

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОТКЛОНЕНИЯ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ С ЭНЕРГИЕЙ 855 МЭВ ИЗОГНУТЫМ КРИСТАЛЛОМ КРЕМНИЯ

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

¹⁾НИУ МАИ, филиал «Стрела», г. Жуковский, Московской обл.

²⁾Сургутский институт нефти и газа, филиал ТюмГНГУ в г. Сургуте,

³⁾ГБОУ ВПО «Сургутский государственный университет ХМАО-Югры», г. Сургут

E-mail: koshcheev1@yandex.ru

Моделирование процесса отклонения электронов с энергией 855 МэВ в плоскостных (111) каналах изогнутого кристалла кремния выполнено с помощью численного решения кинетического уравнения Фоккера—Планка в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей. Показано, что результаты моделирования не описывают эксперимент.

Задача исследования процесса отклонения высокоэнергетических частиц с помощью изогнутых кристаллов относится к числу актуальных задач настоящего времени [1]. В настоящей работе выполнено моделирование угловых распределений электронов изогнутым кристаллом кремния с помощью компьютерной программы TROPICS («Trajectory Of Particle In a Crystal» Simulator) [2]. С помощью компьютерной программы TROPICS производится численное решение кинетического уравнения Фоккера—Планка в пространстве поперечных координат и скоростей методом компьютерного моделирования траекторий каналированных частиц [3].

Эволюция плотности каналированных частиц в пространстве поперечных координат и скоростей описывается кинетическим уравнением Фоккера—Планка, которое имеет вид [4,5]

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

где $f = f(x, y, \dot{x}, \dot{y}, t)$ – функция распределения частиц по поперечным координатам и скоростям в момент времени t ; $D_{xx} = D_{xx}(x, y), D_{yy} = D_{yy}(x, y), D_{xy} = D_{xy}(x, y)$ – компоненты коэффициента диффузии; $\bar{U}_x = \partial \bar{U} / \partial x, \bar{U}_y = \partial \bar{U} / \partial y, \bar{U} = \bar{U}(x, y)$ – 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 [4], а электронный коэффициент диффузии вычисляется в приближении локальной электронной плотности [6], то, как было показано в [7,8], $D_{xx}=D_{yy}$ и $D_{xy}=0$.

Решение уравнения (1) будем искать методом малого шума [9]. Решение запишем в виде символического ряда теории возмущений

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

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

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

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

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

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

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

со следующими начальными условиями: $\bar{x}_0 = \bar{x}(0), \bar{y}_0 = \bar{y}(0), \dot{\bar{x}}_0 = \dot{\bar{x}}(0), \dot{\bar{y}}_0 = \dot{\bar{y}}(0)$. Где $\bar{U}_{eff}(x, y) = \bar{U}(x, y) - pux/R_x - puy/R_y$; R_x, R_y - радиусы изгиба кристалла в направлении оси ОХ и ОУ, соответственно, которые изменяются с глубиной z ; $z = v \cdot t$; p - импульс каналированной частицы.

Пусть $\delta x = (x - \bar{x})$, $\delta \dot{x} = (\dot{x} - \dot{\bar{x}})$, $\delta y = (y - \bar{y})$, $\delta \dot{y} = (\dot{y} - \dot{\bar{y}})$ - флуктуации поперечных координат и скоростей. Следуя [9] построим уравнение Фоккера—Планка в первом порядке теории возмущений

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} + \delta \dot{x} \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \delta x} + \delta \dot{y} \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \delta y} - \frac{[\bar{U}_{xx}(\bar{x}, \bar{y})\delta x + \bar{U}_{xy}(\bar{x}, \bar{y})\delta y]}{m} \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \delta \dot{x}} - \\ & - \frac{[\bar{U}_{xy}(\bar{x}, \bar{y})\delta x + \bar{U}_{yy}(\bar{x}, \bar{y})\delta y]}{m} \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \delta \dot{y}} = \frac{D(\bar{x}, \bar{y})}{2m^2} \left(\frac{\partial^2 f^{(1)}}{\partial \delta \dot{x}^2} + \frac{\partial^2 f^{(1)}}{\partial \delta \dot{y}^2} \right) \end{aligned} \quad (4)$$

