

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 18 за 2021 г.</u>



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

И.А. Барыков, <u>И.Ю. Вичев</u>, <u>Ю.А. Волков</u>, В.И. Зайцев, <u>Н.В. Заложный</u>, В.М. Каневский, <u>И.А. Тараканов</u>, В.А. Федоров

Математическая модель радиационно-индуцированной проводимости в кварце при воздействии мощного рентгеновского излучения

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Математическая модель радиационно-индуцированной проводимости в кварце при воздействии мощного рентгеновского излучения / И.А. Барыков [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 18. 26 с. https://doi.org/10.20948/prepr-2021-18 https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2021-18 Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В.Келдыша Российской академии наук

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

Москва — 2021

Барыков Иван Анатольевич, Вичев Илья Юрьевич, Волков Юрий Александрович, Зайцев Владимир Иванович, Заложный Никита Владимирович, Каневский Владимир Михайлович, Тараканов Илья Алексеевич, Федоров Владимир Анатольевич

Математическая модель радиационно-индуцированной проводимости в кварце при воздействии мощного рентгеновского излучения

Построена модель генерации и динамики радиационной проводимости в кварце под действием мощного мягкого рентгеновского излучения. Модель динамики носителей заряда основана на совместном решении самосогласованных кинетических уравнений и уравнений Максвелла. Модель верифицирована путем сравнения результатов расчетов тока по поверхности кварца с экспериментальными данными, полученными на термоядерной установке Ангара-5-1. В качестве экспериментальных данных взят ток по поверхности кварцевого датчика, генерируемый мощным импульсом мягкого рентгеновского излучения установки Ангара-5-1.

Ключевые слова: радиационная проводимость, математическая модель, альфакварц, мягкое рентгеновское излучение, установка Ангара-5-1.

Barykov Ivan Anatol'yevich, Vichev Il'ya Yur'yevich, Volkov Yuriy Aleksandrovich, Zaytsev Vladimir Ivanovich, Zalozhnyy Nikita Vladimirovich, Kanevskiy Vladimir Mikhaylovich, Tarakanov Il'ya Alekseevich, Fedorov Vladimir Anatol'yevich

Mathematical model of radiation-induced conductivity in quartz under the influence of high-power X-ray radiation

A model of generation and dynamics of radiation conductivity in quartz under the action of powerful soft X-ray radiation is constructed. The charge carrier dynamics model is based on the joint solution of self-consistent kinetic equations and Maxwell's equations. The model was verified by comparing the current calculations on the quartz surface with experiments on the Angara-5-1 thermonuclear installation. The current over the surface of the quartz sensor generated by a powerful pulse of soft X-ray radiation from the Angara-5-1 setup was taken as experimental data.

Key words: radiation conductivity, mathematical model, alpha quartz, soft x-ray radiation, Angara-5-1 installation.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Госкорпорации «Росатом» в рамках научного проекта №20-21-00068 в части расчета проводимости приповерхностных слоев монокристаллического кварца при воздействии мощных потоков мягкого рентгеновского излучения и при поддержке РФФИ проекта № 20-01-00419 в части построения математической модели генерации и динамики радиационной проводимости в кварце.

Введение

Взаимодействие ионизирующего излучения с веществом является причиной возникновения множества радиационных эффектов [1]. Одним из эффектов появление радиационной проводимости таких является В полупроводниках И диэлектриках изделий микроэлектроники [2]. Индуцированная проводимость в тонких слоях диэлектриков может быть достаточной для отказа микросхем. Существуют два взаимосвязанных способа исследования воздействия ионизирующего излучения на диэлектрики. Математическое моделирование является эффективным методом исследования отклика элементов микроэлектроники на радиационные нагрузки. Модель не может существовать сама по себе и требует экспериментальной верификации.

В данной работе построена математическая модель взаимодействия мощного рентгеновского излучения с кристаллическими диэлектриками. Разработана модель генерации неравновесных носителей заряда в этих материалах, основанная на решении уравнений переноса электрон-фотонного каскада методом Монте-Карло. Построена модель динамики электронов проводимости и дырок валентной зоны в диэлектриках. Эта модель состоит из кинетических уравнений для носителей заряда и самосогласованных уравнений Максвелла. Построена модель проводимости в диэлектриках при воздействии мощного рентгеновского излучения. Для отработки методики и процедуры расчетов выбран кварц в альфа-фазе. Для этого материала исследованы количественные характеристики рассеяния носителей заряда на фононах и особенности первичной рекомбинации. Для решения кинетического уравнения используется статистический метод частиц, совмещающий детерминированное движение частиц по электромагнитному полю и их стохастическое рассеяние на фононах кристаллической решетки.

