

## 5. ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ ГАЛУЗІ

УДК 535.343.2

*Проф. З.П. Чорній, д-р фіз.-мат. наук;  
проф. В.І. Вайданич, канд. фіз.-мат. наук;*

*ст. викл. І.Б. Пірко, канд. фіз.-мат. наук; асист. М.В. Дячук;*

*доц. В.М. Салапак, канд. фіз.-мат. наук – НЛТУ України, м. Львів*

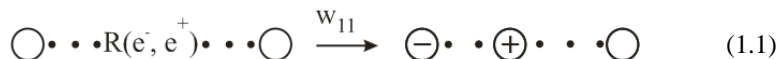
### МЕХАНІЗМ ГЕНЕРАЦІЇ ЦЕНТРІВ ЗАБАРВЛЕННЯ В КРИСТАЛАХ BaCl<sub>2</sub>-Pb ЗА ТЕМПЕРАТУРИ T < 145 K

У моделі лінійного кристала досліджено механізм генерації центрів забарвлення в кристалах BaCl<sub>2</sub>-Pb за умови існування в кристалах автолокалізованих дірок (V<sub>K</sub>-центрів). Показано, що за даних умов у кристалах BaCl<sub>2</sub>-Pb під дією іонізуючої радіації утворюються три типи комплементарних пар центрів забарвлення: [(Pb<sup>+</sup>)-(V<sub>K</sub>)<sup>+</sup>], [(Pb<sup>+</sup>)-(V<sub>KA</sub>)<sup>+</sup>], [(Pb<sup>+</sup>)-(V<sub>K</sub>)<sup>+</sup>-(V<sub>K</sub>)<sup>+</sup>-(Pb<sup>+</sup>)<sup>-</sup>]. Досліджено кінетику їх утворення та граничні концентрації в кристалі, вклад кожної із зазначених пар у сумарне забарвлення кристала. Розраховано ймовірності утворення центрів забарвлення та їх радіаційного висвітлення, енергію іонізуючої радіації, яка необхідна для створення кожної з пар центрів забарвлення.

**Ключові слова:** кристали, радіація, центри забарвлення.

**Вступ.** Відомо [1-3], що радіаційне забарвлення у кристалах галоїдних сполук двоцвалентних металів виникає внаслідок локалізації вільних носіїв заряду на точкових дефектах кристалічної ґратки. У кристалах BaCl<sub>2</sub>-Pb центрами захоплення вільних носіїв заряду виступають іони активатора: (Pb<sup>2+</sup>)<sup>0</sup>-іони. У попередній нашій роботі [4] розглянуто структуру активаторних центрів і механізм їх утворення у кристалах BaCl<sub>2</sub>-Pb за відсутності автолокалізованих дірок у кристалі, тобто за температури T > 145 K. Мета цієї роботи – дослідити специфіку генерації центрів забарвлення за наявності в кристалі стабільних V<sub>K</sub>-центрів (T < 145 K).

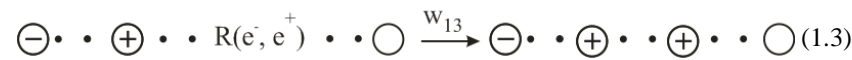
**1. Механізм і структура центрів забарвлення у кристалах BaCl<sub>2</sub>-Pb за наявності стабільних V<sub>K</sub>-центрів.** Експериментально доведено, що автолокалізовані дірки (V<sub>K</sub>-центри) у кристалах BaCl<sub>2</sub> термічно стабільні до температури T ≈ 145 K. Якщо кристал BaCl<sub>2</sub>-Pb опроміювати іонізуючою радіацією при T < 145 K, то в ґратці кристала утворюються три типи комплементарних пар центрів забарвлення: [(Pb<sup>+</sup>)-(V<sub>K</sub>)<sup>+</sup>], [(Pb<sup>+</sup>)-(V<sub>KA</sub>)<sup>+</sup>], [(Pb<sup>+</sup>)-(V<sub>K</sub>)<sup>+</sup>-(V<sub>K</sub>)<sup>+</sup>-(Pb<sup>+</sup>)<sup>-</sup>]. Механізм утворення та висвітлення даних центрів у моделі лінійного кристала можна описати у вигляді такої сукупності рівнянь:



