

Министерство высшего и среднего специального образования
Латвийской ССР

Латвийский ордена Трудового Красного Знамени государственный
университет им.П.Стучки

Научно-исследовательский институт физики твердого тела

на правах рукописи

КАНДЕРС Улдис Карлович

ИЗЛУЧАТЕЛЬНАЯ ТУННЕЛЬНАЯ РЕКОМБИНАЦИЯ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ
В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

01.04.07. - физика твердого тела

Д и с с е р т а ц и я
на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

Научный руководитель:

лауреат Государственной премии ЛССР,
канд. физ.-мат. наук, МИЛЛЕРС Д.К.

Рига - 1980

СОДЕРЖАНИЕ

В В Е Д Е Н И Е	7
Глава 1. РОЛЬ ЭЛЕКТРОННОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ В РЕКОМБИНАЦИОННЫХ ПРОЦЕССАХ	14
Глава 2. СПЕКТРОСКОПИЯ ТУННЕЛЬНОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ЧИСТЫХ И АКТИВИРОВАННЫХ ЩГК	22
2.1. Общие замечания по исследованию спектров туннельной люминесценции	22
2.2. Спектры туннельной люминесценции чистых ЩГК	24
2.2.1. Спектры ТЛ монокристаллов KCl	24
2.2.2. Спектры ТЛ монокристаллов KBr	29
2.2.3. Спектры ТЛ монокристаллов NaCl	31
2.2.4. Спектры ТЛ монокристаллов KI	33
2.2.5. Спектры ТЛ монокристаллов NaBr	35
2.2.6. Спектры ТЛ монокристаллов NaI	38
2.3. Особенности дефектообразования в чистых и активированных ЩГК	41
2.4. Спектры и поляризационные эффекты ТЛ монокристаллов KCl-Tl и KCl-Ag	45
2.5. Р е з ю м е	51
Глава 3. ТУННЕЛЬНАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ АКТИВИРОВАННЫХ ТАЛЛИЕМ И СЕРЕБРОМ ЩГК	53
3.1. Влияние термо- и фотообработки на спектры туннельной люминесценции монокристаллов KCl-Tl	54
3.1.1. Зависимость спектров и эффективности аккумуляции ТЛ от температуры возбуждения	54
3.1.2. Спектры и кинетика рекомбинационной люминесценции при оптической подсветке в 1,9 эВ - полосе поглощения Tl^0 -центров	60

3.2.	Туннельная люминесценция пар $\{TI^0-TI^{2+}\}$ в KCl-TI и туннельно рекомбинационный механизм TI^0 -вспышки ТЛ	66
3.3.	Кинетика TI^0 -вспышки в УФ- и В-полосах излучения кристаллов KCl-TI	75
3.4.	Резюме	82
Глава 4.	КИНЕТИКА ТУННЕЛЬНОЙ РЕКОМБИНАЦИИ И МОДЕЛИ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ	83
4.1.	Элементарный акт туннельного переноса электрона в паре "электронный центр - дырочный центр"	84
4.2.	Математические модели пространственного распределения радиационных дефектов	89
4.3.	Кинетика излучательной туннельной рекомбинации в рамках модели изолированных генетических пар при произвольном виде возбуждения	95
4.3.1.	Кинетическое уравнение для ПР туннельных пар ...	95
4.3.2.	Кинетика ТР при некоторых частных видах возбуждения (стационарный случай)	99
4.3.3.	Кинетика ТР при некоторых частных видах возбуждения (квазистационарный случай)	101
4.4.	Кинетика туннельной люминесценции и количественная оценка эффекта запоминания длительности возбуждения	104
4.4.1.	Кинетика ТЛ при импульсном возбуждении	105
4.4.2.	Параметр $\alpha(t)$ и критерий $\epsilon_\alpha(t)$ для сравнения произвольных кривых затухания ТЛ	107
4.4.3.	Количественная оценка эффекта ЗДВ при экспоненциальном распределении генетических пар	110

Глава 5. АККУМУЛЯЦИЯ ТУННЕЛЬНОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ДОЗЫ ВОЗБУЖДЕНИЯ	I19
5.1. Кинетика затухания туннельной люминесценции при различных дозах возбуждения	I19
5.2. Дозовые характеристики туннельной люминесценции в рамках модели изолированных генетических пар	I22
5.2.1. Дозовые характеристики в различные моменты затухания ТЛ	I30
5.3. Кинетика затухания туннельной люминесценции в рамках модели смешанных пар при различных дозах возбуждения	I35
5.3.1. Кинетика затухания ТЛ	I35
5.3.2. Дозовые характеристики ТЛ	I41
5.4. Р е з ю м е	I45
Глава 6. РЕСТАВРАЦИЯ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ ПО КИНЕТИКЕ ТУННЕЛЬНОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ	I46
6.1. Пространственное распределение радиационных дефектов как результат решения обратной задачи ...	I46
6.2. Построение $K(r, r')$ -представления пространственного распределения	I50
6.2.1. Метод системы линейных алгебраических уравнений.	I50
6.2.2. Метод подобия ядра $K(r, r')$ и дельта-функции	I51
6.3. Некоторые частные $K(r, r')$ -представления пространственного распределения	I54
6.3.1. Представление, соответствующее основному уравнению	I54
6.3.2. Представления типа парциальных светосумм	I56
6.3.3. Представления типа производных кинетики	I60

6.4.	Проверка представлений пространственного распределения "на себя"	I63
6.5.	О возможностях практического применения некоторых $K(r,r')$ -представлений при оценке пространственного распределения радиационных дефектов....	I66
6.5.1.	Кривые затухания ТЛ и критерии применимости конкретных представлений	I66
6.5.2.	Точность $K(r,r')$ -представления и пространственная разрешающая способность τ	I69
6.5.3.	Некоторые дополнительные критерии применимости $K(r,r')$ -представления	I72
6.6.	Восстановление конфигурационного фактора радиационных дефектов по кинетике туннельной люминесценции	I75
6.6.1.	Вводные замечания	I75
6.6.2.	Кинетика затухания ТЛ и исходное уравнение для КФ	I77
6.6.3.	Анализ ядра $\mathcal{R}_{s,t_B}(r,t)$	I78
6.6.4.	$K(r,r')$ -представления КФ	I81
6.6.5.	Точность $K(r,r')$ -представлений КФ и их проверка "на себя"	I84
6.7.	Резюме	I88
ЗАКЛЮЧЕНИЕ		I91
ЛИТЕРАТУРА		I94
Приложение 1. КИНЕТИКА ФРАКЦИОННОЙ ТУННЕЛЬНОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ И ЕЕ ЧАСТОТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ		215
Приложение 2. ТУННЕЛЬНАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ АКТИВИРОВАННЫХ Тl и Ag ШГК ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ДОЗАХ ВОЗБУЖДЕНИЯ		219
П.2.1.	Результаты измерений	220
П.2.2.	Обсуждение результатов	229

Приложение 3. ФРАКЦИОННАЯ ТУННЕЛЬНАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ И
КОНФИГУРАЦИОННЫЙ ФАКТОР РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ..233

П.3.1. Исходное уравнение на базе частотных характе-
ристик ТЛ233

П.3.2. Построение представления КФ по частотным харак-
теристикам ТЛ236

П.3.3. Точность $K(r, r')$ -представлений КФ типа частотных
характеристик и их проверка "на себя"240

Приложение 4. МЕТОД ФРАКЦИОННОЙ ТУННЕЛЬНОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ
В КВАЗИСТАЦИОНАРНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ244

В В Е Д Е Н И Е

В настоящее время ионные, в том числе, щелочногалоидные кристаллы (ЩГК) с успехом применяются в качестве активных сред сцинтилляторов, дизиметров, оптических запоминающих устройств, перестраиваемых лазеров и др. Ядерная энергетика, космическая техника, микро- и оптоэлектроника и другие современные отрасли народного хозяйства нуждаются в материалах с очень специфическими физическими свойствами. Практика показала, что успешное развитие упомянутых выше отраслей промышленности требует нахождения необходимых предпосылок для создания как легко окрашиваемых, так и устойчивых против радиационного воздействия материалов. Хорошо известно, что даже малые концентрации ($n > 10^{-6}$ мол.%) структурных дефектов или примеси существенно влияют на физические характеристики ЩГК. В этой связи облучение кристаллов ионизирующим излучением является одним из наиболее эффективных средств "подгонки" физических характеристик ЩГК без изменения их химического состава. Поэтому с прикладной точки зрения исследование сложных процессов генерации и распада электронных возбуждений, приводящих к созданию структурных дефектов кристаллической решетки, является центральной задачей радиационной физики. Решение этой задачи сводится, в частности, к подробному изучению пространственного распределения (ПР) и электронной структуры радиационных дефектов, а также к исследованию неравновесных релаксационных процессов, в том числе, туннельной рекомбинации (ТР) радиационных дефектов.

Установлено, что значительная доля радиационных дефектов спонтанно распадается за время $\sim 10^{-9}-10^5$ и более секунд [1,2]. Накопление и отжиг радиационных дефектов обусловлены

множеством вторичных реакций [1-4]. При низких температурах, где продукты радиолиза "заморожены", вторичные реакции, нуждающиеся в тепловой активации, малоэффективны. Поэтому целый ряд реакций, проходящих при непосредственном сближении двух дефектов, можно не принимать во внимание. В таком случае особую роль играют туннельные реакции, связанные с спонтанным переносом электрона между двумя пространственно разделенными дефектами. Эффективность электронного туннельного перехода определяется квантовомеханической природой взаимодействующих дефектов и расстоянием между ними. Отметим, что понятие "электронный туннельный переход" не ограничивается представлением о прохождении электрона сквозь энергетический барьер, где конечное состояние имеет непрерывный энергетический спектр. В более широком смысле слова под термином "электронный туннельный переход" подразумевается переход квантовомеханической системы (напр., пара дефектов в кристалле) между двумя стационарными состояниями, где возможные промежуточные состояния системы являются недоступными в рамках классической механики (электрон имеет мнимый квазиимпульс). При этом рассматриваемые начальное и конечное состояния могут различаться не только координатами туннелирующего электрона, но и другими характеризующими их параметрами, в том числе, энергией начального и конечного состояний системы. Таким образом, наряду с упругим (изоэнергетическим) туннелированием электрона, могут осуществляться и неупругие туннельные переходы электрона, сопровождаемые испусканием или поглощением соответственно фонона или фотона. Спектроскопические исследования показывают [5-8], что в ШГК наблюдаются как упругие, так и неупругие туннельные переходы электрона с электронного центра на ближайший дырочный центр. Явления автолокализации квазичастиц и присутствие гомологической

и чужеродной примеси обеспечивает сильную пространственную корреляцию радиационных дефектов, вплоть до того, что образуются изолированные генетические пары (ИГП) электронно-дырочных центров. Из-за близкого расположения электронных и дырочных центров их ТР протекает достаточно эффективно. Это позволяет экспериментально наблюдать туннельно-рекомбинационные процессы в виде туннельной люминесценции (ТЛ), если в результате упругого туннелирования создаются либо возбужденные состояния центров свечения, либо соответствующие электронные туннельные переходы являются излучательными, или же в виде низкотемпературного обесцвечивания образца, если туннельные переходы являются безызлучательными.

Исключительную важность ТР приобретает в области низких температур, где термоактивационные процессы заморожены и именно ТР лимитирует предельно достижимые концентрации стабильных радиационных дефектов [3]. Следовательно, процессы ТР в значительной мере определяют радиационную стойкость матрицы. Эффективность низкотемпературного отжига радиационных дефектов зависит от их начальной концентрации. Сравнение светосумм термостимулированной люминесценции (ТСЛ) непосредственно после возбуждения и после выдерживания образца от нескольких секунд до часов при минимальной температуре (4,2 К или 77 К) позволяет оценить, что при $n \cdot \text{см}^3 \approx 10^{17} - 10^{18}$ в рассматриваемом промежутке времени в ТР участвуют несколько или около десяти процентов из первоначально присутствующих дефектов. Таким образом, при небольших дозах ($D < 1$ Мрад) возбуждения уменьшение концентрации радиационных дефектов из-за ТР нередко составляет $10^{14} - 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Поэтому следить за процессами низкотемпературного отжига радиационных дефектов вследствие их ТР путем измерения оптического поглощения затруднительно, ибо наблюдае-

мне изменения оптической плотности в соответствующих полосах поглощения составляют десятые доли или несколько процентов в зависимости от начальной концентрации туннельно-рекомбинирующих дефектов. В то же время, наличие уже 10^{15} - 10^{16} см⁻³ и больше соответствующих дефектов (напр., TI^0 - и $-$ центров в $KCl-Tl$) обеспечивает достаточно интенсивное и длительное (даже до нескольких часов) послесвечение ТЛ, когда все надбарьерные процессы переноса электронов (дырок) заморожены.

Так как кинетика затухания ТЛ определяется вероятностью электронного туннельного перехода и ПР туннельно-рекомбинируются дефектов, то решение т.н. обратной задачи позволяет в случае ИПП реставрировать начальное ПР радиационных дефектов и оценить разлет комплементарных дефектов, образующихся при распаде одного электронного возбуждения. Вышеизложенные аспекты показывают в основных чертах значимость и ту немаловажную роль, которую играет излучательная ТР в радиационной физике ЩГК.

Электронная и конфигурационная структура различных электронных и дырочных центров в ЩГК изучена значительно лучше, чем в других ионных кристаллах. В этой связи ЩГК давно стали "испытательным полигоном" новейших физических идей. По этой же причине с теоретической точки зрения матрица ЩГК является особенно выгодной для изучения закономерностей излучательной ТР радиационных дефектов. При этом наиболее общие выводы экспериментальных и теоретических исследований, проведенных на ЩГК, распространяемы также на широкий класс самых различных веществ как, например, галогениды и окислы щелочно-земельных металлов, стекла, щелочные льды, содалиты и др., имеющие большое прикладное значение. Как отмечено выше, с прикладной точки зрения ЩГК также являются конкурентно-способными материалами в

оптических запоминающих устройствах [9,10], дозиметрах ядерного излучения [9] и сцинтилляторах различного назначения. Систематические экспериментальные и теоретические исследования рекомбинационных явлений в ЩГК проводятся научными коллективами в Тарту, Ленинграде, Львове, Харькове, Томске, Иркутске, Москве и Риге. Спектроскопия и кинетика излучательных рекомбинационных процессов изучены в работах Алукера, Антонова-Романовского, Воробьева, Галанина, Завта, Калныньша, Кинк, Кристофеля, Лийдя, Лисицина, Лущик Н.Е., Лущик Ч.Б., Михальченко, Мурадова, Плявинь, Ребане, Толпыго, Толстого, Шварца, Эварестова, Яэка и др. Настоящая работа является естественным продолжением исследований ТР радиационных дефектов, проводимых в НИИ ФТТ Латвийского госуниверситета Боганом, Валбисом, Витолом, Гайлитисом, Грабовским, Зирапом, Котоминим, Миллерсом, Тале и др.

Цель настоящей работы представляет собой экспериментальные и теоретические исследования спектрально-кинетических свойств излучательной ТР радиационных дефектов в ЩГК, а также установление возможностей использования кинетики ТЛ для определения ПР радиационных дефектов. К началу наших исследований была обнаружена и весьма подробно изучена ТЛ только некоторых ЩГК (напр., KCl , KBr , $NaCl$). В этой связи имеющийся материал о спектрах ТЛ ЩГК носил фрагментарный характер, что затрудняло надежно установить более общие закономерности механизма ТР радиационных дефектов. Для более полной систематизации спектров ТЛ ЩГК, по крайней мере, предстояло провести исследования, восполняющие гомологические ряды Na и K . Почти отсутствовали экспериментальные данные о зависимости интенсивности ТЛ от температуры и дозы возбуждения для большинства ЩГК. В свою очередь, некоторые новейшие экспериментальные резуль-

таты по кинетике ТЛ при различных дозах возбуждения не укладывались в рамки существующей теории. Упомянутые выше "проблемы" в спектроскопии ТЛ, а также в области кинетики ТР определяли задачи настоящей работы, которые заключаются в следующем.

1. Исследование спектров и кинетики ТЛ чистых и активированных ШГК. Сопоставление спектральных полос ТЛ с процессами ТР в парах определенных радиационных дефектов. Выяснение закономерностей ТЛ при рентгеновском возбуждении в температурной области от 77 К до 300 К.

2. Решение прямой задачи: кинетика ТР при учете генерации дефектов-партнеров. Описание процесса генерации туннельных пар в стационарном и квазистационарном приближениях. Применение одноимпульсного и амплитудно-модулированного возбуждения (ОИВ и АМВ). Кинетика фракционной ТЛ.

3. Развитие полуэмпирического подхода к анализу кривых затухания ТЛ. Теоретическое и экспериментальное изучение интенсивности ТЛ в зависимости от дозы возбуждения. Влияние мощности дозы на кинетику ТЛ.

4. Выяснение экспериментальных возможностей установления модели ПР туннельно-рекомбинирующих дефектов. Критерии выбора математической модели ПР. Влияние статистических изолированных туннельных пар на дозовые характеристики ТЛ.

5. Решение обратной задачи: реставрация ПР туннельно-рекомбинирующих дефектов по кинетике ТЛ. Развитие метода подобия ядра уравнения Фредгольма I-го рода и дельта-функции.

Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения и четырех приложений; содержит 246 страниц, в том числе 38 рисунков, 2 таблицы и список литературы из 205 наименований. С целью повышения компактности излагаемого материала методика физического эксперимента дана непосредственно перед рассмотрением экспериментальных результатов.

В главе I дается краткий исторический обзор развития идей о квантовомеханическом туннелировании электрона в твердом теле. Изложены некоторые особенности туннельно-рекомбинационного процесса применительно к ЩГК. В главе 2 приводится критический обзор литературных данных по спектроскопии ТЛ чистых и активированных ЩГК. Обсуждены некоторые результаты оригинальных исследований КГ и $NaBr$, восполняющих представления об излучательной ТР в чистых ЩГК. Глава 3 посвящена исследованиям спектрально-кинетических свойств ТЛ активированных Тl и Ag ЩГК. Глава 4 - в ней развиты теоретические представления о математических моделях ПР радиационных дефектов. Рассмотрена кинетика ТР в рамках модели ИГП при учете особенностей возбуждения конечной длительности. В главе 5 предложен полуэмпирический подход к рассмотрению дозовых характеристик ТЛ в случаях ИГП и смешанных генетических пар (СП). Приведены экспериментальные результаты по исследованию дозовых характеристик активированных Тl и Ag ЩГК. В главе 6 развит новый метод реставрации ПР радиационных дефектов. Показаны особые свойства временно-пространственной избирательности фракционной ТЛ. В заключении приведены основные результаты работы.

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 16 работах (7, 43, 62, 79, 102, 104, 105, 132, 134, 143, 155, 171, 172, 188, 191, 200); 11 из них написаны в соавторстве. В этих коллективных работах автору принадлежат результаты и выводы, изложенные в настоящей работе. Материалы диссертационной работы доложены на международной конференции по люминесценции в Ленинграде (1972 г.), на Всесоюзных Совещаниях по люминесценции (Ставрополь, 1973 г., Эзерниеки, Латв.ССР, 1980 г.), на Всесоюзном совещании по радиационной физике и химии ионных кристаллов (Рига, 1978 г.), на Прибалтийских семинарах по физике ионных кристаллов (1974-1980 гг.), на ежегодных научных конференциях Латвийского госуниверситета (Рига, 1972-1980 гг.).

Глава I. РОЛЬ ЭЛЕКТРОННОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ В РЕКОМБИНАЦИОННЫХ ПРОЦЕССАХ

Взаимодействие ионизирующего излучения с твердыми кристаллическими телами, в частности, ЩГК приводит к образованию структурных дефектов кристаллической решетки. Рентгеном и Иоффе впервые было показано (1921 г.), что F-центры в NaCl эффективно создаются при облучении кристаллов мягкими X-лучами. С современной точки зрения можно сказать, что в процессах радиационного окрашивания ЩГК особую роль играют, так называемые, подпороговые механизмы создания радиационных дефектов [1,2]. Так, в чистых и активированных ЩГК безызлучательный распад электронных возбуждений обуславливает возникновение пар френкелевских дефектов. Захват на структурных дефектах подвижных продуктов радиолиза, автолокализация дырок, а также перезарядка во время облучения присутствующих в кристалле дефектов приводят к образованию электронных центров типа F , F' , $T1^0$, Ag^0 , ... и дырочных центров типа H , V_k , V_{ka} , $T1^{2+}$, Ag^{2+} , ... [1,2]. Следовательно, значительная доля поглощенной кристаллом энергии ионизирующего излучения запасается в виде целого ряда радиационных дефектов. Оказывается, что квантовомеханическая система "пространственно разделенные дефекты в кристаллической матрице" даже в условиях, когда всякий термоактивационный процесс делокализации или ионизации дефектов заморожен, находится в квазистационарном состоянии. Переход рассматриваемой системы из чисто стационарного на квазистационарное состояние обеспечивается туннельным переносом электрона между пространственно разделенными электронными и дырочными центрами.

Предположение о возможности найти электрон внутри энергетического барьера, разделяющего электронный и дырочный центры,

противоречит классическим представлениям движения частиц и носит сугубо квантовомеханический характер. Прохождение электроном потенциального барьера в самых общих чертах объясняется соотношением неопределенностей Гейзенберга (см. напр., [11]). Прежде чем перейти к непосредственному изложению материала о туннельной рекомбинации (ТР) радиационных дефектов в ионных кристаллах, отметим некоторые основополагающие работы в области туннельных явлений.

Представление о переносе электрона сквозь энергетический барьер путем его туннелирования возникло еще на заре развития квантовой механики. При воздействии сильного электрического поля на металлы Лилиенфельдом [12] в 1922 г. была обнаружена холодная электронная эмиссия, которая сравнительно долгое время не нашла удовлетворительного теоретического толкования. Лишь в 1928 г. физиками-теоретиками было высказано предположение, что туннелирование электрона происходит при понижении или утончении потенциального барьера под действием сильного внешнего электрического поля. Опенгеймер показал [13], что кулоновская потенциальная яма, ограничивающая движение атомного электрона, может быть искажена достаточно сильным электрическим полем таким образом, что произойдет ионизация атома. Развивая идеи об электронном туннелировании, Фаулеру и Нордгейму [14] удалось наконец выяснить общие черты холодной электронной эмиссии, обнаруженной Лилиенфельдом. Вслед за этими работами туннельный перенос частиц успешно применялся при рассмотрении α -распада атомных ядер [15, 16]. Кроме вышеупомянутых к основополагающим работам следует отнести также статью Френкеля [17] (1930 г.), в которой рассматривается аномальная температурная зависимость сопротивления контакта двух металлов, разделенных пустым зазором.

Применение представления о туннельном переносе электрона между пространственно разделенными точечными дефектами в твердых матрицах началось сравнительно позднее - в начале 50-х гг. В соединениях типа $AII-BVI$ и $AIII-BV$, а также в элементарных полупроводниках были обнаружены люминесцентные явления, связанные с рекомбинацией локализованных на дефектах электронов и дырок, которые не укладывались в рамки моделей Шена-Класенса [18] и Ламбе-Клика [19] (рис. I.1). Речь идет о люминесценции донорно-акцепторных пар (ДАП) в ZnS [20-22], CdS [23-25], GaP [26-31], $GaAs$ [32], Ge [33, 34], SiC [35] и др., являющейся следствием туннельно-рекомбинационного процесса, в котором не участвуют промежуточные зонные состояния электронов и дырок. Так как в этом случае согласно модели Вильямса-Пренера [20, 36] (рис. I.1) рекомбинационный процесс не связан с предварительной ионизацией ни донора, ни акцептора, то люминесценция ДАП практически не зависит от температуры (рис. I.2).

На возможность осуществления туннельного переноса электрона между пространственно разделенными электронными и дырочными центрами в ШГК впервые обратили внимание Гормли и Леви [37], а также Декстер [38, 39] при рассмотрении процессов генерации и накопления радиационных дефектов и возникновения рекомбинационной люминесценции. Электронное туннелирование упомянуто также Каблером [40] при исследовании рентгеновской и рекомбинационной люминесценции в чистых ШГК. Дальнейшие исследования рекомбинационной люминесценции в области низких температур, где термоактивационные процессы в основном заморожены, убедительно доказывают (см. работы Делбека [5, 41, 42], Богана и Витола [44, 45], Яэка [46, 47] и др. [48, 49]), что рекомбинация близкорасположенных локализованных на собственных или примесных дефектах электронов и дырок во многих случаях осуществляется электрон-

C-ЗОНА

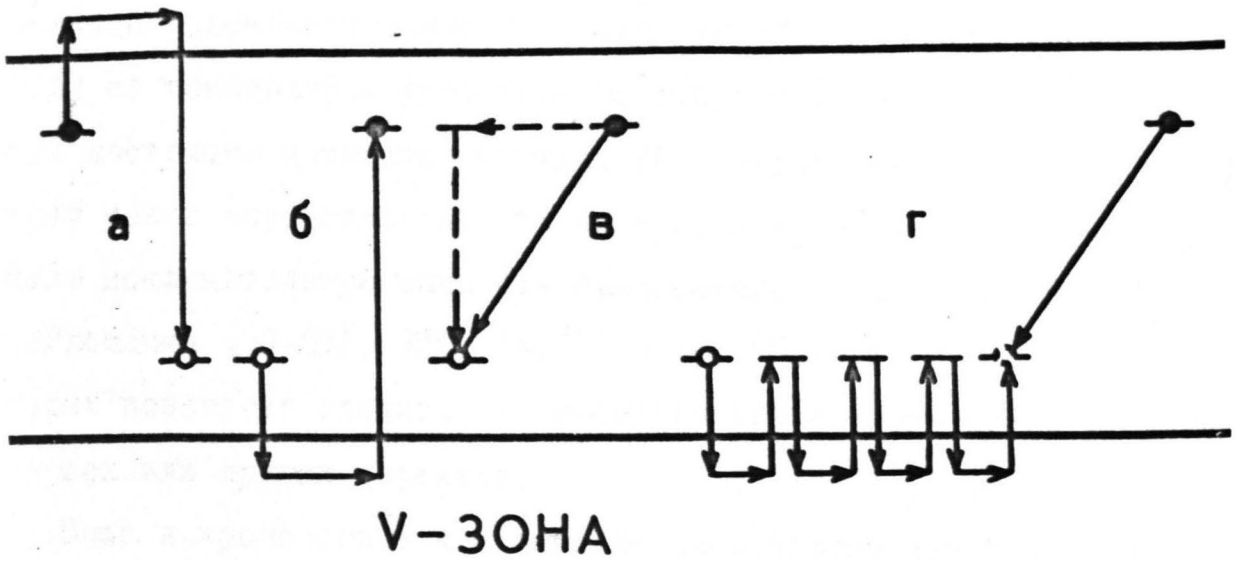


Рис. I. I. Механизмы рекомбинационной люминесценции в представлении данной схемы:

- а) модель Щена-Классенса [18];
- б) модель Ламбе-Клика [19];
- в) модель Вильямса-Пренера [20];
- г) дырочная рекомбинационная люминесценция в ЩГК.

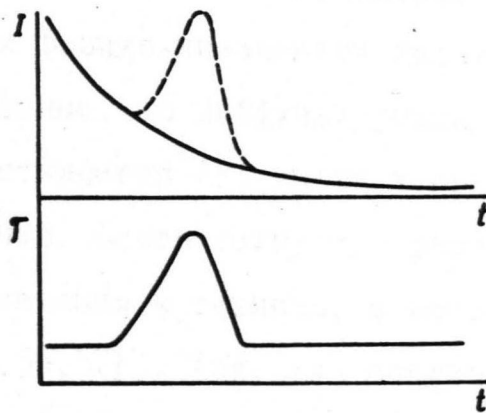


Рис. I. 2. Схема проверки рекомбинационного свечения на "туннельность": кинетика ТЛ не реагирует на импульсный нагрев образца.

ным туннелированием. Относительная независимость сопровождающей эти рекомбинационные процессы туннельной люминесценции (ТЛ) от температуры указывает на отсутствие промежуточных зонных состояний носителей заряда. ТР электронных и дырочных центров может осуществляться также и безызлучательно. В этих случаях исключительную важность приобретают методы оптического поглощения [50-53], ЭПР [54, 55] и др. [56-59], применение которых позволяет следить за кинетикой низкотемпературного отжига тех или других дефектов.

Выше в хронологическом порядке рассмотрены основные этапы развития и распространения на область рекомбинационных явлений идей электронного туннелирования в твердых матрицах. Следует добавить, что туннельный перенос электрона на большие расстояния играет немаловажную роль в химических реакциях и рекомбинационных процессах, протекающих в стеклах, жидкостях и даже в газах [56, 57]. В зависимости от вещества, от его агрегатного состояния и других физико-химических характеристик локализованные или же захваченные, но диффундирующие электрон и дырка, между которыми осуществляется ТР, имеют в конкретных случаях самое различное проявление. Соответствующую разновидность имеют также определения, обозначения и термины, в которых описывается ТР (см. например, [36, 56, 57]). Так, для соединений типа АII-VUI и АШВУ, а также для элементарных полупроводников общепринятыми являются термины "ДАП", "люминесценция ДАП" и т.д. При этом роль доноров (Д) и акцепторов (А) играют различные примесные атомы: напр., в ZnS , CdS $D = \{Cl, Br, I, Ga, In\}$ и $A = \{Cu, Ag, Au, P, As\}$ [20] в GaP $D = \{O, S, Se, Te\}$ и $A = \{Cd, Be, Zn, Mg\}$ [26]. В стеклах, неорганических и органических жидкостях донором является захваченный e_{tr}^- , сольватированный e_{aq}^- или гидратированный e_s^- электроны, которые представляют собой некие молекуляр-

ние образования, конфигурационная и электронная структуры которых часто неизвестны. В качестве акцепторов выступают различные молекулы, анионы, катионы, ион-радикалы и комплексы переходных металлов [57]. ТР в этих системах часто осуществляется безызлучательно.

В литературе по ЩГК термины "донор" и "акцептор" не употребляются, ибо ТР осуществляется между радиационными дефектами, как собственными, так и обусловленными присутствием примеси. Они представляют собой электронные и дырочные центры. В настоящее время обстоятельный обзор о ТР в ЩГК отсутствует, поэтому можно сказать, что создание единой терминологии для описания процессов ТР в ЩГК не закончено. В этой связи мы сопоставили термины, встречающиеся в литературе по ЩГК и относящиеся к ТР, с соответствующими по физическому смыслу терминами на общепринятом языке ДАП (табл. I. I). При абстрактном рассмотрении процессов ТР в настоящей работе мы будем придерживаться терминов "строчки № 7", а в случае анализа ТР в конкретных парах электронных и дырочных центров - "строчки № 4" (табл. I. I).

Термоактивационные рекомбинационные процессы в ЩГК с точки зрения экспериментального исследования ТЛ имеют одну практически важную особенность по сравнению с такими полупроводниковыми соединениями, как, напр., ZnS , CdS , GaP , $GaAs$ и др. Рассматриваемые в дальнейшем кристаллофосфоры являются широкощелевыми материалами (6-11 эВ [65]), в которых электронные и дырочные центры представляют собой в запрещенной зоне сравнительно глубокие локальные уровни ($E_{(-)}$, $E_{(+)}$) $\approx 0,2-2,5$ эВ [66-68]). Эффективность термической ионизации таких уровней захвата резко падает при охлаждении кристалла ниже некоторой температуры T_d , которая в ряде случаев является весьма высокой ($T_d > 100$ К). Таким образом, путем достаточного охлаждения образца можно вы-

Таблица № I. I

Терминология, употребляемая для описания ТР в ШГК

№ п. п.	Донор (Д)	Акцептор (А)	Донорно-акцепторная пара (ДАП)	Люминесценция ДАП	Лигатура
1.	Дефект	дефект	пара дефектов	ТЛ	[61]
2.	Электронный дефект	дырочный дефект	пара электронно-дырочных дефектов	ТЛ	[60]
3.	Донорный дефект	акцепторный дефект	пара донорно-акцепторных дефектов	ТЛ	[60]
4.	Электронный центр	дырочный центр	пара электронно-дырочных центров	ТЛ	[61, 62]
5.	Донорный центр	акцепторный центр	пара донорно-акцепторных центров	ТЛ	[63]
6.	Электронная компонента туннелирующей пары	дырочная компонента туннелирующей пары	туннелирующая пара	ТЛ	[60, 63] [64]
7.	Электронная компонента туннельной пары	дырочная компонента туннельной пары	туннельная пара	ТЛ излучательная ТР	[7]

делить ТЛ из суммарной люминесценции, порождаемой также и зонными рекомбинационными процессами. Температурная независимость ТЛ в ШГК долгое время считалась неким неизблемым признаком "туннельности" рекомбинационного процесса. Витолом недавно на примере смешанных кристаллов $NaCl-NaBr$ было показано [69], что в температурной области 4,2-35 К наряду с температурно независимыми процессами ТР наблюдается полоса излучения при 4,15 эВ, также порождаемая ТР, но имеющая энергию активации 11 ± 5 мэВ. Следовательно, к температурной независимости послесвечения как к признаку излучательной ТР следует отнести с

некоторой осторожностью. Однако, и в настоящее время температурная независимость послесвечения является главным и решающим критерием туннельного характера рекомбинационного процесса не только в ШГК и в других кристаллических матрицах, но и в различных неупорядоченных системах [56,57].

Глава 2. СПЕКТРОСКОПИЯ ТУННЕЛЬНОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ЧИСТЫХ И АКТИВИРОВАННЫХ ЦГК

2.1. Общие замечания по исследованию спектров туннельной люминесценции

Спектры ТЛ измеряются при минимальной температуре $T_{\text{мин.}}$, достигаемой в данном эксперименте, поэтому чаще всего встречаются спектры ТЛ, измеренные при температурах жидкого азота или жидкого гелия в зависимости от применяемого хладагента [70-76]. Для более детального изучения спектров ТЛ применяются самые различные температуры возбуждения $T_{\text{В}}$ ТЛ ($T_{\text{В}} \geq T_{\text{мин.}}$), а также разнообразные режимы нагрева и охлаждения образца после прекращения возбуждения. С одной стороны, вероятность ТР и спектры ТЛ существенно определяются такими факторами как электронно-фонное, кулоновское, конфигурационное взаимодействие и корреляционные эффекты электронной подсистемы туннельной пары [36, 59]. С другой стороны, то же взаимодействие, обеспечивающее эффективную ТР близкорасположенных радиационных дефектов, настолько слабое, что практически не изменяется их термическая стабильность и спектры оптического поглощения по сравнению с изолированными дефектами. Это свойство используется при установлении взаимосоответствия наблюдаемых полос ТЛ с конкретными парами дефектов. Тут же следует оговорить случаи очень больших концентраций ($n > 10^{19} - 10^{20} \text{ см}^{-3}$), когда резко возрастает эффективность образования парных центров [77] и других ассоциатов, в которых дефекты со сравнимо большей вероятностью расположены на ближайших координационных сферах [78], нежели это обуславливают термодинамически равновесные концентрации ассоциатов.

В поисках электронной компоненты туннельных пар эффективными оказались оптические подсветки в полосах поглощения элек-

тронных центров [45, 46, 79]. Описывая в самых общих чертах всевозможные комбинации воздействий оптической подсветки на предварительно возбужденные кристаллы, мы впредь будем пользоваться понятием "фото- или оптическая обработка образца". Изучение оптического разрушения или создания новых дырочных центров и влияния этих процессов на ТЛ затруднено из-за резкой несимметричности движения зонных электронов и дырок в ионных кристаллах [65, 66, 79, 80]. Даже небольшое наложение "крыла" электронной полосы на дырочную полосу поглощения не позволяет селективно детектировать дырочные рекомбинационные процессы из-за малой, по сравнению с электронами, подвижности зонных дырок. При низких температурах ($T < T_d$) определяющую роль играет автолокализация дырок. На практике дырочная компонента туннельных пар чаще всего устанавливается с помощью термической обработки исследуемых образцов [7, 44, 45, 79, 81].

В настоящее время излучательная ТР убедительно доказана лишь в тех случаях, когда дырочной компонентой туннельной пары является заряженный относительно решетки дырочный центр. Особую роль при этом играют V_k -центры. Благодаря аксиальной симметрии V_k -центра (D_{2h}) вероятность электронных туннельных переходов вдоль V_k -оси $w_{||}$ значительно превышает вероятность туннелирования электрона перпендикулярно V_k -оси w_{\perp} ($w_{||} \gg w_{\perp}$) [41, 43, 81]. По этой причине наблюдаемая ТЛ обусловлена преимущественно электронными туннельными переходами вдоль V_k -оси. В дипольном приближении порождаемый при этом фотон также является поляризованным вдоль V_k -оси. Если V_k -центры предварительно ориентированы преимущественно по какому-то направлению $\langle 110 \rangle$, то и ТЛ будет частично поляризована в этом же направлении. Сказанное относится также к другим дырочным центрам, волновая функция которых в основном состоянии отличается от сферически сим-

метричной. Таким образом, поляризационные измерения позволяют определить не только дырочную компоненту туннельной пары, но и уточнить особенности микромеханизма излучательной ТР.

Ниже мы рассмотрим более подробно спектры ТЛ чистых KCl , KBr , $NaCl$, KI , $NaBr$ и NaI , а также активированных Tl и Ag кристаллов KCl .

2.2. Спектры туннельной люминесценции чистых ЩГК

2.2.1. Спектры ТЛ монокристаллов KCl

Длительное температурно независящее послесвечение чистых кристаллов KCl исследовано в ряде работ [6,44,45,60,70-72,74]. Спектры ТЛ, измеренные при 4,2 К и 77 К, имеют две полосы излучения с максимумами при 2,4 эВ и 3,9 эВ (рис.2.1 и 2.2). Точное установление положения максимумов полос затруднено реабсорбцией излучения F -центрами в случае длинноволновой полосы и перекрыванием полос в случае коротковолновой полосы. Видимо, по этой причине данные о максимумах полос у разных авторов различны и колеблются в пределах 2,40-2,65 эВ для длинноволновой и 3,5-3,90 эВ для коротковолновой полос [44,60]. В области 4,2-100 К уменьшение T_B приводит к сильному возрастанию интенсивности ТЛ, но контур спектра ТЛ практически не изменяется. Исследования эффективности аккумуляции ТЛ в зависимости от T_B (ЭАТЛ (T_B)), спектров ТЛ после воздействия подсветки в F' - и F -полосах поглощения [44,45,60,70], а также поляризационные измерения [72] показали, что полоса при 2,4 эВ обусловлена ТР в парах $\{F-V_k\}$, а полоса при 3,9 эВ - в парах $\{F'-V_k\}$. В настоящее время убедительно доказано, что ТЛ пар $\{F-V_k\}$ не является ни α -люминесценцией, как это предполагалось ранее [44], ни излучением триплетного автолокализованного экситона (АЛЭ)

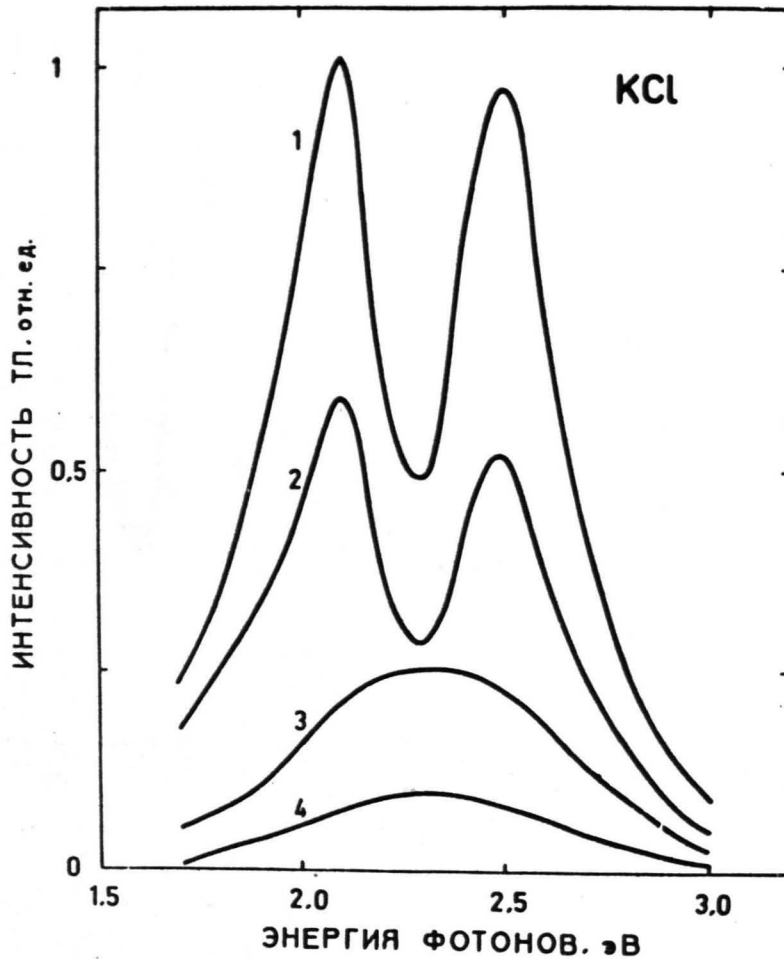


Рис.2.1. Зависимость спектра ТЛ КСІ от дозы облучения. Температура возбуждения образца и температура измерений - 4,2 К; время возбуждения образца - 1200 с (кривая 1), 300 с (кривая 2), 60 с (кривая 3), 10 с (кривая 4) [74].

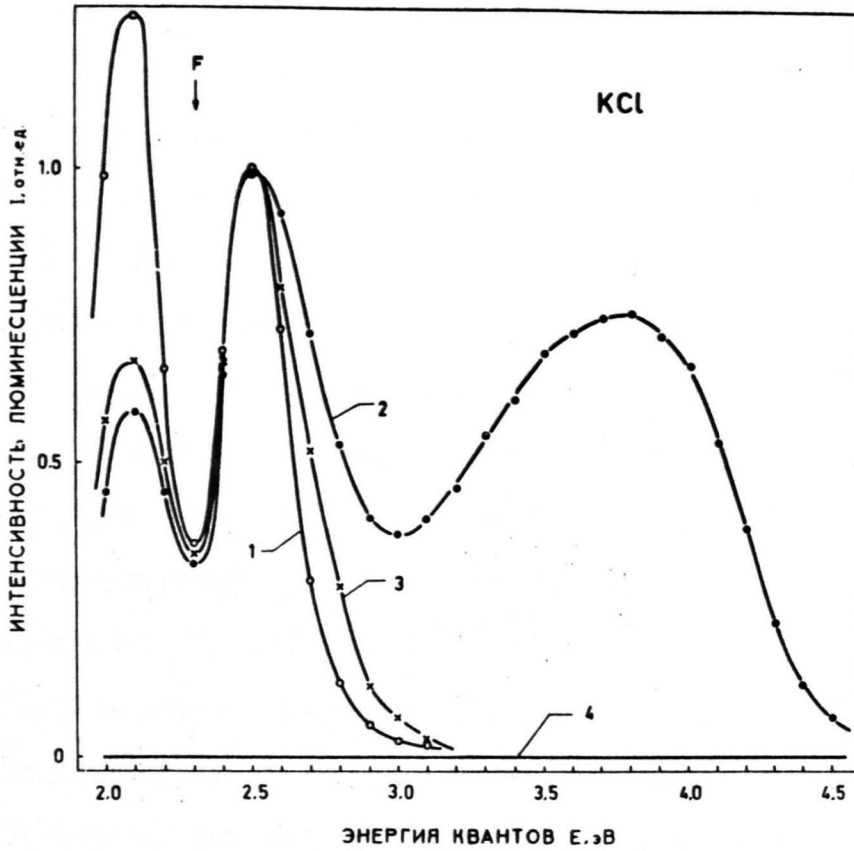


Рис.2.2. 1 - спектр рентгенолюминесценции KCl при температуре 4,2 К. 2 - спектр ТЛ, созданной облучением рентгеновскими лучами и измеренной при температуре 4,2 К; 3 - спектр ТЛ после дополнительного освещения образца светом в полосе поглощения F' -центров, 4 - после последующего освещения в полосе поглощения F -центров [60].

(состояние ${}^3\Sigma_u^+$) [72]. В КВ⁺ и КГ ТЛ пар {F-V_к} также была интерпретирована как α-люминесценция [44, 45, 64, 70], поэтому коротко рассмотрим на примере КСГ основные причины, послужившие доводом такого представления о излучательной ТР в паре {F-V_к}.

При анализе кинетики дырочной рекомбинационной люминесценции (ДРЛ), возникающей из-за термической делокализации V_к-центров в КСГ (T > T_d ≈ 208 К), было установлено, что завершающий акт рекомбинации дырок с F-центрами происходит путем ТР [45, 70]. Это обусловлено малой подвижностью дырок, которые перемещаются по кристаллу в виде прыжковой диффузии [83-85]. В результате даже при T > T_d дырка большую часть времени проводит в автолокализованном состоянии (V_к-центр). При столь медленном движении ($\mu_{V_k} \sim 10^{-11} - 10^{-6} \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ сек}^{-1}$ при 250-600 К для КСГ [70]) дырка не успевает подойти к F-центру на расстояние, представляющее сумму газокинетических радиусов F-центра и подвижной дырки, так как дальнейшее ее перемещение опережается туннельным переносом F-электрона на V_к-центр. Рассмотренный выше механизм ДРЛ характерен для матриц, в которых осуществляется автолокализация дырок (рис. I.I). Из сказанного следует, что ТСЛ, возникающую при термической делокализации V_к-центров, нельзя описывать в рамках классической модели Ламбе-Клика [19] (рис. I.I). В этой связи рассматриваемый рекомбинационный процесс не обуславливает создание локализованного рядом (на ближайшей координационной сфере) с анионной вакансией экситона, аннигиляция которого сопровождается так называемой α-флуоресценцией [86-89]. Хотя и осознали особенности механизма ДРЛ в ШГК по сравнению с моделью Ламбе-Клика, излучение, порождаемое рекомбинацией подвижных дырок с F-центрами, приобрело название рекомбинационной α-люминесценции, подчеркивая этим бли-

зость или даже тождественность элементарных излучателей α -флуоресценции, возникающей при непосредственном оптическом возбуждении в α -полосе поглощения, и ДРЛ в случае F-центров. Первоначальные исследования ТЛ чистых кристаллов KCl, KBr и KI [37, 44, 70, 71] показали, что длинноволновая полоса спектров ТЛ при 77 К в пределах экспериментальной ошибки совпадает с рекомбинационной α -люминесценцией (ДРЛ в случае F-центров). Реабсорбция излучения F-центрами "сдвинула" максимум полосы ТЛ пар {F-V_k} в коротковолновую сторону, что тоже способствовало отождествлению ТЛ пар {F-V_k} с α -люминесценцией. Отметим, что с учетом реабсорбции F-центров расхождение расположения максимумов полос ТЛ пар {F-V_k} и α -флуоресценции составляет около 0,3-0,4 эВ. Окончательно приходим к выводу, что рекомбинационная α -люминесценция не что другое как ТЛ пар {F-V_k}, откуда и элементарные излучатели рекомбинационной α -люминесценции и α -флуоресценции не тождественны.

Нет основания отрицать возможность создания состояния $^3\Sigma_u^+$ триплетного АЛЭ в процессе ТР мелких электронных центров (типа F') с V_k-центрами. Аннигиляция триплетного АЛЭ сопровождается излучением (максимум полосы при 2,3 эВ [40, 73]), которое при 4,2 К термически не потушено и спектрально очень мало отличается от ТЛ пар {F-V_k}. Более убедительный ответ о присутствии излучения триплетного АЛЭ в длинноволновой полосе ТЛ KCl при 4,2 К может дать тщательное изучение температурной зависимости интенсивности и поляризационных свойств ТЛ в области 4,2-30 К.

Спектр ТЛ, возможно, содержит, кроме отмеченных, еще одну дополнительную сильно перекрывающуюся полосу с максимумом около 3 эВ (рис. 2.2). Однако, более точное выделение и изучение этой полосы не проведены. Природа радиационных дефектов, ТР

между которыми обуславливает данную полосу, также пока не установлена.

2.2.2. Спектры ТЛ монокристаллов KBr

После рентгеновского возбуждения спектр ТЛ, измеренный при 4,2 К, состоит из нескольких значительно перекрывающихся полос с максимумами при 2,2 эВ, 3,0 эВ, 3,6 эВ, и 4,45 эВ (рис.2.3) [60]. Точное определение контура отдельных спектральных полос весьма сложное, поэтому расположения их максимумов и особенно при 3,0 эВ и 3,6 эВ не следует воспринимать как окончательное [6,44,70]. На контур длинноволновой полосы при 2,2 эВ влияет также реабсорбция ТЛ F-центрами. Понижение T_B от 77 К до 4,2 К сопровождается значительным возрастанием интенсивности ТЛ во всех спектральных полосах. Путем измерения спектров ТЛ после термической или оптической обработки кристаллов KBr установлено, что длинноволновая полоса при 2,2 эВ обусловлена ТР в парах $\{F-V_k\}$ [44,60]. Поляризационные измерения ТЛ пар $\{F-V_k\}$ при 77 К и выше [72] показали, что элементарный излучатель в этом случае не может быть идентифицирован триплетным состоянием $^3\Sigma_u^+$ АЛЭ. Об этом свидетельствует также температурная независимость излучения при 2,2 эВ в области 50-100 К [60], где излучение триплетного АЛЭ (максимум полосы 2,28 эВ [40,73]) почти полностью потушено. В спектре ТЛ при 4,2 К, однако, не исключены некоторые "добавки" излучения триплетного АЛЭ, с помощью которых можно объяснить увеличение ($\sim 44\%$ [60]) интенсивности ТЛ в полосе при 2,2 эВ, когда образец охлаждался от 50 К до 4,2 К. Учитывая погрешность измерения контура полос ТЛ можно сказать, что ТЛ пар $\{F-V_k\}$ и излучение триплетного АЛЭ спектрально почти неразличимы. На возможность создания $^3\Sigma_u^+$ -состояния АЛЭ путем ТР косвенно указывает присутствие в спектре ТЛ излучения

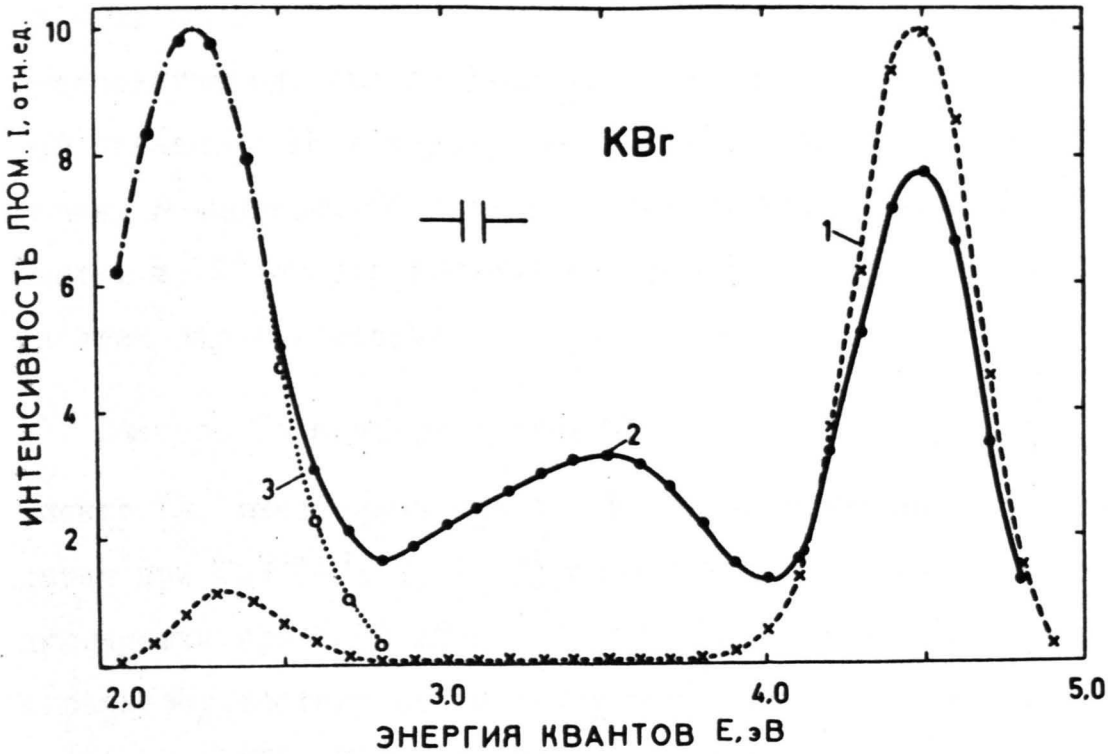


Рис.2.3. 1 - спектр рентгенолюминесценции KBr при температуре 4,2 К. 2 - спектр ТЛ, созданной облучением рентгеновскими лучами и измеренной при температуре 4,2 К, 3 - спектр ТЛ после дополнительного освещения образца светом в полосе поглощения F -центров [60].

синглетного АЛЭ при 4,45 эВ, которое обусловлено ТР в парах $\{F'-V_k\}$ [6]. Подробное исследование контура полосы, а также поляризационных свойств ТЛ при 2,2 эВ в зависимости от температуры в области 4,2-50 К могло бы дать прямой ответ на затронутый выше вопрос.

Предполагается, что возникновение полос ТЛ при 3,0 эВ и 3,6 эВ связано с ТР в парах, электронной компонентой которых являются F' -центры. Об этом свидетельствуют спектры ТЛ после подсветки в F' -полосе поглощения (рис.2.3). Дырочная компонента этих пар неизвестна.

2.2.3. Спектры ТЛ монокристаллов $NaCl$

Спектр ТЛ, измеренный при 4,2 К, после рентгеновского возбуждения при $T_B \in (4,2 \text{ К}, 15 \text{ К})$ содержит две полосы излучения с максимумами при 3,35 эВ и 5,35 эВ [75,76] (рис.2.4), по спектральному составу соответствующие излучению триплетного и синглетного АЛЭ [73]. При повышении температуры возбуждения ($T_B > 80 \text{ К}$) появляется и возрастает с ростом T_B дополнительная полоса ТЛ с максимумом при 2,4-2,5 эВ [74]. Предварительные данные о ЭАТЛ (T_B) убедительно показывают, что V_k -центры в кристаллах $NaCl$, также как в рассмотренных выше чистых ЩГК, играют особую роль в процессах излучательной ТР. Возбуждение $NaCl$ при $T_B > T_d (V_k) = 150 \text{ К}$ [126,138,139] приводит к резкому спаду ЭАТЛ (T_B) во всех трех полосах излучения. В случае достаточно чистых кристаллов (отсутствуют термически более устойчивые ловушки дырок) при $T_B > 150 \text{ К}$ длительное ($\tau > 1 \text{ с}$) температурно независимое послесвечение практически не наблюдается. Можно отметить, что спектры ТСЛ рентгенизованных при 4,2 К кристаллов в низкотемпературных пиках (в области 4,2-25 К) совпадают с излучением АЛЭ, а в V_k -пике ТСЛ ($\sim 150 \text{ К}$)

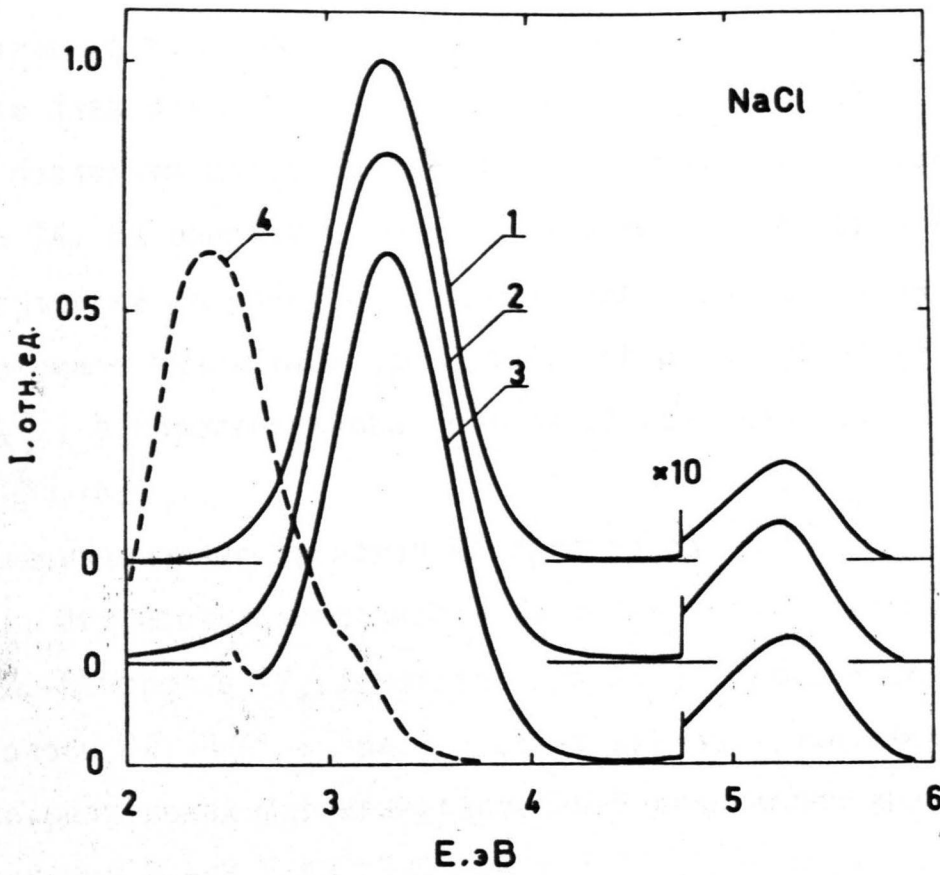


Рис.2.4. Спектры рентгенолюминесценции (1), ТЛ после рентгеновского возбуждения (2), фотостимулированная люминесценция во время стимуляции светом с энергией квантов 2,0 эВ после рентгеновского возбуждения (3) и ТЛ после обесцвечивания через фильтры $\text{ЖС}4+\text{ОС}14$ (4) кристалла *NaCl* при 4,2 К [75].

максимум полосы излучения находится при 2,4 эВ. Продолжительные подсветки в F - и F' -полосах поглощения по разному воздействуют на спектры ТЛ: Если при достаточно большой дозе F -подсветки ТЛ во всех трех полосах излучения тушится безвозвратно, то облучение такой же дозой в F' -полосе поглощения приводит к тушению лишь полос ТЛ, совпадающих с излучением АЛЭ. Кроме того, в последнем случае значительно усиливается длинноволновая полоса ТЛ. На основании данных о влиянии термической и оптической обработки на спектры ТЛ можно заключить, что длинноволновая полоса с максимумом при 2,4-2,5 эВ обусловлена ТР в парах $\{F-V_k\}$, а коротковолновые полосы ТЛ возникают при ТР в парах $\{F'-V_k\}$ [75, 76].

Поляризационные свойства ТЛ кристаллов $NaCl$ ни кем не изучались. Эти исследования могли бы более веско подтвердить участие V_k -центров в ТР, ответственной за порождение длинноволновой полосы ТЛ. Нам неизвестны также литературные данные о кинетике разгорания фотостимулированной люминесценции (ФСЛ) в полосах при 2,4-2,5 эВ, 3,35 эВ и 5,35 эВ во время оптической подсветки в полосах поглощения F - и F' -центров. Анализ кинетики разгорания ФСЛ позволяет определить характер движения (зонный или диффузионный) делокализованного носителя заряда.

2.2.4. Спектры ТЛ монокристаллов KI

ТЛ чистых кристаллов KI ранее никем последовательно не изучалась. Автору настоящей работы известна лишь единственная работа [64], в которой упомянута ТР в парах $\{F-V_k\}$, порождающая излучение, спектрально совпадающее с α -люминесценцией [106] кристаллов KI. В этой связи нами проведены некоторые исследования спектрально-кинетических свойств ТЛ неактивированных KI. Ниже коротко рассмотрим лишь спектры ТЛ.

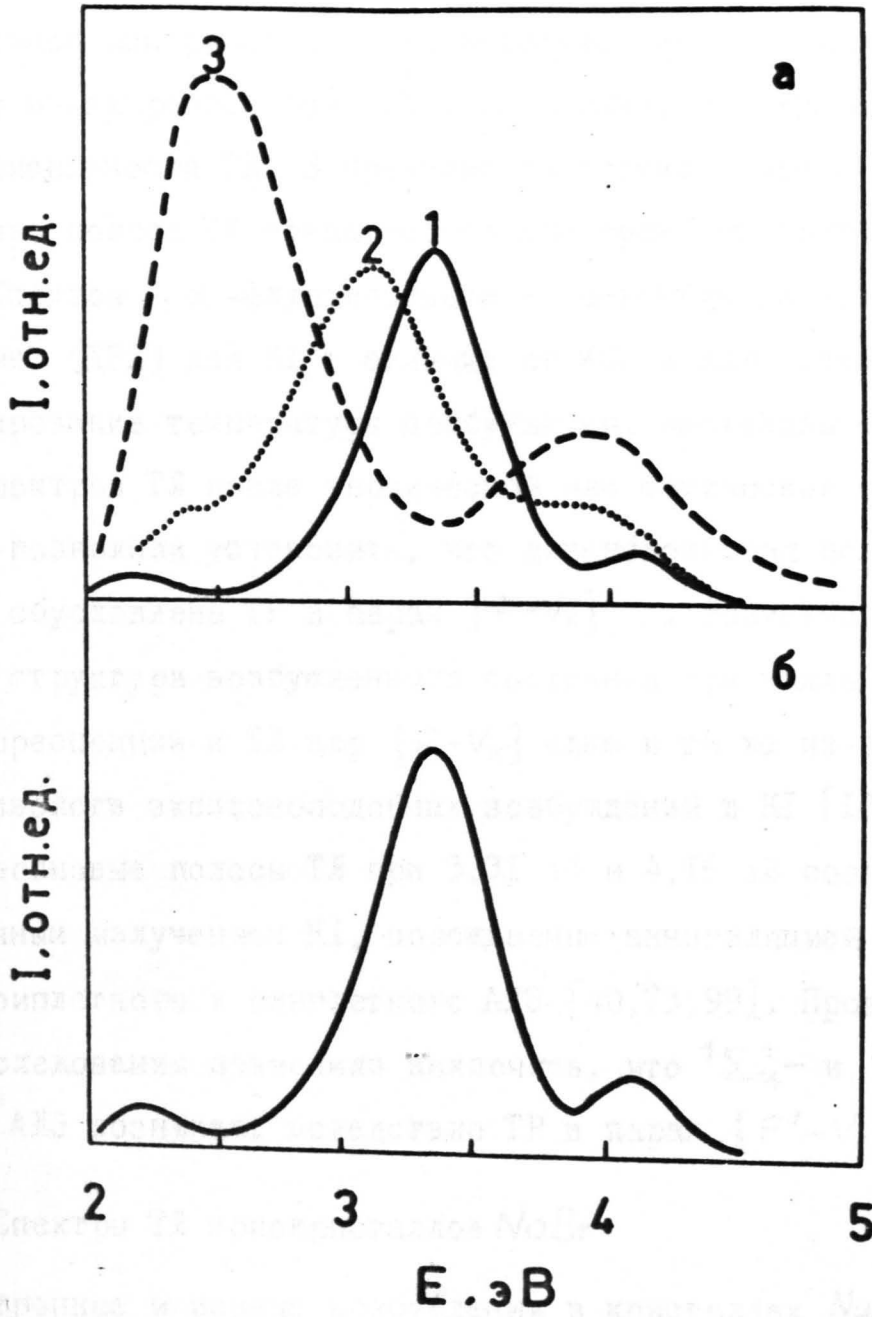


Рис.2.5. Спектры а) рентгенолюминесценции при 80 К (1), 170 К (2), 300 К (3) и б) ТЛ при $T_B = 100$ К, измеренной при 80 К, кристаллов КІ.

После рентгеновского возбуждения при температурах ниже температуры делокализации T_d V_k -центров ($T_d = 110$ К [139]) спектр ТЛ, измеренный при 77 К, содержит три несколько перекрывающихся полосы с максимумами 2,25 эВ, 3,31 эВ и 4,16 эВ (рис. 2.5). Точное измерение контура отдельных спектральных полос затруднено из-за реабсорбции ТЛ F -центрами, перекрывания полос и нестационарности ТЛ. В пределах экспериментальной ошибки длинноволновая полоса ТЛ совпадает со спектром α -люминесценции [106]. Спектры α -флуоресценции и "рекомбинационной α -люминесценции" (ДРЛ) для KI в отличие от KCl и KBr совпадают [7,70].

Варьирование температуры возбуждения, последовательное измерение спектров ТЛ после термической или оптической обработки образца позволили установить, что длинноволновая полоса при 2,25 эВ обусловлена ТР в парах $\{F-V_k\}$. Возможно, что электронная структура возбужденного состояния кристалла в случаях α -флуоресценции и ТЛ пар $\{F-V_k\}$ одна и та же из-за специфических свойств экситоноподобных возбуждений в KI [100,107,108]. Коротковолновые полосы ТЛ при 3,31 эВ и 4,16 эВ совпадают с собственным излучением KI, порождаемым аннигиляцией соответственно триплетного и синглетного АЛЭ [40,73,99]. Проведенные нами исследования позволили заключить, что $^1\Sigma_u^+$ и $^3\Sigma_u^+$ - состояния АЛЭ возникают вследствие ТР в парах $\{F'-V_k\}$.

2.2.5. Спектры ТЛ монокристаллов NaBr

Электронные и ионные возбуждения в кристаллах NaBr, по сравнению с рассмотренными выше ЩГК, мало изучены [109-114]. Это отчасти обусловлено такими факторами, как высокая гигроскопичность, отсутствие достаточно чистого сырья для выращивания совершенных монокристаллов NaBr, а также слабая окрашиваемость под действием рентгеновского возбуждения ($v \sim 1000$ раз ху-

же, чем в случаях KCl, KBr [II5]). Этот пробел в ряду чистых ШГК в значительной мере восполнила работа Лушика и др. [II6], в которой, к сожалению, ТР радиационных дефектов не изучалась. Нами была предпринята попытка установить основные спектрально-кинетические закономерности ТЛ неактивированного NaBr. По данным эмиссионного спектрального анализа наши образцы содержали добавки иода в количестве $\sim 10^{-4}$ молярных долей. Ниже убедимся, что такая концентрация иода еще "не заряжает" кристалл, ибо спектры собственной люминесценции наших и чистых ($[I^*] < 3 \cdot 10^{-4}$ мол. % [II6]) образцов практически не отличаются. В этом разделе рассмотрим лишь спектры ТЛ.

Спектры ТЛ кристаллов NaBr после рентгеновского возбуждения при 4,2 К содержат две полосы излучения с максимумами 3,5 эВ и 4,5 эВ (рис.2.6). Первая из этих полос спектрально совпадает с излучением, сопровождающим аннигиляцию локализованного у иода экситона (BrI^*) [II6]. Это несомненно подтверждает присутствие в наших образцах гомологической примеси иода. Вторая коротковолновая полоса (4,5 эВ) ТЛ как по положению максимума так и по полуширине совпадает с излучением триплетного АЛЭ [73,87,109]. Спектры ТЛ, а также корреляция ЭАТЛ (T_B) с Br_2^- и BrI^- - пиками (130 К и 300 К соответственно) ТСЛ однозначно доказывают участие этих дырочных центров в излучательной ТР. Изменения интенсивности и спектра ТЛ после оптической подсветки в полосах поглощения F - и F' - центров позволили установить электронную компоненту туннельных пар, ответственных за наблюдаемую ТЛ. Таким образом, полосы ТЛ при 3,5 эВ и 4,5 эВ обусловлены ТР в парах $\{F'-BrI^-\}$ и $\{F'-I_2^-\}$, соответственно. Следовательно, состояния АЛЭ и локализованных у иода экситонов в NaBr можно создавать не только оптически и при зонной рекомбинации [II6], но и в процессах ТР.

