

12. Шостак В.В. Наукові основи прогнозування технічного стану та обґрунтування структури ремонтного циклу обладнання для виробництва деревностружкових плит: Автореф. дис. ... д-ра техн. наук. – Львів: УкрДЛТУ, 1999. – 35 с.

13. Черняхівський В.В. Dilphi-4: сучасна технологія візуального програмування. – Львів: БаК, 1999. – 196 с.

14. Архангельский А.Я. Программирование в C++ Builder 6. – М.: Изд-во БИНОМ, 2003. – 1152 с.

15. Григор'єв А.С., Пилипчук М.І. Створення динамічної моделі процесу різання лісопильної рами на ЕОМ// Наук. вісник УкрДЛТУ: Зб. наук.-техн. праць. – Львів: УкрДЛТУ, 1998, вип. 8. – С. 159-160.

16. Пилипчук М.І., Романчук М.В. Застосування ЕОМ для дослідження процесу калібрування-шліфування деревностружкових плит// Наук. вісник УкрДЛТУ: Зб. наук.-техн. праць. – Львів: УкрДЛТУ. – 1999, вип. 9.6. – С. 176-177.

УДК 535.343.2

*Проф. З.П. Чорний, д-р фіз.-мат. наук; І.Б. Пірко;
доц. В.М. Салапак, канд. фіз.-мат. наук; М.В. Дячук – УкрДЛТУ*

ГЕНЕРАЦІЯ ЦЕНТРІВ ЗАБАРВЛЕННЯ В ЛЕГОВАНИХ КРИСТАЛАХ ФЛЮОРИТІВ: ОДНОВИМІРНА МОДЕЛЬ

Проведено розрахунки конфігурації потенціальної ями для електрона та дірки в електростатичному полі, створеному моно- та бідиполями, які введені в іонний ланцюг. Розраховано величину ефективності генерації центрів забарвлення та їх релаксації для двох випадків розміщення дипольних комплексів: дипольні моменти $\vec{p}_e$ – сусідніх комплексів паралельні і $\vec{p}_e$ – антипаралельні. Досліджено залежність ефективності генерації центрів забарвлення залежно від віддалі між сусідніми дипольними комплексами.

*Prof. Z.P. Chornij; I.B. Pirko; doc. V.M. Salapak;
N.V. Dyatchouk – USUFWT*

Generation of coloration centers in admixture crystals of fluorites: one-measure model

There have been performed configuration calculations of the potential pit for electron and the hole in electrostatic field, created by mono- and bidipoles which are inserted into the ion chain. The amount of generation efficiency for coloration centers and their relaxation for two cases of dipole complex placing have been calculated: dipole moments of $\vec{p}_e$ neighbouring complexes are parallel and $\vec{p}_e$ are antiparallel. There has been researched the dependence of generation efficiency of coloration centers depending upon the distance between the neighbouring dipole complexes.

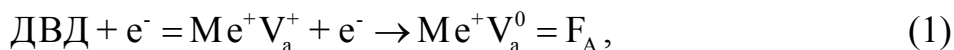
У роботі [1] ми розглянули основні принципи побудови одновимірної моделі механізму генерації центрів забарвлення в легованих кристалах із структурою флюориту. У запропонованій моделі реальний кристал розглядається як ланцюг, побудований із іонів основи і обмежений по довжині домішково-вакансійними диполями (ДВД). Центри забарвлення виникають внаслідок розпаду в іонному ланцюгу електронно-діркових пар. Запропонована модель дає змогу передбачити структуру центрів забарвлення, їх граничну концентрацію та термоіндуковані перетворення. Наведені в роботі [1] результати мають в основному ілюстраційний характер. У цій роботі подані результати досліджень дрейфу носіїв заряду вздовж іонного ланцюга під

дією електростатичного поля, створеного точковими структурними дефектами або центрами забарвлення, які мають структуру електричних диполів.

