بسم الله الرحمن االرحيم

دانشکده‌ی علوم پایه

پایان‌نامه برای دریافت درجه‌ی کارشناسی ارشد (M.SC)

رشته‌ی فیزیک هسته‌ای

محاسبه طیف کانالی الکترون های نسبیتی در بلورهای ضخیم

استاد راهنما:

دکتر بهنام آزادگان

استاد مشاور:

دکتر عبدالرحیم عسکری

پژوهشگر:

حمید شفقت

بهمن ۹۲

سوگندنامه دانش‌آموختگان دانشگاه حکیم سبزواری

به نام خداوند جان و خرد کزین برتر اندیشه بر نگذرد

اینک که به خواست آفریدگار پاک، کوشش خویش و بهره‌گیری از دانش استادان و سرمایه‌های مادی و معنوی این مرز و بوم، توشه‌ای از دانش و خرد گردآورده‌ام، در پیشگاه خداوند بزرگ سوگند یاد می‌کنم که در به‌کارگیری دانش خویش، همواره بر راه راست و درست گام بردارم. خداوند بزرگ، شما شاهدان، دانشجویان و دیگر حاضران را به عنوان داورانی امین گواه می‌گیرم که از همه دانش و توان خود برای گسترش مرزهای دانش بهره گیرم و از هیچ کوششی برای تبدیل جهان به جایی بهتر برای زیستن، دریغ نورزم. پیمان می‌بندم که همواره کرامت انسانی را در نظر داشته باشم و همنوعان خود را در هر زمان و مکان تا سر حد امکان یاری دهم. سوگند می‌خورم که در به‌کارگیری دانش خویش به کاری که با راه و رسم انسانی، آیین پرهیزگاری، شرافت و اصول اخلاقی برخاسته از ادیان بزرگ الهی، به ویژه دین مبین اسلام، مباینت دارد دست نیازم. همچنین در سایه اصول جهان‌شمول انسانی و اسلامی، پیمان می‌بندم از هیچ کوششی برای آبادانی و سرافرازی میهن و هم میهنانم فروگذاری نکنم و خداوند بزرگ را به یاری طلبم تا همواره در پیشگاه او و در برابر وجدان بیدار خویش و ملت سرافراز ، بر این پیمان تا ابد استوار بمانم.

نام و نام خانوادگی و امضای دانشجو:

حمید شفقت

به پاس قلب هایی به وسعت دریا، تقدیم به:

مادری مهربان و پدری فداکار

تقدیر و تشکر

اول کلام، الهی شکر به داده و نداده ات.....

تجلیل از معلم، سپاس از انسانی است که هدف و غایت آفرینش راتامین می‌کند، بدین‌سان و بر حسب وظیفه؛ از استاد عزیز و بزرگوارم، جناب آقای دکتر بهنام آزادگان که با کمال سعه صدر، حسن خلق وفروتنی، از هیچ کمکی در این عرصه بر من دریغ ننمودند و زحمت راهنمایی این پایان نامه را برعهده گرفتند تقدیر وتشکر می‌نمایم.

از مساعدت‌ها وزحمات بی شائبه استاد گرانقدرم، جناب آقای دکتر علی اصغر مولوی، در طول این دو سال و همچنین قبول زحمت داوری این پایان‌نامه، بی‌نهایت سپاسگذارم.

از استاد عزیز، جناب آقای دکتر عبدالرحیم عسکری بابت تمام رهنمون‌های علمی و اخلاقی که در این مدت کوتاه به بنده عنایت داشته‌اند، تشکر فراوان دارم.

باشد که بدین لفظ بخشی از زحمات این بزرگواران را پاسخ گویم.

شاگرد همیشگی شما

حمید شفقت

فرم چکیده‌ی پایان‌نامه‌ی دوره‌ی تحصیلات تکمیلی

مدیریت تحصیلات تکمیلی

دانشگاه حکیم سبزواری

نام خانوادگی دانشجو: شفقت	**نام:** حمید	**ش دانشجویی:** ۹۰۱۳۷۳۳۰۱۳
استاد راهنما: دکتر بهنام آزادگان	**استاد مشاور:** دکترعبدالرحیم عسکری	
دانشکده: علوم پایه	**رشته:** فیزیک	**گرایش:** هسته‌ای
مقطع: کارشناسی ارشد	**تاریخ دفاع:**۱۳۹۲/۱۱/۱۵	**تعداد صفحات:** ۸۲

عنوان پایان‌نامه: محاسبه طیف کانالی الکترون‌های نسبیتی در بلورهای **ضخیم**

کلیدواژه‌ها: الکترون‌های کانالی، معادله فوکر- پلانک، کانال‌زنی استهلاکی، طیف تابش کانالی

چکیده: فرایند کانال زنی استهلاکی بر پایه حل معادله فوکر- پلانک است. دینامیک چگالی توزیع الکترون‌ها در عمق بلور به دو عامل انرژی و توزیع پراکندگی اولیه الکترون‌ها وابسته است. تاثیر فرایند کانال زنی استهلاکی الکترون روی شدت طیف تابش کانالی برای الکترون‌ها در صفحات مختلف بلورهای سیلیکون و ژرمانیم و کربن بررسی شده است.

