

УДК 621.315.592.538.915

## ИССЛЕДОВАНИЕ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ИК–ЛАЗЕРОВ НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ $A^{II}B^{VI}$ , ЛЕГИРОВАННЫХ ИОНАМИ $Fe^{2+}$

© 2015 г. И. С. Курчатов, Д. М. Кустов

Национальный исследовательский университет «МЭИ»,  
Красноказарменная улица, д. 14, Москва, 111250, Россия

### Введение

В настоящее время полупроводниковые лазеры нашли широкое применение в [1]:

- волоконно–оптических линиях связи (ВОЛС);
- технологии формообразования, резке и сварке различных материалов;
- медицине для диагностики и лечения различных заболеваний;
- системах военного назначения;
- научных исследованиях;
- измерительной технике и др.

Полупроводниковые лазеры характеризуются большим диапазоном генерируемой мощности в непрерывном и импульсном режимах и большим быстродействием при импульсной модуляции, а их частота излучения может перестраиваться в пределах области люминесценции [2]. По сравнению с другими типами лазеров они имеют наибольший коэффициент полезного действия, а также меньшие массу и габариты. Волоконно–оптические линии связи — это одна из самых больших областей применения полупроводниковых лазеров. Известно, что полоса прозрачности ВОЛС в диапазоне длин волн 1,5–3 мкм значительно шире спектров передаваемых сигналов. Поэтому для повышения экономической эффективности построен-

ных и новых ВОЛС перспективна передача сигналов на новых, еще не использованных частотах. Возможно, именно по этой причине в последние годы возник интерес к исследованиям по созданию лазеров на полупроводниках  $A^{II}B^{VI}$  и  $A^{III}B^V$ , легированных ионами  $Cr^{2+}$ ,  $Co^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$  и  $Fe^{2+}$  и редкоземельных элементов. Ранее как теоретические, так и экспериментальные исследования в этом направлении обычно выполняли на отдельном типе полупроводника, легированного одним из ионов [3–7]. С появлением общей теории лигандной структуры окружения ионов группы железа ( $Co^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$  и  $Fe^{2+}$ ) [8–11] стало возможным рассчитать весь набор параметров областей люминесценции ионов группы железа в полупроводниках  $A^{II}B^{VI}$ . В работах [12, 13] рассчитаны параметры массива областей люминесценции в ионах  $Co^{2+}$  и  $Ni^{2+}$ , введенных в полупроводники  $A^{II}B^{VI}$  в диапазоне длин волн 1,5–3 мкм, и дано сравнение результатов расчета с результатами экспериментальных исследований других авторов. Ниже приведены результаты такого расчета для ионов  $Fe^{2+}$  в полупроводниках  $A^{II}B^{VI}$ .

### Определение параметра $Dq$

Параметр  $Dq$  в ионной модели диэлектрических кристаллов можно рассчитать по формуле

Полоса прозрачности волоконно–оптических линий связи (ВОЛС) в диапазоне длин волн 1,5–3 мкм значительно шире спектров передаваемых сигналов. Для повышения экономической эффективности построенных и новых ВОЛС перспективно применение передачи сигналов на новых, еще не использованных частотах.

С этим, возможно, связан интерес к исследованиям по созданию лазеров на полупроводниках  $A^{II}B^{VI}$  и  $A^{III}B^V$ , легированных ионами  $Cr^{2+}$ ,  $Co^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$  и  $Fe^{2+}$  и редкоземельных элементов. Ранее исследования в этом направлении выполняли на отдельном типе полупроводника, легированного одним из ионов. С появлением общей теории лигандной структуры окружения ионов группы железа ( $Co^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$  и  $Fe^{2+}$ ) появилась возможность рассчитать весь набор параметров областей люминесценции ионов группы железа в полупроводниках  $A^{II}B^{VI}$ , в дополнение к более традиционным способам исследований.

Приведены результаты расчета параметров массива областей люминесценции для ионов  $Fe^{2+}$  в полупроводниках  $A^{II}B^{VI}$ .

Показано, что полученные расчетные значения спектральных областей люминесценции совпадают со значениями, определенными экспериментально другими авторами, что подтверждает правильность выбранного метода расчета.

Полученные результаты позволяют целенаправленно выбирать из всего рассчитанного массива переходов в материалах  $A^{II}B^{VI}$ , легированных  $Fe^{2+}$ , наиболее подходящие для создания ИК–лазеров с требуемыми значениями длины волны и спектральных характеристик излучения, перестраиваемых в широком диапазоне длин волн.

