

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**

АВТОРЕФЕРАТ

**диссертации на соискание учёной степени доктора философии (PhD) –
доктор по специальности 6D060400-Физика
(6D060407-Физика конденсированного состояния)**

Душанбе-2025

Диссертация выполнена на кафедре ядерной физики физического факультета Таджикского национального университета.

Научный руководитель: Махсуд Барот Исломода – доктор физико-математических наук, профессор, зав. кафедрой ядерной физики Таджикского национального университета.

Официальные оппоненты: Ташметов Маннаб Юсупович - доктор физико-математических наук, профессор, заместитель директора Института ядерной физики АН Республики Узбекистана по науке.

Зафари Умар – кандидат физико-математических наук, заведующий кафедрой общей физики Таджикского государственного педагогического университета имени С. Айни.

Ведущая организация: Физико-технический институт имени С.У. Умарова Национальной академии наук Таджикистана.

Защита диссертации состоится «02» сентября 2025 года, 14:00 часов на заседании диссертационного Совета 6D.KOA-056 при Таджикском национальном университете по адресу: 734025, РТ, г. Душанбе, поселок Буни Хисорак, учебный корпус №16, физический факультет, Зал диссертационного Совета, 206.

С диссертацией можно ознакомиться на сайте www.tnu.tj и Центральной научной библиотеке Таджикского национального университета по адресу 734025, РТ, г. Душанбе, проспект Рудаки, 17.

Автореферат разослан « ____ » _____ 2025 г.

Ученый секретарь
диссертационного Совета
6D.KOA-056, к.ф.м.н, доцент

Исломов З.З.

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность исследования. Кристаллические полупроводники группы A^2B^6 широко применяются в современной технологии, включая от солнечных панелей, детекторов ядерного излучения до медицинских приборов. Эти материалы с их уникальными электрическими свойствами произвели революцию в различных отраслях и технологиях, предложив способ управления электропроводностью с большой точностью. Полупроводниковые соединения A^2B^6 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 детекторы на основе $CdZnTe$ являются превосходной заменой сцинтилляционным детекторам с точки зрения высокой чувствительности, лучшего энергетического разрешения и высокого пространственного 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.

Степень изученности темы исследования. Известно, что современные полупроводниковые технологии не достигли того уровня чтобы, получить 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 взаимодействии малых потоков тепловых нейтронов с полупроводниковыми структурами можно найти в различных работах. Сообщается также об исследованиях влияние малых потоков тепловых нейтронов на биологические объекты. Во всех этих 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^2B^6 , 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 25.04.2022 г., и 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 изменения 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 моделирование процесса взаимодействия тепловых нейтронов на CdTe.

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.

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.

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

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.

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-преподавательского состава и сотрудников ТНУ (Душанбе, 2022 г.), Международной региональной конференции «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.), Научно-теоретической 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, UV-Vis-спектрофотометрия и кванто-механический расчет для вычисления электронных свойств исследуемых материалов.

В третьей главе представлены результаты экспериментальных исследований влияния малых потоков тепловых нейтронов на электрофизические и структурные параметры полупроводниковых кристаллов CdTe и CdZnTe. Проведён сравнительный анализ рентгенодифрактограмм образцов CdTe и CdZnTe до и после облучения различными потоками тепловых нейтронов. Установлена корреляция между интенсивностью рентгеновских рефлексов и величиной нейтронного потока.

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^2B^6 . Это объясняется их физико-химическими характеристиками, выгодно отличающими их от аналогичных соединений.

Схематическое изображение измерительной установки для определения сопротивления плёночных образцов представлено на рисунке 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.

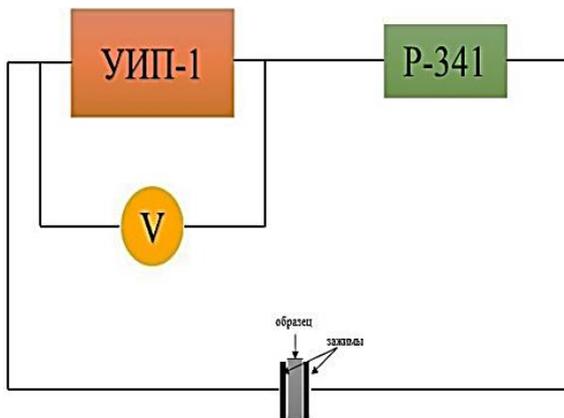


Рисунок 1. Схема подключения приборов для измерения сопротивления полупроводниковых плёнок.

На рисунке 2 представлена зависимость удельной проводимости и сопротивления плёнок CdTe от величины потока тепловых нейтронов.

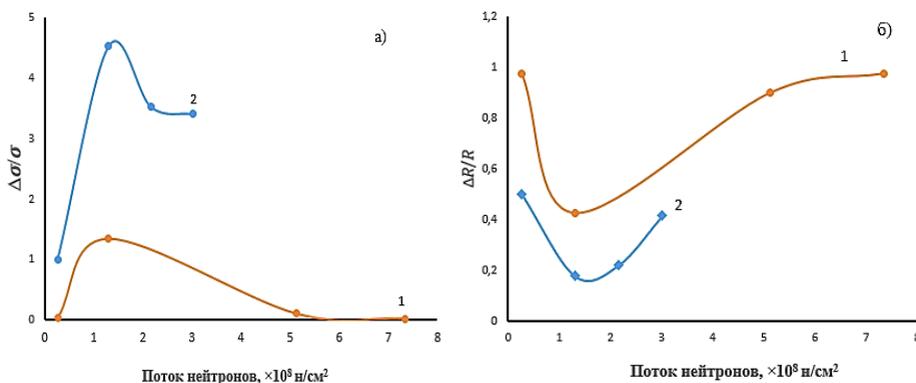


Рисунок 2. Зависимость удельной проводимости (а) и сопротивления (б) от потока тепловых нейтронов: 1 – пленка CdTe (на подложке CdTe), 2 – плёнка CdTe на подложке Si.

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 1.

Таблица 1. Электрофизические параметры исследованных образцов

R (до обл.), $\times 10^9$ Ом	$\rho, \times 10^9$ Ом·см	$\sigma, \times 10^{-10}$ Ом·см ⁻¹	R (после обл.), $\times 10^9$ Ом	$\rho, \times 10^9$ Ом·см	$\sigma, \times 10^{-9}$ Ом·см ⁻¹	Поток нейтр., $\times 10^8$ н/см ²
CdTe (на подложке CdTe)						
17	27	0,37	0,45	0,711	1,40	0,264
0,7	1,1	9,0	0,4	0,628	1,59	1,3
6,0	9,4	1,06	0,6	0,912	1,09	5,12
25	39	0,25	0,6	0,936	1,06	7,34
CdTe (на подложке Si)						
0,005	0,0078	1270	0,0025	0,0039	254	0,264
0,22	0,345	28,9	0,18	0,282	3,53	1,3
0,9	1,413	7,0	0,70	1,099	0,90	2,16
0,12	0,188	53,1	0,17	0,266	3,74	3,02

Сопоставление экспериментальных данных с результатами численного моделирования 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. Анализируя информацию, приведённую на рисунке 2 и в таблице 1, можно заметить: при низких уровнях облучения тепловыми нейтронами происходит падение удельного сопротивления и рост проводимости образцов. Однако при повышении потока нейтронного облучения наблюдается 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.

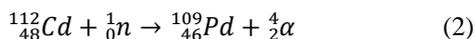
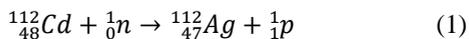
У образцов теллурида кадмия с электронной (n-тип) проводимостью нейтронное облучение может приводить к появлению в запрещённой зоне новых энергетических состояний, расположенных близко к дну зоны проводимости. Это эквивалентно введению дополнительной донорной компоненты, которая способствует увеличению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

Резкий скачок проводимости, зафиксированный на графике (рисунок 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. 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. Таким образом, наиболее подверженными нейтронному воздействию являются атомы Cd, и именно они играют ключевую роль в формировании радиационных эффектов в кристаллической решётке.

Согласно имеющимся литературным источникам, при облучении тепловыми нейтронами ядра кадмия могут участвовать в ряде ядерных реакций, основными из которых являются следующие:



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, увеличивают электрическую проводимость материала. Это объясняет фиксируемое при низких нейтронных потоках (рисунок 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 приводит к накоплению точечных дефектов, 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. 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.

На рисунке 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).

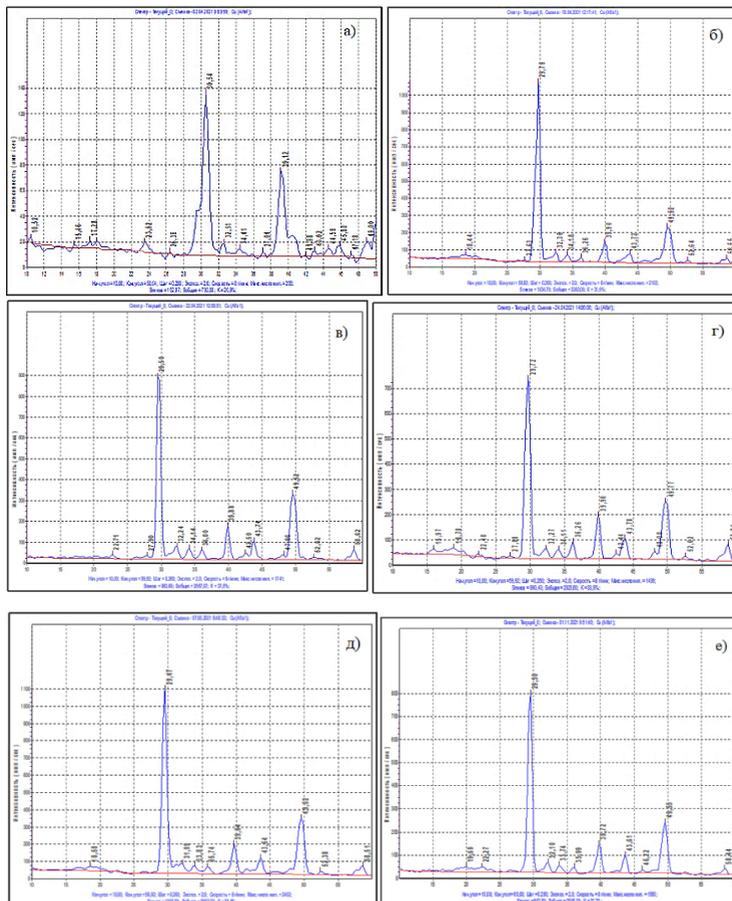


Рисунок 3. Рентгенодифрактограммы кристаллов CdTe: исходный – (а), облученные тепловыми нейтронами потоком $0,264 \cdot 10^8$ н/см² (б), $1,3 \cdot 10^8$ н/см² (в), $2,16 \cdot 10^8$ н/см² (г), $3,02 \cdot 10^8$ н/см² (д) и $1,85 \cdot 10^9$ н/см² (е) образец №1

Рисунок 4 демонстрирует, как изменяется интенсивность отражённого рентгеновского излучения в зависимости от потока тепловых нейтронов для дифракционного пика №1.

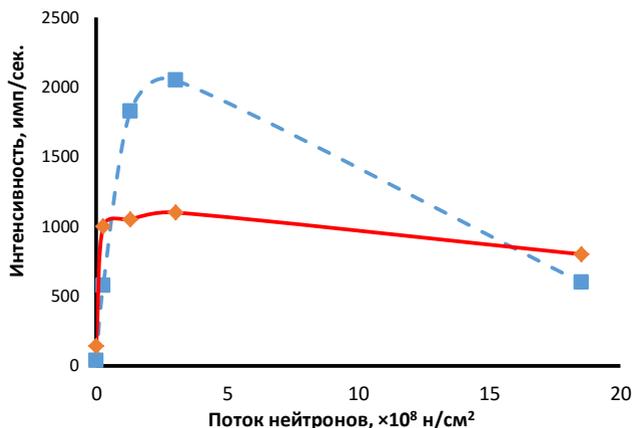


Рисунок 4. Зависимость интенсивности отраженного рентгеновского излучения от значения потока тепловых нейтронов для кристаллов CdTe для рефлекса 1. Сплошная линия – образец №1, пунктирная линия – образец №2

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 $0,264 \cdot 10^8$ н/см², а затем постепенно снижается. Для образца №2 аналогичное поведение проявляется при большей величине потока — до $1,3 \cdot 10^8$ н/см² наблюдается рост, после чего начинается плавное снижение интенсивности отражённого сигнала.

Указанные результаты открывают перспективу использования нейтронной обработки как метода тонкой настройки физико-технических характеристик полупроводников, что может быть востребовано в зелёной энергетике и при создании детекторов ядерного излучения.

Четвёртая глава посвящена квантово-механическим расчётам электронных и оптических характеристик соединений CdTe и CdZnTe, выполненным в рамках теории функционала плотности (DFT) с применением пакета WIEN2k. Также представлены экспериментальные данные по оптическим свойствам, полученные методом UV-Vis-спектрофотометрии.

Для исследования структурных и электронных характеристик твёрдого раствора $Cd_xZn_{1-x}Te$ были проведены расчёты с использованием DFT (см. главу 2). Оптимизированные структурные параметры всех изученных нанокристаллов этой системы приведены в таблицу 2.

