## ТАДЖИКСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

**УДК: 538.9** 

## НОСИРЗОДА МУХАММАД

## ВЛИЯНИЕ МАЛЫХ ПОТОКОВ ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНОВ НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ, СТРУКТУРНЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ CdTe И CdZnTe

Диссертация на соискание учёной степени доктора философии (PhD) – доктор

### по специальности 6D060400-Физика

(6D060407-Физика конденсированного состояния)

Научный руководитель:

д.ф.-м.н., профессор

Махсуд Барот Исломзода

Душанбе-2025

## оглавление

Перечень сокращений	4
Введение	5
Общая характеристика работы	7
Содержание работы	10
Глава 1. Электрофизические, структурные и оптические свойства	
полупроводниковых соединений CdTe и CdZnTe (литературный	
обзор)	12
1.1. Теллурид кадмия и теллурид кадмия цинка как перспективные	
материалы	12
1.2. Морфология структуры кристаллических соединений А <sup>II</sup> В <sup>VI</sup>	
после технологической обработки	20
1.3. Изменение фундаментальных свойств твердых тел и полупро-	
водниковых материалов под действием облучении	25
1.4. Анализ влияния облучения нейтронами на электрофизические	
свойства полупроводниковых материалов	31
1.5. Изменение оптических свойств полупроводниковых материа-лов	
при облучении	39
Выводы литературного обзора	43
Глава 2. Методика получения экспериментальных образцов и	
проведения эксперимента	45
2.1. Методика получения и обработка исследованных образцов	45
2.2. Методика измерения потока тепловых нейтронов и облучения	
образцов	48
2.3. Рентгенодифракционный анализ образцов	55
2.4. Кванто-механический расчет структурных, электронных и	
оптических свойств CdTe и CdZnTe	57
2.5. Методика исследования оптических свойств	61
Выводы второй главы	62

Глава 3. Влияния малых потоков тепловых нейтронов на	
электрофизические и структурные свойства полупроводниковых	
кристаллов CdTe и CdZnTe	63
3.1. Влияние облучения тепловыми нейтронами на электрофизи-	00
ческие характеристики CdTe, легированного хлором и CdZnTe	63
3.2. Влияние потока тепловых нейтронов на структурные пара-	
метры монокристаллов теллурида кадмия	68
3.3. Возникновение дополнительных рефлексов на рентгенодифрак-	
тограммах теллурида кадмия после облучение тепловыми	
нейтронами	81
3.4. Изучение структурных свойств полупроводниковых кристаллов	
CdZnTe после облучения тепловыми нейтронами	83
3.5. Сравнение результатов облучения тепловыми нейтронами	
полупроводниковых кристаллов CdZnTe и CdTe	90
Выводы третьей главы	94
Глава 4. Теоретический расчет и экспериментальное исследование	
электронных и оптических свойств CdZnTe и CdTe	96
4.1. Оптимизация оптоэлектронных свойств системы Zn <sub>x</sub> Cd <sub>1-x</sub> Te для	
применения в солнечных элементах	96
4.2. Комбинированный рентгеноструктурный анализ и квантово-	
механическая интерпретация влияния тепловых нейтронов на гео-	
метрию и электронные свойства CdTe	106
4.3. Исследование оптических свойств CdTe экспериментальными и	
кванто-механическими методами	114
Выводы четвертой главы	118
Выводы	119
Рекомендации по практическому использованию результатов	120
Литература	122

### ПЕРЕЧЕНЬ СОКРАЩЕНИЙ

- КПД коэффициент полезного действия
- ППД полупроводниковый детектор
- ГЦК границентрированный кубический
- ХМП химико-механическая полировка
- БМ бром-метанол
- РФЭС рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия
- АСМ атомно-силовая микроскопия
- ВАХ вольт-амперная характеристика
- ФЛ фотолюминесценция
- УФ ультрафиолетовый
- УЭС удельное электросопротивление
- ИК инфракрасный
- СЭ солнечный элемент
- РЭМ растровый электронный микроскоп
- ВИП высокостабильный источник питания
- КП кварцевый порошок
- DFT density functional theory (теория функционала плотности)
- FP-LAPW full potential linearized augmented plane wave (метод линеаризованных присоединенных плоских волн полного потенциала)
- GGA generalized gradient approximation (обобщенный градиентный приближения)
- VASP Vienna Ab initio Simulation Package (Пакет моделирования Ab initio Vienna)
- PBE Perdew-Burke-Ernzerhof (Пердью-Берк-Эрнцерхоф)
- УИП универсальный источник питания
- DOS density of states (плотность состояний)
- ВЗ валентная зона
- 3П зона проводимости

#### введение

Актуальность исследования. Кристаллические полупроводники группы А<sup>2</sup>В<sup>6</sup> широко применятся в современной технологии, включая от солнечных панелей [1], детекторов ядерного излучения [2] до медицинских приборов. Эти уникальными электрическими свойствами материалы с их произвели революцию в различных отраслях и технологиях, предложив способ управления электропроводностью с большой точностью. Полупроводниковые соединения А<sup>2</sup>В<sup>6</sup> имеют весьма хорошие показатели, такие как высокий коэффициент поглощения и высокая эффективность преобразования солнечной радиации. Исследования, проведенные в области технологии изготовления детекторов ядерного излучения за последние несколько десятилетий, показали, что CdZnTe детекторы на основе являются превосходной заменой сцинтилляционным детекторам с точки зрения высокой чувствительности, энергетического разрешения И высокого пространственного лучшего разрешения при комнатной температуре. CdTe является лидером среди тонкопленочных технологий для солнечных панелей и, согласно некоторым исследованиям, обещает самую низкую себестоимость производства по сравнению с другими фотоэлектрическими технологиями, доступными в настоящее время на коммерческом рынке [3].

Степень изученности темы исследования. Известно, что современные полупроводниковые технологии не достигли того уровня чтобы, получит идеальный материал с заданными параметрами. Для устранения структурных дефектов и оптимизации параметров кристалла нужно внешнее воздействие. Возможность изменять параметры полупроводника посредством внешних воздействий, таких как приложение напряжения, изменение температуры или отжиг, делает эти материалы чрезвычайно универсальными.

Для оптимизации характеристик полупроводниковых кристаллов также применяются различные виды ядерного излучения, в частности нейтроны. Нейтронное облучение является важным методом воздействия на физические и электрические свойства полупроводниковых кристаллов. Нейтронное

облучение, в отличие от других видов ионизирующего излучения, взаимодействует с материалами в основном посредством ядерных реакций, а не прямой ионизации, что делает его эффекты отчетливыми и часто более сложными.

Следует отметить, что в этом направлении выполнено много работ, но все эти исследования проведены в условиях больших доз и потоков излучения. Информацию о взаимодействие малых потоков тепловых нейтронов с полупроводниковыми структурами можно найти в работе [4]. В [5] также исследовано влияние малых потоков тепловых нейтронов на биологические объекты. Во всех перечисленных работах указано улучшения характеристик исследованных образцов в области малых потоков тепловых нейтронов. Но взаимодействие тепловых нейтронов с кристаллическими полупроводниками CdTe и CdZnTe до сих пор остается мало изученным.

Поэтому, в диссертационной работе методами рентгеновской дифрактометрии, спектрофотометрии, кванто-механическими расчетами, исследовано влияния малых потоков тепловых нейтронов на электрофизические, структурные и оптические характеристики полупроводниковых кристаллов группы A<sup>2</sup>B<sup>6</sup>, в частности теллурида кадмия (CdTe) и теллурид кадмия цинка (CdZnTe).

Связь исследования с научными проектами и темами. Диссертационная работа выполнена в 2021-2025 гг. в соответствии с тематикой научных исследований кафедры ядерной физики Таджикского национального университета по теме «Влияние тепловых нейтронов на свойства биологических объектов и твердых тел», №01/1050-03 от 25.04.2022г., 0122TJ1422 от 29.04.2022 г. Тема диссертационной работы соответствует Перечню, в который включены приоритетные направления научных и научно-технических исследований, выполняемые в течение 2021-2025 гг. (Согласно Постановлению Правительства РТ №503 от 26.09.2020 г.). и в период до 2030 г. (Согласно Постановлению Правительства РТ №114 от 25.02.2025 г.).

#### ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Целью** диссертационной работы является исследование влияния малых потоков тепловых нейтронов на электропроводность, структурные параметры и оптические свойства кристаллических полупроводников CdTe и CdZnTe.

Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие задачи:

- Разработка методов облучения и измерения величины потока тепловых нейтронов;
- Исследование электрофизических и структурных свойств CdTe и CdZnTe до и после облучения и сравнение результатов;
- Исследование оптических параметров CdTe до и после облучения тепловыми нейтронами;
- Проведение кванто-механических расчетов для теоретического обоснования экспериментальных результатов исследования и их сравнение.

Объект исследования. Объектами исследования являются монокристаллические полупроводники CdTe и CdZnTe.

Предметами исследования являются изучение изменение электрофизических, структурных и оптических параметров CdTe и CdZnTe после обработки потоком тепловых нейтронов.

Научная новизна исследования заключается в том, что впервые:

- экспериментальными методами установлено уменьшение удельного сопротивления CdTe и CdZnTe после облучения малыми потоками тепловых нейтронов;

- выявлено улучшение структуры кристаллов CdTe после облучения малыми потоками тепловых нейтронов, о чем свидетельствует увеличение интенсивности рентгеновских рефлексов;

- установлено зависимость структурных параметров CdTe и CdZnTe от потока тепловых нейтронов;

- проведен кванто-механический расчет структурных и оптических свойств CdZnTe в зависимости от концентрации Zn;

- проведен кванто-механическое моделирования процесса взаимодействия тепловых нейтронов на CdTe.

#### Выносимые на защиту положения:

- влияние тепловых нейтронов на электрофизические, структурные и оптические свойства полупроводниковых кристаллов CdTe и CdZnTe;

- зависимость проводимости полупроводниковых кристаллов CdTe и CdZnTe от величины потока тепловых нейтронов;

 эффект малых потоков тепловых нейтронов при их взаимодействии с полупроводниковыми кристаллами CdTe;

- квантово-механический расчёт электронно – оптических свойств полупроводниковых кристаллов CdTe и CdZnTe;

- зависимость оптических свойств полупроводниковых кристаллов CdTe от потока тепловых нейтронов;

- протекание ядерных реакций под действием тепловых нейтронов приводящих к изменению характеристик полупроводниковых кристаллов CdTe и CdZnTe.

**Теоретическая ценность исследования.** Экспериментальными методами и теоретическими расчетами установлено, что под действием малых потоков тепловых нейтронов электрофизические, структурные и оптические свойства образцов улучшаются. Этот процесс связан с протеканием ядерных реакций тепловых нейтронов с ядрами изученных образцов, что в результате приводит к образованию новых изотопов и упорядочению структуры.

Практическая ценность работы. Полученные результаты могут быть использованы в области солнечной энергетики для повышения эффективности солнечных панелей с использованием нейтронного облучения. Кроме этого, кристаллы CdTe и CdZnTe с улучшенными характеристиками можно широко применять для детекторов ядерного излучения.

#### Соответствие паспорту научной специальности.

Содержание диссертации соответствует паспорту научной специальности 6D060400 – Физика (6D060407-Физика конденсированного состояния), который утвержден Высшей аттестационной комиссией при Президенте Республики Таджикистан по следующим пунктам:

- теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков, в том числе светящихся веществ, как в твердом, так и в аморфном состояниях в зависимости от химического состава, изотопа, температуры и давления.

- разработка математических моделей и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных сред в зависимости от влияния внешних факторов.

 разработка экспериментальных методов изучения физических свойств и изложение физических основ промышленной технологии получения веществ с определенными свойствами.

Достоверность результатов обеспечивается наличием многократно повторяемых экспериментальных данных, соответствие экспериментальных результатов с кванто-механическими расчетами и результатами литературных данных.

**Личный вклад автора** заключается в планировании исследований, проведении облучении образцов и измерении значений электропроводности, экспериментальных исследований структурных характеристик и оптических свойств, компьютерной обработке полученных данных и анализе экспериментальных исследований. Обсуждения результатов диссертационной работы, их интерпретация и соответствующие заключения выполнены автором лично.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались на: Международной научно-практической конференции «Обзор современных проблем физики, техники и технологии полупроводников» (Худжанд, 2021 г.), Научно-теоретической конференции профессорско-

ТНУ (Душанбе, 2022 г.), преподавательского состава и сотрудников конференции Международной региональной «Перспективы развития возобновляемой энергетики в странах Центральной Азии» (Душанбе, 3-4 июня 2022 г.), Международной конференции «Роль физики в развитии науки, образования и инноваций» (Душанбе, 27.10.2022), XX Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук» (Россия, Томск, 25-28 апреля 2023 г.), Научнотеоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ (Душанбе, 2023 г.), Международной конференции «Фундаментальные и прикладные проблемы современной физики» (Ташкент, 19-21 Октября 2023 г.), Международной научной конференции «Современные проблемы физики конденсированного состояния» (Душанбе, 24-25 октября 2023) г.), Научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ (Душанбе, 2024 г.), Международной научной конференции «Состояние и перспективы развития возобновляемой энергетики в Таджикистане» (Душанбе, 24-26 июня 2024 г.), IX Международной научной конференции «Современные проблемы физики», (Душанбе, 2024).

Опубликованные результаты диссертации. Материалы диссертационной работы опубликованы в 17 научных трудах, в том числе 1 статья в изданиях из международной базы данных SCOPUS, 4 статьи в рецензируемых журналах ВАК Республики Таджикистан, 12 тезисов в сборниках и материалах трудов конференций республиканских и международных уровней.

Структура и объем диссертации. Структура диссертации определена в соответствии с целями и задачами исследования и включает введение, четыре главы, заключение, список цитированной литературы (149 наименований). Общий объем диссертации составляет 142 страниц компьютерного набора, количество рисунков 55, таблиц 12.

#### СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении приведена актуальность исследовательской темы, дано краткое содержание предмета исследования. Также в этой части

диссертационной работы указаны основные цели и задачи исследования, научная новизна и практическая значимость выбранной темы. Приведены основные положения, выносимые на защиту, обоснована достоверность научных результатов и вклад автора в процессе исследования.

В первой главе подробно проанализированы литературные источники по взаимодействию ионизирующего излучения на различные характеристики полупроводниковых материалов, отдельно рассмотрено влияние нейтронного облучения на материалы и приведены основные предпосылки для проведения исследований в этом направлении.

Во второй главе приведены методики проведения исследовательских работ. Приведено метод выращивания и обработка образцов, методы вычисления потока тепловых нейтронов и облучения образцов с использованием нейтронного источника Pu-Be, метод рентгеноструктурного анализа рентгеновским аппаратом ДРОН-3.0 для изучения структурных изменений, UVкванто-механический расчет Vis-спектрофотометрия И для вычисления электронных свойств исследуемых материалов.

В третьей главе излагаются экспериментальные результаты по влиянию тепловых нейтронов на электрофизические и структурные характеристики CdTe и CdZnTe. Сравнены рентгенодифрактограммы CdTe и CdZnTe до и после облучения различными потоками тепловых нейтронов и установлено зависимость интенсивности рентгеновских рефлексов от величины потока тепловых нейтронов.

Четвертая глава посвящена результатам кванто-механических расчетов электронных и оптических свойств CdTe и CdZnTe в рамках теория функционала плотности (DFT) с использованием пакета программ WIEN2k. Приведены результаты исследования оптических свойств методом UV-Visспектрофотометрии.

В заключении сформулированы основные научные результаты и приведены выводы.

### ГЛАВА 1. ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ, СТРУКТУРНЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ CdTe И CdZnTe (ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР)

В настоящее время одним из основных и перспективных направлений разработка научных исследований считается И производство новых высокоэффективных, высокотехнологических и дешевых материалов, которые используются в различных областях современного технологического процесса. Модификация и улучшение ряда характеристик уже существующих веществ под влиянием внешних факторов, в частности, влияния ионизирующих излучений тоже не остается без внимания. Эта тенденция интересна тем, что разработка новых материалов является трудоёмким процессом и, в большинстве случаев, заканчивается неудачными опытами или полученный материал не удовлетворяет предъявленным требованиям для использования в той или иной области. При этом было выявлено, что модификация свойств материалов с помощью ионизирующего излучения обходится недорого. Появившиеся В ходе неоднородности структуры можно производства материалов устранить, используя ионизирующие излучения различной природы. Стоит отметить, что может случится и обратное, т.е. облучение приводит к деградации внутренних и внешних параметров материала. Поэтому, установление конкретного предела облучения является неотъемлемой части модификации свойств вещества.

## 1.1. Теллурид кадмия и теллурид кадмия цинка как перспективные материалы

Развитие современной солнечной и ядерной энергетики требует синтезирования дешевых, надежных и высокоэффективных материалов для создания фотопреобразующих панелей и детекторов ядерных излучений.

В настоящее время растущий спрос на экологически чистые технологии подталкивает к проведению исследований новых поглотительных материалов из экологически чистых и распространенных в земной коре элементов, таких как: Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> (CZTS), SnS и Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> между неорганическими веществами и

перовскитами и полимерами среди органических веществ. Исследования этих систем еще молоды; по этой причине конечные характеристики и долгосрочная стабильность солнечных элементов на основе этих поглотителей, безусловно, улучшились [6]. На этом фоне полупроводниковые соединения A<sup>2</sup>B<sup>6</sup> являются весьма уникальными материалами, которые отвечают вышеуказанным требованиям. Самыми известными представителями полупроводникового соединения А<sup>2</sup>В<sup>6</sup> считаются халькогениды подгруппы цинка. Данные соединения давно известны в области химии и широко изучаются за счет их оптических и электрофизических характеристик. Большая ширина запрещенной зоны ( $\Delta E=1,5$ эВ) и высокий коэффициент поглощения поликристаллической структуры теллурида кадмия в области видимой части спектра электромагнитного излучения, делает её перспективным соединением для изготовления солнечных панелей [7, 8]. Его высокий коэффициент оптического поглощения позволяет падающему свету с энергией выше запрещенной зоны полностью поглощаться в пределах 1 мкм от поверхности [9, 10]. Солнечный элемент на основе CdTe может создавать фототок 30,5 мА/см<sup>2</sup> при освещении солнечным светом с интенсивностью 100 мВт/см<sup>2</sup>, обеспечивая теоретический максимальный КПД, близкий к 30%. Исторически сложилось так, что наилучшие характеристики обычно достигались с гетеропереходом, в котором партнером п-типа был сульфид кадмия (CdS). Было предпринято несколько различных попыток, когда монокристаллы CdTe p-типа были соединены с In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ZnO или очень тонким слоем CdTe n-типа, получив максимальную эффективность 13,8% [11-13].

Независимые исследования показали, что металлический кадмий гораздо более токсичен по сравнению с соединением CdTe, а большие дозы CdTe, принимаемые при пероральном вдыхании, примерно в девять раз ниже, чем токсичность элементарного кадмия [14].

Начало обработки материалов, производство модулей, эксплуатация фотоэлектрических установок и их удаление по окончании срока службы

уменьшает выбросы кадмия по сравнению с самыми современными теплоэлектростанциями [15].

Что касается проблем окружающей среды, некоторые из основных характеристик CdTe таковы: а) это негорючее твердое вещество, б) он нерастворим в воде, в) температура плавления на воздухе выше 1000 °C (типичная температура наружного пожара), г) при высокой температуре с кислородом (воздухом) образует оксид CdTeO<sub>3</sub>, который даже более стабилен, чем сам CdTe. Кроме того, модули CdTe относятся к многослойному типу стекло-стекло, а материалы CdS-CdTe удерживаются на расплавленном стекле при воздействии температуры, превышающей температуру размягчения герметизирующих стекол [16]

Кроме этого, CdTe благодаря высокому значению атомных номеров широко применяется в области детекторостроении. Этот материал образован тяжёлыми элементами (Z<sub>CdTe</sub> = 50). Атомы теллура Те и кадмия Cd имеют высокие атомные номера (48 и 50, соответственно), что обусловливает большую эффективность торможения у-квантов. Особенно заметен выигрыш (по сравнению с Ge и Si) в режиме спектрометрии у-квантов, т.к. вероятность фотопоглощения и параобразования пропорциональна соответственно Z<sup>5</sup> и Z<sup>2</sup>. Это позволяет использовать меньшие объёмы материала при создании рентгеновских детекторов по сравнению с Ge, Si и GaAs [17]. Следует отметить, что наряду с поликристаллическим CdTe для создания ядерных детекторов также используют монокристаллические структуры теллурида кадмия, которые являются очень надежными и высокоэффективными структурами в области детектирования ядерных излучений. Однако высокая стоимость является главным препятствием для использования данных материалов [18]. Ширина запрещённой зоны CdTe ( $E_e$ =1,5 эВ при 300 K), что соответствует концентрации носителей в собственном кристалле  $n_i = 8 \cdot 10^5$  см<sup>-3</sup>. Темновой ток, соответственно шумы счетчика будут довольно низкими и детекторы рентгеновского и гамма излучения на основе CdTe могут эффективно работать при комнатной

температуре или в условиях слабого охлаждения, реализуемого с помощью термоэлектрических холодильников.

Необходимо отметить, что наиболее качественные на сегодняшний день спектрометрические детекторы гамма-излучения, изготавливаемые из германия, работают лишь при температуре жидкого азота. Ближайший по ширине запрещенной зоны полупроводник GaAs ( $E_g = 1,42$  эВ) уступает по свойствам детекторам из CdTe из-за наличия глубокого уровня, обусловленного собственными точечными дефектами. Таким образом, кристаллы CdTe и твердые растворы на его основе Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te на сегодняшний день являются одним из ключевых материалов для изготовления детекторов ионизирующего излучения, работающих при комнатной температуре [19].

Среди тонкопленочных фотоэлектрических технологий теллурид кадмия достиг впечатляющего развития и становился коммерческим конкурентом кремния. История разработки модулей-чемпионов по эффективности для кремниевых и тонкопленочных материалов показано на рисунке 1.1 [20].



Рисунок 1.1. История развития КПД тонкопленочных технологий, построенная с 80-х годов прошлого века до настоящее время. Материалы из <a href="https://www.nrel.gov/pv/module-efficiency.html">https://www.nrel.gov/pv/module-efficiency.html</a>

Что касается теллурида кадмия цинка, то этот материал тоже является эффективным соединением для использования в указанных областях [21]. CdZnTe это сплав теллурида кадмия и теллурида цинка. Данный полупроводник имеет прямую запрещенную зону, ширина которой варьируется в пределах от 1,4 до 2,2 эВ в зависимости от процента составляющих компонентов [22]. Детекторы, изготавливаемые на основе кристаллов CdZnTe, работают при комнатной температуре, в связи с чем для таких детекторов отпадает необходимость использования охлаждающих компонентов [23].

Также, это соединения может быт использовано для изготовления оптоэлектронных устройств и солнечных элементов, работающих в сине-зеленой области спектра [25]. Параметры детекторов, изготовленных на основе указанных полупроводниковых кристаллов, приведены в таблице 1.1 [26].

Таблица 1.1. Параметры детекторов, изготовленных на основе полупроводниковых кристаллов CdTe и CdZnTe.

Материал (Т <sub>раб.</sub> , <sup>0</sup> С)	Атомный номер	<i>Е</i> <sub>g</sub> , эВ	Диапазон энергий	Геометр размер	Энергетическое разрешение,			
				<b>S</b> , мм <sup>2</sup>	<i>Н</i> , мм	кэВ		
						5,9	59,6	662
						кэВ	кэВ	кэВ
CdTe $(-30  {}^{0}\text{C})$	48, 52	1,5	6 - 800	20	1 - 2	0,35	0,8	1,8
CdZnTe (20 <sup>0</sup> C)	48, 30, 52	1,48	6 - 1000	30	2-5	0,3	0,8	10

В гомологическом ряду CdS – CdSe – CdTe, теллурид кадмия при нормальных давлениях принадлежит к двум основным структурным типам: кубической структуре цинковой обманки (сфалерит) и гексогональной структуре (вюрцит) (Рисунок 1.2). На вершинах кристаллической решетки расположены ионы кадмия для обеих кристаллов, а внутри куба определенным образом базированы ионы теллура и цинка. В зависимости от концентрации теллура и цинка структура указанных кристаллов меняется. Эту структуру иногда описывают как пару взаимопроникающих гранецентрированных кубических (ГЦК) подрешеток, смещенных друг от друга на одну четверть диагонали тела элементарной ячейки, при этом ядра Cd или Zn занимают одну подрешетку, а ядра Te другой.



Рисунок 1.2. Кристаллическая структура теллурида кадмия (цинковая обманка) (а), теллурида кадмия цинка (б) и структура вюрцита (в)

В таблице 1.2 приведены основные параметры кристаллической структуры гомологического ряда CdS – CdSe – CdTe [27, 28].

Таблица 1.2. Основные параметры кристаллической структуры в гомологическом ряду CdS – CdSe – CdTe

Химическое соединение	Кристаллическая структура	Плотность, г/см <sup>3</sup>	Период кристаллической решетки, нм			
CdS	Сфалерит	_	0,582	—		
	Вюрцит	4,820	0,413	0,671		
CdSe	Сфалерит	<b>-</b>	0,605	—		
	Вюрцит	5,684	0,429	0,701		
CdTe	Сфалерит	5,860	0,648	_		
	Вюрцит	_	0,457	0,747		

Известно, что в настоящее время использования ядерных технологий в энергетике науке, медицине, И промышленности стали характерным направлением. Это обусловливает применение детекторов для регистрации заряженных α, β-частиц и электронов, рентгеновского и γ-излучений, и нейтронов. Все детекторы, которые используются для регистрации данных частиц делятся на две основные группы: первая, это пассивные детекторы примером таких детекторов являются эмульсионные детекторы, трековые детекторы, калориметры и термолюминесцентные детекторы; вторая – активные детекторы, к ряду которых можно отнести твердотельные детекторы и детекторы с газовым наполнением [7, 29, 30]. В связи с этим во многих исследовательских свойства работах изучены различные твердотельных детекторов С кристаллической структурой. Надо отметить, что детекторные И фотопреобразующие свойства CdTe и CdZnTe зависят от методы синтеза, соотношение компонентов, легирующих элементов и структуры кристаллов.

Независимо от того, какой полупроводниковый материал используется, для создания высокопроизводительных спектрометров, обеспечивающих как хорошее спектральное разрешение, так и высокую эффективность счета, необходимы определенные свойства материала. Некоторые из ключевых свойств следующие [31, 32]:

1. Высокий атомный номер (Z) для эффективного радиационно-атомного взаимодействия. Сечение фотоэлектрического поглощения в материале с атомным номером Z изменяется как Zn, где 4 < n <5.

