

## 中子对碲锌镉辐照损伤模拟研究\*

魏雯静 高旭东 吕亮亮 许楠楠 李公平†

(兰州大学核科学与技术学院, 兰州 730000)

(2022年6月17日收到; 2022年7月22日收到修改稿)

碲锌镉探测器长期暴露于辐射环境下时, 会形成不同程度的辐照损伤, 影响器件性能甚至失效, 极大缩短探测器在辐射场中的服役时限. 本文首先利用 Geant4 程序包对能量为 1.00—14.00 MeV 的中子在碲锌镉材料中的输运过程进行模拟, 获取初级离位原子的信息, 进而结合级联碰撞模型, 对不同能量的中子在碲锌镉材料中造成的辐照损伤进行模拟计算. 计算结果表明初级离位原子能量大部分位于低能端, 并随着入射中子能量升高, 初级离位原子的种类更加丰富, 能量也逐渐增大; 中子辐照碲锌镉材料时非电离能损沿着深度方向均匀分布, 且非电离能损随着入射中子能量的增加呈现先增大后减小的趋势; 辐照损伤量——原子离位次数 (dpa) 的计算结果表明, dpa 也随入射中子能量升高呈先增大后减小的趋势, 进一步分析可知随着入射中子能量增大, 非弹性散射成为造成材料内部离位损伤的主要因素.

**关键词:** 中子辐照, 碲锌镉, 辐照损伤, Geant4 模拟**PACS:** 61.80.Hg, 78.55.Et, 61.80.-x, 02.70.Uu**DOI:** 10.7498/aps.71.20221195

## 1 引言

碲锌镉 (cadmium zinc telluride, CZT) 作为第三代前沿战略性半导体材料, 由于其自身优异的特性所制成的核辐射探测器等器件近年来成为关注的热点, CZT 探测器具有探测效率高、暗电流小、便携性强以及无需附加冷却系统便可在室温下使用等优点<sup>[1,2]</sup>. CZT 材料是当前制造室温红外探测、X 射线探测、 $\gamma$  射线探测等探测器最先进的材料之一, 被广泛应用于核医学、辐射监测、天文学等领域, 具有广阔的发展前景<sup>[3-6]</sup>. 但在辐射场下服役期间, CZT 材料会受到各种辐射粒子的影响, 例如空间辐射环境以及核爆辐射环境中产生的  $\gamma$  射线、质子、电子和中子等, 其中中子造成的损伤深度较大, 具有均匀贯穿的特点. 这些粒子会对器件造成不同程度的辐照损伤, 进而使探测器的性能

下降甚至失效<sup>[7]</sup>.

当前已有通过实验、模拟计算等方式开展质子、 $\gamma$  射线以及重离子等在 CZT 材料中造成的辐照损伤的研究. Gu 等<sup>[8]</sup>通过 2 MeV 质子辐照 CZT 探测器的实验研究得到 CZT 探测器的辐照损伤阈值约为  $3.3 \times 10^{11}$  p/cm<sup>2</sup>; Xu 等<sup>[9]</sup>通过研究发现, 高剂量 (~2.4 kGy) 的 <sup>60</sup>Co  $\gamma$  射线辐照 CZT 探测器后, 电子迁移率寿命积从  $1.08 \times 10^{-3}$  cm<sup>2</sup>/V 下降到  $7.12 \times 10^{-4}$  cm<sup>2</sup>/V, 同时发现康普顿光电子是其主要的相互作用产物, 可生成  $10^{10}$ — $10^{11}$  个 Cd 空位以及缺陷配合物; Bao 等<sup>[10]</sup>研究了以 Au 为引出电极的 CZT 探测器在 3 MeV 和 2.08 GeV 的 Kr 离子在注量为  $1 \times 10^{12}$  ions/cm<sup>2</sup> 辐照后的性能变化, 发现 CZT 探测器在 3 MeV 的 Kr 离子辐照后, 大量 Au 迁移到 CZT 材料中, 导致探测器漏电流从 3.37 nA 增长到 246 nA, 探测器失效, 而 CZT 探测器经过 2.08 GeV 的 Kr 离子辐照后

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11975006, 11575074) 和兰州大学特殊功能材料与结构设计教育部重点实验室 (B 类)2021 年开放课题 (批准号: lzujbky-2021-kb06) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [ligp@lzu.edu.cn](mailto:ligp@lzu.edu.cn)

Au 迁移量很小, 漏电流变化很小, 但探测器的能量分辨率从 6.2% 下降到 15.8%, 由于 3 MeV 的 Kr 离子辐照主要以非电离能量损失 (non-ionizing energy loss, NIEL) 沉积能量, 而 2.08 GeV 的 Kr 离子主要发生电离能量损失, 而 NIEL 与辐照损伤正相关, 因此 3 MeV 的 Kr 离子辐照导致了更明显的辐照损伤.

近年来, 部分学者也开展了中子辐照对 CZT 探测器性能影响的研究. Eisen 等<sup>[11]</sup>研究了 1—7 MeV 的快中子辐照 CZT 像素探测器, 发现总剂量约为  $10^{10}$  n/cm<sup>2</sup> 中子辐照后能量分辨率从 2.1% 下降到 6%; Bao 等<sup>[12]</sup>通过 <sup>252</sup>Cf 中子源研究了快中子辐照对 In 掺杂的 CZT 探测器性能的影响, 当  $10^{10}$  n/cm<sup>2</sup> 中子辐照后, 样品的全能峰能量分辨率从生长样品的 8.8% 下降到 17.5%, 对于  $5 \times 10^{10}$  n/cm<sup>2</sup> 中子辐照后, 样品中产生  $10^{16}$ /cm<sup>3</sup> 缺陷, 载流子迁移率寿命积从  $1.0 \times 10^{-3}$  cm<sup>2</sup>/V 减小到  $1.6 \times 10^{-5}$  cm<sup>2</sup>/V; Bartlett 等<sup>[13]</sup>将 CZT 平面探测器置于 <sup>252</sup>Cf 中子源下, 当累积中子注量大于  $10^{10}$  n/cm<sup>2</sup>, 探测器的光谱特性会退化. 这些研究皆表明, 随中子注量增大, 辐照损伤会严重影响探测器的探测性能, 甚至使其完全失效. 尽管目前已有部分中子辐照对 CZT 探测器影响的实验研究, 但关于中子辐照 CZT 材料过程中在材料内部造成损伤模拟计算研究较少. 早期中子辐照损伤效应以其他带电粒子辐照损伤等效替代进行研究, 而目前已有研究者通过 Geant4 以及分子动力学等方法对 InP, Zr, Si 以及 GaN 等材料的中子辐照损伤情况加以研究, 得出中子辐照各类材料后内部损伤情况<sup>[14–17]</sup>. 基于太空辐射环境, 及核爆环境下, 中子辐照损伤造成的器件损坏成为了当今抗辐照效应材料器件研究的关键, 此外由于 CZT 材料的优异特性, 其可制成具有较好应用前景的中子探测器, 但也同时存在中子辐照损伤的隐患. 所以基于核反应堆等高辐射场, 明确中子辐照 CZT 材料的微观过程, 特别是明确离位损伤、电离损伤等对进一步提升 CZT 材料抗辐照性能有重要意义. 本文利用 Geant4 程序包对中子在 CZT 材料中的运输过程进行模拟, 从 NIEL、辐照损伤量——原子离位次数 (displacements per atom, dpa) 等方面分析中子在 CZT 材料内部产生的辐照损伤, 探究不同能量中子辐照对于 CZT 半导体材料的辐照损伤程度, 为进一步明确辐照粒子对 CZT 材料的辐照损

伤微观机制, 以及探究如何提升 CZT 材料的抗辐照性能奠定理论基础.

