

КЫРГЫЗ РЕСПУБЛИКАСЫНЫН БИЛИМ БЕРҮҮ ЖАНА ИЛИМ
МИНИСТРЛИГИ
ОШ МАМЛЕКЕТТИК УНИВЕРСИТЕТИ
К.01.12.012 ДИССЕРТАЦИЯЛЫК КЕҢЕШИ

Кол жазма укугунда
УДК 535.548.736+
535.35+539.2+539.16.04

Каденова Батмакан Ажимаматовна

**Жегич-галоиддик кристаллдардагы радиациялык
дефекттердин пайда болуу, бири-бирине айлануу жана ажыроо
процесстерин моделдештирүү**

Адистиги 01.04.07– конденсацияланган абалдардын физикасы

Физика-математика илиминин кандидаты илимий даражасын изденип алуу
үчүн жазылган диссертациянын

АВТОРЕФЕРАТЫ

Ош-2014

Диссертациялык жумуш Ош мамлекеттик университетинин
Эксперименталдык жана теориялык физика кафедрасында аткарылган.

Илимий жетекчи: КРдин илимине эмгек сиңирген ишмер,
физика-математика илимдеринин доктору,
профессор **Арапов Б.А.**

Расмий оппоненттер: физика-математика илимдеринин доктору,
профессор **Шаршеев К.Ш.**
техника илимдеринин кандидаты,
доцент **Садыков Э.С.**

Жетектөөчү мекеме: Ж. Баласагын атындагы
Кыргыз Улуттук Университети

Диссертациялык жумуш 2014-жылдын «20»июнь, саат 14⁰⁰дө
Ош мамлекеттик университетинин алдындагы физика-математика илиминин
кандидаты илимий даражасын ыйгаруучу К 01.12.012 диссертациялык
кеңештин жыйынында корголот.

Дареги: 723500, Ош ш., Ленин көчөсү, 331, ОшМУ нун башкы
имараты.

Диссертация менен ОшМУнун илимий китепканасынан таанышууга болот.

Автореферат 2014-жылдын “15”майда таркатылды.

Диссертациялык кеңештин
окумуштуу катчысы,
физика-математика илимдеринин
кандидаты, доцент

Өскөнбаев М.Ч.

ЖУМУШТУН ЖАЛПЫ МҮНӨЗДӨМӨСҮ

Теманын актуалдуулугу: Жегич-галоиддик кристаллдарда дефекттердин курамын жана түзүлүшүн аныктоо катуу заттардын физикасы үчүн теориялык жактан да, практикалык жактан да каралган негизги маселелерден болуп эсептелет, себеби кристаллдардагы радиациялык дефекттердин пайда болуусу, бири-бирине айлануусу жана ажыроосу алардын оптикалык, электрдик жана люминесценттик касиеттерин аныктайт.

Жегич-галоиддик кристаллдарда жетишээрлик деңгээлде жөнөкөй электрондук жана көзөнөктүк дефекттердин курамы жана түзүлүшү аныкталган. Бирок кристаллдардын негизги оптикалык, радиациялык жана башка касиеттерин аныктаган татаал курамга жана түзүлүшкө ээ болгон (нанотүзүлүштүк) дефекттердин түзүлүшү жана курамы азыркы мезгилге чейин так аныктала элек. Азыркы мезгилде кристаллдарды эсептөө техникасында, өндүрүштүн жана башка тармактарында колдонуу алардагы радиациялык дефекттердердин термикалык жок болуу жана бири-бирине айлануу механизмдин үйрөнүүгө кескин талапты койду. Ошондой эле катуу заттардын металлдык, жарым өткөргүчтүк, диэлектрдик, жогорку өткөрүмдүүлүк жана башка касиеттеринин кызмат кылуу мөөнөтүн узартуу үчүн алардын ар кандай түрдөгү радиациялык таасирлерге чыдамдуулугун жогорулатуу маанилүү болуп саналат. Бул механизмдерди кароодо физикалык моделдин негизинде заттын нурдануу менен өз ара аракеттенишүүсүндө жүрүүчү процесстерди баяндаган кеңири математикалык аппарат иштелип чыккан жана аны практикалык колдонууда үч негизги багытты көрсөтүүгө болот:

Биринчиден, катуу заттардагы радиациялык дефекттердин касиеттеринин генерациялык эң ыңгайлуу техникалык багыттагы (радиациялык материал таанууда) колдонулушу.

Экинчиден, катуу заттардын касиеттерин иондук нурдануунун күчтүү аракет этүүсүндөгү таасирди (ядролук реакторлордо, ылдамдаткычтарда, космосто) тынчтык багытта колдонулушун камсыз кылуу.

Үчүнчүдөн, катуу заттардагы радиациялык дефекттердин негизги касиеттерин билүү менен информацияларды сактоо жана жазууда (дозиметр, эске тутуу түзүлүштөрдө ж.б.) колдонуу.

Бул каралган маселелер изилденүүчү теманын теориялык жактан да, практикалык жактан да **актуалдуу** экендигин көрсөтөт.

Мамлекеттик программалар менен диссертациялык теманын байланышы: Диссертациялык жумуш Ош мамлекеттик университетинин жана КР билим берүү жана илим министрлигинин алдындагы иновациялык технологиялар жана илим департаментинин илим изилдөө иштеринин планындагы № ОФГН 031 2008-2013- жылдарындагы каржылаган проект боюнча аткарылган.

Диссертациялык жумуштагы изилдөөнүн максаты жана милдети: ЖГКдагы радиациялык дефекттердин пайда болуу, бири-бирине айлануу жана ажыроо механизмдин изилдөө, топтук өзгөртүп түзүү методдорунун

негизинде дефекттердин пайда болуу процесстеринин физикалык жана математикалык моделдештирүүсүн пайдаланып, орто аралык жана татаал дефекттердин курамын жана түзүлүшүн аныктоо.

Бул максатка жетүү үчүн төмөнкүдөй маселелерди чечүү керек:

- Жегич-галоиддик кристаллдардагы дефекттердин жалпы мүнөзү, касиеттери, изилдөө усулдары, аларды ар түрдүү механикалык, радиациялык жана башка аракет этүүлөрдө нурдануу жана түстөнүү борборунун өзгөрүүсүнүн закон ченемдүүлүктөрүн аныктоо.
- Жегич-галоиддик кристаллдардагы радиациялык дефекттердин пайда болуусунун, бири-бирине айлануусунун жана ажыроосунун физикалык моделин түзүү, дефекттердин оптикалык касиеттеринин мезгилдүүлүгүн жана ал дефекттердин пайда болуусундагы өзгөртүп түзүүлөрдүн топторун аныктоо.
- Аталган процесстердин физикалык моделдин негизинде иондук кристаллдардын радиациялык дефекттерин аныктоо менен кийинки пайда болуучу, кыска убакытта жашоочу дефекттердин курамын, түзүлүшүн аныктоо.

Изилдөөнүн объектилери: Изилдөөнүн объектилери катарында NaCl, KCl, NaCl-Ag жана KCl-Ag жегич-галоиддик кристаллдары алынат, ал эми изилдөөнүн методу катарында радиациялык дефекттердин топтук өзгөртүп түзүүсүнө негизделген физикалык жана математикалык моделдештирүү алынган.

Изилдөөнүн негизги илимий жаңылыктары төмөнкүлөр:

- Жегич-галоиддик кристаллдардагы татаал курамга ээ болгон иондук-электрондук квазибөлүкчөлөрдүн курамы жана түзүлүшү аныкталды.
- Жегич-галоиддик кристаллдардагы белгилүү бир туруктуу эмес кыска убакытта жашаган орто аралык дефекттердин курамын жана түзүлүшү аныкталды.
- Кристаллдардагы дефекттерди мүнөздөгөн кванттык сандарды аныктоо менен матрица жана дефекттердеги окшоштуктарды пайдаланып, электрондук түстөнүү борборлорунун пайда болуусунун физикалык модели түзүлдү.
- Иондук кристаллдардагы радиациялык дефекттердин пайда болуусундагы өнүгүү процесси, “кичинекей” козголуусу, катуу заттардагы туруксуздуктун сызыктуу анализи, ички чыңалуулар, кристаллдардагы дефекттердин топтолууларынын ирээттелген түзүлүштөрүнүн пайда болуусун математикалык моделдештирүүсү каралды.

Диссертациялык жумушту коргоого алып чыгуучу негизги жоболор:

- Жегич-галоиддик кристаллдардагы физикалык касиеттерин аныктаган түстөнүү борборлордун курамын жана түзүлүшүн аныктагандыгы.

