

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ВОЛИНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ЛЕСІ УКРАЇНКИ**

Кафедра експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій

На правах рукопису

КОСТАНОВИЧ БОГДАН РУСЛАНОВИЧ

**ФОТОЕЛЕКТРИЧНІ ТА ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ
МОНОКРИСТАЛІВ $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$**

Спеціальність: 105 «Прикладна фізика та наноматеріали»

Освітньо-професійна програма «Прикладна фізика»

Робота на здобуття освітнього ступеня «магістр»

Науковий керівник:

НОВОСАД ОЛЕКСІЙ ВОЛОДИМИРОВИЧ,
кандидат фізико-математичних наук, доцент

РЕКОМЕНДОВАНО ДО ЗАХИСТУ

Протокол № _____
засідання кафедри _____
від _____ 202_р.

Завідувач кафедри
(_____) _____
(підпис) ПІБ

ЛУЦЬК – 2025

АНОТАЦІЯ

Костанович Б.Р. Фотоелектричні та оптичні властивості монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$.

У випускній кваліфікаційній роботі досліджено спектральний розподіл фотопровідності та спектральний розподіл коефіцієнта поглинання світла монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ при $T=300$ К. На основі проведених досліджень оцінено значення ширини забороненої зони $E_g \approx 1,57$ eV та визначено енергетичне положення домішкових максимумів (1,41 eV та 1,51 eV).

Дослідження фізичних властивостей монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ становить значний інтерес для сучасної фізики та хімії, адже цей матеріал поєднує специфічні електронні та оптичні параметри, що робить його придатним для застосування у високотехнологічних пристроях. Варіювання вмісту Zn дає змогу точно змінювати ширину забороненої зони, покращувати структурну якість і регулювати дефектний стан кристалу, що визначає його електропровідність, фоточутливість і стійкість до радіаційних впливів. Сукупність цих властивостей є вирішальною для розробки γ - та рентгенівських детекторів, інфрачервоних сенсорів, оптоелектронних компонентів і сонячних елементів.

У першому розділі кваліфікаційної роботи розглянуті та проаналізовані основні оптичні та фотоелектричні явища, які використовуються в сучасній напівпровідниковій техніці, проаналізовано можливості використання $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ в різних галузях науки і техніки. У другому розділі описані основні методики досліджень, які використовувалися для вивчення оптичних та фотоелектричних властивостей монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$. У третьому розділі представлені результати досліджень оптичних та фотоелектричних властивостей монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ та їх обґрунтування.

Наукова новизна одержаних результатів полягає в тому, що встановлено, що основний максимум фотопровідності монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ спостерігався при $h\nu \approx 1,57$ eV та відповідає міжзонним оптичним переходам. Сумарний спектр фотопровідності у домішковій області формується

як суперпозиція трьох Гаусівських компонент, що свідчить про багатофакторний характер фотопровідності. Різкий спад фотопровідності при $h\nu > 1,57 \text{ eV}$ обумовлений високою швидкістю поверхневої рекомбінації вільних носіїв заряду. Домішкова область спектрів фотопровідності містить два максимуми (при $1,41 \text{ eV}$ та при $1,51 \text{ eV}$), кожен із яких пов'язаний з певними типами дефектів. Природа цих піків включає як ізольовані точкові дефекти, так і дефекти, пов'язані з протяжним структурним розупорядкуванням. Енергетична залежність коефіцієнта поглинання світла у монокристалах $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ добре описується правилом Урбаха, що свідчить про суттєвий рівень структурного розупорядкування та наявність Урбахівських хвостів у зонній структурі. З аналізу енергетичного розподілу коефіцієнта поглинання отримано значення ширини забороненої зони $E_g \approx 1,53 \text{ eV}$. Воно добре узгоджується з положенням максимуму фотопровідності $h\nu = 1,57 \text{ eV}$. Отримане значення параметра розупорядкування Урбаха $\Delta_0 = 0,023 \text{ eV}$ вказує на високу концентрацію дефектів та флуктуацій потенціалу, які істотно впливають на формування краю оптичного поглинання.

Практичне значення результатів досліджень оптичних та фотоелектричних властивостей монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ полягає в тому, що напівпровідникові матеріали $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ є перспективними для виготовлення чутливих фотодатчиків. Монокристали $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ є перспективними як матеріали для фотодіодів, оптичних елементів і модуляторів у середній- та довгохвильовій ІЧ-оптиці, де потрібні стабільні кристали з керованою шириною забороненої зони. Монокристали $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ в порівнянні з монокристалами CdTe можуть бути використані як модельні об'єкти для дослідження взаємозв'язку між кристалічною структурою та фізико-хімічними властивостями.

Ключові слова: монокристали, фотопровідність, коефіцієнт поглинання, дефекти кристалічної структури.

ABSTRACT

Kostanovych B.R. Photoelectric and Optical Properties of $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ Single Crystals.

The final qualification work investigates the spectral distribution of photoconductivity and the spectral dependence of the light absorption coefficient of $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ single crystals at $T=300\text{ K}$. Based on the conducted studies, the band-gap width was evaluated as $E_g \approx 1,57\text{ eV}$, and the energetic positions of impurity maxima ($1,41\text{ eV}$ and $1,51\text{ eV}$) were determined.

The study of the physical properties of $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ single crystals is of considerable interest for modern physics and chemistry, since this material combines specific electronic and optical parameters that make it suitable for use in advanced technological devices. Variation in the Zn content allows precise tuning of the band-gap width, improvement of structural quality, and regulation of the defect structure of the crystal, which determines its electrical conductivity, photosensitivity, and radiation resistance. The combination of these properties is crucial for the development of γ - and X-ray detectors, infrared sensors, optoelectronic components, and solar cells.

The first chapter reviews and analyzes the main optical and photoelectric phenomena used in modern semiconductor technology, as well as the potential applications of $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ in various fields of science and engineering. The second chapter describes the main research methods used to study the optical and photoelectric properties of $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ single-crystal samples. The third chapter presents the experimental results on the optical and photoelectric properties of $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ single crystals along with their interpretation.

The scientific novelty of the obtained results lies in establishing that the main photoconductivity maximum of $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ single crystals is observed at $h\nu \approx 1,57\text{ eV}$ and corresponds to band-gap optical transitions. The total photoconductivity spectrum in the impurity region is formed as a superposition of three Gaussian components, indicating the multifactor nature of the photoconductivity process. The sharp decrease in photoconductivity for $h\nu > 1,57\text{ eV}$ is attributed to the high surface recombination rate of free charge carriers. The impurity region of the

photoconductivity spectra contains two maxima (at $1,41\text{ eV}$ and $1,51\text{ eV}$), each associated with specific types of defects. The nature of these peaks includes both isolated point defects and defects related to extended structural disorder. The energy dependence of the absorption coefficient in $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ single crystals is well described by Urbach's rule, indicating a significant level of structural disorder and the presence of Urbach tails in the band structure. From the analysis of the absorption coefficient, the band-gap value $E_g \approx 1,53\text{ eV}$ was obtained, which is consistent with the photoconductivity maximum at $h\nu = 1,57\text{ eV}$. The considerable value of the Urbach disorder parameter $\Delta_0 = 0,023\text{ eV}$ suggests a high concentration of defects and potential fluctuations that significantly affect the formation of the optical absorption edge.

The practical significance of studying the optical and photoelectric properties of $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ single crystals lies in the fact that this semiconductor material is promising for the fabrication of sensitive photodetectors. $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ single crystals are suitable for use in photodiodes, optical elements, and modulators operating in the mid- and long-wavelength infrared range, where stable crystals with tunable band-gap width are required. Compared to CdTe single crystals, $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ crystals can also serve as model systems for studying the relationship between crystal structure and chemical properties.

Keywords: single crystals, photoconductivity, absorption coefficient, crystal structure defects.

ЗМІСТ

ВСТУП	8
РОЗДІЛ 1. ОПТИЧНІ ТА ФОТОЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАПІВПРОВІДНИКІВ	12
1.1. Основні механізми поглинання світла напівпровідниками	12
1.2. Правило Урбаха.	16
1.3. Фотопровідність в напівпровідниках.....	17
1.3.1. Загальні відомості про фотопровідність.....	17
1.3.2. Власна фотопровідність у напівпровідниках: природа, механізми та особливості	19
1.3.3. Домішкова фотопровідність у напівпровідниках.....	24
1.4. Монокристали CdTe та їх використання	27
1.4.1. Кристалічна структура та дефекти кристалічної структури монокристалів CdTe.....	27
1.4.2. Використання монокристалів CdTe.	28
ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 1	30
РОЗДІЛ 2. МЕТОДИКА ТА ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ	32
2.1. Методика вирощування монокристалів $Cd_{1-x}Zn_xTe$ методом Бріджмена в парах кадмію та цинку	32
2.2. Підготовка зразків монокристалів $Cd_{1-x}Zn_xTe$ до вимірювань	34
2.3. Методика дослідження спектрального розподілу фотопровідності монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$	36
2.4. Методика дослідження спектрального розподілу коефіцієнта поглинання світла фотопровідності монокристалами $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$	37
ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 2	39

РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ	40
3.1. Фотопровідність монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$	40
3.2. Фізична інтерпретація домішкових максимумів фотопровідності монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$	43
3.3. Оптичні властивості твердих розчинів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$	45
ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 3	48
ВИСНОВКИ.....	49
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	50

ВСТУП

Дослідження фізичних властивостей монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ є актуальним завданням сучасної фізики та хімії, оскільки цей матеріал поєднує у собі унікальні електронні й оптичні характеристики, які роблять його перспективним для використання у високотехнологічних галузях. Зміна концентрації Zn дозволяє тонко керувати шириною забороненої зони, структурною досконалістю та дефектним складом кристалу, що безпосередньо впливає на його провідність, фоточутливість і радіаційну стійкість. Такі властивості є ключовими для створення детекторів γ - та рентгенівського випромінювання, інфрачервоних приймачів, елементів оптоелектроніки та сонячних перетворювачів. Крім того, $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ виступає модельним об'єктом для вивчення процесів переносу заряду та взаємодії домішок кристалах. Тому систематичне дослідження його параметрів сприяє як розвитку фундаментальних знань, так і удосконаленню практичних технологій створення нових функціональних матеріалів.

Випускна кваліфікаційна робота присвячена дослідженню спектрального розподілу коефіцієнта світла монокристалами $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ та дослідженню спектрального розподілу фотопровідності монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ при кімнатних температурах.

Мета наукового дослідження полягала у:

- 1) Дослідженні спектрального розподілу коефіцієнта поглинання світла монокристалами $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$.
- 2) Оцінці ширини забороненої зони монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$.
- 3) Дослідженні спектрів фотопровідності монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$.
- 4) Аналізі спектрів фотопровідності монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$.
- 5) Поясненні результатів досліджень та побудові електронних моделей оптичних та фотоелектричних процесів у монокристалах $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$.