## 2 计算模型

### 2.1 物理模型构建

Geant4 是欧洲核子中心推出的基于蒙特卡洛方法的高能粒子仿真模拟程序库, 用户可通过构建物理模型, 调用所需的 PhysicsList, 进行粒子运输过程的模拟, 实现追踪粒子动能、动量等功能. Geant4 相比于 MCNP 和 EGS 等软件, 具有模拟粒子能量范围较大, 以及开源等优势<sup>[18–20]</sup>. 本文首先利用 Geant4 程序包对中子在 CZT 材料中的运输过程进行模拟, 在获取初级离位原子 (primary knock-on atom, PKA) 能谱等信息的基础上, 结合经典二元碰撞模型对中子的辐照损伤进行计算. 本文计算调用 QGSP\_BIC\_HP 为物理列表.

中子与物质相互作用过程中, 原子核受中子轰击可能发生的反应类型包括: 弹性散射 (n, n)、非弹性散射 (n, n')、以及 (n,  $\gamma$ ), (n, p), (n, d), (n, t), (n, <sup>3</sup>He), (n,  $\alpha$ ) 等核反应及核裂变. 而对于 1.00—14.00 MeV 中子辐照 CZT 靶材来说, 其主要发生弹性散射、非弹性散射、辐射俘获以及 (n, 2n) 等核反应<sup>[21,22]</sup>.

当中子与靶材料原子发生相互作用时, 靶原子将获得能量, 若其能量超过该原子自身离位阈能  $E_d$ , 则会离开所属位置, 成为 PKA, 在原位置形成空位缺陷. 若 PKA 能量足够大, 则会继续运动与其他原子发生碰撞, 进而产生次级离位原子 (SKA), 从而产生级联碰撞. 除弹性散射过程外, 非弹性散射等过程会生成能量较高的反应产物, 此类产物与原子核发生屏蔽库伦散射, 在材料中慢化, 并且会传递更高的能量使得靶原子离开原来的位置, 导致离位损伤<sup>[16]</sup>. 由于两类过程造成缺陷机理相似, 故将其统称为 PKA 进行分析讨论<sup>[23]</sup>.

### 2.2 几何模型参数

本文利用 Geant4 程序包构建计算模型时, 参考实际应用环境以及目前 CZT 材料生产情况, 基于现存中子源装置能量范围, 方便之后进一步实验开展, 设定模拟环境为真空, 靶材料中 Zn 含量占总原子数的 5%, Cd 含量占 45%, 其余为 Te. CZT 材料尺寸为 10 mm  $\times$  10 mm  $\times$  1 mm, 密度 5.78 g/cm<sup>3</sup>,

并采用单能平行中子束入射, 中子能量分别设定为 1.00—14.00 MeV, 入射中子数为  $1 \times 10^8$  个. 如图 1 所示, 对于 1.00—14.00 MeV 入射中子, 其平均自由程为 2.5—4.0 cm, 因此可认为在本文模拟设定厚度为 1 mm 的靶材料中, 绝大部分入射中子与原子核仅发生一次相互作用. 计算过程中使用的几何模型结构如图 2 所示.

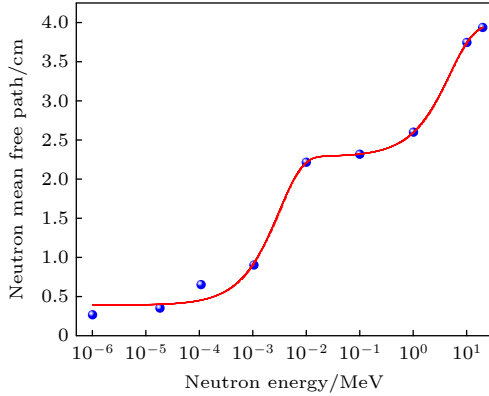


图 1 中子在 CdZnTe 中的平均自由程

Fig. 1. The mean free path of neutron in CdZnTe.

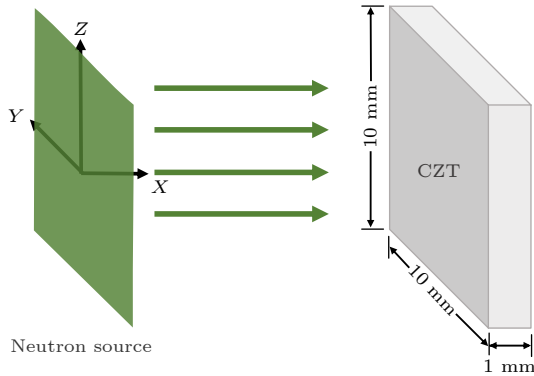


图 2 Geant4 几何模型结构示意图

Fig. 2. Schematic diagram of Geant4 geometric model structure.

### 2.3 辐照损伤计算方法

NIEL 是指入射粒子与靶材料相互作用时, 造成离位损伤时所沉积的部分能量, 可作为衡量样品辐照后离位损伤的量度. 同时中子辐照半导体材料时, 通过弹性散射以及非弹性散射等一系列过程, 会产生不同种类、能量的 PKA, 结合级联碰撞模型, 可计算得到总的离位原子数  $N_d$ . NIEL 的计算公式如下 [24]:

$$\text{NIEL}(T_0) = \frac{N_A}{A} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} TQ(T) \left( \frac{d\sigma}{dT} \right)_{T_0} dT, \quad (1)$$

式中,  $N_A$  为阿伏伽德罗常数,  $A$  为靶原子质量数,  $T_{\min}$ ,  $T_{\max}$  分别为 PKA 最小, 最大能量,  $E_d$  代表靶原子离位阈能,  $T$  表示初级反冲原子能量,  $d\sigma/dT$  为粒子产生动能为  $T$  的反冲核的损伤截面,  $Q(T)$  为初级反冲原子的损伤能. 进一步推导可得 (2) 式, 基于 Geant4 模拟计算中, (2) 式中  $T$ 、 $Q(T)$  相比 (1) 式的积分以及反应截面更便于读取, 所以在本文模拟计算过程中, 采用 (2) 式对中子产生的 NIEL 进行计算 [25,26]:

$$\begin{aligned} \text{NIEL}(T) &= \frac{N_A}{A} \sigma_d = \frac{N_A}{A} \frac{E_{\text{dam}}(T)}{N_v x} \\ &= \frac{E_{\text{dam}}(T)}{\rho x} = \frac{TQ(T)}{\rho x}, \end{aligned} \quad (2)$$

式中,  $\sigma_d$  为离位损伤截面,  $E_{\text{dam}}$  离位能损,  $N_v$  为靶原子的原子密度,  $x$  为靶材厚度,  $\rho$  为靶材密度.

本文通过修正后的 lindhard 分离函数计算得到  $E_{\text{dam}}$ , 代入 (2) 式求得 NIEL, 归一化 NIEL 计算见 (3) 式,  $n$  为入射粒子数目 [14]:

$$\text{NIEL}(T) = \frac{E_{\text{dam}}(T)}{\rho x n}. \quad (3)$$

Robinson 等 [27] 以及 Akkerman 等 [24] 修正后的 lindhard 分离函数可表述为

$$E_{\text{dam}}(T) = \frac{T}{1 + k_d g(\varepsilon_d)}, \quad (4)$$

$$k_d = \frac{0.0793 Z_1^{2/3} Z_2^{1/2} (A_1 + A_2)^{3/2}}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/4} A_1^{3/2} A_2^{1/2}}, \quad (5)$$

$$\varepsilon_d = \frac{T}{30.724 Z_1 Z_2 \sqrt{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}} (1 + A_1/A_2)}, \quad (6)$$

$$g(\varepsilon_d) = \begin{cases} \varepsilon_d + 0.40244\varepsilon_d^{3/4} + 3.4008\varepsilon_d^{1/6}, & T > 200 \text{ keV} \\ 0.742\varepsilon_d + 1.6812\varepsilon_d^{3/4} + 0.90565\varepsilon_d^{1/6}, & T < 200 \text{ keV}, \end{cases} \quad (7)$$

其中  $Z_1$ ,  $Z_2$ ,  $A_1$ ,  $A_2$  分别为 PKA 与靶原子的原子序数和质量数. 对于 CZT 此类化合物, 应计算其平均电荷数  $Z_{2, \text{average}}$  和平均质量数  $A_{2, \text{average}}$ , 即:

$$Z_{2, \text{average}} = \frac{\sum_i n_i Z_{2,i}}{\sum_i n_i}, \quad (8a)$$

$$A_{2, \text{average}} = \frac{\sum_i n_i A_{2,i}}{\sum_i n_i}, \quad (8b)$$

式中,  $Z_{2,i}$ ,  $A_{2,i}$  依次表示化合物中各元素的电荷数及质量数,  $n_i$  代表元素  $i$  在化合物中的相对分数, 代入 (3)—(7) 式计算可得 NIEL.