- Катуу заттардагы жүрүүчү процесстердин физикалык өзгөчөлүктөрүн негиздеген кыска убакыттык аралыкта жашаган дефекттердин курамы аныкталгандыгы.
- Кристаллдардын оптикалык жана люминесценттик өзгөчөлүгүнүн негизин түзгөн нурдануу жана түстөнүү борборлорунун нурдануу жана нур жутуу спектрлериндеги белгилүү закон ченемдүүлүккө алып келген матрица жана дефекттердеги топтук теориянын негизделиши.
- Кристаллдардагы иондук-электрондук квазибөлүкчөлөрдүн түзүлүшүн жана курамын аныктоо үчүн физикалык моделдештирүүнүн негизделиши.
- Иондук кристаллдардагы иондук-электрондук дефекттердин пайда болуусундагы өнүгүү процессинин, кристаллдардагы дефекттеринин “кичинекей” козголууларын, катуу заттардагы туруксуздуктун пайда болушунун сызыктуу анализи, ички чыңалуулардын, дефекттердин топтолууларынын ирээттелген түзүлүшүнүн пайда болуусун математикалык моделдештирүүсү.

Илимий жыйынтыктарды алууда автордун жеке катышуусу: Диссертациялык жумуштун негизги жыйынтыктары илимий жетекчинин көрсөтмөсү менен автордун өзүнүн изилдөөсүндө аткарылды. Эксперименталдык жана теориялык изилдөөлөр илимий изилдөө лабораториясындагы кызматкерлер менен биргеликте аныкталып, ал эми катуу заттардагы дефекттердин пайда болууларын жана бири-бирине айланууларын математикалык моделдештирүү автордун жеке өзү аткарды жана жыйынтыктар чыгарылды.

Илимий жыйынтыктардын жана тыянактардын жетишээрлик ишенимдүүлүгү: Алынган эксперименталдык жыйынтыктын тактыгы физикалык (оптикалык, люминесценттик, электрдик ж.б.) изилдөө ыкмаларын пайдалануу менен алардан алынган жыйынтыктардын өз ара дал келиши, ошондой эле эксперименталдык жана теориялык алынган жыйынтыктардын да өз ара дал келиши негиз болот. Каралган маселелерди чечүүдө физикалык жана математикалык моделдештирүүнү пайдалануу жана алынган жыйынтыктар чыгарылган тыянактын ишенимдүүлүгүн далилдейт.

Жумуштун апробациясы. Диссертациялык жумуштун негизги жыйынтыктары төмөнкүдөй илимий конференцияларда жана семинарларда баяндалган жана талкууланган:

- ОшМУнун иондук кристаллдардын физикасы илимий лабораториясындагы кафедра аралык ар жылы өтүп туруучу илимий семинарларларында (1998-2013- жылдар, Ош шаары);
- «Активации творческих возможностей молодых ученых ВУЗов Юга Кыргызстана» аттуу республикалык илимий конференция (2002, Ош шаары);

- «Информационные технологии, математическое моделирование в науке, технике и образовании» деген аталыштагы академик А.Жайнаковдун 70- жылдык мааракесине арналган эл аралык конференция (2011, Бишкек шаары);
- «Актуальные проблемы современной физики и технологии обучения» деген аталыштагы профессор Т.Карашевдин 80-жылдык мааракесине арналган Республикалык илимий конференциясында (2012, Бишкек шаары);
- Коомдук ишмер А.Масалиевдин 80 жылдык мааракесине арналган “XXI кылымдын билим берүү көйгөйлөрү жана өнүгүү багыттары” деген аталыштагы регионалдык илимий практикалык конференциясында (2013, Кызыл- Кыя шаары);
- «Физика, математика, техника и образование: достижения и перспективы развития» деген аталыштагы КРдин илимине эмгек сиңирген ишмер, физика-математика илимдеринин доктору, профессор Б.А Араповдун 70-жылдык мааракесине арналган Эл аралык илимий конференциясында (2013-жыл, Ош шаары);
- “ Иссык-Кульская международная летняя школа по радиационной физике (SCORPh – 2013)” аталыштагы КР УИА нын корр.-мүчөсү, физика-математика илимдеринин доктору, профессор А. Алыбаковдун 80 жылдык мааракесине арналган Эл аралык илимий конференциясында (2013-жыл, Каракол шаары).
- Абай атындагы КазУПУнун 85 жылдыгына арналган “Математическое моделирование и информационные технологии в образовании и науке (ММ ИТОН)” деген аталыштагы VI Эл аралык илимий-методикалык конференциясында (2013-жыл, Алмата шаары);

Диссертациялык жумуш боюнча илимий басылмалар: Диссертациянын негизин Кыргыз Республикасынын жогорку аттестациялык комиссиясы тарабынан каттоодон өткөн илимий журналдарда жарык көргөн 15 макала жана 1 тезис түзөт. Алардан: 1 макала “Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований” журналында (Россия, Москва шаары), 1 макала “Математическое моделирование и информационные технологии в образовании и науке (ММ ИТОН)” журналында (Казакстан, Алмата шаары), Кыргыз Республикасынын Бишкек шаарында; 3 макала “Наука и новые технологии” журналында, 1 макала “Известия вузов”журналында, 1 макала жана 1 докладдын тезиси “Вестник КНУ им.Ж.Баласагына”журналында, 1 макала “Известия КГТУ” журналында, Ош шаарында; 6 макала Ош мамлекеттик университетинин “Вестник ОшГУ” журналында жарык көргөн. Алардын ичинен 5 макала жана 1 тезис автордун өзүнүн атынан басмадан чыгарылган.

Диссертациялык жумуштун структурасы жана көлөмү: Жалпысынан диссертациялык жумуш киришүүдөн, 4 баптан, жыйынтыктоодон жана колдонулган адабияттардын тизмесинен туруп, жалпы көлөмү 146 бет. Анын ичинде 18 сүрөттөр жана 11 жадыбалдар камтылган.

ЖУМУШТУН МАЗМУНУ

Киришүүдө жумуштун актуалдуулугу, анын максаты жана чечилүүчү маселелери баяндалган, диссертациянын түзүлүшү келтирилген, анын кыскача мазмуну жана негизги натыйжалары баяндалган. Диссертациялык жумуштун илимий жаңылыктары жана алынган жыйынтыктардын практикалык мааниси көрсөтүлгөн. Диссертациялык жумушту коргоого алып чыгылуучу негизги жоболор келтирилген.

Диссертациялык жумуштагы **биринчи бапта** жегич-галоиддик кристаллдардагы дефекттер, алардын түрлөрү жана аларда болуучу процесстерди моделдештирүү методдору адабияттык изилдөөлөрдүн негизинде каралган.

Экинчи бапта изилдөө объекттери, оптикалык жана термикалык ыкмалар менен алынган изилдөөлөр берилген. Жегич- галоиддик кристаллдарды радиациялык нурлар менен нурдантканда салыштырмалуу стабилдүү дефекттер пайда болушат. Ал дефекттердин айрымдарынын гана курамы жана түзүлүшү аныкталган. Кристаллдын физикалык касиетин аныкташкан көпчүлүк дефекттердин курамы жана түзүлүшү толук аныктала элек экендиги белгиленген.

Үчүнчү бапта жегич-галоиддик кристаллдардагы татаал курамдагы радиациялык дефекттердин пайда болуусунун механизмдери, электрондук түстөнүү борборлорунун түзүлүшү, алардын оптикалык касиеттеринин мезгилдүүлүгү, иондук кристаллдарда дефекттерди пайда кылуудагы өзгөртүп түзүүлөрдүн топтору жана бул процесстерди физикалык моделдештирүү каралган.

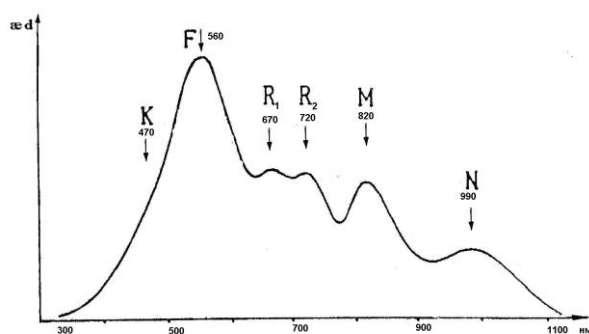
Төртүнчү бапта катуу заттарды радиациялык нурдантуу мезгилинде дефекттердин пайда болуусунун өнүгүү процесстери, бул процесстердин математикалык формулалардын жардамында берилүүсү, жегич-галоиддик кристаллдарды радиациялык нурдантууда дефекттердин жана ирээттелген түзүлүштөрдүн пайда болуу процесстерин математикалык моделдештирүү көрсөтүлгөн. Иондук кристаллдардагы концентрациялык-деформациялык-жылуулуктук туруксуздук моделинин негизинде радиациялык нурдануунун таасири астында катуу заттардагы дефекттердин топтолууларынын ирээттелген түзүлүштөрүнүн пайда болуусу, сызыктуу эмес процесстерди моделдештирүү, кристаллдардагы ички чыңалуулар жана дефекттердин “кичинекей” козголуусун сүрөттөөчү дифференциалдык тендеменин чыгарылышынын туруктуулугунун сызыктуу анализи каралган.