Для досягнення поставленої мети необхідно було вирішити наступні завдання:

- 1) Зробити огляд літератури за темою дослідження.
- 2) Підготувати групу зразків монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ для дослідження оптичних та фотоелектричних властивостей.
- 3) Підготувати установку для дослідження спектрального розподілу фотопровідності монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$.
- 4) Дослідити спектральний розподіл фотопровідності.
- 5) Підготувати установку для дослідження спектрального розподілу коефіцієнта поглинання світла монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$.
- 6) Дослідити спектральний розподіл поглинання світла монокристалами $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$.
- 7) Проаналізувати та дати фізичну інтерпретацію оптичним та фотоелектричним властивостям монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$.

Об'єкт дослідження: напівпровідникові монокристали $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$, вирощувались методом Бріджмена в парах Cd та Zn.

Предметом дослідження є спектральний розподіл коефіцієнта поглинання світла монокристалами $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ та спектральний розподіл фотопровідності монокристалами $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ при кімнатній температурі.

Методи дослідження. Під час дослідження спектрального розподілу фотопровідності та коефіцієнта поглинання світла використовували неодноразово перевірені стандартні методики та обладнання. Основні вимірювання здійснювали за допомогою сучасного обладнання з використанням комп'ютерних програм для опрацювання отриманих даних і визначення похибок.

Наукова новизна одержаних результатів сформульована у висновках випускної кваліфікаційної роботи, основні з яких полягають у тому, що встановлено, що:

- 1) Основний максимум фотопровідності монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ спостерігався при $h\nu \approx 1,57 \text{ eV}$ та відповідає міжзонним оптичним переходам.
- 2) Сумарний спектр фотопровідності у домішковій області формується як суперпозиція трьох Гаусівських компонент, що свідчить про багатofакторний

характер фотопровідності.

3) Різкий спад фотопровідності при $h\nu > 1,57 \text{ eV}$ обумовлений поверхневою рекомбінацією вільних носіїв заряду.

4) Домішкова область спектрів фотопровідності містить два основні максимуми ($1,41 \text{ eV}$ та $1,51 \text{ eV}$), кожен із яких пов'язаний з певними типами дефектів. Природа цих піків включає як ізольовані точкові дефекти, так і дефекти, пов'язані з протяжним структурним розупорядкуванням.

5) Енергетична залежність коефіцієнта поглинання світла $k(h\nu)$ у монокристалах $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ добре описується правилом Урбаха, що свідчить про суттєвий рівень структурного розупорядкування та наявність Урбахівських хвостів у зонній структурі.

6) З аналізу енергетичного розподілу коефіцієнта поглинання отримано значення ширини забороненої зони $E_g \approx 1,53 \text{ eV}$. Воно добре узгоджується з положенням максимуму фотопровідності $h\nu = 1,57 \text{ eV}$.

7) Отримане значення параметра Урбаха $\Delta_0 = 0,023 \text{ eV}$ вказує на високу концентрацію дефектів та флуктуацій потенціалу, які істотно впливають на формування краю оптичного поглинання.

Актуальним залишається дослідження спектрів фотопровідності та спектрів поглинання світла монокристалами $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ при низьких температурах $\sim 77\text{-}300 \text{ K}$. Це дасть можливість більш точно ідентифікувати вплив різних типів дефектів на оптичні та фотоелектричні властивості монокристалів.

Практичне значення отриманих результатів.

1) Напівпровідникові матеріали $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ є перспективними матеріалами для виготовлення чутливих фотодатчиків.

2) Досліджувані нами монокристали $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ є перспективними як матеріали для фотодіодів, оптичних елементів і модуляторів у середньо- та довгохвильовій ІЧ-оптиці, де потрібні стабільні кристали з керованою шириною забороненої зони.

3) Монокристали $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ в порівнянні з монокристалами CdTe

можуть бути використаними як модельні об'єкти для дослідження взаємозв'язку між кристалічною структурою та фізико-хімічними властивостями.

Апробація результатів та публікації.

Результати експериментальних досліджень, представлених у випускній кваліфікаційній роботі, а також їх обґрунтування були представлені на засіданні кафедри експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій, на якому були присутні викладачі та здобувачі освіти. Значна частина результатів досліджень були апробовані на двох наукових конференціях [1, 2]:

1. Костанович Б.Р., Новосад О.В. Фотопровідність монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$. *Молода наука Волині: пріоритети та перспективи досліджень: матеріали XIX Міжнар. наук.-практ. конф., м. Луцьк, 13-14 травн. 2025 р. Луцьк : ВНУ ім. Лесі Українки, 2025. С. 816-818.*

2. Костанович Б.Р., Новосад О.В, Данильчук С.П. Оптичні та фотоелектричні властивості монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$. *Актуальні проблеми фундаментальних наук : матеріали VI Міжнар. наук. конф., Луцьк-Світязь, 9-12 черв. 2025 р. Луцьк : Вежа-Друк, 2025. С. 84-85.*

РОЗДІЛ 1

ОПТИЧНІ ТА ФОТОЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАПІВПРОВІДНИКІВ

1.1. Основні механізми поглинання світла напівпровідниками

Поглинання світла в напівпровідниках є одним із ключових процесів, що визначають їхні оптичні та електронні властивості [3]. Саме завдяки взаємодії фотонів із електронною підсистемою матеріалу можливими стають фотоелектричні ефекти, фотопровідність, генерація носіїв заряду, формування спектральної чутливості детекторів, робота сонячних елементів та оптоелектронних компонентів. Механізми поглинання залежать як від енергетичного спектра напівпровідника, так і від типу переходу, природи домішок, рівня безладдя та фононних процесів [3, 4].

1.1.1. Міжзонне (фундаментальне) поглинання світла

Основним механізмом під час міжзонного поглинання світла є міжзонні переходи електронів із валентної зони у зону провідності під дією фотонів. Якщо енергія фотона $h\nu$ перевищує ширину забороненої зони E_g , то можливими стають прямі або непрямі міжзонні переходи [5-7].

Прямі переходи відбуваються без зміни квазіімпульсу електрона, тобто:

$$h\nu = E_c(k) - E_v(k).$$

Такі переходи характерні для прямозонних напівпровідників, наприклад, GaAs, CdTe [8]. У таких напівпровідниках коефіцієнт поглинання світла зростає різко і набуває порівняно великих значень.

Непрямі оптичні переходи вимагають участі фонона, оскільки вершина валентної зони та мінімум зони провідності знаходяться в різних точках k -простору. Тому процес непрямих оптичних переходів описується умовою:

$$h\nu = E_g \pm E_{ph},$$

де E_{ph} — енергія фонона.

До матеріалів, у яких спостерігаються непрямі оптичні переходи, належать, наприклад, Si, Ge. У таких матеріалах коефіцієнт оптичного поглинання світла біля краю значно менший і зростає повільніше.

1.1.2. Екстонне поглинання світла

Поблизу фундаментального краю можливе утворення екситонів — зв'язаних станів електрон–дірка. Екситони являють собою аналоги «атомів» у кристалі, зв'язаних кулонівською взаємодією. При цьому поглинання відбувається за законом [6]:

$$h\nu = E_g - E_{ex} + \Delta E,$$

де E_{ex} — енергія зв'язку екситона.

На спектрах поглинання світла екситонні переходи проявляються у вигляді вузьких піків нижче краю зони і сильно залежать від чистоти та температури кристала. У дефектних або сильно легованих напівпровідниках вони згладжуються та стають непомітними.

1.1.3. Домішкове поглинання світла

У присутності донорів і акцепторів у забороненій зоні з'являються додаткові енергетичні рівні, з яких можливі оптичні переходи у зони. Такі процеси поділяють на:

1. Перехід «валентна зона - домішковий рівень».
2. Перехід «домішковий рівень - зона провідності»
3. Внутрішні переходи між домішковими рівнями складних дефектів

На спектрах поглинання будуть спостерігатися смуги або широкі «хвости», які часто використовуються для визначення типу та концентрації

домішок.

1.1.4. Поглинання, зумовлене дефектами та розупорядкуванням кристалічної ґратки.

Дефекти кристалічної ґратки, вакансії, міжвузлові атоми, дислокації, хімічна неоднорідність та розупорядкування спричиняють появу локалізованих станів поблизу краю зон. Саме вони формують Урбахівський хвіст, що описується експоненціальним законом [9]:

$$\alpha(h\nu) = \alpha_0 \exp\left(\frac{h\nu - E_{g0}}{\Delta}\right)$$

де Δ — енергія Урбаха.

У сильно дефектних кристалах спектри поглинання світла суттєво відрізняються від ідеального випадку.

1.1.5. Фононне (інфрачервоне) поглинання

У середньому та далекому інфрачервоному діапазоні перехід між електронними зонами стає неможливим через недостатню енергію фотонів, тому основне поглинання світла зумовлене взаємодією квантів світла з фононами кристалічної ґратки.

Для полярних кристалів характерні процеси:

$$h\nu = \hbar\omega_{LO}, \quad h\nu = \hbar\omega_{TO}$$

де ω_{LO} та ω_{TO} — частоти поздовжніх та поперечних оптичних фононів.

Таке поглинання призводить до появи добре виражених смуг у ІЧ-області та використовується для ідентифікації складу і фазового стану матеріалу.

1.1.6. Поглинання вільними носіями заряду

Електрони та дірки у зонах можуть поглинати фотони, змінюючи свій

імпульс та енергію через взаємодію з фононами чи дефектами. Це так зване дримерське поглинання, що описується моделлю Друде [10]:

$$\alpha(\omega) \sim \left(\frac{ne^2}{m^* c \varepsilon_0} \cdot \frac{1}{\omega^2 \tau} \right)$$

де n — концентрація носіїв, τ — час релаксації, m^* — ефективна маса.

Такий механізм поглинання світла домінує в ІЧ-діапазоні, особливо у сильно легованих або вироджених напівпровідниках.

1.1.7. Інтразонні та міжпідзонні оптичні переходи

У напівпровідниках зі складною зонною структурою можливі оптичні переходи всередині однієї і тієї ж зони, наприклад, між підзонами важких і легких дірок, між спліт-оф підзоною та валентною зоною, між підзонами квантових ям.

Енергії таких переходів зазвичай менші, ніж E_g , тому вони проявляються в ближньому інфрачервоному спектрі.

1.1.8. Нелінійне поглинання: багатофотонні процеси

При великих інтенсивностях світлового потоку виникають нелінійні оптичні процеси, зокрема:

1. Двофотонне поглинання

$$2h\nu = E_g,$$

2. Трифотонне поглинання,

3. Збудження станів через віртуальні рівні.

Такі явища характерні для лазерного опромінення напівпровідникових кристалів та використовуються для керування оптичними перемикачами, генерації другої гармоніки, фотолітографії.

1.2. Правило Урбаха.

Правило Урбаха описує експоненціальну поведінку коефіцієнта оптичного поглинання в безпосередній околиці краю фундаментального поглинання світла напівпровідниками. У реальних кристалах край забороненої зони не є ідеально різким, оскільки на електронні стани впливають теплові коливання ґратки, локальні електричні поля, а також структурні дефекти. Ці фактори спричиняють появу так званого Урбахівського хвоста — області, де поглинання спадає не за степеневим, а за експоненціальним законом.

