

Н. Н. ЖАНТУРИНА<sup>1</sup>, К. Ш. ШУНКЕЕВ<sup>2</sup>, Б. А. АЛИЕВ<sup>1</sup>, Л. Н. МЯСНИКОВА<sup>2</sup>, А. А. БАРМИНА<sup>2</sup>

(<sup>1</sup>Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Республика Казахстан,

<sup>2</sup>Актюбинский государственный педагогический институт, Актобе, Республика Казахстан)

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ  
И ОДНООСНОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ВЕРОЯТНОСТЬ ВОЗНИКНОВЕНИЯ  
РАДИАЦИОННЫХ ЦЕНТРОВ  
В ЩЕЛОЧНОГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛАХ**

**Аннотация**

В статье на основе геометрической модернизированной модели и термического расширения постоянной решетки щелочногалоидных кристаллов рассчитана эффективность возникновения *H*-центров при разных температурах и степенях одноосной деформации. Показано, при повышении температуры эффективность радиационного дефектообразования растет, кристаллы KI и RbI очень чувствительны к действию обоих факторов. В остальных же щелочногалоидных кристаллах, особенно в бромидах и фторидах, создание *H*-центра облегчено, повышение температуры и деформации особо не влияет на процессы радиационного дефектообразования. Полученные данные согласуются с экспериментальными данными и соответствуют другим критериям радиационного дефектообразования в щелочногалоидных кристаллах.

**Ключевые слова:** кристаллы, *H*-центр, геометрическая модернизированная модель, дефекты, анионы, катионы.

**Кілт сөздер:** кристалдар, *H*-орталық, геометриялық жаңартылған модель, ақаулар, аниондар, катиондар.

**Keywords:** crystal, *H*-center, geometry modern model, defects.

Одним из каналов аннигиляции экситона в щелочногалоидных кристаллах является радиационное дефектообразование, которое зависит как от деформации, так и от температуры. Экспериментально показано, что в широком интервале температур основными дефектами, возникающими в щелочногалоидных кристаллах (ЩГК), являются *F-H* пары, локализованные в регулярных узлах решетки или около других дефектов [1]. В рассматриваемой нами геометрической модели щелочногалоидных кристаллов анионы

считаются поддающимися сжатию, а катионы являются жесткими образованиями. Размер  $H$ -центра равен радиусу атома ( $R_a^0$ ), таким образом, эффективность дефектообразования зависит от размера пустоты ( $R_{max}$ ), которое вероятно может быть

Структура  $H$ -центра для расчета  $R_{max}$  в гранцентрированных ЦГК при сжатии по направлению  $\langle 100 \rangle$

заполнено  $H$ -центром. Если  $R_{max} > R_a^0$ , то существует вероятность возникновения  $H$ -центра, в обратном случае дефектообразование в ЦГК считается затрудненным. Эксперименты показывают увеличение межионного расстояния с ростом температуры для ЦГК:  $\delta = 0,7\%$  для хлоридов,  $\delta = 0,8\%$  для бромидов,  $\delta = 0,9\%$  для йодидов,  $\delta = 1-1,1\%$  для галогенидов цезия.

Радиус пустоты для размещения предполагаемого дефекта согласно геометрической модели (рисунок) принимается равным:

$$R_{max} = \frac{1}{2} \sqrt{a^2 + L^2 - 2aL \cos \alpha} - R_c^+ \quad (1)$$

где  $a$  – постоянная решетки,  $L$  – длина связи в  $H$ -центре, определяемая в интервале  $R_a^- + R_a^0 \geq L \geq 2R_a^0$ ,  $R_c^+$  – радиус катиона. В этой модели предполагается, что одноосное сжатие осуществляется по кристаллографическому направлению  $\langle 100 \rangle$  и от степени деформации зависит значение угла  $\alpha$ , который является индикатором воздействия на кристалл.

Из рисунка следует, что

$$\cos \alpha = \frac{AO}{OO'} = \frac{1}{\sqrt{1+Q^2}}, \text{ откуда } Q = \frac{a'}{a} = 1 \pm \varepsilon, \quad (2)$$

здесь  $\varepsilon$  – относительное изменение постоянной решетки за счет внешнего сжатия или растяжения,  $a'$  – постоянная решетки при сжатии,  $\varepsilon$  – значение упругой деформации (%).

