
ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

ATOMIC NUCLEUS AND ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS

УДК 539.1

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ЛИВНЕЙ В ОРИЕНТИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ

**В. В. ТИХОМИРОВ¹⁾, В. В. ГАВРИЛОВЕЦ¹⁾,
А. С. ЛОБКО¹⁾, Н. С. СОЧИВКО²⁾, С. Л. ЧЕРКАС¹⁾**

¹⁾Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220006, г. Минск, Беларусь

²⁾Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь

Аннотация. Образующие электромагнитные ливни последовательности процессов излучения гамма-квантов электронами и позитронами и рождения электрон-позитронных пар гамма-квантами играют существенную роль в формировании спектров астрофизических источников жесткого излучения, прохождении космического излучения

Образец цитирования:

Тихомиров ВВ, Гавриловец ВВ, Лобко АС, Сочивко НС, Черкас СЛ. Моделирование высокоэнергетических электромагнитных ливней в ориентированных кристаллах. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2024;3:50–61.
EDN: AXXHWA

For citation:

Tikhomirov VV, Haurylavets VV, Lobko AS, Sarchyuka MS, Cherkas SL. Simulation of the high-energy electromagnetic showers in oriented crystals. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2024;3:50–61. Russian.
EDN: AXXHWA

Авторы:

Виктор Васильевич Тихомиров – доктор физико-математических наук, профессор; главный научный сотрудник отраслевой лаборатории радиационной безопасности.

Виктор Васильевич Гавриловец – научный сотрудник отраслевой лаборатории радиационной безопасности.

Александр Сергеевич Лобко – доктор физико-математических наук, доцент; заместитель директора по научной работе.

Никита Сергеевич Сочивко – аспирант кафедры ядерной физики физического факультета. Научный руководитель – А. С. Лобко.

Сергей Леонидович Черкас – кандидат физико-математических наук; ведущий научный сотрудник лаборатории фундаментальных взаимодействий.

Authors:

Viktor V. Tikhomirov, doctor of science (physics and mathematics), full professor; chief researcher at the laboratory of radiation safety.

vtikh@mail.ru

Viktar V. Haurylavets, researcher at the laboratory of radiation safety.

bycel@tut.by

Alexander S. Lobko, doctor of science (physics and mathematics), docent; deputy director for research.

lobko@inp.bsu.by

Mikita S. Sarchyuka, postgraduate student at the department of nuclear physics, faculty of physics.

nikitasochivko@gmail.com

Sergey L. Cherkas, PhD (physics and mathematics); leading researcher at the laboratory of fundamental interactions.

cherkas@inp.bsu.by

через атмосферу, а также измерения энергии электронов, позитронов и гамма-квантов электромагнитными калориметрами, используемыми в физике высоких энергий и на орбитальных гамма-телескопах. Обширные теоретические и экспериментальные исследования 1950–80-х гг. показали, что при движении частиц под углами порядка градуса и менее к осям и плоскостям кристаллов процессы рассеяния, излучения и рождения пар демонстрируют когерентную природу и претерпевают качественные изменения. В зависимости от атомного номера вещества кристалла степень когерентного увеличения интенсивности излучения и вероятности рождения пар в нем достигает 10–100 раз при энергиях частиц от десятых долей до единиц тераэлектронвольта, приводя к настолько же масштабному уменьшению эффективной радиационной длины, характеризующей скорость развития ливня. Для моделирования высокоэнергетических электромагнитных ливней в ориентированных кристаллах в статье представлена программа, сочетающая развитые нами и протестированные совместно с исследователями из Университета Феррары и Национального института ядерной физики (INFN) (Италия) в Европейском центре ядерных исследований (CERN) методы описания когерентных процессов рассеяния, излучения и рождения пар в кристаллической решетке при высоких энергиях и малых отклонениях импульсов частиц от главного кристаллического направления с алгоритмами инструментария Geant4 для моделирования аналогичных процессов в приближении аморфной среды при низких энергиях и больших отклонениях импульсов частиц. Программа может быть использована как для проведения надежных расчетов характеристик электромагнитных ливней в кристаллах в настоящее время, так и для внедрения усовершенствованных теоретических подходов в целях повышения точности и производительности расчетов в будущем.

Ключевые слова: электроны; позитроны; гамма-кванты; релятивистские частицы; излучение; рождение пар; моделирование; электромагнитные ливни; электромагнитные каскады.

Благодарность. Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект Ф22МЦ-006 «Разработка средств моделирования процессов излучения гамма-квантов электронами и позитронами, образования электрон-позитронных пар гамма-квантами высоких энергий и каскадных последовательностей этих процессов в ориентированных кристаллах и их приложений в физике высоких энергий»).

SIMULATION OF THE HIGH-ENERGY ELECTROMAGNETIC SHOWERS IN ORIENTED CRYSTALS

V. V. TIKHOMIROV^a, V. V. HAURYLAVETS^a,
A. S. LOBKO^a, M. S. SACHYUKA^b, S. L. CHERKAS^a

^aInstitute for Nuclear Problems, Belarusian State University,
11 Babrujskaja Street, Minsk 220006, Belarus

^bBelarusian State University, 4 Niezaliezhnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus

Corresponding author: V. V. Tikhomirov (vvtikh@mail.ru)

Abstract. The sequences of processes of gamma-quanta emission by electrons and positrons and of the production of electron-positron pairs by gamma-quanta that form electromagnetic showers play the significant role in the formation of the spectra of hard electromagnetic radiation of astrophysical sources, in the passage of cosmic radiation through the atmosphere, as well as in the measurement of the energy of electrons, positrons and gamma-quanta by electromagnetic calorimeters, used in high-energy physics and on orbital gamma-ray telescopes. Extensive theoretical and experimental studies have showed in the 1950–80s, that when particles move at angles of the order of a degree or less with respect to the axes and planes of crystals, the processes of scattering, radiation and pair production exhibit a coherent nature and undergo qualitative changes. Depending on the atomic number of a crystal ions, the degree of coherent increase in the radiation intensity and the probability of pair production multiply 10–100 times at energies from tenths to units of teraelectronvolt, leading to an equally large-scale reduction in the effective radiation length, which characterises the rate of a shower development. To numerically simulate high-energy electromagnetic showers in the oriented crystals, the programme has been developed that combines the methods for describing coherent processes of scattering, radiation and pair production in a crystal lattice at high energies and small deviations of particle momenta from the main crystalline directions, developed by us and tested jointly with scientists from the University of Ferrara and the National Institute for Nuclear Physics (INFN) (Italy) at the European Centre for Nuclear Research (CERN), with the Geant4 toolkit algorithms for simulating similar processes in the approximation of an amorphous medium at low energies and large deflections. The programme can be used both for reliable simulations of the characteristics of electromagnetic showers in crystals at present and for implementation of upgraded theoretical approaches in order to improve the accuracy and productivity of simulations in the future.

