

УДК 548.55

<https://doi.org/10.32362/2410-6593-2025-20-1-55-62>

EDN WCZQAO



НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

Оптимизация процесса роста монокристалла КРС-5 с помощью расчета градиента температуры методом конечных элементов

С.В. Ерохин[✉], К.С. Зараменских, М.С. Кузнецов, С.М. Пилюшко

Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет» имени Н.П. Сажина, Москва, 111524 Россия

[✉] Автор для переписки, e-mail: fizteh1993@gmail.com

Аннотация

Цели. Галогениды таллия, в частности, КРС-5 (TlBr–TlI), являются одними из наиболее перспективных оптических кристаллов среднего и дальнего инфракрасного диапазона. Однако высокие требования к качеству материала приводят к существенным сложностям производства данных монокристаллов, т.к. при несоблюдении точных условий роста образцы получают поликристаллическими, непригодными для коммерческого использования. Для определения оптимальных условий роста необходимо проведение десятков дорогостоящих экспериментов. В таком случае альтернативным решением является компьютерное моделирование. В зависимости от требований можно анализировать ключевые параметры по отдельности, не усложняя модель множеством неизвестных одновременно. Целью данной работы является определение условий роста кристалла КРС-5 вычислительными методами для установления причин поликристалличности образцов и нахождения оптимальных параметров получения монокристаллов.

Методы. Для решения поставленной задачи использовали метод конечных элементов, с помощью которого можно выполнить расчеты температурного распределения, механических напряжений, конвективных эффектов, скорости распространения фронта кристаллизации, деформаций из-за теплового расширения и других явлений, возникающих в процессе кристаллообразования. Для построения модели ампулы использовался пакет MATLAB с модулем для решения уравнений в частных производных. Задача о температурном градиенте решалась в осесимметричном приближении.

Результаты. С помощью компьютерного моделирования рассчитано распределение температур в материале в процессе роста, на основе чего определено положение и форма фронта кристаллизации. Сделан вывод, что поликристаллические образцы растут в результате прохождения фронта кристаллизации плоской формы. Определена оптимальная температура в печи, необходимая для формирования выпуклого фронта кристаллизации. Продемонстрирован выращенный монокристалл КРС-5.

Выводы. Расчеты позволили быстро определить причину поликристалличности образцов, получить оптимальные параметры роста монокристаллов и на основе их провести эксперимент роста КРС-5. В полученном образце не наблюдалась блочная структура, и кристалл успешно подвергся механической обработке.

Ключевые слова

метод конечных элементов, расчет градиента температур, оптические кристаллы, галогенид таллия, КРС-5

Поступила: 20.09.2024

Доработана: 30.10.2024

Принята в печать: 24.12.2024

Для цитирования

Ерохин С.В., Зараменских К.С., Кузнецов М.С., Пилюшко С.М. Оптимизация процесса роста монокристалла КРС-5 с помощью расчета градиента температуры методом конечных элементов. *Тонкие химические технологии*. 2025;20(1):55–62. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2025-20-1-55-62>

RESEARCH ARTICLE

Optimization of KRS-5 single crystal growth process by calculation of temperature gradient using finite element method

Sergey V. Erohin✉, Ksenia S. Zaramenskikh, Mikhail S. Kuznetsov, Stanislav M. Pilyushko

Federal State Research and Design Institute of Rare Metal Industry (Giredmet), Moscow, 111524 Russia

✉ Corresponding author, e-mail: fizteh1993@gmail.com

Abstract

Objectives. Thallium halides, in particular KRS-5 (TlBr–TlI), represent one of the most promising classes of optical crystals for applications in the mid- and far-infrared ranges. Nevertheless, the high-quality standards applied to materials used for such applications present considerable challenges in the manufacture of single thallium halide crystals. In particular, when failing to adhere to exacting growth conditions, the samples exhibit polycrystalline characteristics, rendering them unsuitable for utilization. Given the high cost of experiments carried out to ascertain the optimal conditions for growth, computer modeling may present a viable alternative. When taking such an approach to satisfy the specific requirements, it becomes possible to analyze key effects as standalone entities, thus avoiding unnecessary complications resulting from the introduction of a high number of simultaneous unknown variables. Thus, the aim of the present work is to simulate the growth conditions of KRS-5 crystal to ascertain the causes of polycrystallinity in the samples and identify the optimal parameters for obtaining single crystals.

Methods. In order to solve the problem, the finite element method was used. This method is employed for the calculation of temperature distribution, mechanical stresses, convective effects, the rate of spreading of the crystallization front, deformations due to thermal expansion, and other phenomena that arise during the process of crystal formation. The MATLAB package, which includes a module for solving partial differential equations, was used to simulate the crystal growth ampoule. The problem of temperature gradient was solved in axisymmetric approximation.

