

# Поглощение, спектры возбуждения люминесценции и инфракрасного пропускания кристаллов $\text{ZnS(O)}-\text{ZnSe(O)}$ в модели непересекающихся зон

© Н.К. Морозова<sup>¶</sup>, Д.А. Мидерос, Н.Д. Данилевич

Московский энергетический институт (Технический университет),  
111250 Москва, Россия

(Получена 28 апреля 2008 г. Принята к печати 28 апреля 2008 г.)

Приведены результаты оптических исследований спектров поглощения, возбуждения люминесценции и инфракрасного пропускания для системы твердых растворов с резким несоответствием свойств анионов  $\text{ZnS(O)}-\text{ZnSe(O)}$ . Показано, что применение теории непересекающихся зон дает глобальное объяснение особенностей их оптических свойств, которые ранее не получали интерпретации. В работе представлена зонная модель переходов с поглощением в сложной мультизоне, инициированной кислородом. Дается интерпретация деталей спектров поглощения, возбуждения люминесценции, свидетельствующих о распределении и формах присутствия кислорода в кристаллах. Рассмотрено влияние кислорода на полосу пропускания  $\text{ZnS}-\text{ZnSe}$  в ближнем инфракрасном диапазоне. Дан новый подход к интерпретации инфракрасных полос поглощения, обусловленных присутствием растворенного кислорода. Предложены схемы расчета, позволяющие определить спектральное положение полос в зависимости от концентрации растворенного кислорода.

PACS: 71.23.An, 71.55.Gs, 78.40.Fy, 78.55.Et, 78.66.Hf

## 1. Введение

Введение изоэлектронной примеси (ИЭП), сильно локально искажающей кристаллическую решетку, позволяет получить на основе полупроводников III–V, II–VI фактически новый класс материалов с мультизапрещенными зонами [1–6]. Это твердые растворы с резким несоответствием свойств компонентов (highly mismatched alloys, HMAs) [1–3]. Только  $\sim 1\%$  ИЭП замещения приводит к образованию новой результирующей зоны, включающей две прямые запрещенные подзоны. Эта замечательная модификация зонной структуры уже описана теорией непересекающихся зон [1–4]. Энергетический зазор между подзонами  $E_+$  и  $E_-$  зоны проводимости зависит от концентрации примеси, но он существенно меньше, чем расстояние до вышележащих зон. Оптические переходы с поглощением возможны как из состояний валентной зоны ( $E_V$ ) на уровни подзон  $E_+$  и  $E_-$  [3,4], так и между подзонами  $E_+$  и  $E_-$  [1]. Коэффициент поглощения в области межзонных переходов сравним с фундаментальным поглощением чистого кристалла. В настоящее время имеется обширный экспериментальный материал, подтверждающий это (см. в частности [1–4,7–13]).

Объяснение роли кислорода в системе  $\text{ZnS(O)}-\text{ZnSe(O)}$  типа HMAs в настоящее время базируется на ряде альтернативных представлений. Анализ наших исследований показал, что использование сравнительно молодой теории непересекающихся зон (band anticrossing model, BAC) дает глобальное объяснение особенностей оптических свойств  $\text{ZnS(O)}-\text{ZnSe(O)}$ . Эти результаты частично описаны в ряде предшествующих

наших работ [7–14]. Определена, в частности, зонная структура, существенно усложненная в присутствии изоэлектронной примеси кислорода в  $\text{ZnS}-\text{ZnSe}$ .

В данном сообщении рассматриваются особенности спектров  $\text{ZnS(O)}-\text{ZnSe(O)}$ , связанные с поглощением. На рис. 1 по результатам [7–13] представлена зонная модель для переходов с поглощением, на основании которой рассмотрены особенности исследованных нами спектров поглощения и отражения, пропускания, возбуждения люминесценции кристаллов  $\text{ZnS(O)}$  и  $\text{ZnSe(O)}$ .

Наблюдаемые полосы поглощения при растворении кислорода в  $\text{ZnS(O)}$  и  $\text{ZnSe(O)}$  можно разделить в зависимости от того, в какой спектральной области они проявляются.

