

Телефон: (3822)49-15-32
E-Mail: bee@iao.ru стр. 546

Веселова Валентина Владимировна, 5 курс
МГУ им. Ломоносова, физический
Моделирование процессов люминесценции вольфрамата свинца с учетом двух каналов излучательной рекомбинации.
Научный руководитель: Шпиньков И.Н., к. ф.-м. н, ст.н.с., физический МГУ
Адрес: 117513 г.Москва, ул. Бакулева 12-105
Телефон: (095) 438-65-26
E-Mail: vesselovavv@rambler.ru стр. 548

Вильчинская Светлана Сергеевна, аспирант
Томский Политехнический Университет, Электрофизический
Радиационные дефекты в щелочно-галондных кристаллах с примесью йода
Научный руководитель: Лисицын Виктор Михайлович, д. ф.-м. н, профессор, Томский политехнический университет, электрофизический, кафедра лазерной и световой техники
Адрес: 634050, г.Томск, пр. Ленина 30
Телефон: (3822) 41-89-14
E-Mail: svetvil@mail2000.ru стр. 549

Воронин Борис Александрович, научный сотрудник
Институт оптики атмосферы, отделение спектроскопии атмосферы
Спектры поглощения водяного пара в ИК диапазоне
Научный руководитель: Быков А.Д., д. ф.-м. н, в.н.с, Институт оптики атмосферы
Адрес: 634055 г. Томск, пр. Академический 1
Телефон: (3822)49-17-17
E-Mail: boris@asd.iao.ru стр. 551

Воронина Светлана Станиславовна, м. н. с.
Институт оптики атмосферы, отделение спектроскопии атмосферы
Моделирование высоковозбужденных состояний КВ-состояний и центробежные эффекты в молекуле H₂O
Научный руководитель: Быков А.Д., д. ф.-м. н, в.н.с, Институт оптики атмосферы
Адрес: 634055 г. Томск, пр. Академический 1
Телефон: (3822)49-17-17
E-Mail: Svetlana@asd.iao.ru стр. 554

Воронина Элина Ивановна, Старший преподаватель
Новороссийский политехнический институт, Экологии и технологии энергоносителей
Лазерное зондирование молекулярного водорода
Научный руководитель: Шеманин Валерий Геннадьевич, к.т.н., Зам. директора, Новороссийский политехнический институт
Адрес: 353900, Новороссийск, ул. К.Маркса, 20
Телефон: (8617) 25-19-40
E-Mail: dekan@nbkstu.org.ru стр. 556

Воронина Юлия Викторовна, 6 курс
ТГУ, физический
Поглощательный спектр водяного пара в области 14395-14407 обратных см
Научный руководитель: Фирсов Константин Михайлович, д. ф.-м. н, ст. научный сотрудник, институт оптики атмосферы
Адрес: 634034, Томск, пр.Ленина 49
Телефон: (3822)56-20-55
E-Mail: Voronina-Ulia@rambler.ru стр. 558

Галкин Константин Николаевич, 4 курс
Дальневосточный государственный университет, физико-технический

Оптические свойства и электронная структура кремния со встроенными наноразмерными кластерами силицида магния

Научный руководитель: Галкин Николай Геннадьевич, д. ф.-м. н, заведующий лабораторией, Институт автоматизации и процессов управления ДВО РАН

Адрес: 690022 г. Владивосток, ул. Кирова д. 105, кв. 78

Телефон: (4232) 32-06-82

E-Mail: galkinkn@iacp.dvo.ru стр. 559

Герасименко Юлия Владимировна, 5 курс

Воронежский государственный университет, физический

Низкотемпературная релаксация фотовозбужденного хлорида серебра.

Научный руководитель: Ключев Виктор Григорьевич, д. ф.-м. н, профессор кафедры оптики и спектроскопии, Воронежский государственный университет

Адрес: 394027 г. Воронеж, ул. 9 Января, д. 217, кв. 71

Телефон: (0732)79-29-53

E-Mail: vgklyuev@phys.vsu.ru стр. 561

Голицын Александр Андреевич, 1 курс

Новосибирский Государственный Университет, физический

Фантомы на фотографиях

Адрес: 630119 г. Новосибирск ул. Зорге 199-21

Телефон: (3832) 15-20-89

E-Mail: aag@gorodok.net стр. 563

Голубьев Максим Анатольевич, 1 курс

МГУ им. Н.П.Огарева, Институт Физики и Химии

Изучение дисперсионных свойств кристаллов двойных вольфраматов и молибдатов, активированных TR3+ ионами.

Научный руководитель: Рябочкина Полина Анатольевна, к. ф.-м. н, Доцент кафедры общей физики, Институт Физики и Химии

Адрес: 430032 г. Саранск, ул. Энгельса, дом 13а, кв 90

Телефон: (8342) 33-77-37

E-Mail: maxemus@nm.ru стр. 564

Гребнева Светлана Владимировна, 6 курс

ТГУ, физический

Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы CN₂D₂ в диапазоне 2350-2650 см⁻¹.

Научный руководитель: Бехтерева Елена Сергеевна, к. ф.-м. н, доцент, ТГУ

Адрес: 634034 г. Томск, пр. Ленина 49, ком.520

E-Mail: grebnevaSV@yandex.ru стр. 565

Громова Ольга Васильевна, 5 курс

ТГУ, физический

Исследование колебательно-вращательного спектра молекулы H₂S в диапазоне 7300-7900 см⁻¹.

Научный руководитель: Бехтерева Елена Сергеевна, к. ф.-м. н, доцент, ТГУ

Адрес: г. Томск, пр. Ленина 49, ком.410.

E-Mail: gromova@phys.tsu.ru стр. 567

Добромыслов Петр Петрович, 6 курс

СПбГИТМО, компьютерные технологии

Применение метода фазово-согласованной фильтрации для распознавания сигналов различной природы

Научный руководитель: Стафеев Сергей Константинович, д. ф.-м. н, декана ЕНФ, СПбГИТМО

Адрес: 192281 С.Петербург, ул Ярослава Гашека 2-79

E-Mail: Petr.Dobromyslov@mail.ru стр. 569

Жаркова Оксана Михайловна, аспирант
ТГУ, физический

Комплексообразование и фотопроцессы в молекулах PRODANA и кумарина 1

Научный руководитель: Артюхов Виктор Яковлевич, Морозова Юлия Петровна, д. ф.-м. н.,
Адрес: 634001 ул. К. Маркса 81 - 49
E-Mail: krisss@mail2000.ru стр. 571

Жигулина Светлана Валерьевна, 5 курс

Новосибирский Государственный Технический Университет, физико-технический

Антистоксовая флуоресценция красителя феналемин 512 в полимерной матрице при низкоинтенсивном возбуждении

Научный руководитель: Мешалкин Ю.П., д. ф.-м. н, профессор, Новосибирский Государственный
Технический Университет

Адрес: 630121 г.Новосибирск, ул. Забалуева, д.64, кв.24
E-Mail: Zh_sveta@ngs.ru стр. 573

Иванов Андрей Михайлович, инженер

Калининградский Государственный технический университет, фундаментальной подготовки

Фрактальная кинетика люминесценции молекул эозина на поверхности анодированного алюминия

Научный руководитель: Брюханов В.В., д. ф.-м. н, профессор, КГТУ

Адрес: 236013, Калининград,, Лужская 11-9
E-Mail: ridlerg@yahoo.com стр. 575

Каспржицкий Антон Сергеевич, магистрант

Ростовский государственный университет, физический

Теоретическое исследование спектра К-фотопоглощения атома Ве

Научный руководитель: Бугаев Лусеген Арменакович, д. ф.-м. н, профессор кафедры теор. и
вычислительной физики, физический Ростовского Государственного Университета

Адрес: 344023 Ростов-на-Дону ул. Ленина , 229 кв.8
E-Mail: Anton1982@mail.ru стр. 577

Китаева Ирина Викторовна, 4 курс

МГУ им. Ломоносова М.В., физический

Оптические и люминесцентные свойства ряда кристаллов со структурным типом шеелита

Научный руководитель: Михайлин В.В., д. ф.-м. н, зав. каф., МГУ им. Ломоносова М.В.

Адрес: 142190 Моск. Обл., Г. Троицк, Сиреневый б-р д.10 кв.48
Телефон: (095) 939-29-91
E-Mail: Irina_Kitaeva@rambler.ru стр. 579

Коваль Людмила Валерьевна, 5 курс

Дальневосточный Государственный Университет, физико-технический

Формирование границы раздела Si(111)/Fe при комнатной температуре по данным ДОС

Научный руководитель: Галкин Николай Геннадьевич, д. ф.-м. н, Зав. лаб `Оптики и электрофизики`,
ИАПУ ДВО РАН, Институт автоматки и процессов управления, ДВО РАН

Адрес: Владивосток, ул. Пограничная, 26
Телефон: (4232) 32-06-82
E-Mail: luda2603@phys.dvgu.ru стр. 580

Крапивина Татьяна Владимировна, 5 курс

ТГУ, физический

Анализ колебательно-вращательных спектров молекул D2mSe (m=78.80) в диапазоне 2300-4000 1/см.

Научный руководитель: Бехтерева Елена Сергеевна, к. ф.-м. н, доцент, ТГУ

Адрес: г.Северск ул.Крупской 9а-27
E-Mail: garmonya2003@rambler.ru стр. 582

Красиков Дмитрий Николаевич, 5 курс
МГУ им. Ломоносова, физический

Люминесценция иттербий-содержащих полупроводниковых оксидов

Научный руководитель: Герасимова Наталья Владимировна, к. ф.-м. н, м.н.с., физический МГУ, каф. оптики и спектроскопии

Адрес: Москва, Воробьевы горы, ДС МГУ, сектор В, к.351.

Телефон: (8926) 256-19-55

E-Mail: kdn@hotmail.ru стр. 583

Крутяк Наталия Романовна, аспирант

Львовский национальный университет имени Ивана Франко, электроники

Люминесценция монокристаллов $PbWO_4$, легированных PbF_2

Адрес: электроники, ЛНУ им. И.Франко, ул. Драгоманова, 50, г.Львов, 79005, Украина

E-Mail: krutyakn@yahoo.com стр. 585

Крылова Светлана Николаевна, м. н. с.

Институт Физики Сибирского Отделения Российской Академии Наук, физический

Фазовые переходы, индуцированные гидростатическим давлением в кристалле $RbMnCl_3$ - спектроскопия КР и расчет колебательного спектра.

Научный руководитель: Втюрин Александр Николаевич, д. ф.-м. н, заместитель директора, Институт физики СО РАН

Адрес: 660036, Россия, Красноярск, Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, лаборатория молекулярной спектроскопии, Крыловой

E-Mail: slanky@iph.krasn.ru стр. 586

Кулай Тарас Стефанович, м. н. с.

Львовский национальный университет имени Ивана Франко, электроники

Исследования далеких ИК-спектров $4H-CdI_2$

Научный руководитель: Болеста Иван Михайлович, д. ф.-м. н, профессор, зав. кафедры радиофизики, Львовский национальный университет имени Ивана Франко

Адрес: 790170, ул. Тарнавского, 107, г. Львов, Украина

Телефон: (0322) 96-45-65

E-Mail: kulay@rd.wups.lviv.ua стр. 588

Куриная Александра Витальевна, 5 курс

ДВГУ, физический

Применение лазерного индуцированного излучения в исследованиях состояния растений

Научный руководитель: Голик Сергей Сергеевич, аспирант, ДВГУ

Адрес: 690016, г. Владивосток а/я 16-82

E-Mail: alexvit@front.ru стр. 1274

Кухаренко Андрей Игоревич, 5 курс

Уральский государственный технический университет, физико-технический

Люминесценция наноструктурного оксида алюминия возбуждаемая импульсным электронным пучком

Научный руководитель: Чолах Сеиф Османович, д. ф.-м. н, профессор, Кафедра электрофизики УГТУ-УПИ

Адрес: 620046, г.Екатеринбург, ул.Конотопская, д.5, кв.112

E-Mail: ilya@dpt.ustu.ru стр. 590

Лесивцев Виталий Николаевич, аспирант

Львовский национальный университет имени Ивана Франко, электроники

Оптические и люминесцентные свойства слоистых кристаллов CdI_2 интеркалированных металлическим кадмием

Научный руководитель: Болеста Иван Михайлович, д. ф.-м. н, профессор, зав. кафедры радиофизики, Львовский национальный университет имени Ивана Франко

Адрес: ул. Тарнавского, 107, г. Львов, Украина, 79017

E-Mail: lesivtsiv@rd.wups.lviv.ua стр. 592

Литвинова Ман Нен, аспирант

Дальневосточный государственный университет путей сообщения, Естественнонаучный

Электрооптический метод определения кристаллофизических осей кристалла ниобата лития

Научный руководитель: Криштоп Виктор Владимирович, к. ф.-м. н, доцент кафедры `Физика`, ДВГУПС

Адрес: 680021, г. Хабаровск, ул.Серышева, 47, ДВГУПС

Телефон: (4212)35-91-14

E-Mail: krishtop@list.ru стр. 593

Ломанович Константин Александрович, 3 курс

Новосибирский Государственный Университет, физический

Многоочаговый диафрагменный электрический разряд для спектрального анализа жидкостей

Научный руководитель: Санкин Георгий Николаевич, к. ф.-м. н, н.с., Институт гидродинамики им. М.А.

Лаврентьева СО РАН

Адрес: ИГиЛ, просп. Ак. Лаврентьева 15, Новосибирск 630090, Россия

E-Mail: 1-k-a@yandex.ru стр. 1194

Маевский Андрей Геннадьевич, инженер

РНИИ КИ, НТК КЦСИ, нет

Флуоресцентный EXAFS-спектрометр. Первые измерения.

Научный руководитель: Артемьев Александр Николаевич, к. ф.-м. н, начальник лаборатории, РНИИ КИ, НТК КЦСИ

Адрес: 123182, Москва, пл. Курчатова, 1

Телефон: (095) 196-76-08

E-Mail: exafs@nm.ru стр. 595

Майорова Татьяна Львовна, 6 курс

Воронежский госуниверситет, физический

Люминесцентные и фотоэлектрические свойства полликристаллических пленок сульфида кадмия.

Научный руководитель: Ключев Виктор Григорьевич, д. ф.-м. н, профессор кафедры оптики и спектроскопии, Воронежский государственный университет

Адрес: 394068 ул. Хользунова, 50, к.46

Телефон: (0732)20-83-94

E-Mail: mtl084@yandex.ru стр. 596

Марков Игорь Александрович, 4 курс

МГУ им.М.В. Ломоносова, физический

Моделирование релаксации электронных возбуждений широкозонных диэлектриков после поглощения ВУФ фотонов.

Научный руководитель: Васильев Андрей Николаевич, д. ф.-м. н, профессор, МГУ им. М.В. Ломоносова, физический, кафедра оптики и спектроскопии

Адрес: Россия, Москва, Ленинские горы, 119992 (ГСП-2)

Телефон: (095)247-33-03

E-Mail: igormarkov@yandex.ru стр. 72

Молева Наталья Александровна, 5 курс

Воронежский государственный университет, физический

Рекомбинационное взаимодействие центров люминесценции в хлориде серебра

Научный руководитель: Ключев Виктор Григорьевич, д. ф.-м. н, профессор кафедры оптики и спектроскопии, Воронежский государственный университет

Адрес: 394053 г. Воронеж ул. Жукова д. 22 кв. 76

Телефон: (0732)74-08-44

E-Mail: aadm@mail.ru стр. 598

Мосин Олег Владимирович, 5 курс

Ульяновский государственный университет, физико-технический

Модуляционная неустойчивость в системах сильносвязанных волн с дисперсией нелинейности

Научный руководитель: Семенцов Дмитрий Игоревич, д. ф.-м. н, Профессор, зав. кафедрой, Ульяновский государственный университет

Адрес: 432000 г. Ульяновск ул. Пролетарская д.23 кв.2
Телефон: (8422) 44-06-26
E-Mail: srs_enigman@mail.ru стр. 600

Нежданов Алексей Владимирович, аспирант
ННГУ им.Н.И.Лобачевского, физический
Оптические свойства структурно неоднородного кремния легированного атомами эрбия
Научный руководитель: Машин Александр Иванович, д. ф.-м. н, профессор, ННГУ
Адрес: 603016 г.Н.Новгород, ул.Веденяпина, 1а, кв 88
E-Mail: neav3@uic.nnov.ru стр. 602

Овчинников Олег Владимирович, преподаватель
Воронежский госуниверситет, физический
Механизмы люминесценции кристаллов галогенидов серебра
Научный руководитель: Латышев Анатолий Николаевич, д. ф.-м. н, заведующий кафедрой оптики и спектроскопии, Воронежский госуниверситет
Адрес: 394006, г.Воронеж, Университетская пл., 1, кафедра оптики и спектроскопии
Телефон: (0732)20-87-80
E-Mail: Ovchinnikov_O_V@rambler.ru стр. 604

Орлова Анна Николаевна, магистрант
Тверской государственной университет, физико-технический
Влияние высокотемпературного отжига на оптические свойства монокристаллов ниобата лития, подвергнутых различным дефектообразующим воздействиям.
Научный руководитель: Педько Б.Б., к. ф.-м. н, декан физико-технического, Тверской государственной университет
Адрес: 170002 г. Тверь, Садовый пер., 35
E-Mail: s012833@tversu.ru стр. 606

Панина Екатерина Константиновна, нс, к.ф.-м.н.
Институт оптики атмосферы СО РАН, -
Моделирование нелинейно-оптических эффектов в микрочастицах
Научный руководитель: Землянов Александр Анатольевич, д. ф.-м. н, заведующий лабораторией, Институт оптики атмосферы СО РАН
Адрес: 634055, г. Томск, пр. Академический 1, ИОА СО РАН
Телефон: (3822) 49-15-32
E-Mail: pek@iao.ru стр. 608

Пахомова Татьяна Егоровна, старший преподаватель, аспирантка III года обуч.
Якутский государственный университет, физико-технический институт, физический
Расчет вероятностей безрадиационных распадов многоэлектронных систем в jj -связи
Научный руководитель: Сивцев Василий Иванович, к. ф.-м. н, доцент, Якутский государственный университет, физико-технический институт
Адрес: 677000, г. Якутск пр.Ленина 23 кв.32.
Телефон: (4112)49-68-62
E-Mail: taniu@bk.ru стр. 77

Пикуль Ольга Юрьевна, аспирант
ДВГУПС, ЕНФ
Особенности коноскопических фигур в оптических кристаллах
Научный руководитель: Строганов Владимир Иванович, д. ф.-м. н, профессор, ав. кафедрой физики ДВГУПС
Адрес: 680021 г.Хабаровск, ул.Некрасова, д.68, кв. 29
E-Mail: pikoul@mail.redcom.ru стр. 610

Подвинцев Александр Сергеевич, 5 курс
ГОУВПО Уральский Государственный Технический Университет-УПИ, физико-технический
Люминесценция и радиационные дефекты в кристаллах алюминатов щелочно-земельных металлов MAI_2O_4 ($M=Ca, Sr, Ba$)

Научный руководитель: Пустоваров Владимир Алексеевич, к. ф.-м. н, профессор, ГОУВПО Уральский Государственный Технический Университет-УПИ

Адрес: г. Екатеринбург, ул. Мира 19, Кафедра экспериментальной физики

E-Mail: simpson13@bk.ru стр. 611

Путинцева Светлана Николаевна, инженер
Томский политехнический университет, Электрофизический

Влияние уровня возбуждения на люминесценцию полупроводников группы A_2B_6

Научный руководитель: Олешко Владимир Иванович, к. ф.-м. н, доцент, Томский политехнический университет, каф. Лазерной и световой техники

Адрес: 634004 г.Томск, ул. Кирова 2-412

Телефон: (3822)41-89-14

E-Mail: swp1978@mail2000.ru стр. 614

Ржевская Ольга Владимировна, 4 курс

МГУ им. Ломоносова М.В., физический

Исследование люминесцентных оптических свойств ряда кристаллов со структурным типом вольфрамита

Научный руководитель: Михайлин В.В., д. ф.-м. н, МГУ им. Ломоносова М.В.

Адрес: 119234 г.Москва Ленинские горы,ГЗ,ДС, 'В'-837

Телефон: (095) 939-29-91

E-Mail: galadrien@mail.ru стр. 616

Русинов Александр Петрович, аспирант

ГОУ `Оренбургский государственный университет`, физико-математический

Запись нестационарных амплитудных голограмм в системе насыщаемых трехуровневых центров

Научный руководитель: Кучеренко М.Г., д. ф.-м. н, Зав. кафедрой, профессор, ГОУ `Оренбургский государственный университет`, кафедра Радиофизики и электроники

Адрес: 460000 ул. Челюскинцев 22, к. 320

E-Mail: sano232@mail.ru стр. 617

Санжаров Максим Александрович, 4 курс

Томский Государственный Университет, физический

Динамические постоянные молекулы $HDSe$

Научный руководитель: Синецын Евгений Александрович, Бехтерева Елена Сергеевна, к. ф.-м. н, ,

Адрес: 634000 Томск, Ленина 49, к.206

E-Mail: maxisan@mail.ru стр. 619

Свеженцова Екатерина Витальевна, аспирант

Киевский Национальный Университет имени Тараса Шевченко, физический

Влияние модификации поверхности на фотолюминесцентные свойства нанопористого кремния

Адрес: 252139 Киев, ул. Курнатовского 4, кв.211

E-Mail: katt@univ.kiev.ua стр. 620

Сивков Данила Викторович, 3 курс

Сыктывкарский государственный университет, физический

Моделирование влияния аппаратурных искажений на силы осцилляторов резонансов формы в ультрамягких рентгеновских спектрах поглощения

Научный руководитель: Сивков Виктор Николаевич, д. ф.-м. н, профессор, Сыктывкарский государственный университет

Адрес: 167001, г.Сыктывкар, Октябрьский проспект, 55

E-Mail: svn@syktsu.ru стр. 622

Смирнов Андрей Алексеевич, 5 курс
ГОУ ВПО Уральский Государственный Технический Университет-УПИ, физико-технический
Экситоны и перенос энергии в кристаллах нелинейной оптики KPb_2Cl_5 и $RbPb_2Cl_5$
Научный руководитель: Пустоваров Владимир Алексеевич, д. ф.-м. н, профессор, ГОУВПО Уральский
Государственный Технический Университет-УПИ
Адрес: г. Екатеринбург, ул. Автомагистральная 23-65
Телефон: (3432)52-79-25
E-Mail: simpson13@bk.ru стр. 624

Смирнов Михаил Сергеевич, аспирант
Воронежский госуниверситет, физический
Механизм безызлучательной релаксации запасенных светосумм в галогенидах серебра
Научный руководитель: Латышев Анатолий Николаевич, д. ф.-м. н, заведующий кафедрой оптики и
спектроскопии, Воронежский госуниверситет
Адрес: 394006, г. Воронеж, Университетская пл., 1, Воронежский госуниверситет, кафедра оптики и
спектроскопии
Телефон: (0732)20-87-80
E-Mail: opt@phys.vsu.ru стр. 626

Соболева Ирина Владимировна, 5 курс
МГУ им. М.В.Ломоносова, физический
**Фотонные кристаллы и микрорезонаторы с перестраиваемой фотонной запрещенной зоной на
основе анизотропного мезопористого кремния**
Научный руководитель: А.А.Федянин, к. ф.-м. н, с. н. с., МГУ, кафедра квантовой электроники
Адрес: 119992 Россия, Москва, Ленинские горы, МГУ, физфак, кафедра квантовой электроники
Телефон: (095) 939-36-69
E-Mail: irina@shg.ru стр. 692

Совков Денис Евгеньевич, аспирант
Красноярский государственный университет, физический
Влияние локального поля на спектры автоионизационных резонансов
Научный руководитель: Геллер Юрий Исаевич, к. ф.-м. н, доцент кафедры квантовой электроники,
Красноярский государственный университет
Адрес: 660041
Телефон: (3912) 44-54-69
E-Mail: sovkov@mail.ru стр. 99

Старикова Евгения Николаевна, 5 курс
Томский Государственный Университет, физический
**Исследование эмиссионных высокотемпературных спектров молекулы D_2O в диапазоне 300-900
см⁻¹)**
Научный руководитель: Михайленко Семён Николаевич, кандидат наук, научный сотрудник, Институт
оптики атмосферы
Адрес: 634034 г.Томск, пр-т Ленина 49, км.410
E-Mail: starikova_e@iao.ru стр. 628

Тараева Анастасия Юрьевна, 5 курс
МГУ им.Ломоносова, физический
Спектроскопические исследования молекул $EuFOD$ в пористых стеклах и полимерах
Научный руководитель: Герасимова Василиса Игоревна, к. ф.-м. н, ст.науч.сотрудник, НИИЯФ МГУ
Адрес: 119234 г.Москва, Воробьевы горы, ГЗ МГУ, корп.В, к.840
E-Mail: LittleFly@rambler.ru стр. 630

Тищенко Андрей Борисович, 5 курс
Ставропольский государственный университет, физико-математический
**Концентрационная зависимость квантового выхода сенсibilизированной фосфоресценции в
твердых растворах органических соединений**

Чудинов Александр Андреевич, 6 курс
Уральский государственный технический университет, физико-технический
Люминесценция наноструктурного диоксида кремния при возбуждении синхротронным излучением
Научный руководитель: Зацепин Анатолий Федорович, к.т.н., доцент, Уральский государственный технический университет
Адрес: 620098, Россия, Екатеринбург, ул. Ильича, д.-71, корп.-Г, кв.-5
E-Mail: alekc2k@mail.ru стр. 640

Чудинова Татьяна Дмитриевна, 6 курс
Томский Государственный Университет, физический
Интерпретация полосы высокого разрешения 6v1 молекулы PND2.
Научный руководитель: Улеников О.Н., д. ф.-м. н, профессор, ТГУ, ФФ, кафедра оптики и спектроскопии
Адрес: г. Томск, ул. Украинская 5, кв. 2
E-Mail: CTD@mail2000.ru стр. 642

Шадурский Александр Владимирович, 5 курс
Витебский государственный университет, физический
Анализ методов расчета двуцентровых интегралов в системе `MAPLE`
Научный руководитель: Корниенко Алексей Александрович, д. ф.-м. н, заведующий кафедрой общей и теоретической физики, Витебский государственный университет
Адрес: 210036 Республика Беларусь, г. Витебск, Московский проспект 33, ВГУ
E-Mail: korn@vsu.by стр. 1067

Шлыгин Евгений Сергеевич, аспирант
ГОУ ВПО Уральский государственный технический университет - УПИ, физико-технический
Люминесценция центров Cr³⁺ при возбуждении в области края фундаментального поглощения в сложных бериллийсодержащих кристаллах
Научный руководитель: А.В.Кружалов, д. ф.-м. н, зав. кафедрой, профессор, ГОУ ВПО Уральский государственный технический университет - УПИ
Адрес: 620002 Екатеринбург, Мира 19
Телефон: (3432) 75-44-10
E-Mail: shlygin@dpt.ustu.ru стр. 644

Янко Виталий Сергеевич, 5 курс
Санкт-Петербургский государственный Университет, физический
Расчет взаимодействия простых молекул с анионами поверхности ионных адсорбентов
Научный руководитель: Цыганенко Алексей Алексеевич, д. ф.-м. н, в. н. сотрудник, Научно-исследовательский институт физики СПбГУ им. Фока
Адрес: 198504, Санкт-Петербург, Петродворец, ул. Ульяновская, д.1
Телефон: (812)428-45-71
E-Mail: refuznik@yandex.ru стр. 364

Энергообменные реакции в кислородно-йодной среде с высокой плотностью электронного и колебательного возбуждения

Антонов Иван Олегович

Аязов Валерий Николаевич, Уфимцев Николай Иванович

Физический Институт им. П.Н. Лебедева РАН, Самарский Филиал

Аязов Валерий Николаевич, к.ф.-м.н

Antonov@fian.smr.ru

Впервые обнаружен колебательно-возбужденный кислород в активной среде химического кислородно-йодного лазера (ХКЛ) с использованием эмиссионной методики. Анализ спектров люминесценции молекул кислорода на электронно-колебательно-вращательных переходах $O_2(b^1\Sigma_g^+, x') \rightarrow O_2(X^3\Sigma_g^-, x'')$ показал, что в активной среде ХКЛ заселяются колебательные уровни состояния $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ вплоть до $x=5$. Относительная населенность $O_2(b^1\Sigma_g^+, x=1)$ составляет $\approx 22\%$, а $O_2(b^1\Sigma_g^+, x=2) \approx 10\%$. Теоретически показано, что из-за быстрых процессов ЕЕ-энергообмена между молекулами кислорода относительные населенности первого и второго колебательных уровней состояний $O_2(X^3\Sigma_g^-)$, $O_2(a^1\Delta_g)$ и $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ приблизительно одинаковы.

Сравнение интенсивностей линий переходов $O_2(b^1\Sigma_g^+, x') \rightarrow O_2(X^3\Sigma_g^-, x'')$ показало, что несколько процентов молекул $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ колебательно-возбуждены с $x=3, 4$ и 5 . Предложен механизм заселения данных состояний в реакции пулинга $O_2(a^1\Delta_g, x=i) + I(^2P_{1/2}) \rightarrow O_2(b^1\Sigma_g^+, x'=i+2) + I(^2P_{3/2})$, где $i=1, 2$ или 3 , скорость которой увеличивается с ростом колебательного уровня молекулы $O_2(a^1\Delta_g)$.

Сравнение экспериментальных и расчетных результатов показало, что в среде кислородно-йодного лазера при тушении одной молекулы $O_2(a^1\Delta_g)$ образуется в среднем 4.5 колебательных кванта молекулы кислорода.

Изучено влияние колебательно-возбужденного $O_2(a^1\Delta_g)$ на характеристики активной среды ХКЛ - пороговую долю синглетного кислорода и коэффициент усиления. Пороговая доля синглетного кислорода увеличивается с ростом доли колебательно-возбужденного O_2 и может быть на несколько процентов больше, чем считалось ранее. Коэффициент усиления слабо зависит от доли колебательно-возбужденного кислорода.

Спектроскопическое исследование широкозонных фторидных кристаллов активированных редкоземельными элементами

Бежанов Виталий Анатольевич

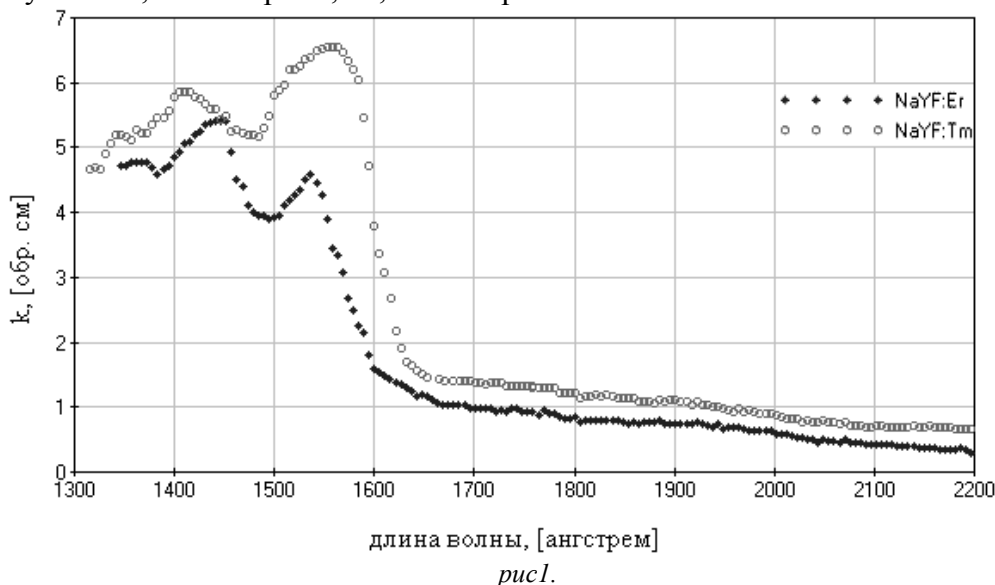
Московский Государственный Университет им. М.В.Ломоносова

Михайлин Виталий Васильевич д.ф.-м.н

wetal@ok.ru

Получены спектры поглощения кристаллов типа $\text{Na}_{0.4}(\text{Y,R})_{0.6}\text{F}_{2.2}$, $\text{Na}_{0.4}\text{R}_{0.6}\text{F}_{2.2}$ (R – трехкратные ионы Er, Tm) в УФ и ВУФ области.

Спектральный ход коэффициента поглощения монокристалла NaYF_3 , активированного трехкратными ионами тулия с концентрацией 0,05 мол.% приведен (в относительных единицах) на (рис. 1). Начало поглощения, определяемого $4f^{12} - f^{11}5d$ переходами иона Tm^{3+} , приходится на $61,3 \cdot 10^3$ обр. см (163нм). В спектрах отчетливо выделяются две полосы поглощения с расстояниями между максимумами порядка 6400 обр. см. Наблюдаемые полосы характеризуются следующими положениями максимумов: $64,5 \cdot 10^3$ обр. см, $70,9 \cdot 10^3$ обр. см.



Спектры поглощения монокристалла NaYF_3 , активированного трехкратными ионами эрбия с концентрацией 0,02 мол.% приведен на (рис. 1).

В спектре можно выделить три полосы поглощения, которые характеризуются следующими положениями максимумов λ_{max} , полуширинами h и значениями коэффициента поглощения k : 1 - $\lambda_{\text{max}}=1646 \text{ \AA}$, $h=4 \text{ \AA}$, $k=1,2 \text{ см}^{-1}$; 2 - $\lambda_{\text{max}}=1540 \text{ \AA}$, $h=70 \text{ \AA}$, $k=4,6 \text{ см}^{-1}$; 3 - $\lambda_{\text{max}}=1444 \text{ \AA}$, $h=80 \text{ \AA}$, $k=5,4 \text{ см}^{-1}$.

Следует отметить влияние люминесценции, искажающее ход коэффициента поглощения в коротковолновой области, вследствие значительных толщин образцов (10мм) и концентраций активатора. Именно этим можно объяснить аномальное падение коэффициента поглощения начиная примерно с 1350 \AA .

Большая полуширина полос поглощения, высокие значения поглощения в этих полосах дают основание идентифицировать наблюдаемые полосы поглощения

переходами из основного состояния $^4I_{15/2}$ иона Er^{3+} на уширенные, как за счет электрон-решеточного взаимодействия, так и частичной разупорядоченности кристаллической структуры матрицы, уровни $4f^{10}5d$ конфигурации этого иона. Рассчитано, что разрешенным $4f \rightarrow 5d$ переходам в Er^{3+} соответствуют следующие значения сил осцилляторов $f_{\text{экср}}$: $2 \cdot 10^{-3}$ и $3 \cdot 10^{-3}$ (соответственно для каждой полосы с максимумом 1540 \AA и 1444 \AA) Полосе с $\lambda_{\text{max}} = 1646 \text{ \AA}$, отвечает спин запрещенный переход из основного состояния Er^{3+} на нижайший $4f^{10}5d$ уровень. Значение сил осцилляторов для этой полосы - $f_{\text{экср}} = 0,07 \cdot 10^{-3}$.

В спектре поглощения самоактивированного кристалла NaErF в УФ и ВУФ области (см. рис. 2) имеется серия резких и узких пиков с полуширинами $5 \text{ \AA} - 10 \text{ \AA}$, интерпретируемые как переходы внутри $4f$ -оболочки эрбия. Малые полуширины пиков, есть следствие экранированности $4f$ -электронов, а относительно большая интенсивность линий поглощения следствие большой (сто процентной) концентрации активатора. По мере продвижения в более коротковолновую область, поглощение медленно растет и на длине волны 1710 \AA составляет 9 обр. см, а затем резко возрастает до 30 обр. см. Для длин волн короче 1710 \AA измерения провести не удалось из-за резкого возрастания поглощения.

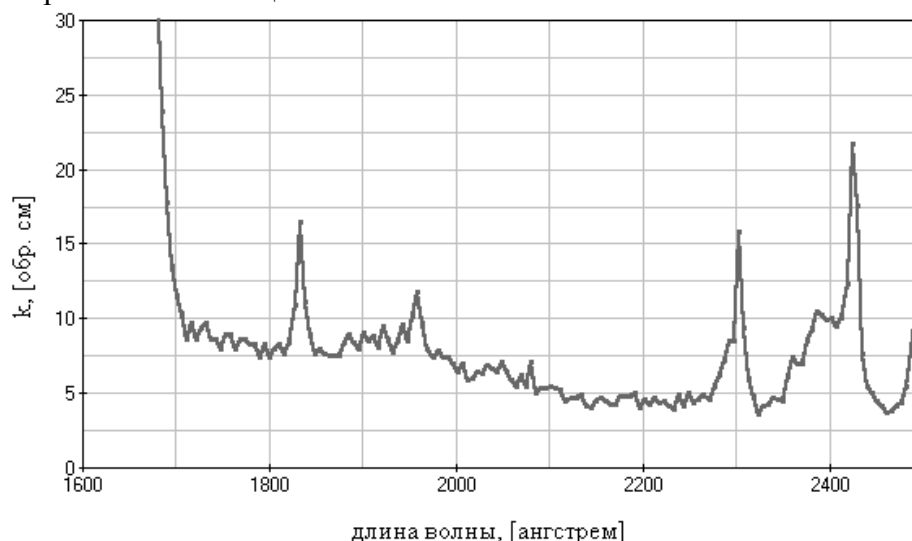


рис.2.

Таким образом, поглощение в области длин волн короче 1710 \AA интерпретировано как край собственного поглощения кристалла NaErF , связанный с интеркомбинационным $4f \rightarrow 5d$ переходом иона Er^{3+} . Значение сил осцилляторов для запрещенных по четности ff - переходов в Er^{3+} составляет порядка 10^{-7} (для каждой полосы с максимумами $2425, 2300, 1960$ и 1830 ангстрем).

Феномен изменения спектров растворов перманганата калия при бесконтактной активации

Бердова Елена Сергеевна

Глухова Нина Александровна, Широносков Валентин Георгиевич

Курганович Владимир Степанович

Учебно-научный центр "Резонансные Технологии" Удмуртского
Государственного Университета, научно-исследовательский центр
"ИКАР"

Широносков Валентин Георгиевич, к.ф.-м.н

svg@uni.udm.ru

Эффект бесконтактной активации жидкостей (БАЖ) при электролизе без диафрагмы был обнаружен экспериментально (1999) Широносковым В.Г. и Широносковым Е.В. [1]. Экспериментам предшествовали теоретические работы [2], в которых доказана возможность решения проблемы $1/R^3$ – возникновения устойчивых резонансных микрокластеров из двух и более диполей (1984). При электролизе, под влиянием излучения от контактно активированной жидкости, бесконтактно активируемая жидкость, как и при других способах бесконтактной активации (магнитной, ультразвуковой, лазерной...), переходит в термодинамически неравновесное состояние с резонансной микрокластерной структурой.

Для исследования активированных жидкостей наряду с широко распространенным методом измерения окислительно-восстановительного потенциала (ОВП) (рис.1) авторами дополнительно был применен метод абсорбционной спектроскопии (спектрофотометрии) в оптическом и СВЧ диапазонах.

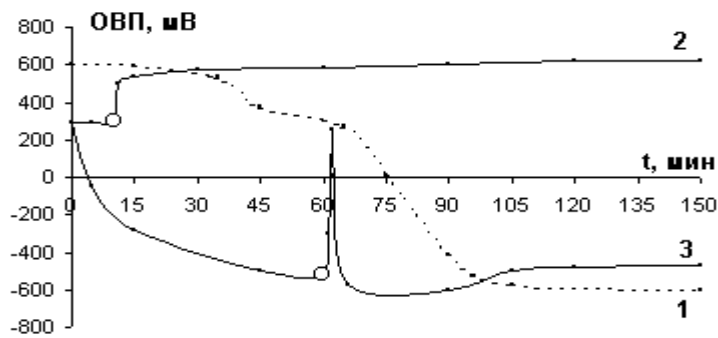


рис. 1. График зависимости ОВП от времени активации: 1- Бесконтактная активация готового 0,006% раствора $KMnO_4$; 2- контрольная дистиллированная вода (с добавлением 0,1% раствора $KMnO_4$ на 10 минуте); 3- Бесконтактная активация дистиллированной воды (с добавлением 0,1% раствора $KMnO_4$ на 60 минуте). Точками отмечены моменты добавления раствора $KMnO_4$.

Проводилась регистрация спектров пропускания растворов в диапазонах 200-750 нм на спектрофотометрах СФ-26, СФ-2000 и 8,3-12,05 ГГц с использованием панорамного измерителя КСВН и ослабления Р2-61 в волноводных трактах. В качестве исследуемых жидкостей использовались дистиллированная вода и растворы $KMnO_4$, применяемые в окислительно-восстановительных методах объемного анализа [4]. В

зависимости от рН среды, окислительная способность перманганата существенно меняется, что отражается на окраске раствора. Обнаруженный феномен заключается в том, что изменение цвета и спектров (рис.2) бесконтактно активированного раствора перманганата калия, а также ОВП (рис.1), происходит без изменения рН раствора и его химического состава, что не соответствует цветовому переходу в стандартных окислительно-восстановительных реакциях.

Регистрация спектров пропускания БА растворов перманганата калия в оптическом (рис. 2а) и СВЧ диапазонах (рис. 2б) проводилась относительно раствора KMnO_4 , находящегося в равновесном термодинамическом (не активированном) состоянии.

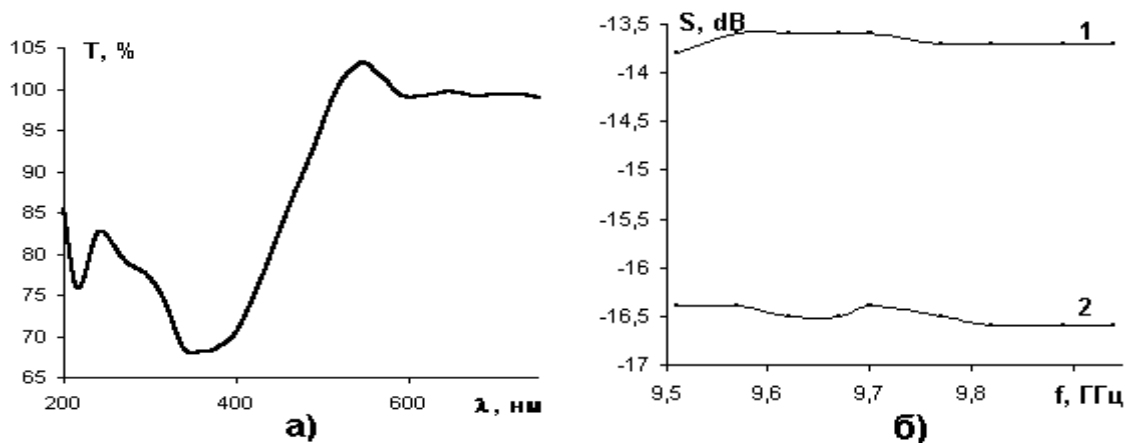


рис. 2. а) спектр пропускания БА 0,008% раствора KMnO_4 относительно необработанного раствора в оптическом диапазоне. б) зависимость коэффициента ослабления от частоты. 1-контрольный 0,1% раствор KMnO_4 , 2-БА. 0,1% раствор KMnO_4 в СВЧ диапазоне.

Изменения спектров растворов при БАЖ без изменения их химического состава достаточно просто можно объяснить переходом жидкостей в неравновесное термодинамическое состояние с избыточной потенциальной энергией за счет образования резонансной микрокластерной структуры из осциллирующих диполей (воды, $\text{OH}\dots$) вблизи электродов [1-3]. На основе теории резонансных нелинейных динамических систем можно показать, что переменное электромагнитное поле от двух синхронно-осциллирующих диполей (СОД) [2, 3] имеет узкий спектр частот (квадрупольный резонансный эффект) и убывает $\sim 1/\nu^4$. Эффект БАЖ при электролизе без диафрагмы позволяет получать термодинамические неравновесные жидкости с микрокластерной структурой и с отрицательным окислительно-восстановительным потенциалом (ОВП) без изменения их химического состава.

Таким образом, как показали опыты, раствор перманганата может играть роль детектора микрокластерной структуры жидкостей при бесконтактной активации растворов. А сам способ БАЖ может послужить основой для новых методов и устройств неравновесной резонансной спектроскопии при обнаружении сверхмалых количеств растворенных веществ и изменений при физических воздействиях различных излучений и факторов на жидкости.

Список публикаций:

- [1] Широносков В.Г., Широносков Е.В., *Опыты по бесконтактной электрохимической активации воды*, сб. докл. 2-й Межд. Симп. Электрохимическая активация в медицине, сельском хозяйстве, промышленности. – М.; ВНИИИМТ АО НПО "Экран", Ч 1, 66-68 (1999) - <http://www.ikar.udm.ru/sb15-12.htm>.
- [2] Широносков В.Г., *Резонанс в физике, химии и биологии*, Ижевск, Изд. дом "Удмуртский университет", 1-92 (2001) - <http://www.ikar.udm.ru/sb22.htm>.
- [3] Широносков В.Г., *Задача двух магнитных диполей с учетом уравнений движений спинов*, Изв. вузов, Физика, 74-78 (1985).
- [4] Алексеев В.Н., *Количественный анализ*, Москва, издательство "Химия", 504 (1972).

