

Об распределении заряда на поверхности монокристалла LiTaO_3 и его влиянии на характеристики пироэлектрического ускорителя

П. Г. Шаповалов^{1,2,*}, А. Н. Олейник^{2,†}, М. Э. Гильц², А. С. Кубанкин^{2,3}

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ». Лаборатория «Излучение заряженных частиц»
Россия, 115409, Москва, Каширское ш., 31

²Белгородский государственный национальный исследовательский университет. Лаборатория радиационной физики
Россия, 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85

³Физический институт им. П.Н. Лебедева. Россия, 119991, г. Москва, Ленинский пр-т., 53
(Поступила в редакцию 14.05.2023; подписана в печать 14.07.2022)

В работе приводятся результаты конечно-элементного моделирования пироэлектрического ускорителя на основе монокристалла танталата лития. Рассматривается влияние распределения заряда на поверхности кристалла на характеристики потока электронов. Модель с использованием аксиально-симметричного распределения заряда, полученная путём интерполяции экспериментальной зависимости, приводит к возникновению ожидаемых эффектов самофокусировки и моноэнергичности потока. Также уделено внимание модельному «треугольному» распределению. Такое распределение может быть вызвано структурой доменных стенок танталата лития при изменении его температуры. Обсуждаются результаты моделирования для обоих распределений.

PACS: 77.22, 77.70, 78.20, 79.70

УДК: 537.9

Ключевые слова: пироэлектрические кристаллы, пироэлектрический эффект, пироэлектрический ускоритель, компактный ускоритель, численное моделирование, генерация электронов, электроны, поверхностное распределение заряда, танталат лития.

ВВЕДЕНИЕ

Пироэлектрические ускорители могут служить компактными источниками электронов с энергиями, достигающими десятков кэВ [1]. Пироэлектрический кристалл — главный элемент такого ускорителя, он приобретает собственную поляризацию при изменении температуры. Если заземлить одну из граней такого кристалла, то на противоположной образуется нескомпенсированный заряд. Расположив напротив заряженной грани заземлённую мишень, мы получим систему из двух электродов: заряженного (кристалла) и заземлённого (мишени). Таким образом в пространстве кристалл–мишень возникает разность потенциалов, которая в случае отрицательной полярности пироэлектрика (ситуация, когда не заземлённая грань заряжена отрицательно) вызывает полевую эмиссию электронов из поверхности пироэлектрика (рис. 1) [2, 3]. В случае положительной полярности кристалла возможен другой режим работы ускорителя, когда полевая эмиссия электронов происходит из мишени и направлена к кристаллу. В цикле работы пироэлектрического ускорителя обычно присутствуют обе фазы, так как температура кристалла зачастую меняется по синусоидальному закону [4]. Электроны, попадающие в кристалл, генерируют рентгеновское тормозное излучение, и пироускоритель может быть использован как рентгеновский источник [5]. Как и любой ускорительный прибор, пироускоритель должен находиться в вакууме, поэтому заряд не может быть компенсирован зарядами из окружающей среды.

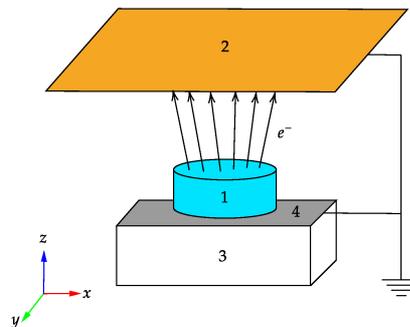


Рис. 1. Схема устройства пироэлектрического ускорителя 1 — кристалл танталата лития LiTaO_3 , 2 — латунная мишень (заземлена), 3 — элемент Пельтье (с его помощью изменяется температура кристалла), 4 — алюминиевая фольга (заземлена)

Монокристаллы танталата лития (LiTaO_3) часто используются в качестве основы для пироускорителей. В первом разделе настоящей работы рассматривается эффект самофокусировки потока электронов в пироэлектрическом ускорителе, вызванный неоднородным распределением плотности поверхностного заряда LiTaO_3 [6]. Обсуждается численное моделирование пироэлектрического ускорителя с использованием экспериментальной зависимости поверхностного распределения заряда [7]. Используемая модель распределения заряда аксиально-симметрична, в то же время исследования доменной структуры LiTaO_3 при температурах ниже 100 C° позволяют предположить наличие у распределения заряда треугольной структу-

