

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

**Кондрик Олександр Іванович**

УДК 621.315.592.3; 539.1.074

**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

**АВТОРЕФЕРАТ**

дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Харків - 2019

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Національному науковому центрі «Харківський фізико-технічний інститут» Національної академії наук України

**Науковий керівник:** доктор фізико-математичних наук, професор **Ковтун Геннадій Прокопович**, начальник лабораторії Напівпровідникових матеріалів, Інститут фізики твердого тіла, матеріалознавства та технологій Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України

**Офіційні опоненти:** доктор фізико-математичних наук, професор, член-кореспондент НАН України **Клепиков В'ячеслав Федорович**, Інститут електрофізики і радіаційних технологій НАН України, директор

доктор фізико-математичних наук, професор **Лазурик Валентин Тимофійович**, Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна Міністерства освіти і науки України, професор кафедри моделювання систем і технологій, декан факультету комп'ютерних наук

Захист дисертації відбудеться «\_\_» \_\_\_\_\_ 2019 р о \_\_ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 64.845.01 Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України за адресою: 61108, м. Харків, вул. Академічна, 1, конференц-зал.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут», за адресою: 61108, м. Харків, вул. Академічна, 1.

Автореферат розісланий «\_\_» \_\_\_\_\_ 2019 р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради Д 64.845.01



Мануйленко О.В.

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** 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  $\rho$  ( $10^8$ – $10^{11}$  Ом·см), рухливості електронів  $\mu_n$  ( $\sim 10^3$  см<sup>2</sup>/В·сек) і часу життя нерівноважних електронів  $\tau_n$  та дірок  $\tau_p$  ( $\sim 10^{-5}$ – $10^{-6}$  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  $\rho$ ,  $\tau$ ,  $\mu_n$  і ефективності збору зарядів  $\eta$  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  $\sigma_i$ , 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  $\mu_n$ ,  $\rho$ ,  $\tau$ , 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  $\rho$ , час життя нерівноважних носіїв заряду  $\tau$ , рухливість електронів  $\mu_n$  в GaAs, CdTe, CdZnTe, а також на ефективність збору зарядів детекторів іонізуючих випромінювань на їх основі.

Для досягнення цієї мети необхідно було вирішити наступні наукові 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  $\rho$  досліджуваних матеріалів з послідовним розрахунком електронної рухливості  $\mu_n$ , часу життя нерівноважних носіїв заряду  $\tau$ , ефективності збору зарядів детекторів  $\eta$  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  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  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  $Cd_{1-x}Zn_xTe$ , 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  $\eta$  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  $\rho$ ,  $\tau$ ,  $\mu$ ,  $\eta$  методом комп'ютерного моделювання вхідними даними слугували параметри неоднорідностей легування і експериментально виміряні та опубліковані в літературі величини  $E_i$ ,  $\sigma_i$ ,  $N_i$  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  $\mu_n$ , концентрації вільних електронів  $n_0$  та дірок  $p_0$  і питомого опору  $\rho$ , 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  $\tau$  в CdTe, CdZnTe і ефективності збору зарядів  $\eta$  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 фононах у GaAs можна представити аналітичним виразом замість чисельного вирішення рівняння Больцмана.

3. Встановлено, що залежності  $\rho$  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  $\rho$  ( $10^{10}$ – $10^{11}$  Ом·см)  $\tau_n$ ,  $\tau_p$  ( $10^{-5}$  сек),  $\mu_n$  ( $1100$  см<sup>2</sup>/(В·сек)); вперше показано, що збільшення ефективності збору зарядів  $\eta$  (~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<sub>0.9</sub>Zn<sub>0.1</sub>Te та  $\gamma$ -опромінення Cd<sub>0.9</sub>Zn<sub>0.1</sub>Te:Al збільшується вміст електрично активних акцепторів, що демонструється зміщенням залежності питомого опору  $\rho$  від концентрації мілкового донора  $N_d$  в бік більших  $N_d$ , причому при дозах опромінення CdTe:Cl і Cd<sub>0.9</sub>Zn<sub>0.1</sub>Te в сотні кГр відбувається зменшення  $\rho$  на 3-4 порядки внаслідок пониження рівня Фермі та зменшення ефективності збору зарядів  $\eta$  внаслідок захоплення нерівноважних носіїв заряду глибоким рівнем радіаційного дефекту  $J$  ( $E_v + 0.53$  eV), а при малих дозах (кілька кГр)  $\gamma$ -опромінення Cd<sub>0.9</sub>Zn<sub>0.1</sub>Te:Al збільшується  $\rho$  і  $\eta$ .

5. Вперше з'ясована причина високої радіаційної стійкості Cd<sub>0.9</sub>Zn<sub>0.1</sub>Te: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  $\rho$ .

**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 [6, 8-11, 13, 14, 16, 17] були 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 [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 [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 фононах, 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 [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 фононах та іонізованих центрах.

В роботі [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 [5, 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  $\mu_n$ ,  $\rho$  і одержання матеріалу високої детекторної якості.

В роботах [7, 15] здобувач провів порівняльний аналіз ефективності збору зарядів  $\eta$  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  $\eta$ , дослідив та встановив концентрації Zn в CdZnTe, що дозволяють використати цей матеріал в детекторах іонізуючих випромінювань.

В роботі [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 [12]; V міжнародна науково-практична конференція «Сучасні інформаційні і електронні технології», м. Одеса, Україна, 2004 [13]; VI міжнародна науково-практична конференція «Сучасні інформаційні і електронні технології», м. Одеса, Україна, 2005 [14]; I Міжнародна науково-практична конференція «Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка», м. Кременчук, Україна, 2011; XV міжнародна науково-практична конференція «Сучасні інформаційні і електронні технології», м. Одеса, Україна, 2014; IV міжнародна конференція «Високочисті матеріали: одержання, застосування, властивості», м. Харків, Україна, 2017; V міжнародна науково-практична конференція «Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка», м. Кременчук, Україна, 2018 р.

**Публікації.** Результати роботи повністю відображено у 18 наукових працях, а саме: у 9 статтях [1-6, 8-10] у спеціалізованих фахових наукових виданнях України, які задовольняють вимогам, що пред'являються до публікацій, на яких ґрунтується дисертація, 2 статтях [7, 11] у спеціалізованих наукових виданнях України, які додатково характеризують дисертацію, 7 матеріалах і тезах доповідей на наукових конференціях [12-18]. Статті [1-6, 8, 10, 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 [1-4, 10] опубліковано у журналах, що входять до Q3 у SJR, а також індексуються Scopus та Web of Science.

**Структура та 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.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ ДИСЕРТАЦІЇ

У **вступі** обґрунтована актуальність теми дисертації, сформульована мета і задачі роботи, показана наукова новизна та практична цінність отриманих результатів, розкритий зв'язок роботи з планами, науковими програмами і темами. Показаний особистий внесок автора в роботу, апробацію результатів дисертації та її структуру.

Досягнення поставленої мети було здійснено в 3 етапи. 1. Визначення фізичних моделей. 2. Встановлення складу глибоких рівнів у  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$  і  $\text{GaAs}$  та їх параметрів для одержання матеріалу високої детекторної якості. 3. Встановлення характеру впливу радіаційних дефектів на зміну і деградацію властивостей детекторів на основі  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ .

У **першому розділі** «Огляд літератури: проблеми дослідження детекторних характеристик і енергетичних рівнів детекторних матеріалів» висвітлено характеристики детекторів іонізуючих випромінювань, властивості детекторних матеріалів, роль фонових та радіаційних дефектів, а також труднощі в ідентифікації та вивченні цих дефектів та відповідних їм рівнів енергії, які утворюються в забороненій зоні при вирощуванні монокристалів  $\text{GaAs}$ ,  $\text{CdTe}$ ,  $\text{CdZnTe}$  та в процесі експлуатації виготовлених з них приладових структур в умовах жорсткого іонізуючого опромінення. Проведено аналіз робіт, присвячених розрахунку та експериментальному вимірюванню таких важливих параметрів рівнів як концентрація  $N_i$ , енергетичне положення  $E_i$ , переріз захоплення  $\sigma_i$  як для щойно вирощених кристалів, так і після дії іонізуючого випромінювання. Висвітлено вплив  $N_i$ ,  $E_i$ ,  $\sigma_i$  глибоких рівнів на електрофізичні властивості, особливо на питомий опір  $\rho$  та час життя нерівноважних електронів  $\tau_n$  та дірок  $\tau_p$ , що визначають реєструвальні властивості детекторів.