通常用 dpa 表征辐照损伤<sup>[28,29]</sup>, 即:

$$\text{dpa} = \frac{N_d}{N}, \quad (9)$$

其中  $N$  表示靶材料中所包含的原子数目,  $N_d$  表示 PKA 产生的离位原子数, 可利用 NRT 模型进行计算得到<sup>[27]</sup>:

$$N_d(T) = \begin{cases} 0, & T < E_d, \\ 1, & E_d \leq T < 2.5E_d, \\ \frac{0.8E_{\text{dam}}(T)}{2E_d}, & T \geq 2.5E_d, \end{cases} \quad (10)$$

由此可见,  $E_d$  对 dpa 有较大的影响, 但目前为止, 关于 Cd, Zn, Te 这 3 种原子的  $E_d$  并没有统一的参考阈值. 早在 1967 年, Bryant 等<sup>[30]</sup> 利用电子辐照的方法研究了 CdTe 材料中原子的  $E_d$ , 研究表明能量高于 340 keV 的电子使得 CdTe 材料的发射光谱发生明显改变, 因此作者认为能量为 340 keV 的电子能够使得 Cd 和 Te 发生离位, 进而推断 CdTe 材料中 Cd, Te 原子的  $E_d$  分别为 8.9, 7.8 eV.

Guo 等<sup>[31]</sup> 在其研究中即采用 Bryant 等<sup>[30]</sup> 研究得到的  $E_d$ , 并将 Zn 的  $E_d$  设定为 7.35 eV, 但上述研究工作中涉及的  $E_d$  比通常默认的 20—25 eV 低得多, 在本文模拟计算过程中, 将沿用 Xu 等<sup>[9]</sup> 研究中的  $E_d$ , 近似考虑认为  $E_d = E_b$  (结合能), 故将 Cd, Te 和 Zn 的  $E_d$  分别设定为 18.99, 19.01 和 19.39 eV<sup>[9]</sup>.  $E_{\text{dam}}(T)$  可通过 lindhard 分离函数计算得出, 即通过 (4)—(8) 式计算得出  $E_{\text{dam}}(T)$  数值后代入 (9) 和 (10) 式计算得到 dpa. 本文主要通过 NIEL 和 dpa 等来定量分析样品所受辐照损伤程度.

### 3 数据分析

#### 3.1 反应截面

如图 3 所示, 分别给出 Cd, Te, Zn 原子中子反应截面, 分析可知对于 1—20 MeV 高能中子, 其反应截面均在 0—6 barn ( $1 \text{ barn} = 1.0 \times 10^{-28} \text{ m}^2$ ) 范围内浮动, 整体反应截面较小. 3 类原子在较低能中子反应时, 其主要以弹性散射为主, 随着中子能量逐渐增大, 非弹性散射截面逐渐增大后又下降,

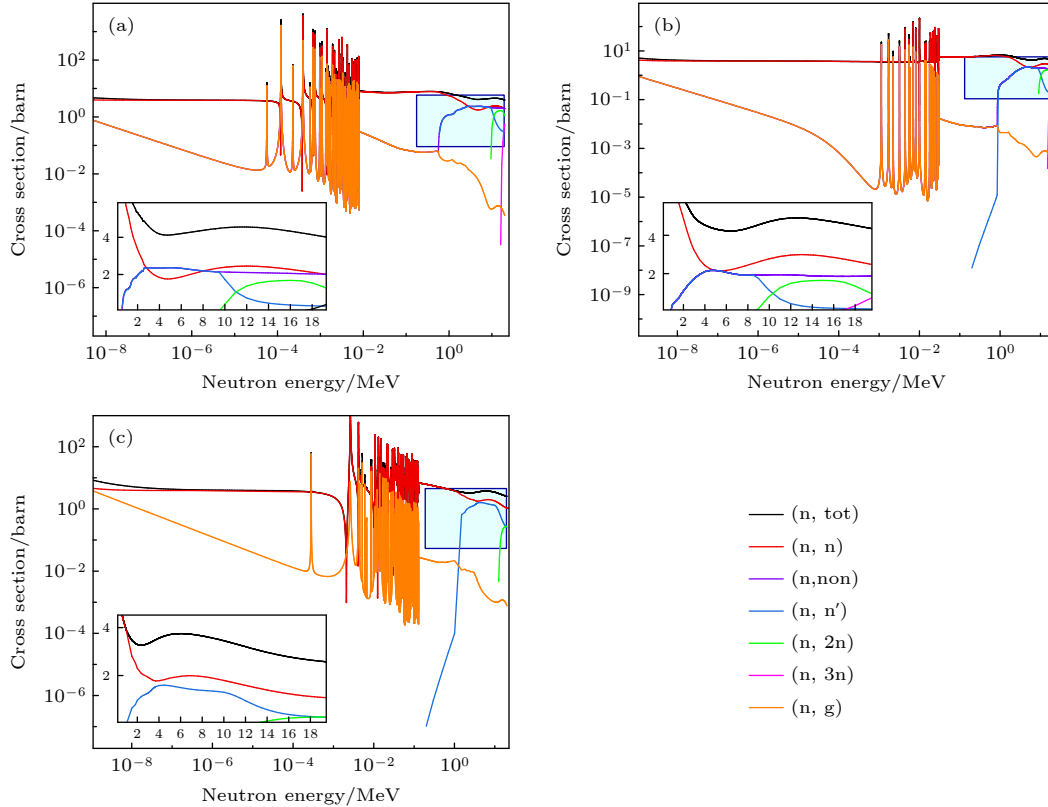


图 3 中子反应截面 (a) Cd; (b) Te; (c) Zn

Fig. 3. Neutron reaction cross section: (a) Cd; (b) Te; (c) Zn.

并伴随其他核反应截面升高. 分析各类原子与中子反应截面, 有利于掌握材料中子辐照过程中反应类型的甄别, 以及辐照效应的梳理.

### 3.2 不同能量中子产生 PKA 信息

表 1 列出了 D-D 中子 (2.45 MeV) 与 D-T 中子 (14.00 MeV) 能量的中子辐照 CZT 材料所生成的 PKA 的种类、动能以及占比等信息 (更多能量下 PKA 信息汇总见附录). 分析可知, PKA 种类随着入射中子能量的升高逐渐增加, 由于中子与靶核发生嬗变反应, 例如 (n, p) 和 (n,  $\alpha$ ) 等, 生成其他类型的核素, 如  $^1\text{H}$ ,  $^4\text{He}$ ,  $^{64, 67}\text{Cu}$ ,  $^{107}\text{Cd}$ ,  $^{115}\text{Cd}$ ,  $^{111}\text{Ag}$ ,  $^{103}\text{Pd}$  等, 特别由于  $^1\text{H}$  和  $^4\text{He}$  两种元素在材料中溶解度极小, 很容易析出形成氢泡或氦泡, 导致材料发生“氢脆”或“氦脆”的现象, 破坏材料特性, 造成较为严重的辐照损伤, 进而影响材料在探测器以及其他电子器件的寿命及使用.

