ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 6, № 3 (2002) с. 347–353

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 6, No. 3 (2002) p. 347–353

ВПЛИВ γ-ОПРОМІНЕННЯ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ КРАЙОВОЇ ФОТОЛЮМІНЕСЦЕНЦІЇ НЕЛЕҐОВАНОГО CdTe

Н. Д. Вахняк[1], С. Г. Крилюк[2], Ю. В. Крюченко[2], І. М. Купчак[2]
[1] *Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, вул. Коцюбинського, 2, 58012, Чернівці, Україна*
[2] *Інститут фізики напівпровідників НАН України, просп. Науки, 45, 03028, Київ, Україна*

(Отримано 25 березня 2002 р.)

Досліджено вплив γ-опромінення дозами $D = 1 \div 300$ кГр на характеристики крайової ($E = 1.50 - 1.57$ еВ) низькотемпературної фотолюмінесценції (ФЛ) нелеґованого CdTe. Результати чисельної обробки отриманих спектрів ФЛ при $D < 10$ кГр свідчать про наявність у ділянці крайової фотолюмінесценції CdTe двох близько розташованих смуг: (e–A)-смуги, зумовленої рекомбінацією вільного електрона й локалізованої на акцепторному центрі дірки, та (Д–А)-смуги, зумовленої рекомбінацією донорно-акцепторних пар. Гама-опромінення CdTe дозами до $D \approx 10$ кГр супроводжується згасанням (Д–А)-смуги аж до її повного зникнення. Це викликано, на наш погляд, знищенням указаною обробкою донорних центрів, що входять у донорно-акцепторні пари. Навпаки, відносна інтенсивність (e–A)-смуги $I_{\text{ФЛ}}^{(e,A)}/I_{\text{ФЛ}}^{(A^0,X)}$ (де $I_{\text{ФЛ}}^{(A^0,X)}$ — інтенсивність смуги ФЛ екситона, зв'язаного на нейтральному акцепторі) різко зростає при $D > 10$ кГр внаслідок ефективної ґенерації вакансій кадмію, які формують акцепторні центри. З енерґетичного зсуву лінії Д–А рекомбінації знайдено середню відстань $R \approx 12$ нм між донором й акцептором у Д–А парах. Проведено теоретичні розрахунки залежности фактора Хуанґа–Ріса S_{DA} від R для Д–А рекомбінації. Результати зіставлено з експериментально визначеними значеннями фактора Хуанга–Ріса $S_{\text{DA}}^{\text{exp}}$.

Ключові слова: CdTe, γ-опромінення, фотолюмінесценція, донорно-акцепторна рекомбінація, домішково-дефектна структура.

PACS number(s): 78.55.Et; 78.55.–m

I. ВСТУП

Успіхи в технології вирощування високоякісних монокристалів CdTe стимулюють широке практичне застосування цього матеріялу, зокрема в дозиметрії ядерних випромінювань [1]. Відомо, що властивості CdTe, як і інших сполук A^2B^6, визначаються головним чином станом власних дефектів, домішок та їхніх комплексів. Тому дослідження впливу різних активних обробок на домішково-дефектну структуру CdTe є важливим науковим завданням. Особливо це стосується радіяційного опромінення, яке може приводити як до перетворення наявних домішково-дефектних комплексів, так і до створення нових структурних дефектів, що в свою чергу супроводжується істотними змінами електрофізичних, оптичних, люмінесцентних та інших характеристик матеріялу.

У цій роботі досліджено вплив γ-опромінення на поведінку домішок та дефектів, що формують крайову ($E = 1.50 \div 1.57$ еВ) фотолюмінесценцію (ФЛ) нелеґованого телуриду кадмію. Використання методу низькотемпературної ФЛ зумовлено його високою чутливістю до стану домішково-дефектної системи досліджуваного матеріялу, що дозволяє вивчати зміну параметрів домішково-дефектних комплексів під дією різних чинників.

Що стосується природи локальних центрів, відповідальних за крайову ФЛ CdTe, то це питання дискутується в літературі до сьогодні. Уже в ранніх працях (див., напр., [2–4]) появу крайової ФЛ пов'язували з двома типами переходів: зона–акцептор (e–A) і донор–акцептор (Д–А). Висловлювали припущення, що донорами можуть бути домішки заміщення (In, Al) чи міжвузловий Cd. Акцепторні центри приписували наявності залишкових домішок або складних комплексів, що включають власні дефекти та залишкові домішки. У пізніших працях [5–11] на основі детальних досліджень крайової ФЛ CdTe залежно від температури, інтенсивности збудження, типу леґуючої домішки тощо надійно встановлено, що крайова люмінесценція формується (e–A) та (Д–А) переходами і їх LO-фононними повтореннями. При цьому енерґетична відстань між (e–A)- та (Д–А)-смугами, як правило, складає 5–10 меВ залежно від концентрації донорів та акцепторів, і в багатьох випадках вони слабо розділяються.

У більшості праць, присвячених дослідженню крайової ФЛ нелеґованого CdTe, природа донорних центрів не ідентифікується, а щодо акцепторних центрів, то вважається, що це або неконтрольовані домішки, або вакансії кадмію (V_{Cd}) [8,9,11], або складні комплекси, які включають V_{Cd} [4,11,12].

Не зважаючи на те, що дослідженню крайової люмінесценції присвячена велика кількість робіт, особливості впливу γ-опромінення на складові частини цієї ФЛ — (e–A)- та (Д–А)-смуги — раніше не вивчались.

