

УДК 538.9

PACS 71.15.Mb; 71.20.-b; 78.55.Hx; 78.67.Bf; 78.70.Ps

## ВИЗНАЧЕННЯ ДОВЖИНИ ТЕРМАЛІЗАЦІЇ ЕЛЕКТРОНІВ У КРИСТАЛАХ $CaF_2$ , $SrF_2$ ТА $BaF_2$

Я. Чорнодольський<sup>1</sup>, В. Вістовський<sup>1</sup>,  
А. Жишкович<sup>1</sup>, С. Сиротюк<sup>2</sup>, О. Гектін<sup>3</sup>,  
А. Васільєв<sup>4</sup>, А. Волошиновський<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Львівський національний університет імені Івана Франка  
вул. Кирила і Мефодія 8, 79005 Львів, Україна

<sup>2</sup> Національний університет "Львівська політехніка"  
вул. С. Бандери 12, 79013 Львів, Україна

<sup>3</sup> Інститут сцинтиляційних матеріалів, просп. Леніна 60, 61001  
Харків, Україна

<sup>4</sup> Науково-дослідний інститут ядерної фізики, МДУ імені М.В.  
Ломоносова, 119991 Москва, Росія

Розраховано електронну енергетичну структуру кристалів  $CaF_2$ ,  $SrF_2$  та  $BaF_2$ , використовуючи формалізм PAW з урахуванням сильних локальних кореляцій в наближенні PBE0 GGA. Визначено значення ефективних мас електронів в околі Г-точки зони Брілюена. Оцінено середню довжину термалізації електронів з кінетичною енергією 5 еВ, яка становить 66, 95, 117 нм, відповідно для кристалів  $CaF_2$ ,  $SrF_2$  та  $BaF_2$ .

**Ключові слова:** електрон-діркові пари, сцинтилятори, електронна енергетична структура, довжина термалізації електронів.

## 1 Вступ

Розробка нових сцинтиляційних матеріалів для фізики високих енергій, медицини та моніторингу навколишнього середовища залишається актуальною проблемою протягом більше ніж півстоліття. На даний момент практично вичерпано можливості покращення сцинтиляційних властивостей шляхом пошуку нових матеріалів за хімічним складом. Подальше удосконалення існуючих сцинтиляційних кристалів пов'язують із поглибленням розуміння фізичних процесів, які відбуваються у них в результаті поглинання іонізуючого випромінювання. Недавні дослідження причин непропорційності сцинтиляційного відгуку матеріалу відносно енергії іонізуючого

випромінювання спричинили значний прогрес у цьому питанні. Загальний механізм сцинтиляційного процесу є наступним. Під час поглинання іонізуючого випромінювання утворюються первинні високоенергетичні електрони та дірки. Процес релаксації діркової компоненти в основному відбувається за рахунок Оже-процесів та характеристичного рентгенівського випромінювання. В результаті таких процесів та процесу термалізації, за участю фононів ґратки, дірки за короткий час опиняються у вершині валентної зони. Більший вплив на перебіг сцинтиляційного процесу і розмір сцинтиляційного треку мають первинні електрони. Оскільки їх енергія значно перевищує значення ширини забороненої зони кристала, то в першу чергу вони релаксують за рахунок електрон-електронного розсіювання, що супроводжується створенням вторинних електрон-діркових пар. В результаті цього процесу помноження електронних збуджень, який відбувається за час порядку  $10^{-14}$  с, утворюються вторинні електрони та дірки із кінетичною енергією, меншою за ширину забороненої зони кристалу [1]. Подальша їх термалізація відбувається за рахунок електрон-фононного розсіювання, тривалість якого становить порядку  $10^{-12}$  с [1]. При цьому, якщо під час термалізації віддаль, яку проходять дірки (довжина термалізації), є відносно малою (одиноці нанометрів), то довжина термалізації електронів може становити десятки чи сотні нанометрів. Термалізовані носії заряду утворюють екситони чи рекомбінують на люмінесцентних центрах і починається завершальний етап сцинтиляційного процесу - випромінювальна релаксація. Ефективність сцинтиляційного процесу  $\eta$ , яку вимірюють в кількості випромінених фотонів на електронвольт поглинутої енергії іонізуючого випромінювання, визначається співвідношенням