$$+\Delta[V_K] = -\Delta[Pb^{2+}] = w_{11}; \quad (1.1 \text{ a})$$



$$+\Delta[Pb^{2+}] = -\Delta[V_K] = w_{12}; \quad (1.2 \text{ a})$$



$$-\Delta[V_K] = +\Delta[2V_K] = w_{13}; \quad (1.3 \text{ a})$$



$$+\Delta[V_K] = -\Delta[2V_K] = w_{14}; \quad (1.4 \text{ a})$$



$$-\Delta[V_K] = +\Delta[2V_{KA}] = w_{15}; \quad (1.5 \text{ a})$$



$$+\Delta[V_K] = -\Delta[2V_{KA}] = w_{16}; \quad (1.6 \text{ a})$$



$$+\Delta[V_{KA}] = -\Delta[Pb^{2+}] = w_{17}; \quad (1.7 \text{ a})$$



$$-\Delta[V_{KA}] = +\Delta[Pb^{2+}] = w_{18}. \quad (1.8 \text{ a})$$

У рівняннях (1.1)-(1.8) використано такі позначення:  $\bigcirc$  – (Pb<sup>2+</sup>)<sup>0</sup>- іон, який заміщує іон Ba<sup>2+</sup> у ґратці кристала;  $\ominus$  – (Pb<sup>+</sup>)<sup>-</sup> іон, що утворився внаслідок локалізації електрона на домішці (Pb<sup>2+</sup>)<sup>0</sup> + e<sup>-</sup> → (Pb<sup>+</sup>)<sup>-</sup> (позначення в дужках означають зарядовий стан іона "2+" та "+", позначення за рисунками "0" та "-" – зарядовий стан іона відносно ґратки кристала;  $\oplus$  – автолокалізована дірка: (V<sub>K</sub>)<sup>+</sup>-центр;  $\oplus \bigcirc$  – дірка, локалізована біля Pb<sup>2+</sup>-іона: (V<sub>KA</sub>)<sup>+</sup>-центр;  $\cdot \cdot \cdot$  – крапками позначені іони основи кристала; [Pb<sup>2+</sup>], [V<sub>K</sub>], [V<sub>KA</sub>], [2V<sub>K</sub>] – позначення концентрації комплементарних пар дефектів (центрів забарвлення): (Pb<sup>2+</sup>)<sup>0</sup>-(Pb<sup>+</sup>)<sup>-</sup>, (Pb<sup>+</sup>)<sup>-</sup>-(V<sub>K</sub>)<sup>+</sup>, (Pb<sup>+</sup>)<sup>-</sup>-(V<sub>KA</sub>)<sup>+</sup>, (Pb<sup>+</sup>)<sup>-</sup>-(V<sub>K</sub>)<sup>+</sup>-(V<sub>K</sub>)<sup>+</sup>-(Pb<sup>+</sup>)<sup>-</sup>, відповідно; +Δ[] і -Δ[] – зростання чи зменшення концентрацій відповідних пар; w<sub>11</sub> – ймовірність утворення (Pb<sup>+</sup>)<sup>-</sup>-(V<sub>K</sub>)<sup>+</sup> – комплементарної пари при розпаді (e<sup>-</sup>, e<sup>+</sup>)-пари в фрагменті: (Pb<sup>2+</sup> – V<sub>K</sub>)-перетворення (рівняння (1.1) та (1.1 a)); w<sub>12</sub> – ймовірність висвітлення (Pb<sup>+</sup>)<sup>-</sup>-(V<sub>K</sub>)<sup>+</sup>-центрів: V<sub>K</sub> → Pb<sup>2+</sup>-перетворення (рівняння (1.2) та (1.2 a)); w<sub>13</sub> – ймовірність V<sub>K</sub> → 2V<sub>K</sub>-перетворень (рівняння (1.3) та (1.3 a)); w<sub>14</sub> – ймовірність 2V<sub>K</sub> → V<sub>K</sub>-перетворень (рівняння (1.4) та (1.4 a)); w<sub>15</sub> – ймовірність V<sub>K</sub> → V<sub>KA</sub>-перетворень (рівняння (1.5) та (1.5 a)); w<sub>16</sub> – ймовірність V<sub>KA</sub> → V<sub>K</sub>-перетворень (рівняння (1.6) та (1.6 a)); w<sub>17</sub> – ймовірність Pb<sup>2+</sup> → V<sub>KA</sub>-перетворень (рівняння (1.7) та (1.7 a)); w<sub>18</sub> – ймовірність V<sub>KA</sub> → Pb<sup>2+</sup>-перетворень (рівняння (1.8) та (1.8 a)).

Величини ймовірностей  $w_{11}-w_{18}$ , розраховані в моделі одновимірного кристала, наведено в табл. 1.

Табл. 1. Ймовірності утворення центрів забарвлення та їх радіаційне висвітлення

C, мол. %	$w_{11}$	$w_{12}$	$w_{13}$	$w_{14}$	$w_{15}$	$w_{16}$	$w_{17}$	$w_{18}$
0,200	0,1905	0,1317	0,0501	0,8000	0,0841	0,1190	0,1270	0,2738
0,025	0,1725	0,1364	0,0692	0,2813	0,0466	0,2571	0,0314	0,3571

C – концентрація (мол. %  $PbCl_2$ ) у кристалі. Зміст ймовірностей  $w_{11}-w_{18}$  відповідає рівнянням (1.1)-(1.8).

**2. Кінетика радіаційних процесів та їх висвітлення.** Рівняння (1.1)-(1.8) описують механізм генерації комплементарних пар центрів забарвлення та їх радіаційного стимульованого висвітлення. Дані рівняння справедливі незалежно від дози радіації, яку поглинув кристал. Відносно рівнянь (1.1 а)-(1.8 а), то вони справедливі лише у тому випадку, коли концентрація дефектів в лівій частині рівнянь (1.1-1.8) становить 100 % від загальної кількості дефектів в кристалі, тобто  $C=1$ . Рівність  $C=1$  виконується в кристалі лише до його опромінення. У цьому випадку за відсутності центрів забарвлення у ґратці кристала наявні виключно лише іони свинцю. Отже, до опромінення кристала радіацією:

$$[Pb^{2+}]_{(0)} \equiv [(Pb^{2+})^0 - (Pb^{2+})_{(0)}^0] = 1.$$

У процесі опромінення внаслідок локалізації носіїв заряду концентрація  $[Pb^{2+}]_{(0)}$ -іонів зменшується, відповідно концентрація центрів забарвлення зростає. Розрахунок кінетики наростання центрів забарвлення проводять таким чином. Сумарна доза опромінення, яка поглинута кристалом, розбивається на  $n$ -ізодоз. Величина ізодози вибирається такою, щоб вона генерувала в кожному фрагменті іонного ланцюга одну ( $e^-$ ,  $e^+$ )-пару, тобто щоб на кожний фрагмент іонного ланцюга припадала енергія радіації  $E=1,5E_g$ , де  $E_g$  – ширина забороненої зони. Зокрема після поглинання кристала 1 дози радіації ( $n=1$ ) в ньому генеруються  $\Delta[V_K]_{(1)}$  та  $\Delta[V_{KA}]_{(1)}$  – центри забарвлення:

$$\Delta[V_K]_{(1)} = [Pb]_{(0)} \cdot w_{11} = 1 \cdot w_{11} = [V_K]_{(1)}? \quad (2)$$

$$\Delta[V_{KA}]_{(1)} = [Pb]_{(0)} \cdot w_{17} = 1 \cdot w_{17} = [V_{KA}]_{(1)}. \quad (3)$$