Математическая модель радиационной проводимости использована для расчета тока утечки в кварцевом датчике при воздействии рентгеновского излучения термоядерной установки Ангара-5-1. Исследованы особенности проникновения излучения в кварце, распределения электромагнитных полей и проводимости. Рассчитанный ток утечки сравнен с экспериментально измеренным.

1. Физико-математическая модель генерации неравновесных носителей заряда

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

В квазистационарном приближении [3-5] интегро-дифференциальное уравнение для плотности потока частиц $\Phi(\mathbf{r}, \Omega, E)$ сводится к интегральному уравнению Фредгольма 2-го рода [6]:

$$\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) = \Phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) + \int_0^{\infty} d\xi \exp\{-\tau(\mathbf{r} - \xi \mathbf{\Omega}, \mathbf{r}, E)\} \int d\mathbf{\Omega}' \int dE' \mu_s(\mathbf{r} - \xi \mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}', E', E)$$
(1.1)
$$\Phi(\mathbf{r} - \xi \mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}', E'),$$

где $\Phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$ — поток нерассеянных частиц:

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

 $S(\mathbf{r}, \Omega, E)$ – источник излучения; $\tau(\xi, \mathbf{r}, E) = \int_{0}^{\xi} \mu(\mathbf{r} - \xi'\Omega, E) d\xi'$ – оптическое расстояние (глубина) между точками **r** и $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \xi \Omega$; 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 на графических ускорителях [6].

Учитываются следующие типы столкновений квантов рентгеновского излучения с атомами вещества: когерентное рассеяние и фотопоглощение. При когерентном (или рэлеевском) рассеянии квант взаимодействует со связанным атомным электроном без возбуждения атома. Энергии налетающего и рассеянного фотона совпадают. В результате рассеяния изменяется только направление движения фотона. Сечение этого процесса описывается с помощью формулы Томпсона с учетом релятивистского форм-фактора. 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 дифференциальные сечения рождения фотоэлектрона представлены в работе [3].

Рассматриваются следующие процессы взаимодействия электронов с веществом. Упругое рассеяние на атомах вещества отклоняет электрон от первоначального направления движения. Возбуждение атомов сопровождается малыми потерями энергии падающего электрона. Ударная ионизация атомов приводит к появлению в непрерывном спектре вторичных электронов. Для расчета траекторий электронов используется модель индивидуальных соударений [4]. Модель переноса использует вероятностные распределения характеристик частиц после рассеяния. Данные распределения строятся путем обработки сечений соответствующих процессов рассеяния [5]. Основным источником сечений является база данных Национального центра ядерных данных [7].

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

$$N_{e-h} = J/\varepsilon_i$$
.

Здесь J – энерговыделение, ε_i – средняя энергия ионизации, необходимая для образования пары (для кварца $\varepsilon_i = 17$ эВ).

Источник электронов проводимости и дырок валентной зоны представим в виде

$$Q_{e,h} = \frac{N_{e-h}F_{e,h}(\varepsilon)}{\int\limits_{0}^{t_{uwn}}f_x(t)}, \quad \int F_{e,h}(\varepsilon) d\varepsilon = 1,$$

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

Энергия электронов проводимости отсчитывается от дна зоны проводимости, а энергия дырок отсчитывается от потолка валентной зоны.



Рис. 1 – Эволюция распределения электронов по энергиям в SiO₂; энергия первичного электрона – 200 эВ. Распределения нормированы на 1

Доля (энергии) электронов проводимости в диоксиде кремния приведена согласно расчету эволюции энергетического распределения электронов [8]. В качестве первичной частицы рассматривался электрон с энергией 200 эВ. На рис. 1 показаны спектры частиц в различные моменты времени.

2. Математическая модель и алгоритм динамики неравновесных носителей заряда

Распределение электронов проводимости и дырок валентной зоны в невозмущенном кристалле описывается равновесным распределением Максвелла.

