УДК 519.6

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАДИАЦИОННОЙ ПРОВОДИМОСТИ И ЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ В ШИРОКОЗОННЫХ ДИЭЛЕКТРИКАХ

© 2024 г. А. В. Березин^а, В. М. Каневский^b, И. А. Тараканов^{а, b, *}

а" Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук", Москва, 125047 Россия
 ^bФедеральное государственное бюджетное учреждение «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, 123182, Россия

*e-mail: liu roach@mail.ru

Поступила в редакцию 06.06.2024 г. После доработки 08.08.2024 г. Принята к публикации 08.08.2024 г.

Построена полная математическая модель формирования радиационных и электромагнитных эффектов внутри кристаллических диэлектриков и у их поверхности. Рассматривается случай воздействия мощных потоков мягкого рентгеновского излучения. Математическая модель основана на уравнениях переноса фотонов и электронов, кинетических уравнениях для вторичных носителей заряда. Система уравнений замыкается самосогласованными уравнениями Максвелла. В уравнениях переноса детально рассматриваются процессы электрон-фотонного каскада. Для вторичных носителей заряда, электронов проводимости и дырок валентной зоны, учитываются процессы рассеяния на фононах. Приводится сравнение результатов, полученных по более простым моделям, с результатами применения полной математической модели.

Ключевые слова: радиационная проводимость, фотоэлектроны, вторичные носители заряда, самосогласованность, рентгеновское излучение, математическая модель, широкозонный диэлектрик, кинетическое уравнение, уравнение переноса, уравнения Максвелла.

DOI: 10.31857/S1028096024110122, **EDN:** REANPR

введение

Взаимодействие ионизирующего излучения с веществом является причиной возникновения целого спектра физических эффектов. Существует два основных способа исследования этих эффектов: натурные эксперименты и математическое моделирование. При исследовании мощных потоков достаточно мягкого рентгеновского излучения проведение натурных экспериментов становится очень дорогим и сложным. К тому же натурный эксперимент имеет ограниченный инструментарий для измерения результатов и по его результатам достаточно сложно судить о причине тех или иных физических эффектов. Математическое моделирование позволяет получить результаты с меньшими финансовыми и трудовыми затратами, получить распределение физических величин, которые нельзя измерить в натурных экспериментах, а также сделать вывод о физических явлениях, происходящих при воздействии ионизирующего излучения на вещество. Однако используемые математические модели должны быть фундаментальными и применяемые приближения не должны приводить к искажению результатов. Также математические модели не могут существовать сами по себе без проверки их на натурных экспериментах.

В последнее время большой интерес вызывает использование диэлектриков с большой шириной запрещенной зоны для регистрации мощного рентгеновского излучения [1—3]. В прошлых работах исследовался отклик таких диэлектрических датчиков на воздействие установки Ангара-5—1 [4—6]. Была построена частная модель

генерации радиационной проводимости в приповерхностном слое диэлектрика. Однако сравнение результатов расчетов с экспериментом показало, что имеет смысл построить совместную полную математическую модель радиационной проводимости в диэлектрике и обратной эмиссии электронов. В этой работе будет построена полная математическая модель генерации радиационной проводимости в объеме диэлектрика и самосогласованной эмиссии электронов с его поверхности. В качестве примера математические модели будут проверены на натурных экспериментах по воздействию рентгеновского излучения мощностью порядка 1 МВт/см² и со средней энергия фотонов 100 эВ на образцы из кварца и сапфира.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОБЪЕМНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ

При воздействии рентгеновского излучения на диэлектрический кристалл возникают фотоэлектроны, которые могут генерировать электронно-дырочные пары в объеме кристалла и эмитировать с его поверхности. Для описания этих эффектов необходимо построить математическую модель кинетики фотонов и электронов в диэлектрике.

