

## تأثير عنصر الايتيربيوم في البنية القطاعية للبلورات CdTe

الدكتور طلال خلاص\*

الدكتور عمار صارم\*\*

(تاريخ الإيداع 2 / 7 / 2007. قُبِلَ للنشر في 27/8/2007)

### □ الملخص □

تم اختبار طيف الانعكاسية للبلوريتين CdTe و Cd<sub>0.96</sub>Yb<sub>0.04</sub>Te في مجال الطاقة من 1 إلى 6eV في درجة حرارة الغرفة. إن التغيرات الملاحظة في أشكال الأطياف، بسبب وجود الايتيربيوم Yb، تم مقارنتها مع البنية القطاعية المحسوبة للمركب الثنائي CdTe المتوافرة في المراجع. تبين أن البنية القطاعية للمركب الثنائي في بعض المناطق حساسة إلى وجود الأيونات Yb، وأن إدخال Yb إلى البنية القطاعية للمادة CdTe أدى إلى ظهور قمة جديدة بقرب 2eV. نوقشت أيضاً الانتقالات الذرية الداخلية، نتيجة إدخال الايتيربيوم كإشابة إلى البلورة CdTe، في المادة Cd<sub>0.96</sub>Yb<sub>0.04</sub>Te.

الكلمات المفتاحية: انعكاسية البلورات CdYbTe، تنمية البلورات CdYbTe بطريقة الحزمة الجزيئية التراتبية.

\* مدرس في قسم الفيزياء من كلية العلوم بجامعة تشرين، اللاذقية - سورية.

\*\* أستاذ في قسم الفيزياء من كلية العلوم بجامعة تشرين، اللاذقية - سورية.

## Influence of Ytterbium on band structure of CdTe Crystals

Dr. Talal Khalass\*  
Dr. Ammar Sarem\*\*

(Received 2 / 7 / 2007. Accepted 27/8/2007)

### □ ABSTRACT □

The reflectivity spectra of CdTe and Cd<sub>0.96</sub>Yb<sub>0.04</sub>Te crystals have been investigated in the 1-6eV energy range at room temperature. The observed changes in the shapes of the spectra, caused by the presence of ytterbium Yb, have been compared with the calculated band structure of binary compound CdTe available in the literature. The band structure in some regions seems to be sensitive to the presence of Yb ions. The introduction of Yb to band structure of CdTe material leads to the appearance a new maximum near 2eV. The intra-atomic transitions, due to ytterbium introduced as an impurity to the CdTe crystal, in the Cd<sub>0.96</sub>Yb<sub>0.04</sub>Te material were also discussed

**Keywords:** Reflectivity of CdYbTe, Molecular Beam Epitaxy growth of CdYbTe.

---

\* Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Tishreen University, Latakia, Syria.

\*\* Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Tishreen University, Latakia, Syria.

## 1. مقدمة:

تتمتع دراسة المركبات II-VI المطعمة بعناصر نادرة (Rare Earth- RE) في أيامنا هذه بأهمية كبيرة وذلك بسبب خصائصها الضوئية المهمة وإمكانية تطبيقها في ليزرات أنصاف النواقل وعناصر ضوئية أخرى [1]. ومن جهة أخرى توجد بعض الصعوبات للحصول على بلورات ذات نوعية عالية مما يحد من التطبيقات المرتقبة لهذه المواد، وبشكل خاص أنصاف النواقل II-VI المطعمة بعناصر نادرة. وبسبب ذلك فإن معرفتنا للخصائص الضوئية لهذه المواد غير تامة وترتكز بشكل رئيسي على نتائج الدراسات لعينات صلبة من نوعية بلورية رديئة نسبياً. إن تطور طريقة التتمية بالحزم الجزيئية التراتبية (MBE – Molecular Beam Epitaxy) فتح طريقاً جديداً في الحصول على أفلام رقيقة نصف ناقلة من خليط ثلاثي  $Cd_{1-x}Yb_xTe$ .

ينبلور المحلول الصلب للمركب YbTe في الشروط النظامية على هيئة بلورة تشبه بلورة كلور الصوديوم أما CdTe فينتبلور في بنية شبيهة بكبريت التوتياء (Zinc blende) ولكن الأفلام الرقيقة المتشكلة في الخليطة الثلاثية تنتبلور على هيئة كبريت التوتياء [2-6].