Иондук кристаллдардын касиетин аныктаган ар кандай физикалык процесстерде кристаллдык торчонун бузулушу же дефекттер чоң ролду ойнойт. Татаал системаны түзгөн чыныгы кристаллдарда бул бузулуулар чекиттик, сызыктуу жана беттик болушу мүмкүн. Кристаллдык торчонун кээ бир дефекттери электрондордун жана көзөнөктөрдүн локализациялануу орду, тактап айтканда кармап калуу борборлору болуп эсептелет. Люминесценция менен байланышкан көпчүлүк кубулуштарда кристаллдык

торчо боюнча түстөнүү, борборунун жана башка түзүлүштөгү дефекттердин кайра топтолуусу, бири-бирине айлануусу которулушу менен коштолот.

Биз салыштырмалуу таза KCl, NaCl жана ар кандай концентрациядагы күмүштүн кошулмасы болгон KCl-Ag, NaCl-Ag кристаллдарында активдештирилген жана активдештирилбеген электрондук жана көзөнөктүк түстөнүү борборлорунун пайда болуусун изилдегенбиз.

1-сүрөттө рентген нуру менен нурдантылган KCl кристаллынын нур жутуу спектри берилген. Рентген нуру менен нурданткандан кийин бул кристаллдан жутуу спектринде F, R, R₁, R₂, M, N, жана K – жутулуу тилкелери пайда болот.



1 – сүрөт.

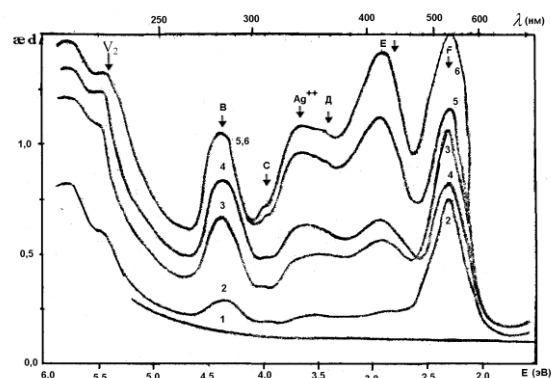
Рентген нуру менен нурдантылган, KCl кристаллынын жутуу спектри.

Рентген нуру менен KCl-Ag жана NaCl-Ag кристаллдарын нурдантуу ал кристаллдарда да ушундай эле түстөнүү борборлорунун пайда болушуна алып келет. Мындай электрондук жана көзөнөктүк түстөнүү борборлорунун болуп F, E, B, C, D, Ag_c²⁺, V₂, V_{2A} ж.б. эсептелет.

Мисал катарында 2-сүрөттө KCl-Ag кристаллын рентген нуру менен нурданткандан кийин кристаллдын нур жутуу спектри берилген. Бул сүрөттөн көрүнгөндөй электрондук жана көзөнөктүк борборлору пайда болот. Ал эми күмүштүн кошулмасын ар кандай өзгөртүү түстөнүү борборлорунун пайда болушун өз ара бөлүштүрүлүшүнө алып келет.

2 – сүрөт 290K температурада 90 мин. убакытта рентген нуру менен нурдантылган күмүштүн ар түрдүү концентрациясындагы KCl-Ag кристаллынын нур жутуу спектри:

- 1 - нурдантылбаган; 2 – 0,01 м%;
- 3 – 0,05 м%; 4 – 0,1 м%;
- 5 – 0,5 м%; 6 - 1,0 м%.



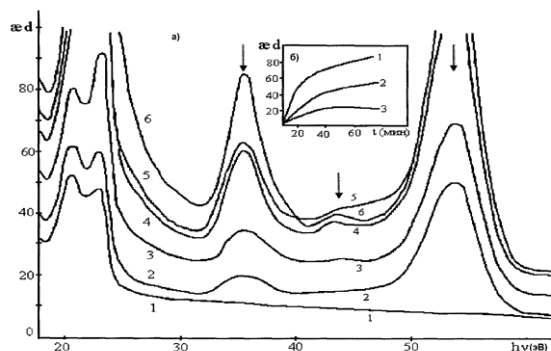
Ал эми 3-сүрөттө NaCl-Ag (0,1 моль %) кристаллын ар түрдүү убакыттык аралыкта (ар түрдүү дозада) рентген нуру менен нурданткан мезгилдердеги нур жутуу спектри берилген.

3-сүрөт. а) Ар түрдүү дозадагы рентген нуру менен нурдантылган NaCl-Ag (0,1 моль %) кристаллынын жутуу спектри:

1- нурдантылбаган, 2 – 5 мин.,
3 – 10 мин., 4 – 20 мин.,
5 – 30 мин., 6 – 60 мин.

б) Жутулуунун айрым тилкелери үчүн αd нын өсүү кинетикасы:

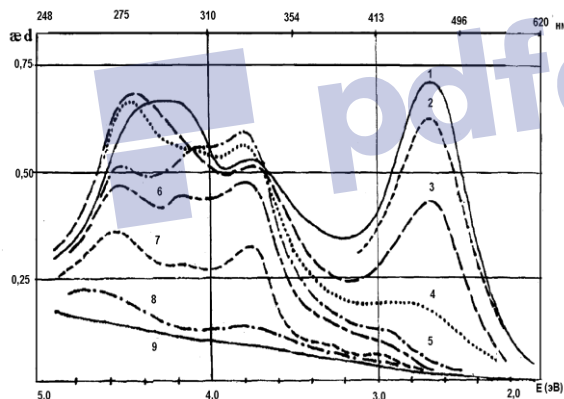
1 – 2,64 эВ, 2 – 4,5 эВ, 3 – 3,7 эВ.



Бул сүрөттөн көрүнгөндөй NaCl-Ag (0,1 моль %) кристаллынын да нур жутуу спектринде ар кандай түзүлүшкө ээ болгон ар түрдүү электрондук жана көзөнөктүк түстөнүү борборлору (F, E, В, С, D, Ag_c^{2+} , V_2 , V_{2A} ж.б.) пайда болушат.

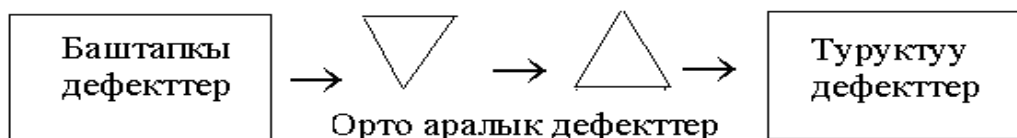
Нурдантуунун дозасын жогорулатуу түзүлүшү ар түрдүү түстөнүү борборлорунун пайда болуу кинетикасы да ар түрдүү экендигин көрсөтөт.

4-сүрөттө NaCl-Ag (0,3 моль %) кристаллынын рентген нуру менен нурдантканда пайда болгон нур жутуу спектринин импульстук режим менен ысыткандан кийинки өзгөрүлүшү берилген. Бул сүрөттөн көрүнгөндөй нур жутуу спектрин мүнөздөгөн түстөнүү борборлору ар түрдүү термикалык туруктуулукка ээ.



4-сүрөт Импульстук режим менен NaCl-Ag (0,1 моль%) кристаллын ысытканда радиациялык дефекттердин термикалык жок болушунун жутуу спектри.
1 – 295 К, 2 – 335 К, 3 – 355 К,
4 – 375 К, 5 – 395 К, 6 – 415 К,
7 – 455 К, 8 – 495 К, 9 – 535 К.

Бул берилген материалдардан көрүнгөндөй жегич-галоиддик кристаллдарда дефекттер белгилүү бир шарттарда пайда болуу менен өз ара бири-бирине айланышып, убакыттын өтүшү менен тең салмактуу абалга келишет. Эгерде бул процесстин схемасын карасак, ал төмөндөгүчө болот:



Ал эми ошол эле мезгилде радиациялык дефекттер стабилдешип туруктуу абалга келгенге чейин бир канча орто аралык дефекттер пайда болот. Ал дефекттер кыска убакыттык аралыктарда жашап бири-бирине айланышат. Бул процесс дефекттердин туруктуу стабилдик абалына келгенге чейин уланат.

Курамы жана түзүлүшү белгилүү болгон түстөнүү борборлорунун пайда болуусун, бири-бирине айлануусун жана ажыроосун изилдөө алардагы болгон процесстерди тереңирээк түшүнүп, ал процесстердин механизмдин аныктоого мүмкүнчүлүк берет.

