01.1

Моделирование процесса отклонения релятивистских частиц в осевых и плоскостных каналах кристалла кремния

© *В.П. Кощеев, Д.А. Моргун, Ю.Н. Штанов*

НИУ МАИ, филиал „Стрела", Жуковский
Сургутский государственный университет ХМАО-Югры, Сургут
E-mail: koshcheev1@yandex.ru

Поступило в Редакцию 9 июня 2013 г.

Моделирование процесса отклонения протонов и π^--мезонов в осевых и плоскостных каналах изогнутого кристалла кремния выполнено с помощью численного решения кинетического уравнения Фоккера–Планка как в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей, так и в пространстве поперечных энергий. Обсуждаются причины формирования углового распределения пучка π^--мезонов с двумя максимумами в плоскостном канале кристалла, которое было представлено нами в предыдущей работе. Показано, что результаты моделирования в пространстве поперечных энергий и в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей достаточно близки между собой для протонов, но несколько различаются для π^--мезонов.

Задача исследования процесса отклонения высокоэнергетических частиц с помощью изогнутых кристаллов относится к числу актуальных задач настоящего времени [1–3]. В цели данной работы входит задача моделирования угловых распределений протонов и π^--мезонов изогнутым кристаллом кремния с помощью новой версии компьютерной программы TROPICS („Trajectory Of Particle In a Crystal" Simulator) [4]. Основу компьютерной программы TROPICS составляет метод компьютерного моделирования траекторий каналированных частиц в пространстве поперечных энергий [5]. Новая версия компьютерной программы TROPICS включает в себя также численное решение кинетического уравнения Фоккера–Планка в пространстве поперечных координат и скоростей методом компьютерного моделирования траекторий каналированных частиц.

Эволюция плотности каналированных частиц в пространстве поперечных координат и скоростей описывается кинетическим уравнением Фоккера–Планка, которое имеет вид [6,7]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{x}\frac{\partial f}{\partial x} + \dot{y}\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{\overline{U}_x}{m}\frac{\partial f}{\partial \dot{x}} - \frac{\overline{U}_y}{m}\frac{\partial f}{\partial \dot{y}}$$
$$= \frac{D_{xx}}{2m^2}\frac{\partial^2 f}{\partial \dot{x}^2} + \frac{D_{xy}}{m^2}\frac{\partial^2 f}{\partial \dot{x}\partial \dot{y}} + \frac{D_{yy}}{2m^2}\frac{\partial^2 f}{\partial \dot{y}^2}, \tag{1}$$

где $f = f(x, y, \dot{x}, \dot{y}, t)$ — функция распределения частиц по поперечным координатам и скоростям в момент времени t; $D_{xx} = D_{xx}(x, y)$, $D_{xy} = D_{xy}(x, y)$, $D_{yy} = D_{yy}(x, y)$ — компоненты коэффициента диффузии; $\overline{U}_x = \partial\overline{U}/\partial x$, $\overline{U}_y = \partial\overline{U}/\partial y$, $\overline{U} = \overline{U}(x, y)$ — непрерывный потенциал, образованный атомными цепочками; $m = \gamma m_0$; $\gamma = (1-\beta^2)^{-1/2}$ — Лоренц-фактор; $\beta = v/c$; c — скорость света; v — скорость заряженной частицы в направлении оси OZ; m_0 — масса покоя.

Если ядерный коэффициент диффузии вычисляется в приближении Китагавы–Оцуки [6], а электронный коэффициент диффузии вычисляется в приближении локальной электронной плотности [8], то, как было показано в [9,10], $D_{xx} = D_{yy}$ и $D_{xy} = 0$.

