

УДК 614.84

Doi: 10.31772/2712-8970-2024-25-3-384-390

**Для цитирования:** Мозжерин А. В., Паклин Н. Н., Логинов Ю. Ю. Специфика дефектообразования в детекторах на основе теллурида кадмия при импульсном тепловом воздействии // Сибирский аэрокосмический журнал. 2024. Т. 25, № 3. С. 384–390. Doi: 10.31772/2712-8970-2024-25-3-384-390.

**For citation:** Mozzherin A. V., Paklin N. N., Loginov Yu. Yu. [Specificity of defect formation in detectors based on cadmium telluride under pulse thermal influence]. *Siberian Aerospace Journal*. 2024, Vol. 25, No. 3, P. 384–390. Doi: 10.31772/2712-8970-2024-25-3-384-390.

## Специфика дефектообразования в детекторах на основе теллурида кадмия при импульсном тепловом воздействии

А. В. Мозжерин<sup>\*1</sup>, Н. Н. Паклин<sup>1</sup>, Ю. Ю. Логинов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Сибирский федеральный университет

Российская Федерация, 660041, Красноярск, просп. Свободный, 79

<sup>2</sup>Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М. Ф. Решетнева

Российская Федерация, 660037, г. Красноярск, просп. им. газ. «Красноярский рабочий», 31

E-mail: Amozzherin@sfu-kras.ru

*Активное развитие наукоемких технологий в аэрокосмической отрасли требует рассмотрения работы приборов и устройств в экстремальных условиях, важно исследовать деградацию материалов при быстром нагревании и охлаждении. В данной статье, на основе выполненной теоретической и экспериментальной работы, рассмотрена деградация детекторов на основе теллурида кадмия, вызванная развитием и эволюцией сети точечных дефектов, обусловленных импульсным воздействием с тепловодозой около 1000 °C в течение не более 10 с, имитирующим экстремальную ситуацию короткого замыкания вблизи детектора или прямое нагревание световыми импульсами. Исследование показало, что кристаллический материал в таких экстремальных условиях быстро деградирует вследствие стремительной эволюции дефектной сети. Доработана феноменологическая модель образования и распределения дефектов при кратковременном воздействии теплового излучения на детектор. Электронно-микроскопические исследования образцов, подвергшихся воздействию импульсного инфракрасного излучения, показали развитие плотной дефектной сети, дефектов вакансионного и междоузельного типов, их кластеров и прочих повреждений во всех образцах.*

*Ключевые слова:* теллурид кадмия, точечные дефекты, кластеры дефектов, термическое дефектообразование.

## Specificity of defect formation in detectors based on cadmium telluride under pulse thermal influence

A. V. Mozzherin<sup>\*1</sup>, N. N. Paklin<sup>1</sup>, Yu. Yu. Loginov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Siberian Federal University

79, Svobodny Av., Krasnoyarsk, 660041, Russian Federation

<sup>2</sup>Reshetnev Siberian State University of Science and Technology

31, Krasnoyarskii rabochii prospekt, Krasnoyarsk, 660037, Russian Federation

E-mail: Amozzherin@sfu-kras.ru

*Active development of high technologies in the aerospace industry requires consideration of the operation of devices and equipment under extreme conditions; it is important to study the degradation of materials during rapid heating and cooling. In this paper, based on the theoretical and experimental work per-*

formed, we consider the degradation of cadmium telluride detectors caused by the development and evolution of a network of point defects caused by pulsed exposure with a heat dose of about 1000 °C for no more than 10 seconds, simulating an extreme situation of a short circuit near the detector or direct heating by light pulses. The study showed that the crystalline material quickly degrades under such extreme conditions due to the rapid evolution of the defect network. The phenomenological model of the formation and distribution of defects during short-term exposure of the detector to thermal radiation has been improved. Electron microscopic studies of samples exposed to pulsed infrared radiation showed the development of a dense defect network, vacancy and interstitial defects, clusters and other damage in all samples.

**Keywords:** thermal impact, cadmium telluride, defects, emergency situations.

## Введение

Аэрокосмическая сфера, активно развивающаяся в настоящее время, всё чаще сталкивается с нестандартными задачами, возникающими в результате работы приборов и устройств в экстремальных условиях при импульсном тепловом и радиационном воздействиях или возникновении чрезвычайных ситуации, например, пожаров и взрывов.

