

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Corso di Laurea in Fisica

Tesi di Laurea

Channeling elettronico in cristalli micrometrici curvi di Germanio

Relatore:

Prof. Davide de Salvador

Correlatore:

Dott. Sara Carturan

Laureando: Nicola Carlon Zambon

Anno Accademico 2013/2014

Indice

1	Introduzione	5
1.1	Struttura dell'Elaborato	6
2	Struttura e caratteristiche dei solidi cristallini	7
2.1	Una forma approssimata per il potenziale planare	8
3	Stima della lunghezza di Dechanneling	12
3.1	Lo scattering nucleare	13
3.2	Lo scattering elettronico	14
4	Fabbricazione di una lamina sottile	18
4.1	Sputtering Cr-Au e taglio chimico	19
4.2	Etching e montaggio	20
4.3	Mappe profilometriche, trasmissione di raggi X	21
5	Caratterizzazione del campione curvo	23
5.1	Condizioni di Laue	23
5.2	Misure diffrattometriche della curvatura QM	24
6	Simulazione della dinamica di elettroni in un reticolo cristallino	29
6.1	La cella dinamica	29
6.2	Algoritmo d'integrazione	31
6.3	Calcolo numerico della lunghezza di dechanneling	33
6.4	Il calcolo dello spettro d'irraggiamento	36
7	Conclusioni	38
8	Appendici	40
8.1	Il calcolo di $f(E_T)$	40
8.2	Il calcolo di $F(x)$	41
8.3	Il potenziale di Thomas-Fermi	41

1 Introduzione

Un anno prima che Bragg e suo figlio, nel 1913, formulassero la loro interpretazione della diffrazione dei raggi X da parte dei cristalli, J. Stark pubblicava una lettera [1] in cui suggeriva la possibilità che alcune direzioni nei cristalli fossero particolarmente trasparenti alle particelle cariche. La sua intuizione venne presa in considerazione solo negli anni 60', quando i fenomeni di channeling emersero dalle simulazioni numeriche di M.T. Robinson. Le evidenze sperimentali non si fecero attendere. Le particelle cariche perdono energia nei mezzi amorfi in buon accordo con la legge di Bethe-Bloch, ma se si misura il range di queste particelle con traiettoria parallela ai principali piani cristallografici, si osserva che il potere di frenamento del mezzo è significativamente inferiore al valore predetto dalla teoria. Il fenomeno è dovuto alla forte anisotropia del mezzo cristallino nel quale la struttura reticolare presenta dei piani con densità atomica particolarmente elevata. Le particelle cariche vengono incanalate lungo queste direzioni preferenziali da campi elettrici molto intensi dell'ordine di alcuni GeV/cm , il potenziale coulombiano agisce così da guida per le particelle cariche.

A metà degli anni 70' Tsyganov fu il primo a proporre l'utilizzo dei fenomeni di channeling per la deflessione di fasci di particelle cariche negli acceleratori, con questa idea nel 79' si svolsero i primi esperimenti a Dubna e al Fermilab di Batavia. Da questo momento in poi il fenomeno venne studiato ampiamente ed emerse la possibilità non solo di deflettere le traiettorie delle particelle cariche, ma anche di focalizzarle controllando la geometria del bordo di uscita del cristallo. In generale questi esperimenti vennero condotti con acceleratori di protoni, per questi infatti il fenomeno di channeling è molto favorito in quanto il loro moto è preferenzialmente localizzato lontano dai piani cristallografici, dove la densità di carica è dovuta ai soli elettroni di valenza, risultando in una sezione d'urto Rutherford molto bassa, e quindi in un cammino libero medio nel cristallo molto elevato.

Recentemente si è voluta esplorare la possibilità di sfruttare il confinamento in piani cristallini curvi per produrre radiazione elettromagnetica ad energie sin ora inaccessibili alle comuni sorgenti di luce di sincrotrone. Ai fini di produrre radiazione elettromagnetica è necessario però utilizzare particelle leggere come gli elettroni, si può infatti ricavare dalla formula relativistica di Larmor la perdita di energia per giro in un sincrotrone.

$$\Delta\varepsilon = \frac{e^2 v^3}{3R} \left(\frac{\varepsilon}{m} \right)^4$$

Dove e è la carica della particella m la sua massa, v ed ε sono rispettivamente la sua velocità ed energia. La necessità di usare particelle con massa piccola pone però un problema: le particelle leggere più disponibili nei laboratori -quindi le più interessanti per sviluppi applicativi del channeling- sono gli elettroni. Visto che questi sono carichi negativamente si muovono in vicinanza dei piani cristallografici e subiscono frequenti processi di scattering sia con i nuclei che con gli elettroni del mezzo cristallino. Se definiamo L_n la lunghezza di dechanneling, ovvero la lunghezza media per cui il numero di particelle inizialmente incanalate si riduce di un fattore $1/e$, si trova che mentre per protoni a $400 GeV$ L_n nel silicio è dell'ordine dei centimetri, per elettroni a $855 MeV$, se non si considerano gli effetti di rechanneling $L_{n,exp} \approx 13.6 \mu m$ [2]. E' evidente che se si vuole raggiungere una buona efficienza bisogna trovare una maniera per creare canali cristallini curvi con lunghezze micrometriche.

Per raggiungere questo obiettivo si possono sfruttare nuovamente le proprietà della struttura cristallina. In una sbarra di materiale amorfo che viene flessa da una coppia di forze si presentano solo due curvature: quella principale e quella anticlastica, invece nei solidi cristallini, in particolare in quelli con un reticolo di tipo diamante, si presenta una terza curvatura detta quasi-mosaico, il cui effetto è quello di piegare i piani cristallini paralleli allo spessore della lamina. Se si sviluppa una lamina con spessore micrometrico è quindi possibile ottenere canali planari della lunghezza adeguata a deflettere un fascio di elettroni con una buona efficienza. Questo fenomeno è già stato osservato e studiato per campioni in silicio di $\sim 30 \mu m$ di spessore con buoni risultati [2]. Il ${}_{14}Si$ tuttavia ha basso numero atomico e quindi potenziale interplanare limitato. La scelta del silicio inoltre è stata vincolante fino a a qualche anno fa essendo l'unico materiale ad essere prodotto con sufficiente purezza e assenza di dislocazioni, co-responsabili dei processi di dechanneling. Il Germanio invece in questo senso è promettente: ha numero atomico più che doppio rispetto al silicio e recentemente viene prodotto con qualità confrontabile.

L'obiettivo di questo lavoro è quindi la costruzione di una lamina micrometrica di ${}_{32}Ge$ per il channeling di elettroni, la caratterizzazione e la misura della curvatura quasi-mosaico, lo studio e la simulazione del fenomeno del channeling. I dati teorici prodotti con la simulazione saranno confrontati con quelli sperimentali raccolti al Microtrone di Mainz, MAMI, della J. Gutenberg Universitat. Si illustrano inoltre i vantaggi di una fabbricazione della lamina sottile con una procedura di etching chimico.

1.1 Struttura dell'Elaborato

Il lavoro si articola nel seguente modo:

- **Primo capitolo.**

Si richiamano gli elementi necessari alla comprensione della notazione utilizzata e si espongono alcune idee cardinali per la descrizione delle strutture cristalline. Sulla base di questi elementi è possibile ricavare alcune costanti della struttura reticolare del germanio che sono fondamentali per tutti le successive stime. Si illustra infine il formalismo ed i vantaggi della descrizione nello spazio di Fourier delle strutture con reticolo periodico. Un secondo paragrafo si propone invece di porre le basi per una trattazione dei fenomeni di channeling. Sfruttando le idee di Linhard [3] si costruisce una forma analitica per il potenziale interplanare e si evidenziano le sue peculiarità. Il fine è quello di scegliere opportunamente una direzione cristallografica per i piani paralleli allo spessore della lamina.

- **Secondo capitolo.**

Prima di poter fabbricare la lamina bisogna valutare quali parametri costruttivi soddisfano in linea teorica gli obiettivi prefissati. Il channeling elettronico infatti è influenzato pesantemente dai processi di scattering multiplo. E' possibile mostrare che l'efficienza del fenomeno è fortemente dipendente dallo spessore del mezzo cristallino: seguendo la traccia proposta in [4] sono stati trovati degli adattamenti semi-analitici di alcuni estimatori specifici per il channeling elettronico in cristalli di *Ge*, che hanno permesso un calcolo della lunghezza di dechanneling nel mezzo. Le stesse stime adattate al silicio riproducono con buon accordo i dati sperimentali e mostrano che il contributo elettronico ai fenomeni di dechanneling è trascurabile.

- **Terzo capitolo.**

Sulla base delle stime ricavate nel secondo capitolo si illustrano i processi di taglio, assottigliamento e montaggio della lamina. Il taglio di spessori micrometrici è un processo delicato e richiede l'uso di tecniche che inducano stress meccanici minimi sul campione, in quest'ottica si mostrano le tecniche di taglio chimico e di sputtering. L'assottigliamento è un'altra fase delicata perchè l'uniformità della superficie cristallina influisce sulla bontà del channeling: si evidenziano i vantaggi e le metodologie di un assottigliamento per attacco chimico. Si mostrano infine i risultati ottenuti: la mappa profilometrica del campione si può ricavare con ottima precisione sfruttando le tecniche di fotoassorbimento X.

- **Quarto capitolo.**

Si richiamano i fondamenti di diffrattometria alla Laue, questo formalismo rende intuitiva una tecnica sperimentale per la misura della curvatura quasi mosaico. Si illustrano quindi brevemente le caratteristiche della curvatura quasi mosaico e si spiegano i metodi per ottenere la curvatura desiderata. Si passa quindi alla caratterizzazione della curvatura QM e si riassumono le procedure che sono necessarie per un'ottimizzazione delle caratteristiche del campione. Si sceglie quindi una zona del campione ottimale nella quale si effettueranno le misure a MAMI.

- **Quinto capitolo.**

La proposta è quella di costruire un algoritmo numerico molto versatile che permetta una stima accurata delle grandezze fondamentali nei fenomeni di channeling. Lo stesso algoritmo può essere usato come base per lo sviluppo di un programma di calcolo dello spettro di bremsstrahlung degli elettroni in canali cristallografici curvi. L'idea è quella di sfruttare la natura a corto range del potenziale atomico schermato per creare una cella dinamica che segua l'elettrone nella sua traiettoria, che viene calcolata con i metodi standard di discretizzazione delle ODE . Si analizzano i pro ed i contro dell'approccio scelto e si mostrano i risultati ottenuti.

2 Struttura e caratteristiche dei solidi cristallini

La ricchezza dei fenomeni fisici che caratterizzano i cristalli e che li rendono versatili per diverse applicazioni tecnologiche, derivano dalla particolare struttura reticolare di questi solidi. Infatti gli atomi in un cristallo sono disposti seguendo strutture geometriche regolari che si ripetono nello spazio in maniera modulare: la cella unitaria. Lo spazio viene così tassellato dalle unità reticolari di base, ognuna delle quali è univocamente posizionata nello spazio se definiamo una terna di vettori non degeneri e una terna di angoli tra questi $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \alpha, \beta, \gamma)$ che fissano la forma geometrica della cella. Prendiamo quindi un vettore definito da

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad (n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{Z}^3$$

qualsiasi cella diversa da quella con vertice nell'origine dello spazio è determinata a meno di traslazioni di un vettore \mathbf{R} . Quest'invarianza per simmetrie traslazionali¹ discrete è all'origine delle proprietà dei cristalli. Il principio di *Neumann* infatti afferma che *in un cristallo ideale ogni proprietà fisica deve trasformarsi in maniera tale da rispettare le simmetrie del reticolo*. Lo spazio che intuitivamente si adatta meglio a soddisfare questa richiesta è lo spazio di Fourier: nella sezione dedicata all'analisi in diffrazione X dei campioni si sviluppa questa idea, passando dalla descrizione del reticolo diretto a quella nel reticolo reciproco.

Piani e assi cristallografici

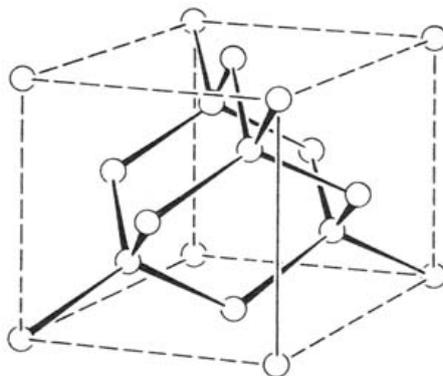
Prima di iniziare a ricavare alcune stime delle quantità che ci interessano per l'esperimento, si elencano le notazioni usate per individuare i luoghi geometrici nel cristallo: piani e assi. La natura della struttura periodica dei cristalli comporta l'esistenza di direzioni preferenziali lungo le quali la densità atomica è particolarmente elevata. Vista l'invarianza in \mathbf{R} dell'abito cristallino, un generico asse che abbia il vincolo di intercettare degli atomi del reticolo è necessariamente individuato da un vettore del tipo:

$$\mathbf{V} = u\mathbf{a}_1 + v\mathbf{a}_2 + w\mathbf{a}_3 \quad (u, v, w) \in \mathbb{Z}^3$$

così scritto l'asse cristallografico sarà scritto in notazione compatta come $\langle uvw \rangle$. In uno spazio euclideo tridimensionale tre punti non allineati fissano univocamente un piano: se prendiamo tre atomi del reticolo con coordinate definite dai vettori con componenti $(s, 0, 0)$, $(0, r, 0)$ e $(0, 0, t)$, il piano passante per questi tre atomi è definito dai tre più piccoli interi, siano h, k, l , che stanno tra loro come i reciproci delle coordinate dei tre atomi, il piano cristallografico sarà notato come (h, k, l) .

Struttura reticolare del Germanio

Gli elementi del quarto gruppo *C, Si, Ge, etc.* hanno quattro elettroni di legame nella shell più esterna; per completarla tendono a formare quattro legami covalenti semplici con gli atomi vicini, la configurazione a piramide tetragonale è quindi energeticamente favorita. Con le opportune condizioni di temperatura e pressione i primi elementi di questo gruppo si aggregano formando una struttura reticolare di tipo *diamante*, sovrapposizione di due reticoli cubici a facce centrate traslati lungo la diagonale maggiore della cella cubica di $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$.



¹A cui si aggiungono alcune simmetrie di riflessione a seconda del tipo di reticolo di Bravais che rappresenta la cella unitaria

Il reticolo reciproco

Seguendo il principio di Neumann una qualsiasi proprietà fisica del cristallo, sia $n(\mathbf{r})$, deve soddisfare la proprietà $n(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = n(\mathbf{r})$, la periodicità di $n(\mathbf{r})$ implica per il teorema di Fourier che è possibile svilupparla come

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (1)$$

Si tratta quindi di trovare i \mathbf{k} che garantiscano la periodicità cercata. Si possono definire tre vettori $\mathbf{b}_{1,2,3}$ a partire dai vettori di base del reticolo diretto $\mathbf{b}_{1,2,3}$ che soddisfino la relazione

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{V} \epsilon_{ijk} a_{2,j} a_{3,k}$$

V è il volume della cella unitaria e $\mathbf{b}_{2,3}$ si trovano ciclando sul primo indice di \mathbf{a} . Grazie alle proprietà di antisimmetria del pseudotensore di Levi-Civita vale la relazione $\mathbf{a}_r \cdot \mathbf{b}_s = 2\pi\delta_{rs}$. Si può allora definire un vettore $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$, con $m_{1,2,3}$ interi, se identifichiamo a questo punto \mathbf{G} con \mathbf{k} è facile vedere che la riscrittura della (1) soddisfa la richiesta periodicità di $n(\mathbf{r})$ in R . I vettori di base $\mathbf{b}_{1,2,3}$ sono i vettori di base del reticolo reciproco. Con ragionamenti di geometria si può dimostrare che un vettore del reticolo reciproco $\mathbf{G}(h, k, l)$ è ortogonale al piano (h, k, l) ; è allora possibile calcolarsi la distanza tra due piani con uguali indici di Miller sfruttando l'interpretazione geometrica del prodotto scalare.

$$d = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}(h, k, l)|}$$

Ci interessiamo nel seguito ai piani cristallografici (100), (110) e (111) che sono quelli che presentano spaziatura maggiore, si mostrerà tra poco che questo implica una buca di potenziale interplanare più profonda. Calcoliamoci alcune caratteristiche del reticolo diamante del germanio. A partire dalla densità del germanio, sapendo il numero di atomi per cella -otto- è possibile ricavarsi i parametri della cella cubica, risulta $a \approx 5.659\text{\AA}$, le distanze interplanari risultano essere:

$$d(100) = 1.41\text{\AA} \quad d(110) = 2.00\text{\AA} \quad d(111) = (0.82 - 2.45)\text{\AA}$$

Per $d(111)$ sono tabulati due valori perchè si alternano piani con periodicità diversa, questo fatto discende dalla struttura del reticolo diamante che è un reticolo con base quindi non riducibile a una cella di Bravais contenente un solo atomo.

2.1 Una forma approssimata per il potenziale planare

Per trattare il fenomeno del channeling di particelle cariche nei cristalli è necessario saperne descriverne almeno in maniera approssimata la dinamica. In questo paragrafo si vuole ricavare un potenziale che descriva l'interazione coulombiana tra particelle cariche e piani cristallografici con una forma analitica semplice che ci permetta di trarre alcune conclusioni di carattere qualitativo sul comportamento delle particelle incanalate, si trascurano per ora tutti i fenomeni di scattering. Il moto che si ottiene è idealizzato ma contiene tutti gli elementi di base che permettono poi di sviluppare una trattazione analitica più soddisfacente e di ricavare un modello numerico per il fenomeno. La trattazione segue la linea guida suggerita da V. M. Biryukov [4] adattandola al caso di elettroni.

Il potenziale planare

Per prima cosa si deve trovare una buona descrizione per il potenziale di ogni singolo atomo, sfruttiamo per questo un modello semplice che fu sviluppato attorno agli anni 20' da Thomas e Fermi basandosi su un approccio quanto-statistico: invece che risolvere in maniera approssimata una complicata equazione di Shroedinger a molti corpi, si può trattare la nube elettronica come un gas di fermioni confinati in un volume V , al fine di valutare l'effetto di schermo medio. Il modello è tanto migliore quanto Z è grande e presenta alcuni problemi collegati alla forma dell'energia cinetica degli elettroni come funzionale della loro densità [5], nel nostro caso questo non è un problema, visto che si procede per approssimazioni successive. Le equazioni da cui si ricava il modello sono riportate in appendice, ci limitiamo qui ad esporre il risultato:

$$V_{TF}(r) = -\frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r} \chi(r/a_{TF}) \quad (2)$$

La χ è detta funzione di schermo, $a_{TF} = 0.885a_0Z^{-\frac{1}{3}}$ dove a_0 è il raggio di Bohr per l'idrogeno atomico, per il germanio $a_{TF} = 0.1475\text{\AA}$. L'equazione differenziale per trovare χ , non ha soluzione analitica: è possibile però trovare una forma approssimata, come mostrato da Molière [6].

$$\chi(r/a_{TF}) = \sum_{i=1}^3 \alpha_i e^{-\frac{\beta_i r}{a_{TF}}}$$

I valori di α_i, β_i sono tabulati in letteratura. Ora che si è scritta una forma analitica semplice per il potenziale generato dal singolo atomo, possiamo ricavare il potenziale medio generato da un piano cristallografico. Il fatto che si possa utilizzare un potenziale mediato per descrivere la dinamica delle particelle cariche relativistiche in moto quasi parallelo a un piano cristallografico è stato dimostrato da Lindhard [3]. La motivazione intuitiva è che se l'angolo massimo della traiettoria rispetto al piano è piccolo i processi di scattering coulombiano con il piano sono correlati: la distanza che percorre la particella lungo il piano a parità di intervallo temporale dt è molto maggiore di quella trasversa, visto che il potenziale decade velocemente con la distanza la forza complessiva agente sulla particella è l'integrale di tutti i contributi lungo un tratto di piano. Possiamo quindi scrivere l'energia potenziale di un elettrone a distanza x da un piano $(0, y, z)$ come:

$$U_{pl}(x) = Nd_p \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} V(x, y, z) dy dz = 2\pi Nd_p a_{TF} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i}{\beta_i} e^{-\frac{\beta_i x}{a_{TF}}} \quad (3)$$

Calcolato passando in coordinate polari. La proporzionalità di U_{pl} dalla distanza interplanare suggerisce che le direzioni con piani maggiormente spazati sono le più favorevoli per il channeling, nel caso del reticolo diamante: (110) e (111). Un ruolo importante lo assume anche la vibrazione termica degli atomi rispetto ai siti reticolari. Sia u_T lo scarto quadratico medio dell'ampiezza di vibrazione, per il germanio si può stimare $u_T \approx 0.085\text{\AA}$ a $T = 300K$ ². Se supponiamo un potenziale di richiamo armonico i contributi nelle tre direzioni spaziali sono separabili. Integrando sul piano i contributi in y e z si mediano a zero e la distribuzione degli scostamenti dal sito reticolare risulta gaussiana. Mentre per tener conto della vibrazione ortogonale al piano si tratta di operare nella (4) una convoluzione rispetto alla variabile x tra una distribuzione gaussiana normalizzata con $\sigma = u_T$ e l'energia potenziale.

$$U_{pl,T}(x) = \eta \sum_{i=1}^3 \frac{\gamma_i}{2} e^{\tau_i} \left(e^{-\left(\frac{\beta_i x}{a_{TF}}\right)} \operatorname{erfc} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\beta_i u_T}{a_{TF}} - \frac{x}{u_T} \right) \right) + e^{\left(\frac{\beta_i x}{a_{TF}}\right)} \operatorname{erfc} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\beta_i u_T}{a_{TF}} + \frac{x}{u_T} \right) \right) \right) \quad (4)$$

Con η che è la stessa costante di proporzionalità della (4), $\gamma_i = \frac{\alpha_i}{\beta_i}$ e $\tau_i = \frac{\beta_i^2 u_T^2}{2a_{TF}^2}$. Arrangiando opportunamente le grandezze nella costante di proporzionalità, otteniamo il potenziale planare a temperatura ambiente ($T = 300K$).

