

Особенности спектров люминесценции ZnSe · O с привлечением теории антипересекающихся зон

© В.И. Олешко¹, С.С. Вильчинская¹, Н.К. Морозова²

¹ Национальный исследовательский Томский политехнический университет, 634050 Томск, Россия

² Национальный исследовательский университет „Московский энергетический институт“, 111250 Москва, Россия

E-mail: morozovank@mail.ru, oleshko@tpu.ru

Поступила в Редакцию 27 декабря 2020 г.
В окончательной редакции 30 декабря 2020 г.
Принята к публикации 31 декабря 2020 г.

Представлены исследования на основе теории антипересекающихся зон влияния на спектры излучения структурных особенностей самоактивированного селенида цинка и кристаллов с активаторами. Разрозненность многочисленных литературных данных затрудняет понимание этого вопроса. Теория антипересекающихся зон, которая утвердилась в настоящее время, требует учитывать влияние изоэлектронной примеси кислорода, неизменно присутствующего в решетке ZnSe, на зонную структуру. Совершенствование методов расчета равновесия собственных точечных дефектов предполагает привлечение этих данных при анализе оптических свойств A^{II}B^{IV}, в частности селенида цинка. Цель работы — исследование особенностей и природы полос люминесценции, широко используемых для получения информации о качестве кристаллов. Для этого были исследованы спектры фото-, катодо-, импульсной люминесценции и спектры возбуждения, а также спектры вынужденного свечения ZnSe в едином контексте с привлечением этих особенностей. Выявлены устойчивые состояния кристаллов с дефектами упаковки при введении активаторов или фоновой примеси меди. Результаты представляют интерес для диагностики кристаллов, пригодных для создания лазеров.

Ключевые слова: изоэлектронные центры, активаторы, импульсная катодолюминесценция, вынужденное свечение, комплексы, связанный экситон, дефекты упаковки, мультизона.

DOI: 10.21883/FTP.2021.05.50828.9585

1. Введение

Интерпретация спектров, как самоактивированного (SA), так и легированного некоторыми посторонними примесями ZnSe, очень противоречива. Она может быть обоснована только на основе особенностей: электронной, кристаллической и собственно-дефектной структуры кристалла, содержащего кислород. Подход к изучению оптических свойств соединений A^{II}B^{IV} при изменении зонной модели вследствие присутствия в них изоэлектронных ловушек O_{Se} и дефектов, стабилизирующих эти центры, существенно расширяют представления о процессах люминесценции ZnSe и свойствах самого кристалла [1–12].

Изменение зонной структуры ZnSe в зависимости от содержания кислорода на основе теории антипересекающихся зон (ВАС) рассматривалось ранее, в частности в работах [1–5]. Зонная модель ZnSe · O, построенная в соответствии с этой теорией [7,11,13], представлена на рис. 1.

При построении модели мы использовали известные данные: $E_C = 2.813$ эВ (80 К) — дно зоны проводимости бескислородного ZnSe [6,7], $E_O = 0.11$ эВ — положение уровня кислорода [2], учитывалось линейное смещение краев E_+ и E_- подзон по отношению к E_C или E_O [9,12]. Величина смещения подзон на 1 мол.% ($2 \cdot 10^{20}$ см⁻³)

растворенного кислорода O_{Se} в ZnSe 100 мЭВ [6]. Рекомбинационные уровни SAL- и SA-свечения взяты по литературным источникам [6,7,10,11]. По этим данным построена зонная модель для ZnSe · O при 80 К на

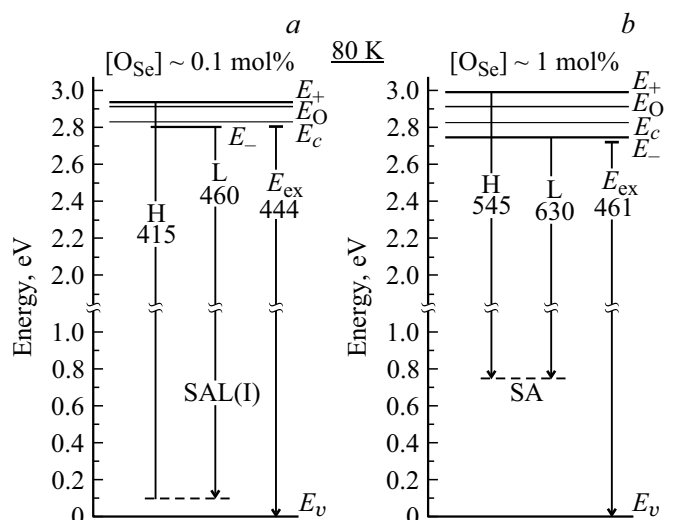


Рис. 1. Зонная модель ZnSe · O при 80К, определяющая полосы излучения для чистых (а) и сильно легированных (б) областей кристаллов. Расчеты проведены при концентрациях кислорода [O_s], равных 0.1 и 1.0 мол.% ($2 \cdot 10^{20}$ см⁻³).