此外, 从表 1 中可以看出, Cd, Te 类 PKA 占比较大, 并且在入射中子能量升高后, Cd\_PKA 数量占比反超 Te\_PKA 数量; 比较 Cd, Te, Zn 与其他类别 PKA 动能, 可以发现其他类 PKA 动能远大于 Cd, Te, Zn 类 PKA 的动能, 其数量占比同低能入射中子相比, 也有所提高. 高能 PKA 的出

现, 将导致更多离位原子的产生, 并随着其数量的增多, 造成更大程度的辐照损伤.

图 4 给出了能量为 2.45 MeV(D-D 中子) 及 14.00 MeV(D-T 中子) 的中子在 CZT 材料内部产生的 PKA 能谱, 分别是 Cd\_PKA, Te\_PKA 以及 Zn\_PKA. 对比分析可知, 随着入射中子能量的增大, PKA 的最大能量将会提高 (图 4(b) 横坐标末端右侧仍存在高能 PKA 并未标出), 但绝大部分 PKA 处于较低能端, 3 类 PKA 的数量均随着能量升高而减小, 并且不论中子能量是 2.45 MeV 还是 14.00 MeV, Cd\_PKA 与 Te\_PKA 数量相差较小, 但 Te\_PKA 在低能端占比更大, 而 Zn\_PKA 数目远小于其他两类 PKA, 这是由其反应截面以及靶材料中不同原子含量占比所共同调制. 但对于 14.00 MeV 中子辐照所得 PKA 能谱而言, 虽然低能端的 Te\_PKA 数目多于 Cd\_PKA, 但由于其高能端 PKA 数目小于高能端 Cd\_PKA 数目, 综合分析, Cd\_PKA 数目将大于 Te\_PKA, 与表 1 所示数据相同. 从 2.45 MeV 中子所形成的 PKA 能谱中发现, Te\_PKA 在高端出现一小峰, 这可能是由于其发生了非弹性散射导致生成较高能量的 PKA, 这将会导致大量离位原子的产生, 损害材料内部结构, 造成严重的辐照损伤.

表 1 不同能量中子辐照 CZT 产生 PKA 信息汇总表  
Table 1. Summary of PKA generated by neutron incident Cd, Te, Zn.

Energy/ MeV	Element	Recoil atoms	$E_k$	$E_{\text{dam}}(T)$	Percentage/%
2.45	Cd	$^{114}\text{Cd}(12.57\%)$ $^{112}\text{Cd}(10.47\%)$ $^{111}\text{Cd}(5.57\%)$ $^{113}\text{Cd}(5.44\%)$ $^{110}\text{Cd}(5.33\%)$ $^{116}\text{Cd}(3.31\%)$ $^{106-109, 115, 117}\text{Cd}(0.98\%)$	0.002 eV— 91.79 keV	0.002 eV— 76.80 keV	43.67
	Te	$^{130}\text{Te}(18.43\%)$ $^{128}\text{Te}(16.58\%)$ $^{126}\text{Te}(9.94\%)$ $^{125}\text{Te}(3.71\%)$ $^{124}\text{Te}(2.51\%)$ $^{122}\text{Te}(1.32\%)$ $^{120, 121, 123, 127, 129, 131}\text{Te}(0.58\%)$	0.03 eV— 81.05 keV	0.03 eV— 69.68 keV	53.05
	Zn	$^{64}\text{Zn}(1.59\%)$ $^{66}\text{Zn}(0.93\%)$ $^{68}\text{Zn}(0.55\%)$ $^{65, 67, 69-70}\text{Zn}(0.15\%)$	1.33 eV— 150.18 keV	1.29 eV— 102.91 keV	3.23
	Other	$^1\text{H}$ $^4\text{He}$ $^{61, 64}\text{Ni}$ $^{64}\text{Cu}$ etc.	527.59 eV— 5.62 MeV	492.12 eV— 239.7 keV	0.05
14.00	Cd	$^{112}\text{Cd}(11.47\%)$ $^{114}\text{Cd}(10.38\%)$ $^{113}\text{Cd}(9.46\%)$ $^{111}\text{Cd}(8.68\%)$ $^{110}\text{Cd}(7.08\%)$ $^{116}\text{Cd}(2.66\%)$ $^{109}\text{Cd}(2.02\%)$ $^{115}\text{Cd}(1.47\%)$ $^{105-108, 117}\text{Cd}(1.12\%)$	0.07 eV— 548.26 keV	0.07 eV— 314.20 keV	54.34
	Te	$^{130}\text{Te}(13.88\%)$ $^{128}\text{Te}(13.17\%)$ $^{126}\text{Te}(7.87\%)$ $^{125}\text{Te}(2.85\%)$ $^{124}\text{Te}(2.02\%)$ $^{122}\text{Te}(1.10\%)$ $^{120-121, 123, 127, 129, 131}\text{Te}(0.41\%)$	0.05 eV— 458.06 keV	0.05 eV— 279.67 keV	41.29
	Zn	$^{64}\text{Zn}(1.30\%)$ $^{66}\text{Zn}(0.87\%)$ $^{68}\text{Zn}(0.54\%)$ $^{65, 67, 69-70}\text{Zn}(0.13\%)$	0.87 eV— 861.92 keV	0.85 eV— 325.25 keV	2.83
	H	$^1\text{H}(0.71\%)$ $^2\text{H}(0.02\%)$	2.17 keV— 14.60 MeV	313.33 eV— 1.69 keV	0.73
	Other	$^4\text{He}(0.26\%)$ $^{61, 63-65, 67}\text{Ni}$ $^{63-68, 70}\text{Cu}$ $^{120-128, 130}\text{Sb}$ $^{102-111, 113}\text{Pd}$ $^{105-114, 116}\text{Ag}$ $^{117, 119-123, 125, 127}\text{Sn}$ etc.	328.98 eV— 19.94 MeV	315.24 eV— 0.66 MeV	0.81

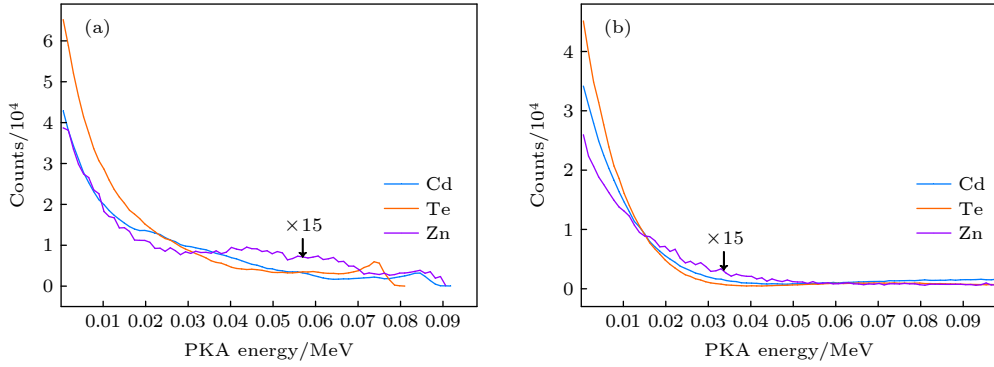


图 4 中子辐照不同种类 PKA 能谱图 (a) 2.45 MeV; (b) 14.00 MeV

Fig. 4. PKA spectra of different types of neutron irradiation: (a) 2.45 MeV; (b) 14.00 MeV.