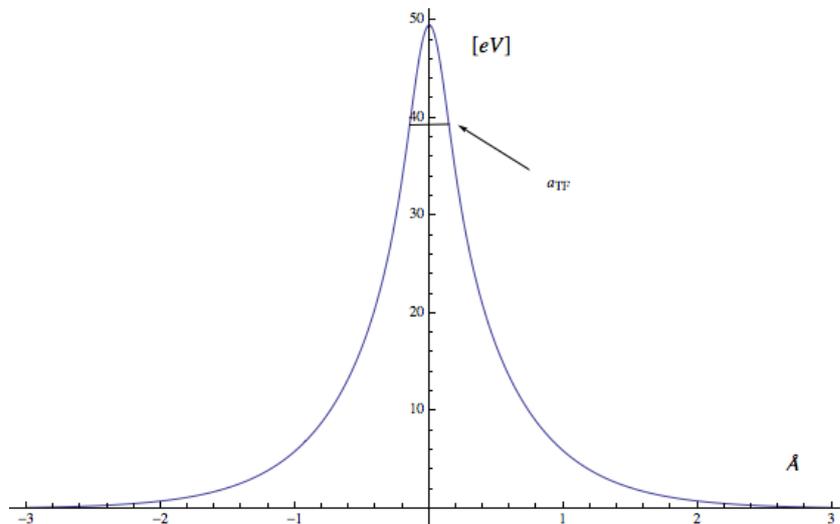


Figura 1: Potenziale per un singolo piano (110), Germanio

²si tratta di utilizzare il modello di Debye, è un risultato classico: i valori di u_T si trovano facilmente in letteratura

Sommando i contributi dei primi piani vicini, si può ottenere il potenziale planare trasverso. Si mostra il grafico risultante per i piani (111) su cui ci concentreremo in questo lavoro, infatti come vedremo, questi piani sono gli unici a presentare contemporaneamente d_P elevata e curvatura quasi mosaico non nulla.

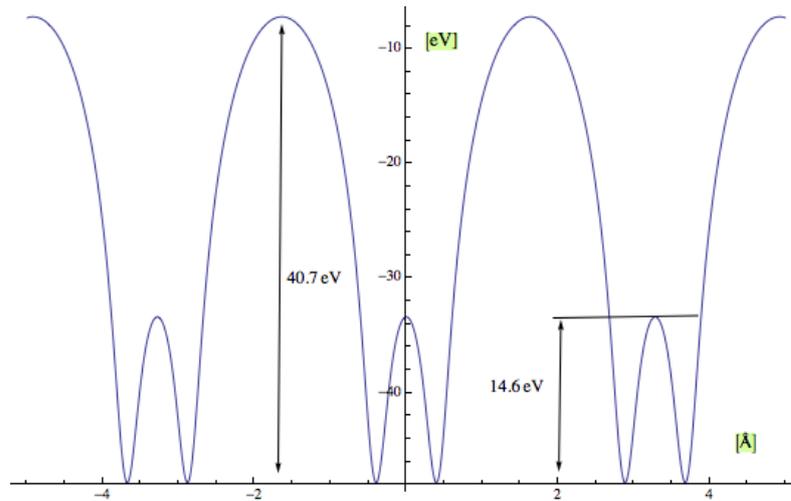


Figura 2: Potenziale trasverso (111), Germanio

Ricordando poi che $F = -\partial_x U_{pl}(x)$, è possibile ricavare l'espressione per $F(x)$.

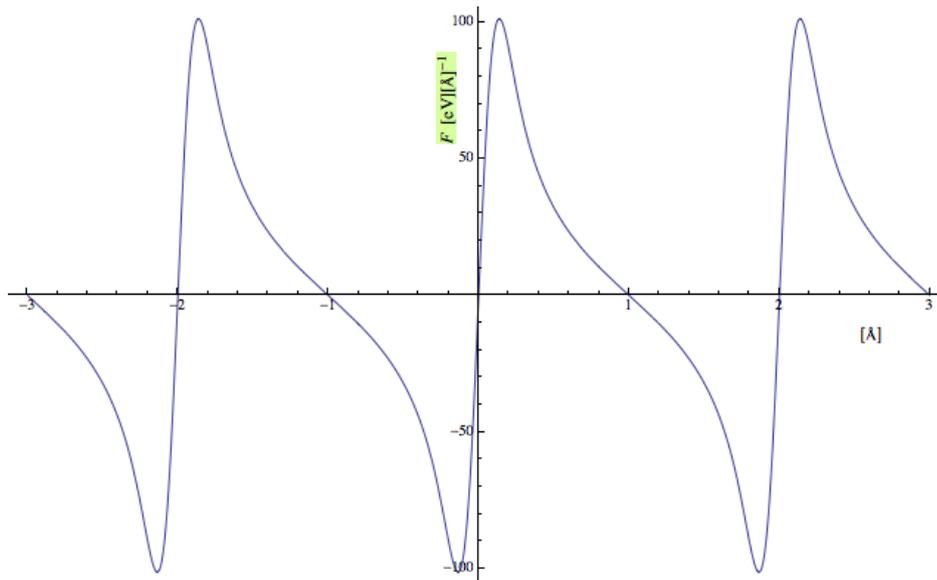


Figura 3: Forza trasversa agente su un elettrone (111), Germanio

Come si vede dal grafico, la forza trasversa che è in grado di sviluppare un piano cristallino è di almeno un ordine di grandezza maggiore di quello che si riesce a raggiungere nei moderni acceleratori lineari. Per avere un'idea dell'intensità delle interazioni nel canale cristallografico possiamo fare infatti un semplice parallelo: usando i dati sperimentali in [2] è facile ricavare che campo magnetico servirebbe per deflettere un elettrone dello stesso angolo ottenuto via channeling. Dalla formula relativistica per la frequenza di ciclotrone, considerando un elettrone a 855 MeV, deflesso di $\theta_0 \approx 910 \mu rad$ si ricava che:

$$B_{eq} = \frac{\gamma \beta mc}{eR} = 85T$$

E' quindi evidente che lo studio e lo sviluppo di tecnologia che sfrutta questi fenomeni sono argomenti del tutto attuali.

La dinamica in un piano cristallino ideale

Prima di descrivere la dinamica del sistema bisogna scegliere un formalismo adeguato alla trattazione del problema. Si consideri il potenziale appena ricavato per i piani (111), in un ottica di problema quantistico la soluzione dell'equazione agli autovalori per l'operatore hamiltoniano è la chiave di volta: sicuramente un problema che si affronta numericamente vista la forma di $V_{pl,T}(x)$, è possibile però porci in approssimazione classica grazie ad alcune osservazioni. Consideriamo un regime di piccole oscillazioni, visto che nei minimi il potenziale è convesso, esso ammette un'approssimazione armonica. Come noto la separazione di due livelli energetici contigui in un oscillatore armonico quantistico di massa m è data da $\delta E = \hbar\sqrt{8U_0/L^2m}$, con $U_0(2x/L)^2$ ricavato dal termine armonico nello sviluppo del potenziale. Se la buca è profonda U_0 il numero di stati corrispondenti alle particelle incanalate è [4]

$$N = \frac{d_p}{\hbar\sqrt{8}}\sqrt{U_0m\gamma}$$

Dove si è sostituita ad m la forma relativistica. Il limite classico è applicabile se $N \gg 1$, questo è verificato per particelle leggere se le energie in gioco sono dell'ordine dei $(30 - 100)MeV$. Il potenziale parabolico nei due minimi relativi fitta male il potenziale (111), un fit polinomiale di quarto ordine è più appropriato, si può vedere con una simulazione che i livelli energetici sono in questo caso più fitti di quelli stimati in approssimazione armonica, stiamo lavorando quindi nelle corrette condizioni anche utilizzando la forma completa per il potenziale.

Possiamo ora scrivere le equazioni classiche del moto della particella nel canale cristallino in assenza di curvatura:

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} + U(x)$$

Sfruttiamo poi il fatto per angoli d'ingresso piccoli $E_z \approx E$, $p_z \approx p$ e vale la relazione $\theta = p_x/p_z$, si ha per sostituzione:

$$E_T = \frac{pv}{2}\theta^2 + U(x) = const$$

Diremo quindi che una particella è in channeling planare se $E_T \leq U_0$, visti i valori tabulati precedentemente per il potenziale, si calcola l'angolo massimo come:

$$\theta_C = \sqrt{\frac{2U_0}{\gamma mv^2}} \approx 306\mu rad$$

La distribuzione in energia delle particelle nel canale dipende dall'angolo d'incidenza rispetto al piano θ e dalla coordinata trasversa di ingresso. Sia $g(\theta)$ la distribuzione angolare del fascio, nel setup sperimentale di MAMI $g(\theta)$ è gaussiana con $\sigma_x \approx 26\mu rad$. La distribuzione delle particelle rispetto all'energia trasversa si trova come:

$$f(E_T) = \int_{-\frac{d_p}{2}}^{\frac{d_p}{2}} \frac{dx}{d_p} \int_{\mathbb{R}} g(\theta)\delta(pv\frac{\theta^2}{2} + U(x) - E_T)d\theta \quad (5)$$

Conoscere il valor medio di questa distribuzione è importante per poter calcolare la lunghezza media di dechanneling, di cui daremo la definizione al prossimo paragrafo. La distribuzione può essere ricavata per via numerica, riscrivendo (6) come:

$$f(E_T) = \frac{1}{pv d_p} \int_{-x_{max}}^{x_{max}} g\left(\sqrt{\frac{2}{pv}(E_T - U(x))}\right) (E_T - U(x))^{-\frac{1}{2}} dx$$

con x_{max} definito implicitamente da $U(x_{max}) = E_T$. In appendice si spiega dettagliatamente l'algoritmo utilizzato, mostriamo qui i risultati, il θ indicato è la divergenza RMS del fascio al momento dell'impatto sulla superficie del campione.

Riusulta dai calcoli:

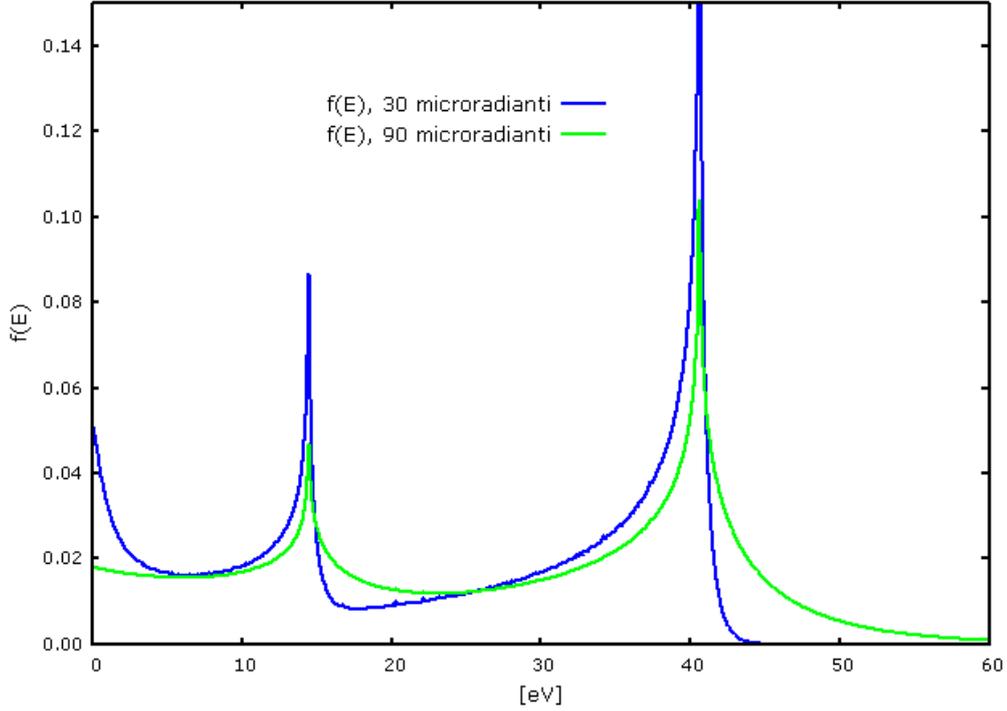


Figura 4: Distribuzione dell'energia trasversa E_T

I picchi in figura corrispondono esattamente alle energie dei massimi relativi ed assoluti del potenziale, che costituiscono punti di equilibrio instabile per particelle con $E_T = U(x_{1,2})$.

3 Stima della lunghezza di Dechanneling

Il modello che si è considerato sino a qui è puramente ideale e non tiene conto dell'interazione degli elettroni con la materia: noti i dati iniziali si ha già la certezza che la particella sia o meno incanalata dai piani cristallini. Nel nostro caso vista la bassa divergenza del fascio di MAMI si avrebbe un'efficienza del channeling prossima al 100% per un cristallo non curvo, la realtà è completamente diversa. Come accennato nell'introduzione vista la carica degli elettroni, questi tendono a oscillare in prossimità dei piani cristallografici risentendo fortemente degli scattering con i nuclei. Inoltre nello spazio tra piano e piano è presente un gas elettronico a densità variabile. Mentre gli urti e^-e^- sono in genere di tipo 'soft' quelli con i nuclei portano a variazioni di E_T più significative. Vedremo nei prossimi paragrafi come trattare questi due contributi. L'effetto netto di questi processi è che una particella inizialmente incanalata può guadagnare in una serie di scattering successivi energia sufficiente per sfuggire alla buca di potenziale. Anche il processo inverso è possibile, si parla in questo caso di re-channeling, ovvero il processo secondo il quale una particella perde energia trasversa a seguito degli scattering e risulta re-incanalata. Tipicamente questo secondo processo è statisticamente sfavorito. Si osserva sperimentalmente che la frazione di particelle inizialmente incanalate decresce in buon accordo con una legge esponenziale dipendente dallo spessore cristallino attraversato: possiamo quindi definire L_D .

è detta lunghezza di dechanneling L_D , la lunghezza dopo cui le particelle inizialmente incanalate si sono ridotte di un fattore $1/e$

Recentemente si è dimostrato che il re-channeling è un termine correttivo importante alle energie di MAMI che provoca un innalzamento efficace della lunghezza di dechanneling misurata sperimentalmente [2]. Inoltre è stato mostrato che anche la curvatura del cristallo influenza la lunghezza di dechanneling. In seguito per semplicità tratteremo solo il dechanneling nucleare ed elettronico per cristalli non curvi e mostreremo come darne un stima in assenza di re-channeling.

3.1 Lo scattering nucleare

Il cambiamento dell'energia trasversa in ogni evento di scattering è dato da

$$E = pv\theta_S + \frac{1}{2}pv\theta_S^2 \quad (6)$$

tuttavia ai fini di ricavare dei valori medi il primo termine è trascurabile, la sua dipendenza da θ in un moto pseudo-armonico dovuto al potenziale planare trasverso in cui la particella compie più di un'oscillazione completa³, si media infatti a zero.

Immaginiamo di avere una particella con energia trasversa iniziale E_T in una buca di potenziale profonda U_0 , definiamo energia di gap $E_g = U_0 - E_T$. Possiamo stimare per effetto dei nuclei quanto spazio deve percorrere in un materiale un elettrone relativistico affinché venga deflesso dalla sua direzione iniziale di un angolo $\theta_g(E_g)$ tale da deincanalarlo. Sfruttiamo l'approssimazione di Kitagawa-Ohtsuki [7] che lega l'angolo medio di scattering in un cristallo a quello in un materiale amorfo

$$\langle \theta_S^2 \rangle_c = \langle \theta_S^2 \rangle_{am} \rho(x)$$

dove $\rho(x)$ è la densità atomica in funzione di x mediata sul piano e normalizzata (quindi una PDF adimensionale). L'angolo di scattering in materiale amorfo è in genere ben descritto per processi di scattering multiplo dalla Particle Data Group formula, [8]

$$\theta_S^{rms} = \sqrt{\langle \theta_S^2 \rangle_{am}} = \frac{E_C}{pv} Z \sqrt{\frac{z}{X_0}} \left[1 + 0.038 \log \left(\frac{z}{X_0} \right) \right] \quad (7)$$

dove z è lo spessore di materiale attraversato dalla particella, $X_0 \approx 2.30cm$ la lunghezza di radiazione nel germanio [9] e Z è il numero atomico del materiale, $E_C \approx 13.6MeV$ è invece un termine costante. Nel caso di cristalli micrometrici questa formula si rivela non adatta, risultando in una forte sovrastima dell'angolo medio di scattering. L'indicazione importante che suggerisce la (7) è però la dipendenza dallo spessore di θ_S^{rms} .

$$\theta_S^{rms} \approx a\sqrt{z}$$

La costante a è stata ricavata da *G. Benetti* con una serie di misure sistematiche nel suo lavoro di tesi, dove si è misurata la divergenza angolare del fascio uscente da monocristalli di germanio di diverso spessore orientati casualmente. Risulta $a = (0.089 \pm 0.005)[\mu m]^{-1}[mrad]$. Per inversione della (6) e vista la dipendenza di θ_S^{rms} da z possiamo scrivere:

$$L_{D,N} \approx 2 \frac{\langle E_g \rangle}{pv} \frac{1}{a^2}$$

Il termine $\langle E_g \rangle = U_0 - \langle E_T \rangle$ compare per tenere conto dell'energia media di gap, questa può essere ricavata -visto che E_T si distribuisce secondo la (5)- usando la definizione di speranza matematica

$$\langle E_T \rangle = \int_{\mathbb{R}} E_T f(E_T) dE_T$$

Questa volta però bisogna tenere conto anche del termine di densità dovuto all'approssimazione di Kitagawa-Ohtsuki, per cui

$$f_{KO}(E_T) = \int_{-x_{max}}^{x_{max}} \frac{1}{\rho(x)} g \left(\sqrt{\frac{2}{pv} (E_T - U(x))} \right) (E_T - U(x))^{-\frac{1}{2}} dx \quad (8)$$

Per $\rho(x)$ si è usata la somma normalizzata di due gaussiane con $\sigma = u_T$ centrate nei minimi del potenziale. L'integrale può essere calcolato numericamente per valori discreti di E_T , mappando poi in un istogramma a classi sufficientemente fitte $f(E_T)$, il calcolo di $\langle E_T \rangle$ si riduce a una sommatoria. Tabuliamo i risultati ottenuti assumendo come valor medio della dispersione angolare degli elettroni alcuni valori interessanti in $[30, 300]\mu rad$. La corrispondente PDF pesata con il termine di Kitagawa-Ohtsuki è graficata in Appendice.

