



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 15 за 2022 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

**В.М. Каневский, И.А. Тараканов,
В.А. Федоров**

**Математическое
моделирование
радиационной проводимости
в сапфире с учетом электрон-
фононного взаимодействия**

Статья доступна по лицензии
[Creative Commons Attribution 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Каневский В.М., Тараканов И.А., Федоров В.А. Математическое моделирование радиационной проводимости в сапфире с учетом электрон-фононного взаимодействия // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 15. 20 с.
<https://doi.org/10.20948/prepr-2022-15>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2022-15>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

В.М.Каневский, И.А.Тараканов, В.А.Федоров

**Математическое моделирование
радиационной проводимости в сапфире
с учетом электрон-фононного
взаимодействия**

Москва — 2022

Каневский В.М., Тараканов И.А., Федоров В.А.

Математическое моделирование радиационной проводимости в сапфире с учетом электрон-фононного взаимодействия

Построена математическая модель радиационной проводимости в кристаллическом сапфире при воздействии рентгеновского излучения. Модель состоит из кинетических уравнений для фотонов, быстрых электронов, электронов проводимости и из самосогласованных уравнений Максвелла. Рассчитаны частоты рассеяния электронов проводимости на акустических и оптических фононах. Модель верифицирована путем расчета тока утечки в сапфировом детекторе и сравнением тока с экспериментальными данными. Проведен анализ рассчитанных физических величин и принятых в ходе расчета приближений.

Ключевые слова: математическая модель, сапфир, радиационная проводимость, частоты рассеяния, электрон-фононное взаимодействие

Kanevskiy V.M., Tarakanov I.A., Fedorov V.A.

Mathematical model of radiation-induced conductivity in sapphire with electron-phonon interaction

The mathematical model of radiative conductivity in crystalline sapphire under the action of X-rays is constructed. The model consists of kinetic equations for photons, fast electrons and conduction electrons and self-consistent Maxwell equations. The frequencies of conduction electrons scattering by acoustic and optical phonons are calculated. The model was verified by calculating the leakage current in the sapphire detector and comparing the current with experimental data. The analysis of the calculated physical quantities and the approximations adopted in the course of the calculation is carried out.

Key words: mathematical model, sapphire, radiation conductivity, scattering frequencies, electron-phonon interaction

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №20-21-00068 в части расчета проводимости приповерхностных слоев сапфира при воздействии мощных потоков мягкого рентгеновского излучения и при поддержке РФФИ проекта № 20-01-00419 в части построения математической модели радиационной проводимости в сапфире.

Введение

В последнее время большой интерес вызывает использование диэлектриков с большой шириной запрещенной зоны для регистрации мощного рентгеновского излучения. В предыдущей работе [1] исследовалось воздействие мягких рентгеновских квантов установки Ангара-5-1 на кварцевый датчик. Была построена математическая модель радиационной проводимости в кристаллическом диоксиде кремния. Рассчитан ток утечки в кварцевом детекторе, и этот ток сравнивался с экспериментальными данными. Хорошее совпадение расчетных и экспериментальных результатов позволило применять разработанные математические модели для моделирования радиационной проводимости в широкозонных диэлектриках при воздействии мощного мягкого рентгеновского излучения.

Данная работа посвящена построению математической модели радиационной проводимости в сапфире и верификации модели путем сравнения рассчитанного тока в приповерхностном слое детектора с экспериментальными данными, полученными на установке Ангара-5-1. Математическая модель предполагает совместное решение кинетических уравнений для рентгеновских квантов, фотоэлектронов, электронов проводимости и дырок валентной зоны с самосогласованными уравнениями Максвелла, в которые вместо стороннего тока вторичных носителей заряда входит ток радиационной проводимости. Радиационная проводимость рассчитывается исходя из концентрации носителей заряда, частоты рассеяния и массы электропроводности. Новизна данной работы состоит в определении плотностей состояний, эффективных масс и масс электропроводности, групповых скоростей и частот рассеяния на фононах для носителей заряда в сапфире.

Математическая модель генерации и кинетики носителей заряда в сапфире

В математической модели радиационной проводимости движение и рассеяние электронов проводимости и дырок валентной зоны описывается полными кинетическими уравнениями. Эти уравнения должны учитывать рассеяние электронов проводимости или дырок валентной зоны на дефектах решетки [2]

$$\frac{\partial f_{e,h}}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_{e,h}}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{H}] \right) \frac{\partial f_{e,h}}{\partial \mathbf{p}} = I[f, f] + Q_{e,h}, \quad (1)$$

где c – скорость света, \mathbf{E} – напряженность электрического поля, \mathbf{H} – напряжённость магнитного поля.

Правая часть уравнения (1) описывает изменение функции распределения за счет рассеяния. Здесь $I[f, f]$ – квадратичный оператор, действующий на

функцию распределения по переменной квазиимпульса. Интеграл рассеяния определяется через скорости перехода из состояния \mathbf{p}' в состояние \mathbf{p} и обратно.

Скорости прямой и обратной реакции подчиняются принципу детального равновесия

$$\frac{W(\mathbf{p}', \mathbf{p})}{W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')} = \exp \left\{ \frac{\varepsilon(\mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{p})}{k_B T} \right\}. \quad (2)$$

Электромагнитное поле в (1) в сапфировом детекторе создается движением всех заряженных частиц: свободных электронов и носителей заряда в кристалле. Уравнения (1) дополняются уравнениями Максвелла с соответствующими начальными условиями [3]. Прямое моделирование токов электронов проводимости и дырок валентной зоны как стороннего тока в уравнениях Максвелла не представляется возможным. Этот ток можно выразить как $\sigma \mathbf{E}$ - ток радиационной проводимости. Соответственно, уравнения Максвелла можно записать как [4]

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \frac{\varepsilon}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi\sigma}{c} \mathbf{E} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, & \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \\ \mathbf{j} &= \sigma \mathbf{E} + \mathbf{j}_0 + \mathbf{j}_{ext}. \end{aligned} \quad (3)$$

В этих формулах σ — проводимость электрон-дырочной плазмы,

$$\sigma = en_e \mu_e + en_h \mu_h, \quad (4)$$

e — заряд электрона, n_e, n_h — концентрации, μ_e, μ_h — подвижности электронов и дырок. При вычислении подвижностей носителей заряда с энергией ε через время релаксации учитывались процессы рассеяния на акустических и оптических фононах и рассеяние на заряженных примесях.

