

УДК 539.1.076

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ КАНАЛИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ**В. П. Кошечев¹, Ю. Н. Штанов², Д. А. Моргун³, Т. А. Панина³**¹ *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), филиал «Стрела», koshcheev1@yandex.ru*² *Сургутский институт нефти и газа*³ *Сургутский государственный университет*

В рамках ланжевеновского подхода построены атомный, электронный и ядерный коэффициенты диффузии каналированных частиц для случая осевого каналирования и выполнен их численный расчет.

Ключевые слова: численное моделирование, атомный коэффициент диффузии.

MODELLING OF THE DIFFUSION COEFFICIENT OF CHANNЕLED PARTICLES**V. P. Koshcheev¹, Yu. N. Shtanov², D. A. Morgun³, T. A. Panina³**¹ *Strela Branch of the National Research University MAI (Moscow Aviation Institute), koshcheev1@yandex.ru*² *Surgut Oil and Gas Institute*³ *Surgut State University*

As part of the Langevin approach built atomic, electronic and nuclear diffusion coefficients of channeled particles in the case of axial channeling and made their numerical calculation.

Keywords: numerical modeling, atomic diffusion coefficient.

Теоретические и экспериментальные исследования процесса прохождения релятивистских частиц через кристаллы продолжают оставаться одним из актуальных научных направлений настоящего времени [1, 2]. Компьютерное моделирование [3] с ядерным коэффициентом диффузии [4] и электронным [5] не описывает эксперимент [1, 2]. Более 30 лет тому назад, в работах [6-8], был получен коэффициент диффузии для случая осевого каналирования, но его детальный анализ так и не был выполнен вплоть до настоящего времени.

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

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

Потенциальная энергия взаимодействия быстрой частицы с ядрами атомов кристалла имеет вид:

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

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

Потенциальная энергия взаимодействия быстрой частицы с атомными электронами кристалла имеет вид:

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

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

Флуктуация потенциальной энергии взаимодействия быстрого иона с атомами кристалла определяется выражением

$$\delta U = \overline{U} - U.$$

Черта $(\overline{\dots})$ означает усреднение как по квантовым флуктуациям местоположения атомных электронов $\langle \dots \rangle_e$, так и по независимым тепловым колебаниям атомов кристалла $\langle \dots \rangle_T$ [6, 9]. Усреднение по независимым тепловым колебаниям атомов кристалла осуществляется с помощью функции распределения Гаусса. Усреднение по квантовым флуктуациям местоположения атомных электронов будем осуществлять с помощью метода, приведенного в [10]. Многократное рассеяние каналированных частиц на электронах и ядрах атомов кристалла описываются с помощью компонент диффузионной матрицы

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

Так как [6, 9] корреляционная функция флуктуаций случайной силы является дельта-коррелированной, то эти компоненты имеют вид:

$$D_{ij}(x, y) = \int dt_2 \frac{\partial^2 \langle \delta U(\vec{r}_1) \delta U(\vec{r}_2) \rangle_{e, T}}{\partial i \partial j}, \quad (4)$$

где $i, j = (x; y)$.

Перепишем (4) с учетом (1-3) в виде:

$$D_{ij}(x, y) = \int dt_2 \left[\overline{\delta f_i^{nucl}(\vec{r}_1) \delta f_j^{nucl}(\vec{r}_2)} + \overline{\delta f_i^{el}(\vec{r}_1) \delta f_j^{el}(\vec{r}_2)} + 2 \overline{\delta f_i^{nucl}(\vec{r}_1) \delta f_j^{el}(\vec{r}_2)} \right], \quad (5)$$

где $\delta f_i(\vec{r}) = -\frac{\partial \delta U(\vec{r})}{\partial i}$, $i, j = (x; y)$.

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. Покажем, что в непрерывном приближении ядерный и электронный коэффициенты диффузии в (5) совпадают с ядерным коэффициентом диффузии [4] и электронным [5], а в случае учета третьего слагаемого получим атомный коэффициент диффузии [6]. Сначала рассмотрим многократное рассеяние каналированных частиц на атомных ядрах. Флуктуация потенциальной энергии взаимодействия каналированной частицы с ядрами атомов кристалла имеет вид:

$$\delta U_{nucl} = \sum_n \int \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{g^2} \exp(i\vec{g}(\vec{r} - \vec{r}_n)) \times \\ \times \left(\exp(-i\vec{g}\delta\vec{r}_n) - \exp\left(-\left(g_x^2 \sigma_x^2 + g_y^2 \sigma_y^2 + g_z^2 \sigma_z^2\right)/2\right) \right), \quad (6)$$

где $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ — средние квадраты тепловых смещений атомов кристалла в трех взаимно перпендикулярных направлениях.