У класичному вигляді правило Урбаха можна записати, як [8]:

$$\alpha(h\nu) = \alpha_0 \exp\left(\frac{h\nu - E_{g0}}{\Delta}\right),$$

де α - коефіцієнт поглинання для фотона енергії $h\nu$; α_0 - матеріальна стала, що визначає масштаб поглинання; E_0 - енергія, близька до ширини забороненої зони E_g , але дещо зміщена через локальні потенціали; Δ - енергія Урбаха, яка характеризує крутизну експоненціального хвоста та є мірою безладдя в кристалі.

Фізичний зміст величини Δ полягає в тому, що вона відображає ступінь неоднорідності потенціального рельєфу, що діє на носії заряду. Чим більшим є Δ , тим суттєвішим є вплив коливань або дефектів, а отже, тим ширшим стає Урбахівський хвіст. У добре впорядкованих монокристалах Δ зазвичай є малим, тоді як у легованих або частково аморфізованих матеріалах ця величина зростає.

У багатьох напівпровідниках енергія Урбаха виявляє температурну залежність. Емпірично її можна описати співвідношенням:

$$\Delta(T) = \Delta_0 + \sigma kT,$$

де Δ_0 - внесок статичного безладдя, σ - параметр взаємодії носіїв із фононами, k - стала Больцмана, T - температура.

Таке співвідношення узгоджується з тим, що зі збільшенням T інтенсивність теплових коливань зростає, що ще більше «розмиває» край зони та посилює експоненціальну поведінку.

Графічно залежність $\ln \alpha$ від $h\nu$ у зоні Урбаха є прямою лінією, і похила цієї прямої дає можливість визначити енергію Урбаха зі співвідношення:

$$\Delta = \left(\frac{d \ln \alpha}{d(h\nu)} \right)^{-1}$$

Цей метод широко застосовується для аналізу чистоти кристалів, ступеня структурного безладдя, впливу домішок, а також оцінки якості вирощених монокристалів у напівпровідниковому матеріалознавстві.

Правило Урбаха має важливе значення для дослідження процесів переносу та рекомбінації носіїв заряду, оскільки поява хвоста в зоні поглинання свідчить про наявність локалізованих станів поблизу краю забороненої зони. Такі стани можуть зумовлювати пастки, впливати на рухливість носіїв, розподіл часу життя та формувати специфічні оптичні переходи. Тому аналіз експоненціального характеру поглинання допомагає зрозуміти мікроскопічну природу дефектів і неперіодичності кристалічної ґратки.

1.3. Фотопровідність в напівпровідниках

1.3.1. Загальні відомості про фотопровідність

Фотопровідність у напівпровідниках є одним із ключових проявів взаємодії оптичного випромінювання з електронною підсистемою кристалу. Суть явища полягає у збільшенні електропровідності матеріалу при опроміненні його світлом, енергія якого достатня для збудження електронів у зону провідності або для активації домішкових і дефектних рівнів. З фізичної точки

зору фотопровідність виникає через зростання концентрації нерівноважних носіїв заряду, які створюються внаслідок поглинання фотонів.

Початково, у темряві, провідність напівпровідника задається рівноважними концентраціями електронів n_0 у зоні провідності та дірок p_0 у валентній зоні. Ці величини визначаються шириною забороненої зони, енергетичними рівнями домішок і температурою. Коли ж на напівпровідник падає світло, у ньому виникають додаткові носії заряду Δn і Δp , що призводить до зміни провідності:

$$\sigma = q((n_0 + \Delta n)\mu_n + (p_0 + \Delta p)\mu_p).$$

Освітлення збільшує Δn та Δp , тим самим спричиняючи зростання струму навіть за сталої напруги. Важливою характеристикою фотопровідних матеріалів є те, що електрони й дірки зазвичай створюються парами, тому $\Delta n = \Delta p$, хоча конкретний внесок у провідність залежить від рухливостей μ_n і μ_p .

Однак генерація носіїв - це лише частина процесу. Протилежним явищем до генерації є рекомбінація, яка повертає систему до рівноважного стану. Динаміка встановлюється співвідношенням:

$$G = R = \frac{\Delta n}{\tau},$$

де G — швидкість генерації, R — швидкість рекомбінації, а τ — середній час життя нерівноважних носіїв. Велике значення τ свідчить про уповільнену рекомбінацію, що забезпечує сильний та тривалий фотострум. У реальних напівпровідниках час життя може змінюватися в широких межах залежно від домішок, дефектів і чистоти матеріалу.

Ключовим фактором є енергетичні умови поглинання світла. Міжзонна фотогенерація можлива лише за умови:

$$h\nu \geq E_g,$$

тобто енергія фотона повинна дорівнювати або перевищувати ширину забороненої зони. Саме тому фотопровідність кремнію активується у видимому та ближньому інфрачервоному діапазонах, тоді як широкозонні матеріали на кшталт *GaN* реагують лише на ультрафіолет.

Важливою особливістю реальних кристалів є наявність домішок і дефектів, які формують у забороненій зоні локалізовані енергетичні рівні. Ці рівні можуть брати участь у поглинанні фотонів, сприяючи виникненню фотопровідності навіть за нижчих енергій випромінювання. Крім того, вони визначають швидкість рекомбінації, утворюючи канали захоплення електронів або дірок і змінюючи час життя нерівноважних носіїв. У багатьох складних халькогенідах, іонних кристалах та напівізолюючих напівпровідниках ефекти пасток настільки виражені, що фотострум може не зникати десятки хвилин після завершення опромінення.

1.3.2. Власна фотопровідність у напівпровідниках: природа, механізми та особливості

Власна фотопровідність - це збільшення електропровідності напівпровідника в результаті генерації пар «електрон–дірка» при міжзонних переходах, коли енергія фотона $h\nu$ не менша, ніж ширина забороненої зони E_g .

Фотопровідність у напівпровідниках є одним із ключових оптичних явищ, що виникають у матеріалах із ковалентним або йонно-ковалентним типом зв'язку, коли поглинання електромагнітного випромінювання призводить до значного збільшення концентрації вільних носіїв заряду. В основі цього явища лежить здатність фотона з енергією $h\nu$ взаємодіяти з електронною підсистемою кристала, передаючи їй свою енергію. Якщо енергія фотона дорівнює або перевищує ширину забороненої зони E_g , електрон валентної зони переходить у зону провідності, залишаючи дірку. У результаті виникає електронно-діркова пара, що збільшує провідність напівпровідника. Питома провідність матеріалу у найпростішому наближенні виражається формулою

$$\sigma = q(n\mu_n + p\mu_p)$$

де q — елементарний заряд, n і p — концентрації електронів і дірок, а μ_n і μ_p — відповідні рухливості. Під дією світла в матеріалі виникають додаткові носії, тому реальна провідність у стані освітлення записується, як

$$\sigma_{осв} = q((n + \Delta n)\mu_n + (p + \Delta p)\mu_p),$$

а збільшення провідності

$$\Delta\sigma = q(\Delta n\mu_n + \Delta p\mu_p)$$

Саме величина $\Delta\sigma$ визначає ефективність фотопровідного процесу.

Власна фотопровідність проявляється тоді, коли фотони викликають прямі міжзонні переходи без участі домішок, локальних рівнів або пасток. Це характерно для високочистих кристалів, у яких концентрація домішкових атомів мінімальна, і електронна структура практично не спотворена дефектами. У таких матеріалах фотопровідність відтворює фундаментальні властивості зони провідності та валентної зони. Для опису процесу генерації стандартно використовують співвідношення

$$G = \eta \frac{P_{погл}}{h\nu},$$

де G — число створюваних пар електрон–дірка за секунду в одиниці об'єму. Поведінка нерівноважних носіїв задається рівнянням

$$\frac{d(\Delta n)}{dt} = G - R,$$

де R — швидкість рекомбінації. Якщо вважати, що рекомбінація лінійна, тобто

$$R = \frac{\Delta n}{\tau} = 0,$$

де τ — середній час життя носіїв, то в усталеному режимі, коли

$$\frac{d(\Delta n)}{dt} = 0,$$

отримуємо

$$\Delta n = G \cdot \tau.$$

Це ключовий результат: фотопровідність пропорційна добутку генерації на час життя, тому фоточутливі матеріали повинні сильно поглинати світло і мати великий час життя носіїв. Саме тому германій та кремній високої чистоти демонструють значну власну фотопровідність у ближньому ІЧ-діапазоні.

Оптичні властивості напівпровідника визначаються незалежно від домішок. Коефіцієнт поглинання $\alpha(h\nu)$ поблизу порогу поглинання має різний характер залежно від типу міжзонних переходів. Для прямих переходів електрон переходить у зону провідності без зміни імпульсу і тоді

$$\alpha(h\nu) \sim (h\nu - E_g)^{\frac{1}{2}}.$$

У матеріалах із непрямою забороненою зоною (як у Si або Ge) перехід між максимумом валентної зони і мінімумом зони провідності супроводжується поглинанням або випромінюванням фонона, тому

$$\alpha(h\nu) \sim (h\nu - E_g)^2.$$

Форма спектральної залежності фотоструму близька до залежності $\alpha(h\nu)$, але модифікується часом життя носіїв і дифузійними процесами. Саме поріг фундаментального поглинання дозволяє експериментально визначати ширину забороненої зони з високою точністю.

Фотопровідність у власних напівпровідниках значною мірою визначається кінетикою рекомбінації. Рекомбінація може бути радіаційною, коли електрон повертається у валентну зону, випромінюючи фотон, або безвипромінювальною, коли енергія передається фононам. Якщо всередині забороненої зони присутні пастки — локальні стани, які можуть захоплювати електрони або дірки - рекомбінація набуває складного характеру. Часто її описують моделлю Шоклі–Ріда–Холла (SRH), відповідно до якої

$$R_{SHR} = \frac{\Delta n}{\tau_0 + \tau_t}$$

де τ_t — час, пов'язаний із захопленням на пастки. У власних кристалах пасток небагато, проте навіть незначні дефекти можуть змінювати характер фотоструму та його часове затухання. Затримана рекомбінація у деяких матеріалах призводить до фотопіслядії — явища, коли фотострум зберігається ще тривалий час після вимкнення світла, а це впливає на роботу фотодетекторів.

Температурні ефекти відіграють важливу роль у власній фотопровідності. Пониження температури зменшує ширину теплового розподілу носіїв, збільшує їхній час життя, уповільнює рекомбінацію і може значно підвищувати фоточутливість. Однак ширина забороненої зони залежить від температури. Для більшості напівпровідників цю залежність описують рівнянням Варшні:

$$E_g(T) = E_{g0} - \frac{\alpha T^2}{T + \beta},$$

де параметри α і β є залежать від роду матеріалу. Зменшення E_g із підвищенням температури призводить до зміщення спектрального порогу, але водночас зростає термічна рекомбінація, що зменшує ефективність фотопровідності. Таким чином, оптимальна температура для максимальної власної фотопровідності залежить від конкретного матеріалу та його дефектної структури.

Інтенсивність світла також визначає характер фотопровідної відповіді. У випадку лінійної рекомбінації

$$\Delta n \sim I,$$

де I — інтенсивність випромінювання. Однак у реальних кристалах нерідко спостерігається степенева залежність виду

$$\Delta n \sim I^\gamma,$$

де показник γ може бути меншим за одиницю. Це свідчить про насичення пасток або появу нелінійних механізмів рекомбінації. У високочистих матеріалах ступінь нелінійності значно менший, і фотопровідний відгук часто має майже ідеально лінійний характер.