Первое слагаемое в правой части (3) описывает плотность тока электронов проводимости и дырок. Свободные электроны генерируют в кремнии плотность тока \mathbf{j}_0 . Она, также как и источник неравновесных носителей Q , вычисляется как функционал функции распределения свободных электронов.

Неравновесное распределение избыточных носителей заряда в кварце при воздействии рентгеновского излучения образуется вследствие переноса и рассеяния фотоэлектронов. Этот процесс описывается классическими уравнениями переноса фотонов и электронов.

Учитываются следующие типы столкновений квантов рентгеновского излучения с атомами вещества: когерентное рассеяние и фотопоглощение. Рассматриваются следующие процессы взаимодействия электронов с

веществом: упругое рассеяние на атомах вещества, возбуждение атомов и ударная ионизация [6].

В качестве алгоритма решения кинетических уравнений для электронов проводимости и дырок валентной зоны предложен статистический метод частиц, который совмещает решение уравнений движения между актами рассеяния и прямое стохастическое моделирование столкновений [7].

Описание эксперимента

Построенная математическая модель радиационной проводимости в сапфире требует верификации путем сравнения расчетных и экспериментальных данных. Эксперименты проводились на термоядерной установке Ангара-5-1[8]. Геометрия установки с указанием расположения диагностического оборудования приведена на рис. 1. Подробное описание установки приведено в [1].

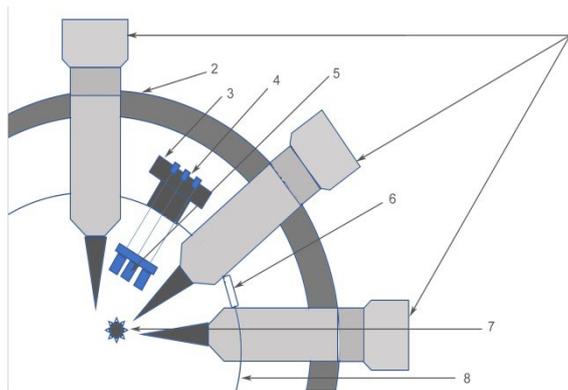


Рис. 1. Геометрия установки: 1. Генератор импульсного напряжения с подводящей линией (8 шт., расположенных равномерно по окружности); 2. Бетонная защита от излучения (толщина ~ 1 м); 3. Диагностический фланец; 4. Вакуумные разъемы; 5. Диэлектрические датчики; 6. Область излучения; 7. Плазменный источник РИ; 8. Стенка вакуумной камеры (диаметр 4 метра, высота 2,5 метра).

Основные характеристики рентгеновского пучка (мощность, спектральный состав) при фиксированном токе установки определяются конструкцией и материалом токовой нагрузки [9].

Образцом служит пластинка сапфира толщиной 0,5 мм и диаметром 18 мм. Плоскость детектора ориентирована по нормали к оптической оси (ось третьего порядка). Контакты обеспечиваются Au покрытием толщиной порядка 300 нм. Переднее покрытие имеет форму кольца с внутренним отверстием, обеспечивающим облучение поверхности образца диаметром 6 мм, и создает надежный контакт с корпусом установки и оплеткой коаксиального кабеля (длина ~ 100 м). Сигнальный отклик регистрируется осциллографом TDS 2024

(полоса частот — 200 МГц). Спектр рентгеновского излучения и его временная форма, мощность импульса приведены в предыдущей работе [1].

Физические параметры математической модели

Времена релаксации (частоты рассеяния) электрон-фононного взаимодействия играют ключевую роль в расчетах подвижности носителей заряда в полупроводниках и диэлектриках [10], [11]. Следовательно, без рассчитанных энергетических зависимостей частот рассеяния невозможно посчитать радиационную проводимость в сапфире. Практический расчет времен релаксации требует задания большого количества параметров (констант потенциалов деформации), которые фактически можно найти только из экспериментальных данных. Важную роль для расчета частот рассеяния играет плотность энергетических состояний. Квазиклассическая плотность энергетических состояний, соответствующая приближению параболической зоны, далека от истинной плотности состояний. По этой причине желательно иметь плотность энергетических состояний как функцию энергии, например, рассчитанную по методу Хартри-Фока, как это было сделано в работе [12, плотность кремний и диоксид].

В рамках зонной теории состояния электрона классифицируются его квазиимпульсом \mathbf{p} , который пропорционален волновому вектору $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. При заданном \mathbf{k} уравнение Шредингера имеет бесконечное число решений, отвечающих бесконечному числу различных дискретных уровней энергии. Соответственно, функцию $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$ будем называть законом дисперсии. Закон дисперсии $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$ дает полное описание поведения электрона. По очевидным причинам универсальный вид дисперсионного соотношения установить нельзя. Тем не менее из модельных дисперсионных соотношений получают ряд количественных характеристик реальных кристаллов - скорость и эффективную массу электрона в веществе; плотность электронных (дырочных) состояний; распределение электронов (дырок) по энергиям. Используя рассчитанные характеристики кристалла и экспериментально измеренные константы электрон-фононного взаимодействия можно рассчитать частоты рассеяния электронов на оптических и акустических фононах.

Текущее состояние электрона определяется его квазиимпульсом. На практике гораздо удобнее классифицировать электроны не по квазиимпульсам, а по их энергиям. Для описания числа состояний вводится функция $g(\varepsilon)$ — плотность состояний, т.е. $g(\varepsilon)d\varepsilon$ есть число квантовых состояний в единице объема в заданном интервале энергий $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$.

На рис. 2 показана плотность состояний $g(\varepsilon)$ в сапфире, рассчитанная по методу функционала плотности (DFT), по сравнению с данными по кварцу.