امضای استاد راهنما

فهرست مطالب

۱ فصل اول: نظریه تابش کانالی الکترون های نسبیتی ۱

۱-۱ مقدمه ۲

۱-۲ تاریخچه تابش کانالی ۳

۱-۳ نظریه تابش کانالی در انرژیهای بالاتر تراز ۱۰۰MeV (توصیف کلاسیکی)..... ۵

۱-۴ پتانسیل پیوسته صفحه بلور..... ۶

۱-۵ ضریب ساختار بلور..... ۸

۱-۶ معادلات انرژی جنبشی برای ذرات دارای بار مثبت و منفی ۱۰

۱-۷ کانال زنی صفحهای..... ۱۰

۱-۸ ضریب انتشار..... ۱۲

۱-۹ بردار شبکه وارون..... ۱۷

۱-۱۰ ساختار الماسی (Diamond)..... ۱۸

۲.فصل دوم: توصیف تئوری تابش کانالی صفحهای وسینماتیک حرکت الکترون کانالی ۲۰

۲-۱ مقدمه ۲۱

۲-۲ محاسبه پتانسیل پیوسته بین صفحه ای ۲۲

2-3 محاسبه مسیر حرکت و سرعت الکترونها در تک بلور ۲۵

۳فصل سوم : انرژی جنبشی پرتو کانالی ۳۵

۳-۱ مقدمه ۳۶

۳-۲ معادله انرژی جنبشی(فوکر- پلانک) ذرات باردار نسبیتی..... ۳۶

۴فصل چهارم : محاسبه عددی طیف تابش کانالی در بلورهای ضخیم ۵۳

۴-۱ محاسبه طول کانال زنی استهلاکی ۵۴
۴-۲ محاسبه طیف تابش کانالی در بلورهای ضخیم ۶۰
نتیجه گیری ۶۷
مراجع ۶۹

فهرست اشکال

شکل ۱ ساختار بلور الماس که در آن آرایش پیوند چهار وجهی نشار داده شده است. ۱۸
شکل ۲ پتانسیل پیوسته الکترون در صفحات (۱۱۱)، (۱۱۰)و (۱۰۰) بلورGe ۲۳
شکل ۳ پتانسیل پیوسته الکترون در صفحات (۱۱۱)، (۱۱۰)و (۱۰۰) بلور C ۲۴
شکل ۴ پتانسیل پیوسته الکترون در صفحات (۱۱۱)، (۱۱۰)و (۱۰۰) بلورSi ۲۴
شکل ۵ مسیر حرکت الکترونهای کانالی دربلور Ge(۱۱۱) به ازای نقاط فرودی مختلف ۲۵
شکل ۶ مشتق مسیر حرکت(سرعت) الکترونهای فرودی به ازای نقاط فرودی مختلف در بلورGe(۱۱۱) ۲۶
شکل ۷ مسیر حرکت الکترونهای کانالی دربلور Ge(۱۱۰) به ازای نقاط فرودی مختلف ۲۶
شکل ۸ مشتق مسیر حرکت(سرعت) الکترونهای فرودی به ازای نقاط فرودی مختلف در بلورGe(۱۱۰) ۲۷
شکل ۹ مسیر حرکت الکترونهای کانالی دربلور Ge(۱۰۰) به ازای نقاط فرودی مختلف ۲۷
شکل ۱۰ مشتق مسیر حرکت(سرعت) الکترونهای فرودی به ازای نقاط فرودی مختلف در بلورGe(۱۰۰) ۲۸
شکل ۱۱ مسیر حرکت الکترونهای کانالی دربلور C(۱۱۱) به ازای نقاط فرودی مختلف ۲۸
شکل ۱۲ مشتق مسیر حرکت(سرعت) الکترونهای فرودی به ازای نقاط فرودی مختلف در بلورC(۱۱۱) ۲۹
شکل ۱۳ مسیر حرکت الکترونهای کانالی دربلور C(۱۱۰) به ازای نقاط فرودی مختلف ۲۹
شکل ۱۴ مشتق مسیر حرکت(سرعت) الکترونهای فرودی به ازای نقاط فرودی مختلف در بلورC(۱۱۰) ۳۰
شکل ۱۵ مسیر حرکت الکترونهای کانالی دربلور C(۱۰۰) به ازای نقاط فرودی مختلف ۳۰
شکل ۱۶ مشتق مسیر حرکت(سرعت) الکترونهای فرودی به ازای نقاط فرودی مختلف در بلورC(۱۰۰) ۳۱