Корреляционная функция флуктуаций потенциальной энергии взаимодействия каналированной частицы с ядрами атомов кристалла имеет вид:

$$\langle \delta U_{nucl}(1) \cdot \delta U_{nucl}(2) \rangle_T = \sum_{n_1, n_2} \int \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3} \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{g^2 q^2} \exp(i\vec{g}(\vec{r}_1 - \vec{r}_{n_1}) - i\vec{q}(\vec{r}_2 - \vec{r}_{n_2})) \times \\ \times \left[\langle \exp(-i\vec{g}\delta\vec{r}_{n_1} + i\vec{q}\delta\vec{r}_{n_2}) \rangle_T - \exp\left(-\left((g_x^2 + q_x^2)\sigma_x^2 + (g_y^2 + q_y^2)\sigma_y^2 + (g_z^2 + q_z^2)\sigma_z^2\right)/2\right) \right]. \quad (7)$$

При $n_1 = n_2$ среднее от экспоненты равно

$$\langle \exp(-i\vec{g}\delta\vec{r}_{n_1} + i\vec{q}\delta\vec{r}_{n_2}) \rangle_T = \exp\left\{-\left[(g_x - q_x)^2 \sigma_x^2 + (g_y - q_y)^2 \sigma_y^2 + (g_z - q_z)^2 \sigma_z^2\right]/2\right\},$$

а при $n_1 \neq n_2$ среднее от экспоненты равно

$$\langle \exp(-i\vec{g}\delta\vec{r}_{n1} + i\vec{q}\delta\vec{r}_{n2}) \rangle_T = \exp\left[-\left((g_x^2 + q_x^2)\sigma_x^2 + (g_y^2 + q_y^2)\sigma_y^2 + (g_z^2 + q_z^2)\sigma_z^2\right)/2\right].$$

Легко видеть, что при $n_1 \neq n_2$ коррелятор (7) равен нулю, а при $n_1 = n_2$ не равен нулю. Будем рассматривать атомную цепочку, то есть $n_x = n_y = 0$. Бесконечная сумма в корреляторе (7) является дельта-функцией Дирака

$$\sum_{n_z} \exp(-i(g_z - q_z)a_z n_z) = (2\pi/a_z) \delta(g_z - q_z). \quad (8)$$

Корреляционная функция (7) с учетом (8) для одной атомной цепочки примет вид

$$\begin{aligned} \langle \delta U_{nucl}(1) \cdot \delta U_{nucl}(2) \rangle_T &= \int \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3} \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{a_z} \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{(g_x^2 + g_y^2 + g_z^2)(q_x^2 + q_y^2 + g_z^2)} \times \\ &\times \exp(i(g_x x_2 - q_x x_1) + i(g_y y_2 - q_y y_1) + i g_z(z_2 - z_1)) \times \\ &\times \left[\langle \exp(-i(g_x - q_x)\delta x) - i(g_y - q_y)\delta y \rangle_T - \exp\left(-\frac{(g_x^2 + q_x^2)\sigma_x^2}{2} - \frac{(g_y^2 + q_y^2)\sigma_y^2}{2} - g_z^2\sigma_z^2\right) \right]. \quad (9) \end{aligned}$$

Заменяем регулярное расположение атомов в кристаллографической цепочке на хаотическое, устремив $\sigma_z \rightarrow \infty$. В этом случае последнее слагаемое в квадратных скобках в формуле (9) будет равно нулю. Малоугловой характер рассеяния каналированных частиц обеспечивается условием:

$$\begin{aligned} g_x^2 + g_y^2 + g_z^2 &\approx g_x^2 + g_y^2, \\ q_x^2 + q_y^2 + g_z^2 &\approx q_x^2 + q_y^2. \end{aligned} \quad (10)$$

Если это условие не выполняется, то корреляционная функция компонент проекций флуктуаций поперечной силы оказывается не дельта-коррелированной. Далее вычислим интеграл по dq_z , принимая во внимание, что

$$x = x(t); \quad y = y(t); \quad z = vt,$$

где v – скорость каналированной частицы.

