

## Особенности спектров самоактивированной люминесценции CdS(O) с позиций теории непересекающихся зон

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

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

(Получена 11 сентября 2009 г. Принята к печати 12 сентября 2009 г.)

На основе теории непересекающихся зон, позволяющей учесть влияние изоэлектронной примеси кислорода на изменение зонной структуры, дана интерпретация природы спектров самоактивированной люминесценции CdS(O).

Выявлены полосы самоактивированной SA и SAL люминесценции CdS(O), аналогичные ZnS–ZnSe(O). В присутствии растворенного кислорода O<sub>S</sub> обнаружено наличие в составе SA-полос дополнительно двух компонент H и L, которые обязаны переходам из E<sub>+</sub>- и E<sub>-</sub>-подзон расщепленной зоны проводимости CdS(O) на уровень рекомбинации E<sub>SA</sub>. Определена их спектральная зависимость от концентрации растворенного кислорода [O<sub>S</sub>].

Показано, что зеленое краевое свечение CdS аналогично SAL, однако в отличие от ZnS–ZnSe(O) не обнаруживает H-компоненту, попадающую в область фундаментального поглощения кристалла. Анализ состава SA- и SAL-центров в кристаллах CdS показал их соответствие ZnS(ZnSe).

По экспериментальным данным представлены: положение локализованного уровня кислорода E<sub>0</sub>, уменьшение ширины запрещенной зоны E<sub>g</sub> от [O<sub>S</sub>], зонная модель CdS(O).

Работа дополняет аналогичные исследования, выполненные ранее для ZnS–ZnSe(O).

Развитие теоретических основ физики дефектных структур привело на границе XX–XXI веков к практически новому подходу в интерпретации оптических свойств соединений A<sup>II</sup>B<sup>VI</sup>, содержащих фоновую примесь кислорода, поскольку новая теория — band anticrossing (BAC) [1–4] — позволяет учесть присутствие в кристаллах изоэлектронных примесей. В работах [4–10] впервые с позиций теории BAC дан анализ спектров (ZnS·ZnSe)·O и роли кислородных скоплений. В настоящем сообщении ставится цель провести аналогии с кристаллами CdS(O).

Выявленные ранее для (ZnS·ZnSe)·O закономерности следующие. Согласно [4–10], с увеличением концентрации растворенного кислорода [O<sub>S</sub>] проявляются аномалии в спектрах поглощения и самоактивированной люминесценции кристаллов (ZnS·ZnSe)·O. Для свечения на дефектах эти аномалии наблюдаются при низких уровнях возбуждения  $\sim 10^{20-22} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$ . С ростом уровня возбуждения  $> 10^{25} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$ , когда рекомбинация осуществляется в основном через экситонные каналы, аномалии проявляются в экситонных спектрах.

Было показано [4–12], что самоактивированное свечение специально не легированных кристаллов II–VI(O) не ограничивается только SA-полосой, обязанной глубоким рекомбинационным уровням. Оно включает также вторую более коротковолновую — SAL-полосу.

Определен состав и зарядовое состояние комплексов собственных точечных дефектов (СТД), ответственных за оба вида свечения ZnS и ZnSe, что согласуется с предшествующими работами Watkins [12,13]. Кислород, присутствующий как фоновая примесь, стабилизирует эти центры, компенсируя Zn<sub>i</sub>. Показано, что SA-свечение

возникает при избытке цинка, а SAL-люминесценция преобладает для кристаллов, близких к стехиометрии, что связано с перезарядкой центра.

В присутствии растворенного кислорода [O<sub>S</sub>] обнаружено наличие в составе SA- и SAL-свечения (ZnS·ZnSe)·O дополнительно двух компонент (H и L), которые испытывают нетривиальное изменение спектрального положения при изменении концентрации [O<sub>S</sub>].

Объяснение особенностей оптических свойств таких кристаллов стало возможным только с позиций теории BAC [1–4]. Согласно ей, в присутствии изоэлектронного акцептора — примеси кислорода изменяется структура зоны проводимости кристаллов, которая разделяется на две подзоны (E<sub>-</sub> и E<sub>+</sub>). Переходы из этих 2 подзон на один и тот же уровень рекомбинации E<sub>SA</sub> (или E<sub>SAL</sub>) определяют две H- и L-компоненты SA (или SAL)-свечения.