شکل ۱۷ مسیر حرکت الکترونهای کانالی دربلور (۱۱۱)Si به ازای نقاط فرودی مختلف ۳۱
شکل ۱۸ مشتق مسیر حرکت(سرعت) الکترونهای فرودی به ازای نقاط فرودی مختلف در بلور(۱۱۱)Si..... ۳۲
شکل ۱۹ مسیر حرکت الکترونهای کانالی دربلور (۱۱۰)Si به ازای نقاط فرودی مختلف ۳۲
شکل ۲۰ مشتق مسیر حرکت(سرعت) الکترونهای فرودی به ازای نقاط فرودی مختلف در بلور(۱۱۰)Si..... ۳۳
شکل ۲۱ مسیر حرکت الکترونهای کانالی دربلور (۱۰۰)Si به ازای نقاط فرودی مختلف ۳۳
شکل ۲۲ مشتق مسیر حرکت(سرعت) الکترونهای فرودی به ازای نقاط فرودی مختلف در بلور(۱۰۰)Si..... ۳۴
شکل ۲۳ توزیع های زاویه ای الکترون های نسبیتی کانالی در صفحات $Si\,(111)$..... ۳۷
شکل ۲۴ توزیع های زاویه ای الکترون های نسبیتی کانالی در صفحات $Si\,(110)$ ۳۸
شکل ۲۵ توزیع های زاویه ای الکترون های نسبیتی کانالی در صفحات $Si\,(100)$ ۳۸
شکل ۲۶ توزیع های زاویه ای الکترون های نسبیتی کانالی در صفحات Ge(111) ۳۹
شکل ۲۷ توزیع های زاویه ای الکترون های نسبیتی کانالی در صفحات Ge(110) ۳۹
شکل ۲۸ توزیع های زاویه ای الکترون های نسبیتی کانالی در صفحات $Ge\,(100)$ ۴۰
شکل ۲۹ توزیع های زاویه ای الکترون های نسبیتی کانالی در صفحات C(111) ۴۰
شکل ۳۰ توزیع های زاویه ای الکترون های نسبیتی کانالی در صفحات C(110)..... ۴۱
شکل ۳۱ توزیع های زاویه ای الکترون های نسبیتی کانالی در صفحات C(100) ۴۱
شکل ۳۲ ضرایب رانش وانتشار برای صفحه(۱۱۱) بلورهایSi, Ge, C..... ۴۳
شکل ۳۳ ضرایب رانش وانتشار برای صفحه(۱۱۰) بلورهایSi, Ge, C..... ۴۴
شکل ۳۴ ضرایب رانش وانتشار برای صفحات مختلف $C\,(100)$ ۴۵
شکل ۳۵ پارامتر زمانی الکترون های کانالی صفحه ای برای صفحات $Si\,(111)$..... ۴۶
شکل ۳۶ پارامتر زمانی الکترون های کانالی صفحه ای برای صفحات $Si\,(110)$..... ۴۷
شکل ۳۷ پارامتر زمانی الکترون های کانالی صفحه ای برای صفحات $Si\,(100)$..... ۴۷

