



ГОСУДАРСТВЕННЫЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

ИФВЭ 96-20

ОП

В.М. Бирюков

**ДЕКАНАЛИРОВАНИЕ НА ДИСЛОКАЦИЯХ РЕШЕТКИ  
В ИЗОГНУТЫХ КРИСТАЛЛАХ**

Направлено в *ЖТФ*

Протвино 1996

**Аннотация**

Бирюков В.М. Деканалирование на дислокациях решетки в изогнутых кристаллах.: Препринт ИФВЭ 96–20. – Протвино, 1996. – 17 с., 6 рис., библиогр.: 41.

Проанализирована теория деканалирования частиц в кристаллах на дефектах дислокационной природы. Методами компьютерного моделирования исследовано деканалирование протонов в области высоких энергий (ГэВ и ТэВ) на дислокациях решетки в длинных изогнутых кристаллах. Обсуждаются перспективы применения изогнутых кристаллов в области многотэвных энергий. Сформулированы требования к совершенству кристаллических решеток.

**Abstract**

Biryukov V.M. Dechanneling on the Lattice Dislocations in Bent Crystals: IHEP Preprint 96–20. – Protvino, 1996. – p. 17, figs. 6, refs.: 41.

We analyze the theory of particle dechanneling on the defects of dislocation nature in crystals. The dislocation dechanneling of protons in high energy range in the long curved crystals has been investigated by means of computer simulation. The prospects for the multi-TeV applications of the bent crystals are discussed. The requirements for the crystal lattice perfection are formulated.

## Введение

Недавние эксперименты [1,2] продемонстрировали значительный прогресс на пути эффективного управления пучками заряженных частиц высоких энергий на ускорителях с использованием каналирования в изогнутых кристаллах [3]. Особый интерес представляют эксперименты, ведущиеся в ЦЕРНе и ФНАЛе, по изучению вывода протонного пучка, циркулирующего в ускорителях, с помощью изогнутого кристалла [4,5]. Эти исследования имеют в виду возможное применение каналирования для вывода пучка из многотэвных ускорителей [6,7], где выведенный пучок открыл бы очень интересные возможности для изучения физики В-кварков на фиксированной мишени [8]. Обсуждаются также и другие возможные применения изогнутых кристаллов при высоких энергиях, как например, измерение магнитных моментов короткоживущих частиц [9], формирование нейтринных пучков для поиска нейтринных осцилляций на сверхдлинной базе [10], вывод вторичных частиц, образующихся в местах встреч в коллайдерах [2], организация каналов частиц без использования магнитной оптики [11].

Отклонение частиц изогнутым кристаллом происходит благодаря захвату частиц в потенциальную яму, сформированную полями изогнутых атомных плоскостей (либо осей). Эта упрощенная картина нарушается процессами рассеяния, которые могут вызывать (как результат одного или многих актов рассеяния) переходы частицы из связанного состояния в свободное (деканалирование), либо из свободного состояния в каналированное (объемный захват). Каналирование возможно в изогнутом кристалле до тех пор, пока отношение импульса пучка  $p$  к радиусу изгиба  $R$  не становится больше, чем максимальное поле вблизи атомной плоскости (порядка 6 ГэВ/см в кремнии).

Эффективность кристаллической оптики заряженных пучков ограничена процессом деканалирования. Два вида деканалирования хорошо известны в настоящее время (см., например, работу [12]): (а) деканалирование, обусловленное центробежной силой в изогнутом канале, и (б) деканалирование, обусловленное рассеянием каналированной частицы на электронах и ядрах кристалла. Второй процесс харак-

теризуется длиной деканалирования  $L_D$ , на которой большая часть пучка (точнее,  $1 - 1/e$ ) деканалирует. В совершенном прямом кристалле рассеяние на электронах и ядрах ведет к пропорциональности  $L_D \sim pv$  (логарифмический множитель здесь опущен). При многотэвных энергиях величина  $L_D$  в совершенном кристалле составляет несколько метров, поэтому соответствующие потери пучка там ничтожно малы.

## 1. Классификация дефектов решетки

В реальном кристалле различные дефекты возмущают совершенство решетки. Из-за их различного влияния на каналирование частиц, удобно классифицировать дефекты, присутствующие в кристалле, следующим образом: точечные (примесные атомы и вакансии), линейные (дислокации), двумерные (дефекты упаковки) и трехмерные (аморфные кластеры). Это различие особенно существенно для зависимости деканалирования на дефектах решетки от энергии частиц. Хорошее введение в эту область можно найти в книге [13]. Ниже мы кратко рассматриваем деканалирование для каждой группы дефектов.

**Точечные дефекты.** Рассеяние частицы с зарядом  $Z_i e$  на одиночном атоме (с номером  $Z_a$  и массой  $M_a$ ) в канале может вызвать немедленное деканалирование, если столкновение достаточно жесткое (рис. 1). Для такого жесткого рассеяния

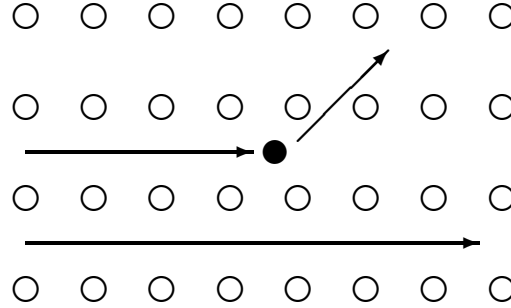


Рис. 1. Рассеяние каналированной частицы на примесном атоме.

с углом  $\theta_s$ , бóльшим критического угла каналирования  $\theta_c$  (максимальный угол каналированной частицы по отношению к атомной плоскости), можно оценить сечение, используя формулу Резерфорда для неэкранированного поля ядра:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4Z_i^2 Z_a^2 e^4}{p^2 v^2 \theta_s^4}, \quad (1)$$

где принято  $\theta_s \ll 1$ . Интегрирование по  $d\Omega = \theta_s d\theta_s d\phi$  для угла проекции  $\theta_s \cos \phi > \theta_c$  дает сечение плоскостного деканалирования

$$\sigma_D = \frac{2\pi Z_i^2 Z_a^2 e^4}{p^2 v^2 \theta_c^2}, \quad (2)$$

которое падает с энергией как  $1/pv$  (отметим, что  $\theta_c^2 = 2E_c/pv$  [14], где  $E_c$  — глубина межплоскостной потенциальной ямы). Длина деканалирования на дефектах (если деканалирование вызывается преимущественно ими)

$$L_D = \frac{1}{n_D \sigma_D} \quad (3)$$

зависит от объемной плотности дефектов  $n_D$  и растет линейно с  $pv$ .

