

ОСОБЛИВОСТІ КІНЕТИКИ РАДІАЦІЙНОГО ДЕФЕКТОУТВОРЕННЯ ЗА УМОВИ ФОРМУВАННЯ КОМПЛЕКСІВ ДЕФЕКТІВ

© Бурій О. А., Убізький С. Б., 2017

На основі розв’язку системи диференціальних рівнянь проаналізовано кінетику накопичення радіаційних дефектів у кристалічних середовищах за умови виникнення комплексів дефектів. Встановлено характерні особливості дозових залежностей, які відображають процес утворення комплексів дефектів.

Ключові слова: радіаційне дефектоутворення, кристалічні середовища, дозові залежності.

O. Buryu, S. B. Ubizskii
Lviv Polytechnic National University

THE PECULIARITIES OF THE RADIATION DEFECTS FORMATION KINETICS IN THE CASE OF DEFECT COMPLEXES GENESIS

© Buryu O., Ubizskii S. B., 2017

The problem of determination of radiation defects accumulation kinetics is considered under the assumption of defects complexes formation, particularly, the ones of anion and cation vacancies. Based on the system of differential equations, the analytical expression for doze dependencies of concentrations of defects and their complexes are obtained. As it is shown, the enrichment of the crystal by the defects with higher formation cross-section and the simultaneous depletion by the defects with lower one are taking place at sufficiently high fluences of radiation (about 10^{18} cm⁻²). At that the doze dependencies for the defects with lower cross-section have got the maxima. The flex points are observed on the doze dependences of concentrations of defects and their complexes at the same value of the fluence. These peculiarities are typical for the doze dependencies in the case of complexes formation and can be used for identification of this process during experimental studies. The typical peculiarities of the processes observed under crystal irradiation are also determined by calculations and analysis that are carried out for the set of parameters characterizing the intensity of irradiation, the probability of defects formation and the velocity of complexes accumulation. The obtained mathematical model can be used for analysis of doze dependencies for different crystalline materials used in solid-state electronics and photonics.

Key words: radiation defects formation, crystalline media, doze dependencies.

Вступ

Опромінення кристалічних матеріалів швидкими важкими частинками (протонами, нейтронами, іонами) є одним із відомих технологічних методів модифікації їхніх властивостей, що дає змогу, зокрема, змінювати структуру та властивості поверхні та приповерхневих шарів твердих тіл, вводити домішки за рахунок іонної імплантації або трансмутаційного легування, збільшувати

роздільну здатність літографічного процесу за доз опромінення, менших за типові дози в електронній літографії тощо [1–3]. Іонно-трекова технологія може застосовуватися для формування нанорозмірних мембран, нанодротин, інших наноструктур із великою густиною елементів [4]. Разом із тим, опромінення є одним із факторів, що може змінювати характеристики електронних приладів у радіаційних умовах експлуатації. Все це зумовлює актуальність досліджень змін властивостей матеріалів, зокрема кристалічних, під дією радіаційних випромінювань. Необхідною ланкою у комплексі таких досліджень є побудова адекватної математичної моделі дефектоутворення, яка дасть змогу передбачати результат дії на матеріал різних видів та доз опромінення. Ця робота є продовженням циклу робіт [5–9], пов’язаних із моделюванням процесів накопичення радіаційних дефектів у складних оксидних кристалах. Такий вибір об’єкта досліджень зумовлений широким використанням оксидних кристалів, таких як LiNbO_3 , $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$, YAlO_3 , $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ тощо, у квантовій та оптоелектроніці, що, своєю чергою, зумовлює комплекс вимог щодо їх оптичної якості, зокрема, можливості утворення у них радіаційних центрів забарвлення. Можливість ефективного використання оксидних кристалів, зокрема YAlO_3 : Mn, у детекторах радіації [10–11] також визначає важливість встановлення реалістичних моделей процесів, які відбуваються під час взаємодії квантів високих енергій або швидких частинок з цими матеріалами.

В роботі визначено особливості кінетики процесу дефектоутворення за умови, що дефекти зміщення різних типів (аніонні та катіонні) можуть об’єднуватися у комплекси. Раніше це завдання аналізували у [9] за допомогою числових методів. Проте, як показано в роботі, для системи диференціальних рівнянь, що описують процеси накопичення дефектів та комплексоутворення, існує і аналітичний розв’язок, зручніший для аналізу та загальніший, ніж результати числових розрахунків, виконаних для певних заданих наборів параметрів. Отриманий аналітичний розв’язок використано для визначення основних особливостей залежності концентрацій радіаційних дефектів від флюенсу частинок, якими опромінюється кристал.