³mostreremo nelle simulazioni che questo è vero per i cristalli che si sono fabbricati

$\langle\theta_e\rangle$ [μrad]	$\langle E_g\rangle$ [eV]	$\langle\theta_e\rangle$ [μrad]	$\langle E_g\rangle$ [eV]
30.0	37.1	120.0	31.3
45.0	36.6	150.0	27.9
60.0	35.9	200.0	21.5
90.0	34.0	300.0	2.1

I valori per $\langle E_g\rangle$ possono essere considerati buoni entro il punto percentuale tranne per i due valori a $\langle\theta_e\rangle$ maggiore in cui la distribuzione $f_{KO}(E_T)$ ha code molto lunghe quindi il troncamento dell'integrazione a $E_{T,max} = 200eV$ comporta degli errori numerici che portano a sovrastimare l'energia di gap, negli ultimi due casi i valori sono buoni entro il 5% – 8%. Consideriamo per ora un fascio con divergenza $\sim 30\mu rad$.

$$\langle E_g\rangle = 37.1 eV$$

Da cui calcoliamo la lunghezza di dechanneling $L_{D,N} \approx 10.94 \mu m$. Una seconda stima si può ricavare utilizzando quanto trovato da *V. N. Baier* in [10], è possibile scrivere

$$L_D = \frac{\alpha}{2\pi} \frac{2U_0 E_e}{m_e^2 c^4} X_0$$

dove α è la costante di struttura fine, le restanti notazioni sono invariate. Siccome questa stima non tiene conto in alcun modo della dipendenza dalla divergenza angolare del fascio, la si corregge sostituendo ad $U_0 E_g$ che è l'energia media necessaria agli elettroni con incidenza regolata da una certa $g(\theta)$ per uscire dal canale di potenziale.

Ricaviamo similmente per una divergenza del fascio di $\sim 30\mu rad$

$$L_{D,B} \approx 6.49 \mu m$$

Le due stime non sono in buon accordo, fissano però l'ordine di grandezza, inoltre il valore $L_{D,N}$ deriva in larga parte da dati sperimentali lo si ritiene quindi più affidabile.

Questi valori sono ottenuti nell'ipotesi di campione piatto e trascurando l'effetto del re-channeling. Visto che si intende fabbricare un campione che dovrà essere curvato è lecito chiedersi in che misura queste prime stime possano essere sfruttate per scegliere dei buoni parametri di fabbricazione per la lamina. Ragioniamo brevemente sui fenomeni trascurati nelle nostre stime: mentre la curvatura tende ad accorciare la lunghezza di dechanneling a causa della forza centrifuga, il re-channeling tende ad aumentarla. Per il silicio si è verificato [2] che questi due effetti tendono ad equilibrarsi per i raggi di curvatura tipicamente utilizzati (20 – 30) mm. Ci aspettiamo un comportamento qualitativo simile anche nel caso del germanio.

3.2 Lo scattering elettronico

Come si diceva prima gli urti elettrone elettrone sono prevalentemente di carattere elastico 'soft', è allora possibile trattare la variazione dell'energia trasversa in questo tipo di scattering seguendo un approccio diffusivo, seguendo la linea guida individuata da Biryukov in [4]. Sia $w(E_T, q)dz$ la probabilità che l'energia trasversa evolva da E_T a $E_T + q$ nella lunghezza dz , è possibile impostare una master equation che descriva in funzione dello spessore attraversato l'andamento della funzione $f(E_T)$:

$$\frac{\partial f(E_T, z)}{\partial z} = \int [f(E_T - q, z)w(E_T - q, q) - f(E_T, z)w(E_T, q)] dq$$

Se la variazione di energia è piccola in ogni evento di scattering, si può sviluppare la relazione in potenze di q fino al terzo ordine e ricavare un eq. di Fokker-Planck, assumendo poi una relazione differenziale tra il termine d'attrito A e quello diffusivo D nei processi di scattering $A(E_T) = \frac{1}{2}\partial_{E_T} D(E_T)$ [4] tutto si può arrangiare nella forma

$$\frac{\partial f(E_T, z)}{\partial z} = \frac{1}{2}\partial_{E_T} \left[D(E_T) \frac{\partial f(E_T, z)}{\partial E_T} \right]$$

Quest'equazione può essere risolta numericamente una volta determinato il fattore diffusivo, utilizzando ad esempio i metodi *full implicit* con condizioni al contorno imposte dalle condizioni di channeling in E_T e di equilibrio diffusivo per $z \gg L_D$. L'equazione ammette anche una soluzione analitica se si assume che D dipenda linearmente da E_T , quest'approssimazione come mostrano le misure in [8] è buona sino

a distanze di $\sim a_{TF}$ dai piani cristallografici, dove subentrano termini viscosi descritti da polinomi di ordine superiore in E_T . Con queste condizioni si trova la soluzione

$$f(E_T, z) = \sum_{k=1}^{\infty} C_k J_0(j_{0,k} \sqrt{E_T/U_0}) \exp\left(-\frac{D_0 j_{0,k}^2 z}{4U_0}\right) \quad (9)$$

dove $j_{0,k}$ sono gli zeri di ordine k delle funzioni di Bessel J_0 , U_0 è la profondità della buca di potenziale e C_k sono coefficienti ricavati a partire dalla distribuzione iniziale in energia trasversa delle particelle $f(E_T, 0)$.

Sfrutteremo anche in questo caso l'approssimazione di Kitagawa-Otsuki, ci serve quindi calcolare numericamente la distribuzione $F(x)$ delle posizioni delle particelle per $x \in [-d_p/2, d_p/2]$. Si sono calcolate le traiettorie a step discretizzati costanti di un campione di particelle in un canale ideale, distribuite in maniera spazialmente uniforme e con una dispersione angolare dettata dalla $g(\theta)$ del fascio di MAMI, per ogni step la coordinata x dell'elettrone è stata raccolta in un istogramma. Per l'integrazione numerica si è sfruttato un algoritmo di tipo *fast Verlet*⁴, per il potenziale $U_{pl,T}(x)$. Come accennavamo prima la (9) è valida con ottima approssimazione tranne per due fasce larghe $\sim a_{TF}$ attorno ai nuclei, nel nostro caso specifico questo però non è un problema: i contributi nelle due fasce, come mostra il grafico sottostante, contribuiscono in maniera relativa visto il ruolo di 'peso' che $F(x)$ ha su $L_{D,e}$. Vedremo inoltre che anche solo l'ordine di grandezza che si otterrà per $L_{D,e}$ permette di fare considerazioni importanti.

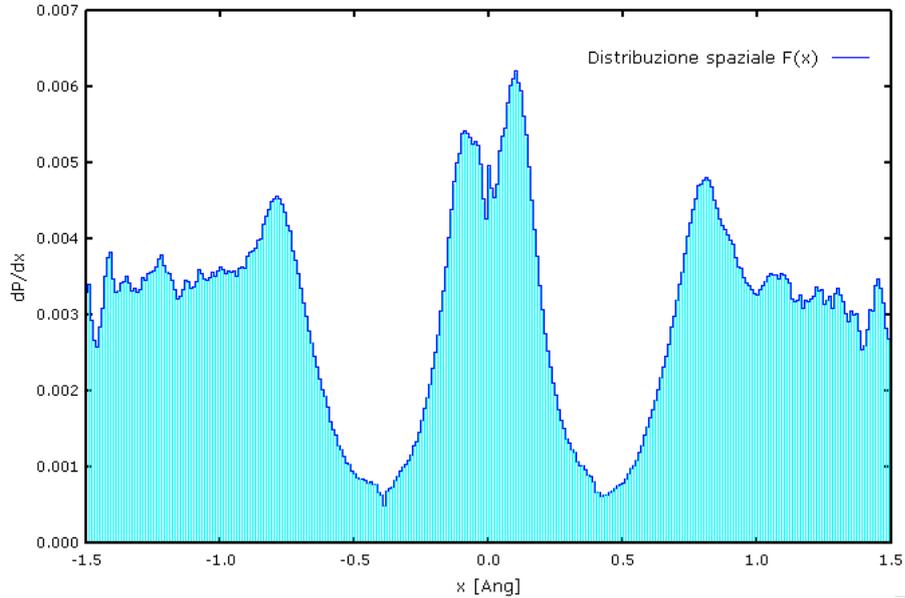


Figura 5: Distribuzione spaziale $F(x)$, $\bar{\theta}_e = 30 \mu rad$

Sfruttando la (9) si può ricavare una stima della lunghezza di dechanneling elettronico sulla base di alcune osservazioni: il termine esponenziale è proporzionale a $j_{0,k} \sim k^2$, i primi termini quindi scompaiono rapidamente in una lunghezza dell'ordine $L \approx (j_{0,1}/j_{0,2})^2 \sim 0.2L_{D,e}$, che si ricava osservando che l'inverso dell'argomento dell'esponenziale a $k = 1$ rappresenta proprio la definizione di L_D . Sarà

$$L_{D,e} = \frac{4U_0}{j_{0,1}^2 D_0} \quad (10)$$

D_0 è il quadrato dell'angolo medio di scattering nel gas elettronico, che in approssimazione di K.O. -come visto nel paragrafo precedente- assume la forma:

$$D_0 = \frac{pv}{2} \left\langle \left(\frac{\delta\theta}{\delta z} \right)^2 \right\rangle = \frac{v}{2} \frac{m_e}{2p} \left(\frac{\delta E}{\delta z} \right)_{am} \frac{n_e(x)}{n_a m} \quad (11)$$

$n_e(x)$ è la densità elettronica nel canale che può essere ricavata a partire dall'equazione di Poisson noto il potenziale planare, $m_e = 0.511 MeV$ e $(\delta E/\delta z)_{am}$ è la perdita media di energia per unità di lunghezza in un materiale amorfo: la nota relazione di Bethe-Bloch per elettroni.

⁴Nelle appendici si riportano i dettagli dei metodi numerici utilizzati

In formule:

$$(\delta E/\delta z)_{am} = \aleph(\beta^{-2}) L_e$$

con $\aleph(\beta^{-2}) = 35.9 \text{ keV m}^{-1}$ costante determinata dalle caratteristiche fisiche del materiale bersaglio, $\beta = 0.99999982$ per elettroni a 855 MeV ed L_e il logaritmo di Coulomb per gli elettroni⁵

$$L_e = \left[\log \left(\frac{T(T + mc^2)^2 \beta^2}{2I^2 mc^2} \right) + (1 - \beta^2) - (2\sqrt{1 - \beta^2} - 1 + \beta^2) \log 2 + \frac{1}{8}(1 - \sqrt{1 - \beta^2})^2 \right] \approx 36.20$$

Il calcolo si semplifica molto sfruttando il fatto che $\beta \sim 1$, $\gamma \gg 1$. Si può infine trovare $n_e(x)$ con l'equazione di Poisson, mostriamo il grafico dell'inverso del termine di Kitagawa-Ohtsuki in funzione della coordinata trasversa:

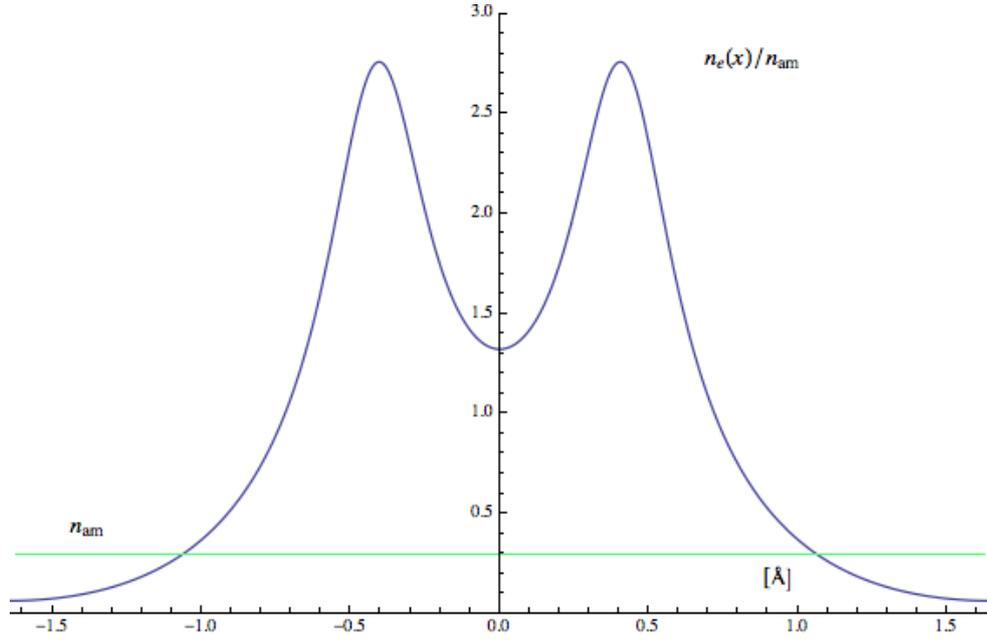


Figura 6: Rapporto di densità elettronica per piani (111)

Si è ottenuta quindi un'espressione analitica per $L_{D,e}(x)$, sfruttando poi $F(x)$ possiamo finalmente calcolare una lunghezza di dechanneling media dovuta allo scattering elettronico come:

$$\langle L_{D,e} \rangle = \int L_{D,e}(x) F(x) dx \quad (12)$$

Visto che $F(x)$ è un istogramma, l'integrale si riduce a una sommatoria sui bin in $x \in [-d_p/2, d_p/2]$.

$$\langle L_{D,e} \rangle \approx 64.1 \text{ cm}$$

Sulla base dei due contributi, nucleare ed elettronico, si ottiene una stima finale per $\langle L_D \rangle$ grazie alla definizione di lunghezza di dechanneling: sia $N(0)$ il numero di particelle inizialmente incanalate, allora

$$N(z) = N(0) \left(e^{-z/L_{D,n}} + e^{-z/L_{D,e}} \right) \implies \langle L_D \rangle = \frac{L_{D,n} + L_{D,e}}{L_{D,n} L_{D,e}} \approx L_{D,n}$$

⁵Dalle dispense di Istituzioni di Fisica Nucleare, S. Lunardi, Università degli studi di Padova

Si noti che siccome gli elettroni sono particelle leggere, essi subiscono forti perdite energetiche per irraggiamento, partendo dalla formula relativistica di Larmor

$$\frac{dp^\mu}{ds} = -\frac{e^2}{6\pi} w^\nu w_\nu u^\mu$$

si può verificare che la perdita di energia per irraggiamento domina su quella dovuta alla ionizzazione se $E \sim 800/Z \text{ MeV}$. Tuttavia quest'interpretazione della bremsstrahlung è classica, mentre la QED mostra che esiste una lunghezza caratteristica affinché il fenomeno abbia luogo con una probabilità di $1 - e^{-1}$. Questa *lunghezza di radiazione* media a 855 MeV è per gli elettroni molto più grande [9] dello spessore dei cristalli che fabbricheremo, conseguentemente solo una parte trascurabile degli elettroni incidenti nel cristallo è influenzata da questo effetto. La trattazione di questo contributo ai fini di una stima della lunghezza di dechanneling è quindi trascurabile.

Sulla base di queste stime qualitative possiamo proseguire con la fabbricazione della lamina. Inoltre questi risultati suggeriscono che nella costruzione di un modello numerico per lo studio dei fenomeni di channeling il contributo di dechanneling elettronico è trascurabile. Per completezza si nota anche che è stato trascurato il fenomeno misto di scattering con elettroni e nuclei che richiede una trattazione molto più complessa, possiamo però sottolineare che visto il peso trascurabile del contributo elettronico anche questo è un termine destinato ad essere di second'ordine rispetto ad $L_{D,N}$.

La stima della lunghezza di dechanneling per il Ge permette quindi di determinare un target per lo spessore di fabbricazione della lamina. Si è scelto di raggiungere uno spessore di circa 10 – 15 micron ovvero in ogni caso maggiore o uguale alla lunghezza di dechanneling. Questo farà sì che la lamina non avrà presumibilmente un'efficienza elevata; lo scopo di questo primo esperimento tuttavia non è stabilire un record di efficienza, ma piuttosto quello di avere una misura sperimentale accurata della lunghezza di dechanneling.

4 Fabbricazione di una lamina sottile

La fabbricazione di lamine micrometriche di silicio sfrutta procedimenti ormai industrializzati e grazie ai grandi investimenti dell'industria elettronica ha ormai raggiunto livelli di lavorazione eccellenti. Il germanio invece è ancora un materiale poco sfruttato anche se recentemente ha mostrato le sue potenzialità in diversi ambiti di ricerca, dall'elettronica, ai rivelatori γ di ultima generazione. I processi meccanici e chimici per la microfabbricazione sono ancora in fase di sviluppo e creare una lamina con le caratteristiche volute, ha richiesto uno studio sistematico delle procedure di assottigliamento. Il punto di partenza sono dei wafer con $d \approx 64\mu\text{m}$ e $\varnothing \sim 10\text{cm}$ prodotti dalla Umicore a partire da dei cilindri monocristallini ottenuti per accrescimento in soluzione fusa di un seme cristallino opportunamente orientato (metodo Czochralski). La rifinitura del wafer è effettuata ambo i lati con processi di CMP⁶ che sfruttano l'azione combinata di una pasta abrasiva granulare e di un solvente per raggiungere una perfezione superficiale nanometrica. Gli effetti che possono rovinare l'efficienza del channeling planare in un cristallo piatto sono:

- Imperfezioni e ondulazioni della superficie che possono variare l'angolo d'ingresso effettivo del fascio
- Presenza di dislocazioni che deformano il reticolo generando fenomeni di scattering anomalo e l'ostruzione di alcuni canali cristallografici.

I campioni Umicore hanno elevata perfezione cristallina e presentano meno di 100 dislocazioni per cm^2 , nel processo di assottigliamento bisogna aver cura di non introdurre dislocazioni aggiuntive utilizzando processi che inducono stress reticolare elevato. Bisognerà poi che il processo di lavorazione mantenga la planarità del cristallo di partenza. La scelta di un attacco chimico è risultata la migliore, riportiamo come esempio il grafico ottenuto per diffrazione su campioni trattati con diversi procedimenti di assottigliamento, l'intensità delle code del picco di bragg è inversamente proporzionale al numero di dislocazioni introdotte nella lavorazione:

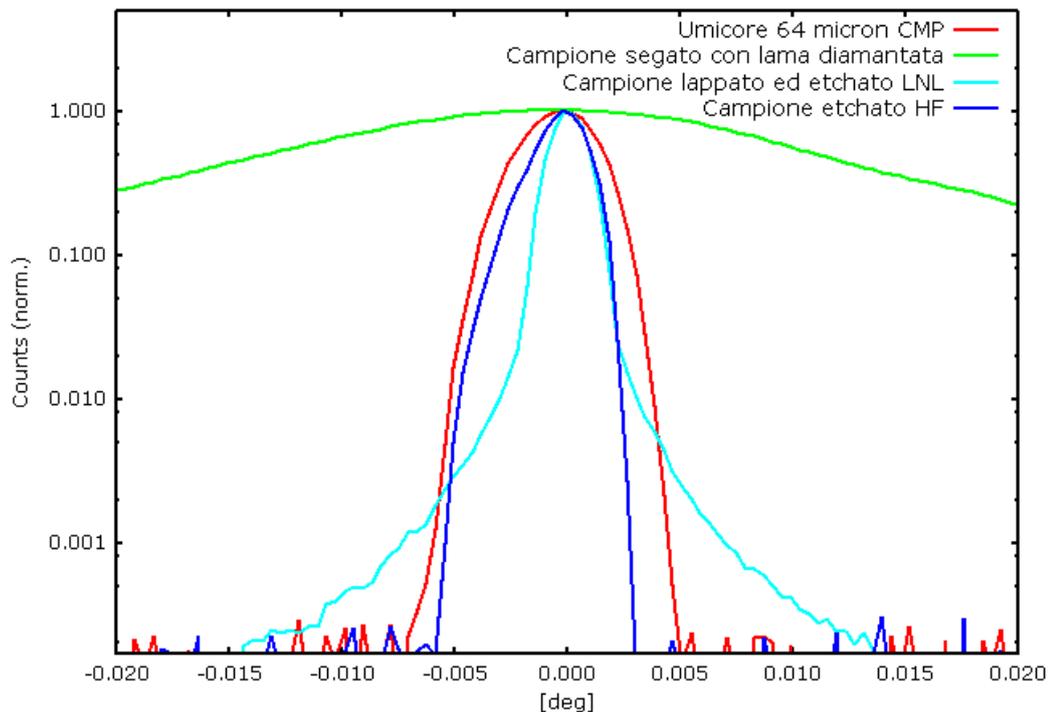


Figura 7: Confronto dei metodi di fabbricazione

I dettagli sulle procedure di etching e la caratterizzazione dei diversi tipi di composti chimici utilizzati, con una relativa analisi delle etch-rate e della regolarità del processo di erosione è trattata ampiamente nel lavoro parallelo di *M. Colautti* [11] a cui si fa riferimento per i dettagli. Di seguito si illustreranno i metodi utilizzati per il taglio del wafer, il montaggio del campione sui supporti, le procedure per ottenere una buona planarità del campione e per evidenziare le dislocazioni in modo da scegliere opportunamente l'area su cui far impattare il fascio al MAMI.