II. МЕТОДИКА ЕКСПЕРИМЕНТУ

Нелеґовані монокристали CdTe були вирощені методом Бріджмена. Спектри ФЛ вимірювали при $T =$ 5 K з використанням Ar^+-лазера (потужність збудження складала ~100 мВт/см^2), монохроматора МДР–23 та охолоджуваного фотопомножувача. Опромінення γ-квантами здійснювалось радіоактивним джерелом ^{60}Co на установці МРХ–γ–25М. Потужність дози випромінювання складала 95.28 Р/с. Заданої дози опромінення досягали підбором відповідного часу експозиції. Зразки CdTe опромінювали дозами $D = 1 \div 300$ кГр. Після кожного такого сеансу вимірювали спектри ФЛ, надалі зразки додатково опромінювали, щоб досягти наступної заданої дози. Час між сеансами опромінення та ФЛ експериментами був мінімальним для запобігання можливої релаксації порушень кристалічної структури, зумовленої деструктуючою дією γ-квантів.

III. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ РЕЗУЛЬТАТИ

На рис. 1 зображено спектри ФЛ неопроміненого зразка CdTe та опроміненого γ-квантами різними дозами. Досліджувані спектри ФЛ доцільно розділити на 3 ділянки: а) 1.588–1.598 еВ — екситонна ФЛ; 1.50–1.57 еВ — крайова ФЛ; 1.35–1.48 еВ — ФЛ з участю А-центрів ($V_{\rm Cd}$-донор). В екситонній ділянці найінтенсивнішою є лінія ФЛ екситонів, локалізованих на нейтральних акцепторах — (A^0, X) з енерґією максимуму $E_{\max} = 1.589$ еВ. На короткохвильовому крилі цієї лінії спостерігаємо значно слабше за інтенсивністю випромінювання екситонів, локалізованих на донорах (D^0, X). Крайова ФЛ в ділянці $E \approx 1.55$ еВ має дві близько розташовані смуги: (e–A) — перехід вільного електрона на акцепторний центр, (Д–А) — перехід електрона з донора на акцептор. З довгохвильового боку від цієї смуги проявляються перше і друге LO-фононні повторення. У ділянці ФЛ з участю А-центрів спостерігається типова картина — нуль-фононна люмінесценція (НФЛ) з $E_{\max} = 1.455$ еВ та серія LO-фононних повторень.

У цій статті основну увагу звернено на поведінку крайової ФЛ в результаті γ-опромінення CdTe. Екситонну ФЛ та ФЛ з участю А-центрів використано тільки для порівняння відносних змін інтенсивности крайової ФЛ досліджуваних зразків CdTe під дією опромінення різними дозами γ-квантів.

Головною ознакою залежности інтеґральної інтенсивности екситонної ФЛ від дози γ-опромінення є її немонотонність: опромінення до $D \approx 3$ кГр супроводжується зростанням інтенсивности ФЛ, а при $D >$ 3 кГр — спадом з дещо меншим нахилом у залежності $I_{\rm ФЛ}(D)$. Так, інтенсивність лінії (A^0, X) при опроміненні досліджуваного зразка CdTe γ-квантами дозою $D \approx 3$ кГр зростає в 4–5 разів порівняно з відповідною інтенсивністю для неопроміненого зразка. Подальше опромінення зменшує інтенсивність лінії (A^0, X), і при $D \approx 300$ кГр вона стає приблизно вдвічі меншою, ніж для неопроміненого зразка. Зазначене зростання $I_{\rm ФЛ}(D)$ є проявом ефекту малих доз або, як його називають, радіяційно стимульованим упорядкуванням кристалічної структури напівпровідника [13–15]. Указаний ефект полягає в релаксації термодинамічно нерівноважних фаз, локальних механічних напружень тощо під дією малих доз проникаючої радіяції, що приводить до зменшення безвипромінювальних утрат і відповідного зростання інтенсивности ФЛ. При високих дозах γ-опромінення ґенеруються нові безвипромінювальні центри, і тому інтенсивність ФЛ зменшується. Докладніше цей ефект для CdTe:Cl описано в нашій попередній праці [16].

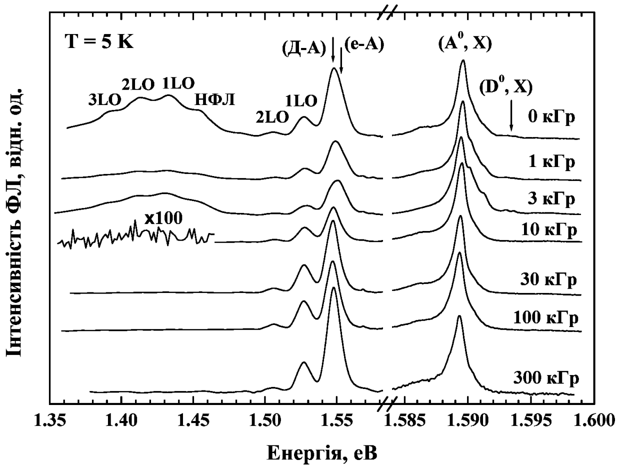

Рис. 1. Спектри ФЛ при $T = 5$ K нелеґованого CdTe до й після опромінення різними дозами γ-квантів, указаними біля кожної кривої. Спектри нормовані до інтенсивности відповідної (A^0, X) лінії.

Для зручности аналізу експериментальних результатів (розділ IV) інтенсивності всіх смуг ФЛ нормували до максимуму інтенсивности лінії (A^0, X). Цим самим враховували вплив безвипромінювальної рекомбінації на залежність інтенсивности різних смуг ФЛ від дози γ-опромінення, а отримані залежності $I_{\rm ФЛ}/{\rm I}(A^0, X)$ від D пояснювали зміною концентрації випромінювальних центрів у результаті γ-опромінення.