Основні співвідношення

Розглянемо кристал, що опромінюється частинками, зіткнення яких з атомами кристалічної решітки призводять до появи радіаційних дефектів зміщення (пар Френкеля). Інтенсивність опромінення характеризуватимемо потужністю флюенсу P , тобто кількістю частинок опромінення, які проходять через одиницю площі кристала за одиницю часу. Процес генерації радіаційних дефектів зміщення у найпростішому випадку описується рівнянням

$$\frac{dn}{dt} = n_a \sigma_d P, \quad (1)$$

де n – концентрація утворених дефектів зміщення; σ_d – переріз утворення дефекту; n_a – концентрація атомів цього типу в кристалі.

Якщо внаслідок взаємодії утворених дефектів, для визначеності аніонної та катіонної вакансій, утворюються їх комплекси, то швидкість комплексоутворення можна вважати прямо пропорційною до добутку відповідних концентрацій вакансій n_1 та n_2 ,

$$\frac{dn_c}{dt} = -K_c n_1 n_2, \quad (2)$$

де n_c – концентрація комплексів; K_c – стала швидкості бімолекулярної реакції комплексоутворення, контрольована дифузиею.

Враховуючи одночасно процеси утворення вакансій обох типів та їх об’єднання у комплекси, процеси, що відбуваються під час опромінення кристала, можемо описати такою системою диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dn_1}{dt} = n_a \sigma_{d1} P - K_c n_1 n_2 \\ \frac{dn_2}{dt} = n_a \sigma_{d2} P - K_c n_1 n_2 \end{cases}, \quad (3)$$

Увівши змінну $w = n_1 - n_2$ та віднімаючи друге рівняння системи (3) від першого, отримуємо рівняння відносно w

$$\frac{dw}{dt} = n_a(\sigma_{d1} - \sigma_{d2})P, \quad (4)$$

яке має розв'язок $w = w(0) + n_a(\sigma_{d1} - \sigma_{d2})Pt$. Далі, виразивши n_2 через n_1 та w , та вважаючи початкові концентрації вакансій обох типів однаковими ($w(0) = 0$), одержимо рівняння відносно n_1 :

$$\frac{dn_1}{dt} = -K_c n_1^2 + K_c n_a(\sigma_{d1} - \sigma_{d2})P n_1 t + n_a \sigma_{d1} P. \quad (5)$$

Рівняння для n_2 є однотипним і збігається з (5) у разі заміни $\sigma_{d1} \leftrightarrow \sigma_{d2}$:

$$\frac{dn_2}{dt} = -K_c n_2^2 + K_c n_a(\sigma_{d2} - \sigma_{d1})P n_2 t + n_a \sigma_{d2} P. \quad (6)$$

Рівняння (5), (6) належать до класу узагальнених диференціальних рівнянь Ріккати, які в загальному випадку мають вигляд [12]:

$$\frac{dy}{dt} = f(t)y^2 + g(t)y + h(t). \quad (7)$$

Для рівняння (5), яке, для визначеності, й розглядатимемо надалі, маємо $y(t) = n_1(t)$, $f(t) = -K_c$, $g(t) = K_c n_a(\sigma_{d1} - \sigma_{d2})Pt$, $h(t) = n_a \sigma_{d1} P$, тобто лише функція $g(t)$ містить залежність від часу, тоді як $f(t)$ та $h(t)$ є константами.

Рівняння (7) нелінійне, проте, якщо функції $f(t)$ та $g(t)$ неперервні, а $f(t)$ – диференційована, його можна перетворити на лінійне диференціальне рівняння другого порядку відносно функції

$$u(t) = \exp\left(-\int f(t)y(t)dt\right), \quad (8)$$

яке має вигляд [12]

$$f(t)\frac{d^2u}{dt^2} - \left(\frac{df}{dt} + f(t)g(t)\right)\frac{du}{dt} + f^2(t)h(t)u = 0. \quad (9)$$

За відомої $u(t)$ функцію $y(t)$ знаходимо як

$$y(t) = -\frac{1}{u(t)f(t)}\frac{du}{dt}. \quad (10)$$

Для рівняння (5) для $u(t)$ отримуємо (якщо $y(t) \equiv n_1(t)$):

$$\frac{d^2u}{dt^2} - K_c n_a(\sigma_{d1} - \sigma_{d2})Pt\frac{du}{dt} - K_c n_a \sigma_{d1} Pu = 0. \quad (11)$$

Позначивши для спрощення $b = -K_c n_a \sigma_{d1} P$, $a = -K_c n_a(\sigma_{d1} - \sigma_{d2})P = \left(1 - \frac{\sigma_{d2}}{\sigma_{d1}}\right)b$ запишемо (11) у вигляді

$$\frac{d^2u}{dt^2} + at\frac{du}{dt} + bu = 0. \quad (12)$$

Введемо функцію $z(t)$, таку, що $u(t) = t^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{at^2}{4}\right)z(t)$. Підставивши цей вираз до (12), після деяких перетворень отримуємо рівняння для визначення $z(t)$:

$$4x^2 \frac{d^2z}{dx^2} = (x^2 - 4kx + 4m^2 - 1)z, \quad (13)$$

де введено нову змінну $x = \frac{a}{2}t^2$, а також параметри $k = \frac{b}{2a} - \frac{1}{4} = \frac{1}{4} \frac{\sigma_{d1} + \sigma_{d2}}{\sigma_{d1} - \sigma_{d2}}$, $m = \frac{1}{4}$. Рівняння (13)