⁶Chemical Mechanical Polishing

4.1 Sputtering Cr-Au e taglio chimico

Il materiale di partenza è quindi un wafer di Ge del diametro di 10 cm e spessore 64 micron. Da questo materiale dobbiamo ricavare lamine rettangolari da sottoporre a curvatura. Il taglio di un campione così sottile è una procedura delicata, i cristalli del quarto gruppo hanno infatti buona durezza ma alta fragilità, l'utilizzo di una sega diamantata rischia di frantumare il wafer o comunque indurre dislocazioni da stress nel reticolo. Anche in questo caso è preferibile l'uso di un attacco chimico. Si procede quindi al deposito di uno strato protettivo tramite sputtering che serve a proteggere i rettangoli di Ge che vogliamo ricavare. Tra i vari rettangoli si lasciano zone scoperte che saranno erose tramite attacco chimico. Lo strato protettivo costituito da un bi-layer di Cr e Au viene poi rimosso tramite etching selettivi che rimuovono i metalli in questione e lasciano inalterato il Germanio. Si descrive brevemente il processo:

- Il wafer in germanio viene alloggiato in un ripiano con una maschera metallica che definisce i rettangoli in cui si depositerà il layer protettivo, il procedimento andrà svolto su ambo i lati e quindi importante curare la specularità.
- Tutto viene portato in alto vuoto, si inietta il gas argon per creare un'atmosfera controllata, quindi si accendono due torce al plasma, in ciascuna è alloggiato un sottile disco del metallo che si intende depositare. Il disco è costantemente bombardato dal plasma di Ar che è confinato dalle linee di campo di un magnete permanente allineato con la torcia, il bombardamento eccita gli atomi del bersaglio fino a produrre un flusso costante di ioni che si depositano sulla superficie di germanio.
- I metalli sono cromo e oro, prima si deposita il cromo, questo non resiste agli acidi ma essendo molto reattivo agisce come substrato per una adesione più efficace dell'oro, che è tendenzialmente inerte.
- Il processo viene ripetuto su ambo i lati, dopodiché l'intero wafer viene immerso in una soluzione molto concentrata di HF ed H_2O_2 che dissolve le zone non protette, si ottengono così i campioni tagliati e con le dimensioni desiderate ma ancora protetti dai layer d'oro e cromo. Si chiude la lavorazione con un triplo lavaggio in soluzioni che non attacchino il germanio (GoldEtchant-HCl-GoldEtchant) per rimuovere i film protettivi.

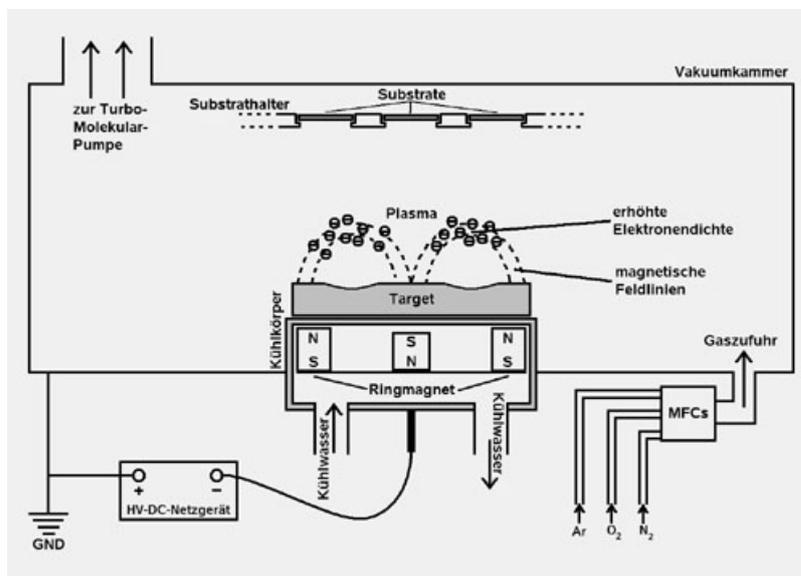


Figura 8: Schema del processo di sputtering

La lamina che si ricava è rettangolare $15\text{mm} \times 12\text{mm}$, ed ha ancora uno spessore di circa 65 micron. Nel progetto iniziale di realizzazione del campione, la lamina ottenuta andrebbe montata su un particolare supporto (Fig. 9a) che ha il duplice scopo di rendere maneggiabile il campione durante il successivo assottigliamento chimico e di poterlo poi trasferire nell'apparato di curvatura. Descriviamo allora come tale lamina viene progressivamente assottigliata e poi piegata.

4.2 Etching e montaggio

Sulla base del grafico in Fig. 7 si è scelto di procedere anche per l'assottigliamento con un attacco chimico. Si sono provati alcuni tipi di etching, il migliore come uniformità di scavo è risultato essere un etching del tipo $(x) : (x) : (1 - 2x)$ di $HF : H_2O_2 : H_2O$. Variando i rapporti di concentrazione si è ricavata una concentrazione ideale (M. Colautti [11]) per $x = 2 - 3\%$. Questo tipo di etching è sufficientemente lento da permettere un controllo fine dello spessore e lascia una morfologia a specchio.

L'etching descritto ha un'ulteriore peculiarità: permette di evidenziare le dislocazioni (ovvero difetti di linea deleteri per il channeling) grazie alle sue caratteristiche di anisotropia, si rimanda a [11]-[12] per i dettagli. Il risultato è che l'etching lascia in rilievo i siti in cui è presente una dislocazione. La densità di dislocazioni evidenziata è tipicamente di 50 cm^{-2} , date le dimensioni del fascio di MAMI ($0.2 \times 0.2 \text{ mm}$) risulta relativamente agevole evitare le zone difettose con il fascio di elettroni una volta evidenziate. Si mostrano le immagini CAD delle spine e del portacampione, perchè la loro geometria ha influito nella scelta di una procedura ottimale per il bagno chimico.

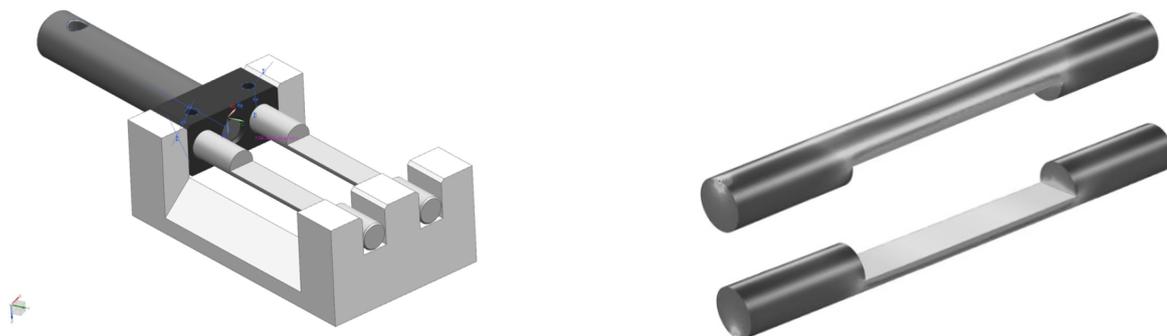


Figura 9: Holder e spine $\varnothing = 4 \text{ mm}$

Si è provata una discreta varietà di metodi per eseguire il bagno chimico, perchè si osserva sperimentalmente una forte dipendenza dell'uniformità dello spessore dalle condizioni in cui si svolgeva il processo di etching. Riassumiamo brevemente i risultati ottenuti:

- Campione montato sulle spine, immerso e fermo: il bagno è statico quindi si instaurano processi diffusivi dei reagenti in prossimità della superficie che rendono poco costante l'etch-rate, la deposizione di ossido di germanio -debolmente reattivo- sulla superficie tende a creare disomogeneità su larga scala.
- Campione montato sulle spine, immerso e fermo, soluzione sottoposta ad ultrasuoni: Il risultato migliora poco e il rischio di rottura del campione aumenta nel caso si instaurino delle risonanze.
- Campione montato sulle spine, immerso e mosso di taglio da un traslatore: il risultato è migliore, ma sono evidenti degli effetti di superficie nel becker e la geometria delle spine rende la superficie posteriore (quella affiancata dalle due metà cilindriche delle spine) irregolare, probabilmente a causa della non laminarità del flusso della soluzione.
- Campione montato sulle spine, immerso in un becker poggiato su un miscelatore circolare: il campione è fermo e il becker si muove, i risultati evidenziano delle irregolarità dovute probabilmente alle periodicità del moto del fluido, inoltre il fluido entra in risonanza a frequenze dipendenti dal diametro del becker e dall'altezza della soluzione nel becker, il procedimento è difficilmente ripetibile.
- Campione montato sulle spine, inclinato a $\sim 45^\circ$ rispetto alla superficie della soluzione e mosso ciclicamente da un traslatore programmabile: il campione è mosso in una traiettoria rettangolare, conseguentemente la laminarità del flusso di liquido migliora e di conseguenza la planarità. La vicinanza del campione con la superficie del liquido comporta una disomogeneità su larga scala (il bordo superiore è $\sim 2.0 \mu\text{m}$ più sottile del bordo vicino al fondo del becker).
- Campione libero in un'ampolla rotante parzialmente riempita: i risultati sono generalmente molto buoni in termini di uniformità. Si ha in questo caso una difficoltà aggiuntiva: il montaggio del campione che dopo il primo lavaggio nell'ampolla raggiunge i $\sim 20 \mu\text{m}$ di spessore ed è molto fragile. Dopo essere stato montato il campione viene mappato in spessore e rifinito con un secondo bagno di durata calibrata in cui l'agitazione è manuale (si tratta di pochi minuti).

L'ultimo metodo garantisce risultati ripetibili e decisamente migliori delle altre procedure. Visto che l'ebrate per la soluzione ottimale $2 : 2 : 96$ è $r_{Ge} = (0.75 \pm 0.02) \frac{\mu m}{min}$ il lavaggio nell'ampolla dura circa 60 min. quello manuale 7 – 9 minuti. La procedura di montaggio sulle spine avviene grazie a due sottili strisce di nastro biadesivo Kapton: per garantire una buona planarità nel punto di incollaggio, sopra il campione viene sistemato un blocchetto planare entro il decimo di micron in silicio e un peso in ottone, quindi l'holder viene chiuso in una camera a $95^\circ C$ per $24h$ sotto vuoto per favorire la suzione delle bolle d'aria intrappolate nel Kapton. Questo processo liquefa parzialmente la colla facendo sì che il campione erediti la planarità del blocco di silicio ed è fondamentale per evitare ondulazioni longitudinali che rovinano l'omogeneità richiesta per una buona curvatura della lamina.

4.3 Mappe profilometriche, trasmissione di raggi X

La mappatura di un campione così sottile richiede l'uso di metodi che non inducano stress meccanico sul campione (profilometri a stilo), si è quindi utilizzata la trasmissione dei raggi X prodotti da un cannone elettronico su un anodo di rame. La riga di emissione utilizzata è la $K_{\alpha,1} = 8047.82 eV$. L'apparato di misura è un difrattometro *X'Pert Pro* della PANalytical. Le misure sfruttano la conoscenza precisa delle sezioni d'urto Fotoelettrica, Compton e di Pair Production; nota la sezione d'urto complessiva σ_T si ricava una lunghezza di attenuazione media dipendente dall'energia dei fotoni incidenti per cui il numero di raggi X che attraversa uno spessore $d = \lambda$ si riduce mediamente di un fattore e^{-1} . La lunghezza d'attenuazione in ${}_{32}Ge$ per la $K_{\alpha,1}$ del rame è calcolata accuratamente in [13] $\lambda = (28.57 \pm 0.01)\mu m$. Le misure sono eseguite in trasmissione ortogonale, la ricerca del centro del campione è veloce se si effettua una scansione a croce nel piano YZ in cui giace la faccia del campione, il fascio incidente ha area d'impatto $(0.2 \times 0.4)mm^2$, la mappa utilizza queste dimensioni come passo: per ogni fissato y viene eseguito uno scan in tutto il range z . Prima di mostrare i risultati raggiunti trattiamo brevemente l'errore da associare alle misure di spessore. Nota l'intensità del fascio libero I_0

$$d = \lambda \log(I_0/I(y, z)) \quad \sigma_d = \sqrt{\left(\frac{\sigma_{I_0}}{I_0}\right)^2 + \frac{1}{I(y, z)}}$$

Dove si è tenuto conto che la singola misura ha un contributo d'errore prevalentemente poissoniano. L'errore su I_0 è ricavato come rms della fluttuazione dell'intensità di fascio libero che si ricava dagli estremi di ogni scan a y fisso (il range in z è $22mm$). Esponiamo di seguito alcune caratterizzazioni in spessore del campione ottimale che verrà poi piegato e utilizzato per le misure al microtrone di Mainz.

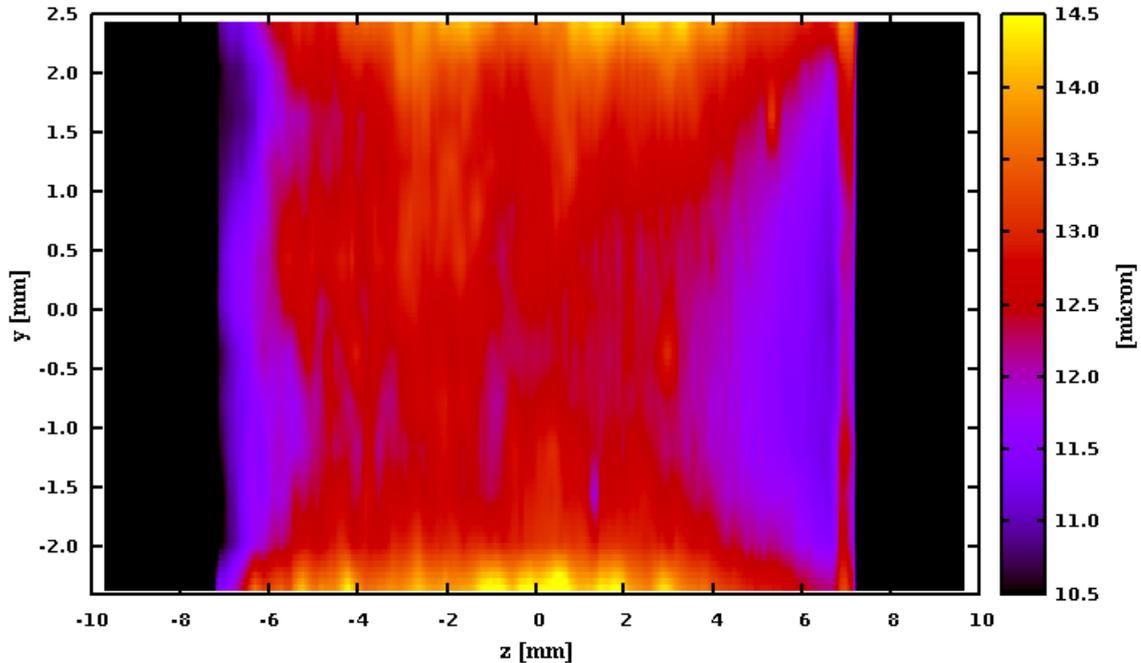


Figura 10: Uniformità su larga scala del campione $d \approx 13 \mu m$

Tutta l'area centrale del campione è entro un micron di spessore, l'errore sul singolo punto è $\sigma \sim 0.2\mu m$, le zone in bluette vicino al bordo destro evidenziano gli effetti di bordo dovuti alla sistematica vicinanza di

un lato della lamina con la superficie della soluzione durante la fase di rifinitura con agitazione manuale. Interessiamoci della parte centrale del campione ($y = 0$), che è quella in cui verrà svolta la caratterizzazione della curvatura e sarà quella in cui il fascio di elettroni dovrà essere incanalato. Proiettando una z-fetta del grafico precedente si può cercare una zona caratterizzata da una buona planarità:

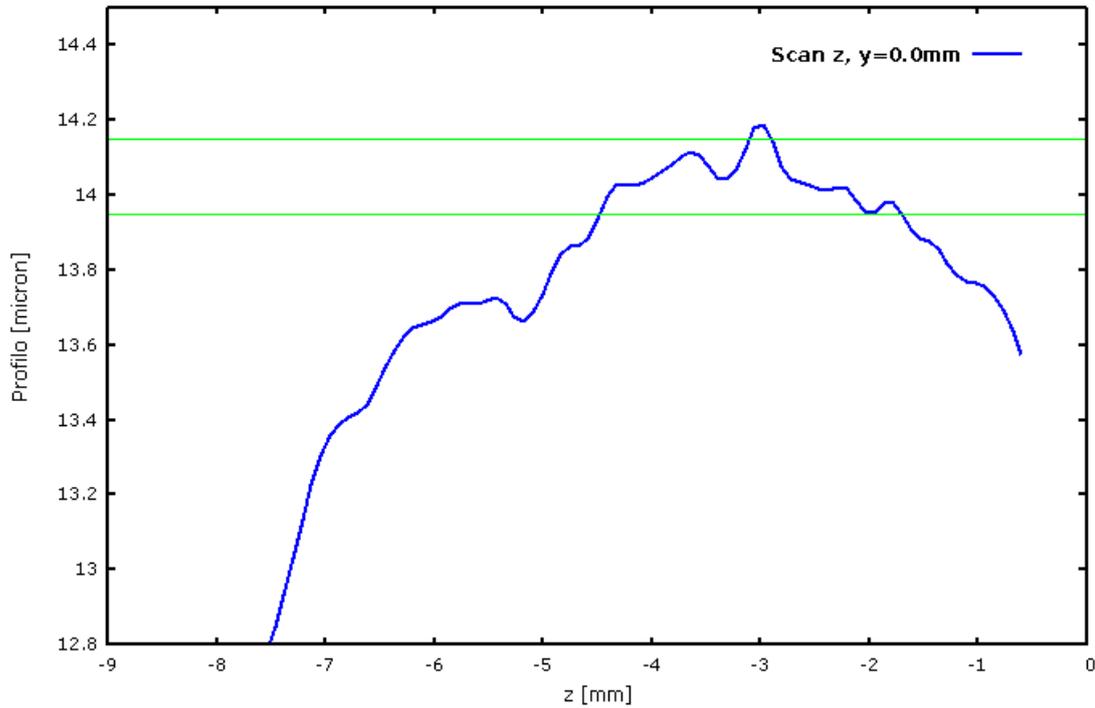


Figura 11: Profilo, scan $z, y = 0$

Come mostra la mappa un'ampia zona del campione (2.6mm) ha un escursione massima di 200nm entro l'errore⁷, un risultato che è piuttosto buono alla luce del fatto che sono stati rimossi $50\mu\text{m}$ di germanio, quindi in questa zona l'etching ha mantenuto l'omogeneità della superficie con un errore piccolo del 0.4% mentre generalmente in letteratura si trovano dati sperimentali con uniformità non migliori di qualche punto percentuale.

⁷Si noti che questa misura è stata registrata con alta statistica, l'incertezza su d per questo scan- z è di $\sim 60\text{nm}$

5 Caratterizzazione del campione curvo

Viste le buone condizioni di planarità raggiunte per alcune lamine, si è passati alla fase di piegatura, questa però richiede alcune operazioni preliminari. Mostriamo per prima cosa il sistema di piegatura: si tratta di un corpo in ottone **C**, dotato di una guida e un carrello che permette di traslare un lato del campione **F-D**, la traslazione viene regolata al micrometro da una vite senza fine **E**. Il sistema è dotato anche di quattro viti differenziali **G** che permettono una fine regolazione del parallelismo delle spine **A** per correggere eventuali difetti di montaggio del campione **B**, le sedi per l'aggancio al piatto del diffrattometro sono indicate da **H**. Le spine sono libere di ruotare attorno al proprio asse, la relazione che esprime la curvatura primaria in funzione della traslazione non ha forma analitica, ma si può mostrare che un'approssimazione parabolica è buona, la forma della curvatura primaria è invece ben approssimabile con un polinomio di quarto grado nei termini di potenze pari.

