

Академия наук Латвийской ССР
Институт физики

На правах рукописи

КАЛНИНЬ Прис-Роберт Харальдович

УДК 548 - 162:539.219.3
539.16.04

КИНЕТИКА ПРОЦЕССОВ РЕКОМБИНАЦИИ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ
(УЧЕТ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ КОРРЕЛЯЦИИ)

01.04.07 - физика твердого тела

А в т о р е ф е р а т

диссертации на соискание ученой
степени доктора физико-математических
наук

Саласпилс - 1983

Работа выполнена в Институте физики Академии наук
Латвийской ССР

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
член-корр. АН СССР, профессор

ОВЧИННИКОВ А.А.

доктор физико-математических наук,
профессор

АГРАНОВИЧ В.М.

доктор физико-математических наук

ВИНЕЦКИЙ В.Л.

Ведущая организация:

Физический институт им. П.Н.Лебедева АН СССР

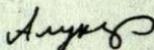
Защита состоится 15 декабря 1983 г. в 9.30 час. на
заседании Специализированного совета Д 010.01.01 при
Институте физики Академии наук Латвийской ССР (конференцзал).

Замечания и отзывы по данной работе просим направлять по
адресу: 229021, Латвийская ССР, Рижский район, Саласпилс,
Институт физики, Специализированный совет Д 010.01.01

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке
Института физики АН Латвийской ССР.

Автореферат разослан 15 ноября 1983 года.

Ученый секретарь
Специализированного совета



Алукер Э.Д.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Процессы рекомбинации играют определяющую роль в самых разнообразных явлениях физики и химии твердого тела. Среди всего разнообразия процессов рекомбинации мы выделим и рассмотрим процессы, контролируемые диффузией и дистанционным переносом.

Диффузионно-контролируемыми процессами определяется рекомбинационная люминесценция в щелочно-галогидных кристаллах, широко используемых в термолюминесцентной дозиметрии, сцинтилляционной технике и являющихся перспективными материалами для оптической записи информации и создания квантовых генераторов. Диффузионно-контролируемыми реакциями (ДКР) типа $A+B \rightarrow A$, где A — стационарные стоки, B — диффундирующая частица (для краткости в дальнейшем о рекомбинирующих партнерах будем говорить как о частицах) описываются процессы захвата экситонов на примесях, захват горячих носителей в щелочно-галогидных кристаллах и др. Исследование радиационного набухания материалов, радиационной ползуности, роста пустот являются важными при поисках новых реакторных материалов. Эти явления также формулируются в терминах ДКР и в конечном счете определяются коэффициентом скорости рекомбинации (КСР), величина которого существенно зависит от характера пространственного распределения стоков и реагирующих частиц относительно них. Вид этого распределения зависит от конкретного механизма создания дефектов (образование кластеров стоков, преимущественное образование дефектов вблизи стоков). Для описания эксперимента в таком случае необходимо иметь соответствующую теорию. Теории, основанные на предположении о статически однородном распределении реагирующих частиц, становятся недостаточными.

В ряде случаев при расчете КСР необходим выход за пределы диффузионного приближения (например, при движении горячих носителей в щелочно-галогидных кристаллах длины пробега частиц могут быть порядка размеров сферы рекомбинации центра захвата или более).

Одной из важных задач физики твердого тела является изучение ограниченного диффузией или спонтанной рекомбинацией накопления точечных дефектов. Число экспериментальных работ по накоплению дефектов при низких температурах значительно возросло в последнее время, и для интерпретации эксперимента необходимы теоретические модели, учитывающие кластеризацию дефектов. Понимание элементарных процессов накопления необходимо также и при решении задач образования агрегатных центров в материалах под воздействием радиации.

Задача спонтанной рекомбинации точечных дефектов может быть сформулирована в терминах дистанционного переноса. Другим примером являются туннельная рекомбинация и перенос энергии от доноров к акцепторам. Последний усиленно изучается в связи с появлением новой высокоразрешающей лазерной техники. Для описания экспериментов, где имеется кластеризация частиц одного типа или пространственные корреляции между частицами разного типа, необходима соответствующая теория.

Состояние вопроса. В развитие теории ДКР в СССР существенный вклад внесли авторские коллективы, возглавляемые В.В. Антоновым-Романовским, В.М. Аграновичем, Х.С. Багдасарьяном, А.И. Бурштейном, В.Л. Винецким, А.А. Овчинниковым, Н.Н. Туницким, а также А.А. Белый, Ю.А. Берлин, Е.А. Котомин и др.

До начала настоящей работы в теории ДКР существовали два подхода к описанию кинетики рекомбинации $A+B \rightarrow C$: так называемый симметричный подход ^{1,2)}, в котором усредняются пространственные корреляции пар частиц, созданных в одном акте рождения, по всем парам; и несимметричный подход ³⁾, где отдельно рассматриваются коррелированные пары (КП) и некоррелированные пары (НП). Введение корреляций между однотипными частицами в уравнения

-
- 1) Leibfried G. *Bestrahlungseffekte in Festkörpern*. Stuttgart, Teubner - Verlag, 1965, pp. 266-277.
 - 2) Антонов-Романовский В.В. *Кинетика фотолюминесценции кристаллофосфоров*. М., Наука, 1966.
 - 3) Waite T.R. *Diffusion-limited annealing of radiation damage in germanium*. - *Phys.Rev.*, 1957, vol. 107, pp. 471-477.

симметричного подхода⁴⁾ расширили круг решаемых задач кинетики реакций $A+B \rightarrow C$, однако стадию коррелированной рекомбинации такие уравнения описывают в таком же приближении, как и уравнения симметричного подхода без учета корреляций $A-A$ и $B-B$. В литературе, отмеченной в диссертации, был решен ряд частных задач с учетом пространственной корреляции между однотипными частицами, однако теории, учитывающей одновременно произвольные корреляции частиц $A-B$ и $A-A$, не существовало.

Для контролируемых диффузией процессов $A+B \rightarrow A$ в теории рассматривались случаи статистически однородного и регулярного распределения стоков⁵⁾. Для реакций $A+A \rightarrow O$ было рассмотрено "роевое" распределение частиц⁶⁾. Задачи с различными пространственными распределениями частиц требовали отдельных теоретических подходов.

Уравнения накопления для ДКР $A+B \rightarrow C$ были получены способом, не позволяющим оценить область их применимости, и лишь в симметричной форме. При описании экспериментов по ограниченному спонтанной рекомбинацией накоплению дефектов использовались уравнения, учитывающие кластеризацию дефектов лишь в начальных стадиях накопления⁷⁾. В теории накопления не имелось однозначного вывода о существовании и величине стационарной концентрации накопленных дефектов. Результаты моделирования процесса накопления на ЭВМ из-за недостаточного статистического материала также не давали ответа на эти вопросы.

При анализе экспериментов по туннельной рекомбинации, как правило, используется либо приближение изолированных пар, либо уравнения в симметричной формулировке. При более сложных распределениях партнеров туннельной рекомбинации также используются эти приближения, или задача рассматривается упрощенным образом. Теоретическое описание переноса энергии возбуждения от доноров к ак-

-
- 4) Kuzovkov V. and Kotomin E. Generalised theory of diffusion-controlled defect annealing. - J. Phys. C, 1980, vol. 13, pp. 499-502.
 5) Агранович В.М., Галанин М.Д. Перенос энергии электронного возбуждения в конденсированных средах. М., Наука, 1978.
 6) Белый А.А., Овчинников А.А. О кинетике рекомбинации радикалов. - ТЭХ, 1967, т.3, с.451-457.
 7) Nakagawa M., et al. Spontaneous recombination volumes of Frenkel defects in neutron-irradiated non-fcc metals. - Phys. Rev. B, 1979, vol. 19, pp. 742-748.

цепторам в большинстве случаев приводит к сложным уравнениям, допускающим лишь численный анализ. Тогда полезным оказываются уравнения, описывающие различные предельные случаи процесса переноса и полученные из более простых соображений, например, уравнение прыжкового переноса⁸⁾. Распределение акцепторов в теории предполагается статистически однородным.

В настоящей работе мы рассматриваем лишь процессы типа $A + B \rightarrow A$ и $A + B \rightarrow C$.

Цель работы заключалась в построении феноменологической теории контролируемых диффузией и дистанционным переносом рекомбинационных процессов типа $A + B \rightarrow A$ и $A + B \rightarrow C$ и процессов накопления при сложном пространственном распределении частиц; в получении основных уравнений ограниченного спонтанной рекомбинацией накопления точечных дефектов с привлечением для этой и других задач накопления и рекомбинации метода статистического моделирования; в определении КСР для притягивающих центров вне рамок диффузионного приближения, и в использовании результатов теории кинетики рекомбинации для объяснения эксперимента и определения кинетических параметров.

Научная новизна работы заключается в построении теории накопления и рекомбинации частиц с одновременным учетом корреляций однотипных и разнотипных частиц в реакциях $A + B \rightarrow A$ и $A + B \rightarrow C$, контролируемых диффузией и дистанционным переносом; в получении основного уравнения накопления точечных дефектов; в установлении эффекта сильного кластерирования частиц в одномерной модели; в расчете эффективных сечений рекомбинации для кулоновского и дипольного центров в случае длин пробега носителей, сравнимых с размерами центра рекомбинации.

Практическая ценность. Развитая теория процессов рекомбинации может быть применена при описании рекомбинаций, контролируемых диффузией и дистанционным переносом в разнообразных явлениях кинетики твердого тела при распределениях частиц, от-

8) Бурштейн А.И. Прыжковый механизм передачи энергии. - ЖЭТФ, 1972, т.62, с.1695-1701.

личных от статистически однородных и регулярных, при описании процессов накопления точечных дефектов, разгорании люминесценции, переносе энергии возбуждения, рекомбинации точечных дефектов, на дислокациях, скоплениях стоков. Даны рекомендации для обработки экспериментов по рекомбинации коррелированных дефектов $A-B$. Полученное основное уравнение ограниченного спонтанной рекомбинацией накопления точечных дефектов позволяет из экспериментальных кривых накопления в стадии, далекой от стационарной, определить стационарную концентрацию дефектов и установить наличие более сложных механизмов накопления точечных дефектов в металлах. Обнаруженный при статистическом моделировании эффект сильной кластеризации частиц имеет принципиальное значение, так как указывает на возможность сильного разделения частиц без учета взаимодействия между частицами одного сорта и важен для построения теории накопления точечных дефектов в более сложных случаях. Рассчитанные значения эффективных сечений рекомбинации для промежуточных длин пробега носителей важны для определения кинетических параметров в щелочно-галогидных кристаллах.