Таким чином, після поглинання кристалом 1-шої дози опромінення в ньому утворились центри забарвлення, концентрація яких дорівнює  $[V_K]_{(1)}$  та  $[V_{KA}]_{(1)}$  (рівняння (2), (3)). Відповідно, внаслідок виникнення у ґратці кристала центрів забарвлення концентрація  $Pb^{2+}$ -іонів зменшується і після першого опромінення становить величину:

$$[Pb^{2+}]_{(1)} = [Pb^{2+}]_{(0)} - [V_K]_{(1)} - [V_{KA}]_{(1)}. \quad (4)$$

З врахуванням рівняння (4) вихід реакцій (1.1) та (1.7) після повторного опромінення кристала (поглинання кристала ізодози 2) становить величину:

$$\Delta[V_K]_{(2)} = [Pb^{2+}]_{(1)} \cdot w_{11}. \quad (5)$$

$$\Delta[V_{KA}]_{(2)} = [Pb^{2+}]_{(1)} \cdot w_{17}. \quad (6)$$

Сумарна концентрація утворених центрів забарвлення в даному випадку становить величину:

$$[V_K]_{(2)} = [V_K]_{(1)} + \Delta[V_K]_{(2)}, \quad (7)$$

$$[V_{KA}]_{(2)} = [V_{KA}]_{(1)} + \Delta[V_{KA}]_{(2)}, \quad (8)$$

а концентрація  $Pb^{2+}$ -іонів в забарвленому кристалі:

$$[Pb^{2+}]_{(2)} = [Pb^{2+}]_{(1)} - [V_K]_{(2)} - [V_{KA}]_{(2)}. \quad (9)$$

Рівняння (2)-(9) ілюструють спосіб розрахунків, в основу якого покладено метод послідовних наближень. Будь-яку дозу поглинутої кристалом радіації можна представити як суму  $n$ -ізодоз радіації, кожна з яких генерує в кристалі центри забарвлення. Їх концентрацію розраховують так:

$$+\Delta[V_K]_{(n)} = [Pb^{2+}]_{(n-1)} \cdot w_{11} = -\Delta[Pb^{2+}]_{(n)}; \quad (1.1,б)$$

$$-\Delta[V_K]_{(n)} = [V_K]_{(n-1)} \cdot w_{12} = +\Delta[Pb^{2+}]_{(n)}; \quad (1.2,б)$$

$$|-\Delta[V_K]_{(n)}| = [V_K]_{(n-1)} \cdot w_{13} = \Delta[2V_K]_{(n)}; \quad (1.3,б)$$

$$\Delta[V_K]_{(n)} = [2V_K]_{(n-1)} \cdot w_{14} = |-\Delta[2V_K]_{(n)}|; \quad (1.4,б)$$

$$|-\Delta[V_K]_{(n)}| = [V_K]_{(n-1)} \cdot w_{15} = \Delta[V_{KA}]_{(n)}; \quad (1.5,б)$$

$$\Delta[V_K]_{(n)} = [V_{KA}]_{(n-1)} \cdot w_{16} = |-\Delta[V_{KA}]_{(n)}|; \quad (1.6,б)$$

$$\Delta[V_K]_{(n)} = [Pb^{2+}]_{(n-1)} \cdot w_{17} = |-\Delta[Pb]_{(n)}|; \quad (1.7,б)$$

$$|-\Delta[V_{KA}]_{(n)}| = [V_{KA}]_{(n-1)} \cdot w_{18} = \Delta[Pb^{2+}]_{(n)}. \quad (1.8,б)$$

У рівняннях (1.1,б)-(1.8,б) використано такі позначення:  $\Delta[V_K]_{(n)}$ ,  $\Delta[2V_K]_{(n)}$ ,  $\Delta[V_{KA}]_{(n)}$  – відносна (до загального числа структурних дефектів) концентрація створених  $n$ -ною дозою опромінення відповідних центрів забарвлення;  $-\Delta[V_K]_{(n)}$ ,  $-\Delta[2V_K]_{(n)}$ ,  $-\Delta[V_{KA}]_{(n)}$  – відносна концентрація центрів забарвлення висвітлених  $n$ -ною дозою радіації.

Радіаційне утворення центрів забарвлення в кристалах  $BaCl_2-Pb$  є наслідком локалізації носіїв заряду на іонах свинцю. Тому в процесі опромінення концентрації  $[Pb^{2+}]$ -іонів зменшується, а відповідно концентрація центрів забарвлення у кристалі зростає. При цьому сумарна концентрація  $[Pb^{2+}]$ -іонів і центрів забарвлення залишається незмінною:

$$[Pb^{2+}]_{(n)} + [V_K]_{(n)} + [2V_K]_{(n)} + [V_{KA}]_{(n)}, \quad (10)$$

де:  $n=0, 1, 2, \dots, N$  – число ізодоз ( $e^-, e^+$ )-пар на фрагмент іонного ланцюга.

Концентрації центрів забарвлення, які містить кристал після n-ізодоз опромінення, визначають такими рівняннями:

$$[V_K]_{(n)} = \sum_{n=1}^N \sum_{i=1.1}^{1.6} \Delta[V_K]_{(n)(i)}, \quad (11)$$

де i – число способів виникнення V<sub>K</sub>-центрів та їх знебарвлення (рівняння (1.1)-(1.6)).

$$[2V_K]_{(n)} = \sum_{n=1}^N \sum_{i=1.3}^{1.4} \Delta[2V_K]_{(n)(i)}, \quad (12)$$

$$[2V_{KA}]_{(n)} = \sum_{n=1}^N \sum_{i=1.5}^{1.8} \Delta[V_{KA}]_{(n)(i)}. \quad (13)$$

**3. Розрахунок кінетичних кривих наростання центрів забарвлення та їх висвічування.** В основу розрахунків покладені рівняння (1.1,б)-(1.8,б). Результати розрахунків наведено в табл. 2-4 і представлено на рис. 1.