В качестве приборов для регистрации импульсов определенного рода излучений используются детекторы на основе теллурида кадмия [1; 2]. При определенных обстоятельствах температура в зоне работы оборудования может достигать огромной величины, приводящей к деградации материалов и впоследствии выходу из строя приборов и устройств. Достаточно хорошо известно, что воздействие инфракрасного излучения на кристаллический материал приводит к образованию и развитию в нем дефектной структуры, эволюция которой влечет изменение физико-химических свойств. Точечные дефекты под воздействием внешних факторов могут образовывать кластеры, формирующие объемные дефекты, что с одной стороны может привести к быстрому разрушению материала, но с другой до определенного момента позволяет противостоять этому. Отдельные вопросы формирования и эволюции дефектов в полупроводниках описаны ранее в работах [3–7].

Рассмотрим чрезвычайную ситуацию, при которой детектор на основе теллурида кадмия (CdTe) подвергается воздействию экстремально высоких температур 1000 °C. Ввиду того что температура плавления CdTe составляет 1092 °C и указанное ранее тепловое воздействие для данного полупроводника является критическим, интересным представляется предел его устойчивости в цельнокристаллических и тонкопленочных образцах.

Целью исследования является более качественное понимание процессов дефектообразования, приводящих к деградации теллурида кадмия при кратковременном импульсном тепловом воздействии с нагреванием до 1000 °C.

## Материалы, методы и практические результаты

В качестве объекта исследования был взят теллурид кадмия – прямозонный полупроводник группы A<sup>II</sup>B<sup>VI</sup>, один из перспективных и активно применяющихся материалов микроэлектроники. Основные свойства исследуемого материала представлены в табл. 1.

Таблица 1

Некоторые физико-химические свойства теллурида кадмия [5; 8; 9]

Плотность	5,85 г/см <sup>3</sup>
Температура плавления	1092 °C
Растворимость в воде и др. растворителях	нерастворимый
Кристаллическая структура	кубическая, сфалерит (цинковая обманка)
Параметр решётки	0,648 нм
Коэффициент Пуассона, $\nu$	0,41
Модуль сдвига	9,2 ГПа
Энергия дефекта упаковки	$11 \pm 1,9$ мДж/м <sup>2</sup>
Пожаровзрывобезопасность	негорючий

Образцы CdTe были подвергнуты импульсному воздействию с тепловозой приблизительно 1000 °С в течение не более 10 с, имитирующему экстремальную ситуацию короткого замыкания вблизи детектора или прямое нагревание солнечными лучами. Внутренний вид установки и процесс теплового воздействия представлен на рис. 1.



Рис. 1. Экспериментальная установка и процесс имитации импульсного теплового воздействия

Fig. 1. Experimental setup and process of simulating pulsed thermal action

Экспериментальная часть исследования дополнительно включала электронно-микроскопические исследования образцов, подвергшихся воздействию импульсного инфракрасного излучения для определения плотности дефектной сети, типов дефектов, их кластеров и прочих повреждений. Полученные результаты показали наличие значительной плотности дефектов во всех образцах до  $10^{19} \text{ см}^{-3}$ . При этом в тонкой пленке CdTe плотность дефектов была ниже. Дефекты были представлены преимущественно вакансиями и междоузельными атомами, дислокациями и дислокационными петлями, а также дефектами упаковки (рис. 2). Дополнительная информация о пробоподготовке образцов и исследованию на просвечивающем электронном микроскопе представлена в [5; 10; 11].

