

1. N. Itoh, M. Stoneham, *Materials Modification by Electronic Excitation*, 536 p., Cambridge University Press, (2000).
2. *Radiation Effects in Solids*, Ed. by K. E. Sickafus et al., 592 p., Springer, (2007).
3. А.Н. Огурцов, *Модификация кристаллов электронными возбуждениями*: монография, 368 с., Харьков: НТУ "ХПИ", (2009).
4. A.N. Ogurtsov, N.Yu. Masalitina, O.N. Bliznjuk, *Low Temp. Phys.*, **33**, № 6/7, 689-693, (2007).
5. A.N. Ogurtsov, A.M. Ratner, E.V. Savchenko, V. Kisand, S. Vielhauer, *J. Phys.: Cond. Matter*, **12**, № 12, 2769-2781, (2000).
6. D.R.Vij, *Luminescence of Solids*, 435 p., Springer, (1998).
7. J. Becker, O.N. Grigorashchenko, A.N. Ogurtsov, M. Runne, E.V. Savchenko, G. Zimmerer, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **31**, № 6, 749-753, (1998).
8. А.Н. Огурцов, О.Н. Близнюк, Н.Ф. Клещёв, Н.Ю. Масалитина, *ИТЭ*, №4, 24-31, (2013).

ОПТИЧЕСКОЕ ДЕТЕКТИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОЙ КИНЕТИКИ МОДИФИКАЦИИ АТОМАРНЫХ КРИОКРИСТАЛЛОВ ЭЛЕКТРОННЫМИ ВОЗБУЖДЕНИЯМИ

Масалитина Н.Ю., Близнюк О.Н., Огурцов А.Н.

Национальный технический университет "ХПИ", Харьков, Украина

Предложена методика оптического детектирования процессов образования точечных дефектов, используя кинетический анализ эволюции спектров люминесценции атомарных крио кристаллов под облучением.

Определение кинетических параметров процесса образования дефектов в радиационной технологии модификации структуры кристаллов облучением является одной из центральных проблем при внедрении в производство современных достижений радиационной физики и химии, и предусматривает аналитическое исследование процессов, происходящих в образцах, на модельных системах. Классической системой для такого моделирования являются атомарные кристаллы инертных элементов, технологическое использование которых в настоящее время только начинается, но спектроскопические характеристики радиационно-индуцируемых процессов в которых уже достаточно подробно исследованы ¹. В предыдущих работах использование кинетического анализа процесса дефектообразования в стационарных условиях позволило обнаружить агрегацию дефектов и формирование дефектной фазы в облучённых кристаллах ². Но стационарная кинетика может дать лишь предварительную информацию о механизмах процессов структурных превращений в образцах, поскольку она отображает лишь те стадии, которые лимитируют ход процесса, и практически не даёт информации о быстрых, нелIMITирующих стадиях процесса структурной перестройки образцов. В данной работе предлагается использовать оптическое детектирование нестационарной кинетики изменения дефектности образцов с использованием соответствующей кинетической модели формирования точечного дефекта.

Рассмотрим процесс образования точечного дефекта как комбинацию трёх разных процессов:



Процесс (1) отображает локализацию мобильного электронного возбуждения, E , с константой скорости k_1 на центре захвата, T , и формирование возбуждённого метастабильного локального центра, MTE , который можно рассматривать как метастабильный короткоживущий дефект образца. В случае идеальной решётки автолокализация мобильного возбуждения может происходить вблизи любого атома решётки. Радиационный распад короткоживущего MTE -центра или возвращает образец в исходное состояние с константой скорости k_{-1} (процесс (2)), или формирует постоянный дефект D (пару Френкеля) в процессе (3) с константой скорости k_2 . Именно радиационный распад MTE -центров формирует характеристические полосы люминесценции атомарных кристаллов, так называемые "дефектные" компоненты ¹, которые обычно отмечают индексом "1".

Нестационарные условия хода процесса дефектообразования существуют в начале облучения, когда материальные и энергетические потоки не достигают стационарных значений. В этом случае кинетика процесса описывается следующими кинетическими уравнениями:

$$\frac{dn_{MTE}}{dt} = k_1 n_E n_T - (k_{-1} + k_2) n_{MTE}, \quad (4)$$

$$\frac{dn_D}{dt} = k_2 n_{MTE}, \quad (5)$$

где n_E , n_T , n_{MTE} , n_D – концентрации мобильных электронных возбуждений, центров захвата, мобильных локализованных возбуждений и радиационных дефектов, соответственно ³. Поскольку радиационно-индуцируемые электронные возбуждения могут быть или свободными, или локализованными, то $N_0 = n_E + n_{MTE}$ или $n_E = N_0 - n_{MTE}$, где N_0 – начальная концентрация электронных возбуждений, и в условиях исследования процесса в самом начале облучения, когда концентрация центров захвата почти не отличается от начальной, $n_T \approx n_T^0$, уравнение (4) может быть переписано в виде

$$\frac{dn_{MTE}}{dt} + (k_1 n_T^0 + k_{-1} + k_2) n_{MTE} = k_1 N_0 n_T^0. \quad (6)$$