شکل ۳۸ توزیع چگالی الکترونها برحسب عمق نفوذ و انرژی عرضی الکترون در صفحات $Si(111)$ ۴۸
شکل ۳۹ توزیع چگالی الکترونها برحسب عمق نفوذ و انرژی عرضی الکترون در صفحات $Si(110)$ ۴۹
شکل ۴۰ توزیع چگالی الکترونها برحسب عمق نفوذ و انرژی عرضی الکترون در صفحات $Si(100)$ ۴۹
شکل ۴۱ توزیع چگالی الکترونها برحسب عمق نفوذ و انرژی عرضی الکترون در صفحات Ge(111) ۵۰
شکل ۴۲ توزیع چگالی الکترونها برحسب عمق نفوذ و انرژی عرضی الکترون در صفحات Ge(110) ۵۰
شکل ۴۳ توزیع چگالی الکترونها برحسب عمق نفوذ و انرژی عرضی الکترون در صفحات $Ge(100)$ ۵۱
شکل ۴۴ توزیع چگالی الکترونها برحسب عمق نفوذ و انرژی عرضی الکترون در صفحات $C(111)$ ۵۱
شکل ۴۵ توزیع چگالی الکترونها برحسب عمق نفوذ و انرژی عرضی الکترون در صفحات C(110) ۵۲
شکل ۴۶ توزیع چگالی الکترونها برحسب عمق نفوذ و انرژی عرضی الکترون در صفحات C(100) ۵۲
شکل ۴۷ تابع کانال‌زنی استهلاکی و طول کانال زنی استهلاکی الکترون در صفحات $Si(111)$ ۵۵
شکل ۴۸ تابع کانال‌زنی استهلاکی و طول کانال زنی استهلاکی الکترون در صفحات $Si(110)$ ۵۶
شکل ۴۹ تابع کانال‌زنی استهلاکی و طول کانال زنی استهلاکی الکترون در صفحات $Si(100)$ ۵۶
شکل ۵۰ تابع کانال‌زنی استهلاکی و طول کانال زنی استهلاکی الکترون در صفحات Ge(111) ۵۷
شکل ۵۱ تابع کانال‌زنی استهلاکی و طول کانال زنی استهلاکی الکترون در صفحات Ge(110) ۵۷
شکل ۵۲ تابع کانال‌زنی استهلاکی و طول کانال زنی استهلاکی الکترون در صفحات Ge(100) ۵۸
شکل ۵۳ تابع کانال‌زنی استهلاکی و طول کانال زنی استهلاکی الکترون در صفحات C(111) ۵۸

شکل ۵۴ تابع کانال‌زنی استهلاکی و طول کانال زنی استهلاکی الکترون در صفحات $C(110)$..... ۵۹
شکل ۵۵ تابع کانال‌زنی استهلاکی و طول کانال زنی استهلاکی الکترون در صفحات $C(100)$..... ۵۹
شکل ۵۶ طیف تابشی الکترونهای کانالی صفحهای برای صفحات مختلف بلور $Si(111)$ به ازای ضخامتهای مختلف بلور..... ۶۱
شکل ۵۷ طیف تابشی الکترونهای کانالی صفحهای برای صفحات مختلف بلور $Si(110)$ به ازای ضخامتهای مختلف بلور..... ۶۲
شکل ۵۸ طیف تابشی الکترونهای کانالی صفحهای برای صفحات مختلف بلور $Si(100)$ به ازای ضخامتهای مختلف بلور..... ۶۳
شکل ۵۹ طیف تابشی الکترونهای کانالی صفحهای برای صفحات مختلف بلور $Ge(111)$ به ازای ضخامتهای مختلف بلور..... ۶۳
شکل ۶۰ طیف تابشی الکترونهای کانالی صفحهای برای صفحات مختلف بلور $Ge(110)$ به ازای ضخامتهای مختلف بلور..... ۶۴
شکل ۶۱ طیف تابشی الکترونهای کانالی صفحهای برای صفحات مختلف بلور Ge(100) به ازای ضخامتهای مختلف بلور..... ۶۴
شکل ۶۲.طیف تابشی الکترونهای کانالی صفحهای برای صفحات مختلف بلور C(111) به ازای ضخامتهای مختلف بلور..... ۶۵
شکل ۶۳ طیف تابشی الکترونهای کانالی صفحهای برای صفحات مختلف بلور C(110) به ازای ضخامتهای مختلف بلور..... ۶۵
شکل ۶۴ طیف تابشی الکترو نهای کانالی صفحهای برای صفحات مختلف بلور $C(100)$ به ازای ضخامتهای مختلف بلور..... ۶۶

۱ فصل اول: نظریه تابش کانالی الکترون های نسبیتی

۱–۱ مقدمه

بعد از پیش بینی نظری تابش کانالی، اولین توصیف دقیق برای این نوع تابش الکترو مغناطیسی توسط کوماکوف در سال ۱۹۷۶ ارائه شد و بررسی های تجربی گسترده ای در مراکز تحقیقاتی جهان شروع شد. این سعی وتلاش‌ها به خوبی در تائید اثر وخواص تابش کانالی نتیجه بخش واقع گردید.

