

01

## Моделирование процесса отклонения протонов с энергией 450 GeV изогнутым кристаллом кремния

© В.П. Кошчев, Н.В. Сафин, Д.А. Моргун

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

Поступило в Редакцию 27 декабря 2006 г.

Показано, что решение кинетического уравнения Фоккера–Планка, предложенного Китагавой и Оцуки в 1973 г., методом компьютерного моделирования траекторий каналированных частиц с помощью компьютерной программы PST хорошо описывает результаты эксперимента по отклонению протонов с энергией 450 GeV изогнутым кристаллом кремния.

PACS: 61.85.+p

Теоретические и экспериментальные исследования отклонения пучков релятивистских частиц изогнутыми кристаллами продолжают оставаться одним из актуальных научных направлений настоящего времени [1]. Более десяти лет тому назад в ЦЕРН была достигнута высокая эффективность отклонения протонов с энергией 450 GeV кристаллом кремния, изогнутого устройством с тремя точками опоры [2]. Теоретический анализ результатов эксперимента [2] был выполнен в (см., например, [3,4]). Цель настоящей работы составляет применение метода компьютерного моделирования траекторий каналированных частиц [5] к расчету эффективности отклонения протонов в эксперименте [2].

Компьютерная программа PST (the Phase Space of Transversal coordinates and velocities) [5] была построена в рамках ланжевеновского подхода к теории эффекта каналирования [6]. Покажем эквивалентность ланжевеновского [6] и кинетического [7] подходов к описанию эффекта плоскостного каналирования. Кинетическое уравнение Фоккера–Планка в фазовом пространстве поперечных координат и

скоростей имеет вид [7]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{x} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{F(x)}{m} \frac{\partial f}{\partial \dot{x}} = \frac{D(x)}{2m^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \dot{x}^2}, \quad (1)$$

где  $F(x)$  — поперечная сила;  $m$  — релятивистская масса;  $D(x)$  — коэффициент диффузии.

Решение уравнения (1) будем искать методом малого шума [8]. Решение запишем в виде символического ряда теории возмущений

$$f = f^{(0)} + f^{(1)} + \dots \quad (2)$$

В нулевом приближении теории возмущений пренебрегаем многократным рассеянием, т.е. полагаем  $D = 0$ . Тогда уравнение (1) запишется в виде

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} + \dot{x} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} + \frac{F(x)}{m} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \dot{x}} = 0. \quad (3)$$

Решение уравнения Лиувилля (3) есть приращение двух дельта-функций Дирака:  $f^{(0)} = \delta(x - \bar{x}(t))\delta(\dot{x} - \dot{\bar{x}}(t))$ , где  $\dot{\bar{x}}(t) = d\bar{x}(t)/dt$ ,  $\bar{x}(t)$  является решением уравнения Ньютона

$$m\ddot{x} = F(x), \quad (4)$$

где  $F(x) = -U_x + kmv^2$ ;  $m = \gamma m_0$ ;  $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$  — Лоренц-фактор;  $\beta = v/c$ ;  $v$  — скорость канализированной частицы;  $c$  — скорость света;  $U_x = \partial U(x)/\partial x$ ;  $U(x)$  — непрерывный потенциал плоскостного канала;  $\dot{x} = dx/dt$ ;  $k = 1/R$  — кривизна измеряется с глубиной  $z$ ;  $z = vt$ . Начальные условия к уравнению (4) имеют вид  $\bar{x}_0 = \bar{x}(t = t_0)$ ;  $\dot{\bar{x}}_0 = \dot{\bar{x}}(t = t_0)$ .

В первом порядке теории возмущений уравнение Фоккера–Планка имеет вид

$$\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} + \dot{\eta} \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \eta} + \eta \frac{F[\bar{x}(t)]}{m} \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \dot{\eta}} = \frac{D[\bar{x}(t)]}{2m^2} \frac{\partial^2 f^{(1)}}{\partial \dot{\eta}^2}, \quad (5)$$

здесь  $\eta = x - \bar{x}$ ;  $\dot{\eta} = \dot{x} - \dot{\bar{x}}$  — флуктуации поперечной координаты и скорости, а коэффициенты диффузии  $D[\bar{x}(t)]$  и сноса  $F[\bar{x}(t)]$  являются функциями решения уравнения Ньютона.

