

01

Моделирование процесса отклонения релятивистских электронов изогнутым кристаллом кремния

© В.П. Кошчев¹, Ю.Н. Штанов², Д.А. Моргун³, Т.А. Панина³

¹ НИУ МАИ, филиал „Стрела“, Жуковский Московской обл.

² Тюменский государственный нефтегазовый университет, филиал ТюмГНГУ в г. Сургуте, Сургут

³ Сургутский государственный университет, Сургут
E-mail: koshcheevl@yandex.ru

Поступило в Редакцию 5 мая 2015 г.

Моделирование процесса отклонения электронов с энергией 855 MeV и 6.3 GeV в плоскостных (111) каналах изогнутого кристалла кремния выполнено с помощью компьютерной программы TROPICS с атомным коэффициентом диффузии. Атомный коэффициент диффузии каналированных частиц построен в Дойль-Тернеровском приближении потенциала изолированного атома. Показано, что атомный коэффициент диффузии стремится к минимальному значению в области максимальной ядерной плотности атомной цепочки там, где коэффициент диффузии Китагавы–Оцуки достигает своего наибольшего значения.

В работах [1,2] наблюдали отклонение релятивистских электронов изогнутым кристаллом кремния. Компьютерное моделирование [3] с ядерным коэффициентом диффузии [4] и электронным [5] не описывает эксперимента [1]. В настоящей работе построен атомный коэффициент диффузии, с помощью которого описываются результаты [1,2].

Потенциальная энергия взаимодействия быстрой частицы с атомами кристалла представляет собой сумму потенциальной энергии взаимодействия быстрой частицы с ядрами атомов кристалла $U_{nuc}(r)$ и потенциальной энергии взаимодействия быстрой частицы с атомными электронами кристалла $U_{el}(r)$

$$U(r) = U_{nuc}(r) + U_{el}(r). \quad (1)$$

Потенциальная энергия взаимодействия быстрой частицы с ядрами атомов кристалла имеет вид

$$U_{nuct}(r) = \sum_n \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|}, \quad (2)$$

где $Z_1 e$, $Z_2 e$ — заряды быстрой частицы и атомов кристалла соответственно; \mathbf{r} — вектор, определяющий положение ядра налетающей частицы; \mathbf{r}_n — вектор, определяющий положение n -го ядра кристалла. Вектор \mathbf{r}_n может быть представлен как $\mathbf{r}_n = \mathbf{r}_{n_0} + \delta\mathbf{r}_n$, где $\mathbf{r}_{n_0} = (a_x n_x, a_y n_y, a_z n_z)$ — вектор, определяющий положение n -го узла кристаллической решетки; a_x , a_y , a_z — периоды кристаллической решетки в направлении осей OX , OY , OZ соответственно; n_x , n_y , n_z — целые числа; $\delta\mathbf{r}_n$ — вектор смещения n -го атома из узла кристаллической решетки.

Потенциальная энергия взаимодействия быстрой частицы с атомными электронами кристалла имеет вид

$$U_{el}(r) = - \sum_n \sum_{j=1}^{Z_2} \frac{Z_1 e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{n_j}|}, \quad (3)$$

где \mathbf{r}_{n_j} — вектор, определяющий положение j -го электрона n -го атома кристалла, причем $\mathbf{r}_{n_j} = \mathbf{r}_n + \delta\mathbf{r}_{n_j}$, $\delta\mathbf{r}_{n_j}$ — вектор, определяющий смещение j -го электрона n -го атома кристалла.

Многочисленное рассеяние каналированных частиц на электронах и ядрах атомов кристалла описывается с помощью компонент диффузионной матрицы

$$D(x, y) = \begin{pmatrix} D_{xx}(x, y) & D_{xy}(x, y) \\ D_{yx}(x, y) & D_{yy}(x, y) \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Так как корреляционная функция флуктуаций случайной силы является дельта-коррелированной [6,7], то эти компоненты имеют вид

$$D_{ij}(x, y) = \int dt_2 \overline{\delta f_i(\mathbf{r}_1) \delta f_j(\mathbf{r}_2)}, \quad (5)$$

где $\delta f_i(\mathbf{r}) = -\frac{\partial \delta U(r)}{\partial i}$, $i, j = (x, y)$. Черта ($\overline{\dots}$) означает усреднение как по квадрату модуля волновой функций атомов кристалла, так и по независимым тепловым колебаниям атомов кристалла [6,7]. Перепишем (5)

