



CdZnTe晶体中深能级缺陷对空间电荷分布特性的影响

郭榕榕 林金海 刘莉莉 李世伟 王尘 林海军

Effect of deep level defects on space charge distribution in CdZnTe crystals

Guo Rong-Rong Lin Jin-Hai Liu Li-Li Li Shi-Wei Wang Chen Lin Hai-Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 69, 226103 (2020) DOI: 10.7498/aps.69.20200553

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200553>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

掺杂含量对环氧纳米复合电介质陷阱与空间电荷的影响

Influence of filler content on trap and space charge properties of epoxy resin nanocomposites

物理学报. 2017, 66(9): 097701 <https://doi.org/10.7498/aps.66.097701>

CdZnTe像素探测器的电输运性能

Investigation on electrical transport properties of CdZnTe pixel detector

物理学报. 2017, 66(20): 206101 <https://doi.org/10.7498/aps.66.206101>

同轴结构中压力波法测量空间电荷分布的物理模型研究

Physical model for space charge distribution measured by pressure wave propagation method in coaxial geometry

物理学报. 2017, 66(12): 127701 <https://doi.org/10.7498/aps.66.127701>

电场和温度对聚合物空间电荷陷阱性能的影响

Simulations of the effects of electric field and temperature on space charge traps in polymer

物理学报. 2017, 66(8): 087201 <https://doi.org/10.7498/aps.66.087201>

空间电子辐射环境中绝缘介质电荷沉积特性及陷阱参数研究综述

Review of charge deposition characteristics and trap parameters of dielectric in space electron radiation environment

物理学报. 2019, 68(23): 239401 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191252>

原子核电荷半径的研究

Study of nuclear charge radius

物理学报. 2020, 69(16): 162101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191643>

CdZnTe 晶体中深能级缺陷对空间电荷分布特性的影响*

郭榕榕[†] 林金海 刘莉莉 李世伟 王尘 林海军

(厦门理工学院光电与通信工程学院, 福建省光电技术与器件重点实验室, 厦门 361024)

(2020 年 4 月 15 日收到; 2020 年 7 月 14 日收到修改稿)

CdZnTe 晶体内的空间电荷积累效应是影响高通量脉冲型探测器性能的关键因素. 为了探索 CdZnTe 晶体中深能级缺陷对空间电荷分布及器件性能的影响规律, 本文采用 Silvaco TCAD 软件仿真了 CdZnTe 晶体内包含位置为 $E_v + 0.86$ eV, 浓度为 1×10^{12} cm⁻³ 的深施主能级缺陷 $\text{Te}_{\text{Cd}}^{++}$ 时, 其空间电荷分布及内电场分布特性. 仿真结果表明, 随着外加偏压的增加, Au/CdZnTe/Au 的能带倾斜加剧, 使得晶体内深能级电离度不断增加, 空间电荷浓度增加, 电场分布死区减小, 从而有利于载流子收集. 此外, 保证 CdZnTe 晶体高阻的前提下, 降低深能级缺陷 ($E_v + 0.86$ eV) 浓度可使内电场死区减小. 深能级缺陷位置为 $E_v + 0.8$ eV, 亦可以减少阴极附近的电荷浓度, 使得电场分布更加平坦, 死区减小, 从而有效地提升载流子的收集效率.

关键词: CdZnTe 核辐射探测器, 深能级缺陷, 空间电荷, 收集效率

PACS: 61.72.uj, 61.72.-y, 85.25.0j

DOI: 10.7498/aps.69.20200553

1 引言

CdZnTe 晶体是近年发展起来的一种最具商业潜力的室温核辐射探测材料, 被广泛应用于制作高能物理、医学成像、工业探伤和核安全防护等领域的探测器和谱仪^[1-3]. 对于核医学应用的成像器件来说, 除了考虑缺陷对成像器件均匀性的影响外, 还面临着一个更大的挑战, 即在大计数率成像器件应用时, 要求探测器在 200—2000 MHz/mm² 脉冲 X-ray 的照射下具有优异的响应性能^[4]. CdZnTe 探测器由于高的截止能量、室温工作特性以及在较低的辐射剂量下就可以具有较高的检测精度, 表现出更大的潜能^[5]. 美国的通用 (GE)、荷兰的飞利浦 (Philips) 以及德国的西门子 (Siemens) 等国际著名的医疗器件厂商公司都已经开始设计与研制

基于 CdZnTe 探测器的 CT, PET 和 SPECT 等核医学成像的设备^[6,7].