**Ключевые слова:** полупроводниковые лазеры, ионы группы железа, энергетическая структура, интенсивности переходов.

$$Dq = k \frac{Z_L r_{3d}^4}{R_{AL}^5}, \quad (1)$$

где  $Z_L$  — заряд лигандов  $B$ ;  $r_{3d}$  — радиус  $3d$ -оболочки иона  $Co^{2+}$ ;  $R_{AL}$  — расстояние между атомами  $A$  и  $L = B$  в кристаллической решетке  $A^{II}B^{VI}$  или  $A^{III}B^V$ ;  $k$  — координационное число окружения иона, для  $Fe^{2+}$   $k = 4$ .

В работе [13] на основании экспериментальных значений параметра  $Dq$  в материалах  $A^{II}B^{VI}$  была определена зависимость заряда лигандов

$$Z_L = \frac{R_{AL}^5}{k r_{3d}^4} Dq$$

от межионного расстояния в этих материалах. На основании этих расчетов по формуле (1) были оценены значения параметра  $Dq$ ,  $B$ ,  $C$  для  $Fe$  с использованием радиуса оболочки  $Fe$   $r_{3d}(Fe^{2+}) = 66$  пм. Значения  $Dq$ ,  $B$  и  $C$  получены параметризацией зависимости, построенной в работе [13] по данным из статьи [14], и приведены в табл. 1.

Параметр электростатического взаимодействия  $B$  в ряду кристаллов незначительно уменьшается с увеличением межионного расстояния. Поэтому в ряду кристаллов  $A^{II}B^{VI}$  такое уменьшение можно учесть, введя феноменологический коэффициент, который постоянен в этом ряду. Второй параметр электростатического взаимодействия, как это следует из расчетов для свободного иона [15], можно определить по формуле  $C = 4,5B$ .

Согласно формуле (1), параметр  $Dq$  должен быть пропорционален  $R_{AL}^{-5}$ . Отклонение от этой зависимости может означать, что заряд лигандов не является постоянной величиной и меняется в соответствии с изменением химической связи между ионом легирующего материала и лигандами, перекрытием

волновых функций и примесью ковалентной связи. Доля ковалентной связи зависит от разности электроотрицательностей иона легирующего материала и атомов лигандов. При уменьшении этой разности увеличивается доля ковалентной связи, и результирующий заряд лигандов уменьшается. Значения зарядов лигандов ионов  $Fe^{2+}$ , полученные в работе [13], также представлены в табл. 1.

Учитывая зависимость параметров  $Dq$ ,  $B$  и  $C$  от  $R_{AL}$ , были определены значения параметра  $Dq$  и рассчитаны спектральные характеристики для иона железа для всего массива материалов.

### Энергетические уровни $Fe^{2+}$ в кристаллах соединений $A^{II}B^{VI}$

При расчете использовали матрицу всех взаимодействий электронной конфигурации  $d^6$   $210 \times 210$ , с параметризацией  $B$ ,  $C$ ,  $Dq$  и 13 параметров кристаллического поля низкой симметрии [10, 11]. Так как симметрия окружения иона железа в кристаллах  $A^{II}B^{VI}$  тетраэдрическая, то можно ограничиться одним параметром кристаллического поля  $Dq$ .

На рис. 1 приведены результаты расчетов энергии уровней  $E$  и силы осцилляторов  $f$  переходов с  $(^5D)^4$  уровней иона  $Fe^{2+}$  в  $CdO$ ,  $CdS$ ,  $CdSe$ ,  $CdTe$  и  $ZnO$ ,  $ZnS$ ,  $ZnSe$ ,  $ZnTe$ . Полученные при расчетах данные по полосам люминесценции совпадают с тремя основными полосами люминесценции  $ZnS$  и  $ZnSe$ , экспериментально измеренными в работе [4] в пределах погрешности измерения. Помимо длин волн, также рассчитаны силы осцилляторов переходов спектра люминесценции для каждого из этих материалов. В табл. 2 приведены значения силы осцилляторов при переходах из основного состояния  $(^5D)^4$  иона  $Fe^{2+}$

Таблица 1

### Спектроскопические параметры иона $Fe^{2+}$ в полупроводниковых кристаллах $ZnO$ , $ZnS$ , $ZnSe$ , $ZnTe$ , $CdO$ , $CdS$ , $CdSe$ , $CdTe$