В настоящем сообщении приводятся основные сведения о роли кислорода в изменении зонной структуры и оптических свойств кристаллов CdS(O) с позиций теории BAC. Рассмотрим некоторые из экспериментальных данных.

Оптические свойства кристаллов CdS исследовались на образцах, выращенных по методу Давыдова–Маркова [14–16] на ориентирующей затравке при 1100°C и контролируемом давлении паров компонентов в процессе роста. Давления варьировались в пределах центральной части области гомогенности CdS от P<sub>S2</sub> ≈ 50 кПа до P<sub>Cd</sub> ≈ 13 кПа (точка стехиометрии ΔC = 0 из расчета газового равновесия при росте кристаллов [14] соответствует P<sub>S2</sub> = 6.8 кПа или P<sub>Cd</sub> = 2.3 кПа). Содержание кислорода [O] (как фоновой примеси) оценивалось по методике [17], а его распределение в кристаллах в сканирующем электронном микроскопе (РЭМ) [9,10,16].

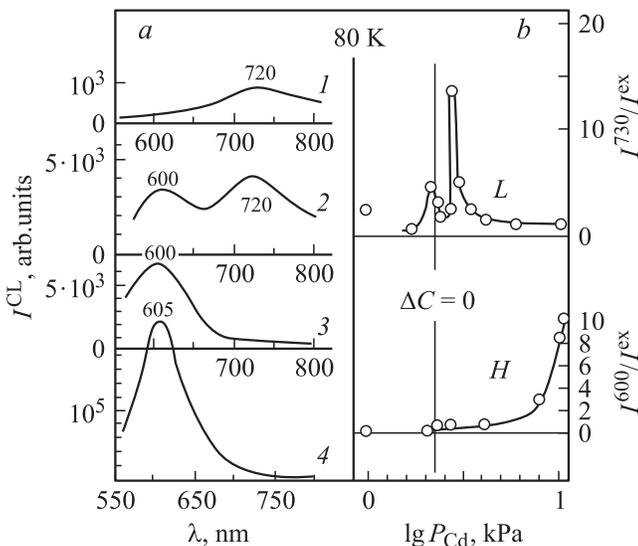
<sup>¶</sup> E-mail: MorozovaNK@

Выяснено, что содержание кислорода максимально и достигает  $10^{20}$  ( $10^{21}$ )  $\text{см}^{-3}$  для образцов, выращенных с избытком кадмия. В точке стехиометрии оно скачкообразно уменьшается и при максимальном давлении паров серы  $[\text{O}] \leq 10^{19} \text{см}^{-3}$  [18].

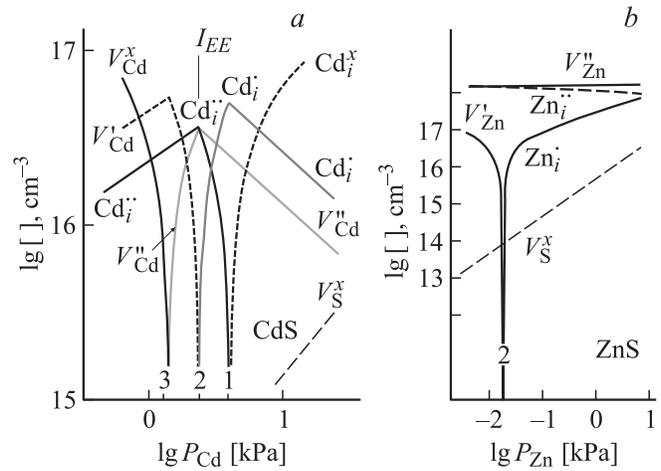
Спектры люминесценции, отражения и поглощения этих кристаллов исследованы по методикам, описанным в [4,8–12]. Исследования показали, что введение кислорода приводит к аномально большому длинноволновому сдвигу края фундаментального поглощения.