- В математической модели рассматриваются следующие типы столкновительных процессов рентгеновских квантов с атомами вещества:
- когерентное рассеяние. При когерентном (или рэлеевском) рассеянии квант взаимодействует со связанным атомным электроном без возбуждения атома. Энергии налетающего и рассеянного фотонов совпадают. В результате рассеяния изменяется только направление движения фотона. Сечение этого процесса описывается с помощью формулы Томпсона с учетом релятивистского форм-фактора;
- комптоновское (некогерентное) рассеяние. Комптоновское рассеяние кванта на свободном покоящемся электроне описывается дифференциальным сечением Кляйны-Нишины, а связанность электрона в атоме учитывается путем введения функции рассеяния [7];
- фотопоглощение квантов (фотоионизация атомов). При фотоионизации квант поглощается атомом с переводом атомарного электрона в непрерывный спектр. Электрон приобретает кинетическую энергию, равную разности энергии фотона и энергии связи указанного электрона в атоме. Полные сечения фотопоглощения и диф-

ференциальные сечения рождения фотоэлектрона представлены в работе [8];

— рождение электрон-позитронных пар. Рождение электрон-позитронной пары обусловлено взаимодействием фотона высокой энергии с вакуумом. При энергиях фотонов до 10 МэВ данный физический эффект пренебрежимо маловероятен по сравнению с комптоновским рассеянием. Тем не менее, в рассматриваемой модели он учтен [9].

При воздействии мягкого рентгеновского излучения установки Ангара-5-1 на диэлектрик типа кварца или сапфира можно рассматривать только фотоионизацию атомов.

В результате взаимодействия квантов с веществом возникает фотон-электронный каскад. Для электронов рассматриваются следующие процессы взаимодействия с веществом:

- упругое рассеяние на атомах вещества, приводящее к отклонению электрона от первоначального направления движения;
- возбуждение атомов, сопровождающееся малыми потерями энергии электрона;
- ионизационные столкновения или ударная ионизация (электроионизация) с появлением в непрерывном спектре вторичного электрона;
- радиационное торможение в кулоновском поле атома с генерацией фотона тормозного излучения.

Модель переноса использует вероятностные распределения характеристик частиц после рассеяния. Данные распределения строятся путем обработки сечений соответствующих процессов рассеяния [10]. Основным источником сечений является база данных Национального центра ядерных данных [11].

В квазистационарном приближении состояние электрона, фотона или позитрона описывается переменными: $x = (r, \Omega, E)$, где r, Ω, E — координаты, направление движения и энергия соответственно. Интегро-дифференциальное уравнение для плотности потока частиц $\Phi(r, \Omega, E)$ сводится к интегральному уравнению Фредгольма 2-го рода [12,13]:

$$\Phi(\mathbf{r}, \Omega, E) = \Phi_0(\mathbf{r}, \Omega, E) +
+ \int_0^\infty d\xi \exp\{-\tau(\mathbf{r} - \xi\Omega, \mathbf{r}, E)\} \times
\times \int d\Omega' \int dE' \mu_s(\mathbf{r} - \xi\Omega, \Omega', E', E)
\Phi(\mathbf{r} - \xi\Omega, \Omega', E'),$$
(1)

гле

$$\Phi_0(\mathbf{r}, \Omega, E) = \int_0^\infty d\xi \exp\{-\tau(\mathbf{r} - \xi \Omega, \mathbf{r}, E)\} \times S(\mathbf{r} - \xi \Omega, \Omega, E)$$

 $S(r,\Omega,E)$ — источник излучения; $\tau(r',r,E) = \int_0^s j(r-\xi'\Omega,E)d\xi'$ — оптическое расстояние (глубина) между точками r и $r'=r-\xi\Omega$; μ,μ_s — полное и дифференциальное макроскопические сечения рассеяния частиц.

Процесс прохождения частицы через вещество представляется ее траекторией — последовательностью элементарных актов взаимодействия с атомами вещества. Такое представление удобно для моделирования переноса излучения методом Монте-Карло.

Результатами расчета в рамках рассмотренной модели являются распределения энерговыделения и плотностей потока частиц в объеме кристалла. Исходя из величины энерговыделения рассчитывается количество электронно-дырочных пар:

$$N_{e-h} = \frac{J}{\varepsilon_i} f(E).$$

Здесь J — энерговыделение, ε_i — средняя энергия ионизации, необходимая для образования пары (для кварца ε_i = 17 эВ), f(E) — функция выхода частиц, связанная с первичной рекомбинацией [14].

