На правах рукописи

Штанг Татьяна Владимировна

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЗАРЯЖЕНИЯ И ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ЭЛЕКТРОНАМИ НАНОСТРУКТУРНЫХ ОКСИДОВ КРЕМНИЯ И АЛЮМИНИЯ

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Екатеринбург – 2014

Работа выполнена на кафедре «Физические методы и приборы контроля качества» физико-технологического института ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

Научный руководитель: доктор технических наук, профессор
Кортов Всеволод Семенович

Официальные оппоненты: **Мартынович Евгений Федорович**,
доктор физико-математических наук, профессор,
Иркутский филиал ФГБУН Института лазерной физики Сибирского отделения Российской академии наук, заведующий филиалом;

Арбузов Валерий Иванович,
доктор физико-математических наук, профессор,
ОАО Научно-исследовательский и технологический институт оптического материаловедения ВНЦ «ГОИ им. С.И. Вавилова», начальник лаборатории лазерных стекол – главный конструктор направления

Ведущая организация: **ФГБУН Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук**

Защита состоится «5» декабря 2014 г. в 15:00 ч на заседании диссертационного совета Д 212.285.02 на базе ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по адресу: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира 19, аудитория И-420.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», http://dissovet.science.urfu.ru/news2/

Автореферат разослан «____» _____ 2014 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Ищенко Алексей Владимирович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Изучение закономерностей и механизмов люминесценции при воздействии ионизирующего излучения на кристаллические и наноструктурные материалы, включая оксиды, является актуальной задачей физики конденсированного состояния. Уникальные люминесцентные свойства широкозонных оксидов обуславливают их применение в индикаторных и светоизлучающих устройствах, оптоэлектронике, твердотельной дозиметрии, радиационной физике. В то же время влияние заряжения поверхности и приповерхностных слоев на свойства люминофоров при облучении потоками электронов практически не изучено, хотя является значимым фактором. Заряжение диэлектриков влияет на их физические свойства, в частности, вызывает смещение энергетических уровней центров захвата и искажения зонной структуры, что может изменять параметры люминесценции. Кроме того известно, что встроенный при облучении электрический заряд существенно влияет на вольт-амперные характеристики МДП структур в электронике.

Особый интерес для исследований представляют широко применяемые в науке и технике диоксид кремния и анионо-дефектный оксид алюминия, в том числе в наноструктурном состоянии. Как известно, при уменьшении размеров частиц материалов до наномасштабов их макроскопические свойства могут значительно изменяться. При исследовании люминесценции в наноструктурных диэлектриках необходимо учитывать особенности нанокристаллического состояния твердого тела, влияющие на процессы возбуждения, спектральный состав и длительность послесвечения.

Ожидается, что на основе наноразмерных широкозонных оксидов кремния и алюминия можно изготовить материалы с высоким квантовым выходом люминесценции в широком спектральном диапазоне, с повышенной радиационной стойкостью и увеличенным ресурсом работы.

Изучение свойств наноразмерных диэлектриков с целью создания новых функциональных материалов непрерывно расширяется. Отметим также, что изготовление и аттестация наноструктурных образцов является непростой задачей, требующей использования дорогостоящего оборудования. В этой связи компьютерное моделирование спектрально-кинетических свойств катодо- и фотолюминесценции наноструктурных материалов позволит значительно сократить время и затраты на поиск и создание новых люминофоров.

Использование методов импульсной катодолюминесценции и фотолюминесценции в ВУФ диапазоне, регистрация люминесценции со спектральным разрешением и компьютерное моделирование позволят комплексно исследовать закономерности возбуждения люминесценции и вторичных процессов, возникающих при облучении образцов. Кроме того, импульсное возбуждение люминесценции дает ряд преимуществ, среди них уменьшение отрицательного

влияния процессов заряжения поверхности и теплового воздействия на исследуемый образец. Становится возможным также исследовать временные процессы релаксации возбуждения.

Целью диссертационной работы является изучение методами компьютерного моделирования и люминесцентной спектроскопии процессов заряжения и спектрально-кинетических характеристик катодо- и фотолюминесценции наноструктурных оксидов алюминия и кремния.

С учетом цели диссертационной работы сформулированы **задачи исследования**:

1 Развить физическую модель процессов заряжения наноструктурных широкозонных оксидов при воздействии пучка электронов. Усовершенствовать физические модели катодо- и фотолюминесценции с учетом наноструктурного состояния исследуемых образцов.

2 Разработать алгоритмы расчета и программы для моделирования изучаемых процессов.

3 Провести моделирование заряжения поверхности и приповерхностных слоев в исследуемых наноструктурных оксидах при варьировании размеров наночастиц и условий возбуждения. Изучить влияние заряжения на кинетику затухания люминесценции, возбужденной импульсным электронным пучком.

4 Рассчитать спектрально-кинетические параметры катодо- и фотолюминесценции в наноструктурных оксидах алюминия и кремния при варьировании размеров наночастиц и условий возбуждения. Провести сравнение с монокристаллами.

5 Найти и обосновать общие закономерности заряжения, а также изменений свойств импульсной катодо- и фотолюминесценции в наноразмерных оксидах алюминия и кремния.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. С учетом основных механизмов рассеяния носителей заряда и особенностей наноструктурного состояния усовершенствованы физические модели и разработаны новые программные модули для компьютерных расчетов процессов заряжения, а также катодо- и фотолюминесценции в диэлектрических материалах.

2. Впервые установлено, что при стационарной электронной бомбардировке (E = 1 кэВ) наноструктурных оксидов алюминия и кремния глубина локализации заряда соответствует размеру наночастиц (20 – 30 нм), а напряженность индуцированного электрического поля в 1,5 – 2 раза меньше, чем в монокристаллах.

3. Впервые рассчитана напряженность индуцированного электрического поля при облучении наноструктурного оксида алюминия наносекундным пучком электронов (E = 130 кэВ), которая на полтора порядка меньше, чем при стационарной электронной бомбардировке.

4. Обнаружено уменьшение времени затухания внутрицентровой люминесценции при заряжении приповерхностных слоев наноструктурных оксидов алюминия и кремния и его немонотонная зависимость от размера частиц.

5. Впервые получена количественная оценка влияния размеров наночастиц на ширину полос свечения и на затухание импульсной катодолюминесценции и фотолюминесценции в наноструктурных оксидах алюминия и кремния.

6. Обоснована и впервые апробирована усовершенствованная методика реконструкции спектров фотолюминесценции для идентификации уширенных и перекрывающихся полос свечения наноструктурных люминофоров.

Защищаемые положения:

1. Развитая физическая модель и разработанное программное обеспечение позволяют исследовать механизмы заряжения и основные процессы внутрицентровой люминесценции при импульсном облучении электронами или фотонами ВУФ диапазона объемных кристаллических и наноструктурных диэлектриков.

2. Уменьшение плотности заряда и напряженности индуцированного им электрического поля в приповерхностном слое наноструктурных оксидов алюминия и кремния по сравнению с монокристаллическими образцами обусловлено изменением ширины запрещенной зоны в нанокристаллах и рассеянием электронов на их границах.

3. При облучении наноструктурных оксидов алюминия и кремния наносекундными импульсами электронов высокой плотности формируется отрицательный заряд у поверхности, вызывающий увеличение времени послесвечения рекомбинационной люминесценции. Величина объемной плотности заряда и напряженности электрического поля на порядок меньше, чем при стационарном облучении электронами средних энергий из-за меньшего флюенса электронов и интенсивной рекомбинации электронно-дырочных пар.

4. При уменьшении размера частиц время затухания импульсной катодолюминесценции в наноструктурных α-Al_2O_3 и α-SiO_2 сокращается более чем на порядок по сравнению с аналогичной величиной в монокристаллах вследствие изменения в наноструктурах фононного спектра и интенсивного рассеяния электронов на многочисленных границах наночастиц.

Практическая значимость работы

1. Получены два свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ. Разработанные программные комплексы можно применять для расчетов заряжения поверхности и оценки электрической прочности широкого круга монокристаллических и наноструктурных оксидных диэлектриков при облучении электронами.

2. Рассчитанные параметры заряжения поверхности и приповерхностных слоев наноструктурных оксидов кремния и алюминия при облучении электронами необходимо учитывать при проектировании радиационно-стойких электронных приборов, используемых в полях излучений, например, в космических аппаратах.

3. Найденные спектрально-кинетические параметры катодо- и фотолюминесценции в наноструктурных диэлектриках представляют интерес при создании светоизлучающих устройств и изделий оптоэлектроники.