є рівнянням Уіттекера, а його розв'язки, за умови, що $2m$ не є цілим числом, виражаються через функцію Уіттекера $M_{k,m}(x)$:

$$z(k, m, x) = C_1 M_{k,m}(x) + C_2 M_{k,-m}(x) \quad (14)$$

Функція Уїттекера, своєю чергою, виражається через вироджену гіпергеометричну функцію F :

$$M_{k,m}(x) = x^{\frac{1}{2}+m} \exp\left(-\frac{x}{2}\right) F\left(\frac{1}{2} + m - k, 2m + 1, x\right), \quad (15)$$

де

$$F(\alpha, \beta, x) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha(\alpha+1)\dots(\alpha+n-1)}{\beta(\beta+1)\dots(\beta+n-1)n!} x^n, \quad (16)$$

за умови, що β не дорівнює від'ємному цілому числу або нулеві. В нашому випадку $\alpha = \frac{1}{2} + m - k$, $\beta = 2m + 1$.

Підставляючи (15), (16) до (14), для функції $z(k, m, x)$ отримуємо:

$$z(k, m, x) = C_1 x^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{x}{2}\right) \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha_1(\alpha_1+1)\dots(\alpha_1+n-1)}{\beta_1(\beta_1+1)\dots(\beta_1+n-1)n!} x^n\right) + C_2 x^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{x}{2}\right) \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha_2(\alpha_2+1)\dots(\alpha_2+n-1)}{\beta_2(\beta_2+1)\dots(\beta_2+n-1)n!} x^n\right) \quad (17)$$

де $\alpha_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} - \frac{1}{4} \frac{\sigma_{d1} + \sigma_{d2}}{\sigma_{d1} - \sigma_{d2}} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\sigma_{d2}}{\sigma_{d1} - \sigma_{d2}}\right)$, $\beta_1 = \frac{3}{2}$, $\alpha_2 = -\frac{1}{2} \frac{\sigma_{d2}}{\sigma_{d1} - \sigma_{d2}}$, $\beta_2 = \frac{1}{2}$. Отже, функція

$z(k, m, x)$ залежить лише від параметра $\frac{\sigma_{d2}}{\sigma_{d1} - \sigma_{d2}}$.

Функція $u(t)$, відповідно до сказаного вище, дорівнює:

$$u(t) = t^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{a}{4} t^2\right) z\left(k, m, \frac{a}{2} t^2\right) = \exp\left(-\frac{a}{2} t^2\right) \left\{ C_1 \left(\frac{a}{2}\right)^{\frac{3}{4}} t F\left(\alpha_1, \beta_1, \frac{a}{2} t^2\right) + C_2 \left(\frac{a}{2}\right)^{\frac{1}{4}} F\left(\alpha_2, \beta_2, \frac{a}{2} t^2\right) \right\} \quad (18)$$

Ця функція прямує до нуля, якщо $t \rightarrow \infty$, та до $\left(\frac{a}{2}\right)^{\frac{1}{4}} C_2$, якщо $t \rightarrow 0$.

Для спрощення перепозначимо сталі інтегрування, $C_1 \equiv \left(\frac{a}{2}\right)^{\frac{3}{4}} C_1$, $C_2 \equiv \left(\frac{a}{2}\right)^{\frac{1}{4}} C_2$. Тоді для $u(t)$

отримуємо вираз

$$u(t) = \exp\left(-\frac{a}{2} t^2\right) \left\{ C_1 t F\left(\alpha_1, \beta_1, \frac{a}{2} t^2\right) + C_2 F\left(\alpha_2, \beta_2, \frac{a}{2} t^2\right) \right\}. \quad (19)$$

Похідна від $u(t)$, необхідна для розрахунку функції $y(t) \equiv n_1(t)$ за формулою (10), дорівнює:

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} = & (-at) \exp\left(-\frac{a}{2} t^2\right) \left\{ C_1 t F\left(\alpha_1, \beta_1, \frac{a}{2} t^2\right) + C_2 F\left(\alpha_2, \beta_2, \frac{a}{2} t^2\right) \right\} + \\ & + \exp\left(-\frac{a}{2} t^2\right) \left\{ C_1 F\left(\alpha_1, \beta_1, \frac{a}{2} t^2\right) + C_1 t \frac{dF\left(\alpha_1, \beta_1, \frac{a}{2} t^2\right)}{dt} + C_2 \frac{dF\left(\alpha_2, \beta_2, \frac{a}{2} t^2\right)}{dt} \right\}, \end{aligned} \quad (20)$$

де

$$\frac{dF\left(\alpha, \beta, \frac{a}{2} t^2\right)}{dt} = \frac{d}{dt} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha(\alpha+1)\dots(\alpha+n-1)}{\beta(\beta+1)\dots(\beta+n-1)n!} \left(\frac{a}{2} t^2\right)^n \right\} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha(\alpha+1)\dots(\alpha+n-1)}{\beta(\beta+1)\dots(\beta+n-1)(n-1)!} \left(\frac{a}{2}\right)^n t^{2n-1} = \frac{2}{t} F\left(\alpha, \beta, \frac{a}{2} t^2\right), \quad (21)$$

Як випливає з (21), якщо $t \rightarrow 0$, перша похідна від виродженої гіпергеометричної функції прямує до нуля.