نعرض في هذه المقالة نتائج القياسات الطيفية المتعلقة بعامل الانعكاسية لسطح الفلم الرقيق المنمى بطريقة MBE، والذي يتمتع بمعامل انعكاس عالي. تم الحصول على طيف الانعكاسية في درجة حرارة الغرفة في مجال من الطاقة 6eV - 1.5 من أجل CdTe، وأيضاً من أجل  $Cd_{0.96}Yb_{0.04}Te$ . وقد تم إجراء القياسات في معهد الفيزياء في أكاديمية العلوم البولونية في وارسو - بولونيا عام 2005.

## 2. أهمية البحث وأهدافه:

تكمن أهمية البحث في اختبار طيف البلورة  $Cd_{0.96}Yb_{0.04}Te$  بواسطة الانعكاسية بغية استنتاج معلومات حول تأثير عنصر الايتيريوم في البنية القطاعية CdTe في درجة الحرارة العادية.

## 3. طريقة البحث ومواده:

تمت تنمية العينات CdTe و  $Cd_{0.96}Yb_{0.04}Te$  في معهد الفيزياء التابع للأكاديمية البولونية في منظومة التتمية باستخدام الحزم الجزيئية التراتبية MBE المصنعة من قبل المعهد نفسه. تزود هذه المنظومة بمصادر Cd و Te و Yb. أما الصفيحة الحاملة فهي من النوع GaAs المنمأة وفق (100) [2-3].

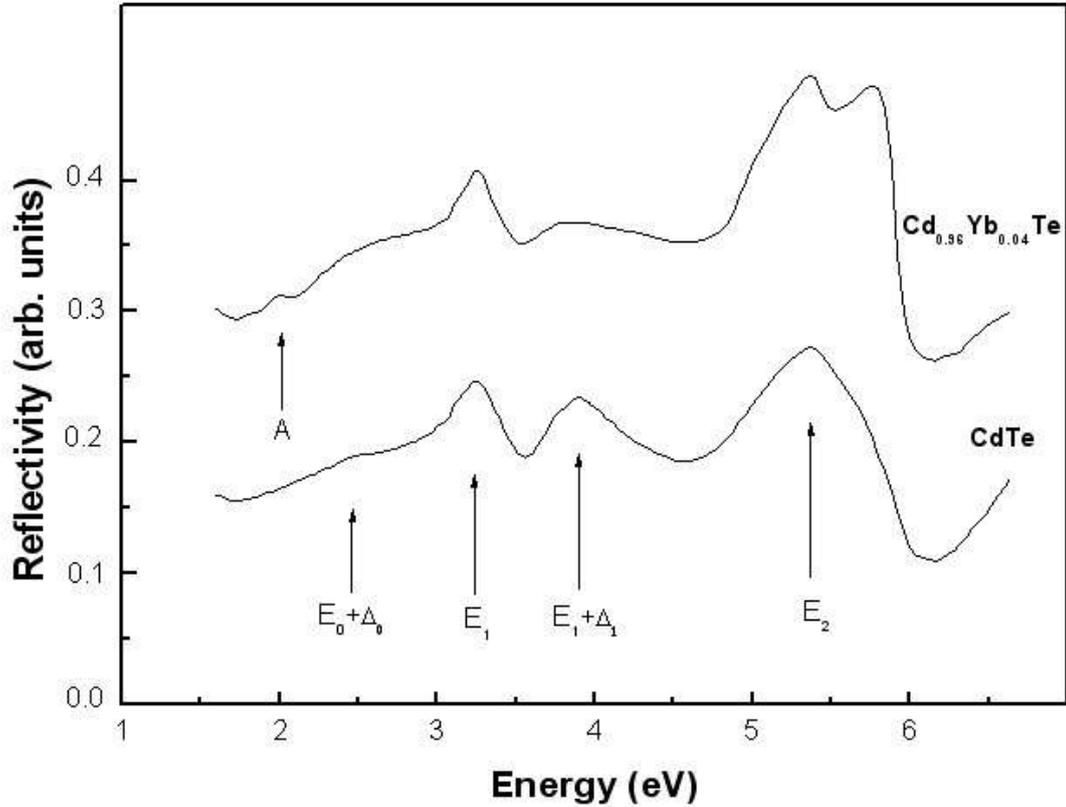
تم أخذ طيف الانعكاسية في درجة حرارة الغرفة باستخدام ضوء غير مستقطب. كما أجريت القياسات على طاقة الفونونات المحصورة ما بين 4eV - 1.5 باستخدام منقٍ لوني مزود بموشور من الكوارتز وبمنبع إضاءة هو عبارة عن مصباح هالوجين. أما من أجل الطاقات الأعلى ما بين (4-12eV) فقد استخدمنا منقياً لونياً يعمل بالأشعة فوق البنفسجية في الخلاء مصمم وفق طريقة (Seya-Namioka)، ومزود بمصباح هيدروجيني ذي ضغط منخفض يعمل بالإنفراغ (الضغط  $10Torr^{-2}$ ) موصول مباشرة إلى المنقي اللوني من دون أية نافذة. تم تعديل شدة الحزمة النافذة من المنقي باستخدام أداة تحول الضوء إلى نبضات. إن قسماً من الضوء البارز من المعدلة ينعكس عن العينة ويرسل إلى موشور مغشى بطبقة تبدي تالفاً ضوئياً (ساليسيلات الصوديوم). وتقاس شدته باستخدام مضاعف ضوئي ذي نافذة من الكوارتز. أما القسم الآخر من الضوء فيعبر من العينة إلى مجموعة مضاعفات ضوئية مغشاة بالطبقة نفسها. تقاس