Таблица 2. Значение структурных параметров $Cd_xZn_{1-x}Te$

$Cd_xZn_{1-x}Te$	Параметры решетки и объем системы			Ошибка a , %
	Эта работа		Эксперимент	
	$a=b=c, \text{Å}$	$V, \text{Å}^3$	$a=b=c, \text{Å}$	
CdTe	6.7364	305.7004	6.5	3.5
$Cd_{0.75}Zn_{0.25}Te$	6.6299	291.4278	-	-
$Cd_{0.5}Zn_{0.5}Te$	6.5140	280.1688	-	-
$Cd_{0.25}Zn_{0.75}Te$	6.4496	268.2909	-	-
ZnTe	6.3774	259.3805	6.20	2.7

Согласно данным таблицы 2 и рисунка 5, при увеличении содержания Zn наблюдается линейное уменьшение параметра решетки и объема кристаллической ячейки, что соответствует закону Вегарда.

Аппроксимация зависимости объема от концентрации цинка (сплошная линия на рисунке 5) описывается уравнением $V = -11,578x + 315,73$. Эта формула позволяет прогнозировать объем нанокристаллов системы $Cd_xZn_{1-x}Te$ для любого значения x в пределах от 0 до 1.

На рисунке 6 (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 $CuK\alpha$ ($\lambda = 1,54 \text{ Å}$).

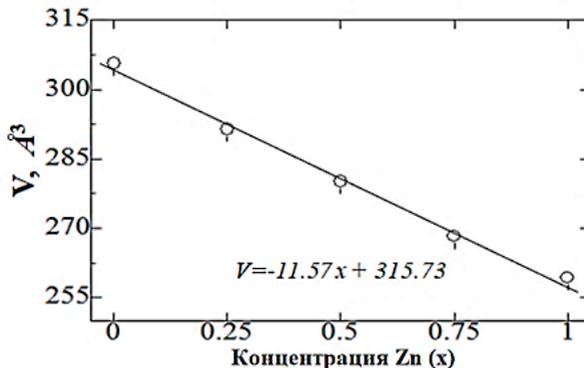


Рисунок 5. Зависимость объема от содержания Zn для $Cd_xZn_{1-x}Te$.

Как видно из квантово-механических расчетов, представленных на рисунке 6 (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 2θ , что указывает на уменьшение параметра кристаллической решётки.

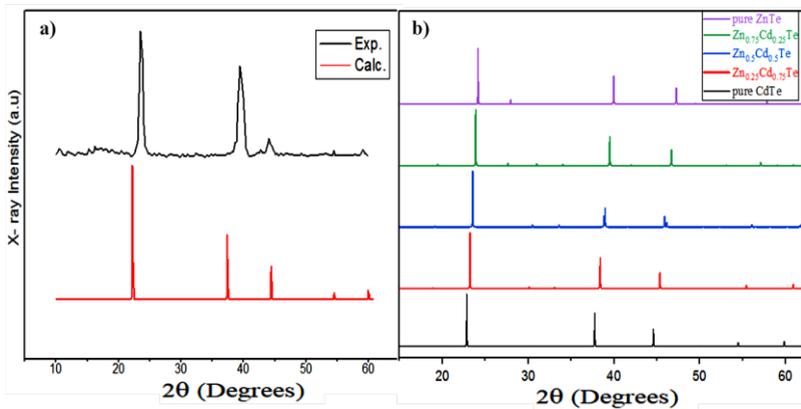


Рисунок 6. Расчетные и экспериментальные рентгенограммы для чистого CdTe (a) и порошковые дифрактограммы (б) для системы $Cd_xZn_{1-x}Te$

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 дальнейшего анализа электронно-энергетических и оптических свойств модифицированных кристаллов CdTe был использован метод теории функционала плотности (DFT).

Электронные свойства твёрдого раствора $Cd_xZn_{1-x}Te$ 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 3 представлены значения ширины запрещённой зоны, полученные в рамках теории функционала плотности (DFT) с применением обменно-корреляционного потенциала mBJ (ТВ-mBJ), и их сравнение с доступными экспериментальными данными.

На рисунке 7 представлена зависимость изменения величины запрещенной зоны от изменения содержания цинка в системе. Величина запрещенной зоны увеличивается по закону $E_{Bg} = 0,6016 x + 1,4932$, где x — концентрация цинка в диапазоне $0 < x < 1$. Обычно данные наименьших квадратов позволяют найти величину запрещенной зоны для остальных промежуточных концентраций цинка.

Таблица 3. Значения запрещенной зоны, рассчитанные с помощью mBJ - приближений для системы $Cd_xZn_{1-x}Te$ в сравнении с экспериментальными результатами

Система		CdTe	$Cd_{0.75}Zn_{0.25}Te$	$Cd_{0.5}Zn_{0.5}Te$	$Cd_{0.25}Zn_{0.75}Te$	ZnTe
Зап. зона, эВ	Эта раб.	1,501	1,672	1,788	1,840	2,169
	Эксп ер.	1,5	-	-	-	2,25
Энер реш.	Эта раб.	-24764,3	-76272,2	-41933,6	-91462,4	-17169,1

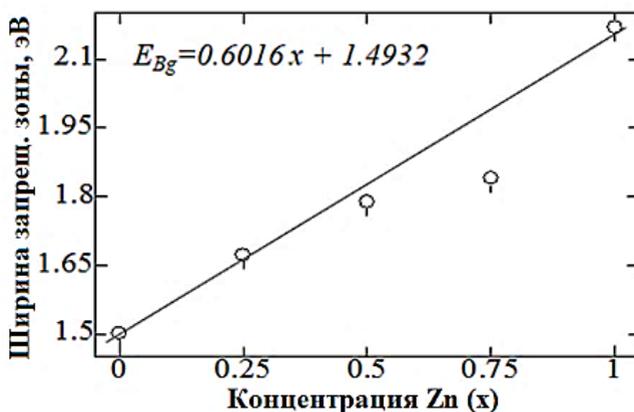


Рисунок 7. Зависимость энергии запрещенной зоны от содержания Zn для образцов $Cd_xZn_{1-x}Te$.

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.

Расчитанная полная плотность электронных состояний для структурно оптимизированных моделей $Cd_xZn_{1-x}Te$ представлена на рисунке 8 (а, б).

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. 8 (a, b)). В области отрицательных энергий появляются дополнительные энергетические уровни, обусловленные вкладом р-электронов орбиталей Zn, которые отсутствуют в зонной структуре чистого CdTe (рис. 8, a).

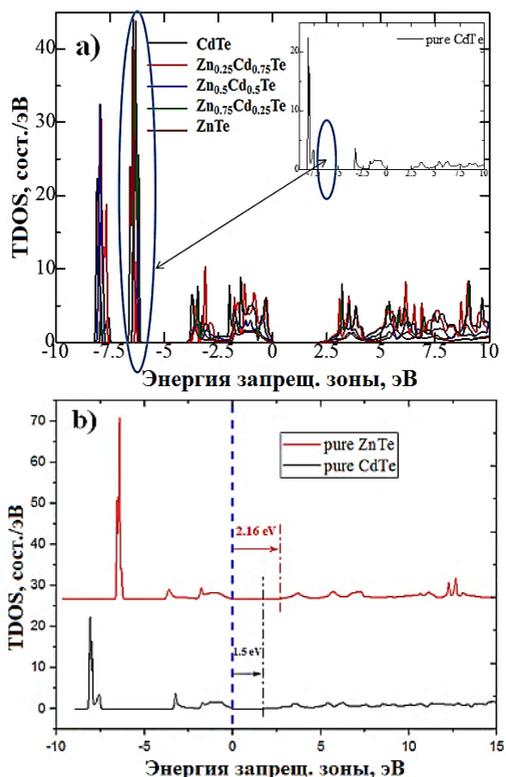


Рисунок 8. Полная плотность состояний для системы $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ (a) и сравнение плотности электронных состояний чистых CdTe и ZnTe (b).

Плотность электронных состояний для крайних членов твёрдого раствора — CdTe и ZnTe – представлены на рисунке 8 (b). Они демонстрируют, что чистые теллуриды характеризуются сравнительно низкой плотностью состояний в зоне проводимости. Однако по мере увеличения содержания цинка в системе

$\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ и приближении состава к ZnTe наблюдается рост плотности состояний как в валентной зоне, так и в зоне проводимости.

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. 9 (a–d)).

Энергетические зонные диаграммы, представленные на рисунке 9, 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 $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$, причём её ширина возрастает по мере увеличения параметра состава x (концентрации Zn).

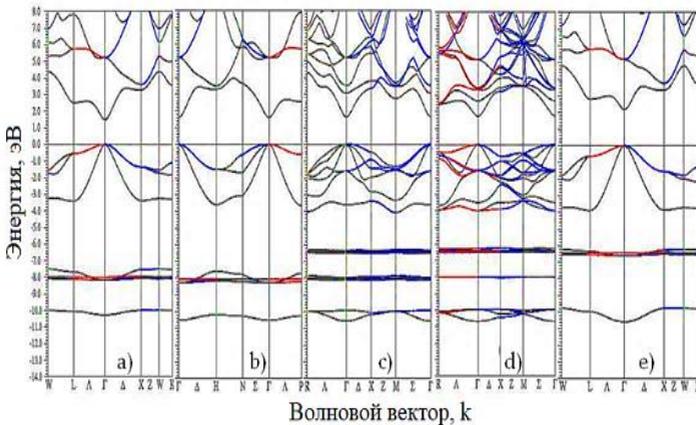


Рисунок 9. Рассчитанные зонные структуры (энергетическая диаграмма) для: (a) CdTe , (b) $\text{Cd}_{0.75}\text{Zn}_{0.25}\text{Te}$, (c) $\text{Cd}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{Te}$, (d) $\text{Cd}_{0.25}\text{Zn}_{0.75}\text{Te}$, и (e) ZnTe . Положение уровня Ферми составляет 0 эВ .

Оптические параметры материалов, такие как мнимая часть диэлектрической проницаемости (ϵ_2), коэффициент поглощения и коэффициент экстинкции, позволяют оценить характер отклика материала на воздействие фотонного излучения. В частности, оптические свойства твёрдого раствора $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ анализируются с использованием как действительной (ϵ_1), так и мнимой (ϵ_2) составляющих комплексной диэлектрической проницаемости. Действительная часть (ϵ_1) характеризует способность материала аккумулировать энергию, воспринимаемую при нулевой или приближённой к нулю частоте — эта величина считается внутренним свойством вещества. В то время как мнимая часть (ϵ_2) отражает способность материала к поглощению энергии

электромагнитного излучения и напрямую зависит от его зонной структуры. На рисунке 10 (а, б) представлены графики зависимости ϵ_1 и ϵ_2 от энергии падающих фотонов для всех нанокристаллических моделей системы $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ (при $0 \leq x \leq 1$).

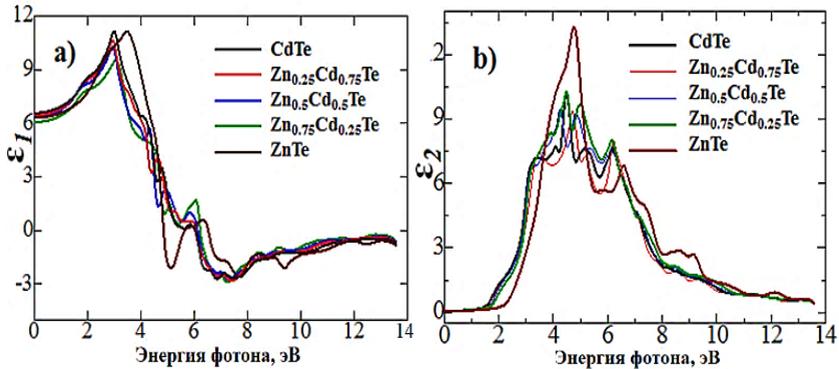


Рисунок 10. Рассчитанные действительная (а) и мнимая (б) части диэлектрической проницаемости системы $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$

Отрицательные значения действительной части диэлектрической проницаемости (ϵ_1) свидетельствуют о металлической природе материала. Иными словами, при достаточно высокой энергии падающего фотона система $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ начинает демонстрировать характеристики, присущие металлам. Таким образом, по поведению ϵ_1 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 11.

В условиях низкого рассеяния и высокого поглощения коэффициент экстинкции (k) приближается по значению к коэффициенту поглощения, что упрощает интерпретацию оптических свойств материала. На рисунках 12 (а, б) 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.

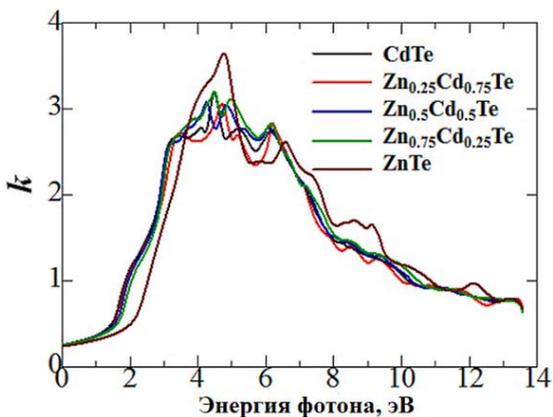


Рисунок 11. Зависимость коэффициента экстинкции от энергии фотона для системы $Cd_xZn_{1-x}Te$

Коэффициент поглощения (α) 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. Расчётные максимумы коэффициентов экстинкции (рис. 11) и поглощения (рис. 12 (а)) 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. 12 (а)), 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 внутрizonных 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.

Легирование кристаллической решётки CdTe цинком приводит к увеличению ширины запрещённой зоны до оптимального значения, благодаря чему наночастицы $Cd_xZn_{1-x}Te$ 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 и ранее опубликованными теоретическими расчётами.

