

А. И. КОНДРИК<sup>1</sup>, д. ф.-м. н. Г. П. КОВТУН<sup>1, 2</sup>

Украина, <sup>1</sup>ННЦ «Харьковский физико-технический институт» НАН Украины,

<sup>2</sup>Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина

E-mail: kondrik@kipt.kharkov.ua

## ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ И СТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ И ДЕТЕКТОРНЫЕ СВОЙСТВА CdTe и CdZnTe

*С помощью компьютерного моделирования рассмотрено влияние легирующих и фоновых примесей, а также их скопленений на электрофизические и детекторные свойства  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  ( $0 \leq x \leq 0,3$ ). Установлены примеси, снижающие эффективность сбора зарядов детекторов ионизирующих излучений на основе  $Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te$ . Установлены условия получения материалов CdZnTe приемлемого детекторного качества.*

*Ключевые слова: CdZnTe, примеси, детекторы, моделирование, глубокие уровни, сбор зарядов.*

Твердотельные детекторы ионизирующих излучений, выполненные на основе высокоомных материалов, могут применяться в сфере контроля безопасности работы ядерных реакторов АЭС. В качестве детекторных материалов можно использовать полуизолирующие полупроводники. Важнейшими электрофизическими свойствами полупроводников, пригодных для детекторов ядерных излучений, являются подвижность электронов  $\mu_n$ , удельное сопротивление  $\rho$  и время жизни неравновесных электронов  $\tau_n$  и дырок  $\tau_p$ , значения которых должны быть как можно больше. Весьма важной характеристикой детектора является эффективность сбора зарядов  $\eta$ . Для оптимальной регистрации гамма- и рентгеновских излучений необходимы детекторы на основе кристаллических материалов с большой атомной массой, поскольку эффективность регистрации гамма-квантов пропорциональна заряду ядра в степени  $n$  ( $4 < n < 5$ ) [1, с. 48]. Такими материалами могут быть соединения на основе CdTe, например  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  ( $0 \leq x < 0,3$ ). Высокоомные полупроводники CdTe и CdZnTe обладают очень хорошими электрофизическими свойствами:  $\rho = 10^9 - 10^{11}$  Ом·см;  $\mu_n = 10^3$  см<sup>2</sup>/(В·с);  $\tau_{n,p} = 10^{-5} - 10^{-6}$  с, однако их широкому применению мешают некоторые проблемы, в числе которых — трудность точного измерения и контроля примесного и дефектного состава, который оказывает решающее влияние на свойства материалов. Кроме того, существует проблема достижения высокого спектрального разрешения и эффективности сбора зарядов детекторов. Также у разных производителей при использовании сходных технологий получают изделия с различным составом и характеристиками. К тому же у исследователей нет еди-

ного мнения относительно идентификации энергетических уровней примесей и дефектов в материалах CdZnTe.

Перечисленные трудности связаны с рядом причин. Во-первых,  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  спектроскопического качества должны обладать очень высоким удельным сопротивлением, что значительно затрудняет работу с ними. Во-вторых, детекторы на основе этих материалов при рабочей температуре ( $T = 300$  К) могут иметь высокие поверхностные токи утечки [2—4]. В-третьих, при проведении измерений постоянно возникает проблема омичности контактов [5, 6]. Наконец, в высокоомных полупроводниках при  $T = 300$  К в условиях сильной компенсации концентрация свободных носителей заряда на 5—6 порядков ниже, чем концентрация ионизованных примесных атомов и дефектов. В этом случае нарушается локальная электронейтральность в решетке и изменяется потенциал окружающего примесного атома, система находится в неравновесном состоянии, а под воздействием внешних факторов, например температуры, давления, меняется электронная структура дефектов решетки и условия взаимодействия дефектов с носителями заряда, перестраиваются глубокие уровни примесных атомов и дефектов. Это означает, что каждому квазиравновесному состоянию решетки соответствуют определенные энергетические уровни, поэтому в разных исследованиях, в зависимости от степени компенсации материала и условий эксперимента, примесные атомы могут вносить в запрещенную зону материала различные энергетические уровни [7].

Все описанные проблемы способны существенно исказить результаты измерений характеристик уровней, а также их идентификацию.

Авторами был проведен подробный анализ публикаций, посвященных экспериментальному исследованию свойств энергетических уровней в CdTe и CdZnTe, и определен типичный состав  $Cd_{1-x}Zn_xTe$ , который приводился разными исследователями (см., например, [8–10]).

Для получения монокристаллов детекторного качества требуется знание зависимостей электрофизических и детекторных свойств материала от содержания в нем примесей и структурных несовершенств. Учитывая трудности и проблемы, возникающие при экспериментальных исследованиях этих зависимостей, в качестве дополнительного инструмента можно применять моделирование с использованием хорошо апробированных физических моделей. Экспериментальные измерения скорости межзонной рекомбинации в широкозонных полупроводниках, в частности в CdTe [11], доказывают, что на время жизни неравновесных носителей заряда и, следовательно, на эффективность сбора зарядов в детекторах на основе этих материалов решающее влияние оказывает захват и рекомбинация электронов и дырок на глубоких уровнях примесей и дефектов. По этой причине наиболее приемлемой моделью для оценки времени жизни неравновесных носителей заряда в CdTe и CdZnTe можно считать теорию рекомбинации Шокли — Рида — Холла. Исследование влияния примесных элементов, содержащихся в исходных компонентах, и дефектов структуры, возникающих в процессе получения монокристаллов, на электрофизические и детекторные свойства CdZnTe поможет подобрать режимы технологических процессов глубокого рафинирования Cd, Zn, Te и определить оптимальные условия выращивания детекторного материала, поскольку уже известны технологические приемы, позволяющие в определенной мере управлять содержанием электрически активных примесей и собственных дефектов [12–14].

Целью настоящей работы было исследование методом компьютерного моделирования характера воздействия фоновых примесей и структурных дефектов на электрофизические и детекторные свойства  $Cd_{1-x}Zn_xTe$ .