Нарешті, використовуючи (10) та ввівши позначення $C = \frac{C_2}{C_1}$, записуємо загальний розв'язок диференціального рівняння (3):

$$n_1(t) = \frac{\left[(-at) \left\{ tF\left(\alpha_1, \beta_1, \frac{a}{2}t^2\right) + CF\left(\alpha_2, \beta_2, \frac{a}{2}t^2\right) \right\} + 3F\left(\alpha_1, \beta_1, \frac{a}{2}t^2\right) + \frac{2C}{t} F\left(\alpha_2, \beta_2, \frac{a}{2}t^2\right) \right]}{K_c \left\{ tF\left(\alpha_1, \beta_1, \frac{a}{2}t^2\right) + CF\left(\alpha_2, \beta_2, \frac{a}{2}t^2\right) \right\}}. \quad (22)$$

Сталу інтегрування C знаходимо з початкової умови $n_1(t=0) = n_{10}$. Відповідно до сказаного вище, $n_{10} = \frac{F(\alpha_1, \beta_1, 0)}{K_c CF(\alpha_2, \beta_2, 0)} = \frac{1}{K_c C}$, а отже, $C = \frac{1}{K_c n_{10}}$.

Остаточо для розв'язку рівняння (3) знаходимо:

$$n_1(t) = \frac{1}{K_c t} \frac{(3-at^2)K_c n_{10} t F\left(\alpha_1, \beta_1, \frac{a}{2}t^2\right) + (2-at^2)F\left(\alpha_2, \beta_2, \frac{a}{2}t^2\right)}{K_c n_{10} t F\left(\alpha_1, \beta_1, \frac{a}{2}t^2\right) + F\left(\alpha_2, \beta_2, \frac{a}{2}t^2\right)}. \quad (23)$$

Концентрація дефектів другого типу (катіонних вакансій) n_2 може бути розрахована як $n_2(t) = n_1(t) - w(t) = n_1(t) - n_a(\sigma_{d1} - \sigma_{d2})Pt$.

Концентрація утворених комплексів n_c визначається з одного з двох еквівалентних рівнянь

$$\frac{dn_c}{dt} = n_a \sigma_{d1} P - \frac{dn_1}{dt}, \quad \frac{dn_c}{dt} = n_a \sigma_{d2} P - \frac{dn_2}{dt}. \quad (24)$$

За початкової умови $n_c(0) = 0$ з (24) отримуємо:

$$n_c(t) = n_a \sigma_{d1} Pt + n_{10} - n_1(t) = n_a \sigma_{d2} Pt + n_{20} - n_2(t). \quad (25)$$

У частковому випадку, коли всі дефекти одного типу беруть участь у комплексоутворенні, наприклад, коли $\frac{dn_2}{dt} = 0$, одержимо

$$n_c(\Phi) = n_a \sigma_{d2} Pt = n_a \sigma_{d2} \Phi, \quad (26)$$

де $\Phi = Pt$ – флюенс частинок. Як видно з (26), концентрація комплексів зростає лінійно, як і у випадку одиничних радіаційних дефектів зміщення. Вочевидь, і концентрація дефектів іншого типу (тобто n_1) зростатиме лінійно відповідно до співвідношення

$$n_1(\Phi) = n_{10} - n_{20} + n_a(\sigma_{d1} - \sigma_{d2})\Phi. \quad (27)$$

Вирази (23), (25) використано для розрахунків залежностей концентрацій аніонних та катіонних вакансій n_1 , n_2 та їх комплексів n_c від величини флюенсу Φ (дозових залежностей).

Аналіз результатів

Результати розрахунків концентрацій аніонної та катіонної вакансій n_1 , n_2 та їх комплексів n_c наведено на рис. 1. Розрахунки виконано для значень параметрів $n_{10} = n_{20} = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $\sigma_{d1} = 1 \cdot 10^{-20} \text{ см}^2$, $\sigma_{d2} = 8 \cdot 10^{-21} \text{ см}^2$, $n_a = 1.5 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$, $K_c = 1 \cdot 10^{-21} \text{ с}^{-1} \cdot \text{см}^3$, $P = 1 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1} \cdot \text{см}^2$. Прямі line 1 та line 2 відображають залежності (27) та (26) відповідно.