С помощью уравнения (4) построим систему уравнений для вторых моментов, следуя (см., например, [10])

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

Система уравнений (5) в точности совпадает с системой уравнений, которая была получена в рамках ланжевеновского подхода к теории каналирования [11]. Решение кинетического уравнения Фоккера—Планка (1) производится с помощью метода компьютерного моделирования траекторий каналированных частиц [12]. Переопределение значений координат и скоростей производится случайным образом при помощи соотношений

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

где функция *RandG* генерирует случайную величину, удовлетворяющую нормальному распределению с заданным математическим ожиданием и дисперсией согласно алгоритму [13].

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 основан на численном решении системы уравнений (3), (5) и (6). Используется кубическая эрмитовая сплайн - аппроксимация коэффициента диффузии и поперечной силы, числен-

ные 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 Мольтера [14]. В плоскости XOZ лежит 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 мрад, так как в работе [1] не было указано его значение. Начальные значения точек влета были равномерно распределены в следующих пределах $\Delta x \cdot \Delta y = 0.07 \text{ мм} \cdot 0.2 \text{ мм} = 0.014 \text{ мм}^2$, а углы влета нормально распределены вокруг среднего значения согласно алгоритму [13]. Модельное среднеквадратичное отклонение, которое определяет угловую расходимость пучка частиц, было выбрано $\sigma_x=30$ и $\sigma_y=70$ мкрад [1]. Толщина кристалла 30.5 мкм. Для численного решения системы дифференциальных уравнений движения применялся метод Рунге—Кутты 4 порядка точности с шагом интегрирования 1.5 нм. Расстояние τ_{min} было равным 80 нм. Расчеты были произведены для 100000 частиц. Время расчета каждого распределения составило около 37 минут на четырех ядерном процессоре с частотой 3ГГц. На рис.1 представлены экспериментальные [1] и расчетные угловые распределения электронов с энергией 855 МэВ, которые отклонялись (111) плоскостным каналом изогнутого кристалла кремния с радиусами изгиба $R_x=33.5$ мм и $R_y=0$, соответственно. Экспериментальные [1] и расчетные значения были нормированы так, что площадь под каждой гистограммой равна единице. Видно, что согласие между результатами эксперимента и моделированием не является удовлетворительным. На рис.1 представлены, также, результаты моделирования более тяжелых отрицательно заряженных частиц таких, как антипротоны и π^- мезоны. Видно, что увеличение массы покоя не приводит к существенному увеличению доли каналированных частиц. На рис.2 представлены экспериментальные [15] и расчетные угловые распределения протонов с энергией 1 ГэВ, которые отклонялись (111) плоскостным каналом изогнутого кристалла кремния с радиусами изгиба $R_x=89$ мм и $R_y=0$, соответственно. Начальные значения точек влета были равномерно распределены в следующих пределах $\Delta x \cdot \Delta y = 0.08 \text{ мм} \cdot 1 \text{ мм} = 0.08 \text{ мм}^2$, а углы влета нормально распределены вокруг среднего значения согласно алгоритму [13], $\sigma_x=\sigma_y=160$ мкрад [15]. Толщина кристалла 30 мкм. Для численного решения системы дифференциальных уравнений движения применялся метод Рунге—Кутты 4 порядка точности с шагом интегрирования 2.1 нм. Расстояние τ_{min} было равным 105.3 нм. Количество частиц в пучке было равным 100000. Время расчета составило около 31 минуты. На рис.3 представлены экспериментальные [16] и расчетные угловые распределения электронов с энергией 6.3 ГэВ, которые

отклонялись (111) плоскостным каналом изогнутого кристалла кремния с радиусами изгиба $R_x=0.15$ м и $R_y=0$, соответственно. Начальные значения точек влета были равномерно распределены в следующих пределах $\Delta x \cdot \Delta y = 0.15 \text{ мм} \cdot 0.15 \text{ мм} = 0.0225 \text{ мм}^2$, а углы влета нормально распределены вокруг среднего значения согласно алгоритму [13]. Толщина кристалла 60 мкм. Шаг интегрирования был равен 4.3 нм, а τ_{min} было равным 217 нм. Количество частиц в пучке было равным 100000. Время расчета составило около 45 минут.

