

НАЦІОНАЛЬНИЙ НАУКОВИЙ ЦЕНТР
«ХАРКІВСЬКИЙ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

НАЦІОНАЛЬНИЙ НАУКОВИЙ ЦЕНТР
«ХАРКІВСЬКИЙ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Кваліфікаційна наукова праця
на правах рукопису

Кондрик Олександр Іванович

УДК 621.315.592.3; 539.1.074

ДИСЕРТАЦІЯ

ВПЛИВ РАДІАЦІЙНИХ І ФОНОВИХ ДЕФЕКТІВ НА ВЛАСТИВОСТІ GaAs, CdTe, CdZnTe І ДЕТЕКТОРІВ ІОНІЗУЮЧИХ ВИПРОМІНЮВАНЬ НА ЇХ ОСНОВІ

01.04.21 – радіаційна фізика і ядерна безпека

(Фізико-математичні науки)

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на інші джерела.

Науковий керівник: Ковтун Геннадій Прокопович, доктор фізико-математичних наук, професор

Харків 2019

АНОТАЦІЯ

Кондрик О. І. Вплив радіаційних і фонових дефектів на властивості GaAs, CdTe, CdZnTe і детекторів іонізуючих випромінювань на їх основі. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.21 – радіаційна фізика і ядерна безпека (фізико-математичні науки). – Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України. – Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України. – Харків, 2019.

Дисертація присвячена з'ясуванню умов ефективної роботи та поліпшення характеристик напівпровідникових детекторів на основі GaAs, CdTe і CdZnTe. Була досліджена динаміка зміни електрофізичних властивостей GaAs, CdTe, CdZnTe та характеристик детекторів ядерних випромінювань на основі цих сполук в залежності радіаційно-стимульованих та власних дефектів, які утворюються в кристалах при їх одержанні та в ході подальшої експлуатації в умовах агресивного радіаційного середовища. Побудована уточнена багаторівнева модель компенсації енергетичних рівнів у напівпровідниках для прогнозування змін електронної рухливості (μ_n), питомого опору (ρ), положення рівня Фермі (F) в залежності від концентрації одно- дво- та три-зарядних донорів та акцепторів, амфотерних домішок типу донор-акцептор DA, донор-донор-акцептор DDA, донор-акцептор-акцептор DAA, їх енергетичного положення в забороненій зоні напівпровідника, неоднорідностей структури і легування (областей накопичення дефектів і домішкових кластерів) в широкому температурному інтервалі. Створене на основі даної фізичної моделі рівняння електронейтральності для довільної кількості багатозарядних домішок та дефектів, яке завжди має тільки один корінь, вирішувалось чисельно методом половинного ділення. Після вирішення рівняння електронейтральності

проводилось обчислення концентрації та рухливості вільних електронів μ_n , вмісту нейтральних та заряджених центрів в області просторового заряду, питомого опору ρ , часу життя нерівноважних електронів τ_n , та дірок τ_p також ефективності збору зарядів η детекторів іонізуючих випромінювань на основі досліджуваних напівпровідникових матеріалів. Для розрахунку τ_n , τ_p , η в детекторах на основі CdTe CdZnTe вперше була застосована модель рекомбінації Шоклі-Ріда-Холла. При обчисленні електронної рухливості вперше була зроблена поправка в модель Брукса-Херрінга шляхом введення додаткового екранування розсіювальних центрів у GaAs, CdTe і CdZnTe іонізованими глибокими рівнями та показано, що парціальну рухливість електронів для їх непружного розсіювання на полярних оптичних фонах можна представити аналітичним виразом замість чисельного вирішення рівняння Больцмана.

Методом моделювання було проведено кількісне дослідження електрофізичних властивостей арсеніду галію в широкому діапазоні температур і концентрацій домішок та структурних дефектів. Вивчений вплив структурного дефекту EL-2 після радіаційного опромінення і наступної термообробки на основні електрофізичні параметри GaAs. Вивчена зміна μ_n в інтервалі $300 \leq T \leq 1100$ К в залежності від вмісту EL-2, кластерів і з'ясовані механізми впливу дефектів на μ_n і ρ . Встановлено, що точкові дефекти, які представлені в забороненій зоні мілкими рівнями, а також лінійні дефекти можуть помітно впливати на електронну рухливість μ_n в арсеніді галію, якщо вони розподілені в матриці у вигляді заряджених скупчень дефектів, кластерів, неоднорідностей легування. Власний дефект EL-2, який вносить в заборонену зону глибокий рівень енергії, помітно впливає на μ_n в GaAs навіть при його однорідному розподілі в матриці кристалу.

Проведено аналіз ряду сполук і було знайдено, що в порівнянні з GaAs більш перспективними детекторними матеріалами є CdTe та $Cd_{1-x}Zn_xTe$ по причині меншого часу життя нерівноважних носіїв заряду в GaAs ($\tau \sim 10^{-9}$ сек) у порівнянні з CdTe і CdZnTe ($\tau \sim 10^{-6}$ сек). Для GaAs, CdTe і $Cd_{1-x}Zn_xTe$ методом моделювання досліджені дрейфова рухливість електронів провідності, питомий

опір ρ , час життя τ , нерівноважних носіїв заряду, а також ефективність збору зарядів η , для детекторів іонізуючих випромінювань в широких діапазонах концентрацій домішок і дефектів при $T=300$ К, а також в залежності від величин концентрації цинку x для $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$. Знайдено пояснення одержаних залежностей μ_n , ρ , τ_n , τ_p і η від складу матриці. Встановлено, що основний внесок у електронну рухливість μ_n в CdTe і CdZnTe дає розсіювання на полярних оптичних фонах, тому μ_n слабо залежить від домішкового складу за умови рівномірного розподілу точкових дефектів і домішок в об'ємі кристалу. Характер зміни залежностей ρ і μ_n від складу якісно схожий для CdTe і CdZnTe , різниця полягає тільки у величині максимального питомого опору ρ_{max} , який для CdTe дорівнює 10^{10} Ом·см, для $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ $\rho_{max} = 10^{11}$ Ом·см, а для $\text{Cd}_{0.8}\text{Zn}_{0.2}\text{Te}$ $\rho_{max} = 10^{12}$ Ом·см. Глибокі донори в CdTe і CdZnTe збільшують розмір напівізолюючої області, яка охоплюється діапазонами зміни концентрацій мілких акцепторів та донорів. В CdTe і CdZnTe область $\sim 10^6$ Ом·см з'являється при неповній компенсації рівня енергії вакансій кадмію, а область $\sim 10^{10}-10^{12}$ Ом·см – в результаті неповної компенсації рівня антиструктурного дефекту Te_{Cd} , який є глибоким донором з енергією $\sim 0,8$ еВ. Знайдені оптимальні концентрації електрично активних домішок та дефектів, а також розподіл цих концентрацій у міжелектродному проміжку для отримання високоомного стану з максимальним ρ детекторних матеріалів CdTe і CdZnTe та з високою електронною рухливістю μ_n і максимальною ефективністю збору зарядів η у детекторах іонізуючих випромінювань на їх основі з плоско-паралельною, сферичною та циліндричною формою електродів. Встановлено, що за сукупністю вищевказаних параметрів найбільш придатними є плоскі детектори на основі $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$. Вперше з'ясовано, що для збільшення η на $\sim 30\%$ потрібно використовувати детекторний матеріал, що складається з двох частин, різних за домішковим складом: з $p \gg n$ в меншій частині міжелектродного зазору поблизу анода з $p \geq n$ – в решті більшої частини зазору поблизу катода.

Встановлено, що прийнятної детекторної якості високоомного $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ можна досягти за умови його збалансованого складу, коли концентрація

фонових домішок Ti, V, Ni, Sn, Ge не перевищує сумарного вмісту структурних дефектів і їх комплексів. Домішки з глибокими донорними рівнями збільшують ρ зі збільшенням енергії цих рівнів. Зниження електронної рухливості в CdTe і CdZnTe може бути викликано утворенням скупчень у вигляді домішкових кластерів. При однорідному розподілі домішок в об'ємі кристала їх сумарна концентрація може досягати $\sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$ без помітного зниження μ_n , проте в цьому випадку може різко зменшитися добуток $\mu_n \cdot \tau_n$, (что за символ после μ ?) а також величина η .

Проведено дослідження кореляції між радіаційними дефектами, які виникають в CdTe:Cl і CdZnTe після жорсткого рентгенівського опромінення і ρ , η детекторів на їх основі. Визначена роль радіаційних дефектів у процесах деградації детекторних характеристик CdTe:Cl. Встановлено, що основний внесок в деградацію детекторних властивостей CdTe:Cl в умовах жорсткого рентгенівського опромінення дає зниження питомого опору на три порядки внаслідок помітного зміщення залежності ρ від вмісту Cl в сторону більших концентрацій хлору, а також по причині захоплення вільних носіїв заряду на радіаційних глибоких акцепторних рівнях J ($E_V + 0.53 \text{ eV}$) і Z ($E_V + 0.47 \text{ eV}$). Середній час дрейфу нерівноважних носіїв заряду в детекторі до їх захоплення на радіаційних дефектах зменшується на два-три порядки величини.

Вперше було знайдено, що більш висока радіаційна стійкість детекторів на основі CdZnTe, у порівнянні з детекторами на основі CdTe:Cl, пояснюється меншою швидкістю утворення радіаційних дефектів A00 ($E_V + 0.06 \text{ eV}$), D ($E_V + 0.41 \text{ eV}$) і J ($E_V + 0.53 \text{ eV}$) в CdZnTe. Збільшення вмісту цих дефектів пов'язане зі зростанням концентрації вакансій Cd і Zn. Вперше встановлено, що негативний вплив дефекту J шляхом захоплення ним носіїв заряду в CdZnTe нейтралізується глибоким донором H1, концентрація якого помітно зростає при відносно невеликих дозах опромінення, що в свою чергу відтягує рівень Фермі в середину забороненої зони, збільшуючи ρ і зменшуючи захоплення носіїв заряду на рівні J.

Проведено аналіз і вказані можливі причини змін характеристик глибоких рівнів у високоомному $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}:\text{Al}$ після γ -опромінення та протягом пострадіаційної релаксації. Досліджені зміни властивостей плоского детектора на основі $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}:\text{Al}$ в залежності від концентрації і рівня енергії глибокого донора, необхідного для досягнення високоомного стану, а також від ступеня легування мілким донором. Визначені умови деградації реєструвальних властивостей детектора на початковому етапі його експлуатації під дією агресивного радіаційного середовища.

Вперше було знайдено, що несприятливий вплив радіаційного середовища на характеристики детекторів на основі CdTe та CdZnTe протягом їх експлуатації полягає у виникненні та збільшенні сумарної концентрації іонізованих глибоких та мілких акцепторів, зокрема вакансій кадмію V_{Cd} та цинку V_{Zn} , а також комплексів дефектів типу домішка–вакансія, що демонструється зміщенням в процесі опромінення залежностей ρ і η від концентрації мілкового донора. Крім того, було встановлено, що електрофізичні та детекторні властивості $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ покращуються на початковій стадії експлуатації при малих дозах опромінення.

Ключові слова: моделювання, електрофізичні властивості, опромінювання, детектор γ -випромінювання, радіаційне дефектоутворення, GaAs , CdTe , CdZnTe .

Список наукових праць, у яких опубліковані основні результати дисертації:

1. Водяницький А.А., Жуков А.И., Ковтун Г.П., Кондрик А.И., Кравченко А.И., Яценко А.А. Компьютерное моделирование электрофизических свойств GaAs в зависимости от содержания в нем структурных несовершенств // Функциональные Материалы. 1994. Том 1, №2. С. 77-84.
2. Kovtun G.P., Kondrik A.I., Yatsenko A.A. Quantitative model for forecasting changes in electric properties of direct gap semiconductors // Functional Materials. 2000. Vol.7, № 2. P. 228-234.

3. Davydov L.N., Datsenko O.A., Kovtun G.P., Kondrik A.I., Kutnij V.E., Rybka A.V. Numerical simulation of CdZnTe semiconductor resistivity as a function of the impurity composition // *Functional materials*. 2001. Vol. 8, № 2. P. 255-261.

4. Datsenko O.A., Kondrik A.I. Electrophysical properties forecasting for CdTe semiconductor materials depending on the impurity composition // *Functional Materials*. 2001. Vol. 8, № 3. P. 516-521.

5. Кондрик А.И., Ковтун Г.П. Исследование свойств полупроводниковых материалов для детекторов ионизирующих излучений // *Технология и конструирование в электронной аппаратуре*. 2003. № 6. С. 3-6.

6. Кондрик А.И. Моделирование свойств CdZnTe и параметров детекторов γ -излучения на его основе // *Технология и конструирование в электронной аппаратуре*. 2004. № 6. С. 17-22.

7. Кондрик А.И., Ковтун Г.П. Расчет эффективности сбора зарядов в датчиках ионизирующих излучений на основе GaAs, CdTe, CdZnTe // *Вісник КрНУ імені Михайла Остроградського*. 2011. Випуск 4 (69). Частина 1. С. 81-85.

8. Кондрик А.И. Эффективность сбора зарядов в датчиках γ -излучения с различной конфигурацией электродов // *Технология и конструирование в электронной аппаратуре*. 2012. №4. С. 47-51.

9. Kondrik A.I. Effect of irradiation on properties of CdTe detectors // *East European Journal of Physics*. 2014. Vol. 1, № 1. P. 47-52.

10. Kondrik A.I. Influence of radiation-induced defects on CdTe and CdZnTe detectors properties // *Problems of atomic science and technology. Ser.: Physics of Radiation Effect and Radiation Materials Science* (105). 2015. № 2 (96). P. 18-24.

11. Кондрик А.И. Детекторные свойства $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}:\text{Al}$ под влиянием γ -облучения малой дозы // *Технология и конструирование в электронной аппаратуре*. 2016. №1. С. 12-19.

Список публікацій, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

12. Кондрик А.И., Ковтун Г.П. Моделирование электрофизических свойств полупроводниковых материалов для детекторов ионизирующих излучений // *IV Международная научно-практическая конференция «Современные*

информационные и электронные технологии», 19-23 мая 2003 г.: труды / ОНПУ, Одесса, Украина, 2003. С. 302, (доповідач).

13. Кондрик А.И. Моделирование детекторных свойств CdZnTe и параметров детекторов γ -излучения на его основе // V Международная научно-практическая конференция «Современные информационные и электронные технологии», 24-28 мая 2004 г.: труды / ОНПУ, Одесса, Украина. 2004. - С. 267, (доповідач).

14. Кондрик А.И. Расчет эффективности сбора зарядов для детекторов на основе легированного материала CdZnTe // VI Международная научно-практическая конференция «Современные информационные и электронные технологии», 23-27 мая 2005 г.: труды / ОНПУ, Одесса, Украина. 2005. С. 355, (доповідач).

15. Кондрик А.И., Ковтун Г.П. Расчет эффективности сбора зарядов в датчиках ионизирующих излучений на основе GaAs, CdTe и CdZnTe // I Міжнародна науково-практична конференція «Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка», 5-7 травня, 2011 р.: тези доповідей / КрНУ ім. Остроградського. м. Кременчук, Україна. 2011. С. 72-74, (доповідач).

16. Кондрик А.И. Влияние радиационных дефектов на свойства детекторов на основе CdTe и CdZnTe // XV Международная научно-практическая конференция «Современные информационные и электронные технологии», 26–30 мая 2014 г.: труды / ОНПУ, Одесса, Украина. 2014. Том 2. С.109-110, (доповідач).

17. Кондрик А.И. Влияние примесей и дефектов на электрофизические и детекторные свойства CdTe и CdZnTe // IV Международная конференция «Высокочистые материалы: получение, применение, свойства», 12-15 сентября 2017 г.: материалы докладов / ННЦ ХФТИ. Харьков, Украина. 2017. С. 59, (доповідач).

18. Кондрик А.И., Ковтун Г.П. Влияние фоновых примесей на свойства $Cd_{1-x}Zn_xTe$ // V Міжнародна науково-практична конференція «Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка», 17-19 травня 2018 р.: тези доповідей / Кременчук, Україна. 2018. С. 35-37, (доповідач).

ABSTRACT

Kondrik A.I. «Effect of radiation and background defects on the properties of GaAs, CdTe, CdZnTe and detectors of ionizing radiation based on them». Research Project, Manuscript copyright

Thesis for the scientific degree of candidate of physics and mathematical sciences by specialty 01.04.21 – radiation physics and nuclear security. – National Science Center «Kharkiv Institute of Physics and Technology». – National Science Center «Kharkiv Institute of Physics and Technology», Kharkiv, 2019.

The thesis presents the results of clarification of the conditions of effective operation and improvement of characteristics of semiconductor detectors based on GaAs, CdTe and CdZnTe. The dynamics of changes in the electrophysical properties of GaAs, CdTe, CdZnTe and in the characteristics of nuclear radiation detectors on the basis of these compounds was investigated, depending on radiation-stimulated and intrinsic defects that are formed in crystals during their production and subsequent operation under aggressive radiation environment.

A specified multilevel compensation model was developed to predict the changes in mobility (μ), specific resistance (ρ), Fermi level (F), depending on the concentration of one-, two- and three-charged donors and acceptors, amphoteric impurities such as donor acceptor DA, donor- donor-acceptor DDA, donor-acceptor-acceptor DAA, on their energy position in the semiconductor bandgap, on irregularities of structure and doping (areas of accumulation of defects and admixture clusters) over a wide temperature range. On the basis of this physical model an algorithm was determined for numerical solution of the electric neutrality equation which always has only one root, for an arbitrary amount of impurities and defects. After solving the equation of electroneutrality the calculations of the concentration of free electrons n and their mobility μ_n , the content of neutral and charged centers in the space-charge region, the specific resistance ρ , the lifetime of nonequilibrium electrons τ_n and holes τ_p as well as the charge collection efficiency η of ionizing

radiation detectors made on the basis of investigated semiconductor materials were carried out. The Shockley-Reed-Hall recombination model was first used for the calculation of τ_n , τ_p , η in the detectors based on CdTe CdZnTe. In calculating electron mobility, for the first time, an amendment was made to the Brooks-Herring model by introducing additional shielding of scattering centers in GaAs, CdTe and CdZnTe by ionized deep levels, and it was shown that the partial mobility of electrons for their inelastic scattering on polar optical phonons can be represented by an analytical expression instead of numerical solution of Boltzmann equation.

By the method of simulation, the quantitative study of the electrophysical properties of gallium arsenide in a wide range of temperatures, concentrations of impurities and structural defects was carried out. The influence of structural defect EL-2 on the basic electro-physical parameters of GaAs was studied after ionizing irradiation and the subsequent heat treatment. The variation of μ_n within the interval $300 \leq T \leq 1100$ K depending on the content of EL-2 and clusters has been investigated, and the mechanisms of influence of defects on μ_n and ρ have been determined. It has been established that point defects, which are represented in the bandgap with shallow levels, as well as linear defects can significantly affect the electron mobility μ_n in gallium arsenide if they are distributed in the matrix in the form of charged clusters of defects and irregularities of doping. The proper defect EL-2, which introduces a deep energy level into the bandgap, significantly affects μ_n in GaAs, even in the case of its homogeneous distribution in the crystal.

A number of compounds have been analyzed and it has been found that CdTe and $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ are the more promising detector materials in comparison with GaAs due to the shorter lifetime of nonequilibrium charge carriers ($\tau \sim 10^{-9}$ sec) in GaAs compared with lifetime in CdTe and CdZnTe ($\tau \sim 10^{-6}$ sec). By the method of simulation, the drift mobility of conduction electrons μ_n , the specific resistance ρ , the lifetime of non-equilibrium electrons τ_n and holes τ_p , the efficiency of charge collection η of ionizing radiation detectors are investigated for GaAs, CdTe, and $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ in the wide ranges of impurities and defects concentrations at the temperature $T = 300$ K as well as depending on the zinc concentration x for $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$. The

explanation of the obtained dependences of μ_n , ρ , τ , η on the composition of the crystal was found. It has been established that scattering on polar optical phonons makes the main affect to the electronic mobility μ_n in CdTe and CdZnTe, therefore μ_n is weakly dependent on the impurity composition provided that the point defects and impurities is uniformly distributed over the crystal volume. The character of the change in the dependences of ρ and μ_n on the composition is qualitatively similar to that for CdTe and CdZnTe, and the difference lies only in the magnitude of the specific resistance maximum ρ_{\max} which equals $10^{10} \Omega \cdot \text{cm}$ for CdTe, and $\rho_{\max} = 10^{11} \Omega \cdot \text{cm}$ for $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$, as well as $\rho_{\max} = 10^{12} \Omega \cdot \text{cm}$ for $\text{Cd}_{0.8}\text{Zn}_{0.2}\text{Te}$. Deep donors in CdTe and CdZnTe increase the dimension of semi-insulating area which is covered by the range of changes in concentrations of shallow acceptors and donors. In CdTe and CdZnTe, the area $\sim 10^6 \Omega \cdot \text{cm}$ appears in the case of partial compensation of cadmium vacancies energy level, and the region $\sim 10^{10}\text{-}10^{12} \Omega \cdot \text{cm}$ is a result of incomplete compensation of the antisite defect Te_{Cd} level, which is a deep donor with an energy of $\sim 0.8 \text{ eV}$. The optimal concentrations of electrically active impurities and defects as well as the distribution of these concentrations within an interelectrode gap have been found to reach a high-resistance state with maximal value ρ for CdTe and CdZnTe detector materials, as well as with high electron mobility and maximal efficiency of charge collection in ionizing radiation detectors with plane-parallel, spherical and cylindrical shape of electrodes. It is established that by the set of the above mentioned characteristics the most suitable detector is the flat one based on $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$. For the first time it was found that to increase η by $\sim 30\%$ it is necessary using a detector material consisting of two parts, different in the impurity composition: with $p \gg n$ in the less part of the interelectrode gap near the anode and with $p \geq n$ – in the rest part of the gap near the cathode.

It is established that the acceptable detector quality of high-resistance $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ can be achieved provided by its balanced content, when the concentration of background impurities Ti, V, Ni, Sn, Ge does not exceed the total content of structural defects and their complexes. Impurities with deep donor levels increase ρ with an increase in the energy position of these levels. The reduction of electron mobility in

CdTe and CdZnTe may be due to the formation of aggregates in the form of admixture clusters. At the homogeneous distribution of the impurities in the volume of the crystal, their total concentration can reach $\sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ without noticeable decrease of μ_n , but in this case the product $\mu_n \cdot \tau_n$, as well as the magnitude of charge collection efficiency η , may decrease sharply.

The investigation of correlation between radiation defects, originating in CdTe:Cl and CdZnTe after hard X-ray irradiation, and ρ , η of detectors based on these materials was carried out. The role of radiation defects was determined in the processes of degradation of the detector characteristics of CdTe:Cl. It was established that the main contribution to the degradation of the detector properties of CdTe:Cl under hard X-ray irradiation conditions gives reducing the resistivity by three orders of magnitude due to a shift in the dependence of the specific resistance on the chlorine concentration towards higher values of the Cl content, as well as owing to capturing free charge carriers at radiation-induced deep acceptor levels J ($E_V + 0.53 \text{ eV}$) and Z ($E_V + 0.47 \text{ eV}$). Besides the average drift time of non-equilibrium charge carriers in a detector before their capture on radiation defects decreases by two or three orders of magnitude.

For the first time it was found that the higher radiation resistance of CdZnTe-based detectors in comparison with the CdTe-based detectors is due to the lower rate of generation of radiation defects A00 ($E_V + 0.06 \text{ eV}$), D ($E_V + 0.41 \text{ eV}$) and J ($E_V + 0.53 \text{ eV}$) in CdZnTe. The increase in the content of these defects is associated with an increase in the concentration of Cd and Zn vacancies. It was first established that the negative effect of the defect J by means of capturing charge carriers in the CdZnTe is neutralized by a deep donor H1, whose concentration is noticeably increased at low dose of irradiation, and this drags the Fermi level into the middle of bandgap, increasing ρ and decreasing the capture of charge carriers at the level J.

The analysis was accomplished and possible reasons for changes in the characteristics of deep levels in high-resistivity $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te:Al}$ after gamma-irradiation and during postradiational relaxation are pointed out. The changes in the properties of a plane detector based on $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te:Al}$ are studied depending on the

concentration and energy level position of the deep donor required to achieve a high-resistivity state, as well as on the degree of doping with a shallow donor. Degradation conditions of registering properties of detector at the initial stage of its operation under the action of an aggressive radiation environment are determined.

It was first discovered that the adverse effect of the radiation environment on the characteristics of the CdTe and CdZnTe detectors during their operation consists in the origination and increase of concentrations of shallow and deep acceptors, in particular vacancies of cadmium V_{Cd} and zinc V_{Zn} , as well as defect complexes such as impurity–vacancy. It is demonstrated by the displacement of the dependences ρ and η on the concentration of the shallow donor. In addition, the electrophysical and detector properties of $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te$ are improved at the initial stage of operation under low doses of irradiation.

Key words: simulation, electrophysical properties, irradiation, γ -radiation detector, radiation defect formation, GaAs, CdTe, CdZnTe.

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ	16
ВСТУП	17
РОЗДІЛ 1 ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ: ПРОБЛЕМИ ДОСЛІДЖЕННЯ РАДІАЦІЙНИХ ДЕФЕКТІВ І ЕНЕРГЕТИЧНИХ РІВНІВ ДЕТЕКТОРНИХ МАТЕРІАЛІВ	26
1.1 Характеристики детекторів іонізуючих випромінювань, властивості детекторних матеріалів і роль рівнів радіаційних і фонових дефектів.....	26
1.2 Ідентифікація рівнів дефектів і визначення їх параметрів.....	30
1.3 Процеси дефектоутворення в умовах жорсткого радіаційного опромінювання.....	34
1.4 Модель для дослідження вихідних матеріалів і проблеми самокомпенсації при легуванні	36
1.5 Процеси самокомпенсації в детекторних матеріалах в умовах агресивного радіаційного середовища	43
1.6 Висновки до розділу і задачі дисертаційної роботи.....	47
РОЗДІЛ 2 МОДЕЛІ ДЛЯ ОПИСАННЯ ЕЛЕКТРОФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ВИХІДНИХ І ОПРОМІНЕНИХ GaAs, CdTe, CdZnTe	50
2.1 Модель електричної компенсації напівпровідників за участю довільної кількості багатозарядних дефектів	50
2.2 Механізми розсіювання вільних носіїв заряду	53
2.3 Потрійні сполуки	56
2.4 Час життя нерівноважних носіїв заряду.....	58
2.5 Висновки до розділу 2.....	60
РОЗДІЛ 3 ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НЕОПРОМІНЕНИХ GaAs, CdTe, CdZnTe	61

	15
3.1 Електрофізичні властивості GaAs в залежності від вмісту структурних недосконалостей	61
3.2 Електрофізичні властивості детекторного матеріалу CdTe в залежності від вмісту фонових і технологічних дефектів	68
3.3 Електрофізичні властивості CdZnTe в залежності від домішкового і дефектного складу	74
3.4 Порівняння зміни ρ , μ_n в CdZnTe і CdTe при зміні дефектного складу....	81
3.5 Висновки до розділу 3.....	86
РОЗДІЛ 4 ВЛАСТИВОСТІ ДЕТЕКТИРОВ ГАММА-ВИПРОМІНВАННЯ НА ОСНОВІ GaAs, Cd_xZn_{1-x}Te.....	88
4.1 Властивості детекторних матеріалів і плоскопаралельних детекторів на їх основі	88
4.2 Ефективність збору зарядів детекторів γ -випромінювань з різною конфігурацією електродів	103
4.3 Висновки до розділу 4.....	107
РОЗДІЛ 5 ДЕТЕКТОРНІ І ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ CdTe І CdZnTe ПІД ВПЛИВОМ ІОНІЗУЮЧОГО ОПРОМІНЕННЯ.....	109
5.1 Опромінення рентгенівськими квантами.....	110
5.2 Опромінення гамма-квантами	124
5.3 Висновки до розділу 5.....	133
ВИСНОВКИ.....	135
ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	138
ДОДАТОК А СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ.....	153

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

d_0	координата відносно катода точки виникнення нерівноважних носіїв заряду в детекторі, мм;
E	енергія, еВ;
$E_{DA}, (E_{DD})$	енергія глибокого акцептора (донора), еВ
$E_i,$	положення i -го рівня енергії дефекту в забороненій зоні, еВ;
E_G	ширина забороненої зони, еВ;
F	положення рівня Фермі, еВ;
k	стала Больцмана еВ/град;
$N_d, (N_a)$	концентрація мілких донорів (акцепторів) см^{-3} ;
$N_{DD} (N_{DA})$	концентрація глибоких донорів (акцепторів), см^{-3} ;
N_T, N_i	концентрація глибоких рівнів (пасток), см^{-3} ;
$N(X)$	концентрація донора X , або X - будь-який елемент, см^{-3} ;
$n (p)$	концентрація вільних електронів (дірок) см^{-3} ;
SIMPA	методика simultaneous peak analysis
T	температура, К;
V_{Cd}	вакансія кадмію;
V_{Zn}	вакансія цинку;
РД	радіаційний дефект;
η	ефективність збору зарядів детектора;
μ	рухливість вільних носіїв заряду, $\text{см}^2/(\text{В}\cdot\text{сек})$;
$\mu_n, (\mu_e)$ і $\mu_p (\mu_h)$	відповідно електронна і діркова рухливості, $\text{см}^2/(\text{В}\cdot\text{сек})$;
ρ	питомий опір, Ом·см;
σ_i	площа перерізу захоплення (захвату) нерівноважних носіїв заряду на i -му енергетичному рівні, см^2 ;
τ	час життя нерівноважних носіїв заряду, сек;
$\tau_n(\tau_e)$ і $\tau_p(\tau_h)$	час життя нерівноважних електронів і дірок, сек;

ВСТУП

Розвиток ядерних енергетичних установок потребує відповідних технологій радіаційної діагностики, що супроводжуються розробкою і вдосконаленням напівпровідникових електронних приладів – детекторів, працюючих в умовах іонізуючих випромінювань. Властивості напівпровідників чутливі до вмісту домішок і дефектів та дії радіації. Основними матеріалами для напівпровідникових детекторів є германій та кремній. Германій потрібно охолоджувати, а питомий опір Si теж не достатньо високий, щоб отримати детектори з низьким відношенням сигнал / шум при кімнатній температурі. Телурид кадмію і потрійні сполуки на його основі знайшли застосування в сонячних елементах, медичних пристроях контролю дози випромінювання і розглядаються як перспективні матеріали для приладів радіаційного моніторингу – неохолоджуваних детекторів іонізуючих випромінювань. Як альтернативний матеріал для детекторів випромінювань розглядається також арсенід галію, який широко застосовується в квантовій і оптоелектроніці, НВЧ-техніці.

Детектори на основі напівпровідникових сполук повинні мати високі величини питомого опору ρ (10^8 – 10^{11} Ом·см), рухливості електронів μ_n ($\sim 10^3$ см²/В·сек) і часу життя нерівноважних електронів τ_n та дірок τ_p ($\sim 10^{-5}$ – 10^{-6} сек), які, в свою чергу, істотно залежать від складу матриці, вмісту легуючих та фонових домішок і структурних дефектів, що утворюють в забороненій зоні енергетичні рівні. Внаслідок дії іонізуючих випромінювань на детекторні напівпровідникові сполуки (GaAs, CdTe, CdZnTe) в їх об'ємі виникають електрично активні радіаційні дефекти, які негативно впливають на реєструвальні властивості детекторів шляхом зниження ρ , τ , μ_n і ефективності збору зарядів η внаслідок зменшення ступеня компенсації, захоплення електронів та дірок, дрейфуючих в міжелектродному проміжку, енергетичними рівнями дефектів – пастками, а також розсіювання на скупченнях дефектів.

Навіть ідентифікація енергетичних рівнів у CdTe і CdZnTe ускладнена, а в різних виробників детекторів виміряні параметри рівнів: енергії E_i , перерізу захоплення σ_i , концентрації N_i – помітно відрізняються. Вимірювання цих параметрів та ідентифікація дефектів ускладнені через високий питомий опір (10^9 – 10^{11} Ом·см) та різні умови компенсації в напівізолюючих детекторних

матеріалах, тому залишається нез'ясованим питання про конкретний вплив радіаційно-стимульованих, технологічних і фонових дефектів на μ_n , ρ , τ , в GaAs, CdTe, CdZnTe і ефективність збору зарядів детекторів іонізуючих випромінювань як в початковому стані, так і під дією агресивного радіаційного середовища.

Розробка радіаційно-стійких матеріалів для детекторів є багатоплановою і дорогою фізико-технологічною та конструкторською задачею, тому є вельми актуальними розрахункові методи та математичне моделювання для з'ясування впливу дефектів, що виникають під впливом іонізуючого випромінювання та технологій одержання на електрофізичні властивості напівпровідникових детекторних матеріалів і характеристики створених на їх основі приладів радіаційної дозиметрії. Таке моделювання можна здійснювати швидко, ефективно і без значних затрат.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота була виконана в Національному науковому центрі «Харківський фізико-технічний інститут». Тема, якій присвячена дисертація, пов'язана з наступними програмами досліджень і проектів, у виконанні яких автор приймав безпосередню участь:

– багатогалузева науково-технічна програма «Програма проведення фундаментальних досліджень по атомній науці і техніці ННЦ ХФТІ на 2001-2005 рр», що виконувалась за розпорядженням КМУ від 13.09.2001 р №421-р, № держреєстрації 080901UP0009;

– державна програма проведення фундаментальних досліджень з атомної науки і техніки Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» на 2006–2010 рр, яка виконувалася згідно з розпорядженням КМУ від 13.06.2005 №421-р, № держреєстрації 080906UP0010;

– державна програма «Ресурс-2004», НАН України, тема «Розробка та створення сенсорних приладів широкого спектру дії для радіаційного і ядерного технологічного контролю в системі АЕС на основі радіаційно-стійких

напівпровідникових сенсорів з CdTe, CdZnTe і штучних діамантових плівок», № держреєстрації 0104U007429;

– проектна угода з Українським науково-технологічним центром № 1810 (2002–2003 рр) «Прогнозування змін властивостей напівпровідникових матеріалів для використання в екстремальних умовах»;

– багатогалузева науково-технічна програма «Програма проведення фундаментальних досліджень по атомній науці і техніці ННЦ ХФТІ на 2011-2015 рік», що виконувалась згідно з постановою Бюро відділення ЯФЕ НАН України від 07.10.2010 р., протокол №7(76), № держреєстрації 0111U008993.

Мета і задачі дослідження Метою дисертаційної роботи є з'ясування методом математичного моделювання впливу радіаційних і технологічних дефектів на питомий опір ρ , час життя нерівноважних носіїв заряду τ , рухливість електронів μ_n в GaAs, CdTe, CdZnTe, а також на ефективність збору зарядів детекторів іонізуючих випромінювань на їх основі.

Для досягнення поставленої мети необхідно було вирішити наступні задачі:

– розробити модель і методику розрахунку ступеня компенсації електрично активних багатозарядних центрів у сполуках A_3B_5 і A_2B_6 при їх довільній кількості на основі чисельного вирішення рівняння електронейтральності і обчислення концентрації вільних носіїв заряду та заряджених і нейтральних глибоких центрів, питомого опору ρ досліджуваних матеріалів з послідуочим розрахунком електронної рухливості μ_n , часу життя нерівноважних носіїв заряду τ , ефективності збору зарядів детекторів η у широкому інтервалі температур і концентрацій дефектів;

– встановити параметри глибоких рівнів домішок та дефектів, їх вміст в GaAs, CdTe і CdZnTe для досягнення необхідних для детекторних матеріалів високих величин питомого опору, електронної рухливості і часу життя нерівноважних носіїв заряду;

- вивчити електрофізичні властивості неопромінених детекторів іонізуючих випромінювань на основі $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ для різних величин концентрації x цинку в широких діапазонах концентрацій легуючих домішок;
- дослідити реєструвальні властивості детекторів гамма- і рентгенівського випромінювань на основі GaAs, CdTe і CdZnTe з різною конфігурацією електродів, а також в залежності від просторового розподілу складу детекторного матеріалу $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, розміщеного міжелектродному проміжку;
- встановити характер впливу радіаційних дефектів, що утворюються в результаті гамма- і рентгенівського опромінення на зміну і деградацію електрофізичних та реєструвальних властивостей детекторів на основі CdTe і CdZnTe;

Об'єкт дослідження: неопромінені та опромінені CdTe, CdZnTe, GaAs і детектори іонізуючих випромінювань на їх основі.

Предмет дослідження: динаміка зміни електрофізичних властивостей CdTe, CdZnTe, GaAs і ефективності збору зарядів η детекторів іонізуючих випромінювань на їх основі в початковому стані, а також після гамма- і рентгенівського опромінення.

Методи дослідження. В процесі дослідження були застосовані наступні апробовані методи фізики твердого тіла, радіаційної фізики, а саме: статистична теорія Гіббса для визначення ступеня заповнення багатозарядних центрів, статистика рекомбінації Шоклі-Ріда-Холла для обчислення часу життя нерівноважних носіїв заряду, кінетична теорія розсіювання для розрахунку електронної рухливості, чисельний аналіз та комп'ютерне моделювання.

При дослідженні ρ , τ , μ , η методом комп'ютерного моделювання вхідними даними слугували параметри неоднорідностей легування і експериментально виміряні та опубліковані в літературі величини E_i , σ_i , N_i для досліджуваних матеріалів.

Наукова новизна одержаних результатів. При виконанні дисертаційної роботи були одержані наступні нові результати:

1. Побудована модель для розрахунку зарядового стану багатозарядних домішок і дефектів при їх довільній кількості у сполуках A_3B_5 , A_2B_6 у поєднанні з обчисленням електронної рухливості μ_n , концентрації вільних електронів n_0 та дірок p_0 і питомого опору ρ , рівня Фермі F в залежності від концентрації багатозарядних донорів та акцепторів, амфотерних домішок типу DA, DDA, DAA, їх енергетичного положення в забороненій зоні напівпровідника і температури; вперше застосована модель рекомбінації Шоклі-Ріда-Холла для розрахунку часу життя нерівноважних носіїв заряду τ в CdTe, CdZnTe і ефективності збору зарядів η детекторів іонізуючих випромінювань на їх основі.

2. Вперше зроблена поправка в модель Брукса-Херрінга шляхом введення додаткового екранування глибокими іонізованими рівнями розсіювальних локальних центрів у GaAs, CdTe і CdZnTe та показано, що парціальну рухливість для непружного розсіювання електронів на полярних оптичних фонах у GaAs можна представити аналітичним виразом замість чисельного вирішення рівняння Больцмана.

3. Встановлено, що залежності ρ і $\rho \cdot \tau \cdot \mu_n$ для $Cd_{1-x}Zn_xTe$ ($0 < x < 0.3$) від концентрації мілких донорів проходять через максимум, в якому відношення концентрацій вільних дірок p_0 і електронів n_0 знаходиться в межах $10^2 < p_0/n_0 < 10^3$, що є прийнятним для якісного детекторного матеріалу з високими величинами ρ (10^{10} – 10^{11} Ом·см) τ_n , τ_p (10^{-5} сек), μ_n (1100 см²/(В·сек)); вперше показано, що збільшення ефективності збору зарядів η (~30%) можливе, коли матеріал CdZnTe складається з двох різних частин, що мають різне співвідношення концентрацій вільних носіїв заряду: $p_0 \gg n_0$ біля анода та $p_0 \geq n_0$ біля катода.

4. Вперше встановлено, що в результаті рентгенівського опромінення CdTe:Cl, Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te та γ -опромінення Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te:Al збільшується вміст електрично активних акцепторів, що демонструється зміщенням залежності питомого опору ρ від концентрації мілкового донора N_d в бік більших N_d , причому при дозах опромінення CdTe:Cl і Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te в сотні кГр відбувається зменшення ρ на 3-4 порядки внаслідок пониження рівня Фермі та зменшення

ефективності збору зарядів η внаслідок захоплення нерівноважних носіїв заряду глибоким рівнем радіаційного дефекту J ($E_V+0.53$ eV), а при малих дозах (кілька кГр) γ -опромінення $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}:\text{Al}$ збільшується ρ і η .

5. Вперше з'ясована причина високої радіаційної стійкості $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}:\text{Al}$, яка пов'язана з меншою швидкістю утворення акцепторних радіаційних дефектів, а також зниженням захоплення носіїв заряду акцепторним радіаційним дефектом J внаслідок впливу глибокого донора, концентрація якого зростає при опроміненні, відсуваючи рівень Фермі в середину забороненої зони та збільшуючи питомий опір ρ .

Практичне значення одержаних результатів. Результати, отримані в дисертаційній роботі можуть використовуватись для одержання нових детекторних матеріалів на основі напівпровідникових сполук $A_{III}B_V$, $A_{II}B_{VI}$.

Розроблений підхід до обчислення електрофізичних і детекторних властивостей дає можливість встановити оптимальний склад домішок та дефектів у напівпровідникових сполуках $A_{III}B_V$ і $A_{II}B_{VI}$, придатних для створення на детекторів високої спектроскопічної якості.

Розроблений підхід та одержані результати обґрунтовують необхідні режими технологій одержання GaAs, CdTe, CdZnTe для їх застосування в приладах, що використовуються в ядерній дозиметрії, в мікро- і оптоелектроніці.

Сукупність одержаних результатів і сформульованих висновків про динаміку поведінки електрофізичних властивостей вихідних і опромінених GaAs, CdTe, CdZnTe може стати основою для прогнозування змін характеристик детекторів іонізуючих випромінювань під впливом агресивного радіаційного середовища, що повинно сприяти розробці нових детекторних матеріалів для застосування в дозиметрії ядерного та іонізуючого випромінювання.

Розроблено підхід, придатний для проведення модельних досліджень напівпровідникових сполук типу $A_{III}B_V$ і $A_{II}B_{VI}$ з метою розробки матеріалів, які використовуються в приладах різного призначення.

Особистий внесок здобувача. Основні результати дисертаційної роботи здобувачем отримані самостійно, причому результати 9 робіт, що наведено в Додатку А, [А.6, А.8-А.11, А.13, А.14, А.16, А.17] отримані без співавторства. В опублікованих в співавторстві роботах здобувач здійснював пошук та аналіз літературних даних, проводив чисельні розрахунки, брав безпосередню участь у аналізі та обговоренні розрахункових результатів, формулюванні висновків, підготовці результатів до друку. У роботах, написаних і опублікованих в співавторстві, особистий внесок автора конкретно полягає в наступному.

В роботі [А.1] здобувач приймав безпосередню участь у визначенні та обґрунтуванні п'ятирівневої моделі компенсації, фізичних моделей розсіювання вільних носіїв заряду та дослідженні методом чисельного моделювання зміни питомого опору, електронної рухливості та рівня Фермі в арсеніді галію в залежності від концентрації акцепторів, донорів і структурної досконалості матриці.

В роботі [А.2] здобувач приймав безпосередню участь в розробці моделі компенсації для багатозарядних центрів, визначенні механізмів розсіювання вільних носіїв заряду в GaAs та доробці формули для знаходження парціальної рухливості електронів при розсіюванні на полярних оптичних фонах, чисельному рішенні рівняння електронейтральності для довільної кількості багатозарядних донорів, акцепторів та амфотерних домішок типу DA, DDA, DAA, обчисленні питомого опору та електронної рухливості, а також в дослідженні впливу дефектів EL-2 та кластерів на поведінку електронної рухливості і питомого опору GaAs в широкому інтервалі температур.

В роботі [А.3] здобувачем проведено дослідження домішкового складу для одержання CdTe детекторної якості з максимальним питомим опором та з високими значеннями дрейфової рухливості вільних електронів, визначення впливу на електронну рухливість механізмів екранування і розсіювання на фонах та іонізованих центрах.

В роботі [А.4] здобувачем проаналізовані властивості локальних глибоких рівнів в матеріалах CdTe та CdZnTe, кількісно досліджені оптимальні діапазони

концентрацій домішок для отримання напівізолюючого CdZnTe, проведено порівняльний аналіз модельних залежностей зміни питомого опору CdTe і CdZnTe при аналогічних домішкових складах, доведені переваги матеріалу телуриду кадмію з цинком.

В роботах [A.5, A.12] здобувачем досліджена конкретна роль присутніх в забороненій зоні енергетичних рівнів у процесах захоплення нерівноважних носіїв заряду, поставлена задача та проведено моделювання і визначено: а) мольну частку x , яка складає ZnTe в $Cd_{1-x}Zn_xTe$; б) вміст домішок і дефектів та необхідність їх нерівномірного розподілу для досягнення максимальних величин μ_n , ρ і одержання матеріалу високої детекторної якості.

В роботах [A.7, A.15] здобувач провів порівняльний аналіз ефективності збору зарядів η для детекторів з різною формою електродів і визначив оптимальний розподіл концентрації легуючого мілкового донора в $Cd_xZn_{1-x}Te$, який розміщено в міжелектродному проміжку детектора, для досягнення максимальної η , дослідив та встановив концентрації Zn в CdZnTe, що дозволяють використати цей матеріал в детекторах іонізуючих випромінювань.

В роботі [A.18] здобувачем був встановлений конкретний вплив фонових домішок, що містяться у Cd, Zn, Te, та співвідношення між їх концентраціями в $Cd_{1-x}Zn_xTe$ на ефективність збору зарядів детектора. З'ясована роль глибоких донорів на електрофізичні властивості високоомного матеріалу детекторної якості. З'ясовано, що основною причиною помітного зниження електронної рухливості в детекторах на основі CdZnTe є розсіювання електронів на скупченнях домішкових атомів.

Апробація результатів дисертації. Основні положення і результати дисертаційної роботи доповідались та отримали позитивну оцінку на наступних міжнародних конференціях: IV міжнародна науково-практична конференція «Сучасні інформаційні і електронні технології», м. Одеса, Україна, 2003 [A.12]; V міжнародна науково-практична конференція «Сучасні інформаційні і електронні технології», м. Одеса, Україна, 2004 [A.13]; VI міжнародна науково-практична конференція «Сучасні інформаційні і електронні технології», м. Одеса, Україна,

2005 [A.14]; I Міжнародна науково-практична конференція «Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка», м. Кременчук, Україна, 2011 [A.15]; XV міжнародна науково-практична конференція «Сучасні інформаційні і електронні технології», м. Одеса, Україна, 2014 [A.16]; IV міжнародна конференція «Високочисті матеріали: одержання, застосування, властивості», м. Харків, Україна, 2017 [A.17]; V міжнародна науково-практична конференція «Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка», м. Кременчук, Україна, 2018 [A.18].