Источник электронов проводимости и дырок валентной зоны представим в виде:

$$Q_{e,h} = \frac{N_{e-h}F_{e,h}(\varepsilon)}{\int_{0}^{t_{8}} f_{x}(t)}, \quad \int F_{e,h}(\varepsilon) d\varepsilon = 1,</math$$

где функция $F_{e,h}(\varepsilon)$ представляет собой распределение рождающихся носителей заряда по энергиям.

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 [15]:

$$\frac{\partial f_{e,h}}{\partial t} + v \frac{\partial f_{e,h}}{\partial r} - e \left(E + \frac{1}{c} [vH] \right) \frac{\partial f_{e,h}}{\partial p} = I[f] + Q_{e,h}, \quad (2)$$

где c — скорость света, E — напряженность электрического поля, H — напряженность магнитного поля.

Правая часть уравнения (2) описывает изменение функции распределения за счет рассеяния. Здесь I[f] — оператор, действующий на функцию распределения по переменной квазиимпульса. Интеграл рассеяния определяется через скорости перехода из состояния p' в состояние p и обратно.

Скорости прямой и обратной реакции подчиняются принципу детального равновесия:

$$\frac{W(p',p)}{W(p,p')} = \exp\left\{\frac{\varepsilon(p') - \varepsilon(p)}{\kappa_B T}\right\}.$$
 (3)

Электромагнитное поле в (3) в диэлектрике создается движением всех заряженных частиц: свободных электронов и носителей заряда в кристалле. Уравнения (2) дополняются уравнениями Максвелла с соответствующими начальными условиями [16]. Прямое моделирование токов электронов проводимости и дырок валентной зоны как стороннего тока в уравнениях Максвелла не представляется возможным. Этот ток можно выразить как σE — ток радиационной проводимости. Соответственно, уравнения Максвелла можно записать как [15]:

$$rot\mathbf{H} = \frac{\varepsilon}{c} \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{4\pi\sigma}{c} E + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad rot\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial H}{\partial t}, \quad (4)$$

в этих уравнениях — проводимость электрон-дырочной плазмы равняется

$$\sigma = e n_e \mu_e + e n_h \mu_h, \tag{5}$$

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

Первое слагаемое в правой части выражения для плотности тока (4) 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.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЭМИССИИ ФОТОЭЛЕКТРОНОВ

Электроны, вылетевшие с поверхности диэлектрика, движутся, не рассеиваясь (при условии глубокого вакуума вблизи поверхности). Их движение происходит только под действием

самосогласованного электрического поля. Для моделирования кинетики электронов необходимо решить нестационарное кинетическое уравнение [17] совместно с полной системой уравнений Максвелла (4). Источник для кинетического уравнения может быть рассчитан решением уравнений переноса (1).

Рассмотрим кинетическое уравнение для функции распределения электронов f = f(t, r, p) в фазовом пространстве координат r = (x, y, z) и импульсов $p = (p_x, p_y, p_z)$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div}_{r}(vf) + e\operatorname{div}_{p}\left[\left(E + [\beta, H]\right)f\right] + \sigma'vf = 0$$

$$= Q(t, r, p) + \int dp'\sigma(p, p')v'f(p'),$$
(6)

где t — лабораторное время, v — скорость электрона, E = E(t,r) и H = H(t,r) — напряженности электрического и магнитного полей, div_{r} и div_{p} — дивергенции в пространствах координат и импульсов, e — заряд электрона, $\beta = \frac{v}{c}$, c — скорость света в вакууме, σ^{t} — полное макроскопическое сечение рассеяния электронов, $\sigma(p,p')$ — дифференциальное макроскопическое сечение рассеяния электронов, p' и p — импульсы электрона до и после рассеяния, соответственно, Q = Q(t,r,p) — источник электронов, выражающий интенсивность их генерации в точке фазового пространства.