### Модель для исследований и исходный состав образцов

В основу расчетов была положена многоуровневая модель компенсации, которая выражается уравнением электронейтральности для произвольного количества примесей и дефектов:

$$n_0 - p_0 + \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{m_i} GN_i(j - m_i) + N_a - N_d = 0, \quad (1)$$

$$\text{где } G = \frac{g_{ij} \exp \left[ \beta \left( jF - \sum_{s=1}^j \varepsilon_{is} \right) \right]}{g_{io} \left\{ 1 + \sum_{s=1}^{m_i} \frac{g_{is}}{g_{io}} \exp \left[ \beta \left( sF - \sum_{r=1}^s \varepsilon_{rs} \right) \right] \right\}};$$

$n_0, p_0$  — концентрация свободных электронов и дырок;

$N$  — суммарное количество примесей и дефектов (центров);

$N_i, m_i$  — концентрация и зарядовое состояние  $i$ -го центра;

$d_i, a_i$  — количество донорных и акцепторных уровней  $i$ -го центра,  $d_i + a_i = m_i$ ;

$\varepsilon_{ij}$  —  $j$ -й уровень энергии  $i$ -го центра,  $1 \leq j \leq m_i$ ;

$r, s$  — индексы суммирования;

$N_a, N_d$  — суммарные концентрации мелких акцепторов и мелких доноров;

$g_{ij}$  — кратность вырождения  $j$ -го уровня примеси или дефекта сорта  $i$ ;

$g_{io}$  — кратность вырождения основного уровня  $i$ -го центра;

$F$  — положение уровня Ферми;

$\beta = 1/(kT)$ ;

$k$  — постоянная Больцмана;

$T$  — абсолютная температура.

Модель компенсации, описываемая уравнением (1), позволяет проводить количественные расчеты концентрации свободных носителей заряда для полупроводника, в матрице которого находится  $N$  мелких и глубоких многозарядных центров.

Анализ уравнения (1) показывает, что оно всегда имеет единственное решение, поэтому решалось численно относительно уровня Ферми методом дихотомии с последующим вычислением концентраций свободных носителей заряда:

$$n_0 = 2 \left( \frac{2\pi m_n kT}{h^2} \right)^{3/2} \times \quad (2)$$

$$\times \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{1 + \exp[\beta(x - F + E_c)]};$$

$$p_0 = 2 \left( \frac{2\pi m_p kT}{h^2} \right)^{3/2} \times \quad (3)$$

$$\times \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{1 + \exp[\beta(x + F - E_v)]};$$

где  $m_n, m_p$  — эффективная масса электронов и дырок;

$E_c, E_v$  — значения энергии дна зоны проводимости и потолка валентной зоны;

$h$  — постоянная Планка.

Концентрация ионизованных и нейтральных центров вычислялась как произведение концентрации соответствующего  $i$ -го центра на вероятность  $f_{ij}$  того, что на нем находится  $j$  электронов:

$$f_{ij} = Ag_{ij} \exp \beta \left( jF + \sum_{s=1}^j \varepsilon_{is} \right),$$

$$\text{где } A = \left[ 1 + \sum_{s=1}^{m_i} \frac{g_{ij}}{g_{i0}} \exp \beta \left( sF + \sum_{j=1}^s \varepsilon_{ij} \right) \right]^{-1}.$$

При этом заряд  $i$ -го центра равен  $-e(j-d_i)$ , поскольку для одно-, двух-, трехзарядного донора  $d_i = 1, 2, 3$ , а для соответствующих акцепторных центров  $d_i = 0$ .

Подвижность электронов  $\mu_n$  определялась в  $\tau$ -приближении с учетом различных механизмов рассеяния:

$$\frac{1}{\tau} = \sum_k \frac{1}{\tau_k},$$

где  $\tau_k$  — характерное время релаксации импульса для отдельных механизмов рассеяния.

Исследования проводили с учетом механизмов рассеяния на ионизованных и нейтральных центрах, акустических фононах, пьезоэлектрических фононах, неполярных оптических фононах при использовании соответствующих моделей из [15, глава VI], без учета искажений и поляризаций решетки. Парциальную подвижность при рассеянии на полярных оптических фононах рассчитывали по формуле (7) из [16]. Модель для расчета парциальной подвижности  $\mu_{sc}$  при рассеянии на неоднородностях легирования взята из [17]:

$$\mu_{sc} = \frac{e}{N_s A (2km_n T)^{1/2}},$$

где  $N_s$  — концентрация кластеров;

$B$  — эффективная площадь поперечного сечения рассеяния кластера.

Итоговое выражение для расчета подвижности электронов выглядит следующим образом:

$$\mu_n = \left( \frac{300m_n \int_0^\infty E^{3/2} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dE}{e \int_0^\infty E^{3/2} \left( \sum_k \frac{1}{\tau_k} \right)^{-1} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dE} + \sum_l \frac{1}{\mu_l} \right)^{-1}.$$

Здесь индекс  $k$  указывает на механизмы, для которых принятые модели определяют время релаксации импульса, а индекс  $l$  — на те, что описывают парциальную подвижность в аналитическом виде.

Подвижность дырок  $\mu_p$  принималась неизменной и равной  $70 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ .

Затем вычислялось удельное сопротивление

$$\rho = \frac{1}{e(n_0\mu_n + p_0\mu_p)}.$$

Время жизни неравновесных носителей заряда определялось по модели Шокли — Рида — Холла [15, с. 310–316], эффективность сбора зарядов детектора — по уравнению Хехта [1, с. 489]

$$\eta(d_0) = \frac{\mu_n U \tau_n}{L^2} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{(L-d_0)L}{\mu_n U \tau_n}\right) \right] + \frac{\mu_p E \tau_p}{L} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{Ld_0}{\mu_p U \tau_p^+}\right) \right], \quad (4)$$

где  $L$  — расстояние между электродами;

$\tau_n, \tau_p$  — среднее время дрейфа, соответственно, неравновесных электронов и дырок, которое приравнивалось к среднему времени жизни неравновесных носителей заряда;

$d_0$  — координата точки возникновения неравновесных носителей заряда, отсчитываемая от катода;

$U$  — напряжение между электродами детектора.