Публікації. Результати роботи повністю відображено у 18 наукових працях, що наведено в Додатку А, а саме: у 9 статтях [A.1-A.6, A.8-A.10] у спеціалізованих фахових наукових виданнях України, які задовольняють вимогам, що пред'являються до публікацій, на яких ґрунтується дисертація, 2 статтях [A.7, A.11] у спеціалізованих наукових виданнях України, які додатково характеризують дисертацію, 7 матеріалах і тезах доповідей на наукових конференціях [A.12-A.18]. Статті [A.1–A.6, A.8, A.10, A.11] опубліковано у спеціалізованих фахових наукових виданнях, які включено до міжнародних наукометричних баз даних (DOAJ, CrossRef (DOI), Ulrich's Periodicals Directory, e-library та ін.), зокрема статті [A.1-A.4, A.10] опубліковано у журналах, що входять до Q3 у SJR, а також індексуються Scopus та Web of Science.

Структура і обсяг роботи. Дисертація складається із вступу, п'яти розділів основного тексту з 42 рисунками і 6 таблицями, висновків, списку використаних літературних джерел зі 150 найменувань та додатку. Повний обсяг дисертації становить 155 сторінок, з яких 14 сторінок займає список використаних джерел, 3 сторінки займає додаток.

РОЗДІЛ 1

ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ: ПРОБЛЕМИ ДОСЛІДЖЕННЯ ДЕТЕКТОРНИХ ХАРАКТЕРИСТИК І ЕНЕРГЕТИЧНИХ РІВНІВ

В даному розділі сформульовані вимоги до характеристик детекторів іонізуючих випромінювань на основі напівпровідників. Висвітлена важливість глибоких рівнів, які виникають в детекторних матеріалах при одержанні і експлуатації під дією опромінення та труднощі вимірювання властивостей рівнів. Обґрунтована модель кількісного дослідження детекторних матеріалів і вказані проблеми самокомпенсації при їх одержанні та експлуатації.

1.1 Характеристики детекторів іонізуючих випромінювань, властивості детекторних матеріалів і роль рівнів радіаційних дефектів

Одними з найбільш важливих електрофізичних властивостей напівпровідників, використовуваних для детекторів іонізуючих випромінювань, є рухливість μ питомий опір ρ і час життя нерівноважних носіїв заряду τ . Для ефективної роботи напівпровідникових детекторів гамма випромінювань необхідні матеріали з великим атомним номером Z , високими величинами ρ , рухливості вільних електронів μ_n та дірок μ_p , часу життя нерівноважних електронів τ_n і дірок τ_p . На детектувальні властивості впливає також густина G і молекулярна маса M детекторного матеріалу. Перелічені електрофізичні властивості є взаємозалежними і впливають на важливий технічний параметр - ефективність збору зарядів детектора, η . Одними з найбільш підходящих матеріалів, що мають хороші детектувальні властивості і оптимальне поєднання G , M , Z , ρ , μ , τ_e , τ_p , є CdZnTe, HgJ₂, CdTe і GaAs [1]. Широке практичне застосування знаходить CdZnTe, що має вказані властивості і дозволяє отримувати детектори з великим об'ємом активної області при низьких токах витоку і відсутності ефектів поляризації.

Принцип роботи твердотілого детектора ґрунтується на зборі зарядів, створених при поглинанні фотонів матрицею детекторного матеріалу і

дрейфуючих у електричному полі між катодом і анодом. Основний внесок в поглинання рентгенівського і гамма-випромінювання з енергією аж до $E_\gamma=1$ MeV дають два ефекти: фотоелектричний і комптонівське розсіювання. Якщо $E_\gamma \geq 1.02$ MeV, спостерігається виникнення електрон-позитронних пар. При фотоелектричному ефекті має місце повна передача енергії падаючого випромінювання атомним електронам, що дає корисну інформацію про енергію фотонів. При комптонівському розсіюванні електрона передається тільки частина енергії фотона. Переріз взаємодії S_{int} випромінювання з матрицею дуже сильно залежить від атомного номера Z детекторного матеріалу. Для фотоелектричного поглинання $S_{\text{int}} \sim Z^{4.5}$, при комптонівському розсіюванні $S_{\text{int}} \sim Z$, а для утворення електрон-позитронних пар $S_{\text{int}} \sim Z^2$. У детекторі з хорошими спектроскопічними характеристиками повинен переважати фотоелектричний ефект, так що для детектування рентгенівського і γ -випромінювання набагато краще використовувати матеріали з великими атомним номером і густиною. Кремній і германій є традиційними детекторними матеріалами, так як детектори випромінювань на їх основі характеризуються високим енергетичним розрізненням і хорошими транспортними властивостями: високою рухливістю і великим часом життя носіїв заряду. З іншого боку, Si і Ge мають слабку гальмівну здатність при проходженні високоенергетичних фотонів, це обмежує їх застосування для реєстрації жорстких рентгенівських і гамма-випромінювань. Більш того, невелика ширина забороненої зони E_G германію (0,67 eV) і, отже, низький питомий опір ρ дозволяє використовувати його тільки при криогенних температурах. У кремнії $E_G = 1.12$ eV і $\rho = 10^4$ Ом·см, що явно недостатньо для отримання детекторів з низьким відношенням сигнал / шум.

Великий інтерес до детекторів, що працюють при кімнатній температурі, стимулював розробку складених напівпровідникових матеріалів з широкою забороненою зоною. Широкозонні складені напівпровідники в основному отримані з елементів груп III і V (наприклад, GaAs), а також груп II і VI (наприклад, CdTe). Крім бінарних сполук отримані також і потрійні сполуки з великим атомним номером, наприклад, такі як CdZnTe, CdMnTe, CdHgTe.

В таблиці 1.1 [2] наведені порівняльні характеристики деяких детекторних матеріалів. З таблиці 1.1 видно, що CdTe і CdZnTe мають сукупність таких важливих для детекторних матеріалів властивостей, як широка заборонена зона і високий питомий опір, великий атомний номер і густина, відносно велика величина добутку $\mu_n \cdot \tau_n$, що забезпечує значну величину вільного пробігу електронів. Таким чином напівізолюючі CdTe і CdZnTe по праву вважаються перспективними матеріалами для створення твердотільних детекторів гамма і рентгенівського випромінювань, які експлуатуються при кімнатній температурі [3–5]], перш за все завдяки широкій забороненій зоні E_G , великим величинам густини і атомного номера, питомого опору ρ , електронної

Таблиця 1.1

Властивості деяких детекторних матеріалів при кімнатній температурі

Матеріал	Si	Ge	GaAs	CdTe	Cd _{0,9} Zn _{0,1} Te	HgI ₂	TlBr
Атомний номер	14	32	31, 33	48, 52	48, 30, 52	80, 53	81, 35
Густина, г/см ³	2.33	5.33	5.32	6.2	5.78	6.4	7.56
Ширина забороненої зони, еВ	1.12	0.67	1.42	1.44	1.57	2.13	2.68
Енергія утворення електрон-діркової пари, еВ	3.62	2.96	4.2	4.43	4.6	4.2	6.5
Питомий опір, Ом·см	10 ⁴	50	10 ⁸	10 ⁹ -10 ¹⁰	10 ¹⁰ -10 ¹¹	10 ¹³	10 ¹²
$\mu_n \cdot \tau_n$, см ² /В	> 1	> 1	10 ⁻⁵	10 ⁻³	10 ⁻³ -10 ⁻²	10 ⁻⁴	10 ⁻⁵
$\mu_p \cdot \tau_p$, см ² /В	~ 1	> 1	10 ⁻⁶	10 ⁻⁴	10 ⁻⁵	10 ⁻⁵	10 ⁻⁶

рухливості μ_n , часу життя електронів τ_n і дірок τ_p .

Як альтернативний матеріал для детекторів в ряді випадків застосовується також і арсенід галію [6–8]. Цьому сприяє великі коефіцієнти поглинання γ -квантів і рентгенівського випромінювання, висока електронна рухливість і можливість роботи при кімнатній температурі. Дослідження по використанню GaAs для створення детекторів заряджених частинок і квантів іонізуючих випромінювань були розпочаті більше 40 років тому. Технології вирощування монокристалів і епітаксціальних шарів є базовими для виготовлення детекторів

на основі GaAs. Епітаксіальний GaAs має більш високий ступінь стехіометрії складу в порівнянні з монокристалічним матеріалом, тобто на кілька порядків меншою концентрацією власних дефектів, в тому числі антиструктурного дефекту - центру EL2. В результаті, час життя електронів в епітаксіальному GaAs значно вищий, ніж в монокристалах GaAs. Тому для створення детекторів з високими енергетичним розрізненням і ефективністю збору заряду епітаксіальні шари є набагато кращими [9]. Однак Cd і Te мають вищі Z , що краще для реєстрації рентгенівських і гамма-квантів високих енергій, і добуток $\mu_n \cdot \tau_n$ в CdTe і CdZnTe помітно більший, ніж в GaAs. Проте, майбутнє використання напівпровідникових детекторів у фізичному експерименті в значній мірі буде визначатися можливостями технології створення високошвидкісних детекторів, що забезпечують необхідні швидкості зчитування інформації та можливостями роботи детекторів в умовах гранично високих радіаційних навантажень. Розвиток експериментальної фізики слідує в напрямку збільшення радіаційних навантажень. Це потребує в найближчому майбутньому використання у фізичному експерименті з високими радіаційними навантаженнями детекторів з таких матеріалів як арсенід галію або штучні алмази [10].

Практичне застосування детекторів обумовлює їх експлуатацію в агресивному радіаційному середовищі при значних експозиціях іонізуючого опромінення, яке може ввести значні радіаційні пошкодження в матеріалі і суттєво змінити характеристики детектора [11–17]. Взаємодія іонізуючих частинок і квантів в детекторному матеріалі викликає деградацію енергетичного розрізнення і ефективності збору зарядів [11, 17]. В даний час до кінця не зрозумілі конкретні причини цих явищ, пов'язаних з виникненням електрично активних дефектів. Радіаційні дефекти вносять в заборонену зону глибокі рівні, які діють як центри захоплення і рекомбінації вільних електронів і дірок, помітно впливаючи тим самим на процеси переносу заряду в напівпровіднику. З'ясування впливу дефектів на реєструвальні властивості детекторів, а також розуміння поведінки дефектів в умовах радіаційного опромінення є дуже

важливими для поліпшення детекторних характеристик. Одними з найважливіших властивостей детекторів ядерних випромінювань є відношення сигнал/шум і ефективність збору зарядів, для яких необхідний високий питомий опір матеріалів та низька концентрація глибоких рівнів, які виступають в ролі пасток для носіїв заряду, що дрейфують у міжелектродному просторі. Основними параметрами і-тих глибоких рівнів, що визначають детекторні властивості GaAs, CdTe, CdZnTe, служать концентрація N_i , переріз захоплення σ_i і положення в забороненій зоні (енергія активації) E_i [11, 12, 18, 19]. Точне вимірювання цих параметрів представляє значні труднощі. Основною причиною зазначеної проблеми вважається високий питомий опір, який для GaAs може досягати 10^8 Ом·см, а для CdTe і $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te} \sim 10^9\text{-}10^{11}$ Ом·см.

1.2 Ідентифікація рівнів дефектів і визначення їх параметрів

Енергетичні рівні дефектів помітно впливають на час життя нерівноважних носіїв заряду, отже, на ефективність збору зарядів детектора, і, крім того, на питомий опір детекторного матеріалу. В даний час для вимірювання характеристик рівнів в GaAs, CdTe і CdZnTe використовуються ряд методик. Наприклад, термостимульована струмова спектроскопія TSC (thermally stimulated current spectroscopy), термоелектрична емісійна спектроскопія TEES (thermoelectric emission spectroscopy) Широко застосовується такий різновид нестационарної спектроскопії глибоких рівнів, як фотостимульована струмова нестационарна спектроскопія, PICTS (photo induced current transient spectroscopy). Однак проведені дослідження електрофізичних і транспортних властивостей CdTe і CdZnTe показало, що питомий опір і час життя, обчислені на основі експериментально виміряних методом PICTS [12, 18, 20] перерізів захвату σ_i , концентрацій N_i і рівнів енергії E_i , в деяких випадках відрізняються на два- три порядки від відомих величин.

Вимірювання N_i , σ_i , E_i здійснюються за допомогою методик, що ґрунтуються на примусовому заповненні енергетичних рівнів електронами і дірками з подальшою їх емісією в відповідні зони. Вимірювання струмів носіїв заряду, емітованих з рівнів в широкому інтервалі температур, дозволяють

отримати спектри з явно вираженими піками при деяких температурах, які відповідають певним положенням рівнів енергій. Висота піків і їх ширина визначаються відповідно концентрацією рівнів і поперечним перерізом захвату носіїв заряду. Перекриття цих піків може не тільки помітно спотворити справжні величини N_i , E_i і σ_i , а й призвести до неправильної ідентифікації рівнів, реєстрації неіснуючих або втрати реальних рівнів дефектів. У зв'язку з цим в цілому ряді робіт спостерігаються розбіжності при вимірах положень рівнів енергії в забороненій зоні [18, 20–26]. Таким чином існує проблема правильної ідентифікації, а також вимірювання параметрів рівнів, що визначають роботу детектора і відповідно залишається відкритим питання про конкретні причини деградації реєструвальних властивостей детектора під впливом іонізуючого випромінювання. Цікава спроба вирішення цієї проблеми запропонована в [27, 28], де для інтерпретації спектрів TSC і визначення характеристик рівнів дефектів використаний метод SIMPA (simultaneous multiple peak analysis), в якому здійснюється підгонка експериментальних спектрів і аналітичної кривої, що складається з суми окремих піків рівнів, кожен з яких характеризується гаусовим розподілом. Визначені таким чином N_i , E_i і σ_i для кожного рівня, певно, є на сьогоднішній день одними з найбільш достовірних експериментальних даних (див., наприклад, [29]).

У деяких роботах були проведені теоретичні розрахунки положення рівнів енергії, виходячи з перших принципів, з подальшим порівнянням з результатами експерименту [30–33]. Енергії активації рівнів власних і домішкових дефектів, обчислених різними авторами, відрізняються більш, ніж в два рази, що і слід було очікувати з урахуванням точності квантово-механічних обчислень [34]. Це також призводить до неоднозначності в ідентифікації зареєстрованих рівнів. Як приклад можна навести завжди присутній в матриці CdTe і CdZnTe власний дефект - дворазово заряджену вакансію кадмію V_{Cd}^{2+} . Рівень енергії зазначеного структурного дефекту, визначений різними дослідниками, має наступні значення, еВ: 0.20 [31], 0,40 [35], 0.47 [18], 0.507, 0.509 [19, 36], 0.735 [37], 0.8 [33], 0.9 [18], тобто змінюється в широких межах.

Слід зазначити, що автори робіт [39, 40] на підставі досліджень спектрів електронного парамагнітного резонансу (ЕПР) зробили висновок про те, що дворазово заряджений акцептор V_{Cd}^{2-} не може бути глибше рівня 0,47 еВ і в [18] приписали цього дефекту саме таке значення. З іншого боку, в роботі [14] взагалі не було зафіксовано вакансії кадмію, а рівень 0,47 еВ був ідентифікований як електронна пастка, що відповідає донорному центру. Аналогічні проблеми виникають при спробі ідентифікації інших структурних дефектів, яким в забороненій зоні відповідають саме глибокі рівні, наприклад, вакансії телуру V_{Te}^{2+} [34]. Енергія відповідного глибокого донорного рівня $E(V_{Te}^{2+})$ також має розкид за величиною, еВ: 0,34 [41], 0,43 [42], 0,6 [20]. Єдиним питанням, за яким досягнуто майже повну однотайність серед дослідників, є тип точкового дефекту в CdTe. Так одним глибоким акцепторним дефектом виступають двократно заряджені вакансії кадмію. Вакансії телуру V_{Te}^+ , V_{Te}^{2+} , міжвузельні атоми кадмію Cd_i^+ , і телуру Cd_i^{2+} , а також антиструктурні дефекти - телур на місці кадмію Te_{Cd}^+ , Te_{Cd}^{2+} і кадмій на місці телуру Cd_{Te}^{2+} беруть участь в процесах компенсації як донорні центри [20, 31, 38, 41, 43–45]. Що стосується значних розбіжностей по величинам виміряних положень рівнів енергії в забороненій зоні, перерізах захоплення і концентрацій дефектів, то це практично не знаходить пояснення в роботах, опублікованих у відкритому друку.

Певний виняток становить робота [46], де на прикладі кремнію було експериментально показано, що виміряні величини концентрацій електрично активних атомів легуючої домішки залежать від типу і концентрації вихідних домішок, а, отже, від ступеня компенсації. Автор також зробив висновок про те, що в залежності від ступеня компенсації матеріалу і умов експерименту, одні і ті ж домішкові атоми з глибокими енергетичними рівнями можуть внести в заборонену зону напівпровідника різні положення цих рівнів, які відповідають певним станам в кристалічній решітці. Мабуть висновки роботи [46] можна застосувати й для досліджуваних матеріалів. Таким чином, спираючись на результати роботи [46], можна зробити висновок, що високоомні GaAs, CdTe і

CdZnTe при кімнатній температурі знаходяться в стані сильної компенсації, коли концентрація вільних електронів n і дірок p приблизно на шість порядків нижче концентрації нерухомих іонізованих центрів N_i' . Зі зниженням температури різниця між n , p і N_i' збільшується ще більше. В цих умовах навколо іонізованих локальних центрів виникають сильні електричні поля, а в решітці з'являються області з порушеннями електронейтральності, і тоді дефектна структура кристала може сильно змінюватися. У сильно компенсованому напівпровіднику система вільних носіїв заряду і нерухомих іонізованих центрів знаходиться в нерівноважному стані, таким чином, будь-який зовнішній вплив може змінювати електронну структуру дефектів і впливати на їх взаємодію з вільними електронами і дірками. В результаті цього, на думку автора [46], дефекти решітки не мають фіксованих станів і змушені перебудовуватися під впливом зовнішніх чинників: температури, тиску, електричних полів і т. п., а кожному квазірівноважному стану решітки відповідає тільки певний стан дефектів і положення їх рівнів в забороненій зоні. Так що в залежності від ступеня компенсації матеріалу і умов експерименту, стани дефектів, домішкових атомів і відповідні їм енергетичні рівні не є фіксованими, а можуть мати різні значення [46].

З іншого боку, аналіз літературних даних показує, що площа перерізу захвату вільних носіїв заряду локальними центрами залежить від положення глибоких рівнів, які відповідають цим центрам. Іншими словами, в детекторних матеріалах GaAs, CdTe і CdZnTe експериментально виміряні параметри глибоких рівнів енергії залежать від ступеня компенсації цих матеріалів і умов експерименту. Теорія глибоких рівнів в сильно компенсованих напівпровідниках ще не створена. Особливий інтерес представляє точне знання про такий важливий параметр, як концентрація глибоких рівнів. Через високий питомий опір CdTe і CdZnTe, а також внаслідок вищевикладених міркувань, визначення параметрів глибоких рівнів традиційно наштовхується на великі труднощі, і розбіжності в виміряних величинах концентрацій, опублікованих у відкритій пресі, може досягати двох-трьох порядків по абсолютній величині.

1.3 Процеси дефектоутворення в умовах жорсткого радіаційного опромінення

Робочі характеристики напівпровідникових приладів залежать від електрофізичних властивостей матеріалу і обумовлені його природою, домішковим і дефектним складом, а також характером і інтенсивністю зовнішніх опромінювань, які виникають в процесі експлуатації. З дефектів структури, які найбільш сильно впливають на електрофізичні властивості напівпровідника, можна виділити дислокації, точкові дефекти [47] і їх скупчення. В процесі експлуатації напівпровідникових приладів вони можуть піддаватися впливу радіаційного опромінення важкими частинками і γ -квантами, що призводить до виникнення вакансій (V), власних міжвузлових атомів (I), а також скупчень V і I. Крім того, при опроміненні напівпровідників важкими частинками виникають складні структурні пошкодження - розупорядковані області (PO), які представляють собою щільні скупчення дефектів, що складаються з ядра, насиченого дивакансіями (VV) і оточеного оболонкою, яка складається з комплексів вакансія + атом домішки [48]. PO, точкові і лінійні структурні дефекти, а також комплекси викликають появу значних деформацій, а також електростатичного, поляризаційного (п'єзоелектричного і флексометричного) потенціалів, що істотно впливає на електрофізичні властивості напівпровідників.

Велика кількість експериментальних даних, накопичених радіаційною фізикою, свідчать про істотний вплив умов деструкуючого опромінення на зміну експлуатаційних параметрів напівпровідникових матеріалів і приладів на їх основі. При цьому реальне розуміння основних фізичних процесів, що відбуваються в напівпровідниках при опроміненні, виникає на шляху розвитку кількісних моделей, які враховують вплив деформацій, які вводяться дефектами, і їх зарядових станів на швидкість радіаційного дефектоутворення [49,50] .

В процесі експлуатації детекторів в умовах жорсткого радіаційного середовища швидкість введення радіаційних дефектів (РД) залежить від умов

опромінення і вихідного (початкового) стану матеріалу: ступеня компенсації, типу легуючої домішки, наявності стоків, а також від деформацій, що виникають в решітці навколо дефектів, їх зарядового стану [49, 50]. При бомбардуванні GaAs важкими частинками утворюються розупорядковані області, що представляють собою щільні скупчення дефектів, причому деформація, що вводиться точковими дефектами РО роблять сильний вплив на електрофізичні властивості напівпровідників, які їх містять [50–53]. Автори роботи [50] запропонували в наближенні ізотропного середовища кількісну модель кінетики формування ізольованих розупорядкованих областей з урахуванням деформаційної, поляризаційної і електростатичної взаємодії дефектів в РО. У літературі відсутня інформація про дослідження РО в CdTe і CdZnTe, для яких вивчалася тільки радіаційне утворення комплексів дефектів, наприклад, типу вакансія-домішка. Для напівпровідників кубічної симетрії в наближенні анізотропного континууму отримані вирази для енергії взаємодії $U_{12}(r)$ двох точкових дефектів з урахуванням взаємного впливу поляризації і деформації кристала навколо дефектів [49]. Показано, що в ряді випадків можливе подання $U_{12}(r) = U_{12}^k + U_{12}^p + U_{12}^d$, де $U_{12}^k, U_{12}^p, U_{12}^d$ – кулонівська, поляризаційна і деформаційна складові взаємодії. На прикладі GaAs обчислені значення U_{12}^p і U_{12}^d для характерних параметрів точкових дефектів. Показано, що деформаційна і поляризаційна складові можуть складати помітну частину повної енергії взаємодії. На прикладі утворення А-центрів в n-Si показано, що короткодіюча взаємодія $U_{12}^p + U_{12}^d$ вакансії і атома розчиненого кисню ефективно проявляє себе як енергетичний бар'єр реакції Ω^* . З урахуванням цієї взаємодії вдалося отримати узгодження з експериментальними даними по співвідношенням швидкостей утворення Е-центрів і А-центрів в Si. Показано, що поляризаційна і деформаційна взаємодія проявляють себе у вигляді ефективного бар'єру Ω^* при реакціях утворення інших дефектних комплексів і не тільки в кремнії. У зв'язку з цим можна обчислити енергію взаємодії двох точкових дефектів, що утворюють комплекси вакансія-домішковий атом, щоб

оцінити швидкість утворення цих А-центрів в CdTe під впливом радіаційного опромінення.

Точкові радіаційні дефекти в CdTe можуть діяти як центри рекомбінації, змінюючи при цьому час життя неосновних носіїв заряду, або як центри захоплення, знижуючи концентрацію основних носіїв. Ступінь впливу точкових дефектів як іонізованих розсіюючих центрів на відповідну парціальну електронну рухливість в CdTe залежить від відносного вкладу інших механізмів розсіювання.

Ефективність дефектоутворення і тип РД, що вводиться сильно залежать від електронних параметрів вихідного матеріалу (положення рівня або квазірівня Фермі) і протікають по різному в нейтральній області і області просторового заряду матеріалу [54–56]. Вивчення впливу деструкуючого опромінення на властивості напівпровідників, як правило, включає дослідження термодинамічних і електронних властивостей РД, їх атомної конфігурації, що вимагає великої експериментальної бази даних. Однак ефективність відповідних експериментальних методик, наприклад, електронного парамагнітного резонансу відносно невелика. Матеріали GaAs, CdTe і CdZnTe мають, до того ж, високий питомий опір, що вносить додаткові труднощі при вимірюванні їх характеристик. Так що дані про РД в напівпровідниках уривчасті і неповні, особливо це стосується CdTe і CdZnTe.

1.4 Модель для дослідження вихідних матеріалів і проблеми самокомпенсації при легуванні

Для дослідження методом моделювання зміни електрофізичних і детекторних властивостей GaAs, CdTe, CdZnTe під впливом агресивного радіаційного середовища необхідно спочатку розробити модель для дослідження властивостей початкових (вихідних), неопромінених матеріалів, в тому числі надчистих і легованих для отримання наперед заданих характеристик. Склад початкових CdTe і CdZnTe досить складний і може включати близько 10–15 різних домішок і дефектів, що створюють в

забороненій зоні відповідні мілкі та глибокі рівні [14, 18, 20, 21, 24]. Для визначення питомого опору ρ , дрейфової рухливості μ і часу життя нерівноважних носіїв заряду τ необхідно перш за все знання концентрації вільних носіїв заряду, а також заряджених центрів і ступінь їх заповнення, які можна отримати шляхом вирішення рівняння електронейтральності. Таке вирішення в аналітичному вигляді можливо, якщо є максимум два-три дефекти або домішки. У більш складному випадку з великою кількістю рівнів вказане рівняння можна вирішувати тільки чисельно відносно концентрації вільних носіїв заряду або рівня Фермі. Домішки і дефекти можуть бути одно-, дво- або тризарядними донорами або акцепторами і навіть виявляти амфотерні властивості. Таким чином необхідно побудувати багаторівневу модель компенсації для довільного числа багатозарядних і амфотерних центрів домішок і дефектів. Така модель в поєднанні з моделями розсіювання і рекомбінації вільних носіїв заряду повинна правильно описувати відомі величини ρ , μ , τ для початкових неопромінених, надчистих і легованих матеріалів, що дало б можливість з'ясувати умови і параметри для GaAs, CdTe і CdZnTe з певними, наперед заданими властивостями, необхідними для створення напівпровідникових приладів, таких як детекторів ядерних випромінювань.

Для одержання потрібних характеристик вихідних напівпровідникових матеріалів слід провести їх дослідження в широкому інтервалі концентрацій фонових дефектів і легуючих домішок. При цьому вкрай важливо відповідність, наприклад, експериментально виміряного ρ з його обчисленим значенням для відомого складу і ступеня легування. Слід, однак, відзначити, що фундаментальні дослідження в області легування широкозонних сполук II-VI ще з 60-х років наштовхувалися на певні труднощі. Концентрації вільних носіїв заряду в ряді цих сполук не можуть бути отримані вище деяких граничних значень, істотно менших, ніж концентрація внесених домішкових атомів [57]. Граничні значення залежать від конкретного напівпровідника і типу внесеної домішки. Іншими словами, має місце так звана самокомпенсація (СК), яка

характеризує процеси, що перешкоджають досягненню низькоомних станів. Мірою СК служить відхилення від 1 відношення n/N_d або p/N_a , де N_d і N_a – відповідно концентрації мілких донорів і акцепторів. Для різних домішок в сполуках II-VI цей показник становить 10^{-2} - 10^{-8} і в різних напівпровідниках СК забезпечується різними механізмами. Згідно з запропонованими моделями самокомпенсація може забезпечуватися такими основними процесами [57].

Межа розчинності домішок. Самокомпенсація в GaAs найсильніше проявляється при легуванні домішками IV групи і пояснюється амфотерним характером поведінки цих домішок: у вузлах решітки А вони виявляються донорами, а в решітці В - акцепторами. В [58] було показано, що різниця в ентальпіях розчинення в двох підґратках мінімальна для домішки вуглецю, що означає мінімальну різницю в концентраціях вільних електронів і дірок, що поставляються до відповідних зон амфотерною домішкою С, і відповідно максимальну компенсацію при легуванні вуглецем, який займає переважно місця в вузлах As, тобто виступає в якості акцептора. З іншого боку в роботі [59] зазначено, що гранична концентрація вільних носіїв заряду в арсеніді галію досягає для вільних електронів $n = 2.6 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ при легуванні Те, а для дірок $p = 1.5 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ при легуванні вуглецем. Таким чином при дослідженні GaAs методом моделювання можна задавати в якості вихідних параметрів широкі діапазони зміни концентрацій легуючих домішок. Що стосується сполук II-VI, зокрема CdTe, то в [60] було показано, що розчинність домішок може залежати від рівня Фермі, тобто від рівня легування, і ширини забороненої зони; в тій же роботі було отримано вираз для рівноважної концентрації N_D електрично активної домішки:

$$2 \ln N_D \approx \frac{3}{4} \ln \left(\frac{m_h}{m_e} \right) + \ln(N_i N_c) - \frac{E_G}{2kT_0}, \quad (1.1)$$

де m_e і m_h – ефективні маси електронів і дірок, N_i – концентрація домішок в розплаві, N_c – ефективна густина станів в зоні провідності, T_0 – температура «заморожування» домішок, при якій дифузія домішок фактично припиняється, E_G - ширина забороненої зони, k - постійна Больцмана. Були проведені

розрахунки по формулі (1.1) граничної розчинності мілких домішок в CdTe для $N_i = 4 \cdot 10^{20} \text{см}^{-3}$, $T_0 = 1000 \text{ K}$ і отримано, що при кімнатних температурах (300 K) величина $N_D \approx 4 \cdot 10^{17} \text{см}^{-3}$, що цілком досить при моделюванні для гарантованого перекриття досліджуваної напівізолюючої області низькоомними областями з p -та n -провідностями.

Генерація власних дефектів решітки. У моделі цього процесу передбачається, що внесення в кристал донорних домішок індукує перехід деякої кількості атомів металу з кристала в газову фазу і створення підвищеної в порівнянні з рівноважною концентрації вакансій металу. В CdTe такими вакансіями є двократно заряджений акцептор вакансій кадмію V_{Cd}^{2+} з енергією близько 0,45-0,47 eV, а легуючим донором - атоми Cl, Al, In. Мілкі акцепторні домішки компенсуються створенням власних донорних дефектів - вакансій халькогеніда (Te) або міжвузлових атомів металу (Cd). Енергетичний вигравш від СК за цим механізмом становить близько $2E_G$, а енергія, необхідна для створення вакансії, приблизно дорівнює $4 \cdot E_b$ [57], де E_b - енергія зв'язку між атомами решітки. Отже утворення вакансій буде енергетично вигідним, якщо в напівпровіднику $E_G > 2E_b$ або $E_G/E_b > 2$. Для GaAs $E_G/E_b \approx 0.3$, а для CdTe $E_G/E_b \approx 1$. Ці прості оцінки дозволяють зробити висновок про те, що явище СК, яке реалізується через генерацію власних дефектів решітки, не заважає досліджувати електрофізичні властивості GaAs, CdTe і CdZnTe в широкому інтервалі концентрацій домішок, шляхом їх задання безпосередньо як вхідні параметри. Відзначимо, що для розрахунків енергій формування та концентрацій власних дефектів в досліджуваних матеріалах зазвичай залучаються сучасні, але вельми складні комп'ютерні методики, наприклад, в наближенні псевдопотенціалу [61] або з використанням схеми змішаного базису [62].

Компенсація за допомогою комплексів домішка-дефект. Розрахунок концентрації дефектів в легованих кристалах з урахуванням утворення комплексів у процесі самокомпенсації проводився в роботі [63]. Більш детально

цей процес розглянуто в обзорі [64]. Для розрахунку концентрацій дефектів необхідно враховувати їх кулонівську і пружну взаємодію, що виникає через деформації решітки, а також ковалентну взаємодію, що приводить до утворення комплексів молекулярного типу. Внаслідок великого радіусу захвату кулонівська взаємодія грає переважну роль в процесах комплексоутворення, однак пружна (деформаційна) взаємодія має порівнянну величину і також є важливою в сполуках III-V і II-VI [52, 65, 66]. Розрахунок рівноважної концентрації комплексів в сполуках II-VI можна проводити за законом діючих мас з урахуванням зміни ентальпії і ентропії системи при утворенні комплексу [67], причому в зміні ентальпії враховується тільки кулонівська взаємодія. Розрахунок швидкості утворення комплексів повинен також враховувати вплив деформації на електростатичну взаємодію [66, 68] між точковими дефектами. Положення рівнів енергій комплексів можна оцінити за допомогою наближення досить мілких рівнів, які можуть описуватися хвильовими функціями відповідних зон (провідності або валентної). Стосовно до CdTe ця модель включає комплекс дворазово зарядженої вакансії кадмію V_{Cd} з Cl або In, Al, Br - хімічна природа донорної домішки слабо впливає на стан рівня. Розрахунок положення енергії комплексу $V_{Cd}-Cl$, а також $V_{Cd}-In$, $V_{Cd}-Al$ за цією моделлю [69] дає 0,03 eV, що добре узгоджується з даними експерименту [70]. Модель згодом отримала численні експериментальні підтвердження, в тому числі з використанням ЕПР і магнітного резонансу, що оптично детектується [71]. Утворення комплексів домішка-дефект слід враховувати при легуванні і в процесі деградації при експлуатації детекторів під опроміненням.

Релаксація решітки поблизу атома домішки. Вбудовування атомів домішки в ґратку викликає релаксацію оточуючих атомів внаслідок різного розміру прониклих чужорідних центрів і атомів матриці, що, в свою чергу, впливає на сумарну енергію кристала. Якщо релаксація сильна, то зв'язок в безпосередній близькості від прониклого атома може бути розірваний, що призводить до формування зарядженого компенсуючого дефектного центру [72]. Помічена також термічна нестабільність легованих сполук II-VI та зміна

властивостей після тривалого зберігання [73] внаслідок чого збільшується опір. Такі процеси «старіння» – це прояв низькотемпературної самокомпенсації, яка здійснюється самою домішкою і пов'язана зі зміною положення в решітці атома домішки або сусіднього з ним атома решітки. Теоретична модель такої структурної релаксації була розроблена спочатку для сполук III-V (GaAs) [74], а потім для сполук II-VI [75, 76]. Для отримання напівізолюючого стану CdTe і CdZnTe легують донорними домішками, тому розглянемо саме цю модель. В [72] було показано, що донори в CdTe формують мілкі та стабільні глибокі центри, аналогічні DX-центрам в GaAlAs. Формування DX-центрів відбувається згідно реакції: $2d^0 \rightarrow DX^- + d^+$, де d - домішка заміщення, DX - глибокий центр, сформований розривом зв'язку і зміщенням донорної домішки в напрямку $\langle 111 \rangle$ (див рис.1.1).

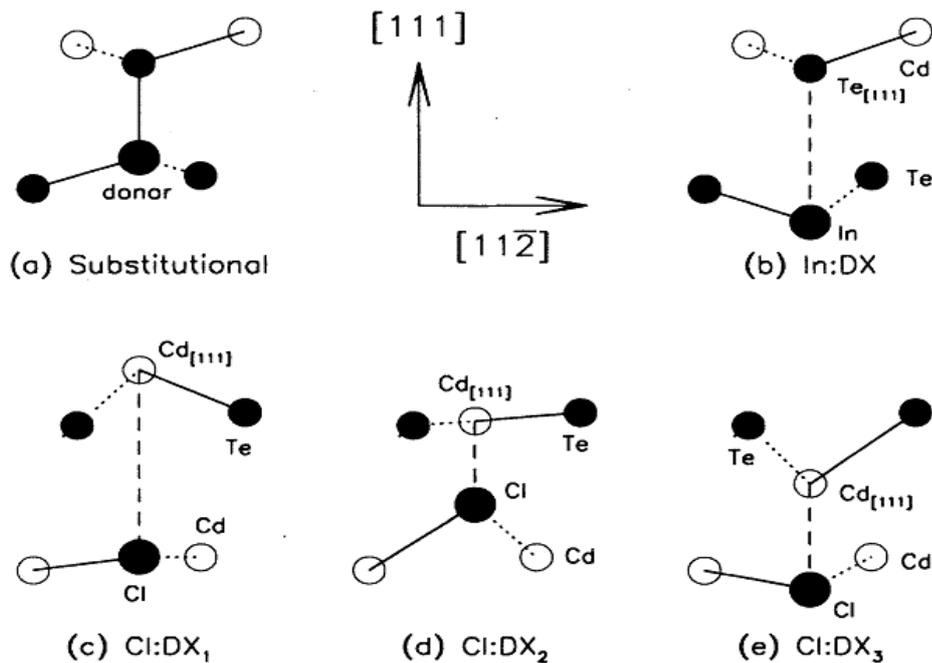


Рис. 1.1. Схематична атомна конфігурація донорів у площині (110) а) мілкий донор – домішка заміщення, б) геометрія великої релаксації решітки для донора III групи (In) в) DX₁ д) DX₂ е) DX₃ - структури великої релаксації решітки для донора VII групи (Cl) [72].

Перехід домішки з вузла в міжвузля. У попередньому випадку не розглядалася можливість утворення стабільних міжвузельних станів домішки з

малим ковалентним радіусом як, наприклад, Li, введений в CdTe. В роботі [77] було показано, що після тривалого витримування легovanого низькоомного матеріалу CdTe:Li при 300-500 К його опір зростав на 3-4 порядки, спостерігалось значне збільшення оптичного поглинання, пов'язане з іонізацією дефекту V_{Cd}^- . Був зроблений висновок, що в процесі старіння відбувається перехід атомів Li з вузлів у міжвузля. Утворені вакансії V_{Cd}^- повністю компенсуються міжвузельними атомами Li_l^+ , тому рівень Фермі розташовувався між рівнями одноразово V_{Cd}^- і дворазово V_{Cd}^{2-} іонізованими вакансіями кадмію.

При легуванні мілкими донорами в умовах, що перешкоджають утворенню власних дефектів в більшості сполук II-VI, в тому числі в CdTe (CdZnTe), вдалося досягти хорошої електронної провідності, однак при докладному дослідженні з'ясувалося, що має місце часткова компенсація [57]. У кристалах CdTe, легованих Cl до $n = (1-5) \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ в умовах, що перешкоджають утворенню компенсуючих дефектів V_{Cd} (зразки відпалювали в парах Cd), спостерігалася залишкова довготривала релаксація фотопровідності [78]. Зміни в спектрах домішкового поглинання після фотозбудження пояснювалися моделлю глибокого центру, що виникає при легуванні Cl і включає в себе вакансію Te (V_{Te}) і Cl_{Te} . З даних по вимірюванню ефекту Холла була визначена термічна енергія іонізації E_T компенсуючого акцепторного дефекту $V_{Te}-Cl_{Te}$, що дорівнює 0.1 eV відносно зони провідності. Можлива природа дефекту - аналог DX-центру, причому акцепторні властивості цього дефекту виходять, якщо використовувати ковалентну схему зі зв'язків; при цьому стан V_{Te} виникає зі станів валентної зони, але її рівень дуже глибокий і знаходиться поблизу зони провідності. Вплив близько розташованої донорної домішки на стан V_{Te} дуже слабкий через сильну локалізацію V_{Te} .

Таким чином, CdTe і CdZnTe можна легувати донорними і акцепторними домішками для отримання низькоомного матеріалу. З іншого боку, процеси самокомпенсації можна використовувати для отримання стабільних напівізолюючих кристалів телуриду кадмію, в яких положення рівня Фермі

закріплюється поблизу середини забороненої зони і слабо залежить від типу і концентрації фонових (випадкових) домішок. Кристали такого типу, наприклад, CdTe:Cl отримують легуванням з розплаву з великою концентрацією мілких донорів і тривалому охолодженні [79], в ході якого на різних стадіях утворюються різні компенсуючі дефекти. Це вакансії кадмію V_{Cd}^{2-} , що виникають при високих температурах, комплекси $(V_{Cd}-Cl)^-$ і $(V_{Cd}-2Cl)^0$, що виникають при проміжних температурах, нарешті, комплекси $(V_{Cd}-Cl)^- + Cd_I^0$, що утворюються при більш низьких температурах відпалу внаслідок релаксації атома решітки поблизу атома Cl і переходу сусіднього атома Cd в міжвузля [57, 77]. З позицій моделювання, це означає можливість дослідження вихідних матеріалів в самому широкому інтервалі концентрацій домішок і дефектів, а також при різних температурах.

1.5 Процеси самокомпенсації в детекторних матеріалах в умовах агресивного радіаційного середовища

В процесі радіаційного опромінення CdTe і CdZnTe спостерігалось збільшення питомого опору цих матеріалів [14, 16, 19] с подальшою стабілізацією ρ у високоомному стані. Цей ефект обумовлений закріпленням (пінінга) рівня Фермі в середині забороненої зони і вперше був виявлений авторами роботи [80]. Був досліджений широкий клас сполук III-V, а також потрійних сполук II-IV-V₂ і встановлено, що незалежно від ширини мінімальної забороненої зони кристала реакція напівпровідникового матеріалу на дію жорсткої радіації - це завжди процес самокомпенсації, в результаті якого рівень Фермі переходить в стаціонарний "граничний" стан F_{lim} . При цьому первинні властивості матеріалу (тип провідності, рівень легування, домішковий склад), а також умови опромінення визначають тільки швидкість досягнення цього стаціонарного граничного стану. Цей стан опроміненого напівпровідника відповідає практично повній взаємній компенсації радіаційних донорів і акцепторів, при цьому густина зв'язаного на дефектах заряду після опромінення перевищує густина вільних носіїв навіть у вироджених матеріалах [81]. CdTe і CdZnTe відносяться до сполук II-VI і для них не проводилися такі широкі

дослідження. Однак GaAs і CdTe це близькі за властивостями матеріали, наприклад, вони мають однакову кристалічну структуру і ступінь іонності зв'язку, близьку за величиною ширину забороненої зони при кімнатній температурі. З цієї причини результати [54, 81] можна узагальнити на CdTe і CdZnTe, при цьому інтерес представляє з'ясування характеристик «граничного» стаціонарного стану цих матеріалів: питомого опору, типу провідності, граничного рівня Фермі F_{lim} при робочих температурах детекторів (300 К) .

Якщо виміряні параметри всіх радіаційних дефектів, то поведінку рівня Фермі в опромінену матеріалі можна визначити шляхом чисельного рішення рівняння електронейтральності [54]:

$$n + I \sum G_{A_i} f(E_{A_i}) = p + I \sum G_{D_j} f(E_{D_j}) + (N_d - N_a), \quad (1.2)$$

де n , p – концентрація вільних електронів і дірок; I – інтегральний потік опромінення; G_{D_j} , G_{A_i} , – швидкість введення відповідно радіаційних донорів і акцепторів; $f(E_{ti}) = 1/\{1 + g_{ti} \exp[(E_{ti} - F)/kT]\}$ – функція заповнення рівня з фактором виродження g_{ti} ; $t = D, A$; N_d , N_a – концентрація домішкових відповідно донорів і акцепторів, T – температура, k – постійна Больцмана. Концентрації домішок слід враховувати тільки на початкових стадіях опромінення, коли вони перевищують концентрації радіаційних дефектів. В даний час в науковій літературі практично відсутні роботи, присвячені таким дослідженням, оскільки відсутні експериментальні дані про повний спектр РД більшості напівпровідників. Недолік інформації про параметри РД зумовлює розробку прогностичних моделей, здатних описати фізичні процеси, що протікають в напівпровідниках при радіаційному опроміненні [54, 81].

Як уже зазначалося, в результаті впливу жорсткої радіації на напівпровідниковий кристал в його об'ємі виникають процеси самокомпенсації. В результаті цього рівень Фермі переходить в стаціонарний "граничний" стан F_{lim} , величина якого не залежить від якості матеріалу і умов опромінення. В результаті опромінення матеріалу він переходить в напівізолюючий стан, коли відбувається майже повна взаємна компенсація радіаційних донорів і акцепторів. Відбувається стабілізація рівня Фермі поблизу F_{lim} , тобто швидкості

накопичення заряджених РД донорного і акцепторного типів вирівнюються. Густина зв'язаних зарядів перевищує густину вільних носіїв навіть якщо F_{lim} потрапляє в зону провідності або валентну [81].

Електрофізичні властивості опроміненого матеріалу визначаються тільки особливостями його електронного спектра $E(\mathbf{k})$ поблизу його мінімальної забороненої зони E_G , тобто залежать від енергетичного зазору між положенням F_{lim} і найближчими екстремумами зони провідності або валентної. В процесі жорсткого радіаційного опромінення рівень Фермі зміщується з положення, що задається рівнем легування хімічної домішкою, в найбільш глибокий стан F_{lim} в енергетичному проміжку між зоною провідності і валентною зоною кристала в межах всієї зони Бріллюена. Рівень F_{lim} виступає як "центр тяжіння" для всього набору радіаційних дефектів і проявляється як граничний рівень Фермі в опроміненому напівпровіднику. В умовах закріплення рівня Фермі в опроміненому напівпровіднику рівняння електронейтральності (1.2) можна перетворити до вигляду:

$$D \left\langle \sum_m I_{Dm} f(E_{Dm}) - \sum_l I_{Al} f(E_{Al}) \right\rangle \approx n_{lim} - p_{lim}, \quad (1.3)$$

де n_{lim} і p_{lim} - відповідно граничні значення концентрації вільних електронів і дірок. Рівняння (1.3) можна використовувати для аналізу властивостей опроміненого матеріалу, якщо знати величину F_{lim} .

Таким чином, обчислення параметра F_{lim} , як базової характеристики матеріалу, дозволить змоделювати зміну електрофізичних властивостей в полях жорсткої радіації [81]. Для визначення F_{lim} широко застосовується концепція точки розгалуження комплексної зонної структури кристала, тобто рівня локальної зарядової нейтральності, або «нейтральної» точки кристала з використанням різних евристичних моделей [82, 83], що вимагає значного обсягу обчислень. Тому має сенс скористатися простим підходом, розробленим в роботі [81], де висвітлюється проста модель опроміненого напівпровідника, що ґрунтується на розвитку моделі самокомпенсації при дії жорсткої радіації на матеріал, ш яка придатна для численних прогнозних оцінок його

електрофізичних параметрів. Модель враховує, що РД - це дефекти типу обірваних зв'язків, які відносяться до "глибоких" станів кристала і містить внесок від блохівських станів зон провідності і валентних зон зі значеннями хвильового вектору \mathbf{k} з усієї зони Брілюена кристала. У формуванні таких станів домінуючу роль якраз виконують зонні стани $E(\mathbf{k})$ з хвильовими векторами \mathbf{k} , порівнянними з вектором оберненої решітки кристала.