Основные защищаемые положения:

1. Построена теория процессов рекомбинации и накопления для реакций $A+B \rightarrow A$ и $A+B \rightarrow C$ при наличии пространственной корреляции между частицами $A-A$, $A-B$, как начальной, так и возникающей в ходе рекомбинации. В рамках предложенного формализма решен целый ряд задач, отмеченных в частных результатах в заключении и выводах.
2. Установлены закономерности процесса накопления дефектов, ограниченного спонтанной рекомбинацией, путем моделирования накопления на ЭВМ в одномерной картине и получено основное уравнение накопления, учитывающее корреляции, возникающие между точечными дефектами в процессе накопления.
3. При накоплении частиц без прямого взаимодействия между частицами одного типа в одномерной картине возможно эффективное

4. Определены эффективные сечения рекомбинации для кулоновского и дипольного центров вне рамок диффузионного приближения и получено подтверждение теории машинным экспериментом.

5. Оценены кинетические параметры для захвата горячих дырок и миграции F - центров в щелочно-галлоидных кристаллах.

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 26 статей и тезисы 14 докладов на всесоюзных совещаниях, конференциях и семинарах, и международных конференциях. Список опубликованных работ приведен в конце автореферата.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на XIX Совещании по люминесценции, Рига, 1970, на Прибалтийских семинарах по физике ионных кристаллов, 1971 - 1982 гг. Вильянди, Тарту, Сигулда, Эзерниеки, Лиелупе; Международной конференции по люминесценции, Ленинград; 1972 г.; XXV Совещании по люминесценции, Львов, 1978 г.; на III Всесоюзном совещании по радиационной физике и химии ионных кристаллов, Рига, 1975 г.; на заседаниях Постоянного семинара по моделированию радиационных и других дефектов в кристаллах, Кривой Рог, 1977; Ленинград, 1979; Лиелупе, 1980; Звенигород, 1981; на IV Всесоюзном совещании по радиационной физике и химии ионных кристаллов, 1978, Рига; на Международной конференции "Дефекты в диэлектрических кристаллах", Рига, 1981; неоднократно на семинарах в ФИАН им. П. Лебедева, в Институте физики АН УССР, в Институте оптики и спектроскопии АН СССР.

Объем и структура. Диссертация состоит из введения - глава I, восьми глав, содержащих оригинальные результаты, заключения - глава IX, и списка литературы, содержащего 265 наименований. Материал диссертации содержит 265 страниц машинописного текста, в том числе 21 рисунок и 6 таблиц.

Во введении отмечается актуальность темы диссертации, научная новизна и научно-практическое значение результатов.

Во второй главе дается краткое описание состояния теории процессов рекомбинации.

В третьей главе развита теория ДКР $A+B \rightarrow A$ при произвольном пространственном распределении стоков.

В четвертой главе рассмотрена теория ДКР $A+B \rightarrow C$ при наличии корреляций $A-A$ и $A-B$.

В пятой главе рассмотрена теория статического распада $A+B \rightarrow A$ и $A+B \rightarrow C$.

В шестой главе выводятся уравнения теории накопления, контролируемого диффузией и статическим распадом.

В седьмой главе определены коэффициенты скорости рекомбинации для произвольных длин свободного пробега носителей.

В восьмой главе дано моделирование процесса накопления, ограниченного спонтанной рекомбинацией и получено основное уравнение накопления.

В девятой главе получены выражения для вероятности захвата горячих дырок и эффективного коэффициента диффузии в щелочно-галогидных кристаллах и определены кинетические параметры этих процессов.

В заключении формулируются основные результаты и выводы диссертации.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во второй главе, носящей вводный характер, дан краткий обзор работ по теории процессов рекомбинации с акцентированием внимания на задачах с отличным от статистически однородного пространственным распределением частиц. Существовавшие теоретические результаты для таких задач ДКР, полученные Аграновичем, Дейчем, Хэмом, Белым, Овчинниковым, в каждом отдельном случае требовали отличного подхода к решению. Для ДКР $A+B \rightarrow A$ в стадии рекомбинации по степени влияния пространственного распределения стоков от более сильного к более слабому на КСР можно выделить зависимости от: а) кластерирования стоков, б) регулярного распределения стоков; в) от статистически однородного распределения стоков; г) от "исключенного" объема. Полного решения задачи в) в настоящее время не существует, есть однако результаты в пределе больших

времен (Зельдович, Овчинников).

Рассмотрены также физический смысл симметричного и несимметричного приближений в теории рекомбинации дефектов, влияние кулоновского притяжения на КСР, состояние теории накопления точечных дефектов.

Теория контролируемых диффузией процессов рекомбинации $A+B \rightarrow A$ при произвольных пространственных распределениях стоков A и рекомбинаций $A+B \rightarrow C$ при наличии корреляций $A-A$ и $A-B$ (гл. 3,4).

Основные уравнения ДКР $A+B \rightarrow A$. Основные уравнения для реакций $A+B \rightarrow A$ при наличии корреляций $A-A$ и $A-B$ выводятся из цепочки уравнений для плотностей вероятностей обрывом цепочки с использованием суперпозиционного приближения, которое применяется отдельно для трехчастичной плотности вероятности, содержащей вклад от КП и не содержащей. Полученные уравнения удовлетворяют принципу независимости рекомбинаций в отличие от симметричного подхода. Основные уравнения имеют вид

$$\frac{dn_B(t)}{dt} = -n_B^0 \int_{r_0}^{\infty} \sigma(r) \eta_{AB}^K(r,t) 4\pi r^2 dr - \int_{r_0}^{\infty} \sigma(r) \eta_{AB}^H(r,t) 4\pi r^2 dr n_A n_B(t), \quad (1)$$

$$\frac{\partial \eta_{AB}^H(r,t)}{\partial t} = D \Delta \eta_{AB}^H(r,t) - \sigma(r) \eta_{AB}^H(r,t) + \left\{ n_A \int_V \sigma(\vec{r}') [1 - \eta_{AA}(|\vec{r} - \vec{r}'|)] \times \right. \\ \left. \times \eta_{AB}^H(\vec{r}',t) d\vec{r}' + \frac{n_A}{n_B(t)} \int_V \sigma(\vec{r}') [1 - \eta_{AA}(|\vec{r} - \vec{r}'|)] \eta_{AB}^K(\vec{r}',t) d\vec{r}' \right\} \eta_{AB}^H(r,t), \quad (2)$$

$$\frac{\partial \eta_{AB}^K(r,t)}{\partial t} = D \Delta \eta_{AB}^K(r,t) - \sigma(r) \eta_{AB}^K(r,t) - \\ - n_A \int_V \sigma(\vec{r}') \eta_{AA}(|\vec{r} - \vec{r}'|) \eta_{AB}^H(\vec{r}',t) d\vec{r}' \eta_{AB}^K(r,t), \quad (3)$$

где n_A - концентрация стационарных стоков, $n_B(t)$ - зависящая от времени t концентрация рекомбинирующих частиц, $n_B^0 = n_B(t=0) - n_A$, D - коэффициент диффузии, V - макроскопический объем, r_0 - минимальное расстояние, с которого возможна рекомбинация, $\phi(r)$ - зависящая от расстояния между рекомбинирующими частицами скорость рекомбинации, $\eta_{AB}^H(r, t)$ и $\eta_{AB}^K(r, t)$ - парные функции распределения для НП и КП. Для контролируемого диффузией процесс $A+B \rightarrow A$ из (1) - (3) получаем

$$\frac{dn_B(t)}{dt} = -K^H(t)n_B^0 - K^K(t)n_A n_B(t), \quad (4)$$

$$\frac{\partial \eta_{AB}^H(r, t)}{\partial t} = D \Delta \eta_{AB}^H(r, t) + n_A \left[1 - I(r, r_0) \right] \left[K^H(t) \eta_{AB}^H(r, t) + \frac{K^K(t)}{n_B(t)} \eta_{AB}^H(r, t) \right], \quad (5)$$

$$\frac{\partial \eta_{AB}^K(r, t)}{\partial t} = D \Delta \eta_{AB}^K(r, t) - n_A K^K(t) I(r, r_0) \eta_{AB}^K(r, t), \quad (6)$$

где

$$I(r, r_0) \equiv I(r, r_0; \eta_{AA}) = \frac{1}{2\pi r r_0} \int_{r-r_0}^{r+r_0} \eta_{AA}(r') r' dr' \quad (7)$$

и $K^H(t)$ и $K^K(t)$ - КСР для НП и КП, определяемые согласно

$$K^i(t) = 4\pi D r_0^2 \left. \frac{\partial \eta_{AB}^i(r, t)}{\partial r} \right|_{r=r_0} \quad (i=H, K). \quad (8)$$

Анализ (4) - (8) при отсутствии корреляций $A-A$ показывает, что при $t_1 > (r_1 - r_0)^2 / D$ и функции распределения КП

$$f(r) \equiv \eta_{AB}^K(r, t=0) = \frac{\delta(r - r_1)}{4\pi r^2} \quad (9)$$

$n_B(t > t_1) \rightarrow 0$ (при $r_1 \rightarrow r_0$), в отличие от симметричного подхода, дающего при этом физически неверный результат, $n_B(t > t_1) \rightarrow 1 - e^{-1}$. Причина такого результата симметричной теории в том, что она не учитывает различные масштабы времен для коррелированной и некоррелированной стадий рекомбинаций.

Зависимость КСР от вида функции распределения стоков для ДКР реакций. Пренебрегая корреляциями $A-B$ в (4) - (8) и выбирая

10.

$$\eta_{AA}(r) = \theta(r-a), (\theta(x > 0) = 1, \theta(x \leq 0) = 0). \quad (10)$$

В случае квазистационара из (5) и (8) имеем

$$D \Delta \eta_1(r) + \kappa(\infty) n_A \eta_1(r) = 0 \quad (r_0 < r \leq a), \quad (11)$$

$$D \Delta \eta_2(r) = 0 \quad (r > a). \quad (12)$$

При $\eta_1(r_0) = 0$ и $\eta_2(r \rightarrow \infty) = 1$ получаем для квазистационарного КСР

$$\kappa(\infty) = \frac{\kappa_0(\infty)}{\cos \left\{ \left[\frac{\kappa(\infty) n_A}{D} \right]^{1/2} (a - r_0) \right\}}, \quad (13)$$

где $\kappa_0(\infty) = 4\pi D r_0$.

При $S = \frac{4}{3} \pi r_0^3 n_A \ll 1$ (S - доля объема, занимаемая стоками) имеем $\kappa(\infty) = \kappa_0(\infty) \left[1 + 3,9 S^{1/3} (a - r_0)^2 / R^2 \right]$, где $R = n_A^{-1/3}$, т.е. концентрационная поправка при регулярном распределении стоков $\sim S^{1/3}$, а при статистически однородном распределении в суперпозиционном приближении отсутствует.

Для скоплений из $2^X + 4^X$ стоков нетрудно получить

$$\kappa_z = \kappa_0(\infty) \left[1 - \frac{z r_0}{l} \left(1 - \frac{r_0}{l} \right) \right], \quad (14)$$

где $z = 1+3$, соответственно, l - расстояние между двумя стоками в скоплении.