[Spectroscopy of  $Fe^{2+}$  Ion and  $ZnO$ ,  $ZnS$ ,  $ZnSe$ ,  $ZnTe$ ,  $CdO$ ,  $CdS$ ,  $CdSe$  and  $CdTe$  Semiconductor Crystals]

Лиганд	$R_{AL}$ , пм		$Dq$ , $cm^{-1}$		$B$ , $cm^{-1}$		$C$ , $cm^{-1}$		$Z_L$ [13]	
	(Zn-L)	(Cd-L)	(ZnL)	(CdL)	(ZnL)	(CdL)	(ZnL)	(CdL)	(ZnL)	(CdL)
O	204	—	337	—	700	—	3148	—	0,155	
S	233	—	306	—	597	—	2687	—	0,287	
Se	247	—	291	—	548	—	2465	—	0,358	
Te	266	—	270	—	481	—	2163	—	0,479	
O	—	221	—	319	—	640	—	2878	—	0,213
S	—	250	—	287	—	537	—	2417	—	0,342
Se	—	264	—	272	—	488	—	2195	—	0,437
Te	—	283	—	251	—	421	—	1893	—	0,600

Обозначения:  $R(Zn-L)$ ,  $R(Cd-L)$  — сумма ковалентных радиусов цинка, кадмия и атомов лигандов  $L$ ;  $Dq(ZnL)$ ,  $Dq(CdL)$  — параметр потенциала кристаллического поля кубической симметрии ( $cm^{-1}$ );  $B(ZnL)$ ,  $B(CdL)$ ,  $C(ZnL)$ ,  $C(CdL)$  — параметры электростатического взаимодействия атома железа в соответствующих кристаллах;  $Z_L(Zn)$ ,  $Z_L(Cd)$  — заряд лиганда.

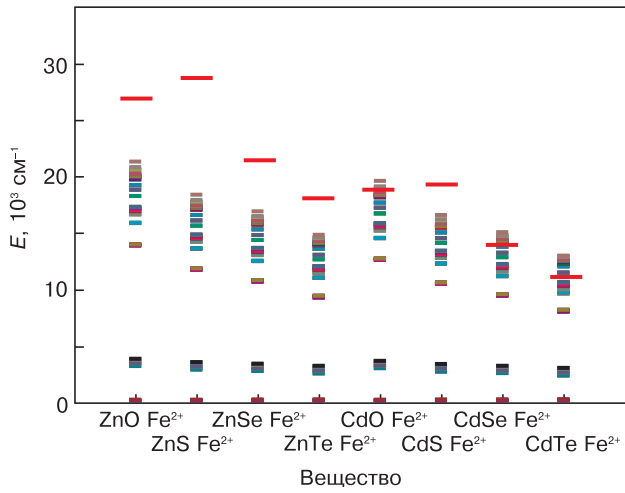


Рис. 1. Энергетические уровни соединений  $A^{II}B^{VI}$ , легированных ионами  $Fe^{2+}$ , на примере ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdO, CdS, CdSe и CdTe

Fig. 1. Energy Levels of  $A^{II}B^{VI}$  Compounds Doped with  $Fe^{2+}$  Ions for the Example of ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdO, CdS, CdSe and CdTe

на все остальные для CdO, CdS, CdSe, CdTe. Отметим, что рассчитываются не только энергии 90 уровней, но и силы осцилляторов переходов электродипольного типа, индуцированные нечетным потенциалом кристаллического поля.

Таким образом, достигнута основная цель проведенного аппроксимационного исследования — идентификация переходов и определение их энергии. На рис. 2 приведены длины волн люминесценции  $\lambda$  при переходах с  $(^5D)^4$  уровня иона  $Fe^{2+}$  в диапазоне от 0 до  $12000\text{ см}^{-1}$  в материалах группы  $A^{II}B^{VI}$ .

**Заключение**

С использованием нового способа аппроксимационной параметризации матриц для легированных ионами  $Fe^{2+}$  материалов  $A^{II}B^{VI}$  определены спектральные области люминесценции, сила осцилляторов и время жизни для каждого перехода в ионе  $Fe^{2+}$  в массиве ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdO, CdS, CdSe, CdTe.