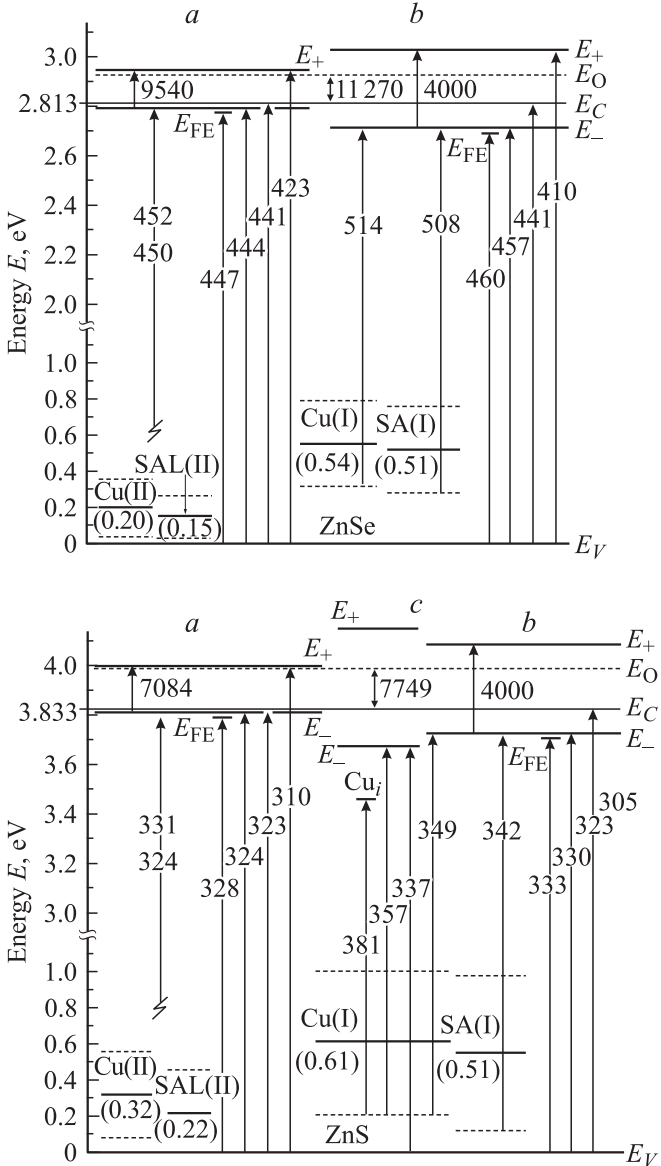
## 2. Влияние кислорода на поглощение в области края фундаментального поглощения

Край фундаментального поглощения, смещающийся в длинноволновую сторону при растворении кислорода, прежде всего определяется межзонными переходами  $E_V \rightarrow E_-$ . Низкоэнергетический сдвиг этого края фундаментального поглощения при увеличении концентрации кислорода описан для  $\text{ZnS}$  в работе [14]. Показано, что смещение, которое составляет 75 мэВ на 1 мол% для сфалерита, как и смещение 100 мэВ на 1 мол% для  $\text{ZnSe}$  [7], получает объяснение с позиций теории непересекающихся зон.

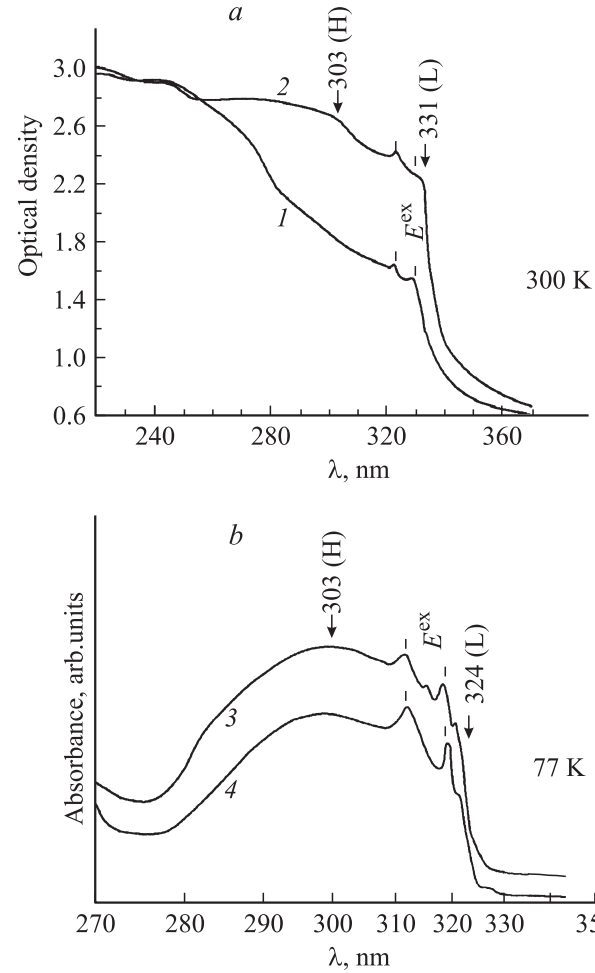
На рис. 2 приведены спектры поглощения поликристаллических пленок  $\text{ZnS(O)}$ . При температуре  $T = 300$  К по сравнению с исходной пленкой (кривая 1)