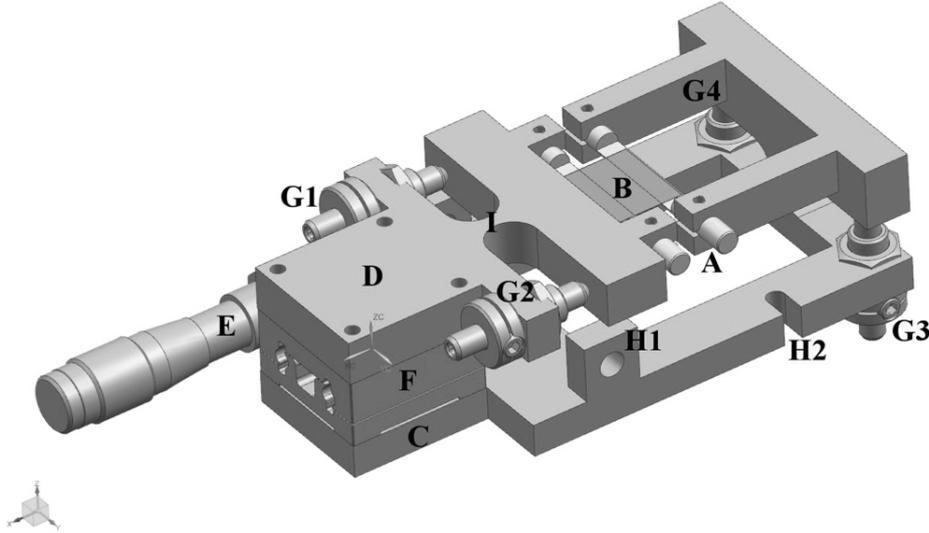


Figura 12: Sistema di piegatura

In fig. 7 si mostrava un confronto tra vari metodi di assottigliamento, il campione ottenuto per bagno chimico mostra non solo di essere l'approccio migliore per la fabbricazione di una lamina sottile, ma anche un altro fatto importante: quel campione è stato lasciato in piega con un piccolo raggio di curvatura e quindi in regime di grande deformazione per circa due mesi. Le misure diffrattometriche mostrano che il campione non ha avuto nè problemi di isteresi elastica, nè ci sono state dislocazioni figlie prodotte dagli sforzi di taglio per il meccanismo di *Frank-Read*. Le lamine sottili di *Ge* presentano quindi eccezionali proprietà elastiche. Per caratterizzare la curvatura del campione faremo uso della diffrazione di raggi-X, saranno richiamati brevemente i punti chiave di questa tecnica sperimentale di misura illustrandone brevemente il principio fenomenologico. Si vedrà che per particolari direzioni cristallografiche la curvatura primaria indotta nella lamina, abbia come effetto secondario il piegamento di piani interni alla lamina (quasi mosaico). Si mostrano poi in chiusura le caratterizzazioni della lamina di Germanio sottoposto a curvatura, sviluppata nell'ambito della mia tesi.

5.1 Condizioni di Laue

Nell'interpretazione alla Laue della diffrazione di raggi X si considerano gli atomi nei siti reticolari come centri di diffusione della radiazione. Consideriamo anzitutto un reticolo semplice, siano \mathbf{k} , \mathbf{k}' i vettori d'onda rispettivamente della radiazione incidente e di quella diffusa ed \mathbf{n} , \mathbf{n}' i corrispondenti versori. Assumendo $|\mathbf{k}| \approx |\mathbf{k}'|$ la differenza di cammino ottico per la radiazione diffusa da due centri diffondenti con posizione relativa \mathbf{r} è

$$\delta l = \mathbf{r} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{r} \cdot \mathbf{n}' = m\lambda \quad m \in \mathbb{N}$$

Dove si sono imposte le condizioni di interferenza costruttiva tra i due raggi diffusi, questa condizione se si esplicita il prodotto scalare e si sfrutta la formula di Eulero è equivalente alla richiesta che $\exp(-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = 1$, soddisfatta automaticamente se si prende $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{G}(h, k, l)$ ⁸, queste sono le condizioni di Laue per un

⁸Si veda in merito il capitolo 1

reticolo semplice. L'ampiezza dell'onda diffusa a $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}$, qualora il fascio incidente illumini M, N, P celle di un reticolo semplice a cella cubica rispettivamente lungo $\mathbf{a}_{1,2,3}$ è data da:

$$A = \sum_m^M \sum_n^N \sum_p^P e^{-i(m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2 + p\mathbf{a}_3) \cdot \Delta\mathbf{k}}$$

Lo spettro di intensità diffusa è quindi dato da $I = A^*A$, il calcolo si esegue semplicemente considerando i termini ridotti delle tre serie telescopiche che compaiono separatamente. Nel caso di reticoli con base come il reticolo diamante, oltre al fattore A compaiono anche termini di fase dovuti alle posizioni all'interno della base dei singoli atomi. A causa dei termini di fase alcune frange d'interferenza vengono annullate. Compare un termine di forma che detta le cosiddette *Regole di Estinzione*.

Le condizioni di Laue suggeriscono un metodo di grande precisione e versatilità per misurare la curvatura di una lamina cristallina, infatti se i piani cristallografici sono curvi entro l'area d'impatto del fascio incidente, ho tratti infinitesimi di piano che vanno in condizioni di Laue ad angoli diversi. Come si mostrava nella seconda sezione, il vettore del reticolo reciproco $\mathbf{G}(h, k, l)$ è ortogonale al piano di indici di Miller (h, k, l) . Ciò che si osserva è quindi un picco di interferenza costruttiva largo quanto l'angolo spazzato dalle normali al piano cristallografico, sia θ_D . Approssimando poi la curvatura con la circonferenza osculatrice a metà del piano curvo, con una semplice costruzione geometrica si calcola il raggio di curvatura del piano come

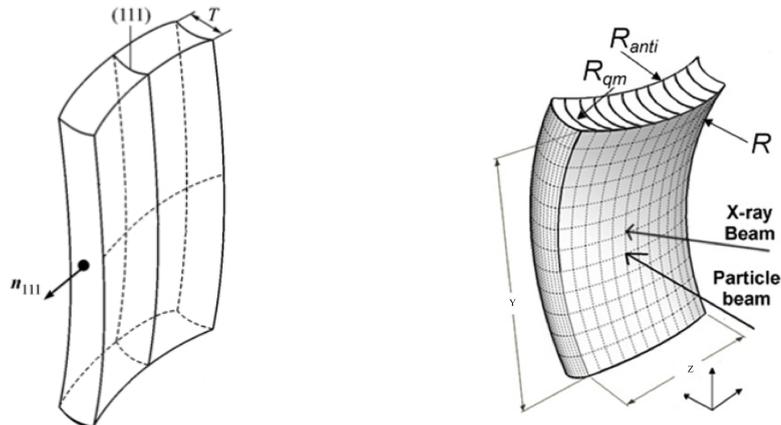
$$R_B \approx \frac{d}{\theta_D}$$

Valida se $d \ll R_B$ e ottenuta approssimando la lunghezza d'arco di circonferenza con la corrispondente corda di lunghezza d , e considerando che per lamine micrometriche $\theta_D \ll 1 \text{ rad}$. Chiameremo R_B raggio di curvatura e θ_D per costruzione corrisponde alla deviazione angolare che subisce una particella carica incanalata lungo questi piani cristallografici.

5.2 Misure diffrattometriche della curvatura QM

Prima di spiegare le procedure di piegatura e di misura, si illustra brevemente la natura della curvatura quasi mosaico:

La curvatura Quasi Mosaico: la natura anisotropa della struttura cristallina si ripercuote su le proprietà meccaniche del solido, tra queste anche quelle elastiche. La maggior parte delle informazioni sulle proprietà elastiche di un corpo sono contenute nel suo tensore delle costanti elastiche la cui struttura determina attraverso un set di equazioni quale sia il campo di deformazione del solido noto il tensore degli sforzi σ_{ij} . Una trattazione estensiva di queste teorie non è né l'obiettivo della tesi, né si presta a una trattazione spiccia essendo un argomento molto articolato e per alcuni versi complesso, si rimanda per le sue idee fondamentali a [14]. Sulla base della teoria dell'elasticità è possibile mostrare che per alcune direzioni cristallografiche l'introduzione di una curvatura ha come conseguenza la deformazione dei piani ortogonali alla superficie che presenta la curvatura primaria [15]-[16]. Il vantaggio nell'uso di questa curvatura per gli esperimenti di channeling è che nel nostro caso interesserebbe i piani trasversi alle facce della una lamina sottile, rendendo possibile un channeling con buona efficienza anche di particelle negative. Mostriamo un grafico esemplificativo, la prima figura rappresenta il corretto orientamento dei piani (111) nel nostro campione.



Vista la struttura della curvatura quasi mosaico, le misure di diffrazione vanno eseguite in trasmissione, schematizziamo le condizioni di misura come in figura: il campione **A** è montato su un piano libero di ruotare e traslare nelle tre direzioni indicate, i raggi rifratti sono raccolti da dei rivelatori gas-proporzionale **B** in modalità triplo asse **C**, la sorgente di raggi X è un cannone elettronico con anodo in rame la cui emissione viene collimata e successivamente passa in un monocromatore Bartel **D** con specchi estrusi da un blocco Germanio monocristallino. Il sistema di fenditure è tarato per ottenere un fascio con dimensioni paragonabili a quello di MAMI.

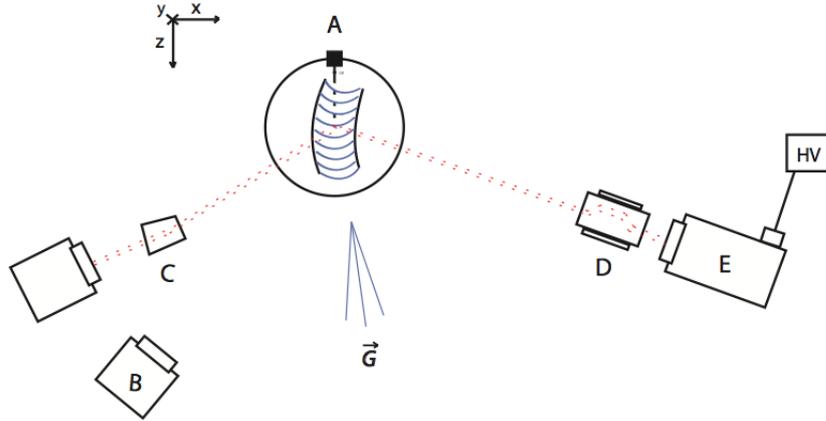


Figura 13: X'PERT Pro, schematiche dell'apparato di misura

Un requisito fondamentale prima di curvare il campione è quello di aver correttamente allineato le spine e di verificare la planarità del campione lungo la direzione z . Poniamo ad esempio che sulle dimensioni del fascio la lamina sia ondulata lungo z , allora l'angolo d'incidenza affinché il fascio di elettroni sia parallelo ai piani (111) varia in funzione di z , questo può diminuire fortemente l'efficienza del channeling. Infatti, in generale, ogni deformazione non voluta del campione si ripercuote in un aumento della dispersione degli angoli in ingresso ai piani cristallini. Per analizzare questo fenomeno, il picco di bragg relativo ai piani (111) viene misurato a vari z . Il risultato è la mappa riportata in Fig. 14. Tale mappa indica come si modifica l'angolo di Bragg dei piani (111) in funzione della coordinata z .

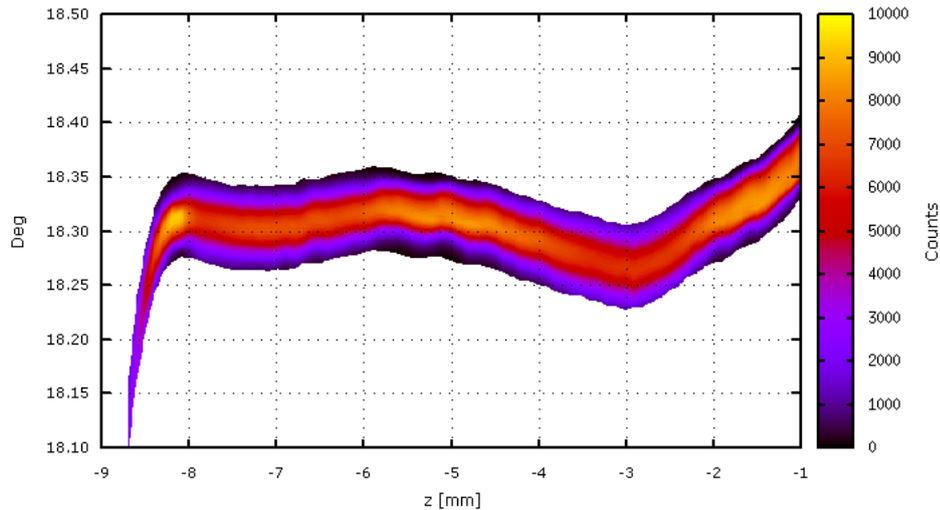


Figura 14: Scan (z, ω) , lamina piana

La coda irregolare per $z \in [-9, -8]mm$ corrisponde al bordo del campione. Si osserva che su $8mm$ si ha un escursione massima di $\sim 0.05^\circ mm^{-1}$ nella zona critica a destra del grafico, questo corrisponde sulle dimensioni del fascio a una variabilità massima nell'angolo d'ingresso di $\sim 175\mu rad$ mentre la divergenza del fascio è di $\sim 26\mu rad$. Un errore sistematico di questo tipo è critico e per quanto possibile dovrà essere

minimizzato. Agendo sulle viti differenziali dell'holder e lasciando un'altra notte in forno il campione per aggiustare la planarità della colla del nastro Kapton il risultato è migliorato sensibilmente. Si è quindi iniziata la piegatura della lamina muovendo le due spine una verso l'altra di circa 1.5 mm agendo sulla vite micrometrica **E** di Fig. 12.

Appena dopo la curvatura le rocking curve non hanno una ben definita forma a cassetta ma hanno salite e discese irregolari (curva in verde, Fig. 15). Per migliorare la rocking curve si attuano le viti micrometriche in modo da migliorare il parallelismo tra le spine fino ad arrivare alla curva blu. In pratica il mancato parallelismo tra le spine provoca una torsione della lamina. La torsione fa sì che diversi punti del campione lungo la direzione y abbiano angoli di bragg differenti. La cassetta assume quindi una forma a trapezio essendo la somma di tante rocking curve a 'cassetta' leggermente traslate tra loro. L'attuazione delle viti è stata fatta avendo come criterio un aumento della pendenza delle code del segnale. Il risultato finale è la curva blu.

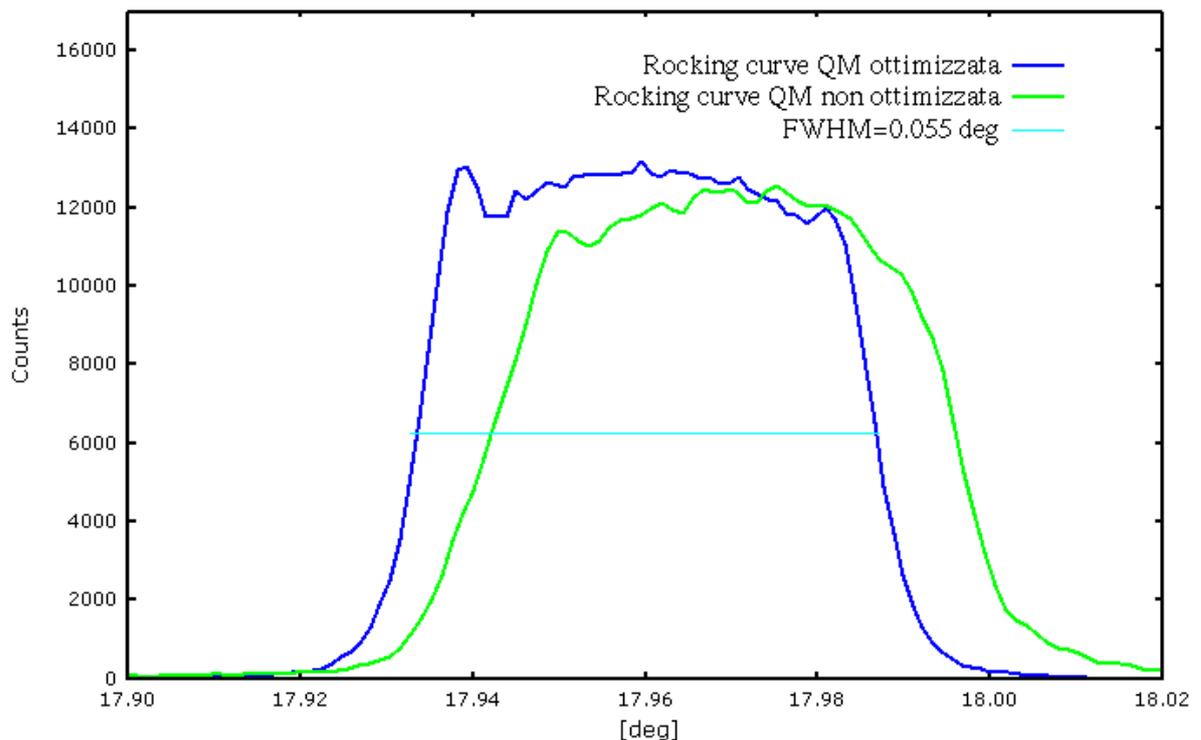


Figura 15: Effetto dell'ottimizzazione sulla Rocking Curve, $z = -3.2mm$

Anche per la curva ottimizzata le spalle della cassetta hanno ancora una pendenza che però è da imputarsi in larga parte alla risoluzione dell'apparato.

Il picco di diffrazione prodotto da un piano curvo può essere pensato come il prodotto di convoluzione di una funzione a gradino larga θ_D con il picco Darwin-Prince prodotto dal singolo tratto infinitesimo di piano cristallografico. Con θ_D si indica l'angolo spazzato da G per effetto della curvatura. Sia $f(\theta)$ la figura di diffrazione prodotta dal singolo piano, la forma funzionale della rocking curve in Fig. 15 è descritta da:

$$F(\theta) = f * H = \int_{\mathbb{R}} (H(\theta' + \theta_D/2) - H(\theta' - \theta_D/2)) f(\theta - \theta') d\theta' \quad (13)$$

con $H(\theta')$ la funzione di Heavside. Possiamo ricavare $f(\theta)$ sperimentalmente a passi discreti in θ con una misura di diffrazione di una lastra piana di Ge . Sulla base di quest'ultima misura possiamo ricavare $F(\theta)$ che rappresenta la curva teorica prodotta da un piano curvo in assenza di deformazioni e confrontarla con la rocking curve ottenuta dopo gli aggiustamenti con le viti differenziali.

Il risultato conferma la bontà delle condizioni di misura: la curva teorica che si ricava è perfettamente sovrapponibile con la curva prodotta dal campione da noi misurato.

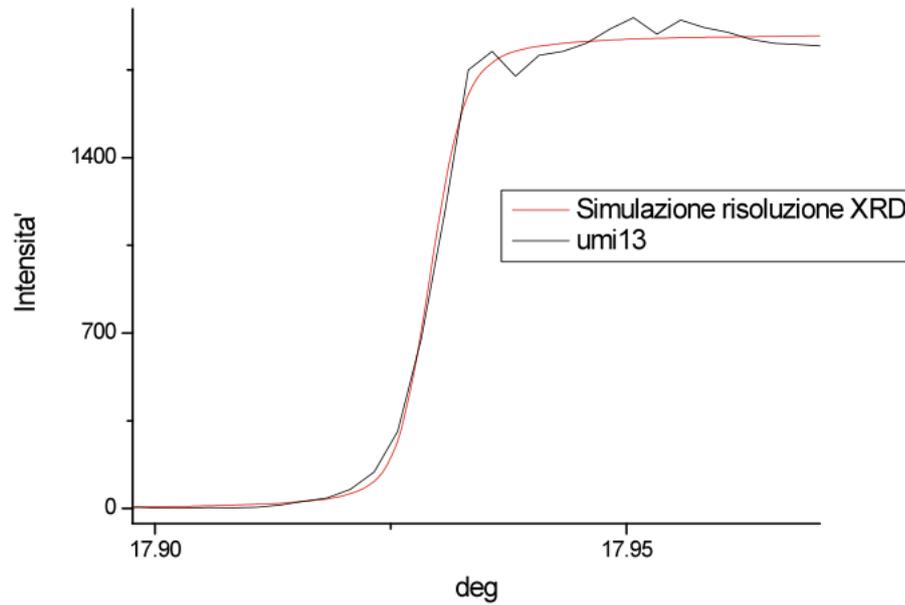


Figura 16: Spettro acquisito e risoluzione sperimentale , $z = -3.2\text{ mm}$

Mostriamo anche un tratto della mappa (z, ω) per il campione curvo: nel tratto $[-3.5, -2.8]$ l'omega shift del punto a metà altezza è di $\Delta\theta = (36.7 \pm 2.1)\mu\text{rad}$ su 0.7 mm ovvero in media $\sim 20\mu\text{rad}$ sulle dimensioni del fascio⁹, un miglioramento di quasi un fattore dieci rispetto al panorama precedente alle procedure di ottimizzazione.