Модели позволяют вычислять  $\mu_n, \rho, \tau_n, \tau_p$ , эффективность сбора зарядов  $\eta$ . Вводными параметрами при этом служат опубликованные в технической литературе экспериментально измеренные характеристики: состав и концентрация примесей и дефектов, положения их уровней энергии в запрещенной зоне, сечение захвата этими уровнями неравновесных носителей заряда.

Достоверность принятого подхода получила хорошее подтверждение при сравнении результатов моделирования с хорошо известными экспериментальными данными по величинам  $\rho, \mu_n$  для CdTe и CdZnTe, а также с результатами работ [18–20]. Это можно увидеть на рис. 1, где приведены результаты вычислений, выполненных в рамках принятых моделей, и эксперимента, проведенного на образце Cd<sub>0,9</sub>Zn<sub>0,1</sub>Te в [19].

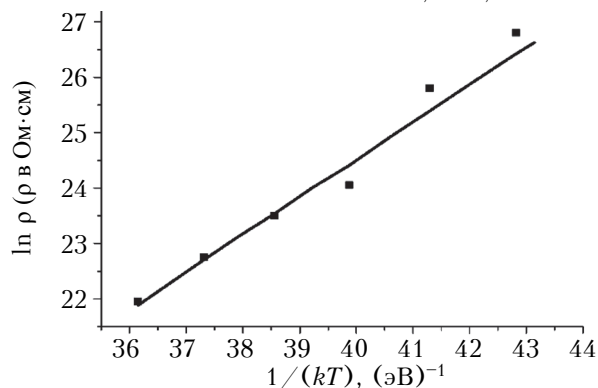


Рис. 1. Зависимость удельного сопротивления Cd<sub>0,9</sub>Zn<sub>0,1</sub>Te:In от  $1/(kT)$ , полученная при вычислениях в рамках принятых моделей (точки — экспериментальные данные [19])

Типичный состав образцов CdTe и Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te [9, 10]

Уровень	N <sub>d</sub> (Cl)	Ag <sub>Cd</sub>	As <sub>Te</sub>	P <sub>Te</sub>	V <sub>Cd</sub> <sup>-</sup> Cl <sub>Te</sub>	V <sub>Cd</sub> <sup>-</sup> related	V <sub>Te</sub> <sup>-</sup> related	Zn- related	V <sup>2-</sup> <sub>Cd</sub>	V <sub>Te</sub> <sup>+</sup>	H <sub>1</sub> <sup>+</sup>	H <sub>2</sub> <sup>2-</sup>
Концентрация, 10 <sup>14</sup> см <sup>-3</sup>	см. рис. 2	50	50	50	5	5	10	50	10	35	200	8

При вычислениях было получено  $\tau_n \approx \tau_p \approx 10^{-6}$  с, что совпадает с хорошо известными значениями этих величин для CdTe и Cd<sub>0,9</sub>Zn<sub>0,1</sub>Te. В [19] методом кривых Аррениуса определено положение уровня Ферми  $F$ , равное 0,73 эВ, а в результате численного решения уравнения (1) относительно  $F$ , было получено значение 0,74 эВ. Таким образом, правомочность применения принятых моделей для количественных исследований электрофизических свойств Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te ( $0 \leq x \leq 0,3$ ) очевидна.

Достоверность результатов исследований детекторных свойств находится в пределах применимости уравнения (4), которое учитывает захват неравновесных носителей заряда на уровнях ловушек, но не учитывает тот факт, что некоторая их часть может высвобождаться с этих уровней путем эмиссии в соответствующие зоны.

В запрещенной зоне Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te обычно присутствует глубокий уровень донора. Согласно современным представлениям это может быть теллур на месте кадмия Te<sub>Cd</sub> или же теллур в междоузлии Te(I). Также есть вакансии теллура V<sub>Te</sub>, акцепторные уровни вакансий кадмия V<sub>Cd</sub> и вакансий цинка V<sub>Zn</sub>. Кроме того, имеются мелкие акцепторные уровни комплексов V<sub>Cd</sub> с примесями, а также мелкие акцепторные уровни примесей замещения Ag<sub>Cd</sub>, As<sub>Te</sub>, P<sub>Te</sub>. Для компенсации акцепторных уровней и достижения высокоомного состояния материал легируется одним из мелких доноров, таких как Cl, I, In, Al. Типичный состав образцов CdTe и CdZnTe, представлен в **таблице** (здесь сохранены обозначения, использованные в [9, 10]). Аналогичные данные были также опубликованы в [8] и в некоторых других работах.

В ряде работ (см., например, [9]) экспериментально зарегистрированы фоновые примеси (Ti, V, Cr, Fe, Co, Ni, Cu, Sn, Pb, Ge), которые могут содержаться в исходных компонентах и загрязнять матрицу Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te при его получении. Эти примеси, за исключением Cr, выступают в роли глубоких доноров.

### Результаты моделирования электрофизических и детекторных свойств

Материал детекторного качества в первую очередь должен обладать высоким удельным сопротивлением, поэтому сначала было смоделировано поведение  $\rho$  в зависимости от концентрации ( $N_{DD}$ ) и энергии ( $E_{DD}$ ) глубокого доно-

ра. Было установлено, что в образовании области высокоомного состояния важную роль играет глубокий донор и что для достижения значения  $\rho \approx 10^{10}$  Ом·см в CdTe и Cd<sub>0,9</sub>Zn<sub>0,1</sub>Te необходимо присутствие глубокого донора с энергией  $E_{DD} \approx 0,8$  эВ. Установлено также, что характер поведения удельного сопротивления материалов Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te при  $0 \leq x \leq 0,3$  качественно сходен, различия заключаются только в величине  $\rho$ .