Results. A computer simulation was employed to calculate the temperature distribution within the material during the growth process. This was used to determine the position and shape of the crystallization front. It is established that polycrystalline samples develop as a consequence of the crystallization front assuming a flat configuration. The optimum temperature in the furnace was determined. The work demonstrated the successful growth of a KRS-5 crystal under the calculated conditions.

Conclusions. The calculations used to identify the underlying cause of polycrystallinity in the samples enabled a determination of the optimal parameters for single crystal growth. On the basis of the calculations, a growth experiment was conducted on the KRS-5 sample. The obtained sample met the requisite criteria for commercial utilization.

Keywords

finite element method, temperature gradient calculation, optical crystals, thallium halide, KRS-5

Submitted: 20.09.2024

Revised: 30.10.2024

Accepted: 24.12.2024

For citation

Erohin S.V., Zaramenskikh K.S., Kuznetsov M.S., Pilyushko S.M. Optimization of KRS-5 single crystal growth process by calculation of temperature gradient using finite element method. *Tonk. Khim. Tekhnol. = Fine Chem. Technol.* 2025;20(1):55–62. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2025-20-1-55-62>

ВВЕДЕНИЕ

Галогениды таллия обладают равномерной прозрачностью в очень широком диапазоне длин волн, охватывающем видимую и среднюю инфракрасную области спектра от 0.35 до 50 мкм. Пропускание составляет до 70% при коэффициенте отражения 30%, полосы поглощения в диапазоне пропускания отсутствуют. В зависимости от состава галогениды таллия находят применение в различных областях. Среди галогенидов таллия кристаллы КРС-5 (нем. Kristalle aus dem Schmelzfluss,

42.5% TlBr, 57.5% TlI) являются наиболее перспективными для применения в космической астрофизике, тепловидении и спектрофотометрии. Кристаллы обладают механической, химической и вибрационной прочностью и влагостойкостью, благодаря чему пригодны для работы в атмосферных условиях без специальной защиты. Сочетание характеристик кристаллов КРС-5 может позволить улучшить свойства оборудования в диапазоне до 10 мкм и послужить основой создания не имеющих аналогов новых устройств, работающих в диапазоне от 10 до 50 мкм [1, 2].

Бромид таллия — полупроводник с запрещенной зоной 2.68 эВ — также перспективен. Благодаря большим атомным номерам (81 и 35) и высокой плотности (7.56 г/см^3) он обладает превосходной останавливающей способностью гамма-излучения [3, 4], что делает его идеальным для обнаружения радиации при комнатной температуре. Также бромид таллия является перспективным материалом для позитронно-эмиссионной томографии, поскольку он обеспечивает очень хорошее энергетическое разрешение и возможность 3D-сегментации, а также эффективность обнаружения, превосходящую таковую у широко используемых сцинтилляторов [5, 6]. Несмотря на хорошее разрешение детекторов на основе TlBr, все же наблюдается нестабильность их работы. Данную проблему пытаются решить добавлением в состав кристалла атомов йода I или хлора Cl [7], а также легированием компенсационными примесями [8, 9].

Выращивание кристаллов галогенидов таллия может быть выполнено методом Бриджмена–Стокбаргера, который подходит для получения монокристаллов данного состава [10]. Тем не менее присутствует ряд проблем в производстве данных кристаллов, особенно с диаметрами свыше 50 мм. Ключевыми свойствами данных материалов являются чистота и структурное совершенство, однако методы достижения чистоты материала с уровнем содержания примесей не более 10^{-5} мас. % недостаточно отработаны, а бездефектность кристаллов часто оказывается далека от совершенства [11–13]. Кроме того, материал является токсичным, что также усложняет технологический процесс получения его монокристаллов. Степень блочности кристалла КРС-5 существенно зависит от параметров роста в мультizonной печи. Также износ оборудования может приводить к тому, что ранее отработанные режимы не будут давать монокристаллы необходимого качества, а поиск новых условий роста путем проб и ошибок может повлечь за собой неприемлемые затраты как дорогостоящего материала, так и времени.

В таком случае решением может послужить проведение компьютерного моделирования [14]. Численные методы давно зарекомендовали себя, как эффективный способ решения технологических задач. В зависимости от требований можно рассматривать ключевые эффекты по отдельности, не усложняя модель учетом множества неизвестных одновременно. Например, расчеты распределения температур, механических напряжений, эффектов конвекции, скорости распространения фронта кристаллизации,

деформаций в результате теплового расширения и других явлений, возникающих в процессе роста кристаллов, доступны в рамках численных методов. В данной работе демонстрируется пример решения упрощенной задачи поиска распределения температур, которая позволяет определить параметры роста качественных образцов кристаллов.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Все расчеты были выполнены в пакете MATLAB¹ с использованием модуля для решения уравнений в частных производных Partial Differential Equation Toolbox (PDEs²). Задача распределения температур решалась в осесимметричном приближении. Высота модели ампулы составляла 0.35 м, радиус 0.04 м, угол при вершине конуса 45°C . Модель ампулы разбивалась на сетку с треугольными элементами размером не больше 0.005 м с квадратичным разбиением узлов сетки, со скоростью изменения сетки 1.5.