О влиянии концентрации на кинетику фосфоресценции органических молекул в растворах при 77 К

Блужин Алексей Сергеевич

Ставропольский Государственный Университет

Дерябин Михаил Иванович, к. ф.-м. н

a_bluzhin@mail.ru

При изучении различных фотофизических и фотохимических процессов, протекающих с участием триплетных состояний органических соединений часто, наряду со спектральными, используются кинетические методы исследования. При этом исследователи получают информацию из результатов изучения времени и характера разгорания и затухания фосфоресценции, а также их зависимости от температуры, концентрации и других параметров. С этой точки зрения актуальным является установление и изучение механизмов концентрационной зависимости времени затухания фосфоресценции органических молекул в твердых растворах при 77 К, поскольку последние часто используются в качестве модельных систем при решении различных задач молекулярной фотофизики.

В работе показано, что существенный вклад в концентрационном тушении фосфоресценции нафталина в стеклообразном необезгаженном растворе вносит миграционно – ускоренное тушение триплетных возбуждений кислородом. Следствием такого тушения является падение интенсивности фосфоресценции нафталина сопровождаемое параллельным уменьшением времени ее затухания. После обезгаживания раствора этот вид тушения снимается, время затухания фосфоресценции и ее интенсивности возрастает.

Установлено, что другой причиной уменьшения времени затухания фосфоресценции нафталина с ростом концентрации раствора является миграционно – ускоренное тушение на ассоциатах. Этот вывод подтверждается результатами исследования спектров поглощения.

Как миграционно – ускоренное тушение на ассоциатах, так и миграционно – ускоренное тушение на молекулах кислорода начинают заметно проявляться, когда среднее расстояние между молекулами в твердом растворе при 77 К становится меньше 1,5 – 1,7 нм. Это хорошо согласуется с обменно-резонансным механизмом передачи энергии в процессе ее миграции по молекулам нафталина. При увеличении концентрации раствора среднее расстояние между молекулами нафталина уменьшается, вероятность передачи энергии возрастает, что уменьшает время поиска возбуждением тушителя. В результате этого константа скорости безызлучательной дезактивации триплетных возбуждений возрастает, а время их жизни сокращается. Это и является основной причиной сокращения времени затухания фосфоресценции нафталина в твердых растворах с ростом их концентрации.

Таким образом результаты проведенных исследований свидетельствуют о том, что существенный вклад в концентрационное тушение фосфоресценции необезгаженных стеклообразных растворов органических соединений при 77 К может вносить миграционно – ускоренное тушение триплетных возбуждений молекулами кислорода. Этот вид тушения заметно влияет на параметры фосфоресценции

примесных центров, когда среднее расстояние между ними становится меньше чем 1,5 нм и жизни триплетных возбуждений больше времени поиска ими молекул кислорода.

Особенности двухфотонной флуоресценции органических молекул в микрочастице при взаимодействии с фемтосекундным лазерным излучением

Быкова Елена Евгеньевна

Гейнц Юрий Эльмарович

Институт оптики атмосферы СО РАН

Землянов Александр Анатольевич, д.ф-м.н

bee@iao.ru

Дифракция лазерного излучения на прозрачной сферической микрочастице сопровождается увеличением интенсивности оптического поля во внутренних зонах, расположенных вблизи освещенной и теневой ее поверхностей. Поэтому появляется возможность существенного снижения энергетических порогов нелинейных эффектов, таких как многофотонное поглощения и флуоресценция, многофотонная ионизация.

В настоящей работе исследуется задача о двухфотонной флуоресценции органических молекул, помещенных в открытый оптический резонатор–микрочастицу, который накачивается фемтосекундным лазерным импульсом.

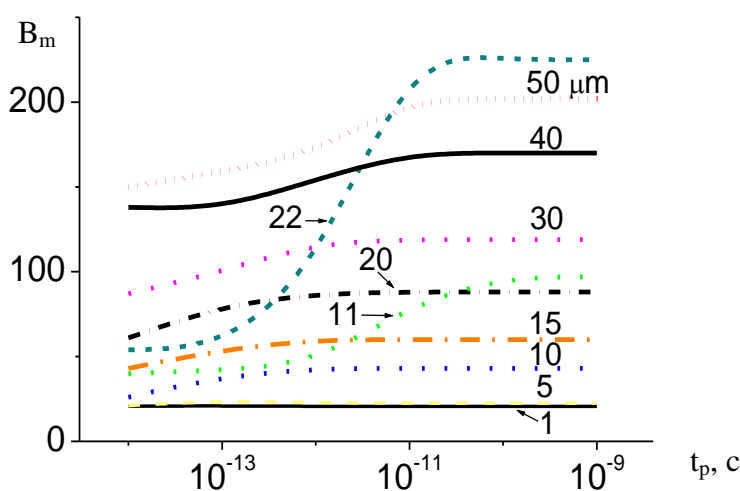


рис.1

На рис.1 показана зависимость отношения $V_m = I_{max}/I_{max}^0$, максимально достижимой интенсивности оптического поля за все время дифракции в зоне фокуса оптического поля вблизи теневой поверхности частицы к пиковой интенсивности воздействующего импульса от длительности лазерного импульса t_p для различных размеров частиц. Видно, что в целом при укорочении лазерного импульса происходит снижение абсолютного максимума интенсивности поля от его стационарного значения. Однако это не препятствует реализации достаточно высоких уровней фокусировки и,

таким образом, обеспечению реализации двухфотонной флуоресценции в локальных областях микрочастицы.

На рис.2 показана выбранная модель спонтанной релаксации двухфотонно возбужденной молекулы.

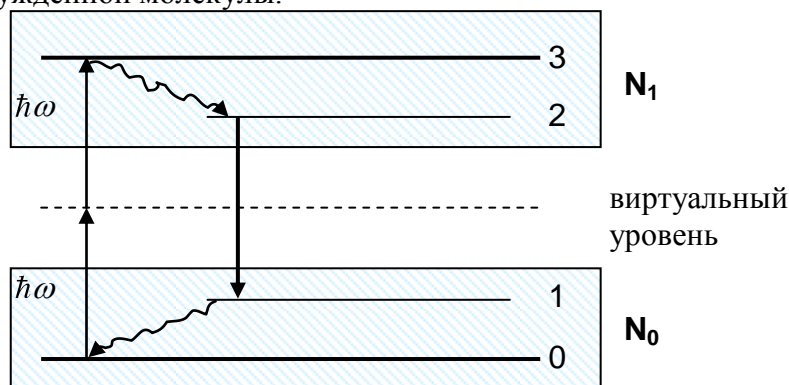


рис.2

Кинетические уравнения для данной модели имеют следующий вид:

$$\frac{dN_0}{dt} = -N_0\sigma_2 I^2 + N_1 \left(\frac{1}{\tau} + \sigma_{10} I \right), \quad (1)$$

$$\frac{dN_1}{dt} = N_0\sigma_2 I^2 - N_1 \left(\frac{1}{\tau} + \sigma_{10} I \right). \quad (2)$$

Здесь σ_2 – сечение двухфотонного поглощения, τ - время спонтанной релаксации, σ_{10} – сечение вынужденного перехода, N_0 и N_1 – концентрации молекул на нижнем и верхнем уровнях.

В работе проведен расчет интенсивности спонтанной двухфотонной флуоресценции органических молекул, помещенных в диэлектрическую частицу – микрорезонатор.

В качестве модели спонтанного излучения использовалась модель излучения классических диполей. Для интенсивности спонтанного излучения, усредненной по ориентации, положению диполей в объеме частицы, а также по флуктуациям фазы излучающего диполя для поздней стадии процесса ($t \gg t_p$) получено следующее выражение:

$$I_s(\vec{r}, t) = \frac{c\sqrt{\epsilon_a}}{8\pi} e^{-\frac{t-t_p}{\tau}} \sum_n \sum_m |A_n^0|^2 |\vec{E}_n(\vec{r})|^2 \Pi_{nm},$$

где $\Pi_{nm} = \int_V |\vec{E}_n(\vec{r}')|^2 |\vec{E}_m(\vec{r}')|^4 d\vec{r}'$ - интегралы пространственного перекрытия полей

накачки и спонтанного излучения, суммирование происходит по модам накачки (m) и модам спонтанного излучения (n); $|A_n^0|$ - амплитуда моды спонтанного излучения в момент $t = t_p$, зависящая от квантовых свойств молекул, пропорциональная времени затухания в резонаторе и пиковой интенсивности импульса I_{\max}^0 , \vec{E}_n – вектор ТЕ-моды.

Анализ выражений для $I_s(\vec{r}, t)$ показывает, что для фемтосекундного излучения в микрорезонаторе модифицируется квантовый выход флуоресценции. Интенсивность

спонтанного излучения существенно зависит от положения излучающего объема в микрорезонаторе.

Моделирование процессов люминесценции вольфраматов свинца с учетом двух каналов излучательной рекомбинации.

Веселова Валентина Владимировна

Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова

Шпиньков Игорь Николаевич, к.ф.-м.н

vesselovavv@rambler.ru

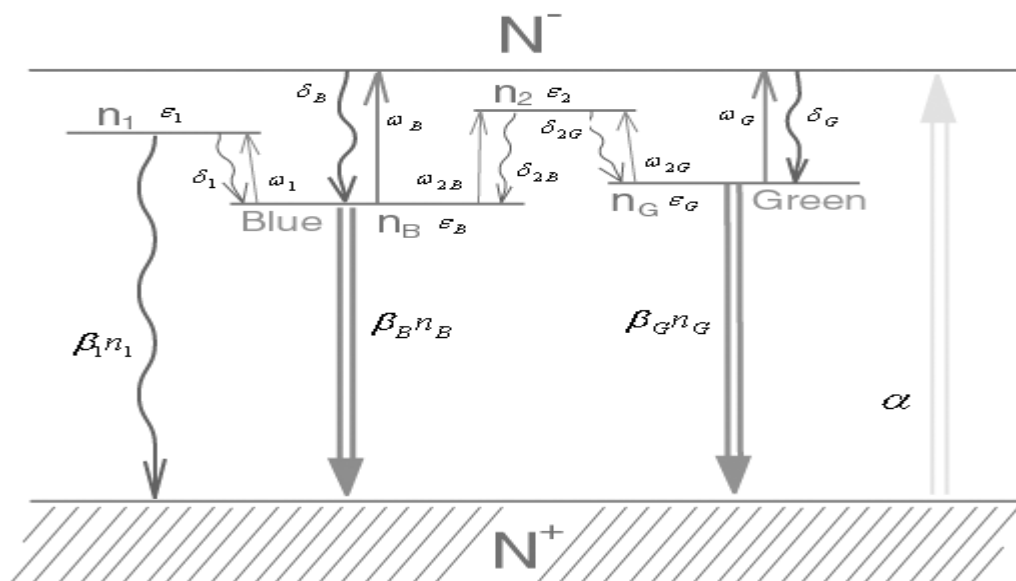
Последние десятилетие в различных исследовательских центрах по всему миру был получен обширный экспериментальный материал по люминесцентным свойствам вольфрамата свинца. Были получены спектры люминесценции, кривые затухания люминесценции, зависимость спектра люминесценции от плотности возбуждающего излучения, а также температурная зависимость люминесценции PbWO_4 .

Среди особенностей спектра люминесценции PbWO_4 особый интерес может представлять тот факт, что при изменении температуры изучаемого образца может происходить перераспределение интенсивностей между различными линиями спектра люминесценции.

Для объяснения данного явления был предложен широкий спектр моделей, однако численного моделирования температурных зависимостей спектров люминесценции проведено не было.

В данной работе предложен метод описания данного явления посредством взаимодействующих центров люминесценции. При помощи зонной схемы и её математической интерпретации проводится численное моделирование. В качестве основы взята модель предложенная в статье [1].

Так же в работе планируется произвести сравнение экспериментальных и полученных при моделировании спектров



Кинетические уравнения, описывающие эту систему, имеют следующий вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dN^+}{dt} = \alpha - \beta_B n_B N^+ - \beta_G n_G N^- - \beta_1 n_1 N^+ \\ \frac{dN^-}{dt} = \alpha - \delta_B N^- - \delta_G N^- + \omega_B n_B + \omega_G \omega_G \\ \frac{dn_1}{dt} = \omega_1 n_B - \beta_1 n_1 N^+ - \delta_1 n_1 \\ \frac{dn_2}{dt} = \omega_{2B} n_B + \omega_{2G} n_G - \delta_{2B} n_2 - \delta_{2G} n_2 \\ \frac{dn_B}{dt} = \delta_B N^- + \delta_1 n_1 + \delta_{2B} n_2 - \beta_B n_B N^+ - \omega_B n_B - \omega_1 n_B - \omega_{2B} n_B \\ \frac{dn_G}{dt} = \delta_G N^- + \delta_{2G} n_2 - \beta_G n_G N^+ - \omega_G n_G - \omega_{2G} n_G \end{array} \right.$$

Эти уравнения не являются независимыми, так как переменные в них связаны законом сохранения заряда

$$N^+ = N^- + n_B + n_G + n_1 + n_2,$$

однако понадобятся они нам все.

Список публикаций:

- [1] A.N. Belsky, I.A. Kamenskikh, V.N. Kolobanov, V.V. Mikhailin, P.A. Orekhanov, I.N. Shpinkov, A.N. Vasil'ev, *Relaxation of electronic excitations in scheelite tungstate. Tungstate Crystals*, 1998.
- [2] P. Lecog, I. Dafinei, E. Auffray, M. Schneegans, M.V. Korzhik, O.V. Missevitch, V.B. Pavlenko, A.A. Annenkov, V.L. Kostylev, V.D. Ligon, *Lead tungstate (PbWO₄) scintillators for LHC EM calorimetry. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. 1995.

Радиационные дефекты в щелочно-галогидных кристаллах с примесью йода

Вильчинская Светлана Сергеевна

Корепанов Владимир Иванович

Томский Политехнический Университет

Лисицын Виктор Михайлович, д.ф-м.н

korepan@ephd.tpu.ru

Щелочно-галогидные кристаллы (ЩГК) с гомологическими примесями интересны тем, что они позволяют изучить влияние локальной деформации решетки на процессы дефектообразования. В реальных кристаллах такого рода дефектности в виде различных видов деформаций всегда очень много. Поэтому выявление их влияния на свойства материала является важной задачей. ЩГК с гомологическими примесями могут служить в качестве модельных объектов для изучения характера и степени влияния локальных деформаций на процессы радиационного дефектообразования в ионных кристаллах. При низких температурах в ШГК с примесями наряду с собственными, обнаружены экситоны, связанные с примесью. К настоящему времени,

однако, нет полностью устоявшегося мнения о структуре локализованных экситонов (ЛЭ) в этих системах, полной информации о механизмах их распада, характере влияния примесей на процессы генерации и стабилизации F,H-пар.

Поэтому, основная цель наших исследований - получить дополнительные сведения об этих процессах. В частности о природе наименее изученных примесных полос люминесценции в кристалле KCl:I.

В кристалле KCl:I при импульсном электронном возбуждении наблюдается свечение, обусловленное присутствием примеси йода. В спектре импульсной катодолюминесценции (ИКЛ) можно выделить четыре основные полосы с максимумами при 5.88 эВ, 4.64 эВ, 3.4 эВ, 2.64 эВ. Полоса 4.64 эВ обусловлена излучательным распадом экситонов, захваченных на двух ионах примеси йода (I_2^-)^{*} (димерах). Считается, что полоса 2.64 эВ в KCl:I обусловлена свечением гетероядерных триплетных экситонов (ClI^-)^{*}. В кинетике свечения этой полосы наблюдаются две экспоненциальные составляющие с $\phi_1 = 130$ мкс и $\phi_2 \leq 20$ нс. Природа полосы 3.4 эВ в KCl:I не установлена. Поэтому нами были проведены подробные исследования спектрально-кинетических характеристик полос люминесценции, возникающих в кристаллах KCl:I при импульсном электронном возбуждении в области спектра 3 – 4эВ и сделан анализ природы центров свечения, ответственных за эти полосы. Для анализа использовались также результаты исследований экситонной люминесценции в кристаллах KCl:Br.

Исследования проводились методом оптической спектроскопии с наносекундным временным разрешением при температурах 22-170 К. Возбуждение образцов производилось сильноточным электронным пучком с параметрами: плотность потока энергии за импульс < 0.01 Дж/см², средняя энергия электронов - 200 кэВ, длительность импульса - 7нс. Кристаллы KCl:I и KCl:Br перед исследованиями отжигались в вакууме при T=900К в течение 6 часов.

Измерены спектры ИКЛ кристалла KCl:I с концентрацией 1,2 М% при T=25К, в разные от начала воздействия импульса электронов моменты времени (в максимуме возбуждающего импульса и через 1мкс). Помимо исследованных ранее полос с максимумами 4.64 эВ, 3.4 эВ и 2.64 эВ, при достаточно высоких концентрациях примеси нами обнаружена интенсивная полоса с максимумом при 3,8 эВ. Для детального изучения полос 3,4 и 3,8 эВ нами были подробно исследованы кинетики затухания и интенсивности свечения в максимумах полос и их температурные зависимости в интервале 27-240К. Кинетика затухания свечения в максимуме полосы 3,4 эВ при 25К описывается набором экспонент с $\tau_1 = 120$ мкс, $\tau_2 = 38$ мкс, $\tau_3 = 2$ мкс. Кинетика затухания свечения в максимуме полосы 3,8эВ описывается в основном компонентом с $\tau_3 = 1$ мкс и компонентом с $\tau_2 = 5,8$ мкс. Изучены температурные зависимости характеристических времен затухания, интенсивностей свечения в максимумах полос и высвеченных светосумм длинновременных компонентов с $\phi_1 = 120$ мкс, $\phi_2 = 38$ мкс для полосы 3.4 эВ и компонентов с $\tau_3 = 1$ мкс и $\tau_2 = 5,8$ мкс для полосы 3,8 эВ. Для полосы 3,4эВ тушение свечения обеих компонентов происходит в районе 120К. Однако при этом происходит также перераспределение заселенностей состояний ответственных за $\phi_1 = 120$ мкс и $\phi_2 = 38$ мкс в пользу компонента с $\phi_2 = 38$ мкс. Энергии активации тушения, вычисленные из аррениусовых зависимостей $\ln I / \phi = f(1/T)$ оказались равными 0,1эВ. Тушение свечения обеих компонентов полосы 3,8эВ происходит в районе 100К с энергией активации 0,095эВ.

Для выяснения природы полос в области 3 – 4эВ были исследованы спектры с разной концентрацией йода и проведено сравнение изученной люминесценции с аналогичным свечением в кристаллах KCl:Br. Такое сравнение может быть полезно по той причине, что эти две системы отличаются только степенью локальной деформации решетки, но не характером ее, так как оба атома I и Br больше атома Cl. Поэтому можно предположить, что в этих кристаллах должны создаваться при облучении одинаковые по строению электронные возбуждения с близкими параметрами полос излучения. В самом деле, в KCl:Br в области спектра 3-4эВ обнаружена полоса, которую отнесли к свечению локализованных экситонов, связанных с димерами брома (квадратичная зависимость интенсивности от концентрации Br). Нами подробно изучены температурные зависимости интенсивности и времени жизни этой полосы. Из измерений спектров ИКЛ кристалла KCl:I через 1мкс, 2мкс и 25мкс после окончания возбуждения СЭП при $T = 27\text{K}$ с концентрацией 0,6 М% и 1,2 М% установлено, что в KCl:I (1,2М%) соотношение интенсивностей полос 4.6эВ (димеры) и 3.8эВ равно $I_{4.6} : I_{3.8} = 157$, а в KCl:I (0,6М%) соотношение $I_{4.6} : I_{3.8} = 83$. То есть с изменением концентрации интенсивность излучения меняется линейно. Таким образом, эти соотношения свидетельствуют о принадлежности этой полосы к излучению мономеров.

Проведенные исследования показали, что в KCl:I наблюдается такой же набор полос свечения ЛЭ, как и в KCl:Br. Это совпадение легко объясняется одинаковым характером релаксации решетки вокруг примесей I и Br, так как они оба тяжелее аниона основы кристалла KCl. Влияние размера примеси сказывается лишь на изменении соотношения микросекундных составляющих полос (3.4 эВ и 2.64 эВ в KCl:I и 3.55 эВ и 2,5 в KCl:Br) и незначительным смещением их максимумов. Совершенно очевидно, что ядерные конфигурации полос – аналогов в обоих кристаллах должны быть одинаковы.

По итогам работы можно сделать следующие выводы.

1. Обнаружена и исследована полоса 3,8эВ в KCl:I при низких температурах.
2. Показано, что полоса 3,8эВ в KCl:I обусловлена излучательным распадом ЛЭ связанных с мономерами примеси йода.

Спектры поглощения водяного пара в ИК диапазоне

Воронин Борис Александрович

Институт оптики атмосферы

Быков Александр Дмитриевич, д.ф-м.н

boris@asd.iao.ru

В данном докладе представлен анализ современного состояния исследования спектра водяного пара в ИК диапазоне. Как известно, кроме основной изотопной модификации H_2^{16}O , в спектрах поглощения также проявляются линии других изотопических модификаций H_2^{18}O , H_2^{17}O , HDO, а также HD^{18}O и HD^{17}O . В таблице приводятся данные по природному изотопическому составу и некоторые характеристики спектров изотопических модификаций водяного пара H_2O согласно наиболее полной на сегодняшний день базе данных (БД) HITRAN 2000 [1].

Код	Изотопическая модификация	Изотопический состав	Диапазон, см ⁻¹	Диапазон, мкм	Число линий
161	H ₂ ¹⁶ O	0,997317	0,4-22657	25000-0,44	31683
181	H ₂ ¹⁸ O	0,00199983	6-13901	1666,7-0,71	7424
171	H ₂ ¹⁷ O	0,000372	6-11144	1666,7-0,89	3755
162	HD ¹⁶ O	0,00031069	0,007-5508	1,4·10 ⁶ -1,81	9796
182	HD ¹⁸ O	0,000000623	1173-1685	8,52-5,93	438
172	HD ¹⁷ O	0,000000116	1234-1599	8,10-6,25	175
Общее число линий H ₂ O в БД HITRAN 2000					53217

На рисунке представлены рассчитанные «плотности» линий в спектрах, полученных на основе БД [1] для различных изотопных модификаций H₂O. Плотность линий оценивалась следующим образом. Если расстояние между соседними линиями меньше 20 см⁻¹, то «плотность» принималась равной 1, иначе 0.

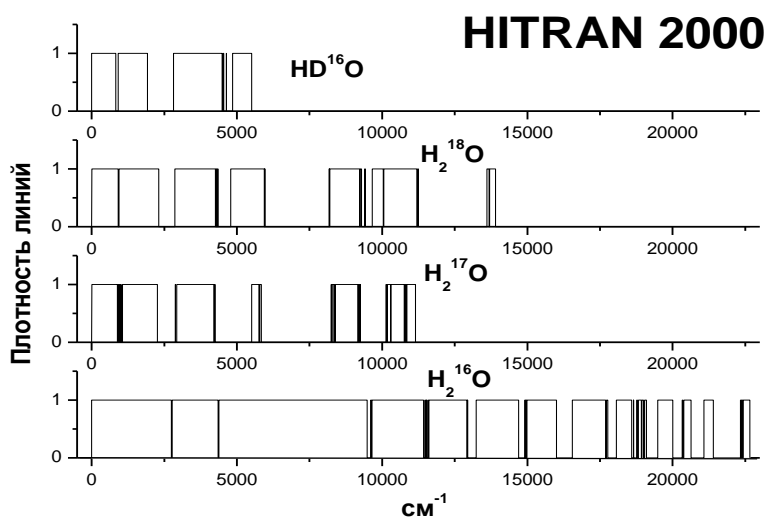


рис.1 Плотность линий в спектре поглощения водяного пара для основных изотопических модификаций (согласно БД HITRAN 2000).

Как видно из рисунка и таблицы, существуют диапазоны, где информация о линиях отсутствует для всех изотопических модификаций. В основном это относится к окнам и микроокнам прозрачности атмосферы, но, как было показано в [2,3], линии поглощения H₂O, отсутствующие в современных БД, могут давать значительный вклад для ряда атмосферных приложений. В [2] указывается, что учет слабых линий водяного пара, обычно не используемых в атмосферных расчетах, в диапазоне 4000–20000 см⁻¹ дает дополнительный вклад в уменьшение освещенности земной поверхности солнечным излучением до 1,6% на спектральных интервалах шириной 100 см⁻¹ в области 0,7 мкм.

Необходимо отметить, что для оценок [2,3] дополнительно к данным БД HITRAN 2000, использовались слабые линии из наиболее точного на настоящий момент ab initio расчета, однако расчет [4] имеет ряд недостатков связанных с ограниченной точностью интенсивностей и центров линий [5]. Кроме того, в работе [4] есть проблема с неоднозначным колебательно-вращательным отнесением переходов, а также там отсутствуют параметры линий - такие как полуширина, коэффициенты температурной зависимости и другие. В БД HITRAN кроме ошибок идентификации и отсутствия части

параметров линий существуют проблемы компиляции данных из разных источников, см. например [6].

Несмотря на то, что в России существует группы исследователей, занимающихся идентификацией и моделированием спектров H_2O , отсутствует отечественный банк данных по водяному пару, в котором бы компилировались последние результаты анализа отечественных и зарубежных спектров. Среди отечественных БД можно отметить только информационную систему (<http://spectra.iao.ru>), которая также не лишена недостатков.

Итак, можно выделить 3 проблемы современной спектроскопии H_2O .

1) Необходимо расширение массива спектральной информации, регистрации и анализа новых спектров посредством новых линий как в ИК, так и в видимом и в УФ диапазонах.

2) Необходимо устранение ошибок для линий, уже внесенных в БД. К таким относятся ошибки идентификации и ошибки измерений. После этого станет возможным проведение более точных атмосферных расчетов.

3) Необходимо устранение ошибок компиляции. Сюда необходимо отнести систематические ошибки, которые связаны как со стандартами частоты, так с неточностью перевода различных данных к одной температуре и давлению. Для банков данных нужно применить новый принцип формирования, когда для каждой линии приводятся данные из оригинального источника с указанными параметрами эксперимента.

Только совершение подобной титанической работы может привести к качественно новому пониманию молекулярной динамики, термодинамических и физических свойств такой обычной и удивительной молекулы как H_2O .

Работа поддержана грантом РФФИ №02-07-90139-в.

Список публикаций:

[1] www.hitran.com

[2] Воронин Б.А., Насретдинов И.М., Серебренников А.Б., Чеснокова Т.Ю., *Оптика атмосферы и океана.*, 16(3), 298-302. (2003).

[3] Chesnokova T.Yu., Firsov K.M., Nasretdinov I.M., Serebrennikov A.B., Voronin B.A., *Proceedings of SPIE.*, 5311., 272-278. (2003).

[4] Partridge H., Schwenke D., *J. Chem. Phys.*, 106(11). 4618-4639. (1997).

[5] Воронин Б.А. *Изв. вузов. Физика.*, 3., 93-100., (1999).

[6] Giver L.P., C. Chackerian Jr., Varanasi P., *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.*, 66. 101-105. (2000).

Моделирование высоковозбужденных колебательно-вращательных состояний и центробежные эффекты в молекуле H₂O

Воронина Светлана Станиславовна

Быков Александр Дмитриевич

Институт Оптики Атмосферы

Быков Александр Дмитриевич, д.ф.-м.н

Svetlana@asd.iao.ru

Исследования спектров поглощения молекулы H₂O представляют особый интерес для атмосферных исследований, поскольку водяной пар – газовая составляющая атмосферы, обеспечивающая около 70% поглощения приходящего солнечного излучения. По этой причине детальному изучению спектров поглощения, излучения и рассеяния H₂O посвящено большое количество исследований. В последние годы интерес исследователей переместился в область высокоэнергетических состояний и спектров в ближней ИК, видимой и ближней ультрафиолетовой области.

Данная работа направлена на изучение высоковозбужденных состояний молекулы воды – типичного представителя легких асимметричных волчков с сильными эффектами нежесткости. Конкретной целью является моделирование высоких состояний и объяснение на основе новых моделей слабой полосы поглощения в области 270 нм, наблюдающейся в эксперименте 0, но не интерпретированной до сих пор. Часть работы посвящена расчетам недиагональных матричных элементов, обуславливающих т.н. HEL – резонансы, связанные с проявлениями сильного центробежного эффекта.

Был выполнен анализ взаимодействия основного \tilde{X}^1A_1 и возбужденного \tilde{B}^1A_1 электронных состояний молекулы воды, который показал, что центробежное искажение вращающейся молекулы вблизи линейной конфигурации приводит к их существенному перемешиванию состояний (в случае, когда волновые функции локализуются вблизи линейной конфигурации). Как результат, переходы на высокие изгибные состояния, такие как (0V₂0) с V₂~20, в пределах основного электронного состояния могут быть интенсивными благодаря переносу интенсивности от сильной электронной полосы \tilde{B}^1A_1 . Чтобы определить долю переносимой интенсивности был рассчитан коэффициент перемешивания $\eta = \eta_{el} \eta_{vr}$, $\eta_{vr} = \sin \gamma$ (η_{el} - коэффициент перемешивания для электронных состояний, η_{vr} - коэффициент перемешивания колебательно-вращательных состояний). Для определения η_{vr} вычислялось следующее выражение:

$$\gamma = \frac{1}{2} \arctg \left(\frac{2 \cdot \langle \psi_{vr}^{(\tilde{X})} | H' | \psi_{v'r'}^{(\tilde{B})} \rangle}{E_{vr}^{\tilde{X}} - E_{v'r'}^{\tilde{B}}} \right) \quad (1)$$

где H' - оператор возмущения; v , v' и r , r' - колебательные и вращательные квантовые числа. Использовалась упрощенная одномерная модель с фиксированными связями ОН, равными их равновесному значению. Учитывалось вращение молекулы вокруг оси z, но игнорировались другие члены, содержащие вращение вокруг осей x и y. Волновые функции необходимые для расчета (1) были получены прямым вариационным методом.

Результаты расчетов приведены на рисунке 1.

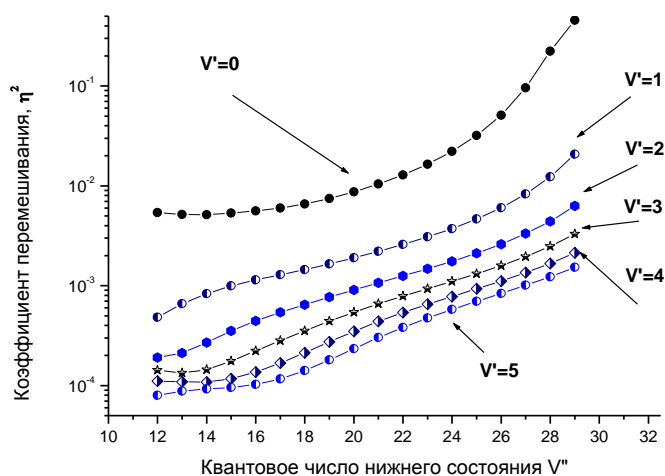


рис.1

Параметр η^2 определяет часть интенсивности, перенесенной от сильной полосы \tilde{B}^1A_1 к слабым колебательно-вращательным переходам основного электронного состояния \tilde{X}^1A_1 . Этот эффект объясняет слабую полосу 270 нм в ближней ультрафиолетовой области спектра водяного пара наблюдаемую в эксперименте.

Также была проведена оценка недиагональных матричных элементов гамильтониана, связанных с HEL (Highly Excited Local) – резонансами 0,0. Для расчета использовался гамильтониан трехатомной молекулы в естественных координатах и функция потенциальной энергии, восстановленная подгонкой к измеренным значениям КВ уровней энергии. Это позволяет провести расчеты для высоковозбужденных колебательных состояний, лежащих выше барьера к линейности.

Результаты работы заключается в том, что

А) впервые предложена обоснованная интерпретация слабой полосы поглощения водяного пара в области 270 нм;

Б) впервые проведены расчеты резонансных матричных элементов, вызывающих HEL – резонансы в молекуле воды, впервые доказано, что наличие в спектрах водяного пара переходов на высокие изгибные состояния обусловлено сильным центробежным эффектом.

Список публикаций:

- [1] Макогон М.М., *Оптика атмосферы и океана*, **14**, 64-775 (2001).
- [2] Быков А.Д., Науменко О.В., Сеница Л.Н., *Оптика атмосферы и океана*, **3**, 1115–1119 (1990).
- [3] Bykov A., Naumenko O., Senitsa L., Voronin B., Flaud J.-M., Camy-Peyret C. and Lanquetin^oR., *J.Mol.Spectrosc*, **205**, 1-8 (2001).

Лазерное зондирование молекулярного водорода

Воронина Элина Ивановна

Новороссийский политехнический институт

Кубанского Государственного технологического университета

Шеманин Валерий Геннадьевич, к.т.н

nbkstu@nbkstu.org.ru

Лидарные измерения концентрации молекулярного водорода в технологических газах различного состава вплоть до чистого водорода представляют интерес в связи с широким распространением H_2 как теплоносителя и горючего вещества. Для обнаружения низких концентраций молекул водорода на больших расстояниях наиболее предпочтительным представляется лидар комбинационного рассеяния света (КР) [1, 2].

В работе выполнены численные расчеты мощности излучения обратного КР на молекулах водорода H_2 и его изотопных аналогах D_2 , T_2 , HD , HT и DT для концентраций этих молекул $\sim 10^{16}$ и 10^{20} $см^{-3}$ и расстояний зондирования 2-6 км. Расчеты выполнены по тому же алгоритму, что и в [2]. Оптимальным вариантом лазерной системы будет лидар КР с длиной волны лазерного излучения, позволяющей получить в заданных условиях максимальную мощность обратного КР.

Выбраны лазеры со следующими длинами волн: 266, 355 и 532 нм – четвертая, третья и вторая гармоники YAG: Nd лазера, 347 нм – вторая гармоника рубинового лазера, 337 нм – азотный лазер и 308 нм – эксимерный лазер на XeCl.

По результатам расчетов построены зависимости логарифмов мощности КР в направлении назад для исследуемых молекул от расстояния зондирования и определены оптимальные длины волн лазерного излучения.

Далее в работе проведено экспериментальное исследование зависимостей интенсивности КР чистого молекулярного водорода лидаром КР в направлении назад от расстояния зондирования.

В лабораторном макете лидара [3] с расстоянием зондирования до 8 м излучение YAG: Nd лазера с импульсами длительностью 10 нс и энергией 10 мДж на длине волны 532 нм направлялось в специальную кювету с окнами под углом Брюстера, которая была заполнена чистым водородом.

Рассеянное назад излучение КР молекул H_2 собиралось с расстояния до 2 м телескопом типа Ньютона со сферическим зеркалом диаметром 0,4 м через специальный светофильтр с максимумом пропускания на длине волны КР – 684 нм и полушириной 5 нм на фотокатод ФЭУ-79. Импульс напряжения с ФЭУ записывался на запоминающем осциллографе С8-17 и одновременно подавался на вход специальной микропроцессорной измерительной системы [3].

Для перевода амплитуды сигнала КР в энергию импульса КР были выполнены калибровочные эксперименты для измерения коэффициента передачи фотоприемного модуля на ФЭУ-79. Для этой цели ослабленное калиброванными нейтральными светофильтрами НС излучение второй гармоники лазера на длине волны 532 нм направлялось на ФЭУ. Рабочий диапазон устанавливался напряжением на ФЭУ, а энергия лазерного импульса контролировалась с помощью измерителя ИМО-2М.

По итогам работы можно сделать следующие выводы.

1. В диапазоне расстояний 2-6 км для зондирования водорода и его изотопных аналогов наиболее предпочтительными являются две длины волны: третья гармоника YAG: Nd лазера - 355 нм и вторая гармоника рубинового лазера - 347 нм. На расстоянии 2 км эффективнее использовать 347 нм, на расстоянии 3 и 4 км обе длины волны дают примерно одинаковые результаты, и на расстоянии 5 и 6 км предпочтительней является 355 нм.

2. Увеличение энергии лазерного импульса или сокращение его длительности приводит к пропорциональному увеличению регистрируемой мощности КР, а уменьшение концентрации молекул – к пропорциональному уменьшению мощности без изменения спектральной зависимости постоянных, входящих в лидарное уравнение.

3. В результате обработки данных измерений определено значение коэффициента передачи $K_f = 0.375 \pm 0.064$ мкДж/В. Этот результат позволил перейти от напряжения к энергии импульса КР.

4. Построена зависимость энергии импульса КР на молекулах водорода от расстояния зондирования R (см. рис. 1).

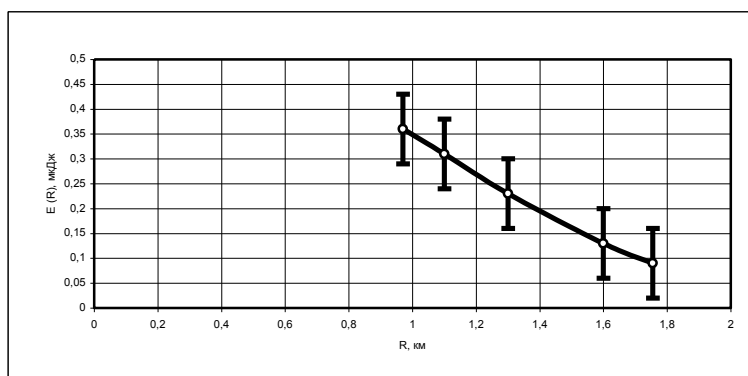


рис.1

5. Экспериментальным путем определено значение дифференциального сечения КР $(\frac{d\sigma}{d\Omega})_F$ молекул водорода при возбуждении лазерным излучением с длиной волны 532 нм. Это значение равно $(4.3 \pm 0.97) 10^{-30}$ см²/ср.

Таким образом, полученные результаты подтверждают возможность лидарного зондирования молекулярного водорода и его изотопов в диапазоне расстояний 2-6 км с длинами волн лазерного излучения 355 и 347 нм, а обработка результатов измерений позволила получить дифференциальное сечение КР молекулы водорода на длине волны 532 нм в диапазоне расстояний зондирования до 2 м, которое хорошо согласуется с данными [1] – $1,4 10^{-30}$ см²/ср.

Список публикаций:

[1] Межерис Р. Лазерное дистанционное зондирование. - М.: Мир, 1987. - 550 с.

[2] Лактюшкин Г.В., Привалов В.Е., Шеманин В.Г. Параметры зондирования молекулярного водорода в атмосфере на наклонных трассах лидаром с Nd-YAG лазером. Журнал технической физики, 1998, Т. 68, №1, С. 20 - 22

[3] Воронина Э.И., Привалов В.Е., Шеманин В.Г. Лидарное зондирование молекулярного водорода при низких давлениях. Оптика и спектроскопия, 2002, Т.93, №4, С. 699-701

Поглощательный спектр водяного пара в диапазоне 14395-14407 см⁻¹

Воронина Юлия Викторовна

Лаврентьева Нина Николаевна, Воронин Борис Александрович, Воронина Светлана Станиславовна

Томский Государственный Университет

Фирсов Константин Михайлович, д. ф-м. н

Voronina-Ulia@rambler.ru

Данная работа является продолжением наших предыдущих работ, в которых мы оценивали радиационный вклад слабых линий поглощения водяного пара, не включенных в современные банки данных HITRAN и GEISA. Слабые линии водяного пара были взяты из *ab initio* расчета Партриджа-Швенке. Спектральный интервал 14395- 14407 см⁻¹ интересен для атмосферных приложений т.к. например, для измерения концентрации H₂O или O₂ можно использовать в данном диапазоне достаточно популярный рубиновый лазер. Поэтому детальная спектроскопическая информация является необходимой для данного диапазона. Это, прежде всего, точные центры и интенсивности линий, квантовая идентификация линий, уширение воздухом и самоуширение, сдвиг и температурная зависимость.

Для того чтобы создать новую базу данных для диапазона рубинового лазера, мы использовали расчет Партриджа-Швенке, БД HITRAN2000, и экспериментальные данные имеющиеся в нашем распоряжении. Из 17 линий H₂¹⁶O представленных для данного диапазона в БД HITRAN, 4 линии не имеют идентификации и соответственно имеют осредненные значения для коэффициентов уширения воздухом и самоуширения. Из расчета Партриджа-Швенке были включены только линии с интенсивностью большей 1·10⁻²⁹ см/молекуле: 123 — H₂¹⁶O, 68 – H₂¹⁸O, 27 – H₂¹⁷O. Линии HDO, в этом регионе с интенсивностью большей 10⁻²⁹ отсутствуют. Для 7 наиболее сильных линий, отсутствующих в БД HITRAN, центры и интенсивности линий были уточнены согласно верхним и нижним уровням энергии, определенным из обработки экспериментальных спектров, для остальных слабых линий уточнение было произведено только там, где оно было в принципе возможно, т.е. в основном уточнены значения нижних уровней энергии..

В настоящей работе приводится наиболее полная информация на сегодняшний день по линиям и параметрам водяного пара в диапазоне рубинового лазера. Данные спектрального банка данных HITRAN2000 необходимо дополнять и расширять. Причем как в количественном плане - дополнять новыми слабыми линиями, так и в качественном - проводить идентификацию имеющихся линий и проводить измерения и расчет параметров линий. Добавление даже нескольких наиболее сильных линий из числа так называемых неучтенных "слабых" линий к известным "сильными" линиям из БД HITRAN2000 в районе рубинового лазера значительно улучшает согласие по сравнению с добавлением всех слабых линий из расчета Швенке. Таким образом, необходимо проводить тонкие эксперименты и идентифицировать и уточнять параметры линий.

Оптические свойства и электронная структура кремния с захороненными наноразмерными кластерами силицида магния

Галкин Константин Николаевич,

Дальневосточный государственный университет

Галкин Николай Геннадьевич, д.ф.-м.н

galkinkn@iacp.dvo.ru

Известно, что тонкие пленки силицида магния (Mg_2Si) на кремнии представляют собой непрямозонный полупроводник с шириной запрещенной зоны 0.75 - 0.78 эВ. Формирование захороненных кластеров (преципитатов) силицида магния в кремнии представляет интерес для создания кремнийсодержащих материалов с новыми фотоэлектрическими, термоэлектрическими и люминесцентными свойствами. В данной работе проведено исследование роста, морфологии, структуры и оптических свойств островковых пленок силицида магния на кремнии и систем с захороненными в кремнии наноразмерными кластерами силицида магния, а также вычислены параметры зонной энергетической структуры выращенных материалов.

Эксперименты по росту островковых пленок силицида магния (Mg_2Si) на атомарно-чистой поверхности $Si(111)7\times7$ и систем с захороненными в кремнии наноразмерными кластерами силицида магния проводили в сверхвысоковакуумной установке VARIAN. Для роста слоя островков силицида магния на атомарно-чистую поверхность $Si(111)7\times7$ при комнатной температуре последовательно осаждали слой магния толщиной 1 нм со скоростью около 1 нм/мин и слой кремния толщиной 0.5 нм, после чего проводили отжиг образца при температуре 380 °С от одной до пяти минут. В ряде образцов сформированные островки силицида магния зарастивали слоем кремния. Кремний (20-50 нм) на островковых пленках Mg_2Si выращивали методом твердофазной эпитаксии с температурой отжига 650-700 °С, также методом твердофазной эпитаксии при температуре 650-750 °С были выращены структуры с тремя захороненными слоями силицида магния. Кластеры силицида магния в каждом слое формировали из двойного слоя Mg-Si, осажденного при комнатной температуре и отожженного при температуре 380 °С. Толщина слоя кремния между слоями силицида магния составляла 10 нм, а толщина верхнего слоя кремния - 50 нм. Кристаллизацию слоев кремния в многослойной структуре проводили после осаждения верхнего слоя кремния. Состав и электронную структуру образцов на различных стадиях роста исследовали методами электронной оже-спектроскопии (ЭОС) и спектроскопии характеристических потерь энергии электронами (СХПЭЭ). После выгрузки образцов из ростовой камеры проводили регистрацию спектров отражения (пропускания) образцов в диапазоне энергий 0.1–6.2 эВ. Расчеты оптических функций пленок силицида магния проводили с использованием интегральных соотношений Крамерса-Кронига и приближения Филиппа-Тафта. Морфологию образцов исследовали методом атомной силовой микроскопии в контактном и полуконтактном режимах на многомодовом сканирующем зондовом микроскопе Solver P47.

По данным ЭОС и СХПЭЭ взаимодействие аморфного кремния с магнием происходит при комнатной температуре. Из анализа соотношения амплитуд оже-пигов кремния и магния до и после отжига установлено, что отжиг при температуре 380°С приводит к формированию островков силицида магния, которые занимают незначительную площадь поверхности кремния. Осаждение кремния поверх островков

силицида магния приводит к полному их закрытию по данным ЭОС и СХПЭЭ уже при толщине слоя кремния выше 4 нм. Установлено, что сохранение сплошности слоя кремния, осажденного поверх островков силицида магния, в процессе его кристаллизации при температурах 650-750 °С наблюдается при толщинах более 30 нм.

