ФИЗИКА

УДК. 537.86.535.343
DOI: 10.52754/16947452_2022_4_7

ИОНДУК КРИСТАЛЛДАРДАГЫ РАДИАЦИЯЛЫК ДЕФЕКТТЕРДИ ТҮЗҮҮ МЕХАНИЗМИ ЖАНА АНЫ МОДЕЛДЕШТИРҮҮ

Каденова Батмакан Ажимаматовна к.ф.-м.н.
kadenova66@mail.ru
Назирова Инобат Нуралиевна, магистрант
Маматкабыл кызы Сонунбү, магистрант
Калмурза кызы Асылзат, магистрант
Ош мамлекеттик университети
Ош, Кыргызстан

Аннотация. *Иондоштуруучу нурлануунун катуу заттарга тийгизген таасири аларда жаңы структуралык дефекттердин пайда болушуна жана нурланууга чейин болгон дефекттердин өзгөрүшүнө алып келет. Нурлануу аркылуу кристаллдардын структурасында жаңы дефекттердин пайда болушу нурлануу аяктагандан кийин көптөгөн физикалык жана химиялык касиеттердин өзгөрүшүнөн көрүнөт. Катуу заттардын радиациялык физикасында радиациялык дефекттердин табиятын жана алардын ар кандай материалдарга айлануу механизмдерин ачууга байланышкан маселелер негизги орундардын бирин ээлейт. Бул жумушта катуу заттардагы анын иондоштуруучу нурдануулардын өз ара аракеттенишүү учурундагы өнүктүрүлгөн иондук кристаллдардын согулган жана согулбаган механизмдери каралган жана математикалык берилиши алынган.*

Ачкыч сөздөр*: радиациялык дефекттер, согулуу механизми, френкелдик дефекттер, чектик энергия, дефекттердин диффузиясы.*

МЕХАНИЗМЫ СОЗДАНИЯ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ И ЕГО МОДЕЛИРОВАНИЕ

Каденова Батмакан Ажимаматовна к.ф.-м.н.
kadenova66@mail.ru
Назирова Инобат Нуралиевна, магистрант
Маматкабыл кызы Сонунбү, магистрант
Калмурза кызы Асылзат, магистрант
Ошский государственный университет
Ош, Кыргызстан

Аннотация. *Воздействие ионизирующей радиации на твердые тела приводит к возникновению в них новых дефектов структуры и преобразованию дефектов, существовавших до облучения. Создание радиацией новых дефектов структуры кристаллов проявляется после окончания облучения в изменении многих физических и химических свойств. Вопросы, связанные с выяснением природы радиационных дефектов и механизмов их преобразования в различных материалах, занимают одно из центральных*

мест в радиационной физике твердого тела. В данной работе рассмотрена ударный и не ударный механизм ионного кристалла, развивающийся в твердом теле при взаимодействии его ионизирующим излучением и получены математическое описание.

Ключевые слова: *радиационные дефекты, ударный механизм, френкелевские дефекты, пороговая энергия, диффузии дефекты.*

MECHANISMS FOR CREATING RADIATION DEFECTS IN IONIC CRYSTALS AND ITS SIMULATION

Kadenova Batmakan Azhimatovna Ph.D.
kadenova66@mail.ru
Nazirova Inobat Nuralieva, master student
Mamatkabyl kyzy Sonunbu, master student
Kalmurza kyzy Asylzat, master student
Osh State University,
Osh, Kyrgyzstan

***Abstract**. The impact of ionizing radiation on solids leads to the appearance of new structural defects in them and the transformation of defects that existed before irradiation. The creation of new defects in the structure of crystals by radiation manifests itself after the end of irradiation in a change in many physical and chemical properties. Questions related to the elucidation of the nature of radiation defects and the mechanisms of their transformation in various materials occupy one of the central places in the radiation physics of solids. In this paper, the impact and non-impact mechanism of an ionic crystal, which develops in a solid body when it interacts with ionizing radiation, is considered, and a mathematical formula is obtained.*

Keywords: *radiation-induced defects, impact mechanism, frenkel defects, threshold energy, diffusion defects*