Keywords: electrons; positrons; gamma-quanta; relativistic particles; radiation; pair production; simulation; electromagnetic showers; electromagnetic cascades.

Acknowledgements. The work was carried out with the financial support of the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (project F22MC-006 «Development of means for simulating the processes of gamma-quanta emission by electrons and positrons, the production of electron-positron pairs by high-energy gamma-quanta and cascade sequences of these processes in oriented crystals and their applications in high-energy physics»).

Введение

Процессы излучения гамма-квантов электронами и позитронами и рождения электрон-позитронных пар гамма-квантами определяют взаимодействие с веществом электронов, позитронов и гамма-квантов с энергиями десятки мегаэлектронвольт и выше. Многоступенчатые последовательности этих процессов, именуемые электромагнитными ливнями или электромагнитными каскадами, играют существенную роль в формировании спектров астрофизических источников жесткого излучения, прохождении космического излучения через атмосферу, а также регистрации и измерении энергии электронов, позитронов и гамма-квантов электромагнитными калориметрами, используемыми в физике высоких энергий и на орбитальных гамма-телескопах.

Обширные теоретические и экспериментальные исследования 1950–80-х гг. показали [1–7], что при движении частиц под углами порядка градуса и менее к осям и плоскостям кристаллов процессы рассеяния, излучения и рождения пар демонстрируют когерентную природу и претерпевают качественные изменения. В частности, проявляются эффекты каналирования, когерентного рассеяния заряженных частиц цепочками атомов, излучения при каналировании, когерентного тормозного и магнитотормозного излучения и рождения пар. Начиная с энергий, составляющих единицы – десятки гигаэлектронвольт, интенсивность излучения гамма-квантов электронами и позитронами и вероятность рождения электрон-позитронных пар гамма-квантами в кристаллах кратно превышают аналогичные величины в аморфном веществе, а сами процессы сопровождаются значительными поляризационными эффектами [1–5]. В зависимости от атомного номера вещества кристалла степень когерентного увеличения интенсивности излучения и вероятности рождения пар в нем достигает 10–100 раз при энергиях частиц от десятых долей до единиц тераэлектронвольта, приводя к настолько же масштабному уменьшению эффективной радиационной длины, характеризующей скорость развития ливня.

Перечисленные эффекты открывают широкие перспективы для совершенствования детекторов, применяемых в физике высоких энергий и космических исследованиях [8; 9]. В целях их демонстрации с нашим участием были поставлены эксперименты по наблюдению за ускорением электромагнитных ливней, порождаемых электронами [10; 11] и гамма-квантами [12], а также проведено разностороннее моделирование источника позитронов для проектируемых коллайдеров на основе использования излучения электронов в кристаллах [13].

В настоящее время моделирование каскадных электромагнитных процессов с помощью Geant4 [14; 15] и подобных программных инструментов обеспечивается только для аморфной среды. Однако разработка конструкций детекторов нового типа требует всестороннего моделирования протяженных каскадных процессов в кристаллах [5; 11; 16]. Для первичной оценки преимуществ применения кристаллов в электромагнитных калориметрах нами был предложен подход [17], основанный на введении в Geant4 коэффициентов, учитывающих возрастание интенсивности излучения и вероятности рождения пар, вызываемое когерентными эффектами в кристаллах. Этот прием впервые позволил оценить смещение пика энерговыделения и сокращение продольной утечки электромагнитных ливней в кристаллах вольфрамата свинца $PbWO_4$ (PWO), используемых в электромагнитном калориметре детектора CMS (компактного мюонного солениода) Большого адронного коллайдера в Европейском центре ядерных исследований. Однако данный подход не позволял учесть модификацию спектров излучения и образования пар в кристаллах и их угловую зависимость, а также не обладал простыми возможностями уточнения своих предсказаний. Предлагаемая статья посвящена варианту решения указанных проблем на основе интеграции известных методов расчета характеристик ливневых процессов в аморфном веществе в разработанную нами программу расчета характеристик рассеяния, излучения и рождения пар в кристаллах [10; 11; 18].

Расширение возможностей моделирования электромагнитных ливней в кристаллах за счет интеграции с методами аналогичных расчетов в аморфном веществе

При значительных энергиях частиц и толщинах кристаллов в развитии ливня естественно выделить две качественно различные стадии: начальную, многократно ускоренную под влиянием когерентных эффектов при высоких (десятки гигаэлектронвольт и более) энергиях и малых (порядка миллирадиана и менее) углах отклонения направлений импульсов частиц от главного кристаллического направления,

и конечную, включающую максимальное развитие и последующее затухание ливня вследствие преобладания ионизационных энергетических потерь электронов и позитронов над радиационными при энергиях частиц десятки – сотни мегаэлектронвольт. Практика моделирования когерентных радиационных процессов в кристаллах [9–13; 17; 18] на основе метода Байера – Каткова [5] демонстрирует возможность его полного проведения лишь для короткой начальной стадии развития ливня, на которой энергии заряженных частиц успевают уменьшиться в несколько раз на миллиметровой длине, их число не превышает нескольких десятков, а величина углов отклонения – нескольких миллирадиан. В то же время при начальных энергиях сотни гигаэлектронвольт и более число частиц ливня на конечной стадии достигает многих тысяч, а величина углов отклонения – многих градусов. Трудоемкость точных расчетов возрастает при этом на один-два порядка за счет большей длины траекторий, на два-три порядка за счет увеличения количества частиц и на один-два порядка за счет уменьшения шага интегрирования уравнений движения частиц, отклонившихся на такие значительные углы. Указанные факторы делают проведение полного моделирования развития высокоэнергетических ливней в кристаллах протяженностью более нескольких радиационных длин на основе метода Байера – Каткова практически невозможным и заведомо избыточным.

Итак, ускорение развития ливней на порядок и более проявляется в кристаллах только на малых длинах [3–5; 9–13; 16; 17]. Довольно быстро процессы излучения и рождения пар перестают радикально отличаться от аналогичных процессов в аморфном веществе по причине ослабления когерентных эффектов в результате падения энергий частиц и значительных отклонений их импульсов от главных кристаллических направлений. Как следствие, проведение трудоемких расчетов методом Байера – Каткова оказывается принципиально необходимым лишь для небольшого числа частиц достаточно высоких энергий в узкой области направлений движения. В связи с этим, если исключить учет влияния когерентных процессов при низких энергиях и больших отклонениях импульсов частиц и продолжать моделирование электромагнитного ливня более быстрыми методами [14; 15], используемыми при рассмотрении аморфного вещества, можно совместить детальное описание значительного эффекта когерентного ускорения развития ливня с прослеживанием тысяч и более траекторий его частиц на стадии максимального развития и перехода к затуханию.

