K., Hansen J.L., Uggerhøj U.I.** Channeling and Radiation of electrons in silicon single crystals and Si1–xGe_x crystalline undulators // Journal Phys.: Conf. Series. 2013. Vol. 438. Pp. 012017.

[29] **Mikkelsen U., Uggerhøj E.** A crystalline undulator based on graded composition strained layers in a superlattice // Nucl. Instrum. Method Phys. Res. B. 2000. Vol. 160. Pp. 435–439.

[30] **Krause W., Korol A.V., Solov'yov A.V., Greiner W.** Photon emission by ultra-relativistic positrons in crystalline undulators: the high-energy

regime // Nucl. Instrum. Method Phys. Res. A. 2002. Vol. 483. Pp. 455–460.

[31] **Sushko G.B., Bezchastnov V.G., Korol A.V., Greiner W., Solov'yov A.V., Polozkov R.G., Ivanov V.K.** Simulations of electron channeling in bent silicon crystal // J. Phys.: Conf. Ser. 2013. Vol. 438. Pp. 012019.

[32] **Sushko G.B., Korol A.V., Greiner W., Solov'yov A.V.** Sub-GeV electron and positron channeling in straight, bent and periodically bent silicon crystals // J. Phys.: Conf. Ser. 2013. Vol. 438. Pp. 012018.

[33] **Polozkov R.G., Ivanov V.K., Sushko G.B., Korol A.N., Solov'yov A.N.** Radiation emission by electrons channeling in bent silicon crystals // Eur. Phys. J. D. 2014. Vol. 68. Pp. 268.

[34] **Baier V.N., Katkov V.M., Strakhovenko V.M.** Electromagnetic Processes at High Energies in Oriented Single Crystals, World Scientific, Singapore, 1998.

[35] **Gemmell D.S.** Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals // Rev. Mod. Phys. 1974. Vol. 46. Pp. 129–227.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПОЛОЗКОВ Роман Григорьевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого. 195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 polozkov@tuexph.stu.neva.ru

ИВАНОВ Вадим Константинович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого. 195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 ivanov@physics.spbstu.ru

СУШКО Геннадий Борисович – научный сотрудник Научно-исследовательского центра мезобионаносистем (MBN); г. Франкфурт-на-Майне, Германия. Altenhoferallee 3, 60438 Frankfurt am Main, Germany sushko@mbnexplorer.com

КОРОЛЬ Андрей Владимирович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики Санкт-Петербургского государственного морского технического университета, научный сотрудник Научно-исследовательского центра мезобионаносистем (MBN); г. Франкфурт-на-Майне, Германия. 198262, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Ленинский пр., 101. korol@fias.uni-frankfurt.de

СОЛОВЬЕВ Андрей Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор, директор Научно-исследовательского центра мезобионаносистем (MBN); г. Франкфурт-на-Майне, Германия. Altenhoferallee 3, 60438 Frankfurt am Main, Germany solovyov@mbnresearch.com

Polozkov R.G., Ivanov V.K., Sushko G.B., Korol A.N., Solov'yov A.N. CHANNELING OF ULTRARELATIVISTIC POSITRONS IN BENT DIAMOND CRYSTALS.

Results of numerical simulations of channeling of ultra-relativistic positrons are reported for straight and uniformly bent diamond crystals. The projectile trajectories in a crystal are computed using the newly developed module of the MBN Explorer package which simulates classical trajectories in a crystalline medium by integrating the relativistic equations of the motion with account for the interaction between the projectile and crystal atoms. A Monte Carlo approach is employed to sample the incoming positrons and to account for thermal vibrations of the crystal atoms. The channeling parameters and emission spectra of incident positrons with a projectile energy of 855 MeV along C(110) crystallographic planes are calculated for different curvature radii of the crystal. Two features of the emission spectrum associated with positron oscillations in a channel and synchrotron radiation are studied as a function of crystal curvature.

ULTRA-RELATIVISTIC POSITRON, BENT DIAMOND CRYSTAL, CHANNELING, NUMERICAL SIMULATION, EMISSION.