Для оценки влияния "исключенного" объема полагаем

$$\eta_{AA}(r) = \theta(r - 2r_0). \quad (15)$$

Тогда для квазистационарного КСР получаем

$$\kappa(\infty) = 4\pi D r_0 (1 + 1,53 S). \quad (16)$$

Кинетика рекомбинации с учетом "исключенного" объема имеет два характерных времени: $\tau_1 \sim r_0^2/D$, в течение времен такого порядка частицы В чувствуют лишь каждая "свой" сток и $K_1 = K_0(\infty)$; после времени $\tau_2 \sim (4\pi r_0 n_A)^{-1}$ появляется эффект конкуренции различных стоков, $K_2 = K(\infty)$.

Кинетика рекомбинации при наличии корреляций А-В и регулярном распределении стоков. При изменении распределения стоков от статистически однородного до регулярного в КСР появляется добавочный член $\sim K_0(\infty) \int \frac{1}{r}$, и в такой же мере меняется и кинетика рекомбинации. Изменение же функции распределения $\rho_{AB}(r, t)$ от распределения НП и КП влияет на кинетику процесса более существенным образом. Это обосновывает возможность использования решения задачи с регулярным распределением стоков при наличии значительных корреляций для выяснения условий коррелированной рекомбинации. Настоящая задача может быть решена точно после замены кубической ячейки со стоком А в центре ее на эквивалентную сферу. Средняя по макроскопическому объему V концентрация частиц определяется из уравнения

$$n_B(t) = \frac{1}{V} \int_{r_0}^R \rho(r, t) 4\pi r^2 dr, \quad (17)$$

где R - радиус эквивалентной сферы, $\rho(r, t)$ - плотность частиц в эквивалентной сфере, определяемая из уравнения

$$\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t} = D \Delta \rho(r, t) \quad (18)$$

с условиями

$$\rho(r, t=0) = f(r), \quad \rho(r=r_0, t) = 0, \quad \left. \frac{\partial \rho(r, t)}{\partial r} \right|_{r=R} = 0; \quad (19)$$

именно последнее условие дает возможность учесть конкуренцию других стоков и описать теоретически коррелированную и некоррелированную стадии рекомбинации.

Решение (17) - (19) имеет при $n_B(t=0) = n_B^0$ вид

$$\frac{n_B(t)}{n_B^0} = 2 \frac{r_0 d}{r_1} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{z_n \cos(\beta z_n) - \sin(\beta z_n)}{z_n(z_n^2 + \frac{1}{2} - \alpha)} \exp\left(-\frac{z_n^2 D t}{R^2}\right), \quad (20)$$

где $\alpha = R/R - r_0$, $\beta = (R - r_0)/R$, z_n - корни трансцендентного уравнения $\text{tg } z_n(1 - r_0/R) = z_n$, корреляцию $f(r)$ мы выбрали

в виде $f(r) = \frac{\delta(r-r_A)}{4\pi r^2}$. При $t \gg R^2/z_1 D$ из (20) следует

$$n_B(t) = n_B^0 \left(1 - \frac{r_0}{r_A}\right) \left(1 + 1,8 S^{\frac{1}{2}}\right) \exp\left[-4\pi D r_0 n_A \left(1 + 1,8 S^{\frac{1}{2}}\right) t\right]. \quad (21)$$

Задача может быть решена и по (4) - (4) при двух разных условиях определения коррелированной стадии

$$\eta_{AB}^k(r=R, t) = 0, \quad (22)$$

$$\eta_{AB}^k(r \rightarrow \infty, t) = 0 \quad (23)$$

Результаты расчетов показывают, что коррелированную рекомбинацию необходимо определять по (22). Отметим, что ранее (22) постулировалось без должного доказательства. Полученный результат (20) имеет самостоятельное значение для определения степени начальной корреляции $A-B$ ($f(r)$) по экспериментальной зависимости $n_B(t)/n_B^0$.

Симметричный и несимметричный подходы в теории ДКР и роль корреляций $A-A$ в процессах $A+B \rightarrow C$. Уравнения ДКР $A+B \rightarrow C$ при наличии пространственных корреляций $A-A$ и $A-B$ имеют вид ($\eta^n \equiv \eta_{AB}^n(r, t)$, $\eta^k \equiv \eta_{AB}^k(r, t)$)

$$\frac{dn(t)}{dt} = -n^0 k^k(t) - k^n(t) n^2(t), \quad (24)$$

$$\frac{\partial \eta^n}{\partial t} = D \Delta \eta^n + \frac{2}{n(t)} [n^0 k^k(t) + n^2(t) k^n(t)] [1 - I(r, r_0; \eta_{AA})] \eta^n, \quad (25)$$

$$\frac{\partial \eta^k}{\partial t} = D \Delta \eta^k - 2n(t) k^n(t) I(r, r_0; \eta_{AA}) \eta^k, \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \eta_{AA}}{\partial t} = & D \Delta \eta_{AA} - \frac{2}{n(t)} [k^n(t) I(r, r_0; \chi_{AB}) + \\ & + n^0 k^k(t) I(r, r_0; \eta_{AB}) - n^0 k^k(t) - n^2(t) k^n(t)] \eta_{AA}. \end{aligned} \quad (27)$$

$$(D_A = D_B = D/2)$$

$$\text{где } \chi_{AB} \equiv \chi_{AB}(r, t) = \eta_{AB}^n(r, t) n^2(t) + n^0 \eta_{AB}^k(r, t), \quad (28)$$

при $\eta_{AA}(r, t) \equiv 1$ эти уравнения переходят в уравнения Вейта.

В задачах рекомбинации при наличии корреляции $A-B$ недостаточно ограничиться одной двухчастичной функцией распределения частиц, в отличие, например, от многих задач статистической теории жидкостей. Так как частицы, имевшие партнеров рекомбинации ближе, чем другие, выбывают из дальнейшего процесса вследствие увеличенной вероятности рекомбинации КП и уносят с собой информацию об их "особом" положении, нет возможности приписать с начального момента времени всем парам элемент сходства и ограничиться симметричным подходом (все пары идентичны и корреляция делится равномерно на все пары). Мы показываем, что попытки учесть корреляции $A-B$ в симметричном подходе, принимая во внимание корреляции однотипных частиц, несостоятельны именно по вышеуказанной причине. Анализ процесса рекомбинации при учете корреляций $A-A$ показывает, что возникающие отрицательные корреляции однотипных частиц в области сильных корреляций разнотипных частиц не имеют существенного значения для описания стадии коррелированной рекомбинации. Корреляции $A-A$, возникающие в процессе реакции, определяют кинетику рекомбинации лишь при больших временах.

Кинетика дистанционного переноса $A+B \rightarrow A$ и $A+B \rightarrow C$ (гл.5).

Уравнения дистанционного переноса $A+B \rightarrow A$ при наличии корреляций $A-A$ и $A-B$ могут быть получены непосредственно из уравнений (1) и (2), полагая в них $\mathcal{D} \equiv 0$. Важное значение пространственных корреляций видно из примера статического распада. В отсутствии корреляций в пространственном распределении акцепторов для вероятности выживания возбужденного донора (ВВД) из (1) и (2) легко получить известную формулу Ферстера-Галанина. Учет же того факта, что в одном узле решетки не может находиться более одного акцептора, приводит к ВВД для произвольных концентраций акцептора. Последнее выражение было получено самыми различными способами (диаграммная техника - Голубов, Конобеев, Сакун), усреднение вероятности выживания одного донора по распределению вероятности, запрещающему многократное заселение одного узла акцепторами (Блюмен и др.). В диссертации получено ВВД для произвольных значений концентрации из цепочки уравнений для плотностей вероятностей с использованием суперпозиционного приближения, которое для данной задачи является точным. Преимущество такого метода не

только в простоте, но и в возможности обобщения задачи на более сложные случаи (учет миграции возбуждения по донорам, произвольные пространственные распределения акцепторов).

Определив $\rho(\vec{n}_1, \dots, \vec{n}_r, \vec{m}_1, \dots, \vec{m}_s, t)$ как вероятность найти конфигурацию с узлами решетки $\vec{n}_1, \dots, \vec{n}_r$, занятыми акцепторами и $\vec{m}_1, \dots, \vec{m}_s$ - возбужденными донорами к моменту t , легко получить уравнения цепочки

$$\frac{d\rho(\vec{m}_1, t)}{dt} = - \sum_{\vec{n}_1 \neq \vec{m}_1} \sigma(\vec{n}_1 - \vec{m}_1) \rho(\vec{n}_1, \vec{m}_1, t), \quad (29)$$

$$\frac{d\rho(\vec{n}_1, \vec{m}_1, t)}{dt} = - \sigma(\vec{n}_1 - \vec{m}_1) \rho(\vec{n}_1, \vec{m}_1, t) - \sum_{\vec{n}_2 (\neq \vec{n}_1, \vec{m}_1)} \sigma(\vec{n}_2 - \vec{m}_1) \rho(\vec{n}_1, \vec{n}_2, \vec{m}_1, t). \quad (30)$$

При суперпозиционном приближении

$$\rho(\vec{n}_1, \vec{n}_2, \vec{m}_1, t) = \frac{\rho(\vec{n}_1, \vec{m}_1, t) \rho(\vec{n}_2, \vec{m}_1, t) \rho(\vec{n}_1, \vec{n}_2)}{\rho(\vec{m}_1, t) \rho(\vec{n}_1) \rho(\vec{n}_2)} \quad (31)$$

в пренебрежении корреляциями акцепторов, находящихся в разных узлах $\rho(\vec{n}_1, \vec{n}_2) = \rho(\vec{n}_1) \rho(\vec{n}_2)$ при $\vec{n}_1 \neq \vec{n}_2$ ($\rho(\vec{n}, \vec{n}) = 0$) (для произвольного распределения акцепторов имеем $\rho(\vec{n}_1, \vec{n}_2) = \rho(\vec{n}_1) \rho(\vec{n}_2) f(\vec{n}_1, \vec{n}_2)$ где $f(\vec{n}_1, \vec{n}_2)$ - соответствующая парная функция распределения) из (30) и (31), учитывая макроскопическую однородность системы, получаем

$$\frac{d'c_B(t)}{dt} = - c_A c_B(t) \sum_{\vec{m}} \sigma(\vec{m}) \eta(\vec{m}, t), \quad (32)$$

$$\frac{d\eta(\vec{m}, t)}{dt} = - \sigma(\vec{m}) \eta(\vec{m}, t) + c_A \sigma(\vec{m}) \eta^2(\vec{m}, t), \quad (33)$$

где $c_B(t) = \rho(\vec{m}, t)$, $\rho(\vec{n}) = c_A$, $\eta(\vec{m}, t) = \eta(\vec{n}_2 - \vec{m}_1, t) = \rho(\vec{n}_1, \vec{m}_1, t) / \rho(\vec{n}_1) \rho(\vec{m}_1, t)$,

c_A - доля узлов, занимаемая акцепторами, c_B - донорами. Решение (32) и (33) при $c_B(t=0) = c_B^0$ и $\eta(\vec{m}, t=0) = 1$ дает для ВВД $w(t) = c_B(t) / c_B^0$ выражение

$$w(t) = \exp \sum_{\vec{m}} \ln \{ 1 - c_A + c_A \exp[-t \sigma(\vec{m})] \}. \quad (34)$$

Для получения непрерывного аналога (34) в (1) и (2) необходимо положить $D = 0$ и $\eta_{AA}(r) = v_A \delta(r - r')$, где v_A - объем, занимаемый одним акцептором.