Видно, что согласие между результатами эксперимента [15,16] и моделированием является удовлетворительным. Таким образом, описать результаты эксперимента [1] с помощью программы TROPICS [2] не удалось, в то время как результаты моделирования и эксперимента в [1] демонстрируют достаточно хорошее согласие между собой.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Mazzolari A. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2014. V. 112. P. 135503.
2. <http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/tropics/index.html>
3. *Коцеев В.П., Моргун Д.А., Штанов Ю.Н.* // Письма в ЖТФ. 2013. Т.39, В. 20, С. 77-86.
4. *Kitagawa M., Ohtsuki Y.H.* // Phys. Rev. B. 1973. V.8. N 7. P. 3117-3123.
5. *Белошутский В. В., Кумахов М.А., Рябов В.А.* // ЖЭТФ. 1984. Т. 87, В. 3, С. 878-884.
6. *Gemmel D.S.* // Rev. Mod. Phys. 1974. V.46. N 1. P. 129 - 235.
7. *Коцеев В.П.* // Изв. Вузов. Физика. 1997. № 8. С. 32 - 37.
8. *Коцеев В.П., Моргун Д.А., Панина Т.А.* // Стохастическая динамика эффекта каналирования в кристаллах и нанотрубках : монография. – Ханты-Мансийск: Полиграфист, 2008. – 100 с.
9. *Гардинер К.В.*, Стохастические методы в естественных науках, М.:Мир, 1986. 527 с.
10. *Рытов С.М.*, Введение в статистическую радиофизику. Часть I. Случайные процессы. — М.: Наука, 1976. 484 с.
11. *Коцеев В.П., Моргун Д.А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед., 1998, №5, С. 5-11.
12. *Коцеев В.П.* // Изв. вузов. Физика. 1990, №4, С. 123-124.
13. *Marsaglia G., Bray T.A.* // SIAM Rev. 1964, Vol. 6. No. 3. P. 260–264.
14. *Molière, G.* // Z. Naturforsch. A, 1947, Vol. 2, p.133-145.
15. *Иванов Ю.М. и др.* // Письма в ЖЭТФ, 2006, Т.84, вып.7, с.445-450.
16. *Wienands, U. et al.* // SLAC-PUB-15952. 2014. P.1-5.