然而, 生长态 CdZnTe 晶体中不可避免地存在大量的杂质和缺陷, 诸如 Cd 空位、Te 反位原子、Te 间隙原子以及它们和杂质原子形成的缺陷复合体等^[8-10]. 这些结构缺陷容易形成载流子的陷阱, 在探测器工作时容易造成空间电荷积累, 引起电场畸变进而产生极化效应. 严重的极化效应甚至会使得探测器彻底失效^[11,12]. 近年来的研究集中于观测 CdZnTe 晶体内电场分布特性以及测试大剂量照射下器件性能响应. Cola 和 Farella^[13] 对 CdTe 晶体内部电场的研究表明, 空间电荷的积累会严重影响了电场分布, 进而降低了电荷收集效率. Li 等^[14] 研究了 CdZnTe 探测器在大剂量 X 射线照射下光电流特性对探测器性能的影响. Bale 等^[15]、Camarda 等^[16] 和 Musiienko 等^[17] 研究表明, 大剂量照射下积累的空间电荷会使探测器发生灾难性的故障.

* 国家自然科学基金青年科学基金 (批准号: 51702271, 61904155)、福建省自然科学基金 (批准号: 2020J05239) 和福建省教育厅中青年教育科研课题 (批准号: JAT170407) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: guorr2020@163.com

对 X 射线成像系统来说, 空间电荷积累所引起电场的畸变是 CdZnTe 探测器面临的一大挑战^[18,19]. 然而, 目前对于深能级缺陷如何影响空间电荷分布的微观机制讨论较少. 如何在引入深能级缺陷使晶体实现高阻的同时, 尽可能避免深能级缺陷带来的不利影响, 是值得探索的一个问题. 因此, 系统掌握深能级缺陷对空间电荷分布特性的影响规律对提高器件的性能有着重要的意义. Silvaco TCAD 仿真软件可以得到半导体内部电学性能等相关信息, 在半导体性质与器件性能仿真方面有突出优势^[20-22]. 由于晶体生长的复杂性且周期性长, 为了节约人力成本, 避免不必要的浪费, 本文采用 Silvaco TCAD 软件对 CdZnTe 晶体空间电荷分布等性质进行仿真, 探究深能级缺陷对空间电荷的分布以及内电场分布特性的影响规律, 从而揭示了深能级缺陷对器件性能的影响. 仿真结果将对 CdZnTe 晶体生长及成像器件的制备提供一定的理论指导.

2 Silvaco TCAD 模拟基本方法描述与模型建立

Silvaco TCAD 是以物理为基础对半导体特性进行设计和仿真的计算机辅助系统, 包含二维工艺

仿真器 Athena、二维器件仿真器件 Atlas、器件编辑器 Devedit 和三维仿真器 Victory. Atlas 模拟是根据用户设定的物理参数来生成器件, 仿真半导体器件的电学、光学和热学特性等^[23]. 本文采用 Silvaco TCAD 对 Au/CdZnTe/Au 结构的探测器进行 (two-dimensional, 2D) 数值模拟, 研究 CdZnTe 晶体中深能级缺陷对空间电荷分布特性的影响规律. 仿真所用 Au/CdZnTe/Au 器件的结构示意图如图 1(a) 所示. 其中, CdZnTe 晶体为 N 型半导体, 电子亲和能为 4.3 eV. Au 的功函数为 5.1 eV, 具体的参数如表 1 所示. 本次模拟仿真采用三能级补偿模型^[24], 考虑晶体内部存在浅施主, 浅受主以及深施主能级, 如图 1(b) 所示. 同时定义, 浅施主能级的浓度为 $1.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, 浅受主能级的浓度为 $1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, 浅施主与浅受主能级在室温下全电离. 普遍认为掺 In 的 CdZnTe 晶体中, 深施主能级 ($\text{Te}_{\text{Cd}}^{++}$) 能级位置为 $E_v + 0.86 \text{ eV}$ ^[25]. 非平衡载流子在该能级上会被俘获或者复合, 其电离后形成的空间电荷也会对电场分布特性产生一定影响, 从而影响着器件的性能. 为了研究不同深能级缺陷浓度对空间电荷分布特性的影响规律, 本文选用以下三种不同浓度的深能级信息作为仿真参数, 具体如表 2 所列.

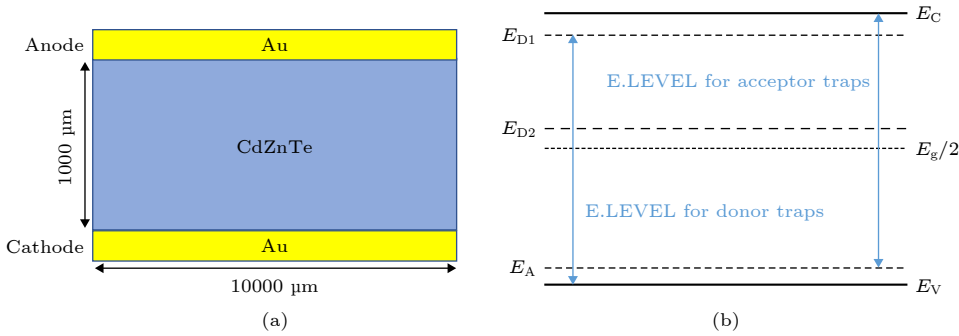


图 1 (a) Au/CdZnTe/Au 器件结构示意图; (b) CdZnTe 晶体内缺陷能级分布图

Fig. 1. (a) Schematic diagram of Au/CdZnTe/Au device structure; (b) distributions of defect energy levels in CdZnTe crystal.

