

Моделирование экспериментов по каналированию заряженных частиц с энергией 1-180 ГэВ в изогнутых кристаллах кремния

2026 П. Ю. Иванова¹, Ю. М. Иванов

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» — Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова, Гатчина, Россия

Разработана программа MCFC (Monte-Carlo For Channeling) для моделирования методом Монте-Карло прохождения заряженных частиц в плоских и изогнутых кристаллах кремния. Программа проверена сравнением с известными экспериментами, выполненными на выведенных пучках в ПИЯФ (1 ГэВ), ИФВЭ (70 ГэВ), ЦЕРН (180 ГэВ). Установлено хорошее согласие расчетов с экспериментальными данными. Разработанное программное обеспечение применяется при проектировании кристаллических дефлекторов для ускорителя ПИЯФ и изучении возможностей их использования на установках адронной медицины.

1. ВВЕДЕНИЕ

Изогнутые кристаллы, предложенные Э.Н. Цыгановым [1], нашли применение [2,3] на ускорителях высоких (синхрофазотрон в ОИЯИ, У-70 в ИФВЭ) и сверхвысоких (Tevatron во ФНАЛ, SPS и LHC в ЦЕРН) энергий для вывода, деления, фокусировки и коллимации пучков, в физических экспериментах. Обсуждаются возможности их использования на будущих ускорителях и коллайдерах (например, в проекте FCC). Меньший прогресс пока достигнут при промежуточных энергиях (< 1 ГэВ) из-за ограничений на размер возможных кристаллических дефлекторов и неизученности их эффективности. В недавних экспериментах на синхроциклотроне ПИЯФ [4] получены обнадеживающие результаты, которые подкрепляются расчетами, представленными в настоящей статье.

Для описания взаимодействия заряженных частиц высоких энергий с кристаллами создана программа MCFC (Monte-Carlo For Channeling), написанная на C++ с использованием пакета ROOT. Методом Монте-Карло моделируются траектории частиц при прохождении через кристалл вблизи кристаллографических плоскостей в приближении непрерывного потенциала с учётом многократного кулоновского рассеяния на ядрах и электронах [5], что позволяет описать основные ориентационные эффекты: каналирование, квазиканалирование, деканалирование, объемное отражение, объемный захват. В программе реализована возможность отслеживания каждой частицы и контроля вклада различных физических механизмов.

В статье представлено сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными, полученными на выведенных пучках протонов с энергией 1 ГэВ (синхроциклотрон СЦ-1000 ПИЯФ [4, 6]), протонов с энергией 70 ГэВ (синхротрон У-70 ИФВЭ [7]), положительных пионов с энергией 180 ГэВ (ЦЕРН [8]).

2. ОПИСАНИЕ ПРОГРАММЫ MCFC

Программа MCFC содержит несколько модулей, основными из которых являются графический интерфейс, модуль расчета траекторий частиц, модуль физических формул. Программа моделирует движение заряженной частицы в изогнутом кристалле путём численного решения уравнения движения в эффективном потенциале изогнутых атомных плоскостей, рассчитываемом в приближении Мольера с учётом тепловых колебаний атомов для ориентаций (110) и (111). При нулевой кривизне реализуется случай плоского кристалла. За ось z выбрано направление вдоль плоскости, за ось x — поперечное направление. В малоугловом приближении сохраняется поперечная энергия

$$E_T = \frac{pv}{2} \cdot \theta^2 + U_{eff}(x), \quad (1)$$

где p — импульс частицы, v — скорость частицы, θ — угол отклонения частицы от оси z в горизонтальной плоскости, $U_{eff}(x)$ — эффективный потенциал, сумма непрерывного

¹E-mail: ivanova_py@pnpi.nrcki.ru

межплоскостного потенциала и центробежного. Движение частицы вдоль плоскостей задаётся уравнением

$$pv \cdot \frac{d^2x}{dz^2} = -\frac{dU_{eff}}{dx}. \quad (2)$$

При замене потенциала Мольера гармоническим потенциалом уравнение имеет синусоидальное решение с длиной осцилляций $\lambda = \pi d_p \sqrt{\frac{pv}{2U_0}}$ (U_0 – глубина потенциальной ямы, d_p – ширина канала).

Траектория хорошо описывается, если расчетный шаг δz берется порядка 0.01λ , дальнейшее уменьшение шага значительно увеличивает машинное время. Решение уравнения реализовано методом Стёрмера–Верле и методом Рунге–Кутты четвёртого порядка. Для ускорения расчёта при запуске десятков тысяч частиц для набора статистики межплоскостной потенциал, его первая и вторая производные табулируются с шагом $0.001 \text{ \AA}$. Промежуточные значения находятся линейной интерполяцией.