Таблица 2

**Энергия уровней и сила осцилляторов переходов с  $(^5D)^4$  уровней иона  $Fe^{2+}$  в CdO, CdS, CdSe, CdTe**  
 [Energies and Oscillator Forces of Transitions from the  $(^5D)^4$  Shells of  $Fe^{2+}$  Ions in CdO, CdS, CdSe and CdTe]

№	Уровни	CdO		CdS		CdSe		CdTe	
		$E, \text{ см}^{-1}$	$f(10^{-7})$	$E, \text{ см}^{-1}$	$f(10^{-7})$	$E, \text{ см}^{-1}$	$f(10^{-7})$	$E, \text{ см}^{-1}$	$f(10^{-7})$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	$^5D_4$	0	—	0	—	0	—	0	—
2		28	4,773636	30	5,416572	32	10,7561	34	33,25658
3		28	10,71957	30	28,13497	32	22,2507	34	9,818412
4		28	12,76896	30	8,611517	32	18,62565	34	26,67836
5		54	19,68547	59	24,73237	61	35,3589	65	47,18116
6		54	16,86143	59	29,06856	61	29,97768	65	39,75931
7		92	19,58177	102	51,01132	107	105,4696	116	34,75182
8		92	63,31965	102	74,27607	107	25,18232	116	66,87795
9		92	13,26055	102	20,27412	107	49,03738	116	144,1297
10	$^5D_3$	132	45,92268	147	70,57288	156	87,86193	171	122,0456
11		2953	594,2321	2646	643,9904	2502	2239,475	2302	1211,195
12		2953	1413,586	2646	1856,035	2502	1033,668	2302	893,4748
13		2953	750,4985	2646	928,7286	2502	552,9304	2302	2397,879
14		3211	1200,568	2906	612,2573	2764	915,6474	2567	1972,77
15		3211	534,9034	2906	915,3724	2764	837,0657	2567	873,2283
16		3211	519,2736	2906	1321,362	2764	1454,493	2567	981,7355
17	$^5D_2$	3232	327,1952	2928	455,8393	2786	517,7665	2589	588,1808
18		3232	355,1373	2928	423,4075	2786	482,9423	2589	626,5582
19		3555	596,8351	3248	730,8348	3105	804,0326	2905	1032,931
20		3555	542,3546	3248	748,2402	3105	776,4543	2905	933,3019
21		3555	578,1847	3248	687,5071	3105	859,4934	2905	952,8145
22	$^5D_1$	3583	619,6396	3278	438,3933	3135	587,7485	2937	490,3095
23		3583	296,6179	3278	908,1105	3135	831,0287	2937	638,1275