表 1 CdZnTe 晶体的基本参数

Table 1. Basic parameters of CdZnTe crystals.

介电常数	300 K 时禁带宽度/eV	300 K 时导带密度/cm ⁻³	300 K 时价带密度/cm ⁻³	电子迁移率/cm ² ·V ⁻¹ ·s ⁻¹	空穴迁移率/cm ² ·V ⁻¹ ·s ⁻¹
10.9	1.6	9.14×10^{17}	5.19×10^{18}	1000	100

表 2 深施主能级的基本信息

Table 2. Basic information of deep donor energy levels.

类型	位置/eV	浓度/cm ⁻³	电子俘获界面/cm ²	空穴俘获界面/cm ²	简并度
Donor1	$E_v + 0.86$	5×10^{12}	3×10^{-14}	3×10^{-15}	2
Donor2	$E_v + 0.86$	1×10^{12}	3×10^{-14}	3×10^{-15}	2
Donor3	$E_v + 0.86$	1×10^{13}	3×10^{-14}	3×10^{-15}	2

3 仿真结果与讨论

3.1 深能级缺陷对电阻率的影响

不同深能级缺陷下仿真的 CdZnTe 晶体的电阻率结果如表 3 所列. 与不存在深能级缺陷的晶体相比, 深能级缺陷的加入会增大晶体的电阻率. 其原因是深施主去补偿多余的浅受主能级, 使载流子的浓度降低了, 费米能级也更靠近禁带中部位置, 从而使得电阻率增大 [25]. 而随着深能级缺陷浓度不断增加, 晶体的电阻率会随着该深能级缺陷的浓

表 3 不同深能级缺陷浓度下 CdZnTe 晶体的电阻率仿真结果

Table 3. The resistivity of CdZnTe crystals at different deep energy level concentrations via simulation.

能级类型	位置/eV	浓度/cm ⁻³	电阻率/Ω·cm
无深施主能级	—	—	6.08 × 10 ⁹
Donor1	E _v + 0.86	5 × 10 ¹¹	1.50 × 10 ¹⁰
Donor2	E _v + 0.86	1 × 10 ¹²	6.66 × 10 ⁹
Donor3	E _v + 0.86	1 × 10 ¹³	6.05 × 10 ⁸

度增大而减小. 当深施主缺陷 (E_v + 0.86 eV) 浓度为 5 × 10¹¹ cm⁻³ 时, CdZnTe 晶体的电阻率达到 1.50 × 10¹⁰ Ω·cm, 满足探测器级 CdZnTe 晶体的电阻率要求.

3.2 深能级缺陷对空间电荷分布特性及器件性能的影响

为了进一步研究深施主能级对 CdZnTe 晶体内部空间电荷以及内电场分布特性的影响规律, 本文选择深施主缺陷能级位置为 E_v + 0.86 eV, 浓度为 1 × 10¹² cm⁻³ 条件下进行仿真, 其仿真结果如图 2 所示. CdZnTe 晶体内部不同偏压下载流子浓度分布规律, 如图 2(a) 所示. 当外加偏压为 0 V 时, Au 与 CdZnTe 界面处的载流子浓度低于体内的载流子浓度. 结合热平衡条件下 Au/CdZnTe/Au 的能带图 (如图 3(a) 所示) 可知, 当金属 Au 和 n 型 CdZnTe 晶体接触时, 因为金属 Au 的功函数大于半导体 CdZnTe 的功函数, 电子从半导体向金属流动, 金属的一侧聚集负电荷, 而半导体的一侧聚集正电荷. 积累的正电荷从半导体表面向内部延伸一定的厚度, 形成空间电荷区. 亦即 Au 与