На рис. 1, а представлены спектры катодолуминесценции (КЛ) исследуемых кристаллов CdS(O) с отклонением от стехиометрии в спектральной области, связанной с глубокими уровнями. Плотность возбуждения КЛ  $\approx 10^{22} \text{см}^{-3} \text{с}^{-1}$ . Как видно, наблюдаются две полосы самоактивированного SA-свечения  $\sim 600$  и  $720 \text{нм}$ . Ранее в литературе [12–16] эти полосы приписывались различным центрам и не получили однозначной интерпретации. По аналогии с ZnS–ZnSe(O) приведенные на рис. 1, а две полосы КЛ CdS(O) соответствуют *H*- и *L*-компонентам SA-свечения. С увеличением концентрации кислорода (до 1 мол%) наблюдается их спектральное смещение:  $605 \rightarrow 580$  и  $695 \rightarrow 734 \text{нм}$ . При этом коротковолновая *H*-составляющая обязана излучательным переходам из верхней  $E_+$ -подзоны расщепленной в присутствии кислорода зоны проводимости CdS(O) на уровень рекомбинации  $E_{\text{SA}}$ , а длинноволновая *L*-компонента связана с излучательными переходами из нижней  $E_-$ -подзоны на тот же уровень. Коротковолновая *H*-компонента менее характерна для CdS(O), чем для ZnS–ZnSe(O), и наблюдалась в основном с увеличением избытка кадмия и концентрации кислорода  $[\text{O}] \geq (1-5)10^{20} \text{см}^{-3}$  ( $\sim 1$  мол%).

При избытке Cd длинноволновая *L*-компонента КЛ CdS(O) уменьшается по интенсивности (рис. 1, б). Для



**Рис. 1.** Изменение люминесценции с составом CdS(O); а — SA-люминесценции (кривые 1–4 для  $P_{\text{Cd}}$ , кПа: 2.1, 2.8, 4.2, 12.8), б — интенсивности компонент *L* и *H*.



**Рис. 2.** Диаграммы равновесия собственных точечных дефектов: а — для CdS в диапазоне давлений  $P_{\text{Cd}}$  0.8–13 кПа, соответствующих условиям роста кристаллов; б — для ZnS [19] в области стехиометрии и избытка Zn.

ZnS–ZnSe(O) наблюдалось усиление *L*-компоненты в спектрах кристаллов при увеличении избытка цинка, вводимого в процессе роста [19,4]. Это объяснялось образованием донорно-акцепторных (Д–А) пар на основе акцепторных SA-центров и присутствующих в избытке донорных центров  $\text{Zn}_i^+$ . Диаграммы равновесия собственных точечных дефектов (СТД) представлены на рис. 2 в сравнении для CdS и ZnS.

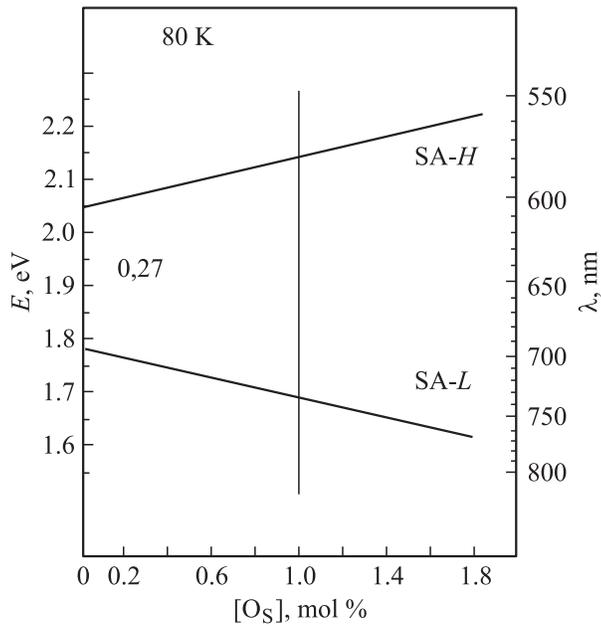
Как видно, для ZnS и CdS изменение концентрации доноров  $\text{Zn}_i^+$  и  $\text{Cd}_i^+$  от давления  $P_{\text{Zn(Cd)}}$  различно. Это определяется различием типов дефектов и соотношением их концентраций в сульфидах Zn и Cd.<sup>1</sup> Таким образом, при значительном избытке Cd изменение интенсивности *L* составляющей SA-свечения с концентраций мелкого собственного донора  $\text{Cd}_i^+$  для CdS(O) подобно ZnS–ZnSe(O).