Выделение энергии электронами отдачи, образующимися при рассеянии рентгеновских фотонов в кварце, нарушает равновесие носителей заряда в кристалле. Неравновесные избыточные носители заряда распределяются в пространстве неравномерно и взаимодействуют друг с другом посредством среднего самосогласованного электромагнитного поля, т.е. образуют электрондырочную плазму.

В термодинамическом равновесии распределение частиц является максвелловским. Выделение в кристалле дополнительной энергии смещает равновесие в сторону рождения избыточных пар. Предполагается, что газ электронов проводимости и дырок валентной зоны остается невырожденным, т.е. концентрации носителей заряда $n_{e,p} \leq 10^{20}$ 1/см³. Тогда для описания процессов переноса заряда оказываются пригодными методы, традиционные для газовой плазмы. Главные отличия состоят в следующем: эффективная масса электрона (дырки) выражается тензором и может меняться при движении электрона. Кроме того, в отсутствие воздействия на кристалл скорость квазичастицы совпадает с ее групповой скоростью

$$\mathbf{v} = \partial \varepsilon (\mathbf{p}) / \partial \mathbf{p},$$

где $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p})$ – закон дисперсии для данного вещества.

Полное кинетическое уравнение должно учитывать рассеяние электронов проводимости или дырок валентной зоны на дефектах решетки [9]

$$\frac{\partial f_{e,h}}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_{e,h}}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v}\mathbf{H}] \right) \frac{\partial f_{e,h}}{\partial \mathbf{p}} = I[f, f] + \mathbf{Q}_{e,h}, \qquad (1.2)$$

где *с* – скорость света, **Е** – напряженность электрического поля, **Н** – напряжённость магнитного поля.

Правая часть уравнения (1.2) описывает изменение функции распределения за счет рассеяния. Здесь I[f, f] – квадратичный оператор,

действующий на функцию распределения по переменной квазиимпульса (переменные \mathbf{r} и t при описании рассеяния являются параметрами и не указываются)

$$I[f, f] = \int \left\{ W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}') (1 - f(\mathbf{p})) - W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f(\mathbf{p}) (1 - f(\mathbf{p}')) \right\} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3}$$

В самой записи интеграла рассеяния учтено, что носители заряда являются Ферми-частицами.

Величина $W(\mathbf{p}',\mathbf{p})$ есть скорость реакции перехода из состояния \mathbf{p}' в состояние \mathbf{p} . Первый член в фигурных скобках выражает приход в состояние \mathbf{p} из всех других состояний, при условии, что состояние \mathbf{p} свободно. Аналогично, второй член в фигурных скобках описывает уход из состояния \mathbf{p} в любое другое свободное состояние \mathbf{p}' со скоростью $W(\mathbf{p},\mathbf{p}')$. Полное число частиц при всех переходах не изменяется, так как из формы записи интеграла рассеяния прямо вытекает

$$\int d\mathbf{p} I[f,f] = 0.$$

В термодинамическом равновесии интеграл рассеяния должен обращаться в нуль. Тогда и подынтегральное выражение обращается в нуль.

$$W(\mathbf{p}',\mathbf{p})f_0(\mathbf{p}')(1-f_0(\mathbf{p})) - W(\mathbf{p},\mathbf{p}')f_0(\mathbf{p})(1-f_0(\mathbf{p}')) = 0, \qquad (1.3)$$

где f_0 – равновесное распределение. Подставляя в (1.3) распределение Ферми-Дирака, получим связь скоростей прямой и обратной реакции

$$\frac{W(\mathbf{p}',\mathbf{p})}{W(\mathbf{p},\mathbf{p}')} = \exp\left\{\frac{\varepsilon(\mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{p})}{\kappa_B T}\right\}.$$
(1.4)

Соотношение (1.4) представляет собой принцип детального равновесия. Приход и уход частиц уравновешиваются не суммарно, а детально, для каждой пары состояний. Из (1.4) вытекает, что вероятность перехода с увеличением энергии мала по сравнению с переходом в сторону уменьшения энергии. Малая вероятность перехода с уровней меньшей энергии на уровни с большими энергиями компенсируется большей заселенностью этих уровней в равновесии.

