

01

## Моделирование процесса отклонения протонов и $\pi^-$ -мезонов кристаллом кремния

© В.П. Кошчев, Д.А. Моргун, Ю.Н. Штанов

Сургутский государственный университет ХМАО-Югры  
E-mail: koshcheev1@yandex.ru

Поступило в Редакцию 16 февраля 2012 г.

Моделирование процесса отклонения протонов и  $\pi^-$ -мезонов в изогнутых осевых и плоскостных каналах кристалла кремния выполнено с помощью численного решения кинетического уравнения Фоккера–Планка в пространстве поперечных энергий методом пропагатора. Показано, что  $\pi^-$ -мезоны с энергией 150 GeV деканализуют из плоскостных каналов кристалла кремния на глубинах порядка нескольких десятков микрометров, формируя угловое распределение с двумя максимумами, симметрия которых нарушается при изгибе кристалла.

Задача исследования процесса отклонения высокоэнергетических частиц с помощью изогнутых кристаллов относится к числу актуальных задач настоящего времени [1,2]. В цели настоящей работы входит задача моделирования угловых распределений протонов и  $\pi^-$ -мезонов за изогнутым кристаллом кремния с помощью новой компьютерной программы TROPICS („Trajectory Of Particle In a Crystal“ Simulator) [3], основу которой составляет численное решение кинетического уравнения Фоккера–Планка в пространстве поперечных энергий методом пропагатора (см., например, [4]).

Эволюция изменения плотности каналированных частиц в фазовом пространстве поперечных энергий за счет многократного рассеяния описывается кинетическим уравнением Фоккера–Планка, которое имеет вид [5]

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial E_{\perp}} [P A(E_{\perp}, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial E_{\perp}^2} [P B(E_{\perp}, t)], \quad (1)$$

где  $P = P(E_{\perp}, t)$  — функция распределения частиц по поперечной энергии  $E_{\perp}$  в момент времени  $t$ ;  $A(E_{\perp}, t)$  и  $B(E_{\perp}, t)$  — коэффициенты дрейфа и диффузии соответственно.

Движение каналированных частиц в поле атомной цепочки описывается системой стохастических уравнений

$$\begin{cases} m\ddot{x} + \frac{\partial \overline{U}_{eff}(x, y)}{\partial x} = \delta f_x, \\ m\ddot{y} + \frac{\partial \overline{U}_{eff}(x, y)}{\partial y} = \delta f_y, \end{cases}$$

где  $m = \gamma m_0$ ;  $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$  — Лоренц-фактор;  $\beta = v/c$ ;  $c$  — скорость света;  $v$  — скорость заряженной частицы в направлении оси OZ;  $m_0$  — масса покоя;  $\overline{U}_{eff}(x, y) = \overline{U}(x, y) + pvx/R_x + pvy/R_y$ ;  $\overline{U}(x, y)$  — непрерывный потенциал атомной цепочки;  $R_x, R_y$  — радиусы изгиба кристалла в направлении оси OX и OY соответственно, которые изменяются с глубиной  $z$ ;  $z = vt$ ;  $p$  — импульс каналированной частицы;  $\delta f_x, \delta f_y$  — флуктуация поперечной силы вдоль направления  $x$  и  $y$  соответственно.

Поперечную энергию каналированных частиц в случае осевого каналирования представим в виде

$$E_{\perp} = \frac{m}{2} (x^2 + y^2) + \overline{U}_{eff}(x, y).$$

Скорость изменения поперечной энергии частицы имеет вид

$$\frac{dE_{\perp}}{dt} = \dot{x}\delta f_x + \dot{y}\delta f_y.$$

Вдоль регулярной траектории будет выполняться уравнение

$$\frac{dE_{\perp}}{dt} \approx \dot{\bar{x}}\delta f_x + \dot{\bar{y}}\delta f_y,$$

где  $\bar{x} = \bar{x}(t)$  и  $\bar{y} = \bar{y}(t)$  — решение уравнения Ньютона в отсутствие флуктуаций

$$\begin{cases} m\ddot{\bar{x}} = \frac{\partial \overline{U}_{eff}(\bar{x}, \bar{y})}{\partial \bar{x}}, \\ m\ddot{\bar{y}} = -\frac{\partial \overline{U}_{eff}(\bar{x}, \bar{y})}{\partial \bar{y}}. \end{cases} \quad (2)$$

Начальные условия к уравнению (2) имеют вид:  $\bar{x}_0 = \bar{x}(0)$ ,  $\bar{y}_0 = \bar{y}(0)$ ,  $\dot{\bar{x}}_0 = \dot{\bar{x}}(0)$ ,  $\dot{\bar{y}}_0 = \dot{\bar{y}}(0)$ . Приращение  $\Delta E_{\perp}$  за малое время  $\Delta t$  определим

следующим образом:

$$\Delta E_{\perp} = \int_t^{t+\Delta t} (\bar{x} \delta f_x + \bar{y} \delta f_y) dt.$$

Коэффициент дрейфа  $A(E_{\perp}, t)$  имеет вид

$$A(E_{\perp}, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta E_{\perp}}}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} (\bar{x} \overline{\delta f_x} + \bar{y} \overline{\delta f_y}) dt = 0,$$

так как  $\overline{\delta f_x} = 0$  и  $\overline{\delta f_y} = 0$ .