Исследования методом атомной силовой микроскопии показали, что в островковых пленках Mg_2Si на Si(111) плотность островков составляла $(2-3) \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$. Они занимали 10-15% площади образца, имели квадратную огранку и узкое

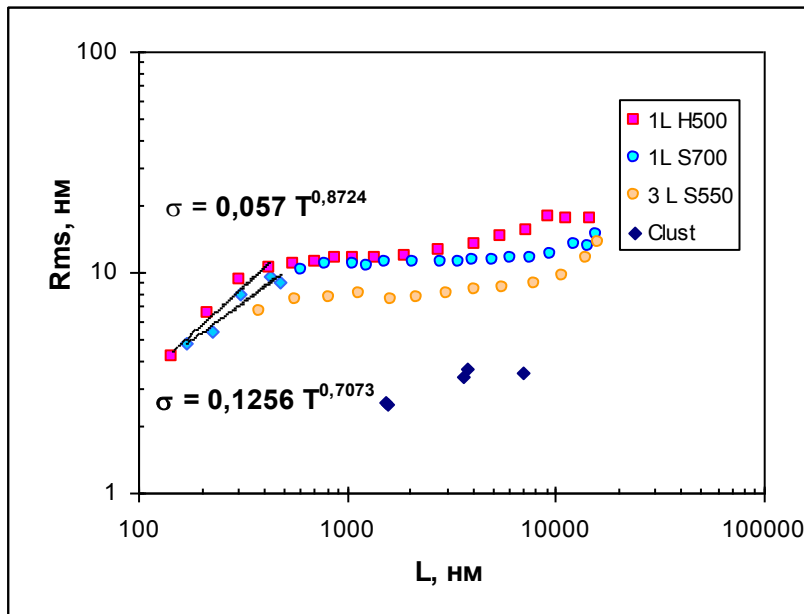


Рис. Среднеквадратичное отклонение от шероховатости в зависимости от длины сканирования для образцов с островками Mg_2Si на кремнии и захороненными в кремнии (1 и 3 слоя) по данным АСМ.

распределение по размерам 50-60 нм и высоте 5-7 нм. Образцы с захороненным в кремнии одним слоем кластеров Mg_2Si имели увеличенный рельеф

поверхности ($R_s=10,3-11,5 \text{ нм}$), а для трехслойных структур - рельеф был меньше $R_{ms}=7.5-7.8 \text{ нм}$. Пленки кремния в однослойных структурах состояли из сросшихся неограниченных зерен с размерами 100-150 нм, а в трехслойных структурах – наблюдались ограниченные зерна с теми же размерами. По данным специализированных методик АСМ кластеры Mg_2Si не присутствовали на поверхности кремния в многослойных материалах. Обнаружено (Рис.), что среднеквадратичное отклонение от шероховатости (σ) имеет тенденцию к насыщению для всех образцов при размерах области сканирования (L) в диапазоне 1-6 мкм. При меньших L для однослойных образцов наблюдается степенное уменьшение величины (σ): $\sigma=\sigma_0 L^h$ с величиной $h=0.7-0.87$, что удовлетворительно соответствует модели трехмерного островкового роста с интенсивной поверхностной диффузией атомов кремния.

Расчеты из интегральных соотношений Крамерса-Кронига показали, что диэлектрическая функция образцов с кластерами Mg_2Si на кремнии и захороненными в кремнии определяется в основном вкладом Si-подложки при энергиях выше 1.5 эВ. Показано, что вклад кластеров Mg_2Si максимален в случае их локализации на поверхности. Вклад захороненных кластеров Mg_2Si максимален при энергии 0.7 – 1.2 эВ, что связано с формированием дополнительной полосы поглощения на первых межзонных переходах в наноразмерных кластерах с высокой плотностью. Расчеты эффективного количества электронов показали, что в материалах с захороненными кластерами Mg_2Si их количество возрастает более чем в 2.5 раза по сравнению с кремнием. При этом резко возрастает эффективная диэлектрическая проницаемость

таких образцов до $\varepsilon_{\text{эфф}}=21.3-21.6$, что свидетельствует о формировании электронной структуры отличной от объемного кремния и толстых пленок Mg_2Si .

Низкотемпературная релаксация фотовозбужденного хлорида серебра

Герасименко Юлия Владимировна

Воронежский государственный университет

Клюев Виктор Григорьевич, д.ф.-м.н

Воздействие на кристаллофосфор излучением с энергией кванта, превышающей ширину его запрещенной зоны ($h\nu > \Delta E_g$), приводит его в возбужденное (неравновесное) состояние. При этом в нем протекают процессы рекомбинации (как излучательной, так и безызлучательной) неравновесных носителей заряда на центрах люминесценции (рекомбинации) и процессы локализации неравновесных электронов и дырок на мелких и глубоких уровнях захвата (запасенные светосуммы). Снятие возбуждения (релаксация) может быть осуществлено либо освещением возбужденного кристаллофосфора излучением с энергией кванта, равной энергетической глубине соответствующего уровня захвата (фотостимулированная вспышка люминесценции (ФСВЛ)), либо без освещения (термическая релаксация).

Известно, что запасенная светосумма хлорида серебра после затухания фосфоресценции постепенно уменьшается. Это приводит к уменьшению интенсивности ФСВЛ по мере увеличения темнового интервала между окончанием возбуждения стационарной люминесценции и моментом включения стимулирующего вспышку излучения. Так как ФСВЛ используется для исследования распределения энергетических состояний кристалла в запрещенной зоне, а также для других прикладных целей, то самопроизвольное уменьшение запасенной кристаллом светосуммы становится серьезным препятствием как в проведении эксперимента, так и в трактовке его результатов. В частности, ФСВЛ часто применяется для изучения фотохимических процессов в широкозонных светочувствительных кристаллах. Ранее это явление подробно не исследовалось, и причина релаксации возбуждения хлорида серебра (и др. кристаллофосфоров) и механизм этой релаксации до сих пор остаются неизученными. Также следует отметить, что изучение механизмов релаксации светосумм может положить основу исследованию процессов безызлучательной деградации энергии возбуждения в кристаллофосфорах, а эта проблема является одной из самых серьезных в изучении переноса электронных возбуждений и до сих пор малоисследованна. В данной работе проведено исследование процесса термической релаксации возбужденного хлорида серебра (чистого и обработанного в растворах нитрата серебра различной концентрации) при помощи метода ФСВЛ, а так же рассмотрены две кинетические модели кристаллофосфора, результаты которых согласуются с данными эксперимента.

В эксперименте высвеченная светосумма измерялась за 8 с, т.к. за это время вспышка полностью затухает. Аппроксимация зависимости светосуммы от времени темнового интервала при разных температурах в интервале 77÷110К двумя экспоненциальными функциями позволила установить, что процесс термической релаксации возбуждения AgCl имеет две составляющие, скорости которых различаются на порядок. Согласно вычислениям, энергии активации этих процессов

равны 0,03 эВ и 0,06 эВ. Были рассмотрены две кинетические модели релаксации неравновесных зарядов, локализованных на центрах захвата (электроны) и рекомбинации (дырки). Обе они содержат по одному центру рекомбинации и по две электронные ловушки, только в первой модели процессы перехода электронов с ловушек на центры люминесценции осуществляются через зону проводимости, а во второй модели используются два механизма прямой рекомбинации локализованных электронов с дырками, локализованными на центрах люминесценции. После решения соответствующих систем дифференциальных уравнений получили, что выражения для светосумм в обоих случаях представляют собой сумму двух экспоненциальных функций, т.е. описываемый ими процесс затухания светоуммы имеет две составляющие, скорости которых различаются, что согласуется с данными эксперимента. Энергии активации процессов релаксации 0,03эВ и 0,06 эВ для первой модели имеют смысл энергетической глубины электронных ловушек, а для второй модели с прямой рекомбинацией эти энергии активации должны включать в себя высоту потенциальных барьеров для прямого перехода электронов на центры люминесценции излучательным или безызлучательным образом. Тот факт, что обе модели согласуются с экспериментом, свидетельствует о том, что в процессе релаксации, скорее всего, участвуют оба механизма рекомбинации, как прямой, так и через зону проводимости. Поэтому возможен и третий вариант, представляющий собой комбинацию двух этих моделей, т.е. описывающий процессы как излучательной, так и безызлучательной рекомбинации, но он нами пока не рассматривался. Дальнейшие исследования могут либо подтвердить, либо опровергнуть возможность применения метода ФСВЛ для исследования безызлучательных процессов в широкозонных кристаллофосфорах.

Эксперимент также показал, что в интервале $77 \text{ K} \leq T \leq 110 \text{ K}$ зависимости полной светосуммы от температуры немонотонны и имеют локальные максимумы в основном при 100 К. Из зависимости светосуммы от температуры при $\tau_{\text{темн}} = 2 \text{ с}$ для чистого AgCl была выделена составляющая, ответственная за перелокализацию дырок с мелких ловушек на центры люминесценции. Обработка этой составляющей по формуле Урбаха позволила оценить энергетическое положение соответствующей дырочной ловушки. Оказалось, что уровень этой ловушки расположен выше потолка валентной зоны на 0,17 эВ.

Для сравнения процессов релаксации в чистых монокристаллах AgCl и в монокристаллах, на поверхности которых имеются примесные центры, на очищенную предыдущей обработкой поверхность монокристаллов AgCl из раствора AgNO₃ наносились определенные количества адатомов серебра. Концентрации обрабатываемых растворов AgNO₃ изменялись в пределах от 10⁻⁷ до 10⁻⁴ моль/л. Оказалось, что при увеличении концентрации раствора AgNO₃ энергия активации перелокализации дырок уменьшается практически в три раза. Уменьшение энергии активации свидетельствует об уменьшении потенциального барьера для термического освобождения дырок. Так как при обработке в растворе AgNO₃ серебро адсорбируется в виде ионов Ag⁺, то понизить потенциальный барьер для локализованных дырок оно не может. Можно предположить следующее. Дырка в хлориде серебра является автолокализованной. Если уровень 0,17 эВ соответствует таким дыркам, которые расположены в приповерхностной области кристалла AgCl, то понизить потенциальный барьер может отрицательный заряд, появляющийся на поверхности в

результате адсорбции. Такой заряд могут создать адсорбирующиеся отрицательно заряженные группы NO_3^- .

Фантомы на фотографиях
Голицын Александр Андреевич
Новосибирский Государственный Университет
aag@gorodok.net

В работе исследуется интересное явление. На некоторых фотографиях, сделанных цифровой фотокамерой в темном помещении, изредка появляются прозрачные круги. Сюжетом одной группы снимков являлось празднование в школе Рождества, другой – черная кошка на черном фоне. Круги выглядят как прозрачные сферы, летающие в воздухе. Они располагаются совершенно случайно, имеют различные размеры (иногда превышающие голову человека) и иногда даже окраску.



Круги не вызваны дефектом фотоматериалов или их некачественной обработкой, поскольку изображение записывается фотоприемной матрицей. Они не вызваны дефектами матрицы или влиянием посторонних источников света и бликами от них в оптике, так как не повторяются в одних и тех же условиях (в противном случае круги находились бы на всех фотографиях в одних и тех же местах и одного размера).

В «серьезной» литературе отсутствуют сведения о таком эффекте, хотя в средствах массовой информации встречались сведения о фотографировании подобных явлений американскими исследователями паранормальных явлений в старых заброшенных домах и на кладбище. Эти явления «объяснялись» неизвестными «сущностями» невидимыми невооруженным глазом или «неуспокоенными душами» убитых в гражданской войне солдат. Появление сфер в цифровой фотокамере объяснялось также тем, что спектральный диапазон фотокамеры охватывает область ближнего инфракрасного излучения, невидимого невооруженным глазом.

В представляемом исследовании, выяснены условия появления кругов и найдена материальная причина их образования. Установлено, что круги появляются исключительно при использовании вспышки, а их размер зависит от дальности фокусировки. Таким образом, эффект порождается отражением света от случайных микрочастиц, рассеянных в воздухе. Причиной больших размеров кругов по сравнению с размерами самих частиц является то, что их изображение расфокусировано. Контрольный опыт показывает образование на снимке множества кругов при искусственном внесении в воздух микрочастиц. Расчетами обоснован большой угловой размер кругов, значительно превышающий размеры самих частиц.

Изучение дисперсионных свойств двойных вольфраматов и молибдатов, активированных TR^{3+} ионами.

Голубьев Максим Анатольевич

Мордовский государственный университет им. Н.П.Огарева

Рябочкина Полина Анатольевна, к.ф.-м.н

taxemus@nm.ru

Монокристаллы двойных вольфраматов и молибдатов, активированные TR^{3+} ионами, представляют значительный интерес в качестве активных лазерных сред. Разупорядоченность их структуры приводит к уширению линий поглощения и люминесценции ионов примеси, что существенно облегчает диодную накачку лазерных сред, а также благоприятствует получению генерации ультракоротких импульсов [1,2].

В настоящей работе изучены дисперсионные свойства кристаллов $NaLa(WO_4)_2-Yb,Er$ и $NaLa(MO_4)_2-Er$. Оптические константы этих кристаллов измерены методом призмы с помощью гониометра-спектрометра ГС-5.

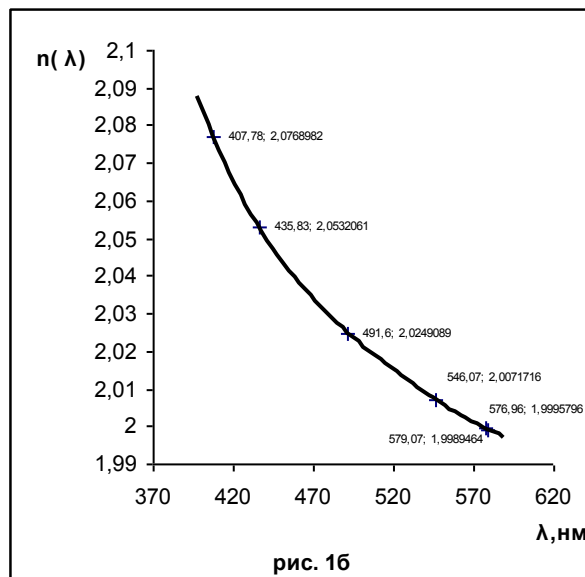
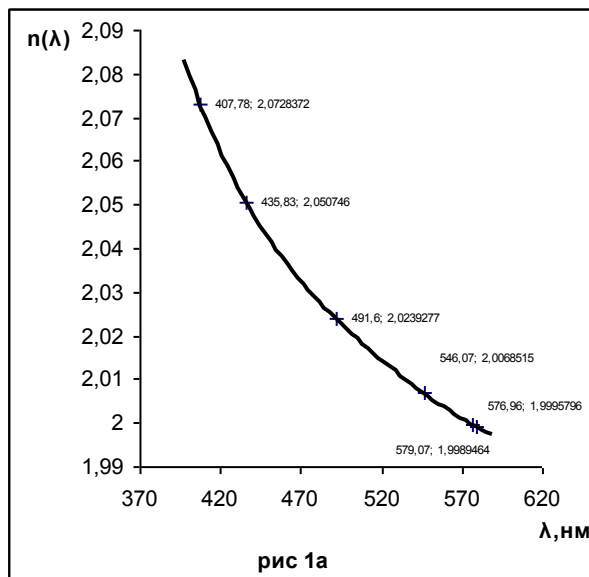
Значения основного показателя преломления $n_{осн}^o$, основной средней дисперсии $D_{осн}$, основного коэффициента дисперсии $v_{осн}$ при $T=300K$ для обыкновенной и необыкновенной волн в кристаллах $NaLa(WO_4)_2-Yb,Er$ и $NaLa(MO_4)_2-Er$ представлены в таблице:

Кристалл	$n_{осн}^o$	$n_{F'}^o - n_{C'}^o$	$v_{осн}^o$
	$n_{осн}^e$	$n_{F'}^e - n_{C'}^e$	$v_{осн}^e$
NLW-Yb,Er	1,95311	0,03148	30,27668
	1,95665	0,02707	35,33986
NLM-Er	2,00685	0,03430	29,35423
	2,00717	0,03528	28,54790

На рис 1а,б приведены дисперсионные спектры для обыкновенной и необыкновенной волн, которые наблюдались при освещении призмы из кристалла $NaLa(MO_4)_2-Er$ светом ртутной лампы ПРК-4.

Их особенностью является то, что положения спектральных линий с $\lambda=576,96$ нм и $579,07$ нм совпадают в обоих дисперсионных спектрах. Этот факт свидетельствует о том, что оптическая ось кристалла, в данном случае, соответствует направлению на желтую линию в дисперсионном спектре.

Нами также проведены исследования термооптических свойств кристалла $\text{NaLa}(\text{MO}_4)_2\text{-Er}$.



Список публикаций.

[1] Kaminskii A.A. // *Ann. Phys. Fr.* 1991. V.16 P.639.

[2] Kuleshov V., Lagatsky A.A., Shcherbisky V.G. // *Appl. Phys. B.* 1997. v.64. P.409-413.

Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы CH_2D_2 в диапазоне $2350\text{-}2650\text{ см}^{-1}$.

Гребнева Светлана Владимировна

Улеников Олег Николаевич, Бехтерева Елена Сергеевна

Томский Государственный Университет

Бехтерева Елена Сергеевна, к.ф.-м.н

grebnevaSV@yandex.ru

В настоящей работе объектом исследования стала дважды дейтерозамещенная CH_2D_2 модификация молекулы CH_4 , исследование свойств которой представляет интерес как с точки зрения практических, так и теоретических задач.

В лаборатории оптики и спектроскопии ТГУ совместно с экспериментальной группой Цюриха (Швейцария) были начаты исследования тонкой колебательно-вращательной структуры спектра молекулы метана. Экспериментальный спектр был зарегистрирован на Фурье-спектрометре Bomem DA002 (Цюрих) в диапазоне $2350\text{-}2650\text{ см}^{-1}$, содержащий колебательные полосы $2\nu_9$, $\nu_3 + \nu_4$, $\nu_5 + \nu_9$, $\nu_5 + \nu_7$ и $\nu_3 + \nu_7$, с разрешением 0.004 см^{-1} . Молекула CH_2D_2 – это молекула типа асимметричного волчка с группой симметрии C_{2v} . Ее девять колебательных мод соответствуют симметриям: $q_\lambda (\lambda = 1, 2, 3, 4) \in A_1$, $q_5 \in A_2$, $q_6, q_7 \in B_1$ и $q_8, q_9 \in B_2$.

Модель Гамильтониана была выбрана с учетом резонансных взаимодействий между всеми пятью колебательными полосами этого диапазона:

$$H^{V.-R.} = \sum_{V,V'} |V\rangle \langle V'| H_{VV'} \quad (1)$$

Суммирование ведется по всем колебательным состояниям. Диагональные операторы H^{VV} описывают вращательные структуры соответствующих колебательных состояний:

$$\begin{aligned} H_{vv} = & E^v + [A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v)]J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v)J^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v)J_{xy}^2 - \\ & - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \Delta_J^v J^4 - \delta[J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta J^2 J_{xy}^2 + \\ & + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 + [J_{xy}^2, h_K^v J_z^4 + h_{KJ}^v J^2 J_z^2 + h_J^v J^4] + \\ & + L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^6 J^2 + L_{KJ}^v J_z^4 J^4 + L_{JJK}^v J_z^2 J^6 + L_J^v J^8 + \\ & + [J_{xy}^2, l_K^v J_z^6 + l_{KJ}^v J_z^4 J^2 + l_{JK}^v J_z^2 J^4 + l_J^v J^6] + P_K^v J_z^{10} + [J_{xy}^2, p_K^v J_z^8] + \dots, \end{aligned} \quad (2)$$

где $J^2 = \sum_{\alpha} J_{\alpha}^2$, J_{α} – компоненты полного углового момента; $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$.

E^v – центр полосы; A^v, B^v, C^v – вращательные постоянные; Δ_K^v, \dots, H_K^v и др. – коэффициенты центробежного искажения.

Мы рассматриваем четыре типа сопряженных операторов $H^{VV'}, (V \neq V')$, описывающие четыре различных типов резонансных взаимодействий, которые могут встречаться в молекуле асимметричного волчка группы симметрии C_{2v} .

Если произведение $\Gamma = \Gamma^v \otimes \Gamma^{v'}$ симметричного вида состояний v и v' равно A_1 (т.е. $\Gamma^v = \Gamma^{v'}$), тогда состояния v и v' связаны с ангармоничным резонансным взаимодействием, и соответствующий оператор взаимодействия имеет вид:

$$\begin{aligned} H_{vv'} = & {}^{vv'}F_0 + {}^{vv'}F_K J_z^2 + {}^{vv'}F_J J^2 + {}^{vv'}F_{KK} J_z^4 + {}^{vv'}F_{KJ} J_z^2 J^2 + {}^{vv'}F_{JJ} J^4 + \dots \\ & + {}^{vv'}F_{xy} (J_x^2 - J_y^2) + {}^{vv'}F_{Kxy} \{J_z^2, (J_x^2 - J_y^2)\}_+ + 2{}^{vv'}F_{Jxy} J^2 (J_x^2 - J_y^2) + \dots \end{aligned} \quad (3)$$

Если произведение $\Gamma = B_1$, тогда состояния v и v' связаны взаимодействием резонанса Кориолиса:

$$\begin{aligned} H_{vv'} = & iJ_z H_{vv'}^{(1)} + \{J_x, J_y\}_+ H_{vv'}^{(2)} + H_{vv'}^{(2)} \{J_x, J_y\}_+ + \\ & + \{iJ_z, (J_x^2 - J_y^2)\}_+ H_{vv'}^{(3)} + H_{vv'}^{(3)} \{iJ_z, (J_x^2 - J_y^2)\}_+ + \dots \end{aligned} \quad (4)$$

Когда $\Gamma = B_2$, тогда соответствующее взаимодействие Кориолиса примет вид:

$$\begin{aligned} H_{vv'} = & iJ_y H_{vv'}^{(1)} + H_{vv'}^{(1)} iJ_y + \{J_x, J_z\}_+ H_{vv'}^{(2)} + H_{vv'}^{(2)} \{J_x, J_z\}_+ + \\ & + \{iJ_y, (J_x^2 - J_y^2)\}_+ H_{vv'}^{(3)} + H_{vv'}^{(3)} \{iJ_y, (J_x^2 - J_y^2)\}_+ + \dots \end{aligned} \quad (5)$$

И, наконец, когда $\Gamma = A_2$, взаимодействие Кориолиса возможно в следующем виде:

$$H_{vv'} = iJ_x H_{vv'}^{(1)} + H_{vv'}^{(1)} iJ_x + \{J_y, J_z\}_+ H_{vv'}^{(2)} + H_{vv'}^{(2)} \{J_y, J_z\}_+ + \\ + \{iJ_x, (J_x^2 - J_y^2)\}_+ H_{vv'}^{(3)} + H_{vv'}^{(3)} \{iJ_x, (J_x^2 - J_y^2)\}_+ + \dots \quad (6)$$

Операторы $H_{vv'}^{(i)}, i = 1, 2, 3, \dots$ в уравнениях (4)-(6) имеют вид:

$$H_{vv'}^{(i)} = \frac{1}{2} {}^{vv'} C^i + {}^{vv'} C_K^i J_z^2 + \frac{1}{2} {}^{vv'} C_J^i J^2 + {}^{vv'} C_{KK}^i J_z^4 + {}^{vv'} C_{KJ}^i J_z^2 J^2 + \frac{1}{2} {}^{vv'} C_{JJ}^i J^4 + \\ {}^{vv'} C_{KKK}^i J_z^6 + {}^{vv'} C_{KKJ}^i J_z^4 J^2 + {}^{vv'} C_{KJJ}^i J_z^2 J^4 + \frac{1}{2} {}^{vv'} C_{JJJ}^i J^6 + \dots \quad (7)$$

В результате анализа, выполненного на основе метода комбинационных разностей, было исследовано более 3000 линий полос $2\nu_9, \nu_3 + \nu_4, \nu_5 + \nu_9, \nu_5 + \nu_7$ и $\nu_3 + \nu_7$; определены центры полос, вращательные, центробежные и резонансные постоянные, позволяющие воспроизводить экспериментальные данные с точностью, сравнимой с точностью эксперимента.

Исследование колебательно-вращательного спектра молекулы H_2S в диапазоне $7300-7900 \text{ см}^{-1}$

Громова Ольга Васильевна

Томский Государственный Университет

Бехтерева Елена Сергеевна, к.ф.-м.н

Gromova@phys.tsu.ru

Исследование спектра высокого разрешения молекулы сероводорода является важным по ряду причин, как чисто академического, так и практического характера. Во первых, молекула H_2S является типичным представителем молекулы, удовлетворяющей модели локальных мод. Эта молекула лёгкая и, как правило, все эффекты и особенности в спектрах поглощения такого типа молекул проявляются наиболее ярко и поэтому они являются наиболее удобными объектами для апробации и проверки предсказательной способности теоретических методов. Во вторых, исследование колебательно-вращательных спектров молекулы H_2S практически значимо для атмосферной оптики и астрофизики.

В данной работе на основе метода комбинационных разностей был выполнен анализ тонкой колебательно-вращательной структуры полос $3\nu_1, 2\nu_1 + \nu_3, \nu_1 + 2\nu_3, 3\nu_3, 2\nu_1 + 2\nu_2$ и $\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3$, до максимальных значений квантовых чисел $J = 11, 14, 10, 11, 8$ и $11, k = 8, 8, 9, 9, 9$ и 6 , соответственно.

Как показывает анализ, между всеми полосами, рассматриваемыми в данной работе, существуют сильные резонансные взаимодействия. По этой причине для анализа экспериментальных данных используется гамильтониан [1], имеющий следующий вид:

$$H^{v..r.} = \sum_{v,v'} H^{v,v'} \quad (1)$$

где суммирование ведётся по всем колебательным состояниям. Диагональные операторы H^{vv} описывают вращательную структуру соответствующих колебательных состояний и имеют вид операторов Уотсона [2]:

$$\begin{aligned} H^{vv} = & E^v + \left[A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J_{xy}^2 \\ & - \Delta_{Kz}^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \Delta_{Jz}^v J^4 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 \\ & + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 + [J_{xy}^2, h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J^2 J_z^2 + h_J^v J^4] \\ & + L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^6 J^2 + L_{JK}^v J_z^4 J^4 + L_{JKK}^v J_z^2 J^6 + L_J^v J^6 \\ & + [J_{xy}^2, l_K^v J_z^6 + l_{KJ}^v J_z^4 J^2 + l_{JK}^v J_z^2 J^4 + l_J^v J^6] + P_K^v J_z^{10} + [J_{xy}^2, p_K^v J_z^8] +, \end{aligned} \quad (2)$$

Не диагональные операторы $H^{vv'}$ ($v \neq v'$) описывают резонансные взаимодействия между состояниями $|v\rangle$ и $|v'\rangle$. В данном случае, резонансные взаимодействия между состояниями с одинаковой симметрией описывается с помощью операторов типа Ферми[3]:

$$H_F^{vv'} = F^{vv'} + F_K^{vv'} J_z^2 + \dots + F_{xy}^{vv'} J_{xy}^2 + F_{xyK}^{vv'} [J_{xy}^2, J_z^2] + F_{xyJ}^{vv'} J_{xy}^2 J^2 + \dots, \quad (3)$$

где $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$ и $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$. Не диагональный оператор $H^{vv'}$ типа Кориолиса [4] описывает резонансные взаимодействия между состояниями $v\rangle$ и $v'\rangle$ разной симметрии, определяется следующим выражением:

$$\begin{aligned} H_{C_y}^{vv'} = & (2B\zeta^z)^{vv'} iJ_y + C_{yK}^{vv'} [iJ_y, J_z^2]_+ + C_{yJ}^{vv'} iJ_y J^2 + \\ & C_{yKK}^{vv'} [iJ_y, J_z^4]_+ + C_{yJK}^{vv'} [iJ_y, J_z^2 J^2]_+ + C_{yJJ}^{vv'} iJ_y J^4 + \\ & C_{yKKK}^{vv'} [iJ_y, J_z^6]_+ + C_{yKKJ}^{vv'} [iJ_y, J_z^4 J^2]_+ + \dots + C_{xz}^{vv'} [J_x, J_z]_+ + \\ & C_{xzK}^{vv'} [[J_x, J_y]_+, J_z^2]_+ + C_{xzJ}^{vv'} [J_x, J_z]_+ J^2 + C_{xzKK}^{vv'} [[J_x, J_z]_+, J_z^4]_+ + \\ & C_{xyJK}^{vv'} [[J_x, J_z]_+, J_z^2 J^2]_+ + C_{xzJJ}^{vv'} [J_x, J_z]_+ J^4 + \dots \end{aligned} \quad (4)$$

Экспериментальный спектр был зарегистрирован на Фурье-спектрометре Bruker IFS 120HR в Открытой лаборатории химии выделенных связей университета наук и технологий Китая (г. Хефэй) в диапазоне 7300-7900 см^{-1} с разрешением 0.015 см^{-1} , при давлении 2076 Па.

В результате решения обратной спектроскопической задачи с Гамильтонианом [1] определены вращательные, центробежные, резонансные постоянные, воспроизводящие исходные данные с экспериментальной точностью. Средне квадратичное отклонения полученных 510 верхних уровней (извлечённых более чем из 1550 переходов) составляет rms 0.0022 см^{-1} . В модели были включены 75 параметров, в том числе 23 резонансных.

Применение метода фазово-согласованной фильтрации для распознавания сигналов различной природы

Добромыслов Петр Петрович

*Санкт-Петербургский Государственный Институт Точной Механики и
Оптики (Технический Университет)*

Стафеев Сергей Константинович, д.ф.-м.н.

Petr.Dobromyslov@mail.ru

Проблемы анализа и обработки сигналов включают ряд направлений, среди которых наиболее важными являются: фильтрация двумерных полей яркости, улучшение качества двумерных изображений, сегментация и распознавание предметов. Задачи распознавания и фильтрации особенно важны при компьютерной обработке текстов и документов, для проведения физических исследований и измерения различных объектов.

Успешное решение задачи распознавания основывается на свойствах световых полей, определяемых процессами взаимодействия световых электромагнитных волн с объектом и распространении волн. Во многих случаях распознаваемые изображения искажены влиянием помех, поэтому особенно актуальной является задача повышения помехоустойчивости процесса распознавания сигналов.

Для решения такого рода задач мы выбрали метод фазово-согласованной фильтрации и на примерах доказали его бесспорное преимущество среди других методов согласованной фильтрации.

Одной из простейших задач анализа сигналов является задача определения его смещения относительно начала отсчета. Известно, что согласованный фильтр является оптимальным фильтром, минимизирующим среднюю квадратическую погрешность при выделении полезной составляющей. Выходной сигнал согласованного фильтра определяется оператором свертки:

$$S(z) = \xi(x) * h(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \xi(x) h(z-x) dx \quad (1)$$

Суть исследуемого метода заключается в том, что для построения оператора свертки мы берем не стандартный комплексный спектр сигнала, а только его фазовую составляющую. Если $\xi(w) = a(w) \exp(i\phi(w))$ представление комплексного спектра эталонного сигнала, а $f(w)$ - спектр сигнала на входе фильтра, то

$$\xi'(w) = \exp(i\phi(w)) \quad (2)$$

модифицированный спектр изображения с нормированной амплитудной компонентой.

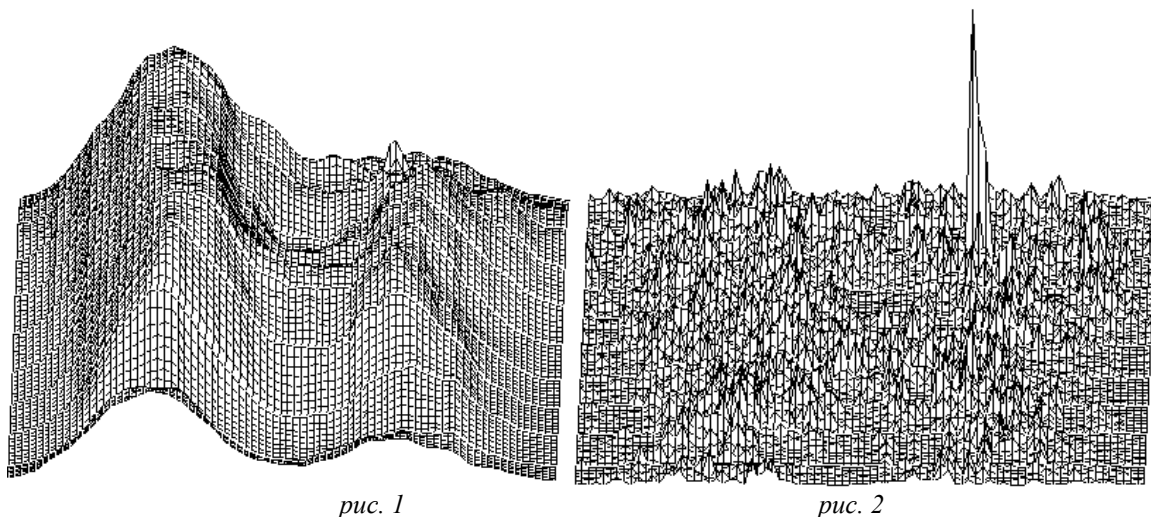
Учитывая формулы (1) и (2) приходим к заключительному соотношению для описания результирующей функции метода фазово-согласованной фильтрации.

$$R(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi'(w) f(w) e^{iwt} dw \quad (3)$$

Метод был применен при решении следующих задач:

- Совмещение геометрической оси (оси симметрии базовой цилиндрической поверхности линзы) с ее оптической осью по смещению центра интерференционных колец Ньютона.
- Распознавание нормированных двумерных полей яркости при зашумленности объекта в соотношении сигнал/шум больше 10%.
- Выделение из фазовой компоненты спектра изображения границы предмета.
- Сравнение с методом согласованного фильтрования в вопросах распознавания реальных двумерных изображений ограниченного размера и влияние шума на результат идентификации исследуемого объекта.

На (рис. 1) и (рис. 2) приведены результирующие функции распознавания размытого объекта методами согласованной и фазово-согласованной фильтрации.



В результате проведенных исследований были выявлены следующие закономерности:

- Отклик фазового фильтра на сигнал, соответствующий эталонному, более острый, локализован в значительно более узкой области, чем аналогичный отклик классического фильтра. Острота отклика фазового фильтра слабо зависит от вида спектра входного сигнала и его ширины. Амплитуда отклика (высота пика) фазового фильтра на 80% больше, чем амплитуда отклика классического фильтра.
- Фазово-согласованная фильтрация более шумоустойчива, обеспечивает большую вероятность распознавания зашумленных сигналов по сравнению с методами согласованной фильтрации (см. рис. 1 и рис. 2).
- Выявлен механизм работы метода фазово-согласованной фильтрации, основанный на свойствах фазовой компоненты спектра сигналов.
- Нелинейная фильтрация фазового спектра двумерных сигналов приводит к выделению наиболее значащих составляющих спектра (для изображения – выделение его границ).

Комплексообразование и фотопроцессы в молекулах продан и кумарин 1

Жаркова Оксана Михайловна

Томский Государственный Университет

Артюхов Виктор Яковлевич, д.ф.-м.н, Морозова Юлия Петровна, к.ф.-м.н

krisss@mail2000.ru

Влияние комплексообразования на спектрально-люминесцентные характеристики молекулярных систем – актуальная проблема молекулярной фотофизики. Комплексообразование может существенно изменять соотношение между излучательными и безызлучательными процессами.

В работе были рассмотрены фотофизические процессы и влияние межмолекулярных взаимодействий на примере молекул продана (6-пропионил-2-диметиламин нафталин) и кумарина 1 (см. рис.1).

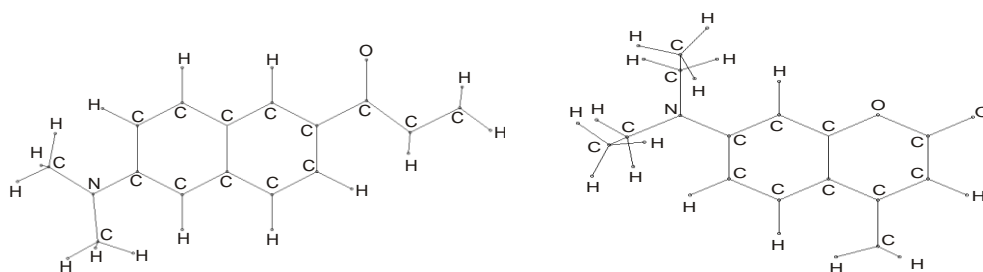


рис.1

Обе молекулы имеют два протонакцепторных центра, локализованных на атомах азота и кислорода. Нами были исследованы комплексы данных молекул в воде. Ионы гидроксония H_3O^+ подвигались по указанным центрам молекул. Изучено тушение флуоресценции кумарина 1 в смеси изопропанол - вода.

Продан - зонд чрезвычайно чувствительный к растворителю по смещению полос [1]. Наибольшее смещение максимумов поглощения и флуоресценции наблюдается для воды.

Результаты молекулярного электростатического потенциала показывают, что минимумы на кислороде для обеих молекул лежат в плоскости, а на азоте наблюдаются внеплоскостные минимумы.

По результатам квантово-химического расчёта (см. рис.2) квантовый выход флуоресценции для продана из состояний S_1 , S_2 составил 0.00002 и 0.001 соответственно, что согласуется с экспериментальными данными. Комплекс молекулы продана по кислороду даёт смещение $\pi-\pi^*$ уровней в область меньших частот, а $n-\pi^*$ уровня в область больших частот, в результате квантовые выходы из состояний S_1 , S_2 составили 0.08 и 0.00001 соответственно. Взаимодействие иона гидроксония по азоту дало смещение $n-\pi^*$ уровня в область меньших частот, а $\pi-\pi^*$ уровней в область больших частот. В результате наблюдается слабая флуоресценция из второго синглета и квантовые выходы из S_1 , S_2 составили 0.0001 и 0.05 соответственно. Взаимодействие по двум центрам уменьшает константу скорости интеркомбинационной конверсии из нижнего синглетного состояния по сравнению со свободной молекулой на порядок, т.е., квантовые выходы из состояний S_1 , S_2 низкие - 0.001 и 0.0003 соответственно.

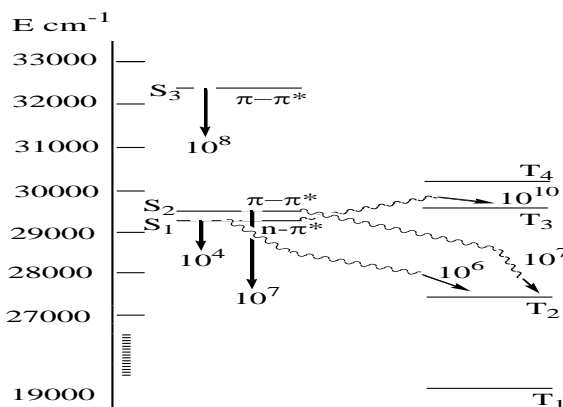


рис.2

В результате расчёта для молекулы кумарина 1 было замечено, что в возбуждённом состоянии наблюдаются значительные изменения в величинах заселённости связи R_{AB} и зарядов для некоторых атомов углерода ароматического кольца. С учётом формулы (1), были сделаны изменения в длинах связей, в результате получена схема уровней, отражающая геометрию флуоресцентного состояния кумарина 1 (см. рис.3).

$$\Delta R_{AB}^* = 0.46 \cdot \Delta P_{AB}^* \quad (1)$$

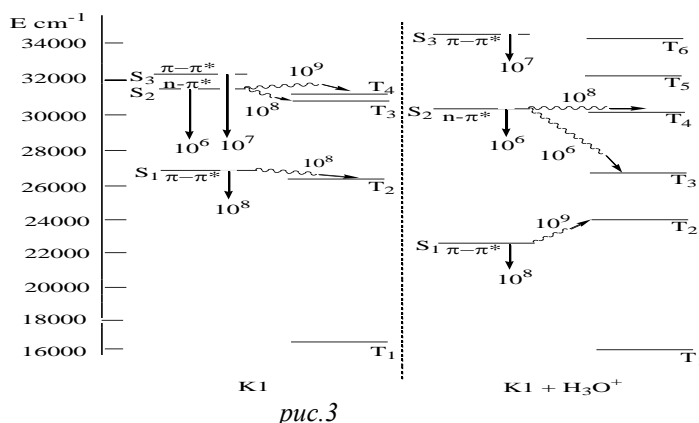


рис.3

Комплекс кумарина 1 по кислороду даёт слабую флуоресценцию из состояния S_1 в области 22500 cm^{-1} . Квантовые выходы из нижнего синглетного состояния для кумарина 1 и комплекса составили 0.3 и 0.01 соответственно.

Таким образом, наблюдались минимумы молекулярного электростатического потенциала на атоме азота не только для продана, но и для кумарина 1. Чувствительность к растворителю молекулы продана объясняется следующим: при увеличении полярности среды, в разной степени прогрессируют комплексы по кислороду и азоту. Комплекс по кислороду даёт красный сдвиг, а по азоту голубой. В возбуждённом состоянии оба типа комплексов дают красный сдвиг. Предложенная геометрия флуоресцентного состояния кумарина 1 согласуется с экспериментальными результатами.

Список публикаций:

[1] Lakowicz J.R. Principles of fluorescence spectroscopy. Kluwer Academic/ Plenum Publishers, New York 2nd ed. 1999 P.698.

Антистоксовая флуоресценция красителя феналемин-512 в полимерной матрице при низкоинтенсивном возбуждении

Жигулина Светлана Валерьевна

Чуносова Светлана Сергеевна

Новосибирский государственный технический университет

Мешалкин Юрий Петрович, д.ф.-м.н

Zh_sveta@ngs.ru

Изучение путей дезактивации энергетически возбужденных молекул является одним из основных вопросов молекулярной люминесценции. Существуют различные пути перехода молекулы из возбужденного состояния в основное: флуоресценция, безызлучательная дезактивация, фосфоресценция и интеркомбинационная конверсия. Одним из самых распространенных методов изучения структуры уровней молекул является флуоресцентная спектроскопия. Существует много работ по флуоресцентной спектроскопии в так называемой стоксовой области, в то время как антистоксовая флуоресценция молекул изучена слабо. Под антистоксовой флуоресценцией (АФ) понимают фотолюминесценцию, длина волны которой меньше длины волны возбуждающего света. Механизм возникновения подобной флуоресценции до сих пор изучен не полностью, также остается открытым вопрос о квантовом выходе флуоресценции в антистоксовой области. Исследование антистоксовой флуоресценции имеет фундаментальное значение. Кроме того, наш интерес обусловлен практическим применением АФ, так как при антистоксовой флуоресценции в световую энергию переходит энергия теплового движения атомов, происходит охлаждение вещества (эффект оптического охлаждения). На этом эффекте работает новый тип охлаждающих устройств – оптический рефрижератор. Кроме того, антистоксовую флуоресценцию можно использовать для перестройки длины волны принимаемого излучения путем нанесения на фотодиод слоя красителя. Такая задача актуальна, когда фотоприемник обладает высокой чувствительностью в коротковолновой спектральной области (190-1100 нм), в то время как необходима регистрация излучения связанного диапазона (1300-1500 нм) в оптико-информационных технологиях. Также АФ можно применять для переноса длины волны излучения светодиодов в коротковолновую область спектра путем нанесения на них соответствующего красителя.

Ранее полагалось, что антистоксовая флуоресценция возникает лишь при наличии высокоинтенсивного источника. В данной работе была исследована антистоксовая флуоресценция красителя феналемин-512 в полимерной матрице при возбуждении низкоинтенсивным излучением He-Ne лазера, лазерного диода и светодиода. Предполагается, что дополнительная энергия флуоресценции берется с заселенных колебательных уровней основного состояния. Если верно предположение, интенсивность АФ должна уменьшаться, т.к. с понижением температуры заселенность колебательных уровней уменьшается. Данная работа посвящена проверке этого предположения.

Исследования выполнялись на образцах красителя феналемин-512 в полимерных матрицах в концентрациях 10^{-2} и $3.9 \cdot 10^{-3}$ М. Размеры образцов составляли 14.5x28.5x3.5 мм. В качестве источника возбуждения использовался He-Ne лазер ЛГН 207Б ($\lambda_{\text{макс}}=632.8$ нм) со средней мощностью 2 мВт, лазерная полупроводниковая

указка ($\lambda_{\text{макс}}=647.9$ нм) – приблизительно 0,5 мВт и светодиод LUR2043 ($\lambda_{\text{макс}}=682.3$ нм) – 600 мCd, приблизительно 0,8 мВт.