Так как фотоэлектроны не рассеиваются, то в кинетическом уравнении интеграл рассеяния электронов и слагаемое, содержащее полное макроскопическое сечение рассеяния электронов можно выкинуть:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div}_{r}(vf) + e\operatorname{div}_{p}[(E + [\beta, H])f] = Q(t, r, p). (7)$$

Дифференциальное уравнение (7) эквивалентно [10] интегральному уравнению:

$$f = \int_{0}^{t} d\tilde{t} \int d\tilde{r} \int d\tilde{p} Q(\tilde{t}, \tilde{r}, \tilde{p}) \times \delta(r - r^{s}) \delta(p - p^{s}), (8)$$

где функции $\mathbf{r}^s = \mathbf{r}^s \left(t, \tilde{t}, \tilde{r}, \tilde{p}\right), \ \mathbf{p}^s = \mathbf{p}^s \left(t, \tilde{t}, \tilde{r}, \tilde{p}\right)$ являются решениями уравнений движения:

$$\frac{d\mathbf{p}^{s}}{dt} = e\left(\mathbf{E}(t,\mathbf{r}^{s}) + \frac{1}{c}\left[\mathbf{v}^{s},\mathbf{H}(t,\mathbf{r}^{s})\right]\right)$$
(9)

с начальными условиями $\left. oldsymbol{r}^s \right|_{t= ilde{t}} = ilde{oldsymbol{r}}, \left. oldsymbol{p}^s \right|_{t= ilde{t}} = ilde{oldsymbol{p}}.$

Интегральное уравнение (8) решается методом последовательных поколений [18] в пространстве финитных обобщенных функций [19].

Кинетические уравнения замыкаются уравнениями Максвелла для компонент электромагнитного поля (4).

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

В качестве примера использования разработанных математических моделей рассматривается воздействие мощного рентгеновского излучения на диэлектрический кристалл [4-6]. Мощность потока излучения на поверхности сапфира принимается равной 1 МВт/см², средняя энергия рентгеновских квантов 100 эВ. Результаты получены для воздействия на кристаллы кварца и сапфира.

Физико-геометрическая модель численного эксперимента представлена на рис. 1.

При воздействии фотонов из поверхности диэлектрика выбиваются фотоэлектроны. Эти фотоэлектроны генерируют *Z*-компоненту плотности тока, которая порождает электрическое поле, тормозящее эти электроны. Внутри диэлектрика фотоэлектроны генерируют электронно-дырочные пары, из-за кинетики которых возникает радиационная проводимость.

Рассчитано пространственное распределение поглощенной дозы в сапфире. На рис. 2 показано сравнение поглощенной дозы в сапфире и кварце. Видно, что рентгеновское излучение практически одинаково поглощается в приповерхностных слоях детекторов. Дальнейшие результаты по моделированию электрических полей приведены для воздействия рентгеновского излучения на сапфир.

Проведено три расчета с использованием разных конфигурацией математической модели. В первом расчете использовались модель переноса излучения и модель кинетики вторичных

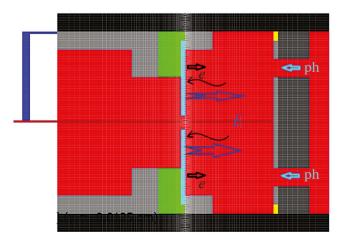


Рис. 1. Физическая схема численного эксперимента.

носителей заряда в диэлектрике, т.е. моделировались только объемные эффекты, связанные с возникновением электронно-дырочных пар и стороннего тока фотоэлектронов. Во втором расчете моделировалась эмиссия электронов с поверхности сапфира. Электрическое поле вблизи поверхности генерировалось только эмиссией электронов и моделировалось совместным решением самосогласованных уравнений Максвелла и кинетических уравнений для фотоэлектронов. В третьем расчете использовалась полная математическая модель, изложенная в данной работе. Результаты расчетов показали сильное влияние объемных радиационных эффектов на электрическое поле вблизи поверхности диэлектрика. На рис. 4 показана зависимость напряженности электрического поля от времени под поверхностью диэлектрика (рис. 4а) и вблизи поверхности (рис. 4б). Видно, что электрическое поле внутри диэлектрика определяется только объемными радиационными эффектами, связанными со сторонним током фотоэлектронов и радиационной проводимостью. Тогда как вблизи поверхности во втором расчете наблюдается сильное электрическое поле, которое достигает 30 МВ/м. При учете объемных радиационных эффектов, в первую очередь стороннего тока фотоэлектронов внутри сапфира, поле сильно снижается примерно в 20 раз.