Вклад многократного кулоновского рассеяния на точечных дефектах в диффузию поперечной энергии  $E_T$  можно учесть в рамках диффузионной модели [15]. При равномерном распределении примесных атомов в канале диффузионный коэффициент есть  $D = E_T \epsilon^2 Z_i^2 n_a / 2pv L_R$ , здесь  $\epsilon = 14$  МэВ;  $L_R$  — радиационная длина,  $n_a$  — объемная плотность примесных атомов, отнесенная к таковой в аморфном веществе. Этот вклад в деканалирование становится сравнимым со вкладом от электронного рассеяния только при  $n_a \approx 0,01$ . Обусловленная диффузионным рассеянием на точечных дефектах длина деканалирования  $L_D \approx pv E_c L_R / \epsilon^2 Z_i^2 n_a$  растет как  $pv/Z_i$ , т.е. в точности так же, как и зависимость (3).

**Линейные дефекты.** Протяженные дефекты кристаллической структуры (типа дислокационных линий, петель и стенок) нарушают дальний порядок кристаллической решетки. По этой причине каналированная частица может попасть в область с высокой кривизной канала, или испытать рассеяние на ядрах, либо на возмущениях потенциала решетки. Это может приводить к значительному изменению поперечной энергии или к деканалированию частицы. Вообще говоря, это может приводить и к центробежному деканалированию, и к деканалированию за счет рассеяния. Первый из этих эффектов (центробежное деканалирование), условно говоря, определяет некоторый эффективный “внутренний аксептанс” кристалла, задаваемый максимальной локальной кривизной его каналов. Второй эффект (дополнительное рассеяние частиц вблизи дислокаций) означает дополнительную диффузию поперечной энергии частиц. В терминах кинетических уравнений это означает соответственно изменение граничного условия и диффузионного коэффициента.

В окрестности линейной дислокации возмущение решетки изменяет локальную ориентацию каналов на угол порядка  $b/r$ , где  $r$  — расстояние до дислокации, а  $b$  — величина вектора Бюргерса [16]. Этот угол превышает критическую величину  $\theta_c$  на расстояниях до  $r_D \simeq b/\theta_c$  от дислокации. Условно можно считать, что частица деканалирует, если попадает в цилиндр радиусом  $\sigma_D \simeq r_D$ , описанный вокруг дислокации. С учетом плотности дислокаций  $n_D$  (суммарная длина дислокаций на единицу объема, измеряемая в  $\text{см}^{-2}$ ) можно оценить вероятность деканалирования частицы как  $n_D \sigma_D \simeq n_D b / \theta_c$  на единицу длины. Длина деканалирования  $L_D = 1/n_D \sigma_D \approx \theta_c / b n_D$  зависит от плотности дислокаций  $n_D$ , и с ростом энергии уменьшается как  $1/\sqrt{pv}$  по мере того, как центробежные эффекты становятся все более существенными.

**Двумерные дефекты.** Может существовать разрыв в положениях атомных рядов и плоскостей (рис. 2), называемый ошибкой упаковки. Граница разрыва, раз-

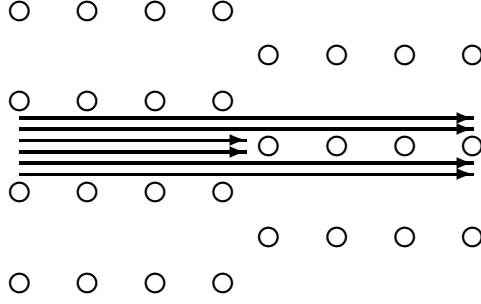


Рис. 2. Дефект упаковки.

деляющая совершенные блоки, является двумерным дефектом. Его площадь определяет вероятность того, что частица в кристалле пересечет границу разрыва. Доля частиц, деканализируемых при пересечении такого дефекта, аналогична доле частиц, не захватываемых в режим каналирования при падении на поверхность кристалла, и составляет порядка  $\approx (\pi/4)(2x_c/d_p) \approx 0.6$  (так называемый “поверхностный акцептанс”); здесь  $d_p$  — межплоскостной интервал,  $x_c$  — максимальная разрешенная амплитуда каналированной частицы. Величина вероятности деканализирования фактически не зависит от энергии.

**Трехмерные дефекты.** Мелкие объемные дефекты, внутри которых кристаллическая структура отлична от окружающей структуры (аморфные кластеры, двойникование и т.д.), способствуют деканализированию тем же образом, как и отдельные примесные атомы (точечные дефекты). Рассеяние на этих дефектах уменьшается с энергией как  $1/E$ . Если размер дефекта сопоставим с периодом колебания частицы в канале  $\lambda \simeq 2\pi x_c/\theta_c$ , то вероятность деканализирования определяется поперечным сечением дефектов и не зависит от энергии.

Мы видим, что из всех различных дефектов, присутствующих в кристалле, дислокации представляют собой наибольший интерес, поскольку вклад других дефектов в деканализирование уменьшается с энергией или остается постоянным. При существующих энергиях (сотни ГэВ) и высоком совершенстве кремниевых кристаллов, дефекты не влияют на эффективность отклонения пучка. Имеется хорошее согласие между теорией для совершенных кристаллов и экспериментами с реальными кремниевыми кристаллами при энергиях до  $\sim 450$  ГэВ [1,3,12]. Поэтому достаточно ограничиться рассмотрением дислокаций.

Ниже мы анализируем теорию деканализирования на дефектах дислокационной природы, делая акцент на области наиболее высоких энергий (порядка ТэВ), в которой рассматриваемые эффекты могут быть наиболее значимы.

## 2. Линейные дислокации

Линейную краевую дислокацию можно представить себе как край лишней полуплоскости атомов в кристаллической решетке (рис. 3). Она характеризуется

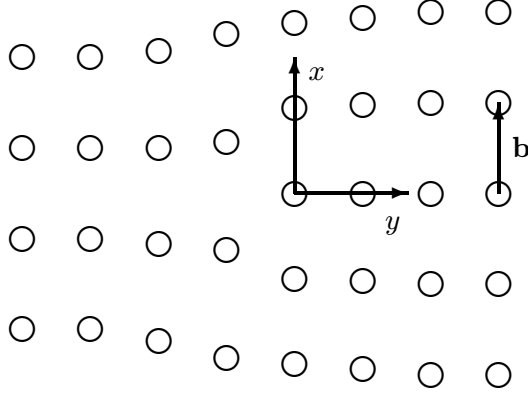


Рис. 3. Линейная краевая дислокация.

вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$ , который показан на рис. 3 нормальным к добавленной (либо вакантной) полуплоскости атомов с величиной, равной межатомному расстоянию (периоду решетки в направлении  $\mathbf{b}$ ). Вызванное дефектом смещение атома в окружающей решетке равно [16]

$$u_x = \frac{b}{2\pi} \left( \arctan \frac{y}{x} + \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{xy}{r^2} \right), \quad (4)$$

$$u_y = \frac{b}{4\pi(1-\nu)} \left( (1-2\nu) \ln r + \frac{x^2}{r^2} \right) \quad (5)$$

в системе отсчета, показанной на рис. 3: ось  $z$  — вдоль дислокационной линии  $\xi$ , ось  $x$  — вдоль вектора Бюргерса  $\mathbf{b}$ ;  $r^2 = x^2 + y^2$ . Коэффициент Пуассона  $\nu = 0.42$  в кремнии. В случае винтовой дислокации ее направление  $\xi$  и вектор  $\mathbf{b}$  параллельны (пусть это будет ось  $z$ ). Ненулевое смещение происходит только по  $z$ :

$$u_z = \frac{b}{2\pi} \arctan \frac{y}{x}. \quad (6)$$

Эти формулы рассматриваются в деталях в любом стандартном учебнике по теории упругости.

Движение частицы в возмущенной решетке следует рассматривать с учетом изменившегося расположения атомов. Эквивалентный подход заключается в переходе в систему отсчета, связанную с атомами решетки. В этой системе вместо смещений появляется центробежная сила. Такой подход широко используется при описании движения частиц в искривленных кристаллах. Уравнение движения частицы в этой системе отсчета принимает вид

$$pv \frac{d^2 x}{dz^2} + U'(x) + pv \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{pv}{R(z)} = 0. \quad (7)$$

Локальная кривизна  $\partial^2 u / \partial z^2$  в плоскости каналирования зависит от взаимной ориентации дислокации  $\xi$ , вектора Бюргера  $\mathbf{b}$  и импульса частицы  $\mathbf{p}$ , а также от расстояния до дефекта  $r$ . Глобальная кривизна кристалла (если присутствует) представлена членом с  $1/R(z)$ .

Центробежная сила имеет порядок  $\sim p v b / r^2$ , она может вывести частицу из режима каналирования, если та приближается к дислокации со слишком малым  $r$ . Это рассмотрение было впервые выполнено Кэрэ [17]. Предположив, что частица деканализует, если (и только если) максимальная кривизна канала на пути частицы превышает критическую  $1/R_c$ , Кэрэ вывел сечение деканализования на прямолинейной дислокации:

$$\sigma_D = K \sqrt{\frac{b p v}{2 Z_i Z e^2 N d_p}} = K \sqrt{\frac{\pi}{2} b R_c}. \quad (8)$$

Критический радиус находится из баланса между центробежной силой  $p v / R_c$  и максимальным градиентом межплоскостного поля  $U(x_c)$ . Для  $\sigma_D$ , усредненной по взаимной ориентации  $\xi$  и  $\mathbf{p}$ , константа  $K \simeq 0.34$  для винтовой дислокации и  $0.56$  — для краевой. Цилиндр с диаметром  $\sigma_D$  (соосный  $\xi$ ) непрозрачен для каналированной частицы в рассмотрении Кэрэ. Для 1-тэвного протона в кремнии  $\sigma_D$  имеет порядок 10 мкм. Вероятность деканализования на единицу длины есть  $\sigma_D n_D$ , длина деканализования

$$L_D = \frac{1}{n_D \sigma_D} \quad (9)$$

падает с энергией как  $1/\sqrt{p v}$ .

Величина  $\sigma_D$  примерно на порядок меньше, чем период осцилляции частицы  $\lambda$ . Это означает, что частица не делает даже одной осцилляции в изогнутом канале. Следовательно, критерий критической кривизны Кэрэ есть лишь грубое приближение. Вместо рассмотрения статического баланса двух сил  $U'(x_c)$  и  $p v / R$ , следует решать уравнение (7) с учетом распределения потока частиц в канале.

Подход с использованием уравнения (7) применялся в работах [18-22] Проследивалась траектория частицы и применялся критерий деканализования  $x > x_c$  на всем пути  $x(z)$ , либо лишь на  $z = +\infty$ ; этот подход выбрасывает из рассмотрения ядерное рассеяние, соответственно пере- или недооценивая рассеяние вблизи оси дислокации. Были немногие попытки [23,24] моделирования с учетом рассеяния. Эти работы подтвердили закон  $\sigma_D \sim \sqrt{E}$ , предсказанный Кэрэ. Этот же закон  $\sqrt{E}$  был найден и в экспериментах [25,13] с пучками мэвных ионов. В сравнении с экспериментами формула Кэрэ недооценивает  $\sigma_D$  для плоскостных каналов в  $\sim 2$  раза [21] и меньше [19,13], и переоценивает для аксиальных каналов в  $\sim 4$  раза [22]. Авторы расчетов [18-23] сообщают об хорошем согласии теории с экспериментами. Измерения деканализования в несовершенных кристаллах в гэвной области энергий мы обсудим ниже.

Уравнение (7) может быть решено с гармоническим потенциалом [26]. После взаимодействия (при  $z = +\infty$ ) решение представляет собой гармоническое колебание



с амплитудой [19,22]

$$x_f = (x_m^2 + x_d^2 + 2x_mx_d \cos \phi)^{1/2}, \quad (10)$$

где  $x_m$  — амплитуда при  $z=-\infty$ ,  $\phi$  зависит от начальной фазы и будет усреднено позже,  $x_d$  определяется дислокацией. Для  $\mathbf{p} \perp \xi$

$$x_d = \frac{b}{2} e^{-2\pi r/\lambda} \quad (11)$$

для винтовой дислокации, и

$$x_d = \frac{b}{2} e^{-2\pi r/\lambda} \left( \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} + \frac{\pi r}{(1-\nu)\lambda} \right), \quad (12)$$

$$x_d = \frac{b}{2} e^{-2\pi r/\lambda} \left( 1 + \frac{\pi r}{(1-\nu)\lambda} \right) \quad (13)$$

для краевой дислокации,  $\mathbf{p} \parallel \mathbf{b}$  и  $\mathbf{p} \perp \mathbf{b}$  соответственно. Уравнения (11)–(13) показывают, что влияние дислокации ограничено расстояниями  $\approx \lambda/2\pi$ , растущими с энергией частицы как  $\sqrt{p\nu}$ . Разность поперечных энергий  $E_T$  до и после взаимодействия есть

$$\delta E_T = \frac{E_c}{x_c^2} (x_d^2 + 2x_mx_d \cos \phi). \quad (14)$$

Частица деканализирует, если  $\delta E_T \geq E_c - E_T$ . Усредняя  $\phi$ , находим вероятность деканализирования частицы с поперечной энергией  $E_T$  и прицельным параметром  $r$  в виде

$$q(E_T) = \frac{1}{\pi} \arccos \left( \frac{x_c^2 E_c - x_c^2 E_T - x_d^2 E_c}{x_d x_c \sqrt{E_c E_T}} \right) \quad (15)$$