Продолжение таблицы 2

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	
24		3583	415,1918	3278	334,7625	3135	477,1853	2937	1146,174	
25	$^5D_0$	3611	131,7139	3306	177,3744	3163	206,8539	2964	261,2604	
26	$^3H_6$	12619	9,104121	10453	7,7051	9407	8,895242	7985	7,931022	
27		12619	2,689945	10453	4,308163	9407	5,478268	7985	18,46892	
28		12619	3,979843	10453	13,8534	9407	19,14556	7985	23,29847	
29		12684	8,220425	10540	10,24148	9500	13,3226	8088	19,85174	
30		12696	6,209331	10540	14,8527	9500	19,05218	8088	27,7303	
31		12696	9,208501	10545	13,77299	9517	18,07083	8122	27,25717	
32		12730	8,18175	10588	13,12721	9557	13,78847	8158	25,89691	
33		12730	8,090717	10588	16,68175	9557	26,10709	8158	24,95183	
34		12730	9,170602	10588	12,78333	9557	15,94352	8158	33,26024	
35		14552	2,589522	12253	4,978443	11148	8,134483	9638	8,753034	
36		14552	3,261181	12253	5,864042	11148	5,58283	9638	14,02526	
37		14552	3,160701	12253	4,949148	11148	7,966673	9638	13,99103	
38		14583	4,847519	12296	6,644183	11198	12,36361	9706	12,94936	
39		14583	2,699855	12296	8,252523	11198	6,009723	9706	8,637356	
40		$^3H_5$	14583	3,806726	12296	3,860016	11198	6,050882	9706	14,89136
41			15238	7,804953	12779	5,643352	11598	19,07367	9990	17,74316
42	15238		4,045774	12779	7,733564	11598	12,75455	9990	11,90314	
43	15238		4,641656	12779	15,59213	11598	7,370607	9990	32,24813	
44	15246		3,588165	12794	6,062334	11617	7,980895	10020	12,15007	
45	15246		4,894627	12794	8,148968	11618	10,70819	10020	16,2524	
46	15471		7,310581	13023	12,05568	11848	15,64165	10247	23,15741	
47	15559		10,4151	13105	25,52487	11926	36,68404	10322	57,73507	
48	15559		13,61225	13105	18,66622	11926	28,99194	10322	36,73398	
49	15559		14,91057	13105	23,18839	11926	23,89204	10322	41,84413	
50	15700	6,384205	13232	11,15186	12043	14,9274	10419	23,11424		
51	$^3H_4$	15700	4,683194	13232	7,959506	12043	10,49533	10420	15,86235	
52		15804	17,65464	13359	19,16583	12186	38,63395	10582	17,41573	
53		15804	6,534343	13359	19,1269	12186	25,27757	10582	31,97917	
54		15804	9,621925	13359	20,89165	12186	15,84903	10582	10,69445	
55		15873	4,741551	13399	8,94423	12208	11,01781	10590	23,70768	
56		15873	2,610968	13399	7,690903	12208	4,549989	10590	44,76168	
57		15873	5,380067	13399	2,779331	12208	8,337869	10590	29,19598	
58		15884	4,978877	13426	7,98891	12246	10,22173	10642	14,79302	
59		16752	46,36286	14113	59,52444	12847	30,90029	11127	131,0564	
60	$^3P_2$	16752	9,883543	14113	32,84118	12847	87,35846	11127	58,64588	
61		16752	20,51894	14113	32,26768	12847	41,2361	11127	39,81141	
62		17263	6,946567	14539	10,72399	13237	13,87215	11470	20,50806	
63		17263	6,063877	14539	10,56883	13237	14,95381	11470	23,02983	
64	17263	6,549667	14539	11,43522	13237	13,98703	11470	20,59309		
65	$^3F_4$	17717	2,942673	15054	3,080148	13777	2,484663	12030	6,891724	
66		17717	1,323423	15054	8,355794	13777	2,41279	12030	3,284952	
67		17717	5,053829	15054	2,644959	13777	12,33274	12030	12,44502	
68		17724	3,824119	15060	5,916174	13783	7,413403	12037	10,44432	

Продолжение таблицы 2

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
69		17725	1,987595	15062	3,017407	13785	3,74962	12039	5,230008
70		18203	4,848155	15455	10,95932	14114	14,30636	12264	20,96593
71		18203	4,675882	15455	10,46493	14114	8,8264	12264	12,89708
72		18203	4,257111	15455	7,059171	14114	16,18479	12264	21,99082
73		18256	2,0556	15557	9,988889	14169	8,303712	12271	5,10969
74	$^3F_3$	18368	5,955189	15557	3,889307	14169	6,078109	12271	5,096686
75		18414	11,08068	15557	3,792109	14169	4,419385	12271	14,25463
76		18414	7,385111	15586	10,05954	14253	13,21208	12433	19,8921
77		18414	8,821985	15591	3,202263	14306	11,12677	12523	9,216916
78		18415	5,226274	15622	7,610059	14306	9,035977	12523	14,24649
79		18415	4,188622	15622	11,83503	14306	8,598142	12523	7,485684
80		18415	6,977801	15622	9,776656	14317	4,009539	12562	16,37633
81	$^3F_2$	18579	1,367232	15731	6,348357	14386	5,565228	12562	10,62223
82		18579	1,414494	15731	4,491086	14386	9,020207	12562	9,34662
83		18579	1,628179	15731	4,237845	14386	8,23134	12578	5,495583
84		18666	4,230479	15864	6,595782	14517	8,202332	12669	11,08509
85		18668	6,218433	15867	10,00551	14520	12,70982	12672	17,90159
86	$^3G_5$	18974	3,032429	16117	7,019331	14755	19,79172	12888	25,31471
87		18974	7,783318	16117	24,72726	14755	28,70144	12903	21,2346
88		18974	10,49955	16117	12,74317	14755	15,57951	12903	26,37933
89		19179	8,619405	16228	13,78662	14816	17,55964	12903	60,51524
90		19655	4,769195	16616	3,293996	15081	4,749253	13000	9,338828