рис. 1, *a, b*. Кристаллы обычно неоднородны в объеме. Прежде всего это относится к наличию дефектов упаковки (ДУ), которые возникают для компенсации напряжений и преимущественной сегрегации O_{Se} -центров. В кристаллах предельно легированные кислородом слои на ДУ находятся в равновесии с чистыми [8,9]. Поэтому мультислона построена с учетом разных концентраций $[O_{Se}]$.

Для „чистых“ слоев свечение при низких температурах представлено одной SAL-серией эквидистантных полос с основной линией 460 нм и ее LO повторениями [6,11]. Люминесценция реализуется с участием комплексов собственных точечных дефектов $\{Zn_i^{••}V_{zn}^{//}\}^{\times}$, которые определяют мелкие уровни, рекомбинации ~ 0.12 эВ при 80 К [6,13] (рис. 1, *a*)¹.

При избытке цинка и повышенной концентрации $[O_{Se}] \sim 1$ мол% [6,11] наблюдается SA-свечение (рис. 1, *b*). Это связано с включающим кислород комплексом собственных точечных дефектов — $\{O_{Se}Zn_i^{•}V_{zn}^{//}\}$, которые определяют глубокие уровни рекомбинации E_{SA} этих центров. Согласно зонной модели, две компоненты SA(L) SA(H) самоактивированного SA-свечения обусловлены излучением из двух подзон E_+ и E_- расщепленной на эти уровни зоны проводимости в присутствии изоэлектронной примеси O_{Se} [6,11].

Рассмотрим экспериментальные данные с привлечением зонной модели. Методика исследования оптических свойств ZnSe дана в работах [6,11] и в цитируемых источниках.

2. Экспериментальные результаты и их обсуждение

2.1. Спектры SA-свечения самоактивированного ZnSe · O

Поскольку образование SA-центров требует повышенной концентрации кислорода и избытка цинка, исследовано влияние на спектры катодолуминесценции ZnSe сильного легирования кислородом при ионной имплантации. Ионное легирование проведено в монокристаллы, выращенные из расплава при 300 К и энергии 300 кэВ до расчетной концентрации $[O] \sim 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ с последующим отжигом образцов [11].

Спектры микрокатодолуминесценции (МКЛ) ионно-легированных слоев, исследованных в растровом электронном микроскопе (РЭМ) при 100 К и интенсивности возбуждения $G = 5 \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$, приведены на рис. 2, *a*. Как видно из рисунка, при внедрении кислорода возникает обычное самоактивированное свечение ZnSe 600–635 нм и, кроме того, вторая полоса – 540–550 нм

¹ O_{Se} — кислород, растворенный в узлах решетки ZnSe. Зарядовые состояния дефектов 0, +, ++, --, — соответствуют обозначениям: ×, •, ●, //, / [9,10].

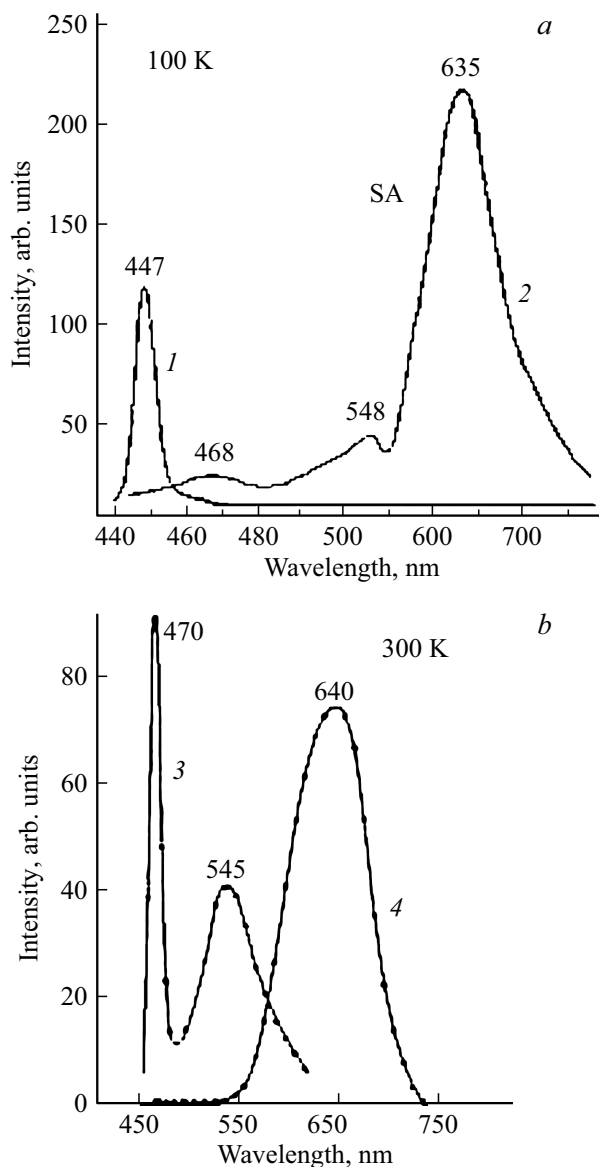


Рис. 2. Спектры МКЛ монокристалла ZnSe · O исходного (1) и участка ионно-легированного кислородом слоя (2) при 100 К и $G = 5 \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ (*a*), а также ИКЛ CVD ZnSe при 300 К и $G = 10^{26} - 10^{24} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ в момент импульса возбуждения (3) и через 2 мкс после импульса возбуждения (4). Глубина информационного слоя при измерении МКЛ ~ 0.5 мкм, для спектров ИКЛ до 200 мкм [14].