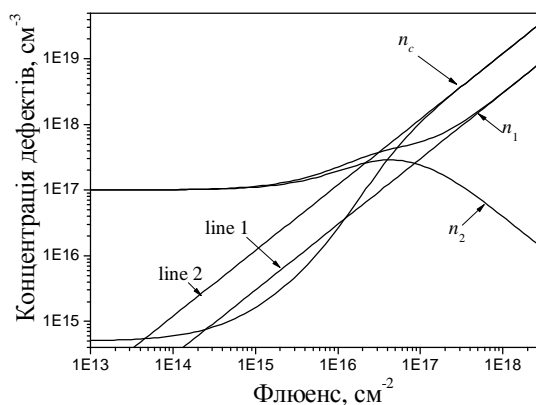


Рис. 1. Кінетика накопичення радіаційних дефектів зміщення – аніонних n_1 та катіонних вакансій n_2 та їх комплексів n_c .

Як видно з рис. 1, за різних значень перерізу радіаційного дефектоутворення аніонної та катіонної вакансій в області великих флюенсів спостерігається зростання концентрації вакансій, що характеризуються більшим перерізом дефектоутворення σ_d , та зменшення концентрації вакансій з меншим σ_d . Це пов'язано з тим, що зростання концентрації дефектів з більшим σ_d веде до зростання імовірності зв'язування дефектів другого типу у комплекс, яка за деякого значення флюенсу починає перевищувати імовірність їх утворення. На дозовій залежності спостерігатиметься максимум (див. криву n_2 на рис. 1), що може розглядатися як характерна особливість дозової залежності, яка спостерігається у разі утворення в опромінену кристалі комплексів дефектів. Зазначимо, що подібні максимуми спостерігалися, наприклад, на дозових залежностях пасивних та генераційних втрат лазерного кристала $Y_3Al_5O_{12}: Nd^{3+}$ [1] та коефіцієнта поглинання кристала $BaLiF_3$, опроміненого електронами [8].

Як видно з дозової залежності n_2 , вона містить точку перегину за величини флюенсу, дещо меншої за ту, яка відповідає максимуму функції $n_2(\Phi)$. Залежність $n_1(\Phi)$ повинна мати точку перегину за того самого значення Φ . Справді, як випливає із системи рівнянь (3), другі похідні за часом (або флюенсом) від концентрацій дефектів $\frac{d^2 n_1}{dt^2}$, $\frac{d^2 n_2}{dt^2}$ завжди рівні між собою, а отже, й координати точок, у яких містяться нулі других похідних, у них повинні збігатися. Крім того, як випливає з (24), друга похідна від концентрації комплексів за часом протилежна за знаком до других похідних від концентрації вакансій, $\frac{d^2 n_c}{dt^2} = -\frac{d^2 n_1}{dt^2} = -\frac{d^2 n_2}{dt^2}$, а отже, теж має точку перегину за того самого значення флюенсу.

Обидві зазначені особливості – наявність максимуму та збіг точок перегину можуть розглядатися як характерні ознаки процесів, що супроводжуються утворенням комплексів дефектів та використовуватися для їх ідентифікації на основі дозових залежностей.

Параметри процесів утворення дефектів можна визначити з дозових залежностей. Зокрема, як випливає з (26), (27), перерізи утворення дефектів σ_{d1} , σ_{d2} можна визначити через тангенси кута нахилу асимптот (line 1, line 2). Сталу швидкості K_c реакції комплексоутворення можна знайти за відомих σ_{d1} , σ_{d2} та концентрацій дефектів n_1^* , n_2^* , які відповідають максимуму n_2 , з другого рівняння системи (3) при $\frac{dn_2}{dt} = 0$. Тоді для постійної швидкості знаходимо $K_c = \frac{n_a \sigma_{d2} P}{n_1^* n_2^*}$.

Враховуючи зв'язок між концентраціями дефектів $n_1(\Phi) - n_2(\Phi) = n_a(\sigma_{d1} - \sigma_{d2})\Phi$, з другого рівняння системи (3), якщо $\frac{dn_2}{dt} = 0$, можна отримати співвідношення, яке зв'язує концентрації дефектів n_1^* , n_2^* з величиною флюенсу Φ^* , що відповідає максимуму n_2 . Зокрема, для n_2^* знаходимо, що

$$n_2^* = -\frac{n_a}{2}(\sigma_{d1} - \sigma_{d2})\Phi^* + \sqrt{\frac{n_a^2}{2}(\sigma_{d1} - \sigma_{d2})^2(\Phi^*)^2 + \frac{4n_a\sigma_{d2}P}{K_c}}. \quad (28)$$

Це співвідношення можна використати для визначення постійної швидкості K_c на основі даних стосовно n_2^* та Φ^* , коли лише залежність $n_1(\Phi)$ недостатньо добре відома в околі максимуму n_2 .