Электромагнитное поле в (1.2) в общем случае создается как рабочим напряжением прибора, так и движением всех заряженных частиц: свободных электронов и носителей заряда в кристалле. Уравнения (1.2) дополняются уравнениями Максвелла с соответствующими начальными условиями [10]

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{\varepsilon}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t},$$
$$\mathbf{j} = e \left(\int \mathbf{v} f_h(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{\left(2\pi\hbar\right)^3} - \int \mathbf{v} f_e(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \frac{2d\mathbf{p}}{\left(2\pi\hbar\right)^3} \right) + \mathbf{j}_0 + \mathbf{j}_{ext}.$$
(1.5)

Первое слагаемое в правой части (1.5) описывает плотность тока электронов проводимости и дырок. Свободные электроны генерируют в кремнии плотность тока \mathbf{j}_0 . Она, так же как и источник неравновесных носителей Q, вычисляется как функционал функции распределения свободных электронов. Электрическое поле прибора устанавливается плотностью тока \mathbf{j}_{ext} , определяющей ток заряжения прибора в его внешней цепи, ε — диэлектрическая проницаемость кристалла.

Так как скорость носителей заряда гораздо меньше скорости света $v/c \ll 1$, магнитным полем в уравнениях Максвелла можно пренебречь.

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 [11].

Следует отметить отличие предлагаемого подхода от метода Монте-Карло, предполагающего независимость испытаний. После того как носитель заряда пройдет всю свою траекторию и внесет вклад в показания детектора, например, в ток радиационной проводимости через заданную поверхность, его можно исключить из рассмотрения. В действительности электрическое поле определяется текущей плотностью тока всех носителей заряда, что не позволяет рассчитывать траектории частиц отдельно друг от друга.

Рассмотрим для определенности электроны проводимости. Рассеяние электронов на дефектах решетки будем считать случайным процессом. В соответствии с полной вероятностью перехода $W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$ из состояния \mathbf{v} в состояние \mathbf{v}' выбирается время свободного пробега. Движение электрона проводимости между актами рассеяния описывается уравнениями движения:

$$\frac{d\mathbf{r}_e}{dt} = \mathbf{v}_e,$$

$$\frac{d\mathbf{v}_e}{dt} = -\frac{e}{m^*}\mathbf{E}\,,$$

где *m*^{*} – эффективная масса электропроводности, учитывающая анизотропию состояний

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} \right).$$

Эффективная масса состояний $m \approx (m_1 m_2 m_3)^{1/3}$ по-прежнему участвует в определении времен свободного пробега носителей заряда. По окончании времени свободного пробега происходит один из процессов рассеяния.

Схема алгоритма изображена на рис. 2.



Рис. 2 – Схема алгоритма статистического метода частиц

Из-за высокой частоты рассеяния электроны проводимости и дырки валентной зоны не успевают далеко сдвинуться относительно точки генерации, соответственно, их суммарный ток достаточно мал. Статистический метод частиц чувствителен к наличию в расчете достаточного количества частиц. Изза этого адекватное моделирование токов электронов проводимости и дырок валентной зоны как стороннего тока в уравнениях Максвелла не представляется возможным. Этот ток можно выразить как σE , собственно ток радиационной проводимости. Соответственно, уравнения Максвелла можно записать как [12]

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

В этих формулах σ — проводимость электрон-дырочной плазмы, $\sigma = en_e \mu_e + en_h \mu_h$, e — заряд электрона, n_e, n_h — концентрации, μ_e, μ_h подвижности электронов и дырок. При вычислении подвижностей носителей заряда с энергией ε учитывались процессы рассеяния на акустических и оптических фононах и рассеяние на заряженных примесях. Полное время свободного пробега τ квазичастицы с энергией ε определяется через времена релаксации носителей заряда в каждом из процессов рассеяния:

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} = \sum_{i} \frac{1}{\tau_i(\varepsilon)}$$

Так как концентрации электронов зоны проводимости и дырок валентной зоны малы по сравнению с концентрацией электронов в валентной зоне, то подвижность носителей заряда имеет классический тип, т.е. вклад дают все состояния [13]

$$\mu_{e(h)} = \frac{e < \tau_{e(h)} >}{m_{e(h)}^*}, < \tau_{e(h)} > = \frac{\int \tau_{e(h)}(\varepsilon)\varepsilon^{3/2} \exp(-\varepsilon/k_B T)d\varepsilon}{\int \varepsilon^{3/2} \exp(-\varepsilon/k_B T)d\varepsilon},$$

где $m_{e(h)}^*$ — эффективная масса электропроводности электрона (дырки), *T* — температура кристалла, k_B — константа Больцмана.