Характерный масштаб углов проявления когерентного усиления процессов излучения и рождения пар при энергиях несколько гигаэлектронвольт и выше задается величиной $\frac{V_0}{m}$, где V_0 – амплитуда усредненного потенциала атомной цепочки или плоскости; m – масса покоя электрона [4]. Для главных кристаллических осей эта величина составляет, например, около 2 мрад для вольфрама и 0,3 мрад для кремния и алмаза. Для кристаллических плоскостей она обычно в 5–7 раз меньше. В области энергий, при которых интенсивность излучения и вероятность рождения пар в кристаллах заметно превосходят аналогичные величины в аморфном веществе, угол $\frac{V_0}{m}$ превышает угол каналирования в несколько раз и более. Поскольку при углах падения $\theta \gg \frac{V_0}{m}$ и достаточно высоких энергиях частиц роль когерентных процессов быстро уменьшается, эти процессы необходимо учитывать только до углов, составляющих 3–5 углов $\frac{V_0}{m}$, а при больших величинах переходить к модели аморфного вещества [14; 15], предусмотрев при этом возможность ее уточнения в будущем.

Интенсивность когерентного излучения в полях атомных цепочек сравнивается с интенсивностью некогерентных процессов при энергии ϵ_{eq} , составляющей 0,5–1,0 ГэВ для цепочек с наименьшими межатомными расстояниями и амплитудами тепловых колебаний и 1,0–1,5 ГэВ и более для остальных цепочек. Что касается процесса когерентного рождения пар, то при энергиях фотонов несколько гигаэлектронвольт и ниже его вероятность несущественно отличается от вероятности Бете – Гайтлера в аморфном веществе.

Поскольку набор инструментов Geant4 [14; 15] не располагает возможностями частого кратковременного подключения в ходе моделирования электромагнитных ливней в кристаллах, был выбран путь внедрения его процедур в алгоритм моделирования каскадных процессов в кристаллах. Приступая к реализации этой идеи, следует исходить из того, что данный инструментарий разрабатывался в качестве универсального средства, описывающего процессы рассеяния и излучения в очень широком диапазоне параметров. В то же время условия использования когерентных процессов рассеяния и излучения в кристаллах заметно ограничены, что позволяет сузить рассматриваемый ниже минимальный набор необходимых процедур Geant4 и ускорить их реализацию.

Рассеяние. Естественно начать с процесса рассеяния. Помимо того, что столкновения электронов и позитронов с атомами порождают процессы излучения и рождения пар в аморфном веществе, они

также вызывают отклонение электронов и позитронов, определяющее распределение частиц ливня по направлениям движения. В Geant4 и ряде других пакетов моделирование процесса рассеяния проводится на базе сечения рассеяния ультрарелятивистских электронов и позитронов атомом [15, sect. 8.2.1]

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega} = \frac{4Z^2\alpha^2}{p^2v^2(\theta_{sc}^2 + \theta^2)^2}, \quad (1)$$

где Z – атомный номер вещества; α – постоянная тонкой структуры; p и v – импульс и скорость электрона; $d\Omega = \theta d\theta d\varphi$ – элемент телесного угла; $\theta \ll 1$ и φ – полярный и азимутальный углы рассеяния;

$\theta_{sc} = \frac{\hbar}{pR} \left(1,13 + 3,76 \frac{\alpha Z}{\beta^2} \right)$ – эффективный минимальный угол, описывающий влияние на рассеяние экранирования ядерного потенциала атомными электронами, в определении которого $R = 0,885 a_B Z^{\frac{1}{3}}$ и a_B – радиус экранирования и боровский радиус соответственно, а β – скорость частицы в единицах скорости света. Максимальный же угол рассеяния ограничивается в логарифмическом приближении предельным углом [15, sect. 8.2.1]

$$\theta_n = \frac{12\hbar}{pr_n},$$

где r_n – радиус ядра. Оценка интеграла (1) по полному телесному углу $\sigma \approx 4\pi Z^2 \alpha^2 R^2 \approx 1,5 \cdot 10^{-20} \cdot Z^{\frac{4}{3}} \text{ см}^2$ показывает, что при типичных концентрациях атомов $n \sim 5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ длина пробега электронов не достигает микрометра. Поскольку радиационная длина X_0 составляет 3,5 мм в вольфраме и 9,36 см в кремнии, понятно, что полное аналоговое моделирование процесса рассеяния с настолько малым шагом является излишним.

Для оптимизации выбора шага моделирования процесса рассеяния введем промежуточный угол θ_2 , $\theta_{sc} \ll \theta_2 \ll \theta_n$, и будем описывать многочисленные отклонения частиц на «малые» углы $\theta \ll \theta_2$, следуя теории многократного рассеяния [1; 15; 19], а редкие случаи рассеяния на «большие» углы $\theta_2 \ll \theta \ll \theta_n$ моделировать методом Монте-Карло, разыгрывая (определяя вероятностным методом) сначала длину рассеяния

$$l_{sc} = -\frac{\ln r}{n\sigma_{tot}}, \quad (2)$$

где r – определяемое на единичном интервале псевдослучайное число [14; 15]; $\sigma_{tot} = \frac{4\pi Z^2 \alpha^2}{p^2 v^2} \left[\frac{1}{\theta_{sc}^2 + \theta_2^2} - \frac{1}{\theta_{sc}^2 + \theta_n^2} \right]$ – интегральное сечение рассеяния на углы $\theta_2 < \theta < \theta_n$. Двумерный угол однократного рассеяния $\bar{\theta}_s$ разыгрывается с использованием сечения (1). Затем к нему добавляется угол многократного рассеяния $\bar{\theta}_{ms}$ на длине (2), разыгрываемый с использованием гауссова распределения и среднего квадрата угла рассеяния на единичной длине

$$\theta_s^2 \equiv nl_{sc} \int \theta^2 d^2\sigma = \frac{4\pi Z^2 \alpha^2 nl_{sc}}{p^2 v^2} \left[\ln \left(1 + \frac{\theta_2^2}{\theta_{sc}^2} \right) - \frac{\theta_2^2}{\theta_{sc}^2 + \theta_2^2} \right].$$

Следуя описанному алгоритму и выбирая θ_2^2 равным $10^2 - 10^3 \theta_{sc}^2$, можно сократить число шагов моделирования процесса рассеяния в десятки – сотни раз при сохранении условия $l_{sc} \ll X_0$.