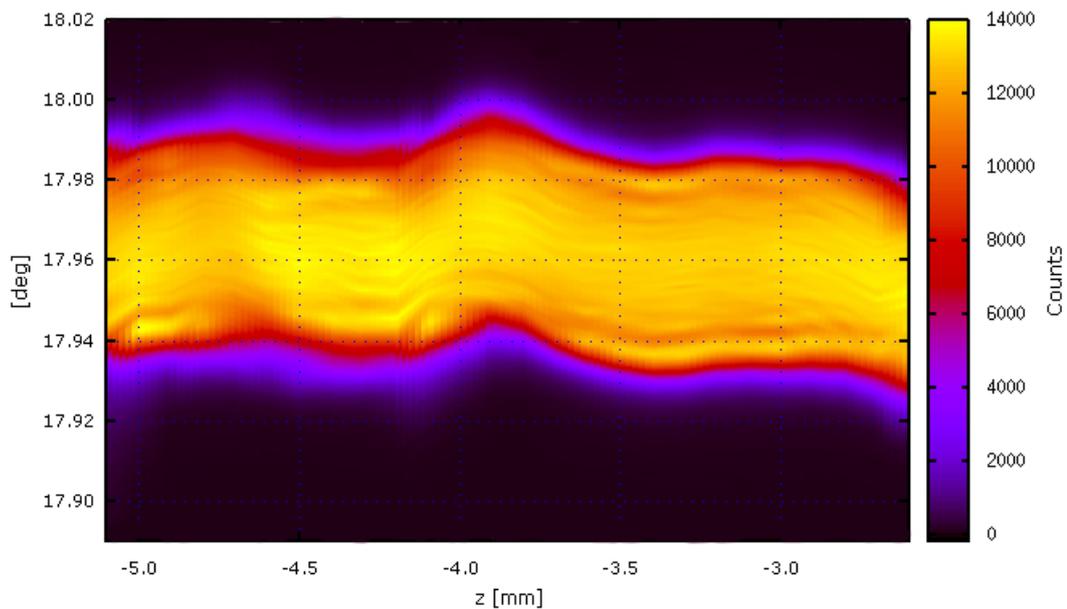


Figura 17: Scan (z, ω) , ottimizzato

⁹Deriva da una media della fluttuazione sulle dimensioni del fascio in diversi punti entro il range prestabilito

Mostriamo alcune caratteristiche del campione che ci permettono di controllare la regolarità dei parametri critici per il channeling. Si può ad esempio osservare che la FWHM ha delle fluttuazioni entro $\sim 20\mu rad$ tra $z = -3.5\text{ mm}$ e $z = -2.9\text{ mm}$. L'errore che si mostrerà nel grafico è stato calcolato nel modo che segue: si è interpolata con una funzione costante del tipo $f(\theta) = a$ la zona approssimativamente piana in testa alla rocking curve, il FWHM corrisponderà quindi a $\Delta = (\theta_2 - \theta_1)$ con $\theta_{1,2}$ che soddisfano la condizione $f(\theta) = \frac{a}{2}$. L'errore su a è stato quindi propagato in $\theta_{1,2}$. L'errore sul singolo θ_i della rocking curve è invece trascurabile poichè tutti gli spettri sono stati acquisiti in alta statistica.

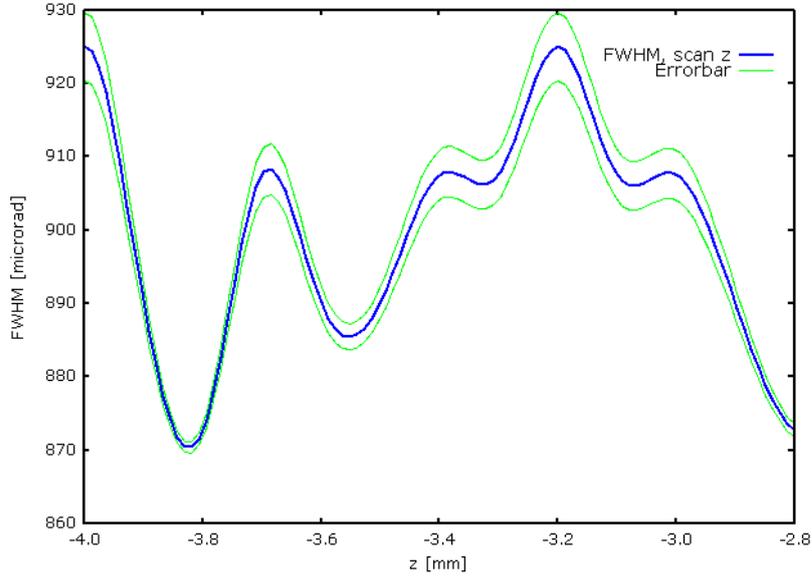


Figura 18: Fluttuazioni del FWHM, scan z

Un secondo indicatore della bontà delle condizioni di misura è lo shift relativo del punto a mezza altezza destro e sinistro, tra due spettri contigui ($z_{i,i+1}, \omega$). E' infatti possibile che ci sia uno shift di tutta la figura di diffrazione a causa delle ondulazioni della lamina, ma in prima approssimazione la rocking curve dovrebbe essere simmetrica nelle code, dunque lo shift per il punto a mezz'altezza destro e sinistro dovrebbe essere uguale. Si può verificare sperimentalmente che l'asimmetria dello spettro è principalmente dovuta ad un errato allineamento dello strumento di misura.

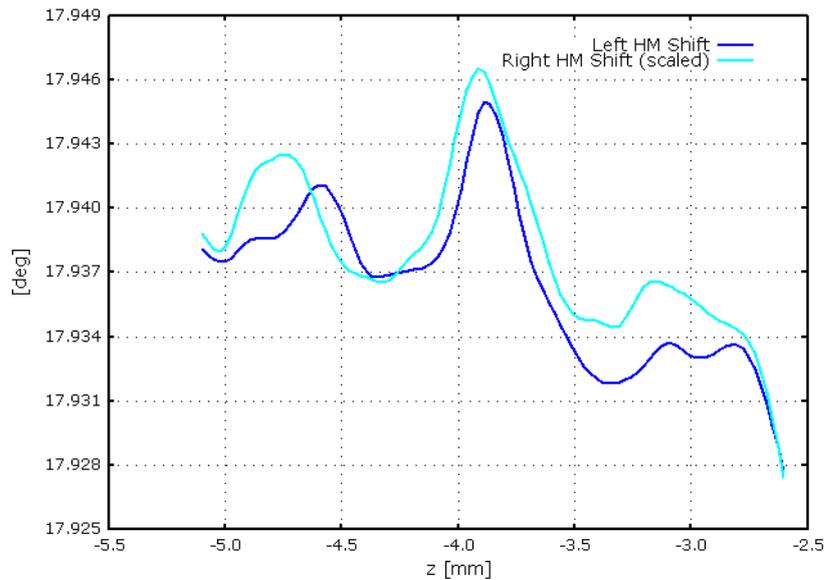


Figura 19: Fluttuazioni dell'HM destro e sinistro, scan z

Anche in questo caso le fluttuazioni piuttosto contenute dell'HM ci assicurano una buona ripetibilità e qualità delle misure. In conclusione quest'analisi evidenzia una zona piuttosto ampia (3.5 volte le

dimesioni del fascio) in cui la lamina presenta una buona regolarità. Dunque nella zona tra $z = -3.5 \text{ mm}$ e $z = -2.9 \text{ mm}$ si ha:

$$\begin{array}{c} \hline \text{SCHEDA RIASSUNTIVA} \\ \hline \langle \theta_D \rangle = (905.1 \pm 12.1) \mu\text{rad} \\ \langle R_B \rangle = (15.58 \pm 0.21) \text{mm} \\ \sigma_{ond} \sim 20 \mu\text{rad} \\ \hline \end{array}$$

Gli errori sono stati ricavati come il 68% CL two-side di t-Student della distribuzione in ragione del numero limitato di punti sperimentali nel range prescelto. σ_{ond} è il contributo da aggiungere in quadratura alla divergenza del fascio di MAMI dovuto alla variabilità dell'angolo dei piani cristallografici in z per effetto delle ondulazioni della lamina.

6 Simulazione della dinamica di elettroni in un reticolo cristallino

Ora che abbiamo ricavato i parametri principali della lamina, possiamo provare a impostare un modello numerico che descriva la dinamica degli elettroni nel cristallo, prima per il problema con cristallo planare e poi per quello curvo. L'obiettivo è quello di avere una simulazione che sia sufficientemente versatile da permettere il calcolo delle osservabili fisiche più interessanti per un esperimento di channeling: lunghezza di dechanneling, efficienza, spettro angolare di deflessione e in linea teorica il nostro modello permetterà anche di prestarsi in futuro al calcolo dello spettro di radiazione per bremsstrahlung degli elettroni incanalati. Generalmente le simulazioni del channeling elettronico sfruttano un'evoluzione unidimensionale dell'energia trasversa nel canale cristallino, inserendo poi dei termini stocastici che tengono conto di scattering, dislocazioni e variabilità del raggio di curvatura. Il vantaggio di questo approccio è la sua efficienza a livello computazionale e la sua capacità, come mostrato in [2], di riprodurre molto bene i dati sperimentali, questo modello è tuttavia inadatto al calcolo dello spettro di emissione bremsstrahlung che richiede una conoscenza dettagliata della traiettoria della particella carica da cui si ricava la quadricorrente associata quindi il potenziale di *Lenard-Wiechert*, base fondamentale per ricavare la maggior parte delle grandezze d'interesse in elettrodinamica classica.

Il nostro proposito è quindi la costruzione di un algoritmo di integrazione numerica delle ODE che combini una buona rapidità di calcolo con la possibilità di calcolare la traiettoria di ciascun elettrone in moto ultrarelativistico nel reticolo. Il modello che costruiremo si basa su alcune ragionevoli assunzioni:

- Gli atomi del reticolo vibrano attorno alle posizioni di equilibrio per agitazione termica, tuttavia il lasso temporale caratteristico in cui una particella con $v \sim c$ attraversa lo spessore del cristallo da noi costruito è $\delta t \sim 4.3 \cdot 10^{-14} \text{ s}$, su queste scale di tempo gli atomi del cristallo appaiono per l'elettrone come immobili in posizioni che seguono una certa distribuzione centrata nel sito reticolare.
- Come mostra la lunghezza di dechanneling elettronica, calcolata precedentemente, il contributo di scattering elettronico è praticamente ininfluenza nella modificazione della traiettoria degli elettroni. Gli elettroni quindi influiranno solo come termine di schermo nel nostro modello. Nel caso il modello non funzionasse adeguatamente l'introduzione di un termine stocastico di scattering e^-e^- è semplicemente un termine additivo di facile inserimento.
- Si sfrutta la natura a corto raggio del potenziale schermato di Thomas-Fermi, considereremo nulla l'interazione con gli atomi a distanza relativa dall'elettrone maggiore di $\rho_{cut} = 5 \text{ \AA}$, come mostra Fig. 1, questa è un'assunzione del tutto lecita infatti si può calcolare $V(\rho_{cut})/V(0) \approx 1.4 \cdot 10^{-5}$.

Partendo da queste ipotesi iniziamo a costruirci lo spazio in cui si muoverà la particella.

6.1 La cella dinamica

Sfruttando la natura a corto range del potenziale di TF, è possibile costruire un modulo reticolare che segue dinamicamente la particella, il cui moto è determinato univocamente dal termine di potenziale posizionale. Consideriamo una cella cubica del reticolo diamante essa ha parametro reticolare $a \approx 5.65 \text{ \AA}$, gli atomi in questo reticolo di Bravais hanno le posizioni:

$$\begin{array}{cccc} (0, 0, 0)\mathbf{a} & (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})\mathbf{a} & (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})\mathbf{a} & (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)\mathbf{a} \\ (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})\mathbf{a} & (\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})\mathbf{a} & (\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})\mathbf{a} & (\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})\mathbf{a} \end{array}$$

una qualsiasi altra cella è definita traslando questi elementi di un vettore del reticolo di base di $\mathbb{R}(n_1, n_2, n_3)$. In questo modo la generazione di qualsiasi atomo nel suo sito reticolare è un'operazione di somma dipendente da tre numeri interi (n_1, n_2, n_3) , l'idea è allora che se un atomo si trova in una certa posizione la cella di base che contiene l'elettrone può essere trovata facilmente attraverso le operazioni di modulo e parte intera delle librerie standard C++ come:

$$(n_1, n_2, n_3) = \text{int}(x \div a, y \div a, z \div a)$$

Questi tre indici producono il vettore di traslazione che sommato agli otto vettori di base degli atomi creano la cella contenete l'elettrone. Immaginiamo di costruire una struttura C++ contenente gli otto vettori degli atomi, possiamo creare attorno alla cella contenete l'elettrone altre 26 celle di contorno per assicurarci che entro ρ_{cut} ci siano sempre tutti gli atomi necessari. Queste 26 celle contengono atomi nelle posizioni descritte da $\mathbf{R}(n_1 \pm 1, n_2 \pm 1, n_3 \pm 1)$ sommato agli otto vettori di base. Bisogna ora tenere conto delle vibrazioni termiche degli atomi attorno ai rispettivi siti reticolari, anche in questo caso si tratta semplicemente di generare per ciascun atomo della cella di base 8 vettori di spostamento relativo Δ , le cui componenti sono determinate da un generatore di numeri casuali secondo una PDF gaussiana:

$$\Delta_i = \frac{1}{\sqrt{2\pi u_T^2}} \exp\left(-\frac{r_i^2}{2u_T^2}\right)$$

Il generatore di numeri casuali utilizzato è un LC marsenne-twister che ha buona pseudorandomicità, ed essendo di tipo LC¹⁰ ha la massima velocità di generazione disponibile. Abbiamo quindi creato una cella dinamica di $3 \times 3 \times 3$ unità di base che segua la particella nel suo moto. Vediamo il meccanismo con cui la cella si aggiorna senza andare a creare dei kick energetici per l'elettrone generati dalla modifica delle posizioni di atomi entro la sfera d'interazione con $r = \rho_{cut}$. Immaginiamo di mantenere la cella statica per tutto il tempo in cui l'elettrone è all'interno della cella centrale, quando l'elettrone eccede una delle dimensioni della cella l'unità reticolare adiacente diventa quella centrale, le celle in coda sono sicuramente più lontane di ρ_{cut} dall'elettrone in quanto la precedente cella centrale ha dimensioni $a > \rho_{cut}$ possono essere allora rimosse senza influire sulla dinamica dell'elettrone, si tratta di aggiungere quindi le celle nella direzione di moto dell'elettrone. Anche le celle da aggiungere non perturberanno la dinamica dell'elettrone se e solo se gli atomi introdotti saranno a $r < \rho_{cut}$, questo può essere evitato imponendo un vincolo sul passo d'integrazione h dell'algoritmo: possiamo considerare nulla la probabilità che un atomo disti dal suo sito reticolare più di $4u_T$ in una certa direzione, immaginiamo che l'elettrone si muova a $v \sim c$ immaginando che l'elettrone sia in condizioni di soglia con il confine della cella centrale, al più questo si muoverà lungo la direzione prescelta di $\delta x = h \cdot c$. Si tratta di imporre semplicemente che $a - \rho_{cut} - 4u_T > \frac{\delta x}{c}$. La condizione cercata è che $h \leq 0.10 [a.s]$. Illustriamo schematicamente quanto detto sin qui:

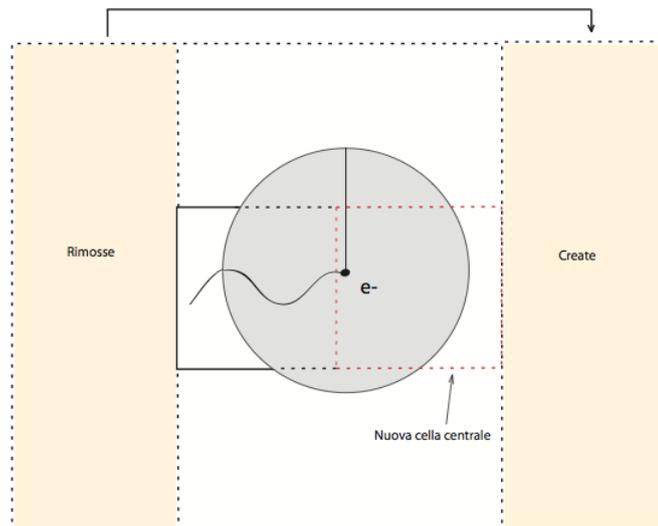


Figura 20: La cella dinamica

¹⁰linear-congential generator

È possibile chiedersi se sia vantaggioso usare celle dinamiche con dimensioni maggiori, si tratta di ragionare in termini di efficienza computazionale: creare celle con un ritmo maggiore accresce linearmente il numero di operazioni, ma creare una cella con più unità accresce in maniera cubica il numero di atomi, e quindi cresce allo stesso modo il numero di check di appartenenza alla sfera $r < \rho_{cut}$ per individuare quali atomi stiano interagendo con l'elettrone, la possibilità di scegliere h maggiori si scontra poi con la precisione del calcolo numerico. Con alcuni run test è possibile verificare che il costo computazionale minore si ha per la cella dinamica $3 \times 3 \times 3$.

6.2 Algoritmo d'integrazione

La scelta di un buon algoritmo d'integrazione non può prescindere dalla struttura delle equazioni differenziali che regolano il moto. Nel nostro caso si tratta di equazioni per una dinamica relativistica, ci riferiremo quindi alla formula di Minkovski

$$\frac{dp^\mu}{ds} = \mathfrak{S}^\mu = \left(\frac{\gamma}{c^2} \frac{dE}{dt}, \frac{\gamma}{c} \frac{d\mathbf{p}}{dt} \right)$$

da cui ricaviamo il sistema per le componenti spaziali:

$$\begin{cases} \frac{dp^i}{dt} = F^i(\mathbf{r}_j) = eE^i(\mathbf{r}_j) \\ \frac{dx^i}{dt} = v^i \end{cases} \quad (14)$$

Dove \mathbf{r}_j sono le coordinate relative del j -esimo atomo entro la sfera d'interazione. Considerando il fatto che il campo elettrico sviluppato da un piano è dell'ordine del centinaio di eV per \AA , si veda fig. 3, mentre l'energia dell'elettrone è di $855 MeV$ possiamo assumere che con il vincolo su h considerato γ rimanga costante nella discretizzazione temporale per cui la prima delle (16) diventa

$$\frac{dv^i}{dt} = \frac{e}{\gamma m_e} E^i(\mathbf{r}_j)$$

Si tratta di costruire quindi un metodo d'integrazione per un ODE di second'ordine. Prendiamo in considerazione due metodi e ne discutiamo vantaggi e svantaggi. Il primo metodo d'integrazione è comunemente utilizzato in dinamica molecolare ed è l'algoritmo di Verlet che si può ottenere facilmente a partire dalla somma dei due sviluppi di Taylor al quart'ordine in $(t \pm h)$:

$$\begin{cases} x(t+h) = x(t) + h\dot{x} + \frac{h^2}{2}\ddot{x} + \frac{h^3}{6}\dddot{x} + O(h^4) \\ x(t-h) = x(t) - h\dot{x} + \frac{h^2}{2}\ddot{x} - \frac{h^3}{6}\dddot{x} + O(h^4) \end{cases}$$

Sottraendo membro a membro le due abbiamo:

$$x(t+h) = 2x(t) - x(t-h) + h^2 \frac{F}{m} + O(h^4) \quad (15)$$

Si riesce poi a ricavare dalla definizione di velocità che:

$$v(t) = \frac{x(t+h) - x(t-h)}{2h} + O(h^2) \quad (16)$$

Questo algoritmo ha un ottima precisione spaziale, ma è debole nella determinazione della velocità. Andrà quindi bene per il calcolo della lunghezza di dechanneling ma per uno sviluppo numerico del calcolo della quadricorrente è fondamentale una conoscenza precisa della velocità è preferibile utilizzare un algoritmo di Runge-Kutta del quarto ordine. Usiamo la formula per il metodo di quart'ordine per un ODE del tipo $\dot{x} = f(t, x)$ senza dimostrarla¹¹

$$\begin{aligned} K_0 &= f(t_i, x_i) & K_1 &= f(t_{i+1/2}, x_i + \frac{h}{2}K_0) \\ K_2 &= f(t_{i+1/2}, x_i + \frac{h}{2}K_1) & K_3 &= f(t_{i+1}, x_i + hK_2) \end{aligned}$$

¹¹Si rimanda per dimostrazione generale al testo Numerical Recipes, 'the art of scientific computing', William H. Press

Con queste definizioni:

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{6}(K_0 + 2K_1 + 2K_2 + K_3)$$

La trascrizione di questo algoritmo per un ODE al second'ordine richiede solo la separazione dell'equazione in due termini del prim'ordine. Assumiamo per compattezza una notazione vettoriale, siano $K_{i,j} = f_j(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ con $i = 0, 1, 2, 3$, $j = 1, 2, 3$ le j -esime componenti del campo vettoriale K_i , siano poi $Q_{i,j}$ le componenti del vettore \mathbf{Q}_i , è possibile ricavare con qualche semplificazione il seguente algoritmo di RK-4 per ODE del second'ordine:

$$\begin{aligned} K_{0,j} &= f_j(\mathbf{r}, \mathbf{v}) & Q_{0,j} &= v_j + \frac{h}{2}K_{0,j} \\ K_{1,j} &= f_j\left(\mathbf{r} + \frac{h}{2}\mathbf{v}, \mathbf{Q}_0\right) & Q_{1,j} &= v_j + \frac{h}{2}K_{1,j} \\ K_{2,j} &= f_j\left(\mathbf{r} + \frac{h}{2}\mathbf{Q}_0, \mathbf{Q}_1\right) & Q_{2,j} &= v_j + hK_{2,j} \\ K_{3,j} &= f_j\left(\mathbf{r} + h\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_2\right) \end{aligned}$$

e con queste definizioni risulta:

$$\begin{cases} \mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k + h\left(\mathbf{v} + \frac{h}{6}(\mathbf{K}_0 + \mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2)\right) + O(h^5) \\ \mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{v}_k + \frac{h}{6}(\mathbf{K}_0 + 2\mathbf{K}_1 + 2\mathbf{K}_2) + \mathbf{K}_3 + O(h^5) \end{cases} \quad (17)$$

Questo metodo richiede quattro volte il calcolo del campo elettrico e si può calcolare che il tempo computazionale rispetto ad un algoritmo di Verlet è circa triplo nel nostro codice. Il vantaggio è un calcolo accurato delle velocità. Quanto al calcolo di $f_j(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ si tratta di computare il campo elettrico, sfruttando il fatto che $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r})$, si tratta poi di sommare $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ su tutti gli atomi entro la sfera d'interazione con $r = \rho_{cut}$.