3. Особенности константного обеспечения математической модели динамики носителей заряда

Построенная для диэлектриков математическая модель применима для расчета радиационной проводимости в самых различных диэлектриках. Для определенности необходимые для расчета радиационной проводимости и решения уравнений движения времена релаксации, эффективные массы и групповые скорости электронов проводимости и дырок валентной зоны в кристалле определим для кварца в альфа-фазе. Эти константы зависят от плотности состояния $g(\varepsilon)$ [14-18].

В данной работе используется приближение скалярной эффективной массы с поправкой на ее зависимость от энергии. Зависимость $g(\varepsilon)$ для оксида кремния получена в работе [19] с помощью метода функционала плотности (DFT – Density Functional Theory)

$$m_{eff}(\varepsilon) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{2\pi^2 g_{e,h}}{\sqrt{\varepsilon}} \right)^{2/3}.$$
 (1.6)

Сравнение плотностей состояния, полученных в разных приближениях, приведено на рис. 3. Групповые скорости могут быть получены из плотности состояния. На рис. 4 показано сравнение групповых скоростей, полученных по плотности состояния (рис. 3), с результатами из [19].



Рис. 3 – Зависимость плотности состояния диоксида кремния от энергии электрона в различных приближениях. 1 – параболическое приближение с $m_{eff} = 0.5 \cdot m$ (*m* – масса свободного электрона), 2 – плотность состояний с учётом эффективной массы по Кейну, 3 – плотность состояний, полученная по методу HF (решение уравнений Хартри-Фока) [19]



Рис. 4 – График зависимости групповой скорости от энергии электрона для SiO₂. 1 – групповая скорость [20], 2 – групповая скорость, вычисленная по плотности состояний [19]

Носитель заряда в кварце – электрон проводимости или дырка валентной зоны, характеризуется временем свободного пробега $\tau(\varepsilon)$ или частотой рассеяния $1/\tau(\varepsilon)$

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} = \sum_{i} \frac{1}{\tau_i(\varepsilon)},\tag{1.7}$$

где суммирование идет по всем процессам, включая рекомбинацию. Некоторые типы рассеяния удобно представлять как взаимодействие носителей заряда с фононами, представляющими из себя кванты колебательного движения атомов кристалла. Известны следующие процессы рассеяния в кварце:

- упругое рассеяние на акустических фононах (АС-фононы);
- неупругое рассеяние на полярных оптических фононах (LO-фононы);
- неупругое рассеяние на неполярных оптических фононах (ТО-фононы).

Рассеяние состоит в переходе электрона из состояния с квазиимпульсом \mathbf{p}' и энергией ε' в состояние с квазиимпульсом \mathbf{p} и энергией ε . При неупругом рассеянии изменение энергии электрона квантуется величиной $\hbar\omega_{opt}$, где ω_{opt} – частота оптического фонона. Заметим, что неупругие процессы подразумевают как поглощение, так и испускание фононов. В соответствии с принципом детального равновесия [17] отношение вероятностей поглощения и испускания зависит от разности энергий начального и конечного состояний электрона при заданной температуре кристалла $T: W^{abs} / W^{emis} \approx \exp\{-\hbar\omega_{opt}/\kappa_B T\}, \kappa_B -$ постоянная Больцмана. Подставляя сюда характерные значения энергии оптического фонона для диоксида кремния $\hbar\omega_{opt} = 0,1$ эВ [20] и тепловой энергии электрона $\kappa_B T = 1/40$ эВ, получим $W^{abs} / W^{emis} \approx 0,02$. По этой причине для быстрых электронов ($\varepsilon >> \kappa_B T$) вклад поглощения в рассеяние мал по сравнению с испусканием.

Формулы для вычисления времен релаксации приведены в работе [21]. На рис. 5 представлены результаты расчета времен релаксации в кварце.