### 3.3 离位损伤

#### 3.3.1 NIEL

依据 lindhard 函数计算得到 PKA 损伤能  $E_{\text{dam}}$ , 进而计算得到不同深度处不同能量中子 (1.00, 2.45, 5.00, 10.00, 14.00 MeV) 辐照后 CZT 材料中 NIEL, 如图 5 所示. 从图 5 可以直观看到单能中子辐照时, 在靶材中的 NIEL 随深度分布均匀. 这是由于在本次模拟计算中, 靶材料厚度设定为 1 mm, 由图 1 可知本次计算所涉及到中子能量范围其对应的中子平均自由程在厘米量级, 而对于 1 mm 厚度靶材料, 大部分中子在其内部仅发生一次碰撞, 碰撞次数较少, 使得 NIEL 随深度分布均匀, 无明显差异. 图 6 给出了不同反应类型的 NIEL 随入射中子能量变化的关系. 从图 6 可以看到随着入射中子能量的增大, 靶内造成的 NIEL 并没有持续增大, 而是从入射中子能量为 9.00 MeV 起, 有了小范围的降低, 也就是在 1.00—14.00 MeV 范围内, 9.00 MeV 中子入射时, 靶内产生的 NIEL 达到峰值, 与图 5 中显示的不同能量中子入射靶材料中的 NIEL 分布趋势一致. 进一步分析可知, 其 NIEL 主要是由弹性碰撞以及非弹性碰撞造成, 其中非弹性碰撞造成的 NIEL 在 1.00—9.00 MeV 范围内逐渐升高, 在 2.45 MeV 后超过弹性碰撞所造成的 NIEL, 成为靶材料中 NIEL 的主要贡献部分, 并且由于靶材料厚度较薄, 随着中子能量提高, 靶材料原子与中子发生相互作用的概率在一定程度上降低, 多方面因素导致随入射中子能量增大, 总的 NIEL 呈先增大后减小的趋势, 与非弹性散射造成的 NIEL 趋势一致, 而辐射俘获所造成的 NIEL 占比较小, 与弹性散射所贡献的 NIEL 均随入射中子能量无明显变化.

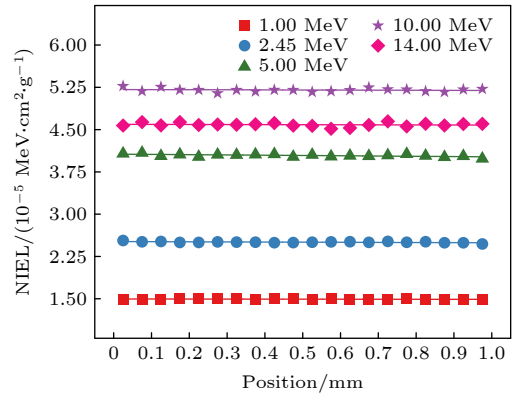


图 5 不同能量中子辐照 CZT 材料 NIEL 随深度变化

Fig. 5. NIEL of CZT material irradiated by neutrons of different energies varies with depth.

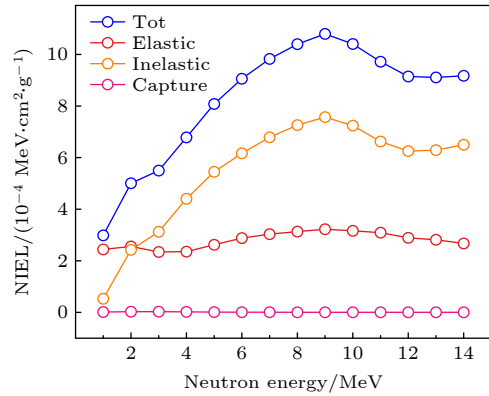


图 6 不同反应类型 NIEL 随入射中子能量变化

Fig. 6. NIEL varies with incident neutron energy in different reaction types.

#### 3.3.2 $N_d$

利用修正后的 NRT 模型计算得出具有不同能量的 PKA 产生的  $N_d$ , 其中包含级联碰撞所造成的更多缺陷数. 依据不同反应类型, 分别比较不同类别 PKA 所造成的  $N_d$ , 如图 7 所示.

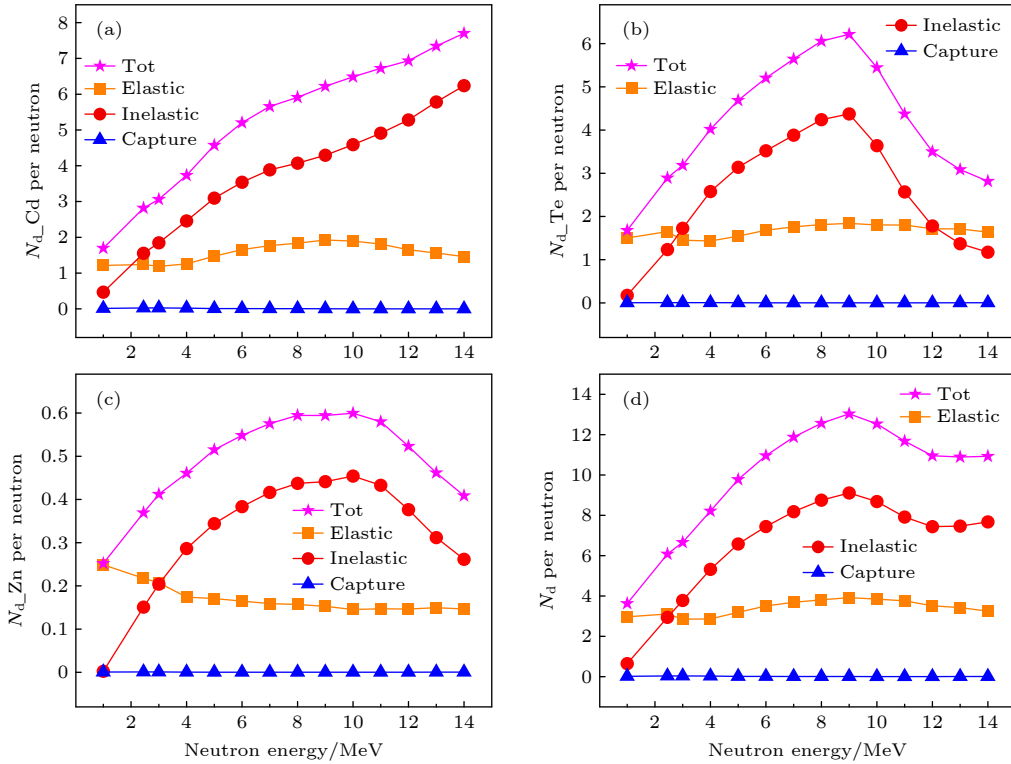


图 7 不同反应类型造成离位原子数随能量变化 (a) Cd; (b) Te; (c) Zn; (d) Tot

Fig. 7. The number of dislocated atoms varies with energy due to different reaction types: (a) Cd; (b) Te; (c) Zn; (d) Tot.

从图 7 中可以明显看到 Te, Zn 所造成的  $N_d$  与靶材料中总  $N_d$  变化趋势相似, 但 Cd 所造成的  $N_d$  却与其他类原子  $N_d$  变化趋势大不相同, 其随入射中子能量增大而持续增大. 对于各类原子造成的  $N_d$ , 其中非弹性散射占主要贡献部分, 决定了总  $N_d$  的趋势, 而弹性散射以及辐射俘获均随入射中子能量增长无明显变化. 故非弹性散射在高中子入射的情况下是造成离位损伤的主要原因. 其中产生的 Cd 类  $N_d$  中, 由非弹性散射产生的部分随中子能量增大逐渐增多, 结合反应截面分析, 这可能是由于在非弹性散射反应截面降低的同时, 其他类核反应截面升高, 并随之生成高能 PKA 产生更多离位缺陷, 与此同时, 虽然 Te 原子非弹性散射截面降低, 同时也伴有核反应截面升高, 但由于其主要发生 (n, 2n) 和 (n, 3n) 核反应, 这两类核反应对于 Cd 原子可生成  $^{112}\text{Cd}$  等稳定核素, 但对于 Te 原子其产生  $^{129}\text{Te}$  等不稳定核素, 极易发生  $\beta^-$  衰变生成其他核素, 减少 Te 类  $N_d$  的产生. 所以综合考虑, 虽然随中子能量升高, 各类核反应截面升高, 但 Te 产生的  $N_d$  仍然呈下降趋势. Zn 的情况同 Te 类似, 并且其他类核反应截面也较低, 所以同样会出现随中子能量升高但产生的  $N_d$  却下降的情况.