Табл. 2. Величина вкладу процесів, що описуються рівняннями (1.1)-(1.6) в утворенні V<sub>K</sub>-центрів

n	+Δ[V <sub>K</sub> ] <sub>1</sub>	-Δ[V <sub>K</sub> ] <sub>2</sub>	Δ[V <sub>K</sub> ] <sub>3</sub>	Δ[V <sub>K</sub> ] <sub>4</sub>	Δ[V <sub>K</sub> ] <sub>5</sub>	Δ[V <sub>K</sub> ] <sub>6</sub>	Δ[V <sub>K</sub> ] <sub>i</sub>
1	0,1905	-	-	-	-	-	0,1905
2	0,1300	-0,0251	-0,0095	-	-0,0160	0,0151	0,0945
3	0,1001	-0,0375	-0,0143	0,0076	-0,0240	0,0214	0,0533
4	0,0849	-0,0446	-0,0169	0,0130	-0,0285	0,0238	0,0317
5	0,0768	-0,0487	-0,0183	0,0161	-0,0311	0,0246	0,0192
6	0,0725	-0,0513	-0,0195	0,0180	-0,0327	0,0247	0,0117
7	0,0699	-0,0528	-0,0201	0,0192	-0,0337	0,0247	0,0072
8	0,0688	-0,0537	-0,0204	0,0199	-0,0343	0,0245	0,0048
9	0,0679	-0,0544	-0,0207	0,0203	-0,0347	0,0244	0,0028

концентрація [V<sub>K</sub>]-центрів, нормована на одиницю; Δ[V<sub>K</sub>]<sub>1</sub> – концентрація V<sub>K</sub>-центрів, що утворилися в кристалі при опроміненні n-ою дозою радіації (вклад реакції 1.1 в забарвлення кристала), Δ[V<sub>K</sub>]<sub>2</sub> – вклад реакції 1.2 і т.д. ΔV<sub>K(n)</sub> = ∑<sub>i=1</sub><sup>6</sup> Δ[V<sub>K</sub>]<sub>i</sub> – сумарний вклад реакцій (1.1)-(1.6) в забарвлення. C=0,2 мол. % PbCl<sub>2</sub>.

Табл. 3. Величина вкладу процесів, що описуються рівняннями (1.1)-(1.6) в утворенні [V<sub>KA</sub>]-центрів

n	Δ[V <sub>KA</sub> ] <sub>1</sub>	Δ[V <sub>KA</sub> ] <sub>2</sub>	Δ[V <sub>KA</sub> ] <sub>3</sub>	Δ[V <sub>KA</sub> ] <sub>4</sub>	Δ[V <sub>KA</sub> ] <sub>(n)</sub>
1	0,1270				0,1270
2	0,0867	-0,0348	0,0160	-0,0151	0,0528
3	0,0668	-0,0492	0,0240	-0,0214	0,0202
4	0,0568	-0,0548	0,0285	-0,0238	0,0067
5	0,0512	-0,0566	0,0311	-0,0246	0,0011
6	0,0483	-0,0569	0,0327	-0,0247	-0,0006
7	0,0466	-0,0567	0,0337	-0,0247	-0,0011
8	0,0458	-0,0564	0,0343	-0,0245	-0,0008
9	0,0453	-0,0562	0,0347	-0,0244	-0,0006

Δ[V<sub>KA</sub>]<sub>1</sub>, Δ[V<sub>KA</sub>]<sub>2</sub>, Δ[V<sub>KA</sub>]<sub>3</sub>, Δ[V<sub>KA</sub>]<sub>4</sub> відображають вклад в забарвлення кристала реакцій (1.7), (1.8), (1.5), (1.6) відповідно.

Табл. 4. Величина вкладу процесів, що описуються рівняннями (1.1)-(1.6) в утворенні [2V<sub>K</sub>]-центрів

n	Δ[2V <sub>K</sub> ] <sub>1</sub>	Δ[2V <sub>K</sub> ] <sub>2</sub>	Δ[2V <sub>K</sub> ] <sub>(n)</sub>
2	0,0095	-	0,0095
3	0,0143	-0,0076	0,0067
4	0,0169	-0,0130	0,0039
5	0,0185	-0,0161	0,0024
6	0,0195	-0,0180	0,0015
7	0,0201	-0,0192	0,0009
8	0,0204	-0,0199	0,0005
9	0,0207	-0,0203	0,0004

Δ[2V<sub>K</sub>]<sub>1</sub> і Δ[2V<sub>K</sub>]<sub>2</sub> – вклад реакцій (1.3) та (1.4) у механізм генерації [2V<sub>K</sub>]-центрів.

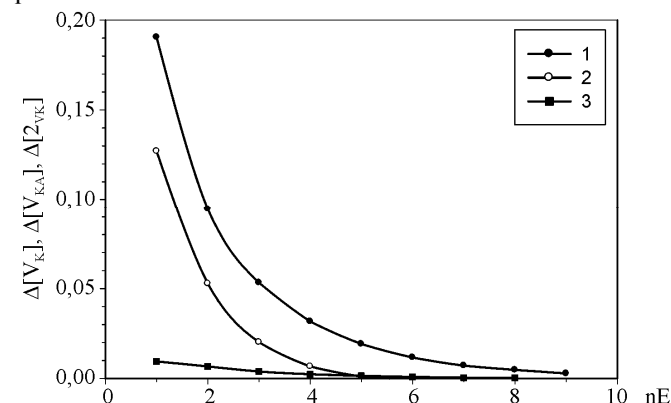


Рис. 1. Залежність ефективності генерації центрів забарвлення від дози опромінення: 1 – концентрація [(Pb<sup>+</sup>)-V<sub>K</sub>]<sup>+</sup>; 2 – [(Pb<sup>+</sup>)-V<sub>KA</sub>]<sup>+</sup>; 3 – [(Pb<sup>+</sup>)-V<sub>K</sub>]<sup>+</sup>-(V<sub>K</sub>)<sup>+</sup>-(Pb<sup>+</sup>)<sup>+</sup>]-центрів. Кристал BaCl<sub>2</sub>-0,2 мол. % PbCl<sub>2</sub>. E – доза опромінення; E=1,5E<sub>g</sub> – ізодоза радіації; E<sub>g</sub> – ширина забороненої зони кристала; n = 1, 2, ..., N.