Вследствие многократного кулоновского рассеяния на ядрах и электронах поперечная энергия изменяется. Значение энергетической поправки определяется углом рассеяния на электронах и ядрах в событии θ_s . Средний квадрат угла отклонения на единицу длины траектории при многократном рассеянии на электронах [3, 9]:

$$\left\langle \left(\frac{\delta \theta_s}{\delta z} \right)^2 \right\rangle_e = \frac{m_e}{2p^2} \left(\frac{\delta E}{\delta z} \right)_{am} \frac{n_e(x)}{n_{am}}, \quad (3)$$

$$\left(\frac{\delta E}{\delta z} \right)_{am} = \frac{4\pi N_A m_e c^2 r_e^2 \rho Z}{A} \left(\frac{Z_i}{\beta} \right)^2 \left(\ln \frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2}{I} - \beta^2 \right), \quad (4)$$

где m_e – масса электрона; r_e – классический радиус электрона; N_A – число Авогадро, ρ – плотность кремния, A – атомный вес кристалла; n_e – электронная плотность в канале; n_{am} – плотность аморфного вещества; $\left(\frac{\delta E}{\delta z} \right)_{am}$ – ионизационные потери энергии в аморфном веществе; Z – зарядовое число атомного ядра; $Z_i e$ – заряд частицы; $\beta = v/c$, c – скорость света; γ – лоренц-фактор; $I = 16 \cdot Z^{0.9} \text{ эВ}$ – энергия ионизации. Ядерный вклад берётся в приближении Оцуки–Китагавы [10], где квадрат угла рассеяния в аморфной среде θ_{am}^2 масштабируется нормированной ядерной плотностью:

$$\langle (\delta \theta_s)^2 \rangle_n = \theta_{am}^2 \cdot \frac{Z n_n(x)}{ZN}, \quad (5)$$

где $n_n(x)$ – ядерная плотность, N – объемная плотность атомов. Формула для θ_{am} из Particle Data Group (PDG) [9] содержит логарифмическую поправку, из-за которой угол рассеяния при прохождении кристалла одной и той же длины будет зависеть от выбора расчетного шага. В программе используется модифицированная формула, в которой аргумент логарифма содержит не значение расчетного шага δz , а длину кристалла L , что обеспечивает независимость значения суммарного угла рассеяния от шага расчета:

$$\theta_{am} = \frac{13.6 \text{ МэВ} \cdot Z_i}{p\beta} \sqrt{\frac{\delta z}{L_r} \left(1 + 0.038 \ln \left(\frac{L \cdot Z_i^2}{L_r \beta^2} \right) \right)}, \quad (6)$$

где $L_r = 9,37 \text{ см}$ – радиационная длина в кремнии.

После прохождения кристалла частица классифицируется по механизму: каналирование, деканалирование, объёмное отражение, объёмный захват. Результаты сохраняются в формате root-файла и текстового журнала для последующего анализа.

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ НА ПУЧКЕ ПРОТОНОВ С ЭНЕРГИЕЙ 1 ГЭВ

Период осцилляций протонов с энергией 1 ГэВ в кристалле кремния составляет 3 мкм. Шаг расчета выбран 100 А для точного решения уравнения. Выполненные расчеты подтверждают возможность применения формулы (6) для моделирования. Были проанализированы два эксперимента, выполненные на протонном пучке с энергией 1 ГэВ.

3.1. Эксперимент с кристаллом длиной 30 мкм

В эксперименте [6] использовался кристалл кремния длиной 30 мкм вдоль пучка с упруго-квазимозаичным изгибом атомных плоскостей (111). Угол изгиба плоскостей – 380 мкрад. Угловая расходимость пучка составляла 160 мкрад, критический угол каналирования – 170 мкрад. Входная поверхность кристалла имела седловидную форму. Программа MCFC учитывает форму кристалла, что позволяет описать веерообразное расположение каналирующих изогнутых атомных плоскостей. Ширина пучка была 80 мкм. Эффективность каналирования, найденная в моделировании, равна 58.3 %, эффективность объёмного отражения равна 72.6 %, что согласуется с экспериментом $(63 \pm 3) \%$ и $(71 \pm 3) \%$ соответственно (рис. 1). При моделировании учитывалось рассеяние на остаточном газе в канале. Расчетная оценка давления воздуха в канале после кристалла получилась 3 мбар, что соответствует экспериментальным данным.