Лазерное излучение фокусировалось в торец матрицы линзой ($F=8$ см). При этом в продольном направлении в матрице наблюдался желто-оранжевый трек антистоксовой флуоресценции. Ее регистрация выполнялась под углом 90° к направлению трека оптоволоконном, соединенным с оптическим анализатором «Ангстрем» на основе фотодиодной линейки (диапазон регистрации 330–900 нм, энергетическая чувствительность 1 пДж). Время измерения оптического спектра составляло 150–300 мс. Спектр поглощения измеряли при помощи спектрофотометра.

Исследуемые матрицы охлаждали при помощи термохолодильника на основе элементов Пельтье до температуры -30°C и нагревали до $+50^\circ\text{C}$. Для измерения температуры использовали цифровой термометр с точностью измерения 0.5 градуса, измерение проводилось непосредственно на образце. Измерения оптического спектра и температуры образца проводились синхронно, что позволяло минимизировать температурные дрейфы образцов.

Получены зависимости антистоксовой флуоресценции от температуры. При повышении (понижении) температуры наблюдалось увеличение (уменьшение) интенсивности антистоксовой флуоресценции соответственно, что подтверждает предположение о природе возникновения антистоксовой флуоресценции.

При одних и тех же условиях (интенсивность возбуждения, температура, геометрия сбора) сигнал антистоксовой флуоресценции пропорционален концентрации красителя в образце.

В данной работе мы наблюдали АФ не только при низкоинтенсивном лазерном возбуждении He-Ne лазера и лазерного диода, но и при возбуждении некогерентным излучением светодиода. При этом наблюдается смещение длины волны максимума АФ, что, вероятно, связано с изменением длины волны возбуждения. Необходимо отметить, что полоса излучения светодиодов значительно шире полосы лазерных источников. Сравнение АФ при возбуждении источниками с узкой полосой излучения планируется осуществить в дальнейших экспериментах.

В данной работе была исследована антистоксовая флуоресценция красителя феналемин-512 в полимерной матрице при возбуждении низкоинтенсивными источниками. Проверено предположение о том, что дополнительная энергия в АФ берется с заселенных колебательных уровней основного состояния. Для практического применения АФ необходимо выяснить, какие материалы наиболее эффективно охлаждаются при помощи лазерного излучения. Дальнейшие исследования будут посвящены изучению эффективности охлаждения различных материалов и изучению квантового выхода антистоксовой флуоресценции.

Фрактальная кинетика люминесценции молекул эозина на поверхности анодированного алюминия

Иванов Андрей Михайлович

Самусев Илья Геннадьевич, Брюханов Валерий Вениаминович

Калининградский Государственный Технический Университет

Брюханов Валерий Вениаминович, д.ф.-м.н

ridlerg@yahoo.com

В работе смоделирован процесс миграции энергии триплетного возбуждения на пористой поверхности анодированного алюминия с помощью модели триплет-триплетной аннигиляции (ТТА), а также посредством модели триплет-триплетного переноса энергии, учитывающей связь между глубиной диффузионного проникновения молекул люминофоров в поры анодированного алюминия с фрактальной размерностью поверхности образца.

Для реализации первой модели были рассчитанные кинетические характеристики затухания фосфоресценции молекул эозина на длине волны $\lambda = 680$ нм и аннигиляционной замедленной флуоресценции на длине волны $\lambda = 580$ нм. Возбуждение образцов проводилось с помощью лазерной установки LQ-129 YAG:Nd³⁺ на длине волны третьей гармоники ($\lambda = 355$ нм). Сигналы фосфоресценции и аннигиляционной замедленной флуоресценции регистрировались с помощью цифрового осциллографа SDS-200. Концентрация эозина в растворе составляла 10^{-2} и 10^{-3} моль/л. Эксперименты проводились при температурах 290 и 80 К.

С помощью фрактальной модели случайных блужданий триплетной энергии, согласно которой скоростной коэффициент ТТА на дальних временах зависит от времени как

$$k(t) = k_0 t^{-h}, \quad (1)$$

и решая уравнение дезактивации триплетных состояний

$$-\frac{dn}{dt} = k_1 n + k(t)n^2, \quad (2)$$

из наклона графика зависимости $\ln(I_{A3\Phi}/I_{\Phi OC}^2)$ от $\ln t$ были найдены значения параметра неоднородности h среды, в которой происходит перенос энергии триплетного возбуждения. Значения h составили 0,22 и 0,29 соответственно для концентраций эозина 10^{-2} и 10^{-3} моль/л, что соответствует фрактальной размерности d_f среды 2,7 и 2,3 соответственно. При охлаждении образцов до температуры 80 К, аналогичные расчеты показали, что для обеих концентраций эозина на поверхности анодированного алюминия соответствующие параметры неоднородности среды оказались равными 0,31 и 0,40. Последнее свидетельствует о квазиоднородном переносе триплетной энергии между молекулами красителя, однако в этом случае h уже не определяет топологию среды, в которую помещены молекулы эозина, так как известно, что поверхность анодированного алюминия имеет фрактальную размерность $2 < d_f < 3$.

С целью установления истинного значения фрактальной размерности в работе была предложена модель, учитывающая связь между глубиной проникновения молекул-акцепторов триплетной энергии в поры анодированного алюминия и фрактальной размерности d_f этой системы.

Кинетика люминесценции в общем случае может быть описана с помощью выражения

$$I(t) = I_0 \exp \left[-\frac{t}{\tau_0} - \chi \left(\frac{t}{\tau_0} \right)^{d_f/6} \right], \quad (3)$$

где I_0 – интенсивность люминесценции в начальный момент времени, τ_0 – время жизни возбужденного состояния донора в среде без акцепторов, параметр χ зависит от критического расстояния переноса энергии и концентрации акцепторов.

Предполагая диффузионный механизм проникновения люминофоров-акцепторов триплетной энергии в поры анодированного алюминия, согласно которому распределение молекул под поверхностью образца можно аппроксимировать функцией

$$\rho = \rho_0 \exp \left[-\left(\frac{z}{z_0} \right)^2 \right], \quad 0 \leq z \leq \infty, \quad (4)$$

где параметр z_0 характеризует глубину диффузионного проникновения акцепторов и определяется условиями эксперимента.

Таким образом, кинетика люминесценции с учетом вышеприведенных предположений, а также, рассматривая перенос энергии как процесс, идущий по обменно-резонансному механизму, определяется выражением:

$$I(t) = \exp \left\{ -\frac{t}{\tau_0} - \int \rho(R) [1 - \exp(-k(R)t)] d\vec{R} \right\}, \quad (5)$$

где $k(R)$ – константа скорости переноса триплетной энергии по обменно-резонансному механизму. Численные расчеты для интервала времен $0,1 \leq t/\tau_0 \leq 10$ показали, что в этом случае

$$\int \rho(R) [1 - \exp(-k(R)t)] d\vec{R} \propto \left(\frac{t}{\tau_0} \right)^\beta, \quad 0 \leq \beta \leq 1 \quad (6)$$

Следовательно, кинетика люминесценции доноров триплетной энергии при диффузионном механизме проникновения акцепторов в соответствующем временном интервале хорошо описывается уравнением (3), в котором фрактальная размерность $d_f = 6\beta$. При этом с увеличением z_A фрактальная размерность увеличивается от 2 до 3. В работе были вычислены значения β , которые оказались равны 0,39 и 0,44 для концентраций 10^{-3} и 10^{-2} моль/л соответственно. Для указанных значений β фрактальная размерность поверхности анодированного алюминия равна 2,34 и 2,64.

Таким образом, модель случайных блужданий триплетной аннигиляции дает информацию именно о топологии этого процесса, однако при больших концентрациях красителя и при низких температурах не определяет топологию среды. В то же время,

модель, учитывающая связь между фрактальной размерностью системы и глубиной проникновения молекул люминофора внутрь пор анодированного алюминия успешно согласуется с литературными данными по исследованию структуры и размерности пористой поверхности анодированного алюминия.

Теоретическое исследование спектра К-фотопоглощения атома Ве

Каспржицкий Антон Сергеевич

Ростовский Государственный Университет

Бугаев Лусеген Арменакович, д.ф.-м.н

Anton1982@mail.ru

Многие физические процессы при их количественном описании требуют уточнения волновой функции системы по сравнению с приближением Хартри-Фока (ХФ). Известно большое количество работ, посвященных решению этой проблемы, например [1,2].

В данной работе рассмотрено влияние учета корреляций в движении электронов на сечение К - поглощения атомом Ве.

Исследование выполнено в два этапа. На первом этапе, методом наложения конфигураций, изучен вопрос влияния корреляций на полную энергию атома Ве. В расчете учтены 28 конфигурации вида: $1s^2nl^2$ и $1s^2nlml$ с $2 \leq n, m \leq 5$ и $l \leq 3$. Установлено, что наибольший вклад в корреляционную энергию (КЭ) вносят конфигурации $1s^2npr$ (45,6% экспериментального значения $KЭ_{эксп} = 0,0944a.e$ [2]), причем, 40% КЭ связано с учетом конфигурация $1s^22p^2$.

На втором этапе работы выполнен расчет сечения К - фотопоглощения. Расчет осуществлен в трех приближениях.

Приближение 1. Радиальные части волновых функций электронов начального состояния перехода $1s^22s^2$ получены решением уравнения ХФ в терме 1S . При расчете радиальных частей волновых функций электронов конечного состояния перехода первоначально, в приближении перестроенного остова, в терме 2S определены функции атомного остатка $1s^12s^2$. Радиальные части функций фотоэлектронов рассчитаны в приближении «замороженного остова» в терме 1P . Сечения фотопоглощения определены в приближении неортогональных орбиталей [3].

Приближение 2. Дополнительно учтено взаимодействие начальной и конечной конфигураций перехода (Приближение 1) с $1s^22p^2(^1S)$ и $1s^12p^2\epsilon p$, соответственно. Радиальные части волновых функций электронов конфигурации $1s^12p^2$ получены в среднем электростатическом поле конфигурации. При расчете радиальных частей волновых функций фотоэлектрона их взаимодействие с 1s- электроном учтено в терме 1P .

Приближение 3 отличается от Приближения 2 тем, что радиальные части волновых функций электронов остова получены в термах $1s^12p^2(^1S, ^3P, ^1D)$.

На Рис.1. результаты расчета сечений фотоионизации в приближениях 1 и 2 сопоставлены с экспериментальными результатами [2]. Отличие величин сечений фотопоглощения, определенных в форме «скорости» и «радиуса» для матричного элемента оператора электрического дипольного перехода практически не зависит от выбранного приближения и составляет 4-5%. Учет состояний, генеалогически связанных с $1s^1 2p^2(^1S, ^3P, ^1D)\epsilon p$ увеличивает сечения фотоионизации на 1-2%.

Переход от Приближения 2 к Приближению 3 практически не сказывается на результатах расчета.

Рассчитанные в данной работе абсолютные значения сечений фотоионизации атома Ве находятся в хорошем согласии с результатами расчетов других авторов [2].

Дальнейшее развитие теоретических исследований может быть связано с дополнительным учетом конфигураций в начальном и конечном состояниях перехода; корреляций в приближение случайных фаз с обменом (ПСФО) и процессов кратного поглощения / ионизации.

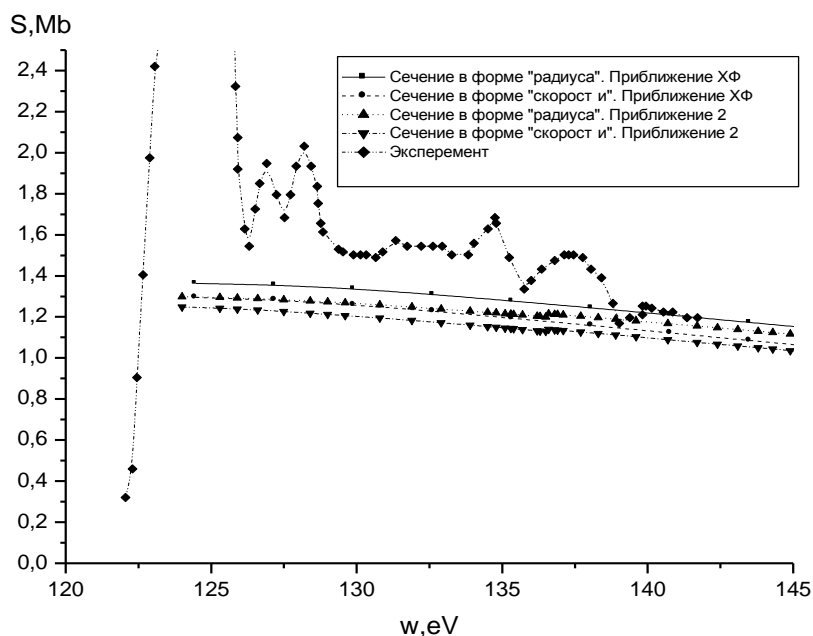


рис.1

Список публикаций:

- [1] Демехин В.Ф., Демехин Ф.В., Кочур А.Г., Демехина Н.В. // Журнал Структурной Химии-1998,39,№6
 [2] Hari P., Saha and C.Denise Caldwell // Phys.Rev A.-1989. -40.-P.7020-7025
 [3] Сухоруков В.Л., Демехин В.Ф., Тимошенко В.В. // Оптика. Спектроскопия-1979.47,№2 стр407-409

Оптические и люминесцентные свойства ряда кристаллов со структурным типом шеелита $SrWO_4$, $SrMoO_4$ и $CaMoO_4$

Китаева Ирина Викторовна

Колобанов Виталий Николаевич, Михайлин Виталий Васильевич, Спасский Дмитрий Андреевич

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Михайлин Виталий Васильевич, д.ф.-м.н

Irina_kitaeva@rambler.ru

В работе были исследованы следующие шеелитовые кристаллы: $SrWO_4$, $SrMoO_4$ и $CaMoO_4$. Вольфрамат и молибдат стронция являются перспективными лазерными кристаллами [1], а молибдат кальция используется в перестраиваемых акустооптических фильтрах [2].

Однако до сих пор отсутствует информация об электронной плотности энергетических зон данных кристаллов. Изучение их энергетических зонных структур по спектрам поглощения затруднено в области фундаментального поглощения (ФП), поэтому в данной работе для получения информации об электронной структуре кристаллов в области края ФП и в области ФП измерялись спектры отражения, которые затем преобразовываются в спектры поглощения по дисперсионным соотношениям Крамерса-Кронига. К тому же в экспериментах учитывалась анизотропия кристаллической решетки исследованных соединений, что важно для анализа полученных спектров отражения, которые значительно зависят от ориентации оптических осей кристалла относительно вектора E падающего на образец излучения [3]. Люминесцентные свойства данных соединений на настоящее время также изучены весьма слабо.

В настоящей работе были измерены спектры отражения, возбуждения люминесценции в области энергий фотонов 3 - 40 эВ, а также спектры фото- и рентгенолюминесценции и их кинетики затухания. Измерения проводились на установках, расположенных в канале синхротронного излучения (СИ) позитронного накопителя DORIS III (DESY, Гамбург, Германия) и накопителя «Сибирь-2» Курчатовского центра СИ при комнатной температуре и температуре жидкого гелия (4.2 К). Исследованные кристаллы, были выращены методом Чохральского в Институте общей физике РАН, г. Москва.

Анализ спектров отражения $SrWO_4$, $SrMoO_4$ и $CaMoO_4$ позволил объяснить основные особенности электронной структуры этих кристаллов. В частности, было показано, что электронные состояния кальция не участвуют в формировании дна зоны проводимости. Были сделаны оценки ширины запрещенной и валентной зоны. Сделаны выводы о природе центров люминесценции в этих кристаллах.

Список публикаций:

[1] L.I. Ivleva, T.T. Basiev, I.S. Voronina, P.G. Zverev, V.V. Osiko, N.M. Polozkov *Optical Materials*, 23 (2003), 1-2 (июль), 439-442

[2] А.А. Блистанов *Кристаллы квантовой и нелинейной оптики. Москва. МИСИС. 2000. 431 стр.*

[3] V.N. Kolobanov, I.A. Kamenskikh, V.V. Mikhailin, I.N. Shpinkov, D.A. Spassky, B.I. Zadneprovsky, L.I. Potkin, G. Zimmerer *Optical and luminescent properties of anisotropic tungstate crystals // Nuclear Instruments and Methods A* 486/1-2 (2002) pp. 496-503.

Формирование границы раздела Si (111)/Fe при комнатной температуре по данным ДОС.

Коваль Людмила Валерьевна

Доценко Сергей Анатольевич

Дальневосточный Государственный Университет

Галкин Николай Геннадьевич, д.ф.-м.н

luda2603@phys.dvgu.ru

С исторической точки зрения, оптические методы играли важную роль в самом начале развития спектроскопии состояния чистой полупроводниковой поверхности, то есть в конце 60-х годов. Для изучения оптических свойств тонкой пленки, в частности поверхности образца, необходимо было из всего сигнала, подавляющую часть которого составляет вклад от подложки, выделить вклад от тонкой пленки. Эту задачу решает метод дифференциальной отражательной спектроскопии (ДОС). Суть метода ДОС заключается в определении коэффициента дифференциального отражения, который вычисляется следующим образом $\frac{\Delta R}{R} = \frac{R - R_0}{R_0}$ (1), где R_0 и R – коэффициенты отражения до и после осаждения адсорбата, соответственно.

Однако на практике мы измеряем не сам коэффициент отражения, а некоторую величину $X = CR(\lambda, \varphi)\Phi(\lambda)$, где C – это приборная постоянная, $\Phi(\lambda)$ – спектральная функция источника света, используемого для исследования системы адсорбат/подложка, R - коэффициент отражения системы.

Но, учитывая то, что мы работаем в вакууме и использование эталонов затруднительно, то лучше использовать метод ДОС, который позволяет избавиться от неизвестных нам параметров, в самом деле $\frac{\Delta X}{X} = \frac{\Delta R}{R}$.

Исследование зависимости коэффициента дифференциального отражения от длины волны позволяет определить возможные оптические переходы в пленке. Первоначально этот метод так и использовался, но благодаря теоретической работе Аспенса и Макинтаера, в которой была установлена связь между коэффициентом дифференциального отражения и диэлектрической функцией пленки, стало возможным определять величину мнимой части диэлектрической проницаемости пленки. Известно, что связь между коэффициентом дифференциального отражения и диэлектрической функцией пленки выглядит следующим образом: $\frac{\Delta R}{R} = -8\pi \left(\frac{d}{\lambda}\right) \text{Im} \left(\frac{1 - \epsilon_s}{1 - \epsilon_b}\right)$ (2) где ϵ_s и ϵ_b диэлектрические функции плёнки и подложки, d – толщина пленки.

Однако просто приравнять выражения (1) и (2) нельзя, поскольку выражение (2) в качестве подложки использовалось вещество с идеальной границей раздела, то есть предполагалось, что отсутствуют уровни Тамма и Шокли. Нетрудно показать, что между величинами коэффициентов дифференциального отражения, определенных по

формуле (1) и (2) существует следующая связь: $\left(\frac{\Delta R}{R}\right)_{\text{exp}} = \frac{\left(\frac{\Delta R}{R}\right)_{\text{ads}} - \frac{\Delta R}{R_0}}{\frac{\Delta R}{R_0} + 1}$.

Состояние подложки, отражение от которой равно R_0 , относительно которой вычисляют коэффициент дифференциального отражения, называют эталоном. Эталоном может выступать как начальное состояние подложки, на которую еще не нанесен адсорбат, так и конечное состояние. При исследовании поведения поверхности Si(111) в присутствии адсорбата в условиях СВВ методом ДОС использовались лишь 4 эталона: $O_2/Si(111)$, $H_2/Si(111)$, $SiO_2/Si(111)$, $Si(111)7 \times 7$.

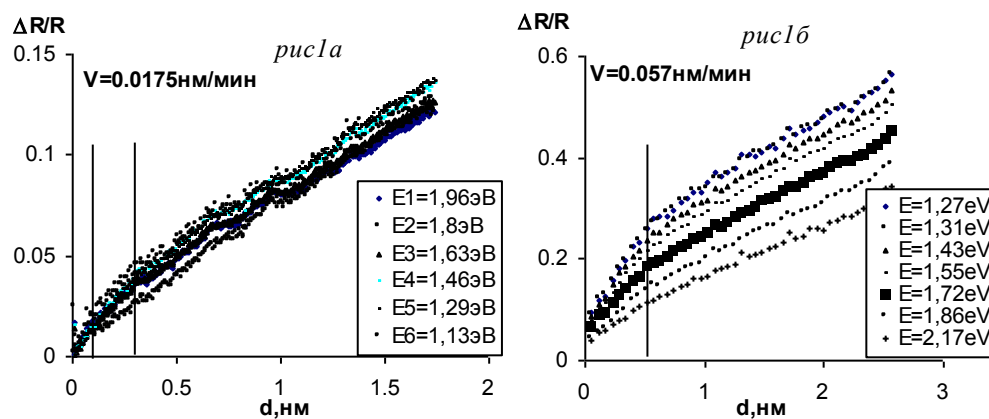


рис. 1а, б. Зависимость коэффициента дифференциального отражения от толщины пленки для двух различных скоростей осаждения

В силу того, что эти эталоны имеют ряд недостатков, в ходе выполнения работы предложен другой подход – метод динамического эталона. При осаждении адсорбата на подложку всегда существует диапазон значений толщины пленки, в пределах которого диэлектрическая проницаемость сформированной структуры не изменяется. На графике зависимости $\Delta R/R(d)$ это соответствует линейному участку (Рис. 1). Состояние образца, соответствующее любой точке из этого диапазона, можно взять в качестве эталона. Линейных участков на зависимости $\Delta R/R(d)$ может оказаться несколько и для каждого участка можно будет выбрать свой эталон. Таким образом, вместо одного эталона, выбранного для всего диапазона значений толщины адсорбата, используются несколько эталонов, динамически изменяющихся при переходе от одного диапазона к другому.

В последнее время большое внимание исследователей привлекает малоизученная система Fe/Si(111). Рядом ученых, среди которых были специалисты из нашей лаборатории, было установлено, что при комнатной температуре железо на кремнии растет ограниченными островками, которые имеют приблизительно равные размеры. Следующим шагом в изучении системы Fe/Si(111) учеными нашей лаборатории стало исследование формирования границы раздела Si(111)/Fe.

Нами были поставлены необходимые эксперименты по осаждению железа при комнатной температуре. На рис.1 представлены два графика, на которых представлена зависимость коэффициента дифференциального отражения от толщины пленки Fe, сформированной при различных скоростях осаждения адсорбата. Нетрудно заметить на первом графике три линейных участка, а на втором – два. Согласно нашим расчетам, такое поведение коэффициента дифференциального отражения указывает на то, что формирование границы раздела Fe/Si(111) в первом и во втором случае происходит по-разному.

Исследование колебательно-вращательных спектров молекул $D_2^M Se$ ($M=78,80$) в диапазоне $2300-4000\text{ см}^{-1}$

Кривина Татьяна Владимировна

Томский Государственный Университет

Бехтерева Елена Сергеевна, к.ф.-м.н

Garmonya2003@rambler.ru

Исследование колебательно-вращательной структуры спектров поглощения высокого разрешения дейтерозамещенной D_2Se модификации молекулы селеноводорода H_2Se является интересным и полезным по многим причинам. Эта молекула является одной из достаточно легких и простых из существующих в природе молекул, спектру которой присущи практически все особенности и эффекты, проявляющиеся в большинстве такого типа молекул. Также исследование спектров поглощения этой молекулы практически значимо для атмосферной оптики и астрофизики.

В данной работе анализируется колебательно-вращательная структура полос $\nu_1+\nu_2/\nu_2+\nu_3$ и $2\nu_1/\nu_1+\nu_3/2\nu_3$. Как показывает анализ, между всеми полосами существуют сильные резонансные взаимодействия, по этой причине для анализа экспериментальных данных используется гамильтониан [1], имеющий следующий вид:

$$H^{v..r.} = \sum_{v,v'} H^{v,v'}$$

(1)

где суммирование ведётся по всем колебательным состояниям. Диагональные операторы H^{vv} описывают вращательную структуру соответствующих колебательных состояний и имеют вид операторов Уотсона [2]:

$$\begin{aligned} H^{vv} = & E^v + \left[A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J_{xy}^2 \\ & - \Delta^v_{\kappa} J_z^4 - \Delta^v_{JK} J_z^2 J^2 - \Delta^v_J J^4 - \delta^v_{\kappa} [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta^v_J J^2 J_{xy}^2 \\ & + H^v_K J_z^6 + H^v_{KJ} J_z^4 J^2 + H^v_{JK} J_z^2 J^4 + H^v_J J^6 + [J_{xy}^2, h^v_K J_z^4 + h^v_{JK} J^2 J_z^2 + h^v_J J^4] \end{aligned}$$

(2)

$$\begin{aligned} & + L^v_K J_z^8 + L^v_{KKJ} J_z^6 J^2 + L^v_{JK} J_z^4 J^4 + L^v_{JJK} J_z^2 J^6 + L^v_J J^6 \\ & + [J_{xy}^2, l^v_K J_z^6 + l^v_{KJ} J_z^4 J^2 + l^v_{JK} J_z^2 J^4 + l^v_J J^6] + P^v_K J_z^{10} + [J_{xy}^2, P^v_K J_z^8] + \end{aligned}$$

Не диагональные операторы $H^{vv'}$ ($v \neq v'$) описывают резонансные взаимодействия между состояниями $|v\rangle$ и $|v'\rangle$. В данном случае, резонансные взаимодействия между состояниями с одинаковой симметрией описывается с помощью операторов типа Ферми[3]:

$$H_F^{vv'} = F^{vv'} + F^v_K J_z^2 + \dots + F^{vv'}_{xy} J_{xy}^2 + F^{vv'}_{xyK} [J_{xy}^2, J_z^2] + F^{vv'}_{xyJ} J_{xy}^2 J^2 + \dots,$$

(3)

где $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$ и $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$. Не диагональный оператор $H^{vv'}$ типа Кориолиса [4] описывает резонансные взаимодействия между состояниями $v >$ и $v' >$ разной симметрии, определяется следующим выражением:

$$\begin{aligned}
 H_{C_y}^{vv'} = & (2B\zeta^z)^{vv'} iJ_y + C_{yK}^{vv'} [iJ_y, J_z^2]_+ + C_{yJ}^{vv'} iJ_y J^2 + \\
 & C_{yKK}^{vv'} [iJ_y, J_z^4]_+ + C_{yJK}^{vv'} [iJ_y, J_z^2 J^2]_+ + C_{yJJ}^{vv'} iJ_y J^4 + \\
 & C_{yKKK}^{vv'} [iJ_y, J_z^6]_+ + C_{yKKJ}^{vv'} [iJ_y, J_z^4 J^2]_+ + \dots + C_{xz}^{vv'} [J_x, J_z]_+ + \\
 & C_{xzK}^{vv'} [[J_x, J_y]_+, J_z^2]_+ + C_{xzJ}^{vv'} [J_x, J_z]_+ J^2 + C_{xzKK}^{vv'} [[J_x, J_z]_+, J_z^4]_+ + \\
 & C_{xyJK}^{vv'} [[J_x, J_z]_+, J_z^2 J^2]_+ + C_{xzJJ}^{vv'} [J_x, J_z]_+ J^4 + \dots
 \end{aligned} \quad (4)$$

Данный спектр высокого разрешения молекулы D_2Se был зарегистрирован на Фурье-спектрометре BRUKER IFS 120HR в университете г. Вупперталь (Германия) при давлении 440 Па с разрешением $1 \times 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ и максимальной длиной оптического пути 3.3 м.

В результате анализа, выполненного на основе метода комбинационных разностей, было проинтерпретировано более 1450 переходов. Максимальное значение квантового числа J для полос v_1+v_2/v_2+v_3 и $2v_1/v_1+v_3/2v_3$ равно 21,10, а квантового числа K равно 10,9, соответственно.

В результате решения обратной спектроскопической задачи с Гамильтонианом [1] определены вращательные, центробежные, резонансные постоянные, воспроизводящие исходные данные с экспериментальной точностью.

Люминесценция иттербий-содержащих полуторных оксидов

Красиков Дмитрий Николаевич

Герасимова Наталья Владимировна, Каменских Ирина Александровна,

Михайлин Виталий Васильевич

Московский Государственный университет им. Ломоносова

Герасимова Наталья Владимировна, к. ф.-м. н

kdn@hotbox.ru

Полуторные оксиды с примесью иттербия получили широкое распространение как хорошие лазерные кристаллы. Одним из характерных свойств этих соединений является ИК-люминесценция, обусловленная f-f-переходами на ионе активатора. Однако эта люминесценция характеризуется большими временами (порядка 1 мкс). В последнее время полуторные оксиды привлекают внимание исследователей наличием люминесценции с переносом заряда (ЛПЗ). Последняя имеет наносекундные времена жизни и может быть использована при создании быстродействующих сцинтилляторов.

Были проведены измерения спектров люминесценции в области от 1,1 до 5 эВ при возбуждении УФ- и ВУФ-излучением, спектров возбуждения ЛПЗ в области от 5 до 22 эВ и кинетики ЛПЗ для монокристаллов $Y_2O_3:Yb$, $Sc_2O_3:Yb$ и $Lu_2O_3:Yb$. Измерения ЛПЗ для Lu_2O_3 и спектров ИК-люминесценции при возбуждении в полосе с переносом заряда проводились впервые. Измерения проводились на установке SUPERLUMI (DESY, Гамбург, Германия) в области температур от 10 до 300 К, при измерении спектров ЛПЗ использовались временные ворота.

Также как в гранатах и перовскитах, активированных иттербием, в спектрах

люминесценции иттербий-содержащих оксидов в области 2-5 эВ наблюдаются два пика, соответствующие переходам с состояния с переносом заряда (состояние, образованное при переходе дырки с ионов иттербия на кислородное окружение) на уровни иттербия $^2F_{5/2}$ и $^2F_{7/2}$. Однако форма полос ЛПЗ в спектрах люминесценции, как и форма полосы с переносом заряда в спектрах возбуждения, различаются для измерений с различными временными воротами. Максимумы обеих полос ЛПЗ и полосы с переносом заряда в спектрах возбуждения для быстрых ворот расположены при более низких энергиях. При этом спектр ЛПЗ с хорошей точностью аппроксимируется четырьмя гауссианами. Известно, что в исследованных полупроводниковых оксидах ионы иттербия занимают две кристаллографические позиции с разными типами симметрии: C_2 и C_{3i} . Таким образом, можно сделать вывод, что ионы иттербия в обеих позициях образуют эффективные центры люминесценции с переносом заряда. Эти два типа центров характеризуются различным положением и различной шириной полос люминесценции, а также различной кинетикой.

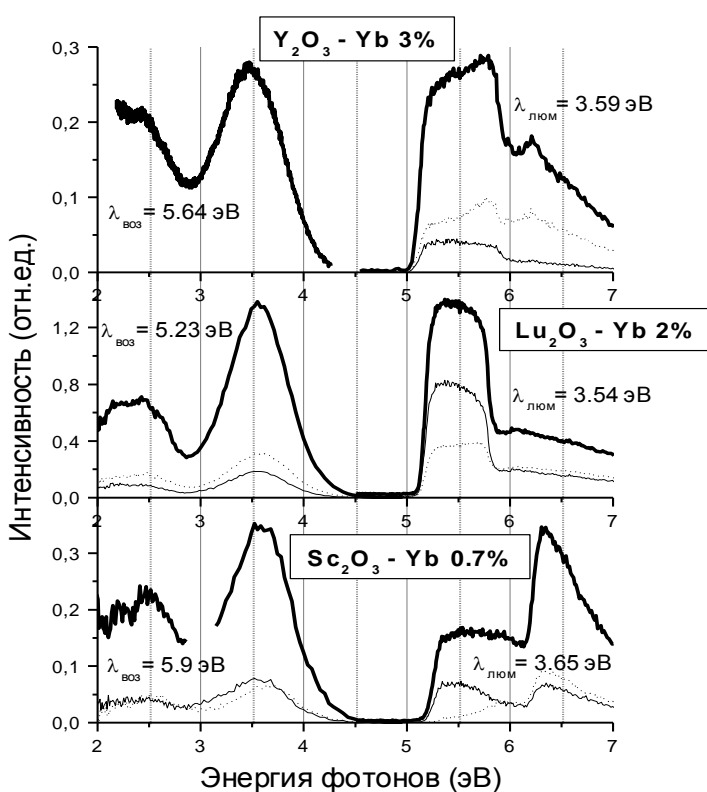


рис.1. Спектры люминесценции с переносом заряда и спектры возбуждения ЛПЗ для $Y_2O_3:Yb$, $Sc_2O_3:Yb$ и $Lu_2O_3:Yb$, измеренные при температуре 10 К. Жирной линией изображены интегральные по времени спектры, тонкой сплошной линией – спектры быстрой компоненты ЛПЗ (временные ворота 8-68 нс для Lu_2O_3 , 3-14 нс для Sc_2O_3 и Y_2O_3), пунктирной линией – спектры медленной компоненты ЛПЗ (временные ворота 90-179 нс).

Люминесценция монокристаллов PbWO_4 , легированных PbF_2 *Крутяк Наталия Романовна*

Львовский национальный университет имени Ивана Франко

Пашковский Мариан Владиславович, д.ф.-м.н

krutyakn@yahoo.com

Вольфрамат свинца PbWO_4 является объектом масштабных исследований в связи с его применением в детекторных системах в физике высоких энергий. Тем не менее, несмотря на большое количество работ, посвященных исследованию оптико-люминесцентных свойств этого сложного оксида, природа центров свечения, связанных с существованием структурных дефектов и примесей, остается дискуссионным вопросом. Важен и технологический аспект получения монокристаллов, а также их легирование специальными (гетеровалентными) примесями как метод улучшения сцинтилляционных параметров и управления спектром свечения вольфрамата свинца. В настоящей работе проведено исследование зависимости люминесцентных свойств PbWO_4 от внедрения в кристаллическую структуру атомов фтора разной концентрации в форме PbF_2 . Очевидно, имеет место частичное анионное замещение регулярных атомов кислорода (атомный радиус 1,26 Å) атомами фтора (1,19 Å), следствием чего является увеличение параметров решетки на 0,06 % [1].

Исследованы особенности влияния примеси PbF_2 разной концентрации (400 и 4000 ppm) на структуру спектров возбуждения и люминесценции вольфрамата свинца. Полученные спектры фотолюминесценции при возбуждении $\lambda_{\text{возб}}=280\div330$ нм в температурном диапазоне $T=80\text{--}290$ К позволяют сделать вывод о существенном отличии положения максимумов полос свечения и об их природе в PbWO_4 и $\text{PbWO}_4:\text{PbF}_2$.

Авторами работы [2] установлено, что легирование фтором вольфрамата свинца увеличивает световыход и улучшает пропускание в длинноволновой области спектра. Согласно полученных нами результатов спектры фотолюминесценции чистого PbWO_4 представлены хорошо известными полосами в голубой (с максимумом при $\lambda_{\text{мак}}=430$ нм), зелено-голубой ($\lambda_{\text{мак}}=490\text{--}500$ нм) и красной ($\lambda_{\text{мак}}=630$ нм) спектральных областях, причем голубая компонента наблюдается только при азотной температуре, а красная – при комнатной. В спектрах люминесценции $\text{PbWO}_4:\text{PbF}_2$ превалирует зелено-голубая компонента с четко выраженной тенденцией к смещению в длинноволновую область с ростом концентрации фтора в кристалле.

Кроме того, изучено влияние жесткого рентгеновского облучения на фотолюминесцентные свойства кристаллов вольфрамата свинца, легированного фтором при их возбуждении на краю фундаментального поглощения (He-Cd лазер, $\lambda_{\text{возб}}=325$ нм).

Основные результаты и выводы:

1. Установлено, что оптимальная концентрация PbF_2 в расплаве стехиометрического PbWO_4 равна 4000 ppm, поскольку при добавлении 13700 ppm кристалл вырос некачественным.

2. Корреляция спектров возбуждения и излучения $\text{PbWO}_4:\text{PbF}_2$ позволяет допускать, что превалирующая зелено-голубая составляющая легко возбуждается в

области коротковолновой полосы с максимумом $\sim 310\text{-}330$ нм, тогда как голубое свечение возбуждается светом из области ближнего ультрафиолета. Однако, существуют некоторые различия в спектрах разных образцов, что связано с суперпозицией отдельных полос как в спектрах люминесценции, так и возбуждения. Установлен эффект изменения энергетического положения полосы фотовозбуждения зелено-голубого свечения с полосой возбуждения голубого излучения при переходе температур $80 \rightarrow 300$ К.

3. Предложена модель люминесценции в $\text{PbWO}_4\text{:PbF}_2$, которая позволяет объяснить влияние оксианионного замещения на люминесцентные свойства вольфрамата свинца.

Список публикаций:

[1] N.Krutyak, R.Gladyshevskii et al. *Rad.Measur.* (2004) – to be published

[2] X.Liu, G.Hu et al. *Phys.Stat.Sol A190, R1-R3* (2002)

Фазовые переходы, индуцированные гидростатическим давлением в кристалле RbMnCl_3 - спектроскопия КР и расчет колебательного спектра.

Крылова Светлана Николаевна

А. Н. Втюрин, С. А. Горяйнов, Н. Г. Замкова, В. И. Зиненко,

А. С. Крылов, А. Д. Шефер

Институт физики им. Л.В Киренского СО РАН

Втюрин Александр Николаевич, д.ф.-м.н

slanky@iph.krasn.ru

Кристалл RbMnCl_3 относится к обширному семейству перовскитоподобных структур с общей формулой ABX_3 . Галоген-содержащие перовскиты могут образовывать как кубическую, так и гексагональную решетки, а также смешанные структурные типы.

В RbMnCl_3 наблюдался фазовый переход при понижении температуры, сопровождаемый восстановлением мягкой моды в спектре КР [1], а также из гексагональной в кубическую структуру при высоких давлениях и температурах: в [2] мелкокристаллический порошок RbMnCl_3 подвергался гидростатическому давлению свыше 0.7 GPa, отжигался под давлением (полчаса при 700°C), и затем стабилизированная таким образом кубическая структура исследовалась уже при нормальных условиях. В [3] при сравнимых температурах и давлениях было зафиксировано возникновение кубической структуры в части объема образца. Хотя и было отмечено, что значение температуры отжига слабо влияет на давление перехода в кубическую фазу, тем не менее до сих пор этот переход при комнатной температуре не наблюдался.

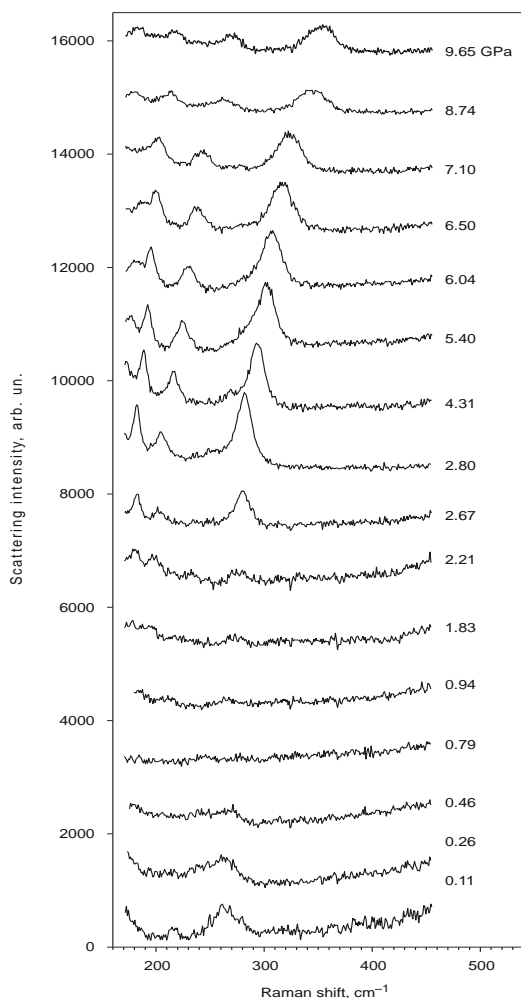


рис. 1. Трансформация высокочастотной части спектра КР кристалла $RbMnCl_3$ при повышении давления

Недавние теоретические исследования [4] этой группы кристаллов показали, что при повышении давления гексагональная структура $RbMnCl_3$ должна терять устойчивость при гидростатического давления (около 1 ГПа); при этом энергетически более выгодной становится кубическая модификация кристалла. Разница расчетных значений энергий кубической и гексагональной решеток $RbMnCl_3$ незначительна и зависит от давления слабо, поэтому необходима экспериментальная проверка этих расчетов с целью поиска перехода гексагональной структуры $RbMnCl_3$ в кубическую под давлением при комнатной температуре.

В данной работе выполнено исследование экспериментальных поляризованных спектров КР гексагональной фазы $RbMnCl_3$, изучено влияние гидростатического давления на спектр КР этого кристалла (рис.1). Переход из гексагональной фазы (пространственная группа $R\bar{6}_3/mmc$) в кубическую (пространственная группа $Pm\bar{3}m$), наблюдавшийся ранее при высоких температурах, впервые удалось наблюдать под давлением при комнатной температуре. В диапазоне $0.4\div 0.8$ ГПа происходит через разделение фаз. Экспериментальный диапазон давлений находится в хорошем согласии с рассчитанным давлением потери устойчивости гексагональной фазы (1 ГПа). Этот переход обратим, он не сопровождается заметными гистерезисными эффектами.

Эксперимент показал, что при дальнейшем повышении давления происходят переходы при 1.1 ГПа и, возможно, 5 ГПа. Симметричный сравнительный анализ спектра комбинационного рассеяния и рассчитанного спектра колебаний решетки $RbMnCl_3$ в гексагональной фазе позволил идентифицировать большую часть линий спектра КР и определить собственные векторы соответствующих колебаний.

Список публикаций:

- [1] К. С. Александров, А. Т. Анистратов, С. В. Мельникова, В. И. Зиненко, Л. А. Шабанова, А. Д. Шефер. *ФТТ*, **21**, 1119 (1979).
- [2] J. M. Longo, J. A. Kafalas. *J. Solid State Chem.*, **3**, 429 (1971).
- [3] И. П. Александрова, В. Ф. Шабанов, А. К. Москалев и др. *Структурные фазовые переходы в кристаллах при воздействии высокого давления*. Новосибирск: Наука, 1982.
- [4] В. И. Зиненко, Н. Г. Замкова, С. Н. Софронова. *ЖЭТФ*, **11**, 1742 (1998).

Исследования далеких инфракрасных спектров 4Н–CdI₂

Кулай Тарас Стефанович

Львовский национальный университет имени Ивана Франко

Болеста Иван Михайлович, док. ф-м. н

kulay@rd.wups.lviv.ua

Исследовались далекие инфракрасные спектры пропускания и отражения кристаллов 4Н политипа CdI₂ в области 10–220 см⁻¹. Кристаллы выращивались из расплава методом Бриджмена, для измерений скалывались пластинки по базисных плоскостях (0001) толщиной 0.1–0.5 мм и площадью 0.5–1 см², поверхность которых не была дополнительно обработана. Спектры отражения и пропускания кристаллов 4Н–CdI₂ в области 10–220 см⁻¹ измерялись со спектральным разрешением 1 см⁻¹ при T = 290 К. В спектре пропускания кристалла 4Н–CdI₂ наблюдались пики при 15, 25, 39, 51, 60, 66.5, 82.5, 90, 97, 137, 148, 154 см⁻¹. При этом соблюдалась хорошая корреляция между спектрами пропускания и отражения, а незначительное несовпадение частот (~3 см⁻¹) в спектрах обусловлено разным качеством поверхности исследуемых образцов.

Изучалось влияние концентрации надстехиометрического кадмия на фоновые спектры 4Н–CdI₂. С этой целью исследовались спектры пропускания и отражения четырех кристаллов 4Н–CdI₂ с концентрацией надстехиометрического кадмия 10⁻⁴, 10⁻³, 10⁻², 10⁻¹ % (в молярных долях).