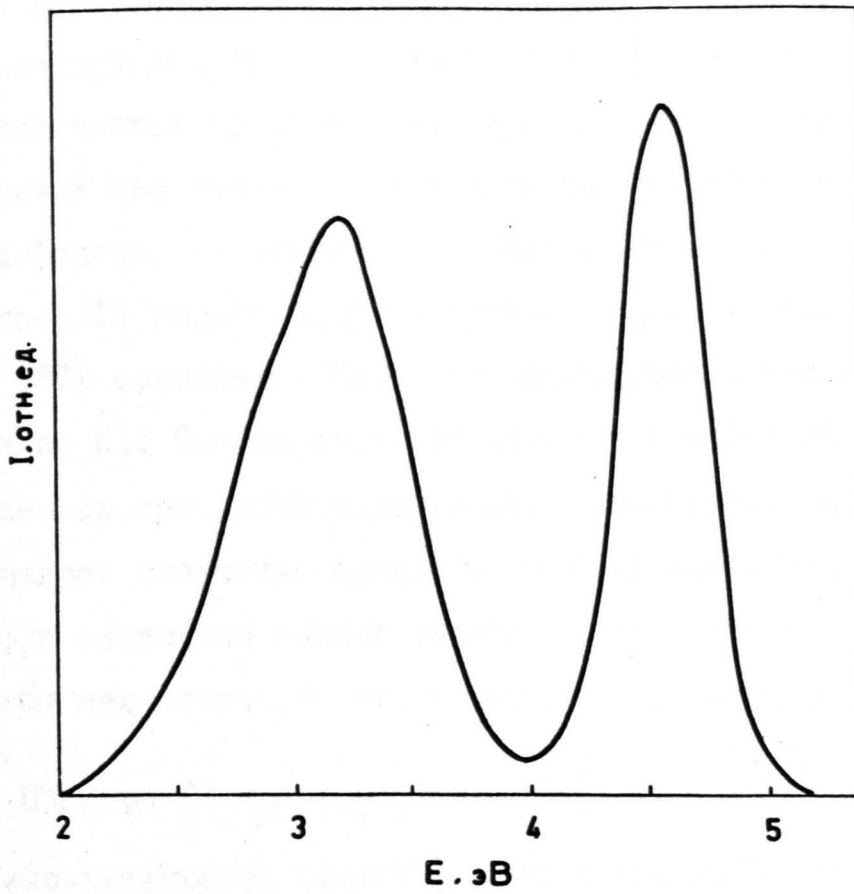


Рис.2.6. Спектр ТЛ кристаллов $NaBr$, возбужденной и измеренной при 4,2 К.

Возбуждение при $T_B \in (77 \text{ К}, 110 \text{ К})$ приводит к появлению, кроме описанных выше, новой полосы ТЛ с максимумом 2,7 эВ. Анализ результатов воздействия термо- и фотообработки образца на спектры ТЛ позволил установить, что длинноволновая полоса ТЛ возникает вследствие ТР в парах $\{F-V_k\}$. По-видимому, в случае более чистых образцов полоса ТР при 3,5 эВ отсутствовала, а остальные две полосы, обусловленные ТР собственных радиационных дефектов, не изменились. Следует отметить, что спектральные полосы ТЛ пар $\{F-V_k\}$ и оптически возбужденной α -флуоресценции [87] совпадают. Такое же совпадение имело место для кристаллов KI. Сам по себе напрашивается вывод об идентичности возбужденных состояний электронной подсистемы, распад которых обеспечивает излучение одного и того же спектрального состава. Однако, в настоящий момент имеющиеся экспериментальные факты для $NaBr$ недостаточны, чтобы решить этот вопрос окончательно.

2.2.6. Спектры ТЛ монокристаллов NaI

Физико-химические свойства кристаллов $NaBr$ и NaI во многом схожие, поэтому в настоящем разделе сделаем лишь дополнительный акцент на слабую окрашиваемость этих кристаллов при безызлучательном распаде экситонов на радиационные дефекты [146,147]. По-видимому, в значительной степени это обусловлено наличием энергетического барьера для автолокализации экситонов [148,150,151]. Поэтому более низкоэнергетические свободные экситоны не испытывают автолокализации и их свободный пробег из-за когерентности движения достигает 10^3-10^4 постоянных решетки [65]. В результате значительная доля созданных зонных экситонов аннигилирует излучательно либо на дефектах решетки (напр., на α -центрах), либо в узлах совершенной решетки из-за экситон-фотонного взаимодействия (краевая люминесценция) [148,150,

[52]. Следовательно, эффективность распада экситонов на пары френкелевских дефектов аннионной подрешетки в NaI (также в KI и $NaBr$) понижена по сравнению с KCl , KBr и $NaCl$. Так, выход радиационного создания H^- , I^- -центров в NaI , на наш взгляд, гораздо ниже чем, например, в $NaCl$. В то же время концентрационное отношение $[F']/[I]$ в NaI больше, чем в $NaCl$. Особенности концентрационных соотношений радиационных дефектов обуславливают в конечном счете некоторые отличия свойств излучательной ТР в KCl , KBr и $NaCl$, с одной стороны, и в KI , $NaBr$ и NaI , с другой стороны. Перейдем к рассмотрению ТЛ NaI согласно работе [75].

В спектрах ТЛ кристаллов NaI после рентгеновского возбуждения при 4,2 К доминируют две полосы излучения с максимумами при 2,6 эВ и 4,2 эВ (рис.2.7). По контуру спектра ТЛ можно судить, что между доминирующими полосами находится по крайней мере еще одна с предполагаемым максимумом около 3,3 эВ, которая убедительно проявляется в спектре фотолюминесценции (ФЛ) [75,149]. Однако, примененная в [75] термо- и фотообработка образцов не позволила выделить эту полосу, ибо ТЛ в спектральном районе 3,2-3,8 эВ не обладает свойствами, отличными от ТЛ в длинноволновой полосе. Так, ТЛ в длинноволновой полосе, включая также район около 3,3 эВ, не стимулируется подсветкой в F - и F' -полосах поглощения. При достаточно большой дозе F -подсветки ТЛ в этой полосе полностью тушится.

Коротковолновая полоса ТЛ по положению максимума и полуширине совпадает с излучением триплетного АЛЭ [109,149]. После подсветки в F - или F' -полосах поглощения предварительно возбужденного образца интенсивность ТЛ в коротковолновой полосе возрастает. Дальнейшие исследования ЭАТЛ (T_B), спектров в пиках ТСЛ и учет данных о влиянии фотообработки на спектры ТЛ

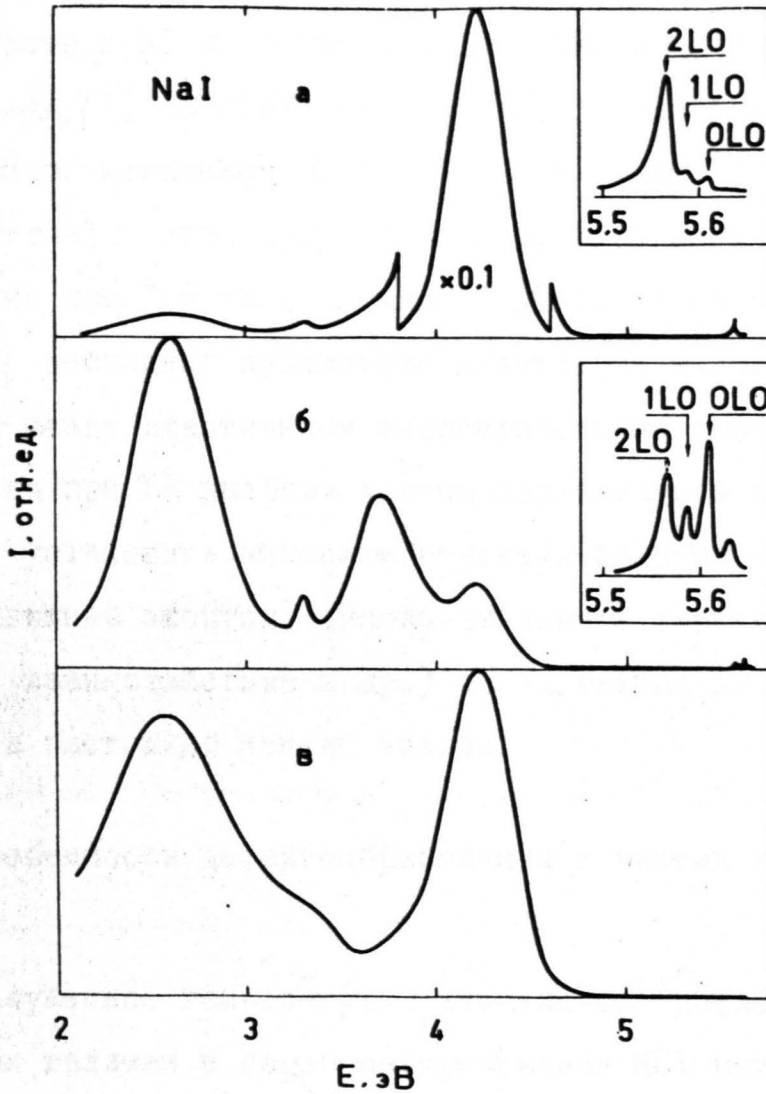


Рис.2.7. Спектры рентгенолюминесценции (а), фотолюминесценции при возбуждении квантами света с энергией 5,55 эВ (б) и ТЛ после рентгеновского возбуждения (в) кристалла *NaI* при 4,2 К [75].

позволили установить, что полосы ТЛ при 2,6 эВ и 4,2 эВ обусловлены ТР в парах $\{F-V_k\}$ и $\{F'-V_k\}$, соответственно.

Отметим, что длинноволновая полоса (при 2,6 эВ) ФЛ и ТЛ пар $\{F-V_k\}$ в NaI спектрально неразличимы так же, как это имело место в KI и $NaBr$. Совпадение α -флуоресценции с ТЛ пар $\{F-V_k\}$, по всей вероятности, обусловлено особенностями экситонного механизма передачи энергии центрам свечения (напр., α -центрам) в этих кристаллах [65,153]. Если предположить, что излучение при 2,6 эВ в случаях α -флуоресценции и ТЛ пар $\{F-V_k\}$ возникает вследствие квантовомеханического перехода системы между идентичными энергетическими уровнями, то освобожденная при ТР энергия должна передаваться анионной вакансии. Однако, установить механизм передачи энергии анионным вакансиям (подвижный экситон, диполь-дипольное взаимодействие, резонансное взаимодействие и др.) по имеющимся экспериментальным данным в настоящий момент нельзя.

2.3. Особенности дефектообразования в чистых и активированных ЩГК

Обнаруженное температурно независимое послесвечение активированных таллием и серебром кристаллов KCl исторически сыграло важнейшую роль в развитии идей о ТР радиационных дефектов в ЩГК [41,42,44,47]. Прежде чем перейти к непосредственному обсуждению результатов по исследованию спектров ТЛ активированных тяжелыми металлами (Tl, Ag, In) ЩГК, коротко отметим некоторые, общие для всех активированных ЩГК, особенности возбуждения ТЛ по сравнению с чистыми ЩГК.

В большинстве случаев спектры и кинетика ТЛ исследуются после облучения образца сравнительно небольшими дозами высокоэнергетических частиц или фотонов. Если при изучении кинетики на-

копления радиационных дефектов кристалл облучается часами и даже сутками [117], то для возбуждения ТЛ при тех же условиях применяются обычно времена возбуждения от несколько секунд до часа [41, 43, 60, 70, 105]. Отсюда следует, что наблюдаемая после такого возбуждения ТЛ обусловлена ТР радиационных дефектов, созданных в самых начальных стадиях кинетики их "долгого" накопления, где немаловажную роль играют дорадиационные дефекты. До облучения в рассмотренных выше (п.2.2) чистых ШГК преимущественно присутствуют дефекты типа Шоттки (анионные, катионные вакансии и их ассоциаты) [1]. Нередко можно обнаружить также присутствие трудно контролируемой примеси гомологических анионов и катионов. Тут же отметим, что термодинамически равновесные концентрации собственных дефектов решетки малы ($[V_a^+] < 10^{10} \text{ см}^{-3}$ в КС1 при 80 К [118]) по сравнению с вводимыми добавками активатора А ($[A^+] \approx 10^{16} - 10^{20} \text{ см}^{-3}$; $A^+ = \{Ga^+, In^+, Tl^+, Cu^+, Ag^+, Au^+\}$). При подавляющем перевесе ионов активатора над собственными дефектами решетки начальная стадия кинетики накопления радиационных дефектов будет определяться преобладающей примесью. Однако, эффективность участия одних или других дорадиационных дефектов в процессах накопления электронных и дырочных центров обусловлена не только их концентрацией, но и эффективными сечениями захвата и рекомбинации подвижных электронов и дырок с каждым отдельным дорадиационным дефектом.

Известно, что одновалентные ионы активатора А ($A^+ = \{Ga^+, In^+, Tl^+, Cu^+, Ag^+, Au^+\}$), расположенные в катионных узлах ШГК, могут служить эффективными ловушками электронов [119, 120, 122]. Действительно, ионизационные потенциалы тяжелых примесных атомов выше тех же потенциалов атомов щелочных металлов, поэтому сродство к электронам ионов активатора больше, чем катионов основания. В результате захвата электронов ионами активатора образуются

электронные центры типа $A^0 = \{Ga^0, In^0, Tl^0, Cu^0, Ag^0, Au^0\}$. Наряду с A^0 -центрами в примесных кристаллах возникают F - и F' -центры, также как в чистых ШГК, при захвате электронов анионными вакансиями или непосредственно при безызлучательном распаде экситона на $\{F-H\}$ пару [1,121].

В настоящее время убедительно доказано, что эти же активаторные ионы A^+ являются также ловушками горячих (зонных) и делокализованных ($T > T_d$) дырок [42,122-127]. Так, в процессе возбуждения KI-TI ($[TI^+] = 0,07$ мол.%) при 77 К ($77 \text{ К} < T_d = 110 \text{ К}$) 7% дырок локализуется в виде TI^{2+} -центров и 93%-в виде V_k -центров [128]. Нагревание облученного при $T_B < T_d$ кристалла выше T_d приводит к пересадке 80-90% из всех V_k -центров на TI^+ , образуя TI^{2+} -центры [129]. Известно, что A^+ -центр отщепляет от дырочной зоны локальный уровень [130], который, как это следует из приведенных выше примеров, одновременно является состоянием как ионизованного донора, так ионизованного акцептора. Объяснение такой двойственной природы A^+ -центров не столь очевидно. "Сродство" к дыркам A^+ -центров, отчасти, можно пояснить тем фактом, что ионизационные потенциалы ионов A^+ ниже, чем катионов основания [128]. Таким образом, получаем, что A^+ -центрам по сравнению с катионами основания выгоднее как захватить, так и потерять электрон. Захват дырок A^+ -центрами иногда трактуется как их ионизация "снизу". Аналогичное положение имеет место в соединениях АШВУ, где элементы IV-подгруппы (напр., Si, Ge в GaP) одновременно являются донорами и акцепторами [129]. Из рассмотренного выше анализа можно заключить, что введение в ШГК ртутеподобных (Ga^+, In^+, Tl^+) или "благородных" (Cu^+, Ag^+, Au^+) ионов эффективно влияет на "номенклатуру" радиационных дефектов, а также на их пространственное распределение. Все это проявляется в спектрах и кинети-

ках ТЛ активированных ШГК.

При исследовании ЭТЛ (T_B) в активированных ШГК можно выделить три характерные области температур: а) $T_B < T_d(V_K)$; б) $T_B \in (T_d(V_K), T_d(A^0))$ и в) $T_B > T_d(A^0)$ [7, 64, 79, 134]. После возбуждения кристалла при $T_B \in (T_{\text{мин}}, T_d(V_K))$ преобладают радиационные дефекты типа A^0 и V_K, H, H_A . Если $T_B \in (T_d(V_K), T_d(A^0))$, то доминируют дефекты типа A^0 и A^{2+}, V_{KA}, XY^- (дырки, захваченные примесью) [120-128]. Возбуждение при $T_B \in (T_d(A^0), T_{\text{плавл.}})$ приводит к накоплению F-центров и термически более стабильных дырочных центров типа A^{2+}, V_2, V_3 . В области в) "номенклатуру" радиационных дефектов в большой степени определяют свойства собственной решетки, поэтому при высоких температурах чистые и активированные ШГК с точки зрения дефектообразования как-то сближаются. В зависимости от преимущественно присутствующих в кристалле радиационных дефектов (т.е., от T_B) образуются соответствующие туннельные пары: после возбуждения в областях а) - пары типа $\{A^0 - V_K\}$; б) - пары типа $\{A^0 - A^{2+}\}, \{A^0 - V_{KA}\}, \{A^0 - XY^-\}$; в) - пары типа $\{F - A^{2+}\}, \{F - V_{(2)}\}$ [5-7, 41, 42, 64, 79]. Следовательно, различающаяся термическая стабильность (T_d) радиационных дефектов обеспечивает селективное создание одних или других туннельных пар, что использовано нами при изучении спектров и кинетики ТЛ. Не менее эффективно можно использовать термообработку образцов уже после возбуждения ТЛ. Так, например, термическая стимуляция реориентационного движения V_K -центров существенно изменяет соотношение далеких и близких пар типа $\{A^0 - V_K\}$ в пользу последних [134, 135].

2.4. Спектры и поляризационные эффекты ТЛ монокристаллов KCl-Tl и KCl-Ag

ТЛ кристаллов KCl-Tl и KCl-Ag имеет много общего. Так, при распространении закономерностей ЭАТЛ (T_B) KCl-Tl на KCl-Ag следует учесть лишь отличающуюся термическую стабильность $Tl^{0,Ag}$ -центров (300 К и 350 К соответственно [5]). В этой связи более подробно рассмотрим спектры и поляризационные свойства ТЛ на примере KCl-Tl.

После возбуждения (γ -, X-лучи) KCl-Tl ($[Tl^+] \approx 10^{-3}-10^{-1}$ мол.%) при $T_B < T_d (V_K) = 208$ К доминирует ТЛ, обусловленная ТР в парах $\{Tl^0-V_K\}$ [5, 7, 42, 79, 134]. Спектр ТЛ имеет одну полосу с максимумом при 2,9 эВ (рис. 2.8). При небольших дозах облучения ($D \lesssim 10^5$ рад.) накопление F-центров настолько подавлено, что их присутствие не проявляется ни в виде ТЛ пар $\{F-V_K\}$, ни в виде реабсорбции излучения пар $\{Tl^0-V_K\}$ F-центрами. Об этом косвенно свидетельствует также кинетика накопления F-центров в KCl-Ag при 100 К [136].

Пары $\{Tl^0-V_K\}$ образуются, по-видимому, преимущественно при распаде электронно-дырочных пар в окрестности Tl^+ -центров. Взаимодействие зонных дырок с оптическими и акустическими фононами обеспечивает быстрый переход ($\tau \lesssim 10^{-11}-10^{-10}$ с [137]) с зонного состояния на автолокализованное. За время релаксации, видимо, значительная доля горячих дырок ни сколь не уходит от места рождения [128, 137]. Зонные электроны в основном захватываются ближайшими Tl^+ -центрами. Нагрев возбужденного образца выше $T_d (V_K)$ сопровождается ТСЛ (V_K -пик), длинноволновая полоса спектра которой в пределах экспериментальной ошибки совпадет со спектром ТЛ пар $\{Tl^0-V_K\}$ [5, 41, 79]. Это указывает на то, что даже при $T > T_d (V_K)$ электрон-фононное взаимодей-

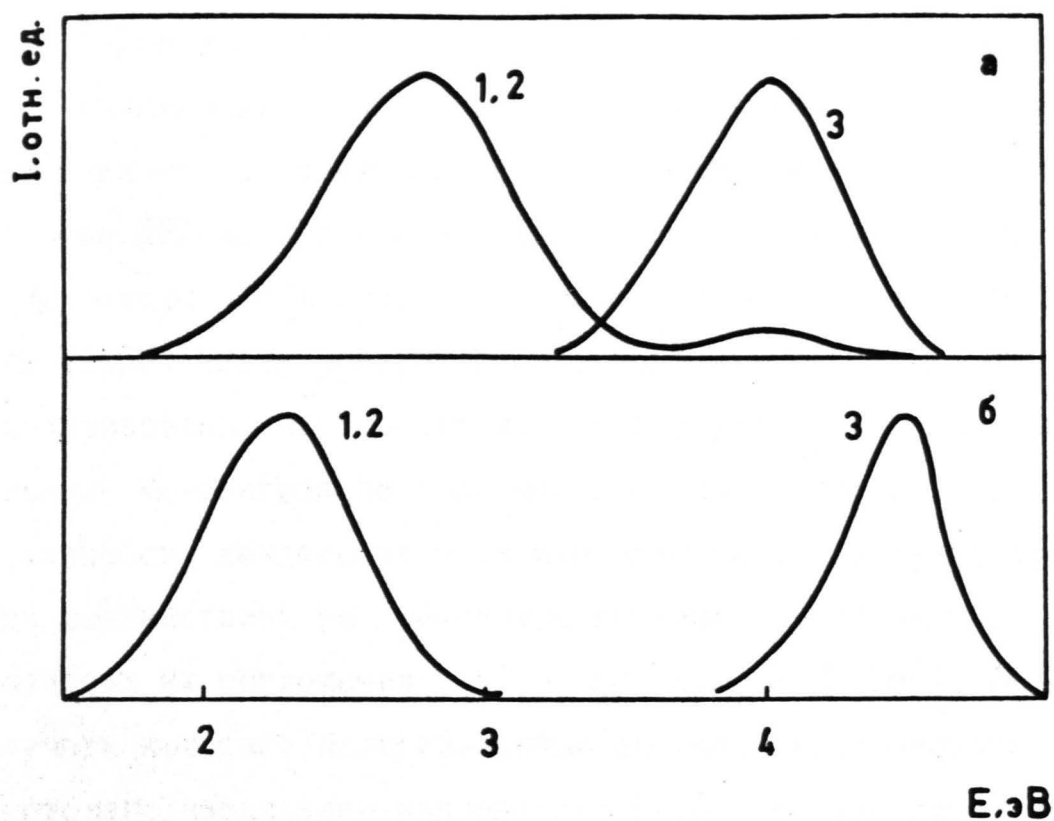


Рис.2.8. Спектры люминесценции активированных Тl (а) и Ag (б) КСl. Рентгенолюминесценция при 80 К (1), ТЛ, возбужденная при 100 К и измеренной при 80 К (2) и характерное активаторное свечение (3) [45].

вне достаточно сильное, чтобы циклически возобновлять разрывающуюся аксиальную связь двух галоидов (${}^2\Sigma_{1/2}^+$ - состояние). В результате делокализованный V_k -центр, как это было отмечено в п.2.2.1, перемещается прыжками, а не когерентно, что имело бы место в случае зонной частицы. Следовательно, дырочный рекомбинационный процесс в KCl-Tl, также как в чистых ЩГК представляет собой диффузионно-контролируемую ТР. Возникающая при этом ДРЛ является диффузионно-контролируемой ТЛ пар $\{Tl^0 - V_k\}$.

V_k -центры в ЩГК ориентированы по шести возможным направлениям $\langle 110 \rangle$. После рентгеновского возбуждения ТЛ пар $\{Tl^0 - V_k\}$ неполяризована, что свидетельствует о равновероятном распределении V_k -центров по всем шести направлениям $\langle 110 \rangle$. Степень заселенности каждого из этих направлений можно эффективно изменять воздействием на V_k -центры линейно поляризованным светом в полосах их поглощения ($\sim 3,40$ эВ, $1,65$ эВ [138]). Так, если облучать кристалл поляризованным светом, электрический вектор \vec{E} которого параллелен направлению $[110]$, то это направление, в зависимости от дозы оптической подсветки, будет значительно или полностью опустошено. В то же самое время заселенность перпендикулярного \vec{E} -вектору направления $[1\bar{1}0]$ будет наибольшая. Степень заселенности остальных четырех направлений будет промежуточной между $[110]$ и $[1\bar{1}0]$: чем направление $\langle 110 \rangle$ ближе к $[1\bar{1}0]$, тем выше.

После предварительной ориентации V_k -центров ТЛ пар $\{Tl^0 - V_k\}$ также оказывается частично поляризованной параллельно V_k -оси, причем степень поляризации P в зависимости от дозы предварительной оптической подсветки достигает 30-50% [43]. Величина P непосредственно связана с ориентацией V_k -центров, ибо оптическая или термическая реориентация V_k -центров уменьшает поляризованность ТЛ пар $\{Tl^0 - V_k\}$. Во время затухания ТЛ P

уменьшается незначительно ($\leq 4\%$). Напротив, при нагреве кристалла KCl-Tl с предварительно ориентированными V_k -центрами Р ТЛ пар $\{\Gamma^0 - V_k\}$ уменьшется уже на низкотемпературном подножии ($T \geq 150$ K) V_k -пика, проходит нулевое значение и достигает абсолютный минимум ($P_{\text{мин}} \approx -14\%$). В районе максимума V_k -пика ТЛ пар $\{\Gamma^0 - V_k\}$ становится опять неполяризованной. Эффект изменения знака поляризации объясняется анизотропией вероятности ТР в зависимости от расположения Γ^0 -центра относительно V_k -оси. Спектры σ ($\vec{E} \parallel V_k$ -оси) - и π ($\vec{E} \perp V_k$ -оси) - поляризованной ТЛ пар $\{\Gamma^0 - V_k\}$ не различаются.

Поляризационные измерения, таким образом, показывают, что симметрия элементарного излучателя в большой мере обусловлена электронной структурой V_k -центра. Сам по себе напрашивается вывод о том, что излучение пар $\{\Gamma^0 - V_k\}$ будто генетически связано с V_k -центром. Дальнейшее развитие подобных идей привело бы к заключению, что ТЛ пар $\{\Gamma^0 - V_k\}$ возникает при аннигиляции АЛЭ, созданного в процессе туннелирования бр-электрона Γ^0 -центра на V_k -центр, или же, так называемого, "околоактиваторного экситона". Однако, ни одно, ни другое из этих состояний, по-видимому, не образуется в процессе ТР, ибо их распад сопровождается излучением, не совпадающим ни спектрально, ни по поляризации с ТЛ пар $\{\Gamma^0 - V_k\}$. В этом можно убедиться, создавая оптически или в зонном рекомбинационном процессе АЛЭ или "околоактиваторный экситон" [140]. По всей вероятности и другие попытки заменить возбужденное состояние "пара $\{\Gamma^0 - V_k\}$ " чем-то другим, более наглядным и более понятным, не столь очевидны или вообще не увенчаются успехом. В данный момент феномен излучательной ТР пар $\{\Gamma^0 - V_k\}$ в свете имеющихся экспериментальных фактов [5,7,45] следует трактовать как особый вид излучательной рекомбинации, причем элементарным излучателем является

непосредственно сама пара $\{T1^{\circ}-V_k\}$. Мы подчеркиваем этим тот факт, что возбужденное состояние "пара $\{T1^{\circ}-V_k\}$ " нельзя привести к другим, более опознанным представлениям. Однако, это не отрицает необходимость в более подробном изучении электронной структуры "элементарного" излучателя-пары $\{T1^{\circ}-V_k\}$.

ТЛ кристаллов KCl-Ag ($[A_{\frac{1}{2}}^{\ddagger}] \approx 10^{-3}-10^{-1}$ мол.%) при $T_B < T_d(V_k)$ имеет свойства, аналогичные рассмотренным выше. Коротко перечислим их. Максимум полосы излучения пар $\{A_{\frac{1}{2}}^{\circ}-V_k\}$ находится при 2,3 эВ (рис.2.8) [5,45,141]. Длинноволновая полоса спектра ТСЛ (в V_k -пике) в пределах экспериментальной ошибки совпадает со спектром ТЛ пар $\{A_{\frac{1}{2}}^{\circ}-V_k\}$. ДРЛ в кристаллах KCl-Ag, разумеется, также обусловлена диффузионно-контролируемой ТР. Предварительная ориентация V_k -центров приводит к частичной поляризации ТЛ пар $\{A_{\frac{1}{2}}^{\circ}-V_k\}$ ($P \leq 38\%$). Спектры σ - и π -поляризованного излучения совпадают. Эффект изменения знака поляризации ТЛ пар $\{A_{\frac{1}{2}}^{\circ}-V_k\}$ при термической реориентации V_k -центров проявляется более сильно ($P_{\min} \approx -23\%$), чем в случае ТЛ пар $\{T1^{\circ}-V_k\}$ [5]. Во время затухания ТЛ степень поляризации практически не изменяется. Рассмотренные выше экспериментальные результаты удовлетворительно объясняются электронной структурой V_k -центра (квазимолекула Cl_2^-) и анизотропией вероятности ТР в паре $\{A_{\frac{1}{2}}^{\circ}-V_k\}$.

Спектральное расположение полос ТЛ пар $\{A_{\frac{1}{2}}^{\circ}-V_k\}$ и $\{F-V_k\}$ отличаются мало (сравни рис.2.2 с рис.2.8). Однако, преимущественное присутствие $A_{\frac{1}{2}}^{\ddagger}$ -центров над анионными вакансиями ($[A_{\frac{1}{2}}^{\ddagger}] \gg [V_{\alpha}^{\ddagger}]$), подавляет генерацию F-центров. Об этом свидетельствует отсутствие реабсорбции ТЛ пар $\{A_{\frac{1}{2}}^{\circ}-V_k\}$ F-центрами, а также прямые данные по поглощению света F-центрами в кристаллах KCl-Ag [136]. Таким образом, ТЛ пар $\{A_{\frac{1}{2}}^{\circ}-V_k\}$ удается наблюдать в неискаженном виде.

Воздействие на кристалл KCl-Tl и KCl-Ag магнитного поля ($|\vec{B}| \leq 6$ Тл) в температурной области от 1,4 К до 4,2 К приводит к различным эффектам [81,142]. Так, ТЛ пар $\{Tl^0 - V_K\}$ "не реагирует" на приложенное поле. Интенсивность ТЛ пар $\{Ag^0 - V_K\}$, напротив, значительно уменьшается при $(|\vec{B}|/T) > 0$. Эффективность тушения ТЛ при дальнейшем росте фактора $|\vec{B}|/T$ ($[|\vec{B}|/T] = \text{Тл/К}$) падает, и при $|\vec{B}|/T \in (3, 4)$ достигает насыщения. ТЛ пар $\{Ag^0 - V_K\}$ в районе насыщения потушена на 90-95%. Спектры и закон затухания ТЛ в обоих случаях не меняются при воздействии магнитного поля. Тушение ТЛ пар $\{Ag^0 - V_K\}$ магнитным полем трактуется как проявление спин-поляризационных эффектов. Предполагается, что электронный переход в паре $\{Ag^0 - V_K\}$ разрешен лишь в случае, когда неспаренные спины в Ag^0 - и Cl_2^- -центрах ориентированы антипараллельно [81]. Это предположение равноценно тому, что, по крайней мере, излучательный распад триплетного состояния пары $\{Ag^0 - V_K\}$ запрещен. Насыщение эффективности тушения ТЛ пар $\{Ag^0 - V_K\}$ [142] при расширении области изменения фактора $|\vec{B}|/T$, на наш взгляд, является довольно веским доводом в пользу того, что наряду с магнитно-чувствительным синглетным состоянием излучательно распадаются также туннельные пары в триплетном состоянии. Вероятность ТР для пары в синглетном состоянии, по-видимому, больше чем в триплетном состоянии этой же пары ($W_S(\uparrow) > W_T(\uparrow)$). Следует признать, что в настоящее время не существует последовательной, безупречной теории, объясняющей тонкости магнитных эффектов ТЛ пар типа $\{A^0 - V_K\}$. По всей вероятности, это связано с недостаточным изучением электронной структуры возбужденного состояния "пара $\{A^0 - V_K\}$ " в кристалле.

2.5. Р е з ю м е

1. ТР в парах $\{F-V_K\}$, $\{T1^0-V_K\}$, $\{A_g^0-V_K\}$ и $\{F-V_{KA}\}$ представляет собой неупругое туннелирование электрона с основного электронного состояния F- или A^0 -центров на основное электронное состояние квазимолекулы ($V_K + e^-$), сопровождающееся испусканием фотона.

2. Основное $^1\Sigma_g^+$ -состояние квазимолекулы ($V_K + e^-$) не является стационарным, ибо последующая колебательная релаксация приводит к восстановлению идеальной решетки. Поэтому V_K -центр в качестве ионизованного акцептора занимает особое место в излучательной ТР. Предполагается, что $^1\Sigma_g^+$ -состояние не обладает спектром электронно-колебательных уровней, обеспечивающим резонанс, необходимый для упругого туннелирования. Так как электроны F-, A^0 -центров залегают ниже уровней возбужденных $^3\Sigma_u^+$ - и $^1\Sigma_u^+$ -состояний АЛЭ, то упругое туннелирование в соответствующих парах "запрещено".

3. В парах $\{F'-V_K\}$ электрон с основного электронного состояния F' -центра упруго туннелирует на возбужденные состояния квазимолекулы ($V_K + e^-$). В результате релаксации ионной подсистемы образуются возбужденные $^1\Sigma_u^+$ - и $^3\Sigma_u^+$ -состояния АЛЭ, при распаде которых возникает экситонная люминесценция.

4. Эффективное упругое туннелирование может осуществляться на конечное состояние, обладающее, по крайней мере, квазинепрерывным энергетическим спектром. Это условие легче выполняется для электронно-колебательных термов с повышенной ангармоничностью. Видимо, возбужденные $^1\Sigma_u^+$ - и $^3\Sigma_u^+$ -состояния обеспечивают условия (малая кривизна, ангармоничность адиабатических потенциалов) резонанса для упругого туннелирования.

5. Сравнение спектров ТЛ ШГК, обусловленной туннельными переходами с электронных центров различной глубины (I_1^0 , I_1^0 , A_2^0 , F) на пробный дырочный центр (напр., V_K) показывает, что положение максимумов спектров ТЛ нельзя объяснить только термически равновесной заселенностью электронно-колебательных уровней электронных центров. Для этого и в случае неупругого туннелирования необходимо допустить туннельные переходы на высокие электронно-колебательные уровни системы "дырочный центр + электрон."

6. Излучательная ТР в парах $\{F - H\}$ не обнаружена [60]. Предполагается, что спектр электронно-колебательных уровней I -центра обеспечивает необходимые условия резонанса с F -центром. В результате упругого туннелирования образуется горячий I -центр, который в ходе релаксации ионной подсистемы может либо безызлучательно прорекомбинировать с α -центром, либо "заморозиться" в ближайшей окрестности α -центра. Согласно этой же модели в парах $\{F' - H\}$ электрон упруго туннелирует с F' -центра на возбужденные состояния I^* -центра, которые мало отличаются от $^3\Sigma_u^+$ - и $^1\Sigma_u^+$ - состояний АЛЭ. Следовательно, полная релаксация возбужденного I^* -центра должна сопровождаться люминесценцией, близкой к экситонной.

Глава 3. ТУННЕЛЬНАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ АКТИВИРОВАННЫХ ТАЛЛИЕМ И СЕРЕБРОМ ШГК

Проведенные нами исследования ТЛ активированных Тl и Ag ШГК показали, что спектрально-кинетические свойства температурно независящего послесвечения существенно зависят от T_B [7,79,104,134]. Анализ кривых ЭАТЛ (T_B) позволил выделить три основных температурных области возбуждения: а) $T_B \in (T_{\text{мин}}, T_d(V_k))$; б) $T_B \in (T_d(V_k), T_d(A^0))$ и в) $T_B > T_d(A^0)$ (см. п.2.3). Следует отметить, что ТЛ активированных Тl и Ag ШГК при $T_B < T_d(V_k)$ была уже ранее изучена [41,42,44,70] (см.гл.2). Однако, подробные исследования ТЛ при варьировании T_B в широкой температурной области отсутствовали. Это можно объяснить отчасти тем фактом, что интенсивность ТЛ при повышении T_B уменьшается на два-три порядка по сравнению с интенсивностью ТЛ при $T_B \approx T_{\text{мин}}$ ($T_{\text{мин}}$ обычно 77 К или 4,2 К). Следовательно, для исследования ТЛ при высоких T_B необходимо значительно увеличить чувствительность измерительной аппаратуры, что особенно важно при измерении спектров ТЛ. Кроме того, люминесцентный криостат и система регулирования температуры должны обеспечить быстрое ($|dT/dt| > 3$ град./с) охлаждение образца. Повышение чувствительности измерительного канала, применение малоинерционного азотного люминесцентного криостата совместно с терморегулятором позволили исследовать ТЛ при $T_B \in (77 \text{ К}, 600 \text{ К})$.

Оптическая подсветка в полосах поглощения электронных центров предварительно возбужденных активированных Тl и Ag ШГК приводит к значительному возрастанию интенсивности ТЛ [79]. Исследования спектров и кинетики ТЛ до и после, а также во время оптической подсветки позволили установить основные закономерности этого эффекта и выяснить микромеханизм создания но-

вых туннельных пар, распад которых обуславливает приращение интенсивности ТЛ. Следует подчеркнуть, что нормированное на единичную интенсивность оптической подсветки приращение интенсивности ТЛ сильно зависит от концентрации активатора, ибо эффективность создания новых туннельных пар определяется ПР пустых электронных ловушек вблизи дырочных центров типа V_K , V_{KA} , A^{2+} и др. Кинетика оптической вспышки позволяет установить характер движения высвобожденного носителя заряда. В этой связи исследовались временные характеристики оптической вспышки как активаторной люминесценции, так и ТЛ. Сравнение этих экспериментально полученных кинетик оптической вспышки убедительно показывает, что механизмы рекомбинационных процессов в рассматриваемых случаях различны.

Описанные выше люминесцентные исследования проводились на монокристаллических образцах, выращенных методом Киропулоса в воздухе, а также в инертной атмосфере (см. табл.2). В качестве сырья использовалась соль марки "о.ч.". Содержание примесей в исследуемых кристаллах контролировалось эмиссионным спектральным анализом. Обычно образцы имели форму параллелепипеда с размерами $8 \times 8 \times 1$ мм³. Во всех изученных кристаллах ТЛ имеет общие закономерности, которые подробно рассмотрены ниже на примере КСІ-ТІ.

3.1. Влияние термо- и фотообработки на спектры туннельной люминесценции монокристаллов КСІ-ТІ

3.1.1. Зависимость спектров и эффективности аккумуляции ТЛ от температуры возбуждения

Эффективность накопления тех или других радиационных дефектов в значительной мере зависит от T_B [1,3,146,147,154]. Это обусловлено температурной зависимостью выхода создания

Таблица 2

Концентрация примеси в исследуемых кристаллах

№ п. п.	Крис-талл	Шифр крис-талла	Концентрация активатора, вес. %		Концентрация случайной примеси, вес. %						
			Tl	Ag	Na	Ca	Cu	Mg	Fe	Al	Si
1	KCl-Tl	K-461	1,04	$1,6 \cdot 10^{-4}$	$4,4 \cdot 10^{-3}$	$6,3 \cdot 10^{-4}$	10^{-4}	$5,5 \cdot 10^{-4}$	10^{-4}	10^{-4}	-
2	KCl-Tl	M-902	0,57	$7,8 \cdot 10^{-4}$	$3,1 \cdot 10^{-3}$	$4,8 \cdot 10^{-4}$	$1,4 \cdot 10^{-4}$	$3,2 \cdot 10^{-4}$	$4,5 \cdot 10^{-4}$	$1,3 \cdot 10^{-4}$	-
3	KCl-Tl	K-126	0,36	$< 10^{-4}$	$3,7 \cdot 10^{-3}$	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$7,2 \cdot 10^{-5}$	10^{-4}	$7,8 \cdot 10^{-4}$	10^{-4}	10^{-4}
4	KCl-Tl	M-846	0,10	$< 10^{-4}$	$4,0 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$2,8 \cdot 10^{-4}$	$1,8 \cdot 10^{-4}$	$3,3 \cdot 10^{-4}$	$2,4 \cdot 10^{-4}$	-
5	KCl-Ag	M-432	-	0,68	$5,0 \cdot 10^{-3}$	$3,4 \cdot 10^{-4}$	10^{-5}	$1,3 \cdot 10^{-4}$	10^{-5}	$2,2 \cdot 10^{-4}$	$3,8 \cdot 10^{-4}$
6	KCl-Ag	M-905	-	0,10	$7,2 \cdot 10^{-3}$	$3,8 \cdot 10^{-4}$	10^{-4}	10^{-4}	$1,3 \cdot 10^{-4}$	$3,0 \cdot 10^{-4}$	$3,6 \cdot 10^{-4}$
7	KBr-Ag	M-449	10^{-4}	0,02	$5,0 \cdot 10^{-3}$	$3,1 \cdot 10^{-4}$	$1,1 \cdot 10^{-4}$	10^{-4}	$2,1 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-4}$	-
8	KBr-Ag	M-430	10^{-4}	0,45	$1,2 \cdot 10^{-2}$	$2,0 \cdot 10^{-4}$	$5,0 \cdot 10^{-4}$	10^{-4}	$3,0 \cdot 10^{-4}$	-	10^{-4}
9	NaCl-Ag	M-909	10^{-4}	0,78	-	$5,1 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-5}$	10^{-4}	10^{-4}	$6,8 \cdot 10^{-5}$	10^{-4}
10	NaCl-Ag	M-434	10^{-4}	0,42	-	$4,2 \cdot 10^{-4}$	$4,3 \cdot 10^{-3}$	10^{-4}	$1,5 \cdot 10^{-4}$	$1,8 \cdot 10^{-4}$	10^{-4}

дефектов, их термической стабильностью и вторичными реакциями, ответственными как за стабилизацию, так и за отжиг созданных радиационных дефектов:

В результате подбора соответствующей T_B можно весьма селективно изменить "номенклатуру" присутствующих в кристалле дефектов (см. п. 2.3). В п. 2.4 мы детально рассмотрели спектры ТЛ пар $\{TI^0 - V_K\}$. В настоящем разделе обратим внимание на ТР TI^0 -центров с термически более стабильными дырочными центрами типа V_{KA} , XU^- и TI^{2+} при $T_B > T_d(V_K) = 208 \text{ К}$ [139, 157]. В этой связи была исследована серия спектров ТЛ кристаллов KCl-TI ($[TI^+] = 0,2 \text{ мол.}\%$) после рентгеновского возбуждения при $T_B > T_d(V_K)$.

Отметим, что спектр РЛ кристаллов KCl-TI содержит две полосы излучения: В-полосу и УФ-полосу. При $T_B = 235 \text{ К}$ максимумы полос находятся при 2,72 эВ и 4,10 эВ соответственно (рис. 3.1а). В-полоса РЛ, по всей вероятности, возникает в процессах диффузионно-контролируемой ТР. Строго доказано, что УФ-полоса РЛ обусловлена рекомбинацией зонных электронов с TI^{2+} -центрами [122, 123]. Соответствующий спектр ТЛ, измеренный при 77 К, имеет лишь одну полосу излучения с максимумом при 2,67 эВ (полуширина $\Delta_{1/2}(E) = 0,64 \text{ эВ}$). Контуры спектра ТЛ и В-полосы РЛ ($\Delta_{1/2}(E) = 0,75 \text{ эВ}$), таким образом, мало отличаются (рис. 3.1а, б). Обнаружено, что максимум полосы ТЛ по мере возрастания $T_B > 160 \text{ К}$ смещается в длинноволновую сторону и интенсивность интегральной ТЛ быстро падает. Так, например, отношение интенсивностей интегральной ТЛ при $T_B = 100 \text{ К}$ и $T_B = 235 \text{ К}$ составляет около $\sim 10^3$. Если $T_B > 260 \text{ К}$, то сдвиг спектра больше не наблюдается и максимум полосы ТЛ находится при 2,65 эВ. Исследование спектров ТЛ при $T_B > 280 \text{ К}$ трудно осуществимо из-за малой интенсивности и нестационарности послесвечения.

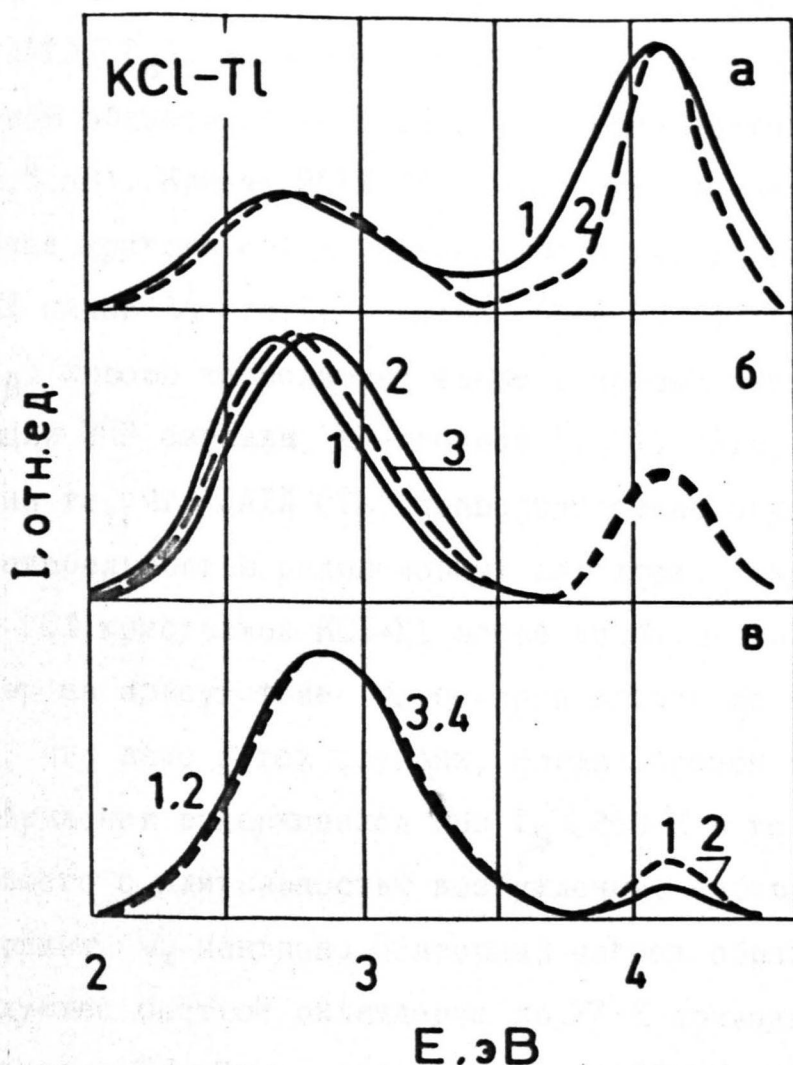


Рис.3.Г. Спектры люминесценции кристаллов KCl-Tl:
 а) рентгенолюминесценции при 235 К (1) и Tl^0 -вспышка (2) при 80 К предварительно возбужденного при 235 К ($T_B = 235$ К) кристалла; б) ТЛ, измеренная при 80 К, до (1) и после (2) Tl^0 -подсветки (1,9 эВ) и Tl^0 -вспышка (3) при $T_B = 235$ К; в) рентгенолюминесценция (1), Tl^0 -вспышка (2), ТЛ до (3) и после (4) Tl^0 -подсветки; $T_B = T_{изм.} = 80$ К.

Для установления природы радиационных дефектов, присутствующих в кристалле после возбуждения при $T_B > 208$ К, нами использовались высокочувствительные методы ТСЛ и ФСЛ. Об участии этих дефектов в излучательной ТР можно убедиться, исследуя кривые ЭАТЛ (T_B). Исследования ЭАТЛ (T_B) были проведены в температурной области от 77 К до 320 К через светофильтр БС-6 ($h\nu < 3,5$ эВ). Кривая ЭАТЛ (T_B) имеет два температурных интервала более крутого спада интенсивности ТЛ, которые соответствуют ТСЛ пиков V_K - и TI^0 -центров (рис.3.2). Ступеньки на ЭАТЛ (T_B) хорошо коррелируют также с кривой неизотермической релаксации ЭПР сигнала V_K -центров [157]. Это, несомненно, указывает на то, что ЭАТЛ (T_B) непосредственно обусловлена термической стабильностью радиационных дефектов. Результаты исследования ТСЛ кристаллов КСЛ-ТІ после возбуждения при $T_B > T_d(V_K)$ указывают на присутствие V_K -центров вплоть до $T_B = 250-260$ К. Отметим, что даже в тех случаях, когда образец после прекращения возбуждения выдерживался при $T_B < 260$ К в течении времени, совпадающего с длительностью возбуждения, наблюдался лишь частичный отжиг V_K -центров. Повторный нагрев образца до $T_d(V_K)$ и последующее быстрое охлаждение до 77 К приводят к возрастанию интенсивности ТЛ. Этот эффект при $T_B \in (208 \text{ К}, 260 \text{ К})$ примерно в 10^2-10^3 раз слабее, чем при $T_B = 100$ К, но свидетельствует о участии V_K -центров в ТР еще при $T_B > T_d(V_K)$.

Уже неоднократно обсуждалось, что сравнительно интенсивное излучение в В-полосе обусловлено ТР TI^0 -центров с V_K - и TI^{2+} -центрами. Однако, даже после длительной выдержки ($t \sim 10^4 - 10^5$ с) при 77 К предварительно возбужденных кристаллов еще наблюдаются интенсивные V_K - и TI^0 -пики ТСЛ. С целью оценить долю туннельно прорекомбинировавших TI^0 -, V_K - и TI^{2+} -центров от общего их числа нами была измерена ТСЛ до и после долгой вы-

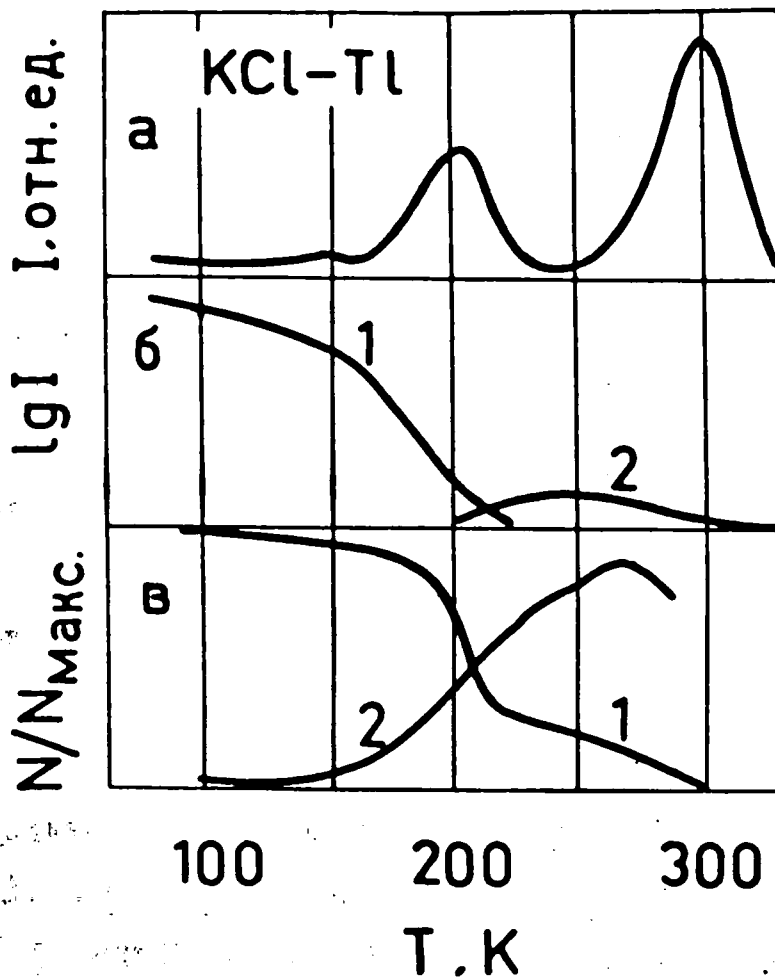


Рис.3.2. Люминесценция кристаллов KCl-Tl: а) интегральная ТСЛ; б) ЭТЛ (T_B) в полосах излучения с максимумами 2,9 эВ (1) и 2,65 эВ; в) относительная концентрация V_k -центров (1) (по данным ЭПР [157]) и Tl^{2+} -центров (2) (детектирована по Tl^0 -вспышке активной люминесценции в зависимости от T_B).

держки образца при 77 К. В первой серии измерений образец после возбуждения при $T_B \in (100 \text{ К}, 300 \text{ К})$ быстро охлаждался до 77 К. Через сравнительно короткое, зависящее от скорости охлаждения, время $t_1 = 50-100 \text{ с}$ ($t = 0$ в момент выключения возбуждения) в линейном режиме нагрева ($T(t) = 77 \text{ К} + \beta t$; $\beta = 0,1 \text{ К/с}$) высвечивалась светосумма, накопленная при рентгеновском возбуждении. Во второй серии измерений режимы возбуждения и охлаждения образца полностью повторялись, но время выдержки было увеличено до $t_2 \sim 10^4 \text{ с}$. Отношения светосумм, высвеченных в V_K - и TI^0 -пиках ТСЛ, мало отличались от единицы. Для характеристики доли V_K - и TI^0 -центров, туннельно прорекомбинировавших за время выдержки от t_1 до t_2 , введен коэффициент

$$\xi(t_2/t_1) \equiv 1 - (S_{t_2}/S_{t_1}).$$

Оказывается, что $\xi(t_2/t_1, V_K)$ и $\xi(t_2/t_1, TI^0)$ для V_K - и TI^0 -пиков ТСЛ в пределах экспериментальной ошибки совпадают. Можно отметить, что коэффициент $\xi(t_2/t_1)$ с ростом T_B уменьшается весьма медленно, за исключением небольшого скачка в районе V_K -пика ТСЛ. Средние значения коэффициента $\xi(t_2/t_1)$ в областях $T_B \in (100 \text{ К}, 200 \text{ К})$ и $T_B \in (200 \text{ К}, 300 \text{ К})$ равняются соответственно 4-6% и 2-4% при $t_1 = 10^2 \text{ с}$ и $t_2 = 10^4 \text{ с}$. Полученные результаты показывают, что в ТЛ, измеренной в пределах двух порядков по времени, высвечиваются несколько процентов из общего числа накопленных V_K , TI^0 - и, видимо, TI^{2+} -центров.

3.1.2. Спектры и кинетика рекомбинационной люминесценции при оптической подсветке в 1,9 эВ полосе поглощения TI^0 -центров

Изучение фотостимулированных дырочных рекомбинационных процессов в КСИ-ТИ затруднено перекрытием полос поглощения электронных и дырочных центров и малой, по сравнению с электронами, подвижностью делокализованных дырок. В этой связи нами исследо-

ваны эффекты, связанные с оптической подсветкой только в полосах поглощения электронных центров. Всякая фотообработка образца, также как измерение ТЛ, проведена при 77 К.

Интенсивность интегральной ТЛ после подсветки в TI^0 (1,9 эВ) - или F (2,3 эВ) - полосах поглощения значительно возрастает. TI^0 -вспышка ТЛ (В-полоса излучения ФСЛ во время TI^0 -подсветки), а также ТЛ после TI^0 -подсветки примерно в 140 раз ярче, чем в случае F -подсветки, поэтому обычно применялась TI^0 -подсветка. Обнаружено, что спектр ТЛ после облучения кристалла TI^0 -подсветкой смещается в коротковолновую сторону по сравнению с спектром ТЛ до TI^0 -подсветки при любой $T_B \in (160 \text{ К}, 250 \text{ К})$. При этом величина сдвига максимума полосы ТЛ зависит от T_B немонотонно, но не превышает 0,16 эВ (при $T_B = 235 \text{ К}$, рис.3.1б). При $T_B > 260 \text{ К}$ сдвиг максимума полосы вследствие TI^0 -подсветки практически не наблюдается. При этом интенсивность интегральной ТЛ возрастает, но спектры ТЛ до и после TI^0 -подсветки в пределах экспериментальной ошибки совпадают.

Наряду с изучением спектров ТЛ после TI^0 -подсветки предварительно возбужденных при $T_B \in (77 \text{ К}, 260 \text{ К})$ кристаллов КС1-Т1 рассматривались также спектры TI^0 -вспышки ТЛ. Установлено, что контур спектральной полосы TI^0 -вспышки ТЛ занимает промежуточное положение между полосами ТЛ до и после TI^0 -подсветки при той же $T_B \in (160 \text{ К}, 250 \text{ К})$ (рис.3.1б). При $T_B < 150 \text{ К}$ спектр TI^0 -вспышки ТЛ не зависит от T_B и практически совпадает со спектрами В-полосы РЛ и ТЛ при $T_B = 100 \text{ К}$ (рис.3.1в). Следовательно, максимум В-полосы TI^0 -вспышки при изменении T_B от 77 К до 280 К всегда находится в пределах 2,7-2,9 эВ. Отметим, что контур спектра TI^0 -вспышки активаторной люминесценции (АЛ) не зависит от T_B и совпадает с УФ-полосой РЛ и ТЛ при $T_B = 100 \text{ К}$. Разработанная нами методика скрещенных световых затворов

позволила измерить спектры фотостимуляции ТЛ. Следует обратить внимание на одну важную особенность этой методики. Если при изучении обычных спектров фотостимуляции оптической вспышки ответная люминесценция наблюдается под оптической подсветкой, то в случае спектров фотостимуляции ТЛ измеряется инерционное послесвечение ($\tau > 1$ с), когда оптическая подсветка уже выключена. Эта особенность позволяет измерить спектр стимуляции также в области сильного его перекрывания со спектром испускания - ТЛ. Спектры фотостимуляции ТЛ и оптической вспышки АЛ (рис. 3.3), как обычно, нормированы на единичную интенсивность оптической подсветки при соответствующей длине волны. В этой связи можно отметить, что спектральное распределение оптической подсветки было измерено с помощью органического люминофора: раствор 8 мг родамина Б в 1 мл этиленгликоля [170]. На всех спектрах стимуляции отчетливо выделяются полосы с максимумами 2,0 эВ и 2,4 эВ. Нет сомнений, что возникновение этих полос обусловлено поглощением света Ti^{O} - и F-центрами. Положение максимумов спектров стимуляции сдвинуто в коротковолновую сторону на 0,1 эВ относительно полос поглощения Ti^{O} (1,9 эВ)- и F (2,3 эВ)- центров. Это вызвано, по всей вероятности, отклонениями истинного спектрального распределения оптической подсветки от экспериментально определенного. Спектры стимуляции после возбуждения кристалла при $T_{\text{B}} = 80 \text{ K} < T_{\text{d}}(V_{\text{K}})$ и $T_{\text{B}} = 253 \text{ K} > T_{\text{d}}(V_{\text{K}})$ в общих чертах не отличаются: положение соответствующих максимумов не изменяется. Так как присутствие или отсутствие V_{K} -центров не влияет на спектры стимуляции ТЛ, то участие V_{K} -центров в фотостимулированных процессах, видимо, малоэффективно в спектральной области ниже 3 эВ. Совпадение максимумов спектров стимуляции ТЛ и оптической вспышки АЛ, а также их корреляция со спектрами оптического поглощения Ti^{O} - и F-

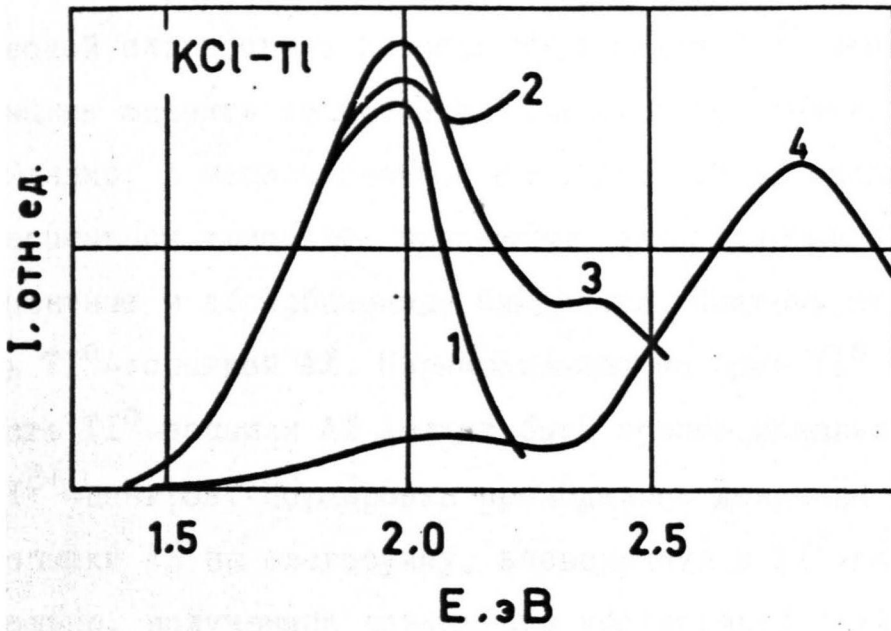


Рис.3.3. Спектры фотостимуляции туннельной (1,3) и активаторной (2,4) люминесценции при $T_B = 80$ К (1,2) и $T_B = 253$ К (3,4).

центров позволяют заключить, что влияние оптической подсветки на ТЛ обусловлено главным образом электронными процессами.

Результаты по измерению ТЛ после термообработки образца не позволили проследить изменения концентрации TI^{2+} -центров в зависимости от возрастания T_B . Очевидно, по данным приведенной оптической плотности в полосах поглощения TI^{2+} -центров можно в принципе оценить по крайней мере их относительную концентрацию. Однако, в использованном нами термически малоинерционном люминесцентном кристате невозможно одновременно провести люминесцентные и абсорбционные измерения. Поэтому мы воспользовались TI^0 -вспышкой АЛ. Нормированная на один TI^0 -центр интенсивность TI^0 -вспышки АЛ должна быть пропорциональной концентрации TI^{2+} -центров. Нормировка проводилась делением интенсивности TI^0 -вспышки АЛ на светосумму, высвеченную в TI^0 -пике ТСЛ. Действительно, полученные результаты убедительно показывают, что увеличение T_B приводит к росту относительной концентрации TI^{2+} -центров, что и ожидалось (рис.3.2).

TI^0 -вспышка ТЛ и АЛ согласно общепринятой терминологии представляет собой ФСЛ. При этом известно, что TI^0 (также и F) -вспышка АЛ возникает при рекомбинации свободных электронов с TI^{2+} -центрами. Однако, природа рекомбинационного процесса, порождающего TI^0 -вспышку ТЛ, не столь очевидна. В этой связи нами изучались не только спектры, но и кинетика TI^0 -вспышки и В- и УФ-полосах излучения при некоторых интенсивностях TI^0 -подсветки и различных T_B . Общие закономерности кинетики разгорания TI^0 -вспышки как в В-, так и в УФ-полосах излучения не зависят от T_B , поэтому более подробно рассмотрим лишь случай $T_B = 260$ К. Существенно отличаются стадии разгорания в В- и УФ-полосах TI^0 -вспышки (рис.3.4). Установлено, что TI^0 -вспышка АЛ независимо от интенсивности TI^0 -подсветки "без-

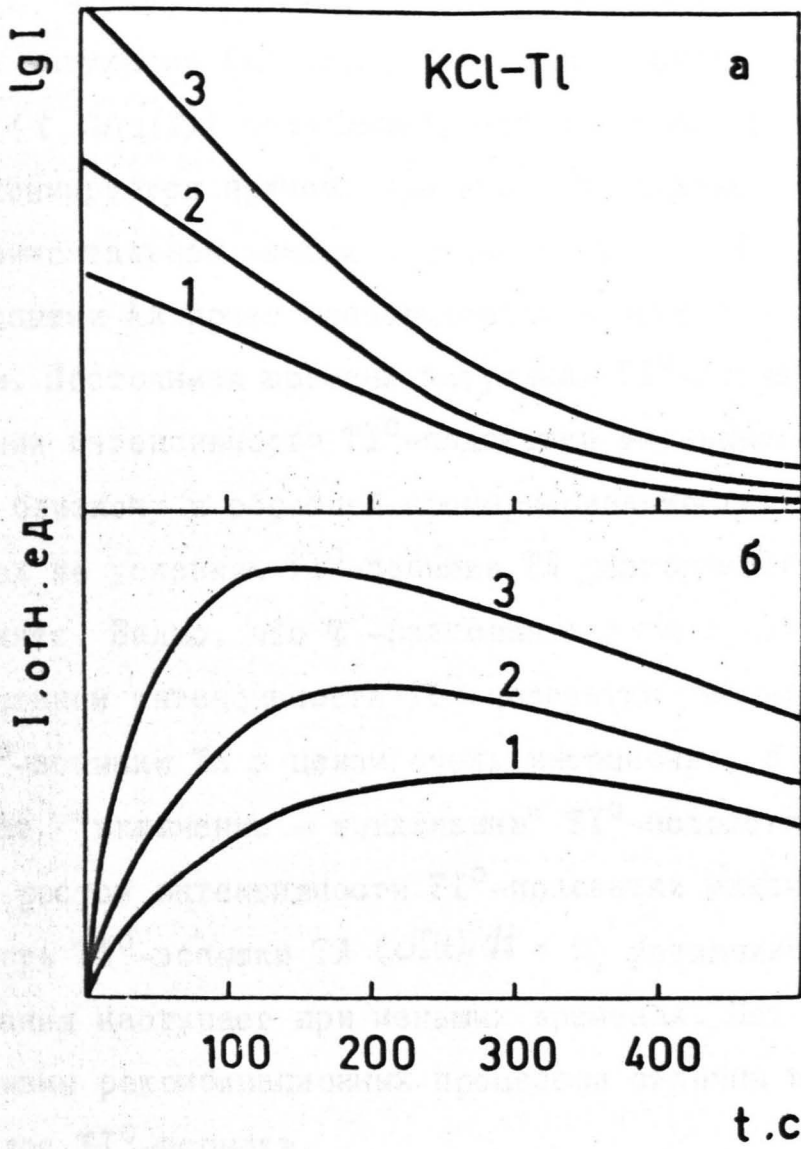


Рис.3.4. Кинетики Tl^0 -вспышки активаторной (а) и туннельной (б) люминесценции при различных интенсивностях Tl^0 -подсветки (1,9 эВ) - $J_1(1):J_2(2):J_3(3) \approx 1:2:3$ при $T_B = 260$ К.

инерционно" следует "включению-выключению" TI^0 -подсветки. Быстрый спад интенсивности TI^0 -вспышки АЛ, очевидно, связан с эффективным опустошением электронных (TI^0 -центры) и дырочных (TI^{2+} -центры) ловушек во время TI^0 -подсветки. Построение кривых затухания TI^0 -вспышки АЛ в полупологарифмических координатах ($t, \ln I(t)$) показывает, что их начальная стадия хорошо аппроксимируется прямой. При этом обнаружено, что в пределах экспериментальной ошибки начальная ($t = 0 \pm 1$ с) интенсивность TI^0 -вспышки АЛ прямо пропорциональна интенсивности TI^0 -подсветки. Постоянная времени затухания TI^0 -вспышки АЛ при возрастании интенсивности TI^0 -подсветки уменьшается согласно закону, близкому к обратной пропорциональности. В то же время при тех же условиях TI^0 -вспышка ТЛ разгорается несравнимо медленнее. Видно, что τ -разгорания оптической вспышки при возрастании интенсивности TI^0 -подсветки уменьшается. Кинетика TI^0 -вспышки ТЛ в целом очень инерционно, с запаздыванием, следует "включению - выключению" TI^0 -подсветки. Обнаружено, что с ростом интенсивности TI^0 -подсветки максимальная интенсивность TI^0 -вспышки ТЛ ($dI(t)/dt = 0$) увеличивается, а стадия затухания наступает при меньших временах. Нет сомнений, что механизмы рекомбинационных процессов отличны в случаях В- и УФ-полос TI^0 -вспышки.

3.2. Туннельная люминесценция пар $\{TI^0-TI^{2+}\}$ в KCl-Tl и туннельно-рекомбинационный механизм TI^0 -вспышки ТЛ

Коротко подытожим описанные в пп. 3.1.1 и 3.1.2 экспериментальные результаты по влиянию термо- и фотообработки образца на спектры ТЛ кристаллов KCl-Tl.

1) Спектр ТЛ с ростом T_B смещается в длинноволновую сторону. Предельными значениями максимума полосы ТЛ являются 2,90

эВ и 2,65 эВ при $T_B < 150$ К и $T_B > 260$ К соответственно.

2) Спектр ТЛ при $T_B \in (150 \text{ К}, 260 \text{ К})$ после воздействия TI^0 -подсветки смещается в коротковолновую сторону относительно спектра ТЛ до подсветки. Наибольшее расхождение ($\sim 0,16$ эВ) максимумов полос ТЛ до и после TI^0 -подсветки при возрастании T_B обнаружено при $T_B = 235 \text{ К} \pm 3 \text{ К}$.

3) При $T_B < 150$ К и $T_B > 260$ К спектры ТЛ до и после TI^0 -подсветки в пределах экспериментальной ошибки ($\pm 0,05$ эВ) совпадают.

4) При $T_B \in (150 \text{ К}, 260 \text{ К})$ В-полоса TI^0 -вспышки занимает промежуточное положение между спектрами ТЛ до и после TI -подсветки. Максимум В-полосы TI^0 -вспышки при $T_B = 100$ К и $T_B = 280$ К имеет значения 2,9 эВ и $\sim 2,7$ эВ соответственно.