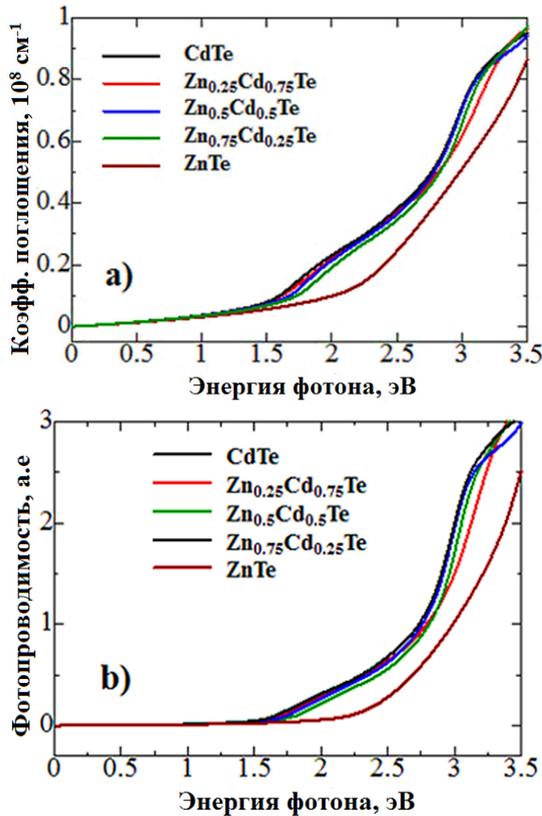


Рисунок 12. Расчет коэффициента поглощения (а) и оптическая проводимость (б) как функция энергии фотона для системы $Cd_xZn_{1-x}Te$

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 (а) 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.

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-A].
2. Установлено, что при взаимодействии потока тепловых нейтронов от $2,64 \cdot 10^7$ н/см² до $7,34 \cdot 10^8$ н/см² 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 $2,64 \cdot 10^7$ н/см² до $3,02 \cdot 10^8$ н/см² 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 $2\theta \approx 43,5^\circ$ 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 РСА установлено, что облучение тепловыми нейтронами ухудшает структуру CdZnTe. Показано, что облучение тепловыми нейтронами от $2,64 \cdot 10^7$ н/см² до $3,02 \cdot 10^8$ н/см² 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 акту 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-A, 8-A].
7. Показано, что при облучении потоком тепловых нейтронов $1,3 \cdot 10^8$ н/см² наблюдается увеличение коэффициента оптического поглощения. Предположено, что обнаруженное явление есть результат появления промежуточных соединений, которые имеют большую поглощательную

способность в исследованных длинах волн спектра. Облучение потоком $4,32 \cdot 10^8$ н/см² 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.

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. Ақобирова, М.Т. Яров, Э. Дж. Шаимов // Вестник ТНУ. 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-А] **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-А] **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-А] **Яров, М.Т.** Ядернофизические методы оптимизации свойств полупроводниковых кристаллов, используемых в солнечных панелях / Б.И. Махсудов, М.Т. 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 АІВVI / 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 ТФП-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. Шаймов // 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 рентгено-дифрактограммах 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. Ақобирова, 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. Ақобирова, 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. Камолитдинов // 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.

ДОНИШГОҲИ МИЛЛИИ ТОҶИКИСТОН

Бо ҳуқуқи дастнавис

ВБД: 538.9

НОСИРЗОДА МУҲАММАД

**ТАЪСИРИ СЕЛИ КАМИ НЕЙТРОНҲОИ ҶАРОРАТӢ БА ХОСИЯТҲОИ
ЭЛЕКТРОФИЗИКӢ, СОҲТОРӢ ВА ОПТИКИИ ПАЙВАСТАГИҲОИ
НИМНОҚИЛИИ CdTe ВА CdZnTe**

АВТОРЕФЕРАТИ

**диссертатсия барои дарёфти дараҷаи илмии доктори фалсафа (PhD) -
доктор аз рӯи ихтисоси 6D060400-Физика
(6D060407-Физикаи ҳолатҳои конденсӣ)**

Душанбе-2025

Диссертатсия дар кафедраи физикаи ҳастаи факултети физикаи Донишгоҳи миллии Тоҷикистон иҷро шудааст.

Роҳбари илмӣ: Махсуд Барот Исломова – доктори илмҳои физикаю математика, профессор, мудири кафедраи физикаи ҳастаи Донишгоҳи миллии Тоҷикистон

Муқарризи расмӣ: Ташметов Маннаб Юсупович – доктори илмҳои физикаю математика, профессор, муовини директор оид ба илми Институти физикаи ҳастаи АИ Ҷумҳурии Ўзбекистон

Зафари Умар – номзоди илмҳои физикаю математика, мудири кафедраи физикаи умумии Донишгоҳи давлатии омӯзгории Тоҷикистон ба номи С. Айни

Муассисаи пешбар: Институти физикаю техникаи ба номи С.У. Умарови Академияи миллии илмҳои Тоҷикистон

Ҳимояи диссертатсия санаи «02» сентябри соли 2025, соати 14:00 дар ҷаласаи Шурои диссертатсионии 6D.KOA-056 назди Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, суроғи 734025, ҶТ, ш. Душанбе, маҳаллаи Буни Ҳисорак, бинои таълимии №16, факултети физика, Толори Шурои диссертатсионӣ 206, баргузор мегардад.

Бо диссертатсия дар сомонаи www.tnu.tj ва Китобхонаи илмӣ марказии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, суроғи 734025, хиёбони Рудақӣ, 17 шинос шудан мумкин аст.

Автореферат фиростода шуд «___» _____ 2025 с.

Котиби илмӣ
Шурои диссертатсионии
6D.KOA-056, н.и.ф.м., дотсент

Исломов З.З.

МУҚАДДИМА

Мухимияти тадқиқот. Нимноқилҳои кристаллии гурӯҳи A^2B^6 дар технологияи муосир, аз ҷумла аз панелҳои офтобӣ, детекторҳои афканишоти ҳастай то асбобҳои тиббӣ васеъ истифода мешаванд. Ин маводҳо бо хосиятҳои беназири электрикии худ дар соҳаҳои мухталифи саноат ва технология инкилобро ба вуҷуд оварда, роҳи идоракунии электргузaronиро бо дақиқии зиёд пешкаш карданд. Пайвастагиҳои нимноқилии A^2B^6 дорои нишондиҳандаҳои хеле хуб, ба монанди коэффисиенти баланди фурубурд ва самаранокии баланди табдилдиҳии афканишоти офтоб мебошанд. Тадқиқотҳое, ки дар тӯли чанд даҳсолаи охир дар соҳаи технологияи сохтани детекторҳои афканишоти ҳастай гузаронида шуданд, нишон доданд, ки детекторҳои CdZnTe аз нуқтаи назари ҳассосияти баланд, тафриқаи баланди энергетикӣ ва фазой дар ҳарорати хона ҷойгузини детекторҳои синтиллиатсионӣ мебошанд. CdTe дар байни технологияҳои пардаҳои тунук барои панелҳои офтобӣ пешсаф аст ва мувофиқи баъзе тадқиқотҳо дар муқоиса бо дигар технологияҳои фотоэлектрикӣ, ки ҳоло дар бозори тичоратӣ мавҷуданд, хароҷоти камтарини истеҳсолиро доро мебошад.

Дарачаи омӯхта шудани мавзӯи тадқиқот. Маълум аст, ки технологияи муосири нимноқилӣ ба дарачае нарасидааст, ки маводи идеалии бо параметрҳои додашуда ба даст оварад. Барои бартараф кардани нуқсонҳои сохторӣ ва беҳтарсозии параметрҳои кристалл, таъсири беруна лозим аст. Қобилияти тағйир додани параметрҳои нимноқил тавассути таъсири беруна, аз қабili истифодаи шиддат, тағйир додани ҳарорат ё тозакунии ин маводҳоро хеле гуногунҷабҳа мекунад.

Намудҳои гуногуни афканишоти ҳастай, аз ҷумла нейтронҳо, барои беҳтарсозии хусусиятҳои кристаллҳои нимноқилӣ истифода мешаванд. Нурбориши нейтронӣ усули муҳими таъсири беруна ба хосиятҳои физикӣ ва электрикии кристаллҳои нимноқилӣ мебошад. Афканишоти нейтронӣ, бар хилофи дигар намудҳои афканишоти ионофар, бо маводҳо на тавассути иониши мустақим, балки ба воситаи реаксияҳои ҳастай таъсир мекунад, ки эффеқтҳои онро таққ ва аксар вақт мураккаб мекунад.

Бояд гуфт, ки дар ин самт корҳои зиёде иҷро шудааст, вале ҳамаи ин тадқиқотҳо дар шароити доза ва сели зиёди афканишот гузаронда шудаанд. Маълумотро дар бораи таъсири мутақобилаи сели ками нейтронҳои ҳароратӣ бо сохторҳои нимноқилӣ дар адабиётҳои гуногун пайдо кардан мумкин аст. Дар баъзеи онҳо таъсири сели ками нейтронҳои ҳароратӣ ба объектҳои биологӣ низ тақққ шудааст. Ҳамаи корҳои номбаршуда нишон медиҳанд, ки хусусиятҳои намунаҳои тадқиқшуда дар минтақаи сели ками нейтронҳои ҳароратӣ беҳтар шудааст. Аммо таъсири мутақобилаи нейтронҳои ҳароратиро бо нимноқилҳои кристаллии CdTe ва CdZnTe кам омӯхтаанд.

Аз ин рӯ, дар ин диссертатсия бо истифода аз усулҳои таҳлили рентгеносохторӣ, спектрофотометрия ва ҳисобҳои кванто-механикӣ таъсири

сели ками нейтронҳои ҳароратӣ ба хосиятҳои электрофизикӣ, сохторӣ ва оптикӣ кристаллҳои нимноқилии гурӯҳи A^2B^6 , аз ҷумла, теллуриди кадмий ($CdTe$) ва теллуриди кадмий рӯх ($CdZnTe$) нишон дода шудааст.

Алоқаи тадқиқот бо лоиҳаҳо ва мавзӯҳои илмӣ. Кори диссертационӣ солҳои 2021-2025 мутобиқи мавзӯи тадқиқоти илмии кафедраи физикаи ҳастаи Донишгоҳи миллии Тоҷикистон дар мавзӯи «Таъсири нейтронҳои ҳароратӣ ба хосиятҳои объектҳои биологӣ ва ҷисмҳои сахт», №01/1050-03 аз 25.04.2022 с., 0122ТJ1422 аз 29.04.2022 с. анҷом дода шудааст.

Мавзӯи диссертатсия ба Рӯйхати самтҳои афзалиятноки тадқиқоти илмӣ ва илмию техникии дар солҳои 2021-2025 (Мутобиқи қарори Ҳукумати Ҷумҳурии Тоҷикистон № 503 аз 26 сентябри соли 2020) ва барои давраи то соли 2030 амалишаванда (Мутобиқи қарори Ҳукумати Ҷумҳурии Тоҷикистон № 114 аз 28. 02. 2025) мувофиқат мекунад.

ТАВСИФИ УМУМИИ КОР

Мақсади диссертатсия омӯзиши таъсири сели ками нейтронҳои ҳароратӣ ба электргузаронӣ, параметрҳои сохторӣ ва хосиятҳои оптикӣ нимноқилҳои кристаллии $CdTe$ ва $CdZnTe$ мебошад.

Барои расидан ба мақсади гузошташуда **вазифаҳои** зерин муайян карда шуданд:

- коркарди усулҳои нурбориш ва ҷенкунии сели нейтронҳои ҳароратӣ;
- омӯзиши хосиятҳои электрофизикӣ ва сохтори $CdTe$ ва $CdZnTe$ пеш ва баъд аз нурбориш ва муқоисаи натиҷаҳо;
- омӯзиши параметрҳои оптикӣ $CdTe$ пеш ва баъд аз нурбориш қардан бо нейтронҳои ҳароратӣ;
- гузаронидани ҳисобҳои кванто-механикӣ барои асоснокунии назариявии натиҷаҳои тадқиқоти таҷрибавӣ ва муқоисаи онҳо.

Объекти тадқиқот. Объектҳои тадқиқот нимноқилҳои монокристаллии $CdTe$ ва $CdZnTe$ мебошанд.

Предмети тадқиқот омӯзиши тағйирёбии параметрҳои электрофизикӣ, сохторӣ ва оптикӣ $CdTe$ ва $CdZnTe$ пас аз коркард бо сели нейтронҳои ҳароратӣ мебошад.

Навоварии илмӣ тадқиқот дар он аст, ки бори аввал:

- бо усулҳои таҷрибавӣ пастшавии муқовимати хосси $CdTe$ ва $CdZnTe$ пас аз нурбориш бо сели ками нейтронҳои ҳароратӣ муқаррар карда шуд;
- беҳтар шудани сохтори кристаллҳои $CdTe$ баъд аз нурбориш бо сели ками нейтронҳои ҳароратӣ мушоҳида карда шуд, ки инро афзоиши интензивияти нурҳои рентгении инъикосшуда тасдиқ мекунад;
- вобастагии параметрҳои сохтори $CdTe$ ва $CdZnTe$ аз сели нейтронҳои ҳароратӣ муқаррар карда шуд;
- ҳисобкунии кванто-механикӣ хосиятҳои сохторӣ ва оптикӣ $CdZnTe$ вобаста аз консентратсияи Zn гузаронида шуд;

- моделсозии кванто-механикии раванди таъсири нейтронҳои ҳароратӣ дар CdTe гузаронида шуд.