* PGShapovalov@mephi.ru

† oleynik_a@bsu.edu.ru

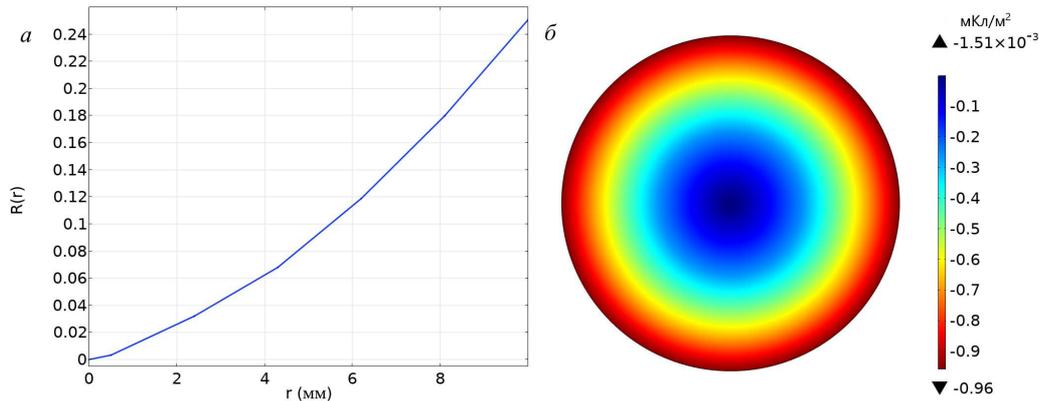


Рис. 2. *a* — Радиальная функция распределения заряда, нормированная на полную поверхностную плотность заряда, *б* — поверхностная плотность заряда на отрицательно заряженной грани LiTaO₃

ры [8]. Моделированию пироэлектрического ускорителя с модельным угловым распределением посвящён второй раздел.

1. ЭФФЕКТ САМОФОКУСИРОВКИ

От распределения заряда на поверхности пироэлектрического кристалла зависят важные характеристики ускорителя, такие как энергия и траектории электронов. При радиальном распределении заряда возможно осуществление эффекта самофокусировки, когда линии электрического поля пересекаются на некотором расстоянии от кристалла и образуют таким образом фокус [6]. В работе [7] было показано, что заряд на поверхности LiTaO₃ изменяется с расстоянием от центра кристалла.

Нами было произведено численное моделирование пироэлектрического ускорителя с использованием метода конечных элементов. Геометрия моделируемого ускорителя аналогична используемой нами экспериментальной установке [9, 10]. Для задания распределения заряда на поверхности кристалла использовалась функция $\rho(r) = \rho_0 R(r)$, где $\rho_0 = -381.97$ нКл/см², $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $R(r)$ — нормированное радиальное распределение, полученное интерполяцией экспериментальных данных из [7]. Значение ρ_0 было получено путём деления суммарного заряда на площадь поверхности кристалла Q/S , где $Q = -1200$ нКл, значение получено из эксперимента [10], а $S = \pi$ см². Вид радиальной функции и итоговое распределение заряда изображены на рис. 2. При моделировании все металлические поверхности, включая стенки вакуумной камеры, считались заземлёнными. Была учтена проводимость вакуума $\sigma_{vac} = 10^{-18}$ См/м. Поле пироэлектрика считалось постоянным и не изменялось во времени, поскольку время изменения конфигурации пироэлектрика (его температуры) много больше, чем характерное время пролёта электрона в ускорителе. Зависимость вероятности эмиссии электрона из определённой

ной точки на поверхности кристалла также задавалась функцией $R(r)$.

В результате моделирования были получены распределение электронов по энергиям и их траектории. Как видно на рис. 3 электроны действительно фокусируются на определённом расстоянии от кристалла. Причём фокусное расстояние электронов зависит от начального радиуса r_0 , с которого произошла эмиссия частицы. Таким образом в отверстие мишени попадают только электроны, эмитированные из кольца радиусом от 2.99 до 4.58 мм. Средняя энергия электронов в потоке также зависит от радиуса эмиссии, это обеспечивает моноэнергетичность потока электронов [9].