Негизинен стабилдүү калыптанган салыштырмалуу жөнөкөй түзүлүштөгү түстөнүү борборлорунун пайда болуусу каралган. Ал эми кыска убакытта радиациялык дефекттердин пайда болуу механизмдерин жана алардын түзүлүштөрүн түздөн-түз аныктоо өтө татаал. Мына ошондуктан мындай кыска убакытта пайда болгон радиациялык дефекттердин түзүлүшүн аныктоо үчүн кыйыр жолдорду издеп табуу керек. Мындай кыйыр жолдун бири болуп радиациялык дефекттердин бири-бирине айланышын караган түстөнүү борборлорун өзгөртүп түзүүнүн топтук ыкмасы эсептелет жана бул ыкма радиациялык дефекттердин пайда болушун, бири-бирине айлануусун жана жок болушун изилдеген физикалык моделдештирүүнүн негизи болот.

Түстөнүү борборлорунун негизги мүнөздөөчү чоңдугу катарында кристаллдардын нур жутуу спектринин спектралдык тилкелеринин максимуму $E_m^{\text{э}}$ жана анын бир типтен экинчи типке өтүүсүндөгү өзгөрүүлөргө таандык болгон $\Delta E_m^{\text{э}}$ маанилери алынган. 1-жадыбалда рентген нурлары менен нурдантылган *NaCl-Ag* кристаллындагы кээ бир түстөнүү борборлору үчүн $E_m^{\text{э}}$ нын жана $\Delta E_m^{\text{э}}$ нын маанилери келтирилген.

1-жадыбалы

Борборлордун белгиле ниши	$\lambda_m^{\text{э}}$, (нм)	$E_m^{\text{э}}$ (эВ)	$\Delta E_m^{\text{э}}$ (эВ)			
Ag ⁺	210	5,90				
A-	245	5,00	}0,55		}0,90	
B-	275	4,45				
C ₄ -	315	3,90	}0,35		}0,90	
Д-	345	3,55				
E-	365	3,35	}0,35	}0,55		
K-	410	3,00				
F-	465	2,65			}0,90	
R-	600	2,05				
M-	725	1,70	}0,35	}0,60	}0,90	
N-	850	1,45				
O-	1150	1,10	}0,35	}0,65	}0,90	
P-	1450	0,85				
Q-	2500	0,50	}0,35			

Көрүнүп тургандай $\Delta E_m^{\text{э}}$ нын маанилери боюнча түстөнүү борборлорун $\Delta E_m^{\text{э}} = 0,90$ эВ, $\Delta E_m^{\text{э}} = 0,60$ эВ, $\Delta E_m^{\text{э}} = 0,35$ эВ турактуу маанилериндеги мультиплеттерге бириктирүүгө болот.

Маанилери $E_m^{\text{э}} = 0,90$ эВ жана $\Delta E_m^{\text{э}} = +0,35$ эВ болгон F- жана M-, M- жана R- борборлорунун дублетине кирген салыштырмалуу жөнөкөй F-, M-, R- түстөнүү борборлорун карайлы. Бизге белгилүү болгондой F-борборлордун түзүлүшү ($V_a^+e^-$), ал эми M- борборлору-

нуку ($V_a^+e^-$)₂ ал эми R- борборлорунуку ($V_a^+e^-$)₃ түзүлүштөргө ээ.

NaCl-Ag кристаллында нонетти түзгөн жогоруда көрсөтүлгөн мультиплеттердин кээ бир оптикалык мүнөздөмөлөрү 2-жадыбалда көрсөтүлгөн. Түстөнүү борборлорунун нонети синглетке жана октетке ажырайт, ал эми октет бир кваттеттен жана эки дублеттен турат.

Түстөнүү борборунун электрондук курамын ошондой эле бир түрдөгү борбордун башка түрдөгү борборго өзгөрүүсүнүн закон ченемдүүлүктөрүн сүрөттөө үчүн борбордогу электрондордун санына туура келген борбордун изочеттуулугу деген түшүнүктү киргизели жана аны U менен белгилейли.

2- жадыбалы

ΔE_m^z (эВ)	Түстөнүү борбор- лорунун белгиле- ниши	E_m^z (эВ)	Мультиплеттер- дин аталышы		
0,95	Ag^+	5,90	Синглет		Н О О Н Е Е Т
0,50	A-	4,95	Кватрет	О	
	B-	4,45		К	
0,50	C-	3,95		Т	
0,60	E-	3,35		Е	
0,25	D-	3,60	Дублет	Т	
	K-	3,00			
0,60	F-	2,65	Дублет		
	R-	2,05			

Изочеттуулук чоңдугунун маанисин аныктаган изочеттуулуктун кванттык саны (I) деген түшүнүктү киргизебиз жана бул эки аныктаманын байланышы $U=2I$ болот.

Анда F - түстөнүү борборлору үчүн $U=1, I=1/2$; M -түстөнүү борборлору үчүн $U=2, I=1$; R -түстөнүү борбору үчүн $U=3, I=3/2$ болот. Ал эми түстөнүү борборундагы жалпы суммардык электрондордун спинин S менен белгилесек, анда кристаллдагы электрондук түстөнүү борборлорун (E_m^z, I, S) координаталарында чагылдырууга болот.

Бул учурда электрондук түстөнүү борборлордун бири-бирине айлануусунун өзгөртүп түзүү матрицасынын ($\Delta E_m^z, \Delta I, \Delta S$) жардамында

көрсөтүүгө болот. Мындай өзгөртүп түзүүлөр аддитивдик топту түзүшөт. F -борбордон ($V_a^+ e^-$) башталган, борборлордун тобу үчүн негизги өзгөртүп түзүүлөрдүн матрицасы $(-0,95; +1/2; \mp 1/2)$ жана $(+0,35; +1/2; \pm 1/2)$ болот.

Эгерде өзгөртүү нурдануу борборуна электронунун спини өзгөртүп түзүлүүчү борбордун электронунун компенсацияланбаган антипараллель спинге ээ болгон квазибөлүкчөнү ($V_a^+ e^-$) кошконго туура келсе, өзгөртүп түзүүнүн матрицасы $(-0,95; +1/2; \mp 1/2)$ болот. Ал эми параллель спинге ээ болгон квазибөлүкчөнү ($V_a^+ e^-$) кошкондо өзгөртүп түзүүнүн матрицасы $(+0,35; +1/2; \pm 1/2)$ болот.

Ар бир топтордун ичинде борборлордун бири-бирине болгон дагы жаңы өзгөртүп түзүүлөрү негизги матрицанын жардамында аткарылат.

$$(\Delta E_m^e, \Delta I, \Delta S) = (a, b) \begin{pmatrix} -0,95; +1/2; \mp 1/2 \\ +0,35; +1/2; \pm 1/2 \end{pmatrix}$$

Мында a жана b дискреттүү чоңдуктар.

Ушундай эле жол менен $(\Delta E_m^e, \Delta I, \Delta S)$ матрицалары менен туюнтулуучу борборлордун бири-бирине айланууларын борборлордун белгилүү ион-электрондук ажыроолору катарында кароого болот. Борборлордун мындай ажыроолору бул борборлорго $(V_a^+ e^-)_n$ түрүндөгү квазибөлүкчө кошулганда же алардан бөлүнүп чыкканда ишке ашуусу мүмкүн.

$NaCl-Ag$ кристаллында E_m^e жана $U=2I$ координаттарындагы F , M жана R -түстөнүү борборлорунун өзгөртүп түзүүлөрү F -, M -, R - борборлорунун электрондук курамын эске алып, $(\Delta E_m^e, \Delta I)$ өзгөртүп түзүүлөр менен борборлордун курамынын ортосундагы өзгөрүп түзүүлөрдүн окшоштугу боюнча төмөнкүдөй жыйынтык чыгарууга болот.

1. $(-0,95; +1/2)$ өзгөртүп түзүүсүнө F - борборуна $(V_a^+ e^-)$ квазибөлүкчөнү кошуу туура келет.

2. $(-0,60; +1)$ өзгөртүп түзүүсүнө F - борборуна $(V_a^+ e^-)_2$ квазибөлүкчөнү кошуу туура келет.

3. $(+0,35; +1/2)$ өзгөртүп түзүүсүнө F -түстөнүү борборуна $(V_a^+ e^-)_3$ квазибөлүкчөнү кошуу туура келет.

Эгерде E - түстөнүү борборун да F - борборундай эле компенсацияланбаган спинге ээ болгон бир электрону бар деп эсептесек жана аны $I=1/2$ изочеттуулуктун кванттык саны менен мүнөздөсөк, анда $(\pm 0,95; +1/2)$, $(\pm 0,60; +1)$, $(\pm 0,35; +1/2)$ өзгөртүп түзүүлөрүн удаалаш аткаруу жолу менен 3-жадыбалда келтирилген бардык борборлорду алууга болот.