Найбільш поширеними сучасними методиками дослідження  $N_i$ ,  $E_i$ ,  $\sigma_i$  є термостимульована струмова спектроскопія TSC (thermally stimulated current spectroscopy), термоелектрична спектроскопія TEES (thermoelectric effect spectroscopy), фото-стимульована струмова нестационарна спектроскопія, PICTS (photo induced current transient spectroscopy). Показано, що опубліковані дані відносно  $N_i$ ,  $E_i$ ,  $\sigma_i$  в  $\text{CdTe}$ ,  $\text{CdZnTe}$  мають помітний розкид по величині у різних авторів, а дуже мілкі енергетичні рівні ( $E_i \leq 0.05$  eV) як правило не піддаються реєстрації вказаними методиками. Серед дослідників нема єдиної думки відносно природи переважної більшості виявлених рівнів енергії.

Параметри ( $N_i$ ,  $E_i$ ,  $\sigma_i$ ) напівпровідникових матеріалів та характеристики детекторів на їх основі можуть зазнавати значних змін під час експлуатації в умовах агресивного радіаційного середовища внаслідок гамма-, рентгенівського та нейтронного опромінення. Були розглянуті роботи, в яких досліджувались умови та основні процеси радіаційного дефектоутворення, як експериментально так і за допомогою обчислень, що враховують ступінь компенсації, тип легуючої домішки, деформації, що виникають в решітці навколо дефектів та їх зарядовий стан.

Вміст домішок та дефектів у  $\text{GaAs}$ ,  $\text{CdTe}$ ,  $\text{CdZnTe}$ , як вихідних так і опромінених у процесі експлуатації, досить складний, що, з урахуванням вищевказаних проблем, значно ускладнює визначення конкретного впливу відповідних енергетичних рівнів на електрофізичні та детекторні властивості цих матеріалів. Крім того, розробка матеріалів для детекторів потребує значних затрат коштів та дорогих матеріалів, тому вельми актуальним є моделювання їх електрофізичних властивостей в залежності від фонових,

технологічних та радіаційно стимульованих дефектів структури. Для обчислення електрофізичних та детекторних характеристик обґрунтована необхідність розробки моделі електричної компенсації для довільної кількості багатозарядних центрів у поєднанні з моделями розсіювання та рекомбінації вільних носіїв заряду та створенням відповідного підходу для визначення  $\mu_n$ ,  $\rho$ ,  $\tau_n$ ,  $\tau_p$ ,  $\eta$ . Обчислення необхідно проводити в широких інтервалах концентрацій домішок та дефектів, в яких можуть виникнути процеси самокомпенсації (СК). Розглянуті основні процеси СК: межа розчинності домішок, генерація власних дефектів решітки, компенсація за допомогою комплексів домішка-дефект, релаксація решітки поблизу атома домішки, перехід домішки з вузла у міжвузловину. Також були розглянуті процеси СК в умовах радіаційного опромінення. В результаті аналізу встановлено, що процеси СК в GaAs, CdTe та CdZnTe не обмежують концентрації електрично активних домішок та дефектів, діапазони зміни яких завжди повністю перекривають високоомну область.

Таким чином, теоретичний розрахунок і експериментальне вимірювання параметрів енергетичних рівнів і електрофізичних властивостей досліджуваних матеріалів не дозволяють визначити їх вплив на характеристики детекторних матеріалів. З цієї причини потрібно додатково застосувати комп'ютерне моделювання для з'ясування залежності необхідних електрофізичних і детекторних властивостей GaAs, CdTe і CdZnTe від вмісту і параметрів енергетичних рівнів як у неопромінених матеріалах, так і в тих, що піддавалися радіаційному опроміненню.

**У другому розділі** «Моделі для описання електрофізичних властивостей вихідних і опромінених GaAs, CdTe, CdZnTe» викладені фізичні та математичні моделі для розрахунку електрофізичних властивостей прямозонних напівпровідників з довільним дефектним складом в залежності від концентрацій дефектів, положення їх рівнів енергії в забороненій зоні та температури. Описана модель електричної компенсації напівпровідників за участю довільної кількості домішок та дефектів різного типу, а саме: одно-, дво- та тризарядних донорів та акцепторів, амфотерних дефектів типу донор-акцептор (DA), двозарядний донор - однозарядний акцептор (DDA), однозарядний донор - двозарядний акцептор DAA. Прийнята модель для розрахунку концентрації іонізованих багатозарядних центрів та вільних носіїв заряду у зоні провідності базується на канонічному розподіленні Гіббса для системи із змінним числом частинок.

Введемо умовні позначення:  $N_i$  - концентрація  $i$ -го центру,  $m_i$  – його зарядовий стан;  $d_i$ ,  $a_i$  - число відповідно донорних та акцепторних рівнів  $i$ -го центру, причому  $d_i + a_i = m_i$ ;  $\varepsilon_{ij}$  -  $j$ -й рівень енергії  $i$ -того центру,  $1 \leq j \leq m_i$ , причому  $\varepsilon_{i0} \equiv 0 \leq \varepsilon_{i1} \leq \varepsilon_{i2} \leq \dots \leq \varepsilon_{imi}$ , а  $\varepsilon_{i0}$  - рівень енергії глибокого центра, на якому відсутні електрони,  $\varepsilon_{i1}$  - рівень глибокого центра, на якому присутній 1 електрон і т.д.;  $\varepsilon_{idi}$  - рівень нейтрального стану донора;  $\varepsilon_{imi}$  - максимально заряджений акцепторний рівень енергії;  $g_{ij}$  - ступінь виродження рівня  $j$  центру  $i$ ;  $n$ ,  $p$  - відповідно концентрація вільних електронів та вільних дірок.  $N_A$  – сумарна концентрація мілких акцепторів;  $N_D$  – сумарна концентрація мілких донорів. Без урахування збуджених станів і відповідно до статистики Гіббса модель дозволяє проводити розрахунки для напівпровідників з практично будь-яким складом матриці напівпровідника, де присутні  $N$  різних центрів і відображається наступним рівнянням електронейтральності:

$$n - p + \sum_i^N \sum_{j=0}^{m_i} N_i(j - d_i) \frac{g_{ij} \cdot \exp \left[ \beta \left( jF - \sum_{s=1}^j \varepsilon_{is} \right) \right]}{g_{io} \cdot \left\{ 1 + \sum_{s=1}^{m_i} \frac{g_{is}}{g_{io}} \exp \left[ \beta \left( sF - \sum_{r=1}^s \varepsilon_{rs} \right) \right] \right\}} + N_A - N_D = 0, \quad (1)$$

де  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ,  $k_B$  - постійна Больцмана,  $T$  - абсолютна температура,  $F$  - положення рівня

Фермі,  $g_{io}$  - кратність виродження основного рівня домішки сорту  $i$ . Для багатозарядних центрів  $d_i$ ,  $a_i = 1, 2, 3 \dots$ . Для амфотерних центрів типу DA  $d_i=1$ ,  $a_i=1$ , типу DDA  $d_i=2$ ,  $a_i=1$ , типу DAA  $d_i=1$ ,  $a_i=2$ . Аналіз рівняння (1) показав, що його ліва частина має монотонний характер зміни без екстремумів і зі зміною  $n$  або  $F$ , один раз змінює знак на протилежний, проходячи через нуль і тому має єдине рішення. Рівняння (1) вирішувалось чисельно методом половинного ділення відносно рівня Фермі  $F$ .

Для розрахунку електронної рухливості  $\mu_n$ , яка визначається розсіюванням на дефектах структури, було взято за основу наближення часу релаксації ( $\tau$ -наближення):

$$\frac{1}{\tau} = \sum_j \frac{1}{\tau_j}, \quad (2)$$

де  $\tau_j$  - характерні часи релаксації для окремих механізмів розсіювання.

Загальна формула для обчислення електронної рухливості :

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

В (3) 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. Враховані механізми розсіювання на фононах, іонізованих та нейтральних центрах, домішкових кластерах, дислокаціях і т.д. Розсіювання електронів на поляризованих оптичних фононах в GaAs непружне, тому  $\tau$ -наближення є неприйнятним і була знайдена емпірична формула для обчислення парціальної рухливості при розсіюванні електронів на полярних оптичних фононах в GaAs. Була також зроблена поправка в модель Брукса-Херрінга для розсіювання на іонізованих центрах шляхом введення додаткового екранування глибокими рівнями.

Питомий опір визначався за формулою:  $\rho = \frac{1}{en\mu_n + ep\mu_p}$ , де  $\mu_n$  і  $\mu_p$  - дрейфові рухливості

відповідно електронів і дірок.  $\mu_n$  можна одержати з (3) при підстановці відповідних параметрів для електронів. Рухливість дірок  $\mu_p$  припускається незмінною.