4. Усовершенствованная методика реконструкции слабо разрешенных экспериментальных спектров фотолюминесценции, учитывающая уширение полос при наличии наночастиц, позволяет идентифицировать полосы свечения в наноструктурных и разупорядоченных люминофорах.

Личный вклад автора. Постановка целей и задач исследований была проведена совместно с научным руководителем профессором, д-ром техн. наук В.С. Кортовым. Автором самостоятельно усовершенствована физическая модель и разработан алгоритм для расчета параметров заряжения и люминесценции, создано программное обеспечение, проведено моделирование процессов заряжения поверхности и катодо- и фотолюминесценции в монокристаллических и наноструктурных оксидах алюминия и кремния. Программирование отдельных процедур и контрольное тестирование программного комплекса были выполнены совместно с канд. физ.-мат. наук С.В. Звонаревым.

Спектры стационарной фотолюминесценции при ВУФ-возбуждении получены совместно с канд. физ.-мат. наук Е.А. Бунтовым. Спектры фотолюминесценции при возбуждении анионо-дефектного оксида алюминия синхротронным излучением измерены д-ром физ.-мат. наук В.А. Пустоваровым. Обработка спектров и идентификация полос свечения выполнены диссертантом.

Анализ, интерпретация результатов моделирования и экспериментальных данных, а также формулировка выводов и защищаемых положений диссертации принадлежат лично автору.

Апробация работы. Основные результаты диссертации были представлены и обсуждены на следующих конференциях: XII международной школе-семинаре по люминесценции и лазерной физике (Иркутск, 2010); XVII и XVIII международных конференциях молодых ученых по приоритетным направлениям развития науки и техники (Екатеринбург, 2010); Девятой международной научно-практической конференции «Исследование, разработка и применение высоких технологий в промышленности» (Санкт-Петербург, 2010); the 3rd Russian-German traveling seminar «Synchrotron Radiation for Physics and Chemistry of Nanostructured Material» (Москва, Екатеринбург, Новосибирск, 2011); международной научно-технической конференции «Нанотехнологии функциональных материалов» (Санкт-Петербург, 2012); the 15th International Conference on Radiation Physics and Chemistry of Condensed Matter в рамках the 3rd International Congress «Radiation Physics and chemistry of Condensed Matter, High Current Electronics and Modification of Materials with Particle beams and Plasma Flows» (Томск, 2012); the 17th International Symposium on High Current Electronics в рамках the 3rd International Congress «Radiation Physics and chemistry of Condensed Matter, High Current Electronics and Modification of Materials with Particle beams and Plasma Flows» (Томск, 2012); Всероссийской молодежной конференции «Физика и

химия наноразмерных систем» (Екатеринбург, 2012); на Восемнадцатой и Девятнадцатой всероссийских научных конференциях студентов-физиков и молодых ученых (Красноярск, 2012; Архангельск, 2013); V всероссийской конференции по наноматериалам (Звенигород, 2013), XIV Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества памяти академика А.М. Ильина (Екатеринбург, 2013), 2014 Sino-Russian Symposium on Advanced Materials and Processing Technology (P.R. China, Qingdao, 2014).

Диссертант является победителем конкурса на проведение научных исследований аспирантами Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в 2012 г., 2013 г. И 2014 г. в рамках реализации программы его развития (договора № 1.2.1.5/61 от 01.07.2012, № 1.2.2.3/63 от 27.05.2013 и № 1.2.2.2 - 14/75 от 31.03.2014), а также принимал участие как соисполнитель по следующим грантам и проектам, включающим материалы диссертационной работы:

1) грант Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых МК-4696.2013.2 (договор № 14.125.13.4696-МК);

2) грант ОПТЭК Carl Zeiss для поддержки молодых ученых ведущих высших учебных заведений и научных исследовательских центров 2012/2013 (договор № 20/2013 от 21 мая 2013).

Публикации. Результаты исследований изложены в 23 публикациях, в том числе, в 5 статьях в реферируемых российских журналах, 2 статьях в сборниках трудов международных и российских конференций, 14 материалах международных и российских конференций и в 2 свидетельствах о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы из 114 наименований. Объем диссертации составляет 140 страниц, включая 24 таблицы, 67 рисунков.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность исследований, сформулированы цель и задачи диссертационной работы, ее научная новизна и практическая значимость, приведены защищаемые положения, указаны личный вклад автора, апробация, структура и объем работы.

В **первой обзорной главе** «Взаимодействие электронных пучков и квантов ВУФ диапазона с широкозонными оксидами» рассмотрены основные физические процессы, возникающие при облучении оксидных диэлектриков электронными пучками и фотонами, в частности, механизмы возникновения токов, транспорт электронов в диэлектрике в условиях электрон-фононных взаимодействий, заряжение его поверхности и приповерхностных слоев, катодо- и фотолюминесценция. Приводится краткий анализ существующих моделей заряжения, результаты моделирования объемного заряда и напряженности электрического поля для кристаллического SiO_2. Особое внимание уделено особенностям люминесцентных свойств наноструктурных

материалов и рассмотрению основных центров свечения в исследуемых оксидах кремния и алюминия.

По результатам анализа литературных данных и с учетом цели диссертационной работы сформулированы задачи исследования, приведенные в общей характеристике работы.

Во **второй главе** «Развитие физических моделей и разработка алгоритмов расчета процессов заряжения и люминесценции кристаллических и наноструктурных диэлектриков» представлены разработанные автором диссертации модели и алгоритмы расчета заряжения наноструктурных диэлектриков при электронной бомбардировке, кинетики затухания катодо- и фотолюминесценции. Приведены результаты оценки воспроизводимости расчетов при моделировании заряжения диэлектриков.

При моделировании заряжения и кинетики затухания катодо- и фотолюминесценции в наноструктурных оксидах разумно вначале разработать и апробировать соответствующие модели для объемных монокристаллических материалов, а затем учесть особенности наноструктурного состояния, поскольку рассматриваемым нами наноструктурным оксидам свойственны как процессы, присущие кристаллам, так и новые эффекты.

Заряжение диэлектриков при электронной бомбардировке. При облучении диэлектрического образца электронами средних энергий (1 – 10) кэВ в его приповерхностном слое образуется двойной слой объемного заряда с положительно заряженной поверхностью за счет эмиссии вторичных электронов и отрицательным зарядом, формирующимся в приповерхностной области образца вследствие захвата электронов ловушками. Одновременно в диэлектрике формируется электрическое поле с напряженностью до нескольких МВ/см.

В математическом описании заряжения поверхности диэлектриков можно выделить следующие этапы. Сначала рассчитывается суммарная плотность тока $j(x)$, определяемая током первичных (PE) и вторичных (SE) электронов, током Пула-Френкеля (PF) и Фаулера-Нордгейма (FN), а также дырочным (H) и обратным (G) токами:

$$j(x) = j_{PE}(x) + j_{SE}(x) + j_{PF}(x) - j_{FN}(x) - j_H(x) + j_G(x), \qquad (1)$$

Затем интегрально-дифференциальное уравнение для напряженности электрического поля решается численно итерационным методом квазистационарно для малых интервалов времени [1]:

$$F_n(x,t) = F(x,t-\Delta t) - \frac{\Delta t}{\varepsilon_0 \cdot \varepsilon} \cdot \left[j_n\left(x, \{F'_{n-1}(x')\}\right) - j_n\left(x=0, \{F'_{n-1}(x')\}\right)\right], \qquad (2)$$

где $F'(x')$ – электрическое поле по всему диэлектрическому слою ($0<x'<d$), d – толщина слоя, t – время облучения электронами, Δt – малый интервал времени, ε – диэлектрическая проницаемость материала, ε_0 – абсолютная диэлектрическая проницаемость. Слагаемое $-j_n(x = 0, \{F_{n-1}'(x')\})$ задает граничное условие $F(x = 0, t) = 0$.

Распределение объемной плотности заряда $\rho(x)$ определяется при решении уравнения Пуассона:

$$\varepsilon_0 \varepsilon \nabla \vec{F} = \varepsilon_0 \varepsilon \frac{d}{dx} F = \rho \,. \tag{3}$$

Кинетика затухания катодо- и фотолюминесценции. При облучении диэлектрического образца электронами с энергиями (100 – 150) кэВ или ВУФ квантами большая часть приобретаемой энергии расходуется на ионизацию вещества, создание электронно-дырочных пар (ЭДП). Скорость генерации ЭДП в случае катодолюминесценции равна [2]:

$$G = E_0 \cdot j_0 / \left(e \cdot R \cdot E_i \right), \tag{4}$$

где E_0 - начальная энергия первичных электронов; j_0 - плотность тока электронного луча; e - элементарный заряд; R – максимальная глубина проникновения заряда.