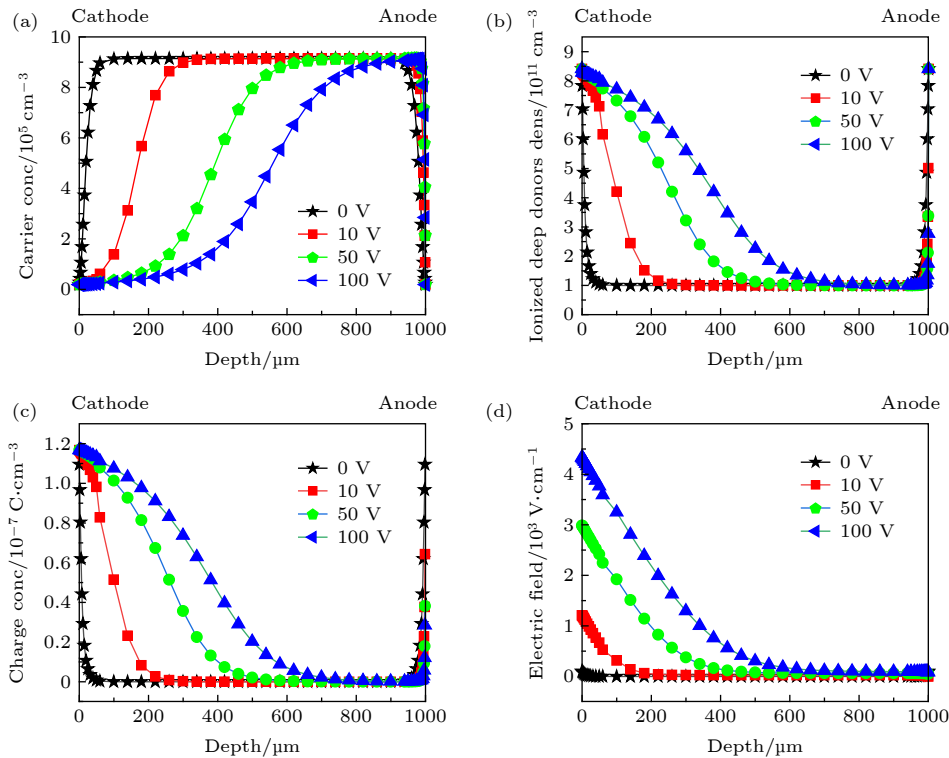


图 2 不同偏压下的 Au/CdZnTe/Au 器件仿真结果 (a) 载流子浓度分布; (b) 深施主的电离浓度分布; (c) 空间电荷浓度分布; (d) 内部电场强度分布变化规律

Fig. 2. Simulation results of Au/CdZnTe/Au device under different bias voltages: (a) Distribution of carrier concentration; (b) density of ionized deep donors; (c) distribution of space charge concentration; (d) distribution of internal electric field intensity.

CdZnTe 接触界面处存在一定的载流子耗尽区, 使得这部分电子的浓度低于 CdZnTe 晶体体内电子浓度. 与此同时, 空间电荷区的存在形成内建电场, 其电场的方向由半导体指向金属, 因而造成一定的能带弯曲. 随着外加偏压的增大, 晶体内载流子的浓度呈现出均匀分布趋势. 这与外加偏压下 Au/CdZnTe/Au 能带倾斜有关. 如图 3(b) 所示, 当外加偏压大于 0 时, 由于外加电场的作用, Au/CdZnTe/Au 能带发生由阴极向阳极逐渐倾斜的趋势, 从而使器件内载流子的浓度呈现不均匀分布.

载流子浓度的改变直接影响深能级的电离浓度^[26]. 图 2(b) 为不同偏压下, 深能级电离浓度的分布图. 晶体中深施主能级总浓度为 $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$. 根据图 2(b) 仿真结果显示, 在热平衡下晶体内部已电离的深施主能级浓度约为 $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, 即大概有 10% 的深施主能级发生了电离. 与此同时, 根据仿真结果可得, 热平衡下晶体费米能级位于 $E_V + 0.9 \text{ eV}$, 深施主能级的位置为 $E_V + 0.86 \text{ eV}$. 因此, 热平衡下, 费米能级处于深能级上方, 深施主能级发生了部分电离. 未电离的深施主能级被电子所占

据着, 呈现中性态. 其能带示意图如图 3(a) 所示. 由图 2(b) 可知, 晶体内阳极附近的区域, 同一个位置的深施主电离浓度随着外加偏压的增大而减小, 而其余的区域, 同一个位置的深施主电离浓度则随着外加偏压的增大而增大. 这可能与外加偏压作用下 Au/CdZnTe/Au 能带倾斜有关, 其趋势如图 3(b) 所示. 在倾斜的能带中, 深能级处于费米能级上方, 意味着深能级被电子占据的概率下降, 则深能级缺陷倾向于发射电子, 即深能级发生电离. 深施主能级电离后留下不可移动的正电中心, 聚集产生空间电荷区, 如图 3(c) 所示. 因此, 在外加偏压作用下, 晶体内空间电荷浓度分布也呈现阴极到阳极逐渐减小趋势, 且晶体中的空间电荷浓度随着外加偏压的增加而增大. 原因是晶体内部的空间电荷主要是来源于深施主能级的电离后的正电中心. 即外加偏压增大, 使得能带倾斜越厉害, 从而深施主电离的概率越大, 其空间电荷浓度也就越多. 由图 2(c) 可知, 在热平衡条件下空间电荷区约为 $50 \mu\text{m}$. 当电压为 100 V, 几乎整个探测器的体积都受到正空间电荷的影响. 与此同时, 随着外加电压的增大, 能带倾斜越厉害, 此时阳极区域的势垒不断下降.