5) Кривая ЭАТЛ (T_B) имеет два более крутых спада в температурных областях термического разрушения V_K - и TI^0 -центров. При $T_B > 320$ К ТЛ либо отсутствует, либо послесвечение становится слабее предельной чувствительности измерительной аппаратуры.

6) Термическая реориентация и разрушение V_K -центров ($T_B > 170$ К) приводит к перелокализации дырок на TI^+ -центры. Присутствие V_K -центров обнаружено до $T_B = 250 - 260$ К.

Выше изложенные экспериментальные факты по сдвигу спектра ТЛ, расхождению спектров ТЛ до и после TI^0 -подсветки, а также по смещению В-полосы РЛ с ростом T_B можно объяснить предположением о наличии двух по контуру близких спектральных полос с максимумами при 2,90 эВ и 2,65 эВ. Первая из них является хорошо известной полосой ТЛ пар $\{TI^0 - V_K\}$ [41, 44], рассмотренных нами в п.2.4. Вторая из этих полос при 2,65 эВ, по всей вероятности, обусловлена ТР в парах $\{TI^0 - TI^{2+}\}$. Участие других, более стабильных, чем V_K , дырочных центров типа V_{Ka} и XU^- , по-видимому, очень маловероятно или вообще отсутствует. Это

подтверждается следующими соображениями. Известно, что в кристаллах KCl в температурной области (210 К, 300 К) между обоими спадами ЭАТЛ (T_B) термически разрушаются такие дырочные центры как V_F (240 К) [159], ICl^- (250 К) [158], $V_{KA(Na)}$ (265 К) [159] и V^+Cl^- (275 К) [160]. Если бы эти центры участвовали в излучательной ТР, то их термическое разрушение проявилось, видимо, на кривой ЭАТЛ (T_B) в виде некоторой более тонкой структуры в области $T_B \in (240 \text{ К}, 275 \text{ К})$. При измерении ЭАТЛ (T_B) шаг приращения T_B равнялся 5 К, однако, какая-либо тонкая структура ЭАТЛ (T_B) в рассматриваемой температурной области не была обнаружена. Анализ кривых ТСЛ также позволяет заключить, что в температурной области (210 К, 300 К) термопики обусловленные ДРЛ, отсутствуют. Таким образом, в температурной области (210 К, 260 К) в качестве дырочной компоненты туннельной пары выступают TI^{2+} - и, отчасти, V_K -центры, но вклад последних в ТР с ростом T_B быстро уменьшается. Следовательно, дырочной компонентой туннельных пар при $T_B > 260 \text{ К}$ несомненно являются TI^{2+} -центры.

Хотя примененные нами дозы возбуждения ТЛ малы (см. п.2.3), F-вспышка ТЛ и АЛ, а также независимые измерения наведенной оптической плотности, указывают на присутствие F-центров. Следовательно, во всей области (77 К, 320 К), кроме TI^0 -центров, с TI^{2+} -центрами могут в принципе прорекомбинировать также F-центры. Однако, вклад возможной ТЛ пар {F - TI^{2+} } в данном случае пренебрежимо мал, ибо ТЛ при $T_B > 320 \text{ К}$ отсутствует, хотя F- и TI^{2+} -центры термически еще стабильны. Отсутствие излучения {F - V_K } пар в V_K -пике ТСЛ и реабсорбции ТЛ F-центрами в температурной области (77 К, 320 К) позволяет заключить, что концентрация F-центров гораздо меньше (в $\sim 10^2$ раз) концентрации TI^0 -центров. Из приведенного выше анализа следует, что из-

лучение с максимумом 2,65 эВ несомненно обусловлено ТР в парах $\{TI^0 - TI^{2+}\}$. Увеличение концентрации пар $\{TI^0 - TI^{2+}\}$ с ростом T_B смещает спектр ТЛ в длинноволновую сторону. TI^0 -подсветкой изменяется соотношение концентраций пар $\{TI^0 - TI^{2+}\}$ и $\{TI^0 - V_K\}$ в пользу последних, что объясняет сдвиг спектра ТЛ после облучения в коротковолновую сторону и прочие эффекты (см. выше 3) и 4)), связанные с фотообработкой образца.

Рассмотрим процессы генерации и разрушения туннельных пар, обуславливающие возрастание интенсивности ТЛ после TI^0 -подсветки предварительно возбужденных кристаллов. Основное внимание обратим на генерацию пар $\{TI^0 - TI^{2+}\}$, ответственных за излучение в полосе с максимумом 2,65 эВ. Следует отметить, что интенсивность ТЛ зависит не только от концентрации туннельных пар, а также от их пространственного распределения $n^*(r,t)$ и вероятности электронного туннельного перехода $w(r)$ (см. п.4.1). Очевидно, в случае KCl-TI процессы генерации туннельных пар (с учетом сближения электронной и дырочной компонент уже существующих до TI^0 -подсветки пар) преобладают над процессами разрушения созданных уже рентгеновским возбуждением "старых" или TI^0 -подсветкой новых туннельных пар. Рентгеновское возбуждение кристаллов KCl-TI при $T_B > T_d (V_K)$ приводит к созданию преимущественно TI^0 -, TI^{2+} - и некоторой доли F-, V_K -центров. Так как ТЛ при $T_B \in (210 \text{ K}, 300 \text{ K})$ обусловлена в основном ТР в парах $\{TI^0 - TI^{2+}\}$, то анализ рассматриваемого эффекта прироста интенсивности ТЛ после TI^0 -подсветки проведем на примере этих пар. Однако, можно уже сейчас сказать, что все полученные ниже выводы в полной мере распространяемы на случай ТЛ пар $\{TI^0 - V_K\}$.

Подсветка в полосе поглощения с максимумом 1,9 эВ TI^0 -центров приводит к фотоионизации этих центров [161]. Следователь-

но, примененная нами TI^0 -подсветка генерирует в единицу времени определенное количество свободных электронов, концентрация которых обусловлена вероятностью фотоионизации, интенсивностью подсветки и концентрацией TI^0 -центров. В ШГК свободный пробег зонных электронов небольшой и не превышает два-три десятка постоянных решетки. Так, по данным проводимости в КСИ свободный пробег зонных электронов составляет ~ 10 постоянных решетки [65]. Для оценки размеров области взаимодействия зонных электронов с локализованными на TI^+ -центрах дырками используем так называемый радиус захвата R_3 , который, согласно [163] вычисляется из уравнения

$$V(R_3) = (3/2) kT, \quad (3.1)$$

где $V(R_3)$ - потенциальная энергия зонного электрона в поле TI^{2+} -центра, k - постоянная Больцмана, T - температура в К. Аппроксимируя зонный электрон и TI^{2+} -центр точечными зарядами, в континуальном приближении кристаллической среды при достаточно медленном движении электрона находим, что R_3 при 77 К равен $\sim 48a$, где a - постоянная решетки. При расчете R_3 мы предполагаем, что созданный фотоионизацией TI^0 -центров газ свободных электронов быстро ($\tau \ll 10^{-8}$ с) термализуется и находится в термодинамическом равновесии с решеткой. Радиус захвата R_3 с ростом температуры уменьшается: при 100 К и 300 К имеем соответственно значения $\sim 37a$ и $\sim 13a$. Из (3.1) следует, что после того, как электрон попал в сферу захвата TI^{2+} -центра ($r \leq R_3 \approx 48a$), он уже нашел "своего" рекомбинационного партнера. Так как свободный пробег зонного электрона ($l \sim 10a$) мал по сравнению с радиусом захвата R_3 , то, строго говоря, движение электрона следовало бы описывать в рамках диффузионной теории [163]. Однако, рассмотрение электронных рекомбинационных процессов в газокинетическом приближении также для ШГК

до сих пор привело к результатам, хорошо согласующимся с экспериментальными данными [65].

Оценим пространственное расположение TI^0 - и TI^{2+} -центров в предположении, что TI^{2+} -центры размещены в кристалле случайно (стохастическое распределение). Среднее расстояние в единицах постоянной решетки между стохастически распределенными дефектами находим по формуле [164]

$$\langle r \rangle = 0,5539 \{ [A] \cdot a^3 \}^{-1/3}, \quad (3.2)$$

где $[A]$ - средняя макроскопическая концентрация дефектов в см^{-3} ; a - постоянная решетки в см. Для концентрации TI^+ -центров, равной 0,2 мол.%, согласно (3.2); получаем $\langle r(\text{TI}^+ - \text{TI}^+) \rangle = 3a$. По данным оптического поглощения оценено, что после возбуждения образцов дозами, примерно одинаковыми с примененными нами, несколько процентов из начально присутствующих TI^+ -центров превращаются в TI^0 - и TI^{2+} -центры [41]. Предполагая, что $[\text{TI}^0] \simeq [\text{TI}^{2+}] = 0,01 \cdot [\text{TI}^+]$ ($[\text{TI}^0]$, $[\text{TI}^{2+}]$ и $[\text{TI}^+]$ - концентрации TI^0 -, TI^{2+} - и TI^+ -центров), из (3.2) находим, что $\langle r(\text{TI}^0 - \text{TI}^0) \rangle = \langle r(\text{TI}^{2+} - \text{TI}^{2+}) \rangle \simeq 13a$. При пренебрежении обусловленных кулоновским взаимодействием эффектами пространственной корреляции TI^0 - и TI^{2+} -центров можно сказать, что TI^{2+} -центр находится в пуассоновском поле TI^0 -центров, или наоборот. Расчет среднего расстояния от TI^{2+} -центра до ближайшего TI^0 -центра дает такое же значение: $\langle r(\text{TI}^{2+} - \text{TI}^0) \rangle \sim 13a$. Если построить вокруг TI^{2+} -центра сферу радиусом $r \sim 13a$, то нетрудно оценить отношение вероятностей событий обнаружить в этой сфере а) хотя бы один TI^0 -центр и б) еще один TI^{2+} -центр. В случае реализации стохастического распределения TI^0 - и TI^{2+} -центров можно использовать формулу [165, 166]

$$p(s, \Delta V) = ([A] \Delta V)^s \exp(-[A] \Delta V) / s!, \quad (3.3)$$

где $p(s, \Delta V)$ - вероятность обнаружить в объеме ΔV S -дефектов; $S = 0, 1, 2, 3, \dots$; $\Delta V \ll 1 \text{ см}^3$. Согласно (3.3) находим, что отношение вероятностей реализации событий а) и б) равно ~ 4 . Учет пространственной корреляции TI^0 -, TI^{2+} -центров должен, разумеется, еще увеличить отношение вероятностей а)/б). Изложенный выше анализ показывает, что при данной $[\text{TI}^+] = 0,2 \text{ мол.}\%$ $\langle r(\text{TI}^0 - \text{TI}^{2+}) \rangle < R_3$ и большая часть TI^0 -, TI^{2+} -центров именно в этом смысле являются спаренными. Поэтому "в среднем" все локализованные на TI^0 -центрах электроны уже до фотоионизации оказываются "захваченными" TI^{2+} -центрами. Однако, это еще не говорит о том, что буквально все электроны на TI^0 -центрах уже заранее "знают" своего рекомбинационного партнера. Небольшая доля зонных электронов после фотоионизации TI^0 -центров, в действительности, окажется вне сферы захвата TI^{2+} -центров. Их движение можно считать свободным.

Продолжим анализ движения "среднего" зонного электрона, который уже "знает" свой TI^{2+} -центр. Ясно, что "средний" электрон неизбежно прорекомбинирует с TI^{2+} -центром, если между рассмотренными TI^0 - и TI^{2+} -центрами не найдется хотя бы один TI^+ -центр. По всей вероятности, именно силовая линия (прямая, соединяющая TI^0 - и TI^{2+} -центры) является наиболее выгодной траекторией движения электрона на TI^{2+} -центр. В этой связи выделим цилиндрический объем \tilde{V} между TI^0 - и TI^{2+} -центрами с поперечным сечением $\sigma_3 = \pi a^2$ и высотой, равной $\langle r(\text{TI}^0 - \text{TI}^{2+}) \rangle \approx 13a$. При этом, следуя [65], мы приняли, что сечение захвата электронов TI^+ -центром равно πa^2 . Нетрудно определить вероятности реализации следующих трех событий: А - объем $\tilde{V} = \pi \cdot a^2 \cdot \langle r(\text{TI}^0 - \text{TI}^{2+}) \rangle$ пустует; В - в объеме \tilde{V} находится, по меньшей мере, один TI^+ -центр и С - в объеме \tilde{V} находится один и только один TI^+ -центр. Учитывая, то, что объем

вырезан в пуассоновском поле Tl^+ -центров и $\tilde{V} \ll 1 \text{ см}^3$, мы используем формулу (3.3). Таким образом, вероятности $P(A)$, $P(B)$ и $P(C)$ реализации событий A, B , и C , согласно (3.3), можно вычислить из следующих соотношений

$$P(A) = p(0, \tilde{V}), \quad P(B) = 1 - p(0, \tilde{V}) \quad \text{и} \quad P(C) = p(1, \tilde{V}). \quad (3.4)$$

Подстановка конкретных данных о рассматриваемом примесном кристалле ($[Tl^+] = 0,2 \text{ мол.}\%$, $\tilde{V} = 13 \pi \text{ а}^3$) в (3.4) позволила оценить, что $P(A) \simeq 0,72$, $P(B) \simeq 0,28$ и $P(C) \simeq 0,24$. Полученные оценки приводят к заключению, что из каждых трех электронов только двум удастся непосредственно прорекомбинировать с Tl^{2+} -центрами, а каждый третий захватывается Tl^+ -центрами. Ясно, что вероятность выживания „незахваченных“ до Tl^0 -подсветки электронов ($\nu(Tl^0 - Tl^{2+}) > R_3$) вследствие увеличения числа возможных соударений с Tl^+ -центрами должна быть несколько больше, чем та же вероятность ($P(B)$) заранее „захваченных“ электронов ($\nu(Tl^0 - Tl^{2+}) < R_3$). Малое отличие вероятностей $P(B)$ и $P(C)$ убедительно показывает, что в объеме \tilde{V} гораздо чаще обнаружим только один Tl^+ -центр ($P(B) \simeq P(C)$). Вероятность найти в объеме \tilde{V} $S = 2, 3, 4, \dots$ Tl^+ -центров быстро падает с увеличением S . Отсюда заключаем, что повторное высвобождение перехваченных Tl^+ -центрами электронов с близкой к единице вероятностью приводит к неизбежной их рекомбинации с Tl^{2+} -центрами уже во время Tl^0 -подсветки. В таком случае после выключения Tl^0 -подсветки не удалось бы обнаружить прирост интенсивности ТЛ, что противоречит экспериментальным фактам. Следовательно, плотность потока фотонов примененной нами Tl^0 -подсветки невысокая и соответствующие дозы небольшие, ибо двух-, трех- и т.д. - кратное высвобождение одного и того же электрона происходит очень редко. Интересно отметить, что многократный переброс электрона Tl^0 -подсветкой по цепочке Tl^+ -центров до рекомбинации с

TI^{2+} -центрам можно рассматривать как фотостимулированную прыжковую диффузию TI^0 -центров. Это имеет место, по-видимому, в случае больших $[\text{TI}^+]$ и малых $[\text{TI}^0]$ и $[\text{TI}^{2+}]$ ($[\text{TI}^0] = [\text{TI}^{2+}] \sim \sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$), когда свободный пробег электронов лимитируется TI^+ -центрами.

Изложенные выше пространственно-геометрические представления о взаимном распределении TI^+ -, TI^0 - и TI^{2+} -центров позволяют определить относительный выход создания возбужденных TI^+ -центров и новых туннельных пар $\{\text{TI}_i^0 - \text{TI}^{2+}\}$ при TI^0 -подсветке. Индекс "i" в $\{\text{TI}_i^0 - \text{TI}^{2+}\}$ указывает, что TI_i^0 создан при захвате электрона TI^+ -центром, случайно расположенным между рассматриваемыми TI^0 - и TI^{2+} -центрами. Видимо, расстояние $r(\text{TI}^0 - \text{TI}^{2+}) \sim 10-13 \text{ \AA}$ настолько большое, что вероятность ТР пренебрежимо мала. Поэтому спаренные лишь по критерию $r(\text{TI}^0 - \text{TI}^{2+}) < R_3$ TI^0 - и TI^{2+} -центры, очевидно, еще нельзя считать туннельными парами, ибо время жизни таких пар во многом превышает реально доступные в эксперименте времена ($t \sim 10^4 - 10^5 \text{ с}$). Эффективный вклад в наблюдаемую ТЛ ($t < < 10^5 \text{ с}$) дают более близкие пары TI^0 - и TI^{2+} -центров с $r(\text{TI}^0 - \text{TI}^{2+}) < 10 \text{ \AA}$, которые, по всей вероятности, создаются во время TI^0 -подсветки. Подчеркнем, что приведенные нами здесь цифры для абсолютного расстояния эффективной ТР TI^0 - и TI^{2+} -центров носят оценочный характер, для уточнения которых необходимы данные о боровских радиусах TI^0 - и TI^{2+} -центров [56]. Сравнение светосумм, измеренных в V_k - и TI^0 -пиках ТСЛ до и после долгой выдержки ($t \approx 10^4 - 10^5 \text{ с}$) предварительно возбужденного кристалла при низкой температуре ($T < T_d$) позволяет заключить, что за этот промежуток времени туннельно прорекомбинировали несколько процентов от всех присутствующих V_k - и TI^0 -центров. Соотношения этих светосумм подтверждают, что на-

ша оценка расстояния эффективной ТР TI^0 - и TI^{2+} -центров $r(TI^0 - TI^{2+}) < 10$ а разумна: в экспериментально наблюдаемой ТР участвуют лишь более близко расположенные TI^0 - и TI^{2+} -центры. Количество близких пар $\{TI^0 - TI^{2+}\}$ небольшое по сравнению с общим числом пар $(TI^0 - TI^{2+})$, для которых $r(TI^0 - TI^{2+}) < R_3$, поэтому число созданных TI^0 -подсветкой новых туннельных пар $\{TI_i^0 - TI^{2+}\}$ значительно превышает число разрушенных "старых" туннельных пар $\{TI^0 - TI^{2+}\}$.

3.3. Кинетика TI^0 -вспышки в УФ- и В-полосах излучения кристаллов KCl-Tl

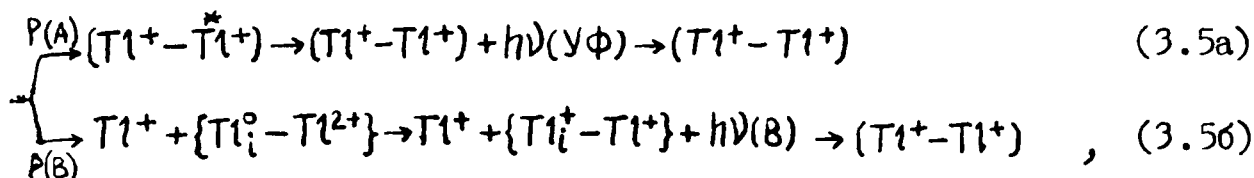
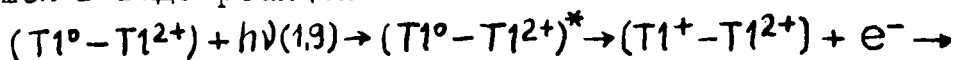
Прежде чем перейти к феноменологическому рассмотрению кинетики TI^0 -вспышки напомним основные ее свойства. По экспериментальным кривым кинетики TI^0 -вспышки в УФ- и В-полосах излучения можно было сделать следующие выводы.

1) Стадия разгорания TI^0 -вспышки АЛ во много раз короче временного разрешения ~ 1 с измерительной установки. Соответствующая кинетика безинерционно следует "включению-выключению" TI^0 -подсветки независимо от ее интенсивности. Обнаружено, что начальная ($t = 0^{\pm 1}$ с) интенсивность TI^0 -вспышки АЛ прямо пропорциональна, а постоянная времени затухания τ_3 TI^0 -вспышки АЛ обратно пропорциональна интенсивности TI^0 -подсветки.

2) TI^0 -вспышка ТЛ обладает значительной, по сравнению с ~ 1 с, инерционностью, зависящей от интенсивности TI^0 -подсветки. На кинетике TI^0 -вспышки ТЛ можно выделить все три стадии: разгорание ($dI(t)/dt > 0$), в коротком промежутке времени стационарный режим свечения ($dI(t)/dt = 0$) и затухание ($dI(t)/dt < 0$). Стадия разгорания становится короче, а стационарное значение интенсивности TI^0 -вспышки ТЛ возрастает при увеличении интенсивности TI^0 -подсветки.

Близкое по сравнению с $R_3 \sim 48$ а взаимное пространственное расположение TI^0 - и TI^{2+} -центров позволяет рассматривать кинетику TI^0 -вспышки в мономолекулярном приближении. Это отнюдь не отрицает возможности при определенных условиях описывать ту же кинетику TI^0 -вспышки согласно бимолекулярной реакции и при этом добиваться неплохого совпадения с экспериментальными кривыми. Так, на основании проведенного в п.3.2 анализа мы предполагаем, что все TI^0 - и TI^{2+} -центры спарены между собой по критерию $\kappa(TI^0 - TI^{2+}) < R_3$, ибо вероятность обнаружить в сфере захвата TI^{2+} -центра более одного TI^0 -центра будет малой, особенно с учетом пространственной корреляции TI^0 - и TI^{2+} -центров.

Рассматриваемый нами рекомбинационный процесс условно запишем в виде реакций



где $(TI^0 - TI^{2+})$ - пара TI^0 - и TI^{2+} -центров, для которой $\kappa(TI^0 - TI^{2+}) < R_3$; $(TI^0 - TI^{2+})^*$ - та же пара TI^0 - и TI^{2+} -центров после поглощения фотона $h\nu$ (1.9); Ti^+ - возбужденное состояние TI^+ -центра; $(TI^+ - TI^+)$ - пара TI^+ -центров как основное состояние пары $(TI^0 - TI^{2+})^*$; e^- - электрон; $\{TI_i^0 - TI^{2+}\}$ - созданная в рекомбинационном процессе новая туннельная пара, для которой $\kappa(TI_i^0 - TI^{2+}) < \kappa(TI^0 - TI^{2+})$; $\{TI_i^+ - TI^+\}$ - пара TI^+ -центров как основное состояние пары $\{TI_i^0 - TI^{2+}\}$ после ее спонтанного распада; Ti_i^+ - случайный "промежуточный" TI^+ -центр между спаренными TI^0 - и TI^{2+} -центрами; $h\nu$ (1.9), $h\nu(УФ)$ и $h\nu(B)$ - энергия фотонов TI^0 -подсветки и TI^0 -вспышки в УФ- и В-полосах излучения. Так как

"в среднем" все TI^0 - и TI^{2+} -центры являются взаимно спаренными, то кинетика реакций (3.5а,б) и ими обусловленной АЛ и ТЛ описывается уравнениями (см. также п.4.3)

$$d[(TI^0-TI^{2+})^*]_t/dt = -[(TI^0-TI^{2+})^*]_t/\tau + \kappa \mathcal{F}_\phi [(TI^0-TI^{2+})]_t, \quad (3.6)$$

$$d[TI^0]_t/dt = -\kappa \mathcal{F}_\phi [TI^0]_t, \quad (3.7)$$

$$[TI^0]_t = [TI^{2+}]_t = [(TI^0-TI^{2+})]_t, \quad (3.8)$$

$$[(TI^0-TI^{2+})^*]_{t=0} = 0, \quad (3.9)$$

$$[(TI^0-TI^{2+})]_{t=0} = [(TI^0-TI^{2+})]_0, \quad (3.10)$$

$$I_\phi(t) = [(TI^0-TI^{2+})^*]_t/\tau, \quad (3.11)$$

где $[(TI^0 - TI^{2+})^*]_t$ и $[(TI^0 - TI^{2+})]_t$ - концентрации пар $(TI^0 - TI^{2+})^*$ и $(TI^0 - TI^{2+})$ в текущий момент времени t ; $\kappa \mathcal{F}_\phi$ - вероятность фотоионизации TI^0 -центров в единицу времени; κ и \mathcal{F}_ϕ - коэффициент пропорциональности и интенсивность TI^0 -подсветки; τ - время жизни возбужденного состояния $(TI^0 - TI^{2+})^*$; $t = 0$ в момент включения TI^0 -подсветки. Решение уравнения типа (3.6) дано и подробно проанализировано в гл.4, п.

4.3. Ниже приведем лишь решение уравнения (3.6) при условии $[(TI^0 - TI^{2+})]_t \approx const$, что всегда имеет место в некоторой небольшой, зависящей от \mathcal{F}_ϕ , окрестности $(t' - \Delta t, t' + \Delta t)$ любой фиксированной точки t' . Так, для небольшой окрестности точки $t' = 0$ с учетом (3.9) и (3.10) имеем

$$[(TI^0-TI^{2+})^*]_t = \kappa \mathcal{F}_\phi [(TI^0-TI^{2+})]_0 \{1 - \exp(-t/\tau)\} \cdot \tau, \quad (3.12)$$

где $t \in (0, \Delta t)$. Подстановка (3.12) в (3.11) приводит к выражению

$$I_\phi(t) = \kappa \mathcal{F}_\phi [(TI^0-TI^{2+})]_0 \{1 - \exp(-t/\tau)\}. \quad (3.13)$$

На основании (3.13) совместно с (3.6) и (3.7) рассмотрим разгорание, стационарный режим и затухание TI^0 -вспышки как в УФ-, так в В-полосах излучения.

Реакция (3.5а) описывает рекомбинационный процесс, порождающий АЛ. В этом случае время жизни пары $(\text{TI}^0 - \text{TI}^{2+})^*$ τ_a равно

$$\tau_a = \tau_{e^-} + \tau^*$$

где τ_{e^-} и τ^* - времена жизни зонного электрона и возбужденного состояния TI^+ -центра. Кинетика разгорания TI^0 -вспышки АЛ, согласно (3.13), определяется постоянной времени $\tau_a \sim 10^{-8}$ с

[168], поэтому интенсивность TI^0 -вспышки АЛ $I_{\phi}^{\text{AL}}(t)$ достигает стационарного значения $I_{\phi, \infty}^{\text{AL}}$ в течении промежутка времени δt близкого к τ_a :

$$|I_{\phi}^{\text{AL}}(t) - I_{\phi, \infty}^{\text{AL}}| / I_{\phi, \infty}^{\text{AL}} < 1\% \quad \text{при } \delta t \geq 5\tau_a.$$

Таким образом, $I_{\phi}^{\text{AL}}(t)$ при $t \sim 10^{-7}$ с достигает своего стационарного значения, соответствующего начальной концентрации $[(\text{TI}^0 - \text{TI}^{2+})]_0$. Вполне аналогично можно показать, что при любом фиксированном $t' > 0$ стационарное значение интенсивности TI^0 -вспышки АЛ $I_{\phi, \infty}^{\text{AL}}(t')$, соответствующее текущей концентрации $[(\text{TI}^0 - \text{TI}^{2+})]_{t=t'}$, установится с постоянной времени $\leq 10^{-7}$ с. Отсюда и следует "безинерционность" TI^0 -вспышки АЛ при "включении-выключении" TI^0 -подсветки (рис.3.4а), если временное разрешение экспериментальной установки гораздо ниже постоянной времени процесса. Ясно, что в случае TI^0 -вспышки АЛ область разгорания свечения короче $\sim 10^{-7}$ с, поэтому нельзя было обнаружить ее в нашем эксперименте с временным разрешением ~ 1 с. В самом деле мы наблюдаем затухание стационарного значения интенсивности TI^0 -вспышки АЛ, зависящей от концентрации $[(\text{TI}^0 - \text{TI}^{2+})]_t$ в текущий момент времени. В этой связи кинетику затухания TI^0 -вспышки АЛ достаточно точно описывает уравнение (3.7), откуда, с учетом (3.8), (3.11) и (3.12), получаем

$$I_{\phi, \infty}^{\text{AL}}(t) = \kappa J_{\phi} P(A) [\text{TI}^0]_0 \exp(-\kappa J_{\phi} t), \quad (3.14)$$

где $[\text{TI}^0]_0 = [\text{TI}^0]_{t=0}$; $P(A)$ - вероятность создания TI^+ -состо-

яния при распаде пары $(TI^0 - TI^{2+})^*$. Из (3.14) видно, что TI^0 -вспышка ЛЛ затухает согласно кинетике первого порядка и ее начальная интенсивность $I_{\phi, \infty}^{\Delta\Delta}(t=0) \sim J_{\phi}$, а постоянная затухания $\tau_3 = [\alpha J_{\phi}]^{-1}$. Можно сказать, что это хорошо согласуется с экспериментальными данными (рис.3.4а).

TI^0 -вспышка ТЛ возникает согласно реакции (3.56). В этом случае созданные TI^0 -подсветкой новые туннельные пары $\{TI_i^0 - TI_i^{2+}\}$ могут отличаться друг от друга расстоянием $r(TI_i^0 - TI_i^{2+})$. Вероятность спонтанного распада $w(r)$ пар $\{TI_i^0 - TI_i^{2+}\}$ экспоненциально убывает с ростом $r(TI_i^0 - TI_i^{2+})$ (см. гл.4). Время жизни пар $\{TI_i^0 - TI_i^{2+}\}$ в случае (3.56) можно представить в виде [56, I72]:

$$\tau_6 = \tau_e + 1/w(r) \approx 1/w(r) = [w_0 \exp(-r/r_0)]^{-1}, \quad (3.15)$$

где w_0, r_0 - феноменологические постоянные. Длительность затухания ТЛ показывает, что времена жизни туннельных пар простираются в чрезвычайно широком временном интервале - $\tau_6 \approx (\sim 10^{-6} \text{с}, \sim 10^5 \text{с})$. При описании кинетики TI^0 -вспышки ТЛ необходимо учитывать ПР так называемых ионизованных туннельных пар $\{TI_i^+ - TI_i^{2+}\} n(r, t)$: при захвате электрона TI_i^+ -центром образуется туннельная пара $\{TI_i^0 - TI_i^{2+}\}$. Для ПР пар $\{TI_i^+ - TI_i^{2+}\}$ с учетом (3.4) имеем

$$[1/P(B)] \cdot \int_0^{\infty} \dot{n}(r, t) dr = [(TI^0 - TI^{2+})]_t = [TI^0]_t = [TI^{2+}]_t. \quad (3.16)$$

Область интегрирования расширена до бесконечности с условием, что $n(r, t) \equiv 0$, если $r > R_3$. Так как $\tau = \tau_6 = 1/w(r)$, то уравнение (3.6) применимо без видоизменений для любой элементарной r -фракции туннельных пар $\{TI_i^0 - TI_i^{2+}\}$, TI_i^0 - и TI_i^{2+} -центры которых размещены на расстоянии $r(TI_i^0 - TI_i^{2+}) \in (r, r+dr)$. Заменой обозначений $[(TI^0 - TI^{2+})^*]_t$ и $[(TI^0 - TI^{2+})]_t$ в (3.7) на $\dot{n}^*(r, t)$ и $n(r, t)$ получаем кинетическое уравнение

$$\begin{cases} dn^*(r,t)/dt = -w(r)n^*(r,t) + \chi J_{\phi} P(\nu)n(r,t) \\ n^*(r,0) = 0; n(r,0) = n_0(r) \end{cases} \quad (3.17)$$

для отдельной элементарной r -фракции пар $\{TI_i^0 - TI^{2+}\}$;

$n^*(r,t)$ — ПР пар $\{TI_i^0 - TI^{2+}\}$. Решение уравнения (3.17) при условии $\partial n(r,t)/\partial t \approx 0$ имеет уже известный вид (3.12). Ки-

нетика разгорания TI^0 -вспышки ТЛ, согласно (3.13) и (3.16),

описывается выражением

$$I_{\phi}^{T\Lambda}(t) = \chi J_{\phi} P(\nu) \int_0^{\infty} n_0(r) \{1 - \exp[-w(r)t]\} dr, \quad (3.18)$$

где $t \in (0, \Delta t)$; Δt — небольшая окрестность точки $t = 0$, в

которой $\partial n(r,t)/\partial t \approx 0$ Понятно, что малоинерционные, по срав-

нению с временным разрешением измерительной аппаратуры, фрак-

ции ($\tau_f < 1$ с) TI^0 -вспышки ТЛ будут "безинерционно" следить

за "включением-выключением" ТЛ подсветки. Разгорание TI^0 -вспыш-

ки ТЛ этих фракций мы не обнаружим, а соответствующая кинетика

затухания будет следовать аналогичному (3.14) закону. Однако,

инерционные фракции ($\tau_f > 1$ с) TI^0 -вспышки ТЛ "не вспыхнут"

сразу после создания соответствующих более далеких туннельных

пар $\{TI_i^0 - TI^{2+}\}$. Интенсивность TI^0 -вспышки ТЛ этих фракций

достигнет своего стационарного значения лишь при $t \gtrsim \tau_f \gg 1$ с,

что в конечном счете обуславливает инерционность разгорания

интегрального свечения (3.18). Кинетика разгорания такого вида

подтверждается экспериментальными кривыми (рис.3.4). Время ус-

тановления стационарного значения интегральной TI^0 -вспышки ТЛ

связано с накоплением более далеких пар $\{TI_i^0 - TI^{2+}\}$ во время

TI^0 -подсветки. Затухание TI^0 -вспышки ТЛ обусловлено, также как

в случае TI^0 -вспышки АЛ, неизбежным разрушением TI^0 -подсветкой

"исходных" пар ($TI^0 - TI^{2+}$), чтобы создать новые пары $\{TI_i^0 - TI^{2+}\}$.

Ресурсы пар ($TI^0 - TI^{2+}$) могут быть возобновлены лишь повтор-

ным рентгеновским возбуждением.

Кинетику разгорания и затухания в случае одной экспоненциальной составляющей, как это имело место в случае TI^0 -вспышки АЛ, можно было представить в аналитическом виде. Анализ же кинетики интегральной TI^0 -вспышки ТЛ в широком временном интервале, разумеется, возможен лишь численно и то при заданном $n_0(r)$. Аналитические выражения удается получить исключительно в некоторых простейших модельных случаях. В качестве примера проанализируем кинетику разгорания (3.18) для равновероятного распределения ионизированных туннельных пар

$$n_0(r) = n_0 = \text{const} . \quad (3.19)$$

Строго говоря, распределение (3.19) может реализоваться только в ограниченном интервале изменений r , например, $r \in (0, R_3)$, ибо в противоположном случае это приводит к бесконечному стационарному значению интенсивности TI^0 -вспышки при $t \rightarrow \infty$ и конечном \mathcal{J}_ϕ . Однако, нас интересует область $t \in (0, \Delta t)$, поэтому допустим реализацию распределения (3.19) для всех $r \in (0, \infty)$. Учет (3.19) в (3.18) приводит к выражению

$$I_\phi^{TA}(t) = \mathcal{J}_\phi P(\nu) n_0 \cdot \{C + 1/\nu \omega_0 t - Ei(-\omega_0 t)\} , \quad (3.20)$$

где C - эйлерова постоянная; $t \in (0, \Delta t)$. Инерционность интегральной TI^0 -вспышки ТЛ (3.20) наиболее наглядно проявляется при сравнении производной кинетики типа (3.13) одной экспоненциальной составляющей с производной кинетики (3.20). Нетрудно показать, что соответствующие производные имеют следующий вид:

$$dI_\phi^{AA}(t)/dt \sim (\mathcal{J}_\phi/\tau_a) \exp(-t/\tau_a) \quad (3.21)$$

и

$$dI_\phi^{TA}(t)/dt \sim (\mathcal{J}_\phi/t) [1 - \exp(-\omega_0 t)] , \quad (3.22)$$

где $\omega_0 t \gg 1$, если $t \geq 1/\omega_0$. По мере того, как производная dI/dt с ростом t приближается к нулю, можно судить о скорости установления стационарного значения интенсивности TI^0 -вспышки. Выражение (3.22) убедительно демонстрирует инерционность модельной кинетики (3.20), что хорошо согласуется с экспериментальными кривыми (рис.3.46).

3.4. Р е з ю м е

1. В активированных TI и Ag ШГК излучательная ТР в парах $\{\text{TI}^0 - \text{TI}^{2+}\}$ и $\{\text{Ag}^0 - \text{Ag}^{2+}\}$ представляет собой неупругое туннелирование. Упругое туннелирование с A^0 -центра на основное (а) или возбужденные (б) состояния A^+ -центра "запрещено": в случае а) из-за отсутствия соответствующего резонансного электронно-колебательного уровня в A^+ -центре; в случае б) уровни возбужденных состояний A^+ -центров находятся значительно выше уровней A^0 -центров.

2. ТЛ чистых и активированных TI и Ag KCl , KBr , KI и NaCl , NaBr обусловлена ТР в парах электронно-дырочных центров, дырочной компонентой которых являются заряженные относительно решетки дырочные центры типа V_K , V_{KA} , XU^- и A^{2+} . Излучательная ТР электронных центров с нейтральными относительно решетки дырочными центрами не обнаружена.

3. В ШГК осуществляются два вида излучательных электронных туннельных переходов: а) переходы, генетически связанные с дырочной компонентой пар электронно-дырочных центров; б) переходы, характерные исключительно для акта ТР, которые не наблюдаются при непосредственном возбуждении каждой из компонент пар или в зонном рекомбинационном процессе.

Глава 4. КИНЕТИКА ТУННЕЛЬНОЙ РЕКОМБИНАЦИИ И МОДЕЛИ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ

Возбуждение ШГК ионизирующим излучением приводит к возникновению ТЛ, обусловленной ТР созданных возбуждением пространственно разделенных радиационных дефектов [5,7,44,61,167]. Кинетика ТР в зависимости от функционального вида возбуждения включает в себя стадии переходных и установившихся процессов генерации и распада радиационных дефектов, участвующих в ТР. В случае возбуждения одним прямоугольным импульсом наблюдаем разгорание и затухание ТЛ. При обычно применяемых длительностях возбуждения ($t_g < 10^4$ с) интенсивность ТЛ не достигает стационарного значения при данной плотности возбуждения. Это обусловлено особенностями τ -спектра ТЛ. Процессы разгорания и затухания ТЛ более подробно будут рассмотрены ниже, но можно уже сейчас сказать, что особое внимание заслуживает кинетика затухания ТЛ. Это понятно, ибо во время возбуждения часто параллельно идут несколько излучательных рекомбинационных процессов различной природы, которые не всегда спектрально делимы. В случае спектральной неразличимости рекомбинационных процессов ввиду инерционности ТЛ удается наблюдать ее после исчезновения более быстрых компонентов релаксационного процесса. Кроме того, кинетика затухания ТЛ является крайне информативной относительно пространственного распределения радиационных дефектов (см. гл.6). Кривые затухания ТЛ чистых и активированных ШГК [7,61,177] не могут быть аппроксимированы элементарными законами типа $I(t) \sim \exp(-t/\tau), \sim t^{-1}, \sim t^{-2}$, как это имеет место в случаях внутрицентральной [156,168] и зонной рекомбинационной люминесценции. Можно отметить, что при описании кинетики зонных рекомбинационных процессов (газокинетический подход) не учитывается

взаимное пространственное распределение свободных электронов (дырок) и локализованных дырок (электронов). Однако, в случае ТР именно пространственное распределение радиационных дефектов приводит к необычной интегральной (суммарной) кинетике ТЛ, которая описывается сложными функциями времени t [7,25, 36,104,172]. Если представить интегральную ТЛ как суперпозицию множества экспоненциальных составляющих, то приходим к выводу, что τ -спектр ТЛ ШГК перекрывает чрезвычайно широкий временной интервал от $\sim 10^{-6}$ до $\sim 10^5$ с [60,177,187]. Так как интенсивность ТЛ во многих случаях не зависит от температуры, то путем охлаждения образца можно заморозить термоактивационные процессы, в том числе диффузию термически менее стабильных дырочных центров. В этой связи эксперименты по исследованию ТЛ в ШГК проводятся обычно при температурах жидкого азота и ниже. В отсутствие диффузии радиационных дефектов значительно упрощается рассматриваемая ниже задача о кинетике ТЛ в ШГК.

4.1. Элементарный акт туннельного переноса электрона в паре "электронный центр - дырочный центр"

Пусть в кристаллической решетке расположена изолированная пара радиационных дефектов, на одном из которых локализован электрон, а на другом - дырка. Оба дефекта находятся на расстоянии r и разделены энергетическим барьером $U(r)$. Температура кристалла при этом достаточно низка, чтобы вероятность каких-либо надбарьерных процессов переноса электрона с электронного центра на дырочный центр была ничтожно малой. В таком случае время жизни рассматриваемой пары полностью определяется вероятностью ТР ее партнеров, обусловленной туннелированием электрона через энергетический барьер на дырочный центр. При небольших расстояниях данную пару можно рассматри-

вать как особый вид электронного возбуждения, называемого туннельной парой (см. также гл. I). Квантовомеханический расчет вероятности ТР может быть выполнен согласно квазиклассической теории излучения [II, I6]. Однако, волновые функции электрона в начальном (туннельная пара) и конечном (пара "нерелаксированный пустой электронный центр - нерелаксированный дырочный центр с захваченным электроном") состояниях не известны, поэтому поставленная задача решима лишь ценой целого ряда приближений и допущений. Многочисленные попытки более или менее последовательно вычислить вероятность ТР, пренебрегая маловажными геометрическими факторами типа рельефа потенциального барьера и др., привели к простому экспоненциальному закону [25]

$$w(\tau) = w_0 \exp(-\tau/\tau_0) = [T(\tau)]^{-1}, \quad (4.1.1)$$

где $T(\tau)$ - время жизни туннельной пары; w_0 и τ_0 - феноменологические постоянные, физическая интерпретация которых зависит от применяемой в расчете модели. Экспоненциальная зависимость $w(\tau)$ от τ в конечном счете обусловлена поведением волновой функции электрона в классически недоступной области подбарьерного пространства. Коротко рассмотрим некоторые модели элементарного акта переноса электрона в туннельной паре, приводящие к отношению типа (4.1.1).

В рамках исторически первой и, видимо, простейшей модели предполагается, что электрон изоэнергетически туннелирует из потенциальной ямы (электронный центр) сквозь энергетический барьер $U(q)$ на дырочный центр. Для одномерного случая ($q = x$) Гамов впервые получил коэффициент прозрачности барьера в виде [15]

$$D(l) = D_0 \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} [2m^*(U(x) - E)]^{1/2} dx\right\}, \quad (4.1.2)$$

где D_0 - постоянная; $2\pi\hbar$ - постоянная Планка; $l = |x_2 - x_1|$ - ши-

рина энергетического барьера на уровне $E = U(x_1) = U(x_2)$; m^* и E - эффективная масса и полная энергия электрона. Следует отметить, что $\mathcal{D}(l)$ при барьерах $U(x)$ различной формы, но с одинаковыми шириной l и высотой U_0 , мало отличаются, поэтому интеграл в (4.1.2) заменим его средним значением. В результате получаем

$$\mathcal{D}(l) = \mathcal{D}_0 \exp\{-[2kl/\hbar] \cdot [2m^*(U_0 - E)]^{1/2}\}, \quad (4.1.3)$$

где k - безразмерный коэффициент, учитывающий форму барьера. Если пренебречь размерами потенциальных ям электронного \uparrow^- и дырочного \uparrow^+ центров ($l \gg r^-, r^+$) и ввести обозначения

$$l = r \quad \text{и} \quad r_0 = \hbar / 2K [2m^*(U_0 - E)]^{1/2},$$

то получаем из (4.1.3) экспоненциальное соотношение, совпадающее с (4.1.1) при замене обозначений $\mathcal{D}(l)$ и \mathcal{D}_0 на $w(r)$ и w_0 . Согласно рассматриваемой модели w_0 является частотой столкновений электрона с потенциальным барьером в точках поворота. В нулевом приближении можно положить, что w_0 совпадает с характеристической частотой движения электрона в атомах $\nu_0 \sim 10^{15} - 10^{16}$ Гц. Постоянная r_0 , в свою очередь, интерпретируется как половина эффективного радиуса Бора электронного центра. В случае мелких ловушек электронов, когда можно пользоваться методом эффективной массы, радиус Бора определяется выражением

$$[11, 16] \quad r_B = \hbar / (2m^* E_m)^{1/2}, \quad (4.1.4)$$

где E_m - энергетическая глубина ловушки. Видно, что введенный нами r_0 при $U_0 - E = E_m$ и $k = 1$ (прямоугольная яма), действительно, совпадает с половиной r_B^- , которая в ШГК, видимо, не превышает постоянную решетки [189]. Отметим некоторые "слабые места" формулы (4.1.2). При выводе этой формулы неявно потребовалось, чтобы в энергетическом спектре дырочного центра уровень E также был дозволённым. Изоэнергетическое туннелирование электрона, строго говоря, возможно либо на

область с резонансным уровнем, либо на область пространства с непрерывным энергетическим спектром. Однако, энергия электрона в начальном и конечном состояниях при излучательной ТР в ШГК отличается на несколько электрон-вольт. Следовательно, модель изоэнергетического (упругого) туннелирования лишь частично передает свойства реального механизма ТР. Кроме того, рассматриваемая модель не учитывает особенности электронной структуры дырочного центра, ибо феноменологические постоянные W_0 и τ_0 полностью определяются свойствами электронного центра. В самом деле это не так. Спектры и кинетика ТЛ зависят от свойств обоих партнеров туннельной пары. Однако, формула (4.1.2) правильно передает экспоненциальную зависимость вероятности ТР от расстояния, которая, по-видимому, является фундаментальным соотношением ТР, сохраняющимся также при более строгом рассмотрении.

В квантовой механике туннелирование является таким же "законным" видом движения электрона как, напр., когерентное перемещение зонных электронов в кристалле или же переход с одного стационарного состояния на другое в атоме. С этой точки зрения ТР можно рассматривать в рамках общей теории квантовомеханических переходов системы между стационарными состояниями. В этой связи, согласно [11, 16, 56, 57], для вероятности ТР получаем

$$W(\tau) = (2\pi/\hbar) \sum_i \sum_f K_{if} |\hat{V}(\tau)|_{if}|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\nu) \rho(\tau) \exp(-E_i/kT), \quad (4.1.5)$$

где i и f , $\langle i |$ и $| f \rangle$, E_i и E_f - соответственно обобщенные квантовые числа, волновые функции и полная энергия начального и конечного состояний; $\hat{V}(\tau)$ - оператор возмущения, представляющий собой потенциал дырочного центра; ν - частота испускаемого фотона; $\rho(\tau) \exp(-E_i/kT)$ - вероятность заселенности i -го колебательного уровня начального электронного терма при дан-

ной температуре. Суммирование в (4.1.5) ведется по всем начальным (i) и конечным (f) колебательным состояниям ядерного движения. Данная модель в отличие от предыдущей учитывает принципиально важное электронное и ядерное взаимодействие. Освобождающаяся при ТР энергия может быть передана либо ядерной подсистеме (безызлучательный переход), либо электромагнитному полю (излучательный переход). При низких температурах, когда заселено лишь нижнее начальное состояние $i = 0$, вероятность ТР $W(r)$, видимо, не зависит от температуры. Однако при повышении температуры, согласно (4.1.5), может появляться некоторая зависимость вероятности ТР от температуры. При этом $W(r)$ с ростом T может не только увеличиться, но и уменьшиться в зависимости от соотношения между вероятностями переноса электрона из основного и возбужденных колебательных уровней начального состояния на конечное. Расчет вероятности $W(r)$ значительно упрощается, если в туннельном переносе электрона участвует лишь один электронный терм начального состояния. Однако, последовательный вывод основного соотношения феноменологической теории кинетики ТР согласно (4.1.5) выполнен только в самых простейших случаях: аппроксимация волновых функций $\langle i |$ и $\langle f |$ водородоподобными, без учета колебательной структуры электронных термов начального и конечного состояний. Так, в работе [175], используя водородоподобные волновые функции S -типа

$$\langle i | = [\pi (r_B^-)^3]^{-1/2} \exp(-r/r_B^-)$$

и $\langle f | = [\pi (r_B^+)^3]^{-1/2} \exp(-r/r_B^+)$,

получена вероятность ТР в виде

$$W(r) = [4e^2 h \nu / 3 m^* c^2 (r_B^-)^2] 64 (r_B^+ / r_B^-)^3 \exp(-2r/r_B^-); \quad (4.1.6)$$

$r \gg r_B^-$, $r_B^- > 2r_B^+$, r_B^- и r_B^+ - радиусы Бора электронного и дырочного центров. В [56] приводятся аналогичные соотношения,

из которых следует, что $W(\nu)$ также можно привести к виду (4.1.1), однако, феноменологические постоянные w_0 и ν_0 зависят также от свойств волновой функции конечного состояния. Согласно [56], предэкспоненциальный множитель w_0 представляет собой сложную комбинацию характеристик электронного и ядерного движений и не может быть интерпретирован как частота столкновения электрона с потенциальным барьером. Проведенные в [56, 190] оценки показывают, что w_0 в зависимости от электронно-колебательной структуры туннельной пары может стать значительно меньшей ($w_0 \approx 10^5 \ll 10^{16}$ Гц) или большей ($w_0 \approx 10^{21} \gg 10^{16}$ Гц) по сравнению с характеристической частотой движения электронов в атомах. Феноменологическая постоянная ν_0 представляет, в свою очередь, линейную комбинацию радиусов Бора электрона в начальном и конечном состояниях. В простейшем случае имеем [56]

$$\nu_0 = (\nu_B^- + \nu_B^+) / 4.$$

4.2. Математические модели пространственного распределения радиационных дефектов

Создание радиационных дефектов в ШГК под воздействием ионизирующего излучения наиболее эффективно происходит при безызлучательной аннигиляции электронных возбуждений [1, 2]. Энергия электронной подсистемы передается ядерному движению, что в конечном счете приводит к возникновению пары дефектов Френкеля как анионной, так и катионной подрешеток [1, 167]. Парное рождение дефектов обусловлено, по-видимому, законами сохранения импульса, спина, заряда и др. Таким образом, каждый электронный центр имеет свой генетически сопряженный дырочный центр, и наоборот. Можно ожидать, что при малых дозах возбуждения и малом разлете продуктов распада электронных возбуждений генетические пары дефектов будут изолированными. Для определенности

введем понятия геометрической и физической изолированности туннельной пары. Пусть расстояние между двумя центрами - электронным и дырочным - равно r . Данная пара электронно-дырочных центров является геометрически r -изолированной, если частично перекрывающиеся сферические окрестности с радиусом r вокруг каждого из партнеров пары пусты [174, 193]. Физическую относительно ТР изолированность той же пары определим из соотношения

$$\chi(r) \equiv w(r) / [w(r) + \sum_{i=1}^{VN-1} w(r_i)] \approx [1 - \tau(r) \sum_{i=1}^{VN-1} w(r_i)] \approx 1, \quad (4.2.1)$$

где V - объем кристалла; N - средняя макроскопическая концентрация присутствующих в кристалле дырочных центров; r_i - расстояние от данного электронного центра до i -го дырочного центра: i - пронумеровывает все дырочные центры, за исключением одного, включенного в состав рассматриваемой пары; очевидно $r_i > r$. Так как координаты радиационных дефектов неизвестны, то физическую изолированность удобнее заменить "усиленной" геометрической изолированностью данной пары. Нетрудно убедиться, что условие (4.2.1) всегда выполнено, если пара электронно-дырочных центров будет геометрически κr -изолированной. Множитель κ определяется, согласно (4.1.1), из неравенства

$$\exp[-(\kappa-1)r/r_0] \ll 1. \quad (4.2.2)$$

Рассматривая изолированные туннельные пары, в настоящей работе всюду подразумевается их физическая изолированность, поэтому слово "физическая" обычно опускается. С ростом дозы возбуждения (макроскопической концентрации дефектов) генетическим парам все труднее оставаться изолированными. Если в область изолированности данной генетической пары попадает некоторый другой дефект, то генетические пары, очевидно, смешиваются. При высоких концентрациях радиационных дефектов генетические пары будут смешанными. Не исключено, что в так создавшейся смеси генетических радиационных дефектов также можно выделить неко-

торые изолированные - согласно (4.2.2) - пары электронно-дырочных центров. Такие изолированные пары, в отличие от генетических, называются статистическими, ибо неизвестно, являются ли образующие пару электронно-дырочные центры генетическими. Все возможные остальные парные комбинации электронных и дырочных центров, которые не удовлетворяют условию изолированности (4.2.2), представляют собой смешанные статистические пары. Понятно, что реальное расположение радиационных дефектов в кристалле сложное. "Рассортировка" разноименных дефектов по парам приводит к заключению, что реальное ПР дефектов можно представить как суперпозицию изолированных и смешанных пар (ИП и СП). Следовательно, модели изолированных генетических пар (ИП) и смешанных генетических пар (СП) являются предельными случаями реальной ситуации.

Математическое описание произвольного ПР дефектов, видимо, в принципе невозможно, ибо для этого необходимо установить координаты каждого дефекта. В этой связи кинетика ТР в ШГК, стеклах, щелочных льдах и в других соединениях рассматривается в рамках двух математических моделей, представляющих рассмотренные выше предельные случаи реального ПР. Модель ИП предполагает, что ансамбль электронных и дырочных центров можно однозначно разбить на изолированные электронно-дырочные пары, которые одновременно являются также туннельными парами. В этом случае процесс ТР описывается согласно кинетике мономолекулярных реакций с дополнительным учетом парной плотности туннельных пар по расстоянию между их партнерами r . Важно отметить, что геометрические факторы, в том числе изолированность туннельных пар, являются единственными критериями генетичности радиационных дефектов. Очевидно, не имеется других физических критериев, согласно которым можно определить гене-

тически сопряженный данному электронному центру дырочный центр, и наоборот. Если ансамбль дефектов однозначно распределяется на ИП, то с большой достоверностью можно утверждать, что они одновременно являются также генетическими парами. Трудно представить такой процесс генерации радиационных дефектов, в котором генетические пары смешивались бы настолько целенаправленно, что в конечном счете привело бы к образованию ИП. Ясно, что совокупность ИП, выделенных из реального ПР радиационных дефектов, кроме генетических содержит также некоторую добавку статистических пар. Модель СП, в свою очередь, предполагает, что при рождении электронных и дырочных центров отсутствует какая-либо пространственная корреляция и их размещение является случайным процессом. При теоретическом анализе кинетики ТР следует учесть взаимодействие данного электронного (дырочного) центра со всеми дырочными (электронными) центрами. В качестве модели СП обычно рассматривают стохастическую смесь электронных и дырочных центров. Таким образом, кинетика ТР в зависимости от ПР радиационных дефектов описывается в рамках различных математических моделей, которые в предельных случаях взаимоисключают друг друга. При аппроксимации ПР дефектов моделями ИП и СП взаимное расположение электронных и дырочных центров учитывается с помощью парной плотности и локальных концентраций, соответственно. Определим эти функции, характеризующие ПР.

Пусть имеет место модель ИП. Макроскопическая концентрация электронных и дырочных центров в данный момент времени имеет значения $n(t)$ и $N(t)$. Очевидно, $n(t) = N(t)$ при любом t . Парная плотность электронно-дырочных (туннельных) пар $n^*(r, t)$ представляет собой число пар с расстоянием между их партнерами в единичном объеме кристалла на единичной длине в текущий момент времени. Макроскопическая концентрация дефектов связана с

парной плотностью очевидным соотношением

$$n(t) = N(t) = \int_0^{\infty} \tilde{n}^*(r,t) dr. \quad (4.2.3)$$

Если рассмотреть единичный объем кристалла, то среднее расстояние между партнерами (электронной и дырочной компонентами) туннельных пар определяется выражением

$$\langle r(t) \rangle = [n(t)]^{-1} \int_0^{\infty} r \tilde{n}^*(r,t) dr. \quad (4.2.4)$$

Используя понятие среднего расстояния по ансамблю туннельных пар (4.2.4), мы можем сформулировать критерий применимости модели ИГП в следующем виде

$$\langle r(t) \rangle \ll R_{cp}(t) = 0.5539 [n(t)]^{-1/3}. \quad (4.2.5)$$

В (4.2.5) предположено, что электронные и дырочные центры сами по себе в кристалле распределены стохастически по объему. Следовательно, $R_{cp}(t)$ - среднее расстояние между электронными или дырочными центрами в отдельности.

В рамках модели СП взаимное расположение электронных и дырочных центров учитывается с помощью, так называемых, локальных концентраций $n(r,t)$ и $N(r,t)$. Так, $n(r,t)$ ($N(r,t)$) представляет усредненную по всем конфигурациям концентрацию электронных центров $n_i(r,t)$ (дырочных центров $N_j(r,t)$) на расстоянии r от i -го дырочного центра (j -го электронного центра) в момент времени t . i и j пронумеровывают все дырочные и электронные центры, соответственно. Усреднение проводится согласно уравнениям [57, 163]

$$n(r,t) = [V \cdot n(t)]^{-1} \sum_{i=1}^{V \cdot n(t)} n_i(r,t) \quad (4.2.6)$$

и

$$N(r,t) = [V \cdot N(t)]^{-1} \sum_{j=1}^{V \cdot N(t)} N_j(r,t). \quad (4.2.7)$$

Средние макроскопические и локальные концентрации связаны друг с другом соотношениями

$$\lim_{r \rightarrow \infty} n(r,t) = n(t); \quad \lim_{r \rightarrow \infty} N(r,t) = N(t); \quad (4.2.8)$$

$$n(t) N(r,t) = N(t) n(r,t); \quad (4.2.9)$$

$$N(t) \cdot n(t) = N(0) - n(0) = const, \quad (4.2.10)$$

где $N(0)$ и $n(0)$ могут отличаться друг от друга.

Следует отметить, что подход локальных концентраций не является универсальным. В [166] показано, что применение локальных концентраций для описания кинетики ТР частично коррелированных радиационных дефектов привело к ложному результату. Этот подход не применим также в случае сильной пространственной корреляции дефектов, приводящей к образованию ИГП. Это понятно, ибо модели ИГП и СПП взаимно исключают друг друга. Можно сказать, что усреднение согласно (4.2.6) и (4.2.7) имеет физический смысл лишь при стохастической смеси электронных и дырочных центров. Локальные концентрации и парная плотность ИГП - совершенно различные понятия.

Накопление радиационных дефектов в ШГК определяется вторичными реакциями, на протекание которых влияют такие факторы, как кулоновское, электрон-фононное и упругое взаимодействия, присутствие ловушек электронов и дырок, обеспечивающие пространственную корреляцию соответствующих центров. Если факторы, обуславливающие корреляцию, действуют достаточно эффективно, то локализация электронов и дырок осуществляется близко от места их рождения. При невысокой концентрации дефектов генетические пары электронно-дырочных центров не смешиваются и ТР осуществляется преимущественно между партнерами генетических пар.

Перечисленные выше особенности механизма генерации и накопления радиационных дефектов, видимо, имеют место для ШГК. Поэтому кинетика ТР в ионных кристаллах наиболее адекватно описывается в рамках модели ИГП [60, 61, 191].

4.3. Кинетика излучательной туннельной рекомбинации в рамках модели изолированных генетических пар при произвольном виде возбуждения

4.3.1. Кинетическое уравнение для ПР туннельных пар

ТЛ возникает исключительно из-за ТР радиационных дефектов, образующих туннельные пары. Так как в рамках модели ИПП процесс распада туннельных пар можно рассматривать как мономолекулярную реакцию, то кинетика ТЛ описывается выражением [171, 172]

$$I(t) \equiv \int_0^{\infty} \eta(r) n^*(r, t) w(r) dr, \quad (4.3.1)$$

где $I(t)$ - интенсивность интегральной ТЛ; $\eta(r)$ - квантовый выход. Из определения (4.3.1) ясно, что рассмотрение кинетики ТЛ сводится к анализу распределения $n^*(r, t)$, для которого необходимо написать кинетическое уравнение. В этой связи следует учитывать не только распад туннельных пар, но в первую очередь их генерацию вследствие воздействия возбуждающего излучения плотностью $\mathcal{F}(t)$. Предположим, что в единицу времени под действием возбуждения образуются $\alpha \mathcal{F}(t) P(r, t)$ туннельных пар элементарной r -фракции; α - коэффициент пропорциональности; $P(r, t)$ - плотность вероятности того, что при рождении туннельной пары соответствующие дефекты будут удалены один от другого на расстояние r . Поэтому впредь $P(r, t)$ будем называть конфигурационным фактором (КФ) радиационных дефектов. Естественно возникает вопрос, почему появляется зависимость КФ от t , если речь идет о модели ИПП. Дело в том, что генерация и распад туннельных пар обусловлены силами различной природы. Расположение электронной и дырочной компонент туннельной пары при ее рождении в значительной мере зависит от дальнедействующих (напр., электростатических) сил со стороны других дефектов. Однако, силы, вызывающие распад этой же пары, являются кратковременными

ми - убывающими экспоненциально с ростом μ . Следовательно, изолированность процессов распада не обуславливает изолированности также процессов генерации туннельных пар. Ясно, что в реальном эксперименте присутствие уже созданных туннельных пар и неспаренных радиационных дефектов может изменить условия генерации туннельных пар в текущий момент времени по сравнению с предшествующим моментом. В то же время распад туннельных пар произойдет согласно модели ИП. Кроме того, временную зависимость КФ обуславливает также обеднение источника туннельных пар. Если емкость источника неограничена или же возбуждение достаточно слабое, то в ряде случаев $P(r,t)$ практически не зависит от t . Это обычно имеет место, если источником туннельных пар являются собственные радиационные дефекты матрицы, ибо число неповрежденных узлов решетки, действительно, велико по сравнению с концентрацией созданных возбуждением дефектов. Если это так, то генерация туннельных пар является стационарным вероятностным процессом и

$$P(r,t) \equiv P(r,0) = p(r) \quad (\partial P(r,t)/\partial t \equiv 0) \quad (4.3.2)$$

с формальной точки зрения представляет собой математическое ожидание некоторой случайной величины - выхода создания туннельных пар данной элементарной μ -фракции. В общем случае, когда условие (4.3.2) не выполняется, имеем дело с нестационарным процессом генерации туннельных пар. При этом важно отметить, что обычно КФ меняется со временем гораздо медленнее, чем ПР $n^*(r,t)$. Это всегда можно обеспечить, видимо, также путем подбора плотности возбуждения. В таком случае реализуется квазистационарный процесс генерации туннельных пар, что частично будет рассмотрено ниже при анализе кинетики фракционной ТЛ. Из сказанного выше ясно, что КФ зависит от времени не прямо, а параметрически через дозу возбуждения: $P(r,t) = \hat{P}[r, \mathcal{D}(t)]$, где

$$D(t) \equiv \int_0^t F(\vartheta) d\vartheta. \quad (4.3.3)$$

Так как распад туннельных пар происходит мономолекулярно, то число распавшихся из-за ТР в единицу времени пар равно $n^*(r,t)w(r)$. Учитывая высвечивающее действие возбуждения на туннельные пары, предположим, что разрушение какой-либо пары не влечет за собой рождение новой туннельной пары. Из проведенного анализа следует, что искомое кинетическое уравнение с учетом высвечивающего действия возбуждения имеет вид

$$d n^*(r,t)/dt = \alpha F(t)P(r,t) - [w(r) + \lambda(r)F(t)] n^*(r,t); n^*(r,0) = 0, \quad (4.3.4)$$

общим решением которого является

$$n^*(r,t) = \alpha \exp\left\{-\int_0^t [w(r) + \lambda(r)F(\vartheta)] d\vartheta\right\} \times \int_0^t P(r,\vartheta) F(\vartheta) \exp\left\{\int_{-\infty}^{\vartheta} [w(r) + \lambda(r)F(\vartheta')] d\vartheta'\right\} d\vartheta. \quad (4.3.5)$$

В выражениях (4.3.4) и (4.3.5) в качестве начала отсчета времени выбран момент включения возбуждения; начальное условие соответствует отсутствию туннельных пар в кристалле при $t = 0$; $\lambda(r)F(t)$ - плотность вероятности разрушения туннельной пары возбуждением; ϑ, ϑ' - переменные интегрирования. Допустим, что выбранное возбуждение настолько слабо, что имеет место неравенство

$$W(r) \geq 1/t_{\max} \gg \lambda(r)F(t), \quad (4.3.6)$$

где t_{\max} - максимальное доступное в эксперименте время. В таком случае выражение (4.3.5) упрощается:

$$n^*(r,t) = \alpha \exp[-w(r)t] \int_0^t P(r,\vartheta) F(\vartheta) \exp[w(r)\vartheta] d\vartheta \quad (4.3.7)$$

В общем случае невозможно представить временную зависимость распределения $n^*(r,t)$ в явном виде, так как вид КФ часто неизвестен и сам по себе является объектом исследования. Однако, оценить влияние временной зависимости КФ на $n^*(r,t)$ возможно путем разложения $P(r,t)$ в степенной ряд по времени

$$P(r,t) = P(r,t') + \dot{P}(r,t')(t-t') + \ddot{P}(r,t')(t-t')^2/2 + \dots; \quad (4.3.8)$$

где t' - некоторый произвольно выбранный фиксированный момент времени; $\dot{P}(r,t') \equiv [\partial P(r,t)/\partial t]_{t=t'}$ и т.д.

Проведем анализ выражения (4.3.7) в небольшой окрестности точки t' : $t \in (t' - \Delta t, t' + \Delta t)$, где $2\Delta t$ - длина окрестности.

Для этого случая мы можем в разложении КФ (4.3.8) отбросить члены второго и более высокого порядка малости по t . Подставим оставшиеся члены нулевого и первого порядка в выражение (4.3.7), по следующим интегрированием по частям получаем следующее

$$n_{t'}^*(r, t) = \alpha \exp[-w(r)t] P(r, t') \left\{ \left[1 + \dot{P}(r, t')(t-t')/P(r, t') \right] \times \right. \\ \left. \times \int_0^t \mathcal{F}(\psi) \exp[w(r)\psi] d\psi - [\dot{P}(r, t')/P(r, t')] \int_0^t d\psi \int_{-\infty}^{\psi} \mathcal{F}(\psi') \exp[w(r)\psi'] d\psi' \right\}. \quad (4.3.9)$$

Индекс t' в $n_{t'}^*(r, t)$ указывает на то, что представление ПР туннельных пар в виде (4.3.9) справедливо лишь в небольшой окрестности точки t' . Дальнейший анализ (4.3.9) целесообразен лишь при явно заданном $\mathcal{F}(t)$. Критерий квазистационарности процессов генерации туннельных пар можно установить путем сравнения (4.3.9) с (4.3.7) при выполнении условия (4.3.2). Так, учет (4.3.2) в (4.3.7) дает

$$n_{ст.}^*(r, t) = \alpha \exp[-w(r)t] P(r, 0) \int_0^t \mathcal{F}(\psi) \exp[w(r)\psi] d\psi \quad (4.3.10)$$

Стационарность процесса генерации туннельных пар, согласно (4.3.10), значительно упрощает функциональный вид ПР (4.3.7). Для того, чтобы сохранить функциональный вид ПР (4.3.10) также в нестационарном случае, необходимо наложить дополнительные требования на КФ. Именно в этом заключается суть квазистационарного приближения при описании процесса генерации туннельных пар. Действительно, если имеет место неравенство

$$|\dot{P}(r, t')/P(r, t')| \cdot |(t-t') - \int_0^t d\psi \int_{-\infty}^{\psi} \mathcal{F}(\psi') \exp[w(r)\psi'] d\psi' / \int_0^t \mathcal{F}(\psi) \exp[w(r)\psi] d\psi| \ll 1, \quad (4.3.11)$$

то

$$n_{t', кв. ст.}^*(r, t) = \alpha \cdot \exp[w(r)t] P(r, t') \int_0^t \mathcal{F}(\psi) \exp[w(r)\psi] d\psi, \quad (4.3.12)$$

где $t \in (t' - \Delta t, t' + \Delta t)$. Сравнение между собой (4.3.10) и (4.3.12) показывает, что $n_{t', кв. ст.}^*(r, t)$ можно получить из $n_{ст.}^*(r, t)$ формальной заменой $P(r, 0) = p(r)$ на $P(r, t')$. Следо-

вательно, кинетика ТР в стационарном и квазистационарном приближениях описывается одним и тем же формализмом. Учет временной зависимости КФ при этом сводится к формальной замене $p(r)$ на $P(r,t)$, если (4.3.II) имеет место для любого $t' \in (0, t_{\max})$.