Привертає до себе увагу немонотонна залежність відносної інтенсивности крайової ФЛ від дози γ-опромінення: спад до $D \approx 10$ кГр змінюється зростанням аж до максимально використаної дози $D \approx$ 300 кГр (рис. 1). Напівширина крайової смуги ФЛ стрибкоподібно зменшується при $D \approx 10$ кГр від $H \approx 14$–15 меВ (для неопроміненого CdTe та опроміненого дозами 1 і 3 кГр) до $H \approx 10$ меВ для $D \geq$ 10 кГр (рис. 2). Фактор Хуанґа–Ріса S (який вираховують з експериментальних спектрів як відношення інтенсивности першого фононного повторення до інтенсивности нуль-фононної смуги ФЛ) теж стрибкоподібно змінюється: для $D < 10$ кГр $S \approx 0.24 \div 0.29$;

при $D = 10 \div 100$ кГр $S \approx 0.4$; а при $D \approx 300$ кГр він знову зменшується до $S \approx 0.3$ (рис. 2).

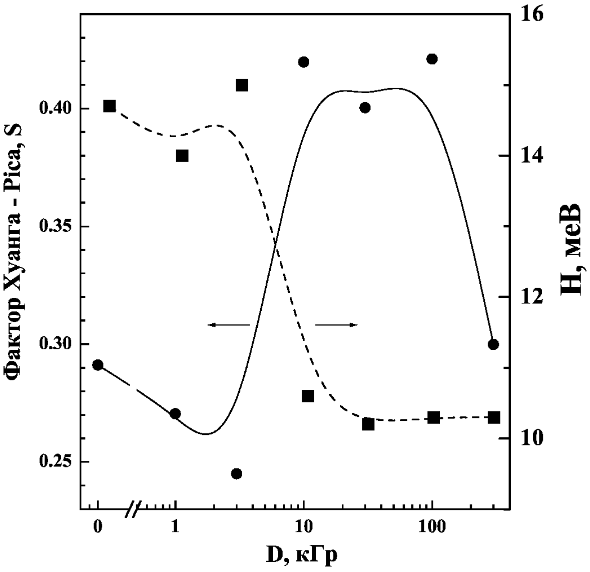

Рис. 2. Залежність експериментально визначеного фактора Хуанґа–Ріса S та напівширини нуль-фононної смуги H від дози γ-опромінення для крайової ФЛ CdTe.

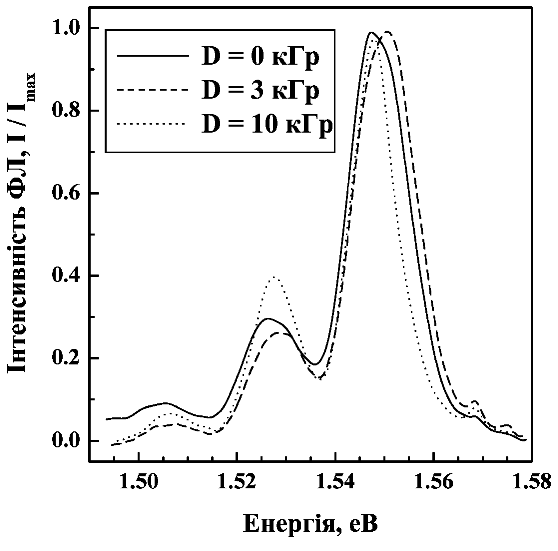

Рис. 3. Спектри крайової ФЛ вихідного зразка CdTe (1) та опроміненого γ-квантами дозами 3 кГр (2) і 10 кГр (3).

Для наочности на рис. 3 наведено форму крайової ФЛ для неопроміненого CdTe та опроміненого дозами 3 кГр і 10 кГр. Видно, що γ-опромінення до $D = 3$ кГр приводить до зміщення максимуму крайової смуги ФЛ в короткохвильовий бік на $\Delta E \approx 3$ меВ, а при $D = 10$ кГр максимум зміщується вже в довгохвильову ділянку, при цьому напівширина лінії різко зменшується.

IV. АНАЛІЗ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ

Подані на рис. 1–3 результати наводять на думку, що γ-опромінення сильніше гасить довгохвильову компоненту в крайовій ФЛ, зумовлену (Д–А) переходами. Це приводить до того, що співвідношення інтенсивностей обох компонент ФЛ змінюється на користь (е–А) переходів, що і є причиною короткохвильового зсуву крайової смуги ФЛ. При $D \geq 10$ кГр довгохвильова компонента зникає зовсім, і залишається лише компонента, зумовлена (е–А) переходами. Тому й напівширина крайової ФЛ стрибкоподібно зменшується до ≈ 10 меВ (рис. 2). Для того, щоб пересвідчитись у правильності висловленого припущення, ми розклали крайову ФЛ на два складники, (Д–А)- та (е–А)-смуги, для випадків, коли вони проявляються в спектрах ФЛ: неопромінений зразок CdTe та опромінений дозами 1 кГр та 3 кГр.