с помощью (1)–(3) в виде

$$D_{ij}(x, y) = \int dt_2 [\overline{df_i^{nucl}(\mathbf{r}_1)\delta f_j^{nucl}(\mathbf{r}_2)} + \overline{\delta f_i^{el}(\mathbf{r}_1)\delta f_j^{el}(\mathbf{r}_2)} + 2\overline{\delta f_i^{nucl}(\mathbf{r}_1)\delta f_j^{el}(\mathbf{r}_2)}]. \quad (6)$$

Первые два слагаемых описывают ядерный и электронный коэффициенты диффузии, а третье слагаемое учитывает вклад от экранирования ядра атомными электронами. Легко видеть, что третье слагаемое может быть отрицательно, так как заряды электронов и ядра атома противоположны. В [7,8] показано, что в непрерывном приближении ядерный и электронный коэффициенты диффузии в (6) совпадают с ядерным коэффициентом диффузии [4] и электронным [5]. Далее будет показано, что атомный коэффициент диффузии (6) будет меньше коэффициента диффузии [4] в области максимальной ядерной плотности атомной цепочки. Одна из компонент атомного коэффициента диффузии канализованных частиц в окрестности изолированной атомной цепочки имеет вид ([6], см. также, [9,10]):

$$D_{xy}(x, y) = \frac{a_z}{v} \left[\left\langle \frac{\partial V(r_\perp)}{\partial x} \frac{\partial V(r_\perp)}{\partial y} \right\rangle_T - \left\langle \frac{\partial V(r_\perp)}{\partial x} \right\rangle_T \left\langle \frac{\partial V(r_\perp)}{\partial y} \right\rangle_T \right], \quad (7)$$

где $r_\perp = \sqrt{x^2 + y^2}$; $\langle \dots \rangle_T$ — усреднение по независимым тепловым колебаниям атомов кристалла; $V(r_\perp)$ — потенциальная энергия взаимодействия канализованной частицы с изолированной атомной цепочкой.

Моделирование эффекта канализования осуществлялось с помощью решения систем уравнений (8) и (9), которые были построены в [11]:

$$\begin{cases} m\ddot{x} = -\frac{\partial \bar{U}_{eff}(\bar{x}, \bar{y})}{\partial \bar{x}}, \\ m\ddot{y} = -\frac{\partial \bar{U}_{eff}(\bar{x}, \bar{y})}{\partial \bar{y}}, \end{cases} \quad (8)$$

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

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

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta y} &= -\frac{1}{m} (\overline{U_{xx} \delta x \delta y} + \overline{U_{xy} \delta y^2}) + \overline{\delta \dot{x} \delta \dot{y}}, \quad \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{y}} \\ &= -\frac{1}{m} (\overline{U_{yy} \delta x \delta y} + \overline{U_{xy} \delta x^2}) + \overline{\delta \dot{x} \delta \dot{y}}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x} \delta \dot{y}} = -\frac{1}{m} (\overline{U_{xx} \delta x \delta \dot{y}} + \overline{U_{xy} \delta y \delta \dot{y}} + \overline{U_{yy} \delta \dot{x} \delta y} + \overline{U_{xy} \delta x \delta \dot{x}}) + \frac{D_{xy}}{m^2},$$

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

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

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{y}^2} = -\frac{2}{m} (\overline{U_{yy} \delta y \delta \dot{y}} + \overline{U_{xy} \delta x \delta \dot{y}}) + \frac{D_{yy}}{m^2}$$

со следующими начальными условиями: $\overline{x}_0 = \overline{x}(0)$, $\overline{y}_0 = \overline{y}(0)$, $\overline{\dot{x}}_0 = \overline{\dot{x}}(0)$, $\overline{\dot{y}}_0 = \overline{\dot{y}}(0)$. Система уравнений (9) имеет нулевые начальные условия, где $\overline{U_{eff}}(x, y) = \overline{U}(x, y) - p v x / R_x - p v y / R_y$; R_x, R_y — радиусы изгиба кристалла в направлении оси OX и OY соответственно, которые могут быть заданной функцией от глубины z ; $z = vt$; $p = mv$ — импульс каналированной частицы; $\overline{U}(x, y)$ — непрерывный потенциал системы упорядоченных атомных цепочек. Переопределение значений координат и скоростей производится случайным образом при помощи соотношений