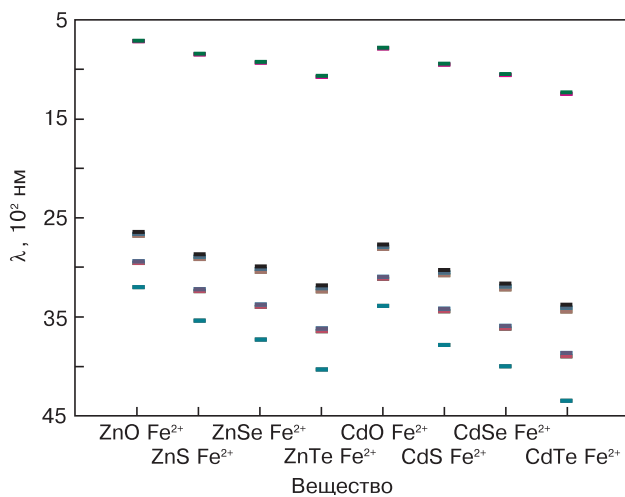


Рис. 2. Длины волн электронных переходов для ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdO, CdS, CdSe, CdTe, легированных ионами Fe<sup>2+</sup>  
 Fig. 2. Wavelengths of Electron Transitions for ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdO, CdS, CdSe and CdTe Doped with Fe<sup>2+</sup> Ions

Показано, что полученные расчетные значения спектральных областей люминесценции совпадают со значениями, определенными экспериментально другими авторами, что подтверждает правильность выбранного метода расчета.

Полученные результаты позволяют целенаправленно выбирать из всего рассчитанного массива

переходов в материалах A<sup>II</sup>B<sup>VI</sup>, легированных Fe<sup>2+</sup>, наиболее подходящие для создания ИК-лазеров с требуемыми значениями длины волны и спектральных характеристик излучения, перестраиваемых в широком диапазоне длин волн.

**Библиографический список**

1. Гоголева, Н. Г. Применение лазеров в науке, технике и медицине / Н. Г. Гоголева. – СПб.: Издательство СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2007.
2. Page, R. H. Cr<sup>2+</sup> — doped zinc chalcogenides as efficient, widely tunable mid-infrared lasers / R. H. Page, K. I. Schaffers, L. D. DeLoach, G. D. Wilke, F. D. Patel, J. B. Tassano, S. A. Payne, W. F. Krupke, K. T. Chen, A. Burger // IEEE J. Quantum Electron. – 1997. – V. 33, N 4. – P. 609—617. DOI: 10.1109/3.563390
3. Baranowski, J. M. Crystal-field spectra of 3dn impurities in II–VI and III–V compound semiconductors / J. M. Baranowski, J. W. Allen, G. L. Pearson // Phys. Rev. – 1967. – V. 160. – P. 627—632.
4. DeLoach, L. D. Transition metal-doped zinc chalcogenides: spectroscopy and laser demonstration of a new class of gain media / L. D. DeLoach, R. H. Page, G. D. Wilke, S. A. Payne, W. F. Krupke // IEEE J. Quantum Electron. – 1996. – V. 32. – P. 885—895.
5. Pappalardo, R. Absorption spectra of transition ions in CdS crystals / R. Pappalardo, R. E. Dietz // Phys. Rev. – 1961. – V. 123. – P. 1188—1203.
6. Weakliem, H. A. Optical spectra of Ni<sup>2+</sup>, Co<sup>2+</sup>, and Cu<sup>2+</sup> in tetrahedral sites in crystals / H. A. Weakliem // J. Chem. Phys. – 1962. – V. 36. – P. 2117—2140. DOI: 10.1063/1.1732840
7. Griffith, J. S. The theory of transition metal ions / J. S. Griffith. – Cambridge: Cambridge University Press, 1961. – 468 p.
8. Kustov, E. F. Орбитальная система структур наноразмерной дисперсности / Е. F. Kustov // Изв. Акад. инженерных наук им. А. М. Прохорова. – 2013. – № 1. – С. 92—124.



9. Kustov, E. F. Orbital structure of vibrations of nanoparticles, clusters, and coordination polyhedra / E. F. Kustov, V. M. Novotortsev, M. E. Kustov // *Russ. J. Inorganic Chem.* – 2013. – V. 58, N 14. – P. 1624–1646.