Глибокі радіаційні дефекти визначають граничне положення рівня Фермі в опромінену напівпровіднику, тому в якості "забороненої" енергетичної щільності опроміненого матеріалу в роботі [81] використаний не мінімальний енергетичний зазор E_G між зоною провідності і валентною, а величина $\langle E_G \rangle = \langle E_C \rangle - \langle E_V \rangle$. Тут $\langle E_C \rangle$ ($\langle E_V \rangle$) - середній по енергії рівень зони провідності (валентної зони) в межах всієї зони Брілюена кристала. Це дозволило перетворити енергетичний спектр тривимірного кристала в спектр одновимірного кристала з ізотропною енергетичною щільністю $\langle E_G \rangle$ і відповідно до результатів розрахунків для одновимірного кристала [84] обчислити енергетичний стан точки розгалуження напівпровідника як величину $\langle E_G/2 \rangle$ [85]. Для розрахунку $\langle E_G \rangle$ використовувалися спец. точки загального виду (gsp) [86]. Якщо вести відлік $\langle E_G \rangle$ від стелі валентної зони, то для широкозонного CdTe виконується умова $F_{\text{lim}} \equiv \langle E_G \rangle / 2 \approx E_G / 2$.

Обчисливши F_{lim} , і задаючи в рівнянні електронейтральності різні діапазони зміни концентрації радіаційних дефектів, можна визначити такі їх концентрації, які відповідають F_{lim} в матеріалі, що зазнав жорсткого радіаційного опромінення важкими частинками, наприклад, нейтронами або протонами. Потім ці дані можна порівнювати з результатами експериментів, де досліджувалися властивості опромінених детекторних матеріалів на основі телуриду кадмію, і шляхом порівняльного аналізу спробувати визначити причини та умови деградації реєструвальної здатності детекторів при великих дозах жорсткого опромінення.

Таким чином, точний теоретичний розрахунок і правильне експериментальне вимірювання параметрів радіаційних дефектів, що впливають на характеристики детекторів на основі CdZnTe, досить ускладнені. Відсутні повні експериментальні дані про РД. З цієї причини необхідно додатково до експериментальних методів, застосувати комп'ютерне моделювання для з'ясування залежності необхідних електрофізичних і детекторних властивостей GaAs, CdTe і CdZnTe від параметрів рівнів як у вихідних матеріалах, так і в тих, що піддавалися радіаційному опромінюванню. При цьому різні процеси самокомпенсації, що виникають при легуванні і радіаційне опромінення не обмежують можливість такого дослідження вихідних і опромінених матеріалів в широкому інтервалі концентрацій домішок і дефектів, а також при різних температурах.

1.6 Висновки до розділу 1 і задачі дисертаційної роботи

В результаті аналізу опублікованих даних було встановлено:

- існують проблеми точного вимірювання концентрації глибоких і мілких центрів N_i , енергетичного положення E_i їх рівнів в забороненій зоні, перерізу захоплення σ_i для напівпровідникових матеріалів Si, GaAs, CdTe, CdZnTe;
- виміряні параметри рівнів в сильно компенсованих CdTe і CdZnTe не дозволяють точно визначати їх детекторні властивості з урахуванням рекомбінації на глибоких рівнях через виникнення різних квазірівноважних станів з різними величинами енергій і концентрацій рівнів в інтервалі температур: від 10 до 350 K;
- для визначення ρ , μ , τ і ефективності збору зарядів η , які сильно залежать від N_i , σ_i , E_i , необхідно розробити багаторівневу модель компенсації з побудовою відповідного рівняння електронейтральності, яке можна вирішувати тільки чисельно, для довільної кількості багатозарядних домішок і дефектів;
- процеси самокомпенсації в GaAs, CdTe і CdZnTe не перешкоджають досягненню низькоомних станів n- і p-типу провідності по обидві сторони високоомних областей при легуванні домішками, тобто є можливість

дослідження вихідних матеріалів в широкому інтервалі концентрацій домішок і дефектів.

– необхідно застосовувати математичне моделювання на основі апробованих фізичних моделей для кількісного дослідження залежності необхідних електрофізичних і детекторних властивостей від характеристик рівнів у вихідних і опромінених матеріалах.

Таким чином **метою роботи** є з'ясування методом математичного моделювання впливу радіаційних і технологічних дефектів на питомий опір ρ , час життя нерівноважних носіїв заряду τ , рухливість електронів μ_n в GaAs, CdTe, CdZnTe, а також на реєструвальні властивості детекторів іонізуючих випромінювань на їх основі.

Для досягнення цієї мети потрібно вирішити такі задачі:

- розробити моделі і методики розрахунку електричної компенсації сполук A_3B_5 і A_2B_6 для довільної кількості багатозарядних центрів на основі чисельного рішення рівняння електронейтральності і обчислення концентрації заряджених і нейтральних глибоких центрів, питомого опору ρ досліджуваних матеріалів, електронної рухливості μ_n , часу життя нерівноважних носіїв заряду τ , ефективності збору зарядів детекторів η в широкому інтервалі температур і концентрацій дефектів;
- встановити параметри глибоких рівнів домішок і дефектів, їх вміст в GaAs, CdTe і CdZnTe для забезпечення необхідних для детекторних матеріалів високих величин ρ , μ_n і τ ;
- вивчити електрофізичні властивості неопромінених детекторів іонізуючих випромінювань на основі $Cd_{1-x}Zn_xTe$ для різних величин концентрації x цинку в широких діапазонах концентрацій легуючих домішок;
- дослідити реєструвальні властивості детекторів гамма і рентгенівського випромінювання на основі GaAs, CdTe і CdZnTe з різною конфігурацією електродів, а також в залежності від просторового розподілу детекторного матеріалу $Cd_{1-x}Zn_xTe$, розміщеного в міжелектродному проміжку;

- встановити характер впливу радіаційних дефектів, що утворюються в результаті гамма і рентгенівського опромінення на зміну і деградацію реєструвальних властивостей детекторів на основі CdTe і CdZnTe.

РОЗДІЛ 2

МОДЕЛІ ДЛЯ ОПИСАННЯ ЕЛЕКТРОФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ВИХІДНИХ ТА ОПРОМІНЕНИХ GaAs, CdTe, CdZnTe

В даному розділі представлені фізичні та математичні моделі (роботи [А.1, А.2]), що наведені в Додатку А) для кількісного дослідження електрофізичних властивостей GaAs, CdTe, CdZnTe. Представлено модель компенсації багатозарядних та амфотерних енергетичних рівнів, що утворюються дефектами та домішками в досліджуваних матеріалах. Розглянуто механізми розсіювання електронів на фононах, нейтральних та іонізованих центрах, скупченнях дефектів, дислокаціях, в потрійних сполуках (сплавах). Описаний вплив часу життя нерівноважних носіїв заряду на детекторні властивості матеріалів.

2.1 Модель електричної компенсації напівпровідників за участю довільної кількості багатозарядних дефектів

При опроміненні напівпровідників утворюються різноманітні дефекти кристалічної структури: вакансії, дивакансії, комплекси вакансій і домішкових елементів, вакансій і міжвузлових атомів, скупчення точкових дефектів і т.п. При утворенні дефектів структури в забороненій зоні напівпровідника з'являються відповідні рівні енергії, які здатні захоплювати вільні носії заряду. Рівні енергії радіаційно-стимульованих дефектів можуть проявляти себе як багатозарядні донори і акцептори або як амфотерні дефекти. Прийнята модель для розрахунку ступеня заповнення електронами багатозарядних центрів, а також концентрації вільних носіїв заряду ґрунтується на канонічному розподілі Гіббса для системи зі змінною кількістю частинок.

Введемо наступні умовні позначення. N_i - концентрація i - того центру, m_i – його зарядовий стан; d_i , a_i - кількість відповідно донорних і акцепторних рівнів i - того центру, причому $d_i + a_i = m_i$; ε_{ij} - j - тий рівень енергії i -того центра, $1 \leq j \leq m_i$, причому $\varepsilon_{i0} \equiv 0 \leq \varepsilon_{i1} \leq \varepsilon_{i2} \leq \dots \leq \varepsilon_{im_i}$, а ε_{i0} - відповідає глибокому центру,

на якому відсутні електрони, ε_{i1} - відповідає глибокому центру, на якому є 1 електрон и т. д.;

ε_{idi} - рівень нейтрального стану донора, заряд дорівнює нулю; ε_{imi} - максимально заряджений акцепторний рівень енергії; g_{ij} - ступінь виродження рівня j центра i ; Na – сумарна концентрація всіх мілких акцепторів; Nd – сумарна концентрація всіх мілких донорів; n_0, p_0 - концентрація вільних електронів і дірок.

Без урахування збуджених станів згідно зі статистикою Гіббса, ймовірність f_{ij}^0 того, що в стані термодинамічної рівноваги на i -му центрі знаходиться j електронів, тобто, що його заряд дорівнює $-e(j-d_i)$:

$$f_{ij}^0 = A \cdot g_{ij} \cdot e^{\beta \left(jF + \sum_{s=1}^j \varepsilon_{is} \right)}, \quad (2.1)$$

де $\beta = \frac{1}{kT}$, k - стала Больцмана, T – абсолютна температура, F - положення рівня

Фермі; $A = \frac{1}{1 + \sum_{s=1}^{m_i} \frac{g_{ij}}{g_{i0}} \cdot e^{\beta \left(sF + \sum_{j=1}^s \varepsilon_{ij} \right)}}$, де g_{i0} - кратність виродження основного рівня

домішки сорту i .

Як впливає з аналізу численних літературних даних, зарядовий стан багатозарядних домішок в реальних напівпровідниках практично зрідка перевищує 3, а амфотерних - 2. Тому розглядалися одно-, дво- і три-зарядові стани глибоких донорів і акцепторів, коли $d_i=1, 2, 3$; $a_i=1, 2, 3$ і амфотерні домішки типу DA ($d_i = 1, a_i = 1$), типу DDA ($d_i = 2, a_i = 1$) і типу DAA ($d_i = 1, a_i = 2$). У матриці напівпровідника крім глибоких центрів присутні також мілкі центри. Тоді при наявності домішок всіх зазначених сортів маємо в загальному

випадку К - рівневу модель компенсації, де $K = \sum_{i=1}^N (d_i + a_i)$. Таким чином, якщо в

матриці напівпровідника присутня загальна кількість N мілких і глибоких центрів, то модель дозволяє проводити кількісні розрахунки для напівпровідників з практично будь-яким складом і відображається наступним рівнянням електронейтральності:

$$n_0 - p_0 + \sum_i^N \sum_{j=0}^{m_i} N_i(j-d_i) \frac{g_{ij} \cdot \exp \left[\beta \left(jF - \sum_{s=1}^j \varepsilon_{is} \right) \right]}{g_{io} \cdot \left\{ 1 + \sum_{s=1}^{m_i} \frac{g_{is}}{g_{io}} \exp \left[\beta \left(sF - \sum_{r=1}^s \varepsilon_{rs} \right) \right] \right\}} + N_a - N_d = 0. \quad (2.2)$$

Аналіз рівняння (2.2) показав, що його ліва частина має монотонний характер зміни без екстремумів зі зміною n або F , один раз змінює знак на протилежний, проходячи через нуль і тому має єдине вирішення. Рівняння (2.2) можна вирішувати чисельно методом половинного ділення відносно n_0 , p_0 або відносно рівня Фермі F . Ліву частину рівняння (2.2) було визначено як функцію рівня Фермі $f(F)$ і вирішувалось чисельно відносно F .

Потім визначалися концентрації вільних електронів n_0 і вільних дірок p_0 :

$$n_0 = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{1 + \exp[\beta(x - F + E_c)]}, \quad (2.3)$$

$$p_0 = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{1 + \exp[\beta(x + F - E_v)]}, \quad (2.3)'$$

де m_n^* , m_p^* - ефективні маси електронів і дірок відповідно для зон провідності та валентної; E_c - дно зони провідності; E_v - стеля валентної зони.

В формулах (2.1)– (2.3) неявно міститься величина ширини забороненої зони E_g , що, взагалі кажучи, залежить від температури. В більшості практично важливих випадків цю залежність можна апроксимувати виразом [87]:

$$E_g(T) = E_0 - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}, \quad \text{де } \alpha \text{ і } \beta - \text{ константи, які підбираються емпірично. Автори}$$

роботи [88] з посиланням на [89] пропонують при розрахунках використовувати узагальнену формулу, яка описує залежність ширини забороненої зони $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ від концентрації x цинку і температури T :

$$E_g(x, T) = E_0 + 0.38x + 0.463x^2 - \frac{4.5 \cdot 10^{-4} \cdot T^2}{1 + \beta}. \quad (2.4)$$

Якщо в цій формулі прийняти $E_0 = 1.606$ eV, $\beta = 265$, то виходять значення $E_g(x, T)$, які досить добре узгоджуються з величинами, наведеними в літературі. Однак в [90] було зазначено на відсутність в даній формулі залежності температурного коефіцієнта ширини забороненої зони від концентрації цинку x ,

хоча в твердих розчинах на основі CdTe цей коефіцієнт може сильно залежати від x [91]. Автори [90] на основі отриманих експериментальних даних запропонували представляти залежність $E_g(T)$ лінійними апроксимаціями $E_g(T) = 1.608 + 4.52 \cdot 10^{-4} T$ eV для CdTe і $E_g(T) = 1.664 + 4.32 \cdot 10^{-4} T$ eV для $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$.

Коли до досліджуваних напівпровідників прикладаються великі електричні поля, або вони нагріваються до високих температур вільні носії заряду можуть набувати високих енергій і в цьому випадку потрібно враховувати відхилення закону дисперсії $E(k)$ від параболічного. Для цього зазвичай використовується теорія Кейна [92, 93], а також результати роботи [94] де теорія Кейна була вдосконалена з урахуванням багатозонної моделі і була показана придатність удосконалення теорії для сполук $A_{III}B_V$, зокрема GaAs. Ефективна маса вільних носіїв біля краю зони визначається із загального виразу

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E(k)}{dk^2}}, \text{ де } E(k) \text{ – дисперсійне співвідношення.}$$

2.2 Механізми розсіювання вільних носіїв заряду

Електронна рухливість μ_n , питомий опір ρ , визначаються розсіюванням на коливаннях решітки та присутніх в матриці радіаційних і власних дефектах структури. Для розрахунку електронної рухливості було взято за основу наближення часу релаксації (τ -наближення):

$$\frac{1}{\tau} = \sum_j \frac{1}{\tau_j}, \quad (2.5)$$

де τ_j - характерні часи релаксації для окремих механізмів розсіювання. У розрахункову модель були включені механізми розсіювання вільних носіїв заряду на акустичних деформаційних фононах [95], акустичних п'єзоелектричних фононах [96, 97], поляризованих і неполярних оптичних фононах [95], на іонізованих центрах, нейтральних центрах, на неоднорідностях легування (кластерах), на central-cell потенціал, на розплаві, на дислокаціях. Розгляд механізму розсіювання на поляризованих оптичних фононах в

загальному випадку призводить до виразу для відповідного часу релаксації τ_{PO} :

$$\frac{1}{\tau_{PO}} = \frac{4\pi \cdot kT (Ze)^2 \sqrt{2m^*}}{\Omega M \cdot \hbar^2 \omega_o^2 \sqrt{E}}, \text{ де } M - \text{ зведена маса атомів; якщо в наявності атоми двох}$$

різних сортів M_1 і M_2 то $M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$; Ze - ефективний заряд атомів (Z - ступінь

іонності); ω_o - гранична частота оптичного фонона, рад/сек;

Однак розсіяння на поляризованих оптичних фононах в GaAs непружне, тому наближення часу релаксації тут не дійсне. В цьому випадку необхідно вирішувати рівняння Больцмана, наприклад методом ітерацій [98], або можна використати підхід, що ґрунтується на напівемпіричному часі релаксації [99]:

$$\frac{1}{\tau_{op}} = \frac{\frac{1}{\sqrt{\frac{E}{kT}}} + \frac{e^Z}{\sqrt{\frac{E}{kT} - Z}}}{\frac{4\sqrt{2}\varepsilon_0^2 M \Omega \hbar \omega_l \sqrt{kT}}{(e^*)^2 \sqrt{m^*}} [e^Z - 1]}, \quad (2.6)$$

де $(e^*)^2 = M \Omega \varepsilon_0 \omega_l^2 \left(\frac{\varepsilon_S}{\varepsilon_d} - 1 \right) \frac{1}{\varepsilon_S}$; $Z = \frac{\hbar \omega_l}{kT}$; ω_l - подовжня частота оптичних коливань; ε_d

– високочастотна діелектрична проникність; ε_S – статична діелектрична проникність; e^* – ефективний заряд Колена; M - зведена маса; Ω – об'єм елементарної комірки кристалу, м³.

Попередні розрахунки показали, що обчислення рухливості за формулою (2.6) роботи [99] для GaAs не завжди задовільно збігається з експериментальними результатами, особливо в широкому інтервалі температур 4 - 300 К. З цієї причини, з урахуванням результатів Еренрайха [100] була знайдена емпірична формула для обчислення парціальної рухливості при розсіюванні електронів на полярних оптичних фононах в GaAs:

$$\mu_n = 3,0695 \cdot 10^{40} \sqrt{\frac{T}{300}} \left(\frac{e}{e^*} \right)^2 \left(\frac{m_0}{m^*} \right)^{3/2} M \Omega \omega_l [e^Z - 1] \cdot e^{-\frac{246}{T}}. \quad (2.7)$$

Парціальна рухливість при розсіюванні вільних носіїв заряду на полярних оптичних фононах в CdTe обчислювалась по формулі (7) з роботи [101].

Для розсіювання на іонізованих центрах в слабо і помірно легуваних напівпровідниках існують моделі, які описуються формулами Брукса-Херрінга [102] і Конуелл-Вайскопфа [103]. Було зроблено уточнення формули Брукса-Херрінга, яка враховує екранування тільки вільними носіями заряду. У модель, крім екранування вільними носіями заряду, було введено екранування глибокими рівнями, і остаточна формула для відповідного часу релаксації τ_{ii} набула вигляду:

$$\tau_{ii} = \frac{2^{9/2} X^{3/2} (kT)^{3/2} (\varepsilon_0)^2 \pi \sqrt{m^*}}{e^4 N_t^z \cdot 10^6 \left[\ln(1 + \beta) - \frac{1}{1 + \beta} \right]}, \quad (2.8)$$

де $\beta = \frac{8m^* \varepsilon_0 (kT)^2 X}{\hbar^2 e^2 (Q_{DZ} + n_0 + p_0) \cdot 10^6}$; $X = \frac{E}{kT}$; ε - діелектрична проникність; ε_0 - електрична постійна; N_t^z - концентрація заряджених центрів розсіювання; Q_{DZ} - концентрація заряджених глибоких рівнів. Розрахунки за формулою (2.8) точніше відображали експериментальні залежності рухливості електронів від температури для вихідних еталонних матеріалів. У модель був включений також механізм розсіювання на нейтральних центрах і відповідна формула для парціальної рухливості μ_N наведена в [104, 105].

Для напівпровідників з великою неоднорідністю легування в матриці напівпровідника можуть утворюватися кластери домішок, що призводить до флуктуацій на краях зон. Ці флуктуації перевищують кінетичну енергію вільних носіїв заряду. В [106] отримано вираз для рухливості μ_{sc} , обумовленої даним механізмом розсіювання: $\mu_{sc} = \frac{e}{N_s A \sqrt{2km^*T}}$, N_s - концентрація кластерів, см^{-3} ;

A – ефективна площа поперечного перерізу розсіювання кластера, см^2 .

В модель був також включений механізм розсіювання на дислокаціях з характерним часом релаксації τ_d . Відповідна теорія розсіювання наводиться в роботах [107–109].

Рухливість вільних носіїв заряду визначається виразом: $\mu = \frac{e\langle\tau\rangle}{m^*}$, де ефективна маса m^* в загальному випадку є тензором; τ визначається формулою (2.5), а усереднення ведеться по енергіям вільних носіїв. Переходячи до

інтегрування по енергії E , можна записати: $\langle\tau\rangle = \langle E\tau\rangle = \frac{4}{3kT} \frac{\int_0^\infty E f(E,T) N(E) dE}{\int_0^\infty dn(E)}$. Тут

$f(E,T)$ – функція Фермі-Дірака; $N(E) = \frac{2\pi}{h^3} (2m_e^*)^{3/2} [E(k) - E_C]^{1/2}$ для зони провідності;

$N(E) = \frac{2\pi}{h^3} (2m_h^*)^{3/2} [E_V - E(k)]^{1/2}$ для валентної зони; $E(k)$ – дисперсійне

співвідношення, в якому \mathbf{k} – хвильовий вектор; решта величин ті ж, що і раніш.

У випадку параболічних зон, що має місце для GaAs, CdTe, CdZnTe, загальна формула для електронної рухливості [110]:

$$\mu_n = \left\{ \frac{300m^* \int_0^\infty \left[E^{3/2} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \right] dE}{e \int_0^\infty \left[E^{3/2} \left(\sum_i \frac{1}{\tau_i} \right)^{-1} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \right] dE} + \sum_j \frac{1}{\mu_j} \right\}^{-1}. \quad (2.9)$$

В (2.9) індексом i позначені механізми, для яких прийняті моделі визначають час релаксації імпульсу, а індексом j - механізми, для яких прийняті моделі визначають рухливість в аналітичному вигляді. Питомий опір визначалося за формулою:

$$\rho = \frac{1}{en_0\mu_n + ep_0\mu_p}, \quad (2.10)$$

где μ_n и μ_p - дрейфові рухливості відповідно вільних електронів і дірок. μ_n і μ_p можна одержати з (2.9) при підстановці відповідних параметрів для електронів і дірок.

2.3 Потрійні сполуки

У випадку потрійної сполуки $Cd_{1-x}Zn_xTe$ в правій частині формули (2.5) з'являється новий доданок, який відображає механізм розсіювання в сполуці.

Між атомами Те виникає розподіл атомів типу Cd і Zn, який не повторюється в періодичній решітці. Збурення, що виникає при цьому, викликає розсіювання в сполуці. Для сполуки $A_xB_{1-x}C$ результуючий вираз для відповідного часу релаксації τ_{AR} [99]:

$$\tau_{AR} = \frac{4N_A h^4}{3\sqrt{2}(m^*)^{3/2}(kT)^{3/2}C_A(1-C_A(\Delta E)^2)} \sqrt{\frac{E}{kT}}.$$

Тут N_A – концентрація центрів сполуки в кристалі; C_A – атомна частка компонента А, ΔE – глибина потенційної розсіювальної ями.

Вирази для різних механізмів розсіювання, розглянуті раніше, залишаються в силі, але параметри кристала тепер уже залежать від складу сполуки. До таких параметрів належать параметр решітки a , ефективна маса вільних носіїв m^* , зведена іонна маса M , ефективний заряд Коллена e^* , ширина забороненої зони E_g , статична ϵ_r^s і динамічна ϵ_r^d діелектричні проникності, поперечна частота поляризованих оптичних фононів ω_T , об'єм елементарної комірки Ω , п'єзоелектричні константи, наприклад h_{14} . В роботі [99] були зроблені деякі допущення відносно цих параметрів.

Параметр решітки підкоряється закону Вегардса: $a = a_A C_A + a_B C_B$, де C_B – атомна частка компонента B в сполуці, a_A і a_B – параметри решіток відповідно для компонентів А і В.

Ефективна маса електронів: $\frac{1}{m^*} = \frac{C_A}{m_A^*} + \frac{C_B}{m_B^*}$,

де m_A^* , m_B^* – ефективні маси електронів відповідно в чистих компонентах А і В. Ширину забороненої зони сполуки можна розрахувати по формулі [111] $E_g = A + B \cdot x + C \cdot x^2$, де $x = C_A$; A , B , C – константи, або по формулі (2.4).

Відносна статична ϵ_r^s і відносна динамічна ϵ_r^d діелектричні проникності:

$$\frac{\epsilon_r^{s,d} - 1}{\epsilon_r^{s,d} + 2} = C_A \frac{\epsilon_{rA}^{s,d} - 1}{\epsilon_{rA}^{s,d} + 2} + C_B \frac{\epsilon_{rB}^{s,d} - 1}{\epsilon_{rB}^{s,d} + 2}.$$

Поздовжня частота оптичних коливань ω_l і поперечна частота довгохвильових оптичних коливань ω_T пов'язані співвідношення [112]:

$$\omega_T^2 = \varepsilon_s \omega_T^2 / \varepsilon ; \omega_T = (C_A \omega_{TA}^2 + C_B \omega_{TB}^2)^{1/2} ; \omega_{TA}^2 = \frac{2K_A}{M_{rA}} , \omega_{TB}^2 = \frac{2K_B}{M_{rB}} , M_{rA} = \frac{M_A M_B}{M_A + M_C} ,$$

$$M_{rA} = \frac{M_B M_C}{M_B + M_C} \text{ де } \omega_{TA} \text{ і } \omega_{TB} - \text{ частоти довгохвильових оптичних коливань}$$

відповідно для компонентів A і B ; M_r, M_r – зведені маси, M_A, M_B, M_C – маси атомів відповідно компонентів A, B і C ; K_A і K_B – коефіцієнти зв'язку (жорсткості) відповідно атомів A і B з найближчим атомом C . Коефіцієнти K_A і K_B можуть бути виражені через рівняння коливань атомів в одномірній A, B, C решітці.

Частота розсіювання вільних носіїв заряду на поляризованих оптичних фононах пропорційна величині $\frac{(e^*)^2}{M\Omega}$ (див. формулу (2.6)), що для сполуки має

$$\text{вигляд: } \left(\frac{(e^*)^2}{M\Omega} \right)_{\text{alloy}} = \frac{C_A (e_A^*)^2}{M_{rA} \Omega} + \frac{C_B (e_B^*)^2}{M_{rB} \Omega} , \text{ де } e_A^* \text{ і } e_B^* - \text{ ефективні заряди Коллена}$$

відповідно для чистих $A-C$ і $B-C$ сполук.

Розгляд п'єзоелектричного розсіювання в сполуці дає вираз для п'єзоелектричної константи h_{14} , і усередненої пружної сталої \bar{C} :

$$h_{14} = \frac{8(C_A e_{IA} + C_B e_{IB})}{3\pi \varepsilon_s a^2} , \bar{C} = 4 \left(\frac{M_C + C_A M_A + C_B M_B}{a^3} \right) , \text{ де } u - \text{ швидкість розповсюдження}$$

довгохвильових акустичних коливань в матеріалі; e_{IA}, e_{IB} – однорідні заряди.

Вирази для e_{IA}, e_{IB} і u докладно описані в [99].

2.4 Час життя нерівноважних носіїв заряду

Час життя нерівноважних носіїв заряду τ_i (для електронів - τ_n , для дірок - τ_p) визначається процесами їх захоплення, вивільнення і рекомбінації на технологічних та радіаційних дефектах структури у вигляді глибоких і мілких точкових центрів, мікро-неоднорідностей, лінійних дефектів, областей скупчення радіаційних дефектів, а також на присутніх в матриці власних і технологічних дефектах. Міжзонною рекомбінацією можна знехтувати. Такий висновок випливає з експериментальних вимірювань коефіцієнтів міжзонної

рекомбінації K_{zz} , виконаних авторами робіт [113, 114], де було встановлено, що для CdTe $K_{zz}=3 \cdot 10^{-11} \text{ см}^3/\text{сек}$. Відповідний час життя τ_{zz} в CdTe складає $\sim 10^4$ сек, а відома експериментально виміряна величина $\tau_n, \tau_p \sim 10^{-5} - 10^{-6}$ сек. Крім того, нас будуть цікавити високоомні стани GaAs, CdTe і CdZnTe, коли концентрація іонізованих глибоких радіаційних центрів перевищує концентрацію вільних носіїв заряду на 5-6 порядків, тому їх рекомбінація на глибоких рівнях помітно перевищує міжзонну рекомбінацію. Таким чином, поведінку нерівноважних носіїв заряду можна описати статистикою Шоклі-Ріда [115].

Введемо позначення. Нехай N_t – концентрація рекомбінаційних центрів; E_t – рівень енергії центру рекомбінації; c_n – середня ймовірність того, що в одиницю часу електрон в енергетичному інтервалі $(E, E + dE)$ захоплюється одним центром; c_p – середня ймовірність того, що в одиницю часу в енергетичному інтервалі $(E, E+dE)$ дірка захоплюється одним центром; n_0, p_0 відповідно концентрація електронів і дірок в стані термодинамічної рівноваги; $C_p, (C_n)$ – відповідно ймовірності в одиницю часу захоплення дірки (електрона) за умови, що всі центри заповнені електронами (порожні).

У загальному випадку, коли концентрація центрів рекомбінації велика, що нею не можна нехтувати в порівнянні з концентрацією вільних носіїв і $\delta n \neq \delta p$, час життя нерівноважних електронів:

$$\tau_n = \frac{\tau_{p0}(n_0 + n_1) + \tau_{n0} \left[p_0 + p_1 + N_t \left(\frac{p_1}{p_1 + p_0} \right) \right]}{n_0 + p_0 + N_t \frac{p_1 p_0}{(p_1 + p_0)^2}}. \quad (2.11)$$

Час життя нерівноважних дірок:

$$\tau_p = \frac{\tau_{n0}(p_0 + p_1) + \tau_{p0} \left[n_0 + n_1 + N_t \left(\frac{n_1}{n_1 + n_0} \right) \right]}{n_0 + p_0 + N_t \frac{n_1 n_0}{(n_1 + n_0)^2}}. \quad (2.11)'$$

В (2.11) і (2.11)': $n_1 = N_C \exp \left[\frac{E_t - E_C}{kT} \right]$; $p_1 = N_V \exp \left[\frac{E_V - E_t}{kT} \right]$; $N_V = 2 \frac{(2\pi m_p^* kT)^{3/2}}{h^3}$; $N_C = 2 \frac{(2\pi m_n^* kT)^{3/2}}{h^3}$; $\tau_{n0} = \frac{1}{C_n} \equiv \frac{1}{S_t^n v_T^n N_t^n}$; $\tau_{p0} = \frac{1}{C_p} \equiv \frac{1}{S_t^p v_T^p N_t^p}$; S_t^n, N_t^n - переріз захвату і

концентрація електронної пастки; S_i^p , N_i^p – переріз захвату і концентрація діркової пастки; $v_T^n, v_T^p = \sqrt{\frac{8kT}{\pi \cdot m_{n,p}^*}}$ – теплові швидкості вільних електронів і дірок відповідно.

На основі прийнятих математичних моделей були проведені обчислення електрофізичних властивостей досліджуваних прямо зонних напівпровідникових матеріалів на прикладі розрахунку μ_n , ρ , і часу життя нерівноважних носіїв заряду τ_n , τ_p для арсеніду галію. Продемонстровані можливості математичних моделей на прикладі вивчення впливу дефекту EL-2 в GaAs (після радіаційного опромінення з наступною термообробкою) на основні електрофізичні параметри в широкому температурному інтервалі.

Матеріали даного розділу опубліковані в роботах [A.1, A.2], що наведені в Додатку А, та представлені на конференції [A.12].

2.5 Висновки до розділу 2

1. Визначені фізичні та математичні моделі для опису змін електрофізичних властивостей (питомого опору, рухливості, часу життя нерівноважних носіїв заряду) досліджуваних матеріалів в залежності від складу при довільній кількості радіаційних і технологічних дефектів різного сорту в широкому інтервалі температур.
2. Отримано простий аналітичний вираз для розрахунку парціальної рухливості при непружному розсіюванні вільних носіїв заряду на полярних оптичних фононах в арсеніді галію (формула (2.7)).
3. Уточнено модель Брукса-Херрінга для розрахунку парціальної рухливості вільних носіїв заряду при розсіюванні на іонізованих радіаційно-стимульованих і технологічних дефектах.

РОЗДІЛ 3 ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НЕОПРОМІНЕНИХ GaAs, CdTe, CdZnTe

В даному розділі представлений опис результатів дослідження та встановлення електрофізичних властивостей вихідних матеріалів GaAs, CdTe, CdZnTe хорошої детекторної якості до їх опромінення в процесі експлуатації детекторів. Дослідження характеристик неопромінених матеріалів проводилось в широкому інтервалі температур і концентрацій фонових та технологічних домішок і структурних дефектів (роботи [A.1–A.4, A.17, A.18], що наведено в Додатку А). Досліджена кореляція між питомим опором ρ і електронною рухливістю μ_n в CdTe і CdZnTe [A.4, A.12].

3.1 Електрофізичні властивості GaAs в залежності від вмісту структурних недосконалостей

Спочатку слід продемонструвати відповідність результатів обчислень, зроблених на основі прийнятих моделей, експериментальним результатам, отриманим з незалежних джерел. В роботі [116] наводяться експериментальні результати електронної рухливості μ_n в високочистому зразку арсеніду галію, отриманому методом парофазної епітаксії. В роботі [36] була виміряна температурна залежність питомого опору $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}:\text{In}$. Після підстановки в математичну модель необхідних параметрів GaAs, величин концентрацій і енергій фонових дефектів були отримані криві, показані на рис.3.1(а,б) суцільними лініями. Там же наводяться експериментально виміряні значення рухливості, відмічені точками, взяті з указаних робіт. Як бачимо, є хороша відповідність між експериментом і результатами обчислень за прийнятою моделлю. Порівняння модельних графіків з експериментальними результатами роботи [117] також дає хороший збіг кривих, які тут не наводяться. В таблиці 3.1 показані відомі з багатьох літературних джерел величини рухливості μ_n та часу життя τ_n , електронів, максимального питомого опору ρ_{max} в GaAs, CdTe, $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ і для порівняння – величини, обчислені в рамках прийнятої моделі для матеріалів, досліджених в роботах [36, 117]. Очевидний хороший збіг

експериментальних даних з обчисленнями.

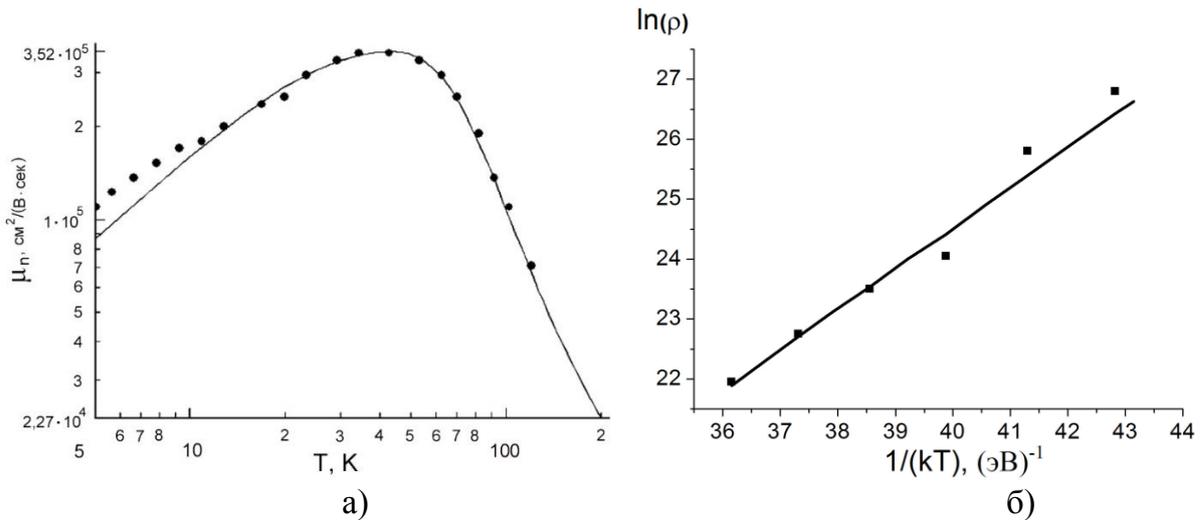


Рис. 3.1. Залежності (а) μ_n від температури T в GaAs та (б) натурального логарифма питомого опору ρ $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te:In}$ (б) від $1/kT$. В GaAs концентрація донора $N_d = 4,8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$, концентрація акцепторного дефекту $N_a = 2,13 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$, рівень енергії донора $E_d = 5,52 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$.

Таблиця 3.1

Порівняння експериментальних і обчислених величин τ_n , μ_n , і ρ_{max} .

Матеріал	τ_n , сек		μ_n , $\text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{сек})$		ρ_{max} , $\text{Ом} \cdot \text{см}$	
	Експери- мент	Розраху- нок	Експери- мент	Розраху- нок	Експери- мент	Розраху- нок
GaAs	$\sim 10^{-9}$	$2 \cdot 10^{-9}$	9000	8500	$\sim 10^8$	$3 \cdot 10^8$
CdTe	$\sim 10^{-6}$	$1.5 \cdot 10^{-6}$	1100	1080	$\sim 10^{10}$	$2 \cdot 10^{10}$
CdZnTe	$\sim 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-6}$	~ 1000	900	$\sim 10^{11}$	$1.15 \cdot 10^{11}$

На властивості монокристалів GaAs великий вплив має виникнення і стабільність дефектів типу EL-2 - власного дефекту, що присутній навіть в напівізольуючому зразку, що не піддавався ніяким обробкам. Цінність дефекту EL-2 полягає в можливості отримання напівізольуючих властивостей GaAs без спеціального легування. Важливим моментом при цьому є вивчення впливу

різних іонізуючих випромінювань на поведінку власного дефекту EL-2, що формує властивості напівпровідникових матеріалів, в широкому інтервалі температур.

В роботі [118] вивчалася поведінка дефектів EL-2, що виникають при опроміненні нейтронами і наступною термообробкою. Виявлено збільшення концентрації EL-2 з підвищенням температури відпалу в порівнянні з вихідним станом матеріалу до опромінення. Досліджувався вплив дефекту EL-2 на електронну рухливість $\mu_n(T)$ в температурному інтервалі $300 \div 1100$ К, в якому дефект залишається стабільним. На рис. 3.2 показані модельні температурні залежності рухливості електронів ($\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{сек}$) в зразку, очищеному від мілких центрів (концентрація мілких рівнів на $5 \cdot 10^{13} \text{см}^{-3}$) для різного вмісту глибокого донора EL-2. Видно, що центри EL-2 істотно впливають на розсіювання вільних електронів. Слабо виражений мінімум на залежностях обумовлений спільним впливом розсіювання на фононах, іонізованих та нейтральних домішках.

Зафіксувавши характерне значення концентрації EL-2, що дорівнює $1 \cdot 10^{16} \text{см}^{-3}$, отримали тривимірну модельну залежність електронної рухливості від вмісту компенсованого мілкового акцептора N_a в температурному інтервалі $10 \div 500$ К (рис.3.3). На рисунку чітко простежується максимум при зростанні температури T . Це пояснюється сукупною дією механізмів розсіювання на іонізованих домішках і фононах. Зі збільшенням температури розсіювання електронів на іонізованих глибоких центрах домішока і структурних дефектів зменшується за рахунок збільшення екранування розсіювальних центрів вільними носіями заряду, що сприяє збільшенню рухливості. З іншого боку, з ростом температури розсіювання на акустичних та полярних оптичних фононах збільшується, що, в свою чергу, зменшує рухливість вільних носіїв заряду. Таким чином, з'являється максимум, який спостерігається при температурі близько 120 К. Стрибкоподібне збільшення рухливості зі збільшенням концентрації мілкового акцептора N_a при $T = 120$ К пояснюється тим, що при

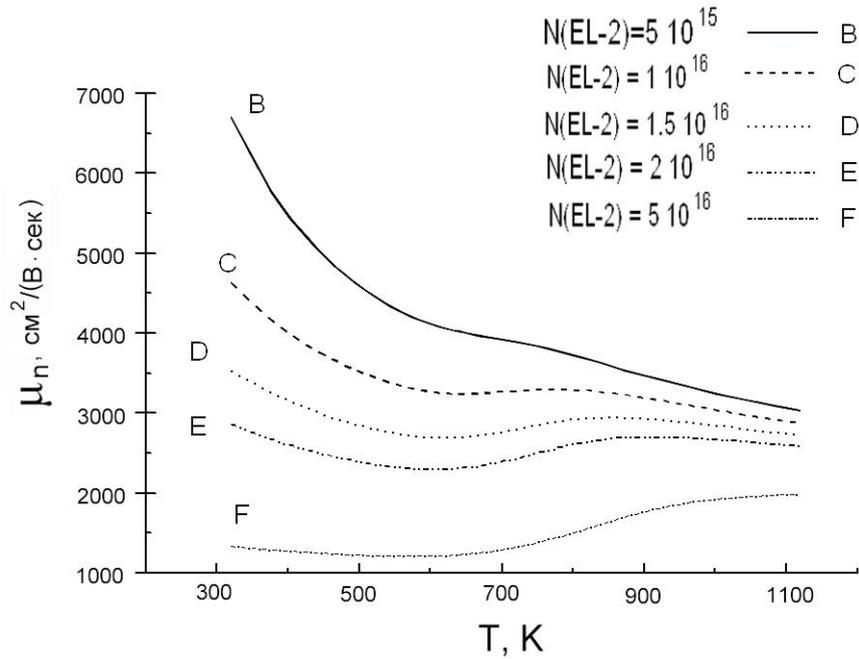


Рис. 3.2. Температурні залежності електронної рухливості в високочистому GaAs при різних концентраціях глибокого центру EL2, (cm^{-3}).

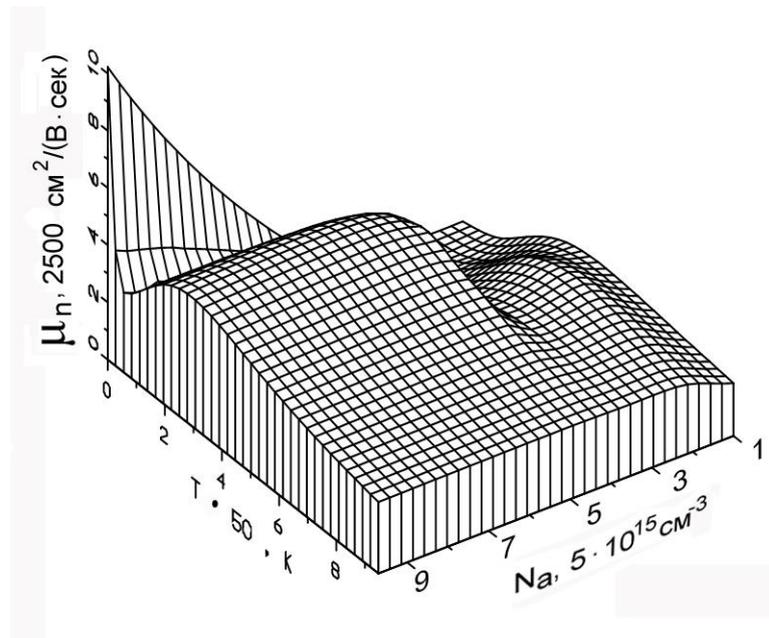


Рис. 3.3. Залежність електронної рухливості від концентрації мілкого акцептора N_a і температури T ; $5 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3} < N_a < 5 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$; $10 < T < 500 \text{K}$.

певній концентрації N_a мілкий акцептор залишається некомпенсованим іонізованими центрами глибокого донора EL-2, що супроводжується різким збільшенням концентрації вільних дірок і разом з нею помітно зростає екранування вільними дірками іонізованих центрів (значно скорочується дебаєвський радіус екранування). Помітний стрибок рухливості при низьких

температурах пояснюється зменшенням розсіювання на фононах (виморожування фононів) в той час як помітного обмеження рухливості механізмом розсіювання на іонізованих домішках ще не спостерігається (воно проявляється при $\mu > 10^5 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$).

Досліджувалися температурні залежності електронної рухливості μ_n в арсеніді галію для різних концентрацій дислокацій, рівномірно розподілених в матриці і виникають в основному при деформаціях, а також в процесі вирощування і термоциклюванні [119]. Рис. 3.4 демонструє вказані залежності.

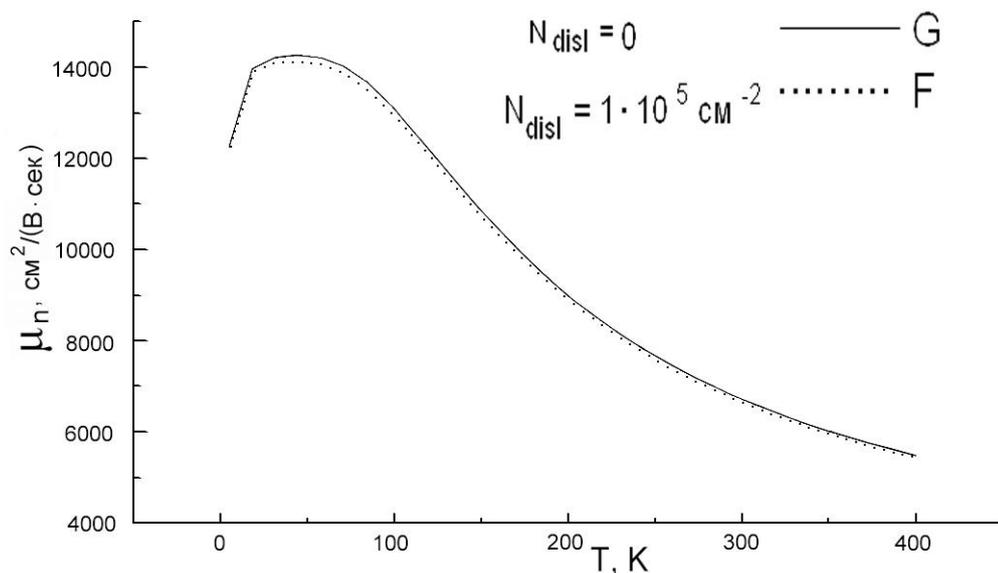


Рис. 3.4. Обчислені температурні залежності електронної рухливості в бездислокаційному кристалі GaAs (крива G) і кристалі з поверхневою густиною дислокацій 10^5 см^{-2} (крива F).