Излучение. Для моделирования процесса излучения исходным является полное (проинтегрированное по энергиям $\omega > \omega_c$, где ω_c – минимальная энергия фотона, и направлениям испускания фотонов) сечение этого процесса σ_{rad} . Поскольку процессы излучения исследуются лишь в кристаллах немногих химических элементов (алмаз, Si, Ge, W, PWO), вместо параметризации сечений по атомному номеру [18, sect. 8.2.1] проще использовать исходные данные [20] для отдельных элементов. Отметим, что в работе [20] выбрано исключительно низкое значение ω_c (0,1 эВ), обеспечивающее полную независимость от него результатов моделирования. Подобно длине рассеяния (2), сечение излучения используется для разыгрывания длины пробега частицы до точки испускания гамма-кванта

$$l_{rad} = -\frac{\ln r}{n\sigma_{rad}}. \quad (3)$$

В случае $l_{rad} > l_{sc}$ разыгрывается суммарный угол однократного и многократного рассеяния и рассчитываются ионизационные потери энергии излучающей частицы на длине l_{sc} , производится замена

$l_{\text{rad}} \rightarrow l_{\text{rad}} - l_{\text{sc}}$, а длина l_{sc} разыгрывается снова и сравнивается с l_{rad} . При выполнении условия $l_{\text{rad}} \leq l_{\text{sc}}$ разыгрывается угол многократного рассеяния $\bar{\theta}_{ms}$ и рассчитываются ионизационные потери на длине l_{rad} , производится замена $l_{\text{sc}} \rightarrow l_{\text{sc}} - l_{\text{rad}}$, разыгрывается новое значение l_{rad} и, главное, энергия испущенного фотона. С этой целью дифференциальное сечение излучения представляется в форме функции

$$\frac{d\sigma_{\text{rad}}}{d\omega} = \frac{S(x)}{S(x_0)x \ln x_0}$$

параметра $x = \frac{\omega}{t}$, где t – кинетическая энергия излучающей частицы $x_0 = \frac{\omega_c}{t}$, а функция $S(x)$ описана в работе [21, sect. 8.2.2]. Далее разыгрывается значение введенного параметра $x = e^{r_1 \ln x_0}$, где r_1 – случайное число. При выполнении условия $r_2 < \frac{S(x)}{S(x_0)}$, где r_2 – другое случайное число, значение x используется

для расчета энергии гамма-кванта $\omega = xt$, определяющей также кинетическую энергию испутившей его частицы $t - \omega$. Если же последнее неравенство не выполняется, разыгрывание энергии излученного гамма-кванта повторяется до его успешной реализации.

Помимо энергии фотона, разыгрывается отклонение частицы при его испускании. Для этого генерируется сначала случайная величина

$$b = \begin{cases} 0,625, & r_1 < 0,25, \\ 1,875, & r_1 \geq 0,25, \end{cases} \quad (4)$$

а затем параметр

$$u = -\frac{\ln(r_2 r_3)}{b}, \quad (5)$$

определяющий величину $\theta = \frac{mu}{\varepsilon}$, которая используется далее в качестве полярного угла рассеяния при выполнении условия $\theta \leq \pi$. В противном случае повторяется его разыгрывание с использованием формул (4) и (5). Азимутальный угол рассеяния равномерно разыгрывается на интервале от 0 до 2π .

Рождение пар. Моделирование рождения пары также начинается с разыгрывания длины пробега гамма-кванта по формуле, аналогичной выражениям (2) и (3), с использованием полного сечения. Поскольку каскадные процессы исследуются на практике в кристаллах небольшого числа химических элементов, вместо параметризации сечения рождения пары по атомному номеру [18, sect. 6.5.1] также используются исходные данные [22] для рассматриваемых элементов. Остановимся на моделировании распределения энергии в паре, существенно различающемся для когерентных и некогерентных процессов. В аморфном веществе это распределение является симметричным и описывается дифференциальным сечением

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \alpha r_e^2 Z^2 \left[A_1 (0,5 - \varepsilon)^2 F_1 + A_2 F_2 \right], \quad (6)$$

$$F_1(\varepsilon) = 3\Phi_1(\varepsilon) - \Phi_2(\varepsilon) - F(Z), \quad (7)$$

$$F_2(\varepsilon) = \frac{3}{2}\Phi_1(\varepsilon) + \frac{1}{2}\Phi_2(\varepsilon) - F(Z), \quad (8)$$

где ε – энергия произвольной частицы пары. Функции $\Phi_1(\varepsilon)$, $\Phi_2(\varepsilon)$ и $F(Z)$ приведены в руководстве пользователя Geant4 [15; 21], а коэффициенты A_1 , A_2 введены для сокращенной записи выражения (6), детальный вид которого нам не понадобится. Поводом для упоминания здесь явных выражений (7) и (8) является следующее обстоятельство: как наши выкладки, так и сравнение результатов численных расчетов с графиками классической монографии [23] указывают на то, что знак «минус» перед дробью $\frac{1}{2}$ в выражении (8) в обеих версиях руководства пользователя Geant4 [15; 21] ошибочен, а «правильный» спектр [23] удастся воспроизвести только после его исправления на стоящий в формуле (8) знак «плюс».

Выражение (6) также позволяет пояснить, что энергия выбранной частицы пары разыгрывается после вероятностного выбора первого либо второго слагаемого в квадратных скобках по соответствующей ему формуле

$$\varepsilon = 0,5 - (0,5 - \varepsilon_{\text{min}}) r^{\frac{1}{3}}$$

или

$$\varepsilon = \varepsilon_{\min} + (0,5 - \varepsilon_{\min})r,$$

где r – псевдослучайное число. Наконец, полярный угол θ вылета частицы относительно направления импульса родительского фотона разыгрывается с использованием алгоритма [21]

$$\theta = -\frac{16}{15} \ln(r_2 r_3) \frac{m}{\varepsilon} \begin{cases} 3, & r_1 < 0,25, \\ 1, & r_1 \geq 0,25, \end{cases}$$

где $r_{1,2,3}$ – также псевдослучайные числа. Азимутальный угол вылета рождающихся частиц по-прежнему равномерно разыгрывается на интервале от 0 до 2π .