### 3.3.3 dpa

由  $N_d$  计算得到平均每个原子所造成的缺陷数, 结果如图 8 所示. 靶材料中 PKA 造成原子离位, 会造成镉空位 ( $V_{\text{Cd}}$ )、碲空位 ( $V_{\text{Te}}$ ) 以及锌空位 ( $V_{\text{Zn}}$ ) 等缺陷. dpa 随入射中子能量变化趋势大致与 NIEL 随入射中子能量变化趋势一致, 其中  $V_{\text{Cd}}$ ,  $V_{\text{Te}}$  数目随入射中子能量逐渐升高, 并在 9.00 MeV 之前增长幅度保持一致, 而  $V_{\text{Te}}$  数目在 9.00 MeV 后开始下降,  $V_{\text{Cd}}$  数目仍然保持增长趋势, 但相比前者,  $V_{\text{Zn}}$  数目并没有随着中子能量增长有明显变

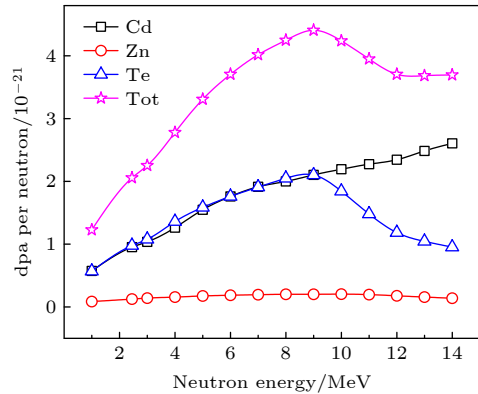


图 8 各类原子 dpa 随中子能量变化

Fig. 8. Dpa of various atoms varies with neutron energy.

化. 这与表 1 中入射中子能量较高时, Cd\_PKa 数目占比逐渐超过 Te\_PKa 数目占比的趋势保持一致. 这可能是由于 Cd, Te, Zn 三类原子在靶材中的原子占比以及反应截面共同导致.

如图 3 所示, 随中子能量增大, Te, Zn 原子的非弹性散射截面逐渐升高并保持平稳, 对于 Cd 原子, 非弹性散射截面甚至反超弹性散射截面. 但在中子能量增大到约 9.00 MeV 之后, Te, Zn 原子的非弹性碰撞截面逐渐降低, Cd 原子的非弹性散射截面在中子能量大于 6.00 MeV 后呈下降趋势, 即造成的 PKA 平均能量将降低, 由其造成的缺陷数降低, 但其中 Cd 原子除非弹性散射截面降低外, 伴随其他核反应生成并产生稳定高能 PKA, 所以导致其总 PKA 平均能量依旧保持较高水平, 如图 8 所示, 在 9.00 MeV 后  $V_{Te}$  数目减小而  $V_{Cd}$  仍然持续增长的趋势.

#### 4 结 论

本文主要模拟计算了 1.00—14.00 MeV 中子在 CZT 材料中的辐照损伤, 统计分析其在靶材中产生的 PKA 能谱、NIEL、 $N_d$  以及 dpa 等方面信息, 来综合考量 CZT 材料所受辐射损伤程度. 由以上数据分析可知: PKA 能量主要分布于低能端, 并且随着入射中子能量的升高, 其 PKA 种类增多, 最大能量也在升高, 其中以 Cd, Te\_PKa 为主要组成部分, 并在较高能中子辐照后伴随部分 H, He 粒子生成, 可能会进一步影响材料自身特性; NIEL 随深度均匀分布是由于所选靶材厚度相对于中子

在 CZT 材料中的平均自由程较小所致, 靶材中 NIEL 随入射中子能量增长呈先增大后减小的趋势, 其主要原因是非弹性散射截面随中子能量变化; 进一步分析得知辐照后靶材中的  $N_d$  随入射中子能量升高先增大后减小, 其中  $V_{Cd}$  随入射中子能量升高持续增大, 而  $V_{Te}$ ,  $V_{Zn}$  却随着入射中子能量升高出现先增大后减小的趋势, 但这并不表示较高能中子辐射材料所导致的辐照损伤变小, 因为除了主要 Cd, Te, Zn 类 PKA 造成的离位损伤外, 中子辐照后还会产生各类其他核素的高能次级粒子, 这些次级粒子造成的辐照损伤同样重要, 例如次级 gamma 射线、次级中子同样可能造成一定程度的辐照损伤. 本文从微观角度研究中子对 CZT 材料的辐照损伤情况, 为今后进一步进行中子辐照实验奠定计算基础, 同时给寻找提升核辐射探测器等半导体器件的耐辐照特性途径提供理论参考. 目前依据本文中子辐照碲锌镉材料的损伤情况来看, 随着中子能量逐渐升高, 其离位损伤先增大后减小, 所以制作探测器时, 可以根据所测量中子的预期能量进行合理设计, 若要测量高能量中子, 则在碲锌镉探测器基础上附加中子慢化层, 达到利用降低中子能量来降低辐照损伤, 最终延长探测器使用寿命的目的. 并且由于非电离能损占主要损伤因素, 所以适当增大探测器中碲锌镉材料尺寸, 也可在一定程度上提高探测器使用寿命.

感谢兰州大学超算中心为本研究提供的超算平台支持.

#### 附 录

表 A1 中子入射 CdZnTe 产生的 PKA 详细信息汇总表  
Table A1. Summary of PKA details generated by neutron incident CdZnTe.

Energy/ MeV	Element	Recoil atoms	$E_k$	$E_{dam}(T)$	Percentage
1.00	Cd	$^{114}Cd$ (13.61%), $^{112}Cd$ (11.30%), $^{111}Cd$ (6.00%) $^{113}Cd$ (5.83%), $^{110}Cd$ (5.80%), $^{116}Cd$ (3.56%) $^{106-109, 115, 117}Cd$ (1.06%)	0.03 eV—37.49 keV	0.03 eV—32.95 keV	47.16%
	Te	$^{130}Te$ (16.79%), $^{128}Te$ (15.86%), $^{126}Te$ (9.30%) $^{125}Te$ (3.51%), $^{124}Te$ (2.40%), $^{122}Te$ (1.27%) $^{120, 121, 123, 127, 129, 131}Te$ (0.57%)	0.02 eV—33.17 keV	0.02 eV—29.67 keV	49.69%
	Zn	$^{64}Zn$ (1.55%), $^{66}Zn$ (0.87%), $^{68}Zn$ (0.57%) $^{65, 67, 69-71}Zn$ (0.15%)	0.10 eV—61.31 keV	0.10 eV—47.55 keV	3.14%
	Other	$^4He$ , $^{61}Ni$ , etc.	0.12—3.84 MeV	5.88—171.64 keV	0.01%
2.45	Cd	$^{114}Cd$ (12.57%), $^{112}Cd$ (10.47%), $^{111}Cd$ (5.57%) $^{113}Cd$ (5.44%), $^{110}Cd$ (5.33%), $^{116}Cd$ (3.31%) $^{106-109, 115, 117}Cd$ (0.98%)	0.002 eV—91.79 keV	0.002 eV—76.80 keV	43.67%
	Te	$^{130}Te$ (18.43%), $^{128}Te$ (16.58%), $^{126}Te$ (9.94%) $^{125}Te$ (3.71%), $^{124}Te$ (2.51%), $^{122}Te$ (1.32%) $^{120, 121, 123, 127, 129, 131}Te$ (0.58%)	0.03 eV—81.05 keV	0.03 eV—69.68 keV	53.05%
	Zn	$^{64}Zn$ (1.59%), $^{66}Zn$ (0.93%), $^{68}Zn$ (0.55%) $^{65, 67, 69-70}Zn$ (0.15%)	1.33 eV—150.18 keV	1.29 eV—102.91 keV	3.23%
	Other	$^1H$ , $^4He$ , $^{61, 64}Ni$ , $^{64}Cu$ , etc.	527.59 eV—5.62 MeV	492.12 eV—239.77 keV	0.05%

表 A1 (续) 中子入射 CdZnTe 产生的 PKA 详细信息汇总表  
Table A1 (continued). Summary of PKA details generated by neutron incident CdZnTe.