При воздействии на диэлектрический материал пучком фотонов, выражение для расчета скорости генерации ЭДП принимает вид [3]:

$$G = 6.25 \cdot 10^{15} \cdot P_\gamma \cdot \rho / E_i \,, \tag{5}$$

где P_γ – мощность дозы излучения, идущего на ионизацию; ρ – плотность облучаемого вещества; E_i – энергия образования вторичных электронов.

Изменение концентрации пар дефектов n_{eh} рассчитывается на основе кинетического уравнения баланса [2]:

$$dn_{eh} / dt = G - A \cdot n_{eh} - B \cdot n_{eh}^2 \,, \tag{6}$$

где A и B – суммарные коэффициенты линейной и квадратичной рекомбинации электронно-дырочных пар на центрах люминесценции.

Изменение интенсивности люминесценции I_c со временем, т.е. кинетика затухания, определяется населенностью N_i излучательного уровня и вероятностью A_{i0} оптического перехода с этого уровня в основное состояние:

$$I_c(t) = E_m \cdot A_{i0} \cdot N_i(t) \,, \tag{7}$$

где E_m - энергия фотонов (положение максимума в спектре излучения).

Кинетическое уравнение для населенности i-го излучательного уровня центра люминесценции в облучаемой зоне вещества имеет вид:

$$dN_i / dt = B_{ief} \cdot n_{eh}^2 - \left(A_{i0} + A_{ip} \right) \cdot N_i \,, \tag{8}$$

где A_{ip} - вероятность безызлучательного перехода; B_{ief} - эффективная константа скорости возбуждения излучательного уровня.

Особенности переноса заряда в наноструктурных диэлектриках. Различие свойств наноструктурных и монокристаллических образцов связано с малой величиной кристаллитов и очень сильно развитыми границами раздела наноматериалов. Электроны, двигаясь в наноструктуре, испытывают многократные столкновения с указанными границами, что приводит к потере их энергии. Для перехода электрона в другую наночастицу необходимо, чтобы его энергия E была больше величины потенциального барьера χ_B на границе наночастицы с учетом угла

рассеяния θ. Если энергия недостаточна для преодоления барьера на границе нанокристалла, электрон отражается от нее и, рассеиваясь на фононах, термализуется. Вероятность прохождения электрона W_B через границу определяется по формуле [4]:

$$W_B = 4\left(1-\frac{\chi_B}{E\cdot\cos^2\theta}\right)^{1/2} \Bigg/ \left[1+\left(1-\frac{\chi_B}{E\cdot\cos^2\theta}\right)^{1/2}\right]^2, \text{ при } E\cdot\cos^2\theta \geq \chi_B. \quad (9)$$

Другой важной особенностью наноструктурных материалов является значительный рост концентрации поверхностных центров захвата электронов, связанный с увеличением числа границ наночастиц с высоким уровнем дефектности. При электронной бомбардировке значительная часть электронов будет захватываться на указанные центры. Поверхностные состояния имеют энергии, отличные от массивных твердых тел. Одна из причин – это нарушение трехмерной периодичности на поверхности. По приведенной ниже формуле можно произвести оценку изменения энергии поверхностных уровней захвата по сравнению с объемными [5]:

$$\Delta E_S = (1-\beta)\cdot E_g/2, \quad (10)$$

где $\beta = M_S/M_V$ – отношение поверхностной и объемной констант Маделунга, E_g - ширина запрещенной зоны.

При моделировании было также учтено изменение ширины запрещенной зоны в зависимости от размера наночастиц. Энергия электронного возбуждения изолированной молекулы обычно больше ширины запрещенной зоны в объемном материале. Отсюда следует, что переход в нанокристаллическое состояние материала должен сопровождаться смещением полосы фундаментального поглощения в высокочастотную область. Поэтому в наноструктурах происходит увеличение ширины запрещенной зоны с уменьшением размера наночастиц:

$$\Delta E = E'_g - E_g = \hbar^2\cdot\pi^2/\left(2\cdot\mu\cdot R_C^2\right), \quad (11)$$

где E'_g и E_g – ширина запрещенной зоны в размерно-ограниченной структуре и в объемном кристалле; μ – эффективная масса пары электрон-дырка; R_C – радиус нанокристалла.

Особенности нанолюминофоров. В нанолюминофорах уменьшение размера частиц и переход от объемного материала с зонной структурой к отдельным электронным уровням, а также ограничение длины свободного пробега носителей заряда приводит к появлению новых оптических переходов, изменению энергии переходов и времени свечения.

Для наноструктурных люминофоров характерен сдвиг спектральных полос в сторону больших энергий квантов при уменьшении размера частиц – «голубой сдвиг». Кроме того, известно, что в наноструктурных материалах происходит уширение полос поглощения и свечения. Ширина полосы спектра обусловлена действием двух факторов: рассеянием электрона на дефектах кристаллической решетки и электрон-фононным взаимодействием. Основной вклад вносят процессы рассеяния электронов, который определяется долей поверхности и пропорционален

~ $1/R$. Вклад от электрон-фононного взаимодействия соответствует ~ $1/R^2$. Таким образом, изменение ширины полосы свечения ΔU можно описать следующей формулой [5]:

$$\Delta U = h\nu_e / R + \varphi(R) / R^2 , \qquad (12)$$

где ν_e - кинетическая скорость свободных носителей заряда; h - постоянная Планка; $\varphi(R)$ - функция, зависящая от размера частиц; R - размер частиц. Значения изменения ширины линии свечения в данной формуле представлены в эВ.

В наноматериалах происходит изменение времени τ релаксации возбуждения, которое описывается соотношением:

$$1/\tau = a \cdot R^{\alpha} / \tau_b + b \cdot \nu_e / R , \qquad (13)$$

где a, b – константы, τ_b - время релаксации в массивном материале, ν_e - кинетическая скорость свободных носителей заряда, R - размер частицы.

В наноструктурных образцах исследуемых оксидов быстрые излучательные релаксации вызываются в основном поверхностными аналогами известных центров свечения, образованных вакансиями кислорода. В диоксиде кремния это кислородно-дефицитные центры (КДЦ), представленные нерегулярными связями ≡Si – Si ≡, ≡ Si – Ge ≡ или ≡ Ge – Ge ≡. При возбуждении пучком электронов спектр свечения α-КДЦ имеет две составляющие – при 2,7 эВ и при 4,45 эВ. Спектр свечения β-КДЦ также имеет два максимума – при 3,1 эВ и 4,3 эВ [6]. В анионо-дефектном Al_2O_3 основными собственными дефектами являются F-центры (вакансия кислорода, захватившая два электрона) и F^+-центры (вакансия кислорода с одним захваченным электроном). Свечение F-центра происходит при 3,0 эВ, а F^+-центра при 3,8 эВ [7]. Спектрально-кинетические расчеты проведены для указанных центров в исследуемых оксидах.

На базе описанных физических и математических моделей были разработаны алгоритмы и программы на языке программирования Object Pascal в среде Delphi 7 для расчетов заряжения наноструктурных диэлектриков после электронной бомбардировки и кинетики затухания катодо- и фотолюминесценции исследуемых материалов. Выполненная оценка воспроизводимости результатов моделирования показала возможность применения разработанного программного обеспечения для расчета заряжения и кинетики затухания люминесценции исследуемых материалов.

В **третьей главе** «Основные закономерности процессов заряжения поверхности и приповерхностных слоев наноструктурных оксидов кремния и алюминия при облучении пучком электронов» описана апробация развитой физической модели, разработанных алгоритмов расчета и программного обеспечения, проведено моделирование динамики возникновения токов и заряжения наноструктурных оксидов алюминия и кремния.

В ходе апробации были рассчитаны основные параметры заряжения для кристаллического диоксида кремния, подвергнутого электронной бомбардировке. Полученные величины

максимальной глубины проникновения заряда, его объемной плотности и напряженности электрического поля хорошо соответствуют литературным данным.

Описанные далее результаты расчетов заряжения исследуемых оксидов получены при энергии бомбардирующих электронов 1 кэВ, плотности тока 10^{-5} А/см^2 при варьируемой длительности бомбардировки от 5 мс до 1 с.