<sup>¶</sup> E-mail: MorozovaNK@mpei.ru

увеличение концентрации растворенного кислорода после термообработки приводит к резкому росту поглощения в области длины волны  $\lambda \approx 300$  нм за счет переходов  $E_V \rightarrow E_+$ , или H, и к длинноволновому сдвигу края поглощения, где возникает полоса при 331–332 нм за счет  $E_V \rightarrow E_-$ , или L (кривая 2). Аналогичное изменение спектра регистрируется при 77 К (кривые 3, 4) фотографической методикой [15], которая выявляет не смещающийся с температурой [16] максимум в области  $\lambda \approx 300$  нм и низкоэнергетический сдвиг края. В слоях, напыленных при избытке цинка, поглощение в



**Рис. 1.** Расчет оптических переходов с поглощением при 80 К в зонной модели для кристаллов ZnSe(O), ZnSe-Cu(O), а также ZnS(O), ZnS-Cu(O). Концентрации растворенного кислорода: *a* — 0.2 и 0.1 мол% для ZnSe и ZnS соответственно; *b* — 1 мол%; *c* — 2 мол% для скоплений кислорода на центрах зеленого излучения ZnS-Cu [7,8]. Указаны длины волн переходов в нм, энергии уровней (в скобках) в эВ.



**Рис. 2.** Спектры поглощения поликристаллических пленок ZnS, напыленных на кварце (1, 3) и прошедших ампульную термообработку в парах Zn для растворения кислорода (2, 4). *a* — спектры 1, 2 измерены на спектрофотометре Hitachi,  $T = 300$  К; *b* — микрофотограммы спектров 3, 4 сняты на спектрографе ИСП-28,  $T = 77$  К. Толщина пленок  $d \approx 0.3$  мкм. Указаны длины волн переходов H и L в нм.

области  $\lambda = 300\text{--}330$  нм иногда столь резко возрастает, что при 77 К выделяется в самостоятельную полосу. Последнее позволило предположить в ранних работах, что полоса должна иметь примесную природу, а ширина запрещенной зоны ZnS не постоянна [15].

С позиций теории непересекающихся зон мы наблюдаем на рис. 2 усиление с увеличением концентрации растворенного кислорода  $[O_S]$  поглощения, обусловленного переходами  $E_V \rightarrow E_{+,-}$ , возникновение которых возможно только в результате изменения зонной структуры, инициированной кислородом. Поскольку величина расщепления зоны проводимости зависит от  $[O_S]$ , спектральное положение соответствующих полос поглощения может меняться. Учитывая линейное изменение ширины запрещенной зоны от концентрации растворенного кислорода [7,8,14], можно рассчитать положения полос поглощения, возникающих при переходах из  $E_V$

Коэффициенты соотношений (1)–(3)

Подзона	T, К	ZnS — сфалерит		ZnS — вюрцит		ZnSe — сфалерит	
		A, эВ/мол%	C, эВ	A, эВ/мол%	C, эВ	A, эВ/мол%	C, эВ
$E_-$	80	-0.075	3.833	-0.1	3.901	-0.1	2.813
	300		3.728		3.780		2.715
$E_+$	80,	+0.075	3.993	+0.1	4.061	+0.1	2.923
	300						

Примечание. Учтено отсутствие температурного смещения сильно локализованного уровня кислорода  $E_O$  (рис. 1).

в подзоны  $E_-$ ,  $E_+$ . Приведенные далее аналитические зависимости и данные таблицы определяют при 80 и 300 К взаимное расположение полос, связанных с  $E_-$  и  $E_+$ , в спектрах поглощения ZnS и ZnSe кубической модификации, а также вюрцита ZnS(w):

$$E_{-,+} = A[O_{S(Se)}] + C, \quad (1)$$

$$E_+ = C_+ + C_- - E_-, \quad (2)$$

$$\Delta = E_+ - E_-. \quad (3)$$

Здесь A, C ( $C_+$ ,  $C_-$ ) — коэффициенты,  $\Delta$  — расщепление зоны проводимости;  $[O_S]$ ,  $[O_{Se}]$  — концентрации растворенного кислорода в ZnS, ZnSe соответственно.

Расчет величины коэффициента поглощения в области основных переходов  $E_V \rightarrow E_+$  и  $E_V \rightarrow E_-$  показывает, что даже при учете отражения для разных образцов возможен разброс в пределах порядка. Аналогичные сведения имеются и в литературе [3,4,17,18]. Разброс данных отражает неравномерное распределение кислорода в кристаллах и в частности наличие в объеме участков, чистых от кислорода. Факт неоднородного распределения кислорода обсуждался нами ранее [7,8]. Подтверждением этого является также присутствие во многих случаях наряду с краем „дополнительного поглощения ( $E_-$ )“ экситонных полос, почти не смещенных в длинноволновую сторону по сравнению с чистым кристаллом.<sup>1</sup>