Были взяты следующие свойства кристалла КРС-5: теплоемкость $C = 151 \text{ Вт}\cdot\text{с}/(\text{кг}\cdot^\circ\text{C})$, теплопроводность $k = 0.544 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot^\circ\text{C})$ и плотность $\rho = 7.37 \text{ г/см}^3$ [15]. Рост кристалла осуществлялся в АО *Гиредмет* (Россия) из шихты соединения двух солей иодида и бромида таллия (*Гиредмет*, Россия) в печи EDG11-D4 Sunfire (*MELLEN*, США).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Рост монокристаллов вертикально направленной кристаллизации может быть реализован в мультizonной печи без использования мембраны, разделяющей холодную и горячую зону. В этом случае вместо перемещения ампулы с расплавом можно менять температуру нагревательных элементов и тем самым сдвигать положение изотермы кристаллизации (рис. 1).

В ампулу из термостойкого стекла помещается шихта состава КРС-5, после чего ампула подвешивается внутри печи (рис. 1б). Затем температура внутри всей рабочей зоны повышается до температур выше температуры плавления, и материал переходит в расплавленное состояние. Далее температура нагревательных элементов последовательно опускается до значений ниже температуры кристаллизации КРС-5, начиная с расположенных ниже ампулы с материалом элементов, после чего внутри ампулы формируется кристаллическая фаза. Однако общей информации о параметрах роста недостаточно для получения качественных образцов.

¹ MATLAB. version 9.14.0 (R2023a). Natick, Massachusetts: The MathWorks Inc.; 2023.

² Partial Differential Equation Toolbox. version 9.14 (R2023a). Natick, Massachusetts: The MathWorks Inc.; 2023.

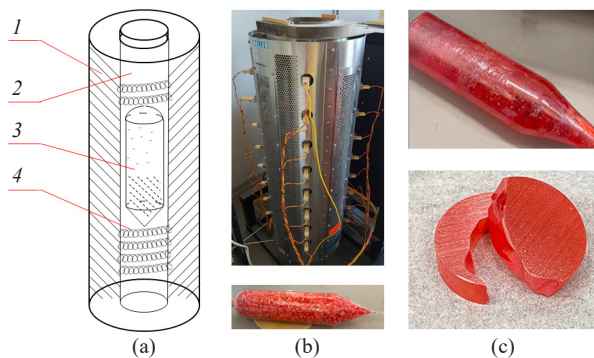


Рис. 1. (а) Схематичное изображение мультizonной печи: 1 — изолятор; 2 — рабочая зона; 3 — ампула с КРС-5; 4 — нагревательные элементы. Температура на каждом нагревательном элементе контролируется отдельно, и за счет этого в ампуле одновременно сосуществуют кристаллическая фаза и расплав (показано пунктирными линиями и волнами). (б) Фото мультizonной печи и ампулы с шихтой, которая подвешивается в нагревательной зоне. (с) Кристалл КРС-5, выращенный в печи (фото сверху). При неправильном температурном режиме кристалл разваливается при обработке (фото внизу).

Fig. 1. (a) Schematic representation of a multizone furnace: (1) insulator; (2) working zone; (3) ampoule with KRS-5; (4) heating elements. The temperature of each heating element is regulated independently, allowing for the coexistence of the crystal phase and the melt within the ampoule (illustrated by dotted lines and waves). (b) Photo of a multizone furnace and an ampoule with powder that is suspended within the heating zone. (c) KRS-5 crystal grown in the furnace (photo above). If the temperature regime is not correct, the crystal falls apart during processing (photo below)

Например, на рис. 1с показан образец поликристаллического КРС-5, полученный при поддержании градиента температуры до 10°C/см и скорости роста кристалла не более 1.5 мм/ч. Поскольку одним из ключевых применений КРС-5 является оптика, то полученные образцы подвергаются механической обработке. Поликристаллические образцы не выдерживают такой обработки и потому непригодны. Причин для роста поликристаллов может быть несколько: форма фронта кристаллизации, напряжения на границе контакта ампула/материал, механизмы конвекции, множественные центры кристаллизации и т.д. Искать решение подбором параметров крайне затратно и трудоемко, по этой причине было решено использовать численное моделирование.

В рамках данной работы было решено, что для проверки формы фронта кристаллизации достаточно сфокусироваться на расчете изотерм внутри ампулы без учета конвекции или механических напряжений на границе контакта материала с ампулой. Последние эффекты могут быть добавлены в усложненную модель при необходимости.