REFERENCES

- [1] **G.B. Sushko, V.G. Bezchastnov, I.A. Solov'yov, A.V. Korol, et al.**, Simulation of ultra-relativistic electrons and positrons channeling in crystals with MBN EXPLORER, *J. Comp. Phys.* 252 (2013) 404–418.
- [2] **I.A. Solov'yov, A.V. Yakubovich, P.V. Nikolaev, et al.**, MesoBioNano explorer—A universal program for multiscale computer simulations of complex molecular structure and dynamics, *J. Comp. Chem.* 33 (2013) 2412–2439.
- [3] **J. Lindhard, A. Winther**, Stopping power of electron gas and equipartition rule, *Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.* 34 (1965) 1–64.
- [4] **E.N. Tsyganov**, Estimates of cooling and bending processes for charged particle penetration through a mono crystal, Fermilab Preprint TM-682. Fermilab, Batavia, 1976; Fermilab Preprint TM-684. Fermilab, Batavia, 1976.
- [5] **M.A. Kumakhov**, On the theory of electromagnetic radiation of charged particles in a crystal, *Phys. Lett.* 57A (1976) 17–18.
- [6] **H.H. Andersen, L.E. Rehn (eds.)**, Channeling and other crystal effects at relativistic energy, *Nucl. Instrum. Methods B* 119 (Topical Issue) (1996) 1–315.
- [7] **J. Bak, J.A. Ellison, B. Marsh, et al.**, Channeling radiation from 2 to 20 GeV/c electrons and positrons (II): Axial case, *Nucl. Phys. B.* 302 (1988) 525–558.
- [8] **V.A. Bazylev, N.K. Zhevago**, Intense electromagnetic radiation from relativistic particles, *Sov. Phys. Usp.* 25 (1982) 565–595.
- [9] **A. Carrigan, J. Ellison (eds.)**, Relativistic Channeling. Plenum, New York (1987).
- [10] **M.A. Kumakhov, F.F. Komarov**, Radiation from Charged Particles in Solids, AIP, New York (1989).
- [11] **A.W. Saenz, H. Überall**, Calculation of electron channeling radiation with a realistic potential, *Nucl. Phys.* A372 (1981) 90–108.
- [12] **E. Uggerhøj**, Some recent experimental investigations of photon emission and shower formation in strong crystalline fields, *Radiat. Eff. Defects Solids.* 25 (1993) 3–21.
- [13] **U.I. Uggerhøj**, The interaction of relativistic particles with strong crystalline fields, *Rev. Mod. Phys.* 77 (2005) 1131–1171.
- [14] **V.V. Kaplin, S.A. Vorobiev**, On the electromagnetic radiation of channeled particles in a curved crystal, *Phys. Lett.* 67A (1978) 135–137.
- [15] **A.M. Taratin, S.A. Vorobiev**, Quasi-synchrotron radiation of high-energy positrons channeled in bent crystals, *Nucl. Instrum. Methods B.* 42 (1989) 41–45
- [16] **V.A. Arutyunov, N.A. Kudryashov, V.M. Samsonov, M.N. Strikhanov**, Radiation of ultrarelativistic charged particles in a bent crystal, *Nucl. Phys. B.* 363 (1991) 283–300.
- [17] **A.M. Taratin**, Particle channeling in a bent crystal, *Phys. Part. Nucl.* 29 (1998) 437–462.
- [18] **A.V. Solov'yov, A. Schäfer, W. Greiner**, Channeling process in a bent crystal, *Phys. Rev. E.* 53 (1996) 1129–1137.
- [19] **L.D. Landau, E.M. Lifshitz**, Course of Theoretical Physics, Vol. 2, The Classical Theory of Fields, Pergamon Press, Oxford, 1971.
- [20] **J.D. Jackson**, Classical Electrodynamics. Wiley, Hoboken, New Jersey, USA, 1999.
- [21] **V.M. Biryukov, Yu.A. Chesnokov, V.I. Kotov**, Crystal Channeling and its Application at High-Energy Accelerators. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1996.
- [22] **A.V. Korol, A.V. Solov'yov, W. Greiner**, Coherent radiation of an ultrarelativistic charged

particle channelled in a periodically bent crystal, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* 24 (1998) L45-L53.

