

УДК 535.343.2

## ГЕНЕРАЦІЯ ( $Tl^0-Tl^{2+}$ )–КОМПЛЕМЕНТАРНИХ ПАР У ЛУЖНО-ГАЛОЇДНИХ КРИСТАЛАХ

З. Чорній<sup>1</sup>, М. Панасюк<sup>2</sup>, М. Дячук<sup>1</sup>, І. Пірко<sup>3</sup>, В. Салапак<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Кафедра фізики, Національний лісотехнічний університет України,  
вул. ген. Чупринки, 105, 79044 Львів, Україна

<sup>2</sup>Науково-технічний і навчальний центр низькотемпературних досліджень,  
вул. Драгоманова, 50, 79005 Львів, Україна

<sup>3</sup>Кафедра обчислювальної техніки і моделювання технологічних процесів,  
Національний лісотехнічний університет України,  
вул. ген. Чупринки, 103, 79044 Львів, Україна

Розраховано кінетику утворення активаторних центрів забарвлення в іонних кристалах. В одновимірній моделі іонного кристала розраховано радіаційні параметри лужно-галогідних кристалів, легованих іонами талію. З'ясовано, що ймовірність генерації центрів забарвлення під дією іонізуючої радіації менша, ніж ймовірність висвітлювальної дії, і вона різко знижується зі зменшенням концентрації активатора. Концентрація центрів забарвлення становить 10 % від концентрації активатора. Розраховано енергію, необхідну для створення пари центрів забарвлення та кінетики їх наростання.

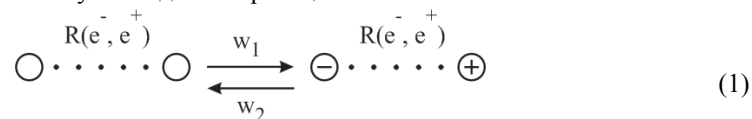
*Ключові слова:* кристали, центри забарвлення, радіація.

Радіаційні властивості іонних кристалів визначені наявністю в кристалі дорадіаційних точкових дефектів, їхньою концентрацією та електричним зарядом, а також структурою центрів забарвлення та їхнім зарядовим станом [1–3]. Вплив зазначених чинників на радіаційні параметри кристала в першому наближенні можна розрахувати в лінійній моделі [4–6]. Ми за методикою роботи [7] розрахували кінетичну криву наростання активаторних центрів забарвлення в лужно-галогідних кристалах (ЛГК), легованих іонами талію. Вибір цього класу кристалів зумовлений тим, що їх широко використовують як сцинтиляційні матеріали.

### 1. Механізм генерації активаторних центрів забарвлення в лужно-галогідних кристалах, активованих талієм.

Загальновідомо [3, 8, 9], що активаторні центри забарвлення в ЛГК виникають унаслідок локалізації електронів і дірок на іонах активатора.

У лінійній моделі процес утворення та радіаційного руйнування талієвих центрів забарвлення можна описати у вигляді такої реакції:



У рівнянні (1) застосовано такі позначення:

○ –  $Tl^+$  – іон заміщення;

⊖ –  $Tl^0$  – атомарний талій;

⊕ –  $Tl^{2+}$  – іон;

$R(e^-, e^+)$  – створена радіацією електронно-діркова пара;

$w_1$  – імовірність утворення ( $Tl^0 \dots Tl^{2+}$ )-пари в разі розпаду електронно-діркової пари в лінійному фрагменті ( $Tl^+ \dots Tl^+$ );

$w_2$  – імовірність радіаційного руйнування ( $Tl^0 \dots Tl^{2+}$ )-центрів.

Радіаційні параметри кристалів КСІ-ТІ, розраховані за методикою [7], наведені в табл. 1.