Спектральна форма як (Д–А)-, так і (е–А)-смуг з урахуванням LO-фононних реплік може бути описана добре відомою формулою (див., напр., [10])

$$I(\omega) = \omega^2 \sum_{p=0} \frac{S^p}{p!} e^{-S} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\omega_0 - p\ \omega_{\mathrm{LO}} - \omega}{\Gamma}\right)^2\right], \quad (1)$$

де $\hbar\omega_0$ задає енерґетичне положення нуль-фононної лінії, $\hbar\Gamma$ визначає ширину лінії, сума береться за всіма можливими фононними репліками ($p = 0, 1, 2, \ldots$). При дозах, менших від 10 кГр, ми описували експериментально виміряний спектр сумою двох рядів типу (1), а саме $I(\omega)/I_{\max} = \alpha I_{\mathrm{DA}}(\omega) + (1-\alpha) I_{\mathrm{eA}}(\omega)$, де смуга $I_{\mathrm{DA}}(\omega)$ характеризувалась набором параметрів S_{DA}, $\hbar\omega_0^{\mathrm{DA}}$ та $\hbar\Gamma_{\mathrm{DA}}$, а смуга $I_{\mathrm{eA}}(\omega)$, відповідно, S_{eA}, $\hbar\omega_0^{\mathrm{eA}}$ та $\hbar\Gamma_{\mathrm{eA}}$. Для неопроміненого зразка і зразків, опромінених дозами $D < 10$ кГр, найліпше узгодження спостерігали при $\hbar\omega_{\mathrm{LO}} = 21.6$ меВ, $S_{\mathrm{DA}} \approx 0.3$, $\hbar\omega_0^{\mathrm{DA}} \approx 1.547$ еВ, $\hbar\Gamma_{\mathrm{DA}} = 4.0 \div 4.8$ меВ, $S_{\mathrm{eA}} \approx 0.33$, $\hbar\omega_0^{\mathrm{eA}} \approx 1.553$ еВ, $\hbar\Gamma_{\mathrm{eA}} = 4.9 - 5.7$ меВ та $\alpha = 0.72$ (для $D = 0$), $\alpha = 0.45$ ($D = 1$ кГр), $\alpha = 0.34$ ($D = 3$ кГр). При більших дозах у спектрі залишається тільки одна незміщена смуга з енерґетичним положенням нуль-фононної смуги $\hbar\omega_0^{\mathrm{eA}} \approx 1.5485$ еВ і $S_{\mathrm{eA}} \approx 0.4$.

Результати розкладання подані на рис. 4, з якого видно, що γ-опромінення дійсно різко зменшує долю (Д–А) переходів у крайовій ФЛ. При цьому домінуючою стає люмінесценція, зумовлена (е–А) переходами. Рис. 5 ілюструє залежність інтенсивностей смуг (Д–А) та (е–А) від дози γ-опромінення. Збільшення дози до $D = 10$ кГр приводить до практично повного гасіння (Д–А)-смуги, тоді як інтенсивність смуги (е–А) різко зростає при $D > 10$ кГр.

Виникає запитання: яка причина різкого зменшення інтенсивности (Д–А) переходів у γ-опромінених зразках CdTe? Якщо в крайовій ФЛ (Д–А) і (е–А) переходи відбуваються з участю одного й того ж акцептора (наприклад, V_{Cd} або комплексів, що включають V_{Cd}), а зникає тільки одна компонента (Д–А), то це дає підстави стверджувати, що γ-опромінення приводить до різкого зменшення концентрації донорних центрів (найімовірніше, атомів заміщення — неконтрольованих елементів III або VII груп, розташованих, відповідно, у вузлах Cd або Te).

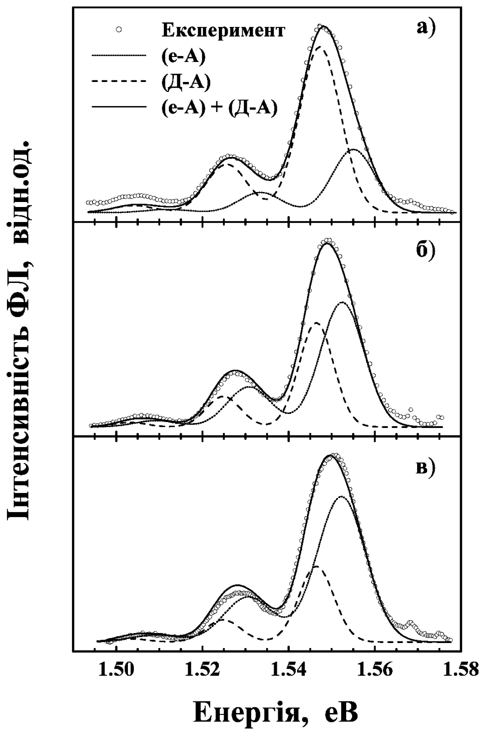

Рис. 4. Розкладання спектрів крайової ФЛ на дві смуги (е–А) і (Д–А) згідно з рівнянням (1) для неопроміненого зразка (а) та опроміненого дозами 1 кГр (б) і 3 кГр (в).

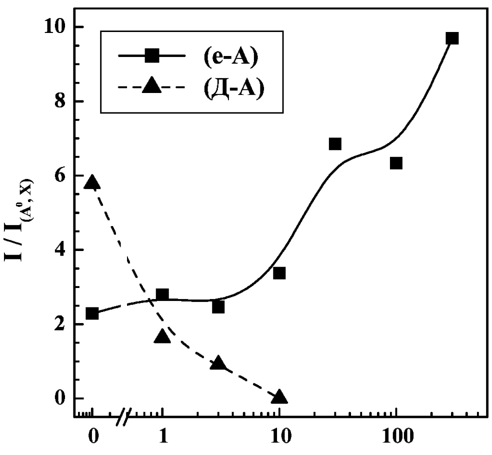

Рис. 5. Залежність відносної інтенсивности (е–А)- та (Д–А)-смуг від дози γ-опромінення.

Додатковим арґументом на користь такого твердження є різке гасіння інтенсивности ФЛ лінії екситонів, локалізованих на донорах, і практично повне зникнення смуги ФЛ в ділянці 1.35–1.48 еВ (зумовленої Д–А переходами з участю А-центрів) у результаті γ-опромінення CdTe дозами $D \geq 10$ кГр (див. рис. 1). В обох випадках, як й у крайовій ФЛ, беруть участь одні й ті ж донорні центри. Різке зростання інтенсивности смуги (е–А) при $D > 10$ кГр засвідчує, що при таких великих дозах відбувається ефективна ґенерація вакансій кадмію, які або самі є акцепторними центрами, або входять до складу акцепторних комплексів.

