

ӘОЖ 535.37

**¹³²Xe ИОНЫМЕН СӘУЛЕЛЕНГЕН MgO КРИСТАЛДАРЫНДА РАДИАЦИЯЛЫҚ
АҚАУЛАРДЫҢ ПАЙДА БОЛУЫ**

Бейімбет Үміт Бейімбетқызы

beimbet.umat@gmail.com

Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ 4-курс студенті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Ғылыми жетекшісі – Баубекова Г.М.

Кіріспе

Қазіргі уақытта екілік және одан да күрделі кең аймақты оксидтер әртүрлі техникада көптеп қолданылады. Бұл материалдар жоғары температураға төзімді, көптеген қоспалар иондарымен легірілуі мүмкін және монокристалдар, керамика, жұқа пленкалар, жіп тәрізді кристалдар және т. б. түрінде қолданысқа ие. Металл оксидтері белсенді лазерлік орталар, люминофорлар, плазмалық дисплейлерге арналған материалдар, оптикалық терезелер мен талшықтар, сцинтилляторлар, дозиметриялық материалдар, ядролық және термоядролық энергетикаға арналған конструкциялық және диагностикалық материалдар ретінде қолданылады [1,2].

Көптеген сілтілі- жер кристалдарда анионды интерстициалды-Френкель ақауларының бос жұптарын құру энергиясы тыйым салынған аймақтың енінен аз, $E_{FD} < E_g$. Бұл жағдайда толық релаксацияланған өткізгіш электрон мен валенттік кемтік (автолокализацияланған тесік) рекомбинациялау немесе аниондық экситонның ыдырауы кезінде бөлінетін энергия Френкель ақауларын жасау үшін жеткілікті [3]. Сонымен қатар, MgO монокристалдары рентген және γ -сәулелерге жоғары радиациялық төзімділікке ие. Теориялық есептеулерге сәйкес $E_{FD} = 15.2$ эВ $> E_g = 7.83$ эВ MgO аниондық тор үшін [4], және суық (релаксацияланған) электрондар мен валенттік тесіктердің рекомбинациясы тұрақты торда Френкель ақауларының пайда болуына әкелмейді. MgO-да анионды экситондар (~7.7 эВ түзілу энергиясы) автолокализацияны сезбейді және олардың кристалл көлеміндегі ыдырауы да Френкель ақауының түзілуіне әкелмейді [1,3]. Магний оксиді бұл түссіз диэлектрлік иондық кристалл, ол бетке бағытталған текше құрылымы бар және $Fm\bar{3}m(O_h^5)$ симметриясының кеңістіктік тобына жатады. Кристалл екі зарядты Mg^{2+} иондарынан (иондық радиусы $r_k = 0.74$ Å) және екі зарядты O^{2-} иондарынан ($r_a = 1,36$ Å) тұрады. Катиондар да, аниондар да кубтық тығыз орау заңына сәйкес, магний иондары оттегі торының октаэдрлік қуыстарында орналасқан. Интерстициалды ақаулар локализациялануы мүмкін тетраэдрлік қуыстар аз тиімді радиусқа ие – шамамен 0,3 Å. Әр катион 6 анионмен қоршалған және керісінше, яғни координациялық саны 6-ға тең, ал тор тұрақтысы $a = 4,24$ Å [5,6].

Қазіргі уақытта дейін иондық сәулеленуге ұшыраған MgO кристалдарындағы құрылымдық ақауларды құру және тазарту процестерін зерттеу үшін бірнеше зерттеулер жүргізілген. Нейтрондармен, электрондармен, протондармен немесе жоғары энергиялы иондармен сәулелену кезінде, қосымша бояу жағдайындағыдай, MgO кристалдарында оттегі (анион) бос орындары жасалады. [1,7] еңбектерінде максималды 5,0 эВ болатын басым кешенді сіңіру жолағы F^+ орталықтарының (максимум 4,96 эВ) және F орталықтарының (5,03 эВ) сіңіру жолақтарының қабаттасуы болып табылады. F^+ орталығы-бір электронды оттегі бос орны, ал F орталығы-екі электронды оттегі бос орны (яғни кристалл торына қатысты бейтарап ақау) [8].