Согласно [17,18], увеличение концентрации ИЭП, хотя и дает смещение края фундаментального поглощения, но величина поглощения остается постоянной,  $\sim 6 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$ . Действительно, число состояний в зоне (подзонах) постоянно. Однако в неоднородных кристаллах усиление поглощения с ростом концентрации ИЭП может быть следствием увеличения числа кислородсодержащих скоплений в объеме. Помимо этого, фундаментальное поглощение чистых участков накладывается на область поглощения  $E_V \rightarrow E_{+,-}$ . Это может увеличивать величину поглощения преимущественно в области коротковолновой полосы  $E_V \rightarrow E_+$ , что отмечалось в ряде работ [1,3,4], где величины коэффициентов поглощения в области коротковолновой полосы (H) ближе к величине  $10^5 \text{ см}^{-1}$ , а в области длинноволновой полосы (L)  $\sim 5 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$ .

<sup>1</sup> На рис. 2 отмечены экситонные переходы  $E^{ex}$  ( $E_{FE}$  на рис. 1). Для исследуемых образцов они соответствуют (A+B)- и C-экситонам гексагональной пленки [15].

### 3. Спектры возбуждения люминесценции

Полосы поглощения, соответствующие основным переходам  $E_V \rightarrow E_+$  и  $E_V \rightarrow E_-$ , проявляются как селективные при исследовании низкотемпературных спектров фотовозбуждения люминесценции. Рассмотрим спектры возбуждения люминесценции на примере ZnS. На рис. 3 приведены спектры фотовозбуждения люминесценции (ФВЛ) порошков ZnS(O), отожженных для увеличения количества растворенного кислорода при различных давлениях паров Zn [14].

В спектрах ФВЛ самоактивированного свечения SA, возникающего при переходах из  $E_-$ -подзоны (L-компонента SA-свечения при 430 нм), преобладает интенсивная полоса при 331–335 нм (рис. 3), что соответ-

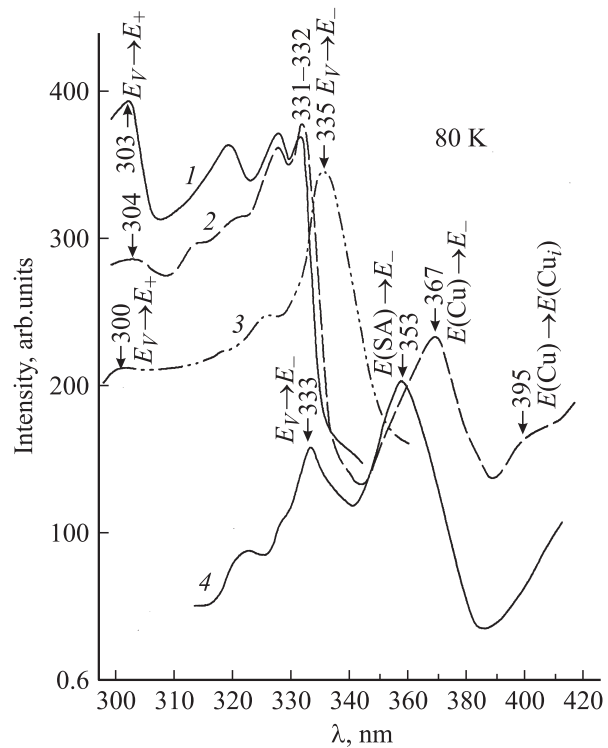


Рис. 3. Спектры возбуждения полос люминесценции порошков ZnS(O): 1, 4 — 390 нм, SA (H); 3 — 430 нм, SA (L); 2 — 520 нм, зеленое свечение ZnS-Cu(O). Указаны длины волн особенностей спектров в нм.

ствует переходам  $E_V \rightarrow E_-$ . Спектральное положение этой полосы ФВЛ зависит от  $[O_S]$  и сопоставимо с типичным сдвигом края  $E_-$  с  $[O_S]$  в спектрах поглощения и отражения при  $\lambda \approx 330\text{--}335$  нм. Смещение их отражает эффект зависимости ширины запрещенной зоны от концентрации ИЭП [2,3,16]. Такая полоса ФВЛ, приведенная на рис. 3, смещается при изменении концентрации растворенного кислорода в образцах от 1.3 мол% ( $\lambda = 331\text{--}332$  нм) до 1.5–1.8 мол% ( $\lambda = 333\text{--}335$  нм).

Для образцов с недостатком Zn усиливается Н-компонента SA-свечения при 390 нм. В спектре возбуждения ее максимум приходится на 331–332 нм, что соответствует меньшему содержанию кислорода (см. выше).