Решение уравнения (1) будем искать методом малого шума [11]. Решение запишем в виде символического ряда теории возмущений

$$f = f^{(0)} + f^{(1)} + \ldots$$

В нулевом приближении пренебрегаем многократным рассеянием, т. е. полагаем все компоненты коэффициента диффузии равными нулю, тогда

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} + \dot{x}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} + \dot{y}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial y} - \frac{\overline{U}_x}{m}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \dot{x}} - \frac{\overline{U}_y}{m}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \dot{y}} = 0. \tag{2}$$

Решение уравнения Лиувилля (2) можно представить в виде произведения четырех дельта-функций Дирака

$$f^{(0)} = \delta(x - \overline{x})\delta(y - \overline{y})\delta(\dot{x} - \dot{\overline{x}})\delta(\dot{y} - \dot{\overline{y}}),$$

где $\dot{\overline{x}} = d\overline{x}/dt, \dot{\overline{y}}(t) = d\overline{y}(t)/dt; \overline{x}(t), \overline{y}(t)$ — являются решением системы уравнений

$$\begin{cases} m\ddot{\overline{x}} = -\frac{\partial \overline{U}_{eff}(\overline{x},\overline{y})}{\partial \overline{x}}, \\ m\ddot{\overline{y}} = -\frac{\partial \overline{U}_{eff}(\overline{x},\overline{y})}{\partial \overline{y}} \end{cases} \tag{3}$$

со следующими начальными условиями: $\overline{x}_0 = \overline{x}(0), \overline{y}_0 = \overline{y}(0), \dot{\overline{x}}_0 = \dot{\overline{x}}(0), \dot{\overline{y}}_0 = \dot{\overline{y}}(0)$, где $\overline{U}_{eff}(x, y) = \overline{U}(x, y) - pvx/R_x - pvy/R_y$; R_x, R_y — радиусы изгиба кристалла в направлении оси OX и OY соответственно, которые изменяются с глубиной z; $z = vt$; p — импульс каналированной частицы.

Пусть $\delta x = (x - \overline{x})$, $\delta\dot{x} = (\dot{x} - \dot{\overline{x}})$, $\delta y = (y - \overline{y})$, $\delta\dot{y} = (\dot{y} - \dot{\overline{y}})$ — флуктуации поперечных координат и скоростей. Следуя [11], построим уравнение Фоккера–Планка в первом порядке теории возмущений

$$\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} + \delta\dot{x}\,\frac{\partial f^{(1)}}{\partial \delta x} + \delta\dot{y}\,\frac{\partial f^{(1)}}{\partial \delta y} - \frac{[\overline{U}_{xx}(\overline{x},\overline{y})\delta x + \overline{U}_{xy}(\overline{x},\overline{y})\delta y]}{m}\,\frac{\partial f^{(1)}}{\partial \delta\dot{x}}$$
$$- \frac{[\overline{U}_{xy}(\overline{x},\overline{y})\delta x + \overline{U}_{yy}(\overline{x},\overline{y})\delta y]}{m}\,\frac{\partial f^{(1)}}{\partial \delta\dot{y}} = \frac{D(\overline{x},\overline{y})}{2m^2}\left(\frac{\partial^2 f^{(1)}}{\partial \delta\dot{x}^2} + \frac{\partial^2 f^{(1)}}{\partial \delta\dot{y}^2}\right). \tag{4}$$

С помощью уравнения (4) построим систему уравнений для вторых моментов, следуя (см., например, [12])

$$\frac{d}{dt}\,\overline{\delta x^2} = 2\overline{\delta x \delta\dot{x}},$$

$$\frac{d}{dt}\,\overline{\delta x \delta\dot{x}} = \overline{\delta\dot{x}^2} - \frac{1}{m}\left(\overline{U}_{xx}\overline{\delta x^2} + \overline{U}_{xy}\overline{\delta x \delta y}\right),$$

$$\frac{d}{dt}\,\overline{\delta\dot{x}^2} = -\frac{2}{m}\left(\overline{U}_{xx}\overline{\delta x \delta\dot{x}} + \overline{U}_{xy}\overline{\delta\dot{x}\delta y}\right) + \frac{D_{xx}}{m^2},$$

$$\frac{d}{dt}\,\overline{\delta x \delta y} = \overline{\delta\dot{x}\delta y} + \overline{\delta x \delta\dot{y}},$$

$$\frac{d}{dt}\,\overline{\delta\dot{x}\delta y} = -\frac{1}{m}\left(\overline{U}_{xx}\overline{\delta x \delta y} + \overline{U}_{xy}\overline{\delta y^2}\right) + \overline{\delta\dot{x}\delta\dot{y}},$$