Energy/ MeV	Element	Recoil atoms	$E_k$	$E_{\text{dam}}(T)$	Percentage
5.00	Cd	$^{114}\text{Cd}(12.56\%), ^{112}\text{Cd}(10.53\%), ^{111}\text{Cd}(5.60\%), ^{110}\text{Cd}(5.39\%), ^{113}\text{Cd}(5.32\%), ^{116}\text{Cd}(3.33\%)$ $^{106-109, 115, 117}\text{Cd}(0.93\%)$	0.04 eV—187.28 keV	0.04 eV—147.18 keV	43.66%
	Te	$^{130}\text{Te}(17.82\%), ^{128}\text{Te}(16.26\%), ^{126}\text{Te}(9.67\%), ^{125}\text{Te}(3.61\%), ^{124}\text{Te}(2.45\%), ^{122}\text{Te}(1.30\%)$ $^{120, 121, 123, 127, 129, 131}\text{Te}(0.54\%)$	0.02 eV—163.22 keV	0.02 eV—133.96 keV	51.65%
	Zn	$^{64}\text{Zn}(2.07\%), ^{66}\text{Zn}(1.26\%), ^{68}\text{Zn}(0.86\%)$ $^{65, 67, 69-71}\text{Zn}(0.21\%)$	0.20 eV—306.43 keV	0.20 eV—150.03 keV	4.39%
	Other	$^{64, 66-67}\text{Cu}, ^{103, 108}\text{Pd}, ^1\text{H}, ^4\text{He}$ $^{61, 63-65}\text{Ni}, ^{106, 108}\text{Ag}, \text{etc.}$	163.93 eV—10.68 MeV	154.95 eV—368.6 keV	0.30%
10.00	Cd	$^{114}\text{Cd}(13.72\%), ^{112}\text{Cd}(13.72\%), ^{110}\text{Cd}(7.19\%), ^{111}\text{Cd}(5.30\%), ^{113}\text{Cd}(4.80\%), ^{116}\text{Cd}(3.44\%)$ $^{106-109, 115, 117}\text{Cd}(1.32\%)$	0.04 eV—387.48 keV	0.04 eV—234.63 keV	49.08%
	Te	$^{130}\text{Te}(15.10\%), ^{128}\text{Te}(15.02\%), ^{126}\text{Te}(9.37\%), ^{125}\text{Te}(2.65\%), ^{124}\text{Te}(2.50\%), ^{122}\text{Te}(1.37\%)$ $^{120, 123, 127, 129, 131}\text{Te}(0.42\%)$	0.02 eV—327.02 keV	0.02 eV—207.62 keV	46.42%
	Zn	$^{64}\text{Zn}(1.77\%), ^{66}\text{Zn}(1.15\%), ^{68}\text{Zn}(0.81\%)$ $^{67, 69-70}\text{Zn}(0.17\%)$	0.21 eV—614.56 keV	0.21 eV—256.14 keV	3.90%
	Other	$^{1-2}\text{H}(0.21\%), ^{63-64, 66-68}\text{Cu}(0.17\%), ^4\text{He}(0.10\%)$ $^{61, 63-65}\text{Ni}, ^{102-103, 105, 107-108, 110}\text{Pd}$ $^{117, 119-123, 127}\text{Sn}, ^{106, 108, 110-114}\text{Ag}$ $^{120, 122-126, 128, 130}\text{Sb}, \text{etc.}$	1940.87 eV—15.72 MeV	554.83 eV—547.11 keV	0.60%
14.00	Cd	$^{112}\text{Cd}(11.47\%), ^{114}\text{Cd}(10.38\%), ^{113}\text{Cd}(9.46\%), ^{111}\text{Cd}(8.68\%), ^{110}\text{Cd}(7.08\%), ^{116}\text{Cd}(2.66\%)$ $^{109}\text{Cd}(2.02\%), ^{115}\text{Cd}(1.47\%), ^{105-108, 117}\text{Cd}(1.12\%)$	0.07 eV—548.26 keV	0.07 eV—314.20 keV	54.34%
	Te	$^{130}\text{Te}(13.88\%), ^{128}\text{Te}(13.17\%), ^{126}\text{Te}(7.87\%), ^{125}\text{Te}(2.85\%), ^{124}\text{Te}(2.02\%), ^{122}\text{Te}(1.10\%)$ $^{120-121, 123, 127, 129, 131}\text{Te}(0.41\%)$	0.05 eV—458.06 keV	0.05 eV—279.67 keV	41.29%
	Zn	$^{64}\text{Zn}(1.30\%), ^{66}\text{Zn}(0.87\%), ^{68}\text{Zn}(0.54\%)$ $^{65, 67, 69-70}\text{Zn}(0.13\%)$	0.87 eV—861.92 keV	0.85 eV—325.25 keV	2.83%
	H	$^1\text{H}(0.71\%), ^2\text{H}(0.02\%)$	2.17 keV—14.60 MeV	313.33 eV—1.69 keV	0.73%
	Other	$^4\text{He}(0.26\%), ^{61, 63-65, 67}\text{Ni}, ^{63-68, 70}\text{Cu}$ $^{120-128, 130}\text{Sb}, ^{102-111, 113}\text{Pd}, ^{105-114, 116}\text{Ag}$ $^{117, 119-123, 125, 127}\text{Sn}, \text{etc.}$	328.98 eV—19.94 MeV	315.24 eV—0.66 MeV	0.81%

参考文献

[1] Alam M D, Nasim S S, Hasan S 2021 *Prog. Nucl. Energy* **140** 103918

[2] Takahashi T, Watanabe S 2001 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **48** 950

[3] Rao C V S, Shankara Joisa Y, Hansalia C J, Hui A K, Paul R, Ranjan P 1997 *Rev. Sci. Instrum.* **68** 1142

[4] Alper B, Dillon S, Edwards A W, Gill R D, Robins R, Wilson D J 1997 *Rev. Sci. Instrum.* **68** 778

[5] Ingesson L C, Alper B, Peterson B J, Vallet J C 2008 *Fusion Sci. Technol.* **53** 528

[6] Yin Y, Li Y, Wang T, Huang C, Ye Z, Li G 2020 *Sensors* **20** E1294

[7] Johns P M, Nino J C 2019 *J. Appl. Phys.* **126** 040902

[8] Gu Y, Jie W, Rong C, Wang Y, Xu L, Xu Y, Lv H, Shen H, Du G, Fu X, Guo N, Zha G, Wang T 2016 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. Mater. At.* **386** 16

[9] Xu L, Jie W, Zha G, Xu Y, Zhao X, Feng T, Luo L, Zhang W, Nan R, Wang T 2013 *Crystr. Eng. Comm.* **15** 10304

[10] Bao L, Zha G, Gu Y, Jie W 2021 *Mater. Sci. Semicond. Process.* **121** 105369

[11] Eisen Y, Shor A 2009 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **56** 1700

[12] Bao L, Zha G, Xu L, Zhang B, Dong J, Li Y, Jie W 2019 *Mater. Sci. Semicond. Process.* **100** 179

[13] Bartlett L M, Stahle C M, Shu P K, Barbier L M, Barthelmy S D, Gehrels N A, Krizmanic J F, Kurczynski P, Palmer D M, Parsons A M, Teegarden B J, Tueller J 1996 *Hard X-Ray/Gamma-Ray Neutron Opt. Sens. Appl.* 1996-07-19 pp10-16