Спектральное положение *H*- и *L*-компонент SA-свечения CdS(O) зависит от концентрации кислорода [1–4,10]. Это показано на рис. 3. Представленные зависимости являются результатом анализа экспериментальных данных [10,16]. Экстраполяция зависимости к  $[\text{O}_\text{S}] \rightarrow 0$  (рис. 3) позволяет оценить положение уровня  $E_0$  как 0.27 эВ [10].

В халькогенидах Cd локализованный уровень кислорода лежит выше дна зоны проводимости  $E_C$ . Так, для CdTe(O)  $E_0$  лежит выше  $E_C$  на 0.21 эВ [20]. По теории ВАС, зазор между  $E_0$  и  $E_C$  увеличивается в ряду CdTe–CdSe–CdS с уменьшением разницы свойств в парах Te–O  $\rightarrow$  S–O, т.е. при ослаблении взаимодействия локализованных состояний изоэлектронной примеси кислорода с протяженными состояниями зоны проводимости. Это согласуется с полученным нами значением  $E_0$  для CdS(O).

Обнаружить коротковолновое самоактивированное свечение SAL в спектрах излучения сульфида кадмия

<sup>1</sup> В соответствии с [13] приняты обозначения зарядовых состояний дефектов на диаграммах рис. 2 (0, –, +) как (x, l, •).



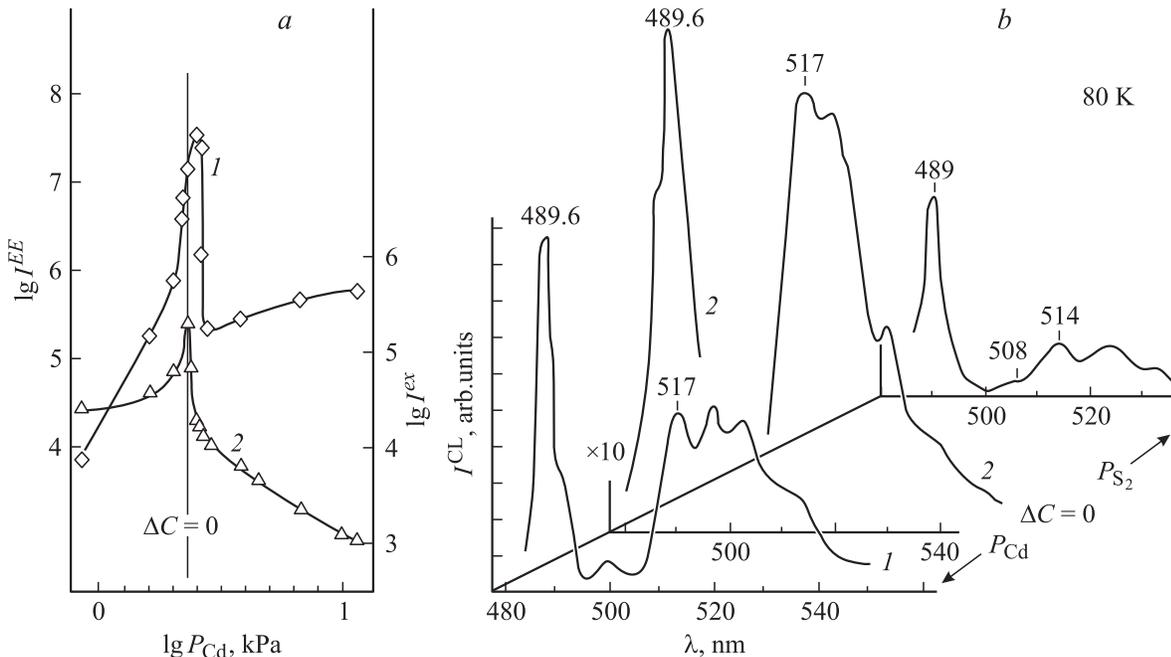
**Рис. 3.** Зависимость спектрального положения *H*- и *L*-компонент SA-свечения CdS(O) от концентрации растворенного кислорода  $[O_S]$ .