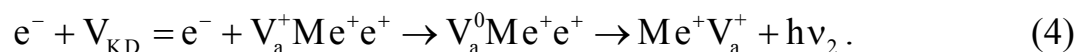
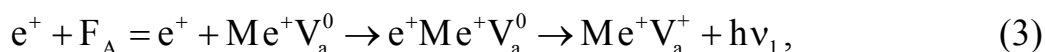
1. Генерація центрів забарвлення при низьких температурах

Під терміном "низькі температури" розуміють температури, при яких іонні процеси у кристалі "заморожені" – відсутня реорієнтація диполів та просторова міграція аніонних вакансій. При опроміненні кристала радіацією в ньому генеруються електронно-діркові пари, релаксація яких може відбуватися декількома шляхами [2]:

- вільні електрони і дірки зникають у кристалі внаслідок локалізації на ДВД з утворенням F_A і V_{KD} -центрів:



- рекомбінації з центрами забарвлення:

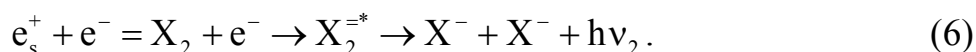


Рекомбінація супроводжується свіченням, яке за своєю природою є аналогом α -люмінесценції в лужно-галоїдних кристалах (тунелювання електрона з s-стану F_A -центра на основний рівень V_K -центра [3]).

- при низьких температурах у кристалах флюоритів має місце автолокалізація дірок. Тому, крім реакцій (2) і (3), які характерні для "гарячих" дірок, має місце самолокалізація дірок в ідеальній ґратці кристала:



Автолокалізовані дірки є центрами рекомбінації для зонних електронів. У результаті рекомбінації виникають автолокалізовані екситони, розпад яких супроводжується виникненням власної люмінесценції [4, 5]:



Таким чином, можна виділити три канали релаксації енергії збуджуючої радіації:

- утворення центрів забарвлення;
- виникнення α -люмінесценції;
- виникнення люмінесценції автолокалізованих екситонів.

Кількісне співвідношення між енергетичними втратами по кожному з каналів залежить від концентрації домішки.

2. Електричні потенціали при диполь-дипольній взаємодії

На рис. 1-3 наведено результати розрахунку електричного потенціалу, створеного просторово розділеними диполями в іонному ланцюгу для трьох концентрацій домішок: $C=0,5$ мол. % (рис. 1); $C=0,1$ мол. % (рис. 2); $C=0,01$ мол.% (рис. 3) і для трьох конфігурацій диполів: $V_a^+ \text{Me}^+ - \text{Me}^+ V_a^+$ (рис. 1, а-3 а), $\text{Me}^+ V_a^+ - V_a^+ \text{Me}^+$ (рис. 1 б-3 б), $\text{Me}^+ V_a^+ - \text{Me}^+ V_a^+$ (рис. 1, с-3 с). Конфігурації потенціальних ям для дірок відображають криві 1, для електронів – криві 2. Коли електричні моменти обох диполів антипаралельні

(рис. 1, а-3 а і рис. 1, b-3 b), потенціальні ями симетричні відносно осі X. Якщо моменти диполів паралельні – потенціальні ями є дзеркальним відображенням відносно осі ординат (рис. 1, с-3 с).