для  $E_T + \sqrt{E_c E_T} x_d/x_c > E_c(1 - x_d^2/x_c^2)$ , и нулевую вероятность для меньших  $E_T$ . Полная вероятность есть  $\int_0^{E_c} q(E_T) f(E_T) dE_T$  для функции распределения частиц  $f(E_T)$ . Наконец, сечение деканализирования есть интеграл по прицельным параметрам  $r$ :

$$\sigma_D = \int_0^\infty dr \int_0^{E_c} q(r, E_T) f(E_T) dE_T. \quad (16)$$

Выше мы рассмотрели взаимодействие только с одиночной дислокацией. Частицы, не деканализированные в одном столкновении с дислокацией, испытывали некоторое изменение поперечной энергии  $E_T$ . В результате, деканализирование может происходить из-за множественных столкновений с дислокациями. Согласованная теория должна учитывать все вклады. Сделаем аналитическую оценку в диффузионном подходе (аналогичная оценка сделана в работе [27]). Он применим только, если  $\delta E_T \ll E_c$ . Тогда (14) есть  $\delta E_T \approx 2E_c x_m x_d \cos \phi/x_c^2$ . Диффузионный фактор

$$\left\langle \frac{(\delta E_T)^2}{\delta z} \right\rangle = \frac{2E_c E_T n_D}{x_c^2} \int_{r_{min}}^\infty x_d^2 dr, \quad (17)$$

поскольку диффузионный подход обоснован, начиная лишь с  $r_{min} \approx \lambda/2\pi$ , согласно (11)-(13). Предположив временно, что деканализирование обусловлено лишь мягкими актами (чтобы почувствовать их вклад), можно вывести “парциальную” длину деканализирования, соответствующую диффузионному фактору (17) (детали можно найти, например, в книге [15]).

Например, для винтовой дислокации эта длина при усреднении (17) по углу между  $\mathbf{p}$  и  $\xi$  составит

$$L_{diff} \approx \frac{6\pi e^{2\pi r_{min}/\lambda} \theta_c d_p}{j_{0,1}^2 b^2 n_D} \approx 25 \frac{\theta_c d_p}{b^2 n_D}. \quad (18)$$

Вклад мягких множественных актов составляет, таким образом, лишь часть вклада от жесткого рассеяния (8), и растет как  $b^2$ . Оценка для краевой дислокации приводит к тому же выводу. Хотя количественные предсказания должны принимать в расчет как однократные, так и многократные рассеяния (в методах Монте-Карло), можно видеть, что оба механизма дают одинаковую зависимость от энергии каналлизованной частицы. Результаты анализа можно представить простой формулой

$$L_D \approx \frac{\theta_c}{b n_D}, \quad (19)$$

которая дает правильный порядок величины. Точный количественный множитель (порядка единицы) так же, как и правильная зависимость от геометрии искажения кристаллической решетки, должен быть получен в рамках более детальной теории.

Теория деканализирования на дислокациях была первоначально разработана для мэвной области энергий, поэтому стоит остановиться на том, какие изменения в теории могут возникнуть при ее применении в тэвной области. И размер искажения решетки  $\sigma_D$  (значимый для каналлизованной частицы), и период колебаний частицы в канале  $\lambda$  имеют одинаковую зависимость от энергии. Поэтому в характере движения частицы в возмущенной решетке не происходит больших изменений с ростом энергии на шесть порядков.

С другой стороны, некогерентное рассеяние на ядрах и электронах кристалла сильно подавлено. Например, угол рассеяния на длине  $\lambda$  в аморфном кремнии на порядок больше чем  $\theta_c$  при энергии 1 МэВ, но такой же угол становится на два порядка меньше чем  $\theta_c$  при энергии 1 ТэВ. Следовательно, вклад рассеяния на ядрах в центре дислокации, существенный при 1 МэВ, становится пренебрежимым при 1 ТэВ. Таким образом, оценки, следующие из модели непрерывного потенциала, становятся даже более оправданными в тэвной области энергий.

Для разрабатываемых применений кристаллов при самых высоких энергиях, порядка 7 ТэВ, необходима чистота кристалла порядка  $n_D \ll \theta_c/bL$  с тем, чтобы можно было использовать кристаллы длиной  $L$ . Это означает, что “совершенный” кристалл должен иметь не более одной линейной дислокации на квадратный сантиметр. Качество производимых кристаллов непрерывно улучшается; в принципе, можно выращивать бездислокационные экземпляры ( $n_D \leq 1/\text{см}^2$  [5]) кристаллов кремния.

**Мозаичность кристалла и дислокационные петли.** Линейные дислокации могут из-за взаимодействия между собой образовывать более сложные структуры в кристалле. Пример такой структуры — *мозаичность* кристалла, когда он состоит из совершенных блоков слегка разориентированных между собой. Она обусловлена выстраиванием краевых дислокаций в стенку разделяющую кристалл на блоки. Это требует подвижности дислокаций и потому этот дефект более типичен для металлических кристаллов, чем для полупроводников. Лучшие кремниевые кристаллы размера  $\sim$ см имеют мозаичность на уровне до 0.05 мкрад [28], что не должно мешать каналированию даже при  $\sim 10$  ТэВ, где  $\theta_c \simeq 2$  мкрад.

Другой характерный вид дефектов — *дислокационная петля*, т.е. замкнутая краевая дислокация. Ее типичный размер (от 0.06–0.08 до 1–3 мкм в кремнии [29]) существенно меньше, чем  $\lambda$  в околотэвной области ( $\sim 0.1$  мм). По этой причине влияние малых дислокационных петель на каналирование тэвных частиц схоже с влиянием точечных дефектов, т.е. деканалирование на них уменьшается с ростом энергии [30].

## 2.1. Моделирование каналирования в дислокационных решетках

Далее мы исследуем плоскостное деканалирование на линейных дислокациях кристалла с помощью компьютерного моделирования. Для этой цели была модифицирована программа SATCH [31] с тем, чтобы включить зависимости (4)–(7) в уравнения движения частицы в кристалле (версия программы носит название SATCH 2.0). Эта программа использует непрерывный потенциал в приближении Мольера для аппроксимации поля атомных плоскостей и учитывает процессы однократного и многократного рассеяний на электронах и ядрах кристалла методами Монте-Карло. Частицы транспортируются через изогнутые кристаллические решетки малыми шагами, порядка 1 микрона при энергии частиц порядка сотни ГэВ. Дальнейшие детали о методе моделирования каналирования в идеальных решетках изогнутых кристаллов см. в работе [31].