мы предполагали в области зеленого краевого свечения (*EE*) CdS. В исследуемых нами кристаллах на разных участках наблюдались серии краевого свечения с головными линиями при 80 К: 508, 515, 517, 518 нм (рис. 4, *b*) и т. д.

В работе [9] высказано предположение, что все эти серии краевого свечения обязаны одному и тому же комплексу СТД, имеющему глубину акцепторного уровня  $\sim 0.13$  эВ (от  $E_V$ ), а изменение их спектрального положения определяется изменением ширины запрещенной зоны (положения  $E_-$ ) на разных участках кристалла CdS(O) при неоднородном распределении растворенного кислорода  $[O_S]$ . Действительно, более длинноволновые серии *EE* присутствовали в спектрах кристаллов с повышенным содержанием кислорода при избытке Cd. Если кристалл выращен при избытке серы, наблюдалась только слабая серия с головной линией 506–508 нм. Краевое свечение резко уменьшалось по интенсивности (или даже загасало) при отклонении от стехиометрии как в сторону избытка серы, так и Cd (рис. 4, *a*, кривая 1).

Поскольку природа центров свечения неактивированного CdS до настоящего времени дискутируется, рассмотрим изменение интенсивности люминесценции исследуемых кристаллов CdS, выращенных с отклонением от стехиометрии, в зависимости от концентрации и типа собственных точечных дефектов (рис. 2, *a*).

На диаграмме равновесия СТД цифрами 1–3 отмечены давления  $P_{Cd}$ , которые соответствуют некоторым изменениям типа дефектов. Так, вблизи точки 1 ( $\sim P_{min}$ ) преобладает взаимозависимая пара дефектов:  $Cd_i^*$  и  $V_{Cd}^{||}$ . Комплекс их  $\{Cd_i^* \cdot V_{Cd}^{||}\}'$  известен [13] как А-центр, или центр SA-свечения. В этой части области гомогенности CdS действительно наблюдается SA-свечение. Избыток  $Cd_i^*$  способствует образованию с А-центрами донорно-



**Рис. 4.** Зависимость от состава кристаллов краевой (*EE*) и экситонной (*FE*) катодолуминесценции CdS(O): *a* — изменение интенсивности *EE* (1) и *FE* (2) полос с давлением  $P_{Cd}$ ; *b* — примеры спектров кристаллов, выращенных при избытке кадмия (1), серы (3), и  $\Delta C = 0$  (2). Плотности возбуждения  $\sim 10^{22} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$ .

акцепторных пар. При этом преобладает *L*-компонента, которая следует за концентрацией  $Cd_i^*$ , имея максимум интенсивности для кристаллов с наибольшей  $[O_S]$  вблизи точки равенства концентраций  $Cd_i^*$  и  $V_{Cd}^{\parallel}$ . Присутствие  $Cd_i^*$  требует компенсации объема этого дефекта, что способствует вхождению кислорода в кристалл до  $\sim 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ .

Если условия роста обеспечивают образование дефектов  $Cd_i^*$ , то содержание кислорода в кристаллах достигает предела растворимости  $\geq 10^{20} \text{ см}^{-3}$ . В спектрах усиливается *H*-компонента SA-свечения, а *L* ослабевает (рис. 1, *b*). Особенности SA-спектра таких кристаллов, по-видимому, определяются образованием скоплений [21] (см. далее).