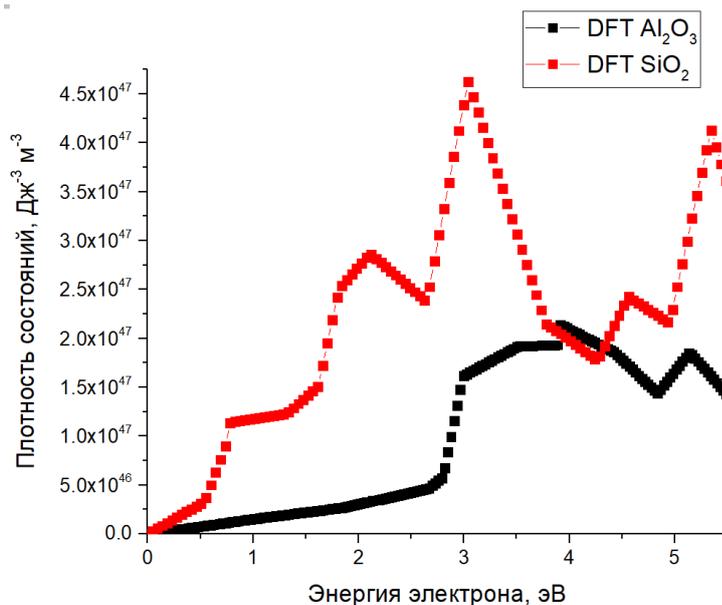


Рис. 2. Плотность состояний электронов в Al_2O_3 по сравнению с SiO_2 .

Зависимость эффективной массы от энергии электрона в сапфире можно найти, приравняв квазиклассическую плотность состояний к плотности состояний $g(\varepsilon)$:

$$\frac{m_e(\varepsilon)}{m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi^2 g(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}} \right)^{2/3}. \quad (5)$$

Тогда для энергии и групповой скорости носителей заряда сохраняются простые соотношения

$$\varepsilon_e = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e(\varepsilon)}. \quad (6)$$

Соотношения (5), (6) значительно упрощают вычисления по методу частиц, так как явным образом определяют связь энергии с квазиимпульсом, и, что еще более важно, однозначно связывают потери квазиимпульса с потерями энергии при неупругом рассеянии носителей заряда.

Сравнения рассчитанных энергетических зависимостей эффективной массы и групповой скорости в сапфире и диоксиде кремния приведено на рис. 3 и рис. 4.

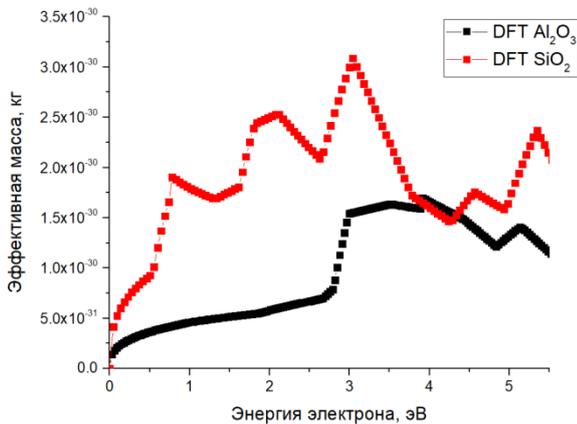


Рис. 3. Эффективная масса электронов, рассчитанная по плотности состояний, в Al₂O₃ по сравнению с SiO₂.

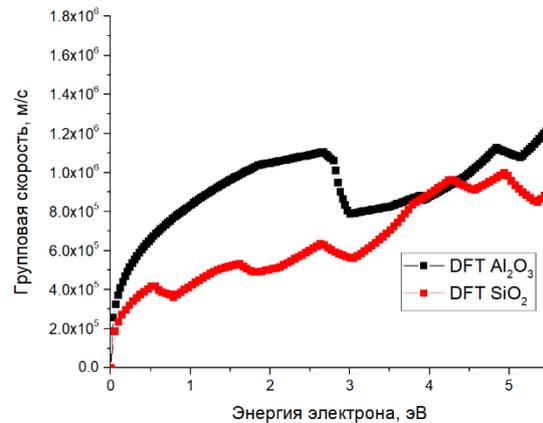


Рис. 4. Групповая скорость электронов, рассчитанная по плотности состояний, в Al₂O₃ по сравнению с SiO₂.

Рассчитанной эффективной массы электрона проводимости недостаточно для моделирования движения частицы в электрическом поле и расчета подвижности и проводимости. Для этого нужно определить массу электропроводности. В Таблице 1 [13] приведено отношение масс электропроводности электрона и дырки в сапфире к массе покоя электрона. Можно сделать вывод о том, что в поперечных направлениях (относительно оптической оси) дырка практически не движется. Вообще в диэлектриках с большой шириной запрещенной зоны дырку валентной зоны некорректно рассматривать как в [2]. Поэтому при расчете частот рассеяния мы пренебрежем дырками валентной зоны и будем рассматривать только электроны проводимости.

Таблица 1 – Соотношения массы электропроводности электронов и дырок

Направление	m_h/m_0	m_e/m_0
Г-М	6.2	0.39
Г-А	0.36	0.41
Г-К	6.4	0.39

Каждая частица характеризуется своим (не зависящим от других частиц) временем свободного пробега $\tau(\varepsilon)$

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} = \sum_i \frac{1}{\tau_i(\varepsilon)},$$

где суммирование идет по всем процессам, включая рекомбинацию. Интеграл рассеяния включает в себя следующие процессы:

упругое рассеяние на акустических фононах (АС-фононы);

неупругое рассеяние на полярных оптических фононах (ЛО-фононы);
неупругое рассеяние на неполярных оптических фононах (ТО-фононы).

Приведем формулы для всех типов рассеяния, явно выделяя в них плотность состояний $g(\varepsilon)$ и термически усредненные числа заполнения фононов $N_{ph} = \kappa_B T / \hbar \omega$.

Рассеяние на АС-фононах. Потерями энергии электронов пренебрегаем, полагая $\hbar \omega_{ac} = 0$. Теория деформационного потенциала дает [3]

$$\frac{1}{\tau_{ac}(\varepsilon)} = \frac{3\sqrt{2}\pi C_1^2 \kappa_B T}{\rho \hbar c_s^2} g(\varepsilon),$$

где C_1 — деформационный потенциал ($C_1=19$ эВ в сапфире [14]), ρ — плотность вещества, c_s — скорость звука в данном веществе. Рассеяние изотропно по углам. На рис. 5 показано сравнение частоты рассеяния электронов на акустических фононах в диоксиде кремния и сапфире.