Киришүү. Иондук кристаллдарда радиациялык дефекттерди пайда кылуу, аларды оптикалык (лазердик, ультра кызгылткөк, инфра кызыл жана радиациялык (рентген, $\alpha-,\gamma-,\beta-$) нурлар менен бөлүкчөлөрдүн (электрон, протон, нейтрон, иондор) агымы жана башка механикалык, электрдик, химиялык таасир этүүлөрдүн натыйжасында жүргүзүлөт. Иондук кристаллдарды иондоштуруучу нурлар менен нурдантууда радиациялык дефекттердин пайда болуу механизмдерин эки класска бөлүүгө болот [1, 2]; түйүндөр аралык атомдордун жана түгөйлүү вакансиялардын пайда болуусунун универсалдуу согулуу (ударный) механизми жана электрондук дүүлүгүүнүн ажыроосундагы дефекттердин пайда болуусунун механизмдери.

Изилдөөнүн объектиси жана ыкмалары: изилдөөнүн объектилери катарында катуу заттар физикасынын мазмуну жана NaCl, KCl, NaCl-Ag жана KCl-Ag жегич-галоиддик кристаллдары алынат, ал эми изилдөөнүн

ыкмасы катарында радиациялык дефекттердин согулуу механизмине негизделген математикалык моделдештирүүсү каралат.

Жыйынтыктар жана талкуулар. Кенен жылчыктуу иондук кристаллдарда дефект пайда болуунун согулуу механизми менен катар дефект пайда болуусунун согулуу эмес механизмдери да эффективдүү иштеп келет. Бул учурда согулган бөлүкчө-фотондун энергиясынын негизги бөлүгү катуу заттын ядролук эмес, электрондук подсистемасына берилет да кристаллдык торчону түзүүчү атомдордун (иондордун) дүүлүгүсү жана иондошуусу ишке ашат [2]. Тез өтүүчү орто аралыктык процесстерден кийин кристаллда өткөрүмдүүлүк электрондору жана валенттик көзөнөкчөлөр, ошондой эле аниондук жана катиондук электрондук дүүлүгүлөр пайда болушат. Эгерде дүүлүгүнүн жашоо убактысы жетишээрлик көп болсо, анда электрондор (e^-) менен көзөнөкчөлөрдүн (e^+) рекомбинациясында, же (e_a^0) аниондук экситондордун ажыроосунда Френкелдик дефект (ФД) пайда болуусу мүмкүн. Дефект пайда кылуунун согулуу механизмине караганда ФД мындай жол менен пайда кылуу үчүн азыраак энергия сарпталат.

Дефекттердин согулуу механизми боюнча радиациялык дефекттердин пайда болуусу негизинен кристаллга келип түшкөн электрондордун, протондордун жана башка бөлүкчөлөрдүн кристаллдын иондорунун же атомдорунун ядролору менен серпилгичтүү кагылышуусунун натыйжасында аткарылат [1,3]. Эгерде серпилгичтүү кагылышуунун натыйжасында кыймылдагы бөлүкчөдөн атомго (ионго) берилген энергия кандайдыр бир пределдик маанисинен чоң болсо, анда торчонун түйүнүнөн учуп чыккан атом кристаллдык торчо боюнча кыймылдап бош орун–вакансияны пайда кылат.

Кристаллдын иону (атому) жакынкы түйүндөр аралык боштука чыгуу үчүн берилүүчү энергиянын эң кичинекей мааниси чектик (пороговый**)** энергия деп аталат. Эгерде ионго жогорку кыймылдагы бөлүкчө берген энергия чектик энергиядан аз болсо, анда иондордун түйүндөр аралыгына жылышуусу болбойт. Бул учурда берилүүчү энергия серпилгичтүү толкундарды пайда кылган кристаллдардын жылуулук энергиясына айланат. Чектик энергия иондордун торчосунун түйүнүнөн түйүндөр арасына адиабаттык жылышуусу үчүн зарыл болгон энергиядан эки-үч эсе чоң экендигин тажрыйба көрсөтөт. Көпчүлүк кристаллдар үчүн чектик энергия жакындаштырылган түрдө 25 эВ го барабар, ал эми иондордун байланыш энергиясы болжол менен 10 эВ. Кагылышуунун натыйжасында чектик энергиядан көбүрөөк энергия алган кристаллдын ар бир иону түйүндөр