При перемещении по шкале  $P_{Cd}$  от точки 1 к точке 2 (рис. 2, *a*) преобладающей на диаграмме становится пара дефектов  $V_{Cd}^{\parallel}$  и  $Cd_i^{**}$ , образуется комплекс  $\{V_{Cd}^{\parallel} \cdot Cd_i^{**}\}^x$ . В спектрах это сопровождается резким усилением интенсивности краевого свечения *EE* (рис. 4). Максимальное количество образующихся комплексов возможно при равенстве концентраций  $V_{Cd}^{\parallel}$  и  $Cd_i^{**}$  (точка 2 на рис. 2, *a*). Этот состав, выделенный как *IEE* сверху, совпадает с составом кристаллов, для которых интенсивность краевого свечения проходит через максимум (рис. 4, *a*).

После точки стехиометрии с уменьшением концентрации  $V_{Cd}^{\parallel}$  и при исчезновении их, как и комплекса  $\{V_{Cd}^{\parallel} \cdot Cd_i^{**}\}^x$ , наблюдается затухание краевого свечения.

Значительное увеличение концентрации вакансий кадмия  $V_{Cd}$  (левее точки 3 на диаграмме) нарушает закономерность изменения оптических свойств исследуемых кристаллов от типа дефектов, так как накладывается вторичный процесс — образование при избытке серы множественных пор.

Рассмотренная взаимосвязь краевого свечения с составом CdS и типом возникающих при этом дефектов полностью совпадают с условиями возникновения и усиления SAL-полосы в ZnSe, которая определяется подобным же комплексом  $\{V_{Zn}^{\parallel} \cdot Zn_i^{**}\}^x$ , что детально описано в [12,19,4]. Очевидно, что зеленое краевое свечение безактиваторного CdS и является второй коротковолновой полосой самоактивированного свечения, аналогичного SAL в ZnS–ZnSe(O).

Полученный экспериментальный материал позволяет установить зонную модель CdS(O). Схема приведена на рис. 5 для CdS(O) с концентрацией растворенного кислорода  $[O_S] = 1 \text{ мол}\%$ . Температура 80 К соответствует условиям, при которых в основном проводились исследования спектров. Положение дна зоны проводимости бескислородного CdS обозначено как  $E_C$ . Длины волн, соответствующие переходам с излучением, указаны в нм. Положения  $E_+$  и  $E_-$  даны, полагая, что смещение подзон на 1 мол% растворенного кислорода  $O_S$  линейно и соответствует  $\sim 90 \text{ мЭВ}$  [10,4].  $E_{ex}$  на схеме определяет полосы свободного экситона CdS и CdS(O).

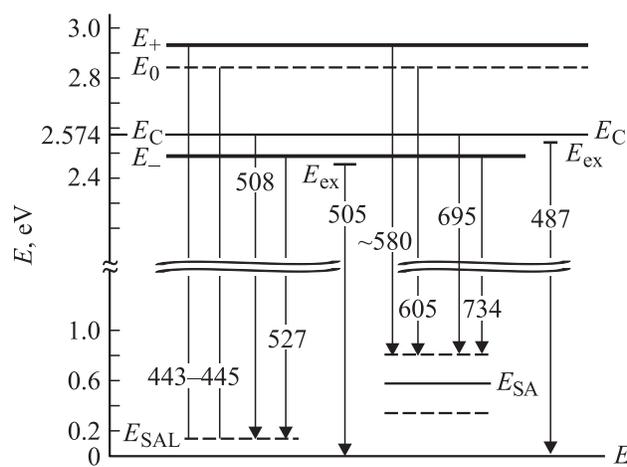
На основе зонной модели (рис. 5) можно отметить некоторые отличия спектров излучения CdS(O). Так, если для ZnS(O) и ZnSe(O) коротковолновое самоак-

тивированное свечение (типа SAL) обнаруживает две компоненты *L* и *H*, соответствующие переходам из  $E_-$  и  $E_+$ -подзон, то для CdS(O) наблюдается в излучении исключительно длинноволновая *L*-полоса. Действительно, согласно зонной модели (рис. 5), вследствие большой величины зазора  $E_O - E_C$  излучение из подзоны  $E_+$  приходится на область фундаментальной абсорбции CdS(O) и поглощается.