Таблиця 1

Радіаційні параметри кристалів КСІ-ТІ

Номер за пор.	С, мол. %	$l$	$w_1$	$w_2$	$[Tl^0]/[Tl^+]$	Е, еВ
1	0,2	$8a$	0,127	0,348	0,267	79
2	0,06	$12a$	0,056	0,347	0,139	179
3	0,025	$16a$	0,031	0,346	0,082	323

Примітки: С – концентрація іонів  $Tl^+$  у кристалі;  $l$  – середня відстань між  $Tl^+$ -іонами (довжина фрагмента ( $Tl^+ \dots Tl^+$ )),  $a$  – параметр кристалічної ґратки;  $[Tl^0]$  – концентрація ( $Tl^0-Tl^{2+}$ )-пар центрів на стадії насичення забарвлення;  $[Tl^+]$  – концентрація ( $Tl^+-Tl^+$ )-пар іонів до опромінення кристала радіацією; Е – енергія утворення комплементарної пари центрів забарвлення.

## 2. Розрахунок кривої наростання концентрації активаторних центрів забарвлення в процесі опромінення кристала іонізуючою радіацією.

За методикою праці [7] розраховано такі параметри:

$\Delta_1[Tl^0](n)/\Delta E$  – швидкість радіаційного утворення ( $Tl^0 \dots Tl^{2+}$ )-пар центрів забарвлення в разі опромінення  $n$ -ю дозою радіації, значення кожної ізодози  $\Delta E = 1,5E_g \approx 10$  еВ, де  $E_g$  – ширина забороненої зони;

$\Delta_2[Tl^0](n)/\Delta E$  – швидкість радіаційного руйнування активаторних центрів забарвлення;

$[Tl^0](n)$  – концентрація ( $Tl^0-Tl^{2+}$ )-пар центрів забарвлення, які утворилися в кристалі після поглинання фрагментом іонного ланцюга  $n \Delta E$ -ізодоз радіації;

$[Tl^+](0)$ ,  $[Tl^+](n)$  – концентрація ( $Tl^+-Tl^+$ )-пар іонів талію до та після опромінення  $n \cdot \Delta E$ -ізодозами радіації, відповідно.

Розрахунки значень  $[Tl^+](n)$  та  $[Tl^0](n)$  проводили методом послідовних наближень:

$$[Tl^0](n) = [Tl^0](n-1) + \Delta_1[Tl^0](n) - \Delta_2[Tl^0](n-1), \quad (2)$$

де  $n = 1, 2, 3, \dots$

$$[Tl^+] = [Tl^+](0) - [Tl^0](n). \quad (3)$$

У табл. 2–4 наведено і на рис. 1–4 відображено результати розрахунків радіаційних параметрів кристалів КСІ-ТІ<sup>+</sup>.

Таблиця 2

Характеристики кривої кінетики наростання центрів забарвлення  
 в кристалах типу KCl-Tl ( $C = 0,025$  мол. % TlCl)

$n$	$[Ti^{+}](n)/[Ti^{+}](0)$	$\Delta_1[Ti^0]/\Delta E$	$\Delta_2[Ti^0]/\Delta E$	$[Ti^0](n)/[Ti^{+}](0)$
1	1,0000	0,0310	0	0,0310
2	0,9690	0,0300	0,0107	0,0503
3	0,9470	0,0294	0,0174	0,0623
4	0,9377	0,0291	0,0216	0,0698
5	0,9302	0,0288	0,0242	0,0744
6	0,9256	0,0287	0,0257	0,0774
7	0,9226	0,0286	0,0268	0,0792
8	0,9208	0,0285	0,0274	0,0803
9	0,9197	0,0285	0,0278	0,0810
10	0,9190	0,0285	0,0280	0,0815

Примітки :  $n$  – кількість ізодоз ( $h\nu = 1,5E_g$ ) на фрагмент іонного ланцюга ( $Ti^{+}\dots Ti^{+}$ );  $[Ti^{+}](n)$  і  $[Ti^0](n)$  – кількість пар іонів  $Ti^{+}$  та ( $Ti^0\dots Ti^{2+}$ )-пар після опромінення кристала  $n$  ізодозами радіації;  $[Ti^{+}](0)$  – початкова кількість пар іонів  $Ti^{+}$  у кристалі до його опромінення.

