Министерство образования и науки
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 9

ТВЕРЬ 2017

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения об рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

www.physchemaspects.ru

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2017. – Вып. 9. – 592 с.

ISBN 978-5-7609-1275-6

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-1275-6

ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2017

© Тверской государственной
университет, 2017

УДК 539.1.074

РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА СБОРА ЗАРЯДА И ФОРМИРОВАНИЯ СПЕКТРА В ДЕТЕКТОРАХ НА ОСНОВЕ CdTe (CdZnTe) ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ГАММА-КВАНТАМИ

А.А. Смирнов¹, И.А. Каплунов², А.А. Ольнев¹, А.Н. Никифорова¹

¹АО «Институт физико-технических проблем»

141980, Россия, Московская область, Дубна, ул. Курчатова, 4

²ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

asmirnov@iftp.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2017.9.465

Аннотация: Рассмотрены особенности формирования спектра в детекторах на основе CdTe (CdZnTe) при облучении гамма-квантами. Определены основные характеристики исходного материала полупроводникового детектора, определяющие его спектрометрические свойства – энергетическое разрешение и эффективность регистрации, которые выводятся из функции отклика. Результаты положены в основу физико-математической модели работы полупроводниковых детекторов на основе CdTe (CdZnTe) и применены при разработке портативного спектрометра СЕГ-ТК-1К для регистрации гамма-квантов в широком энергетическом диапазоне.

Ключевые слова: полупроводниковые детекторы, теллурид кадмия, рентгеновская и гамма-спектроскопия.

1. Введение

Существенным недостатком всех полупроводниковых детекторов (ППД), используемых сегодня в спектроскопии, есть необходимость охлаждать их до температуры жидкого азота, как в процессе хранения, так и эксплуатации. В настоящее время успехи электронного материаловедения дают возможность применять полупроводниковые монокристаллы, свойства которых существенно улучшают параметры и возможности применения ППД, а применение методов математического моделирования позволяет достичь наивысших спектрометрических характеристик спектрометров.

2. Общие положения – функция отклика

Самой общей характеристикой полупроводниковых детекторов фотонного излучения является функция отклика $G(E, A)$, которая определяет вероятность того, что квант с энергией E возбудит в детекторе сигнал A . Вид функции отклика определяет пригодность детектора для решения конкретной ядерно-физической задачи [1, 2].

При спектрометрии ионизирующего излучения функция отклика (ФО) связывает спектр сигналов с детектора $N(A)$ (амплитудный спектр) и спектр гамма-квантов E_γ следующим образом:

$$N(A) = \int \varphi(E, A) G(E_\gamma, A) dE. \quad (1)$$

Таким образом, для нахождения исследуемого распределения E надо решить уравнение типа (1). Рассмотрение решения (1) позволяет сформулировать некоторые требования к характеристикам детектора. Непременным условием является линейный характер связи между измеряемым сигналом и параметром частицы.

Поскольку процессы потери энергии частицы носят статистический характер, сигналы детектора также имеют некоторое статистическое распределение по величине, и по времени их появления, т.е. в реальных детекторах ФО имеет некоторую ширину σ . Это значит, что при заданном значении E или еще какой-либо характеристике частицы сигналы A и другие имеют конечную вероятность получить значение в интервале $A + \Delta A$. Как правило, для детекторов, с помощью которых исследуют распределение частиц по энергиям, ФО – $G(E_\gamma, A)$ описывается распределением Гаусса.

Амплитуда импульсов A измеряется в энергетических величинах и связана с энергией кванта E_γ , поглощенной в чувствительном объеме детектора, как:

$$A(E) = \frac{E_{\gamma_a} q M}{w}, \quad (2)$$

где E_{γ_a} – энергия кванта, поглощенная в чувствительном объеме ППД, q – заряд электрона, M – коэффициент преобразования заряда в амплитуду выходного сигнала, w – энергия образования электронно-дырочной пары.

Функция отклика детектора на рентгеновское и гамма-излучение имеет четко выраженный пик полного поглощения, где амплитуда сигнала соответствует полному поглощению энергии гамма-кванта в чувствительной области детектора и непрерывное распределение света от пика. Величина непрерывного распределения задается комптоновским рассеянием гамма-квантов на атомных электронах, неполным сбором образованного заряда, уходом «горячих» электронов из чувствительной области ППД. При моделировании процесса сбора заряда и формировании спектра основные характеристики полупроводникового детектора (ППД), определяющие его спектрометрические свойства – энергетическое разрешение и эффективность регистрации – выводятся из функции отклика.