**4. Кінетика нагромадження центрів забарвлення.** З даних, наведених на рис. 1, випливає, що ефективність генерації центрів забарвлення в кристалах BaCl<sub>2</sub>-Pb із збільшенням дози опромінення спадає. Це означає, що число центрів забарвлення (нормоване на одиницю), які генерує в кристалі n-на доза радіації, із збільшенням числа зменшується (див. напр. значення Δ[V<sub>K</sub>]<sub>1</sub> табл. 2, Δ[V<sub>KA</sub>]<sub>1</sub> табл. 3). З іншого боку, в міру збільшення дози опромінення концентрація центрів забарвлення зростає, відповідно збільшується висвітлювальна дія радіації (див. напр. значення Δ[V<sub>K</sub>]<sub>2</sub>, Δ[V<sub>K</sub>]<sub>3</sub>, Δ[V<sub>K</sub>]<sub>5</sub> з табл. 2). За певних доз опромінення настає динамічна рівновага, коли число центрів забарвлення, яке генерує в кристалі радіація, стає співрозмірним з числом центрів забарвлення, які висвітлює радіація – забарвлення кристала досягає свого насичення.

Криві накопичення центрів забарвлення розраховувались за формулами (10)-(12). Результати розрахунків наведено в табл. 5, 6 та проілюстровано на рис. 2 і 3.

Табл. 5. Кінетика наростання центрів забарвлення в кристалах  $BaCl_2$ -0,2 мол. %  $PbCl_2$

n	$[Pb^{2+}]$	$[V_K]$	$[V_{KA}]$	$[2V_K]$
0	1,0000	-	-	-
1	0,6825	0,1905	0,1270	-
2	0,5257	0,2850	0,1798	0,0095
3	0,4455	0,3383	0,2000	0,0162
4	0,4032	0,3700	0,2067	0,0201
5	0,3805	0,3892	0,2078	0,0225
6	0,3679	0,4009	0,2072	0,0240
7	0,3609	0,4081	0,2061	0,0249
8	0,3564	0,4129	0,2053	0,0254
9	0,3538	0,4157	0,2047	0,0258

Табл. 6. Кінетика нагромадження центрів забарвлення в кристалах  $BaCl_2$ -0,025 мол. %  $PbCl_2$

n	$[Pb^{2+}]$	$[V_K]$	$[V_{KA}]$	$[2V_K]$
0	1			
1	0,7961	0,1725	0,0314	
2	0,6524	0,2825	0,0532	0,0119
3	0,5500	0,3540	0,0679	0,0281
4	0,4763	0,4015	0,0775	0,0447
5	0,4230	0,4336	0,0835	0,0599
6	0,3839	0,4558	0,0872	0,0731
7	0,3553	0,4713	0,0894	0,0840
8	0,3335	0,4823	0,0912	0,0930
9	0,3180	0,4902	0,0916	0,1002
10	0,3063	0,4961	0,0917	0,1059
11	0,2974	0,5006	0,0917	0,1103
12	0,2909	0,5036	0,0916	0,1139

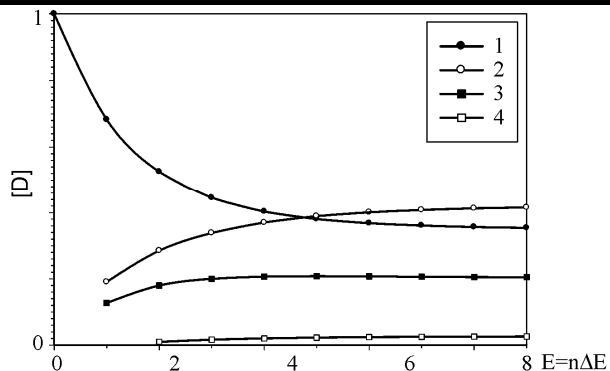


Рис. 2. Кінетика радіаційного руйнування  $[Pb^{2+}]$ -центрів і нагромадження центрів забарвлення в кристалах  $BaCl_2$ -0,2 мол. %  $PbCl_2$ : 1 –  $[Pb^{2+}]$ ; 2 –  $[V_K]$ ; 3 –  $[V_{KA}]$ ; 4 –  $[2V_K]$

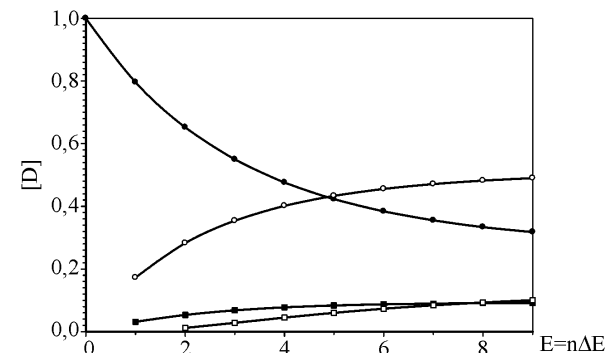


Рис. 3. Кінетика радіаційного руйнування  $[Pb^{2+}]$ -центрів і нагромадження центрів забарвлення в кристалах  $BaCl_2$ -0,025 мол. %  $PbCl_2$ : 1 –  $[Pb^{2+}]$ ; 2 –  $[V_K]$ ; 3 –  $[V_{KA}]$ ; 4 –  $[2V_K]$

## 5. Результати досліджень

**5.1. Граничні концентрації центрів забарвлення.** Практична задача радіаційної фізики – це цільовий пошук радіаційно надстійких і надчутливих матеріалів. Основними об'єктами досліджень є лужно-галоїдні кристали. Серед класу лужно-галоїдних кристалів виявлено радіаційно стійкі матеріали (NaJ, CsJ), які знайшли широке застосування в сцинтиляційній техніці, і радіаційно чутливі матеріали, зокрема кристали KCl, для яких концентрація центрів забарвлення може досягати величини  $n=10^{18}$  1/см<sup>3</sup>.