(кривая 2). Природа коротковолновой полосы ~ 540 нм была неясна, поэтому ее связывали с примесью Cu.²

Согласно зонной модели (рис. 1, *b*), расщепление зоны проводимости ZnSe в присутствии кислорода приводит к возникновению двух полос, связанных с переходами $E_- \rightarrow E_{SA}$ и $E_+ \rightarrow E_{SA}$. Это компоненты SA(L) и SA(H)

² При ионном легировании экситонная полоса исходного кристалла 447 нм размывается, а возникающий максимум 468 нм связан с проявлением $A_{ex}ZnO$. Содержание кислорода в исходной подложке $\sim 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, так как A_{ex} чистого ZnSe при 100 К соответствует ~ 445 нм.

самоактивированного SA-свечения ZnSe. Коротковолновая компонента усиливается с увеличением концентрации кислорода при приближении состава к точке максимальной интенсивности SA-свечения, когда уменьшается вероятность переходов $E_- \rightarrow E_{SA}$ с участием донорно-акцепторных пар между избыточным Zn_i и акцепторным уровнем SA-центра [7,9]. При съемке спектров импульсной катодолуминесценции (ИКЛ) полоса SA(H) выявляется как единственная (рис. 2, b, кривая 3), которая быстро загасает, уступая интенсивному свечению SA(L) 640 нм (рис. 2, b, кривая 4). С позиций теории ВАС это объясняется, так как самоактивированное свечение SA(H) обязано переходам с более высокого уровня E_+ , который быстрее опустошается, чем E_- . Рассмотренные особенности предполагают при обычных методах съемки преимущественное присутствие в спектрах полосы люминесценции SA(L). С увеличением плотности возбуждения до уровня насыщения центров рекомбинации SA-свечения обе компоненты самоактивированного излучения ZnSe · O выходят на насыщение.³

2.2. SA-свечение некоторых легированных монокристаллов ZnSe

Кристаллы ZnSe, были выращены из расплава с избытком цинка и содержали повышенное количество кислорода. Активирующие примеси (Te, Ga, Ca, Si), усиливающие SA люминесценцию ZnSe, вводились в процессе роста до концентраций $(5 \cdot 10^{-3} - 1 \cdot 10^{-2})\%$ [15]. По аналогии с данными работы [9] активация приводит к образования устойчивых комплексов с изоэлектронной примесью O_{Se} , т. е. к стабилизации кислорода в решетке ZnSe на ДУ.

Спектры фотолюминесценции всех образцов при 300 К приведены на рис. 3, a. Все спектры представлены одной широкой полосой в области 600 нм. Форма и спектральное положение этих SA(L) полос при введении всех приведенных выше активаторов сходны.

В спектрах ИКЛ тех же кристаллов также обнаруживается преимущественно полоса 600 нм при 300 К при регистрации спектра с тыльной поверхности исследуемого образца [14,15]. При измерении спектра ИКЛ под углом 45° наблюдаются две, сравнимые по интенсивности, полосы: широкая с максимумом ~ 600 нм и узкая 477 нм.

Рассмотрим более детально эти полосы на примере кристаллов ZnSe · Ga(O). Для них были измерены спектры фотовозбуждения свечения ~ 600 нм, которые приведены на рис. 3, b. Спектры возбуждения, как и фотолюминесценции, измерялись при температуре 300 К при $\lambda_{возб} = 460$ нм.

³ В экситонной области спектра фиксируется полоса 470 нм, спектральное положение которой определяется предельной $[O_{Se}]$ в слоях дефектов упаковки CVD ZnSe [11]. Спонтанное экситонное излучение 470 нм в спектрах КЛ слабое, а при высокой плотности возбуждения ИКЛ резко усиливается и переходит в режим вынужденного излучения.