Розуміння механізмів власної фотопровідності має фундаментальне та прикладне значення. У приладах типу фотопровідних резисторів зміна провідності використовується для детектування світла в широкому спектральному діапазоні. У германієвих і кремнієвих детекторах ближнього ІЧ-діапазону власна фотопровідність забезпечує високу чутливість при мінімальних рівнях шуму. У детекторах терагерцового діапазону, які працюють на основі вузькозонних напівпровідників, саме власні міжзонні переходи визначають роботу приймальних структур. Крім цього, фотопровідність є інструментом для визначення енергетичних параметрів кристала: ширини забороненої зони, форми краю фундаментального поглинання, коефіцієнтів міжзонних переходів, часу життя нерівноважних носіїв і навіть концентрації домішок, якщо спектральний аналіз проводиться з високою точністю.

Таким чином, власна фотопровідність у напівпровідниках є складним багатофакторним явищем, що формується взаємодією оптичних, електричних та рекомбінаційних процесів. Вона визначається структурою енергетичних зон, механізмами поглинання світла, кінетикою генерації та рекомбінації електронно-діркових пар, характером дефектів, температурою та інтенсивністю

освітлення. Детальне дослідження власної фотопровідності дозволяє глибше зрозуміти фізичну природу напівпровідникових матеріалів і розробляти нові оптоелектронні пристрої з оптимальними характеристиками.

1.3.3. Домішкова фотопровідність у напівпровідниках.

Домішкова фотопровідність у напівпровідниках є фундаментальним явищем, що виникає при поглинанні фотонів з енергією, меншою за ширину забороненої зони E_g , але достатньою для збудження електронів із домішкових рівнів у зону провідності або з валентної зони на акцепторні рівні [1,2]. На відміну від власної фотопровідності, де генерація носіїв відбувається через міжзонні переходи, домішкова фотопровідність визначається наявністю локальних енергетичних станів, створених донорними або акцепторними домішками. Ці рівні, що знаходяться всередині забороненої зони, дозволяють поглинати фотони меншої енергії, розширюючи спектральну чутливість напівпровідника [3]. Для донорних домішок характерним є збудження електронів з рівнів донорів у зону провідності, тоді як для акцепторних — з валентної зони на акцепторні рівні [4]. Концентрацію таких домішкових рівнів зазвичай позначають як N_D для донорних та N_A для акцепторних. Швидкість генерації нерівноважних носіїв під дією фотонів описується рівнянням

$$G_D = \eta \frac{N_D I}{h\nu},$$

$$G_A = \eta \frac{N_A I}{h\nu},$$

де I - інтенсивність падаючого світла, $h\nu$ — енергія фотона, а η — квантова ефективність переходу [2,5]. Величини G_D і G_A визначають кількість електронів і дірок, що з'являються у матеріалі під дією світла, і є основою для визначення фотопровідності

$$\sigma_o = q(\Delta n \mu_n + \Delta p \mu_p)$$

де $\Delta n = G_D \tau_D$, $\Delta p = G_A \tau_A$ - концентрації нерівноважних носіїв, τ_D і τ_A - їх середній час життя, а μ_n і μ_p - рухливості електронів і дірок [1,3]. Важливо відзначити, що у домішковій фотопровідності значення Δn та Δp значно менші, ніж у власній фотопровідності, проте навіть невелика концентрація нерівноважних носіїв здатна істотно підвищувати провідність у спектральних областях нижче ширини забороненої зони [2,4].

Кінетика домішкових переходів суттєво залежить від часу життя носіїв та рекомбінаційних процесів, які визначаються дефектами та пастками у кристалічній ґратці. У рамках моделі Шоклі–Ріда–Холла (SRH) швидкість рекомбінації для домішкових носіїв записується, як

$$R_D = \frac{\Delta n_D}{\tau_D},$$

$$R_A = \frac{\Delta p_A}{\tau_A}$$

Ці рівняння демонструють, що фотопровідність збільшується тоді, коли швидкість генерації G_D або G_A переважає швидкість рекомбінації R_D або R_A . Зменшення кількості дефектів у кристалі, а також оптимізація концентрації домішок, дозволяє підвищити ефективність домішкової фотопровідності та чутливість напівпровідникових фотодетекторів [2,3].

Домішкова фотопровідність характеризується специфічною спектральною поведінкою. Для донорних переходів коефіцієнт поглинання залежить від енергії фотонів наступним чином:

$$\alpha_D(h\nu) \sim (h\nu - E_D)^{\frac{1}{2}},$$

де E_D — енергія переходу електрона з донорного рівня у зону провідності [4]. Аналогічно для акцепторних переходів:

$$\alpha_A(h\nu) \sim (h\nu - E_A)^{\frac{1}{2}},$$

де E_A — енергія переходу з валентної зони на акцепторний рівень [4,5]. Спектральні залежності часто мають дискретні піки, що відповідають конкретним енергетичним рівням домішок. Ширина та інтенсивність цих піків визначаються розподілом домішок, їх концентрацією та температурою матеріалу [2,3].

Температура істотно впливає на прояв домішкової фотопровідності. При підвищенні температури збільшується іонізація домішок, що призводить до зростання концентрації вільних носіїв у темряві, зменшуючи відносну величину фотопровідності. З іншого боку, при низьких температурах нерівноважні носії, збуджені фотонами, живуть довше, що збільшує фотострум [2,5]. Тому домішкова фотопровідність є ключовим механізмом для низькотемпературних фотодетекторів та оптичних сенсорів, чутливих до інфрачервоного та видимого світла.

Взаємодія між структурними властивостями кристала, типом та концентрацією домішок, кінетикою носіїв і умовами експерименту визначає спектральну чутливість і амплітуду фотопровідного відгуку. Домішкова фотопровідність лежить в основі роботи фотодетекторів інфрачервоного діапазону, фотопровідних резисторів, сенсорів освітленості та інших приладів, де необхідно забезпечити чутливість у спектральних областях, де власна фотопровідність практично не проявляється [1,3,4]. Цей механізм дозволяє «тонко» налаштовувати спектральну чутливість напівпровідника через контроль концентрації домішок та їх енергетичного положення, що робить домішкову фотопровідність незамінним інструментом як для фундаментальних досліджень енергетичної структури матеріалів, так і для практичної інженерії оптоелектронних пристроїв [2,5].

1.4. Монокристали CdTe та їх використання

1.4.1. Кристалічна структура та дефекти кристалічної структури монокристалів CdTe.

Монокристали CdTe мають кубічну гранецентровану структуру (F-43m), де атоми кадмію та телуру розташовані в октаедричній координації. Кожний атом Cd оточений чотирма атомами Te і навпаки, що забезпечує високу симетрію кристалічної решітки та відносно низький рівень внутрішньокристалічних напружень [11,12]. Параметр решітки для чистого CdTe при кімнатній температурі становить приблизно 6.48 Å [13]. Така кристалічна структура забезпечує «пряму» ширину забороненої зони (~1.44–1.5 eV), що визначає фотопровідні та фотоелектричні властивості матеріалу [14].

Попри високу симетрію, монокристали CdTe часто містять різного роду дефекти кристалічної решітки, які суттєво впливають на їхні фізичні властивості. До основних дефектів належать точкові дефекти (вакансії Cd (V_{Cd}), вакансії Te (V_{Te}), міжвузлові атоми, атоми заміщення [15]); дислокації та лінійні дефекти, які виникають у процесі вирощування та охолодження кристалів; межі зерен у випадку полікристалічних структур, що сильно впливають на рекомбінацію носіїв [16].

Вплив дефектів на фізичні властивості CdTe проявляється насамперед у зміні електропровідності, фотопровідності та оптичних характеристик. Вакансії Cd, як правило, створюють акцепторні рівні в забороненій зоні, що призводить до p-типу провідності у природно охолоджених кристалах [17]. Вакансії Te, навпаки, формують донорні рівні, що можуть компенсувати p-провідність. Наявність домішок, таких, як хлор або інші галогени, використовується для компенсації дефектів і регулювання типу провідності [12, 18].

Дефекти впливають також на оптичні властивості. Наприклад, присутність вакансій і міжвузлових атомів створює локальні рівні в забороненій зоні, що збільшує поглинання фотонів із енергією нижче ширини забороненої зони, тобто змінює спектральну чутливість фотодетекторів і сонячних елементів [15].

Лінійні дефекти, дислокації та межі зерен підвищують швидкість рекомбінації нерівноважних носіїв, що зменшує ефективність фотопровідності та фотоструму [16, 19].

Дефекти також впливають на електронні та термоелектричні властивості. Наприклад, підвищена концентрація вакансій Cd веде до збільшення концентрації дірок та зміни рухливості носіїв, а нерівномірне розподілення дефектів може створювати локальні потенціальні бар'єри, що зменшують ефективність носіїв заряду і підвищують електричний опір кристала [17, 20]. У фотодетекторах і сонячних елементах контроль дефектності є критичним: надлишкові дефекти знижують фотострум, а оптимальна концентрація легуючих домішок дозволяє поліпшити ефективність і стабільність пристроїв [12,18].

Таким чином, кристалічна структура CdTe визначає його основні фізичні властивості, а дефекти кристалічної решітки суттєво модифікують електричні, оптичні та фотоелектричні характеристики. Контроль росту монокристалів, легування і оптимізація технологічних процесів дозволяють мінімізувати негативний вплив дефектів і отримати матеріал із високою однорідністю та стабільністю для застосування в сонячних елементах, детекторах і оптоелектронних пристроях.

1.4.2. Використання монокристалів CdTe.

Монокристали CdTe - один із найважливіших напівпровідникових матеріалів для оптоелектроніки, фотодетекторів та радіаційної техніки. Завдяки своїй зонній структурі з шириною забороненої зони близько 1.44 eV, вони добре підходять для фотоелектричного перетворення сонячного світла, оскільки ця ширина зони оптимально відповідає спектру сонячного випромінювання [20, 23]. У тонкоплівкових чи кристалічних сонячних елементах на основі CdTe поглинання світла відбувається ефективно, що дає змогу отримувати добру фотоефективність навіть при невеликій товщині активного шару; ця властивість робить CdTe конкурентним матеріалом у виробництві сонячних панелей.

Окрім фотогальванічних пристроїв, монокристали CdTe дуже широко застосовуються у детекторах іонізуючого випромінювання - рентгенівських і γ -детекторах. Зокрема, бінарна сполука CdTe має великий середній атомний номер (Cd і Te), а також достатню щільність і широку заборонену зону, що дозволяє ефективно поглинати високоенергетичні фотони та забезпечувати детекцію при кімнатній температурі без необхідності охолодження [18, 25]. У таких детекторах CdTe-кристали можуть бути як одиничними елементами, так і частиною багатомодульних систем, наприклад, для медичної томографії або спектрометрії радіації, де важливі енергетична роздільна здатність і стабільність роботи.