Ар кандай нурдантылган кристаллдарда электрондорунун спиндери боюнча айырмаланган эки түрдүү квазибөлүкчө $(V_a^+ e^-)$ жашайт. Аларды F – борборуна кошуу $(+0,35; +1/2)$ жана $(-0,95; +1/2)$ болгон, түстөнүү борборлорунун энергияларынын (E_m^e) эки түрдүү өзгөрүүсүнө алып келет. Мындан, борборлордун эки түрдүү өзгөртүп түзүүлөрүндөгү квазибөлүкчөлөрдүн $(V_a^+ e^-)$ айырмачылыгы, анын курамына кирген электрондордун e^- спиндеринин S эки түрдүү маанилери менен байланышкан. Эгерде F - борборунун электронунун спини $(\pm 1/2)$, ал эми кошулуучу квазибөлүкчөнүн электронунун спинине $(\pm 1/2)$ жарыш болушса өзгөртүп түзүүдөн кийин куралган борбордун спини ± 1 болот. Эгерде бул электрондордун спиндери карама-каршы болушса, (тиешелүү түрдө $\pm 1/2$ жана $\mp 1/2$) куралган борбордун спини 0 болот. Ошондуктан $(+0,35 \pm 1/2)$ өзгөртүп түзүүсү, борбордун электрондорунун спиндеринин $\Delta S = \pm 1/2$ чоңдугун өзгөрүүсүнө, ал эми $(-0,95; \mp 1/2)$ өзгөртүп түзүүсү анын спининин $\Delta S = \mp 1/2$ чоңдугунун өзгөрүүсүнө алып келет.

Анда борборлорунун өзгөртүп түзүүлөрүнүн матрицалары $(\Delta E_m^e, \Delta I)$ дагы бир ΔS саны менен толукталышы керек жана $(\Delta E_m^e, \Delta I, \Delta S)$ түрүндө жазылышы керек. Электрондордун спининин өзгөрүүсүн эске алуу менен

жогоруда каралган $(\Delta E_m^e, \Delta I)$ борборлорунун өзгөртүп түзүүлөрүнүн матрицаларын төмөнкүдөй түрдө кайрадан жазууга болот:

1. Электронунун спини, өзгөртүп түзүлүүчү борбордун компенсацияланбаган электронунун спинине бирдей болгон $(V_a^+ e^-)$ квазибөлүкчөсүн кошуу менен байланышкан борбордун өзгөртүп түзүлүүсү $(+0.35; +1/2; \pm 1/2)$ болгон өзгөртүп түзүүсүнүн матрицасы менен аныкталат.

2. Электронунун спини, өзгөртүп түзүлүүчү түстөнүү борборунун компенсацияланбаган электронунун спинине карама-каршы болгон $(V_a^+ e^-)$ квазибөлүкчөсүн кошуу менен байланышкан борбордун өзгөртүп түзүлүүлөрү $(-0.95; +1/2, \mp 1/2)$ өзгөртүп түзүүсүнүн матрицасы менен аныкталат.

3. Электрондорунун спиндери жарыш жана өз ара компенсацияланган $(V_a^+ e^-)$ квазибөлүкчөсүн кошуу менен байланышкан борбордун өзгөртүп түзүлүүлөрү, $(-0.60; +1.00)$ өзгөртүп түзүүсүнүн матрицасы менен аныкталат.

Мындай матрицалар менен аныкталуучу өзгөртүп түзүүчүлөр аддитивдик топту түзүшөт. Өзгөртүүнү F - жана E – борборлоруна колдонуунун жыйынтыгы 5-сүрөттө көрсөтүлгөн.

1) Борборлордун ортосунда I ге $(\Delta I=0)$ салыштырмалуу инварианттуу өзгөртүп түзүүлөр болушу мүмкүн. Ал өзгөртүүлөр S -ке карата симметриялуу. Мындай өзгөртүп түзүүнүн бирдик матрицасы $(+1.30; 0; \pm 1)$ түрүндө жазылат. Борборлорду мындай өзгөртүп түзүүдө алардын курамы өзгөрбөйт. Бул учурда өзгөртүп түзүүлөр борбордогу электрондордун биринин спининин ориентациясын өзгөртүү менен байланышкан $(S=\pm I)$. Электрондун спининин бурулушу түстөнүү борборунун түзүлүшүнүн өзгөрүшү менен коштолот. Мисалы, ΔE_m^e чоңдугунун белгисине карата $2(Ag_c^+ e^-)$ квазибөлүкчөсүнөн бул электрондун активатордук түстөнүү борборунун курамына кирген $2(V_a^+)$ квазибөлүкчөсү же тескерисинче $2(V_a^+ e^-)$ квазибөлүкчөдөн $2(Ag_c^+)$ квазибөлүкчөсү бөлүнүп чыгат.

Ушундай эле көрүнүш F – борборунан башталган борборлордун группасы үчүн да аткарылышы мүмкүн. Анда F – түстөнүү борборунун түзүлүшү $(Na_c^+ e^-)$ түрүндө болушу керек, т.а. берилген борбордун электрону Na_c^+ жана V_a^+ дун ортосунда бөлүнүшү мүмкүн же V_a^+ менен катар жайгашкан Na^+ ионунда болушу мүмкүн.

2) Борборлордун ортосунда S $(\Delta S=0)$ салыштырмалуу инварианттуу өзгөртүп түзүүлөр болушу мүмкүн. Бул өзгөртүп түзүүлөр I карата симметриялуу. Мындай өзгөртүп түзүүлөрдүн бирдик матрицасы $(-0.60; +1; 0)$.

3) E -борборлорунан ар кандай удаалаш өзгөртүп түзүүлөр менен D -, D_1 -, D_2 -, C_1 , C_2 -, C_3 -, B_1 -, B_2 борборлору алынышы мүмкүн. 3-жадыбалда тиешелүү активатордук түстөнүү борборлорунун курамы келтирилген.

4) $(+0.90; +1/2; +1/2)$ өзгөртүп түзүүнүн жолу менен E - борборлорун B - борборлоруна айлантууну карайлы. Ал үчүн E - борборунун электронунун спинине карама-каршы спинге ээ болгон электрону бар $(V_a^+ e^-)$ квазибөлүкчөнү кошобуз. Анда $(V_a^+ e^-)_2$ квазибөлүкчөсүнүн пайда болушун

өзгөртүп түзүү үчүн E- борборунун курамында V_a^+ квазибөлүкчөсүнүн болушу, б.а. E- борборунун түзүлүшү ($Ag_c^+ e^- V_a^+$) түрүндө болушу керек.

5) Борборлордун ар түрдүү мультиплеттерине кирген ар кандай дефекттердин курамын аныктоого болот.