Результати розрахунків цієї роботи (табл. 5, 6) дають змогу обчислити граничні концентрації центрів забарвлення в кристалах  $BaCl_2$ -Pb. Результати розрахунків наведено в табл. 7.

Табл. 7. Концентрація центрів забарвлення в кристалах  $BaCl_2$ -Pb

C, мол. %	$[V_K]$	$[V_{KA}]$	$[2V_K]$
0,025	$6,3 \cdot 10^{17}$	$1,1 \cdot 10^{17}$	$1,4 \cdot 10^{17}$
0,200	$4,2 \cdot 10^{18}$	$2,0 \cdot 10^{18}$	$2,6 \cdot 10^{17}$

Із результатів, наведених в табл. 7, випливає, що в кристалах  $BaCl_2$ -Pb, опромінених за низьких температур, основними центрами забарвлення є  $[(Pb^+)-(V_K)^+]$ -комплементарні пари. Вклад активаторних центрів забарвлення  $[(Pb^+)-(V_{KA})^+]$ -пар є істотним лише у високолегованих кристалах і спадає із зменшенням вмісту активатора. Парні центри забарвлення  $[(Pb^+)-(V_K)^+-(V_K)^+-(Pb^+)]$  утворюються в кристалах з малим вмістом активатора, в цьому випадку їх концентрація перевищує концентрацію активаторних центрів забарвлення.

Високолеговані кристали  $BaCl_2$ -Pb за низьких температур є радіаційно надчутливими матеріалами. Гранична концентрація центрів забарвлення в них на порядок вища порівняно з кристалами KCl, які є еталонними об'єктами радіаційної фізики.

**5.2. Енергія, що витрачається на утворення в кристалах однієї пари центрів забарвлення.** У лінійній моделі іонного кристала розраховано величину енергії радіації, яку необхідно затратити, щоб створити пару центрів забарвлення:

$$E_1 = \frac{1,5E_g}{w_{11}}, E_2 = \frac{1,5E_g}{w_{17}}, E_3 = \frac{1,5E_g}{w_{13}}, \quad (14)$$

де:  $E_1, E_2, E_3$  – енергія, яка витрачається для створення  $V_K, V_{KA}, 2V_{KA}$ -центрів, відповідно;  $E_g$  – ширина забороненої зони кристала;  $w_{11}, w_{17}, w_{13}$  – значення імовірностей (табл. 1). Розраховані значення величин  $E$  наведено в табл. 8.

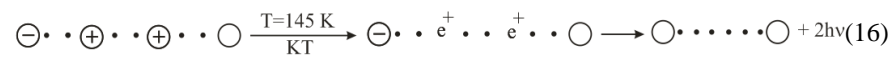
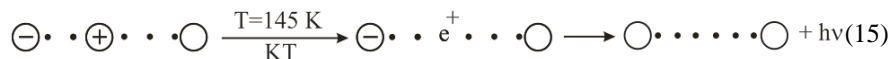
**Табл. 8. Енергія ( $E_1, E_2, E_3$ ) радіації, яка витрачається для створення пари центрів забарвлення ( $V_K, V_{KA}, 2V_K$ ) відповідно**

C, мол. %	$E_1$ (eB)	$E_2$ (eB)	$E_3$ (eB)
0,025	52,2	287	130
0,200	47,2	70,8	180

Із наведених в табл. 8 даних варто зазначити високу ефективність утворення  $V_K$ -центрів у кристалах  $BaCl_2-Pb$ : при релаксації кожної п'ятої ( $e^-, e^+$ )-пари в середньому генерується в ґратці кристала одна  $[(Pb^{2+})^-(V_K)^+]$ -комплементарна пара. Друга істотна особливість генерації  $V_K$ -центрів полягає в тому, що енергія утворення  $[(Pb^{2+})^-(V_K)^+]$ -пари практично не залежить від концентрації активатора.

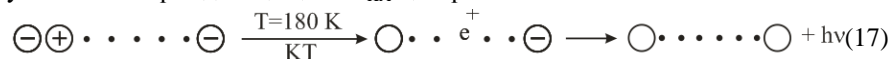
**5.3. Термічне знебарвлення кристалів  $BaCl_2-Pb$ .** За низьких температур іонізуюча радіація генерує в кристалах  $BaCl_2-Pb$  центри забарвлення, які термічно стабільні до температур  $T \approx 140$  К. За вищих температур наявна термодисоціація діркових центрів і кристал знебарвлюється. Враховуючи структуру діркових центрів, термічне знебарвлення відбувається в два етапи.

Перший етап зумовлений термодисоціацією  $V_K$ -центрів ( $T=145$  К). За цієї температури дірки стають мобільними і рекомбінують на  $(Pb^{2+})$ -іонах, що зумовлює термічне знебарвлення  $V_K$ -смуги поглинання:



де:  $\circ$  –  $(Pb^{2+})^0$ -іон;  $\ominus$  –  $(Pb^+)^-$ -іон;  $\oplus$  – автолокалізована дірка,  $e^+$  – мобільна дірка. Рівняння (15) описує термічне знебарвлення  $V_K$ -центрів та  $2V_K$ -центрів (парних).

Після прогріву забарвленого кристала до температур  $T > 145$  К забарвлений кристал містить лише  $V_{KA}$ -центри. Другий етап термічного знебарвлення обумовлений термодисоціацією  $V_{KA}$ -центрів:



де  $\ominus \oplus$  –  $V_{KA}$ -центр.

У моделі лінійного кристала розраховано вклад  $V_K, V_{KA}$ -центрів в сумарне поглинання кристалів. Результати розрахунків наведено в табл. 9.