Арзиши назариявӣ тадқиқот. Усулҳои таҷрибавӣ ва ҳисобҳои назариявӣ нишон доданд, ки дар зери таъсири сели ками нейтронҳои ҳароратӣ хосиятҳои электрофизикӣ, сохторӣ ва оптикӣ намунаҳо беҳтар мешаванд. Ин раванд бо ба амал омадани реаксияҳои ҳастаии нейтронҳои ҳароратӣ бо ҳастаҳои намунаҳои тадқиқшуда алоқаманд аст, ки ин дар нихояти қор боиси пайдо шудани изотопҳои нав ва ботартибии сохтор мегардад.

Арзиши амалии қор. Натиҷаҳои ба даст овардашударо дар соҳаи энергетикаи офтобӣ барои баланд бардоштани самаранокии панелҳои офтобӣ бо ёрии нурбориши нейтронӣ истифода бурдан мумкин аст. Ғайр аз ин, кристаллҳои CdTe ва CdZnTe, ки хосиятҳои мукамал доранд, барои детекторҳои афканишоти ҳастаӣ васеъ истифода бурдан мумкин аст.

Муқаррароти барои дифоъ пешниҳодшаванда:

- таъсири нейтронҳои ҳароратӣ ба хосиятҳои электрофизикӣ, сохторӣ ва оптикӣ кристаллҳои нимноқилии CdTe ва CdZnTe;
- вобастагии электргузаронии кристаллҳои нимноқилии CdTe ва CdZnTe аз бузургии сели нейтронҳои ҳароратӣ;
- падидаи “сели кам”-и нейтронҳои ҳароратӣ хангоми таъсири мутақобилаи онҳо бо кристаллҳои нимноқилҳои CdTe;
- ҳисобкунии кванто-механикии хосиятҳои электрофизикӣ оптикӣ кристаллҳои нимноқилии CdTe ва CdZnTe;
- вобастагии хосиятҳои оптикӣ кристаллҳои нимноқилии CdTe аз сели нейтронҳои ҳароратӣ;
- ба амал омадани реаксияҳои ҳастаӣ дар зери таъсири нейтронҳои ҳароратӣ, ки боиси тағйир ёфтани хосиятҳои кристаллҳои нимноқилии CdTe ва CdZnTe мегардад.

Эътимоднокии натиҷаҳо бо мавҷудияти маълумотҳои тақрорӣ таҷриба, мувофиқати натиҷаҳои таҷриба бо ҳисобҳои кванто-механикӣ ва натиҷаҳои адабиёти илмӣ таъмин карда мешавад.

Мутобиқат бо шиносномаи ихтисоси илмӣ.

Мазмуни рисола ба шиносномаи ихтисоси илмӣ 6D060400 – Физика (6D060407 – Физикаи ҳолатҳои конденсӣ), ки аз ҷониби Комиссияи олии аттестатсионии назди Президенти Ҷумҳурии Тоҷикистон тасдиқ шудааст, аз рӯи нуктаҳои зерин мувофиқат мекунад:

- омузиши назариявӣ ва таҷрибавии табиати физикии хосиятҳои металлҳо ва ҳулаҳои онҳо, пайвастиҳои ғайриорганикӣ ва органикӣ, диэлектрикҳо, аз ҷумла моддаҳои рӯшанкунанда ҳам дар ҳолати сахт ва ҳам аморфӣ вобаста ба таркиби химиявӣ, изотоп, ҳарорат ва фишор.
- таҳияи моделҳои математикӣ ва пешгуи тағйироти хосиятҳои физикии муҳити конденсӣ вобаста ба таъсири омилҳои беруна.

- коркарди усулҳои таҷрибавии омӯхтани хосиятҳои физикӣ ва пешниҳод намудани асосҳои физикии технологияи саноатии ба даст овардани моддаҳои дорои хосиятҳои муайян.

Саҳми шахсии муаллиф ба нақша гирифтани тадқиқот, нурбориши намунаҳо ва ҷен кардани қиматҳои электргузaronӣ, тадқиқоти таҷрибавии хосиятҳои сохторӣ ва оптикӣ, коркарди компютерии маълумоти бадастомада ва таҳлили тадқиқоти таҷрибавӣ иборат аст. Муҳокимаи натиҷаҳои кори диссертатсионӣ, тафсир ва хулосаҳои дахлдор аз ҷониби муаллиф шахсан анҷом дода шудааст.

Санҷиши кор. Натиҷаҳои асосии диссертатсия дар Конфронси байналмилалӣ илмӣ-амалии «Баррасии масъалаҳои муосири физика, техника ва технологияи нимноқилҳо» (Хучанд, 2021), Конфронси илмӣ-назариявии ҳаياتи омӯзгорон ва кормандони ДМТ (Душанбе, 2022), Конфронси байналмилалӣ «Рушди энергетика дар Осиёи Марказӣ» Душанбе, 3-4 июни 2022), Конфронси байналмилалӣ «Нақши физика дар рушди илм, маориф ва инноватсия» (Душанбе, 27 октябри 2022), Конфронси XX байналмилалӣ донишҷӯён, аспирантҳо ва олимони ҷавон «Пешомадҳои рушди илмҳои фундаменталӣ» (Россия, Томск, 25-28 апрели 2023), Конфронси илмӣ-назариявии ҳаياتи омӯзгорон ва кормандони ДМТ (Душанбе, 2023), Конфронси байналмилалӣ «Масъалаҳои бунёдӣ ва амалии физикаи муосир» (Тошкент, 19-21 октябри 2023), Конфронси байналмилалӣ илмӣ «Проблемаҳои муосири физикаи конденсӣ» (Душанбе, 24-25 октябри 2023), Конфронси илмӣ-назариявии ҳаياتи омӯзгорон ва кормандони ДМТ (Душанбе, 2024), Конфронси илмӣ «Ҳолат ва дурнамои рушди энергетикаи таҷдидшаванда дар Тоҷикистон» (Душанбе, 24-26 июни 2024), Конфронси IX байналмилалӣ илмӣ «Проблемаҳои муосири физика» (Душанбе, 2024).

Натиҷаҳои интишори диссертатсия. Маводҳои кори диссертатсия дар 17 мақолаи илмӣ, аз ҷумла 1 мақола дар нашрияҳои аз пойгоҳи байналмилалӣ SCOPUS, 4 мақола дар маҷаллаҳои тақризшавандаи Комиссияи олии аттестатсионии Ҷумҳурии Тоҷикистон, 12 тезис дар маҷмӯаҳо ва маводи конференсияҳои сатҳи ҷумҳуриявӣ ва байналмилалӣ ба таъб расидаанд.

Сохтор ва доираи рисола. Сохтори рисола мувофиқи мақсад ва вазифаҳои тадқиқот муайян карда шуда, аз муқаддима, чор боб, хулоса ва рӯйхати адабиёт (149 ном) иборат аст. Ҳаҷми умумии рисола аз 142 саҳифаи ҷопи компютерӣ иборат буда, аз 55 расм ва 12 ҷадвал иборат аст.

МУНДАРИҶАИ КОР

Дар муқаддима аҳамияти мавзӯи тадқиқот нишон дода шуда, мазмуни муҳтасари тадқиқот оварда шудааст. Инчунин дар ин қисми рисола мақсад ва вазифаҳои асосии тадқиқот, навоари илмӣ ва аҳамияти амалии он нишон дода шудааст. Муқаррароти асосии ба ҳимоя пешниҳодшаванда, эътимоднокии натиҷаҳои илмӣ ва саҳми муаллиф дар раванди тадқиқот асоснок карда шудаанд.

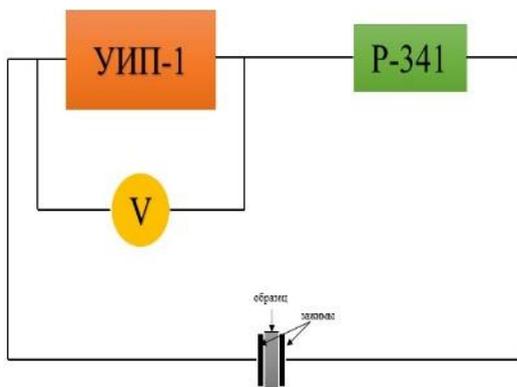
Дар боби якум маъхазҳои адаби доир ба таъсири мутақобилаи афканишоти ионофар ба хосиятҳои гуногуни маводҳои нимноқилӣ, дар алоҳидагӣ таъсири афканишоти нейтронӣ ба маводҳо таҳлил карда шуда, шартҳои асосии гузаронидани тадқиқот дар ин соҳа пешниҳод карда шудаанд.

Дар боби дуюм усулҳои гузаронидани корҳои илмӣ-тадқиқотӣ оварда шудаанд. Усули ҳосил кардан ва коркарди намунаҳо, усулҳои ҳисоб кардани сели нейтронҳои ҳароратӣ ва нурбориши намунаҳо бо истифода аз манбаи нейтрони $Pu - Be$, усули таҳлили рентгеносохторӣ бо истифода аз дастгоҳи рентгени ДРОН-3.0 барои омӯختани тағйироти сохторӣ, UV-Vis спектрофотометрия ва омӯзиши хосиятҳои квантӣ-механикии маводҳо пешниҳод карда шудаанд.

Дар боби сеюм натиҷаҳои таҷрибавӣ оид ба таъсири нейтронҳои ҳароратӣ ба хусусиятҳои электрофизикӣ ва сохтори $CdTe$ ва $CdZnTe$ оварда шудаанд. Рентгенодифрактограммаҳои $CdTe$ ва $CdZnTe$ то ва баъд аз нурбориш бо селҳои гуногуни нейтронҳои ҳароратӣ муқоиса карда шуда, вобастагии интенсивияти инъикоси нурҳои рентгенӣ аз бузургии сели нейтронҳои ҳароратӣ муқаррар карда шуд.

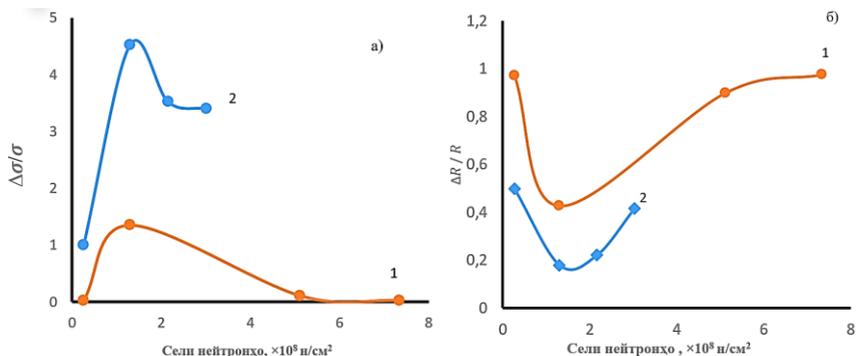
Тавре дар муҳимияти кор нишон дода шуд, ин кристаллҳо намояндагони синфи нимноқилҳои фарохзонна мебошанд ва дар байни пайвастагиҳои A^2B^6 яке аз маводҳои зиёд омӯхташаванда мебошанд. Ин бо хосиятҳои физикию химиявӣ онҳо шарҳ дода мешавад, ки дар байни аналогҳои худ фарқ мекунанд.

Тарҳи пайваस्तшавии дастгоҳҳои ченкунии муқовимати парда дар расми 1 нишон дода шудааст. Барои бо шиддат таъмин намудани занҷир манбаи шиддати УИП-1 ва барои чен кардани қимати шиддат ба манбаъ асбоби комбинатсионии У-4341 параллел васл карда шуд. Муқовимат бо истифода аз нановолтаметр Р-341 чен карда шуд.



Расми 1. Тарҳи пайваस्तкунии дастгоҳҳо барои ченкунии муқовимати пардаҳои нимноқилӣ

Дар расми 2 вобастагии тағйирёбии ноқилияти хос ва муқовимати пардаҳои CdTe ҳангоми нурбориш бо киматҳои гуногуни сели нейтронҳои ҳароратӣ оварда шудааст.



Расми 2. Вобастагии тағйирёбии ноқилияти хос (а) ва муқовимат (б) аз сели нейтронҳои ҳароратӣ. 1 – пардаи CdTe (дар таҳлавҳои CdTe), 2 – пардаи CdTe дар таҳлавҳои Si

Аз расм дида мешавад, ки бо афзоиши сели нейтронҳо, тағйирёбии назарраси хосиятҳои электрофизикии мавод мушоҳида мегардад. Дар ҷадвали 1 параметрҳои электрофизикии намунаҳои омӯхташуда нишон дода шудааст. Ҷанҷунӣ дар дастгоҳи таҷрибавие, ки дар расми 1 нишон дода шудааст, гузаронида шуд.

