# فصل اول

# نظریەی تابش کانالی

## ۱-۱ مقدمه

بعد از پیش بینی نظری تابش کانالی(CR)[1] اولین توصیف دقیق برای این نوع تابش الکترومغناطیسی توسط کوماکوف[2] در سال ۱۹۷٦ ارائه شد . بررسی های تجربی گسترده ای در مراکز مختلف تحقیقاتی جهان شروع شد. این سعی و تلاشها به خوبی در تایید اثر و خواص تابش کانالی مثمرثمر واقع شد.

تابش کانالی به وسیله ذرات باردار نسبیتی در مدت عبورشان از میان یک تک بلور، موازی با یک صفحه یا محوربلور گسیل می شود. در بررسی های بیشتر انجام شده روشن شده است که تابش کانالی ممکن است که به صورت یک چشمه تک انرژی پرتو x با قابلت تنظیم انرژی به کار گرفته شود. نتایج آزمایشات انجام شده در این مراکز تحقیقاتی نشان داد که تک بلور الماس مناسب ترین بلور برای تولید تابش کانالی در انرژی های پایین الکترون، برای تهیه چشمه تک انرژی پرتو x به منظور کاربرد در تحقیقات رادیوبیولوژی است. بلور الماس با توجّه به دمای دبای بالا و رسانندگی گرمایی بالایشان می توانند در جریان الکترون نسبتاً بالا به کار برده شوند. در طول این سالیان آزمایشات زیادی با بلور های مختلف از قبیل الماس(C)، سیلیکون(Si)، ژرمانیوم(Ge) و فلوراید لیتیم (LiF) انجام شده است.

---

[1] channeling radiation

[2] M.A Kumakhov

تحقیقات جدید در این زمینه مربوط به تحریک تابش کانالی با استفاده از امواج فراصوتی است. اولین آزمایش‌ها در این زمینه با بلور کوارتز ($SiO_2$) انجام شده است. با توجه به این که ثابت پیزوالکتریک کوارتز نسبتاً پایین است. این ایده مطرح شد که از بلورهای دیگری با ثابت پیزوالکتریک بالاتر استفاده شود. برای انجام این کار ابتدا نیاز به انجام محاسبات نظریه تابش کانالی دارد. در این پروژه دو بلور پیزوالکتریک لیتیم نیوبات ($LiNbO_3$) و تیتانات سرب ($PbTiO_3$) مورد بررسی قرار گرفته‌اند.

محا سبه‌ی طیف‌های تابش از صفحات مختلف بلور نیاز به کد کامپیوتری موثر برای محاسبات نظری و شبیه‌سازی تابش کانالی دارد. برای این هدف کد کامپیوتری بر پایه‌ی نرم‌افزار Matematica طراحی شد. در عوض پتانسیل‌های تقریبی که با بهینه‌سازی پارامترها بدست می آیند، پتانسیل واقعی صفحات بلور که به صورت گرمایی متوسط گیری شده‌اند مورد استفاده قرار گرفته شده‌است.

پتانسیل اپتیکی مختلط برای تخمین پهنای ذاتی خطوط تابش کانالی به کار گرفته شده‌است. فرایندهای دیگری که موجب پهنای خطوط می‌شوند برای شبیه‌سازی در محاسبات لحاظ شده‌اند.

علاوه بر این در ارتباط با شکل‌گیری خطوط تابشی تقریب های مختلفی در مقالات علمی وجود دارد که تاثیر پراکندگی چند گانه الکترون در طول کانال می‌باشد. این پراکندگی چندگانه با افزایش ضخامت بلور اهمیت بیشتری پیدا می‌کند. نهایتاً محاسبه‌ی طیف تابش کانالی به وسیله انتگرال‌گیری عددی جمعیت‌های حالت‌های کانالی روی ضخامت بلور و ترکیب با احتمال گذار بین حالت‌های مقید انجام شده‌است.

در فصل اول به نظریه تابش کانالی ارائه می‌گردد و در فصل دوم مواد پیزوالکتریک‌ها وبلورهای پروسکایت و خواص آنهاا مورد بررسی قرار می‌گیرد. در فصل سوم به بررسی تابش کانالی الکترون‌ها در بلور پیزوالکتریک تیتانات سرب ($PbTiO_3$)، در فصل چهارم به بررسی تابش کانالی الکترون‌ها و پوزیترون‌ها در بلور پیزوالکتریک لیتیم نیوبات ($LiNbO_3$) و در فصل پنجم به تحریک تابش کانالی با امواج فراصوتی پرداخته شده‌است.

## ۱-۲ تاریخچه‌ی تابش کانالی

اثر کانالی ذرات باردار یعنی حرکتشان در تک بلور در طول محورها یا صفحات بلوری به طور حیرت‌آوری به وسیله شبیه‌سازی کامپیوتری حرکت یون‌ها در بلور در سال 1960 کشف شد [1,2]. توصیف این پدیده با معرفی تقریب پیوسته برای پتانسیل بر همکنشی لیندرهارد نتیجه‌بخش بود [3].

کانال زدن الکترون‌ها و پوزیترون‌های انرژی پایین اولین بار به صورت تجربی توسط اگرهوج[1] (کسی که از پرتوهای $\beta^+$، $\beta^-$ در فروپاشی رادیو اکتیوی یون‌های $^{64}Cu$ که تک بلور مس را در خود جای داده است استفاده کرد.) مشاهده شد [4].