Цікавий результат отримано щодо енерґетичного положення максимуму ФЛ, зумовленої (е–А) переходами. Коли в крайовій ФЛ наявні обидві компоненти, (Д–А) і (е–А), енерґетичне положення максимуму (е–А)-смуги складає $E_{\max} = 1.553$ еВ. Як зазначалось вище, у результаті опромінення CdTe дозами $D > 10$ кГр у крайовій ФЛ залишається лише смуга (е–А). При цьому її максимум зміщується в довгохвильову ділянку на 4.5 меВ і складає $E_{\max} \approx 1.5485$ еВ. Фізична причина такого зміщення полягає в наступному. У першому випадку, коли переходи (е–А) здійснюються за наявности близько розташованих донорних центрів (це означає, що донори та акцептори об'єднані в Д–А пари), кулонівська взаємодія зменшує енерґію зв'язку донорів та акцепторів [17]. Наведені вище цифри означають, що енерґія зв'язку акцептора за рахунок кулонівської взаємодії з донором зменшилась на ≈ 4.5 меВ. У другому випадку, коли (Д–А)-переходи відсутні (при $D > 10$ кГр), переходи електрона здійснюються на незміщений кулонівською взаємодією акцепторний рівень. Це дає змогу визначити значення енерґії зв'язку акцептора $E_{\mathrm{A}} \approx 57.5$ меВ. Енерґія зв'язку мілких донорів в CdTe $E_{\mathrm{D}} \approx 14$ меВ і слабо залежить від їхньої природи. Значення цих величин дало змогу визначити відстань R між донором й акцептором в Д–А парі, використовуючи формулу:

$$E_{\mathrm{DA}} = E_g - E_{\mathrm{D}} - E_{\mathrm{A}} + e^2/\varepsilon R, \qquad (2)$$

де $e^2/\varepsilon R$ — загальна величина зсуву донорних й акцепторних рівнів, викликана кулонівською взаємодією відповідних центрів у середовищі з діелектричною проникливістю ε. Підставляючи $E_{\mathrm{DA}} = 1.547$ еВ, $E_g = 1.606$ еВ, $E_D = 14$ меВ, $E_{\mathrm{A}} \approx 57.5$ меВ, маємо $e^2/\varepsilon R \approx 12.5$ меВ. Звідси одержуємо $R \approx 12$ нм. З отриманих значень стає зрозумілою близька енерґетична відстань між (е–А)- та (Д–А)-смугами, які слабо розділяються в досліджуваному зразку: мала відстань між донорами й акцепторами і, відповідно, сильна кулонівська взаємодія між ними приводять до значного зсуву (Д–А)-смуги в короткохвильову ділянку, ближче до (е–А)-лінії.

V. ТЕОРЕТИЧНИЙ РОЗРАХУНОК ФАКТОРА ХУАНҐА–РІСА

Вище вже зазначалась нетривіяльна залежність фактора Хуанґа–Ріса для крайової ФЛ від дози γ-

опромінення CdTe (див. рис. 2). При дозах, менших від 10 кГр, коли крайова смуга **ФЛ** формується лініями рекомбінації (Д–А) і (е–А), отримано з розкладання крайової **ФЛ** на дві складові (рис. 4) значення фактора Хуанґа–Ріса для рекомбінації електрона на акцепторі $S_{\mathrm{eA}}^{\mathrm{exp}} \approx 0.33$, тоді як при дозі $\sim$ 10 кГр і вищих, коли весь спектр крайової **ФЛ** формується лише однією незміщеною нуль-фононною смугою (е–А) рекомбінації та її фононними повтореннями, фактор $S_{\mathrm{eA}}^{\mathrm{exp}}$ стрибкоподібно збільшується до величини $S_{\mathrm{eA}}^{\mathrm{exp}} \approx 0.4$.

Проведімо теоретичний аналіз залежности S від параметрів Д–А пар. Процеси випромінювальної рекомбінації на домішкових центрах у напівпровідниках з урахуванням електрон-фононної взаємодії теоретично проаналізовано в багатьох працях (див., напр., [10,18,19]). Показано, зокрема, що вплив фононів й електрон-фононної взаємодії на спектр **ФЛ** можна врахувати за допомогою фактора Хуанґа–Ріса S, який визначає ймовірності $W_p \sim e^{-S}S^p/p!$ випромінювальних переходів на домішковому центрі за участю p LO-фононів. Він може бути розрахований з використанням добре відомої формули теорії Фрьоліха для неперервного середовища: $S = [2\pi e^2/(V\hbar\omega_{\mathrm{LO}})](1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_0)\sum_{\mathbf{q}} |\rho_{\mathbf{q}}|^2 / q^2$, де $\mathbf{q}$ — хвильовий вектор, V — об'єм кристала, $\hbar\omega_{\mathrm{LO}}$ — енерґія LO-фононів, ε_∞ — високочастотна діелектрична проникливість, ε_0 — статична діелектрична проникливість, ρ_q — фур'є-компонента розподілу густини заряду. Теоретичні розрахунки проводили, в основному, в межах водневоподібної моделі в наближенні ефективних мас. Проте в багатьох випадках існує розбіжність між теоретичними результатами й експериментальними даними, тому є необхідність в подальшому розвитку теорії.