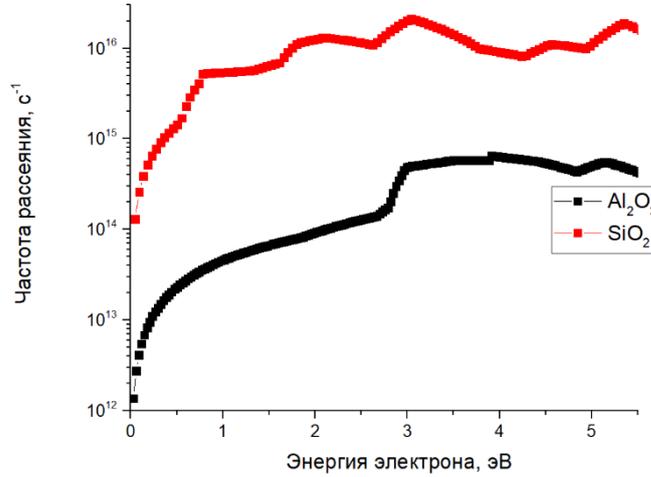


Рис. 5. Частота рассеяния на акустических фононах в Al₂O₃ по сравнению с SiO₂.

Рассеяние на ЛО-фононах. Изменение энергии электрона $\Delta\varepsilon = \hbar \omega_{LO}$. Теория Фрелиха дает [15], [16], [17]

$$\frac{1}{\tau_{LO}(\varepsilon)} = \frac{e^2 \hbar^2 \omega_{LO}}{16\pi^2 m_e \varepsilon} \chi g(\varepsilon) N_{ph} \ln \frac{1 + \sqrt{1 - \hbar \omega_{LO} / \varepsilon}}{1 - \sqrt{1 - \hbar \omega_{LO} / \varepsilon}},$$

где $\chi = 1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_0$, ε_∞ — динамическая диэлектрическая проницаемость, ε_0 — статическая диэлектрическая проницаемость вещества.

Сапфир имеет достаточно сложные фоновые дисперсионные зависимости. Это связано с нетривиальной кристаллической решеткой. На рис. 6 показана обратная кристаллическая ячейка сапфира.

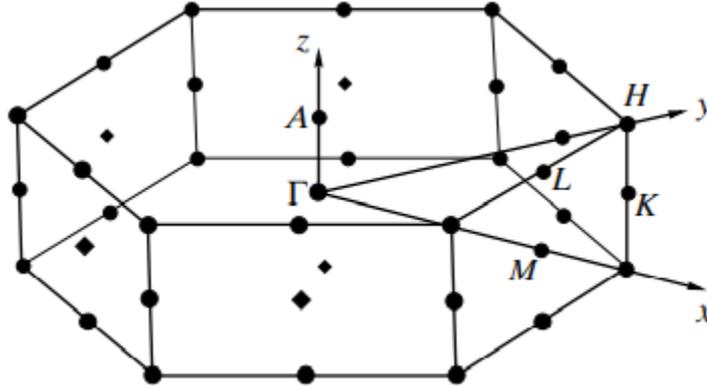


Рис. 6. Обратная кристаллическая ячейка α -Al₂O₃.
Направление А-Г соответствует оптической оси.

У сапфира есть шесть ветвей продольных и поперечных оптических фононов [18]. В табл. 2 приведены значения энергий ветвей продольных (LO) и поперечных (TO) оптических фононов. Обозначению Eu соответствует фонон, которому соответствует продольная волна (волна параллельная оптической оси кристалла). A2u обозначаются фононы с перпендикулярной относительно оси А-Г волной.

Таблица 2 – Энергия ветвей продольных и поперечных оптических фононов, мэВ

	TO	LO
Eu1	47.9325	48.1815
Eu2	54.6555	59.8845
Eu3	70.8405	78.3105
Eu4	78.8085	112.797
A2u1	49.4265	63.495
A2u2	72.459	109.6845

В сапфире согласно [18] статическая и динамическая диэлектрические проницаемости равны $\epsilon_0 = 9.39$, $\epsilon_\infty = 3.07$ в поперечном направлении и $\epsilon_0 = 11.61$, $\epsilon_\infty = 3.07$ в продольном направлении.

На рис. 7 показаны энергетические зависимости частоты рассеяния электрона в сапфире на всех продольных оптических фоновых ветвях. На рис. 8 представлено сравнение суммарной по всем ветвям частоты рассеяния на продольных оптических фононах в сапфире и диоксиде кремния.

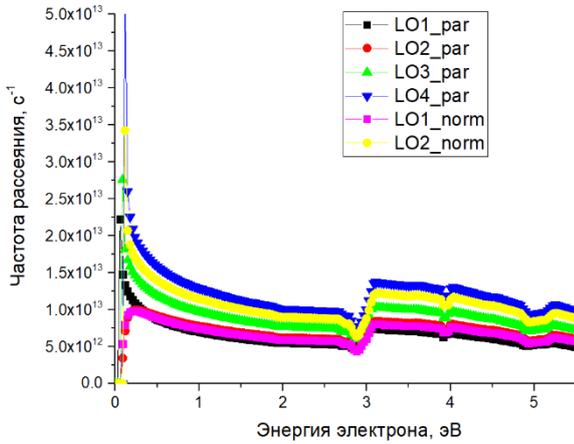


Рис. 7. Частота рассеяния на продольных оптических фононах в направлении оптической оси (par) и перпендикулярно ей (norm).

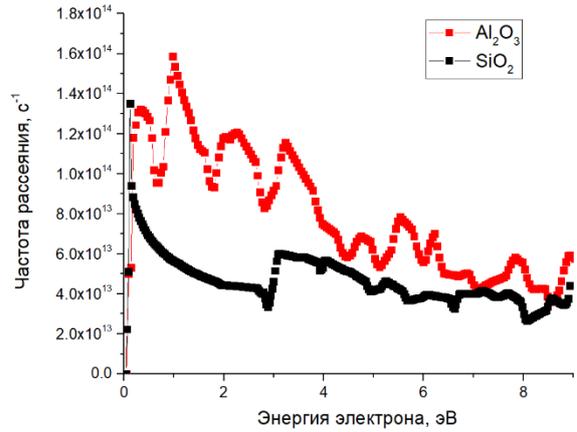


Рис. 8. Суммарная по всем ветвям частота рассеяния на продольных оптических фононах в Al_2O_3 по сравнению с SiO_2 .