З метою визначення характеру залежностей концентрацій дефектів та їх комплексів виконано розрахунки для набору параметрів, що характеризують інтенсивність опромінення (потужність флюенсу P), імовірність утворення дефектів (переріз утворення дефектів σ_{d1} ; параметр σ_{d2} залишався фіксованим на значенні $8 \cdot 10^{-21} \text{ см}^2$) та швидкість утворення комплексів (константа швидкості квазіхімічної реакції утворення комплексів дефектів K_c). Відповідні залежності наведено на рис. 2–4.

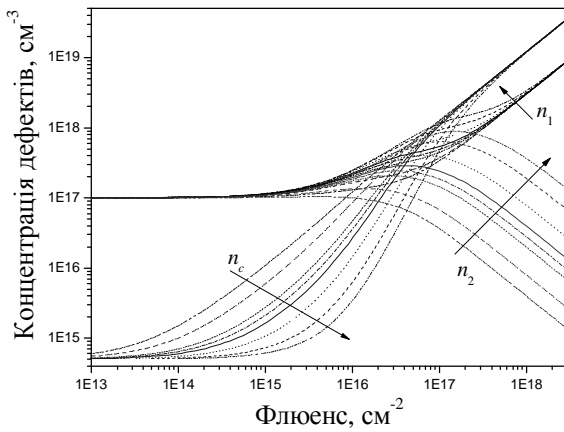


Рис. 2. Залежності концентрацій дефектів та їх комплексів від величини флюенсу за значень потужності флюенсу $P = 1 \times 10^{12}, 0.2 \times 10^{13}, 0.5 \times 10^{13}, 0.7 \times 10^{13}, 1 \times 10^{13}, 2 \times 10^{13}, 5 \times 10^{13}, 1 \times 10^{14} \text{ c}^{-1} \times \text{см}^{-2} \text{ c}^{-1} \times \text{см}^{-2}$. Стрілки відображають послідовності зміни графіків відповідних залежностей у разі збільшення P

Як показують розрахунки, збільшення потужності флюенсу (рис. 2) веде до зміни характеру кривої накопичення дефектів з більшим перерізом утворення σ_{d1} : у разі збільшення інтенсивності флюенсу ділянка, на якій похідна $\frac{d^2 n_1}{d\Phi^2}$ змінює знак, стає помітнішою. Збільшення потужності флюенсу призводить також до зсування максимуму на дозовій залежності $n_2(\Phi)$ у бік більших флюенсів (рис. 5, а), що зумовлено інтенсивнішим дефектоутворенням за більших P . Концентрація дефектних центрів n_c за однакових значень флюенсу тим більша, чим менша потужність флюенсу P .

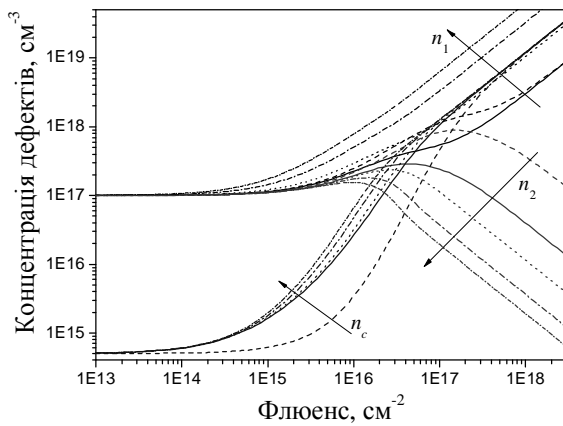


Рис. 3. Залежності концентрацій дефектів та їх комплексів від величини флюенсу за значень перерізу утворення дефектів $S_{d1} = 0.85 \cdot 10^{-20}, 1 \cdot 10^{-20}, 1.5 \cdot 10^{-20}, 3 \cdot 10^{-20}, 5 \cdot 10^{-20} \text{ см}^2$. Стрілки відображають послідовності зміни графіків відповідних залежностей за збільшення S_{d1}

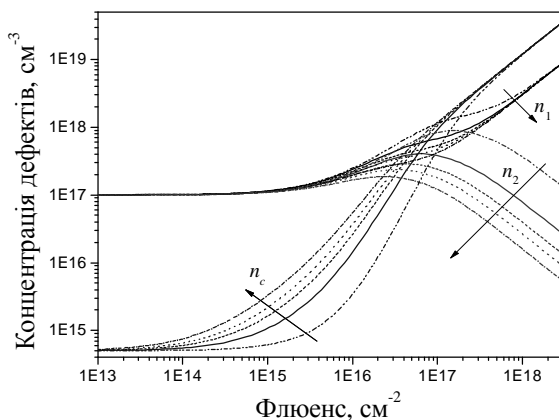


Рис. 4. Залежності концентрацій дефектів та їх комплексів від величини флюенсу за значень константи швидкості утворення комплексів дефектів $K_c = 0.1 \times 10^{-21}, 0.5 \times 10^{-21}, 1 \times 10^{-21}, 1.5 \times 10^{-21}, 2.5 \times 10^{-21} \text{ c}^{-1} \times \text{см}^3$. Стрілки відображають послідовності зміни графіків відповідних залежностей у разі збільшення K_c