Перенос энергии при наличии миграции возбуждения по донорам.
Уравнения переноса получаются добавлением в (1) и (2) соответствующие миграции возбуждения члены. Уравнения для произвольной функции распределения акцепторов имеют вид

$$\frac{dn_D(t)}{dt} = - \int_{r_0}^{\infty} \sigma(r) \eta_{AD}(r, t) 4\pi r^2 dr n_A n_D(t), \quad (35)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\eta_{AD}(r, t)}{dt} = & -\sigma(r) \eta_{AD}(r, t) + n_A \int \eta_{AA}(|\vec{r} - \vec{r}'|) \sigma(\vec{r}') \eta_{AD}(\vec{r}', t) \times \\ & \times d\vec{r}' \eta_{AD}(r, t) + n_D^0 \int \eta_{AD}(|\vec{r} - \vec{r}'|, t) \sigma_1(\vec{r}') d\vec{r}' - \\ & - n_D^0 \int \sigma_1(\vec{r}') d\vec{r}' \eta_{AD}(r, t) + \frac{1}{n_D(t)} \frac{dn_D(t)}{dt} \eta_{AD}(r, t), \end{aligned} \quad (36)$$

где $n_D(t)$ - концентрация возбужденных доноров в момент t , n_D^0 - общая концентрация доноров, $\sigma_1(r)$ - скорость переноса возбуждения от донора к донору.

Предполагая, что доноры образуют решетку с постоянной $r_d = (\frac{4}{3}\pi n_D^0)^{-\frac{1}{3}}$, и пренебрегая корреляцией между донорами в сфере сильного взаимодействия акцептора из (36), получаем уравнение переноса в прыжковом приближении для произвольных n_A :

$$\begin{aligned} \frac{d\eta_{AD}(r, t)}{dt} = & -\sigma(r) \eta_{AD}(r, t) + n_A v_A \sigma(r) \eta_{AD}^2(r, t) + n_D^0 \int_{r_d}^{\infty} \sigma_1(r) 4\pi r^2 dr - \\ & - n_D^0 \int_{r_d}^{\infty} \sigma_1(r) 4\pi r^2 dr \eta_{AD}(r, t). \end{aligned} \quad (37)$$

Пологая $\eta_{AD}(r, t=0) = 1$, из (35) и (37) имеем

$$\eta_{AD}(r, t) = \frac{1}{2a} \frac{-(b+\Delta)(2a+b-\Delta) + (2a+b+\Delta)(b-\Delta) \exp(-\Delta t)}{2a+b-\Delta - (2a+b+\Delta) \exp(-\Delta t)}, \quad (38)$$

$$a = n_A v_A \sigma(r), \quad b = -[\sigma(r) + \alpha],$$

$$\Delta^2 = [\sigma(r) + \alpha]^2 - 4n_A v_A \sigma(r) \alpha, \quad \alpha = n_D^0 \int_{r_0}^{\infty} \sigma_1(r) 4\pi r^2 dr.$$

В пределе $n_A v_A \rightarrow 1$ из (37) следует $\eta_{AD}(r, t) \rightarrow 1$ для всех t . Это соответствует случаю непрерывной поглощающей среды. При $\alpha \rightarrow \infty$ также имеем $\eta_{AD}(r, t) \rightarrow 1$. В отличие от работы ⁹⁾, где рассматривается случай больших концентраций акцепторов, при выводе (38) не используется отдельно результат для статического распада для больших концентраций акцептора; статический распад получается из (38) как частный случай при $\sigma_1 = 0$.

Статический распад $A+B \rightarrow C$ при наличии корреляции $A-B$. Аналогично (1) - (3) можно получить и уравнения для статического распада $A+B \rightarrow C$. В частном случае $\eta_{AA}(r) = 1$ имеем

$$\begin{aligned} \frac{dn_A(t)}{dt} = & -n \exp \left\{ - \int_0^t \int_{r_0}^{\infty} [n_A(t) + n_B(t)] \sigma(r) \exp \left[-\sigma(r)t - \frac{t}{\tau} \right] \times \right. \\ & \times 4\pi r^2 dr dt \left. \right\} \int_{r_0}^{\infty} \exp \left[-\sigma(r)t - \frac{t}{\tau} \right] \sigma(r) 4\pi r^2 dr - \\ & - \int_{r_0}^{\infty} \sigma(r) \exp \left[-\sigma(r)t - \frac{t}{\tau} \right] 4\pi r^2 dr n_A(t) n_B(t) - \frac{n_A(t)}{\tau}, \end{aligned} \quad (39)$$

где τ_A и τ_B - времена жизни частиц A и B , соответственно, $\tau^{-1} = \tau_A^{-1} + \tau_B^{-1}$, $n^0 = \max \{ n_A(t=0), n_B(t=0) \}$. Аналогичное уравнение имеет место и для $n_B(t)$.

Уравнение (39) учитывает сложный характер пространственного распределения частиц A и B , начальные корреляции разнотипных частиц задаются функцией распределения $f(r)$. Простой анализ (39) при $n_A(t) = n_B(t)$ и $\tau_A, \tau_B \rightarrow \infty$ показывает, что решение задачи рекомбинации при $t \rightarrow \infty$ дает в случае сильной корреляции $n_B(t \rightarrow \infty) \rightarrow 0$,

9) Huber D.L. Donor fluorescence at high trap concentration. -- Phys.Rev.B, 1979, vol. 20, pp. 5333-5338.

тогда как симметричный подход к задаче статического распада в этом случае дает $n_B(t \rightarrow \infty) \rightarrow \frac{\lambda}{2}$, что физически неверно. Уравнение (39) как предельный случай содержит в себе и случай изолированных пар, и случай статистически распределенных пар АВ.

Кинетика процессов накопления $A+B \rightarrow A$ и $A+B \rightarrow C$ (гл.6).

Уравнения накопления, ограниченного спонтанной рекомбинацией и диффузией. Для задач накопления $A+B \rightarrow A$ имеются два способа получения уравнений. Во-первых, задача накопления может всегда быть решена, если известно решение задачи затухания, путем взятия свертки по решению задачи затухания. Второй способ предполагает использование приближения усреднения по моментам создания частиц и пригоден лишь при малых концентрациях накопленных частиц, однако его преимущество в последнем случае заключается в простоте получения уравнений в стадии стационара для произвольных функций распределения стоков. Первый способ в более простых случаях может служить тестовой задачей для второго способа. Получение квазистационарных КСР первым методом затруднено. Основное уравнение кинетики имеет вид

$$\frac{dn_B(t)}{dt} = \lambda - \kappa(t)n_A n_B(t), \quad (40)$$

$$\frac{\partial \eta_{AB}(r,t)}{\partial t} = D \Delta \eta_{AB}(r,t) + \frac{\lambda}{n(t)} [1 - \eta_{AB}(r,t)] + \kappa(t)n_A \eta_{AB}(r,t) [1 - \eta(r,r_0)], \quad (41)$$

где λ - скорость генерации частиц В. Решение стационарного уравнения (41) приводит при статическом распределении стоков к КСР

$$\frac{\kappa(\infty)}{4\pi D r_0} = 1 + \sqrt{\frac{\kappa(\infty)n_A}{D}} r_0. \quad (42)$$

$$\kappa(\infty) = 4\pi D r_0 (1 + \sqrt{3S} + 1,5S), \quad (S \ll 1). \quad (43)$$

Для распределения стоков в виде

$$\eta_{AA}(r) = \theta(r-a) \quad (44)$$

имеем

$$\kappa(\infty) = \kappa_0 \left\{ 1 - \frac{3S}{2} + \frac{\sqrt{3S} + 1,5S(a/r_0)^2 + 0,5\sqrt{3S} [(a/r_0)^2 - 1]}{1 + \sqrt{3S}(a/r_0 - 1)} \right\}, \quad (45)$$

что при $a = R$, где R - среднее расстояние между стоками, дает результат для регулярного распределения стоков. Нетрудно видеть, в частности, что при $\eta_{AA}(r_0 < r < r_1) = b > 1$ и $\eta_{AA}(r > r_1) = 1$, значение КСР становится меньше $\kappa_0(\infty)$, т.е. при кластеризации стоков КСР уменьшается.

При накоплении, ограниченном статическим распадом, метод, основанный на усреднении по моментам создания частиц, приводит к наличию нефизического стационара: так, например, $n_A \bar{V}_a = 1$, где \bar{V}_a - объем сферы спонтанной рекомбинации. Этот результат показывает непригодность метода усреднения по моментам создания при концентрациях частиц $n_A > \bar{V}_a^{-1}$, включение же диффузии уменьшает при достаточно быстрой диффузии концентрацию в стационаре и метод усреднения по моментам создания частиц "работает".

Уравнения накопления $A + B \rightarrow C$ в несимметричной формулировке.

Уравнения накопления, ограниченного диффузией, могут быть получены из цепочек уравнений для многочастичных плотностей вероятности, используя модифицированное суперпозиционное приближение, учитывающее одновременно и усреднение по моментам создания частиц. Уравнения имеют вид

$$\frac{dn(t)}{dt} = \lambda \left\{ 1 - \int_0^t \frac{d\Phi(t-\tau)}{d\tau} \exp \left[-2 \int_{\tau}^t p(t') n(t') dt' \right] d\tau - \int_0^t \frac{2\lambda}{n(\tau)} p(t-\tau) \exp \left[- \int_{\tau}^t \frac{2\lambda}{n(t')} dt' \right] d\tau n^2(t) \right\}, \quad (46)$$

($\Phi(t)$ - доля прорекомбинировавших частиц в КП)

где

$$p(t) = 4\pi D r_0^2 \left. \frac{\partial \eta_2(r,t)}{\partial r} \right|_{r=r_0} \quad (47)$$

и

$$\frac{\partial \eta_1(r,t)}{\partial t} = \frac{2\lambda}{n(t)} [1 - \eta_1(r,t)] + D \Delta \eta_1(r,t), \quad (48)$$

$$\frac{\partial \eta_2(r,t)}{\partial t} = \lambda f(r) + D \Delta \eta_2(r,t) - 2p(t)n(t)\eta_2(r,t). \quad (49)$$

Стационарные уравнения для граничного условия Смолуховского имеют вид

$$\lambda - 4\pi r_0 \lambda \int_{r_0}^{\infty} f(r) \exp \left[-\sqrt{\frac{2\rho(\infty)n(\infty)}{D}}(r-r_0) \right] dr - \rho(\infty)n^2(\infty) = 0, \quad (50)$$

где

$$\rho(\infty) = 4\pi D r_0 \left[1 + \sqrt{\frac{2\lambda}{Dn(\infty)}} r_0 \right]. \quad (51)$$

В случае симметричной формулировки в показателе экспоненты в (50) стоит вместо длины "захвата" $L_1 = \sqrt{D/2\rho(\infty)n(\infty)}$ длина $L_2 = \sqrt{Dn(\infty)/2\lambda}$, учитывающая захват как из-за коррелированной, так и некоррелированной рекомбинации. При $f(r) = \delta(r-r_1)/4\pi r^2$ имеет место $L_2^2 = L_1^2(1-r_0/r_1)$. Итак, в симметричной формулировке коррелированная рекомбинация учтена дважды. При больших значениях L_1 и L_2 в стационаре оба подхода дают близкие результаты.

