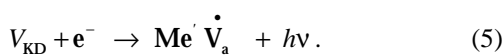
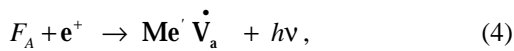


Рис. 1. Моделі ДВД і центрів забарвлення.

де $\bullet\bullet\bullet\bullet$ – іони основи; $Me \dot{V}_a \bullet\bullet\bullet\bullet Me \dot{V}_a$ – фрагмент іонного ланцюга, довжину якого обмежують домішково-вакансійні диполі; $Me \dot{V}_a$ – домішково-вакансійний диполь (ДВД); Me^- – негативно заряджений іон лужного металу; \dot{V}_a^+ – позитивно заряджена аніонна вакансія; $R(e^-, e^+)$ – створена іонізуючою радіацією електронно-діркова пара (e^-, e^+); w_1 – імовірність захоплення носіїв заряду (e^-, e^+) парою ДВД і, відповідно, створення ($F_A - V_{KD}$)-пари центрів забарвлення; w_2 – імовірність руйнування ($F_A - V_{KD}$)-пари центрів забарвлення внаслідок локалізації носіїв заряду (e^-, e^+) на центрах забарвлення і, відповідно, відновлення пари ДВД.

В міру нагромадження центрів забарвлення вступає в дію зворотна реакція, що є наслідком захоплення дірок F_A -центрами і електронів V_{KD} -центрами [3]:



Внаслідок висвітлювальної дії знебарвлення кожної пари центрів забарвлення супроводжується виникненням відповідної пари диполів. На стадії насичення забарвлення кристала настає динамічна рівновага між процесами генерації центрів забарвлення та висвітлювальною дією радіації. Згідно роботи [3], концентрація центрів забарвлення

на стадії насичення забарвлення визначається виразом:

$$C_I = \frac{w_1}{w_1 + w_2} C_0, \quad (6)$$

де C_I – концентрація ($F_A - V_{KD}$)-комплементарних пар центрів забарвлення у забарвленому кристалі, C_0 – концентрація пар ДВД у кристалі перед його опроміненням.

II. Термоіндуковані перетворення центрів забарвлення

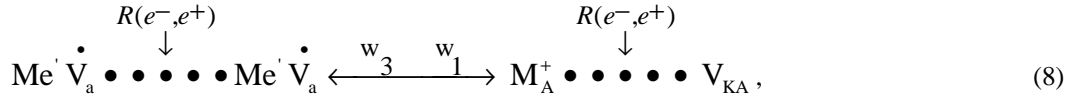
($F_A - V_{KD}$)-пари термічно стабільні до температури порядку $T \sim 200$ К [1]. При вищих температурах аніонна вакансія мігрує в ґратці кристала, що обумовлює виникнення максимуму максимуму термостимульованої деполяризації (ТСД) $T = 205$ К [1, 3]. Мобільна вакансія локалізується на F_A -центрі й утворюється M_A^+ -центр. Внаслідок імпульсного прогріву забарвленого кристала до температур $T > 200$ К ($F_A - V_{KD}$)-пара центрів зникає в кристалі та утворюється ($M_A^+ - V_{KA}$)-комплементарна пара. Моделі M_A^+ і V_{KA} -центрів зображені на рис. 1, а механізм їх утворення можна описати наступною схемою:



де F_A – F-центр, локалізований в області ДВД; V_{KD} – дірка, окалізована в околі ДВД; M_A^+ – аніонна

бівакансія з локалізованим електроном, розташована в околі домішкового іона; V_{КА} – дірка, локалізована в околі домішкового іона.

(M_A⁺ – V_{КА})-пари центрів забарвлення генеруються не тільки після імпульсного прогріву кристала до температури T ~ 205 K (рівняння (7)), а й безпосередньо під час опромінення при T > 250 K [1].



де w₁ і w₃ – імовірності утворення (M_A⁺ – V_{КА})- пар та їх знебарвлення відповідно.

Оскільки M_A⁺ і V_{КА} є дефектами дипольного типу, то ймовірності w₁ і w₃ збігаються за величиною. Отже, гранична концентрація (M_A⁺ – V_{КА})-пар центрів забарвлення, які утворилися в кристалах, опроміненіх при кімнатних температурах, описується рівнянням:

$$C_2 = \frac{w_1}{w_1 + w_2} C_0 = \frac{1}{2} C_0, \quad (9)$$

де C₂ – концентрація (M_A⁺ – V_{КА})-пар центрів забарвлення на стадії насичення забарвлення кристала, опроміненого при T > 200 K; C₀ – концентрація пар ДВД перед опроміненням кристала.

В таблиці 1 наведені результати розрахунків радіаційної чутливості кристалів флюоритів, легованих лужними металами, в залежності від концентрації домішки і температури опромінення, розрахованих за методикою, описаною в роботах [2, 3].

IV. Співставлення теоретичних розрахунків з експериментальними даними

З експериментальних даних, приведених в роботі [1], випливає, що на радіаційну чутливість кристалів впливають два фактори: концентрація легуючих добавок і температура, при якій опромінюються зразки. Дані властивості кристалу пояснюються в одновимірній моделі іонного кристалу, згідно якої

III. Генерація центрів забарвлення в області кімнатної температури

Процес їх утворення та радіаційного знебарвлення можна описати у вигляді наступної схеми:

радіаційні процеси розглядаються як результат розпаду електронно-діркової пари в іонному ланцюгу, довжина якого обмежена домішково-вакансійними диполями (рівняння (3) і (8)): якщо компоненти електронно-діркової пари локалізуються на ДВД – в кристалі генеруються центри забарвлення; якщо локалізація відбувається на центрах забарвлення – відбувається радіаційне висвічування кристала.