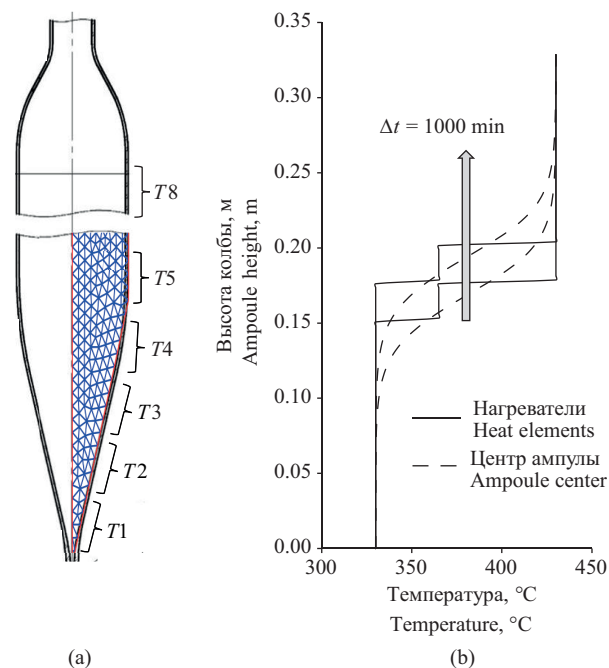


Рис. 2. (а) Модель ампулы из термостойкого стекла. Для расчетов пространство разбивалось сеткой треугольных элементов, которым задавались свойства материала КРС-5. Отрезки T1–T8 отмечают положение нагревательных элементов. (б) Температура на нагревательных элементах (сплошная линия) и соответствующая температура в центре ампулы (пунктирная линия) в два момента времени. Стрелкой указано, куда во времени смещаются зависимости.

Fig. 2. (a) Model of the ampoule made of heat-resistant glass. The blue color shows the mesh. Each element has the properties of the KRS-5 material. The positions of the heating elements are indicated by T1–T8. (b) The temperature of the heating elements (solid line) and the corresponding temperature at the center of the flask (dashed line) at two points in time are illustrated. The arrow indicates where the dependencies shift over time

Для проведения моделирования методом конечных элементов в пакете MATLAB была создана осесимметричная 2D-модель ампулы с материалом, см. рис. 2а. В рамках задачи решалось стандартное уравнение теплопроводности:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(k \nabla T),$$

где T — температура, t — время. Элементам задавались характеристики теплоемкости (C_p), теплопроводности (k) и плотности (ρ), соответствующие кристаллу КРС-5. В задаче не учитывалась теплота кристаллизации, поскольку при достаточно медленном процессе роста кристалла система успевает прийти в тепловое равновесие. Учет нагревательных элементов задавался фиксированной температурой на краях модели. Размеры участков с контролируемой

температурой, как и размер модели соответствовали экспериментальной установке. Далее предполагалось, что положение фронта кристаллизации соответствует положению изотермы кристаллизации ($T_{кр} = 414^\circ\text{C}$).

Температура нагревательных элементов менялась во времени по следующему алгоритму: сначала температура всех нагревателей была равна максимальной температуре: $T1 = T2 = \dots = T8 = T_{max}$. Затем температура первого нагревателя менялась по соотношению

$$T1 = T_{max} - \left(\frac{t - t_1}{1000 \cdot (T_{max} - T_{min})} \right),$$

где t_1 — время начала охлаждения элемента $T1$ (мин), t — время расчета (мин). После охлаждения элемента $T1$ до T_{min} , аналогичным образом менялась температура на элементе $T2$. Температуры T_{min} и T_{max} варьировались в различных расчетах в диапазонах $330\text{--}360^\circ\text{C}$ и $430\text{--}460^\circ\text{C}$. Профиль температур и нагревателей в зависимости от высоты приведен на рис. 2б. При указанных параметрах изотерма кристаллизации за 1000 мин смещается на 2.5 см, что соответствует скорости роста кристалла 1.5 мм/ч.

На рис. 3 представлены 3D поверхности части модели с температурой ниже температуры кристаллизации 414°C и видно изменение формы изотерм при переключении температуры нагревателей как в области

конуса, так и в цилиндрической области ампулы. На рис. 3а и 3б показано сравнение двух температурных режимов, в которых при одной и той же разнице максимальной и минимальной температур наблюдается принципиально разная форма изотермы кристаллизации. В случае, если диапазон сдвинут так, что максимальная температура близка к температуре кристаллизации $T_{кр}$, форма изотермы получается выпуклой (рис. 3а). В противоположном случае, если минимальная температура близка к $T_{кр}$, форма изотермы кристаллизации получается вогнутой.