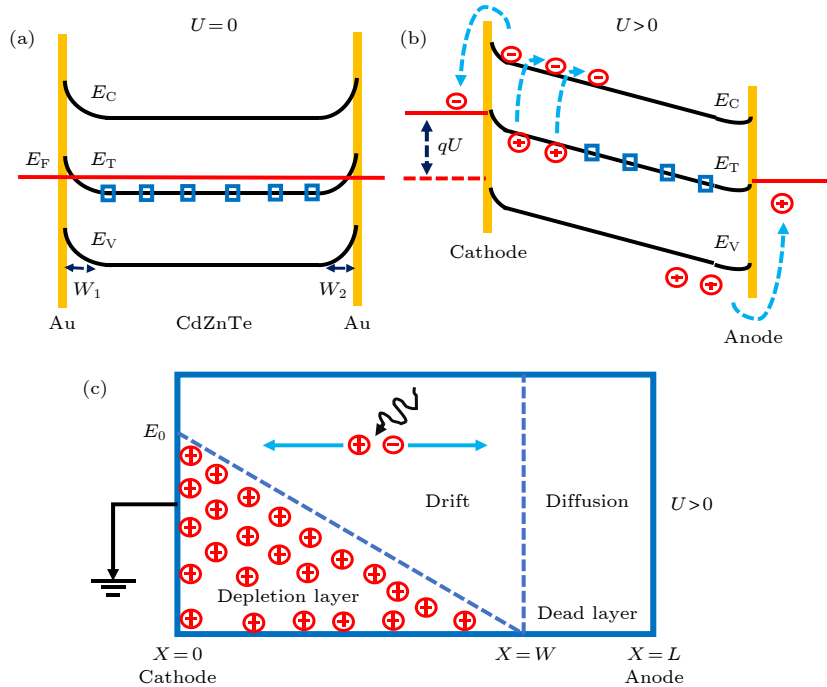


图 3 Au/CdZnTe/Au 器件内能带和内部电场分布示意图 (a) 热平衡的 Au/CdZnTe/Au 能带结构图; (b) $U > 0$ 的 Au/CdZnTe/Au 能带结构图; (c) 内部电场分布示意图

Fig. 3. Energy-band diagram and internal electric field distribution in Au/CdZnTe/Au device: (a) Au/CdZnTe/Au energy-band diagram in thermal equilibrium; (b) Au/CdZnTe/Au energy-band diagram under $U > 0$; (c) schematic diagram of internal electric field distribution.

因此, 阳极区域的空间电荷浓度随着外加电压的增大而减小.

器件内部空间电荷与电场关系满足如下泊松方程式:

$$-\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{dE}{dx} = \frac{\rho}{\epsilon_S} = \frac{q}{\epsilon_S}(p + N_{SD}^+ + N_{DD}^+ - n - N_{SA}^-), \quad (1)$$

式中, φ 为静电势, E 为电场, ϵ_S 为介电常数, N_{SD}^+ 为已电离的浅施主能级浓度, N_{SA}^- 为已电离的浅受主能级浓度, N_{DD}^+ 为已电离的深施主能级浓度, $n(p)$ 为自由电子(空穴)的浓度. 由泊松方程可得器件内电场强度分布, 如图 2(d) 所示. 当外加偏压大于 0 时, 内部电场强度分布由阴极向阳极逐渐减小的趋势, 深施主的电离率越大的区域, 其空间电荷浓度越大, 即内部电场越大. 与此同时, 阴极区域空间电荷所形成的内建电场与外加电场同向, 呈现三角形线性倾斜. 阳极区域空间电荷产生的内建电场与外加电场方向相反. 相互抵消后, 该区域电场强度特别弱, 形成死区. 死区对光生载流子的输运有较大的影响, 如图 3(c) 所示. 在死区中, 扩散是载流子唯一的驱动力. 这就增加了载流子在到达电极两端过程中被复合的概率, 从而使探测器的载流子收集效率降低.

综上, 外加电压时, Au/CdZnTe/Au 器件整体的能带结构呈现由阴极向阳极逐渐倾斜的趋势, 且界面处能带弯曲对载流子的收集存在一定的影响. 随着外加电压逐渐增大, 阴极势垒逐渐增大, 越有利于空穴从半导体进入阴极, 即空穴在阴极很容易被收集; 与此同时, 阳极势垒不断降低, 越有利于电子从半导体进入阳极, 即电子在阳极很容易被收集. 随着外加电压的增大, 耗尽区的区域逐渐增大, 死区的区域在不断的减小, 越有利于探测器对载流子的收集.