Мы рассмотрим случай высоких энергий (ГэВ и ТэВ), что подразумевает, как правило, пучки падающих на кристалл частиц с расходимостью много большей критического угла  $\theta_c$ . Другое характерное отличие случая высоких энергий — использование длинных изогнутых кристаллов, что, в свою очередь, означает также возможность множественных столкновений с дислокациями. Напротив, мэвный случай, изученный ранее в работах [17–23], подразумевал параллельный пучок (с расходимостью много меньшей критического угла  $\theta_c$ ) частиц, падающих на кристалл, и однократное столкновение с дислокацией в прямом кристалле.

Вначале мы рассмотрим деканалирование при взаимодействии с изолированной единичной линейной дислокацией. В моделировании протонный пучок с расходимостью больше  $\theta_c$  падал на кристалл Si(110). На некоторой глубине в кристалле частица встречала дислокацию.

С тем, чтобы четко различать каналированные и случайные частицы в кристалле, а также обеспечить распределение частиц, типичное для высоких энергий, мы

брали кристалл, изогнутый с некоторой небольшой кривизной  $pv/R = 0.1$  ГэВ/см.

Канализованные частицы с  $E_T < 18.0$  эВ отбирались до столкновения с дислокацией, и частицы, имевшие  $E_T > 22.8$  эВ после столкновения с дислокацией, рассматривались как деканализованные; 22.8 эВ есть глубина потенциальной ямы Si(110) в приближении Мольер (разность 22.8–18.0 эВ взята для подавления вклада от “обычного” деканализованья из-за рассеяния в идеальном кристалле). Вероятность деканализованья, полученная в моделировании, показана на рис. 4 как функция минимального расстояния частица–дислокация для краевой и винтовой дислокаций с  $b = 3.84$  Å при энергиях 450 ГэВ и 7 ТэВ. Вероятности на рис. 4 усреднены по углам падения протона по отношению к вектору  $\mathbf{b}$  и дислокации. Интегрирование

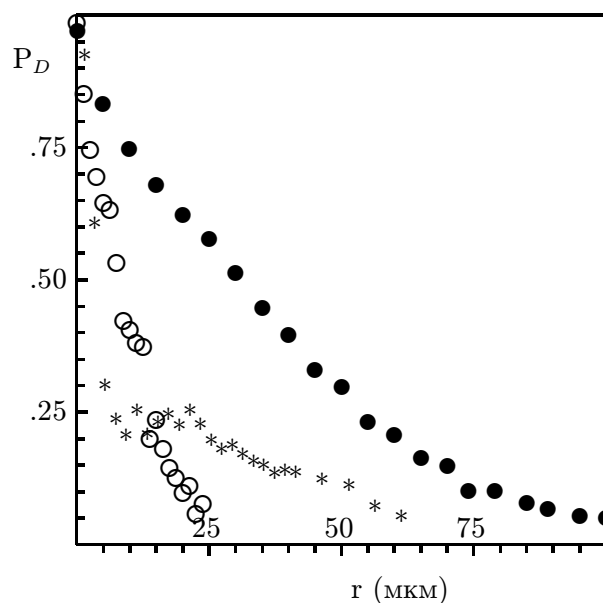


Рис. 4. Вероятность деканализованья  $P_D$  на единичной дислокации как функция прицельного параметра для краевой (●) и винтовой (\*) типа при 7 ТэВ, и для краевой типа при 450 ГэВ (○).

зависимостей, показываемых на рис. 4, дает сечения деканализованья  $\sigma_D$ : 20 и 7 мкм для краевой и винтовой дислокаций соответственно при 450 ГэВ, и 77 мкм (краевая) и 27 мкм (винтовая) при 7 ТэВ. Отношение  $\sigma_D(7 \text{ ТэВ})/\sigma_D(450 \text{ ГэВ})$  равно 3.85 в согласии с ожидаемым по закону  $(pv)^{1/2}$ , т.е.  $(7 \text{ ТэВ}/450 \text{ ГэВ})^{1/2} = 3.94$ . Найденные сечения довольно близки к ожидаемым по формуле (8): 47 мкм (краевая) и 29 мкм (винтовая) для 7 ТэВ. В той же процедуре, повторенной для изгиба 1 ГэВ/см, сечение  $\sigma_D$  возросло примерно на 10 %.

Далее мы исследовали множественные взаимодействия канализованной частицы с дислокациями в длинном изогнутом кристалле. Тот же пучок падал на Si (110) — кристалл длиной 3 см. Изгиб кристалла был равномерный с кривизной  $pv/R$ , варьируемой в разных опытах от 0.2 до 3.0 ГэВ/см.

Дислокации были распределены случайно по объему кристалла с плотностью  $n_D$ , с равномерным распределением по координатам и углам ориентации. Было равное количество дислокаций краевого и винтового типов. Для простоты анализа принималось  $b=3.84 \text{ \AA}$  независимо от ориентации дислокации.

Были исследованы две энергии, 450 ГэВ и 7 ТэВ, и плотность дислокаций варьировалась от 0.1 до 500  $\text{см}^{-2}$ . Обычное рассеяние на электронах и ядрах также принималось в расчет. Длина деканализирования, полученная в моделировании фитированием углового распределение частиц за кристаллом, показана на рис. 5. Для почти совершенного кристалла ( $n_D=0.1\text{--}1 \text{ см}^{-2}$ ) распределение деканализирования вдоль кристалла на длине  $L$  было не экспоненциально (так как  $L$  много короче, чем  $L_D$ ; см. работу [32]) и потому  $L_D$  представляет собой лишь локальную оценку, определяемую быстрым деканализированием частиц с наибольшими амплитудами каналирования (порядка и выше  $x_c$ ). Для высоких  $n_D$  деканализирование в

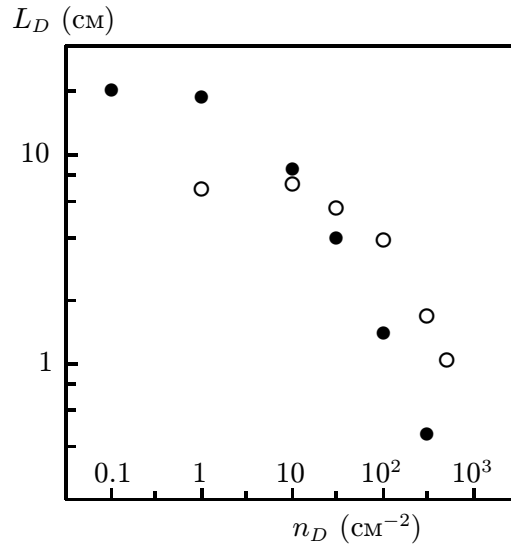


Рис. 5. Длина деканализирования в 3-см кристалле Si(110), изогнутом с  $pv/R=1$  ГэВ/см, как функция плотности дислокаций. Для 450 ГэВ (o) и 7 ТэВ (●).