В квазистационарном режиме, когда скорость роста существенно медленнее, чем скорость установления температурного равновесия, предполагается, что положение фронта кристаллизации соответствует изотерме кристаллизации. Форма фронта кристаллизации оказывает существенное влияние на качество растущего кристалла. Например, согласно исследованиям, проведенным еще в XX веке [16], выпуклая граница фронта кристаллизации препятствует появлению новых центров зародышеобразования на пути дальнейшего роста главного кристалла, так как наиболее продвинувшаяся в расплав часть кристалла дальше всего удалена от стенок, где наиболее вероятно формирование новых зародышей. Также важно отметить, что конус ампулы является местом с наибольшей вероятностью роста таких дефектов. Чем больше угол при вершине конуса, тем больше

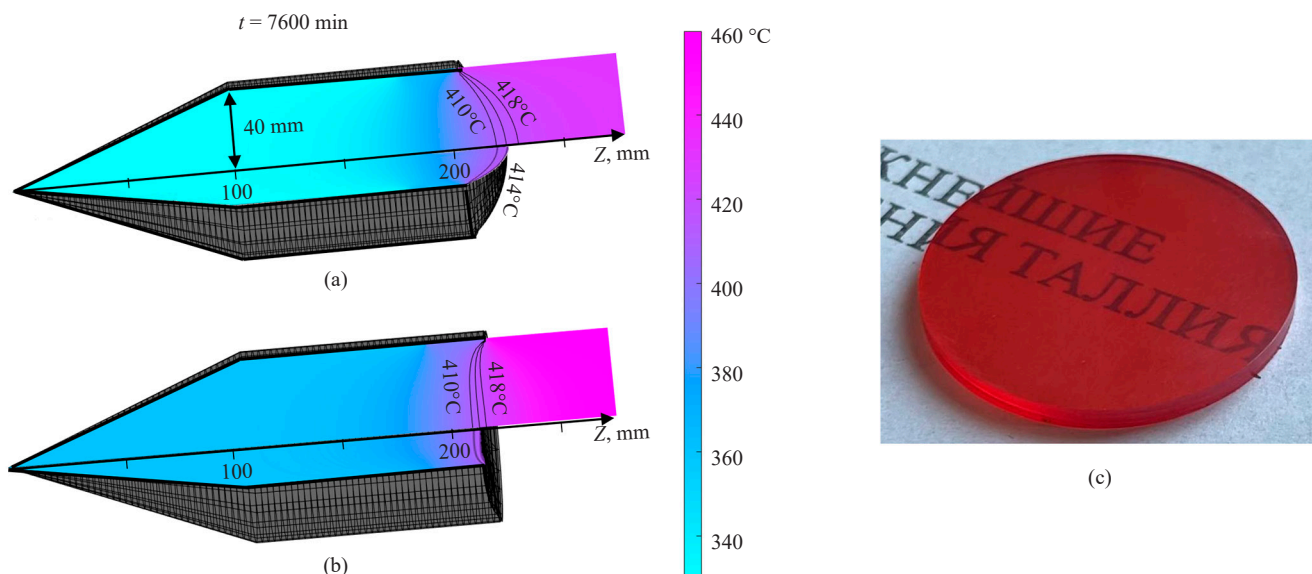


Рис. 3. (а), (б) 3D модели кристаллизованной части материала внутри ампулы в случае двух температурных режимов: (а) $330\text{--}430^\circ\text{C}$; (б) $360\text{--}460^\circ\text{C}$. Градиентом цвета показано распределение температуры внутри материала. Черными линиями отмечены три изотермы 410, 414 и 418°C . (с) Обработанный образец кристалла КРС-5, полученный при использовании температурного режима (а).

Fig. 3. (a), (b) 3D models of the crystallized part of the material inside the ampoule in the case of two temperature regimes: (a) $330\text{--}430^\circ\text{C}$; (b) $360\text{--}460^\circ\text{C}$. The color gradient shows the temperature distribution within the material. Three isotherms, for 410, 414, and 418°C , are marked with black lines. (c) Processed sample of KRS-5 crystal obtained using the temperature regime (a)

вероятность поликристалличности, и по этой причине форма ампулы имеет большое значение.

Кроме того, степень блочности кристалла может зависеть от формы фронта кристаллизации. Поскольку блочность часто формируется в результате скопления дислокаций, а дислокации перемещаются преимущественно перпендикулярно границе роста, то при выпуклом фронте дислокации могут “выталкиваться” из кристалла, не создавая высокой плотности дефектов [17]. Таким образом, для получения высококачественных образцов необходимо использовать режим, представленный на рис. 3а. Из расчетов также можно определить величину градиента в зоне фронта кристаллизации. По изотермам на рис. 3а и 3б было получено, что для первого режима градиент в центре ампулы составляет 11°C/см, а для второго 14°C/см.

Согласно рассчитанному режиму, был выращен новый кристалл КРС-5 в мультizonной печи. Образец представлен на рис. 3с. Контроль качества кристаллов проводился визуально, без использования микроскопа или других оптических средств при ярком освещении. Наблюдение проводилось под острыми углами к поверхности образцов. При таких условиях осмотра выявляются блоки, обусловленные несовершенством структуры кристалла. В полученном образце не наблюдалась блочная структура, и кристалл успешно подвергался механической обработке.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью метода конечных элементов, реализованного в пакете MATLAB, было получено распределение температур в мультizonной печи. Основываясь на предположении, что при

достаточно медленном росте кристалла фронт кристаллизации располагается вдоль изотермы кристаллизации, было определено, что причина поликристалличности ранее выращенных кристаллов связана с плоской формой фронта кристаллизации, что в свою очередь способствует появлению множественных центров кристаллизации и, как следствие, формированию поликристаллической структуры. Затем были определены новые параметры роста и установлены соответствующие значения температур на нагревательных элементах, что позволило вырастить кристалл КРС-5 с низкой степенью блочности, подходящий для коммерческого использования.