Як видно з табл. 9, оптична густина в максимумі  $V_{KA}$ -смуги поглинання становить 11 % і 30 % від сумарного поглинання діркових центрів у кристалах з  $C=0,025$  мол. % та 0,2 мол. %  $PbCl_2$  відповідно. Одержані величини свідчать про те, що основними центрами забарвлення (за  $T < 140$  К) є автолокалізовані дірки.

**Табл. 9. Радіаційні параметри кристалів  $BaCl_2-Pb$**

C, мол. %	$D_{(VK+VKA)}$	$D_{(VKA)}$	$I_{(VK)}$	$I_{(VKA)}$	$[V_{KA}]_1$	$[V_{KA}]_2$	$\frac{[V_{KA}]_2}{[V_{KA}]_1}$
0,025	1,000	0,1139	1,000	0,1252	$1,1 \cdot 10^{17}$	$1,55 \cdot 10^{17}$	1,4
0,200	1,000	0,3046	1,000	0,4378	$2,0 \cdot 10^{18}$	$3,0 \cdot 10^{18}$	1,5

$D_{(VK+VKA)}$  – сумарна оптична густина (нормована на одиницю) в складі поглиняючих  $V_K$  і  $V_{KA}$ -центрів ( $T < 140$  К);  $D_{(VKA)}$  – оптична густина в максимумі  $V_{KA}$ -смуги ( $145 \text{ K} < T < 180 \text{ K}$ );  $I_{(VK)}$  та  $I_{(VKA)}$  – інтенсивність (нормована на одиницю) максимумів термічного висвічування, зумовлених термодисоціацією  $V_K$  і  $V_{KA}$ -центрів.

**5.4. Термостимульована люмінесценція (ТСЛ).** Термічне знебарвлення кристалів (рівняння 14-16) супроводжується рекомбінаційним світінням. Під час нагрівання забарвлених кристалів  $BaCl_2-Pb$  виникають два максимуми термічного висвічування за 145 К та 180 К, які генетично пов'язані з термодисоціацією  $V_K$  і  $V_{KA}$ -центрів відповідно.

У табл. 9 наведено (нормовані на одиницю) інтенсивності обох максимумів. Із даних табл. 9 випливає, що в кристалах  $BaCl_2-Pb$  домінує максимум ТСЛ за 145 К ( $I_{(VK)}$ ). Вклад ( $I_{(V_{KA})}$ )-центрів у запасену світлосуму зменшується із зменшенням вмісту активатора в кристалі.

### Література

- Chornij Z.P. Relaxation properties of defect complexes in  $SrCl_2-Tl^+$  crystals / Z.P. Chornij, S.I. Kachan, I.B. Pirko and other. // Functional materials. – 2004. – Vol. 11. – Pp. 696-701.
- Чорний З.П.  $F_2$ -центри в кристалах флюоритів, легованих лужними металами / З.П. Чорний, І.Б. Пірко, В.М. Салапак, М.Р. Панасюк // Журнал фізичних досліджень : зб. наук.-техн. праць. – 2012. – Т. 16, № 1. – С. 1602-1-1602-8.
- Чорний З.П. Центри забарвлення в кристалах  $CaF_2-Na$  і  $CaF_2-Li$ . I. Результати експериментальних досліджень / З.П. Чорний, І.Б. Пірко, В.М. Салапак, М.В. Дячук // Фізика і хімія твердого тіла : зб. наук.-техн. праць. – 2012. – Т. 13, № 4. – С. 879-882.
- Чорний З.П. Активаторні центри забарвлення в кристалах  $BaCl_2-Pb$  / З.П. Чорний, І.Б. Пірко, В.М. Салапак, М.В. Дячук, М.С. Кобринович // Науковий вісник НЛТУ України : зб. наук.-техн. праць. – Львів : РВВ НЛТУ України. – 2014. – Вип. 24.3. – С. 321-327.

### Чорний З.П., Вайданич В.І., Пірко І.Б., Дячук Н.В., Салапак В.М. Механізм генерації центрів окраски в кристалах $BaCl_2-Pb$ при температурах $T < 145$ К

В моделі лінійного кристала досліджено механізм генерації центрів окраски в кристалах  $BaCl_2-Pb$  при умови існування в кристалах автолокалізованих дьор ( $V_K$ -центров). Показано, що при даних умовах в кристалах  $BaCl_2-Pb$  под дією іонізуючої радіації утворюються три типи комплементарних пар центрів окраски:  $[(Pb^+)-(V_K)^+]$ ,  $[(Pb^+)-(V_{KA})^+]$ ,  $[(Pb^+)-(V_K)^+-(V_K)^+-(Pb^{2+})]$ . Ісследована кінетика їх утворення і предельні концентрації в кристалі, вклад кожної з указаних пар в сумарну окраску кристала. Рассчитаны вероятности образования центров окраски, а также их радиационного высвечивания, энергии ионизирующей радиации, которая необходима для создания каждой из пар центров окраски.

**Ключевые слова:** кристаллы, радиация, центры окраски.

### Chornij Z.P., Vaidanitch V.I., Pirko I.B., Djachuk N.V., Salapak V.M. The Mechanism of the Generation of Colour Center Crystals $BaCl_2-Pb$ at Temperatures $T < 145$ K

In the linear model of the crystal the mechanism of generation of colour centers in crystals  $BaCl_2-Pb$  is investigated on the condition of existing crystals of self-trapped holes

( $V_K$ -centers). Under these conditions, crystals  $BaCl_2$ -Pb under the influence of ionizing radiation are shown to produce three types of complementary pairs of colour centers:  $[(Pb^{2+})-(V_K)^+]$ ,  $[(Pb^+)-(V_{KA})^+]$ ,  $[(Pb^+)-(V_K)^+-(V_K)^+-(Pb^+)]$ . The kinetics of formation and limit the concentration in the crystal, the contribution of each of these pairs in total colour crystal are researched. The probability of the colour centers formation and radiation illumination, energy ionizing radiation, which is required to create each pair of color centers, are calculated.