Магний оксидіндегі радиациялық зақым көптеген жылдар бойы зерттелді. Сонымен қатар, MgO-да радиациялық процестердің көптеген бөлшектерін түсіндіру әліде жалғасуда. *Осы зерттеудің мақсаты* ^{132}Xe ауыр жоғары энергиялы иондармен сәулеленген MgO кристалдарында құрылымдық ақаулардың пайда болуы туралы жаңа эксперименттік деректерді зерттеу және талдау болып табылады.

Үлгілер мен эксперименттік әдістер

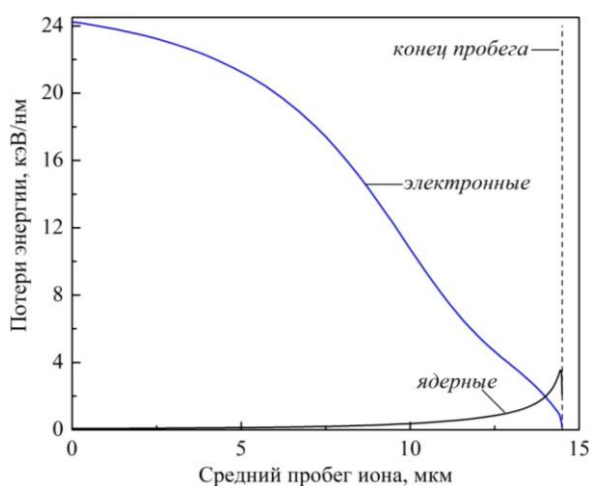
Жұмыста MgO кристалдарының монокристалдары зерттелді. MgO кристалдары қатты дене физикасы саласында жұмыстар жүргізуге арналған DC-60 циклотронының эксперименттік арнасында (Нұр-Сұлтан, Қазақстан) сәулелендірілді. Үдеткіш иондардың диапазоны ^6Li -ден ^{132}Xe -ге дейін, энергия 0.35-тен 1.75 МэВ/нуклонға дейін, ал массаның зарядқа қатынасы бойынша үдеткіш иондардың диапазоны 4.3-10. Сәулеленудің келесі параметрлері пайдаланылды: энергиясы 1.75 МэВ/нуклон ^{132}Xe ионы (бұл 231 МэВ ионының толық энергиясына сәйкес келеді), заряды 22+ және сәулелену тоғының тығыздығы 10 нА/см² флюенс диапазонында 5×10^{11} - 1×10^{14} ион/см².

Оптикалық жұтылу спектрлері 1.5-6.5 эВ аймағында CM-2000 екі сәулелі спектрофотометрді пайдалана отырып өлшенді.

Нәтижелер және талқылау

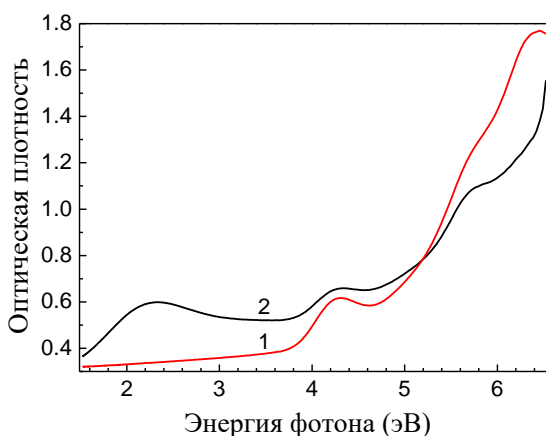
Кристалды жоғары энергиялы иондармен сәулелендіргенде, атқылаушы ион ядролық және электронды шығындар арқылы энергиясын жоғалтады. Ионның жүру жолындағы энергия шығыны dE/dx функциясымен сипатталады. SRIM бағдарламасы арқылы ядролық және ионизация энергиясының жоғалуы және MgO кристалындағы ^{132}Xe иондарының орташа жүру жолы анықталды. Энергетикалық шығындардың MgO кристалындағы ионның орташа жүру жолына тәуелділігі 1-суретте көрсетілген. SRIM есептеулеріне сәйкес, MgO-да 0,230 ГэВ энергиясы бар ^{132}Xe иондарының орташа жүру жолы шамамен 14 мкм құрайды. Иондық