Корреляционная функция проекций флуктуаций поперечной силы имеет вид

$$\overline{\delta f_k(t) \delta f_k(t')} = D_{kk}(\bar{x}, \bar{y}) \delta(t - t'), \quad (3)$$

где  $k = x, y$ ;  $D_{kk}(\bar{x}, \bar{y})$  — компонента коэффициента диффузии заряженных частиц в поле атомной цепочки [6].

Коэффициент диффузии  $B(E_{\perp}, t)$  с учетом (3) имеет вид

$$B(E_{\perp}, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta E_{\perp}^2}}{\Delta t} = \bar{x}^2 D_{xx} + \bar{y}^2 D_{yy} + 2\bar{x}\bar{y} D_{xy}.$$

Можно показать, что для изолированной атомной цепочки  $D_{xx} = D_{yy}$ , а  $D_{xy} = 0$ . Подставим коэффициенты  $A(E_{\perp}, t)$  и  $B(E_{\perp}, t)$  в (1) и получим уравнение диффузии в пространстве поперечных энергий

$$\frac{\partial P_D(E_{\perp}, t)}{\partial t} = \frac{B(t)}{2} \frac{\partial^2 P_D(E_{\perp}, t)}{\partial E_{\perp}^2}, \quad (4)$$

где  $B(t) = \bar{x}^2 D_{xx} + \bar{y}^2 D_{yy}$  — коэффициент диффузии в пространстве поперечных энергий. Решение уравнения диффузии (4) имеет вид

$$P_D(E_{\perp}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\delta E_{\perp}^2}} \exp \left[ -\frac{(E_{\perp} - E_{\perp 0})^2}{2\delta E_{\perp}^2} \right], \quad (5)$$

где  $E_{\perp 0} = \frac{m\bar{x}_0^2}{2} + \frac{m\bar{y}_0^2}{2} + \overline{U_{eff}(\bar{x}_0, \bar{y}_0)}$  — значение поперечной энергии в момент времени  $t_0$ ;  $\delta E_{\perp}^2$  — средний квадрат флуктуаций поперечной

энергии, скорость изменения которого запишем в виде

$$\frac{d\overline{\delta E_{\perp}^2}}{dt} = \overline{x^2} D_{xx} + \overline{y^2} D_{yy}. \quad (6)$$

Таким образом, коэффициент диффузии  $B(t)$  уравнения (4) имеет смысл скорости изменения среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии (6).

Решение уравнения Фоккера–Планка в кристалле найдем методом пропагатора, роль которого играет функция распределения (5). Скорости каналированных частиц переопределяются случайным образом с помощью функции распределения (5) после прохождения каналированной частицей отрезка траектории, длина которого  $z_{\max} = vt_{\max}$  ограничена неравенством

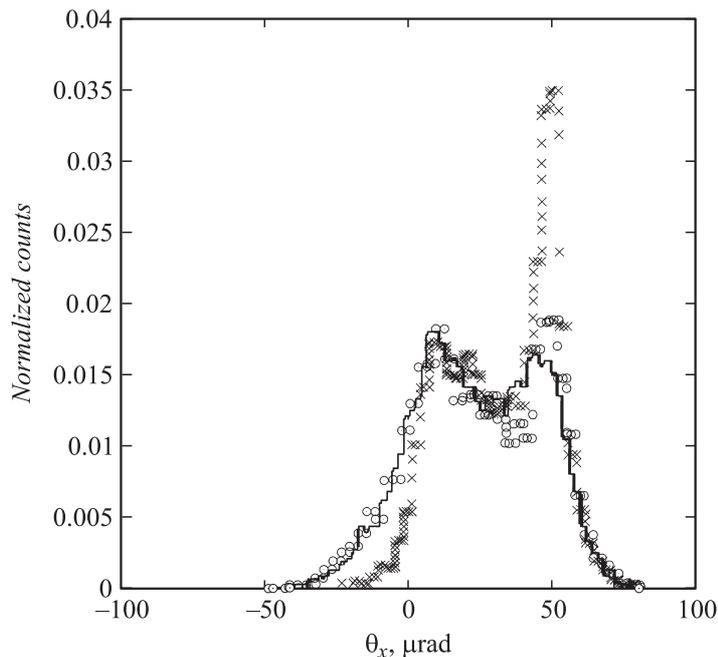
$$\overline{\delta E_{\perp}^2}(t \leq t_{\max}) \leq (0.05V_{\max})^2,$$

где  $V_{\max}$  — максимальное значение непрерывного потенциала.