3. Основные стадии формирования спектра

Процесс формирования электрического сигнала на выходе ППД можно представить в виде ряда этапов, проходя которые последовательно, спектр падающих квантов E_γ преобразуется в спектр амплитуд импульсов тока или напряжения на выходе $N(A)$ (см. рис. 1).

Важнейшим свойством данного процесса является независимость каждого этапа. Так, сбор генерации неравновесного заряда вторичными частицами не зависит от того, в результате какого процесса взаимодействия эти частицы образуются. Поэтому процессы, происходящие на каждом этапе, описываются своей функцией отклика. Свертка этой функции со спектром выражений на входе в соответствие с выражением (1) определяет вид спектра после прохождения данного этапа.

Рис. 1. Этапы формирования амплитудного спектра в ППД.

На первом этапе происходит преобразование спектра регистрируемого гамма-излучения – $f(E)$ в спектр энергии вторичных заряженных частиц $\Pi(E_e)$ в результате взаимодействия квантов с материалом детектора. На следующем этапе энергия вторичного излучения поглощается. В результате чего образуется некоторое число неравновесных носителей заряда – $U(n)$, т.е. происходит ионизация. В ходе третьего этапа происходит сбор неравновесных носителей на электроды, на которых индуцируется зарядовый импульс с распределением $C(q)$. Величина импульса зависит от условий сбора заряда, конструкции и однородности чувствительной области детектора. На четвертом этапе зарядовые импульсы с помощью зарядочувствительного предусилителя преобразуются в импульсы тока или напряжения со спектром амплитуд – $N(A)$. Суммарное преобразование (функцию отклика детектора) можно представить в виде последовательной свертки функции отклика каждого этапа.

Для выяснения вида амплитудного спектра ППД от моноэнергетического гамма-излучения была проведена оценка функции отклика каждого этапа преобразования, которые определяются реакцией процесса на дельтаобразный спектр входных величин [3].

4. Сбор заряда

Как указано выше, функция отклика планарного ППД на моноэнергетическое гамма-излучение описывается колокообразной

функцией $G(E, A)$ – пиком полного поглощения и непрерывным распределением слева от пика. Принимая во внимание, что в результате комптоновского рассеяния слоя dr на глубине r чувствительной области детектора, рис. 2, передается не вся энергия гамма-кванта E_γ , а только часть ее – E_e , реакцию детектора можно описать выражением (3)

Рис. 2. Структурная схема включения ППД и зарядочувствительного предусилителя.

Для планарного детектора площадью S отклик на нормально падающее гамма-излучение с энергией E_γ с флюенсом $\Phi_0(E)$ имеет вид:

$$G(E_\gamma, A) = G_p(E_\gamma, A) + G_f(E_\gamma, A) = \int_0^d \int_0^{E_e} \frac{N(E_\gamma, r) \mu_\gamma(E_\gamma, E_e)}{\sqrt{2\pi}\sigma(E_e, r)} \times \exp\left(\frac{[A - \eta(r)E_e]^2}{2\sigma^2(E_\gamma, r)}\right) dE_e dr + \int_0^d \left\{ \frac{\mu_{\gamma f} N(E_\gamma, r)}{\sqrt{2\pi}\sigma(E_\gamma, r)} \right\} \times \exp\left(\frac{[A - \lambda(r)E_\gamma]^2}{2\sigma^2(E_\gamma, r)}\right) dr, \quad (3)$$

где $N(E_\gamma, r) = \Phi_0(E_\gamma) \cdot S \cdot \exp(-\mu_{\gamma f} d) \exp(-\mu_{\gamma c} d) \exp(-\mu_\gamma r) = N_0(E_\gamma) \exp(-\mu_\gamma r)$ – число квантов, дошедших до слоя dr на глубине r , без взаимодействия, $\mu_{\gamma f}, \mu_{\gamma c}$ – линейные коэффициенты ослабления гамма-излучения в материале входного окна и контакта детектора, d_0, d_c – толщина входного окна прибора и лицевого электрического контакта детектора, соответственно (см), $\mu_\gamma(E_\gamma, E_e)$ – дифференциальный коэффициент передачи электрону энергии в интервале от E_e до $E_e + \Delta E_e$ (кэВ·см)⁻¹, $E_{e, \max} = 4E / (mc^2 + 2E)$ – максимальная энергия, которая может быть передана электрону при комптоновском взаимодействии (кэВ).