Компонента коэффициента диффузии $D_{xx}^{nucl}(x, y)$ определяется как:

$$D_{xx}^{nucl}(x, y) = \int dt_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_2} \overline{\delta U_{nucl}(x_1, y_1, t_1) \delta U_{nucl}(x_2, y_2, t_2)}. \quad (11)$$

Произведем операции дифференцирования и интегрирования. Затем полученное выражение усредним по x . В результате получим

$$\begin{aligned} \langle D_{xx}^{nucl}(x, y) \rangle_x &= \int dx D_{xx}^{nucl}(x, y) = \int \frac{dg_x dg_y}{(2\pi)^3} \int dq_x dq_y \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{(g_x^2 + g_y^2)(q_x^2 + q_y^2)} \frac{g_x q_x}{a_z v} \delta(g_x - q_x) \times \\ &\times [\exp(i(g_y - q_y)y)] \langle \exp(-i(g_x - q_x)\delta x) - i(g_y - q_y)\delta y \rangle_T. \end{aligned}$$

Далее проинтегрируем по dq_x и dg_x , учитывая интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{q_x^2 dq_x}{(q_x^2 + g_y^2)(q_x^2 + q_y^2)} = \frac{\pi}{g_y + q_y}.$$

Затем перейдем к переменным Вигнера

$$g_y + q_y = Q, \quad g_y - q_y = q, \quad dg_y dq_y = \frac{dQ dq}{2}.$$

В результате получим

$$\langle D_{xx}^{nucl}(x,y) \rangle_x = \int \frac{dQ}{Q} \int dq \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{2(2\pi)^3} \frac{\pi}{a_z v} \times \exp(iyq) \times \exp\left(-\sigma^2 q^2 / 2\right),$$

где $L_n = \int \frac{dQ}{Q}$ — ядерный кулоновский логарифм; пусть $\sigma_x = \sigma_y = \sigma$.

Вычислим оставшийся интеграл. С логарифмической точностью получим компоненту коэффициента диффузии в направлении x , которая усреднена по x и зависит только от y :

$$\langle D_{xx}^{nucl}(x,y) \rangle_x = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{a_z v} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sigma} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right) L_n.$$

Можно вычислить компоненту коэффициента диффузии в направлении x , которая усреднена по y и зависит только от x :

$$\langle D_{xx}^{nucl}(x,y) \rangle_y = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{a_z v} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) L_n.$$

Видно, что для изолированной цепочки ядерный коэффициент диффузии совпадает с [4]:

$$D_{xx}^{nucl}(x,y) = D_{yy}^{nucl}(x,y) = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{a_z v \sigma^2} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}\right) L_n. \quad (12)$$

Аналогичным образом рассмотрим многократное рассеяние каналированных частиц на атомных электронах. Флуктуация потенциальной энергии взаимодействия каналированной частицы с электронами атомов кристалла имеет вид:

$$\delta U_{el} = -4\pi Z_1 \sum_n \int \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3} \exp[i\vec{g}(\vec{r} - \vec{r}_n)] \times \\ \times \frac{e^2}{g^2} \left[\sum_{j=1}^{Z_2} \exp[-i\vec{g}(\delta \vec{r}_{nj} + \delta \vec{r}_n)] - F(g) \exp\left(-\frac{(g_x^2 \sigma_x^2 + g_y^2 \sigma_y^2 + g_z^2 \sigma_z^2)/2}{2}\right) \right],$$

где $F(g) = \left\langle \sum_{j=1}^{Z_2} \exp(i\vec{g}\delta \vec{r}_{nj}) \right\rangle_e = \int n(\vec{r}) \exp(i\vec{g}\vec{r}) d^3 \vec{r}$ — атомный форм-фактор; $F(0) = Z_2$; $n(\vec{r})$ — плотность атомных электронов кристалла.

Можно показать, что для изолированной цепочки электронный коэффициент диффузии совпадает с [5]:

$$D_{xx}^{el}(x,y) = D_{yy}^{el}(x,y) = \frac{2\pi (Z_1 e^2)^2}{v} \langle \rho(x,y) \rangle_T L_e, \quad (13)$$

где $\langle \rho(x,y) \rangle_T$ — электронная плотность изолированной атомной цепочки. $L_e = \int \frac{dQ}{Q}$ — электронный кулоновский логарифм.

