

Арапов Байыш, д.ф.-м.н., профессор,
Орозбаева Айнагул Асланбековна,
аспирант, Акылбек к. Эльвира, Тагаева
Аширбу – магистранты
Ошский Государственный Университет
E-mail: baish-arapov@yandex.ru

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТЖИГА РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В ЩГК

На основе математического метода моделирования получено кинетическое уравнение отжига радиационных дефектов в кристаллах, для коррелированных и некоррелированных пары центров и подвижных дефектов. Для многостадийных процессов кинетика распада определяется концентрацией коррелированных и некоррелированных паррекомбинационных дефектов.

Ключевые слова: математическое моделирование, радиационные дефекты, кристаллы, коррелированные пары, некоррелированные пары

Arapov Baiysh – D.Ph.-M.Sc., prof.,
E-mail: baish-arapov@yandex.ru
Orozbaeva Ainagul Aslanbekovna, Akylbek kyzy
Elvira, Tagaeva Ashirby, graduate students,
Osh State University

MATHEMATICAL MODELING ANNEALING OF RADIATION DEFECTS IN SGC

On the basis of mathematical modeling method the kinetic equation of annealing of radiation defects in crystallsis obtained for correlated and uncorrelated pairs of centers and mobile defects. For multistage processes, the decay kinetics is determined by the concentration of correlated and uncorrelated pairs of recombination defects.

Key words: mathematical modeling, radiation defects, alkali-halide crystals, correlated pairs, uncorrelated pairs.

Известно, что в образовании, отжига и взаимопревращения радиационных дефектов определенную роль играют подвижные ионные дефекты, образуемые при радиационно-стимулированных и термостимулированных процессах в ионных кристаллах. Подвижные дефектыобразованные в результате радиационного облучения имеют конечную длину свободного пробега, поэтому для описания кинетики термического распада дефектов рассмотрена диффузионная теория рекомбинации Антонова-Романовского [3].

В результате экспериментального исследования установлено, что процессы термического отжигарадиационных дефектов в щелочно-галлоидных кристаллах (ЩГК) имеют многостадийный характер. Однако кинетика и характер процессов, приводящих к многостадийному распаду этих дефектов, теоретически обоснованы недостаточно.

Для моделирования многостадийного характера термического отжига дефектов в твердых телах необходимо сперва остановить процесс отжига на определенной стадии процесса, за тем надо приводить к отжигу дефектов в следующей стадии процесса.

В работах [2-6], при использовании диффузионной теории рекомбинации, получены дифференциальные уравнения для отжига радиационных дефектов для

коррелированной пары частиц. Генетически связанные, коррелированные между собой пары частиц характеризуются однокомпонентной парой N . Однако некоррелированные между собой радиационно-наведенные центры подвижные дефекты на основе выше указанной теории не рассмотрены. В данной работе рассмотрен термический отжиг генетически несвязанных дефектов в ионных кристаллах.

При этом было использовано дифференциальное уравнение для описания рекомбинации генетически не связанных между собой пар в следующем виде (центры окраски N и подвижные дефекты n). Для некоррелированных между собой рекомбинационных частиц каждый тип частиц характеризуется своей концентрацией $N(t)$ и $n(t)$. Концентрации некоррелированных частиц можно теперь изменять различно, увеличивая одни и уменьшая другие. Тогда закономерности их рекомбинаций будут определяться от рекомбинации некоррелированных между собой частиц N и n .

Исходя из представлений диффузионной теории рекомбинации для генетически несвязанных между собой центров и дефектов-разрушителей, многостадийные кривые термического отжига (ТО), происходящие по реакции первого порядка, получить не удалось. Для решения этого вопроса в этом случае были использованы представления диффузионной теории рекомбинации, когда корреляция подвижных дефектов сконцентрацией центров окраски данного типа происходит частичной взаимодействует так же, как генетически связанные, коррелированные пары.

Если N_0 – концентрация всех распадающихся дефектов данного типа, а $(N - \Delta N_0)$ – концентрации центров коррелированных с дефектами-разрушителями, то после рекомбинации концентрация оставшихся центров $-\Delta N_0$. Если исчерпается концентрация центров N_0 на концентрации $\frac{\Delta N_{01}}{N_0}$, то после первой стадии термического отжига процесс должен остановиться после первой стадии.