در سال 1976 کوماکوف نظریه ای را منتشر کرد که بر طبق آن، گسیل تابش الکترومغناطیسی گسترده توسط الکترون‌ها یا پوزیترون‌ها ی نسبیتی کانال زده شده به طور نظریه پیش‌بینی شد [5].او بر اساس رفتار دقیق اثر نسبیتی نتیجه‌گیری کرد که تابش ذرات قویتر از تابش ترمزی است و نیز این تابش تکفام‌تر از تابش سیکلوترونی است. الگوی تابش دو قطبی کلاسیکی به یک مخروط تابش خیلی باریک رو به جلو انتقال می‌یابد و بسامدهای تابش به گستره‌ی پرتو x انتقال می‌یابند. بنابراین ایده‌ی مربوط به یک منبع تابش جدید متولد شد. این پیش‌بینی به یک تحقیق کامل وهمه جانبه برای تابش کانالی در بسیاری از آزمایشگا ههای شتاب دهنده منجر شد که سهم زیادی در بررسی‌های گسترده از این نوع تابش دارد.

[1] Uggerhoj

در سال ۱۹۷۷ اندرسون[1] توصیف مکانیک کلاسیک و کوانتومی این اثر را ارائه کرد[٦] و اندکی بعد تابش کانالی،CR ، از پوزیترون‌های ٥٦ مگا الکترون- ولت کانال زده شده علاوه بر پوزیترون‌های فوق نسبیتی مشاهده شد [7,8]. در اندازه گیری‌های تابش کانالی از باریکه‌های الکترون یا پوزیترون با انرژی پایین (چندین مگا الکترون– ولت)، انرژی متوسّط ( دهها مگا الکترون- ولت) و انرژی بالا (از ۱۰۰ مگا الکترون- ولت تا چندین گیگا الکترون– ولت) از تک بلورهایی از قبیل نیکل (Ni)، الماس (C)،سیلیکون (Si) ژرمانیم (Ge)، فلوراید لیتیم (LiF)، دی هیدرید لیتیم ($LiH_۲$)، کوارتز ($SiO_2$)و... استفاده می‌شود که این تحقیقات در مراکزی از قبیل: آرهوس[2]، سرن[3] و... دنبال می‌شوند. ویژگیهای اساسی تابش کانالی را می‌توان در مقالات علمی و رساله‌ها دید.

لازم به تذکّر است که شدّت افزایش یافته در تابش کانالی در طول سال 1990 ظاهر شد. زمانی پیشنهادات اساسی به کار برده شد تا تابش کانالی را به عنوان چشمه راحت قابل تنظیم پرتو x شبه تکفام در انرژی‌های متوسط الکترون به کار برند [9,10]. به تازگی از شتاب دهنده های ابررسانای پیشرفته خطی الکترون برای تولید موثر تابش کانالی، باریکه‌های مفید با واگرایی کم راستفاده می‌کند.

بررسی‌هایی که بر روی انواع بلورها انجام شد بلور الماس مورد مناسبی برای تولید تابش کانالی است. بلور الماس به خاطر داشتن پارامترهای بر جسته از قبیل عدد اتمی پایین، ساختار تقریباً کامل، دمای دبای بالا، رسانندگی گرمایی بالا و ... مورد توجّه هستند [11,12]. ایده‌ی جدید در تابش کانالی تحریک تابش کانالی به منظور افزایش بهره تابش می-باشد. از آنجا که میدان الکتریکی داخلی بلور از مرتبه (GV/m) است این کار به سادگی نمی‌تواند انجام شود. استفاده از بلورهای خمیده و قرار دادن صفحات اتمی دیگر در بین صفحات بلوربرای تولید CR روش‌های مرسوم هستند. روش دیگر استفاده از بلورهای پیزوالکتریک می‌باشد. اعمال میدان الکتریکی نوسانی خارجی به یک بلور پیزوالکتریک باعث ارتعاش اتم‌های بلور و در نتیجه تغییر فواصل اتم‌ها می‌شود. از آنجا که طیف تابش کانالی وابسته به فواصل

---

[1] Anderson

[2] Arhus

[3] CERN

صفحات اتمی و عمق پتانسیل صفحات است انتظار می‌رود که با این روش بتوان تابش کانالی را تحریک کرد. این کار نیاز به محاسبه‌ی طیف تابش کانالی برای بلورهای پیزوالکتریک مختلف دارد. برای این هدف کاربردی، بهینه‌سازی بهره ی تابش و پهنای خط تابش کانالی کاربردهای متعددی دارد که برخی از آنها عبارتند از:

1) CR یکی از راههای پی بردن به عیوب بلوری از قبیل: ناخالصی‌ها [13]، دامنه‌ی ارتعاشات گرمایی [12] در اتم‌های بلور است.

۲) CR روشی را برای مشخص کردن خواص ذرات کانال زده شده از قبیل انرژی منتشر شده را فراهم می‌کند.

۳) CR می‌تواند برای تولید پرتو x شبه تکفام به کار برده شود[8, 9,13].

مفهوم نظری تابش کانالی در انرژی‌های الکترون کمتر از 100 مگا الکترون– ولت با جزئیات در بخش بعدی بحث خواهد شد. کدهای کامپیوتری پیشرفته دراین کار برای محاسبات عددی انرژی‌های فوتون تایش کانالیِ پیش‌بینی شده، پهنای خطوط و بهره‌ی تابش به کار برده شده است.