Из анализа **рис. 2, а, в** видно, что увеличение в пять раз концентрации глубокого донора  $N(X)$  приводит к существенному расширению области высокоомного состояния. В ряде опубликованных экспериментальных работ (см., например, [8, 10, 17]) отмечается, что кроме примесей ( $M$ ) в качестве глубокого донора ( $X$ ) могут выступать также антиструктурные дефекты: теллур на месте кадмия Te<sub>Cd</sub>, теллур в междоузлии Te(I) или их комплексы с примесями  $M - Te_{Cd}$ ,  $M - Te(I)$ . Большое удельное сопротивление полупроводников достигается при выполнении условий компенсации некомпенсированной части акцепторов ионизированными глубокими донорами, т. е. при выполнении условия  $N_{DD}^+ > (N_{DA}^- - N_D^+ + N_A^-)$ , где  $N_{DD}^+$ ,  $N_{DA}^-$  – суммарные концентрации ионизированных глубоких доноров и акцепторов,  $N_D^+$ ,  $N_A^-$  – то же самое для мелких доноров и акцепторов.

Анализ **рис. 2, б, г** показывает, что в условиях предполагаемого в модели однородного распределения примесей по объему кристалла существенное (на порядок) увеличение концентрации примесей вплоть до  $5 \cdot 10^{16}$  см<sup>-3</sup> не вызывает значительного изменения подвижности электронов  $\mu_n$ . Кроме того, ее величина близка к известному значению  $\mu_n \approx 10^3$  см<sup>2</sup>/(В·с). Однако, как видно из **рис. 3**, на подвижность электронов весьма заметно влияет скопление примесей, и при  $T = 300$  К, т. е. при рабочей температуре детектора, увеличение концентрации примесных кластеров на порядок приводит к тому, что значение  $\mu_n$  снижается в разы. Кроме того, примесные кластеры деформируют кристаллическую решетку (с эффектом поляризации), что, очевидно, приведет к еще большему снижению  $\mu_n$ . Аналогичным образом на подвижность электронов влияют искажающие решетку скопления дефектов.

Фоновые примеси влияют не только на электрофизические свойства CdZnTe, но и на детек-

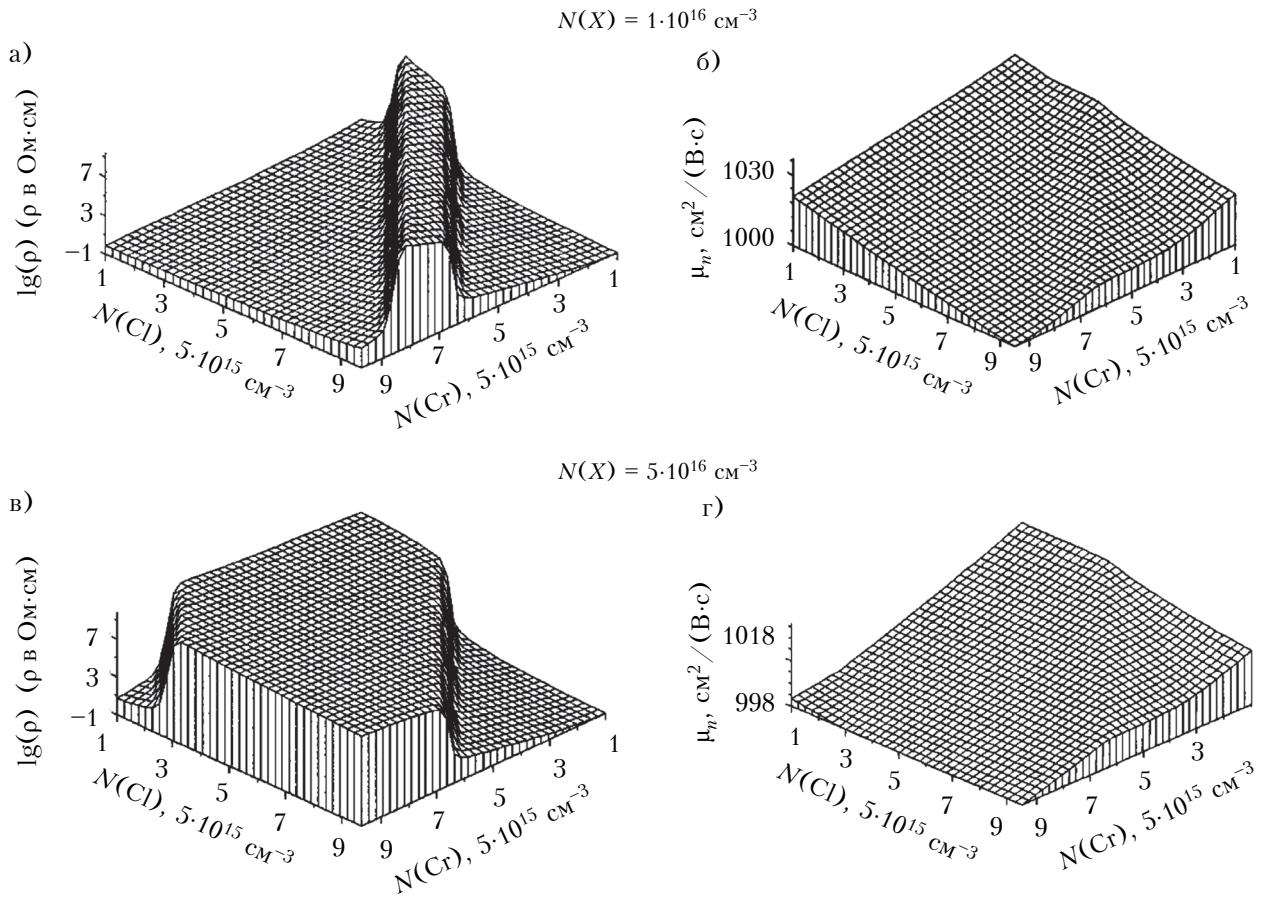


Рис. 2. Зависимости удельного сопротивления  $\rho$  (а, б) и подвижности электронов  $\mu_n$  (б, г) CdTe от концентрации легирующей примеси  $N(Cl)$  и фоновой примеси  $N(Cr)$ , полученные при разной концентрации фоновой примеси  $N(X)$  с энергией 0,8 эВ