$$\eta = \frac{S \cdot Q}{\beta \cdot E_g}, \quad (1)$$

де  $S$  - ефективність передачі енергії від електронних збуджень кристала до люмінесцентних центрів;  $Q$  - квантовий вихід люмінесцентних центрів;  $E_g$  - ширина забороненої зони;  $\beta E_g$  - середня енергія, необхідна для створення електрон-діркової пари [2]. Ефективність передачі енергії від електронних збуджень кристала до люмінесцентних центрів ( $S$ ) визначається описаним вище етапом термалізації електронних збуджень в результаті їх розсіювання на фононах, характеристикою якого є довжина термалізації. У випадку великих значень довжини термалізації зростає імовірність захоплення електронів дефектами ґратки, що приводить до зменшення ефективності передачі енергії  $S$ . Крім того, як показують дослідження причин непропорційності світловиходу сцинтиляторів щодо енергії поглинутого опромінення, кращою пропорційністю володіють матеріали, де рекомбінація відбувається між генетичними (створеними під час одного акту електрон-електронного розсіювання) електрон-дірковими парами. Відношення кількості рекомбінацій генетичних пар до кількості рекомбінацій стохастичних є тим більшим, чим меншою є довжина термалізації електронів. Для оцінки імовірності рекомбінації генетичних електрон-діркових пар використовують модель Онзагера. Зважаючи на те, що довжина термалізації дірок є малою (1 – 3 нм), в даній моделі вважають, що переважаючою є рекомбінація генетичних електрон-діркових пар у випадку, якщо довжина термалізації електронів не перевищує радіус сфери Онзагера, який визначається із співвідношення

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \cdot R_{\text{Онз}}} = k_B T. \quad (2)$$

Ліва частина рівняння (2) відображає енергію кулонівської взаємодії між генетичною електрон-дірковою парою, ( $R_{\text{Онз}}$  - радіус сфери Онзагера [3]). При кімнатній температурі радіус сфери Онзагера становить близько 10 нм (при  $\epsilon = 5, 7$ ). Чим ближчим буде значення довжини термалізації електрона до цієї величини, тим менше енергетичних втрат буде в матеріалі на етапі перенесення енергії від електронних збуджень до люмінесцентних центрів, а, отже, тим вищим буде світловихід і пропорційність сцинтилятора. Тому для цілеспрямованого пошуку нових сцинтиляційних матеріалів важливою є оцінка довжини термалізації електронів.

Виявилось також, що довжина термалізації електронів є критично важливою величиною також для сцинтиляційних властивостей наночастинок. Як показано в роботах [4, 5], у випадку, коли розмір наночастинки стає співмірним, або меншим за довжину термалізації електрона, сцинтиляційна ефективність наночастинок різко зменшується. Причиною цього є те, що за таких умов вторинні електрони, утворені в об'ємі наночастинки, під час термалізації досягають поверхні наночастинки, яка є багатою на поверхневі дефекти, а взаємодія електронів зони провідності з поверхневими дефектами веде до гасіння рекомбінаційної люмінесценції. Таким чином, для того, щоб наночастинки володіли задовільними сцинтиляційними властивостями, необхідно, щоб їх розмір перевищував довжину термалізації електронів. Тому оцінка довжини термалізації електронів є необхідною для визначення критичних розмірів наночастинок з метою їх використання як компонент сцинтиляційних композитів чи нанокompозитів для радіотерапії.

Проблемі оцінки довжини термалізації електронів останнім часом присвячена значна кількість досліджень. Основний внесок у процес термалізації дає розсіювання на оптичних фонах. Автори [6], для оцінки довжини термалізації електрона з початковою кінетичною енергією  $E_{e0}$  при розсіюванні на поздовжніх оптичних фонах отримали співвідношення

$$l_{e,LO}^2(E_{e0}) = \frac{8}{9} a_B^2 \left( \frac{\tilde{\epsilon}}{m_e^*/m_0} \right)^2 \tanh \left( \frac{\hbar\Omega_{LO}}{2k_B T} \right) \left( \frac{E_{e0}}{\hbar\Omega_{LO}} \right)^3 / \ln \left( \frac{4E_{e0}}{\hbar\Omega_{LO}} \right), \quad (3)$$

де  $a_B$  - радіус Бора,  $\tilde{\epsilon}$  - ефективна діелектрична проникність ( $\tilde{\epsilon}^{-1} = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_{st}^{-1}$ , де  $\epsilon_\infty$  - оптична діелектрична проникність,  $\epsilon_{st}$  - статична діелектрична проникність),  $m_e^*$  - ефективна маса електрона,  $m_0$  - маса електрона,  $\hbar\Omega_{LO}$  - енергія оптичних фонів.