**Key words:** crystals, radiation, colour centers, linear model, kinetics.

УДК 004.056:504

Доц. Г.В. Микитин, д-р техн. наук –  
НУ "Львівська політехніка"

## ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ У ГАЛУЗІ БЕЗПЕКИ ТЕХНОГЕННИХ І ПРИРОДНИХ ОБ'ЄКТІВ

Проведено конструктивний аналіз методів відбору даних для забезпечення безпеки техногенних і природних об'єктів та засад безпеки автоматизованих систем. Розкрито зміст концепції побудови інформаційних технологій (ІТ) відбору даних як стратегічний механізм забезпечення безпеки системи "об'єкт – ІТ" згідно з методологічним, системним, комплексним підходами, моделями у контексті вирішення проблемних задач. Запропоновано систему "вода – техногенний об'єкт ↔ вода – людина: екологія", як складову структури забезпечення якості питної води за техногенного впливу з метою прийняття управлінського рішення на встановлення рівноважного стану структури "промислова інфраструктура – природні екосистеми – соціум – екологічна безпека".

**Ключові слова:** техногенний і природний об'єкт, інформаційна технологія, відбір даних, безпека, концепція, система "об'єкт – ІТ", підхід, вода, людина, екологія.

**Вступ.** Згідно з основними розділами Національної парадигми сталого розвитку України актуальною залишається проблема створення й ефективного застосування ІТ відбору даних у галузі безпеки техногенних і природних об'єктів [1]. Технологічні системи промислової інфраструктури та екосистеми навколишнього середовища є двома базовими сегментами, які характеризують цивілізацію і стан природи одночасно, бо взаємодіють, взаємозв'язані і останнім часом привертають увагу щодо комплексного вирішення проблеми їх безпечного функціонування /природовикористання у рамках системи управління технічними і природними ризиками. Ця проблема може бути ефективно вирішена засобами ІТ відбору і оброблення даних з метою оцінювання технічного/ екологічного стану об'єктів та прийняття рішення на управління проблемними ситуаціями.

З метою попередження та уникнення техногенних і природних ризиків на об'єктах експлуатації і природокористування ефективно використовують контроль і технічне діагностування конструкцій, обладнання та екологічний моніторинг стану природних систем. У контексті взаємозв'язку та взаємодії техногенних систем з природними актуальною є безпека використання питної води за техногенного впливу, що відображає екологічну безпеку загалом – для соціуму і планети.

Оскільки ІТ відбору і оброблення даних є основним інструментарієм розв'язання прикладних задач у галузі техногенно-природної безпеки об'єктів: контролю (технічного діагностування) матеріалів і конструкцій, обладнання та енергоактивних агрегатів; екологічного моніторингу природних екосистем, то з метою точного відбору і оброблення інформації автоматизовані системи повин-

ні бути безпечними у функціональному та інформаційному вимірах [2]. У світлі обговорення концепції переходу України до сталого розвитку оцінювання технічного стану обладнання промислової інфраструктури і природного стану екосистем потребує нових підходів щодо визначення роботоздатності/природовикористання, розроблення та впровадження стратегічного механізму забезпечення безпеки структури "об'єкт – ІТ".

**Постановка проблеми.** Безпечна експлуатація техногенних об'єктів та безпека природовикористання, зокрема водних ресурсів як екосистеми, яка взаємодіє активно з техногенними, ґрунтується на процесах відбору даних відповідними методами і засобами. Контроль (діагностування) параметрів технічного стану об'єктів за дії експлуатаційних факторів (навантаження, температури, агресивного середовища, технологічної води), їх оцінювання за критеріями "міцність – ресурс" та оперативне прийняття рішення на управління техногенною безпекою вимагає гарантоздатних інформаційних технологій. Моніторинг екологічних властивостей природних об'єктів, зокрема питної води за техногенного впливу, спрямований на точний контроль параметрів за умови забезпечення функціональної та інформаційної безпеки автоматизованих систем, що є підставою для прийняття управлінського рішення за критерієм "якість – використання".

Розроблені методи і засоби відбору даних у контексті проблеми контролю (діагностування) стану об'єктів вирішують задачі у сегменті техногенної безпеки [3-8] та у сегменті природної безпеки, зокрема забезпечення якості водних ресурсів [9-11]. Розроблені моделі, методи і засоби безпеки автоматизованих систем вирішують задачу забезпечення властивостей гарантоздатності у сегменті безпеки інформаційних технологій [12, 13].

Розроблена концепція створення ІТ відбору даних від техногенних/ природних об'єктів, яка спрямована на забезпечення безпеки системи "об'єкт – ІТ" [14]. Роботоздатність техногенного об'єкта та якість використання природного, а також гарантоздатність автоматизованих систем, здатних з відповідною точністю визначати параметри їх безпечного функціонування/природовикористання забезпечують умову ефективної цілеспрямованості системи "об'єкт – ІТ" на рівні: параметри/ ресурс – захищеність системи/ продуктивність.

Для оцінювання рівнів техногенно-природної безпеки та обґрунтування ефективності застосування системних критеріїв побудови ІТ відбору даних у сегменті безпеки "об'єкт – ІТ" виникає потреба порівняно окремих методів забезпечення безпечного функціонування/природовикористання об'єктів і методів забезпечення безпеки автоматизованих систем та ІТ відбору даних, створених на основі концепції у контексті проблемних задач: контролю дефектів, водневої деградації, напружено-деформованого стану матеріалів.

**Мета роботи** – провести конструктивний аналіз застосування ІТ відбору даних для вирішення проблемних задач контролю техногенних і моніторингу природних об'єктів, захищеності автоматизованих систем у контексті: окремих сегментів техногенно-природної безпеки та безпеки ІТ; цілісного сегменту безпеки "об'єкт – ІТ" на основі концепції побудови ІТ, яка дає підстави для прогнозування ресурсу/ якості об'єктів та прийняття рішення на комплексне управління проблемними ситуаціями.