Ҷадвали 1. Параметрҳои электрофизикии намунаҳои омӯхташуда

R (то нурб.), $\times 10^9$ Ом	$\rho, \times 10^9$ Ом·см	$\sigma, \times 10^{-10}$ Ом·см ⁻¹	R (баъди нурб.), $\times 10^9$ Ом	$\rho, \times 10^9$ Ом·см	$\sigma, \times 10^{-9}$ Ом·см ⁻¹	Сели нейтр., $\times 10^8$ н/см ²
CdTe (дар таҳлавҳои CdTe)						
17	27	0,37	0,45	0,711	1,40	0,264
0,7	1,1	9,0	0,4	0,628	1,59	1,3
6,0	9,4	1,06	0,6	0,912	1,09	5,12
25	39	0,25	0,6	0,936	1,06	7,34
CdTe (дар таҳлавҳои Si)						
0,005	0,0078	1270	0,0025	0,0039	254	0,264
0,22	0,345	28,9	0,18	0,282	3,53	1,3
0,9	1,413	7,0	0,70	1,099	0,90	2,16
0,12	0,188	53,1	0,17	0,266	3,74	3,02

Муқоисаи маълумоти таҷрибавӣ бо натиҷаҳои моделсозии рақамии хусусиятҳои электрофизикӣ ва оптикӣ пардаҳо дар асоси CdTe:Cl мувофиқатро байни онҳо нишон медиҳад ва барои фаҳмонидани механизмҳои, ки асоси тағйирёбии муқовимати ҳос, ноқилият ва пастшавии самаранокии ҷамъоварии зарядҳо дар детекторҳо пас аз таъсири нейтронҳои ҳароратиро ташкил медиҳанд, замина фароҳам меорад. Ин ҳулосаҳо бо нуктаҳои дар параграфи якум ва дуҷуми боби чаҳорум зикршуда мувофиқ мебошанд. Таҳлили маълумоти дар расми 2 ва ҷадвали 1 овардашуда, нишон медиҳад, ки дар савияҳои пасти нурбориш бо нейтронҳои ҳароратӣ муқовимати ҳос кам мешавад ва ноқилияти намунаҳо зиёд мегардад. Аммо бо зиёд шудани сели нейтронҳо, вазъият баръакс мешавад — муқовимат меафзояд ва ноқилият коҳиш меёбад. Ин натиҷаҳо эҳтимолан бо тағйироти панҷараи кристаллии CdTe асос ёфта ба дигаргуншавии паҳноии минтақаи мамнӯъ вобаста аст, ки дар натиҷа ба тағйироти механизмҳои ноқилият меоварад. Илова бар ин, эҳтимол дорад умр ва ҷобукии барандагони заряд, ки дар раванди интиқол иштирок мекунанд, ба таври назаррас коҳиш ёбанд.

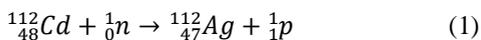
Дар теллуриди кадмий бо ноқилияти электронӣ (навъи n), нейтронбориш аз афташ боиси пайдоиши сатҳҳои иловагии энергетикӣ дар минтақаи мамнӯъ мегардад, ки дар наздикии қаъри минтақаи гузаронандагӣ ҷойгиранд. Ин ба ворид кардани ғашҳои иловагии донорӣ ба нимноқил баробар аст, ки боиси афзоиши ноқилияти электронии мавод мегардад.

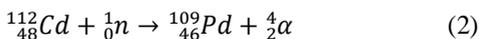
Бо афзоиши минбаъдаи сели нейтронҳои ҳароратӣ тағйироти навъи ноқилият ба амал меояд ва он то як қимати ҳудудии муайян меафзояд ва сипас ба таври монотонӣ кам шуда, ба қимати худӣ майл мекунанд.

Ҷаҳиши яқбории ноқилият, ки дар расми 2(а) мушоҳида мешавад, бо таҷдиди сохтори панҷараи кристаллӣ ва тағйирёбии параметрҳои яҷейкаи элементарӣ, тағйирёбии паҳноии минтақаи мамнӯъ ҳангоми нурбориш бо нейтронҳои ҳароратӣ шарҳ дода мешавад.

Таъсири иловагӣ инчунин аз ҳамтаъсироти ҳастаии нейтронҳо бо ҳастаҳои атомҳои моддаро ташкилдиханда, бармеояд. Ҳангоми фуру бурдани нейтронҳои ҳароратӣ аз ҷониби ҳастаҳои атомҳо, эҳтимол аст, ки реаксияҳои фурубурди радиатсионӣ бо ташаккули изотопҳои нав ба амал оянд. Эҳтимолияти ҷараён гирифтани чунин равандҳо аз андозаи буриши самараноки фурубурд вобаста аст. Барои кадмий ин нишондиханда тақрибан 2450 барнро ташкил медиҳад, дар ҳоле ки барои теллур — ҳамагӣ 4,7 барн мебошад. Аз ин рӯ, ҳастаи бештар ба таъсири нейтронӣ дучоршаванда ҳастаҳои Cd мебошанд ва маҳз онҳо нақши калидиро дар ташаккули падидаҳои радиатсионӣ дар панҷараи кристаллӣ иҷро мекунанд.

Мувофиқи маълумоти маъхазҳо, реаксияҳои ҳастаии эҳтимолии нейтронҳо бо иштироки ҳастаҳои кадмий шакли зерин доранд:

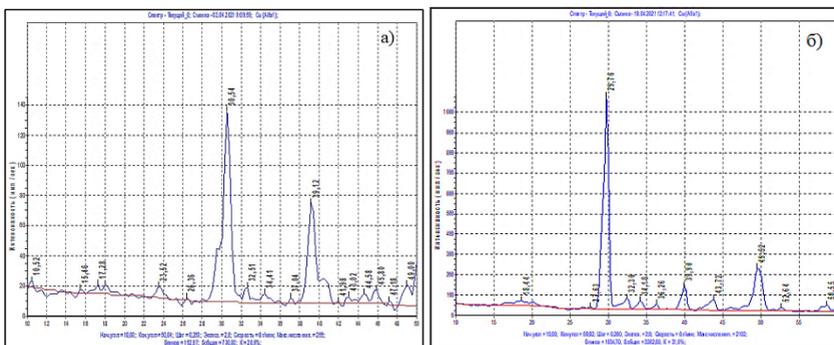


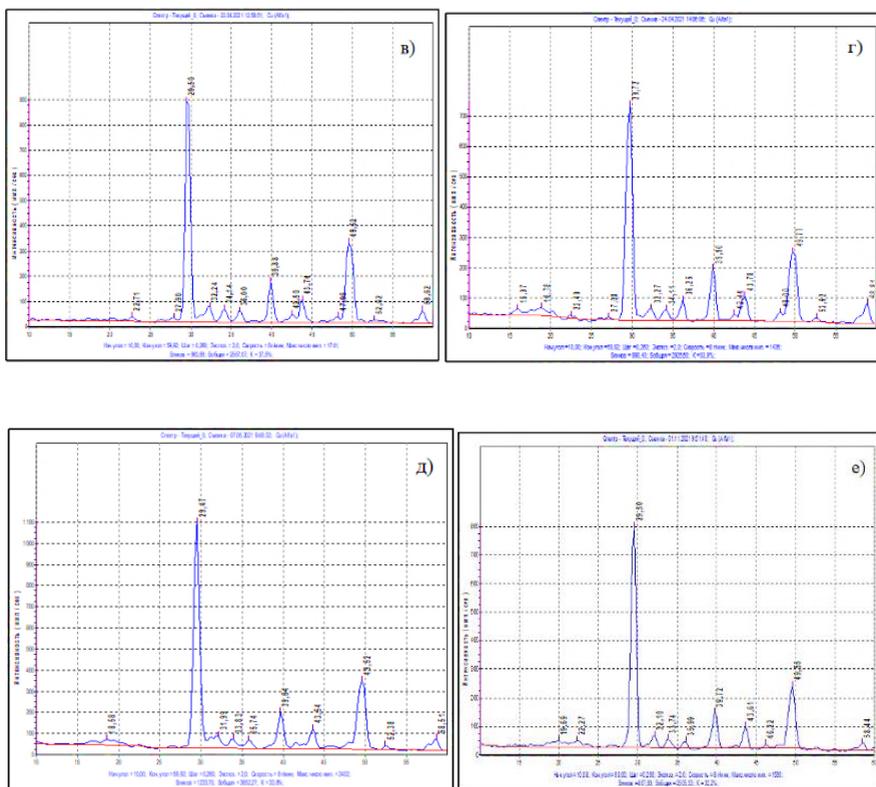


Дар натиҷаи ин реаксияҳои ҳастай дар нимноқил концентратсияи иловагии барандагони заряд дар шакли электронҳои озод ҳосил мешаванд. Ин равандҳо бо ташаккули ҳолатҳои нави энергетикӣ дар дохили минтақаи мамнӯъ меоранд, ки ба қазри минтақаи гузаронандагӣ наздик ҷойгиранд. Чунин сатҳҳо ба афзоиши зичии электронҳо мусоидат мекунанд ва дар натиҷа ноқилияти электронии моддаро зиёд менамоянд. Ин ҳолат бехтаршавии хосиятҳои электроноқилӣ дар сохторҳои бо нейтронҳо нурборишшудаи CdTe-ро дар мавриди сели ками нейтронӣ (расми 2, а) мефаҳмонад. Бо афзоиши минбаъдаи интенсивияти нурбориши нейтронӣ, воридшавии атомҳои бегона, ба монанди нукра (Ag) ва палладий (Pd), ба панҷараи кристаллӣ тақвият меёбад. Ин боиси ҷамъшавии нусонҳои нуктавӣ мегардад, ки ноқилиятро паст карда, самаранокии онро коҳиш медиҳанд. Домҳо ва марказҳои рекомбинатсияи ба вучудодада монеаи ҳаракати озоди барандагони заряд мегарданд.

Маълумоти таҷрибавии бадастомада бо натиҷаҳои моделсозии рақамие, ки барои баҳододи хусусиятҳои электрофизикии CdTe:Cl анҷом дода шудаанд, мувофиқати хубро нишон медиҳанд. Ин мувофиқат имкон медиҳад, ки тағйироти мушоҳидашудаи муқовимати хос, сатҳҳои ноқилият ва коҳиши самаранокии ҷудошавии зарядҳо аз детекторҳо, ки дар асоси ин мавод сохта шудаанд, дар шароити таъсири нейтронӣ бо интенсивияти гуногун, асоснок фаҳмонда шаванд.

Дар расми 3 рентгенодифрактограммаҳои кристаллҳои CdTe пеш ва баъд аз нурбориш бо селҳои гуногуни нейтронҳои ҳароратӣ, нишон дода шудаанд. Намунаҳои интихобшуда аз гурӯҳҳои истехсолии гуногун мебошанд, ки ин имконият медиҳад тақроршавии қонуниятҳои бадастомадаро пайгирӣ намоем. Ҷенкуниҳо мувофиқи усуле, ки дар параграфи сеюми боби дуюми рисола оварда шудаанд гузаронида шуданд (расми 2.7).

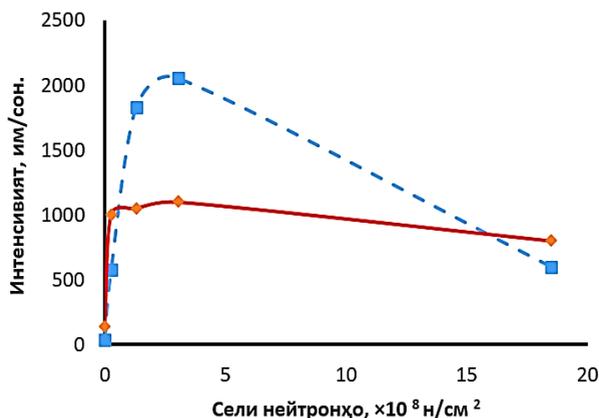




Расми 3. Рентгендифрактограммаҳои кристаллҳои CdTe, намунаи № 1: ибтидоӣ – (а), бо нейтронҳои ҳарорати $0,264 \cdot 10^8$ н/см² (б), $1,3 \cdot 10^8$ н/см² (в), $2,16 \cdot 10^8$ н/см² (г), $3,02 \cdot 10^8$ н/см² (д) и $1,85 \cdot 10^9$ н/см² (е) нурбороншуда.

Расми 4 нишон медиҳад, ки чӣ гуна интенсивияти шуоъҳои рентгени инъикосёфта барои қуллаи дифраксионии №1 вобаста ба сели нейтронҳои ҳароратӣ тағйир меёбад.

Дар графикҳо равшан дида мешавад, ки шакли вобастагии интенсивият аз нурбориши нейтронӣ барои ҳар ду намуна хусусияти шабеҳ дорад. Аз ҷумла, барои намунаи №1 интенсивият аввал то сели нурбориши $0,264 \cdot 10^8$ н/см² зиёд мешавад, пас аз он тадричан коҳиш меёбад. Барои намунаи №2 рафтори шабеҳ ҳангоми сели бештар мушоҳида мешавад — то $1,3 \cdot 10^8$ н/см² афзоиш ва баъдан пастшавии мулоими интенсивияти нурҳои инъикосёфта ба қайд гирифта мешавад.



Расми 4. Вобастагии интенсивияти нурҳои рентгении инъикосшуда аз қимати сели нейтронҳои ҳароратӣ барои кристаллҳои CdTe. Хати яклухт – намунаи №1, хати қанда – намунаи №2.

Натиҷаҳои зикршуда имкони истифодаи коркарди нейтронӣ ҳамчун усули танзими дақиқи хусусиятҳои физикӣ-техникии нимноқилҳоро мекушоянд, ки ин метавонад дар соҳаи энергетикаи сабз ва ҳангоми сохтани детекторҳои афканишоти ҳастай татбиқ гардад.

Боби чорум ба натиҷаҳои ҳисобҳои кванто-механикии хосиятҳои электронӣ ва оптикии CdTe ва CdZnTe дар доираи назарияи функционали зичӣ (DFT) бо истифода аз бастаи нармафзори WIEN2k бахшида шудааст. Натиҷаҳои тадқиқоти хосиятҳои оптикӣ бо усули спектрофотометрии UV-Vis нишон дода шудааст.