$$\frac{d}{dt}\,\overline{\delta x \delta\dot{y}} = -\frac{1}{m}\left(\overline{U}_{yy}\overline{\delta x \delta y} + \overline{U}_{xy}\overline{\delta x^2}\right) + \overline{\delta\dot{x}\delta\dot{y}},$$

$$
\begin{gathered}
\frac{d}{dt}\,\overline{\delta\dot{x}\delta\dot{y}} = -\frac{1}{m}\,\left(\overline{U}_{xx}\overline{\delta x\delta\dot{y}} + \overline{U}_{xy}\overline{\delta y\delta\dot{y}} + \overline{U}_{yy}\overline{\delta\dot{x}\delta y} + \overline{U}_{xy}\overline{\delta x\delta\dot{x}}\right) \\
+ \frac{D_{xy}}{2m^2} + \frac{D_{yx}}{2m^2}, \\
\frac{d}{dt}\,\overline{\delta y^2} = 2\overline{\delta y\delta\dot{y}}, \\
\frac{d}{dt}\,\overline{\delta y\delta\dot{y}} = \overline{\delta\dot{y}^2} - \frac{1}{m}\,\left(\overline{U}_{yy}\overline{\delta y^2} + \overline{U}_{xy}\overline{\delta x\delta y}\right), \\
\frac{d}{dt}\,\overline{\delta\dot{y}^2} = -\frac{2}{m}\,\left(\overline{U}_{yy}\overline{\delta y\delta\dot{y}} + \overline{U}_{xy}\overline{\delta x\delta\dot{y}}\right) + \frac{D_{yy}}{m^2}.
\end{gathered}
\tag{5}
$$

Система уравнений (5) в точности совпадает с системой уравнений, которая была получена в рамках ланжевеновского подхода к теории каналирования [13]. Решение кинетического уравнения Фоккера–Планка (1) производится с помощью метода компьютерного моделирования траекторий каналированных частиц [14]. Переопределение значений координат и скоростей производится случайным образом при помощи соотношений

$$
\begin{cases}
\overline{x} = RandG(\overline{x},\, \sqrt{\overline{\delta x^2}}), \quad \overline{y} = RandG(\overline{y},\, \sqrt{\overline{\delta x^2}}) \\
\dot{\overline{x}} = RandG(\dot{\overline{x}},\, \sqrt{\overline{\delta\dot{x}^2}}), \quad \dot{\overline{y}} = RandG(\dot{\overline{y}},\, \sqrt{\overline{\delta\dot{x}^2}}),
\end{cases}
\tag{6}
$$

где функция $RandG$ генерирует случайную величину, удовлетворяющую нормальному распределению с заданным математическим ожиданием и дисперсией согласно алгоритму [15].

Переопределение запрещается, если после предыдущего переопределения пройдено расстояние меньше $\tau_{\min}$. Расстояние $\tau_{\min}$ определяется некоторым минимальным количеством столкновений частицы с атомами кристалла. Программный комплекс TROPICS основан на численном решении системы уравнений (3), (5) и (6). Используется кубическая эрмитовая сплайн-аппроксимация коэффициента диффузии и поперечной силы, численные значения которых были первоначально вычислены с помощью разложения в двойной тригонометрический ряд Фурье. Учитывались структурный и атомный форм-факторы, а также фактор Дебая–Валлера. Температура кристалла считалась равной 294 K. Для потенциала изолированного атома использовалось приближение Мольер [16]. Схема эксперимента представлена на рис. 1.

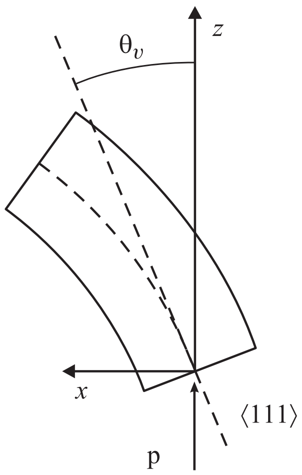

Рис. 1. Схема эксперимента [1–3].