## ۳-۱ توصیف نظری تابش کانالی در انرژی‌های متوسّط الکترون

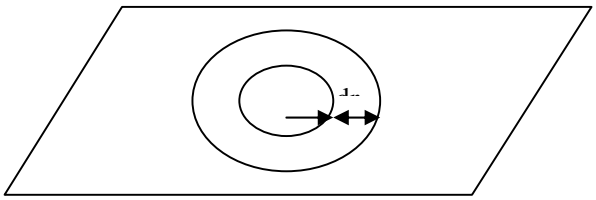
هنگامی که باریکه ی الکترون‌های نسبیتی به طور تصادفی از میان تک بلور عبور می‌کند به دلیل واکنش‌های ذرات باردار با اتمهای بلور به طور غیر منسجم (شبیه مواد بی شکل) پراکنده می‌شود. نتیجه‌ی تغییر پیوسته اندازه حرکت عرضی ذرات باردار گسیل طیف تابش اتمی است. تابش کانالی هنگامی رخ می‌دهد که باریکه وارد تک بلور در جهتی نزدیک به محور یا صفحه بلور می‌شود. در چارچوب مدل کلاسیکی پراکندگی منظم الکترون‌ها از اتم‌های بلور همدوس می‌شوند و موجب حرکت نوسانی الکترون‌ها در طول صفحات متناظر می‌شوند. با در نظر گرفتن حرکت نوسانی به عنوان حرکت شتابدارِ الکترون‌ها، تابش الکترونی که CR نامیده می‌شود، گسیل می‌شود. اگر چه بسامد $\omega_0$ نسبتاً پایین است ولی بر انرژی تابش $\hbar\omega_0$ در ناحیه‌ی اپتیکی قرار دارد ، آثار نسبیتی از قبیل انقباض لورنتس مختصات طول و اثر دوپلر موجب انتقال انرژی فوتون‌های گسیل شده تابش کانالی در ناحیه پرتو x و مشاهده‌ی فوتون های

گسیل شده در جهت باریکه فرودی می‌شوند. در انرژی الکترون‌های در نظر گرفته شده، پدیده‌ی گسیل تابش کانالی با فرمول‌های مکانیک کوانتومی توصیف می‌شود. حرکت الکترون‌ها در راستای محور بلور توسط بر همکنش ذرات با پتانسیل صفحه‌ای یا محوری پیوسته صورت می‌گیرد [14].

علی رغم انرژی نسبیتی حرکت عرضی الکترون‌های کانال زده شده توسط معادله‌ی شرودینگر یک بعدی با جرم موثر $m\gamma$، که m جرم سکون الکترون و $\gamma$ ثابت لورنتس است، توصیف می شود. مولفه‌ی عرضی اندازه حرکت خطی الکترون‌های کانال زده شده به حالت های مقیّد در پتانسیل پیوسته محدود شده است. گذار خود بخودی بین دو ویژه حالت منجر به تابش کانالی می‌شود. در نتیجه طیف انرژی با ساختار خطی انرژی فوتون‌ها مشخص می‌شود. نظریه تابش کانالی در انرژی‌های الکترون کمتر از 100 مگا الکترون– ولت در چارچوب مکانیک کوانتومی توصیف می‌شود.

## ۱-٤ پتانسیل پیوسته

با توجّه به سرعت بالای ذرّات مولفه‌ی طولی سرعت ذرات نسبیتی $v\approx c$ فرض شده است که $c$ بیانگر سرعت نور است ($\gamma\gg1$ یا $\beta\approx1$) و الکترون پتانسیل اتمی صفحه را پیوسته مشاهده می‌کند [14]. این بدان معناست که صفحات بلور، صفحات باردارپیوسته فرض می‌شوند. فرض کنید الکترون‌ها در صفحه در جهت z حرکت می‌کنند.



شکل (۱-۱)هندسه‌ی به کار رفته برای استنتاج پتانسیل پیوسته برای تابش کانالی صفحه‌ای

این پتانسیل به صورت زیر بیان می‌شود:

$$V(x) = 2\pi N d_p \int_0^\infty V_{atom}(\sqrt{x^2 + r^2}) r dr \qquad (۱-۱)$$

که x نشانگر فاصله عمودی از صفحه است، N چگالی اتمی صفحات و $d_p$ فاصله‌ی بین صفحات هستند و $V_{atom}$ پتانسیل بر همکنشی است [12] . پتانسیل مولییر[1] یکی از بیشترین پتانسیل‌های مورد استفاده در این زمینه می‌باشد که حالت‌های کانالی و انرژی‌های گسیل شده نسبتاً خوب پیش‌بینی می‌کند[15, 16]. تقریب مولییر برای پتانسیل توماس-فرمی که یک پتانسیل استتار شده با تابع استتار شده است به صورت زیر بیان می‌شود:

$$V_{atom}(r) = \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \sum_{i=1}^{3} \alpha_i \exp\left(-\beta_i r / a_T\right) \qquad (۲-۱)$$

در این فرمول $\alpha_i$= {0.1,0.55,0.35} و $\beta_i$= {6.0,1.2,0.3} به ترتیب اعداد اتمی پرتابه وهدف هستند. r فاصله‌ی بین ذره و اتم بلور است. $e^2$ = 14.4 eV و $a_T$ طول استتار شده توماس است که به صورت زیر بیان می-شود:

$$a_T = 0.8853 a_0 (z_1^{1/2} + z_2^{1/2})^{-2/3} \qquad (۳-۱)$$

$a$ شعاع بوهر (۰/۵۲۹ Å) است.