В сильно компенсованих широкозонних напівпровідниках концентрація глибоких центрів на 5–6 порядків перевищує концентрацію вільних носіїв заряду, а темп міжзонної рекомбінації<sup>1</sup> дуже малий у порівнянні зі швидкістю рекомбінації через глибокі рівні, що відповідають домішкам та дефектам структури, тому для розрахунку

<sup>1</sup> 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  $A_{IV}B_{IV}$  types // Russian Chemical Bulletin. 2007. V. 56. №5. P. 890–894.

часу життя нерівноважних електронів  $\tau_n$  та дірок  $\tau_p$  була прийнята модель Шоклі-Ріда-Холла. Для оцінки ефективності збору зарядів  $\eta$  використовувалось рівняння Хегта, в яке підставлялися обчислені величини  $\mu_n$ ,  $\tau_n$ ,  $\tau_p$ , електричне поле  $E$ , і відстань між електродами. На основі прийнятих та доопрацьованих моделей розраховувались питомий опір  $\rho$ , електронна рухливість  $\mu_n$ , час життя нерівноважних електронів  $\tau_n$  та дірок  $\tau_p$  в прямозонних напівпровідниках GaAs, CdTe, CdZnTe та ефективності збору зарядів  $\eta$  детекторів ядерних випромінювань на їх основі. В ролі вхідних даних для розрахунків виступали величини  $E_i$ ,  $N_i$ ,  $\sigma_i$ , які були виміряні експериментально за допомогою сучасних методик та опубліковані в науково-технічній літературі.

Результати розділу опубліковані в роботах [1, 2] та представлені на конференції [12].

**В третьому розділі** «Електрофізичні властивості неопромінених GaAs, CdTe CdZnTe» спочатку перевірялась правильність обчислень згідно з прийнятими моделями шляхом порівняння з результатами моделювання  $\rho$  і  $\mu_n$  для GaAs, CdTe і CdZnTe, опублікованими в трьох наукових статтях. Результати проведених обчислень повністю збіглися з модельними залежностями, одержаними іншими авторами. Була також встановлена відповідність обчислених  $\mu_n$ ,  $\rho$  при  $T=300$  К для неопромінених високочистих монокристалів GaAs ( $8500 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{сек}$ ,  $10^8 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ ), CdTe ( $1100 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{сек}$ ,  $10^9\text{--}10^{10} \text{ Ом}\cdot\text{см}$ ) і CdZnTe ( $1050 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{сек}$ ,  $10^{10}\text{--}10^{11} \text{ Ом}\cdot\text{см}$ ) відомим експериментальним даним<sup>2,3</sup>. Рис. 1 демонструє на прикладі арсеніду галію хорошу відповідність експерименту<sup>4</sup> (точки) результатам обчислень (суцільна крива) у широкому температурному діапазоні. Таким чином має місце відповідність прийнятих фізичних та математичних моделей реальним процесам в GaAs, CdTe і CdZnTe і дає змогу визначати електрофізичні та детекторні властивості досліджуваних матеріалів у широких діапазонах концентрацій домішок та дефектів.

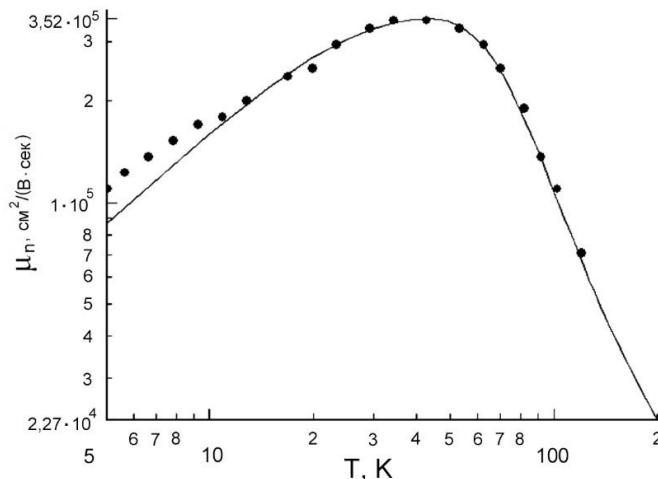


Рис. 1. Залежність  $\mu_n(T)$ .  $N_d = 4,8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ ,  $N_a = 2,13 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ ,  $E_d = 5,52 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$ .

Шляхом обчислень визначався домішковий та дефектний склад, який забезпечує високі величини  $\rho$ ,  $\mu_n$ ,  $\tau_n$ ,  $\tau_p$ , необхідні для детекторів на основі вихідних GaAs, CdTe і

<sup>2</sup> NAN Rui-hua, JIE Wan-qi et al. Determination of trap levels in CZT:In by thermally stimulated current spectroscopy // Trans. Nonferrous Met. Soc. China, 2012. № 22. P. 148-152.

<sup>3</sup> Zumbiehl A., Fougères P. et al. Resistivity simulation of CZT materials // Journal of Crystal Growth, 1999. V. 197. P. 670-674.

<sup>4</sup> Wolf C.M., Stillan G.E., Lindley W.T. Electron mobility in high-purity GaAs // Journal of Applied Physics. 1970. V.41, №7. P.3088-3091.

CdZnTe. Визначений склад домішок та дефектів підтвердився в експериментах, результати яких були опубліковані в технічній літературі<sup>2,4,5</sup>.

Для GaAs визначений помітний вплив власного дефекту EL-2 та домішок на  $\mu_n$  в широкому температурному діапазоні 10–300 К. Знайдено, що вміст дислокацій за умови їх рівномірного розподілу в матриці арсеніду галію практично не впливає на  $\mu_n$ . Виявлений значний вплив неоднорідностей легування (кластерів) на  $\mu_n$ . Так, при їх вмісті  $5 \cdot 10^5 \text{ см}^{-3}$  електронна рухливість зменшується на 25–30%.

Для детекторних матеріалів CdTe і CZnTe найважливішими властивостями є високі величини рухливості  $\mu_n \approx 10^3 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{сек})$ , питомого опору  $\rho \approx 10^9\text{--}10^{11} \text{ Ом} \cdot \text{см}$  і часу життя нерівноважних носіїв заряду  $\tau_n, \tau_p \sim 10^{-6} \text{ сек}$ . Обчислення  $\rho$  для CdTe проводилось з урахуванням початкового вмісту фонових дефектів, що утворюються при вирощуванні сучасними технологіями<sup>6,7</sup>. На рис. 2(а) зображена обчислена залежність  $\rho$  CdTe, що містить фонові дефекти, від концентрації і рівня енергії однозарядного глибокого донора, який позначимо через X. З рисунка видно, що для одержання високоомного стану матеріалу з  $\rho \sim 10^9\text{--}10^{10} \text{ Ом} \cdot \text{см}$  необхідний глибокий донор з рівнем енергії  $\sim 0,8 \text{ еВ}$  і концентрацією  $N(X) > 1,2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ . На рис. 2(б) зображена рухливість в тому ж діапазоні  $N(X)$  і енергій  $E(X)$  глибокого донора X, що і на рис. 2(а). Видно, що  $\mu_n$  слабо залежить від складу домішок та дефектів за умови їх рівномірного розподілу в матриці. Це пояснюється тим, що в CdTe основний вклад в  $\mu_n$  дає механізм розсіювання на полярних оптичних фононах. Згідно з сучасними уявленнями<sup>2</sup> в ролі глибокого донора X може виступати антиструктурний дефект  $\text{Te}_{\text{Cd}}^{2+}$  або Te у міжвузлі.