Методом дисперсионного анализа изучались основные параметры колебательных осцилляторов, которые формируют спектр отражения 4Н–CdI₂ в области 10–160 см⁻¹. Теоретический спектр отражения $R(\omega)$ рассчитывался со спектра комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon^*(\omega)$ по формуле (1):

$$R(\omega) = \left[\frac{|\sqrt{\varepsilon^*} - 1|}{|\sqrt{\varepsilon^*} + 1|} \right]^2, \quad (1)$$

которая задавалась моделью независимых затухающих осцилляторов по формуле (2):

$$\varepsilon^*(\omega) = \varepsilon_\infty \prod_{n=1}^{N_0} (\omega_{l,n}^2 - \omega^2 + i\omega\gamma_{l,n}) / (\omega_{t,n}^2 - \omega^2 + i\omega\gamma_{t,n}), \quad (2)$$

где ε_∞ – вклад высокочастотных колебаний, $\omega_{l,n}$, $\omega_{t,n}$ и $\gamma_{l,n}$, $\gamma_{t,n}$ – частоты и коэффициенты затухания n -го поперечного (ТО) и продольного (ЛО) колебаний, N_0 – число колебаний. Силы осцилляторов S оценивались из соотношения (3):

$$\omega_l - \omega_t \approx S\omega_t / 2\varepsilon_\infty. \quad (3)$$

Аппроксимируя взаимодействие двух ближайших слоев I–Cd–I...I–Cd–I, соотношением (4):

$$U(R) = -\frac{C}{R^6} + \frac{B}{R^n}, \quad (4)$$

в котором первый член характеризует ван дер Ваальсовое притяжение, а второй – взаимодействие, связанное с отталкивающими силами, нами рассчитывались параметры C , B , n для кристалла 4H-CdI_2 . Константы C и B рассчитывались используя формулы (5) и (6):

$$\frac{dU(R)}{dR} \Big|_{R=R_0} = 0 \quad (5)$$

$$\frac{d^2U(R)}{dR^2} \Big|_{R=R_0} = \Phi, \quad (6)$$

где R_0 – равновесное расстояние между слоями $\text{I-Cd-I}\cdots\text{I-Cd-I}$, Φ – междуатомная константа взаимодействия. Константа Φ связана с константой межслойного взаимодействия k соотношением (7):

$$k = 2\Phi \cos \Theta, \quad (7)$$

где $\Theta = 59.6^\circ$ – угол, который образуется атомами йода двух соседних слоев $\text{I-Cd-I}\cdots\text{I-Cd-I}$ и базисом кристаллической решетки. Глубина потенциальной ямы в точке R_0 для кристалла 4H-CdI_2 определялась из температуры плавления кристалла 4H-CdI_2 ($T_{пл} = 388 \text{ K}$).

По итогам работы можно сделать следующие выводы.

1. Из сравнения спектров кристаллов 4H-CdI_2 и $4\text{H-CdI}_2\text{-Cd}$ установлено изменение кристаллической структуры в кристаллах $4\text{H-CdI}_2\text{-Cd}$. Оно свидетельствует о возникновении химической связи между надстехиометрическими атомами кадмия и решеточными йонами йода, вследствие возникновения дополнительных силовых констант.

2. Наблюдались концентрационные зависимости пиков в спектрах КРС $4\text{H-CdI}_2\text{-Cd}$, а также уменьшение интенсивности пиков в области 10 см^{-1} и высокоэнергетический сдвиг пика при $200\text{--}215 \text{ см}^{-1}$. При этом зафиксировано уменьшение интегрального пропускания спектров $4\text{H-CdI}_2\text{-Cd}$.

3. Методом дисперсионного анализа изучено основные параметры колебательных осцилляторов, которые формируют спектр отражения 4H-CdI_2 в области $10\text{--}160 \text{ см}^{-1}$.

4. Аппроксимируя взаимодействие двух ближайших слоев $\text{I-Cd-I}\cdots\text{I-Cd-I}$ соотношением (4), рассчитано параметры C , B , n для кристалла 4H-CdI_2 . Используя значения $R_0 = 3.96 \text{ \AA}$ и $k = 1.33 \text{ Н/м}$ для кристалла 4H-CdI_2 рассчитанные параметры $C = 1.91 \cdot 10^{-77} \text{ Дж}\cdot\text{м}$, $B = 1.35 \cdot 10^{-143} \text{ Дж}\cdot\text{м}$ и $n = 13$.

Катодолюминесценция наноструктурного оксида алюминия, возбуждаемого импульсным электронным пучком

Кухаренко Андрей Игоревич

Горбунов Сергей Владимирович, Зацепин Анатолий Федорович

Уральский Государственный Технический Университет

Чолах Сеиф Османович, д. ф-м. н

akuharenko@inbox.ru

Интенсивное развитие нанотехнологий и создание новых оксидных материалов определяет необходимость изучения свойств точечных дефектов и электронно-оптических процессов в низкоразмерных системах. Цель данной работы состояла в изучении спектрально-кинетических свойств люминесцирующих дефектов в наноструктурных модификациях оксида алюминия.

В качестве основного экспериментального метода использована люминесцентная спектроскопия с временным разрешением, позволяющая изучать кинетику создания и эволюции центров свечения, возникающих в материалах под действием коротких импульсов возбуждающей радиации. Источником возбуждения служил наносекундный ускоритель ГИН 600, генерирующий пучки с параметрами $E = 0.25$ МэВ, $t = 3-30$ нс, $j = 10 \cdot 2 \cdot 10^3$ А·см².

Исследуемые нанопорошки Al_2O_3 (средний размер зерна 17 нм) были синтезированы на воздухе методом электровзрыва металлического алюминия. Для облучения наноструктурного Al_2O_3 ионами железа использовался источник ионов типа MEVVA с параметрами $t_{имп} = 0,4$ мс; $f = 25$ Гц; $E = 30$ кэВ; $j = 3$ мА/см². Нанокерамика Al_2O_3 изготовлена методом магнито-импульсного прессования нанопорошка. Все образцы были получены в институте электрофизики УрО РАН.

Рентгенодифракционный анализ фазового состава нанопорошков Al_2O_3 показал, что исходный образец состоит из смеси алюминиевого оксида и гидроксида алюминия $Al(OH)_3$. Оксидная компонента представлена смесями γ и δ фаз в соотношении 1:1. Рентгеновские дифрактограммы образца, облученного ионами железа ($\Phi = 10^{17}$ см⁻²), отличаются от исходного отсутствием гидроксида. При этом облучение не изменяет размера наночастиц и соотношения γ и δ фаз Al_2O_3 .

На рис. 1 представлены спектры катодолюминесценции наноструктурного оксида алюминия, зарегистрированные при 295 К. Сравнение спектров люминесценции исходного и облученного ионами железа нанопорошка Al_2O_3 (рис. 1а) выявило следующие особенности. Облучение вызывает снижение интенсивности полосы 3,8 эВ и повышение интенсивности свечения 2,4 эВ. Спектр люминесценции нанокерамики Al_2O_3 (рис 1б) отличается заметным сужением и одновременным увеличением интенсивности полос 2,4; 3,1; 3,8 эВ и образованием нового центра с люминесценцией при 4,3 эВ. Эти особенности могут быть обусловлены образованием стабильной кристаллической фазы α - Al_2O_3 .

Природа полосы 2,4 эВ установлена в облученном нейтронами оксиде алюминия [1] и отнесена к парным анионным вакансиям, захвативших электроны (агрегатные центры F-типа). Причина возникновения подобных центров в нашем случае может быть обусловлена термодинамически неравновесными условиями получения нанопорошка. Увеличение интенсивности люминесценции при 2,4 эВ (рис 1а),

наблюдаемое при ионно-лучевой обработке нанопорошков, свидетельствует о дополнительном радиационно-индуцированном образовании дефектов данного типа.

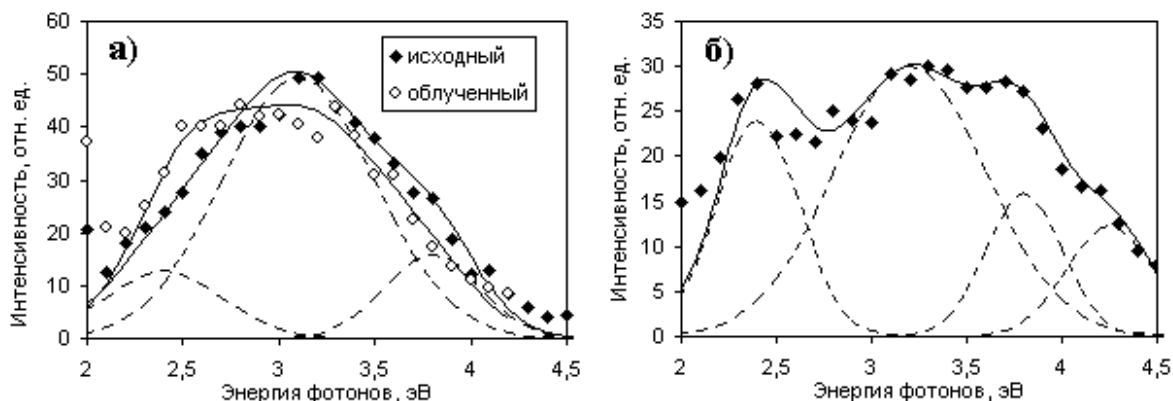


рис. 1. Спектры катодолуминесценции наноструктурных образцов Al_2O_3 .
а) порошок; б) керамика.

Основным люминесцирующим дефектом в нанопорошке Al_2O_3 является центр свечения при 3,1 эВ. Данный центр, представляющий собой анионно-катионную дивакансию (P^- -центр), впервые был обнаружен в монокристаллах α - Al_2O_3 , подвергнутых высокотемпературной термообработке с последующей закалкой [2].

Особый интерес вызывает эффект уменьшения интенсивности полосы при 3,8 эВ после облучения образцов ионами железа. Увеличение интенсивности полосы люминесценции 3,8 эВ при переходе к нанокерамике Al_2O_3 указывает на "собственную" природу этого свечения. Происхождение данной полосы в настоящий момент окончательно не выяснено. Весьма вероятно, что возникновение свечения при 3,8 эВ может быть связано с автолокализацией электронных возбуждений в α -фазе, которая является доминирующей в нанокерамике Al_2O_3 . Особенности релаксации обнаруженных центров в наноструктурном Al_2O_3 рассмотрены на основе анализа кинетики затухания люминесценции, которая в данном случае описывается суммой трех экспонент.

Таким образом, в этой работе показано, что облучение нанопорошка Al_2O_3 приводит к увеличению центров люминесценции при 2,4 эВ и снижает интенсивность свечения при 3,8 эВ. Переход от нанопорошка к нанокерамике сужает и одновременно увеличивает интенсивность полос в спектре катодолуминесценции, а также приводит к появлению нового центра свечения при 4,3 эВ.

Список публикаций:

- [1] M. J. Springis and J.A. Valbis, *Phys. Stat. Sol. (b)*, 123, 335 (1984)
[2] A.V. Puyats, M. J. Springis, J. A. Valbis, *Phys. Stat. Sol. (a)*, 62, 85 (1980)

Оптические и люминесцентные свойства слоистых кристаллов CdI₂ интеркалированных металлическим кадмием

Лесивцев Виталий Николаевич

Кулай Тарас Стефанович

Львовский национальный университет имени Ивана Франко

Болеста Иван Михайлович, докт.ф-м.н

lesivtsiv@rd.wups.lviv.ua

Особенности структуры слоистых кристаллов CdI₂ обуславливают возможность локализации примесных атомов как в структурном слое I – Cd – I, в котором действуют ионно-ковалентные связи, так и между слоями, которые связаны ван-дер-ваальсовыми силами. Локализация примесных атомов в ван-дер-ваальсовых щелях (интеркалирование кристаллов) приводит к появлению новых свойств матрицы, которые проявляются, в частности, в оптических спектрах.

В работе исследованы спектры поглощения и люминесценции слоистых кристаллов CdI₂, интеркалированных металлическим кадмием. Интеркалирование атомами Cd достигалось при их выращивании из расплава, обогащенного металлическим кадмием в количестве, не превышающем 0,01 мол. %.

Исследования проводились на автоматизированной установке на базе монохроматора МДР–23. Оптический сигнал регистрировался фотоэлектронным умножителем ФЭУ–78, и при помощи АЦП записывался ЭВМ. Зона-зонное облучение осуществлялось с помощью лазера ЛГИ–21, энергия квантов которого ($h\nu = 3,68$ эВ) больше ширины запрещенной зоны CdI₂ ($E_g = 3,3$ эВ при 290 К).

При температурах 90–130 К в спектрах поглощения интеркалированных кристаллов наблюдаются две дополнительные полосы при 3,34 эВ, 3,10 эВ за резким краем собственного поглощения. Температурный коэффициент смещения полосы 3,34 эВ равен $3 \cdot 10^5$ эВ/К, для полосы 3,34 эВ – $1,2 \cdot 10^4$ эВ/К, в то время как уменьшение ширины запрещенной зоны происходит со скоростью $1,0 \cdot 10^3$ эВ/К. Это приводит к исчезновению полосы 3,34 эВ при $T = 150$ К и полосы 3,10 эВ при $T = 265$ К, несмотря на то, что при указанных температурах, край собственного поглощения находится в более высокоэнергетичной области. Такой эффект связывается из перемешиванием электронных конфигураций атомов интеркалянтов и зонных состояний, вследствие чего происходит своеобразная перекачка силы осцилляторов между ними. Из двухпараметрической аппроксимации температурной зависимости полуширины полос формулой

$$H(T) = H(0) \left[\operatorname{cth} \frac{E_\phi}{2kT} \right]^{1/2}. \quad (1)$$

получены энергии фононов, взаимодействующих с электронными переходами, которые равны 41 меВ (для полосы 3,10 эВ) и 15 меВ (для полосы 3,34 эВ).

Такие значения фононов хорошо коррелируют с данными фононных спектров для этих же кристаллов [1].

В спектрах люминесценции интеркалированных кристаллов CdI₂ наблюдается дополнительная полоса с максимумом при 1,77 эВ, которая возбуждается в области собственного поглощения матрицы и в полосах 3,10 и 3,34 эВ. При понижении

температуры интенсивность свечения этой полосы возрастает, достигая максимума при температуре около 125 К.

Возникновение дополнительных полос поглощения и люминесценции кристаллов CdI_2 интеркалированных металлическим кадмием мы связываем с CdI_6 комплексами, которые возникают при локализации атома интеркалянта в октаэдрической ван-дер-ваальсовой пустоте, и обуславливают локальные дополнительные уровни под зоной проводимости. При такой схеме дополнительные полосы поглощения обусловлены переходами электронов с валентной зоны на примесные уровни, а люминесценция – с обратными.

Список публикаций:

[1] Кулай Т.С., Лесивцев В.Н., *Науч. вестн. Ужгородского ун-та. Серия Физика*, **14**, 100–104 (2003).

Коноскопический метод определения направлений кристаллофизических осей в кристалле ниобата лития

Литвинова Ман Нен

Дальневосточный государственный университет путей сообщения

Криштон Виктор Владимирович, к.ф-м.н

fizika@festu.khv.ru

В работе показано, что направления кристаллофизических осей кристалла ниобата лития можно определить по углу поворота плоскости оптических осей кристалла во внешнем электрическом поле.

В кристаллах ниобата лития, принадлежащих к классу симметрии $3m$, оптическая активность вдоль оптической оси отсутствует. Коноскопическая фигура, наблюдаемая вдоль оптической оси, представляет собой систему светлых и темных окружностей, разделенных, в зависимости от положения поляризаторов, светлым или темным „мальтийским крестом“. Оптическая индикатриса кристалла ниобата лития представляет собой эллипсоид вращения, главные оси которого направлены вдоль кристаллофизических осей x , y , z .

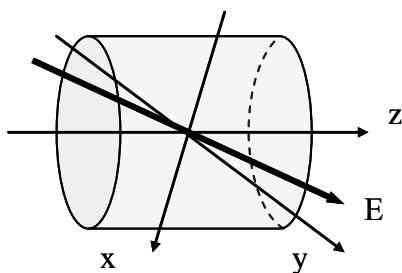


рис.1

Во внешнем электрическом поле, приложенном перпендикулярно оптической оси (рис.1), кристалл ниобата лития становится двуосным. При этом происходит поворот главных осей эллипсоида показателя преломления в плоскости (x,y) , перпендикулярной оптической оси z . Угол, на который повернутся главные оси эллипсоида, определяется

отношением проекций вектора напряженности электрического поля на кристаллофизические оси:

$$\beta = \frac{1}{2} \operatorname{arctg}(E_x / E_y) \quad (1)$$

Из выражения (1) видно, что угол поворота главных осей эллипсоида не зависит от величины напряженности электрического поля.

Определим направления кристаллофизических осей x, y кристалла ниобата лития. Пусть напряженность электрического поля \mathbf{E} направлена горизонтально, перпендикулярно оптической оси кристалла (рис. 2).

Во внешнем электрическом поле коноскопическая фигура изменяется, и имеет вид, характерный для двуосного кристалла. O и O' - выходы индуцированных оптических осей. Ось y' направлена вдоль плоскости индуцированных оптических осей. Оптическая ось z кристалла направлена перпендикулярно плоскости рисунка.

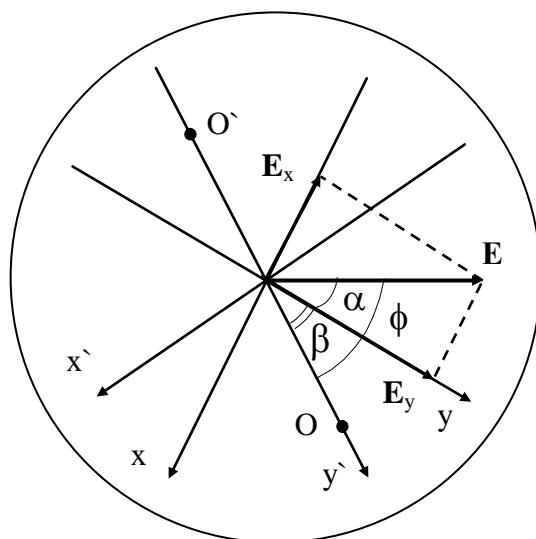


рис. 2

Угол между вектором напряженности электрического поля \mathbf{E} и кристаллофизической осью y равен (см. рис. 2):

$$\alpha = \operatorname{arctg}(E_x / E_y) \quad (2)$$

Согласно (1), угол поворота осей $\beta = \frac{1}{2} \alpha$, следовательно, угол ϕ между направлением напряженности электрического поля \mathbf{E} и плоскостью индуцированных оптических осей (осью y') можно выразить как:

$$\phi = \alpha + \beta = \frac{3}{2} \alpha \quad (3)$$

Таким образом, ось y направлена под углом α к вектору напряженности электрического поля \mathbf{E} :

$$\alpha = \frac{2}{3} \phi \quad (4)$$

По коноскопическим фигурам кристалла ниобата лития, находящегося во внешнем электрическом поле, необходимо определить угол ϕ между направлением напряженности электрического поля \mathbf{E} и плоскостью индуцированных оптических осей (осью y') и рассчитать угол α между вектором напряженности электрического поля \mathbf{E} и кристаллофизической осью y по формуле (4). Ось x будет направлена перпендикулярно оси y .

Флуоресцентный EXAFS-спектрометр. Первые измерения.

Маевский Андрей Геннадьевич

Забелин Александр Владимирович, Кон Виктор Германович, Потловский Кирилл Геннадьевич

Российский Научный Центр «Курчатовский институт»

Артемов Александр Николаевич, к.ф.-м.н

exafs@nm.ru

EXAFS – аббревиатура английского названия метода исследования тонкой структуры края поглощения рентгеновского излучения в материале. EXAFS является очень широко применяемым мощным методом исследования твердых тел. Он позволяет определить расстояние от поглощающего атома до ближайшей координационной сферы с точностью 0.001нм, а до двух – четырех последующих с точностью 0.01нм. Определяются амплитуда тепловых колебаний, тип окружающих атомов и координационные числа. Метод применим к моно и поликристаллам, аморфным веществам и даже к жидкостям. Исследуются разбавленные образцы – концентрация исследуемого элемента может быть до 0.1%.

Нами разработан, изготовлен, смонтирован на пучке СИ и отлажен спектрометр для измерения EXAFS-спектров. Спектрометр расположен на канале 6.2 большого накопительного кольца Курчатовского Центра Синхротронного Излучения (КЦИ). Это источник СИ второго поколения с энергией накопленных электронов до 2.5 ГэВ и током до $I=0.1$ А.

Схема стенда EXAFS-спектрометра представлена на рис.1. Спектрометр (см. рис.1) состоит из: 1 - накопитель, 2 - белый пучок СИ, 3 - Ве фольги канала СИ, 4 - монитор положения пучка, 5 - монохроматор, 6 - монитор интенсивности, 7 - EXAFS образец, 8 - рабочий детектор, 9 – мониторинг рассеиватель.

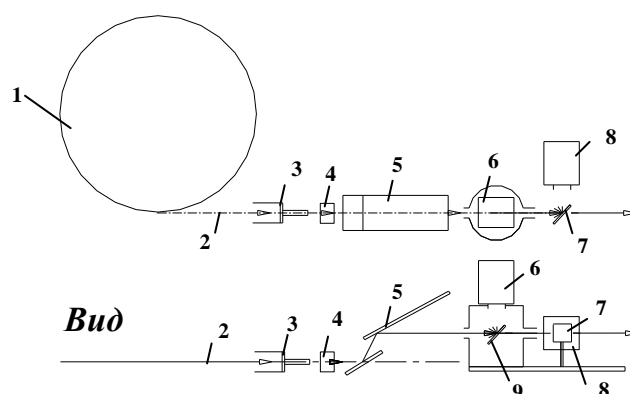


рис. 1

Монохроматор приводится в движение ранее разработанным высокопрецизионным узлом вращения. Узел вращения приводится в движение пьезодвигателем, абсолютный отсчет угла поворота производится с помощью индуктосина. Дискретность отсчета угла составляет одну угловую секунду. Детекторами служат фотоумножители с сцинтилляторами. На спектрометре могут исследоваться большинство элементов, интересных с точки зрения материалов атомной энергетики, начиная с железа и кончая трансурановыми элементами. Важным отличием спектрометра является возможность исследования толстых, неповрежденных образцов, сохраняющих свою “предысторию” - закалку, старение и т.д. Для этого спектрометр работает в режиме регистрации флуоресцентного излучения образца, сопровождающего поглощение падающих фотонов. В перспективе после выполнения санитарных требований будет возможно исследование облученных конструкционных материалов. Спектрометр полностью автоматизирован. В качестве примеров приводятся EXAFS-спектры некоторых сплавов.

Люминесцентные и фотоэлектрические свойства поликристаллических пленок на основе сульфида кадмия

Майорова Татьяна Львовна

Воронежский Государственный Университет

Клюев Виктор Григорьевич, д.ф.-м.н

mtl084@yuandex.ru

За последние годы было получено большое количество химических соединений и твердых растворов со свойствами полупроводников, среди которых сравнительно новыми материалами являются тонкопленочные полупроводниковые соединения на основе сульфидов металлов. Эти соединения являются достаточно новыми материалами и представляют интерес в связи с большим разнообразием электрических, фотоэлектрических и оптических свойств.

В данной работе исследовались пленки CdS, как чистые, так и легированные примесями щелочных металлов (Na, K) совместно с Cl и без него. Получены спектры фотолюминесценции и зависимость интенсивности люминесценции от длительности воздействия на образцы УФ излучения с квантовой интенсивностью 10^{21} квант/с·см²,

что на 5 порядков больше интенсивности УФ излучения, возбуждающего люминесценцию. Кроме того, были проведены исследования электрических и фотоэлектрических свойств образцов.

Исследуемые пленки CdS получали методом пульверизации, который заключается в распылении на нагретую подложку водных растворов реагентов. Температура подложки варьировалась от 350 °С до 500 °С. Концентрация примесей варьировалась в диапазоне 10^{-5} ÷ 10^{-3} ат.%.

Исследования фотолюминесценции проводились на установке, которая позволяет регистрировать спектры люминесценции в диапазоне 400 – 850 нм. Образцы возбуждали стандартным осветителем ОИ-18 с ртутной лампой ДРК-120 ($\lambda=365$ нм). Измерения проводились как при комнатной температуре, так и при температуре жидкого азота.

Для изучения фотоэлектрических и электрических свойств использовалась установка, состоящая из стабилизированного источника тока и электрометрического усилителя У5-6, позволяющего измерять малые токи в интервале от 10^{-6} до 10^{-12} А.

В спектрах фотолюминесценции образцов, как при комнатной температуре, так и при температуре жидкого азота наблюдалась широкая полоса в области спектра от 650 нм и далее в ближней ИК области. Данная полоса люминесценции содержит, по крайней мере, три элементарные составляющие с максимумами интенсивности при 730 нм, 785 нм и 840 нм. Данные полосы фотолюминесценции обусловлены наличием дефектов, по крайней мере, трех типов: $[V_{Cd}^{2-} V_S^{2+}]^{\circ}$, $[V_{Cd}^{2-} Cl_S^{+}]^{-}$ и $[V_{Cd}^{2-} O_S^{2+}]^{\circ}$, соответственно [1, 2].

Следует отметить, что полоса люминесценции с $\lambda_{max}=510$ нм, которая обычно наблюдается в моно- и микрокристаллах CdS при 77 К, в спектре фотолюминесценции наших пленок отсутствовала.

Наблюдали увеличение интенсивности исследуемой полосы люминесценции при совместном легировании примесями щелочных металлов (Na, K) и Cl пленок по сравнению с чистыми пленками CdS почти на порядок. Такой эффект объясняется, во-первых, блокировкой безызлучательных каналов рекомбинации за счет того, что при синтезе пленок ионы металлов могут занимать вакантные места в решетке, в том числе и на поверхности, снижая тем самым количество центров безызлучательной рекомбинации, что и приводит к увеличению интенсивности люминесценции кристаллофосфора CdS.

Во-вторых, увеличение интенсивности исследуемой полосы люминесценции легированных пленок по сравнению с чистыми пленками CdS может быть связано с увеличением концентрации носителей заряда в зоне проводимости при легировании пленок щелочными металлами Na и K. Последнее подтверждается полученными зависимостями электропроводимости и фотолюминесценции от концентрации примеси и температуры напыления.

Нами исследована также зависимость интенсивности фотолюминесценции образцов от длительности воздействия УФ излучением на исследуемые пленки. Наблюдалось, что при облучении образцов в течение часа УФ излучением с квантовой интенсивностью 10^{21} квант/с·см² заметного изменения интенсивности люминесценции

пленок CdS не происходит. Это свидетельствует об устойчивости исследуемых пленок к воздействию УФ излучения.

Известно, что кристаллы CdS окрашиваются (темнеют) под действием УФ света. При этом одновременно наблюдается значительное возрастание их поверхностной электропроводности. Световое излучение переводит электроны из валентной зоны в зону проводимости и в результате этого происходит восстановление сульфидов с образованием металлического слоя и свободной серы, что доказано рентгеноструктурным анализом. Этот процесс на свету необратим. Такое поведение связано с миграцией адсорбированных атомов Cd по поверхности при поочередном захвате неравновесных электронов и дырок. В случае CdS легированным ионами металлов Na⁺ и K⁺ атомы примесных металлов согласно электрохимическому ряду напряжений металлов, вытесняя атомы Cd, адсорбируются на поверхность. Однако мигрировать по поверхности атомы Na и K как атомы Cd не могут, т.к. они обладают меньшей электроотрицательностью. $\chi_{\text{Na}} = 0,9$, $\chi_{\text{K}} = 0,8$, а $\chi_{\text{Cd}} = 1,7$.

Нами была также исследована фоточувствительность пленок на основе CdS. Оказалось, что легирование пленок CdS щелочными металлами Na и K совместно с Cl увеличивает их фоточувствительность по сравнению с чистым CdS и легированным только щелочными металлами.

Список публикаций:

[1] Майорова Т.Л. // Молодые ученые – 2003 / Материалы Международной научно-технической школы – конференции. – М.: МИРЭА, 2003, с.26-28.

[2] Майорова Т.Л., Семенов В.Н., Клюев В.Г., Наумов А.Н. // Полиматериалы – 2003 / Материалы Международной научно-технической конференции. – М.: МИРЭА, 2003, Т.2, с.135-138.

Рекомбинационное взаимодействие центров люминесценции в хлориде серебра

Молева Наталья Александровна

Козицкая Елена Петровна

Воронежский Государственный Университет

Клюев Виктор Григорьевич д.ф-м.н

aadm@mail.ru

Установлено различие в форме и структуре спектров люминесценции мк AgCl, полученных при 77 К при двух разных способах измерения. Первый способ – метод обычной стационарной люминесценции. Второй способ – метод фотостимулированной вспышки люминесценции (ФСВЛ), который заключается в следующем. Образец предварительно освещался излучением ртутной лампы с $h\nu = 3.4$ эВ в течение времени $t_{\text{yf}} = 30$ с. Затем после выключения возбуждающего света через промежуток времени $t_{\text{ти}}$, называемый «темновым интервалом», на мк AgCl направлялось излучение, кванты которого имели энергию $E_{\text{ик}} = 1.9$ эВ. При этом наблюдалось свечение $I(t)$ в виде кратковременной вспышки люминесценции. Высвеченная светосумма вспышки люминесценции, так называемый спектр вспышки люминесценции, регистрировалась методом счета фотонов за определённый интервал времени Δt .

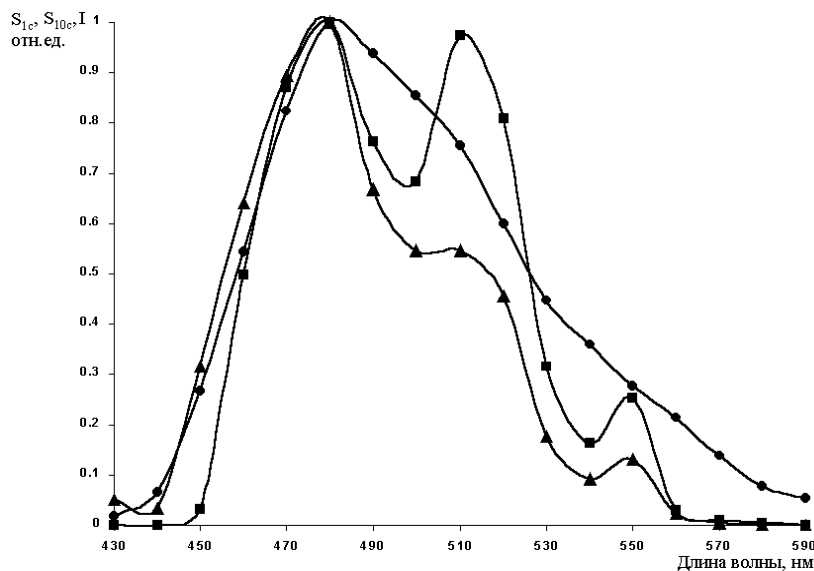


рис.1

На рис. 1 приведен: спектр стационарной люминесценции (1) и спектры, полученные в режиме измерения ФСВЛ (2,3) полученные при следующих параметрах: $t_{уФ} = 30$ с, $t_{ти} = 5$ с, $h\nu_{ИК} = 1.9$ эВ, $\Delta t = 1$ с (2), $\Delta t = 10$ с (3). Все спектры представляют собой широкие полосы, которые разделены на элементарные составляющие гауссовой формы программой “Спектральный анализатор”.

В спектре стационарной люминесценции имеется четыре элементарные составляющие с $\lambda_{max} \cong 480$ нм, 516 нм, 545 нм, 567 нм. В спектрах люминесценции ФСВЛ при $h\nu_{ИК} = 1.9$ эВ полоса с $\lambda_{max} = 567$ нм отсутствует, а при $h\nu_{ИК} = 0.7$ эВ появляется полоса с $\lambda_{max} = 445$ нм. Относительная интенсивность элементарных полос также разная.

Интерпретация наблюдаемых различий в спектрах люминесценции проводилась с помощью физического моделирования процесса рекомбинационного взаимодействия центров люминесценции в рамках кинетических моделей кристаллофосфора, содержащих два центра люминесценции разной природы и одну электронную ловушку.

При рассмотрении модели кристаллофосфора с двумя центрами люминесценции, рекомбинация на которых происходит по одинаковому механизму (механизм Шена - Классенса), в условиях различных воздействий на кристаллофосфор получены аналитические выражения для отношений интенсивностей стационарной люминесценции, светосумм ФСВЛ, высвеченных за время $\Delta t = 1$ с, и для полных высвеченных светосумм $\Delta t = 10$ с обоих центров. Эти отношения отличны от 1 при условии, что так называемый коэффициент рекомбинационного взаимодействия

$$c = \sigma'N'\omega'' / (\sigma''N''\omega') \quad (1)$$

отличен от 1, где σ - эффективное сечение захвата, N - концентрация центров люминесценции, ω - вероятность освобождения дырок с этих центров.

В результате решения кинетической задачи о рекомбинационном взаимодействии между двумя центрами люминесценции, рекомбинация на которых осуществляется по разным механизмам (механизм Шена – Классенса для одного центра и механизм Лэмба

– Клика для другого), получено, что аналитические выражения для отношений интенсивностей стационарной люминесценции, светосумм ФСВЛ, высвеченных за время $\Delta t = 1$ с, и полных высвеченных светосумм для двух центров люминесценции также отличаются друг от друга. Эти зависимости более сложные и ввести коэффициент аналогичный c не удалось. Показано, что если центр люминесценции 1-го типа является достаточно глубокой дырочной ловушкой, то полоса люминесценции для центра 2-го типа при стимуляции ФСВЛ отсутствует.

Сравнение экспериментальных зависимостей отношений полных светосумм ФСВЛ и начальных амплитуд от интенсивности возбуждения α с аналитическими выражениями, полученными в результате моделирования показало, что полосы люминесценции с $\lambda_{\max} \cong 480$ нм и 516 нм, обусловлены рекомбинацией по одному механизму, полоса с $\lambda_{\max} \cong 545$ нм – по другому механизму, отличному от первых двух. Ранее проведенные эксперименты указывают на то, что полоса люминесценции с максимумом 480 нм обусловлена рекомбинацией свободного электрона с дыркой, локализованной на катионной вакансии (механизм Шена - Класенса). Таким образом, можно сделать вывод о том, что полоса люминесценции с максимумом в области 516 нм обусловлена рекомбинацией носителей заряда по механизму Шена - Класенса, а полоса 545 нм - механизму Ламбе - Клика (рекомбинация свободной дырки с локализованным электроном).

На основе полученных результатов сделан вывод о том, что имеется принципиальная возможность определения механизма рекомбинации неравновесных носителей заряда в кристаллофосфорах с помощью измерения спектров люминесценции в режиме стационарного возбуждения и в режиме облучения более длинноволновым светом кристаллофосфора, предварительно возбужденного УФ излучением.

Модуляционная неустойчивость в системах связанных волн с дисперсией нелинейности.

Мосин Олег Владимирович

Золотовский Игорь Олегович, Семенцов Дмитрий Игоревич

Ульяновский Государственный Университет

Семенцов Дмитрий Игоревич, д.ф.-м.н

srs_enigman@mail.ru

В последнее время внимание исследователей привлекает анализ динамики распространения волновых пакетов, распространяющихся в оптически-нелинейных волоконных световодах с сильной нелинейной связью и нелинейностью керровского типа. В настоящей работе приводятся результаты исследования условий возникновения модуляционной неустойчивости оптического волнового пакета, формируемого двумя однонаправленными сильно взаимодействующими волнами, с учетом влияния на процесс временной дисперсии нелинейного отклика среды. Выявлены области роста волновых возмущений по частоте, интенсивности входного излучения, дисперсионным параметрам. Установлено существенное влияние начальных условий возбуждения подобного рода световодов на динамику модуляционной неустойчивости.

Решается система уравнений для огибающих двух волн, формирующих волновой пакет, в координатах бегущего времени $\tau = 1 - z/u$, где u – групповая скорость волнового пакета с учетом межволнового линейного и нелинейного взаимодействий, а также дисперсии нелинейности:

$$\frac{\partial A_j}{\partial z} + \frac{(-1)^j}{v} \frac{\partial A_j}{\partial \tau} - i \frac{d_j}{2} \frac{\partial^2 A_j}{\partial \tau^2} = -i \sigma A_{3-j} - \left(iR + p \frac{\partial}{\partial \tau} \right) \left(\gamma_c |A_j|^2 + \gamma_k |A_{3-j}|^2 \right) A_j, \quad (1)$$

где $j = 1, 2$; $v^{-1} = (u_1 - u_2)/2u^2$ и $u_j = (\partial \beta_j / \partial \omega)^{-1}$ – расстройка групповых скоростей и групповые скорости соответствующих волн, $2u = u_1 + u_2$; σ – коэффициент линейной межмодовой связи, γ_c и γ_k – параметры фазовой само- и кроссмодуляции; R – параметр нелинейности, p – параметр самообострения волнового пакета, характеризующий дисперсию нелинейности световода. Уравнения (1) решаются совместно с начальными условиями для временных огибающих мод A_j , определяемыми условиями возбуждения световода: $A_{z0} = \xi A_{j0}$, где $A_{j0} = A_j(\tau, 0)$, а параметр ξ определяет тип возбуждения волокна. При $\xi = \pm 1$ имеют место симметричное и антисимметричное возбуждения световода соответственно, а при $\xi = 0$ реализуется одноволновое его возбуждение.

Решение системы приводит к получению общего дисперсионного соотношения для волновых возмущений парциальных импульсов, устанавливающего связь волновых чисел с частотой возмущения. Рассмотрен случай, когда волновой пакет может быть представлен только одним ПИ. Такая ситуация реализуется, если в световоде на входе возбуждается только один ПИ, что имеет место при симметричном или антисимметричном возбуждении световода ($\xi = \pm 1$). В этом случае получаем следующее выражение для волновых чисел возмущений:

$$k_f = \Omega \left[b_f \pm \sqrt{(2\gamma P_f I_f)^2 + 2\gamma R D_f I_f + (D_f \Omega / 2)^2} \right]. \quad (2)$$

В случае $D_f < 0$, т.е. при аномальной аддитивной дисперсии волновых скоростей ПИ, возможны комплексные значения константы распространения k_f , что и указывает на неустойчивость решения системы уравнений для возмущений импульсов. В этом случае инкремент усиления волнового возмущения соответствующего ПИ определяется выражением:

$$g_f = 2 \operatorname{Im} k_f = 2 |\Omega| \sqrt{2\gamma R D_f I_f - (2\gamma P_f I_f)^2 - (D_f \Omega / 2)^2}. \quad (3)$$

Частотный интервал, где реализуется режим МН, согласно (11) задается неравенством $|\Omega| < \Omega_{cf}$, где

$$\Omega_{cf} = \frac{2}{|D_f|} \sqrt{2\mathcal{M}_f (R|D_f| - 2\mathcal{M}_f P_f^2)}. \quad (4)$$

На рис. 1 изображены графики зависимости инкремента усиления волнового возмущения от модуля его частоты при разных значениях мощности излучения накачки $I = 10, 20, 30, 40 \text{ Вт}$ для симметричного (пунктирная линия) и антисимметричного

(сплошная линия) случаев. Здесь приняты значения параметров $\gamma = 3/2$; $R = 2 \cdot 10^{-1} (\text{м} \cdot \text{Вт})^{-1}$; $d = 2 \cdot 10^{-26} \text{ с}^2/\text{м}$; $\nu = 10^{13} \text{ с}/\text{м}$; $\omega_0 = 2 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$; $\sigma = 10 \text{ м}^{-1}$. Видно, что увеличение мощности излучения накачки приводит к расширению области существования модуляционной неустойчивости и к увеличению максимального значения инкремента усиления возмущения, причем для симметричного случая это значение несколько больше, чем для антисимметричного.

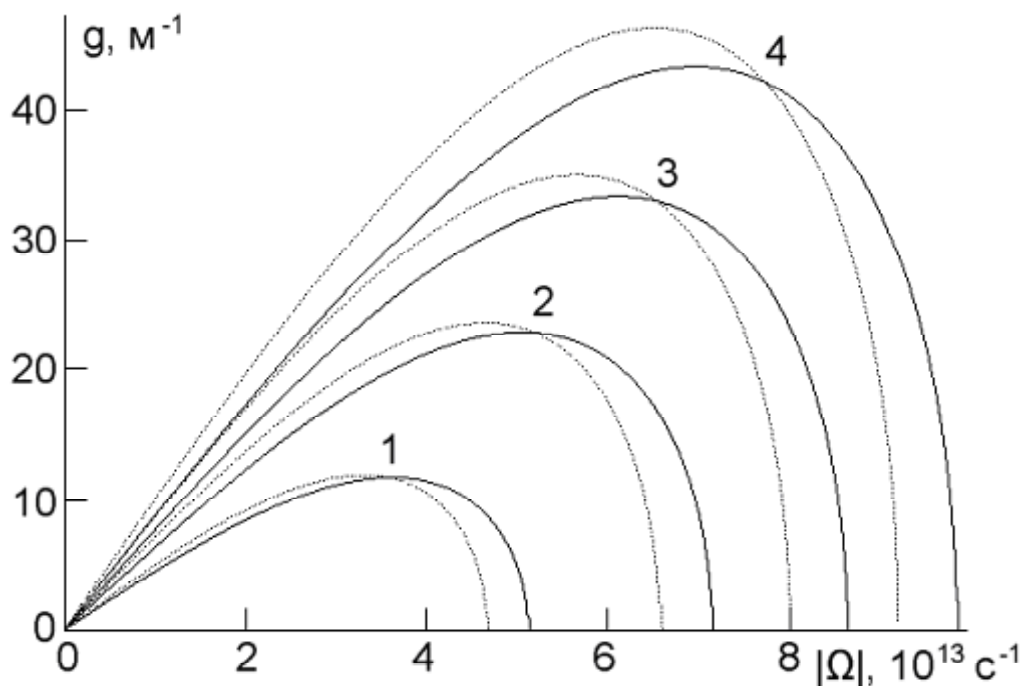


рис. 1

Оптические свойства структурно-неоднородного кремния, легированного атомами эрбия

Нежданов Алексей Владимирович

*Машин Александр Иванович, Ершов Алексей Валентинович, Шенгуров Владимир Геннадьевич
Нижегородский Государственный Университет им. Н.И.Лобачевского*

Машин Александр Иванович, д. ф.-м.н

neav3@uic.nnov.ru

Известно, что формирование кремниевых мультисвязей при отжиге аморфных пленок кремния происходит лишь в пленках, имеющих крупномасштабные неоднородности типа «столбчатая структура» и/или нанокристаллические включения, блистеры и тому подобные дефекты [1]. При отжиге структурная перестройка в таком материале происходит всегда в условиях высокой концентрации оборванных связей и ориентирующего действия стенок указанных неоднородностей, стимулирующих формирование кремниевых мультисвязей. Для стабилизации новых структурных модификаций кремния могут привлекаться атомы примесей и структурные неоднородности [2].

В данной работе мы изучали влияние условий получения и легирования атомами редкоземельных элементов на морфологию поверхности и оптические свойства структурно неоднородного аморфного кремния.

Аморфные пленки были получены методом электроннолучевого испарения (ЭЛИ) и сублимацией кремния в вакууме. В случае метода сублимации, также осуществлялось легирование пленок атомами эрбия с концентрацией $\sim 10^{-19}$ - 10^{-20} см $^{-3}$. В качестве подложек использовался кристаллический кремний КЭФ-4.5(100), КДБ-12(100), ситалл и поликор. Температура подложек $T_s = 150 \div 300^\circ\text{C}$. Отжиг осуществлялся в вакууме при температурах $T_a = 350 \div 700^\circ\text{C}$, в течение 30 минут.

Согласно электронографическим исследованиям все напыленные пленки кремния были аморфными.

Исследования топографии поверхности, проведенные на атомно-силовом микроскопе TopoMetrix Accurex TMX – 2100, показали, что структурные макронеоднородности в пленках a -Si имеют место только в случае, когда $T_s \geq 300^\circ\text{C}$ – ЭЛИ и $\geq 280^\circ\text{C}$ – для метода сублимации. Характерные латеральные размеры неоднородностей ≈ 100 нм, а по высоте ≈ 5 – 10 нм, с плотностью $\sim 10^{10}$ см $^{-2}$. В случае пленок легированных атомами эрбия, так же обнаружено присутствие макронеоднородностей (рис. 1), но в данном случае они носят более ярко выраженный характер. В пленках a -Si, полученных при 250°C , не обнаружено макронеоднородностей.

Оптические исследования проводились с помощью метода угловой сканирующей рефлектометрии. В основу методики положено измерение коэффициента отражения (R) в зависимости от угла падения света на образец. Из экспериментальных данных рассчитывались показатель преломления (n) и коэффициент поглощения (k) исследуемого образца.

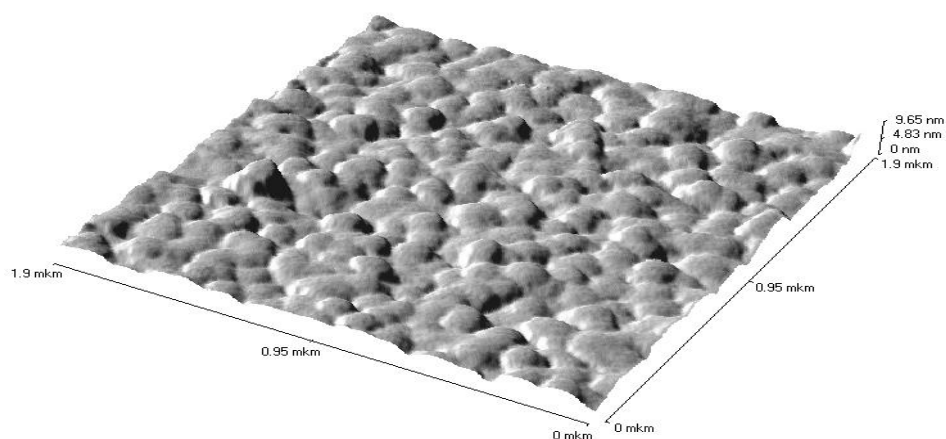


рис. 1

В докладе обсуждается влияние присутствия структурных неоднородностей на оптические свойства аморфного кремния, такие как показатель преломления и коэффициент поглощения. Исследовалась спектральная зависимость данных параметров от длины волны излучения в диапазоне $0.55 - 1.11$ мкм.