На рис. 5 показана зависимость напряженности электрического поля от координаты Z (направление перпендикулярное поверхности диэлектрика)

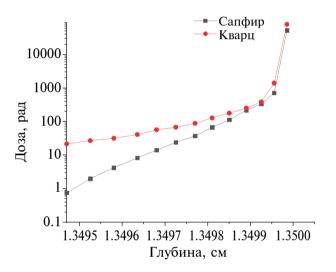


Рис. 2. Сравнение зависимостей поглощенной дозы по глубине в сапфире и кварце.

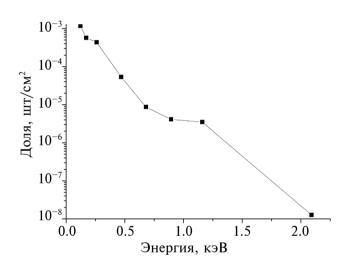
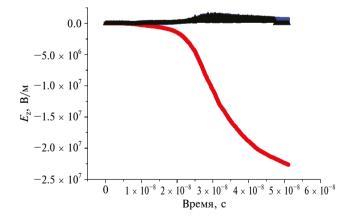


Рис. 3. Спектр фотоэлектронов.



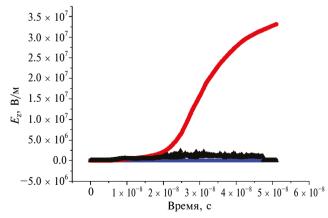


Рис. 4. Зависимость напряженности электрического поля от времени под поверхностью и вблизи поверхности диэлектрика. Синим цветом обозначен первый расчет, красным цветом обозначен второй расчет, черным цветом обозначен третий расчет.

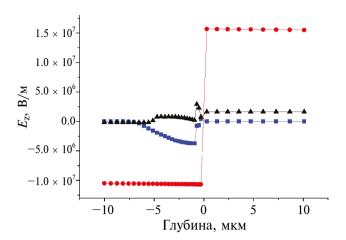


Рис. 5. Зависимость напряженности электрического поля по глубине в момент времени, который соответствует максимуму импульса рентгеновского излучения. Синим цветом обозначен первый расчет, красным цветом обозначен второй расчет, черным цветом обозначен третий расчет.

в момент максимума импульса рентгеновского излучения. Объемный сторонний ток в диэлектрике уменьшает напряженность электрического поля вблизи поверхности диэлектрика. Внутри диэлектрика при учете эмиссии с поверхности напряженность электрического поля меняет знак и соответственно изменяется кинетика вторичных носителей заряда. Электроны проводимости могут глубже проникать в толщу диэлектрика создавать радиационную проводимость на большей глубине.