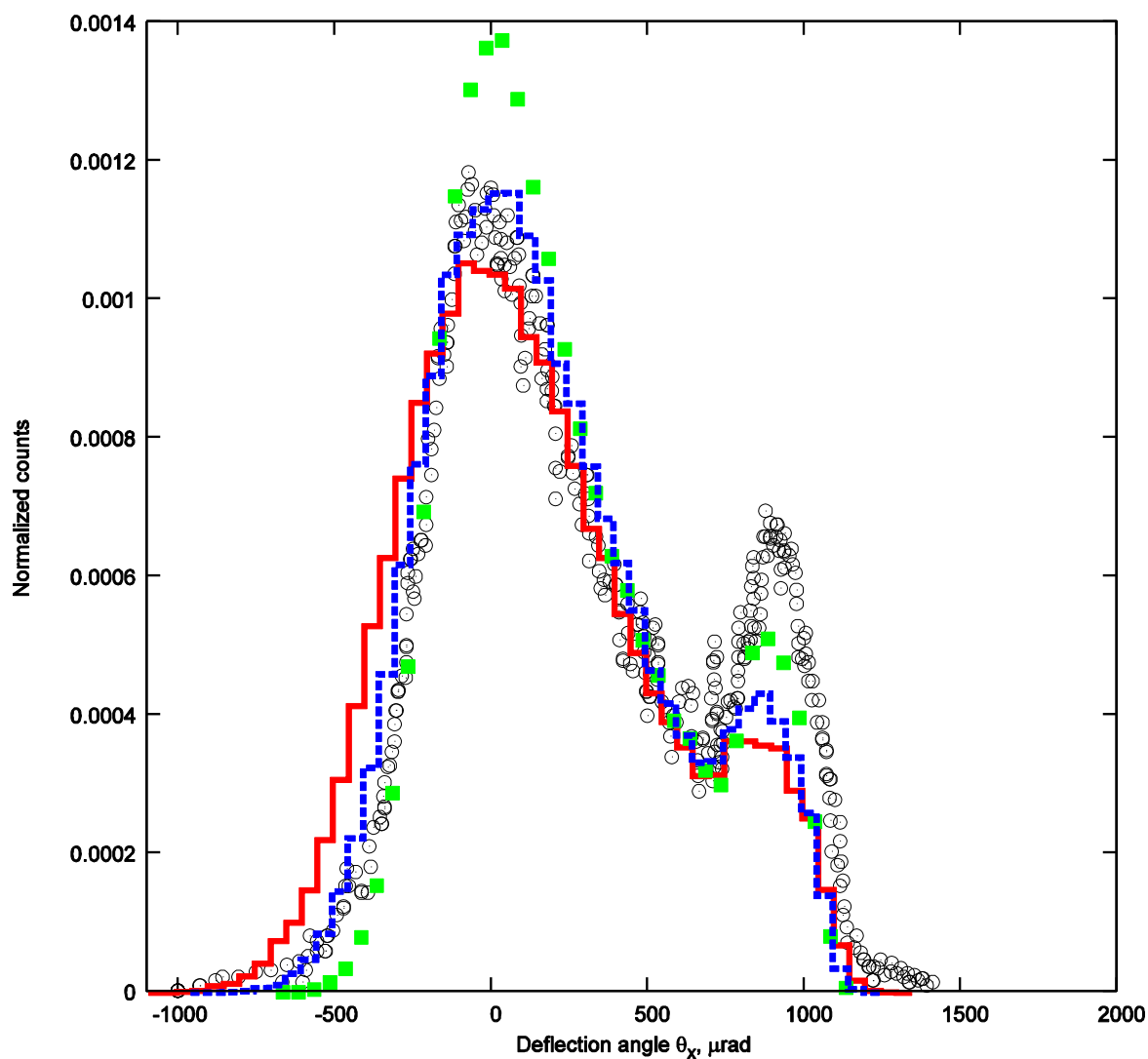


Рис.1. Угловое распределение пучка отрицательно заряженных частиц с энергией 855 ГэВ в (111) плоскостном канале кремния. На рисунке обозначены черным цветом – эксперимент [1], результаты компьютерного моделирования: красный цвет – электроны, синий – π^- мезоны, зеленый – антипротоны. Радиус изгиба кристалла 33.5 мм.

