

# ЗАВИСИМОСТЬ КОНЦЕНТРАЦИИ ЭЛЕКТРОННЫХ ЦЕНТРОВ ОКРАСКИ ОТ СОСТОЯНИЯ ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ ОБЛУЧЕННЫХ КРИСТАЛЛОВ LiF

Г.А. Петченко, А.М. Петченко

Харьковский национальный университет городского хозяйства им. А.Н. Бекетова,  
Харьков, Украина  
E-mail: gdaeron@ukr.net

Изучено оптическое поглощение излучения для облученных до дозы 1057 Р кристаллов LiF с величинами предварительной деформации 0,155 и 1,5%. Сделан вывод о присутствии F-центров в облученных кристаллах, определена объемная плотность указанных радиационных дефектов. На основании экспериментальных данных, полученных в настоящей и предыдущих работах, изучены деформационные зависимости спектрального показателя ослабления  $K_\lambda$  и концентрации F-центров  $N_F$ .

## ВВЕДЕНИЕ

Данная работа подводит итоги серии недавних работ [1–3] по изучению природы радиационных дефектов в облученных кристаллах LiF. В этих работах в рамках оптического абсорбционного метода изучалось влияние дозы облучения и степени предварительной деформации  $\epsilon$  на зависимости спектрального коэффициента пропускания  $\tau_\lambda$  излучения в интервале длин волн 220...650 нм. При дозах облучения  $\sim 500$  Р в кристаллах начинали появляться полосы поглощения, вызванные формированием F-центров. Сделаны выводы, что в изученном спектральном диапазоне в интервале доз облучения 0...1057 Р из возможного многообразия различных типов электронных центров окраски, возникающих в кристаллах под действием облучения, присутствуют только F-центры. По полуширине полос и их локализации на оси длин волн в рамках теории Смакулы были выполнены расчеты объемной плотности F-центров  $N_F$  в кристаллах. В частности, для кристаллов LiF при дозе облучения 1057 Р для  $\epsilon = 0,8\%$  [1] значение  $N_F$  составило  $1,15 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ , для  $\epsilon = 0,3$  и  $1,2\%$  [2] расчет  $N_F$  дал  $8,34 \cdot 10^{15}$  и  $10,34 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$  соответственно, для  $\epsilon = 0,4$ ;  $0,65$  и  $3,3\%$  [3]  $N_F$  оказалось равным  $8,49 \cdot 10^{15}$ ;  $10,85 \cdot 10^{15}$  и  $5,28 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$  соответственно. В работе [3] обращалось внимание на немонотонный характер зависимости концентрации центров окраски от дислокационной структуры образцов, и в качестве актуальной задачи на дальнейшее планировалось более детальное изучение функциональной зависимости  $N_F(\epsilon)$ .

Следует напомнить, что исследования [1–3] были проведены с целью идентификации радиационных дефектов, играющих роль слабых центров закрепления дислокаций в серии акустических опытов [4], и все полученные оптико-акустические результаты создают единую картину физических процессов, протекающих в кристаллах под действием рентгеновского облучения.

В настоящей работе ставится задача расширить и дополнить уже имеющуюся информацию о влиянии величины предварительной деформации на локализацию спектральных характеристик коэффициента пропускания  $\tau_\lambda(\lambda)$  в облученных кристаллах LiF и на

ее основании изучить зависимости спектрального показателя ослабления  $K_\lambda$  и концентрации F-центров  $N_F$  от  $\epsilon$ .

## МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

Для опытов использовали кристаллы LiF чистотой  $10^{-4}$  вес.%, выколотые по плоскостям спайности {100}, с остаточными деформациями 0,155 и 1,5% и приблизительными размерами  $16 \times 16 \times 29$  и  $16 \times 16 \times 25$  мм соответственно. Уровень плоскопараллельности образцов, достигнутый в результате шлифования и полирования, контролировался оптиметром типа ИКВ и составлял  $\pm 1$  мкм/см. Отжиг образцов проводился в течение  $\sim 12$  ч в муфельной печи МП-2УМ при температуре  $\sim 0,8 T_{пл}$  с дальнейшим медленным охлаждением до комнатной температуры. Кристаллы деформировали сжатием при значении скорости  $\sim 10^{-5} \text{ с}^{-1}$  на разрывной машине типа «Инстрон». Предел текучести кристаллов, точное значение которого необходимо для начала отсчета времени деформирования, регистрировали по ленте самописца КСП-4. Геометрические размеры образцов контролировали с помощью компаратора ИЗА-2. Облучение кристаллов рентгеновскими лучами, как и в предыдущих работах, выполнялось на установке УРС-55 (40 кВ, 10 мА). Суммарное время облучения кристаллов составило 160 мин, что соответствовало дозе облучения 1057 Р при ее мощности в месте расположения исследуемых кристаллов 0,11 Р/с. Измерение зависимостей  $\tau_\lambda(\lambda)$  для кристаллов с различными  $\epsilon$  выполняли на спектрофотометре СФ-26 в интервале длин волн 220...650 нм. При этом, согласно паспорту прибора, в спектральном диапазоне 220...350 нм в качестве осветителя использовали дейтериевую лампу ДДС-30, а в интервале 350...650 нм – лампу накаливания ОП-33-0.3. В качестве приемника излучения во всем интервале измерений использовали сурьмяно-цезиевый фотоэлемент Ф-17.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 приведены зависимости спектрального коэффициента пропускания  $\tau_\lambda$  в интервале длин волн 220...650 нм для кристаллов LiF с величинами

остаточной деформацией 0,155 и 1,5% при дозе облучения 1057 Р.

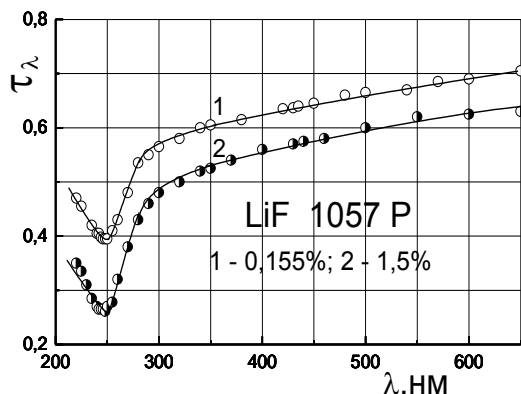


Рис. 1. Зависимости спектрального коэффициента пропускания от длины волны в облученных до дозы 1057 Р кристаллах LiF с величинами предварительной деформации 0,155 и 1,5%

Из рис. 1 видно, что в окрестности  $\lambda \approx 248$  нм для кристаллов с указанными  $\epsilon$  наблюдаются ярко выраженные полосы поглощения. Также видно, что при переходе от 0,155 к 1,5% пропускающая способность образцов несколько снижается, но в качественном плане никаких явных изменений в ходе  $\tau_\lambda(\lambda)$  не наблюдается. Наличие полос поглощения в окрестности  $\lambda \approx 248$  нм и монотонное нарастание кривых  $\tau_\lambda(\lambda)$  в интервале 300...650 нм свидетельствует о наличии в облученных кристаллах F-центров [5] и отсутствии более сложных конфигураций центров окраски, дающих полосы на  $\lambda_{\max} \approx 443$  нм (F<sub>2</sub>-центры) и  $\lambda_{\max} \approx 307$  и 377 нм (разные типы F<sub>3</sub>-центров) [6].

На основании выполненных опытов были проведены расчеты объемной плотности электронных центров окраски N<sub>F</sub>. При этом использовалось дисперсионное соотношение Смакулы [7], позволяющее по параметрам полосы поглощения определить концентрацию F-центров.

Согласно [7] указанное соотношение имеет вид:

$$N_F = \frac{A}{f} \cdot \frac{n}{(n^2 + 2)^2} \cdot K_m \cdot \Delta E, \quad (1)$$

где  $A = 1,31 \cdot 10^{17}$  – числовой коэффициент, справедливый для лоренцевой формы полосы поглощения;  $f$  – сила осциллятора (равная 0,8 для лоренцевой формы полосы);  $n = 1,42$  для LiF [8] – показатель преломления невозбужденного кристалла в области  $\lambda_{\max} = 248$  нм;  $K_m$  – максимальное значение показателя ослабления;  $\Delta E$  – полуширина полосы, определяемая шириной линии поглощения на ее полувысоте [9].