A questo punto è stato necessario un run test per scegliere anzitutto uno step d'integrazione h e per decidere quale dei due metodi sia più conveniente per le stime delle osservabili fisiche che ci proponiamo di calcolare: la scelta di un passo d'integrazione che renda stabile e ripetibile la traiettoria calcolata con un algoritmo numerico può semplicemente essere ricavata sfruttando il fatto che se si dimezza il passo d'integrazione la precisione aumenta drasticamente, si tratta di trovare un buon compromesso tra le due, si mostrano i risultati.

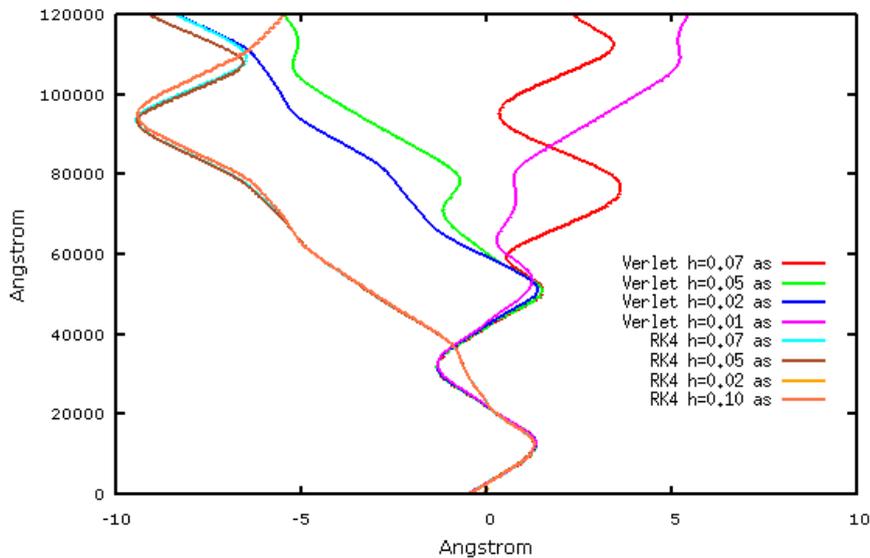


Figura 21: La scelta del passo d'integrazione

Il grafico mostra chiaramente come l'algoritmo di Verlet non sia in grado di fornire risultati riproducibili nemmeno a step molto piccoli d'integrazione, sembra che lo step ottimale per i metodi di Runge Kutta invece sia $h = 0.07 [as]$ in quanto la traiettoria differisce per qualche decimo di Angstrom alla fine del percorso dalla traccia ad $h = 0.05 [as]$ che è completamente sovrapposta ad $h = 0.02 [as]$, lo step al decimo di attosecondo invece si rivela insufficiente anche per questo metodo. Prima di rinunciare completamente all'uso della discretizzazione di Verlet, rimane da fare un ultimo controllo: è infatti possibile che pur non riproducendo esattamente le traiettorie nel cristallo, questo algoritmo preservi le proprietà statistiche della popolazione simulata. Siccome ci focalizzeremo nel calcolo della lunghezza di dechanneling, calcoliamo per $d = 15.0 \mu m$ la distribuzione angolare per positroni dopo l'attraversamento del cristallo piano, se le distribuzioni ottenute sono sovrapponibili questo indicherà la possibilità di usare Verlet almeno per la stima delle proprietà d'ensamble. Si per $h = 0.07 [as]$ il seguente istogramma:

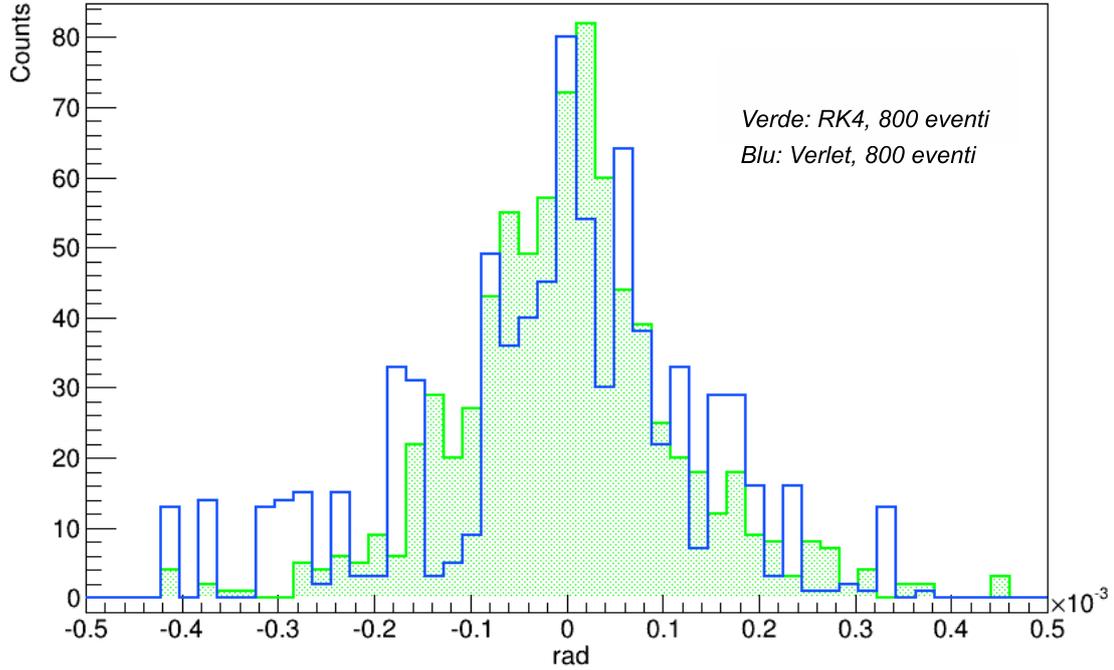


Figura 22: Le proprietà di gruppo della popolazione

Anche in questo caso il risultato non è soddisfacente, si intuisce infatti che la forte discontinuità dell'istogramma per il metodo di Verlet è determinato dalla discontinuità dei $\theta \sim \frac{v_x}{v}$, dovuta evidentemente ad effetti numerici derivanti dalla scarsa precisione che si ha sulla determinazione della velocità in questo tipo di algoritmo. Tirando le somme per un'integrazione su spessori dell'ordine di $d \sim 14 \mu m$:

$$h_{opt} = 0.07 [as] \quad t_{C,e} \sim 24s$$

dove con $t_{C,e}$ si intende il tempo computazionale su singolo core $2.4GHz$ per l'evoluzione della dinamica di un singolo elettrone, ovvero si riescono a calcolare su 8Core 10000 traiettorie (inclusi tempi di stampa della traiettoria su file) in circa otto ore e mezza. Il calcolo inoltre, vista l'abbondanza di cicli ricorsivi, si presta a una compilazione vettoriale che permette di migliorare ulteriormente le prestazioni.

6.3 Calcolo numerico della lunghezza di dechanneling

Come noto possiamo considerare incanalate le particelle qualora l'angolo che forma la velocità dell'elettrone con il piano cristallografico è $\theta < \theta_D$. Usando poi la definizione di lunghezza di dechanneling si tratta di calcolare quando il numero di particelle entro θ_D si è ridotto di un fattore $1/e$, la rappresentazione in forma di istogramma per la distribuzione angolare è in questo caso particolarmente adatta. Si tratterà di calcolare per diversi spessori del cristallo la porzione di elettroni incanalati. L'errore che assoceremo è poissoniano sul singolo bin, considereremo quindi nel calcolo una quadratura di tutti gli apporti dei bin con contatore non nullo.

$$F_D = \frac{\sum_{i,(\theta>\theta_D)} Bin[i]}{\sum_i Bin[i]} \quad \sigma = F_D \sqrt{\sum_{i,(\theta>\theta_D)} \frac{1}{Bin[i]}}$$

Dove si è utilizzata la definizione di varianza poissoniana. Prima di dare una stima per la lunghezza di dechanneling nel germanio con lamina piana, per cui mancano completamente ad oggi dei dati in letteratura, usiamo come banco di prova un set di simulazioni per una lamina piana di silicio (111) per il quale esistono diverse misure sperimentali e teoriche [2]-[17]. Si sono simulati 10 set da 200 elettroni con una divergenza angolare rms del fascio pari a $60\mu rad$ e un errore di allineamento con i piani pari a $\theta_{off} = \pm 10.0\mu rad$ generato secondo una distribuzione uniforme. Per ogni set si sono raccolte le frazioni di particelle deincanalate a passi di $1\mu m$. Gli errori mostrati corrispondono agli errori delle medie dei 10 singoli valori di F_D ricavati per ogni set.

La stima dell'accetanza del canale può essere ricavata dall'intercetta del fit. Come si osserva l'accetanza è $\eta \sim 0.5$, questo fatto può essere sorprendente se si pensa che la divergenza angolare utilizzata è molto minore dell'angolo critico per i piani (111) del silicio, pari a $\theta_C \approx 243\mu rad$. In realtà questo è dovuto al fatto che molte delle particelle con angoli d'ingresso molto piccoli hanno alta probabilità di subire scattering duri con gli atomi del reticolo, risultando immediatamente deincanalate. Valori simili emergono anche nelle simulazioni in [18].

Bisogna però sottolineare un fatto: i dati sperimentali forniscono delle stime nettamente differenti. In [2] si misura infatti un'efficienza $\eta \approx 0.7$ con un cristallo curvo, dove generalmente l'accetanza dei canali è minore che nel caso piano. Ci siamo in effetti accorti che per parametri d'urto elettrone-nucleone molto piccoli l'algoritmo non è stabile, con la conseguente generazione di singolarità numeriche artificiali. Gli elettroni affetti da questo baco in genere subiscono una brusca deflessione e risultano immediatamente deincanalati. E' in fase di sviluppo una routine che riesca ad riconoscere ed eliminare correttamente gli elettroni che soffrono di questi effetti.

Discutiamo brevemente in che misura questo problema alteri la stima della lunghezza di dechanneling: alcuni degli elettroni bruscamente deincanalati da questo effetto numerico avrebbero invece potuto essere particelle successivamente re-incanalate. Questo ci indica che i valori che otterremo per L_D sono con ogni probabilità sottostimati.

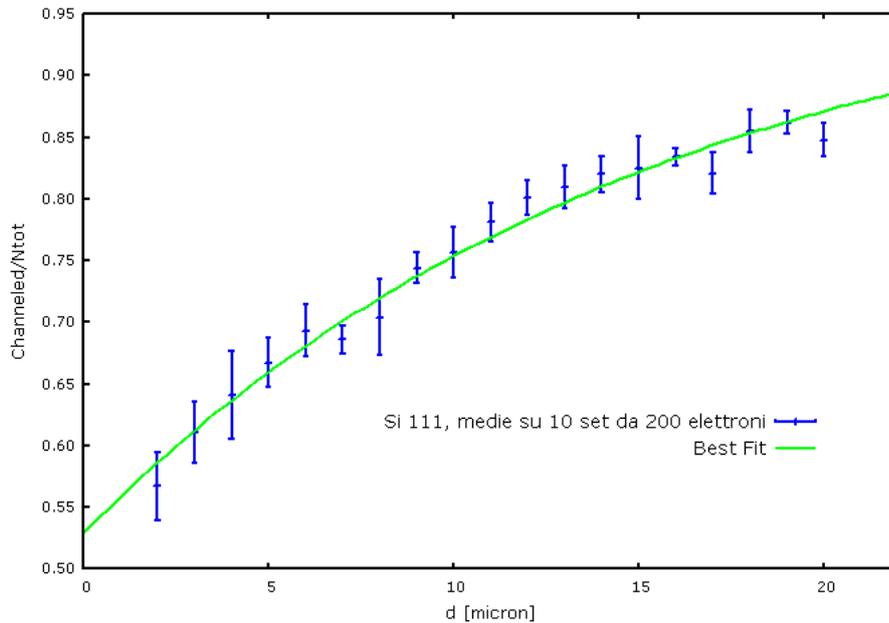


Figura 23: Stima della L_D per Si (111) piano

Dal fit pesato si può ricavare la seguente lunghezza di dechanneling:

$$L_{D,Si(111)} = (15.8 \pm 0.7)\mu m$$

Questo valore è leggermente inferiore alle previsioni teoriche basate su un approccio diffusivo [17], mentre è in ottimo accordo con le stime ricavate in [2] per un campione piano in assenza di effetti di re-channeling. E' inoltre in ottimo accordo con la lunghezza di dechanneling che si può calcolare per il Silicio con l'ausilio della relazione proposta da Baier e Katkov in [10], già mostrata nella sezione dedicata al dechanneling per scattering nucleare.

Autore	L_D
[2]	$16.5\mu m$
[10]	$15.7\mu m$
Qui	$15.8\mu m$

Questa congruenza tra i dati previsti in assenza di fenomeni di re-channeling sia sperimentali che teorici ed i dati qui prodotti sembra suggerire che l'effetto al netto dell'instabilità numerica dell'algoritmo sia quella di ridurre drasticamente la popolazione di particelle soggette a rechannelamento. Questo aspetto necessita approfondimenti successivi perchè potrebbe anche fornire indicazioni importanti su quale parte di popolazione elettronica contribuisca maggiormente ai fenomeni di re-channeling.

Riteniamo quindi che la stima che daremo per $L_{D,Ge}$ sarà qualitativamente corretta in assenza del contributo di rechanneling. Si ritiene inoltre scorretto affidare molto peso all'errore del fit, inquanto le simulazioni hanno mostrato una forte dipendenza dalla scelta delle modalità di generazione dei dati iniziali, per cui la simulazione andrebbe fatta ad hoc nelle precise condizioni sperimentali in cui si svolge la misura. Mostriamo i risultati ottenuti per la lamina piana di Germanio:

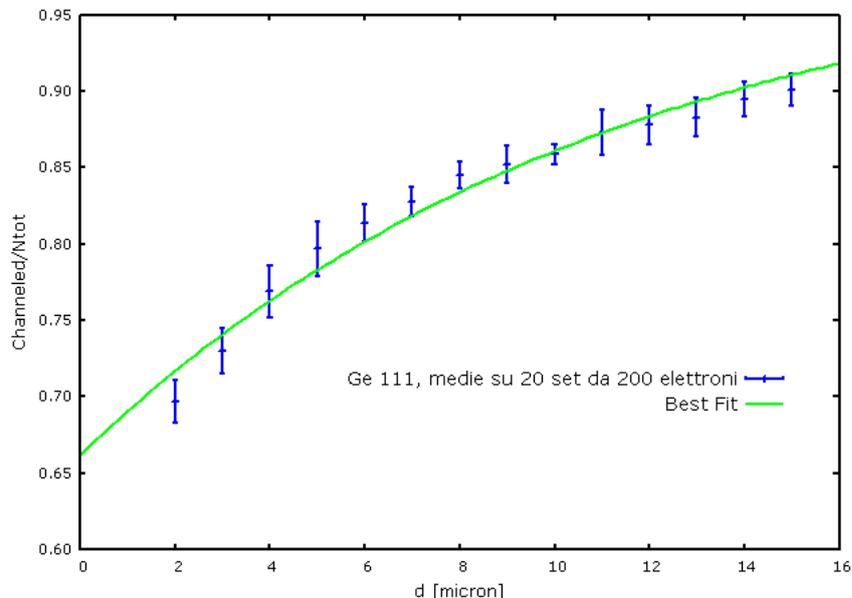


Figura 24: Stima della L_D per Ge (111) piano

Dal fit pesato si ricava analogamente:

$$L_{D,Ge(111)} = (11.2 \pm 0.6)\mu m$$

Nel turno di misura programmato a MAMI in autunno si potranno validare questi valori. L'algoritmo proposto si presta bene anche al calcolo della distribuzione angolare delle particelle, non si mostrano tuttavia i risultati qui perchè ad ora si hanno solo dati con bassa statistica.

Si sottolinea che la stima prodotta è anche in questo caso consistente con il valore ricavato in maniera semiempirica nella sezione 3.1 sempre in assenza di rechanneling: $L_{D,N} \approx 10.9\mu m$

Un'altra caratteristica che emerge dalle simulazioni è che la dipendenza L_D dalla dispersione angolare del fascio incidente è molto debole nel range $\theta^{rms} \in [10, 120] \mu rad$.

6.4 Il calcolo dello spettro d'irraggiamento

In questo paragrafo vogliamo fornire una formula che si presti al calcolo numerico dello spettro d'irraggiamento, ricaviamo brevemente la formula classica ed esponiamo la sua correzione semiclassica ricavata da Baier e Katkov [10] nel caso in cui si tenga conto del rinculo dovuto all'emissione del fotone. Ricaviamo la formula classica per i pesi spettrali d'irraggiamento di una particella carica in moto arbitrario secondo la legge oraria $\vec{y}(t)$ seguendo la linea guida proposta in [20].