Рассеяние на ТО-фононах. Изменение энергии электрона $\Delta\varepsilon = \hbar\omega_{\text{TO}}$. Теория деформационного потенциала дает [15]

$$\frac{1}{\tau_{\text{TO}}(\varepsilon)} = g(\varepsilon) \frac{\sqrt{2} \pi C_2^2 \hbar}{\rho \hbar \omega_{\text{TO}}} N_{\text{ph}} (1 - \hbar\omega_{\text{TO}}/\varepsilon)^{1/2}.$$

Здесь C_2 — константа деформационного потенциала, ρ — плотность вещества. Вероятность рассеяния не зависит от углов, поэтому формально рассеяние изотропно по углам.

На рисунке рис. 9 представлено сравнение суммарных по всем электронно-фононным взаимодействиям частот рассеяния в кремнии, диоксиде кремния и сапфире. Также на этом рисунке приведена зависимость суммарной частоты рассеяния для дырок в кремнии.

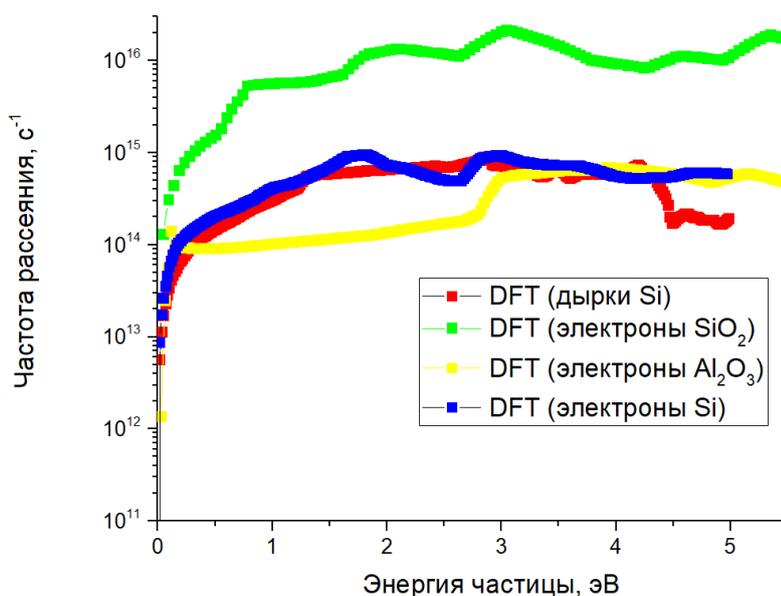


Рис. 9. Сравнение суммарной частоты рассеяния электронов и дырок в кремнии, электронов в диоксиде кремния и электронов в сапфире.

Результаты расчета

В предыдущих разделах представлена полная математическая модель радиационной проводимости в сапфире. Она основана на кинетических уравнениях для рентгеновских квантов, фотоэлектронов, электронов проводимости и дырок валентной зоны. Сила Лоренца в этих уравнениях рассчитывается из полной системы уравнений Максвелла. Приведены энергетические зависимости плотности состояний, эффективной массы, групповой скорости электронов в сапфире и частот электрон-фононного рассеяния. Набор зависимостей физических величин, необходимый для расчетов по полной модели, является неполным. Поэтому примем некоторые приближения, которые позволят рассчитать ток утечки в сапфировом детекторе под действием рентгеновского излучения установки Ангара-5-1:

1. Пренебрежем движением дырок, так как подвижность дырок в диэлектриках намного меньше подвижности электронов;
2. Примем, что генерация электронов в зоне проводимости равномерна по энергии;
3. Пренебрежем рассеянием на поперечных оптических фононах, так как константа деформационного потенциала остается неизвестной;
4. Примем, что функция выхода электронов проводимости, зависящая от напряженности электрического поля, совпадает с такой же функцией в диоксиде кремния [1].

Моделирование тока утечки в сапфировом детекторе, сравнение тока с экспериментальными данными и анализ рассчитанных физических величин позволит оценить правильность принятых приближений. Далее показаны

результаты расчета поглощенной дозы, концентрации электронов, проводимости, напряженности электрического поля и тока утечки. Облучаемая поверхность на графиках располагается при глубине $Z=1.35$ см.

Рассчитано пространственное распределение поглощенной дозы в сапфире. На рис. 10 показано сравнение поглощенной дозы в сапфире и кварце. Видно, что рентгеновское излучение установки Ангара-5-1 практически одинаково поглощается в приповерхностных слоях детекторов.

