

04,08

Диффузия и агрегация приповерхностных радиационных дефектов в нанокристаллах фторида лития

© А.П. Войтович¹, В.С. Калинов¹, Е.Ф. Мартынович², А.П. Ступак¹, Л.П. Рунец¹

¹ Институт физики НАН Белоруссии,
Минск, Белоруссия

² Иркутский филиал Института лазерной физики СО РАН,
Иркутск, Россия

E-mail: voitovich@imaph.bas-net.by

(Поступила в Редакцию 18 марта 2015 г.)

Нанокристаллы фторида лития облучены гамма-квантами при температуре, меньшей температуры подвижности анионных вакансий. Определена кинетика процессов агрегации радиационных дефектов в приповерхностных слоях нанокристаллов во время отжига после облучения. Установлены процессы, которые могут быть использованы для нахождения энергии активации диффузии анионных вакансий. Найдена величина этой энергии в приповерхностных слоях. Для приповерхностных слоев получено соотношение концентраций вакансий и дефектов, состоящих из одной вакансии и двух электронов. Обсуждены причины различий в значениях энергий активации и соотношений концентраций в приповерхностных слоях и объеме кристаллов.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект Ф14Р-182) и Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 14-02-90033).

1. Введение

В настоящее время интенсивно исследуются процессы создания, а также характеристики наноматериалов и наноструктур. Изучаются радиационные свойства нанокристаллов (НК), включая НК на основе фторида лития (LiF), для определения эффективности их использования в дозиметрии ионизирующего излучения [1,2]. НК демонстрируют хорошие дозиметрические возможности при больших дозах облучения, а также высокую чувствительность и линейный отклик на воздействие тяжелых заряженных частиц в широком диапазоне экспозиций. Предложено также использовать поликристаллические пленки LiF в качестве сенсоров нейтронов [3] и новые детекторы в виде микрокристаллического фторида лития в полимерной матрице для определения высоких доз гамма-квантов и электронов [4]. Для пленок, микрокристаллов и НК характерно большое отношение поверхности к объему. Поэтому при воздействии на такие объекты ионизирующей радиации необходимо учитывать особенности образования радиационных дефектов в приповерхностных слоях образцов. В таких устройствах на основе LiF, как волноводы, пленочные нанокристаллические структуры для записи информации с высоким пространственным разрешением [5,6], радиационные дефекты также формируются в приповерхностных и поверхностных слоях кристаллов.

В большинстве щелочно-галогидных кристаллов, за исключением фторидов лития и натрия, сравнительно давно обнаружены радиационные центры окраски в поверхностных и приповерхностных слоях [7,8]. В дальнейшем будем называть их поверхностными центрами окраски (ПЦО) или поверхностными дефектами (ПД).

Недавно были найдены различные типы ПД в приповерхностном слое кристаллов и в нанокристаллах LiF, измерены их спектры фотолюминесценции (ФЛ) и возбуждения фотолюминесценции (ВФЛ), а также определены их составы [9,10]. Основные измерения проведены с НК, поскольку для них наблюдается повышенное содержание ПД по сравнению с кристаллами такого же объема при одинаковых условиях радиационного облучения.

Идентифицированы следующие пять типов ПЦО во фториде лития: F_{S2}^+ , F_{S2} , F_{S2}^- , F_{S3}^+ , F_{S3} [10]. Приведенные здесь обозначения аналогичны традиционным обозначениям для центров окраски в объеме кристалла. К ним добавлен только индекс S , который указывает на принадлежность центров к поверхностным. Измеренные спектры ФЛ и ВФЛ для ПЦО отличаются от спектров аналогичных центров в объеме кристалла положением максимумов и значениями ширин. Для спектров ВФЛ поверхностных дефектов характерно присутствие нескольких полос (двух или трех), близких по интенсивности. Перечисленные особенности спектров являются следствием различия величин и симметрии кристаллического поля в приповерхностном слое и объеме кристалла.

Многие вопросы формирования ПД в кристаллах остаются пока невыясненными. Неизвестны также характеристики диффузии ПД. В НК их невозможно измерить электрическими методами, регистрируя, например, ток в образцах, обеспечиваемый движением ионов. В такой ситуации перспективно использование оптических методов, в частности регистрации кинетики агрегации дефектов люминесцентными или абсорбционными методами [11,12]. В пострадиационный период в приповерхностных слоях LiF наблюдалась агрегация ПД. При