3.3 深能级缺陷浓度对空间电荷分布特性的影响

晶体内部深能级缺陷的存在会对内电场分布产生较大影响. 为了进一步了解不同浓度的深能级缺陷对空间电荷分布特性及器件性能的影响规律, 仿真了位置为 $E_v + 0.86$ eV, 深施主能级缺陷浓度分别为 5×10^{11} , 1×10^{12} 和 1×10^{13} cm^{-3} 的 CdZnTe 探测器在 100 V 外加偏压下, 其空间电荷分布及内电场分布, 具体仿真结果如图 4 所示. 由

图 4(a) 可以看出, 100 V 偏压下 Au/CdZnTe/Au 器件内空间电荷分布呈现由阴极向阳极逐渐减小的趋势, 且在阳极区域附近空间电荷浓度很小, 近乎为 0. 在阴极附近区域, 空间电荷的浓度随着深施主能级的浓度的增大而不断增大. 由图 4(b) 可知, 当深施主能级浓度为 1×10^{13} cm^{-3} 时, 内部电场变得陡峭. 在阴极区域电场强度很大, 且死区的区域最大. 这样的内部电场分布, 使得大部分的光生载流子(电子)无法通过漂移被阳极收集. 大量的电子在死区内只能靠浓度梯度扩散输运, 使得这部分载流子被晶体内部的缺陷俘获或者复合的概率急剧增大, 从而严重影响着探测器的载流子收集效率.

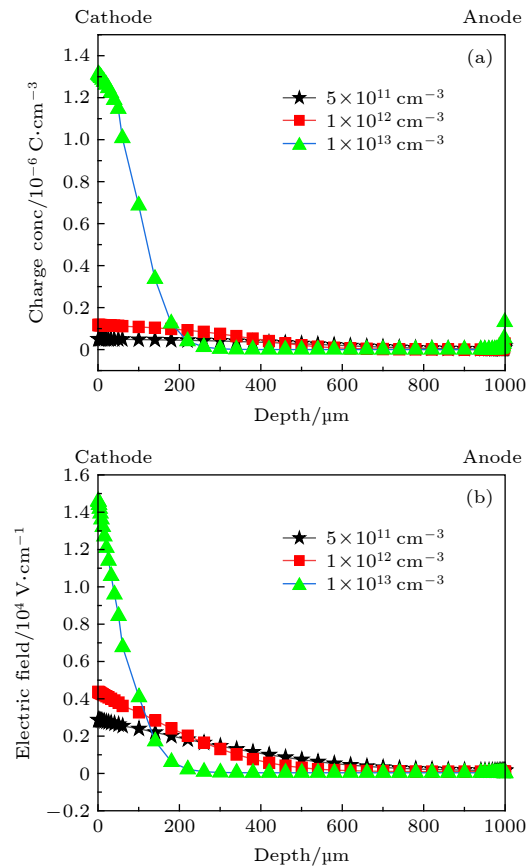


图 4 100 V 偏压下 Au/CdZnTe/Au 器件不同深施主浓度下的 (a) 空间电荷分布特性; (b) 内部电场分布特性

Fig. 4. Space charge distributions (a) and internal electric field distribution (b) of Au/CdZnTe/Au devices with different deep donor concentrations under bias of 100 V.

3.4 不同位置的深能级缺陷对空间电荷分布特性的影响

为了得到不同位置的深能级缺陷对空间电荷分布特性及器件性能的影响规律. 本节仿真了

CdZnTe 晶体深施主能级缺陷浓度为 $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, 位置分别为 $E_V + 0.80$, $E_V + 0.82$ 和 $E_V + 0.86 \text{ eV}$ 时, 且在 100 V 外加偏压下其内部空间电荷分布及内电场分布图, 仿真结果如图 5 所示. 由仿真得到深施主能级位于 $E_V + 0.80$, $E_V + 0.82$ 和 $E_V + 0.86 \text{ eV}$ 时, 晶体的电阻率分别为 6.85×10^{10} , 3.19×10^{10} 和 $6.66 \times 10^9 \Omega\text{-cm}$, 都满足探测器级 CdZnTe 晶体的电阻率要求. 由图 5(a) 可知, 在 100 V 的偏压下, 阴极区域附近的电荷浓度随着深施主能级位置的增大而增大, 而阳极区域和阴极区域的相反. 原因是深施主能级位置越接近于导带, 如上文所述在外加偏压作用时, 能带发生倾斜, 其深施主能级缺陷的电离浓度就越大. 且位置为 $E_V + 0.86 \text{ eV}$ 的施主能级在阳极附近的出现空间电荷近乎为 0 的区域. 由图 5(b) 可知, 当深施主能级位置为 $E_V + 0.80 \text{ eV}$ 时, 内部电场较平坦, 在阴极区域的电场强度最小, 且无死区的区域. 亦即在 100 V 的

偏压下, 器件完全工作在耗尽层内, 则光生载流子就可以通过漂移的方式快速地到达两端的电极, 从而大大减小在输运过程中被俘获或者复合的概率, 进而提升了载流子的收集效率.