Також CdTe використовують у складних гетероструктурах, наприклад, у комбінаціях з іншими напівпровідниками, де CdTe виступає як шар-абсорбер або пасивний шар. Так, у гетероструктурах на основі HgCdTe шар CdTe може виконувати роль захисного або буферного, підвищуючи стійкість і стабільність структури, що важливо для ІЧ-оптики та інфрачервоних детекторів [26].

Дослідження також показують, що монокристали CdTe можуть бути основою для високодосконалих детекторів у медичній візуалізації, зокрема, для мультиспектральної візуалізації та спін-контрастних методів, де потрібне детектування фотонів різної енергії з високою точністю; в одному з таких досліджень оцінювалася якість CdTe як детектора для медичних застосунків з аналізом дефектів, однорідності кристалу та стабільності сигналу [18].

Крім того, можливості легування, контроль чистоти, методи вирощування монокристалів (зонне плавлення, Bridgman, інші) дають змогу оптимізувати параметри матеріалу для конкретних задач: зменшення дефектів, підвищення часу життя носіїв, зниження фонових струмів — усе це критично важливо для створення ефективних детекторів або фотодетекторів [18, 20].

Отже, спектр застосувань монокристалів CdTe охоплює сонячну енергетику (фотоелектричні перетворювачі), рентген- та γ -детектори, медичні і

промислові системи детектування радіації, гетероструктурні пристрої для ІЧ-оптики та оптоелектроніки, сенсори, а також інші спеціалізовані пристрої.

ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 1

Поглинання світла в напівпровідниках є багатокомпонентним процесом, що включає міжзонні, екситонні, домішкові, дефектні, фононні, поглинання вільними носіями заряду та нелінійні механізми поглинання світла. Кожен із них відіграє важливу роль у формуванні спектральних властивостей матеріалу. Різноманіття можливих переходів дозволяє використовувати напівпровідники в широкому діапазоні довжин хвиль — від глибокого ультрафіолету до далекого інфрачервоного. Систематичне дослідження механізмів поглинання є основою для створення високочутливих фотоприймачів, сонячних елементів, лазерних структур і нових оптоелектронних технологій.

Правило Урбаха є одним із ключових інструментів у фізиці напівпровідників. Воно дозволяє не лише точно описувати оптичне поглинання в околі краю фундаментального переходу, а й надає важливу інформацію про ступінь безладдя, дефектність, домішковий склад та температурні ефекти в матеріалах. Саме тому аналіз Урбахівського хвоста залишається невід’ємною частиною сучасних досліджень оптичних властивостей як чистих монокристалів, так і складних твердих розчинів.

Фотопровідність — це фундаментальне явище, що визначає реакцію напівпровідника на електромагнітне випромінювання. Вона базується на змінах концентрації носіїв і описується балансом генерації та рекомбінації. Різноманіття фотоіндукованих процесів зумовлює існування багатьох форм фотопровідності: прямої, суперлінійної, сублінійної, негативної, короткочасної та тривалої. Її параметри чутливі до домішок, дефектів, структури енергетичних зон і спектральних характеристик матеріалу.

Завдяки широкому діапазону механізмів фотогенерації фотопровідність успішно використовується в оптоелектроніці, детекції оптичного та рентгенівського випромінювання, сенсорних системах, телекомунікаційних технологіях та енергетиці.

Це робить фотопровідність однією з найважливіших фізичних властивостей напівпровідників, яка продовжує залишатись об'єктом активних наукових досліджень і технологічних розробок.

Фотопровідність є складним багатофакторним процесом, який визначається взаємодією оптичних переходів, рекомбінаційних механізмів, дефектної структури та властивостей поверхні. Залежно від домінування того чи іншого механізму одним і той самий матеріал може мати різні типи спектральної чутливості, різні часові характеристики фотоструму та різний рівень шумів. Саме тому фотопровідні явища лежать в основі сучасних фотодатчиків, сенсорів, рентгенівських детекторів, приладів нічного бачення, інфрачервоних приймачів та багатьох інших високотехнологічних пристроїв.

РОЗДІЛ 2

МЕТОДИКА ТА ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ

2.1. Методика вирощування монокристалів $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ методом Бріджмена в парах кадмію та цинку

Вирощування монокристалів твердих розчинів $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ методом Бріджмена є одним із найбільш придатних способів отримання об'ємних кристалів зі стабільними структурними та електрофізичними параметрами [26]. Суть методу полягає у спрямованій кристалізації розплаву всередині герметично запаєної кварцової ампули, де підтримується керований паровий тиск компонентів, насамперед кадмію та цинку [27]. Створення такої атмосфери компенсує природну втрату летких елементів і дозволяє зменшити ймовірність порушення стехіометрії.

Підготовка вихідних матеріалів та ампули. Вихідні речовини високої чистоти відбирають відповідно до необхідного складу твердого розчину. Компоненти ретельно очищають та завантажують у кварцову ампулу, куди також можуть додавати резервуар із додатковою кількістю металевого кадмію або цинку. Такий резервуар підтримує стабільну парову рівновагу всередині ампули протягом усього процесу росту [28].

Перед запаюванням ампулу вакуумують або заповнюють інертним газом, що запобігає утворенню оксидних забруднень.

Плавлення та гомогенізація розплаву. Ампулу з вихідною шихтою розміщують у високотемпературну багатозонну піч. На початковій стадії проводять повне плавлення матеріалу з подальшою витримкою, необхідною для гомогенізації розплаву. У цей період резервуар із кадмієм та цинком формує парову рівновагу, що перешкоджає виснаженню летких компонентів та сприяє формуванню якісного розплаву [29].

Спрямована кристалізація. Після гомогенізації розпочинають стадію росту монокристала. Ампулу плавно переміщують крізь температурний градієнт так, щоб фронт кристалізації послідовно просувався вздовж усього об'єму розплаву. Стабільний температурний профіль дає змогу уникнути конвекційних потоків і мінімізувати виникнення макродефектів. У деяких технологічних схемах також застосовують повільне обертання ампули, що сприяє вирівнюванню складу розплаву.

Охолодження та післяростова обробка. Після завершення кристалізації монокристал повільно охолоджують для зменшення термічних напружень. За потреби проводять додаткові термічні обробки, такі як відпал у середовищі з надлишком кадмію, що сприяє зменшенню концентрації вакансій та покращує електричні властивості кристала [30].

Структурна схема установки. На рисунку представлено спрощену структурну схему установки, яка використовується для вирощування монокристалів методом Бріджмена в парах летких компонентів. У верхній частині розташована високотемпературна багатозонна піч, у якій створюється контрольований температурний профіль, необхідний для плавлення шихти та формування фронту кристалізації. У середині печі міститься кварцова або графітова ампула, що складається з резервуара для летких компонентів (Cd, Zn) та основної частини з розплавом. Під час процесу нагрівання частина Cd/Zn випаровується, підтримуючи необхідний парціальний тиск над розплавом.

У нижній частині ампули розташована зона кристалізації, де під час повільного переміщення ампули або зміни температурного градієнта формується монокристалічний зливочок $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$. Контроль температури та швидкості переміщення забезпечує стабільне зростання кристала з мінімальною кількістю дефектів. Схема відображає ключові елементи установки та загальні принципи взаємодії між зонами плавлення, випаровування та кристалізації.

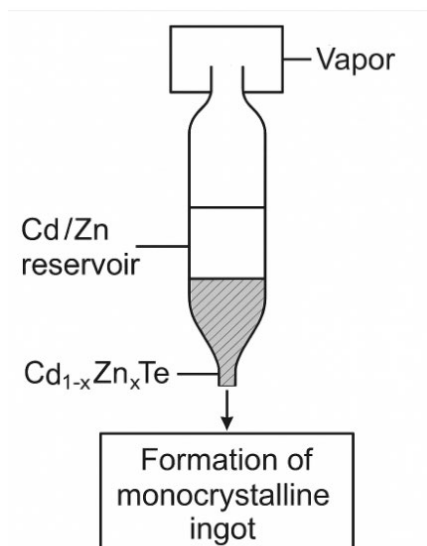


Рис. 2.1. Спрощена структурна схема установки для вирощування монокристалів методом Бріджмена в парах летких компонентів.

Особливості процесу. Метод Бріджмена дає змогу отримувати монокристали значних розмірів, однак якість кінцевого зливка суттєво залежить від температурного профілю, швидкості переміщення ампули та стабільності парового тиску. Типовими проблемами є інклюзії телуру, порушення однорідності та дефекти, пов'язані з нестехіометрією. Оптимізація температурного градієнта та використання резервуарів Cd/Zn значно зменшує ризик таких недоліків.

2.2. Підготовка зразків монокристалів $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ до вимірювань

Зразки монокристалів $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ відповідали компонентному складу $x=0,04$. Для вивчення спектрального розподілу фотопровідності характеристик монокристалів $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ виготовляли зразки у вигляді правильних паралелепіпедів, які вирізали зі злитків, одержаних після вирощування монокристалів. Формування поверхонь зразків здійснювали у кілька етапів: спочатку проводили грубе й тонке шліфування, після чого виконували полірування з використанням алмазних паст різної зернистості. Така

послідовність операцій давала змогу отримати гладкі, однорідні та дефектно-чисті поверхні, необхідні для точних електричних і оптичних вимірювань. Типові геометричні розміри підготовлених зразків становили приблизно $(6-8) \times (2-2) \times (2-2)$ мм³, що забезпечувало можливість коректно розміщувати їх у вимірювальних тримачах та підключати відповідні контакти.

Для проведення оптичних досліджень відбирали зразки з високою якістю поверхонь, зокрема з плоско-паралельними гранями, що гарантувало мінімальні втрати на розсіяння. Товщина таких зразків зазвичай перебувала у межах (0,06–0,1) мм, також використовували тонкі сколи, які мали природну рівність поверхні й достатню прозорість у потрібному спектральному діапазоні. Це дозволяло отримувати надійні дані щодо оптичного поглинання та інших спектральних параметрів матеріалу.

Для забезпечення якісного електричного контакту застосовували різні методи залежно від складу матеріалу. Для сполук $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ оптимальним виявилось вплавлення чистого індію, що забезпечувало високу провідність і відповідну механічну міцність контакту. У деяких випадках додатково використовували контакти на основі галій-індієвої евтектики, яка має низьку температуру плавлення та добре змочує поверхню кристала, що сприяє зменшенню контактного опору.

Проведений аналіз вольт-амперних характеристик (ВАХ) засвідчив, що всі сформовані контакти є омичними, тобто струм через них змінюється лінійно із прикладеною напругою. Крім того, було встановлено, що вони є нейтральними щодо освітлення, тобто їх електричні властивості залишаються стабільними як у темряві, так і під дією світлового випромінювання. Це дозволяє впевнено використовувати такі контакти у дослідженнях фоточутливих властивостей матеріалів і гарантує відсутність паразитних контактних ефектів.

2.3. Методика дослідження спектрального розподілу фотопровідності монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$

Вимірювання спектральної залежності фотопровідності проводили за температури, близької до 300 К, у режимі стабільного освітлення та постійного електричного сигналу. Такий підхід забезпечує мінімізацію впливу температурних та часових флуктуацій на результати, що дозволяє отримати більш коректні значення фотоструму в усьому діапазоні довжин хвиль. Джерелом оптичного випромінювання слугувала галогенна лампа потужністю 20 Вт, оскільки її спектр є досить широким і рівномірним, що робить її зручною для дослідження фоточутливості матеріалів у широкому інтервалі енергій. Для реєстрації фотопровідності та спектрального розділення світла застосовували монохроматор ДМР-4, який забезпечує необхідну спектральну роздільну здатність, а також високочутливий мегаомметр Е6-17, призначений для вимірювання великих опорів та малих струмів.