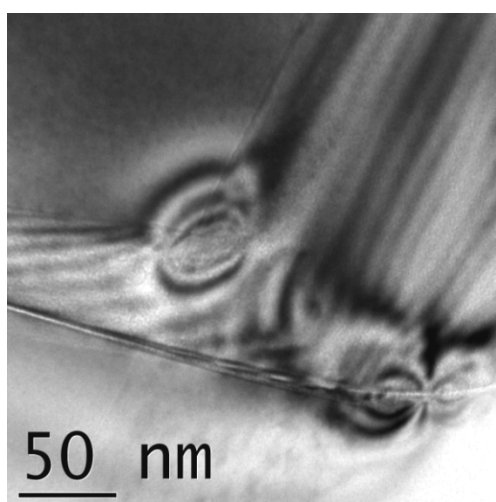


Рис. 2. Формирование дефектов в теллуриде кадмия после кратковременного теплового воздействия

Fig. 2. Formation of defects in cadmium telluride after short-term thermal exposure

**Модель образования дефектов в теллуриде кадмия при импульсном тепловом воздействии**

Теоретическая работа была основана на доработке математической модели физико-химических превращений в CdTe при импульсном воздействии инфракрасного излучения с амплитудой 1 000 С° в течение не более 10 с. Моделирование импульса осуществлялось формулой (колокол Гаусса):  $T = 27^\circ\text{C} + A \cdot \exp(-t^2)$ , где  $A = 1\,000\text{ С}^\circ$ . Расчет производился с помощью математического пакета Maple.

В основу усовершенствованной модели физико-химических превращений в полупроводниках под действием теплового излучения легла система модифицированных уравнений эволюции концентраций структурных точечных и двойных дефектов:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = P + D_I \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} - c_0 R(nv + 2nw - 2vm) - 2c_0 A_I(n^2 + nm) + 2Pm, \quad (1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = P + D_V \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} - c_0 R(nv - 2nw + 2vm) - 2c_0 A_V(v^2 + vw) + 2Pw, \quad (2)$$

$$\frac{\partial m}{\partial t} = c_0 A_I(n^2 - 2nm) - 2c_0 Rvm - Pm, \quad (3)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = c_0 A_V(v^2 - 2vw) - 2c_0 Rnw - Pw, \quad (4)$$

где  $t$  – время;  $z$  – расстояние от поверхности до середины пленки (толщина пленки равна 200 нм). Для эффективных концентраций введены следующие обозначения:  $C_I$  и  $C_V$  – концентрации междоузельных атомов и вакансий;  $C_m$  и  $C_w$  – концентрации димеждоузлий и дивакансий;  $c_0$  – концентрация узлов идеальной решетки теллурида кадмия. Результаты расчетов представлены в терминах относительных концентраций:  $n = C_I / c_0$ ,  $v = C_V / c_0$ ,  $m = C_m / c_0$ ,  $w = C_w / c_0$ . Обозначения для параметров модели:  $D_I$  и  $D_V$  – коэффициенты диффузии (миграции) междоузельных атомов и вакансий;  $A_I$  и  $A_V$  – коэффициенты агломерации (присоединения) междоузельных атомов и вакансий, соответственно;  $R$  – коэффициент рекомбинации;  $P$  – коэффициент диссоциации решетки кристалла, отвечающий эффективной энергии теплового рождения пар Френкеля  $E_P$ .

Все перечисленные коэффициенты выражаются через энергии активации реакции как

$$(R, A_I, A_V) = a^3 v \cdot \exp\left(-\frac{1}{kT}(E_R, E_I, E_V)\right), \quad (5)$$

$$(D_I, D_V) = a^2 v \cdot \exp\left(-\frac{1}{kT}(E_{Im}, E_{Vm})\right), \quad (6)$$

$$P = v \cdot \exp\left(-\frac{E_P}{kT}\right), \quad (7)$$

здесь  $v$  – частота колебаний кристаллической решетки;  $a$  – постоянная решетки;  $k$  – постоянная Больцмана;  $T$  – температура. Для решения уравнений необходимо учитывать диффузию, влияющую на тонкие плёнки значительно, чем на макроскопические образцы. Численные значения параметров, используемых в выражениях (1)–(7) представлены в табл. 2.

Таблица 2

**Численные значения ряда параметров кристалла CdTe [5; 6; 12–15]**

$E_{Im}$	$E_{Vm}$	$E_I$	$E_V$	$E_R$	$E_P$	$c_0$	$v$	$a$
эВ	эВ	эВ	эВ	эВ	эВ	см <sup>-3</sup>	Гц	нм
0,32	0,6	0,45	0,5	0,25	1,4	$1,5 \cdot 10^{22}$	$10^{13}$	0,648

Решение уравнений (1)–(7) представлены на рис 3.