10. Кустов, Е. Ф. Матрицы энергии и сил осцилляторов электродипольных переходов в ионах  $3dn$  ( $n = 2, 3, 4, 6, 7, 8$ ) конфигураций ( $Cr^{2+}$ ,  $Co^{2+}$ ,  $Fe^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$ ) в кристаллических полях любой симметрии / Е. Ф. Кустов, И. Т. Басиева // *Реестр базы данных № 2012621086 от 19.10.2012.*

11. Кустов, Е. Ф. Расчет оптических спектров ионов  $Cr^{2+}$ ,  $Cr^{3+}$ ,  $Cr^{4+}$ ,  $Co^{2+}$ ,  $Co^{3+}$ ,  $Fe^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$  в полупроводниках  $A^{II}B^{VI}$ ,  $A^{III}B^{V}$  / Е. Ф. Кустов, И. Т. Басиева // *Реестр программ для ЭВМ № 2012619507 от 19.10.2012.*

12. Кустов, Д. М. ИК лазеры на полупроводниках  $A^{II}B^{VI}$  и  $A^{III}B^{V}$  с ионами  $Co^{2+}$  / Д. М. Кустов, А. В. Бундюк, Е. О. Гончаров, И. С. Курчатова // *Изв. Акад. инженерных наук им. А. М. Прохорова.* – 2014. – № 2. – С. 49–52.

13. Курчатова, И. С. Исследование материалов для ИК-лазеров на основе полупроводников  $A^{II}B^{VI}$  и  $A^{III}B^{V}$ , легированных ионами  $Co^{2+}$  / И. С. Курчатова, А. В. Бундюк, И. Т. Басиева, Д. М. Кустов // *Вестн. СГТУ.* – 2014. – № 2. – С. 35–41.

14. Dreyhsig, J. Nature of optical transitions in the charge-transfer region of  $ZnS : Co$  and  $ZnSe : Co$  / J. Dreyhsig, B. Litzenburger // *Phys. Rev. B.* – 1996. – V. 54. – P. 10516–10524. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.10516

15. Кустов, Е. Ф. Магнетохимия молекулярных структур / Е. Ф. Кустов, В. М. Новоторцев. – М.: URSS Crosand, 2014. – 400 с.

Статья поступила в редакцию 31 марта 2015 г.

ISSN 1609–3577 *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronic Technics.* 2015, vol. 18, no. 4, pp. 273–278.

### Study of $A^2B^6$ based materials for IR lasers doped with $Fe^{2+}$ ions

Ivan S. Kurchatov<sup>1</sup> — Postgraduate Student (kurchatovivan@mail.ru);  
Daniiil M. Kustov<sup>1</sup> — Student (phobos9999@gmail.com)

<sup>1</sup>National Research University  
«Moscow Power Engineering Institute»,  
14 Krasnokazarmennaya Str., Moscow 111250, Russia

**Abstract.** It well-known that optical fibers have a «window of transparency» (1.5–3  $\mu m$ ) which is much wider than the spectra of the transmitted signals. For this reason there is some potential in transmitting signals using different, previously unused frequencies, in order to increase the economic efficiency of existing and new optical fiber lines. This may be the origin of the great interest to research into the creation of  $A^2B^6$  and  $A^3B^5$  semiconductor lasers doped with  $Cr^{2+}$ ,  $Co^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$ ,  $Fe^{2+}$  and rare earth element ions. Theoretical and experimental studies in this field are usually focused on one type of semiconductor doped with one type of ion. With the appearance of the general theory of ligand structure environment of iron group ions ( $Co^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$  and  $Fe^{2+}$ ) there is now a way to calculate the full matrix of luminescence parameters of iron group ions for the entire group of  $A^2B^6$  semiconductors, in addition to conventional research methods. The results of research for  $Fe^{2+}$  ions in  $A^2B^6$  semiconductors are presented in this paper.

**Keywords:** semiconductor lasers, iron group ions, energy structure, intensity of transitions

### References

- Gogoleva N. G. *Primenenie lazerov v nauke, tekhnike i meditsine* [Laser applications in science engineering and medicine]. St. Petersburg: Izdatel'stvo SPbGETU «LETI», 2007. (In Russ.)
- Page R. H., Schaffers K. I., DeLoach L. D., Wilke G. D., Patel F. D., Tassano J. B., Payne S. A., Krupke W. F., Chen K. T., Burger A.  $Cr^{2+}$  — doped zinc chalcogenides as efficient, widely tunable mid-infrared lasers. *IEEE J. Quantum Electron.* 1997, vol. 33, no. 4, pp. 609–617. DOI: 10.1109/3.563390
- Baranowski J. M., Allen J. W., Pearson G. L. Crystal-field spectra of  $3dn$  impurities in II–VI and III–V compound semiconductors. *Phys. Rev.* 1967, vol. 160, pp. 627–632.
- DeLoach L. D., Page R. H., Wilke G. D., Payne S. A., Krupke W. F. Transition metal-doped zinc chalcogenides: spectroscopy and laser demonstration of a new class of gain media. *IEEE J. Quantum Electron.* 1996, vol. 32, pp. 885–895.

copy and laser demonstration of a new class of gain media. *IEEE J. Quantum Electron.* 1996, vol. 32, pp. 885–895.