Із даних, приведених в таблиці 1, випливає, що ймовірність утворення центрів забарвлення w₁ менша за ймовірність їх висвічування w₂. Ця закономірність пов'язана з тим, що електричні поля, створені електрично зарядженим центром забарвлення, значно сильніші за поля, створені домішково-вакансійним диполем, отже, ймовірність захоплення вільних носіїв електричного заряду монополями вища порівняно з електричними диполями.

Із рівняння (6) випливає, що гранична концентрація центрів забарвлення, опроміненіх при низьких температурах, залежить від двох факторів: концентрації домішково-вакансійних пар в кристалі C₀ і від значення коефіцієнта k₁=w₁/(w₁+w₂), величина якого в свою чергу залежить від концентрації домішки в кристалі C (таблиця 1).

Збільшення радіаційної чутливості в кристалах флюоритів з підвищенням температури опромінення зразків обумовлене зміною структури центрів забарвлення внаслідок термоіндукованих перетворень: (F_A – V_{КА}) → (M_A⁺ – V_{КА})-перетворення. Внаслідок даних перетворень відбувся перехід від електрично заряджених центрів забарвлення (центрів монопольного типу) до електронейтральних центрів (центрів дипольного типу), що зменшує ймовірність висвітлювальної дії

Таблиця 1

Параметри радіаційної чутливості кристалів CaF₂-Me (Me = Li, Na)

C	l	w ₁	w ₂	C ₁ /C ₀	C ₂ /C ₀	C ₂ /C ₁	E, eВ
0,50	6a	0,100	0,27	0,27	0,50	1,85	150
0,10	10a	0,069	0,29	0,19	0,50	2,60	220
0,01	21a	0,032	0,29	0,10	0,50	5,00	470

іонізуючої радіації w_3 ($w_3=w_1$). При кімнатній температурі концентрація центрів забарвлення розраховується згідно рівняння (9), а співвідношення концентрації центрів забарвлення, опромінених при кімнатній температурі C_2 , до концентрації центрів забарвлення, опромінених при низьких температурах C_1 , складає величину:

$$\frac{C_2}{C_1} = \frac{1}{2} \frac{w_1 + w_2}{w_2}, \quad (10)$$

Дане співвідношення змінюється в залежності від концентрації домішки в границях від 2 до 5 разів (таблиця 1), що узгоджується з експериментальними результатами роботи [1].

Висновки

З одержаних результатів випливає, що на

радіаційну чутливість кристалів впливає не лише концентрація дорадіаційних структурних дефектів в ґратці кристала, а вирішальну роль відіграє їх електричний заряд. Надвисоку радіаційну чутливість мають ті іонні кристали, дорадіаційні дефекти яких володіють надлишковим відносно кристалічної ґратки електричним зарядом.

Чорній З.П. - доктор фізико-математичних наук, професор кафедри фізики;

Пірко І.Б. - старший викладач кафедри обчислювальної техніки і моделювання технологічних процесів;

Салапак В.М. - кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри фізики;

Дячук М.В. - асистент кафедри фізики.

- [1] Z.P. Chornij, I.B. Pirko, V.M. Salapak, M.V. Djachuk, *Physics and Chemistry of Solid State*, 13(4), 879 (2012).
- [2] Z.P. Chornyj, I.B. Pirko, V.M. Salapak, *Functional materials*, 18(2), 206 (2011).
- [3] Z.P. Chornij, I.B. Pirko, V.M. Salapak, M.R. Panasjuk, *Zhurnal fizichnih doslidzhen'*, 16(1), 1602 (2012).
- [4] Z.P. Chornij, G.A. Shhur, S.I. Kachan, S.P. Dubel't. *Izvestija vuzov, ser. fiz.* 6, 116 (1988).
- [5] Z.P. Chornij, M.R. Panasjuk, A.S. Krochuk, *Izvestija vuzov, ser. fiz.* 9, 106 (1984).
- [6] Z.P. Chornij, *Phys. Stat. Sol.* 223, 757 (2001).
- [7] Z.P. Chornij, S.I. Kachan, *Fizika tverdogo tela* 48(2), 239 (2006).

Z.P. Chornij¹, I.B. Pirko², V.M. Salapak¹, N.V. Djachuk¹

Color Centers in CaF₂-Na and CaF₂-Li Crystals. II. Results of Experimental Research

¹Department of Physics, National Forestry University of Ukraine, 105 Gen. Chuprynyk St., Lviv, 79057, Ukraine

²Department of Computer Engineering and Modeling Processes, National Forestry University of Ukraine, 103 Gen. Chuprynyk St., Lviv, 79057, Ukraine, e-mail: pirko1966@mail.ru

In the one-dimensional model of ionic crystals the parameters of the radiation sensitivity of the crystals fluorites doped with alkali metal: w_1 - probability of formation of color centers in the crystal lattice; w_2 - vysvitlyvalnoyi probability of radiation. The adsorbed concentration of color centers in the crystal at low temperatures ($T < 200$ K) $C_1 = \frac{1}{2} \cdot w_1 / (w_1 + w_2)$, and at temperatures $T > 250$ K $C_2 = \frac{1}{4} \cdot C$, where C - concentration of impurities in the crystal. The dependence of the concentration of color centers on the content of alloying elements in the crystal and the structure of color centers. The calculations of fluorite crystals radiation parameters were conducted in the frame work of ionic crystal one dimensional model. The theoretical results were compared with experimental data.

Keywords: fluorite, impurity-vacancy dipoles, color centers, thermally depolarization, one-dimensional model.