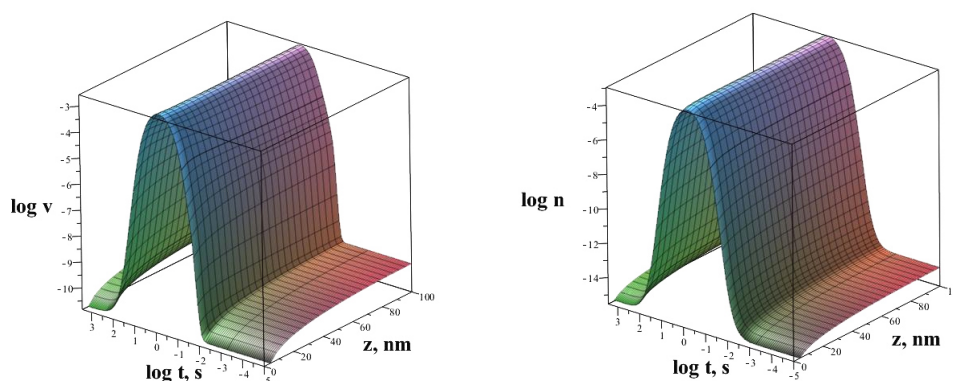


Рис. 3. Зависимость концентраций точечных дефектов (вакансий и междоузлий) от времени и расстояния от поверхности до середины кристаллической пленки при кратковременном тепловом воздействии с амплитудой до 1000 °C

Fig. 3. Dependence of concentrations of point defects (vacancies and interstitials) on time and distance from the surface to the middle of the crystalline film under short-term thermal exposure with an amplitude of up to 1000 °C

Полученные результаты (рис. 3) показывают хорошую согласованность с экспериментальными данными. Безусловно, высокие температуры, даже действуя кратковременно на теллурид кадмия, приводят к взрывному росту и эволюции дефектной сети с концентрацией порядка  $10^{19} \text{ см}^{-3}$  и последующим разрушением материала. Однако исследования показывают, что тонкопленочные образцы CdTe имеют тенденцию к более скорому остыванию и снижению концентрации точечных дефектов вследствие выхода части из них на поверхность, что уменьшает вероятность объединения в кластеры.

### Заключение

Проведено комплексное исследование импульсного теплового воздействия на детектор, состоящий из теллурида кадмия. Рассмотрено повышение температуры детектора от 27 до 1027 °C. Причиной нагревания может служить воздействие солнечных лучей, инфракрасное излучение при коротком замыкании вблизи детектора, прямое нагревание детектора при скачках напряжения в сети питания, импульсное радиационное воздействие. Исследование показало, что кристаллический материал в таких экстремальных условиях быстро деградирует вследствие стремительной эволюции дефектной сети. При этом тонкопленочные образцы CdTe более устойчивы к импульсному тепловому воздействию, а оборудование на их основе способно сохранять рабочее состояние значительно дольше.

Математическая модель, на основе которой получены численные результаты, является хорошим дополнением (в качестве начального условия) к моделям, описывающим эволюцию точечных дефектов при ионизирующем облучении.

### Библиографические ссылки

1. CdTe-детекторы для регистрации импульсов рентгеновского излучения с субнаносекундным разрешением / С. Л. Эльяш, А. В. Родигин, Т. В. Лойко и др. // Приборы и техника эксперимента. 2011. № 4. С. 116–119.
2. Пленочные детекторы ядерных излучений из теллурида кадмия / Б. Н. Заверюхин, Ш. А. Мирсагатов, Н. Н. Заверюхина и др. // Письма в ЖТФ. 2003. Т. 29, вып. 22. С. 80–87.
3. Irradiation-induced defects in CdTe and CdZnTe detectors / A. Cavallini, B. Fraboni, N. Auricchio et al. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2001. Vol. 458, Iss. 1–2. P. 392–399.