Оскільки для широкого класу матеріалів частоти оптичних фонів відомі, то для оцінки довжини вільного пробігу електронів необхідно задачею є знаходження ефективної маси електрона. Визначення ефективної маси електрона проводять за формою енергетичних рівнів зони провідності.

В даній роботі проведено розрахунок зонної структури для ряду оптичних матеріалів, що мають широке практичне використання:  $CaF_2$ ,  $SrF_2$  і  $BaF_2$ , який дав змогу оцінити ефективні маси та довжини термалізації у них.

## 2 Методика розрахунку зонної структури

Метод проекційних приєднаних хвиль (PAW, projector augmented waves) [7] поєднує риси псевдопотенціала і методу приєднаних плоских хвиль. Хвильова  $|\psi_n(\mathbf{r})\rangle$  та псевдохвильова  $|\tilde{\psi}_n(\mathbf{r})\rangle$  функції зв'язані між собою співвідношенням

$$|\psi_n(\mathbf{r})\rangle = |\tilde{\psi}_n(\mathbf{r})\rangle + \sum_a \sum_i (|\phi_i^a(\mathbf{r})\rangle - |\tilde{\phi}_i^a(\mathbf{r})\rangle) \langle \tilde{p}_i^a | \tilde{\psi}_n \rangle, \quad (4)$$

де  $|\phi_i^a(\mathbf{r})\rangle$  - атомна хвильова функція,  $|\tilde{\phi}_i^a(\mathbf{r})\rangle$  - псевдохвильова функція, а  $\langle \tilde{p}_i^a |$  - функція проектор. Підсумовування в (4) проводиться за сферами приєднання, які нумеруються індексом  $a$ , а індекс  $i = \{n, l, m\}$  відповідає квантовим числам - головному, орбітальному й магнітному, відповідно.

З рівняння (4) бачимо, що

$$|\psi_n(\mathbf{r})\rangle = \tau |\tilde{\psi}_n(\mathbf{r})\rangle, \quad (5)$$

де оператор  $\tau$  перетворює псевдохвильову  $|\tilde{\psi}_n(\mathbf{r})\rangle$  у електронну хвильову функцію  $|\psi_n(\mathbf{r})\rangle$ .

Явна форма оператора  $\tau$  випливає з рівняння (4):

$$\tau = 1 + \sum_a \sum_i (|\phi_i^a\rangle - |\tilde{\phi}_i^a\rangle) \langle \tilde{p}_i^a|. \quad (6)$$

Стационарне рівняння Шредингера

$$H|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \varepsilon_{n\mathbf{k}} \quad (7)$$

з урахуванням (5) набуває наступного вигляду:

$$\tau^\dagger H \tau |\tilde{\psi}_{n\mathbf{k}}\rangle = \tau^\dagger \tau |\tilde{\psi}_{n\mathbf{k}}\rangle \varepsilon_{n\mathbf{k}}, \quad (8)$$

у якому шуканий спектр електронів  $\varepsilon_n$  такий, як і в рівнянні (7).

Електронна густина у методі PAW визначається трьома доданками [7]:

$$\rho(\mathbf{r}) = \tilde{\rho}(\mathbf{r}) + \sum_a (\rho^a(\mathbf{r}) - \tilde{\rho}^a(\mathbf{r})). \quad (9)$$

Перший доданок - плавна псевдогустина  $\tilde{\rho}(\mathbf{r})$ , яка зображається за допомогою перетворення Фур'є

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{n\mathbf{k}} f_{n\mathbf{k}} |\tilde{\psi}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{G}} \tilde{\rho}(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}}, \quad (10)$$

де  $f_{n\mathbf{k}}$  - числа заповнення одноелектронних станів,  $\mathbf{k}$  - вектор з першої зони Брілюєна,  $n$  - номери заселених електронами зон,  $\Omega$  - об'єм елементарної комірки,  $\mathbf{G}$  - вектор оберненої ґратки кристала.