Рис. 5 – Графики зависимости частоты рассеяния в диоксиде кремния при эмиссии фононов: 1 – верхняя LO ветвь, 2 – нижняя LO ветвь, 3 – AC, 4 – TO

Подвижность электронов диоксида кремния вычислялась в приближении массы состояний, зависящей от энергии $m(\varepsilon)$. В результате подвижность тепловых электронов ($\kappa_B T = 1/40$ эВ) получилась равной $\mu = 54 \text{ см}^2/(\text{B}\times\text{c})$, что при таких маленьких значениях сравнимо с экспериментальной величиной в $\mu = 20 \text{ см}^2/(\text{B}\times\text{c})$ [22]. Подвижность дырок ($\mu = 10^{-5} \text{ см}^2/(\text{B}\times\text{c})$) на несколько порядков меньше, чем подвижность электронов, поэтому кинетикой дырок на временах порядка 10^{-7} с (время воздействия импульсного рентгеновского излучения) можно пренебречь.

Так как в кварце присутствует электрическое поле, созданное электронами отдачи, то после генерации электроны проводимости сразу начинают удаляться от дырок валентной зоны. Однако часть электронов успевает прорекомбинировать с дырками в валентной зоне. Начальная рекомбинация сильно зависит от напряженности электрического поля в оксиде. На рис. 6 изображена зависимость выхода заряда (доля электронов избежавших начальной рекомбинации) от напряженности электрического поля [23].



Рис. 6 – Начальная рекомбинация электронов проводимости в кварце

Оставшиеся после начальной рекомбинации электроны проводимости свободно дрейфуют с учетом рассеяния на фононах под воздействием радиационного электрического поля.

4. Физико-геометрическая модель эксперимента

Разработанная математическая модель радиационной проводимости в кварце использована для расчета тока в кварцевом детекторе при воздействии мощного рентгеновского излучения.

Исследования проводились на термоядерной установке Ангара-5-1, где под действием мегаамперных токов нагрузка превращается в нагретое плазменное образование [24]. Установка построена по модульному принципу, где токи 8 модулей складываются до величины 3-4 МА в центре общей вакуумной камеры (цилиндрическая, диаметр 4 метра) на общую нагрузку. Геометрия установки с указанием расположения диагностического оборудования приведена на рис. 7.



Рис. 7 — Геометрия установки. Генератор импульсного напряжения с подводящей линией (8 шт., расположенные равномерно по окружности. Вакуумная камера (диаметр 2 метра, высота 2,5 метра)

Общий вид установки показан на рис. 8.



Рис. 8— Общий вид установки. Фотография установки – 1, фотография вакуумной камеры с входной дверью – 2, фотография концентратора энергии в область излучения – 3

Основные характеристики рентгеновского пучка (мощность, спектральный состав) при фиксированном токе установки определяются конструкцией и материалом токовой нагрузки. Наибольшее применение на установке Ангара-5-1 нашли цилиндрические нагрузки (лайнеры) из W-проволок толщиной 5-10 мкм. Данная нагрузка при полном токе 3-4 МА обеспечивает

выход излучения до 30 кДж за время 10 нс [25]. Форма импульса излучения, измеренная вторично-эмиссионным детектором, с длительностью порядка 20 нс на полувысоте показана на рис. 9.



Рис. 9 – Временная функция рентгеновского излучения установки Ангара-5-1.

Спектральный состав излучения определяется параметрами лайнера (геометрия, атомный состав материала). Спектральный состав излучения показан на рис. 10.



Рис. 10 – Спектральный состав рентгеновского излучения установки Ангара-5-1.

Основная доля излучения находится в области энергий квантов менее 400 эВ, глубина проникновения которых в кварце меньше чем 1 мкм. На рис. 11 показаны изображения физико-геометрической модели кварцевого датчика. На кварцевую шайбу (фиолетовый цвет) толщиной 0,5 мм и диаметром 18 мм сверху нанесен слой золота толщиной 300 нм (желтый цвет). Вторым активного слоя диэлектрика является электродом для подложка ИЗ нержавеющей стали (голубой цвет). Рентгеновское излучение проходит через коллиматор толщиной 4 мм с отверстием диаметром 3 мм (синий цвет верхняя пластина). Все эти пластины вместе с диэлектрическими прокладками заключены в латунный цилиндрический корпус (серый цвет).





Рис. 11 – Физико-геометрическая модель кварцевого датчика

Мощность потока энергии вблизи верхнего золотого электрода оценивается от 1 до 3 MBт/см².