Переопределение значений скорости производится случайным образом при помощи соотношений

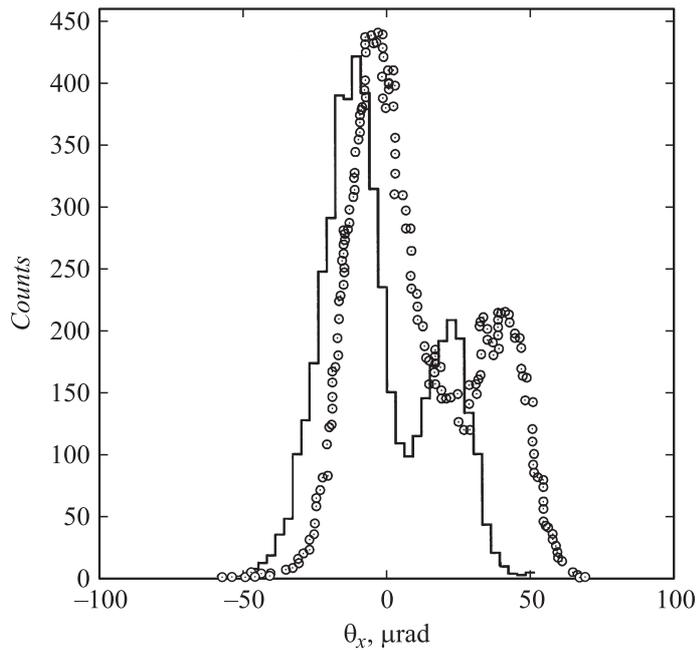
$$\begin{aligned} \Delta v^2 &= \frac{2}{m} \left( -2\overline{(\delta E_{\perp})^2} \ln P_D(E_{\perp}) \right)^{1/2}; \\ v_x|_{n+1} &= v_x|_n + \Delta v \cos \varphi; \\ v_y|_{n+1} &= v_y|_n + \Delta v \sin \varphi. \end{aligned} \quad (7)$$

Случайные величины  $P_D(E_{\perp})$  и  $\varphi$  равномерно распределены на интервалах  $0 \leq P_D(E_{\perp}) \leq 1$  и  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ . Переопределение скорости 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 (5), (6) и (7). Ядерный коэффициент диффузии вычислялся в приближении Китагавы–Оцуки [7], а электронный коэффициент диффузии — в приближении локальной электронной плотности [8]. Используется кубическая эрмитова 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



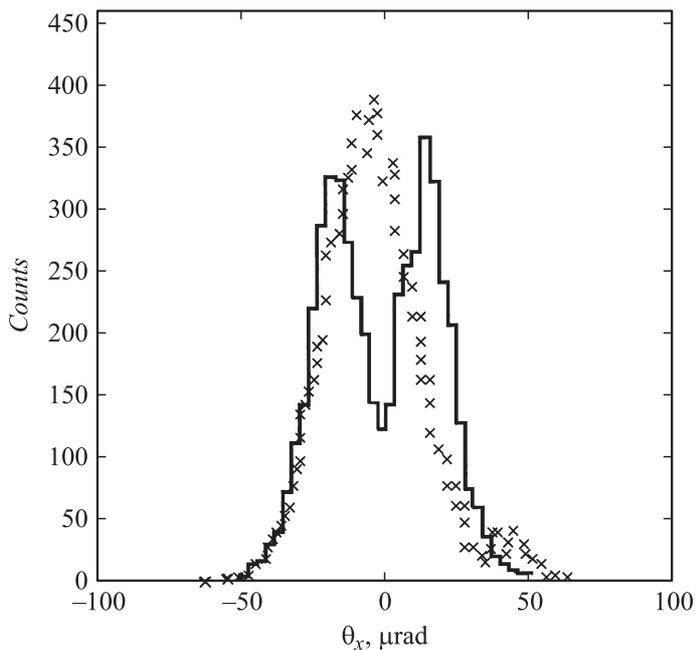
**Рис. 1.** Угловое распределение протонов с энергией 400 GeV за кристаллом Si,  $\langle 111 \rangle$ . Сплошная линия — [1] и крестики (x) — расчет для  $\theta_v = \theta_v^{teor} = 0$ , кружки (o) — расчет для  $\theta_v^{teor} = 14 \mu\text{rad}$ . Радиус изгиба кристалла указан в тексте.