Кроме того, в возбуждении L- и Н-компонент SA-свечения присутствует высокоэнергетический максимум ФВЛ при 300–304 нм, сопоставимый с переходами  $E_V \rightarrow E_+$ . Он более интенсивный при возбуждении Н-компоненты (рис. 3, кривая 1). В области 320–330 нм в спектре ФВЛ регистрируются также слабые минимумы, обусловленные поглощением экситонными состояниями.

При больших концентрациях растворенного кислорода и избытке Zn в возбуждении L- и Н-компонент SA-свечения проявляется также более длинноволновая полоса при  $\sim 353$  нм, как, например, на кривой 4 рис. 3. Сопоставление со схемой рис. 1 показывает, что полоса ФВЛ при  $\sim 353$  нм, скорее всего, обязана переходам электронов с уровня  $E(SA)$  в подзону проводимости  $E_-$ . Эти факты указывают на высокую вероятность заполнения уровней  $E_+$  через  $E_-$ .

Следует отметить, что в спектрах отражения образцов с повышенной концентрацией растворенного кислорода также наблюдаются эти эффекты: два края „дополнительного поглощения“ — первый, при  $\sim 333$  нм, связанный с  $E_-$ , и второй, существенно более длинноволновый и слабый, при  $\sim 350\text{--}353$  нм, который в поглощении может полностью перекрывать коротковолновый. Оба края соответствуют полосам ФВЛ (рис. 3, кривая 4).

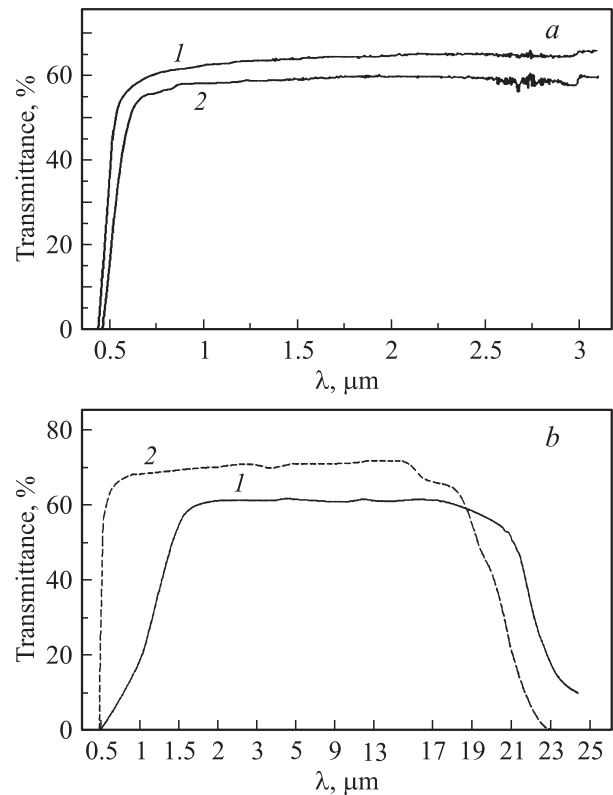
Спектр возбуждения „зеленой“ полосы люминесценции при  $\sim 520$  нм, возникающей в ZnS(O) в присутствии фоновой примеси меди, более сложный. Прежде всего наблюдаются интенсивные полосы ФВЛ, соответствующие переходам  $E_V \rightarrow E_{-,+}$ , таким же, как в матрице (рис. 3, кривая 2). Кроме того, всегда обнаруживаются дополнительно две значительно более длинноволновые полосы ФВЛ при  $\sim 367$  и  $\sim 395$  нм. Ранее интерпретация этих полос вызвала затруднения. Согласно модели рис. 1, *b*, длинноволновые полосы определяются переходами в кислородных скоплениях  $E(Cu(I)) \rightarrow E_-$  и  $E(Cu(I)) \rightarrow E(Cu_i)$  соответственно. Спектры ФВЛ зеленого свечения ZnS-Cu, таким образом, подтверждают схему, предложенную и описанную в [8], которая отражена в поглощении на рис. 1, *c*. Согласно ей, спектральное положение полосы возбуждения 367 нм и соответствующий ей край дополнительного поглощения, связанный с  $E_-$ , при  $\sim 350$  нм определяют концентрацию растворенного кислорода в скоплениях:  $\sim 3$  мол%.

Через уровни медных центров может осуществляться также возбуждение L-компоненты как SA-, так и SAL-свечения. Последнее, как и SA-свечение, возбуждается в основном с участием подзоны  $E_-$ .

#### 4. Поглощение в полосе прозрачности ZnS и ZnSe

Полоса прозрачности чистых материалов, в частности II–VI, ограничена с коротковолновой стороны фундаментальным поглощением, с длинноволновой — многофонным спектром решеточных колебаний, чаще всего 2LO-компонентами. Для сфалерита ZnS и ZnSe это диапазоны 0.33–(14.6–15.2) и 0.46–(20.2–22.4) мкм соответственно. При наличии кислорода спектры пропускания обнаруживают не только сдвиг коротковолнового края фундаментального поглощения, но и общее уменьшение прозрачности в полосе пропускания. Последнее может определяться рассеянием на кислородсодержащих включениях. На рис. 4 показано влияние кислорода в разных возможных формах его присутствия на пропускание в полосе прозрачности ZnSe [19,20].