На основе диффузионной теории рекомбинации нами [4,5] предложен уравнение для скорости рекомбинации коррелированных пар $\frac{dN}{dt}$ под действием частично коррелированных дефектов-разрушителей.

$$-\frac{dN(t)}{dt} = 4\pi r_1 D_1 (N - \Delta N_{01}) \quad (1)$$

Для изотермических условий это уравнение будет иметь вид:

$$-\frac{dN(T)}{dT} = \frac{4\pi r_0}{\beta} D_{01} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} (N - \Delta N_{01}) \quad (2)$$

Решение этого дифференциального уравнения будет следующим виде:

$$\frac{N}{N_0} = \left\{ \left[\left(1 - \frac{\Delta N_{01}}{N_0} \right) \exp \left(- \frac{4\pi r_{01}}{\beta} D_{01} \int_{T_0}^T e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} dT \right) \right]^{-1} + \left(\frac{\Delta N_{01}}{N_0} \right) \right\} \quad (3)$$

Тогда процесс, определяющийся этим выражением, приводит к распаду на первой стадии термического отжига и уменьшению относительной концентрации центров до $\left(\frac{\Delta N_{01}}{N_0} \right)$, т.к. второй множитель первого слагаемого уменьшается экспоненциально с ростом температуры и стремится к нулю. Кинетика этого процесса приведена на рис. 1.

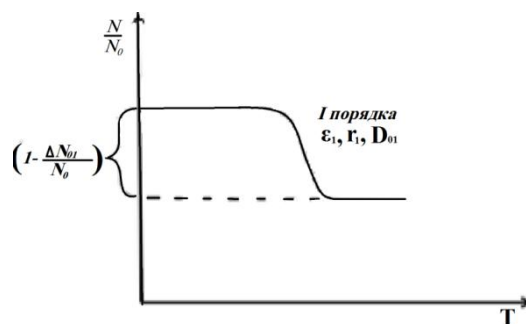


Рис.1. Изменение концентрации некоррелированных частиц

Для дальнейшего распада центров окраски, оставшихся после первой стадии ТО, необходимо дальнейшее действие ионов-разрушителей.

Характер дальнейшего распада центров зависит от таких факторов, какие значения имеют величины ΔN_{01} , т.е. от концентрации центров, оставшихся после первой стадии термического отжига дефектов.

Рассмотрим отдельные случаи:

1) Если ΔN_{01} – коррелированная пара центров и подвижных дефектов, тогда вторая стадия кинетики процесса термического отжига происходит по реакции первого порядка. В этом случае для коррелированных пар центров окраски возможны два случая.

1а) Коррелируемые с центрами окраски дефекты-разрушители вызывают отжиг центров окраски на второй стадии ТО того же типа, что и у дефектов разрушителей, вызвавших распад центров окраски на первой стадии. Но дефекты-разрушители, вызывающие распад центров окраски на второй стадии, образуются в ходе релаксации.

В этом случае на оставшиеся концентрации центров окраски $\frac{\Delta N_{01}}{N_0}$ действуют коррелированные дефекты того же типа, но оставшиеся из комплементарных микродефектов. Они доведут эту корреляцию до нуля, и термический отжиг доходит до конца. Тогда имеем двухстадийные кривые ТО, обе стадии которого происходят по реакции первого порядка.

Кинетическое уравнение в этом случае имеет следующий вид:

$$\frac{N}{N_0} = \left[\left(1 - \frac{\Delta N_{01}}{N_0} \right) \exp \left(- \frac{4\pi\tau_{01}}{\beta} D_{01} \int_{T_0}^T e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} dT \right) + \left(\frac{\Delta N_{01}}{N_0} \right) \times \left[\exp \left(- \frac{4\pi\tau_{02}}{\beta} D_{01} \int_{T_0}^T e^{-\frac{\varepsilon_1}{kT}} dT \right) \right] \right] \quad (4)$$

В процессе термической релаксации вторая стадия ТО идет по реакции первого порядка до конца, некоррелированными дефектами того же типа, но образующейся из коррелированных дефектов образующихся в ходе релаксации, из комплементарных микродефектов (см., рис.2. 1а-случай).