Загальна схема експериментальної установки, призначеної для отримання спектрів фотопровідності, наведена на рис. 2.2 [48]. Світловий потік від джерела випромінювання (1) спочатку збирається та спрямовується за допомогою конденсора (2), який фокусує інтегральний промінь на вхідну щілину монохроматора (3). У середині монохроматора відбувається спектральне розкладання світла, після чого з вихідної щілини вже монохроматичний пучок спрямовується другим конденсором (4) безпосередньо на поверхню досліджуваного зразка (5). Така оптична схема дозволяє точно контролювати довжину хвилі випромінювання, яке потрапляє на зразок, що є ключовим для побудови достовірного спектру фотопровідності.

Щоб уникнути впливу зовнішніх електромагнітних полів, які можуть спотворювати вимірювання слабких фотострумів, зразок разом із підвідними провідниками розміщували в металевому екранованому корпусі (6). Це забезпечує необхідний рівень захисту від шумів і підвищує точність експерименту. До електродів зразка під'єднували мегаомметр Е6-17 (7), на який подавали постійну напругу 10 В, що дозволяло реєструвати зміни струму,

зумовлені фотогенерацією носіїв заряду. Завдяки такій методиці можна отримати детальний спектральний профіль фотопровідності та визначити характерні енергетичні особливості матеріалу.

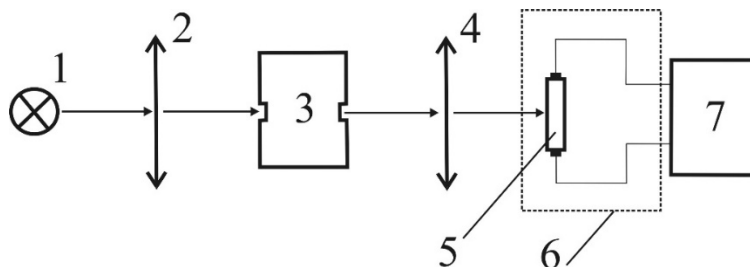


Рис. 2.2. Блок-схема установки для дослідження спектрів фотопровідності: 1 – лампа розжарення; 2 – конденсор; 3 – монохроматор ДМР-4; 4 – конденсор; 5 – зразок; 6 – екран; 7 – мегаомметр Е6-17. [48]

2.4. Методика дослідження спектрального розподілу коефіцієнта поглинання світла фотопровідності монокристаллами $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$

Вимірювання спектральної залежності коефіцієнта оптичного поглинання проводили на експериментальному комплексі, у основу якого покладено монохроматор МДР-208. Як джерело світла використовували галогену лампу розжарювання потужністю 20 Вт. Інтенсивність проходження оптичного сигналу реєстрували кремнієвим фотоприймачем, після чого інформація через інтерфейс RS-232 передавалася на комп'ютер [31]. На етапі оцифрування сигнал перетворювався аналого-цифровим перетворювачем, а подальша обробка здійснювалася у програмному середовищі «Монохроматор». Загальну конфігурацію вимірювальної установки показано на рис. 2.3 [48].

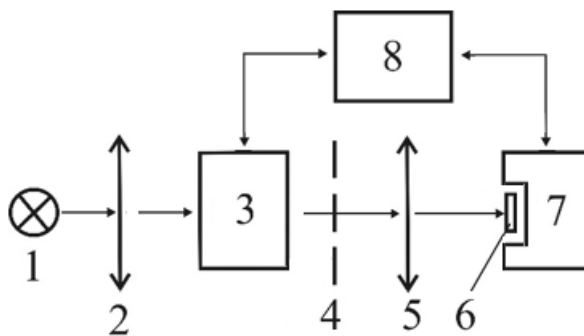


Рис. 2.3. Структурна схема установки для реєстрації спектрів оптичного поглинання.

Світловий потік, сформований джерелом 1 (рис. 2.2), за допомогою фокусуючої оптики 2 спрямовувався на вхідну щілину монохроматора 3. Відібране монохроматором випромінювання, що виходило з вихідної щілини, проходило крізь модулятор 4 і через оптичну систему 5 фокусувалося на зразку 6, перед яким був встановлений фотоприймач 7. Сигнали, отримані з фотоприймача та монохроматора, надходили до комп'ютера 8, де проводили їх подальшу обробку. Для експериментів при знижених температурах досліджуваний зразок розміщували всередині кріостата.

Для розрахунку коефіцієнта поглинання застосовували закон Ламберта–Бугера. За умови, що поглинання у матеріалі є значним, його можна представити у вигляді [32, 32]:

$$I \approx I_0 (1 - R)^2 e^{-\alpha d}, \quad (2.5)$$

де I_0 – інтенсивність світлового потоку перед входом у зразок, I – інтенсивність світла, що пройшло крізь зразок, α – коефіцієнт поглинання, R – коефіцієнт відбивання при нормальному падінні, d – товщина зразка;

Після експериментального визначення величин відбитого та переданого світла, а також вимірювання товщини зразка, значення коефіцієнта поглинання обчислювали за формулою:

$$\alpha \approx \frac{1}{d} \ln \frac{(1-R)^2 I_0}{I}$$

Якщо в розрахунках враховувати лише відбивання від передньої поверхні, вираз для визначення α набуває спрощеного вигляду:

$$\alpha \approx \frac{1}{d} \ln \frac{(1-R)I_0}{I}$$

ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 2

Для досліджень спектрального розподілу фотопровідності та спектрів оптичного поглинання світла монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ використовувалось неодноразово перевірене обладнання та відомі методики досліджень. Обробку результатів і побудову графіків виконували із використанням сучасного програмного забезпечення для розрахунків та аналізу даних.

РОЗДІЛ 3

РЕЗУЛЬТАТИ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

3.1. Фотопровідність монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$

Дослідження спектрального розподілу фотопровідності монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ дозволяє встановити як фундаментальні міжзонні процеси, так і специфічні особливості, пов'язані з дефектами точкового та протяжного типів [34]. На рис. 3.1 наведено спектр фотопровідності монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ при температурі $T \approx 300\text{ K}$, який демонструє складну структуру як основної, так і домішкової областей поглинання.

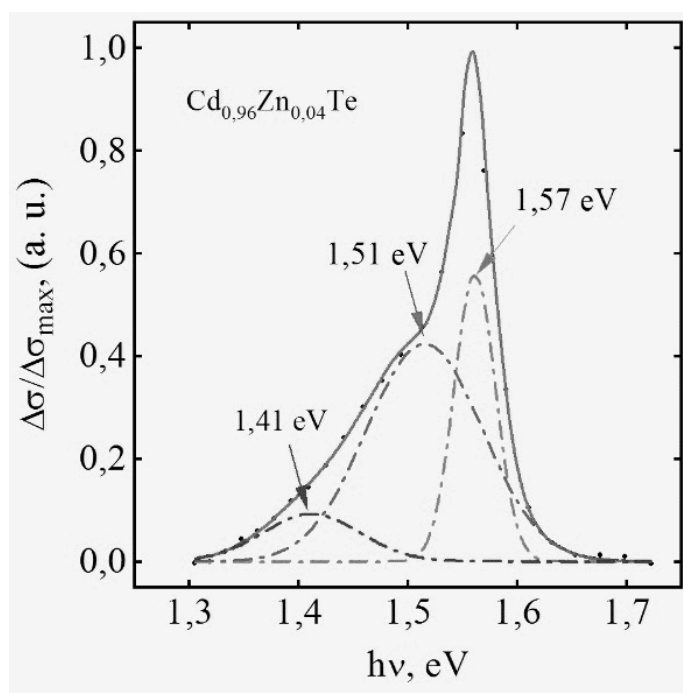


Рис.3.1. Спектральний розподіл фотопровідності монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ при 300 K

У спектрі чітко виділяється інтенсивний максимум при енергії фотонів $h\nu \approx 1,57\text{ eV}$, що відповідає власним міжзонним переходам електронів із валентної зони у зону провідності [35]. Це значення корелює з шириною забороненої зони

CdTe, модифікованою невеликим вмістом *Zn* (4%), який викликає незначне збільшення E_g та зміну форми електронних зон.

Максимум фотопровідності формується тоді, коли ймовірність генерації носіїв заряду, їх транспорту перевищує механізми рекомбінації. Саме тому положення та інтенсивність цього піку є ключовим параметром для оцінки якості монокристалів.

Особливістю досліджуваних монокристалів є різке зниження фотоструму при енергіях $h\nu \geq 1,57 \text{ eV}$. Таке явище характерне для матеріалів з високою швидкістю поверхневої рекомбінації. За наявності великої концентрації поверхневих станів фотогенеровані носії не встигають брати участь у транспорті, а рекомбінують поблизу поверхні зразка. До таких поверхневих станів належать незавершені хімічні зв'язки, оксидні плівки, шорховатість поверхні в результаті шліфування, а також локальні порушення кристалічної періодичності.

Таким чином, головний власний максимум фотопровідності і поведінка спектральної залежності при високих енергіях відображають якість поверхні, чистоту кристалу та особливості його енергетичної структури [35].

Домішкова область спектрів фотопровідності. Найбільш цікавою особливістю спектрів фотопровідності монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ є добре виражена домішкова фотопровідність у діапазоні $\sim 1,35\text{--}1,50 \text{ eV}$. Таке оптичне поглинання світла свідчить про наявність локалізованих енергетичних рівнів у забороненій зоні, які можуть переходити в іонізований стан під дією квантів світла з енергією, меншою за E_g .

Більш детальний аналіз нормованої залежності

$$\frac{\Delta\sigma}{\Delta\sigma_{\max}} = f(h\nu)$$

показав, що спектр фотопровідності у домішковому діапазоні описується сумою трьох Гаусівських компонент, що підтверджує складну природу домішково-

дефектних центрів. Два основні максимуми розташовані при $h\nu \approx 1,41$ eV та $h\nu \approx 1,51$ eV.

Такі піки фотопровідності однозначно вказують на присутність стабільних глибоких центрів, які відіграють важливу роль у фотогенерації та рекомбінації носіїв заряду.

Природа точкових дефектів, відповідальних за домішкову фотопровідність. У структурі $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ формуються кілька типів дефектів, які можуть відповідати за наявність домішкових максимумів. Найбільш поширеними є дефекти, які являють собою вакансії кадмію (V_{Cd}). Це одні з найпоширеніших акцепторних центрів у монокристалічній структурі $CdTe$. Вони утворюють глибокі енергетичні рівні, які можуть бути фотоіонізовані в зону провідності. Енергетичне положення таких рівнів добре узгоджується з домішковим максимумом $1,41$ eV.

Антиструктурні дефекти типу Te_{Cd} є донорними центрами, що захоплюють електрони та створюють локальні рівні. Перехід електронів із валентної зони на ці донорні рівні або з цих рівнів у зону провідності може спричиняти появу піку $1,51$ eV.