Таблиця 3

Характеристики кривої кінетики наростання кількості центрів забарвлення  
 в кристалах типу KCl-Tl ( $C = 0,06$  мол. % TlCl)

$n$	$[Ti^{+}](n)/[Ti^{+}](0)$	$\Delta_1[Ti^0]/\Delta E$	$\Delta_2[Ti^0]/\Delta E$	$[Ti^0](n)/[Ti^{+}](0)$
1	1,0000	0,0560	0,0000	0,0560
2	0,9440	0,0527	0,0194	0,0893
3	0,9107	0,0509	0,0310	0,1203
4	0,8797	0,0493	0,0417	0,1279
5	0,8721	0,0488	0,0444	0,1323
6	0,8677	0,0486	0,0459	0,1350
7	0,8650	0,0484	0,0468	0,1366
8	0,8634	0,0484	0,0474	0,1376
9	0,8624	0,0483	0,0477	0,1382
10	0,8618	0,0483	0,0480	0,1385

Таблиця 4

Характеристики кривої кінетики наростання кількості центрів забарвлення  
 в кристалах типу KCl-Tl ( $C = 0,05$  мол. % TlCl)

$n$	$[Ti^{+}](n)/[Ti^{+}](0)$	$\Delta_1[Ti^0]/\Delta E$	$\Delta_2[Ti^0]/\Delta E$	$[Ti^0](n)/[Ti^{+}](0)$
1	1,0000	0,1270	0,0000	0,1270
2	0,8730	0,1109	0,0442	0,1712
3	0,8288	0,1053	0,0596	0,2169
4	0,7831	0,0995	0,0755	0,2409
5	0,7591	0,0964	0,0838	0,2535
6	0,7465	0,0948	0,0882	0,2601
7	0,7399	0,0930	0,0905	0,2626
8	0,7374	0,0934	0,0914	0,2646
9	0,7354	0,0933	0,0921	0,2659
10	0,7341	0,0932	0,0925	0,2666
11	0,7334	0,0931	0,0927	0,2670

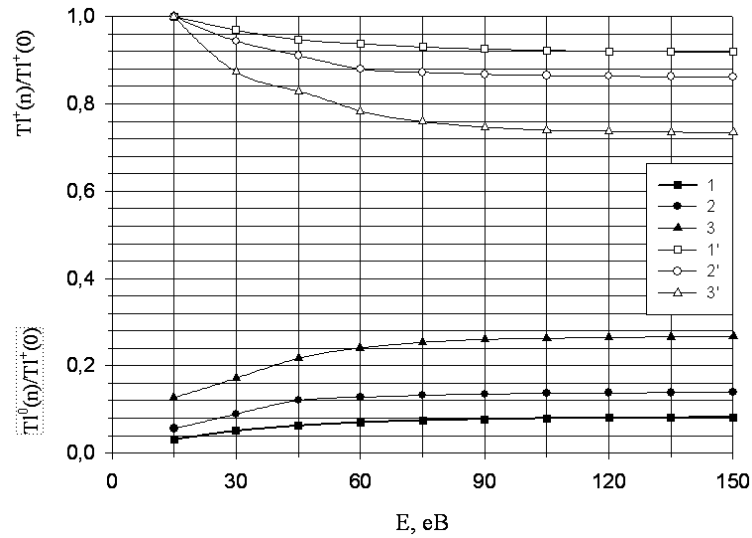


Рис.1. Кінетика наростання  $Tl^0$ -центрів ( $[Tl^0](n)/[Tl^+](0)$ ) (криві 1–3) та зменшення кількості  $Tl^+$ -іонів ( $[Tl^+](n)/[Tl^+](0)$ ) (криві 1'–3') залежно від дози іонізуючої радіації в кристалах  $KCl-Tl^+$ :  
1, 1' –  $C = 0,025$  мол. %  $TlCl$ ; 2, 2' –  $C = 0,06$  мол. %  $TlCl$ ; 3, 3' –  $C = 0,2$  мол. %  $TlCl$ .