2. Достаточно большая запрещенная зона для высокого удельного сопротивления и низкого тока утечки. Низкие токи утечки при приложении электрического поля во время работы имеют решающее значение для работы с низким уровнем шума. Необходимое высокое удельное сопротивление (>10<sup>9</sup> О·см) достигается за счет использования материалов с большей запрещенной зоной и низким содержанием собственных носителей заряда, и путем контроля

внешних и внутренних дефектов для закрепления уровня Ферми вблизи середины запрещенной зоны.

3. Достаточно малая запрещенная зона, чтобы энергия электрон-дырочной ионизации была мала (<5 эВ). Хотя абсолютного минимума энергии запрещенной зоны для обнаружения излучения не существует, значения выше примерно 1,5 эВ обычно необходимы для контроля термически генерируемого тока и связанных с этим потерь энергетического разрешения из-за шума. Это гарантирует, что количество создаваемых электрон-дырочных пар достаточно велико, а статистическое изменение количества создаваемых электрон-дырочных пар невелико. Это приводит к более высокому соотношению сигнал/шум.

4. Высокий собственный продукт  $\mu\tau$ . Длина дрейфа носителей определяется выражением  $\mu\tau E$ , где  $\mu$  – подвижность носителей,  $\tau$  – время жизни носителей, E – приложенное электрическое поле. Сбор заряда определяется тем, какую часть толщины детектора проходят фотогенерированные электроны и дырки за время сбора заряда. В идеальном случае длина дрейфа носителей будет намного больше толщины детектора, чтобы обеспечить полный сбор заряда. Хотя это может иметь место для электронов в некоторых материалах, это обычно не относится к дыркам. Таким образом, эти устройства часто страдают от неполного сбора дырок, что приводит к неполному сбору заряда и снижению тока. Это, в свою очередь, расширяет фотопик в спектре высоты импульса в сторону низких энергий и тем самым снижается разрешение спектрометра.

Учитывая все перечисленные выше требования, некоторые материалы кажутся особенно хорошо подходящими для этого применения. В частности, теллурид кадмия-цинка (Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te или CZT) вышел на первый план среди ряда материалов для этого применения, и в последние годы (CZT) рентгеновские и гамма-спектрометры были разработаны до такой степени, что теперь они могут надежно производить спектры высокого разрешения в широком диапазоне энергий [33, 34]. Такая производительность была достигнута как за счет

улучшения свойств материала, так и за счет разработки ряда геометрий устройств, которые наилучшим образом используют свойства материала.

В работе [35] проведено моделирование И экспериментальное исследование детекторов на основе CdTe и CdZnTe для измерения рентгеновского и у-излучений. Результаты исследования показали возможность использования кристаллов теллурида кадмия и теллурида кадмия цинка в качестве датчиков мощности экспозиционной дозы и спектрометров без потери чувствительности, начиная с энергии фотонов более 60 кэВ. Авторы утверждают, что дальнейшее улучшение спектрометрических и детекторных характеристик CdTe и CdZnTe может быть достигнуто путем улучшения их качества и структуры. В качестве другого варианта предлагали использовать современную электронику регистрации и обработки данных.

Итак, обзор данного параграфа показывает актуальность использования полупроводниковых кристаллов CdTe и CdZnTe в сфере возобновляемых источников энергии и других сфер.

# **1.2.** Морфология структуры кристаллических соединений А<sup>II</sup>В<sup>VI</sup> после технологической обработки

Изучение параметров поверхности кристаллических полупроводников, которые изготавливаются различными методами способствует правильному выбору материала для поставленной цели. На сегодняшний день изучению морфологии поверхности материалов придается огромное внимание. Часто, используя морфологию структуры материала, можно судить о его качестве. Этот метод позволяет получать полупроводниковые кристаллы, имеющие оптимальные структурные параметры. В литературе этому вопросу посвящено много исследовательских работ, в которых обсуждено изменение структуры материалов в зависимости от методов выращивания, влияния температуры среды и других факторов.

Качество поверхности (шероховатость поверхности, поверхностные дефекты, примеси и т. д.) материала CdZnTe является важным фактором, влияющим на работу детекторного устройства. Таким образом, обработка поверхности является основным процессом при изготовлении высокоэффективного детектора CdZnTe, который вызвал широкую озабоченность и интенсивно исследовался [36-41]. Однако CdZnTe является мягко-хрупкого материала [42]. Твердость разновидностью И вязкость разрушения кристалла CdZnTe составляют одну двенадцатую и одну шестую твердости кристалла кремния соответственно, что делает CdZnTe материалом, трудно поддающимся полирующей обработке [43].

В настоящее время существует несколько методов обработки поверхности материалов CdZnTe, включая шлифовку, механическую полировку, химическую полировку и химико-механическую полировку. Шлифовка и механическая полировка используют трение между полирующим порошком и материалом CdZnTe для обработки поверхности CdZnTe, уменьшения поверхностных дефектов и уменьшения шероховатости поверхности [44, 45]. Химическая полировка и химико-механическая полировка (XMП) основаны на механической полировке, при этом добавляется раствор химического травления для дальнейшего травления поверхности с целью уменьшения шероховатости поверхности [46-49]). Тем не менее, исследования процесса полировки материалов CdZnTe все еще недостаточны, особенно процесса полировки пленок CdZnTe. До настоящего времени сообщалось о небольшом количестве исследований процесса механической полировки и влияния механической полировки на поверхностные свойства пленок CdZnTe.

Механическая полировка поликристаллических пленок CdZnTe, близкорасположенной сублимации показали, выращенных методом ЧТО уменьшение размера частиц полировочного порошка и соответствующее увеличение времени полировки могут улучшить шероховатость поверхности, дефекты поверхности и ток утечки образца CdZnTe [50].

Детально исследовано влияние температуры подложки на микроструктуру и морфологию тонких пленок CdZnTe. Тонкие пленки CdZnTe наносились на стеклянные подложки при 200, 300 и 400°С методом радиочастотного магнетронного распыления и отжигались при 450°С в течение часа в атмосфере N<sub>2</sub> при атмосферном давлении. Микроструктура и морфология пленок CdZnTe проанализированы методами рентгеновской дифрактометрии, сканирующей электронной микроскопии, энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии и атомно-силовой микроскопии. Также было исследовано влияние температуры подложки на спектры пропускания пленок CdZnTe. Результаты экспериментов показывают, что оптимальная морфология и кристаллическая структура тонких пленок были достигнуты при температуре роста 400°С. При более высоких температурах подложки ускоряются подвижность и диффузия атомов, что может стабилизировать однородность и размер кристаллитов. Кристаллические зерна увеличиваются, а морфология поверхности становится более гладкой за счет роста зерен в тонких пленках CdZnTe. Кроме того, спектры пропускания пленок соответствуют морфологическим изменениям. Можно сделать вывод, что подложки CdZnTe выращивании пленок температура при оказывает существенное влияние на морфологические характеристики, и требуемое качество тонких пленок CdZnTe можно получить при более высоких температурах подложки [51].

Рассмотрено влияние поверхностных обработок на структурные и электронные свойства химико-механически полированного  $Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te$  перед контактным осаждением. В частности, полированные образцы CdZnTe обрабатывались четырьмя различными химическими травителями: (1) бромметанол (БМ), (2) бром в молочной кислоте, (3) бром в метаноле, а затем бром-20% молочная кислота в этиленгликоле и (4) соляная кислота (HCl). Структуру поверхности и поверхностные электронные свойства изучали методами атомносиловой микроскопии (ACM) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Изображения ACM показали, что три из четырех травителей

значительно изменили морфологию поверхности и структуру CdZnTe. Все травители создавали более гладкие поверхности; однако все, кроме HCl, также имели высокую плотность дефектов. Установлено, что HCl не влияет на структуру поверхности. Измерения РФЭС показали, что примерно через 1 час после травления образовался толстый слой TeO<sub>2</sub> толщиной от ~3 до 4 нм; поэтому очень важно обрабатывать изделия сразу после травления, чтобы предотвратить образование оксидов [52].

Морфология поверхности буферных слоев CdTe (310), выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии, показало, что чистая поверхность теллурида кадмия (310) является атомно-гладкой. В ходе дальнейших исследований определена реконструкция поверхности с образованием террас плоскости в результате адсорбции Te<sub>2</sub> в количестве до 0,2 монослоя. Дальнейшее увеличение адсорбционного слоя приводит к развитию систем фасеток (100) + (210) [53]. Авторы утверждают, что причиной образования фасеток является уменьшение свободной энергии «пар – адсорбат – поверхность».

В работе [54] сообщается о первых экспериментальных исследованиях по CdTe ориентированных выращиванию пленок на поверхности неориентированных подложек, В частности стекло, охлажденной ДО отрицательной температуры. Результаты исследования показали, что пленки, синтезированные в режимах аномально низкой скоростью формирования, имеют хорошую текстуру. Кроме экстремальных условий на внутреннюю структуру кристаллов теллурида кадмия влияет также обработка разными растворами. Обработка тонкопленочных солнечных элементов из CdTe, с помощью хлорида кадмия приводит к устранению структурных дефектов теллурида кадмия. Причиной этого процесса является базирование атомов хлора в составе теллурида кадмия [55].

Одним из важных технологических процессов, который существенно влияет на свойства полупроводниковых кристаллов, является пассивация.

Влиянию эффекта пассивации на структурные и электрофизические параметры кристаллов CdTe и CdZnTe посвящено достаточно много работ [56-60].

Химическое травление бромом, которое является одним из способов изготовления CdZnTe, обеспечивает избирательную скорость травления каждого атома CdZnTe, что приводит к образованию слоя, богатого Te, на поверхности CdZnTe. Слой, богатый теллуром, обладает высокой проводимостью на поверхности теллурида кадмия цинка и действует как управляющий центр. Для проблемы решения данной предлагается метод влажной пассивации. Химические соединения, которые имеют достаточного кислорода, являются отличными пассиваторами. Пассивация с использованием гипохлорита натрия (NaOCl) кристаллов CdZnTe способствует компенсацию слоя богатым Te на слой оксида Те. Кроме этого пассивация NaOCl улучшает транспортные свойства, время жизни, подвижность и скорость поверхностной рекомбинации носителей заряда кристалла [61].

Следует отметить, что в последние годы ведутся исследования в области синтеза многокомпонентных полупроводниковых кристаллов с использованием ИК-лазерных методов осаждения при низкой температуре. Спектры низкотемпературной фотолюминесценции кристаллов CdZnTe, выращенных данным методом, показывают наличие полос свободных экситонов, экситонов на нейтральном акцепторе и на нейтральном доноре, которые свидетельствуют о высоком структурном совершенстве [62].

Можно сделать вывод, что изучение структуры кристаллов до и после обработки различными методами является решающим критерием в области детекторостроении и создание фотопреобразователей. Морфология структуры поверхности кристалла позволяет избежать применения некачественных материалов в указанных областях. Применение различных методов обработки поверхности, существенным образом изменит поверхность кристалла и степень воздействия обработки определяется особенностями метода и свойств самого обрабатываемого материла.

## 1.3. Изменение фундаментальных свойств твердых тел и полупроводниковых материалов под действием облучении

Изучение свойства материалов является главным этапом, определяющим успех инженерных разработок в технической отрасли. Особенно их роль стала ключевой при создании сложных конструкций и приборов, работающих в экстремальных условиях. Наиболее видными примерами таких конструкций являются ядерные реакторы, космические аппараты и детекторы ядерных излучений. Попадая в условия воздействия высоких потоков облучения, в материалах происходит значительные структурные перестройки по причине возникновения радиационных повреждений. В результате появление структурных радиационных дефектов резко изменяются физические свойства материалов.

Механизм воздействие излучений протекает в несколько этапов. Первый этап - это передача энергии бомбардирующих частиц ядрами материала, в результате которого происходит образование первичного выбитого атома. Далее, на втором этапе, энергия первичного выбитого атома передается другим атомам кристаллической решетки и в последствие возникает каскад атомных смещений. И наконец, на третьем этапе происходят локальные перестройки.

Поэтому одним из важных условий эксплуатации электронных приборов и других материалов, которые работают в радиационных полях, является повышенная радиационная стойкость. Для решения данной проблемы в последние годы ведутся исследовательские работы в области синтеза радиационно-стойких материалов [63, 64].

Отдельные виды излучения действуют на один и тот же материал поразному, и наоборот, одно и то же излучение влияет на разнообразные материалы по-разному. Но в материалах, в конечном счете, появляются радиационные дефекты.

Взаимодействие ускоренных заряженных частиц с твердым телом представляет собой сложный последовательный процесс, в ходе которого появляются структурные изменения в кристаллической решетке. К числу таких процессов относятся возбуждение, ионизация и смещение атомов. В общем случае потеря энергии заряженных частиц определяется несколькими факторами [65], такими, как упругое рассеяние, возбуждение электронов на внешних оболочках атома, ионизация внутренних и внешних электронных оболочек, возникновения тормозного излучения, ядерные реакции и смещение атомов и ионов.

Из всех видов ядерных и ионизирующих излучений, только нейтронное излучение приводит к серьёзным изменениям структуры материалов. Известно, что изменение свойств конструкционных материалов начинает проявляться в области флюенса нейтронов выше от 1·10<sup>18</sup> н/см<sup>2</sup>. Тем временем, особый интерес представляют данные о влиянии облучения на упругие, пластические и прочностные характеристики материалов [66].

После облучения нейтронами в некоторых видах сталей, которые используются в ядерных реакторах, наблюдается снижение коррозионной стойкости и повышения химической активности агрессивной среды. Указано, что снижение коррозионной стойкости возникает за счет следующих факторов: a) радиационного эффекта, обусловленного изменением химического потенциала коррозионной среды в результате радиолиза; б) разрушительное влияния радиационного воздействия, в результате которого образуются вакансии, междоузельные дислокации И дефекты; атомы, другие B) фоторадиационное влияние, вызывающее изменение характеристик материалов при поглощении энергии излучения [67].

Облучения реакторными нейтронами и гамма-излучением из радиоактивного источника Со-60 на прочностные характеристики аустенитной стали, титана, вольфрама, молибдена и других сплавов показали, что результаты измерений зависят только от дозы облучения и не зависят от мощности дозы.

После облучения вышесказанными источниками уменьшается предел прочности и деформации образцов, но микротвердость и жесткость сплавов увеличивается [68]. В работе [69] исследовалось влияние малых потоков реакторных нейтронов на микрокристаллические порошки алмаза. Установлены закономерности формирования фракционного и примесного состава, а также дефектной структуры алмазов в зависимости от времени синтеза. Показано, что облучение в горизонтальном канале реактора нейтронами спектра деления с плотностью потока 1·10<sup>13</sup> н/см<sup>2</sup> течение 4 часов, вызывает уменьшение концентрации азотных дефектов дисперсной природы при сохранении концентрации парамагнитного никеля во всех исследованных образцах независимо от условий синтеза. Обнаружено увеличение прочности кристаллов вследствие нейтронного воздействия.

Анализируя литературные данные можно сделать вывод, что большие дозы облучения заряженными частицами и большими потоками высокоэнергетических нейтронов в основном приводят к понижению исходных свойств твердых тел.

Современная технология производства полупроводниковых приборов, в основе создания которых лежит ионное легирование поверхностного слоя подложки, достигла уровня исполнения, при котором важным фактором является появления дефектов в результате облучения. Для модификации структуры кристаллов раньше было предложено облучать их с использованием потока быстрых заряженных частиц, от электронов до тяжелых ионов, рентгеновского и действием гамма-излучения Под И др. ионизирующего излучения В кристаллической решетке полупроводников возникают различного рода дефекты, которые приводят к образованию энергетических уровней в запрещенной зоне. Ионизирующее излучение вызывает изменения таких электрофизических характеристик полупроводника, как подвижность, время жизни носителей заряда т, концентрация носителей заряда, диффузионная длина, характеристиках приборов. Образование глубоких что отражается на

энергетических уровней в запрещенной зоне вызывает увеличение скорости объёмной рекомбинации, т.е. уменьшение времени жизни неравновесных носителей заряда в полупроводнике [70, 71].

Снижение подвижности связано с увеличением рассеяния электронов на ионизированных атомах примеси, которые образовались в результате облучения [72]. В процессе исследовании влияния ионизирующей радиации на свойства различных неорганических и органических материалов был обнаружен эффект «малых доз». При небольших дозах радиационного излучения ионизирующего характера различные свойства материалов улучшаются. Например, в работах [72-77] изучено влияние гамма-излучения на свойства полупроводниковых инжекционных лазеров и различных видов растений. Это, главным образом, связано с изменением в электронной конфигурации атомов, входящих в состав кристаллических решёток полупроводников и макромолекул биологических систем.

Облучение ионами водорода кристаллов кремния приводит к разрушению поверхностного слоя подложки. Экспериментальные данные в этой области показывают, что при изменении дозы имплантации от 2,5·10<sup>15</sup> до 2·10<sup>16</sup> см<sup>-2</sup> толщина и деформация нарушенного слоя возрастает (Рисунок 1.3) [78]. Возрастание толщины нарушенного слоя от дозы имплантации можно описать следующим уравнением:

$$L_{i} = L_{0i} \left( 1 - \exp\left(-\frac{\beta_{i}}{\varphi}D\right) \right)$$
(1.1)

где  $\beta_i$  – вероятность отжига радиационных дефектов,  $\varphi$  – «скорость» ввода междоузельных атомов.

Наличие дислокации в структуре полупроводниковых материалов играют немалую роль в современных технологиях. Аналогично точечным дефектам, влияние дислокаций на свойства материалов определяется формированием электронных уровней в запрещенной зоне полупроводника.



Рисунок 1.3. Дозовые зависимости средних значений эффективной толщины нарушенного слоя (а) и относительной деформации (б) при разных температурах имплантации [78]

Для того чтобы устранить негативное влияние дислокаций предлагается метод адресного воздействия, и при этом сохраняя основные свойства невозмущенной решетки полупроводника [79]. Сообщается, что кратковременное адресное воздействия лазерного излучения длиной волны 1053 нм позволяет локально перестраивать структуру дислокационных ядер, и при этом не воздействуя на кристаллическую решетку кристалла (CdTe).

Немаловажную роль в радиационных процессах на полупроводниковых кристаллах играет и гамма-излучение. Проникающая способность данного вида излучения намного превышает протонное и электронное излучения, в результате чего во внутренней структуре кристалла наблюдаются серьёзные изменения.

Гамма-облучение (0,66 мкэВ) поликристаллических пленок CdTe показало, что по мере увеличения дозы облучения ширина оптической энергетической зоны уменьшается линейным образом [80].

Влияние гамма-облучения Co-60 на электрические характеристики интерфейса CdTe/CdS было проанализировано с использованием вольтамперной характеристики в темноте. Облучение проводилось в широком диапазоне доз от 1 до 100 кГр. Электрические параметры, такие как коэффициент идеальности (n),

последовательное сопротивление ( $R_s$ ) и ток утечки обратного смещения ( $I_R$ ), для каждой дозы рассчитывали по ВАХ. Установлено, что коэффициент идеальности исходного солнечного элемента составляет 1,80 и постепенно увеличивается до 3,38 для дозы 10 кГр, затем составляет около 3,38-3,61 для более высоких доз до 100 кГр. ВАХ показали значительное увеличение прямого смещения и резкое увеличение обратного тока утечки. Деление  $I_R$  составляет 16,8 мкА для необлученного интерфейса и увеличивается до 1,46 мА для 10 кГр. Далее наблюдается четырехкратное наблюдаемое изменение значения  $I_R$ . Однако значение  $R_s$  составляет 0,80 Ом для необлученной среды и постепенно уменьшается до 0,34 Ом для дозы 50 кГр. Далее происходит незначительное увеличение последовательного сопротивления до 0,38 Ом для дозы 100 кГр [81].

Аналогичные исследования были проведены авторами [82]. В облученном CdTe:Cl вызванное облучением усиление электрон-фононной связи для фотолюминесценции (ФЛ) А-центра было приписано снижению концентрации донорно-акцепторных пар, ответственных за эту полосу. Гамма-облучение нелегированного CdTe дозой более 10 кГр привело к тушению ФЛ А-центра при 1,4 эВ, донорно-акцепторной линии в краевой люминесценции при 1,55 эВ, а также излучению связанных с донором экситонов. Наблюдаемые особенности объясняются снижением концентрации изолированных доноров, предположительно, за счет создания комплексов с собственными дефектами, генерируемыми γ-лучами.

Под действием гамма-излучения с энергией 1,3 Мэв и дозой до 500 Мрад сцинтилляционные полупроводники на основе ZnSe (O, Te), ZnSe (Cd), ZnCdS (Te) показали хорошую устойчивость к облучению [83].

В [84] исследовано влияние жесткого ультрафиолетового излучения на кристаллическую структуру и оптические свойства тонкопленочных полупроводниковых слоев теллурида кадмия, полученных методом термического испарения. В результате исследований установлено, что для пленок CdTe кубической модификации кристаллической решетки после

жесткого УФ-облучения с энергией фотонов 10,5 эВ в течение 10 часов параметр решетки *а* увеличивается от 6,48 Å в исходном состоянии до 6,49 Å после облучения. УФ-облучение (в диапазоне 300–370 нм) при интенсивности 0,4 Вт/см<sup>2</sup> (в течение 75 мин.) приводит к деградации стабилизатора и поверхности квантовых точек CdTe. После 75 мин. комбинированного УФ- и видимого облучения происходит постепенное увеличение спонтанной агрегации, что свидетельствует о чрезмерном снижении высоты стабилизирующего потенциального барьера [85].

В [86] сообщается о модификации структуры кристаллов CdZnTe ионами Yb<sup>3+</sup> с энергией 5 МэВ. Результаты показали, что ионы Yb<sup>3+</sup> при заданной энергии проникают на глубину 1 микрон и приводят к образованию высокопроводящего интерфейса с высоким током утечки. Рентгеновский анализ облученных образцов показал ухудшающее влияние облучения на производительность устройств. Для предотвращения негативного воздействия радиоактивного излучения предлагается облучать кристаллы CdZnTe лазерным излучением. При лазерном облучении образца на его поверхности образуется тонкий слой кадмия, который способствует улучшению радиационной стойкости материала.

## 1.4. Анализ влияния облучения нейтронами на электрофизические свойства полупроводниковых материалов

Влияние излучения на полупроводниковые материалы охватывает обширную область науки и на сегодняшний момент на исследования в этом направлении выделяется много внимания и средств. Научные исследования по изучению влияния излучения на полупроводниковые материалы начато ещё на заре использования этих материалов в электронике и ядерной энергетике. В процессе производства и использования полупроводниковых материалов и приборов на их основе, не исключена их работа под действием излучения различной природы: γ-излучение, рентгеновское, протонное, нейтронное,

электронное и др. Источниками таких излучений являются ядерные реакторы, радиоактивные материалы, солнечное и космическое излучение.

Облучение твердых тел приводит к ионизации и смещению атомов кристаллической решетки, изменяя тем самым структуру и электрофизические свойства материала. Данная тенденция, в свою очередь, приводит к изменениям в работе полупроводниковых приборов. К структурным изменениям можно отнести первичные и вторичные радиационные дефекты. Первичные радиационные дефекты появляются в результате столкновения движущей частицы с ядрами или атомами вещества. Примерами таких радиационных дефектов являются вакансии, междоузельные атомы и дивакансии. Вакансии и выбитые атомы перемещаясь по периметру материала взаимодействуют друг с другом и дефектами, существующими до облучения. Результатом таких взаимодействий является появление вторичных радиационных дефектов [87].

В зависимости от отрасли использования, электрофизические свойства полупроводниковых материалов регулируется в определенном интервале. Основные электрофизические свойства полупроводников, использующиеся при изготовлении детекторных структур приведены в таблице 1.3.

В этом ряду действие тепловых нейтронов на электрофизические свойства полупроводников особенно интересно. Это связано с тем, что электронные конфигурации атомов кристаллической решетки твёрдых тел и полупроводниковых структур не испытывают изменений под действием тепловых нейтронов, то вероятность структурных изменений этих объектов предполагается ничтожно малой. В связи с этим, механизм влияния нейтронов малой энергии (менее 1эВ) на свойства различных сред изучен недостаточно.

При взаимодействии нейтронов с веществом происходит процесс радиационного захвата нейтронов ядрами атомов, входящих в состав этого вещества [88, 89]. Кроме этого, существуют различные процессы, связанные с упругими и неупругими рассеяниями нейтронов в ядре атомов.

Ma	атериал		Плотность.	E <sub>a</sub> .	0.	Энергия	T.	$\mu$ , cm <sup>2</sup>	/(B·c)	τ,	c	μτ, c	м²/В	
Группа	Соединение	Z	] Z	г/см <sup>3</sup>	- <u>г</u> , эВ	р, Ом∙см	образования пары, эВ	<sup>0</sup> C	e	h	e	h	e	h
A <sup>IV</sup> B <sup>IV</sup>	4HSiC	14, 0	3,21	3,26	>10 <sup>6</sup>	7,8	2827	1000	115	5.10-7	10-7	$4 \cdot 10^{-4}$	8·10 <sup>-5</sup>	
	InP	49, 15	4,72	1,34	106	4,2	1055	4700	150	10-6	10-9	5.10-6	<1.10-5	
	GaAs	31, 33	5,33	1,43	107	4,2	1238	10000	500	10-8	10-9	10-4	5·10 <sup>-7</sup>	
$A^{III}B^{V}$	GaP	31, 15	4,13	2,26	109	7,0	1790	300	150	10-8	10-9	10-5	10-7	
	GaN	31, 7	6,15	3,40	10 <sup>11</sup>	10,2	>2500	~1000	40	10-7	10-9	10-4	10-8	
	AlSb	13, 51	4,20	1,65	108	4,71	1060	1200	850	10-7	10-9	1,2.10-4	8,5·10 <sup>-7</sup>	
A <sup>II</sup> B <sup>VI</sup>	CdTe	48, 52	5,85	1,50	109	4,43	1105	1050	80	3.10-6	2.10-6	3.10-3	2.10-4	
	CdZnTe	48, 30, 52	5,78	1,48	10 <sup>10</sup>	4,64	1092- 1295	1000	120	3.10-6	1.10-6	4·10 <sup>-3</sup>	1,2.10-4	
	CdSe	48, 34	5,81	1,72	109	5,5	1239	650	50	1.10-6	10-9	6,3.10-5	_	
	ZnTe	30, 52	5,68	2,25	10 <sup>10</sup>	6,34	1240	3000	110	4·10 <sup>-6</sup>	_	_	_	

Таблица 1.3. Основные электрофизические свойства полупроводников, которые используются в детекторных целях

Поэтому вероятность нейтронно-стимулированных структурных превращений в биологических объектах зависит от сечения захвата нейтронов различными ядрами атомов данного вещества. Известно, что сечение захвата тепловых нейтронов ядрами атомов намного выше, чем нейтронов больших энергий [90].