З рис. 3.4 видно, що залежності рухливості μ_n від температури як для бездислокаційного кристалу, так і для такого, що містить велику кількість дислокацій, практично не відрізняються. Іншими словами, зміна концентрації лінійних дефектів за умови рівномірного їх розподілу по об'єму кристала не впливає на зміну рухливості. Аналогічна ситуація спостерігається і в залежностях для питомого опору. Однак, з експерименту відомо, що дислокації істотно впливають на електрофізичні властивості (див., наприклад, [120]). З одного боку в роботах [121–123] був зроблений висновок про те, що в Si, GaAs і

InP помітно переважає механізм розсіювання електронів на скупченнях дефектів у порівнянні з розсіюванням на ізольованих заряджених дефектах. З іншого боку, в прийнятій для розрахунків моделі розсіювання (див. [107–109]) припускається рівномірний розподіл дефектів. Таким чином результат моделювання можна пояснити тим, що в прийнятій моделі розсіювання на дислокаціях припускається однорідний розподіл дислокацій в об'ємі напівпровідника, а для реальних зразків арсеніду галію ця умова не виконується.

В GaAs очевидно дислокації розподілені нерівномірно і основний вплив на процеси розсіювання роблять скупчення лінійних дефектів. Скупчення дислокацій повинні утворювати в матриці заряджені локальні області, які то того ж сильно спотворюють решітку кристала, створюючи в ній ще й значні механічні напруги, що і призводить до помітних змін електрофізичних властивостей, які спостерігаються експериментально. Також істотну роль в розсіянні вільних носіїв заряду можуть грати неоднорідності легування, що призводять до утворення кластерів іонізованих домішок. Розсіювання на кластерах в певних умовах може бути вирішальним. Було проведено моделювання впливу областей скупчення електрично активних дефектів з ефективним перерізом розсіювання $s = 1 \times 10^{-6} \text{ см}^{-2}$ і концентрацією $5 \times 10^{10} \text{ см}^{-3}$ на електронну рухливість. Результат моделювання представлено на рис. 3.5. Видно, що навіть введення відносно невеликих концентрацій мікронеоднорідностей (кластерів) легування сильно впливає на рухливість в усьому інтервалі температур. Помітне зниження вимірної рухливості в зразках, отриманих, наприклад, методом Чохральського в порівнянні зі значенням μ_n для ідеальних монокристалів, викликане неоднорідним розподілом легуючих домішок. Приблизні кількісні оцінки, які проводилися з урахуванням результатів роботи [123] показали також, що найбільш сильний вплив на μ_n , в тому числі і в CdTe, робить розсіювання на скупченнях заряджених дефектів.

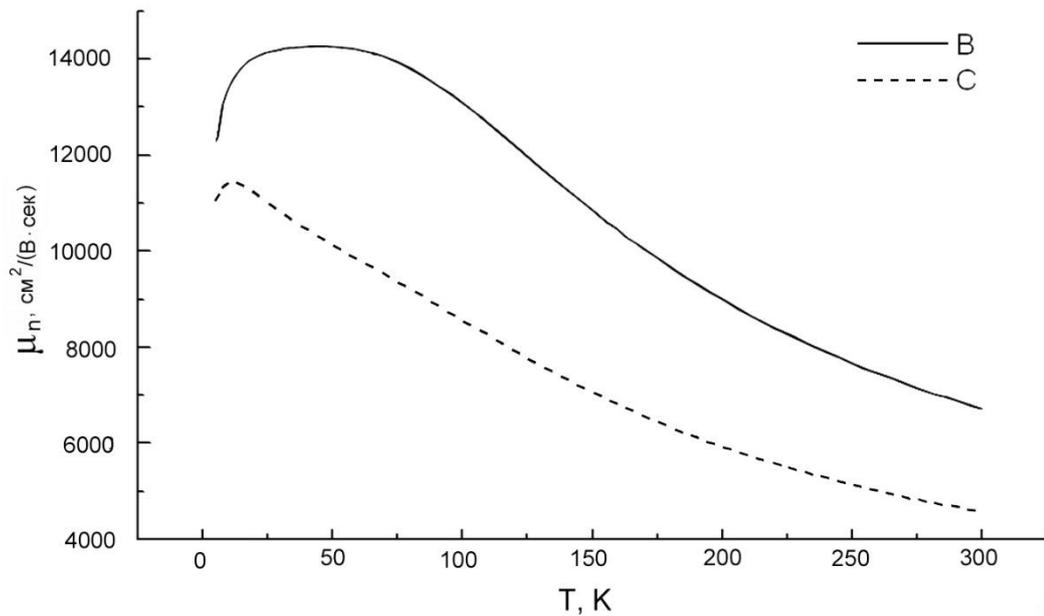


Рис.3.5. Температурна залежність електронної рухливості в GaAs для різного розподілу структурних дефектів. В - високочистий кристал GaAs з однорідним розподілом дефектів; С - в кристалі присутні кластери в кількості $5 \times 10^{10} \text{ см}^{-3}$.

Для з'ясування впливу глибокого акцептора на електрофізичні властивості були розраховані залежності ρ і μ_n від рівня енергії глибокого акцептора E_{DA} і його концентрації N_{DA} , зображені на рис.3.6, при низьких концентраціях мілких донорів і акцепторів ($N_D = 2 \cdot 10^{15}$, $N_A = 1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$) і характерному для GaAs вмісті власного дефекту EL-2 – $1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. З рисунка 3.6(а) Видно, що отримання високоомного матеріалу можливе починаючи з рівнів енергії глибокого акцептора 0,6 еВ. Зникнення високоомної області починається з рівнів енергії більших 1,0 еВ. Це пояснюється тим, що при дуже високих рівнях залягання глибокий акцептор при даній температурі не може бути іонізованим в достатній мірі, тобто не захоплює електрони і не компенсує мілкі донори.

Прийняті фізичні моделі дають для високочистого напівізолюючого GaAs вірне абсолютне значення електронної рухливості $\sim (8-9) \cdot 10^3 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ і питомого опору $\sim 10^8 \text{ Ом} \cdot \text{см}$. Моделювання показало такж, що при змінах концентрацій мілких акцепторів і донорів в межах одного порядку, зміни електронної рухливості не перевищують $2000 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{сек})$ (див. рис. 3.6 (б)).

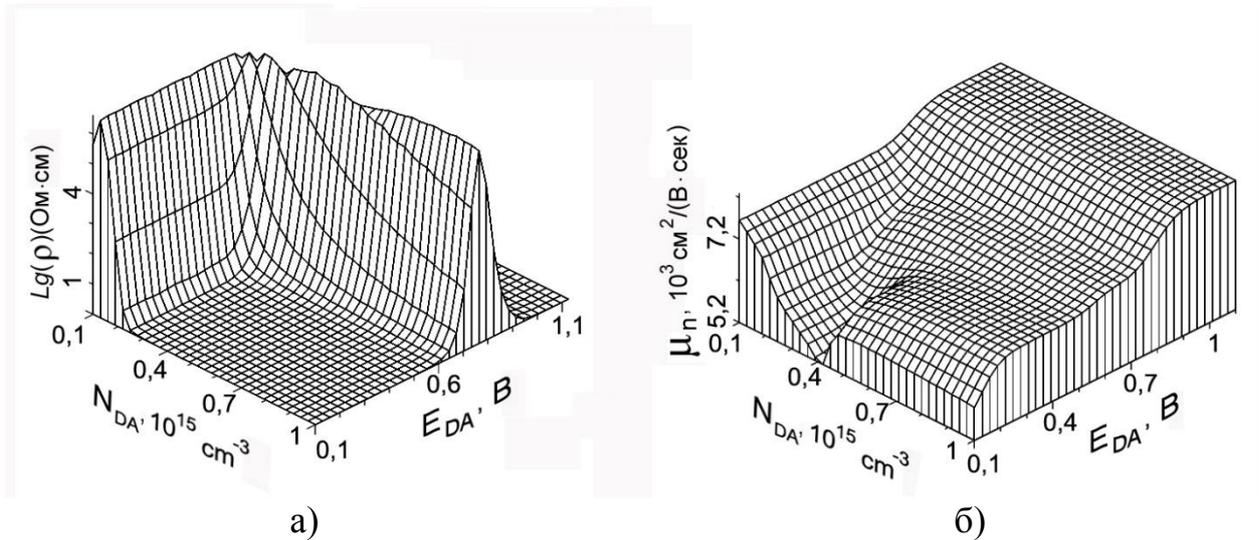


Рис.3.6. Залежності ρ і μ_n від концентрації N_{DA} і енергії E_{DA} акцептора при $N_{DD}=1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; $N_A=1 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$; $N_D=2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$; $1 \cdot 10^{15} < N_{DA} < 1 \cdot 10^{16}$; $T=300 \text{ K}$.

Зміни μ_n розраховувалися в припущенні про рівномірний розподіл дефектів по об'єму напівпровідника, що не завжди може бути реалізовано на практиці. З цієї причини, в тих випадках, коли обчислені значення електронної рухливості виявляються вищими, ніж експериментально виміряні, це слід пояснити розсіюванням на скупченнях іонізованих дефектів і кластерах легуючих домішок, які, до того ж, створюють в решітці деформовані області, що помітно впливають на розподіли зарядів і процеси розсіювання [49, 66]. При цьому нейтральні скупчення із 100-150 дефектів виявляються сильнішими розсіюючими центрами, ніж поодинокі іони домішок [123]. Коли скупчення дефектів у напівізолюючому GaAs мають велику густину заряду, що перевищує густину заряду поляризації при п'єзоефекті, вклад в парціальну рухливість електронів при розсіянні на заряджених скупченнях зменшується оскільки в цьому випадку радіус розсіювальної області визначається розмірами області просторового заряду, які суттєво перевершують розміри скупчення [123].

3.2 Електрофізичні властивості детекторного матеріалу CdTe в залежності від вмісту фонових і технологічних дефектів

Для контролю безпеки роботи ядерних реакторів, визначення радіонуклідів в радіоактивних відходах і матеріалах АЕС знайшли застосування твердотільні детектори іонізуючих випромінювань, виконані на основі

високоомних напівпровідникових матеріалів. Як вже зазначалося, найбільш важливими електрофізичними властивостями напівпровідників, використовуваних для детекторів ядерних випромінювань, є високі величини електронної рухливості μ_n , питомої опору ρ і часу життя нерівноважних електронів (τ_n) і дірок (τ_p). Крім того, необхідні детектори на основі напівпровідникових матеріалів з великим атомним номером, так як ефективність реєстрації гамма квантів пропорційна заряду ядра в ступені 4–5. Такими матеріалами можуть бути CdTe і CdZnTe.

Попереднє моделювання показало, що основний вклад в процеси розсіювання вільних носіїв заряду в CdTe і CdZnTe вносить розсіювання на поляризованих оптичних фононах і рухливість електронів в цих матеріалах мало залежить від вмісту рівномірно розподілених в матриці точкових дефектів, а також їх комплексів. У технічній літературі відсутні відомості про розупорядковані області в матриці CdTe і CdZnTe, тобто заряджені скупчення радіаційних дефектів, які могли б зробити помітний внесок у розсіювання вільних носіїв заряду. З цієї причини в цьому підрозділі не розглядається поведінка μ_n , а описані дослідження змін тільки питомого опору CdTe і CdZnTe в залежності від співвідношень між концентраціями технологічних і фонових дефектів структури, а також легуючих домішок.

Моделювання питомого опору ρ для CdTe проводилося з урахуванням початкового вмісту фонових дефектів, які виникають в сучасних технологіях вирощування кристалів [18, 20].

На рис.3.7 зображена промодельована залежність питомого опору CdTe, що містить фонові домішки і дефекти, від концентрації і рівня енергії однозарядового глибокого донора X, в ролі якого можуть виступати антиструктурні дефекти телур на місці кадмію Te_{Cd} , або телур у міжвузлі Te_I [19, 29]. З рисунка видно, що для максимально високоомного стану матеріалу з $\rho \sim 10^{10}$ Ом·см необхідне введення глибокого донора X з рівнем енергії $E_{DD}(X)$, що знаходиться в діапазоні 0.72–0.79 eВ в залежності від концентрації $N_{DD}(X)$, яка повинна бути не менше $1 \cdot 10^{16}$ см⁻³. З урахуванням цього і результатів робіт [18,

20] за вихідний був прийнятий наступний склад. Концентрація $N(Cl) \sim 10^{14} \text{ см}^{-3}$, сумарна концентрація домішок заміщення: Ag замість Cd (Ag_{Cd}), As замість Cd (As_{Cd}) і P замість Cd (P_{Cd}), а їх сумарна концентрація $\sum (Ag_{Cd}, As_{Te}, P_{Te}) = 1.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, концентрація вакансій кадмію $V_{Cd} \sim 10^{14} \text{ см}^{-3}$, вакансій телуру $V_{Te} = 5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, концентрація глибокого донора X $N_{DD}(X) \sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Тоді $\sum N_A^- - N_D^+ \geq \sum N_{DD}^+ - N_{DA}^-(V_{Cd})$, де $\sum N_{DD}^+$ и $\sum N_A^-$ – відповідно сумарна концентрація іонізованих глибоких донорів і мілких акцепторів. З цієї причини виходить низькоомний зразок p-типу з $\rho \sim 10^2 \text{ Ом}\cdot\text{см}$.

Для компенсації мілких акцепторів зазвичай навмисно вводиться в ролі мілкового донору домішка заміщення, наприклад, хлор на місці Te. На рис. 3.8 зображено поведінку ρ в залежності від вмісту легуючого хлору і вакансій кадмію. Вміст фонових дефектів тут такий же, як і на рис. 3.7. Для області напівізолюючого CdTe з $\rho \geq 10^{10} \text{ Ом}\cdot\text{см}$, де має місце змішана провідність з поступовим переходом від p-типу до n-типу, виконується умова $\sum N_{DD}^+ \geq 2N(V_{Cd}^{2-}) - (N_D^+(Cl) - \sum N_A^-)$, де $N(V_{Cd}^{2-})$ – концентрація двократно заряджених вакансій кадмію.

Збільшення концентрації вакансій кадмію на порядок призводить до появи плато з дірковою провідністю і зниженим $\rho \sim 10^6 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ (рис.3.9). Це плато демонструє стан з виконанням умови: $2N(V_{Cd}^{2-}) \geq N_D^+(Cl) + \sum N_{DD}^+ - \sum N_A^-$, коли має місце часткова компенсація вакансій Cd, так як. при $\rho \sim 10^6 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ $N(V_{Cd}) > N(V_{Cd}^{2-})$, де $N(V_{Cd})$ – концентрація всіх вакансій кадмію. Перехід до напівізолюючого матеріалу відбувається при повній компенсації вакансій кадмію. Таким чином, для одержання матеріалу CdTe з $\rho \sim 10^6 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ необхідна повна компенсація сумарного вмісту мілких акцепторів і часткова компенсація глибоких акцепторів V_{Cd} глибокими донорами (провідність p-типу). При повній компенсації мілких і глибоких акцепторів глибокими донорами відбувається перехід вже в напівізолюючій області від p-типу до n-провідності.

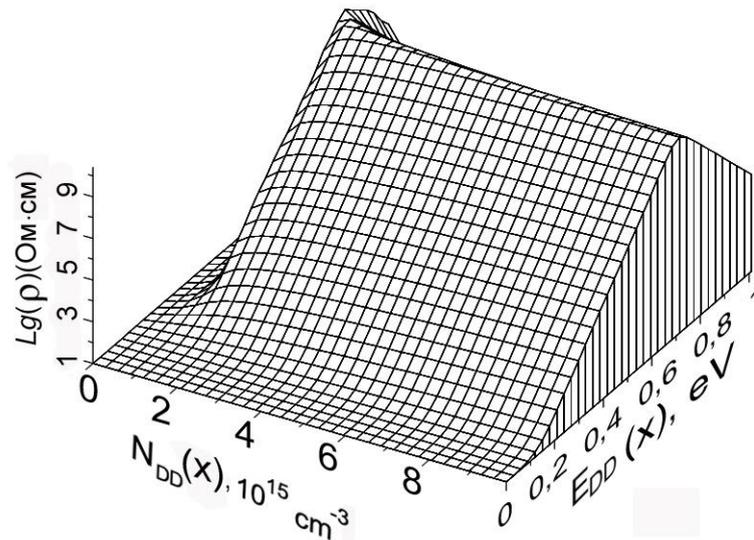


Рис. 3.7. Десятковий логарифм питомого опору ρ CdTe в залежності від концентрації і рівня енергії глибокого донора X. Склад: $N_D(\text{Cl})=1 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$, $N_A(0.06)=0.5 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$, $N_A(0.08)=0.5 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$, $N_A(0.10) = 0.5 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$, $N_{DA}(0.47)=1 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$, $N_{DD}=(E_C - 1.4 \text{ eV})=3.5 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$, $5 \cdot 10^{14} \text{cm}^{-3} \leq N_{DD} \leq 10^{17} \text{cm}^{-3}$.

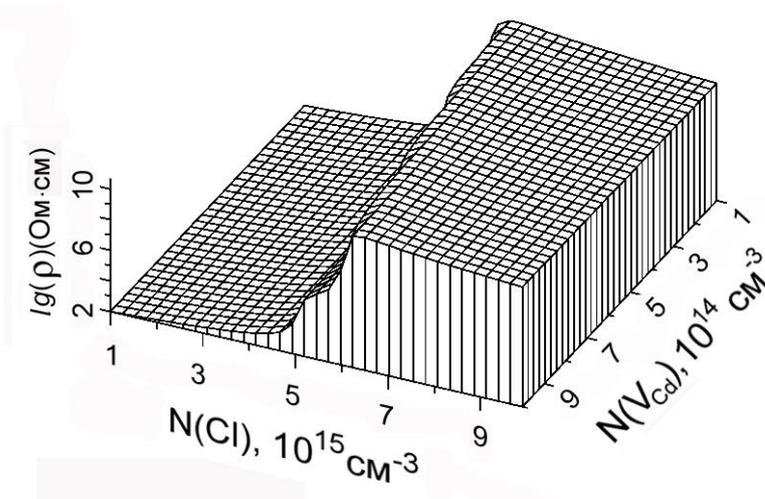


Рис. 3.8. Десятковий логарифм питомого опору ρ в залежності від концентрації хлору і вакансій кадмію. Концентрація мілкового донору хлору $N(\text{Cl})$ змінюється в межах $1 \cdot 10^{15} \div 1 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$. Концентрація вакансій кадмію V_{Cd} в ролі глибокого акцептора $N_{DA}(E_V + 0.47 \text{ eV})$ – в межах $1 \cdot 10^{14} \div 1 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$ (V_{Cd}). $N(X)=1 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$.

Вміст решти домішок такий же, як і на рис. 3.7.

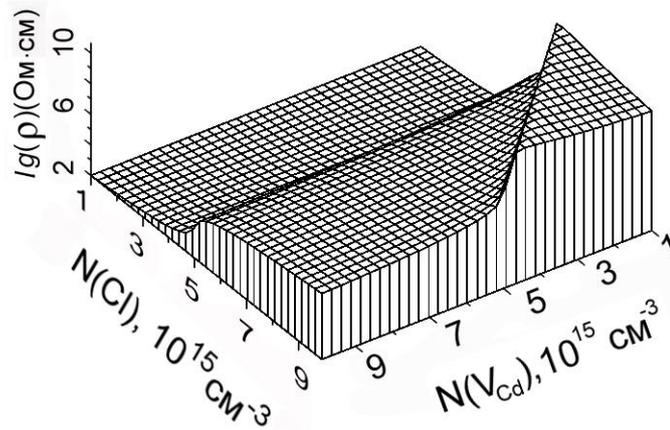


Рис. 3.9. $\lg(\rho)$ в залежності від концентрації хлору і вакансій кадмію в CdTe.

$N_{DA}(E_V + 0.47 \text{ eV}) = 1 \cdot 10^{15} - 1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3} (V_{Cd}); N(Cl)[E_C - 0.014 \text{ eV}] = 1 \cdot 10^{15} - 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Вміст решти домішок такий же, як і на рис. 3.7.

В реальних умовах отримання телуриду кадмію відбувається ненавмисне внесення ряду металів (Fe, Sn, Ni) в об'єм матеріалу. Сумарний вміст таких фонових домішок може бути на рівні $(1-2) \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Оскільки всі зазначені метали є глибокими донорами, їх вплив на питомий опір зразка багато в чому схожий. Це можна наочно продемонструвати серією тривимірних модельних залежностей, де чітко простежуються дві області: низькоомна область р-типу (ліве плато) і низькоомна область n-типу (праве плато). Розміри і положення цих областей залежать від кількісного співвідношення концентрацій донорів і акцепторів, а також від природи і кількості внесених металів, тобто їх зарядових станів і положень рівнів енергії в забороненій зоні.

Так як метали, що вносяться, беруть участь в процесах компенсації в ролі донорів, є смисл моделювати поведінку ρ в залежності від концентрації Me без легування донорною домішкою хлору. На рис. 3.10 і рис. 3.11, як приклади, наведені такі модельні залежності для Fe і Sn відповідно. З аналізу цих залежностей можна зробити висновок, що ширина напівізолюючої області ($\sim 10^{10} \text{ Ohm}\cdot\text{cm}$) пропорційна глибині залягання легуючих донорів Fe (0,5 eV) і Sn (0,8 eV) щодо зони провідності. В цих матеріалах у порівнянні з легованими хлором низькоомна область р-типу зменшується і з'являється низькоомна область n-типу.

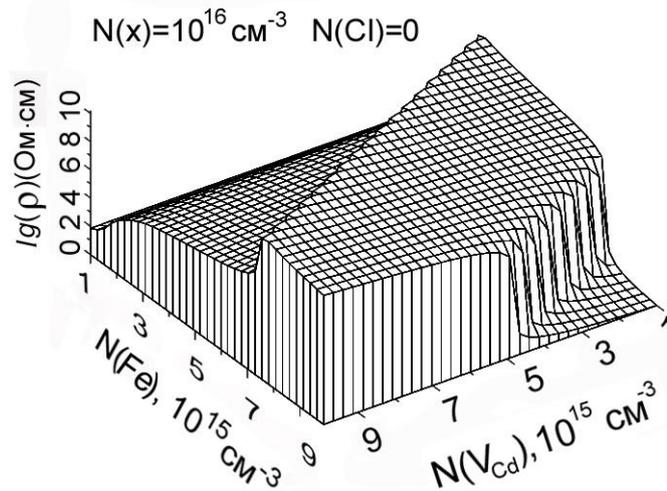


Рис. 3.10. Залежність $\lg(\rho)$ від концентрацій V_{Cd} і Fe при нульовому вмісті Cl . $1 \cdot 10^{15} < N(Fe) < 1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; $1 \cdot 10^{15} < N(V_{Cd}) < 1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. $N_{dd}(X)=0$. Вміст решти домішок такий же, як і на рис. 3.7.

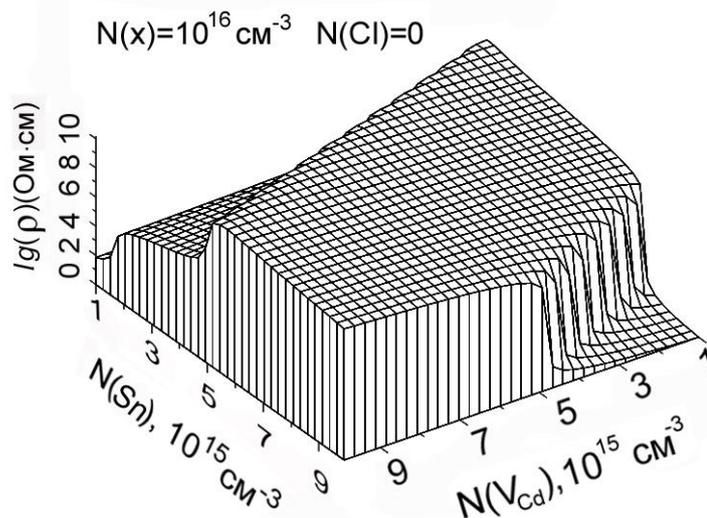


Рис. 3.11. Залежність $\lg(\rho)$ від концентрацій V_{Cd} і Sn при $N(Cl)=0$; $1 \cdot 10^{15} < N(Sn) < 1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; $1 \cdot 10^{15} < N(V_{Cd}) < 1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; $N_{dd}(X)=0$. Склад решти домішок такий же, як і на рис. 3.7.

Була промодельована поведінка ρ для матеріалу з найбільш широкою високоомною областю: $CdTe$, що містить Ni . Така залежність показана на рис.3.12. Видно, що в досліджуваному інтервалі концентрацій Ni і Cd зникає низькоомна область n -типу і виходить матеріал p -типу з $\rho \geq 10^{10} \text{ Ом}\cdot\text{см}$. Ще раз слід відмітити, що на рис.3.10–3.12, як і раніш на рис. 3.7–3.9, спостережуване

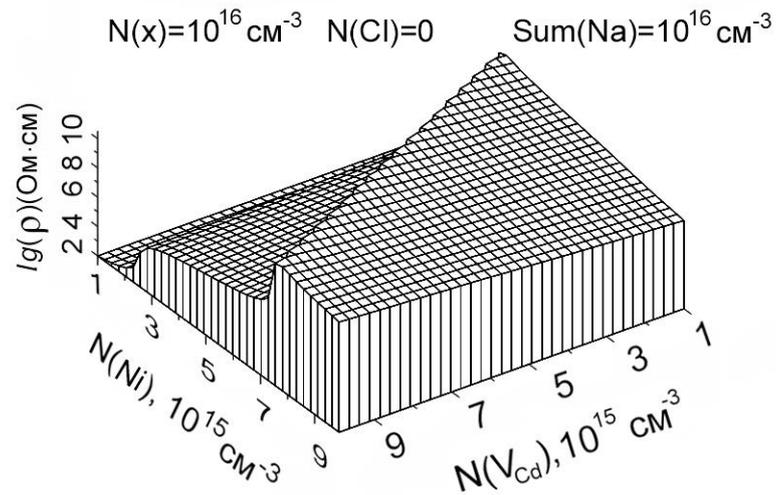


Рис. 3.12. $\lg(\rho)$ від вмісту V_{Cd} і Ni при $N(\text{Cl}) = 0$. $1 \cdot 10^{15} < N_{\text{Ni}} < 1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. $1 \cdot 10^{15} < N(V_{\text{Cd}}) < 1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Вміст решти домішок, як і на рис. 3.11.

плато з $\rho \sim 10^5 - 10^6 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ з'являється завдяки компенсації мілких акцепторів і неповної компенсації вакансій кадмію, а високоомна область – завдяки повній компенсації глибоких акцепторів V_{Cd} .

3.3 Електрофізичні властивості CdZnTe в залежності від домішкового і дефектного складу

Внесення в матрицю CdTe атомів Zn , що заміщують кадмій, призводить до утворення $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, в якому край валентної зони не зазнає помітних змін, а зсувається в основному край зони провідності [124]. При введенні цинку в кількості 20% ат. маємо матеріал CdZnTe зі збільшеною шириною забороненої зони приблизно на 0,2 еВ, тобто до 1,8 еВ (при $T = 0 \text{ К}$) [125]. Тоді всі фонові домішкові рівні суттєво не змінять своє положення відносно валентної зони. Представляє інтерес дослідити зміну ρ в залежності від вихідного домішкового вмісту в CdZnTe , який аналогічний вмісту в CdTe .

В підрозділі 3.2 розглядався вихідний склад фонових домішок і дефектів в зразках CdTe , одержаних за допомогою сучасних технологій [18, 20]. Для дослідження CdZnTe приймемо такий же склад матриці. В CdZnTe , як і в CdTe , повинен бути присутнім глибокий донор X з енергією $E = E_V + 0.82 \text{ еВ}$, де E_V – рівень енергії стелі валентної зони. Як один із способів одержання

напівізольуючого CdTe в його матрицю навмисно вводять домішку мілкового донора Cl в кількості $\sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$, яка частково компенсує мілкі акцептори, а остаточна компенсація досягається дією глибокого донора X [126], в ролі якого як уже відмічалось, можуть виступати антиструктурні дефекти Te_{Cd} і Te_{I} . Таким чином донор X забезпечує напівізольуючий стан CdZnTe.

На рис.3.13(a) зображена модельована залежність питомого опору $\text{Cd}_{0,8}\text{Zn}_{0,2}\text{Te}$ при $T=300 \text{ K}$, що містить вихідні фонові домішки і дефекти, від концентрації і рівня енергії однозарядного глибокого донора X. Тут концентрація глибокого донора (N_{DD}) змінюється в межах від $3 \cdot 10^{14}$ до $3 \cdot 10^{16}$, а енергія, відлічувана від дна зони провідності E_{C} , – від 0,1 до 1,2 еВ. Порівняння даної залежності з аналогічною залежністю для CdTe, яка представлена на рис. 3.13(б), показує, що головна відмінність матеріалу CdZnTe полягає в збільшенні

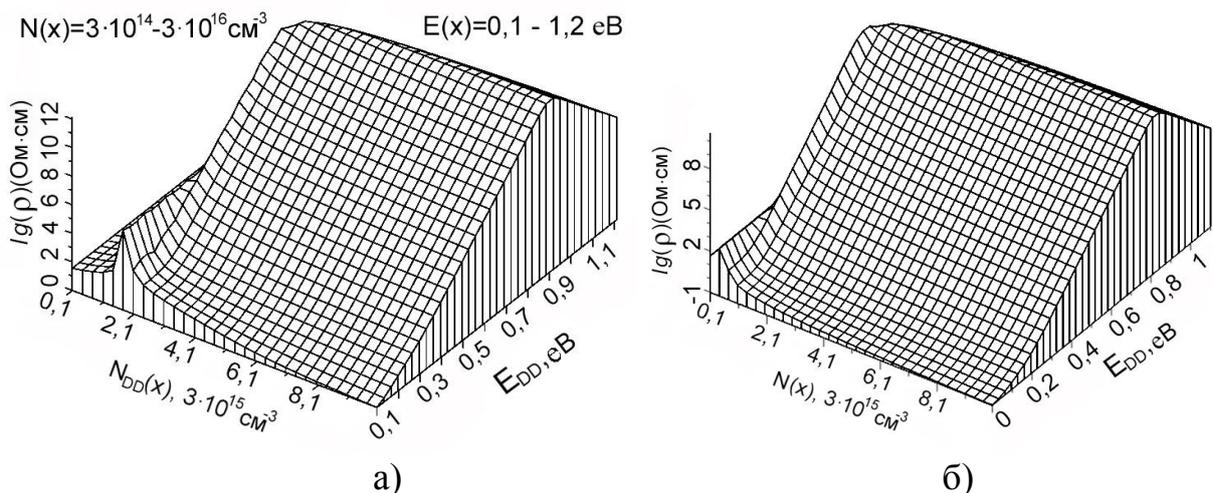


Рис. 3.13. Залежності $\lg(\rho)$ $\text{Cd}_{0,8}\text{Zn}_{0,2}\text{Te}$ (а) і CdTe (б) від концентрації і рівня енергії глибокого донора X; $N_{\text{D}}(\text{Cl})[E_{\text{C}} - 0.014 \text{ eV}] = 1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; $N_{\text{A}}(\text{Ag}_{\text{Cd}})[E_{\text{V}} + 0.06 \text{ eV}] = 0.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; $N_{\text{A}}(\text{As}_{\text{Te}})[E_{\text{V}} + 0.08 \text{ eV}] = 0.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; $N_{\text{A}}(\text{P}_{\text{Te}})[E_{\text{V}} + 0.10 \text{ eV}] = 0.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; $N_{\text{DA}}(\text{V}_{\text{Cd}})[E_{\text{V}} + 0.47 \text{ eV}] = 1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$; $N_{\text{DD}} = (\text{V}_{\text{Te}})[E_{\text{C}} - 1.4 \text{ eV}] = 3.5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$; а) $3 \cdot 10^{14} < N(X) < 3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; $0,1 < E_{\text{DD}}(X) < 1,2 \text{ eV}$;

б) $5 \cdot 10^{14} < N(X) < 1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

питомого опору приблизно на два порядки. Цей результат узгоджується з даними, отриманими іншими дослідниками (див., наприклад, [18, 127–129]). З

рис. 3.13(a) також видно, що для матеріалу з максимальним $\rho \sim 10^{12}$ Ом·см необхідно внесення однозарядового глибокого донора X з рівнем енергії $\sim 0,9$ еВ, відлічуваного від зони провідності і концентрацією $N(X) > 7 \cdot 10^{15}$ см⁻³.

Обчислена ширина забороненої зони для CdZnTe при T=300 К дорівнює 1.705 еВ. Таким чином, оптимальний рівень енергії донора X, відлічуваний від валентної зони дорівнює $E(X) = E_V + 0.805$ еВ, що досить близько до значення 0,82 еВ, прийнятому тут, виходячи з результатів робіт [18, 20, 130].

Для компенсації мілких акцепторів в CdZnTe навмисно вводиться домішка мілкового донора, наприклад, Cl, In, Al. Дослідження оптимальних діапазонів концентрацій домішок для отримання напівізолюючих стану проводилося для CdZnTe, в якому основним компенсатором виступає глибокий донор X, в ролі якого може виступати Te_{Cd} або Te у міжвузлі Te_I.

Положення рівнів енергій всіх домішок і дефектів щодо валентної зони слід прийняти такими ж, як і в CdTe [124]. Тоді для прийнятого вихідного складу $\sum N_A^- - N_D^+ > \sum N_{DD}^+ - N_{DA}^-(V_{Cd})$ і виходить низькоомний зразок p-типу з $\rho \sim 10^2$ Ом·см. Тут N_D^+ - концентрація мілких донорів, N_{DD}^+ - концентрація іонізованих глибоких донорів, N_{DA}^- - концентрація іонізованих глибоких акцепторів. Причому в діапазоні концентрацій $5 \cdot 10^{14}$ см⁻³ < N(X) , $N(V_{Cd}) < 5 \cdot 10^{15}$ см⁻³ питомий опір майже не змінюється.

Так само, як і для випадку CdTe, внесення мілкового донора в CdZnTe, необхідне лише для часткової компенсації сумарного вмісту мілких акцепторів, а напівізолюючий стан досягається впливом глибокого донора. При цьому збільшення концентрації не тільки мілкового, але і глибокого донора в кінцевому підсумку може призвести до досягнення низькоомного стану n-типу. Це відбувається тому, що в певний момент виконується умова, яка в загальному випадку має вигляд: $\sum N_D > (\sum N_{DA}^- + \sum N_A) - \sum N_{DD}^+$. Якщо в напівізолюючому стані зменшувати концентрацію мілкового донора, то в певний момент стає справедливим умова $\sum N_A > (N_{DD}^+ + N_D) - \sum N_{DA}^-$, і відбувається перехід від

високоомної області до низькоомної р-типу. З останньої умови можна бачити, що при наявності досить великої кількості мілких акцепторів, збільшення сумарної концентрації глибоких акцепторів може привести до переходу в низькоомний стан р-типу (тому що зменшується різниця в правій частині). У напівізолюючій області, де спостерігається змішана провідність, повинні виконуватися загальні умови компенсації: $\sum N_{DD}^+ \geq \sum N_{DA}^- + (\sum N_A - \sum N_D)$ для ділянки з невеликим переважанням провідності n-типу і $\sum N_{DA}^- \geq \sum N_{DD}^+ + (\sum N_D - \sum N_A)$ для ділянки з деякою перевагою провідності р-типу. Як і у випадку з CdTe, в реальних умовах одержання CdZnTe відбувається забруднення елементами ряду металів, які є глибокими донорами (Fe, Sn, Pb) в об'ємі матеріалу на рівні $(1-2) \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Їх вплив на питомий опір CdZnTe і CdTe дуже схожий. Чітко простежуються дві області: низькоомна область р-типу і низькоомна n-область. Різниця полягає лише у величині ρ для напівізолюючої області, яка для $\text{Cd}_{0.8}\text{Zn}_{0.2}\text{Te}$ на два порядки більша ніж для CdTe.

В реальних умовах одержання CdZnTe також може відбуватися забруднення домішковими елементами ряду металів, наприклад, Cr, Co, Ni, які є глибокими акцепторами. Розглянемо поведінку ρ в залежності від зміни концентрації цих металів і зміни концентрації глибокого донора X аналогічно тому, як це було зроблено раніше для системи $V_{\text{Cd}} - X$. Концентрація $N(V_{\text{Cd}})$ фіксована і становить $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, що відповідає фоновому вмісту. Концентрація інших фонових домішок така ж, як і для стану, зображеного на рис.3.13.

На рис.3.14 показана зміна ρ в залежності від зміни концентрації $N(X)$ з $E_{DD}^+ = E_V + 0,82 \text{ eV}$ і Cr з $E_{Cr}^{2-} = E_V + 1,34 \text{ eV}$. При цьому, $1 \cdot 10^{16} \leq N(X) \leq 1 \cdot 10^{17}$, $1 \cdot 10^{15} \leq N(\text{Cr}) \leq 1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. На відміну від графіка рис.3.15(b) тут відсутнє широке плато з $\rho \sim 10^6 \text{ Ом}\cdot\text{см}$, яке на рис.3.15(b) відповідає визначальному вкладу в діркову провідність не скомпенсованих вакансій кадмію. Відмінність пояснюється тим, що рівень хрому $E_{Cr}^{2-} = E_V + 1.34 \text{ eV}$ є значно глибшим акцепторним рівнем, ніж аналогічний рівень вакансії кадмію і, тому, практично не дає дірок у валентній зоні. З цієї причини зі збільшенням вмісту $N(X)$

компенсація сумарної концентрації мілких акцепторів відразу дає напівізольюючий стан з $\rho \sim 10^{12}$ Ом·см.

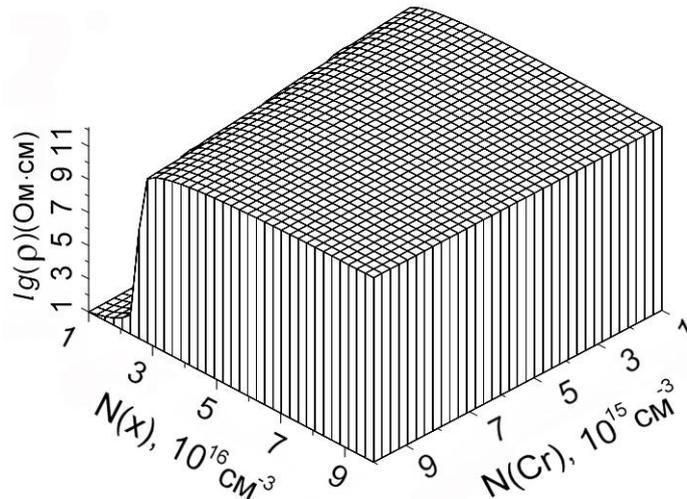
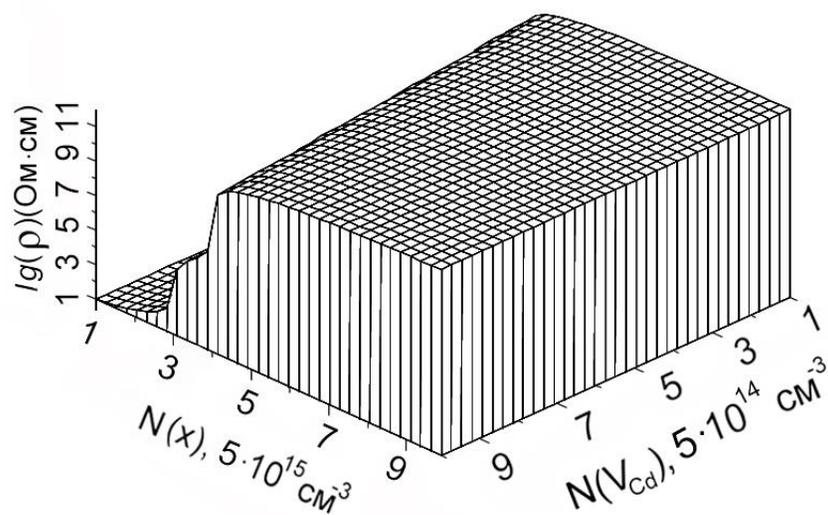


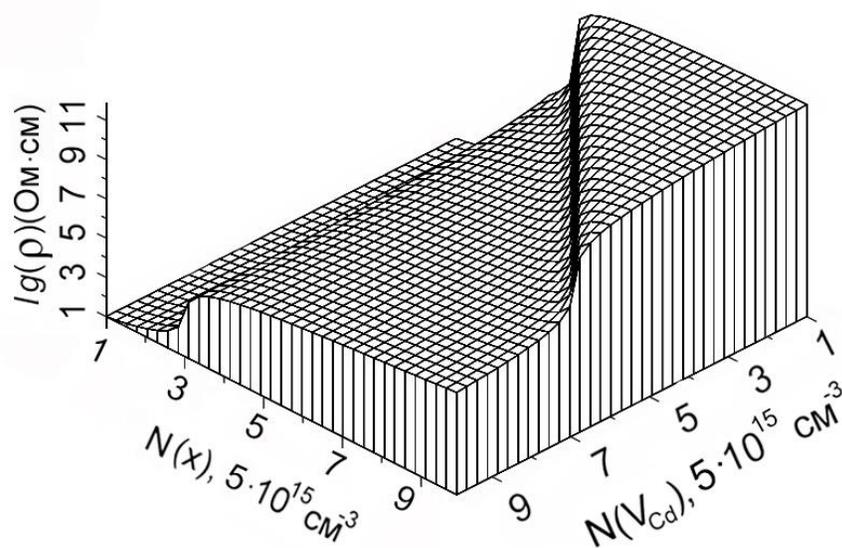
Рис. 3.14. Залежність $\lg(\rho)$ для CdZnTe від вмісту донора X і домішки Cr. $N(X) = 1 \cdot 10^{16} \div 1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$; $N(\text{Cr}) = 1 \cdot 10^{15} \div 1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; Вміст решти домішок такий же, як і на рис.3.13.

На рис.3.15(a) зображена поведінка ρ в залежності від концентрації глибокого донора X і вакансій кадмію. Вміст фонових дефектів тут такий же, як і на рис.3.13. Для області напівізольюючого CdZnTe з $\rho \geq 10^{12}$ Ом·см, де має місце в основному змішана провідність, виконується умова $\sum N_{DD}^+ \geq N_{DA}^-(V_{Cd}) - (N_D(Cl) - \sum N_A)$.

Збільшення концентрації вакансій кадмію на порядок (при такому ж вмісті інших домішок і дефектів, що і на рис.3.15 (a)) призводить до появи плато з $\rho \sim 10^6$ Ом·см і дірковою провідністю. Цей випадок показаний на рис.3.15 (б). Зазначене плато демонструє компенсацію сумарного вмісту мілких акцепторів при не скомпенсованих рівнях V_{Cd} тобто виконується умова $N_{DA}^-(V_{Cd}) > \sum N_{DD}^+ - (\sum N_A - N_D(Cl))$. Перехід до напівізольюючих матеріалу відбувається завдяки компенсації V_{Cd} . Описана зміна ρ аналогічна його поведінці в CdTe, відображеній на рис. 3.8 і 3.9.



а)



б)

Рис. 3.15. Десятковий логарифм питомого опору CdZnTe в залежності від концентрації глибокого донора X і вакансій кадмію V_{Cd} ; а) $N_D(E_C - 0.014 \text{ eV}) = 1 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}(\text{Cl})$; $N(X) = 5 \cdot 10^{15} \div 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; $N(V_{Cd}) = 5 \cdot 10^{14} \div 5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, б) $N(V_{Cd}) = 5 \cdot 10^{15} \div 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Вміст інших домішок такий же як і на рис 3.14.

Збільшення вмісту $N(X)$ аж до величин $\sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$ не призводить до появи низькоомної області n-типу, так як мілких донорів ми не вводили, а глибокий донор X є однозарядним і не має мілких донорних рівнів. Іншими словами, всюди в області $N(X) > 3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ виконується умова $\sum N_{DD}^+ > \sum N_A + N_{DA}^-$, що і забезпечує напівізолюючі властивості матеріалу.

У ситуації, що розглядається, домішка Co з $E^2 = E_V + 1.25 \text{ eV}$ принципово не відрізняється від вже розглянутого випадку з домішкою Cr і, тому, відповідна залежність та інтерпретація є приблизно такими ж.

У світлі розглянутих загальних випадків компенсації рівнів, стає можливим пояснити спостережуваний на рис.3.13 (а) максимум ρ при зміні глибини залягання однозарядного донора X . При $0 < E_{DD}^+ < |E_C - 0.9| \text{ eV}$ донор X майже повністю іонізований в цій області n-типу і виконується умова $\sum N_{DD}^+ > N_{DA}^- + \sum N_A - \sum N_D$. Тут $\sum N_{DD}^+$ відповідає головним чином концентрації елементу X ; $\sum N_{DA}^-$ відповідає концентрації вакансій кадмію; $\sum N_A$ – сумарному вмісту мілких акцепторів Ag_{Cd} , As_{Te} , P_{Te} ; $\sum N_D$ – домішці хлору. При цьому, зі збільшенням глибини компенсуючого донора зростає питомий опір. При $E^+ \approx |E_C - 0.9| \text{ eV}$ спостерігається напівізолююча область зі змішаною провідністю. При $E_{DD}^+ > |E_C - 0.9| \text{ eV}$ донор стає занадто глибоким і дає в зону провідності менше електронів, а кількість дірок у валентній зоні збільшується, тому опір зменшується зі зростанням концентрації вільних дірок. У певний момент починає виконуватися умова $\sum N_{DA}^- > \sum N_D + \sum N_{DD}^+ - \sum N_A$, тому вже основний внесок в провідність дають вакансії кадмію. Існування меншого бічного гребеня на рис. 3.14 (а) пояснюється впливом вакансій кадмію.

Таким чином, слід зазначити, що збільшення ширини забороненої зони від 1.6 (для CdTe) до 1,8 eV (для $\text{Cd}_{0,8}\text{Zn}_{0,2}\text{Te}$) при $T = 0 \text{ K}$, при збереженні положень всіх рівнів щодо валентної зони не призводить до помітних змін вигляду

всіх досліджених раніше тривимірних залежностей. Єдина відмінність графіків для $\text{Cd}_{0,8}\text{Zn}_{0,2}\text{Te}$ від графіків для ZnTe полягає в збільшенні питомої опору ρ приблизно на два порядки у всій дослідженій області. Моделювання показало також, що внесення Zn в кількості 10% ат. призводить до збільшення максимального питомого опору $\text{Cd}_{0,9}\text{Zn}_{0,1}\text{Te}$ на один порядок у порівнянні з CdTe . Ці результати знайшли підтвердження в роботі [37]. Таке збільшення ρ пояснюється тим, що компенсація глибоким донором X грає вирішальну роль в процесі отримання напівізолюючих зразків CdTe і CdZnTe . Дійсно, збереження положень всіх рівнів щодо валентної зони при одночасному збільшенні ширини забороненої зони означає збільшення глибини залягання всіх донорів, в тому числі і компенсуючого. Збільшення глибини компенсуючого донора зменшує його внесок в концентрацію електронів провідності, збільшуючи питомий опір.