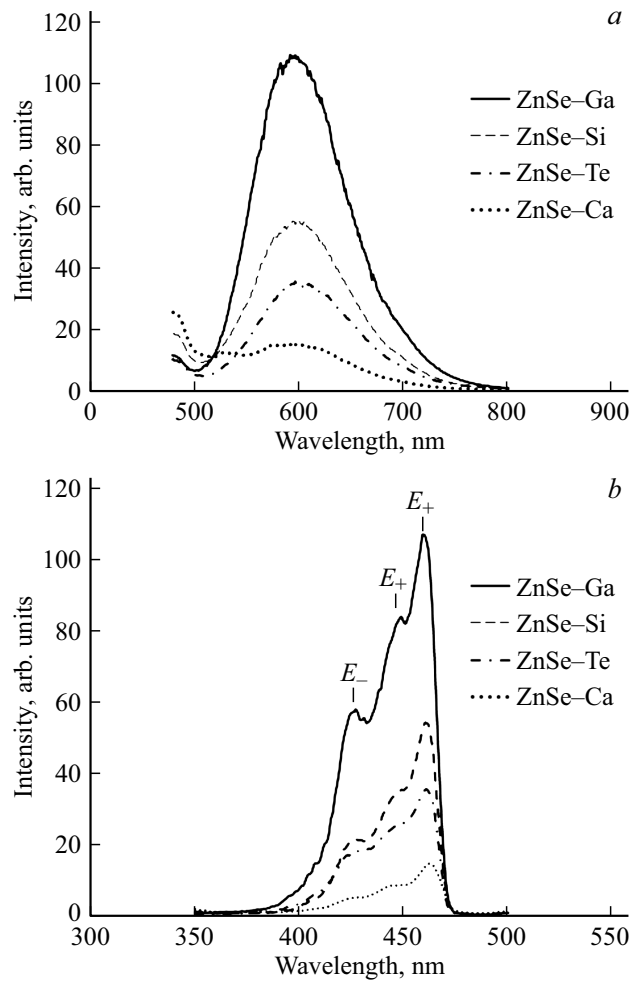


Рис. 3. Спектры фотолюминесценции кристаллов ZnSe · O с примесями (a) и фотовозбуждения полосы 600 нм ZnSe · Ga(O) при $\lambda_{exc} = 460$ нм (b). Сплошные кривые соответствуют ZnSe · Ga(O).

Основные максимумы спектра возбуждения полосы 600 нм кристалла ZnSe · Ga(O) определены как 2.937 эВ, 2.824 и 2.714 эВ (рис. 3, b). Эти данные позволяют представить сложный состав кристалла ZnSe · Ga(O) в рамках зонной модели рис. 4.

При сопоставлении со спектрами возбуждения зонная модель (рис. 4, b) определяет положение уровня $E_+ = 2.937$ эВ подзоны сильно легированных слоев ДУ кристалла. Положение дна этой подзоны $E_- = 2.601$ эВ выявляется в соответствии с теорией ВАС, описывающей смещение краев зон E_+ и E_- по отношению к E_C или E_O как линейное [11,12]. Концентрация растворенного кислорода $[O_{Se}]$, согласно положению этих уровней, $\sim 1.1 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ близка к пределу растворимости кислорода в ZnSe при температуре плавления [6,11]. Наблюдаемая в спектрах ИКЛ такого кристалла узкая полоса излучения 477 нм не является LO сателлитом A_{ex} 460 нм. Она соответствует 1-LO фоновому повтору полосы 470 нм — экситона, связанного на центрах Ga— O_{Se} в слоях дефектов упаковки (энергия связи ~ 50 мэВ).

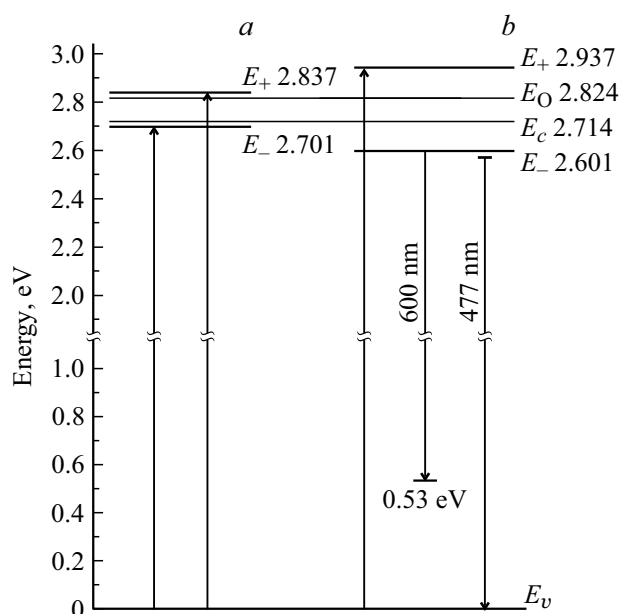


Рис. 4. Зонная модель $\text{ZnSe} \cdot \text{Ga}(\text{O})$ при 300 К, $E_c = 2.714$ эВ. Величина смещения подзон на 1 мол% $[\text{O}_{\text{Se}}]$ в ZnSe составляет 100 мэВ. По спектрам возбуждения концентрация растворенного кислорода ~ 1.1 мол% на ДУ (b) и $\sim 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ в „чистых“ слоях (a).