С этой точки зрения, изучение влияния тепловых нейтронов на свойства полупроводниковых структур является интересной научной задачей. Кроме этого, известно, что различные полупроводниковые приборы подвергаются непрерывному действию малых потоков тепловых нейтронов во время полётов в космическом пространстве и верхних слоях атмосферы. Таким образом, изучение эффектов, связанных с действием тепловых нейтронов на полупроводниковые структуры, представляют значительный научный и практический интерес.

В 80-х годов прошлого века А. Войцеховский и А. Коханенко проводили много исследовательских работ в области синтеза и модификации параметров узкозонных полупроводниковых кристаллов, в частности теллурид кадмия ртути Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te, под действием облучении.

Анализ полученных данных показал, что при облучении исходных кристаллов дозовые зависимости времени жизни носителей заряда хорошо согласуются с расчетными концентрационными зависимостями для механизмов рекомбинации Шокли-Рида-Холла и Оже:

$$R = \frac{np}{\tau_n(p+p_t) + \tau_p(n+n_t)} \tag{1.2}$$

где  $p_t$  и  $n_t$  – концентрация дырок и электронов соответственно,  $\tau_n = \frac{1}{B_n N_t}$  – среднее время жизни электронов,  $\tau_p = \frac{1}{B_p N_t}$  – среднее время жизни дырок. Также выяснилось, что подвижность носителей заряда возрастает с дозой облучения. Этот процесс они связывают с появлением эффекта экранирования исходных

ионизированных центров введенными радиацией электронами проводимости [91].

Зная общие закономерности изменении электрофизических свойств полупроводниковых материалов под действием облучении можно прогнозировать поведение данных материалов в радиационных полях и повышать их радиационную стойкость. Удельное электрическое сопротивление является одним из основных параметров монокристаллов. В работах Е.А. Ладыгина и других [92] приведен обзор радиационных эффектов в полупроводниках, в частности, приведены материалы по влиянию быстрых нейтронов на УЭС. Установлена зависимость УЭС от флюенса нейтронов, который имеет следующий вид:

$$\rho = \rho_0 \exp(K_\rho \Phi) \tag{1.3}$$

где  $K_{\rho}$  – коэффициент, являющиеся функцией свойства кристалла,  $\Phi$  – флюенс нейтронов,  $\rho_0$  и  $\rho$  – УЭС до и после облучении, соответственно. Но для конкретных монокристаллов данное выражение не может предсказывать изменение УЭС в зависимости от флюенса нейтронов. Но в [91] предложена иноя зависимость, которая более точно предсказывает эти изменения.

Для полупроводниковых кристаллов *р*-типа:

$$\Phi = \chi_1 \left( \frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right) = \chi_1(\sigma_0 - \sigma) \tag{1.4}$$

здесь  $\chi_1 = 1/(k_1 e \mu_p)$ ,  $k_1$  – коэффициент пропорциональности,  $\mu_p$  – подвижность дырок,  $\sigma_0$  и  $\sigma$  – удельные электропроводности полупроводника до и после облучения, соответственно.

Для полупроводниковых кристаллов *n*-типа:

$$\Phi = \chi_2 \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho}\right) = \chi_2(\sigma_0 - \sigma) \tag{1.5}$$

где  $\chi_2 = 1/(k_2 e \mu_n)$ ,  $\mu_n$  – подвижность электронов. Экспериментальная проверка этих формул показала линейный характер зависимости УЭС от флюенса нейтронов для кремния (Рисунок. 1.4).



Рисунок 1.4. Зависимость разности проводимостей от флюенса нейтронов [91]

Для определения степени воздействия ионизирующего излучения на свойства и структуру полупроводниковых кристаллов было проведено много экспериментов [92-94], в ходе которых было выявлено, что облучение приводит к появлению множество энергетических уровней в запрещенной зоне кристалла. Многие из этих уровней являются рекомбинационными, однако время жизни носителей заряда будет определяться только доминирующими центрами рекомбинации.

На примере карбида кремния SiC можно увидеть, что облучения нейтронами приводит к линейному возрастанию концентрации глубоких энергетических уровней в запрещенной зоны (Рисунок. 1.5) [95, 96].

Подвижность носителей заряда в облученных кристаллах *n*-6*H*-SiC увеличилась с увеличением концентрации донорных и акцепторных носителей заряда в исходных образцах, в то время как для исходных образцов наблюдалась противоположная картина (Рис. 1.6) [95].


Рисунок 1.5. Концентрация глубоких уровней в зависимости от потока облучения нейтронами эпитаксиальных слоев CVD *n*-6*H*-SiC [95]



Рисунок 1.6. Подвижность носителей заряда в исходных образцах SiC и после облучения нейтронами в зависимости от концентрации носителей в исходных образцах [95]

Электрические свойства облученного нейтронами кремния анализировались с помощью эффекта Холла и температурной зависимости магнитосопротивления [97]. Установлено, что подвижность электронов снижается с увеличением потока нейтронов в широком интервале флюенсов. Было обнаружено, что нейтронное облучение вводит глубокие уровни в верхней части запрещенной зоны, но их вклад с возрастанием значение потока нейтронов, уменьшается. Аналогичные исследования для изучения подвижности носителей заряда проводились со стороны японских ученых [98]. В качестве исследуемого материала они выбрали кристаллы CdTe. Кристаллы были облучены быстрыми нейтронами с энергией 14 МэВ из дейтонного акселератора ОКТАВИАН. Для сравнения также использовалось сильное гамма-излучение <sup>60</sup>Co. Флюенс быстрых нейтронов варьировался в интервале 1,0·10<sup>8</sup> – 1,8·10<sup>11</sup> н/см<sup>2</sup>.

Результаты показывают, что с ростом флюенса быстрых нейтронов произведение µт для электронов уменьшается и для дырок остается неизменным (Рисунок 1.7). Нейтронное облучения создает в объеме кристалла центры захвата электронов, что ухудшает характеристики детектора на основе CdTe.



Рисунок 1.7. Произведение µт для CdTe (а) и эффективность сбора носителей (б) как функция флюенса нейтронов [98]

Интерфейс металл/полупроводник играет важную роль В полупроводниковых детекторах излучения высокой энергии, например, в CdZnTe. Помимо детекторах этого, очень внимание уделялось мало радиационному повреждению такого интерфейса. При нейтронном облучении с энергией 2 МэВ и флюенсом  $1 \cdot 10^{10}$  и  $1 \cdot 10^{11}$  нейтрон/см<sup>2</sup> структуры Au/CdZnTe/Au наблюдаются существенное изменения в интерфейсе. Появляются дефекты и

электроактивные ловушки. По данным вольт-амперных измерений можно заметить уменьшение высоты барьера Шоттки с 0,892 В до 0,826 В и концентрации донорных центров с 2,74 $\cdot$ 10<sup>10</sup> см<sup>-3</sup> до 4,72 $\cdot$ 10<sup>8</sup> см<sup>-3</sup> [99]. Результаты моделирования взаимодействия нейтронного облучения с энергией 2 МэВ на CdZnTe показал, что концентрация дефектных уровней, связанных с вакансиями и междоузлиями, увеличивается с 10<sup>14</sup> см<sup>-3</sup> до 10<sup>15</sup> см<sup>-3</sup>, тем самым ухудшает состояния CdZnTe [100].

Авторы [101] изучали влияние нейтронного излучения большой энергии и флюенса на полупроводниковую структуру AlGaN/GaN. Нейтронное излучение с энергией 1 МэВ при флюенсе 10<sup>15</sup> см<sup>-2</sup> приводит к возрастанию тока утечки затвора. Кроме этого, холловскими измерениями и вольт-фарадными испытаниями показано, что подвижность и концентрация двумерного электронного газа уменьшается после облучения. Точечные дефекты, которые появляются после нейтронного облучения, являются доминирующими.

Анализ литературных данных показывает, что несмотря на существование многих работ, посвященных исследованию влияния нейтронного облучения на характеристики полупроводниковых структур, в настоящее время физическая картина процессов при малых потоках достаточно далека от понимания.

## 1.5. Изменение оптическых свойств полупроводниковых материалов при облучении

Быстрый прогресс в производстве полупроводников и связанных с ним технологий увеличил потребность в методах исследования оптических характеристик для анализа материалов и приложений мониторинга/управления на месте. Оптические измерения имеют множество уникальных и привлекательных особенностей для изучения и характеристики свойств полупроводников [102]:

1. Они бесконтактны, являются неразрушающими и совместимы с любой прозрачной средой, включая среды с высоким вакуумом;

2. Они способны к дистанционному зондированию и, следовательно, полезны для анализа на месте систем роста и обработки;

3. Высокое поперечное разрешение, присущее оптическим системам, может быть использовано для получения пространственных карт важных свойств полупроводниковых пластин или устройств;

4. В сочетании с субмонослойной чувствительностью такого метода, как эллипсометрия, оптические измерения приводят к непревзойденным аналитическим деталям;

Все оптические измерения полупроводников основаны на фундаментальном понимании их оптических свойств.

Наряду с детекторными свойствами CdTe обладает неординарными оптическими свойствами. В частности, для него характерно высокое пропускание в ИК-диапазоне спектра излучения (0,8 – 2,5 мкм). Величина электрооптического коэффициента CdTe в 4 раза превосходит GaAs, следовательно, CdTe является перспективным материалом для инфракрасной оптики [103].

Теллурид кадмия обладает ещё одним уникальным свойством, которое CdTe обусловлено применением для создания тонкопленочных фотопреобразователей. Среди соединений A<sup>2</sup>B<sup>6</sup> он обладает уникальной шириной запрещенной зоны ( $E_g = 1,5$  эВ) для прямого преобразования солнечной энергии в электрическую. Теллурид кадмия и арсенид галлия с высоким коэффициентом более эффективны поглощения производства для фотопреобразователей, чем кремний. Достаточно слоя в 5 – 10 мкм для эффективного преобразования солнечной энергии, что позволяет значительно сократить расход материала и уменьшить затраты на производство тонкопленочных солнечных элементов (СЭ) [103].

В [104] изучено влияние гамма-излучения с энергией 0,662 МэВ на оптические свойства тонких пленок CdTe. Образцы CdTe толщиной 300 нм были

облучены дозами 10, 20, 30,60 крад при комнатной температуре. Обнаружено, что с увеличением дозы облучения оптическая энергетическая щель уменьшается с 1,53 до 1,48 эВ, а ширина локализованных состояний увеличивается с 1,34 до 1,49 эВ. Поведение энергетической щели в зависимости от дозы облучения делает этот материал хорошим кандидатом для дозиметрии в промышленных целях. Также указано, что по мере увеличения дозы облучения показатель преломления кристаллов имеет тенденция к уменьшению (Рисунок 1.8).



Рисунок 1.8. Изменение показателя преломления тонких пленок CdTe после облучения гамма-излучением.

Такие эффекты наблюдали и авторы [105]. Обнаружено улучшение кристаллической структуры при воздействии на образцы у -облучения в дозах плоскости 40 - 120кГр в (111)кубической структуры цинковой обманки. Установлено, что такие оптические свойства, как показатель преломления (Рисунок 1.9), коэффициент экстинкции, диэлектрическая проницаемость, уменьшаются с увеличением дозы у -облучения. Было обнаружено уменьшение энергетической запрещенной зоны с 2,47 эВ для осажденного до 2,20 эВ для 120 кГр (синий сдвиг по сравнению с объемным CdTe), что объясняется небольшой толщиной тонкой пленки.



Рисунок 1.9. Изменение показателя преломления CdTe при воздействии на образцы γ -облучения в дозах 40 – 120 кГр

ультрафиолетового Исследование влияния жесткого излучения на кристаллическую свойства тонкопленочных структуру И оптические полупроводниковых слоев теллурида кадмия показало, что для пленок CdTe кубической модификации после жесткого УФ-облучения с энергией квантов 10,5 эВ в течение 10 часов параметр *а* увеличивается от 6,48 Å в исходном состоянии до 6,49 Å после УФ-обработки. Исследования оптических свойств термических тонких пленок теллурида кадмия в исходном состоянии и после жесткого УФоблучения показывают, что коэффициент пропускания и ширина запрещенной зоны материала не изменяются после жесткого УФ-облучения. Уменьшение коэффициента отражения в части спектра ближнего инфракрасного излучения обусловлено кристаллической структуры изменением ультратонкого приповерхностного слоя тонкой пленки CdTe после жесткой УФ-обработки [106].

Одним из представителей полупроводниковой группы II-IV является CdSe и наряду с теллуридом кадмия широко применяется в фотоволтике. Исследование влияния нейтронного облучения на данный материал показало, что после 7 дней облучения потоком 3·10<sup>5</sup> н/см<sup>2</sup>, происходит увеличение

коэффициента поглощения α. Графическим образом этот процесс можно увидеть на рисунке 1.10 [107].



Рисунок 1.10. Увеличение коэффициента поглощения α после нейтронного облучения

Также, лазерная обработки кристаллов CdTe приводили к изменению как оптических параметров, так и толщины модифицированного поверхностного слоя [108].

#### Выводы литературного обзора

Из обзора научной литературы следует, что облучение большими дозами ядерного излучения в основном приводит к деградации свойств твердых тел и полупроводниковых материалов. Выяснено, что исследования в области взаимодействие малых потоков тепловых нейтронов проводились недостаточно. Поэтому проведение научных исследований по изучению взаимодействия малых потоков тепловых нейтронов с полупроводниковыми материалами с целью изучения изменения их электрофизических, структурных и оптических свойств до сих пор остается актуальным вопросом. В связи с этим вопросы, очень важным является рассмотрение следующих задач:

- 1. Установление зависимости электрофизических и структурных параметров CdTe и CdZnTe от потока тепловых нейтронов.
- 2. Исследование оптических параметров CdTe до и после облучения тепловыми нейтронами;
- Проведения кванто-механических расчетов для теоретического обоснования экспериментальных результатов исследования и их сравнения.

### ГЛАВА 2. МЕТОДИКА ПОЛУЧЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ОБРАЗЦОВ И ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

#### 2.1. Методика получения и обработка исследованных образцов

В рамках наших исследований в качестве подложек использовались монокристаллические образцы теллурида кадмия и кремния, полученные с применением модифицированного метода Бриджмена. Из монокристаллов были вырезаны пластины, которые последовательно подвергались механической шлифовке абразивной бумагой с градацией Р1200–Р4000 и полировке с использованием серебряной пасты. После этого образцы промывались этиловым спиртом и травились в растворе бутилового спирта и брома в соотношении 10:1. Такая обработка позволяет устранить поверхностные трещины. Исходные кристаллы характеризуются концентрацией носителей заряда порядка  $10^8$  см<sup>-3</sup>. Времена жизни электронов и дырок составляют около  $5 \cdot 10^{-6}$  с, а подвижности —  $\mu_n = 1000$  см<sup>2</sup>/В·с и  $\mu_p = 100$  см<sup>2</sup>/В·с соответственно.

Плёнки теллурида кадмия были получены методом вакуумного напыления в квазизамкнутом объёме на шлифованные и полированные кремниевые подложки, а также на подложки из монокристаллического теллурида кадмия [109]. Осаждение проводилось в условиях вакуума при давлении не выше  $10^{-5}$ мм рт. ст. и температуре подложки  $220 \pm 10$  °C. Продолжительность напыления составляла от 12 до 24 минут. В качестве источника использовался монокристаллический CdTe с удельным сопротивлением  $(1-5)\cdot10^9$  Ом·см, испарение которого осуществлялось с применением ленточного танталового испарителя. Толщина полученных плёнок на всех типах подложек варьировалась в пределах 150–200 мкм. Удельное сопротивление плёнок составляло ~ $10^9$ – $10^{10}$ Ом·см, что соответствует требованиям, предъявляемым к материалам для изготовления недорогих детекторов ядерного излучения. Химический состав осаждённых плёнок приведён в таблице 2.1 [109].

Поверхностная морфология плёнок исследовалась методом атомносиловой микроскопии (ACM) при комнатной температуре в полуконтактном резонансном режиме на частоте 145 кГц с использованием прибора Solver P47Pro. В качестве зондов применялись кантилеверы серии NSG01 с радиусом закругления наконечника 10 нм. Для оценки поверхности использовался параметр шероховатости  $R_a$ , представляющий собой среднее арифметическое отклонение высот микронеровностей от средней линии профиля, определённой методом наименьших квадратов. Измерения проводились на площади сканирования 20 × 20 мкм, при этом на каждом образце диаметром 5 мм выполнялось не менее пяти сканирований [110].

Таблица 2.1. Состав полученных пленок	

Пленка/подложка	Сd, вес.%	Те, вес.%	Аl, вес.%
CdTe/CdTe	48,10	51,60	0,30
CdTe/Si	50,44	48,74	0,82

Для определения элементного состава приповерхностного слоя использовался метод рентгеноспектрального микроанализа, реализованный на растровом электронном микроскопе (РЭМ) LEO-1455 VP. Пространственное разрешение анализа составляло около 5 мкм, а погрешность при определении концентрации элементов не превышала 10%.

Структурные характеристики плёнок исследовались с применением рентгеновского дифрактометра Rigaku Ultima IV в конфигурации Брегга– Брентано. Для изучения влияния химической обработки на морфологию поверхности образцы дополнительно подвергались травлению в бромбутиловом растворе при комнатной температуре. Длительность процедуры не превышала 20 минут [109].

Изображения поверхности подложек после шлифовки и полировки, а также плёнок теллурида кадмия, выращенных на этих подложках, полученные методом атомно-силовой микроскопии, представлены на рисунке 2.1.

После шлифовки на поверхности кремниевой подложки наблюдаются царапины глубиной до 140 нм, а средняя шероховатость составляет 8,6 нм. На такой подложке при осаждении теллурида кадмия формируются кристаллиты размером 2–2,5 мкм и высотой около 300 нм. Среднее значение шероховатости сформированной плёнки достигает 34,1 нм.



Рисунок 2.1. Результаты атомно-силовой микроскопии поверхности шлифованных и полированных подложек, а также пленок теллурида кадмия, выращенных на этих подложках [109].

На полированной кремниевой подложке не наблюдаются царапины. Шероховатость поверхности такой подложки составляет 2,7 нм. Пленки CdTe, выращенные на этой подложке, имеют крупные зерна, размеры которых варьируются от 3,5 до 4 мкм. Средняя шероховатость пленки составляет 87,5 нм.

На рисунке 2.2 показано ACM-изображение поверхности CdTe и пленки CdTe, выращенной на её поверхности. Шероховатость подложки составляет 15,7 нм, а шероховатость пленки — 23 нм.



Рисунок 2.2. ACM-изображение поверхности CdTe и выращенной на ее поверхности пленки CdTe [109]

# 2.2. Методика измерения потока тепловых нейтронов и облучения образцов

В рамках наших исследований для облучения образцов мы использовали плутоний-бериллиевый (Pu-Be) источник нейтронов. Данный источник относится к радиоизотопным ( $\alpha$ , n) – источникам. Из всех изотопов плутония, которые известны на сегодняшний день, фактически только три из них можно использовать для приготовления нейтронных источников. Такими изотопами являются <sup>238</sup>Pu, <sup>239</sup>Pu и <sup>240</sup>Pu.

В нашем случае источник быстрых нейтронов приготовлен из изотопа <sup>239</sup>Pu. Данный изотоп получается в результате прохождения ядерной реакции типа:

$${}^{238}_{92}U(n,\gamma){}^{239}_{92}U \xrightarrow{\beta^-, \ T_{1/2}=23,5 \text{ мин}}{}^{239}_{93}Np \xrightarrow{\beta^-, \ T_{1/2}=2,23 \text{ дн.}}{}^{239}_{94}Pu$$

Изотоп <sup>239</sup>Ри является долгоживущим α-излучателем, период полураспада, которого равняется 24360 лет. В альфа-спектре указанного изотопа резко выражены три наиболее интенсивные α-линии: 5,157 (73%), 5,145 (15%) и 5,107 (12%). <sup>239</sup>Ри испускает очень мягкое гамма-излучение. Суммарный абсолютный выход γ-линий с энергиями больше 100 кэВ составляет 1,3·10<sup>-4</sup> кв/расп. Наиболее интенсивные γ-кванты <sup>239</sup>Ри имеют энергию 39,53 и 100 кэВ. Они легко

поглощаются свинцовыми фильтрами небольшой толщины. Поэтому малый гамма-фон Pu-Be-го источника не опасен для персонала, который работает вблизи источника.

Нейтроны в плутоний-бериллиевом источнике нейтронов получаются в результате ядерной реакции:

$${}^{9}_{4}Be + {}^{4}_{2}\alpha \rightarrow {}^{12}_{6}C + {}^{1}_{0}n + Q$$

Максимальный выход нейтронов Pu-Be-го источника составлял  $g = 2 \cdot 10^6$  нейтр./сек. кюри.

Энергетический спектр нейтронов Pu-Be-го источника лежит в пределах 0,5-10 МэВ и в области 4 МэВ имеет резко выраженный максимум (Рисунок 2.3). Форма спектра плутоний-бериллиевого источника изменяется в зависимости от весового содержания плутония и бериллия, то есть от размеров самого источника.



Рисунок 2.3. Энергетический спектр нейтронов Ри-Ве-го источника

Источник нейтронов изготовлен из интерметаллического соединения плутония с бериллием – PuBe<sub>13</sub>. Кристаллы соединения PuBe<sub>13</sub> геометрическими размерами 2-10 мкм расположены в матрице бериллия. Для защиты работающих от нейтронного облучения источник помещен в парафиновый блок (Рисунок 2.4).



Рисунок 2.4. Блок для источника нейтронов

Следующим шагом исследований является измерение и определение величины потока тепловых нейтронов. Наиболее простым и удобным методом для этой цели считается метод активации.

Появление и развитие активационного метода определения потока тепловых нейтронов связано с научными достижениями ядерной физики и радиохимии. Принимая во внимание, что данный метод основан на облучении стабильных ядер различными частицами, исторической фазой этого метода считается открытие искусственной радиоактивности в тридцатых годах прошлого века.

Среди способов активации находит большое применение способ активации тепловыми нейтронами. Уникальность метода определяется простой ядерной реакцией и высокой чувствительностью метода. Поэтому для определения потока тепловых нейтронов мы использовали этот метод.

Известно, что в результате облучения тепловыми нейтронами в детекторе за единицу времени образуются радиоактивные ядра, число которых обозначается таким образом:

$$N = fn\sigma \tag{2.1}$$

Активность радиоактивных ядер, возникших при ядерной реакции определяется следующим соотношением:

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N_t \tag{2.2}$$

Здесь  $\lambda$  – постоянная распада образовавшегося радиоактивного изотопа,  $N_t$  – число радиоактивных ядер в образце к моменту времени *t*.

Числа радиоактивных ядер в детекторе в интервале времени от t до t + dt увеличивается, и будет равно:

$$dN_t = Ndt - \lambda N_t dt \tag{2.3}$$

Из этого выражения можно определить число радиоактивных ядер, после облучения нейтронами в течении определенного времени:

$$N_t = \frac{N}{\lambda} \left( 1 - e^{-\lambda t} \right) = \frac{f n \sigma}{\lambda} \left( 1 - e^{-\lambda t} \right)$$
(2.4)

Таким образом, активность облученного детектора  $A_t$  в момент t будет равна:

$$A_t = \lambda N_t = fn\sigma(1 - e^{-\lambda t})$$
(2.5)

Из выражения (2.5) можно найти плотность потока тепловых нейтронов:

$$f = \frac{A_t}{n\sigma(1 - e^{-\lambda t})} = \frac{A_t}{n\sigma\left(\frac{-\frac{0.693}{T_1}t}{1 - e^{-\frac{1}{2}}}\right)}$$
(2.6)

Из выражение (2.6) следует, что величина потока тепловых нейтронов может быть определена путем измерения активности детектора  $A_t$  в момент завершения облучения t. Сечения активации ядер детектора тепловыми нейтронами  $\sigma$  и число ядер в детекторе n должны быть известны. Указанное выражение упрощается в случае, когда время облучения детектора значительно

больше периода полураспада искусственного радиоактивного изотопа и вторым слагаемым в знаменателе можно пренебречь:

$$f = \frac{A_t}{n\sigma} \tag{2.7}$$

Если измерение наведенной активности детектора производится спустя некоторое время  $\Delta t$  после момента окончания облучения детектора нейтронами t, то необходимо учесть уменьшение активности препарата вследствие радиоактивного распада.

В качестве мишени-детектора мы использовали изотоп марганца <sup>55</sup>Mn. Его достоинствами как активационного детектора тепловых нейтронов является большое эффективное сечение активации простая схема распада искусственного изотопа. При измерении нейтронных потоков небольшой интенсивности сравнительно малый период полураспада искусственного радиоактивного изотопа марганца позволяет производить измерения активности детектора после кратковременного облучения.

Зависимость эффективного сечения реакции радиационного захвата нейтронов ядрами марганца представлена на рисунке 2.5.



Рисунок 2.5. Зависимость эффективного сечения реакции радиационного

захвата нейтронов ядрами марганца

Из рисунка видно, что активация марганца возможна не только тепловыми нейтронами, но и нейтронами большой энергии. При энергии от 10<sup>2</sup> до 10<sup>3</sup> эВ наблюдаются резонансные пики. Следовательно, при помещении активационного детектора из марганца в нейтронный поток со сложным энергетическим спектром его активность после облучения будет определяться не только потоком тепловых нейтронов, но и потоком нейтронов высоких энергий.