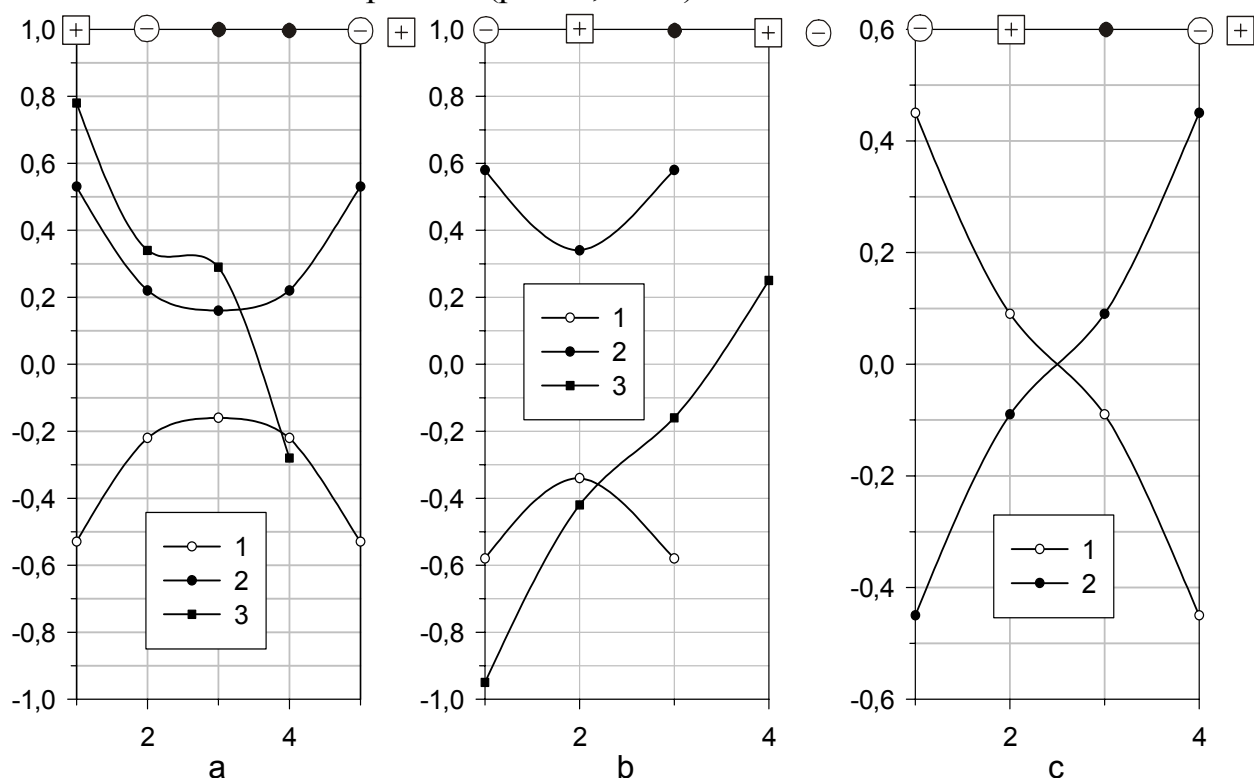


Рис. 1. Просторові зміни величини електростатичної взаємодії носіїв заряду з електричними диполями, що розміщені в іонному ланцюгу на віддалі $l = 5a$ (а – параметр ґратки): 1 – енергія взаємодії дірок; 2 – енергія взаємодії електронів; 3 – енергія взаємодії носіїв заряду в електростатичному полі, створеному центрами забарвлення і ДВД

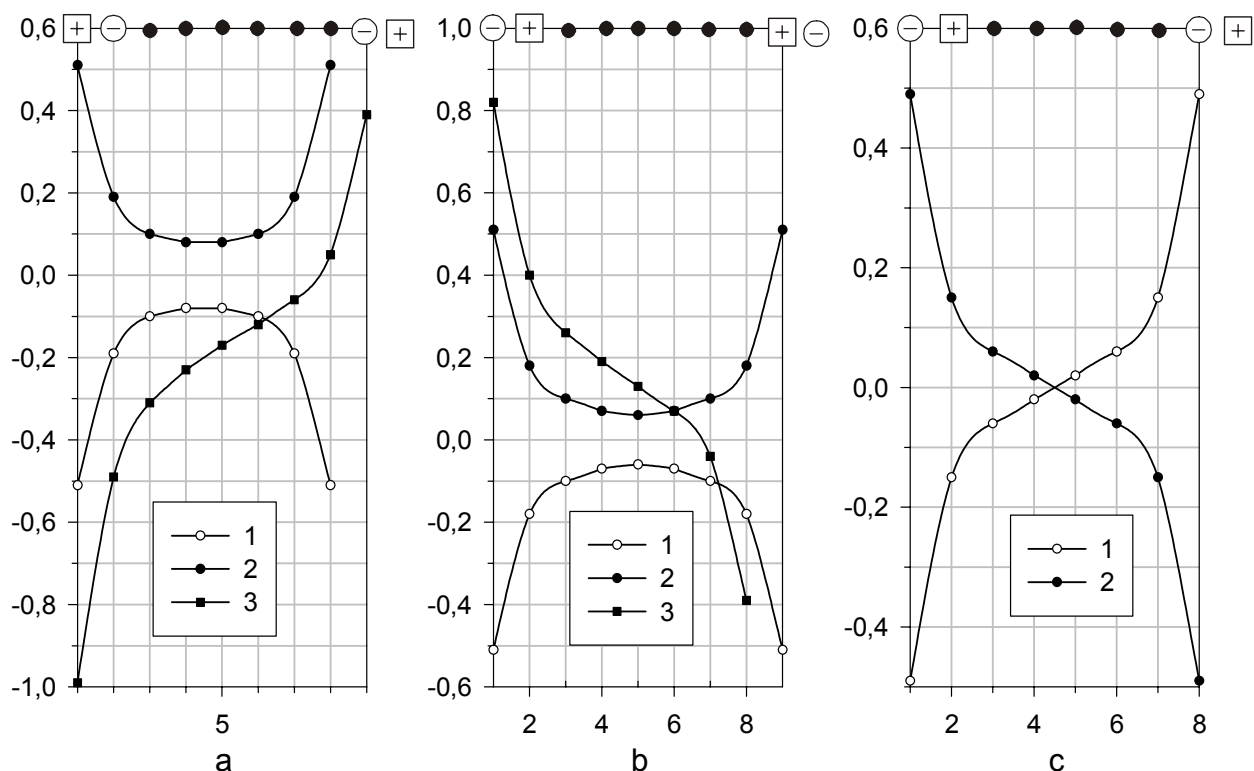


Рис. 2. Те саме, що і на рис. 1 ($l = 10a$)