4 结 论

本文采用半导体器件仿真软件 TCAD 系统分析了 CdZnTe 晶体内深能级缺陷浓度、位置以及外加偏压对空间电荷分布特性及器件性能的影响. 仿真结果表明当增大器件的外加偏压时, Au/CdZnTe/Au 结构整体的能带结构呈现由阴极下阳极逐渐倾斜的趋势. 晶体内的空间电荷浓度随着外加偏压的增加而增大, 死区逐渐减小, 从而大大降低光生的载流子被俘获或者复合的概率, 进而有助于提高器件中载流子的收集效率. 在保证 CdZnTe 晶体电阻率高阻为前提, 位于 $E_V + 0.86 \text{ eV}$ 的深能级缺陷, 其浓度降低为 $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ 时, 阴极附近区域的空间电荷浓度降低, 死区减小, 晶体内部电场更加平坦, 进而有助于提升载流子的收集效率. 与此同时, 当深能级位置为 $E_V + 0.80 \text{ eV}$ 时, 内部电场较平坦, 且无死区存在. 亦即在 100 V 的偏压下, 器件可完全工作在耗尽层内, 则光生载流子就可以通过漂移的方式快速地到达两端的电极, 从而大大减小在输运过程中被俘获或者复合的概率, 进而提升载流子的收集效率.

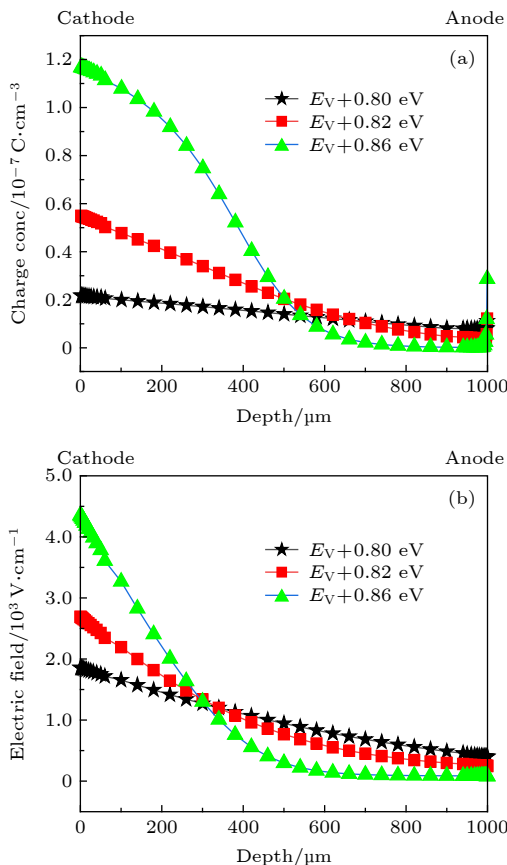


图 5 100 V 偏压下 Au/CdZnTe/Au 器件不同深施主位置下的 (a) 空间电荷分布特性; (b) 内部电场分布特性

Fig. 5. Space charge distributions (a) and internal electric field distribution (b) of Au/CdZnTe/Au devices with different depths of deep donor under bias of 100 V .

参考文献

- [1] Czyz S A, Farsoni A T, Gadey H R 2019 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **945** 162614
- [2] Johns P M, Nino J C 2019 *J. Appl. Phys.* **126** 040902
- [3] Guo Q, Beilicke M, Garson A, Kislat F, Fleming D, Krawczynski H 2012 *Astropart. Phys.* **41** 63
- [4] Prokesch M, Soldner S A, Sundaram A G, Reed M D, Li H, Eger J F, Reiber J L, Shanor C L, Wray C L, Emerick A J, Peters A F, Jones C L 2016 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **63** 1854
- [5] Chai L, Chen L, Yang C P, Zhou D D, Yang M M, Qu W W, Zhang G L, Hei D Q, Xu S P, Chen X J 2019 *Nucl. Sci. Tech.* **30** 91
- [6] Jiang W, Chalich Y, Deen M J 2019 *Sensors* **19** 5019
- [7] Iniewski K 2014 *J. Instrum.* **9** C11001
- [8] Carvalho A, Tagantsev A K, Öberg S, Briddon P R, Setter N 2010 *Phys. Rev. B* **81** 075215
- [9] Chu M, Terterian S, Ting D, Wang C C, Gurgonian H K, Mesropian S 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 2728
- [10] Szeles C, Shan Y, Lynn K G, Moodenbaugh A, Eissler E E 1997 *Phys. Rev. B* **55** 6945
- [11] Bale D S, Szeles C 2008 *Phys. Rev. B* **77** 035205
- [12] Soldner S A, Bale D S, Szeles C 2007 *IEEE Trans. Nucl. Sci.*