3-жадыбалы

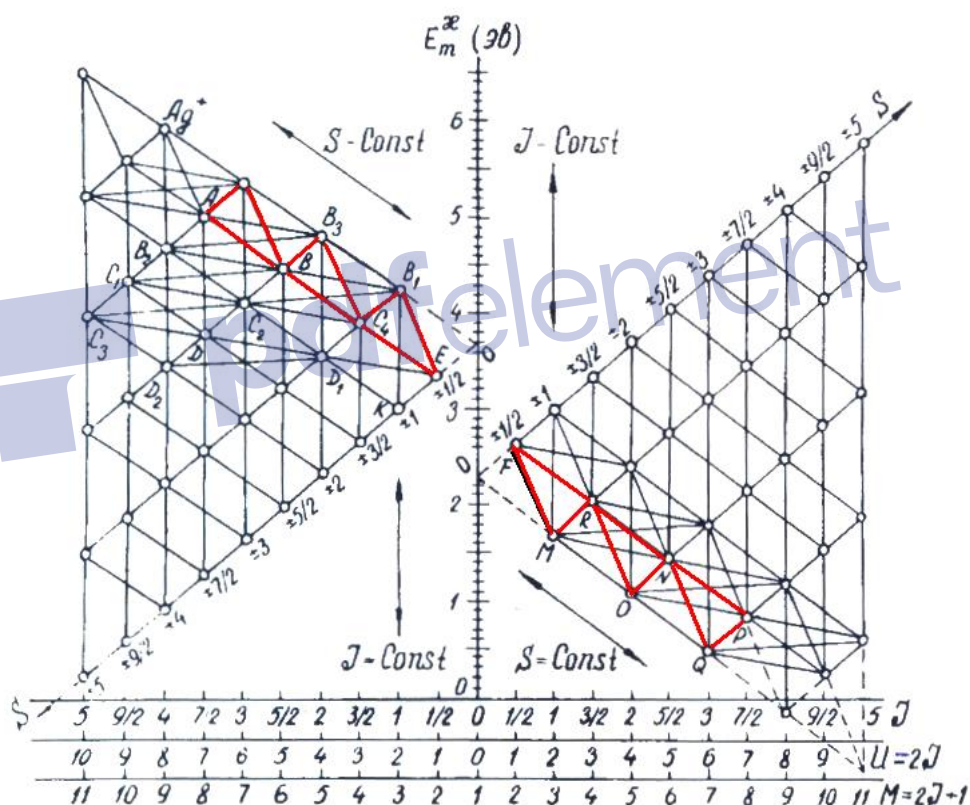
Борборлордун белгилениши	ΔE_m^e (эВ)	Борборлордун курамы	Борборлордун матрицалары ($\Delta E_m^e, \Delta I, \Delta S$)
B_1-	4,25	$Ag_c^+(V_a^+ e^-)_2$	(4,25; 1; 0)
B_3-	4,80	$Ag_c^+(V_a^+ e^-)_4$	(4,80; 2; 0)
-	5,35	$Ag_c^+(V_a^+ e^-)_6$	(5,35; 3; 0)
Ag_c^+ I тиби	5,90	$Ag_c^+(V_a^+ e^-)_8$	(5,90; 4; 0)
-	6,45	$Ag_c^+(V_a^+ e^-)_{10}$	(6,45; 5; 0)
E-	3,35	$Ag_c^+ V_a^+$	(3,35; 1/2; $\pm 1/2$)
C_4-	3,90	$Ag_c^+ V_a^+ (V_a^+ e^-)_2$	(3,90; 3/2; $\pm 1/2$)
B-	4,45	$Ag_c^+ V_a^+ (V_a^+ e^-)_4$	(4,45; 5/2; $\pm 1/2$)
A-	5,00	$Ag_c^+ V_a^+ (V_a^+ e^-)_6$	(5,00; 7/2; $\pm 1/2$)
II тиби	5,55	$Ag_c^+ V_a^+ (V_a^+ e^-)_8$	(5,55; 9/2; $\pm 1/2$)
K-	3,00	$2(Ag_c^+ V_a^+)$	(3,00; 1; ± 1)
D_1-	3,55	$2(Ag_c^+ V_a^+) (V_a^+ e^-)_2$	(3,55; 2; ± 1)
C_2-	4,10	$2(Ag_c^+ V_a^+) (V_a^+ e^-)_4$	(4,10; 3; ± 1)
B_2-	4,65	$2(Ag_c^+ V_a^+) (V_a^+ e^-)_6$	(4,65; 4; ± 1)
III тиби	5,20	$2(Ag_c^+ V_a^+) (V_a^+ e^-)_8$	(5,20; 5; ± 1)
Д-	3,75	$3(Ag_c^+ V_a^+) (V_a^+ e^-)_4$	(3,75; 7/2; $\pm 3/2$)
C_1-	4,30	$3(Ag_c^+ V_a^+) (V_a^+ e^-)_6$	(4,30; 9/2; $\pm 3/2$)
D_2-	3,40	$4(Ag_c^+ V_a^+) (V_a^+ e^-)_4$	(3,40; 4; $\pm 1/2$)
C_3-	3,95	$4(Ag_c^+ V_a^+) (V_a^+ e^-)_6$	(3,95; 5; $\pm 1/2$)
M-	1,70	$(V_a^+ e^-)_2$	(1,70; 1; 0)
O-	1,10	$(V_a^+ e^-)_4$	(1,10; 2; 0)
Q-	0,50	$(V_a^+ e^-)_6$	(0,50; 3; 0)
F-	2,65	$Na_c^+(V_a^+ e^-)$	(2,65; 1/2; $\pm 1/2$)
R-	2,05	$Na_c^+ (V_a^+ e^-) (V_a^+ e^-)_2$	(2,05; 3/2; $\pm 1/2$)
N-	1,45	$Na_c^+ (V_a^+ e^-) (V_a^+ e^-)_4$	(1,45; 5/2; $\pm 1/2$)
P-	0,85	$Na_c^+ (V_a^+ e^-) (V_a^+ e^-)_6$	(0,85; 7/2; $\pm 1/2$)

Мисалы, B - түстөнүү борборлору курамы $Ag_c^0 V_a^+ (V_a^+ e^-)$ болушу керек, себеби E - борборун $(0,60; +1; 0)$ алуу үчүн $Ag_c^0 (V_a^+)$ өзгөртүп түзүүнү эки жолу алмаштыруу менен алынат.

B - борборунун динамикалык варианттагы мындай модели Ag_c^0 атому белгилүү бир убакыттын ичинде эки электрону менен V_a^+ вакансиясынын ордунда болуусу керек. Анда B -борбордун түзүлүшү Ag_a^- болот.

Ошондой эле каралган мисалдардын негизинде Ag_c^+ - борбору $Ag_c^+(V_a^+ e^-)_8$ курамына ээ боло тургандыгы аныкталган. Анда 1-типтеги түстөнүү борбору (Ag_c^+) кристаллдык торчодо өтө жакшы изоляцияланган болот.

Жогоруда аныкталгандай I, II, III-типтердеги түстөнүү борборлорунун 8 электрону $(2+6)$ туюк электрондук катмардык структурага ээ болгондуктан, алар айланасындагы дефекттер менен өз ара начар аракеттенишет. Ошондуктан бул борборлорго жакын жайланышкан кошумча Ag_c^+ ионунун бар же жок экендиги E_m^e чоңдугунун сезилээрлик өзгөрүүсүнө алып келбейт.



5-сүрөт. $NaCl-Ag$ кристаллында E жана F -түстөнүү борборлорунун өзгөртүп түзүүлөрү.

Тиешелүү өзгөртүп түзүүлөрдү колдонуу менен 5-сүрөттө көрсөтүлгөн башка электрондук борборлордун курамын жана түзүлүшүн аныктоого болот.

Катуу заттардагы түзүлүштөрдүн пайда болуусун башкаруу үчүн туруксуздуктарга тиешелүү механизмдерди жана алардын моделдерин иштеп чыгуу менен дефекттердин пайда болуу шарттарын билүү зарыл.

КДЖТ нын жалпы модели радиациялык нурдануунун таасири астында пайда болуучу туруксуздуктардын жетишээрлик кеңири классын камтыйт. Анын бир катар аспектилери туруксуздуктардын башка типтерине өткөрүлүшү мүмкүн.

Дефекттер системасынын өзгөрүшүн башкаруучу негизги процесстер болуп диффузия, дрейфтик кыймылдар, өз ара аннигиляция жана дефекттердин агымдардагы жутулуусу эсептелет. Бул процесстерди эске алуу менен дефекттердин кинетикасын мүнөздөөчү теңдемелерди төмөнкүдөй түрдө жазсак болот:

$$\frac{\partial n_j(r,t)}{\partial t} + \text{div} j_j(r,t) = \theta_j(r,t) - L_j(r,t), \quad (1)$$

$$j_j(r,t) = -D_j \nabla n_j(r,t) + \mathcal{G}_j n_j(r,t), \quad (2)$$

Мында $\theta_j = \theta_j(T, \varepsilon)$ - кошулмалары үчүн дефекттерди генерациялоо ылдамдыгы (T -чөйрөнүн температурасы, $\varepsilon = \text{div} u$ - чөйрөнүн серпилгичтүү деформациясы, u - жылышуу вектору). Ал эми (2) теңдемедеги $j_j(r,t)$ - дефекттердин агымын берет, биринчи кошулуучу коэффициентти $D_j = D_{j0} \exp(-E_{mj} / \kappa T)$ болгон диффузиясын, андагы E_{mj} - диффузиянын активдешүү энергиясын мүнөздөйт. Экинчи кошулуучу деформациянын бир тектүү эмес талаасы менен дефекттердин өз ара аракеттенишүүсү менен шартталган $F_j = -\nabla U$ күчүнүн таасири астында дефекттердин дрейфинин $\mathcal{G}_j = (D_j / \kappa T) F_j$ кыймылынын ылдамдыгын мүнөздөйт. $U = -k \Omega_j \text{div} u$ - бир дефектин деформация талаасы менен аракеттенишүү энергиясы, k - ар тараптуу кысылуу модулу, Ω_j - кристаллда бир дефект пайда болгон учурдагы көлөмүнүн өзгөрүүсүн мүнөздөөчү параметр. Вакансиялар үчүн же кичине радиустагы кошулмалар үчүн $\Omega_j < 0$, түйүндөр арасы үчүн $\Omega_j > 0$ ($\Omega_j \approx d_0^3$, d_0 - торчонун мезгили). (4.10) формуладагы акыркы кошулуучу өз ара рекомбинация жана агымдардагы жутулуунун эсебинен дефекттердин жоголуусун $L_j = L(\varepsilon, T)$ сүрөттөйт.

Биз жегич- галоиддик кристаллдагы радиациялык дефекттердин пайда болуу процессин кароо максатында концентрациялык- деформациялык түзүлүштүн пайда болуу процесси үчүн каралган математикалык моделдештирүүнү пайдаланганбыз.