4.3.2. Кинетика ТР при некоторых частных видах возбуждения (стационарный случай)

Большой практический интерес представляет ОИВ длительности t_B . Такое $\mathcal{J}(t)$ мы представим как разность двух функций Хевисайда:

$$\mathcal{J}(t) = \mathcal{J}_0 [H(t) - H(t - t_B)], \quad (4.3.I3)$$

Подставляя (4.3.I3) в (4.3.I0), получаем

$$n^*(r,t) = \begin{cases} n_{\infty}^*(r) \{1 - \exp[-w(r)t]\}, & \text{если } t \in (0, t_B) \quad (4.3.I4a) \\ n_{\infty}^*(r) \{1 - \exp[-w(r)t_B]\} \exp[-w(r)(t - t_B)], & \text{если } t \in (t_B, \infty), \quad (4.3.I4b) \end{cases}$$

$$\text{где } n_{\infty}^*(r) = \mathcal{J}_0 p(r) \tau(r). \quad (4.3.I5)$$

ПР (4.3.I4) было получено ранее в [173]. Из (4.3.I4) следует, что в случае непрерывного постоянного возбуждения $\mathcal{J}(t) = \mathcal{J}_0 H(t)$ при больших временах ($t \rightarrow \infty$) рассматриваемое ПР стремится к значению $n_{\infty}^*(r)$, которое впредь назовем стационарным ПР туннельных пар. При конечном значении $t_B < \infty$ важную роль играет так называемое "начальное" ПР

$$n_{\mathcal{D}}^*(r) \equiv n^*(r, t_B) = n_{\infty}^*(r) \{1 - \exp[-w(r)t_B]\}, \quad (4.3.I6)$$

которое имеет место в начальный момент затухания ТЛ ($t = t_B$).

Если в качестве отсчета времени выбран момент выключения возбуждения, то $n_{\mathcal{D}}^*(r)$ обозначается через $n_{\mathcal{D}}^*(r, 0)$ (см., напр., [6I, I74]). Нетрудно убедиться, что в момент выключения возбуждения различные элементарные r -фракции туннельных пар находятся в различных состояниях относительно насыщения - $n_{\infty}^*(r)$, ибо для любого r имеет место неравенство

$$\mathcal{D}p(r) \leq n_{\mathcal{D}}^*(r) \leq n_{\infty}^*(r). \quad (4.3.I7)$$

Для малоинерционных относительно возбуждения фракций туннель-

ных пар ($w(r)t_B \gg 1$) начальное ПР $n_0^*(r)$ почти не отличается от стационарного ПР туннельных пар. Для инерционных фракций ($w(r)t_B \ll 1$) $n_0^*(r)$ близко к $\mathcal{D}p(r)$. После мгновенного возбуждения начальное ПР туннельных пар с точностью до постоянного множителя равняется КФ при любом r . Применение $n_\infty^*(r)$ или $n_0^*(r)$ при интерпретации экспериментальных результатов зависит от конкретной ситуации. Главное достоинство стационарного ПР по сравнению с любым другим, в частности, начальным ПР, заключается в том, что стационарное ПР содержит меньше "внешних" параметров ($\mathcal{F}_0, t_B, \dots$), нежели другое возможное ПР.

Особое место занимает периодическое возбуждение, которое соответственно своему характеру часто называется АМВ. Так как любое АМВ можно с достаточной точностью представить рядом Фурье, то, не теряя общности, выберем АМВ в синусоидальной форме

$$\mathcal{F}(t) = \mathcal{F}_0(1 - \delta \cos \omega t), \quad (4.3.18)$$

где \mathcal{F}_0 , δ и ω - соответственно амплитуда, глубина (или коэффициент) модуляции и круговая частота АМВ. Подставляя выражение (4.3.18) в формулу (4.3.10), получаем ПР туннельных пар в виде

$$n^*(r,t) = \bar{n}(r,t) + \tilde{n}(r,t), \quad (4.3.19)$$

где

$$\bar{n}(r,t) = n_\infty^*(r) \left\{ 1 - \frac{1 - \delta + \omega^2 \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} \exp[-w(r)t] \right\} \quad (4.3.20)$$

$$\text{и } \tilde{n}(r,t) = -\delta n_\infty^*(r) (1 + \omega^2 \tau^2)^{-1/2} \cos[\omega t - \arctg \omega \tau(r)]. \quad (4.3.21)$$

Найденное решение (4.3.19) является суперпозицией двух ПР: фонового \bar{n} и переменного \tilde{n} , из которых особого внимания заслуживает переменное ПР. Оно содержит три "внешних" параметра - \mathcal{F}_0 , δ и ω . Варьирование параметров \mathcal{F}_0 и δ не изменит τ -спектра интегральной ТЛ, так как они одинаково "действуют" на все туннельные пары (не различают туннельные пары с разными межкомпонентными расстояниями). Напротив, параметр ω , как видно из

(4.3.19), избирательно "действует" на малоинерционные ($\omega\tau \ll 1$), переходные ($\omega\tau \approx 1$) и инерционные ($\omega\tau \gg 1$) по сравнению с ω τ -фракции туннельных пар. Таким образом, при варьировании частоты АМВ варьируется также подразделение туннельных пар на малоинерционные и инерционные фракции и им соответствующая ТЛ. Отметим, что аналогичное разделение туннельных пар на три группы - $w(r)t_B \gg 1$, $w(r)t_B \approx 1$ и $w(r)t_B \ll 1$, имеет место также при импульсном возбуждении. Такие, "внешние" параметры (напр., ω и t_B), на изменения которых туннельные пары разных фракций "реагируют" по-разному, назовем кинетическими. Ниже показано, что варьирование "внешних" кинетических параметров позволяет выделить и непосредственно наблюдать ТЛ, соответствующую сравнительно узким фракциям туннельных пар. Фоновое ПР $\bar{n}(r,t)$ при больших временах ($t \rightarrow \infty$) принимает значение $n_{\infty}^*(r)$, что соответствует установлению равновесия процессов генерации и распада туннельных пар.

4.3.3. Кинетика ТР при некоторых частных видах возбуждения (квазистационарный случай)

Пусть возбуждение имеет вид (4.3.13). Распределение (4.3.14) в стационарном процессе генерации туннельных пар при $w(r)t \gg 1$ практически совпадает с независимым от времени стационарным ПР (4.3.15). В рассматриваемом ниже случае равенство (4.3.2) не имеет места. Следовательно, стационарное ПР $n_{\infty}^*(r)$ теряет смысл и вместо него мы рассмотрим квазистационарное ПР. В этой связи следует установить критерий квазистационарности. Подстановка (4.3.13) в (4.3.11) приводит к неравенству

$$|\dot{P}(r,t')/P(r,t')| \cdot [\Delta t + \tau(r)] \ll 1, \quad (4.3.22)$$

согласно которому временную зависимость КТ ограничивают Δt - окрестность рассматриваемой точки $t' \in (0, t_B)$ и время жизни тун-

нелных пар длиной элементарной r -фракции. При выполнении неравенства (4.3.22) имеет место квазистационарное ПР

$$n_{\infty, t'}^*(r) \equiv n_{\infty}^*(r, t) = \alpha \mathcal{F}_0 P(r, t') \tau(r). \quad (4.3.23)$$

Для малонерционных относительно t' фракций туннельных пар ($w(r)t' \gg 1$) ПР типа (4.3.7) является установившимся и практически совпадает с (4.3.23). Следовательно, при достаточно большом t' всегда будут такие фракции туннельных пар, для которых (4.3.23) имеет место при любом $t' \leq t_B$. В этом случае " t' " в (4.3.23) можно заменить на " t ". Таким образом, временные зависимости квазистационарного ПР и КФ одинаковы.

Особый интерес вызывает ПР типа (4.3.7) при АМВ в нестационарном процессе генерации туннельных пар. Для расчета $n^*(r, t)$ в разложении (4.3.8) ограничимся членами нулевого и первого порядка. Таким образом, подстановка (4.3.18) в (4.3.9) и вычисление соответствующих интегралов приводят $n_{r'}^*(r, t)$ к следующему виду

$$n_{r'}^*(r, t) = \bar{n}_{r'}^*(r, t) + \tilde{n}_{r'}^*(r, t); \quad (4.3.24)$$

$$\bar{n}_{r'}^*(r, t) = C' \cdot \exp[w(r)t] + n_{\infty}^*(r, t') [1 + \lambda_1(t) + \lambda_2(\tau)]; \quad (4.3.25)$$

$$\tilde{n}_{r'}^*(r, t) = -\delta n_{\infty}^*(r, t') \{ [1 + (\omega\tau(r))^2]^{-1/2} \{ 1 + \lambda_1(t) \cos[\omega t - \varphi_1(\tau)] + \lambda_2(\tau) \{ 1 + [\omega\tau(r)]^2 \}^{-1/2} \cos[\omega t - \varphi_2(\tau)] \} \}; \quad (4.3.26)$$

$$\lambda_1(t) = \dot{P}(r, t')(t - t') / P(r, t'); \quad \lambda_2 = \dot{P}(r, t') \tau(r) / P(r, t');$$

$$\varphi_1(\tau) = \arctg[\omega\tau(r)]; \quad \varphi_2(\tau) = \arctg\{2\omega\tau(r)[1 - \omega^2\tau^2(r)]^{-1}\};$$

C' - постоянная, определяемая из начального условия уравнения (4.3.4). Проведенный анализ показывает, что выражение (4.3.24) при нарушении (4.3.2), так же как в стационарном случае, представляет собой сумму двух ПР - фонового (4.3.25) и переменного (4.3.26). Подставляя фоновое ПР (4.3.25) в (4.3.1), нетрудно убедиться, что полученное таким образом выражение по существу описывает разгорание и установление интегральной ТЛ при постоянном возбуждении $\mathcal{F}(t) = \mathcal{F}_0 H(t)$. Напротив, подстановка перемен-

ного ПР (4.3.26) в (4.3.1) приведет нас к, так называемой, фракционной ТЛ, которая будет рассмотрена ниже. В этой связи впредь при АМВ рассмотрим лишь переменное распределение как в стационарном (4.3.21), так и в нестационарном случаях (4.3.26). Любопытно отметить, что критерий квазистационарности процесса генерации туннельных пар при АМВ имеет совпадающий с (4.3.22) вид. В этом можно убедиться также при сравнении между собой ПР (4.3.21) и (4.3.26). Выполнение критерия (4.3.22) можно всегда обеспечить путем подбора плотности возбуждения, ибо временная зависимость КФ обусловлена дозой возбуждения. По-видимому, уменьшение плотности возбуждения позволит снизить скорость изменения КФ. Следовательно, выбор достаточно слабого возбуждения существенно упростит выражение (4.3.26), приводя его к квазистационарному виду типа (4.3.12). Пусть плотность возбуждения \mathcal{J}_0 в (4.3.18) выбрана настолько малой, что для любого $\omega > 0$ имеет место неравенство (4.3.22). С помощью (4.3.22) можно определить допустимую для квазистационарного приближения скорость изменения КФ относительно частоты АМВ. Для этого положим в (4.3.22) $\Delta t = 10 \cdot [\omega/2\pi]^{-1}$. Известно, что при исследовании τ -спектра интегральной ТЛ (соответственно, КФ) с помощью АМВ частоты ω зондируется сравнительно небольшая окрестность точки $\tau' \approx 1/\omega$ [17], поэтому $\tau(r)$ в (4.3.22) заменим, в свою очередь, на $1/\omega$. Наконец получаем, что допустимая скорость изменения КФ ограничивается неравенством

$$|\dot{P}(r,t') / P(r,t')| \ll \omega/20\pi \quad (4.3.27)$$

Если условие (4.3.27) выполнено, то, пренебрегая в выражении (4.3.26) членами малыми по сравнению с единицей, получаем квазистационарное приближение переменного ПР

$$\tilde{n}_{r,кв.ст.}(r,t) = -\delta n_{\infty}^*(r,t) \{1 + [\omega\tau(r)]^2\}^{-1/2} \times \cos[\omega t - \arctg \omega\tau(r)]. \quad (4.3.28)$$

Сравнивая между собой (4.3.21) и (4.3.28), видим, что (4.3.28)

формально следует из (4.3.21) при замене стационарного ПР квазистационарным. Соответствующая подстановка найденных выше ПР в (4.3.1) позволяет вычислить кинетику ТЛ при рассмотренных частных видах возбуждения.

4.4. Кинетика туннельной люминесценции и количественная оценка эффекта запоминания длительности возбуждения

Применение модели ИП в случае чистых и активированных ШГК оправдывается хорошим согласием теоретических расчетов с реально измеренными кривыми затухания и дозовыми характеристиками ТЛ [5,61,173,174,176,188,191]. В этой связи мы рассмотрим как разгорание, так и затухание ТЛ именно в рамках модели ИП. При этом будут использованы в п.4.3 полученные ПР при ОИВ типа (4.3.13). Особое внимание заслуживает затухание интегральной ТЛ. Можно отметить, что кинетика затухания ТЛ характеризуется более пологим начальным участком, который обусловлен ТР, происходящей во время возбуждения: чем больше длительность возбуждения, тем дальше простирается пологий участок. Это своеобразное запоминание длительности возбуждения (ЗДВ); из-за эффекта ЗДВ кинетика затухания ТЛ в двойных логарифмических координатах спрямляется только при больших временах затухания по сравнению с длительностью возбуждения. В литературе встречаются сообщения [177,180] о том, что наблюдаемый процесс затухания ТЛ подчиняется закону Беккереля [61]

$$I_{\Sigma}(t) = I(0)(1 + \beta t)^{-\alpha'}$$

где α' , β - постоянные. Обычно под этим утверждением понимается лишь то, что кинетика затухания ТЛ при $t \gg t_{\Sigma}$ удовлетворительно аппроксимируется гиперболическим законом $I \sim t^{-\alpha'}$ [5]. Поэтому в настоящем разделе будет проведена также количественная оценка эффекта ЗДВ и отклонений "реальной" кинети-

ки затухания от беккерелевского асимптотического аналога типа $I \sim t^{-\alpha'}$. Кинетика фракционной ТЛ и частотные характеристики ТЛ рассмотрены в Приложении I.

4.4.1. Кинетика ТЛ при импульсном возбуждении

На практике наиболее широкое применение имеет ОИВ, форма импульса которого близка к (4.3.13). Можно сказать, что плотность возбуждающего излучения обычно ограничена, поэтому редко удается реализовать такое "мгновенное" возбуждение, во время которого доза облучения достигла бы величины, достаточной для возбуждения ТЛ в ШГК. Следовательно, в реальном эксперименте нельзя не считаться с длительностью возбуждения. Из очевидных соображений ясно, что применение ОИВ типа (4.3.13) значительно облегчает анализ ответного сигнала-зависимости интенсивности ТЛ от времени. Поэтому рассмотрим разгорание и затухание ТЛ в стационарном процессе генерации туннельных пар (см. (4.3.2)) при ОИВ (4.3.13) конечной длительности.

Согласно определению (4.3.1) и ПР туннельных пар (4.3.14а), находим, что кинетика разгорания ТЛ имеет вид

$$I_r(t) = \alpha J_0 \int_0^{\infty} \rho(r) \{1 - \exp[-w(r)t]\} dr, \quad (4.4.1)$$

где $t \in (0, t_B)$. Здесь и впредь мы принимаем, что распад любой туннельной пары независимо от r происходит излучательно. Не трудно убедиться, что $dI_r(t)/dt \geq 0$ при любом $t \in (0, t_B)$. Следовательно, интенсивность интегральной ТЛ (4.4.1) достигнет своего стационарного значения при $t \gg \max[\tau(r)]$. Это возможно лишь в том случае, если $\rho(r)$ при $r > r_{\max}$ становится равным нулю, где $\tau(r_{\max}) = \max[\tau(r)]$. Однако, интенсивность ТЛ, обусловленная малоинерционными фракциями туннельных пар ($w(r)t_B \gg 1$) скоро после включения возбуждения достигнет насыщения - стационарного значения. Таким образом, ПР туннель-

ных пар к моменту выключения возбуждения с ростом длительности возбуждения изменяется в пользу более далеких пар. КФ в реальном случае не известен и сам по себе является предметом изучения (см. гл. 6), поэтому вычислить кинетику разгорания ТЛ по (4.4.1) возможно только при модельных, явно заданных КФ. При теоретическом рассмотрении кинетики ТЛ часто пользуются экспоненциальным КФ типа (4.4.19а) [61, 173, 174]. В этом случае кинетика разгорания ТЛ, согласно (4.4.1), при $w_0 t \gg 1$ имеет вид

$$I_{\uparrow}(t) = \alpha J_0 [1 - \Gamma(\nu + 1) / (w_0 t)^\nu], \quad (4.4.2)$$

где $\nu \in (0, 1)$. Из (4.4.2) видно, что $I_{\uparrow}(t)$ со временем очень медленно по сравнению с экспонентой ($dI_{\uparrow}(t)/dt \sim 1/(w_0 t)^{\nu+1}$) приближается к стационарному значению $I_{\uparrow, \infty} = \alpha J_0$. Такая инерционность ТЛ обусловлена присутствием далеких пар, хотя их количество экспоненциально мало по сравнению с близкими парами.

Кинетика затухания ТЛ, согласно (4.3.1) и (4.3.14б), описывается выражением

$$I_{\downarrow}(t) = \alpha J_0 \int_0^{\infty} \tilde{\rho}(r) \{1 - \exp[-w(r)t_B]\} \exp[-w(r)(t - t_B)], \quad (4.4.3)$$

где $t \in (t_B, \infty)$. Аналогичное соотношение рассматривалось ранее (см., напр., 173, 174). При изучении кинетики затухания ТЛ можно использовать понятие начального ПР туннельных пар $n_{\downarrow}^*(r, 0)$. При этом вместо переменной t в (4.4.3) удобно ввести "новое" время $t'' = t - t_B$. Однако, индекс в " t " мы опустим, подразумевая, что при затухании ТЛ начало отсчета времени всегда перенесено в момент выключения возбуждения. В результате из (4.4.3) получаем

$$I_{\downarrow}(t) = \int_0^{\infty} n_{\downarrow}^*(r, 0) w(r) \exp[-w(r)t] dr, \quad (4.4.4)$$

где $n_{\downarrow}^*(r, 0) = \alpha J_0 \rho(r) \Gamma(r) \{1 - \exp[-w(r)t_B]\}$.

Можно отметить, что в более сложном случае, когда импульс возбуждения имеет произвольный контур $J(t)$ и $\dot{P}(r, t) \neq 0$, началь-

ное ПР согласно (4.3.7) имеет вид

$$\eta_{\Phi}^*(r, 0) = \chi \exp[-w(r)t_B] \int_0^{t_B} P(r, \psi) \mathcal{F}(\psi) \exp[w(r)\psi] d\psi, \quad (4.4.5)$$

где $\mathcal{F}(\psi) \equiv 0$ при $\psi \geq t_B$. При подходящем выборе $\rho(r)$ выражение (4.4.4) хорошо аппроксимирует экспериментально наблюдаемые кривые затухания ТЛ ($I_3(t)$ при любом t) таких пар, как $\{F - V_k\}$, $\{\pi^0 - V_k\}$, $\{A_0^0 - V_k\}$ и др. в чистых и активированных ШГК [7, 61, 177]. Если $\eta_{\Phi}^*(r, 0)$ слабо зависит от r , то при сравнительно грубой оценке интеграла в (4.4.4) получаем соотношение

$$I_3(t) \approx r_0 \eta_{\Phi}^*(r'_0) / t \quad (4.4.6)$$

где $r' = r_0 \ln w_0 t$ (более подробно см. гл. 6). Для $t \gg t_B$, согласно (4.3.15), можно начальное ПР в (4.4.6) заменить на КФ.

В ряде случаев при больших временах закон затухания ТЛ, действительно, имеет гиперболическую асимптотику типа $1/t^{\alpha'}$, где параметр α' близок к единице [176]. В п. 4.4.3 мы рассмотрим некоторые модельные КФ, для которых параметр α' может принимать значения от 0 до 2. Так, из (4.4.6) следует, что $\alpha' = 1$ при $d\eta_{\Phi}^*(r'_0)/dr' = 0$. Если производная начального ПР больше или меньше нуля, то $\alpha' < 1$ или $\alpha' > 1$, соответственно. Таким образом, соотношение (4.4.6) показывает очевидную взаимную связь между кинетикой затухания ТЛ и начальным ПР туннельных пар.

4.4.2. Параметр $\alpha(t)$ и критерий $\mathcal{E}_{\alpha}(t)$ для сравнения произвольных кривых затухания ТЛ

Непосредственное сравнение кривых затухания ТЛ затруднительно, потому что отсутствует удобный критерий выбора одной из рассматриваемых кривых в качестве эталонной. Для этой цели можно, в принципе, использовать параметр α' , однако, его применение ограничено, ибо аппроксимация $I(t) \sim t^{-\alpha'}$ становится весьма грубой, если кинетика затухания ТЛ наблюдается в широком (4-7 порядков) интервале времени [25]. Отсюда следует, что ис-

пользование закона Беккереля или его асимптотического аналога [61] для обобщения параметра α' на случай произвольной кинетики затухания ТЛ затруднительно. Для произвольной кинетики затухания ТЛ, следуя работам [181, 183, 188, 191], введем параметр

$$\alpha(t) \equiv -d \ln I_t(t) / d \ln t, \quad (4.4.7)$$

характеризующий скорость затухания относительной интенсивности в относительное время. Таким образом, каждая кривая затухания ТЛ как будто сравнивается сама с собой. Из формулы (4.4.7) следует, что вместо аппроксимации $I(t) \sim t^{-\alpha'}$ получается следующая зависимость

$$I(t) = I(0) \exp\left[-\int_0^t (\alpha(t')/t') dt'\right]. \quad (4.4.8)$$

Подстановка в (4.4.8) $\alpha(t) = \text{const} = \alpha'$ дает уже известную гиперболическую зависимость $I(t) \sim t^{-\alpha'}$. Следует заметить, что интерпретация параметра $\alpha(t)$, определенного выражением (4.4.7), непосредственно зависит от математической модели, в рамках которой рассматривается кинетика ТР. Однако, параметр $\alpha(t)$ и в общем случае имеет тесную связь с ПР радиационных дефектов (см. гл.6), поэтому мы используем его как основную характеристику кривых затухания ТЛ, наблюдаемой после возбуждения образцов в разных режимах.

Подстановка выражения (4.4.3) в определение (4.4.7) приводит к общей формуле

$$\alpha(t) = t \cdot \frac{\int_0^\infty p(r) \{1 - \exp[-w(r)t_0]\} w(r) \exp[-w(r)t] dr}{\int_0^\infty p(r) \{1 - \exp[-w(r)t_0]\} \exp[-w(r)t] dr} \quad (4.4.9)$$

Учитывая то, что подинтегральное выражение в (4.4.3) представляет собой ПР генетических пар $n_{\text{D}}^*(r, t)$, деленное на $\tau(r)$ [171], путем несложных преобразований из (4.4.9) получаем важное соотношение

$$\alpha(t)/t = \langle 1/\tau(r) \rangle_t = \langle w(r) \rangle_t, \quad (4.4.10)$$

где

$$\langle w(r) \rangle_t = \int_0^\infty w(r) n_{\text{D}}^*(r, t) w(r) dr / \int_0^\infty n_{\text{D}}^*(r, t) w(r) dr; \quad (4.4.11)$$

$n_0^*(r, t)$ имеет вид (4.3.146). Зависящая от времени вероятность ТР $\langle w(r) \rangle_t$ является усредненным по всему ансамблю генетических пар значением локальной вероятности ТР $w(r)$. Удельный вес далеких пар в ПР со временем увеличивается, поэтому величина $\langle w(r) \rangle_t$ убывает при возрастании t . Для описания кинетики ТР можно применить эффективный радиус ТР $R_{эф}$, который в нашем случае определяется выражением

$$\langle w(r) \rangle_t \equiv w_0 \exp[-R_{эф}(t)/r_0], \quad (4.4.12)$$

откуда, при учете соотношения (4.4.10) в (4.4.12), получаем

$$R_{эф}(t) = r_0 \ln[w_0 t / \alpha(t)]. \quad (4.4.13)$$

Таким образом, соотношения (4.4.10) и (4.4.13) устанавливают связь между эмпирически определенным параметром $\alpha(t)$ и микро-механизмом ТР, придавая этим параметру $\alpha(t)$ четкий физический смысл. Если параметры $\alpha_1(t)$ и $\alpha_2(t)$, соответствующие двум сравниваемым кривым затухания ТЛ, совпадают, то, согласно определению (4.4.7), эти кривые могут различаться лишь постоянным множителем. Следовательно, в обоих случаях ТЛ затухает по одному и тому же закону. Таким образом, при количественной оценке различий законов затухания ТЛ для двух произвольных кривых затухания ТЛ целесообразно ввести критерий вида:

$$E_\alpha(t) \equiv 2|\alpha_1(t) - \alpha_2(t)| / [\alpha_1(t) + \alpha_2(t)]. \quad (4.4.14)$$

Для количественной оценки эффекта ЗДВ, согласно критерию (4.4.14), мы должны сравнить между собой две кривые затухания ТЛ типа (4.4.3), полученные при различных длительностях возбуждения. В этой связи удобно одну из них выбрать при очень кратковременном возбуждении. Рассмотрим асимптотический аналог кинетики (4.4.3):

$$I_0(t) \equiv \lim_{t_B \rightarrow 0} I_{\downarrow}(t); \quad \lim_{t_B \rightarrow 0} \int_0^{t_B} w(r) dr = \mathcal{D}_0. \quad (4.4.15)$$

Подстановкой (4.4.3) в (4.4.15) получаем

$$I_0(t) = \mathcal{D}_0 \int_0^{\infty} \tilde{p}(r) w(r) \exp[-w(r)t] dr \quad (4.4.16)$$

и соответствующий $\alpha_0(t)$ имеет вид

$$\alpha_0(t) = t \int_0^{\infty} \bar{p}(r) [w(r)]^2 \exp[-w(r)t] dr / \int_0^{\infty} \bar{p}(r) w(r) \exp[-w(r)t] dr. \quad (4.4.17)$$

Кинетика (4.4.16) не запоминает длительность возбуждения, так как мгновенность возбуждения удовлетворяет требованию $w(r)t_b \ll 1$ при любом $\bar{p}(r)$ и во время возбуждения распад генетических пар из-за ТР не происходит. Далее будет показано, что в случае экспоненциального КФ кинетика (4.4.16) является оптимальной беккерелевской аппроксимацией в смысле $I(t) \sim t^{-\alpha'}$ "реальной" кинетики затухания ТЛ (4.4.3). Дальнейший анализ временной зависимости $\alpha(t)$, $\alpha_0(t)$ и связанного с ними критерия $\varepsilon_\alpha(t)$, согласно (4.4.9) и (4.4.17) и (4.4.14), возможен лишь при представлении $p(r)$ в явном виде.

4.4.3. Количественная оценка эффекта ЗДВ при экспоненциальном распределении генетических пар

Для характеристики кривых затухания ТЛ чистых и активированных ШГК широко пользуются асимптотическим значением параметра

$$\alpha(t) \quad (\text{см., напр., [61, 180]}): \quad \alpha(\infty) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \alpha(t), \quad (4.4.18)$$

которое определяется по формуле (4.4.7) при $t \gg t_b$, заменяя соответствующие дифференциалы конечными разностями. Обнаружено, что $\alpha(\infty)$ принимает значения в пределах от 0,6 до 1,8, но чаще всего колеблется около единицы [180]. В этой связи целесообразно рассматривать КФ следующих типов:

$$p(r) = (1/R_0) \exp(-r/R_0), \quad \text{если } \alpha(\infty) > 1 \quad (4.4.19a)$$

$$p(r) = (1/R_0) = \text{const}, \quad \text{если } \alpha(\infty) = 1 \quad (4.4.19б)$$

$$p(r) = (1/R_0) \exp(r/R_0), \quad \text{если } \alpha(\infty) < 1, \quad (4.4.19в)$$

где R_0 - постоянная. Выражение (4.4.3) при подстановке (4.4.19а, б, в) вместо $p(r)$ хорошо описывает также начальную стадию экспериментально полученных кривых затухания ТЛ [176, 177].

КФ (4.4.19а) получен теоретически в частном случае, когда после прямолинейного пробега электрон захватывается ловушкой недалеко от ионизированного центра [163]. В (4.4.19а) $R_0 = \langle r \rangle$ является средним по ансамблю расстоянием между партнерами генетических пар. Хорошее совпадение кинетики (4.4.3) с экспериментальными результатами дает и применение $p(r)$ в виде (4.4.19б,в). КФ (4.4.19в) является искусственно построенным и применяется впервые. Подстановка $p(r)$, выраженного в виде (4.4.19а,б,в), в общую формулу (4.4.9) и замена соответствующих переменных интегрирования приводит во всех трех случаях к единому выражению

$$\alpha(t) = \frac{\int_0^{w_0 t} x^\psi [1 - \exp(-x/t')] \exp(-x) dx}{\int_0^{w_0 t} x^{\psi-1} [1 - \exp(-x/t')] \exp(-x) dx}, \quad (4.4.20)$$

где $|\psi| = r_0/R_0$; $x = w(r)t$; $t' = t/t_B$.

Значения $\psi > 0$, $\psi = 0$ и $\psi < 0$ имеют место для $p(r)$ соответственно в виде (4.4.19а), (4.4.19б) и (4.4.19в). Далее при анализе выражения (4.4.20) рассмотрим лишь случай, когда $|\psi| < 1$, ибо допущение $|\psi| > 1$ привело бы к $r_0 \geq R_0$, что, напр., при $p(r)$ в виде (4.4.19а) не имеет физического смысла. Нетрудно установить, что $\alpha(t)$, согласно (4.4.20), монотонно возрастает во всем интервале $t \in (0, \infty)$. Интерес представляют предельные значения параметра $\alpha(t)$ при $t=0$ и $t \rightarrow \infty$. Расшифровав неопределенности типа 0/0 получим, что при любом конечном w_0 имеют место равенства

$$\lim_{t \rightarrow 0} \alpha(t) = \alpha(0) = 0 \quad (4.4.21)$$

и
$$\alpha(\infty) = 1 + \psi. \quad (4.4.22)$$

Аналитическое изучение $\alpha(t)$ в виде (4.4.20) значительно упрощается при $w_0 \rightarrow \infty$. Оказывается, что это приближение совсем не грубое, так как подстановка $w_0 = \infty$ в (4.4.20) приводит к тем же предельным значениям (4.4.21) и (4.4.22), за исключением случая $\psi > 0$ и $t \rightarrow 0$. В окрестности нуля $\alpha(t)$ при конечном

w_0 и $w_0 = \infty$ имеет различные значения, ибо

$$\lim_{t \rightarrow 0} \alpha(t) = \nu, \quad (\nu > 0, w_0 = \infty). \quad (4.4.23)$$

В качестве условия применимости перехода $w_0 \rightarrow \infty$ можно использовать неравенство типа

$$\Gamma(\nu+1) \{1 - [t/(t+t_B)]^{\nu+1}\} \gg \int_{w_0 t}^{\infty} x^{\nu} [1 - \exp(-x/t')] \exp(-x) dx, \quad (4.4.24)$$

что всегда выполняется, если $w_0 t \gg 1$ и $w_0 t_B \gg 1$. По данным работ [51, 56, 182] $w_0 = 10^6 - 10^{19} \text{ с}^{-1}$. Поэтому условие (4.4.24) выполняется уже при весьма коротких временах. В этой связи отметим, что параметр $\alpha(t)$, согласно (4.4.20), с точностью до экспоненциально малых слагаемых типа $(w_0 t)^{\nu} \exp(-w_0 t)$ явно не содержит ни t , ни t_B , а зависит лишь от приведенного времени t' независимо от величины $\alpha(\infty)$. Таким образом, $\alpha(t/t_B)$ является неким инвариантом, не зависящим от дозы возбуждения. Это одно из важнейших свойств параметра $\alpha(t)$, которое можно принять за критерий ТР в ИГП (стационарный случай).

Результаты численного анализа временной зависимости параметра $\alpha(t)$, согласно (4.4.20), при различных значениях $\alpha(\infty)$ представлены на рис.4.1. Из кривых $\alpha(t/t_B)$ видно, что при $t' > > 100$ параметр $\alpha(t) \approx \alpha(\infty)$ и соответствующие кривые затухания ТЛ удовлетворительно аппроксимируются законом $I(t) \sim t^{-\alpha(\infty)}$. На практике $\alpha(\infty)$ заменяется значением $\alpha(t)$ при $t \gg t_B$. На рис.4.2 показано отличие определенного таким образом $\alpha(\infty)$ от его истинного значения (4.4.22).

Коротко рассмотрим свойства параметра $\alpha_0(t)$ при подстановке формулы (4.4.19а, б, в) в (4.4.17). В результате получаем

$$\alpha_0(t) = (1 + \nu) - (w_0 t)^{\nu+1} \exp(-w_0 t) / \int_0^{w_0 t} x^{\nu} \exp(-x) dx. \quad (4.4.25)$$

Из (4.4.25) следует, что $\alpha_0(t)$ также монотонно возрастает и его предельные значения совпадают с (4.4.21) и (4.4.22): $\alpha_0(0) = 0$ и $\alpha_0(\infty) = 1 + \nu$. Кроме того, при $w_0 t \gg 1$ $\alpha_0(t)$ с точностью до экспоненциально малого слагаемого $(w_0 t)^{\nu+1} \exp(-w_0 t)$ не зависит от

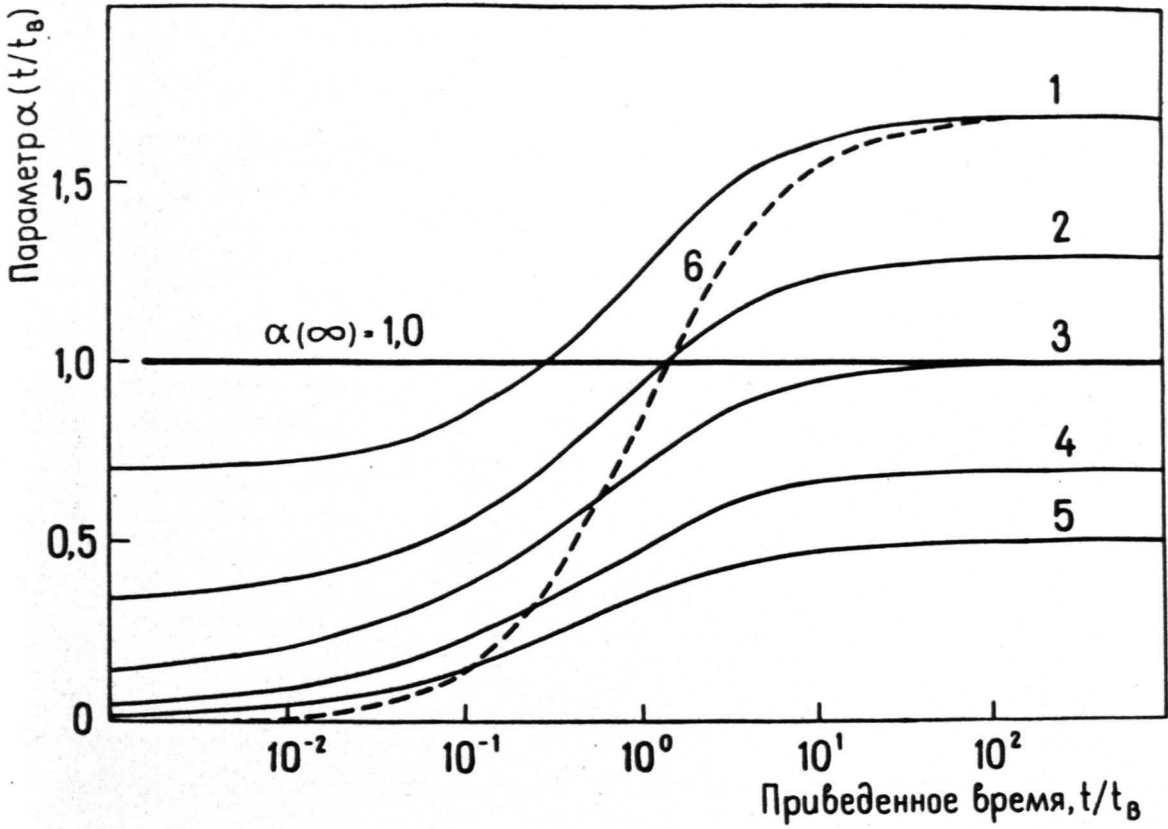


Рис.4.1. Параметр $\alpha(t/t_B)$ в случае экспоненциального ПР партнеров генетических пар при $\alpha(\infty) = 1,7$ (1); $\alpha(\infty) = 1,3$ (2); $\alpha(\infty) = 1$ (3); $\alpha(\infty) = 0,7$ (4) и $\alpha(\infty) = 0,5$ (5). Кривая (6) - это $\alpha_B(t/t_B)$ согласно закону Беккереля. $\omega_0 = 10^9 \text{ с}^{-1}$.

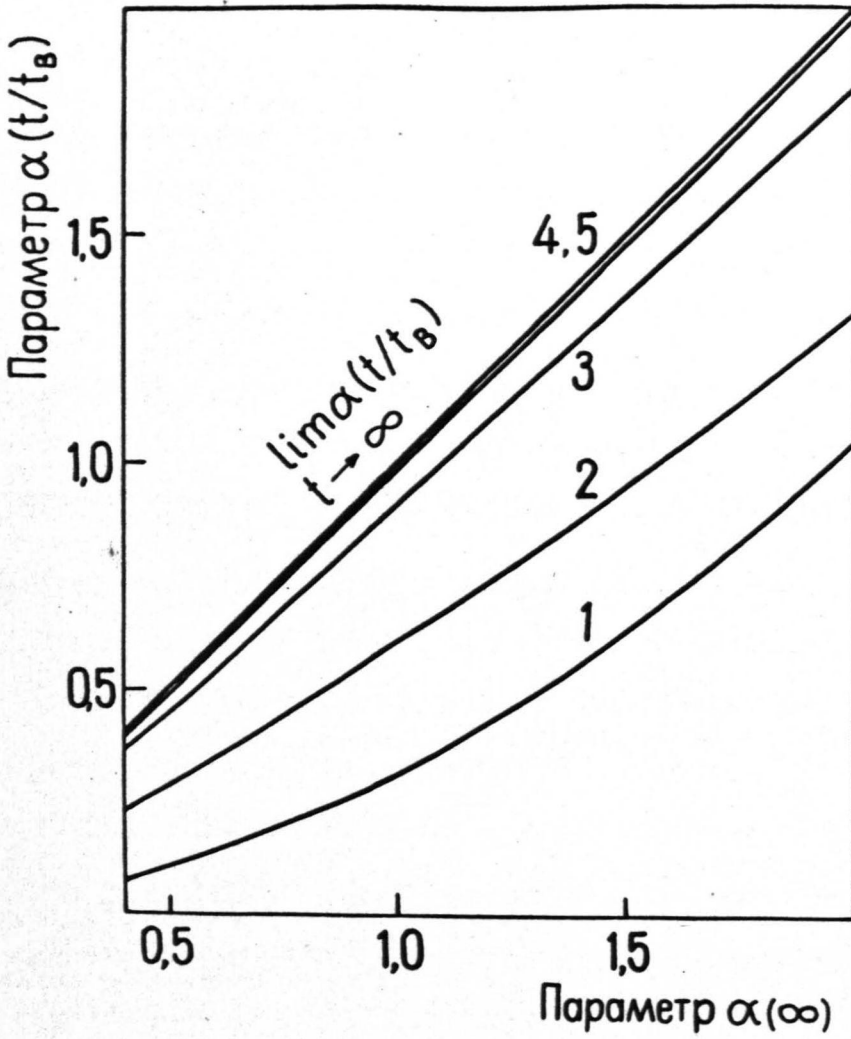


Рис.4.2. Параметр $\alpha(t/t_B)$ в зависимости от предельного значения $\alpha(\infty)$ в фиксированный момент времени t/t_B равный 0,05 (1); 0,5 (2); 5 (3); 50 (4) и 500 (5). $\omega_0 = 10^9 \text{ с}^{-1}$.

времени. Подстановка $w_0 = \infty$ в (4.4.25) приводит к $\alpha_0(t) \equiv 1 + \gamma$ независимо от t .

Количественная оценка эффекта ЗДВ заключается в подстановке $\alpha(t)$ и $\alpha_0(t)$ в (4.4.14) в качестве $\alpha_1(t)$ и $\alpha_2(t)$. Результаты численного интегрирования приведены на рис.4.3; $\varepsilon_\alpha(t/t_B)$ показан при тех же значениях $\alpha(\infty)$ как $\alpha(t/t_B)$ на рис.4.1. Следует отметить, что $\varepsilon_\alpha(t/t_B)$ при $t > t_B$ мало зависит от величины $\alpha(\infty)$. Зависимость критерия $\varepsilon_\alpha(t/t_B)$ от t_B в некоторые фиксированные моменты времени представлена на рис.4.4. Встречающиеся в литературе оценки начального пологого участка кинетики затухания ТЛ $t < 3-4 t_B$ (когда мы должны считаться с ТР во время возбуждения) явно занижены [179]. Так, если $\alpha(t)$ при $t = 4 t_B$ интерпретируется как $\alpha_0(t)$ в тот же момент времени, то относительная погрешность, согласно критерию $\varepsilon_\alpha(t)$, составляет около 11%. При детектировании тонких изменений параметра $\alpha(t)$ с точностью не меньше 1% мы должны учитывать эффект ЗДВ вплоть до $t \leq 50 t_B$ независимо от значения $\alpha(\infty)$. Почти то же самое можно сказать о величине $t \cdot I(t)$, которая обычно интерпретируется как начальное ПР $n_D^*(r', 0)$ (см. гл.6). Однако, с помощью $t \cdot I(t)$ оценивается также КФ. Из расчетов следует, что относительная погрешность представления $p(r') \sim t \cdot I(t)$ при $\beta = 0$ и $t = 4 t_B$ еще довольно большая - 11,3%, а меньше 1% она становится также при $t > 50 t_B$.

Оценим применимость закона Беккереля [61] для аппроксимации "реальной" кинетики затухания ТЛ (4.4.3). Соответствующий кинетике $I_B(t) \sim (1 + \beta t)^{-\alpha'}$ параметр $\alpha(t)$ имеет вид

$$\alpha_B(t) = \alpha' \beta t / (1 + \beta t). \quad (4.4.26)$$

Аппроксимация возможна лишь при выполнении условия $\alpha_B(t) \approx \alpha(t)$. В этой связи мы должны потребовать, чтобы по крайней мере предельные значения $\alpha(0)$ и $\alpha(\infty)$ "реальной" кинетики затухания ТЛ

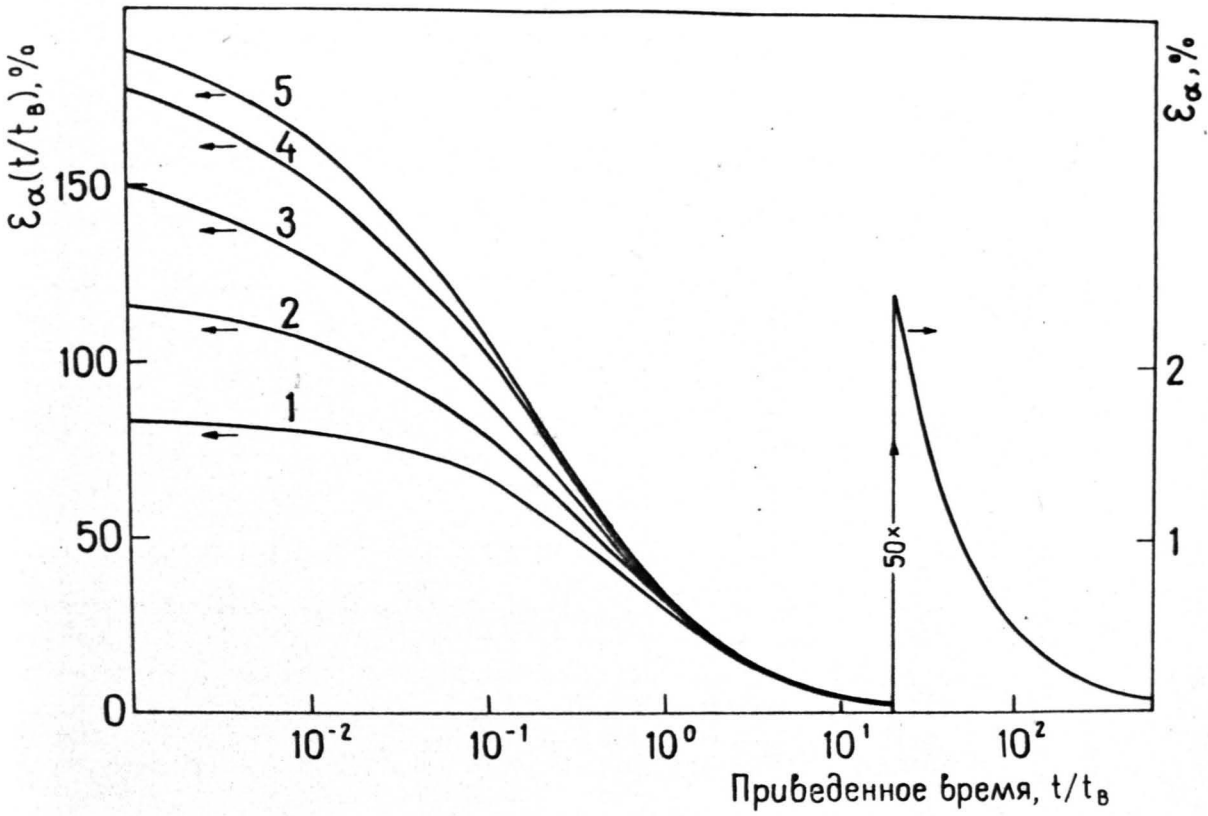


Рис.4.3. Критерий $\epsilon_{\alpha}(t/t_B)$ в случае экспоненциального ПР партнеров генетических пар при $\alpha(\infty) = 1,7$ (1); $\alpha(\infty) = 1,3$ (2); $\alpha(\infty) = 1$ (3); $\alpha(\infty) = 0,7$ (4) и $\alpha(\infty) = 0,5$ (5). $w_0 = 10^9 \text{с}^{-1}$.

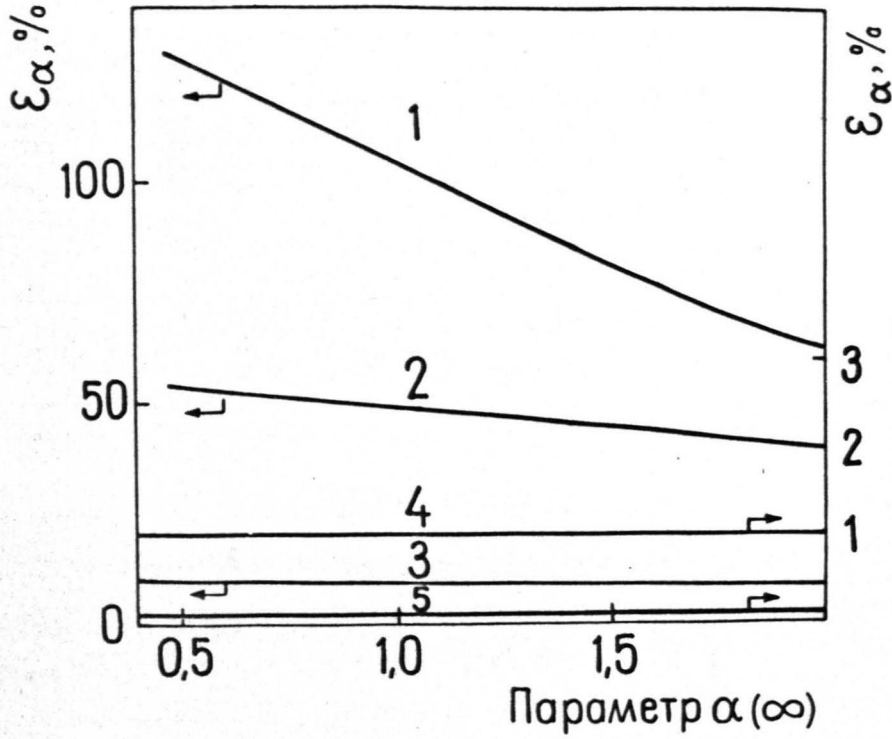


Рис.4.4. Параметр $\epsilon_{\alpha}(t/t_B)$ в зависимости от предельного значения $\alpha(\infty)$ в фиксированный момент времени t_0/t_B равный 0,05 (1); 0,5 (2); 5 (3); 50 (4) и 500 (5). $W_0 = 10^9 \text{ с}^{-1}$.

(4.4.3) и аппроксимирующей кинетики совпали, т.е. $\alpha' = 1 + \beta^2$.

Нетрудно убедиться, что нельзя подыскать такую постоянную $\beta > 0$, при подстановке которой в (4.4.26) удалось бы удовлетворительно согласовать временные зависимости $\alpha(t)$ и $\alpha_B(t)$ в интервале $t \in (0, 100t_B)$. Так как $\alpha(t)$ при $\omega_0 t \gg 1$ зависит лишь от приведенного времени t' , то дальнейшая "оптимизация" выражения (4.4.26) требует положить $\beta \sim 1/t_B$. Соответствующая временная зависимость $\alpha_B(t)$ с учетом $\alpha' = 1 + \beta^2$ и $\beta = 1/t_B$ приведена на рис. 4.1 для сравнения с $\alpha(t)$. Таким образом, мы показали, что с помощью одной лишь постоянной β нельзя удовлетворительно учесть эффект ЗДВ "реальной" кинетики. Если под законом Беккереля понимать также его асимптотический аналог

$I(t) \sim t^{-\alpha'}$, то $\mathcal{E}_\alpha(t)$ можно использовать в качестве критерия применимости беккерелевской аппроксимации в случае реально наблюдаемых кривых затухания ТЛ.

Глава 5. АККУМУЛЯЦИЯ ТУННЕЛЬНОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ДОЗЫ ВОЗБУЖДЕНИЯ

Принципиально важное значение имеет вопрос о применяемой математической модели для описания кинетики ТР. В зависимости от выбора той или иной модели кардинально изменяются содержание и способ решения так называемой обратной задачи (см.гл.6). В настоящей главе мы обсудим возможности определения математической модели ПР радиационных дефектов по экспериментальным кривым затухания ТЛ при различных дозах облучения.

5.1. Кинетика затухания туннельной люминесценции при различных дозах возбуждения

Измерение семейства кривых затухания ТЛ, параметрически зависящих от дозы возбуждения, не представляет экспериментальных трудностей. При этом дозы, соответствующие двум произвольным соседним кривым затухания ТЛ, могут отличаться друг от друга на сколь угодно малую величину. Поэтому с математической точки зрения следует, что с помощью семейства кривых затухания ТЛ, измеренных при различных дозах возбуждения, задана функция $I(t, D)$ двух переменных - t и D . Мы уже убедились в том, что при рассмотрении кинетики затухания ТЛ удобно пользоваться параметром $\alpha(t)$ (см.гл.4). В настоящем разделе мы расширим этот подход путем анализа полного дифференциала $d \ln I(t, D)$. Принимая во внимание, что интенсивность ТЛ $I(t, D)$ является функцией двух независимых переменных t и D , имеем

$$d \ln I(t, D) = -\alpha(t, D) d \ln t + \beta(t, D) d \ln D, \quad (5.1.1)$$

где $\alpha(t, D) \equiv -\partial \ln I(t, D) / \partial \ln t$ (5.1.2)

и $\beta(t, D) \equiv \partial \ln I(t, D) / \partial \ln D$. (5.1.3)

При фиксированной дозе определения параметра $\alpha(t, D)$ (5.1.2) и

(4.4.7) совпадают. Можно отметить, что зависимость параметра $\alpha(t, \mathcal{D})$ от дозы возбуждения отчасти изучалась уже в п.4.4 для случая ИП. К этому вопросу мы еще вернемся ниже. Производная интенсивности ТЛ по переменной \mathcal{D} имеет некоторую особенность, связанную с тем, что сама доза, согласно (4.3.3), зависит от интенсивности и длительности возбуждения. Наиболее важный практический интерес представляет ОИВ в виде (4.3.13). Следовательно, при подстановке (4.3.14) в (4.3.3) получаем $\mathcal{D} = \mathcal{F} \cdot t_B$, где ради удобства записи индекс в " \mathcal{F}_0 " опущен. Таким образом, одну и ту же дозу можно осуществить различными способами.

Кривые затухания ТЛ, измеренные после облучения образца одинаковыми, но отличающимися по интенсивности и длительности возбуждения, дозами, собственно говоря, будут различны. Следовательно, параметр $\beta(t, \mathcal{D})$, также как интенсивность ТЛ $I(t, \mathcal{D})$, является неоднозначной функцией дозы возбуждения. В этой связи следует различать значения параметра $\beta(t, \mathcal{D})$, полученные при постоянной интенсивности и длительности возбуждения соответственно. Введем определения

$$\beta_{\mathcal{F}}(t, \mathcal{D}) \equiv [\partial \ln I(t, \mathcal{D}) / \partial \ln \mathcal{D}]_{\mathcal{F}} = [t_B / I(t, \mathcal{D})] [\partial I(t, \mathcal{D}) / \partial t_B] \quad (5.1.4)$$

при $\mathcal{F} = \text{const}$ и

$$\beta_{t_B}(t, \mathcal{D}) \equiv [\partial \ln I(t, \mathcal{D}) / \partial \ln \mathcal{D}]_{t_B} = [\mathcal{F} / I(t, \mathcal{D})] [\partial I(t, \mathcal{D}) / \partial \mathcal{F}] \quad (5.1.5)$$

при $t_B = \text{const}$. Ясно (см. также п.4.4), что в общем случае

$$\beta_{\mathcal{F}}(t, \mathcal{D}) \neq \beta_{t_B}(t, \mathcal{D}),$$

где $t \in (0, \infty)$ и $\mathcal{D} \in (0, \mathcal{D}_{\text{макс}})$.

Изучение эффективности аккумуляции ТЛ в зависимости от дозы возбуждения ($\mathcal{ЭАТЛ}(\mathcal{D})$) сводится к измерению интенсивности ТЛ в некоторый момент времени t_0 после прекращения возбуждения при различных дозах облучения образца. Полученную таким образом кривую $I(t_0, \mathcal{D})$ назовем дозовой характеристикой ТЛ.

При исследовании $I(t_0, \mathcal{D})$ в широком диапазоне доз не только интенсивность, но и длительность, напр., рентгеновского возбуждения, изменяются в пределах двух-трех порядков. Это связано с весьма ограниченной максимальной интенсивностью возбуждающего излучения. В свете рассмотренной выше неоднозначности $I(t, \mathcal{D})$ от \mathcal{D} естественно возникает вопрос, насколько однозначна получаемая при таких условиях дозовая характеристика ТЛ. В этой связи важно выяснить эквивалентность одинаковых, но различными способами реализованных, доз. За критерий эквивалентности одинаковых доз можно взять однозначность дозовой характеристики $I(t_0, \mathcal{D})$, для обеспечения которой должно выполняться равенство

$$I(t_0, \mathcal{D}) = I(t_0, \mathcal{D}'), \quad (5.1.6)$$

если только $\mathcal{D} = \mathcal{D}'$ (также при $\mathcal{J} \neq \mathcal{J}'$). Далее, такие одинаковые дозы, для которых выполняется равенство (5.1.6), назовем эквивалентными в процессах накопления ТЛ. Причинами неэквивалентности одинаковых доз может служить ряд факторов: отличающаяся эффективность создания и высвечивания дефектов в зависимости от интенсивности возбуждения, разрушение дефектов из-за ТР во время возбуждения и некоторые концентрационные эффекты. ТР во время возбуждения снижает крутизну кинетики затухания ТЛ. В гл.4 показано, что длительность возбуждения существенно влияет на начальную стадию ($t \leq 50 t_g$) кинетики затухания ТЛ, поэтому возбуждение необходимо осуществлять по возможности кратковременными импульсами. Для того, чтобы устранить возможную неоднозначность дозовой характеристики $I(t_0, \mathcal{D})$, необходимо обеспечить такие условия возбуждения и измерения, при которых можно выделить некоторый общий для всего семейства кривых затухания ТЛ $I(t, \mathcal{D}_1), I(t, \mathcal{D}_2), \dots$ ($\mathcal{D}_1 < \mathcal{D}_2 < \dots$) интервал времени $(\vartheta_1, \vartheta_2)$, в котором соблюдается закон эквивалентности доз

(5.1.6). Если рассматриваемое семейство кривых затухания ТЛ действительно позволяет выделить в реально доступные времена ($t < 10^5$ с) такой интервал, то момент времени t_0 выбирается соответственно из (θ_1, θ_2) . В противоположном случае, когда невозможно выделить интервал (θ_1, θ_2) , нельзя построить однозначную дозовую характеристику. При этом изучение $I(t_0, \mathcal{D})$ при постоянной интенсивности или длительности возбуждения приобретает особое значение. В качестве меры ЭАТЛ(\mathcal{D}) для произвольной дозовой характеристики $I(t_0, \mathcal{D})$ используем параметр $\beta(t_0, \mathcal{D})$. Ясно, что для $t_0 \in (\theta_1, \theta_2)$ имеем равенство

$$\beta_I(t_0, \mathcal{D}) = \beta_{t_B}(t_0, \mathcal{D}).$$

Для определения интервала (θ_1, θ_2) важно оценить точность выполнения закона эквивалентности доз (5.1.6). В этой связи введем критерий

$$\varepsilon_\beta(t, \mathcal{D}) \equiv 2 |\beta_I(t, \mathcal{D}) - \beta_{t_B}(t, \mathcal{D})| / [\beta_I(t, \mathcal{D}) + \beta_{t_B}(t, \mathcal{D})]. \quad (5.1.7)$$

При выполнении равенства (5.1.6) $\varepsilon_\beta(t, \mathcal{D}) \rightarrow 0$. Пусть это равенство имеет место для $t \in (\theta_1, \theta_2)$. В таком случае $\beta(t, \mathcal{D})$ является однозначной функцией дозы. Если $\beta(t, \mathcal{D}) = 1$, то интенсивность ТЛ возрастает прямо пропорционально дозе облучения. В свою очередь, значения $\beta(t, \mathcal{D}) < 1$ или $\beta(t, \mathcal{D}) > 1$ соответствуют суб- или суперлинейной зависимости интенсивности ТЛ от дозы возбуждения.

5.2. Дозовые характеристики туннельной люминесценции в рамках модели изолированных генетических пар

Аккумуляция ТЛ в зависимости от дозы возбуждения обусловлена процессами генерации и накопления радиационных дефектов. При обычных плотностях возбуждения концентрация созданных радиацией дефектов меняется пропорционально дозе возбуждения, о чем свидетельствуют кинетики накопления радиационных дефектов, из-

меренные по оптическому поглощению. В ТР эффективно участвуют более близко расположенные дефекты, поэтому интенсивность ТЛ резко "реагирует" на то, с какой интенсивностью и длительностью реализована доза возбуждения. Параметр $\beta(t, \vartheta)$ наглядно передает главные закономерности дозовых характеристик ТЛ, поэтому продолжим его анализ на примере кинетики затухания ТЛ в случаях стационарного (4.4.3) и нестационарного (4.4.4) процесса генерации туннельных пар.

Подстановка (4.4.3) в (5.1.4) и (5.1.5) приводит к формулам

$$\beta_{\Sigma}(t, \vartheta) = t_{\vartheta} \int_0^{\infty} \tilde{p}(r) w(r) \exp[-w(r)(t+t_{\vartheta})] dr / \int_0^{\infty} \tilde{p}(r) \{1 - \exp[-w(r)t_{\vartheta}]\} \exp[-w(r)t] dr \quad (5.2.1)$$

и

$$\beta_{t_{\vartheta}}(t, \vartheta) \equiv 1. \quad (5.2.2)$$

Выражения (5.2.1) и (5.2.2) показывают, что различно реализованные одинаковые дозы не эквивалентны. Строго говоря, эквивалентность доз имеет место лишь при $t \rightarrow \infty$,

ибо $\lim_{t \rightarrow \infty} \beta_{\Sigma}(t, \vartheta) = \beta_{\Sigma}(\infty, \vartheta) = 1 = \beta_{t_{\vartheta}}(t, \vartheta)$ для произвольного интегрируемого $\tilde{p}(r)$.

В рассматриваемом случае причиной неэквивалентности одинаковых доз является процесс ТР в более близких парах во время возбуждения. Можно показать, что $\beta_{\Sigma}(t, \vartheta)$ в (5.2.1) относительно t всюду ($t \in (0, \infty)$) монотонно возрастающая функция. Из этого следует, что $\beta_{\Sigma}(0, \vartheta) = \lim_{t \rightarrow 0} \beta_{\Sigma}(t, \vartheta)$ является наименьшим возможным значением параметра $\beta_{\Sigma}(t, \vartheta)$. Согласно (5.2.1), имеем

$$\beta_{\Sigma}(0, \vartheta) = t_{\vartheta} \int_0^{\infty} \tilde{p}(r) w(r) \exp[-w(r)t_{\vartheta}] dr / \int_0^{\infty} \tilde{p}(r) \{1 - \exp[-w(r)t_{\vartheta}]\} dr. \quad (5.2.3)$$

Численное значение $\beta_{\Sigma}(0, \vartheta)$ зависит от постоянной w_0 : чем она больше, тем ближе $\beta_{\Sigma}(0, \vartheta)$ к нулю. Интерес вызывает идеализированный эксперимент, в котором реализовано мгновенное возбуждение. Для этого предельного случая необходимо вычислить переход $t_{\vartheta} \rightarrow 0$ в (5.2.1). В результате получаем равенство

$$\lim_{t_{\vartheta} \rightarrow 0} \beta_{\Sigma}(t, \vartheta) = \beta_{t_{\vartheta}}(t, \vartheta) = \beta_{\infty} = 1,$$

согласно которому при мгновенном возбуждении дозы эквивалентны для любого t . Следовательно, интервал (θ_1, θ_2) совпадает с $(0, \infty)$. Тот факт, что предельное значение β_∞ (при $t \rightarrow \infty$ или $t_B \rightarrow 0$) равняется единице, не случайный. Это вполне естественно следует из основного кинетического уравнения (4.3.4), при выводе которого предполагалось, что изолированные генетические пары дефектов рождаются пропорционально интенсивности и длительности возбуждения. Если выход создания радиационных дефектов зависит от интенсивности возбуждения, то предельные значения для $\beta_2(t, \theta)$ и $\beta_{t_B}(t, \theta)$ различны и могут отличаться от единицы также в рамках модели ИП. При этом неэквивалентность одинаковых доз принципиальна, которую нельзя устранить выбором интервала (θ_1, θ_2) , ибо такого интервала просто не существует.

В случае нестационарного процесса генерации туннельных пар мы приходим к результатам, аналогичным полученным выше. Для вычисления $\beta(t, \theta)$ используем кинетику затухания ТЛ (4.4.4). При этом следует помнить, что КФ $P(r, t)$ зависит от времени параметрически:

$$P(r, t) = \hat{P}(r, \theta(t)).$$

Для возбуждения в виде (4.3.13) имеем

$$\hat{P}(r, \theta) = \hat{P}'(r, t_B, \xi). \quad (5.2.4)$$

При подстановке (4.4.4) в (5.1.4) и (5.1.5) с учетом зависимости КФ от дозы (5.2.4) получаем

$$\beta_2(t, \theta) = t_B \frac{\int_0^\infty \tilde{w}(r) \exp[-w(r)t] \{ \hat{P}'(r, t_B, \xi) - w(r) \exp[-w(r)t_B] \int_0^{t_B} \hat{P}'(r, \psi, \xi) \exp[w(r)\psi] d\psi \} dr}{\int_0^\infty \tilde{w}(r) \exp[-w(r)(t+t_B)] \int_0^{t_B} \hat{P}'(r, \psi, \xi) \exp[w(r)\psi] d\psi dr} \quad (5.2.5)$$

и

$$\beta_{t_B}(t, \theta) = 1 + \frac{\int_0^\infty \tilde{w}(r) \exp[-w(r)(t+t_B)] \int_0^{t_B} \hat{P}'(r, \psi, \xi) / \partial \xi \exp[w(r)\psi] d\psi dr}{\int_0^\infty \tilde{w}(r) \exp[-w(r)(t+t_B)] \int_0^{t_B} \hat{P}'(r, \psi, \xi) \exp[w(r)\psi] d\psi dr} \quad (5.2.6)$$

Можно сказать, что выражения (5.2.5) и (5.2.6), также как

(5.2.1), определяют относительно t всюду монотонно возрастающие функции, пороговые значения которых следует вычислять при $t=0$ и $t=\infty$. Важно отметить, что предельное значение β_∞ па-

параметра $\beta(t, \mathcal{D})$ может быть использовано в качестве критерия при установлении математической модели ПР радиационных дефектов. В рамках модели ИГП предельное значение β_∞ обусловлено свойствами процесса генерации туннельных пар. С этой точки зрения член, ответственный за генерацию туннельных пар в уравнении (4.3.4), может быть записан в более общем виде:

$$\Delta n^*(r, t) \sim \alpha \exp(\alpha \ln t) P(r, t) \Delta t, \quad (5.2.7)$$

где α - численный коэффициент. Кинетики затухания ТЛ (4.4.3) и (4.4.4) получены при предположении $\alpha = 1$, поэтому $\beta_\infty = 1$. В более общем случае, $\beta_\infty = \alpha$. Однако, в большинстве встречающихся на практике случаев (невысокая плотность возбуждающего излучения) α близок к единице, поэтому модель ИГП характеризуется $\beta_\infty = 1$. В свою очередь, если при изучении реальных дозовых характеристик ТЛ удастся установить β_∞ близкий к единице, то с большой достоверностью можно полагать, что процесс ТР радиационных дефектов протекает согласно модели ИГП.

Для построения однозначной с точностью до $\varepsilon_0 \geq 0$ дозовой характеристики $I(t_0, \mathcal{D})$ необходимо выделить интервал (θ_1, θ_2) ; ε_0 - заранее заданное малое число. Видимо, в рассматриваемых случаях $\theta_2 = \infty$. θ_1 определяется из уравнения

$$\beta_\beta(\theta_1, \mathcal{D}) = \varepsilon_0. \quad (5.2.8)$$

Однако, выделение интервала (θ_1, ∞) , согласно уравнению (5.2.8) возможно лишь при явно заданном КФ. В этой связи вернемся к модельным КФ типа (4.4.19). Поочередная подстановка (4.4.19а, б, в) в (5.2.1) приводит к единому выражению

$$\beta_\beta(t, \mathcal{D}) = [t'^\beta / (1+t')^{\beta+1}] \int_0^{w_0(t+t_B)} x^\beta \exp(-x) dx / \int_0^{w_0 t} x^{\beta-1} [1 - \exp(-x/t')] \exp(-x) dx, \quad (5.2.9)$$

где $|t'| < 1$, $t' = t/t_B$, $x = w_0 t$. Нетрудно заметить, что $\beta_\beta(t, \mathcal{D})$ в (5.2.9) при больших временах затухания ($w_0 t \gg 1$) с точностью до экспоненциально малых величин типа $(w_0 t)^\beta \exp(-w_0 t)$ не зависит от t и t_B в отдельности, а только от их отношения - приведен-

ного времени t' . Поэтому параметр $\beta_3(t, \vartheta)$ в (5.2.9) целесообразно исследовать в зависимости от приведенного времени. Результаты численного анализа выражения (5.2.9) при некоторых значениях γ' представлены на рис.5.1 и рис.5.2. На основании этих результатов легко определить наименьшее допустимое значение θ_1 по заранее заданному ε_0 . Пусть $\varepsilon_0 = 0,01$. Тогда при подстановке $\beta_{t_B}(t, \vartheta) = 1$ в (5.2.8) получаем, что $\beta_3(t, \vartheta) \approx 0,99$. Так, для $\gamma' = -0,2; 0; 0,2$ согласно (5.2.9), имеем, что $\theta_1 \approx 40t_B; 50t_B; 60t_B$ соответственно. Если при измерении кривых затухания ТЛ в широком диапазоне доз применялись возбуждающие импульсы различной длительности t_B , то $\theta_1 \approx 50 \max[t_B]$. Таким образом, момент времени t_0 следует выбрать из интервала времени $(50 \max[t_B], \infty)$.