54 1723

- [13] Cola A, Farella I 2013 *Sensors* **13** 9414
- [14] Li Y, Zha G, Guo Y, Xi S, Xu L, Jie W 2020 *Sensors* **20** 383
- [15] Bale D S, Soldner S A, Szeles C 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 082101.1
- [16] Camarda G S, Bolotnikov A E, Cui Y, Hossain A, Awadalla S A, Mackenzie J, Chen H, James R B 2007 *IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record* Honolulu, Hawaii, USA, October 26 – November 3, 2007 p1798
- [17] Musienko A, Grill R, Pekárek J, Belas E, Praus P, Pipek J, Dědič V, Elhadidy H 2017 *Appl. Phys. Lett.* **111** 082103.1
- [18] Mahmood S A 2019 *J. Appl. Phys.* **125** 214505
- [19] Thomas B, Veale M C, Wilson M D, Sellar P, Schneider A, Iniewski K 2017 *J. Instrum.* **12** C12045
- [20] Maneuski D, Gostilo V, Owens A 2019 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **53** 015114
- [21] Das A, Dutttagupta S P 2015 *Radiat. Prot. Dosim.* **167** 443
- [22] Johannesson D, Nawaz M, Nee H P 2019 *Mater. Sci. Forum.* **963** 670
- [23] Tang L G 2014 *Semiconductor Process and Device Simulation Software Silvaco TCAD Practical Tutorial* (Beijing: Tsinghua University Press) p99 (in Chinese) [唐龙谷 2014 半导体工艺和器件仿真软件Silvaco TCAD实用教程 (北京: 清华大学出版社) 第99页]
- [24] Prokesch M, Szeles C 2007 *Phys. Rev. B* **75** 245204.1
- [25] Gul R, Roy U N, James R B 2017 *J. Appl. Phys.* **121** 115701.1
- [26] Simmons J G, Taylor G W 1971 *Phys. Rev. B* **4** 502

Effect of deep level defects on space charge distribution in CdZnTe crystals*

Guo Rong- Rong[†] Lin Jin-Hai Liu Li-Li Li Shi-Wei
Wang Chen Lin Hai-Jun

(Fujian Provincial Key Laboratory of Optoelectronic Technology and Devices, School of Opto-electronics and Communication Engineering, Xiamen University of Technology, Xiamen 361024, China)

(Received 15 April 2020; revised manuscript received 14 July 2020)

Abstract

CdZnTe recently emerged as a leading semiconductor crystal for fabricating room-temperature x- and gamma-ray imaging detectors, due to its excellent energy resolution and sensitivity. However, its wide deployment is hampered by the low availability of high-quality CdZnTe crystals. As-grown CdZnTe crystals generally encounter the problems arising from the impurities and defects, especially deep level defects. The presence of impurities and defects leads to severe charge trapping, which significantly affects detector performance. Especially for high counting rate imaging detector used in medical imaging and tomography, the accumulation of space charge at deep levels significantly deforms the electric field distribution and subsequently reduces the charge collection efficiency. Therefore, a considerable interest is focused on the investigation of the space charge accumulation effect in CdZnTe crystal, which is the key factor to improve the performance of high counting rate imaging detector. Thus, the goal of this work is to investigate the effects of deep level defects on space charge distribution and internal electric field in CdZnTe detector. In order to reveal the major problem therein, Silvaco TCAD technique is used to simulate the space charge and electric field distribution profile in CdZnTe detector with considering the typical deep level defects $\text{Te}_{\text{Cd}}^{++}$ in CdZnTe crystals with activation energy of $E_{\text{v}} + 0.86$ eV and concentration of $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ at room temperature. The simulation results demonstrate that the Au/ CdZnTe /Au energy band tilts intensively with the increase of applied bias, which makes the deep level ionization fraction increase. The space charge concentration also increases in the crystal. Meanwhile, the dead layer of electric field distribution decreases, which is of benefit to the carrier collection of CdZnTe detector. In addition, under the premise of the high resistivity of CdZnTe crystal, the reduction of deep level defect concentration located at $E_{\text{v}} + 0.86$ eV can narrow the internal dead layer moderately. The deep level defect located at $E_{\text{v}} + 0.8$ eV can also reduce the space charge concentration near the cathode, which flattens the electric field distribution with narrower dead layer, thus significantly improving the carrier collection efficiency of CdZnTe detector. These simulation results will provide meaningful theoretical guidance for further optimizing the CdZnTe crystal growth, device design and fabrication.

Keywords: CdZnTe nuclear radiation detector, space charge, deep level defect, charge collection efficiency

PACS: 61.72.uj, 61.72.-y, 85.25.0j

DOI: 10.7498/aps.69.20200553

* Project supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51702271, 61904155), the Natural Science Foundation of Fujian Province, China (Grant No. 2020J05239), and the Middle-Aged and Young Teachers Education , Scientific Research Program of the Education Department of Fujian Province, China (Grant No. JAT170407) .

[†] Corresponding author. E-mail: guorr2020@163.com