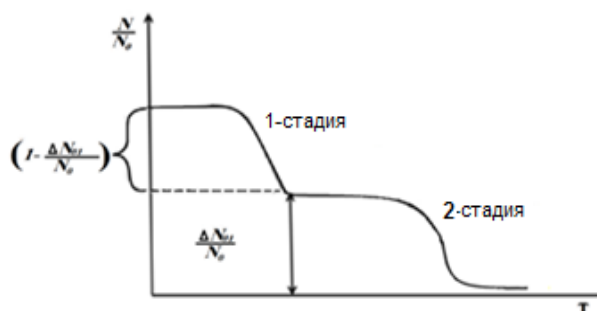


Рис. 2.

1а-случай: 1-стадия: I-порядка; $\varepsilon_1, r_{01}, D_{01}$, 2-стадия: I-порядка; $\varepsilon_1, r_{02}, D_{01}$,

1б-случай: 1-стадия: I-порядка; $\varepsilon_1, r_{01}, D_{01}$, 2-стадия: I-порядка; $\varepsilon_2, r_{02}, D_{02}$,

1б) Коррелируемые с центрами данного типа дефекты-разрушители другого типа, чем те, которые вызвали распад центров окраски на первой стадии ТО, и имеют характеристики $\varepsilon_2, r_{02}, D_{02}$. В этом случае вторая стадия тоже происходит по кинетике первого порядка. На оставшиеся концентрации центров окраски $\frac{\Delta N_{01}}{N_0}$ действуют

коррелированные дефекты-разрушители другого типа: $\varepsilon_2, r_{02}, D_{02}$. Тогда также имеем двухстадийную кривую, в которой обе стадии происходят по кинетике первого порядка (см., рис.2. 1б.).

$$\frac{N}{N_0} = \left[\left(1 - \frac{\Delta N_{01}}{N_0} \right) \exp \left(- \frac{4\pi r_{01}}{\beta} D_{01} \int_{T_0}^T e^{-\frac{\varepsilon_1}{kT}} dT \right) + \left(\frac{\Delta N_{01}}{N_0} \right) \right] \times \left[\exp \left(- \frac{4\pi r_{02}}{\beta} D_{02} \int_{T_0}^T e^{-\frac{\varepsilon_2}{kT}} dT \right) \right] \quad (5)$$

2) Если ΔN_{01} – некоррелированная пара центров и дефектов-разрушителей. Тогда вторая стадия ТО протекает по реакции второго порядка. В случае для некоррелированных пар центров и дефектов-разрушителей возможны три случая.

2а) Некоррелированными дефектами являются дефекты того же типа, что и вызвали распад центров на первой стадии термического отжига, но разлетевшиеся от центра данного типа на более далекие расстояния, чем дефекты-разрушители, вызвавшие первую стадию.

В этом случае на оставшиеся концентрации центров $\frac{\Delta N_{01}}{N_0}$ действуют

некоррелированные дефекты того же типа, что и вызвавшие первую стадию, но разлетевшиеся друг от друга более далекие расстояния. Тогда имеем:

$$\frac{N}{N_0} = \left[\left(1 - \frac{\Delta N_{01}}{N_0} \right) \exp \left(- \frac{4\pi r_{01}}{\beta} D_{01} \int_{T_0}^T e^{-\frac{\varepsilon_1}{kT}} dT \right) + \left(\frac{\Delta N_{01}}{N_0} \right) \right] \times \left[1 + \frac{4\pi r_{02}}{\beta} D_{01} \Delta N_{01} \int_{T_0}^T e^{-\frac{\varepsilon_1}{kT}} dT \right] \quad (6)$$

Кинетика такого процесса приведена на рис.3 (2а-случай).

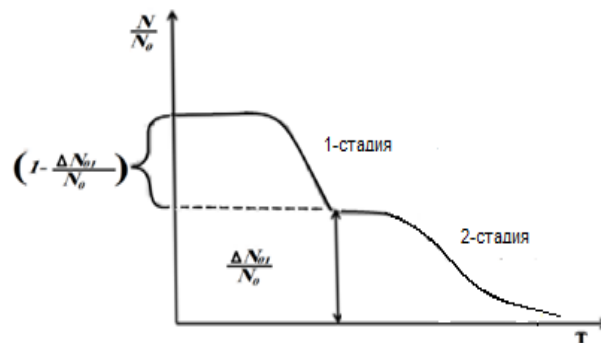


Рис. 3

2а-случай: 1-стадия: I-порядка; $\varepsilon_1, r_{01}, D_{01}$, 2-стадия: II-порядка; $\varepsilon_1, r_{02}, D_{01}$,