арасына жылышат да анын натыйжасында бир эле мезгилде вакансия жана түйүндөр аралык ион пайда болот. Энергияны алуучу иондор (атом отдачи) деп аталган жылышкан иондордун энергияларынын мааниси чектик энергиядан сезилээрлик чоң болсо, анда бул биринчи энергияны алуучу иондор өз кезегинде экинчи энергияны алуучу иондорду пайда кылышат, экинчилери-үчүнчүлөрүн, ж.б. Бул жылышкан иондордун (атомдордун) энергиялары чектик мааниге жакындашканга чейин уланат. Мына ошентип, атомдук жылышуулардын секиртмеси (каскады) пайда болот.

Каралган механизм боюнча радиациялык чекиттик дефекттер ар дайым түгөйлүк дефекттер экендиги келип чыгат, тактап айтканда алар Френкелдик дефекттер [2]. Дефекттердин согулуу механизми менен жаратууда пайда болгон радиациялык дефекттер кристаллдын дефекти жок аймактарында жана ошондой эле торчонун симметриясында радиацияга чейинки бузулуусу бар аймактарда да пайда болот. Баштапкы дефекттердин бар экендиги радиациялык дефекттерди пайда кылуунун зарыл шарты болуп эсептелбейт [1]. Бирок заряддалган бөлүкчөлөрдүн катуу заттар менен өз ара кагылышуусунда энергиясынын негизги бөлүгү кристаллдын электрондук структурасын дүүлүктүрүүгө кетет. Көпкө чейин дүүлүккөн электрондук подсистема радиациялык дефекттердин пайда болуусуна катышпайт деп эсептелинип келген. Жегич-галоиддик кристаллдарга (ЖГК) окшогон кенен жылчыктуу иондук системанын жана кээ бир жарым өткөргүчтөрдүаныктоодогу изилдөөлөр бул материалдарда радиациялык дефекттин пайда болуусу серпилгичтүү жылышуунун механизми менен гана эмес, кристаллдын электрондук подсистемасынын дүүлүгүүсү менен да байланыштуу экендигин көрсөттү [3].

Катуу заттардагы түзүлүштөрдүн пайда болуусун башкаруу үчүн туруксуздуктарга тиешелүү механизмдерди жана алардын моделдерин иштеп чыгуу менен дефекттердин пайда болуу шарттарын билүү зарыл. Радиациялык дефект пайда болгондон кийин диффузиялык процесс жүрөт жана бул процесстин жүрүшүнүн теңдемесин 1855 –жылы Фико сунуш кылган, кийинчерээк Емельянов өзүнүн кызматчыларыменен бирдикте ар кандай учурлар үчүн өз ара аракеттенүүчү деформациялар талаасы, дефекттердин концентрациясы жана температурасы менен беттик туруксуздуктардын өсүүсү системаларда каралган. Бул туруксуздуктар концентрациялык-деформациялык-жылуулук туруксуздуктар (КДЖТ) деген аталышка ээ болушкандыгы белгилүү. КДЖТ нын жалпы модели радиациялык нурдануунун таасири астында пайда болуучу

туруксуздуктардын жетишээрлик кеңири классын камтыйт. Анын бир катар аспектилери туруксуздуктардын башка типтерине өткөрүлүшү мүмкүн.

Дефекттер системасынын өзгөрүшүн башкаруучу негизги процесстер болуп диффузия, дрейфтик кыймылдар, өз ара аннигиляция жана дефекттердин агымдардагы жутулуусу эсептелет. Бул процесстерди эске алуу менен дефекттердин кинетикасын мүнөздөөчү теңдемелерди төмөнкүдөй түрдө жазсак болот:

$$\frac{\partial n_j(r,t)}{\partial t} + div j_j(r,t) = \theta_j(r,t) - L_j(r,t), \qquad (1)$$