температурах, близких к комнатной, агрегацию обеспечивает диффузия только анионных вакансий (в дальнейшем вакансий). Дефекты F_{S2}^+ в приповерхностном слое в отличие от дефектов F_2^+ в объеме кристалла не диффундируют при таких температурах [10]. Этот факт свидетельствует о том, что энергия активации диффузии для таких дефектов в приповерхностном слое существенно больше, чем в объеме кристалла, где она составляет 1.07 eV [11,12]. Агрегация дефектов в приповерхностных слоях, обеспечиваемая миграцией вакансий, открывает возможности исследования кинетики реакций агрегации при различных температурах и определения энергии активации диффузии для вакансий в таких слоях. В настоящей работе излагаются результаты таких исследований. Проводится выбор реакций, кинетика которых может быть использована для определения энергии активации, и находится величина энергии. Эта величина сравнивается с данными для дефектов в объеме кристаллов. На основании анализа экспериментальных результатов делаются выводы о соотношениях концентраций некоторых типов дефектов в приповерхностных слоях.

2. Методика эксперимента

Эксперименты проводились с НК и кристаллическими пластинками фторида лития. НК (размеры $d \leq 1 \mu\text{m}$) получались путем механической фрагментации части монокристалла. Для удобства работы НК прессовались. Полученные таким способом образцы в дальнейшем будем называть таблетками. Как следует из работы [9], удобными объектами для наблюдения и исследования ПД во фториде лития являются НК, подвергнутые воздействию ионизирующего излучения при температурах $T_{\text{итт}}$, меньших температуры T_v подвижности вакансий. Радиационные дефекты во всех используемых образцах создавались при облучении гамма-квантами от источника 60°C при температуре жидкого азота $T_{\text{итт}} = 77 \text{ K} < T_v$. Определить дозу облучения не представлялось возможным, так как образцы располагались перед источником гамма-радиации в металлическом сосуде, заполненном жидким азотом.

Информация о диффузии вакансий извлекалась из зависимостей интенсивностей ФЛ от времени отжига образцов при различных температурах $I(t)$. Измерялась ФЛ продуктов или компонентов реакций, протекающих с участием диффундирующих вакансий. Облученные образцы переносились из дьюара с жидким азотом в термостат, обеспечивающий определенную стабилизированную температуру $T > T_v$, при которой проводились измерения зависимостей $I(t)$. Время перехода от температуры $T_{\text{итт}}$ до температур измерения (отжига) $T_{\text{анн}}$ составляло 1.5–2.0 min. Температуры $T_{\text{анн}}$ варьировались в диапазоне 288–323 K. Каждая из зависимостей $I(t)$ регистрировалась в течение нескольких часов на спектрофлуориметре SM-2203 (SOLAR, Беларусь) с усреднением сигнала в интервале 2 s. Измерения ФЛ

проводились в условиях, при которых ее интенсивности пропорциональны концентрациям исследуемых центров свечения. Следовательно, зависимости $I(t)$ дают информацию о кинетике концентраций центров и протекания реакций в процессе отжига образцов.

Измерялись зависимости $I(t)$ для центров F_{S2}^+ , F_{S2} и F_{S3}^+ при регистрации на длинах волн $\lambda_{\text{рег}} = 890, 770$ и 660 nm и при возбуждении излучением с длинами волн $\lambda_{\text{exc}} = 410, 630$ и 560 nm соответственно. Используемый спектрофлуориметр не предназначен для работы в инфракрасной области спектра, где находится свечение центров F_{S2}^- . Поэтому их ФЛ не регистрировалась. Спектры ВФЛ и ФЛ центров F_{S3} сильно перекрываются с аналогичными спектрами других центров, что не позволяло корректно измерять их ФЛ.

3. Агрегация дефектов и выбор реакций для исследования кинетики

В работе [10] установлено, что в отличие от кристаллических пластинок в НК к моменту окончания облучения при $T_{\text{итт}} < T_v$ уже существуют агрегатные центры F_{S2} и F_{S2}^- . Определено также, что в приповерхностных слоях НК во время отжига протекают следующие реакции с участием вакансий v_a :



Итак, информацию о диффузии вакансий в приповерхностных слоях кристалла можно получать из кинетики реакций агрегации (1)–(4). По причинам, изложенным в предыдущем разделе, нами исследовались только реакции (1)–(3).

На рис. 1 представлены измеренные зависимости интенсивностей ФЛ от времени отжига $I(t)$ для центров F_{S2}^+ , F_{S3}^+ и F_{S2} . Как видно из данных рис. 1, *a, b*, интенсивности ФЛ и, следовательно, концентрации центров F_{S2}^+ , F_{S3}^+ растут в процессе отжига вследствие протекания реакций (1), (3). Наблюдаются две стадии роста: начальная (быстрая) и конечная (медленная). Как показывают измерения, достигнутые к концу отжига значения концентраций сохраняются постоянными при комнатных температурах в течение нескольких лет. Концентрация центров F_{S2} на первой стадии кинетики быстро уменьшается и затем, на второй стадии, медленно возрастает (рис. 1, *c*). Наблюдаемое уменьшение обусловлено реакцией (3), в которой участвуют центры F_{S2} , созданные во время облучения образцов. Последующий рост определяется процессом, состоящим из реакций (2) и (3).

