

01

Моделирование процесса отклонения протонов и π^- -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 π^- -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 π^- -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 π^- -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 ΔE_{\perp} за малое время Δt 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 ; δE_{\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 φ 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 τ_{\min} . Расстояние τ_{\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

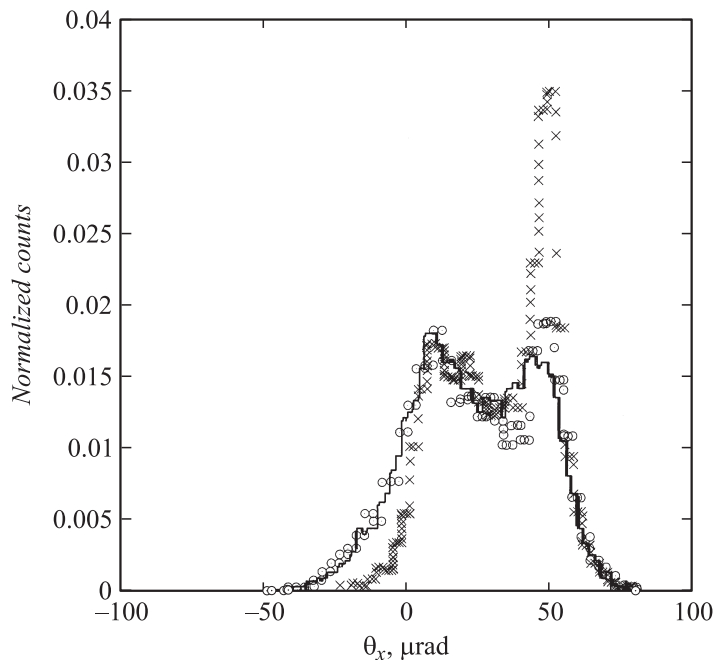


Рис. 1. Угловое распределение протонов с энергией 400 GeV за кристаллом Si, $\langle 111 \rangle$. Сплошная линия — [1] и крестики (x) — расчет для $\theta_v = \theta_v^{teor} = 0$, кружки (o) — расчет для $\theta_v^{teor} = 14 \mu\text{rad}$. Радиус изгиба кристалла указан в тексте.

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 θ_v оси $\langle 111 \rangle$ кристалла кремния и вылета частиц θ_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

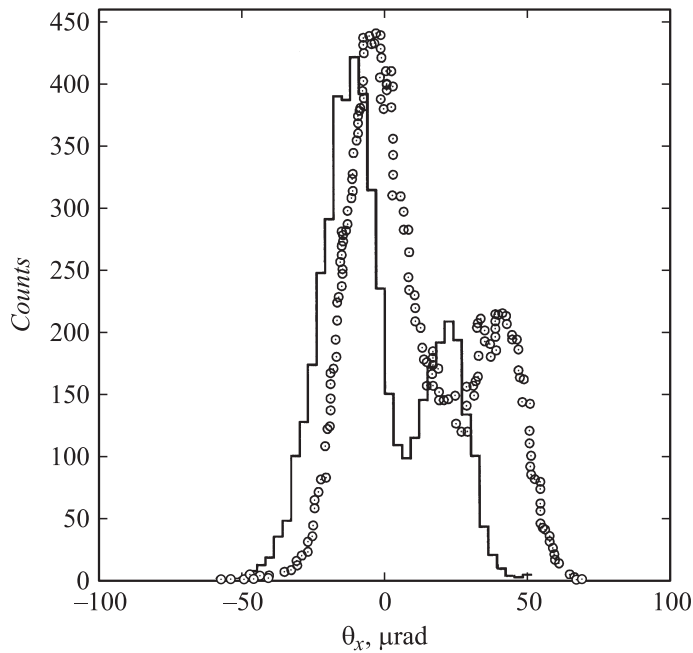


Рис. 2. Угловое распределение пучка π^- -мезонов с энергией 150 GeV в (110) плоскостном канале кристалла кремния в эксперименте [2] (кружки) и компьютерном эксперименте (сплошная линия) с радиусами изгиба кристалла 22.79 и 80 м соответственно.

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 τ_{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-

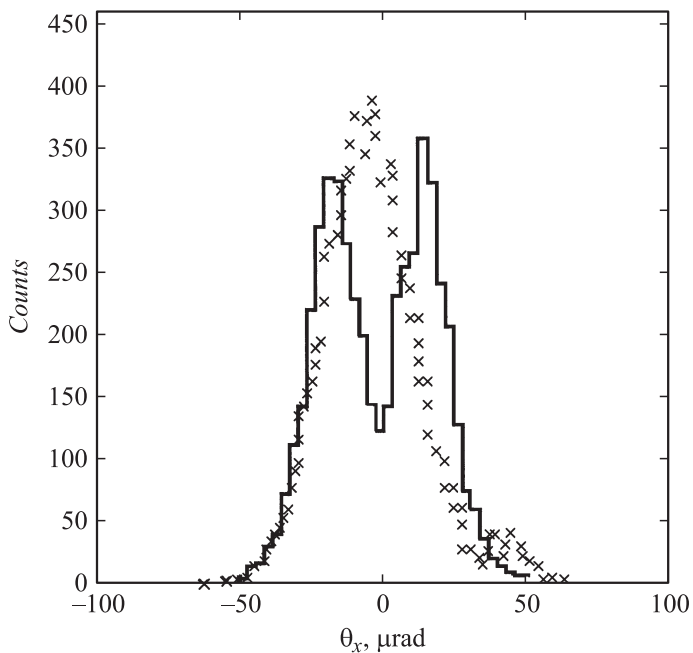


Рис. 3. Угловое распределение пучка π^- -мезонов с энергией 150 GeV в (110) плоскостном канале кристалла кремния в компьютерном эксперименте для прямого кристалла (кривизна равна нулю) (сплошная линия) и для кристалла с радиусом изгиба 22.79 m (крестики).

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 π^- -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 π^- -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 π^- -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.