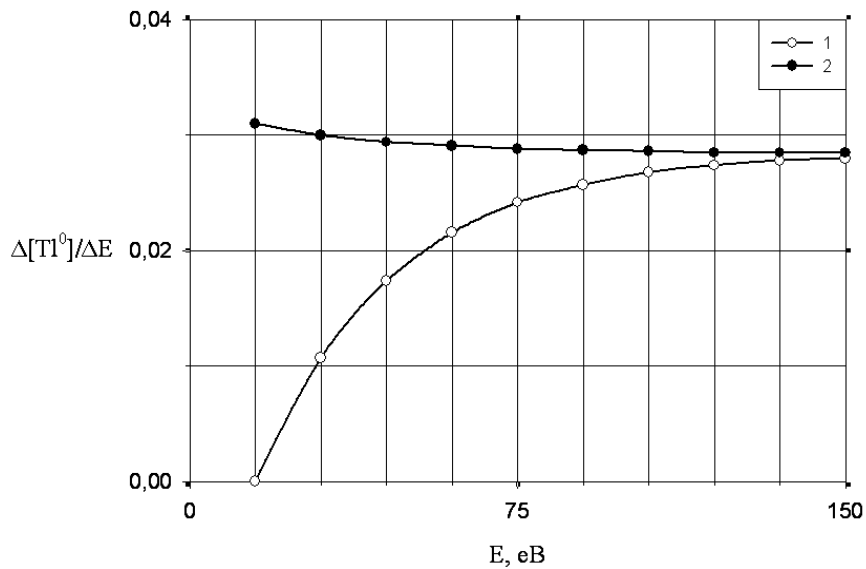


Рис. 2. Швидкість наростання (крива 1) та висвічування (крива 2) концентрації  $Tl^0$ -центрів у процесі опромінення кристала іонізуючою радіацією (кристал  $KCl - 0,025$  мол. %  $TlCl$ ).

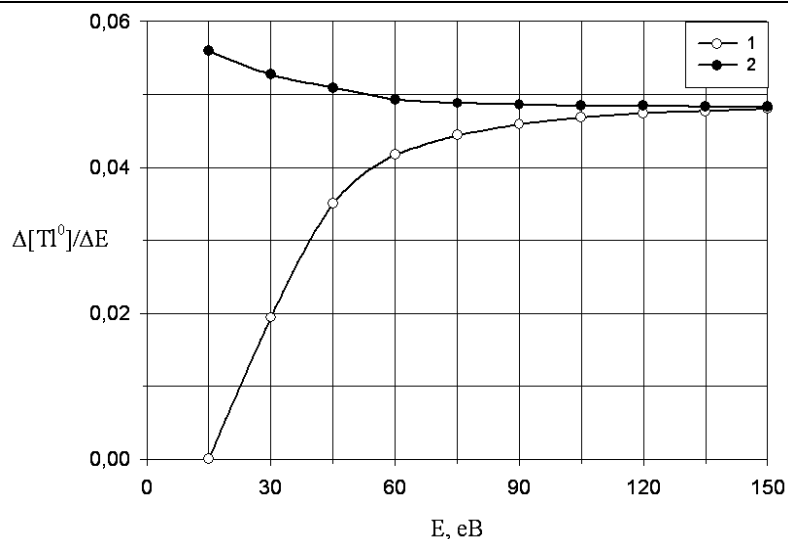


Рис. 3. Швидкість наростання (крива 1) та висвічування (крива 2) концентрації  $Tl^0$ -центрів у процесі опромінення кристала іонізуючою радіацією (кристал KCl – 0,06 мол. % TlCl).