На сьогодні найзагальнішим є, на наш погляд, розвинутий у праці [19] підхід з урахуванням так званого квантового дефіциту. Він дозволяє проводити розрахунки не тільки для мілких водневоподібних, але й для глибших центрів домішкової рекомбінації. У межах цього підходу сильно локалізовані на домішках основні стани носіїв описуються огинаючою хвильовою функцією $\Psi_{\nu_i}(r) = N_{\nu_i}\ r^{\nu_i}\ \exp[-r/(\nu_i a_i^*)]$, де $i = e$ для зв'язаного стану електрона на донорі та $i = h$ для зв'язаного стану дірки на акцепторі, r — радіус-вектор, $a_i^* = \hbar^2\ \varepsilon_0\ /\ (e^2\ m_i^*)$ — ефективні борівські радіуси для електрона (дірки), m_i^* — ефективна маса відповідного носія, $N_{\nu_i} = [2/(\nu_i a_i^*)]^{\nu_i}/[(\nu_i a_i^*)^{1/2}\Gamma(\nu_i + 1)]$ — коефіцієнт нормування, ν_i — так званий параметр квантового дефіциту, який визначається зі співвідношення енерґій $\nu_i = E_i^{\mathrm{R}}/E_{\mathrm{D(A)}}$. В останньому виразі $E_{\mathrm{D(A)}}$ є експериментально виміряним значенням енерґії йонізації основного стану донора (акцептора), а $E_i^{\mathrm{R}} = e^4 m_i^*/(2\varepsilon_0^2\hbar^2)$ — енерґія зв'язку відповідного носія на домішковому центрі в межах водневоподібної моделі (тобто ефективний рідберґ).

При розрахунку фактора Хуанґа–Ріса для процесу рекомбінації на ізольованому центрі (донорі або акцепторі) фур'є-компоненту розподілу густини заряду визначаємо формулою $\rho_{qi} = N_p \int \exp(i\mathbf{qr}) r^{2(\nu_i - 1)} \exp[-2r/(\nu_i a_i^*)] d^3\mathbf{r}$, де N_p є константою нормування, яку знаходимо з умови $\rho_{0i} = 1$. Якщо випромінювальна рекомбінація відбувається на Д–А парах за участю як донора, так і акцептора, то фур'є-компоненту розподілу загальної (електрон-діркової) густини заряду визначаємо формулою

$$\rho_{\mathrm{eh}}(\mathbf{q}) = \langle \Psi_{\mathrm{e}}(\mathbf{r}_{\mathrm{e}})\Psi_{\mathrm{h}}(\mathbf{r}_{\mathrm{h}})|\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\mathrm{h}}) - \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\mathrm{e}})|\Psi_{\mathrm{h}}(\mathbf{r}_{\mathrm{h}})\Psi_{\mathrm{e}}(\mathbf{r}_{\mathrm{e}})\rangle\,. \tag{3}$$

При такому розподілі заряду значення фактора Хуанґа–Ріса є функцією відстані R між донором й акцептором у Д—А парі:

$$S(R) = \frac{e^2}{\pi\hbar\omega_{\mathrm{LO}}}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}\right)\int\limits_0^\infty \left[|\rho_{q\mathrm{e}}|^2 + |\rho_{q\mathrm{h}}|^2 - 2\rho_{q\mathrm{e}}\rho_{q\mathrm{h}} sin(qR)/(qR)\right] dq. \tag{4}$$

Коли $\nu_{\mathrm{e}(h)} = 1$, результати обчислень за допомогою формули (4) збігаються з результатами аналітичних обчислень для водневоподібної моделі, які наведені в [10]. На практиці, завдяки малій величині енерґії йонізації донорів у CdTe ($E_{\mathrm{D}} \approx 14$ меВ) і практично точній реалізації співвідношення $E_{\mathrm{e}}^{\mathrm{R}}/E_{\mathrm{D}}$=1, водневоподібна модель для донорних центрів дійсно є досить адекватною експериментальній ситуації. Що стосується акцепторів, які беруть участь у випромінювальній рекомбінації в досліджуваній ділянці спектра, то їхня енерґія йонізації $E_{\mathrm{A}} \approx 60$ меВ є значно меншою від енерґії зв'язку $E_{\mathrm{hh}}^{\mathrm{R}} \approx 118$ меВ для важкої дірки ($m_{\mathrm{hh}} = 0.8m_0$) і водночас набагато більшою від енерґії зв'язку $E_{\mathrm{lh}}^{\mathrm{R}} \approx$18 меВ для легкої дірки (m_{lh}=0.12m_0). Якщо розраховувати фактор Хуанґа–Ріса за допомогою формули (4), то: а) для легких дірок ($S \sim$0.3-0.5) він виявляється значно ближчим до експериментальних значень, ніж для важких дірок ($S \sim$1.3–1.5); б) співвідношення $E_{\mathrm{lh}}^{\mathrm{R}}/E_{\mathrm{A}}$ менше за одиницю, тоді як $E_{\mathrm{hh}}^{\mathrm{R}}/E_{\mathrm{A}}$ більше від одиниці, отже в останньому випадку сам підхід квантового дефіциту вже викликає певні сумніви. Таким чином, можна зробити висновок, що крайова смуга ФЛ найімовірніше зумовлена випромінювальною рекомбінацією на акцепторних центрах і Д–А парах електронів і легких дірок, тоді як смуга ФЛ в ділянці 1.455 еВ — випромінювальною рекомбінацією на Д–А парах електронів і важких дірок. Розраховані залежності фактора Хуанґа–Ріса для Д–А рекомбінації від відстані R між донором й акцептором в Д–А парі при різних значеннях ефективної маси дірки зображені на рис. 6. Зменшення фактора Хуанґа–Ріса зі зменшенням відстані R між донором й акцептором у Д–А парі зумовлене зростаючою взаємною компенсацією розподілів електронного й діркового зарядів на цих центрах і відповідним зменшенням зміщень адіабатичних потенціялів на конфіґураційній діяграмі Франка–Кондона.