Для определения основных параметров заряжения, таких, как напряженность электрического поля и объемная плотность заряда, необходимо рассчитать суммарную плотность электрического тока. Возникает необходимость исследования закономерностей формирования различных токов в зависимости от глубины слоя, возбужденного электронной бомбардировкой, при варьировании времени облучения электронами и условий воздействия на ток вторичных электронов. В последнем случае рассматривалось изменение потенциала вблизи поверхности, которое задавалось величиной и знаком потенциала на управляющей сетке. При положительном потенциале сетки обеспечивался отбор вторичного тока, при отрицательном потенциале электронная бомбардировка происходила без отбора вторичного тока и все вторичные электроны возвращались в образец.

Суммарный ток определяется суперпозицией следующих токов: токи первичных (PE) и вторичных электронов (SE), Пула-Френкеля (PF) и Фаулера-Нордгейма (FN), дырочный (H) и обратный (G) токи.

На рисунке 1 показано изменение плотностей токов: суммарного, первичных и вторичных электронов, дырочного и обратного токов, тока Пула-Френкеля и Фаулера-Нордгейма при электронной бомбардировке образца Al_2O_3 в течение 5 мс, без отбора вторичного тока. Можно видеть, что плотность тока первичных электронов при увеличении глубины слоя плавно уменьшается от значения $8\cdot10^6$ А/см^2 на поверхности диэлектрика до 0 на глубине приблизительно 50 нм и определяется параметрами падающего электронного пучка, а также характеристиками самого материала. Плотность дырочного тока, возникающего за счет ионизации первичными и вторичными электронами атомов вещества, изменяется на глубине до 60 нм.

Основной вклад в формирование суммарного тока в рассматриваемом образце при указанной длительности электронной бомбардировке вносят ток вторичных электронов и обратный ток. При описании возникновения тока вторичных электронов учитывается скорость образования внутренних вторичных электронов, зависящая от энергетических потерь рассеянных первичных электронов в оксиде и энергии возбуждения вторичных электронов, влияние внутреннего электрического поля и вероятность захвата электронов дырками. Обратный ток - ток отраженных и возвращенных в образец электронов.

Ток Пула-Френкеля, возникающий в сильных электрических полях (более 10^6 В/см) за счет понижения энергии активации освобождения электронов с центров захвата, очень мал и не превышает $6\cdot10^{-17}$ А/см^2.Ток Фаулера-Нордгейма равен нулю, поскольку формируется только при

достаточно высоких напряженностях электрического поля (более 6 МВ/см), когда происходит лавинное образование электронов и дырок.

На рисунке 2 представлены полученные нами зависимости суммарной плотности тока *j* от глубины *x* для монокристаллического и наноструктурного со средним размером частиц 5 нм образцов Al_2O_3 при времени облучения *t* = 5 мс, без отбора вторичного тока. Видно, что кривые близки по форме, но отличаются глубиной локализации максимумов и минимумов плотности суммарного тока. При этом плотность тока в наноструктурном Al_2O_3 меньше, чем в монокристаллическом. Заметные изменения суммарной плотности тока в монокристаллическом образце происходят в более узком приповерхностном слое, чем в наноструктурном оксиде алюминия. Это связано с тем, что удельная плотность наноразмерного Al_2O_3 меньше, чем в монокристалле.

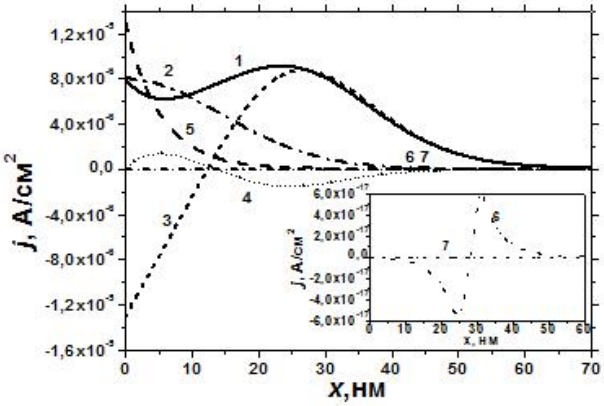

Рисунок 1 – Изменение плотности токов от глубины слоя наноструктурного Al_2O_3 при длительности облучения 5 мс: 1 – суммарного тока; 2 - первичного тока; 3 – вторичного тока; 4 – дырочного тока; 5 – обратного тока; 6 – тока Пула-Френкеля; 7 – тока Фаулера-Нордгейма. На вставке представлены токи Пула-Френкеля (6) и Фаулера-Нордгейма (7)

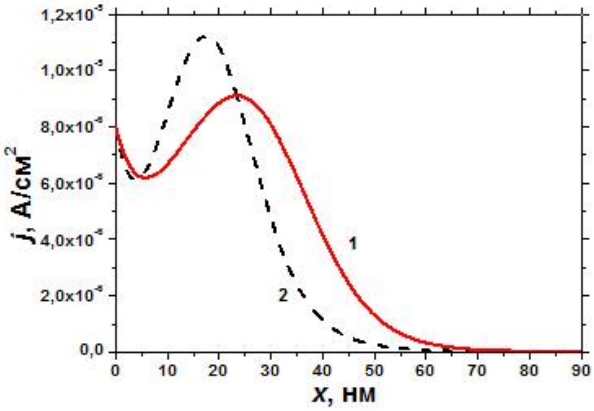

Рисунок 2 – Суммарная плотность тока *j* для наноструктурного (1) и кристаллического (2) образцов Al_2O_3 при времени облучения электронами *t* = 5 мс

Расчеты показали, что при электронной бомбардировке без отбора вторичного тока в приповерхностном слое оксидного диэлектрика формируется «минус-плюс-минус» структура заряда. При электронной бомбардировке с отбором вторичного тока поверхность заряжается положительно. Как видно из рисунка 3.а, при этом максимум плотности заряда формируется на глубине 35 нм (первая область). С увеличением времени бомбардировки растет объемная плотность заряда, созданная дырочным током, и появляется вторая область положительного заряда на глубине около 60 нм, обусловленная током Пула-Френкеля. У наноструктурного Al_2O_3 максимальная величина объемной плотности заряда достигает значений 2,17 Ас/см^3. У монокристаллического образца объемная плотность заряда почти в 1,5 раза больше: величина первой области положительного заряда составляет 3,17 Ас/см^3. Кроме того, существенно выражена вторая область положительного заряда, значение которой в максимуме равно 2,65 Ас/см^3.

Созданный заряд индуцирует внутреннее электрическое поле (рисунок 3.б). У поверхности наноструктурного Al_2O_3 поле мало, затем на глубине около 30 нм наблюдается резкое увеличение.

Напряженность электрического поля в наноструктурном образце не превышает 5,86 МВ/см. Для монокристалла на кривой зависимости напряженности электрического поля наблюдается перегиб на глубине 50 нм, связанный с уменьшением энергии термической ионизации центров захвата электронов в полях высокой напряженности (~ 10^6 В/см) и возникновением тока Пула-Френкеля. При этом напряженность электрического поля в монокристалле Al_2O_3 выше почти в 2 раза по сравнению с наноструктурным образцом и достигает 12,7 МВ/см, вызывая уменьшение энергетической глубины ловушек на 0,96 эВ.

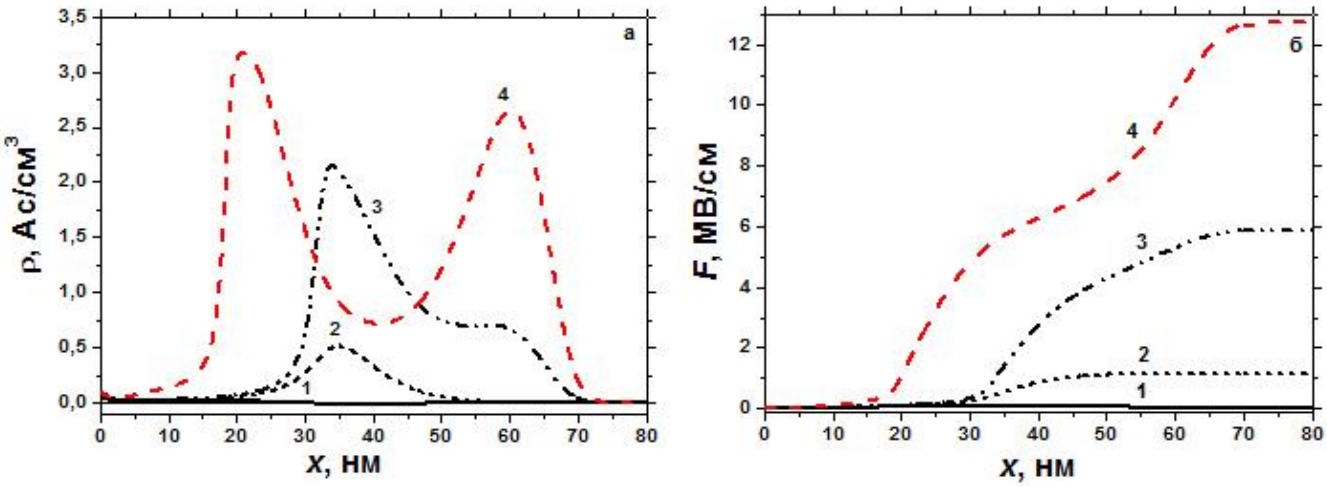

Рисунок 3 – Профиль заряда (а) и распределение напряженности электрического поля (б) в приповерхностном слое наноструктурного Al_2O_3 при различной длительности бомбардировки *t*: 1 – 5 мс, 2 – 100 мс, 3 – 1 с, в сравнении с монокристаллическим аналогом при *t*: 4 – 1 с