$$\begin{cases} \overline{x} = \text{RandG}(\overline{x}, \sqrt{\delta x^2}), & \overline{y} = \text{RandG}(\overline{y}, \sqrt{\delta y^2}), \\ \overline{\dot{x}} = \text{RandG}(\overline{\dot{x}}, \sqrt{\delta \dot{x}^2}), & \overline{\dot{y}} = \text{RandG}(\overline{\dot{y}}, \sqrt{\delta \dot{y}^2}), \end{cases} \quad (10)$$

где функция RandG генерирует случайную величину, удовлетворяющую нормальному распределению с заданным математическим ожиданием и дисперсией согласно алгоритму [12].

Переопределение 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 [3] основан на численном решении системы уравнений (8)–(9) и соотношений (10), что эквивалентно решению кинетического уравнения Фоккера–Планка [4,9] методом компьютерного моделирования траекторий каналированных

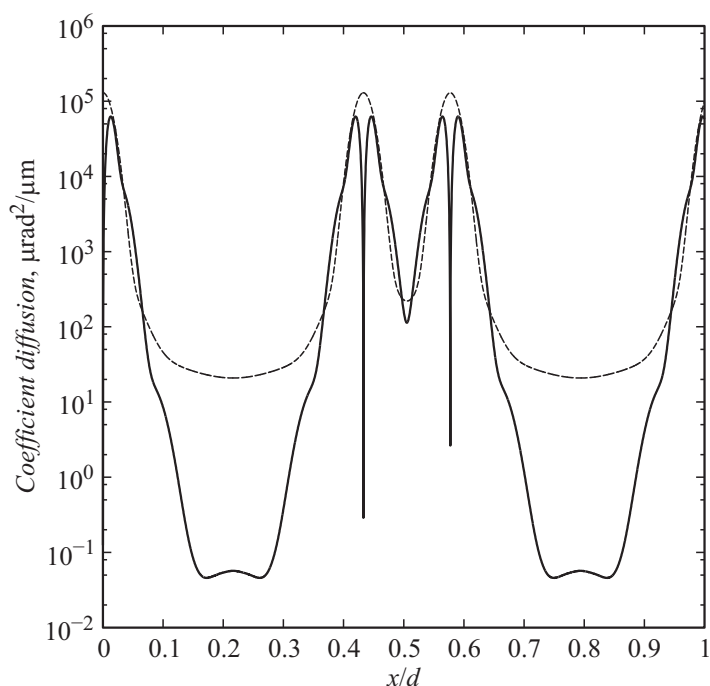


Рис. 1. Атомный коэффициент диффузии [6] (сплошная линия) и суммарный коэффициент диффузии [4,5] (пунктирная линия) в окрестности атомных $\langle 110 \rangle$ цепочек кристалла кремния для электронов с энергией 855 MeV.

частиц. 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 К. Для потенциала изолированного атома использовалось приближение Дойля–Тернера [13]. Для построения атомного коэффициента диффузии использовались вычислительные мощности видеокарты с поддержкой технологии CUDA [14]. Время интерполирования атомного коэффициента диффузии составляет 10.5 h. Коэффициент диффузии [4] и атомный коэффициент диффузии представлены