Следуя [1–3], были приняты обозначения, а именно: в плоскости XOZ лежат как радиус изгиба R_x плоскости (110), так и углы наклона θ_v оси $\langle 111 \rangle$ кристалла кремния и вылета частиц θ_x, которые измерялись относительно первоначального направления пучка. Угол разориентации между осью $\langle 111 \rangle$ и направлением падения частиц в плоскости (110) был взят равным $5\,\mu$rad, так как в работе [2] не было указано его значение. Начальные значения точек влета были равномерно распределены в следующих пределах $\Delta x \Delta y = 0.5\,\text{mm} \cdot \Delta 2\,\text{mm} = 1\,\text{mm}^2$, а углы влета нормально распределены вокруг среднего значения согласно алгоритму [15]. Модельное среднеквадратичное отклонение, которое определяет угловую расходимость пучка частиц, было выбрано равным экспериментальному [1,2]. В компьютерном эксперименте учитывалось угловое разрешение детектирующей системы $\Delta\theta_x = \Delta\theta_y = 3\,\mu$rad. Толщина кристалла была 0.98 mm. Для численного решения системы дифференциальных уравнений движения применялся метод Рунге–Кутта 4 порядка точности с шагом интегрирования 20 nm. Расстояние $\tau_{\min}$ было равным 200 nm. Расчеты были произведены для 20 000 частиц. На рис. 2 представлены экспериментальные [1,2] и расчетные угловые распределения π^--мезонов с энергией 150 GeV, которые отклонялись

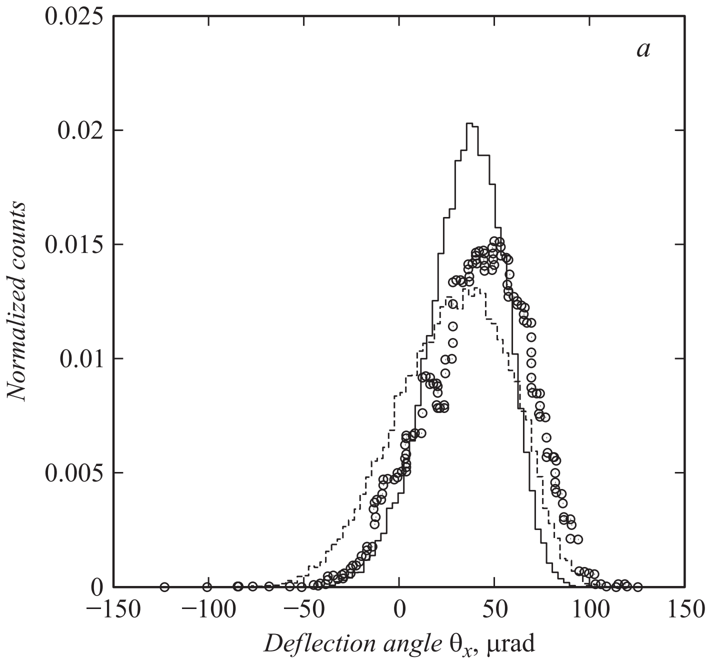

Рис. 2. Угловое распределение π^--мезонов с энергией 150 GeV за кристаллом Si, $\langle 111 \rangle$, кружки — [1] (a) и за кристаллом Si, (110), кружки — [2] (b). Сплошная линия — расчет в пространстве поперечных координат и скоростей; пунктирная линия — расчет в пространстве поперечных энергий. Радиус изгиба кристалла 22.79 m. Расходимость пучка 10 μrad (a) и 5 μrad (b). Угол $\theta_v = 0\,\mu$rad.

изогнутым кристаллом кремния в направлении оси $\langle 111 \rangle$ и плоскости (110) соответственно. Экспериментальные [1,2] и расчетные значения были нормированы так, что площадь под каждой гистограммой равна единице. Результаты моделирования в пространстве координат и скоростей и в пространстве поперечных энергий представлены сплошной и пунктирной гистограммами соответственно. Видно, что согласие между результатами эксперимента и моделированием является удовлетворительным. Необходимо отметить, что в работе [5] качественное согласие результатов расчета в пространстве поперечных энергий с экспериментом было достигнуто при радиусе изгиба кристалла в