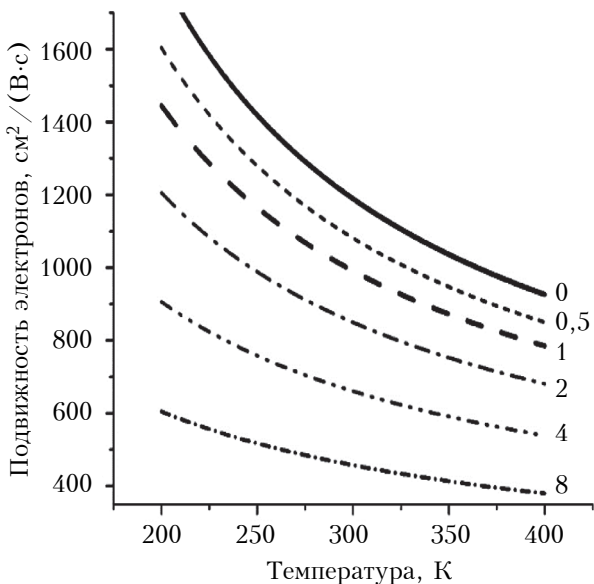


Рис. 3. Температурные зависимости подвижности электронов  $\mu_n$  в  $Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te:Al$  при различных значениях концентрации примесных кластеров с поперечным сечением  $1 \cdot 10^{-6} \text{ см}^2$  (концентрация кластеров указана возле кривых, ед. изм. « $10^{11} \text{ см}^{-3}$ »)

торные. Это продемонстрировано на рис. 4, а, где видно, что заметно ухудшают эффективность сбора зарядов детектора  $\eta$  такие примеси, как Ti, V, Ge, Ni, Sn. Судить о причинах такого ухудшения детекторных свойств можно из анализа рис. 4, б, который показывает, что при загрязнении кристалла примесями Cr, Co, V и Sn уровень Ферми проходит вблизи энергетического уровня вакансии кадмия  $V_{Cd}$ , на котором и происходит захват и рекомбинация неравновесных носителей заряда. По сравнению с другими структурными дефектами именно вакансии кадмия особенно сильно ухудшают эффективность сбора зарядов, что соответствует общепринятым представлениям. При этом на величину  $\eta$  оказывает также влияние захват и рекомбинация неравновесных зарядов на уровнях Ti, V, Ge, Ni, Sn, но это влияние значительно меньше, чем на уровне  $V_{Cd}$ .

Порядок величины концентрации фоновых примесей и дефектов, измеренной в [20], составляет  $10^{13} - 10^{14} \text{ см}^{-3}$ . Моделирование показало, что детекторные свойства материала заметно ухудшаются при концентрации вредных приме-

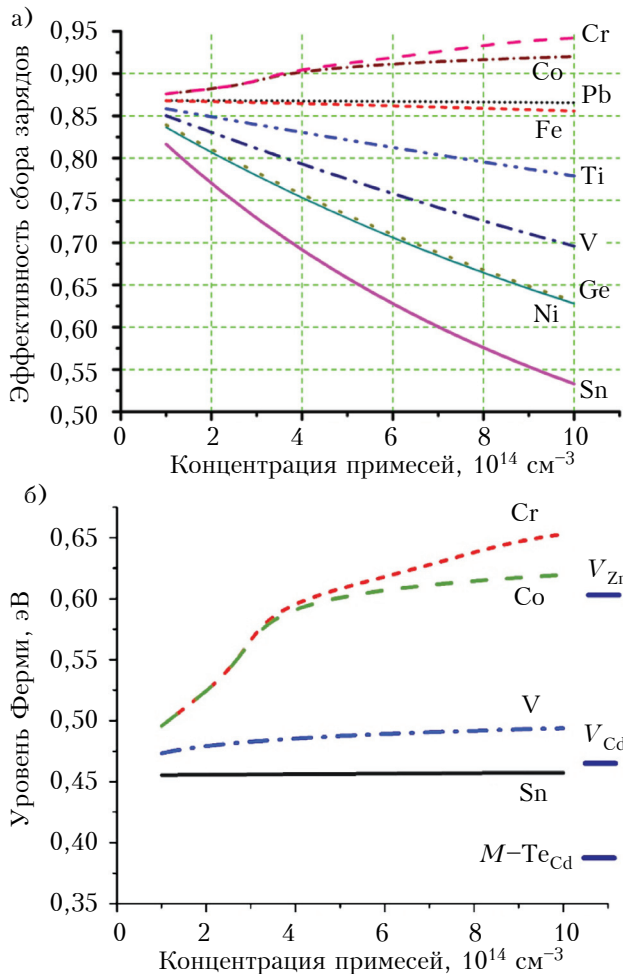


Рис. 4. Зависимость эффективности сбора заряда детектора (а) и уровня Ферми (б) в  $Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te:Al$  от содержания фоновых примесей (состав образца для моделирования взят из [21] для необлученного материала)

сей выше  $(1-2) \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ , а их предельная концентрация (выше которой заметно падает эффективность сбора зарядов) увеличивается с увеличением концентрации остальных фоновых примесей и дефектов, что объясняется совокупным влиянием всех фоновых примесей на уровень Ферми. Таким образом, если технологии рафинирования и выращивания позволяют получить кристалл  $CdZnTe$  с определенной концентрацией «фона», то следует позаботиться о том, чтобы содержание перечисленных вредных примесей не превышало указанного фонового уровня, а еще лучше — было ниже его.