Для более длинноволнового SA-свечения CdS(O), которое соответствует области „прозрачности“ CdS, наблюдаются обе его компоненты *L* и *H*. При этом положение уровня  $E_O$  влияет на возможность заселения подзоны  $E_+$ , особенно в скоплениях [9,21,22]. Действительно, как было показано, *H*-составляющая SA-свечения резко усиливается для кристаллов со значительным избытком Cd и сопутствующего кислорода.

Кислородные скопления в основном в виде твердого раствора CdS(O) с повышенной  $[O_S]$  — еще одна характерная особенность таких кристаллов. В большинстве предшествующих работ по исследованию ZnS(O) и ZnSe(O) в спектрах наблюдалась аномальная экситонная полоса, которая трактовалась как связанный экситон BE, обязанный присутствию кислорода [4–8,22]. Роль кислородных скоплений в оптике кристаллов II–VI (O) получила объяснение в работе [9]. Как оказалось, при  $[O_S] \geq 10^{20} \text{ см}^{-3}$  и достаточной глубине информационного слоя ведущие полосы люминесценции (как экситонной, так и самоактивированной) определяются кислородными скоплениями.

Изучение в сканирующем электронном микроскопе микроструктуры рассматриваемых кристаллов CdS(O) [9,10,16] показало, что кислород неравномерно распределен в объеме. Это наблюдалось также и для ZnS–ZnSe(O) [4–12]. Твердые растворы кислорода в соединениях  $A^{II}B^{VI}$  образуют гетерогенные системы, включающие скопления с повышенной  $[O_S]$  в слабо легированной кислородом матрице CdS(O). Поскольку



**Рис. 5.** Зонная модель при 80 К для кристаллов CdS(O) с концентрацией растворенного кислорода  $[O_S] = 1 \text{ мол}\%$ . Длины волн, соответствующие переходам с излучением, указаны в нм.

концентрации растворенного кислорода в скоплениях и в матрице резко различаются, то, согласно теории ВАС, ширина запрещенной зоны в области скоплений существенно меньше. Это влияет на процессы поглощения и излучения. Поглощение в такой системе осуществляется всей сложной мультизоной кристалла. Излучение же определяется почти исключительно областями скоплений, для которых интенсивность излучения оказывается существенно выше, особенно для  $H$ -компоненты [4–5]. Таким образом, теория ВАС позволяет объяснить влияние кислорода на оптические свойства кристаллов II–VI (O) с совершенно новой точки зрения, в частности, данные Akimoto, полученные при легировании кислородом ZnSe [23], или спектры акустолуминесценции самоактивированного CdS [24].

В качестве основных выводов можно отметить следующее.

— Идентифицированы полосы самоактивированного свечения CdS:SA и SAL, аналогичные ZnS–ZnSe(O).

— По экспериментальным результатам представлена зависимость, определяющая спектральный диапазон смещения  $H$ - и  $L$ -компонент SA-свечения от  $[O_S]$ .

— При образовании кислородных скоплений в гетерогенной матрице обнаружено усиление  $H$ -компоненты и загасание  $L$ -составляющей SA-свечения, которые обязаны переходам из  $E_+$ - и  $E_-$ -подзон соответственно.

— Показано, что зеленое краевое свечение CdS подобно SAL, но в отличие от ZnS–ZnSe(O) не обнаруживает  $H$ -компоненту, попадающую в область фундаментального поглощения кристалла.

— Проведен анализ состава комплексов собственных точечных дефектов, ответственных за SA- и SAL-свечение самоактивированных кристаллов CdS(O), и показано, что они идентичны изученным в ZnS–ZnSe(O).

— Построена зонная модель CdS(O).