Были проведены расчеты заряжения исследуемых оксидов при их облучении импульсами (1 нс) электронов длительностью 1 нс с энергиями 130 кэВ при плотности тока 60 А/см^2. Параметры возбуждения соответствовали характеристикам ускорителя электронов люминесцентного анализатора КЛАВИ, что дает возможность сравнивать результаты расчета с экспериментальными данными. Электроны указанных энергий проникают на глубину около (50-80) мкм. Плотность ионизации при таких энергиях высока из-за лавинного образования носителей заряда в объеме образца, большая часть которых после термализации эффективно заполняет ловушки разного знака и энергетической глубины.

Результаты моделирования представлены на рисунке 4. Расчеты показали, что при облучении наносекундными импульсами электронов в α-Al_2O_3 формируется внутреннее электрическое поле, напряженность которого в приповерхностном слое нарастает монотонно до стационарного значения на глубине около 48 мкм в монокристалле и 78 мкм в наноструктурном образце (рисунок 4.б). Поверхность заряжается отрицательно, причем объемная плотность заряда и напряженность электрического поля меньше в наноструктурном Al_2O_3. На глубине около 80 мкм напряженность электрического поля обоих типов образцов достигает максимального значения 6,75•10^4 В/см. При этом энергетическая глубина ловушек уменьшается на 0,07 эВ вследствие эффекта Пула-Френкеля.

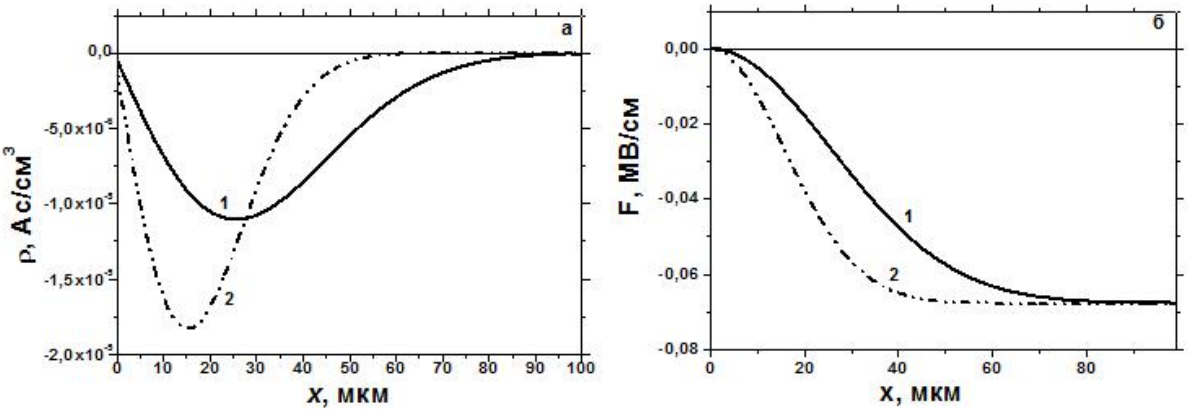

Рисунок 4 – Распределение объемной плотности заряда (а) и напряженности электрического поля (б) в приповерхностном слое Al_2O_3 при облучении наносекундными импульсами электронов с E_0 = 130 кэВ: 1 – наноструктурный образец; 2 – монокристалл

Таким образом, плотность заряда и напряженность электрического поля, формируемые в наноструктурных оксидах алюминия и кремния при электронной бомбардировке, меньше по сравнению с кристаллическими образцами. Чем больше время облучения образца, тем существеннее различие между наноструктурой и монокристаллом. Уменьшение величин указанных параметров в наноструктуре вызвано увеличением ширины запрещенной зоны и влиянием процессов рассеяния электронов на границах наночастиц. При этом уменьшается ток вторичных электронов и дырочный ток, которые создают отрицательный и положительный заряды в объеме диэлектрика. Кроме того, меньшая удельная плотность наноструктурного образца обуславливает локализацию заряда на больших глубинах по сравнению с монокристаллом.

В **четвертой главе** «Моделирование катодо- и фотолюминесценции наноструктурных оксидов кремния и алюминия. Сравнение с экспериментом» рассмотрены полученные данные по моделированию уширения полос свечения и длительности затухания ИКЛ в наноструктурных оксидах кремния и алюминия. Приведены также результаты расчетов кинетики затухания рекомбинационной люминесценции в Al_2O_3 после окончания импульсного возбуждения электронами. Описана методика и данные идентификации полос свечения в экспериментальных спектрах фотолюминесценции низкоразмерных и разупорядоченных образцов оксида алюминия, возбужденного импульсным синхротронным излучением.

Заряжение и катодолюминесценция исследуемых оксидов под действием электронного пучка протекают одновременно. Можно предположить, что созданный заряд и индуцированное им электрическое поле высокой напряженности способны оказать влияние на затухание люминесценции после окончания импульса возбуждения вследствие изменения энергетической глубины ловушек, термоионизация которых ответственна за послесвечение.

Для наноструктурных оксидов α-Al_2O_3 и α-SiO_2 при импульсном воздействии пучка электронов с энергией 130 кэВ, плотностью тока 60 А/см^2 и длительностью 1 нс рассчитаны спектрально-кинетические характеристики ИКЛ. Расчеты проведены для α-КДЦ и β-КДЦ центров

свечения в SiO_2 и для F- и F^+-анионо-дефектного Al_2O_3. Люминесценция указанных центров реализуется по внутрицентровому механизму [6, 7].

Результаты моделирования показали, что в наноструктурных оксидах алюминия и кремния по сравнению с монокристаллами наблюдается снижение интенсивности ИКЛ и уширение полос свечения, зависящее от размеров частиц. Данный факт обусловлен действием двух факторов: рассеянием электрона на дефектах кристаллической решетки и электрон-фононными взаимодействиями. Наибольший вклад в уширение полосы свечения ИКЛ вносят процессы рассеяния электронов на поверхностных дефектах, сконцентрированных на границах наночастиц. Размерная зависимость в этом случае определяются отношением доли поверхности к объему. С другой стороны, с уменьшением размеров наночастиц происходит ослабление электрон-фононных взаимодействий из-за уменьшения числа фононов [5].

На рисунке 5 в качестве примера приведена зависимость полуширины полос ИКЛ α- и β-КДЦ-центров от размера наночастиц в SiO_2. Существенное изменение полуширины полос катодолюминесценции наблюдается при размерах частиц 25 нм и меньше.

При рассмотрении кинетики затухания ИКЛ следует иметь в виду, что в наноструктурных образцах Al_2O_3 и SiO_2 быстрые излучательные релаксации определяются поверхностными аналогами указанных выше центров свечения и характеризуются более коротким временем затухания. Результаты моделирования кинетики затухания ИКЛ в монокристалле анионо-дефектного α-Al_2O_3, показали, что в наносекундной области времен релаксации доминирует свечение F^+-центров с длительностью затухания 1,5 нс. Время затухания свечения F-центров составляет 35 мс. Типичная кривая затухания ИКЛ F-центра приведена на вставке рисунка 6. Полученные результаты хорошо согласуются с данными работы [7]. Кинетика затухания свечения F-центра при указанных выше параметрах возбуждения в наноструктурном α-Al_2O_3 с размером частиц 5, 10, 20 и 50 нм представлена на рисунке 6 и в таблице 1, в которой приведены полученные значения времени τ_e, за которое величина интенсивности ИКЛ уменьшается в *e* раз. Установлено, что при уменьшении размера частиц в наноструктурном α-Al_2O_3 время затухания люминесценции F – центров сокращается от 35 мс до долей микросекунды.