3.4 Порівняння зміни ρ , μ_n в CdZnTe і CdTe при зміні дефектного складу

У підрозділі 3.3 було встановлено, що поведінка питомого опору CdZnTe і CdTe при зміні домішкового складу приблизно однакова і різниця полягає лише в абсолютній величині ρ . Це означає, що характер зміни кількості вільних носіїв заряду і іонізованих центрів також буде однаковим, тобто процеси екранування будуть аналогічні, отже, зміни рухливості в залежності від зміни домішкового складу повинні бути схожими для CdTe і CdZnTe . Такий висновок підтверджується і результатами попереднього моделювання, згідно з якими абсолютні значення ρ і μ_n в CdTe і CdZnTe відрізняються при однаковому характері їх відносних змін. Параметри напівпровідника, які необхідні для коректного моделювання рухливості, більш вірогідно встановлені для CdTe . У зв'язку з цим для вивчення кореляції між ρ і μ_n в CdZnTe доцільно провести таке дослідження на прикладі CdTe .

На рис.3.16(а) зображена модельна залежність (при $T = 300 \text{ K}$) питомого опору CdTe , що містить початкові фонові домішки і дефекти, від концентрації глибокого донора $N(X)$ і рівня енергії E_{DD} однозарядного глибокого донора X , який

повинен бути присутнім в матеріалі для забезпечення його напівізольюючих властивостей [18, 125]. Як вже відзначалося раніше, розрахунок питомої опору для CdTe проводився з урахуванням вихідного змісту фонових дефектів, одержуваних в сучасних технологіях вирощування [18, 20]. У підрозділі 3.3 представлена аналогічна залежність (рис 3.13б), де CdTe легувався хлором, в нашому ж випадку концентрація Cl не перевищує фонового рівня, тобто маємо CdTe без хлору. Оскільки хлор є мілким донором, то зі зменшенням його концентрації низькоомна область з дірковою провідністю збільшується (плато $\rho \sim 10^2 \text{ Ом}\cdot\text{см}$). Високоомний стан досягається при концентраціях донора X від $1,5 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ до $3 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

На рис 3.16 (б) показана модельна дрейфова рухливість електронів μ_n в залежності від концентрації і рівня енергії глибокого донора X . Моделювання рухливості проводилося при 300 К. Моделювання показало, що рухливості вільних носіїв заряду безхлорного CdTe і CdTe:Cl відрізняються мало. З рис. 3.16 (б) видно, що для початкового складу фонових домішок в CdTe і концентрації глибокого донора $X \sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$ маємо матеріал CdTe с високою рухливістю $\sim 10^3 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$, а відносні зміни величин μ_n становлять близько 1% за умови рівномірного розподілу.

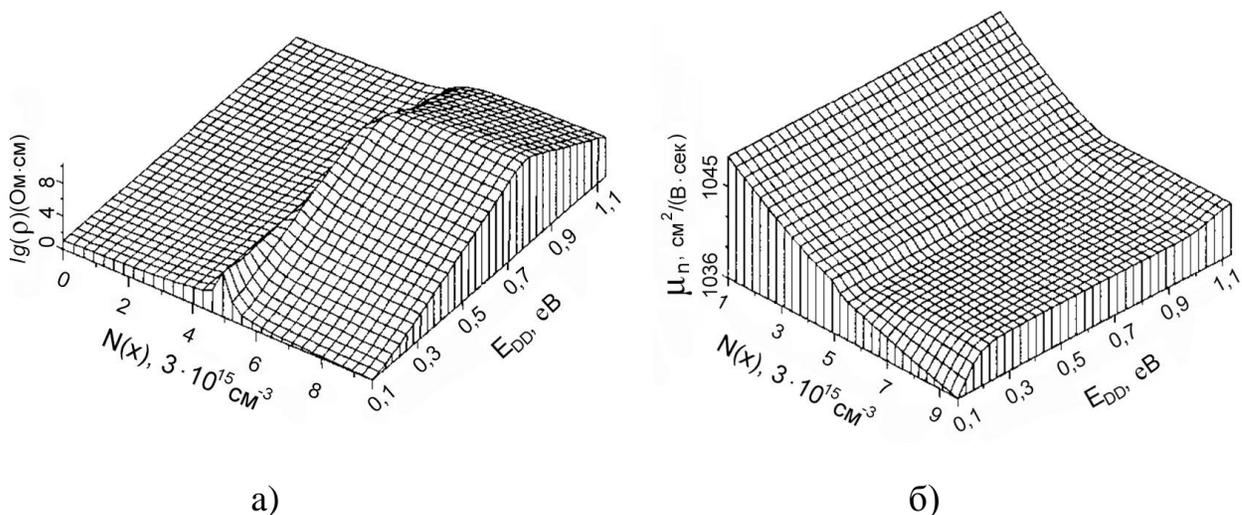


Рис. 3.16. Електрофізичні властивості CdTe в залежності від концентрації і рівня енергії однозарядного глибокого донора X ; а) залежність $\lg(\rho)$; б) залежність рухливості. Склад фонових домішок той же, що і раніше. $N(X) = 3 \times 10^{15} \text{ см}^{-3} \div 3 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$. $E_{DD}(X) = 0,4 \text{ eV} \div 1,4 \text{ eV}$ і відлічується від зони провідності.

дефектів і домішок по об'єму. У зв'язку з цим був оцінений внесок у рухливість від традиційних механізмів розсіювання вільних носіїв заряду Одержані значення рухливості, розраховані за формулою (2.9), збігаються з експериментальними даними [131]. При кімнатних температурах визначальний вплив чинить розсіювання на полярних оптичних фонах. Саме це розсіювання і визначає отриману величину ($\sim 10^3$ см²/В×с) рухливості електронів, яке вимірюється в експериментах. Невеликий вплив при кімнатних температурах справляє також розсіювання на іонізованих домішках та дефектах. Для оцінки вкладів був обраний домішковий склад рис.3.17 при $T = 300$ К і фіксованих значеннях концентрації хрому $N(\text{Cr}) = 3 \cdot 10^{16}$ см⁻³ і хлору $N(\text{Cl}) = 5 \cdot 10^{15}$ см⁻³. Моделювання показало, що внесок механізму розсіювання на полярних оптичних фонах (формула 2.7) становить 96%, на іонізованих домішках (формула 2.8) - 3%, сумарний внесок всіх інших механізмів становить близько 1%. При зміні рухливості від її максимального значення 1037 см² / (В·с) до мінімального ~ 1000 см²/(В×сек) змінюється тільки частота зіткнення електронів провідності з іонізованими домішками $1/\langle t_{\text{im}} \rangle$, частоти зіткнень для інших механізмів залишаються незмінними. При цьому зміна величини $1/\langle t_{\text{im}} \rangle$, як і слід було очікувати, не перевищує 3% від загальної частоти зіткнень. У зв'язку з цим навіть значна зміна концентрацій заряджених центрів (за умови рівномірного їх розподілу в обсязі) мало впливає на зміну рухливості при кімнатних температурах. Як показують розрахунки, при низьких температурах (~ 10 К) основний внесок вносить розсіювання електронів на іонізованих домішках (99,8%).

При отриманні CdTe може відбуватися внесення в нього металів (Cr, Co), які є глибокими акцепторами. Донор Cl і глибокі акцептори взаємно компенсуються, тому можна розглянути поведінку ρ і μ_n в залежності від зміни концентрації цих металів і Cl. На рис. 3.17 наведені залежності для Cr, вплив інших акцепторів аналогічний. З рис. 3.17 видно, що збільшення концентрації тільки глибокого донора істотно збільшує розмір високоомній області і, отже, помітно полегшує

отримання необхідного напівізольюючих стану кристала. У той же час зміна концентрації глибокого акцептора не впливає на розмір зазначеної високоомної області.

У механізмі розсіювання на іонізованих домішках враховувалося екранування вільними носіями заряду і зарядженими глибокими центрами. Для з'ясування причин зміни рухливості при зміні складу було проведено кількісний аналіз відносного впливу цих екранувань. За початкову точку був прийнятий домішковий склад рис.3.17 з $N(\text{Cl}) = 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ і $N(\text{Cr}) = 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, а для порівняння - точки з максимальною електронною та дірковою провідностями. У зазначених точках по черзі включалися і виключалися екранування вільними носіями і глибокими рівнями. В результаті було встановлено, що в напівізольюючій області визначальний внесок в екранування дають іонізовані глибокі центри, так як тут їх концентрація максимальна. У низькоомних областях екранування вільними носіями заряду і глибокими центрами впливають приблизно однаково, забезпечуючи спільно більш високі значення рухливості. З рис.3.17 (б) видно, що початкова точка лежить в області з найменшою рухливістю μ_{min} . Моделювання показує, що ця область ($\rho \sim 10^1 \text{ Ом}\cdot\text{см}$), безпосередньо примикаючи до напівізольюючих області, характеризується тим, що тут сумарна концентрація вільних носіїв і іонізованих глибоких центрів ($N_{\text{сум}}^{\text{екр}}$) мінімальна. Ще одним фактором, що впливає на рухливість, є концентрація самих розсіювальних центрів. Саме тому на характер зміни μ_n накладається монотонне зменшення при збільшенні концентрації хлору і хрому. На рис. 3.16 також бачимо, що μ_n досягає максимальної величини в низькоомній області за винятком точки з мінімальною енергією глибокого донора E_{dd} і його максимальною концентрацією $N(\text{X})$, де відбувається різке збільшення концентрації розсіювальних центрів.

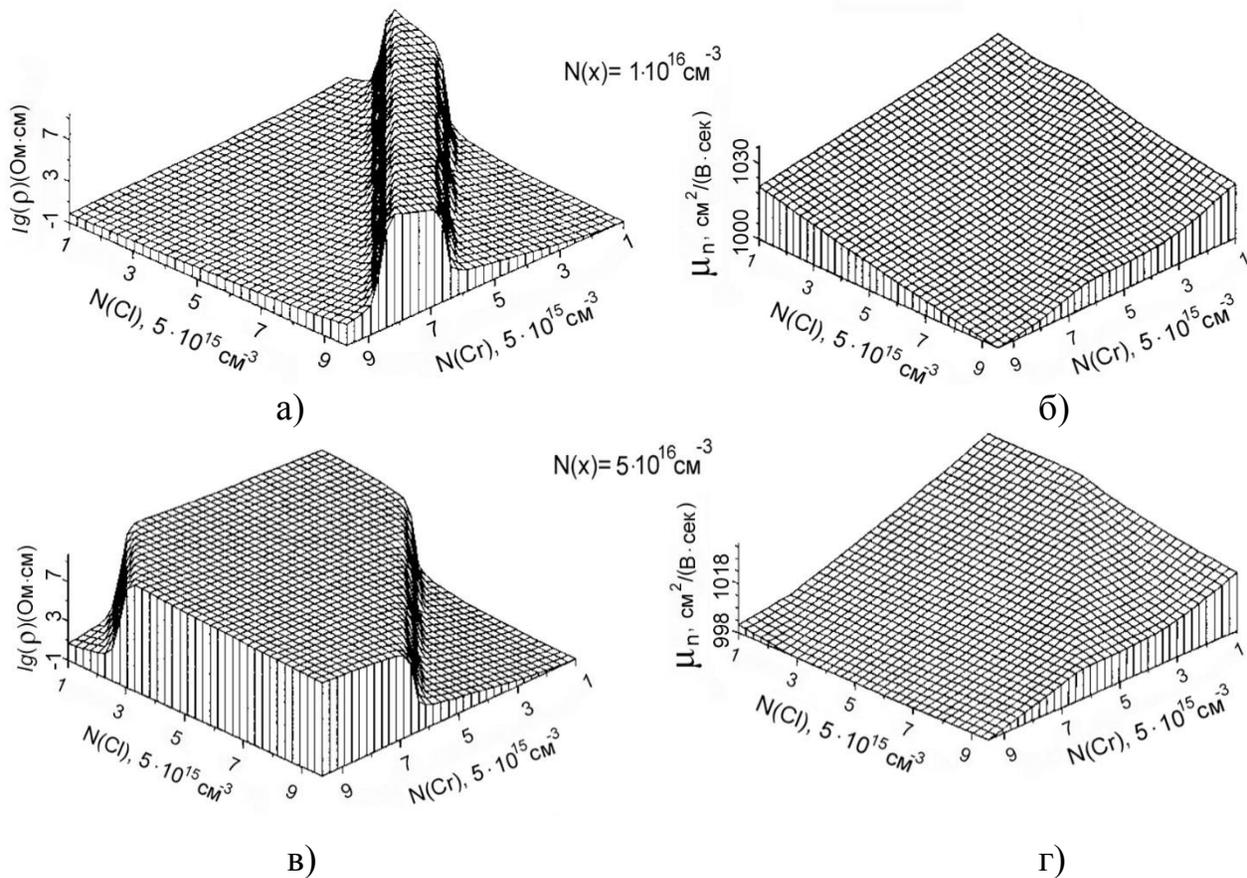


Рис. 3.17. Електрофізичні властивості CdTe в залежності від зміни концентрації Cl і акцептора Cr з енергією $E^2 = E_v + 1,34$ eV. $N(X) = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Вміст решти домішок такий же, як і на рис.3.16. $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3} \leq N(\text{Cl}) \leq 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3} \leq N(\text{Cr}) \leq 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; а, в – питомий опір; б, г - рухливість.

З рис.3.17, так само як з рис. 3.16 видно, що рухливість електронів, мало залежить від зміни на порядок концентрації домішок, що діють, як іонізовані точкові дефекти за умови їх рівномірного розподілу в матриці. Тобто при суттєвому збільшенні ρ в детекторах на основі CdZnTe абсолютне значення рухливості електронів практично мало змінюється. На електронну рухливість μ_n вельми помітно впливає неоднорідний розподіл домішок, тобто скупчення домішок. Цей вплив видно з рисунка 3.18, де показані температурні залежності μ_n при різних концентраціях скупчень домішок, тобто домішкових кластерів.

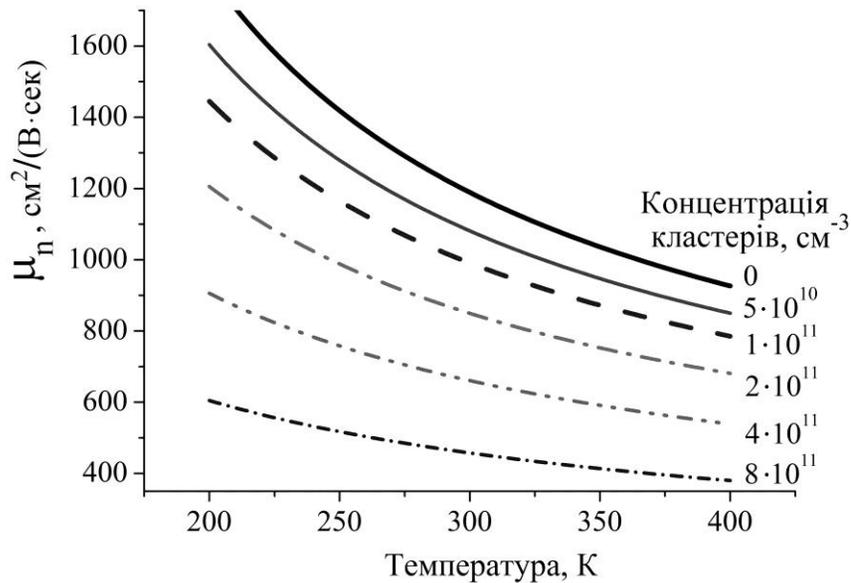


Рис. 3.18. Температурні залежності електронної рухливості μ_n в $\text{Cd}_{0,9}\text{Zn}_{0,1}\text{Te}$ при різних концентраціях домішкових кластерів з площею поперечного перерізу $S=1 \cdot 10^{-6} \text{ см}^2$.

Можна бачити, що зі збільшенням концентрації скупчень домішок приблизно на порядок помітно знижується електронна рухливість μ_n при $T=300 \text{ К}$ – робочій температурі детектора.

Результати розділу опубліковані в роботах [А.1-А.5], що наведено в Додатку А, та представлені на конференціях [А.12, А.17, А.18].

3.5 Висновки до розділу 3

1. Багаторівнева модель компенсації для довільного числа багатозарядних домішок дозволила отримати близькі до експерименту величини ρ і електронної рухливості μ_n в GaAs і CdTe з урахуванням уточнених механізмів розсіювання і екранування.

2. Мілкі рівні, точкові і лінійні дефекти можуть помітно впливати на μ_n в GaAs , якщо вони розподілені в матриці у вигляді заряджених скупчень дефектів,

кластерів, неоднорідностей легування. Природний дефект EL-2 помітно впливає на μ_n в GaAs навіть при його однорідному розподілі в матриці.

3. Визначальний внесок у величину електронної рухливості μ_n в CdTe і CdZnTe дає розсіювання на полярних оптичних фононах, тому μ_n слабо залежить від домішкового складу за умови рівномірного розподілу точкових дефектів і домішок по об'єму кристала. Характер зміни залежностей ρ і m_n від складу якісно подібний для CdTe і CdZnTe.

4. Глибокі донори в CdTe і CdZnTe збільшують розмір напівізолюючої області зміни концентрацій мілких рівнів. Збільшення ширини забороненої зони від 1,6 для CdTe до 1,8 eV і більше для $\text{Cd}_{0.8}\text{Zn}_{0.2}\text{Te}$ при $T = 0$ K не призводить до помітних змін тривимірних залежностей ρ в порівнянні з CdTe, але максимальна величина ρ збільшується на два порядки.

5. В CdTe і CdZnTe область $\sim 10^6$ Ом·см з'являється при неповній компенсації вакансій кадмію, а область $\sim 10^{10}$ – 10^{12} Ом·см – в результаті неповної компенсації глибокого донора X з глибиною залягання $\sim 0,8$ eV.

РОЗДІЛ 4

ВЛАСТИВОСТІ ДЕТЕКТОРІВ ГАММА-ВИПРОМІНЮВАННЯ НА ОСНОВІ GaAs, Cd_xZn_{1-x}Te

В розділі 4 представлені дослідження умов, коли високоомний CdZnTe з високим μ_n має хороші детекторні властивості, тобто високу ефективність збору зарядів η (роботи [А.5–А.8, А.13, А.15], що наведено в Додатку А). Був з'ясований склад досліджуваних матеріалів Cd_xZn_{1-x}Te ($0,4 < x < 1$), при якому вони мають необхідні високі величини питомого опору ρ і електронної рухливості μ_n , що відповідало результатам досліджень, описаних в розділі 3. Були розглянуті матеріали з різним вмістом Zn, виконаний їх порівняльний аналіз та встановлені найбільш придатні для детектування іонізуючого випромінювання. Був досліджений також кристалічний арсенід галію [А.7] і з'ясовані труднощі його застосування в ролі детекторів. Досліджені детектори на основі Cd_{0,7}Zn_{0,3}Te з різною конфігурацією електродів та зроблений їх порівняльний аналіз [А.8, А.15]. Встановлені шкідливі фонові домішки в Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te, які значно знижують η детектора [А.18].

4.1 Властивості детекторних матеріалів і плоскопаралельних детекторів на їх основі

Як вже зазначалось, для ефективної реєстрації гамма, рентгенівського випромінювання і спектроскопії заряджених частинок необхідні детектори на основі кристалічних матеріалів з великим питомим опором ρ і атомною масою, високими величинами електронної рухливості μ_n і часу життя τ нерівноважних носіїв заряду. Розробка сучасних детекторів, що працюють при кімнатній температурі, як правило, проводиться в напрямку оптимізації геометрії електродів [132–134], удосконалення системи реєстрації [135, 136] або розробки методів вимірювання γ -випромінювання [137], однак є постійна потреба в удосконаленні детекторних матеріалів з поліпшеними характеристиками.

Методом моделювання можна досліджувати ρ , μ_n і τ , які залежать від домішкового і дефектного складу матриці. Незважаючи на прогрес, досягнутий в технології отримання детекторних матеріалів, властивості переносу заряду в активній області детектора при реєстрації γ -випромінювання ще далекі від прийнятних. Існує проблема неповного збору зарядів детекторів на основі CdTe і CdZnTe, пов'язана з різницею в рухливостях вільних електронів і дірок і малим значенням добутку $\mu_h \cdot \tau_h$, де μ_h і τ_h - відповідно рухливість і час життя нерівноважних дірок. Велика різниця в ефективності збору електронів і дірок значно погіршує енергетичну роздільну здатність детектора. Це проявляється на амплітудних спектрах спотворенням форми лінії повного поглинання випромінювання і утворенням хвоста в області більш низьких енергій. Цю проблему вирішують різними методами [132–136], які припускають величини рухливості μ і часу життя τ для електронів і дірок фіксованими і заздалегідь заданими. Однак на μ і τ впливають домішковий та дефектний склад, а також молярна частка x сполуки CdTe в $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ ($0 < x < 1$). Самі величини τ і μ визначають ефективність збору зарядів η .

Високі величини рухливості і питомого опору є бажаними властивостями матеріалів твердотільних детекторів, тому в попередньому розділі, а також в роботах [125, 126, 138] проводився пошук умов досягнення максимальних величин μ_n і ρ . Однак μ_n , τ і ρ є взаємно залежними параметрами, а в цих роботах не вивчалася поведінка τ , і, що найголовніше, досліджені величини не пов'язувались з характеристиками детектора, на які вони впливають.

Інтерес представляє проведення кількісного пошуку оптимального поєднання τ_n , τ_p , μ_n і ρ в залежності від дефектного і домішкового складу, при яких ефективність збору зарядів максимальна для найбільш простого плоскопаралельного детектора γ -випромінювання, на основі $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$.

Для обчислення μ_n і ρ була використана модель, описана в розділі 2 і в роботі [138]. Було забезпечено точне врахування ширини забороненої зони $E_g(x)$ при

кімнатній температурі в залежності від мольної частки CdTe. В роботі [139] залежність $E_g(x)$ апроксимувалась квадратним тричленом при кімнатній температурі. Якщо проводити таку апроксимацію для низькотемпературної ширини забороненої зони E_{g0} , потім ввести поправку на температуру [87, 138] і отримані значення $E_g(x)$ порівняти з відомими експериментальними результатами, то в результаті при $T \rightarrow 0$ отримаємо залежність $E_{g0}(x)$ для $Cd_{1-x}Zn_xTe$:

$$E_{g0}(x) = E_{g0} + 0.906 \cdot x + 0.179 \cdot x^2. \quad (4.1)$$

В (4.1) E_{g0} – ширина забороненої зони для CdTe при $T \rightarrow 0$, тоді результуюча залежність $E_g(x, T)$ мало відрізнялась від розрахованої по формулі (2.4).

Гамма-кванти реєстрованого випромінювання проходять через активну зону детектора, взаємодіють з її матеріалом, генеруючи електронно-діркові пари. Акти взаємодії випромінювання з матеріалом можуть відбуватися з однаковою ймовірністю у всьому об'ємі активної зони. γ -кванти взаємодіють з речовиною детектора і утворюють електронно-діркові пари в деякій протяжній області міжелектродного проміжку. Причому досить складно обчислити збір зарядів з такої протяжної області довільної форми. У зв'язку з цим для кращого розуміння впливу матеріалу активної зони на властивості детектора цілком достатньо досліджувати фізику цього процесу, тобто залежності ефективності збору зарядів η від координати d_0 початку дрейфу нерівноважних електронів і дірок до відповідних електродів. Для побудови залежностей $\eta(d_0)$ для різного домішкового складу детекторного матеріалу підходять розрахунки за формулою Хегта:

$$\eta(d_0) = \frac{\mu_e E \tau_e^+}{L} \left[1 - \exp\left(-\frac{L-d_0}{\mu_e E \tau_e^+}\right) \right] + \frac{\mu_h E \tau_h^+}{L} \left[1 - \exp\left(-\frac{d_0}{\mu_h E \tau_h^+}\right) \right], \quad (4.2)$$

де L – відстань між електродами; τ_e^+ і τ_h^+ – середні часи дрейфу відповідно електронів і дірок; μ_e і μ_h – рухливості відповідно електронів і дірок; d_0 – координата точки виникнення нерівноважних носіїв заряду, відлічувана від катода; E – напруженість електричного поля в міжелектродному проміжку детектора. При цьому, середні часи дрейфу електронів і дірок в міжелектродному проміжку

прирівнювались до часів життя нерівноважних носіїв заряду до їх захвату на рівнях, тобто було прийнято $\tau_e^+ = \tau_n$ і $\tau_h^+ = \tau_p$. Час життя нерівноважних електронів τ_n і дірок τ_p обчислювався згідно теорії Шоклі-Ріда-Холла для невідроджених напівпровідників при довільній концентрації пасток і малих концентраціях нерівноважних носіїв заряду, тобто по формулам (2.11) і (2.11'). В роботах [140, 141] викладена модель для обчислення ефективності збору зарядів у детекторі з урахуванням процесів їх захвату і вивільнення без урахування рекомбінації через глибокі рівні. В даній дисертаційній роботі здобувач проводив обчислення відповідно до моделі рекомбінації через глибокі рівні пасток з урахуванням експериментально встановлених і опублікованих в літературі [36, 130] площ їх перерізів захоплення ($\sim 10^{-15}$ см²), що дозволило одержати вірні величини τ_n і τ_p , які необхідні для визначення η .

Зазвичай в обчисленнях ефективності збору зарядів по формулі (4.2) величини μ_e , μ_h , τ_e^+ і τ_h^+ вважаються відомими і фіксованими. В даному дослідженні зазначені величини були представлені як змінні (крім μ_h), залежними від складу матриці і безпосередньо обчислювалися [142].

Початковий склад матеріалу, визначений у [18, 20] зображений для наочності на рис. 4.1, а більш детально в таблиці 4.1. Енергетичне положення всіх рівнів наведено для $T = 300$ К.

Таблиця 4.1

Вміст домішок і дефектів у CdTe і CdZnTe

Домішка, дефект	$N_d(Cl)$	Ag_{Cd}	As_{Te}	P_{Te}	V_{Cd}	V_{Cd} related*	V_{Te} related*	Zn related*	V_{Cd}^{2-}	V_{Te}^+	H_I^+	H_2^{2-}
Концентрація, см ⁻³	$3 \cdot 10^{15}$ – $2.6 \cdot 10^{16}$	$5 \cdot 10^{15}$	$5 \cdot 10^{15}$	$5 \cdot 10^{15}$	$5 \cdot 10^{14}$	$5 \cdot 10^{14}$	$1 \cdot 10^{15}$	$5 \cdot 10^{15}$	$1 \cdot 10^{15}$	$3.5 \cdot 10^{15}$	$2 \cdot 10^{16}$	$8 \cdot 10^{14}$
Положення в забороненій зоні, еВ	1,59	0,1	0,06	0,08	0,11	0,13	0,14	0,22	0,40	0,406	0,8	0,76
Переріз захоплення, см ²	$1 \cdot 10^{-16}$	$2 \cdot 10^{-16}$	$1 \cdot 10^{-16}$	$1 \cdot 10^{-16}$	$2 \cdot 10^{-16}$	$1 \cdot 10^{-16}$	$1 \cdot 10^{-17}$	$8 \cdot 10^{-17}$	$1 \cdot 10^{-14}$	$1 \cdot 10^{-16}$	$4 \cdot 10^{-18}$	$1,5 \cdot 10^{-17}$

* Не є рівнем дефекту, але з'являється в спектрах, коли реєструється відповідний дефект чи домішка.

Розшифрування позначень фонових домішок і дефектів в табл.4.1 зроблено в розділі 3. Крім того, в роботі [20] були зареєстровані рівні одноразово зарядженої електронної пастки H_1^+ , на роль якої підходить донор X , і рівні дворазово зарядженої діркової пастки, позначеної H^{2-} - на роль якої підходять енергетичні рівні фонових домішок, наприклад, Cr і Co , досліджені в розділі 3 і які повинні забезпечити діркову провідність у високоомному стані $\rho \sim 10^9-10^{11}$ Ом·см.

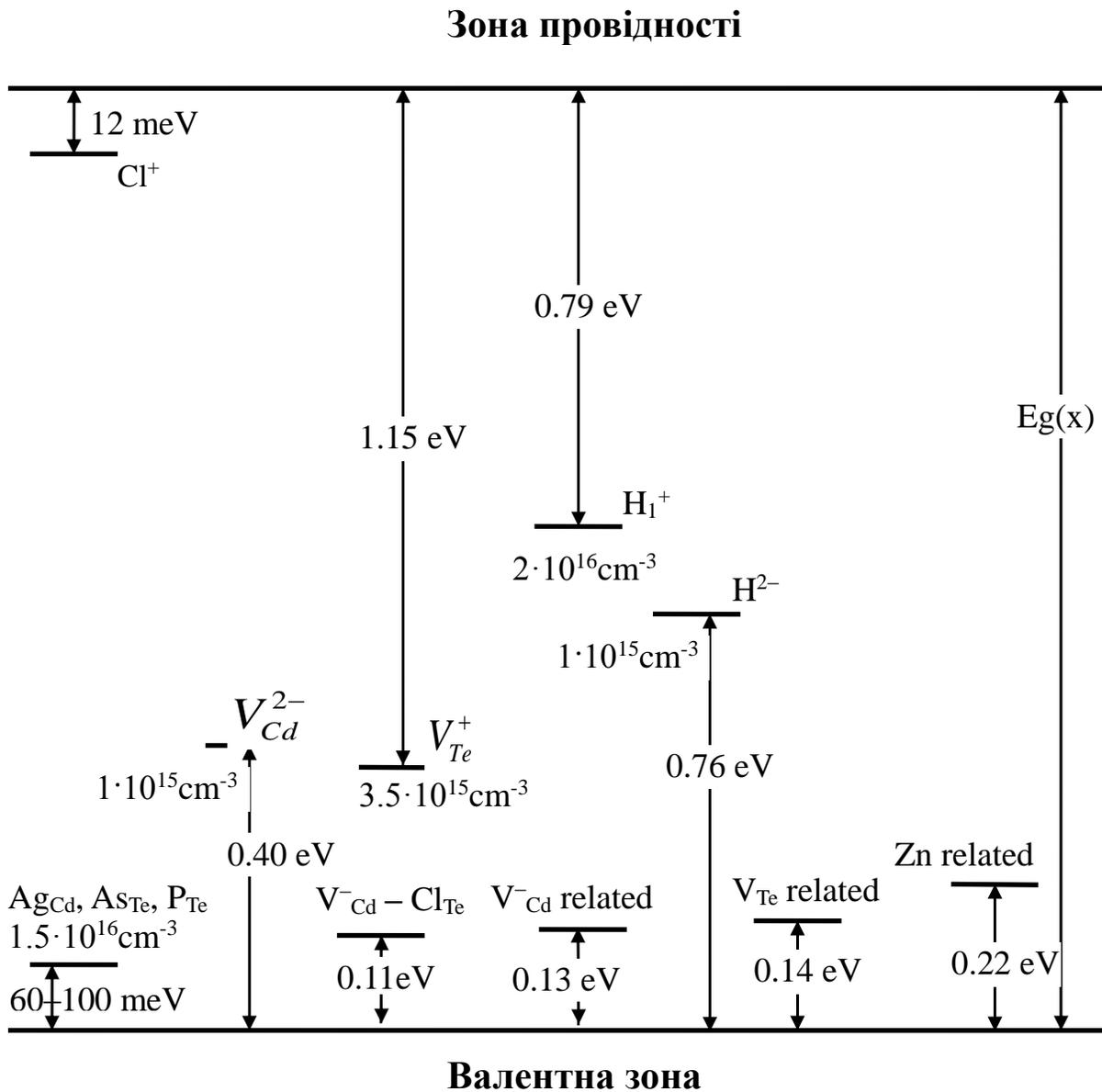


Рис. 4.1. Вихідний склад CdZnTe. Рівні енергії електронних пасток відлічуються від зони провідності; рівні енергії діркових пасток - від валентної зони.

Обчислення μ_n здійснювалося з урахуванням традиційних моделей розсіювання на акустичних фонах (наближення потенціалу деформації), поляризованих оптичних фонах, акустичних п'єзоелектричних фонах, іонізованих центрах і розсіювання в сполуці, як зазначено в розділі 2. Величина μ_n слабо залежить від складу, тому вважалася постійною, рівною $70 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$.

Для розрахунку часу життя τ_n і τ_p використовувались значення рівнів енергії і відповідні їм площі перерізу захвату, одержані зі спектрів методу PICTS (photo induced current transient spectroscopy) авторами [20]. Після порівняння цих величин з результатами робіт [36, 130] і проведених розрахунків було встановлено, що збіг обчислених τ_n і τ_p з загальновідомим експериментальним результатом $\tau_{n,p} \sim 10^{-6}$ мав місце у випадку пониження ефекту рекомбінації через електронну пастку H_1^+ і діркову пастку H_2^- . Дослідження, проведені в розділі 3 і роботах [125, 126], показали, що такі глибокі рівні забезпечують напівізолюючі властивості CdZnTe. Пониження ефекту рекомбінації досягалось зменшенням веретину захвату S_1 для пастки H_1^+ при розрахунку τ_e і площі перерізу S_2 пастки H_2^- при розрахунку τ_h . Площі перерізу захвату решти рівнів відповідають роботі [20]. В наступному розділі будуть представлені величини перерізів захвату, виміряні експериментально за допомогою більш досконалої методики SIMPA (simultaneous peak analysis), використаної для обробки даних TSC (thermally stimulated current) спектроскопії. Перерізи захвату глибоких рівнів, одержані з методики SIMPA, виявились близькими до величин S_1, S_2 , прийнятих в даному розділі.

Були прийняті типові параметри детектора: мієлектродна відстань $L = 5 \text{ мм}$; напруженість електричного поля E в між електродами 1000 В/см .

Для зменшення темнових струмів і шумів детектора необхідний матеріал з великим питомим опором ρ , і в цьому випадку маємо невідроджений стан, коли можна застосувати модель розрахунку τ (2.11)–(2.11)'. Велике ρ дозволяє також знизити час дрейфу зарядів шляхом збільшення напруги між електродами. Через

велику різницю в рухливостях електронів $\mu_e \sim 1000 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{сек})$ і дірок $\mu_p=70 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{сек})$ в CdZnTe на амплітудних спектрах реєструються в основному електрони. Для збільшення відношення сигнал/фон вільні електрони в міжелектродному проміжку повинні бути неосновними носіями заряду, тобто потрібен напівізолюючий матеріал з р-типом провідності. Спочатку був проведений пошук інтервалу зміни концентрації легуючої домішки хлору, який перекривав би область напівізолюючого стану $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ у всіх випадках, що розглядаються. Результат такого пошуку зображений на рис. 4.2, де показані залежності $\lg(\rho)$ від концентрації хлору при різному мольному вмісті CdTe. Вертикальними лініями проведено розмежування між областями n- і p-провідності для матеріалів з різними мольними частками x CdTe, причому для $x=0.7$ і менше вся високоомна область є областю діркової провідності, необхідною для детекторів.

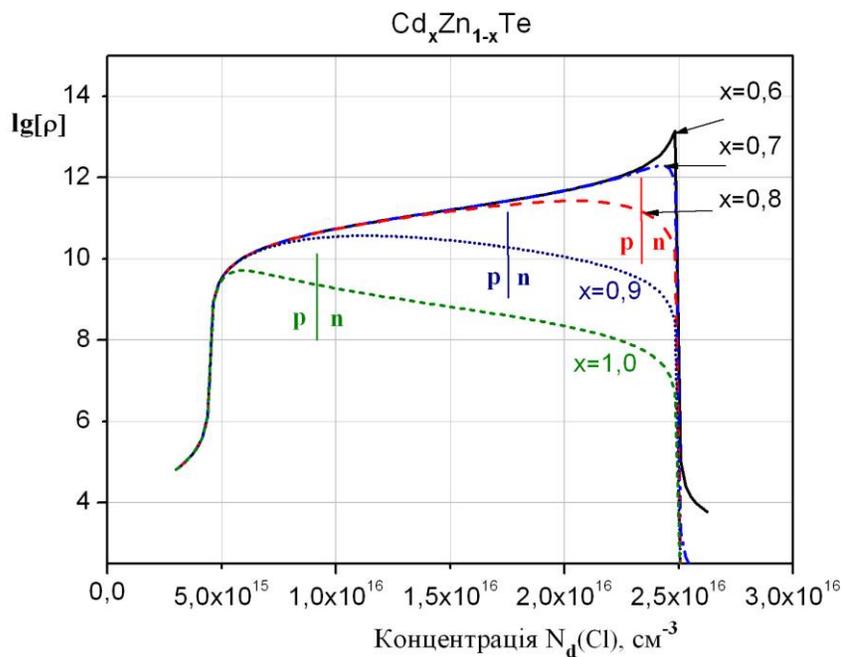


Рис. 4.2. Десятковий логарифм питомого опору в залежності від концентрації мілкого донора Cl для матеріалів $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ з різними значеннями x . Показані області p- і n-провідності для $x=1,0, 0,9, 0,8$. Для $x=0,4 - 0,7$ вся напівізолююча область має p-провідність.

З рис. 4.2 також видно, що $\text{Cd}_{0,9}\text{Zn}_{0,1}\text{Te}$ є кращим, ніж CdTe , а $\text{Cd}_{0,8}\text{Zn}_{0,2}\text{Te}$ і $\text{Cd}_{0,7}\text{Zn}_{0,3}\text{Te}$ підходять по p -провідності, однак мають занадто великий питомий опір, внаслідок чого важко контролювати їх склад і властивості, тому переважна кількість публікацій в технічній літературі присвячена саме матеріалам $\text{Cd}_{0,9}\text{Zn}_{0,1}\text{Te}$, напівізолююча область яких має p -тип електричної провідності.

Для порівняння з CdZnTe на Рис. 4.3 показані криві зміни питомого опору арсеніду галію, а також концентрації вільних електронів n і дірок p в залежності від зміни концентрації легуючої домішки Cr. Видно, що в порівнянні з CdZnTe , в GaAs максимальний питомий опір значно нижчий: $\rho \sim 10^8$ Ом·см. Крім того, область концентрацій з p -типом провідності не є переважуючою, хоча максимум ρ попадає в область з дірковою провідністю. Ці ж висновки залишились справедливими після проведеного дослідження високоомної області GaAs , легovanого киснем і залізом.

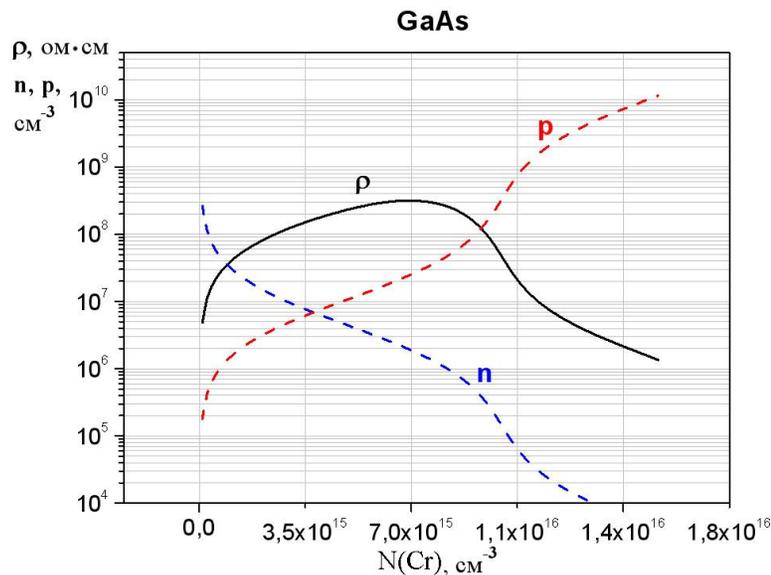


Рис. 4.3. Питомий опір GaAs і концентрації вільних електронів n і дірок p в залежності від вмісту хрому. Концентрація мілких донорів $N_d = 1 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$, мілких акцепторів $N_a = 1 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$, $N_{EL2} = 1 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$.

Були розраховані криві ефективності збору зарядів η для вільних носіїв заряду, дрейфуючих в електричному полі до відповідних електродів від п'яти точок, розташованих на різних відстанях d_0 від катоду. Результат моделювання η для арсеніду галію наведений на рис. 4.4.

Зіставляючи рис. 4.3 і рис. 4.4 бачимо, що в високоомній області ($\rho \geq 10^8$ Ом·см) арсеніду галію величина η має дуже малі значення, близькі до нуля. Задовільно прийнятні величини $\eta \sim 0,2-0,3$ мають місце для $\rho \sim 10^7$ Ом·см, які, в свою чергу, досягаються в дуже вузькій області концентрацій домішок, величину якої потрібно забезпечити у всьому об'ємі детекторного матеріалу. Малі η для високоомної області пояснюються тим, що в GaAs рівні дефектів, розташовані в середині забороненої зони і мають відносно великі площі перерізу захвату σ .

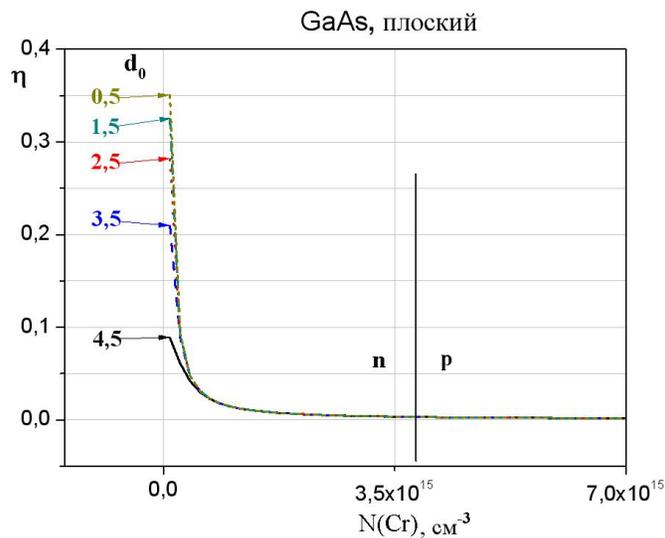


Рис. 4.4. Ефективність збору зарядів у плоскому детекторі на основі GaAs, легovanому хромом в діапазоні концентрацій $1 \cdot 10^{14} \text{см}^{-3} - 1,5 \cdot 10^{16} \text{см}^{-3}$

Так, рівні, віддалені від валентної зони на 0,5–0,9 еВ, мають $\sigma \sim 10^{-10} - 10^{-12} \text{см}^2$, в то час як для мілких рівнів, розташованих поблизу відповідних зон, $\sigma \sim 10^{-15} - 10^{-18} \text{см}^2$ [143]. В напівізолюючому стані GaAs рівень Фермі зміщується до середини забороненої зони і обумовлює часткове заповнення глибоких рівнів, що включає їх в процес захвату вільних носіїв. Великі площі перерізу захвату вільних носіїв глибокими рівнями визначають високі темпи рекомбінації, тому час життя

нерівноважних носіїв заряду в кристалічному GaAs по порядку величини $\sim 10^{-9}$ сек. Застосування GaAs детекторів у середовищі з жорстким радіаційним опроміненням приводить до появи глибоких радіаційних дефектів, які знижують час життя нерівноважних носіїв заряду аж до 10 пікосекунд [143]. З іншого боку, прийнятна ефективність збору зарядів досягається при $\rho \sim 10^7$ Ом·см, а при такому відносно невисокому питомому опорі зростають фонові шуми і темнові струми. Таким чином, крім менших значень молекулярної маси M і атомного номеру Z складових елементів, а також більш низького питомого опору у порівнянні з CdZnTe до недоліків кристалічного GaAs слід віднести малу ефективність збору зарядів, обумовлену малим часом життя нерівноважних носіїв заряду.

На сьогоднішній день добре відомо, що величини τ , ρ і μ взаємно впливають одна на одну, при цьому збільшення однієї з них часто призводить до зменшення решти. Ефективні детектори виходять на матеріалах з максимальною величиною добутку $\mu \cdot \tau \cdot \rho$ [144]. В зв'язку з цим була досліджена поведінка цієї величини в CdZnTe. Результат цього дослідження показано на рис. 4.5. На залежностях рис. 4.5–4.7 був вибраний однаковий склад та інтервал зміни концентрації мілкового донора, що і на рис.4.2, за виключенням концентрації $N(X)$, яка дорівнює $1 \cdot 10^{16} \text{см}^{-3}$. З рисунка 4.5 видно, що скільки-небудь помітне зростання добутку $\mu_n \cdot \tau_n \cdot \rho$ відбувається при зменшенні x від 1 до 0,8. Матеріал з $x = 0.7$ має більш високе $\mu_n \cdot \tau_n \cdot \rho$ в дуже вузькій області, де має місце помітний вклад від електронної провідності, тобто спостерігається змішана провідність, що не дуже добре для детекторів. Так що, якщо в ролі критерія відбору матеріалу прийняти вказаний добуток, а технологія вирощування дозволяє досить точно контролювати склад, то є смисл одержувати матеріал з $x=0.8-0.9$. З іншого боку, в попередньому розділі було показано, що питомий опір $\text{Cd}_{0.8}\text{Zn}_{0.2}\text{Te}$ в ідеалі може досягати 10^{12} Ом·см. Робота з таким високоомним матеріалом вельми ускладнена, і навіть вимірювання ρ може представити значну проблему, не кажучи вже про надійний контроль домішкового вмісту. Тому на нинішньому етапі розвитку технологій одержання і

методик вимірювання характеристик найкращим матеріалом для детекторів іонізуючих випромінювань є $\text{Cd}_{0,9}\text{Zn}_{0,1}\text{Te}$. Матеріали $\text{Cd}_{0,8}\text{Zn}_{0,2}\text{Te}$ і $\text{Cd}_{0,7}\text{Zn}_{0,3}\text{Te}$ можна віднести до розряду перспективних. Такий висновок підтверджується тим, що, як вже зазначалось, переважна більшість робіт, опублікованих в науково-технічній літературі, присвячена саме матеріалу $\text{Cd}_{0,9}\text{Zn}_{0,1}\text{Te}$.