Нурдантылуучу катуу заттарда пайда болуучу сызыктуу эмес деформациялык-концентрациялык түзүлүштөрдү моделдөөдө деформациялардын өз ара байланышкан талааларынын кооперативдик динамикалык абалын, дефекттердин локалдык баш-аламандыктарынын концентрациясын жана чөйрөнүн температурасын сүрөттөгөн сызыктуу эмес маселелер каралган жана төмөнкү түрдөгү теңдемелер системасы алынган.

$$\frac{\partial n_\alpha(r,t)}{\partial t} = Q_\alpha + D_\alpha \Delta n_\alpha - \frac{D_\alpha k \Omega_\alpha}{\kappa T} \text{div}(n_\alpha \text{grad}(\text{div} u)) - \sum_a \rho_{\alpha a} S_{\alpha a} \quad (3)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c_\tau^2 \Delta u + (c_L^2 - c_\tau^2) \text{grad}(\text{div} u) + \sum_{\alpha=i,v,p} \frac{k}{\rho} \Omega_\alpha \text{grad} n_\alpha + G_N(u) \quad (4)$$

(3) теңдеме α тибиндеги дефекттердин концентрациясынын өзгөрүүсүнүн мүнөздөйт, ал эми (4) теңдеме жылышуу векторунун өзгөрүүсүн аныктайт.

(3), (4) теңдемелериндеги $n_\alpha(r,t)$ α тибиндеги дефекттердин r чекитиндеги жана убакыттын t учурундагы концентрациясы $r=(x,y,z)$; $Q_\alpha = Q_A(r,t)$ -сырткы нурдантуунун таасиринде кыймылда болгон дефекттердин генерациясынын ылдамдыгы; $S_{\alpha\alpha}$ -топтолуулардын пайда болуу ылдамдыгы; T - чөйрөнүн температурасы $D_\alpha = D_0 e^{-E_{m\alpha}/kT}$ - диффузия коэффициенти; $E_{m\alpha}$ - диффузиянын активдешүү энергиясы k – кысылуу модулу; $\Omega_\alpha \approx d_3$ – кристаллдын көлөмүнүнүн бир дефект пайда болгондогу өзгөрүүсүн мүнөздөөчү дилатациялык параметр, d - торчонун мезгили.

(3) теңдемедеги экинчи кошулуучу α тибиндеги дефекттердин диффузиясын жана үчүнчү кошулуучу –дефекттердин дрейфин мүнөздөйт

(4) теңдемедеги үчүнчү кошулуучу дефекттер шарттаган концентрациялык чыңалууну сүрөттөйт, ал эми төртүнчү кошулуучу чөйрөнүн ангармонизмин эске алат.

Иондоштуруучу нурдантуунун таасиринен кристаллдарда жөнөкөй чекиттик дефекттер пайда болушат. Бул дефекттер чөйрөнүн атомдорунун же иондорунун жылышуусу менен байланышкан. Анын натыйжасында дефекттин аймагында деформациялык туруксуздук пайда болушу мүмкүн, ал серпилгичтүү чыңалуулардын пайда болуусун шарттайт.

Бир типтеги дефекттер болгон ваканциялардын системасында деформациялык- диффузиялык туруксуздуктун пайда болуусун карайлы. Анда $n_\alpha = n_v = n$, $n = n'_0 + n_1$, $u = u'_0 + u_1$ десек, n'_0, u'_0 - мейкиндиктик бир тектүү чечимдер, n_1, u_1 – кичинекей козголуулар. $E_j \ll k_B T$, $Q_\alpha = Q = \text{const}$, $\sum_v 4\pi R_{\alpha\alpha} \rho_{\alpha\alpha} = M_\alpha^2 = M^2$ экендигин эске алып жана дефекттердин дрейфин эске

албасак (4) теңдемеден n_1 үчүн төмөнкү теңдемени алабыз:

$$\frac{\partial n_1(r,t)}{\partial t} - D \Delta n_1 = Q - M^2 D \Delta n_1 - \frac{\theta M^2 D n'_0}{k_B T} \text{div} u_1 e^{-\beta \varepsilon} \quad (5)$$

Мында M^2 – дефекттердин диффузиялык жолунун узундугу. Анда $\text{div} u_1 = \varepsilon_1$ деформациясын төмөнкү түрдө беребиз:

$$\varepsilon_1 = A_q \exp(iq(x+y) + \gamma t) \quad (6)$$

Мында A_q - деформациянын баштапкы амплитудасы; q - козголуулардын толкундук саны; $\gamma = \gamma_1 + i\gamma_2$ -туруксуздуктун инкременти. Мындай чечимди деформациянын талаасы эки өлчөмдүү торчо түрүндө берет.

Мына ошентип, жогоруда аныкталган жегич-галоиддик кристаллдардагы түстөнүү жана нурдануу борборлорунун пайда болуу жана бири-бирине айлануу процесстерин изилдеп жана ал процесстерди физикалык жана математикалык моделдештирүүнүн негизинде төмөнкүдөй жыйынтыктарды чыгарууга болот:

1. Жегич-галоиддик кристаллдарда ар кандай абалдардагы электрондорго ээ болгон түстөнүү борборлору төрт кванттык сандарга кошумча изочеттук кванттык санды кийирүү менен аныкталды.
2. Матрицалар жана дефекттердин топторунун окшоштуктарын пайдаланып жегич-галоиддик кристаллдардагы электрондук түстөнүү борборлорундагы ар бир бөлүкчөлөрдүн пайда болуусунун физикалык моделдештирүүсү сунушталат. Мындай моделдештирүүнү пайдалануу түстөнүү борборлорунун бири-бирине айлануу механизмдерин, анын курамын жана түзүлүшүн аныктоого мүмкүнчүлүк берет.
3. Түстөнүү борборунун бири-бирине айлануусун физикалык моделдештирүүдөн көрүнгөндөй, анын курамынын жана түзүлүшүнүн өзгөрүүсү каралган түстөнүү борборуна белгилүү бир иондук-электрондук квазибөлүкчөнүн келип кошулуусу же андан бөлүнүп кетүүсү менен аныкталат.
4. Жегич-галоиддик кристаллдардагы түстөнүү борборлорунун өзгөртүп түзүүсүнүн өзгөчөлүгүн аныктоо кийинки пайда болуучу түстөнүү борборлордун курамын жана түзүлүшүн, алардын өз ара бири-бирине айлануусунун өзгөчөлүгүн жана закон ченемдүүлүктөрүн аныктоого мүмкүнчүлүк берет.
5. Жегич-галоиддик кристаллдардын радиациялык нурдантууда радиациялык дефекттердин пайда болуу процессин мүнөздөөчү математикалык аппарат аныкталган. Ал концентрациялык деформациялык- жылуулук туруксуздуктун (КДЖТ) жана генерациялык деформациялык- жылуулук туруксуздуктун (ГДЖТ) өнүгүү концепциясына негизделген.
6. Концентрациялык деформациялык- жылуулук туруксуздук моделинин негизинде иондук кристаллдардагы радиациялык дефекттердин пайда болуусунун өнүгүү процесси, дефекттердин “кичинекей” козголуусу, катуу заттардагы туруксуздуктун сызыктуу анализи, ички чыңалуулар, дефекттердин топтолууларынын ирээттелген түзүлүштөрүнүн пайда болуусун моделдештирүү каралган.

Диссертациялык тема боюнча жарыкка чыккан илимий эмгектердин тизмеси:

1. Арапов, Б. Группа преобразований и состав электронных центров окраски и свечения в кристаллах NaCl-Ag. [Текст]:/ Б. Арапов, М. Садырова, Б. Каденова.- Изв. ВУЗов.- Бишкек, 2002.-С. 26-31.
2. Арапов, Б. Структура электронных центров и групп преобразований в NaCl-Ag. [Текст]:/ Б. Арапов, Б. Каденова, М. Садырова.-Вестник ОшГУ, сер.физ.-мат. наук., -Ош, 2002, -С.203 - 209.
3. Арапов, Б. О преобразованиях электронных центров окраски и свечения в ионных кристаллах. [Текст]:/ Б. Арапов, М. Садырова, Б. Каденова.-Вестник ОшГУ, сер.физ.-мат.наук.-Ош, 2002. -С.209 - 215.
4. Арапов, Б. Периодичность оптических свойств в щелочно-галоидных кристаллах. [Текст]:/ Б.Арапов, М. Садырова, Б. Каденова.- Вестник