Вклад авторов

С.В. Ерохин — проведение расчетов, написание текста статьи.

К.С. Зараменских — отработка режимов роста, написание текста статьи.

М.С. Кузнецов — рост кристаллов в мультizonной печи, планирование эксперимента.

С.М. Пилушко — подготовка образцов и их механическая обработка.

Authors' contributions

S.V. Erohin — carrying out calculations, writing the text of the article.

K.S. Zaramenskikh — developing growth regimes, writing the text of the article.

M.S. Kuznetsov — growing crystals in a multizone furnace, planning the experiment.

S.M. Pilyushko — preparing samples and mechanical processing.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов. Работа выполнена без финансовой поддержки.

The authors declare no conflict of interest. The work was done without financial support.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кузнецов М.С., Зараменских К.С., Лисицкий И.С., Полякова Г.В., Морозов М.В., Пимкин Н.А., Сосков О.В., Бутвина Л.Н. Градиентные материалы на основе кристаллов галогенидов таллия для оптических элементов и оптоволокон в ИК-диапазоне. *Фотон-Экспресс*. 2021;6(174):76–77. <https://doi.org/10.24412/2308-6920-2021-6-76-77>
2. Khorkin V.S., Voloshinov V.B., Kuznetsov M.S. Anisotropic acousto-optic interaction in a KRS-5 crystal. *Appl. Opt.* 2022;61(15):4397–4403. <https://doi.org/10.1364/AO.453606>
3. Kim H., Ogorodnik Y., Kargar A., Cirignano L., Thrall C.L., Koehler W., O'Neal S.P., He Z., Swanberg E., Payne S.A., Squillante M.R., Shah K. Thallium Bromide Gamma-Ray Spectrometers and Pixel Arrays. *Front Phys.* 2020;8:55. <https://doi.org/10.3389/fphy.2020.00055>
4. Hitomi K., Kim C., Nogami M., Shimazoe K., Takahashi H. Characterization of coincidence time resolutions of $TlBr_xCl_{1-x}$ crystals as Cherenkov radiators. *Jpn. J. Appl. Phys.* 2023;62:081001. <https://doi.org/10.35848/1347-4065/ace5fa>

REFERENCES

1. Kuznetsov M.S., Zaramenskikh K.S., Lisitskii I.S., Polyakova G.V., Morozov M.V., Pimkin N.A., Soskov O.V., Butvina L.N. Gradient materials based on thallium halide crystals for optical elements and optical fibers of the IR range. *Foton-Ekspress = Photon-Express*. 2021;6(174):76–77 (in Russ.). <https://doi.org/10.24412/2308-6920-2021-6-76-77>
2. Khorkin V.S., Voloshinov V.B., Kuznetsov M.S. Anisotropic acousto-optic interaction in a KRS-5 crystal. *Appl. Opt.* 2022;61(15):4397–4403. <https://doi.org/10.1364/AO.453606>
3. Kim H., Ogorodnik Y., Kargar A., Cirignano L., Thrall C.L., Koehler W., O'Neal S.P., He Z., Swanberg E., Payne S.A., Squillante M.R., Shah K. Thallium Bromide Gamma-Ray Spectrometers and Pixel Arrays. *Front Phys.* 2020;8:55. <https://doi.org/10.3389/fphy.2020.00055>
4. Hitomi K., Kim C., Nogami M., Shimazoe K., Takahashi H. Characterization of coincidence time resolutions of $TlBr_xCl_{1-x}$ crystals as Cherenkov radiators. *Jpn. J. Appl. Phys.* 2023;62:081001. <https://doi.org/10.35848/1347-4065/ace5fa>