Если ввести константу $A = (k_{-1} + k_2) / k_1$, которая характеризует отношение скоростей процессов распада и образования локализованных электронных возбуждений, то решение этого неоднородного дифференциального уравнения имеет вид

$$n_{MTE} = \frac{N_0 n_T^0}{A + n_T^0} \left(1 - \exp \left[-k_1 (n_T^0 + A) \cdot t \right] \right). \quad (7)$$

Ход кинетической кривой накопления радиационных дефектов будет определяться соотношениям констант n_T^0 и A . Так, в случае $n_T^0 \gg A$, то есть в случае большой начальной концентрации центров захвата и интенсивных процессов локализации электронных возбуждений на этих центрах, кинетика образования метастабильных локальных центров (7) описывается соотношением

$$n_{MTE} = N_0 \left(1 - \exp \left[-k_1 n_T^0 t \right] \right). \quad (8)$$

В противоположном случае, когда центров захвата мало и эффективность локализации электронных возбуждений на них низкая, кинетика образования метастабильных локальных (7) центров имеет вид

$$n_{MTE} = \frac{N_0 n_T^0}{A} \left(1 - \exp \left[-k_1 A t \right] \right). \quad (9)$$

Рассмотрим практическое применение предложенной нестационарной кинетической модели в качестве метода анализа дозовых кривых разгорания полос характеристической люминесценции атомарных ван-дер-ваальсовых кристаллов инертных элементов. Именно для этих модельных систем наиболее подходит формула (8), поскольку, с одной стороны,

кристаллические свойства образцов и технологии выращивания данных кристаллов характеризуются достаточно большими значениями n_T^0 , а с другой стороны, эти системы отличаются интенсивными процессами автолокализации экситонов и дырок, что снижает значение константы A ¹.

На рис. 1 представлены дозовые кривые характеристических полос люминесценции при $T = 5$ К. Точками изображены экспериментальные данные работы ², а сплошные линии изображают аппроксимацию этих данных с помощью формулы (8) при соотношениях $n_T^0(\text{Xe}) = n_T^0(\text{Ne})$ и $N_0(\text{Xe}) = 3N_0(\text{Ne})$. Образцы возбуждались монохроматическими фотонами с энергиями $h\nu_{\text{Xe}} = 9,15$ эВ и $h\nu_{\text{Ne}} = 20$ эВ ниже ширины запрещённой зоны $E_g^{\text{Xe}} = 9,298$ эВ и $E_g^{\text{Ne}} = 21,58$ эВ, соответственно. Образцы Ne и Xe выращивались в идентичных условиях, и поэтому они содержат равные начальные концентрации центров автолокализации экситонов. Использование модели позволяет определить относительную эффективность образования экситонов в решётках двух образцов, сравнивая полученные при компьютерном моделировании значения начальных концентраций N_0 экситонов в образцах. Поскольку $N_0(\text{Xe}) = 3N_0(\text{Ne})$, то образование экситонов в кристаллическом Xe происходит втрое эффективнее, чем в Ne.

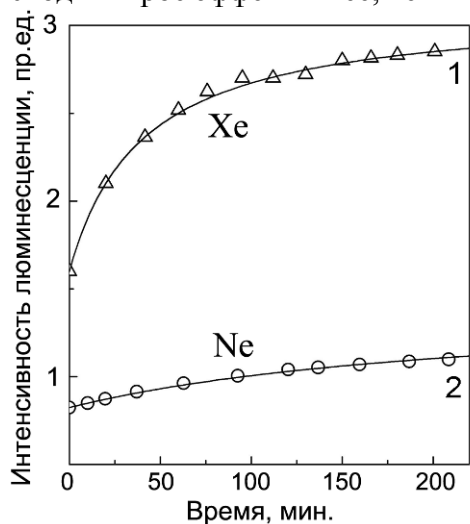


Рис. 1. Дозовые кривые характеристических полос люминесценции криокристаллов Xe и Ne