5. Сравнение экспериментальных данных с результатами расчетов

Рассчитаны распределения поглощенной дозы и тока электронов отдачи по толщине кварца. Поглощенная доза спадает больше чем в 1000 раз на 5 мкм (рис. 12). Ток вблизи поверхности достигает 0,068 А/см².



Рис. 12 – Распределение поглощенной дозы по толщине кварца

На рис. 13 и 14 представлены результаты расчета концентрации электронов проводимости. Временная зависимость концентрации электронов проводимости повторяет временную форму импульса рентгеновского излучения. Носители заряда генерируются в приповерхностной области кварца.



Рис. 13 – XZ сечение концентрации электронов проводимости [см⁻³] при t=22 нс (максимум импульса рентгеновского излучения).



Рис. 14 – Зависимость концентрации электронов проводимости от времени вблизи поверхности кварца.

На рис. 15 и 16 представлены результаты расчета проводимости. Проводимость вблизи поверхности кварца достигает значений, характерных для собственной проводимости полупроводников (10⁻⁴ См/м).



20



Рис. 16 – Зависимость проводимости от времени вблизи поверхности кварца.

На рисунках 17 и 18 представлены результаты расчета напряженности электрического поля. Напряженность электрического поля не превышает 1 МВ/м. При таких напряженностях первичная рекомбинация не достигает насыщения. Следовательно, ток проводимости σE зависит не только от источника электронно-дырочных пар и напряженности поля, которые определяются флюенсом рентгеновского излучения, но и от первичной рекомбинации, зависящей от самосогласованного электрического поля. Поэтому зависимость тока проводимости от флюенса излучения нелинейна.



Рис.17 – XZ сечение напряженности электрического поля [ед. СГСЭ] при t=22 нс.



Рис. 18 – Зависимость напряженности электрического поля от времени вблизи поверхности кварца.

По проводимости и напряженности электрического поля рассчитан ток по поверхности кварца. Зависимости тока от времени и сравнение с

экспериментом приведены на рисунке 19. На этом рисунке приведены расчеты при мощности потока энергии 1, 2 и 3 MBт/см². Экспериментальная зависимость тока от времени получена как среднее по четырем независимым испытаниям.



Рис. 19 – Зависимость рассчитанного тока от времени при различных значениях потока излучения в сравнении с экспериментом

Временная форма рассчитанной зависимости тока по поверхности кварца совпадает с экспериментально измеренной. По амплитуде зависимость тока от времени больше похожа на эксперимент при мощности потока энергии 3 MBт/см².

Заключение

Разработана математическая модель генерации и динамики электронов проводимости в кварце. Модель генерации учитывает зависимость начальной рекомбинации от напряженности электрического поля. Для описания рассеяния электронов проводимости на фононах рассчитаны времена релаксации, зависящие от плотности состояний. Для решения кинетических уравнений используется статистический метод частиц.

Математическая модель и алгоритм верифицированы путем сравнения рассчитанного тока утечки с экспериментом. В эксперименте кварцевый датчик облучался рентгеновским излучением, генерируемым на установке Ангара-5-1. Рентгеновское излучение поглощается вблизи поверхности кварца (~1 мкм), в этой области генерируются электрические поля с достаточной большой напряженностью (~1 МВ/м) и радиационная проводимость, связанная с возникновением большого количества носителей заряда в зоне проводимости.

Проводимость в приповерхностных слоях кварца сравнима с проводимостью в полупроводниках. Из этого можно сделать вывод, что для моделирования динамики неравновесных носителей в других диэлектрических материалах применима кинетическая модель радиационной проводимости, предложенная в этой работе. В дальнейшем представляет интерес моделирование радиационной проводимости в приповерхностном слое лейкосапфира при воздействии мощного рентгеновского излучения.

Как радиационная проводимость, так и напряженность электрического поля нелинейно зависят от мощности флюенса энергии. Вычислен ток по поверхности кварца и флюенсах 1, 2 и 3 MBт/см². Получено, что при задании в вычислительном эксперименте мощности потока энергии 3 MBт/см² зависимость тока от времени лучше совпадает с экспериментальными данными.