форм-факторы, а также фактор Дебая–Валлера. Температура кристалла считалась равной 294 К. Для потенциала изолированного атома использовалось приближение Мольер [8]. Следуя [1,2], были приняты обозначения, а именно: в плоскости  $XOZ$  лежат как радиус изгиба  $R_x$  плоскости (110), так и углы наклона  $\theta_v$  оси  $\langle 111 \rangle$  кристалла кремния и вылета частиц  $\theta_x$ , которые измерялись относительно первоначального направления пучка. Начальные значения точек влета были равномерно распределены в следующих пределах  $\Delta x \Delta y = 0.5 \cdot 2 = 1 \text{ mm}^2$ , а углы влета нормально распределены вокруг среднего значения. Модельное среднеквадратичное отклонение, которое определяет угловую расходимость пучка частиц, было выбрано равным  $5 \mu\text{rad}$  по осям  $OX$  и  $OY$ , так



**Рис. 2.** Угловое распределение пучка  $\pi^-$ -мезонов с энергией 150 GeV в (110) плоскостном канале кристалла кремния в эксперименте [2] (кружки) и компьютерном эксперименте (сплошная линия) с радиусами изгиба кристалла 22.79 и 80 м соответственно.

как в эксперименте [1,2] осуществлялся дополнительный отбор частиц по углам. В компьютерном эксперименте учитывалось угловое разрешение детектирующей системы  $\Delta\theta_x = \Delta\theta_y = 3 \mu\text{rad}$ . Толщина кристалла была 0.98 mm. Для численного решения системы дифференциальных уравнений движения применялся метод Рунге–Кутты 4-го порядка точности с шагом интегрирования 20 nm. Расстояние  $\tau_{\text{min}}$  было равным 30 nm. Время расчета каждого распределения составило около 2 h на двухъядерном компьютере. Расчеты были произведены для 10 000 частиц. На рис. 1 представлены экспериментальные [1] и расчетные угловые распределения протонов с энергией 400 GeV, которые отклонялись изогнутым кристаллом кремния ( $R_x = 40 \text{ m}$  и  $1/R_y = 0$ ). Наи-



**Рис. 3.** Угловое распределение пучка  $\pi^-$ -мезонов с энергией 150 GeV в (110) плоскостном канале кристалла кремния в компьютерном эксперименте для прямого кристалла (кривизна равна нулю) (сплошная линия) и для кристалла с радиусом изгиба 22.79 m (крестики).

лучшее согласие с экспериментом достигается тогда, когда кристалл дополнительно разориентирован на угол  $\theta_v^{teor} = 14 \mu\text{rad}$ . На рис. 2 представлены экспериментальные [2] и расчетные угловые распределения  $\pi^-$ -мезонов с энергией 150 GeV, которые отклонялись изогнутым кристаллом кремния. Качественное согласие результатов расчета с экспериментом достигается при радиусе изгиба кристалла  $R_x^{teor} = 80 \text{ m}$ . Результаты моделирования указывают на то, что  $\pi^-$ -мезоны с энергией 150 GeV деканализируют из плоскостных каналов кристалла кремния на глубинах порядка нескольких десятков микрометров, формируя угловое распределение с двумя максимумами, симметрия которого нарушается при изгибе кристалла. На рис. 3 представлены результаты

компьютерного моделирования для прямого кристалла (кривизна равна нулю) и для кристалла с радиусом изгиба  $R_x = R_x^{teor} = 22.79$  м. Угловое расстояние между двумя максимумами слабо зависит от радиуса изгиба кристалла. В работе [9] было показано, что радиус кривизны изменяется в несколько раз вдоль длины кристалла, если применяется способ изгиба кристалла, который был реализован в эксперименте [2]. Таким образом, есть все основания предполагать, что в эксперименте [2] не наблюдался эффект плоскостного каналирования  $\pi^-$ -мезонов в общепринятом смысле этого слова.

## Список литературы

- [1] Scandale W., Vomiero A., Baricordi S. et al. // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101. P. 164 801.
- [2] Scandale W., Vomiero A., Bagli E. et al. // Phys. Lett. B. 2009. V. 681. P. 233–236.
- [3] Моргун Д.А., Кощев В.П., Штанов Ю.Н. // Тез. докл. XL Международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М.: Изд-во УНЦ ДО, 2010.
- [4] Scheuter F., Hofmann H. // Nucl. Phys. A. 1983. V. 394. P. 477–500.
- [5] Мартыненко Ю.В. // ФТТ. 1971. Т. 13. В. 9. С. 2580–2586.
- [6] Кощев В.П. // Изв. вузов. Физика. 1997. № 8. С. 32–37.
- [7] Kitagawa M., Ohtsuki Y.H. // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. N 7. P. 3117–3123.
- [8] Gemmel D.S. // Rev. Mod. Phys. 1974. V. 46. N 1. P. 129–235.
- [9] Guidi V., Lanzoni L., Mazzolari A. // J. Appl. Phys. 2010. V. 107. P. 113 534.