В задачах накопления $A+B \rightarrow C$, ограниченного спонтанным распадом, имеет место ситуация, аналогичная накоплению при реакции $A+B \rightarrow A$. В суперпозиционном приближении в пределе мгновенной рекомбинации в сфере спонтанной рекомбинации объема V_a стационарная концентрация частиц определяется уравнением $n(\infty)V_a = 1/2$. Члены, включающие трехчастичные корреляции, в уравнениях кинетики исчезают, и полученные уравнения пригодны лишь для описания начальных стадий накопления. При незначительных скоростях рекомбинации эффект кластеризации не ощущается

сильно. В пределе малых σ_a ($\sigma_a \ll \lambda v_a$) имеем очевидный результат $\lambda = \sigma_a v_a n^2(\infty)$, где $\sigma = \sigma_a \theta(r_0 - r_a)$ и r_a - радиус сферы рекомбинации.

Коэффициенты скорости рекомбинации при произвольных длинах пробега носителей (гл. 7).

Определение эффективного сечения рекомбинации для заряженного центра. Заряженный центр представляется в виде сферы с радиусом рекомбинации r_0 и с потенциалом $V(r) = -e/\epsilon_0 r$, где e - заряд центра, ϵ_0 - диэлектрическая постоянная. Эффективное сечение рекомбинации $\sigma_{эфф}$ связано с КСР согласно $k(\infty) = \langle v \rangle \sigma_{эфф}$, где $\langle v \rangle$ - средняя тепловая скорость рекомбинирующей частицы.

Для определения $\sigma_{эфф}$ рассмотрим стационарное уравнение Больцмана для частиц в поле изолированного заряженного центра:

$$v_r \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{v_r^2}{r} \frac{\partial f}{\partial v_r} - \frac{v_r v_p}{r} \frac{\partial f}{\partial v_p} + \frac{F_r}{m} \frac{\partial f}{\partial v_r} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ст} \quad (52)$$

где $f = f(\vec{v}, \vec{r})$ - функция распределения для частиц со скоростью $\vec{v}(v_r, v_\theta, v_p)$ и расстоянием от центра r , $v_p = (v_\varphi^2 + v_\theta^2)^{\frac{1}{2}}$, F_r - сила притяжения центром рекомбинирующих частиц, m - масса частиц. Эффективное сечение определяется согласно

$$\sigma_{эфф} = 4\pi r_0^2 \left. \int f \vec{v} d\vec{v} \right|_{r=r_0} \quad (53)$$

Член столкновений $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ст}$ в (53) выбирался в виде

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ст} = \frac{3}{l} \left(\frac{\pi k T}{2m} \right)^{\frac{1}{2}} (\bar{f} - f), \quad (54)$$

где \bar{f} - равновесная функция, l - длина пробега частицы, k - постоянная Больцмана. Уравнение (53) решаем методом моментов; используя двухстороннее приближение Максвелла, получаем уравнение

$$\frac{d\eta}{dx} - \frac{R'}{r_0} \eta = -I \left[\frac{3}{4} \frac{r_0}{l} + F(x) \right], \quad (x = \frac{r_0}{r}, R' = \frac{e^2}{\epsilon_0 k T}) \quad (55)$$

$$F(x) = \frac{r_0}{\sqrt{\pi}(R'+r_0)} \left\{ \left[\frac{x}{\sqrt{1-x^2}} + \frac{R'x(2+x)\sqrt{1-x^2}}{r_0(1+x)^2} \right] x \right. \\ \left. + \int_0^{\infty} \left[t + \frac{R'x}{r_0(1+x)} \right] \exp(-t) dt + \frac{R'}{r_0} \left[1 + \frac{\sqrt{1-x}}{(1+x)^2} \right] \sqrt{\frac{R'}{r_0}} x \right\}, \quad (56)$$

где $\eta = \int f d\vec{v}$ и $I = -4\pi r^2 \int f \vec{v} d\vec{v}$. Граничные условия для (56) получаем из условия отсутствия потока носителей от центра при $r = r_0$ и из равенства $\eta(r \rightarrow \infty) = f$ (фактически имеем среду с бесконечным источником). Учитывая, что $\sigma_{эфф} = -I/\langle v \rangle$, получаем

$$\sigma_{эфф} = \frac{\pi r_0^2}{C \exp\left(-\frac{R'}{r_0}\right) + \left[1 - \exp\left(-\frac{R'}{r_0}\right)\right] \frac{3r_0^2}{4R'L} + \int_0^1 F(x) \exp\left(-\frac{R'}{r_0}x\right) dx}, \quad (57)$$

где

$$C = \frac{r_0}{2(R'+r_0)} \left(\exp \frac{R'}{r_0} \operatorname{erfc} \sqrt{\frac{R'}{r_0}} + 2 \sqrt{\frac{R'}{\pi r_0}} \right). \quad (58)$$

Из (58), в частности, при $R'/r_0 > 4$ получаем

$$\sigma_{эфф} = \pi r_0^2 \left(\frac{3r_0^2}{4R'L} + \frac{r_0}{R'+r_0} \right)^{-1}. \quad (59)$$

Из (59) при $l \ll r_0$ получаем сечение для контролируемого диффузией процесса: $\sigma_{эфф} = \frac{4}{3} \pi R'l$, а при $l > r_0$ - газокинетическое сечение. На рис. 1 показана функция распределения η для ряда значений R' и l . В зависимости от соотношения параметров R' , r_0 и l может быть как $\eta(r_0) > 1$, так и $\eta(r_0) < 1$. Выводы, полученные из (56), качественно подтверждаются результатами моделирования процесса рекомбинации носителей на заряженном центре в двухмерной модели. Заряженный центр помещался в центр круга радиуса R_k и разыгрывался процесс блуждания частиц с учетом изменения их траектории под действием сил притяжения центра. На границе R_k использовались условия отражения. Результаты моделирования приведены на рис. 2.

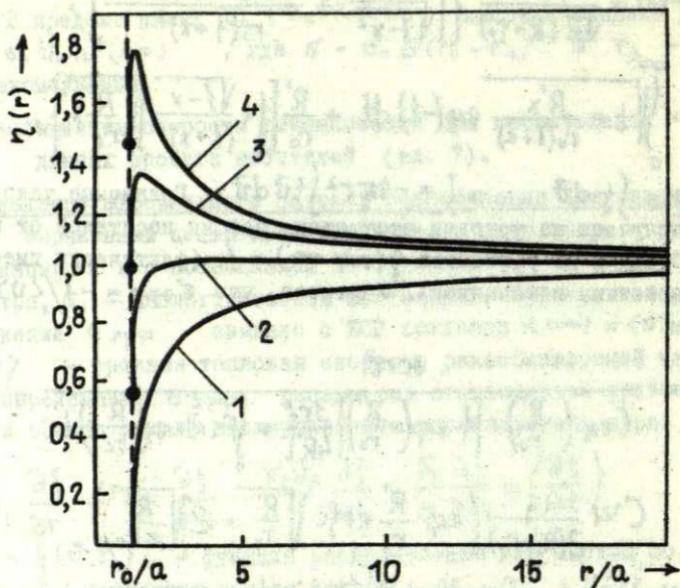


Рис. 1. Функция распределения $\eta(r)$:
 1. $R' = 0, l = 5a$; 2. $R' = a, l = a$; 3. $R' = a, l = 5a$;
 4. $R' = 2a, l = 2a$ (a - постоянная решетки).

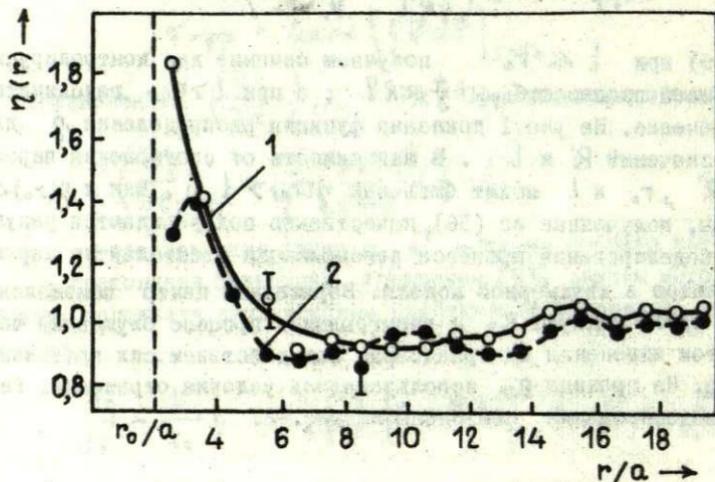


Рис. 2. Результаты моделирования $\eta(r)$:
 1. $R' = 5a$; 2. $R' = 3a$; $l = 5a$.

Эффективные сечения для дипольного центра, учет отражения носителей и уточнение параметров для заряженного центра.

Дипольный центр представим в виде пары противоположно заряженных центров с расстоянием между ними d . При $d < r_0$ можно предположить, что энергия носителя в поле центра описывается выражением

$$eV(r) = -\frac{R'dkT}{2r^2}. \quad (60)$$

Тогда имеем

$$\sigma_{эфф} = \pi R'd \left[1 + \frac{3}{4L} \sqrt{\frac{1}{2} \pi R'd} \right]^{-1} \quad (61)$$

при $R'd \gg 2r_0^2$

Определим вероятность избежать носитель рекомбинации при столкновении с центром через γ . Выражения для эффективных сечений нейтрального $\sigma_{эфф}^{нч}$ и заряженного центров $\sigma_{эфф}^{зч}$ имеют вид

$$\sigma_{эфф}^{нч} = \frac{K(\infty)}{\langle v \rangle} = \pi r_0^2 \left(\frac{1}{1-\gamma} + \frac{3}{4} \frac{r_0}{L} \right)^{-1}, \quad (62)$$

$$\sigma_{эфф}^{зч} = \pi R'r_0 \left(\frac{1}{1-\gamma} + \frac{3}{4} \frac{r_0}{L} \right)^{-1}. \quad (63)$$

Учитывая $D = \frac{l\langle v \rangle}{3}$, вместо (62) получаем для КСР

$$K(\infty) = \frac{4\pi D r_0 (1-\gamma) \pi r_0^2 \langle v \rangle}{(1-\gamma) \pi r_0^2 \langle v \rangle + 4\pi D r_0}. \quad (64)$$

Сравнивая (64) с выражением, полученным для КСР с радиационным граничным условием в уравнении диффузии

$$K(\infty) = \frac{4\pi D r_0 k_0}{k_0 + 4\pi D r_0} \quad (65)$$

получаем непосредственно смысл коэффициента химической реакции k_0 .