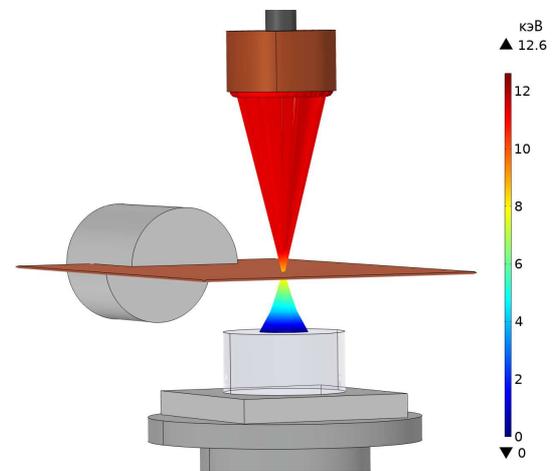


Рис. 3. Траектории электронов в пироэлектрическом ускорителе при использовании радиальной модели распределения заряда на поверхности LiTaO₃, цветовой шкалой обозначена кинетическая энергия частиц

2. ПЛОТНОСТЬ ЗАРЯДА С УЧЁТОМ УГЛОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Для генерации электронного потока температура пирокристалла варьируется в диапазоне от 21 до 39 °С. Исследования доменной структуры LiTaO₃ показывают, что при температурах менее 100 °С на поверхности монокристалла имеется одна доменная стенка треугольной формы [8]. Иными словами, распределение заряда на поверхности кристалла предположительно должно иметь треугольную симметрию. При этом нам достоверно известно, что распределение заряда имеет радиальную зависимость (рис. 2, а). Эти два факта наводят на мысль о том, что распределение заряда

$$\rho(r) = \rho_0 R(r),$$

необходимо модифицировать так, чтобы в нём присутствовала угловая зависимость, причём такая, что $\rho(r, \varphi) = \rho(r, \varphi + 2\pi/3)$. В таком случае можно ожидать, что изменения претерпят и траектории электронов. Выберем функцию углового распределения заряда в виде

$$Y(\varphi) = \frac{B + A \sin^2\left(\frac{3}{2}\varphi\right)}{1 + B},$$

где A — нормировочная постоянная:

$$A = \frac{1}{\pi} (1 + B(1 - 2\pi)),$$

а B — произвольный коэффициент, который ограничен условием положительности нормировочной постоянной и может принимать значения

$$0 < B < \frac{1}{2\pi - 1}.$$

Была рассчитана конечно-элементная модель пирозлектрического ускорителя с поверхностным распределением заряда, задаваемым формулой

$$\rho(r, \varphi) = \rho_0 R(r) Y(\varphi), \quad (1)$$

где $R(r)$ — это распределение из первой модели (рис. 2, а)). Поверхностная плотность заряда танталата лития, распределённая по закону (1), представлена на рис. 4. Распределение плотности вероятности эмиссии электрона из определённой точки на поверхности кристалла задавалось как $R(r)Y(\varphi)$, остальные параметры аналогичны параметрам модели, описанной в предыдущем разделе.

Моделирование показало, что при использовании распределения (1) поток электронов ускорителя делится на шесть отдельных потоков, которые можно рассматривать как два треугольника, вершинами которых являются центры интенсивности потоков (рис. 5). Причём оба треугольника смещены относительно друг друга на 60°. Потоки, образующие вершины «желтого» треугольника на рис. 5 (r_0 порядка 3.25 мм), имеют

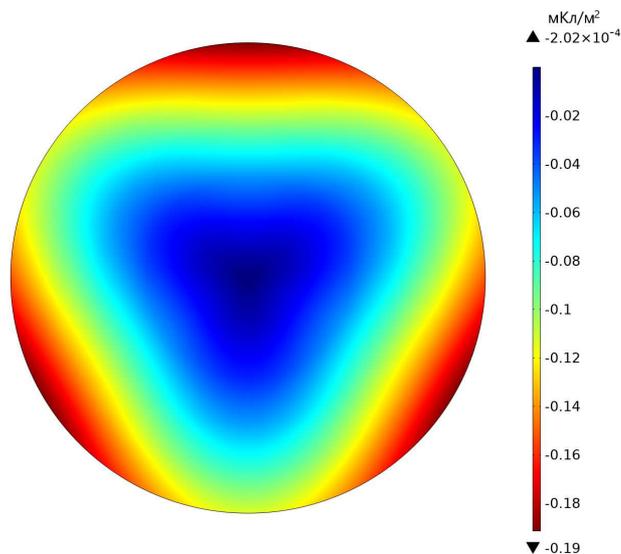


Рис. 4. Поверхностная плотность заряда на отрицательно заряженной грани LiTaO₃ в модели (1)