Последовательность моделирования процессов в электромагнитном ливне

При моделировании развития высокоэнергетического электромагнитного ливня, образуемого процессами излучения и рождения пар, записываются координаты точек испускания, энергии и направления импульса гамма-квантов, излучаемых исходными либо рождающимися электронами и позитронами, а также аналогичные характеристики электронов и позитронов, рождаемых падающими или излученными ранее гамма-квантами, как это иллюстрирует блок-схема на рис. 1. Сохраненные данные используются для моделирования образования пар, рассеяния, ионизационного торможения и излучения вторичных электронов и позитронов, а также рождения пар излученными гамма-квантами вплоть до завершения прослеживания траекторий электронов и позитронов и исчерпания списка сохраненных гамма-квантов с энергиями, превышающими определенный порог, который чаще выбирается в области десятков – сотен мегаэлектронвольт. Данная последовательность действий одинакова для аморфного вещества и кристалла.



Рис. 1. Блок-схема алгоритма моделирования электромагнитного ливня
 Fig. 1. Flow chart of the electromagnetic shower simulation algorithm

Цикл моделирования начинается с запуска частицы, падающей на кристалл, – электрона ($IZ_0 = -1$), позитрона ($IZ_0 = +1$) или гамма-кванта ($IZ_0 = 0$). В первых двух случаях проводится моделирование движения с учетом рассеяния, ионизационных потерь и излучения. При этом N_γ испущенным гамма-квантам присваиваются номера $I_\gamma = 1, 2, \dots, N_\gamma$ и в памяти сохраняются энергия $\omega(I_\gamma)$, продольная координата точки испускания $z_\gamma(I_\gamma)$ и поперечные компоненты скорости $v_x(I_\gamma), v_y(I_\gamma)$ каждого кванта. Также для соответствующего прослеживания частиц, падающих на кристалл и рождающихся в нем, вводится параметр IP. Для первых частиц он полагается равным нулю, а для вторых частиц задается способом, описанным ниже.

Если начальной частицей является гамма-квант ($IZ_0 = 0$), то осуществляется переход к моделированию рождения пары с увеличением номера I_γ рассмотренных квантов на единицу. Аналогичный переход осуществляется также после завершения моделирования движения и излучения электрона и позитрона предыдущей пары при наличии квантов для обработки ($I_\gamma < N_\gamma$). В отсутствие же излученных квантов ($N_\gamma = 0$) или по завершении их рассмотрения ($I_\gamma = N_\gamma$) после окончания моделирования траекторий электрона и позитрона последней пары выполняется переход к следующей начальной частице.

При моделировании рождения пары очередным квантом энергии $\omega(I_\gamma)$ его вероятность, дифференциальная по энергии ε одной из частиц пары с зарядом $IZ \cdot e$, используется для разыгрывания распределения энергии в паре. Затем рассчитывается интегральная вероятность $W_{pp}(\omega(I_\gamma))$ и разыгрывается координата точки рождения пары $z_{pp} = z_\gamma(I_\gamma) - \frac{\ln r}{W_{pp}(\omega(I_\gamma))}$, где r – случайное число. При выходе

этой координаты за пределы кристалла ($z_{pp} \geq l_{cr}$) энергия и поперечные компоненты скорости кванта сохраняются для последующего анализа и использования характеристик излучения, покинувшего кристалл. Далее в случае исчерпания списка сохраненных характеристик излученных гамма-квантов ($I_\gamma = N_\gamma$) осуществляется переход к следующей начальной частице. В противном случае ($I_\gamma < N_\gamma$) моделируется рождение пары следующим квантом из списка.

При попадании же точки рождения пары внутрь кристалла ($z_{pp} < l_{cr}$) моделируются стартующие из этой точки движение и излучение частиц родившейся пары, заряд $IZ \cdot e$ и энергия ε одной из которых уже были разыграны при вычислении вероятности рождения пары. Для управления переходом к моделированию движения второй частицы пары и последующим переходом к разыгрыванию рождения пары следующим квантом введенный выше параметр IP изначально полагается равным единице. На этом же шаге задаются поперечные компоненты скорости частицы $v_x = v_{x\gamma}(I_\gamma) + \theta_x$, $v_y = v_{y\gamma}(I_\gamma) + \theta_y$ в точке рождения пары $z = z_\gamma(I_\gamma)$, которые складываются из компонент скорости фотона и отклонений от них θ_x, θ_y , приобретаемых при рождении. При рассмотрении кристалла также проводится разыгрывание поперечных координат точки рождения пары, не отображенное на рис. 1. Далее, как и в случае падения заряженных частиц на кристалл, проводится моделирование движения частиц, рожденных внутри него, с учетом рассеяния, ионизационных потерь и излучения и в памяти сохраняются энергии $\omega(I_\gamma)$, координаты точек испускания $z_\gamma(I_\gamma)$ и поперечные компоненты скорости $v_x(I_\gamma), v_y(I_\gamma)$ всех N_γ испущенных гамма-квантов, которым присваиваются номера $I_\gamma = 1, 2, \dots, N_\gamma$. Увеличение параметра IP до двух после завершения моделирования траектории первой частицы пары обеспечивает переход к моделированию траектории второй частицы пары, начинающемуся с изменения заряда ($IZ = -IZ$) и энергии ($\varepsilon = \omega(N_\gamma) - \varepsilon$), возврата к начальной координате $z = z_\gamma(I_\gamma)$ и нового задания поперечных компонент скорости $v_x = v_{x\gamma}(I_\gamma) + \theta_x$, $v_y = v_{y\gamma}(I_\gamma) + \theta_y$. Увеличение значения параметра IP до трех по окончании моделирования прохождения через кристалл второй частицы пары обеспечивает переход к рассмотрению следующего гамма-кванта. При этом номер I_γ рассмотренного кванта сравнивается с полным количеством N_γ квантов в списке. В случае $I_\gamma < N_\gamma$ осуществляется переход к моделированию рождения пары этим гамма-квантом, а в случае $I_\gamma = N_\gamma$ – переход к рассмотрению новой начальной частицы, завершающий цикл моделирования, порожденный предыдущей начальной частицей.