الإشارة المعدلة القادمة من كلا المضاعفين الضوئيين باستخدام مقياس فولط نانو متري نبضي مصمم بطريقة الأنماط الموجة (Lock-in nanovolt meters). وتحفظ المعطيات على شكل رقمي في الحاسوب.

#### 4. النتائج والمناقشة:

يمثل الشكل 1 نتائج الانعكاسية التي تخص الفلم الرقيق CdTe بتابعية الطاقة. وقد رسمنا فوقه نتائج الفلم  $Cd_{0.96}Yb_{0.04}Te$  لكي يتسنى لنا المقارنة بينهما. إن مثل هذه المقارنة تسمح لنا أن نظهر التغير في بنية عصابة الطاقة التي سببتها أيونات Yb.

نلاحظ أن الطيف النقي CdTe يتطابق مع نتائج الأعمال الأخرى [4, 5, 7, 8]. تتسبب البنية  $E_0 + \Delta_0$  في بداية المنحني إلى الانتقالات  $\Gamma_{7v} - \Gamma_{6c}$  [5]. وإنما كما نرى متعلقة بفجوة الطاقة الأساسية  $E_0$  الموافقة للانتقالات  $Te5p \rightarrow Cd5s$  بين العصابات الداخلية عند النقطة  $\Gamma$  في منطقة بريلون (BZ) على الرغم من عدم ملاحظتها في المنحني (لأن قيمة بداية القياس كانت أكبر من قيمة العصابة المحظورة). مثل هذه القمة للسبين-مدار تنشطر إلى مركبات. وإذا عدنا طاقة الفجوة الأساسية  $E_0$  مساوية  $1.55eV$  [4, 5, 7, 8]، فإن انشطار السبين-مدار لعصابة التكافؤ في النقطة  $\Gamma$  يكون  $\Delta_0 = 0.83 eV$ ، وهو يتوافق مع ما يتوافر في المراجع [4, 7, 8] بصورة جيدة.



الشكل (1). طيف الانعكاسية الناتج من أجل CdTe ومن  $Cd_{0.96}Yb_{0.04}Te$  في درجة حرارة الغرفة. المصطلحات المستخدمة من أجل البنية توافقت المصطلحات الموجودة في CdTe [4-5] و YbTe [6].

الجدول (1). مواضع طاقة القمم ومناطق الصعود (بالإلكترون فولت eV) المبينة في طيف CdTe و  $Cd_{0.96}Yb_{0.04}Te$  وإسهامهما معاً في الانتقالات ما بين العصابات.

الانتقالات الضوئية	$Cd_{0.96}Yb_{0.04}Te$	CdTe	القمم
$\Gamma_{8v} - \Gamma_{6c}$ [7]	2.02	-	A
$\Gamma_{7v} - \Gamma_{6c}$ [7]	2.48	2.48	$E_0 + \Delta_0$
$(L_{4,5v} - L_{6c}$ [7]; $\Lambda$ (0.43,0.43,0.43) [8])	3.28	3.28	$E_1$
$(L_{6v} - L_{6c}$ [7]; $A$ (0.43,0.43,0.43) [8])	3.89	3.89	$E_1 + \Delta_1$
$(\Delta_5 - \Delta_5$ (0.5,0,0), (0.75,0.25,0.25), $(\Delta_5 - \Delta_5$ (0.75,0,0) [7]; $(\Delta$ (0.7,0,0), (0.9, 0.2,0.2), $\Sigma$ (0.7,0.7,0), $\Delta$ (0.7, 0, 0), (0.35, 0.07,0.7), $\Delta$ (0.2,0,0) [8])	5.37 5.78	5.37	$E_2$
	-	0.83	$\Delta_0$
	0.61	0.61	$\Delta_1$