Библиографический список

- 1. Мурзин С.В. Введение в физику космических лучей. М.: Атомиздат, 1979.
- 2. Радиационная стойкость изделий ЭКБ: Научное издание / Под ред. д-ра техн. наук, проф. А.И. Чумакова. М.: НИЯУ МИФИ, 2015, 512 с.
- 3. Ермаков С.М., Михайлов Г.А.: Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982.
- 4. Жуковский М.Е., Скачков М.В., Егорушкин А.А. Модификации метода Монте-Карло в задачах о трансформации ионизирующего излучения. // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, №85, 2005.
- 5. Натерер Ф. Математические аспекты компьютерной томографии. М.: Мир, 1990.
- 6. NVIDIA, CUDA C PROGRAMMING GUIDE, _v7.5 | September 2015.
- 7. Vengrinovich V.L., Denkevich Y.B., Tillack G.-R. and Nockemann C. Multistep 3D X-Ray Tomography for a Limited Number of Projections and Views. Review of Progress in QNDE 16, ed. By D.Tompson and D.Chimenti, Plenum Press, N.Y., p.317-323, 1997.
- 8. Яненко А.В., Никифоров А.Ю., Скоробогатов П.К., Чумаков А.И. Экстремальная электроника: Текст лекций М.: НИЯУ МИФИ, 2014.
- 9. Березин А.В., Волков Ю.А., Марков М.Б., Тараканов И.А. Модель радиационно-индуцированной проводимости кремния // Матем. моделирование, 28:6 (2016), 18–32.
- 10.Березин А.В., Воронцов А.В., Марков М.Б., Плющенков Б.Д. О выводе и решении уравнений Максвелла в задачах с заданным волновым фронтом полей // Математическое моделирование, 18 (4), 2006, с. 43-60.
- 11.Березин А.В., Волков Ю.А., Казымов Ш.А., Марков М.Б., Тараканов И.А. Моделирование радиационной проводимости статистическим методом частиц // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2016, № 9, 20 с. https://doi.org/10.20948/prepr-2016-9
- 12.Волков Ю.А., Казаков Е.Д., Калинин Ю.Г., Марков М.Б., Масленников Д.Д., Орлов М.Ю., Тараканов И.А. Исследование отклика полупроводникового

детектора на действие мощного импульсного ионизирующего излучения // Прикладная физика. 2020. № 1. С. 58.

- 13.Протасов Ю.С., Чувашов С.Н. Твердотельная электроника. М.: Из-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2003, 480 с.
- 14.Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М., 1978, 615 с.
- 15.Китель Ч. Квантовая теория твердых тел. М., 1967, 491 с.
- 16.Кардона М. Основы физики полупроводников. М., 2002, 560 с.
- 17.Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. М.: Наука, 1977.
- 18.Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1974.
- 19.Gnani E., Reggiani S., Rudan M. Density of states and group velocity of electrons in SiO2 calculated from a full band structure // Physical Review, B66, 2002, p. 195205.
- 20.Fischetti M.V., DiMaria D.J., et al. Theory of high-field electron transport in silicon dioxide // Phys. Rev., B, V.31, N12, 1985.
- 21.Волков Ю.А., Тараканов И.А. Радиационно-индуцированная проводимость в кремнии и оксиде кремния. Времена релаксации // Препринты ИПМ им.М.В.Келдыша, 2013, № 84.
- 22.Scozzoli L., Reggiani S. and Rudan M. Homogeneous Transport in Silicon Dioxide Using the Spherical-Harmonics Expansion of the BTE // IEICE Trans.Electron, Vol.E83-C. NO.8, 2000.
- 23. Таперо К.И., Улимов В.Н., Членов А.М. Радиационные эффекты в кремниевых интегральных схемах космического применения
- 24. Альбиков З.А., Велихов Е.П., Веретенников А.И. и др. Экспериментальный комплекс Ангара-5-1 // Атомная энергия, 1990, т.68, в.1, С. 36-46
- 25. Айвазов И.К., Волков Г.С., Вихарев В.Д., Зайцев В.И. 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.

Оглавление

Введение	
1. Физико-математическая модель генерации неравновесн носителей заряда	ых 3
2. Математическая модель и алгоритм динамики неравнов носителей заряда	есных б
3. Особенности константного обеспечения математическо динамики носителей заряда	й модели 10
4. Физико-геометрическая модель эксперимента	
5. Сравнение экспериментальных данных с результатами ј	расчетов18
Заключение	
Библиографический список	