Можно показать, что если принять вместо условия захвата носителя при столкновении с центром с вероятностью I , модель по-

тери энергии; предложенную Натансоном¹⁰⁾, то диффузионная формула

$$\sigma_{эфф}^{34} = \frac{4}{3} \pi R^2 l \quad (66)$$

может быть использована и до длин пробега $l \sim 10r$. Подтверждением такой модели являются определенные в II) отношения эффективных сечений σ_p на Tl^+ к эффективному сечению захвата на Tl^+ центре σ_3 , когда взаимодействие с заряженным центром носит диффузионный характер, а с нейтральным — газокинетический.

Моделирование ограниченного спонтанной рекомбинацией накопления точечных дефектов в одномерной картине и основное уравнение накопления (гл.8)

Моделирование накопления в квазинепрерывной картине. Для установления основных закономерностей процесса накопления в случае, наиболее трудно поддающемся теоретическому анализу, была рассмотрена модель квазинепрерывного "кристалла". Одномерный "кристалл" представляется в виде отрезка длиной L ячеек, на концах отрезка задаются периодические условия. Создание пары междоузлие-вакансия представляется появлением в "кристалле" точки I в ячейке, представляющей междоузлие, и отрезка длиной l ячеек, представляющего ему искажения решетки около вакансии (сфера спонтанной рекомбинации). Положение точки и отрезка прямой определяется парой случайных чисел из таковых с равномерным распределением в интервале $(0, L)$. Целая часть случайного числа определяет номер ячейки, где находится междоузлие или начало ямы искажения. Число дефектов в одной ячейке не ограничивалось — квазинепрерывная модель. При попадании междоузлия в яму искажения происходит мгновенная рекомбинация данной пары дефектов. При попадании междоузлия в область, перекрытую несколькими ямами, вместе с междоузлием удаляется случайно выбранная вакансия, создающая одну из этих ям; то же происходит и при образовании ямы на месте скопления междоузлий. Моделирование

10) Натансон Г.Л. К теории объемной рекомбинации ионов. — ВЭФ, 1959, т.29, с.1373-1380.

11) Алукер Э.Д., Лусис Д.Ю., Чернов С.А. Электронные возбуждения и радиолуминесценция щелочно-галлоидных кристаллах. Рига, Зинатне, 1979, с.251.

проводилось для длин $L = 40+2000$ и величин области рекомбинации $l = 5+100$. Результат показывает, что 1) кривая зависимости числа накопленных дефектов от общего числа создаваемых дефектов (доза) выходит на насыщение; 2) при $L = 100+400$ и $l = 5 \div 20$ было достигнуто полное разделение "кристалла" на области междоузлий и вакансий, местоположение областей в дальнейшем изменяется; 3) сумма длин ям, накопленных вакансий при $L/l > 2$, значительно превышает длину L .

Моделирование накопления в одномерном кристалле. Моделирование в одномерном кристалле позволило установить закономерности накопления с точностью, необходимой для вывода основ теории и получения основных уравнений накопления.

Кристалл представляется отрезком длиной $2N$ ячеек. В ячейках с нечетными номерами в начальный момент времени $t = 0$ находятся атомы, остальные ячейки пусты. Создание пары междоузельный атом-вакансия происходит следующим образом: случайно выбивается атом, на его месте образуется вакансия с областью спонтанной рекомбинации, моделируемой отрезком длиной в U ячеек (см. рис. 3).



Рис. 3. Образование пар вакансия-междоузельный атом в одномерном кристалле. Показан случай $U = 9$; ● - атом, ○ - вакансия, ● - междоузельный атом, — - активные к рекомбинации на них междоузлий места кристалла

Выбитый атом попадает в междоузлие, местоположение которого определяется случайным образом. Если соответствующая ячейка уже занята, заново разыгрывается создание пары. В остальном модель аналогична случаю квазинепрерывного кристалла.

Длина кристалла выбиралась $2N = 2000$ ячеек и определялась зависимость от времени концентрации накопленных дефектов $n(t) = N(t)/N$, где $N(t)$ - число накопленных к моменту времени дефектов одного сорта. Для различных U результаты моделирования для среднего числа накопленных дефектов $N(\infty)$, характерной величины $n(\infty) \nu$, где $\nu = (U-1)/2$ - число активных к рекомбинации мест в отдельной области спонтанной рекомбинации, отношения активных междоузлий к общему их числу в кристалле приве-

Результаты моделирования накопления в кристалле

U	N(∞)	n(∞)U	β
5	232,2	0,464	0,388 \pm 0,02
9	158,9	0,636	0,422
21	92,2	0,922	0,447
49	52,4	1,248	0,470

Из таблицы I следует справедливость выражения

$$n(\infty) = 1 - 2\beta \quad * (67)$$

Существенным является то, что β зависит от U . Для качественного изучения эффекта кластеризации при накоплении определялись парные функции распределения для одноименных и разноименных дефектов. На рис. 4 показана картина для $U = 21$.

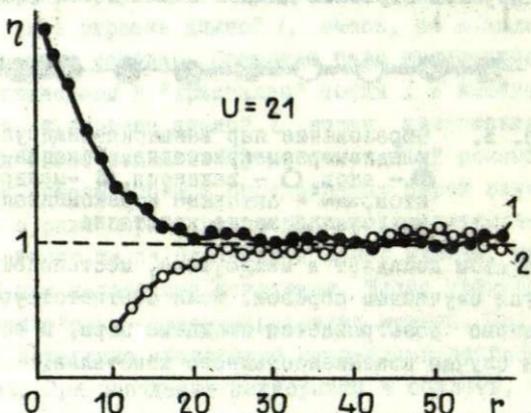


Рис. 4. Парные функции распределения дефектов в случае $U = 21$: 1 — для пар вакансия-вакансия, 2 — для пар вакансия-междоузельный атом. Значения r даны в постоянных решетках одномерного кристалла

В области малых значений r функция распределения однотипных дефектов имеет область "обогащения", что указывает на кластеризацию дефектов. Функция распределения разнотипных дефектов в

той же области имеет значения меньше единицы.

Основное уравнение накопления. Уравнение накопления может быть из общих соображений написано в виде

$$\frac{dn(t)}{dt} = \lambda \left[1 - \frac{2\beta}{1-n(t)v_0} \right], \quad (68)$$

где $\beta = V_z(t)/Nv_0$, $V_z(t)$ - перекрытый сферами рекомбинации объем, v_0 - объем элементарной ячейки, N - число междоузельных мест на единицу длины одномерного кристалла. Уравнение (68) в случае стационара дает (67), здесь мы перешли к концентрации накопленных частиц, введя $n(t) = n/v_0$, вместо доли накопленных частиц в (67). Для дальнейшего удобно ввести коэффициент эффективности $\alpha(t) = \beta/n(t)v_0$, $\alpha(0) = 1$; для $\alpha(t)$, учитывая, что она - медленно меняющаяся функция времени, предполагается

$$\alpha(t) = 1 - [1 - \alpha(\infty)] \frac{n(t)}{n(\infty)}, \quad (69)$$

где $\alpha(\infty)$ и $n(\infty)$ - стационарные значения соответствующих величин.

Из (68) и (69) имеем

$$\frac{dn(t)}{dt} = \lambda \left\{ 1 - 2 \left[1 - (1 - \alpha(\infty)) \frac{n(t)}{n(\infty)} \right] \frac{n(t)v_0}{1 - n(t)v_0} \right\}, \quad (70)$$

где $\alpha(\infty)$ может быть определена из стационарного уравнения (48), тогда

$$\alpha(\infty) = \frac{1 - n(\infty)v_0}{2n(\infty)v_0}, \quad (71)$$

здесь мы обозначали объем сферы рекомбинации через v_0 .

Из (70) и (71) получаем основное уравнение накопления, ограниченного спонтанной рекомбинацией

$$\frac{dn(t)}{dt} = \lambda \left\{ 1 - 2 \left[1 - \left(1 - \frac{n(\infty)v_0}{2n(\infty)v_0} \right) \frac{n(t)}{n(\infty)} \right] \frac{n(t)v_0}{1 - n(t)v_0} \right\}. \quad (72)$$

Полученное уравнение дает возможность определить по экспериментальной зависимости концентрации накопленных частиц от времени объем сферы спонтанной рекомбинации v_0 и стационарную концентрацию $n(\infty)$.

Для проверки гипотезы (69) была промоделирована кинетика накопления и получены зависимости $v_0 n(\mathcal{N})$ и $\alpha(n)$. На рис.5 приведены результаты машинного эксперимента - кривые 2 и 3 в сравнении с теорией (72) - кривые 1 и 2. Для получения одной кри-

вой накопления рис. 5 процесс накопления повторялся независимо

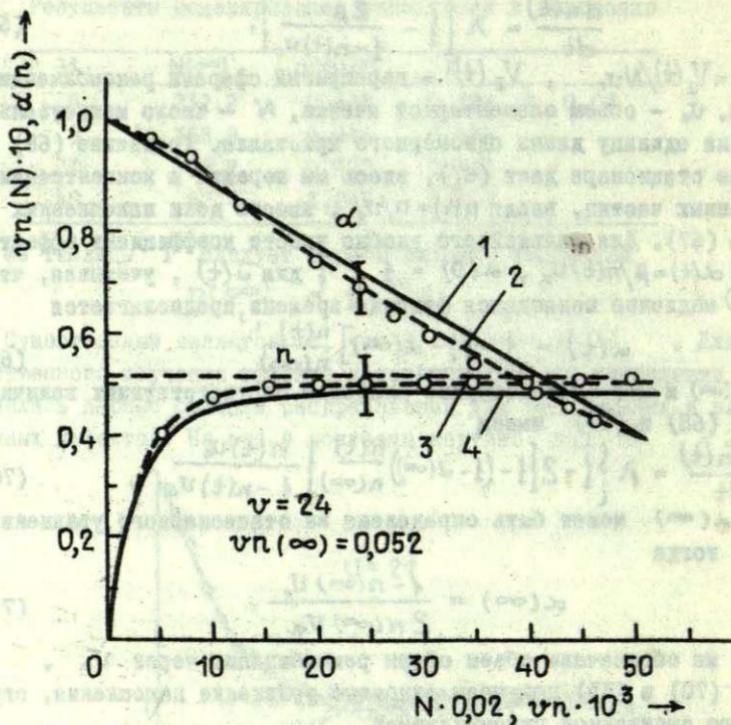


Рис. 5. Сравнение результатов моделирования с теорией. 1 - $\alpha(n)$ по (47) и (49); 4 - $\nu n(N)$ из (50); 2 - $\alpha(n)$ при моделировании; 3 - $\nu n(N)$ при моделировании, $N = \lambda t$.

100 - 200 раз до достижения в каждом случае стадии насыщения. По этим независимым испытаниям строилась усредненная кривая. В каждом эксперименте вычислялась и доля кристалла, перекрытая сферами рекомбинации β . Как видно из рис. 5, в пределах ошибки эксперимента ($\sim 5\%$) теоретические и экспериментальные кривые совпадают. Это указывает на пригодность приближения (47) при описании кинетики накопления. Моделирование для случая $\mathcal{U} = 16$ и $\mathcal{U} = 50$ приводит к аналогичным результатам. Отметим, что в последних двух случаях имеем $n(\infty)\mathcal{U} = 1,184$, $\beta = 0,476$ и $n(\infty)\mathcal{U} = 1,625$, $\beta = 0,478$.