Некоторые из экспериментальных данных по кинетике изменения концентраций центров во время отжига показаны на рис. 2 в полулогарифмическом масштабе.

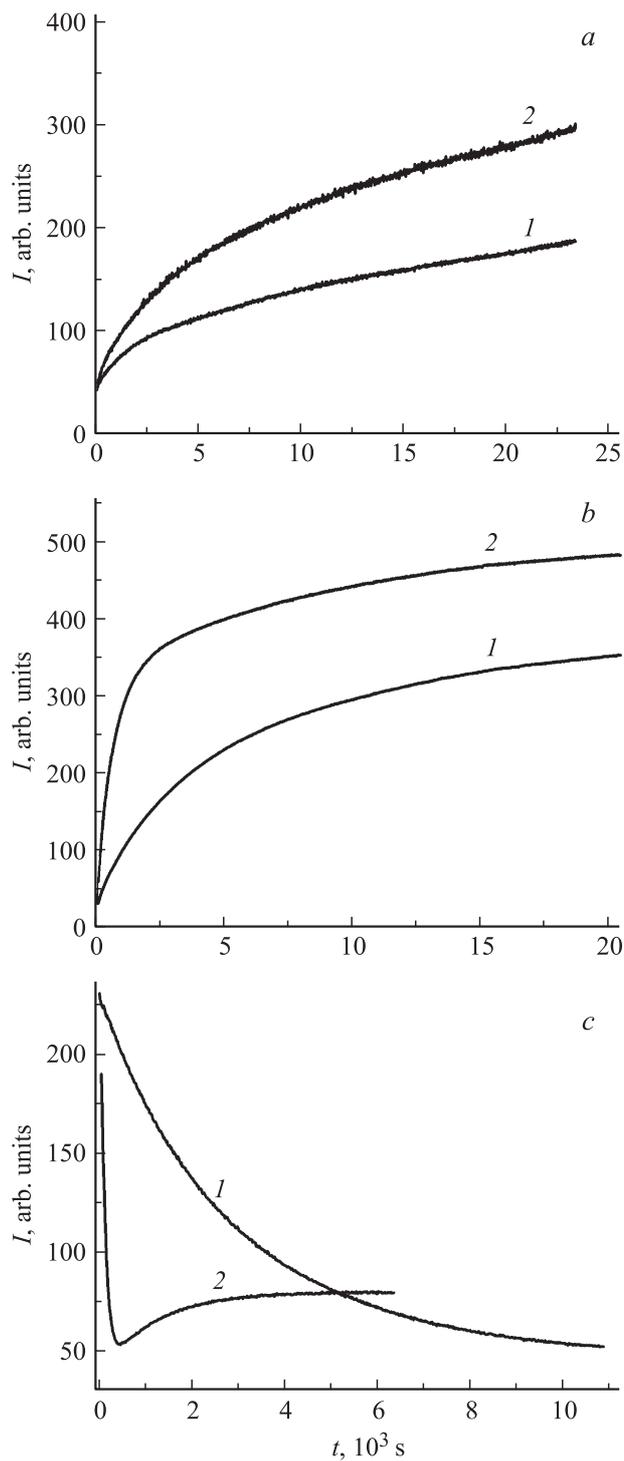


Рис. 1. Изменения интенсивностей ФЛ $I(t)$ для центров F_{S2}^+ (a), F_{S3}^+ (b) и F_{S2} (c) в процессе отжига при различных температурах. T_{ann} , К: a) 1 — 289, 2 — 296; b) 1 — 288, 2 — 298; c) 1 — 289, 2 — 314.

Чтобы отобразить рост концентраций центров F_{S2}^+ и F_{S3}^+ , на рис. 2, a, b используются величины $\ln([I_{\text{fin}} - I(t)]/I_{\text{fin}})$, где I_{fin} — конечные значения интенсивностей ФЛ на рассматриваемых стадиях роста. Для представления уменьшения концентрации центров F_{S2} применяются

величины $\ln(I(t)/I_{\text{max}})$, где I_{max} — максимальное значение интенсивности (рис. 2, c). Для всех центров кинетика в использованных координатах описывается прямыми линиями. Следовательно, концентрации всех центров изменяются со временем отжига экспоненциальным обра-