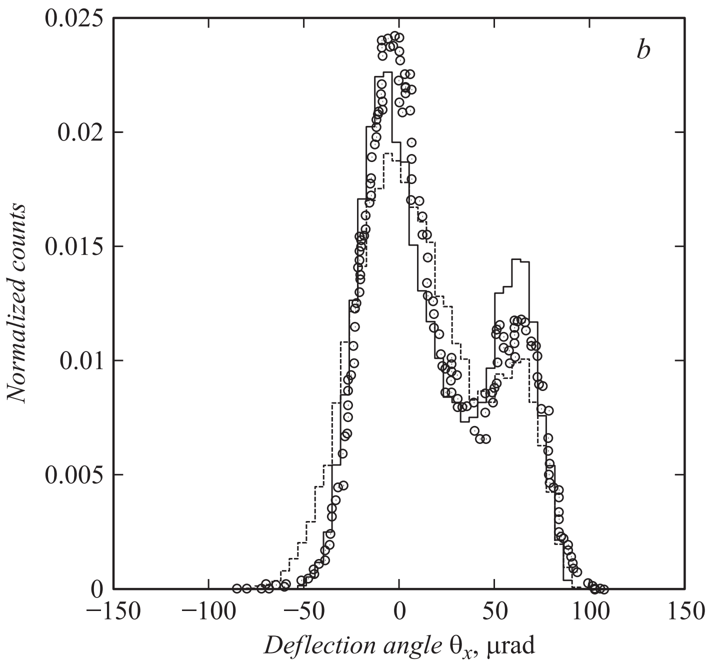

Рис. 2 (*продолжение*).

четыре раза большем, чем в эксперименте [2]. Это было связано с тем, что переопределение координат и скоростей в [5] запрещалось, если после предыдущего переопределения средний квадрат флуктуаций поперечной энергии был меньше некоторого минимального значения. Анализ показал, что этот критерий переопределения координат и скоростей постоянно срабатывал в области максимальной ядерной плотности, что и приводило к формированию углового распределения с двумя максимумами в прямом кристалле. При каналировании положительно заряженных частиц розыгрыш происходил с одинаковой вероятностью в любой точке плоскостного или осевого канала. Тем не менее в новой версии компьютерной программы TROPICS переопределение координат и скоростей как в пространстве поперечных энергий, так и в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей запреща-

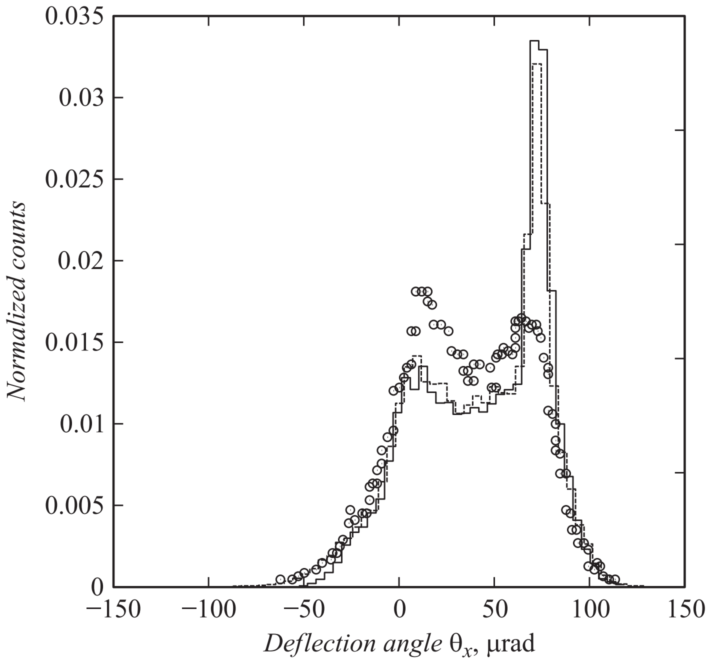

Рис. 3. Угловое распределение протонов с энергией 400 GeV за кристаллом Si, $\langle 111\rangle$. Кружки — [3]; сплошная линия — расчет в пространстве поперечных координат и скоростей; пунктирная линия — расчет в пространстве поперечных энергий. Радиус изгиба кристалла 40 m. Расходимость пучка 5 μrad. Угол $\theta_v = 0\,\mu$rad.