[14] Li W, Bai Y R, Guo H X, He C H, Li Y H 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 082401 (in Chinese) [李薇, 白雨蓉, 郭昊轩, 贺朝会, 李永宏 2022 物理学报 **71** 082401]

[15] Chen J Y 2014 *M. S. Thesis* ( Xi'an: Xidian University) (in Chinese) [陈金勇 2014 硕士学位论文 (西安: 西安电子科技大学)]

[16] Xie F, Zang H, Liu F, He H, Liao W L, Huang Y 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 192401 (in Chinese) [谢飞, 臧航, 刘方, 何欢, 廖文龙, 黄煜 2020 物理学报 **69** 192401]

[17] Cui Z G, Gou C J, Hou Q, Mao L, Zhou X S 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 156105 (in Chinese) [崔振国, 勾成俊, 侯氢, 毛莉, 周晓松 2013 物理学报 **62** 156105]

[18] Agostinelli S, Allison J, Amako K, et 2003 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. Accel. Spectrometers Detect. Assoc. Equip.* **506** 250

[19] Allison J, Amako K, Apostolakis J, et al. 2006 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **53** 270

[20] Allison J, Amako K, Apostolakis J, et al. 2016 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. Accel. Spectrometers Detect. Assoc. Equip.* **835** 186

[21] Srour J R, Marshall C J, Marshall P W 2003 *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **50** 653

[22] Hao R J, Guo H X, Pan X Y, Lv L, Lei Z F, Li B, Zhong X L, Ouyang X P, Dong S J 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 207301 (in Chinese) [郝蕊静, 郭红霞, 潘霄宇, 吕玲, 雷志锋, 李波, 钟向丽, 欧阳晓平, 董世剑 2020 物理学报 **69** 207301]

[23] Shen S S, He C H, Li Y H 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 182401 (in Chinese) [申帅帅, 贺朝会, 李永宏 2018 物理学报 **67** 182401]

[24] Akkerman A, Barak J, Chadwick M B, Levinson J, Murat M, Lifshitz Y 2001 *Radiat. Phys. Chem.* **62** 301

[25] Liu Y, Zhu T, Yao J, Ouyang X 2019 *Sensors* **19** 1767

[26] Zhu J H, Wei Y, Xie H G, Niu S L, Huang L X 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 066102 (in Chinese) [朱金辉, 韦源, 谢红刚, 牛胜利, 黄流兴 2014 物理学报 **63** 066102]

[27] Robinson M, Torrens I 1974 *Phys. Rev. B* **9** 5008

- [28] Nordlund K, Zinkle S J, Sand A E, Granberg F, Averback R S, Stoller R E, Suzudo T, Malerba L, Banhart F, Weber W J, Willaime F, Dudarev S L, Simeone D 2018 *J. Nucl. Mater.* **512** 450
- [29] Nordlund K, Zinkle S J, Sand A E, Granberg F, Averback R S, Stoller R, Suzudo T, Malerba L, Banhart F, Weber W J, Willaime F, Dudarev S L, Simeone D 2018 *Nat. Commun.* **9** 1084
- [30] Bryant F J, Webster E 1967 *Phys. Status Solidi B* **21** 315
- [31] Guo R, Xu Y, Wang T, Zha G, Jie W 2020 *J. Appl. Phys.* **127** 024501

## Simulation study of neutron radiation damage to cadmium zinc telluride<sup>\*</sup>

Wei Wen-Jing   Gao Xu-Dong   Lü Liang-Liang  
Xu Nan-Nan   Li Gong-Ping<sup>†</sup>

(School of Nuclear Science and Technology, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)

( Received 17 June 2022; revised manuscript received 22 July 2022 )

### Abstract

In recent years, the development of new semiconductor materials has made an opportunity and challenge for technological innovation and the development of emerging industries. Among them, cadmium zinc telluride materials have highlighted important application prospects due to their excellent properties. The CdZnTe, as the third-generation cutting-edge strategic semiconductor material, has the advantages of high detection efficiency, low dark current, strong portability, and applicability at room temperature without additional cooling system. However, when the cadmium zinc telluride detector is exposed to radiation environment for a long time, it will cause different degrees of radiation damage, which will affect the performance of the device or even fail to work, and greatly shorten the service time of the detector in the radiation field. The transport process of 1.00–14.00 MeV neutrons in CdZnTe material is simulated to obtain the information about the primary knock-on atoms, and then by combining with the cascade collision model, the irradiation of neutrons with different energy in CdZnTe material is analyzed. The damage is simulated and calculated. The calculation results are shown below. The energy of most of the primary knock-on atoms is located at the low-energy end, and with the increase of the incident neutron energy, the types of primary knock-on atoms are more abundant, and the energy also increases gradually. With neutron irradiation of CdZnTe, the non-ionizing energy loss is uniformly distributed along the depth direction in the material, and the non-ionizing energy loss first increases and then decreases with the increase of the incident neutron energy. The calculation results of displacements per atom(dpa) show that the dpa also increases first with the increase of the incident neutron energy. And further analysis shows that the number of Te displacement atom atoms and the number of the Zn displacement atoms both increase first and decrease then with the increase of incident neutron energy, while the number of Cd displacement atoms increases with the increase of incident neutron energy, which is co-modulated by its inelastic scattering cross-section and other nuclear-like reaction cross-sections. The comprehensive analysis shows that with the increase of the incident neutron energy, inelastic scattering becomes the main factor causing the internal displacement damage of the material.

**Keywords:** neutron irradiation, CdZnTe, radiation damage, Geant4 simulation

**PACS:** 61.80.Hg, 78.55.Et, 61.80.-x, 02.70.Uu

**DOI:** 10.7498/aps.71.20221195

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11975006, 11575074), and the Open Project of Key Laboratory of Special Functional Materials and Structural Design of the Ministry of Education (Class B) of Lanzhou University in 2021 (Grant No. lzujbky-2021-kb06).

† Corresponding author. E-mail: [ligp@lzu.edu.cn](mailto:ligp@lzu.edu.cn)



## 中子对碲锌镉辐照损伤模拟研究

魏雯静 高旭东 吕亮亮 许楠楠 李公平

### Simulation study of neutron radiation damage to cadmium zinc telluride

Wei Wen-Jing Gao Xu-Dong Lü Liang-Liang Xu Nan-Nan Li Gong-Ping

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 226102 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20221195

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221195>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### InP中子位移损伤效应的Geant4模拟

Geant4 simulation of neutron displacement damage effect in InP

物理学报. 2022, 71(8): 082401 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211722>

#### AlGaIn/GaN高电子迁移率晶体管器件中子位移损伤效应及机理

Neutron-induced displacement damage effect and mechanism of AlGaIn/GaN high electron mobility transistor

物理学报. 2020, 69(20): 207301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200714>

#### 基于蒙特卡罗模拟研究锆钛酸铅镧材料的中子辐照损伤

Simulation of neutron irradiation damage in lead lanthanum zirconate titanate by Monte Carlo method

物理学报. 2022, 71(7): 076101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212041>

#### 氮化镓在不同中子辐照环境下的位移损伤模拟研究

Simulated research on displacement damage of gallium nitride radiated by different neutron sources

物理学报. 2020, 69(19): 192401 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200064>

#### 体心立方Fe中位错环对微裂纹扩展影响的分子动力学研究

Effect of interstitial dislocation loop on expansion of micro-crack in body centered cubic iron investigated by molecular dynamics method

物理学报. 2020, 69(11): 116102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200317>

#### 电子束对ZnO和TiO<sub>2</sub>辐照损伤的模拟计算

Simulation study of electron beam irradiation damage to ZnO and TiO<sub>2</sub>

物理学报. 2021, 70(23): 234101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211223>