5. Pappalardo R., Dietz R. E. Absorption spectra of transition ions in CdS crystals. *Phys. Rev.* 1961, vol. 123, pp. 1188–1203.

6. Weakliem H. A. Optical spectra of  $Ni^{2+}$ ,  $Co^{2+}$ , and  $Cu^{2+}$  in tetrahedral sites in crystals. *J. Chem. Phys.* 1962. – V. 36. – P. 2117–2140. DOI: 10.1063/1.1732840

7. Griffith J. S. The theory of transition metal ions. Cambridge: Cambridge University Press., 1961. 468 p.

8. Kustov E. F. Orbital system of structures of nanoscale dispersion. *Izvestiya Akademii Inzhenernykh Nauk im. A. M. Prokhorova.* 2013, no. 1, pp. 92–124.

9. Kustov E. F., Novotortsev V. M., Kustov M. E. Orbital structure of vibrations of nanoparticles, clusters, and coordination polyhedra. *Russ. J. Inorganic Chem.* 2013, vol. 58, no. 14, pp. 1624–1646.

10. Kustov E. F., Basieva I. T. Matritsy energii i sil ostillyatorov elektrodipol'nykh perekhodov v ionakh  $3dn$  ( $n = 2, 3, 4, 6, 7, 8$ ) konfiguratsii ( $Cr^{2+}$ ,  $Co^{2+}$ ,  $Fe^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$ ) v kristallicheskiykh polyakh lyuboi simmetrii [Energy matrix and oscillator strengths electric dipole transitions in ions  $3dn$  ( $n = 2, 3, 4, 6, 7, 8$ ) configurations ( $Cr^{2+}$ ,  $Co^{2+}$ ,  $Fe^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$ ) in crystal fields of any symmetry]. FIPS No. 2012621086 at 19.10.2012. (In Russ.)

11. Kustov E. F., Basieva I. T. Raschet opticheskikh spektrov ionov  $Cr^{2+}$ ,  $Cr^{3+}$ ,  $Cr^{4+}$ ,  $Co^{2+}$ ,  $Co^{3+}$ ,  $Fe^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$  v poluprovodnikakh  $A^{II}B^{VI}$ ,  $A^{III}B^{V}$  [The calculation of optical spectra for ions  $Cr^{2+}$ ,  $Cr^{3+}$ ,  $Cr^{4+}$ ,  $Co^{2+}$ ,  $Co^{3+}$ ,  $Fe^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$  in semiconductors  $A^{II}B^{VI}$ ,  $A^{III}B^{V}$ ]. FIPS No. 2012619507 at 19.10.2012. (In Russ.)

12. Kustov D. M., Bundyuk A. V., Goncharov E. O., Kurchatov I. S. IR lasers of semiconductors  $A^{II}B^{VI}$  and  $A^{III}B^{V}$  with  $Co^{2+}$  ions. *Izvestiya Akademii Inzhenernykh Nauk im. A. M. Prokhorova.* 2014, no. 2, pp. 49–52. (In Russ.)

13. Kurchatov I. S., Bundyuk A. V., Basieva I. T., Kustov D. M. Research of laser materials for IR lasers of  $A^{II}B^{VI}$  and  $A^{III}B^{V}$  semiconductors doped  $Co^{2+}$  ions. *Vestnik SGTU.* 2014, no. 2, pp. 35–41. (In Russ.)

14. Dreyhsig J., Litzenburger B. Nature of optical transitions in the charge-transfer region of  $ZnS:Co$  and  $ZnSe:Co$ . *Phys. Rev. B.* 1996, vol. 54, no. 15, pp. 10516–10524. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.10516

15. Kustov E. F., Novotortsev V. M. *Magnetokhimiya molekulyarnykh struktur* [Magnetochemistry of molecular structures]. Moscow: URSS Crosand, 2014. 400 p. (In Russ.)

Received March 31, 2015