Непосредственной подстановкой можно показать, что решением уравнения (5) является следующая функция распределения флуктуаций поперечной координаты и скорости:

$$f^{(1)}(\eta, \dot{\eta}, t) = (2\pi\Delta)^{-1} \exp\left[-\left(\dot{\eta}^2 \overline{(\delta x)^2} + \eta^2 \overline{(\delta \dot{x})^2} - 2\dot{\eta}\eta \overline{\delta x \delta \dot{x}}\right)/2\Delta^2\right], \quad (6)$$

где  $\Delta^2 = \overline{(\delta \dot{x})^2} \overline{(\delta x)^2} - \overline{(\delta x \delta \dot{x})^2}$ , если вторые моменты удовлетворяют системе уравнений

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} &= 2\overline{\delta x \delta \dot{x}}, \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} &= \overline{\delta \dot{x}^2} - \frac{U_{xx}}{m} \overline{\delta x^2}, \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x}^2} &= -2 \frac{U_{xx}}{m} \overline{\delta x \delta \dot{x}} + \frac{D[\bar{x}(t)]}{m^2}, \end{aligned} \quad (7)$$

где  $U_{xx} = \partial^2 U(x)/\partial x^2$  при  $x = \bar{x}(t)$ .

Система уравнений (7) была построена в [6] с помощью ланжевеновского подхода к описанию эффекта плоскостного каналирования. Начальные условия к уравнению (4) переопределяются случайным образом (разыгрываются) с помощью решения уравнений (7) после прохождения каналированной частицей отрезка траектории, длина которого ограничена неравенствами

$$\begin{aligned} \overline{\delta x^2}(t) &\leq d^2 \cdot 25 \cdot 10^{-4}, \\ \overline{\delta \dot{x}^2}(t) &\leq v^2 \cdot \Psi_1^2 \cdot 4 \cdot 10^{-4}, \end{aligned} \quad (8)$$

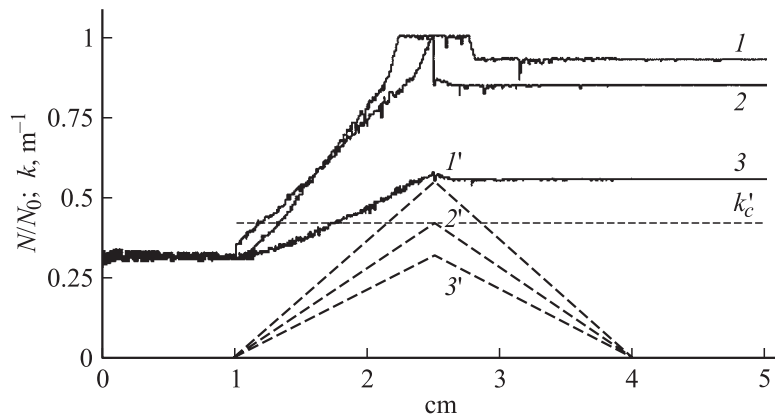
где  $d$  — постоянная кристаллической решетки;  $\Psi_1 = (2V_{\max}/mv^2)^{1/2}$  — критический угол каналирования Линдхарда [9];  $V_{\max}$  — максимальное значение потенциала плоскостного канала.

Розыгрыш запрещается, если после предыдущего розыгрыша пройдено расстояние меньше  $T_{\min}$ . Расстояние  $T_{\min}$  определяется минимальным количеством столкновений частицы с атомами кристалла, после которого возможно рассеяние.

Решение системы уравнений (4) и (7) с учетом неравенств (8) составляет содержание компьютерной программы PST. В рамках программы PST также возможно вести расчет траекторий без многократного рассеяния (версия „XV“) и по „стандартной“ модели многократного рассеяния (версия „SM“). Отличие стандартной модели состоит в том, что в системе уравнений (7) положено  $U_{xx} = 0$ . Многократное