تقریب دقیق‌تر تقریب دویلی – تورنر[2] است. در اینجا پتانسیل ریز اتمی به وسیله مناسب‌سازی ضریب پراکندگی الکترون با محاسبات هارتری – فوک برای نتایج تجربی بدست می‌آید:

$$V_{atom}(r) = 16\pi z_1 a_0 e^2 \sum_{i=1}^{4} \frac{a_i}{(b_i/\pi)^{3/2}} \exp\left[\frac{r^2}{(b_i/4\pi)^2}\right] \qquad (٤-۱)$$

که $a_i$ و$b_i$ ضرایب در جداول مربوطه هستند[17].با جایگذاری معادله (۱-۲) در (۱-۱) پتانسیل متوسط صفحه‌ای استاتیک مولییر برای یک صفحه‌ی تک بلور نتیجه می‌شود:

---

1 Moliere

2 Doyle-Turner

$$V(x) = 2\pi z_1 z_2 (Nd_p) a_T \sum_{i=1}^{3} (\alpha_i / \beta_i) \exp\left(-\beta_i x / a_T\right) \qquad (۵-۱)$$

متشابهاً، پتانسیل پیوسته استاتیک صفحه بر طبق تقریب دویلی– تورنر نتیجه می‌شود:

$$V(x) = 2\sqrt{\pi} z_1 a_0 e^2 (Nd_p) \sum_{i=1}^{4} \frac{a_i}{\sqrt{\beta_i}} \exp\left(-x^2 / \beta_i\right) \qquad (٦-۱)$$

که $\beta_i = b_i/4\pi^2$ است.

پتانسیل پیوسته استاتیک بدست آمده بایستی برای ارتعاشات گرمایی اتم‌های شبکه تصحیح شود. این می‌تواند با به هم پیچیدگی معادلات (۱–۵) و(۱–٦) با یک توزیع گوسی که نشان دهنده‌ی جابجایی گرمایی اتم‌ها از یک صفحه‌اند انجام شود. چون اتم به طور مجزا ارتعاش می‌کند دامنه‌ی ارتعاشات گرمایی یک بعدی با جذر میانگین مربعی (rms) جابجایی $u_1$ مشخص می‌شود. با چنین فرضی تابع متوسط گرمایی به صورت زیر خواهد بود:

$$V(x,u_1) = \int_{-\infty}^{\infty} V(x-x')P(x')dx' \qquad (۷-۱)$$

که

$$P(x') = (2\pi u_1^2)^{-1/2} \exp\left(-x'^2 / 2u_1^2\right). \qquad (۸-۱)$$

این تبدیل، پتانسیل دویلی– تورنر را به متوسط گیری گرمایی برمی‌گرداند که به صورت زیر بیان می‌شود:

$$V(x,u_1) = 2\sqrt{\pi} z_1 a_0 e^2 (Nd_p) \sum_{i=1}^{4} \frac{a_i}{(\beta_i + 2u_1^2)^{1/2}} \exp\left(-x^2 / (\beta_i + 2u_1^2)\right) \qquad (۹-۱)$$

## ۱–۵ معادله موج عرضی الکترون کانالی

تابش کانالی صفحه‌ای ذرات باردار تحت یک زاویه‌ی فرودی کوچک نسبت به صفحه‌ی بلور تحت بررسی وارد بلور می‌شوند. توصیف تابش کانالی بر پایه‌ی تقسیم حرکت ذرّات به یک مولفه‌ی طولی ویک مولفه‌ی عرضی است. حرکت

طولی الکترون‌ها از میان بلور تحت تاثیر پتانسیل پیوسته‌ی بالانیست. سرعت در جهت $z$، واقعاً نزدیک سرعت نور است ($v_z \approx c$). اگر تحت شرایط کانالی مولفه‌ی عرضی اندازه‌ی حرکت خطی، $p_x$، ذرات کانال زده شده در مقایسه با مولفه‌ی طولی کوچک باشد انرژی عرضی می‌تواند به وسیله‌ی رابطه‌ی غیر نسبیتی زیر بیان شود:

$$E_x = \frac{p_x^2}{2m\gamma} + V(x) \qquad (۱۰-۱)$$

به این ترتیب برای توصیف تابش گسیل شده به وسیله‌ی ذرّات باردار در طول کانال هر دو نظریه‌ی کوانتومی و کلاسیکی باید مورد توجّه قرار گیرند. در انرژِی‌های متوسط الکترون (کمتر از 100 مگا الکترون– ولت ) حرکت ذرّات مشخصّات کوانتومی دارد. حالت‌های کانالی عرضی مقیّد هستند و تعداد حالت‌های مقیّد کم است. چنانچه تابش کانالی در نتیجه گذار بین حالت‌های مقیّد گسیل شود با افزایش انرژی ذرّات، تعداد حالت‌های مقیّد افزایش می‌یابد که منجر به هم‌پوشانی حالت‌ها می‌شود. این حالت‌ها توسط محاسبات کلاسیک مورد محاسبه قرار می‌گیرند. دراین کار چون انرژی الکترون ها بین ۱۰–۴۰ مگا الکترون– ولت قرار دارد نظریه مکانیک کوانتومی استفاده می‌گردد.

## ۱–۶ توصیف مکانیک کوانتومی تابش کانالی صفحه‌ای

همانطور که در بالا اشاره شد پتانسیل برهم کنشی صفحات یک بعدی است و مولفه‌ی عرضی اندازه حرکت خطی در طول مختصات $x$ با معادله شرودینگر توصیف می‌شود:

$$\left[\frac{p_x^2}{2m\gamma} + V(x)\right]u(x) = E_x u(x) \qquad (۱۱-۱)$$

که Ex و u(x) به ترتیب انرژی عرضی و تابع موج الکترون هستند.