4. Кондрик А. И., Ковтун Г. П. Влияние радиационных дефектов на электрофизические и детекторные свойства CdTe:Cl, облученного нейтронами // *Технология и конструирование в электронной аппаратуре*. 2020. № 1–2. С. 22–29.
5. Логинов Ю. Ю., Браун П. Д., Дьюроуз К. Закономерности образования структурных дефектов в полупроводниках  $A_2B_6$ . М. : Логос, 2003. 304 с.
6. Мозжерин А. В., Паклин Н. Н. Теплостойкость устройств на основе теллурида кадмия при пожарах в условиях переменной температуры // *Пожарная безопасность*. 2023. № 2 (111). С. 42–48. <https://doi.org/10.37657/vniipo.pb.2023.111.2.003>.
7. Loginov Yu. Yu., Mozzherin A. V., Bril'kov A. V. Dependence of the Critical Radius of Partial Dislocation Loops on the Stacking Fault Energy in Semiconductors // *Physics of the Solid State*. 2014. Vol. 56, No. 4. P. 720–722.
8. Физика и химия соединений  $A_2B_6$  / под ред. С. А. Медведева. М. : Мир, 1970. 624 с.
9. Султонов Н. С., Хамрокулов Р. Б., Акобиров А. Т. Разработка технологии получения поликристаллических пленок теллурида кадмия и исследование их структуры и электрических свойств // *Вестник ТНУ*. 2020. № 4. С. 130–146.
10. Кобелева С. П. Структура собственных точечных дефектов в CdTe // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов : материалы IV Междунар. конф., Москва, 24–26 октября 2022 г. М. : МАКС Пресс, 2022. С. 135–138.
11. Characterization of CdTe, (Cd,Zn)Te, and Cd(Te,Se) single crystals by transmission electron microscopy / R. S. Rai, S. Mahajan, S. McDevitt, C. J. Johnson // *J. Vac. Sci. and Technol.* 1991. Vol. B9, No. 3. P. 1892–1896.
12. Loginov Y. Y., Mozzherin A. V., Paklin N. N. Particularities of the interstitial atoms and vacancies clusters formation in a thin cadmium telluride foil during in situ electron irradiation in a TEM // *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*. 2022. Vol. 1230. P. 012013. Doi: 10.1088/1757-899X/1230/1/012013.
13. Горичок И. В. Энтальпия образования дефектов Шоттки в полупроводниках // *ФТТ*. 2012. Т. 54, вып. 3. С. 1373–1376.
14. Glas F. A simple calculation of energy changes upon stacking fault formation or local crystalline phase transition in semiconductors // *Journal of Applied Physics*. 2008. Vol. 104, 093520. P. 1–6.
15. Разработка математической модели процесса сбора заряда и формирования спектра в детекторах на основе CdTe (CdZnTe) при облучении гамма-квантами / А. А. Смирнов, И. А. Каплунов, А. А. Ольнев, А. Н. Никифорова // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. 2017. № 9. С. 465–474.

## References

1. Elyash S. L., Rodigin A. V., Loiko T. V., Polyakov A. I., Kapitanov S. V. CdTe detectors for recording X-ray pulses with subnanosecond resolution. *Instruments and experimental technique*. 2011, No. 4, P. 116–119.
2. Zaveryukhin B. N., Mirsagatov Sh. A., Zaveryukhina N. N., Volodarsky V. V., Zaveryukhina E. B. [Film detectors of nuclear radiation from cadmium telluride]. *Letters to the Journal of Technical Physics*. 2003, Vol. 29, Iss. 22, P. 80–87 (In Russ.).
3. Cavallini A., Fraboni B., Auricchio N., Caroli E., Dusi W., Chirco P., Morigi M.P., Zanarini M. Irradiation-induced defects in CdTe and CdZnTe detectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 2001, Vol. 458, Iss. 1–2, P. 392–399.
4. Kondrik A. I., Kovtun G. P. [Influence of radiation defects on the electrophysical and detector properties of CdTe:Cl irradiated with neutrons]. *Tekhnologiya i konstruirovaniye v elektronnoy apparatury*. 2020, No. 1–2, P. 22–29 (In Russ.).
5. Loginov Y. Y., Brown P. D., Durose K. *Zakonomernosti obrazovaniya strukturnykh defektov v poluprovodnikakh  $A_2V_6$*  [Regularity of the structural defects formation in semiconductors  $A_2B_6$ ]. Moscow, Logos Publ., 2003, 304 p.