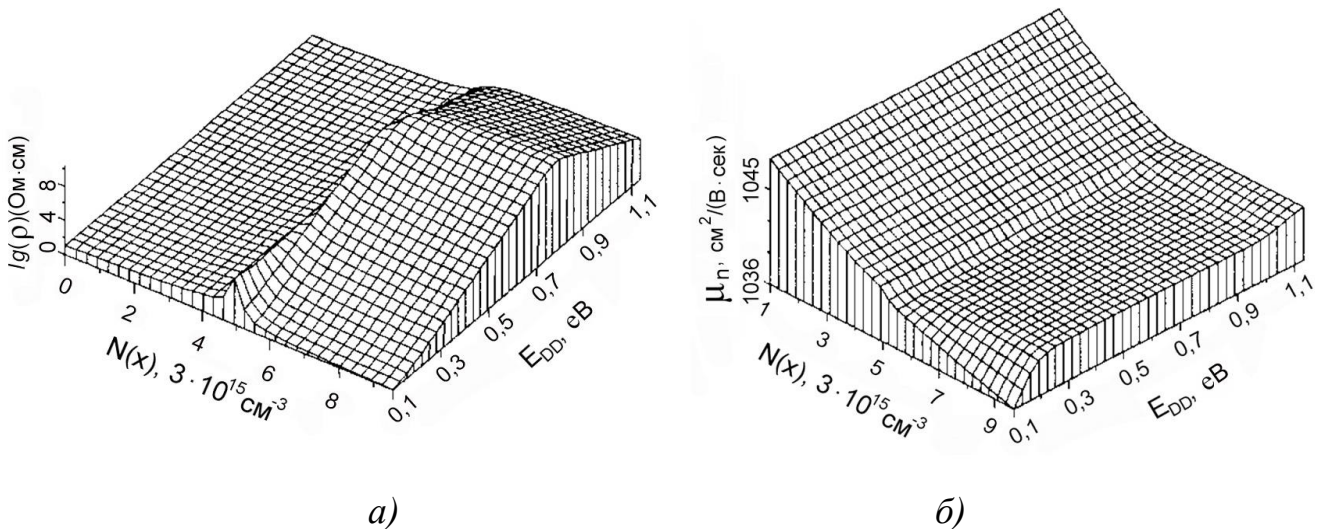


Рис.2.  $\lg(\rho)$  (а) та електронна рухливість (б) в CdTe в залежності від концентрації та рівня енергії однозарядного глибокого донора X при  $T=300 \text{ К}$ . Склад:  $N_D(\text{Cl})=1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ ;  $N_A(\text{Ag}_{\text{Cd}})=0.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ;  $N_A(\text{As}_{\text{Te}})=0.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ;  $N_A(\text{P}_{\text{Te}})=0.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ;  $N_{\text{DA}}(\text{V}_{\text{Cd}})=1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ;  $N_{\text{DD}}(\text{V}_{\text{Te}})=3.5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ . Концентрація донора X змінюється від  $3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$  до  $3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ .

<sup>5</sup> Blakemore J.S. Semiconducting and other major properties of GaAs // Journal of Applied Physics. 1982. Vol. 53, № 10. P. R123 – R181.

<sup>6</sup> Hofmann D. M., Stadler W., Christmann P., Meyer B. K. Defects in CdTe and  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$  // Nuclear Instruments Methods in Physics Research Sec. A. 1996. Vol. 380. P. 117-120.

<sup>7</sup> Castaldini A., Cavallini A., Fraboni B. Deep energy levels in CdTe and CdZnTe // Journal of Applied Physics 1998. Vol. 83, № 4. P. 2121-2126.

В реальних умовах одержання CdTe в його матрицю можуть вноситись домішки ряду металів (Cr, Co), які є глибокими акцепторами. Також при одержанні CdTe в матрицю вносяться фонові дефекти, здебільшого вакансії кадмію  $V_{Cd}$ : однократно заряджені  $V_{Cd}^-$  – мілкі акцептори та двократно заряджені  $V_{Cd}^{2-}$  – глибокі акцептори. Для одержання CdTe детекторної якості в його матрицю додають мілкі донори, наприклад Cl, Al, In, які компенсують мілкі акцептори. Було проведено дослідження залежностей  $\rho$  і  $\mu_n$  від концентрацій Cl і глибокого акцептора на прикладі двократно зарядженого акцептора  $Cr^{2-}$  з енергією  $E_V + 1.34$  eV для різного вмісту  $N(X)$ , рис. 3.

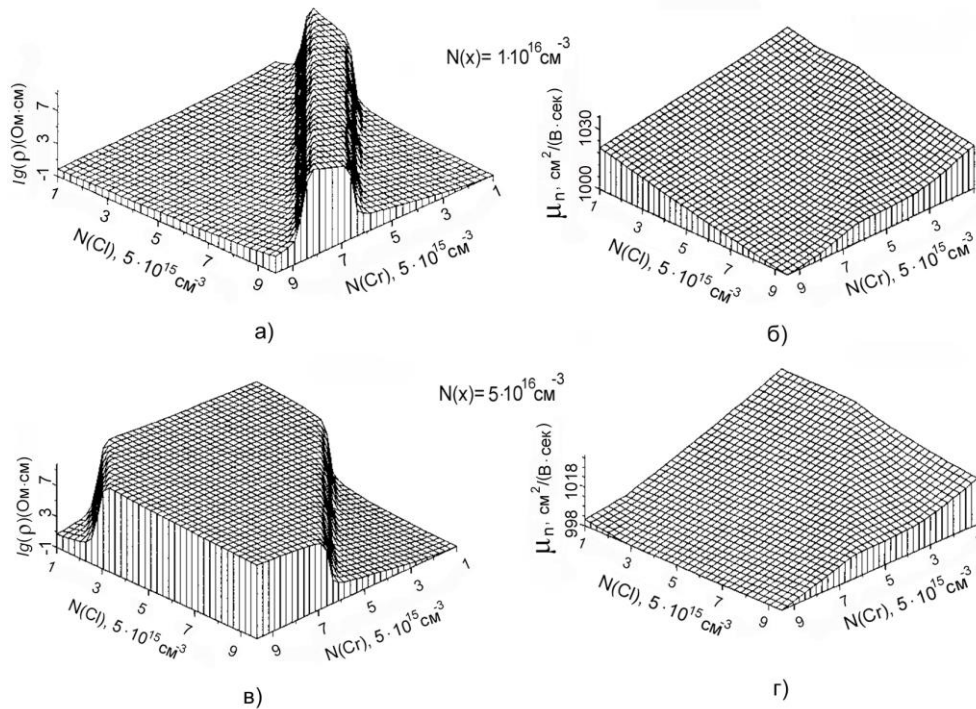


Рис.3. Залежності  $lg(\rho)$  (а, в) і  $\mu_n$  (б, г) в CdTe від зміни концентрації мілкового донора Cl і глибокого акцептора Cr.  $5 \cdot 10^{15} \leq N(Cl) \leq 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ;  $5 \cdot 10^{15} < N(Cr) < 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ;  $N(X) = 1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $N(X) = 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Вміст решітки домішок такий же як в матеріалі рис. 2.

На рис. 3 показані ці тривимірні залежності для концентрацій глибокого донора  $N(X)$ , які дорівнюють  $1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  і  $5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Ширина високоомного плато на рис. 3 збільшується зі збільшенням концентрації  $N(X)$ . Максимальне  $\rho$  та діркова провідність, необхідні для детектора на основі CdTe, досягаються при умові компенсації:  $\Sigma N_{DA}^- \geq (\Sigma N_D^+ + \Sigma N_{DD}^+ - \Sigma N_A^-)$ , де  $\Sigma N_{DA}^-$  і  $\Sigma N_{DD}^+$  – відповідно сумарні концентрації іонізованих глибоких акцепторів і донорів. На величину  $\mu_n$  впливають два протилежно направлені фактори: екранування (в бік збільшення) і концентрація іонізованих домішок (в бік зменшення). Оцінка вкладу в електронну рухливість від різних механізмів розсіювання дозволила встановити, що визначальний вплив має розсіювання на полярних оптичних фонах (96%), тому величина  $\mu_n$  при кімнатній температурі мало залежить від вмісту домішок, рівномірно розподілених у матриці (рис.3 б, г). Як показують розрахунки, при низьких температурах ( $\sim 10$  K) основний внесок вносить розсіювання електронів на іонізованих домішках (99,8%). Розраховані  $\rho$ ,  $\mu_n$  (рис. 2, 3) дуже близькі до відомих величин для CdTe:  $10^9$ – $10^{10} \text{ Om} \cdot \text{cm}$ ,  $10^3 \text{ cm}^2/(\text{В} \cdot \text{сек})$ .

При введенні Zn в матрицю CdTe одержують  $Cd_{1-x}Zn_xTe$ , і ширина забороненої зони зростає зі збільшенням молярної долі цинку  $x$ . Були одержані тривимірні

залежності питомого опору від енергії глибокого донора в CdZnTe для різного домішкового складу. Проведений пошук оптимальних діапазонів концентрацій домішок для одержання напівізолюючого CdZnTe. Зроблений порівняльний аналіз модельних залежностей зміни питомого опору CdTe і CdZnTe при аналогічних домішкових складах, були показані переваги телуриду кадмію з цинком. Встановлені умови повної компенсації для одержання високоомного CdZnTe *p* і *n* – типів. Показано, що збільшення ширини забороненої зони від 1.6 (для CdTe) до 1,8 eV (для Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te при  $x=0.2$ ) не призводить до помітних змін вигляду всіх досліджених тривимірних залежностей, за виключенням  $\rho$ , яке збільшується на два порядки, а при  $x=0,1$   $\rho$  збільшується приблизно на порядок. Цей результат знайшов підтвердження<sup>8</sup>. Глибокий донор грає важливу роль для досягнення високоомного стану CdTe і CdZnTe.