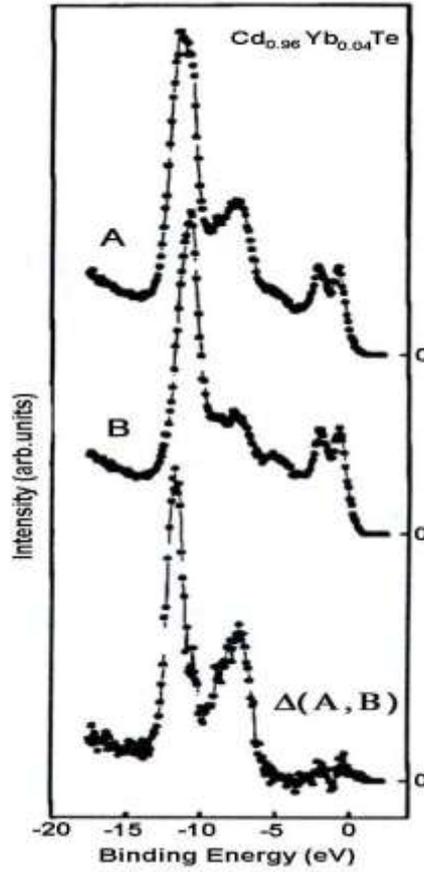
إن البنية  $(E_1, E_1 + \Delta_1)$  تمثل الانتقالات من السيين- مدار لعصابة التكافؤ المنشطرة في جوار النقطة L وبالاتجاه  $\Lambda <111>$  لمنطقة بريلون (BZ)، إلى أخفض سوية في عصابة الناقلية وإلى السوية التالية لها. لهذه الانتقالات الحالة الابتدائية نفسها [7, 8] تتوافق القيمة  $\Delta_1 = 0.61 \text{ eV}$  المبينة في الجدول (1) مع ثلثي طاقة الانشطار المقدر من أجل  $\vec{k} = 0$  بشكل جيد.

تمثل الطاقة  $E_2$  الواضحة والمميزة الانتقالات الضعيفة التوضع في الفراغ  $\vec{k}$  بالاتجاهين  $\Delta$  و  $\Sigma$  بشكل خاص [7, 8].

يعطي وجود أيونات Yb مايلي (الشكل 1):

- (1) لا يوجد تغير في مواضع بعض القمم  $(E_0 + \Delta_0, E_1, E_1 + \Delta_1)$  لذا فإنه من السهل أن نعزو ذلك إلى الانتقالات ما بين العصابات في CdTe النقي (انظر الجدول 1).
- (2) التعريض الملحوظ في القمة المميزة للانعكاسية توافق مجالاً من الطاقة  $h\nu$  واقعاً ما بين 3.5- 4.5 eV.
- (3) ظهور الصعود الذي أشرنا له بـ A لم نلاحظه في طيف CdTe.
- (4) أقوى القمم  $E_2$  انشطرت إلى قمتين واضحتين جداً. القمة الأولى تظهر عند 5.37 eV (كما في مركب CdTe) والثانية تظهر عند 5.78 eV.

يسمح لنا تحليل مواضع الطيف الناتج للفلم الرقيق وأشكاله  $Cd_{0.96}Yb_{0.04}Te$  أن نجد تأثير YbTe في خصائصه الضوئية. إن الشكل الكامل للطيف  $Cd_{0.96}Yb_{0.04}Te$  يشابه جداً طيف CdTe، بالرغم من أننا نلاحظ قمة عظمى صغيرة A في مجال الطاقات المنخفضة عند 2.02 eV. يبدي منحنى البلورة  $Cd_{0.96}Yb_{0.04}Te$  وجوداً مكثفاً للمركب YbTe. نلاحظ أن حرف الامتصاص YbTe يحدث عند 1.8 eV [9]، لذا فإنه من الممكن أن ننسب بحذر القمة العظمى A إلى الانتقالات الضوئية في الجزء العلوي من عصابة التكافؤ (عند  $\Gamma$ ) كأنها فجوة طاقة للفلم الرقيق  $Cd_{0.96}Yb_{0.04}Te$ ، وإن لم نتأكد منها تجريبياً إلى الآن. فمن وجهة نظر الإصدار الضوئي [10-11] الالكترونات المعتبرة f في الجزء العلوي من عصابة التكافؤ في النقطة  $\Gamma$  تم التأكد منها بدراسة الإصدار الضوئي الطينيني. وتظهر أن حالات  $Ybf^{14}$  توجد قريبة من حرف عصابة التكافؤ، بينما حالات  $Ybf^{13}$  تقع عميقاً في عصابة التكافؤ (الشكل 2).