Левая часть диаграммы (рис. 1, a) представляет положения краев зон чистых слоев кристалла как $E_- = 2.701$ эВ и $E_+ = 2.837$ эВ. По этим данным, концентрация растворенного кислорода $[\text{O}_{\text{Se}}]$ в них на порядок меньше $\sim 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Что касается излучения 600 нм на глубоких центрах (рис. 1, d), то оно преимущественно для всей возбужденной системы определяется самым низким уровнем E_- на ДУ в исследуемом кристалле. Тип свечения при этом в кристаллах с избытком цинка зависит от преобладающих в основном кристалле дефектов и их комплексов, т.е. в случае кристалла $\text{ZnSe} \cdot \text{Ga}(\text{O})$ при избытке цинка и повышенной концентрации кислорода в выращенном из расплава селениде цинка — это SA-центры. Более полное исследование спектров ИКЛ проведено при уровнях возбуждения $10^{26} - 10^{27} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$.

2.3. Стимулированная катодолюминесценция кристалла $\text{ZnSe} \cdot \text{O}(\text{Ga})$

С увеличением уровня возбуждения $\geq 10^{25} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ в спектрах ИКЛ происходят насыщение интенсивности свечения SA полосы ~ 600 нм вследствие ограниченной концентрации центров свечения и перестройка экситонного спектра спонтанного излучения. При этом усиливается интенсивность полосы 477 нм — вынужденного излучения при высокой плотности возбуждения ИКЛ (рис. 5, кривая 1).

Легирование галлием предполагает образование комплексов $\text{Ga}-\text{O}_{\text{Se}}$ с преимущественной сегрегацией их

на ДУ. Предельная концентрация на ДУ комплексов O_{Se} с разными активаторами несколько различна [16]. Такие сильно легированные области в неоднородных кристаллах успешно выявляются в спектрах ИКЛ. Согласно теории ВАС, изменение положения уровня E_- определяется присутствием именно O_{Se} в составе слоев (рис. 4, b).

При увеличении интенсивности возбуждения наблюдается стимулированная люминесценция, которая проявляется резким увеличением интенсивности и уменьшением полуширины полосы спонтанной катодолюминесценции 477 нм от 54 до 22 мэВ (рис. 5, кривая 2).

При плотности возбуждения $\geq 10^{26} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ возникает вторая полоса вынужденного излучения 484 нм и

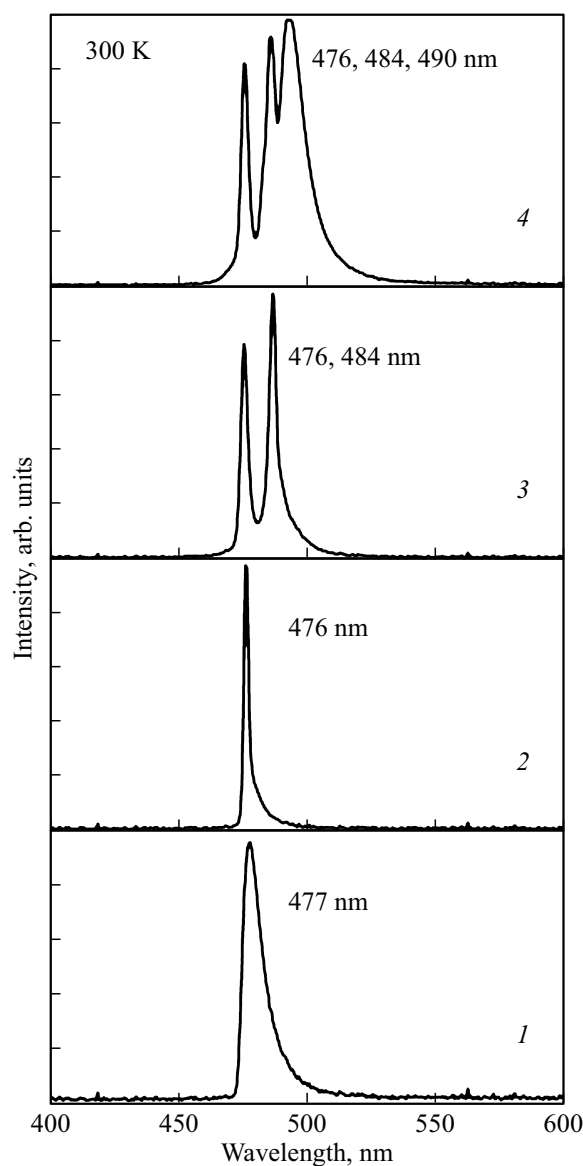


Рис. 5. Спектры ИКЛ кристаллов $\text{ZnSe} \cdot \text{O}(\text{Ga})$ с ростом плотности энергии электронного пучка. Вынужденное излучение при аннигиляции экситонов ВЕду-1ЛО (кривая 2), ВЕду-2ЛО и ВЕду-3ЛО при стимулированной аннигиляции экситонов (кривые 3, 4). Кривая 1 — спонтанная ИКЛ.