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

**В четвертому розділі** «Властивості детекторів гамма-випромінювання на основі GaAs, Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te» вивчались детекторні властивості матеріалів, оптимальний склад яких був встановлений у попередньому розділі. Обчислювалась ефективність збору зарядів  $\eta$ , які дрейфують у міжелектродному проміжку детектора іонізуючих випромінювань на основі GaAs і Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te. Було встановлено, що недоліком об'ємних кристалів GaAs є малий час життя ( $10^{-9}$  сек) нерівноважних носіїв заряду і відповідно мала ефективність збору зарядів для високоомної області, що визначає значну складність створення ефективних детекторів іонізуючих випромінювань на базі кристалічного арсеніду галію. Величина  $\eta$  залежить від складу матеріалу Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te і конфігурації електродів детектора. Збір зарядів, дрейфуючих від рівновіддалених координат  $d_0$ , що відлічуються відносно катода, найбільший у плоских детекторах. На рис. 4 показана  $\rho$  і  $\eta$  в залежності від концентрації компенсуючого Cl. Видно, що найбільш прийнятними матеріалами є Cd<sub>0,9</sub>Zn<sub>0,1</sub>Te і Cd<sub>0,8</sub>Zn<sub>0,2</sub>Te, для яких  $\eta$  і  $\rho$  зберігають високі величини при дірковій провідності. Такий висновок має численні експериментальні підтвердження. Для Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te при  $0 \leq x < 0.3$  в максимумах залежностей  $\rho(N(Cl))$  відношення  $p_0/n_0 = 10^2-10^3$ , що цілком прийнятно для детекторних матеріалів. З'ясовано, що при збільшенні ширини забороненої зони  $E_G$  вище 1,8 eV ( $x > 0.2$ ) добуток величин  $\mu \cdot \tau \cdot \rho$ , помітно не змінюється в усьому дослідженому діапазоні концентрацій легуючих донорних домішок. Це пояснюється тим, що при введенні в матрицю кристалу цинку та відповідному збільшенні  $E_G$  з ростом  $x$  глибокі рівні в забороненій зоні не змінюють свого положення відносно стелі валентної зони, тобто глибина залягання донорів збільшується, а глибина акцепторів залишається незмінною.

З'ясовано, що металічні домішки Ti, V, Ge, Ni, Sn значно погіршують  $\eta$  через захват і рекомбінацію нерівноважних електронів та дірок на вакансіях кадмію.

Використання сферичної та циліндричної конфігурації електродів потребує кращого контролю домішкового складу детекторного матеріалу, особливо по глибоким центрам. На рис. 5 представлені залежності  $\eta$  від  $N_d(Cl)$  в циліндричному та сферичному детекторах для різних координат  $d_0$  початку дрейфу нерівноважних електронів та дірок до відповідних електродів. В плоскому детекторі зазані залежності мають схожий вигляд, при більш високих величинах  $\eta$  для однакових  $N_d$ .

<sup>8</sup> Krsmanovic N., Lynn K.G., Weber M.H. et al. Electrical compensation in CdTe and Cd<sub>0,9</sub>Zn<sub>0,1</sub>Te by intrinsic defects // Physical Review B., 2000.– Vol. 62(24). P. 279–282.

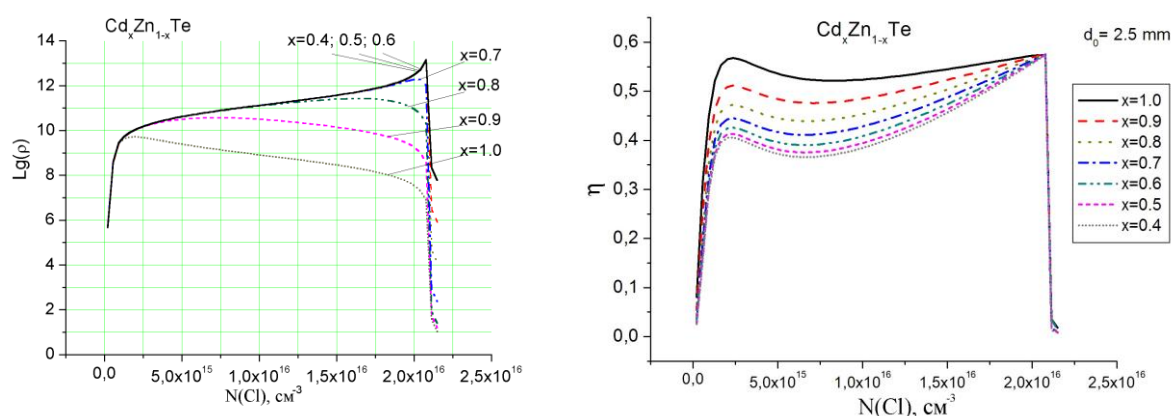


Рис. 4.  $\lg(p)$  та ефективність збору зарядів від концентрації мілкого донора Cl для плоского детектора на основі  $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$  з різними  $x$  та відстані від катоду  $d_0 = 2.5$  мм початку дрейфу носіїв заряду до електродів детектора.

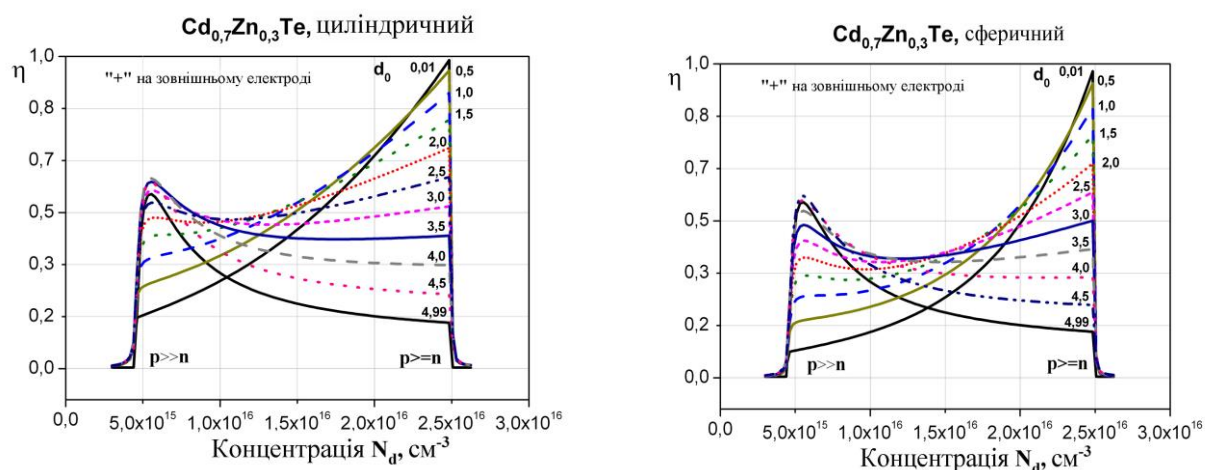


Рис. 5. Ефективності збору зарядів, дрейфуючих від різних координат  $d_0$  відносно катоду в циліндричному та сферичному детекторах на основі  $\text{Cd}_{0.7}\text{Zn}_{0.3}\text{Te}$ .

Видно, що поблизу аноду доцільно розмістити матеріал з концентрацією дірок  $p$  набагато вищою, ніж  $n$ . А поблизу катоду – матеріал з  $p \geq n$ , тобто для одержання більшої ефективності збору зарядів  $\eta$  в детекторі ядерного випромінювання на основі  $\text{CdZnTe}$  необхідний неоднорідний розподіл легуючих домішок в міжелектродному проміжку.

Результати четвертого розділу опубліковані в роботах [5–8] та представлені на конференціях [13 - 15, 18].

У п'ятому розділі «Детекторні і електрофізичні властивості  $\text{CdTe}$  і  $\text{CdZnTe}$  під впливом іонізуючого опромінення» проведено модельне дослідження кореляції між радіаційними дефектами, які виникли в  $\text{CdTe:Cl}$ ,  $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te:Al}$  і  $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$  після жорсткого рентгенівського і  $\gamma$ -опромінення, та питомим опором цих матеріалів і ефективністю збору зарядів у детекторах на їх основі. Моделювання, проведене по ввідним даним експерименту<sup>9</sup>, показало, що після гамма- і рентгенівського опромінення в матриці збільшується сумарна кількість електрично активних акцепторів, насамперед

<sup>9</sup> 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.

глибоких. На початковій стадії гамма-опромінення рівень Фермі  $F$  зміщується в бік середини забороненої зони  $E_G$ , а  $\rho$  матеріалу детектора збільшується, це узгоджується з результатами експериментів<sup>10</sup>. Збір зарядів  $\eta$  суттєво не змінюється. Після збільшення дози опромінення  $F$  наближається до положення енергій глибоких радіаційних рівнів,  $\rho$  зменшується на два-три порядки, а  $\eta$  зменшується практично до нуля.