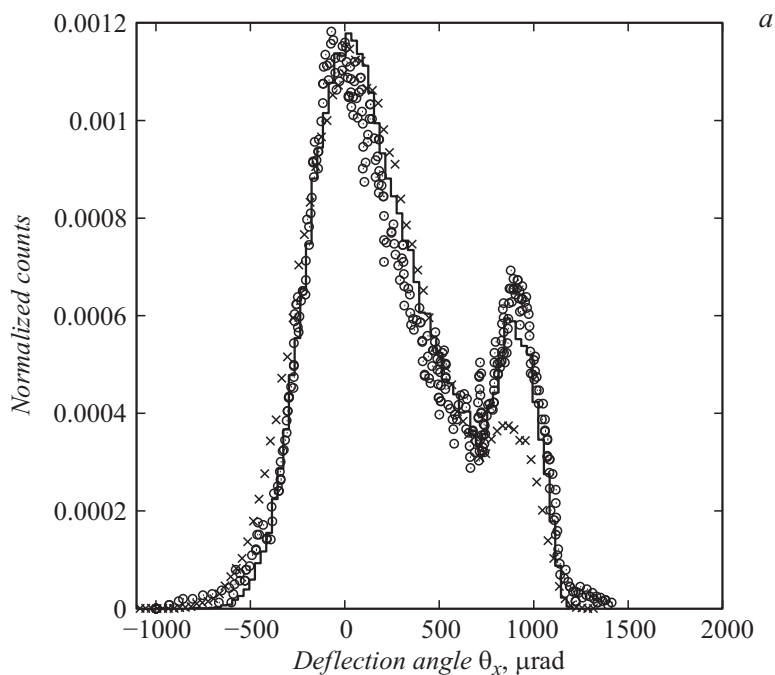


Рис. 2. Угловое распределение пучка электронов с энергией 855 MeV (*a*), 6.3 GeV (*b*) в (111) плоскостном канале кремния. *a* — эксперимент [1] и *b* — эксперимент [2] обозначены кружками, результаты компьютерного моделирования: сплошная линия с использованием атомного коэффициента диффузии [6] и крестики — расчет с использованием суммарного коэффициента диффузии в приближении [4,5]. Разрешение детектирующей системы, μrad : *a* — 30, *b* — 10.

на рис. 1. Видно, что атомный коэффициент диффузии стремится к минимальному значению в области максимальной ядерной плотности атомной цепочки, а коэффициент диффузии [4] достигает своего наибольшего значения. В плоскости XOZ лежат как радиус изгиба R_x плоскости (111), так и угол вылета частиц θ_x , которые измерялись относительно первоначального направления пучка. Угол разориентации между осью $\langle 110 \rangle$ и направлением падения частиц в плоскости (111) был взят равным 50 mrad, так как в работах [1,2] не было указано

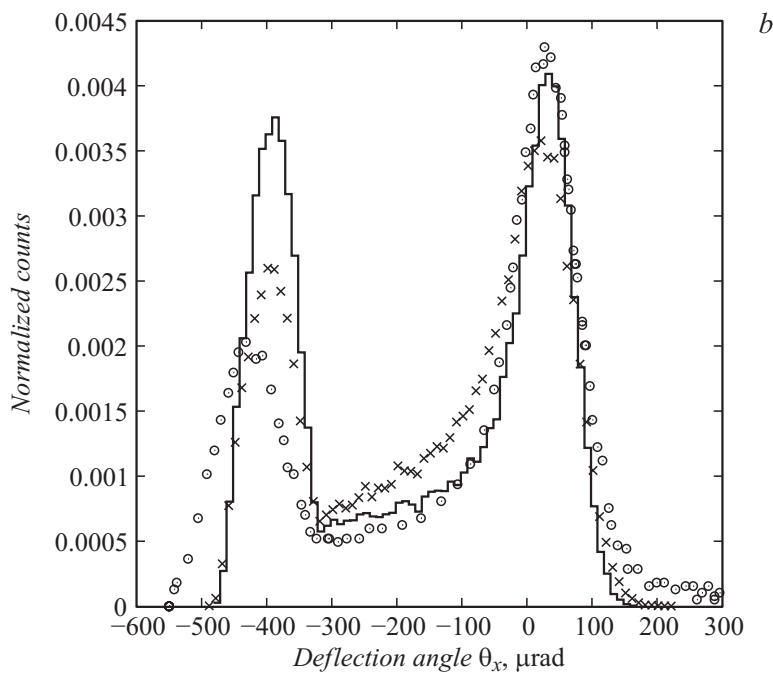


Рис. 2 (продолжение).

его значение. Начальные значения точек влета были равномерно распределены в следующих пределах $\Delta x \cdot \Delta y = 0.07 \cdot 0.2 = 0.014 \text{ mm}^2$, а углы влета нормально распределены вокруг среднего значения согласно алгоритму [12]. Модельное среднеквадратичное отклонение, которое определяет угловую расходимость пучка частиц, было выбрано $\sigma_x = 30$ и $\sigma_y = 70 \mu\text{rad}$ [1], толщина кристалла $30.5 \mu\text{m}$. Для численного решения системы дифференциальных уравнений движения применялся метод Рунге–Кутты 4 порядка точности с шагом интегрирования 1.8 nm . Расстояние τ_{min} было равным 18 nm . Расчеты были произведены для $100\,000$ частиц. Время расчета каждого распределения составило около 40 min на четырех-ядерном процессоре с частотой 3 GHz . На рис. 2, *a* представлены экспериментальные [1] и расчетные угловые распределения электронов с энергией 855 MeV , которые отклонялись