- ОшГУ, Весенняя сессия «Активизация творческих возможностей молодых ученых ВУЗов Юга Кыргызстана». -Ош, Билим, 2002, -С. 19-22.
5. Каденова, Б.А. Моделирование процессов радиационного дефектообразования в ЩГК. [Текст]:/ Б.А. Каденова.- Тезисы докладов. Вестник КНУ им.Ж.Баласагына, Бишкек, 2011, -59 с.
 6. Каденова, Б.А. Моделирование процессов упорядоченных структур радиационных дефектов в ЩГК. [Текст]: / Б.А. Каденова.- ННТ. Бишкек, 2011, № 5, - С.3-5.
 7. Каденова, Б.А. Моделирование процессов радиационного дефектообразования в щелочно-галоидных кристалла. [Текст]:/ Б.А. Каденова. - Известия КГТУ, Бишкек, 2011. №24, -С. 134-136.
 8. Каденова, Б.А. Моделирование образования упорядоченных структур мелких скоплений радиационных дефектов в щелочно-галоидных кристаллах. [Текст]:/ Б.А. Каденова.- Вестник ОшГУ, I выпуск, 2012, №2, - С.199-202.
 9. Каденова, Б.А. Механизмы радиационного дефектообразования в щелочно - галоидных кристаллах. / [Текст]: /Б.А. Каденова, Б. Арапов, М. Садырова. - Вестник ОшГУ, Ош, 2012, №3, -С. 172-178.
 10. Каденова Б.А. Динамика концентрационно-деформационно-тепловых неустойчивости. [Текст]:/ Б.А.Каденова.- ННТ, №4, 2012, С.6-8.
 11. Арапов, Б. Группа преобразований в создании наноструктурных дефектов в ионных кристаллах. / [Текст]: /Б. Арапов, Б. Каденова, Т. Арапов, М. Садырова.- Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. Москва, 2012, №11, -С.48- 53.
 12. Каденова, Б.А. Создание наноструктурных дефектов в ионных кристаллах. / [Текст]: /Б.А. Каденова, Б.А. Арапов, М.М. Садырова, К.Д. Ташкулов.- Вестник КНУ им.Ж.Баласагына, Бишкек. 2013, Серия 3, - С.9-14.
 13. Каденова, Б.А. Моделирование процессов радиационного дефектообразования в ионных кристаллах. / [Текст]: /Б.А. Каденова, Б. Арапов, М. Садырова.- Вестник ОшГУ, Ош , 2013, №2, -С.38-40.
 14. Каденова Б.А. Общая математическая модель разития концентрационно-деформационно-тепловых неустойчивостей. [Текст]:/ Б.А. Каденова, Б. Арапов.- “ННТ”, №5, Бишкек: 2013. –С.85-87.
 15. Каденова, Б.А. Малые возмущения и линейный анализ устойчивости. / [Текст]:/ Б.А. Каденова.- Сборник докладов Иссык-Кульская международная летняя школа по радиационной физике SCORPh – 2013. Бишкек: 2013. – С. 67-70.
 16. Каденова, Б.А. Внутренние напряжения в твердых телах и радиационные дефекты. / [Текст]: /Б.А. Каденова, Е.К. Жаменкеев.- Материалы VI международной научно-методической конференции «Математическое моделирование и информационные технологии в образовании и науке (ММ ИТОН)», Алмата, 2013, – С. 118-121.

01.04.07– “конденсацияланган абалдын физикасы” адистиги боюнча Б.А. Каденованын “Жегич-галоиддик кристаллдардагы радиациялык дефекттердин пайда болуу, бири-бирине айлануу жана ажыроо процесстерин моделдештирүү” деген темада физика- математика илимдеринин кандидаты окумуштуулук илимий даражасын изденип алуу үчүн жазылган диссертациялык жумуштун

РЕЗЮМЕ СИ

Ачкыч сөздөр: Жегич- галоиддик кристаллдар, радиациялык дефекттер, түстөнүү борбору, термостимуляциялык люминесценция, иондук-электрондук квазибөлүкчө, спин, мультиплет, изочеттуулук, концентрациялык деформациялык- жылуулук туруксуздук, генерациялык деформациялык- жылуулук туруксуздук, ирээттелген түзүлүштөр, ички чыңалуу.

Изилдөө объектилери: $NaCl$, KCl , $NaCl-Ag$ жана $KCl-Ag$ жегич-галоиддик кристаллдарындагы радиациялык жол менен киргизилген электрондук түстөнүү борборлору.

Изилдөөнүн максаты: Жегич-галоиддик кристаллдардагы радиациялык дефекттердин пайда болуу, бири-бирине айлануу жана ажыроо механизмдерин изилдөө, топтук өзгөртүп түзүү методдорунун негизинде дефекттердин пайда болуу процесстеринин физикалык жана математикалык моделдештирүүсүн пайдаланып орто аралык жана татаал курамдагы электрондук түстөнүү борборлорунун курамын жана түзүлүшүн аныктоо.

$NaCl-Ag$ кристаллында электрондук түстөнүү жана нурдануу борборлору адитивдик группаны түзүшөт. Матрицалар жана дефекттердин топторунун жалпы окшоштуктарын пайдаланып жегич-галоиддик кристаллдардагы электрондук түстөнүү борборлорунун пайда болуусунун физикалык моделдештирүүсү сунушталат жана анын негизинде пайда болгон иондук-электрондук квазибөлүкчөлөрдүн курамы жана түзүлүшү аныкталган. Физикалык моделдештирүүдөн көрүнгөндөй, түстөнүү борборлорунун бири-бирине айлануусу каралган түстөнүү борборуна белгилүү бир иондук-электрондук квазибөлүкчөнүн келип кошулуусу же андан бөлүнүп кетүүсү менен аныкталат.

Ар түрдүү маанилерин алган татаал түзүлүштөгү иондук-электрондук квазибөлүкчөнүн өнүгүү процесси, дефекттердин “кичинекей” козголуусу, катуу заттардагы туруксуздуктун сызыктуу анализи, ички чыңалуулар, дефекттердин топтолууларынын ирээттелген түзүлүштөрүнүн пайда болуусунун математикалык моделдештирүү каралды.

РЕЗЮМЕ

диссертационной работы Б. А. Каденовой на тему: “Моделирование процессов образования, распада и взаимопревращения радиационных дефектов в щелочно-галоидных кристаллах» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01. 04. 07 - физика конденсированного состояния.

Ключевые слова: Щелочно-галоидные кристаллы, радиационные дефекты, центры окраски, термостимуляционная люминесценция, ионно-электронные квазичастицы, спин, мультиплет, изочетность, концентрационно-деформационно-тепловые неустойчивости, генерационно-диффузионно-деформационные неустойчивости, диффузионно-деформационные неустойчивости, упорядоченные структуры, внутренние напряжения.

Объект исследования: Кристаллы KCl, NaCl, NaCl-Ag и KCl-Ag и образующиеся в нем радиационно наведенные электронные центры окраски.

Цель работы: Определение механизма ионных процессов образования, взаимопревращения и распада радиационных дефектов в ЩГК. На основе метода группового преобразования и физического моделирования образования дефектов определять составы и структуры промежуточных и стабильных электронных центров окраски и центров свечения.

Электронные центры окраски и свечения в кристаллах NaCl-Ag образуют определенную аддитивную группу. Используя матрицы преобразования и совокупности группы дефектов предложено физическое моделирование образования электронных центров окраски в щелочно-галоидных кристаллах. На основе этого определены составы и структуры электронных центров окраски в ЩГК. Как видно из физического моделирования взаимопревращения центров друг в друга обусловлены подходом к центру или отходом от него ионно-электронных квазичастиц. Рассмотрено математическое моделирование процесса образования концентрационно-деформационных структур в твердом теле, малых возмущений радиационных дефектов и внутренние напряжения, образования упорядоченной структуры скоплений дефектов под действием радиационного облучения на основе модели концентрационно-деформационно-тепловых неустойчивостей.

SUMMARY

of the research dissertation of B. A. Kadenova on “Modelling of processes of decay and interconversion of radiation defects in alkali-halide crystals” for the degree of candidate of physical and mathematical sciences.

Specialty: 01.04.07- physics of condensed state

Keywords: alkali-halide crystals, radiation defects, colour centres, thermostimulation luminescence, ion-electron quasi-particle, spin, multiplet, isoparity, concentration-deformation-thermal instabilities, generation and diffusion-deformational instabilities, diffusion-deformation instabilities, ordered structures, internal stresses.

Object of research: Crystals KCl, NaCl, NaCl-Ag and KCl-Ag and radiation induced electronic colour centres formed therein.

Research objective: To determine the mechanism of ion formation processes, interconversion and decay of radiation defects in alkali-halide crystals. To determine the composition and structure of intermediate and stable electronic colour centres and luminescence centres on the basis of group transformations and physical modelling of defects.

Electronic colour centres and luminescence in NaCl-Ag crystals form a certain additive group. Using the transformation matrix and the aggregate group of defects a physical simulation of the formation of electronic colour centres in alkali-halide crystals has been proposed. Based upon this compositions and structures of electron colour centres in alkali-halide crystals have been defined. As seen from the physical modelling the interconversion of centres to each other are conditioned by the approach toward the centre or away from it of ion-electron quasi-particles. The mathematical modelling of the formation of concentration-deformation structures in the solid state, small perturbations of radiation defects and internal stresses, formation of the ordered structure of defect clusters under the influence of radiation exposure based on the model of the concentration-deformation-thermal instabilities.

Басууга берилди: 12.05.2014-ж.

Көлөмү : 1,5 б.т.
Форматы 60x84 1/16.

Буюртма №24
Нуска 100 шт

ОшМУнун “Билим” редакциялык-басма бөлүмү