жолдың көп бөлігінде есептелген ионизация энергиясының жоғалуы Хе ядролық энергия шығындарынан әлдеқайда жоғары.



1 сурет – MgO кристалының 0,230 ГэВ энергиясы бар ^{132}Xe иондарының жолындағы энергия шығыны

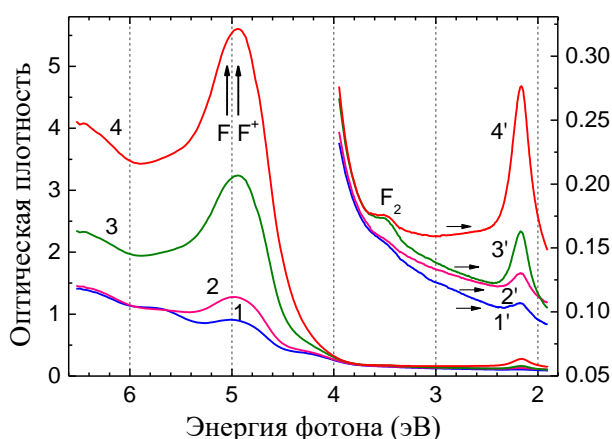
Пайдаланылған магний оксиді монокристалдарында темір концентрациясы (Fe^{3+}) шамамен 3 ppm, ал OH^- шамамен 0,1 ppm. 2-суретте сәулеленуге дейін MgO кристалының оптикалық сіңіру спектрлері (1-сызық) және бөлме температурасында рентген сәулелерімен сәулелендірілген (2-сызық) спектрлері көрсетілген. Сәулеленбеген кристалдың сіңіру спектрінде Fe^{3+} қоспалық иондарымен байланысты 5,74 және 4,26 эВ максимумы бар типтік жолақтар, сондай-ақ OH^- гидроксиді иондарымен байланысқан 6,4 эВ жолағы бар. Рентген сәулелерімен сәулелендірілген кристалдың оптикалық сіңіру спектрінде максимум 2,3 эВ болатын қосымша кең жолақ бар.



2 сурет – 90 минут бойы рентген сәулелермен сәулеленуден кейін және 295 К-ге дейін (1 сызық) өлшенген MgO кристалдарының оптикалық жұтылу спектрлері

3-суретте ^{132}Xe иондарымен сәулелендірілген кристалдардың оптикалық сіңіру спектрлері көрсетілген. Әр түрлі сұйықтықтарға иондалған MgO кристалдарында сіңіру спектрінде 4,92 , 5,03 , 3,51 және 2,16 эВ максимумы бар жолақтар пайда болады. Әр түрлі авторлардың еңбектерінде [1,7] 4,92 және 5,03 эВ жолақтарының F^+ және F^- орталықтарымен байланысты екендігі көрсетілген, сәйкесінше 3,51 эВ жолағының F_2 агрегаттық орталықтарымен байланысы бар (екі жақын орналасқан F-орталық), ал 2,16 эВ жолағының бос орындар агрегаттарына сәйкес келуі мүмкін [7-9]. 3-суретте ^{132}Xe иондарының флюенсінің

жоғарылауымен сәулеленудің әсерінен болатын оптикалық сіңірудің қарқындылығы (1-4 сызықтар) өсетіні анық көрсетілген.