Згідно з відомими експериментальними даними<sup>11</sup> в детекторі CdTe:Cl повна деградація реєструвальних властивостей відбувається тільки в присутності радіаційно-стимульованого дефекту Z ( $E_V+0.47$  eV), а проведене моделювання визначило, що його вміст при цьому повинен бути  $4 \cdot 10^{13} \text{см}^{-3}$ . Ґрунтуючись на цьому факті, були розраховані залежності  $\eta$  від концентрації хлору N(Cl) для неопроміненого матеріалу (рис. 6 а) при виміряній<sup>9</sup> концентрації  $N(Z)=2 \cdot 10^{12} \text{см}^{-3}$ , також для опроміненого CdTe:Cl при  $N(Z)=4 \cdot 10^{13} \text{см}^{-3}$  (рис. 6 б). Видно, що для опроміненого детектора відбувається зсув залежності  $\eta$  від N(Cl) у бік більших величин N(Cl), тому для повернення деградованого детектора в робочий стан необхідне збільшення в його матриці концентрації мілкового донора. Було встановлено, що основний вклад в деградацію детекторних властивостей CdTe:Cl при експлуатації в умовах рентгенівського опромінення дає зниження питомого опору на три порядки (що призводить до збільшення темнового струму витоку), а також захват вільних носіїв заряду на радіаційних глибоких рівнях J ( $E_V+0.53$  eV) і Z ( $E_V+0.47$  eV). На рис. 7 а показані залежності  $\rho$  від N(Cl) для неопроміненого CdTe:Cl та двох станів після опромінення. Середній час дрейфу нерівноважних носіїв заряду в детекторі до їх захоплення на глибоких рівнях радіаційних дефектів зменшується для електронів на два порядки, а для дірок – на три порядки величини. Спостережувана в експерименті<sup>9</sup> більш висока радіаційна стійкість  $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$  детекторів у порівнянні з детекторами на основі CdTe:Cl можна пояснити наступним. По-перше, концентрації мілкового радіаційного дефекту A00 ( $E_V+0.06$  eV), що виникає при опромінюванні  $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.9}\text{Te}$ , та глибоких дефектів D ( $E_V+0.41$  eV) і J ( $E_V+0.53$  eV) порівняно невеликі і слабо впливають на  $\rho$ . По-друге, дефекти J і Z помітно впливають на процеси захоплення вільних носіїв заряду, однак їх негативна дія частково компенсується дефектом H1 ( $E_C-0.79$  eV), концентрація якого помітно зростає при опромінюванні. Рис. 7б характеризує поведінку рівня Фермі в залежності від концентрації радіаційно-стимульованого дефекту J для різного вмісту дефекту H1. Можна бачити, що дефекти H1 і J впливають на рівень Фермі  $F$  протилежним чином. Збільшення N(J) наближає  $F$  до положення енергії  $E(J)$  і тому залучає рівень J у процес рекомбінації, помітно зменшуючи  $\tau_n$ ,  $\tau_p$ , а також зменшує  $\rho$ , збільшуючи концентрацію вільних дірок. Рівень H1 діє навпаки: відтягує  $F$  від рівня J в напрямку середини забороненої зони, зменшує рекомбінацію через J і збільшує  $\rho$ . Рівні Y та W не є радіаційно-стимульованими, їх концентрація не змінюється у процесі опромінювання, вони не впливають на зміну  $\tau$ ,  $\eta$ ,  $\rho$ ,  $\mu$ .

Проведено аналіз і вказані можливі причини змін характеристик глибоких рівнів, виміряними експериментально<sup>12</sup>, у високоомному  $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te:Al}$  після  $\gamma$ -опромінення та протягом пострадіаційної релаксації. Досліджені зміни властивостей

<sup>10</sup> Cavallini A., Fraboni B., Duzi W. et al. Deep levels and compensation in  $\gamma$ -irradiated CdZnTe // Applied Physics Letters. 2000. Vol.77, № 20. P.3212-3214.

<sup>11</sup> 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.

<sup>12</sup> Ruihua Nan, Wanqi Jie et al. Irradiation-Induced Defects in  $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te:Al}$  // Journal of Electronic Materials. 2012. V. 41, № 11. P. 3044-3049.

плоскопаралельного детектора на основі  $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}:\text{Al}$  в залежності від концентрації і рівня енергії глибокого донора, та від концентрації алюмінію. Вимірювання характеристик глибоких рівнів, які реально впливають на захоплення носіїв заряду, здійснюється при температурах, близьких до кімнатних, тобто робочих температур детектора, що робить можливим якісне моделювання змін властивостей детектора під впливом іонізуючого опромінювання. Вельми несприятливим фактором для властивостей детектора на основі  $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$  є підвищена концентрація вакансій цинку, що може виникнути як на стадії виготовлення, так і під дією  $\gamma$ -опромінювання при експлуатації.

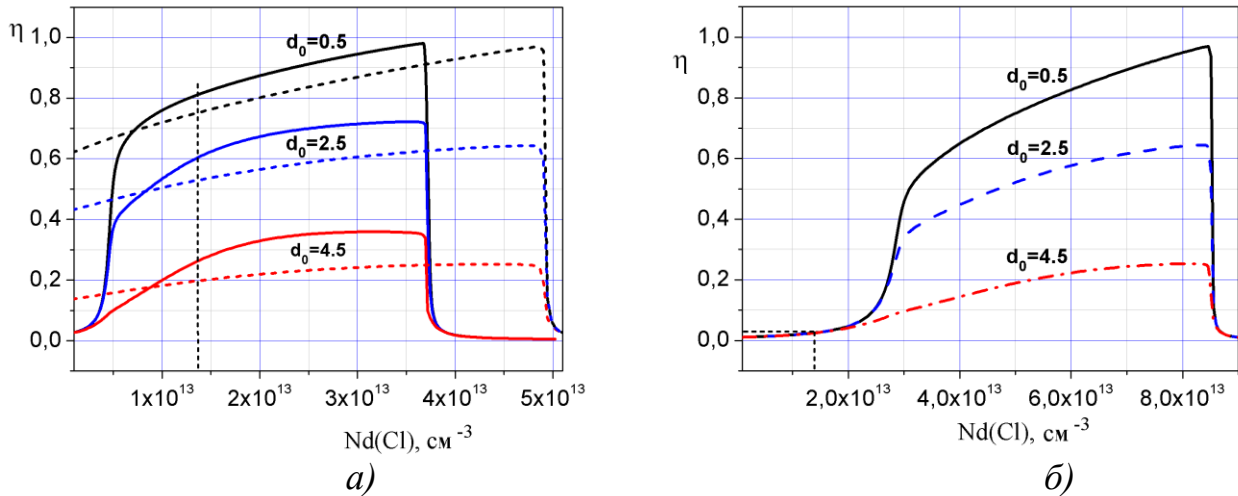


Рис. 6. Ефективність збору зарядів в залежності від концентрації Cl: а) в неопромінену (суцільні криві) і опромінену (пунктирні), при концентрації радіаційного дефекту  $N(Z) = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$  в детекторі на  $\text{CdTe}:\text{Cl}$  для носіїв заряду, дрейфуючих з відстаней  $d_0$  від катода; б) опроміненому детекторі дозою 260 кГр при  $N(Z) = 4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ . Вертикальні пунктирні лінії відмічають досліджуваний матеріал.

Деградація властивостей  $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}:\text{Al}$  детектора, опромінюваного у процесі експлуатації, може статися через зміщення залежності питомого опору  $\rho$  від концентрації легуючого алюмінію  $N(\text{Al})$  у бік більших концентрацій Al (рис. 8). Така деградація буде спостерігатися у випадку недостатньо великої величини легуючого Al, при цьому на початковому етапі опромінювання відбудеться зниження тільки питомого опору, а ефективність збору зарядів може навіть трохи підвищитись. При достатньо високому рівні легування  $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$  алюмінієм на початковому етапі опромінення буде збільшуватися  $\rho$ , що підтверджено експериментально<sup>10,12</sup>, і підвищуватиметься  $\eta$  детектора на його основі. Експериментально виявлено, що  $E_{\text{dd}}$  змінюється вже на початковій стадії  $\gamma$ -опромінювання. З рис. 8 видно, що для матеріалів з однаковим  $E_{\text{dd}}$  має місце експериментально спостережуване збільшення  $\rho$  (криві 1-6), а також зсув залежностей  $\lg(\rho)$  від  $N(\text{Al})$  у опроміненого матеріалу порівняно з вихідним – неопроміненим.