Мы рассматриваем случай сжатия, поэтому предполагая, что  $L = 2R_a^0$ , находим выражение для  $R_{\max}$ :

$$R_{\max} = \frac{a^2 - 4(R_c^+)^2}{8R_c^+ + \frac{4a}{\sqrt{1+(1-\varepsilon)^2}}}. \quad (3)$$

Из этого можно определить максимальную степень деформации, в результате которой еще возможно образование  $H$ -центра в щелочногалоидных кристаллах:

Геометрические параметры решетки и образования  $H$ -центра в деформированных  
гранцентрированных ЦГК

в интервале температур 4,2–300 К

Кристалл	Максимально возможный радиус пустоты			Максимальная деформация
	Температура	$R_{\max}$ (А)	$R_a^0$ (А)	
KI	4,2	1,402	1,4	-0,0016
	20	1,405		0,0099
	40	1,407		0,015
	80	1,41		0,022
	150	1,414		0,03
	200	1,416		0,035
	250	1,418		0,039
	300	1,42		0,043
KCl	4,2	1,145	1	0,437
	20	1,147		0,443
	40	1,149		0,448
	80	1,151		0,454

	150	1,154		0,462
	200	1,156		0,467
	250	1,157		0,471
	300	1,158		0,475
KBr	4,2	1,365	1,15	0,547
	20	1,368		0,554
	40	1,37		0,56
	80	1,373		0,567
	150	1,376		0,577
	200	1,378		0,583
	250	1,38		0,588
	300	1,382		0,593
NaCl	4,2	1,177	1	0,498
	20	1,179		0,503
	40	1,18		0,507
	80	1,182		0,513
	150	1,185		0,52
	200	1,186		0,524
	250	1,187		0,528
	300	1,188		0,531
RbI	4,2	1,38	1,4	-0,005
	20	1,383		-0,0309
	40	1,385		-0,033
	80	1,389		-0,026
	150	1,393		-0,016
	200	1,395		-0,011
	250	1,397		-0,006
	300	1,399		-0,001
	350	1,401		0,0019

--	--	--	--	--

$$\varepsilon_{\max} = 1 - \sqrt{\left[ \frac{4aR_a^0}{a^2 - 4(R_c^+)^2 - 8R_a^0 R_c^+} \right]^2} - 1. \quad (4)$$

Температурная зависимость образования радиационных центров обусловлена расширением постоянной решетки при воздействии температуры. В работе [3] выведена формула температурной зависимости постоянной решетки, согласно которой:

$$a = \frac{a_0 \hbar \sqrt{\pi}}{\hbar \sqrt{\pi} - a_0 j \sqrt{mk_{\sigma} T}}, \quad (5)$$

где  $a_0$  – постоянная решетки при 0 К,  $m$  – эффективная масса экситона,  $j$  – параметр, зависящий от термического влияния на межатомные или межионные расстояния. Для щелочногалоидных кристаллов он варьирует в пределах от 0,01 до 0,1.

Результаты расчетов  $R_{\max}$  и  $\varepsilon_{\max}$  (%) при  $R_{\max} = R_a^0$  при использовании выражений (3), (4), (5) в интервале температур 4,2–300 К представлены в таблице (см. выше).

Из таблицы видно, что максимальный размер пустоты для размещения дефекта с температурой увеличивается, кристаллы KI и RbI, для которых создание  $H$ -центра было затруднено при гелиевых температурах, при 20 К и 350 К, соответственно радиационное дефектообразование начинает расти.

Для бромидов и хлоридов изначально облегчено создание  $H$ -центра, а при повышении температуры до 300 К такая ситуация сохраняется в этих кристаллах вплоть до деформаций 48% для KCl, 53% для NaCl, 59% для NaBr.

Таким образом, при повышении температуры эффективность радиационного дефектообразования растет, кристаллы KI и RbI очень чувствительны к действию обоих факторов. В остальных же щелочногалоидных кристаллах, особенно в бромиде и фторидах, создание  $H$ -центра облегчено, повышение температуры и деформации особо не влияют на процессы радиационного дефектообразования.

Экспериментально доказано, что в кристаллах NaCl, KI и RbI радиационное дефектообразование имеет малую эффективность, однако резко возрастает при азотной температуре, что подтверждает результаты нашего моделирования.

## ЛИТЕРАТУРА

1 Ikezawa M., Wakita S., Kojima T. Intrinsic luminescence of alkali iodides. // J. Soc. Phys. – Japan. 1967. – Vol. 23.

2 Рябых С.М., Бугаенко Л.Т. Модернизированная геометрическая модель кристаллов и ее применение в физике твердого тела // Изв. АН Латв. ССР. – Сер. физ. и тех. наук. – 1990. – № 2. – С. 77.