Для електронної функції формула (10) мала б вигляд

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{n\mathbf{k}} f_{n\mathbf{k}} |\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{G}} \rho(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}}. \quad (11)$$

Між формулами (10) та (11) є дуже суттєва відмінність. Вона полягає у тому, що рівняння (10) потребує врахування  $\sim 10^3$  векторів  $\mathbf{G}$ , тоді як для досягнення однакової з рівнянням (10) точності розрахунку їх потрібно використати в (11)  $\sim 10^6$ . Отже, оперування електронною функцією  $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$  у кристалі робить задачу (7) нездійсненною щодо розв'язання навіть на суперкомп'ютерах.

Наступні два доданки густини електронів всередині сфери приєднання визначаються за допомогою спроектованих коефіцієнтів заселення станів:

$$W_{ij}^a = \sum_{n\mathbf{k}} f_{n\mathbf{k}} \langle \tilde{\psi}_{n\mathbf{k}} | \tilde{p}_i^a \rangle \langle \tilde{p}_j^a | \tilde{\psi}_{n\mathbf{k}} \rangle \quad (12)$$

а саме:

$$\rho^a(\mathbf{r}) = \sum_{ij} W_{ij}^a \varphi_i^{a*}(\mathbf{r}) \varphi_j^a(\mathbf{r}), \quad (13)$$

$$\tilde{\rho}^a(\mathbf{r}) = \sum_{ij} W_{ij}^a \tilde{\varphi}_i^{a*}(\mathbf{r}) \tilde{\varphi}_j^a(\mathbf{r}). \quad (14)$$

Ідея методу PAW полягає в перетворенні рівняння Шредингера до такого рівняння, у якому невідомою функцією стану є  $|\tilde{\psi}_{n\mathbf{k}}\rangle$ . Якщо ж вона знайдена, то за допомогою оператора  $\tau$  (6) отримується електронна функція стану  $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ . Через останню знаходимо густину електронів та відповідний їй потенціал Хартрі. Всі необхідні для отримання густин електронів і потенціалів величини, визначені рівняннями (4)-(14), були розраховані самоузгоджено за допомогою програми *atompaw* [8]. Необхідні функції PAW були згенеровані для таких базисних валентних станів:  $2s^2 2p^5$  для F,  $3s^2 4s^2 3p^6 3d^0$  для Ca,  $4s^2 5s^2 4p^6 4d^0$  для Sr та  $5s^2 6s^2 5p^6 6p^0$  для Ba. Значення радіусів сфер приєднання ( $r_{PAW}$ ) дорівнювали 1,51, 1,9, 2,0 та 2,9 а.о. для F, Ca, Sr та Ba, відповідно. Обмінно-кореляційний потенціал був обраний у формі узагальненого градієнтного наближення (Generalized Gradient Approximation, GGA) [9-11].

Базис плоских хвиль визначався максимальним значенням кінетичної енергії  $E_{cut} = 48 Ry$ , що відповідало сітці  $40 \times 40 \times 40$  для виконання швидкого перетворення Фур'є в самоузгоджених розрахунках хвильових функцій. Для отримання густини електронів і потенціалів була обрана щільна сітка  $75 \times 75 \times 75$ , якій відповідала гранична енергія  $4E_{cut} = 192 Ry$ . Такими були параметри, застосовані в розрахунках електронних властивостей кристала  $BaF_2$ . Всі розрахунки проводились самоузгоджено до досягнення точності повної енергії зв'язку кристала  $2 \cdot 10^{-12} Ry$ . Для кристала  $BaF_2$  така точність була досягнута після 21 кроку ітерацій.

### 3 Результати розрахунку зонної структури та оцінка довжини термалізації електронів

Для оцінки ефективної маси електрона розраховано зонну структуру кристалів  $CaF_2$ ,  $SrF_2$  та  $BaF_2$  (рис. 1-3). Дно зони провідності для всіх трьох кристалів має форму близьку до параболи з мінімумом в  $\Gamma$ -точці при кінетичних енергіях нижче 2 еВ. Електронні стани для більших значень кінетичної енергії є пологішими, тобто їм відповідає більша ефективна маса електронів. З формули (3) видно, що відліт визначається мінімальною масою, тобто гілками з великим значенням похідної