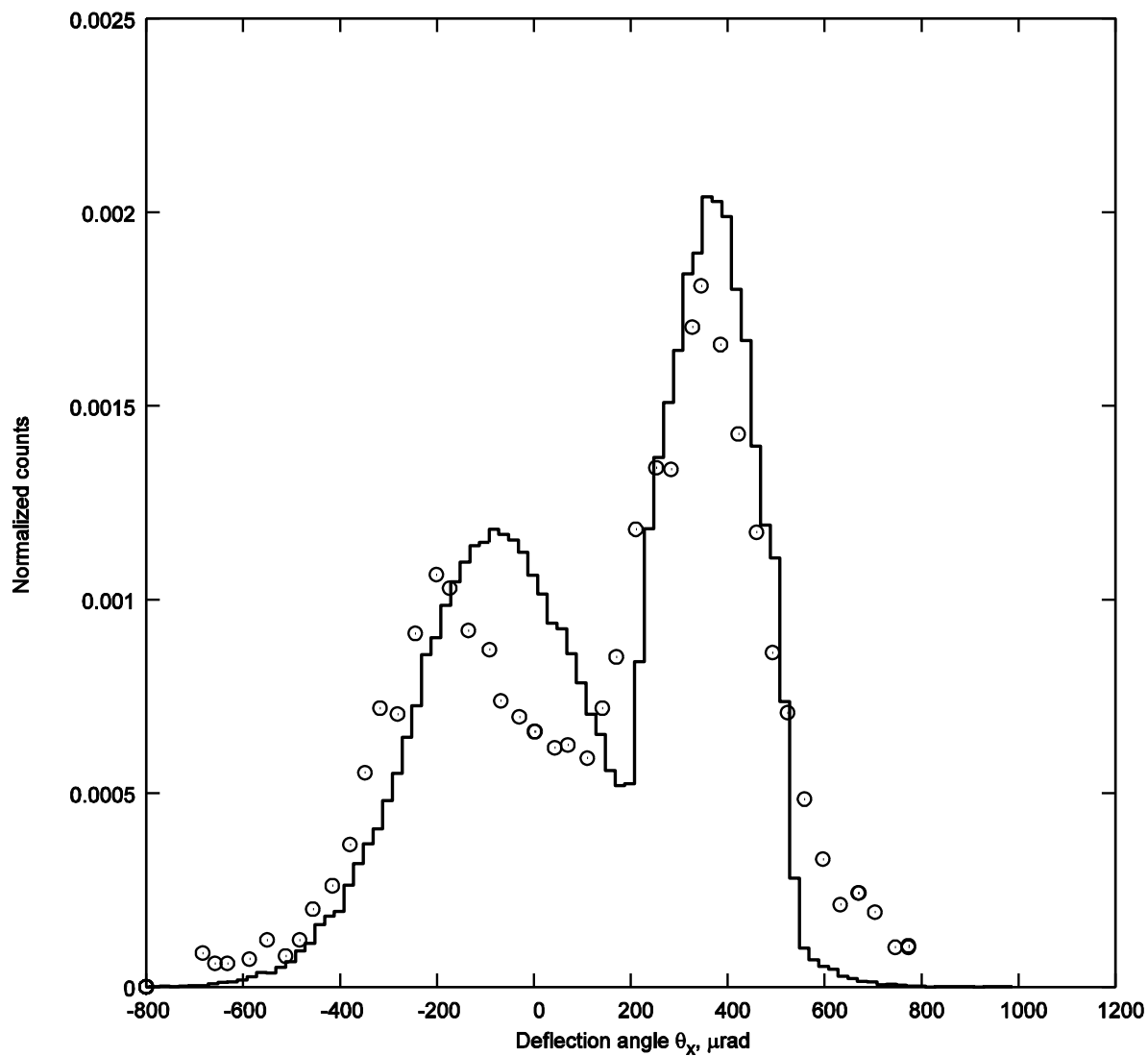


Рис.2. Угловое распределение пучка протонов с энергией 1 ГэВ в (111) плоскостном канале кристалла кремния в эксперименте [15] (кружки) и компьютерном эксперименте (сплошная линия) с радиусом изгиба кристалла 89 мм. Толщина кристалла 30 мкм.