**Заключение**

Проведенные исследования показали, что фоновые примеси и дефекты, выполняющие роль глубоких доноров, расширяют высокоомную область и увеличивают удельное сопротивление  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  ( $0 \leq x \leq 0,3$ ) при увеличении их энергии в запрещенной зоне относительно дна

зоны проводимости вплоть до 0,8 эВ для  $CdTe$  и  $Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te$ . Для получения  $CdTe$  и  $CdZnTe$  с хорошими электрофизическими свойствами необходимо стремиться получить материал с однородным распределением по объему примесей (примесных кластеров) и дефектов, поскольку это существенно влияет на подвижность электронов в исходном  $Cd_{1-x}Zn_xTe$ . В таком случае их суммарная концентрация может достигать  $10^{16} \text{ см}^{-3}$  без заметного снижения подвижности электронов. При этом следует понизить содержание фоновых примесей Ag, P, As — в таком случае высокоомного состояния материала можно достичь при меньшем количестве легирующего мелкого донора (Cl, I, In, Al), присутствие которого способствует образованию комплексов, приводящих к снижению удельного сопротивления.

С целью улучшения детекторных свойств исследованных материалов необходимо увеличить эффективность сбора заряда, которая зависит от времени жизни неравновесных электронов. Поскольку последнее связано с рекомбинацией неравновесных электронов на вакансиях кадмия  $V_{Cd}$  [11], следует снизить концентрацию  $V_{Cd}$ , а также фоновых примесей Ti, V, Ni, Cr, Sn, поскольку они смещают уровень Ферми в окрестность энергетического уровня  $V_{Cd}$ , заметно увеличивая рекомбинацию на нем. При этом следует учитывать, что облучение детекторов на основе  $CdTe$  и  $CdZnTe$  приводит к повышению содержания вакансий кадмия и вакансий цинка, которые могут образовывать комплексы с легирующими и фоновыми примесями. Уровни энергии таких комплексов находятся вблизи валентной зоны, и при больших дозах облучения уровень Ферми смещается в направлении к ней, вследствие чего заметно снижается удельное сопротивление и появляются большие токи утечки.

Приведенные рекомендации направлены на помощь технологам в получении  $CdTe$  и  $CdZnTe$  высокого детекторного качества.

**ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ**

1. Glenn F. Knoll Radiation detection and measurement. — John Wiley & Sons, Inc., 2010.
2. Pekarek J., Belas E., Zazvorka J. Long-term stable surface treatments on CdTe and CdZnTe radiation detectors // Journal of Electronic Materials. — 2017. — Vol. 46, № 4. — P. 1996–2002. — <http://dx.doi.org/10.1007/s11664-016-5065-5>
3. Kim K. H., Hwang S., Fochuk P., Nasi L. et al. The effect of low-temperature annealing on a CdZnTe detector // IEEE Transactions on Nuclear Science. — 2016. — Vol. 63, № 4. — P. 2278–2282. — <http://dx.doi.org/10.1109/TNS.2016.2583546>
4. Reihon M., Franc J., Zazvorka J., Dedic V. Influence of low temperature annealing on Schottky barrier height and surface electrical properties of semiinsulating CdTe // Semiconductor Science and Technology. — 2017. — Vol. 32, №8. — P. 085007–1-6. — <http://dx.doi.org/10.1088/1361-6641/aa7500>

5. Bell S. J., Baker M. A., Duarte D. D., Schneider A. et al. Performance comparison of small-pixel CdZnTe radiation detectors with gold contacts formed by sputter and electroless deposition // Journal of Instrumentation. – 2017. – Vol. 12. – P. 06015–1–10. – <https://doi.org/10.1088/1748-0221/12/06/P06015>
6. Bell S. J., Baker M. A., Duarte D. D. et al. Characterization of the metal semiconductor interface of gold contacts on CdZnTe formed by electroless deposition // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2015. – Vol. 48. – P. 275304–275317. – <http://dx.doi.org/10.1088/0022-3727/48/27/275304>
7. Садуллаев А. Б. Состояние примесных атомов с глубокими уровнями в полупроводниках в условиях сильной компенсации // Молодой ученый. – 2011. – Т. 1, № 12. – С. 48–50. – <https://moluch.ru/archive/35/3956/>
8. Ruihua Nan, Tao Wang, Gang Xu, Man Zhu, Wanqi Jie. Compensation processes in high-resistivity CdZnTe crystals doped with In/Al // Journal of Crystal Growth. – 2016. – Vol. 451. – P. 150–154. – <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2016.07.032>
9. Hofmann D. M., Stadler W., Christmann P., Meyer B. K. Defects in CdTe and Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. – 1996. – Vol. 380, iss. 1–2. – P. 117–120. – [http://dx.doi.org/10.1016/S0168-9002\(96\)00287-2](http://dx.doi.org/10.1016/S0168-9002(96)00287-2)
10. Castaldini A., Cavallini A., Fraboni B. et al. Deep energy levels in CdTe and CdZnTe // J. Appl. Phys. – 1998. – Vol. 83, iss. 4. – P. 2121–2126.
11. 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<sup>II</sup>B<sup>VI</sup> and A<sup>I</sup>B<sup>VII</sup> types // Russian Chemical Bulletin. – 2007. – Vol. 56, № 5. – P. 890–894. – <https://doi.org/10.1007/s11172-007-0134-9>
12. Колобов Г.А., Карпенко А.В. Рафинирование легких редких, редкоземельных и радиоактивных металлов // Вопросы атомной науки и техники. – 2016. – № 1. – С. 3–9.
13. Деярых Г. Г. Разработка высококачественных материалов // В сб.: Сучасне матеріалознавство XXI сторіччя. – Київ: Наукова думка, 1998.
14. Ажажа В. М., Ковтун Г. П., Неклюдов И.М. Комплексный подход к получению высококачественных материалов для электроники // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 2002. – № 6. – С. 3–6.
15. Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. – Москва: Наука, 1990.
16. Segall B., Lorenz M.R., Halsted R.E. Electrical Properties of n-Type CdTe // Physical Review. – 1963. – Vol. 129, № 6. – P. 2471–2481.
17. Faulkner R. A. Toward a Theory of Impurities in Semiconductors // Physical Review. – 1968. – Vol. 175, № 3. – P. 991–1009. – <https://doi.org/10.1103/PhysRev.175.991>
18. Wolf C. M., Stillman G. E., Lindley W. T. Electron mobility in high-purity GaAs // Journal of Applied Physics. – 1970. – Vol. 41, № 7. – P. 3088. – <https://doi.org/10.1063/1.1659368>
19. Ruihua Nan, Wanqi Jie et al. Determination of trap levels in CdZnTe:In by thermally stimulated current spectroscopy // Trans. Nonferrous Met. Soc. China. – 2012. – Vol. 22. – P. 148–152. [http://dx.doi.org/10.1016/S1003-6326\(12\)61700-2](http://dx.doi.org/10.1016/S1003-6326(12)61700-2)
20. Zumbiehl A., Fougères P., Hage-Ali M et al. Resistivity simulation of CdZnTe materials // Journal of Crystal Growth. – 1999. – Vol. 197. – P. 670–674.
21. Ruihua Nan, Wanqi Jie, Gangqiang Zha et al. Irradiation-Induced Defects in Cd<sub>0.9</sub>Zn<sub>0.1</sub>Te:Al // Journ. Electronic Materials, 2012. – Vol. 41, № 11. – P. 2044–2049. <http://dx.doi.org/10.1007/s11664-012-2204-5>