Одна из компонент атомного коэффициента диффузии каналированных частиц (5) в окрестности изолированной атомной цепочки имеет вид ([6], см. также [7, 8]):

$$D_{xy}(x,y) = \frac{a_z}{v} \left[\left\langle \frac{\partial U(r_\perp)}{\partial x} \frac{\partial U(r_\perp)}{\partial y} \right\rangle_T - \left\langle \frac{\partial U(r_\perp)}{\partial x} \right\rangle_T \left\langle \frac{\partial U(r_\perp)}{\partial y} \right\rangle_T \right], \quad (14)$$

где $r_\perp = \sqrt{x^2 + y^2}$; $U(r_\perp)$ — потенциальная энергия взаимодействия каналированной частицы с изолированной атомной цепочкой.

В последние несколько лет растёт популярность использования графических процессоров (GPU) для ускорения сложных алгоритмов благодаря многоядерной структуре GPU, содержащей сотни вычислительных ядер [11]. Моделирование атомного коэффициента диффузии в виде (14) требует значительных вычислительных ресурсов и, соответственно, значительных затрат времени.

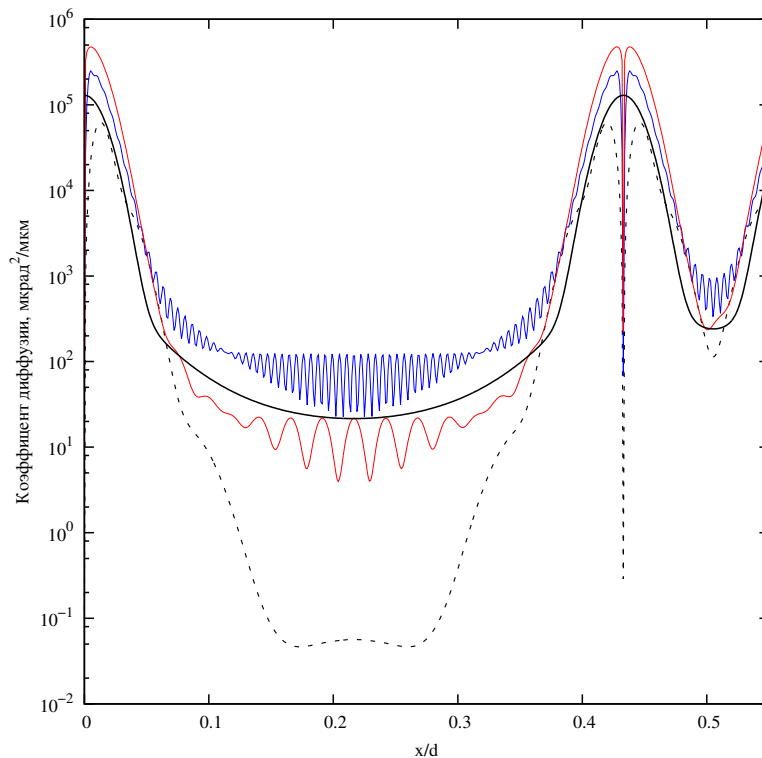


Рис. 1. Атомный коэффициент диффузии [6] в приближении Дойля–Тёрнера (пунктирная линия) и приближении Мольер $N = 50$ (синяя линия), $N = 300$ (красная линия) и суммы электронного и ядерного коэффициентов диффузии [4, 5] (сплошная линия) в окрестности атомных $< 110 >$ цепочек кристалла кремния для электронов с энергией 855 МэВ

Алгоритм для расчета атомного коэффициента диффузии был написан с учетом выполнения на графическом процессоре с поддержкой технологии программирования CUDA (Compute Unified Device Architecture) или OpenCL (Open Computing Language) [12]. Алгоритм включен в состав программного комплекса TROPICS [3]. Скорость расчета 100 значений выражения (14) при количестве членов разложения $N = 50$ составляет 2062, 100 и 3 секунд на четырехъядерном центральном процессоре Core i5-3450, суперкомпьютере АПК-5 ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» и графическом ускорителе Geforce GTX-660Ti соответственно. Таким образом, реализация алгоритма вычисления атомного коэффициента диффузии на графическом ускорителе позволила добиться ускорения вычислений в 700 раз по сравнению с вычислениями на центральном процессоре. Для достижения такого ускорения использовались способы оптимизации из [13].