3 Myasnikova L.N., Zhanturina N.N., Shunkeyev K.Sh., Aliev B.A., Grinberg M., Tkachenko V.S. The modeling of intrinsic luminescence ignition effect in crystal KI at low temperature elastic stress // 3-rd International congress on of condensed matter high current electronics and modification of materials with particle beams and plasma flows. – Tomsk, 2012. – P. 28.

4 Лущик Ч.Б., Витол И.К., Эланго М.А. Распад электронных возбуждений на радиационные дефекты в ионных кристаллах // УФН. – 1977. – Т. 122, вып. 2. – С. 223-248.

## REFERENCES

1. Ikezawa M., Wakita S., Kojima T. *J. Soc. Phys. Japan.* **1967.** Vol. 23. (in Eng)
2. Riyabih S.M., Bugaengo S.T. *Izv. AN Latvii*, ser. phys. I tech. nauk, **1990** (in Russ)
3. Myasnikova L.N., Zhanturina N.N., Shunkeyev K.Sh., Aliev B.A., Grinberg M., Tkachenko V.S. *3-rd International congress on of condensed matter high current electronics and modification of materials with particle beams and plasma flows.* Tomsk, **2012.** (in Eng)
4. Lushik Ch.B., Vitol I.K., Elango M.A. *UFN*, tom 122, vipusk.2, **1977** (in Russ)

## Резюме

Н. Н. Жантурина<sup>1</sup>, К. Ш. Шункеев<sup>2</sup>, Б. А. Алиев<sup>1</sup>, Л. Н. Мясникова<sup>2</sup>, А. А. Бармина<sup>2</sup>

<sup>1</sup>әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан Республикасы,

<sup>2</sup>Ақтөбе мемлекеттік педагогикалық институты, Ақтөбе, Қазақстан Республикасы)

СІЛТІЛІ ГАЛОИДТЫ КРИСТАЛДАРДА ТЕМПЕРАТУРАНЫҢ

ЖӘНЕ БІРОСТІ ДЕФОРМАЦИЯНЫҢ РАДИАЦИЯЛЫҚ ОРТАЛЫҚТАРДЫҢ

## ПАЙДА БОЛУЫНА ӘСЕР ЕТУІН МОДЕЛЬДЕУ

Мақалада кристалдардың модернизацияланған геометриялық моделі негізінде және тор тұрақтысының термиялық кеңеюі негізінде *H*-орталықтарының әртүрлі температураларда және деформация деңгейлерінде пайда болу мүмкіндіктері есептелінген. Температура артқан сайын радиациялық ақаулар пайда болу эффективтілігі өсетіні көрсетілген, KI және RbI кристалдары екі фактордың әсеріне өте сезімтал болып келеді. Басқа сілтілі галоидты кристалдарда, әсіресе бромидтерде және фторидтерде *H*-орталықтарының пайда болуы жеңілдетілген, температураның және деформацияның артуы ерекше өзгерістер енгізбейді. Алынған нәтижелер эксперименталды мәліметтерге, сілтілі галоидты кристалдарда радиациялық ақаулар пайда болуының басқа критерийлеріне сәйкес келеді.

**Кілт сөздер:** кристалдар, *H*-орталық, геометриялық жаңартылған модель, ақаулар, аниондар, катиондар.

### Summary

*N. N. Zhanturina<sup>1</sup>, K. Sh. Shunkeyev<sup>2</sup>, B. A. Aliev<sup>1</sup>, L. N. Myasnikova<sup>2</sup>, A. A. Barmina<sup>2</sup>*

#### MODELING OF THE TEMPERATURE AND UNIAXIAL STRESS INFLUENCE ON THE RADIATION CENTERS CREATION IN ALKALI HALIDE CRYSTALS

(<sup>1</sup>al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Republic of Kazakhstan,

<sup>2</sup>Aktobe State Pedagogical Institute, Aktobe, Republic of Kazakhstan)

Efficiency of H-centers at different temperatures and degrees of uniaxial strain calculated on the basis of geometric upgraded model and thermal expansion of the lattice constant of alkali halide crystals. Shown, that the effectiveness of radiation defect creation increases with the temperature, KI and RbI crystals are very sensitive to both factors. In other alkali halide crystals, especially in the bromide and fluoride, creation of H-center is facilitated, increasing of the temperature and strain does not affect the processes of radiation defect creation. These data are consistent with experimental data and meet the other criteria of radiation defect formation in alkali halide crystals.

**Keywords:** crystal, H-center, geometry modern model, defects.

*Поступила 5.07.2013г.*