چون پتانسیل بلور تناوبی است لذا آن رامی‌توان بر اساس سری فوریه بسط داد.

$$V(x) = \sum_n v_n e^{ingx} \, (n = \ldots, -1, 0, 1, 2, \ldots) \qquad (۱۲-۱)$$

که $v_n$ نشانگر ضرایب فوریه پتانسیل و ng بردار شبکه وارون است که در شکل (۱-۲) نشان داده شده است.

ویژه توابع معادله (۱-۱۱) امواج بلاخِ یک بعدی هستند:

$$u(x) = e^{ikx}\sum_n c_n e^{ingx}\,(n = ...,-1,0,1,2,...) \qquad (۱۳-۱)$$

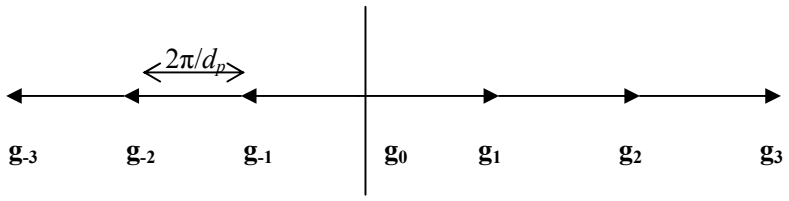
که در آن $k$ بردار موج الکترون است و در ناحیه اول بریلوئن، $0 \le k \le g/2$ واقع شده است.در محاسبات عملی جمع روی n بعد از شماری محدود می‌تواند برداشته شود.

با جایگذاری معادلات (۱-۱۲) و (۱-۱۳) در (۱-۱۱) مسأله به حل ویژه مقادیر و ویژه توابع ماتریس A منجر می‌شود که در مورد صفحه‌ای شامل مولفه‌های زیر است:

$$A_{nm} = v_{n-m} \qquad (m \neq n) \qquad (۱٤-۱)$$

$$A_{nn} = \frac{\hbar^2}{2m\gamma}(k+ng)^2 + v_0$$

اگر مبداء مختصات در بلور چنان انتخاب شود که پتانسیل عرضی متقارن شود یعنی $V(x) = V(-x)$، ماتریس A هرمیتی است یعنی $A^*_{nm} = A_{mn}$، ویژه مقادیر حقیقی هستند و ویژه توابع یک پاریته مشخص دارند و از زوج به فرد به صورت متناوب تغییر می‌کنند که حالت پایه پاریته‌ی زوج دارد.




شکل(۱-۲) توضیح بردار شبکه وارون نرمال بر صفحه بلور

## ۱-۷ ضرایب فوریه پتانسیل پیوسته

پتانسیل‌های عرضی دارای تناوب شبکه هستند. این بیان برای سری فوریه است که عمومی‌ترین شکل پتانسیل پیوسته

را ارائه می‌کند. برای مشخص کردن ضرایب فوریه باید چند خاصیت ساختار شبکه بلور را درنظرگرفت.

### ۱-۷-۱ بردار شبکه وارون

موقعیت اتم در شبکه بلور با بردار $\vec{R}$ تعریف می‌شود:

$$\vec{R} = u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3 \qquad (۱۵-۱)$$

که $\{\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3\}$ بردارهای اولیه و $(u_1, u_2, u_3)$ اعداد صحیح هستند.

معادل هر شبکه بلور یک شبکه وارون وجود دارد که برای توصیف پراکندگی ذرات در بلور بسیار مهم است. $\vec{g}$ بردار شبکه وارون، یک دسته صفحات موازی بلور که بر $\vec{g}$ عمود است را نشان می‌دهد. فاصله‌ی بین صفحات مجاور $d_p=2\pi/g$ است. صفحات معادل معمولاً به وسیله شاخص میلر($hkl$) نشان داده می‌شوند.

$$\vec{g} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \qquad (۱۶-۱)$$

که $\{\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3\}$ بردارهای اولیه شبکه وارون هستند. بردارهای اولیه شبکه وارون با شبکه حقیقی به وسیله روابط زیر به هم مربوط هستند.

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)},$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \qquad (۱۷-۱)$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}.$$

فاصله‌ی بین صفحات به صورت زیر بیان می‌شود:

$$dp = 2\pi\sqrt{1/(\vec{g}_{hkl}.\vec{g}_{hkl})} \qquad (۱۸-۱)$$

### ۱-۷-۲ ضریب ساختار بلور

هنگامی که ذره باردار وارد بلور می‌شود از اتم‌های بلور به صورت منحصر به فرد پراکنده خواهد شد. بسته به جهت باریکه الکترون فرودی بعلاوه فاصله فضایی اتم‌ها در یک صفحه بلور، پتانسیل‌های صفحه‌ای برهمکنشی متفاوتی وجود خواهد داشت. به منظور توصیف این پتانسیل‌ها، مسئله را می‌توان به دو قسمت تقسیم کرد:

۱) پراکندگی روی اتم منفرد ۲) پراکندگی روی 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 [17]:

$$f_{el}(s) = \frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty r^2 V_{atom}(r)\frac{\sin(4\pi sr)}{4\pi sr}dr \qquad (۱۹-۱)$$

$4\pi s$ تغییر بزرگی بردار موج الکترون در رخ داد پراکندگی را نشان می‌دهد

$$s=\sin(\theta)/\lambda \qquad (۲۰-۱)$$

$\theta$ زاویه ی بین بردار موج الکترون فرودی و منعکس شده است. یک تقریب تحلیلی $f_{el}(s)$ به صورت زیر است:

$$f_{el}(s) = \sum_{i=1}^{4} a_i e^{-b_i s^2} \qquad (۲۱-۱)$$

$a_i$ , $b_i$ پارامترهای تعیین شده به وسیله فرایند مناسب سازی منحنی در تقریب دویلی–تورنر می‌باشند.