Зависимость времени затухания ИКЛ от размеров наночастиц в α-Al_2O_3 немонотонная. При размерах частиц (50-20) нм длительность послесвечения возрастает, но при дальнейшем снижении размера частиц до 5 нм она уменьшается. Такая закономерность обусловлена двумя основными конкурирующими процессами – электрон-фононными взаимодействиями и рассеянием электронов на границах наночастиц. Аналогичная закономерность была найдена для КДЦ-центров наноструктурного SiO_2.

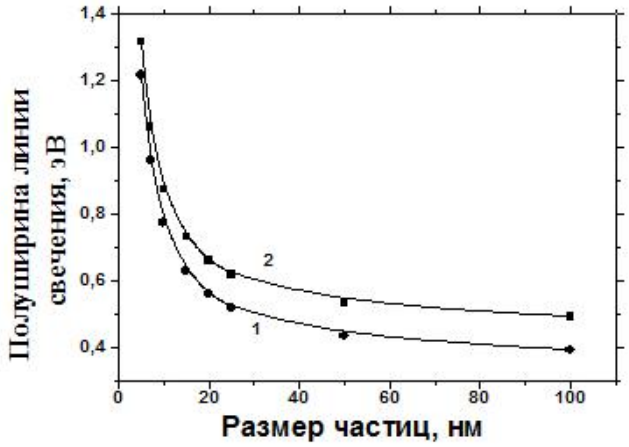

Рисунок 5- Зависимость полуширины полос катодолюминесценции α-КДЦ-центра при 2,7 эВ (1), и β-КДЦ-центра при 3,1 эВ (2) от размера наночастиц в α-SiO_2 при импульсном возбуждении электронным пучком

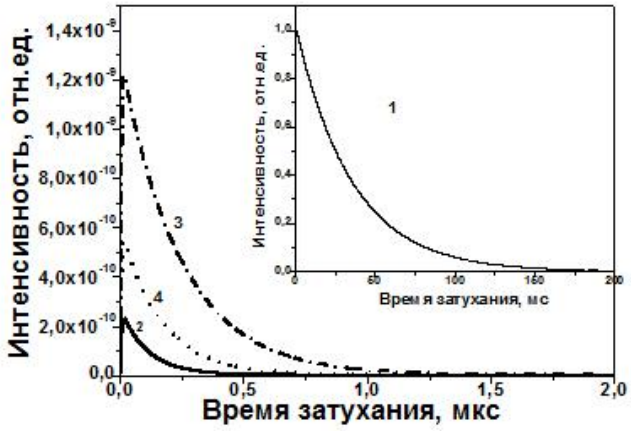

Рисунок 6 - Кинетика затухания импульсной катодолюминесценции F – центров в монокристаллическом (1) и наноструктурном α-Al_2O_3 с размером частиц 50 нм (2), 20 нм (3), 10 нм (4)

Таблица 1 – Затухание импульсной катодолюминесценции F-центра в α-Al_2O_3

Величина τ_e				
Монокристалл	Наноразмерный образец с различной величиной частиц			
	50 нм	20 нм	10 нм	5 нм
35,10 мс	0,12 мкс	0,25 мкс	0,17 мкс	0,09 мкс

При комнатной температуре исследовано влияние заряжения приповерхностных слоев наноструктурного Al_2O_3 с размером частиц 5 нм на кинетику затухания рекомбинационной люминесценции после окончания возбуждения наносекундным импульсом электронов. Моделирование проводилось для электронной ловушки, предположительно связанной с примесью кремния в исследуемом образце. Ее ТЛ регистрируется в монокристаллическом образце при 350 К и быстро затухает после окончания облучения. Импульс электронов заполняет мелкую ловушку, ответственную за пик ТЛ при 350 К, а затем происходит ее термическое опустошение при комнатной температуре. Энергетическая глубина ловушки составляет 0,8 эВ. В ультрадисперсной керамике ТЛ регистрируется при 385 К и энергетическая глубина ловушки составляет 0,83 эВ. Как было отмечено ранее возникающее при облучении наносекундным пучком электронов электрическое поле сдвигает этот уровень в сторону меньших энергий почти на 9 % (0,07 эВ). При моделировании рассматривались случаи с учетом и без учета влияния электрического поля на энергетическую глубину ловушки, а также с учетом (q = 2) и без учета (q = 1) повторного захвата электронов. Результаты моделирования представлены в таблице 2.

Таблица 2 – Затухание рекомбинационной люминесценции в Al_2O_3 при комнатной температуре

Величина τ_e, с				
Монокристаллический образец			Керамика	
	q = 1	q = 2	q = 1	q = 2
без учета влияния электрического поля	275,05	174,87	812,44	671,42
с учетом влияния электрического поля	4124,38	3309,35	12182,55	9080,02

Из данных таблицы следует, что при наличии индуцированного электронным облучением электрического поля высокой напряженности затухание люминесценции происходит за более длительное время (уменьшается ~ в 15 раз). В случае повторного захвата электронов на ловушки время послесвечения сокращается ~ в 1,5 раза. Таким образом, формирование объемного заряда в диэлектрике при импульсном возбуждении электронами вызывает существенное увеличение длительности послесвечения.

Известно, что полосы свечения в наноструктурных люминофорах уширены и перекрываются друг с другом. В этой связи разработана методика и проведена идентификация полос свечения в экспериментальных спектрах фотолюминесценции (ФЛ), возбужденной синхротронным излучением, в анионо-дефектной керамике оксида алюминия с ультрадисперсной структурой при размере зерна (300-500) нм. Предварительно с использованием вакуумного спектрометра McPherson VuVAS 1000 + были измерены при возбуждении квантами с энергией 7,7 эВ спектры свечения ФЛ номинально чистых анионо-дефектных монокристаллов оксида алюминия (рисунок 7). Видно, что в спектре ФЛ монокристалла присутствуют две основных полосы: F-центров и центров, созданных примесными ионами Cr^{3+}.

При идентификации полос в экспериментальном спектре ФЛ анионо-дефектной ультрадисперсной керамики Al_2O_3 было принято во внимание, что помимо полос указанных выше F- и F^+-центров, созданных одиночными кислородными вакансиями, могут присутствовать полосы агрегатных F_2-центров (две вакансии с четырьмя захваченными электронами). Известно, что при температурной обработке и облучении в кристаллах α-Al_2O_3 возникают такие центры и их заряженные аналоги (F_2^+, F_2^{2+}-центры). Кроме того, согласно проведенному химическому анализу, в исследуемой керамике присутствовали примеси Mg, Fe, Cr и Ti, способные создавать люминесцентные центры.

Спектр ФЛ ультрадисперсной керамики α-Al_2O_3, возбужденной СИ, был рассчитан при параметрах облучения, соответствующих экспериментальным. При идентификации спектров были учтены литературные данные о положении и ширине полос предполагаемых центров ФЛ в ультрадисперсной керамике α-Al_2O_3. Результаты представлены на рисунке 8, они показали, что в исследуемом образце экспериментальный спектр ФЛ представляет собой суперпозицию полос свечения центров F-типа, агрегатных и указанных выше примесных центров.

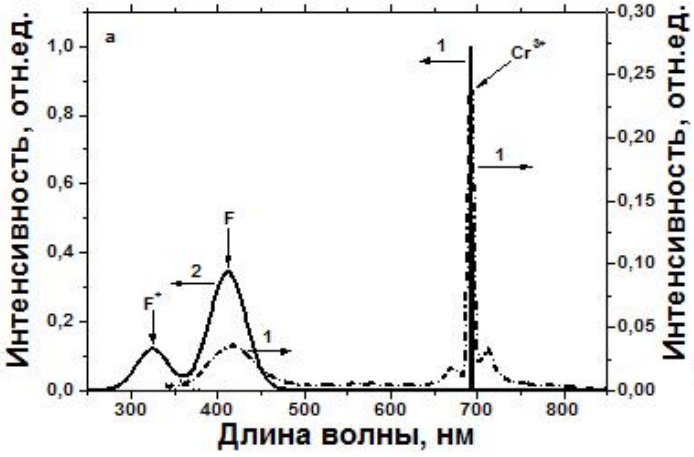

Рисунок 7 – Экспериментальный (1) и рассчитанный (2) спектры фотолюминесценции анионо-дефектного монокристалла α-Al_2O_3 при ВУФ-возбуждении (E_{exc} = 7,7 эВ, T = 300 К)