3-сантиметровом кристалле было экспоненциально, и длина  $L_D$  была хорошо определена. Влияние дислокаций начинает сказываться при  $n_D \geq 30 \text{ см}^{-2}$  для 450 ГэВ, и при  $n_D \geq 3 \text{ см}^{-2}$  для 7 ТэВ. Для более высоких  $n_D$  деканализирование на дефектах доминирует, и  $L_D$  хорошо описывается формулой

$$L_D = 1/n_D \sigma_{eff}. \quad (20)$$

Эффективное сечение деканализирования  $\sigma_{eff}$ , полученное из фита результатов моделирования, равно 19 мкм при 450 ГэВ и 72 мкм при 7 ТэВ. Так как оно включает все возможные вклады от кратных взаимодействий с дислокациями в объеме кристалла,  $\sigma_{eff}$  несколько выше, чем средняя (для винтовых и краевых дислокаций) величина  $\sigma_D$  (52 мкм для 7 ТэВ) для однократных столкновений, полученная из рис. 4.

Результаты на рис. 5 даны для  $pv/R = 1$  ГэВ/см. Моделирование для  $n_D = 100 \text{ см}^{-2}$  при 7 ТэВ, повторенное с различными  $pv/R = 0.2; 0.5; 1; 2; 3$  ГэВ/см, выявило лишь слабое влияние глобальной кривизны на  $L_D$  (которая составила 1.69; 1.70; 1.50; 1.24; 1.14 см соответственно); конечно, число первоначально захватываемых частиц было очень разным в каждом случае. Зависимость эффективного сечения деканалирования  $\sigma_{eff}$  от  $pv/R$  показана на рис. 6 для протонов с энергией 7 ТэВ, каналированных в длинных кристаллах Si (110). Качественное объяснение слабой зависимости (найденной и для однократных столкновений) может быть следующим. Локальная кривизна есть сумма  $1/R$  и вклада дислокации  $\partial^2 u / \partial z^2$ ; этот вклад меняет знак вблизи дислокации. Поэтому  $1/R$  может либо усиливать, либо сокращать вклад  $\partial^2 u / \partial z^2$ , давая малый эффект в среднем. Наивысшая на сегодняш-

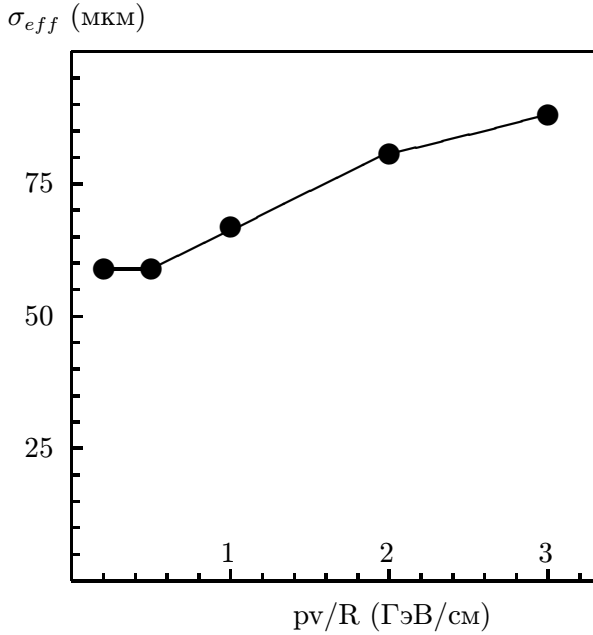


Рис. 6. Эффективное сечение деканалирования как функция  $pv/R$ , для 7 ТэВ протонов, каналированных в длинных кристаллах Si (110).

ний день энергия применений каналирования составляет 900 ГэВ — это энергия протонов, циркулирующих в ускорителе Тэватрон (ФНАЛ, США), где осуществлен вывод частиц с использованием изогнутого кристалла [5]. Наше моделирование показывает, что влияние дислокаций было бы замечено в этом эксперименте только для  $n_D \geq 10 - 20 \text{ см}^{-2}$ . Для еще более высоких  $n_D$  величина  $L_D$  может быть описана формулой  $L_D = 1/n_D \sigma_{eff}$ , где  $\sigma_{eff} \simeq 26$  мкм для условий, указанных выше.

Единственные измерения деканалирования на дислокациях в гэвной области в длинных изогнутых кристаллах были сделаны в ИФВЭ при энергии 70 ГэВ [3]. Были исследованы кристаллы германия с паспортной плотностью дислокаций  $1000/\text{см}^2$  и длиной до 45 мм. Была найдена длина деканалирования  $L_D \simeq 5$  мм. В моделировании программой SATCH этого эксперимента мы исследовали два случая.

В первом присутствовали и краевые и винтовые дислокации в равных количествах

с изотропным распределением по углу. Для  $b=4 \text{ \AA}$  и  $n_D=1000 \text{ см}^{-2}$  длина деканалирования в кристалле длиной 3 см составила  $(11\pm 2)$  мм. Во втором случае присутствовали только краевые дислокации, все ориентированные нормально пучку. Длина деканалирования сократилась до 4 мм. В обоих случаях исследовалась зависимость  $\sigma_D$  от  $b$ , и была найдена линейная связь. Поскольку нет детальных сведений о качестве кристалла, можно заключить лишь, что согласие лучше, чем фактор  $\sim 2$ .

Мы обсудили влияние на каналирование микроскопических дефектов кристаллической решетки. Для практических применений также важны макроскопические искажения кристаллической пластины, вызванные процессами обработки и изгиба кристалла [34].

### 3. Радиационные повреждения

В применениях на ускорителях важным вопросом являются радиационные повреждения кристаллов [35,36]. Хотя сами повреждения практически не зависят от энергии в гэвной области и выше (см. формулу (21)), их влияние на каналирование может сильно зависеть от энергии. Эта зависимость будет определяться характеристиками накопленных дефектов. По этой причине изучение дефектов, производимых в облученных кристаллах, было бы очень интересно. Из теории мы видим, что чем выше организация дефектов, тем они опаснее. Радиационная стойкость должна расти с энергией, как  $E$  для точечных дефектов или малых дислокационных петель [30], убывать, как  $1/\sqrt{E}$  для линейных дислокаций и как  $1/E$  для дислокационных стенок (мозаичность) [30].