Не слід виключати дію дефектних комплексів V_{Cd} +донор, які утворюються внаслідок електростатичної взаємодії вакансій із домішками та власними дефектами. Їх комплексна природа зумовлює широкий спектр можливих енергетичних рівнів. Важливу роль можуть відігравати локальні зміни складу (міні-області Cd або Te). Нерівномірний розподіл Zn може утворювати флуктуаційні потенціали, які проявляються як система локалізованих рівнів.

Протяжні дефекти у формуванні домішкових максимумів. Окрім точкових дефектів, важливий внесок у спектр фотопровідності роблять структурні недосконалості протяжного типу, зокрема, дислокації та їх ядра [36]. Біля дислокацій можуть накопичуватися вакансії, домішки атомів Zn , а також комплекси $V_{Cd}-Te_{Cd}$. Такі області мають значно змінену локальну електронну структуру.

Також варто враховувати границі зерен та доменів. Навіть у монокристалах можуть існувати слаботорієнтовані межі, що модифікують локальні зони енергетичних рівнів [37]. Мікропорожнини та пори утворюють локальні потенціальні ями та пастки для носіїв. Кластери домішок особливо характерні для кристалів, вирощених у неідеальних температурних умовах.

Усі ці дефекти формують або широкі смуги локалізованих станів, або набір дискретних рівнів, що й проявляється у вигляді кількох піків домішкової фотопровідності.

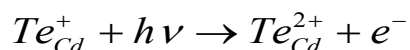
3.2. Фізична інтерпретація домішкових максимумів фотопровідності монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$

Фізична інтерпретація домішкових максимумів у спектрах фотопровідності монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ ґрунтується на аналізі можливих оптичних переходів, пов'язаних із різними типами точкових та комплексних дефектів у кристалічній ґратці. Одним із ключових механізмів є фотоіонізація акцепторних дефектів типу вакансій кадмію V_{Cd} , які відомі як одні з найпоширеніших та енергетично значущих центрів у кристалах $CdTe$ та $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$. Поглинання кванта світла з енергією, близькою до $1,41\text{ eV}$, може переводити заряджений стан дефекту V_{Cd}^- у нейтральний стан V_{Cd}^0 із вивільненням електрона в зону провідності. Цей процес можна схематично подати рівнянням

$$V_{Cd}^- + h\nu \rightarrow V_{Cd}^0 + e^-,$$

що відображає виникнення відповідного максимуму у спектрі фотопровідності. Внаслідок такого переходу концентрація носіїв у зоні провідності збільшується, що й приводить до зростання фотопровідності саме в діапазоні енергій, де розташований перший домішковий пік.

Другим важливим механізмом є оптичне збудження електронів із донорних центрів, пов'язаних із антиструктурними дефектами типу Te_{Cd} , які утворюються тоді, коли атом телуру займає вузол атома кадмію. Такі дефекти створюють донорні рівні в забороненій зоні й можуть переходити з однократно зарядженого стану Te_{Cd}^+ у двічі заряджений Te_{Cd}^{2+} із вивільненням електрона при оптичному збудженні. Відповідний процес описується реакцією [38, 39]



і асоціюється з піком у ділянці $1,51\text{ eV}$. Цей механізм відповідає добре відомим донорним властивостям антиструктурних дефектів, які часто формуються в умовах нестачі кадмію при вирощуванні кристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$.

Окрім ізольованих дефектів, суттєвий внесок у формування спектральних максимумів можуть забезпечувати різноманітні дефектні комплекси та кластери. Це можуть бути скупчення вакансій із домішковими атомами, комплекси «вакансія–дислокація», а також мікроскупчення точкових дефектів, що виникають поблизу протяжних структурних неоднорідностей. Такі комплекси не лише утворюють розподіл локалізованих енергетичних рівнів, а й розширюють спектральну смугу поглинання, що проявляється у вигляді додаткових Гаусівських компонент або розмитих максимумів у домішковій області спектра.

Важливу роль у формуванні домішкової фотопровідності відіграє також механізм «пастка–делокалізація носіїв», який характерний для напівпровідникових матеріалів із флуктуаціями потенціалу, спричиненими просторовою неоднорідністю складу або дефектною структурою. На таких ділянках локальні мінімальні потенціальні ями здатні тимчасово захоплювати носії заряду, а оптичне збудження певної енергії може переводити ці носії у делокалізований стан, що додатково зумовлює появу спектральних максимумів у домішковому діапазоні. Саме флуктуації енергетичного рельєфу можуть

сприяти тому, що окремі Гаусівських компоненти мають більшу ширину, ніж ті, що пов'язані лише з ізольованими дефектними рівнями.

Таким чином, формування домішкових піків у спектрах фотопровідності $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ є комплексним явищем, у якому взаємодіють кілька фізичних механізмів: фотоіонізація акцепторних вакансій кадмію, збудження електронів із донорних антиструктурних центрів телуру, участь дефектних кластерів та комплексів, а також процеси делокалізації носіїв у флуктуаційному потенціальному полі. Сукупність цих ефектів формує характерну структуру спектра включно з домішковими максимумами, які несуть важливу інформацію про типи, концентрацію та взаємодію дефектів у кристалічній ґратці.

Таким чином, аналіз спектрального розподілу фотопровідності монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ дозволяє зробити такі висновки: основний максимум при $h\nu \approx 1,56$ eV відповідає міжзонним переходам; різкий спад фотопровідності при $h\nu > 1,57$ eV обумовлений поверхневою рекомбінацією; домішкова область містить два основні максимуми (1,41 eV та 1,51 eV), кожен із яких пов'язаний з певними типами дефектів; природа цих піків включає як ізольовані точкові дефекти, так і дефекти, пов'язані з протяжними структурними недосконаlostями. Сумарний спектр у домішковій області формується як суперпозиція трьох гаусівських компонент, що свідчить про багатofакторний характер фотопровідності.

3.3. Оптичні властивості твердих розчинів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$

На рис. 3.2 подано енергетичну залежність коефіцієнта поглинання світла $\alpha(\nu)$ на краю власних оптичних переходів монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ за температури 300 K. Отримана експериментальна крива демонструє характерну експоненційну поведінку залежності коефіцієнта поглинання світла від енергії квантів світла. Як видно з рисунка, енергетичний хід $\alpha(h\nu)$ задовільно

описується правилом Урбаха [9], що є типовим для напівпровідників з певним рівнем структурного розупорядкування [40, 41]. Така поведінка є прямим свідченням того, що у формуванні оптичних переходів важливу роль відіграють так звані «хвости» щільності електронних станів, які виникають через наявність як точкових дефектів (вакансій, міжвузлових атомів, домішок), так і локальних збурень потенціалу кристалічної ґратки [42, 43].

Згідно з правилом Урбаха, оптичний коефіцієнт поглинання в області фундаментального краю змінюється за експоненціальним законом:

$$\alpha(\nu) \sim \exp\left(-\frac{E_{g0} - h\nu}{\Delta_0}\right), \quad (3.1)$$

де E_{g0} — константа, пропорційна ширині забороненої зони при температурі 0 К, а Δ_0 — характеристична енергія, що визначає ступінь розмиття краю оптичного поглинання. Параметр Δ_0 відображає рівень структурного безладу і є прямо пов'язаним з інтенсивністю хаотичних збурень електричного потенціалу біля забороненої зони [44]. Чим більше значення Δ_0 , тим ширшим є так званий Урбахівський хвіст і тим більша концентрація дефектів, домішок, мікродеформацій або варіацій хімічної стехіометрії у зразку [45].

За результатами апроксимації експериментальної залежності (рис.2.3) було отримано величину $\Delta_0 = 0,023$ eВ. Це доволі велике значення, характерне не лише для слабо впорядкованих змішаних кристалів, але й близьке до таких, які спостерігають у неупорядкованих або аморфних напівпровідникових структурах [46]. Така величина параметра Урбаха вказує на те, що у досліджених кристалах $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ присутня значна концентрація локальних дефектів або варіацій хімічної композиції, що й формує розмитий край поглинання. Подібний ступінь дефектності може бути зумовлений технологічними особливостями вирощування монокристалів, відхиленнями від стехіометрії, наявністю мікродомішок кадмію або цинку, напруженнями мікроскопічного масштабу тощо [47].

З аналізу енергетичного розподілу коефіцієнта поглинання світла отримано значення ширини забороненої зони $E_g \approx 1,53 \text{ eV}$. Воно узгоджується з положенням максимуму фотопровідності (рис. 3.1), який, на нашу думку, формується саме власними міжзонними оптичними переходами. Визначення $E_g \approx 1,53 \text{ eV}$ проводилось при значенні коефіцієнта поглинання $\alpha = 300 \text{ cm}^{-1}$, що є типовим критерієм для визначення краю фундаментальних переходів у сполуках типу A^2B^6 .

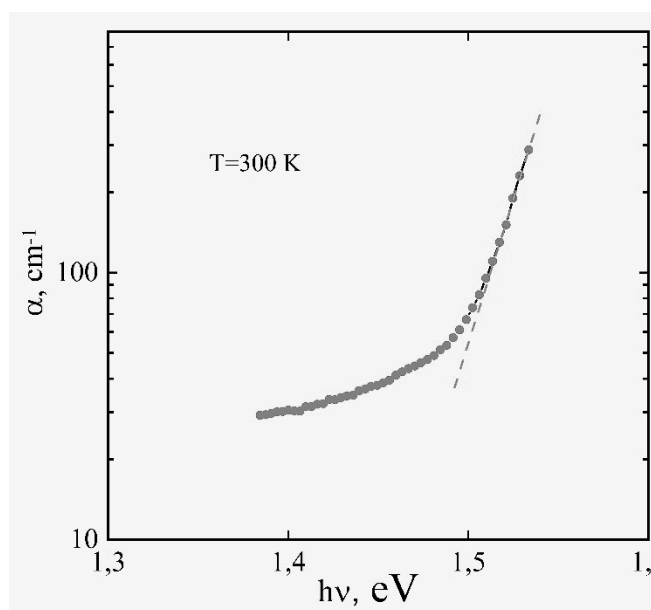


Рис.3.2. Енергетичний розподіл коефіцієнта поглинання світла монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ при 300 К.

Співпадіння енергетичного положення краю поглинання з максимумом спектрального розподілу фотопровідності $h\nu \approx 1,57 \text{ eV}$ є важливим експериментальним підтвердженням того, що домінуючий внесок у фотореакцію вносить генерація нерівноважних носіїв заряду шляхом прямого міжзонного поглинання фотонів. Невелике зміщення між значеннями $1,53 \text{ eV}$ та $1,57 \text{ eV}$ легко пояснюється різницею критеріїв визначення енергетичної щільності, наявністю тонкої структури хвостів станів, а також можливим впливом пасток і локальних рівнів, які трохи зміщують максимум фотопровідності у бік більших енергій.

Таким чином, отримані експериментальні спектри поглинання та фотопровідності перебувають у взаємному узгодженні й дозволяють дійти висновку про значний вплив дефектності кристалічної структури $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ на формування краю фундаментального оптичного переходу, що проявляється у великому параметрі Урбаха Δ_0 , широкому експоненційному хвості поглинання та відповідному зміщенні спектральних максимумів фотопровідності.