Первое слагаемое выражения (3) описывает комптоновскую составляющую отклика, второе – учитывает фотоэлектрическое взаимодействие и описывает пик полного поглощения. Выражение для комптоновской составляющей детектора можно записать в форме, более удобной для расчетов и моделирования на ЭВМ [4]. При этом принималось, что коэффициент сбора заряда во всех точках чувствительной области больше 0,9, а зависимостью коэффициента сбора заряда и дисперсии от координаты взаимодействия пренебрегали.

В планарном детекторе с однородным электрическим полем ε коэффициент сбора неравновесного заряда η в зависимости от места его генерации рассчитывается согласно:

$$\eta(r) = \frac{\mu_e \tau_e \varepsilon}{d} \left\{ 1 - \exp \left(- \frac{d-r}{\mu_e \tau_e \varepsilon} \right) \right\} + \frac{\mu_h \tau_h \varepsilon}{d} \left\{ 1 - \exp \left(- \frac{r}{\mu_h \tau_h \varepsilon} \right) \right\}, \quad (4)$$

где r – координата места поглощения гамма-кванта и образования неравновесного заряда, μ, τ – подвижность и время жизни электронов (индекс e) и дырок (индекс h), d – толщина детектора. Анализ выражения (4) показывает, что амплитуда импульса определяется не только потерями заряда при сборе носителей, но и местом их генерации. Распределение амплитуд принимает характерную асимметрическую форму. Дисперсия этого распределения связана как со статистическими процессами генерации неравновесного заряда по объему счетчика, так и с флуктуациями сбора и неоднородностью распределения центров захвата по объему детектора. Результаты расчета $\eta(r)$ для разных $(\mu\tau)_e$ и $(\mu\tau)_h$ приведены на рис. 3.

Условие однородности поля в $CdTe$ и $CdZnTe$ далеко не всегда соблюдаются поскольку достаточно велика вероятность образования объемного заряда (ОЗ), вызванного наличием глубоких центров в запрещенной зоне. В случае однородного распределения ОЗ электрическое поле в детекторе имеет вид:

$$E(x) = E_0 + kx, \quad (5)$$

где E_0 – напряженность электрического поля у отрицательного входа контакта (В/см), k – коэффициент, учитывающий плотность и знак объемного заряда (В/см²).

В соответствии с теоремой Рамо [6], заряд, наведенный на электродах планарного детектора, при сборе неравновесного заряда Q , образованного в точке r определяется из:

$$Q = Q_e + Q_h = \frac{q}{d} \int_r^d n_e(x) dx + \frac{q}{d} \int_r^d n_h(x) dx, \quad (6)$$

где d – толщина детектора (см), $n_e(x), n_h(x)$ – число электронов и дырок,

соответственно в точке с координатой x в процессе их дрейфа к электродам.

Рис. 3. Зависимость коэффициента сбора заряда $\eta(r)$ от относительной координаты r/d его генерации для планарного $CdTe$ – ППД толщиной 2 мм при напряжении 1000 В для случая: однородного электрического поля (кривые 1, 2: $(\mu_\tau)_e = 10^{-3} \text{ см}^2/\text{В}$, $(\mu_\tau)_h = 5 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{В}$) и равномерно-распределенного положительного заряда (кривые 3, 4: $(\mu_\tau)_e = 10^{-4} \text{ см}^2/\text{В}$, $(\mu_\tau)_h = 10^{-3} \text{ см}^2/\text{В}$).

Из выражения (6), после соответствующих преобразований можно получить зависимость коэффициента сбора заряда от места его генерации в детекторе:

$$\eta(r) = \frac{Q_0}{n_0 q} = \frac{(E_0 + kd)}{kd} - \left\{ \frac{1}{1 - A_e} \left[\left(\frac{E_0 + kd}{E_0 + kr} \right)^{1 - A_e} \right] + \frac{1}{1 - A_h} \left[1 - \left(\frac{E_0}{E_0 + kr} \right)^{1 - A_h} \right] \right\}, \quad (7)$$

где E_0 – напряженность поля, A_e, A_h – доля электронов, дырок. Изменение коэффициента сбора заряда с координатой его генерации при наличии равномерно распределенного ОЗ показано на рис. 3 (кривая 4). Значения подвижностей электронов μ_e и дырок μ_h взяты те же, что и для случая однородного электрического поля. Конфигурация электрического поля влияет на сбор заряда, что сказывается и на форме отклика детектора.