(111) плоскостным каналом изогнутого кристалла кремния с радиусами изгиба $R_x = 33.5 \text{ nm}$ и $R_y = 0$ соответственно. Экспериментальные [1] и расчетные значения были нормированы так, что площадь под каждой гистограммой равна единице. Видно, что хорошее согласие между результатами эксперимента и моделированием наблюдается при использовании атомного коэффициента диффузии. На рис. 2, *b* представлены экспериментальные [2] и расчетные угловые распределения электронов с энергией 6.3 GeV, которые отклонялись (111) плоскостным каналом изогнутого кристалла кремния с радиусами изгиба $R_x = 0.15 \text{ m}$ и $R_y = 0$ соответственно. Начальные значения точек влета были равномерно распределены в следующих пределах $\Delta x \cdot \Delta y = 0.15 \cdot 0.15 = 0.0225 \text{ mm}^2$, а углы влета нормально распределены вокруг среднего значения согласно алгоритму [12]. Толщина кристалла $60 \mu\text{m}$. Шаг интегрирования был равен 4.9 nm, а τ_{min} было равным 49 nm. Количество частиц в пучке было равным 100 000. Время расчета составило около 30 min. В [2] утверждается, что расходимость пучка была меньше, чем $\sigma_x = \sigma_y = 10 \mu\text{rad}$, но наилучшее согласие между моделированием и экспериментом может быть получено при расходимости пучка меньше $\sigma_x = \sigma_y = 60 \mu\text{rad}$. Видно, что с увеличением энергии релятивистских электронов разница между действием суммарного коэффициента диффузии [4,5] и атомного коэффициента диффузии на эффект каналирования становится менее существенной.

Таким образом, непрерывный потенциал и атомный коэффициент диффузии каналированных частиц полностью определяются через параметры потенциала изолированного атома кристалла. Данный подход позволяет исключить из рассмотрения электронный и ядерный кулоновские логарифмы, которые ответственны за многократное рассеяние быстрых заряженных частиц на электронах и ядрах атомов кристалла.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и правительства Ханты-Мансийского автономного округа — Югры в рамках научного проекта № 15-41-00048 „p_урал_a“.

Список литературы

- [1] *Mazzolari A. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2014. V. 112. P. 135 503.
- [2] *Wienands U. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2015. V. 114. P. 074 801.
- [3] <http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/tropics/index.html>
- [4] *Kitagawa M., Ohtsuki Y.H.* // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. N 7. P. 3117–3123.

- [5] *Линдхард Й.* // УФН. 1969. Т. 99. В. 2. С. 249–296.
- [6] *Кошечев В.П.* // Изв. вузов. Физика. 1997. № 8. С. 32–37.
- [7] *Кошечев В.П., Моргун Д.А., Панина Т.А.* // Стохастическая динамика эффекта каналирования в кристаллах и нанотрубках: монография. Ханты-Мансийск: Полиграфист, 2008. 100 с.
- [8] *Кошечев В.П., Моргун Д.А., Панина Т.А.* // Изв. РАН. Сер. Физ. 2009. Т. 73. № 11. С. 1586–1590.
- [9] *Ольховский И.И., Садыков Н.М.* // Труды 10 Всесоюзного совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. Ч. 1. М.: Изд-во МГУ, 1980. С. 173.
- [10] *Базылев В.А., Жеваго Н.К.* Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. М.: Наука, 1987. 269 с.
- [11] *Кошечев В.П., Моргун Д.А., Штанов Ю.Н.* // Письма в ЖТФ. 2013. Т. 39. В. 20. С. 77–86.
- [12] *Marsaglia G., Bray T.A.* // SIAM Rev. 1964. V. 6. N 3. P. 260–264.
- [13] *Doyle P.A., Turner P.S.* // Acta Cryst. A. 1968. V. 24. P. 390–397.
- [14] *Боресков А.В., Харламов А.А.* Основы работы с технологией CUDA. М.: ДМК Пресс, 2010. 232 с.