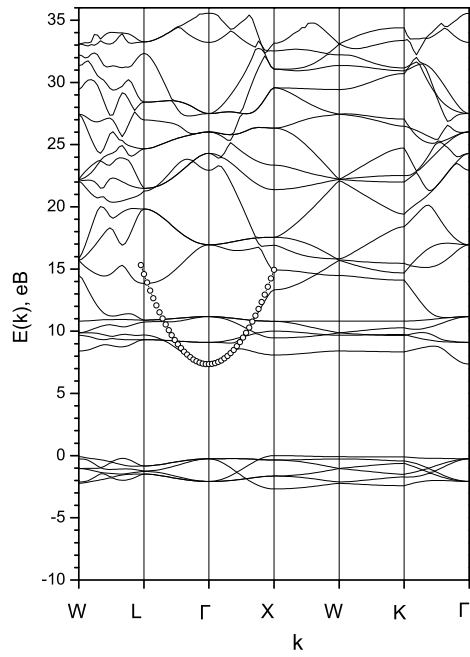


Рис. 1: Електронна енергетична структура кристала  $CaF_2$ .

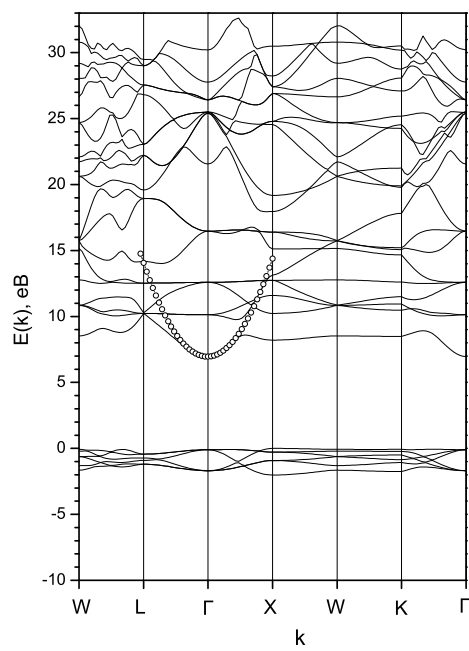


Рис. 2: Електронна енергетична структура кристала  $SrF_2$ .

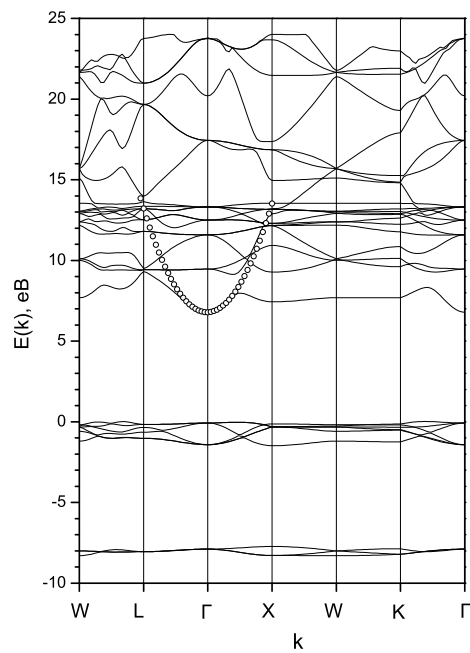


Рис. 3: Електронна енергетична структура кристала  $BaF_2$ .

$dE/dk$ . Така оцінка довжини термалізації є завищеною. Щоб визначити ефективні маси даних кристалів, нижню вітку зони провідності в околі  $\Gamma$ -точки апроксимовано параболою (рис. 1-3 (криві побудовані точками)). За результатами апроксимації, враховуючи, що  $m^* = \hbar^2(d^2E/dk^2)^{-1}$ , оцінено відношення ефективної маси електрона в кристалах  $CaF_2$ ,  $SrF_2$  та  $BaF_2$  до маси електрона. Відповідні дані наведено в таблиці 1. Решту даних, які необхідні для довжини термалізації електронів за співвідношенням (3), взято з літературних джерел і також наведено в таблиці 1.

Вторинні електрони, створені в результаті етапу помноження електронних збуджень сцинтиляційного процесу, володіють кінетичними енергіями від 0 до  $E_g$ . Положення максимуму розподілу електронів за енергіями в цьому діапазоні зміщено в область менших енергій. Експериментальне значення ширини забороненої зони досліджених кристалів є порядку 10 еВ. Тому за характеристичні було обрано довжини термалізації для електронів із кінетичною енергією, близькою до значення половини ширини забороненої зони (5 еВ). Розраховані значення довжини термалізації електронів із початковою кінетичною енергією 5 еВ представлено в таблиці 1.