5. Формирование амплитудного спектра

Дисперсия реакции детектора из слоя dx имеет три составляющие: дисперсия статистики генерации неравновесного заряда $(\sigma_{st})^2$, дисперсия сбора носителей $(\sigma_c)^2$ и дисперсия шумов электроники $(\sigma_e)^2$. Рассмотрим

их для $CdTe$ – ППД. Дисперсия статистики генерации неравновесного заряда определяется фактором Фано F . Оценка его проводилась на разных этапах разработки детекторов на теллуриде кадмия [5]. С учетом этой работы, где при измерениях на однородном детекторе с малошумящей электроникой получено значение $F = 0,2$ вклад дисперсии составит:

$$(\sigma_{st})^2 = w \cdot F \cdot E_\gamma, \quad (8)$$

где E_γ (кэВ), σ_{st} (эВ).

Захват носителей заряда при их сборе из слоя dr однородного детектора, согласно [6] можно записать как:

$$(\sigma_c(r, E_\gamma))^2 = 4,62 \cdot 10^3 [1 - \eta(r)] \cdot E_\gamma, \quad (9)$$

где $\eta(r)$ – сбор заряда, $1 - \eta(r)$ – потеря заряда.

Шумы электроники можно разбить на две составляющие. Первая из них включает шумы радиоэлементов предусилителя и равна шуму электроники без детектора с дисперсией $\sigma_{e,0}$. Вторая составляющая с дисперсией $\sigma_{e,d}$ зависит от геометрии детектора, его ёмкости и токов утечки. Для $CdTe$ и $CdZnTe$ вклад составляющих выше, чем у германиевых и кремниевых ППД за счет большего значения средней энергии образования электронно-дырочной пары. Выражение для дисперсии шума электроники запишется следующим образом:

$$(\sigma_e)^2 = (\sigma_{e,0})^2 + (\sigma_{e,d})^2 = (\sigma_{e,0})^2 + 2,1 \cdot 10^5 \left[\frac{0,03(C_d^2 + C_0 C_d)}{\tau_f q} + \tau_f I_d \right], \quad (10)$$

где C_0, C_g – ёмкость входа предусилителя и ёмкость детектора соответственно, I_d – темновой ток детектора, τ_f – время формирования детектора. Результирующая дисперсия отклика детектора из слоя dr для $CdTe$ – ППД запишется как:

$$(\sigma_g(r, E_\gamma))^2 = 4,62 \cdot 10^3 [1,19 - \eta(r)] E_\gamma + (\sigma_e)^2. \quad (11)$$

Подставляя соответствующие значения коэффициента сбора заряда и дисперсии в (3) можно построить функцию отклика идеализированного $CdTe$ детектора и рассчитать на ее основе предельные значения чувствительности и энергетического разрешения.

Зависимость чувствительности детектора от энергии гамма-квантов получается при интегрировании функции отклика по всем возможным амплитудам импульсов выше уровня дискриминации A_a^* . Чувствительность в пике полного поглощения можно оценить, интегрируя второе слагаемое функции отклика (3) в интервале амплитуд импульсов от $A - 1,5A$ до $A + 1,5A$. где A – амплитуда импульсов в максимуме пика полного поглощения. По своему значению в пике полного поглощения

чувствительность мало отличается от чувствительности в счетном режиме в области энергий до ~ 100 кэВ в связи со значительно меньшей вероятностью комптоновского взаимодействия по сравнению с фотопоглощением. Из результатов проведенных расчетов следует, что для обеспечения приемлемой чувствительности энергий характеристического излучения толщина металл-полупроводник-металл (МПМ) $CdTe$ – детекторов должна быть $> 0,8$ мм.

Влияние неоднородности подвижности и времени жизни носителей заряда на спектр хорошо иллюстрируется на рис. 4, где приведены пики полного поглощения квантов с энергией 59,54 кэВ, рассчитанные для детектора с разными значениями произведения.

Рис. 4. Пики полного поглощения гамма-квантов ($E_\gamma = 59,54$ кэВ) $CdTe$ – ППД толщиной 2 мм для разных значений произведений: 1 – $(\mu_\tau)_e = 2 \cdot 10^{-4}$ см²/В, 2 – $(\mu_\tau)_e = 9 \cdot 10^{-3}$ см²/В, 3 – $(\mu_\tau)_e = 1 \cdot 10^{-2}$ см²/В, 4 – $(\mu_\tau)_e = 5 \cdot 10^{-3}$ см²/В.