Дата поступления рукописи  
в редакцию 21.01 2019 г.

DOI: 10.15222/ТКЕА2019.5-6.43  
УДК 621.315.592.3

О. І. КОНДРИК<sup>1</sup>, Г. П. КОВТУН<sup>1,2</sup>

Україна, м. Харків, <sup>1</sup>ННЦ «ХФТІ» НАН України,  
<sup>2</sup>Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна  
E-mail: kondrik@kipt.kharkov.ua

## ВПЛИВ ДОМІШОК І СТРУКТУРНИХ ДЕФЕКТІВ НА ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ТА ДЕТЕКТОРНІ ВЛАСТИВОСТІ CdTe ТА CdZnTe

*Твердотільні детектори іонізуючих випромінювань, виконані на основі високоомних напівпровідників, можуть використовуватись в сфері моніторингу безпеки ядерних реакторів. Такі високоомні матеріали, як CdTe і CdZnTe, мають дуже хороші електрофізичні і детекторні властивості. Метою даної роботи було визначення методом комп'ютерного моделювання характеру впливу домішок і структурних дефектів, а також їхніх кластерів на електрофізичні і детекторні властивості Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te (0 ≤ x ≤ 0,3).*

*Обчислення ґрунтувались на добре апробованих моделях, надійність яких підтвердилась при порівнянні результатів моделювання з відомими експериментальними даними. Встановлено, що глибокі донори з рівнем енергії поблизу середини забороненої зони значно розширюють область високоомного стану CdTe та CdZnTe, яка є придатною для створення детекторів випромінювань. Дослідження також дозволили встановити, що на глибоких рівнях вакансій кадмію має місце захоплення та рекомбінація нерівноважних зарядів завдяки дії домішок Ti, V, Ge, Ni, Sn. З цієї причини такі домішки є шкідливими, вони помітно знижують ефективність збору зарядів детекторів на основі CdTe та CdZnTe. Зменшення електронної рухливості в CdTe і CdZnTe може бути спричинене неоднорідним розподілом домішок (домішковими кластерами). За умови рівномірного розподілу домішок в об'ємі кристалу можна досягти прийнятної детекторної якості високоомного CdZnTe у випадку, коли концентрація шкідливих домішок Ti, V, Ni, Sn, Ge не перевищує вміст «фону». Отримані результати можуть допомогти у визначенні умов отримання матеріалів CdTe та CdZnTe високої детекторної якості.*

**Ключові слова:** CdZnTe, детектори, комп'ютерне моделювання, глибокі рівні, збір зарядів.

## INFLUENCE OF IMPURITIES AND STRUCTURAL DEFECTS ON ELECTROPHYSICAL AND DETECTOR PROPERTIES OF CdTe AND CdZnTe

*Solid-state ionizing radiation detectors based on high-resistance semiconductors can be used to monitor the safety of nuclear reactors. High-resistance CdTe and CdZnTe have very good electrophysical and detector properties. The objective of this study was to use computer simulation to determine how impurities and structural defects, as well as their clusters, affect electrophysical and detector properties of Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te (0 ≤ x ≤ 0.3). The calculations were based on well-tested models, the reliability of which was confirmed when comparing simulation results with well-known experimental data. It has been established that deep donors with energy levels near the middle of the band gap considerably extend the area of the high-resistance state of CdTe and CdZnTe, which is suitable for the creation of radiation detectors. The capture and recombination of non-equilibrium charge carriers occurs at the deep levels of cadmium vacancies owing to the influence of Ti, V, Ge, Ni, and Sn impurities. For this reason, such impurities are considered to be harmful, noticeably reducing the efficiency of charge collection η in CdTe and CdZnTe detectors. The decrease of electron mobility in CdTe and CdZnTe can be caused by the distribution heterogeneity of impurities (impurity clusters). When concentration of harmful impurities Ti, V, Ni, Sn, Ge does not exceed the content of the "background", provided that the impurities are distributed over the crystal uniformly, it is possible to obtain high-resistance CdZnTe of an acceptable detector quality. The obtained results could help determining conditions for producing CdTe and CdZnTe materials of high detector quality.*