Таким чином, узгодженість даних поглинання та фотопровідності підтверджує, що домінуючим механізмом оптичного відгуку є власні міжзонні переходи, тоді як дефекти та локальні рівні модифікують форму спектрів і зумовлюють невелике енергетичне зміщення максимумів.

ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 3

Аналіз спектрального розподілу фотопровідності монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ дозволяє зробити такі висновки: основний максимум при $h\nu \approx 1,57$ eV відповідає міжзонним оптичним переходам; різкий спад фотопровідності при $h\nu > 1,57$ eV обумовлений поверхневою рекомбінацією; домішкова область містить два основні максимуми (1,41 eV та 1,51 eV), кожен із яких пов'язаний з певними типами дефектів; природа цих піків включає як ізольовані точкові дефекти, так і дефекти, пов'язані з протяжними структурними недосконаlostями кристалічної ґратки. Сумарний спектр у домішковій області формується як суперпозиція трьох Гаусівських компонент, що свідчить про багатofакторний характер фотопровідності.

Залежність коефіцієнта поглинання світла $\alpha(\nu)$ від енергії квантів світла у монокристалах $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ добре описується правилом Урбаха, що свідчить про суттєвий рівень структурного розупорядкування та наявність урбахівських хвостів у зонній структурі.

Отримане значення параметра Урбаха $\Delta_0 = 0,023$ eV вказує на високу концентрацію дефектів та флуктуацій потенціалу, які істотно впливають на формування краю оптичного поглинання.

ВИСНОВКИ

- 1) Основний максимум фотопровідності монокристалів $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ спостерігався при $h\nu \approx 1,57 \text{ eV}$ та відповідає міжзонним оптичним переходам.
- 2) Сумарний спектр фотопровідності у домішковій області формується як суперпозиція трьох Гаусівських компонент, що свідчить про багатofакторний характер фотопровідності.
- 3) Різкий спад фотопровідності при $h\nu > 1,57 \text{ eV}$ обумовлений поверхневою рекомбінацією вільних носіїв заряду.
- 4) Домішкова область спектрів фотопровідності містить два основні максимуми ($1,41 \text{ eV}$ та $1,51 \text{ eV}$), кожен із яких пов'язаний з певними типами дефектів. Природа цих піків включає як ізольовані точкові дефекти, так і дефекти, пов'язані з протяжним структурним розупорядкуванням.
- 5) Енергетична залежність коефіцієнта поглинання світла $k(h\nu)$ у монокристалах $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ добре описується правилом Урбаха, що свідчить про суттєвий рівень структурного розупорядкування та наявність Урбахівських хвостів у зонній структурі.
- 6) З аналізу енергетичного розподілу коефіцієнта поглинання отримано значення ширини забороненої зони $E_g \approx 1,53 \text{ eV}$. Воно добре узгоджується з положенням максимуму фотопровідності $h\nu = 1,57 \text{ eV}$.
- 7) Отримане значення параметра Урбаха $\Delta_0 = 0,023 \text{ eV}$ вказує на високу концентрацію дефектів та флуктуацій потенціалу, які істотно впливають на формування краю оптичного поглинання.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Костанович Б.Р., Новосад О.В. Фотопровідність монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$. *Молода наука Волині: пріоритети та перспективи досліджень: матеріали XIX Міжнар. наук.-практ. конф., м. Луцьк, 13-14 травн. 2025 р. Луцьк : ВНУ ім. Лесі Українки, 2025. С. 816-818.*
2. Костанович Б.Р., Новосад О.В., Данильчук С.П. Оптичні та фотоелектричні властивості монокристалів $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$. *Актуальні проблеми фундаментальних наук : матеріали VI Міжнар. наук. конф., Луцьк-Світязь, 9-12 черв. 2025 р. Луцьк : Вежа-Друк, 2025. С. 84-85.*
3. Sze S.M., Ng K.K. *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons, 2021. 944 p.
4. Yu P.Y., Cardona M. *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties*. Springer, 2010. 778 p.
5. Haug H., Koch S. W. *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*. World Scientific, 2009. 453 p.
6. Фреїк Д.М., Чобанюк В.М., Готра З.Ю. *Фізика процесів у напівпровідниках та елементах електроніки : курс лекцій*. Івано-Франківськ : Видавництво Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника, 2010. 263 с.
7. Третьяк О.В., Лозовський В.З. *Основи фізики напівпровідників: Підручник: У 2 т.* Київ: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2007. 338 с.
8. Fodchuk I.M., Kuzmin A.R., Gutsulyak I.I. Defect Structure of High-Resistivity CdTe:Cl Monocrystals. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 2023. Vol.26, №4. P. 415–423.
9. Studenyak I., Kranjec M., Kurik M. Urbach Rule in Solid State Physics. *International Journal of Optics and Applications*. 2014. Vol.4, №3. P. 76-83.

10. Streetman B.G., Banerjee S.K. Solid State Electronic Devices. Pearson, 2015. 624 p.
11. Redshaw C., Coe S.E. Cadmium Telluride Crystals for Radiation Detection. Springer, 2018. 342 p.
12. Prontera F., Zappettini A. Progress in the Development of CdTe and CdZnTe Semiconductor Radiation Detectors. Sensors, 2009. Vol.9, №5. C. 3491–3526.
13. Shah A.V. Thin-Film Cadmium Telluride Solar Cells. Springer, 2019. 410 c.
14. Fochuk P., Sniala Y., Armani N. et al. Electrical Properties of CdTe:P Single Crystals at Low and High Temperatures. Physics and Chemistry of Solid State, 2023. Vol.25, №.2. P. 352–361.
15. Xiaofeng Xiang, Yijun Tong, Aaron Gehrke et al. Point Defects in CdTe and CdTeSe Alloy: A First Principles Investigation with DFT+U. arXiv, 2024. 18 p.
16. Kirschenmann S., Bezak M., Bharthuar S. et al. Quality Assessment of Cadmium Telluride as a Detector Material for Multispectral Medical Imaging. arXiv, 2022. 12 p.
17. Lachish U. CdTe and CdZnTe Crystal Growth and Production of Gamma Radiation Detectors. arXiv. 2016. 29 p.
18. Шляхов І. М. Застосування детекторів на основі напівпровідникових сполук CdTe і CdZnTe у задачах аналізу джерел γ -випромінювання. Дисертація. 2012. 198 с.
19. Mori I., Takayama T., Motomura N. The CdTe detector module and its imaging performance. Nuclear Medicine Communications. 2002. Vol. 23, №. 11. P. 1053–1061.

20. Prontera F., A. Zappettini et al. Progress in the Development of CdTe and CdZnTe Semiconductor Radiation Detectors for Astrophysical and Medical Applications. *Sensors*. 2009. Vol. 9, № 5. P. 3491–3526.
21. Sizov F., Tsybrii Z. Optical transmittance of CdTe/HgCdTe/CdZnTe structures. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2020. Vol. 26, №. 2. P. 344–349.
22. Хрипунов Г. С., Копач Г. І., Харченко М. М. та ін. Структура і оптичні властивості плівок CdTe, отриманих методом магнетронного розпилення. *Вісник Одеського національного університету ім. І. І. Мечникова*. 2016. № 13 (3). 47–56 с.
23. Rogalski A. *Infrared Photon Detectors*. Bellingham. WA: SPIE Optical Engineering Pres, 2002. 568 p.
24. Christian Scheiber, George C. Giakos. Christian Scheiber. Medical applications of CdTe and CdZnTe detectors. *Nucl. Instr. Meth. Physics Res*. 2001. – Vol. A458. P. 12-25.
25. Rogalski A. *Infrared Photon Detectors*. Bellingham. WA: SPIE Optical Engineering Pres, 2002. 568 p.
26. Bray C. *Crystal Growth Techniques*. Oxford: Pergamon Press, 1970. 312 p.
27. Rudolph P. *Fundamentals of Bridgman Crystal Growth*. Berlin: Springer, 2014. 530 p.
28. Capper P. (Ed.) *Bulk Crystal Growth of Electronic Materials*. Chichester: Wiley, 2005. 456 p.
29. James F. *Semiconductor Materials Processing*. New York: McGraw-Hill, 1992. 384 p.
30. Henry J. *Properties and Growth of II–VI Semiconductors*. London: Academic Press, 2001. 428 p

31. Азаров О.Д., Гарнага В.А., Клятченко Я.М., Тарасенко В. П. *Комп'ютерна схемотехніка : підручник*. Вінниця : ВНТУ, 2018. 230 с. URL: http://pdf.lib.vntu.edu.ua/books/IRVC/2021/Azarov_2018_230.pdf (дата звернення: 25.08.2025)
32. Klingshirn C.F. *Semiconductor Optics : Graduate Texts in Physics*. Berlin : Heidelberg : Springer, 2012. 849 p.
33. Fox M. *Optical Properties of Solids*. Oxford : Oxford University Press, 2010. 360 p.
34. Bube R.H. *Photoelectronic Properties of Semiconductors*. Cambridge : Cambridge University Press, 1992. 572 p.
35. Sze S.M., Ng K.K. *Physics of Semiconductor Devices*. 3rd ed. Hoboken : Wiley, 2007. 815 p.
36. Blood P., Orton J. *The Electrical Characterization of Semiconductors: Majority Carriers and Electron States*. London : Academic Press, 1992. 351 p.
37. Look D.C. *Electrical Characterization of GaAs Materials and Devices*. New York : Wiley, 1989. 224 p.
38. Szeles C. Advances in the crystal growth and characterization of CdZnTe for radiation detection. *IEEE Transactions on Nuclear Science*. 2004. Vol. 51, No. 3. P. 1242–1249.
39. Owens A., Peacock A. Compound semiconductor radiation detectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*. 2004. Vol. 531. P. 18–37.
40. Street R.A. *Hydrogenated Amorphous Silicon*. Cambridge: Cambridge University Press, 1991.
41. Abkowitz M. Disorder and optical absorption in semiconductors. *J. Non-Cryst. Solids*. 1989. Vol. 114. P. 1–15.
42. Jagannath C., Narayan J. Defect-induced states in II–VI semiconductors. *J. Appl. Phys.* 1985. Vol. 57. P. 123–129.

43. O'Donnell K.P., Woggon U. Optical transitions in disordered semiconductors. Berlin: Springer, 1998.
44. Cody G.D. Urbach edge of crystalline and amorphous semiconductors. In: Semiconductors and Semimetals. Vol. 21. N.Y.: Academic Press, 1984.
45. Tauc J. Amorphous and Liquid Semiconductors. N.Y.: Plenum Press, 1974.
46. Redfield D. Effect of disorder on absorption edge in semiconductors. Phys. Rev. B. 1980. Vol. 21. P. 235–245.
47. Capper P. Bulk Crystal Growth of Electronic Materials. Chichester: Wiley, 2019.
48. Новосад О.В. Електричні, фотоелектричні та оптичні властивості монокристалів $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{InSe}_2$ та $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{InS}_2$ та бар'єрних структур на їх основі : дис. ... канд. фіз.-мат. наук : 01.04.10. Київ, 2016. 149 с.