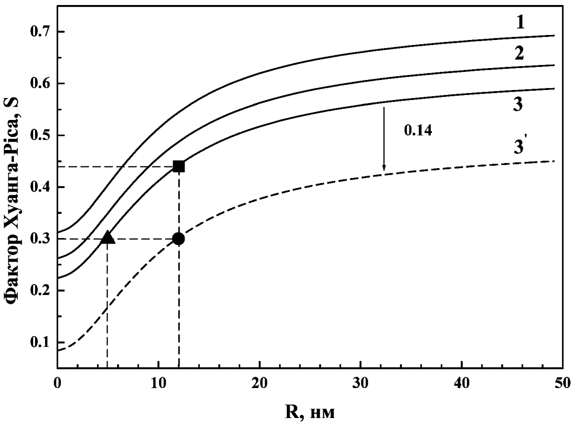

Рис. 6. Розрахована залежність фактора Хуанґа–Ріса S від відстані між донором та акцептором при різних параметрах дірки: 1 — $m_{\rm h}=0.40m_0$, $E_{\rm h}^{\rm R}=59$ меВ, $a_{\rm h}=1.3$ нм, $\nu_{\rm h}$=1.01; 2 — $m_{\rm h}=0.20m_0$, $E_{\rm h}^{\rm R}=30$ меВ, $a_{\rm h}=2.5$ нм, $\nu_{\rm h}$=0.71; 3 — $m_{\rm h}=0.12m_0$, $E_{\rm H}^{\rm R}=18$ меВ, $a_{\rm h}=4.2$ нм, $\nu_{\rm h}$=0.55; $3'$ — лінія 3, зсунута вниз на $\Delta S = -0.14$. Параметри електрона $m_{\rm e}$=0.096 m_0, $E_{\rm e}^{\rm R}$=14 меВ, $a_{\rm e}$=5.3 нм та $\nu_{\rm e}$=1 є однаковими для всіх ліній.

Отримана в попередньому розділі середня відстань між донорами й акцепторами в Д–А парах складає $R \approx 12$ нм. На підставі теоретичної залежности $S_{\rm DA}(R)$ (рис. 6, крива 3) для $R \approx 12$ нм одержуємо $S_{\rm DA} \approx 0.44$ для дірки (точка ■ на кривій 3) і ще більші значення $S_{\rm DA}$ при виборі ефективної маси дірки, більшої за $m_{\rm lh}=0.12\,m_0$. Якщо провести на рис. 6 горизонтальну лінію $S_{\rm DA}^{\rm exp} \approx 0.3$, що відповідає отриманому значенню фактора Хуанґа–Ріса для (Д–А)-смуги при припасовуванні експериментально отриманого спектра за формулою (1), то вона перетне теоретично розраховану залежність $S_{\rm DA}(R)$ для легких дірок при $R \approx 5$ нм (точка ▲ на кривій 3), тобто середня відстань між донорами й акцепторами виходить меншою від тієї, що ми визначили, $R \approx 12$ нм. Якщо вибирати за ефективну масу дірок величину більшу, ніж маса легкої дірки, то значення R, що відповідають перетинові, будуть ще менші і, таким чином, будуть ще більше відрізнятись від $R \approx 12$ нм. Повне узгодження спостерігалось би, якби вся теоретична залежність $S_{\rm DA}(R)$ для легких дірок була зміщена як ціле на $\Delta S \approx 0.14$ у ділянку нижчих S (крива $3'$). Точка ● на кривій $3'$ відповідає значенням $S \approx 0.3$ при $R \approx 12$ нм, які ми отримали.

На основі теоретичного аналізу можна зробити висновок, що збільшення $S_{\rm eA}^{\rm exp}$ для (e–A)-смуги від ~ 0.33 до ~ 0.4 при γ-опроміненні CdTe дозою 10 кГр зумовлене зняттям часткової компенсації донорами заряду на акцепторах (унаслідок відсутности Д–А пар) та відповідним збільшенням деформаційного конфіґураційного зміщення адіабатичного потенціялу акцепторного центра на діяграмі Франка–Кондона. При максимально високих дозах γ-опромінення $D = 300$ кГр, які ми використали, створюється висока концентрація власних дефектів та їхніх комплексів, які компенсують заряд на акцепторному центрі, що супроводжується відповідним зменшенням фактора Хуанґа–Ріса (див. рис. 2).

VI. ВИСНОВКИ

1. Низькодозове ($D \leq 3$ кГр) γ-опромінення CdTe приводить до зростання інтеґральної інтенсивности екситонної ФЛ (до 4–5 разів), що викликане ефектом малих доз — радіяційно-стимульованим упорядкуванням кристалічної структури напівпровідника. При $D > 3$ кГр вводяться додаткові центри безвипромінювальної рекомбінації й інтенсивність ФЛ падає.

2. Під дією γ-опромінення CdTe відбувається перерозподіл смуг крайової ФЛ. Інтенсивність (Д–А)-смуги $I_{\rm ДА}$ при збільшенні дози γ-опромінення D помітно спадає, і при $D = 10$ кГр (Д–А)-смуга зникає зовсім. Така поведінка $I_{\rm ДА}$ пояснюється знищенням за допомогою γ-опромінення донорних центрів, що входять у Д–А пари. Водночас інтенсивність (e–A)-смуги різко зростає при $D > 10$ кГр внаслідок інтенсивної ґенерації вакансій кадмію, що формують акцепторні центри.