Видно, что для реальных образцов ZnSe пропускание в среднем инфракрасном (ИК) диапазоне заметно ниже

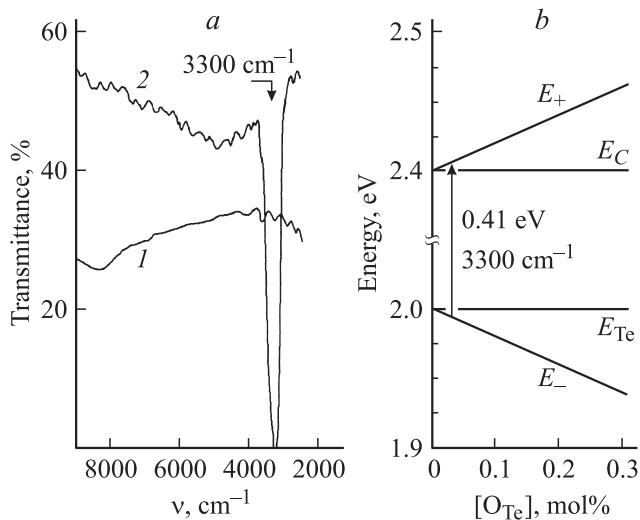


**Рис. 4.** Спектры пропускания ZnSe при 300 К: *a* — CVD-ZnSe с полной концентрацией кислорода  $10^{18}\text{--}10^{19}$  и  $2 \cdot 10^{20}$  см $^{-3}$  (2); *b* — конденсат ZnSe, полученный перекристаллизацией через газовую фазу с избытком Zn (1), и теоретическая полоса пропускания ZnSe (2).

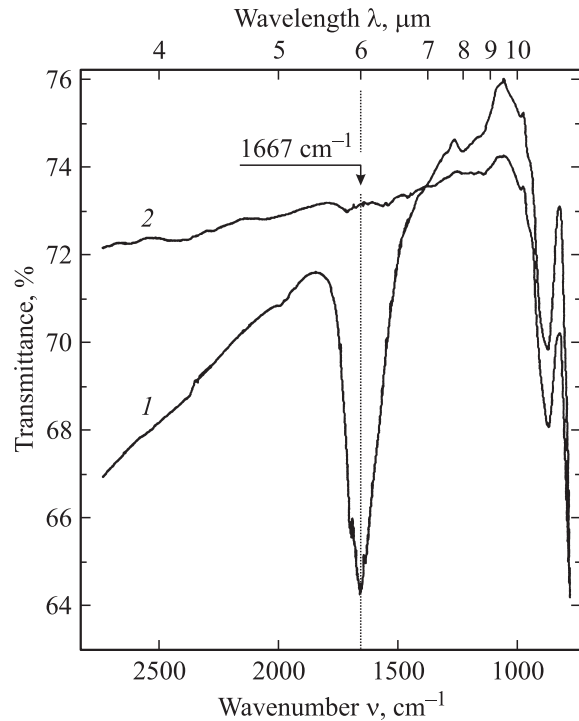
теоретического. Очистка образца от кислорода при газостатировании за счет коалесценции сдвигает край фундаментального поглощения в коротковолновую сторону почти до „чистого“ ZnSe и увеличивает прозрачность в полосе пропускания [20].

Особый интерес представляет область ИК спектров, где, согласно модели непересекающихся зон, возможно обнаружить селективные полосы поглощения, связанные растворенному кислороду благодаря переходам между подзонами зоны проводимости ( $E_- \rightarrow E_+$ , см. рис. 1). Для примера на рис. 5 представлен спектр пропускания монокристаллического скола ZnTe(O) [21]. Как видно, после отжига в парах цинка появляется мощная полоса поглощения при 0.41 эВ ( $3300 \text{ см}^{-1}$ ), которую авторы связывают с кислородом. Уровень кислорода расположен примерно на 0.4 эВ ниже зоны проводимости  $E_C$  чистого ZnTe [22]. Очевидно, что наблюдаемая полоса поглощения соответствует переходам электронов  $E_- \rightarrow E_+$  при концентрации кислорода  $[\text{O}_{\text{Te}}] \sim 0.04 \text{ мол\%}$  ( $1.1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ).