الشكل 2. منحنى طاقة توزع الالكترونات الضوئية (أي منحنى عدد الالكترونات الصادرة بدلالة طاقتها) من أجل طاقة ظنينية مقدارها 177,5 eV للطيف A، وطاقة لا ظنينية مقدارها 174,5 eV للطيف B. يبين المنحنى السفلي الفرق بين الطيفين A و B، وهو قياس توزع كثافة الحالات الايتربيوم. يطابق الصفر على مقياس الطاقة حد عصابة التكافؤ.

تقودنا هذه الدراسة إلى استنتاج أن سويات الايتربيوم قريبة من سوية فيرمي، وأن بنية عصابة التكافؤ CdYbTe عند طاقة ارتباط مساوية إلى 5eV تشابه بنية CdTe. كما وجد أن الايتربيوم في المركب CdYbTe يوجد في حالتين مميزتين بالشحنة  $Yb^{+2}$  و  $Yb^{+3}$ . تميز الحالة  $Yb^{+2}$  الايتربيوم الموجود على السطح. لوحظت القيمة العظمى لهذه البنية في المركب CdYbTe عند 1.25eV. هذه الحالة تحدث بالقرب من قمة عصابة التكافؤ (عند  $\Gamma$ ) وهو ما يدعم اقتراحنا بحصول تفاعل للالكترونات في عصابة التكافؤ بالقرب من النقطة  $\Gamma$  في BZ مع الكترونات في Yb.

لم نلاحظ تغيرات مهمة في  $E_1$  (عند 3.28 eV) ناتجة عن YbTe. أما الانخفاض القليل في ارتفاع القمة  $E_1 + \Delta_1$  بالمقارنة مع القمة  $E_1$ ، فيعزى إلى دخول حالات Yb في بنية عصابة CdTe. تبدي هذه المنطقة فوضى عارمة نتيجة لوجود حالات Yb. لذا فإن هذه القمة لانتحرف بشكل ملحوظ بوجود الايتربيوم، ولكن تصبح عريضة، ومن المحتمل أن يكون ذلك ناتجاً عن انتقالات ما بين الذرات في هذه المنطقة. تبدو القيمة العظمى الكبرى  $E_2$  متأثرة بشدة بوجود أيونات Yb الناتجة عن الانتقالات في نقاط عديدة في منطقة بريلون الحجمية. إنها تنتشر إلى قيمتين مميزتين تظهر الأولى عند 5.37eV (تطابق مع CdTe)، والثانية عند 5.78 eV بوجود أيونات الايتربيوم. والفرق بينهما هو 0.41eV. يتطلب هذا التأثير أن تملك الانتقالات الحالات النهائية نفسها وتتوضع حول

4eV تقريباً فوق القيمة العظمى لعصابة التكافؤ. وهذا ينسجم مع نتائج الاصدار الضوئي الطينيني التي تبين أن الايتيريوم يدخل كشائبة إلى بلورة CdTe ويتصرف كأيون  $Yb^{+3}$  في البلورة  $Cd_{0.96}Yb_{0.04}Te$  [10,11]. إن بنية عصابة التكافؤ للمركب CdTe المتوضعة عند طاقة الارتباط الدنيا ( $\sim 2.4eV$ ) تكون مغطاة بالشكل المتولد لـ  $Yb$  في الحالة  $4f$ .

وعلى الرغم من أن بنية العصابة للبلورة  $Cd_{0.96}Yb_{0.04}Te$  تشابه جداً بنية عصابة CdTe، فقد دلت النتائج التي حصلنا عليها في هذه الدراسة على وجود تغير ملموس في شكل عصابة التكافؤ وعصابة الناقلية ناتجة عن عدم الترتيب الحاصل في الشبكة.