примерно одинаковую интенсивность, чего нельзя сказать о «красных» потоках (r_0 порядка 4 мм), они сильно различаются по интенсивности. Интерес представляет крайний правый поток, так как его интенсивность максимальна и достигает почти четверти от суммарной. По всей видимости асимметрия в интенсивностях «красных» потоков вызвана асимметрией экспериментальной установки. Латунная мишень крепится слева на фторопластовый держатель, который в силу своих электрических свойств искривляет электрическое поле. Это искривление почти не сказывается на достаточно близких друг к другу «жёлтых» потоках, а вот для «красных» потоков конфигурация электрического поля имеет уже сильную асимметрию. Также присутствует слабый поток элеронов прямо из центра кристалла $r_0 \approx 0$, который движется по прямой траектории. Как видно на рис. 5, б в «треугольной» модели распределения заряда воспроизводится эффект самофокусировки. Ожидаемо, что «треугольное» распределение заряда привело к изменению вида траекторий электронов. Важным фактом становится падение средней кинетической энергии частиц почти в 7 раз.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Было проведено конечно-элементное моделирование пирозлектрического ускорителя в двух вариантах поверхностного распределения заряда кристалла LiTaO₃. Геометрия обеих моделей, выбор материалов и граничных условий соответствуют таковым в реальной экспериментальной установке. В первом случае распределение заряда было выбрано на основании экспериментальных измерений. Моделирование подтвердило хорошо известное явление в сфере пирозлектриче-

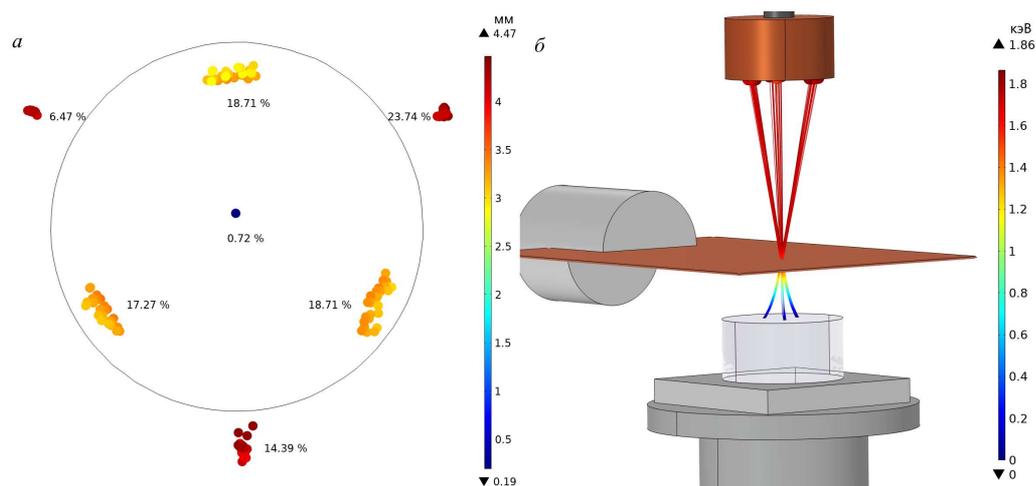


Рис. 5. Результаты моделирования пьезоэлектрического ускорителя с угловой зависимостью распределения заряда. *а* — Поперечное сечение пучка электронов, чёрной окружностью обозначена граница детектора, цветовая шкала определяет точку эмиссии r_0 , цифры рядом с потоками — для частиц в потоке от общего числа частиц на графике; *б* — траектории электронов, цветовая шкала показывает энергию частиц

ских ускорителей — эффект самофокусировки. Модель с экспериментальным распределением плотности заряда хорошо согласуется с наблюдаемыми значениями энергии пьезоускорителя и объясняет наблюдаемую моноэнергичность потока электронов. Это объясняется тем, что в отверстие мишени проходят только электроны, фокусное расстояние которых совпадает с расстоянием от кристалла до мишени. Энергия электрона однозначно связана с фокусным расстоянием.