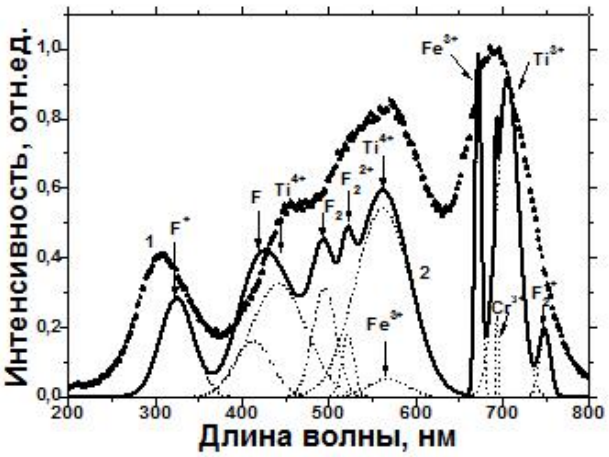

Рисунок 8 – Экспериментальный (1) и рассчитанный (2) спектры фотолюминесценции ультрадисперсной керамики α-Al_2O_3 при возбуждении фотонами СИ с энергией 10,8 эВ, T = 7,6 К

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

1. Развита физическая модель, разработаны алгоритм и программа расчетов параметров заряжения поверхности и приповерхностных слоев широкозонных оксидов при электронной бомбардировке с учетом основных особенностей наноструктурного состояния материалов. Проведена апробация физической модели и программного обеспечения.

2. Усовершенствована физическая модель, разработаны алгоритм и программа расчетов для моделирования кинетики затухания внутрицентровой и рекомбинационной люминесценции кристаллических и наноструктурных широкозонных диэлектриков после импульсного возбуждения электронами и фотонами ВУФ диапазона.

При моделировании заряжения и катодолюминесценции, возбужденной электронами разных энергий, а также кинетики затухания внутрицентровой и рекомбинационной люминесценции наноструктурных и монокристаллических образцов оксидов алюминия и кремния установлены следующие общие закономерности:

3. Суммарный ток в приповерхностном слое оксидов при электронном облучении определяется суперпозицией токов первичных и вторичных электронов, токов Пула-Френкеля и Фаулера-Нордгейма, дырочного и обратного токов. При этом токи Пула-Френкеля и Фаулера-Нордгейма возникают в электрических полях высокой напряженности (10^6 В/см и более).

4. Структура заряда и токи, формирующие суммарный ток, зависят от условий воздействия на ток вторичных электронов. При электронной бомбардировке без отбора вторичного тока в приповерхностном слое оксидов формируется «минус-плюс-минус» структура заряда. В условиях отбора вторичного тока поверхность заряжается положительно благодаря влиянию дырочной составляющей суммарного тока.

5. С увеличением времени бомбардировки суммарная плотность тока стремится к постоянному значению в глубине оксида, при этом происходит рост напряженности электрического поля и объемной плотности заряда из-за его накопления при захвате носителей заряда ловушками.

6. В наноструктурных оксидах алюминия и кремния при стационарной бомбардировке электронами увеличивается глубина проникновения заряда, но уменьшается его плотность, токи и напряженность созданного электрического поля по сравнению с указанными параметрами в монокристаллических образцах, что обусловлено в основном изменением ширины запрещенной зоны и рассеянием электронов на границах наночастиц. При энергии бомбардирующих электронов 1 кэВ, плотности тока 10^{-5} А/см^2, времени облучения 1 с напряженность электрического поля может достигать значений $5 \cdot 10^5$ В/см, что вызывает изменение энергетической глубины ловушек на 0,2 эВ.

7. При облучении наноструктурного Al_2O_3 наносекундным импульсом электронов с энергией 130 кэВ при плотности тока 60 А/см2 напряженность электрического поля, возникающая в образце, имеет величину порядка ~104 В/см, которая на полтора порядка меньше, чем при стационарной электронной бомбардировке (см. п. 6), поскольку меньший флюенс электронов, а также интенсивная рекомбинация электронно-дырочных пар при высокой плотности возбуждения уменьшает число электронов, способных термализоваться после окончания импульса и создавать заряд при захвате на ловушки. Созданное отрицательное электрическое поле изменяет энергетическую глубину центров захвата на 0,07 эВ, что существенно только для мелких ловушек. Например, для ловушки с E_A = 0,8 эВ индуцированное заряжением электрическое поле вызывает увеличение на порядок времени затухания рекомбинационной люминесценции.

8. В наноструктурных оксидах кремния и алюминия наблюдается уменьшение интенсивности люминесценции и уширение полос свечения, зависящее от размеров частиц. Наиболее существенное уширение полос свечения возникает при размерах наночастиц меньше 25 нм.

9. Для наноструктурных образцов α-Al_2O_3 (F-центры) и α-SiO_2 (КДЦ) характерно существенное уменьшение времени послесвечения внутрицентровой люминесценции при импульсном возбуждении пучком электронов по сравнению с монокристаллами. Зависимость времени затухания ИКЛ от размеров наночастиц в исследуемых образцах немонотонная и обусловлена конкурирующими процессами на многочисленных границах наночастиц, основными из которых являются электрон-фононные взаимодействия и рассеяние электронов на границах наночастиц.

10. Особенностью ФЛ наноразмерных керамик и разупорядоченных высокодозным облучением монокристаллов α-Al_2O_3 при ВУФ возбуждении, не создающим объемного заряда,

является большой вклад в спектр свечения центров люминесценции, созданных агрегатами кислородных вакансий в различном зарядовом состоянии и примесными дефектами.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Glavatskikh, I.A. Self-consistent electrical charging of insulating layers and metal-insulator-semiconductor structures/ I.A. Glavatskikh, V.S. Kortov, H.-J. Fitting // J. Appl. Phys. - 2001. - V.89. - №1. - Pp.440-448.

2. Соломонов, В.И. Импульсная катодолюминесценция и ее применение для анализа конденсированных веществ / В.И. Соломонов, С.Г. Михайлов. - Екатеринбург: УрО РАН, 2003. - с.182.

3. Громов, В.Т. Введение в радиационную физику твердого тела / В.Т. Громов. - Снежинск: Изд-во РФЯЦ – ВНИИТФ, 2007. - 208 с.

4. Мартинсон, Л.К. Квантовая физика: учебное пособие/ Л.К. Мартинсон, Е.В. Смирнов. – М: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2006. – 528 с.

5. Суздалев, И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов/ И.П. Суздалев. – М.: КомКнига, 2006. – 592 с.

6. Зацепин, А.Ф. Статика и динамика возбужденных состояний кислородно-дефицитных центров в SiO_2 / А.Ф. Зацепин // Физика твердого тела. – 2010. – Т. 52. - № 6. – С. 1104-1114.

7. Evans, Bruce D. A review of the optical properties of anion lattice vacancies, and electrical conduction in α-Al_2O_3: their relation to radiation-induced electrical degradation / Bruce D. Evans // Journal of Nuclear Materials. – 1995. – V. 219. – Pp. 202-223.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Статьи в российских и зарубежных рецензируемых научных журналах, определенных ВАК России:

1. Спиридонова (Штанг), Т.В. Компьютерное моделирование процессов заряжения поверхности и приповерхностных слоев диоксида кремния при электронной бомбардировке / В.С. Кортов, С.В. Звонарев, Т.В. Спиридонова (Штанг) // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2011. – Т. 54. – № 3. – С. 25-31 (0,43 п.л./0,25 п.л.).

2. Спиридонова (Штанг), Т.В. Исследование влияния параметров электронного облучения на заряжение наноструктурного диоксида кремния / В.С. Кортов, С.В. Звонарев, Т.В. Спиридонова (Штанг) // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2011. – Т. 54. – № 2/2. – С. 196-201 (0,37 п.л./0,18 п.л.).

3. Spiridonova (Shtang), T.V. Explanation and Testing of the Model for Computer Calculations of Luminescence Spectra and Photoluminescence Decay Kinetics under Pulsed Laser

Excitation in Silicon Dioxide Crystals / T.V. Spiridonova (Shtang), V.S. Kortov, S.V. Zvonarev // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2012. – Т. 55. – № 11/3. – С. 219-222 (0,25 п.л./0,16 п.л.).

4. Спиридонова, (Штанг) Т.В. Компьютерное моделирование фотолюминесценции при возбуждении наноструктурного оксида алюминия импульсным синхротронным излучением / В.С. Кортов, Т.В. Спиридонова (Штанг), С.В. Звонарев // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2013. – № 10. – С. 107-112 (0,37 п.л./0,25 п.л.).