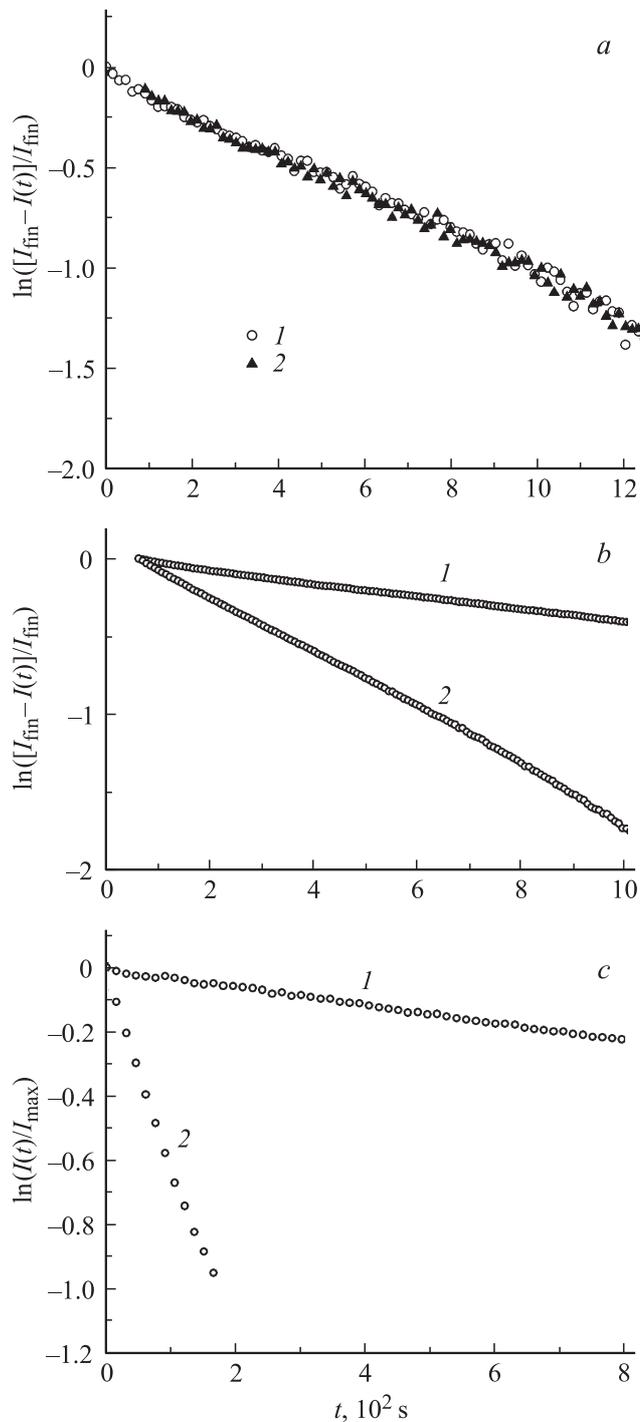


Рис. 2. Зависимости величины $\ln([I_{\text{fin}} - I(t)]/I_{\text{fin}})$ для центров F_{S2}^+ (a), F_{S3}^+ (b) и величины $\ln(I(t)/I_{\text{max}})$ для центров F_{S2} (c) от времени отжига при температурах T_{ann} . Обозначение кривых то же, что на рис. 1. Все данные относятся к первой стадии кинетики.

зом. Это обстоятельство позволяет по зависимостям $I(t)$ находить постоянные τ времени реакций [13]. Времена τ определяются углом наклона прямых на рис. 2. Все данные, показанные на рис. 2, соответствуют первым стадиям кинетики реакций агрегации. Из других полученных результатов следует, что изменения концентраций центров на вторых стадиях кинетики также хорошо моделируются экспоненциальными зависимостями.

Протекание реакций (1)–(4) обеспечивается диффузией подвижных вакансий из исходных положений до их локализованных партнеров по реакциям. Для диффузии типа случайных блужданий характерны следующие закономерности [14]:

$$L^2 = 6Dt, \quad (5)$$

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right), \quad (6)$$

где L^2 — квадрат диффузионного пути дефектов (квадрат смещения из исходного положения) за время t ; D — коэффициент диффузии; E_a — энергия активации диффузии; k — постоянная Больцмана; T — температура среды, в которой наблюдается диффузия; D_0 — предэкспоненциальный множитель. Из равенств (5), (6) следует, что диффузия ускоряется с повышением температуры отжига. Поэтому с ростом температуры T_{ann} реакции (1)–(4) и изменения концентраций их компонентов и продуктов также должны ускоряться. При этом должны уменьшаться средние времена τ протекания реакций и соответственно увеличиваться наклоны прямых на рис. 2. Для центров F_{S3}^+ и F_{S2} этот вывод экспериментально подтверждается (рис. 2, *b, c*). Измеренные данные для центров F_{S2}^+ демонстрируют совпадение времен τ при температурах отжига 289 и 296 К (рис. 2, *a*). Причиной получения такого результата является следующее обстоятельство. При регистрации ФЛ на длине волны $\lambda_{\text{рег}} = 890$ нм измеряются одновременно свечения поверхностных центров F_{S2}^+ , F_{S3}^+ и центров F_2^+ в объеме кристаллов. Это происходит потому, что ФЛ этих типов дефектов имеет перекрывающиеся спектры и возбуждается при воздействии на образцы излучением с $\lambda_{\text{exc}} = 410$ нм. Исследования стадий кинетики ФЛ центров F_{S2}^+ и F_2^+ , измерения времен τ для этих стадий показывают, что основные искажения в регистрируемые зависимости $I(t)$ для центров F_{S2}^+ вносит ФЛ центров F_2^+ . Таким образом, данные по ФЛ центров F_{S2}^+ не могут быть использованы для изучения кинетики реакции (1) и определения характеристик диффузии вакансий.

В работе [10] установлено, что центры F_{S2} , сформированные в таблетках облучением γ -квантами при $T_{\text{irr}} < T_v$, во время отжига трансформируются в центры F_{S3}^+ . Кинетика этой трансформации представляется данными рис. 2, *b, c* для первых стадий изменения концентраций указанных ПЦО. Зависимости $1/\tau = f(1/T_{\text{ann}})$ для этих стадий показаны на рис. 3. Зависимости хорошо описываются экспонентой, что согласуется с формулами (5), (6). Скорости $1/\tau$ увеличения концентраций центров F_{S3}^+ и уменьшения концентраций центров F_{S2} при одинаковых температурах

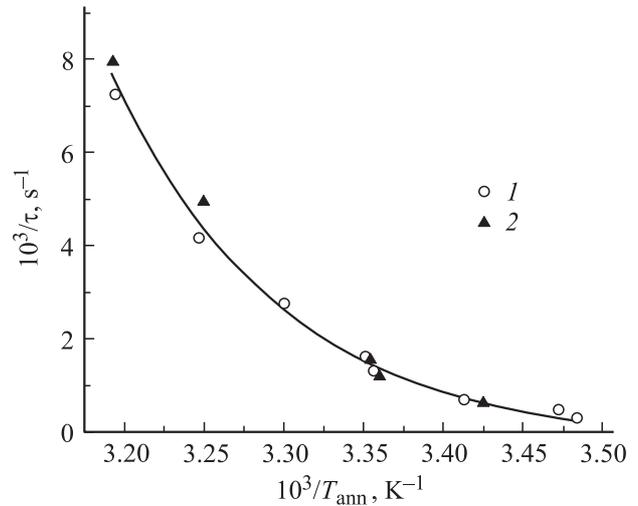


Рис. 3. Зависимость $1/\tau = f(1/T_{\text{ann}})$ для начальных стадий изменения концентраций центров F_{S3}^+ (1) и F_{S2} (2). Точки — экспериментальные данные, кривая — аппроксимация экспонентой.

отжига совпадают. В таком случае выполняется следующее соотношение для изменения концентраций в любой определенный интервал времени: $\Delta N_1 = -\Delta N_2$ где индексы 1 и 2 относятся к центрам F_{S3}^+ и F_{S2} . Этот факт также означает, что измерения зависимостей $I(t)$ для этих ПЦО не искажены вкладом ФЛ других центров. С учетом этого обстоятельства кинетика реакции (3) и изменений концентраций центров F_{S3}^+ и F_{S2} выбрана для определения характеристик диффузии вакансий в приповерхностных слоях НК.

4. Характеристики диффузии и соотношения концентраций вакансий и центров F_{S1}^- в приповерхностных слоях LiF

Из уравнений (5), (6) при $t = \tau$ и $L^2 = L_\tau^2$ получается следующее соотношение:

$$\ln\left(\frac{1}{\tau}\right) = \ln\left(\frac{6D_0}{L_\tau^2}\right) - \left(\frac{E_a}{k}\right)\left(\frac{1}{T_{\text{ann}}}\right). \quad (7)$$

Зависимость $\ln(1/\tau) = f(1/T_{\text{ann}})$ представляет собой прямую линию. Угол наклона этой прямой определяется энергией активации E_a диффузии, а пересечение с осью ординат — величиной $6D_0/L_\tau^2$.