[23] **A.V. Korol, A.V. Solov'yov, W. Greiner**, Channeling and Radiation in Periodically Bent Crystals, 2nd Edition. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2014.

[24] **V.T. Baranov, S. Bellucci, V.M. Biryukov, et al.**, Preliminary results on the study of radiation from positrons in a periodically deformed crystal, *Nucl. Instrum. Methods.* 252 (2006) 32–35.

[25] **H. Backe, D. Krambrich, W. Lauth, et al.**, Future aspects of X-ray emission from crystal undulators at channeling of positrons, *Nuovo Cimento C.* 34 (2011) 175–180.

[26] **H. Backe, P. Kunz, W. Lauth, A. Rueda**, Planar channeling experiments with electrons at the 855 MeV Mainz Microtron MAMI, *Nucl. Instrum. Method Phys. Res. B.* 266 (2008) 3835–3851.

[27] **H. Backe, D. Krambrich, W. Lauth, et al.**, X-ray emission from a crystal undulator – Experimental results at channeling of electrons, *Nuovo Cimento C.* 34 (2011) 157–165.

[28] **H. Backe, D. Krambrich, W. Lauth, et al.**, Channeling and radiation of electrons in silicon single crystals and Si_{1-x}Ge_x crystalline undulators, *Journal Phys.: Conf. Series.* 438 (2013) 012017.

[29] **U. Mikkelsen, E. Uggerhøj**, A crystalline

undulator based on graded composition strained layers in a superlattice, *Nucl. Instrum. Method Phys. Res. B.* 160 (2000) 435–439.

[30] **W. Krause, A.V. Korol, A.V. Solov'yov, Greiner W.**, Photon emission by ultrarelativistic positrons in crystalline undulators: the high-energy regime, *Nucl. Instrum. Method Phys. Res. A.* 483 (2002) 455–460.

[31] **G.B. Sushko, V.G. Bezchastnov, A.V. Korol, W. Greiner, A.V. Solov'yov, R.G. Polozkov, V.K. Ivanov**, Simulations of electron channeling in bent silicon crystal, *J. Phys.: Conf. Ser.* 438 (2013) 012019.

[32] **G.B. Sushko, A.V. Korol, W. Greiner, A.V. Solov'yov**, Sub-GeV electron and positron channeling in straight, bent and periodically bent silicon crystals, *J. Phys.: Conf. Ser.* 438 (2013) 012018.

[33] **R.G. Polozkov, V.K. Ivanov, G.B. Sushko, A.N. Korol, A.N. Solov'yov**, Radiation emission by electrons channeling in bent silicon crystals, *Eur. Phys. J. D.* 68 (2014) 268.

[34] **V.N. Baier, V.M. Katkov, V.M. Strakhovenko**, Electromagnetic Processes at High Energies in Oriented Single Crystals, World Scientific, Singapore, 1998.

[35] **D.S. Gemmell**, Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals, *Rev. Mod. Phys.* 46 (1974) 129–227.

THE AUTHORS

POLOZKOV Roman G.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
polozkov@tuexp.stu.neva.ru

IVANOV Vadim K.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
ivanov@physics.spbstu.ru

SUSHKO Gennady B.

MBN Research Center at Frankfurt Innovation Center of Biotechnology
Altenhoferallee 3, 60438 Frankfurt am Main, Germany
sushko@mbnexplorer.com

KOROL Andrei V.

State Marine Technical University of St. Petersburg
3, Lotsmanskaya St., St. Petersburg 190008, Russian Federation
korol@fias.uni-frankfurt.de

SOLOV'YOV Andrei V.

MBN Research Center at Frankfurt Innovation Center of Biotechnology

Altenhoferallee 3, 60438 Frankfurt am Main, Germany

solovyov@mbnresearch.com