البته این تقریب تنها برای $s \leq 6Å^{-1}$ معتبر است و محاسبات با افزایش عدد موج بلاخ با شکست مواجهه می‌شود. یک

برازش مینیمم مربعی به پنج تابع گاوسی در محاسباتمان به کار گرفته شده است. کاربرد دستگاههای مختلف برای ضریب$a_i$ و $b_i$ به نتایج یکسانی منجر می‌شود.

به منظور توصیف پراکندگی در شبکه، عامل ساختار در پتانسیل وارد می‌شود:

$$S = \frac{1}{V_c}\sum_j e^{i\vec{g}\cdot\vec{r}_j} \qquad (۲۲-۱)$$

که جمع بر روی تمام اتم‌ها در سلول واحد است.

ضریب ساختار آن دسته‌هایی از شاخص‌های میلر را تعیین می‌کند که انعکاسات ازصفحات متناظر با آنها قوی هستند. می توان نشان داد که $S$ برای هر مقدارs متفاوت با $s = ng/4\pi$ صفر است، از اینرو عامل پراکندگی شکلی اتمی به صورت زیر بیان می‌شود:

$$f_{el}(\frac{ng}{4\pi}) = \frac{2m}{V_c\hbar^2}\sum_j e^{i\vec{g}\cdot\vec{r}_j}\int_0^\infty r^2 V_{atom}(r)\frac{\sin(gr)}{gr}dr \qquad (۲۳-۱)$$

مولفه‌های فوریه پتانسیل پیوسته صفحه می‌توانند با استفاده از عامل‌های پراکندگی شکلی الکترون $f_{el}(s)$ محاسبه شوند که متناسب با تبدیلات فوریه پتانسیل اتمی هستند.مولفه‌های فوریه پتانسیل پیوسته صفحه به صورت زیر بیان می‌شوند:

$$v_n = \frac{h^2}{2\pi m} f_{el}(\frac{ng}{4\pi}). \qquad (۲٤-۱)$$

اگر ارتعاشات گرمایی اتم‌های شبکه به حساب آورده شوند ضرایب فوریه به صورت زیر بیان می‌شوند:

$$v_n = \frac{4\pi}{V_c}\sum_j e^{-M_j(\vec{g})} e^{(-i\vec{g}.\vec{r}_j)}\int_0^\infty r^2 V_{atom}(r)\frac{\sin(gr)}{gr}dr \qquad (۲۵-۱)$$

که درآن $V_c$ بیانگرحجم سلول واحد، $\vec{r_j}$ موقعیت اتم $j$ام شبکه در سلول واحد، $M_j(\vec{g}) = \frac{1}{2} g^2 \langle u_j^2 \rangle$ فاکتور دبای-والر برای اتم $j$که حرکت گرماییش را به حساب می آورد و $u_j$ دامنه ارتعاشات یک بعدی است.

پتانسیل $V_{atom}(r)$ استفاده شده برای برهمکنش اتم-الکترون می‌تواند پتانسیل کولنی استتار شده در معادله (۱-۲) یا به صورت دقیق تر پتانسیل دویلی- تورنر در معادله (۱-٤) باشد. برای پتانسیل کولنی استتار شده، ضرایب فوریه تعریف شده در معادله (۱-۲۵) به صورت زیر در می‌آیند:

$$v_n = \frac{4\pi\hbar^2 z_1 z_2}{m a_0 V_c} a_0^2 . (e^2 / a_0) \sum_j e^{-M_j(\vec{g})} \cdot e^{(-i\vec{g}.\vec{r_j})} \sum_{i=1}^{4} \frac{\alpha_i}{(\beta_i / a_n)^2 + (ng)^2} \qquad (۱-۲٦)$$

و برای پتانسیل دویلی – تورنر ضرایب فوریه یه صورت زیر در می‌آیند:

$$v_n = \frac{2\pi z_1}{V_c} a_0^2 . (e^2 / a_0) \sum_j e^{-M_j(\vec{g})} \cdot e^{(-i\vec{g}.\vec{r_j})} \sum_{i=1}^{4} a_i e^{\left(-\frac{1}{4}(\frac{b_i}{4\pi^2})(ng)^2\right)} \qquad (۱-۲۷)$$

## ۱-۸ محاسبات عددی انرژی‌های فوتون تابش کانالی برای صفحات مختلف

تقریب نظری به تابش کانالی الکترون شرح داده شده در پاراگراف قبلی برای ایجاد یک کد کامپیوتری بر پایه نرم افزار Mathematica به کار گرفته شده است. این برنامه پتانسیل پیوسته صفحه‌ای بعلاوه توابع موج و ویژه مقادیر الکترون‌های کانال زده شده را محاسبه می‌کند. ازاین داده‌ها، انرژی‌های گذار بین حالت‌های مقید عرضی و بنابراین انرژی‌های فوتون به دست می‌آیند.

محاسبات برای انرژی‌های متوسط الکترون و صفحات مختلف بلورهای $LiNbO_3$ و $PbTiO_3$انجام شده‌اند.