- Ariño-Estrada G., Du J., Kim H., Cirignano L.J., Shah K.S., Cherry S.R., Mitchell G.S. Development of TlBr detectors for PET imaging. *Phys. Med. Biol.* 2018;63(13):13NT04. <https://doi.org/10.1088/1361-6560/aac27e>
- Ellin J., Rebolo L., Backfish M., Prebys E., Ariño-Estrada G. Prompt gamma timing for proton range verification with TlBr and TlCl as pure Cherenkov emitters. *Phys. Med. Biol.* 2024;69(11):115002. <https://doi.org/10.1088/1361-6560/ad4304>
- Kim H., Churilov A., Ciampi G., Cirignano L., Higgins W., Kim S., O'Dougherty P., Olschner F., Shah K. Continued development of thallium bromide and related compounds for gamma-ray spectrometers. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equip.* 2011;629(1):192–196. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2010.10.097>
- Смирнов И.С., Говорков А.В., Кожухова Е.А., Лисицкий И.С., Кузнецов М.С., Зараменских К.С., Поляков А.Я. Влияние условий выращивания и легирования донорными примесями на механизм проводимости и спектры глубоких уровней в кристаллах TlBr. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники.* 2013;3:4–12. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2013-3-4-12>
- Bishop S.R., Higgins W., Ciampi G., Churilov A., Shah K.S., Tuller H.L. The Defect and Transport Properties of Donor Doped Single Crystal TlBr. *J. Electrochem. Soc.* 2011;158(2):J47. <http://doi.org/10.1149/1.3525243>
- Salimgareev D., Lvov A., Yuzhakova A., Pestereva P., Shmygalev A., Korsakov A., Zhukova L. Optical materials for IR fiber optics based on solid solutions of $\text{AgCl}_{0.25}\text{Br}_{0.75} - \text{TlCl}_{0.74}\text{Br}_{0.26}$, $\text{AgCl}_{0.25}\text{Br}_{0.75} - \text{TlBr}_{0.46}\text{I}_{0.54}$ systems. *Opt. Mat.* 2023;143(3):114304. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2023.114304>
- Лисицкий И.С., Голованов В.Ф., Кузнецов М.С., Полякова Г.В. Макроскопические дефекты монокристаллов галогенидов таллия, выращенных из расплава методом Стокбаргера. *Цветные металлы.* 2004;2:81–84.
- Kozlov V., Leskelä M., Sipilä H. Annealing and characterisation of TlBr crystals for detector applications. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equip.* 2005;546(1):200–204. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2005.03.025>
- Kozlov V., Leskelä M., Prohaska T., Schultheis G., Stinger G., Sipilä H. TlBr crystal growth, purification and characterisation. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equip.* 2004;531(1):165–173. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2004.06.002>
- Аронов П.С., Гусев А.О., Родин А.С. Моделирование напряженно-деформированного состояния кристалла, выращенного методом Бриджмена. *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша.* 2023;8:26 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2023-8>
- Авдиенко К.И., Артюшенко В.Г., Белоусов А.С. и др. Кристаллы галогенидов таллия. Получение, свойства и применение. Новосибирск: Наука; 1989. 151 с.
- Лодиз Р.А., Паркер Р.Л. *Рост монокристаллов*: пер. с англ. М.: Мир; 1974. 540 с.
- Aust K.T., Chalmers B. Control of lineage structure in aluminum crystals grown from the melt. *Can. J. Phys.* 1958;36(7):977–980. <https://doi.org/10.1139/p58-103>
- Ariño-Estrada G., Du J., Kim H., Cirignano L.J., Shah K.S., Cherry S.R., Mitchell G.S. Development of TlBr detectors for PET imaging. *Phys. Med. Biol.* 2018;63(13):13NT04. <https://doi.org/10.1088/1361-6560/aac27e>
- Ellin J., Rebolo L., Backfish M., Prebys E., Ariño-Estrada G. Prompt gamma timing for proton range verification with TlBr and TlCl as pure Cherenkov emitters. *Phys. Med. Biol.* 2024;69(11):115002. <https://doi.org/10.1088/1361-6560/ad4304>
- Kim H., Churilov A., Ciampi G., Cirignano L., Higgins W., Kim S., O'Dougherty P., Olschner F., Shah K. Continued development of thallium bromide and related compounds for gamma-ray spectrometers. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equip.* 2011;629(1):192–196. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2010.10.097>
- Смирнов И.С., Говорков А.В., Кожухова Е.А., Лисицкий И.С., Кузнецов М.С., Зараменских К.С., Поляков А.Я. The influence of growth conditions and donor doping on conductivity mode and deep traps spectra in TlBr single crystals. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki = Materials of Electronics Engineering.* 2013;3:4–12 (in Russ.). <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2013-3-4-12>
- Bishop S.R., Higgins W., Ciampi G., Churilov A., Shah K.S., Tuller H.L. The Defect and Transport Properties of Donor Doped Single Crystal TlBr. *J. Electrochem. Soc.* 2011;158(2):J47. <http://doi.org/10.1149/1.3525243>
- Salimgareev D., Lvov A., Yuzhakova A., Pestereva P., Shmygalev A., Korsakov A., Zhukova L. Optical materials for IR fiber optics based on solid solutions of $\text{AgCl}_{0.25}\text{Br}_{0.75} - \text{TlCl}_{0.74}\text{Br}_{0.26}$, $\text{AgCl}_{0.25}\text{Br}_{0.75} - \text{TlBr}_{0.46}\text{I}_{0.54}$ systems. *Opt. Mat.* 2023;143(3):114304. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2023.114304>
- Lisitsky I.S., Golovanov V.F., Kuznetsov M.S., Polyakova G.V. Macroscopic defects of thallium halide single crystals grown from the melt by the Stockbarger method. *Tsvetnye Metally.* 2004;2:81–84 (in Russ.).
- Kozlov V., Leskelä M., Sipilä H. Annealing and characterisation of TlBr crystals for detector applications. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equip.* 2005;546(1):200–204. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2005.03.025>
- Kozlov V., Leskelä M., Prohaska T., Schultheis G., Stinger G., Sipilä H. TlBr crystal growth, purification and characterisation. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equip.* 2004;531(1):165–173. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2004.06.002>
- Aronov P.S., Gusev A.O., Rodin A.S. Modeling of the stress-strain state of the crystal grown by Bridgman method. *Preprinty IPM im. M.V. Keldysha = Keldysh Inst Prepr.* 2023;8:26 p. (in Russ.). <https://doi.org/10.20948/prepr-2023-8>
- Avdienko K.I., Artyushenko V.G., Belousov A.S., et al. *Krystally galogenidov talliya. Poluchenie, svoistva i primeneniye (Crystals of Thallium Halides. Synthesis, Properties and Applications)*. Novosibirsk: Nauka; 1989. 151 p. (in Russ.).
- Laudise R.A., Parker R.L. *Rost monokristallov (The Growth of Single Crystals)*: transl. from Engl. Moscow: Mir; 1974. 540 p. (in Russ.). [Laudise R.A. *The Growth of Single Crystals*. N.Y.: Prentice-Hall Publ., 1970. 352 p.]
- Aust K.T., Chalmers B. Control of lineage structure in aluminum crystals grown from the melt. *Can. J. Phys.* 1958;36(7):977–980. <https://doi.org/10.1139/p58-103>

