Simulation of Polarized Electron Interactions with Matter in the MeV Energy Range

Michał Drągowski

Marek Adamus Jacek Ciborowski Günter Weber Marta Włodarczyk

University of Warsaw, Faculty of Physics

National Centre for Nuclear Research, Świerk

Helmholtz Institut Jena

23rd International Spin Symposium, September 13, 2018



scarce experimental data

Complexity of experiment optimization

Seyond the scope of general purpose Monte Carlo codes

< ロ > < 同 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < □ > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ >

э

- Mott scattering elastic scattering off target nuclei
- Møller scattering elastic scattering off quasi-free target electrons
- ionization scattering off bound target electrons
- bremsstrahlung photon emission – negligible polarization change

azimuthal asymmetry due to spin - orbit interaction

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{Mott}}}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{Mott}}}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{0} (1 + S(\theta)\vec{P}\cdot\vec{n})$$
$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{Mott}}}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{0} = \text{unpolarized cross section}$$
$$S(\theta) = \text{Sherman function}$$
$$\vec{P}\vec{n} = \frac{A_{LR}}{S_{\mathrm{eff}}}$$

the theoretical value of S is replaced with its effective value S_{eff}

N. F. Mott, Proc. R. Soc. A 124, 425 (1929)

Michał Drągowski

Polarized Electron Interactions

∃ 990

イロト イボト イヨト イヨト

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{Mott}}}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{Mott}}}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{0} (1 + S(\theta)\vec{P}\cdot\vec{n})$$
$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{Mott}}}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{0} = |f(\theta)|^{2} + |g(\theta)|^{2}$$
$$S(\theta) = i\frac{fg^{*} - f^{*}g}{|f(\theta)|^{2} + |g(\theta)|^{2}}$$
$$f(\theta) = \text{spin-conserving amplitude}$$

 $g(\theta) = \text{spin-flip amplitude}$

$$\vec{P'} = \frac{(\vec{P} \cdot \vec{n} + S(\theta))\vec{n} + T(\theta)\vec{n} \times (\vec{n} \times \vec{P}) + U(\theta)(\vec{n} \times \vec{P})}{1 + S(\theta)\vec{P} \cdot \vec{n}}$$

$$S(\theta) = i \frac{fg^* - f^*g}{|f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2}$$
$$T(\theta) = \frac{|f(\theta)|^2 - |g(\theta)|^2}{|f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2}$$
$$U(\theta) = \frac{fg^* + f^*g}{|f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2}$$

J. Kessler, Polarized Electrons, Springer, Berlin (1985)

Michał Drągowski

Polarized Electron Interactions

ELSEPA

- ELSEPA = ELastic Scattering of Electrons and Positrons by neutral Atoms and positive ions
- scattering amplitudes f and g determining $\left(\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{Mott}}}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathsf{n}}$, S, T and U
- relativistic (Dirac) partial-wave analysis in a central potential:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \{ (\ell+1) [\exp(2i\delta_{\kappa=-\ell-1}) - 1] + \ell [\exp(2i\delta_{\kappa=\ell}) - 1] \} P_{\ell}(\cos\theta)$$

$$g(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\exp(2i\delta_{\kappa=\ell}) - \exp(2i\delta_{\kappa=-\ell-1}) \right] P_{\ell}^{1}(\cos\theta).$$

- assuming Fermi distribution for nuclear charge density
 - + numerical description of atomic electrons density
 - + approximate exchange correction
- F. Salvat, A. Jablonski, C. J. Powell, *Comput. Phys. Commun.* 165, 157 (2005)

PEBSI Monte Carlo simulation

- PEBSI = Polarized Electron Bremsstrahlung SImulator
- simulation of bremsstrahlung emission from polarized electrons in thin solid state targets
- scattering amplitudes f and g determining $\left(\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{Mott}}}{\mathrm{d}\Omega}\right)_0$, S, T and U from ELSEPA code
- analytical formulae for Møller scattering cross section and polarization transfer

G. Weber et al., Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B 279, 155 (2012)
M. Drągowski et al., Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B 389, 48 (2016)

< ロ > < 同 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < □ > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ >

Geant4 Monte Carlo simulation

toolkit for the simulation of the passage of particles through matter



Geant4 Monte Carlo simulation

toolkit for the simulation of the passage of particles through matter



Coulomb Scattering:

- multiple and single scattering algorithms
- no dependence on polarization
- no polarization transfer

Sung Hun Kim et al., IEEE Trans. Nucl. Sci. 62, 451 (2015)

Michał Drągowski

Polarized Electron Interactions



interaction model to replace the default Coulomb scattering model

cross section, momentum and polarization change calculated for given energy, momentum and polarization

data from ELSEPA imported only at initialization

10 / 17

Simulated effective Sherman function Comparison with theory



100 keV, 2 nm Au

Michał Dragowski

Simulated effective Sherman function Comparison with measurement



Michał Drągowski

Polarized Electron Interactions

September 13, 2018 12 / 17



100 keV, 2 - 500 nm Au

Simulated effective Sherman function Comparison with measurement



Michał Drągowski

Polarized Electron Interactions



100 keV, 10 nm Au

• encouraging results of comparison with experimental data

applications:

- computation of the effective Sherman function
- experiment optimization
- depolarization of electron beams passing through matter

In further validation ongoing (higher energies)

This work was supported from the funds of the National Science Centre as a part of the research project 2017/25/N/ST2/00619.

NATIONAL SCIENCE CENTRE

Michał Drągowski

17 / 17