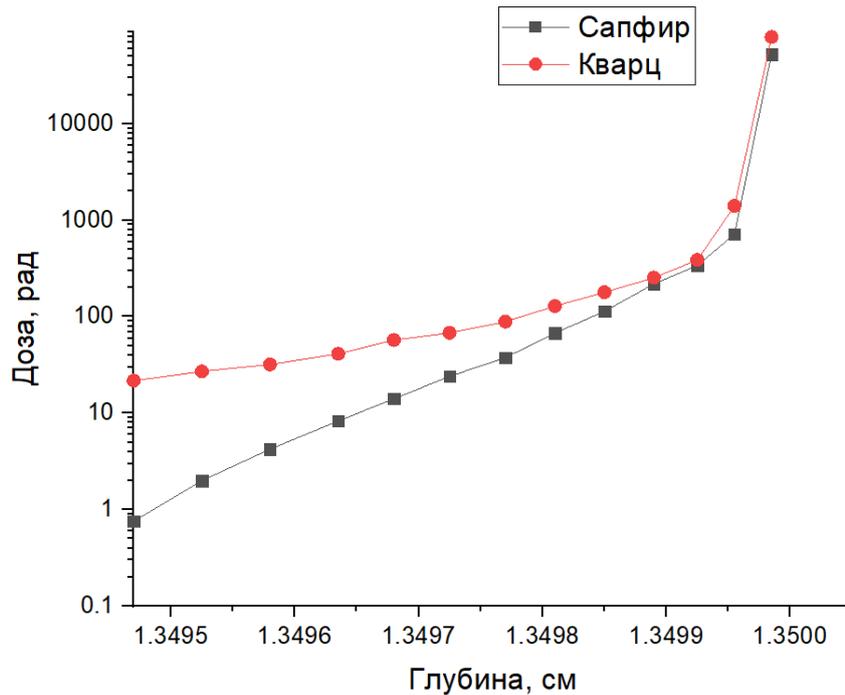


Рис. 10. Сравнение зависимостей поглощенной дозы по глубине в сапфире и кварце

На рис. 11 и 12 представлены временная и пространственная (по оптической оси кристалла) зависимости концентрации электронов проводимости. Также на рис. 12 показана аналогичная зависимость концентрации в кварце при таком же воздействии рентгеновского излучения.

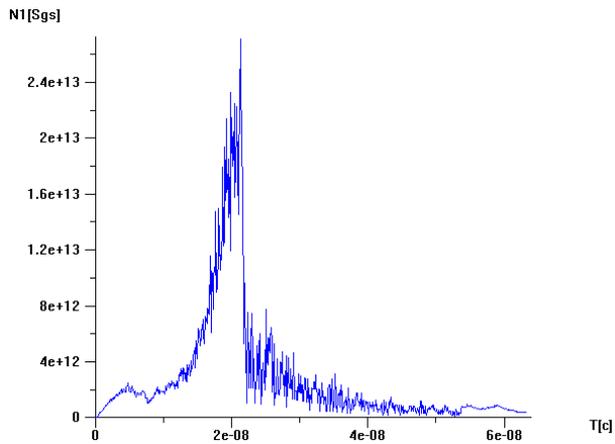


Рис. 11. Временная зависимость концентрации электронов в приповерхностной области сапфира

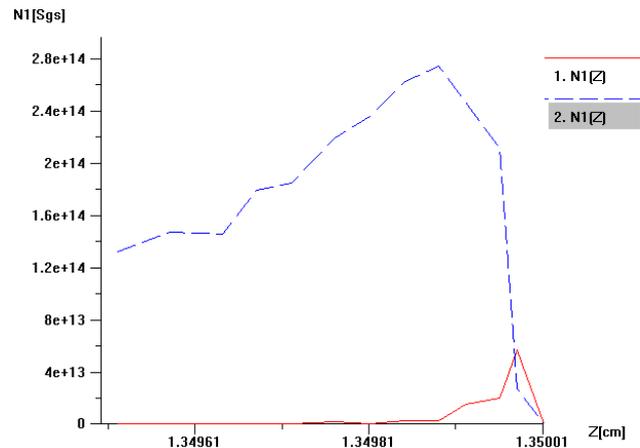


Рис. 12. Пространственное распределение концентрации электронов в сапфире (синяя линия) и кварце (красная линия) при $t = 21.3$ нс

На рис. 13 и 14 представлены временные и пространственные (по оптической оси кристалла) зависимости проводимости в сапфире и кварце.

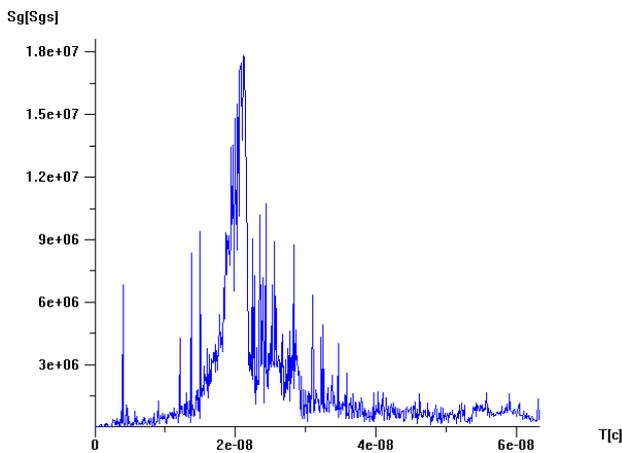


Рис. 13. Временная зависимость проводимости в приповерхностной области сапфира

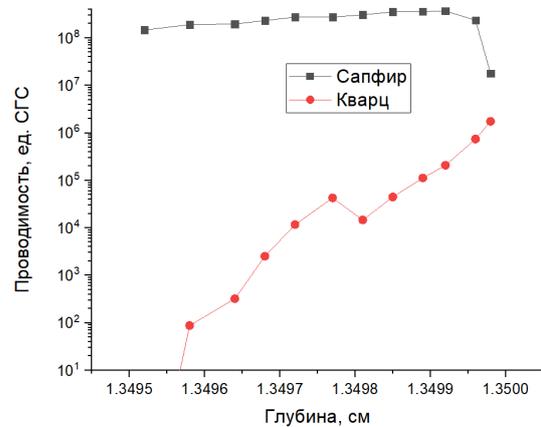


Рис. 14. Пространственное распределение проводимости в сапфире (черная линия) и кварце (красная линия) при $t = 21.3$ нс

На рис. 15 представлена временная зависимость напряженности электрического поля в приповерхностной области сапфира и кварца при одинаковых условиях облучения.