Работа выполнена при частичной поддержке Минобразования РФ (гранты № E02-3-4-385 и T02-2.3-2383).

Список публикаций:

[1] А.Ф.Хохлов, А.И.Машин, Аллотропия кремния: Монография. Н.Новгород, 2002.

[2] Hidefumi H., Takehide M., Toshihiko K. Formation of Metal-Encapsulation Si Cage Clusters // Phys. Rev. Lett.- 2001.- V. 86.- P. 1733-1736.

Механизмы люминесценции кристаллов галогенидов серебра

Овчинников Олег Владимирович

Смирнов Михаил Сергеевич

Воронежский Государственный Университет

Латышев Анатолий Николаевич, д.ф.-м.н

Ovchinnikov O V@rambler.ru

Известно, что выявление детальных механизмов фотохимических превращений в светочувствительных кристаллах оказывается наиболее удачным при использовании люминесцентных методов. Однако анализ экспериментальных данных, полученных с помощью люминесценции, всегда осложнен проблемой обоснования механизма свечения, предположительность которого порождает неоднозначность интерпретации результатов. К сожалению, выводы о механизме люминесценции ионно-ковалентных кристаллов практически всегда опираются на ряд косвенных экспериментальных фактов, что приводит зачастую к множеству противоречий.

В данной работе впервые предлагается метод определения механизма люминесценции, основанный на исследовании изменения распределения интенсивности фотостимулированной вспышки люминесценции (ФСВЛ) кристалла после создания в нем фотоэлектрических состояний [1], образующихся при смещении электрическим полем свободных зарядов, возникающих в кристалле, при возбуждении актиничным излучением, с последующей их локализацией на глубоких уровнях. Снятие электрического поля и облучение кристалла длинноволновым светом, ионизирующим ловушки, приводит к исчезновению электрического состояния [1]. В люминесцирующих кристаллах может возникнуть вспышка люминесценции [2]. Полная светосумма вспышки люминесценции S пропорциональна концентрации зарядов, ионизованных с глубоких центров локализации [3]. Поляризация в электрическом поле при возбуждении люминесценции будет приводить к смещению свободных носителей заряда за время их жизни, в результате чего будут неодинаковыми заполнение центров люминесценции вдоль направления поля и распределение интенсивности ФСВЛ по образцу. Определив место наиболее интенсивной вспышки люминесценции, и, зная знак локализованных при фотополяризации носителей заряда, оказывается принципиально возможным определение механизма люминесценции.

Применение предложенного метода осуществлено на примере низкотемпературной фотолюминесценции монокристаллов AgCl, AgBr высокой чистоты, выращенных по методу Бриджмена, и плавленых слоев твердых растворов $AgBr_{0.95}I_{0.05}$, $AgBr_{0.60}Cl_{0.40}$, $AgCl_{0.95}I_{0.05}$.

Измерительная ячейка (рис.1) располагалась в вакуумном оптическом криостате при давлении 10^{-6} мм.рт.ст. и охлаждалась до температуры 77К. Спектры стационарной фотолюминесценции и ФСВЛ регистрировались высокочувствительным автоматическим спектрофотометром, работающим в режиме счета фотонов [4]. Напряженность электрического поля, прикладываемого к кристаллу, составляла 10кВ/см. Толщина образца составляла 2.5мм. Исходя из экспериментальных данных о подвижности носителей заряда и времени их жизни [5], можно считать, что при указанной напряженности электрического поля возможен сдвиг электронов на всю толщину кристалла, а дырок - на меньшие расстояния. На торце кристалла выделялись три области шириной 0.08см (на рис.1 они пронумерованы как 1,2,3) с помощью щелевой диафрагмы, управляемой системой электрических реле. Стационарная люминесценция, возбуждалась излучением ртутной лампы во всем объеме образца. Стационарная фотолюминесценция и светосумма ФСВЛ регистрировались на участках под номерами 1,2,3 в случаях отсутствия поля и его наличия в двух противоположных направлениях. Это позволяло учесть при относительных измерениях возможные искажения за счет рассеяния возбуждающего света и дрейфа носителей заряда.



рис.1. принципиальная схема измерительной ячейки: а – высоковольтные электроды, б – слюдяные прокладки, в - исследуемый образец.

Были получены диаграммы распределения высвеченной светосуммы ФСВЛ, наблюдаемой в исследуемых полосах. Их детальный анализ позволяет сделать следующие выводы:

1. Сканирование распределения яркости фотостимулированной вспышки люминесценции кристаллов AgCl в полосе с $\lambda_{\text{max}}=480\text{nm}$, а также твердых растворов $\text{AgBr}_{0.95}\text{I}_{0.05}$, $\text{AgBr}_{0.60}\text{Cl}_{0.40}$, $\text{AgCl}_{0.95}\text{I}_{0.05}$ в полосах с $\lambda_{\text{max}}=540\text{nm}$, $\lambda_{\text{max}}=480\text{nm}$, $\lambda_{\text{max}}=515\text{nm}$ соответственно, помещенных в постоянное электрическое поле, показало, что в области преимущественного расположения положительных локализованных зарядов регистрируется повышенная фотостимулированная вспышка люминесценции. Это свидетельствует о том, что свечение в этих полосах происходит вследствие рекомбинации локализованной на центре свечения дырки со свободным электроном (т.е. по механизму Шена-Класенса).

2. В оранжевой полосе люминесценции $\text{AgBr}_{0.95}\text{I}_{0.05}$, $\text{AgBr}_{0.60}\text{Cl}_{0.40}$ при $\lambda_{\text{max}}=630\text{nm}$ впервые наблюдалась фотостимулированная вспышка люминесценции, яркость которой была максимальна в области преимущественной локализации отрицательных зарядов. Поэтому оказалось возможным с помощью предложенной выше методики доказать, что оранжевое свечение возникает при рекомбинации свободной дырки с локализованным электроном (т.е. по механизму Ламбе-Клика). Это позволяет

утверждать, что ФСВЛ в этой же полосе для монокристалла AgBr не наблюдается, вследствие отсутствия эффективных дырочных ловушек. В роли таких центров локализации могут выступать, например, примесные ионы галоидов (хлора или йода).

Работа выполнена при поддержке гранта Минобразования РФ на проведение молодыми учеными научных исследований в ведущих научно-педагогических коллективах вузов и научных организаций (№ PD02-1.2-310).

Список публикаций:

- [1] В.И. Бугриенко, В.М. Белоус., ФТТ, **6**, 1427-1429 (1962).
- [2] В.М. Белоус, Н.Г. Дьяченко., Опт. и спектр., **10**, 649-652 (1961).
- [3] А.Н. Латышев, М.А. Кушинир, В.В. Бокарев., Опт. и спектр., **2**, 364-366 (1982).
- [4] А.Н. Латышев, В.Г. Ключев, А.И. Кустов и др. Журн. научн. и прикл. фотографии, **5**, 13-17 (2001).
- [5] П.В. Мейкляр. Физические процессы при образовании скрытого фотографического изображения, Москва (1972)

Влияние высокотемпературного отжига на оптические свойства монокристаллов ниобата лития, подверженных различным дефектообразующим воздействиям

Орлова Анна Николаевна

Педько Борис Борисович

Тверской Государственный Университет

Педько Борис Борисович, к.ф-м.н

s012833@tversu.ru

В настоящей работе исследовано влияние высокотемпературного отжига (окислительного и восстановительного) на показатели преломления монокристаллов ниобата лития, подверженных радиационным воздействиям, (гамма-облучению и смешанному гамма-нейтронному облучению), и вакуумной обработке металлическим литием.

Гамма-облучение проводилось на установке Со₆₀ при дозах до 10⁷ Р, а смешанное γ , n-облучение - при γ -дозе 5·10⁴ Р, при этом флюенс быстрых нейтронов с E > 0.1 МэВ составил $\Phi = 3.5 \cdot 10^{13}$ н/см² при времени облучения t = 2940 с. Окислительный отжиг кристаллов проводился в воздушной атмосфере при 600 °С в течение 4-х часов. Восстановительный отжиг проводился в вакууме при тех же условиях. Процедура обработки литием заключалась в следующем: на поверхность кристалла в вакууме напылялся металлический литий, после чего кристалл нагревался до 600 °С. Показатели преломления измерялись методом призмы по углу наименьшего отклонения с помощью однокружного гониометра ГС-2. Погрешность в измерении показателей преломления составляла 10⁻⁵.

Установлено, что облучение приводит к увеличению как обыкновенного, так и необыкновенного показателей преломления монокристаллов LiNbO₃. Зависимость n_o, n_e и Δn от дозы облучения для γ -облученных кристаллов носит возрастающий характер с выходом на насыщение при дозе 10⁶ Р. Зависимость n_{o,e} от времени, прошедшего после γ , n-облучения, обнаруживает экстремальный характер с максимумом при времени порядка 300 час, после чего значения показателей преломления выходят на стационарное значение. При циклических нагревах температурная зависимость как

обыкновенного, так и необыкновенного показателей преломления носит «гистерезисный» характер. Наличие этого температурного гистерезиса мы связываем с возникновением внутренних пьезоэлектрических полей в процессе нагрева [1].

В результате отжига γ , n -облученных кристаллов наблюдалось возрастание показателей преломления как обыкновенных, так и необыкновенных лучей при комнатной температуре. Установлено, что отжиг меняет температурный коэффициент зависимостей показателей преломления, причем сильнее у n_e (T). Отметим также, что величина температурного гистерезиса после отжига уменьшилась на порядок.

Отжиг γ -облученных монокристаллов LiNbO_3 не вызывает существенных изменений показателей преломления, но температурные зависимости имеют аномалию: в интервале 30 – 70 °C наблюдается уширение линий изображения щели коллиматора, соответствующих показателям преломления n_o и n_e , а после 120 °C и вплоть до 400 °C наблюдается раздвоение выше указанных линий.

Показатели преломления n_o и n_e оказались чувствительны к отжигу и обработке кристалла парами лития. Установлено, что отжиг кристалла в вакууме приводит к незначительному уменьшению обоих показателей преломления. Высокотемпературная обработка кристалла литием еще больше снижает показатели преломления. Влияние лития на оптические константы не может быть объяснено однозначно. С одной стороны, такое влияние может быть связано с внедрением лития в объем кристалла и устранением его дефицита, характерного для конгруэнтных кристаллов. С другой стороны, особенности изменения окраски кристаллов, подвергнутых обработке литием при нагреве в вакууме, могут объясняться изменением состава кристалла в приповерхностных слоях. В этом случае возможно образование Li_2O за счет обеднения кислородом приповерхностного слоя. Соответственно изменение оптических свойств обусловлено именно изменением оптических характеристик приповерхностного участка кристалла. Отметим, что обработке литием подвергалась часть объема призмы.

При исследовании температурной зависимости показателей преломления обработанных литием призм наблюдалась аномалия оптических свойств, связанная с раздвоением лучей в объеме кристалла, как соответствующих n_o , так и n_e (см. рис. 1 и 2). Такая аномалия проявлялась в температурном интервале 110 - 400 °C. Данное явление мы объясняем различием температурного коэффициента зависимости показателей преломления для частей призмы, подвергнутой обработке литием и не подвергавшейся такой обработке.

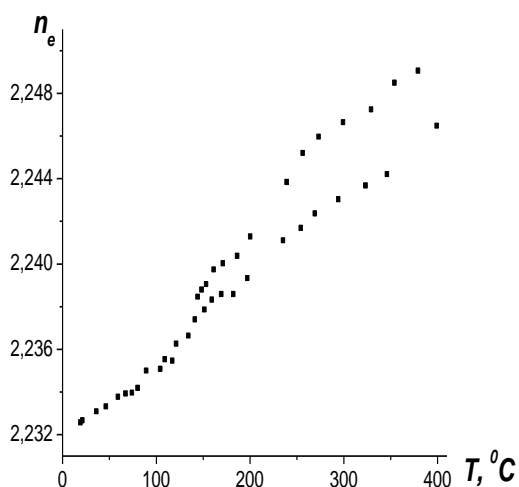


рис. 1. Зависимость $n_e(T)$ для кристалла LiNbO_3 после обработки Li при нагреве

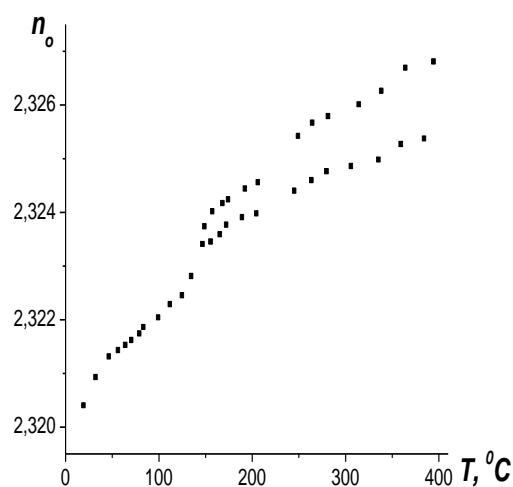


рис. 2. Зависимость $n_o(T)$ для кристалла LiNbO_3 после обработки Li при нагреве

В целом влияние высокотемпературного отжига на показатели преломления мы связываем с изменением дефектной структуры кристаллов ниобата лития, происходящем при высокотемпературной обработке.

Список публикаций:

[1] Педько Б.Б., Прохорова А.Ю., Орлова А.Н., Голиков В.В.// Изв. РАН. Сер. физ., 2003. Т. 67. № 8.

Моделирование нелинейно-оптических эффектов в микронных частицах

Панина Екатерина Константиновна

Гейнц Юрий Эльмарович

Институт оптики атмосферы СО РАН

Землянов Александр Анатольевич, д.ф.-м.н

pek@iao.ru

Бурное развитие в последние годы источников фемтосекундного лазерного излучения открывает широкие возможности для исследования физических явлений в аэрозольных частицах. Данная проблема является наиболее актуальной, поскольку значительно расширяет возможности диагностики параметров аэрозольных сред с высоким пространственным разрешением. Следует заметить, что нелинейно-оптические эффекты светорассеяния в частицах микронных размеров являются объектом исследования ученых и специалистов различных стран уже достаточно давно. Это связано с уникальными возможностями для моделирования и изучения различных процессов, которые предоставляют такие системы. Сферическая поверхность частиц, действуя, как линза, фокусирует падающее излучение внутри них, приводя к существенному увеличению интенсивности внутреннего оптического поля. Кроме того, наличие в прозрачных микрочастицах целого набора собственных высокодобротных резонансных мод (типичные значения добротности $\sim 10^5 - 10^8$), аккумулирующих

энергию нелинейных волн, приводит к увеличению эффективной длины их взаимодействия и модификации коэффициента усиления нелинейных процессов светорассеяния.

Большинство проблем, связанных с исследованием нелинейно-оптических процессов в микрочастицах требует знания пространственно-временной динамики формирования оптических полей в частице, при воздействии на нее мощного лазерного излучения. Теоретическому исследованию оптических полей в прозрачных частицах посвящено большое количество научных статей и монографий, однако необходимость решения все более сложных задач требует создания новых расчетных методов и использования современной вычислительной техники.

В нашей лаборатории нелинейных оптических взаимодействий был разработан компьютерный код для расчета оптических полей при различных условиях возбуждения в широком диапазоне размера частиц. Создан пакет компьютерных программ (в среде NI LabVIEW 6i), позволяющий проводить численные эксперименты по возбуждению высокодобротных электромагнитных колебаний типа мод “шепчущей галереи” в изолированных сферических микрочастицах мощными фемтосекундными лазерными импульсами с гауссовым пространственным и временным профилем при различных схемах освещения частицы (центральная, краевая). Рассчитывается пространственная структура внутреннего и внешнего оптических полей частицы с целью определения вариантов, наиболее оптимальных с точки зрения передачи энергии накачки в резонансные моды частицы.

Использование созданного пакета программ позволило решить ряд задач нелинейной оптики, представляющих практический интерес. В частности, был рассмотрен вопрос о резонансном возбуждении поля в прозрачных сферических частицах, а также о выборе наиболее оптимальной геометрии облучения. Было проведено численное исследование резонансного возбуждения сферической частицы при облучении ее плоской монохроматической волной, а также сфокусированным гауссовым пучком при центральном и боковом освещении [1].

Еще одной важной проблемой является исследование эффективности взаимодействия оптических полей при процессах вынужденного рассеяния света в частицах, определяемой интегральным коэффициентом пространственного перекрытия. Моделирование различных комбинаций возбуждения электромагнитных мод и расчет данного коэффициента позволило определить варианты, наиболее оптимальные с точки зрения передачи энергии накачки в резонансные моды частицы. Проведены численные расчеты для реализации в водной капле различных процессов вынужденного рассеяния света: “одинарного” резонанса вынужденного комбинационного рассеяния (ВКР), “двойного” резонанса ВКР, вынужденного рассеяния Мандельштама-Бриллюэна (ВРМБ), а также исследовано влияние значения коэффициента перекрытия на пороговые характеристики этих процессов [2].

Создание источников лазерного излучения, способных генерировать импульсы с фемтосекундной длительностью, позволило наблюдать в микрочастицах ряд специфических нелинейно-оптических эффектов, таких, например, как многофотонное поглощение и флюоресценция, которые при использовании наносекундных импульсов излучения обычно не реализуются. Так в работе [3] экспериментально исследовалось многофотонное возбуждение флюоресценции в каплях этанола и метанола, содержащих краситель кумарин 510, при облучении их излучением Ti:Sapphire – лазера

с $\lambda = 0.8$ мкм. Наблюдалась асимметрия индикатрисы рассеяния, причем степень ее асимметрии значительно увеличивалась с увеличением порядка многофотонного процесса. Теоретической интерпретации эффекта предложено не было.

Нами было проведено теоретическое исследование данного вопроса. Получено выражение для интенсивности спонтанной многофотонной флюоресценции от сферической частицы, а также рассчитан пространственный профиль относительной интенсивности поля накачки в главном сечении водной частицы при падении на нее плоской волны, позволяющий дать качественное объяснение наблюдаемого эффекта.

Моделирование различных нелинейно-оптических эффектов в сферических микрочастицах позволяет выявить ряд физических закономерностей энергетических, спектральных, пространственных и временных характеристик нелинейных процессов, реализующихся под воздействием высокоинтенсивного лазерного излучения. Это позволяет не только понять механизм возникновения различных процессов в частицах, но и заложить физические основы новых принципов и методов лазерной дистанционной диагностики дисперсных сред, основанных на эффектах нелинейно-оптических взаимодействий.

Список публикаций:

- [1] Гейнц Ю.Э., Землянов А.А., *Оптика атмосферы и океана*, **13**(5), 447-456, (2000).
- [2] Гейнц Ю.Э., Землянов А.А., Панина Е.К. (Чистякова Е.К.), *Оптика атмосферы и океана*, **10**(3), 289-293, (1997).
- [3] S.C. Hill, Y. Pan, S. Holler, R. K. Chang., *Phys.Rev.Lett.* **85**(1), 54-57, (2000).

Особенности коноскопических фигур в оптических кристаллах

Пикуль Ольга Юрьевна

Дальневосточный государственный университет путей сообщения

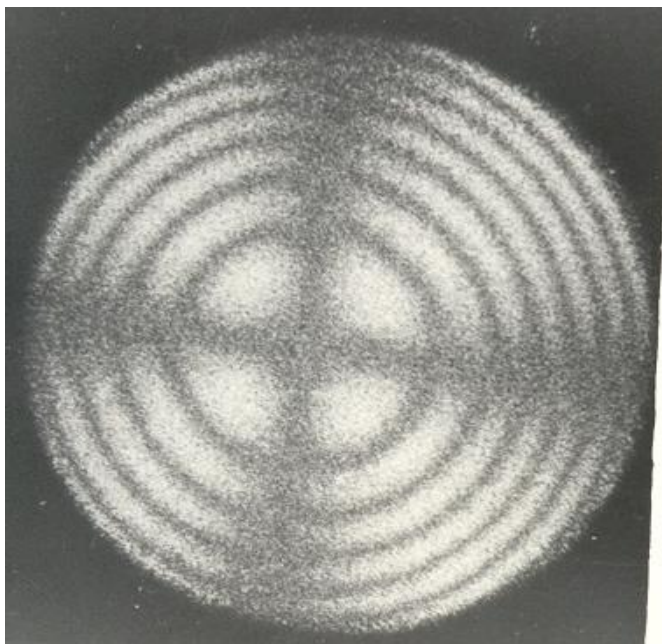
Строганов Владимир Иванович, д.ф.-м. н

pikoul@mail.redcom.ru

Известно, что характерная коноскопическая картина одноосного неактивного кристалла, вырезанного перпендикулярно оптической оси, состоит из серии концентрических колец – изохром и черного «мальтийского» креста, ветви которого, состоящие из двух изогир, пересекаются в центре поля зрения и расширяются к его краям.

Плоскополяризованный свет, выходящий из поляризатора, падая на кристаллическую пластинку, дает начало двум когерентным волнам – обыкновенной и необыкновенной, идущим с различной скоростью и приобретающим разность фаз $\Delta\varphi$. Анализатор, помещенный после кристаллической пластинки, пропускает волны лишь с колебаниями, лежащими в определенной плоскости [1,2].

В эксперименте обнаружено аномальное поведение изохром, расположенных в области «мальтийского креста» в коноскопической картине одноосного кристалла, вырезанного перпендикулярно оптической оси. Плоскопараллельная пластинка, изготовленная из ниобата лития толщиной 10 мм, находится между скрещенными поляризатором и анализатором. Аномалии заключаются в смещении изохром при переходе через изогирю. Смещение равно 1/2 полосе интерференционной картины (см. рисунок).



Такое смещение соответствует изменению фазы на π и осуществляется скачком при переходе направления пропускания поляризатора или анализатора. При небольшом повороте анализатора положение изогир несколько изменяется, что позволяет высветить слегка расходящимся пучком процесс перехода через изогир. Таким образом, можно сделать вывод: кольца-изохром в коноскопической картине в районе «мальтийского креста» при повороте анализатора терпят разрыв и смену диаметра кольца. Этим своеобразным «перескоком» изохром можно управлять с помощью поворота

анализатора.

Отметим, что данный эффект смещения наблюдается не во всех кристаллах ниобата лития и, скорее всего, связан с предысторией образцов кристаллов ниобата лития, с их внутренними электрическими полями.

Список публикаций:

- [1] Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1979. -640 с.
- [2] Шишловский А.А. Прикладная физическая оптика. М.: Физматгиз, 1961. -822 с.

Люминесценция и радиационные дефекты в кристаллах алюминатов щелочно-земельных металлов MA_2O_4 (M=Ba,Ca,Sr)

Подвинцев Александр Сергеевич

Уральский государственный технический университет - УПИ

Пустоваров Владимир Алексеевич, профессор, д.ф-м.н

pva@dpt.ustu.ru

Кристаллы алюминатов щелочно-земельных металлов (ЩЗМ) являются эффективными люминофорами нового поколения и материалами для активных лазерных сред. Целью данной работы являлось проведение комплексного исследования излучательных релаксационных процессов в кристаллах алюминатов ЩЗМ при селективном возбуждении синхротронным излучением (СИ) вакуумного ультрафиолетового (ВУФ) и рентгеновского диапазонов, а также изучение процессов радиационного дефектообразования в этих материалах с привлечением методов абсорбционной и время-разрешенной люминесцентной спектроскопии.

Время-разрешенные спектры фотолюминесценции (ФЛ) и рентгенолюминесценции (РЛ) в области 1,5-6,0 эВ, время-разрешенные спектры возбуждения ФЛ (4-25 эВ), кинетика затухания ФЛ при T=9 и 295 К были измерены при селективном возбуждении СИ на станции SUPERLUMI лаборатории HASYLAB

синхротрона DESY, а также на накопителе ВЭПП-3 Института ядерной физики СО РАН.

При возбуждении фотонами в области фундаментального поглощения спектр ФЛ BaAl_2O_4 при $T=9\text{K}$ содержит широкую элементарную полосу 3,9 эВ (FWHM=1,16 эВ), разложение на гауссианы позволяет выделить две полосы: 3,66 (FWHM=0,98 эВ) и 4,12 эВ (FWHM=0,75 эВ). На Рис.1 представлены время разрешенные спектры возбуждения ФЛ и спектр отражения.

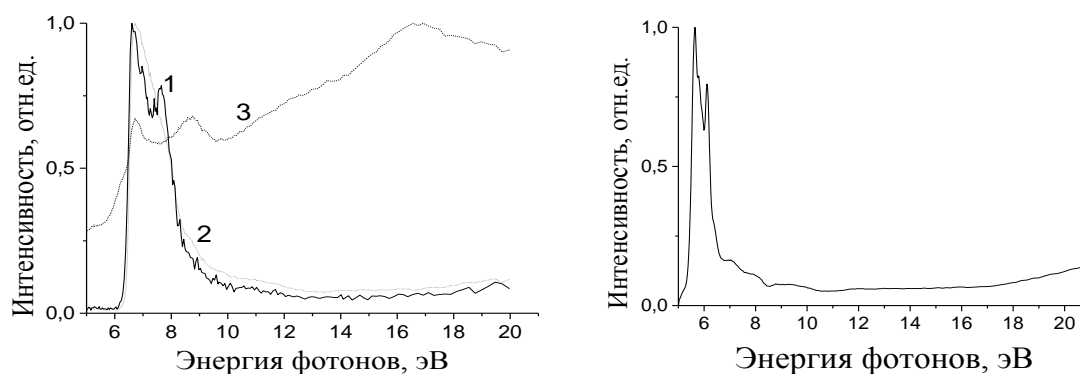


рис.1. Время разрешенный спектр возбуждения ФЛ ($E_{\text{изл}}=4,13$ эВ) (1,2) и спектр отражения (3)

BaAl_2O_4 , $T=9\text{K}$: (1) - быстрый компонент, (2) - медленный компонент;

рис.2. Спектр возбуждения ФЛ кристалла $\text{CaAl}_2\text{O}_4\text{-Tb}$, $E_{\text{изл}}=3,24$ эВ, $T=9\text{K}$

Спектр ФЛ легированного кристалла $\text{CaAl}_2\text{O}_4\text{-Tb}$ содержит группы узких линий, соответствующих излучательным переходам в ионе Tb^{3+} . При возбуждении фотонами с энергией $E > E_g$ других свечений в спектре ФЛ при температурах $T=9\text{--}295\text{K}$ не наблюдается. Спектр возбуждения ФЛ Tb^{3+} (линия 382 нм) при $T=300\text{K}$ содержит основные пики при 5,67 и 6,09 эВ, Рис.2. Спектры ФЛ и РЛ $\text{SrAl}_2\text{O}_4\text{-Eu}$ содержит полосу 2,38 эВ (FWHM=0,24 эВ). Свечение Eu^{2+} эффективно возбуждается при энергии фотонов $E < E_g$ (пики 4,03; 5,19 эВ), а также в области длинноволнового края фундаментального поглощения (ДКФП) (пик 6,72 эВ) и при отдельном создании электронно-дырочных пар, Рис.3.

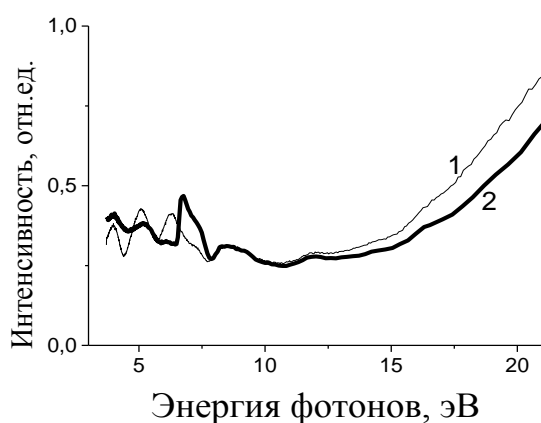


Рис. 3. Спектр возбуждения ФЛ кристалла $SrAl_2O_4$ -Eu, $E_{изл}=2,38$ эВ; $T=300K$ (1) и $9K$ (2)

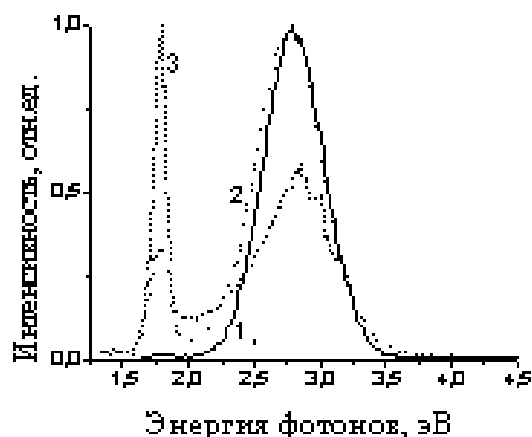


Рис. 4. Спектр ФЛ кристалла $BaAl_2O_4$, облученного быстрыми электронами, при возбуждении фотонами: $E_{возб}=4,68$ эВ (1), $E_{возб}=3,96$ эВ (2), $E_{возб}=3,4$ эВ (3); $T=295K$

Как видно из Рис.4, при возбуждении в низкоэнергетической области в спектре ФЛ четко проявляется полоса 1,76 эВ (FWHM = 0,11 эВ), при высокоэнергетическом возбуждении наблюдается дополнительная полоса в области 2,8 эВ (FWHM = 0,53 эВ).

По итогам работы можно сделать следующие выводы:

1. Отсутствие полос в спектре возбуждения ФЛ в области прозрачности кристалла $BaAl_2O_4$ свидетельствует, что свечение в области 3,6-4,1 эВ является собственным, т.е. не связано с дефектами кристаллической решетки или примесями.

2. Различие спектра возбуждения ФЛ быстрой и медленной компонент в области ДКФП и при раздельном создании электронно-дырочных пар (до 10 эВ), а также вид кинетики затухания ФЛ указывают, что в кристаллах $BaAl_2O_4$ свечение в области 3,6-4,1 эВ неэлементарно. Анализ представленных спектров отражения и возбуждения ФЛ позволяет дать оценку ширины запрещенной зоны для $BaAl_2O_4$: $E_g \approx 7,0$ эВ при $T=9K$.

3. В спектрах поглощения кристаллов алюминатов ШЗМ, облученных быстрыми электронами, появляются полосы поглощения в ультрафиолетовой области при $E > 4$ эВ (оптическая плотность более 3А), а также слабая полоса поглощения в области 2,4 - 2,7 эВ, формирующая оранжевую окраску облученных кристаллов.

4. В облученных кристаллах возникает по крайней мере два новых типа дефектов, индуцированных быстрыми электронами и даже при $T=295$ К проявляющихся в спектрах поглощения и ФЛ.

5. Окраска кристаллов возникает не только после облучения быстрыми электронами, но и после облучения СИ рентгеновского диапазона (3-60 кэВ), что указывает на наличие ионизационных механизмов дефектообразования в примесных кристаллах.

В заключении следует отметить, что настоящая работа является нашим первым исследованием этого класса соединений. Требуется дальнейшее изучение спектров отражения, спектров поглощения в области ДКФП в ряду алюминатов Ba, Ca, Sr,

детальное изучение механизмов переноса энергии, а также изучение влияния примеси на эффективность образования френкелевских радиационных дефектов с привлечением радиоспектроскопических, люминесцентных и абсорбционных методик.

Влияние уровня возбуждения на люминесценцию полупроводников группы A_2B_6

Путинцева Светлана Николаевна

Томский политехнический университет

Олешко Владимир Иванович, к.ф-м.н

swp1978@mail2000.ru

В настоящее время полупроводники группы A_2B_6 нашли широкое практическое применение в опто- и нанoeлектронике. Эти материалы используются в средствах отображения информации, в детекторах ионизирующего излучения и источниках света, в ИК-технике. Новые технологии получения чистых с управляемым составом материалов требуют контроля их качества. Обширную информацию, позволяющую контролировать чистоту кристаллов, присутствие дефектов, комплексов и отдельных примесей, дает исследование люминесценции.

В настоящее время, одним из наиболее перспективных методов люминесцентного контроля материалов является импульсная катодо- и рентгенолюминесценция с наносекундным временным разрешением [1]. Сущность метода заключается в измерении спектрально – кинетических характеристик исследуемых образцов после возбуждения высокоэнергетическим электронным пучком (СЭП) (или импульсом рентгеновского излучения) наносекундной длительности. Метод импульсной спектроскопии имеет ряд преимуществ по сравнению со стационарными методами исследования. Например, имеется возможность получения дополнительной информации о центрах свечения из изменения кинетических характеристик затухания свечения. Однако применение СЭП для диагностики дефектов в полупроводниковых соединениях группы A_2B_6 осложняется тем, что при высоких уровнях возбуждения G ($G \sim 10^{25} - 10^{28}$ пар/см³·с) рекомбинация носителей заряда происходит преимущественно в собственной решетке. Следствием этого является высокая интенсивность краевого излучения, которая не позволяет выделить менее интенсивное излучение, связанное с дефектами кристаллической решетки. Для того, чтобы получить информацию о дефектной структуре, необходимо уменьшить уровень возбуждения образца до $G \sim 10^{20} - 10^{22}$ пар/см³·с. Обеспечить такой уровень возбуждения можно либо уменьшением плотности тока СЭП, либо использованием импульсного рентгеновского излучения, генерируемого СЭП.

Цель настоящей работы заключалась в том, чтобы с помощью метода импульсной спектроскопии получить информацию о центрах свечения, образующихся в монокристаллах группы A_2B_6 , выращенных по различным технологиям.

Исследования проводились при параметрах пучка: энергия электронов ~ 400 кэВ, длительности импульса тока на полувысоте ~ 20 нс. Температура изменялась в диапазоне 25 - 300К. Рентгеновское излучение формировали путем торможения электронного пучка в медном аноде толщиной 300 мкм. Кристаллы устанавливались

под углом 45° к направлению распространения потока электронов. Изображение образца строилось на входной щели монохроматора МДР-23. Оптический сигнал регистрировался фотоэлектронным умножителем ФЭУ-118 и осциллографом С8-12. Временное разрешение регистрирующего тракта ~ 20 нс. Кристаллы облучались в гелиевом криостате, в котором предусмотрена возможность пошагового изменения уровня возбуждения в диапазоне от $G_1 \sim 10^{22}$ пар/см³·с до $G_8 \sim 10^{28}$ пар/см³·с. Измерение спектров осуществлялось путем последовательной обработки осциллограмм свечения образцов при различных длинах волн.

Исследовались две группы кристаллов CdS, выращенные методом Давыдова Маркова (сублимацией из газовой фазы) отличающиеся предысторией. Установлено, что спектры импульсной рентгенолюминесценции (ИРЛ) при $T = 300$ К кристаллов первой группы состоят из двух полос: краевой (зеленой) $\lambda = 524$ нм и длинноволновой (оранжевой) в области $\lambda = 600 - 630$ нм. Время высвечивания обеих полос сравнимо с длительностью импульса тока пучка ($\tau < 25$ нс). Характерной чертой кристаллов CdS второй группы является наличие трех полос излучения ($\lambda = 524$ нм, $\lambda = 600 - 630$ нм, $\lambda = 700-720$ нм), причем красная полоса является преобладающей в спектре. Кинетика затухания красной полосы имеет экспоненциальный характер. Характеристическое время высвечивания составляет $\tau = 35$ нс. Предполагается, что за оранжевое излучение ответственны комплексы (O_s-O_s , Cd_i) [2]. Две полосы 600 и 625 нм (составляющие оранжевого излучения) соответствуют переходам зона – комплекс или Cd_i - комплекс. За красную полосу излучения ответственным является кислород, который переходит в междоузлия (O_i) при избытке серы в кристаллах.

Проведены эксперименты с двумя группами кристаллов ZnSe(Te), выращенными методом Бриджмена – Стокбаргера (выращивание из расплава под давлением инертного газа в графитовых тиглях). В качестве исходного сырья для кристаллов первой группы использовалась смесь порошков ZnSe-ZnTe. В кристаллы второй группы был дополнительно введен кислород. Установлено, что спектры импульсной рентгенолюминесценции (ИРЛ) обеих групп кристаллов ZnSe(Te) при $T = 300$ К состоят из двух полос: краевой $\lambda=480$ нм и длинноволновой $\lambda= 500 - 750$ нм. Соотношение интенсивностей этих полос и параметры кинетики свечения индивидуальны для каждой группы. Время высвечивания коротковолновой полосы сравнимо с длительностью импульса тока пучка. Исследование кинетических характеристик затухания ИРЛ позволило установить, что длинноволновое излучение состоит из двух полос: $\lambda=560$ нм и $\lambda=610-630$ нм. Анализ спектрально-кинетических и амплитудных характеристик ИРЛ свидетельствует о том, что имплантация ионов кислорода в ZnSe(Te) приводит к сдвигу максимума длинноволновой полосы в область $\lambda=610$ нм, увеличению ее интенсивности в 2 – 2,5 раза и уменьшению времени высвечивания.

Исследования кристаллов ZnS, выращенных CVD - методом (выращивание методом химического осаждения из газовой фазы) проводились при трех температурах: 25 К, 77 К, 300 К. При уровне возбуждения $G \sim 10^{25}$ пар/см³·с и температуре 25 К в кристаллах ZnS в ультрафиолетовой области наблюдаются две полосы импульсной катодолюминесценции (ИКЛ) – интенсивная слабоструктурированная полоса $\lambda = 328 - 328,5$ нм (самоактивированное свечение) и полоса на $\lambda = 332,5$ нм. Аналогичные данные получены при этом же уровне возбуждения, но при температурах 77 и 300 К. При уменьшении уровня возбуждения до $G \sim 10^{24}$ пар/см³·с начинает проявляться

тонкая структура спектра ИКЛ. Помимо указанных ранее полос на $\lambda = 328 - 328,5$ нм и $\lambda = 332,5$ нм выделяются полосы при $\lambda = 326 - 326,8$ нм (полоса свободного экситона) и $\lambda = 331$ нм (полоса связанного экситона).

Список публикаций:

[1]. Корепанов В.И., Лисицын В.М., Олешко В.И., *Изв. Вузов. Физика*, 3, 22-30 (2000).

[2]. Морозова Н.К., Назарова Л.Д. и др., *ФТП*, 29.9, 1678 (1995).

Оптические и люминесцентные свойства кристалла со структурным типом вольфрамита CdWO_4

Ржевская Ольга Владимировна

Колобанов Виталий Николаевич, Михайлин Виталий Васильевич, Спасский Дмитрий Андреевич

Московский Государственный Университет имени М. В. Ломоносова

Михайлин Виталий Васильевич, д. ф.-м. н

Galadrien@mail.ru

В данной работе проведены исследования монокристалла CdWO_4 (кристаллическая решетка типа вольфрамит). Вольфрамат кадмия является перспективным материалом для сцинтилляционных детекторов в области компьютерной томографии [1].

В настоящей работе были измерены спектры отражения, возбуждения люминесценции в области энергий фотонов 3-40 эВ, а также спектры люминесценции. Измерения проводились на установке Superlumi (DESY, Гамбург, Германия) при комнатной температуре и температуре 10К, а также на установках лаборатории СИ в каналах синхротронного излучения накопителей «Сибирь-1» и «Сибирь-2» Курчатовского центра СИ только при комнатной температуре. При измерении спектров отражения учитывалась анизотропия кристаллической структуры данного вольфрамита, что важно для анализа полученных спектров отражения, которые значительно зависят от ориентации оптических осей кристалла относительно вектора \mathbf{E} падающего на образец излучения. Исследованные кристаллы были выращены методом Чохральского в Институте монокристаллов, г. Харьков.

На настоящее время отсутствует ясное представление об электронной плотности энергетических зон этого кристалла. В области фундаментального поглощения для получения информации об электронной структуре кристаллов обычно измеряются спектры отражения. Однако трактовку экспериментальных данных до последнего времени затрудняло отсутствие теоретических расчетов зонной структуры для вольфрамата кадмия. Только в последние несколько лет появился ряд работ, посвященных этой проблеме (например, [2]). Нами был проведен анализ экспериментально измеренных спектров отражения CdWO_4 . Спектры отражения были пересчитаны по соотношениям Крамерса-Кронига в спектры поглощения и оптические функции для сравнения экспериментальных данных с результатами теоретических расчетов. Были объяснены основные особенности спектров отражения. Сделана оценка ширины запрещенной зоны кристалла. Из спектра возбуждения собственной люминесценции была оценена ширина валентной зоны и порог начала размножения электронных возбуждений.

Список публикаций:

- [1] Викторов Л.В., Скориков В.М., Жуков В.М. и Шульгин Б.В. Неорганические сцинтилляционные материалы // Неорганические материалы **т.27 №10 (1991) стр.2005-2029.**
[2] Y. Abraham, N.A.W. Holzwarth and R.T. Williams Electronic structure and optical properties of CdMoO₄ and CdWO₄ // Physical Review B **62 №3 (2000) p.1733-1741.**

Запись нестационарных амплитудных голограмм в системе насыщаемых трехуровневых центров

Русинов Александр Петрович

Оренбургский государственный университет

Кучеренко Михаил Геннадьевич, д. ф-м. н

Sano232@mail.ru

В данной работе исследована динамика записи нестационарных амплитудных голограмм в системе насыщаемых трехуровневых центров и рассмотрена кинетика угловой зависимости дифрагированного зондирующего луча. Вследствие нелинейности процесса записи, синусоидальный на начальной стадии, профиль решетки искажается с течением времени. Регистрируя в качестве наблюдаемой дифракционную эффективность голограммы в разных порядках дифракции можно определить вид и профиль записанной решетки и проследить динамику ее записи и релаксации.

На образце создается синусоидальное интерференционное поле $I(x,t) = I_0(t) \cdot (1 - a \cdot \cos(2\pi x/\Lambda))$ с пространственным периодом $\Lambda = \lambda / (2 \sin(\vartheta/2)) \approx \lambda / \vartheta$. Решая систему балансных кинетических уравнений для населенностей n_0 , n_S , n_T нами получено точное решение для случая постоянной интенсивности накачки и приближенное решение для случая медленно изменяющейся интенсивности [см. подробнее 1]. Для анализа кинетики населенностей удобно использовать второе решение, основанное на приближении квазистационарной населенности в подсистеме S – уровней:

$$\begin{cases} n_T(x,t) = n \cdot \left(1 - \exp \left[- \int_0^t \Phi(x,t') \cdot \sigma I(x,t') dt' \right] \right) \\ n_S(x,t) = n \cdot \frac{\Phi(x,t) \cdot \sigma I(x,t)}{K_{ST}} \cdot \exp \left[- \int_0^t \Phi(x,t') \cdot \sigma I(x,t') dt' \right], \end{cases}$$

$$\text{где } \Phi_T(x,t) = \frac{K_{ST}}{2\sigma I(x,t) + \tau_S^{-1} + K_{ST}}.$$

Компьютерное моделирование на основе этих формул показывает, что

- при малых интенсивностях $\sigma I(x,t) < \tau_T^{-1}$ накачки, насыщения на триплетном уровне не происходит, т.е. профиль населенности на синглетном и триплетном уровнях всегда синусоидален;
- при интенсивностях накачки $\tau_T^{-1} < \sigma I(x,t) < \tau_S^{-1}$ (рис. 1) возникает эффект неоднородного заселения T-уровня, из-за различия в разных точках скорости

«перекачки» молекул красителя на триплетный уровень. И изначально синусоидальный профиль населенности уровней со временем искажается;

- в условиях высокой интенсивности накачки $\tau_s^{-1} < \sigma I(x, t)$ проявляется некогерентное насыщение на уровне S, и профиль населенности S и T изначально искажается.

Подбирая длину волны, в полосе поглощения 0, S или T уровня получим, что напряженность $U'(x, t)$ поля пробного луча будет зависеть от профиля населенности этого уровня, как $U_k'(x, t) = U_0 \cdot \exp(-\alpha_k n_k(x, t)s)$, где $k = (0, S, T)$, α_k - коэффициент поглощения k-го уровня, s - толщина голограммы. Основной характеристикой записанной голограммы является дифракционная эффективность, которая определяется как отношение интенсивности света в m-том порядке дифракции к интенсивности падающего света,

$$\eta(m, t) = \frac{|U(m, t)|^2}{U_0^2} = \frac{1}{\Lambda^2} \cdot \left| \int_{-\Lambda/2}^{\Lambda/2} \exp\left(-\alpha_k n_k(x', t)s - \frac{2\pi i}{\Lambda} x' m\right) dx' \right|^2,$$

Как видно из рис. 2 динамика процессов на триплетном уровне разворачивается на временах порядка микросекунд. Общий вид кривой ДЭГ одинаков как для синглетной, так и для триплетной решетки, в начальные моменты времени кривая резко возрастает, что отражает формирование концентрационной решетки, далее кривая проходит через максимум и затухает в результате искажения дифракционной решетки, в пределе выравнивающего профиль населенности.