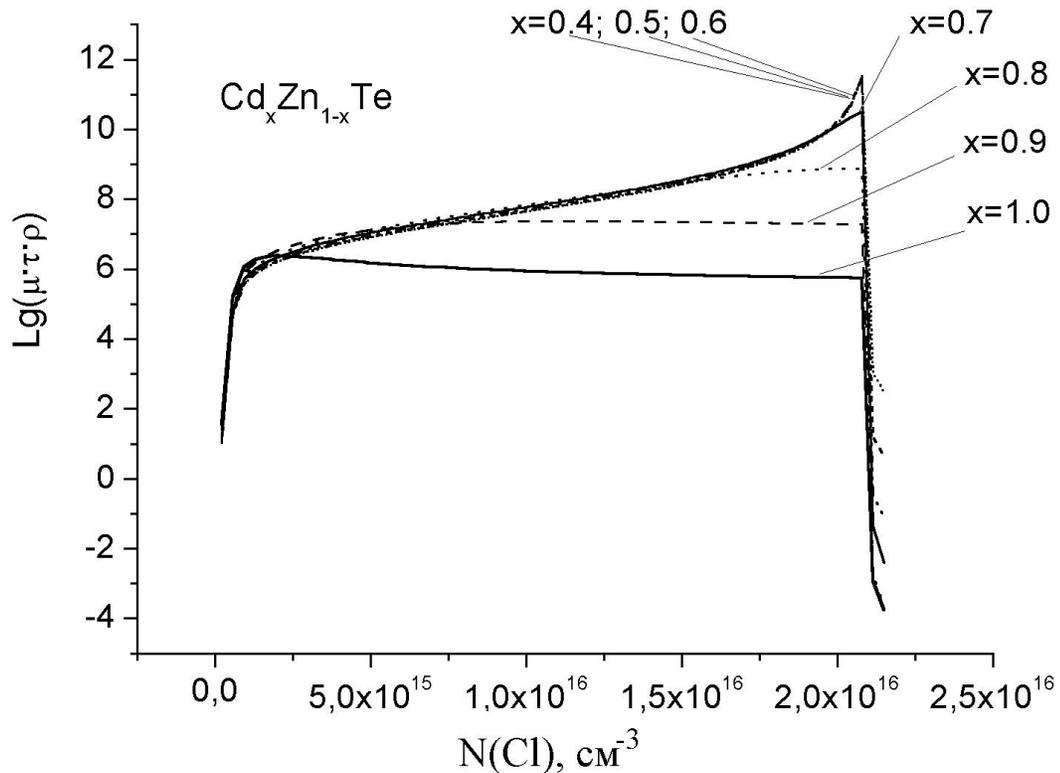


Рис. 4.5. Десятковий логарифм від добутку рухливості на час життя і на питомий опір в залежності від концентрації донора хлору для матеріалів $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ з різними величинами x .

Матеріал $\text{Cd}_{0,8}\text{Zn}_{0,2}\text{Te}$, що було одержано авторами роботи [20], як видно з модельних кривих рис. 4.2, має досить високий питомий опір ($\sim 10^{11} \text{ Ом} \cdot \text{см}$), а з іншого боку, як добре відомо з експерименту, цей матеріал має високу електронну рухливість μ_e , яка забезпечує прийнятний збір електронів. На рис. 4.6 показаний результат розрахунку у вигляді п'яти кривих, що відображають ефективність збору

зарядів η для нерівноважних носіїв, дрейфуючих в міжелектродному проміжку від п'яти різних точок з координатами d_0 початку дрейфу. Вузька область, що зберігає діркову провідність і відповідає умові компенсації мілких донорів (в даному випадку хлору) мілкими акцепторами, є областю з найбільш високим питомим опором для вмісту CdTe менше 0.8. Цю область, яка знаходиться поблизу переходу в низькоомний стан n-типу, позначимо як область А. В нашому випадку концентрація легуючої домішки хлору тут приблизно дорівнює $1.8 \cdot 10^{16} \text{см}^{-3}$.

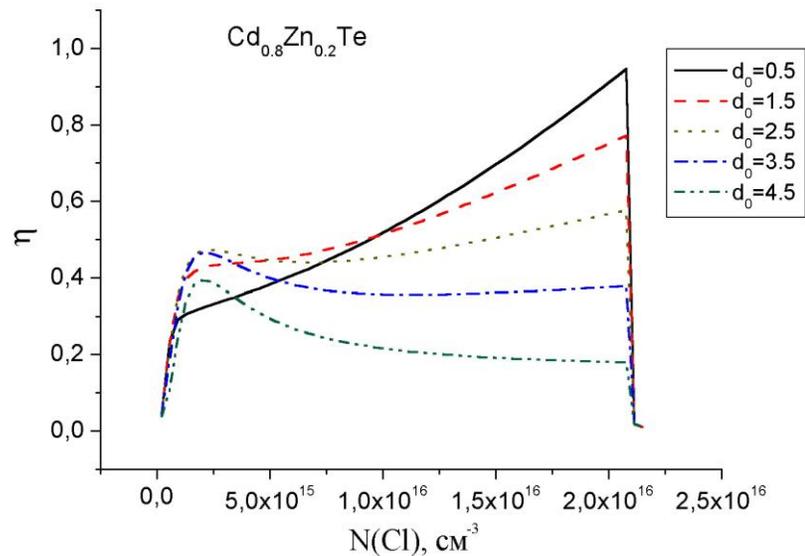


Рис. 4.6. Ефективність збору зарядів в залежності від концентрації мілкового донора Cl для вільних носіїв, дрейфуючих від різних точок d_0 утворення електронно-діркових пар при взаємодії γ -квантів з детекторним матеріалом $\text{Cd}_{0,8}\text{Zn}_{0,2}\text{Te}$.

При генерації електронно-діркової пари поблизу катода ($d_0=0.5$ і $1,5$ мм) можна досягти максимальної величини η в області А. Тут залежність η від d_0 найбільш сильна. Якщо акт генерації відбувається поблизу анода ($d_0=3.5$ і 4.5 мм.), то більш ефективний збір заряду має місце в напівізолюючих матеріалах р-типу с максимальною кількістю дірок, тобто безпосередньо перед переходом в низькоомний стан. В нашому конкретному випадку це область концентрації мілкового донора $(2 \div 3) \cdot 10^{15} \text{см}^{-3}$, де спостерігаються максимуми η , і яку будемо

називати областю В. Найбільші значення η досягаються в матеріалах р-типу з області А для актів взаємодії поблизу катода. Звідси слідує висновок про те, що більш ефективними повинні бути детектори, в яких основна маса напівпровідникового матеріалу А (а значить і кількість актів взаємодії) зосереджена ближче до катода. В більш тонкій прианодній області слід помістити матеріал з області В, що дозволить додатково підвищити η . На сучасному етапі розвитку технологій виготовлення детекторів досить важко, якщо взагалі можна, створити плоскі детектори, які складаються з двох різних матеріалів. Однак детекторами, де основна маса матеріалу А зосереджена поблизу катода, є, наприклад, сферичні і циліндричні детектори, в яких катодом служить зовнішній електрод, а радіус внутрішнього електрода – анода – відносно невеликий. Матеріал повинен бути напівізолюючим з концентрацією дірок p всього лише в кілька разів більшою, ніж концентрація електронів n , ($p \geq n$). На теперішній час як альтернатива плоским детекторам розглядається в основному сферичні детектори. Детектори, які застосовуються на практиці (плоскі та сферичні), направлені до джерела випромінювання саме катодом [145], так як в такому випадку підвищується енергетичне розрізнення піків на спектрі через більш високу рухливість електронів μ_n у порівнянні з рухливістю дірок μ_p . Наш аналіз показує, що в цих умовах підвищується також і ефективність збору зарядів.

Для повноти картини, необхідно змоделювати поведінку η для матеріалів $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ з різними значеннями x . Для цього були вибрані три точки: поблизу катода ($d_0=0.5$ мм), посередині детектора ($d_0=2.5$ мм) і поблизу анода ($d_0=4.5$ мм). В результаті моделювання було встановлено, що для пари електрон-дірка, що утворюються в проміжку від середини міжелектродного простору до катода, спостерігається досить помітна залежність від вмісту Zn практично у всьому діапазоні зміни концентрації мілкового донора (а значить і ρ). Виключенням є область А, де залежність від конкретного матеріалу практично відсутня, а η є високою. Характерно, що найкращий збір зарядів повинен спостерігатися для

CdTe ($x=1$) в області В, однак те, що цей матеріал має найменшу величину ρ (див. рис. 4.2) заставляє обмежитися матеріалами з області А з $x \leq 0,9$. Для електронно-діркових пар, утворених поблизу анода, майже відсутня яка-небудь залежність ефективності збору від конкретного матеріалу $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$, тому уявлення про її поведінку можна одержати з кривої з $d_0=4.5$ рис. 4.6. Видно, що для носіїв заряду, утворених поблизу анода, максимальна величина η спостерігається для високоомних матеріалів р-типу області В. На рис. 4.7 показано η при різних x для випадків $d_0=2.5$ мм і $d_0=0.5$ мм.

З усього сказаного випливає, що більш ефективними повинні бути детектори, в яких основна маса матеріалу активної зони зосереджена поблизу катода, а сам матеріал активної зони повинен бути неоднорідним. Найпростіший варіант полягає в створенні детектора з активною зоною, де поблизу катода і анода присутні відповідно два різних матеріали. Поблизу анода це повинен бути матеріал з області В, тобто такий матеріал р-типу, який має максимальну кількість дірок, але при цьому залишається напівізолюючим. Основна маса матеріалу активної зони повинна складатися з матеріалу області А, тобто матеріалу р-типу, що має кількість дірок $p > n$ і максимальний питомий опір ρ .

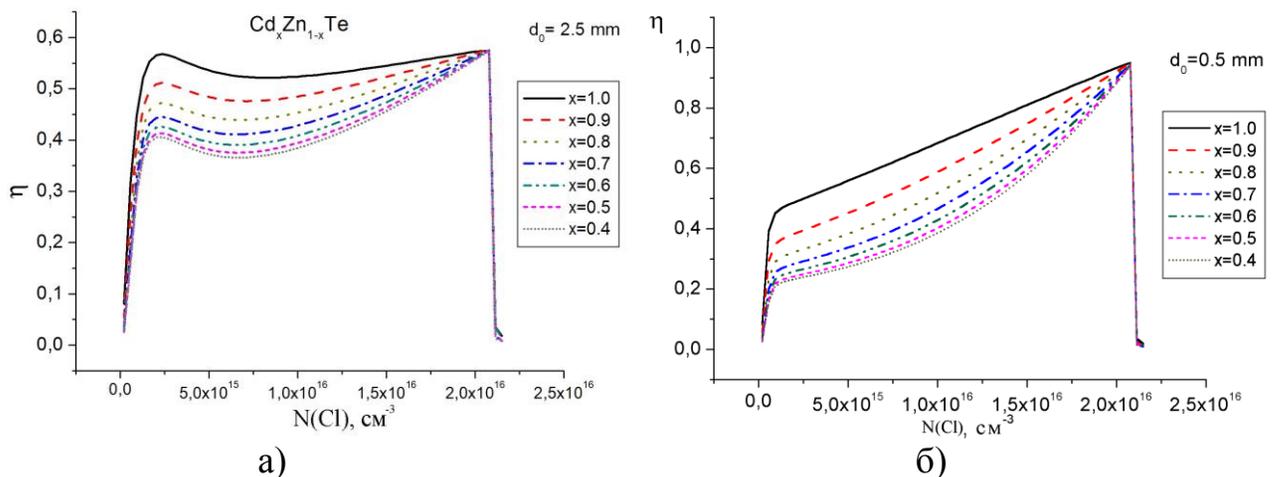


Рис. 4.7. Ефективність збору зарядів в залежності від концентрації мілкового донора для $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ з різними x при $d_0 = 2.5$ мм (а) і $d_0=0.5$ см (б).

Таким чином, матеріали $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ з $x = 0.9$ є певним компромісом між необхідністю досягнення напівізолюючого стану з $\rho \geq 10^{10}$ Ом·см і забезпечення високої ефективності збору зарядів.

Деякі домішки можуть негативно впливати на детекторні властивості CdZnTe , що продемонстровано на рис. 4.8, з якого видно, що існують шкідливі металічні домішки (Ti, V, Ge, Ni, Sn), які помітно погіршують ефективність збору зарядів. Моделювання показало, що при забрудненні кристалу шкідливими домішками рівень Фермі проходить поблизу рівня вакансії кадмію, на якій і здійснюється захват і рекомбінація нерівноважних носіїв заряду. Отже вакансії кадмію є дуже шкідливими структурними дефектами для детекторів. Такий висновок відповідає загальноприйнятим уявленням. Ефективність збору зарядів вельми чутлива і до величини площі перерізу захоплення глибоких рівнів шкідливих домішок, тому на них також відбувається захоплення і рекомбінація

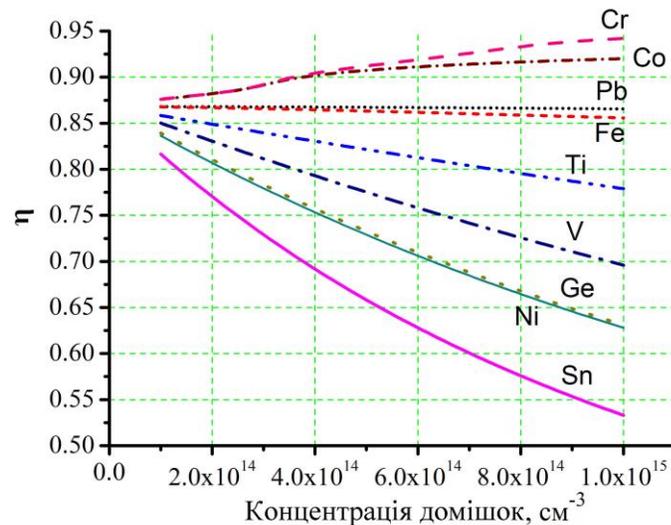


Рис. 4.8. Ефективність збору зарядів детектора на основі неопроміненого $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$, одержаного авторами [19], в залежності від вмісту різних фонових домішок.

нерівноважних носіїв заряду. Виміряна в [19] концентрація фонових домішок і дефектів знаходиться на рівні 10^{13} – 10^{14} см^{-3} і введення шкідливих домішок в

кількості більшій $(1-2) \cdot 10^{14}$ помітно погіршує детекторні властивості матеріалу. Коли одночасно підвищувати концентрацію всіх фонових домішок і дефектів, то підвищується гранична концентрація шкідливих домішок, вище якої помітно спадає ефективність збору зарядів. Таким чином, якщо технологія рафінування і вирощування дозволяє одержати матеріал CdZnTe з певною концентрацією «фону», то слід потурбуватись про те, щоб концентрація вказаних шкідливих домішок не перевищувала цей фоновий рівень, а ще краще – була нижча за нього.

4.2 Ефективність збору зарядів детекторів γ -випромінювань з різною конфігурацією електродів

У підрозділі 4.1 було вказано на корисність застосування детекторів ядерних випромінювань зі сферичною і циліндричною конфігурацією електродів. Розглянемо характеристики цих детекторів більш детально і порівняємо їх з властивостями плоскопаралельних детекторів. Як уже зазначалося, для зменшення темнових струмів і шумів детектора необхідний матеріал з якомога більшим питомим опором ρ , а вільні електрони в міжелектродному просторі повинні виступати в якості неосновних носіїв заряду, тобто потрібен високоомний матеріал з p-типом провідності. Найбільш досліджуваним детекторним матеріалами є $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$, а перспективними слід вважати $\text{Cd}_{0.8}\text{Zn}_{0.2}\text{Te}$ і $\text{Cd}_{0.7}\text{Zn}_{0.3}\text{Te}$.

Порівняльний аналіз результатів показав, що η сильно залежить від конфігурації електродів, але практично мало відрізняється для матеріалів з мольною часткою CdTe, що дорівнює 0.7 і 0.8. Деяку відмінність можна спостерігати лише для зарядів, що дифундують від областей, розташованих в безпосередній близькості до негативно зарядженого електроду, і дослідження були проведені на детекторному матеріалі $\text{Cd}_{0.7}\text{Zn}_{0.3}\text{Te}$, склад якого відображений в табл. 4.1 і на рис. 4.1. На графіках рис. 4.9 - 4.11 представлені криві зміни η в залежності від концентрації легуючої домішки для носіїв заряду, дрейфуючих з різних точок d_0 між електродами з плоскою, циліндричною і сферичною конфігурацією.

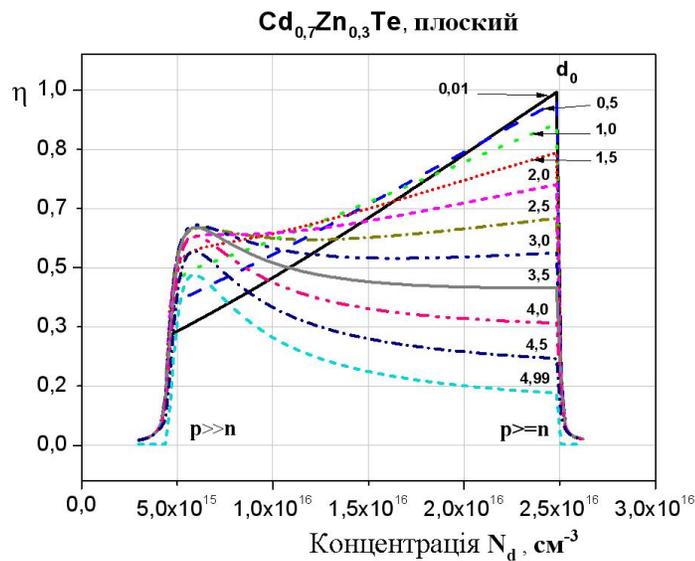


Рис. 4.9. Ефективності збору зарядів, дрейфуючих від різних точок d_0 в плоскому детекторі на основі $\text{Cd}_{0,7}\text{Zn}_{0,3}\text{Te}$.

З порівняння розрахованих залежностей рис. 4.9-4.11 видно, що є особливості, характерні для всіх типів детекторів. В області, де $p \gg n$, має місце максимум η для зарядів, дрейфуючих з точок, розташованих в прианодній половині міжелектродного проміжку, тобто $2,5 \leq d_0 \leq 5$ мм.

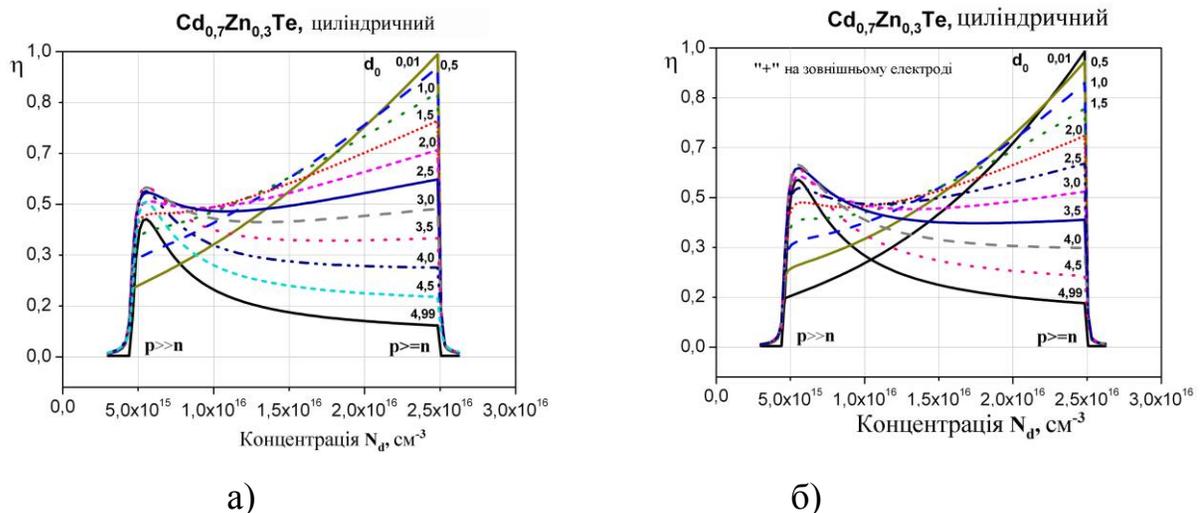


Рис. 4.10. Ефективності збору зарядів, дрейфуючих від різних точок d_0 в циліндричному детекторі на основі $\text{Cd}_{0,7}\text{Zn}_{0,3}\text{Te}$; а) зовнішній електрод - колектор дірок, б) зовнішній електрод - колектор електронів.

Максимум η в прианодній області виникає через високі величини τ_p при $p \gg n$. Збір зарядів, що виникли в прикатодній половині ($0 \leq d_0 \leq 2,5$ мм), зростає в усій напівізолюючій області зі збільшенням концентрації компенсуючого мілкого

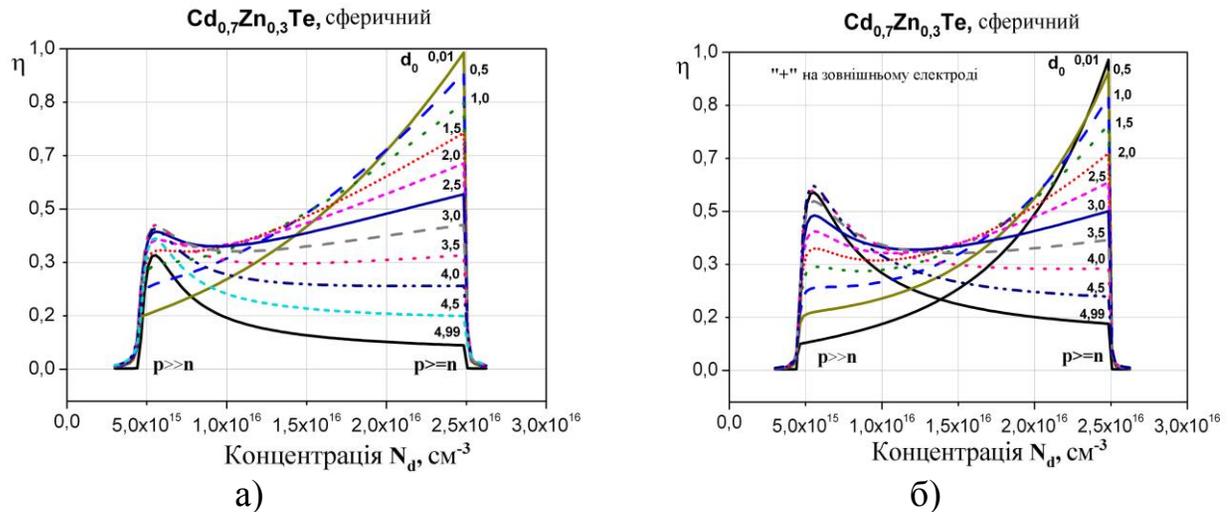


Рис. 4.11. Ефективності збору зарядів, дрейфуючих від різних точок d_0 в сферичному детекторі на основі $\text{Cd}_{0.7}\text{Zn}_{0.3}\text{Te}$; а) зовнішній електрод - колектор дірок, б) зовнішній електрод - колектор електронів.

донора і досягає максимальної величини при $p \geq n$. Найбільші величини η у всій високоомній області зміни концентрацій N_d спостерігається для плоского детектора. Для циліндричного детектора значення η нижчі, ніж у плоского, а для сферичного - найнижчі. Це пояснюється тим, що на всьому міжелектродному проміжку плоского детектора присутнє граничне електричне поле (1000 В / см). У циліндричному і сферичному детекторі поле E біля електроду більшого радіусу відповідно дорівнює 500 В/см і 250 В/см, досягаючи граничної величини тільки біля електроду меншого радіуса.

В області $p \geq n$ ефективність збору зарядів приблизно однакова для всіх детекторів. Складний характер залежностей $\eta(N_d)$ пояснюється наявністю в матриці глибоких центрів H_1^+ , H^2- и V_{Cd}^{2-} , V_{Te}^+ , зарядовий стан яких змінюється в міру зміни положення рівня Фермі, який, в свою чергу, визначається зміною концентрації легуючої домішки. На рис. 4.12 показана зміна рівня Фермі від зміни концентрації

циліндричній та сферичній конфігурації. Як видно з рис.4.9–4.11, найбільші η спостерігаються для зарядів, що рухаються з точок, розташованих в прикатодній області і особливо для концентрацій легуючих мілких донорів в області А. Це пояснюється тим, що основний внесок в такий сигнал дають електрони, що мають високу рухливість, а також підвищену величину часу життя при $p \geq n$. В циліндричних і сферичних детекторах велика частина матеріалу знаходиться поблизу зовнішнього електрода. Якщо в ролі катода служить зовнішній електрод, збільшується ефективність збору електронів. З представлених графічних результатів помітна сильна залежність η від складу детекторного матеріалу з яскраво вираженим максимумом (в області В при $p \gg n$), величина якого сильно залежить від концентрації діркових пасток. Для всіх розглянутих типів детекторів є можливість запропонувати шляхи збільшення η . У прикатодній області проміжку ($0 < d_0 < 2,5$) можна помістити матеріал з $p \geq n$, а в прианодній ($2,5 < d_0 < 5$) – з $p \gg n$.

Таким чином, ефективність збору вільних носіїв заряду помітно залежить від складу детекторного матеріалу і конфігурації електродів детектора. Встановлена конкретна роль присутніх в забороненій зоні рівнів в процесах захоплення вільних носіїв заряду під час їх дрейфу до електродів. З'ясовано вплив легуючих та фонових домішок на найважливіші властивості (ρ , $\rho \cdot \tau \cdot \mu$, η) детекторного матеріалу CdZnTe.

Матеріали розділу 4 опубліковані в роботах [А.5–А.8], що наведено в Додатку А, та представлені на конференціях [А.13-А.15, А.18].

4.3 Висновки до розділу 4

1. Недоліком об'ємних кристалів GaAs є малий час життя (10^{-9} сек) нерівноважних носіїв заряду в високоомній області, що визначає значні труднощі створення ефективних детекторів на базі кристалічного GaAs.

2. Ефективність збору вільних носіїв заряду помітно залежить від складу детекторного матеріалу і в деякій мірі - від конфігурації електродів детектора. За

сукупністю всіх параметрів найбільш прийнятними є плоскі детектори на основі $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$, а перспективними – $\text{Cd}_{0.8}\text{Zn}_{0.2}\text{Te}$ і $\text{Cd}_{0.7}\text{Zn}_{0.3}\text{Te}$.

3. Збір зарядів, дрейфуючих від рівновіддалених точок, більший в плоских детекторах. При використанні сферичної і циліндричної геометрії електродів неоднорідний вміст легуючих домішок в матеріалі активної зони впливає на ефективність збору зарядів, і для збільшення η можна використовувати детекторний матеріал, що складається з двох різних за домішковим складом: з $p \gg n$ в меншій частині міжелектродного зазору поблизу анода і з $p \geq n$ – в решті більшої частини зазору.

4. При однорідному розподілі домішок в кристалі їх сумарна концентрація може досягати $\sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$ без помітного зниження електронної рухливості μ_n . Зниження електронної рухливості в CdTe і CdZnTe може викликатися утворенням неоднорідностей розподілу домішок – їх скупчень.

5. Прийнятної детекторної якості високоомного $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ можна досягти за умови його збалансованого складу, коли концентрація таких шкідливих домішок як Ti , V , Ni , Sn , Ge не перевищує вмісту решти фонових домішок, структурних дефектів і їх комплексів.

РОЗДІЛ 5

ДЕТЕКТОРНІ ТА ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ CdTe і CdZnTe ПІД ВПЛИВОМ ІОНІЗУЮЧОГО ОПРОМІНЕННЯ

В даному розділі описана зміна електрофізичних та детекторних властивостей CdTe та Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te, оптимальний склад яких був встановлений в розділах 3, 4, під дією рентгенівського і гамма-випромінювання (роботи [A.9-A.11, A.16-A18], що наведено в Додатку А). Пояснені причини деградації електрофізичних і детекторних властивостей досліджуваних матеріалів [A.9, A.11, A.16-A.18] під дією рентгенівського опромінення. Вказані причини більш високої радіаційної стійкості CdZnTe у порівнянні з CdTe [A.10]. Продемонстрована зміна властивостей Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te під дією γ-опромінення малої дози [A.11, A.17].

Детектори γ- і рентгенівського випромінювання на основі CdTe і Cd_{1-x}Zn_xTe, як правило, працюють в агресивному радіаційному середовищі і в процесі експлуатації піддаються впливу рентгенівського і γ-випромінювання, в результаті якого в міжелектродному матеріалі утворюються нерівноважні носії заряду, а також радіаційні дефекти, які утворюють в забороненій зоні мілкі і глибокі рівні, що діють як пастки для нерівноважних носіїв заряду, дрейфуючих в електричному полі детектора. Електрично активні радіаційні дефекти і домішки чинять помітний вплив на умови компенсації, визначають питомий опір і процеси захоплення носіїв заряду. Таким чином ядерні випромінювання впливають на такі електричні і транспортні властивості як питомий опір ρ і час життя τ нерівноважних носіїв заряду. Основними вимогами до матеріалів, використовуваних в детекторах іонізуючих випромінювань, є високі ρ і τ . Для того, щоб τ зберігалось на рівні $\sim 10^6$ сек, необхідна низька концентрація N_i пасток. Іонізуючі випромінювання погіршують також енергетичну роздільну здатність детекторів, викликаючи зміщення спектральних піків, що може привести до повної втрати ефективності

збору зарядів η . З'ясування впливу дефектів на реєструвальні властивості детекторів, а також розуміння поведінки дефектів під впливом агресивної радіаційного середовища дуже важливо для поліпшення детекторних характеристик. Як уже зазначалося, значні труднощі представляє точне вимірювання параметрів i -тих дефектів: концентрації пасток N_i , їх перерізу захоплення σ_i , положення їх рівнів енергії в забороненій зоні E_i через високий питомий опір, який для $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ може досягати $\sim 10^{11}$ Ом·см при кімнатній температурі.

5.1 Опромінення рентгенівськими квантами

Для модельного дослідження електрофізичних та детекторних властивостей CdTe і CdZnTe використовувалися моделі та обчислення, описані в роботах [142, 146] та в розділі 2. Фізичні моделі, покладені в основу програми, є добре перевіреними моделями компенсації і розсіювання електронів в наближенні часу релаксації для обчислення питомого опору і електронної рухливості. Як вже зазначалось в розділі 2, з результатів експериментальних вимірювань коефіцієнтів міжзонної рекомбінації K_{zz} , виконаних авторами робіт [113, 114], випливає, що міжзонною рекомбінацією в широкозонних CdTe , CdZnTe можна знехтувати. З цієї причини для обчислення часу життя τ доцільно застосувати статистику Шоклі-Ріда-Холла, яка також добре зарекомендувала себе для непрямозонного Si . Крім того, попередні розрахунки показали, що у випадку високоомних і сильно скомпенсованих CdTe і CdZnTe концентрація глибоких іонізованих центрів рекомбінації N_i перевищує концентрацію вільних носіїв заряду на шість порядків, тому для розрахунку τ необхідно застосовувати вищевказану статистику електронно-діркової рекомбінації на глибоких рівнях. Для оцінки реєструвальних властивостей детектора застосовувалося моделювання ефективності збору зарядів η в вихідному та опроміненого матеріалі з використанням рівняння Хегта (4.2), в яке підставлялися обчислені значення електронної рухливості і часу життя

нерівноважних носіїв заряду. При розрахунках товщина плоскопаралельних детекторів на основі CdTe і CdZnTe приймалася рівною 5 мм, а напруженість електричного поля в міжелектродному зазорі - 1000 В/см.

В роботах [12, 18, 20] опубліковані експериментальні результати, які дозволили за допомогою попередніх розрахунків визначити властивості рівнів дефектів, що виникають в досліджуваних матеріалах. У таблиці 5.1 перераховані дефекти і відповідні параметри для вихідного CdTe:Cl і матеріалу, що піддавався рентгенівському опроміненню дозою 260 кГр [12]. Рівні A00, A0, A і A1 – мілкі акцептори і відносяться до так званих A-центрів [147, 148]. Легуюча домішка Cl утворює в забороненій зоні мілкий донорний рівень. Належність інших рівнів досі залишається темою для дискусій, хоча в роботі [20] була проведена ідентифікація більшості рівнів, присутніх в CdTe і CdZnTe. A1, Z - радіаційно-стимульовані рівні і з'являються тільки після опромінення, а концентрація дефекта J при цьому зростає майже на порядок. Як уже зазначалося в розділі 1, характеристики рівнів можуть залежати від умов експерименту, тому параметри дефектів, виміряні для різних зразків і у різних авторів, можуть помітно відрізнятися, а їх точне визначення в сильно компенсованих напівпровідниках вельми проблематичне. При перерізах захоплення рівнів J, H і H1 порядку $\sim 10^{-15} \text{см}^2$, має місце відповідність обчислених значень часу життя нерівноважних носіїв заряду відомій величині $\tau \sim 10^{-6}$ сек. Попереднє моделювання показало, що для виміряного в роботі [12] питомого опору вихідного матеріалу $\rho = 2 \cdot 10^9 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ потрібна концентрації хлору $8.25 \cdot 10^{12} \text{см}^{-3}$ за умови, що концентрації і енергії інших рівнів дорівнюють величинам, представленим в таблиці 5.1. В цьому випадку провідність високоомного CdTe:Cl є електронною, що суперечить експерименту [12] і технічним умовам експлуатації детекторів. Коли підвищити концентрацію мілких акцепторів A0 на порядок до величини $N(A0) = 2.8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ (див. табл. 5.1), то одержимо матеріал p-типу з $\rho \sim 10^6 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ і його наступне легування хлором до концентрації $1,38 \cdot 10^{13} \text{см}^{-3}$ для компенсації мілких акцепторів дає потрібне

значення питомого опору $\rho=2 \cdot 10^9$ Ом·см, при якому концентрація вільних дірок p_0 перевищує концентрацію вільних електронів n_0 на два порядки $\left(\frac{p_0}{n_0} \approx 440\right)$, що є хорошим показником для детекторного матеріалу. Таким чином характеристики рівнів в CdZnTe до і після опромінення рентгеном дозою 260 кГр. представлено в таблиці 5.2. Рівні енергії A00, D і J - радіаційно-стимульовані.

Таблиця 5.1

Параметри рівнів CdTe:Cl до і після рентгенівського опромінення [12, 18, 20]

Рівень*	Енергія рівня від валентної E_V або зони провідності E_C , eV	Концентрація рівнів, см^{-3}		Переріз захвату, см^{-2}	Тип рівня** і зарядовий стан
		Початковий	Опромінений дозою 260 кГр		
A00	$E_V + 0.06$	$2.6 \cdot 10^{12}$	$2.6 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{-16}$	A^-
A0	$E_V + 0.12$	$2.8 \cdot 10^{12}$ ($2.8 \cdot 10^{13}$)	$2.8 \cdot 10^{12}$	$2 \cdot 10^{-16}$	A^-
A	$E_V + 0.15$	$3 \cdot 10^{12}$	$3 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{-16}$	A^-
A1	$E_V + 0.16$	0	$1 \cdot 10^{12}$	$4 \cdot 10^{-17}$	A^-
X	$E_V + 0.36$	$3.5 \cdot 10^{11}$	$1 \cdot 10^{12}$	$2 \cdot 10^{-15}$	DA^{2-}
Z	$E_V + 0.47$	0	$3 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{-14}$	DA^-
J	$E_V + 0.53$	$4.5 \cdot 10^{11}$	$2.5 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{-15}$	DA^-
H	$E_V + 0.76$	$2.4 \cdot 10^{12}$	$6 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{-15}$	DA^-
H1	$E_C - 0.79$	$3 \cdot 10^{13}$	$5 \cdot 10^{13}$	$1.5 \cdot 10^{-15}$	DD^+
I	$E_C - 1.0$	10^{14}	$1.6 \cdot 10^{14}$	$1.3 \cdot 10^{-12}$	DD^+
Cl	$E_C - 0.014$	$1.38 \cdot 10^{13}$	$1.2 \cdot 10^{13}$	$1 \cdot 10^{-16}$	D^+

*Позначення рівнів прийняті в [12] і ряді інших робіт;

**A – акцептор, DA – глибокий акцептор, D – мілкий донор, DD – глибокий донор.

В таблиці 5.2 показані характеристики рівнів в $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ до і після рентгенівського опромінення дозою 260 кГр. Вони відповідають експериментально вимірним даним [12, 18, 20], з урахуванням яких обчислені значення електронної

рухливості ($1050 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{c})$) і часу життя нерівноважних носіїв заряду ($\sim 10^{-6}$ сек), а одержані величини τ_n , τ_p , μ_n відповідають відомим параметрам CdZnTe. В роботі [12] зазначено, що вимірний питомий опір $\text{Cd}_{0,9}\text{Zn}_{0,1}\text{Te}$ дорівнює $1\cdot 10^{11} \text{ Ом}\cdot\text{cm}$ при кімнатній температурі. Дефекти A00, D і H1 – радіаційно-стимульовані. Концентрація H1 в Cd після опромінення зростає на порядок, помітно впливаючи тим самим на детекторні властивості опроміненого матеріалу.

На рис. 5.1 показані обчислені залежності ефективності збору зарядів η від концентрації легуючого хлору для вихідного (неопроміненого) і опроміненого

Таблиця. 5.2

Рівні в $\text{Cd}_{0,9}\text{Zn}_{0,1}\text{Te}$ до і після рентгенівського опромінення [12, 18, 20]

Рівень	Енергія рівня від валентної E_V або зони провідності E_C , eB	Виміряна концентрація рівнів, cm^{-3}		Переріз захвату, cm^{-2}	Тип рівня** і зарядовий стан
		Початковий	Опромінений дозою 260 кГр		
A00	$E_V + 0,06$	0	$1,4\cdot 10^{12}$	$1\cdot 10^{-16}$	A^-
A1	$E_V + 0,16$	$1\cdot 10^{12}$	$1\cdot 10^{12}$	$4\cdot 10^{-17}$	A^-
K	$E_V + 0,26$	$2\cdot 10^{12}$	$2\cdot 10^{12}$	$5\cdot 10^{-16}$	DA^-
D	$E_V + 0,41$	0	$9\cdot 10^{10}$	$8\cdot 10^{-16}$	DA^-
J	$E_V + 0,53$	0	$1,4\cdot 10^{11}$	$1\cdot 10^{-15}$	DA^-
Y	$E_V + 0,64$	$1,3\cdot 10^{11}$	$1,3\cdot 10^{11}$	$1\cdot 10^{-14}$	DA^-
W	$E_V + 0,71$	$1,7\cdot 10^{11}$	$1,7\cdot 10^{11}$	$1,5\cdot 10^{-14}$	DA^-
H1	$E_C - 0,79$	$2\cdot 10^{12}$	$1,5\cdot 10^{13}$	$4\cdot 10^{-14}$	DD^+
I	$E_C - 1,0$	$1\cdot 10^{14}$	$1,6\cdot 10^{14}$	$9\cdot 10^{-11}$	DD^+
N_d	$1,66 (E_C - 0,014)$	$2,5\cdot 10^{12}$	$2,5\cdot 10^{12}$	$2\cdot 10^{-16}$	D^+

CdTe:Cl. Вертикальною штриховою лінією відзначений досліджуваний матеріал, склад якого був вимірний у роботі [12], де експериментально було показано, що після рентгенівського опромінення дозою 260 кГр детектор γ -випромінювання помітно втрачає свої реєструвальні властивості. Моделювання показує (рис. 5.1),

що для вимірюного складу дефектів ефективність збору зарядів зменшується приблизно на 10-15%. Деяке розходження з даними експерименту могло мати місце через неточності при визначенні концентрації рівнів у CdTe по причині різних умов компенсації, до і після опромінення, про що було вказано в розділі 1.

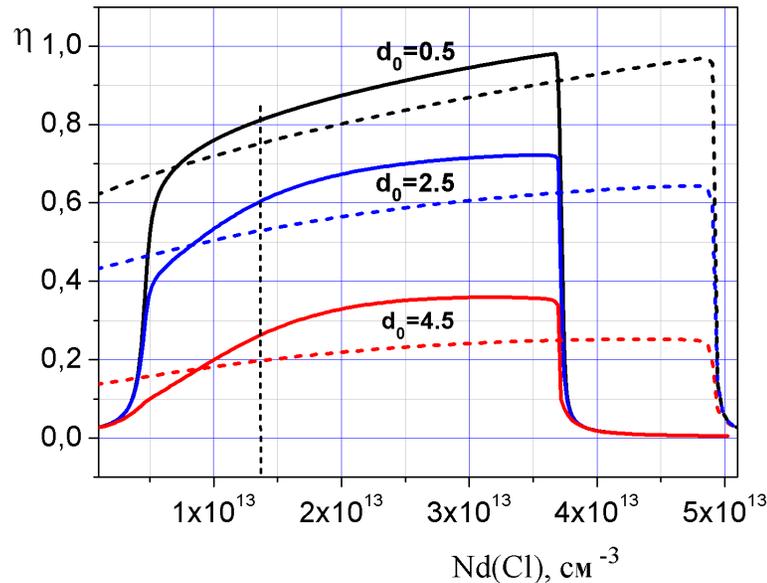


Рис. 5.1. Ефективність збору зарядів в залежності від концентрації хлору в неопроміненому (суцільні криві) і опроміненому (пунктирні) детекторі на основі CdTe:Cl для носіїв заряду, дрейфуючих від координат d_0 відносно катода.

Вертикальна пунктирна лінія позначає досліджуваний матеріал.

Як показано в [17] та деяких інших роботах, повна деградація детекторних характеристик настає після появи радіаційного дефекту Z . Оскільки втрата здатності до реєстрації випромінювань пов'язується з рівнем Z , представляло інтерес з'ясування впливу цього рівня на η . На рис. 5.2 показаний результат розрахунку ефективності збору зарядів в залежності від вмісту радіаційного дефекту Z для опроміненого детектора з концентраціями інших дефектів, зазначеними в таблиці 5.1. Видно, що повна втрата реєструвальних властивостей відбувається при концентраціях дефекту $Z \sim 4 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. Для цієї концентрації Z було проведено обчислення залежності η від концентрації легуючого хлору. Результат розрахунків представлений на рис. 5.3. З порівняння рисунків 5.1 і 5.3

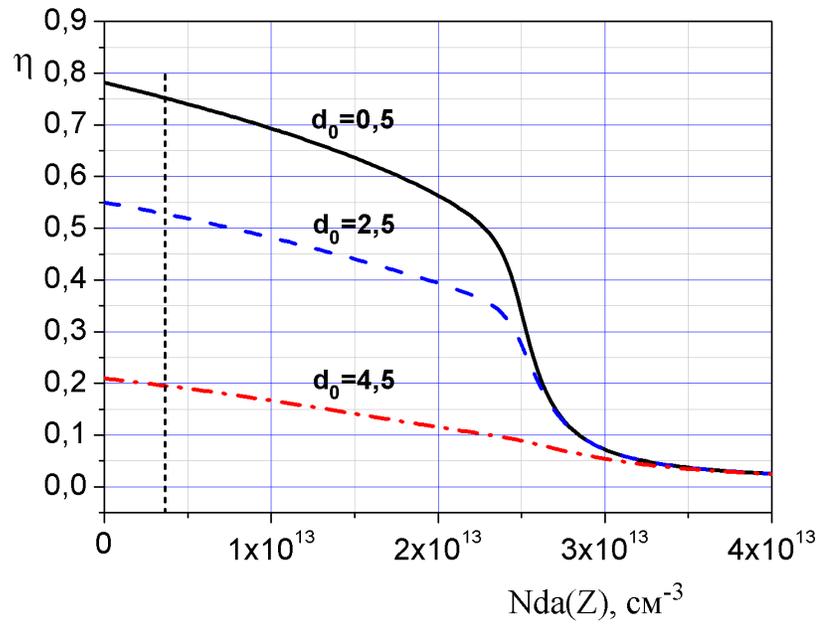


Рис. 5.2. Ефективність збору зарядів в опромінену CdTe:Cl детекторі в залежності від концентрації радіаційного дефекту Z для зарядів, дрейфуючих від різних координат d_0 відносно катода. Вертикальна штрихова лінія відзначає виміряну концентрацію Z в досліджуваному детекторі.

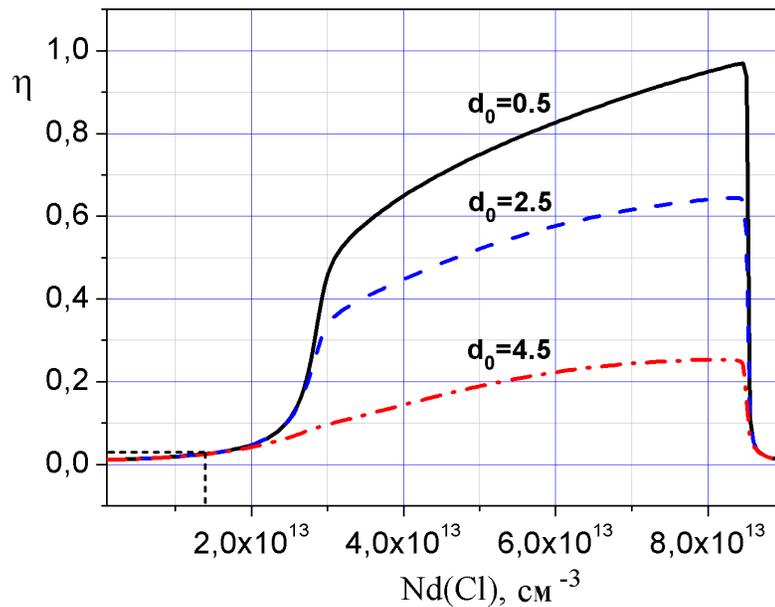


Рис. 5.3. Ефективність збору зарядів в залежності від вмісту легуючого хлору в детекторі CdTe: Cl після опромінення при концентрації радіаційного дефекту $Z = 4 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. Вертикальна і горизонтальна пунктирні лінії відображають концентрацію Cl і η в досліджуваному детекторі.

видно, що в досліджуваному матеріалі ефективність збору зарядів зменшилася, щонайменше, на порядок. Якщо при розрахунках замість дефекту Z використати параметри радіаційного дефекту A1, то отримуються приблизно такі ж залежності, що і на рис. 5.3. Виходячи з цього, а також з порівняння рисунків 5.1–5.3 можна зробити висновок, що деградація детекторних характеристик відображається зсувом залежності η від концентрації хлору в сторону більших концентрацій Cl. А це означає, що деградація при опроміненні супроводжується утворенням іонізованих радіаційних акцепторів, кількість яких переважає вміст іонізованих радіаційних донорів.