Об авторах

Ерохин Сергей Владимирович, к.ф.-м.н., научный сотрудник, лаборатория высокочистых галогенидных материалов для оптики, АО «Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет» имени Н.П. Сагина (111524, Россия, Москва, Электродная ул., д. 2, стр. 1). E-mail: fizteh1993@gmail.com. Scopus Author ID 57003750600, ResearcherID AFR-7212-2022, SPIN-код РИНЦ 6549-5344, <https://orcid.org/0000-0002-7464-8454>

Зараменских Ксения Сергеевна, к.х.н., лаборатория высокочистых галогенидных материалов для оптики, АО «Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет» имени Н.П. Сагина (111524, Россия, Москва, Электродная ул., д. 2, стр. 1). E-mail: kszaramenskikh@rosatom.ru. Scopus Author ID 56743216200, SPIN-код РИНЦ 3904-6167, <https://orcid.org/0000-0001-8573-3470>

Кузнецов Михаил Сергеевич, начальник лаборатории высокочистых галогенидных материалов для оптики, АО «Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет» имени Н.П. Сагина (111524, Россия, Москва, Электродная ул., д. 2, стр. 1). E-mail: gradan@mail.ru. Scopus Author ID 55421893200, <https://orcid.org/0000-0002-8441-4424>

Пилюшко Станислав Михайлович, инженер-технолог, лаборатория высокочистых галогенидных материалов для оптики, АО «Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет» имени Н.П. Сагина (111524, Россия, Москва, Электродная ул., д. 2, стр. 1). E-mail: vorpat2402@bk.ru. Scopus Author ID 57854000900, SPIN-код РИНЦ 4397-6926, <https://orcid.org/0009-0005-3650-4694>

About the authors

Sergey V. Erohin, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Researcher, Laboratory of High-Purity Halogenide Materials for Optics, Giredmet (2-1, Elektrodная ul., Moscow, 111524, Russia). E-mail: fizteh1993@gmail.com. Scopus Author ID 57003750600, ResearcherID AFR-7212-2022, RSCI SPIN-code 6549-5344, <https://orcid.org/0000-0002-7464-8454>

Ksenia S. Zaramenskikh, Cand. Sci. (Chem.), Leading Researcher, Laboratory of High-Purity Halogenide Materials for Optics, Giredmet (2-1, Elektrodная ul., Moscow, 111524, Russia). E-mail: kszaramenskikh@rosatom.ru. Scopus Author ID 56743216200, RSCI SPIN-code 3904-6167, <https://orcid.org/0000-0001-8573-3470>

Mikhail S. Kuznetsov, Head of the Laboratory of High-Purity Halogenide Materials for Optics, Giredmet (2-1, Elektrodная ul., Moscow, 111524, Russia). E-mail: gradan@mail.ru. Scopus Author ID 55421893200, <https://orcid.org/0000-0002-8441-4424>

Stanislav M. Pilyushko, Process Engineer, Laboratory of High-Purity Halogenide Materials for Optics, Giredmet (2-1, Elektrodная ul., Moscow, 111524, Russia). E-mail: vorpat2402@bk.ru. Scopus Author ID 57854000900, RSCI SPIN-code 4397-6926, <https://orcid.org/0009-0005-3650-4694>