تابش کانالی هنگامی رخ می دهد که باریکه فرودی در جهتی نزدیک به صفحه‌ی محور بلور(همان محورz) وارد تک بلور شود. در چارچوب مکانیک کلاسیک پراکندگی‌های منظم الکترون‌های نسبیتی از اتم بلور همدوس می شوند و موجب حرکت نوسانی الکترون‌ها در طول صفحات یا محورهای متناظر می‌شوند. با در نظر گرفتن حرکت نوسانی الکترونها به عنوان حرکت شتابدار، تابش الکترومغناطیسی که تابش کانالی نامیده می شود گسیل می شود. در محدوده انرژیهایی از مرتبه GeV با حل معادلات کلاسیکی حرکت و استفاده از الکترودینامیک کلاسیک می‌توان طیف تابش کانالی را برای ضخامتهای از مرتبه چندین میکرومتر محاسبه نمود. در ضخامتهای بزرگتر با توجه به پراکندگیهای گوناگون الکترون در داخل بلور، الکترون از حالت کانالی خارج می شود. برای تولید بیشتر فوتونها با توجه به خود جذبی فوتونها توسط بلور نیاز به بهینه سازی ضخامت بلور است.

در این پروژه محاسبه رابطه بین ضخامت موثر بلور و طیف گسیلی الکترون ها برای صفحه‌های مختلف (۱۱۱)،(۱۱۰)و(۱۰۰) بلورهای مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبه طیف های تابشی از صفحات مختلف این بلورها نیاز به کد کامپیوتری موثر برای محاسبات نظری و شبیه سازی تابش کانالی دارد. بدین منظور کد کامپیوتری به زبان Mathematica طراحی شده است.

به جای پتانسیل‌های تقریبی که با بهینه سازی پارامترها به دست می آیند، پتانسیل واقعی صفحات بلور که به صورت گرمایی متوسط گیری شده است، استفاده شده است.

با در نظر گرفتن حرکت عرضی الکترون‌های نسبیتی و حل معادلات کلاسیکی حرکت برای الکترون ها، مسیر حرکت الکترون های نسبیتی محاسبه شده و با حل معادله فوکر پلانک و محاسبه تابع کانال زنی استهلاکی الکترون، طیف تابش کانالی در بلور دلخواه در ضخامت‌های مختلف را به دست می آوریم.

در فصل اول این پایان نامه به نظریه تابش کانالی پرداخته می شود. در فصل دوم توصیف تئوری تابش کانالی صفحه‌ای وسینماتیک حرکت الکترون کانالی بررسی می شود. در فصل سوم انرژی جنبشی پرتو کانالی مورد بررسی قرار می‌گیرد و محاسبه عددی طیف تابش کانالی در بلورهای ضخیم، در فصل چهارم انجام می‌شود.

۱–۲ تاریخچه تابش کانالی

اثر تابش کانالی ذرات باردار، یعنی حرکت‌شان در تک بلور در طول صفحات (محورها) به طور حیرت آوری به وسیله شبیه‌سازی حرکت یون ها در بلور در سال ۱۹۶۰ کشف شد[۱و۲]. توصیف این پدیده با معرفی تقریبی پیوسته برای پتانسیل بر هم کنشی لیندهارد نتیجه بخش بود[۳]. کانال زدن الکترون‌ها و پوزیترون‌های کم انرژی، اولین بار به صورت تجربی توسط اوگر هوج (کسی که از پرتو های $\beta+$ و $\beta-$ در فروپاشی رادیو اکتیوی یون های ^{64}Cu که تک بلور مس را در خود جای داده است، استفاده کرد.) مشاهده شد[۴]. در سال ۱۹۷۶ کوماکوف نظریه‌ای را منتشر کرد که بر طبق آن، گسیل تابش الکترومغناطیسی گسترده توسط الکترون‌ها و پوزیترون های نسبیتی کانال زده شده، به طور نظری پیش بینی شد[۵]. او با مطالعه دقیق رفتار اثر نسبیتی نتیجه‌گیری کرد که تابش ذرات قوی تر از تابش ترمزی است و این تابش تک فام تر از تابش سیکلوترونی است.

الگوی تابش دو قطبی کلاسیکی به یک مخروط تابش خیلی باریک رو به جلو انتقال می‌یابد و بسامد های تابش به گستره اشعه ایکس انتقال می‌یابند. بنابراین ایده مربوط به یک منبع تابش جدید متولد شد.

این پیش بینی به یک تحقیق کامل وهمه جانبه برای تابش کانالی در بسیاری از آزمایشگاه‌های شتابدهنده منجر شد که سهم زیادی در بررسی های گسترده از این نوع تابش دارد.