Влияние потока надтепловых нейтронов на результаты измерений может быть устранено применением кадмиевого фильтра. Большая величина эффективного сечения захвата тепловых нейтронов ядрами кадмия приводит к тому, что слой кадмия толщиной 1-2 мм оказывается практически полностью непрозрачным для тепловых нейтронов. Нейтроны с энергией выше 0,5 эВ проходят сквозь него без заметного поглощения. Образец, обернутый кадмиевой фольгой, будет активироваться лишь надтепловыми нейтронами. Активность  $A_t$ , наведенная в марганце тепловыми нейтронами, определится как разность между активностью, наведенной в образце без кадмиевого фильтра  $A_0$ , и активностью, наведенной в образце с фильтром  $A_{\phi}$ :

$$A_t = A_0 - A_{\phi} \tag{2.8}$$

Следует отметить, что эффективное сечение активации изотопа марганца <sup>55</sup>Mn для тепловых нейтронов составляет 13,3 барна. Масса мишени-детектора составлял 10 г. В результате прохождения ядерной реакции типа:

$${}^{55}_{25}Mn + {}^{1}_{0}n \to {}^{56}_{25}Mn + \gamma$$
 (2.9)

образуется изотоп марганца <sup>56</sup>Mn, период полураспада которого равен 2,58 ч.

При переходе в основное состояние изотоп <sup>56</sup>Mn испускает гамма-кванты имеющие такие энергии:  $E_{\gamma} = 2113$  кэВ (14,5 %);  $E_{\gamma} = 1810$  кэВ (25,5%);  $E_{\gamma} = 841$  кэВ (98,8 %). Гамма-кванты непосредственно регистрируются сцинтилляционным гамма-спектрометром. Спектр  $\gamma$ -излучения <sup>56</sup>Mn показан на рисунке 2.6. Как видно, интенсивность испускания гамма-квантов, которые

имеют энергию 841 кэВ, очень высока. Поэтому, активность этого изотопа будем определят именно по этому пику.



Рисунок 2.6. Спектр у-излучения <sup>56</sup>Мп

Для определения потока тепловых нейтронов поставим наш образец в канал тепловых нейтронов на 90 минут. Одновременно подключаем измерительные устройства в сеть и нагреваем их в течении 10 минут. Потом, с использованием калибровочных изотопов <sup>137</sup>Cs (661 кэВ) и <sup>40</sup>K (1461 кэВ) калибруем гамма-спектрометр. В течении 20 минут измеряем радиационный фон, который возникает за счет космических лучей и других источников радиации.

После этого измеряем активность облученной мишени с помощью гаммаспектрометра. Полученный результат подставляем в формулу (2.6) и вычисляем поток тепловых нейтронов. Результаты измерения потока тепловых нейтронов в зависимости от времени облучения приведены в таблице 2.2.

Бак для источника нейтронов создан из листового железа толщиной 4 мм. Бак имеет кубическую форму с размерами 70х70х70 см (Рис. 2.4). Основная часть бака заполнен парафином, в центре которого расположен канал. В этом канале расположен Pu-Be-источник. Высота канала составляет 25 см, а диаметр 3,7 см. Канал быстрых нейтронов окружен 5-ти сантиметровым парафиновым слоем. За этим слоем парафина следует канал тепловых нейтронов, который имеет ширину 2,6 см.

Время облучения, сут.	Поток нейтронов, н/см <sup>2</sup>
0,5	$0,264 \cdot 10^{8}$
3	1,3.108
5	$2,16\cdot10^{8}$
7	$3,02 \cdot 10^8$
12	$5,12 \cdot 10^8$
17	$7,34.10^{8}$

Таблица 2.2. Значения потока тепловых нейтронов в зависимости от времени

После подборки образцы облучались тепловыми нейтронами от Pu-Beисточника при различных потоках нейтронов. Облучение полупроводниковых плёнок тепловыми нейтронами проводились при температуре 28 °C.

### 2.3. Рентгеноструктурный анализ образцов

Рентгеноструктурный анализ основан на явлении отражения образованных рентгеновских лучей плоских сеток, ОТ атомами В кристаллической решетке материала. В результате отражения появляются дифракционные максимумы, каждый из которых характеризуется определенным межплоскостным расстоянием и интенсивностью. Дифракция рентгеновских лучей от кристалла подчиняется закону Вульфа-Брегга:

$$n\lambda = 2d\sin\theta \qquad (2.10)$$

где n – целое число, описывающее порядок дифракционного отражения,  $\lambda$  – длина волны рентгеновского излучения, d – межплоскостное расстояние между отражающими плоскостями,  $\theta$  – угол, который составляет падающий или дифрагированный луч с отражающей плоскостью.

В целях исследования структуры кристаллов CdTe и CdZnTe был использовано указанный метод, с применением рентгеновского дифрактометра

ДРОН-3. В аппарате ДРОН-3 обычно используется монохроматическое излучение, источником которого является рентгеновская трубка. Питание трубки осуществляется от высокостабильного источника питания ВИП 2-50-60M. Измерение положения дифракционных углового отражений осуществляется гониометрическим устройством ГУР-8, которое устанавливается на жесткой плите. На той же плите расположен узел рентгеновской трубки.

Схема устройства рентгеновского аппарата показано на рисунке 2.7. Импульсы обрабатываются специальным программным обеспечением в компьютере и подаются в виде графика.



Рисунок 2.7. Схема дифрактометра с фокусировкой по Брэггу-Брентано. 1 – рентгеновская трубка, 2 – монохроматор, 3 – гониометр, 4- щели, 5 – образец, 6 – детектор.

Проверка аппаратурной погрешности производится путем измерения импульсов рентгеновского излучения за 100 с при отражении порошкового образца КП-3 (каждый час сериями по 11 измерений) в течении 6 ч.

Регулируя анодный ток и высоту горизонтальной щели перед детектором, добиваются уровня скорости счета 8000-10000 имп/с. В процессе измерений образец не должен вращаться.

Дисперсию можно рассчитать по формуле:

$$S^{2} = \frac{\sum_{i=1}^{11} (N_{i} - \bar{N})^{2}}{10}$$
(2.11)

где  $N_i$  – зарегистрированное число импульсов при *i* измерении в данной серии, имп;  $\overline{N}$  – среднее значение числа импульсов в серии, имп.

По найденным значениям дисперсии определяют погрешность измерения скорости счета по формуле:

$$A_0 = \frac{100}{\bar{N}}\sqrt{S^2 - \bar{N}} \tag{2.12}$$

Образцы исследовали под углами от 10° до 60° по 20. Источник рентгеновского излучения работал с током эмиссии 6 мА, напряжение между катодом и анодом в рентгеновской трубке составляло 36 кВ. Для охлаждения анода использовалась обычная вода.

# 2.4. Кванто-механический расчет структурных, электронных и оптических свойств CdTe и CdZnTe

Для исследования структурных и электронных свойств системы Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te были реализованы квантово-механические расчеты с использованием теории функционала плотности (DFT), а также кода расширенных плоских волн (FP-LAPW), пакета Wien2k с обобщенным градиентом аппроксимации GGA-PBE (для оптимизации геометрии) и модифицированный обменно-корреляционный потенциал mBJ (для расчета электронных свойств).

Исходными данными для расчетов послужили параметры кубической фазы CdTe с пространственной группой (F-43m) и номером 406 в кристаллографической базе данных Material Projects [111] с фиксированными положениями атомов Cd, Te и Zn. Paдиус сферы Маффтина (радиус иона) для Cd, Te и Zn принимался равным 2,5*a*<sub>0</sub>, где *a*<sub>0</sub> — радиус Бора. После легирования определенной концентрацией цинка, этапы оптимизации были реализованы для всех нанокристаллов системы Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te. На рисунке 2.8 (a-e) показаны

оптимизированные кристаллические структуры  $2 \times 2 \times 2$  – суперячейки CdTe, Cd<sub>0,75</sub>Zn<sub>0,25</sub>Te, Cd<sub>0,5</sub>Zn<sub>0,5</sub>Te, Cd<sub>0,25</sub>Zn<sub>0,75</sub>Te и ZnTe. Трехмерные структуры кристаллической решетки этих систем были визуализированы с помощью VESTA.



Рисунок 2.8. Кристаллические структуры (a) CdTe, (b) Cd<sub>0,75</sub>Zn<sub>0,25</sub>Te, (c) Cd<sub>0,5</sub>Zn<sub>0,5</sub>Te, (d) Cd<sub>0,25</sub>Zn<sub>0,75</sub>Te и (e) ZnTe

Минимизация полной энергии выполняется с использованием этапов сходимости, которые включают релаксацию решетки, сходимость энергии и kконвергенцию для получения стабильной структуры основного состояния. Оптимизация кристаллических структур проводилась методом Мурнагана, который в связи с расчетами *ab initio* было бы предпочтительнее выразить энергию как функцию объема:

$$E(\mathbf{V}) = E_0 + BV_0 \left[ \frac{1}{B'(B'-1)} \left( \frac{V_0}{V} \right)^{1-B'} + \frac{V}{B'V_0} - \frac{1}{B'-1} \right]$$
(2.13)

где *B* - модуль объемного сжатия, B' - производная по давлению объемного модуля ( $B' = (\partial B / \partial P)_T$ ),  $V_0$  – равновесный объем, то есть когда система находится в релаксирующем (основном) состоянии.

Для определения ширины запрещенной зоны необходимо вычислить полную энергию. Минимизация и расчет полной энергии многоэлектронной системы производится по правилам Кона – Шэма [112], на основе двух теорем Хоэнберга – Кона [113] и начинается с записи уравнения Шрёдингера в виде:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + E_{ion}(r) + E_h(r) + E_{xc}(r)\right)\psi_i(r) = E\,\psi_i(r)$$
(2.14)

здесь,  $E_{ion}(r)$  – ионный потенциал,  $E_h(r)$  – потенциал Хартри,  $E_{xc}(r)$  – обменнокорреляционный потенциал. Последние 2 потенциала рассчитываются как:

$$E_h(r) = e^2 \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' \qquad (2.15)$$

$$E_{xc}(r) = \frac{\delta \epsilon_{xc}[\rho(r)]}{\delta \rho(r)}$$
(2.16)

где  $\rho(r)$  – функционал электронной плотности.

В рамках DFT в 1964 году, Хоэнберг и Кон показали, что функционал электронной плотности  $\rho(r)$  для нормированного  $\psi$  определяется как:

$$\rho(r) = N \int d^3 r_2 \dots \int d^3 r_N \ \psi^*(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots \vec{r}_n) \psi(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots \vec{r}_n)$$
(2.17)

Для плотности основного состояния  $\rho_0(r)$  в принципе можно вычислить соответствующую волновую функцию основного состояния  $\psi_0(r_1,...,r_N)$ , где N – число электронов. Другими словами,  $\psi$  – единственный функционал от  $\rho_0(r)$ .

$$\psi_0 = \psi(\rho_0) \tag{2.18}$$

Таким образом, функционал плотности определяется как:

$$\rho(r) = \sum_{\substack{i=busy\\states}} \psi_i^*(r) \psi_i(r)$$
(2.19)

В рамках Wien2k для соответствующих  $\rho(r)$  сначала вычисляются  $E_h$  и  $E_{xc}$ , а затем осуществляется решение уравнения Шрёдингера (уравнение 3). Затем по собственным состояниям ( $\psi_i(r)$ ) вычисляется  $\rho(r)$  по уравнению 2.19.

Энергия запрещенной зоны в модифицированном потенциале Бекке и Джонсона [114] определяется следующим уравнением:

$$E_{xc}^{mBJ}(r) = c E_x^{BR}(r) + (3c - 2)\frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{5k(r)}{6\rho(r)}}$$
(2.20)

где k(r) – плотность кинетической энергии согласно уравнению Кона – Шэма, – спин-зависимая плотность электронов, а  $E_x^{BR}$  – обменный функционал Бекке – Русселя [115]. Параметр *с* предлагалось определять самосогласованно в зависимости от электронной плотности как:

$$c = \alpha + \beta g^p$$

где,

$$g = \frac{1}{V_{cell}} \int \frac{|\nabla \rho(r')|}{\rho(r')} d^3r'$$

Константы уравнения 6, после минимизации средней абсолютной ошибки ширины запрещенной зоны для широкого круга твердых тел, были приняты равными  $\alpha = -0.012$ ,  $\beta = 1.023B^{1/2}$  и p = 1/2 [116].

Оптические свойства системы  $Cd_xZn_{1-x}$  Те исследовались с использованием действительной ( $\varepsilon_1$ ) и мнимой ( $\varepsilon_2$ ) частей диэлектрической проницаемости [117-123], а затем оптической проводимости ( $\sigma$ ), а также экстинкции (k) и коэффициенты поглощения ( $\alpha$ ) как:

$$k = \sqrt{\varepsilon_2}$$
$$\alpha = \frac{4\pi}{\lambda} k$$
$$\sigma = \frac{1}{2} \frac{c}{\lambda} \varepsilon_2$$

Для всех наших расчетов критерия сходимости полная энергия принималась равной 10<sup>-5</sup> эВ, а силы, приходящиеся на атом, приводились к 10<sup>-3</sup> эВ. Валентные волновые функции внутри МТ-сферы разлагались до l<sub>max</sub> = 10 (максимальный порядок сферической гармоники, использованной в

разложении), а плотность заряда разлагалась в ряд Фурье до  $G_{max}$  (Бор-1) (граница суммирования над векторами обратной решетки). Расчеты проводились в неприводимой зоне Бриллюэна по схеме Монкхорста-Пака [124] и сетке *k*-точек 2 × 2 × 2. Кинетическая энергия обрезания плоской волны для всех расчетов принята равной 400 эВ.

#### 2.5. Методика исследования оптических свойств

Спектрофотометрия – это стандартный и недорогой метод измерения поглощения света в веществе. Он использует световой луч, который проходит через образец, и каждое соединение в веществе поглощает или пропускает свет на определенной длине волны. Из-за широкого спектра образцов источники света могут различаться по своей природе и использовать широкий спектр длин волн, включая видимый, ультрафиолетовый (УФ) и инфракрасный (ИК).

В рамках данной работы для изучения оптических свойств был использовано метод UV-Vis-спектрофотометрии с использованием двухлучевого спектрофотометра. Этот метод прост и состоит из источника света, дисперсионного элемента по длине волны, образца и детектора (Рисунок 2.9).



Рисунок 2.9. Принцип проведения UV-Vis-спектрофотометрии

В двухлучевых спектрофотометрах луч, выходящий из источника света, расщепляется на два луча. Один луч падает на исследуемый предмет, а второй – на эталонный образец, затем сравниваются результаты интенсивности между двумя световыми путями.

Для исследования оптических свойств, кристаллы CdTe измельчались до порошкового состояния. Затем, часть порошка поставили на облучение тепловыми нейтронами.

Перед измерением поглотительной способности образцов, прибор следует калибрировать. Образцы насыпались тонким слоем на поверхность специальной кюветы и помещались в спектрофотометр. Измерения проводились в интервале длин волн от 190 до 1100 нм с шагом 1 нм, при комнатной температуре.

#### Выводы второй главы

Изложенная в настоящей главе методика проведения экспериментов позволяет с достаточной точностью провести исследования в области электрофизических, структурных и оптических характеристик. Приведена методика измерения потока тепловых нейтронов и облучения образцов. Указана методика изучения структурных и оптических параметров. Также приведена методика проведения кванто-механического расчета.

Предложенные методы исследования позволяют с достаточной точностью измерить указанные параметры образцов.

### ГЛАВА 3. ВЛИЯНИЯ МАЛЫХ ПОТОКОВ ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНОВ НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ И СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КРИСТАЛЛОВ CdTe И CdZnTe

### 3.1. Влияние облучения тепловыми нейтронами на электрофизические характеристики CdTe, легированного хлором и CdZnTe

Создание полупроводниковых спектрометрических детекторов ү-квантов и рентгеновского излучения, работающих без охлаждения и с высокой эффективностью регистрации, является чрезвычайно важной задачей [18]. В настоящее время наиболее подходящим материалом для этой цели являются теллурид кадмия (CdTe) и теллурид кадмия цинка (CdZnTe).

Как подчёркивается в разделе, посвящённом актуальности темы и обзору литературы, указанные материалы относятся к классу широкозонных полупроводников и являются одними из наиболее изученных соединений группы A<sup>2</sup>B<sup>6</sup>. Это объясняется их физико-химическими характеристиками, выгодно отличающими их от аналогичных соединений.

В настоящем параграфе приводятся результаты исследований влияния тепловых нейтронов малого потока на электрофизические свойства кристаллов CdTe, легированного хлором и CdZnTe [1-A, 6-A, 7-A], полученных методами направленной кристаллизации [125]. В первом параграфе второй главы приведены основные параметры исследованных образцов.

Методика и условия облучения образцов указаны во втором параграфе предыдущей главы. Кристаллы теллурида кадмия, поликристаллические пленки CdTe на подложке кремния и CdZnTe были облучены тепловыми нейтронами разного потока. Было изучено влияние облучения на проводимость кристаллов.

Схематическое изображение измерительной установки для определения сопротивления плёночных образцов представлено на рисунке 3.1. В качестве источника питания использовался стабилизированный источник напряжения УИП-1. Для параллельного измерения напряжения применялся комбинационный

прибор У-4341. Измерения сопротивления проводились с использованием нановольтамперметра Р-341.



Рисунок 3.1. Схема соединения приборов для измерения сопротивления

полупроводниковых пленок.

На рисунке 3.2 приведена зависимость изменения удельной проводимости и сопротивления пленок CdTe от величины потока тепловых нейтронов. Из графика видно, что с увеличением потока наблюдаются значительные изменения в электрофизических свойствах материала. Таблица 1 содержит обобщённые электрофизические параметры исследованных образцов до и после облучения. Измерения проводились с использованием экспериментальной установки, схема которой приведена на рисунке 3.1.

R (до	ρ,	σ,	R	ρ,	σ,	Поток
обл.),	Ом.см	$OM^{-1} \cdot CM^{-1}$	(после	Ом.см	Ом <sup>-1</sup> ·см <sup>-1</sup>	нейтронов,
Ом			обл.),			н/см <sup>2</sup>
			Ом			
		CdTe (	на подлож	кке CdTe)		
0,17.1011	$0,27 \cdot 10^{11}$	3,7.10-11	$0,45 \cdot 10^9$	$0,711 \cdot 10^9$	1,40.10-9	$0,264 \cdot 10^{8}$
$0,70.10^9$	$1,1.10^{9}$	0,90·10 <sup>-9</sup>	$0,4.10^{9}$	$0,628 \cdot 10^9$	1,59·10 <sup>-9</sup>	1,3·10 <sup>8</sup>
$0,60 \cdot 10^{10}$	$0,94 \cdot 10^{10}$	1,06.10-10	$0,6.10^9$	$0,912 \cdot 10^9$	1,09·10 <sup>-9</sup>	$5,12 \cdot 10^{8}$
$0,25 \cdot 10^{11}$	0,39·10 <sup>11</sup>	2,56.10-11	$0,6.10^9$	$0,936 \cdot 10^9$	1,06.10-9	$7,34.10^{8}$
CdTe (на подложкеSi)						
0,5.107	$0,785 \cdot 10^{7}$	1,27.10-7	0,25.107	0,3925.107	$2,54 \cdot 10^{-7}$	$0,264 \cdot 10^8$
$0,22 \cdot 10^{9}$	$0,345 \cdot 10^9$	$2,89 \cdot 10^{-9}$	$0,18.10^{9}$	$0,282 \cdot 10^9$	3,53·10 <sup>-9</sup>	1,3·10 <sup>8</sup>
$0,9.10^{9}$	$1,413 \cdot 10^9$	$0,70 \cdot 10^{-9}$	$0,70 \cdot 10^9$	$1,099 \cdot 10^9$	0,90.10-9	$2,16\cdot 10^{8}$
$0,12 \cdot 10^9$	$0,188 \cdot 10^9$	5,31.10-9	$0,17.10^{9}$	$0,2669 \cdot 10^9$	3,74.10-9	$3,02 \cdot 10^8$

Таблица 3.1. Электрофизические параметры исследованных образцов



Рисунок 3.2. Зависимость изменения удельной проводимости (a) и сопротивления (б) от потока тепловых нейтронов. 1 – CdTe (монокристалл), 2 – поликристаллическая пленка CdTe на Si

Результаты измерений сопротивления кристаллов CdZnTe до и после облучения представлены в таблице 3.2.

Сопоставление экспериментальных данных с результатами численного моделирования [126] электрофизических и оптических характеристик плёнок на базе CdTe:Cl демонстрирует их согласованность и даёт основания для объяснения механизмов, лежащих в основе изменений удельного сопротивления, проводимости и снижения эффективности сбора зарядов в детекторах после воздействия тепловых нейтронов. Эти выводы перекликаются

с положениями, изложенными в первом и втором параграфах четвёртой главы [8-А].

Образец	R (до обл.), Ом	R (после обл.), Ом	Поток нейтронов, н/см <sup>2</sup>
Nº1	0,25.109	0,55.109	2,64.107
Nº2	6·10 <sup>9</sup>	4,2.109	1,3·10 <sup>8</sup>
Nº3	3,2.109	2,6.1010	2,16.108
<u>№</u> 4	$2,1.10^{9}$	2,8.109	$3,02 \cdot 10^8$

Таблица 3.2. Результаты измерения сопротивления кристаллов CdZnTe

Анализируя информацию, приведённую на рисунке 3.2 и в таблице 3.1, можно заметить: при низких уровнях облучения тепловыми нейтронами происходит падение удельного сопротивления и рост проводимости образцов. Однако повышении потока нейтронного облучения наблюдается при противоположная картина – рост сопротивления и снижение проводимости. Подобное поведение, вероятно, обусловлено трансформацией кристаллической решётки CdTe, сопровождающейся изменениями ширины запрещённой зоны и, как следствие, резким сдвигом в типе и механизмах проводимости. Также возможно значительное сокращение времени жизни и подвижности носителей заряда, участвующих в транспортных процессах.

У образцов теллурида кадмия с электронной (n-) проводимостью нейтронное облучение может приводить к появлению в запрещённой зоне новых энергетических состояний, расположенных близко к дну зоны проводимости. Это эквивалентно введению дополнительной донорной компоненты, которая способствует увеличению электронной проводимости материала.

С ростом потока нейтронов наблюдается смена типа проводимости на противоположный, после чего проводимость возрастает до определённого предела и затем постепенно снижается, приближаясь к значению, характерному для собственного значения.

Моделирование, проведенное авторами [126] показало, что максимально возможное удельное сопротивление теллурида кадмия, легированного хлором

при комнатной температуре, не может превышать  $6,9 \cdot 10^9$  Ом·см, когда уровень Ферми находится примерно в середине запрещенной зоны, а концентрация радиационных дефектов достигает примерно  $1 \cdot 10^{16}$  см<sup>-3</sup>. При дальнейшем увеличении концентрации дефектов уровень Ферми смещается ближе к зоне проводимости, удельное сопротивление уменьшается и при некотором значении  $(N(z)=2\cdot 10^{16})$  составляет  $10^6$  Ом·см, а проводимость становится электронной.

Резкий скачок проводимости, зафиксированный на графике (рисунок 3.2, а), вероятно, вызван перестройкой кристаллической решётки и изменением параметров элементарной ячейки, включая расширение запрещённой зоны, что наблюдается при нейтронном облучении.

Дополнительное влияние оказывает и ядерное взаимодействие нейтронов с ядрами атомов составляющих материала. При поглощении тепловых нейтронов ядрами атомов возможны реакции радиационного захвата с образованием новых изотопов [90]. Вероятность протекания таких процессов определяется величиной эффективного сечения захвата. Для кадмия это значение составляет порядка 2450 барн, тогда как для теллура — лишь 4,7 барн [127]. Таким образом, наиболее подверженными нейтронному воздействию являются атомы Cd, и именно они играют ключевую роль в формировании радиационных эффектов в кристаллической решётке.

Согласно [127] возможные ядерные реакции с участием ядер кадмия имеют следующий вид:

$${}^{112}_{48}Cd + {}^{1}_{0}n \to {}^{112}_{47}Ag + {}^{1}_{1}p \tag{3.1}$$

$${}^{112}_{48}Cd + {}^{1}_{0}n \to {}^{109}_{46}Pd + {}^{4}_{2}\alpha \tag{3.2}$$

В результате ядерных превращений, вызванных захватом тепловых нейтронов ядрами атомов в кристаллической решётке полупроводника, образуются дополнительные свободные электроны. Эти процессы сопровождаются формированием новых энергетических состояний внутри запрещённой зоны, близко расположенных к краю зоны проводимости. Такие уровни способствуют повышению плотности электронов и, как следствие,

проводимость материала. Это объясняет увеличивают электрическую фиксируемое при низких нейтронных потоках (рисунок 3.2, а) улучшение проводящих свойств облучённых структур на основе CdTe. При дальнейшем росте интенсивности нейтронного облучения усиливается внедрение сторонних атомов, таких как серебро (Ag) и палладий (Pd), в решётку кристалла. Это точечных дефектов, приводит К накапливанию которые нарушают проводимость, снижая её эффективность. Возникающие ловушки и центры рекомбинации становятся препятствием для свободного движения носителей заряда.

Полученные экспериментальные данные демонстрируют хорошее соответствие результатам численного моделирования, проведённого для оценки электрофизических характеристик CdTe:Cl [126]. Это соответствие позволяет обоснованно объяснить выявленные изменения удельного сопротивления, уровней проводимости и снижение эффективности извлечения зарядов из детекторов на основе этого материала при нейтронном воздействии разной интенсивности.

Ho облучение тепловыми нейтронами приводило К увеличению сопротивления кристаллов CdZnTe. Видимо, облучение данного материала, в основном, сопутствуется появлением радиационных дефектов. Результаты параграфа соотносятся ядерной технологией данного с получения высококачественных полупроводниковых материалов и могут использоваться при технологическом процессе производства структур на основе теллурида кадмия для оптимизации их электрофизических и оптических параметров.

# 3.2. Влияние потока тепловых нейтронов на структурные параметры монокристаллов теллурида кадмия

В настоящем параграфе экспериментально показано изменение структурных параметров монокристаллов теллурида кадмия под действием потока тепловых нейтронов [1-A, 2-A, 9-A].

Известно, что наряду с другими характеристиками кристаллической решетки, постоянная решетки является важным параметром кристаллического вещества. Этот параметр для различных кристаллов имеет своё значение. Во многих источниках сообщается о влиянии различных факторов, например, добавления примесей, осаждения на разных подложках на постоянную решетки теллурида кадмия, но информации о влиянии тепловых нейтронов на данный параметр кристаллической решетки не имеется.