Зависимость параметра $\alpha(t, \vartheta)$ от дозы возбуждения вне интервала (θ_1, θ_2) следует рассматривать при $\mathcal{F} = \text{const}$ и $t_B = \text{const}$ в отдельности. Согласно (4.4.20) получаем, что $\alpha_3(t_0, \vartheta)$ (при $\mathcal{F} = \text{const}$) с ростом дозы уменьшается из-за эффекта ЗДВ; t_0 - некоторый фиксированный момент времени. Любопытно отметить, что $\alpha_3(t_0, \vartheta)$ при $t_0/t_B \rightarrow 0$ может стать сколь угодно малым. Однако, $\alpha_{t_B}(t, \vartheta)$ при выполнении (4.3.2) не зависит от дозы возбуждения. Если доза ограничена, то, очевидно, имеют место равенства

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \alpha_3(t, \vartheta) = \lim_{t \rightarrow \infty} \alpha_{t_B}(t, \vartheta) = \alpha(\infty)$$

и

$$\alpha_3(t, \vartheta) = \alpha_{t_B}(t, \vartheta),$$

если $t \in (\theta_1, \theta_2)$. Как было отмечено в п.4.4 на примере экспоненциального КФ типа (4.4.19), параметр $\alpha(t, \vartheta)$ при учете эффекта ЗДВ не должен меняться с дозой:

$$\alpha(t_1, \vartheta_1) = \alpha(t_2, \vartheta_2), \quad (5.2.10)$$

если $t_1/t_{B1} = t_2/t_{B2}$. Закономерность параметра $\alpha(t, \vartheta)$ (5.2.10) строго доказана для КФ типа (4.4.19). Можно, однако, показать,

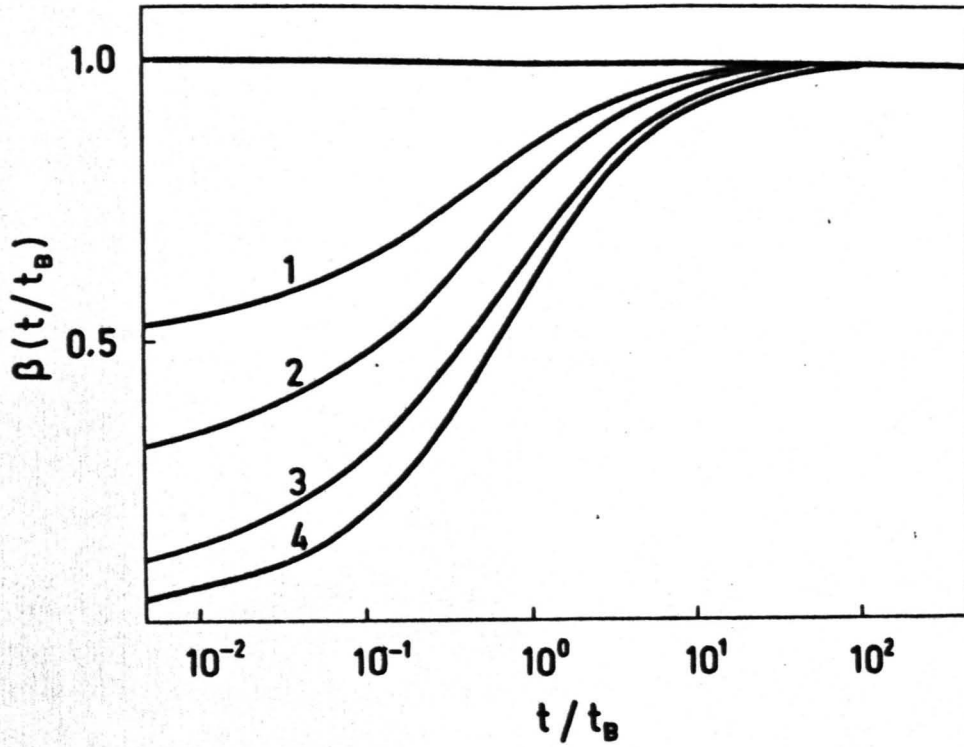


Рис.5.1. Параметр $\beta(t/t_B)$ в случае экспоненциального ПР партнеров генетических пар при $\alpha(\infty) = 0,5$ (1), 0,8 (2), 1,2 (3) и 1,5 (4). $w_0 = 10^9 \text{ с}^{-1}$.

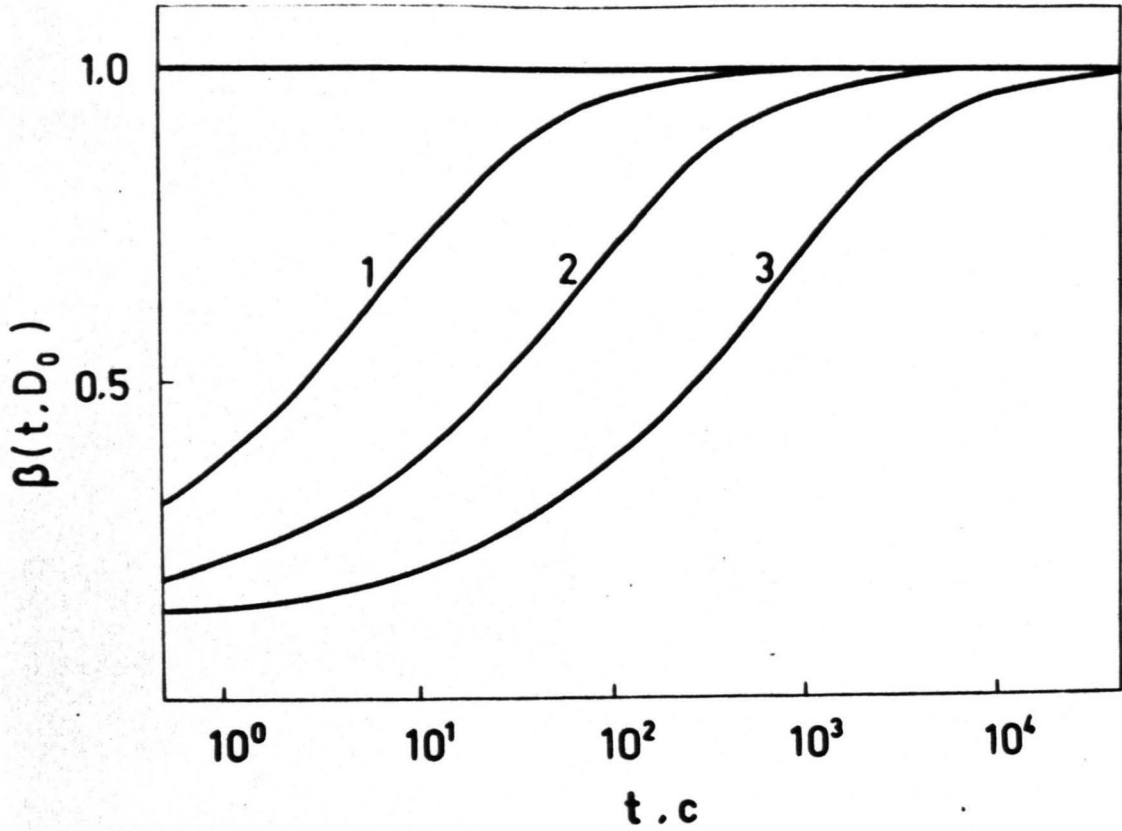


Рис.5.2. Параметр $\beta(t, D_0)$ в случае экспоненциального ПР партнеров генетических пар при различных длительностях возбуждения: $t_B = 10$ с (1), 100 с (2) и 1000 с (3), при $\alpha(\infty) = 1$ и $w_0 = 10^9$ с⁻¹.

что при выполнении (4.3.2) равенство (5.2.I0) остается в силе также для КФ более общего вида. Для этого необходимо с достаточной высокой точностью представить соответствующий параметр $\alpha_3(t, \Theta)$ в виде $\alpha(t/t_B)$. Если при анализе экспериментальных кривых затухания ТЛ с ростом дозы обнаружено нарушение инвариантности $\alpha(t/t_B)$ при $t/t_B = const$, то условие стационарности генерации туннельных пар (4.3.2) в рассматриваемом случае не имеет места.

В случае нестационарного процесса генерации туннельных пар анализ параметра $\alpha(t, \Theta)$ несколько усложняется, ибо кинетика затухания ТЛ описывается выражением (4.4.4), в котором начальное ПР имеет вид (4.4.5). Согласно определению (5.1.2) из (4.4.4) с учетом (4.4.5) получаем

$$\alpha(t, \Theta) = t \cdot \frac{\int_0^{\infty} w(r) \exp[-w(r)(t+t_B)] \int_0^{t_B} \hat{P}(r, \vartheta, \zeta) \exp[w(r)\vartheta] w(r) d\vartheta dr}{\int_0^{\infty} \exp[-w(r)(t+t_B)] \int_0^{t_B} \hat{P}(r, \vartheta, \zeta) \exp[w(r)\vartheta] w(r) d\vartheta dr} \quad (5.2.II)$$

При анализе (5.2.II) следует учитывать соотношение (5.2.4). По всей вероятности можно ожидать, что $\hat{P}(r, t_B, \zeta)$ с ростом дозы возбуждения (соответственно, концентрации электронных и дырочных центров) изменится в пользу более близких пар. В результате параметр $\alpha_{t_B}(t, \Theta)$ при возрастании дозы увеличится. Возрастающая с дозой крутизна кинетики затухания ТЛ, видимо, частично компенсирует эффект ЭДВ. В конечном счете это может привести к эффекту, что более пологая начальная стадия кинетики затухания ТЛ станет аномально "короткой". Поэтому кривая затухания ТЛ в некоторых случаях при сравнительно больших дозах может выйти на асимптотический аналог $I \sim t^{-\alpha}$ "скорее", чем это следовало ожидать согласно оценок, полученных по критерию $\varepsilon_{\alpha}(t)$ (рис.4.3).

5.2.1. Дозовые характеристики в различные моменты затухания ТЛ

Рассмотрим дозовую характеристику $I(t_0, \mathcal{D})$ с целью выяснения, влияет ли выбор момента времени t_0 измерения интенсивности ТЛ на функциональный закон дозовой характеристики. Для этого проанализируем в рамках модели ИГП два характерных случая, когда а) КФ с дозой не меняется и б) КФ при возрастании дозы изменяется в пользу близких пар. Предполагается, что в обоих случаях выполняется закон эквивалентности доз: $t_0 \in (\theta_1, \theta_2)$, причем доза облучения меняется путем увеличения интенсивности при постоянной длительности возбуждения $t_{\text{в}} = 5\text{с}$.

В случае а) для семейства соответствующих кривых затухания ТЛ (рис. 5.3) КФ выбран в виде (4.4.19б). Кроме того, предположено, что в некоторой точке $t_0 = 3\text{с}$, имеет место соотношение $I(t_0, \mathcal{D}) \sim \mathcal{D}$ (рис. 5.4). Нетрудно убедиться, что в этом случае безразлично, каким выбрать момент времени t_0 , так как при $t_1 < t_0$ или $t_2 > t_0$ соответствующие зависимости $I(t_1, \mathcal{D})$ и $I(t_2, \mathcal{D})$, а также $I(t_0, \mathcal{D})$, совпадают с точностью до постоянного множителя, т.е. функциональный закон дозовой характеристики остается неизменным (рис. 5.4).

В случае б) используется КФ (4.4.19а), При этом допускается, что среднее расстояние между партнерами в парах с дозой уменьшается. В результате получаем, что при возрастании дозы соответствующие кривые затухания ТЛ (рис. 5.5) становятся круче. Следовательно, $\alpha(t_0, \mathcal{D})$ с дозой увеличивается. Допустим, что зависимость $I(t_0, \mathcal{D})$ в некоторый момент времени $t_0 = 100\text{с}$ также линейна относительно дозы (рис. 5.6). Легко убедиться, что в этом семействе кривых выбор момента измерения интенсивности ТЛ существенно изменяет функциональный закон дозовой характеристики. Так, $I(t_1, \mathcal{D})$, измеренная при $t_1 < t_0$, имеет су-

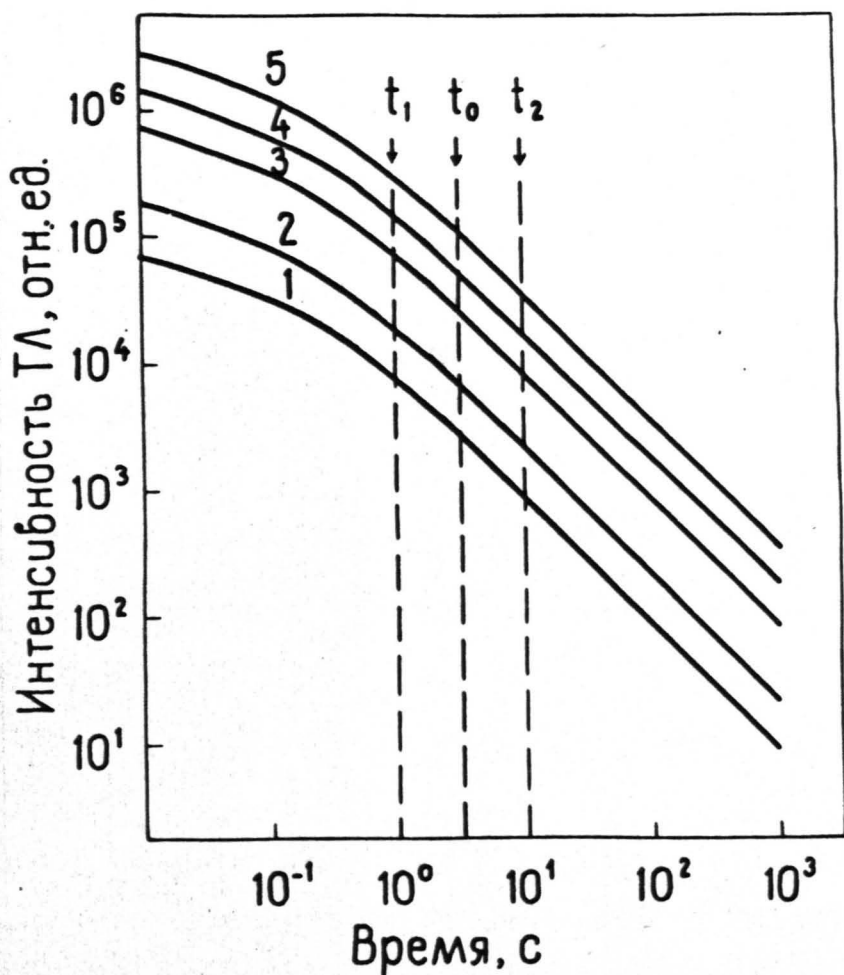


Рис.5.3. Семейство теоретических кривых затухания ТЛ, полученных при различных дозах возбуждения \mathcal{D} ; параметр $\alpha(t, \mathcal{D})$ не зависит от дозы возбуждения: 1 - $\mathcal{D} = 1,0$ отн. ед.; 2 - $\mathcal{D} = 2,5$ отн. ед.; 3 - $\mathcal{D} = 10$ отн. ед.; 4 - $\mathcal{D} = 20$ отн. ед.; 5 - $\mathcal{D} = 40$ отн. ед.; $\alpha_1(\infty) = \alpha_2(\infty) = \dots = \alpha_5(\infty) = 1,0$.

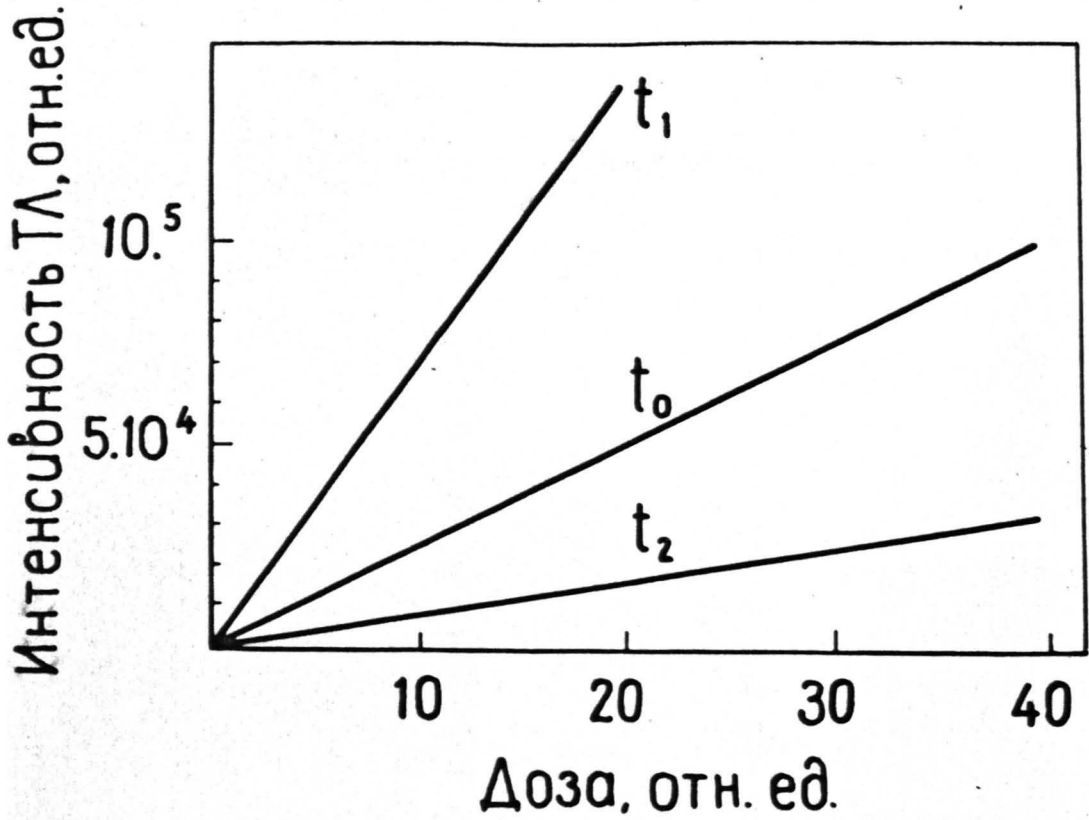


Рис. 5.4. Эффективность аккумуляции ТЛ в зависимости от дозы возбуждения, вычисленная из кинетик затухания ТЛ, приведенных на рис. 5.3.

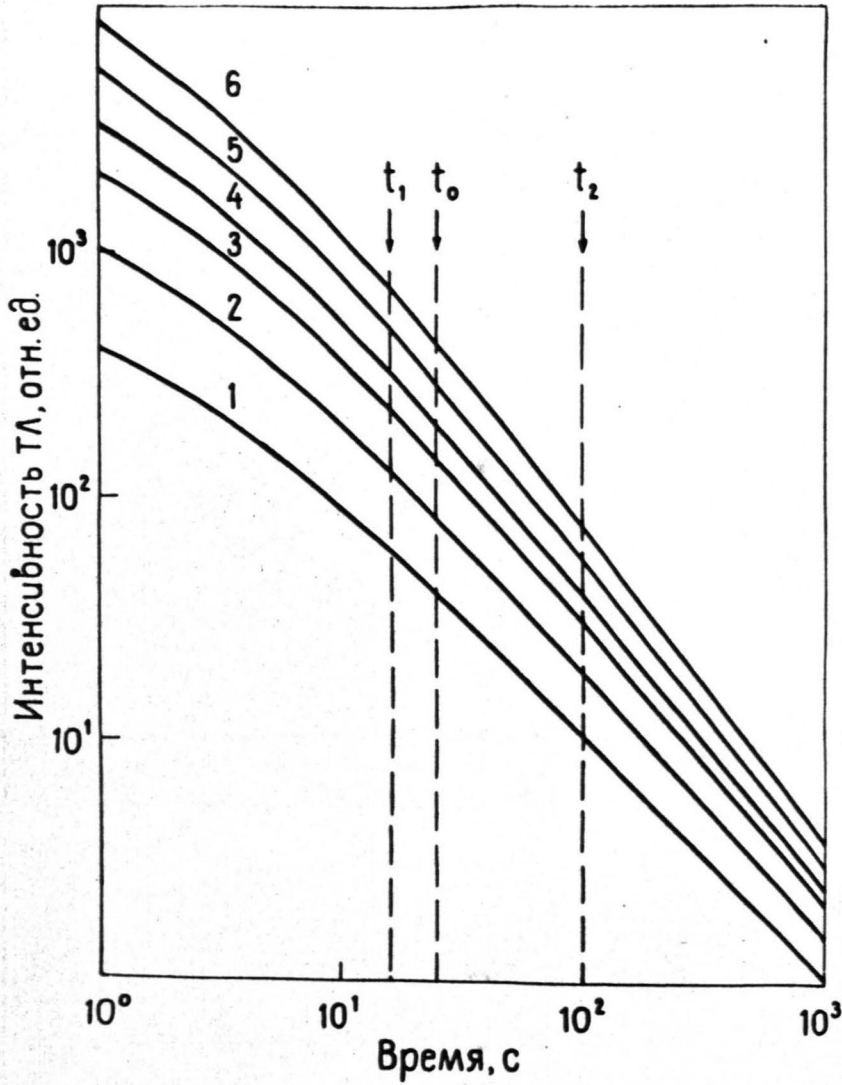


Рис. 5.5. Семейство теоретических кривых затухания ТЛ, полученных при различных дозах возбуждения; параметр $\alpha(t, D)$ возрастает с увеличением дозы возбуждения D :
1 - $D = 1,0$ отн.ед.; $\alpha(\infty) = 1,01$; 2 - $D = 2,0$ отн.ед.; $\alpha(\infty) = 1,10$; 3 - $D = 3,5$ отн.ед.; $\alpha(\infty) = 1,17$; 4 - $D = 4,8$ отн.ед.; $\alpha(\infty) = 1,22$; 5 - $D = 7,0$ отн.ед.; $\alpha(\infty) = 1,27$; 6 - $D = 10$ отн.ед.; $\alpha(\infty) = 1,30$.

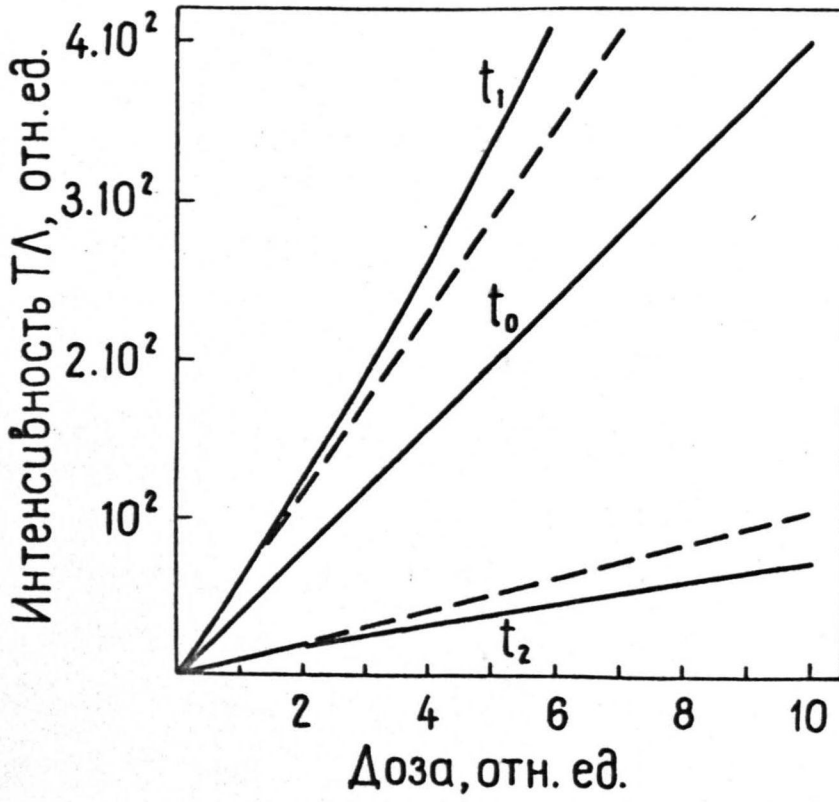


Рис.5.6. Эффективность аккумуляции ТЛ в зависимости от дозы возбуждения, вычисленная из кинетик затухания ТЛ, приведенных на рис.5.5.

перелинейную зависимость от дозы возбуждения. Напротив, выбор момента времени $t_2 > t_0$ приводит $I(t_2, \mathcal{D})$ к сублинейности. Отсюда вывод: во всех случаях, когда $\alpha(t, \mathcal{D})$ зависит от дозы возбуждения, функциональный закон $I(t_0, \mathcal{D})$ зависит, в свою очередь, от выбора момента времени t_0 . Поэтому дозовые характеристики необходимо исследовать в широком временном интервале.

5.3. Кинетика затухания туннельной люминесценции в рамках модели смешанных генетических пар при различных дозах возбуждения

5.3.1. Кинетика затухания ТЛ

Последовательный учет процессов генерации и распад из-за ТР радиационных дефектов в условиях, когда генетические пары смешиваются, сталкивается с принципиальными трудностями. Поэтому поставленная в общем виде задача (учет частичной пространственной корреляции радиационных дефектов) до сих пор не решена. Ясно, что ПР созданных в предшествующие моменты времени радиационных дефектов влияет на процессы их генерации и распада в текущий момент времени: история образца определяет его настоящее. В литературе эти проблемы рассмотрены лишь в некоторых частных случаях, таких как кинетика разгорания люминесценции и кинетика накопления радиационных дефектов [1, 3, 163]. Однако, это оказалось возможным только при сильно коррелированных (случай ИПП) и хаотической смеси электронных и дырочных центров. Учитывая общую сложность одновременного учета генерации и распада СП радиационных дефектов, мы ограничимся рассмотрением кинетики распада из-за ТР смешанных пар электронно-дырочных центров при следующих предположениях. Пусть в момент включения возбуждения произвольно выбранный электронный (дырочный) центр находится в пуассоновском поле дырочных

(электронных) центров. Учитывая то, что электронные и дырочные центры рождаются и погибают попарно, имеем

$$n(t) = N(t).$$

Интенсивность ТЛ в рассматриваемом случае можно определить из уравнения

$$I(t) = -dn(t)/dt = -dN(t)/dt, \quad (5.3.1)$$

Взаимное ПР электронных и дырочных центров описывается с помощью локальных концентраций (4.2.6) и (4.2.7). Равенство макроскопических концентраций, согласно 4.2.9, обеспечивает также равенство локальных концентраций:

$$n(r,t) = N(r,t).$$

Кинетика распада из-за ТР электронных центров описывается системой уравнений [56,192]

$$\begin{cases} dn(t)/dt = -n(t) \int_0^{\infty} \dot{N}(r,t) w(r) 4\pi r^2 dr & (5.3.2a) \\ \begin{cases} dn(r,t)/dt = -n(r,t) \left\{ \int_0^{\infty} \dot{N}(p,t) w(p) 4\pi p^2 dp + w(r) \right\} \\ n(t=0) = n(0); n(r,0) = n(0) \end{cases} & (5.3.2b) \end{cases}$$

Решение системы уравнений (5.3.2) относительно макроскопической концентрации имеет вид

$$n(t) = n(0) \left\{ 1 + n(0) \int_0^{\infty} \{1 - \exp[-w(r)t]\} 4\pi r^2 dr \right\}^{-1} \quad (5.3.3)$$

Подстановка (5.3.3) в (5.3.1) дает

$$I(t) = n^2(0) \dot{\hat{V}}(t) [1 + n(0) \hat{V}(t)]^{-2}, \quad (5.3.4)$$

где

$$\hat{V}(t) \equiv \int_0^{\infty} \{1 - \exp[-w(r)t]\} 4\pi r^2 dr. \quad (5.3.5)$$

Это эффективный объем ТР к моменту времени t ; видно, что

$\hat{V}(t)$ с ростом времени монотонно расширяется; $\dot{\hat{V}}(t) = d\hat{V}(t)/dt$.

Так как $\hat{V}(t)$ неэлементарная функция, то отметим некоторые возможности представить ее в аналитическом виде. Так, при сверхмалых временах ($w_0 t \ll 1$) из (5.3.5) получаем

$$\hat{V}(t) = 8\pi r_0^3 w_0 t, \quad (5.3.6)$$

а при $w_0 t > 1$ имеем

$$\hat{V}(t) \simeq (4\pi/3) (r_0 \ln w_0 t)^3 \equiv \tilde{V}(t). \quad (5.3.7)$$

Особый интерес представляет начальная стадия затухания ТЛ для времен $t < t_K$. Момент времени t_K определим с помощью урав-

нения

$$n(0)\hat{V}(t_k) = 1. \quad (5.3.8)$$

Можно отметить, что при доступных в эксперименте концентрациях дефектов $w_0 t_k \gg 1$. Таким образом, в области малых времен ($n(0)\hat{V}(t) \ll 1$) из (5.3.4) с учетом (5.3.6) и (5.3.7) получаем выражения

$$I(t) \approx n^2(0) 8\pi n_0^3 w_0 (1 - n(0) 16\pi n_0^3 w_0 t) \quad (5.3.9)$$

для $t < 1/w_0$, и

$$I(t) \approx [3n^2(0)/t \ln w_0 t] \tilde{V}(t) [1 - 2n(0)\tilde{V}(t)] \quad (5.3.10)$$

для $1/w_0 < t \ll t_k$.

Вместо приближенного выражения (5.3.10) можно, разумеется, использовать более точную формулу

$$I(t) = [3n^2(0)/t \ln(w_0 t)] \hat{V}(t) [1 + n(0)\tilde{V}(t)]^{-2}, \quad (5.3.11)$$

которая применима также в области больших времен ($n(0)\hat{V}(t) > 1$).

Не трудно убедиться, что "хвост" кинетики затухания ТЛ (5.3.4) при сверхбольших временах ($n(0)\hat{V}(t) \gg 1$) совершенно не зависит от начальной концентрации $n(0)$. Из (5.3.4) с учетом (5.3.7) и (5.3.11) следует, что в области сверхбольших времен имеет место выражение

$$I(t) = -d(1/\hat{V}(t))/dt \approx 9[4\pi n_0^3 t \ln^4 w_0 t]^{-1}.$$

Начальную стадию кинетики затухания ТЛ даже в рамках модели СП можно описывать с помощью парной плотности $n_{сп}^*(r, t)$ изолированных статистических пар. Следует подчеркнуть, что парная плотность в случаях моделей ИП и СП различные понятия. Это необходимо учитывать при интерпретации экспериментальных результатов по восстановлению ПР радиационных дефектов. Парная плотность $n_{сп}^*(r, t)$ выделяет, таким образом, из данного сложного ПР электронных и дырочных центров изолированные статистические пары электронно-дырочных центров. Вернемся к моменту выключения возбуждения, когда электронные и дырочные центры образуют стохастическую смесь. Для построения парной плотности $n_{сп}^*(r, t)$ следует, по-видимому, оценить вероятность

реализации события C : в окрестности произвольно выбранного электронного (дырочного) центра на расстоянии r находится дырочный (электронный) центр (событие A), причем оба центра образуют геометрически R^* -изолированную пару (событие B). Нетрудно заметить, что событие C представляет собой произведение двух сформулированных выше взаимно независимых событий A и B . Поэтому имеет место равенство

$$P(C) = P(A) \cdot P(B) .$$

Так как в единичном объеме присутствуют $n(0)$ электронных (дырочных) центров, то искомая парная плотность изолированных статистических пар определяется уравнением

$$n_{\text{сп}}^*(r, 0) dr = n(0) P(C) = n(0) P(A) \cdot P(B) . \quad (5.3.12)$$

Ясно, что вероятность $P(A)$ пропорциональна числу дырочных (электронных) центров в объеме сферического слоя радиусом r и толщиной dr , поэтому

$$P(A) \sim n(0) 4\pi r^2 dr .$$

R^* -изолированность данной пары требует, чтобы соответствующий объем частично перекрывающихся сферических окрестностей с радиусом R^* пустовал (см. п. 4.2). Так как электронные и дырочные центры образуют пуассоновское поле, то вероятность реализации события B описывается формулой [165]

$$P(B) = \exp\{-2n(0)(4\pi/3)r^3\varphi(r)\} ,$$

где $\varphi(r) = R^3(r) + 3R^2(r)/4 - 1/12$. Следовательно, искомая парная плотность, согласно (5.3.12), имеет вид

$$n_{\text{сп}}^*(r) = n^2(0) 4\pi r^2 \exp\{-2n(0)(4\pi/3)r^3\varphi(r)\} , \quad (5.3.13)$$

которую можно воспринимать как некое начальное ПР типа $n_{\text{сп}}^*(r, 0)$. Величину $R(r)$ и, следовательно, $\varphi(r)$ в (5.3.13) можно определить из соотношения (4.2.2). В качестве примера допустим, что

$$\exp[-(R-1)r/r_0] = 0.01 ,$$

откуда получаем:

$$R(r) = 1 + (r_0 \ln 100)/r \approx 1 + 5r_0/r . \quad (5.3.14)$$

Из (5.3.14) следует, что $\varphi(r \rightarrow \infty) = 5/3$. Это значение нам понадобится ниже. Кинетика затухания ТЛ, за которую ответственна ТР в изолированных статистических парах электронно-дырочных центров, описывается уравнением (4.4.4), в которое вместо начального ПР $n_{\text{сн}}^*(r, 0)$ подставлена парная плотность (5.3.13). В результате имеем

$$I(t) = \int_0^{\infty} \tilde{n}_{\text{сн}}^*(r, 0) w(r) \exp[-w(r)t] dr. \quad (5.3.15)$$

Приближенная оценка интеграла в (5.3.15) с учетом $w_0 t \gg 1$ приводит к выражению

$$I(t) \approx [3n^2(0)/t \ln w_0 t] \tilde{V}(t) \exp\{-2n(0)\tilde{V}(t)\varphi(r_0 \ln w_0 t)\}. \quad (5.3.16)$$

В области малых времен ($n(0)\tilde{V}(t) \ll 1$, но $w_0 t \gg 1$) (5.3.16)

несколько упрощается:

$$I(t) \approx [3n^2(0)/t \ln w_0 t] \tilde{V}(t) \{1 - 2n(0)\tilde{V}(t) \cdot (5/3)\}. \quad (5.3.17)$$

При сравнении (5.3.17) с (5.3.10) мы убеждаемся, что, действительно, в области малых времен ($t \ll t_k$) процесс ТР осуществляется преимущественно в изолированных статистических парах. Отсюда вывод: с учетом приведенных выше оговорок и ограничений описание ПР радиационных дефектов с помощью парной плотности типа $n_{\text{сн}}^*(r, t)$, имеет место даже в случае модели СП. При учете ТР только в изолированных парах мы не учли фотоны, возникающие в актах ТР в смешанных парах. Поэтому естественно, что интенсивность ТЛ, определенной согласно (5.3.17) занижена по сравнению с истинным значением интенсивности, полученной по формуле (5.3.10).

Отметим некоторые общие свойства кинетики затухания ТЛ (5.3.4). Для этого вычислим параметр $\alpha(t)$ согласно определению (4.4.7). Подстановка (5.3.4) в (4.4.7) приводит к выражению

$$\alpha(t) = -t \left\{ \frac{\ddot{\hat{V}}(t)}{\dot{\hat{V}}(t)} - 2\frac{\dot{\hat{V}}(t)}{[1 + n(0)\hat{V}(t)]} \right\}. \quad (5.3.18)$$

Приближенная оценка интегралов в (5.3.18) с учетом (5.3.5) и (5.3.7) даст

$$\alpha(t) \approx \ln^2(w_0 t / 2) / \ln^2 w_0 t + [6 / \ln w_0 t] \{ n(0) \tilde{v}(t) / [1 + n(0) \tilde{v}(t)] \}, \quad (5.3.19)$$

где $w_0 t \gg 1$. Исследование временной зависимости параметра $\alpha(t)$ по формулам (5.3.18) и (5.3.19) приводит к заключению, что $\alpha(t)$ со временем меняется немонотонно. Можно показать, что кривая $\alpha(t)$ согласно (5.3.18), имеет максимум, величина и положение которого зависят от начальной концентрации радиационных дефектов. Для максимального значения параметра $\alpha(t)$ имеет место неравенство

$$\max[\alpha(t)] = \alpha_{\max}(n(0)) \geq 1.$$

Предельные значения при $t=0$ и $t=\infty$ не зависят от начальной концентрации $n(0)$:

$$\alpha(t \rightarrow 0) = 0 \quad \text{и} \quad \alpha(t \rightarrow \infty) = 1.$$

Понятно, что кривая затухания ТЛ (5.3.4) в двойных логарифмических координатах перегибается именно в тот момент времени, когда $\alpha(t)$ принимает максимальное значение. Любопытно отметить, что точка перегиба близка к определенному уравнением (5.3.8) значению t_k . Следовательно, кривая затухания ТЛ в области малых времен является выпуклой, а в области больших времен - вогнутой. При анализе реальных кривых затухания ТЛ точку перегиба можно использовать в качестве критерия применимости парной плотности (5.3.13) для описания пространственного распределения радиационных дефектов в случае реализации модели СП. Следует подчеркнуть, что более пологая начальная стадия кинетики затухания ТЛ (5.3.4) обусловлена особенностями распределения Пуассона, согласно которому самая ближайшая окрестность электронного (дырочного) центра с большей вероятностью пуста, чем занята дырочными (электронными) центрами. В результате ближайших пар значительно меньше того, чтобы обеспечить необходимую константу скорости ТР. Это более чем наглядно проявляется на примере парной плотности (5.3.13).

5.3.2. Дозовые характеристики ТЛ

Система уравнений (5.3.2) при заданных начальных условиях $n(t \rightarrow 0) = n(0)$ и $n(r, 0) = n(0)$ описывает только распад радиационных дефектов вследствие ТР. Совместное аналитическое рассмотрение процессов генерации и распада с учетом пространственной корреляции радиационных дефектов, как было показано, крайне затруднительно. Численное моделирование рассматриваемых процессов на ЭВМ в случае F - и H -центров привело к заключению, что во время возбуждения вследствие ТР образуются кластеры одноименных дефектов [3,154]. Такой результат в первый момент кажется поразительным, ибо согласно исходной модели партнеры генетической пары могли равновероятно разместиться в любом узле кристаллической решетки. Нет сомнений, что возникновение кластеров одноименных дефектов обусловлено именно аннигиляцией близкорасположенных разноименных дефектов, так как при отсутствии рекомбинационного взаимодействия, в частности, ТР, образуется хаотическая смесь созданных дефектов. Даже численное моделирование процессов генерации и распада при создании частично смешивающихся коррелированных генетических пар сталкивается, по-видимому, со значительными техническими трудностями [204]. Цель приведенного выше примера - показать общую сложность учета пространственной корреляции радиационных дефектов в рекомбинационных явлениях.

Продолжим начатый в п.5.3.1 анализ кинетики затухания ТЛ в случае реализации модели СП. В реальном эксперименте влияние особенностей процессов генерации и ТР приведет к более сложным начальным условиям для уравнений (5.3.2): по крайней мере $n(r, 0) \neq n(0)$. Так как последовательное аналитическое описание процесса возбуждения, согласно которому можно было вычислить

начальную локальную концентрацию $n(r, 0)$ не известно, то примем, что реализовано мгновенное возбуждение. В этом случае весьма обоснованно можно полагать $n(r, 0) = n(0)$. Пусть начальная концентрация созданных электронных и дырочных центров пропорциональна дозе возбуждения: $n(0) = N(0) = \kappa D$. В таком случае перепишем (5.3.4) в виде

$$I(t, D) = (\kappa D)^2 \hat{V}(t) / [1 + \kappa D \hat{V}(t)]^2. \quad (5.3.20)$$

Подстановка (5.3.20) в (5.1.3) приводит к выражению

$$\beta(t, D) = 2 / [1 + \kappa D \hat{V}(t)]. \quad (5.3.21)$$

Формальный анализ дозовой характеристики $I(t, D)$ (5.3.20) аналогично п.5.3.1 позволяет выделить области малых, больших и сверхбольших доз, согласно условиям

$$\begin{aligned} \kappa D \hat{V}(t) \ll 1 & \quad \text{или} \quad \beta(t, D) \simeq 2, \\ \kappa D \hat{V}(t) \gtrsim 1 & \quad \text{или} \quad 0 < \beta(t, D) < 2, \\ \kappa D \hat{V}(t) \gg 1 & \quad \text{или} \quad \beta(t, D) \simeq 0, \end{aligned}$$

соответственно. Таким образом, приходим к заключению, что в области обычно доступных доз ПР радиационных дефектов в рамках модели СП характеризуется значением $\beta \simeq 2$. Параметр $\beta(t, D)$ (5.3.21) с ростом дозы монотонно убывает. Значение $\beta \simeq 0$ соответствует насыщению процесса аккумуляции ТЛ. Выясним физическую сущность эффекта насыщения интенсивности ТЛ в области сверхбольших доз.

В ТЛ за время t проявляются только те дырочные (электронные) центры, которые попали в эффективный объем ТР $\hat{V}(t)$ электронного (дырочного) центра. Так как в единичном объеме присутствуют $n(0) = \kappa D$ электронных (дырочных) центров, то при отсутствии перекрытия сферических объемов $\hat{V}(t)$ полный реакционный объем имеет вид

$$V_{\Sigma}(t, D) \simeq \kappa D \hat{V}(t). \quad (5.3.22)$$

Для определения светосуммы $S(t, \mathcal{D})$, высвеченной за время t вследствие ТР, следует среднюю концентрацию дырочных (электронных) центров умножить на полный реакционный объем. В результате имеем:

$$S(t, \mathcal{D}) = \mathcal{K} \mathcal{D} V_{\Sigma}(t, \mathcal{D}) \sim (\mathcal{K} \mathcal{D})^2 \hat{V}(t) \quad (5.3.23)$$

и

$$I(t, \mathcal{D}) = \partial S(t, \mathcal{D}) / \partial t \sim (\mathcal{K} \mathcal{D})^2 \dot{\hat{V}}(t). \quad (5.3.24)$$

Дозовая характеристика $I(t_0, \mathcal{D})$ согласно (5.3.24) представляет собой квадратичную зависимость от величины дозы. Видно, что (5.3.20) в области малых доз близка к (5.3.24). Полный реакционный объем не может видимо, превышать реальный объем образца, поэтому $V_{\Sigma}(t, \mathcal{D}) \leq 1$ (случай образца единичного объема). Если время $t = t_0$ фиксировано, то при некоторой дозе \mathcal{D}_k выполняется равенство

$$\mathcal{K} \mathcal{D}_k \hat{V}(t_0) = 1. \quad (5.3.25)$$

Условие больших доз $\mathcal{D} > \mathcal{D}_k$, таким образом, равносильно тому, что эффективные объемы ТР $\hat{V}(t)$ станут сильно перекрываться. В результате соотношения (5.3.22) для расчета полного реакционного объема больше не имеют места. Вместо (5.3.22) положим

$V_{\Sigma}(t_0, \mathcal{D} > \mathcal{D}_k)$, что приводит к

$$S(t, \mathcal{D} > \mathcal{D}_k) = \mathcal{K} \mathcal{D}.$$

Следовательно, все созданные возбуждением электронные и дырочные центры погибают из-за ТР за время t_0 независимо от величины дозы. Интенсивность ТЛ $I(t_0, \mathcal{D} > \mathcal{D}_k)$ сохраняет то значение, которое она имела при $\mathcal{D} = \mathcal{D}_k$. Действительно, из

(5.3.24) с учетом $V_{\Sigma}(t_0, \mathcal{D} > \mathcal{D}_k) = 1$ следует, что

$$I(t_0, \mathcal{D} > \mathcal{D}_k) = [\mathcal{K} \mathcal{D} \hat{V}(t_0)]^2 [\dot{\hat{V}}(t_0) / \hat{V}^2(t_0)] = \dot{\hat{V}}(t_0) / \hat{V}^2(t_0). \quad (5.3.26)$$

Таким образом, мы приходим к выводу, что насыщение ТЛ с дозой обусловлено интересным эффектом – весь объем образца превратился в реакционный объем.

Рассмотренный выше подход позволяет интерпретировать также

выражение (5.3.20) в области сверхбольших доз. Для этого вычислим $V_{\Sigma}(t_0, \vartheta)$ с учетом частичного перекрыwania объемов $\hat{V}(t_0)$, что, разумеется, играет ощутимую роль уже при $\vartheta < \vartheta_k$. В этой связи истинный $V_{\Sigma}(t_0, \vartheta > \vartheta_k) < 1$. Эффекты перекрыwania можно учитывать с помощью формул (5.3.3) и (5.3.23), что приводит к выражению

$$V_{\Sigma}(t_0, \vartheta) = \kappa \vartheta \hat{V}(t_0) / [1 + \kappa \vartheta \hat{V}(t_0)]^{-1}. \quad (5.3.27)$$

В области малых доз (5.3.27) близок к (5.3.22), а при сверхбольших дозах - $V_{\Sigma}(t_0, \vartheta) \simeq 1$. Из (5.3.20) с учетом (5.3.27) следует

$$I(t_0, \vartheta) = [\dot{\hat{V}}(t_0) / \hat{V}^2(t_0)] \cdot V_{\Sigma}^2(t_0, \vartheta). \quad (5.3.28)$$

В области сверхбольших доз $I(t_0, \vartheta)$ практически постоянная величина. Из (5.3.28) получаем предельную кинетику

$$I(t > t_0, \vartheta \rightarrow \infty) = \dot{\hat{V}}(t) / \hat{V}^2(t) \simeq g / 4\pi r_0^3 \ln^4 w_0 t.$$

Дозовые характеристики ТЛ активированных TI и Ag KCl и KB π (см. прил. 2) аппроксимируются законом $I(t_0, \vartheta) \sim \vartheta^{\beta}$, где $\beta \simeq 1$. Для кристаллов KCl и KB π с $[A^+] > 10^{18} \text{ см}^{-3}$, а также в чистом KI обнаружена слабая суперлинейность ($\beta = 1,04 - 1,10$), которая объясняется с помощью генетического и статистического механизмов генерации туннельных пар. Эти данные приводят к заключению, что в исследуемых ШГК с большой достоверностью реализуется модель ИГП. Параметр $\alpha(t, \vartheta)$ экспериментальных кривых затухания ТЛ возрастает при увеличении дозы возбуждения. Более пологий участок начальной стадии затухания ТЛ, за который, главным образом, ответствен эффект ЗДВ, зависит также от дозы возбуждения. При увеличении дозы этот участок в координатах $(I, t/t_0)$ сокращается. Это свидетельствует о наличии нестационарного процесса генерации туннельных пар, что не противоречит реализации модели ИГП.

5.4. Р е з ю м е

Экспериментальные данные по аккумуляции ТЛ активированных ШГК в зависимости от дозы (прил.2) сравниваются с теоретическими результатами, полученными в рамках моделей ИПП и СПП. Наиболее общие закономерности приведены ниже.

1. Условия: модель ИПП, стационарный процесс $-\partial P(r,t)/\partial t = 0$. Результаты: $\alpha(t \rightarrow \infty, \mathcal{D})$ не зависит от дозы, предельное значение параметра является характерным числом для семейства кривых затухания $I(t, \mathcal{D}_i)$, где $i = 1, 2, \dots$; $\beta_{\mathcal{Z}}(t \rightarrow \infty, \mathcal{D}) = \beta_{t_B}(t, \mathcal{D}) = 1$.

2. Условия: модель ИПП, нестационарный процесс $-\partial P(r,t)/\partial t \neq 0$. Результаты: $\alpha(t \rightarrow \infty, \mathcal{D}) \neq const$, параметр обычно возрастает с дозой возбуждения; $\beta(t, \mathcal{D})$ имеет сложный функциональный вид; если $\hat{P}(r, \mathcal{D}) = \hat{P}(r, t_B, \mathcal{Z})$ явно не содержит \mathcal{Z} , то $\beta_{t_B}(t, \mathcal{D}) = 1$.

3. Условия: модель СПП, пуассоновское распределение дефектов-партнеров. Результаты: $\alpha(t, \mathcal{D})$ в начальной стадии затухания ТЛ возрастает, в некоторый момент времени t_k , зависящий от начальной концентрации дефектов-партнеров, имеет максимум; при $t < t_k$ преимущественно осуществляется ТР в изолированных статистических парах, а при $t > t_k$ - в более сложных агрегатах электронных и дырочных центров; $\beta(t, \mathcal{D}) = 2$ в области малых доз.

4. Предельные значения параметра $\beta(t, \mathcal{D})$ могут быть использованы в качестве меры математической модели ПР: а) $\beta_{\infty} = 2$ - полное отсутствие пространственной корреляции, пуассоновское распределение радиационных дефектов; б) $\beta_{\infty} \in (1, 2)$ - частичная пространственная корреляция, ПР представляет собой суперпозицию пуассоновского распределения и ИПП; в) $\beta_{\infty} \simeq 1$ - полная пространственная корреляция, реализуется модель ИПП; г) $\beta_{\infty} \in (0, 1)$ - частичная пространственная корреляция, наряду с ИПП образуются ассоциаты (димеры, тримеры, ...) одноименных дефектов.

5. Кинетика затухания ТЛ ШГК наиболее адекватно описывается в рамках модели ИПП.

Глава 6. РЕСТАВРАЦИЯ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ ПО КИНЕТИКЕ ТУННЕЛЬНОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ

6.1. Пространственное распределение радиационных дефектов как результат решения обратной задачи

Ранее было показано (гл.4), что кинетика ТЛ обусловлена вероятностью ТР $w(r)$, ПР туннельно рекомбинирующих радиационных дефектов и временной зависимостью возбуждения. Ясно, что $w(r)$ определяется исключительно квантовомеханической природой туннельно рекомбинирующих дефектов и не зависит от условий возбуждения. В свою очередь, ПР радиационных дефектов обусловлено процессами их генерации и разрушения. Не вдаваясь в подробности, отметим, что в феноменологическом рассмотрении генерация генетических пар описывается КФ, зависящим для данного кристалла исключительно от вида возбуждения (γ^- , X^- , ВУФ-, УФ- и др. лучи). Для простоты изложения условия физического эксперимента подбираются такими (напр., $T_B < T_d$; невысокая плотность возбуждения), что разрушение радиационных дефектов обусловлено только их ТР. В этих условиях ПР радиационных дефектов в текущий момент времени определяется временной зависимостью возбуждения и процессами ТР. Кривые затухания (гл. 4) и дозовые характеристики (гл.5, прил.2) ТЛ показывают, что в ЩК ПР радиационных дефектов наиболее адекватно описывается в рамках модели ИПТ, согласно которой кинетика ТЛ имеет вид (4.3.1). В дальнейшем мы допустим, что в (4.3.1) $\eta(r) \equiv 1$. Таким образом, изучение временной зависимости $n^*(r,t)$ и обусловленной ею кинетики ТЛ представляет собой содержание прямой задачи. Эти вопросы мы разобрали в гл.4.

С точки зрения радиационной физики наибольший интерес вызывает не сама кинетика ТЛ, а предметом изучения является ПР

радиационных дефектов. К сожалению, само ПР $n^*(r,t)$ недоступно для прямого изучения, и исследуется некоторое его проявление - кинетика ТЛ. Следовательно, функциональная связь (4.3.1) представляет собой относительно $n^*(r,t)$ интегральное уравнение Фредгольма I-рода. Так как интенсивность ТЛ в (4.3.1) определяется экспериментально, то речь может идти лишь о нахождении $\tilde{n}^*(r,t)$ приближенного к $n^*(r,t)$ решения уравнения

$$\int_0^{\infty} \tilde{n}^*(r,t) w(r) dr = \tilde{I}(t), \quad (6.1.1)$$

где $\tilde{I}(t)$ - приближенное значение интенсивности ТЛ $I(t)$.

Возможные пути решения уравнения (6.1.1), установление критериев применимости того или другого приближения, определение точности приближенных решений $\tilde{n}^*(r,t)$ и их сравнение между собой - все это проблемы, связанные с решением т.н. обратной задачи (6.1.1), которая будет рассмотрена в настоящей главе и в прил.3 и 4.

В качестве примера возьмем кинетику затухания ТЛ: отсчет времени t удобно начинать с момента выключения возбуждения. В режиме затухания ТЛ $n^*(r,t)$ изменяется только вследствие ТР. Учитывая то, что распределение времени жизни для туннельных пар элементарной r -фракции имеет вид [165] (см. также (4.3.14))

$$P(\tau(r) \leq t) = 1 - \exp[-w(r)t], \quad (6.1.2)$$

получаем

$$n^*(r,t) = n^*(r,0) \exp[-w(r)t], \quad (6.1.3)$$

где $n^*(r,0)$ - начальное ПР (см. п.4.4.1); "пространственная" зависимость $n^*(r,0)$ обусловлена не только конкретным видом возбуждающего излучения и механизмом ТР, но также и временной зависимостью возбуждения $\mathcal{E}(t)$. Под возбуждением в самом общем смысле слова мы подразумеваем не только рентгеновское облучение кристалла, но всякое воздействие, в том числе выдержку образца при низкой температуре, приводящее к генерации или разру-

шению туннельных пар. Однако, здесь мы не будем затрагивать вопрос о влиянии функционального закона $\mathcal{F}(t)$ на $n^*(r,0)$.

Подставляя (6.1.3) в (6.1.1), получаем интегральное уравнение Фредгольма I-го рода относительно неизвестной функции $n^*(r,0)$

$$(1/t) \cdot \int_0^{\infty} \tilde{K}_0(r,t) n^*(r,0) dr = \tilde{I}(t), \quad (6.1.4)$$

где $K_0(r,t) \equiv w(r)t \exp[-w(r)t]$ - ядро уравнения (6.1.4), которое, учитывая (4.1.1), можно считать заданным в явном виде; индекс " \approx " в $\tilde{I}(t)$ впредь опустим, подразумевая, что $I(t)$ в правой стороне уравнений типа (6.1.4) представляет собой некую экспериментально определенную зависимость интенсивности ТЛ от времени. В дальнейшем будет показано, что путем интегрирования и дифференцирования по t основного уравнения (6.1.4), можно получить, вообще говоря, бесконечное множество эквивалентных относительно $n^*(r,0)$ уравнений типа

$$\int_0^{\infty} K(r,t) n^*(r,0) dr = f(t), \quad (6.1.5)$$

где $K(r,t)$ - ядро уравнения (6.1.5), $f(t)$ - некоторая функция времени, непосредственно связанная с интенсивностью ТЛ.

Для того, чтобы привести уравнение (6.1.5) к виду, принятому при рассмотрении подобных уравнений в математической литературе [195-199, 201-203], мы должны перейти от переменных r и t

к таким, размерность и области определения которых одинаковы. В этой связи введем совпадающую по размерности с r переменную r' , которая связана со временем t некоторым преобразованием "время-расстояние"

$$r' = g(t); \quad r' \in (0, \infty). \quad (6.1.6)$$

Видимо, $g(t)$ должна быть монотонной функцией t , чтобы всегда существовало однозначное обратное преобразование $t = g^{-1}(r')$.

Таким образом, при подстановке $t = g^{-1}(r')$ в (6.1.5) мы получаем "стандартное" уравнение

$$\int_0^{\infty} K(r,r') n^*(r,0) dr = F(r'), \quad (6.1.7)$$

где $K(r, r') = \mathcal{K}(r, g^{-1}(r'))$ и $F(r') = f(g^{-1}(r'))$.

При изучении уравнений типа (6.1.7) сталкиваются с трудностями не только технического, но и принципиального характера. Так, вопрос о существовании решения уравнения (6.1.7) не всегда может быть решен положительно [195, 198]. Пусть $K(r, r')$ есть многочлен относительно r и r' : $K(r, r') = a_0(r)r'^m + a_1(r)r'^{m-1} + \dots + a_m(r)$.

Тогда левая часть (6.1.7) будет иметь вид

$$b_0 r'^m + b_1 r'^{m-1} + \dots + b_m$$

для любого ПР $n^*(r, 0)$; b_0, b_1, \dots, b_m — постоянные коэф-

фициенты. Следовательно, такой же вид должна иметь правая сторона уравнения (6.1.7) $F(r')$. Таким образом мы показали, что для произвольного $F(r')$, решение уравнения (6.1.7) может и не существовать при сколь угодно "хорошем" ядре $K(r, r')$

Допустим, что уравнение (6.1.7) имеет решение $n^*(r', 0)$. В таком случае показано [199], что $n^*(r', 0)$ неустойчиво к малым изменениям $F(r')$. Так как свободный член уравнения (6.1.7) $F(r')$ практически может быть определен лишь приближенно, то сравнительно малые колебания "исходных данных" $F(r')$ и $F_1(r') = F(r') + \delta F(r')$, обусловленных погрешностью результатов физического эксперимента, могут привести к сколь угодно большому разбросу решений $n^*(r', 0)$ и $n_1^*(r', 0)$.

Задачи, в которых малое изменение исходных данных приводит к малому изменению решения, называется корректными. Решение интегрального уравнения Фредгольма I-го рода в общем случае является некорректной задачей. Построение приближенных решений и оценка их погрешности, строго говоря, возможны лишь после регуляризации уравнения (6.1.7).

6.2. Построение $K(r, r')$ -представления пространственного распределения

6.2.1. Метод систем линейных алгебраических уравнений

Так как значения свободного члена уравнения (6.1.7) $F(r')$ обычно заданы в виде таблицы чисел $\{F(r'_i)\}$, то целесообразно аппроксимировать интеграл в левой части уравнения (6.1.7) суммой, напр., по формуле Симпсона. В результате получаем

$$\sum_{j=1}^{\nu} K(r_j, r'_i) n^*(r_j) \Delta r_j = F(r'_i); \quad i=1, 2, 3, \dots, \nu. \quad (6.2.1)$$

Для более простой записи системы уравнений (6.2.1) введем обозначения $K(r_j, r'_i) \equiv K_{ij}$; $n^*(r_j, 0) \equiv n_j$ и $F(r'_i) \equiv F_i$ и перепишем (6.2.1) в матричном виде

$$\{K_{ij}\} \cdot \{n_j\} = \{F_i\}, \quad (6.2.2)$$

где $\{K_{ij}\}$ - квадратная матрица с элементами K_{ij} ; $\{n_j\}$ и $\{F_i\}$ столбцовые матрицы с элементами n_j и F_i соответственно. Если $\det\{K_{ij}\} \neq 0$, то система (6.2.2) имеет единственное решение, которое можно найти, напр., по известным формулам Крамера. Символически решение системы (6.2.2) можно записать в виде

$$\{n_j\} = \{K_{ij}^{-1}\} \{F_i\}, \quad (6.2.3)$$

где $\{K_{ij}^{-1}\}$ - матрица обратная матрице $\{K_{ij}\}$. Если же $\det\{K_{ij}\} = 0$, то система (6.2.2) является вырожденной. В этом случае она либо имеет бесконечно много решений, либо вообще не имеет решения в зависимости от того, обращаются или не обращаются в нуль определители $\det\{K_{ij}(n_k)\}$ соответствующих неизвестных n_k . $\det\{K_{ij}(n_k)\}$ представляет собой определитель $\det\{K_{ij}\}$, в котором k -тый столбец заменен на $\{F_i\}$.

Трудность практического осуществления алгоритма (6.2.3) для нахождения ПР $n^*(r, 0)$ заключается в следующем. На практике мы располагаем лишь некоторыми приближенными значениями \tilde{K}_{ij} и \tilde{F}_i . Допустим, что соответствующие нормы уклонений

удовлетворяют условиям

$$\|\{K_{ij}\} - \{\tilde{K}_{ij}\}\| \leq \delta \quad \text{и} \quad \|\{F_i\} - \{\tilde{F}_i\}\| \leq \delta, \quad (6.2.4)$$

где δ - погрешность физического эксперимента. Таким образом, вместо системы уравнений (6.2.2) практически приходится изучать одну из бесконечно многих возможных систем уравнений типа

$$\{\tilde{K}_{ij}\} \cdot \{n_j\} = \{\tilde{F}_i\}. \quad (6.2.5)$$

Кроме того, собственные значения матричного оператора $\{K_{ij}\}$ очень малы и $\det\{\tilde{K}_{ij}\}$, как правило, всегда близок к нулю. Так как точность любого машинного расчета ограничена, то трудно установить, когда $\det\{\tilde{K}_{ij}\}$ равен и когда отличен от нуля. Из этого следует, что среди систем уравнений типа (6.2.5) будут как невырожденные, так и вырожденные системы, которые в рамках уровня погрешности δ между собой неразличимы. В конкретных расчетах это проявляется как неустойчивость решения системы уравнений (6.2.5). Регуляризация таких плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений связана с весьма объемными расчетами [200-202], поэтому большой интерес представляют также и другие, относительно проще реализуемые методы оценки $n^*(r, 0)$, к рассмотрению которых мы и перейдем. Важность "полуаналитического" решения уравнения (6.1.7) подчеркивает и тот факт, что феноменологические постоянные w_0 и r_0 обычно неизвестны. Это в значительной мере понижает эффективность применения полностью численных методов определения $n^*(r, 0)$.

6.2.2. Метод подобия ядра $K(r, r')$ и дельта-функции

Наш анализ основывается на сравнении ядра уравнения (6.1.7) с дельта-функцией. Если бы можно было $K(r, r')$ представить в виде дельта-функции: $K(r, r') \sim \delta(r - r')$, то из уравнения (6.1.7) следовало бы $n^*(r, 0) = F(r)$.

Это значит, что мы как будто располагаем такой физической аппаратурой, с помощью которой мы можем непосредственно измерить $n^*(r, 0)$. В самом деле это не так. $K(r, r')$ существенно отличается от какого либо представления дельта-функции. Однако, тем не менее полезно ввести понятие аналога дельта-функции. Для этого потребуем, чтобы $K(r, r')$ во всем интервале $r \in (0, \infty)$ имел лишь один максимум при $r = r'$ и при возрастании $|r - r'|$ значения $K(r, r')$ быстро убывали. Таким образом, $K(r, r')$ будем считать аналогом дельта-функции, если

$$\text{sgn}[\partial K(r, r')/\partial r] = \begin{cases} 1, & \text{если } r < r' \\ -1, & \text{если } r > r' \end{cases} \quad (6.2.6)$$

и

$$\lim K(r, r') = 0 \quad \text{если } |r - r'| \rightarrow \infty. \quad (6.2.7)$$

В этой связи преобразование "время-расстояние" (6.1.6) можно определить из уравнения

$$\partial R(r, t) / \partial r = 0. \quad (6.2.8)$$

Не трудно убедиться, что ядро основного уравнения $R_0(r, t)$ (6.1.4), а также ядра $R(r, t)$ ему эквивалентных уравнений (6.1.5) не является монотонными функциями относительно r . Так, например, при подстановке $R_0(r, t)$ в (6.2.8) мы получаем уже известный результат [61]

$$r' = g_0(t) = r_0 \ln w_0 t. \quad (6.2.9)$$

Также можно показать, что $K_0(r, r')$ соответственно определению (6.1.4) быстро убывает при возрастании $|r - r'|$ и в концах интервала $(0, \infty)$ принимает соответственно значения $K_0(r, r') = \exp\{-[\exp(r/r_0) - r'/r_0]\}$ и $K_0(\infty, r) = 0$. $K_0(0, r')$ при $w_0 t \gg 1$ является экспоненциально малой величиной. Следовательно, $K_0(r, r')$ удовлетворяет требованиям (6.2.6), (6.2.7), наложенным аналогу дельта-функции.

Дальнейший анализ основывается на предположении, что ядро $K(r, r')$ в уравнении (6.1.7) является аналогом дельта-функции. В

этом случае ПР $n^*(r,0)$ следует разложить в окрестности точки r' в ряд Тейлора

$$n^*(r,0) = n^*(r',0) \left\{ 1 + [n^*(r',0)]^{-1} \left. \frac{\partial n^*(r,0)}{\partial r} \right|_{r=r'} \cdot (r-r') + \dots \right\}. \quad (6.2.I0)$$

Если $n^*(r,0)$ в этой окрестности меняется настолько медленно, что

$$\left| \left[(r-r')/n^*(r',0) \right] \left. \left(\frac{\partial n^*(r,0)}{\partial r} \right) \right|_{r=r'} \right| \ll 1, \quad (6.2.II)$$

то можно в разложении (6.2.I0) отбросить все члены кроме члена нулевого порядка. При выполнении условия (6.2.II) для некоторой окрестности $(r' - \Delta_{1/2}(r'), r' + \Delta_{1/2}(r'))$ точки r' имеет место приближенное равенство

$$\int_{r' - \Delta_{1/2}(r')}^{r' + \Delta_{1/2}(r')} K(r, r') n^*(r,0) dr \simeq n^*(r',0) \int_{r' - \Delta_{1/2}(r')}^{r' + \Delta_{1/2}(r')} K(r, r') dr. \quad (6.2.I2)$$

Если $K(r, r')$ является достаточно хорошим аналогом дельта-функции, то равенство (6.2.I2) сохранится также при расширении предела интегрирования до $r \in (0, \infty)$. Учитывая выше сказанное и заменяя левую часть уравнения (6.I.7) на ей приближенное выражение согласно (6.2.I2), получаем

$$n^*(r',0) \simeq \hat{n}(r',0) \equiv F(r') \left\{ \int_0^\infty K(r, r') dr \right\}^{-1}. \quad (6.2.I3)$$

Правую часть равенства (6.2.I3) впредь назовем $K(r, r')$ -представлением ПР $n^*(r,0)$ и соответствующую взаимную связь обозначим через знак \sim .

Еще выясним вопрос о необходимой длине интервала $(r' - \Delta_{1/2}(r'), r' + \Delta_{1/2}(r'))$, в котором должно выполняться условие (6.2.II). Длина соответствующей окрестности точки r' непосредственно связана с "качеством" ядра: чем больше $K(r, r')$ похоже на дельта-функцию, тем короче можно выбрать $\Delta_{1/2}(r')$. Из очевидных соображений понятно, что критерием выбора $\Delta_{1/2}(r')$ может служить отношение $K(r, r')/K(r', r')$. Длина окрестности точки r' должна быть выбрана такой, чтобы $K(r, r')$ для $r \in (r' - \Delta_{1/2}(r'), r' + \Delta_{1/2}(r'))$ был гораздо меньше, чем $K(r', r')$. Оказыва-

ется, что $\Delta_{1/2}(r')$ достаточно выбрать равной полуширине ядра $K(r, r')$. Так, например, для $K_0(r, r')$ из (6.1.4) получаем, что $K_0(r' - \Delta_{1/2}(r'), r') / K_0(r', r') \approx 3.035 \cdot 10^{-4}$ и $K_0(r' + \Delta_{1/2}(r'), r') / K_0(r', r') \approx 2.159 \cdot 10^{-1}$. Если в качестве наименьшей необходимой длины $2\Delta_{1/2}(r')$ окрестности точки r' выбрать удвоенную полуширину ядра $K(r, r')$, то величину $\Delta_{1/2}(r')$ можно определить из уравнения

$$K(r, r') = (1/2) K(r', r'), \quad (6.2.14)$$

которое имеет два вещественных корня $r_{1/2}^{(1)}$ и $r_{1/2}^{(2)}$. Отсюда получаем, что

$$\Delta_{1/2}(r') = |r_{1/2}^{(1)} - r_{1/2}^{(2)}|. \quad (6.2.15)$$

При подстановке $\Delta_{1/2}(r')$ из (6.2.15) в (6.2.11) вместо $(r - r')$, мы можем конкретизировать условие применимости представления ПР $\hat{n}(r', 0)$ (6.2.13) для любого заданного ядра $K(r, r')$. Впредь два представления типа (6.2.13) будем считать эквивалентными, если полуширины $\Delta_{1/2}(r')$ соответствующих ядер совпадают. То представление, которому соответствует более "узкое ядро" $K(r, r')$, является более точным. Мерой точности представления целесообразно использовать величину R , обратную полуширине ядра: $R \sim 1 / \Delta_{1/2}(r')$.

6.3. Некоторые частные $K(r, r')$ -представления пространственного распределения

6.3.1. Представление, соответствующее основному уравнению (6.1.4)

Представление $\hat{n}^*(r', 0) \sim t \cdot I(t)$ было уже найдено ранее в [61]. Наша цель - показать согласие результатов, получаемых по выше описанной схеме, с известными в литературе, а также ввести некоторые уточнения. Для этого проведем анализ ядра $K_0(r, r')$.

Используя введенное выше преобразование (6.2.9), приведем

ядро $\mathcal{K}_0(r, t)$ уравнения (6.1.4) к виду

$$K_0(r, r') = K(r - r') = \exp\left\{-\left[\frac{r - r'}{r_0} + \exp\left[-\frac{r - r'}{r_0}\right]\right]\right\}. \quad (6.3.1)$$

Так как $K_0(r, r')$ удовлетворяет требованиям (6.2.6), (6.2.7), то это ядро является аналогом дельта-функции и развитый в п. 6.2.2 анализ применим к рассматриваемому случаю. Решая численно трансцендентное уравнение типа (6.2.14), получаем полуширину ядра

$$\Delta_{1/2}(r') = 2.446383 r_0,$$

которая будет использована ниже для оценки точности представления $\hat{n}^*(r'; 0) \sim t \cdot I(t)$. Следует отметить, что независимо от положения максимума ядра $K_0(r - r')$ полуширина получается одна и та же. Это значит, что точность представления $\hat{n}_0(r'; 0) = t \cdot I(t)$ не зависит от времени затухания ТЛ. Подставляя ядро $K_0(r - r')$ в формулу (6.2.13) и выражая $t \cdot I(t)$ как функцию переменной r' , мы имеем

$$\hat{n}^*(r'; 0) \sim g_0^{-1}(r') I(g_0^{-1}(r') / r_0 \{1 - \exp[-\exp(r' / r_0)]\}), \quad (6.3.2)$$

где $g_0^{-1}(r') = t = (1/\omega_0) \exp(r' / r_0)$.