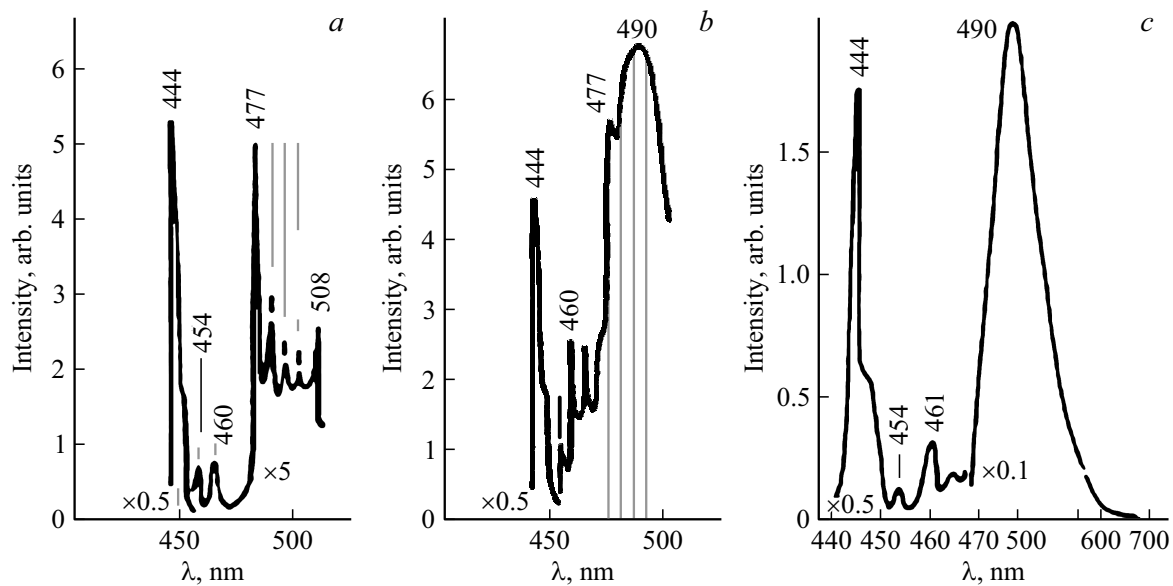


Рис. 6. Спектры КЛ при 80 К разных участков CVD конденсатов ZnSe·O: (a, b) — сильно легированных кислородом и селеном в процессе осаждения, (c) — типичный спектр большинства CVD конденсатов с фоновой примесью меди. Концентрации кислорода по данным анализов [O]: $\leq 10^{20}$ (a), $\sim 10^{20}$ (b), $\sim 10^{18}$ см⁻³ (c).

далее 490 нм в области второго и третьего повторов основной полосы 470 нм (рис. 5, кривые 3 и 4). Увеличение полуширины линии и сдвиг максимума в длинноволновую область спектра при плотностях возбуждения $10^{26} - 10^{27}$ см⁻³ · с⁻¹ объясняется взаимодействием между экситонами при их концентрации $> 10^{17}$ см⁻³. Вследствие перекрытия их волновых функций и возможного образования электронно-дырочной плазмы.

2.4. Низкотемпературное SAL-свечение ZnSe·O на дефектах упаковки

Обычное SAL-свечение ZnSe·O определяется одной серией полос с основной линией 460 нм и LO-фононными повторениями [10,13,17]. Схема его приведена на рис. 1, a как SAL(I). Для этой области составов ZnSe преобладающими дефектами являются комплексы (см. выше), которые не включают кислород и не взаимодействуют с ним. Однако они могут служить центрами захвата дырок и по данным работы [7,11] связаны с возникновением SAL-свечения ZnSe·O с пониженным содержанием кислорода [O_{Se}] ≈ 0.1 мол%.

Вся специфика спектров таких кристаллов с ДУ, описанная ранее для ZnS·O [7,8], сохраняется и для ZnSe·O. Однако, если для ZnS·O выделяется широкая область гомогенности с избытком Zn, где спектры на ДУ представлены SA-свечением, а область с большим избытком серы не столь широкая и определяется в основном экситонными полосами, то для ZnSe·O достижима характерная область составов с большим избытком Se, что и определяет новые особенности спектров SAL.

В работах [7,13] исследованы спектры излучения CVD ZnSe·O, выращенного с введением значительного

избытка селена при сильном легировании кислородом в газовой фазе до 4.3%. Для условий роста исследуемых CVD конденсатов расчет равновесия собственных точечных дефектов [17] показал, что диапазон составов образцов смещен от „области стехиометрии“ к *p*-типу ZnSe. Введение кислорода при избытке Se приводит к существенному изменению спектров краевого SAL-свечения (рис. 6). Возникает и превалирует в краевой области спектра при 80 К „аномальный“ набор узких эквидистантных полос с основной линией 477 нм и LO-фононными повторениями (рис. 6, a).

Фонные LO-повторения линии 477 нм (при $T = 80$ К) усиливаются с увеличением количества кислорода. При этом максимум суммарной полосы смещается ко второму или третьему LO-повторению основной линии 477 нм, формируя широкую полосу 490 нм. При избытке кислорода свечение с максимумом ~ 490 нм доминирует во всей области спектра (рис. 6, b).