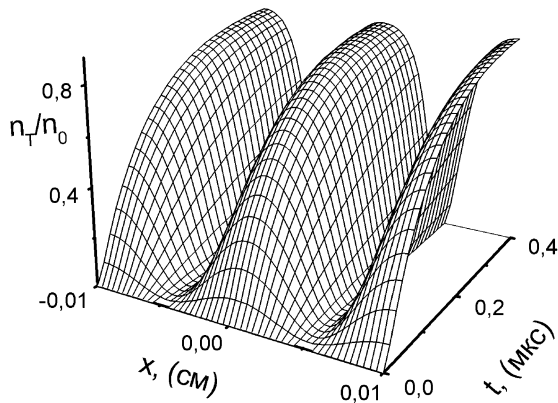


рис. 1. Зависимость населенности уровня n_T от x и t при $\sigma I_0 = 2 \cdot 10^7 \text{ c}^{-1}$.

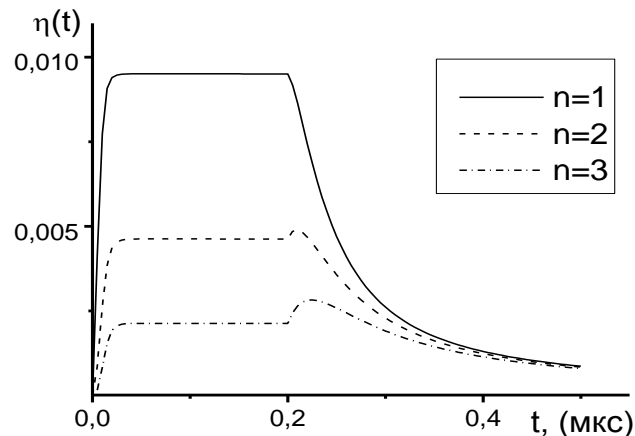


рис. 2. Динамика ДЭГ амплитудных решеток на n_T уровне в 1, 2 и 3 дифракционные максимумы. Записывающий импульс 0-0.05 мкс, Стирающий импульс 0.2-0.5 мкс. $\sigma I_0 = 10^9 \text{ c}^{-1}$.

После выключения накачки уменьшение ДЭГ обусловлено релаксацией фотохромных молекул на основной уровень. Время релаксации с триплетного уровня обычно имеет порядок сотен микросекунд, но может достигать и долей секунды. То есть затухание триплетных голограмм на временах порядка ста микросекунд крайне незначительно. Это можно использовать при создании устройств оптоэлектроники на основе нестационарных голограмм. Преимуществами данного устройства будет быстрая, менее микросекунды, запись и стирание, возможность достаточно долго,

порядка ста микросекунд, сохранять записанную решетку, а также то, что для записи и стирания можно использовать один и тот же лазер. Динамика ДЭГ для данного случая показана на рис. 2.

Список публикаций:

[1.] Кучеренко М.Г., Русинов А.П. Дифракция зондирующего луча на нестационарных тепловых структурах в системах с насыщаемыми трехуровневыми центрами // Вестник ОГУ. 2004, №2. 14 с.

Динамические постоянные молекулы HDSe

Санжаров Максим Александрович

Томский Государственный Университет

Бехтерева Елена Сергеевна, к.ф.-м.н

Синицын Евгений Александрович

maxisan@mail.ru

В теории колебательно-вращательной спектроскопии весьма важной задачей является задача определения потенциальной функции молекулы на основе точных экспериментальных данных. Квадратичная часть потенциальной функции записывается в естественных координатах в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 V^{[2]} = & \frac{1}{2} f_{rr} (\Delta r_1^2 + \Delta r_2^2 + \Delta r_3^2) + f_{rr'} (\Delta r_1 \Delta r_2 + \Delta r_1 \Delta r_3 + \Delta r_2 \Delta r_3) + \\
 & + f_{r\alpha} r_e (\Delta r_1 (\Delta \alpha_{12} + \Delta \alpha_{13}) + \Delta r_2 (\Delta \alpha_{12} + \Delta \alpha_{23}) + \Delta r_3 (\Delta \alpha_{13} + \Delta \alpha_{23})) + \\
 & + f_{r\alpha'} r_e (\Delta r_1 \Delta \alpha_{23} + \Delta r_2 \Delta \alpha_{13} + \Delta r_3 \Delta \alpha_{12}) + \frac{1}{2} f_{\alpha\alpha} r_e^2 (\Delta \alpha_{12}^2 + \Delta \alpha_{13}^2 + \Delta \alpha_{23}^2) + \\
 & + f_{\alpha\alpha'} r_e^2 (\Delta \alpha_{12} \Delta \alpha_{13} + \Delta \alpha_{12} \Delta \alpha_{23} + \Delta \alpha_{13} \Delta \alpha_{23}), \quad (1)
 \end{aligned}$$

где $\Delta r_{1,2,3}$ – изменения связей, $\Delta \alpha$ – изменение валентных углов, r_e – равновесная длина связи, f_{ij} – соответствующие динамические параметры.

В настоящей работе рассматривается метод определения квадратичных и кубических силовых постоянных f_{ij} , f_{ijk} молекулы HDSe на основе экспериментальных данных, полученных на основе колебательно-вращательных спектров этой молекулы.

Первый этап работы заключается в нахождении равновесных структурных параметров $r_{N\alpha}^0$, являющихся функциями равновесных длин связей и валентных углов молекулы HDSe на основе соответствующих известных параметров для молекулы H₂Se. Параметры $r_{N\alpha}^0$ определяются из соотношений

$$\sum_N m_N r_{N\alpha}^0 = 0, \quad (2)$$

$$\sum_N m_N r_{N\alpha}^0 r_{N\beta}^0 = 0 \text{ при } \alpha \neq \beta, \quad (3)$$

$$\left(\frac{\partial V}{\partial Q_\lambda} \right)_{Q=0} = 0. \quad (4)$$

Соотношение (2) соответствует условию, что центр системы координат, связанной с молекулой, расположен в центре масс ядер молекулы, (3) – это условие означает, что главные оси сонаправлены с осями молекулярной системы координат, когда ядра находятся в положениях равновесия, (4) – условия, соответствующего требованию минимума потенциальной функции при отсутствии смещений ядер из равновесных положений.

Второй этап работы состоит в точном определении констант форм колебаний $l_{N\alpha\lambda}$ молекулы HDSe. Для их определения следует использовать систему уравнений, состоящую из условий Экарта:

$$\sum_N m_N^{1/2} l_{N\alpha\lambda} = 0, \quad (5)$$

$$\sum_{N\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} m_N^{1/2} r_{N\beta}^0 l_{N\gamma\lambda} = 0, \quad (6)$$

и требования нормальности колебательных координат:

$$\sum_{N\alpha} l_{N\alpha\lambda} l_{N\alpha\mu} = \delta_{\lambda\mu}, \quad (7)$$

$$\left(\frac{\partial^2 V}{\partial Q_\lambda \partial Q_\mu} \right)_{Q=0} = 0, \lambda \neq \mu. \quad (8)$$

На третьем этапе работы осуществляется численный расчет силовых параметров на основе экспериментальных значений колебательно-вращательных постоянных α_{ij} . Используя теорию возмущений возможно установить связи между колебательно-вращательными постоянными α_{ij} и параметрами $k_{\lambda,\mu\nu}$ в нормальных координатах. Полученная таким образом система линейных уравнений решается методом наименьших квадратов с использованием высокоточной экспериментальной информации о параметрах α_{ij} . Параметры f_{ijk} получены обратным преобразованием от нормальных к естественным координатам.

Влияние модификации поверхности на фотолюминесцентные свойства нанопористого кремния

Свеженцова Екатерина Витальевна

Мельниченко Николай Николаевич

Киевский Национальный Университет имени Тараса Шевченко

Realcrystallab@univ.kiev.ua

Использование пористого кремния, обладающего свойствами пассивирования, просветления, антиотражения, в качестве активного слоя в технологии кремниевых солнечных элементов приводит к значительному улучшению их фотоэнергетических характеристик. Наиболее широко используемым методом формирования слоев пористого кремния совместимого со стандартной технологией изготовления солнечных элементов является метод химического травления, позволяющий получать слои пористого кремния толщиной < 1 мкм.

Поэтому, тонкие слои пористого кремния, полученные химическим травлением, представляют привлекательную альтернативу, по сравнению с другими материалами

для применения в кремниевых солнечных элементах, что повышает актуальность оптимизации методов получения тонких однородных слоев пористого кремния на подложках для солнечных элементов и изучения их свойств.

В данной работе рассмотрено влияние высокотемпературного отжига подложек монокристаллического кремния для солнечных элементов на структурные и фотолюминесцентные свойства нанопористого кремния полученного на них.

Нанопористый кремний наносился на отожженные и не отожженные подложки методом химического травления в растворе на основе плавиковой и азотной кислот. Методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) изучена структура поверхности подложек для изготовления солнечных элементов до, и после проведения высокотемпературного отжига в интервале температур 400-1000°C в воздушной атмосфере, а также сформированного слоя нанопористого кремния на них. Анализ АСМ-изображений показал, что исходные подложки характеризуются присутствием на поверхности большого числа впадин и холмов размерами до 1,5 мкм. Проведение отжига образцов в интервале температур 400-1000°C приводит к сглаживанию шероховатости поверхности и уменьшает глубину рельефа исходной поверхности кремния в 2-3 раза.

Анализ АСМ-изображений поперечных срезов после нанесения нанопористого кремния показывает, что размах высот совпадает со значениями максимальных высот элементов рельефа для исходных и отожженных пластин соответственно. А модифицированный рельеф как в случае отожженных так и не отожженных подложек проявляется в виде возвышений нанометровых размеров над поверхностью микрорельефа. Эти возвышения (или холмы) соответствуют вершинам кремниевых кристаллитов, а углубления между ними – выходу на поверхность узких нанометровых пор. Таким образом, в результате химического травления микрорельеф поверхности подложек промодулирован нанорельефом с размерами кристаллитов в несколько нанометров и высотой нанокристаллитов ~20 нм. Проследить глубже реальную структуру пор вблизи поверхности нанопористого слоя не представляется возможным из-за больших по сравнению с порами размеров зонда. Детальное изучение морфологии поверхности нанопористого слоя на отожженных и не отожженных подложках указывает на отсутствие существенных различий нанорельефа.

Проведенное в данной работе изучение фотолюминесцентных свойств нанопористых слоев кремния показало, что все исследуемые образцы обладали ярким свечением с максимумом в области 650 нм. Полученные спектры возбуждения люминесценции типичны для пористого кремния и содержат широкую полосу в видимой области спектра с максимумом возбуждения $\lambda=320$ нм. Сравнительный анализ спектров фотолюминесценции нанопористого кремния на отожженных и не отожженных подложках показал, что предварительный отжиг подложек в интервале температур 400-1000°C привел к значительному изменению фотолюминесцентных свойств, при этом интенсивность люминесценции для всех образцов нанопористого кремния, нанесенных на отожженные подложки, увеличилась в ~1,5-2 раза, а максимум фотолюминесценции имеет незначительный сдвиг ~ 10 нм в длинноволновую область.

Моделирование влияния аппаратных искажений на силы осцилляторов резонансов формы в ультрамягких рентгеновских спектрах поглощения

Сивков Данил Викторович

Сыктывкарский Государственный Университет

Сивков Виктор Николаевич

Svn@syktsy.ru

В настоящей работе обсуждаются результаты исследований методом математического моделирования влияния окна пропускания спектрометра на форму интенсивных полос поглощения в области ближней тонкой структуры (БТС) ультрамягких рентгеновских спектров поглощения (РСП) на примере К – спектра поглощения молекулы N_2 .

Проведенные недавно экспериментальные измерения спектральных зависимостей абсолютных величин сечений поглощения N_2 в области К - порога ионизации [1], обнаружили сильное уменьшение сил осцилляторов интенсивного π_g – резонанса формы от оптической плотности (давления) азота в газовой кювете. На рис.1 приведены экспериментальные К – спектры поглощения N_2 в интервале давлений 0,21 – 10 мм рт. ст. (длина кюветы $L=50$ мм). В БТС К - спектра поглощения N_2 доминируют два резонанса формы – узкий и очень интенсивный А в начальной области поглощения (π_g - резонанс) и широкий I в континууме (σ_u - резонанс).

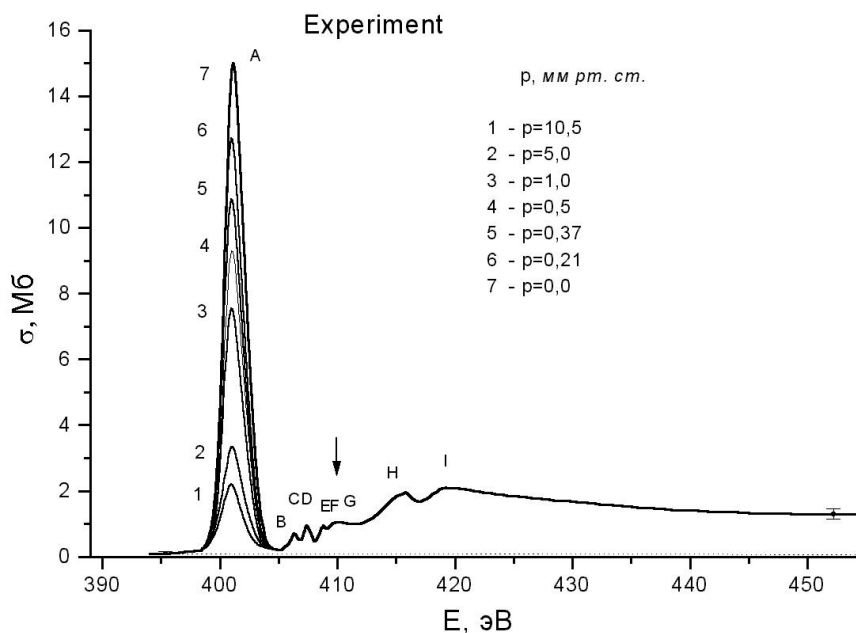


рис.1

Из рисунка видно, что с ростом давления интенсивность и сила осцилляторов (пропорциональная площади пика) быстро убывают, настолько, что при 10 мм рт. ст. он

становиться по интенсивности ниже σ_u -резонанса. Причиной наблюдаемых измерений может быть влияние аппаратной функции спектрометра.

Пусть σ' – это истинное сечение поглощения, а σ – измеряемое экспериментально, тогда они связаны уравнением свертки [1]:

$$\sigma_{(E)} = -\frac{1}{nd} \ln \left[\int e^{-\sigma'(E')nd} f_A(E-E') dE' \right] \quad (1)$$

где f_A – аппаратная функция спектрометра, а nd – оптическая плотность исследуемого вещества, и в случае газа пропорциональна давлению, при $L=50$ мм и $t=20$ °С $nd=1,67p$, где p – давление газа.

Для проведения модельных исследований в качестве σ' выбирается экспериментальный спектр, полученный путем экстраполяции к “нулевому” давлению [1]. Затем, используя уравнение (1) проводилась свертка для разных давлений газа в интервале давлений 0,2 – 16 мм рт. ст.. При этом аппаратная функция выбиралась в виде Гауссоиды с шириной на половине интенсивности в максимуме 0,7эВ. Полученные результаты приведены на рис.2.

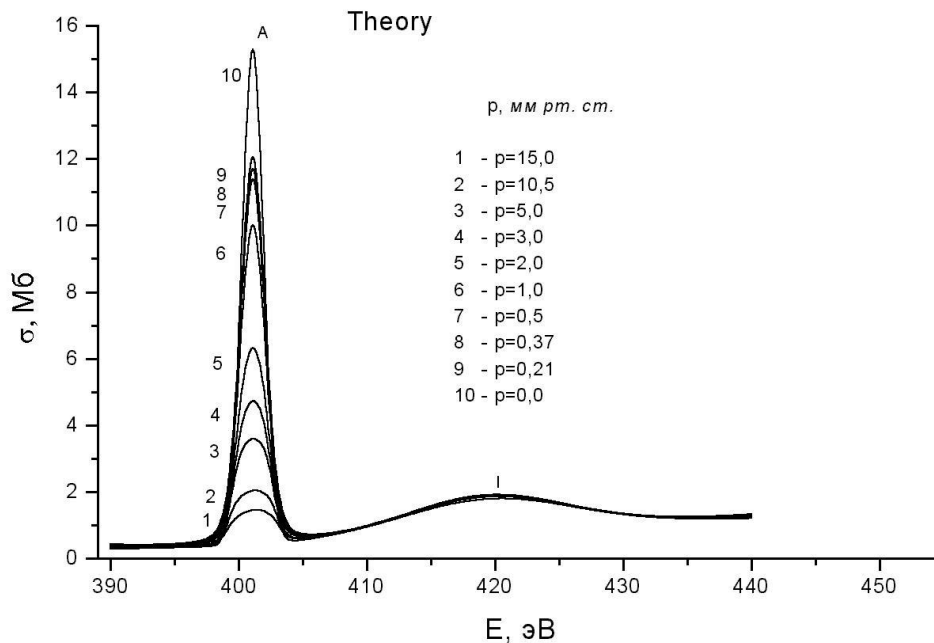


рис2

Из сравнения экспериментальных (см. рис.1) и рассчитанных (см. рис.2) спектральных зависимостей сечений поглощения хорошо видно, что рассчитанные спектры хорошо согласуются с экспериментальными спектрами. В частности наблюдается быстрое уменьшение интенсивности и площади π_g - резонанса, при неизменности параметров широкого резонанса. При этом при давлениях больших 10 мм рт. ст. π_g - резонанс становится ниже по интенсивности σ_u -резонанса. Полученные результаты позволяют утверждать, что наблюдаемые в эксперименте уменьшения сил

осцилляторов (площади контура) π_g -резонанса в К-спектре N_2 , обусловлены влиянием аппаратурной функции спектрометра и представляют собой “толщинный эффект”.

Список публикаций:

[1] Сивков В.Н., Виноградов А.С. // Сила осцилляторов π_g -резонанса формы в НК – спектре поглощения молекулы азота. – Оптика и спектроскопия, 2002, Т.93, №3, 431-434.

Экситоны и перенос энергии в кристаллах нелинейной оптики

KPb_2Cl_5 и $RbPb_2Cl_5$

Смирнов Андрей Алексеевич

Уральский государственный технический университет - УПИ

Пустоваров Владимир Алексеевич, д.ф.-м.н

Simpson13@bk.ru

Прогресс в области производства мощных лазерных диодов (LD) стимулирует создание компактных твердотельных лазеров с диодной накачкой. Использование лазерных диодов для селективной накачки активных сред на основе кристаллов, активизированных редкоземельными ионами (RE), стимулирует поиск новых кристаллических матриц с узкими фононными спектрами, в которых тепловые потери минимальны, а излучательные переходы имеют высокий квантовый выход. Такие кристаллы представляют большой практический интерес как активные среды для лазеров среднего ИК и видимого диапазонов излучения, телекоммуникационных усилителей и линий оптической связи.

Кристаллы двойного хлорида калия-свинца KPb_2Cl_5 (KPC) и $RbPb_2Cl_5$ относятся к числу новых лазерных матриц, пригодных для активации редкоземельными ионами. Они имеют узкий фононный спектр, высокую химическую стойкость и удовлетворительные механические свойства, негигроскопичны.

Целью настоящей работы является исследование экситонных состояний и процессов излучательной релаксации электронных возбуждений и передачи энергии в кристаллах KPb_2Cl_5 и $RbPb_2Cl_5$. Исследованы низкотемпературные спектры отражения, спектры фотолуминесценции (ФЛ), возбуждения ФЛ, кинетика затухания ФЛ с использованием методов вакуумной ультрафиолетовой спектроскопии с временным разрешением и синхротронного излучения (лаборатория HASYLAB, DESY, Hamburg).

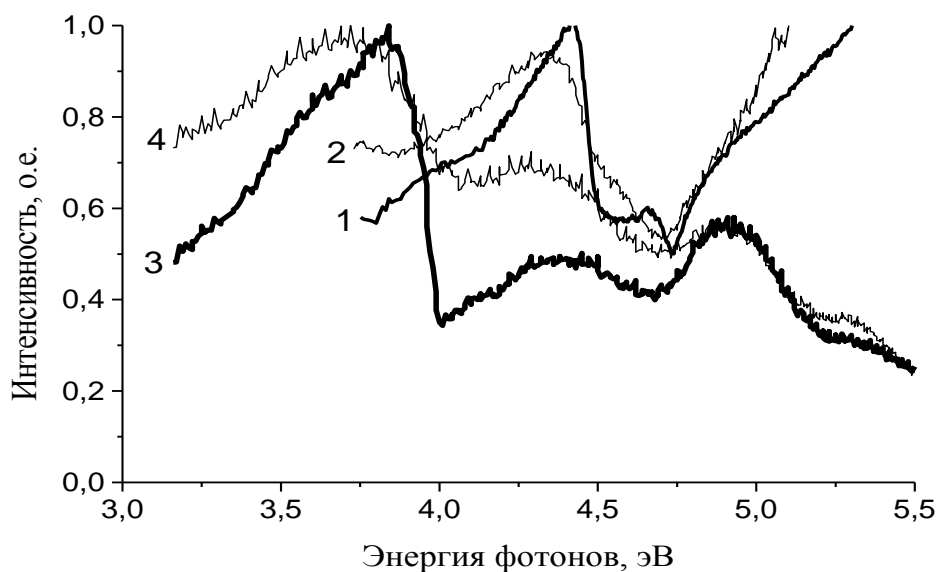


рис.1 Спектры отражения кристаллов $KРb_2Cl_5$ (1,2) и $RbРb_2Cl_5$ (3,4) при $T=8 K$ (1), $80 K$ (3) и $300 K$ (2,4)

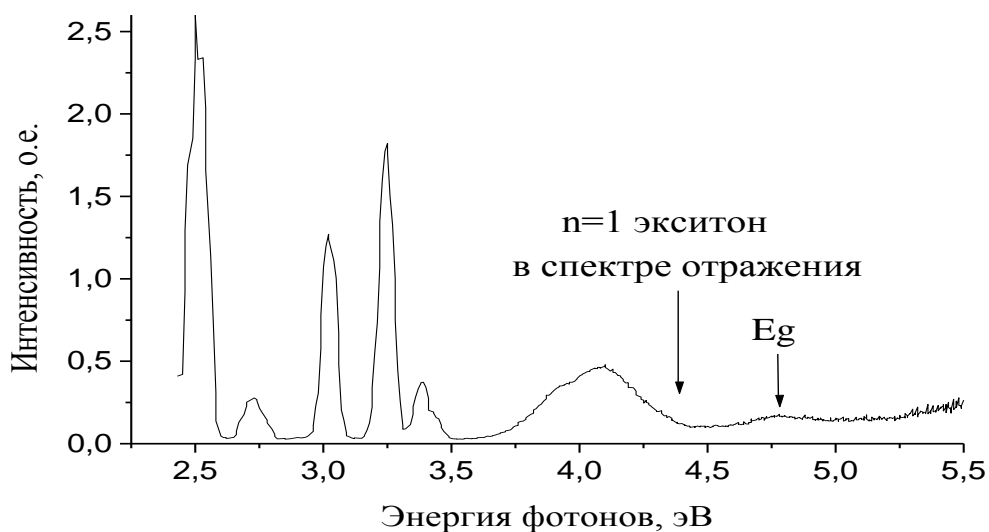


рис.2 Спектр возбуждения фотолюминесценции кристалла $KРb_2Cl_5-Er$ при $T=300 K$ для $E_{изл} = 2,23$ эВ

Получены следующие основные результаты.

1. Как следует из Рис.1, спектр отражения (СО) кристалла КРС содержит ряд пиков в области 4,3-4,7 эВ. Вид и температурная зависимость спектров отражения позволяет связать их с проявлением экситонных состояний. Это есть катионные экситоны, связанные с $6s \rightarrow 6p$ переходами в ионе Pb^{2+} , состояния которых формируют потолок валентной зоны и дно зоны проводимости в этих кристаллах. Исходя из предположения о водородоподобной зависимости положения экситонных линий СО была определена ширина запрещенной зоны кристалла КРС E_g и энергия связи экситона R . Получены значения $E_g = 4,79$ эВ, $R = 0,37$ эВ при $T=8K$. Замена катиона

K→Rb приводит к длинноволновому сдвигу экситонной серии и соответственно значения E_g : для $RbPb_2Cl_5$ при 80 К получены значения $E_g = 4,22$ эВ, $R = 0,40$ эВ.

2. Введение в кристалл примесных ионов редкоземельных элементов (РЗЭ) (Pr, Er, Nd, Ho) приводит к появлению примесного свечения с линейчатым спектром, характерного для каждого из РЗЭ. Такое свечение эффективно при внутрицентровом возбуждении фотонами с энергией $E_{exc} < E_g$ (пики в спектре возбуждения характеризуют энергетическое положение возбужденных уровней примесного центра, Рис.2), а также при возбуждении в области экситонного резонанса и в области создания отдельных электронно-дырочных пар фотонами с энергией $E_{exc} > E_g$, см. для примера Рис.2. Это указывает на эффективную передачу энергии в этих кристаллах при $T=300$ К как по экситонному механизму, так и за счет миграции электронов и дырок с последующей их рекомбинацией на примесном центре.

3. В низкотемпературных спектрах люминесценции ($T=7-80$ К) чистых кристаллов KPb_2Cl_5 , $RbPb_2Cl_5$ обнаружено широкополосное свечение с максимумом в области 2,4 и 2,05 эВ соответственно. Оно характеризуется микросекундной кинетикой затухания ФЛ, возбуждается исключительно в области экситонного поглощения и при межзонных переходах при энергии возбуждения $E_{exc} > E_g$ и по своим свойствам вполне может соответствовать свечению триплетных автолокализованных экситонов.

Механизм безызлучательной релаксации запасенных светосумм в галогенидах серебра

Смирнов Михаил Сергеевич

Овчинников Олег Владимирович, Герасименко Юлия Владимировна

Воронежский Государственный Университет

Латышев Анатолий Николаевич, д.ф.-м.н

opt@phys.vsu.ru

Интерес к ионно-ковалентным кристаллам обусловлен их широким применением в качестве эффективнейших сред для регистрации, хранения, воспроизведения оптической информации, а также основы современных материалов, используемых в волоконной оптике, медицинской диагностике, катализе и т.д. Особое место в исследованиях уникальных светочувствительных свойств этих объектов занимает метод фотостимулированной вспышки люминесценции (ФСВЛ), наблюдаемой после затухания стационарного свечения [1]. Вспышка люминесценции возникает в результате ионизации с глубоких уровней захвата длинноволновым излучением локализованных, при возбуждении люминесценции кристалла, носителей заряда и попадания их на центры люминесценции. При этом регистрируется энергия оптической ионизации исследуемых во вспышке ловушек, которая напрямую связана с глубиной ловушки (это красная граница спектра ионизации уровня захвата), полная светосумма вспышки, пропорциональная концентрации центров локализации, и коэффициент кинетики, пропорциональный эффективному сечению поглощения стимулирующего вспышку излучения. Использование этого метода предполагает учет процессов безызлучательной рекомбинации локализованных носителей заряда. В научной литературе известно [2,3], что запасенная, в результате возбуждения люминесцирующего кристалла, светосумма, в отсутствие воздействия излучения,

постепенно уменьшается (на некоторых образцах кристаллов AgCl снижение достигает 60-70%). Оказалось также, что введение примесей на их поверхность влияет на указанные процессы, усиливая их. В то же время, термическая ионизация глубоких центров захвата неравновесных носителей заряда в случае отсутствия возбуждения и стимуляции светом практически исключена. Маловероятен и механизм туннельной

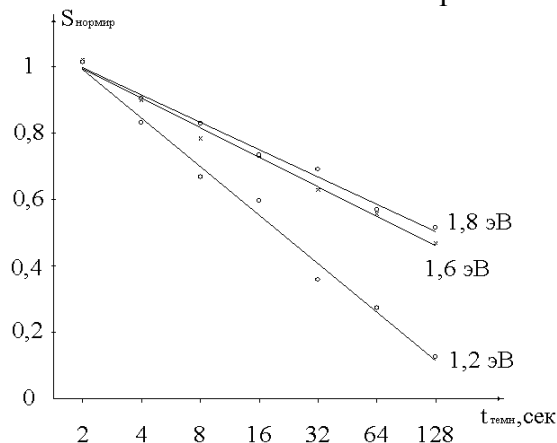


рис 1. Зависимость уменьшения светосуммы от времени темнового интервала для разных энергий стимуляции.

рекомбинации электрона, захваченного на глубокой ловушке с дыркой, захваченной на центр люминесценции [4]. Можно предположить, что значительное снижение запасенной светосуммы происходит за счет термической ионизации электронов с мелких уровней захвата с последующим попаданием их на центр люминесценции и рекомбинацией с находящейся на нем дыркой. Тем самым порождается дефицит дырок на центрах рекомбинации. Возможна и безызлучательная рекомбинация электрона, локализованного на глубокой ловушке с дыркой, ионизованной с мелкой дырочной ловушки термическим путем. Выяснению этих механизмов и посвящена данная работа.

Исследования выполнены на примере монокристаллов AgCl высокой чистоты. Для хлорида серебра известно, что уровням с энергией оптической ионизации 1.0-2.0эВ соответствуют адсорбированные частицы серебра атомно-молекулярной дисперсности [1]. Кроме того, доказано, что люминесценция в основной полосе свечения 480нм (в которой и регистрируется вспышка) происходит вследствие рекомбинации свободного электрона с локализованной на центре свечения дыркой [5]. Изучалась кинетика релаксации запасенных светосумм на центрах локализации, имеющих разную глубину в запрещенной зоне. При этом производился учет потери светосумм на излучательную рекомбинацию локализованных на центрах люминесценции дырок с термоионизованными электронами с мелких уровней (глубина $\sim kT$). Кроме того, проведено исследование влияния на кинетику гибели электронов, локализованных на глубоких ловушках, постоянного электрического поля во время темнового интервала перед измерением фотостимулированной вспышки люминесценции (измерительная ячейка и описание установки приведено в [5]). Тогда, если предполагать, что гибель локализованных носителей заряда происходит за счет безызлучательной рекомбинации с электронами и дырками, термически ионизованными с мелких уровней захвата, то поляризация кристалла в электрическом поле во время темнового интервала позволит влиять на скорость релаксации запасенных светосумм. Сравнивались зависимости, полученные для областей кристалла вблизи противоположно заряженных обкладок измерительного конденсатора с аналогичными кривыми в случае отсутствия поля.

В результате выполненной работы можно сделать следующие выводы:

1. Обнаружен крайне незначительный, порядка 5-7%, вклад в релаксацию запасенной светосуммы за счет снижения концентрации ионизованных центров свечения вследствие излучательной рекомбинации на них свободных электронов, термически ионизованных после выключения УФ возбуждения.

2. Скорости релаксации светосумм, запасенных на центрах разной глубины существенно различны. На рис. 1 приведены кривые уменьшения высвеченных с уровней с потенциалами ионизации 1.8эВ, 1.6эВ, 1.2эВ светосумм. Полученный результат свидетельствует о том, что скорость и механизм гибели электрона на глубокой ловушке зависит от ее природы.

3. Воздействие на кристалл, электрического поля (10^4 В/см) во время темновой паузы при измерении ФСВЛ приводит к снижению скорости релаксации запасенных светосумм как при смещении электронов так и смещении дырок из области сканирования вспышки, что свидетельствует в пользу возможной безызлучательной рекомбинации захваченных на глубоких уровнях носителей заряда.

Работа поддержана грантом на выполнение аспирантами научных исследований в высших учебных заведениях Минобразования РФ №А03-2.9-337.

Список публикаций:

[1] Латышев А.Н., Кушнир М.А., Бокарев В.В., *Оптика и спектроскопия*, 31, 366-364 (1982).

[2] Белоус В.М., *Оптика и спектроскопия*, 13, 412-415(1962).

[3] Коробкина Н.И., Охотников С.С., Овчинников О.В., Латышев А.Н., Клюев В.Г., *Журн. научн. и прикл. фотогр.*, 46, 35-37(2001).

[4] Адирович Э.И. *Некоторые вопросы теории люминесценции кристаллов*. М.: Наука, 1956.-351с.

[5] Латышев А.Н., Овчинников О.В., Смирнов М.С., *Журн. научн. и прикл. фотогр.*, 48, 29-32. (2003).

Исследование эмиссионных спектров молекулы $D_2^{16}O$ в диапазоне 300-900 cm^{-1}

Старикова Евгения Николаевна

Михайленко Семён Николаевич

Томский Государственный Университет

Михайленко Семён Николаевич, к.ф-м.н

Starikova_e@iao.ru

В исследовании свойств молекул изотопический эффект занимает весьма важное место, и его использование стало традиционным при определении структуры молекул, внутримолекулярной потенциальной функции, интерпритации спектров и в ряде других задач. Детальное знание колебательно – вращательных спектров поглощения изотопных модификаций воды в достаточно широкой спектральной области: от микроволнового до видимого диапазона – необходимо для решения задач атмосферной спектроскопии, т.к. линии изотопных молекул часто наблюдаются в атмосферных спектрах, они влияют на излучение лазеров, применяемых для атмосферных исследований.

В работе исследовались 4 спектра паров воды в диапазонах 380 – 860 cm^{-1} ($H_2O + HDO + D_2O$) и 320 – 520 cm^{-1} (D_2O) при различных условиях регистрации для определения новых вращательных уровней энергии состояний (000) и (010) для молекулы $D_2^{16}O$.

Напомним, что редуцированный уотсоновский гамильтониан H_V^{Wats} в принятых в спектроскопии обозначениях имеет вид

$$H_V^{Wats} = E_V + \left[A^V - \frac{1}{2}(B^V + C^V) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^V + C^V) J^2 + \frac{1}{2}(B^V - C^V) J_{xy}^2 - \Delta_K^V J_z^4 - \Delta_{JK}^V J^2 J_z^2 - \Delta_J^V J^4 - \delta_K^V \{J_z^2, J_{xy}^2\} - 2\delta_J^V J^2 J_{xy}^2 + H_K^V J_z^6 + H_{KJ}^V J^2 J_z^4 + H_{JK}^V J^4 J_z^2 + H_J^V J^6 + h_K^V \{J_z^4, J_{xy}^2\} + h_{JK}^V J^2 \{J_z^2, J_{xy}^2\} + 2h_J^V J^4 J_{xy}^2 + \dots,$$

здесь

$$J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2, \{A, B\} = AB + BA.$$

(1)

При использовании такого эффективного вращательного гамильтониана для описания вращательных спектров лёгких молекул типа H_2X (H_2O , CH_2 и т.д.) возникает ряд проблем, связанных с плохой сходимостью разложения (1). Для нежёстких молекул нарушение условий применимости теории возмущений происходит уже при относительно низких значениях вращательных квантовых чисел. Для описания спектров таких молекул приходится привлекать неполиномиальные модели вращательного гамильтониана. Одним из наиболее перспективных направлений в данной области является метод представления ЭВГ в виде производящих функций, предложенный Стариковым и Тютеревым в работах [1-3].

Как и в случае гамильтониана Уотсона, эффективный вращательный гамильтониан H_G^V , построенный на основе производящих функций $F(J^2, J_z)$ и $\chi(J^2, J_z)$, можно представить в виде суммы диагональной и недиагональной частей в базисе вращательных функций

$$H_G^V = {}^v F(J^2, J_z) + \frac{1}{2} \{ (J_+^2 + J_-^2), {}^v \chi(J^2, J_z) \} = {}^{diag} H_G^V + {}^{n.diag} H_G^V.$$

(2)

Явный вид производящих функций зависит от выбора точно решаемой модели в задаче о нулевом приближении. В работах [1-3] предложено следующее выражение для главного вклада в производящие функции F и χ

$$G = \frac{2}{\alpha^{(J)}} \left(\sqrt{1 + \alpha^{(J)} J_z^2} - 1 \right)$$

(3)

где $\alpha^{(J)}$ зависит только от оператора квадрата полного углового момента J^2 :

$$\alpha^{(J)} = a_0 + a_1 J^2 + a_2 J^4 + \dots a_n J^{2n} + \dots$$

(4)

Для молекул типа H_2O разложение (4) является хорошо сходящимся.

Эмиссионные спектры, исследовавшиеся в нашей работе, зарегистрировал Georg Mellau на спектрометре Bruker IFS 120 HR (г. Гиссен, Германия) с разрешением 0.005 см^{-1} .

В результате анализа этих спектров нами было проидентифицировано более 1000 линий излучения трёх полос ((000)-(000), (010)-(010) и (010)-(000)) изотопомера воды

$D_2^{16}O$ и расширен набор экспериментально определённых вращательных уровней энергии состояний (000) и (010). Результаты обработки приведены в следующей таблице

Состояние	(000)	(010)
Rms (10^{-3} см^{-1})	1.08	0.78
Число уровней	649	567
Число параметров	43	44
$(J, K_a)_{\text{max}}$	25,24	23,23

В работе было проведено сравнение полученных результатов с литературными данными. Результаты работы докладывались на 14 Международном симпозиуме по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (HighRus-2003) в Красноярске (июль, 2003) и опубликованы в [4].

Список публикаций:

- [1] Вл.Г.Тютерев, В.И.Стариков, В.И.Толмачёв, Асимптотика вращательных уровней энергии нежёстких молекул типа H_2O . Производящие функции и радиусы сходимости. // ДАН СССР, 1987, т.297, №2, стр.345-349.
- [2] В.И.Стариков, Вл.Г.Тютерев, Метод улучшения сходимости эффективного вращательного гамильтониана нежёстких молекул. // Опт. и спектроск. 1987, т.63, вып.1, стр.75-79.
- [3] Vl.G.Tyuterev, The generating function approach to the formulation of the effective rotational hamiltonian. // J. Mol. Spectrosc. 1992, v.151, №1, p.97-129.
- [4] G. Mellau, S.N. Mikhailenko, E.N. Starikova, S.A. Tashkun, H. Over, Vl.G. Tyuterev, Rotational levels of the (000) and (010) states of $D_2^{16}O$ from hot emission spectra in the $320\text{-}860 \text{ cm}^{-1}$ region // J. Mol. Spectrosc. **224**, 32-60 (2004)

Спектроскопические исследования молекул $Eu(FOD)_3$ в пористых стеклах и полимерах

Тараева Анастасия Юрьевна

Герасимова Василиса Игоревна, Рыбалтовский Алексей Ольгердович

Московский Государственный Университет им. М.В.Ломоносова

Герасимова Василиса Игоревна, к.ф-м.н

LittleFly@rambler.ru

В данной работе были проведены исследования металлорганического соединения (МОС) $Eu(FOD)_3$ (FOD=6,6,7,7,8,8,8-гептофтор-2,2-диметил-3,5-октандионат) в нанопористом стекле (Vycor), в полиметилметакрилате (ПММА) и полимерной пленке (ОГМ - полимер, сшитый из метакриловой кислоты и глицерина). В эти матрицы $Eu(FOD)_3$ импрегнировался с помощью сверхкритического (СК) CO_2 при $T=50 \text{ }^\circ\text{C}$ и $P=130 \text{ атм}$.

Были получены спектры поглощения, ФЛ и ее возбуждения для спиртового раствора $Eu(FOD)_3$, а также спектры поглощения и ФЛ для VYCOR, ПММА и ОГМ до и после импрегнации $Eu(FOD)_3$.

При сравнении спектров поглощения исследуемых образцов до и после импрегнации было обнаружено, что в легированных образцах появилась широкая полоса поглощения с максимумом около 300 нм, за которую, как мы предполагаем, отвечает синглет-синглетный переход ($S_0 \rightarrow S_1$) молекулы FOD (рис.1), а также слабые узкие полосы в видимом диапазоне, принадлежащие $f - f$ переходам ионов Eu^{3+} .

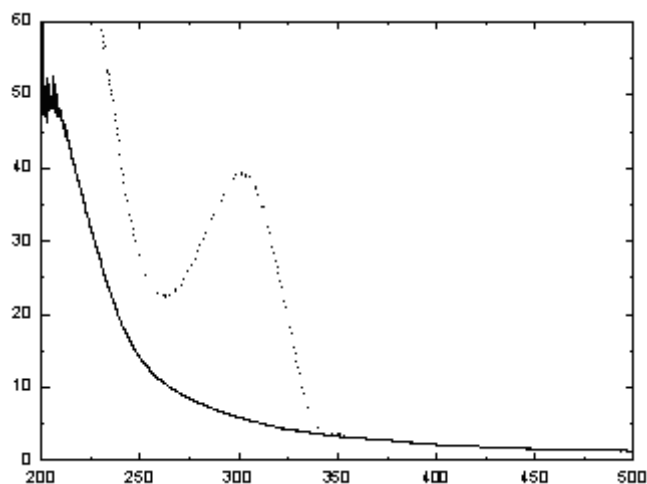


рис.1 Спектр поглощения Vucor до (—) и после импрегнации(⋯) $\text{Eu}(\text{FOD})_3$.

Положение максимума этой полосы зависит от матрицы. Минимальное значение $\lambda_{\text{погл}}=280$ нм принадлежит спиртовому раствору EuFOD , а максимальное $\lambda_{\text{погл}}=310$ нм - Vucor. Помимо перехода $S_0 \rightarrow S_1$ (290 нм) в спектре возбуждения ФЛ ионов Eu^{3+} ($\lambda_{\text{набл}} = 611,6$ нм, переход ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_2$) в спиртовом растворе видна полоса с максимумом 390 нм, за которую, по-видимому, отвечает синглет-триплетный переход ($S_0 \rightarrow T_1$) молекулы FOD (рис.2). Исходя из формы полосы поглощения в районе 300 нм и обеих полос возбуждения можно заключить, что все они двойные, причем их смещение в длинноволновую область в зависимости от матрицы связано с перераспределением интенсивностей между их составляющими. Мы предполагаем, что это связано с пространственным расположением двух разных радикалов R_1 ($-(\text{CF}_2)_2\text{CF}_3$) и R_2 ($-\text{C}(\text{CH}_3)_3$) относительно остова молекулы FOD. Подобный эффект наблюдался и при сравнении нормированных спектров ФЛ ионов Eu^{3+} в разных матрицах. Форма полосы ($\lambda = 611,6$ нм), принадлежащая переходу ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_2$, менялась за счет переигрывания максимумов полос штарковского расщепления, сами же полосы не меняли своего положения от образца к образцу.

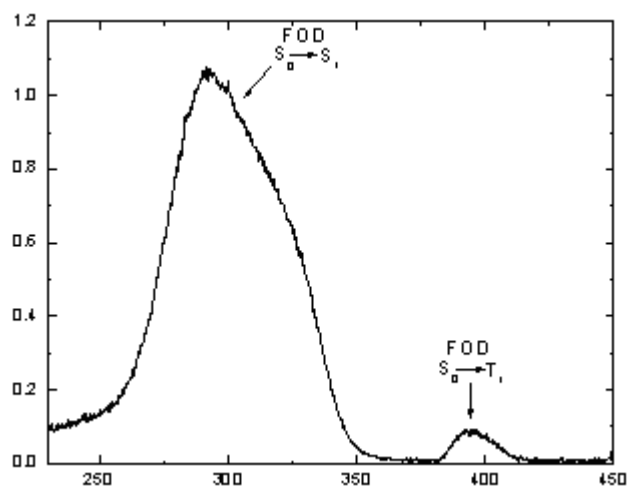


рис.2 Спектр возбуждения ФЛ спиртового раствора $\text{Eu}(\text{FOD})_3$

Основываясь на полученные нами экспериментальные результаты можно сделать вывод, что накачка ФЛ ионов Eu^{3+} может осуществляться через π - π^* внутрелигандные переходы молекулы FOD, а именно $S_0 \rightarrow S_1$ и $S_0 \rightarrow T_1$ переходы, что существенно увеличивает интенсивность ФЛ. Также установлено, что при сверхкритической импрегнации максимальное количество $\text{Eu}(\text{FOD})_3$ содержится в полимерных плёнках типа ОГМ, а минимальное – в ПММА при одинаковых внешних условиях. Наиболее эффективная передача энергии от FOD к ионам Eu^{3+} наблюдается в ПММА.

Такая передача энергии от органической составляющей МОС к иону должна быть зависимой от температуры. На данный момент мы получили подтверждение этого факта при исследовании зависимости интенсивности ФЛ (на длине волны 611,6 нм – переход ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_2$ иона Eu^{3+}) от температуры в диапазоне от 20 до 100 °С. Интенсивность в этом диапазоне падает в 2-5 раз, в зависимости от матрицы и его концентрации, причем характер падения в данном диапазоне температур линейный. Наиболее резкое падение наблюдается у полимерных пленок ОГМ, а менее резкое в ПММА и спиртовом растворе.

В данной работе установлено:

- с помощью СК CO_2 возможна импрегнация МОС в различные типы образцов (нанопористые стекла, полимеры);
- накачка ФЛ редкоземельных ионов осуществляется в данном случае через π - π^* внутрелигандные переходы органической составляющей МОС;
- образцы, легированные $\text{Eu}(\text{FOD})_3$, могут служить температурными датчиками в диапазоне от 20 до 100 С.