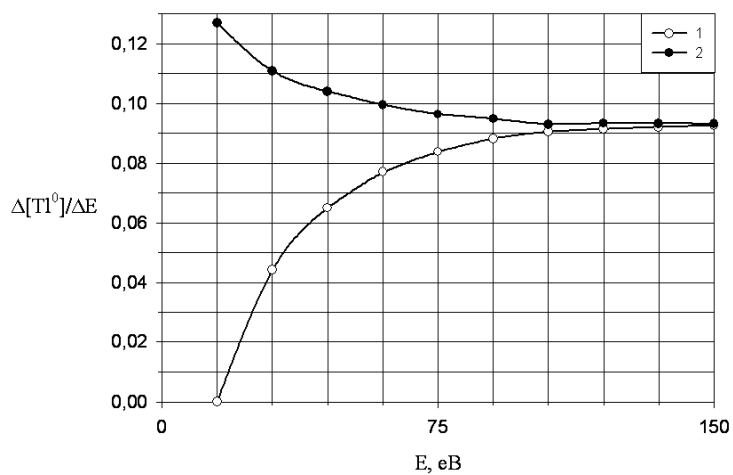


Рис. 4. Швидкість наростання (крива 1) та висвічування (крива 2) концентрації  $Tl^0$ -центрів у процесі опромінення кристала іонізуючою радіацією (кристал KCl – 0,2 мол. % TlCl).

Отже, у лінійній моделі іонного кристала розраховано радіаційні параметри лужно-галоїдних кристалів, легованих іонами талію (див. табл. 1–4).

З результатів розрахунків випливає, що в цьому класі кристалів: імовірність генерації центрів забарвлення під дією іонізуючої радіації менша, ніж імовірність висвітлюва-

льної дії ( $w_1 < w_2$ , див. табл. 1); імовірність генерації центрів забарвлення  $w_1$  різко знижується зі зменшенням концентрації активатора (див. табл. 1).

У лужно-галоїдних кристалах, легованих талієм, на стадії насичення забарвлення концентрація центрів забарвлення становить близько 10 % від концентрації активатора, що узгоджується з експериментальними даними [3].

Розраховано енергію радіації, необхідну для створення пари центрів забарвлення та кінетики їх наростання.

#### СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Стоунхем А. М. Теория дефектов в твердых телах: в 2 т. / А. М. Стоунхем. – М. : Мир, 1978. – Т. 2. – 357 с.
2. Hayes W. Crystals with fluorite structure / W. Hayes, A. M. Stoneham. – Oxford, 1974. – 444 p.
3. Алукер Э. Д. Электронные возбуждения и радиоллюминесценция щелочно-галоидных кристаллов / Э. Д. Алукер, Д. Ю. Лусис, Е. А. Чернов. – Рига : Зинатне, 1979. – 251 с.
4. Chornyi Z. P. Crystals SrCl<sub>2</sub>-K radiation sensitivity / Z. P. Chornyi, I. B. Pirko, V. M. Salapak // Functional materials. – 2011. – Vol. 18, N 2. – P. 206–210.
5. Чорній З. П. Центри забарвлення в кристалах CaF<sub>2</sub>-Na і CaF<sub>2</sub>-Li. I. Результати експериментальних досліджень / З. П. Чорній, І. Б. Пірко, В. М. Салапак, М. В. Дячук // Фізика і хімія тв. тіла. – 2012. – Т. 13, № 4. – С. 879–882.
6. Чорній З. П. F<sub>D</sub>-центри в кристалах флюоритів, легованих лужними металами / З. П. Чорній, І. Б. Пірко, В. М. Салапак, М. Р. Панасюк // Журн. фіз. досліджень. – 2012. – Т. 16, № 1. – С. 1602-1–1602-8.
7. Чорній З. П. Кінетика радіаційного утворення центрів забарвлення в іонних кристалах. I. Кристали з домішково-вакансійними диполями. Генерація F<sub>A</sub>-центрів / З. П. Чорній, І. Б. Пірко, В. М. Салапак, М. В. Дячук // Наук. вісник НЛТУ України : зб. наук.-техн. праць. – 2013. – Вип. 23.11 – С. 175–180.
8. Лущик Ч. Б. Распад электронных возбуждений с образованием дефектов в твердых телах / Ч. Б. Лущик, А. Ч. Лущик. – М. : Наука, 1989. – 261 с.
9. Kachan S. I. Relaxation properties of defect complexes in SrCl<sub>2</sub>-Tl<sup>+</sup> crystals / S. I. Kachan, V. M. Salapak, Z. P. Chornyi and other // Functional materials. – 2004. – Vol. 11. – P. 696–701.