$$j_j(r,t) = -D_j \nabla n_j(r,t) + \vartheta_j n_i(r,t), \qquad (2)$$

Мында $\theta_j = \theta_j(T,\varepsilon)$- кошулмалары үчүн дефекттерди генерациялоо ылдамдыгы (T-чөйрөнүн температурасы, $\varepsilon = div\ u$ - чөйрөнүн серпилгичтүү деформациясы, u-жылышуу вектору). Ал эми (2) теңдемедеги $j_j(r,t)$- дефекттердин агымын берет, биринчи кошулуучу коэффициенти $D_j = D_{j0} \exp(-E_{mj} / \kappa T)$ болгон диффузиясын, андагы E_{mj} - диффузиянын активдешүү энергиясын мүнөздөйт. Экинчи кошулуучу деформациянын бир тектүү эмес талаасы менен дефекттердин өз ара аракеттенишүүсү менен шартталган $F_j = -\nabla U$ күчүнүн таасири астында дефекттердин дрейфинин $\vartheta_j=(D_j / кT)F_j$кыймылынын ылдамдыгын мүнөздөйт. $U=-k\Omega_j\ divu$ - бир дефектин деформация талаасы менен аракеттенишүү энергиясы, k - ар тараптуу кысылуу модулу, Ω_j– кристаллда бир дефект пайда болгон учурдагы көлөмүнүн өзгөрүүсүн мүнөздөөчү параметр. Вакансиялар үчүн же кичине радиустагы кошулмалар үчүн $\Omega_j<0$, түйүндөр арасы үчүн $\Omega_j>0$ ($\Omega_j \approx d_0^3$, d_0 –торчонун мезгили). (4.10) формуладагы акыркы кошулуучу өз ара рекомбинация жана агымдардагы жутулуунун эсебинен дефекттердин жоголуусун $L_j = L(\varepsilon,T)$ сүрөттөйт.

Нурдантылуучу катуу заттарда пайда болуучу сызыктуу эмес деформациялык-концентрациялык түзүлүштөрдү моделдөөдө деформациялардын өз ара байланышкан талааларынын кооперативдик динамикалык абалын, дефекттердин локалдык баш-аламандыктарынын концентрациясын жана чөйрөнүн температурасын сүрөттөгөн сызыктуу эмес маселелер каралган жана төмөнкү түрдөгү теңдемелер системасы алынган.

$$\frac{\partial n_\alpha(r,t)}{\partial t} = Q_\alpha + D_\alpha \Delta n_\alpha - \frac{D_\alpha k \Omega_\alpha}{\kappa T} div(n_\alpha grad(divu)) - \sum_a \rho_{\alpha\alpha} S_{\alpha\alpha} \qquad (3)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c_\tau^2 \Delta u + (c_L^2 - c_\tau^2) grad(divu) + \sum_{\alpha=i,v,p} \frac{k}{\rho} \Omega_\alpha gradn_\alpha + G_N(u) \quad (4)$$

(3) теңдеме α тибиндеги дефекттердин концентрациясынын өзгөрүүсүнүн мүнөздөйт, ал эми (4) теңдеме жылышуу векторунун өзгөрүүсүн аныктайт.

(3), (4) теңдемелериндеги $n_\alpha(r,t)\,\alpha$ тибиндеги дефекттердин r чекитиндеги жана убакыттын t учурундагы концентрациясы $r=(x,y,z)$; $Q_\alpha = Q_A(r,t)$-сырткы нурдантуунун таасиринде кыймылда болгон дефекттердин генерациясынын ылдамдыгы; $S_{\alpha\alpha}$-топтолуулардын пайда болуу ылдамдыгы; T- чөйрөнүн температурасы $D_\alpha = D_0 e^{-E_{m\alpha}/\kappa T}$ - диффузия коэффициенти; $E_{m\alpha}$ - диффузиянын активдешүү энергиясы k – кысылуу модулу; $\Omega_\alpha \approx d_3$ – кристаллдын көлөмүнүнүн бир дефект пайда болгондогу өзгөрүүсүн мүнөздөөчү дилатациялык параметр, d- торчонун мезгили.

(3) теңдемедеги экинчи кошулуучу α тибиндеги дефекттердин диффузиясын жана үчүнчү кошулуучу –дефекттердин дрейфин мүнөздөйт

(4) теңдемедеги үчүнчү кошулуучу дефекттер шарттаган концентрациялык чыңалууну сүрөттөйт, ал эми төртүнчү кошулуучу чөйрөнүн ангармонизмин эске алат.