В (6.3.2) и в дальнейшем будем соответствующие представления выражать как функции времени, так как это непосредственно связано с экспериментальными данными, а также запись представления получается гораздо проще и нагляднее. Если правую часть выражения (6.3.2) написать как функцию от t , то получаем

$$\hat{n}^*(r'; 0) \sim [t \cdot I(t) / r_0] \cdot [1 - \exp(-\omega_0 t)]^{-1}. \quad (6.3.3)$$

Так как $\omega_0 = 10^6 - 10^{19} \text{с}^{-1}$ [51, 56], то уже при сравнительно коротких временах выполняется равенство $\omega_0 t \gg 1$. Таким образом, без ущерба точности можем упростить представление

(6.3.3). В результате получаем

$$\hat{n}^*(r'; 0) \sim \hat{n}_0(r'; 0) \equiv t \cdot I(t) / r_0. \quad (6.3.4)$$

Следует отметить некоторую особенность определения преобразования $r' = g(t)$. Для перехода от уравнения (6.1.5) к

(6.1.7) можно использовать в принципе любое преобразование лишь бы $r' \in (0, \infty)$, если $r \in (0, \infty)$. Однако, в случае применения метода подобия $K(r, r')$ и дельта-функции для определения $g(t)$ мы должны использовать уравнение (6.2.8). В работе [6I] для этой цели применимо другое уравнение

$$\partial[-\partial n^*(r, t)/\partial t]/\partial r = 0, \quad (6.3.5)$$

что, вообще говоря, необоснованно. В случае $K_0(r-r')$ и при учете ограничений на $n^*(r, 0)$ (6.2.II) уравнения (6.2.8) и (6.3.5) дают совпадающие решения, но в других случаях, как будет показано ниже, использование уравнения (6.3.5) приводит к неверному результату.

6.3.2. Представления типа парциальных светосумм

Впервые представления ПР в виде парциальных светосумм были предложены в [6I]. Однако, подробный анализ точности этих представлений не проводился, поэтому нерешенными остались несколько вопросов. В их числе следует упомянуть: а) вопрос о выборе временного интервала для расчета парциальной светосуммы: как изменится результат, если вместо интервала $(t/a, at)$ [6I] выбрать какой-то произвольный интервал $(t_1 = \varphi_1(t), t_2 = \varphi_2(t))$, где φ_1, φ_2 - произвольные функции времени t ; б) вопрос об эквивалентности представлений типа парциальных светосумм при различных значениях параметра a , а также их связь с представлением (6.3.4).

Для решения этих вопросов рассмотрим следующее уравнение

$$\int_0^t (1/t') \int_0^\infty R_0(r, t) n^*(r, 0) dr dt' = \int_0^t I(t') dt', \quad (6.3.6)$$

которое получено из основного уравнения (6.1.4) интегрированием его обеих частей по t . После простых преобразований левой части уравнения (6.3.6), при этом учитывая явный вид ядра $R_0(r, t)$, мы имеем

$$-\int_0^{\infty} \exp[-w(r)t] n^*(r,0) dr = S(t), \quad (6.3.7)$$

где $S(t) \equiv \int_0^t I(t') dt'$ - светосумма в интервале $(0, t)$. Так как нас интересует парциальная светосумма в некотором произвольном интервале (t_1, t_2) , то из (6.3.7) получаем исходное уравнение

$$\int_0^{\infty} \{\exp[-w(r)t_1] - \exp[-w(r)t_2]\} n^*(r,0) dr = S_{t_2-t_1}(t), \quad (6.3.8)$$

где $S_{t_2-t_1}(t) \equiv S(t_2) - S(t_1)$; t_1, t_2 - некоторые функции времени t . Для того, чтобы применить выше развитую теорию подобия ядра $K(r, r')$ и дельта-функции, мы должны установить, является ли ядро уравнения (6.3.8)

$$K_{-1}(r, t) \equiv \exp[-w(r)t_1] - \exp[-w(r)t_2] \quad (6.3.9)$$

аналогом дельта-функции. В этой связи проверим выполнение условия (6.2.6), (6.2.7) для ядра (6.3.9). Не трудно убедиться о том, что в этом случае уравнение типа (6.2.8) имеет единственное вещественное решение

$$r' = g_{-1}(t) = r_0 \ln |w_0(t_2 - t_1) / \ln(t_2/t_1)|. \quad (6.3.10)$$

Следовательно, можно утверждать, что $\max[K_{-1}(r, r')] = K_{-1}(r', r')$. Не трудно показать, что ядро $K_{-1}(r, r')$ удовлетворяет условиям (6.2.6) и (6.2.7). Таким образом, ядро $K_{-1}(r, r')$, соответствующее произвольной парциальной светосумме, является аналогом дельта-функции. Из этого следует, что парциальная светосумма $S_{t_2-t_1}(t)$ может быть использована для построения представления ПР $\hat{n}_{-1}(r', 0)$ согласно формуле (6.2.13).

В дальнейшем ради простоты изложения ограничимся парциальными светосуммами, зависящими лишь от одного параметра $\alpha > 1$. При этом светосумму рассмотрим в интервале $(t/\alpha, \alpha t)$. При подстановке в (6.3.9) $t_1 = t/\alpha$ и $t_2 = \alpha t$ получаем

$$K_{-1,\alpha}(r, t) = \exp[-w(r)t/\alpha] - \exp[-w(r)\alpha t], \quad (6.3.11)$$

для которого соответствующее преобразование $g_{-1,\alpha}(t)$ имеет вид

$$r' = g_{-1,\alpha}(t) = r_0 \ln |w_0(\alpha^2 - 1)t / 2\alpha \ln \alpha|. \quad (6.3.12)$$

Отметим, что преобразование (6.3.I2) отличается от того, что было применено в [6I] как решение уравнения (6.3.5). Применение обратного преобразования $t = g_{-1,a}^{-1}(r')$ в (6.3.II) приводит нас к результату

$$K_{-1,a}(r, r') = \exp\{-[2 \ln a / (a^2 - 1)] \exp[-(r - r') / r_0]\} - \exp\{-[2 a^2 \ln a / (a^2 - 1)] \exp[-(r - r') / r_0]\}. \quad (6.3.I3)$$

Так как ядро (6.3.I3) является частным случаем ядра (6.3.9), то оно также имеет свойства аналога дельта-функции. Отсюда следует, что соответствующее ядру (6.3.I3) представление можно построить по формуле (6.2.I3). В результате имеем

$$\hat{n}^*(r'; 0) \sim [S_a(t) / r_0] \{2 \ln a - [Ei(-aw_0 t) - Ei(-w_0 t/a)]\}^{-1}, \quad (6.3.I4)$$

где $S_a(t) \equiv S(at) - S(t/a)$. Учитывая то, что уже при весьма малых временах $w_0 t \gg 1$ и свойства интегральной показательной функции, получаем, что разница

$$Ei(-aw_0 t) - Ei(w_0 t/a)$$

мало отличается от нуля. Таким образом, удастся упростить представление (6.3.I4), не понижая его точности:

$$\hat{n}^*(r'; 0) \sim \hat{n}_{-1,a}(r'; 0) \equiv (1/2 r_0 \ln a) \int_{t/a}^{at} I(t') dt'. \quad (6.3.I5)$$

Для определения полуширины ядра (6.3.I3) и связанной с ним точности представления (6.3.I5) в зависимости от параметра a , мы должны решить уравнение типа (6.2.I4). Это было сделано для целого ряда фиксированных значений $a \in (1, 15]$ методом итерации. Результаты численного анализа (рис.6.I) показывают, что при возрастании параметра a полуширина ядра (6.3.I3) увеличивается и, разумеется, значительно ухудшается точность представления (6.3.I5). Из сказанного понятно, что мы заинтересованы параметр a выбрать по возможности наименьшим. Однако, и здесь возникают ограничения, которые налагаются погрешностью физического эксперимента $\delta \geq 0$. Так как

$$\lim_{a \rightarrow 1} S_a(t) = 0,$$

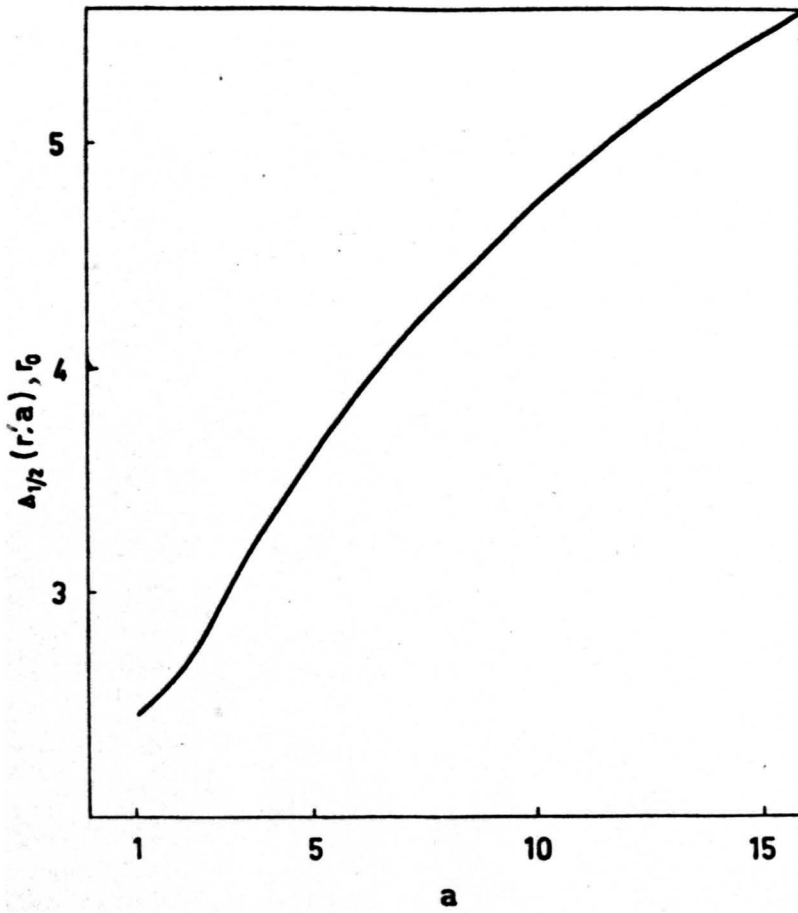


Рис.6.Г. Зависимость полуширины ядра $K_{-1, \alpha}(r, r')$ от параметра a .

то наименьшее допустимое значение $\alpha > 1$ должно быть таким, чтобы еще имело место неравенство $S_\alpha(t) \gg \delta$.

Из результатов численного анализа видно (рис.6.1), что при $\alpha \rightarrow 1$ полуширина ядра $K_{-1,\alpha}(r, r')$ приближается к тому значению, которое имеет ядро (6.3.1). Докажем, что представления (6.3.4) и (6.3.15) действительно эквивалентны, когда $\alpha \rightarrow 1$.

Пусть $\alpha = 1 + \varepsilon$, где ε - малое положительное число. Тогда

$$\lim_{\alpha \rightarrow 1} (1/2r_0 \ln \alpha) S_\alpha(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} [1/2r_0 \ln(1+\varepsilon) \int_{(1-\varepsilon)t}^{(1+\varepsilon)t} I(t') dt'] \quad (6.3.16)$$

После разложения подпредельного выражения в (6.3.16) в ряд по степеням ε не трудно найти предел

$$\lim_{\alpha \rightarrow 1} \hat{n}_{-1,\alpha}(r, 0) = \hat{n}_0(r, 0) = t \cdot I(t) / r_0 \quad (6.3.17)$$

Мы показали тесную взаимосвязь представлений типа парциальных светосумм (6.3.15) с представлением (6.3.4), которое в свете соотношения (6.3.17) можно интерпретировать как представление, соответствующее парциальной светосумме в интервале нулевой длины.

6.3.3. Представления типа производных кинетики

Построение представлений ПР $n^*(r, 0)$ с помощью производных кинетики первого и более высоких порядков рассматривается

впервые. Исходное уравнение предлагаемого анализа

$$\frac{d^s}{dt^s} \left\{ (1/t) \int_0^\infty \tilde{R}_0(r, t) n^*(r, 0) dr \right\} = d^s I(t) / dt^s \quad (6.3.18)$$

получено из основного уравнения (6.1.4), дифференцируя его

по t S -раз. В конечном счете из (6.3.18) следует

$$\int_0^\infty \tilde{R}_s(r, t) n^*(r, 0) dr = (-1)^s t^{s+1} I^{(s)}(t), \quad (6.3.19)$$

где $\tilde{R}_s(r, t) \equiv [w(r)t]^{s+1} \exp[-w(r)t]; \quad (6.3.20)$

$$I^{(s)}(t) = d^s I(t) / dt^s; \quad s = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Интересно отметить, что в группу уравнений типа (6.3.19) включено также основное уравнение (6.1.4) и соответствует значению

$s = 0$, ибо $d^0/dt^0 \equiv 1$. Подставляя ядро (6.3.20) в уравнение

(6.2.8), по уже привычной схеме находим преобразование

$$r' = g_s(t) = r_0 \ln [w_0 t / (s+1)]. \quad (6.3.21)$$

Применение обратного преобразования $t = g_s^{-1}(r')$ в (6.3.20) приводит к следующему функциональному виду ядра

$$K_s(r-r') = (s+1)^{s+1} \exp\{-(s+1)[(r-r')/r_0 + \exp\{-(r-r')/r_0\}]\}. \quad (6.3.22)$$

Ядро (6.3.22) удовлетворяет требованиям (6.2.6), (6.2.7), если $w_0 t$ достаточно большой. Таким образом, для построения представления, соответствующего уравнению (6.3.19), мы опять используем формулу (6.2.13). Подставляя правую часть (свободный член) уравнения (6.3.19) и проинтегрированное по r ядро (6.3.22) в (6.3.19), имеем

$$\hat{n}^*(r';0) \sim \hat{n}_s(r';0) \equiv (-1)^s t^{s+1} I^{(s)}(t) / r_0 \Gamma(s+1). \quad (6.3.23)$$

При расчете представления (6.3.22) допущено, что $w_0 t$ настолько велико, что $\int_{w_0 t}^{\infty} x^s \exp(-x) dx \simeq 0$

Для анализа точности представления типа (6.3.22) в зависимости от порядка производной кинетики следует определить полужирину ядра (6.3.22) согласно уравнению (6.2.14) при $s=0, 1, 2, \dots$. Соответствующее трансцендентное уравнение типа (6.2.14) также как в предыдущих случаях было решено методом итерации для $s \in [0, 1000]$. Численный анализ (рис.6.2) показывает, что полужирину ядра (6.3.22) при возрастании s монотонно убывает. Чисто формальная интерпретация этих результатов приводит к заключению, что применение производной кинетики достаточно высокого порядка позволяет достичь сколь угодно высокой точности представления типа (6.3.23). Однако, кривая затухания ТЛ $I(t)$ обычно задана в виде таблицы чисел, поэтому возможно лишь численное дифференцирование. Практическое выполнение расчетов производных более высоких порядков связано с быстрым ростом погрешности полученных результатов. Таким образом, при вычислении про-

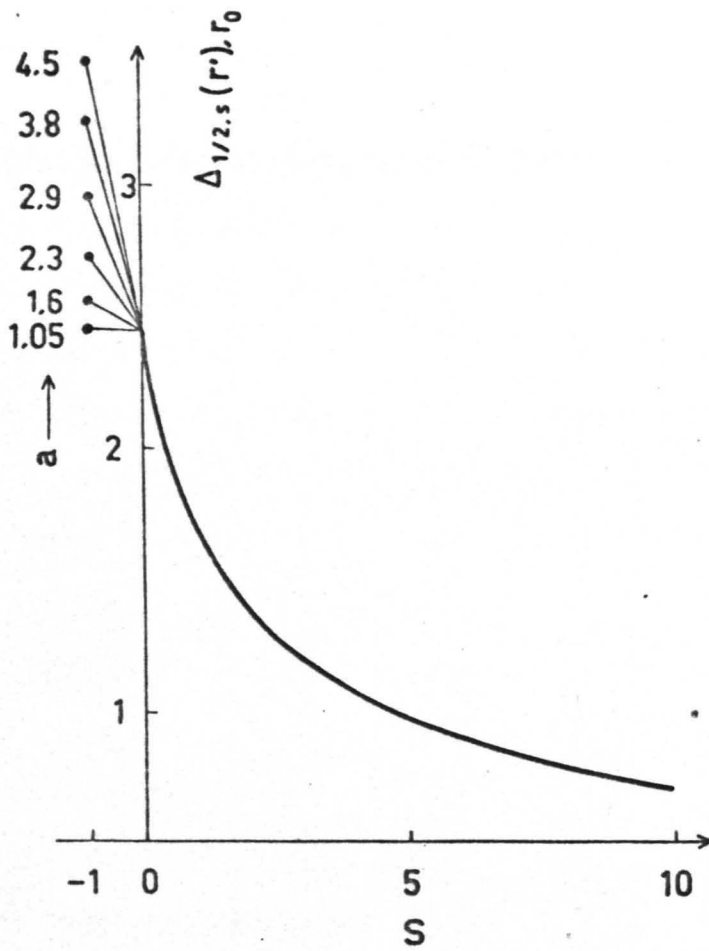


Рис.6.2. Зависимость полуширины ядра $K_S(r, r')$ от S . При $S = -1$ показаны значения полуширины ядра $\Delta_{1/2, -1, \alpha}(r')$ при некоторых α .

изводной кинетики наивысшего допустимого порядка мы сталкиваемся с ограничениями, связанными с погрешностью измерения интенсивности ТЛ.

6.4. Проверка представлений пространственного распределения "на себя"

Выше были рассмотрены алгоритмы для построения бесконечного множества различных представлений одного и того же ПР $n^*(r,0)$. Также была установлена точность каждого из представлений. Интересно было бы проверить, как каждое из этих представлений изображает некое уже предварительно известное ПР. Суть проверки "на себя" заключается в следующем. По заранее заданному $n^*(r,0)$ согласно основному уравнению (6.1.4) можно вычислить кривую затухания ТЛ $I(t)$. Подстановка найденной кривой $I(t)$ в любом из представлений даст соответствующее ему изображение, сравнение которого с "оригиналом" позволит оценить точность данного представления либо по некому критерию, либо "визуально". Модельное ПР наиболее целесообразно выбрать в виде разности двух функций Хевисайда:

$$n^*(r,0) = n(0) \{ H(r-r_1) - H(r-r_2) \}, \quad (6.4.1)$$

где $n(0) = \text{const}$, $r_1 < r_2$. Тут же отметим, что (6.4.1) является "чрезвычайно трудным" распределением, ибо, как только под "колокол" ядра $K(r,r')$ попадут переходные области в окрестностях точек r_1 и r_2 , то всегда будет нарушено условие (6.2.II).

Искажения будут тем сильнее, чем меньше $|r'-r_1|$ или $|r'-r_2|$.

Далее для расчета кривой затухания ТЛ согласно уравнению (6.1.4) используем ПР (6.4.1). В результате имеем

$$I(t) = n(0) \int_{r_1}^{r_2} w(r) \exp[-w(r)t] dr. \quad (6.4.2)$$

Подстановка (6.4.2) в (6.3.4), (6.3.15) и (6.3.23) приводит нас к соответствующим интегралам

$$\hat{n}^*(r',0) \sim \hat{n}_0(r',0) = (n(0)/r_0) \int_{r_1}^{r_2} w(r)t \exp[-w(r)t] dr ; \quad (6.4.3)$$

$$\hat{n}^*(r',0) \sim \hat{n}_{-1,a}(r',0) = [n(0)/2r_0 \ln a] \int_{r_1}^{r_2} w(r) \int_{t/a}^{\sigma t} \exp[-w(r)t'] dt' dr ; \quad (6.4.4)$$

$$\hat{n}^*(r',0) \sim \hat{n}_s(r',0) = [n(0)/r_0 \Gamma(s+1)] \int_{r_1}^{r_2} [w(r)t]^{s+1} \exp[-w(r)t] dr. \quad (6.4.5)$$

Последующее вычисление интегралов в (6.4.3), (6.4.4) и (6.4.5) дает выражения

$$\hat{n}_0(r',0) = n(0) \{ \exp(-w_2 t) - \exp(-w_1 t) \} ; \quad (6.4.6)$$

$$\hat{n}_{-1,a}(r',0) = [n(0)/2 \ln a] \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k (a^k - 1/a^k) [(w_1 t)^k - (w_2 t)^k] / k \cdot k! \quad (6.4.7)$$

$$\hat{n}_s(r',0) = n(0) \sum_{k=0}^s (1/k!) \{ (w_2 t)^k \exp(w_2 t) - (w_1 t)^k \exp(-w_1 t) \}, \quad (6.4.8)$$

где $w_1 = w(r_1)$ и $w_2 = w(r_2)$. Легко заметить, что выражение (6.4.6)

является частным случаем суммы (6.4.8) при $s=0$. Это тоже указывает на тесную взаимосвязь представлений типа (6.3.23) с представлением (6.3.4) основного уравнения (6.1.4). Формулы (6.4.6), (6.4.7) и (6.4.8) использовались для конкретных расчетов соответствующих представлений, при этом r_1 и r_2 были подобраны из следующих ниже соображений. Если интервал (r_1, r_2) будет коротким по сравнению с полушириной ядра соответствующего представления, то искажения, порожденные передним и задним фронтами распределения (6.4.1), перекроются, и изображение $\hat{n}(r',0)$ лишится наглядности. Таким образом, r_1 и r_2 следует подобрать настолько удаленными друг от друга, чтобы в окрестности точки r_1 не чувствовалось "обрыва" при r_2 и наоборот. В наших расчетах r_1 и r_2 были удалены друг от друга настолько, чтобы $w_1/w_2 = 10^4$. Абсолютное положение интервала (r_1, r_2) на r -оси не влияет на "форму" представлений $\hat{n}(r',0)$, поэтому не важно фиксировать значение w_0 , лишь бы оно было достаточно великим.

Полученные результаты по вычислению представлений согласно формулам (6.4.6), (6.4.7) и (6.4.8) приведены на рис.6.3,

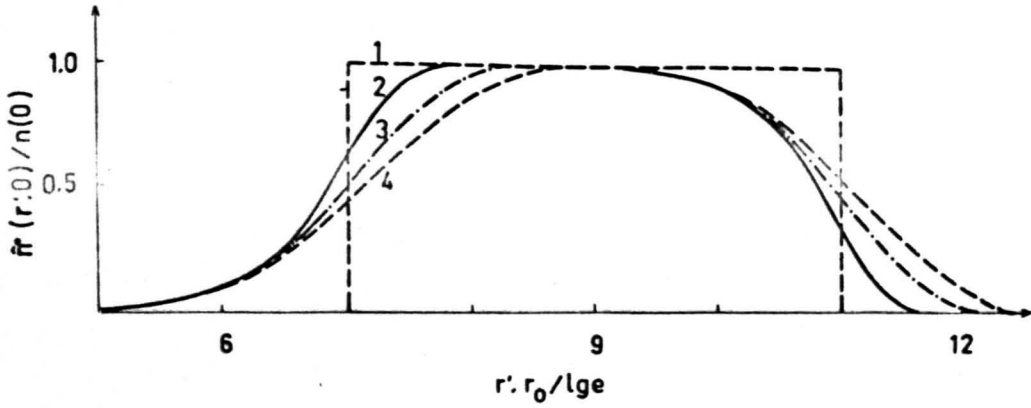


Рис.6.3. Представления ПР партнеров генетических пар типа парциальных светосумм: предварительно заданное распределение - оригинал (1) и его образы при $a = 1,5$ (2), $5,0$ (3) и $10,0$ (4).

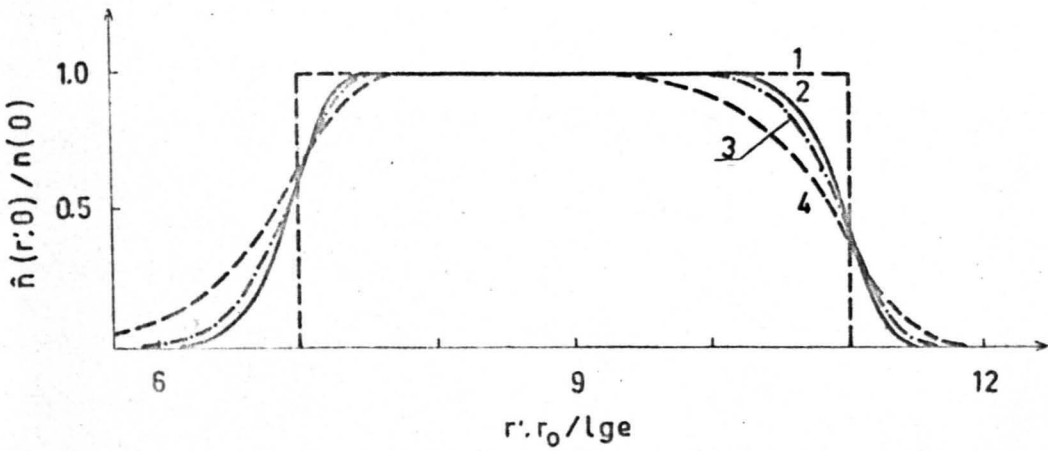


Рис.6.4. Представления ПР партнеров генетических пар типа производных кинетик затухания ТЛ: предварительно заданное распределение - оригинал (1) и его образы при $S = 2$ (2), 1 (3) и 0 (4).

рис.6.4 и рис.6.5. Видно, что более точные представления "преодолевают" крутые передний и задний фронты ПР (6.4.1) гораздо легче, чем менее точные, для которых отклонения от заданного ПР больше. По-видимому, на практике наиболее удобными и доступными окажутся представления при $S = 0, 1, 2$ (рис.6.4). Как уже было отмечено, высокую точность демонстрируют представления типа производных более высоких порядков (рис.6.5). Если рассчитанные по формулам (6.4.6), (6.4.7) и (6.4.8) представления строятся на t -оси, то они разместятся по разному. Так, согласно преобразованиям (6.3.12) и (6.3.21), представления типа парциальных светосумм (6.3.15) сместятся в сторону меньших времен, а представления типа производных (6.3.23) - в сторону 'больших' времен по сравнению с представлением (6.3.4) основного уравнения (6.1.4).

6.5. 0 возможностях практического применения некоторых $K(r, r')$ -представлений при оценке пространственного распределения радиационных дефектов

6.5.1. Кривые затухания ТЛ и критерии применимости конкретных представлений

Пусть имеется экспериментально измеренная кривая затухания ТЛ $\tilde{I}(t)$. При этом известно, что $\|\tilde{I}(t) - I(t)\| \leq \delta$, где $I(t)$ - точное значение интенсивности ТЛ, а δ - величина, связанная с погрешностью физического эксперимента. Поставленный перед нами вопрос заключается в следующем: можно ли при вычислении ПР пользоваться, например, представлением (6.3.4) основного уравнения (6.1.4) или каким-либо другим? При отрицательном ответе мы должны применять другое более точное представление. В качестве критерия выбора дозволенного наименее точного представления распределения $\hat{n}(r, 0)$ при заданном $I(t)$ мы используем соотно-

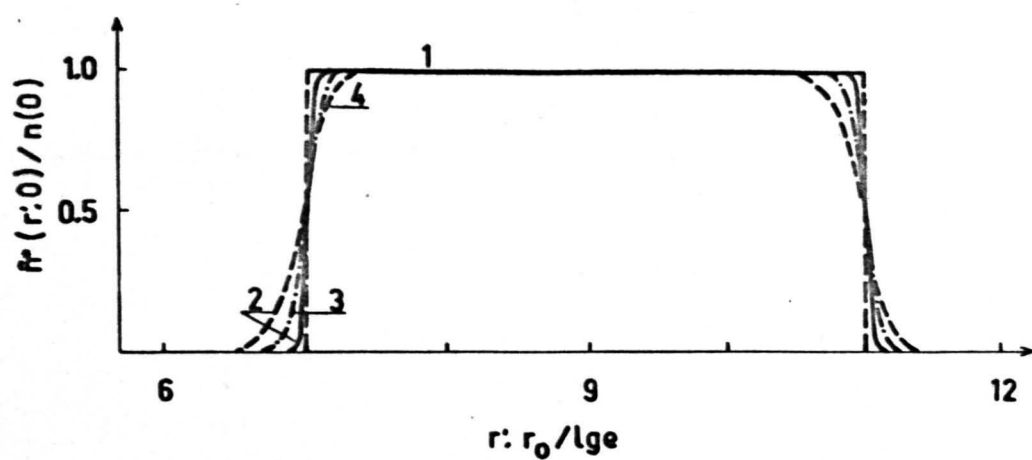


Рис.6.5. Представления ПР партнеров генетических пар типа производных кинетики затухания ТЛ: предварительно заданное распределение - оригинал (1) и его образы при $S = 100$ (2), 20 (3) и 6 (4).

шение (6.2.II). Для этой цели перепишем (6.2.II) в виде

$$| [r_0/\hat{n}(r';0)] \cdot \partial \hat{n}(r';0)/\partial r' | \ll R, \quad (6.5.1)$$

где $\hat{n}(r;0)$ заменено его представлением $\hat{n}(r';0)$ и $R \equiv r_0/\Delta_{1/2}(r')$ - точность представления. Так как представления $\hat{n}(r';0)$ обычно задаются как функции времени t , то необходимо оператор $\partial/\partial r'$ представить через переменную t . В этой связи используем преобразование "время-расстояние" (6.1.6). В результате имеем

$$\partial/\partial r' = (1/\dot{g}(t))(\partial/\partial t), \quad (6.5.2)$$

где $\dot{g}(t) = dg(t)/dt$. Во всех трех рассмотренных нами случаях (6.2.9), (6.3.I2) и (6.3.2I) согласно (6.5.2) получаем одинаковое выражение

$$\partial/\partial r' = (t/r_0) \cdot (\partial/\partial t). \quad (6.5.3)$$

Не трудно показать, что подстановка в (6.5.1) вместо $\hat{n}(r';0)$, представления (6.3.4) и учет соотношения (6.5.3) приводят к выражению

$$|1 - \alpha(t)| \ll R_0 \simeq 0.409, \quad (6.5.4)$$

где R_0 - точность представления (6.3.4). Так как параметр $\alpha(t)$ является важной характеристикой кинетики затухания ТЛ (гл.4), то желательно оценочный критерий (6.5.1) во всех возможных случаях выражать через него, как это сделано в (6.5.4).

В случае представлений типа парциальных светосумм (6.3.I5) найти удобное, общее при любом значении α выражение для рассматриваемого критерия согласно (6.5.1) труднее. При подстановке в (6.5.1) вместо $\hat{n}(r';0)$ представления (6.3.I5) и учета (6.5.3) получаем

$$| [t/S_\alpha(t)] dS_\alpha(t)/dt | \ll R_{-1,\alpha}, \quad (6.5.5)$$

где $R_{-1,\alpha}$ - точность представления (6.3.I5). В случае, когда α мало отличается от единицы, удастся критерий (6.5.5) представить в более развернутом виде

$$|1 - (\alpha + 1/\alpha - 1)\alpha(t)| \ll R_{-1,\alpha}. \quad (6.5.6)$$

Наконец, рассмотрим тот же критерий для представлений типа

производных (6.3.23). Непосредственная подстановка представления (6.3.23) в (6.5.1) дает

$$|(s+1) + t I^{(s+1)}(t)/I^{(s)}(t)| \ll R_s \quad (6.5.7)$$

где R_s - точность представления (6.3.23). Пока $I(t)$ не задана в явном виде, дальнейший анализ критерия (6.5.7) при произвольном s невозможен. Однако, сравнительно просто удастся выразить критерий (6.5.7) через параметр $\alpha(t)$ еще при $s=1$. Так, выразив $I^{(1)}(t)$ в (6.5.7) через параметр $\alpha(t)$ согласно его определению (4.4.7), после несложных преобразований получаем

$$|1 - \alpha(t) + d \ln \alpha(t) / d \ln t| \ll R_1 \approx 0.589. \quad (6.5.8)$$

Напомним, что на практике мы располагаем лишь приближенными значениями $\tilde{I}(t), \tilde{\alpha}(t), \tilde{I}^{(s)}(t)$. Поэтому при выполнении оценочных расчетов левых частей неравенства типа (6.5.4), (6.5.6) и (6.5.8) следует учитывать погрешности $\delta_I, \delta_\alpha, \delta_{I^{(s)}}$. В итоге получаем, что, например, вместо неравенства (6.5.8) мы должны потребовать выполнения неравенства

$$\max[|1 - \tilde{\alpha}(t) + d \ln \tilde{\alpha}(t) / d \ln t|] \ll R_1$$

Таким образом, расшифровка в каждом конкретном случае критерия (6.5.1) и учет влияния соответствующих погрешностей на него позволяет судить о применимости одного или другого представления при оценке распределения $n^*(r, 0)$.

6.5.2. Точность $K(r, r')$ -представления и пространственная разрешающая способность

При анализе возможностей восстановления начального ПР $n^*(r, 0)$ различными методами не была рассмотрена их разрешающая способность. Дело в том, что определить ее согласно критериям обычным в области спектрально-кинетических измерений затруднительно или же вообще невозможно. При восстановлении распределения $n^*(r, 0)$ по кинетике затухания ТЛ пространственная разрешающая

способность зависит не только от временного разрешения измерительной аппаратуры, но также от электронной структуры туннельно рекомбинирующих дефектов, определяющей феноменологические постоянные W_0 и τ_0 . Кроме того, на пространственную разрешающую способность сильно влияет конкретный способ обработки первичных экспериментальных результатов. Мы уже в самом начале предположили, что имеем дело с некоторой непрерывной функцией $n^*(r,0)$, поэтому нецелесообразно рассматривать начальное распределение $n^*(r,0)$ в виде двух дискретных r -фракций:

$$n^*(r,0) = \sum_{i=1}^2 n_i \delta(r-r_i),$$

сблизить их до расстояния $\delta r = |r_1 - r_2|$, уменьшая которое, соответствующее представление $\hat{n}(r',0)$ больше не различит заданные две r -фракции. В этом случае величину δr можно было считать пространственной разрешающей способностью рассматриваемого метода. В самом деле же мы должны сравнить между собой две функции - оригинал $n^*(r,0)$ и образ $\hat{n}(r',0)$, первая из которых неизвестна. Кроме того, при сравнении двух функций всегда следует установить способ определения нормы

$$\|n^*(r',0) - \hat{n}(r',0)\|.$$

Все эти обстоятельства в целом затрудняют решение вопроса о пространственном разрешении методов восстановления начального ПР $n^*(r,0)$. Чтобы обойти эти трудности, нами было введено понятие точности представления, позволяющее их сравнить между собой, установить их эквивалентность или подчинение. Абсолютная точность любого представления $\hat{n}(r',0)$ ПР $n^*(r,0)$ определяется феноменологической постоянной τ_0 . Относительная точность данного представления R , определенная выражением (6.5.1), показывает во сколько раз полуширина соответствующего ядра меньше постоянной τ_0 , какие наименьшие пространственные области по сравнению с τ_0 удастся обследовать с помощью рассматриваемого

мого метода. В этой связи возникает вопрос о том, как велика единица измерения точности R_s , определенной выражением (6.5.1). Точность представлений, например, нулевого и первого порядков имеют значения соответственно $R_0 = 0,4088$ и $R_1 = 0,5892$. Разность между ними составляет $R_1 - R_0 = 0,1804$. Это много или мало? С чем сравнить эту разность? Чтобы ответить на этот вопрос, оказывается достаточным установить, насколько отличаются временные полуширины $\Delta_{1/2,0}(t)$ и $\Delta_{1/2,1}(t)$, соответствующие полуширинам $\Delta_{1/2,0}(r')$ и $\Delta_{1/2,1}(r')$. Отношение $\Delta_{1/2,0}(t)/\Delta_{1/2,1}(t)$ покажет, насколько повысилось временное разрешение при переходе от представления нулевого порядка к представлению первого порядка. Не трудно показать, что

$$\Delta_{1/2,s}(t) = \tau_{1/2,s}^{(1)} [\exp(1/R_s) - 1] = \tau_{1/2,s}^{(2)} [1 - \exp(-1/R_s)], \quad (6.5.9)$$

где $\tau_{1/2,s}^{(i)} = (1/w_0) \exp(r_{1/2,s}^{(i)}/r_0)$; $i=1,2$; $r_{1/2,s}^{(1)} < r_{1/2,s}^{(2)}$.

Согласно формуле (6.5.9) получаем

$$\Delta_{1/2,0}(t) / \Delta_{1/2,1}(t) \approx 3.6697.$$

Если вычислить аналогичное отношение "ширин" ядер $K_0(r,r')$ и $K_1(r,r')$ на "однопроцентном уровне" согласно уравнению

$$K(r,r') = 0.01 K(r',r'),$$

то мы убедимся, в том, что временное разрешение этих двух представлений в целом еще больше отличается друг от друга, чем это показывает отношение полуширин, ибо $\Delta_{1/100,0}(t) / \Delta_{1/100,1}(t) \approx 20.8557$. Из приведенного выше примера следует, что точность представления, определенная выражением (6.5.1), измеряется в весьма больших единицах. Увеличение точности представления R_s на десятые доли единицы влечет за собой повышение временного разрешения метода в несколько раз. Таким образом, представление с точностью около единицы даже при довольно "неприятном" оригинале $n^*(r,0)$ даст хорошо совпадающий с ним образ. Отметим, что при возрастании порядка представлений приращение точности при переходе

от s -го на $(s+1)$ -ое представление монотонно уменьшается. Однако, точность представления R_s все же повышается.

6.5.3. Некоторые дополнительные критерии применимости $K(r, r')$ -представления

Выполнение условия (6.5.I) является довольно строгим требованием относительно начального распределения. В этой связи рассмотрим частный случай, когда условия (6.5.I) или же (6.5.7) относительно кинетики затухания ТЛ явно нарушены, однако, данное представление $\hat{n}(r, 0)$ хорошо отображает ПР $n^*(r, 0)$. Допустим, что в некотором интервале (r_1, r_2) $n^*(r, 0)$ является линейной функцией r . Отсюда следует, что

$$\frac{\partial n^*(r, 0)}{\partial r} = n_1 = \text{const} \quad \text{и} \quad \frac{\partial^k n^*(r, 0)}{\partial r^k} \equiv 0,$$

где $k = 2, 3, 4, \dots$. Разложение $n^*(r, 0)$ в ряд Тейлора в окрестности точки $r' \in (r_1, r_2)$ имеет вид

$$n^*(r, 0) = n^*(r', 0) + n_1 \cdot (r - r'). \quad (6.5.I0)$$

Пусть величина $|(r - r')n_1 / n^*(r', 0)|$ в противоположность условию (6.2.II) или (6.5.I) сравнима или даже больше единицы.

Подставим выражение (6.5.I0) в левую часть уравнения (6.I.7) вместо $n^*(r, 0)$ и подробнее оценим полученный таким образом интеграл

$$\int_0^{\infty} K(r, r') [n^*(r', 0) - n_1 \cdot (r - r')] dr. \quad (6.5.II)$$

Предполагается, что ядро $K(r, r')$ в (6.5.II) удовлетворяет условиям (6.2.6), (6.2.7), причем имеет место равенство

$$K(r' - \rho, r') = K(r' + \rho, r'), \quad (6.5.I2)$$

что является условием четности ядра $K(r, r')$ относительно начала координат в точке r' ; $\rho = r - r'$.

Согласно условиям (6.2.6), (6.2.7), ядро в (6.5.II) за пределами сравнительно небольшой окрестности $|r - r'| \leq \Delta r \approx \Delta \gamma_2(r')$ точки r' практически равняется нулю, поэтому сократим в (6.5.II) пределы интегрирования от нуля до бесконечности на

симметричный относительно точки r' интервал $(r' - \Delta r, r' + \Delta r)$. Из-за нечетности подинтегральной функции $n_1 \rho K(r' + \rho, r')$ аргумента ρ в (6.5.II) следует, что

$$\int_{r' - \Delta r}^{r' + \Delta r} n_1 \cdot \rho K(r' + \rho, r') d\rho = 0$$

независимо от величины n_1 . Таким образом, при учете вышесказанного из (6.5.II) в конечном счете получаем равенство

$$\int_0^{\infty} \tilde{K}(r, r') [n^*(r', 0) + n_1 \cdot (r - r')] dr \approx n^*(r', 0) \int_0^{\infty} \tilde{K}(r, r') dr \quad (6.5.I3)$$

независимо от того, выполняется или не выполняется условие (6.2.II), следовательно, также и (6.5.I). Равенство (6.5.I0) позволяет, таким образом, полученные формулы (6.3.4), (6.3.I5) и (6.3.23) распространить на случаи, когда $n^*(r, 0)$ изменяется с постоянной скоростью гораздо быстрее, чем это допускается критерием (6.5.I). Однако, ядро $K(r, r')$ должно быть четным относительно аргумента $(r - r')$.

Рассмотрим, насколько хорошо выполняется условие четности (6.5.I2) для ядер типа $K_S(r - r')$. Из (6.3.22) получаем функцию

$$K_S(\rho/r_0) = (s+1)^{s+1} \exp\{-(s+1)[(\rho/r_0) + \exp(-\rho/r_0)]\}, \quad (6.5.I4)$$

которая относительно ρ/r_0 не является ни четной, ни нечетной. Однако, не трудно заметить, что при $\rho/r_0 \ll 1$ имеет место приближенное равенство

$$K_S(\rho/r_0) \approx (s+1)^{s+1} \exp\{-(s+1)[1 + (1/2)(\rho/r_0)^2]\}, \quad (6.5.I5)$$

правая часть которого является четной функцией. Если $\rho \leq 0.5 r_0$, то "погрешность четности" ядра (6.5.I4) и, следовательно, (6.3.22) не превышает 1%. Из сказанного следует, что верхняя часть пика ядер типа (6.3.22) над уровнем, на котором ширина ядра меньше r_0 , всегда будет практически четной функцией аргумента $(r - r')$. Расчет полуширины ядер $K_S(r, r')$ (6.3.22) (рис.6.2) показывает, что их четность при возрастании порядка ядра S все увеличивается. Так, уже при $S=5$ $\Delta_{1/2,5}(r') = 0.968 r_0 < r_0$. Это значит, что пик ядра $K_5(r, r')$ над уровнем $K_5(r', r')/2$ явля-

ется с достаточно высокой точностью четным. Для ядер, например, $K_{10}(r, r')$ и $K_{100}(r, r')$ соответствующий "уровень четности" имеет значения $\sim 0,3 K_{10}(r', r')$ и $\sim 10^{-5} K_{100}(r', r')$. Таким образом, при возрастании порядка ядра нечетным остается лишь самое "подножье пика" ядра, где его значения по сравнению с значением $K_S(r', r')$ ничтожно малы. Следовательно, "нечетность подножья" практически не влияет на результат (6.5.13). Об этом свидетельствует также сравнение между собой представлений типа (6.3.23) начального ПР в виде функции Хевисайда (рис.6.5).

При изучении кривых затухания ТЛ и им соответствующих распределений $n^*(r, 0)$ может оказаться, что критерий применимости S -го представления (6.5.7) не удовлетворяется. В этом случае мы должны либо построить по крайней мере $(S+1)$ -ое представление, либо убедиться во возможной линейности распределения $n^*(r, 0)$ в (r_1, r_2) -интервале, соответствующем временному интервалу, в котором измерены рассматриваемые кривые затухания ТЛ. Для этого следует требования типа

$$\partial n^*(r, 0) / \partial r = \text{const} \quad , \quad \partial^2 n^*(r, 0) / \partial r^2 \equiv 0 \quad (6.5.16)$$

переписать с помощью соответствующих представлений относительно $I(t)$. Подставляя в (6.5.16) S -ое представление (6.3.23) и учитывая (6.5.3), получаем соответственно

$$t^{S+1} \{ (S+1) I^{(S)}(t) + t I^{(S+1)}(t) \} = \text{const} \quad (6.5.17)$$

и

$$(S+1)^2 I^{(S)}(t) + (2S+3)t I^{(S+1)}(t) + t^2 I^{(S+2)}(t) = 0. \quad (6.5.18)$$

В качестве примера применения параметра $\alpha(t)$ при изучении кривых затухания ТЛ, напомним условия линейности (6.5.17) и (6.5.18) для случая $S=0$ в виде

$$t \cdot I(t) [1 - \alpha(t)] = \text{const} \quad (6.5.19)$$

и

$$[1 - \alpha(t)]^2 - t \cdot d\alpha(t)/dt = 0. \quad (6.5.20)$$

Если для S -ого представления кривая затухания ТЛ не удовлетворяет ни критерию (6.5.7), ни условиям линейности $n^*(r, 0)$, то для

достоверного отображения начального ПР $n^*(r,0)$ мы должны построить представление более высокого порядка. В тех случаях, когда кривые затухания удовлетворяют соответствующим критериям, нет необходимости вычислять более точное представление, ибо норма

$$\| \hat{n}_s(r';0) - \hat{n}_{s+1}(r';0) \|$$

практически равняется нулю, если, напр., неравенство (6.5.7) для s -ого представления имеет место.

6.6. Восстановление конфигурационного фактора радиационных дефектов по кинетике туннельной люминесценции

6.6.1. Вводные замечания

КФ является краеугольным камнем в феноменологическом описании процессов создания генетических пар радиационных дефектов (см. п.4.3). КФ представляет собой вероятность локализации продуктов распада электронных возбуждений на определенном расстоянии. Поэтому влияние различных факторов, как, например, температура, интенсивность и доза возбуждения, на процессы генерации туннельных пар более отчетливо проявляется при изучении именно КФ, нежели начального ПР $n^*(r,0)$. В некоторых простейших случаях $n^*(r,0)$ и $p(r)$ связаны между собой несложным функциональным законом типа $n^*(r,0) = \varphi(r)p(r)$, где $\varphi(r)$ - некоторая в явном виде заданная функция. В этой связи возникает вопрос, нельзя ли для $p(r)$ использовать те же представления, которые получены в п.6.3 для $n^*(r,0)$. Как будет показано ниже, замена самих величин в равенстве

$$p(r) = [\varphi(r)]^{-1} \cdot n^*(r,0) \quad (6.6.I)$$

их представлениями $\hat{p}(r')$ и $\hat{n}(r',0)$ приводят к нарушению этого равенства:

$$\hat{p}(r') \neq [\varphi(r)]^{-1} \hat{n}(r',0),$$

за исключением случая $\varphi(r) = \text{const}$. Для построения $\hat{p}(r')$ равенство (6.6.I) будет использовано не в прямом виде, а под знаком

интеграла. Напомним, что на функциональный вид $n^*(r, 0)$ существенно влияет временная зависимость возбуждения $F(t)$. Ранее, в частности, было показано, что наибольшие отклонения $p(r)$ от $n^*(r, 0)$ наблюдается в области близких пар - при малых временах затухания ТЛ. Напротив, в области далеких пар $p(r)$ и $n^*(r, 0)$ совпадает с точностью до постоянного множителя. Следовательно, восстановление $p(r)$ по кинетике затухания ТЛ сводится к учету временной зависимости возбуждения $F(t)$ в $\hat{n}(r, 0)$. Можно сказать, что учет $F(t)$ в $\hat{n}(r, 0)$ приводит к некоторым особенностям (напр., к неоднородности r -оси относительно точности представления $\hat{p}(r)$), которые рассмотрены ниже. Кроме того, с точки зрения экспериментального изучения КФ особое внимание заслуживает также АМВ, ибо анализ фракционной ТЛ позволяет сравнительно просто установить функциональный вид $p(r)$ (прил.3, прил.4).

КФ, также как начальное ПР, связан с кинетикой ТЛ, с помощью интегрального уравнения типа (6.1.4). При подстановке (4.3.7) в (4.3.1) после несложных преобразований получаем уравнение

$$\text{относительно } \mathcal{E} \int_0^{\infty} p(r) w(r) \int_0^{\infty} F(t-\vartheta) \exp[-w(r)\vartheta] d\vartheta dr = I(t), \quad (6.6.2)$$

которое учитывает временную зависимость возбуждения в общем виде; $t=0$ в момент включения возбуждения; ϑ - переменная интегрирования. Ясно, что интенсивность ТЛ в текущий момент времени t обусловлена также ранее созданными ($\vartheta > 0$), но сохранившимися до t ($\vartheta = 0$) туннельными парами. Именно интегрирование по ϑ учитывает "историю" кристаллофосфора. Дальнейший анализ уравнения (6.6.2) не целесообразен, если вместо $F(t)$ не поставить явно заданную функцию от времени. С точки зрения практического применения, как отмечалось выше, наибольший интерес представляет $F(t)$ в виде (4.3.13) и (4.3.18). Кроме того, рассмотрение процедуры восстановления КФ по кинетике ТЛ

позволяет при этом достичь максимальной простоты изложения. Более сложную временную зависимость $\mathcal{J}(t)$ можно с помощью Фурье-анализа разложить на гармонические составляющие, на которые распространим развитый ниже метод фракционной ТЛ (при.3).

6.6.2. Кинетика затухания ТЛ и исходное уравнение для КФ

На практике чаще всего пользуется ОИВ (4.3.13). Подстановка (4.3.13) в (6.6.2) и последовательное вычисление интеграла по " ψ " приводит к уравнениям, описывающим как разгорание ($t < t_B$), так и затухание ($t > t_B$) ТЛ. Так как нас интересует кинетика затухания, то рассмотрим только последнее из них, а именно

$$\int_0^{\infty} \mathcal{R}_{0,t_B}(r, t-t_B) p(r) dr = [(t-t_B)/\kappa \mathcal{J}_0] I(t-t_B), \quad (6.6.3)$$

где $\mathcal{R}_{0,t_B}(r, t-t_B) \equiv (t-t_B) \{1 - \exp[-w(r)t_B]\} \exp[-w(r)(t-t_B)]$.

Для анализа кинетики затухания удобнее время отсчитывать с момента выключения возбуждения, поэтому заменим переменную t в (6.6.3) с некоторым $t'' = t - t_B$ (см. п.4.4). Однако, для простоты записи следующих ниже выражений индекс в " t'' " опустим. В результате перепишем уравнение (6.6.3) в виде

$$\int_0^{\infty} \mathcal{R}_{0,t_B}(r, t) p(r) dr = (1/\kappa \mathcal{J}_0) t I(t), \quad (6.6.4)$$

где $\mathcal{R}_{0,t_B}(r, t) = t \{1 - \exp[-w(r)t_B]\} \exp[-w(r)t]$; (6.6.5)

$t=0$ в момент выключения возбуждения. Уравнение (6.6.4), собственно говоря, можно было получить также из (6.1.4), если вместо начального ПР в (6.1.4) поставить (4.3.16), которое, согласно (4.3.14), имеет место в момент выключения возбуждения. В случаях очень кратковременного возбуждения или же наблюдения затухания ТЛ только при больших временах $t \gg t_B$, когда имеет место неравенство $w(r)t_B \ll 1$, вместо (4.3.16) получаем приближенное соотношение

$$n_{\mathcal{D}}^*(r, 0) \simeq \kappa \mathcal{D} p(r), \quad (6.6.6)$$

где $\mathcal{D} = \mathcal{J}_0 t_B$. Если сравнить (6.6.6) с (6.6.1), то $\varphi(r) = \kappa \mathcal{D}$.

Ниже будет показано, что равенство (6.6.6) выполняется также для представлений $\hat{n}_s(r,0)$ и $\hat{p}_{s,t_B}(r')$. Далее поступим также как в п.6.3.3. Продифференцировав основное уравнение (6.6.4)

$$S\text{-раз по } t \frac{d^s}{dt^s} \left\{ (1/t) \int_0^\infty \tilde{K}_{s,t_B}(r,t) p(r) dr \right\} = (1/\chi J_0) d^s I(t)/dt^s,$$

получаем исходное относительно $p(r)$ уравнение

$$\int_0^\infty \tilde{K}_{s,t_B}(r,t) p(r) dr = (1/\chi J_0) (-1)^s t^s I^{(s)}(t), \quad (6.6.7)$$

где $\tilde{K}_{s,t_B}(r,t) = t \{1 - \exp[-w(r)t_B]\} [w(r)t]^s \exp[-w(r)t]; \quad (6.6.8)$

$$I^{(s)}(t) = d^s I(t)/dt^s; \quad s = 0, 1, 2, \dots$$

Следует подчеркнуть, что явный вид ядра типа (6.6.8) зависит от функционального вида $J(t)$. При ОИВ (4.3.13) оно, действительно, имеет самый простейший вид (6.6.8). Сравнение уравнения (6.6.7) с (6.3.19) показывает, что влияние временной зависимости $J(t)$ на $n^*(r,0)$ в (6.3.19) "перенесено" на ядро (6.6.8) в (6.6.7). Для построения соответствующих КФ $K(r,r')$ -представлений используем метод подобия ядра и дельта-функции, развитый в п.6.2.2 для приближенного решения интегральных уравнений Фредгольма I-рода.

6.6.3. Анализ ядра $\tilde{K}_{s,t_B}(r,t)$

Для того, чтобы применять метод подобия ядра и дельта-функции мы должны доказать, что ядро (6.6.8), действительно, является аналогом дельта-функции. В этой связи следует показать, что существует такое преобразование "время-расстояние"

$$r' = g_{s,t_B}(t) \quad (6.6.9)$$

и ему обратное преобразование $t = g_{s,t_B}^{-1}(r')$, применение которого в (6.6.8) дает ядро $K_{s,t_B}(r,r')$, удовлетворяющее условиям (6.2.6) и (6.2.7).

Преобразование (6.6.9), как обычно, определяется уравнением (6.2.8), из которого с учетом (6.6.8) после некоторых преобра-

зований получаем эквивалентное ему уравнение

$$\left\{ \exp[-w(r)t] - (1+t_B/t) \exp[-w(r)(t+t_B)] \right\} w(r)t - \quad (6.6.10)$$

$$- S \left\{ \exp[-w(r)t] - \exp[-w(r)(t+t_B)] \right\} = 0.$$

Уравнение (6.6.10) является трансцендентным и может быть решено только приближенно. Следовательно, преобразование (6.6.9) нельзя представить в аналитическом виде за исключением случая $S=0$. Однако сравнительно простой анализ ядра (6.6.8) позволяет установить асимптотики преобразования (6.6.9) в областях малоинерционных ($w(r)t_B \gg 1$) и инерционных ($w(r)t_B \ll 1$) относительно возбуждения фазаций ТЛ. Нетрудно показать, что имеют место соотношения

$$\mathcal{K}_{S,t_B}(r,t) \simeq t \mathcal{K}_{S-1}(r,t), \quad \text{если } w(r)t_B \gg 1 \quad (6.6.11a)$$

и

$$\mathcal{K}_{S,t_B}(r,t) \simeq t_B \mathcal{K}_S(r,t), \quad \text{если } w(r)t_B \ll 1. \quad (6.6.11б)$$

Ядра типа $K_S(r,r')$, соответствующие ядрам $\mathcal{K}_S(r,t)$, представляют собой аналоги дельта-функции (п.6.3). Из (6.6.11) следует, что $K_{S,t_B}(r,r')$ как будто заключен между ядрами $K_{S-1}(r,r')$ и $K_S(r,r')$ и является неким промежуточным ядром между ними. Поэтому вполне обосновано можно утверждать, что и $K_{S,t_B}(r,r')$ представляет собой аналог дельта-функции.

С помощью соотношений (6.6.11а,б) можно определить искомые асимптотики преобразования (6.6.9). Подставляя ядра $\mathcal{K}_{S-1}(r,t)$ и $\mathcal{K}_S(r,t)$ в (6.2.8) вместо ядра (6.6.8), получаем два уравнения, решения которых представим в виде

$$r' = g_{S,t_B}(t) \simeq \begin{cases} g_{S-1}(t) = r_0 \ln(w_0 t / S), & \text{если } r' \ll \rho(t_B) \quad (6.6.12a) \\ g_S(t) = r_0 \ln[w_0 t / (S+1)], & \text{если } r' \gg \rho(t_B), \quad (6.6.12б) \end{cases}$$

где $\rho(t_B) \equiv r_0 \ln w_0 t_B$ - "расстояние возбуждения" от начала координат, $S = 1, 2, 3, \dots$. Значения функции $g_{S,t_B}(t)$ в промежуточной области, когда t соизмерим с t_B ($t \simeq t_B$), можно найти лишь при численном решении уравнения (6.6.10). Результаты численного анализа преобразования (6.6.9) (рис.6.6), показывают,

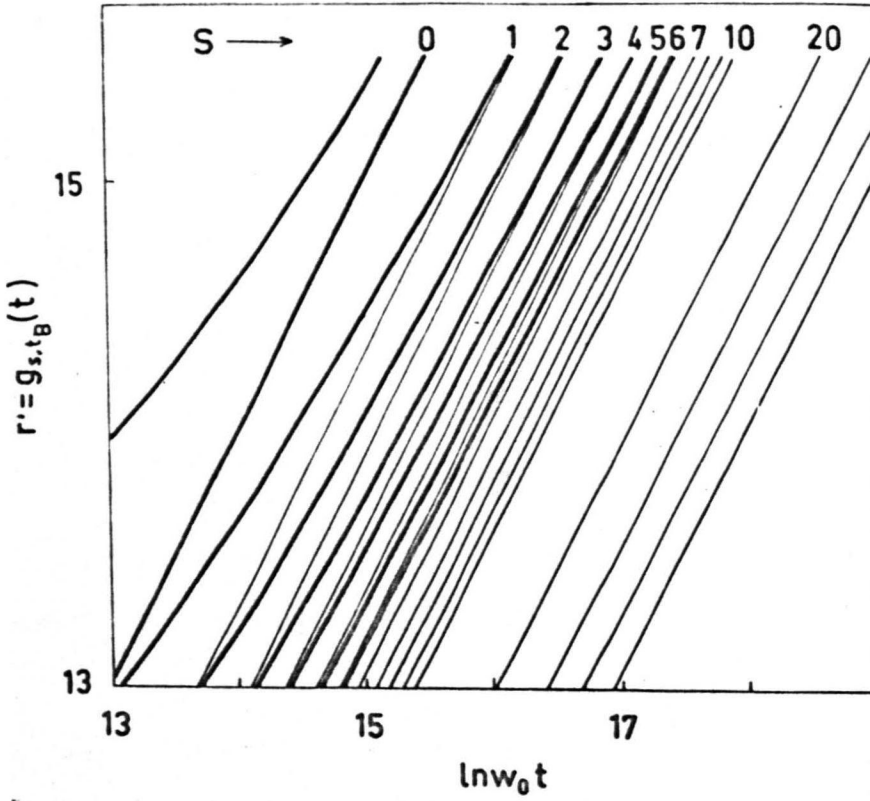


Рис.6.6. Преобразование "время-расстояние" $r' = g_{s,t_B}(t)$, используемое для расчета представлений КФ партнеров генетических пар. Прямые представляют асимптотические преобразования типа $r' = g_s(t)$ при данном s .

что при возрастании S кривая $g_{s,t_B}(t)$ в полулогарифмических координатах $(\ln w_0 t, r')$ все больше "спрямляется". Это вполне естественно, ибо асимптотики $g_{s-1}(t)$ и $g_s(t)$ при больших S сближаются настолько друг к другу, что без большой погрешности можно полагать:

$$g_{s-1}(t) \approx g_{s,t_B}(t) \approx g_s(t).$$

Лишь при $S=0$, как было уже отмечено, уравнение (6.6.10) имеет аналитически представляемое решение

$$r' = g_{0,t_B}(t) = r_0 \ln |w_0 t / \ln(1 + t_B/t)|. \quad (6.6.13)$$

Преобразование (6.6.13) отличается от других $g_{s,t_B}(t)$ при $S = 1, 2, 3, \dots$ тем, что имеет лишь "верхнюю" асимптотику $g_0(t)$. Из (6.6.13) путем несложных преобразований получаем, что

$$g_{0,t_B}(t) \rightarrow g_0(t) = r \ln w_0 t,$$

если $t_B/t \ll 1$. Таким образом, мы доказали, что, действительно, существует преобразование (6.6.9), определенное уравнением (6.2.8), с помощью которого можно перейти от ядра (6.6.8) на ядро $K_{s,t_B}(r, r')$, удовлетворяющее условиям (6.2.6) и (6.2.7).

6.6.4. $K(r, r')$ -представления КФ

Так как ядро (6.6.8) уравнения (6.6.7) является аналогом дельта-функции, то, согласно (6.2.13), $K_{s,t_B}(r, r')$ -представление КФ имеет вид

$$p(r') \sim [(-1)^s t^s I^{(s)}(t) / \mathcal{R} \mathcal{J}_0] \left\{ \int_0^\infty \mathcal{K}_{s,t_B}(r, t) dr \right\}^{-1}. \quad (6.6.14)$$

Интегрирование ядра (6.6.8) в (6.6.14) приводит нас к общей формуле

$$p(r') \sim \hat{p}_{s,t_B}(r') \equiv [(-1)^s t^s I^{(s)}(t) / \mathcal{R} \mathcal{J}_0] \left\{ 1 - [t/(t+t_B)]^s \right\}^{-1} \quad (6.6.15)$$

для расчета представлений при $S = 1, 2, 3, \dots$. При вычислении (6.6.15) допущено, что

$$\int_{w_0 t}^\infty x^{s-1} \exp(-x) dx \approx 0.$$

Это достаточно точно выполняется при $\omega_0 t \gg 1$. Формула (6.6.I5) не позволяет вычислить нулевое представление ($s=0$) для $p(r')$ потому, что интегрирование соответствующего ядра приводит к интегральной показательной функции, которую нельзя включить в общую систему представлений при $s = 1, 2, 3, \dots$. Наряду с нулевым представлением $\hat{p}_{0,t_B}(r')$ рассмотрим в более развернутом виде еще два частных представления при $s=1$ и $s=2$ согласно общей формуле (6.6.I5). Можно показать, что подстановка ядра $\mathcal{K}_{0,t_B}(r,t)$ в (6.6.I4) после вычисления соответствующего интеграла дает нулевое представление в виде

$$p(r') \sim [I(t)/\mathcal{K}_{0,t_B}] \{ \ln(1+t_B/t) + \text{Ei}(-\omega_0 t) - \text{Ei}(-\omega_0(t+t_B)) \}^{-1} \quad (6.6.I6)$$

При достаточно большом $\omega_0 t$ из (6.6.I6) получаем

$$p(r') \sim \hat{p}_{0,t_B}(r') = [I(t)/\mathcal{K}_{0,t_B}] / \ln(1+t_B/t). \quad (6.6.I7)$$

При исследовании экспериментально полученных кривых затухания ТЛ широко пользуется значением параметра $\alpha(t)$ при больших по сравнению с длительностью возбуждения временах $\alpha(\infty)$ [180]. В гл.4, однако, показано, что нередко возникает необходимость в тщательном изучении параметра $\alpha(t)$ также и в начальной стадии затухания ТЛ. Для построения $K(r,r')$ -представлений КФ $\hat{p}(r')$ или же начального ПР $\hat{\eta}(r',0)$ мы также должны исследовать параметр $\alpha(t)$ во всем интервале измерения кинетики затухания ТЛ. Чтобы обосновать вышесказанное, перепишем, напр., представления $\hat{p}_{1,t_B}(r')$ и $\hat{p}_{2,t_B}(r')$ "на языке" параметра $\alpha(t)$. Для этого выразим соответствующие производные в (6.6.I5) через параметр $\alpha(t)$. В результате имеем

$$\hat{p}_{1,t_B}(r') = [tI(t)\alpha(t)/\mathcal{K}_{0,t_B} r_0] (1+t_B/t) \quad (6.6.I8)$$

и

$$\hat{p}_{2,t_B}(r') = \hat{p}_{1,t_B}(r') \{ [1+\alpha(t) - d \ln \alpha(t) / d \ln t] / (2+t_B/t) \} \quad (6.6.I9)$$

"Удобство" применения параметра $\alpha(t)$ заключается в том, что область изменения его значений хорошо известна - $\alpha \in (0,2)$ и в пределах одного-двух порядков времени он во многих случаях

практически является постоянным, если $t \gg t_B$ (см. гл. 4). Имеются еще и другие, не менее важные, соображения [188, 191] в пользу применения параметра $\alpha(t)$.

При больших по сравнению с длительностью возбуждения временах $n^*(r, 0)$ и $p(r)$ связаны между собой простым соотношением (6.6.6). Установим, что такое же соотношение имеет место для соответствующих представлений $\hat{n}(r', 0)$ и $\hat{p}(r')$. Так, при учете малости отношения $t_B/t \ll 1$ в (6.6.15), после несложных преобразований имеем

$$\hat{p}_{s, t_B}(r') = (-1)^s t^{s+1} I^{(s)}(t) / \kappa \mathcal{J}_0 t_B r_0 \Gamma(s+1); \quad (t \gg t_B). \quad (6.6.20)$$

Сравнивая (6.6.20) с соответствующим представлением (6.3.23) типа производных, получаем совпадающее с (6.6.6) соотношение

$$\hat{n}_s(r', 0) = \kappa \mathcal{D} p_{s, t_B}(r'); \quad t_B \ll t. \quad (6.6.21)$$

Такое же соответствие закономерностей между самими $n^*(r, 0)$ и $p(r)$ и их $K(r, r')$ -представлениями имеет место также в случае $s = 0$.

Применение АМВ позволяет измерить частотные характеристики ТЛ $\bar{I}_\varphi(\omega)$ (прил. I, прил. 3) или $\bar{I}_\varphi(\omega, t)$ (гл. 4, прил. 4), на основании которых построены $K(r, r')$ -представления КФ типа $\hat{p}_{\varphi, s}(r')$

Можно показать (прил. 3), что

$$\hat{p}_{\pi/2, 0}(r') = (\pi / \delta \kappa \mathcal{J}_0 r_0) \bar{I}_{\pi/2}(\omega) \quad \text{и} \quad \hat{p}_{0, 1}(r') = -(\pi / 2 \delta \kappa \mathcal{J}_0 r_0) d\bar{I}_0(\omega) / d \ln \omega,$$

где преобразование "частота-расстояние" $r' = g_{\varphi, s}(\omega)$ имеет вид

$g_{\pi/2, 0}(\omega) = g_{0, 1}(\omega) = r_0 \ln(\omega_0/\omega)$. Отметим, что метод фракционной ТЛ является пока единственным, позволяющим реставрировать КФ также

в нестационарном процессе генерации туннельных пар. Для этого следует использовать $K(r, r')$ -представления $\hat{P}_{\varphi, s}(r', t)$, построенные на базе зависящих от времени частотных характеристик ТЛ $\bar{I}_\varphi(\omega, t)$ (прил. 4).

6.6.5. Точность $K(r, r')$ -представлений КФ и их проверка "на себя"

Исследование точности представлений (6.6.15) непосредственно связано с определением полуширины ядер типа (6.6.8). Эта задача сводится к решению уравнения (6.2.14), которое в рассматриваемом случае имеет вид

$$K_{s,t_B}(r, r') = (1/2) K_{s,t_B}(r' r'). \quad (6.6.22)$$

Если корнями уравнения (6.6.22) являются $r_{1/2}^{(1)}$ и $r_{1/2}^{(2)}$, то, согласно (6.5.1), точность соответствующего представления R_{s,t_B} имеет вид

$$R_{s,t_B} = r_0 / |r_{1/2}^{(1)} - r_{1/2}^{(2)}|. \quad (6.6.23)$$

В связи с тем, что преобразование (6.6.9) нельзя представить в аналитическом виде, также ядро $K_{s,t_B}(r, r')$ можно задавать лишь численно. Это значительно затрудняет решение уравнения (6.6.22). Однако, с помощью соотношений (6.6.11а, б) можно легко оценить полуширину $\Delta_{1/2, s, t_B}(r')$ ядра $K_{s,t_B}(r, r')$ при $r' \ll \rho(t_B)$ и $r' \gg \rho(t_B)$. Из очевидных соображений следует, что

$$\Delta_{1/2, s, t_B}(r') \approx \begin{cases} \Delta_{1/2, s-1}(r'), & \text{если } r' \ll \rho(t_B) \\ \Delta_{1/2, s}(r'), & \text{если } r' \gg \rho(t_B), \end{cases}$$

или $\Delta_{1/2, s}(r') \leq \Delta_{1/2, s, t_B}(r') \leq \Delta_{1/2, s-1}(r') \quad (6.6.24)$

ибо $\Delta_{1/2, s}(r') < \Delta_{1/2, s-1}(r')$ (см. п.6.3.3). В отличие от ядер типа $K_s(r, r')$, примененных в расчетах представлений начального ПР $\hat{\eta}^*(r_0)$, полуширина ядра $K_{s,t_B}(r, r')$ в окрестности точки $r' = \rho(t_B)$ сильно зависит от r' . Следовательно, точность представления R_{s,t_B} меняется в пределах

$$r_0 / \Delta_{1/2, s-1}(r') \leq R_{s,t_B}(r') \leq r_0 / \Delta_{1/2, s}(r'). \quad (6.6.25)$$

Таким образом, представление $\hat{\rho}_{s,t_B}(r')$ в области инерционных фракций ТЛ ($r' \gg \rho(t_B)$) изобразит $\mu(r)$ точнее, чем в области малоинерционных фракций ТЛ ($r' \ll \rho(t_B)$). При оценке применимости одного или другого $K(r, r')$ -представления для КФ по экспериментальным данным кривых затухания ТЛ следует руководствоваться

наименьшей точностью представления R_{s-1} . При этом могут быть использованы предложенные в п.6.5 критерии.