Стаття: надійшла до редакції 15.11.2013,  
доопрацьована 10.12.2013,  
прийнята до друку 27.12.2013.

**GENERATION ( $Tl^0$ - $Tl^{2+}$ )-COMPLEMENTARY PAIRS  
IN ALKALI-HALIDE CRYSTALS**

**Z. Chornij<sup>1</sup>, M. Panasiuk<sup>2</sup>, N. Djachuk<sup>1</sup>, I. Pirko<sup>3</sup>, V. Salapak<sup>1</sup>.**

<sup>1</sup>*Department of Physics, National Forestry University of Ukraine,  
105 Gen. Chuprynky St., Lviv, UA\_79057, Ukraine.*

<sup>2</sup>*Scientific-Technical and Educational Center of Low Temperature Studies,  
50 Dragomanov St., Lviv*

<sup>3</sup>*Department of Computer Engineering and Modeling Processes,  
103 Gen. Chuprynky St., Lviv, UA\_79057, Ukraine*

Calculated kinetics of activator color centers in ion crystals. In the one-dimensional model of ionic crystals calculated radiation parameters alkali halide crystals doped with thallium ions. It is shown that the probability of generation of color centers under the action of ionizing radiation is less than the probability of highlighting action and it falls rapidly with decreasing concentration of the activator. The concentration of color centers is of the order of 10% of the activator concentration at the saturation stage. Calculated the energy required to create a pair of color centers and kinetics of increase in their number.

*Key words:* crystals, color centers, radiation.

**ГЕНЕРАЦИЯ ( $Tl^0$ - $Tl^{2+}$ )- КОМПЛЕМЕНТАРНЫХ ПАР  
В ЩЕЛОЧНО-ГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛАХ**

**З. Чорній<sup>1</sup>, М. Панасюк<sup>2</sup>, Н. Дячук<sup>2</sup>, И. Пирко<sup>2</sup>, В. Салапак<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Кафедра физики, Национальный лесотехнический университет Украины  
ул. генерала Чупринки, 105, Львов, 79057, Украина*

<sup>2</sup>*Научно-технический и учебный центр низкотемпературных исследований,  
ул. Драгоманова, 50, 79005 Львов, Украина*

<sup>3</sup>*Кафедра вычислительной техники и моделирования технологических процессов,  
Национальный лесотехнический университет Украины  
ул. генерала Чупринки, 103, Львов, 79057, Украина*

Рассчитано кинетику образования активаторных центров окраски в ионных кристаллах. В одномерной модели ионного кристалла рассчитано радиационные параметры щелочно-галоидных кристаллов, легированных ионами талия. Показано, что вероятность генерации центров окраски под действием ионизирующей радиации меньше вероятности высвечивающего действия, и она стремительно уменьшается с уменьшением концентрации активатора. Концентрация центров окраски составляет 10 % от концентрации активатора на стадии насыщения. Рассчитано энергию, необходимую для создания пары центров окраски, и кинетика нарастания их количества.

*Ключевые слова:* кристаллы, центры окраски, радиация.