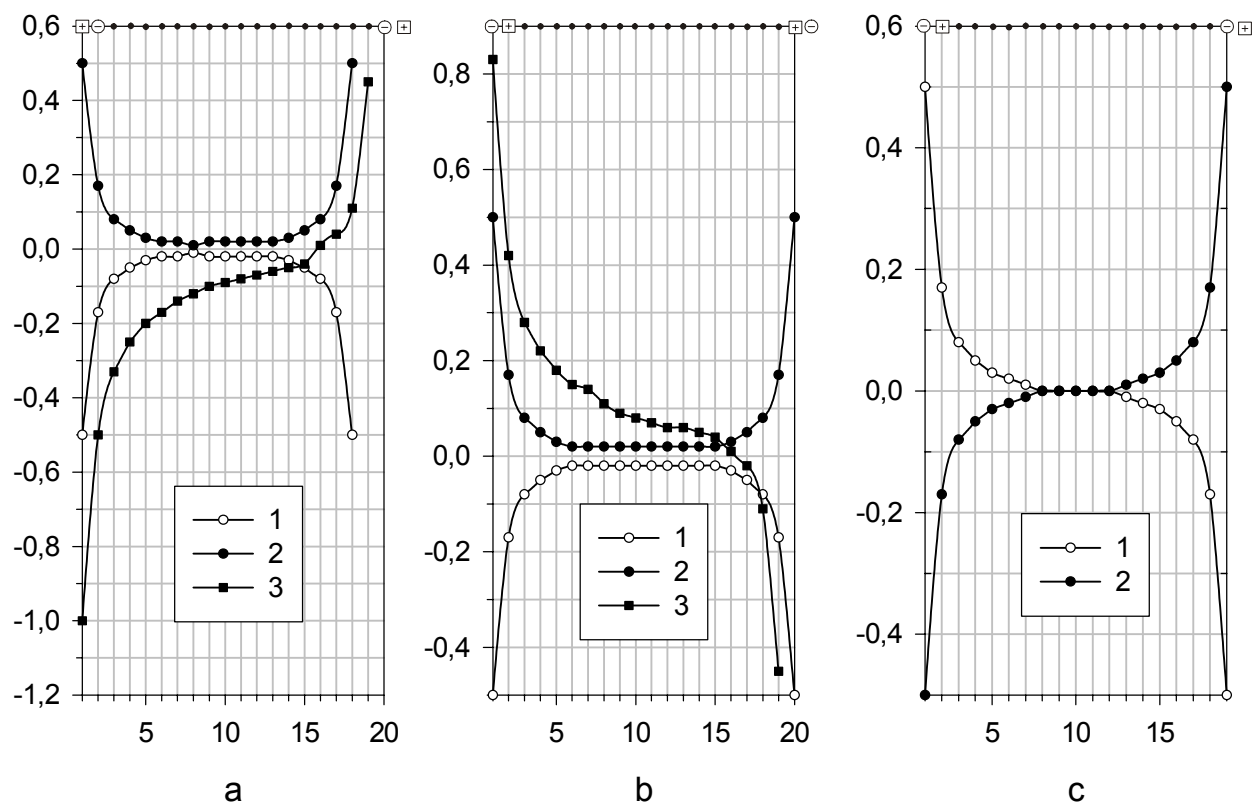


Рис. 3. Те саме, що і на рис. 1 і 2 ($l = 20 \text{ а}$)

Релаксація енергії електронно-діркової пари у випадку, коли електричні диполі антипаралельні, відбувається рекомбінаційним шляхом, супроводжується активаторною люмінесценцією і протікає без утворення центрів забарвлення. Релаксація енергії протікає двостадійно. На першій стадії дірка або електрон дрейфує в напрямі ДВД, локалізується на ньому з утворенням відповідно V_{KD} -центра (рис. 1 а-3 а, крива 1) або F_A -центра (рис. 1 б-3 б, крива 2). У результаті цих процесів утворюється іонний ланцюг, обмежений по довжині, з одного боку – центром забарвлення (монополем), а з іншого – ДВД. На другій стадії процесу електрон (дірка) дрейфує у полі, створеному монополем, в напрямку центра забарвлення (крива 3), рекомбінує з ним з виділенням α -свічення ((3),(4)).