2б-случай: 1-стадия: I-порядка; $\varepsilon_1, r_{01}, D_{01}$, 2-стадия: II-порядка; $\varepsilon_1, r_{01}, D_{01}$,

2в-случай: 1-стадия: I-порядка; $\varepsilon_1, r_{01}, D_{01}$, 2-стадия: II-порядка; $\varepsilon_2, r_{02}, D_{02}$,

2б) Некоррелированными дефектами являются дефекты того же типа, что и те, которые вызвали распад центров данного типа на первой стадии ТО, но которые образуются от микродефектов, некоррелированных с центрами, имеющими очень большую

концентрацию. Тогда вторая стадия ТО, образуемая отнекоррелированных дефектов большой концентрации, идет по реакции второго порядка (см., рис. 3. 2б-случай).

В этом случае на оставшиеся концентрации центров окраски действуют некоррелированные дефекты того же типа, образующиеся в ходе релаксации, отщепленные от некоррелированных микродефектов, концентрации которых достаточно большие. Тогда имеем

$$\frac{N}{N_0} = \left[\left(1 - \frac{\Delta N_{01}}{N_0} \right) \exp \left(- \frac{4\pi r_{01}}{\beta} D_{01} \int_{T_0}^T e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} dT \right) + \left(\frac{\Delta N_{01}}{N_0} \right) \right] \times \exp \left(- \frac{4\pi r_{02}}{\beta} D_{02} \int_{T_0}^T e^{-\frac{\varepsilon_2}{kT}} dT \right) \quad (7)$$

2в) Некоррелированными дефектами являются дефекты другого типа, чем те, которые привели к первой стадии ТО и имеют характеристики $\varepsilon_2, r_{02}, D_{02}$. В этом случае на оставшиеся концентрации центров действуют некоррелированные пары дефектов другого сорта. Тогда имеем:

$$\frac{N}{N_0} = \left[\left(1 - \frac{\Delta N_{01}}{N_0} \right) \exp \left(- \frac{4\pi r_{01}}{\beta} D_{01} \int_{T_0}^T e^{-\frac{\varepsilon_1}{kT}} dT \right) + \left(\frac{\Delta N_{01}}{N_0} \right) \right] \times \left(1 + \frac{4\pi r_{02}}{\beta} \frac{D_{02}}{\Delta N_{01}} \int_{T_0}^T e^{-\frac{\varepsilon_2}{kT}} dT \right)^{-1} \quad (8)$$

В этом случае вторая стадия ТО происходит по кинетике второго порядка до конца, некоррелированными дефектами другого типа, чем на стадии первой стадии термического отжига (см., рис. 3. 2в-случай).

Таким образом, из вышеизложенных данных следует, что кинетика термического распада радиационных дефектов определяется соотношениями между начальными концентрациями радиационных центров и подвижных диффузионных дефектов в ионных кристаллах. На основе такого предположения получено кинетическое уравнение и его решение для изотермического случая.

Литература:

1. **Алтымышев А.** О моно- и бимолекулярной последовательности кинетики процесса термического отжига центров окраски [Текст] // ФТТ. 1977. Т. 19, в.8. – С. 1344-1347.
2. **Алтымышев А.** Кинетика процесса термического распада Д-центров окраски в кристаллах NaCl-Ag [Текст] // ФТТ, 1976, Т. 18. в. 1. – С. 124-128.
3. **Антонов-Романовский В.В.** Кинетика фотолюминесценции кристаллофосфоров [Текст] // – М.: “Наука”, 1996.
4. **Арапов Б.** Диффузионная теория рекомбинации частично коррелированных дефектов в ЩГК [Текст] / А. Алтымышев // Вестник ОшГУ. – Ош, 2003. – С.16-18.
5. **Арапов Б.** Кинетика ионно-диффузионных процессов распада радиационных дефектов в ионных кристаллах [Текст] / А.А. Орозбаева, Т.Б. Арапов // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. Импакт-фактор РИНЦ: (2016)-0,764. – Москва, 2016, – №8. Часть 1. – С.30-32.
6. **Орозбаева А.А.** Кинетика процесса моно- и бимолекулярного тушения свечения центров в облученных кристаллах [Текст] / Аманбай к. Айсулуу, Т.Б. Арапов // Сборник трудов XI Иссык-Кульской международной школы-конференции по радиационной физике твердого тела SCORPh-2015. – Бишкек, 2015. – С. 43-45.