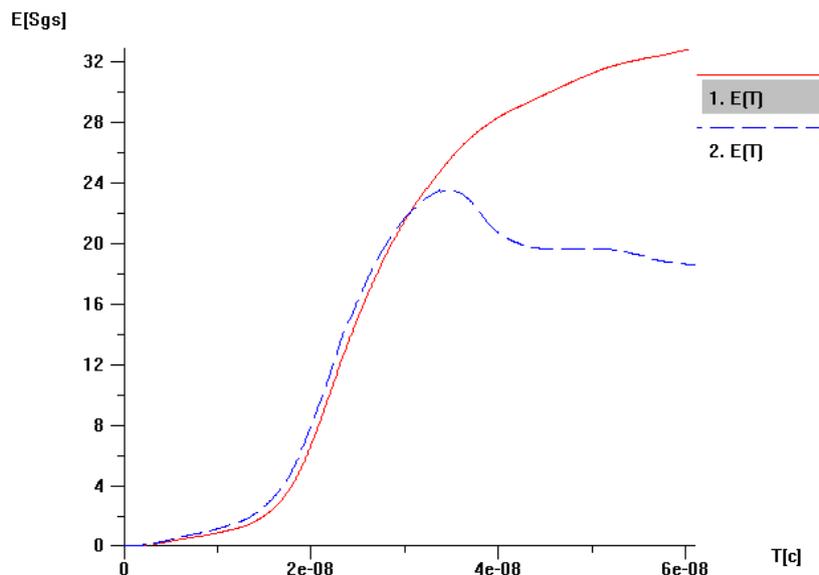


Рис. 15. Временная зависимость напряженности электрического поля в приповерхностном области сапфира

Из рис. 12 видно, что проводимость в сапфире больше, чем в кварце. Это связано с тем, что согласно (4) проводимость зависит от среднего времени релаксации. Время релаксации (обратная частота рассеяния) в сапфире больше, чем в кварце (рис. 9) из-за того, что в данном расчете мы пренебрегли рассеянием на поперечных оптических фононах. Распределения концентрации электронов и проводимости по глубине детектора сильно отличаются для кварца и сапфира. В кварце носители заряда из-за низкой проводимости и большой напряженности электрического поля быстрее вылетают из глубины. В сапфире же они накапливаются в глубине, и только вблизи поверхности детектора возникает достаточно большое электрическое поле, которое выбрасывает их из кристалла (рис. 15).

Несмотря на сильное различие поведения электронов проводимости внутри детектора, ток утечки в сапфире немного отличается от кварца (рис. 16). Это связано с тем, что ток утечки определяется через проводимость и напряженность электрического поля вблизи поверхности детектора.

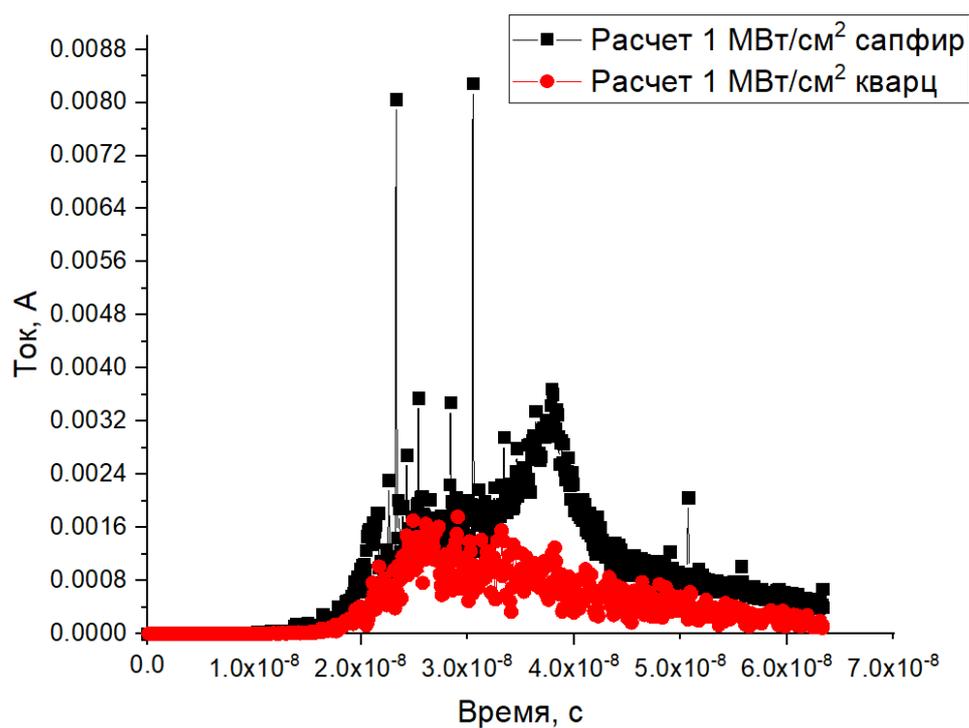


Рис. 16. Сравнение рассчитанного тока в сапфировом детекторе с экспериментальными данными

На рис. 17 показано сравнение расчетных и экспериментальных данных по току утечки в сапфировом детекторе под действием рентгеновского излучения установки Ангара-5-1. Сравнение показывает удовлетворительное совпадение расчетных и экспериментальных данных.

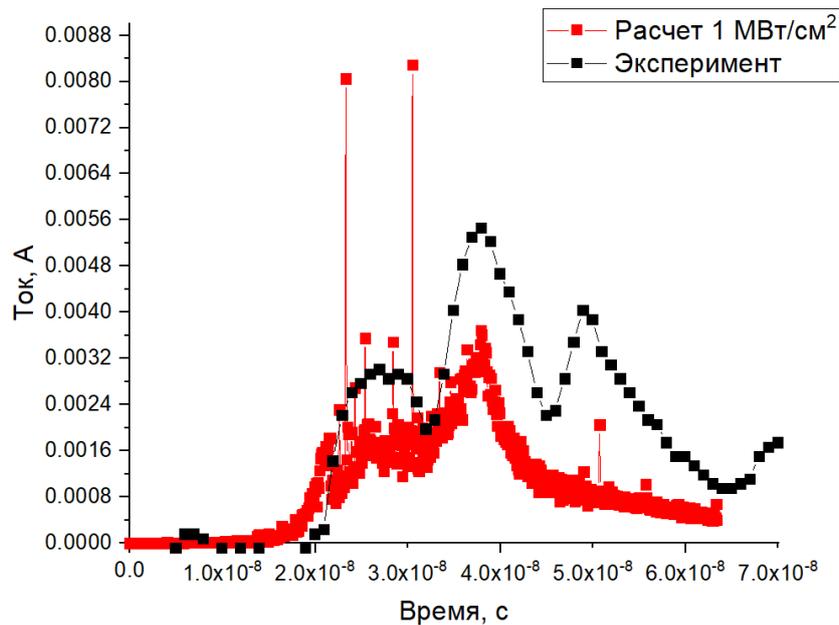


Рис. 17. Сравнение рассчитанного тока в сапфировом детекторе с экспериментальными данными

Заключение

Построена полная трехмерная математическая модель радиационной проводимости в кристаллическом сапфире. Модель основана на решении кинетического уравнения для электронов проводимости совместно с самосогласованными уравнениями Максвелла. Кинетические уравнения дополнены физическими величинами, характеризующими интеграл рассеяния: плотностью состояний, групповой скоростью, эффективной массой и массой электропроводности, а также частотами рассеяния электронов в сапфире. Источник электронов проводимости в кинетическом уравнении моделируется кинетическими уравнениями для фотонов и быстрых электронов. Сторонний ток электронов проводимости в уравнениях Максвелла заменен на ток радиационной проводимости. Радиационная проводимость рассчитывается из концентрации электронов, их времени релаксации на оптических и акустических фонах и массы электропроводности.