در سال ۱۹۷۷اندرسون توصیف مکانیک کلاسیک وکوانتومی این اثر را معرفی کرد [۶] واندکی بعد تابش کانالی، از پوزیترون های ۵۶Mev علاوه بر پوزیترون‌های فوق نسبیتی مشاهده شد [۸ و۷].

در اندازه گیری‌های تابش کانالی از باریکه های الکترون یا پوزیترون با انرژی‌های پایین (چندین MeV)، انرژی متوسط (دهها MeV) و انرژی بالا (۱۰۰MeV تا چندینGeV) از تک بلورهایی از قبیل سیلیکون، کربن، ژرمانیوم، تنگستن و..... استفاده می شود که این تحقیقات به طور گسترده در

مراکز تحقیقاتی دنبال می شوند. ویژگی اساسی تابش کانالی را می توان در مقالات علمی ورساله ها دید. (لازم به ذکر است که مطالعه تابش کانالی در دهه ۹۰ میلادی دوباره مورد توجه قرار گرفت .

زمانی که پیشنهادات اساسی به کار برده شد تا تابش کانالی را به عنوان چشمه قابل تنظیم پرتو ایکس در انرژی‌های متوسط الکترون به کار برند[۹و۱۰]). در حال حاضر از شتابدهنده‌های ابررسانای پیشرفته خطی الکترون، که باریکه‌های الکترون با واگرایی کم تولید می‌کنند، برای تولید موثر تابش کانالی استفاده می شود. ایده جدید در تابش کانالی، تحریک تابش کانالی به منظور افزایش بهره تابش می باشد[۱۱]. از آن جا که میدان داخلی بلور از مرتبه (گیگاالکترون‌ولت) است این کار به سادگی نمی تواند انجام شود. استفاده از بلورهای خمیده و قرار دادن صفحات اتمی دیگر در بین صفحات بلور برای تولید تابش کانالی روش های مرسوم هستند. از آن جا که طیف تابش کانالی وابسته به فواصل صفحات اتمی و عمق پتانسیل صفحات است، انتظار می‌رود که با این روش بتوان تابش کانالی را تحریک کرد. تابش کانالی کاربردهای متعددی دارد که برخی از آن‌ها عبارتند از:

۱- تابش کانالی یکی از راه‌های پی بردن به عیوب بلوری ازقبیل: ناخالصی‌ها[۱۳] و جابه جایی‌ها در اتم‌های بلور است [۱۲].

۲- تابش کانالی روشی برای مشخص کردن خواص ذرات کانال زده شده از قبیل انرژی منتشر شده را فراهم می کند.

۳- تابش کانالی می تواند برای تولید پرتو ایکس شبه تک فام به کار برده شود[۸].

۴- از تابش کانالی به منظور تولید باریکه‌های پر شدت پوزیترون استفاده می‌گردد.

۵-تابش کانالی می تواند برای تعیین دامنه ارتعاشات گرمایی اتم ها در بلور به کار برده شود.

مفهوم نظری، تابش کانالی در انرژی‌های بالاتر از ۱۰۰MeV با جزئیات در بخش ۱-۳ بحث خواهد شد. کدهای کامپیوتری پیشرفته برای محاسبات عددی مسیر حرکت الکترون های نسبیتی در داخل بلور و هم چنین برای محاسبه طیف انرژی تابش کانالی، طراحی شده‌اند.

۱-۳ نظریه تابش کانالی در انرژی‌های بالاتر تراز ۱۰۰MeV (توصیف کلاسیکی)

هنگامی که باریکه الکترون‌های نسبیتی به طور تصادفی از میان تک بلور عبور می کند به دلیل بر هم کنش‌های ذرات باردار با اتم‌های بلور، به طور غیر منسجم پراکنده می شود. نتیجه‌ی تغییر پیوسته اندازه حرکت عرضی ذرات باردار، گسیل طیف تابش ترمزی است. تابش کانالی هنگامی رخ می دهد که باریکه، در جهتی نزدیک به صفحه وارد تک بلور شود. در چارچوب مدل کلاسیکی پراکندگی های منظم الکترون‌های نسبیتی از اتم‌های بلور، هم‌دوس می‌شوند و موجب حرکت نوسانی الکترون-ها در طول صفحات متناظر می‌شوند. با در نظر گرفتن حرکت نوسانی به عنوان حرکت شتابدار الکترون‌ها، تابش الکترومغناطیسی که تابش کانالی نامیده می شود، گسیل می‌شود.