Примеры расчетов ливневых процессов

В качестве весьма актуального примера рассмотрим излучение электронов с начальной энергией 6 ГэВ в кристалле вольфрама, лежащее в основе увеличения выхода гамма-квантов в источнике позитронов повышенной интенсивности, разрабатываемом с нашим участием в Европейском центре ядерных исследований [13]. Как было отмечено выше, интенсивность когерентного излучения в полях атомных цепочек

сравнивается с интенсивностью некогерентного излучения при энергии ϵ_{eq} , составляющей 0,5–1,0 ГэВ для цепочек с наименьшими межатомными расстояниями и амплитудами тепловых колебаний и 1,0–1,5 ГэВ и более для остальных цепочек. При энергиях $\epsilon < \epsilon_{\text{eq}} \sim 1$ ГэВ отношение когерентного вклада в интенсивность излучения к некогерентному вкладу убывает как отношение $\frac{\epsilon}{\epsilon_{\text{eq}}}$, вследствие чего область учета когерентных эффектов в излучении естественно ограничить энергией E_{th} , в несколько раз меньшей энергии ϵ_{eq} . Спектральные распределения энергетических потерь электронов в миллиметровом кристалле вольфрама, рассчитанные при значениях граничной энергии E_{th} , равных 0,5; 0,2 и 0,05 ГэВ, приводятся на рис. 2.

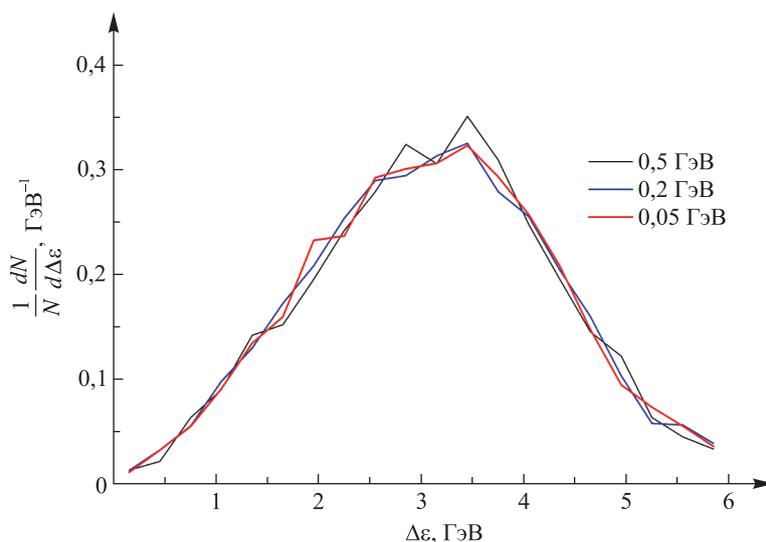


Рис. 2. Распределение энергетических потерь электронов с начальной энергией 6 ГэВ в миллиметровом кристалле вольфрама, ориентированном вдоль оси $\langle 111 \rangle$, при значениях энергии E_{th} перехода от детального расчета вероятности излучения по формулам Байера – Каткова к ее расчету по формуле Бете – Гайтлера, равных 0,5; 0,2 и 0,05 ГэВ

Fig. 2. Distribution of energy losses of electrons with 6 GeV initial energy in the millimeter-thick tungsten crystal oriented along the $\langle 111 \rangle$ axis at values of the transition energy E_{th} from the detailed calculation of the radiation probability using the Bayer – Katkov formulas to the calculation using the Bethe – Heitler formula equal to 0.5; 0.2 and 0.05 GeV

Сравнение приведенных распределений, равно как и спектров излучаемых фотонов, рассчитанных при различных значениях граничной энергии E_{th} , показывает, что переход между значениями 0,2 и 0,05 ГэВ вызывает заметно меньшее изменение указанных распределений, чем переход между значениями 0,5 и 0,2 ГэВ, иллюстрируя сходимость результатов моделирования при уменьшении граничной энергии E_{th} , и обосновывает выбор значения $E_{\text{th}} \approx 0,2$ ГэВ для дальнейшего моделирования реальных установок.

На рис. 3 представлена спектральная интенсивность излучения электронов с начальной энергией 6 ГэВ в миллиметровом кристалле вольфрама вместе со спектральной интенсивностью излучения в миллиметровой мишени из аморфного вольфрама. Их сравнение позволяет убедиться в том, что переход на кристаллический радиатор позволит увеличить выход гамма-квантов в широком диапазоне энергий в 6 раз и более. При этом важнейшей особенностью спектра излучения в кристалле является его выход на плато в играющей центральную роль при получении позитронов области энергий фотонов 100–200 МэВ, что принципиально отличает кривую, представленную на рис. 3, от кривых, приведенных на рис. 1 и 3 в работе [24]. Это отличие связано с принципиальной необходимостью рассмотрения реальной протяженности области формирования излучаемых квантов на мягком конце спектра излучения [18].

В качестве примера масштабного применения развитого подхода рассмотрим ливень, инициируемый гамма-квантами с энергией 1 ТэВ (10^{12} эВ) в сантиметровом кристалле вольфрама, также ориентированном вдоль оси $\langle 111 \rangle$. Усредненно развитие ливня по всей длине сантиметрового кристалла (1 см соответствует примерно $2,86 X_0$) характеризуется примерно 10 эффективными радиационными длинами (рис. 4). Почти десятикратное возрастание интенсивности излучения и вероятности рождения пар приводит к тому, что при энергиях 0,1–1,0 ТэВ на 1 см кристалла укладывается около 30 эффективных радиационных длин, вследствие чего средние энергии частиц ливня успевают уменьшиться до нескольких десятков

гигаэлектронвольт на длине порядка 2 мм. При этом высокая скорость радиационных потерь энергии не позволяет заметно проявиться эффекту деканалирования. Кроме того, последний ослабляется, а излучение электронов усиливается вследствие эффекта радиационного охлаждения [25; 26]. В подобных условиях энергетические потери электронов заметно превосходят таковые позитронов, что приводит к отраженному на рис. 4 превышению количества позитронов с энергией несколько гигаэлектронвольт и более над количеством электронов. Как видно из рис. 4, в условиях трудоемкого прослеживания многочисленных траекторий электронов и позитронов большой длины в диапазоне энергий от сотен гигаэлектронвольт до сотен мегаэлектронвольт приемлемой статистики в области энергий порядка 10 ГэВ и выше набрать не удастся. Однако этого нетрудно достичь, повысив соответствующим образом нижнюю границу энергий, при которой прекращается моделирование.