Табл. 1: Оптичні та сцинтиляційні параметри кристалів  $CaF_2$ ,  $SrF_2$  та  $BaF_2$ :  $m^*/m_0$  - відношення ефективної маси до маси електрона,  $n$  - показник заломлення,  $\varepsilon_\infty = n^2$  - оптична діелектрична проникність,  $\varepsilon_{st}$  - статична діелектрична проникність,  $\tilde{\varepsilon}$  - ефективна діелектрична проникність ( $\tilde{\varepsilon}^{-1} = \varepsilon_\infty^{-1} - \varepsilon_{st}^{-1}$ ),  $\hbar\Omega_{LO}$  - енергія поздовжніх оптичних фононів,  $l_{therm}$  - середнє значення довжини термалізації електронів.

	$m^*/m_0$	$n$	$\varepsilon_\infty$	$\varepsilon_{st}$	$\tilde{\varepsilon}$	$\hbar\Omega_{LO}$ , eV	$l_{therm}$ , нм ( $E_{e0} = 5\text{eV}$ )
$CaF_2$	0,6655	1,43648 [12]	2,063	6,81 [14]	2,960	0,0574 [16]	66
$SrF_2$	0,6029	1,44068 [13]	2,076	6,51 [15]	3,047	0,0464 [16]	95
$BaF_2$	0,5823	1,47784 [13]	2,184	7,33 [15]	3,111	0,0404 [16]	117

Як вказано вище, довжина термалізації електронів визначає мінімальний розмір наночастинок, які можуть бути використані у ролі компонент наноструктурованих сцинтиляційних матеріалів. Для наночастинок  $CaF_2$  автори [4], виходячи з експериментів із залежності інтенсивності люмінесценції при рентгенівському збудженні від розмірів наночастинок, оцінюють мінімальний розмір наночастинок у 50 нм. Ця величина є співмірною із знайденою нами довжиною термалізації електрона - 66 нм. Отримана довжина термалізації електрона для  $SrF_2$  і  $BaF_2$  є ще більшою - 95 та 117 нм відповідно. Таким чином, можна прогнозувати, що для кристалів  $SrF_2$  і  $BaF_2$  мінімальний розмір наночастинок, які можуть бути використані у ролі компонент наноструктурованих сцинтиляційних матеріалів, повинен бути більшим, ніж у випадку наночастинок  $CaF_2$ .

## 4 Висновки

На основі розрахунку електронної енергетичної структури для кристалів  $CaF_2$ ,  $SrF_2$ ,  $BaF_2$  визначено мінімальне значення ефективної маси електрона та оцінено їх середню довжину термалізації. Отримані довжини термалізації значно перевищують

радіус Онзагера при кімнатній температурі, тому у досліджуваних матеріалах на завершальному етапі сцинтиляційного процесу переважатимуть процеси рекомбінації стохастичних електрон-діркових пар. Показано, що в ряді кристалів  $CaF_2$ ,  $SrF_2$ ,  $BaF_2$  довжина термалізації електронів зростає. Таким чином, для використання цих матеріалів у вигляді наночастинок як компонент наноструктурованих сцинтиляторів мінімальні розміри наночастинок повинні зростати у ряді  $CaF_2 \rightarrow SrF_2 \rightarrow BaF_2$ .