Для численного анализа точности представления $R_{s,t_B}(r')$ можно рассматривать вместо (6.6.22) эквивалентное ему уравнение

$$\mathcal{R}_{s,t_B}(r,t) = (1/2) \max[\mathcal{R}_{s,t_B}(r,t_B)] . \quad (6.6.26)$$

Правую часть уравнения (6.6.26) вычислим путем подстановки вместо r решения уравнения (6.6.10) при фиксированном значении времени t (или r'). Далее приближенное решение трансцендентного уравнения (6.6.26) относительно r , напр., методом итерации, дает искомые два корня $r_{1/2}^{(1)}(t)$ и $r_{1/2}^{(2)}(t)$, абсолютное значение разности которых представляет собой зависимость полуширины ядра (6.6.8) от времени. Применяя численно представленное преобразование "время-расстояние" (6.6.9), наконец получаем зависимость полуширины ядра $K_{s,t_B}(r,r')$ и точность представления $R_{s,t_B}(r')$ согласно формуле (6.6.22) (рис.6.7).

Последовательное решение прямой и обратной задач позволяет проверить, насколько хорошо полученное представление $\hat{p}_{s,t_B}(r')$ (образ) отображает предварительно заданный КФ (оригинал). Аналогичная проверка "на себя" была проделана в п.6.4 для представлений начального ПР $\hat{h}(r;0)$. В качестве предварительно известного $p(r)$ опять выберем разность двух функций Хевисайда в следующем виде

$$p(r) = p(0) [H(r-r_1) - H(r-r_2)] , \quad (6.6.27)$$

где $p(0)$ - постоянная; $r_1 < r_2$. Подставляя (6.6.27) в (6.6.4), получаем соответствующее уравнение, которое описывает кинетику затухания ТЛ при заданном КФ:

$$I(t) = \mathcal{J}_0 p(0) \int_{r_1}^{r_2} \{1 - \exp[-w(r)t_B]\} \exp[-w(r)t] dr . \quad (6.6.28)$$

Интеграл в (6.6.28) можно выразить лишь с помощью специальных функций. На практике удобнее вычислить интеграл, соответствующий производной кинетики S -ого порядка

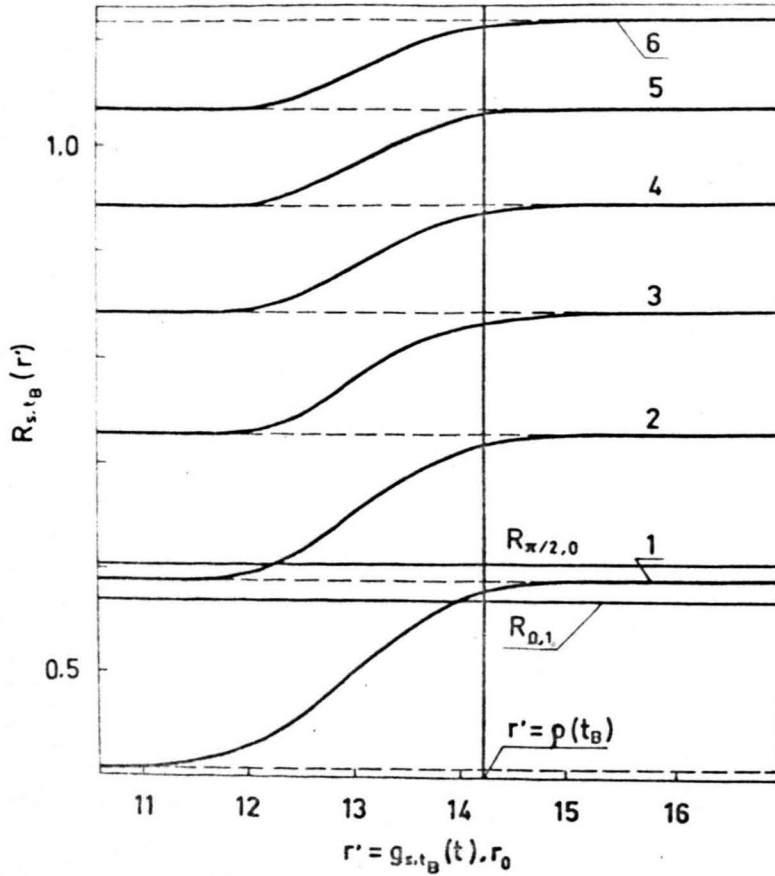


Рис.6.7. Зависимость точности представления КФ партнеров генетических пар от r' при $S = I(1), 2(2), 3(3), 4(4), 5(5), 6(6)$. Горизонтальные прямые соответствуют точности представлений $\hat{\eta}_s(r';0)$ при тех же S .

$$I^{(S)}(t) = (-1)^S \mathcal{L}^{-1} \{ p(\omega) t^{-S} \int_{r_1}^{r_2} \{ 1 - \exp[-w(r)t_B] \} [w(r)t]^S \exp[-w(r)t] dr \}, \quad (6.6.29)$$

где $S = 1, 2, 3, \dots$. Последовательно вычисляя интегралы в

(6.6.28) и (6.6.29), получаем выражения для представлений КФ

$$\hat{p}_{0,t_B}(r') = p(0) \{ \ln(1+t_B/t) \}^{-1} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k [1 - (t+t_B)^k/t^k] [(w_1 t)^k - (w_2 t)^k] / k \cdot k! \quad (6.6.30)$$

и

$$\begin{aligned} \hat{p}_{S,t_B}(r') = p(0) \sum_{k=0}^S (1/k!) \{ & [(w_2 t)^k \exp(-w_2 t) - (w_1 t)^k \exp(-w_1 t)] - \\ & - [t/(t+t_B)]^S \{ [w_2(t+t_B)]^k \exp[-w_2(t+t_B)] - [w_1(t+t_B)]^k \times \\ & \times \exp[-w_1(t+t_B)] \} \} \cdot \{ 1 - [t/(t+t_B)]^S \}^{-1}, \end{aligned} \quad (6.6.31)$$

где $w_1 = w(r_1)$ и $w_2 = w(r_2)$. Интересно отметить, что в случае построения $K(r, r')$ -представлений начального ПР $\hat{\eta}(r', 0)$ было совершенно безразлично, где выбрать на r -оси местонахождение интервала (r_1, r_2) , лишь бы сохранялась его длина. Однако, в рассматриваемом случае особую роль играет окрестность точки $r' = \rho(t_B)$. Точность представления (6.6.31) зависит от того, где относительно точки $\rho(t_B)$ расположен "прямоугольный импульс" (6.6.27). Если интервал (r_1, r_2) находится в областях малоинерционных ($r' \ll \rho(t_B)$) или инерционных ($r' \gg \rho(t_B)$) фракций ТЛ, то точность представления (6.6.31) будет R_{S-1} или R_S соответственно. В окрестности точки $r' = \rho(t_B)$ то же представление имеет некую промежуточную точность между R_{S-1} и R_S (рис.6.7). Таким образом, КФ в виде (6.6.27) позволяет эффективно выявить отклонения образа (6.6.31) от оригинала (6.6.27), а также установить уровень этих "недостатков" в зависимости от положения интервала (r_1, r_2) на r -оси. Однако, если истинный $p(r)$ является достаточно гладким или же порядок $K(r, r')$ -представления достаточно высоким, то зависимость точности представления $R_{S,t_B}(r')$ от r' практически не сказывается на полученный результат и образ (6.6.15) совпадает с оригиналом.

6.7. Резюме

1. Реставрация пространственного распределения радиационных дефектов по кинетике затухания ТЛ в случае ИГП сводится к решению интегрального уравнения Фредгольма I-рода и в связи с этим является некорректной задачей. Неустойчивость решения уравнений этого типа связана с неограниченностью соответствующего обратного интегрального оператора и приближенным характером экспериментально заданной кривой затухания ТЛ. Соответствующее интегральное уравнение сведено к системе линейных алгебраических уравнений и указана возможность регуляризации этой системы.

2. Развита "полуаналитический" метод подобия ядра $K(r, r')$ и дельта-функции. Показано, что ядра $\mathcal{R}(r, t)$ рассматриваемых "физических" уравнений Фредгольма I-рода можно привести к виду $K(r, r')$, которые названы нами аналогами дельта-функции, если

$$\text{sgn}[\partial K(r, r')/\partial r] = \begin{cases} 1, & \text{если } r < r' \\ -1, & \text{если } r > r' \end{cases} \quad \text{и} \quad \lim_{|r-r'| \rightarrow \infty} K(r, r') = 0,$$

где преобразование "время-расстояние" $r' = g(t)$ определяется из уравнения $\partial \mathcal{R}(r, t)/\partial r = 0$. Доказано, что в случае ядер-аналогов дельта-функции имеет место соотношение

$$n^*(r, 0) \sim \hat{n}(r, 0) \equiv F(r') / \int_0^\infty K(r, r') dt,$$

где $F(r')$ - свободный член уравнения, непосредственно связанный с $I(t)$. $\hat{n}(r, 0)$ называется $K(r, r')$ -представлением ПР.

3. Получены $K(r, r')$ -представления типа парциальных светосумм $\hat{n}_{-1, \alpha}(r, 0)$ и производных кинетики затухания ТЛ $\hat{n}_s(r, 0)$, которые имеют следующий вид

$$\hat{n}_{-1, \alpha}(r, 0) = (1/2 r_0 \ln \alpha) \int_{t/\alpha}^{at} I(t') dt' \quad \text{и} \quad \hat{n}_s(r, 0) = (-1)^s t^{s+1} I^{(s)}(t) / r_0 \Gamma(s+1),$$

где $g_{-1,\alpha}(t) = r_0 \ln |(\alpha^2 - 1) w_0 t / 2 \alpha \ln \alpha|$, $\alpha > 1$; $g_s(t) = r_0 \ln [w_0 t / (s+1)]$;

$I^{(s)}(t) = d^s I(t) / dt^s$; $s = 0, 1, 2, \dots$. Введено понятие точности

$K(r, r')$ -представления, на базе которого поставлена и решена задача об эквивалентности различных представлений. Так, напр., представления типа парциальных светосумм в интервале нулевой длины $\hat{n}_{-1,1}(r'; 0)$ и нулевое ($s=0$) представление $\hat{n}_0(r'; 0)$ эквивалентны, ибо

$$\lim_{\alpha \rightarrow 1} \hat{n}_{-1,1}(r'; 0) = \hat{n}_0(r'; 0)$$

4. Доказано, что точность $K(r, r')$ -представлений возрастает по мере уменьшения параметра α и увеличения порядка производной s . Выбор производной достаточно высокого порядка позволяет, в принципе, построить представление сколь угодно высокой точности. Метод подобия ядра $K(r, r')$ и дельта-функции апробирован применительно к ПР, определенному в виде разности двух функций Хевисайда. $\hat{n}_s(r'; 0)$ при большом s с высокой точностью передает свойства оригинала. Представления $\hat{n}_s(r'; 0)$ успешно применены для анализа реальных кривых затухания ТЛ ШГК во временном интервале $1-10^4$ с.

5. Предложен критерий, определяющий возможности применения данного $K(r, r')$ -представления для оценки ПР при заданной кривой затухания ТЛ. Критерий устанавливает функциональную связь между параметром $\alpha(t)$ и точностью представления.

6. При изучении какой-то одной кривой затухания ТЛ можно в качестве $K(r, r')$ -представления КФ использовать соответствующее представление начального ПР $\hat{n}_s(r'; 0)$ исключительно при больших временах затухания ($t/t_B \gg 1$). Такой же подход при анализе КФ в случае совокупности кривых затухания ТЛ является малоэффективным или же вообще не применимым.

7. Для КФ предложена совокупность новых $K(r, r')$ -представлений $\hat{p}_{\varphi, s}(r')$ и $\hat{p}_{s, t_0}(r')$, построенных на базе частотных характеристик ТЛ и производных различных порядков кинетики затухания ТЛ. В отличие от представлений $\hat{\eta}_s(r', 0)$ при построении представлений КФ учтена временная зависимость возбуждения.

8. Преобразование "время-расстояние" при построении представлений КФ нельзя выразить в аналитическом виде, за исключением преобразования для нулевого представления. Асимптотики преобразования "время-расстояние" представляют собой логарифмическую зависимость от времени затухания.

9. Точность представления $\hat{p}_{s, t_0}(r')$ при возрастании расстояния (времени затухания) монотонно повышается, но в то же время остается ограниченной. В области инерционных относительно возбуждения фракций ТЛ ($r \gg r_0 \ln w_0 t_0$) достигается предельная точность, совпадающая с той, которую имеет представление $\hat{\eta}_s(r', 0)$. Наименьшая точность достигается в области малоинерционных фракций ТЛ и равняется точности представления $\hat{\eta}_{s-1}(r', 0)$.

10. Метод фракционной ТЛ является единственным, позволяющим реставрировать КФ также в нестационарном процессе генерации туннельных пар. Для этого следует использовать $K(r, r')$ -представления типа $\hat{P}_{\varphi, s}(r', t)$, построенных на базе зависящих от времени частотных характеристик ТЛ.

II. Частотная характеристика ТЛ $\bar{I}_{\pi/2}(\omega)$ с точностью до постоянного множителя сама является $K(r, r')$ -представлением КФ без всякой предварительной ее математической обработки. Это равносильно тому, что измерительная аппаратура непосредственно регистрирует КФ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Диссертационная работа выполнена в Научно-исследовательском институте физики твердого тела Латвийского госуниверситета им. П.Стучки под руководством лауреата Государственной премии ЛССР, канд. физ.-мат. наук Д.К.Миллера. Основные результаты диссертационной работы заключаются в следующем.

Выводы

1. Туннельная люминесценция чистых и активированных Tl и Ag , KCl , KBr , KI и $NaCl$, $NaBr$ обусловлена туннельной рекомбинацией в парах электронно-дырочных центров, дырочной компонентой которых являются заряженные относительно решетки дырочные центры типа V_k , V_{ka} , XU^- и A^{2+} . Излучательная туннельная рекомбинация электронных центров с нейтральными относительно решетки дырочными центрами не обнаружена.

2. В щелочногалогидных кристаллах осуществляются два вида излучательных электронных туннельных переходов; а) переходы, генетически связанные с дырочной компонентой пар электронно-дырочных центров; б) переходы, характерные исключительно для акта туннельной рекомбинации, которые не наблюдаются при непосредственном возбуждении каждой из компонент пар или в зонном рекомбинационном процессе.

3. Дозовая характеристика туннельной люминесценции позволяет установить характер пространственной корреляции радиационных дефектов, участвующих в излучательной туннельной рекомбинации. Предельные значения параметра $\beta(t, \theta) = \partial \ln I(t, \theta) / \partial \ln \theta$ могут быть использованы в качестве меры математической модели пространственного распределения: напр., $\beta_{\infty} = 1$ соответствует изолированным генетическим парам, $\beta_{\infty} = 2$ - хаотически смешан-

ным генетическим парам.

4. Кинетика затухания туннельной люминесценции щелочногалоидных кристаллов наиболее адекватно описывается в рамках модели изолированных генетических пар.

5. Частотная характеристика и кинетика затухания туннельной люминесценции, а также ее производные по времени могут быть использованы для реставрации пространственного распределения радиационных дефектов при реализации модели изолированных генетических пар. Выбор производной кинетики достаточно высокого порядка обеспечивает восстановление пространственного распределения со сколь угодно высокой точностью.

О т а в т о р а

Выражаю искреннюю благодарность заведующему лабораторией радиационной физики твердого тела канд. физ.-мат. наук Д.К. Миллерсу и канд. физ.-мат. наук, доц. Я.А. Валбису за предоставление темы и постоянное внимание к работе.

Автор глубоко благодарен также доктору физ.-мат. наук, профессору И.К. Витолу за полезные советы и критические замечания, которые способствовали завершению настоящей работы. Искренне благодарю канд. физ.-мат. наук А.А. Гайлитиса за обсуждение некоторых затронутых в работе вопросов, канд. физ.-мат. наук В.Г. Плеханова за предоставление гелиевого кристата и интерес к настоящей работе, канд. физ.-мат. наук В.Я. Грабовского, канд. физ.-мат. наук Е.А. Котомина и А.А. Яунберга за многие стимулирующие замечания в ходе обсуждения ряда вопросов по теме работы.

Выражаю искреннюю благодарность Я.Я. Аболиньшу, Д.Э. Аболтыню, Э.А. Бауманису, Л.Г. Григорьевой, А.Р. Кангро, В.Я. Кру-

миньшу, И.Ф.Мелдере и А.Э.Плаудису за помощь в экспериментах и обсуждение изучаемых в работе вопросов. Также благодарю весь коллектив НИИ ФТТ за повседневное обеспечение условий плодотворной творческой работы и постоянную поддержку.

Выражаю глубокую признательность сотрудникам ЛГУ им.П.Стучки, НИИ ФТТ ЛГУ С.Р.Вайсуне, М.В.Коссовиче, А.Э.Лобановиче, Б.Э.Пете и Л.У.Эглите за неоценимую техническую помощь при оформлении работы.

Автор особенно благодарит С.Э.Аболтынь за оформление рисунков.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Лущик Ч.Б., Витол И.К., Эланго М.А. Распад электронных возбуждений на радиационные дефекты в ионных кристаллах. - УФН, 1977, т.122, с.223-251.
2. Sonder E., Sibley W.A. Defect Creation by Radiation in Polar Crystals. - In.: Point Defects in Solids, Ed. J. Crawford and L.M. Slifkin, N.Y. Plenum Press, 1972, vol.1, ch.4, p.201-290.
3. Tale I., Millers D. and Kotomin E. Role of tunneling recombination in radiation-induced F-centre Creation in alkali halide crystals at liquid helium temperatures. - J.Phys.C.: Solid State Phys., 1975, vol.8, p.2366-2375.
4. Itoh N. Interstitial and Trapped Hole Centers in Alkali Halides. - In: Crystal Lattice Defects, Gordon G. and Breach Science Publishers LTD, 1972, vol.3, p.115-143.
5. Delbecq C.J., Toyozawa Y., Yuster P.H. Tunneling Recombination of trapped Electron and Hole in KCl:AgCl and KCl:TlCl. - Phys.Rev.B: Solid State, 1974, vol.9, p.4497-4505.
6. Grabovskis V.J., and Vitols I.K. Tunneling Recombination Luminescence in KBr and KCl. - J.of Lum., 1979, vol.20, p.337-342.
7. Боган Я.Р., Валбис Я.А., Кандерс У.К., Лейнерте-Нейланде И.Ф., Миллерс Д.К., Нагорный А.А. и Тале И.А. - Туннельная люминесценция чистых и активированных Tl и Ag щелочногалогенидных кристаллов. - Изв.АН СССР. Сер.физ., 1973, т.37, с.741-746.
8. Aboltin D.E., Grabovskis V.J., Kangro A.R., Lushchik Ch.B., O'Konnel-Bronin A.A., Vitol I.K., Zirap V.E. Thermally Stimulated and Tunneling Luminescence and Frenkel Defect Recombination in KCl and KBr at 4,2 K to 77 K. - Phys.Stat. Sol.(a), 1978, vol.47, p.667-675.

9. Shvarts K. Photostimulated processes in inorganic materials and optical information storage. - Publishing House "Zinatne", Riga, 1977.
10. Калныньш Р.А., Нагли Л.Е., Плявинь И.К., Тале А.К. Использование преимущественного накопления F⁻центров около активатора для осуществления различного типа оперативных элементов памяти в щелочногалоидных кристаллах. - Тезисы XXVII Совещания по люминесценции (кристаллофосфоры), Эзерниеки, Латв.ССР, 1980, с.114.
11. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Квантовая механика. - М., Физматгиз, 1963, с.702.
12. Lilienfield J.E. Die Röntgenstrahlung der Kathode bei der autoelektronischen Entladung. - Phys.Zs., 1922, vol.23, p.506-511.
13. Oppenheimer J.R. On the quantum theory of the autoelectric field currents. - Proc.Natl.Acad.Sci.USA, 1928, vol.14, No.5, p.363-365.
14. Fowler R.H., Nordheim L. Electron Emission in Intense Electric Fields. - Proc.Roy.Soc.(London), 1928, vol.A119, p.173-181.
15. Gamow G. Zur Quanten theory des Atomkernes. - Zs,Phys., 1928, vol.51, p.204-212.
16. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. - М., "Наука", 1976, с.664.
17. Frenkel J. On the Electrical Resistance of Contacts between Solid Conductors. - Phys.Rev., 1930, vol.36, p.1604-1618.
18. Роуз А. Основы теории фотопроводимости. - М., "Мир", 1966, с.192.
19. Lambe J.J., Klick C.C. Model for Luminescence and Photoconductivity in the Sulfides. - Phys.Rev., 1955, vol.98, p.909-914.

20. Prener J.S., Williams F.E. Associater Donor - Acceptor Luminescent Centers. - Phys.Rev., 1956, vol.101, p.1427.
21. Prener J.S., Williams F.E. Activator Systems in Zinc Sulphide Phosphors. - J.Electrochem. Soc., 1956, vol.103, p.342-346.
22. Mita Y. Luminescent Centers in Lead and Tin-Activated Zinc Sulphide. - J.Phys.Soc.Japan, 1965, vol.20, p.1822-1826.
23. Colbow K. Free-to-Bound and Bound-to-Bound Transitions in CdS. - Phys.Rev., 1966, vol.141, p.742-749.
24. Thomas D.G., Hopfield J.J., Colbow K. Light from Distant Pairs. - In: Intern.Confer. on the Phys.Semiconductors. Radiative Recombination. Paris, Dunon Cie., 1964, p.67-80.
25. Thomas D.G., Hopfield J.J., Augustyniak W.H. Kinetics of Radiative Recombination at Randomly Distributed Donors and Acceptors. - Phys.Rev., 1965, vol.140, p.202-220.
26. Dean P.J. Isoelectronic traps in semiconductors (experimental). - J.of Lum., 1973, vol.7, p.51-78.
27. Dean P.J., Henry C.H., Prosch C.J. Infrared donor-acceptor pair spectra involving the deep oxygen donor in GaP. - Phys. Rev., 1968, vol.168, p.812-816.
28. Thomas D.G., Gershenzon M., Trumbore F.A. Pair spectra and Edge emission in Gallium Phosphide. - Phys.Rev., 1964, vol.33, A, p.269-279.
29. Maeda K. Temperature Dependence of Pair Band Luminescence in GaP. - J.Phys.Chem.Solids, 1965, vol.26, p.595-605.
30. Гросс Е.Ф., Недзвецкий Д.С. Тонкая структура времен затухания полос краевого излучения в GaP. - ДАН СССР, 1963, т.152, с.309-312.
31. Trumbore F.A., Thomas D.G. New Pair Spectra in Gallium Phosphide. - Phys.Rev.A, 1965, vol.137, p.1030-1033.

32. Гросс Е.Ф., Сафаров В.И., Седов В.Е. Люминесценция донорно-акцепторных пар в кристаллах $GaAs$, легированных Cd . - ФТТ, 1965, вып.7, с.2217-2219.
33. Добрего В.П., Рывкин С.М., Шлимак И.С. Излучательная рекомбинация в германии. Тезисы межд.конф. по люминесценции, Будапешт, 1966, т.8, с.77-82.
34. Добрего В.П., Шлимак И.С. Межпримесная излучательная рекомбинация в компенсированном Ge . - Физ.и техн.полупров., 1978, т.1, с.1478-1483.
35. Choyné W.J., Patrick L. Donor-acceptor pair Luminescence in cubic crystals SiC . - Phys.Rev.B, 1970, vol.12, p.4959-5965.
36. Williams F.E. Donor-acceptor pairs in semiconductors. - Phys.Stat.Sol., 1968, vol.25, p.493-512.
37. Ghormley J.A., Levy H.A. Some observation of luminescence of alkali halide crystal subjected to ionizing radiation. - J.Phys.Chem., 1952, vol.56, p.548-554.
38. D.L.Dexter. A theory of sensitized Luminescence in Solids.- J.Chem.Phys., 1953, vol.21, p.836-850.
39. D.L.Dexter. X-Ray coloration of alkali halides. - Phys. Rev., 1954, vol.93, p.985-992.
40. Kabler M.N. Low-Temperature Recombination Luminescence in Alkali Halides Crystals. - Phys.Rev.A, 1964, vol.136, N.5, p.1296-1302.
41. Delbecq C.J., Gosh A.K., Yuster P.H. Trapping and annihilation of electrons and holes in $KCl-TlCl$. Phys.Rev., 1966, vol.151, p.599-609.
42. Delbecq C.J., Gosh A.K., Yuster P.H. Luminescence Processes in X-Irradiated $KCl-Ag$ Crystals. - Bull.Am.Phys.Soc. 1964, vol.6, p.629.

43. Боганс Я.Р., Валбис Я.А., Кандерс У.К., Лейнерте-Нейланде И.Ф., Миллерс Д.К., Нагорный А.А., Тале И.А. Туннельная люминесценция чистых и активированных Тl и Ag щелочногалогенидных кристаллов. - Междунар. конф. по лум., Ленинград, Тезисы докладов, Черногловка, 1972, с.31.
44. Боган Я.Р., Туннельная люминесценция чистых и активированных Тl и Ag щелочногалогенидных кристаллов. - Изв.АН Латв.ССР. Сер.физ.и техн.наук, 1969, т.3, с.57-62.
45. Боган Я.Р., Витол И.К. Исследование дырочных процессов и их роли в радиационных явлениях в щелочногалогенидных кристаллах. - Труды межвуз.конф. по радиац.физике. Томск, 1970, с.120-124.
46. Jaek J., Kink M. Photostimulated Luminescence due to Hole Releases in KCl and NaCl. - Phys.Stat.Sol., 1969, vol.33, p.905-910.
47. Jaek J., Kink M. Tl, Ga and In Centres in KCl crystals. Phys.stat.sol.(b), 1973, vol.56, p.375-381.
48. Kaufman R.G., Hadley W.B. Spatial distribution of trapped electrons and holes produced by x-rays in KJ (TlJ). - J. Chem.Phys., 1967, vol.47, N.1, p.264-267.
49. Murray R.B., Keller F.J. Recombination luminescence from V_K -centers in potassium iodide. - Phys.Rev., 1965, vol. 137A, p.942-948.
50. Ueta M., Color Center Studies in Alkali Halides by pulsed Electron Beam Irradiation. - J.Phys.Soc.Japan, 1967, vol.23, p.1265-1279.
51. Миллерс Д.К., Тале И.А. Определение некоторых параметров туннельной рекомбинации. Учен.зап.Латв.ун-та, 1974, т.208, с.36-42.

52. Пармон В.П., Хайрутдинов Р.Ф., Замираев К.Л. Формальная кинетика туннельных реакций переноса электрона в твердых телах. - ФТТ, 1974, т.16, с.2572-2577.
53. Алукер Э.Д., Лусис Д.Ю., Нестерова С.Н. Экспериментальная оценка верхней границы радиуса туннелирования пар V_k-Tl^0 - центров в кристаллофосфоре KCl-Tl. - Тезисы докл. XXVII Совещ. по люм. (кристаллофосфоры). Эзерниеки, Латв.ССР, 1980, с.70.
54. Schneggs P.A., Jaccard C., Aegerter M. Optically Detected NMR and ENDOR with F Center Pairs in KCl. - Physics Letters, 1973, v.42A, p.369-370.
55. Ruedin Y., Schnegg P.A., Jaccard C. and Aegerter M.A. EPR Optical Detection of F Centre Pairs in Alkali Halides. - Phys.stat.sol.(b), 1973, vol55, p.215-223.
56. Замираев К. Хайрутдинов Р.Ф. Туннельный перенос электрона на большие расстояния в химических реакциях. - Успехи химии, 1978, вып.6, с.992-1017.
57. Rice S.A., Pilling M.J. Tunneling reactions of Solvated electrons in liquids and glasses. - Progress in Reaction Kinetics, 1978, vol.9, pp.93-194.
58. Furlong L.R. Low Temperature Luminescence of Cadmium Sulfide.- Phys.Rev., 1954, vol.95, p.1086.
59. Shafter J., Williams F. Energy Transfer from Donor-Acceptor Pairs to Deep-Lying Impurity States in Semiconductors. - Phys.stat.sol., 1970, vol.38, p.657-663.
60. Грабовский В.Я. Туннельная рекомбинационная люминесценция KV^+ и KCl. Диссертация на соискание ученой степени канд. физ.-мат.наук, Рига, 1979.
61. Витол И.К., Гайлитис А.А., Грабовский В.Я. Закон Беккереля и оценка распределения изолированных пар электронно-дыроч-

- ных центров по расстояниям между их компонентами. - Учен. зап. Латв.ун-та, 1974, т.208, с.16-30.
62. Боганс Я.Р., Лейнерте-Нейланде И.Ф., Кандерс У.К. Фото- и термостимулированная туннельная люминесценция ЩГК (краткая аннотация). - Изв. АН Латв.ССР, сер. физ. и техн.наук, 1972, № 2, с.214.
63. Витол И.К., Грабовскис В.Я. Некоторые проблемы возбуждения и аннигиляции радиационных дефектов в щелочногалогидных кристаллах. - Учен.зап.Латв.ун-та, 1973, т.193, с.44-55.
64. Нагорный А.А., Тале И.А. Туннельная люминесценция в кристалле KI-Tl. - Учен.зап.Латв.ун-та, 1973, т.193, с.27-43.
65. Алукер Э.Д., Лусис Д.Ю., Чернов С.А. Электронные возбуждения и радиолюминесценция щелочногалогидных кристаллов. - Рига, "Зинатне", 1979, с.251.
66. Fowler W.B. Electronic States and Optical Transitions of Color Centers.-In: Physics of Color Centers, Lenigh University, Bethelam, Pennsylvania, 1968, p.54-179.
67. Була В.Г., Тале И.А. Алгоритмизация измерений спектров фракционного термовысвечивания в ионных кристаллах с применением УВМ. - Учен.зап.Латв.ун-та, 1973, т.193, с.197-223.
68. Кулис П.А. Параметры тепловой ионизации атомарных центров активатора в ионных кристаллах. - Учен.зап.Латв.ун-та, 1975, т.245, с.111-121.
69. Витол И.К. Туннельная люминесценция ионных кристаллов. - Тезисы XXV Сов.по лум., 20-23 сент. 1978 г. (кристаллофосфоры). Львов, с.20-22.
70. Боган Я.Р. Знак и кинетика рекомбинационной люминесценции щелочногалогидных кристаллов. - Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, Рига, 1969.

71. Halperin A., Kristianpoller N. Thermoluminescence Spectra of X-Ray Colored KCl Crystals. - J.Opt.Soc.Amer., 1958, vol.48, p.996-1000.
72. Грабовскис В.Я., Витол И.К., Кангро А.Р. Наведенная поляризация туннельной люминесценции в кристаллах KBr и KCl . - Республ.межвузовский сборник научных трудов. Изд. ЛГУ им.П.Стучки, Рига, 1977, вып.6, с.73-81.
73. Ikezawa M., Kojima T. Luminescence of Alkali Halide Crystal Induced by UV-Light at Low Temperature. - J.Phys.Soc. Japan, 1969, vol.27, p.1551-1563.
74. Аболтынь Д.Э., Витол И.К., Гринфелдс А.У. Туннельная люминесценция KCl . - В кн.: Межвуз.сб.научн.трудов, Рига, ЛГУ, 1980, вып.8, с.132-142.
75. Аболтынь Д.Э., Плеханов В.Г. Туннельная и термостимулированная люминесценция кристаллов NaI и $NaCl$. - Опт. и спектр., в печати.
76. Аболтынь Д.Э. Туннельная люминесценция $NaCl$ при возбуждении рентгеновскими лучами. - В кн.: Межвуз. сб.научн.трудов, Рига, ЛГУ, 1979, в.7, с.57-68.
77. Зазубович С.Г. Поляризованная люминесценция парных таллиевых центров в щелочногалогидных кристаллах. - Опт.и спектр., 1970, т.28, с.728-736.
78. Yasuko Toyotomi, Ryumyo Onaka. Trapped Electron Centers and Trapped Hole Centers in Heavily Doped $KCl:Tl$ I. Thermal Glow Study. - J.of Phys.Soc.Japan, 1979, vol.46, p.1861-1876.
79. Боганс Я.Р., Лейнерте-Нейланде И.Ф., Кандерс У.К. Туннельная люминесценция кристаллов $KCl-Tl$ и $NaCl-Ag$. - Учен.зап. Латв.ун-та, 1973, т.193, с.4-16.

80. Зирап В.Э. Электронно-дырочные процессы и рекомбинационная люминесценция в щелочногалогидных кристаллах. - Диссертация на соиск.учен.степени канд.физ.-мат.наук, Рига, 1967.
81. Delbecq C.J., Yuster P.H. Spin polarization quenching of tunneling recombination luminescence in KCl:AgCl crystal.- Phys.Stat.Sol.(b), 1975, vol.68, p.K21-K23.
82. Грабовский В.Я., Витол И.К. Туннельная люминесценция в KBr-KI. - Учен.зап.Латв.ун-та, 1974, т.208, с.31-35.
83. Keller F.J., Murray R.B. Thermal motion of holes in potassium iodide. - Phys.Rev., 1966, vol.150, p.670-679.
84. Murray R.B., Keller F.J. V_K -centres and recombination luminescence in rubidium iodide and sodium iodide. - Phys. Rev., 1967, vol.153, p.993-999.
85. Murray R.B., Bethers P.G. Optically Stimulated orientation of V_K -centers in KCl. - Phys.Rev., 1969, vol.177, N3, p.1269-1273.
86. Timusk T., Martienssen W. Recombination Luminescence in Alkali Halides. - Phys.Rev., 1962, vol.128, p.1656-1663.
87. Валбис Я.А. Люминесценция щелочногалогидных кристаллов, обусловленная излучательной аннигиляцией локализованных экситоноподобных возбуждений. - Диссертация на соиск.учен. степени канд.физ.-мат.наук, Рига, 1966.
88. Боган Я.Р., Витол И.К., Портнов А.А. Применения метода люминесцентного зондирования для изучения дырочных процессов в кристаллофосфорах. - Изв.АН СССР, Сер.физ., 1966, т.30, с.1441-1442.
89. Onaka R., Fujita I., Fukuda A. α -Centers in Alkali Halide Crystals. - J.Phys.Soc.Japan, 1963, vol.18, p.263-267.
90. Витол И.К. Неизотермическая релаксация спектров люминесценции рентгенизированных кристаллов KCl, активированных

ионами Tl^+ , In^+ , Ag^+ , Cu^+ . - Опт. и спектроск., 1960, т.9, с.535-538.

91. Валбис Я.А., Витол И.К., Зирап В.Э. О механизме возбуждения и девозбуждения рекомбинационной люминесценции $\Sigma\Gamma$ кристаллофосфоров. - Изв.АН СССР, Сер.физ., 1961, т.25, с.377-379.
92. Валбис Я.А. Спектры рекомбинационной люминесценции некоторых кристаллов на основе KBr . - Оптика и спектроск., 1963, т.15, с.282-284.
93. Витол И.К., Боган Я.Р., Зирап В.Э. Дырочные центры и дырочные процессы в щелочногалогенидных кристаллах. - Изв.АН СССР, Сер.физ., 1967, т.31, с.854-858.
94. Боган Я.Р., Витол И.К. Условия появления люминесценции локализованных экситонно-подобных возбуждений и природа центров прилипания V_K дефектов в KBr . - In: Preprints Int. Conf. on Lumin., Budapest, 1966, vol.5c., p.136-141.
95. Hadley W.B., Polick S., Kaufman R.G. and Hersh H.N. Energy storage and Luminescence in $KJ:TL$ at Low Temperatures. - J.Chem.Phys., v.45, p.2040-2048.
96. Hersh Herbert N. Color Centers in x-Rayed Potassium Iodide, - Phys.Rev., 1957, vol.105, N1, p.1158-1167.
97. Konitzer John D., Hersh Herbert N. Color Centers in X-Rayed or Ultraviolet irradiated Potassium Iodide. - J.Phys. Chem.Sol., 1966, vol.27, p.771-781.
98. Hersh Herbert N., Cocco Anthony E. Effects of x-irradiation at 78K on Plastically Deformed KI. - Phys.Rev., 1967, vol.111, No.3, p.834-841.
99. Nishimura Hitoshi. Intrinsic Luminescences of KI Crystals. - J.of Phys.Soc.Jap., 1975, vol.38, No.2, p.450-458.

100. Кинк Р.А., Лийдя Г.Г. Низкотемпературная люминесценция чистых и активированных кристаллов KI при возбуждении в экситонной полосе. - ФТТ, 1969, т.II, в.6, с.1641-1649.
101. Тале И.А., Миллерс Д.К., Гайлитис А.А. Туннельная люминесценция в неактивированном KBr. Тезисы XIX Сов. по люм. (кристаллофосфоры), Ч.I, Рига, 1970, с.179-182.
102. Боганс Я.Р., Кандерс У.К., Лейнерте-Нейланде И.Ф. Кинетика фотостимулированной туннельной люминесценции в кристаллах KCl-Tl и NaCl-Ag (краткая аннотация). - Изв.АН Латв.ССР, Сер. физ. и техн. наук, 1973, № 4, с.120.
103. Yuster P.H. and Delbecq C.J. Some Optical Properties of Potassium Iodide-Thallium Phosphors. - J.Chem.Phys., 1953, vol.21, p.892-897.
104. Bogans Y., Kanders U., Leinerte-Neilande I., Millers D., Nagorni A., Tale I. and Valbis J. Tunnel luminescence of pure and Tl- and Ag-doped alkali halide crystals. - In: Luminescence of Crystals, Molecules and Solutions, Ed. F.Williams, 1973, p.621-627.
105. Кандерс У.К., Боганс Я.Р. Кинетика туннельной люминесценции при модулированном возбуждении. - Материалы XXI Совец. по люм. (кристаллофосфоры), Ставрополь, 1973, с.114.
106. Goldstein F.T. F-center Formation by Fundamental Absorption in KI. - Phys.Stat.sol., 1967, vol.20, p.379-393.
107. Лийдя Г.Г. О возбуждении люминесценции в фундаментальных полосах поглощения щелочногалогидных кристаллофосфоров. - Тр. ИФА ЭССР, 1959, т.10, с.196-207.
108. Луцик Ч.Б., Лийдя Г.Г., Соовик Т.А., Яэк И.В. О механизме люминесценции щелочногалогидных кристаллов при возбуждении ультрафиолетовой радиацией и жесткими излучениями. - Тр. ИФА АН ЭССР, 1961, № 15, с.103-126.

109. Kabler M.N., Patterson D.A. Evidence for a triplet state of the self trapped exciton in alkali halide crystals. - *Phys.Rev.Letters*, 1967, vol.19, p.652-654.
110. Miyata T. Exciton structure of NaJ and NaBr. - *J.Phys. Soc.Japan*, 1969, vol.27, p.266-272.
111. Kunz A.B., Lipari N.O. Electronic structure of NaBr. - *Phys.Rev.B*, 1971, vol.4, p.1374-1381.
112. Pong W., Smith J.A. Photoemission studies of NaBr. - *Phys. Rev.B*, 1973, vol.7, p.5410-5411.
113. Денкс В.П., Луцик Н.Е., Луцик Ч.Б., Соовик Т.А. Ионизация и распад экситонов в кристаллах *NaBr*. - *ФТТ*, 1976, т.18, с.2151-2157.
114. Денкс В.П., Луцик Н.Е., Плоом Л.А., Соовик Т.А. Люминесценция и радиационные дефекты в *NaBr* и *NaJ*. - *Тр.ИФ АН ЭССР*, 1976, № 46, с.113-119.
115. Rabin H., Klick C.C. - Formation of F-Centers at Low and Room Temperatures. - *Phys.Rev.*, 1960, vol.117, p.1005-1010.
116. Луцик Ч.Б., Гиндина Р.И., Луцик И.Е., Плоом Л.А., Пунг Л.К., Соовик Х.А., Эланго А.А. Электронные возбуждения и радиационные дефекты в кристаллах *NaBr*. - *Труды ИФ АН ЭССР*, 1975, № 44, с.3-43.
117. Crawford J.H. Radiolysis in Alkali Halides. - *Adv.Phys.*, 1968, vol.17, p.93-151.
118. Зейкатс В.П., Родионов А.Н., Круминь И.Я. Ионная проводимость кристаллов KCl с примесью сульфатионов. - *Межвуз. сб. научн.трудов*, Рига, ЛГУ, 1977, в.6, с.114-126.
119. Delbecq S.J., Hayes W., O'Brien M.C.M., Yuster P.H. Paramagnetic resonance and optical absorption of trapped holes and electrons in irradiated KCl:Ag. - *Proc. Royal Soc.*, 1963, vol.271, p.243-267.

120. Zazubovich S. Luminescence due to trapping of Holes by In^+ and In^+V_c -centres in KCl-In. - Phys.stat.sol.(b), 1972, vol.50, p.785.
121. Витол И.К. Современные представления о механизме рекомбинационной люминесценции щелочногалогидных кристаллофосфоров. - Изв.АН СССР, Сер.физ., 1966, 30, с.564-569.
122. Лущик Ч.Б., Лийдя Г.Г., Яэк И.В., Тийслер Э.С. О механизме рекомбинационной люминесценции активированных щелочногалогидных кристаллов. - Опт.и спектр., 1960, т.9, с.70-76.
123. Золотарев Г.Х., Лущик Ч.Б., Соовик Г.А., Яэк И.В., Эланго М.А. Автолокализация дырок и оптические явления в ионных кристаллах. - Изв.АН СССР, Сер.физ., 1965, т.29, с.36-39.
124. Dreybrodt W., Silber D. Electron Spin Resonance of Tl^{++} Centres in KCl Crystals. - Phys.st.sol., 1967, vol.20, p.337-344.
125. Пунг Л.А., Халдре Ю.Ю. Исследование электронных и дырочных процессов в ионных кристаллах по неизотермической релаксации ЭПР и рекомбинационной люминесценции. - Тр. ИФА АН ЭССР, 1970, № 38, с.50-84.
126. Халдре Ю.Ю. Захват дырок примесными центрами и рекомбинационная люминесценция кристаллов $NaCl-Cu$ и $NaCl-Ag$. - Изв.АН СССР, Сер.физ., 1967, т.31, № 12, с.1970-1972.
127. Пунг Л.А., Халдре Ю.Ю. Исследование электронных и дырочных процессов в кристаллах $KCl-Ag$ и $NaCl-Ag$ методом электронного парамагнитного резонанса. - Изв.АН СССР. Сер.физ., 1967, т.30, № 3, с.1443-1445.
128. Kaufman R.G., Hadley W.B. Excitation of luminescence from $KJ:Tl$ at $5^{\circ}K$. - J.Chem.Phys., 1967, vol.46, N.5, p.1598-1601.

129. Алукер Э.Д., Аксенов О.Е., Романенко Н.Л. Отношение эффективных сечений рекомбинаций на V_K - и Tl^{++} -центрах в KCl-Tl.- Изв.АН Латв.ССР, Сер. физ. и техн. наук, 1969, № 6, с.45-47.
130. Кристофель Н.Н. Теория примесных центров малых радиусов в ионных кристаллах. - М., "Наука", 1974, 336 с.
131. Йосеф Кубы, Лудвик Кугера, Франтишек Аизак, Милослав Дворжак, Ян Мраз. Таблицы совпадений по атомной спектроскопии. 1964, Прага, Изд. Чехословацкая академия наук, с. II36.
132. Кандерс У.К., Боганс Я.Р. Фракционная фотостимулированная туннельная люминесценция и ее применение для определения пространственного распределения дефектов в ШГК. - Учен. зап. ЛГУ, 1975, т.234, с.59-75.
133. Излучательная рекомбинация в полупроводниках (сб. статей) под редакцией Я.Е. Покровского, "Наука", М., 1972, с.304.
134. Боганс Я.Р., Лейнерте-Нейланде И.Ф., Кандерс У.К. Процессы генерации и разрушения пар в ионных кристаллах. - Учен. зап. Латв. ун-та, 1973, т.193, с.138-150.
135. Боганс Я.Р. Роль подвижных V_K -центров и электронов в процессах кинетики туннельной люминесценции щелочногалогидных кристаллов. - Тезисы XIX Сов. по люм. I (кристаллофосфоры), Рига, 1970, с.43-44.
136. Вале Г.К. О механизмах окрашивания кристаллов KCl-Ag рентгеновскими лучами. - Труды ИФА АН ЭССР, 1964, № 28, с.93-110.
137. Осминин В.С. Оптическая делокализация дырок с Tl^{++} -центров в KCl-Tl в зависимости от концентрации активатора. - ФТТ, 1974, т.16, с.560-561.
138. Kabler M.N. Hole Centers in halide lattices. - In: Point defects in solids, New-York, Plenum Press, 1972, p.327-380.
139. Пунг Л.А. Динамика нерелаксированных и автолокализованных дырок в щелочногалогидных кристаллах. - Тр. ИФ АН ЭССР, № 50, 1979, с.7-34.

140. Kink R., Liidja G. Exciton-Induced Color Centre Growth in KBr and KJ Crystals at 5 K. - Phys.stat.sol., 1970, vol.40, p.379-387.
141. Delbecq C.J., Dexter D.L., Yuster P.H. Tunneling Recombination Luminescence Between Ag^0 and Ag^{2+} in KCl:AgCl. - Phys.Rev., 1978, vol.17B, p.4765-4775.
142. Thieband O., Pillound J.J., Aegerter M.A., Jaccard C. Magnetic effects of tunneling recombination luminescence in CsI and KCl doped crystals.- J.de Physique, Colloque C7, suppl. an no12, Tome 37, Dec., 1976, p.C7-169-C7-173.
143. Кандерс У.К. Реставрация пространственного распределения радиационных дефектов в ионных кристаллах по кинетике затухания туннельной люминесценции. - Тезисы докладов XXVII Сов. по люм.(кристаллофосфоры), Эзерниеки, Латв.ССР, 1980, с.61.
144. Бокий Г.Б. Кристаллохимия (изд.третье), - "Наука", М., 1971, с.400.
145. Бокий Г.Б. Введение в кристаллографию,- Изд.МГУ, 1954,с.204.
146. Лущик Ч.Б., Витол И.К., Эланго М.А. Экситонный механизм создания -центров в бездефектных участках ионных кристаллов. - ФТТ, 1968, т.10, с.2754-2759.
147. Лущик Ч.Б. Элементарные механизмы создания радиационных дефектов в ионных кристаллах. - Труды ИФА АН ЭССР, 1972, № 39, с.81-99.
148. Куусманн М.Л., Лийдья Г.Г., Лущик Ч.Б. Люминесценция свободных и автолокализованных экситонов в ионных кристаллах. - Тр.ИФ АН ЭССР, 1976, № 46, с.50-80.
149. Fontana M., W van Sciver. Quenched-in Photoluminescent Color Centers in Na J. - Phys.stat.sol., 1970, vol.37, p.375-380.

150. Plekhanov V.G., O'Connell-Bronin A.A. Polariton emission in LiH, LiD and NaI single crystals. - *Phys.stat.sol.(b)*, 1978, vol.86, N.2, p.k123-k125.
151. Nishimura H., Tanaka I., Miyazaki H. et al. Line Shapes of zero phonon and LO phonon assisted luminescences due to free excitons in KI and RbI. - *J.Phys.Soc.Japan*, 1979, vol.46, N.1, p.123-131.
152. Нокс Р. Теория экситонов. - М., Мир, 1966, 219 с.
153. Лущик Ч.Б., Лийдя Г.Г., Лущик Н.Е. и др. Экситонные механизмы возбуждения люминесценции примесных центров в ионных кристаллах. - *Изв.АН СССР.Сер.физ.*, 1973, т.37, № 2, с.334-340.
154. Миллерс Д.К., Тале И.А., Котомин Е.А. Единый подход к описанию накопления и отжига радиационных дефектов в щелочногалогидных кристаллах. - *Учен.зап. Латв.ун-та*, 1975, т.245, с.24-72.
155. Кандерс У.К. Расчет конфигурационного фактора радиационных дефектов по кинетике затухания туннельной люминесценции с учетом временной зависимости возбуждения. - Тезисы докладов XXVII Сов. по люм.(кристаллофосфоры), Эзерниеки, Латв.ССР, 1980, с.131.
156. Trinkler M.F., and Plyavin I.K. On the Kinetics of the Luminescence in KCl:Tl, KBr:Tl and KJ:Tl. - *Phys.stat.sol.*, 1965, vol.11, p.277-284.
157. Пунг Л.А., Халдре Ю.Ю. Температурная стабильность автолокализованных дырок в некоторых щелочногалогидных монокристаллах. - *Изв.АН СССР, Сер.физ.*, 1966, т.30, с.1446-1447.
158. Goldberg L.S., Meistrich M.L. Optical and electron-spin-resonance studies of the JCl-V_k-center in KCl-J. - *Phys. Rev.*, 1968, vol.172, p.877-885.

159. Schoemaker D. ϵ and hyperfine components of V_K -centers. - Phys.Rev.B., 1973, vol.7, p.786-801.
160. Delbecq C.J., Schoemaker D., Yester P.H. EPR and optical absorption study of BrCl and associated centers in doped KCl crystals. - I-Phys.Rev.B, 1971, vol.3, p.473-487, II - Phys.Rev.B, 1973, vol.7, p.3933-3944.
161. Кинк М.Ф. Электронная и дырочная рекомбинационная люминесценция активированных щелочногалогидных кристаллов при термо- и фотостимуляции.-Диссертация на соискание ученой степени канд.физ.-мат.наук. Тарту, 1971.
162. Brown F.C. Conduction by polarons in ionic Crystals, - In: Point defects in solids. New-York-London, Plenum Press, 1972, p.491-549.
163. Антонов-Романовский В.В. Кинетика фотолюминесценции кристаллофосфоров. - М., "Наука", 1966, с.324.
164. Чандрасекар С. Стохастические проблемы в физике и астрономии. - М., Гос.изд.ИЛ, 1947, с.168.
165. Феллер В. Введение в теорию вероятностей. т.1. - М., "Мир", 1967, с.498.
166. Гайлитис А.А. Обобщение двух моделей, описывающих кинетику туннелирования электронов между локализованными состояниями в кристаллах с учетом моно- и бимолекулярности.- Межвуз.сб.научн.тр., Рига, ЛГУ, 1979, в.7, с.21-38.
167. Kabler M.N., Williams R.T. Vacancy-interstitial pair production via electron-hole recombination in halide crystals. - Phys.Rev.B, 1978, vol.18, No 4, p.1948-1960.
168. Калныньш Р.А. Создание и оптическое освобождение малоинерционных светосумм в активированных щелочногалогидных кристаллах. - Диссертация на соискание учен.степени канд. физ.-мат.наук, Рига, 1975.

169. Kalnin Yu.H. Diffusion Recombination Theory in the Case of Particles Generation. - J.of Lum., 1978, vol.16, p.311-321.
170. Juan Yguerabide. Быстрый и точный метод измерения потоков фототоков в интервале длин волн от 2500 до 6000 Å. - Приб. для научн.исслед., 1968, 7, № 9, с.101.
171. Кандерс У.К. Роль туннельной люминесценции при определении пространственного распределения дефектов в щелочногалоидных кристаллах. - Уч.зап.Латв.ун-та, 1976, т.254, с.57-75.
172. Кандерс У.К. Кинетика нестационарной фракционной туннельной люминесценции. - Республ.межвуз.сб. научных трудов, вып.6, Рига, 1977, с.21-30.
173. Гайлитис А.А. Зависимость кинетики туннельной люминесценции от взаимного распределения электронных и дырочных центров. - Уч.зап.Латв.ун-та, 1973, т.193, с.17-23.
174. Гайлитис А.А. Кинетика туннельной рекомбинации в ионных кристаллах - две модели. - Уч.зап.Латв.ун-та, 1975, т.234, с.42-58.
175. Гайлитис А.А. Вероятность спонтанного излучательного перехода электрона между пространственно-разделенными локализованными состояниями. - Учен.зап.Латв.гос.ун-та, 1975, т.245, с.26-41.
176. Тале И.А., Гайлитис А.А. Изучение диффузии и туннельной рекомбинации возбуждений в кристаллофосфорах автоматизированными неизотермическими методами. - Изв.АН СССР, Сер. физ., 1971, т.35, № 7, с.1336-1339.
177. Гайлитис А.А., Тале И.А. Кинетика туннельной люминесценции изолированных пар электронно-дырочных центров. - В кн.: Материалы XIX сов.по лям.(кристаллофосфоры), Рига, 1970, ч.1, с.64-67.

178. Riehl N. Neue Ergebnisse Über Elektronentraps und "Tunnel-Nacleuchten" in ZnS. - Festkörperprobleme, 1968, Bd.8, s.232-253:
179. Гайлитис А.А. Некоторые вопросы феноменологической теории, моделирования и управления экспериментами в области рекомбинационной люминесценции кристаллофосфоров. - Диссертация на соискание учен.степени канд.физ.-мат.наук. Рига, 1972.
180. Грабовскис В.Я., Витол И.К., Кангро А.Р. Влияние примесей на кинетику парциальных светосумм. - В кн.: Тезисы XXIII Всесоюзной конференции по люминесценции. Кишинев, 1976, с.69.
181. Грабовскис В.Я. Температурная зависимость среднего расстояния между генетическими радиационными дефектами и эффективность накопления F-центров в KГ и KVr. - Учен.зап. Латв.ун-та, 1975, т.245, с.73-81.
182. Ueta M., Kondo Y., Hirai M., Yoshinari. F-Centre Formation in KCl Crystals by Pulsed Electron Beam at 80 K. - J.Phys. Soc.Japan, 1969, vol.26, p.1000-1006.
183. Витол И.К., Гайлитис А.А., Аболтынь Д.Э., Грабовскис В.Я., Кангро А.Р., Чугунов Л.А. Интерпретация и применение закона Беккереля. - В кн.: Тезисы XXIII-й Всес.конф. по люм., Кишинев; 1976, с.8.
184. Тумерман Л.А. Экспериментальные методы исследования быстрых релаксационных процессов. - Успехи физ.наук, 1947, т.33, вып.2, с.218-276.
185. Толстой Н.А., Феофилов П.П. Новый метод исследования релаксационных процессов и его применение к изучению некоторых физических явлений. - Успехи физ.наук, 1950, т.41, вып.1, с.44-107.

186. Бонч-Бруевич А.М. Об измерениях длительности флуоресценции при помощи фазового флуорометра. - Изв. АН СССР. Сер. физ., 1956, т.20, № 5, с.591-602.
187. Tashiro T., Takeuchi S., Saidoh M. and Itoh N. Luminescence Induced by Tunneling Recombination between Neutral Silver Atoms and V_K -Centres in Alkali Halides. - Phys. Stat.sol.(b), 1979, vol.92, p.611-618.
188. Кандерс У.К. Кинетика затухания туннельной рекомбинации в генетических парах и количественная оценка эффекта запоминания длительности возбуждения. - Межвуз. сб. научн. трудов, Рига, ЛГУ, 1980, в.8, с.91-104.
189. Mollenauer L.F. and Baldacchini G. Empirically Determinated Wave Function for the Relaxed Exite State of the F-Center in KJ. - Phys.Rev.Lett., 1972, vol.29, p.465-468.
190. Grabovskis V.J., Vitols I.K. Tunneling Recombination Luminescence in KBr and KCl. - Enlarged Abstracts Int.Conf. on Lum., Paris, France, 1978, p.382-383.
191. Кандерс У.К., Мелдере И.Ф. Аккумуляция туннельной люминесценции в зависимости от дозы возбуждения в KCl и , активированных таллием и серебром. - Межвуз. сб. научн. трудов, Рига, ЛГУ, 1980, в.8, с.105-131.
192. Гайлитис А.А. О приближениях, составляющих основу математической модели при описании кинетики туннельной рекомбинации. - Учен. зап. Латв. ун-та, 1975, т.245, с.3-23.
193. Nagasaka K., Narita S. Effect of Impurity Interaction upon Ionization Energy of Donor Electrons in Germanium.- J.Phys.Soc.Japan, 1975, vol.35, p.797-800.
194. Миллерс Д.К. Исследование роли туннельной рекомбинации в процессах накопления радиационных дефектов в ШГК. - Дисс. на соиск.учен.степени канд.физ.-мат.наук, Рига, 1975.

195. Трикоми Ф. Интегральные уравнения. - ИЛ, М., 1960, с.299.
196. Михлин С.Г. Лекции по линейным интегральным уравнениям. - "Физматгиз", М., 1959, 232 с.
197. Ловитт У.В. Линейные интегральные уравнения. - Гостехиздат, М., 1957, 266 с.
198. Цлаф Л.Я., Вариационные исчисления и интегральные уравнения (справочное руководство). - "Наука", М., 1966, 196 с.
199. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. - "Наука", М., 1974, 224 с.
200. Кандерс У.К., Мелдере И.Ф. Кинетика и температурная зависимость накопления туннельной люминесценции в активированных ШГК при разных дозах возбуждения. - Тезисы докладов 4 Всесоюзного совещания по радиационной физике и химии ионных кристаллов. Рига-Саласпилс, 1978, с.289-290.
201. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я., Думова А.А., Майоров Л.В., Мостовой В.И. Новый метод восстановления истинных спектров. - "Атомная энергия", М., 1965, т.18, с.6-16.
202. Тихонов А.Н. О некорректных задачах линейной алгебры и устойчивом методе их решения. - ДАН СССР, 1965, т.163, с.6-19.
203. Тихонов А.Н. Об устойчивости алгоритмов для решения вырожденных систем линейных алгебраических уравнений. - ЖВМ и МФ, 1965, т.5, с.4-12.
204. Валдате Г.А., Котомин Е.А. Моделирование низкотемпературного накопления F-центров, ограниченного туннельной рекомбинацией. - В кн.: Республ.межвуз.сб.научн.трудов, Рига, ЛГУ, 1977, в.6, с.57-72.
205. Антохин Ю.Т. Аналитический подход к проблеме уравнений I рода. - ДАН СССР, 1966, т.167, с.4-9.

КИНЕТИКА ФРАКЦИОННОЙ ТУННЕЛЬНОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ И ЕЕ ЧАСТОТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Уже Беккерель и вслед за ним другие ученые (см., напр., [184, 185]) использовали АМВ для определения средней длительности $\langle t \rangle$ быстрых релаксационных процессов, в частности, люминесценции. Однако, "τ-метры", действие которых основано на наблюдении от-ветной на АМВ люминесценции, дают удобно интерпретируемые ре-зультаты лишь в некоторых частных случаях. Так, напр., при од-ной элементарной τ-фракции закон затухания люминесценции яв-ляется экспоненциальным, поэтому легко решается обратная зада-ча - по соответствующей кинетике можем установить среднюю дли-тельность τ люминесценции. Таким образом, АМВ применялось для измерения среднего времени жизни возбужденного состояния цен-тров излучения по кинетике внутрицентральной люминесценции [186]. Аналогично можно поступить в случае нескольких далеко отстоя-щих, но сравнимых по интенсивности τ-фракций люминесценции. В общем случае нельзя однозначно восстановить τ-спектр лю-минесценции по кинетике суммарного (интегрального) излучения. Однако, это уже имеет отношение к проблемам обратной задачи (см. гл. 6) и здесь рассматриваться не будет.

В настоящем разделе мы изучим свойства ТЛ при АМВ. Можно сказать, что "τ-метрия" внутрицентрального свечения и ТЛ имеет много общего. Так, туннельную пару с межкомпонентным расстоя-нием r можно представить как возбужденное состояние некоторо-го центра свечения со средним временем жизни $\tau(r)$. Следова-тельно, каждая элементарная r -фракция туннельных пар обуслав-ливает возникновение соответствующей $\tau(r)$ -фракции ТЛ. С помощью соотношения (4.1.1) не трудно перейти от распределения тун-

нелных пар $n^*(r,t)$ на τ -спектр ТЛ и обратно. Отметим, что в случае ТЛ ШГК мы имеем дело с квазинепрерывным τ -спектром излучения. Интегральная ТЛ при АМВ, согласно определению (4.3.1) и (4.3.19) с учетом $\eta(r) \equiv 1$, имеет вид

$$I(t) = \bar{I}(t) + \tilde{I}(t), \quad (\text{П.1.1})$$

где $\bar{I}(t) = \int_0^\infty \bar{n}(r,t) w(r) dr$; $\tilde{I}(t) = \int_0^\infty \tilde{n}(r,t) w(r) dr$.

Интегральная ТЛ (П.1.1) так же как ПР (4.3.19), состоит из двух составляющих: фоновой $\bar{I}(t)$ и переменной $\tilde{I}(t)$. Нетрудно убедиться, что фоновая составляющая соответствует разгоранию и установлению интегральной ТЛ при стационарном возбуждении $J(t) = J_0 H(t)$. Каждая элементарная τ -фракция ТЛ, как это видно из временной зависимости ПР $\bar{n}(r,t)$ устанавливается через время $t \gg \tau(r)$. Переменная составляющая полностью включает в себя только малоинерционные ($\omega\tau(r) \ll 1$) и частично учитывает переходные ($\omega\tau(r) \approx 1$) τ -фракции интегральной ТЛ. Инерционные τ -фракции ТЛ ($\omega\tau(r) \gg 1$) дискриминируются амплитудными множителем $(1 + \omega^2\tau^2)^{-1/2}$. Кроме того, она, как это будет показано, полностью, но с соответствующим запаздыванием, повторяет временную зависимость АМВ. Понятно, что лишь переменная составляющая $\tilde{I}(t)$ заслуживает дальнейшего интереса. Выражение для $\tilde{I}(t)$ упрощается, если вместо r за переменную интегрирования в (4.4.27) выбрать τ . При этом, согласно соотношению (4.1.1), надо подставить $dr = r_0 d\tau/\tau$. После подстановки явного выражения переменного ПР (4.3.21) в (П.1.1) и замены переменных интегрирования получаем выражение для $I(t)$ в виде:

$$\tilde{I}(t) = - \int_0^\infty \mu(\tau) (1 + \omega^2\tau^2)^{-1/2} \cos(\omega t - \arctg \omega\tau), \quad (\text{П.1.2})$$

где $\mu(\tau) \equiv \kappa J_0 \delta r_0 \rho(r(\tau)) / \tau$ - это τ -спектр ТЛ.

В дальнейшем при анализе переменной составляющей ТЛ мы опустим несущественный множитель "-1" перед знаком интеграла в выражении (П.1.2), так как это эквивалентно фазовому сдвигу перемен-

ной составляющей ТЛ на угол π . Легко проверить, что интеграл в (П.1.2) определяет периодическую функцию с таким же периодом, как АМВ. Некоторые преобразования приводят его к виду:

$$I(t) = \tilde{I}_o(\omega) \cos[\omega t - \Phi(\omega)], \quad (\text{П.1.3})$$

где
$$\tilde{I}_o(\omega) = [I_{\perp}^2(\omega) + I_{\parallel}^2(\omega)]^{1/2}, \quad (\text{П.1.4})$$

$$\Phi(\omega) = \text{arctg}[I_{\perp}(\omega)/I_{\parallel}(\omega)], \quad (\text{П.1.5})$$

$$I_{\perp}(\omega) = \int_{\tau_0}^{\infty} M(\tau)(1 + \omega^2 \tau^2)^{-1} \omega \tau d\tau, \quad (\text{П.1.6})$$

$$I_{\parallel}(\omega) = \int_{\tau_0}^{\infty} M(\tau)(1 + \omega^2 \tau^2)^{-1} d\tau. \quad (\text{П.1.7})$$

Из соотношений (П.1.3-П.1.7) следует, что переменная составляющая ТЛ является суммой двух ортогональных проекций $I_{\perp}(\omega)$ и $I_{\parallel}(\omega)$. Покажем, что применение фазочувствительных методов, в частности, синхронного детектирования, позволяет измерить каждую из этих проекций в отдельности. Общее рассмотрение процесса синхронного детектирования с последующим сглаживанием детектированного сигнала во временном интервале $(t - T_c/2, t + T_c/2)$ приводит к формуле

$$\bar{I}(t) = (1/T_c) \int_{t-T_c/2}^{t+T_c/2} \text{sgn}[j(t')] \tilde{I}(t') dt', \quad (\text{П.1.8})$$

где $\bar{I}(t)$ - интенсивность "выпрямленной" переменной составляющей ТЛ; $\text{sgn}[j(t)]$ - знаковая функция, аргументом которой является опорный сигнал $j(t)$; t' - переменная интегрирования; T_c - период сглаживания. Предполагается, что опорный сигнал $j(t)$ в (П.1.8) формируется непосредственно из АМВ и может задерживаться в синхротракте на угол φ относительно АМВ. Так как $j(t)$ должен периодически менять знак, то представим его в виде

$$j(t) = j_o \cos(\omega t - \varphi), \quad (\text{П.1.9})$$

где j_o - амплитуда опорного сигнала. Подставим в формулу (П.1.8) явное выражение переменной составляющей согласно (П.1.3), опорный сигнал (П.1.9), а период сглаживания выберем в виде $T_c = S \cdot 2\pi/\omega$, где $S \gg 1$. Интегрируя теперь переменную составляющую согласно (П.1.8), нетрудно убедиться, что

$$\bar{I}_\varphi(\omega) = (2/\pi) \tilde{I}_0(\omega) \cos[\Phi(\omega) - \varphi] ; \quad (\text{П.І.І0})$$

$\bar{I}_\varphi(\omega)$ - интенсивность ТЛ при данной частоте АМВ после синхронного детектирования. Выражение (П.І.І0) показывает, что переменная составляющая ТЛ при $\dot{P}(r,t) \equiv 0$ после синхронного детектирования не содержит времени и зависит только от частоты АМВ и фазового сдвига между ею и опорным сигналом. Рассмотрим два частных случая: при а) $\varphi = \pi/2$ и б) $\varphi = 0$ из выражения (П.І.І0) получаем соответственно:

$$\bar{I}_{\pi/2}(\omega) = (2/\pi) I_{\perp}(\omega) \quad (\text{П.І.І1})$$

и

$$I_0(\omega) = (2/\pi) I_{\parallel}(\omega). \quad (\text{П.І.І2})$$

Из соотношений (П.І.І1) и (П.І.І2) видим, что учет фазового сдвига несколько сужает обусловленную амплитудным множителем $(1 + \omega^2 \tau^2)^{-1/2}$ область переходных τ -фракций и тем самым повышает τ -избирательность измерения ТЛ. Так, $\bar{I}_0(\omega)$ и $\bar{I}_{\pi/2}(\omega)$ представляют ТЛ, порождаемую ТР в туннельных парах соответственно из областей малоинерционных ($\omega\tau \ll 1$) и исключительно переходных ($\omega\tau \approx 1$) τ -фракций. Инерционные ($\omega\tau \gg 1$) τ -фракции дискриминируются множителем $1/(1 + \omega^2 \tau^2)$. Эти свойства послужили основанием тому, что переменная составляющая ТЛ и их проекции при фиксированном ω в отличие от интегральной ТЛ называются фракционной ТЛ. При варьировании частоты АМВ, выражения (П.І.3-П.І.7) становятся функциями от частоты ω , поэтому они, в свою очередь, носят название частотных характеристик ТЛ.

Кинетика фракционной ТЛ (П.І.2) позволяет более избирательно, по сравнению с интегральной ТЛ, контролировать процессы генерации и распада туннельных пар в зависимости от расстояния между образующими их дефектами. Следует подчеркнуть, что изучение частотных характеристик ТЛ типа (4.4.28) приводит к эффективному способу определения τ -спектра ТЛ и связанного с ним КФ радиационных дефектов (см. прил. 4).