Во второй модели была рассмотрена угловая зависимость плотности заряда. Её наличие вполне ожидаемо в силу наличия доменной стенки в монокристалле танталата лития при изменении его температуры. Модель подтвердила, что в таком случае поток электронов делится на несколько отдельных. Три из потоков симметричны относительно поворота на 60° , в то время как другие три имеют различную интенсивность,

судя по всему вызванную присутствием в вакуумной камере диэлектрика (держателя мишени). В модели с «треугольным» распределением также присутствует эффект самофокусировки, но наблюдается сильное падение средней энергии частиц. Это говорит о том, что выбранная модель всё же не описывает в точности распределение заряда на поверхности пьезоэлектрика, хотя и способна качественно описать некоторые экспериментально наблюдаемые факты.

Благодарности

Статья подготовлена в рамках реализации программы развития НИУ «БелГУ» на 2021–2030 гг. (Программа стратегического академического лидерства «Приоритет-2030»).

- | | |
|---|--|
| <p>[1] Rosenman G., Shur D., Krasik Ya. E., Dunaevsky A. // <i>J. App. Phys.</i> 88, N 11. 6109. (2000).</p> <p>[2] Gundel H., Riege H., Wilson E. J. N. // <i>Nucl. Inst. and Met. A.</i> 280, N 1. P. 1. (1989).</p> <p>[3] Geuther J. A., Danon Y. // <i>J. App. Phys.</i> 97, N 7. 074109. (2005).</p> <p>[4] Garn L.É., Sharp E. J. // <i>J. App. Phys.</i> 53, N 12. 8974. (1982).</p> <p>[5] Brownridge J. D., Shafrath S. M. // <i>App. Phys. Lett.</i> 85, N 7. 1298. (2004).</p> | <p>[6] Brownridge J. D., Shafrath S. M. // <i>App. Phys. Lett.</i> 79, N 20. 3364. (2001).</p> <p>[7] Ghaderi R., Davani F. A. // <i>App. Phys. Lett.</i> 105, N 23. 232906. (2014).</p> <p>[8] Shur V. Y., Akhmatkhanov A. R., Chezganov D. S. et al. // <i>App. Phys. Lett.</i> 103, N 24. 242903. (2013).</p> <p>[9] Oleinik A. N., Gilts M. E., Karataev P. V. et al. // <i>Europhysics Lett.</i> 142. (2023).</p> <p>[10] Олейник А. Н., Гилъц М. Э., Каратаев П. В. и др. // <i>Письма в Ж. Техн. Физ.</i> 49, № 9. 36. (2023).</p> |
|---|--|

On the charge distribution on the surface of a LiTaO_3 single crystal and its effect on the characteristics of a pyroelectric accelerator

P.G. Shapovalov^{1,2,a}, A.N. Oleinik^{2,b}, M.E. Gilts², A.S. Kubankin^{2,3}

¹¹*National Research Nuclear University "MEPhI Moscow 115409, Russia*

²*Laboratory of radiation physics, Belgorod National Research University, Belgorod 308015, Russia*

³*P.N. Lebedev Physical Institute, Moscow 117924, Russia*

E-mail: ^aPGShapovalov@mephi.ru, ^boleynik_a@bsu.edu.ru

The article presents the results of finite element modeling of a pyroelectric accelerator based on a single crystal of lithium tantalate. The influence of the charge distribution on the crystal surface on the characteristics of the electron flow is considered. A model using an axially symmetric charge distribution obtained by interpolating the experimental dependence leads to the expected effects of self-focusing and monoenergeticity of the flow. Attention is also paid to the model «triangular» distribution. This distribution can be caused by the structure of the lithium tantalate domain walls when its temperature changes. Simulation results for both distributions are discussed.

PACS: 77.22, 77.70, 78.20, 79.70.

Keywords: pyroelectric crystals, pyroelectric effect, pyroelectric accelerator, compact accelerator, numerical simulation, electron generation, electrons, surface charge distribution, lithium tantalate.

Received 14 May 2023.

Сведения об авторах

1. Шаповалов Павел Георгиевич — инженер-исследователь, лаборант-исследователь; e-mail: PGShapovalov@mephi.ru.
2. Олейник Андрей Николаевич — канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотрудник; e-mail: oleynik_a@bsu.edu.ru.
3. Гильц Марк Эрнстович — лаборант-исследователь; e-mail: mk-gilts97@mail.ru.
4. Кубанкин Александр Сергеевич — доктор физ.-мат. наук, доцент, зав. лабораторией радиационной физики НИУ «БелГУ»; e-mail: kubankin@bsu.edu.ru.