### ۱-۸-۱ پتانسیل پیوسته

همگرایی پتانسیل پیوسته و ویژه مقادیر متناظر بستگی به تعداد بردارهای شبکه وارون دارد. تعداد صفحات همیشه فرد است زیرا بردارهای شبکه وارون مثبت و منفی باید لحاظ شوند.ضرایب فوریه پتانسیل پیوسته با استفاده از معادله (۱-۲۷) محاسبه شده‌اند، مقدار عددی p=0.01 a برای دامنه ارتعاشات یک بعدی (rms) در دمای اتاق فرض شده است که a ثابت شبکه بلور است.

### ۱-۸-۲ ویژه مقادیر

با درنظر گرفتن یازده تابع بلاخ ابعاد ماتریس۲۱×۲۱ است. داده‌های ورودی کد کامپیوتری انرژی الکترون و شاخص‌های میلر ($hkl$) صفحات مورد نظر هستند. داده‌های خروجی ویژه مقادیر و ویژه توابع الکترون‌های کانالی در پتانسیل پیوسته صفحه متناظر هستند. انرژی فوتون گسیل شده در چارچوب آزمایشگاه به صورت زیر بیان می‌شود.

$$E_{if} = \frac{\hbar\omega_{if}}{(1-\beta\cos\theta)} \qquad (۱-۲۸)$$

که $\omega_{if}$ فرکانس CR در سیستم الکترون ساکن، $\theta$ نشانگر زاویه‌ی مشاهده نسبت به جهت باریکه الکترون و $\beta = v/c = \sqrt{1-1/\gamma^2}$ است. برای $\theta=0$ معادله (۱-۲۸) به صورت زیر بیان می‌شود:

$$E_{if} = 2\gamma^2\hbar\omega_{if} = 2\gamma^2(E_i - E_f) \qquad (۱-۲۹)$$

که $E_i$ و $E_f$ ویژه مقادیر حالتهای اولیه و نهایی هستند.

از آنجا که پتانسیل پیوسته صفحه‌ای یک بعدی است ویژه مقادیر و ویژه توابع با عدد کوانتومی $n$ مشخص می‌شوند. پتانسیل‌های پیوسته متقارن هستند. بنابراین ویژه توابع برای اندازه حرکت عرضی بلور $k=0$ پاریته‌ی مشخص دارند. از $n=0$ با پاریته‌ی زوج شروع می‌شود و بین زوج و فرد تغییر می‌کند.

### ۱-۸-۳ تقریب تک پتانسیل

برای انرژی الکترون E > 10 MeV پتانسیل صفحات ساده می‌تواند با تقریب، به صورت زیر بیان شو[18]:

$$V(x) = -\frac{u_0}{\cosh^2 x/b} \qquad (۳۰-۱)$$

که $u_0$ و $b$ پارامترها هستند و مقادیرشان برای صفحات مختلف، متفاوت هستند. انرژی‌های گذار از الکترون‌های کانالی شده با فرمول زیر محاسبه می‌شوند:

$$E_{xn} = -\frac{\hbar^2}{2m\gamma b^2}\left(-\frac{1}{2}+\sqrt{\frac{1}{4}+\frac{2m\gamma u_0 b^2}{\hbar^2}}-n\right)^2 \qquad (۳۱-۱)$$

که

$$n \le -\frac{1}{2}+\sqrt{\frac{1}{4}+\frac{2m\gamma u_0 b^2}{\hbar^2}}$$

## ۱-۹ پهنای خطوط شبه تکفام

چندین سازوکار در پهنا و شکل خط به ثبت رسیده با استفاده از طیف نمای پرتو x سهیم هستند که به شرح آن پرداجته می‌شود.

### ۱-۹-۱ طول همدوسی

پهنای ذاتی خط به عمر متناهی حالت‌های کانالی مربوط است [19, 20]. اساساً به وسیله پراکندگی ناهمدوس الکترون‌های کانالی از فونون‌ها تعیین می‌شود (پراکندگی گرمایی). شکل خط یک توزیع لورنتسی دارد و با پهنای داده شده به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر بیان می‌شود [21, 22, 23, 24, 25]:

$$\Gamma_{coh} = \frac{2\gamma^2\hbar c}{l}. \qquad (۳۲-۱)$$

$l$ طول همدوسی کل به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l_1}+\frac{1}{l_2} \qquad (۳۳-۱)$$

$l_1$ و $l_2$ طول همدوسی حالت‌های اوّلیه و نهایی گذار مربوطه هستند

در چارچوب نظریه پتانسیل مختلط، $U(X)=V(x)+iW(x)$، طول همدوسی از رابطه زیر به‌دست می‌آید:

$$l_j = -\frac{\hbar\beta c}{2\langle W\rangle_j} \qquad (۳٤-۱)$$

$\langle W\rangle_j = \langle\psi_j|W|\psi_j\rangle$ مقدار انتظاری قسمت موهومی پتانسیل مختلط برای حالت $j$ است. قسمت موهومی، مانند قسمت حقیقی می‌تواند به یک سری فوریه بسط داده شود.

$$W(x) = \sum_n v_n^i e^{ingx} \text{ (n=…,-1,0,1,2,.)} \qquad (۳۵-۱)$$

که ضرایب فوریه از رابطه زیر بدست می‌آیند[26, 19]:

$$v_{\vec{g}}^i = \frac{\hbar^3\beta N_V}{2m_0^2 c V_c}\int f_{el}(|\vec{q}|) f_{el}(|\vec{q}-\vec{g}|)[e^{-M_j(\vec{g})} - e^{-M_j(\vec{g})-M_j(\vec{q}-\vec{g})}]qdqd\varphi, \qquad (۳٦-۱)$$

که $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_0$ تغییر بردار موج الکترون و $f_{el}(|\vec{q}|)$ دامنه‌ی پراکندگی است.