У випадку, коли електронні моменти диполя паралельні (рис. 1 с-3 с), електрон і дірка дрейфують у протилежних напрямках, захоплюються диполями (рівняння 1, 2) з утворенням F_A і V_{KD} -центрів.

3. Електронно-діркова взаємодія

Наведені вище схеми утворення центрів забарвлення та механізму протікання рекомбінаційних процесів не враховують кулонівської взаємодії між генерованими радіацією електроном і діркою. Цю взаємодію можна врахувати тільки наближено, оскільки топологія розміщення електрона і дірки в іонному ланцюгу невідома. У цій роботі топологія розміщення електронів і дірок враховувалася таким чином. Електронно-діркова пара утворюється в ланцюгу при поглинанні іоном кванта світла. Мінімальна енергія, необхідна для утворення електронно-діркової пари, збігається з енергією збудження аніонного екситона (нульовий розкид електронно-діркової пари). Якщо енергія збудження вища, утворюються просторово розділені електронно-діркові

пари. Чим енергія збудження фотона вища, тим більший розліт компонентів електронно-діркової пари. Виходячи із наведених міркувань, найбільш простим випадком можна вважати такий розподіл, при якому електрони і дірки з рівною імовірністю розташовуються в будь-якому із вузлів ланцюга. Сказане ілюструє рис. 4, на якому відстань між електронно-дірковою парою з рівною ймовірністю набуває значень від 0 до na , де a – параметр ґратки. Механізм генерації центрів забарвлення, зображений на рис. 4 а, має місце за умови, коли електростатичне притягання носія заряду до диполя більше за кулонівську взаємодію між електроном і діркою. У протилежному випадку відбувається рекомбінація електрона з діркою і виникає власна люмінесценція.

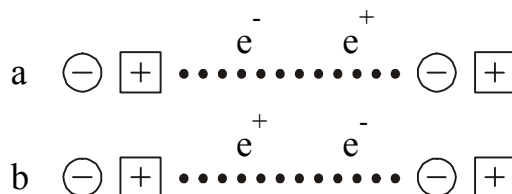


Рис. 4. Модель іонного ланцюга з електронно-дірковою парою: а) носії заряду притягуються до диполів; б) відштовхуються від електричних диполів

Якщо топологія розміщення електронно-діркової пари набуває вигляду, зображеного на рис. 4 б, то у силу електростатичного відштовхування носіїв заряду від диполя центри забарвлення не утворюються і має місце тільки електронно-діркова рекомбінація.

В таблиці наведені сумарні розрахунки ефективності перебігу кожного із трьох каналів релаксації енергії іонізуючого випромінювання.

Табл. Розподіл втрат енергії іонізуючої радіації у кристалах $\text{CaF}_2\text{-Me}^+$ залежно від концентрації домішки C % та відстані між ДВД (l)

C, моль %	l від- стань	початкова стадія опромінення			кінцева стадія забарвлення	
		власне свічення	активаторне свічення	центри забар- влення	власне свічення	активаторне свічення
0,01	20 a	82,5 %	10 %	7,5 %	82,5 %	17,5 %
0,1	10 a	50 %	40 %	10 %	50 %	50 %
0,5	5 a	25 %	60 %	15 %	25 %	75 %

З таблиці випливає, що зі збільшенням концентрації активатора зростає ефективність утворення центрів забарвлення та енергетичний вихід активаторної люмінесценції. Зіставлення розрахункових результатів з експериментальними даними планується обговорити в наступних публікаціях.

Література

1. Чорній З.П., Пірко І.Б., Салапак В.М., Дячук М.В. Механізм генерації центрів забарвлення в легованих кристалах флюоритів. I. Одномірна модель.
2. Чорній З.П. Іонні процеси в радіаційно забарвлених кристалах галогенідів дво- і тривалентних металів: Дис. ... д-ра техн. наук. – Львов: УкрДЛТУ. – 2000. – 464 с.
3. Чорній З.П., Панасюк М.Р., Крочук А.С., Максимович Х.К. Фізична електроніка. – 1981, вип. 22. – С. 75.
4. Williams R.T., Kabler M.N., W. Hayes, Stott J.P. Phys. Rev. B. 1976. – V.14. № 1. P. 725.
5. Call P.L., Hayes W., Kabler M.N. Sol. State Phys. – 1975. V.8 № 1 P. L60-L62.