На рис.5.4 показані залежності питомого опору CdTe:Cl від концентрації хлору для первинного неопроміненого матеріалу (крива 1), після рентгенівського опромінення з вимірними параметрами (крива 2) і для опроміненого матеріалу, який втрачає свої детекторні властивості (крива 3) згідно з обчисленнями при $N(Z) = 4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$. В останньому випадку питомий опір досліджуваного зразка зменшується на три порядки, що призводить до збільшення темного струму витоку i , таким чином, додатково погіршує його детекторні властивості, в той час як для експериментально вимірної концентрації $N(Z) = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ в матеріалі, опроміненому дозою 260 кГр, обчислений питомий опір навіть дещо збільшується (рис. 5.4, криві 1, 2). Для $N(Z) = 4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ обчислене значення часу життя нерівноважних носіїв заряду в досліджуваному опроміненому зразку зменшується для електронів приблизно на два порядки ($\tau_e \approx 2 \cdot 10^{-8}$ сек), а для дірок – на три порядки ($\tau_p \sim 10^{-9}$ сек). При цьому величина електронної рухливості після опромінення практично не змінюється за умови рівномірного розподілу радіаційних дефектів в кристалі.

Рівень Фермі для досліджуваного опроміненого матеріалу знаходиться біля значення $E_V + 0.52 \text{ eV}$, що близько до рівня радіаційного дефекту Z, а також дефекту J, концентрація якого значно зросла після опромінення (рис. 5.5). Таким

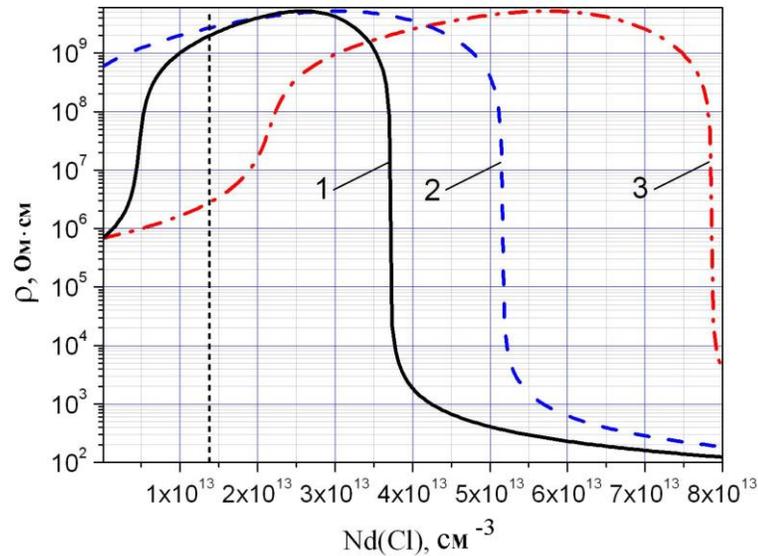


Рис. 5.4. Залежність питомого опору CdTe:Cl від концентрації легуючого хлору. 1 - неопромінений матеріал; 2 - після опромінення дозою 260 кГр; 3 - для опроміненого матеріалу з концентрацією радіаційного дефекту $N(Z)=4 \cdot 10^{13} \text{см}^{-3}$, при якій втрачаються детекторні властивості.

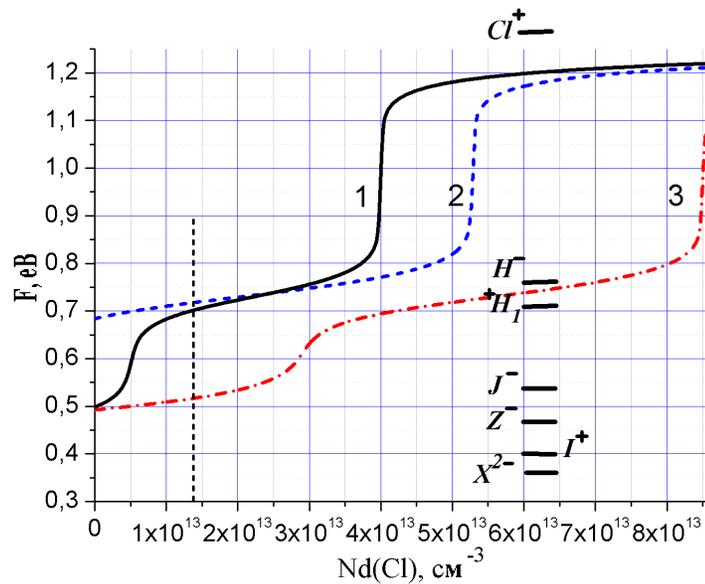


Рис. 5.5. Поведінка рівня Фермі F в CdTe:Cl в залежності від концентрації легуючої домішки; 1 - неопромінений матеріал; 2 - опромінений CdTe:Cl з вимірними параметрами рівнів; 3 - опромінений CdTe:Cl з концентрацією рівня Z $4 \cdot 10^{13} \text{см}^{-3}$, при якій детектор втрачає реєструвальні властивості.

чином, в опроміненому детекторі на основі CdTe:Cl основну роль в погіршенні чи повні деградації реєструвальних властивостей відіграє захоплення вільних носіїв заряду на глибоких радіаційних рівнях Z і J, а також значне зменшення питомого електроопору.

Експеримент, проведений в роботі [12] показав, що детектор на основі Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te після рентгенівського опромінення дозою 260 кГр практично не втрачає своїх реєструвальних характеристик, на відміну від CdTe. Причини такої більш високої радіаційної стійкості залишалися не з'ясованими. В опроміненому Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te з'являються дефекти A00 і D (табл. 5.2), які не можуть безпосередньо впливати на дрейф нерівноважних носіїв заряду в детекторі. Рівень A00 занадто мілкий і його площа перерізу захоплення дуже мала, тому він практично не захоплює дрейфуючі нерівноважні носії заряду. Що стосується рівня D, то, як показало моделювання, сукупність таких параметрів як концентрація ($9 \cdot 10^{10} \text{см}^{-3}$), положення його енергії в забороненій зоні ($E_V + 0.41$) і площа перерізу захоплення ($8 \cdot 10^{-16} \text{см}^{-2}$) також не дозволяють йому мати значний вплив на дрейф вільних електронів і дірок, а значить на ефективність збору зарядів. Рівні J і H1 можна розглядати як основний фактор можливої деградації спектроскопічних властивостей детектора Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te за умови значного збільшення дози опромінення понад 260 кГр. Глибини залягання і перерізу захоплення цих рівнів досить великі, їх концентрації після опромінення зростають майже на порядок, досягаючи для H1 величини ($1,5 \cdot 10^{13} \text{см}^{-3}$) (див. табл. 5.2). Виходячи з вищесказаного, було проведено дослідження впливу радіаційно-стимульованих рівнів J і H1 на детекторні властивості Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te.

На рис. 5.6 показані залежності ефективності збору зарядів детектора при різних концентраціях дефектів J і H1 від координати початку дрейфу до електродів вільних носіїв заряду. Рис. 5.6 (а) демонструє вплив дефекту J на збір зарядів. Для

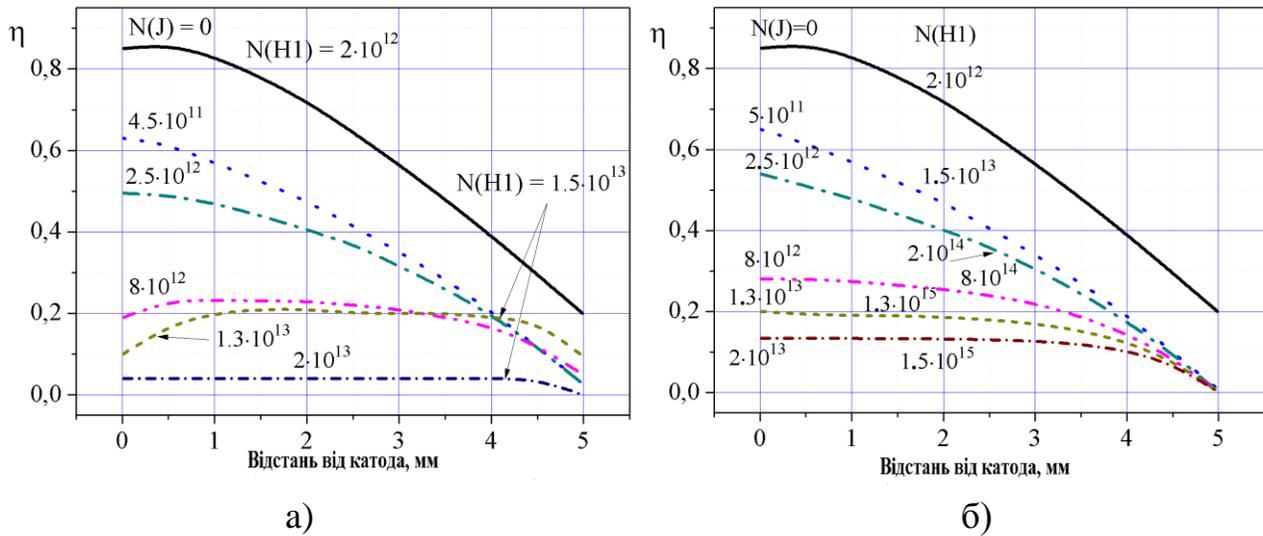


Рис. 5.6. Ефективність збору зарядів для вільних носіїв, дрейфуючих від різних точок d_0 міжелектродного проміжку детектора на основі $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$. а) при зростаючих концентраціях J і при вимірних концентраціях $N(H1)$: початковою і після опромінення; б) – при зростаючих концентраціях J і $N(H1)$ в процесі опромінення.

верхньої кривої концентрація дефекту $N(H1)$ дорівнює його початковій концентрації в неопромінену зразку $2 \cdot 10^{12} \text{см}^{-3}$ і $N(J)=0$. Для решти залежностей концентрація $N(H1)=1.5 \cdot 10^{13} \text{см}^{-3}$ відповідає величині, виміряній після опромінення. Для порівняння на рис.5.6 (б) наведено залежності практично для тих же J , але при різних концентраціях $N(H1)$, які в процесі опромінення збільшуються аж до $1.5 \cdot 10^{15} \text{см}^{-3}$. Можна бачити, що для вимірної концентрації $N(H1)$ повна деградація детекторних властивостей відбувається при $N(J) = 2 \cdot 10^{13} \text{см}^{-3}$, хоча для цієї ж концентрації J при збільшеному на два порядки вмісті $N(H1)$ повної деградації немає. Порівнюючи рис. 5.6 (а) і рис. 5.6 (б), можна зробити висновок, що вирішальний внесок у погіршення реєструвальних властивостей детектора вносить рівень J . Це також наочно підтверджується рис. 5.7, з якого ясно видно, що присутність $N(H1)$ частково нейтралізує негативний вплив рівня J на властивості детектора. Це одна з причин більш високої радіаційної стійкості детектора на основі $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ у порівнянні з детектором на основі CdTe:Cl .

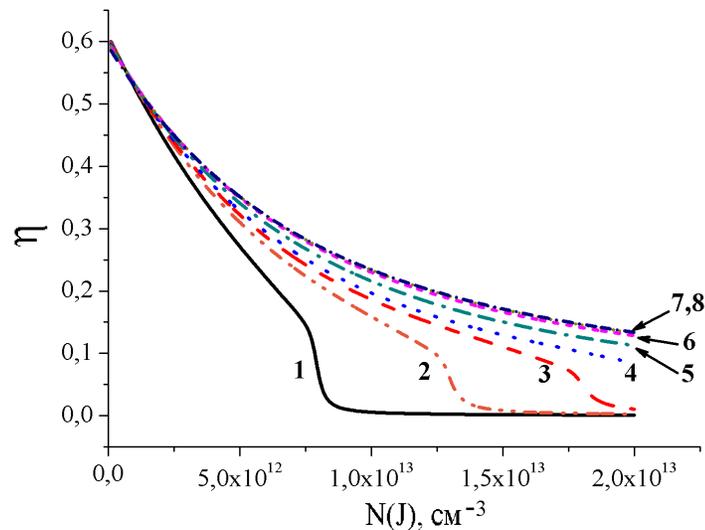


Рис. 5.7. Ефективність збору зарядів в опромінену $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ в залежності від вмісту радіаційного дефекту J при різних концентраціях $N1$, cm^{-3} : 1 – $1 \cdot 10^{13}$; 2 – $1.5 \cdot 10^{13}$; 3 – $2 \cdot 10^{13}$; 4 – $2.5 \cdot 10^{13}$; 5 – $5 \cdot 10^{13}$; 6 – $2 \cdot 10^{14}$; 7 – $8 \cdot 10^{14}$; 8 – $3 \cdot 10^{15}$.

Для пояснення цього ефекту можна розглянути вплив рівнів J і $N1$ на поведінку рівня Фермі F . На рис. 5.8 показані залежності положення рівня Фермі в забороненій зоні від концентрації J при різному вмісті дефекту $N1$, а також положення рівнів J , Y , W , $N1$. З рис. 5.8 випливає, що збільшення концентрації $N1$ підвищує положення рівня Фермі, в той час як збільшення вмісту дефекту J призводить до зниження F до значень енергії, які близькі до рівня J . Порівнюючи рисунки 5.6 і 5.7, можна зробити висновок про те, що деградація реєструвальних властивостей детектора на основі $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ може відбуватися шляхом захоплення вільних носіїв заряду на рівні J . Збільшення вмісту $N1$ відтягує рівень Фермі в середину і верхню частину забороненої зони, послаблюючи тим самим процеси захоплення вільних електронів і дірок на рівні J . Моделювання, проведене з урахуванням концентрацій радіаційних дефектів з таблиць 5.1 і 5.2, показало, що радіаційно-стимульовані дефекти $A00$ і D в $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ помітно менше впливають на ρ і η ніж радіаційні дефекти $A1$ і Z в CdTe . Причиною цього явища є те, що при опроміненні зростання концентрації $A1$ і Z в CdTe:Cl помітно більше, ніж збільшення вмісту $A00$ і D в $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$. Це також служить причиною більш

високої радіаційної стійкості опромінених детекторів на основі CdZnTe, так як рівні дефектів A00 і D беруть участь в процесах компенсації і мала їх концентрація слабо впливає на положення рівня Фермі і питомий опір цього матеріалу.

Легко зрозуміти, що при опроміненні деградація властивостей досліджуваних матеріалів, супроводжувана зміщенням рівня Фермі ближче до валентної зони, пов'язана зі збільшенням концентрацій акцепторних рівнів дворазово заряджених вакансій Cd^{2-} , Zn^{2-} , а також їх комплексів з фоновими і легуючими домішками. Також відбувається процес самокомпенсації при опроміненні, який полягає в збільшенні вмісту глибокого донора, який відтягує рівень Фермі в бік зони провідності. У ролі такого глибокого донора можуть виступати вакансії телуру V_{Te} , телур у міжвузлі Te_I , або його комплекси. Очевидно, що ці два конкуруючі процеси впливають не тільки на захоплення нерівноважних носіїв заряду, але й на питомий опір CdTe і CdZnTe.

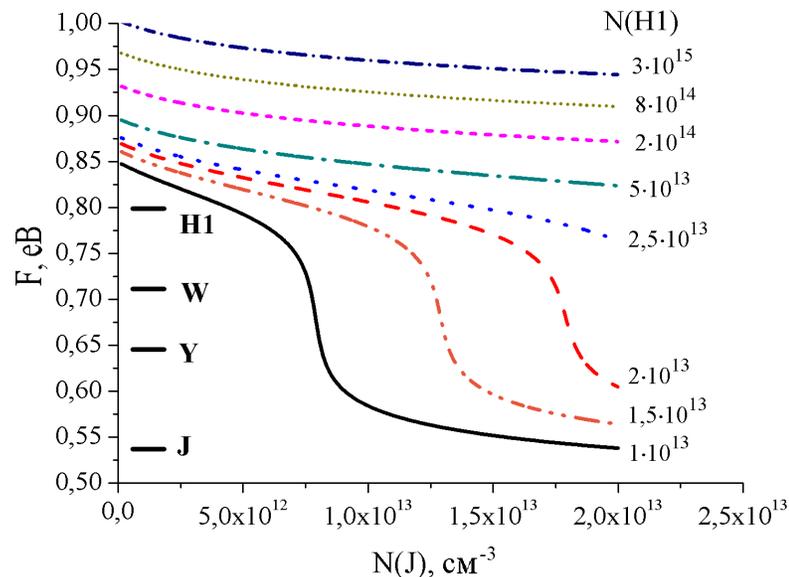


Рис. 5.8. Поведінка рівня Фермі в забороненій зоні $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ в залежності від вмісту дефектів J і H1.

Рис.5.9 демонструє поведінку питомого опору ρ в залежності від некомпенсованої частини мілких донорів $N_d - N_a$ при збільшенні вмісту радіаційних дефектів J і H1 і пропорційному збільшенні концентрацій радіаційних

дефектів A00 і D в процесі опромінення. З рисунка видно, що після опромінення дозою 260 кГр (крива 2) питомий опір досліджуваного зразка трохи зменшується в порівнянні з неопроміненим станом (крива 1). Подальше збільшення концентрації радіаційних дефектів J і H1 при опроміненні призводить до поступового зменшення ρ приблизно в два рази (криві 3-6). Таким чином рівні радіаційно-стимульованих дефектів A00 і D не впливають на дрейф і захоплення нерівноважних носіїв заряду в міжелектродному просторі, проте пропорційне збільшення їх концентрації в процесі опромінення стабілізує питомий опір. Розглянемо рис. 5.10, на якому зображена залежність питомого опору від концентрації дефекту H1 при фіксованих вимірних концентраціях A00, D.

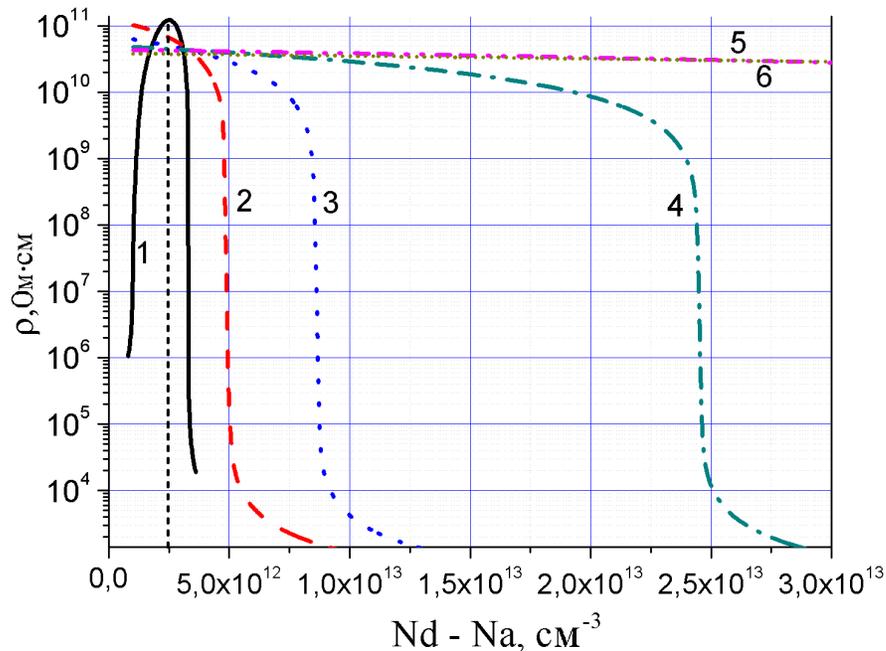


Рис. 5.9. Залежності ρ $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ від некомпенсованої частини мілких донорів для зростаючих концентрацій радіаційно-стимульованих дефектів J, H1, A00, D, cm^{-3} .

1 – неопромінений ($N(J)=0$, $N(H1)=2 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-3}$); **2** – $N(J)=1,5 \cdot 10^{11}$, $N(H1)=1,5 \cdot 10^{13}$, $N(A00)=1,4 \cdot 10^{12}$, $N(D)=9 \cdot 10^{10}$; **3** – $N(J)=5 \cdot 10^{11}$, $N(H1)=5 \cdot 10^{13}$, $N(A00)=4,5 \cdot 10^{12}$, $N(D)=3 \cdot 10^{11}$; **4** – $N(J)=2 \cdot 10^{12}$, $N(H1)=2 \cdot 10^{14}$, $N(A00)=1,8 \cdot 10^{13}$, $N(D)=1,2 \cdot 10^{12}$; **5** – $N(J)=8 \cdot 10^{12}$, $N(H1)=8 \cdot 10^{14}$, $N(A00)=7,0 \cdot 10^{13}$, $N(D)=4,8 \cdot 10^{12}$; **6** – $N(J)=1,3 \cdot 10^{13}$, $N(H1)=1,3 \cdot 10^{15}$; $N(A00)=1,0 \cdot 10^{14}$, $N(D)=7,2 \cdot 10^{12}$.

Збільшення вмісту Н1 впливає на рівень Фермі і тому помітно підвищує питомий опір CdZnTe. При $N(J)=2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$, коли детектор значно втрачає реєструвальні властивості, підвищення вмісту дефекту Н1 від $1 \cdot 10^{13}$ до $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ збільшує питомий опір на п'ять порядків (рис. 5.10, криві 1 і 6). У цьому також проявляється позитивний вплив рівня Н1 на радіаційну стійкість детектора на CdZnTe.

Представлені в даній роботі залежності, які були отримані на основі прийнятих фізичних моделей, дозволяють в основному якісно описати вплив радіаційно-стимульованих рівнів на властивості детекторів на основі CdTe і CdZnTe. Кількісні оцінки носять приблизний характер через значні труднощі точного визначення характеристик глибоких рівнів в сильно компенсованих напівпровідниках.

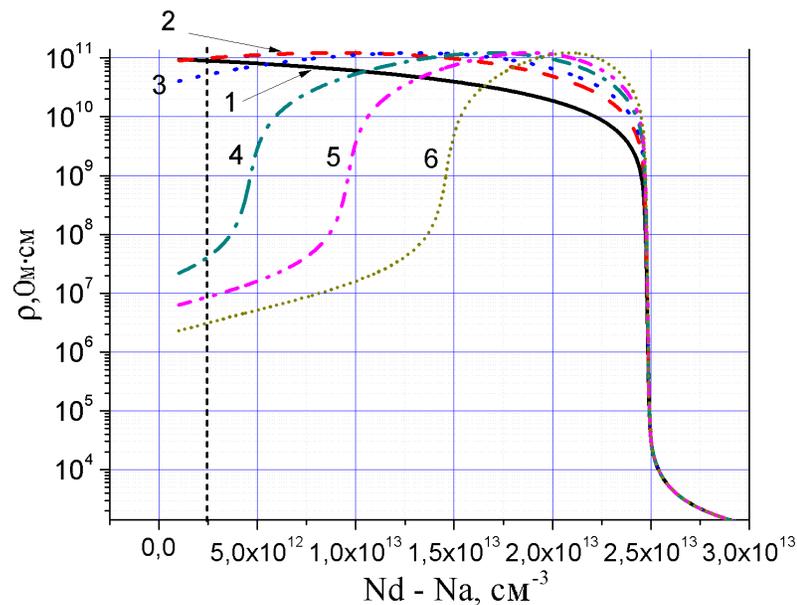


Рис. 5.10. Питомий опір $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ від Nd-Na при фіксованій концентрації радіаційних дефектів $N(J)=2 \cdot 10^{13}$, $N(A00)=1.4 \cdot 10^{12}$, $N(D)=9 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ і різних концентраціях дефекту Н1; **1** – $N(H1)=1.0 \cdot 10^{14}$; **2** – $N(H1)=4.0 \cdot 10^{13}$; **3** – $N(H1)=3.0 \cdot 10^{13}$; **4** – $N(H1)=2.0 \cdot 10^{13}$; **5** – $N(H1)=1.50 \cdot 10^{13}$; **6** – $N(H1)=1.0 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$.

5.2 Опромінення гамма-квантами

Методом комп'ютерного моделювання було вивчено зміна питомої опору та ефективності збору зарядів детекторів іонізуючих випромінювань на основі $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$, що піддавалися γ -опроміненню малої дози. В якості ввідних служили дані, отримані в [19], де використовувалися спектри термостимульованої струмової спектроскопії (TSC), оброблені методом SIMPA [27, 28].

У таблиці 5.3 представлені дані про величини концентрації N_i , положення рівнів енергії E_i і перерізу захоплення σ_i радіаційних і фонових дефектів $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te:Al}$, наведені в [19]. Рівні енергій акцепторів відлічуються від валентної зони, а донорів - від зони провідності. Дослідження в роботі [19] проводились на неопромінених зразках, після γ -опромінення дозою 2,7 кГр і через місяць витримки після опромінення. Методом TSC були виміряні характеристики дев'яти дефектів. Десятий дефект, який виступає в ролі глибокого донора, був зареєстрований шляхом запису спектра темного струму без фотозбудження. Таким методом можна вимірювати положення рівня енергії, але не його концентрацію і переріз захоплення, тому для рівня енергії глибокого донора E_{dd} було встановлено переріз захоплення $5 \cdot 10^{-18} \text{ см}^2$, що приблизно відповідає перерізу захоплення, які мають сусідні рівні. Це дало відоме значення часу життя нерівноважних носіїв за-ряду $\sim 10^{-6}$ сек. Концентрація N_{dd} рівня глибокого донора E_{dd} варіювалася в широких межах, з фіксацією моменту переходу від низькомного до напівізолюючого стану, в якому працюють сучасні детектори.

У рівняння електронейтральності (2.2) були включені концентрації і рівні енергій 10 дефектів з Таблиці 5.3, а також легуючого алюмінію, який є мілким донором. Потім розраховувалася рухливість електронів на основі класичної теорії розсіювання з урахуванням традиційних механізмів розсіювання на домішках і фононах. Питомий опір визначалося за формулою (2.10). Рухливість дірок μ_p приймалася рівною $70 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$. Детектор припускався плоскопаралельним з відстанню 5 мм між електродами, і напруженістю електричного поля 1000 В/см .

Час життя носіїв заряду, що дрейфують в міжелектродному просторі детектора, визначався відповідно до теорії Шоклі-Ріда-Холла. Отримані значення рухливості, часу життя і параметри детектора підставлялися в формулу Хегта (4.2) і таким чином визначалася ефективність збору зарядів.

З таблиці 5.3 видно, що в ході опромінення і подальшої витримки протягом 1 місяця змінюються всі параметри (N_i , E_i , σ_i) всіх зареєстрованих дефектів. Таку зміну не можна пояснити навіть для стадії γ -опромінення, яке вибиває атоми з

Таблиця 5.3

Параметри рівнів в $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te:Al$, виміряні методом TSC для неопроміненого зразка, після опромінення і через 1 місяць витримки після опромінення [19].

Рівень	Енергія і-того рівня E_i , eV			Концентрація N_i , cm^{-3}			Переріз захвату σ_i , cm^2		
	неопромінений	після опромінення	через 1 місяць витримки	неопромінені	після опромінення	через 1 місяць витримки	неопромінені	після опромінення	через 1 місяць витримки
$E_1^- (Ag, Au)$	0.047	–	0.051	$3 \cdot 10^{14}$	–	$6.6 \cdot 10^{14}$	$1.16 \cdot 10^{-14}$	–	$9.44 \cdot 10^{-14}$
$E_2^- (V_{Cd})$	0.094	0.102	0.099	$3.6 \cdot 10^{14}$	$3.9 \cdot 10^{14}$	$4.0 \cdot 10^{14}$	$3.63 \cdot 10^{-19}$	$3.72 \cdot 10^{-19}$	$3.75 \cdot 10^{-19}$
$E_3^- (A)$	0.127	0.129	0.128	$1.5 \cdot 10^{14}$	$1.2 \cdot 10^{14}$	$1.8 \cdot 10^{14}$	$1.08 \cdot 10^{-18}$	$8.8 \cdot 10^{-19}$	$9.77 \cdot 10^{-19}$
$E_4^- (Te_{Cd})$	0.185	–	–	$8.1 \cdot 10^{13}$	–	–	$4,06 \cdot 10^{-18}$	–	–
$E_5^- (C)$	0.236	0.232	0,234	$4.2 \cdot 10^{13}$	$3.1 \cdot 10^{14}$	$3.3 \cdot 10^{14}$	$2.18 \cdot 10^{-18}$	$1.00 \cdot 10^{-18}$	$9.56 \cdot 10^{-19}$
$E_6^- (Cu)$	0.291	0.309	0.312	$4.1 \cdot 10^{14}$	$5.5 \cdot 10^{14}$	$5.8 \cdot 10^{14}$	$1.71 \cdot 10^{-18}$	$1.91 \cdot 10^{-18}$	$1.82 \cdot 10^{-18}$
$E_7^{2+} (Te_{Cd})$	0.371	0.368	0.372	$4.6 \cdot 10^{14}$	$3.5 \cdot 10^{14}$	$3.8 \cdot 10^{14}$	$6,66 \cdot 10^{-18}$	$7,77 \cdot 10^{-18}$	$7,61 \cdot 10^{-18}$
$E_9^- (V_{Cd})$	0.507	0.488	0.487	$7.2 \cdot 10^{14}$	$9.5 \cdot 10^{14}$	$8.8 \cdot 10^{14}$	$2.83 \cdot 10^{-18}$	$2.74 \cdot 10^{-18}$	$2.99 \cdot 10^{-18}$
$E_9^- (V_{Zn})$	0.620	0.621	0.624	$1.1 \cdot 10^{14}$	$2.0 \cdot 10^{14}$	$2.7 \cdot 10^{14}$	$6.8 \cdot 10^{-17}$	$9.16 \cdot 10^{-18}$	$9.68 \cdot 10^{-18}$
E_{dd}^+	0.554	0.792	0.782	$1 \cdot 10^{14} - 4.9 \cdot 10^{15}$			$5.0 \cdot 10^{-18}$		

решітки зі своїх вузлів і збільшує концентрацію радіаційних дефектів, однак не може змінювати концентрацію (а також σ_i і E_i) всіх зареєстрованих дефектів. Тим більш дивно виглядає зміна N_i , σ_i і E_i всіх дефектів в процесі пострадіаційної витримки. Проте можна припустити, що в ході γ -опромінення і подальшої пострадіаційної витримки в результаті різних дифузійних і релаксаційних процесів змінюється зарядовий стан локальних центрів і комплексів дефектів. Це, в свою чергу, змінює співвідношення між концентраціями заряджених центрів і вільних носіїв заряду, тобто ступінь компенсації напівпровідника. З іншого боку, в роботі [46] на прикладі кремнію було експериментально показано, що виміряні величини концентрацій електрично активних атомів легуючої домішки залежать від типу і концентрації вихідних домішок. Автор також зробив висновок про те, що в залежності від ступеня компенсації матеріалу і умов експерименту, одні і ті ж домішкові атоми з глибокими енергетичними рівнями можуть створити в забороненій зоні напівпровідника різні величини цих рівнів, які відповідають певним станам в кристалічній решітці. Висновки роботи [46] можна застосувати і для випадку CdZnTe, що розглядається в дисертації. Тоді отримують пояснення виміряні в [19] зміни концентрації, перерізу захоплення і положення рівнів енергії дефектів решітки в Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te:Al. Таким чином, результати [19] можна пояснити на основі висновків роботи [46]: в разі сильно компенсованого CdZnTe порушуються умови локальної електронейтральності в решітці, змінюється потенціал навколо дефекту і дефектна структура кристалічної решітки. В цьому випадку система знаходиться в нерівноважному стані і вплив температури, тиску, а також електричного поля атомів іонного остову змінює електронну структуру дефектів і умови взаємодії дефектів і вільних носіїв заряду. З цієї причини глибокі рівні дефектів решітки в цих умовах не мають фіксованих станів, як в некомпенсованому напівпровіднику, а постійно перебудовуються під впливом зовнішніх факторів. При цьому кожному квазірівноважному стану решітки відповідають тільки певні стани дефектів і домішок (положення їх в решітці,

енергетичні рівні). Так що в залежності від ступеня компенсації матеріалу і умов експерименту, стану дефектів, домішкових атомів і відповідні їм енергетичні рівні не є фіксованими, а можуть мати різні значення [46].

Дані, представлені, в таблиці 5.3, отримані шляхом обробки TSC-спектрів, записаних в температурному інтервалі 25–310 К, де мілким рівнями відповідали низькотемпературні піки, а глибоким - піки при підвищених температурах аж до кімнатних. Однак різним температурам відповідають різні ступені компенсації і, отже, різні квазірівноважні стани. Детектори γ -випромінювань на основі CdZnTe працюють при кімнатній температурі, тобто в умовах, відмінних від тих, при яких вимірювалися величини N_i , E_i і σ_i для більшості рівнів. Таким чином, метод TSC та інші сучасні методики не дозволяють отримати точні величини N_i , E_i , σ_i глибоких рівнів при робочих температурах детектора на основі сильно компенсованого CdZnTe. У зв'язку з цим має сенс проводити дослідження електрофізичних та детекторних властивостей $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}:\text{Al}$ в широкому інтервалі концентрацій і енергій глибоких рівнів дефектів, особливо тих, які помітно впливають на захоплення носіїв заряду в детекторі.

Легування алюмінієм - традиційне внесення мілкового донора для компенсації мілких акцепторів і часткової компенсації глибоких акцепторів, в ролі яких виступають дворазово заряджені вакансії кадмію V_{Cd}^{2-} (рівень E_8) і однократно заряджені вакансії цинку, V_{Zn}^- (рівень E_9 , див. табл. 5.3). V_{Zn}^- активно беруть участь в процесах захоплення носіїв заряду, дрейфуючих у міжелектродному просторі, тому сильно впливають на реєструвальні властивості детектора. Після компенсації мілких акцепторів і вакансій кадмію V_{Cd}^{2-} , концентрація вільних носіїв заряду визначається співвідношенням між концентраціями глибокого акцептора V_{Zn}^- і глибокого донора, позначеного в таблиці 5.3 як E_{ad}^+ , який і забезпечує високоомні властивості матеріалу $\rho \sim 10^{10}$ Ом·см. Попередні розрахунки показали, що для розглянутого випадку оптимальна концентрація алюмінію $N(\text{Al}) = 8 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Було

проведено дослідження залежності питомого опору ρ вихідного зразка від зміни концентрації N_{dd} і енергії E_{dd}^+ глибокого донора. На рис. 5.11 показані тривимірні залежності $\lg(\rho)$ неопроміненого (а, б) і опроміненого (в, г) $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te:Al$ для різних концентрацій вакансій цинку. E_{dd} відлічується від максимуму валентної зони.

З рис. 5.11 видно, що оптимальний для роботи детектора питомий опір $\rho > 10^{10}$ Ом·см має місце в області енергій глибокого донора $E_{dd} \approx 0.8$ еВ, що відлічується від валентної зони. Загальноприйнята ширина забороненої зони $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te$ при кімнатній температурі дорівнює 1,57 еВ. Відносно низькоомне плато ($\sim 10^7$ Ом·см) перед високоомним піком відповідає неповній компенсації дворазово заряджених вакансій кадмію. Видно, що зі збільшенням концентрації V_{Zn} зменшується високоомна область, придатна для роботи детектора. Крім того, зі збільшенням концентрації V_{Zn} змінюється рівень енергії глибокого донора, який необхідний для досягнення напівізолюючих стану $\rho > 10^{10}$ Ом·см, тобто донор повинен ставати більш глибоким. Отже, в залежності від конкретного складу матеріалу існує деяка критична концентрація вакансій цинку, перевищення якої викликає неприйнятне для детектора зниження ρ на два-три порядки.

Залежності рис. 5.11 розраховані для однакових діапазонів концентрацій і рівнів енергії E_{dd} , тому їх зручно порівнювати. Порівняння рис. 5.11 а) і в), а також рис. 5.1 б) і г) дозволяє зробити висновок, що γ -опромінення малої дози, якому піддається детектор в процесі експлуатації, відразу ж призводить до зменшення області високоомного стану в розглянутому фіксованому діапазоні зміни N_{dd} , або просто зміщення цієї області в сторону більших концентрацій N_{dd} . Це означає початок процесу деградації ρ матеріалу детектора на його основі. Автори роботи [19] зафіксували збільшення ρ після опромінення. Збільшення або зменшення ρ визначається дійсними величинами концентрацій і положеннями рівнів енергії дефектів, точно виміряти які поки що неможливо для сильно компенсованого матеріалу.

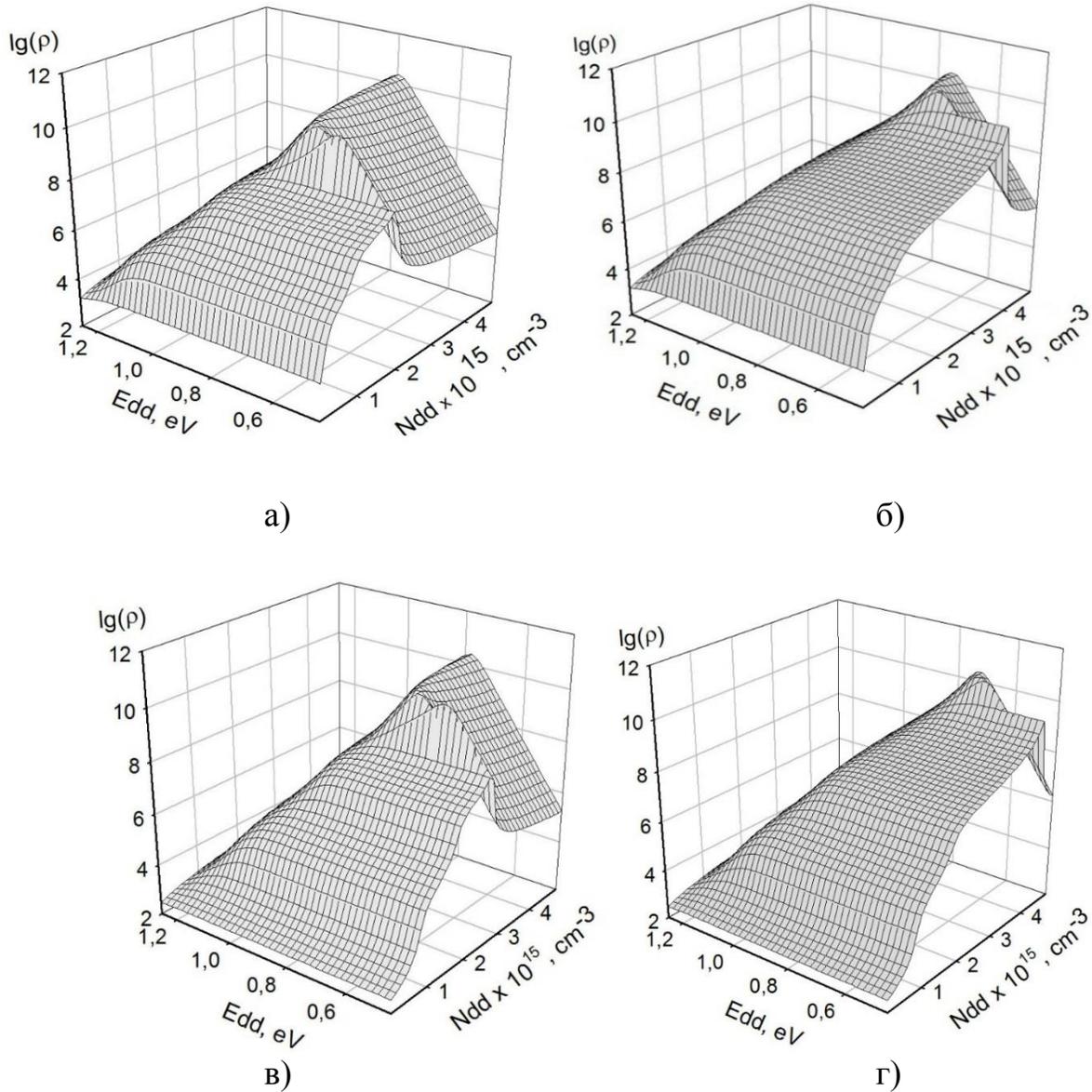


Рис. 5.11. $\lg(\rho)$ $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}:\text{Al}$ від концентрації і енергії глибокого донора. Неопромінений для концентрацій V_{Zn} : $1.1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (а) і $2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (б); опромінений γ -квантами дозою 2,7 кГр для концентрацій вакансії цинку $2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (в) і $2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (г). Параметри решти дефектів вказані в таблиці 5.3.

Для більш точного порівняння на рис 5.12 представлені залежності питомого опору $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}:\text{Al}$ від концентрації легуючого алюмінію до і після опромінення для різних положень рівня енергії глибокого донора E_{dd} . На рис. 5.12 (а) крива 1 розрахована для вимірної величини $E_{\text{dd}} = 0,554 \text{ eV}$ неопроміненого матеріалу, а

на рис. 5.12 (б) крива 6 - для вимірної величини $E_{dd} = 0,792$ еВ після опромінення дозою 2,7 кГр. Дефектний склад обох матеріалів показаний в таблиці 5.3.

З рис. 5.12 відразу видно відповідність обчислених кривих з результатами роботи [19], аж до вимірної після опромінення величини $E_{dd} = 0.792$ еВ (крива 6). А саме: при однакових концентраціях легування алюмінієм, тобто для однакових зразків, після γ -опромінення малими дозами питомий опір матеріалу збільшується для одних і тих же величин E_{dd} . Цей висновок узгоджується також з результатами роботи [16], де для $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te$ було зареєстровано збільшення ρ на початковому етапі γ -опромінення. Крім того, з порівняння рис. 5.12 (а) і рис. 5.12 (б) можна зробити висновок, що в процесі опромінення відбувається зсув залежності ρ від

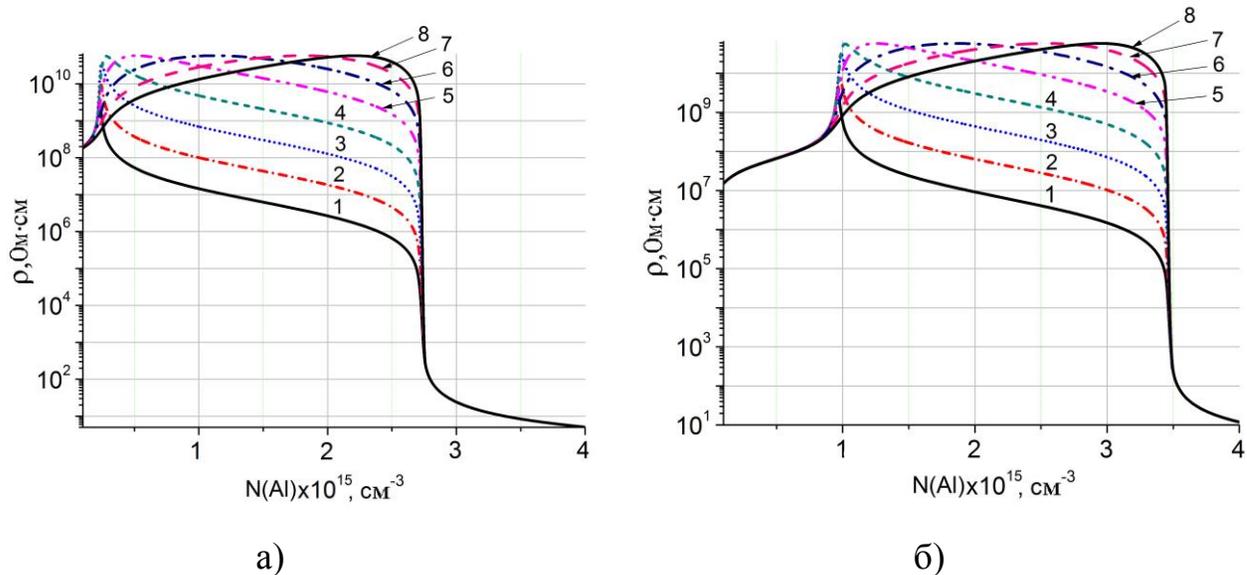


Рис. 5.12. Питомий опір $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te:Al$ від концентрації легуючого Al в неопроміненому матеріалі (а) і після γ -опромінення дозою 2,7 кГр (б) для різних рівнів енергії E_{dd} , віддалених від зони провідності, еВ: 1 – 0.554, 2 – 0.604, 3 – 0.654, 4 – 0.704, 5 – 0.754, 6 – 0.792, 7 – 0.821, 8 – 0.842.

$N(Al)$ в сторону більших концентрацій алюмінію. Цей результат узгоджується з результатами попереднього підрозділу 5.1 і робіт [149, 150], де досліджувалася деградація детекторних властивостей $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te$ під впливом рентгенівського опромінення. Так що, якщо концентрація легуючого алюмінію недостатня по

величині, то в процесі експлуатації можна отримати передчасне зниження ρ , яке призводить до збільшення струмів витоку і зменшення відношення сигнал / шум, що викликає зниження реєструвальної здатності детектора. В [19] для неопроміненого зразка була зафіксована енергія глибокого донора $E_{dd} = 0.554$ eV і $\rho = 7,5 \cdot 10^9$ Ом·см, а для опроміненого - $E_{dd} = 0.792$ eV і $\rho = 5,6 \cdot 10^{10}$ Ом·см. Однак з рис. 5.12(а) видно, що для вимірюного складу і параметрів дефектів вихідного зразка майже неможливо отримати його високоомний стан при будь-якому рівні легування за винятком дуже вузької області при $N(Al) = 2.37 \cdot 10^{14}$ см⁻³, коли $\rho = 2,6 \cdot 10^9$ Ом·см. Причому вказаний високоомний стан відразу ж деградує в ході опромінення, що суперечить експерименту, де ρ збільшується. Причиною такої невідповідності є неможливість вимірювання шляхом запису спектра темного струму без фотозбудження концентрації глибокого донора, енергія якого збільшується в процесі опромінення. У зв'язку з цим немає сенсу оперувати точними значеннями концентрацій і положень рівнів дефектів, достатньо якісного розгляду динаміки поведінки радіаційних дефектів. Також проводилися розрахунки для експериментально вимірюваних характеристик (див. табл. 5.3) дефектів вихідного неопроміненого зразка, опроміненого дозою 2,7 кГр і матеріалу, який витримувався 1 місяць після опромінення. Для цих матеріалів обчислювалися питомий опір і ефективність збору зарядів, дрейфуючих від середини міжелектродного простору детектора, в залежності від концентрації легуючого алюмінію. Результати моделювання показані на рис. 5.13. Видно, що в процесі γ -опромінення і подальшої витримки протягом 1 місяця відбувається не тільки зсув залежності ρ від концентрації алюмінію в сторону більших величин $N(Al)$, але і збільшення питомої опору як опроміненого матеріалу, так і витриманого протягом 1 місяця після опромінення в порівнянні з неопроміненим вихідним зразком. Ефективність збору зарядів (рис. 5.13б) детектора на основі неопроміненого $Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te:Al$ корелює з його питомим опором, зберігаючи високе значення не тільки в високоомній області ($\sim 10^9$ Ом·см), але і в області зниженого $\rho \sim 10^6 - 10^7$

Ом·см і значно деградує тільки з різким падінням питомого опору до низькоомних величин (крива 1). Що стосується детектора на основі опроміненого матеріалу, то, як видно з рис. 5.13 б) (криві 2 і 3), для нього ефективність збору зарядів η зберігає високі значення у всій досліджуваній області концентрацій Al. Це підтверджується експериментом в роботі [19]. Помітне зниження η (до величин 0.4) щойно опроміненого матеріалу, а також через місяць витримки після опромінення, відбувається при концентраціях Al $\sim 10^{16}$ см⁻³ (на рисунку не показано).