Иондоштуруучу нурдантуунун таасиринен кристаллдарда жөнөкөй чекиттик дефекттер пайда болушат. Бул дефекттер чөйрөнүн атомдорунун же иондорунун жылышуусу менен байланышкан. Анын натыйжасында дефекттин аймагында деформациялык туруксуздук пайда болушу мүмкүн, ал серпилгичтүү чыңалуулардын пайда болуусун шарттайт.

Бир типтеги дефекттер болгон вакансиялардын системасында деформациялык- диффузиялык туруксуздуктун пайда болуусун карайлы. Анда $n_\alpha = n_v = n$, $n = n'_0 + n_1$, $u = u'_0 + u_1$ десек, n'_0, u'_0 - мейкиндиктик бир тектүү чечимдер, n_1, u_1 – кичинекей козголуулар. $E_j \ll \kappa_B T$, $Q_\alpha = Q = const$, $\sum_v 4\pi R_{\alpha\alpha}\rho_{\alpha\alpha} = M_\alpha^2 = M^2$ экендигин эске алып жана дефекттердин дрейфин эске албасак (4) теңдемеден n_1 үчүн төмөнкү теңдемени алабыз:

$$\frac{\partial n_1(r,t)}{\partial t} - D\Delta n_1 = Q - M^2 D\Delta n_1 - \frac{\theta M^2 D n'_0}{\kappa_B T} divu_1 e^{-\beta z} \quad (5)$$

Мында M^2– дефекттердин диффузиялык жолунун узундугу. Анда $divu_1 = \varepsilon_1$ деформациясын төмөнкү түрдө беребиз:

$$\varepsilon_1 = A_q \exp(iq(x+y) + \gamma t) \quad (6)$$

Мында A_q - деформациянын баштапкы амплитудасы; q- козголуулардын толкундук саны; $\gamma = \gamma_1 + i\gamma_2$-туруксуздуктун инкременти. Мындай чечимди деформациянын талаасы эки өлчөмдүү торчо түрүндө берет.

Корутунду. Иондук кристаллдарда дефект пайда болуунун согулуу жана согулуу эмес механизмдери каралды жана бул механизмдер боюнча пайда болгон радиациялык чекиттик дефекттер ар дайым түгөйлүк дефекттер экендиги аныкталды.

- Иондоштуруучу нурдантуунун таасиринен кристаллдарда жөнөкөй чекиттик дефекттер пайда болуу процесси каралып, ал дефекттин аймагында деформациялык туруксуздук пайда болушу мүмкүн экендиги аныкталды жана бул деформациялык туруксуздуктун пайда болушу серпилгичтүү чыңалуулардын пайда болуусунун шарты экендиги каралды.
- Бир типтеги дефекттер болгон вакансиялардын системасында деформациялык- диффузиялык туруксуздуктун пайда болуусунун математикалык модели каралды.

Адабияттар

1. Моделирование в научно-технических исследованиях. / А. Н. Лебедев. – М.: Радио и связь, 1989.
2. Арапов, Т.Б. Механизм и кинетика тушения свечения радиационно-наведенных центров окраски в ЩГК: [Текст]: диссертация на соискание ученой степени кандидата физ- мат.наук.: 01.04.07/Т.Б.Арапов, -Ош. 2004.
3. Лущик Ч.Б. Распад электронных возбуждений с образованием дефектов в твердых телах. [Текст]:/ Ч.Б. Лущик, А.Ч. Лущик.- М.: Наука, 1989. -264 с.
4. Ташкулов, К.Д. Фото-и термостимулироввнные ионные процессы распада радиационных дефектов в щелочно-галоидных кристаллах. [Текст]: диссертация на соискание ученой степени кандидата физ -мат.наук. : 01.04.07/ К.Д. Ташкулов,- Ош. 2011.
5. Каденова Б.А. « Жегич-галоиддик кристаллдардагы радиациялык дефекттердин пайда болуу, бири-бирине айлануу жана ажыроо процесстерин моделдештирүү” Диссерт. На соис... канд. физ.- мат. наук. – Ош, 2013.С.109-110.