На рис. 4 (точки 1) приведены экспериментальные результаты для функции $\ln(1/\tau) = f(1/T_{\text{ann}})$, измеренные на первой стадии реакции (3). Временные константы τ кинетики находились из зарегистрированных зависимостей $I(t)$ для центров F_{S2} и F_{S3}^+ . Показаны результаты четырех серий измерений: трех для центров F_{S2} ($\lambda_{\text{exc}} = 630$ нм, $\lambda_{\text{рег}} = 770$ нм) и одной для центров F_{S3}^+ ($\lambda_{\text{exc}} = 560$ нм, $\lambda_{\text{рег}} = 660$ нм). Использовались три независимые процедуры приготовления таблеток и три неза-

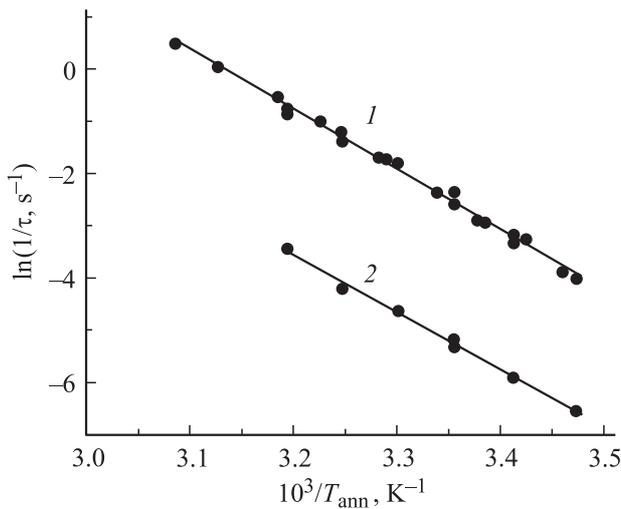


Рис. 4. Зависимости $\ln(1/\tau) = f(1/T_{\text{ann}})$ для первой стадии изменения концентраций центров F_{S2} и F_{S3}^+ (1) и для второй стадии роста концентрации центров F_{S3}^+ (2). Точки — экспериментальные данные, прямые — линейная аппроксимация.

висимые серии их облучения. Экспериментальные данные хорошо аппроксимируются прямой линией. Из этого факта можно сделать некоторые выводы. Исходя из прямолинейности измеренной функции $\ln(1/\tau) = f(1/T_{\text{ann}})$ можно заключить, что диффузия вакансий в приповерхностных слоях НК является диффузией типа случайных блужданий. Это заключение и экспоненциальный характер зависимостей $I(t)$ (рис. 2) свидетельствуют о том, что в толщине приповерхностного слоя, значительно превышающей расстояние между дефектами, существует статистически равномерное распределение дефектов. Эта толщина должна быть также значительно больше протяженности переходного промежутка между приповерхностным слоем и объемом кристалла. Здесь под переходным понимается промежуток, в котором свойства приповерхностного слоя меняются на свойства объема.

Экспериментальные измерения функции $\ln(1/\tau) = f(1/T_{\text{ann}})$ для второй стадии кинетики роста концентрации центров F_{S3}^+ в процессе отжига представлены точками 2 на рис. 4. Формирование этих центров на второй стадии обусловлено процессом, состоящим из последовательных реакций (2) и (3). Как следствие двух реакций временные константы τ образования этих ПЦО на второй стадии кинетики намного больше констант для первой стадии. Установлено, что при увеличении температуры отжига от 288 до 313 К измеренные константы на первой и второй стадиях изменяются в диапазонах $3.3 \cdot 10^3 - 1.3 \cdot 10^2 \text{ s}$ и $3.4 \cdot 10^4 - 1.9 \cdot 10^3 \text{ s}$ соответственно. Процесс, состоящий из двух реакций с участием вакансий, как показано в [13], характеризуется энергией активации для диффузии вакансий.

Энергия активации E_{Sav} для диффузии вакансий в приповерхностных слоях НК определяется по углам наклона прямых 1 и 2 (рис. 4). Из них получаем

значения энергии активации 1.00 ± 0.02 и $0.95 \pm 0.03 \text{ eV}$ соответственно. Будем в дальнейшем использовать величину $E_{Sau} = 1.00 \text{ eV}$ как определенную по большому числу экспериментальных измерений и более достоверную. Энергия активации E_{av} для диффузии вакансий в объеме кристаллов LiF равна 0.60 eV [12,13]. Неравенство $E_{Sav} > E_{av}$ и значения энергий свидетельствуют о том, что потенциальный барьер, отделяющий ион фтора в узле решетки от вакантного узла (вакансии), в приповерхностном слое существенно больше, чем в объеме кристалла.