Например, в работе [3-А] изучено влияние концентрации Zn на структуру и электронные свойства CdTe. Выявлено, что при увеличении концентрации цинка, наблюдается линейное уменьшение постоянной решетки исследованных образцов, что хорошо подчиняется закону Вегарда. При осаждении пленок теллурида кадмия на разные подложки, изменяется межплоскостное расстояния [128], и этот процесс согласно формуле:

$$a = d\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \tag{3.3}$$

где, *а*– постоянная решетки, *d* – межплоскостное расстояние, (hkl) – индексы Мюллера, приводит к изменению постоянной решетки.

Авторы [129] исследовали влияние реакторных нейтронов на изменение структурных параметров решетки пленок *n*-GaN. Показано, что с ростом флюенса реакторных нейтронов, постоянная решетки нитрида галлия увеличивается. Однако, изменение наблюдается только вдоль оси *c*. Эту тенденцию они связывают с появлением точечных дефектов и внутреннего напряжения. Кроме перечисленных факторов на постоянную решетки влияют также методы модифицирования, температура и термообработка [130].

Ещё одним из важных параметров, который дает ценную информацию о структуре кристалла, является полуширина рентгеновских рефлексов. Поэтому в рамках этой главы исследовано влияние тепловых нейтронов малых потоков на постоянную решетки кристаллов и полуширину рентгеновских рефлексов теллурида кадмия.

Для исследования использовались два кристалла CdTe, которые отличались внешними размерами, а остальные исходные параметры были одинаковыми.

Согласно формулы (3.3) для определения постоянной решетки нужно знать межплоскостные расстояния. Межплоскостные расстояния были определены методом рентгеноструктурного анализа с использованием рентгеновского ДРОН-3. Условие проведения рентгеноструктурного аппарата анализа приведено в главе 2. Прибор полностью работает автоматически, и результаты измерения с помощью специального программного обеспечения обрабатываются на компьютере.

На рисунке 3.3 представлены рентгенодифракционные картины образцов CdTe до и после воздействия тепловых нейтронов различной интенсивности. Отобранные образцы происходят из разных производственных партий, что позволяет проследить воспроизводимость полученных закономерностей. Методика измерений соответствует описанию, приведённому в третьем параграфе второй главы диссертации (см. рисунок 2.7).














Рисунок 3.3. Рентгенодифрактограммы кристаллов CdTe: исходный – (а,е), облученные тепловыми нейтронами дозой 0,264·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup> (б,ж), 1,3·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup> (в,з), 2,16·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup> (г,и), 3,02 ·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup> (д,к) и 1,85·10<sup>9</sup> н/см<sup>2</sup> (е,л) образцов №1 (а,б,в,г,д,е) и №2 (ё,ж,з,и,к,л) соответственно.

Рисунок 3.4 демонстрирует, как изменяется интенсивность отражённого рентгеновского излучения в зависимости от потока тепловых нейтронов для дифракционного пика №1. На графиках отчётливо видно, что форма зависимости интенсивности от нейтронного облучения для обоих образцов имеет схожий характер. В частности, для образца №1 интенсивность сначала увеличивается при потоке облучения до 0,264·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup>, а затем постепенно снижается. Для образца №2 аналогичное поведение проявляется при большей величине потока — до 1,3·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup> наблюдается рост, после чего начинается плавное снижение интенсивности отражённого сигнала.

В таблице 3.3 приведены результаты по изменению структурных параметров, исследованных образцов с увеличением потока тепловых нейтронов. Видно, что с изменением величины потока тепловых нейтронов изменяется значение угла рассеяния рентгеновских лучей, то есть величина постоянной решетки.



Рисунок 3.4. Зависимость интенсивности отраженного рентгеновского излучения от значения потока тепловых нейтронов для кристаллов CdTe для рефлекса 1. Сплошная линия –образец №1, пунктирная линия – образец №2

№ обр.	Поток нейтронов, $\times 10^8$ н/см <sup>2</sup>	I <sub>max</sub>
CdTe (исх.)	0	303
2	0	(20=26,358)
2	0.264	397,35
	0,204	(20=29,76)
2	1 200	499
	1,300	(20=29,236)
2	2 160	1257
	2,160	$(2\theta = 21,718)$
CdTe (исх.)	0	303
1	0	(20=26,358)
1	0.264	694
	0,204	(20=29,76)
1	1 1 200	671
	1,500	(20=29,5)
1	1 2160	503
	2,100	(20=29,719)

Таблица 3.3. Структурные параметры исследованных образцов

Согласно рисунков 3.3 (а-л) в рентгенодифрактограммах кристаллов теллурида кадмия в интервале углов от 28 до 50<sup>0</sup> наблюдается несколько отличающихся рефлексов. Как известно, эти рефлексы появляются в результате отражения рентгеновского излучения от плоскостей кристаллической решетки (hkl), и каждому рефлексу свойственна определенная плоскость.

Сопоставляя наши результаты с результатами [131] мы пришли к выводу, что рефлексы, наблюдавшиеся под углами 29, 39 и 49<sup>0</sup> являются результатом отражения рентгеновского излучения от плоскостей (111), (220) и (311), соответственно. Поставляя индексы Мюллера в формулу (3.3) рассчитали постоянную кристаллической решетки и её относительное изменение в зависимости от потока тепловых нейтронов. Результаты вычислений в виде графика приведены на рисунке 3.5.

Как видно из графиков, в области потока тепловых нейтронов от 0,264 до 2,16·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup>, относительное изменение постоянной решетки составляет от 1,5 до 3,5% для первого образца, и от 1 до 5% для второго образца. Кроме этого, результаты вычисления постоянной решетки по плоскости (220) идентичны результатами [131], которые приведены в таблице 3.4.







вычисление по плоскостям (111), (220) и (311) соответственно.

Что касается полуширины рентгеновских рефлексов, то результаты исследования показали, что в интервале потока тепловых нейтронов от 1,3·10<sup>8</sup> до 2,16·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup> наблюдается резкое уменьшение полуширины рефлексов для обеих образцов. Это можно наблюдать на рисунках 3.6 (a, б).

Данная тенденция хорошо согласуется с данными зависимостей интенсивности отраженного рентгеновского излучения и проводимости от потока тепловых нейтронов, в которых основные эффекты наблюдаются именно в указанных интервалах потока тепловых нейтронов.

Таблица 3.4. Изменение величины постоянной решетки теллурида кадмия по плоскости (220) в зависимости от потока тепловых нейтронов

Поток тепловых нейтронов, ×10 <sup>8</sup> н/см <sup>2</sup>	<i>а</i> , Å, образец №1	<i>а</i> , Å, образец №2
0,000	6,50	6,50
0,264	6,36	6,33
1,300	6,36	6,36
2,160	6,36	6,44
3,020	6,41	6,41
18,50	6,39	6,44



Рисунок 3.6. Зависимость полуширины рентгеновских рефлексов от потока тепловых нейтронов. а – образец №1, б – образец №2. 1, 2, 3 – рефлексы отражения от плоскостей (111), (220) и (311), соответственно

По-видимому, относительное изменение постоянной решетки связано с возникновением дефектов и деформацией кристаллической решетки. Деформация кристаллической решетки может привести к уменьшению запрещенной зоны, и этот процесс приводит к изменению проводимости кристалла. Другой вариант изменения данного параметра может быть связан с появлением в результате ядерных реакций с кадмием изотопа серебра, который отличается своей валентностью от исходного изотопа кадмия.

Как указано выше, в области потока тепловых нейтронов от 1,3·10<sup>8</sup> до  $2.16 \cdot 10^8$  $H/cM^2$ наблюдается спад полуширины рефлексов. Согласно литературным данным острые и узкие рефлексы свидетельствуют об улучшении качества кристаллической решетки. Уменьшение полуширины рефлексов может быть связано с улучшением структуры решетки, так как именно в этом интервале наблюдалась высокая интенсивность отраженного рентгеновского излучения и падение сопротивления изученных образцов. Эти результаты могут привести к разработке ядерной технологии оптимизации физико-технических параметров полупроводниковых структур для их широкого использования в зелёной энергетике и при изготовлении детекторов ядерного излучения.

## 3.3. Возникновение дополнительных рефлексов на рентгенодифрактограммах теллурида кадмия после облучения тепловыми нейтронами

Воздействие ядерного излучения на полупроводниковые кристаллы приводит к образованию дефектов кристаллической решетки и различных изотопов, которые могут существенно изменять электрические, рекомбинационные и оптические свойства материала [88]. Для объяснения физических процессов, протекающих при облучении нейтронами, необходимо учитывать фактор образования дополнительных примесей за счет ядерных реакций, протекающих при взаимодействии тепловых и промежуточных нейтронов с атомами основного вещества [132].

В данном параграфе изучен процесс образования рентгеновских рефлексов на монокристаллах теллурида кадмия после облучения тепловыми нейтронами [10-А, 11-А].

Для проведения исследований в качестве опытного материала были выбраны 4 образца из монокристаллического теллурида кадмия. Полупроводниковые кристаллы выращены методом направленной кристаллизации. После подборки полупроводниковые кристаллы подвергались облучению тепловыми нейтронами из Pu-Be-го источника. Для выяснения

образования примесных изотопов был использован метод рентгеноструктурного анализа с использованием рентгеновского аппарата ДРОН-3.

Рентгеноструктурный анализ необлученного теллурида кадмия показывает наличие трех рефлексов, которые отчётливо видны при 20≈29; 39 и 48<sup>0</sup> (Рисунок 3.7). Отражение рентгеновских лучей от определённых плоскостей приводит к образованию данных рефлексов. Из рисунка можно заметить, что кроме перечисленных рефлексов других особо выделенных пиков не существует.



Рисунок 3.7. Рентгенодифрактограмма необлученного образца CdTe

После облучения образцов различными потоками тепловых нейтронов на рентгенодифрактограмме можно заметить несколько изменений. Первое - это увеличение интенсивности отраженного рентгеновского излучения в несколько раз. Данный фактор указывает на то что структура кристалла упорядочилась, и существовавшие до облучения дефекты кристаллической решетки устранялись. Второе, это появление дополнительных пиков интенсивности, в частности при  $20 \approx 43,5^{\circ}$  (Рисунок 3.8). Наблюдаемый сдвиг пиков находится в пределах погрешности. Появление этого пика связано с протеканием ядреных реакций тепловых нейтронов с кадмием. Этот процесс показан в ядерных реакциях (3.1) и (3.2) параграфа 3.1.



Рисунок 3.8. Рентгенодифрактограмма облученных образцов CdTe

В результате протекания этих ядерных реакций в полупроводниковом кристалле появляются дополнительные примесные изотопы, приводящие к появлению дополнительных рефлексов в рентгеновской картине кристалла.

Облучение полупроводникового кристалла CdTe тепловых нейтронами до определённого потока приводит к улучшению структуры кристалла. Это связано с рекомбинацией структурных дефектов кристалла. В результате облучения тепловыми нейтронами образуются новые примесные изотопы серебра и палладия, которые в определенной степени способствуют улучшению электропроводности полупроводниковых кристаллов.

### 3.4. Изучение структурных свойств полупроводниковых кристаллов CdZnTe после облучения тепловыми нейтронами

В последние годы для создания детекторов рентгеновского и гаммаизлучения, фотопреобразующих панелей и других оптоэлектронных устройств теллурид кадмия-цинка показывает хорошие результаты, в силу своей дешевизны и способности работать при комнатной температуре. Для достижения более подходящих параметров предпринимаются разнообразные методы получения кристаллов, легирование химическими элементами, введение в состав

чистого кристалла инородных примесей и др. Однако, модификация структуры кристаллов с помощью ядерного излучения является новым методом. При этом надо учитывать предел потока облучения, так как превышения потока облучения приводит к обратным последствиям.

Однако, в рамках наших исследований мы предприняли другой подход: мы предлагали модифицировать структуру кристаллов CdTe облучением малыми потоками тепловых нейтронов и достигли хороших результатов [1-А]. В отличие от быстрих нейтронов и других видов излучения, тепловые нейтроны не вызывают значительных повреждений структуры кристалла. Теперь, для сравнения с предыдущими результатами мы облучали кристаллы CdZnTe тепловыми нейтронами [12-А].

В качестве исследуемого материала были выбрани два кристаллических полупроводника CdZnTe. Размеры образцов составляли 7x7x2 мм соответственно. Кристаллы выращивались методом направленной кристаллизации.

После подборки полупроводниковые кристаллы подвергались облучению тепловыми нейтронами из Pu-Be-го источника. Значения потока тепловых нейтронов и метод измерения электрофизических параметров образцов приведены во второй главе. Изучение структурных изменений проводилось рентгеновским аппаратом ДРОН-3 в интервале углов от 10 до 60<sup>0</sup>.

Рентгеновский анализ ранее изученных образцов CdTe показал, что структура кристаллов улучшается за счет упорядочения и переориентации ячеек кристаллической решетки, также появляются новые изотопы, которые в определенной степени совершенствуют межатомные связи.

Для теллурида кадмия цинка наши исследования дали обратные результатов. Под действием потока тепловых нейтронов структурные характеристики исследованных кристаллов изменяются в отрицательном направлении (Рисунки 3.9-3.18).







анализа, облученного CdZnTe потоком 2,64 $\cdot$ 10<sup>7</sup> н/см<sup>2</sup>.

Первый образец





Рисунок 3.12. Результат рентгенодифракционного анализа, облученного CdZnTe потоком 2,16·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup>. Первый образец





Рисунок 3.14. Результат рентгенодифракционного анализа, необлученного CdZnTe. Второй образец





Рисунок 3.16. Результат рентгенодифракционного анализа, облученного CdZnTe потоком 1,3·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup>. Второй образец





Рисунок 3.18. Результат рентгенодифракционного анализа, облученного CdZnTe потоком 1,21·10<sup>9</sup> н/см<sup>2</sup>. Второй образец



Рисунок 3.19. Зависимость интенсивности рентгеновских рефлексов от величины потока тепловых нейтронов

Из рисунков видно, что интенсивность отраженного рентгеновского излучения после облучения тепловыми нейтронами падает. Это означает, что центры отражения в кристаллической решетке переориентируются или в структуре кристалла появляются первичные радиационные дефекты. Это можно заметить на зависимостях интенсивности отраженного рентгеновского излучения от потока тепловых нейтронов для CdZnTe, приведенных на рисунке 3.19. Из рисунка видно, что ход изменения интенсивности обеих образцов, как и в случае теллурида кадмия, одинаков.

Исследования в области изучения влияния малых потоков тепловых нейтронов на структурные параметры CdZnTe не дали ожидаемых результатов, как в случае с CdTe. Тепловые нейтроны способствовали появлению радиационных дефектов в структуре кристалла, которые в свою очередь приводили к снижению интенсивности отражения рентгеновского излучения.

# 3.5. Сравнение результатов облучения тепловыми нейтронами полупроводниковых кристаллов CdZnTe и CdTe

В связи с возрастающим интересом к применению CdZnTe кристаллов в качестве детекторов ионизирующего излучения с высоким энергетическим разрешением при комнатной температуре, особенно в задачах, связанных с

космическими и ускорительными исследованиями, в последнее время усилились исследования их радиационной стойкости. Одним из ключевых направлений исследований, осуществляемых, в частности, в рамках проектов НАСА/Годдарда (NASA/Goddard Space Flight Center), является изучение поведения CdZnTe при воздействии видов ионизирующего излучения. Различные различных энергичные частицы в результате столкновения с кристаллом вызывают повреждения, создавая дислокации в структуре кристалла. Эти дефекты в свою очередь увеличивают плотность мест захвата носителей заряда, что приводит к падению спектрального разрешения [133]. Сообщается, что под действием потока нейтронов промежуточных энергий CdZnTe до флюенса 10<sup>10</sup> н/см<sup>2</sup> сохраняет свою устойчивость и этот результат показывает возможность использования указанных кристаллов в космическом пространстве [134].

В данном параграфе приведены результаты облучения тепловыми нейтронами CdZnTe и CdTe, проведено их сравнение, а также сделан вывод об устойчивости данных кристаллов к нейтронному излучению [13-A].

Методика выращивания и проведения рентгеноструктурного анализа приведены во второй главе. С помощью этилового спирта поверхность кристаллов было очищена от загрязнений. После структурного анализа кристаллы подвергались нейтронному облучению из Pu-Be-го источника нейтронов. Для выделения тепловых нейтронов использовался слой парафина. Для выяснения появившихся изменений в структуре кристалла после облучения повторили рентгенодифракционный анализ.

На рисунке 3.20 (а, б) приведены результат рентгеноструктурного анализа кристаллов теллурида кадмия и теллурида кадмия цинка. Из рисунков видно, что ренгенодифрактограммы кристаллов имеют четко выделенные рефлексы. Эти рефлексы являются результатом отражения рентгеновского излучения от кристаллических плоскостей.

Результаты анализа показали, что нейтронное излучение (именно тепловые нейтроны) на кристаллы CdZnTe и CdTe действует по-разному. Из рентгенодифракционных кривых видно, что под действием определенного потока тепловых нейтронов в кристаллах CdZnTe и CdTe наблюдаются совершенно разные эффекты. Примером данных высказываний являются нижеприведенные рисунки (Рисунок 3.21).



Рисунок 3.20. Результат рентгеновского анализа полупроводниковых кристаллов CdTe (а) и CdZnTe (б) до облучения.



Рисунок 3.21. Результат рентгеновского анализа полупроводниковых кристаллов CdTe (a) и CdZnTe (б), облученных потоком тепловых нейтронов 2,16·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup>

Из рисунков видно, что при облучении потоком тепловых нейтронов 2,16·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup> структура кристаллов меняется. В кристаллах CdTe (Puc. 3.21, a) наблюдается усовершенствование структуры за счет выведения структурных дефектов из состава кристалла и упорядочения существующих кристаллических

ячеек, которые являются центром отражения. Свидетельством этого процесса явлются узкие и высокие рефлексы отражения рентгеновского излучения.

Однако, в кристаллах CdZnTe наблюдается иная картина. Тепловые нейтроны способствуют появлению радиационных дефектов кристаллического строения. На рисунке 3.21 (б) можно наблюдать появление множества центров отражении (в интервале углов от 10 до 30<sup>0</sup>, 35-40<sup>0</sup>, 45-50<sup>0</sup>), которые расположены хаотично.

Итак, выяснилось, что механизм действия тепловых нейтронов на кристаллические полупроводники CdZnTe и CdTe отличается друг от друга. В случае теллурида кадмия наблюдается совершенствование структуры кристалла, а для теллурида кадмия цинка можно заметить ухудшение внутреннего строения. Причина такого явления может быть связана с межатомными связами кристаллов. Эти кристаллы отличаются тем, что один из них двухкомпонентный, а другой трехкомпонентный.

Предел устойчивости кристаллической решётки завысит от числа компонентов, то есть числа атомов в их элементарной ячейке. Одним из условий устойчивости кристаллических решёток является соответствие параметров решёток, входящих в их состав атомов. Согласование этого параметра завысит от числа компонентов и чем больше компонентов, тем меньше область согласования параметров решетки. Следовательно, передел устойчивости трёхкомпонентного кристалла будет меньше и достаточно незначительного внешнего возмущения, чтобы разрушать структуру кристаллической решётки.Видимо, отличие в поведении CdTe и CdZnTe при облучении малым потоком тепловых нейтронов связано с этим.

#### Выводы третьей главы

На основании анализа экспериментальных данных и их интерпретации, изложенных в третьей главе диссертации, можно сформулировать следующие обобщённые научные выводы, отражающие основные закономерности, выявленные в процессе исследования влияния облучения тепловыми

нейтронами на электрофизические и структурные свойства полупроводниковых соединений CdTe и CdZnTe:

1. Проведённые измерения электрофизических характеристик продемонстрировали существенное изменение проводимости плёнок CdTe/CdTe под действием облучения малыми потоками тепловых нейтронов. Установлено, что в зависимости от плотности нейтронного потока, проводимость материала может увеличиваться на один-два порядка (от 10 до 100 раз), что указывает на активацию донорных или акцепторных центров в результате нейтронного воздействия и возможное улучшение подвижности носителей заряда. В то же время, для структуры CdTe/Si аналогичное облучение не вызвало значимых изменений в проводимости – полученные значения остались в пределах экспериментальной погрешности. Облучение CdZnTe, монокристаллов напротив, привело к снижению электропроводности, что, вероятно, связано с увеличением концентрации захватывающих уровней или нарушением кристаллической упорядоченности, ведущей к деградации носителей заряда.

2. Рентгеноструктурные исследования, проведённые с использованием метода дифракции рентгеновских лучей, показали, что в области малых потоков тепловых нейтронов наблюдается улучшение кристаллической структуры плёнок CdTe. Это подтверждается увеличением интенсивности рентгеновских рефлексов, что свидетельствует о снижении количества дефектов, повышении степени упорядоченности и, возможно, рекристаллизации материала под действием слабого радиационного воздействия. Установлена чёткая зависимость между интенсивностью дифракционных максимумов и величиной нейтронного потока, что может быть использовано как диагностический инструмент при оценке состояния материала. В отличие от этого, в образцах CdZnTe после облучения фиксируется снижение интенсивности рентгеновских рефлексов, что указывает на разрушение кристаллической решётки, и ухудшение структурного особенно при увеличении флюенса нейтронов. Это порядка, может свидетельствовать о более низкой радиационной стойкости данного материала по сравнению с чистым CdTe.

#### ГЛАВА 4. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ CdZnTe И CdTe

## 4.1. Оптимизация оптоэлектронных свойств системы Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te для применения в солнечных элементах

В условиях быстро растущих выбросов парниковых газов в атмосферу важно разрабатывать технологии, которые могут генерировать энергию с низкими затратами для окружающей среды и обратить вспять усиливающееся изменение климата. Однако для успешного перехода от ископаемого топлива к возобновляемым источникам энергии человечество не может полагаться исключительно на существующие материалы, а должно сосредоточиться на синтезе других классов веществ, особенно наноматериалов с улучшенными и легко контролируемыми свойствами. Традиционные методы производства энергии не смогут удовлетворить энергетические потребности населения мира. Поэтому, разработка новых методов получения высокоэффективных материалов является приоритетным направлением.

Как указано ранее, для чистого CdTe ширина запрещенной зоны составляет 1,5 эВ, как раз в середине солнечного спектра, и имеет высокий коэффициент поглощения для видимого солнечного спектра [135], однако, для получения максимальной производительности ширина запрещенной зоны CdTe должна быть увеличена до 1,8 эВ [136], поскольку, согласно пределу Шокли-Кейссера, максимальная эффективность преобразования достигается для материалов с шириной запрещенной зоны 1,5 эВ и более [137], а также спектр солнечного излучения, принимаемого Землей, имеет максимальную интенсивность на длине волны, почти соответствующей фотонам с энергией 1,5 эВ [137].

Однако известно, что для смешанных полупроводниковых материалов, таких как CdTe и его сплавы, максимальная эффективность (предел Шокли -Кейссера) достигается для более коротких длин волн. Поэтому необходимо увеличить ширину запрещенной зоны и оптимизировать поглощательную способность CdTe для пучков с энергией выше 1,5 эВ. Это может быть

достигнуто путем легирования сверхячейки CdTe посторонними ионами, такими как Zn или Mg, поскольку одним из преимуществ этого материала является возможность контролировать и регулировать ширину запрещенной зоны с помощью различных концентраций примесей.

Легирование Zn вызывает существенное изменение оптических, электрических и механических свойств тонких пленок CdTe. Нанокристаллы системы Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te с низким содержанием Zn (до 20%), в частности, были тщательно изучены для детекторов излучения (гамма- и рентгеновского излучения) [138], которые показали более высокое электрическое сопротивление и меньшую плотность дефектов по сравнению с чистым CdTe. Однако было показано, что низкие концентрации вносят мало изменений в оптимизацию запрещенной зоны.

Принимая во внимание вышеизложенные пункты, в этом параграфе [3-A, 8-A, 14-A] изучено влияние процента легирования Zn на структурные (размерные) и электронные свойства системы  $Cd_xZn_{1-x}Te$  в полном диапазоне  $0 \le x \le 1$  со всеми возможными концентрациями легирования. Легирование осуществляется путем замены атомов Cd на Zn в ячейке CdTe.

Для исследования структурных и электронных характеристик твёрдого раствора Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te были проведены расчёты с использованием DFT (см. главу 2).

Оптимизированные структурные параметры всех изученных нанокристаллов этой системы приведены в таблице 4.1. Согласно данным таблицы 4.1 и рисунка 4.1, при увеличении содержания Zn наблюдается линейное уменьшение параметра решётки и объёма кристаллической ячейки, что соответствует закону Вегарда.

Аппроксимация зависимости объёма от концентрации цинка (сплошная линия на рисунке 5) описывается уравнением V=-11,578x+315,73. Эта формула позволяет прогнозировать объём нанокристаллов системы Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te для любого значения x в пределах от 0<x<1.

	Параметры решетки и объем системы			Ошибка
Cd <sub>x</sub> Zn <sub>1-x</sub> Te	Эта работа		Эксперимент	В
	a=b=c, Å	$V, A^3$	a=b=c, A	<b>a</b> , %
CdTe	6.7364	305.7004	6.5 [139]	3.5
Cd <sub>0.75</sub> Zn <sub>0.25</sub> Te	6.6299	291.4278	-	-
Cd <sub>0.5</sub> Zn <sub>0.5</sub> Te	6.5140	280.1688	-	-
Cd <sub>0.25</sub> Zn <sub>0.75</sub> Te	6.4496	268.2909	-	-
ZnTe	6.3774	259.3805	6.20 <sup>[140]</sup>	2.7

Таблица 4.1. Значение структурных параметров Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te



Рисунок 4.1. Зависимость объема от содержания Zn для образцов Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te.

На рисунке 4.2 (а) представлены результаты сравнения экспериментальных рентгеновских дифрактограмм, полученных с помощью дифрактометра ДРОН-3, с теоретическими порошковыми дифрактограммами, рассчитанными на основе оптимизированной кристаллографической структуры с использованием программного обеспечения REFLEX, входящего в пакет Materials Studio. В обоих случаях использовалось излучение CuK $\alpha$  ( $\lambda$  = 1,54 Å).

Как видно из квантово-механических расчётов, представленных на рисунке 4.2 (б), для системы  $Cd_xZn_{1-x}Te$  наблюдается изменение межплоскостного расстояния при увеличении концентрации цинка. Это проявляется в виде систематического смещения дифракционных пиков в область больших углов 20, что указывает на уменьшение параметра кристаллической решётки. Результаты, полученные методом ab initio, включая параметры элементарной ячейки, длины межатомных связей и углы между ними, а также

синтезированная порошковая рентгенограмма, демонстрируют высокую степень согласия с экспериментальными данными, как настоящего исследования, так и других работ в данной области. Учитывая достоверность этих результатов, для лальнейшего анализа электронно-энергетических И свойств оптических модифицированных кристаллов CdTe был использован теории метод функционала плотности (DFT).