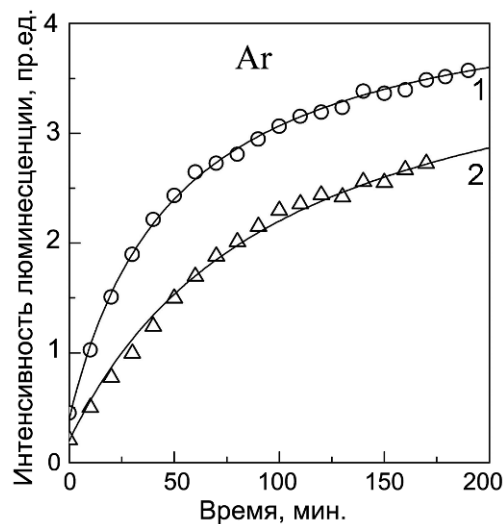


Рис. 2. Дозовые кривые характеристических полос люминесценции криокристаллов Ar

Результаты другого эксперимента проанализированы с помощью предложенной модели на рис. 2, где представлены дозовые кривые из работы ⁴ двух полос люминесценции из одного образца кристаллического Ar при возбуждении пучком электронов с энергией 1000 эВ. Точками изображены экспериментальные данные, а линиями – их аппроксимация с помощью формулы (8). Кривая 1 на рис. 2 отвечает полосе дефектной люминесценции автолокализованных экситонов, а кривая 2 является дозовой кривой полосы люминесценции автолокализованных дырок ⁵. Поскольку обе дозовые кривые зарегистрированы на одном и том же образце, то эффективность образования электронных возбуждений в обоих случаях одинакова $N_0(1) = N_0(2)$. Второе соотношение в данном случае, $n_T^0(1) = 2n_T^0(2)$, является следствием превышения эффективности автолокализации экситонов над эффективностью автолокализации дырок в кристаллах инертных элементов ¹.

Таким образом, предложенная методика оптического детектирования радиационно-стимулированной модификации материалов в результате локализации электронных возбуждений позволяет однозначно интерпретировать полученные параметры нестационарной кинетической модели. Данный метод позволяет проводить качественный и количественный анализ и сертификацию образцов, что является необходимым условием

для сравнения данных экспериментов с разными образцами, и может быть использован при разработке дистанционного непрерывного аналитического метода контроля состояния образцов под облучением.

1. А.Н. Огурцов, *Модификация кристаллов электронными возбуждениями*: монография, 368 с., Харьков: НТУ "ХПИ", (2009).
2. А.Н. Ogurtsov, N.Yu. Masalitina, O.N. Bliznjuk, *Low Temp. Phys.*, **33**, № 6/7, 689-693, (2007).
3. Н.Ю. Масалитина, А.Н. Огурцов, О.Н. Близнюк, А.А. Хлопицкий, *Вопр. химии и хим. технологии*, №1, 166-170, (2013).
4. А.Н. Огурцов, О.Н. Близнюк, Н.Ю. Масалитина, *ИТЭ*, №1, 43-51, (2012).
5. А.Н. Ogurtsov, In: *Spectroscopy of Emerging Materials*, Ed. by E.C. Faulques et al., 45–56, Kluwer, (2004).

**ПРОЯВЛЕНИЕ ВЫРОЖДЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА
МЕТАЛЛОВ В ПЛАЗМОННО-РЕЗОНАНСНОМ
СТРУКТУРИРОВАНИИ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ И
РАССЕЯНИЯ ПРОВОДЯЩИХ КОМПОЗИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ
Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М.**

Оренбургский государственный университет, Оренбург, Россия

В квазиклассическом приближении (Томаса-Ферми) произведены вычисления частотных зависимостей дипольной динамической поляризуемости сферических проводящих нанокомпозитов «кор-оболочка» с учетом вырожденности электронного газа металлов. Проведен анализ структуры оптических спектров и безызлучательной скорости переноса энергии в системах, содержащих такие нанокомпозиты.

О влиянии проводящих нанотел на радиационные переходы в молекулах неоднократно сообщалось разными авторами в ряде работ¹. В металлооптике рассеяние света сферическими частицами изучалось Ми и его современниками, причем в работах этих авторов электронный газ проводника рассматривался как классический.

Однако квантовые статистические свойства электронного газа (ферми-газа) типичны для металлов вплоть до температур их плавления. Распределение плотности $n(\mathbf{r})$ вырожденного электронного газа в металлических наночастицах может быть найдено в квазиклассическом приближении из решения уравнения Томаса-Ферми для потенциала $\varphi(r)$ электрического поля²⁻³. Дипольная динамическая поляризуемость однородной металлической наночастицы в этом случае была определена в работах³⁻⁴. В то же время, определенный интерес для исследования радиационных и безызлучательных молекулярных процессов в ближнем поле сферического плазмонного рефлектора представляет определение дипольной динамической поляризуемости двухкомпонентного шарового нанокомпозита «шар-оболочка». Характеристики такой – сложной – наноантенны являются более гибкими по сравнению с характеристиками однородного проводящего шара за счет вариации диэлектрических проницаемостей компонентов композита и их радиусов.