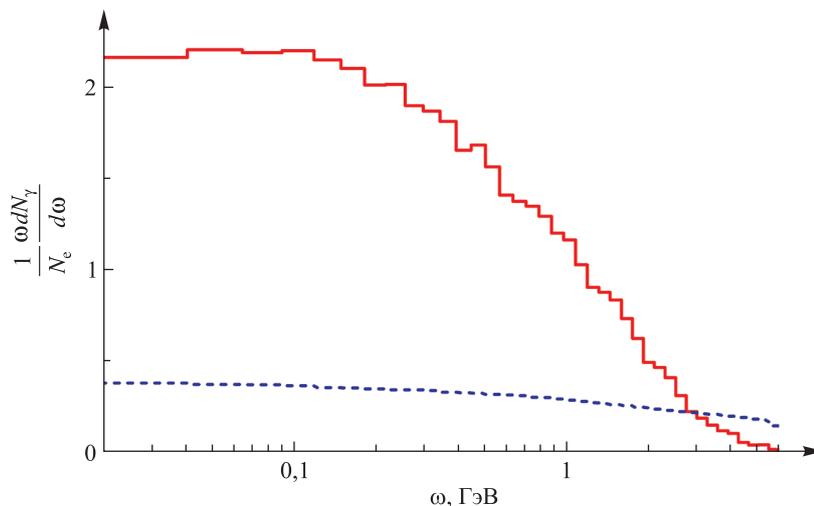


Рис. 3. Спектральное распределение фотонов, излученных электронами с начальной энергией 6 ГэВ в миллиметровом кристалле вольфрама, ориентированном вдоль оси <111> (сплошная линия), и миллиметровой аморфной вольфрамовой мишени (пунктирная линия)

Fig. 3. Spectral distribution of photons emitted by electrons with 6 GeV initial energy in the millimeter-thick tungsten crystal oriented along the <111> axis (solid line) and the millimeter-thick amorphous tungsten target (dashed line)

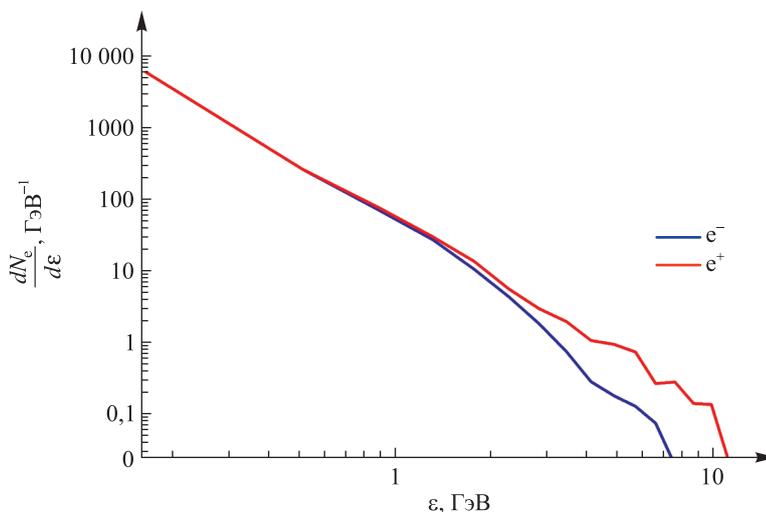


Рис. 4. Энергетические распределения электронов и позитронов электромагнитного ливня, инициированного гамма-квантом с энергией 1 ТэВ в сантиметровом кристалле вольфрама, ориентированном вдоль оси <111>

Fig. 4. Energy distribution of electrons and positrons in the electromagnetic shower initiated by the 1 TeV gamma-quantum in the centimeter-long tungsten crystal oriented along the <111> axis

При энергиях несколько гигаэлектронвольт типичное отклонение электронов и позитронов на радиационной длине вследствие рассеяния на ядрах уже превышает угол каналирования и достигает характерного угла $\frac{V_0}{m}$, что приводит к ослаблению излучения электронов и выравниванию радиационных потерь электронов и позитронов. При дальнейшем понижении энергии большинство электронов и позитронов отклоняются на углы, превышающие угол $\frac{V_0}{m}$ в несколько раз, и роль когерентных эффектов в рассеянии, излучении и рождении пар становится второстепенной, что и позволяет перейти к моделированию завершения развития электромагнитного ливня методами, разработанными для аморфной среды в рамках набора программных инструментов моделирования Geant4 [14; 15].

Заключение

Таким образом, нами разработана гибридная программа, сочетающая моделирование когерентно усиленных процессов рассеяния, излучения и рождения пар в кристаллической решетке при высоких энергиях и малых отклонениях импульсов частиц от главного кристаллического направления с моделированием аналогичных процессов в приближении аморфной среды при низких энергиях и больших отклонениях импульсов частиц. Программа может быть использована как для внедрения уточненных теоретических подходов в будущем, так и для проведения надежных расчетов в настоящее время.

В рамках развития новых подходов на очереди стоит задача перехода к выражениям, учитывающим остаточные ориентационные эффекты при больших отклонениях от главных кристаллических осей на уровне поправок к формулам теории Бете – Гайтлера. Значительное количество и протяженность траекторий ставят задачу разработки приближений, позволяющих существенно понизить трудоемкость расчетов по формулам теории когерентного тормозного излучения и образования пар. При получении подобных формул можно воспользоваться усреднением по значительным интервалам направлений движения. Кроме того, следует учесть возможность попадания частиц в условия плоскостного каналирования, сохраняющуюся и при больших углах падения на ось.

В существующем же виде в зависимости от соотношения угла падения на ось ψ_{BK} , ограничивающего область применения формулы Байера – Каткова, и характерного угла $\frac{V_0}{m}$ программа может быть использована как для быстрой демонстрации роли когерентных эффектов в развитии высокоэнергетических электромагнитных ливней, так и для детальных расчетов с контролируемой точностью. В первом случае угол ψ_{BK} может составлять 2–3 угла $\frac{V_0}{m}$, что соответствует примерно 5 мрад в вольфраме и 1 мрад в кремнии и алмазе. Для более точных расчетов и проверки сходимости результатов следует выбирать угол ψ_{BK} , равный 5–10 углам $\frac{V_0}{m}$, что соответствует 10–20 мрад в вольфраме и 3–5 мрад в кремнии и алмазе.

Внедрение нами адаптированных процедур Geant4 в программу моделирования радиационных процессов в кристаллах было продиктовано большей сложностью и трудоемкостью последней по сравнению с Geant4. При решении же задач детального моделирования работы сложных экспериментальных установок рациональнее, наоборот, включать алгоритмы моделирования радиационных процессов в кристаллах в Geant4 [27], используя изложенный нами подход для дальнейшей разработки и тестирования внедряемых процедур.