CdTe (a) и порошковые дифрактограммы (б) для системы Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te

Электронные свойства  $Cd_xZn_{1-x}$  Te анализировались с точки зрения ширины запрещённой зоны, распределения энергетических зон и зависимости ширины запрещённой зоны от плотности электронных состояний (DOS) в пределах элементарной ячейки. Понимание механизмов формирования этих характеристик имеет ключевое значение для разработки и оптимизации фотоэлектрических устройств на основе CdTe и родственных материалов. В таблице 4.2 представлены значения ширины запрещённой зоны, полученные в рамках теории функционала плотности (DFT) с применением обменно-корреляционного потенциала mBJ (TB-mBJ), и их сравнение с доступными экспериментальными данными.

На рисунке 4.3 представлена зависимость изменения величины запрещенной зоны от изменения содержания цинка в системе. Величина запрещенной зоны увеличивается по закону  $E_{Bg} = 0,6016x + 1,4932$ , где х — концентрация цинка в диапазоне 0<x<1. Обычно данные наименьших квадратов

позволяют найти величину запрещенной зоны для остальных промежуточных концентраций цинка.

Таблица 4.2. Значения запрещенной зоны, рассчитанные с помощью mBJ - приближений для системы Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te в сравнении с экспериментальными результатами

Система		CdTe	Cd <sub>0.75</sub> Zn <sub>0.25</sub> Te	Cd <sub>0.5</sub> Zn <sub>0.5</sub> Te	Cd <sub>0.25</sub> Zn <sub>0.75</sub> Te	ZnTe
Запрещ. зона, эВ	Эта работа	1.501	1.672	1.788	1.840	2.169
	Экспери мент	1.5 [141]	-	-	-	2.25 <sup>[141]</sup>
Энергия решетки	Эта работа	-24764.3	-76272.271	-41933.67	-91462.440	-17169.1



Рисунок 4.3. Зависимость энергии запрещенной зоны от содержания Zn для образцов Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te.

Проведённые расчёты ширины запрещённой зоны для чистых теллуридов кадмия (CdTe) и цинка (ZnTe) показали высокую степень совпадения с экспериментальными данными. Это свидетельствует о корректности выбранного обменно-корреляционного функционала и достоверности использованных расчётных методов в рамках теории функционала плотности (DFT). Установлено, что при увеличении концентрации легирующих примесей ширина запрещённой зоны, как правило, возрастает линейно. Однако в отдельных случаях наблюдаются отклонения от этой зависимости, что может быть

обусловлено квантовыми эффектами, присущими рассматриваемым материалам, либо возникающими неточностями в проведённых квантово-механических расчётах.

Рассчитанная полная плотность электронных состояний для структурно оптимизированных моделей Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te представлена на рисунке 4.4 (а). Уровень Ферми обозначен штриховой линией, расположенной в точке отсчёта (энергия равна нулю).

Анализ расчётной плотности состояний (DOS) проводится с учётом вклада различных s-, p- и d-орбиталей атомов, входящих в состав материала, а также на основе распределения плотности заряда. С увеличением концентрации цинка наблюдается расширение запрещённой зоны И повышение плотности электронных состояний (рис. 4.4 (a,b)). В области отрицательных энергий появляются дополнительные энергетические уровни, обусловленные вкладом рэлектронов орбиталей Zn, которые отсутствуют в зонной структуре чистого CdTe (рис. 4.4, а). Плотность электронных состояний для крайних членов твёрдого раствора — CdTe и ZnTe – представлены на рисунке 4.4 (b). Они демонстрируют, что чистые теллуриды характеризуются сравнительно низкой плотностью состояний в зоне проводимости. Однако по мере увеличения содержания цинка в системе Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te и приближении состава к ZnTe наблюдается рост плотности состояний как в валентной зоне, так и в зоне проводимости.



Рисунок 4.4. Полная плотность состояний для системы Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te (a) и сравнение плотности электронных состояний чистых CdTe и ZnTe (b)

Из представленных результатов видно, что с увеличением концентрации цинка возрастает ширина запрещённой зоны и плотность электронных состояний, а также формируются новые энергетические уровни в области отрицательных энергий. Эти уровни обусловлены вкладом р-электронов орбиталей Zn, которые отсутствуют в зонной структуре чистого теллурида кадмия (рис. 4.5 (a–d)).





Положение уровня Ферми составляет 0 эВ.

Энергетические зонные диаграммы, представленные на рисунке 4.5, свидетельствуют о том, что все исследованные материалы обладают прямозонной структурой. Это делает их перспективными для применения в качестве оптических материалов. Расчётные зонные структуры подтверждают наличие прямой запрещённой зоны во всех трёх сплавах системы CdxZn1-xTe, причём её ширина возрастает по мере увеличения параметра состава х (концентрации Zn).

Оптические параметры материалов, такие как мнимая часть диэлектрической проницаемости (ε<sub>2</sub>), коэффициент поглощения и коэффициент экстинкции, позволяют оценить характер отклика материала на воздействие фотонного излучения. В частности, оптические свойства твёрдого раствора Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te анализируются с использованием как действительной (ε<sub>1</sub>), так и мнимой (є2) составляющих комплексной диэлектрической проницаемости. Действительная часть (є<sub>1</sub>) характеризует способность материала аккумулировать энергию, воспринимаемую при нулевой или приближённой к нулю частоте эта величина считается внутренним свойством вещества. В то время как мнимая  $(\varepsilon_2)$ отражает способность материала поглощению энергии часть к электромагнитного излучения и напрямую зависит от его зонной структуры. На рисунке 4.6 (a, b) представлены графики зависимости є<sub>1</sub> и є<sub>2</sub> от энергии падающих фотонов для всех нанокристаллических моделей системы Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te (при 0 ≤ х ≤ 1).



Рисунок 4.6. Рассчитанные действительная (а) и мнимая (б) части

диэлектрической проницаемости системы Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te

Отрицательные значения действительной части диэлектрической проницаемости (є<sub>1</sub>) свидетельствуют о металлической природе материала. Иными словами, при достаточно высокой энергии падающего фотона система Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te начинает демонстрировать характеристики, присущие металлам. Таким образом, по поведению є<sub>1</sub> можно проводить оценку металличности соединений.

При прохождении света через упругую среду наблюдается явление экстинкции, обусловленное совокупным действием процессов поглощения и рассеяния света. Иными словами, экстинкция характеризует степень ослабления светового пучка с определённой длиной волны при его прохождении через материал. Коэффициент экстинкции (k) является количественной мерой этого явления. Зависимости коэффициента экстинкции от энергии фотонов для исследуемых образцов представлены на рисунке 4.7.



Рисунок 4.7. Зависимость коэффициента экстинкции от энергии фотона для системы Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te

В условиях низкого рассеяния и высокого поглощения коэффициент экстинкции (k) приближается по значению к коэффициенту поглощения, что упрощает интерпретацию оптических свойств материала. На рисунках 4.8 (a, b) представлены графики поглотительной способности и оптической проводимости исследуемых систем в инфракрасной и видимой областях спектра солнечного излучения. Это особенно важно, поскольку материалы, обладающие высокой активностью в этих диапазонах, считаются перспективными для применения в составе тандемных солнечных элементов.

Коэффициент поглощения ( $\alpha$ ) характеризует глубину проникновения света в материал до его полного поглощения. Этот процесс зависит как от длины волны (энергии) падающего фотона, так и от внутренних свойств материала [142]. Расчётные максимумы коэффициентов экстинкции (рис. 4.7) и поглощения (рис. 4.8 (a)) расположены в одном и том же диапазоне энергий, что согласуется с положениями теории дисперсии. Спектры оптической проводимости  $\sigma(\omega)$ , рассчитанные в области низких энергий (рис. 4.8 (a)), демонстрируют несколько пиков, связанных с объёмными плазмонными резонансами, возникающими в

результате переходов электронов из валентной зоны в зону проводимости. Значения  $\sigma(\omega)$  в этом диапазоне отражают вклад как межзонных, так и внутризонных переходов. Полученные результаты способствуют более глубокому пониманию оптических свойств исследуемых материалов и могут быть полезны для разработки функциональных устройств, в частности, в области фотоники и солнечной энергетики. Кроме того, они представляют интерес для исследователей, работающих над созданием материалов с заданными оптическими характеристиками.



Рисунок 4.8. Расчет коэффициента поглощения (а) и оптическая проводимость (b) как функция энергии фотона для системы Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te

Легирование кристаллической решётки CdTe цинком приводит к увеличению ширины запрещённой зоны до оптимального значения, благодаря чему наночастицы Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te рассматриваются как перспективные кандидаты для применения в тонкоплёночных солнечных элементах в качестве поглощающего слоя. Результаты исследований электронных свойств этих материалов были сопоставлены с доступными экспериментальными данными ранее И опубликованными теоретическими расчётами. Установлено, что для легированных теллуридов в области отрицательных энергий возникают дополнительные энергетические уровни, обусловленные вкладом р-электронов орбиталей Zn, которые отсутствуют в зонных диаграммах чистого CdTe и ZnTe. Спектры поглощения исследуемых нанокристаллов демонстрируют смещение краёв поглощения в сторону более коротких волн по мере увеличения концентрации цинка. При этом установлено, что при концентрации Zn, соответствующей x = 0.75, коэффициент поглощения ( $\alpha$ ) достигает наибольших значений, что делает данный состав особенно эффективным для солнечных элементов. Полученные результаты могут быть использованы для дальнейшего моделирования структур на основе CdTe-подобных систем, планируемых к синтезу, а также при анализе взаимосвязи между составом, структурой и свойствами материалов.

## 4.2. Комбинированный рентгеноструктурный анализ и квантовомеханическая интерпретация влияния тепловых нейтронов на геометрию и электронные свойства CdTe

Возможности преобразования солнечной энергии в электричество рассматриваются в контексте прогнозируемых глобальных энергетических потребностей в XXI веке. Поэтому весьма актуальной задачей, стоящей перед учеными и инженерами, является изучение ряда электронных, оптических, тепловых и других характеристик новых материалов с целью их применения в солнечной энергетике. Огромный научный и практический интерес к этим процессам обусловлен тем, что они направлены на решение глобальных проблем энергосбережения. Изучение свойств материалов открывает возможность

синтеза и разработки материалов с оптимальными характеристиками для использования в солнечной энергетике.

Наиболее перспективным материалом для изготовления солнечных элементов являются пленки CdTe, эффективность преобразования света у ных превышает 21,6% [143]. Повышение эффективности с < 1% до приемлемых уровней с рекордной исследовательской эффективностью элемента > 20% требует обработки кристаллической структуры с использованием современных производственных процессов [144]. CdTe, p-слой в устройстве с pn-переходом из-за естественно содержащихся вакансий Cd, которые улучшают его характеристики p-типa, также является поглощающим материалом, поскольку он захватывает высокий процент фотонов в солнечном спектре при малой толщине [145].

Во введении указано, что наряду с современными методами модификации структуры кристаллов, обработка с использованием облучения является многообещающим методом и из обзора литературы выяснилось, что обработка облучением приводит к появлению дополнительных энергетических уровней в запрещенной зоне, что в свою очередь облегчает переход электронов из валентной зоны (ВЗ) в зону проводимости.

Известно, что деградационные процессы в оптоэлектронных устройствах, происходящие при внедрении тяжелых частиц, а также в результате ядерных реакций с возможным последующим распадом их продуктов, связаны с появлением новых атомов в решетке, и это влияет на электрические и оптические свойства приборов. Радиационная стойкость полупроводниковых структур CdTe, работающих в поле излучения, является основным критерием выбора материала. Помимо радиационной стойкости, важными параметрами считаются высокое сопротивление и низкая концентрация ловушек свободных носителей. Возникающие при облучении активные радиационные дефекты влияют на электрофизические и оптические свойства материала и процессы захвата носителей заряда глубокими уровнями [146].

Учитывая перечисленные факты в рамках данного параграфа [4-A, 5-A, 15-A] было проведено компьютерное моделирование процесса взаимодействия тепловых нейтронов с полупроводниковыми кристаллами CdTe. Также результаты моделирования были сравнены с экспериментальными результатами, проведенными ранее.

Методы проведения экспериментальных исследований по облучению, рентгеноструктурному анализу и изучению оптических свойств подробно указаны во второй главе.

Структурные и электронные свойства CdTe исследуются на основе теории функционала плотности. Расчеты проводились в пакете плоских волн VASP [147]. Впервые кристаллические структуры кубической фазы были полностью оптимизированы с учетом релаксации параметров решетки и атомных позиций.

Для моделирования влияния облучения на свойства CdTe была создана суперячейка, состоящая из 216 атомов (108 кадмия и 108 теллура). Затем из суперячейки был удален один атом кадмия как эквивалент дефекта, который появляется после облучения потоком тепловых нейтронов. Далее, структуры были релаксированы с использованием функционала GGA [148]. После серии тестов на сходимость порог кинетической энергии был установлен на уровне 450 эВ. Значения ширины запрещенной зоны исследуемых материалов также были рассчитаны и сравнены с использованием обменно-корреляционного функционала GGA.

На рисунке 4.9 показаны трехмерные оптимизированные структуры CdTe. Из рисунка 4.9 (а) видно, что исходная ячейка CdTe имеет кубическую структуру в виде «цинковой обманки». Атомы кадмия расположены на вершинах и гранях кристаллической решетки. Атомы теллура расположены внутри кристаллической ячейки. Как видно из рисунка 4.9, каждый атом кадмия связан с четырьмя атомами теллура. На рисунке 4.9 (б) показана структура модифицированной ячейки Cd<sub>107</sub>Te<sub>108</sub>, которая состоит из 107 атомов кадмия и 108 атомов теллура.


Рисунок 4.9. Трехмерные оптимизированные структуры CdTe. a) исходная ячейка; б) модифицированная ячейка Cd<sub>107</sub>Te<sub>108</sub>.

Из рисунка 4.9 видно, что один атом теллура после отрыва одного атома кадмия не образует связи с остальными атомами кристаллической ячейки. Освобождающиеся свободные атомы кадмия и теллура проявляют себя как дефекты кристаллической решетки и влияют на структурные и электрические параметры материала. В таблице 4.3 приведены результаты расчетов и экспериментов по измерению параметров кристаллической решетки CdTe.

Таблица 4.3. Результаты расчетов и экспериментов по структурным параметрам CdTe

Параметр	Исходная ячейка CdTe	Модифицированная ячейка Cd <sub>107</sub> Te <sub>108</sub>	Эксперимент
α=β=γ, град.	90,0	90.0082	90,0
a=b=c, Å	6,51	6,50	6,50-6,36
V, Å <sup>3</sup>	275,79	275,19	274,625-257,259

Из таблицы 4.3 видно, что результаты моделирования и экспериментов [149] для структурных параметров CdTe совпадают.

Результаты расчетов показывают, что после удаления одного атома кадмия из структуры Cd<sub>107</sub>Te<sub>108</sub> наблюдается уменьшение параметра *a* и объема элементарной ячейки. Эта тенденция прослеживается и в экспериментальных результатах. Уменьшение параметра *a* и объема кристаллической ячейки CdTe в четвертом столбце связано с облучением кристалла тепловыми нейтронами.

Ранее экспериментально изучалась структура кристаллов CdTe после облучения тепловыми нейтронами. Поскольку кадмий является хорошим поглотителем тепловых нейтронов, основные ядерные реакции происходят с этим элементом. В результате этого количество атомов кадмия в материале уменьшается и появляются новые изотопы. Таким образом, структура материала изменяется, что отражается на его рентгенодифрактограммах.

Экспериментально показано, что в области малых потоков тепловых нейтронов рефлексы сужаются и смещаются в сторону малых углов. На рисунках 4.10 (сравниваются полученные экспериментально рентгеновские дифрактограммы и рентгеновские дифрактограммы, полученные из оптимизированной геометрии с помощью программы REFLEX, входящей в пакет программ Materials Studio.



Рисунок 4.10. Результаты рентгеноструктурного анализа CdTe. а) сравнение экспериментальных рентгенодифрактограмм необлученных (вверху) и облученных образцов потоком 1,3·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup> (внизу); б) расчетные рентгенодифрактограммы исходного CdTe и модифицированной ячейки Cd<sub>107</sub>Te<sub>108</sub>.

Отражения, которые наблюдаются на рентгенодифрактограмме, являются результатом отражения рентгеновских лучей от кристаллических плоскостей

(111), (220) и (311) соответственно (Рисунок 4.10, а, б) На основании результатов квантово-химических расчетов для CdTe можно заметить изменение параметра решетки и межплоскостного расстояния, поскольку рентгенодифрактограммы показывают смещение рентгеновских отражений в сторону малых углов, что хорошо согласуется с предыдущими экспериментальными данными [1-А]. Смещение рентгеновских отражений в сторону малых углов происходит из-за флуктуаций электронной плотности внутри материала.

Электронные свойства CdTe оценивались по форме запрещенной зоны, распределению энергетических зон и другим параметрам. Эти параметры являются важными параметрами полупроводниковых кристаллов, которые используются для создания фотопреобразующих устройств. В таблице 2 приведены значения энергии Ферми, ширины запрещенной зоны элементарной ячейки и суперячейки Cd<sub>107</sub>Te<sub>108</sub>. Таблица 4.3 показывает, что при переходе от исходной ячейки к модифицированной ширина запрещенной зоны уменьшается вдвое. Также наблюдается уменьшение значения полной энергии на элементарную ячейку.

Таблица 4.3. Квантово-механические параметры элементарной ячейки и суперячейки CdTe

Параметр	Исходная ячейка CdTe	Модифицированная ячейка Cd107Te108
Энергия Ферми, эВ	1,81	2,69
Ширина 33, эВ	1,5	0,75
Полная энергия на элементарную ячейку	4,80	4,76

Рассчитана парциальная и полная плотность электронных состояний для системы исходной и модифицированной ячейки Cd<sub>107</sub>Te<sub>108</sub> (рисунок 4.11). Рассчитанная плотность состояний этих систем обсуждается с точки зрения вклада s-, p-, d-состояний составляющих атомов.

Анализ плотности состояний исходной ячейки CdTe показывает, что при формировании электронных состояний ЗП в диапазоне энергий от -5 до -3 эВ

вклад s-состояний атома кадмия существенно велик. По мере приближения к запрещенной зоне увеличивается вклад p-состояний атома теллура. При формировании электронных состояний ЗП в диапазоне энергий до 5 эВ вклад s-состояний атома кадмия очень велик, затем инициатива в небольшой степени переходит к p-состояниям атома теллура.



Рисунок 4.11. Плотность электронных состояний исходной ячейки CdTe. На рисунке 4.12 представлена плотность электронных состояний модифицированной ячейки Cd<sub>107</sub>Te<sub>108</sub>.



Рисунок 4.12. Плотность электронных состояний модифицированной ячейки Cd<sub>107</sub>Te<sub>108</sub>.

Можно отметить, что основной вклад в формирование электронных состояний модифицированной ячейки Cd<sub>107</sub>Te<sub>108</sub> в области B3 вносят s-состояния атомов кадмия и p-состояния атомов теллура. В отличие от электронных состояний исходной ячейки, в данном случае плотность p-состояний атома теллура значительно выше. Это свидетельствует об уменьшении концентрации атомов кадмия в материале, на что указывают экспериментальные результаты.

В запрещенной зоне за счет р-состояний атома теллура появляются новые электронные состояния, которые приводят к уменьшению ширины запрещенной зоны. Можно заметить преимущественный вклад s-состояний атомов кадмия в B3. Другим важным аспектом является резкое увеличение плотности электронных состояний Cd<sub>107</sub>Te<sub>108</sub> относительно чистого CdTe. Обычно предполагается, что увеличение плотности состояния приводит к увеличению вакансий в кристалле, что в нашем случае обосновано появлением дефектов после облучения CdTe тепловыми нейтронами. Такое явление может сопровождаться увеличением поглотительной способности материала, что является весьма благоприятным эффектом.

В итоге изучен эффект воздействия малых потоков тепловых нейтронов на изменение геометрии и электронных свойств CdTe. Изменения, происходящие в структуре кристалла, исследованы методом рентгеноструктурного анализа, а результаты сопоставлены данными квантово-механических С расчетов. Результаты квантово-механического моделирования показали, что взаимодействия тепловых нейтронов с кристаллами CdTe приводят к смещению рентгенодифрактограмме образцов, а также сопровождается пиков на уменьшением ширины запрещенной зоны и изменением электрических свойств кристалла. Выявлено, что за счет протекания ядерных реакций тепловых нейтронов с атомами кадмия увеличивается роль р-состояний атомов теллура в формировании электронных состояний. Результаты расчета параметров решетки и ширины запрещенной зоны совпадают с экспериментально рассчитанными значениями.

# 4.3. Исследование оптических свойств CdTe экспериментальными и кванто-механическими методами

В дополнение к электронным свойствам, также были оценены несколько оптических параметров, таких как коэффициент поглощения, коэффициент потерь и фотопроводимость кристаллов [4-А, 16-А,17-А].

Методика проведения кванто-механических расчетов для вычисления оптических свойств приведена в параграфе 4.2. Экспериментальная часть работы подробно описана во второй главе.

Результаты кванто-механических расчетов оптических свойств дали такие результаты: оптическая полоса поглощения α (рисунок 4.13, a) исходного CdTe и модифицированного Cd<sub>107</sub>Te<sub>108</sub> начинается при 0,1 эВ. Для исходного CdTe полоса поглощения имеет максимум при энергии фотона 3,9 эВ (длина волны излучения 318 нм), а для модифицированного Cd<sub>107</sub>Te<sub>108</sub> максимум поглощения наблюдается при 2,6 эВ (длина волны излучения 477 нм). Это означает, что полоса поглощения смещается из ультрафиолетовой области в сторону видимой части спектра (точнее, в синюю), а коэффициент поглощения увеличивается на 20%. Далее, резкое снижение коэффициента поглощения отмечено при энергиях фотонов от 6 до 8 эВ для обоих исследованных кристаллов, так как в этой области уменьшается плотность электронных состояний. В диапазоне энергий фотонов от 1 до 4 эВ можно заметить улучшение коэффициента проводимости (рисунок 4.13, б) модифицированного Cd<sub>107</sub>Te<sub>108</sub>. Перечисленные изменения позволяют широко использовать эти полупроводниковые кристаллы для создания фотопреобразующих устройств. В диапазоне энергий фотонов от 0,1 до 3 эВ коэффициент потерь (рисунок 4.13, в) обеих структур имеет одинаковое поведение. Для высокоэнергетических фотонов этот параметр постепенно увеличивается.

Расчеты показывают, что влияние малых потоков тепловых нейтронов положительно сказывается на оптических свойствах кристаллов CdTe. Согласно

рисунков 4.13, облучение увеличивает поглотительную способность и фотопроводимость CdTe практически во всех диапазонах энергий.



Рисунок 4.13. Оптические характеристики исходного CdTe и модифицированного Cd<sub>107</sub>Te<sub>108</sub>. а) поглощение; b) проводимость; c): коэффициент потерь энергии.

Кроме того, пики поглощения CdTe после облучения смещаются в сторону меньших энергий, что указывает на уменьшение ширины запрещенной зоны и подтверждает результаты, приведенные в таблице 4.3.

Экспериментальные результаты по исследованию поглотительной способности CdTe показаны на рисунках 4.14 и 4.15. Образцы облучались потоком тепловых нейтронов 1,3·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup> и 4,32·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup> соответственно.



Рисунок 4.14. Зависимость коэффициента поглощения от длины волны падающего фотона до и после облучения потоком 1,3·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup>

Как видно из рисунка 4.14 СdTe имеет хорошую поглотительную способность в области видимого света. Сравнение кривых поглощения CdTe до и после облучения тепловыми нейтронами потоком 1,3·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup> показывает, что поглотительная способность материала увеличивается во всем диапазоне исследований. В диапазоне малых потоков тепловых нейтронов, образовавшиеся свободные электроны и изотопы серебра можно считать, как точечные дефекты, небольшой концентрации. Некоторые предыдущие исследования показали, что дефекты оказывают очевидное влияние на электронную структуру и оптические свойства материалов и в определенной степени стимулируют различные характеристики материала. Именно такой процесс можно наблюдать в поглотительной способности CdTe. Точечные дефекты служат центром захвата фотонов светового излучения.



Рисунок 4.15. Зависимость коэффициента поглощения от длины волны падающего фотона до и после облучения потоком 4,32·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup>

Наряду с появлением дефектов возможной причиной увеличения коэффициента поглощения может быть появление промежуточных соединений в структуре кристалла после облучения. Если эти промежуточные соединения имеют более высокие коэффициенты поглощения на длине волны, которая используется для измерения поглощающей способности, то эта последняя может увеличиться. Но по мере возрастания потока тепловых нейтронов до значения 4,32·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup> степень разрушений кристаллической решетки и количество дефектов возрастают, в результате чего коэффициент поглощения уменьшается (Рис. 4.15). Кроме этого, длительное облучение тепловыми нейтронами приводит к увеличению концентрации Ag. Так как для исследования были использованы полупроводниковые кристаллы CdTe:Cl, возникшие атомы серебра соединяются с атомами хлора и образуют промежуточную соединению AgCl. Появившиеся на кривую поглощения CdTe два пика в области длин волн 549 и 577 нм относятся к этому соединению.

Результаты расчетов оптических параметров CdTe показали, что облученные малыми потоками тепловых нейтронов кристаллы вполне пригодны

для использования в солнечных батареях, поскольку согласно результатам, облучение приводит к улучшению оптических характеристик материала.

#### Выводы четвертой главы

Теоретическое и экспериментальное исследование электронных и оптических характеристик изученных материалов дали следующие важные результаты:

- кванто-механический расчет показал, что добавление определенной концентрации цинка в структуре CdTe оптимизирует ширину запрещенной зоны. По мере возрастания концентрации цинка наблюдается линейное увеличение ширины запрещенной зоны. Оптимальная концентрация Zn (x = 0,75) эффективно увеличивает коэффициент поглощения.

- результаты кванто-механических расчетов процесса влияния тепловых нейтронов с CdTe показали, что влияние малых потоков приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны материала. Выявлено, что после взаимодействии нейтронов роль р-состояний атома теллура в формировании электронных состояний возрастает. Кроме этого, результаты расчета и экспериментов по исследованию оптических свойств показали, что в области малых потоков коэффициент поглощения увеличивается. По мере возрастания потока тепловых нейтронов этот параметр уменьшается от исходного значения.