6. Mozzherin A. V., Paklin N. N. [Heat resistance of devices based on cadmium telluride in fires under conditions of variable temperature]. *Pozharnaya bezopasnost'*. 2023, No. 2 (111), P. 42–48 (In Russ.). <https://doi.org/10.37657/vniipo.pb.2023.111.2.003>.
7. Loginov Yu. Yu., Mozzherin A. V., Bril'kov A. V. Dependence of the Critical Radius of Partial Dislocation Loops on the Stacking Fault Energy in Semiconductors. *Physics of the Solid State*. 2014, Vol. 56, No. 4, P. 720–722.
8. *Fizika i khimiya soedineniy A<sup>2</sup>B<sup>6</sup>* [Physics and Chemistry of A<sup>2</sup>B<sup>6</sup> Compounds]. Ed. S. A. Medvedev. Moscow, Mir Publ., 1970, 624 p.
9. Sultonov N. S., Khamrokulov R. B., Akobirowa A. T. [Development of Technology for Obtaining Polycrystalline Cadmium Telluride Films and Study of Their Structure and Electrical Properties]. *Vestnik TNU*. 2020, No. 4, P. 130–146 (In Russ.).
10. Kobeleva S. P. [Structure of Intrinsic Point Defects in CdTe]. *Matematicheskoe modelirovanie v materialovedenii elektronnykh komponentov : materialy IV Mezhdunar. konf.* [Mathematical Modeling in Materials Science of Electronic Components: Proceedings of the IV International Conference]. Moscow, 2022, P. 135–138 (In Russ.).
11. Rai R. S., Mahajan S., McDevitt S., Johnson C. J. Characterization of CdTe, (Cd,Zn)Te, and Cd(Te,Se) single crystals by transmission electron microscopy. *J. Vac. Sci. and Technol.* 1991, Vol. B9, No. 3, P. 1892–1896.
12. Loginov Y. Y., Mozzherin A. V., Paklin N. N. Particularities of the interstitial atoms and vacancies clusters formation in a thin cadmium telluride foil during in situ electron irradiation in a TEM. *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*. 2022, Vol. 1230, P. 012013. Doi: 10.1088/1757-899X/1230/1/012013.
13. Gorichok I. V. [Enthalpy of Schottky Defects Formation in Semiconductors]. *Physics of the Solid State*. 2012, Vol. 54, P. 1373–1376 (In Russ.).
14. Glas F. A simple calculation of energy changes upon stacking fault formation or local crystalline phase transition in semiconductors. *Journal of Applied Physics*. 2008, Vol. 104, 093520, P. 1–6.
15. Smirnov A. A., Kaplunov I. A., Olnev A. A., Nikiforova A. N. [Development of a mathematical model of the process of charge collection and spectrum formation in detectors based on CdTe (CdZnTe) under gamma-ray irradiation]. *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov*. 2017, No. 9, P. 465–474 (In Russ.).

© Можжерин А. В., Паклин Н. Н., Логинов Ю. Ю., 2024

---

**Можжерин Александр Владимирович** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры Юнеско «Новые материалы и технологии»; Сибирский федеральный университет. E-mail: amozzherin@sfu-kras.ru.

**Паклин Николай Николаевич** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики и волновых явлений; Сибирский федеральный университет. E-mail: npaklin@sfu-kras.ru.

**Логинов Юрий Юрьевич** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры технической физики; Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М. Ф. Решетнева. E-mail: loginov@sibsau.ru.

**Mozzherin Alexandr Vladimirovich** – Cand. Sc., Associate Professor of the UNESCO “New Materials and Technologies” Department; Siberian Federal University. E-mail: amozzherin@sfu-kras.ru.

**Paklin Nikolai Nikolaevich** – Cand. Sc., Associate Professor of the Theoretical Physics and Wave Phenomena Department; Siberian Federal University. E-mail: npaklin@sfu-kras.ru.

**Loginov Yuri Yurievich** – Dr. Sc., Professor of the Technical Physics Department; Reshetnev Siberian State University of Science and Technology. E-mail: loginov@sibsau.ru.

---