Для определения роли корреляции в создаваемых парах был промоделирован случай, когда создаваемое междоузлие находится на различных фиксированных в пределах одного эксперимента расстояниях d , рис. 6.

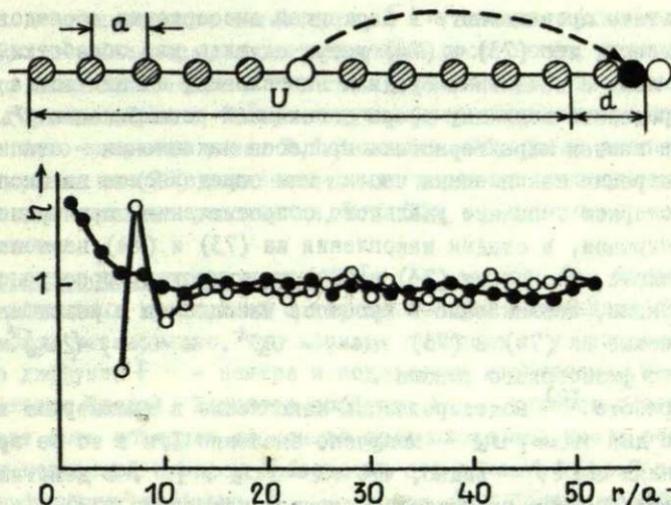


Рис. 6. Создание коррелированных пар вакансия-междоузлие и функции распределения 1 - одноподобных дефектов, 2 - разнотипных дефектов, d - расстояние от края сферы рекомбинации, a - постоянная решетки

Для различных d вычислялись значения $\eta(\infty)U$. При малых d концентрация накопленных дефектов уменьшается, ибо корреляция подавляет эффект кластеризации. Своеобразный вид имеют и функции распределения одноподобных и разнотипных дефектов. В стационарной функции распределения разнотипных дефектов наблюдается максимум в области внутриварной корреляции.

Полученные при моделировании результаты показывают, что при $d > 5a$ корреляция мало влияет на значение $\eta(\infty)U$.

Теория накопления, ограниченного спонтанной рекомбинацией, и эксперимент. При анализе экспериментальных данных по накоплению дефектов при электронном или нейтронном облучении в металлах, как правило, используются уравнения

$$\frac{dn(t)}{dt} = \lambda [1 - 2n(t)v_a], \quad (73)$$

$$\frac{dn(t)}{dt} = \lambda [1 - n(t)v_a]^2. \quad (74)$$

Результаты проведенного в настоящей диссертации исследования показывают, что (73) и (74) могут служить для обработки эксперимента лишь в начальных стадиях накопления, из них тогда возможно определить величину сферы спонтанной рекомбинации v_a . Другая же важная характеристика процесса накопления — стационарная концентрация накопленных частиц или определяемое на эксперименте стационарное значение удельного сопротивления, пропорциональное концентрации, в стадии накопления из (73) и (74) не может быть определена, поскольку (73) и (74) не учитывают пространственные корреляции, возникающие в процессе накопления и рекомбинации. Получаемые из (74) и (73) $n(\infty) = v_a^{-1}$ и $n(\infty) = (2v_a)^{-1}$ не имеют прямого физического смысла.

В работе ^{I2)} моделировалось накопление в трехмерном кристалле и было для $n(\infty)v_a$ получено значение 1, и в то же время по значениям $\alpha(t)$ видно, что $n(\infty)v_a > 1$. В действительности это противоречие разрешается просто, исходя из (72). Для $n(\infty)v_a$ получаем значение 1, ³².

Сравнение с (72) хода экспериментальных кривых в ^{I2)} дает возможность сделать вывод, что большинство из них представляет результат более сложного процесса накопления, чем ограниченный спонтанной рекомбинацией модели, здесь рассматриваемой; и обработка по (73) и (74) не может проводиться, как и по (72), без предварительного анализа эксперимента.

Применение теории рекомбинационных процессов к описанию захвата горячих дырок и миграции F — центров в щелочно-галогенидных кристаллах (гл.9).

Захват нерелаксированных дырок. Нами было показано, что явление захвата горячих дырок может быть описано в схеме процессов ре-

I2) Lück G., Sizmann R. Spontane Frenkeldefektrekombination und Verlauf von Dosiskurven bei Elektronen-Bestrahlung.— Phys. Stat.Sol., 1966, vol.I4, pp.K 61-K 62.

комбинации. Вероятность захвата горячих дырок ρ может быть описана выражением

$$\rho = 1 - \exp(-Rbn), \quad (75)$$

где n - концентрация активатора, b - сечение захвата горячей дырки, R - величина, характеризующая расстояние, проходимое дыркой до автолокализации в решетке. Выражение для вероятности захвата горячих дырок в частном случае пуассоновского распределения R было получено ранее В.Л.Винецким. Обработка экспериментальных кривых по (75) показывает, что дырки до автолокализации проходят значительные расстояния, $R \sim 30a$, где a - постоянная решетки.

Определение параметров миграции F - центров. При изучении целочно-галоидных кристаллов с двухвалентными катионными примесями кальция было установлено, что примеси приводят к увеличению коэффициента диффузии F - центра и подавлению коагуляции F - центров (Ицкович, Шварц). Характер диффузии F - центров в этих случаях может быть объяснен на основе предположения, что в области действия катионной примеси обозначим эту область сферой радиуса r_0 коэффициент диффузии F - центра D_2 больше коэффициента диффузии D_1 вне действия катионной вакансии. Для оценки эффективного коэффициента диффузии D^* получено выражение

$$D^* = \frac{D_1(1+S)}{1+S D_1/D_2}, \quad (76)$$

где $S = 4\pi r_0^3 n$, n - концентрация примеси. Учитывая образование катионной вакансии при диссоциации комплекса вакансия-примесь, можно оценить параметры диффузии F - центров, так, $r_0 \sim 3a$, a - постоянная решетки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей диссертации, с единой точки зрения, основываясь на уравнениях, получаемых из цепочки уравнений для многочастичных плотностей вероятности, в суперпозиционном приближении рассмотрены процессы рекомбинации и накопления, контролируемые диффузией

и дистанционным переносом при сложном пространственном распределении рекомбинирующих частиц. Учет пространственных корреляций между однотипными и разнотипными частицами $A-A$ ($B-B$) и $A-B$ позволяет существенно расширить круг экспериментальных задач, допускающих рассмотрение на основе феноменологической теории реакций в твердых телах. Такими задачами, в частности, являются накопление точечных дефектов, ограниченное спонтанной рекомбинацией; рекомбинация точечных дефектов на скоплениях стоков, туннельная рекомбинация и др. Обнаруженное эффективное кластерирование частиц в одномерной модели представляет принципиальный интерес, поскольку кластеризация происходит без взаимодействия однотипных частиц. Полученные результаты могут служить основой для перспективного направления в теории рекомбинационных процессов в физике твердого тела, рекомбинационных процессов с учетом пространственной корреляции между рекомбинирующими частицами.

ВЫВОДЫ

1. Построена феноменологическая теория процессов рекомбинации $A+B \rightarrow C$ и $A+B \rightarrow A$, контролируемых как диффузией, так и дистанционным переносом с учетом сложного пространственного распределения частиц:

а) впервые получены уравнения для реакций $A+B \rightarrow C$ с одновременным учетом корреляций разнотипных частиц $A-B$, как возникающих в процессе реакций; так и определяемых начальными условиями; и корреляцией однотипных частиц;

б) впервые получены уравнения для процессов $A+B \rightarrow A$ как при произвольных распределениях стоков A , так и частиц B относительно них;

в) впервые решен на основе предложенной теории целый ряд важных задач кинетики, см. далее частные результаты.

2. Получено основное уравнение ограниченного спонтанной рекомбинацией накопления точечных дефектов, позволяющее по стадии накопления, далекой от насыщения, определить стационарную концентрацию дефектов. Установлено существование конечного значения характерной величины накопления $n(\infty) \mathcal{U}_a$ и зависимость ее от числа мест в \mathcal{U}_a , активных к рекомбинации (в дискретной картине); $n(\infty) \mathcal{U}_a$ может быть как меньше, так и больше единицы.

3. Обнаружено эффективное образование кластеров однотипных дефектов в отсутствие прямого взаимодействия между ними в одномерной картине накопления. С увеличением числа мест, активных к рекомбинации, в сфере спонтанной рекомбинации значение $n(\infty) \nu_a$ в дискретной модели приближается к результатам непрерывной модели. Корреляция внутри пар создаваемых дефектов при расстояниях междоузельного атома от края сферы спонтанной рекомбинации $d > 5a$, где a — постоянная решетки, не влияет существенно на стационарное значение накопленных дефектов. Характерный размер области, где функция распределения однотипных дефектов больше единицы, а разнотипных меньше — порядка двух радиусов сферы рекомбинации.

4. Впервые определены эффективные сечения на кулоновском и дипольных центрах вне рамок диффузионного приближения, учтено отражение носителей от центра рекомбинации. Выражения для эффективных сечений рекомбинации при длинах пробега носителей $l \ll r_0$ дают результаты диффузионной теории, при $l \gg r_0$ получаем газокинетические сечения. Результаты моделирования рекомбинации носителей на заряженном центре в двумерной модели подтверждают выводы теории. Выражение $\sigma_{\text{эфф}} = \frac{4}{3} \pi R^2 l$ при учете особенностей захвата носителя может быть использовано для $l \leq 10 r_0$.

5. Даны рекомендации по обработке экспериментов по накоплению точечных дефектов в процессе, ограниченном спонтанной рекомбинацией. Исходя из основного уравнения накопления, определены стационарные концентрации дефектов из экспериментальных кинетических кривых, полученных другими авторами, в рассмотренных случаях $n(\infty) \nu_a > 1$. С использованием теории кинетики рекомбинации изучены процессы захвата горячих дырок и процессы диффузии F -центров в щелочно-галогидных кристаллах, и оценены из эксперимента кинетические параметры этих процессов.

На основе разработанной общей теории получены следующие частные результаты:

1. В несимметричном приближении получены уравнения накопления ДКР $A+B \rightarrow C$ (в трехмерном и двумерном случае) и $A+B \rightarrow A$ и уравнения для процессов $A+B \rightarrow A$ в стадии затухания.

2. Показана некорректность симметричного подхода и установлены физические причины ее при описании процессов $A+B \rightarrow A$ и $A+B \rightarrow C$

при наличии сильных пространственных корреляций $A-B$.

3. Определен квазистационарный коэффициент скорости рекомбинации частиц на стоках, образующих элементарные кластеры из 3^x-4^x стоков.

4. Оценено влияние на кинетику скорости рекомбинации эффекта "исключенного" объема.