ВЫВОДЫ

По результатам анализа результатов морадиационной делирования проводимости в кристаллическом диэлектрике типа кварца/ сапфира видно, что применение предложенной комплексной математической модели генерации и динамики вторичных носителей заряда в глубине диэлектрика и эмиссии фотоэлектронов с его поверхности позволяет учитывать как поверхностные, так и объемные радиационные эффекты. Учет стороннего ток в объеме диэлектрика уменьшает электрическое поле вблизи поверхности. Также видна качественная разница результатов моделирования электрического поля и кинетики вторичных носителей заряда внутри диэлектрика при учете поверхностных радиационных эффектов. Можно сделать вывод о применимости построенной математической модели объемных и поверхностных радиационных эффектов для моделирования диэлектрических датчиков на основе широкозонных диэлектриков при воздействии на них мощного рентгеновского излучения.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Соглашения № 075-15-2024-637 от 28.06.2024 г.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Hughes R.C. // Phys. Rev. Lett. 1973. V. 30. № 26. P. 1333.
- 2. Hughes R.C. //Phys. Rev. B. 1979. V. 19. № 10. P. 5318.
- 3. Зайцев В.И., Барыков И.А., Карташов А.В., Терентьев О.В., Родионов Н.Б. // Письма в ЖТФ/2016. Том 42, Вып. 22. С. 72. https://doi.org./10.21883/pjtf.2016.22.43941.16377
- 4. Барыков И.А., Вичев И.Ю., Волков Ю.А., Зайцев В.И., Заложный Н.В., Каневский В.М., Тараканов И.А., Федоров В.А. 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
- 5. 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. С. 1—20. https://doi.org./10.20948/prepr-2022-15
- 6. Барыков И.А., Вичев И.Ю., Зайцев В.И., Каневский В.М., Тараканов И.А., Федоров В.А. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2022. № 9. С. 27. https://doi.org./10.31857/S1028096022090023
- 7. *Жуковский М.Е.*, *Усков Р.В.* Математическое моделирование, Т. 23. № 7. 2011. С. 20.
- Жуковский М.Е., Подоляко С.В., Усков Р.В. // Вычислительные методы и программирование, Т. 12. № 1. 2011. С.152.
- 9. *Кольчужкин А.М.*, *Учайкин В.В.* Введение в теорию прохождения частиц через вещество. М.: Атомиздат, 1978. 256 с.
- 10. *Жуковский М.Е.*, *Усков Р.В.* //Математическое моделирование. Т. 27. № 5. 2015. С. 39.
- 11. Официальный сайт Национального института стандартов и технологий США. www.nist.gov.com.
- 12. *Каргин Б.А.*, *Михайлов Г.А.* Интегральное уравнение переноса. Метод и алгоритмы Монте-Карло для задач переноса излучения. // Энциклопедия низкотемпературной плазмы. / под ред. Ю.П. По-

- пова. 2008. Том VII-1. Математическое моделирование в низкотемпературной плазме, М.: Янус-К, C. 540.
- 13. Михайлов Г.А. Весовые метолы Монте-Карло. / отв. ред. Б.А. Каргин. Новосибирск: Изд-во СО PAH, 2000. 248 c.
- 14. Чумаков А.И. Действие космической радиации на ИС.М.: Радио и связь. 2004. 320 с.
- 15. Березин А.В., Волков Ю.А., Марков М.Б., Тараканов И.А. //Матем. моделирование, 2016. Т. 28. № 6. C.18.
- 16. Березин А.В., Воронцов А.В., Марков М.Б., Плющенков Б.Д. // Математическое моделирование. 2006.T. 18. №4. C. 43.
- 17. Березин А. В. , Воронцов А. С. , Марков M. B. //Математическое моделирование, 2011. T. 23. № 12. C. 132.
- 18. Whittaker E.T., Watson G.N. A Course of Modern Analysis. Cambridge University Press, 1996.
- 19. Shilov G.E. Generalized Functions and Partial Differential Equations. New-York: Gordon and Breech Science Publishers Inc., 1968.

Mathematical Model of Radiation Conductivity and Electron Emission in Wide-Gap Dielectrics

A. V. Berezin¹, V. M. Kanevskij², I. A. Tarakanov^{1, 2, *}

¹Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences, Moscow, 125047 Russia ²National Research Centre "Kurchatov Institute", Moscow, 123182 Russia

*e-mail: liu roach@mail.ru

A complete mathematical model of the generation of radiation and electromagnetic effects inside crystalline dielectrics and at their surface has been constructed. The case of exposure to powerful flows of soft X-ray radiation is considered. The mathematical model is based on the photon and electron transport equations, kinetic equations for photoelectrons and semi-classical kinetic equations for secondary charge carriers. The system of equations is closed by self-consistent Maxwell equations. The transport equations consider in detail the processes of the electron-photon cascade. For secondary charge carriers, conduction electrons and valence band holes, the processes of scattering by phonons are taken into account. A comparison of the results obtained using simpler models with the results of applying the full mathematical model is provided.

Ключевые слова: radiation conductivity, photoelectrons, secondary charge carriers, self-consistency, X-ray radiation, mathematical model, wide-gap dielectric, kinetic equation, transport equation, Maxwell's equations.