Маловероятно, что пары вакансия-атом (образующиеся вначале) могут организоваться в какие-либо протяженные дефекты в кремнии. Для точечных дефектов можно дать элементарную оценку (см. также [35]) радиационной стойкости. Пусть  $\epsilon_d$  есть минимальная передача энергии, нужная для выбивания атома из узла решетки. Соответствующая передача импульса есть  $q=\sqrt{2Am_p\epsilon_d}$ , где  $Am_p$  — масса атома. Сечение выбивания атома аналогично формуле (2):

$$\sigma_{def.} = \frac{2\pi Z_i^2 Z^2 e^4}{m_p A \epsilon_d v^2}. \quad (21)$$

При  $v^2$ , стремящемся к  $c^2$  для релятивистской частицы, величина (21) насыщается. Мы не учитываем каскадные эффекты и, с другой стороны, не учитываем вероятность рекомбинации образовавшейся пары; оба эффекта могут быть важны. Для релятивистского протона в кремнии величина  $\sigma_{def.}$  порядка  $10^{-23} \text{ см}^2$ . Максимально допустимый интегральный поток  $F_{max}$  протонов/см<sup>2</sup> тогда есть  $F_{max}=n_a/\sigma_{def.}$ , где  $n_a$  — допустимая плотность выбитых атомов. Как мы видели ранее, деканалирование на выбитых атомах становится заметным лишь при  $n_a \approx 0.01$ . Это соответствует интегральному потоку  $F_{max}$  порядка  $10^{21}$  протонов на квадратный сантиметр в кремнии.

Интересен множитель  $Z_i^2$  в формуле (21). Радиационные повреждения сильно вырастают для ионов с большим зарядом, например, в 6700 раз для полностью ионизованного свинца. Независимо от конечной структуры образовавшихся дефектов (аморфные кластеры, дислокационные петли и линии, и др.),  $Z_i^2$  является общим множителем в скорости образования дефектов. Поэтому следует ожидать, что радиационная стойкость кристаллов уменьшается на множитель  $1/Z_i^2$  для пучков многозарядных ионов. Однако типичная интенсивность пучка в ускорителях значительно ниже для тяжелых ионов, чем для протонов. Например, на  $\sim 7$ -тэвном Большом Адронном Коллайдере, строящемся в ЦЕРНе (Женева), интенсивность ионного пучка (полностью ионизованный свинец) планируется ниже, чем интенсивность протонного пучка, почти на тот же самый множитель  $\simeq 6000$ .

На сегодняшний день предельный поток в  $10^{19}$  протонов на кв. сантиметр достигнут в эксперименте [37] с 70-гэвным протонным пучком и изогнутым на 13 мрад кремниевым кристаллом, где не было замечено ухудшения каналирования. В этом случае кристалл испытывал также большие импульсные тепловые и динамические нагрузки. Позже также были проведены исследования кристаллов, облученных до  $4 \cdot 10^{20}$  [36] при 28 ГэВ, и  $2.4 \cdot 10^{20}$  [38] при 450 ГэВ, протон/см<sup>2</sup>. В первой из этих работ облученный кристалл почти полностью сохранил каналирующие свойства, как показал эксперимент с пучком ионов гелия энергии 2 МэВ; наблюдалось лишь небольшое (но измеримое) ухудшение свойств кристалла.

В работе [38] облученный кристалл был затем изогнут, и его отклоняющие свойства исследовались на пучке протонов с энергией 450 ГэВ. Поскольку была облучена лишь центральная часть кристалла, можно было сравнивать каналирующие свойства облученной и необлученной частей того же кристалла. В части кристалла, получившей дозу облучения  $2.4 \cdot 10^{20}$  протонов на кв. сантиметр, ухудшение эффективности отклонения пучка не превысило 10–15 %. Таким образом, кристаллы выдерживают значительные дозы облучения и могут эксплуатироваться в интенсивных пучках годами. Неясным остается то, как радиационная стойкость кристаллов зависит от энергии.

## Заключение

Теория каналирования в несовершенных кристаллах имеет те же хорошо известные основы, которые используются в теории движения частиц в совершенных изогнутых кристаллах. Теоретические предсказания были подтверждены экспериментально везде, где это было возможно. Основная проблема лежит в точном знании структуры реального кристалла. В идеале, требуется знать отдельно плотности и характеристики всех видов дефектов, представленных в кристалле. Но, как правило, в детальных процедурах измерения кристалл приходится разрушать с тем, чтобы изучить его объем... Точное измерение деканалирования от дислокаций при максимальных энергиях в кристалле с хорошо известной структурой было бы крайне полезно, особенно в сравнении с моделированием.



Совершенство решетки современных кремниевых кристаллов, по-видимому, так велико, что они могут вообще не нуждаться в изложенной теории. В экспериментах по отклонению пучков высоких энергий применяются кремниевые кристаллы с менее чем одной дислокацией на кв. сантиметр [5]; такое совершенство достаточно для каналирования даже при энергиях выше 20 ТэВ.

Экспериментально лучшую точку отсчета дают работы [8,1] на пучке Н8 протонов с энергией 450 ГэВ в ЦЕРНе. Измеренная эффективность отклонения 50 % падающего пучка находится в полном согласии с теорией; это означает, что вклад дефектов в деканалирование был заведомо меньше 10 %. Для единственного опасного дефекта решетки, линейной дислокации, этот вклад может расти с энергией не быстрее чем  $\sqrt{E}$ ; т.е. на  $\sim 7$ -тэвном Большом Адронном Коллайдере вклад дефектов в деканалирование в том же самом кристалле был бы заведомо меньше чем 40 % (что может быть уже заметно, но еще не критично). Отметим, что согласно теории этот кристалл должен был иметь  $n_D < 30$  /см<sup>2</sup>.

Тем не менее теория необходима для применения кристаллов более тяжелых материалов таких, как вольфрам; кристаллы с высокими  $Z$  привлекают сильными полями, но имеют решетку низкого качества в настоящее время [39]. Из уравнений (8) и (21) видно, что с увеличением  $Z$  сечение деканалирования сокращается как  $\sim Z^{-1/2}$ , в то время как сечение радиационного повреждения увеличивается как  $\sim Z$  (для  $Z/A \simeq \text{const}$ ). Однако большее значение имеет концентрация дефектов, которая очень различна в полупроводниках и металлических кристаллах. Технология выращивания больших кремниевых кристаллов высоко развита (из-за большого рынка сбыта). Эта практическая причина заставляет физиков-ускорительщиков обычно использовать дешевые и совершенные кремниевые кристаллы для управления пучками частиц. Обзор продвижения в выращивании больших кристаллов с высокими  $Z$  можно найти в работе [39].