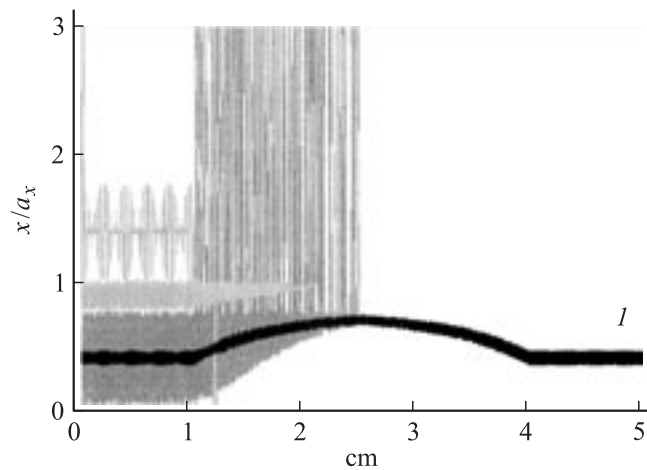
рассеяние в версии SM учитывается в рамках стандартной модели, согласно которой скорость приращения среднего квадрата угла многократного рассеяния на единице длины пути пропорциональна плотности распределения атомных электронов и ядер в той точке пространства, где находится каналированная частица [9]. Ядерный коэффициент диффузии вычислялся в приближении Китагавы–Оцуки [7], а электронный коэффициент диффузии вычислялся в приближении локальной электронной плотности [9]. Непрерывный потенциал и коэффициент диффузии были разложены в периодический ряд Фурье с учетом структурного фактора. Фурье-компоненты потенциала атома и электронной плотности брались в приближении Мольера. Потери энергии каналированных частиц вычислялись вдоль каждой траектории с помощью формулы Бете–Блоха с учетом правила равномерного распределения Линдхарда [9], эффекта плотности и релятивистских поправок в кулоновском логарифме. Эффективность поворота определяется как доля каналированных частиц на выходе из кристалла. Отбор таких частиц выполняется по потерям энергии, т.е. если частица имеет потери, меньшие порогового значения, то она считается каналированной. Пороговое значение потерь энергии принимается равным 0.95 от потерь энергии протонов с энергией 450 GeV в разориентированном кристалле кремния. Потери энергии рассчитываются следующим способом: вся глубина кристалла разбивается на подслои одинаковой длины, для каждой частицы рассчитывается разница значений энергии в начале и конце каждого подслоя, делится на длину подслоя. Выход строится как зависимость числа деканалированных частиц от глубины проникновения с заданным разрешением по глубине, которое не может быть меньше толщины подслоя.

Следующие результаты получены для пучка из 301 протона с энергией 450 GeV и в (111) плоскостном канале кристалла кремния. Начальные значения точки влета были равномерно распределены в пределах одного плоскостного канала ( $0 \leq x \leq a_x$ , где  $a_x = d/\sqrt{3}$ ), а углы влета были нормально распределены вокруг среднего значения, равного нулю со среднеквадратичным отклонением, равным  $3 \mu\text{rad}$ . Условия розыгрыша траекторий для программ PST и SM были одинаковыми, а именно:  $T_{\min} = 0.75 \mu\text{m}$ . На рис. 1 показаны графики выходов из режима каналирования протонов, рассчитанные по модели XV для случаев изгиба на углы 8.9, 6.3 и  $3.7 \text{ mrad}$  (линии 1, 2 и 3 соответственно). Деканалированные частицы отбирались по потерям энергии. Учет многократного рассеяния с помощью программы PST сглаживает графики выходов протонов. Также на рис. 1 показаны

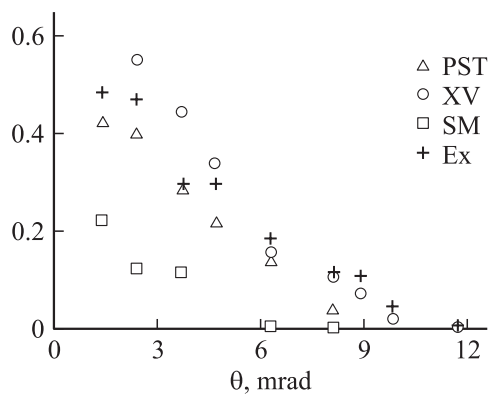


**Рис. 1.** Относительные выходы протонов, рассчитанные методом отбора по потерям энергии, из режима каналирования для случаев изгиба кристалла на углы 8.9, 6.3, 3.7 mrad (линии 1, 2 и 3 соответственно). Графики изменения кривизны для этих трех углов обозначены 1', 2' и 3' соответственно. Прямая линия, обозначенная  $k'_c$ , соответствует критической кривизне  $k'_c \approx k_c/3$ . Расчет траекторий проводился без учета многократного рассеяния по программе XV.