Uno dei risultati cardine del formalismo dell'elettrodinamica classica è la formula d'irraggiamento nella 'zona delle onde', ovvero quando vale per l'osservatore posto in \vec{x} la disuguaglianza forte $\vec{x} \gg \vec{y}(t)$. In questo caso si può ricavare per il tempo ritardato la forma:

$$t' = t - \frac{r}{c} - \frac{\vec{n} \cdot \vec{y}(t')}{c}$$

Dove si intende che $\vec{n} \approx \vec{x}/|\vec{x}|$ nella zona delle onde. Vale allora nel limite asintotico $r \rightarrow \infty$ la seguente formula per il flusso di quadrimomento per unità di tempo ed angolo solido:

$$\frac{dp^\mu}{dt d\Omega} = r^2 n^\mu |\vec{E}(t)|^2 \quad (18)$$

Ricavata applicando le relazioni delle onde al tensore energia impulso elettromagnetico, e con la notazione $n^\mu = (1, \vec{n})$. E' possibile poi ricavare dalla formula per il potenziale di Lenard-Wiechert l'espressione per il campo elettrico di accelerazione:

$$\vec{E}_a(t, \vec{x}) = \frac{e}{4\pi r} \left[\frac{\vec{n} \times [(\vec{n} - \vec{v}) \times \vec{a}]}{(1 - \vec{n} \cdot \vec{v})^3} \right]_{t=t'} \quad (19)$$

Sfruttando poi l'identità di Parseval si può riscrivere la (18) per la componente temporale come:

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\omega d\Omega} = 2r^2 |\vec{E}(\omega)|^2 \quad (20)$$

sfruttando poi il fatto che nella zona delle onde vale $\vec{E} = \vec{n} \times (\vec{n} \times \dot{\vec{A}})$ e la forma del potenziale di LW in funzione della quadricorrente, unito all'identità:

$$\frac{\vec{n} \times [(\vec{n} - \vec{v}) \times \vec{a}]}{(1 - \vec{n} \cdot \vec{v})^2} = \frac{d}{dt} \left[\frac{\vec{n} \times (\vec{n} \times \vec{v})}{(1 - \vec{n} \cdot \vec{v})} \right]$$

si può ricavare che

$$\vec{E}_a(\omega, \vec{x}) = \frac{e}{4\pi r} \frac{e^{-i\omega r}}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-i\omega(t - \vec{n} \cdot \vec{y})} \left[\frac{\vec{n} \times [(\vec{n} - \vec{v}) \times \vec{a}]}{(1 - \vec{n} \cdot \vec{v})^2} \right] dt = \frac{i e \omega}{4\pi r} e^{-i\omega r} \vec{n} \times \left[\vec{n} \times \int e^{-i\omega(t - \vec{n} \cdot \vec{y})} \vec{v} dt \right]$$

Inserendo nella (20) questo risultato e ricordando che per un qualsiasi vettore vale $|\vec{n} \times (\vec{n} \times \vec{k})| = |\vec{n} \times \vec{k}|$ si ricava quindi la formula classica dei pesi spettrali:

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2 \omega^2}{8\pi^2} \left| \vec{n} \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega(t - \vec{n} \cdot \vec{y})} \vec{v} dt \right|^2 \quad (21)$$

Gli estremi d'integrazione nel nostro caso non divergono ad infinito infatti la particella non ha accelerazione se non entro il cristallo, e come noto l'irraggiamento è nullo per particelle con velocità costante, l'integrale sarà esteso quindi solo al lasso temporale $t \in [0, d/c]$, con una scelta opportuna dello zero. Questa formula è valida solo nel caso in cui il fotone emesso abbia energia trascurabile rispetto all'energia della particella carica. Le misure sperimentali assicurando che questo non è il nostro caso, vale però un'approssimazione ricavata da Baiev in ambito semiclassico: nell'ipotesi che $\gamma \gg 1$ che riscrive la (21) come

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\omega d\Omega} = \alpha \frac{q^2 \omega^2 \hbar}{8\pi^2} \left| \int dt_1 \int dt_2 e^{i\omega(\psi(t_1) - \psi(t_2))} \left[(1 + (1 + u)^2)(\vec{\beta}_1 \cdot \vec{\beta}_2 - 1) + \frac{u^2}{\gamma^2} \right] \right|^2 \quad (22)$$

Dove α è la costante di struttura fine, q è la carica della particella in unità di carica elementare, $\vec{\beta}_{1,2}$ sono le velocità del proiettile valutate agli istanti t_1 e t_2 in unità di c e $\psi(t) = t - \vec{n} \cdot \vec{y}(t)/c$. Le quantità $\omega' = (1 + u)\omega$ e $u = (\hbar\omega)/(\varepsilon - \hbar\omega)$ tengono conto del rinculo radiativo.

Sushko in [18] mostra una forma analitica che si presta al calcolo numerico della (22), tuttavia il calcolo di questa formula integrale richiede una potenza numerica di calcolo piuttosto elevata perchè esiste un limite inferiore per il passo d'integrazione molto più stringente affinché il calcolo discretizzato sia accurato [18]. Si lascia quindi quest'ultima implementazione ad un lavoro futuro che richiede un'elaborazione dell'algoritmo per renderlo parallelizzabile. Inoltre l'integrale (22), presuppone la conoscenza accurata di $v(t)$ che quindi deve essere mandata in output a passi molto fitti con la necessità quindi di costruire un sistema di locazione di memoria dinamico per evitare l'output di quantità massicce di dati su file con un conseguente forte perdita di efficienza computazionale¹².

¹²Le operazioni di lettura, scrittura e allocazione di memoria sono infatti le più dispendiose in termini di costo computazionale.

7 Conclusioni

L'obiettivo principale del percorso di tesi è stato raggiunto con successo: la lamina fabbricata presenta ampie zone che mostrano caratteristiche morfologiche e di curvatura ottimali per il channeling.

Le misure condotte e i processi di fabbricazione hanno evidenziato alcuni aspetti fondamentali, utili per studi successivi:

- I processi di assottigliamento per attacco chimico mostrano una buona conservazione della morfologia superficiale, tuttavia sono fortemente dipendenti dalle condizioni di temperatura, concentrazione e dalla dinamica del campione nella soluzione: lo studio e il controllo di questi fenomeni può portare a un miglioramento significativo del prodotto finale.
- Lo sviluppo di lamine così sottili ha come conseguenza la necessità che gli holder e i sistemi di piegatura siano lavorati con alta perfezione meccanica: al diminuire dello spessore della lamina si è infatti osservata un'ereditarietà sempre più forte tra difetti dei supporti meccanici del campione e quelli della lamina. La liquefazione controllata della colla del nastro biadesivo Kapton combinata allo schiacciamento del campione con una lastra molto planare di silicio attenua molto questo effetto.
- L'anisotropia dei processi di etching può essere sfruttata per individuare le zone del campione prive di dislocazioni, ottimali per le misure di channeling.

Si sono inoltre sviluppati dei metodi semi-analitici ad hoc per la stima qualitativa delle lunghezze caratteristiche dei processi di dechanneling per elettroni in piani (111) di germanio. I risultati ottenuti dovranno essere poi confrontati con quelli sperimentali che verranno raccolti a MAMI in autunno.

Il modello ricavato per la simulazione numerica della dinamica degli elettroni nei canali cristallografici mostra una buona efficienza in termini di costo computazionale. Ha inoltre il pregio di essere altamente versatile, in quanto permette una conoscenza dettagliata del moto della particella nel mezzo. I risultati numerici prodotti devono essere però validati dai risultati sperimentali: in particolare si lascia ad uno studio futuro lo sviluppo di una subroutine per la gestione delle divergenze numeriche ed un'elaborazione statistica dettagliata dei risultati ottenuti. E' infatti noto in letteratura [19] che i dati generati con simulazioni Montecarlo sono fortemente correlati tra loro. Le stime ricavate in questo lavoro devono essere quindi passate al setaccio dei metodi Jack-Knife per una corretta valutazione degli errori. Il vantaggio principale dell'algoritmo proposto è che si presta all'implementazione di un protocollo di calcolo dello spettro di irraggiamento EM delle particelle incanalate, ambito di ricerca del tutto attuale.

Prospettive: Le stime effettuate sulla lunghezza di dechanneling dimostrano che questa sarà ridotta nel Ge rispetto al Si. Questo fa presupporre che l'utilizzo di cristalli di germanio curvo per elettroni in questo range di energie non sarà volto alla deflessione o alla collimazione dei fasci di particelle. Più interessanti sono le prospettive per quanto riguarda l'emissione di radiazione. Come mostrato da *H. Backe* in [17] circa $7.7 \cdot 10^{-4}$ elettroni sul totale contribuiscono all'emissione di radiazione per spessori di $\sim 50 \mu m$ in Si. Tuttavia bisogna tenere conto di due fatti: la lunghezza di radiazione nel Ge come mostrato è circa un fattore quattro inferiore di quella nel silicio, ci attendiamo quindi un'efficienza nell'irraggiamento molto maggiore per il Ge. Inoltre abbiamo lavorato in un range di energie accessibile se non superabile da qualsiasi sincrotrone di media grandezza, le prospettive per un fascio elettronico a $5 GeV$ migliorano sensibilmente. Se consideriamo un flusso di qualche milliampere di elettroni attraverso il cristallo di germanio ci si aspetta un'emissione di $10^{14} - 10^{15}$ fotoni al secondo ad alta energia, che rappresenta in realtà una sorgente piuttosto intensa.

Quanto all'energia dei fotoni, se consideriamo il cristallo come un minutissimo tratto di acceleratore circolare con $R = R_B \approx 14.5mm$, possiamo sfruttare la formula classica per l'emissione di picco in un sincrotrone:

$$\omega_c = \frac{3}{2} \frac{c}{R} \gamma^3$$

Da cui:

<i>Sorgente</i>	<i>R [m]</i>	<i>E [GeV]</i>	$\omega_c [s]^{-1}$	E_c
<i>Microtrone</i>	1	0.02	$32 \cdot 10^{12}$	0.02 eV
<i>Grenoble</i>	40	2.00	$8 \cdot 10^{17}$	530 eV
<i>LEP</i>	4290	100.00	$7.8 \cdot 10^{20}$	515 keV
<i>Germanio</i>	$14.5 \cdot 10^{-3}$	0.86	$1.4 \cdot 10^{20}$	95 keV
<i>Germanio</i>	$14.5 \cdot 10^{-3}$	5.00	$2.9 \cdot 10^{22}$	19 MeV

Si riuscirebbe quindi ad ottenere con un fascio di elettroni a energie disponibili in tutti i sincrotroni di media potenza, un'emissione estremamente intensa di radiazione incoerente ad alcune decine di MeV. La possibilità poi di creare un ondulatori cristallino per generare radiazione coerente è una prospettiva del tutto intrigante e i recenti progressi nello studio dei fenomeni di channeling per particelle leggere, aprono un'interessante prospettiva in questa direzione.

8 Appendici

Riprendiamo qui qualche dettaglio pertinente alle metodologie con cui sono stati computati i risultati della sezione 3. Il punto di partenza comune è che il potenziale e le sue derivate hanno forme analitiche piuttosto scomode anche solo da scrivere in linguaggio C++. E' preferibile un'altra strada: i conti analitici esatti sono stati svolti con *Mathematica*, ottenute le forme desiderate per $n(x)$, $U_{pl,T}(x)$ ed $E_{pl,T}(x)$, si è mappata la forma analitica a passi di $5.0 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}$ nell'intervallo $[-d_p/2, d_p/2]$. La discretizzazione può essere poi infittita a piacere usando delle spline cubiche.

8.1 Il calcolo di $f(E_T)$

Partendo da una mappa del potenziale a $4 \cdot 10^5$ passi, l'integrale può essere agevolmente calcolato con i metodi di Simpson-Cavalieri, che sfruttano la formula d'interpolazione di Lagrange per trovare una forma polinomiale approssimata dell'integrando. Presi tre punti $(x_{0,1,2}, y_{0,1,2})$ della discretizzazione si può facilmente vedere che l'approssimazione quadratica $y = A(x - x_1)^2 + B(x - x_1) + C$ della funzione nell'intervallo è determinata univocamente dai tre parametri A, B, C che si ricavano dalla soluzione del sistema:

$$\begin{cases} y_0 = A(x_0 - x_1)^2 + B(x_0 - x_1) + C \\ y_1 = C \\ y_2 = A(x_2 - x_1)^2 + B(x_2 - x_1) + C \end{cases} \quad (23)$$

Per integrazione quindi risulta:

$$I = \int_{x_0}^{x_2} f(x) dx \approx \frac{x_2 - x_0}{3} (f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2))$$

Trovare poi x_{max} nella (6) è questione di ciclare su tutto l'array del potenziale in cerca dell' x_i che meglio approssima la condizione $U(x_{max}) = E_T$. Il tempo computazionale può essere dimezzato osservando la parità dell'integrando rispetto all'origine, usando una forma opportunamente traslata di $U_{pl,T}(x)$. Il calcolo dura $\sim 40s$ su singolo core per $E_T \in [0 : 120] eV$ a step di $0.1 eV$. Quanto al termine d'errore, è possibile calcolare un apporto d'errore pari a:

$$\epsilon = O\left(\frac{h^5}{90} [f(x_1)]^4\right)$$

con $h = x_2 - x_0$. Riportiamo il grafico che si ottiene con questo metodo per la $f(E_T)$ con il termine di densità.

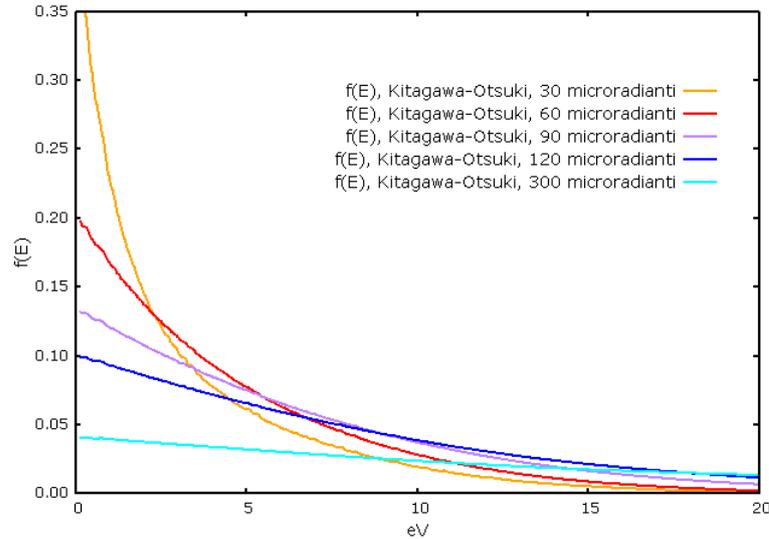


Figura 25: Distribuzione dell'energia trasversa, in approssimazione K.O.

8.2 Il calcolo di $F(x)$

Anche in questo caso la forza in funzione della coordinata trasversa dell'elettrone nel canale cristallografico ha un'espressione analitica scomoda che tende ad appesantire i cicli di calcolo essendo ricca di funzioni come $erfc(x)$ che sono calcolate in maniera approssimata dalle librerie C++. E' preferibile spezzare il problema in due blocchi distinti: vista la buona regolarità della derivata del potenziale le spline cubiche lo approssimano molto bene, si è quindi effettuata una mappa a step molto fitti della forza agente sull'elettrone. In totale si sono usati $n = 328000$ punti, a step in $[-d_p/2, d_p/2]$. L'integrazione a questo punto è di facile implementazione con un algoritmo *fast-Verlet*. Si tratta di scrivere invece che una funzione per il calcolo della forza una funzione che calcoli in che posizione dell'array pescare il valore cercato di $F(x)$. Si tratta poi di scegliere poi opportunamente il passo d'integrazione, affinché due valori di x non cadano entro la stessa discretizzazione, in questo caso l'algoritmo fallisce. La funzione indice è di semplice scrittura ed ha questo scheletro:

```
long double Force (long double * F, long double x){
    int el=int(x/(3.28/n));
    int index=(n/2+el)÷ n;
    return (-F[index]);
}
```

8.3 Il potenziale di Thomas-Fermi

Descriviamo brevemente il sistema di equazioni da cui si ricava il potenziale di Thomas-Fermi, il metodo con cui questo potenziale viene ricavato è stato una delle pietre miliari della moderna teoria dei funzionali di densità. Consideriamo un gas di fermioni con le condizioni al contorno derivanti da un potenziale a 'scatola' con lato a , che presentano quindi un'equazione di Schroedinger separabile. La soluzione dell'equazione di Schroedinger è banale e si ricavano le seguenti autoenergie

$$E_{\mathbf{n}} = \frac{\hbar^2}{8ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{\hbar^2 n^2}{8ma^2}$$

Queste autoenergie si distribuiscono su un reticolo cubico nell'ottante positivo, la densità di stati può essere ricavata, tenendo conto del principio di Pauli come:

$$dN = 2\rho_n(E)dE = 2\frac{4\pi n^2 dn}{8} \implies \rho_n(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} V E^{\frac{1}{2}}$$

che si ricava differenziando E rispetto ad n , e sostituendolo a destra della prima equazione. Se il gas è degenere si può ricavare l'energia di Fermi per gli elettroni sfruttando la definizione di funzione di partizione fermionica, inoltre siccome trattiamo gli elettroni atomici, questi sono legati per cui ho quantomeno il vincolo $E_k + V(r) \leq 0$ per cui quantomeno $E_F(r) = -V(r)$. Possiamo ricavare che la densità di carica è:

$$\rho_e(r) = N(r)/V = \frac{1}{V} \int_0^{E_F(r)} \rho_n(E)dE = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (-V(r))^{\frac{3}{2}} \quad (24)$$

Possiamo poi imporre il vincolo che $-e^{-1}V(r) = \phi(r)$ soddisfi l'equazione di Poisson, per cui dev'essere $\nabla^2 V(r) = -\frac{e^2}{\epsilon_0} \rho_e(r)$, la (24) diventa così

$$\nabla^2 V(r) = -\frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (-V(r))^{\frac{3}{2}}$$

Questa è l'equazione che deve soddisfare l'energia potenziale elettrostatica per un gas degenere di elettroni legati al nucleo. Imponendo le condizioni al contorno che all'infinito il potenziale sia completamente schermato e a zero il potenziale sia Coulombiano questa equazione può essere risolta per via numerica. In definitiva è possibile scrivere in forma compatta il potenziale di Thomas-Fermi con qualche cambio di variabile come (si veda capitolo 2.4 per la notazione):

$$V_{TF}(r) = -\frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r} \chi(r/a_{TF}) \quad (25)$$

Riferimenti bibliografici

- [1] Stark J. , Phys. Zs. **13** (1912) 973
- [2] A. Mazzolari, E. Bagli, L. Bandiera, V. Guidi, H. Backe, W. Lauth, V. Tikhomirov, A. Berra, D. Lietti, M. Prest, E. Vallazza and D. De Salvador, *Steering of a Sub-GeV Electron Beam through Planar Channeling Enhanced by Rechanneling*, D. Phys. Rev. Lett. **112**, 13 (2014) 135503
- [3] J. Lindhard, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. , **34**(1) (1965)
- [4] V.M. Biryukov, Y. A. Chesnokov and V. I. Kotov, *Crystal Channeling and its Application at High-Energy Accelerators*, Springer (1996)
- [5] W. Yang, *Gradient correction in Thomas-Fermi theory*, Phys. Rev. A **34**, 6 (1986) 4575-4585
- [6] G. Moliere, *Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I; Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld* Z. Naturforsch. A **2** (1947) 133
- [7] M. Kitagawa and Y.H. Ohtsuki, Phys. Rev. B **8**, (1973) 3117
- [8] Y.H. Ohtsuki, *Charged Beam Interactions with solids*, Taylor and Francis (1983)
- [9] Yung-Su Tsai, *Pair production and bremsstrahlung of charged leptons*, Rev. Mod. Phys. **46**(4) (1974) 815
- [10] V.N. Baier, V.M. Katkov, V.M. Strakhovenko, *Electromagnetic Processes at High Energies in Oriented Single Crystals*, World Scientific (1998)
- [11] M. Colautti, *Sviluppo di una membrana submicrometrica di germanio per esperimenti di channeling*, Tesi di laurea, Università degli studi di Padova, Sistema Bibliotecario di Ateneo, D.F.A. (2014)
- [12] J. Bloem and J.C van Vesse, *Etching Ge with mixtures of HF – H₂O₂ – H₂O*, J. Electrochem. Soc. **109**(1) 1962 33-36
- [13] J. Baltazar Rodrigues and C. Cusatis, *Determination of X-ray photoelectric absorption of Ge and Si avoiding solid-state effects*, NIMB **179** (2001) 325
- [14] L.D. Landau and E.M Lifshits, *Fisica Teorica vol.7 - Teoria dell'elasticità*, Editori Riuniti, University press (2010)
- [15] V. Guidi, A. Mazzolari, D. De Salvador and A. Carnera, *Silicon crystal for channelling of negatively charged particles*, J. Phys. D: Appl. Phys. **42** (2009) 182005
- [16] Yu. M. Ivanov, A. A. Petrunin, and V. V. Skorobogatov, *Observation of the Elastic Quasi-Mosaicity Effect in Bent Silicon Single Crystals*, JETP Letters, **81**, 3 (2005) 129-132
- [17] H. Backe, P. Kunz, W. Lauth and A. Rueda, *Planar channeling experiments with electrons at the 855 MeV Mainz Microtron MAMI*, Nucl. Inst. and Meth. in Phys. Res. B **266** (2008) 3835-3851
- [18] G. B. Sushko, V. G. Bezchastnov, I. A. Solov'yov, A. V. Korol, W. Greiner and A. V. Solov'yov, *Simulation of Ultra-Relativistic Electrons and Positrons Channeling in Crystals with MBN EXPLORER*, J. Comput. Phys. **252** (2013) 404
- [19] M. C. K. Yang and David H. Robinson, *Understanding and Learning Statistics by Computer*, World Scientific (1986)
- [20] K. Lechner, *Elettrodinamica Classica*, Springer-Unitext (2014).