3 сурет – әртүрлі флюенске дейін ^{132}Xe иондарымен алдын ала сәулелендірілген MgO кристалдары үшін өлшенген 295 К оптикалық сіңіру спектрлері (5×10^{11} ион/см² – 1 қисық, 1', 1×10^{12} ион/см² – 2 қисық, 2', 1×10^{13} ион/см² – 3 қисық, 3' и 1×10^{14} ион/см² – 4 қисық, 4')

Ксенон иондарымен және рентген сәулелерімен сәулелендірілген үлгілердің жұтылу спектрлерін салыстырған кезде рентгендік сәулеленген F және F⁺ кристалдарында орталықтар құрылмайтындығын байқауға болады. Осылайша, тек ^{132}Xe иондарымен сәулелену жаңа құрылымдық ақаулар тудырады деп қорытынды жасауға болады, ал рентгендік сәулелену тек бұрыннан бар радиациялық/қоспалық ақауларды өзгерте/қайта зарядтай алады.

Қорытынды

Рентген сәулелермен сәулеленгеннен кейін MgO оптикалық сіңіру спектрінде максимум 2,3 эВ болатын жолақ және бар ақаулар, қоспалардың өзгеруімен байланысты кең жолақ пайда болады, ал F⁺- және F-орталықтары пайда болмайды. Екінші жағынан, жоғары энергиялы ^{132}Xe иондарымен сәулеленгеннен кейін, F типті құрылымдық ақаулар кристалда тиімді жасалады. Сәулеленумен индукцияланған оптикалық жұтылу спектрінде F⁺ (4,92 эВ) және F-орталықтардың (5,03 эВ) жұтылу жолақтарының қабаттасуы болып табылатын 4,96 эВ кезінде үстем жолақ, агрегаттық F₂-орталықтарға сәйкес келетін 3,51 эВ кезінде әлсіз жұтылу жолағы, сондай-ақ максимумы шамамен 2,1 эВ болатын және табиғаты түпкілікті белгіленбеген кешенді жолақ байқалады.

Әдебиеттер тізімі

1. Lushchik Ch., Lushchik A., Kärner T., Kirm M., Dolgov S. Relaxation, self-trapping and decay of electronic excitations in wide-gap oxides. // Russ. Phys. J. 2000. Vol. 43. №3. P. 171–180.
2. Zimmerer G. Luminescence spectroscopy with synchrotron radiation: history, highlights, future. // J. Lumin. 2006, Vol. 119. № 120. P. 1–7.
3. Lushchik Ch. B., Lushchik A. Ch. Decay of Electronic Excitations with Defect Formation in Solids. – Moscow: Nauka, 1989.
4. Mackrodt W. C., Stewart R. F. Defect properties of ionic solids: 111. The calculation of the point-defect structure of the alkaline-earth oxides and CdO // J. Phys. C: Solid State Phys. 1979. Vol. 12. № 23. P. 5015-5035.
5. Kück S., Fornasiero L., Heumann E., Mix E., Huber G., Kärner T., Maaros A. Investigation of Cr-Doped MgO and Sc₂O₃ as Potential Laser Sources for the Near Infrared Spectral Range // Laser Phys. 2000. Vol. 10. № 2. P. 411-416.
6. Jeffrey G. S., Junichi N., Hidehiko H., Donald J. S. Theoretical Limiting Potentials in Mg/O₂ Batteries // Chem. Mater. 2016. Vol. 28. №5. P. 1390–1401.

7. Evans B.D., Comas J., Philip R. Coloration induced in MgO by MeV $^{20}\text{Ne}^+$ Bombardment // Phys. Rev. 1972. Vol. 6. №6. P. 2453-2462.
8. Ueda A., Mu R., Tung Y-S., Wu M.H., Zavalin A., Wang P.W., Henderson D.O. Optically measured diffusion constants of oxygen vacancies in MgO // J. Phys.: Condens. Matter, 2001. №13. P. 5535-5544.
9. Chen Y., Williams R.T., Sibley W.A. Defect cluster centers in MgO // Phys. Rev. 1969. Vol.182. №3. P. 960-964.