Нами исследованы спектры пропускания CVD-конденсатов ZnS и ZnSe (конденсатов, полученных методом химического газофазного осаждения). Измерения проводились по методике, описанной в [19,20]. На рис. 6 (кривая 1) приведен спектр ИК пропускания для исходного образца CVD-ZnS. Как видно, наблюдается интенсивная полоса поглощения при 6 мкм. Для переходов  $E_- \rightarrow E_+$  это соответствует расщеплению зоны проводимости  $\sim 206 \text{ мэВ}$ . В образцах сфалерита такая величина расщепления соответствует  $\sim 0.3 \text{ мол\%}$  кислорода. Согласно спектральному смещению экситонных полос в спектрах катодолуминесценции (КЛ) ( $\sim 20 \text{ мэВ}$ ), концентрация растворенного кислорода в образцах действительно  $\sim 0.3 \text{ мол\%}$ . Присутствие селективной полосы в области 6 мкм в спектре пропускания свидетельствует



**Рис. 5.** Спектры пропускания поликристаллического образца ZnTe(O) при 80 К [20] (а) до (1) и после отжига в парах Zn (2) и схема расщепления зоны проводимости ZnTe(O) по мере увеличения концентрации кислорода  $[\text{O}_{\text{Te}}]$  (b).



**Рис. 6.** Спектры пропускания при 300 К образцов CVD-ZnS: 1 — исходный; 2 — газостатированный при 1500 атм и  $980^\circ\text{C}$ . Толщины образцов  $\sim 3 \text{ мм}$ .

об однородном составе исходных образцов CVD-ZnS, легированных кислородом при росте из газовой фазы.

После перекристаллизации в процессе газостатирования (рис. 6, кривая 2) селективная полоса поглощения исчезает. В работах [7,8,19,23] показано, что газостатирование при высокой температуре,  $> 1000^\circ\text{C}$ , сопровождается перекристаллизацией, коалесценцией с образованием участков кристаллов с различными концентрациями кислорода. Спектральное положение полосы поглощения может быть рассчитано в зависимости от концентрации растворенного кислорода — см. (3).

Для кристаллов ZnSe в работах [19,20] растворенному кислороду сопоставлена полоса поглощения при  $\sim 10 \text{ мкм}$ . Для переходов  $E_- \rightarrow E_+$  в ZnSe это соответствует расщеплению 130 мэВ, большему, чем зазор  $E_C - E_V = 14 \text{ мэВ}$ . Согласно спектральному смещению экситонных полос ( $\sim 10 \text{ мэВ}$ ), концентрация растворенного кислорода в исследованных образцах  $\sim 0.03 \text{ мол\%}$  ( $\sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ), что согласуется с величиной расщепления и подтверждается результатами анализов на кислород.

## 5. Заключение

На основании изложенного можно сформулировать основные результаты работы.

Представлена схема, определяющая основные компоненты спектра поглощения в системе твердых растворов ZnS(O)–ZnSe(O).

Показано, что при введении кислорода усиливается поглощение до уровня фундаментального  $5 \cdot 10^4 - 10^5 \text{ см}^{-1}$ , которое в области  $\sim 300 - 340 \text{ нм}$  объяснено переходами  $E_V \rightarrow E_{-,+}$ .

Рассмотрены отдельные переходы с поглощением, которые проявляются в спектрах возбуждения самоактивированного свечения и оказываются связанными в эффектами, инициированными кислородом. Уточнены возможные типы переходов.

Показано, что присутствие кислорода уменьшает пропускание в полосе прозрачности, по-видимому, за счет рассеяния скоплениями при неоднородном распределении кислорода в кристаллах.

Выделены селективные полосы поглощения в ближнем ИК диапазоне спектра, обусловленные переходами  $E_- \rightarrow E_+$ . Показано, что спектральное положение этих полос зависит от концентрации кислорода. При неоднородном распределении кислорода наблюдается их смещение или размытие.

Отмечается, что при большом коэффициенте поглощения сложная система уровней повышает эффективность поглощения света твердыми растворами  $\text{ZnS(O)}-\text{ZnSe(O)}$ , что благоприятно для создания ряда новых приборов оптоэлектроники.