Библиографические ссылки

1. Тер-Микаелян МЛ. *Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях*. Ереван: Издательство Академии наук Армянской ССР; 1969. 457 с.
2. Diambri Palazzi G. High-energy bremsstrahlung and electron pair production in thin crystals. *Reviews of Modern Physics*. 1968;40(3):611–631. DOI: 10.1103/RevModPhys.40.611.
3. Барышевский ВГ. *Каналирование, излучение и реакции в кристаллах при высоких энергиях*. Минск: Издательство БГУ имени В. И. Ленина; 1982. 256 с.
4. Baryshevsky VG, Tikhomirov VV. Synchrotron-type radiation processes in crystals and polarization phenomena accompanying them. *Soviet Physics Uspekhi*. 1989;32(11):1013–1032. DOI: 10.1070/PU1989v032n11ABEH002778.
5. Байер ВН, Катков ВМ, Страховенко ВМ. *Электромагнитные процессы при высокой энергии в ориентированных монокристаллах*. Скринский АН, редактор. Новосибирск: Наука; 1989. 395 с.
6. Kimball JC, Cue N. Quantum electrodynamics and channeling in crystals. *Physics Reports*. 1985;125(2):69–101. DOI: 10.1016/0370-1573(85)90021-3.
7. Sørensen AH, Uggerhøj E. Channeling and channeling radiation. *Nature*. 1987;325(6102):311–318. DOI: 10.1038/325311a0.

8. Baryshevsky VG, Tikhomirov VV. Crystal applications in high energy physics for new phenomena observation and acceleration technology development. *Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics Series*. 2017;4:20–32. EDN: YNZIMD.
9. Bandiera L, Baryshevsky VG, Canale N, Carsi S, Cutini S, Davi F, et al. A highly-compact and ultra-fast homogeneous electromagnetic calorimeter based on oriented lead tungstate crystals. *Frontiers in Physics*. 2023;11:1254020. DOI: 10.3389/fphy.2023.1254020.
10. Bandiera L, Bagli E, Guidi V, Mazzolari A, Berra A, Lietti D, et al. Broad and intense radiation accompanying multiple volume reflection of ultrarelativistic electrons in a bent crystal. *Physical Review Letters*. 2013;111(25):255502. DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.255502.
11. Bandiera L, Tikhomirov VV, Romagnoni M, Argiolas N, Bagli E, Ballerini G, et al. Strong reduction of the effective radiation length in an axially oriented scintillator crystal. *Physical Review Letters*. 2018;121(2):021603. DOI: 10.1103/PhysRevLett.121.021603.
12. Soldani M, Bandiera L, Moulson M, Ballerini G, Baryshevsky VG, Bomben L, et al. Strong enhancement of electromagnetic shower development induced by high-energy photons in a thick oriented tungsten crystal. *The European Physical Journal C*. 2023;83(1):101. DOI: 10.1140/epjc/s10052-023-11247-x.
13. Soldani M, Alharthi F, Bandiera L, Canale N, Cavoto G, Chaikovska I, et al. Radiation in oriented crystals: innovative application to future positron sources. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section A, Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 2024;1058:168828. DOI: 10.1016/j.nima.2023.168828.
14. Agostinelli S, Allison J, Amako K, Apostolakis J, Araujo H, Arce P, et al. Geant4 – a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section A, Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 2003;506(3):250–303. DOI: 10.1016/S0168-9002(03)01368-8.
15. *Geant4: a simulation toolkit. Physics reference manual* [Internet]. Release 11.2, Rev8.0. [S. l.]: Geant4 Collaboration; 2023 December 8 [cited 2024 February 20]. XII, 454 p. Available from: <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/PhysicsReferenceManual/fo/PhysicsReferenceManual.pdf>.
16. Møller SP, Sørensen AH, Uggerhøj E, Elsener K. *Can a crystalline detector be used in very high energy gamma ray astronomy?* Geneva: European Organization for Nuclear Research; 1989 November 14. 14 p. Report No.: CERN-EP-89-149.
17. Baryshevsky VG, Haurylavets VV, Korjik MV, Lobko AS, Mechinsky VA, Sytov AI, et al. On the influence of crystal structure on the electromagnetic shower development in the lead tungstate crystals. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B, Beam Interactions with Materials and Atoms*. 2017;402:35–39. DOI: 10.1016/j.nimb.2017.02.066.
18. Guidi V, Bandiera L, Tikhomirov VV. Radiation generated by single and multiple volume reflection of ultrarelativistic electrons and positrons in bent crystals. *Physical Review A*. 2012;86(4):042903. DOI: 10.1103/PhysRevA.86.042903.
19. Jackson JD. *Classical electrodynamics*. 3rd edition. [S. l.]: John Wiley & Sons; 1999. XXII, 811 p.
20. Perkins ST, Cullen DE, Seltzer SM. *Tables and graphs of electron-interaction cross sections from 10 eV to 100 GeV derived from the LLNL Evaluated Electron Data Library (EEDL), Z = 1–100*. Livermore: Lawrence Livermore National Laboratory; 1991. XVI, 485 p. (UCRL-50400 series; volume 31).
21. *Geant4: a simulation toolkit. Physics reference manual* [Internet]. Version Geant4 9.6.0. [S. l.]: [s. n.]; 2012 November 30 [cited 2024 February 20]. 572 p. Available from: <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/PhysicsReferenceManual/BackupVersions/V9.6/fo/PhysicsReferenceManual.pdf>.
22. Hubbell JH, Gimm HA, Øverbø I. Pair, triplet, and total atomic cross sections (and mass attenuation coefficients) for 1 MeV – 100 GeV photons in elements $Z = 1$ to 100. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 1980;9(4):1023–1148. DOI: 10.1063/1.555629.
23. Гайтлер В. *Квантовая теория излучения*. Боголюбов НН, редактор. Москва: Издательство иностранной литературы; 1956. 491 с.
24. Dadoun O, Le Meur G, Touze F, Variola A, Artru X, Chehab R, et al. An event generator for crystal source. Application of the CLIC positron baseline. *Journal of Physics: Conference Series*. 2012;357:012024. DOI: 10.1088/1742-6596/357/1/012024.
25. Tikhomirov VV. Simulation of multi-GeV electron energy losses in crystals. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B, Beam Interactions with Materials and Atoms*. 1989;36(3):282–285. DOI: 10.1016/0168-583X(89)90670-8.
26. Artru X. A simulation code for channeling radiation by ultrarelativistic electrons or positrons. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B, Beam Interactions with Materials and Atoms*. 1990;48(1–4):278–282. DOI: 10.1016/0168-583X(90)90122-B.
27. Sytov AI, Tikhomirov VV, Bandiera L. Simulation code for modeling of coherent effects of radiation generation in oriented crystals. *Physical Review Accelerators and Beams*. 2019;22(6):064601. DOI: 10.1103/PhysRevAccelBeams.22.064601.

Получена 23.08.2024 / исправлена 26.08.2024 / принята 09.09.2024.
Received 23.08.2024 / revised 26.08.2024 / accepted 09.09.2024.