5. Спиридонова, (Штанг) Т.В. Фотолюминесценция ультрадисперсной керамики оксида при ВУФ возбуждении / В.С. Кортов, В.А. Пустоваров, Т.В. Спиридонова (Штанг), С.В. Звонарев // Журнал прикладной спектроскопии. – 2013. – Т. 80. – № 6. – С. 844-849 (0,37 п.л./0,25 п.л.).

Свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ:

6. Спиридонова (Штанг), Т.В., Звонарев, С.В., Кортов, В.С. Программный модуль «Моделирование процессов заряжения поверхности и приповерхностных слоев наноструктурных материалов при электронной бомбардировке («SASH»)» // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2012660401 от 16 ноября 2012 г.

7. Спиридонова (Штанг), Т.В., Звонарев, С.В., Кортов, В.С. Программный модуль «Моделирование спектров и кинетики затухания фото- и катодолюминесценции в наноструктурных диэлектриках при импульсном возбуждении («NANODLUMI»)» // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2012660402 от 16 ноября 2012 г.

Другие публикации:

8. Spiridonova (Shtang), T.V. Simulation of insulating layers charging of nanomaterials under electron bombardment / S.V. Zvonarev, V.S. Kortov, T.V. Spiridonova (Shtang) // Proceeding of the 6th International Conference on Mathematical Modeling and Computer Simulation of Material Technologies MMT-2010. – Ariel, Israel, 2010. – P. 1-24 – 1-30 (0,43 п.л./0,18 п.л.).

9. Спиридонова, (Штанг), Т.В. Спектры и кинетика затухания катодолюминесценции Cr^{3+}-, F- и F^{+}-центров в наноразмерном Al_2O_3 / С.В. Звонарев, В.С. Кортов, Т.В. Спиридонова (Штанг) // Наноструктуры в конденсированных средах: сборник научных статей. – Минск: Изд-во Института тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси, 2013. – С. 51-56 (0,37 п.л./0,18 п.л.).

10. Спиридонова (Штанг), Т.В. Моделирование процессов заряжения поверхности и приповерхностных слоев кристаллического диоксида кремния после электронной бомбардировки / Т.В. Спиридонова (Штанг), С.В. Звонарев // Научные труды XVII международной конференции молодых ученых по приоритетным направлениям развития науки и техники: сборник статей: в 3 частях. – Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2010. – Ч. 2. – С. 213-215 (0,18 п.л./0,09 п.л.).

11. Спиридонова (Штанг), Т.В. Компьютерное моделирование заряжения кристаллического и наноструктурного диоксида кремния при облучении пучком электронов / С.В. Звонарев, Т.В. Спиридонова (Штанг), В.С. Кортов // Высокие технологии, исследования, промышленность: сборник трудов Девятой Международной научно-практической конференции «Исследование, разработка и применение высоких технологий в промышленности»: в 2 томах. – Санкт-Петербург: Изд-во Политехнического университета, 2010. – Т. 1. – С. 331-332 (0,09 п.л./0,03 п.л.).

12. Спиридонова (Штанг), Т.В. Исследование влияния параметров электронного облучения на заряжение кристаллического и наноструктурного диоксида кремния / Т.В. Спиридонова (Штанг), С.В. Звонарев, В.С. Кортов // Тезисы лекций и докладов XII Международной школы-семинара по люминесценции и лазерной физике. – Иркутск: ИГУ, 2010. – С. 201-202 (0,12 п.л./0,04 п.л.).

13. Спиридонова (Штанг), Т.В. Особенности заряжения наноструктурных диэлектриков при электронной бомбардировке / Т.В. Спиридонова (Штанг), С.В. Звонарев, В.С. Кортов // Научные труды XVIII международной конференции молодых ученых по приоритетным направлениям развития науки и техники: сборник статей: в 3 частях. – Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2010. – Ч. 3. –С. 332-333 (0,12 п.л./0,04 п.л.).

14. Спиридонова (Штанг), Т.В. Моделирование размерных зависимостей параметров эмиссии электронов из наноструктурного диоксида кремния / С.В. Звонарев, В.С. Кортов, Т.В. Спиридонова (Штанг) // Нанотехнологии функциональных материалов (НФМ-10): труды международной научно-технической конференции. – Санкт-Петербург: Изд-во Политехнического университета, 2010. – С. 560-561 (0,12 п.л./0,04 п.л.).

15. Спиридонова (Штанг), Т.В. Заряжение и транспорт электронов в приповерхностном слое наноструктурного диоксида кремния после электронной бомбардировки / С.В. Звонарев, В.С. Кортов, Т.В. Спиридонова (Штанг) // Сборник материалов IV Всероссийской конференции по наноматериалам. – М.: ИМЕТ РАН, 2011. – С. 258 (0,06 п.л./0,02 п.л.).

16. Спиридонова (Штанг), Т.В. Разработка и апробация физической модели для компьютерных расчетов кинетики затухания импульсной катодолюминесценции широкозонных диэлектриков / Т.В. Спиридонова (Штанг), В.С. Кортов, С.В. Звонарев // Восемнадцатая всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых: материалы конференции. – Красноярск: Изд-во АСФ России, 2012. – С. 371-372 (0,12 п.л./0,04 п.л.).

17. Спиридонова (Штанг), Т.В. Кинетика затухания люминесценции в монокристаллическом и наноструктурном оксиде алюминия при возбуждении короткими импульсами фотонов / Т.В. Спиридонова (Штанг), В.С. Кортов, С.В. Звонарев // Нанотехнологии функциональных материалов (НФМ’12): труды международной научно-технической конференции. – Санкт-Петербург: Изд-во Политехнического университета, 2012. – С. 114-118 (0,25 п.л./0,12 п.л.).

18. Spiridonova (Shtang), T.V. Explanation and Testing of the Model for Computer Calculations of Luminescence Spectra and Photoluminescence Decay Kinetics under Pulsed Laser Excitation in Silicon Dioxide Crystals / T.V. Spiridonova (Shtang), V.S. Kortov, S.V. Zvonarev // Abstract book of the 3rd International Congress on Radiation Physics and Chemistry of Condensed Matter, High Current Electronics and Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows. - Tomsk: TPU, 2012. - P. 49-50 (0,09 п.л./0,05 п.л.).

19. Spiridonova (Shtang), T.V. Computer simulation of spectral-kinetic characteristics in nanostructured alumina under pulsed electron beam excitation / T.V. Spiridonova (Shtang), V.S. Kortov, S.V. Zvonarev // Abstract book of the 3rd International Congress on Radiation Physics and Chemistry of Condensed Matter, High Current Electronics and Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows. – Tomsk: TPU, 2012. – P. 346-347 (0,09 п.л./0,05 п.л.).

20. Спиридонова (Штанг), Т.В. Исследование размерных зависимостей при моделировании спектральных характеристик фотолюминесценции оксида алюминия при импульсном возбуждении / Т.В. Спиридонова (Штанг), С.В. Звонарев, В.С. Кортов // Физика и химия наноразмерных систем: сборник тезисов докладов Всероссийской молодежной конференции. – Екатеринбург: УрФУ, 2013. – С. 143-144 (0,12 п.л./0,04 п.л.).

21. Спиридонова (Штанг), Т.В. Процессы заряжения наноструктурного SiO_2 при электронной бомбардировке / Т.В. Спиридонова (Штанг), С.В. Звонарев, В.С. Кортов // Девятнадцатая всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых: материалы конференции. – Екатеринбург – Архангельск: Изд-во АСФ России, 2012. – С. 172 (0,06 п.л./0,02 п.л.).

22. Спиридонова (Штанг), Т.В. Кинетика затухания фотолюминесценции наноструктурного диоксида кремния при ВУФ возбуждении / Т.В. Спиридонова (Штанг), В.С. Кортов, С.В. Звонарев // Сборник материалов V Всероссийской конференции по наноматериалам (НАНО 2013). – М.: ИМЕТ РАН, 2013. – С. 297-298 (0,12 п.л./0,04 п.л.).

23. Штанг, Т.В. Изучение фотолюминесцентных свойств керамики Al_2O_3 при ВУФ возбуждении / Т.В. Штанг, В.С. Кортов, С.В. Звонарев // XIV Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества памяти академика А.М. Ильина (СПФКС-14): тезисы докладов. – Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2013. – С. 265 (0,06 п.л./0,02 п.л.).

Подписано в печать	Формат 60x84 1/16	Бумага писчая
26 сентября 2014		
Офсетная печать	Тираж 100 экз.	Заказ №

Отпечатано в ризографии НИЧ УрФУ

620002, Екатеринбург, ул. Мира 19