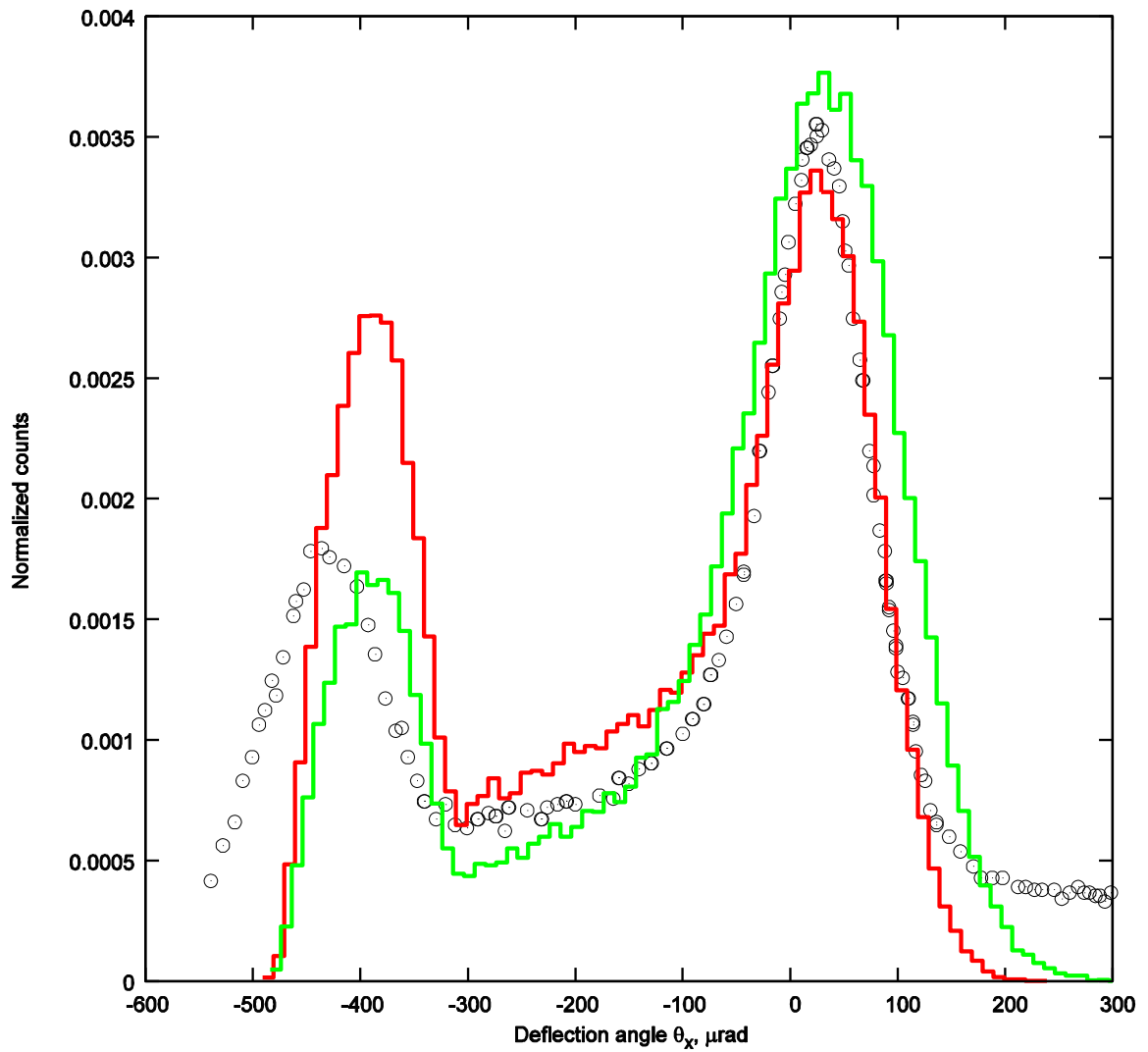


Рис.3. Угловое распределение пучка электронов с энергией 6.3 ГэВ в (111) плоскостном канале кристалла кремния в эксперименте [16] (кружки) и компьютерном эксперименте при $\sigma_x=\sigma_y=10$ мкрад (красная линия) и $\sigma_x=\sigma_y=60$ мкрад (зеленая линия) с радиусом изгиба кристалла 0.15 м. Толщина кристалла 60 мкм.