**Keywords:** CdZnTe, detectors, computer simulation, deep levels, charges collection.

### REFERENCES

- Knoll G. F. *Radiation Detection and Measurement*. 4<sup>th</sup> edition, John Wiley&Sons, Inc., 2010, 829 p.
- Pekarek J., Belas E., Zazvorka J. Long-term stable surface treatments on CdTe and CdZnTe radiation detectors. *Journal of Electronic Materials*, 2017, vol. 46, no. 4, pp. 1996–2002. <http://dx.doi.org/10.1007/s11664-016-5065-5>
- Kim K. H., Hwang S., Fochuk P. et al. The effect of low-temperature annealing on a CdZnTe detector. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 2016, vol. 63, no. 4, pp. 2278–2282. <http://dx.doi.org/10.1109/TNS.2016.2583546>
- Reihon M., Franc J., Zazvorka J., Dedic V. Influence of low temperature annealing on Schottky barrier height and surface electrical properties of semiinsulating CdTe. *Semiconductor Science and Technology*, 2017, vol. 32, no. 8, pp. 085007–1–6. <http://dx.doi.org/10.1088/1361-6641/aa7500>
- Bell S. J., Baker M. A., Duarte D. D., Schneider A. et al. Performance comparison of small-pixel CdZnTe radiation detectors with gold contacts formed by sputter and electroless deposition. *Journal of Instrumentation*, 2017, vol. 12, pp. 06015–1–10. <https://doi.org/10.1088/1748-0221/12/06/P06015>
- Bell S. J., Baker M. A., Duarte D. D. et al. Characterization of the metal semiconductor interface of gold contacts on CdZnTe formed by electroless deposition. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2015, vol. 48, pp. 275304–275317. <http://dx.doi.org/10.1088/0022-3727/48/27/275304>
- Sadullaev A. B. [State of impurity atoms with deep layers in semiconductors under strong compensation conditions]. *Molodoi Uchenyi*, 2011, vol. 1, no. 12, pp. 48–50. <https://moluch.ru/archive/35/3956/> (Rus)
- Ruihua Nan, Tao Wang, Gang Xu et al. Compensation processes in high-resistivity CdZnTe crystals doped with In/Al. *Journal of Crystal Growth*, 2016, vol. 451, pp. 150–154. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2016.07.032>
- Hofmann D. M., Stadler W., Christmann P., Meyer B. K. Defects in CdTe and Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A*, 1996, vol. 380, iss. 1–2, pp. 117–120. [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(96\)00287-2](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(96)00287-2)
- Castaldini A., Cavallini A., Fraboni B. et al. Deep energy levels in CdTe and CdZnTe. *J. Appl. Phys*, 1998, vol. 83, iss. 4, pp. 2121–2126.
- Novikov G. F., Radychev N. A. *Russian Chemical Bulletin*, 2007, vol. 56, no. 5, pp. 890–894. <https://doi.org/10.1007/s11172-007-0134-9> (Rus)
- Kolobov G. A., Karpenko A. V. [Refining of light, rare, rare-earth and radioactive metals]. *Voprosy Atomnoi Nauki i Tekhniki*, 2016, no. 1, pp. 3–9. (Rus)
- Devyatykh G. G. [Developing high-clean materials]. In collection: *Suchasne Materialoznavstvo XXI Storichchya*. Kiyiv, Naukova dumka, 1998, 658 p. (Ukr)
- Azhazha V. M., Kovtun G. P., Neklyudov I. M. [Complex approach to producing high-clean materials for electronics]. *Tekhnologiya i Konstruirovaniye v Elektronnoi Apparature*, 2002, no. 6, pp. 3–6. (Rus)
- Bonch-Bruevich V. L., Kalashnikov S. G. *Fizika poluprovodnikov* [Semiconductor physics]. Moscow. Nauka, 1990, 685 p. (Rus)
- Segall B., Lorenz M. R., Halsted R. E. Electrical properties of n-type CdTe. *Physical Review*, 1963, vol. 129, no. 6, pp. 2471–2481.
- Faulkner R. A. Toward a theory of impurities in semiconductors. *Physical Review*, 1968, vol. 175, no. 3, pp. 991–1009. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.175.991>
- Wolf C. M., Stillman G. E., Lindley W. T. Electron mobility in high-purity GaAs. *Journal of Applied Physics*, 1970, vol. 41, no. 7, pp. 3088. <https://doi.org/10.1063/1.1659368>
- Ruihua Nan, Wanqi Jie et al. Determination of trap levels in CdZnTe:In by thermally stimulated current spectroscopy. *Trans. Nonferrous Met. Soc. China*, 2012, vol. 22, pp. 148–152. [https://doi.org/10.1016/S1003-6326\(12\)61700-2](https://doi.org/10.1016/S1003-6326(12)61700-2)
- Zumbiehl A., Fougères P., Hage-Ali M et al. Resistivity simulation of CdZnTe materials. *Journal of Crystal Growth*, 1999, vol. 197, pp. 670–74.
- Ruihua Nan, Wanqi Jie, Gangqiang Zha et al. Irradiation-induced defects in Cd<sub>0.9</sub>Zn<sub>0.1</sub>Te:Al. *Journ. Electronic Materials*, 2012, vol. 41, no. 11, pp. 2044–2049. <https://doi.org/10.1007/s11664-012-2204-5>

### Описание статьи для цитирования:

Кондрик А. И., Ковтун Г. П. Влияние примесей и структурных дефектов на электрофизические и детекторные свойства CdTe и CdZnTe. *Технология и конструирование в электронной аппаратуре*, 2019, №5-6, с. 43–50. <http://dx.doi.org/10.15222/TKEA2019.5-6.43>

### Cite the article as:

Kondrik A. I., Kovtun G. P. Influence of impurities and structural defects on electrophysical and detector properties of CdTe and CdZnTe. *Tekhnologiya i Konstruirovaniye v Elektronnoi Apparature*, 2019, no. 5-6, pp. 43-50. <http://dx.doi.org/10.15222/TKEA2019.5-6.43>