5. Получены в замкнутом виде уравнения накопления для ДКР при произвольных функциях распределения стоков.

6. Решена аналитически задача ДКР $A+B \rightarrow A$ в стадии затухания при наличии корреляции $A-B$ и явно выделены стадии коррелированной и некоррелированной рекомбинации; и предложен метод оценки степени корреляции по экспериментальным кривым затухания.

7. Обобщено уравнение переноса энергии от доноров к акцепторам при учете миграции возбуждения по донорам на случай больших концентраций и произвольных их пространственных распределений.

8. В суперпозиционном приближении получены уравнения статистического распада $A+B \rightarrow C$ при наличии начальных корреляций $A-B$ с учетом времен жизни частиц A и B .

9. Получены стационарные уравнения для ДКР $A+B \rightarrow C$ с учетом дальнего действия и дистанционного переноса.

10. На примере процессов $A+B \rightarrow A$, контролируемых как диффузией, так и статическим распадом, установлена эквивалентность подходов, основанных на усреднении в уравнениях накопления по моментам создания частиц, и точной задачи при небольших концентрациях частиц.

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Антонов-Романовский В.В., Калнинь Ю.Х. Расчеты эффективного сечения рекомбинации и функции распределения носителей заряда в случае произвольных значений кинетических параметров. — Материалы XIX Совещания по люминесценции. Рига, 1970, с.14.
2. Antonov-Romanovsky V.V., Kalnin Yu.H. On the effective recombination cross-section and distribution function of free carriers relative to ionized centre. — J.Luminescence, 1971, vol.3, pp.423-437.
3. Калнинь Ю.Х. Расчет эффективного сечения рекомбинации и функции распределения свободных носителей для заряженного центра. — ФТТ, 1971, т.13, с.1826-1827.

4. Антонов-Романовский А.А., Калнинь Ю.Х., Об эффективном сечении рекомбинации и функции распределения свободных носителей относительно ионизованного центра. — ФТТ, 1871, т.13, № 5, с.1376-1380.
5. Калнинь Ю.Х. К расчету эффективного сечения рекомбинации. — Изв.АН Латв.ССР, сер.физ.и техн.наук, 1971, 4, с.3-5.
6. Калнинь Ю.Х. Расчет эффективного сечения рекомбинации дипольного центра при произвольной длине свободного пробега. — Изв.АН Латв.ССР, сер.физ.и техн.наук, 1971, № 2, с.51-56.
7. Калнинь Ю.Х. Некоторые вопросы кинетики рекомбинационных процессов в кристаллофосфорах. — В кн.: Радиационная физика, вып.7, Рига, Зинатне, 1973, с.113-142.
8. Калнинь Ю.Х. Эффективное сечение рекомбинации с учетом отражения носителя. — Изв.АН Латв.ССР, сер.физ.и техн.наук, 1975, № 3, с.120-122.
9. Калнинь Ю.Х. Некоторые вопросы кинетики рекомбинационных процессов в ионных кристаллах. В кн.: Третье Всесоюзное совещание по радиационной физике и химии ионных кристаллов. Тезисы докладов, Саласпилс, 1975, с.245-248.
10. Калнинь Ю.Х., Гулбис А.В. Кинетика рекомбинации дефектов при наличии кулоновского притяжения. — В кн.: Тезисы докладов III Всесоюзного совещания по радиационной физике и химии ионных кристаллов, 1975, с.249-250.
11. Калнинь Ю.Х. К выводу уравнений кинетики диффузионно-контролируемых реакций при наличии корреляции. — Изв.АН Латв.ССР, сер.физ.и техн.наук, 1977, № 3, с.70-72.
12. Kalnin Yu.N. and Pirogov F.V. On rate equations in the theory of diffusion-controlled reactions. — Phys. Stat. Sol. (b), 1977, vol. 84, pp. 521-527.
13. Калнинь Ю.Х. Теория диффузионно-контролируемых реакций $A+B \rightarrow C$ в случае создания частиц. — Изв.АН Латв.ССР, сер. физ.и техн.наук, 1977, № 5, с.20-27.
14. Калнинь Ю.Х. Моделирование диффузионно-контролируемого накопления точечных дефектов в твердых телах. — В кн.: Тезисы докладов У заседания постоянного семинара по моделированию радиационных и других дефектов в кристаллах. Кривой Рог, 1977, с.38-39.

15. Калнинь Ю.Х. Моделирование ограниченного спонтанной рекомбинацией накопления точечных дефектов. — В кн.: Тезисы докладов У заседания постоянного семинара по моделированию радиационных и других дефектов в кристаллах. Кривой Рог, 1977, с.40.
16. Калнинь Ю.Х., Пирогов Ф.В. Уравнение для стационарной концентрации частиц при реакции $A+B \rightarrow C$, контролируемой диффузией и туннельной рекомбинацией. — Изв.АН Латв.ССР, сер.физ. и техн.наук, 1977, № 5, с.28-32.
17. Kalnin Ju.H. Diffusion recombination theory in the case of particles generation. — J.Luminescence, 1976, vol.16, pp. 311-321.
18. Калнинь Ю.Х., Пирогов Ф.В. К теории накопления точечных дефектов в твердых телах. — Тезисы IV Всесоюзного совещания по радиационной физике и химии ионных кристаллов, Рига, 1978, с.59-60.
19. Калнинь Ю.Х. Кинетика рекомбинации и накопления точечных дефектов в твердых телах. — Тезисы IV Всесоюзного совещания по радиационной физике и химии ионных кристаллов. Рига, 1978, с.93.
20. Калнинь Ю.Х., Крикис Ю.Ю. Моделирование накопления точечных дефектов в одномерной картине. — В кн.: IV Всесоюзное совещание по радиационной физике и химии ионных кристаллов. Тезисы докладов. Саласпилс, 1978, с.94.
21. Калнинь Ю.Х. К статистической теории туннельной рекомбинации. — В кн.: XXV совещание по люминесценции (кристаллофосфоры), 20-23 сентября 1978г., Тезисы докладов. Ставрополь, 1978, с.68.
22. Калнинь Ю.Х., Пирогов Ф.В. Кинетика диффузионно-контролируемого накопления частиц в двухмерном случае. — Изв.АН Латв.ССР, сер.физ.и техн.наук, 1979, № 4, с.23-24.
23. Калнинь Ю.Х., Пирогов Ф.В. Диффузионно-контролируемое накопление точечных дефектов с учетом дальнего действия между ними. — Материалы Всесоюзного постоянного семинара по моделированию радиационных и других дефектов на ЭВМ. Ленинград, 1979, с. 134-135.
24. Калнинь Ю.Х., Пирогов Ф.В. К теории накопления точечных дефектов в твердых телах. — Изв.АН Латв.ССР, сер.физ.и техн.наук, 1980, № 2, с.29-34.

25. Kalnin Yu. H. Rate constant dependence on spatial distribution of sinks for diffusion-controlled reactions $A+B \rightarrow A$. --- Phys.Stat.Sol. (b), 1980, vol.101, pp. K 139-142.
26. Калнинь Д.Х., Пирогов Ф.В. Моделирование диффузионно-контролируемого накопления точечных дефектов в двухмерном случае. — В кн.: Тезисы докладов X заседания постоянного семинара по моделированию радиационных и других дефектов в кристаллах. Лиелупе, 1980, с.28-29.
27. Калнинь Д.Х., Крикис Ю.Ю. Моделирование накопления точечных дефектов в одномерном кристалле. — Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 1981, вып.3 (17), с.21-22.
28. Kalnin Yu.H. Theory of energy transfer in case of the arbitrary spatial distribution and high acceptor concentration.--- In Defects in insulating crystals. International conference. Abstracts. Riga, Zinatne, 1981, pp.260-261.
29. Калнинь Д.Х. Теория переноса энергии в случае произвольного пространственного распределения больших концентраций акцепторов. — Изв.АН Латв.ССР, сер.физ.и техн.наук, 1982, № 1, с.32-41.
30. Калнинь Д.Х. Теория процессов рекомбинации $A+B \rightarrow A$ и $A+B \rightarrow C$ при наличии корреляции между однотипными и разнотипными частями. — Изв.АН Латв.ССР, сер.физ.и техн.н., 1982, 4, с.3-33.
31. Алукер Э.Д., Аксенов О.Е., Калнинь Д.Х., Чернов С.А. Локализация горячих дырок в $KCl-Tl$. Материалы XIX Совецания по люминесценции. Рига, 1970, с.5-6.
32. Алукер Э.Д., Калнинь Д.Х. Оценка смещения горячих дырок в $KCl-Tl$. — ФТТ, 1971, том 31, с.641-642.
33. Алукер Э.Д., Калнинь Д.Х., Уломирский И.Е., Чернов С.А., — Движение дырок в щелочногалогидных кристаллах. — Изв.АН СССР, сер.физ., 1971, т.35, № 7, с.1352-1355.
34. Алукер Э.Д., Калнинь Д.Х., Чернов С.А., Шварц К.К. L . 3I. Ионизация центров люминесценции в щелочно-галогидных фосфорах нерелаксированными дырками. — Материалы Международной конференции по люминесценции. Ленинград, 1972.
35. Алукер Э.Д., Калнинь Д.Х., Чернов С.А., Шварц К.К. Ионизация центров люминесценции в щелочно-галогидных фосфорах нерелаксированными дырками. — Изв.АН СССР, сер.физ., 1973, т.37, № 4, с.738-740.

36. Иварц К.К., Ицкович В.С., Калимулин С.С., Калинин Д.Х. Термический отжиг F - центров в аддитивно окрашенных кристаллах KCl . — ФТТ, 1974, т.16, с.1586-1588.
37. Калинин Д.Х., Ицкович В.С. Диффузия F - центров в аддитивно окрашенных кристаллах KCl . — Изв.АН Латв.ССР, сер.физ.и техн.наук, 1974, № 5, с.36-39.
38. Калинин Д.Х., Ицкович В.С. Термическая диффузия F - центров в аддитивно окрашенных щелочно-галогидных кристаллах. — ФТТ, 1974, т.16, с.3078-3081.
39. Ицкович В.С., Калинин Д.Х. Влияние двухвалентных катионных примесей на коагуляцию F - центров в аддитивно окрашенных щелочно-галогидных кристаллах. — ФТТ, 1975, т.17, с.1543-1544.
40. Калинин Д.Х., Крикис В.Ю. Моделирование кинетики накопления в одномерном кристалле. Изв.АН Латв.ССР, сер.физ.и техн.наук, 1983, № 1, с.104-106.

Калин

КАЛНИНЬ Юрис-Роберт Харальдович

**КИНЕТИКА ПРОЦЕССОВ РЕКОМБИНАЦИИ В ТВЕРДЫХ
ТЕЛАХ. (УЧЕТ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ КОРРЕЛЯЦИИ)**

А в т о р е ф е р а т

Подписано к печати 7.07.83 ЯТ 03865

Заказ № 244 Тираж 100 экз. 1,8 уч. изд. л.
Бесплатно Ротапринт ИФ АН Латв. ССР
Рижский р-н, Саласпилс