Для определения значения  $K_m$  использовано соотношение [9]:

$$\tau = (1 - \rho)^2 \cdot e^{-k\ell}, \quad (2)$$

где  $\tau$  – коэффициент пропускания кристалла;  $\rho = \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2$  – коэффициент отражения;  $K$  – показатель ослабления;  $\ell$  – оптический путь излучения в

веществе. Так как  $(1 - \rho)^2 = 0,94$ , то видно, что при наличии зависимости  $\tau_\lambda(\lambda)$  и известном значении  $\ell$  можно определить зависимости  $K_\lambda(\lambda)$ :

$$K = [2,3 \cdot \log(0,94/\tau)]/\ell, \quad (3)$$

где  $\log(0,94/\tau)$  – оптическая плотность образца.

Результаты расчета зависимости спектрального показателя ослабления от длины волны для кристаллов LiF с величинами остаточной деформации 0,155 и 1,5% при дозе облучения 1057 Р приведены на рис. 2.

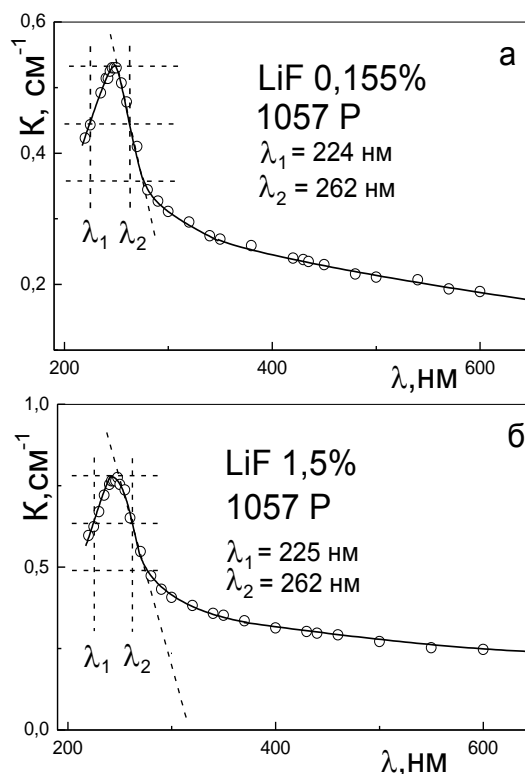


Рис. 2. Зависимости спектрального показателя ослабления от длины волны в облученных до дозы 1057 Р кристаллах LiF с величинами предварительной деформации 0,155 (а) и 1,5% (б). Пунктирные линии демонстрируют способ определения границ полуширины полосы поглощения

Из этого рисунка можно по параметрам полосы и ее локализации на оси длин волн определить значения  $K_m$  и  $\Delta E$ . Расчет полуширины полосы выполняли по формуле  $\Delta E = 1241 \cdot \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}\right)$  [9].

Значения границ полос  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  находили способом, продемонстрированным на рис. 2. Величины  $\Delta E$  для кристаллов с  $\epsilon = 0,155$  и 1,5% составили 0,8 и 0,78 эВ соответственно, что хорошо согласуется с литературными данными для LiF при 300 К [5].

Расчет величины N<sub>F</sub> по соотношению (1) для кристаллов LiF с  $\epsilon = 0,155$  и 1,5% для дозы облучения 1057 Р дал значения  $6,135 \cdot 10^{15}$  и  $8,7 \cdot 10^{15}$  см<sup>-3</sup> соответственно.

Используя данные настоящей работы и результаты работ [1–3], была получена (рис. 3) деформационная зависимость максимума показателя ослабле-

ния кристаллов в интервале степеней предварительной деформации 0,155...3,3%.

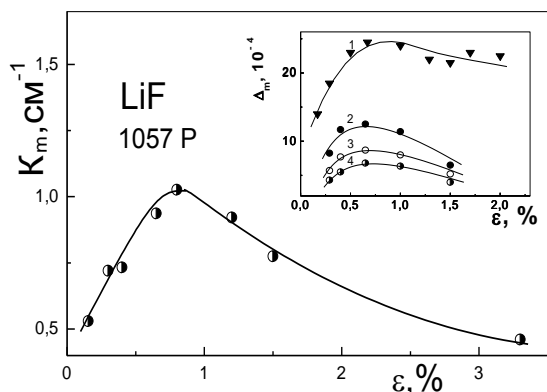


Рис. 3. Зависимости максимума спектрального показателя ослабления в облученных до дозы 1057 P кристаллах LiF от величины предварительной деформации. Вставка – зависимости от деформации максимума дислокационного декремента затухания ультразвука для необлученного (1) и облученных (2–4) кристаллов LiF [4]