Мы рассмотрели деканалирование частиц на дефектах кристаллической решетки. Возможен также обратный процесс, т.е. переходы частиц из надбарьерных в каналированные состояния в глубине изогнутых кристаллов (объемный захват), обусловленные, в частности, рассеянием (как когерентным, так и некогерентным) на возмущениях кристаллической решетки вблизи дислокаций. Теория таких переходов рассмотрена в работах [40,41].

Работа была поддержана Российским фондом фундаментальных исследований.

## Список литературы

- [1] Møller S.P., Worm T., Clement M., Doble N., Elsener K. et al. // Nucl.Instr.Meth. 1994. V.**B84**. P.434.
- [2] Baranov V.I., Biryukov V.M., Bugorsky A.P., Chesnokov Yu.A., Kotov V.I. et al. // Nucl. Instr. and Meth. 1995. V.**B63**. P.366.
- [3] Бирюков В.М., Котов В.И., Чесноков Ю.А. // УФН. 1994. Т.**164**. No.10. С.1017.
- [4] Akbari H., Altuna X., Bardin S., Belazzini R., Biryukov V. et al. // Phys. Lett. 1993. V.**B313**. P.491.
- [5] Carrigan R.A. et al. //Nucl.Instr.and Meth. 1994. V.**B90**. P.128.
- [6] Jensen B.N. et al. *A proposal to test beam extraction by crystal channeling at the SPS: a first step towards a LHC extracted beam*. DRDC/P29, CERN (1991).
- [7] Carrigan R.A. et al. *Proposal for a test of low intensity extraction from the Tevatron using channeling in a bent crystal*. FNAL Proposal P853 (1991).
- [8] Costantini F. // Nucl.Instr.Meth. 1993. V.**A333**. P.125.
- [9] Chen D. et al. // Phys Rev. Lett. 1992. V.**69**. 3286.
- [10] Carrigan R.A. Fermilab FN-366 (1995).
- [11] Бирюков В.М. и др. — Препринт ИФВЭ 95-14. Протвино, 1995.
- [12] Forster J.S. et al. // Nucl. Phys. 1989. V.**B318**. P.301.
- [13] Feldman L.C., Mayer J.W., Picraux S.T. *Materials Analysis by Ion Channeling* (Academic Press, NY 1982).
- [14] Lindhard J.K. // *Dan. Vidensk.Selsk.Mat.Phys.Medd.* 1965. V.**34**. (1).
- [15] Ohtsuki Y.-H. *Charged Beam Interaction with Solids* (Taylor & Francis Ltd, London and New York, 1983).
- [16] Косевич А.М. *Дислокации в теории упругости*. — Киев: Наукова думка, 1978.
- [17] Quere Y. // *Phys.Stat.Sol.* 1968. V.**30**. 713.  
*Radiat. Effects.* 1972. V.**13**. P.57.
- [18] Kudo H. // *J.Phys.Soc.Jpn.* 1976. V.**40**. P.1645.  
//Nucl.Instr.Meth. 1980. V.**170**. 129.
- [19] Wielunski L. et al. //Nucl.Instr.Meth. 1980. V.**168**. P.323.
- [20] Ellison J.A. and Picraux S.T. //Phys.Lett. 1981. **83A**. (6) 271.

- [21] Kimura K., Mannami M. and Natsuaki N. // Jap. J. of Appl.Phys. 1982. V.**21**. P.1769.
- [22] Gärtner K. et al. //Nucl.Instr.Meth. 1984. V.**B4**. P.63.
- [23] Van Vliet D. //Phys.Stat.Sol. (a) 1970. V.**2**. 521.
- [24] Mazzone A.M. //Nucl.Instr.Meth. 1989. V.**B42**. P.317.
- [25] Picraux S.T. et al. //Phys. Rev. 1978. V.**B18**. P.2078.
- [26] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. — М.: Наука, 1973.
- [27] Кумахов М.А., Ширмер Г. Атомные столкновения в кристаллах. — М.: Атомиздат, 1980.
- [28] Deutsch M. et al. // *Appl.Phys.Lett.* 1987. V.**18**. P.1410.
- [29] Samsonov V.M. — In: *Relativistic Channeling* (eds. R.A. Carrigan, Jr. and J.Ellison, Plenum, NY, 1987) P.129.
- [30] Biryukov V.M., Bavizhev M.D. and Tsyganov E.N. *Estimate of the Influence of Dislocation Defects on Crystal Deflector Efficiency at 20 TeV*, SSCL report SSCL-N-777, October 1991
- [31] Biryukov V.M. //Phys. Rev. 1995. V.**E 51**, No. 4, 3522.
- [32] Biryukov V.M. et al. //Nucl.Instr. and Meth. 1994. V.**B86**. P.245.
- [33] Biryukov V.M. //Phys. Rev. Lett. 1985. V.**74**, No. 13, 2471.
- [34] Baranov V.I. et al. — Preprint IHEP 95–13. Protvino, 1995.
- [35] Baker S.I. — In: *Relativistic Channeling* (eds. R.A. Carrigan, Jr. and J. Ellison, Plenum, NY, 1987) P.391.
- [36] Baker S.I. et al. //Nucl.Instr.and Meth. 1994. V.**B90**. P.119.
- [37] Chesnokov Yu.A. et al. — In: *Proc. of 15 International Conference on High Energy Accelerators*, **1**, Hamburg, 1992, p.173
- [38] Elsener K. et al. //Nucl.Instr. and Meth.(to be published 1996.)
- [39] Seeger A. — In: *Relativistic channeling* (R.A. Carrigan, Jr and J. Ellison, eds. Plenum, NY, 1987) p.423.
- [40] Biryukov V.M. //Phys. Lett. 1995. V.**A 205**. P.340.
- [41] Biryukov V.M. //Phys. Lett. 1995. V.**A 205**, P.343.

*Рукопись поступила 14 марта 1996 г.*

В.М. Бирюков.

Деканалирование на дислокациях решетки в изогнутых кристаллах.

Оригинал-макет подготовлен с помощью системы  $\text{\LaTeX}$ .

Редактор Н.В.Ежела.

---

Подписано к печати 14.03.96. Формат  $60 \times 84/8$ .

Офсетная печать. Печ.л. 2,1. Уч.-изд.л. 1,6. Тираж 180. Заказ 728.

Индекс 3649. ЛР №020498 17.04.97.

---

ГНЦ РФ Институт физики высоких энергий  
142284, Протвино Московской обл.