### Список використаної літератури

1. A.N. Belsky, R.A. Glukhov, I.A. Kamenskikh et al., J. of Electr. Spectr. and Rel. Phenom. **79** 147 (1996).
2. P.A. Rodnyi, Physical Processes in Inorganic Scintillators (New York : CRC Press LLC, Boca Raton, FL, 1997).
3. A.V. Gektin, A.N. Belsky, and A.N. Vasil'ev, IEEE TRANSACTIONS ON NUCLEAR SCIENCE, accepted manuscript (2013).
4. V.V. Vistovsky, A.V. Zhyshkovych, N.E. Mitina et al., Journal of Applied Physics. **12**, 024325-1 (2012).
5. T.S. Malyy, V.V. Vistovsky, Z.A. Khapko et al., Journal of Applied Physics. **113**, 224305 (2013).
6. R. Kirkin, V.V. Mikhailin, and A.N. Vasil'ev, IEEE TRANSACTIONS ON NUCLEAR SCIENCE **59**, 2057 (2012).
7. P.E. Blochl, Phys. Rev. B **50**, 17953 (1994).
8. A.R. Tackett, N.A.W. Holzwarth, G.E. Matthews, Computer Phys. Comm. **135**, 348 (2001).
9. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
10. M. Ernzerhof, G.E. Scuseria, J. Chem. Phys. **110**, 5029 (1999).
11. X. Gonze, B. Amadon, P.-M. Anglade et al., Computer Phys. Comm. **180**, 2582 (2009).
12. I.H. Malitson, Applied Optics **2**, 1103 (1963).
13. M. Bass, C. DeCusatis, J. Enoch et al., Handbook of Optics, Third Edition Volume IV: Optical Properties of Materials, Nonlinear Optics, Quantum Optics (set) (Orlando Florida, 2009).
14. David R. Lide, CRC Handbook of Chemistry and Physics, **87**, 2388 (2006).
15. K.F. Young, H.P.R. Frederikse, J. Phys. Chem. Ref. Data **2**, 313 (1973).
16. I. Richman, J. Chem. Phys. **41**, 2836 (1964).

Стаття надійшла до редакції 3.09.2013  
прийнята до друку 10.10.2013



**DETERMINATION OF ELECTRON THERMALIZATION  
LENGTH  $CaF_2$ ,  $SrF_2$  AND  $BaF_2$  CRYSTALS****Ya. Chornodolsky<sup>1</sup>, V. Vistovsky<sup>1</sup>, A. Zhyshkovich<sup>1</sup>,  
S. Syrotyuk<sup>2</sup>, A. Gektin<sup>3</sup>, A. Vasil'ev<sup>4</sup>, A. Voloshinovskii<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> *Ivan Franko National University of Lviv  
8 Kyryla and Mefodiya Street, 79005 Lviv, Ukraine*

<sup>2</sup> *Lviv Polytechnic National University  
12, S Bandery Street, 79013 Lviv, Ukraine*

<sup>3</sup> *Institute for Scintillation Materials, 60 Lenin Ave., 61001 Kharkiv,  
Ukraine*

<sup>4</sup> *Institute of Nuclear Physics, Moscow State University, 119991  
Moscow, Russia*

The electronic energy structure of  $CaF_2$ ,  $SrF_2$  and  $BaF_2$  crystals was calculated using the PAW formalism based on strong local correlations in PBE0 GGA approach. The effective masses of electrons in the vicinity of Brillouin zone  $\Gamma$ -point were determined. Average thermalization length of electrons with a kinetic energy of 5 eV was estimated as 66, 95 and 117 nm for  $CaF_2$ ,  $SrF_2$  and  $BaF_2$  crystals, respectively.

**Key words:** electron-hole pairs, scintillators, electronic energy structure, electron thermalization length.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДЛИНЫ ТЕРМАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ  
В КРИСТАЛЛАХ  $CaF_2$ ,  $SrF_2$  И  $BaF_2$**

**Я. Чернодольский<sup>1</sup>, В. Вистовский<sup>1</sup>, А. Жишківич<sup>1</sup>,  
С. Сиротюк<sup>2</sup>, А. Гектин<sup>3</sup>, А. Васильев<sup>4</sup>,  
А. Волошиновский<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Львовский национальный университет имени Ивана Франко  
ул. Кирилла и Мефодия 8, 79005 Львов, Украина

<sup>2</sup> Национальный университет "Львовская политехника"  
ул. С. Бандеры 12, 79013 Львов, Украина

<sup>3</sup> Институт сцинтилляционных материалов, пр. Ленина 60,  
61001 Харьков, Украина

<sup>4</sup> Научно-исследовательский институт ядерной физики, МГУ  
имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Используя формализм PAW с учетом сильных локальных корреляций в приближении PBE0 GGA, произведен расчет электронной энергетической структуры кристаллов  $CaF_2$ ,  $SrF_2$  и  $BaF_2$ . Определены значения эффективных масс электронов в окрестности Г-точки зоны Бриллюэна. Оценена средняя длина термализации электронов с кинетической энергией 5 эВ, которая составляет 66, 95, 117 нм соответственно для кристаллов  $CaF_2$ ,  $SrF_2$  и  $BaF_2$ .

**Ключевые слова:** электрон-дырочные пары, сцинтилляторы, электронная энергетическая структура, длина термализации электронов.