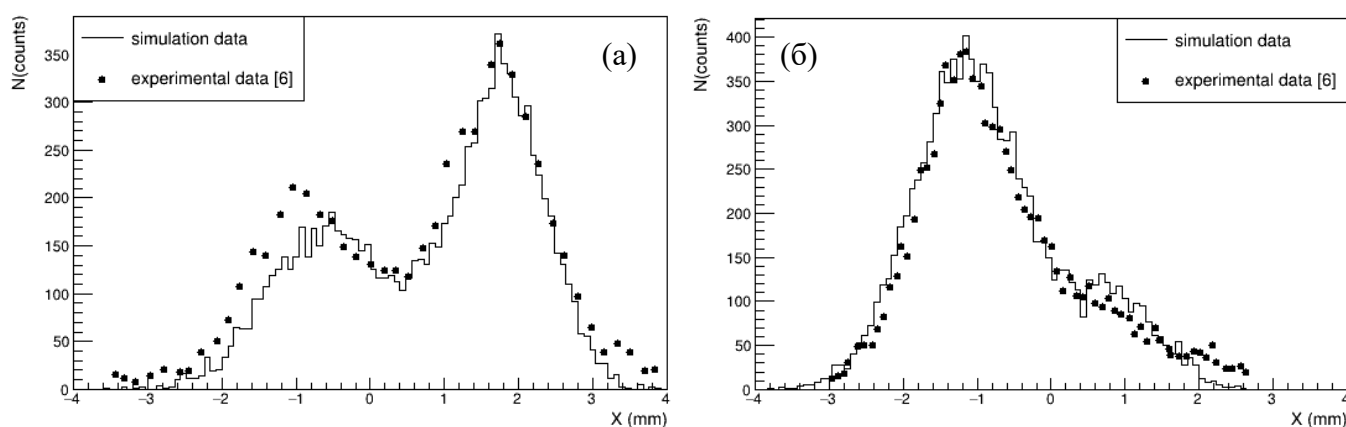


Рис. 1. Горизонтальный профиль пучка протонов с энергией 1 ГэВ на расстоянии 5 м после кристалла: эксперимент [6] и моделирование. На графиках область отрицательных значений X отвечает объёмно отражённым протонам, область положительных значений – проканаловавшим протонам. (а) Профиль пучка в угловом положении кристалла, отвечавшем максимальному каналированию. (б) Профиль пучка в угловом положении кристалла, отвечавшем максимальному объёмному отражению.

На рис. 1а небольшая разница в пике объёмного отражения может быть объяснена вкладом объёмного отражения от косых плоскостей, не учтенном в программе. Хорошее согласие подтверждает использование примененного расчетного метода для очень тонких мишеней.

3.2. Эксперимент с кристаллом длиной 1 мм

В эксперименте [4] использовался кристалл кремния длиной 1 мм с плоскостями (110). Изгиб реализован за счёт антикластического эффекта, что обеспечило высокую однородность кривизны. Угол изгиба составил (3.0 ± 0.1) мрад. Ширина щели коллиматора перед кристаллом 4 мм, только 1/40 часть прямого пучка попадала на кристалл. С шагом сканирования 0.1 мм был измерен горизонтальный профиль пучка системой детекторов, состоящей из горизонтального и вертикального сцинтилляторов, зона их перекрытия 1.5×1.5 мм². Эффективность отклонения, измеренная в эксперименте, равна $(32 \pm 3) \%$. Моделирование в программе MCFC с учётом реальных параметров упавшего на кристалл пучка и самого кристалла дало эффективность 31 %, согласующуюся с экспериментом в пределах погрешностей.