**Концентрационная зависимость квантового выхода
сенсibilизированной фосфоресценции в твердых растворах
органических соединений**

Тищенко Андрей Борисович

Ставропольский Государственный Университет

Дерябин Михаил Иванович, к.ф.-м.н

tishunya@yandex.ru

Согласно существующим представлениям о межмолекулярном триплет-триплетном переносе энергии электронного возбуждения в конденсированных средах считается, что квантовый выход сенсibilизированной фосфоресценции (СФ) не зависит от концентрации раствора. Напомним, что под квантовым выходом СФ имеется ввиду отношение числа квантов, излучаемых акцептором в единицу времени, к числу потушенных триплетных молекул донора за это же время в результате передачи энергии акцептору в стационарном режиме. Поэтому, отсутствие концентрационной зависимости для него может быть в том случае, если присутствие донора в растворе не влияет на константы скоростей излучательной и безызлучательной дезактивации энергии триплетного возбуждения в молекулах акцептора. Необходимость выполнения первого условия следует из квантово-механической теории Ферстера-Декстера переноса энергии по обменно-резонансному механизму. Второе условие выполняется, если присутствие молекул донора не создает дополнительных каналов безызлучательной дезактивации энергии триплетного возбуждения в молекулах акцептора, в сравнении с теми, которые имелись в его отсутствие.

В проводившихся экспериментах в качестве донора энергии использовался бензофенон, а акцептора – нафталин. Растворителем служил толуол, в котором оба соединения хорошо растворяются, и, который стеклется при быстром охлаждении до 77 К. концентрация раствора рассчитывалась для комнатной температуры. Ниже приведены результаты исследования концентрационной зависимости квантового выхода (см. рис. 1.) Как видно из рисунка наблюдаются как интервал увеличения (от 0,1 до 0,35 моль/л), так и интервал уменьшения (от 0,35 до 0,5 моль/л) квантового выхода СФ с ростом концентрации раствора.

Экспериментально наблюдаемую зависимость квантового выхода СФ нафталина от концентрации раствора можно объяснить следующим образом. Для концентраций раствора, при которых среднее расстояние между молекулами акцептора больше радиуса обменных взаимодействий, основной вклад в изменение квантового выхода СФ вносит увеличение константы скорости излучательной дезактивации энергии триплетного возбуждения в молекулах нафталина при уменьшении среднего расстояния между молекулами в донорно-акцепторной паре. В результате этого наблюдается рост квантового выхода СФ с увеличением концентрации компонент в эквимольной смеси до 0,35 моль/л. Когда концентрация компонент в смеси становится выше 0,35 моль/л, среднее расстояние между молекулами нафталина в растворе при 77 К достигает значений меньших, чем 1,5 нм. При таком межмолекулярном расстоянии практически все молекулы нафталина находятся в сфере обменных взаимодействий друг с другом, посредством которых может осуществляться передача энергии триплетного возбуждения между ними.

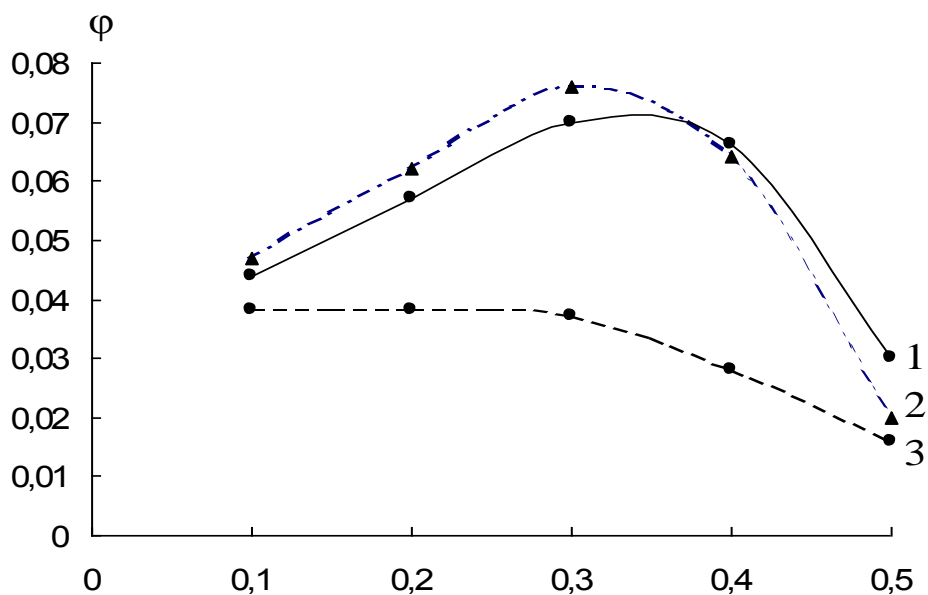


рис. 1. Концентрационная зависимость квантового выхода СФ нафталина в толуоле при 77 К: 1 – экспериментальная кривая; 2 – рассчитанная с учетом изменения κ^{rad} ; 3 – рассчитанная без учета изменения κ^{rad} .

Поэтому существенный вклад в изменение квантового выхода СФ, в этом интервале концентраций, вносит миграционно ускоренное тушение триплетных возбуждений акцептора молекулами кислорода в необезгаженных растворах и гетероассоциатами. С ростом концентрации раствора расстояния между молекулами нафталина сокращаются, миграция возбуждений ускоряется, время поиска тушителя уменьшается. В результате этого миграционно ускоренное тушение сначала замедляет рост квантового выхода СФ, обусловленный увеличением κ^{rad} , а затем начинает его уменьшать при увеличении концентрации раствора.

Таким образом результаты проведенных исследований свидетельствуют о том, что квантовый выход СФ нафталина зависит от концентрации раствора. Основной вклад в концентрационную зависимость квантового выхода СФ вносят два механизма. Первый механизм – это изменение константы скорости излучательной дезактивации триплетных молекул акцептора, обусловленное взаимодействием между молекулами донора в основном состоянии и возбужденными молекулами акцептора. Вторым механизмом является миграционно ускоренное тушение на молекулах кислорода в необезгаженных растворах и на гетероассоциатах.

Зонная структура смешанных кристаллов $\text{AgBr}_{1-x}\text{I}_x$

Фёдоров Дмитрий Георгиевич

Кемеровский государственный университет

Журавлёв Юрий Николаевич, к.ф.-м.н

Mitya00@rambler.ru

Благодаря ряду важных свойств, галогениды серебра являются основными светочувствительными материалами в фотографических процессах. Для повышения эффективности фотографического процесса используются смешанные кристаллы $\text{AgBr}_{1-x}\text{I}_x$, так как они обладают более высокой светочувствительностью. В связи с этим, представляет интерес проследить влияние параметра x на электронные свойства смешанных кристаллов.

Метод расчета зонного спектра смешанного кристалла представлен в работе [1], где в модели виртуального кристалла учитывается вклад, отвечающий за беспорядок

$$H_{\text{alloy}} = H_{\text{vc}} - p(\text{AgBrI})\sqrt{x(1-x)}(H^{\text{AgBr}} - H^{\text{AgI}})$$

где H_{vc} - гамильтониан виртуального кристалла, $p(\text{AgBrI})$ - параметр, отвечающий за беспорядок в кристалле. В данной работе

параметр p находился с помощью подгонки под экспериментальные данные, опубликованные в работе [2]. Расчет зонного спектра проводился в рамках теории функционала электронной плотности по методу псевдопотенциала в базе численных sp^3d^5 атомных псевдоорбиталей.

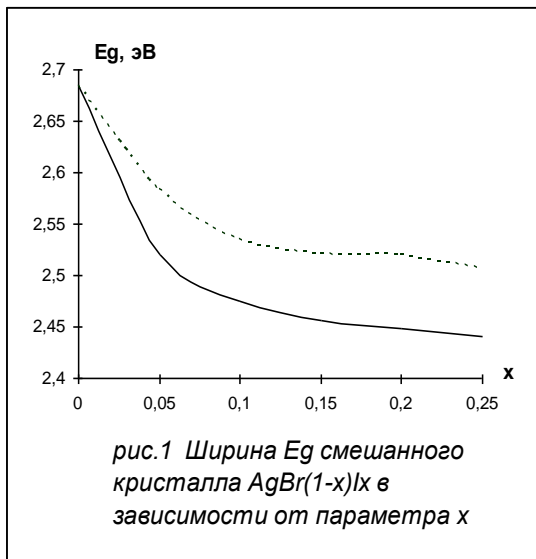


рис.1 Ширина E_g смешанного кристалла $\text{AgBr}(1-x)\text{I}_x$ в зависимости от параметра x

В результате произведенных вычислений были получены зонные спектры смешанных кристаллов в зависимости от параметра x (вклад йода). Изменение ширины запрещенной зоны (E_g) смешанного кристалла $\text{AgBr}_{1-x}\text{I}_x$ в зависимости от x представлено на (рис.1), где сплошной линией обозначена E_g , полученная экспериментально [2], а пунктиром E_g ,

полученная теоретически. В связи с тем, что метод функционала электронной плотности занижает ширину запрещенной зоны, была произведена сдвигка E_g на ΔE .

В зонном спектре чистого кристалла AgBr можно выделить две полосы. Вклад в первую полосу находящуюся внизу валентной зоны в основном вносят s -состояния брома. В более широкую полосу находящуюся сверху валентной зоны основной вклад вносят d -состояния серебра. Вершина валентной зоны реализуется в точке $L(1/2,1/2,1/2)$. Дно зоны проводимости находится в точке $\Gamma(0,0,0)$. Добавления йода в кристалл AgBr к качественным изменениям в зонном спектре не приводят.

Список публикаций:

- [1] H. Heireche, B. Bouhafs, H. Aourag, M. Ferhat and M. Certier, *Phis. Chem. Solids*, v. 50, 997-1007 (1998).
- [2] A. P. Marchetti and M. Burberry., *Indirect optical absorption and recombination in silver bromoiodide*, *Phys. Rew.B*, v.37.- N.18.- p. 10 862-10866 (1998)

Люминесценция диэлектрических кристаллов с катионом свинца

Фёдоров Никита Андреевич

Московский Государственный Университет им. М.В.Ломоносова

Колобанов Виталий Николаевич, к.ф.-м.н

nik_f@rambler.ru

Свинцово содержащие соединения находят широкое применение в современной науке и технике. Например, $PbWO_4$ используется в качестве сцинтиллятора для использования в области физики высоких энергий. Молибдат свинца является перспективным кандидатом в качестве сцинтилляционного материала для регистрации двойного бета распада. При этом зачастую соединения, содержащие катионы свинца в своем составе по своим оптическим и люминесцентным свойствам выделяются в ряду изоструктурных кристаллов с другими катионами. Одной из интересных особенностей, возникающих в кристаллах с катионом свинца, является наличие люминесценции с временами затухания, лежащими в области единиц и десятков наносекунд. В некоторых кристаллах, например в $PbCl_2$ и $PbBr_2$, такая люминесценция объясняется возможным образованием авто локализованных экситонов на катионе свинца.

В настоящей работе проведен сравнительный анализ люминесцентных свойств и особенностей спектров отражения ряда соединений, содержащих катионы свинца.

Описание спектров урана в приближении слабого, промежуточного и сильного конфигурационного взаимодействия

Фомичёва Людмила Александровна

Витебский государственный университет

Корниенко Алексей Александрович, д.ф.-м.н

korn@vsu.by

Используемый для интерпретации оптических спектров одноэлектронный гамильтониан кристаллического поля

$$H_{cf} = \sum_{k,q} B_q^k C_q^k \quad (1)$$

был получен в приближении слабого конфигурационного взаимодействия, когда возбуждённые конфигурации действуют в одинаковой степени на различные мультиплеты. Здесь B_q^k - параметры кристаллического поля, которые в данном приближении должны быть едиными для всех мультиплетов f^N - конфигурации.

Энергии мультиплетов редкоземельных ионов имеют такой же порядок величины, как энергии низших возбуждённых конфигураций. Таким образом, выполнение условий для реализации приближения слабого конфигурационного взаимодействия маловероятно, и применение уравнения (1) зачастую приводит к противоречиям. Поскольку энергетические интервалы между возбуждённой конфигурацией и высоко- и

низколежащими мультиплетами значительно отличаются друг от друга, возбуждённые конфигурации будут влиять на различные мультиплеты в существенно разной степени. Если учесть этот эффект в третьем порядке теории возмущений, то можно получить следующий гамильтониан кристаллического поля [1]:

$$H_{cf} = \sum_{k,q} \underbrace{\left[B_q^k + (E_J + E_{J'} - 2E_f^0) G_q^k \right]}_{\tilde{B}_q^k} C_q^k, \quad (2)$$

в котором параметры \tilde{B}_q^k зависят линейно от энергии мультиплетов E_J и $E_{J'}$.

Здесь E_f^0 - энергия центра тяжести f^N -конфигурации, G_q^k - дополнительные параметры, задающие амплитуду межконфигурационного взаимодействия. Аналитическое выражение для вкладов в G_q^k , обусловленных примесью конфигураций $nf^{N-1}(n+1)d$, $nf^{N-1}(n+1)g$ и $(n+1)p^5nf^{N+1}$, имеет вид

$$G_q^k(l) = (-1)^{l+1} \frac{2k+1}{2\Delta_{fl}^2 \langle f \| C_q^k \| f \rangle} \sum_{\substack{k' k'' \\ q' q''}} (-1)^q \begin{pmatrix} k' & k'' & k \\ q' & q'' & q \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} k' & k'' & k \\ q' & q'' & q \end{pmatrix} \langle f \| C^{k'} \| l \rangle \langle l \| C^{k''} \| f \rangle B_{q'}^{k'}(l) B_{q''}^{k''}(l), \quad (3)$$

где $l = d, g, p$; $\langle f \| C^{k'} \| l \rangle$ - приведённый матричный элемент сферического тензора C^k . Для параметров кристаллического поля использованы обычные обозначения

$$B_q^k(l) = \langle f | r^k | l \rangle A_{kq}. \quad (4)$$

Выражение для оценки вкладов в G_q^k , обусловленных примесью конфигураций с переносом электрона, записывается следующим образом

$$G_q^k(\text{cov}) = \frac{2k+1}{2 \langle f \| C^k \| f \rangle} \sum_b C_q^{k*}(\Theta_b, \Phi_b) \sum_{m,\zeta} (-1)^{f-m} \begin{pmatrix} f & k & f \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \cdot |\lambda_{f\zeta m}|^2. \quad (5)$$

Здесь $C_q^{k*}(\Theta_b, \Phi_b)$ - сферический тензор углов Θ_b и Φ_b , фиксирующих направление от иона-активатора на лиганд b . Параметр ковалентности $\lambda_{f\zeta m}$ соответствует переносу электрона с орбиты ζ лиганда в f -оболочку активатора. Таким образом, параметр λ содержит информацию о делокализации электронов.

Приближение промежуточного по силе межконфигурационного взаимодействия наиболее применимо для лантаноидов. Для актиноидов влияние конфигурационного взаимодействия значительно сильнее. В приближении сильного конфигурационного

взаимодействия в первом порядке теории возмущений гамильтониан кристаллического поля имеет вид [1]:

$$H_{cf} = \sum_{k,q} \underbrace{\left[B_q^k + \left(\frac{\Delta}{\Delta - E_J} + \frac{\Delta}{\Delta - E_{J'}} \right) \tilde{G}_q^k \right]}_{\bar{B}_q^k} C_q^k. \quad (6)$$

Здесь Δ - энергия возбуждённой конфигурации. В этом случае параметры кристаллического поля \bar{B}_q^k зависят от энергии мультиплетов по более сложному закону, чем линейный.

Условия применимости выражений (2) и (6) для описания штарковской структуры спектров актиноидов исследованы ещё недостаточно. Поэтому в данной работе выполнено детальное описание штарковской структуры спектров UF_4 и определены параметры межконфигурационного взаимодействия.

Список публикаций:

[1]. Корниенко А.А., Каминский А.А., Дунина Е.Б., *ЖЭТФ*, **116**, 2087-2102 (1999).

Исследования колебательных спектров метиленового голубого, адсорбированного на поверхности твёрдых растворов $AgCl(I)$

Черных Светлана Владимировна

Овчинников Олег Владимирович

Воронежский Государственный Университет

Воробьева Раиса Павловна, к.ф.-м.н

Латышев Анатолий Николаевич, д.ф.-м.н

opt@phys.vsu.ru

Интенсивность развития современной оптоэлектроники и систем оптической записи информации определяется возможностями эффективного управления амплитудой, фазой, поляризацией, изменением частотного диапазона и направлением распространения оптического излучения. В связи с этим большой интерес проявляется к полупроводниковым соединениям, способным осуществлять преобразование оптических сигналов из инфракрасного диапазона в более высокоэнергетическую область спектра. Вместе с тем, для возбуждения антистоксовой люминесценции зачастую требуется лазерное возбуждение высокой интенсивности (порядка 10 МВт/см^2). Однако, известны возможности наблюдать, например, антистоксовую люминесценцию различных кристаллов при малых интенсивностях возбуждения. Среди них особо выделяется сенсibilизированная люминесценция галогенидов серебра, наблюдаемая при возбуждении в полосах поглощения адсорбированных органических красителей и продуктов фотоллиза. В то же время, до сих пор не существует однозначных ответов на вопрос о механизме преобразования энергии возбуждения в этих случаях.

На системах $\text{AgCl}_{0.95}\text{I}_{0.05}$ с адсорбированным красителем (Кр) (метиленовым голубым) нами наблюдалась интенсивная антистоксова люминесценция при возбуждении слабыми световыми потоками, в полосе поглощения красителя. Обнаружена немонотонная зависимость интенсивности антистоксовой люминесценции в зависимости от концентрации раствора метиленового голубого.

Поэтому целью настоящей работы являлось получение объективной информации, позволяющей построить физически обоснованный механизм антистоксовой люминесценции. Большие возможности для решения этой проблемы дает инфракрасная спектроскопия.

В настоящей работе проводились исследования ИК спектров метиленового голубого (МГ), (принадлежащего к классу тиазиновых красителей ($\text{C}_{16}\text{H}_{18}\text{N}_3\text{S}\cdot\text{Cl}\cdot\text{H}_2\text{O}$), структурная формула которого представлена на рис 1, адсорбированного на поверхности микрокристаллов твердых растворов $\text{AgCl}_{0.95}\text{I}_{0.05}$.

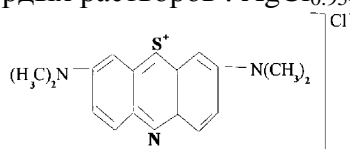


рис.1. Структурная формула метиленового голубого.

Исследования проведены на ИК-спектрофотометрах UR-20 и Specord M82. При записи объектов исследования использованы строго постоянные условия записи

Для нашего случая высокой степенью характеристичности обладают связи С-Н группы $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ красителя метиленового голубого и их валентные $\nu_{\text{cm}^{-1}}$ и деформационные $\delta_{\text{cm}^{-1}}$ колебания, расположенные в интервале частот $2800\text{-}3000\text{ cm}^{-1}$, $1350\text{-}1500\text{ cm}^{-1}$.

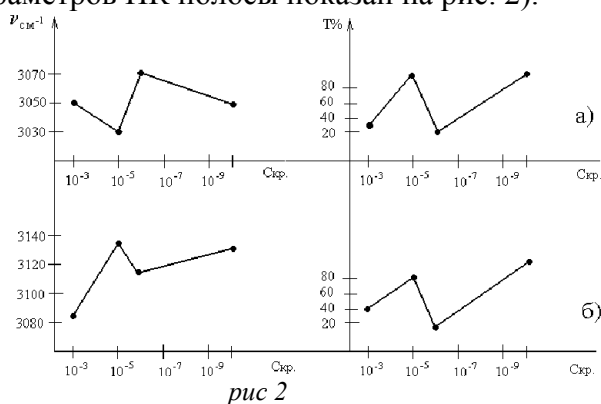
Наличие эквивалентных групп атомов С-Н для метильных групп $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ приводит к появлению в ИК спектре, в указанных областях, характеристических полос двух типов: валентных ν^s и ν^{as} и деформационных δ^s и δ^{as} . Ароматические кольца и гетероцикл с атомами N и S, обладают минимальной степенью характеристичности и при дальнейшей интерпретации спектров не используются.

Анализ экспериментальных данных ИК спектров позволяет выделить следующие основные результаты:

1. Анализ валентных колебаний групп атомов С-Н для метильных групп $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ для МГ, адсорбированного на поверхности $\text{AgCl}_{0.95}\text{I}_{0.05}$ из спиртовых растворов различных концентраций ($10^{-3}\text{-}10^{-10}$ мольКр/моль $\text{AgCl}_{0.95}\text{I}_{0.05}$) свидетельствует о том, что при увеличении концентрации Кр на поверхности микрокристаллов наблюдается низкочастотный сдвиг и рост интенсивности поглощения полос данных колебаний (в области частот $2800\text{-}3000\text{ cm}^{-1}$). Это указывает на донорно-акцепторный механизм связи молекул с кристаллом $\text{AgCl}(\text{I})$. Низкочастотный сдвиг валентных колебаний С-Н для метильных групп $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ при увеличении концентрации, сопровождающийся увеличением интенсивности в этих полосах колебаний говорит в пользу того, что взаимодействие молекул Кр с кристаллом осуществляется по типу водородной связи (по концевым группам С-Н)

2. Для анализируемых систем наибольшие изменения наблюдаются для ν и Т симметричных и асимметричных колебаний при вариации концентрации Кр. Характер

некоторых изменений этих параметров ИК полосы показан на рис. 2. При изменении концентрации Кр. ($C_{кр}$) проявляется эффект альтернации (чередования) спектральных параметров ИК полосы валентного колебания связи С-Н группы $N(CH_3)_2$ (характер изменений указанных параметров ИК полосы показан на рис. 2).



Особенно выделяется здесь концентрация Кр, равная 10^{-6} , при которой частота полосы ν^s принимает максимальное значение при минимальном Т% (максимальное поглощение). Такой характер изменения параметров ИК полосы свидетельствует о наибольшем взаимодействии $AgCl(I)$ с красителем при данной концентрации. Здесь же наблюдается и эффект обращения альтернации $\nu_{см}^{-1}$ полос S и aS валентного колебания, который приводит к перераспределению интенсивности этих полос. Появление эффектов альтерации и обращения альтерации может свидетельствовать о немонотонном характере изменения взаимодействия кристалла и красителя при вариации концентрации Кр, вследствие образования комплексов красителя различных размеров и геометрии.

Люминесценция наноструктурного диоксида кремния при возбуждении синхротронным излучением

Чудинов Александр Андреевич

Бирюков Дмитрий Юрьевич, Пустоваров Владимир Алексеевич, Кортюв Всеволод Семенович

Уральский государственный технический университет – УПИ

Зацепин Анатолий Федорович, к.т.н

alekc2k@mail.ru

Характерной тенденцией современной физики твердого тела является возрастание интереса к структурно-чувствительным свойствам диэлектрических наноструктур. Диоксид кремния играет важную роль в оптике, интегральной оптике, электронике и микроэлектронике. Функциональные характеристики элементов различных устройств на основе SiO_2 существенно зависят от присутствия в его структуре собственных фоточувствительных дефектов. Между тем, многие вопросы, касающиеся свойств дефектов в наноматериалах, до сих пор остаются нерешенными. В частности, детального изучения требуют механизмы релаксации возбужденных состояний вакансионных дефектов в наноструктурном SiO_2 .

С целью получения информации об особенностях релаксационных процессов были выполнены исследования время-разрешенных спектров фотолюминесценции

(ФЛ) при селективном возбуждении синхротронным излучением на экспериментальной станции SUPERLUM лаборатории HASYLAB, Гамбург. Указанные спектры измеряли при температуре жидкого гелия в двух временных окнах шириной $\Delta t_1 = 14$ нс (быстрый компонент) и $\Delta t_1 = 115$ нс (медленный компонент), задержанных относительно начала импульса возбуждения на время $\delta t_1 = 1.9$ нс и $\delta t_1 = 46$ нс, соответственно. Одновременно с этим регистрировали полную (без временного разрешения) интенсивность люминесценции (стационарная фотолюминесценция). В качестве объекта исследования были использованы наноструктурные аморфные образцы SiO_2 , изготовленные путем пиролиза кремнеорганических соединений. Эталонном сравнения являлось кварцевое стекло марки КВ. Для изучения безызлучательных релаксационных процессов дополнительно исследовались спектры фотостимулированной электронной эмиссии (ФСЭЭ), которые были получены на экспериментальной установке для фотоэмиссионных исследований в вакууме 10^{-4} Па.

Предварительные измерения ФЛ наноструктурного SiO_2 показали, что наиболее интенсивная люминесценция возбуждается излучением с энергией 6.5 эВ. Как видно из рис. 1, спектры ФЛ при возбуждении излучением указанной энергии содержат три полосы с максимумами при 2.1, 2.9 и 4 эВ. Полоса 4 эВ характеризуется наносекундным кинетическим диапазоном ($\tau = 4.2$ нс), а полоса 2.9 эВ микросекундной кинетикой. В спектрах возбуждения люминесценции 4 эВ (рис.2) наблюдаются три полосы 5.19, 6.23 и 7.3 эВ, которые характеризуются наносекундной кинетикой. При регистрации люминесценции 2.9 эВ спектр возбуждения имеет аналогичный вид, однако все максимумы характеризуются микросекундной кинетикой. В спектрах люминесценции кварцевого стекла наблюдаются аналогичные полосы ФЛ 3.1 и 4.3 эВ, связанные с максимумами возбуждения 5.15, 6.5 и 7.5 эВ. Вместе с тем, если в наноструктурном SiO_2 доминирует полоса 6.23 эВ, то в кварцевом стекле наиболее интенсивной является максимум 7.5 эВ.

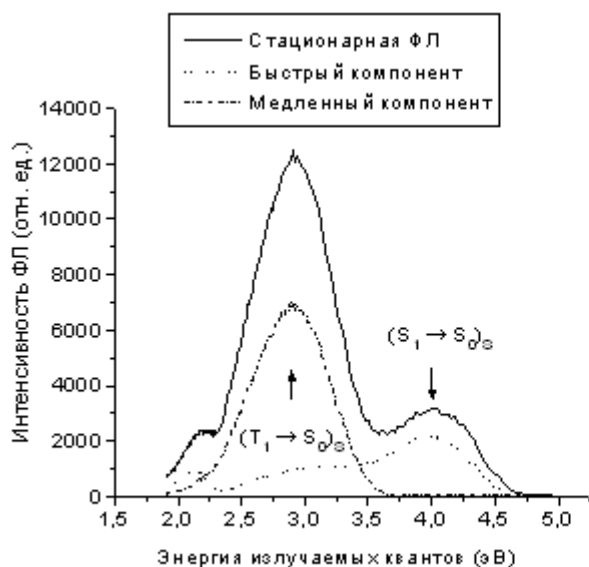


рис. 1

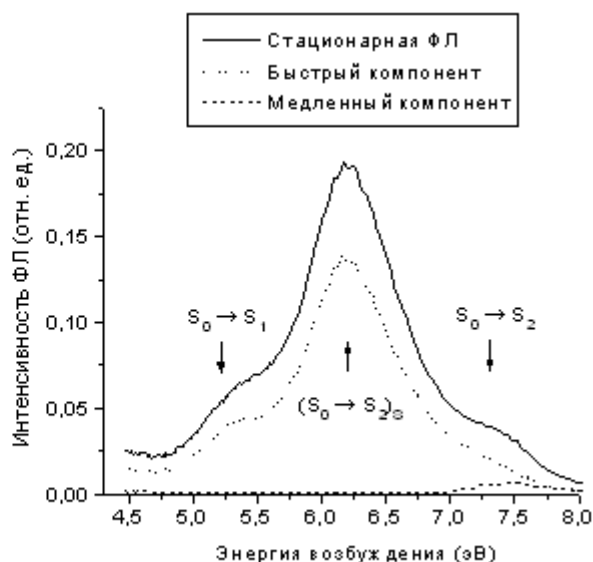


рис. 2

Согласно [1], полосы ФЛ 3.1 и 4.3 эВ могут быть интерпретированы как триплет-синглетные ($T_1 \rightarrow S_0$) и синглет-синглетные ($S_1 \rightarrow S_0$) излучательные переходы в диамагнитных кислородно-дефицитных V_2 -центрах (ДКДЦ). Полоса возбуждения

5.15 эВ соответствует оптическим переходам $S_0 \rightarrow S_1$, а полоса 7.5 эВ – переходам $S_0 \rightarrow S_2$ на более высокие энергетические состояния указанных центров. Анализ спектров наноструктурного SiO_2 (рис. 1 и рис. 2) дает основание считать, что наблюдаемые полосы ФЛ и возбуждения имеют природу, аналогичную природе полос в спектрах кварцевого стекла. При этом полоса возбуждения 6.23 эВ, доминирующая в спектрах нано- SiO_2 , обусловлена переходами $S_0 \rightarrow S_2$ в ДКДЦ поверхностного типа.

В спектрах ФСЭЭ нано- SiO_2 наблюдаются полосы объемных и поверхностных кислородно-дефицитных центров B_2 (5.0 эВ), E_2' (5.55 эВ), E_1' (5.81 эВ) и $E'_s(1)$ (6.3 эВ). Центры семейства E' относятся к нелюминесцирующим дефектам. В отличие от них, B_2 -центры участвуют как в люминесценции, так и в электронной эмиссии.

Таким образом, полученные результаты показывают, что для ДКДЦ в наноструктурном SiO_2 существует три параллельных канала релаксации: электронные переходы с излучением квантов света, внутрицентровые безызлучательные переходы и ионизация возбужденных состояний. Отличительной особенностью наноструктурного состояния является повышенная концентрация дефектов поверхностного типа.

Список публикаций:

[1] L.N.Skuja. *Optically active oxygen-deficiency-related centers in amorphous silicon dioxide* // *J. Non-Crystalline Solids*. 1998. V.239. P.16-48.

Анализ спектра высокого разрешения полосы ν_1 молекулы PHD_2

Чудинова Татьяна Дмитриевна

Томский Государственный Университет

Бехтерева Елена Сергеевна к.ф. - м. н

CTD@mail2000.ru

Молекула фосфина PH_3 , а также ее дейтерезамещенные модификации представляют интерес для спектроскопического изучения по ряду причин. С одной стороны, фосфин легкая и простая многоатомная молекула и, как следствие, рассматривается как хороший тестовый объект в анализе различных эффектов, теоретических моделях и методах. С другой стороны, молекула фосфина представляет практический интерес для решения задач астрофизики [1].

Эта работа является продолжением спектроскопического исследования дейтерированных изотопов фосфина и просвещена анализу полосы пятого обертона, ν_1 . Спектр полосы ν_1 был зарегистрирован в лаборатории физики университета г. Лилль (Франция) с использованием титанового лазерного спектрометра: сапфировый круглый лазер (модель 899-29, Когерентный). Спектр поглощения в диапазоне $12550\text{—}12770\text{ см}^{-1}$ был зарегистрирован при комнатной температуре, с давлением 113 hPa. Точность определения положения линии составляет $0,01\text{ см}^{-1}$. Наблюдаемая полоса была определена с помощью метода комбинационных разностей основного состояния. Параметры основного состояния были взяты из [2].

PHD_2 — плоский асимметричный волчок и группа симметрии PHD_2 изоморфна группе C_s . Как было ранее получено [3], частоты ν_1 ($n=1,2,\dots$) фундаментальных и обертоновых полос PHD_2 , связаны с колебательным возбуждением связи P-H. Состояния ($n00000$) имеют симметрию A' . В полосах такой симметрии возможны переходы b - и c -

типов. В этом изотопе фосфина гармоническая частота ω_1 наибольшая ($\omega_1=2324,765 \text{ см}^{-1}$), и величина ν_1 значительно отличается от других пяти частот, соответствующих экспериментальным результатам [3] и расчетам *ab initio* ($\nu_1=2324,77 \text{ см}^{-1}$, $\nu_2=1693,655 \text{ см}^{-1}$, $\nu_3=1688,634 \text{ см}^{-1}$, $\nu_4=979,976 \text{ см}^{-1}$, $\nu_5=912,670 \text{ см}^{-1}$, $\nu_6=767,607 \text{ см}^{-1}$) [4]. Анализ выполнен с использованием модели Гамильтониана изолированного колебательного состояния для описания вращательной структуры (600000) (А редукция).

$$\begin{aligned}
 H^{vv} = E^v + & \left[A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J_{xy}^2 - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \\
 & - \Delta_J^v J^4 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 + \\
 & + [J_{xy}^2, h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J^2 J_z^2 + h_J^v J^4] + L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^6 J^2 + L_{JK}^v J_z^4 J^4 + L_{JJK}^v J_z^2 J^6 + L_J^v J^6 + \\
 & + [J_{xy}^2, l_K^v J_z^6 + l_{KJ}^v J^4 J^2 + l_{JK}^v J_z^2 J^4 + l_J^v J^6] + P_K^v J_z^{10} + [J_{xy}^2, p_K^v J_z^8]
 \end{aligned} \quad (1)$$

где выполняется условие $B_y > B_x > B_z$; $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$, и $J^2 = \sum_{\alpha} J_{\alpha}^2$;

E – центр полосы;

A, B, C – вращательные постоянные;

$\Delta_K^v, \Delta_{JK}^v, \Delta_J^v, \delta_K^v, \delta_J^v$ – коэффициенты центробежного искажения четвертой степени;

$H_K^v, H_{KJ}^v, H_{JK}^v, H_J^v, h_K^v, h_{JK}^v, h_J^v$ – коэффициенты центробежного искажения шестой степени; и т.д.

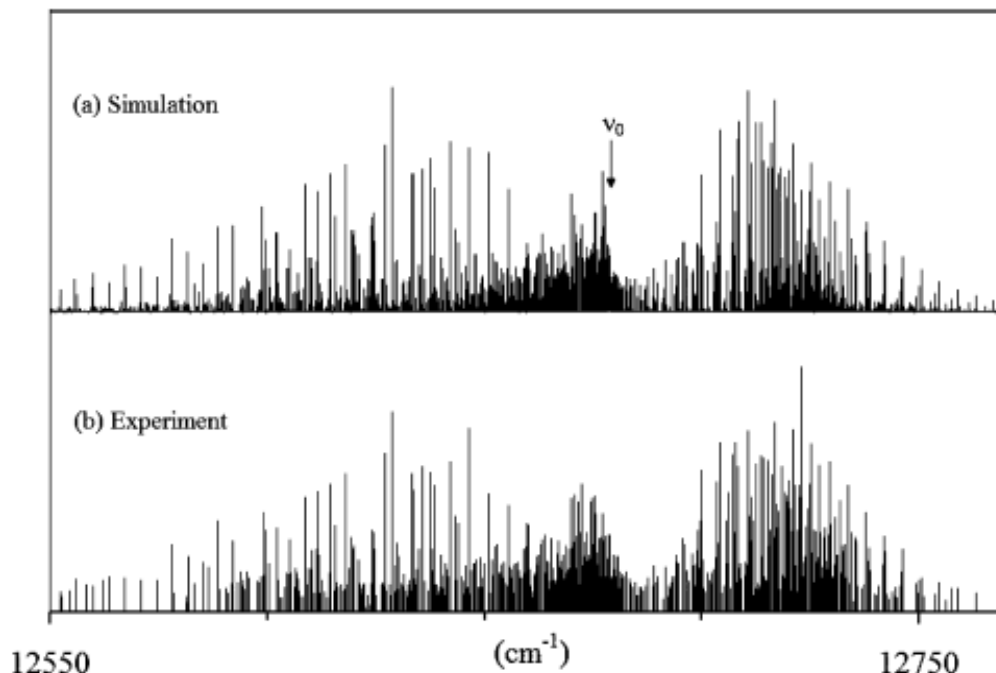


рис. 1. Воспроизведенный и экспериментальный спектры PHD₂.

Было проанализировано больше чем 600 переходов *b*- и *c*-типов с максимальными значениями квантовых чисел $J^{max}=20$ и $K_a^{max}=6$. Среднеквадратичное отклонение составило $0,007\text{см}^{-1}$ при числе параметров 23 и числе уровней 198. Воспроизведенный спектр представлен на (рис. 1).

Список публикаций

- [1] A.T. Tokunaga, R.F. Knacke, S.T. Ridgway, L. Wallace, *Astrophys.J.* 232 (1979) 603–615.
[2] O.N. Ulenikov, H. B.Furger, W. Jerzembeck, G.A. Onopenko, E.S.Bekhtereva, O.L. Petrunina, *J. Mol. Struct.* 599 (2001) 225–237.
[3] O.N. Ulenikov, O.L. Petrunina, E.S. Bekhtereva, H. B.Furger, W.Jerzembeck, *J. Mol. Spectrosc.* 215 (2002) 85–92.
[4] Dong Wang, Qiang Shi, Qing-Shi Zhu, *J. Chem. Phys.* 112 (2000)9624–9631.

Люминесценция центров Cr^{3+} при возбуждении в области края фундаментального поглощения в сложных бериллийсодержащих

Шлыгин Евгений Сергеевич

Иванов Владимир Юрьевич, Пустоваров Владимир Алексеевич

Уральский государственный технический университет - УПИ

Кружалов Александр Васильевич, д.ф-м.н

shlygin@dpt.ustu.ru

В целях изучения эволюции электронных возбуждений (ЭВ) в широкощелевых диэлектриках принципиально важным является установление природы наблюдаемых свечений и механизмов передачи энергии к центрам свечения. В работе исследовались спектры возбуждения люминесценции (СВЛ) и спектры люминесценции (СЛ) александрита ($\text{Al}_2\text{BeO}_4\text{-Cr}^{3+}$) и изумруда ($\text{Al}_2\text{Be}_3\text{Si}_6\text{O}_{18}\text{-Cr}^{3+}$) при возбуждении синхротронным излучением. Метод ориентационной оптической и люминесцентной спектроскопии с временным разрешением реализован на станции SUPERLUMI (лаборатория HASYLAB, DESY, Гамбург).

Для возбуждения люминесценции в области 4-35 eV использовался 2 м вакуумный монохроматор со сменными решетками (спектральное разрешение 3.2 или $25 \cdot 10^{-3}$ eV для области энергий ~ 10 eV). СВЛ нормированы на равное число падающих на кристалл фотонов с применением салицилата натрия. СЛ в области 2.0-6.0 eV анализировались монохроматором В&М (схема Czerny-Turner) и фотоэлектронным умножителем (ФЭУ) R2059 (Hamamatsu). СЛ и СВЛ были измерены как для время-интегрированной люминесценции, так и для люминесценции, детектируемой во временных окнах (ширина временного окна Δ_t), коррелированных относительно возбуждающего импульса СИ (задержка от начала импульса СИ δ_t). Установка параметров временных окон ($\delta_{t1}=2.1$ ns, $\Delta_{t1}=14.1$ ns и $\delta_{t2}=46$ ns, $\Delta_{t2}=155.1$ ns) определялась форматом кинетики затухания люминесценции позволяла измерять СЛ и СВЛ в т.н. быстром и медленном временных окнах. Спектры примесной люминесценции кристаллов, активированных хромом, измерены с разрешением менее 1 Å с применением охлаждаемой CCD-камеры и монохроматора ARC Spectro Pro-380i.

На время-интегрированных СВЛ $\text{Al}_2\text{BeO}_4\text{-Cr}^{3+}$ и $\text{Al}_2\text{Be}_3\text{Si}_6\text{O}_{18}\text{-Cr}^{3+}$ (рис.1) наблюдаются широкая полоса с максимумом в области 6,8 эВ, а также менее выраженные особенности в области края фундаментального поглощения (КФП) матрицы. Доминирующая в СВЛ полоса 6.8 эВ имеет одинаковое спектральное

положение в обоих кристаллах. Ее визуально большая полуширина для $\text{Al}_2\text{Be}_3\text{Si}_6\text{O}_{18}\text{-Cr}^{3+}$ может быть обусловлена тем, что к ней непосредственно прилегает другая полоса, проявляющаяся в виде плеча 7.8 эВ и расположенная вблизи КФП матрицы. Для кристалла $\text{Al}_2\text{BeO}_4\text{-Cr}^{3+}$ похожая особенность также имеется, она проявляется в виде плеча в области 9 эВ. Тот факт, что доминирующая в СВЛ обоих кристаллов полоса имеет одинаковое спектральное положение и близкую полуширину может свидетельствовать о том, что данная особенность спектра связана с внутрицентровым возбуждением уровней иона хрома, причем окружение примесного иона в обоих кристаллах совпадает. Для анализа более высокоэнергетических особенностей СВЛ приведены полученные ранее спектры возбуждения собственной люминесценции кристаллов Al_2BeO_4 и $\text{Al}_2\text{Be}_3\text{Si}_6\text{O}_{18}$, в которых максимум возбуждения расположен в области КФП матриц. Особенности СВЛ 7.8 и 9 эВ в кристаллах с примесью хрома, расположенные ниже КФП на несколько десятых долей эВ, традиционно интерпретируются в широкощелевых кристаллах оксидов обусловленные связанными на примеси экситонами большого радиуса. Конечная эффективность возбуждения свечения R-линий наблюдается и в области выше КФП, где создаются отдельные электрон-дырочные пары. Таким образом, впервые экспериментально установлено, что в кристаллах $\text{Al}_2\text{BeO}_4\text{-Cr}^{3+}$ и $\text{Al}_2\text{Be}_3\text{Si}_6\text{O}_{18}\text{-Cr}^{3+}$ реализуются следующие механизмы передачи энергии центру люминесценции: внутрицентральной, экситонный и за счет свободных носителей заряда.

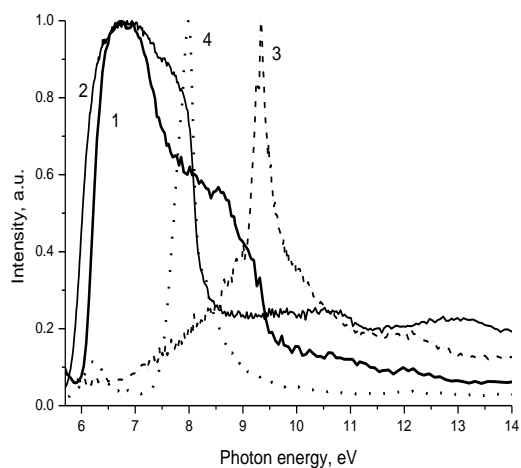


рис.1. Время-интегрированные спектры возбуждения люминесценции $E_{em}=1.82$ eV (1,2) и $E_{em}=3.44$ eV (3,4) для кристаллов $\text{Al}_2\text{BeO}_4\text{-Cr}^{3+}$ (1), $\text{Al}_2\text{Be}_3\text{Si}_6\text{O}_{18}\text{-Cr}^{3+}$ (2), Al_2BeO_4 (3), $\text{Al}_2\text{Be}_3\text{Si}_6\text{O}_{18}$ (4).

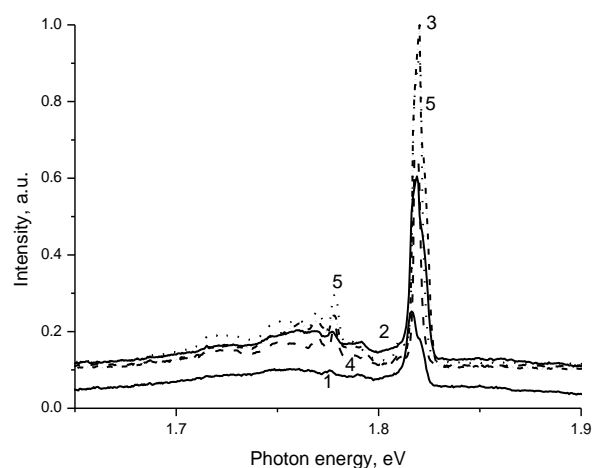


рис.2. Спектры люминесценции $\text{Al}_2\text{BeO}_4\text{-Cr}^{3+}$ измеренные с применением охлаждаемой CCD-камеры при $T=300\text{K}$ (1), $T=200\text{K}$ (2), $T=100\text{K}$ (3), $T=17\text{K}$ (4), $T=16\text{K}$ (5)

На спектрах люминесценции александрита (рис.2), измеренных с применением охлаждаемой CCD-камеры при уменьшении температуры от 300К до 100К виден при 1,82 эВ известный дублет R-линий хрома, связанных с внутрицентровыми переходами. Следует отметить, что по мере охлаждения интенсивность обеих линий дублета растет и их спектральное положение смещается в сторону более высоких энергий. Впервые обнаружено, что при температурах ниже 100К одна из линий дублета (более высокоэнергетическая) не проявляется. Это может быть связано с существованием барьера для заселения одного из возбужденных уровней, с которого осуществляется

переход в основное состояние. В области от 1,7 эВ до 1,79 эВ, по-видимому, наблюдаются многочисленные N-линии, также наблюдавшиеся ранее в спектрах фотолюминесценции берилла с хромом. Природа этих линий дискутируется. Они могут быть связаны с фононными повторениями R-линий, либо с концентрационными эффектами, часть линий – с взаимодействием димеров с мономерами.

Работа выполнена при поддержке Уральского НОЦ «Перспективные материалы» (Award No. REC-005 (grant EK-005-X1) of the Civilian Research & Development Foundation (CRDF)) и РФФИ (грант 02-02-16322).