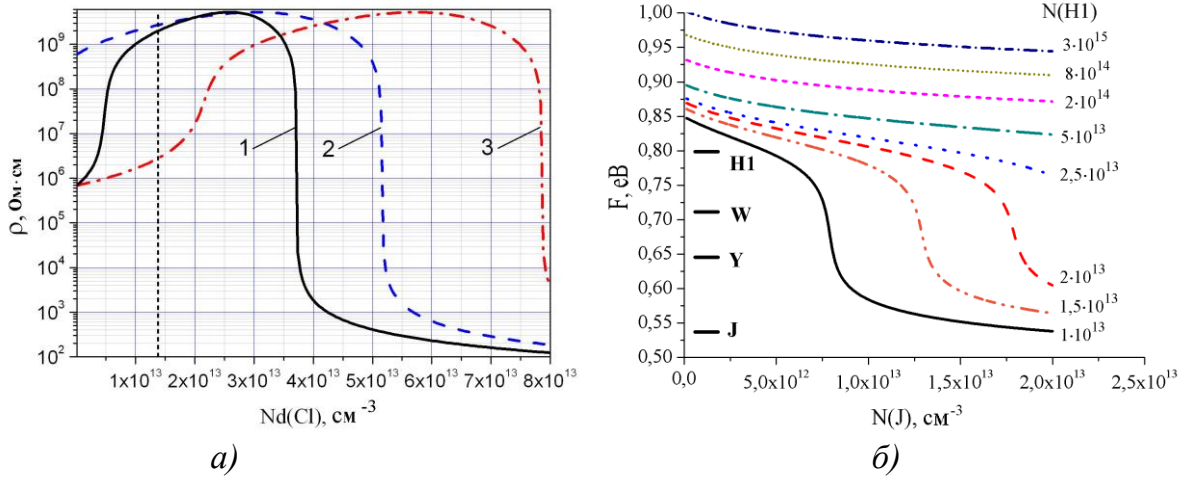


Рис. 7. Питомий опір  $\text{CdTe:Cl}$  (а) в залежності від концентрації легуючого Cl та положення рівня Фермі (б) в забороненій зоні  $\text{CdZnTe}$  від вмісту J для різних концентрацій H1 (б). а) 1 – неопромінений; 2 – після рентгенівського опромінення при  $N(Z) = 2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ; 3 – опромінений дозою 260 кГр матеріал, що втратив детекторні властивості при концентрації радіаційного дефекту  $N(Z) = 4 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ .

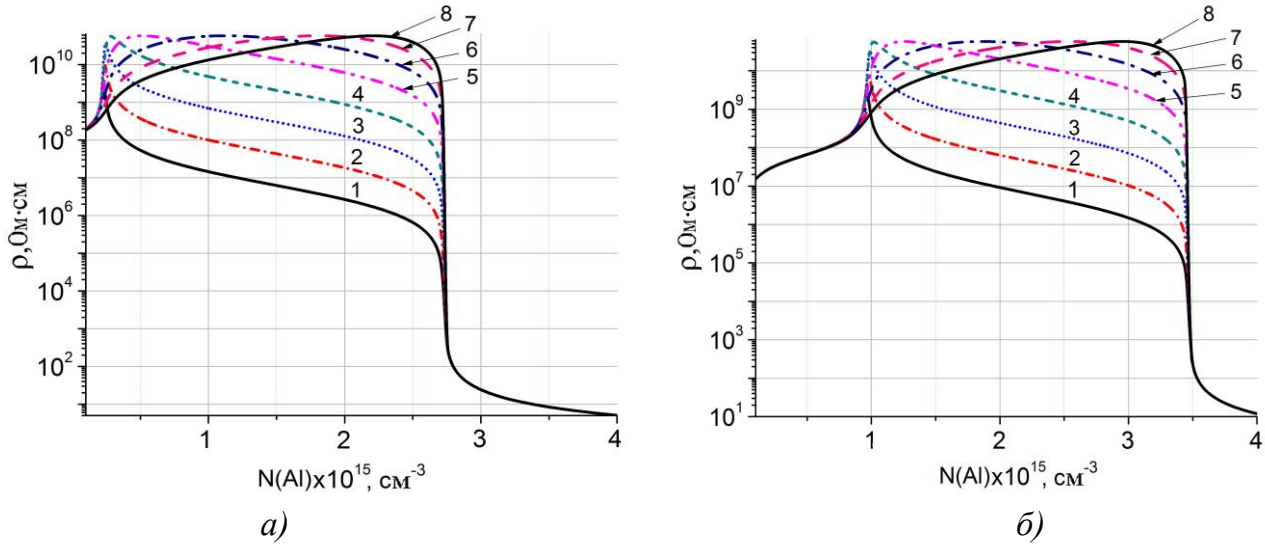


Рис. 8. Залежності  $\rho$   $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te:Al}$  від концентрації Al в неопроміненому матеріалі (а) і після  $\gamma$ -опромінювання дозою 2,7 кГр (б) для різних рівнів енергії донора  $E_{DD}$ , eV: 1 – 0.554, 2 – 0.604, 3 – 0.654, 4 – 0.704, 5 – 0.754, 6 – 0.792, 7 – 0.821, 8 – 0.842.

Матеріали даного розділу опубліковані в роботах [9–11] і працях [16–18] наукових конференцій.

## ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі методом чисельного моделювання вирішена важлива наукова задача з'ясування впливу радіаційних, домішкових, фонових дефектів і температури на електрофізичні та детекторні властивості GaAs, CdTe, CdZnTe. Дослідження поведінки електронної рухливості  $\mu_n$ , питомого опору  $\rho$ , рівня Фермі  $F$ , концентрації заряджених центрів і вільних носіїв заряду в GaAs, CdTe, CdZnTe та ефективності збору зарядів  $\eta$  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 експериментальних досліджень.

2. Встановлені параметри та концентрації глибоких рівнів домішок і дефектів, які потрібні для досягнення необхідних електрофізичних і детекторних властивостей ( $\mu_n$ ,  $\rho$ ,  $\tau_n$ ,  $\tau_p$ ,  $\eta$ ) 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 іонізуючого опромінення.

3. Вперше встановлені залежності  $\mu_n$ ,  $\rho$ ,  $\tau$  і  $\eta$  для GaAs та  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  від вмісту і розподілу домішок в детекторному матеріалі і визначений його оптимальний склад для одержання детекторів високої спектроскопічної якості. З'ясована кореляція між  $\mu_n$  та  $\rho$  для CdZnTe з урахуванням уточнених моделей екранування і розсіювання. Залежності  $\mu_n$  і  $\rho$  для CdTe від вмісту домішок та дефектів подібні аналогічним залежностям для  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  при  $x < 0.3$ .

4. Вперше встановлено, що збільшення  $\eta$  (~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  $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te$  збільшує вміст акцепторів, що демонструється зсувом залежностей  $\rho(N_d)$  і  $\eta(N_d)$  в бік більших концентрацій  $N_d$  мілкого донора. При малих дозах опромінення підвищується  $\rho$  і  $\eta$ , зі збільшенням дози знижується  $\rho$ , 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 дозволять 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.

## СПИСОК ПРАЦЬ, ОПУБЛІКОВАНИХ ЗА ТЕМОЮ 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  $\gamma$ -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  $\gamma$ -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  $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te:Al}$  под влиянием  $\gamma$ -облучения малой дозы // *Технология и конструирование в электронной аппаратуре*. 2016. №1. С. 12-19.
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 / Одесса, Украина, 2003. С. 302.
13. Кондрик А.И. Моделирование детекторных свойств CdZnTe и параметров детекторов  $\gamma$ -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.
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.
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.
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.

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.

18. Кондрик А.И., Ковтун Г.П. Влияние фоновых примесей на свойства  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$  // V Міжнародна науково-практична конференція «Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка», 17-19 травня 2018 р.: тези доповідей / Кременчук, Україна. 2018. С. 35-37.

### АНОТАЦІЯ

Кондрик О.І. «Вплив радіаційних і фонових дефектів на властивості GaAs, CdTe, CdZnTe та детектори іонізуючих випромінювань на їх основі». – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.21 – радіаційна фізика та ядерна безпека – Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут". – Харків, 2018.

Дисертація присвячена з'ясуванню впливу фонових та радіаційно-стимульованих дефектів на електрофізичні властивості GaAs, CdTe, CdZnTe та характеристики детекторів ядерних випромінювань на основі цих сполук.

За допомогою програмного коду, створеного на основі моделі компенсації у поєднанні з моделями розсіювання і рекомбінації, обчислювались положення рівня Фермі  $F$ , питомий опір  $\rho$ , електронна рухливість  $\mu_n$ , час життя нерівноважних носіїв заряду  $\tau$  в залежності від концентрації багатозарядних донорів та акцепторів, їх енергетичного положення в забороненій зоні напівпровідника, неоднорідностей легування в широкому температурному інтервалі. Проведено чисельне дослідження поведінки  $\mu_n$ ,  $\rho$ ,  $F$ ,  $\tau$  і ефективності збору зарядів  $\eta$ , для детекторів на основі GaAs, CdTe і  $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$  в широких діапазонах концентрацій дефектів. Знайдено пояснення залежностей  $\mu_n$ ,  $\rho$ ,  $\tau$  і  $\eta$  від складу матриці. Визначені концентрації домішок та дефектів, необхідні для отримання високоомних CdTe і CdZnTe з високою  $\mu_n$  і максимальною  $\eta$  у детекторах ядерних випромінювань з різною формою електродів.