Исследование спектров фотовозбуждения люминесценции при 80 К показало, что полосы 477 и 490 нм относятся к одному и тому же центру и характеризуются узким максимумом возбуждения 455 нм (2.72 эВ). Спектры поглощения обнаруживают дополнительный край абсорбции ~ 448 нм. Эти данные свидетельствуют о значительной концентрации кислорода [O_{Se}] в кристаллах при избытке селена. Определим это низкотемпературное свечение 477(490) нм самоактивированного ZnSe·O как SAL(II).

В общих чертах свойства SAL(II)-свечения значительно не отличаются от обычной краевой люминесценции ZnSe SAL(I) с основной линией 460 нм, которая также присутствует на всех спектрах рис. 6.

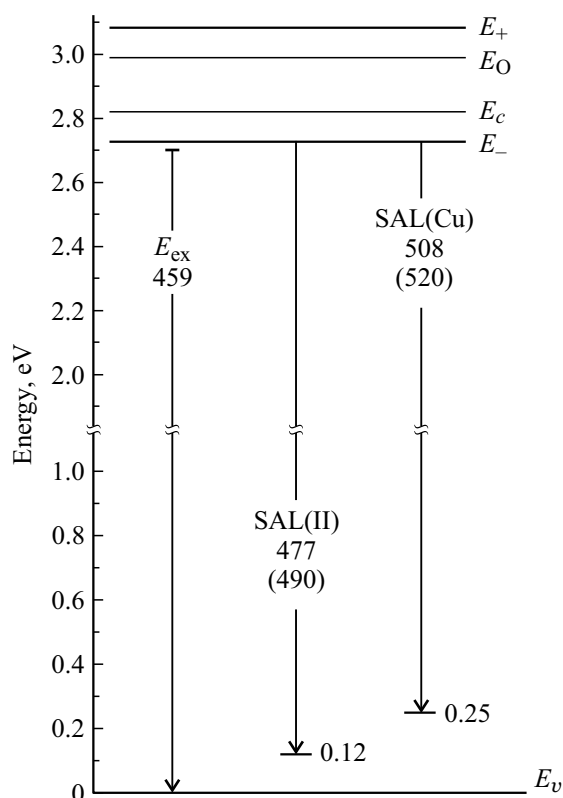


Рис. 7. Зонная модель при 80K на дефектах упаковки в ZnSe·Se (O_{Se}) с $[O_S] \approx 0.7$ мол%, определяющая свечение SAL(II) и SAL(Cu). Указано положение мелких уровней рекомбинации $E_{SAL} = 0.12$ эВ и $E_{SAL(Cu)} = 0.25$ эВ.

В работе [13] показано, что свечение SAL(II) обязано слоям ДУ с резко повышенной концентрацией $[O_{Se}]$. Для них спектры возбуждения выявляют понижение уровня дна зоны проводимости E_- , которое соответствует концентрации растворенного кислорода ~ 0.7 мол% (рис. 7). Как установлено в работе [13], растворению кислорода при значительном избытке селена способствует фоновая примесь меди. Медь в междоузлиях как донорный дефект Cu_i^\bullet обеспечивает образование с кислородом O_{Se} устойчивого комплекса $\{Cu_i^\bullet O_{Se}^*\}$ в силу объемной и зарядовой компенсации. Эти комплексы концентрируются в слоях ДУ. Изменение структуры зон, согласно теории ВАС, связано с увеличением концентрации изоэлектронных центров $[O_{Se}]$, которые и концентрируются на ДУ в составе $\{Cu_i^\bullet O_{Se}^*\}$ комплексов.

На присутствие меди в исследуемых конденсатах указывает узкая полоса 508 нм в спектрах КЛ (рис. 6, а). Фононные повторения полосы 508 нм определяют сопутствующую ей широкую полосу 520 нм, описанную детально в работах [17,18], которая является неотъемлемой составляющей спектров ZnSe Cu(O). Полоса эта аналогична фононной составляющей линии 477 нм с максимумом 490 нм, представленной на рис. 6 для CVD конденсатов ZnSe(O) с фоновым содержанием меди.

В CVD ZnSe с ДУ „чистые“ слои с концентрацией $[O_{Se}] \sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$ определяют обычное свечение SAL(1) с основной линией 460 нм, поскольку ширина запрещенной зоны для них больше (рис. 1, а). Эти полосы также присутствуют во всех спектрах (рис. 6).

3. Заключение

1. Подтверждено, что кислород как ИЭП может войти в решетку ZnSe в составе устойчивых комплексов, при этом не только с собственными дефектами ZnSe, но и с примесями, способными компенсировать упругие напряжения, вносимые изоэлектронными центрами O_{Se} с образованием устойчивых комплексов в решетке ZnSe·O.

2. Уточнена в соответствии с представленными зонными моделями на основе теории ВАС структура спектров двух видов краевого свечения CVD ZnSe SAL(I) и SAL(II). Раскрыта их природа, связанная с различием состава кристаллов ZnSe·Se(O) в чистых слоях и в слоях дефектов упаковки.