#### выводы

Следует отметить, что в ходе научных исследований основная цель диссертационной работы, заключающаяся в исследовании электрофизических, структурных и оптических характеристик полупроводниковых кристаллов CdTe и CdZnTe после облучения тепловыми нейтронами, достигнута. Все поставленные задачи решены и диссертационная работа выполнена полностью.

В рамках данной работы предлагаются следующие научные результаты:

1. Исследовано влияние тепловых нейтронов на электрофизические, структурные и оптические свойства полупроводниковых кристаллов CdTe, CdZnTe и CdTe/Si. Произведен кванто-механический расчет взаимодействия CdTe с тепловыми нейтронами [1-17-А].

2. Установлено, что при взаимодействии потока тепловых нейтронов от  $2,64 \cdot 10^7$  н/см<sup>2</sup> до  $7,34 \cdot 10^8$  н/см<sup>2</sup> проводимость пленок CdTe/CdTe увеличивается от 10 до 100 раз. При облучении пленок CdTe/Si в тех же потоках, значение проводимости изменяется мало [1-A, 6-A, 7-A, 14-A].

3. Методом РСА показано, что в области потока тепловых нейтронов от 2,64·10<sup>7</sup> н/см<sup>2</sup> до 3,02·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup> структура кристаллов CdTe улучшается. Длительное облучение ухудшает структуру CdTe [1-A, 2-A, 13-A].

4. Показано, что на рентгенодифрактограммах облученных тепловыми нейтронами CdTe при 20≈43,5<sup>0</sup> появляются новые рефлексы отражения. Установлено, что эти рефлексы связаны с образовавшимися в результате ядерных реакций тепловых нейтронов с ядрами кадмия изотопов серебра и палладия [2-A, 10-A, 11-A].

5. Методом PCA установлено, что облучение тепловыми нейтронами ухудшает структуру CdZnTe. Показано, что облучение тепловыми нейтронами от 2,64·10<sup>7</sup> н/см<sup>2</sup> до 3,02·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup> незначительно уменьшает проводимость [6-A, 12-A].

6. Кванто-механическим расчетом установлено, что добавление определенной концентрации Zn увеличивает ширину запрещенной зоны. С ростом концентрации Zn полоса поглощения смещается в область коротких волн. Оптимальная концентрация Zn в структуре  $Zn_xCd_{1-x}Te$  равна x=0,75. Показано, что в процессе взаимодействия тепловых нейтронов с CdTe после вырывания одного атома кадмия, как эквивалент одному акта взаимодействия нейтронов в формировании электронных состояний CdTe роль р-состояний атома Te возрастает. Показано, что максимум полосы оптического поглощения смещается из ультрафиолетовой части спектра с длиной волны 318 нм в сторону видимой части с длиной волны 477 нм. Коэффициент поглощения при этом увеличивается на 20% по сравнению с исходным значением [3-А, 8-А].

7. Показано, что при облучении потоком тепловых нейтронов 1,3·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup> увеличение коэффициента оптического наблюдается поглощения. Предположено, ЧТО обнаруженное явление есть результат появления промежуточных соединений, которые имеют большую поглотительную способность в исследованных длинах волн спектра. Облучение потоком 4,32·10<sup>8</sup> н/см<sup>2</sup> приводит к уменьшению этого параметра. На кривых поглощения облученного CdTe появляются дополнительно два пика поглощения (549 и 577 нм соответственно), которые относятся к соединению AgCl, что доказывает правильность утверждения о протекания ядерной реакции Cd(n, p)Ag под действием тепловых нейтронов [4-А, 5-А, 15-А, 16-А, 17-А].

## РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ПРАКТИЧЕСКОМУ ИСПОЛЬЗОВАНИЮ РЕЗУЛЬТАТОВ

В данной работе предложен способ улучшения электрофизических, структурных и оптических характеристик полупроводниковых кристаллов CdTe и CdZnTe нейтронным облучением. Обнаружен эффект «малых потоков» для кристаллов. Этот эффект можно применить для повышения производительности солнечных преобразователей. Помимо этого, эффект «малых потоков» применим для создания ядерных технологий, включая изготовление детекторов

ядерного излучения. Используя результаты данной работы можно оценить предел радиационной стойкости приборов, которые будут созданы на основе CdTe и CdZnTe.

Результатов кванто-механических расчетов по оптимизации электронных свойств CdZnTe можно использовать для промышленного производства высокоэффективных солнечных панелей.

#### ЛИТЕРАТУРА

- Wang, Y. 2D MoSe<sub>2</sub> capping layer passivation for high-efficiency large-area CdTe solar cells / Y. Wang, R. Wang, G. Wang, G. Fu, L. Zheng, Q. Song, Y. Zhou, J. Pan, M. Jiang, S. Peng // Journal of Power Sources. – 2025. -V. 629. – P. 236132.
- Wang, Q. Enhancement of detection performances of cadmium zinc telluride (CdZnTe) radiation detectors through sapphire substrates / Q. Wang, H. Huang, K. Xu, K. Gu, L. Lin, A. Lina, Y. Yang, K. Tang, Z. Zhang, M. Toda, L. Wang, J. Huang // Journal of Alloys and Compounds. – 2025. -V. 1010. – P. 177952,
- Султонов, Н. С. О возможности изготовления солнечных элементов на основе пленок теллурида кадмия / Н. С. Султонов, А.Т. Акобирова, Р.Б. Хамрокулов, К.Д. Азизов // Вестник Таджикского технического университета. – 2012. – №. 3. – С. 17-19.
- Махсудов, Б.И. Влияние тепловых нейтронов на излучательные характеристики InGaAsP/AlGaAs-гетеролазеров / Б.И. Махсудов // Квантовая электроника. 2015. Т. 45. № 3. С. 216-217.
- Махсудов, Б.И. Влияние малых потоков тепловых нейтронов на скорость роста бактерий Rhizobium IS TAAS-80 ТЈ / Б.И. Махсудов, К.Х. Салимов,
   Нигораи // Доклады НАН Таджикистана. 2020. Т. 63. № 11-12. С. 723-726.
- Lai, F. I. Suppression of SnS<sub>2</sub> secondary phase on Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> solar cells using multi-metallic stacked nanolayers / F.I. Lai, J.F. Yang, J.E. Li, Y.C. Hsu, S.Y. Kuo // Nanomaterials. – 2023. – V. 13. – Iss. 3. – P. 432-435.
- Султонов, Н. Электрические свойства пленок теллурида кадмия и барьера Шоттки на его основе (Al/CdTe) / H.C. Султонов, А.Т. Акобирова, Р.Б. Хамрокулов, О.В. Гафуров, Б.А. Рахматов, У.Р. Наимов // Известия Алтайского государственного университета. - 2022. –Т.126. - №4. – С. 74-78.

- Yanhong, L. Optoelectronic and photocatalytic properties of I–III–VI QDs: Bridging between traditional and emerging new QDs. / L. Yanhong, L. Fenghua, H. Hui, M. Baodong, L. Yang, K. Zhenhui // Journal of Semiconductors. –2020. –V. 41. –No 9.
- Bhanu, M. Photocatalytic Activity of Heavy Metal Doped CdS Nanoparticles Synthesized by Using Ocimum sanctum Leaf Extract / M. Bhanu, S. Venkata, M. Sriram, M. Hussen, S. Syam, C. Basavaiah // Biointerface Research in Applied Chemistry. – 2021, –V. 11, -Is. 5. – P. 12547-12559.
- Masafumi, Y. Multi-junction solar cells paving the way for super highefficiency / Y. Masafumi // Journal of Applied Physics. – 2021, – V. 129. –P. 240901.
- Bosio, A. The History of Photovoltaics with Emphasis on CdTe Solar Cells and Modules / A. Bosio, S. Pasini, N. Romeo // Coatings. – 2020, –V. 10. – P. 344.
- Lin, Q. Flexible photovoltaic technologies / Q. Lin, H. Huang, Y. Jing, H. Fu,
   P. Chang, D. Li, Y. Yao, Z. Fan // J. Mater. Chem. 2014, –V. 2. P. 1233– 1247.
- Kumar, M.S. Substitution of Zn in Earth-Abundant Cu<sub>2</sub>ZnSn(S,Se)<sub>4</sub> based thin film solar cells-A status review / M.S. Kumar, S.P. Madhusudanan, S.K. Batabyal // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. – 2018. –V. 185. – P. 287–299.
- Zayed, J., Suzanne Ph. Acute Oral and Inhalation Toxicities in Rats With Cadmium Telluride / J. Zayed, Ph. Suzanne // International journal of toxicology. – 2009. –V. 28. – P. 259-265.
- 15. Strachala, D. / Methods for recycling photovoltaic modules and their impact on environment and raw material extraction / D. Strachala, J. Hylský, J. Vanek, G. Fafilek, K. Jandová // Acta Montanistica Slovaca. – 2017. –V. 22. – P. 257-269.
- 16. Fthenakis, V. Emissions and Encapsulation of Cadmium in CdTe PV Modules During Fires / V. Fthenakis, M. Fuhrmann, J. Heiser, A. Lanzirotti, J. Fitts, W. Wang // Progress in Photovoltaics: Research and Applications. – 2005. – V. 13. – P. 713 - 723.

- Khusainov, A.Kh. Energy resolution of large-area CdTe p-i-n detectors with charge loss correction / A.Kh. Khusainov, T.A. Antonova, V.V. Lysenko, R.K. Makhkamov, V.F. Morozov, A.G. Ilves, R.D. Arlt // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 2001. – V. 458. – P. 242-247.
- 18. Акимов, Ю.К. Полупроводниковые детекторы ядерных излучений. Монография / Ю.К. Акимов. Дубна: Издательство ОИЯИ, 2009. 277 с.
- Khusainov, A.Kh. High performance p-i-n CdTe and CdZnTe detectors / A. Kh. Khusainov, A.L. Dudin, A.G. Ilves, V.F. Morozov, A.K. Pustoroit, R.D. Arlt // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 1999. – Vol. 428. – P. 58-65.
- 20. Bosio, A. A review on the fundamental properties of Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>-based thin film solar cells / A. Bosio, G. Foti, S. Pasini, D. Spoltore // Energies. 2023. V. 16. №. 19. P. 6862.
- 21. Roy, U.N., Camarda, G.S., Cui, Y., James, R.B. Advances in CdZnTeSe for Radiation Detector / U.N. Roy, G.S. Camarda, Y. Cui, R.B. James // Applications Radiation. – 2021, –V. 1, – P. 123–130.
- Capper, P. Properties of narrow gap cadmium-based compounds / P. Capper // INSPEC. – 1994. – P. 618.
- Wilson, M. Small pixel CZT detector for hard X-ray spectroscopy / M. Wilson, R. Cernik, H. Chen, C. Hansson // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2011. –V. 652. – P. 151-168.
- 24. Alam, M.D. Recent progress in CdZnTe based room temperature detectors for nuclear radiation monitoring / M.D. Alam, S.S. Nasim, S. Hasan // Progress in Nuclear Energy. – 2021, – V. 140.
- 25. Pavlyuk, M.D. Detectors for Digital X-Ray Imagers Manufactured of Melt-Grown CdTe and CdZnTe Single Crystals / M.D. Pavlyuk, V.M. Kanevsky, V.F. Dvoryankin, A.A. Kudryashov, A.G. Petrov, Y.M. Ivanov // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators,

Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2010, – V. 624, – P. 482– 485.

- 26. Залетин, В.М. Широкозонные полупроводниковые соединения для детекторов рентгеновского и гамма-излучения / В.М. Залетин, В.П. Вараварица // Материалы электронной техники. – 2010. – №3. – С. 4-13.
- 27. Иванов, Ю.М. Исследование сублимации халькогенидов кадмия / Ю.М. Иванов, А.В. Ванюков // В сб. «Халькогениды цинка, кадмия и ртути». М.: Металлургия, 1973. №73. С. 47-57.
- 28. Лейбов, В.А. Измерение термодинамических свойств CdTe при высоких температурах / В.А. Лейбов, Ю.М. Иванов, А.В. Ванюков // Электронная техника, Сер. Материалы. – 1984. – Т. 195. – № 10. – С. 28-31.
- Bos, A.J., Some developments in neutron and charged dosimetry / A.J. Bos, F. d'Eruco // Radiation Protection Dosimetry. – 2006. – V. 120. – No 1-4. – P. 331-336.
- Vega-Carrillo, H.R. Artificial neural networks in neutron dosimetry / H.R.
   Vega-Carrillo, V.M. Hernandez-Davila // Radiation Protection Dosimetry. –
   2006. V. 118. No 3. P. 251-259.
- Li, Z. Research on the Technological Progress of CZT Array Detectors / Z. Li,
   J. Cheng, F. Liu, Q. Wang, W.W. Wen, G. Huang, Z. Wu // Sensors. 2024. –
   V. 24. №. 3. P. 725.
- Schlesinger, T.E. Cadmium zinc telluride and its use as a nuclear radiation detector material / T.E. Schlesinger, J.E. Toney, H. Yoon, E.Y. Lee, B.A. Brunett, L. Franks, R.B. James // Mater. Sci. Eng., – 2001. – V. 32. – P. 103– 189.
- 33. Nasiekaa, I. Photoluminescence-based material quality diagnostics in the manufacturing of CdZnTe ionizing radiation sensors / I. Nasiekaa, N. Kovalenko, V. Kutniy, A. Rybka, D. Nakonechnyj, S. Sulima, V. Strelchuk // Sensors and Actuators Ser. A. – 2013. – V. 203. – P. 176 – 180.
- 34. Alshal, M. Photoluminescence characterization of cadmium zinc telluride / M. Alshal // Dissertation. – 2019.

- 35. Zázvorka, J. Contactless resistivity and photoconductivity correlation to surface preparation of CdZnTe / J. Zázvorka, J. Franc, P. Moravec, E. Jesenská, L. Šedivý, J. Ulrych, K. Mašek // Applied Surface Science. – 2014, – V. 315. – P. 144-148.
- Zheng, Q. Influence of surface preparation on CdZnTe nuclear radiation detectors / Q. Zheng, F. Dierre, J. Crocco, V. Carcelen, H. Bensalah, J.L. Plaza, E. Dieguez // Applied Surface Science. – 2011. – V. 257. – Is. 20. – P. 8742-8746.
- 37. Haitao, X. The dependence of Zn content on thermal treatments for Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te thin films deposited by close-spaced sublimation / X. Haitao, X. Run, J. Huang, J. Zhang, K. Tang, L. Wang // Applied Surface Science. 2014. V. 305. P. 477-480.
- 38. Liang-Wen, Ji. Effect of seed layer on the growth of well-aligned ZnO nanowires / J. Liang-Wen, Sh.M. Peng, J.Sh. Wu, W.Sh. Shih, Ch.Zh. Wu, I.T. Tang // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2009. V. 70, Is. 10, P. 1359-1362
- 39. Znamenshchykov, Y.V., et al. Electrical, structural and optical properties of Cd1-xZnxTe thick polycrystalline films / Y.V. Znamenshchykov, V.V. Kosyak, O.K. Kononov, I.O. Shpetnyi, V.I. Grebinaha, P.M. Fochuk, A.S. Opanasyuk // Vacuum. – 2018. – V. 149. – P. 270-278.
- 40.Huang, J. Novel CdZnTe micro pillar films deposited by CSS method / J. Huang,
  Z. Chen, J. Bie, Y. Shang, K. Yao, Z. Chen, L. Wang // Materials Letters. 2020.
   V. 263. 127277,
- 41. Brovko, A. Impact of polishing on crystallinity and static performance of Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te / A. Brovko, A. Adelberg, L. Chernyak, S. Gorfman, A. Ruzin // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2020. – V. 984. 164568.
- 42. Qasim, M. Surface Planarization of CdZnTe Wafers: Effect of Slurry Formulation and CMP Processing Parameters on Surface Planarity / M. Qasim,

P. Parthiban, D. Das // ECS Journal of Solid State Science and Technology. – 2022. – V. 11.

- 43.Yu, B. Deposition of CdZnTe Films with CSS Method on Different Substrates for Nuclear Radiation Detector Applications / B. Yu, C. Xu, M. Xie, M. Cao, J. Zhang, Y. Jiang, L. Wang // Crystals. 2022. V. 12. Iss. 2. P. 187.
- 44. Cao, K. Preparation of Cd<sub>0.8</sub>Zn<sub>0.2</sub>Te/Cd<sub>0.5</sub>Zn<sub>0.5</sub>Te/n+-GaAs thick film radiation detectors by close spaced sublimation / K. Cao, G. Zha, H. Zhang, A. Wang, Y. Li, X. Wan // Vacuum. 2021. V. 192. 110426.
- 45. Liu, L. A review: green chemical mechanical polishing for metals and brittle wafers / L. Liu, Zh. Zhang, B. Wu, W. Hu, F. Meng, Y. Li // Journal of Physics D: Applied Physics. 2021. V. 54, Iss. 37.
- 46. Shuai, K. Effect of Mechanical Grinding and Polishing on Resistive Switching Characteristics of CdZnTe Thin Films / K. Shuai, W.U. Min, N. I. Fan, Z.E. Dongmei // Journal of Synthetic Crystals. – 2022. – V. 51. – Iss. 11.
- 47. Yan, X. Effect of surface treatment on photo-electric properties of CZT thick film for radiation detector / X. Yan, X. Gao, H. Sun, D. Yang, T. Zeng, X. Luo, X. Zhu, P. Wangyang // Materials Science in Semiconductor Processing. 2022. V. 148. 106826.
- 48. Li, Y. Cracking mechanism of CdZnTe polycrystalline film deposited on TFT circuit board at high temperature by close-spaced sublimation method / Y. Li, W. Zhang, Kun Cao, Y. Li, G. Zha, T. Tan // Materials Science in Semiconductor Processing. 2021. V. 131. 105821, ISSN 1369-8001.
- 49. Li, Y. The effect of chemical polishing treatment on the microstructure, photoelectric properties of CdZnTe polycrystalline films / Y. Li, Y. Wang, W. Zhang, K. Cao, Y. Li, G. Zha, T. Tan // Materials Science in Semiconductor Processing. – 2021. – V. 124.
- 50. Yang, F. The influence of surface processing on properties of CdZnTe films prepared by close-spaced sublimation / F. Yang, J. Huang, T. Zou, K. Tang, Z. Zhang, Y. Ma, Y. Lu // Surface and Coatings Technology. – 2019. –V. 357. – P. 575-579.

- 51. Malkas, H. Effects of substrate temperature on the microstructure and morphology of CdZnTe thin films / H. Malkas, S. Kaya, E. Yilmaz // Journal of electronic materials. – 2014. – V. 43. – P. 4011-4017.
- Vidhya, S. N. The effect of annealing temperature on structural, morphological and optical properties of CdZnTe thin films / S.N. Vidhya, O.N. Balasundaram, M. Chandramohan // Optik, – 2015. – V. 126. – Iss. 24. – P. 5460-5463.
- 53. Якушев, М.В. Микроморфология поверхности слоев СdTe (310), выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии / М.В. Якушев, Д.В. Брунев, Ю.Г. Сидоров // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2010. – №1. – С. 89-96.
- 54. Беляев, А.П. Формирование ориентированных пленок теллурида кадмия на аморфной подложке в резко неравновесных условиях / А.П. Беляев, В.П. Рубец, И.П. Калинкин // Журнал технической физики. – 2001. – Т. 71. – №. 4. – С. 133-135.
- 55. Abbas, A. The effect of cadmium chloride treatment on close spaced sublimated cadmium telluride thin film solar cells. / A. Abbas, G.D. West, J.W. Bowers, P. Isherwood, P.M. Kaminski, B. Maniscalco, K.L.Barth // IEEE 38th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC) Part 2. – 2012. – IEEE. – P. 1-6.
- 56. Nelson, A.J. X-ray photoemission analysis of passivated Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te surfaces for improved radiation detectors / A.J. Nelson, A.M. Conway, C.E. Reinhardt, J.L. Ferreira, R.J. Nikolic, S.A. Payne // Materials Letters. – 2009. – V. 63. – Iss. 2, – P. 180-181.
- 57. Egarievwe, S.U. Effects of chemical treatments on CdZnTe X-ray and gamma-ray detectors / S.U. Egarievwe, A. Hossain, I.O. Okwechime, A.A. Egarievwe, D.E. Jones, U.N. Roy, R.B. James // IEEE Transactions on Nuclear Science. 2016. V. 63. Is. 2. P. 1091-1098.
- 58. Wright, G.W. Evaluation of NH4F/H2O2 effectiveness as a surface passivation agent for Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te crystals / G.W. Wright, R.B. James, D. Chinn, B.A. Brunett, R.W. Olsen, J.M. Van Scyoc, R.C. Wingfield // Hard X-Ray, Gamma-Ray, and Neutron Detector Physics II. SPIE. 2000. V. 4141. P. 324-335.

- 59. Egarievwe, S.U. Ammonium fluoride passivation of CdZnTeSe sensors for applications in nuclear detection and medical imaging / S.U. Egarievwe, C.A. Goree, B.A. Harrison, J. Jones, U.N. Roy, R.B. James // Sensors. – 2019. – V. 19. – Iss. 15. – P. 3271.
- 60. Marchini, L. Study of surface treatment effects on the metal-CdZnTe interface / L. Marchini, A. Zappettini, E. Gombia, R. Mosca, M. Lanata, M. Pavesi // IEEE Transactions on Nuclear Science. 2009. V. 56. Is. 4. P. 1823-1826.
- Park, B. Passivation effect on large volume CdZnTe crystals / B. Park, Y. Kim,
   J. Seo, J. Byun, K. Kim // Nuclear Engineering and Technology. 2022. V.
   54. Iss. 12. P. 4620-4624.
- Gromoviy, Yu.S. Low-Temperature deposition of Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te layers by laser sputtering and their physical properties / Yu.S. Gromoviy, L.V. Rashkovetskiy, S.V. Plyatsko // Physics and Chemistry of solid state. – 2022. – V. 23. – Iss. 1. P. 154-158.
- 63. Кабальнов, Ю.А. Исследование радиационной стойкости фотодиодов на структурах кремний-на-сапфире / Ю.А. Кабальнов, А.Н. Труфанов, С.В. Оболеньский // Физика и техника полупроводников. 2019. Т. 53. №3. С. 388-395.
- 64. Абдинов, Д.Ш. Радиационно-стойкие фотоприемники на область спектра 0,35-1,1 мкм / Абдинов, Д.Ш., Аскеров, К.А., Гаджиева, В.И., Бекташи, М.Г.// Прикладная физика. 2008. №. 5. С. 106-109.
- 65. Умрихин, А.В. Ионизирующее облучение различной природы как способ изменения электрических свойств твердых тел / А.В. Умрихин, М.А. Умрихина // Вестник российских университетов. Математика. – 2011. – Т. 16. – №. 3. – С. 800-805.
- 66. Овчинников, И.Г. Влияние радиационных сред на механические характеристики материалов и поведение конструкций (обзор) / И.Г. Овчинников, М.Ю. Богина, А.В. Матора // Вестник евразийской науки. 2012. Т. 13. №. 4. С. 98.

- 67. Хофман, А. Влияние облучения на коррозию и коррозионное растрескивание под напряжением в аустенитных нержавеющих сталях / А. Хофман, А.Ю. Дидык, В.К. Семина // Мат. Международной конференции «Радиационная физика твердого тела». Севастополь. –2013.
- Клименов, В.А. Влияния ионизирующего излучения на прочностные характеристики материалов и сплавов / В.А. Клименов, А.П. Мамонтов // Материалы 9-го Международного уральского семинара. Россия. 2011. С. 12-14.
- 69. Азарко, И.И. Влияние нейтронного облучения малыми дозами на физические свойства кристаллов алмаза. / И.И. Азарко, А.Г. Дутов, Е.И. Козлова, В.А. Комар // Материалы 4-й международной конференции «Взаимодействие излучений с твердым телом», – Беларусь. – 2001. – С. 234-236.
- 70. Cavallini, A. Defective states induced in CdTe and CdZnTe detectors by high and low energy neutron irradiation / A. Cavallini, B. Fraboni // Journal of applied Physics. – 2003. – Vol. 94. –No. 5. – P. 3135-3142.
- 71. Мискевич, С.А. Влияние ионизирующего излучения на характеристики приборов полупроводниковой электроники / С.А. Мискевич, Ф.Ф. Комаров, А.Ф. Комаров, Г.М. Заяц, В.Н. Ювченко // 13-я Международная конференция «Взаимодействие излучений с твердым телом». – Минск, 2019. – С. 163-165.
- 72. Гафуров, О.В. Структура и радиационные дефекты γ-облученного кремния / О.В. Гафуров, А.Т. Акобирова Р.Б. Хамрокулов //Вестник Таджикского национального университета. Серия произведений науки. – 2020. – №. 4. – С. 175-181.
- 73. Биленко, Д.И. Влияние гамма-излучения малых доз на электрофизические свойства мезопористого кремния / Д.И. Биленко, В.В. Галушка, Э.А. Жаркова, В.И. Сидоров, Д.В. Терин, Е.И. Хасина // Письма в журнал технической физики. – 2017. – Т.43. – Вып. 3. – с. 57-64.