Модель верифицирована путем сравнения зависимости тока утечки от времени с экспериментом на установке Ангара-5-1. Рассматривалось воздействие мягкого рентгеновского излучения на детектор из сапфира. Сравнение расчетных и экспериментальных результатов показало удовлетворительное совпадение. Однако в отличие от численных экспериментов с кварцем [1] в приповерхностном слое наблюдается чрезмерный вынос заряда через электрод. Это обусловлено тем, что в данном расчете мы пренебрегли рассеянием на оптических поперечных фонах.

Список литературы

1. И.А. Барыков, И.Ю. Вичев, Ю.А. Волков, В.И. Зайцев, Н.В. Заложный, В.М. Каневский, И.А. Тараканов, В.А. Федоров. Математическая модель радиационно-индуцированной проводимости в кварце при воздействии мощного рентгеновского излучения // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 18. 26 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2021-18>
2. А.В. Березин, Ю.А. Волков, М.Б. Марков, И.А. Тараканов. Модель радиационно-индуцированной проводимости кремния // Матем. моделирование, 28:6 (2016), 18–32.
3. А.В. Березин, А.В. Воронцов, М.Б. Марков, Б.Д. Плющенко. О выводе и решении уравнений Максвелла в задачах с заданным волновым фронтом полей // Математическое моделирование, 18 (4), 2006, с. 43-60.
4. Ю.А. Волков, Е.Д. Казаков, Ю.Г. Калинин, М.Б. Марков, Д.Д. Масленников, М.Ю. Орлов, И.А. Тараканов. Исследование отклика полупроводникового детектора на действие мощного импульсного ионизирующего излучения // Прикладная физика. 2020. № 1. С. 58.
5. С.М. Ермаков, Г.А. Михайлов. Статистическое моделирование. - М.: Наука, 1982.
6. М.Е. Жуковский, М.В. Скачков, А.А. Егорушкин. Модификации метода Монте-Карло в задачах о трансформации ионизирующего излучения. // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, № 85, 2005.
7. А.В. Березин, Ю.А. Волков, Ш.А. Казымов, М.Б. Марков, И.А. Тараканов. Моделирование радиационной проводимости статистическим методом частиц // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2016, №9, 20 с.
8. З.А. Альбиков, Е.П. Велихов, А.И. Веретенников и др. Экспериментальный комплекс Ангара-5-1 // Атомная энергия, 1990, т.68, в.1, с. 36-46
9. И.К. Айвазов, Г.С. Волков, В.Д. Вихарев, В.И. Зайцев и др., Измерение параметров мягкого рентгеновского излучения плазмы схлопывающегося быстрого лайнера // Вопросы атомной науки и техники серия: термоядерный синтез, в.3, с. 31-35 1987.
10. M. V. Fishetti, D. J. DiMaria, S.D. Bronson, T. N. Theis and J.R. Kirtley. Theory of high-field electron transport in silicon dioxide // Physical Review B volume 31, number 12, 1985.
11. L. Scozzoli, S. Reggiani and M. Rudan. Homogeneous Transport in Silicon Dioxide Using the Spherical-Harmonics Expansion of the BTE // IEICE Trans.Electron., Vol.E83-C, NO.8 August 2000.
12. Jozef Drga , Jozef Chovanec , Stanislav Šimkovič DENSITY OF STATES AND MAGNETIC PROPERTIES OF Al₂O₃, Cr₂O₃ AND CrO₂ // XIth International Conference PREPARATION OF CERAMIC MATERIALS.
13. T.V. Perevalov, A.V. Shaposhnikov, V.A. Gritsenko, H. Wong, J.H. Han, C.W. Kim Electronic Structure of α -Al₂O₃: Ab Initio Simulations and Comparison with Experiment // ISSN 0021-3640, JETP Letters, 2007, Vol. 85, No. 3, pp. 165–

168. © Pleiades Publishing, Ltd., 2007. Original Russian Text published in *Pis'ma v Zhurnal Éksperimental'noe i Teoreticheskoe Fiziki*, 2007, Vol. 85, No. 3, pp. 197–201.

14. Jie Shan, Feng Wang, Ernst Knoesel, Mischa Bonn, and Tony F. Heinz Measurement of the Frequency-Dependent Conductivity in Sapphire // VOLUME 90, NUMBER 24 PHYSICAL REVIEW LETTERS.

15. Дж. Займан Электроны и фононы. - М.: Издательство иностранной литературы, 1962.

16. T. Kunikiyo, M. Takenaka, Y. Kamakura, M. Yamaji, H. Mizuno. A Monte Carlo simulation of anisotropic electron transport in silicon including full band structure and anisotropic impactionixation model // J. Appl. Phys. 75, 297 1995.

17. F. Murphy-Armando, S. Fahy. First-principles calculation of carrier-phonon scattering in n-type Si_{1-x}Gex alloys // Physical Review B78, 035202 2008.

18. M. Schubert, T. E. Tiwald, C. M. Herzinger. Infrared dielectric anisotropy and phonon modes of sapphire // Physical review b volume 61, number 12 15 march 2000-ii.

Оглавление

Введение	3
Математическая модель генерации и кинетики носителей заряда в сапфире	3
Описание эксперимента	5
Физические параметры математической модели	6
Результаты расчета	12
Заключение	17
Список литературы	18