## 5. الاستنتاجات والتوصيات:

سمح لنا تحليل طيف الانعكاسية للبلوريتين  $Cd_{0.96}Yb_{0.04}Te$  و CdTe بتحديد الفرق بين طيفيهما نوجزه بما يلي:

- (1) ظهور قمة جديدة دعوناها A، وهي التي تحدث عند طاقة تقارب  $2.02eV$  بسبب الانتقال المباشر  $\Gamma_{8V} - \Gamma_{6C}$ ، وهذا يعود إلى مساهمة Yb في سويات  $\Gamma$ . ولذا يمكن توقع توسع في فجوة الطاقة عند النقطة  $\Gamma$ .
- (2) إن القمة  $E_1$  (الانتقال الضوئي  $\Lambda_3 - \Lambda_1$ ) التي تتوافق في الاتجاه مع [111] في منطقة بريلون، تدل على التوسع بسبب مساهمة Yb في المحلول الصلب المدروس. يرتبط هذا الفعل بشكل كمون البلورة الناتج عن انعدام الترتيب على المدى الطويل في البلورة.
- (3) إن مساهمة الانتقالات الضوئية في القمة  $E_2$ ، تعود إلى الانتقالات في مختلف نقاط حجم منطقة BZ، وعدلت بشكل ملحوظ في المحلول الصلب الحاوي على Yb. هذه القمة تأثرت بقوة بسبب الايتيريوم وانشطرت إلى قمتين متميزتين.

## المراجع:

1. BOYN, R. *4f-4f Luminescence of rare-earth centers in II-VI compounds*. Phys. Stat. Sol. (b) Germany. Vol. 148, 1998, 11- 47.
2. STEINERT, J.; KHALAF, H.; RIMPLER, M.; SADOWSKI, J.; DYNOWSKA, E.; SZAMOTA-SADOWSKA, K.; PRZEDPELSKI, W.; SWITATEK, K.; SITAREK, P. *Properties of MBE grown CdYbTe and ZnYbTe on GaAs(100) substrates*. J. Cryst. Growth ELSEVIER Science. Vol. 159, 1996, 1075 -1079.
3. SZAMOTA-SADOWSKA, K.; KOWALSKI, B. J.; SADOWSKI, J.; ORLOWSKI, B. A.; DYNOWSKA, E. *Reflectivity spectra of CdYbTe and ZnYbTe MBE grown crystals*. Electron Technology Poland. Vol. 29, No 2/3, 1996, 294 -296.
4. SAREM, A.; KOWALSKI, B. J.; ORLOWSKI, B. A. *Optical properties of Fe-based semimagnetic semiconductors*. J. Phys. Condens. Matter England. Vol. 2, 1990, 8173- 8187.
5. CARDONA, M.; GREENAWAY, D. L. *Fundamental reflectivity and band structure of ZnTe, CdTe, and HgTe*. Phys. Review USA. Vol. 131, 1963, 98-103.
6. SURYANARAYANAN, R.; FERRE, J.; BRIAT, B. *Low-temperature optical absorption and magnetic circular dichroism of YbTe thin films*. Phys. Review B USA. Vol. 9, 1974, 554 - 557.
7. CHELIKOWSKY, J. R.; COHEN, M. L. *Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors*. Phys. Rev B USA. Vol. 14, 1976, pp 556 - 582.
8. CHADI. D. J.; WALTER. J. P.; COHEN. M. L.; PETROFF Y.; BALKANSKI. M. *Reflectivities and Electronic Band Structure of CdTe and HgTe*. Phys. Review B USA. Vol. 5, 1972, 3058- 3064.
9. NARAYANAMURTI, V.; JAYARAMAN, A.; BUCHER. E. *Optical absorption in ytterbium monochalcogenides under pressure*. Phys. Review B USA. Vol. 9, 1974, 2521-2526.
10. SZAMOTA – SADOWSKA, K.; KOWALSKI, B. J.; GUZIEWICZ, E.; SADOWSKI, J.; ORLOWSKI, B. A.; GOLACKI, Z.; GHIJSEN, J.; JOHNSON, R. L.; BELKHON, R.; RDOSAVKIC, D.; MARTINOTTI, D.; BARRETT, N.; GUILLOT, C. *Influence of Yb on valence band density of states of CdYbTe and PbYbTe - a resonant photoemission study*. Acta Physica Polonica A Poland. Vol. 90, 1996, 943-946.
11. SZAMOTA-SADOWSKA, K.; GUZIEWICZ, E.; KOWALSKI, B. J.; SADOWSKI, J.; ORLOWSKI, B. A.; LESIAK-ORLOWSKA, B.; GUILLOT, C.; BARRETT, N.; JOHNSON, R. L. *Electronic structure of MBE CdYbTe: photoemission studies*. Thin Solid Films, ELSEVIER Science. Vol. 367, 2000, 193-198.