График суммы электронного и ядерного коэффициентов диффузии [8, 9] и атомного коэффициента диффузии представлен на рис. 1. Из рисунка видно, что атомный коэффициент диффузии в приближении Мольер зависит от количества членов разложения, а для приближения Дойля–Тёрнера остается неизменным. Для детального анализа атомного коэффициента диффузии отдельно построен график первого и второго слагаемых выражения (14), представленных на рис. 2 и рис. 3 соответственно. Изменение количества членов разложения показало, что первое слагаемое в области электронной плотности при $N = 300$ в приближении Мольер даёт результаты, аналогичные полученным для приближения Дойля–Тёрнера при $N = 50$, но в области ядерной плотности наблюдаются различия, связанные с различным описанием ядерной и электронной плотностей для приближения Дойля–Тёрнера. Кроме того, в области электронной плотности для приближения Мольер наблюдаются осцилляции при $N = 50$, которые пропадают при $N = 300$ членов разложения. Второе слагаемое атомного коэффициента диффузии не зависит от количества членов разложения, начиная с $N = 50$, и приближения Дойля–Тёрнера и Мольер дают одинаковые результаты. Время, затраченное на расчет каждого слагаемого для $N = 50$ составляет 34 секунды, для $N = 300$ составляет 4 часа при использовании Geforce GTX 660Ti.

В [14] было выполнено компьютерное моделирование результатов эксперимента [1-2] с по-

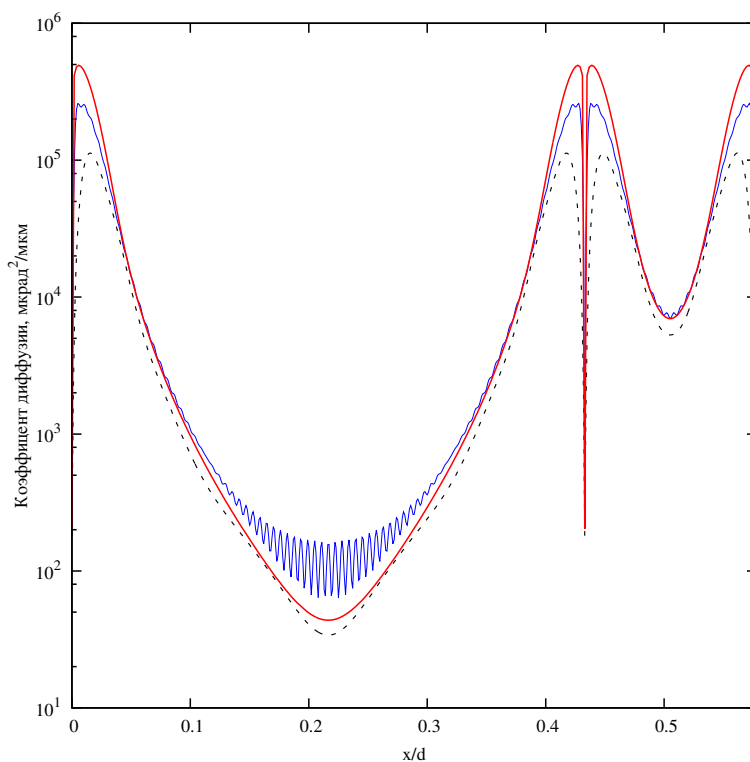


Рис. 2. Первое слагаемое атомного коэффициента диффузии [6] в приближении Дойля–Тёрнера (пунктирная линия) и в приближении Мольер с количеством членов разложения 50 (синяя линия) и 300 (красная линия) в окрестности атомных $\langle 110 \rangle$ цепочек кристалла кремния для электронов с энергией 855 МэВ