Зміна σ_{d1} призводить до змін, загалом протилежних до тих, що виникають у разі змін потужності флюенсу (рис. 3). Зі збільшенням σ_{d1} на залежності $n_1(\Phi)$ стає непомітною область, у якій похідна $\frac{d^2 n_1}{d\Phi^2}$ від'ємна. Характерно, що залежності $n_1(\Phi)$ за різних σ_{d1} не прямують за великих

Φ до того самого значення, подібно як на рис. 2. Це безпосередньо впливає з виразу (27), оскільки за різних σ_{d1} за інших постійних параметрів нахил асимптоти, представленої прямою line 1 на рис. 1, буде різним. Максимум на залежності $n_2(\Phi)$ у разі зростання σ_{d1} зміщується в бік менших флюенсів (рис. 5, б) та за достатньо великих σ_{d1} стає малопомітним. На відміну від випадку різних P , збільшення σ_{d1} веде до зростання концентрації дефектних центрів n_c за однакових значень флюенсу Φ .

Збільшення константи швидкості реакції зумовлює зміни в характері залежностей $n_2(\Phi)$, $n_c(\Phi)$, подібні до тих, що відбуваються за збільшення перерізу утворення дефектів σ_{d1} (рис. 4). Зокрема, максимум на залежності $n_2(\Phi)$ у разі зростання K_c також зміщується в бік менших флюенсів (рис. 5, в), ця залежність є практично лінійною у двічі логарифмічному масштабі. Разом з тим, збільшення K_c веде до зменшення концентрації дефектів з більшим перерізом утворення n_1 , через інтенсивнішу взаємодію між утвореними дефектами за більшої константи швидкості реакції. Подібно до того, як у випадку різних P (рис. 2), всі залежності $n_1(\Phi)$ за великих Φ прямують до асимптоти, що визначається співвідношенням (27) (як видно з (27), положення цієї асимптоти не залежить від K_c).

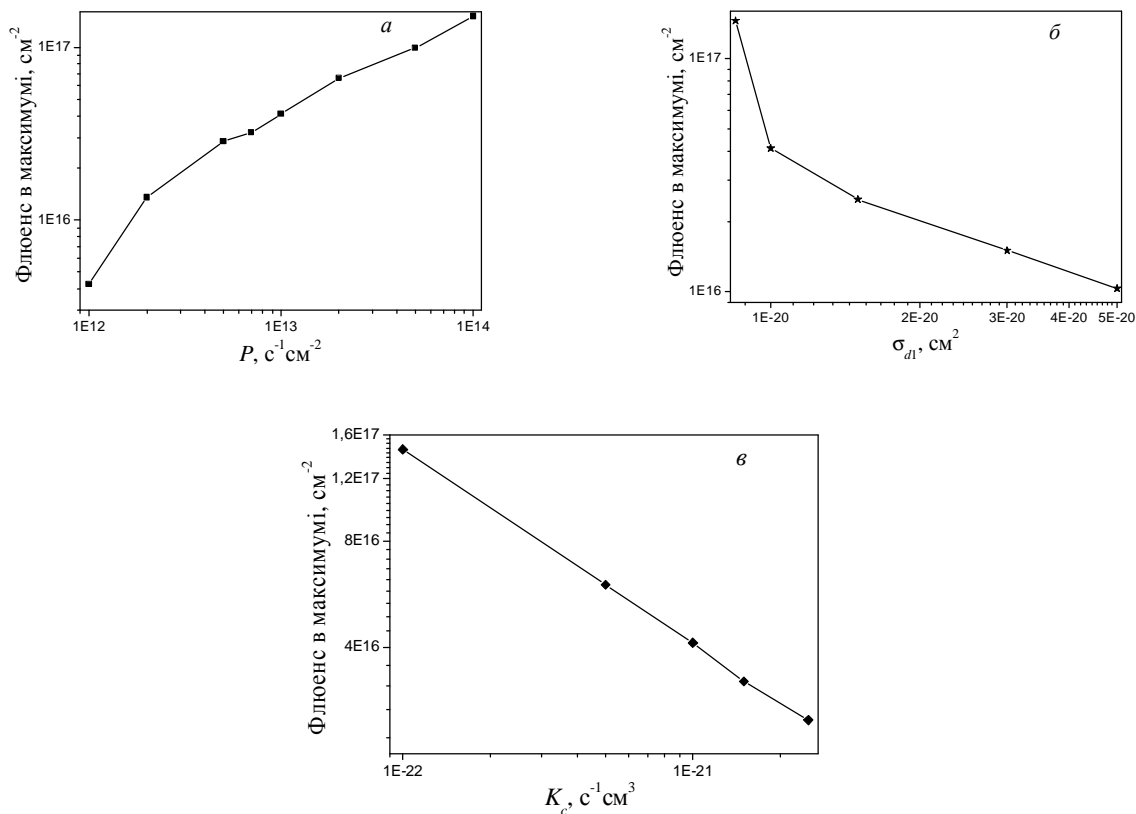


Рис. 5. Залежність флюенсу, відповідного до максимуму на залежності $n_2(\Phi)$, від потужності флюенсу P (а), від перерізу радіаційного дефектоутворення σ_{d1} (б) та від константи швидкості реакції утворення комплексів дефектів K_c (в)