ется, если после предыдущего переопределения пройдено расстояние меньше $\tau_{\min}$, а критерий отбора по среднему квадрату флуктуаций динамической переменной положен равным нулю. На рис. 3 представлены экспериментальные [3] и расчетные угловые распределения протонов с энергией 400 GeV, которые отклонялись изогнутым кристаллом кремния в направлении оси $\langle 111\rangle$. Результаты моделирования в фазовом пространстве координат и скоростей и в пространстве поперечных энергий представлены сплошной и пунктирной гистограммами соответственно. Видно, что согласие между результатом [5] и моделированием в рамках новой версии компьютерной программы

TROPICS является удовлетворительным. Если кристалл дополнительно разориентировать на $14\,\mu$rad в направлении, перпендикулярном атомной плоскости (110), то согласие между расчетами и экспериментом [3] будет достаточно хорошим, как это было показано в [5]. Более четверти века тому назад авторы работы [17] пришли к заключению, что кинетическое уравнение Фоккера–Планка в пространстве поперечных энергий не описывает эффект каналирования тяжелых отрицательно заряженных частиц (π^--мезонов, антипротонов и др.) в диапазоне энергий до 100 GeV, так как нарушаются условия адиабатического приближения. Результаты моделирования, которые представлены на рис. 2 могут свидетельствовать в пользу этой гипотезы, но, очевидно, необходимы дополнительные теоретические и экспериментальные исследования. Исходя из вышеизложенного можно сделать вывод, что построенные в двадцатом веке непрерывные потенциалы, электронные и ядерные коэффициенты диффузии, уравнения Фоккера–Планка в фазовом пространстве и в пространстве энергий поперечного движения дают удовлетворительное описание эффектов осевого и плоскостного каналирования релятивистских протонов и π^--мезонов в пределах границ их применимости.

Список литературы

[1] *Scandale W., Vomiero A., Bagli E.* et al. // Phys. Lett. B. 2009. V. 680. P. 301–304.
[2] *Scandale W., Vomiero A., Bagli E.* et al. // Phys. Lett. B. 2009. V. 681. P. 233–236.
[3] *Scandale W., Vomiero A., Baricordi S.* et al. // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101. P. 164 801.
[4] http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/tropics/index.html
[5] *Кощеев В.П., Моргун Д.А., Штанов Ю.Н.* // Письма в ЖТФ. 2012. Т. 38. В. 12. С. 87–94.
[6] *Kitagawa M., Ohtsuki Y.H.* // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. N 7. P. 3117–3123.
[7] *Белошитский В.В., Кумахов М.А., Рябов В.А.* // ЖЭТФ. 1984. Т. 87. В. 3. С. 878–884.
[8] *Gemmel D.S.* // Rev. Mod. Phys. 1974. V. 46. N 1. P. 129–235.
[9] *Кощеев В.П.* // Изв. вузов. Физика. 1997. № 8. С. 32–37.
[10] *Кощеев В.П., Моргун Д.А., Панина Т.А.* // Стохастическая динамика эффекта каналирования в кристаллах и нанотрубках: монография. Ханты-Мансийск: Полиграфист, 2008. 100 с.

[11] *Гардинер К.В.* Стохастические методы в естественных науках. М.: Мир, 1986. 527 с.
[12] *Рытов С.М.* Введение в статистическую радиофизику. Ч. I. Случайные процессы. М.: Наука, 1976. 484 с.
[13] *Кощеев В.П., Моргун Д.А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед. 1998. № 5. С. 5–11.
[14] *Кощеев В.П.* // Изв. вузов. Физика. 1990. № 4. С. 123–124.
[15] *Marsaglia G., Bray T.A.* // SIAM Rev. 1964. V. 6. N 3. P. 260–264.
[16] *Molière G.* // Z. Naturforsch. A. 1947. V. 2. P. 133–145.
[17] *Базылев В.А., Глебов В.И., Головизнин В.В.* // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. В. 1(7). С. 25–36.