**Исследование релаксации электронных возбуждений в твердых растворах диэлектрических кристаллов**

***Кондратьев И.М.***

*аспирант*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: kondratev-ildar@yandex.ru*

Смешанные сцинтилляционные кристаллы в форме твердых растворов с концентрацией компонентов в диапазоне от 20 до 80% часто демонстрируют более высокий световой выход и лучшее энергетическое разрешение по сравнению с исходными составляющими кристалла. Они также показывают более низкий уровень компонентов кинетики медленного затухания и меньшее послесвечение [1].

Пространственнные флуктуации энергий электронных состояний, образующих дно зоны проводимости и верх валентной зоны, вносимые электронными состояниями атомов замещения, способствуют локализации носителей заряда, ограничивая их миграцию в кристалле. Таким образом уменьшается среднее расстояние между генетически связанными электронами и дырками, что увеличивает вероятность их связывания в экситон [2].

Ранее полученные с помощью модели твердого раствора данные и их сравнение с экспериментом, выполненным с использованием синхротронного излучения [2], подтверждают, что структура твёрдого раствора замещения сильно влияет на сцинтилляционные свойства широкозонных диэлектрических кристаллов.

Целью данного исследования является моделирование миграции носителей возбуждения в условиях образования кластеров обогащением одним из замещаемых компонентов твердого раствора. На базе методов транспортной модели, применяемой в твердых растворах полупроводников, рассматривается изменение сцинтилляционных свойств диэлектрических кристаллов в зависимости от их состава.

Основой исследования являлось моделирование по методу Монте-Карло пространственного распределения компонент твердого раствора с учетом возможных корреляций в расположении ионов [3]. Моделирование проводилось для твердого раствора диэлектрических кристаллов ScxY1-xPO4 в суперячейке 20×20×20 постоянных решетки с периодическими граничными условиями. Во внимание принималась реальная кристаллическая структура твердого раствора с несколькими неэквивалентными положениями катионов в элементарной ячейке. В связи с тем, что запрещенные зоны ScPO4 и YPO4 отличаются почти на 1 эВ, именно в таком твердом растворе можно ожидать образование глубоких потенциальных ям. Модель позволяет изучать влияние беспорядка замещения на потенциал, действующий на электронные возбуждения при их миграции по кристаллу, и дает примерные количественные оценки различных характеристик, которые позволяют объяснить сцинтилляционные особенности твёрдых растворов беспорядка на основе диэлектрических кристаллов с широкой запрещённой зоной.

**Литература**

1. A.V. Gektin, A.N. Belsky, A.N. Vasil’ev, IEEE Trans. Nucl. Sci. 2014. V. 61. P. 262.

2. D. Spassky, A. N. Vasil’ev, V. Nagirnyi, I. Kudryavtseva, D. Deyneko, I. Nikiforov,

I. Kondratyev, B. Zadneprovski. Bright UV-C Phosphors with Excellent Thermal Stability – Y1−xScxPO4 Solid Solutions // Materials. 2022. V. 15(19). P. 6844.

3. A. Belsky, A. Gektin, A. N. Vasil'ev. Influence of disorder in scintillating solid solutions on thermalization and recombination of electronic excitations // Physica Status Solidi (b). 2019. V. 257 (8).