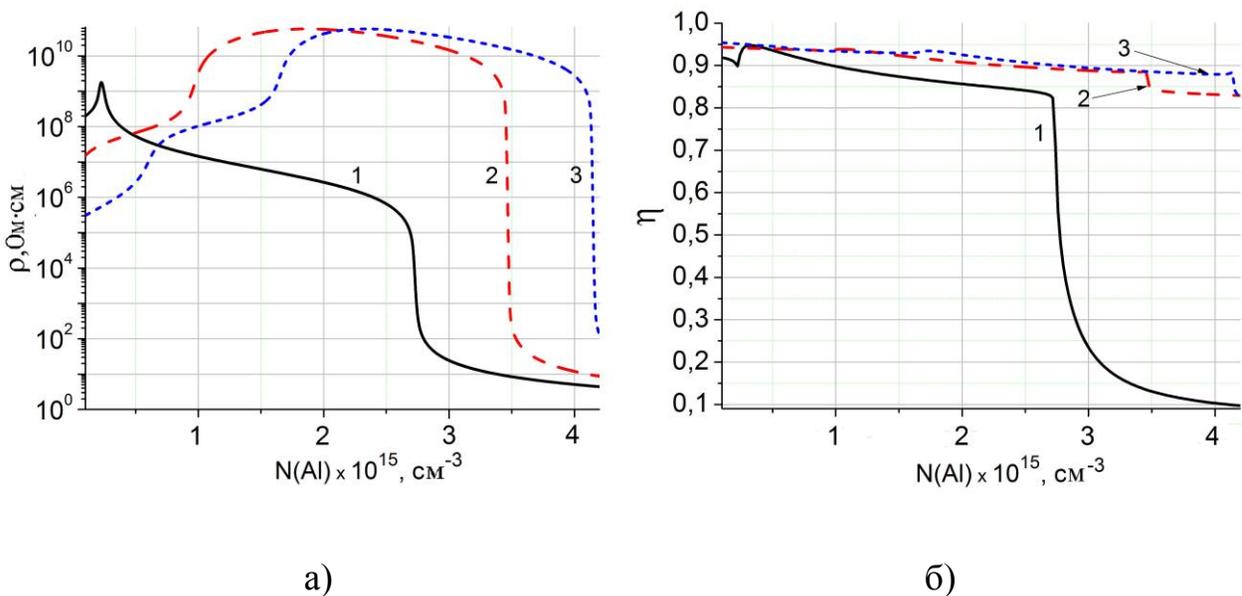


Рис. 5.13. Залежності питомого опору (а) і ефективності збору зарядів (б) від концентрації алюмінію в $\text{Cd}_{0,9}\text{Zn}_{0,1}\text{Te:Al}$. 1 - неопромінений зразок, 2 - після γ -опромінення дозою 2,7 кГр., 3 - через один місяць після опромінення.

Таким чином, детектор на основі $\text{Cd}_{0,9}\text{Zn}_{0,1}\text{Te:Al}$, працюючий під впливом γ -опромінення, може поліпшити свої реєструвальні властивості на початковій стадії експлуатації шляхом підвищення ρ і η . Зниження ρ і η може виникнути тільки при великих дозах опромінення, що супроводжується збільшенням вмісту V_{Zn} .

Матеріали розділу опубліковані в роботах [А.9-А.11], що наведено в Додатку А, і працях [А.16-А.18] наукових конференцій.

5.3 Висновки до розділу 5

1. Параметри глибоких рівнів, виміряні за допомогою методик, що ґрунтуються на записі спектрів у широкому температурному інтервалі, не дозволяють точно відтворити методом моделювання ρ і детекторні властивості сильно компенсованих матеріалів CdTe і CdZnTe.

2. Вимірювання параметрів глибоких рівнів, які реально впливають на захоплення носіїв заряду, здійснюється при температурах, близьких до робочих температур детектора, що робить прийнятним якісне дослідження методом моделювання електрофізичних та реєструвальних властивостей детектора, як неопроміненого, так і після дії іонізуючого випромінювання.

3. Основний внесок в деградацію детекторних властивостей CdTe:Cl в умовах жорсткого рентгенівського опромінення дає зниження питомого опору на три порядки, а також захоплення вільних носіїв заряду на радіаційних глибоких рівнях J ($E_V + 0.53$ eV) і Z ($E_V + 0.47$ eV). Середній час дрейфу нерівноважних носіїв заряду в детекторі до їх захоплення на радіаційних дефектах зменшується на два-три порядки величини.

4. Більш висока радіаційна стійкість CdZnTe детекторів у порівнянні з CdTe детекторами пояснюється меншою швидкістю утворення радіаційних дефектів A00 ($E_V + 0.06$ eV), D ($E_V + 0.41$ eV) і J ($E_V + 0.53$ eV), збільшення вмісту яких пов'язане зі зростанням концентрації вакансій Cd і Zn. Крім того, негативний вплив дефекту J на захоплення носіїв заряду в CdZnTe нейтралізується глибоким донором H1, концентрація якого помітно зростає при опроміненні, що відтягує рівень Фермі в середину забороненої зони, збільшуючи ρ і зменшуючи захоплення носіїв заряду на рівні J.

5. Несприятливим фактором для реєструвальних властивостей детектора на Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te є підвищена концентрація вакансій цинку V_{Zn} , і кадмію V_{Cd} , що

призводить до зниження ρ на 2-3 порядки. V_{Zn} і V_{Cd} можуть виникнути на стадії виготовлення і під впливом γ -опромінення.

6. Деградація CdTe і $Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te$ детекторів в процесі іонізуючого опромінення супроводжується збільшенням вмісту акцепторів, що демонструється зміщенням залежностей $\rho(N_d)$ і $\eta(N_d)$ від концентрації N_d мілконого донора в сторону більших величин N_d при цьому можливе зниження питомого опору. При малих дозах γ -опромінення $Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te$ покращуються властивості матеріалу, що виражається в збільшенні ρ і підвищенні ефективності збору зарядів детектора на його основі.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі вирішена важлива наукова задача з'ясування впливу радіаційних, домішкових, фонових дефектів і температури на електрофізичні та детекторні властивості GaAs, CdTe, CdZnTe. Систематичне дослідження методом моделювання поведінки електронної рухливості μ_n , питомого опору ρ , рівня Фермі F , концентрації заряджених центрів і вільних носіїв заряду в GaAs, CdTe, CdZnTe та ефективності збору зарядів в детекторах іонізуючих випромінювань на їх основі в залежності від вмісту домішок і радіаційних дефектів дозволило встановити наступне:

1. Розроблена методика модельного дослідження електрофізичних і детекторних властивостей матеріалів A_3B_5 , A_2B_6 яка на основі апробованих моделей розсіювання, рекомбінації і електричної компенсації рівнів багатозарядних центрів дозволяє визначити властивості цих сполук в залежності від домішкового, дефектного складу і температури, що набагато дешевше і швидше, ніж проведення відповідних технологічних процедур.

2. Встановлені параметри та концентрації глибоких рівнів домішок і дефектів, які потрібні для досягнення необхідних електрофізичних і детекторних властивостей (μ_n , ρ , τ_n , τ_p , η) неопромінених GaAs, $Cd_{1-x}Zn_xTe$ і CdTe; визначена зміна властивостей детекторів на основі цих матеріалів в залежності від ступеня легування та під дією опромінення.

3. Вперше встановлені залежності μ_n , ρ , τ_n , τ_p і η для детекторів на основі GaAs та $Cd_{1-x}Zn_xTe$ від вмісту і розподілу домішок в детекторному матеріалі і визначений його оптимальний склад. З'ясована кореляція між μ_n та ρ для CdZnTe з урахуванням уточнених моделей екранування і розсіювання. Залежності μ_n і ρ для CdTe від вмісту домішок дефектів подібні аналогічним залежностям для $Cd_{1-x}Zn_xTe$ при $x < 0,3$.

4. Вперше встановлено, що збільшення η ($\sim 30\%$) можливе при неоднорідному складі CdZnTe. Збір зарядів, що дрейфують від рівновіддалених точок, вищий в плоских детекторах, ніж у сферичних і циліндричних.

5. Опромінення детекторів на основі CdTe і $\text{Cd}_{0,9}\text{Zn}_{0,1}\text{Te}$ збільшує вміст акцепторів, що демонструється зсувом залежностей $\rho(N_d)$ і $\eta(N_d)$ в бік більших концентрацій N_d мілкового донора. При малих дозах опромінення підвищується ρ і η , зі збільшенням дози знижується ρ , відбувається захоплення і рекомбінація нерівноважних носіїв заряду на радіаційних дефектах Z ($E_v + 0.53$ eV) і J ($E_v + 0.47$ eV), зменшується час їх дрейфу в детекторі.

6. Вперше одержано пояснення високої радіаційної стійкості CdZnTe, що пов'язано з малою швидкістю утворення радіаційних акцепторних дефектів, а також впливом на рівень Фермі глибокого донора, концентрація якого помітно зростає при опроміненні.

Розроблений підхід та одержані результати дозволяють підбирати режими технологічних процесів глибокого рафінування Ga, As, , Cd, Zn, Te і визначити оптимальні умови одержання матеріалів GaAs, CdTe, CdZnTe високої детекторної якості і в певній мірі полегшити керування вмістом електрично активних домішок і власних дефектів.

Сукупність одержаних результатів і сформульованих висновків про динаміку поведінки електрофізичних властивостей вихідних і опромінених GaAs, CdTe, CdZnTe може стати основою для прогнозування змін характеристик детекторів іонізуючих випромінювань під впливом агресивного радіаційного середовища, що повинно сприяти розробці нових детекторних матеріалів для застосування в дозиметрії ядерного та іонізуючого випромінювання.

На закінчення хочу висловити щирю подяку моєму науковому керівнику, доктору фізико-математичних наук, професору Ковтуну Геннадію Прокоповичу за запропоновану цікаву тему досліджень, сприяння, цінні поради, постійну підтримку на всіх етапах виконання дисертаційної роботи.

Автор вдячний кандидату фізико-математичних наук Давидову Леоніду Миколайовичу, доктору фізико-математичних наук Марченко Івану Григоровичу за корисну дискусію та критичні зауваження за матеріалами дисертації.

Також хочу висловити вдячність моїм співавторам кандидату фізико-математичних наук Рибці Олександровичу Вікторовичу, кандидату технічних наук Кутньому Володимирі Євдокимовичу, кандидату фізико-математичних наук Жукову Олександровичу Івановичу, молодшому науковому співробітнику Даценко Ользі Анатоліївні за плідну співпрацю.

Автор вважає своїм обов'язком згадати добрим словом співавторів наукових праць за темою дисертації, які на жаль вже пішли з життя, Яценко Олександра Олександровича і Водяницького Олександра Анатолієвича.

ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Абызов А.С., Ажажа В.М., Давыдов Л.Н, Ковтун Г. П., Кутний В.Е., Рыбка А. В. Выбор полупроводникового материала для детекторов гамма излучения // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. 2004. № 3. С. 3-6.
2. Stefano Del Sordo, Leonardo Abbene, Ezio Caroli, Anna Maria Mancini, Andrea Zappettini, Pietro Ubertini. Progress in the development of CdTe and CdZnTe semiconductor radiation detectors for astrophysical and medical applications // Sensors. 2009. № 9. P. 3491-3526.
3. Schlesinger T.E., Toney J.E., Yoon H., Lee E.Y. at al. Cadmium zinc telluride and its use as a nuclear radiation detector material // Material Science and Engineering. R: Reports. 2001. Vol. 32, № 4-5. P. 103-189.
4. Hermon H., Schieber M., Lee E.Y., McChesney J.L. et al. CZT detectors fabricated from horizontal and vertical Bridgman-grown crystals // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2001. Vol. 458, №1-2. P. 503-510.
5. Limousin O. New trends in CdTe and CdZnTe detectors for X- and gamma-ray applications // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2003. Vol. 504, №1-3. P. 24-37.
6. Bertolucci E., Bisofni M.G., Bottigli U. et. al. X-ray imaging using a pixel GaAs detector // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 1995. Vol. 362, № 1-2. P. 547-550.
7. Вилисова М.Д., Гермогенов В.П., Пономарев И.В. Электрические характеристики детекторных структур на основе эпитаксиального арсенида галлия // Известия вузов. Физика. 2008. №9/3. С. 21-22.

8. Айзенштат Г.И., Вилисова М.Д., Другова Е.П. и др. Детекторы рентгеновского излучения на эпитаксиальном арсениде галлия // Журнал Технической физики. 2006. Том 76, №8. С.46-49.
9. Пономарев И.В. Структуры для детекторов ионизирующих излучений на основе эпитаксиального арсенида галлия: автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. 01.04.10. Томск, 2011. 20 с.
10. Воробьев А.П. Полупроводниковые детекторы ионизирующих излучений на арсениде галлия: автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук. 01.04.23. Протвино, 2005. 34с.
11. Lingyan Xu, Wanqi Jie, Gangqiang Zha et al. Radiation damage on CdZnTe:In crystals under high dose ^{60}Co γ -rays // CrystEngComm. 2013. Vol. 15, № 47. P.10304–10310.
12. Fraboni B., Pasquini L., Castaldini A. et al. X-ray irradiation effects on the trapping properties of $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ detectors // Journal of Applied Physics. 2009. Vol. 106, № 9. P. 093713-1 – 093713-6.
13. Cavallini A., Fraboni B. Defects introduced in cadmium telluride by γ irradiation // Journal of Applied Physics. 2001. Vol. 89, № 8. P. 4664–4666.
14. Cavallini A., Fraboni B. Defective states induced in CdTe and CdZnTe detectors by high and low energy neutron irradiation // Journal of Applied Physics. 2003. Vol. 94, №5. P. 3135–3142.
15. Fraboni B., Cavalini A., Auricchio N. et al. Time and thermal recovery of irradiated CdZnTe detectors // Semiconductor Science and Technology. 2006. Vol. 21, № 8. P. 1034-1040.
16. Cavallini A., Fraboni B. Deep levels and compensation in γ -irradiated CdZnTe // Applied Physics Letters. 2000. Vol. 77, № 20. P. 3212–3214.
17. Fraboni B., Cavallini A., Dusi W. Damage induced by ionizing radiation on CdZnTe and CdTe detectors // Nuclear Science, IEEE Transactions. 2004. Vol. 51, № 3. P. 1209-1215.

18. Hofmann D.M., Stadler W., Christmann P., Meyer B. K. Defects in CdTe and Cd_{1-x}Zn_xTe // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Sec. A. 1996. Vol. 380, № 1-2. P. 117-120.
19. Ruihua Nan, Wanqi Jie et al. Irradiation-Induced Defects in Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te:Al // Journal of Electronic Materials. 2012. Vol. 41, № 11. P. 3044-3049.
20. Castaldini A., Cavallini A., Fraboni B. Deep energy levels in CdTe and CdZnTe // Journal of Applied Physics. 1998. Vol. 83, № 4. P. 2121-2126.
21. Fraboni B., Cavalcoli D., Cavallini A., Fochuck P. Electrical activity of deep traps in high resistivity CdTe: Spectroscopic characterization // Journal of Applied Physics. 2009. Vol. 105, № 7. P. 073705–073710.
22. Babentsov V., Franc J., James R.B. Compensation and carrier trapping in indium-doped CdTe: Contributions from an important near-mid-gap donor // Applied Physics Letters. 2009. Vol. 94(5). P. 052102–052102-3.
23. Carini G. A., Bolotnikov A.E., Camarda G.S. et al. Effect of Te precipitates on the performance of CdZnTe detectors // Applied Physics Letters. 2006. Vol. 88(14). P.143515-1 – 143515-3
24. Gul R., Keeter K., Rodriguez R. et al. Point defects in Pb-, Bi-, and In-doped CdZnTe detectors: deep-level transient spectroscopy (DLTS) measurements // Journal of Electronic Materials. 2012. Vol. 41, № 3. P. 488-493.
25. Belas E., Grill R., Franc J. et al. Correlation of electrical and optical properties with charge collection efficiency of In-doped and In+Si co-doped CdTe // Nuclear Instr. & Meth. in Phys. Research Sec. A. 2008. Vol. 591, № 1. P. 200–202.
26. Gul Rubi, Bolotnikov A., KiHyun K., Rodrigues R. Point Defects in CdZnTe Crystals Grown by Different Techniques // Journal of Electronic Materials. 2011. Vol. 40, № 3. 2011. P. 274–279.
27. Pavlović M., Desnica U. V., Gladić J. Complete set of deep traps in semi-insulating GaAs // Journal of Applied Physics. 2000. Vol. 88, № 8. P.4563-4570.

28. Pavlović M., Jakšić M., Zorc H., Medunić Z. Identification of deep trap levels from thermally stimulated current spectra of semi-insulating CdZnTe detector material // *Journal of Applied Physics*. 2008. Vol. 104, № 2. P. 023525-1 – 023525-6.
29. Pengfei Wang, Ruihua Nan, Zengyun Jian. The effects of deep-level defects on the electrical properties of Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te crystals // *Journal of Semiconductors*. 2017. Vol.38, № 6. P. 062002-1 – 062002-6.
30. Kobayashi A., Sankey Otto F., Dow John D. Chemical trends for defect energy levels in Hg_(1-x)Cd_xTe // *Physical Review. B*. 1982. Vol. 25, № 10. P. 6367-6379.
31. Su-Huai Wei, Zhang S. B. Chemical trends of defect formation and doping limit in II-VI semiconductors: The case of CdTe // *Physical Review. B*. 2002. Vol. 66, № 15. P. 155211-1 – 155211-10.
32. Lany S., Ostheimer V., Wolf H., Wichert Th. Vacancies in CdTe: experiment and theory // *Physica B: Condensed Matter*. 2001. Vol. 308–310. P. 958–962.
33. Berding M. A. Native defects in CdTe // *Physical Review. B*. 1999. Vol. 60, № 12. P.8943–8950.
34. Фреїк Д.М., Чобанюк В.М., Возняк О.М. та ін. Локалізовані стани електронів у напівпровідниках. III. Енергетичні рівні точкових дефектів у цинк, кадмій і плумбум телуридах // *Фізика і хімія твердого тіла*. 2011. Том 12, № 4. С. 834-848.
35. Chu M., Terterian S., Ting D. et al. Tellurium antisites in CdZnTe. // *Applied Physics Letters*. 2001. Vol.79, № 17. P. 2728–2730.
36. NAN Rui-hua, JIE Wan-qi, ZHA Gang-qiang at al..Determination of trap levels in CdZnTe:In by thermally stimulated current spectroscopy // *Transactions of Nonferrous Metal Society of China*. 2012, № 22. P.148-152.
37. Krsmanovic N., Lynn K., Weber M. et al. Electrical compensation in CdTe and Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te by intrinsic defects // *Physical Review. B*. 2000. Vol. 621, № 24. P. 279–282.
38. Сакалас А., Янушкевичюс З. Точечные дефекты в полупроводниковых соединениях. Вильнюс: Мокслас, 1988. 153 с.

39. Meyer B. K., Stadler W. Native defect identification in II-VI materials // *Journal of Crystal Growth*. 1996. Vol. 161, № 1-4. P. 119-127.
40. Meyer B. K., Omling P., Weigel E., Müller-Wogt G. F center in CdTe // *Physical Review B*. 1992. Vol. 46, № 23. P. 15135-15138.
41. Боброва Е.А., Клевков Ю. В., Медведев С. А., Плотников А.Ф. Исследование глубоких электронных состояний в текстурированных поликристаллах p-CdTe стехиометрического состава методом DLTS // *Физика и техника полупроводников*. 2002. Том 36, №12. С. 1426-1431.
42. Иванов В.С., Стопачинский В.Б., Чапнин В.А. Дифференциальная спектроскопия локальных центров в CdTe // *Физика и техника полупроводников*. 1971. Том 5, № 1. С. 101-105.
43. Xavier Mathew Photo-induced current transient spectroscopic study of the traps in CdTe // *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2003. Vol.76, № 3. P. 225-242.
44. Grill R., Zappettini A. Point defects and diffusion in CdTe // *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*. 2004. Vol. 48-49. P. 209-244.
45. Su-Huai Wey, Zhan S. B. First-principles study of doping limits of CdTe // *Physica status solidi (b)*. 2002. Vol. 229, № 1. P. 305-310.
46. Садуллаев А.Б. Состояние примесных атомов с глубокими уровнями в полупроводниках в условиях сильной компенсации // *Молодой ученый*. 2011. Том 1, №12. С. 48–50.
47. Ланно М., Бургуен Ж. Точечные дефекты в полупроводниках. Теория. М.: Мир, 1984. 264 с.
48. Ухин Н.А. Модель разупорядоченных областей в кремнии, создаваемых быстрыми нейтронами // *Физика и техника полупроводников*. 1972. Том. 6, №5. С. 931-934.
49. Артемьев В.А. Влияние деформации на радиационное дефектообразование в полупроводниках кубической симметрии : дис. ... канд. физ.-мат. наук : 01.04.07. Москва, 1989. 177 с.

50. Артемьев В.А., Михнович В.В., Титаренко С.Г. Модель кинетики формирования областей разупорядочения в полупроводниках с учетом деформаций // Физика и техника полупроводников. 1988. Том 22, № 4. С.750-753.
51. Ломако В.М. Радиационные дефекты в арсениде галлия и электрон-полиморфные центры в полупроводниках: дис. ... д-ра физ.-мат. наук. 01.04.10. Минск, 1989. 336 с.
52. Вавилов В.С., Кекелидзе Н.П., Смирнов Л.С. Действие излучения на полупроводники. М.: Наука, 1988. 190 С.
53. Коршунов Ф.П., Богатырев Ю.В., Вавилов В.А. Воздействие радиации на интегральные схемы. Минск: Наука и техника, 1986. 254 с.
54. Брудный В.Н. Радиационные эффекты в полупроводниках. // Известия Томского государственного университета. 2005, №2. С. 95-102.
55. Брудный В.Н., Пешев В.В., Суржиков А.П. Радиационное дефектообразование в электрических полях: арсенид галлия, фосфид индия. Новосибирск: Наука, 2001. 136 с.
56. Брудный В.Н., Пешев В.В. Влияние электронного (зарядового) состояния Е-ловушек на эффективность их накопления в n-GaAs при облучении // Физика и техника полупроводников. 2003. Том 37, № 1. С. 22-28.
57. Агринская Н.В., Машовец Т.В. Самокомпенсация в полупроводниках. Обзор. // ФТП. 1994. Том 28, № 9. С. 1505-1534.
58. Фистуль В.И., Шмугуров В.А. Преимущественное положение примесей IV группы в арсениде галлия // Физика и техника полупроводников. 1990. Том 24, № 6. С. 1038-1041.
59. Tokumitsu E. Correlation between Fermi Level Stabilization Positions and Maximum Free Carrier Concentrations in III–V Compound Semiconductors // Japanese Journal of Applied Physics. 1990. Vol. 29. Part 2, № 5. P. L698–L701.

60. Neumark G.F. Achievement of Well Conducting Wide-Band-Gap Semiconductors: Role of Solubility and Nonequilibrium Impurity Incorporation // *Physical Review Letters*. 1989. Vol. 62, № 15. P. 1800-1803.
61. Jansen R.W., Sankey O.F. Theory of relative native- and impurity-defect abundances in compound semiconductors and the factors that influence them // *Physical Review B*. 1989. Vol. 39, № 5. P. 3192-3206.
62. Chris G. Van de Walle, Laks D.B., Neumark G.F., Pantelides S.T. First-principles calculations of solubilities and doping limits: Li, Na, and N in ZnSe // *Physical Review B*. 1993. Vol. 47, № 15. P. 9425-9434.
63. Marfaing Y. Self-compensation in II–VI compounds // *Progress in Crystal Growth and Characterization*. 1981. Vol. 4, № 4. 1981. P. 317-343.
64. Desnica U.V. Doping limits in II-VI compounds - challenges, problems and solutions // *Progress in Crystal Growth and Characterization* 1998. Vol. 36, № 4. P. 291-357.
65. Винецкий В.Л., Холодарь Г.А. Радиационная физика полупроводников. Київ: Наукова думка, 1979. 336 с.
66. Артемьев В.А., Михнович В.В. О влиянии деформации на электростатический потенциал областей разупорядочения в полупроводниках // *Физика и техника полупроводников*. 1988. Том. 22, № 2. С. 243-247.
67. Гурвич А.М. Введение в физическую химию кристаллофосфоров. М.: Высшая школа, 1982. 376 с.
68. Артемьев В.А., Михнович В.В. О диффузионно-контролируемых скоростях реакций радиационного дефектообразования в полупроводниках // *Деп. ЦНИИ «Электроника»*. № 3-4630. 1987. Аннот. *Физика и Техника Полупроводников*. 1988. Том. 22, №5. С. 955.
69. Sato J.H. Effects of Impurity-Vacancy Complex on the Degree of Compensation in Compound Semiconductors // *Journal of Physical Society Japan*. 1966. Vol. 21, № 8. P. 1481-1485.

70. Агринская Н.В., Аркадьева Е.Н., Матвеев О.А. Люминесценция комплексов вакансия кадмия – донор в кристаллах CdTe // Физика и техника полупроводников. 1971. Том. 5, № 5. С. 869-875.
71. Hoffman D.M., Omling P. Grimmeses H.B. et al. Identification of the chlorine A center in CdTe // Physical Review. B. 1992. Vol. 45, № 11. P.6247-6250.
72. Park C.H., Chadi D.J. First-principles study of DX centers in CdTe, ZnTe, and $Cd_xZn_{1-x}Te$ alloys // Physical Review B. 1995. Vol. 52, № 16. P. 11884-11890.
73. Chamonal J.P., Molva E., Pautrat J. L., Revoil L. Complex behaviour of Ag in CdTe // Journal of Crystal Growth. 1982. Vol. 59, № 1-2. P. 297-300.
74. Chadi D.J., Chang K.J. Energetics of DX-center formation in GaAs and $Al_xGa_{1-x}As$ alloys // Physical Review B. 1989. Vol. 39, № 14. P. 10063-10074.
75. Chadi D.J. Column V acceptors in ZnSe: Theory and experiment // Applied Physics Letters. 1991. Vol. 59, № 27. P. 3589–3594.
76. Kwak K.W., King-Smith R.D., Vanderbilt D. Column V acceptors in ZnSe // Physical review B. Condensed matter. 1994. Vol. 48, № 24. P.17827-17834.
77. Агринская Н.В., Матвеев О.А. О механизме точной компенсации в кристаллах CdTe, легированных хлором // Физика и техника полупроводников. 1987. Том. 21, №3. С. 542-544.
78. Агринская Н.В., Шашкова В.В. Метастабильные центры в низкоомных кристаллах CdTe:Cl n-типа // Физика и техника полупроводников. 1990. № 4. С. 697-701.
79. Agrinskaya N.V. Effect of large-scale potential relief on the electronic transport in doped and compensated CdTe: the role of impurity correlations // Materials Science and Engineering: B. 1993. Vol. 16, № 1-3. P. 172-177.
80. Брудный В.Н., Кривов М.А. Радиационные дефекты в арсениде галлия // Известия вузов. Физика. 1980. № 1. С. 64-75.

81. В.Н. Брудный, Н.Г. Колин, Л.С. Смирнов Модель самокомпенсации и стабилизация уровня Ферми в облученных полупроводниках // Физика и техника полупроводников. 2007. Том 41, № 9. С. 1031-1040.
82. Brudnyi V.N., Grinyaev S.N., Stepanov V.E. Local neutrality conception: Fermi level pinning in defective semiconductors // Physica B. 1995. Vol. 212, № 4. P. 429-435.
83. Brudnyi V.N., Grinyaev S.N., Kolin N.G. A model for Fermi-level pinning in semiconductors: Radiation defects, interface boundaries // Physica B Condensed Matter. 2004. Vol. 348, № 1-4. P. 213-225.
84. Rehn J.J., Kohn W. Wannier functions in crystals with surfaces // Physical Review B. 1974. Vol. 10, № 2. P. 448-455.
85. Брудный В.Н. Радиационная модификация и дефекты некоторых алмазоподобных полупроводников сложного состава: автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.07. Томск, 1993. 40 с.
86. Chadi D.J., Cohen M.L. Special points in the brillouin zone. Physical Review B. 1973. Vol. 8, №12. P. 5747-5753.
87. Varshni Y.P. Temperature dependence of the energy gap in semiconductors // Physica. 1967. Vol. 34, № 1. P. 149-154.
- 88 Prokesch M., Szeles C. Accurate measurement of electrical bulk resistivity and surface leakage of CdZnTe radiation detector crystals // Journal of Applied Physics. 2006. Vol. 100, № 1. P. 014503-1–014503-8.
89. Reno J.L., Jones E.D. Determination of the dependence of the band-gap energy on composition for $Cd_{1-x}Zn_xTe$ // Physical Review B. 1992. Vol. 45, № 3. P. 1440-1442.
90. Косяченко Л.А., Склярчук В.М., Склярчук О.В., Маслянчук О.Л. Ширина запрещенной зоны кристаллов CdTe и $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te$ // Физика и техника полупроводников. 2011. Том. 45, № 10. С. 1323-1330.
91. Bottka N., Stankiewicz J., Giriat W. Electroreflectance studies in $Cd_{1-x}Mn_xTe$ solid solutions // Journal of Applied Physics. 1981. Vol. 52, № 6. P. 4189-4193.

92. Kane E.O. Band Structure of Indium Antimonide // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1957. Vol. 1, № 4. P. 249-261.
93. Киреев П.С. Физика полупроводников. М.: Высшая школа, 1975. 584 с.
94. Hermann C., Weisbuch C. k-p perturbation theory in III-V compounds and alloys: a reexamination // Physical Review B. 1977. Vol.15, № 2. P. 823.-833
95. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. М: Наука,. 1990. 679 с.
96. Zook D.J. Piezoelectric Scattering in Semiconductors // Physical Review 1964. Vol. 136, № 3A. P. A869-A878.
97. Wolf C.M., Stilman G.E., Lindley W.T. Electron mobility in high-purity GaAs // Journal of Applied Physics. 1970. Vol. 41, № 7. P. 3088-3091.
98. Rode D.L. Electron mobility in direct gap polar semiconductors // Physical Review. B. 1970. Vol. 2, № 4. P. 1012-1024.
99. Harrison J.W. and Hauser J.R. Theoretical calculations of electron mobility in ternary III-V compounds // Journal of Applied Physics. 1976. Vol. 47, № 1. P. 292-300.
100. Ehrenreich H. Electron mobility of indium arsenide phosphide $[\text{In}(\text{As}_y\text{P}_{1-y})]$ // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1959. Vol. 12, № 1. P. 97-104.
101. Segall B., Lorenz M. R., Halsted R. E. Electrical Properties of n-Type CdTe // Physical Review. 1963. Vol. 129, № 6. P 2471-2481.
102. Brooks H. Scattering by ionized impurities in semiconductors // Physical Review. 1951. Vol. 83. P. 879-887.
103. Conwell E.M., Weisskopf V.F. Theory of Impurity Scattering in Semiconductors // Physical Review. 1950. Vol. 77, № 3. P. 388-390.
104. Erginsoy C. Neutral Impurity Scattering in Semiconductors // Physical Review. 1950. Vol. 79, № 6. P. 1013-1014.
105. Lancefield D, Adams A.R., Fisher M.A. Reassessment of ionized impurity scattering and compensation in GaAs and InP including correlation scattering // Journal of Applied Physics. 1987. Vol. 62, № 6. P. 2342-2359.

106. Weisberg L.R. Anomalous Mobility Effects in Some Semiconductors and Insulators // Journal of Applied Physics. 1962. Vol. 33, № 5. P. 1817-1821.
107. Dexter D.L., Seitz F. Effect of dislocations on mobility in semiconductors // Physical Review. 1952. Vol. 86, № 6. P. 964-965.
108. Read W.T. Theory of dislocations in germanium // Philosophical Magazine. 1954. Vol. 45, № 367. P. 775-796.
109. Read W.T. Scattering of electrons by charged dislocations in semiconductors // Philosophical Magazine. 1955. Vol. 46, № 373. P. 111-131.
110. Fawcett W., Bourdman D.A., Swain S.J. Monte Carlo determination of electron transport properties in gallium arsenide // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1970. Vol. 31, № 9. P. 1963-1990.
111. Thompson A.G., Wooley J.C. Energy-gap variation in mixed III-V alloys // Canadian Journal of Physics. 1967. Vol. 45, № 2. P. 255-261.
112. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 791 с.
113. Novikov G.F., Radychev N.A. Experimental determination of the dependence of the free electron-hole recombination rate constant on the band gap in semiconductors of the $A^{II}B^{VI}$ and $A^{I}B^{VII}$ types // Russian Chemical Bulletin. 2007. Vol. 56, № 5. P. 890–894.
114. Гапанович М.В., Радычев Н.А., Один И.Н., Новиков Г.Ф. Влияние легирования йодом на кинетику СВЧ-фотопроводимости теллурида кадмия // Химия Высоких Энергий, краткие сообщения. Фотохимия. 2007. Том 41, № 2. С. 159-160.
115. Shockley W., Read W.T. Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons // Physical Review. 1952. Vol. 87, № 5. P. 835-842.
116. Wolfe C.M., Stillan G.E., Lindley W.T. Electron mobility in high-purity GaAs // Journal of Applied Physics. 1970. Vol. 41, № 7. P. 3088-3091.
117. Blakemore J.S. Semiconducting and other major properties of GaAs. // Journal of Applied Physics. 1982. Vol. 53, № 10. P. R123-R181.

118. Глориозова Р.И., Колесник Л.И., Колин Н. Г., Освенский В. Б. Поведение глубоких центров в ядерно-легированном арсениде галлия // Физика и техника полупроводников. 1988. Том. 22, № 3. С. 507-509.
119. Чиркина Л.А., Оковит В.С., Стародубов Я.Д., Ковтун Г.П. Влияние термоциклирования на упругие, демпфирующие и релаксационные свойства арсенида галлия в области 4.2 - 300 К // Функциональные материалы. 1996. Том. 4, №3. С. 96-102.
120. Литвинов М.Б., Шутов С.В., Борискин И.В. Влияние дислокаций на электрофизические свойства монокристаллов полуизолирующего арсенида галлия в зависимости от времени их термообработки // Неорганические материалы. 2001. Том. 37, № 2. С. 146-148.
121. Витовский Н.А., Лагунова Т.С. Машовец Т.В., Рахимов О. Пространственное распределение электрически, активных центров в n-арсениде галлия и его изменения при гамма-облучении // Физика и техника полупроводников. 1984. Том. 18, № 9. С. 1593-1596.
122. Витовский Н.А., Лагунова Т.С., Рахимов О. Взаимодействие точечных собственных дефектов в фосфиде индия n-типа со скоплениями акцепторов // Физика и техника полупроводников. Том. 18, № 9. С. 1624-1628.
123. Артемьев В.А., Витовский Н.А., Михнович В.В. Скопления точечных дефектов и их влияние на рассеяние носителей заряда в полупроводниках // Физика и техника полупроводников. 1989. Том. 23, № 8. С. 1395-1399.
124. Lopez-Cruz Elias, Gonzalez-Hernandez J., Allred D.D., Allred W.P. Photoluminescence characterization of $Zn_xCd_{1-x}Te$ ($0 \leq x \leq 0.25$) single crystal alloys // Journal of Vacuum Science & Technology A. 1990. Vol. 8, № 4. P. 1934-1938.
125. Davydov L.N., Datsenko O.A., Kovtun G.P., Kondrik A.I., Kutny V.E., Rybka A. V. Numerical simulation of CdZnTe semiconductor resistivity as a function of the impurity composition // Functional materials. 2001. Vol. 8, № 2. P. 255-261.

126. Datsenko O.A., Kondrik A.I. Electrophysical properties forecasting for CdTe semiconductor materials depending on the impurity composition // *Functional materials*. 2001. Vol. 8, № 3. P. 1-6.
127. Cavallini A., Fraboni B. et al. Electronic properties of traps induced by γ -irradiation in CdTe and CdZnTe detectors // *Nuclear Instruments and Methods in Physical Research. Sec. A*: 2000. Vol. 448, № 3. P. 558-566.
128. Cavallini A., Fraboni B., Dusi W. et al. Deep levels and compensation in γ -irradiated CdZnTe // *Applied Physics Letters*. 2000. Vol. 77, № 20. P. 3212-3214.
129. Zumbiehl A., Fougères P., Hage-Ali M. et al. Resistivity simulation of CZT materials. // *Journal of Crystal Growth*. 2000. Vol. 197, № 3. P. 670-674.
130. Ruihua Nan, Wanqi Jie, Gangqiang Zha, Hui Yu. Relationship between high resistivity and the deep level defects in CZT:In // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section A*. 2013. Vol. 705. P. 32-35.
131. Ottaviani G. Charge carriers transport properties in CdTe measured with time of flight technique // *Revue de Physique Appliquée*. 1977. Vol. 12, № 2. P. 249-254.
132. Luke P.N. Unipolar charge sensing with coplanar electrodes – application to semiconductor detectors // *IEEE Transactions on Nuclear Science*. 1995. Vol. 42, № 4. P.207-213.
133. Malm H.L., Canali K., Mayer J.W., Nikolett M.A. Gamma-ray spectroscopy with single-carrier collection in high-resistivity semiconductors // *Applied Physics Letters*. 1975. Vol. 26, № 6. P. 344-346.
134. Alt R., Ambrosi P., Böhm J. et al. The generation of response matrix of hemispherical CdTe detectors // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Sec. A*. 1994. Vol. 353, № 1-3. P. 71-75.
135. Jones I.T., Woodlam P.B. Resolution improvement in CdTe gamma detectors using pulse-shape discrimination // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. 1975. Vol. 124. P. 591-595.

136. Richter M., Siffert P. High-resolution gamma-ray spectroscopy with CdTe detector systems // *Nucler Instruments and Methods in Physics Research. Sec. A.* 1992. Vol. 322, № 3. P. 529-537.
137. Захарченко О.О. Моделювання дозиметричних властивостей детекторів гамма-випромінювання на основі високоомних напівпровідників : автореф. дис. ... канд. фіз.-мат. наук. 01.04.21. Харків, 2009. 20 с.
138. Кондрик А.И., Ковтун Г.П. Исследование свойств полупроводниковых материалов для детекторов ионизирующих излучений. // *Технология и конструирование в электронной аппаратуре.* 2003. №6. С. 3–6.
139. Toney J.E., Brunett B.A., Schlessinger T.E. et al. Uniformity of Cd_{1-x}Zn_xTe grown by high-pressure Bridgman. // *Nucler Instruments and Methods in Physics Research. Section A.* 1996. Vol. 380. P. 132-135.
140. Akutagawa W., Zanio K. Gamma response of semi-insulating material in the presence of trapping and detrapping // *Journal of Applied Physics.* 1969. Vol. 40, № 9. P. 3838-3454.
141. Scannavini M.G., Chirgo P. et al. Computer simulation of charge trapping and ballistic deficit effects on gamma-ray spectra from CdTe semiconductor detectors // *Nucler Instruments and Methods in Physics Research. Sec A.* 1994. Vol. 353. P. 80-84.
142. Кондрик А.И. Моделирование свойств CdZnTe и параметров детекторов γ -излучения на его основе // *Технология и конструирование в электронной аппаратуре.* 2004. №6. С.17-22.
143. Murel A.V., Obolonsky S.V., Fefelov E.V., Kiselyova E.V. Resistance of protons processed GaAs photodetectors to gamma-neutron irradiation // *Physics and Technics of Semiconductors.* 2004. Vol. 38, № 7. P. 834-840 [in Russian].
144. Abysov A.S., Davydov L.N., Kutny V.E. et al. Correlation between spectrometric ability and physical properties of semiconductor detectors // *Functional Materials.* 2000. Vol. 7, №4. P. 827-835.

145. Knoll G.F. Radiation Detection and Measurement (Fourth Edition): monography. John Willey & Sons, Inc. New York, 2010. P. 830.
146. Кондрик А.И. Эффективность сбора зарядов в датчиках γ -излучения с различной конфигурацией электродов // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. 2012. №4. С. 47-51.
147. Stadler W., Hofmann D., Alt H., Muschik T., Meyer B., Weigel E., Mueller-Vogt G., Salk M., Rupp E., Benz K. Optical investigations of defects in $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$. // Physical Review B. 1995. Vol. 51, № 16. P. 10619-10630.
148. Allen J.W. Spectroscopy of lattice defects in tetrahedral II-VI compounds. // Semiconductor Science and Technology. 1995. Vol. 10, № 8. P. 1049-1055.
149. Kondrik A.I. Effect of irradiation on properties of CdTe detectors // East European Journal of Physics. 2014. Vol. 1, № 1. P. 47-53.
150. Kondrik A.I. Influence of radiation-induced defects on CdTe and CdZnTe detectors properties // Problems of atomic science and technology. Ser.: Physics of Radiation Effect and Radiation Materials Science. 2015. № 2 (96). P.18-24.

ДОДАТОК А. СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Список публікацій, в яких відображено основні результати дисертації:

1. Водяницкий А.А, Жуков А.И., Ковтун Г.П., Кондрик А.И., Кравченко А.И., Яценко А.А.. Компьютерное моделирование электрофизических свойств GaAs в зависимости от содержания в нем структурных несовершенств // Функциональные Материалы. 1994. Том 1, №2. С. 77-84.
2. Kovtun G.P., Kondrik A.I., Yatsenko A.A. Quantitative model for forecasting changes in electric properties of direct gap semiconductors // Functional Materials. 2000. Vol.7, № 2. P. 228-234.
3. Davydov L.N., Datsenko O.A., Kovtun G.P., Kondrik A.I., Kutnij V.E., Rybka A.V.. Numerical simulation of CdZnTe semiconductor resistivity as a function of the impurity composition // Functional materials. 2001. Vol. 8, № 2. P. 255-261.
4. Datsenko O.A., Kondrik A.I. Electrophysical properties forecasting for CdTe semiconductor materials depending on the impurity composition // Functional Materials. 2001. Vol. 8, № 3. P. 516-521.
5. Кондрик А.И., Ковтун Г.П. Исследование свойств полупроводниковых материалов для детекторов ионизирующих излучений // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. 2003. № 6. С. 3-6.
6. Кондрик А.И. Моделирование свойств CdZnTe и параметров детекторов γ -излучения на его основе // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. 2004. № 6. С. 17-22.
7. Кондрик А.И., Ковтун Г.П. Расчет эффективности сбора зарядов в датчиках ионизирующих излучений на основе GaAs, CdTe, CdZnTe // Вісник КрНУ імені Михайла Остроградського. 2011. Випуск 4 (69). Частина 1. С. 81-85.
8. Кондрик А.И. Эффективность сбора зарядов в датчиках γ -излучения с различной конфигурацией электродов // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. 2012. №4. С. 47-51.

9. Kondrik A.I. Effect of irradiation on properties of CdTe detectors // East European Journal of Physics. 2014. Vol. 1, № 1. P. 47-52.

10. Kondrik A.I. Influence of radiation-induced defects on CdTe and CdZnTe detectors properties // Problems of atomic science and technology. Ser.: Physics of Radiation Effect and Radiation Materials Science (105). 2015. № 2 (96). P. 18-24.

11. Кондрик А.И. Детекторные свойства $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te:Al$ под влиянием γ -облучения малой дозы // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. 2016. №1. С. 12-19.

Список публікацій, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

12. Кондрик А.И., Ковтун Г.П. Моделирование электрофизических свойств полупроводниковых материалов для детекторов ионизирующих излучений // IV Международная научно-практическая конференция «Современные информационные и электронные технологии», 19-23 мая 2003 г.: труды / ОНПУ, Одесса, Украина, 2003. С. 302, (доповідач).

13. Кондрик А.И. Моделирование детекторных свойств CdZnTe и параметров детекторов γ -излучения на его основе // V Международная научно-практическая конференция «Современные информационные и электронные технологии», 24-28 мая 2004 г.: труды / ОНПУ, Одесса, Украина. 2004. С. 267, (доповідач).

14. Кондрик А.И. Расчет эффективности сбора зарядов для детекторов на основе легированного материала CdZnTe // VI Международная научно-практическая конференция «Современные информационные и электронные технологии», 23-27 мая 2005 г.: труды / ОНПУ, Одесса, Украина. 2005. С. 355, (доповідач).

15. Кондрик А.И., Ковтун Г.П. Расчет эффективности сбора зарядов в датчиках ионизирующих излучений на основе GaAs, CdTe и CdZnTe // I Міжнародна науково-практична конференція «Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка», 5-7 травня, 2011 р.: тези доповідей / КрНУ ім. Остроградського. м. Кременчук, Україна. 2011. С. 72-74, (доповідач).

16. Кондрик А.И. Влияние радиационных дефектов на свойства детекторов на основе CdTe и CdZnTe // XV Международная научно-практическая конференция «Современные информационные и электронные технологии», 26–30 мая 2014 г.: труды / ОНПУ, Одесса, Украина. 2014. Том 2. С.109-110, (доповідач).
17. Кондрик А.И. Влияние примесей и дефектов на электрофизические и детекторные свойства CdTe и CdZnTe // IV Международная конференция «Высококачественные материалы: получение, применение, свойства», 12-15 сентября 2017 г.: материалы докладов / ННЦ ХФТИ. Харьков, Украина. 2017. - С. 59, (доповідач).
18. Кондрик А.И., Ковтун Г.П. Влияние фоновых примесей на свойства $Cd_{1-x}Zn_xTe$ // V Міжнародна науково-практична конференція «Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка», 17-19 травня 2018 р.: тези доповідей / Кременчук, Україна. 2018. С. 35-37, (доповідач).