Если условие стационарности (4.3.2) не имеет места, но КФ удовлетворяет неравенству (П.1.1), то кинетика фракционной ТЛ в квазистационарном приближении описывается выражением:

$$\tilde{I}_{\text{кв. ст.}}(t) = - \int_{\tau_0}^{\infty} M(\tau, t') (1 + \omega^2 \tau^2)^{-1/2} \cos(\omega t - \text{arctg} \omega \tau) d\tau, \quad (\text{П.1.13})$$

где $M(\tau, t') = \kappa F_0 \delta n_0 P(r(\tau), t')$,
 которой, согласно (П.1.2) можно получить из (4.4.28) заменой $p(r)$ на $P(r, t')$. Соответствующие частотные характеристики ТЛ также будут изменяться со временем согласно временной зависимости $P(r, t)$.

Приложение 2.

ТУННЕЛЬНАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ АКТИВИРОВАННЫХ Тl и Ag ШГК ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ДОЗАХ ВОЗБУЖДЕНИЯ

Спектры и кривые затухания ТЛ монокристаллов КСl-Тl и $KBr-Ag$ измерены при 80 К. Кинетика затухания ТЛ исследована в интервале времени 1-8000 с, за исключением тех случаев, когда порог чувствительности измерительной аппаратуры не позволял регистрировать очень слабые световые потоки при больших временах затухания после малоинтенсивного возбуждения. Источником возбуждения служила рентгеновская трубка БСВ2-В. Возбуждение образцов осуществлялось одиночными П-образными импульсами длительностью 1-300 с. При облучении образцов напряжение на рентгеновской трубке поддерживали постоянным - 50 ± 1 кВ. Анодный ток менялся от 0,3 до 30 мА. Так как интенсивность рентгеновского излучения пропорциональна анодному току, то это позволило менять интенсивность возбуждения образцов в пределах двух порядков. Дозиметрические оценки показали, что "дозной единице" 1 мАс при наших условиях возбуждения соответствовало в случае КСl 40 рад, а в случае KBr - 80 рад.

Применение полуэмпирического подхода к анализу дозовых ха-

ра характеристик ТЛ, развитого в гл.5, более подробно рассмотрено на примерах KCl-Tl ($[Ti^+] \sim 0,07 \text{ м\%}$) и KBr-Ag ($[Ag^+] \sim 0,004 \text{ м\%}$) [188,191,200]. Напомним, что спектр ТЛ пар $\{Ti^0 - v_k\}$ в KCl-Tl имеет максимум при 2,9 эВ, а спектр ТЛ пар $\{Ag^0 - v_k\}$ в KBr-Ag - при 2,3 эВ [7,79,104]. Кривые затухания ТЛ пар $\{Ti^0 - v_k\}$ в KCl-Tl и пар $\{Ag^0 - v_k\}$ в KBr-Ag измерены соответственно через светофильтры УФС-I и ЖС-18. Отличающаяся термическая стабильность электронных и дырочных центров, участвующих в ТР, позволяет выбрать оптимальную T_B для выделения ТЛ определенных туннельных пар. При изучении эффективности аккумуляции ТЛ пар $\{A^0 - v_k\}$ от дозы мы возбуждали образцы при 100 К. Одинаковость доз в наших экспериментах контролировалась по площади под пиками ТСЛ A^0 - и v_k -центров.

П.2.1. Результаты измерений

а) Параметр $\alpha(t, D)$ при постоянной длительности возбуждения. Чтобы учитывать влияние длительности возбуждения на дозовую характеристику $I(t, D)$ и параметр $\alpha(t, D)$, мы измеряли два семейства кривых затухания ТЛ при длительностях возбуждения $t_{B1} = 3 \text{ с}$ и $t_{B2} = 5 \text{ с}$ соответственно. Дозу облучения образцов мы меняли путем увеличения интенсивности возбуждения. Кривые затухания ТЛ при всех интенсивностях возбуждения приближенно аппроксимируются асимптотическим аналогом закона Беккереля [61]. Тщательный анализ изменений параметра $\alpha(t, D)$ во временном интервале 3-6000 с (рис.П.2.1) показал хорошее согласие с теорией, развитой для модели ИГП при экспоненциальном КФ типа (4.4.19), за исключением области больших времен.

Измерения показывают (см.рис.П.2.1), что параметр $\alpha(t, D_0)$ в начальной стадии затухания ТЛ ($t < 10-30 t_B$) сравнительно быстро возрастает, а дальнейший рост времени приводит к появлению пла-

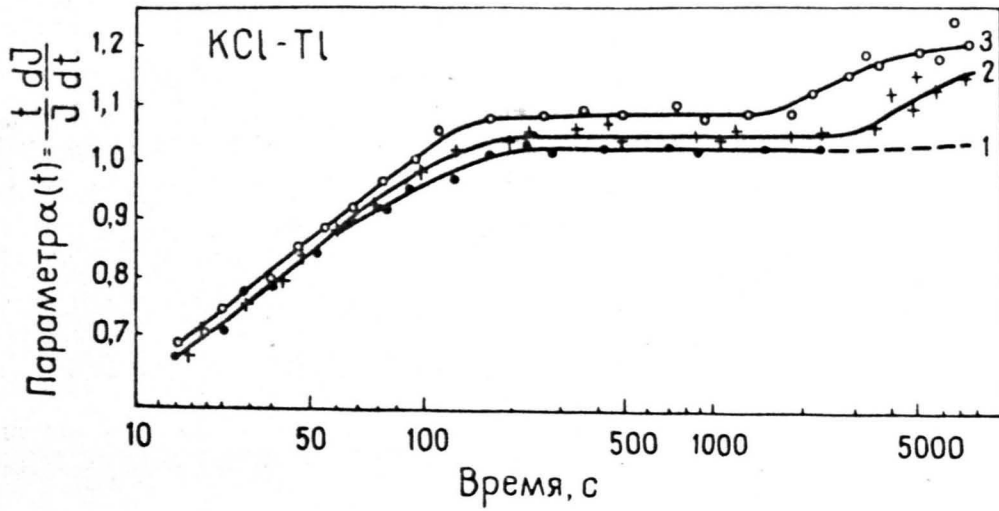


Рис.П.2.І. Временная зависимость параметра $\alpha(t, D_0)$ при различных дозах возбуждения D . Длительность возбуждения t_B во всех случаях постоянная, т.е. 5 с. 1 - $D = 20$ мАс; 2 - $D = 78$ мАс; 3 - $D = 130$ мАс.

то, где изменения $\alpha(t, \mathcal{D}_0)$ не превышают 2-4%. Быстрое возрастание параметра $\alpha(t, \mathcal{D}_0)$ при $t < 10-30 t_B$ обусловлено эффектом ЗДВ. Описанная выше временная зависимость параметра $\alpha(t, \mathcal{D}_0)$ качественно сохраняется при всех интенсивностях возбуждения ($\mathcal{J} = 0,3-30$ мА). Обнаружено, что увеличение интенсивности (дозы) возбуждения приводит к возрастанию параметра $\alpha(t_0, \mathcal{D})$ (см. рис. П.2.1 и П.2.2).

б) Параметр $\alpha(t, \mathcal{D})$ при постоянной интенсивности возбуждения. Аналогичные исследования параметра $\alpha(t, \mathcal{D})$ мы провели в режиме постоянной интенсивности, когда дозу облучения меняли путем варьирования длительности возбуждения. Увеличение длительности возбуждения (дозы) сопровождается уменьшением параметра $\alpha(t_0, \mathcal{D})$. Такая закономерность наблюдалась вплоть до $t = 7-10 t_B$ (рис. П.2.3) при различных интенсивностях возбуждения - 2 мА, 10 мА, 20 мА. При дальнейшем возрастании времени $t > 7-10 t_B$ эффект уменьшения параметра $\alpha(t_0, \mathcal{D})$ с дозой проявляется все слабее. Такое поведение $\alpha(t_0, \mathcal{D})$ несомненно связано с эффектом ЗДВ, так как $\alpha(t, \mathcal{D})$, определенный при одинаковых t/t_B , с дозой возрастает (рис. П.2.4). С увеличением дозы возбуждения (t_B) кривые затухания ТЛ в двойных логарифмических координатах относительно быстрее спрямляются (уже при $t > 10 t_B$) по сравнению с тем, что наблюдалось в серии измерений при постоянной длительности возбуждения. Из изложенного следует, что кинетика затухания ТЛ при больших дозах возбуждения хуже "запоминает" длительность возбуждения, чем при малых. Однако, даже при большой длительности возбуждения ($t_B \approx 200$ с) более пологий спад кривой затухания ТЛ простирается в более широком временном интервале ($\sim 7-8 t_B$), нежели это предполагалось из приближенных оценок в [179] ($\sim 3-4 t_B$).

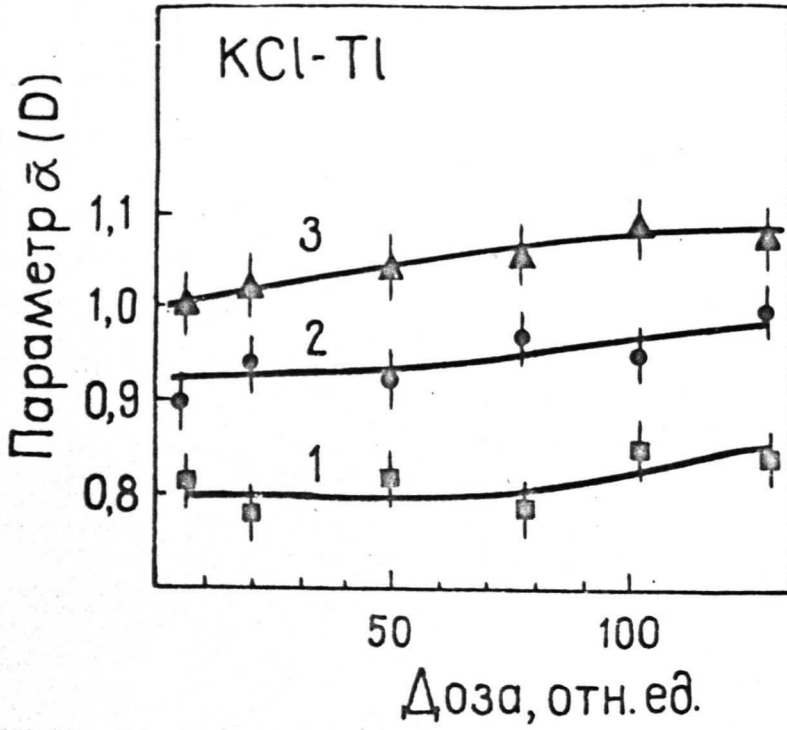


Рис.П.2.2. Зависимость параметра $\alpha(t_0, D)$ от дозы при постоянной длительности возбуждения $t_B = 5$ с. Кривые 1, 2 и 3 получены при измерении параметра $\alpha(t_0, D)$ 40 с, 100 с и 1000 с после прекращения возбуждения соответственно.

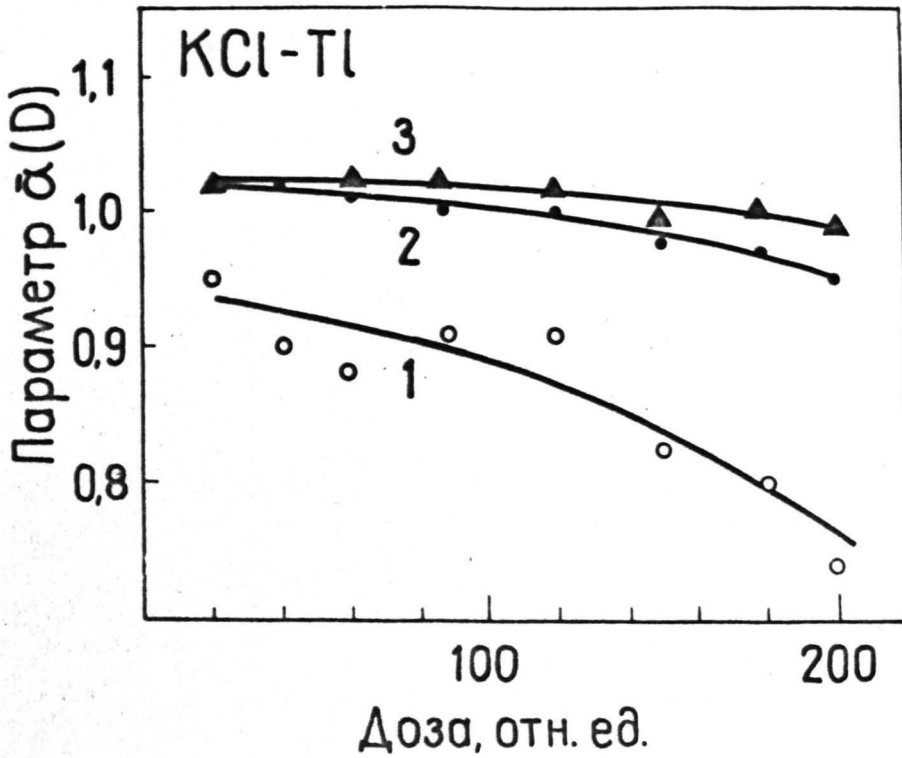


Рис.П.2.3. Зависимость параметра $\alpha(t_0, D)$ от дозы при постоянной интенсивности возбуждения $\mathcal{F} = 2$ мА. Кривые 1, 2 и 3 получены при измерении параметра $\alpha(t_0, D)$ 100 с, 300 с и 1000 с после прекращения возбуждения соответственно.

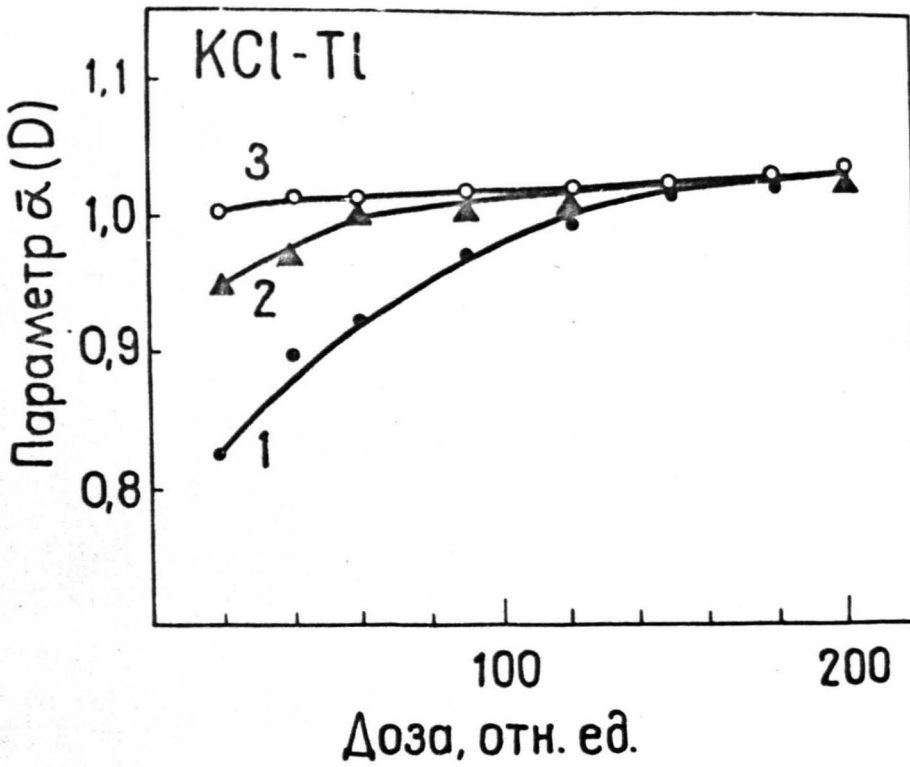


Рис.П.2.4. Зависимость параметра $\alpha(t_0, D)$ от дозы при постоянной интенсивности возбуждения $\mathcal{F} = 2$ мА. Кривые 1, 2 и 3 получены при измерении параметра $\alpha(t/t_B)$ в те моменты времени, в которые приведенное время t' постоянное: $t'_1 = 5$; $t'_2 = 10$; $t'_3 = 20$.

в) Эквивалентность одинаковых доз. Для построения характеристик $I(t_0, \mathcal{D})$ в диапазоне доз $\mathcal{D} \leq 200$ мАс мы использовали те семейства кривых затухания ТЛ, которые обсуждались в подразделах а) и б). Так как одни и те же дозы были получены при отличающихся интенсивностях и длительностях возбуждения, то мы могли убедиться в действии закона эквивалентности доз (5.1.6). Значения $I(t_0, \mathcal{D})$, полученные при одинаковых дозах, совпадают не при всех t_0 , ибо кривые затухания ТЛ даже при одинаковых дозах значительно отличаются в начальной стадии ($t < 10-30 t_B$) и зависят по крайней мере от длительности возбуждения. Наибольшие отличия значений параметра $\alpha(t, \mathcal{D}_0)$, измеренного при одинаковых дозах, составили 9-11% (см.рис.П.2.2-П.2.4), за исключением некоторых значений, которые были явно занижены из-за эффекта ЭДВ. Однако, при $t > 15 t_B$ в пределах ошибок эксперимента равенство (5.1.6) выполняется, совпадение значений $I(t_0, \mathcal{D}), I(t_0, \mathcal{D}'), \dots$ наблюдалось тем лучше, чем меньше отличались значения $\alpha(t_0, \mathcal{D}), \alpha(t_0, \mathcal{D}'), \dots$, где $\mathcal{D} = \mathcal{D}' = \dots$ (рис.П.2.5).

Характеристики $I(t_0, \mathcal{D})$ при 500, 1000 и 2000 с совпадают с точностью до постоянного множителя и представляют собой в пределах ошибок функциональный закон $I(t_0, \mathcal{D}) \sim \mathcal{D}$. Характеристика $I(t_0, \mathcal{D})$ при $t_0 = 200$ с проявляет слабую суперлинейность.

г) $I(t_0, \mathcal{D})$ в широком диапазоне доз. Исследуя аккумуляцию ТЛ в широком диапазоне доз, мы старались выбрать в семействе соответствующих кривых затухания ТЛ такой интервал времени для измерения $I(t_0, \mathcal{D})$, в котором лучше всего выполнялось соотношение (5.1.6). В области небольших доз характеристика $I(t_0, \mathcal{D})$ проявляет слабую суперлинейность (рис.П.2.6), о чем свидетельствует зависимость $I(t_0, \mathcal{D}) \sim \mathcal{D}^\beta$, где $\beta = 1,04 \pm 0,02$. Последовательно увеличивая дозу облучения, параметр $\beta(t_0, \mathcal{D})$ уменьшается и, превысив некоторую критическую дозу \mathcal{D}_k , становится

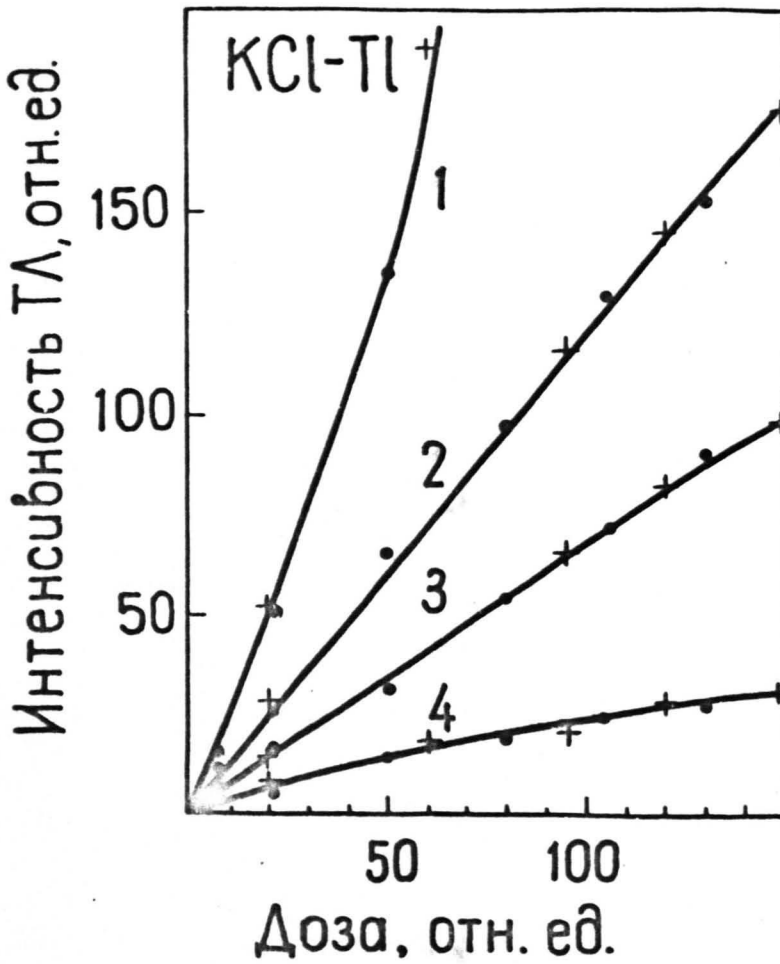


Рис.П.2.5. Эффективность аккумуляции ТЛ в зависимости от дозы возбуждения. Интенсивность ТЛ измерена 200 с (1), 500 с (2), 1000 с (3) и 2000 с (4) после прекращения возбуждения при постоянной длительности $t_B = 5$ с (кружки) и постоянной интенсивности $J = 2$ мА (крестики).

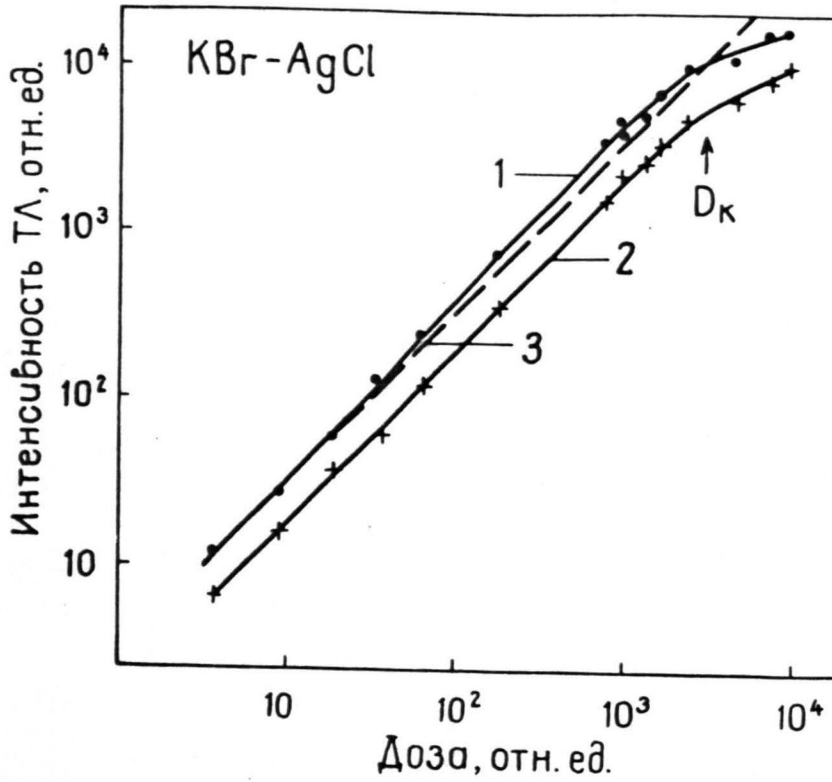


Рис.П.2.6. Эффективность аккумуляции ТЛ в зависимости от дозы возбуждения в широком диапазоне доз. Интенсивность ТЛ измерена 1000 с (1), 2000 с (2) после прекращения возбуждения; 3 - теоретическая кривая $I(t_0, D) \sim D$.

меньше единицы. Длительность возбуждения при дозах $\mathcal{D} > 2000$ мАс менялась в пределах от 100 до 300 с. Так как при малых дозах $\beta = 1$ (см.рис.П.2.5), то параметр $\beta(t_0, \mathcal{D})$ при возрастании дозы увеличивается и проходит через максимум.

П.2.2. Обсуждение результатов

а) Выбор математической модели ПР. По временной зависимости параметра $\alpha(t, \mathcal{D})$ одной индивидуальной кинетики нельзя судить о модели ПР электронных и дырочных центров. Соответствующий выбор или искусственное построение ПР туннельных пар $n^*(r, t)$ позволяет формально описывать в рамках модели ИПП любые нами измеренные кривые затухания ТЛ пар $\{A^0 - V_k\}$. Так, при выборе КФ в виде (4,4.19) можно получить кривые затухания ТЛ, для которых значения $\alpha(\infty)$ изменяются от 0 до 2. Однако изучение временной зависимости параметра $\alpha(t, \mathcal{D})$ и $\beta(t, \mathcal{D})$ при различных дозах возбуждения вносит значительную определенность в выборе математической модели ПР.

В предельном случае изолированных пар, когда туннельная рекомбинация осуществляется лишь в ИПП, параметр $\alpha(t/t_B)$ является неким инвариантом, не зависящим от дозы возбуждения. Кроме того, характеристика $I(t_0, \mathcal{D})$ с учетом эффекта ЗДВ представляет собой функциональный закон, близкий к $I(t_0, \mathcal{D}) \sim \mathcal{D}$ при любом t_0 . В случае модели СПП теоретические расчеты дают (см.п.5.3.2)

$$I(t_0, \mathcal{D}) \sim \mathcal{D}^2.$$

Характеристики $I(t_0, \mathcal{D})$ пар $\{A^0 - V_k\}$ в KCl-Tl и KBr-Ag представляют собой зависимость $I(t_0, \mathcal{D}) \sim \mathcal{D}^\beta$ (см.рис.П.2.5, П.2.6), где β мало отличается от единицы. Параметр $\alpha(t, \mathcal{D})$ в районе плато, (см.рис.5.7) зависит от дозы возбуждения гораздо слабее, чем это предполагает формула (5.3.18). Эти результаты мы считаем довольно веским доводом в пользу того, что в наших образцах с

большой вероятностью реализуется модель ИП.

б) Временная зависимость параметра $\alpha(t, \mathcal{D}_0)$ в случае ТЛ пар $\{A^0 - V_k\}$. Теоретические расчеты параметра $\alpha(t, \mathcal{D}_0)$ в рамках модели ИП (см. п. 4.4) дают хорошее согласие с экспериментально наблюдаемой временной зависимостью $\alpha(t, \mathcal{D}_0)$ (см. рис. П.2.1) при $t \leq 500 t_B$. После установившегося плато из экспоненциального КФ типа (4.4.19) не следовало ожидать повторного быстрого возрастания параметра $\alpha(t, \mathcal{D}_0)$. Для формального объяснения этого феномена в рамках модели ИП мы должны допустить, что ПР, начиная с некоторого $r \simeq r_0 \ln w_0 500 t_B$, с расстоянием убывает быстрее экспоненты. Предположение о резком спаде ПР, по-видимому, неверно из-за того, что повторное быстрое возрастание $\alpha(t, \mathcal{D}_0)$ с увеличением дозы возбуждения начинается уже при меньших временах затухания ТЛ. Таким образом, мы считаем, что поведение параметра $\alpha(t, \mathcal{D}_0)$ в широком временном интервале полностью не укладывается в рамки модели ИП. Предполагается, что обнаруженный повторный подъем параметра $\alpha(t, \mathcal{D}_0)$ вызван переходом от ТР в ИП на случай ТР в СП, когда со сравнительной вероятностью электронный центр может потерять свой электрон по различным каналам рекомбинации.

в) Свойства параметра $\alpha(t_0, \mathcal{D})$ в зависимости от дозы в случае ТЛ пар $\{A^0 - V_k\}$. Параметр $\alpha(t_0, \mathcal{D})$ при увеличении дозы возрастает (см. рис. П.2.2 и П.2.4). Этот эффект более отчетливо выражен в районе плато при больших t , когда доза увеличивается путем изменения интенсивности возбуждения (см. рис. П.2.1 и П.2.2). После учета эффекта ЗДВ аналогичная тенденция наблюдается также с увеличением длительности возбуждения при постоянной интенсивности (см. рис. П.2.4). Такие свойства параметра $\alpha(t_0, \mathcal{D})$ не согласуются с представлением ИП при $\dot{P}(r, t) \equiv 0$ (см. п. 4.3), а, кроме того, $\beta_\infty \gg 1$. В результате приходим к выводу, что на самом де-

ле реализуется некая промежуточная модель, где наряду с ИГП ТР осуществляется также в статистических парах, которые в начальной стадии затухания ТЛ ($t \leq 500 t_B$) являются изолированными. Наблюдаемое возрастание $\alpha(t_0, D)$ с увеличением дозы можно объяснить в рамках модели ИГП при $\dot{P}(r, t) \neq 0$. При этом необходимо учитывать дозовую зависимость КФ, порождаемую статистическими туннельными парами.

г) Механизмы создания туннельных пар. Процессы образования и распада туннельных пар или более сложных комплексов взаимодействующих электронных и дырочных центров весьма сложны и далеко еще не изучены. В рамках модели ИГП создание пар электронно-дырочных центров описывается КФ. В этой связи рассмотрим два механизма - генетический и статистический, формирующие $P(r, t)$ в каждом конкретном случае. В активированных ТІ и Ag ШГК существуют весьма благоприятные условия для реализации генетического механизма создания туннельных пар. Во время рентгеновского возбуждения после распада первичных электронных возбуждений образуются электронно-дырочные пары, дальнейший распад которых приводит к созданию A° - и V_k -центров. Сравнительно высокие концентрации активатора ($[A^+] \sim 0,01-1$ мол.%) обеспечивают эффективный захват электронов недалеко от места рождения. При низких температурах свободный пробег зонной дырки из-за автолокализации получается более коротким, чем для свободного электрона. В результате образуются близкие генетические туннельные пары. При малых плотностях возбуждения КФ действительно не зависит от дозы возбуждения.

Многочисленные экспериментальные данные, однако, показывают (напр., [5.41, 134, 141]), что большая часть созданных A° - и V_k -центров не образует туннельных пар и остается в решетке как изолированные дефекты. Повышая дозу возбуждения, концентрация этих

изолированных A° - и V_k -центров все более возрастает и постепенно растет также их возможность взаимодействовать между собой. В конце концов этот процесс приводит к образованию статистических пар $\{A^\circ - V_k\}$, более близкие из которых опять оказываются изолированными [175, 193]. Эффективность статистического механизма генерации туннельных пар непосредственно зависит от концентрации (дозы облучения) A° - и V_k -центров. Именно вклад статистических близких пар изменяет характер КФ и может вызвать как увеличение параметра $\alpha(t_0, \vartheta)$, так и появление сверхлинейной зависимости $I(t_0, \vartheta)$.

При очень больших дозах возбуждения, когда концентрация A° - и V_k -центров велика, заметно увеличивается вероятность образования агрегатов одноименных дефектов [3, 51, 194]. Создание, например, A° -центра в скоплении V_k -центров образует очень близкую туннельную пару, которая распадается уже во время возбуждения или сразу же после прекращения возбуждения. Определение таких малоинерционных фракций ТЛ ($\tau < 1\text{с}$) не проводилось, поэтому наблюдение затухания ТЛ только в интервале времен 1-8000 с не содержит информации о создании кратковременно живущих туннельных пар и в этом случае может привести к сублинейности $I(t_0, \vartheta)$ (см. рис. 5.12).

Таким образом, мы считаем, что представление о генетическом и статистическом механизмах генерации туннельных пар $\{A^\circ - V_k\}$ дает возможность качественно объяснить те изменения параметра $\alpha(t_0, \vartheta)$, которые возникают при исследовании аккумуляции ТЛ пар $\{A^\circ - V_k\}$ в зависимости от дозы.

На основании изложенных выше экспериментальных результатов коротко сформулируем основные кинетические свойства ТЛ пар $\{A^\circ - V_k\}$.

1) Параметр $\alpha(t, \vartheta)$ экспериментальных кривых затухания ТЛ возрастает при увеличении дозы возбуждения.

2) Более пологий участок в начальной стадии затухания ТЛ, за которой главным образом ответственен эффект ЭДВ, зависит также от дозы возбуждения. При увеличении дозы этот участок сокращается.

3) Временная зависимость параметра $\alpha(t, D_0)$ кривых затухания ТЛ после установившегося плато при $t < 500t_g$ имеет сравнительно резкий подъем, что не следует из модели ИПП. Предполагается, что этот эффект связан с переходом от ТР в парах к ТР в более сложных агрегатах электронных и дырочных центров.

4) При последовательном увеличении дозы возбуждения характеристики $I(t_0, D)$ проходят стадии прямой пропорциональности и слабой суперлинейности ($\beta = 1,04 \pm 0,02$), соответственно. Начиная с некоторой критической дозы, процесс аккумуляции ТЛ замедляется, что приводит к сублинейной зависимости $I(t_0, D)$.

Приложение 3.

ФРАКЦИОННАЯ ТУННЕЛЬНАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ И КОНФИГУРАЦИОННЫЙ ФАКТОР РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ

П.З.І. Исходное уравнение на базе частотных характеристик туннельной люминесценции

АМВ в сочетании с фазочувствительным детектированием переменной составляющей ТЛ позволяет измерить частотную характеристику ТЛ. Временная зависимость частотной характеристики определяется свойствами КФ. Если КФ не зависит от длительности возбуждения ($\dot{P}(r, t) \equiv 0$), то при каждой фиксированной частоте АМВ ω устанавливается некоторое стационарное значение интенсивности переменной составляющей ТЛ \bar{I}_ω . При варьировании частоты АМВ получаем частотную характеристику ТЛ $\bar{I}(\omega)$. Расчет КФ по $\bar{I}(\omega)$ представляет собой содержание метода фракционной ТЛ в стационарном приближении. Однако, в ряде случаев, напр., TI^0 -вспышка

ТЛ (см. гл.3) или ТЛ при высоких дозах возбуждения, когда КФ зависит от длительности возбуждения ($\dot{P}(r,t) \neq 0$), интенсивность ТЛ при той же фиксированной ω зависит от времени: $\bar{I}_\omega = \bar{I}_\omega(t)$. В результате получаем зависящую от времени частотную характеристику $\bar{I}(\omega, t)$ - это случай нестационарной фракционной ТЛ. Если $P(r,t)$ меняется во времени медленно по сравнению с частотной АМВ, то не трудно модифицировать метод стационарной фракционной ТЛ для расчета КФ также по $\bar{I}(\omega, t)$. Следует отметить, что расчет $P(r,t)$ по $\bar{I}(\omega, t)$ без наложения ограничений на скорость изменений КФ физически бессмыслен, поэтому ниже метод фракционной ТЛ будет рассмотрен в стационарном ($\dot{P}(r,t) \equiv 0$) и квазистационарном ($|\dot{P}(r,t)/P(r,t)| \ll \omega$) приближениях.

В гл.4 и прил. I было показано, что в стационарном приближении $p(r)$ и $\bar{I}(\omega)$ связаны между собой уравнением (П. I. 10), которое при учете (П. I. 4-П. I. 7) можно представить в виде

$$\int_0^\infty \tilde{K}_{\varphi,0}(r,\omega) p(r) dr = (\pi/2 \delta x \mathcal{F}_0) \bar{I}_\varphi(\omega), \quad (\text{П. 3. I})$$

где $\tilde{K}_{\varphi,0}(r,\omega) \equiv \{1 + [\omega/w(r)]^2\}^{-1/2} \cos[\text{arctg} \omega/w(r) - \varphi]$;

$\bar{I}_\varphi(\omega)$ - частотная характеристика ТЛ при фиксированном фазовом сдвиге φ между АМВ и опорным сигналом синхротакта; $\varphi \in (0, 2\pi)$. Продифференцировав уравнение (П. 3. I) по ω s -раз,

получаем

$$\int_0^\infty \tilde{K}_{\varphi,s}(r,\omega) p(r) dr = [\pi \text{sgn} z(s) / 2 \delta x \mathcal{F}_0 s!] \omega^s \bar{I}_\varphi^{(s)}(\omega), \quad (\text{П. 3. 2})$$

где $\bar{I}_\varphi^{(s)}(\omega) \equiv d^s \bar{I}_\varphi(\omega) / d\omega^s$; $s = 0, 1, 2, \dots$

Рекуррентные формулы для $\tilde{K}_{\varphi,s}(r,\omega)$ и $z(s)$ зависят от четности s . Для четного $s = 2n$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) имеем

$$\begin{aligned} \text{и } \tilde{K}_{\varphi,2n}(r,\omega) &= \{1 + [\omega/w(r)]^2\}^{-\frac{2n+1}{2}} [\omega/w(r)]^{2n} \cos[(2n+1) \text{arctg} \omega/w(r) - \varphi] \\ z(2n) &= (-1)^n \end{aligned} \quad (\text{П. 3. 3})$$

В свою очередь, для $s = 2n+1$ получаем

$$\begin{aligned} \text{и } \tilde{K}_{\varphi,2n+1}(r,\omega) &= \{1 + [\omega/w(r)]^2\}^{-(n+1)} [\omega/w(r)]^{2n+1} \sin[2(n+1) \text{arctg} \omega/w(r) - \varphi] \\ z(2n+1) &= (-1)^{n+1} \end{aligned} \quad (\text{П. 3. 4})$$

Таким образом, мы опять привели поставленную в п.6.I.I задачу - определение $p(r)$ по $I(\omega)$ к уравнению Фредгольма I-рода. Если ядро $K_{\varphi,s}(r,r')$, соответствующее ядру $\mathcal{R}_{\varphi,s}(r,\omega)$, удовлетворяет требованиям, предъявляемым к аналогу дельта-функции, то приближенное решение уравнения (П.3.2) можно искать методом подобия ядра и дельта-функции. Прежде всего отметим, что согласно (П.3.3) и (П.3.4)

$$\mathcal{R}_{\varphi \pm \pi, s}(r, \omega) = -\mathcal{R}_{\varphi, s}(r, \omega). \quad (\text{П.3.5})$$

Это позволяет область определения $\varphi \in (0, 2\pi)$ сократить на $\varphi \in (0, \pi)$.

Ядро $K_{\varphi,s}(r,r') = \mathcal{R}_{\varphi,s}(r, g_{\varphi,s}^{-1}(r'))$, очевидно, не при всех $\varphi \in (0, \pi)$ будет аналогом дельта-функции. В этой связи на основании свойств аналога дельта-функции можно установить "годные" для нас φ -значения. Переход с $\mathcal{R}_{\varphi,s}(r,\omega)$ на $K_{\varphi,s}(r,r')$ можно осуществить с помощью преобразования "частота-расстояние"

$$r' = g_{\varphi,s}(\omega), \quad (\text{П.3.6})$$

которое находим из уравнения типа (6.2.8). Можно сказать, что эквивалентные ему уравнения для $g_{\varphi,s}(\omega)$ имеют вид

$$\omega/w(r) + \text{tg}\{(2n+1)\text{arctg}\omega/w(r) - \varphi\} = 2n/(2n+1) \{1 + [\omega/w(r)]^2\} w(r)/\omega \quad (\text{П.3.7})$$

для четного $s = 2n$ и

$$\omega/w(r) - \text{ctg}\{2(n+1)\text{arctg}\omega/w(r) - \varphi\} = (2n+1)[2(n+1)]^{-1} \{1 + [\omega/w(r)]^2\} w(r)/\omega \quad (\text{П.3.8})$$

для нечетного $s = 2n+1$. Из трансцендентных уравнений (П.3.7) и (П.3.8) видно, что в общем случае нельзя найти аналитическое выражение для преобразования (П.3.6). Можно показать, что дальнейший анализ $g_{\varphi,s}(\omega)$ и $K_{\varphi,s}(r,r')$ при произвольных $\varphi \in (0, \pi)$ и $s = 0, 1, 2, \dots$ не будет плодотворным и приведет лишь к громоздким формулам. В этой связи ограничимся двумя частными, наиболее важными с физической точки зрения, случаями ($s = 0, 1$).

П.3.2. Построение представления КФ по частотным характеристикам ТЛ

Начнем с рассмотрения ядра $K_{\varphi,0}(r,r')$. Для перехода с $\mathcal{K}_{\varphi,0}(r,\omega)$ на $K_{\varphi,0}(r,r')$, следует найти $g_{\varphi,0}(\omega)$. Согласно (П.3.7) при $\pi = 0$ находим, что

$$r' = g_{\varphi,0}(\omega) = r_0 \ln |(w_0/\omega) \operatorname{tg}(\varphi/2)| \quad (\text{П.3.9})$$

для любого $\varphi \in (0, \pi)$. Формальный анализ (П.3.9) показывает, что при конечных w_0 и ω расстояние r' становится отрицательным для

$$|\varphi| \leq 2 \arctg(\omega/w_0), \quad (\text{П.3.10})$$

что как бы противоречит физическим условиям постановки задачи: $r \geq 0$. Этот результат, однако, еще "не запрещает" малые φ -значения в окрестности $\varphi = 0$. Неравенство (П.3.10) утверждает лишь то, что в окрестности точки $\varphi = 0$ ядро $K_{\varphi,0}(r,r')$ не имеет экстремума в физически доступной области расстояний $r \in (0, \infty)$.

Подстановка $\omega = g_{\varphi,0}^{-1}(r') = w_0 \exp(-r'/r_0) \operatorname{tg}(\varphi/2)$ в $\mathcal{K}_{\varphi,0}(r,\omega)$ приводит к выражению:

$$K_{\varphi,0}(r,r') = \{1 + \exp[2(r-r')/r_0] \operatorname{tg}^2(\varphi/2)\}^{-1/2} \times \cos\{\arctg[\exp[(r-r')/r_0] \cdot \operatorname{tg}(\varphi/2)] - \varphi\}. \quad (\text{П.3.11})$$

Установим те φ -значения, при которых ядро (П.3.11) является аналогом дельта-функции. Путем анализа функции

$$\operatorname{sgn}[\partial K_{\varphi,0}(r,r')/\partial r]$$

можно убедиться, что, действительно, ядро (П.3.11) удовлетворяет требованию (6.2.6). Однако, условие (6.2.7) выполняется не при всех $\varphi \in (0, \pi)$. В этой связи расширим область определения r до $r \in (-\infty, \infty)$ и вычислим пределы $\mathcal{K}_{\varphi,0}(\infty)$ и $\mathcal{K}_{\varphi,0}(-\infty)$.

Можно показать, что

$$\mathcal{K}_{\varphi,0}(\infty) \equiv \lim_{r \rightarrow \infty} [K_{\varphi,0}(r,r')/K_{\varphi,0}(r',r')] = 0 \quad (\text{П.3.12})$$

$$\mathcal{K}_{\varphi,0}(-\infty) \equiv \lim_{r \rightarrow -\infty} [K_{\varphi,0}(r,r')/K_{\varphi,0}(r',r')] = \cos \varphi / \cos^2(\varphi/2). \quad (\text{П.3.13})$$

В самом деле же, $r \in (0, \infty)$, поэтому нас интересует также значение $\mathcal{K}_{\varphi,0}(0)$. Так как в большинстве случаев $\omega/w_0 \ll 1$, то со

сравнительно высокой точностью выполняется равенство $\mathcal{R}_{\varphi,0}(0) \simeq \mathcal{R}_{\varphi,0}(-\infty)$. Таким образом, из (П.3.13) следует, что $K_{\varphi,0}(r,r')$ удовлетворяет условию (6.2.7) исключительно при $\varphi = \pi/2$. Если несколько "смягчить" условие (6.2.7), напр., потребовать, чтобы $\mathcal{R}_{\varphi,0}(-\infty) \leq 1\%$, то дозволённые φ -значения укладываются в интервал $(89,9^\circ - 90,1^\circ)$. Требование $\mathcal{R}_{\varphi,0}(0) = 0$ даёт точку $\varphi = \pi/2 + \omega/\omega_0$. Сделанный выше анализ позволяет заключить, что "годные" для применения метода подобия ядра и дельта-функции φ -значения находятся в узкой окрестности точки $\varphi = \pi/2 + \omega/\omega_0$. В этой связи особое внимание заслуживает ядро $K_{\pi/2,0}(r,r')$, которое и ему соответствующее преобразование (П.3.6) имеют вид

$$K_{\pi/2,0}(r,r') = (1/2) \operatorname{sch}[(r-r')/r_0] \quad (\text{П.3.14})$$

и

$$r' = g_{\pi/2,0}(\omega) = r_0 \ln(\omega_0/\omega). \quad (\text{П.3.15})$$

Следовательно, $p(r)$ находим из уравнения

$$\int_0^\infty \operatorname{sch}[(r-r')/r_0] p(r) dr = (\pi/\delta x \mathcal{F}_0) \bar{I}_{\pi/2}(\omega),$$

откуда, согласно (6.2.13), получаем

$$p(r') \simeq (\pi/\delta x \mathcal{F}_0 r_0) \bar{I}_{\pi/2}(\omega) [\pi - \operatorname{arctg}(\omega/\omega_0)]^{-1}. \quad (\text{П.3.16})$$

Учитывая малость величины $\omega/\omega_0 \ll 1$, с точностью до постоянного множителя, имеем

$$p(r') \simeq \hat{p}(r') = \hat{p}_{\pi/2,0}(r') \simeq \bar{I}_{\pi/2}(\omega)/r_0. \quad (\text{П.3.17})$$

Из (П.3.17) видно, что при $\varphi = \pi/2$ реализуется тот замечательный случай, когда в эксперименте полученная кривая $\bar{I}_{\pi/2}(\omega)$ сама является представлением КФ без всякой предварительной ее математической обработки. Физически это означает, что применение АМВ и подбор сдвига фазы $\varphi = \pi/2$ позволяет наблюдать ТЛ, за которую ответственны лишь несколько элементарных r -фракций туннельных пар из малой r_0 -окрестности точки $r' : r' \in (r' - r_0, r' + r_0)$. Именно с этой точки зрения наблюдаемая при АМВ ТЛ приобрела название "фракционной" в отличие от интегральной ТЛ, за которую ответственна ТР в парах всего ансамбля. Следует напомнить, что

(П.3.16) имеет место для медленно меняющегося по r КФ:

$$|r_0 dp(r)/dr| / p(r) \ll 1 \quad (\text{см. п.6.2.2}).$$

Перейдем к анализу уравнения (П.3.2) в случае $S = I$. Ядро $K_{\varphi,1}(r, r')$, согласно изложенной выше схеме, получаем из $\mathcal{R}_{\varphi,1}(r, \omega)$ при подстановке $\omega = g_{\varphi,1}^{-1}(r')$. Однако, тут возникают некоторые трудности вследствие того, что уравнение $\partial \mathcal{R}_{\varphi,1}(r, \omega) / \partial r = 0$ имеет два корня: ${}^1r' = {}^1g_{\varphi,1}(\omega)$ и ${}^2r' = {}^2g_{\varphi,1}(\omega)$. Следовательно, ядро $K_{\varphi,1}(r, r')$ независимо от примененного преобразования ${}^i g_{\varphi,1}^{-1}(r')$ ($i=1,2$) имеет два экстремума, что приводит к нарушению условия (6.2.6). Согласно (6.7.8) при $\eta = 0$ находим, что

$${}^1r' = {}^1g_{\varphi,1}(\omega) = r_0 \ln |(w_0/\omega) [\cos(\varphi/4) + \sin(\varphi/4)] / [\cos(\varphi/4) - \sin(\varphi/4)]| \quad (\text{П.3.18})$$

и

$${}^2r' = {}^2g_{\varphi,1}(\omega) = r_0 \ln |(w_0/\omega) \operatorname{tg}(\varphi/4)| \quad (\text{П.3.19})$$

для любого $\varphi \in (0, \pi)$. Так же, как в предыдущем случае ($S = 0$), "временно" расширим область определения $r \in (0, \infty)$ на $(-\infty, \infty)$, ибо в окрестности точек $\varphi = 0$ и π расстояние r' , согласно (П.3.18) и (П.3.19), становится отрицательным. Эта "незаконность" в итоге облегчит выявление дозволённых φ -значений. Поочередная формальная подстановка $\omega = {}^1g_{\varphi,1}^{-1}({}^1r')$ и $\omega = {}^2g_{\varphi,1}^{-1}({}^2r')$ в $\mathcal{R}_{\varphi,1}(r, \omega)$ приводит соответственно к ядрам ${}^1K_{\varphi,1}(r, {}^1r')$ и ${}^2K_{\varphi,1}(r, {}^2r')$, которые, хотя и нарушают условие (6.2.6), обладают свойством (6.2.7):

$${}^i \mathcal{R}_{\varphi,1}(\infty) = {}^i \mathcal{R}_{\varphi,1}(-\infty) = 0. \quad (\text{П.3.20})$$

Кроме того, важно отметить, что

$${}^1K_{\varphi,1}({}^1r', {}^1r') \geq 0 \quad \text{и} \quad {}^2K_{\varphi,1}({}^2r', {}^2r') \leq 0 \quad (\text{П.3.21})$$

для любого $\varphi \in (0, \pi)$. Казалось бы, ядра ${}^i K_{\varphi,1}(r, {}^i r')$ никак не соответствуют аналогу дельта-функции. Однако, исключение имеют точки $\varphi = 0, \pi$ и малые их окрестности. Не трудно заметить, что при $\varphi = 0$, согласно (П.3.18) и (П.3.19),

$${}^1r' = {}^1g_{0,1}(\omega) = r_0 \ln(w_0/\omega), \quad (\text{П.3.22})$$

в ${}^2r'$ смещается на " - " бесконечность (${}^2r' \rightarrow -\infty$). На основании (П.3.20) и (П.3.21) можно утверждать, что минимум ядра ${}^1K_{\varphi,1}(r, {}^1r')$ исчезает при $\varphi \rightarrow 0$, а максимум занимает положение соответственно (П.3.22). Аналогичным образом можно убедиться, что при $\varphi \rightarrow \pi$ максимум ядра ${}^2K_{\varphi,1}(r, {}^2r')$ исчезает в " + " бесконечности, а минимум занимает положение бывшего максимума:

$${}^2r' = {}^2g_{\pi,1}(\omega) = {}^1g_{0,1}(\omega) = r_0 \ln(\omega_0/\omega). \quad (\text{П.3.23})$$

Таким образом, мы пришли к выводу, что именно ядро ${}^1K_{\varphi,1}(r, {}^1r')$ при $\varphi \rightarrow 0$ удовлетворит требованиям (6.2.6) и (6.2.7), представляемым к аналогу дельта-функции. Любопытно напомнить, что ${}^1g_{0,1}(\omega) = g_{\pi/2,0}(\omega)$. При подстановке $\eta = 0$ и $\varphi = 0$ в (П.3.4), с учетом (П.3.22), получаем

$$K_{0,1}(r, r') = (1/2) \operatorname{sch}^2[(r-r')/r_0]. \quad (\text{П.3.24})$$

В (П.3.24) индекс "I" в ${}^1r'$ и ${}^1K_{0,1}(r, {}^1r')$ опущен, ибо в дальнейшем будет рассматриваться только ядро ${}^1K_{0,1}(r, {}^1r')$, поэтому недоразумения не возникнут. Подставляя (П.3.24) в (П.3.2), имеем

$$\int_0^{\infty} \operatorname{sch}^2[(r-r')/r_0] p(r) dr = -(\pi/\delta \kappa \mathcal{F}_0) \omega \bar{I}_0^{(1)}(\omega), \quad (\text{П.3.25})$$

откуда, согласно (6.2.13), следует, что

$$p(r') \sim -(\pi/2 \delta \kappa \mathcal{F}_0 r_0) \omega \bar{I}_0^{(1)}(\omega) [1 + (\omega/\omega_0)^2]. \quad (\text{П.3.26})$$

Учитывая в (П.3.26) малость отношения $\omega/\omega_0 \ll 1$ и пренебрегая постоянным масштабным множителем $\pi/\delta \kappa \mathcal{F}_0$, получаем

$$p(r') \sim \hat{p}_{0,1}(r') \approx -(1/r_0) d\bar{I}_0(\omega)/d \ln \omega. \quad (\text{П.3.27})$$

Формулы (П.3.17) и (П.3.27), таким образом, позволяют построить основные представления КФ в стационарном приближении фракционной ТЛ. При этом практический интерес вызывает фазовый сдвиг $\varphi = \pi/2, 3\pi/2$ в случае $S = 0$ и $\varphi = 0, \pi$ в случае $S = I$.

П.3.3. Точность $K(r, r')$ -представлений КФ типа частотных характеристик ТЛ и их проверка "на себя"

Согласно методу подобия ядра и дельта-функции (см. п.6.2.2), точность данного представления определяется как величина, обратная полуширине $\Delta_{1/2, \varphi, s}$ соответствующего ядра - аналога δ -функции. Полуширину ядер типа $K_{\varphi, s}(r, r')$, как обычно, находим из соотношения (6.2.14). В рассматриваемом ниже случае значения $r_{1/2}^{(1)}$ и $r_{1/2}^{(2)}$ вычислим как корни уравнения

$$K_{\varphi, s}(r, r') = (1/2) K_{\varphi, s}(r', r') \quad (\text{П.3.28})$$

для ядер $K_{\pi/2, 0}(r, r')$ и $K_{0, 1}(r, r')$. В результате получаем, что

$$\Delta_{1/2, \pi/2, 0} \approx 1.629 r_0 \quad \text{и} \quad \Delta_{1/2, 0, 1} \approx 1.763 r_0. \quad (\text{П.3.29})$$

Из (6.6.27) и (П.3.29) следует, что точность $R_{\varphi, s}$ принимает значения

$$R_{\pi/2, 0} \approx 0.614 \quad \text{и} \quad R_{0, 1} \approx 0.567. \quad (\text{П.3.30})$$

Важно отметить, что полуширина ядер (6.7.14) и (6.7.24) не зависит от r' , как это имело место в случае затухания ТЛ (6.6.24). Следовательно, точность представлений $\hat{p}_{\pi/2, 0}(r')$ и $\hat{p}_{0, 1}(r')$ в любой точке $r' \in (0, \infty)$ одна и та же. Поэтому в случае фракционной ТЛ r -ось является однородной относительно точности представлений КФ. Точность представлений в конечном счете определяет пространственную разрешающую способность данного метода.

Допустим, что в нашем распоряжении имеется частотная характеристика $\bar{I}_{\varphi}(\omega)$. Спрашивается, применимо ли представление $\hat{p}_{\varphi, s}(r')$ для адекватного отображения $p(r)$. В П.3.2 уже отмечалось, что формулы (П.3.16) и (П.3.26) имеют место при условии, если КФ меняется достаточно медленно. Условие "медленности" $p(r)$, согласно (6.5.1), записывается в виде

$$\left| (r_0 / \hat{p}_{\varphi, s}(r')) (d\hat{p}_{\varphi, s}(r') / dr') \right| \ll R_{\varphi, s}, \quad (\text{П.3.31})$$

где $p(r)$ заменен некоторым его представлением. При подстановке в (П.3.31) вместо $\hat{p}_{\varphi, s}(r')$ явные его выражения (П.3.17)

или (П.3.27) можно оценить применимости $\hat{p}_{\varphi,s}(r')$ по $\bar{I}_{\varphi}(\omega)$.

Так как частотные характеристики ТЛ являются функциями переменной ω , то дифференцирование по r' в (П.3.31) должно быть заменено дифференцированием по ω . Для этого, согласно (П.3.15), имеем равенство

$$d/dr' = -(\omega/r_0) d/d\omega. \quad (\text{П.3.32})$$

Подставляя в (П.3.31) явные $\hat{p}_{\varphi,s}(r')$ выражения (П.3.17) и (П.3.27), и учитывая (П.3.32), получаем

$$|d \ln \bar{I}_{\pi/2}(\omega) / d \ln \omega| \ll R_{\pi/2,0} \approx 0.614 \quad (\text{П.3.33})$$

и

$$|d \ln |d \bar{I}_0(\omega) / d \ln \omega| / d \ln \omega| \ll R_{0,1} \approx 0.567. \quad (\text{П.3.34})$$

Таким образом, критерий типа (П.3.33) или (П.3.34) позволяет по экспериментально измеренной кривой $\bar{I}_{\varphi}(\omega)$ судить о применимости данного представления. Если частотные характеристики ТЛ изменяются быстрее, чем это до这件ено рассматриваемыми критериями, то более резкие скачки или пики истинного КФ в его "образе" $\hat{p}_{\varphi,s}(r')$ будут весьма размытыми по сравнению с "оригиналом" $p(r)$. Другими словами, ограниченное пространственное разрешение метода, разумеется, не позволяет выявить сколь угодно тонкую ($\delta r \ll r_0$) структуру КФ. Критерии (П.3.33) и (П.3.34) можно значительно "смягчить" в случае линейной зависимости $p(r)$ от r , независимо от скорости $(r_0 dp(r)/dr)/p(r)$. Четность ядер $K_{\pi/2,0}(r,r')$ и $K_{0,1}(r,r')$ относительно переменной $\rho = (r - r')$ (см. п.6.5.2) обеспечивает "годность" формул (П.3.17) и (П.3.27) также при сильном нарушении неравенства (П.3.31).

О линейности $p(r)$ можно убедиться по частотной характеристике ТЛ. Условие линейности КФ $dp(r)/dr \equiv \text{const}$ не трудно переписать для $\bar{I}_{\varphi}(\omega)$. Так, например, в случае (П.3.17) имеем

$$d \bar{I}_{\pi/2}(\omega) / d \ln \omega \equiv \text{const}. \quad (\text{П.3.35})$$

Проверку представлений типа $\hat{p}_{\varphi,s}(r')$ "на себя" можно осу-

ществить в полном согласии со схемой, изложенной в п.6.6.4.

Пусть КФ имеет вид (6.6.27). Переменная составляющая фракционной ТЛ в этом случае описывается выражением (прил. I)

$$\tilde{I}(t) = -\delta x \mathcal{F}_0 p(\omega) \int_{r_1}^{r_2} [1 + (\omega/w(r))^2]^{-1/2} \cos\{\omega t - \text{arctg}[\omega/w(r)]\} dr. \quad (\text{П.3.36})$$

Подстановка (П.3.36) в (П.1.8) приводит к частотным характеристикам типа (П.1.10). Легко убедиться, что $\bar{I}_\varphi(\omega)$ имеет вид

$$\bar{I}_{\pi/2}(\omega) = (2\delta x \mathcal{F}_0 p(\omega)/\pi) \int_{r_1}^{r_2} \{1 + [\omega/w(r)]^2\}^{-1} [\omega/w(r)] dr \quad (\text{П.3.37})$$

при $\varphi = \pi/2$ и

$$\bar{I}_0(\omega) = (2\delta x \mathcal{F}_0 p(\omega)/\pi) \int_{r_1}^{r_2} \{1 + [\omega/w(r)]^2\}^{-1} dr \quad (\text{П.3.38})$$

при $\varphi = 0$. Последовательное вычисление интегралов в (П.3.37)

и (П.3.38) позволяет завершить решение прямой задачи - определить функциональный закон частотной характеристики ТЛ по предварительно заданному КФ. Подставляя найденные явные выражения $\bar{I}_\varphi(\omega)$ соответственно в (П.3.16) и (6.3.26), решаем наконец и обратную задачу. В конечном счете имеем

$$\hat{p}_{\pi/2,0}(r') = p(\omega) (2/\pi) \{\text{arctg}(\omega/w_2) - \text{arctg}(\omega/w_1)\} \quad (\text{П.3.39})$$

и

$$\hat{p}_{0,1}(r') = p(\omega) \{(\omega^2 + w_2^2)^{-1} - (\omega^2 + w_1^2)^{-1}\} \omega^2, \quad (\text{П.3.40})$$

где $w_1 = w(r_1)$ и $w_2 = w(r_2)$; $r_1 < r_2$.

С помощью формул, (П.3.39) и (П.3.40), таким образом, можно построить образы $\hat{p}_{\varphi,s}(r')$ оригинала $p(r)$, заданного в виде разности двух функций Хевисайда (6.6.27). Графическое отображение представлений КФ (П.3.39) и (П.3.40) позволяет "визуально" контролировать возможности пространственного разрешения метода стационарной фракционной ТЛ (рис. П.3.1). Интерес вызывает еще один частный случай КФ:

$$p(r) = \begin{cases} p_0 + p_1 \cdot (r - r_1)/r_0, & \text{если } r \in (r_1, r_2) \\ 0, & \text{если } r \notin (r_1, r_2) \end{cases}, \quad (\text{П.3.41})$$

где p_0, p_1 - безразмерные постоянные; $p_0 \geq 0$, $|p_1| \geq 0$. Разумеется, что p_0 и p_1 подобраны такими, чтобы $p(r) \geq 0$ при любом $r \in (r_1, r_2)$. Было бы безобосновано предполагать, что (П.3.41)

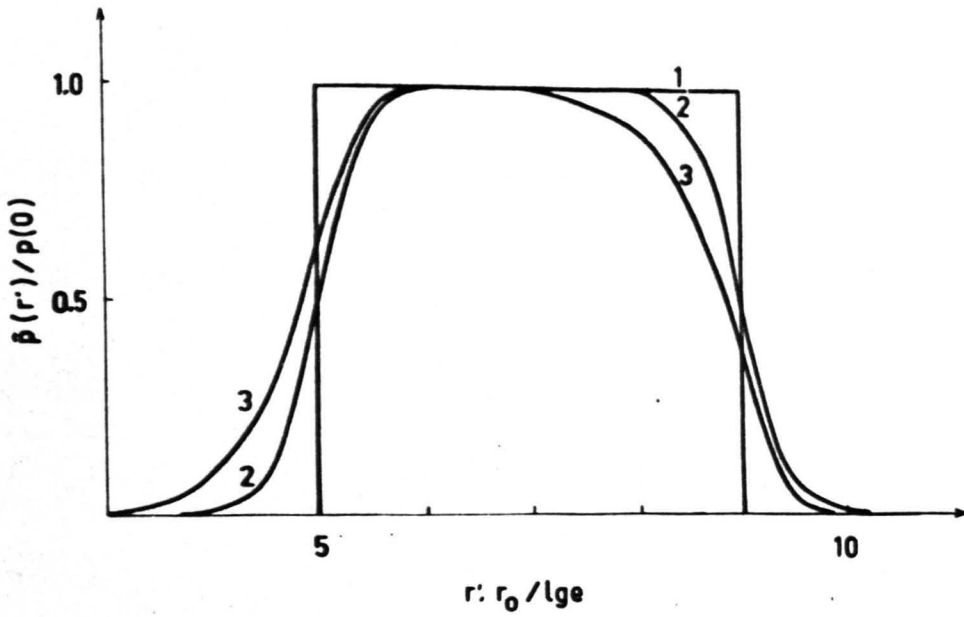


Рис.П.3.1. Представления КФ партнеров генетических пар согласно методу фракционной ТЛ: предварительно заданный КФ - оригинал $\rho(r)$ (1) и его образы $\hat{\rho}_{0,1}(r')$ (2) и $\hat{\rho}_{1,t_B}(r')$ при $r' \gg \rho(t_B)$.

выполняется во всей области определения r : $r_1=0$ и $r_2=\infty$. Однако, в ряде случаев удается реальный КФ аппроксимировать некой линейной функцией типа (П.3.4I) в довольно широких r - интервалах. Именно в этом заключается необходимость рассмотреть КФ типа (П.3.4I). Соответствующее КФ (П.3.4I) представление $\hat{p}_{\pi/2,0}(r')$ нельзя выразить через элементарные функции. Напротив, можно показать, что $\hat{p}_{0,1}(r')$ в этом случае имеет вид

$$\hat{p}_{0,1}(r') = [p_0 - p_1 \ln(w_0/w_1)] \{ [1 + (\omega/w_1)^2]^{-1} - [1 + (\omega/w_2)^2]^{-1} \} +$$

$$+ p_1 \{ [1 + (\omega/w_1)^2]^{-1} \ln(w_0/w_1) - [1 + (\omega/w_2)^2]^{-1} \ln(w_0/w_2) + (1/2) \ln[(\omega^2 + w_1^2)/(\omega^2 + w_2^2)] \},$$

где $w_1 = w(r_1)$, $w_2 = w(r_2)$. Полученный результат убедительно показывает, что "качество" образа КФ (П.3.4I) не зависит от величины p_1 , что характеризует скорость изменения КФ.

Приложение 4.

МЕТОД ФРАКЦИОННОЙ ТУННЛЬНОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В КВАЗИСТАЦИОНАРНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

В прил. I мы рассматривали кинетику фракционной ТЛ в квазистационарном приближении. Пусть выполняется условие квазистационарности (4.3.27). Сравним между собой переменные составляющие ТЛ в стационарном и квазистационарном приближениях:

$$\tilde{I}(t) = -\delta \chi \mathcal{F}_0 \int_0^{\infty} \tilde{p}(r) \{ 1 + [\omega/w(r)]^2 \}^{-1/2} \cos \{ \omega t - \arctg[\omega/w(r)] \} dr, \quad (\text{П.4.1})$$

где $t \in (0, t_{\max})$,

$$\tilde{I}'(t) = -\delta \chi \mathcal{F}_0 \int_0^{\infty} \tilde{P}(r, t') \{ 1 + [\omega/w(r)]^2 \}^{-1/2} \cos \{ \omega t - \arctg[\omega/w(r)] \} dr, \quad (\text{П.4.2})$$

где $t \in (t' - \Delta t, t' + \Delta t)$; $t' \in (0, t_{\max})$; $\Delta t \approx 20\pi/\omega$;

t_{\max} - длительность измерения кинетики фракционной ТЛ. Из формальной аналогии (П.3.43) и (П.3.43) следует, что при выполнении условия квазистационарности (4.3.27) можно разработанный в прил.3 формализм для восстановления КФ в случае стационарной фракционной ТЛ распространить также на случай квази-

стационарной фракционной ТЛ.

Суть квазистационарного приближения заключается в том, что мы положили, чтобы $P(r,t)$ в интервале $(t'-20\pi/\omega, t'+20\pi/\omega)$ слабо изменялся со временем и практически совпадал со значением $P(r,t')$. Так, опираясь на изложенное, напомним по аналогии с выражениями (П.3.17) и (П.3.27) "уточненные" формулы для вычисления КФ в квазистационарном приближении

$$P(r;t') \sim \hat{P}_{\pi/2,0}(r;t') = (1/\delta\chi\mathcal{F}_0 r_0) \bar{I}_{\pi/2}(\omega, t') \quad (\text{П.4.3})$$

и

$$P(r;t') \sim \hat{P}_{0,1}(r;t') = -(\pi/2\delta\chi\mathcal{F}_0 r_0) \partial \bar{I}_0(\omega, t') / \partial \ln \omega. \quad (\text{П.4.4})$$

В формулах (П.4.3) и (П.4.4) $\bar{I}_{\pi/2}(\omega, t')$ и $\bar{I}_0(\omega, t')$ представляют собой частотные характеристики ТЛ, измеренные в некоторый момент времени t' путем синхронного детектирования при сдвиге фаз АМВ и опорного сигнала, соответственно, на $\varphi = \pi/2$ и $\varphi = 0$. Отметим, что формулы (П.4.3), (П.4.4) не содержат текущего времени $t \in (t'-20\pi/\omega, t'+20\pi/\omega)$, но КФ зависит от параметра t' .

Строго говоря, (П.4.3), (П.4.4), действительны лишь в интервале $(t'-20\pi/\omega, t'+20\pi/\omega)$. Однако, при выполнении условия (4.3.27) для любого $t' \in (0, t_{\max})$ мы можем индекс в t' отбросить, ибо момент времени t' выбран совершенно произвольно. Этим мы распространяем квазистационарное решение задачи вычисления КФ на весь временной интервал измерения кинетики нестационарной фракционной ТЛ. Учитывая сказанное, перепишем формулы (П.4.3) и (П.4.4) в "квазистационарном" виде для любого $t \in (0, t_{\max})$

$$\hat{P}_{\pi/2,0}(r;t) = (1/\delta\chi\mathcal{F}_0 r_0) \bar{I}_{\pi/2}(\omega, t) \quad (\text{П.4.5})$$

и

$$\hat{P}_{0,1}(r;t) = -(\pi/2\delta\chi\mathcal{F}_0 r_0) \partial \bar{I}_0(\omega, t) / \partial \ln \omega. \quad (\text{П.4.6})$$

Таким образом, развитый в стационарном приближении формализм в пп. П.3.1-П.3.3 можно в полной мере распространить на

случай зависящих от времени частотных характеристик ТЛ. При этом следует рассматривать частотную характеристику ТЛ в некоторый фиксированный момент времени t_0 . "Перевод" условия квазистационарности (4.3.27) на частотные характеристики ТЛ приводит к неравенствам

$$|[\partial \bar{\Gamma}_{\pi/2}(\omega, t) / \partial t] / \bar{\Gamma}_{\pi/2}(\omega, t)| \ll \omega / 20\pi \quad (\text{П.4.7})$$

и

$$|[\partial^2 \bar{I}_0(\omega, t) / \partial \omega \partial t] / [\partial \bar{I}_0(\omega, t) / \partial \omega]| \ll \omega / 20\pi. \quad (\text{П.4.8})$$