اگرچه بسامد آن‌ها نسبتا پایین است وانرژی تابشی آن‌ها در ناحیه اپتیکی قرار دارد، آثار نسبیتی از قبیل انقباض لورنتس مختصات طول و اثر دوپلر موجب انتقال انرژی فوتون های گسیل شده از تابش کانالی در ناحیه پرتو ایکس و مشاهده فوتون‌های گسیل شده در جهت باریکه فرودی می شوند. در انرژی‌های متوسط الکترون پدیده تابش کانالی با فرمول‌های مکانیک کوانتومی توصیف می‌شود.

حرکت الکترون‌ها در راستای صفحه بلور، توسط بر هم کنش ذرات باردار با پتانسیل صفحه‌ای پیوسته صورت می‌گیرد[۱۴]. با وجود انرژی نسبیتی ، حرکت عرضی الکترون‌های کانال زده شده توسط معادله شرودینگر یک بعدی با جرم موثر γm که جرم سکون الکترون و γ ثابت لورنتس است، توصیف می‌شود. مولفه عرضی اندازه حرکت خطی الکترون‌های کانال زده شده به حالت‌های مقید در پتانسیل پیوسته محدود شده است. گذار خود به خودی بین دو ویژه حالت منجر به تابش کانالی می شود.

در انرژی‌های بالا تعداد حالت‌های مقید افزایش می‌یابد و حالت‌ها بسیار به هم نزدیک شده و به صورت پیوسته ظاهر می‌شوند، در این حالت توصیف کوانتومی توصیف مناسبی نبوده وبه منظور محاسبه‌ی شدت طیف تابش کانالی از توصیف کلاسیک استفاده می شود.

بدین صورت که به کمک محاسبه‌ی مسیر حرکت الکترون کانال زده وحل معادلات نسبیتی حرکت برای الکترون کانال زده و حل معادلات نسبیتی حرکت برای الکترون، طیف تابش کانالی آن محاسبه می شود.

۱-۴ پتانسیل پیوسته صفحه بلور

با توجه به سرعت بالای الکترون‌ها ، مولفه‌ی طولی سرعت ذرات ($v \approx c$) فرض شده که c بیان گر سرعت نور است($\gamma >> 1$ یا $\beta \approx 1$). در این وضعیت الکترون، پتانسیل صفحه‌ای محور بلور را به طور پیوسته مشاهده می‌کند. این بدان معناست که صفحات بلور ، صفحات باردار پیوسته[۱۵] فرض می شوند و در بررسی تابش کانالی از بر هم کنش الکترون با تک تک اتم‌های بلور صرف نظر شده و برهمکنش الکترون با پتانسیل ناشی از این صفحات باردار به صورت یک پتانسیل تک بعدی در راستای موازی با صفحات بلور فرض می‌شود. معادلات کلاسیکی حرکت الکترون‌های نسبیتی در صفحه عمودی حرکت به صورت زیر می باشد[۱۶] :

$$E_{\perp} = \frac{1}{2} m\dot{\rho}^2 + w(\rho) \qquad (۱)$$

$$L_z = m\dot{\varphi}\rho^2 \qquad (۲)$$

که در آن m جرم نسبیتی الکترون، $E_{\perp}$ انرژی عرضی، L_zمولفه اندازه حرکت زاویه‌ای در راستای محور z، ρ و φ نیز به ترتیب مشخص کننده فاصله عرضی از محور بلور،(باتوجه به این که محور z هم جهت با محور بلور در نظر گرفته شده است.) وزاویه فضایی است. $w(\rho)$ پتانسیل متوسط موثر که با رابطه

$$w(\rho) = u(\rho) + \frac{L_z}{2m^2} \qquad (۳)$$

بیان می شود. که در آن $u(\rho)$ پتانسیل پیوسته محور بلور است.

پتانسیل عرضی خط بار(محور بلور) در فاصله ρ با رابطه[۱۷]:

$$\mathrm{u}(\rho) = \frac{1}{d}\int_0^{\infty} v\sqrt{\rho^2 + z^2}dz \qquad (۴)$$

نشان داده می‌شود که در آن، v پتانسیل برهمکنشی بین الکترون ویک بلور و d فاصله‌ی بین اتم‌ها در صفحه‌ی بلور می باشد. انرژی عرضی ومولفه اندازه حرکت زاویه‌ای الکترون در ابتدای ورود به بلور با استفاده از شرایط اولیه، از روابط:

$$E_{\perp} = u(\rho) + \frac{p_{\perp in}^2}{2m} \qquad (۵)$$

$$L_z = m\dot{\varphi}\rho^2 \qquad (۶)$$

محاسبه می شوند. که در این جا، ρ و $p_{\perp in}$ به ترتیب، فاصله عرضی و اندازه حرکت عرضی الکترون در نقطه ورود الکترون می باشند. با نگاه به معادله $u(\rho)$ ملاحظه می شود که پتانسیل محور بلور به صورت ثابت است و باید برای ارتعاشات گرمایی اتم‌های کریستال تصحیح شود. تقریب-های مختلفی برای پتانسیل V به منظور حل معادلات حرکت الکترون‌های نسبیتی در نظر گرفته شده است[۱۸-۲۰]. پتانسیل مولییر یکی از بیشترین پتانسیل های مورد استفاده در این زمینه می باشد که توصیف کوانتومی حالت‌های کانالی و انرژی‌های گسیل شده را نسبتا به خوبی پیش بینی می‌کند[۲۱-۲۲]. تقریب مولییر برای پتانسیل توماس- فرمی که یک پتانسیل استتار شده است به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\mathrm{V}(r) = \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\sum_{i=1}^{3} a_i \frac{-\beta_i r}{a_T} \qquad (۷)$$

که در این فرمول $a_i = \{0.1, 0.55, 0.35\}$، $\beta_i = \{0.6, 1.2, 0.3\}$، z_1 و z_2 به ترتیب اعداد اتمی پرتابه و هدف هستند و r فاصله بین ذره و اتم بلور است. $e^2 = 14.4\,\mathrm{eV\AA}$ و a_T طول استتار شده توماس است که به صورت زیر بیان می‌شود:

$$a_T = \frac{0.8853 a_0}{\sqrt[3]{(z_1^{1/2} + z_2^{1/2})^2}} \qquad (۸)$$

که $a_0 = 0.529\text{A}^{\circ}$ شعاع بوهر است.

تقریب دقیق‌تر برای پتانسیل بر هم کنشی بین الکترون و یک اتم بلور، تقریب دویلی، تورنر است. پتانسیل دویلی- تورنر به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\mathrm{V(r)} = 16\pi z_1 a_0 e^2 \sum_{i=1}^{5} \frac{a_i}{(\frac{b_i}{\pi})^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{r\hat{}2}{(bi/4\pi)\hat{}2}} \qquad (۹)$$

که a_i و b_i ضرایب ثابت هستند[۲۳]. با جایگذاری رابطه (۸) در رابطه (۳) پتانسیل پیوسته محوری مطابق با پتانسیل دویلی-تورنر به صورت زیر بیان می‌شود:

$$u(\rho) = \frac{-2h^2}{dm_0} \sum_{i=1}^{5} \frac{a_i}{b_i} e^{-\frac{4\pi\rho\hat{}2}{b_i}} \qquad (۱۰)$$

پتانسیل به دست آمده باید برای ارتعاشات گرمایی اتم های شبکه تصحیح شود، با تصحیح رابطه به کمک یک توزیع گاوسی که نشان دهنده‌ی جابه جایی گرمایی اتم‌ها از یک محور است، پتانسیل پیوسته محوری با استفاده از متوسط گیری گرمایی با رابطه

$$u(\rho) = \frac{-2h^2}{dm_0} \sum_{i=1}^{5} \frac{a_i}{b_i + 4\pi^2\delta^2} e^{\frac{\rho\hat{}2}{\frac{b_i}{4\pi\hat{}2}+\delta\hat{}2}} \qquad (۱۱)$$

بیان می‌شود. که δ بیان‌گر دامنه ارتعاشات گرمایی دو بعدی می‌باشد.

۱-۵ ضریب ساختار بلور

هنگامی که ذره باردار وارد بلور می‌شود، از اتم های بلور به صورت منحصر به فرد پراکنده خواهد شد. بسته به جهت باریکه‌ی الکترون فرودی وفاصله فضایی اتم‌ها در یک محور بلور، پتانسیل‌های محوری بر هم کنشی متفاوتی وجود خواهد داشت. به منظور توصیف این پتانسیل‌ها، مسئله را می توان به دو قسمت تقسیم کرد:

۱) پراکندگی از اتم منفرد

۲) پراکندگی از شبکه بلور

پراکندگی روی اتم منفرد منجر به ضریب پراکندگی شکلی می‌شود. اگر پتانسیل اتمی دارای تقارن کروی نسبت به هسته باشد پراکندگی به صورت زیر بیان می‌شود[۲۳].

$$f_{el} = \frac{2m}{h^2} \int_0^{\infty} r^2 v(r) \frac{\sin(4\pi sr)}{4\pi sr} dr \qquad (۱۲)$$

که $4\pi s$ تغییر بزرگی بردار موج الکترون در رخداد پراکندگی را نشان می‌دهد.