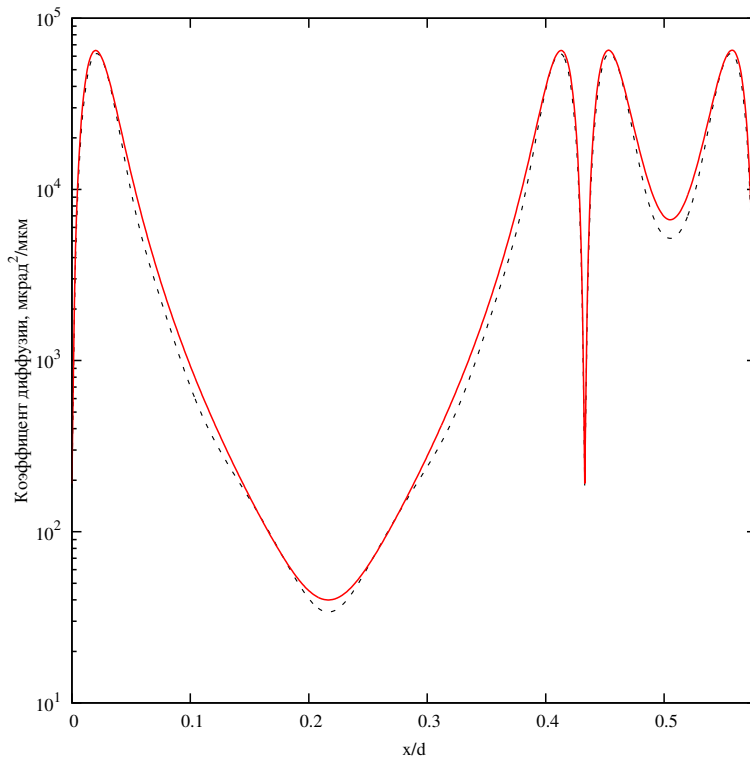


Рис. 3. Второе слагаемое атомного коэффициента диффузии [6] в приближении Дойля–Тёрнера (пунктирная линия) и приближении Мольер (красная линия) с количеством членов разложения 50 в окрестности атомных $\langle 110 \rangle$ цепочек кристалла кремния для электронов с энергией 855 МэВ

мощью электронного, ядерного и атомного коэффициентов диффузии. Показано, что использование атомного коэффициента диффузии дает более адекватное описание эксперимента.

Таким образом, атомный коэффициент диффузии каналированных частиц полностью определяется 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 поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 15-41-00048 «р_урал_а».

ЛИТЕРАТУРА

1. Mazzolari A. et al. Steering of a sub-GeV electron beam through planar channeling enhanced by Rechanneling // *Phys. Rev. Lett.* 2014. Vol. 112. P. 135503.
2. Wienands U. et al. Observation of deflection of a beam of multi-GeV electrons by a thin crystal // *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 114. P. 074801.
3. Штанов Ю. Н., Кошечев В. П., Моргун Д. А. TROPICS. Программный комплекс для моделирования траекторий движения быстрых заряженных частиц в кристаллах. Режим доступа : <http://www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/tropics/index.html>.
4. Kitagawa M., Ohtsuki Y. H. Modified dechanneling theory and diffusion coefficients // *Phys. Rev. B.* 1973. Vol. 8, no. 7. P. 3117–3123.
5. Gemmel D. S. Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals // *Rev. Mod. Phys.* 1974. Vol. 46, no. 1. P. 129 – 235.
6. Кошечев В. П. Корреляционная функция и ядерный коэффициент диффузии каналированных частиц // *Изв. Вузов. Физика.* 1997. № 8. С. 32–37.
7. Ольховский И. И., Садыков Н. М. Классические кинетические уравнения для ориентационных эффектов с учетом двухчастичной корреляционной функции кристалла // *Труды 10 Всесоюзного совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами, Ч.1.* М. : Изд-во МГУ. С. 173–179.
8. Базылев В. А., Жеваго Н. К. Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. М. : Наука, 1987. 269 с.
9. Кошечев В. П., Моргун Д. А., Панина Т. А. Стохастическая динамика эффекта каналирования в кристаллах и нанотрубках: монография. Ханты-Мансийск : Полиграфист, 2008. 100 с.
10. Бете Г. Квантовая механика. М. : Мир, 1965. 333 с.
11. Боресков А. В., Харламов А. А. Основы работы с технологией CUDA. М. : ДМК Пресс, 2010. 232 с.
12. Штанов Ю. Н., Моргун Д. А., Фокин А. С. Параллельное вычисление потенциалов для осевого каналирования на видеокартах // *Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2014618657.* М. : Роспатент, 2014.
13. Приймак А. В. Оптимизация вычислений на CUDA при моделировании неустойчивости ленгмюровских волн в плазме // *Вісник НТУУ «КПІ». Інформатика, управління та обчислювальна техніка.* 2013. № 58. С. 125–130.
14. Кошечев В. П., Штанов Ю. Н., Моргун Д. А., Панина Т. А. Моделирование процесса отклонения релятивистских электронов изогнутым кристаллом кремния // *Письма в ЖТФ.* 2015. Т. 41, Вып. 19. С. 55–63.