графики изменения кривизны для данных углов изгиба кристалла (линии 1', 2' и 3'). Можно видеть, что на участке изгиба кристалла с нарастающей кривизной все каналированные протоны исчезают, когда локальное значение кривизны кристалла начинает превышать некоторое критическое значение  $k'_c \approx k_c/3$ , где  $k_c = 1/R_c$ ;  $R_c \approx 80$  см — радиус Цыганова [10] для данного случая. На участке изгиба кристалла с уменьшающейся кривизной каналированные протоны вновь появляются, когда локальное значение кривизны кристалла становится меньше некоторого критического значения  $k'_c$ . Эффект „исчезновения“ каналированных протонов можно объяснить тем, что при значениях локальной кривизны кристалла, больших некоторого критического значения  $k'_c$ , траектории каналированных протонов попадают в область повышенной электронной плотности вблизи атомной плоскости (см. рис. 2), где потери энергии становятся не меньше потерь энергии протонов в разориентированном кристалле. Такой эффект „исчезновения“ каналированных протонов может быть зарегистрирован с помощью полупроводникового детектора, встроенного в изогнутый кристалл на том его участке, где значения локальной кривизны кристалла больше, чем некоторое крити-



**Рис. 2.** Графики траекторий  $x(t)$  в случае изгиба кристалла на угол  $8.9 \text{ mrad}$ , рассчитанные без учета многократного рассеяния. Траектории частиц, каналирующих в „широких“ (111) плоскостных каналах, обозначены  $I$ .



**Рис. 3.** Эффективности отклонения частиц, рассчитанные по модели деканализации, связанной с отбором частиц по потерям энергии (Ex — эксперимент).

ческое значение  $k'_c$ . На рис. 3 представлены результаты эксперимента [2] и рассчитанные значения эффективности отклонения. Видно, что учет деканализации в рамках компьютерной программы PST немного

уменьшает значения эффективности отклонения по сравнению с результатами расчета без учета многократного рассеяния каналированных протонов на электронах и ядрах кристалла (программа XV). Расчет эффективности отклонения в рамках компьютерной программы SM демонстрирует столь сильное деканалирование из-за многократного рассеяния, что это приводит к значительному расхождению с результатами эксперимента.

Хорошее согласие с экспериментом [2] получено с помощью компьютерной программы PST [5], что связано с уменьшением скорости деканалирования релятивистских протонов вследствие применения нового подхода [6] к описанию эволюции средних квадратов флуктуаций поперечной координаты и скорости. Уменьшение числа актов многократного рассеяния для подбарьерных траекторий по модели PST связано с тем, что скорость изменения среднего квадрата угла многократного рассеяния меньше, чем в модели SM. Так, в модели SM скорость изменения среднего квадрата угла многократного рассеяния прямо пропорциональна коэффициенту диффузии, а в модели PST она меньше на величину  $2\overline{\delta x \delta \dot{x}} (\partial^2 U(x) / \partial x^2) / m$ , поскольку для подбарьерных частиц  $\overline{\delta x \delta \dot{x}} > 0$  при  $\partial^2 U(x) / \partial x^2 = \text{const} > 0$ .

## Список литературы

- [1] *Ivanov Yu.M., Petrunin A.A., Skorobogatov V.V.* et al. // Physical Review Letters. 2006. PRL. V. 97. 144801 P. 1.
- [2] *Møller S.P., Worm T., Clément M* et al. // Nucl. Instr. Meth. in Phys. Res. B. 1994. V. 84. P. 434.
- [3] *Бирюков В.М., Котов В.И., Чесноков Ю.А.* // УФН. 1994. Т. 164. В. 10. С. 1017.
- [4] *Taratín A.M.* // Nucl. Instr. Meth. in Phys. Res. B. 1996. V. 119. P. 156.
- [5] *Кощев В.П., Моргун Д.А., Сафин Н.В., Холодов К.А.* // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32. В. 9. С. 1.
- [6] *Кощев В.П.* // Изв. вузов. Физика. 1995. № 1. С. 100.
- [7] *Kitagawa M., Ohtsuki Y.H.* // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. N 7. P. 3117.
- [8] *Гардинер К.В.* Стохастические методы в естественных науках. М.: Мир, 1986. 528 с.
- [9] *Линдхард Й.* // УФН. 1969. Т. 99. В. 2. С. 249.
- [10] *Tsyganov E.N.* Preprint Fermilab. ТМ-682, ТМ-684. Batavia, 1976.