Барои омӯзиши хосиятҳои сохторӣ ва электронии системаи Cd_xZn_{1-x}Te бо истифода аз назарияи функционали зичӣ (DFT) ҳисобҳои кванто-механикӣ гузаронида шуданд (боби 2). Параметрҳои сохтории беҳтаршудаи ҳамаи нанокристаллҳои омӯхташуда дар ҷадвали 2 оварда шудаанд.

Ҷадвал 2. Қиматҳои параметрҳои сохтории Cd_xZn_{1-x}Te

Cd _x Zn _{1-x} Te	Параметри панҷара ва ҳаҷми система			Ҳатоғӣ a, %
	Ин қор		Таҷриба	
	$a=b=c, \text{Å}$	$V, \text{Å}^3$	$a=b=c, \text{Å}$	
CdTe	6.7364	305.7004	6.5	3.5
Cd _{0.75} Zn _{0.25} Te	6.6299	291.4278	-	-
Cd _{0.5} Zn _{0.5} Te	6.5140	280.1688	-	-
Cd _{0.25} Zn _{0.75} Te	6.4496	268.2909	-	-
ZnTe	6.3774	259.3805	6.20	2.7

Мувофиқи маълумотҳои ҷадвали 2 ва расми 5 камшавии ҳаттии доимии панҷара ва ҳаҷми ин системаҳо ро бо афзоиши консентратсияи рух, ки ба қонуни Вегард қомилан итлоат мекунад, мушоҳида мешавад.

Аппроксиматсияи вобастагии ҳаҷми нанокристалл аз консентратсияи рух (ҳати яқлӯхт дар расми 5), бо формулаи $V = -11,578x + 315,73$ ифода карда мешавад. Аз руи онҳо ҳаҷми ин нанокристаллҳои системаи $Cd_xZn_{1-x}Te$ -ро барои ҳама гуна консентратсияи дигари Zn, дар ҳудуди 0 то 1, муайян кардан мумкин аст.

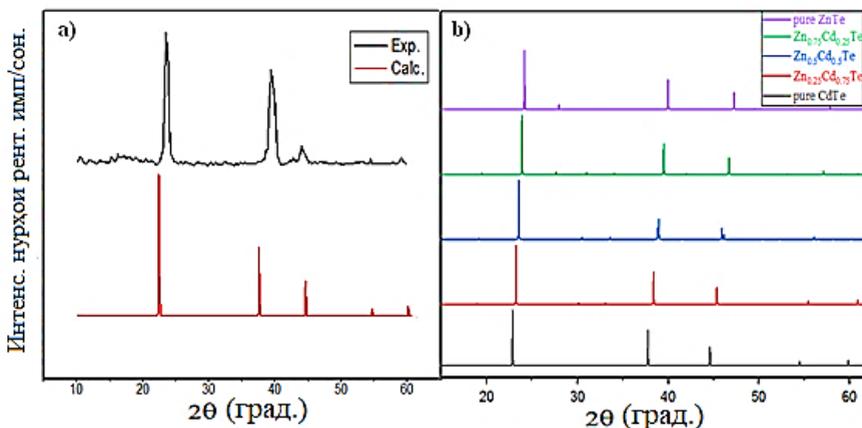


Расми 5. Вобастагии ҳаҷм аз миқдори Zn барои $Cd_xZn_{1-x}Te$.

Дар расми 6 (а) дифрактограммаҳои рентгении таҷрибавии намунаҳо, ки бо ёрии дифрактометри ДРОН-3 гирифта шудаанд ва дифрактограммаҳои рентгении ҳокавӣ бо истифода аз геометрияи бехтаршудаи нармафзори REFLEX ($CuK\alpha$, $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$), ки ба бастаи нармафзори Materials Studio дохил карда шудаанд, муқоиса шудаанд.

Тавре аз ҳисобҳои кванто-механикии дар расми 6 (б) овардашуда дида мешавад, барои системаи $Cd_xZn_{1-x}Te$, тағйирёбии масофаи байни ҳамворихоро бо зиёдшавии консентратсияи рух мушоҳида кардан мумкин аст. Ин дар шакли ғеҷиши систематикӣ рефлексҳо ба сӯи кунҷҳои калонтари 2θ намудор мешавад.

Натиҷаҳои, ки бо усули *ab initio* бо шумули параметрҳои ячейкаҳои элементарӣ, дарозии алоқаҳои байниатомӣ ва кунҷҳои байни онҳо, инчунин рентгенограммаи ҳокавӣ, ба даст омадаанд, бо натиҷаҳои таҷрибавии қори мазкур ва дигар таҷрибаҳо мувофиқати хуб доранд. Саҳеҳияти ин натиҷаҳо ро ба инобат гирифта, усули DFT барои анҷом додани ҳисобҳои назариявӣ боқимондаи ҳосиятҳои электронӣ-энергетикӣ ва спектралӣ теллуриди кадмий истифода шудааст.



Расми 6. Рентгенодиффрактограммаҳои ҳисобшуда ва таҷрибавӣ барои намунаи тозаи CdTe (a) ва намунаҳои диффрактограммаҳои хокавӣ (б) барои системаи $Cd_xZn_{1-x}Te$.

Хусусиятҳои электронии системаи $Cd_xZn_{1-x}Te$ аз нуқтаи назари паҳноии минтакаи мамнӯ, тақсими минтақаҳои энергетикӣ ва вобастагии паҳноии минтакаи мамнӯ аз зичии ҳолатҳои электронӣ (DOS) дар ячeyкаи элементарӣ арзёбӣ карда шуданд. Фаҳмидани механизмҳои ташаккули онҳо барои тарҳрезӣ ва беҳтарсозии дастгоҳҳои фотоэлектрикӣ дар асоси CdTe ва дигар маводҳо муҳим ҳисобида мешавад. Дар чадвали 3 қиматҳои паҳноии минтакаи мамнӯ, ки дар доираи назарияи функционали зичӣ (DFT) бо истифодаи потенциали мубодилавӣ-коррелятсионии mBJ (TB-mBJ) ҳисоб карда шуданд, оварда шудааст ва бо маълумоти таҷрибавӣ муқоиса карда мешаванд.

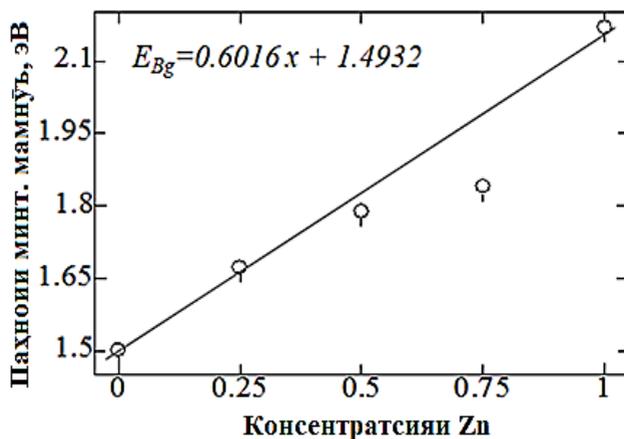
Чадвали 3. Қиматҳои минтакаи мамнӯи бо истифода аз mBJ-наздиқшавӣ барои системаи $Cd_xZn_{1-x}Te$ ҳисобшуда дар муқоиса бо натиҷаҳои таҷрибавӣ.

Система		CdTe	$Cd_{0.75}Zn_{0.25}Te$	$Cd_{0.5}Zn_{0.5}Te$	$Cd_{0.25}Zn_{0.75}Te$	ZnTe
Мин. мам., эВ	Ин кор.	1,501	1,672	1,788	1,840	2,169
	Таҷ	1,5	-	-	-	2,25
Энер. панҷ.	Ин кор.	-24764,3	-76272,2	-41933,6	-91462,4	-17169,1

Дар расми 7 вобастагии тағйирёбии қимати паҳноии минтакаи мамнӯ аз тағйирёбии миқдори рӯҳ дар система нишон дода шудааст. Қимати паҳноии минтакаи мамнӯ мувофиқи конуни $E_{Bg} = 0,6016x + 1,4932$ меафзояд, ки дар он x консентратсияи рӯҳ дар ҳудуди $0 < x < 1$ мебошад. Одатан, маълумоти квадратҳои

хурдтарин ба мо имкон медиҳанд, ки қимати паҳноии минтақаи мамнӯро барои боқимонда концентратсияҳои мобайнии рӯҳ пайдо кунем.

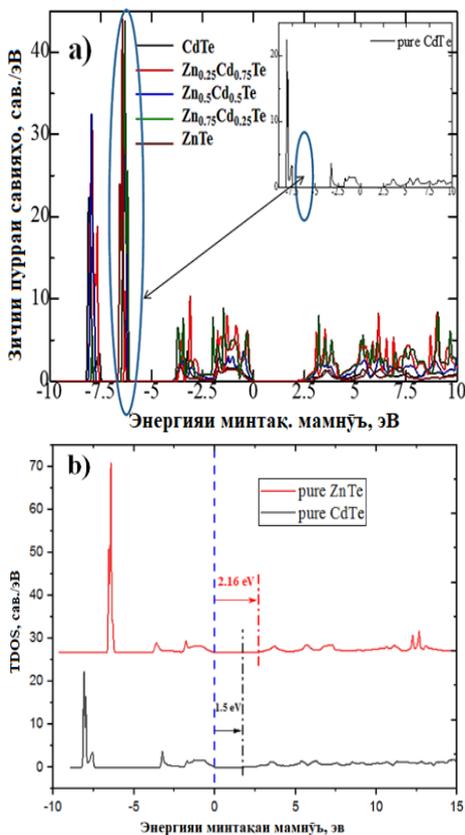
Натиҷаҳои ҳисобҳо барои баҳодиҳии паҳноии минтақаи маҳдуди теллуридҳои тоза (CdTe ва ZnTe) бо таҷриба бо дақиқии баланд мувофиқанд. Ин аз дурустии интихоби функционали мубодилавӣ-коррелятсионӣ ин системаҳо, инчунин дурустӣ ва эътимоднокии ҳисобҳо дар ҷаҳорҷӯбаи DFT шаҳодат медиҳад. Дидан мумкин аст, ки бо афзоиши концентратсияи омехтаҳои ҷавҳаронанда, паҳноии минтақаи мамнӯ ба таври хаттӣ зиёд мешавад. Аммо дар баъзе ҳолатҳои алоҳида равиши хаттӣ вайрон мегардад, ки ин метавонад ба падидаҳои квантии ба ин маводҳо хос ё хатогиҳои ҳисобҳои кванто-механикӣ алоқаманд бошад.



Расми 7. Вобастагии энергияи минтақаи мамнӯ аз миқдори Zn барои намунаҳои $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$.

Зичии пурраи ҳолатҳои электронии ҳисобшудаи моделҳои аз ҷиҳати сохторӣ беҳтаршудаи $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ дар расми 8 (a, b) нишон дода шудааст. Сатҳи Ферми бо хатҳои канда, ки дар нуқтаи сифр ҷойгиранд, ишора карда мешавад.

Таҳлили зичии савияҳои ҳисобшуда (DOS) бо дарназардошти ҳиссаи s, p ва d-орбиталҳои атомҳои таркиби модда ва тақсими зичии заряд гузаронида мешавад. Бо афзоиши концентратсияи рӯҳ паҳноии минтақаи мамнӯ ва зичии ҳолатҳои электронӣ зиёд мешавад (расми 8 (a, b)). Дар минтақаи энергияҳои манфӣ аз ҳисоби p-электронҳои орбиталҳои Zn, ки дар диаграммаи минтақавии теллуриди кадмий тоза мавҷуд нестанд, савияҳои нави энергия пайдо мешаванд (расми 8, a).

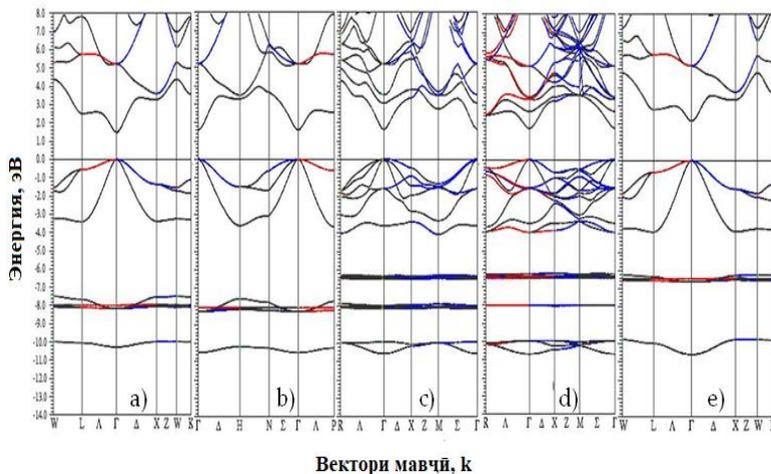


Расми 8. Зичии пурраи савияҳо барои системаи $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ (a) ва муқоисаи зичии савияҳои электрони CdTe ва ZnTe -и тоза (b)

Зичии ҳолатҳои электрони барои элементҳои канорӣ (CdTe ва ZnTe) дар расми 8 (b) нишон дода шудаанд. Дидан мукин аст, ки теллуридҳои тоза бо зичии пасти ҳолатҳо дар минтақаи ноқилият нисбат ба таркибҳои ивазшуда фарқ мекунад. Аммо бо зиёд шудани консентратсияи руҳ дар системаи $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ ва гузаштан ба системаи ZnTe дар ҳарду минтақа афзоиши зичии ҳолат мушоҳида мешавад.