معادله (۱-۳٦) به صورت زیر در می‌آید[26]:

$$v_n^i = -\frac{\hbar^3\pi N_v}{2m_0{}^2 c V_c}\sum_i\sum_j a_i a_j\left[\frac{e^{-M_j(\vec{g})-B_iB_jn^2g^2/(B_i+B_j)}}{B_i+B_j} - \frac{e^{-C_iC_jn^2g^2/(C_i+C_j)}}{C_i+C_j}\right] \qquad (۳۷-۱)$$

که $B_i = b_i/(16\pi^2)$ و $C_i = B_i + 0.5\langle u_i^2\rangle$ هستند.

### ۱-۹-۲ ضخامت محدود بلور

سهم پهنای خطوط ناشی از ضخامت متناهی بلور از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$\Gamma_L = \frac{4\pi\gamma^2\hbar c}{L}. \qquad (۳۸-۱)$$

که در ضخامت‌های بزرگتر $L$ می تواند نادیده گرفته شود.

### ۱-۹-۳ پهنای موج بلاخ

این یک امر ذاتی برای تقریب چند باریکه ای تابش کانالی است که ویژه مقادیر به بردار موج الکترون ،$k$، وابسته است. بردار موج الکترون می‌تواند بین $-g/2$ تا $g/2$ تغییر کند($-g/2 \le k \le g/2$). این اثر موجب یک ساختار نواری حالت‌های کانالی می شود. تغییرات انرژی عرضی با بردار موج برای حالت‌های مقید محکم (ته چاه) کوچک است. برای حالت‌های نزدیک به بالای پتانسیل و درون ناحیه پیوسته، البته این اثر، سازوکار غالب پهنای خطوط می‌شود.

در زاویه‌های کوچک مشاهده، پهنای موج بلاخ با جمع پهنای نوار حالت‌های اولیه و نهایی به‌دست می‌آید [26]:

$$\Gamma_{Bloch} = 2\gamma^2 \left( \left| \varepsilon_i^{k=0} - \varepsilon_i^{k=\frac{g}{2}} \right| + \left| \varepsilon_f^{k=0} - \varepsilon_f^{k=\frac{g}{2}} \right| \right) \qquad (۳۹-۱)$$

جدایی از پهنای ذاتی خطوط، شرایط تجربی تولید به علاوه‌ی شرایط ثبتCR مولفه‌های موثر بیشتری را در شکل خطوط CR مشادهده شده شامل می‌کند.

### ۱-۹-٤ پهن شدگی انرژی باریکه الکترون

رابطه انرژی، با انرژی الکترون به صورت زیر مقیاس زده می‌شود:

$$E_x \propto \gamma^a \qquad (٤٠-۱)$$

که a مقداری ثابت بین ۱/۵ تا ۲ است که به گذار مورد رسیدگی وابسته است[27].

پهن شدگی انرژی باریکه ی اوّلیه ،$\Delta E_e$، باعث پهن شدگی انرژی فوتون مشاهده شده می‌شود.

$$\Delta E_x = a \frac{\Delta E_e}{E_e} . \qquad (٤١-۱)$$

معمولاً در شتاب دهنده‌های امروزی کوچک است و می‌توان آنرا نادیده گرفت.

### ۱-۹-۵ شکل خطوط CR

تمامی سازوکار های پهنای خطوط بحث شده در بالا به طور هم زمان در شکل یک خط CR اندازه گیری شده سهیم هستند. تابع دلتا مشخصه ی نرخ تابش دیفرانسیلی بین حالت‌های کانالی به شکل لورنتسی نمایش دهنده شکل ذاتی خط CR تبدیل می‌شود.

## ۱-۱۰ شدت تابش کانالی

### ۱-۱۰-۱ قوائد انتخاب و عناصر ماتریس

میدان الکتریکی صفحات اتمی موجب نوسانات دو قطبی ذرات باردار در مدت کانال زدن می‌شود. در تقریب مکانیک کوانتومی، شدت گذار بین حالت‌های کانالی به بزرگی عناصر ماتریس دو قطبی وابسته است که این عناصر با $< u_f | p_x | u_i >$ تعریف می‌شوند. دراین حالت $p_x$ اندازه حرکت عرضی الکترون است.

ویژه توابع برای $k = 0$ پاریته‌ی مشخص دارند. تقارن ویژه توابع به انتخاب قواعدی برای عناصر ماتریس گذار منجر می‌شود.گذارهای دو قطبی الکترون‌های کانال زده شده بین چنین حالت‌های اولیه و نهایی مجاز هستند که دارای پاریته‌ی مخالف باشند. معمولاً گذارهایی با $\Delta n = 1$ قوی ترین گذارها هستند گذارهایی با $\Delta n \geq 3$ معمولاً ضعیف هستند اما ممکن است در طیف اندازه‌گیری شده مشاهده شوند[18].

ویژه توابع بهنجار شده به یک تناوب صفحات از رابطه زیر بدست می‌آیند:

$$u_i(x) = \frac{1}{\sqrt{d_p}} e^{ikx} \sum_{n=-m}^{m} c_n^i e^{ingx} \qquad (۱-۴۲)$$