Встановлена кореляція між радіаційними дефектами, що виникають в CdTe:Cl і CdZnTe після жорсткого рентгенівського опромінення і  $\rho$ ,  $\eta$  детекторів на їх основі. Визначена роль радіаційних дефектів у процесах деградації детекторних характеристик CdTe:Cl. Знайдено пояснення більш високої радіаційної стійкості CdZnTe у порівнянні з CdTe:Cl. Визначені умови деградації властивостей детектора на початковому етапі експлуатації під дією  $\gamma$ -опромінення.

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

### АННОТАЦИЯ

Кондрик А.И. «Влияние радиационных и фоновых дефектов на свойства GaAs, CdTe, CdZnTe и детекторов ионизирующих излучений на их основе». – Рукопись.

Диссертация на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.21 – радиационная физика и ядерная безопасность – Национальный научный центр "Харьковский физико-технический институт", Харьков, 2018.

Диссертация посвящена выяснению влияния фоновых и радиационно-стимулированных дефектов на электрофизические свойства GaAs, CdTe, CdZnTe и характеристик детекторов ядерных излучений на основе этих соединений.

Построена уточненная многоуровневая модель компенсации для прогнозирования изменений удельного сопротивления ( $\rho$ ), положения уровня Ферми ( $F$ ), электронной подвижности ( $\mu_n$ ) в зависимости от концентрации одно- двух- и трех-зарядных доноров и акцепторов, амфотерных примесей типа донор-акцептор DA, донор -донор-акцептор DDA, донор-акцептор-акцептор DAA, их энергетического положения в запрещенной зоне полупроводника, неоднородностей структуры и легирования (областей накопления дефектов и примесных кластеров) в широком температурном интервале. Созданное на основе данной физической модели уравнение электронейтральности для произвольного количества многозарядных примесей и дефектов решалось численно относительно уровня Ферми методом половинного деления для последующего вычисления с применением моделей рассеяния и рекомбинации электронной подвижности, удельного сопротивления, времени жизни неравновесных электронов  $\tau_n$  и дырок  $\tau_p$  в зависимости от концентрации многозарядных центров, их энергетического положения в запрещенной зоне, неоднородностей легирования в широком температурном интервале.

Изучено влияние структурного дефекта EL-2 в GaAs после радиационного облучения и последующей термообработки на основные электрофизические параметры GaAs. Изучена изменение  $\mu_n$  в интервале  $300 \leq T \leq 1100$  K в зависимости от содержания EL-2, кластеров и выяснены механизмы влияния дефектов на  $\mu_n$  и  $\rho$ . Установлено, что точечные дефекты, которые представлены в запрещенной зоне мелкими уровнями, а также линейные дефекты могут заметно влиять на электронную подвижность  $\mu_n$  в арсениде галлия, если они распределены в матрице в виде заряженных скоплений дефектов, кластеров, неоднородностей легирования. Собственный дефект EL-2, который вносит в запретную зону глубокий уровень энергии, заметно влияет на  $\mu_n$  в GaAs даже при его однородном распределении в матрице кристалла.

Проведен анализ ряда соединений и было обнаружено, что по сравнению с GaAs более перспективными детекторными материалами являются CdTe и  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$  по причине меньшего времени жизни неравновесных носителей заряда ( $\tau \sim 10^{-9}$  сек) в GaAs по сравнению с CdTe и CdZnTe ( $\tau \sim 10^{-5} - 10^{-6}$  сек).

Проведено численное исследование поведения  $\mu_n$ ,  $\rho$ ,  $F$ ,  $\tau_n$ ,  $\tau_p$  и эффективности сбора зарядов  $\eta$  для детекторов на основе CdTe и  $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$  в широких диапазонах концентраций примесей и дефектов и найдено объяснение полученных зависимостей  $\mu_n$ ,  $\rho$ ,  $\tau$  и  $\eta$  от состава матрицы. Установлено, что основной вклад в электронную подвижность  $\mu_n$  в CdTe и CdZnTe дает рассеяния на полярных оптических фононах, поэтому  $\mu_n$  слабо зависит от примесного состава при условии равномерного распределения точечных дефектов и примесей в объеме кристалла. Характер изменения зависимостей  $\rho$  и  $\mu_n$  от состава качественно похож для CdTe и CdZnTe, разница заключается только в величине максимального удельного сопротивления  $\rho_{\max}$ , которая для CdTe равна  $10^{10}$  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. Установлено, что глубокие доноры в CdTe и CdZnTe увеличивают размер полуизолирующей области, охватываемой диапазонами изменения концентраций мелких акцепторов и доноров.

Исследовано поведение  $\eta$  в зависимости от состава CdTe и CdZnTe, предназначенных для детекторов ядерных излучений с разной формой электродов. Установлено, что наиболее подходящими являются плоские детекторы на основе

$\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ , а для увеличения  $\eta$  на  $\sim 30\%$  нужно использовать детекторный материал, состоящий из двух частей, различных по примесным составом: с  $p \gg n$  в меньшей части межэлектродного зазора вблизи анода и с  $p \geq n$  - в остальных большей части зазора, при этом во всех типах детекторов катод должен быть направлен к источнику излучения.

Установлена корреляция между радиационными дефектами, которые возникают в  $\text{CdTe:Cl}$  и  $\text{CdZnTe}$  после жесткого рентгеновского облучения и  $\rho$ ,  $\eta$  детекторов на их основе. Определена роль радиационных дефектов в процессах деградации детекторных характеристик  $\text{CdTe:Cl}$ . Установлено, что основной вклад в деградацию детекторных свойств  $\text{CdTe:Cl}$  в условиях жесткого рентгеновского облучения дает снижение удельного сопротивления на три порядка, а также захват свободных носителей заряда на радиационных глубоких акцепторных уровнях J ( $E_V + 0.53$  эВ) и Z ( $E_V + 0.47$  эВ). Среднее время дрейфа неравновесных носителей заряда в детекторе до их захвата на радиационных дефектах уменьшается на два-три порядка величины. Найдено объяснение более высокой радиационной стойкости  $\text{CdZnTe}$  по сравнению с  $\text{CdTe:Cl}$ .

Проведен анализ и указаны возможные причины изменений характеристик глубоких уровней в высокоомном  $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te:Al}$  после  $\gamma$ -облучения и в течение пострadiационной релаксации. Исследованы изменения свойств плоского детектора на основе  $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te:Al}$  в зависимости от концентрации и уровня энергии глубокого донора, а также от степени легирования мелким донором. Определены условия деградации регистрирующих свойств детектора на начальном этапе его эксплуатации под действием агрессивной радиационной среды. Определены условия деградации свойств детектора на начальном этапе его эксплуатации под действием  $\gamma$ -облучения.

Ключевые слова: моделирование, электрофизические свойства, облучение, детектор  $\gamma$ -излучения, радиационное дефектообразование, GaAs, CdTe, CdZnTe.

## SUMMARY

Kondrik A.I. Effect of radiation and background defects on the properties of GaAs, CdTe, CdZnTe and detectors of ionizing radiation based on them. – Manuscript.

Thesis submitted for an academic degree of a Candidate in physical & mathematical science by specialty 01.04.21 – Radiation physics and nuclear safety. – National Science Center “Kharkov Institute of Physics & Technology”, Kharkov, 2018.

In the dissertation the numerical modeling method solves an important scientific problem of determining the influence of radiation-stimulated, admixture, background defects and temperature on the electrophysical and detector properties of GaAs, CdTe, CdZnTe.

The numerical study and explanation of the behavior of electron mobility  $\mu_n$ , specific resistance  $\rho$ , Fermi level  $F$ , lifetime of the nonequilibrium charge carriers  $\tau$ , and charge collection efficiency  $\eta$  for detectors based on GaAs, CdTe and  $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$  has been made over a wide range of defect concentrations which were determined to produce high quality detectors.

The correlation between radiation defects originated in  $\text{CdTe:Cl}$ ,  $\text{CdZnTe}$  after the hard X-ray irradiation and  $\rho$ ,  $\eta$  of detectors has been ascertained. The role of radiation defects in the degradation process of detector performances of  $\text{CdTe:Cl}$ ,  $\text{CdZnTe}$  was determined. An explanation the higher radiation resistance of  $\text{CdZnTe}$  compared with  $\text{CdTe:Cl}$  was found.

Keywords: modeling, electrophysical properties, irradiation, gamma-ray detector, radiation-induced defect formation, GaAs, CdTe, CdZnTe.