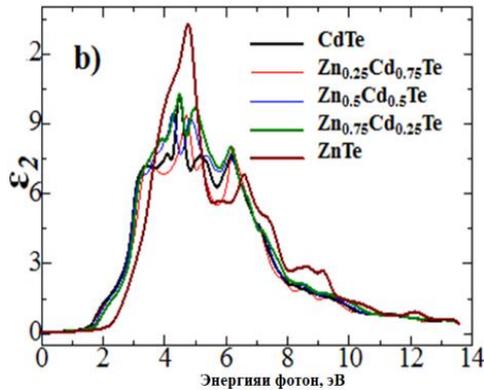
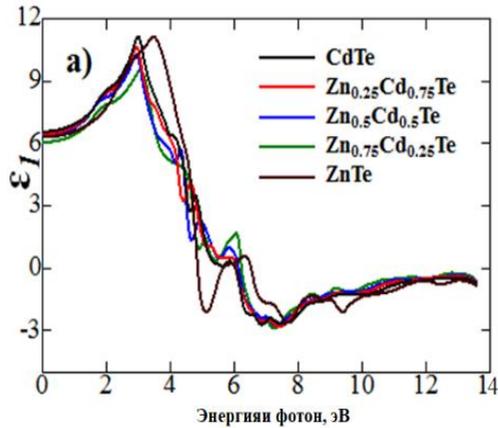
Аз натиҷаҳои нишондодашуда маълум аст, ки бо афзоиши консентратсияи рӯҳ паҳноии минтақаи мамнӯъ ва зичии ҳолатҳои электронӣ зиёд шуда, дар минтақаи энергияҳои манфӣ савияҳои нави энергия пайдо мешавад (расми 9 (a-e)). Ин савияҳо аз ҳисоби p-электронҳои орбиталҳои Zn , ки дар диаграммаи минтақаҳои теллуриди кадмийи тоза мавҷуд нестанд, ба вучуд меоянд.

Диаграммаи минтақаҳои энергетикӣ дар расми 9 овардашуда нишон медиҳад, ки ҳамаи ин маводҳо сохтори минтақаи мустакими гузариш доранд. Яъне онҳо барои истифода ба сифати маводи оптикии мавриди тавачҷӯх комилан мувофиқанд. Сохторҳои минтақавии ҳисобшуда паҳноии минтақаи мамнӯби мустакимро барои ҳар се хӯла бо тартиби афзоянда дар тамоми ҳудуди параметри таркиби x (концентратсияи Zn) нишон медиҳанд.



Расми 9. Сохторҳои минтақавии ҳисобшуда (диаграммаи энергетикӣ) барои: (а) CdTe, (б) $Cd_{0,75}Zn_{0,25}Te$, (с) $Cd_{0,5}Zn_{0,5}Te$, (г) $Cd_{0,25}Zn_{0,75}Te$ ва (д) ZnTe. Мавқеи сатҳи Ферми 0 эВ аст.

Параметрҳои оптикии маводҳо, ба монанди қисми мавҳум (ϵ_2)-и нуфузпазирии диэлектрикӣ, коэффисенти фурӯбурд ва коэффисенти экстинксия, нишон медиҳанд, ки ин мавод ҳангоми ворид шудани фотонҳо ба онҳо чӣ гуна ақсуламал нишон медиҳанд. Дар асоси ин, хосиятҳои оптикии системаи $Cd_xZn_{1-x}Te$ бо истифода аз қисмҳои ҳақиқӣ (ϵ_1) ва мавҳум (ϵ_2)-и нуфузпазирии диэлектрикӣ таҳлил карда мешаванд. Қисми ҳақиқӣ энергияи захирашудаи маводро нишон медиҳад, ки метавонад ҳангоми энергияи сифрӣ ё дар ҳудуди басомади сифрӣ, интиқол дода шавад, ки хусусияти дохилии ҳама гуна мавод ҳисобида мешавад. Аз тарафи дигар, қисми мавҳум (ϵ_2) қобилияти фурӯбурди маводро ифода мекунад, аммо дар асл он ба мо маълумот медиҳад, ки мавод ба ошӯбҳои аз тарафи афканишоти электромагнитӣ ҳосилшуда чӣ гуна вокуниш нишон медиҳад ва бевосита аз сохтори минтақавии он вобаста аст. Дар расми 10 (а, б) графикҳои вобастагии ϵ_1 ва ϵ_2 аз энергияи фотонҳои афтанда барои ҳамаи нанокристаллҳои системаи $Cd_xZn_{1-x}Te$ ($0 \leq x \leq 1$) оварда шудаанд.

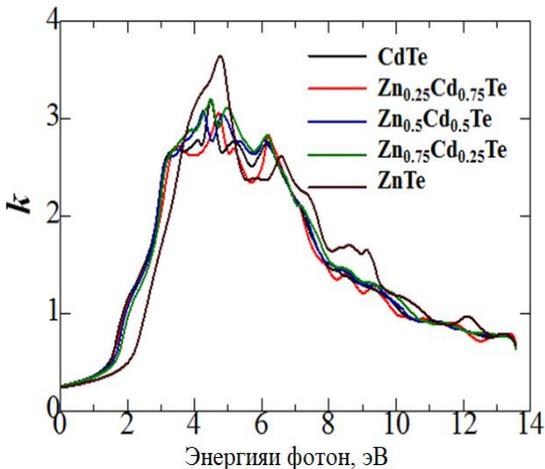


Расми 10. Қисмҳои ҳақиқӣ (а) ва мавҷуми (б) ҳисобшудаи нуфузпазирии диэлектрикии системаи $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$.

Қимати манфии қисми ҳақиқии нуфузпазирии диэлектрикӣ ϵ_1 табиати металли мавдро нишон медиҳад. Яъне, ҳангоми энергияи фотони ба қадри кофӣ баланд, системаҳои $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ рафтори металиро нишон медиҳанд. Ҳамин тариқ, аз рӯи рафтори ϵ_1 металлӣ будани пайвастагиро таҳқиқ ва баҳо додан мумкин аст.

Одатан, ҳангоми дар муҳити чандир паҳн шудани рӯшноӣ парокандашавии рӯшноӣ ба амал меояд, ки сабаби он пароканиш ва фурубурди рӯшноӣ аст. Ин падидаро экстинксия меноманд. Ба ибораи дигар, экстинксия маънои онро дорад, ки нуҳҳои дарозии мавҷи муайян дар мавод чӣ гуна фаъолна фуру бурда мешаванд. Коэффисиенти экстинксия (k) ченаки ҳомӯшшавии рӯшноӣ мебошад. Дар расми 11 вобастагии коэффисиентҳои экстинксияи маводҳои тадқиқшуда аз энергияи фотон нишон дода шудааст.

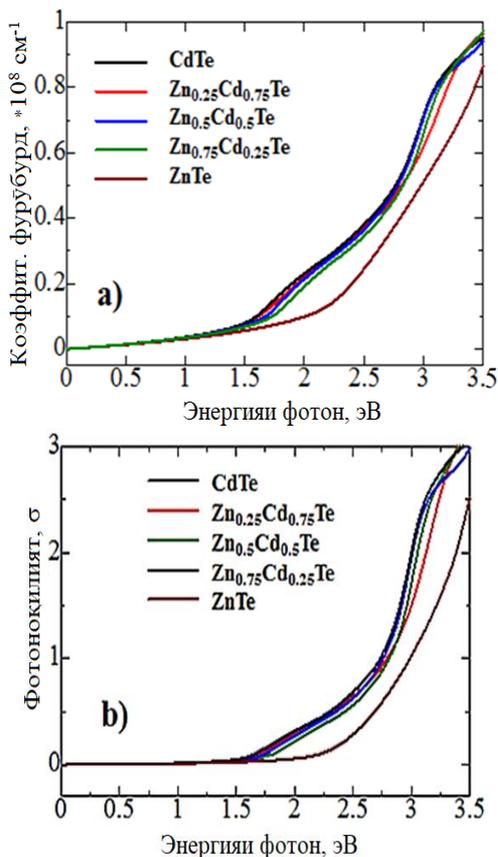
Хангоми парокандашавии кам ва фурубарии зиёд коэффисиенти экстинксия ба коэффисиенти фурубурд баробар мешавад, ки тафсири хосиятҳои оптикӣ маводро осон мекунад. Дар расмҳои 12 (а, б) қобилияти фурубурд ва ноқилияти оптикӣ системаҳои омӯхташуда барои фосилаи инфрасурх ва намоёни афканишоти офтобӣ нишон дода шудааст. Зеро маводҳои дар афканишоти инфрасурх ва намоён ҷабҳаҳои барои дастгоҳҳои фотоэлектрикӣ тандемӣ мувофиқанд.



Расми 11. Вобастагии коэффисиенти экстинксия аз энергияи фотон барои системаи $Cd_xZn_{1-x}Te$.

Коэффисиенти фурубурд (α) умқи воридшавии рӯшноиро то пурра фуру бурда шуданаш муайян мекунад. Ин раванд ба дарозии мавҷ (энергия)-и фотон ва хосиятҳои дохилии мавод вобаста аст. Максимумҳои ҳисобшудаи экстинксия (расми 11) ва фурубурд (расми 12 (а)) дар як ҳудуди энергия мебошанд, ки онро назарияи дисперсия тасдиқ мекунад. Спектрҳои ноқилияти оптикӣ $\sigma(\omega)$, ки дар диапазони ками энергия ҳисоб карда шудаанд, дар расми 12 (а) якҷанд қуллаҳои ба резонансҳои плазмони ҳаҷмӣ мувофиқро нишон медиҳанд, ки дар натиҷаи гузариши электронҳо аз банди валентӣ ба банди ноқилӣ ба вуҷуд меоянд. Қиматҳои $\sigma(\omega)$ дар диапазони ками энергия мутаносибан ба гузаришҳои байнизонавӣ ва дохилизонавӣ мувофиқанд. Натиҷаҳои бадастомада метавонанд ба дарки баъзе ҷабҳаҳои хосиятҳои оптикӣ, ки барои татбиқи амалии системаҳои омӯхташуда муҳиманд, мусоидат кунанд ва барои тадқиқотчиёне, ки маводи дорой хусусияти оптикӣ муайяншударо ҷустуҷӯ мекунад, ҷолиб бошанд.

Натиҷаҳои бадастомада метавонанд ба дарки баъзе ҷабҳаҳои хосиятҳои оптикӣ, ки барои татбиқи амалии системаҳои омӯхташуда муҳиманд, мусоидат кунанд ва барои тадқиқотчиёне, ки маводи дорой хусусияти оптикӣ муайяншударо ҷустуҷӯ мекунад, ҷолиб бошанд.



Расми 12. Ҳисоби коэффиенти фурӯбурд (а) ва ноқияти оптикӣ (б) ҳамчун функцияи энергияи фотон барои системаи $Cd_xZn_{1-x}Te$.

Чавхаронидани панҷараи кристаллии CdTe бо рӯҳ паҳноии минтақаи мамнӯро то кимати беҳтарин афзоиш дод ва ин ба он оварда расонд, ки нанозарраҳои $Cd_xZn_{1-x}Te$ метавонанд номзади умедбахш барои кор дар ячейкаҳои тунуки офтобӣ ҳамчун кабаҳои фурӯбаранда бошанд. Натиҷаҳои ба даст омадаи тадқиқоти хосиятҳои электронии ин маводҳо бо маълумоти мавҷудаи таҷрибавӣ ва дигар ҳисобҳои назариявӣ муқоиса карда шуданд. Муқаррар карда шудааст, ки барои теллуридҳои тағйирёфта дар минтақаи энергияҳои манфӣ сатҳи нави энергия аз ҳисоби p-электронҳои орбиталҳои Zn, ки дар диаграммаи минтақаҳои теллуриди кадмий тоза ва теллуриди рӯҳ мавҷуд нестанд, пайдо мешаванд.

Спектрҳои фурӯбурди нанокристаллҳои омӯхташуда нишон медиҳанд, ки бо афзоиши консентратсияи Zn, қанорҳои фурӯбурд ба мавҷҳои кӯтоҳтар

мегузаранд. Дар баробари ин маълум шуд, ки концентратсияи беҳтарини Zn ($x = 0,75$) α -ро самаранок зиёд мекунад. Натиҷаҳои бадастомадаро дигар муҳаққикон барои моделсозии сохтори системаҳои ба CdTe монанд, ки бояд синтез карда шаванд, инчунин барои муайян кардани чунин хусусиятҳои муҳим, ба монанди «таркиб-сохтор-хосият» истифода бурда метавонанд.

ХУЛОСАҲО

Бояд гуфт, ки дар рафти тадқиқоти илмӣ мақсади асосии кори диссертатсионӣ, ки аз омӯхтани хосиятҳои электрофизикӣ, сохторӣ ва оптикӣ кристаллҳои нимнокилии CdTe ва CdZnTe пас аз нурбориш бо нейтронҳои ҳароратӣ иборат аст, ба даст оварда шуд. Ҳамаи вазифаҳои гузашташуда ба сомон расонида шуданд, кори диссертатсионӣ пурра иҷро карда шуд.