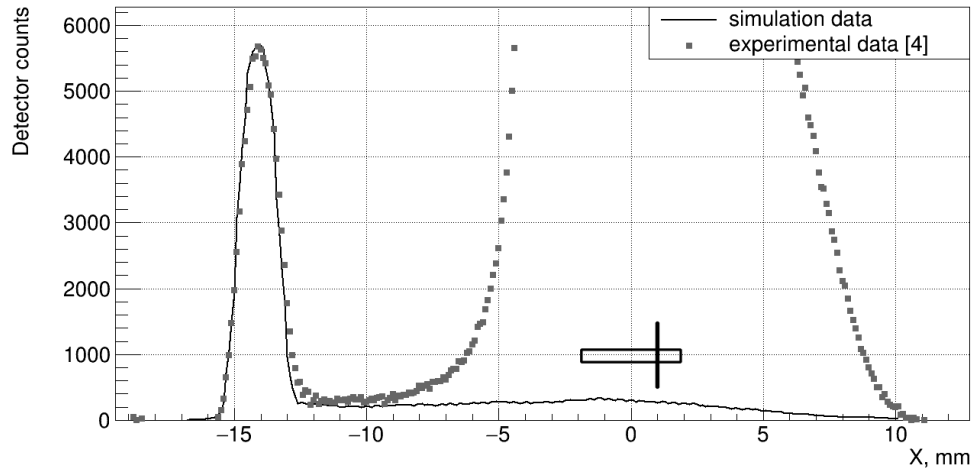


Рис. 2. Линейный X-скан прямого (правый пик) и каналированного (левый пик) пучков. Снизу пика прямого пучка показано положение кристалла относительно эффективного отверстия коллиматора. Различие прямых пучков связано с тем, что при моделировании учитывалась только 1/40 часть прямого пучка протонов, которая попадала на кристалл.

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА НА ПУЧКЕ ПРОТОНОВ С ЭНЕРГИЕЙ 70 ГЭВ

В области высоких энергий кристаллические дефлекторы нашли практическое применение в системах вывода и деления пучков, поэтому моделирование ориентационных эффектов в этом диапазоне имеет важное значение для развития кристаллооптических решений.

Эксперимент [7] выполнен на пучке протонов с энергией 70 ГэВ с кристаллом кремния длиной 0.72 мм. Пучок имел угловую расходимость ~ 15 мкрад, что значительно меньше критического угла каналирования (~ 24 мкрад). На эмульсионной пластинке, расположенной на расстоянии 5.9 м от кристалла, были зарегистрированы три характерные линии: каналированный пучок *C*, отражённый пучок *A* и область между отраженными частицами и прямым пучком *B* (рис. 3а). Кристалл имел седлообразную форму, моделирование в MCFC подтвердило предположение, выдвинутое в статье [6], что наблюдаемый на эмульсии изгиб линий по высоте связан с изменением радиуса антикластического изгиба по высоте кристалла.

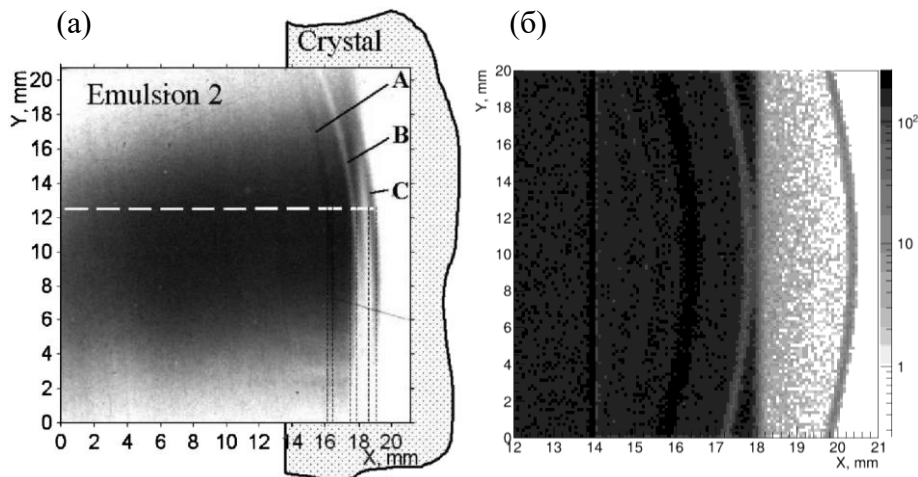


Рис. 3. Линии каналированного и отражённого пучков, зарегистрированные на эмульсии в эксперименте [7] с протонами 70 ГэВ (а), и их воспроизведение в моделировании (б). *A* – объемное отражение, *B* – область между отраженными частицами и прямым пучком, *C* – каналирование.

5. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА НА ПУЧКЕ ПИОНОВ С ЭНЕРГИЕЙ 180 ГЭВ

Эксперимент [8] проводился на пучке π^+ -мезонов с энергией 180 ГэВ с кристаллом кремния длиной 23 мм с антикластическим изгибом плоскостей (110). Радиус изгиба составлял 21.56 м, угол изгиба — 1067 мкрад. Для анализа отбирались пионы с входным углом в диапазоне от -1.25 мкрад до 1.25 мкрад, что позволяет считать пучок параллельным. При моделировании эксперимента получены значения эффективности отклонения 59.7 % и длины деканалирования 68.8 мм, что удовлетворительно согласуется с измеренными значениями (55.3 ± 0.8) % и (71.34 ± 0.68) мм соответственно (рис. 4). Рассеяние на веществе в канале регистрации приводит к уширению экспериментального пика каналирования и уменьшению его амплитуды.