3. Выявлена структура ИКЛ спектров вынужденного излучения кристаллов ZnSe·O (Ga), сильно легированных кислородом при росте. Показано, что лазерный эффект достигается на длине волны 476 нм — первом фононном повторении полосы ВЕду 470 нм, соответствующей предельной концентрации O_{Se} центров на ДУ.

4. Опробован подход к описанию оптических свойств кристаллов ZnSe·O с учетом электронной, кристаллической и собственно-дефектной структуры. Полученные данные позволили выявить природу ряда явлений в хорошем согласии с экспериментом.

5. Использование этой модели для кристалла ZnSe·O(Ga) выявило детали спектров излучения, поглощения и возбуждения люминесценции, а также вынужденного свечения этих образцов. Выявлена информативность спектров ИКЛ в подобных исследованиях для получения информации о реальной структуре кристаллов и возможности использования их для создания полупроводниковых лазеров.

Финансирование работы

Работа поддержана программой развития ТПУ.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] W. Walukiewicz, W. Shan, K.M. Yu, M.J. Seong, H. Alawadhi, A.K. Ramdas. Phys. Rev. Lett., **85** (7), 1552 (2000).
- [2] Jingbo Li, Su-Huai Wei. Phys. Rev. B, **73**, 041201 (2006).
- [3] W. Shan, W. Walukiewicz, K.M. Yu, E.E. Haller, Y. Nabetani. Appl. Phys. Lett., **83** (2), 299 (2003).

- [4] M.A. Mayer, Kin Man Yu, E.E. Haller, W. Walukiewicz. *J. Appl. Phys.*, **111** (11), 113 (2012).
- [5] K.M. Yu, W. Walukiewicz, J. Wu, W. Shan. *Phys. Rev. Lett.*, **91** (24), 246403 (2003).
- [6] Н.К. Морозова, Д.А. Мидерос, Н.Д. Данилевич. (LAP, Saarbrücken Germany, 2013) с. 205.
- [7] Н.К. Морозова. *Sciences of Europe*, **1** (52), 28 (2020).
- [8] Н.К. Морозова. *Sciences of Europe*, **1** (56), 21 (2020).
- [9] Н.К. Морозова. *Sciences of Europe*, **1** (59), 57 (2020).
- [10] М. Авен, Д.С. Пренер. *Физика и химия соединений A²B⁶* (М., Мир, 1970) [пер. с англ. / под ред. С.А. Медведева].
- [11] Д.А. Мидерос. *Оптические свойства соединений A²B⁶ с изоэлектронной примесью кислорода с позиций теории антипересекающихся зон*. Канд. дис. (М., МЭИ, 2008).
- [12] J.D. Perkins, A. Mascarenhas, J.F. Geisz, D.J. Friedman. *Phys. Rev. Lett.*, **82** (16), 3312 (1999).
- [13] N.K. Morozova, I.N. Miroshnikova. *Semiconductors*, **54** (1), 102 (2020).
- [14] В.И. Олешко. *Пороговые процессы в твердых телах при взаимодействии с высокоэнергетическими электронными пучками*. Докт. дис. (Томск, ТПУ, 2009).
- [15] В.И. Олешко, В.Ф. Тарасенко, М.В. Ерофеев, С.С. Вильчинская. *Изв. вузов. Физика*. **63** (2), 117 (2020).
- [16] Н.К. Морозова. *Sciences of Europe*, **2** (54), 28 (2020).
- [17] В.В. Блинов. *Оптика центров, связанных с присутствием кислорода и меди в соединениях A²B⁶ (на примере ZnSe)*. Канд. дис. (М., МЭИ, 2003).
- [18] N.K. Morozova, D.A. Mideros, E.M. Gavrishchuk, V.G. Galshtan. *Semiconductors*, **42** (2), 131 (2008).

Редактор А.Н. Смирнов

Luminescence spectra peculiarities of ZnSe·O crystals in the band anticrossing theory context

V.I. Oleshko¹, S.S. Vilchinskaya¹, N.K. Morozova²

¹ Tomsk Polytechnical University,
634034 Tomsk, Russia

² National Research University
„Moscow Power Engineering Institute“,
111250 Moscow, Russia

Abstract Investigations are presented in the light of the band-anticrossing theory (BAC) of the influence on the emission spectra of the structural features self-activated zinc selenide and crystals with activators. The disunity of numerous literature data makes it difficult to understand this question. Theory-BAC requires taking into account the influence of isoelectronic admixture of oxygen, which is invariably present in the ZnSe lattice, on the zone structure. Improvement of methods for calculating the equilibrium of intrinsic point defects (STD) intends use of these data in the analysis of the optical properties of A^{II}B^{-V}, in particular zinc selenide. The aim of the work was to reveal the features and nature of individual luminescence bands that are widely used to obtain information on the quality of crystals. For this, the spectra of photo, cathode, pulsed luminescence, excitation, and stimulated emission of ZnSe are investigated in a single context with the use of these features. Stable states of crystals with stacking faults were revealed upon introduction of activators or background copper impurity. The data are of interest for the diagnostics of crystals that are useful for creating lasers.