Оценим отношения концентраций дефектов различного типа в приповерхностных слоях и проведем сравнение с отношениями в объеме. Положим, как в [13], что эффективные концентрации N_i^* и N_j^* дефектов, участвующих в i -й и j -й реакциях (процессах), связаны соотношением $N_i^*/N_j^* = L_j^3/L_i^3$. В этом соотношении, как и в уравнении (7), величины L_j^2 и L_i^2 являются средними квадратами диффузионных путей, проходимых вакансиями до встречи с их партнерами за все время протекания реакций или процессов j и i . На второй стадии кинетики скорость $V_{2,3}$ формирования центров F_{S2} в результате процесса, состоящего из реакций (2) и (3), может быть записана в виде [13]

$$V_{2,3} = V_2 - V_3, \tag{8}$$

где $V = 1/\tau$, V_2 и V_3 — скорости реакций (2) и (3) соответственно. Из соотношений (8) и (7) для любой заданной температуры T_{ann} получаем

$$\frac{V_{2,3}}{V_3} = \frac{L_3^2}{L_2^2} - 1. \tag{9}$$

Временные константы τ_3 и $\tau_{2,3}$ (и скорости V_3 и $V_{2,3}$) могут быть экспериментально определены с помощью зависимостей $I(t)$ для центров F_{S3}^+ и F_{S2} на второй стадии кинетики.

Это позволяет вычислить отношения как средних квадратов диффузионных путей для реакций (3) и (2), так и эффективных концентраций дефектов, являющихся компонентами этих реакций. Данные, подобные показанным на рис. 4, предоставляют еще одну возможность нахождения отношений L_i^2/L_j^2 . Пересечения прямых 1, 2 на рис. 4 с осью ординат определяют значения величин $6D_{0v}/L_{it}^2$, где индекс i обозначает реакцию или процесс. Таким образом, точки пересечения прямых с осью ординат позволяют вычислять значение L_i^2/L_j^2 и отношение эффективных концентраций дефектов, участвующих в реакциях.

Для второй стадии формирования дефектов F_{S2} и F_{S3}^+ было определено отношение L_3^2/L_2^2 обоими описанными способами. Получены значения 2.41 и 2.35 соответственно. Найдено, что $N_2^*/N_3^* = 3.67$. Для реакции (2) величина $N_2^* = N_{\text{vac}} + N_1$, где N_{vac} и N_1 — концентрации вакансий и центров F_{S1}^- соответственно. В реакции (3) участвуют вакансии и центры F_{S2} (концентрация N_2), поэтому $N_3^* = N_{\text{vac}} + N_2 \approx N_{\text{vac}}$, поскольку на второй

стадии $N_{\text{vac}} \gg N_2$. Теперь с учетом приведенных слагаемых для величин N_2^* и N_3^* из найденного значения $N_2^*/N_3^* = 3.67$ получается равенство $N_1 \approx 2.7N_{\text{vac}}$. Такое соотношение между N_1 и N_{vac} на второй стадии кинетики агрегации обусловлено, вероятнее всего, существенным уменьшением концентрации вакансий на первой стадии кинетики, поскольку на первой стадии вакансии участвуют во всех реакциях (1)–(4), а для партнеров вакансий по этим реакциям характерны большие концентрации перед началом отжига [10].

Данные, представленные на рис. 4, могут быть использованы для сравнения концентраций ПД, участвующих в реакции (3) на первой и второй стадиях агрегации. В реакцию (3) на обеих стадиях вступают вакансии и дефекты F_{S2} . Поэтому эффективная концентрация реагирующих дефектов $N_{3,n}^*$ ($n = 1, 2$ для первой и второй стадий соответственно) есть сумма концентраций этих компонентов. Из пересечений линий 1 и 2 с осью ординат определяются значения $6D_{0v}/L_{\text{ит}}^2$ и величина $N_{3,1}^*/N_{3,2}^* = [N_{\text{vac},1} + N_{F_{S2},1}]/[N_{\text{vac},2} + N_{F_{S2},2}] = 59$. Как уже отмечалось, на второй стадии концентрация $N_{3,2}^*$ примерно равна концентрации вакансий $N_{\text{vac},2}$. Необходимо принять во внимание то, что на первой стадии концентрация вакансий больше, чем концентрация центров F_{S2} . С учетом этих замечаний можно заключить, что $N_{\text{vac},1} > 30N_{\text{vac},2}$, т.е. концентрация вакансий на первой стадии агрегации намного больше концентрации вакансий на второй стадии. Сопоставление соотношения $N_1 \approx 2.7N_{\text{vac},2}$, выполняющегося на второй стадии кинетики, и неравенства $N_{\text{vac},1} > 30N_{\text{vac},2}$ и учет реакций (1)–(4), протекающих на первой стадии, дают основание сделать следующий вывод. В приповерхностном слое на первой стадии и фактически до начала отжига (после окончания облучения) концентрация вакансий намного превышает концентрацию центров F_{S1}^- . Отметим, что для объема кристаллов на первой стадии кинетики агрегации характерно примерное равенство концентраций этих дефектов [13].