Видно, что изменение $(\mu_\tau)_e$ всего в 2 раза, что вполне реально, приводит к сдвигу пика полного поглощения на 0,5 кэВ. Такое же изменение $(\mu_\tau)_h$ слабо влияет на положение пика, т.к. импульсы, обусловленные дырочной составляющей заряда при этих энергиях дают вклад, в основном, в низкоэнергетический «хвост». При больших энергиях гамма-квантов число импульсов с дырочным сбором увеличивается, и вклад флуктуаций сбора этой составляющей будет приближаться к электронной.

Энергетическое разрешение определялось из функции отклика детектора как ширина пика полного поглощения на половине высоты. Результаты расчета для однородного детектора с типичными

характеристиками: толщина 0,1 см, $(\mu_{\tau})_e = 10^3$ см²/В, $(\mu_{\tau})_h = 10$ см²/В, при различных шумах электроники приведены на рис. 5. Там же отмечены лучшие значения энергетического разрешения МПМ – *CdTe* детекторов, известные из литературы [7]. Энергетическое разрешение, обусловленное только статистической генерацией электронно-дырочных пар при $F = 0,2$ показано пунктиром. Существенное отличие расчетных значений энергетических разрешений от реальных объясняется неоднородностью параметров реальных детекторов по площади, что не учитывается при расчете.

С возрастанием энергии регистрируемых квантов увеличивается глубина их проникновения в детектор, возрастает время их сбора и потери "дырочной" компоненты заряда. Что приводит к дополнительному уширению пика полного поглощения. Рассмотрение результатов расчета позволяет сделать вывод, что при энергиях квантов ниже 20 кэВ основным фактором, ограничивающим энергетическое разрешение детектора, является шум электроники. При больших энергиях определяющую роль начинают играть потери носителей заряда при сборе их на электроды детектора и неоднородность этих потерь по чувствительному объему.

Рис. 5. Зависимость предельно возможного энергетического разрешения от энергии, рассчитанная для *CdZnTe* – детектора толщиной 2 мм при энергетическом эквиваленте шумов электроники 0 эВ – (1), 200 эВ – (2), 500 эВ – (3), 1000 эВ – (4), $F = 0,19$. Пунктирная кривая соответствует энергетическому разрешению, полученному от генератора точной амплитуды, при отсутствии емкостной нагрузки входа предусилителя.

6. Заключение

Представленные результаты положены в основу физико-математической модели работы ППД на теллуриде кадмия и твердых растворов на его основе и применены при разработке портативного спектрометра СЕГ-ТК-1К для регистрации гамма-квантов в широком энергетическом диапазоне.

Библиографический список:

1. **Газизов, И.М.** Неохлаждаемые детекторы на основе *CdTe* и *CdZnTe* для спектрометрии γ -излучения / И.М. Газизов, А.А. Смирнов, В.Г. Федорков и др. // Атомная энергия. – 2016. – Т. 121. – Вып. 5. – С. 285-290.
2. **Хрунов, В.С.** Блок детектирования на основе теллурида кадмия. Методы и технологии / В.С. Хрунов, Ю.А. Петухов, Ю.П. Харитонов и др. // Ядерные измерительно-информационные технологии. – 2012. – № 3 (43). – С. 111-115.
3. **Акимов, Ю.К.** Полупроводниковые детекторы ядерных излучений: посвящается 60-летию Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ / Ю.К. Акимов. – Дубна: ОИЯИ, 2009. – 277 с.
4. Physics Reference Manual. Version: geant4 9.6.0. 30th November, 2012. – 556 p.
5. **Allison, J.** Geant4 development and applications / J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis et al. // IEEE Transactions on Nuclear Science. – 2006. – V. 53. – I. 1. – P. 270-278.
6. **Дирнли, Дж.** Полупроводниковые счетчики ядерных излучений / Дж. Дирнли, Д. Нортроп. – М.: Мир, 1966. – 359 с.
7. **Arlt, R.** Advances in high-resolution *CdTe* and large volume *CdZnTe* detectors / R. Arlt, V. Ivanov, A. Khusainov // Proceedings of SPIE – The International Society for Optical Engineering. – 1997. – V. 3115. – P. 76-89.