- 74. Лаханова, К.М. Действие различных доз рентгеновских и гамма-лучей на солодку уральскую / К.М. Лаханова, М.У. Сарсембаева // Успехи современного естествознания. – 2015. – №6. – С. 119-122.
- 75.Чурюкин, Р.С. Влияние облучения Со-60 семян ячменя на развитие растений на ранних этапах онтогенеза / Р.С. Чурюкин, С.А. Гераськин // Радиация и риск. – 2013. – Т. 22. – №3. – С. 80-92.
- 76. Махсудов, Б.И. Влияние малых потоков тепловых нейтронов на ИКспектр бактерий Rhizobium Phaseoli IS TAAS-80 ТЈ и Bacillus megaterium var. Phoosphaticum / Б.И. Махсудов, Н.У. Мулллоев, З. Нигораи // Доклады НАН Таджикистана. - 2021. - Т. 64. - № 7-8. - С. 406-412.
- 77. Махсудов, Б.И. Деградационные и радиационные процессы в инжекционных лазерах / Б.И. Махсудов // Монография. – Душанбе: ЭР-Граф, – 2016. – 73 с.
- 78. Асадчиков, В.Е. Изучение микроструктуры кристаллов Si, подвергнутых облучению быстрыми H<sup>+</sup>-ионами и термообработке, методами высокоразрешающей трехкристальной рентгеновской дифрактометрии и электронной просвечивающей микроскопии / В.Е. Асадчиков, И.Г. Дьячкова, Д.А. Золотов, Ф.Н. Чуховский // Физика твердого тела. 2019. Т. 61. №. 10. С. 1754-1762.
- 79. Dobrozhan, A. Structure and Optical Properties of CdS Thin Films after Hard Ultraviolet Irradiation / A. Dobrozhan, A. Meriuts, G. Kopach, R. Kropachek // 2019 IEEE 9th International Conference Nanomaterials: Applications & Properties (NAP). IEEE, 2019. P. 1-3.
- 80. Abid, E.Y. Effect Gamma Radiation of CdTe Thin Films Deposited by Thermal Evaporation / E.Y. Abid // Ibn AL-Haitham Journal For Pure and Applied Sciences. – 2016. – V. 29. – Iss. 2. – P. 31-40.
- Kumar, S. Effect of Gamma Irradiation on Electrical Properties of CdTe/CdS Solar Cells / S. Kumar, M.V. Kumar, M. Pattabi, K. Asokan, B.N. Chandrashekar, Ch. Chun, S. Krishnaveni // Materials Today: Proceedings, – 2018. – V. 5, Iss. 10, Part 3, – P. 22570-22575,

- 82. Krylyuk, S.G. Gamma-radiation effect on donor and acceptor states in CdTe and CdTe:Cl / S.G Krylyuk, D.V Korbutyak, Yu.V. Kryuchenko, I.M Kupchak, N.D Vakhnyak // Journal of Alloys and Compounds. 2004. V. 371, Iss. 1–2, P. 142-145.
- 83. Starzhinskiy, N.G. Radiation-induced processes in A2B6 and oxide compounds under proton and gamma-irradiation / N.G. Starzhinskiy, V.D. Ryzhikov, L.P. Galchinetskiy, L.L. Nagornaya, V.I. Silin // Issues of atomic science and technology. – 2005. – № 3. – C. 43-46.
- 84. Xu, B. Ultraviolet radiation synthesis of water dispersed CdTe/CdS/ZnS core–shell–shell quantum dots with high fluorescence strength and biocompatibility / B. Xu, B. Cai, M. Liu, H. Fan // Nanotechnology. 2013. V. 24. Iss. 20. P. 205601.
- 85. Tsipotan, A.S. Effect of visible and UV irradiation on the aggregation stability of CdTe quantum dots / A.S. Tsipotan, M.A. Gerasimova, A.S. Aleksandrovsky, S.M. Zharkov, V.V. Slabko // Journal of Nanoparticle Research. – 2016. – V. 18. – P. 1-8.
- 86. Babalola, S.O. Effects of Surface Irradiation on the Performance of CdZnTebased Nuclear Detectors / S.O. Babalola, A.E. Bolotnikov, G.S. Camarda, C. Muntele // PREPRINT (Version 1) available at Research Square. – 2022 <u>https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-1998137/v1</u>
- 87. Вологдин, Э.Н. Радиационные эффекты в некоторых классах полупроводниковых приборов. / Вологдин Э.Н., Лысенко А.П. // Учебное пособие. МИЭМ, – М., – 2005 г.
- 88. Войцеховский, А.В. Радиационное дефектообразование при ионной имплантации бора в эпитаксиальные пленки Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te различного состава / А.В. Войцеховский, Д.В. Григорьев, А.П. Коханенко, А.Г. Коротаев, И.И. Ижнин, С.А. Дворецкий, Н.Н. Михайлов // Прикладная физика. 2016. №. 5. С. 27-31.

- 89. Кулаков, В.М. Действие проникающей радиации на изделия электронной техники / В.М. Кулаков, Е.А. Ладыгин, В.И. Шаховцев // М.: Сов. Радио. 1980. 224 с.
- 90. Мухин, К.Н. Экспериментальная ядерная физика / М.: Атомиздат, 2009. 384 с.
- 91. Варлачев, В.А. Влияние быстрых нейтронов на проводимость простых полупроводников / В.А. Варлачев, Е.Г. Емец, Е.С. Солодовников // 9-я Межд. Конф. «Взаимодействие излучения с твердым телом». – Минск. – 2011. – С. 107.
- 92. Музафарова, С.А. Исследование промежуточного слоя на гетерогранице n+-CdS/p-CdTe / С.А. Музафарова, Б.У. Айтбаев, Ш.А. Мирсагатов, К. Дуршимбетов, Ж. Жанабергенов // Физика и техника полупроводников. – 2008. – Т. 42. – №12. – С. 1409-1414.
- 93. Bosio, A. Past, present and future of the thin film CdTe/CdS solar cells / A. Bosio, G. Rosa, N. Romeo // Solar Energy. 2018. V. 175. P. 31-43.
- 94. Соболев, В.В. Электронная структура и оптические свойства кристаллов группы III–VI / В.В. Соболев // Известия РАН. Сер. физическая. 2008. Т. 72, № 4. С. 524–531.
- 95. Huang, Y. Experimental study and modeling of the influence of screw dislocations on the performance of Au/n-GaN Schottky diodes / Y. Huang, X.D. Chen, S. Fung, C.D. Beling, C.C. Ling // Journal of applied physics. 2003. V. 94. №. 9. P. 5771-5775.
- 96. Калинина, Е.В. Оптические и электрические свойства 4H-SiC, облученного нейтронами и тяжелыми ионами высоких энергий / Е.В. Калинина, Г.Ф. Холуянов, Г.А. Онушкин, Д.В. Давыдов, и др. // Физика и техника полупроводников. – 2004. – Т. 38. – №. 10. – С. 1223-1227.
- 97. Vaitkus, J.V. Neutron irradiation influence on mobility and compensation of dark conductivity in silicon / J.V. Vaitkus, A. Mekys, V. Rumbauskas, J. Storasta // Lithuanian Journal of Physics. – 2016. – V. 56. – №. 2. – P. 102-110.

- 98. Kanazawa, S. Radiation effects in silicon carbide / S. Kanazawa, M. Okada, I. Kimura //AIP Conference Proceedings. American Institute of Physics, 2003.
   V. 680. №. 1. P. 881-884.
- 99. Bao, L. Investigation of neutron irradiation effects on the properties of Au/CdZnTe junction / L. Bao, G. Zha, B. Zhang, J. Dong, Y. Li, W. Jie // Vacuum, - 2019, - V. 167. - P. 340-343,
- 100. Bao, L. Neutron irradiation-induced defects in Cd<sub>0.9</sub>Zn<sub>0.1</sub>Te:In crystals / L. Bao, G. Zha, L. Xu, B. Zhang, J. Dong, Y. Li, W. Jie // Materials Science in Semiconductor Processing. 2019. V. 100, P. 179-184.
- 101. Lü, L. Neutron irradiation effects on AlGaN/GaN high electron mobility transistors / L. Lü, J.C. Zhang, J.S. Xue, X.H. Ma, W. Zhang, Z.W. Bi, Y. Hao // Chinese physics B. – 2012. – V. 21. – №. 3. – P. 037104.
- 102. Schroder, D.K. Semiconductor material and device characterization. / D.K. Schroder // John Wiley & Sons, 2015.
- 103. Ede, A.M.D. Thin-film CdTe for imaging detector applications / A.M.D. Ede, E.J. Morion, P. De Antonis // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 2001. – Vol. 458. – P. 7-11.
- 104. Yas, R.M. Gamma radiation induced changes in the optical properties of CdTe thin films for dosimetric purposes / R.M. Yas // Iraqi Journal of Physics. 2012.
   V. 10. №. 17. P. 71-76.
- 105. Afaneh, F. The γ-irradiation effect on the optical properties of CdTe thin films deposited by thermal evaporation technique / F. Afaneh, M. Okasha, K.J. Hamam, A. Shaheen, M. Maghrabi, B. Lahlouh, H.K. Juwhari // Materials Science. 2018. V. 24. №. 1. P. 3-9.
- 106. Dobrozhan, A. Influence of Ionizing Radiation on the Structure and Optical Properties if CdTe Layers for Solar Cells / A. Dobrozhan, G. Kopach, R. Mygushchenko, O. Kropachek, A. Meriuts // IEEE 10th International Conference Nanomaterials: Applications & Properties (NAP). – 2020. – P. 1-4.
- 107. Al Refaei, D.H. The Effect of Neutron Irradiation on Optical, Structural and Morphological Properties of Cadmium Selenide Thin Films / D.H. Al Refaei, L.A.

Najam, L.M. Al Taan // Journal of Radiation and Nuclear Applications. – 2021. – V. 6, – No. 3, – P. 207-216.

- 108. Gnatyuk, V.A. Modification of the surface state and doping of CdTe and CdZnTe crystals by pulsed laser irradiation / V.A. Gnatyuk, T. Aoki, O.I. Vlasenko, S.N. Levytskyi, B.K. Dauletmuratov, C.P. Lambropoulos // Applied surface science. – 2009. – V. 255. – №. 24. – P. 9813-9816.
- 109. Akobirova, A.T. Surface morphology of cadmium telluride films prepared by vacuum sputtering on the silicon and cadmium telluride substrates. / A.T. Akobirova, V.I. Halauchyk, M.G. Lukashevich, N.S. Sultonov, R.B. Hamroqulov // J. Belarus. State Univ. Phys. 2017. No. 2. P. 69 75.
- 110. Миронов, В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии. / В.Л. Миронов // – Н. Новгород, – 2004.
- 111. https://materialsproject.org
- 112. Kohn, W. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. / W. Kohn, L. Sham // Physical Review A. –1965, –V. 140, 1133-1965.
- 113. Hohenberg, P. Inhomogeneous electron gas. / P. Hohenberg, W. Kohn // —
  Physical Review B. 1964, –V. 136, P. 864-871.
- 114. David, K. Merits and limits of the modified Becke-Johnson exchange potential
  / K. David, T. Fabien, B. Peter // Physical Review B. 2011, -V. 83, 195134.
- 115.Takahashi, H. The Exchange-Energy Density Functional Based on the Modified Becke-Roussel Model / H. Takahashi, R. Kishi, M. Nakano // J. Chem. Theory Comput. – 2010, – V. 6. – Is. 3. – P. 647–661.
- 116. Lu, Y.H. Hexagonal TiO<sub>2</sub> for Photoelectrochemical Applications / Y.H. Lu, B. Xu, A.H. Zhang, M. Yang, Y.P. Feng // The Journal of Physical Chemistry C. 2011. –V. 115, Is. 36, P. 18042–18045.
- 117. Nematov, D.D. Investigation of Structural and Optoelectronic Properties of N-Doped Hexagonal Phases of TiO<sub>2</sub> (TiO<sub>2-x</sub>N<sub>x</sub>) Nanoparticles with DFT Realization: OPTIMIZATION of the Band Gap and Optical Properties for Visible-Light Absorption and Photovoltaic Applications / D.D. Nematov M.A.

Khusenzoda, A.S. Burhonzoda et al. // Biointerface research in applied chemistry 2021 12, 3, 3836 – 3848.

- 118. Нематов, Д. Компьютерный анализ электронных и структурных свойств нанокристаллов CsSnI3:Cl и CsPbI3:Cl. / Д. Нематов // Электронный периодический рецензируемый научный журнал «SCI-ARTICLE.RU» 2019, Т. 76, С. 187-196.
- 119. Doroshkevich, A. Frequency Modulation of the Raman Spectrum at The Interface DNA - ZrO<sub>2</sub> Nanoparticles / A.S. Doroshkevich, A.A. Nabiev, A.V. Shylo, A. Pawlukojć, V.S. Doroshkevich, V.A. Glazunova, V.I. Bodnarchuk, // Egyptian Journal of Chemistry – 2019, – V. 62, – P. 13-20.
- 120. Nematov, D. Molecular Dynamics of DNA Damage and Conformational Behavior on a Zirconium-Dioxide Surface / D. Nematov, A. Burkhonzoda, M. Khusenov, Kh. Kholmurodov, A. Doroshkevich, N. Doroshkevich, T. Zelenyak, S. Majumder // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2019, – V. 13, – P. 1165–1184.
- 121. Nematov, D. Molecular Dynamics Simulations of the DNA Radiation Damage and Conformation Behavior on a Zirconium Dioxide Surface. / D. Nematov, A. Burkhonzoda, M. Khusenov, Kh. Kholmurodov, A. Doroshkevich, N. Doroshkevich, T. Zelenyak, S. Majumder, R. Ahmed, I. Medhat // Egyptian Journal of Chemistry. – 2019, – V. 62, – P. 149-161,
- 122. Бурхонзода, А. Кванто-механический расчет электронного строения ZrO2:Ti4+ в рамках теории функционала плотности. / А. Бурхонзода, С. Гиёсов, Д. Нематов, М. Хусенов, Х. Холмуродов // Политехнический вестник. Серия: Интеллект. Инновации. Инвестиции. – 2019, – Т. 3, – С. 11-17.
- 123. Nematov, D. First principles analysis of geometrical structure, electronic and optical properties of CsSnI<sub>3-x</sub>Br<sub>x</sub> perovskite for photoelectric applications / D. Nematov, A. Burhonzoda, M. Khusenov, Kh. Kholmurodov, T. Yamamoto // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2021, – V. 15, – No. 3, – P. 532–536

- 124. Нематов, Д.Д. Исследование и оптимизация оптоэлектронных свойств Nлегированных наночастиц диоксида титана (TiO<sub>2-x</sub>N<sub>x</sub>) для фотоэлектрических применений / Д.Д. Нематов // Электронный периодический рецензируемый научный журнал «SCI-ARTICLE.RU», серии: физика, нанотехнология, – 2021, – № 91. – С. 110-130.
- 125. Акобирова, А.Т. Прочностные свойства нейтронно-облученных эпитаксиальных пленок CdTe / А.Т. Акобирова, Д.И. Бринкевич, С.А. Вабищевич, Н.В. Вабищевич, В.И. Головчук, М.Г. Лукашевич, Б.И. Махсудов // Журнал БГУ. Физика. – 2018. – №1. – С. 73-79.
- 126. Castaldini, A. Deep energy levels in CdTe and CdZnTe / A. Castaldini, A. Cavallini, B. Fraboni, P. Fernandez, J. Piqueras // Journal of Applied Physics. 1998. V. 83. Is. 4. P. 2121-2126.
- 127. Гордеев, И.В. Справочник по ядерно-физическим константам для расчета реакторов / И.В. Гордеев, Д.А. Кардашов, А.В. Малышев // – М.: Атомиздат, – 1960. – 278 с.
- 128. Султонов, Н.С. Разработка технологии получения поликристаллических пленок теллурида кадмия и исследование их структуры и электрических свойств / Н.С. Султонов, Р.Б. Хамрокулов, А.Т., Акобирова // Вестник ТНУ. – 2020. – №4. – С. 130-146.
- 129. Брудный, В.Н. Изменение структурных параметров решетки и электронных спектров пленок n-GaN на сапфире при облучении реакторными нейтронами / В.Н. Брудный, А.В. Кособуцкий, Н.Г. Колин, А.В. Корулин // Физика и техника полупроводников. 2011. Т.45. Вып. 4. С. 461-467.
- 130. Сердобинцев, А.А. Показатель преломления и постоянная решетки пленок оксида цинка, модифицированных в низкотемпературной плазме / А.А. Сердобинцев, Е.И. Бурылин, А.Г. Веселов, О.А. Кирясова, А.С. Джумалиев // Журнал технической физики. – 2008. – Т.78. – Вып. 3. – С. 83-85.

- 131.Huang, L. Structural and optical verification of residual strain effect in single crystalline CdTe nanowires / L. Huang, S. Lu, P. Chang, K. Banerjee, R. Hellwarth, J.G. Lu // Nano Research. – 2014. – V. 2. –No 7. – P. 228-235.
- 132. Большакова, И.А. Влияние нейтронного облучения на свойства нитевидных микрокристаллов n-InSb / И.А. Большакова, В.М. Бойко, В.Н. Брудный, И.В. Каменская, Н.Г. Голин и др. // Физика и техника полупроводников. –2005. –Т.39, Вып. 7, – С. 814-819.
- 133. Bruckner, J. Proton-induced radiation damage in germanium detectors / J. Bruckner, M. Korfer, H. Wanke, A. Schroeder, D. Filges, P. Dragovitsch, E.R. Shunk // IEEE Transactions on Nuclear Science. – 1991. – V. 38. – Is. 2. – P. 209-217.
- 134. Lyle, B. Radiation damage and activation of CdZnTe by intermediate energy neutrons / B. Lyle, S. Carl, Sh. Peter, B. Louis, B. Scott, et al. // SPIE, 1996. V. 2859. P. 10-16.
- 135. Lane, D. Review of the Optical Band gap of Thin Film. CdS<sub>x</sub>Te<sub>1-x</sub> / D. Lane // Solar Power Materials and Solar Cells, 2006, V. 90, P. 1169-1175.
- 136. Koç, M. Combined Optical-Electrical Optimization of CdZnTe / M. Koç, G. Kartopu, S. Yerci // Silicon Tandem Solar Cells Materials, 2020, V. 13. Is.
  8. P. 1860.
- 137. Peter, L.M. Towards sustainable photovoltaics: the search for new materials / L.M. Peter // Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 2011, V. 369, P. 1840-1856.
- Sordo, S. Progress in the Development of CdTe and CdZnTe Semiconductor Radiation Detectors for Astrophysical and Medical Applications / S. Sordo, L. Abbene, E. Caroli, A. Mancini, A. Zappettini, P. Ubertini // Sensors, - 2009, -V. 9, - P. 3491-3526.
- 139. Swanso, D.E. Co-sublimation of CdSe<sub>x</sub>Te<sub>1-x</sub> layers for CdTe solar cells / D.E.
  Swanso, J.R. Sites, W.S. Sampath // Solar Energy Materials and Solar Cells. –
  2017, V. 159, <u>https://doi.org/10.1016/j.solmat.2016.09.025</u>

- 140. Bahloul, B. Ab initio study of the structural, electronic and optical properties of ZnTe compound / B. Bahloul, B. Deghfel, L. Amirouche, A. Bentabet, Y. Bouhadda, S. Bounab, N. Fenineche // AIP Conference Proceedings. – 2015. – V. 1653, 020019, https://doi.org/10.1063/1.4914210
- 141. Adachi, S. Zinc Telluride (ZnTe) / S. Adachi // Optical Constants of Crystalline and Amorphous Semiconductors: Numerical Data and Graphical Information. – 1999. – P. 473-486.
- 142. Najm, A.S. Areca catechu as photovoltaic sensitizer for dye-sensitized solar cell (DSSC) / A.S. Najm, H. Moria, N.A. Ludin // Biointerface Research in Applied Chemistry. – 2020, – V. 10, – P. 5636-5639.
- 143. Romeo, A. CdTe-Based Thin Film Solar Cells: Past, Present and Future. / A. Romeo, E. Artegiani // Energies, -2021. V. 14. Is. 6. P. 1-24
- 144. Artegiani, E. How the selenium distribution in CdTe affects the carrier properties of CdSeTe/CdTe solar cells / E. Artegiani, A. Gasparotto, M. Meneghini et al. // Sol Energy, – 2023, –V. 260. – P. 11-16.
- 145. Shepidchenko, A. Small hole polaron in CdTe: Cd-vacancy revisited. / A. Shepidchenko, B. Sanyal, M. Klintenberg et al. // Scientific reports. 2015. V. 5. №. 1.14509. P. 1-6.
- 146. Nasieka, I. Gamma-irradiation effect on electron–phonon coupling in Ge-doped CdTe crystals: Raman and photoluminescence study / I. Nasieka, M. Boyko, V. Strelchuk et al. // Solid State Commun, – 2014. – V. 196. – P.46-50.
- 147. Nematov, D. Analysis of the Optical Properties and Electronic Structure of Semiconductors of the Cu2NiXS4 (X = Si, Ge, Sn) Family as New Promising Materials for Optoelectronic Devices / D. Nematov // J. Opt. Photonics Res. – 2024. –V. 1. – P. 91-97
- 148. Singh, D. Electronic structure calculations with the Tran-Blaha modified Becke-Johnson density functional / D. Singh // Phys. Rev. B, – 2010. – V. 82. – P. 20.
- 149. Nematov, D. Bandgap tuning and analysis of the electronic structure of the Cu2NiXS4 (X= Sn, Ge, Si) system: mBJ accuracy with DFT expense / D. Nematov, // Chem. Inorg. Mater. 2023. V. 1. 100001.

### ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

# Статьи, опубликованные в научных журналах, рекомендованных ВАК при Президенте Республики Таджикистан

[1-А] **Яров, М.Т.** Влияние облучения тепловыми нейтронами на электрофизические и структурные характеристики CdTe, легированного хлором / Б.И. Махсудов, А.Т. Акобирова, М.Т. Яров, Э. Дж. Шаимов // Вестник THУ. Серия естественных наук. – 2022, –№1, – С. 116-130.

[2-А] **Яров, М.Т.** Влияние потока тепловых нейтронов на постоянной решетки, монокристаллов теллурида кадмия / М.Т. Яров // Политехнический вестник. Серия Интеллект. Инновации. Инвестиции. – 2022. – Т. 58. – №2, – С. 8-11.

[3-A] **Yarov, M.T.** Optimization optoelectronic properties  $Zn_xCd_{1-x}Te$  system for solar cell application: Theoretical and experimental study / Makhsudov B.I., Nematov D.D., Kholmurodov Kh.T., Yarov M.T. // Biointerface Research in Applied Chemistry. – 2023. – V. 13, – Issue 1, 90 (**Scopus**).

[4-A] **Yarov, M.T.** Combined X-ray Diffraction Analysis and Quantum Chemical Interpretation of the Effect of Thermal Neutrons on the Geometry and Electronic Properties of CdTe / B. Makhsudov, D. Nematov, M. Yarov // J. Mod. Nanotechnology. – 2024. – V. 4. – Iss. 4. DOI:10.53964/jmn.2024004.

[5-А] Яров, М.Т. Повышение эффективности материалов для солнечных элементов на основе CdTe нейтронным облучением // Б.И. Махсудов, М.Т. Яров, Д.Д. Нематов // Доклады НАНТ. – 2024. – Т. 67. – №3-4. – С. 198-203.

### Публикации в материалах научных конференций

[6-A] Яров, M.T. Ядернофизические методы свойств оптимизации полупроводниковых кристаллов, используемых в солнечных панелях / Б.И. Махсудов, M.T. Яров // Международная региональная конференция "Перспективы развития возобновляемой энергетики в странах Центральной Азии", – Душанбе, 3-4 июня – 2022 г.

[7-А] **Яров, М.Т.** Влияние тепловых нейтронов на электрофизические свойства полупроводников группы А<sup>II</sup>В<sup>VI</sup> / Б.И. Махсудов, А.Т. Акобирова, М.Т. Яров //

Республиканская научно-практическая конференция «Современные проблемы физики конденсированное состояние и ядерная физика», – Душанбе, – 2020. – С. 205-207.

[8-А] **Яров, М.Т.** Исследование влияния концентрации Zn на структуру и электронные свойства полупроводниковых наноструктур CdTe в рамках TФП-WIEN2K. / Б.И. Махсудов, Д.Д. Нематов, А.Т. Акобирова, М.Т. Яров // Материалы Международной научно-практической конференции «Обзор современных проблем физики, техники и технологии полупроводников» – Худжанд, 2021 г. – С. 35-40.

[9-А] **Яров, М.Т.** Влияние потока тепловых нейтронов на структурные параметры монокристаллов теллурида кадмия / Б.И. Махсудов, А.Т. Акобирова, М.Т. Яров, Э.Дж. Шаимов // Материалы Научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ. – Душанбе, 2022 г. – С. 65-68.

[10-А] **Яров, М.Т.** Возникновение дополнительных рефлексов на рентгенодифрактограммах теллурида кадмия после облучение тепловыми нейтронами / Б.И. Махсудов, М.Т. Яров // Материалы XX Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук», – Россия, Томск, 2023 г. – С. 271-273.

[11-А] **Яров, М.Т.** Образование примесных изотопов при нейтронном облучении кристаллов теллурида кадмия / Б.И. Махсудов, А.Т. Акобирова, М.Т. Яров // Материалы республиканской научно-практической конференции "Миссия физики в развитии современной техники и технологий". – Худжанд. – 2023. – С. 62-65.

[12-А] **Яров, М.Т.** Изучение структурных свойств полупроводниковых кристаллов CdZnTe после облучения тепловыми нейтронами / Б.И. Махсудов, М.Т. Яров // Труды Международной конференции «Фундаментальные и прикладные проблемы современной физики», – Ташкент, – 2023 г., – Т. 1. – С. 60-61.

[13-А] **Яров, М.Т.** Сравнение результатов облучения тепловыми нейтронами полупроводниковых кристаллов CdZnTe и CdTe / Б.И. Махсудов, М.Т. Яров, Э. Дж. Шаимов, А.Т. Акобирова, Р.Т. Кадыров // Материалы международной научной конференции «Современные проблемы физики конденсированного состояния». – Душанбе, – 2023. – С. 150-152.

[14-А] **Яров, М.Т.** Оптимизация электрофизических и структурных параметров полупроводниковых кристаллов ядернофизическими методами / Б.И. Махсудов, А.Т. Акобирова, М.Т. Яров // Материалы Международной конференции «Роль физики в развитии науки, образования и инноваций». – Душанбе. – 2022. – С.

[15-А] **Яров, М.Т.** Кванто-механический расчет изменения плотности электронных состояний теллурида кадмия после облучения тепловыми нейтронами / Б.И. Махсудов, М.Т. Яров, Д.Д. Нематов // Материалы Республиканской конференции «Актуальные проблемы физики конденсированного состояния», – Худжанд. – 2024, – С. 20-24.

[16-А] **Яров, М.Т.** Повышение коэффициента поглощения CdTe нейтронным облучением / Б.И. Махсудов, М.Т. Яров, Д.Д. Нематов, Ф. Камолиддинов // Материалы Международной научной конференции «Состояние и перспективы развития возобновляемой энергетики в Таджикистане», –Душанбе, – 2024. – С. 65-67.

[17-А] **Яров, М.Т.** Влияния тепловых нейтронов на оптические свойства CdTe / Б.И. Махсудов, М.Т. Яров, Д.Д. Нематов // Материалы IX Международной научной конференции «Современные проблемы физики» – Душанбе, 2024, – С. 256-259.