## Список литературы

- [1] K.M. Yu, W. Walukiewicz, J. Wu, W. Shan, J.W. Beeman, M.A. Scarpulla, O.D. Dubon, P. Becla. *Phys. Rev. Lett.*, **91** (24), 246 403 (2003).
- [2] W. Sahn, W. Walukiewicz, J.W. Ager III, E.E. Haller, J.F. Geisz, D.J. Friedman, J.M. Olson. *Phys. Rev. Lett.*, **82** (6), 1221 (1999).
- [3] J. Wu, W. Walukiewicz, E.E. Haller. *Phys. Rev. B*, **65**, 233 210 (2002).
- [4] P. Perlin, P. Wisniewski, C. Skierbiszewski, T. Suski, E. Kaminska, S.G. Subramanya, E.R. Weber, D.E. Mars, W. Walukiewicz. *Appl. Phys. Lett.*, **76**, 1279 (2000).
- [5] C. Tablero. *Phys. Rev. B*, **72**, 035 213 (2005).
- [6] D.J. Friedman, J.F. Geisz, S.R. Kurtz, D. Myers, J.M. Olson. *J. Cryst. Growth*, **195**, 409 (1998).
- [7] Н.К. Морозова, Д.А. Мидерос, Е.М. Гавришук, В.Г. Галстян. *ФТП*, **42** (2), 131 (2008).
- [8] Н.К. Морозова, Д.А. Мидерос, Е.М. Гавришук, В.Г. Галстян. *ФТП*, **42** (2), 131 (2008).
- [9] Н.К. Морозова, Д.А. Мидерос. *Изв. вузов. Электроника*, № 3, 12 (2007).
- [10] Н.К. Морозова, Д.А. Мидерос. *Изв. вузов. Электроника*, № 3, 3 (2008).
- [11] Н.К. Морозова, Д.А. Мидерос, Е.М. Гавришук. *Изв. вузов. Физика*, **10**, 166 (2006).
- [12] Д.А. Мидерос, Н.К. Морозова. *Матер. докл. 36 межд. науч.-техн. сем. „Шумовые и деградационные процессы в полупроводниковых приборах“* (М., МЭИ, 2006) с. 163.
- [13] Д.А. Мидерос, Н.К. Морозова. *Матер. докл. 37 межд. науч.-техн. сем. „Шумовые и деградационные процессы в полупроводниковых приборах“* (М., МЭИ, 2007) с. 156.
- [14] Н.К. Морозова, И.А. Каретников, К.В. Голуб, Н.Д. Данилевич, В.М. Лисицын, В.И. Олешко. *ФТП*, **39** (5), 513 (2005).

- [15] Н.К. Морозова. Автореф. канд. дис. (М., МЭИ, 1964).
- [16] Jingbo Li, Su-Huai Wei. *Phys. Rev. B*, **73**, 41 201 (2006).
- [17] J. Wu, W. Walukiewicz, K.M. Yu, J.W. Ager III, S.X. Li, E.E. Haller, Hai Lu, William J. Schaff. *Sol. St. Commun.*, **127**, 411 (2003).
- [18] S.X. Li, E.E. Haller, K.M. Yu, W. Walukiewicz, J.W. Ager III, J. Wu, W. Shan, Hai Lu, William J. Schaff. *Lawrence Berkeley National Laboratory* (2005) paper LBNL-57562.
- [19] В.В. Блинов. Автореф. канд. дис. (М., МЭИ, 2003).
- [20] Н.К. Морозова, И.А. Каретников, Е.М. Гавришук, В.Г. Плотниченко, Э.В. Яшина, В.Б. Иконников. *ФТП*, **38** (1), 39 (2004).
- [21] А.В. Квит, С.А. Медведев, Ю.В. Клевков, В.В. Зайцев, Е.Е. Онищенко, А.В. Клоков, В.С. Багаев, А.В. Цикунов, А.В. Пересторонин, М.В. Якимов. *ФТП*, **40** (6), 1010 (1998).
- [22] M.J. Seong, H. Alawadhi, I. Miotkowski, A.K. Ramdas, S. Miotkowska. *Phys. Rev. B*, **62** (3), 1866 (2000).
- [23] Н.К. Морозова, В.Г. Плотниченко, Е.М. Гавришук, В.Г. Галстян, Э.В. Яшина. *Неорг. матер.*, **40** (11), 1138 (2004).

Редактор Л.В. Шаронова

## Absorption, excitation spectra and infrared transmission of $\text{ZnS(O)}-\text{ZnSe(O)}$ crystals in the context of the band anticrossing model

N.K. Morosova, D.A. Mideros, N.D. Danilevich

Moscow Power Engineering Institute  
(Technical University),  
111250 Moscow, Russia

**Abstract** Results of optical researches of absorption spectra, luminescence excitation and infrared transmission for systems of highly mismatched solid solutions  $\text{ZnS(O)}-\text{ZnSe(O)}$  are presented. It is shown that application of the band anticrossing theory gives a global explanation of features of their optical properties which earlier did not receive interpretation. In this paper a model of absorption transitions in the complex conduction multiband, initiated by oxygen, is submitted. Interpretation of absorption spectra and luminescence excitation which testify about the presence and distribution of oxygen in the crystals is given. The influence of oxygen on the transmittance band in the near infrared of  $\text{ZnS}-\text{ZnSe}$  is considered. It is given a new interpretation of selective infrared absorbance bands bounded to the dissolved oxygen presence. Schemes of the calculation are offered, allowing to define the spectral position of bands in dependence on the dissolved oxygen concentration.