## 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] Д.А. Мидерос. Автореф. канд. дис. (М., МЭИ, 2008).
- [5] Н.К. Морозова, И.А. Каретников, Н.Д. Данилевич. ФТП, **39** (5), 513 (2005).
- [6] Н.К. Морозова, Д.А. Мидерос, Е.М. Гавришук, В.Г. Галстян. ФТП, **42** (2), 131 (2008).
- [7] Н.К. Морозова, Д.А. Мидерос, В.Г. Галстян, Е.М. Гавришук. ФТП, **42** (9), 1039 (2008).
- [8] Н.К. Морозова, Д.А. Мидерос, Н.Д. Данилевич. ФТП, **43** (2), 174 (2009).
- [9] Н.К. Морозова, В.Г. Галстян, Н.Д. Данилевич, В.М. Семенов. Изв. вузов. Электроника, № 1 (75), 3 (2009).
- [10] Н.К. Морозова, Н.Д. Данилевич, В.М. Семенов. Матер. докл. 39 межд. научн.-техн. сем. „Шумовые и деградационные процессы в полупроводниковых приборах“ (М., МЭИ, 2009) с. 132.
- [11] Н.К. Морозова, В.В. Блинов, Е.М. Гавришук, В.Г. Галстян, В.Г. Плотниченко, И.А. Каретников, В.С. Зимогорский. Неорг. матер., **37** (12), 1439 (2001).
- [12] Н.К. Морозова, И.А. Каретников, Е.М. Гавришук. Неорг. матер., **35** (8), 917 (1999).
- [13] *Физика и химия соединений A<sup>II</sup>B<sup>VI</sup>*, под ред. С.А. Медведева (М., Мир, 1970).
- [14] В.А. Теплицкий. Автореф. канд. дис. (М., МИЭТ, 1989).
- [15] Н.К. Морозова, А.В. Морозов, Л.Д. Назарова, Н.Д. Данилевич, И.А. Каретников. ФТП, **28** (10), 1699 (1994).
- [16] А.В. Морозов. Автореф. канд. дис. (М., МЭИ, 1993).
- [17] В.С. Зимогорский, Н.А. Яштулов, В.В. Блинов. Матер. докл. 30 межд. науч.-техн. сем. „Шумовые и деградационные процессы в полупроводниковых приборах“ (М., МЭИ, 2000).
- [18] Н.К. Морозова, А.В. Морозов, В.С. Зимогорский. Неорг. матер., **29** (7), 1014 (1993).
- [19] Д.А. Мидерос, Нгуен Чан Ха, Н.К. Морозова. Матер. докл. 38 межд. науч.-техн. сем. „Шумовые и деградационные процессы в полупроводниковых приборах“ (М., МЭИ, 2008) с. 138.
- [20] Jingo Li, Su-Huai Wei. Phys. Rev. B, **73**, 041 201 (2006).
- [21] М.Ю. Ребров, В.Т. Бублик, Т.А. Теплицкий, Е.В. Марков. Докл. АН СССР. Физика. **307** (3), 597 (1989).
- [22] Н.К. Морозова, Д.А. Мидерос. Изв. вузов. Электроника, № 3, 3 (2008).
- [23] К. Akimoto, T. Miyajima, Y. Mori. Phys. Rev., B, **39** (5), 3138 (1989).
- [24] И.В. Островский. Физика. Соросовский образовательный журнал, № 1, 95 (1998).

Редактор Л.В. Беляков

## Self-activated luminescence spectra of CdS(O) in the context of the band anticrossing theory

N.K. Morozova, N.D. Danilevich

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

**Abstract** This work provides an interpretation of the nature of self-activated luminescence spectra, based on the band anticrossing theory, which enables us to take into consideration the effect of oxygen isoelectronic impurity on changes in band structure.

Analogous to ZnS–ZnSe(O) bands SA and SAL were discovered in CdS(O) luminescence. The presence of two  $H$  and  $L$  components were detected in the structure of SA bands in presence of dissolved oxygen. They owe to the process of transitions from  $E_+$  and  $E_-$  subbands bifid conduction band of CdS(O) to the level of  $E_{SA}$ . Their spectral dependence from the concentration of dissolved oxygen  $[O_S]$  was estimated.

It is shown, that green edge emission CdS is analogous to SAL, but, in different from ZnS–ZnSe(O), it doesn't contain  $H$  component, got into fundamental absorption band of crystal. The analysis of the structures of SA and SAL complex intrinsic point defects CdS have shown their equivalence to ZnS(ZnSe). The position of localized level of oxygen  $E_0$ , bowing band gap  $E_g[O_S]$ , band model CdS(O) are based on the research results. The work adds the analogous researches, being done earlier for ZnS–ZnSe(O).