Как и предполагалось в [3], зависимость  $K_m(\epsilon)$  оказалась немонотонной. При этом максимум кривой наблюдался в окрестности  $\sim 0,7...0,8\%$ . Из работы [4] известно, что указанные значения  $\epsilon$  для LiF характеризуют особое состояние деформируемого кристалла, когда дислокации под действием механической нагрузки максимально открепилась от удерживающих их стопоров, а процесс их перезакрепления, обусловленный взаимодействием первичных дислокаций с «лесными», еще не начался. На рис. 3 в виде вставки приведены зависимости дислокационного декремента затухания  $\Delta_d(\epsilon)$  для необлученного (1) и облученных (2–4) кристаллов LiF, полученных нами ранее в [4]. Обращает на себя внимание явная аналогия, наблюдаемая в ходе зависимостей  $K_m(\epsilon)$  и  $\Delta_d(\epsilon)$ . Можно предположить, что звуковая и электромагнитная волны реагируют на дислокационную структуру кристаллов похожим образом. В принципе, это вполне допустимо, если учесть, что уравнения распространения этих волн в среде качественно практически идентичны. Из результатов, приведенных на рис. 3, следует, что, чем больше средняя эффективная длина дислокационного сегмента, тем больше и ультразвуковые потери [4], и потери при прохождении излучения оптического диапазона через вещество.

Для более детального анализа полученной на рис. 3 зависимости и для получения сведений о процессе размножения центров окраски с деформацией была построена зависимость концентрации F-центров  $N_F$  от деформации, показанная на рис. 4.

Видно, что зависимость  $N_F(\epsilon)$  качественно ничем не отличается от  $K_m(\epsilon)$ , что объясняется прямой пропорциональной зависимостью указанных характеристик, вытекающей из соотношения (1). Из рис. 4 следует, что состояние максимальной открепленности дислокационных сегментов в кристалле является наиболее благоприятным для образования значительного количества F-центров в кристалле.

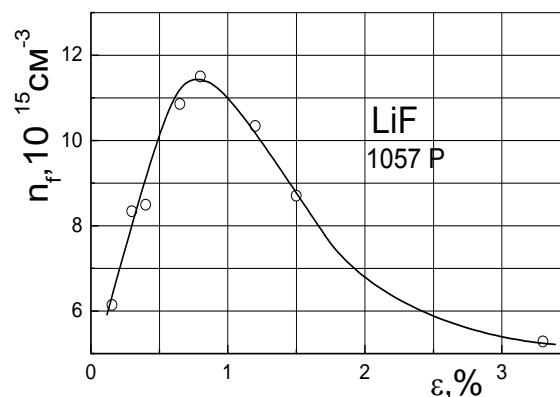


Рис. 4. Зависимости концентрации F-центров в облученных до дозы 1057 P кристаллах LiF от величины предварительной деформации

Наблюдаемую картину физических процессов в облученных кристаллах можно качественно представить таким образом. Облучение кристаллов приводит к возникновению в них радиационных дефектов. Дислокации в кристалле играют роль своеобразных ловушек для этих дефектов [10]. Максимальное освобождение дислокаций от стопоров в области  $\epsilon \sim 0,7...0,8\%$  приводит к увеличению количества F-центров во внедислокационном объеме кристалла. Это, вероятно, приводит к возникновению большого количества свободных резонаторов, отвечающих за поглощение энергии излучения оптического диапазона.

## ВЫВОДЫ

1. Изучено влияние рентгеновского облучения на зависимость спектрального коэффициента пропускания  $\tau_\lambda(\lambda)$  от длины волны в интервале 220...650 нм в кристаллах LiF с остаточными деформациями 0,155 и 1,5% при дозе облучения 1057 P. В окрестности  $\lambda \approx 248$  нм обнаружены полосы поглощения, сформировавшиеся в связи с появлением F-центров в кристаллах.