Висновки

Отримано аналітичний розв'язок задачі опису кінетики накопичення радіаційних дефектів за умови утворення комплексів дефектів, зокрема комплексу, що складається з аніонної та катіонної вакансій. Показано, що за достатньо великих флюенсів відбуватиметься збагачення кристала дефектами з більшим значенням перерізу радіаційного дефектоутворення σ_d та збіднення його дефектами з меншим перерізом. На залежності концентрації дефектів останнього типу від флюенсу

спостерігається максимум, а точки перегину на дозових залежностях концентрацій дефектів обох типів, а також концентрації утворених центрів, спостерігатимуться за того самого значення флюенсу. Ці особливості характерні для дозових залежностей у випадку утворення комплексів дефектів і можуть використовуватися для ідентифікації таких процесів під час експериментальних досліджень. Характерні особливості процесів, що відбуваються під час опромінення кристалів, визначено також з розрахунків, виконаних для набору параметрів, що характеризують інтенсивність опромінення, імовірність утворення дефектів та швидкість процесу утворення комплексів. Отриману математичну модель можна використати для аналізу дозових залежностей для різних кристалів твердотільної електроніки та фотоніки.

1. Kharisov B. I., Kharissova O. V. and Mendez U. O. (2013) *Radiation Synthesis of Materials and Compounds*, Boca Raton – London – New York, SRC Press. 2. Курносов А. И., Юдин В. В. (1986) *Технология производства полупроводниковых приборов и интегральных микросхем.* – М.: Высшая школа, 1986. 3. Матковский А. О., Сугак Д. Ю, Убизский С. Б., Шпотюк О. И., Черный Е. А., Вакив Н. М., Мокрицкий В. А. (1996), *Воздействие ионизирующих излучений на материалы электронной техники,* – Львов: Світ. 4. Реутов В. Ф., Дмитриев С. Н. (2002). *Ионно-трековая нанотехнология. Российский химический журнал*, 2002, т. 46, № 5, с. 74–80. 5. Sugak D., Matkovski A., Durygin A., Suchocki A., Solskii I., Ubizskii S., Koczynski K., Mierczyk Z (1999) *Influence of color centers on optical and lasing properties of the gadolinium gallium garnet single crystals doped with Nd³⁺ ions. J. Luminescence*, vol. 82, no. 1, pp. 9–15. 6. Ubizskii S, Matkovskii A, Mironova-Ulmane N, Skvortsova V, Suchocki A, Zhydachevskii Ya and Potera P (2000), “Displacement defect formation in complex oxide crystals under irradiation”, *J. Luminescence*, vol. 177, no. 2, pp. 349–366. 7. Ubizskii S., Matkovskii A. and Kholyavka R. and Rak M. (1993) *Investigation of Radiation-Stimulated Processes in Epitaxial Yttrium-Iron Garnet Films. J. Magn. & Magn. Mat.*, vol. 125, pp. 110–112. 8. Ubizskii S., Matkovski A. and Kuzma M. (1996) *Irradiation-induced effects in yttrium – iron garnet films. J. Magn. & Magn. Mat.*, vol. 157/158, pp. 279–280. 9. Bury O., Ubizski S. and Potera P. (2008) *The kinetics of radiation defect accumulation in oxide crystals. Radiation Effects and Defects in Solids*, vol. 163, no. 8, pp. 713–727. 10. Zhydachevskii Ya., Fidelus J. D., Luchechko A., Cabaj A., Pieniązek A., Berkowski M., Suchocki A., Martinez I. C. and Garciae J. R. (2015) *Solid-state and solar sintering of YAP: Mn, Hf ceramics applicable for thermoluminescent dosimetry. Optical Materials*, vol. 45, pp. 246–251. 11. Zhydachevskii Ya., Morgun A., Dubinski S., Yan Yu, Glowacki M., Ubizskii S., Chumak V., Berkowski M. and Suchocki A. (2016) *Energy response of the TL detectors based on YAlO₃: Mn crystals. Radiation Measurements*, vol. 90, pp. 262–264. 12. Камкэ Э. (1976) *Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям.* – М.: Наука. 13. Prado L, Gomes L., Baldochi S., Morato S. and Vieira Jr. N (1998) *Electron-irradiation-induced defects in BaLiF₃ crystals. J. Phys.: Condens. Matter*, vol. 10, no. 37, pp. 8247–8256.