Полученный из анализа экспериментальных данных вывод о значительном превышении концентрации вакансий над концентрацией центров F_{S1}^- в приповерхностных слоях кристалла после его облучения согласуется с двумя другими экспериментальными наблюдениями. Во-первых, установлено [10], что во время облучения НК при $T_{\text{ит}} = 77 \text{ K} < T_v$ создается большое количество центров F_{S2}^- . При их образовании расходуются в 1.5 раза больше электронов, чем вакансий. Во-вторых, получение НК путем механической фрагментации кристаллов сопровождается испусканием электронов [15]. В результате этого процесса формируются приповерхностные слои НК, обедненные электронами.

5. Заключение

В приповерхностных слоях кристаллов фторида лития энергия активации диффузии дефектов намного больше, чем в объеме. Энергия активации для анионных вакансий в приповерхностных слоях составляет 1.0 eV , в то

время как в объеме она равна 0.60 eV . Следовательно, потенциальный барьер, отделяющий ион фтора в узле решетки от вакантного узла (вакансии), в приповерхностном слое существенно больше, чем в объеме кристалла. В приповерхностных слоях в отличие от объема при комнатных температурах не наблюдается диффузии дефектов, состоящих из двух вакансий и одного электрона. В результате концентрация таких дефектов остается постоянной длительное время, если образец хранится при комнатной температуре.

После облучения кристаллов при температуре $T_{\text{ит}} < T_v$ в приповерхностных слоях концентрация вакансий намного больше концентрации дефектов, состоящих из одной вакансии и двух электронов. В объеме кристаллов эти концентрации примерно равны. Данный результат является существенной частью фактической базы, необходимой для объяснения особенностей формирования радиационных дефектов в приповерхностных слоях фторида лития.

Список литературы

- [1] N. Salah, P.D. Sahare, A.A. Rupasov. *J. Lumin.* **124**, 357 (2007).
- [2] N. Salah. *Rad. Phys. Chem.* **80**, 1 (2011).
- [3] A. Kovacs, M. Baranyai, W.L. McLaughlin, S.D. Miller, A. Miller, P.G. Fuochi, M. Lavalle, I. Slezsak. *Rad. Phys. Chem.* **57**, 691 (2000).
- [4] S. Almaviva, M. Marinelli, E. Milani, G. Prestopino, A. Tucciarone, C. Verona-Rinati, M. Angelone, D. Lattanzi, M. Pillon, R.M. Montereali, M.A. Vincenti. *J. Appl. Phys.* **103**, 054 501 (2008).
- [5] R.M. Montereali. In: *Handbook of thin film materials* / Ed. H.S. Nalwa. Academic Press, N.Y. (2002). P. 399.
- [6] R. Larciprete, I. Gregoratti, M. Danailov, R.M. Montereali, F. Bonfigli, M. Kiskinova. *Appl. Phys. Lett.* **80**, 3862 (2002).
- [7] V. Zielasek, T. Hildebrandt, M. Henzler. *Phys. Rev. B* **62**, 2912 (2000).
- [8] S.V. Moharil, B.T. Deshmukh. *Rad. Eff. Def. Solids* **34**, 189 (1977).
- [9] A.P. Voitovich, V.S. Kalinov, M.V. Korzhik, E.F. Martynovich, L.P. Runets, A.P. Stupak. *Rad. Eff. Def. Solids* **168**, 130 (2013).
- [10] A.P. Voitovich, V.S. Kalinov, A.P. Stupak, A.N. Novikov, L.P. Runets. *J. Lumin.* **157**, 28 (2015).
- [11] Л.А. Лисицына. *ФТТ* **34**, 2694 (1992).
- [12] A.P. Voitovich, V.S. Kalinov, L.P. Runets, A.P. Stupak, E.F. Martynovich, R.M. Montereali, G. Baldacchini. *J. Lumin.* **143**, 207 (2013).
- [13] А.П. Войтович, В.С. Калинов, Е.Ф. Мартынович, А.Н. Новиков, А.П. Ступак. *ФТТ* **54**, 1659 (2012).
- [14] Я.И. Френкель. *Кинетическая теория жидкостей*. Наука, Л. (1975). 592 с.
- [15] B.P. Chandra, N.L. Patel, S.S. Rahangdale, R.P. Patel, V.K. Patle. *Pramana — J. Phys.* **60**, 109 (2003).