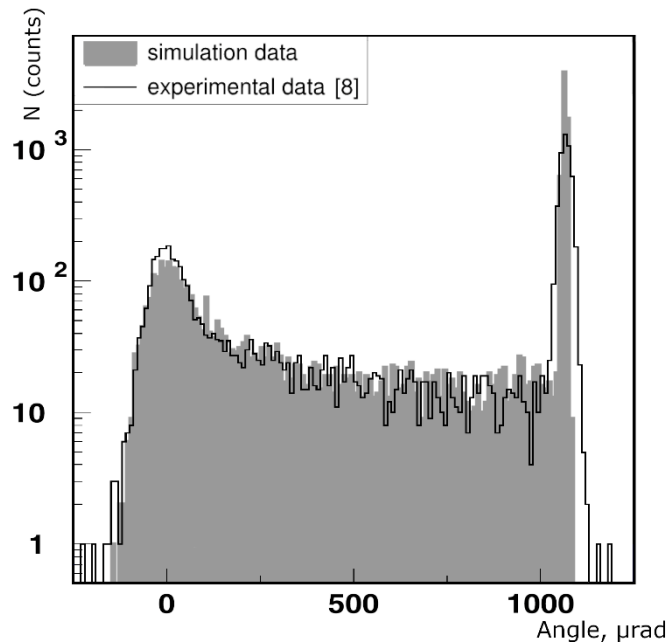


Рис. 4. Каналирование и деканалирование π^+ -мезонов с энергией 180 ГэВ в изогнутом кристалле: сопоставление эксперимента и моделирования.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье представлены программный пакет MCFC и результаты моделирования прохождения заряженных частиц с энергиями 1, 70 и 180 ГэВ в изогнутых кристаллах кремния. Программа MCFC позволяет учесть седловидную форму входной поверхности упруго-квазимозаичных кристаллов, которые использовались в экспериментах [6, 7]. Результаты моделирования хорошо согласуются с данными, полученными в экспериментах в ПИЯФ, ИФВЭ и ЦЕРН. Разработанный пакет применяется при проектировании кристаллических дефлекторов для ускорителя ПИЯФ и изучении возможностей их использования на установках адронной медицины.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. E.N. Tsyganov, Preprint TM-682, Fermilab (Batavia, 1976)
2. V.M. Biryukov, Y.A. Chesnokov, V.I. Kotov, *Crystal channeling and its application at high-energy accelerators* (Springer Science & Business Media, Berlin, 2013)
3. UA9 Collaboration, International Journal of Modern Physics A **37**(13), 2230004 (2022)
4. Д.А. Амерканов, Л.А. Вайшнене, Ю.А. Гавриков, Б.Л. Горшков, А.С. Денисов, Е.М. Иванов, П.Ю. Иванова, Ю.М. Иванов, М.А. Кознов, В.И. Мурзин, Л.А. Щипунов, Письма в ЖЭТФ **118**, 551 (2023)
5. П.Ю. Иванова, *Моделирование эксперимента по высокоэффективному отклонению протонов с энергией 1 ГэВ изогнутым кристаллом*, СПбГУ: магистр. дисс. (2024)
6. Ю.М. Иванов, Н.Ф. Бондарь, Ю.А. Гавриков, А.С. Денисов, А.В. Желамков, В.Г. Ивочкин, С.В. Косьяненко, Л.П. Лапина, А.А. Петрунин, В.В. Скоробогатов, В.М. Суворов, А.И. Щетковский, А.М. Таратин, В. Скандале, Письма в ЖЭТФ **84**(7), 445 (2006)
7. Yu.M. Ivanov, A.A. Petrunin, V.V. Skorobogatov, Yu.A. Gavrikov, A.V. Gelamkov, L.P. Lapina, A.I. Schetkovsky, S.A. Vavilov, V.I. Baranov, Yu.A. Chesnokov, A.G. Afonin, V.T. Baranov, V.N. Chepegin, V. Guidi, W. Scandale, A. Vomiero, Physical Review Letters **97**(14), 144801 (2006)
8. W. Scandale, G. Arduini, F. Cerutti, M. Garattini, S. Gilardoni, A. Lechner, R. Losito, A. Masia, D. Mirarchi, S. Montesano, S. Redaelli, R. Rossi, G. Smirnov, D. Breton, L. Burmistrov, V. Chaumat, et al., Nuclear Inst. and Methods in Phys. R. B **438**, 38 (2019)
9. R.L. Workman et al. (Particle Data Group), Prog. Theor. Exp. Phys. (2022)
10. M. Kitagawa, Y. H. Ohtsuki, Phys. Rev. B **8**(7), 3117 (1973)