2. На основе дисперсионного соотношения Смакулы выполнен расчет концентрации F-центров  $N_F$  в кристаллах LiF. Для образцов LiF с деформациями 0,155 и 1,5% при дозе рентгеновского облучения 1057 P значения  $N_F$  оказались равными  $6,135 \cdot 10^{15}$  и  $8,7 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$  соответственно.

3. Определены деформационные зависимости максимума показателя ослабления кристаллов  $K_m(\epsilon)$  и концентрации электронных центров окраски  $N_F(\epsilon)$  в интервале степеней предварительной деформации 0,155...3,3%. Полученные характеристики представляют собой немонотонные зависимости с максимумами в области деформаций 0,7...0,8%, характеризующейся максимальным откреплением подвижных дислокаций от точечных центров закрепления.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Г.А. Петченко. Изучение природы радиационных дефектов в облученных кристаллах LiF // *Вестник ХНУ им. В.Н. Каразина*. 2013, №1075, в. 18, с. 50-54.

2. Г.А. Петченко, А.М. Петченко. Оптическое поглощение в облученных кристаллах LiF // *Вісник ХНУ ім. В.Н. Каразіна*. 2013, №1076, в. 19, с. 35-38.
3. Г.А. Петченко, С.С. Овчинников. Влияние предварительной деформации и облучения на оптическое поглощение в кристаллах LiF // *ВАНТ. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»*. 2014, №2(90), с. 29-33.
4. G.A. Petchenko. Research of the preliminary deformation and irradiation effect on the viscous damping of dislocation in LiF crystals // *Functional Materials*. 2013, N 3(20), p. 315-320.
5. В.М. Лисицын. *Радиационная физика твердого тела*. Томск: Издательство Томского политехнического университета, 2008, 172 с.
6. И.А. Парфианович, Э.Э. Пензина. *Электронные центры окраски в ионных кристаллах*. Иркутск: «Восточно-Сибирское книжное издательство», 1977, 208 с.
7. A. Smakula. Uber Erregung und Entfärbung lichtelektrisch leitender Alkalihalogenide // *Z. Physik*. 1930, N 9-10(59), p. 603-614.
8. А.А. Блистанов, В.С. Бондаренко, Н.В. Переломова, Ф.Н. Стрижевская, В.В. Чкалова, М.П. Шаскольская. *Акустические кристаллы*. М.: «Наука», 1982, 632 с.
9. М.М. Гуревич. *Фотометрия (теория, методы и приборы)*. Л.: «Энергоатомиздат», 1983, 272 с.
10. А. Гранато, К. Люкке. Струнная модель дислокации и дислокационное поглощение ультразвука // *Физическая акустика*. М.: «Мир», 1969, т. 4, ч. А, с. 261-321.

Статья поступила в редакцию 12.05.2014 г.

## **ЗАЛЕЖНІСТЬ КОНЦЕНТРАЦІЇ ЕЛЕКТРОННИХ ЦЕНТРІВ ЗАБАРВЛЕННЯ ВІД СТАНУ ДИСЛОКАЦІЙНОЇ СТРУКТУРИ ОПРОМІНЕНИХ КРИСТАЛІВ LiF**

*Г.О. Петченко, О.М. Петченко*

Вивчено оптичне поглинання випромінювання для опромінених до дози 1057 Р кристалів LiF з величинами попередньої деформації 0,155 і 1,5%. Зроблено висновок щодо присутності F-центрів в опромінених кристалах, визначено об'ємну густину вказаних радіаційних дефектів. На підставі експериментальних даних, отриманих у даній та попередніх роботах, вивчено деформаційні залежності спектрального показника ослаблення  $K_\lambda$  та концентрації F-центрів  $N_F$ .

## **DEPENDENCE OF ELECTRONIC COLOR CENTER CONCENTRATION ON THE STATE OF IRRADIATED LiF CRYSTAL DISLOCATION STRUCTURE**

*G.A. Petchenko, A.M. Petchenko*

The optical radiation absorption has been investigated for LiF crystals preliminary deformed to the level of 0.155 and 1.5% under irradiation to a dose of 1057 R. A conclusion on the presence of F-centers in irradiated crystals is drawn. The volume density of the observed radiation defects is evaluated. Basing on the experimental data of the present and previous papers the deformation dependences of the spectral damping coefficient  $K_\lambda$  and the concentration  $N_F$  of F-centers were investigated.