Дар доираи ин кор натиҷаҳои илмӣ зерин пешниҳод карда мешаванд:

1. Таъсири нейтронҳои ҳароратӣ ба хосиятҳои электрофизикӣ, сохторӣ ва оптикӣ кристаллҳои нимнокилии CdTe, CdZnTe ва CdTe/Si таҳқиқ карда шуданд. Ҳисоби кванто-механикӣ таъсири мутақобилаи нейтронҳои ҳароратӣ бо CdTe анҷом дода шуд [1-17-А].

2. Муқаррар карда шудааст, ки ҳангоми ҳамтаъсири сели нейтронҳои ҳароратӣ қиматаш аз $2,64 \cdot 10^7$ н/см² то $7,34 \cdot 10^8$ н/см² нокилияти пардаҳои CdTe/CdTe аз 10 то 100 маротиба меафзояд. Вакте ки пардаҳои CdTe/Si бо ҳамон селҳо нейтронбориш карда мешаванд, қимати нокилият дар ҳудуди хурд тағйир меёбад [1-А, 6-А, 7-А, 14-А].

3. Усули таҳлили рентгеносохторӣ нишон дод, ки дар ҳудуди сели нейтронҳои ҳароратӣ аз $2,64 \cdot 10^7$ н/см² то $3,02 \cdot 10^8$ н/см² сохтори кристаллҳои CdTe беҳтар мешавад. Нейтронбориши дарозмуддат сохтори CdTe-ро вайрон мекунад [1-А, 2-А, 13-А].

4. Нишон дода шудааст, ки дар рентгенодифрактограммаҳои CdTe-и бо нейтронҳои ҳароратӣ нейтронбориш шуда, дар $2\theta \approx 43,5^\circ$ рефлексҳои нави инъикос пайдо мешаванд. Муқаррар карда шудааст, ки ин рефлексҳо ба изотопҳои нуқра ва палладий, ки дар натиҷаи реаксияҳои ҳастаи нейтронҳои ҳароратӣ бо ҳастаҳои кадмий ба вуҷуд меоянд, тааллуқ доранд [2-А, 10-А, 11-А].

5. Бо усули таҳлили рентгеносохторӣ муайян карда шуд, ки нейтронбориш бо нейтронҳои ҳароратӣ сохтори CdZnTe-ро бад мекунад. Нишон дода шудааст, ки ҳангоми нейтронбориш бо сели аз $2,64 \cdot 10^7$ н/см² то $3,02 \cdot 10^8$ н/см² нокилиятро кам мекунад [6-А, 12-А].

6. Ҳисобҳои кванто-механикӣ нишон доданд, ки илова кардани концентратсияи муайяни Zn паҳнои минтақаи мамнӯро зиёд мекунад. Бо афзоиши концентратсияи Zn, тасмаи фурӯбурд ба минтақаи мавҷи кӯтоҳ мегузарад. Концентратсияи беҳтарини Zn дар сохтори Cd_{1-x}Zn_xTe $x = 0,75$ аст. Нишон дода шудааст, ки дар раванди таъсири мутақобилаи нейтронҳои ҳароратӣ бо CdTe пас аз қандани як атоми кадмий, ҳамчун эквивалент ба як атоми таъсири мутақобилаи нейтрон, дар ташаккули ҳолатҳои электронии CdTe, нақши р-ҳолатҳои атоми Te меафзояд. Нишон дода шудааст, ки максимуми тасмаи

фурӯбурди оптикӣ аз қисми ултрабунафши спектр бо дарозии мавҷаш 318 нм ба тарафи қисми намоёни дарозии мавҷаш 477 нм мегузарад. Коэффисиенти фурӯбурд нисбат ба арзиши ибтидоӣ 20% зиёд мешавад [3-А, 8-А].

7. Муайян карда шудааст, ки ҳангоми нейтронбориш бо сели нейтронҳои ҳароратӣ $1,3 \cdot 10^8$ н/см² зиёдшавии коэффисиенти фурӯбурди оптикӣ мушоҳида мешавад. Тахмин карда мешавад, ки падидаи мушоҳидашуда натиҷаи пайдоиши пайвастиҳои мобайнӣ мебошад, ки дар дарозии мавҷҳои омӯхташудаи спектр қобилияти фурӯбурди бештар доранд. Нейтронбориш бо сели $4,32 \cdot 10^8$ н/см² боиси паст шудани ин параметр мегардад. Дар қачиҳои фурӯбурди CdTe-и нейтронборишшуда ду қуллаи иловагии фурӯбурд пайдо мешавад (мутаносибан 549 ва 577 нм), ки ба пайвастиҳои AgCl тааллуқ доранд. Ин дурустии хулосаро дар бораи реаксияи ҳастаии Cd(n, p)Ag, ки дар зери таъсири нейтронҳои ҳароратӣ ба амал меоянд, исбот мекунад [7- А].

ТАВСИЯҲО БАРОИ ИСТИФОДАИ АМАЛИИ НАТИҶАҲО

Дар ин диссертатсия усули бехтар кардани хосиятҳои электрофизикӣ, сохторӣ ва оптикӣ кристаллҳои нимноқилии CdTe ва CdZnTe тавассути афканишоти нейтронӣ пешниҳод шудааст. Таъсири "сели кам" барои кристаллҳо мушоҳида шудааст. Ин таъсир метавонад барои бехтар кардани қори табдилдиҳандаҳои офтобӣ истифода шавад. Ғайр аз ин, таъсири «сели кам» ба сохтани технологияи ҳастай, аз ҷумла истеҳсоли детекторҳои афканишоти ҳастай дахл дорад. Бо истифода аз натиҷаҳои ин қор ҳудуди устувории радиатсионии дастгоҳҳоеро, ки дар асоси CdTe ва CdZnTe сохта мешаванд, муайян кардан мумкин аст .

Натиҷаҳои ҳисобҳои кванто-механикӣ барои бехтар гардондани хосиятҳои электронии CdZnTe барои истеҳсоли саноатии панелҳои пурмаҳсули офтобӣ истифода бурдан мумкин аст.

ИНТИШОРОТ АЗ РӯИ МАВЗУИ ДИССЕРТАТСИЯ

**Мақолаҳо дар маҷаллаҳои илмӣ, ки ҚОА-и
назди Президенти Ҷумҳурии Тоҷикистон тавсия кардааст**

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

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

[3-А] **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] **Яров, М.Т.** Combined X-ray Diffraction Analysis and Quantum Chemical Interpretation of the Effect of Thermal Neutrons on the Geometry and Electronic Properties of CdTe / В. Махсудов, D. Nematov, M. Yarov // J. Mod. Nanotechnology. – 2024. – V. 4. – Iss. 4. DOI:10.53964/jmn.2024004.

[5-A] **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.

Интишорот дар маводҳои конференсияҳои илмӣ

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

[7-A] **Яров, М.Т.** Влияние тепловых нейтронов на электрофизические свойства полупроводников группы АІІВVI / Б.И. Махсудов, А.Т. Ақобирова, М.Т. Яров // Республиканская научно-практическая конференция «Современные проблемы физики конденсированное состояние и ядерная физика», – Душанбе, – 2020. – С. 205-207.

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

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

[10-A] **Яров, М.Т.** Возникновение дополнительных рефлексов на рентгено-дифрактограммах 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-A] **Яров, М.Т.** Образование примесных изотопов при нейтронном облучении кристаллов теллурида кадмия / Б.И. Махсудов, А.Т. Ақобирова, 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.

АННОТАЦИЯ

диссертации Носирзода Мухаммад на тему «Влияние малых потоков тепловых нейтронов на электрофизические, структурные и оптические свойства полупроводниковых соединений CdTe и CdZnTe», представленной на соискание учёной степени доктора философии (PhD) – доктор по специальности 6D060400-Физика (6D060407-Физика конденсированного состояния)

Ключевые слова: теллурид кадмия, теллурид кадмия цинка, кристалл, тепловые нейтроны, электропроводность, структура, рентгеноструктурный анализ, оптические свойства, кванто-механический расчет.

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

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

Методы исследования. Для выявления структурных изменений кристаллов после облучения тепловыми нейтронами использован метод рентгеноструктурный анализ. Оптические свойства были исследованы методом UV-Vis-спектрофотометрии. Кроме этого, был проведен кванто-механический расчет исследованных структур методом теории функционала плотности (DFT).

Научная новизна исследования. Установлено уменьшение удельного сопротивления CdTe и CdZnTe после облучения малыми потоками тепловых нейтронов; выявлено улучшение структуры кристаллов CdTe после облучения; установлено зависимость структурных параметров CdTe и CdZnTe от потока тепловых нейтронов; проведен кванто-механический расчет структурных и оптических свойств CdZnTe и CdTe.

Область применения. Обнаружен эффект «малых потоков» для кристаллов. Этот эффект можно применить для повышения производительности солнечных преобразователей и детекторов ядерного излучения. Используя результаты данной работы можно оценить предел радиационной стойкости приборов, которые будут созданы на основе CdTe и CdZnTe.

АННОТАТСИЯИ

диссертатсияи Носирзода Муҳаммад дар мавзӯи «Таъсири сели ками нейтронҳои ҳароратӣ ба хосиятҳои электрофизикӣ, сохторӣ ва оптикии пайвастагиҳои нимноқилии CdTe ва CdZnTe», барои дарёфти дараҷаи илмӣ доктори фалсафа (PhD) - доктор аз рӯи ихтисоси 6D060400-Физика (6D060407-Физикаи ҳолатҳои конденсӣ)

Калидвожаҳо: теллуриди кадмӣ, теллуриди кадмӣ рӯҳ, кристалл, нейтронҳои ҳароратӣ, ноқилият, сохтор, таҳлили рентгеносохторӣ, хосиятҳои оптикӣ, ҳисобкунии кванто-механикӣ.

Мақсади ин рисола омӯзиши таъсири селҳои ками нейтронҳои ҳароратӣ ба ноқилият, хосиятҳои сохторӣ ва оптикии нимноқилҳои кристаллии CdTe ва CdZnTe мебошад.

Объекти омӯзиш. Объекти тадқиқот нимноқилҳои монокристаллии CdTe ва CdZnTe мебошанд.

Усулҳои тадқиқот. Барои муайян кардани тағйироти сохтории кристаллҳо баъди нейтронбориш усули таҳлили рентгеносохторӣ истифода шуд. Хусусиятҳои оптикӣ тавассути спектрофотометрияи UV-Vis тафтиш карда шуданд. Ғайр аз ин, бо усули назарияи функционали зичӣ (DFT) ҳисоби кванто-механикии сохторҳои тадқиқшуда гузаронида шуд.

Навоари илмӣ тадқиқот. Дар рафти тадқиқот пас аз нейтронбориш қардан бо селҳои ками нейтронҳои ҳароратӣ паст шудани муқовимати ҳосси CdTe ва CdZnTe муқаррар карда шуд; баъди бо селҳои ками нейтронҳои ҳароратӣ таъсир қардан, беҳтар шудани сохтори кристаллҳои CdTe ошкор гардид; вобастагии параметрҳои сохтории CdTe ва CdZnTe аз сели нейтронҳои ҳароратӣ муқаррар карда шуд; ҳисоби кванто-механикии хосиятҳои сохторӣ ва оптикии CdZnTe ва CdTe гузаронида шуд.

Соҳаи татбиқ. Таъсири "сели кам" барои кристаллҳо мушоҳида шудааст. Ин падида метавонад барои беҳтар кардани самаранокии табдилдиҳандаҳои офтобӣ детекторҳои афқанишоти ҳастай истифода шавад. Бо истифода аз натиҷаҳои ин кор устувории радиатсионии дастгоҳҳоеро, ки дар асоси CdTe ва CdZnTe сохта мешаванд, муайян шавад.

ABSTRACT

of dissertation by Nosirzoda Muhammad on the topic "The influence of small thermal neutron fluxes on the electrophysical, structural and optical properties of CdTe and CdZnTe semiconductor compounds", submitted for the degree of Doctor of Philosophy (PhD) - doctor in the specialty 6D060400-Physics (6D060407-Condensed Matter Physics)

Keywords: cadmium telluride, cadmium zinc telluride, crystal, thermal neutrons, electrical conductivity, structure, X-ray diffraction analysis, optical properties, quantum mechanical calculation.

The purpose of this dissertation is to study the influence of small thermal neutron fluxes on the electrical conductivity, structural parameters and optical properties of CdTe and CdZnTe crystalline semiconductors.

Object of study. The objects of the study are single-crystal semiconductors CdTe and CdZnTe.

Research methods. To identify structural changes in crystals after irradiation with thermal neutrons, the X-ray diffraction analysis method was used. Optical properties were studied by UV-Vis spectrophotometry. In addition, a quantum-mechanical calculation of the studied structures was carried out using the density functional theory (DFT) method.

Scientific novelty of the study. The studies revealed a decrease in the specific resistance of CdTe and CdZnTe after irradiation with low fluxes of thermal neutrons; an improvement in the structure of CdTe crystals after irradiation with low fluxes of thermal neutrons was revealed, as evidenced by an increase in the intensity of X-ray reflections; the dependence of the structural parameters of CdTe and CdZnTe on the thermal neutron flux was established; a quantum-mechanical calculation of the structural and optical properties of CdZnTe and CdTe was carried out.

Scope. The effect of "small flows" for crystals was discovered. This effect can be used to increase the productivity of solar converters. In addition, the effect of "small flows" is applicable to the creation of nuclear technologies, including the manufacture of nuclear radiation detectors. Using the results of this work, it is possible to estimate the limit of radiation resistance of devices that will be created on the basis of CdTe and CdZnTe.