3. Знайдено середню відстань між донором та акцептором у Д–А парах ($R \approx 12$ нм) та фактор Хуанґа–Ріса S для (Д–А)- та (e–A)-смуг ФЛ. Для (Д–А)-смуги $S \approx 0.3$. Для (e–A)-смуги $S \approx 0.3$, коли акцептори входять у Д–А пари, і $S \approx 0.4$ для ізольованих акцепторів (Д–А пари відсутні). Виявлене зростання S пояснюється зняттям часткової зарядової компенсації донорами акцепторних центрів.

ПОДЯКИ

Автори висловлюють щиру подяку О. П. Шахову (ІФ НАНУ) за проведене γ-опромінення досліджуваних зразків CdTe та О. І. Власенкові (ІФН НАНУ) за обговорення результатів роботи.

[1] Д. В. Корбутяк, С. В. Мельничук, Є. В. Корбут, М. М. Борисюк, *Телурид кадмію: домішково-дефектні стани та детекторні властивості* (Іван Федоров, Київ, 2000).

[2] R. E. Halsted, B. Segall, Phys. Rev. Lett. **10**, 392 (1963).

[3] Ж. Р. Паносян, Труды ФИАН СССР **68**, 147 (1973).

[4] R. O. Bell, Solid State Commun. **7**, 913 (1975).

[5] E. Molva, K. Saminadayar, J. L. Pautrat, E. Ligeon, Solid State Commun. **48**, 955 (1983).

[6] E. Molva, J. L. Pautrat, K. Saminadayar, G. Milchberg, N. Magnea, Phys. Rev. B **30**, 3344 (1984).

[7] H. A. Mar, N. Salansky, J. Appl. Phys. **56**, 2369 (1984).

[8] J. M. Figueora, F. Sanchez-Sinencio, J. G. Mendoza-Alvarez, O. Zelaya, C. Vazquez-Lopez, J. S. Helman, J. Appl. Phys. **60**, 452 (1986).

[9] Н. В. Агринская, О. А. Матвеев, А. В. Никитин, В. А. Сладкова, Физ. техн. полупр. **21**, 676 (1987).

[10] M. Soltani, M. Certier, R. Evrard, E. Kartheuser, J. Appl. Phys. **78**, 5626 (1995).

[11] H.-Y. Shin, C.-Y. Sun, Mater. Sci. Eng. B **52**, 78 (1998).

[12] T. A. Kuhn, W. Ossau, R. N. Bicknell-Tassius, G. Landwehr, Appl. Phys. Lett. **55**, 2637 (1989).

[13] В. А. Зуев, Д. В. Корбутяк, В. Г. Литовченко, Г. А. Сукач, Физ. техн. полупр. **8**, 1651 (1974).

[14] Н. Л. Дмитрук, В. Г. Литовченко, ОПТ **3**, 13 (1983).

[15] В. Г. Литовченко, Д. В. Корбутяк, Е. Г. Лашкевич, Ю. Г. Садофьев, Физ. техн. полупр. **19**, 1704 (1985).

[16] N. D. Vakhnyak, S. G. Krylyuk, Yu. V. Kryuchenko, I. M. Kupchak, Physics of Semiconductors, Quantum Electronics and Optoelectronics **5**, 25 (2002).

[17] Ж. Панков, *Оптические процессы в полупроводниках* (Мир, Москва, 1973).

[18] H. L. Malm, R. R. Haering, Can. J. Phys. **49**, 2970 (1971).

[19] A. L. Gurskii, S. V. Voitikov, Solid State Commun. **112**, 339 (1999).

THE INFLUENCE OF γ-IRRADIATION ON CHARACTERISTICS OF EDGE PHOTOLUMINESCENCE IN UNDOPED CdTe

N. D. Vakhnyak[1], S. G. Krylyuk[2], Yu. V. Kryuchenko[2], I. M. Kupchak[2]

[1] *Yu. Fed'kovych Chernivtsi National University,*
2 Kotsyubynsky Str., Chernivtsi, 58012, Ukraine

[2] *Institute of Semiconductor Physics NAS of Ukraine,*
45 Nauky Pr., Kyiv, 03028, Ukraine

E-mail:div47@isp.kiev.ua

We have studied the effect of γ-irradiation with different doses ($D = 1 \div 300$ kGy) on the edge ($E = 1.50 - 1.57$ eV) low-temperature photoluminescence (PL) of undoped CdTe crystals. Numerical fitting of experimental edge PL spectrum at $D < 10$ kGy gives evidence for this spectrum formation by two closely-spaced bands. One of them, the (e–A)-band, is attributed to the recombination of a free electron with a hole localized at an acceptor center, while the other, the (D–A)-band, is due to the donor–acceptor recombination. γ-irradiation of CdTe crystals with relatively small doses leads to the (D–A)-band quenching and its complete disappearance at $D \approx 10$ kGy. We believe it occurs due to the destruction of the corresponding donor centers at such a treatment. Contrary to the (D–A) recombination, the relative intensity of the (e–A)-band $I_{\rm PL}^{(e,A)}/I_{\rm PL}^{(A^0,X)}$ (where $I_{\rm PL}^{(A^0,X)}$ is the intensity of the (A^0, X) line of excitons bound to neutral acceptors) increases dramatically at $D > 10$ kGy due to the effective generation of Cd vacancies which are responsible for acceptor centers formation. From the energy shift of the (D–A)-band we have evaluated the mean distance $R \approx 12$ nm between donor and acceptor in D–A pairs. Theoretical calculations of the Huang–Rhys factor $S_{\rm DA}$ as a function of the distance R for D–A recombination have been made as well. The results of the calculations have been compared with the values $S_{\rm DA}^{\rm exp}$ of the Huang–Rhys factor obtained from the experiment.