

УДК 538.915

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ИК ЛАЗЕРОВ НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ $A^{II}B^{VI}$, ЛЕГИРОВАННЫХ ИОНАМИ ГРУППЫ ЖЕЛЕЗА

И. С. Курчатов¹, Н. А. Булычев², А. В. Бундюк¹,
М. А. Казарян², Д. М. Кустов¹

Исследованы спектральные закономерности энергетической структуры ионов Co^{2+} , Ni^{2+} и Fe^{2+} в полупроводниковых материалах ZnO , ZnS , $ZnSe$, $ZnTe$, CdO , CdS , $CdSe$, $CdTe$ и соотношения этих структур с шириной запрещенной зоны. Оцениваются возможности получения лазерного эффекта на этих материалах в диапазоне 1.5–3 микрона.

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

Исследование спектральных закономерностей ионов группы железа Co^{2+} , Fe^{2+} , Ni^{2+} приобретает большое значение в связи с тем, что молекулярные структуры с этими ионами имеют ИК люминесценцию и могут позволить получить лазерную генерацию в диапазоне прозрачности оптических волокон 1.5–3 микрона. Кроме этого, перенастраиваемые в широком диапазоне твердотельные лазеры востребованы для научных, технологических и медицинских целей.

Нами были рассчитаны значения энергетических уровней и положение полос люминесценции для массива кристаллов $A^{II}B^{VI}$ (конкретно, для CdO , CdS , $CdSe$, $CdTe$, ZnO , ZnS , $ZnSe$, $ZnTe$), легированных ионами группы железа Co^{2+} , Ni^{2+} и Fe^{2+} . Общая теория лигандной структуры окружения ионов группы железа разработана в работах [1, 2].

При расчете мы использовали матрицу всех взаимодействий электронной конфигурации d^7 120×120 для соединений иона кобальта, d^6 210×210 для – иона железа и d^8

¹ Национальный исследовательский университет “МЭИ”.

² ФИАН, 119991 Россия, Москва, Ленинский пр-т, 53; e-mail: nbulychev@mail.ru.

40×40 для – иона никеля, с параметризацией значений параметров кристаллического поля B , C , Dq и 13 параметров кристаллического поля низкой симметрии [3, 4]. В упомянутых расчетах симметрия окружения ионов в кристаллах $A^{II}B^{VI}$ тетраэдрическая, поэтому можно ограничиться одним параметром кристаллического поля Dq .

Каждый из исследованных материалов, легированных Co^{2+} , имеет по четыре полосы люминесценции в диапазоне от 1500 до 2250 нм на нижнем краю окна прозрачности. Также легированные Co^{2+} ZnO и ZnS имеют по четыре полосы в диапазоне от 2500 до 3000 нм, а легированный Co^{2+} CdO имеет две полосы в границах 2750–3000 нм диапазона. На рис. 1 приведены данные по нижним (коротковолновым) полосам иона Co^{2+} в кристаллах полупроводников $A^{II}B^{VI}$.

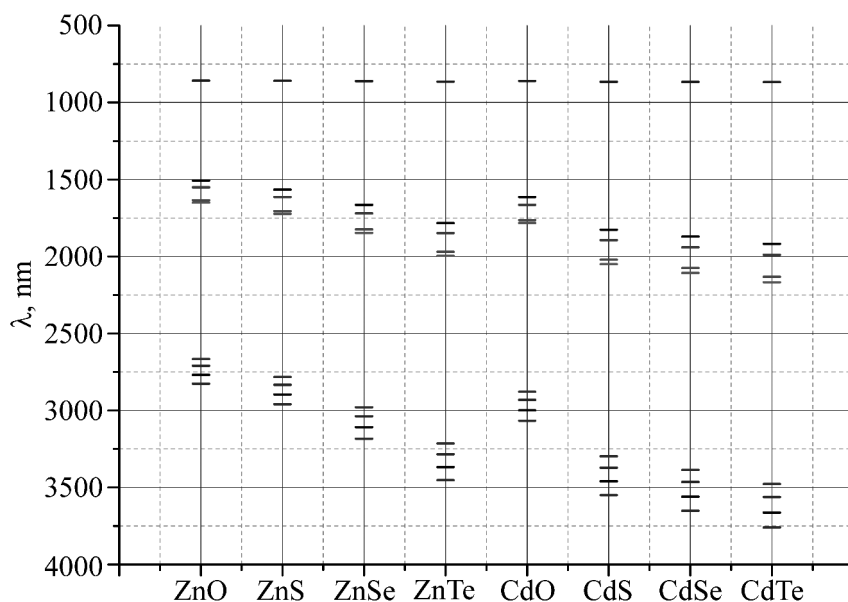


Рис. 1: Длины волн переходов иона Co^{2+} в кристаллах ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdO, CdS, CdSe, CdTe.

На рис. 2 приведены данные по нижним (коротковолновым) полосам иона Ni^{2+} в кристаллах полупроводников $A^{II}B^{VI}$.

Каждое соединение, легированное Ni^{2+} , имеет по четыре полосы люминесценции в диапазоне от 1750 до 2500 нм, в центре окна прозрачности оптических волокон. Кроме того, в окно прозрачности на нижнем его краю попадает одна из коротковолновых полос люминесценции CdTe, легированного Ni^{2+} .

На рис. 3 приведены данные по нижним (коротковолновым) полосам иона Fe^{2+} в кристаллах полупроводников $A^{II}B^{VI}$.

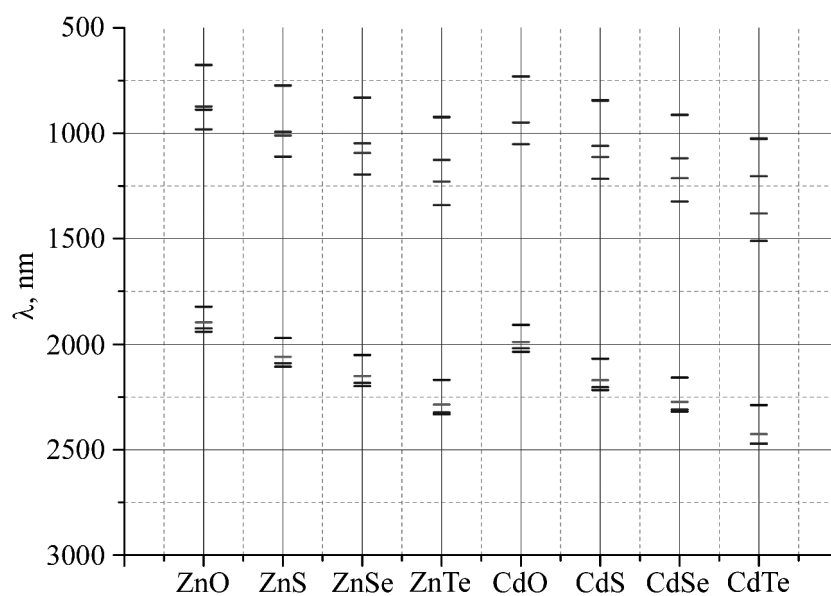


Рис. 2: Длины волн переходов иона Ni^{2+} в кристаллах ZnO , ZnS , $ZnSe$, $ZnTe$, CdO , CdS , $CdSe$, $CdTe$.

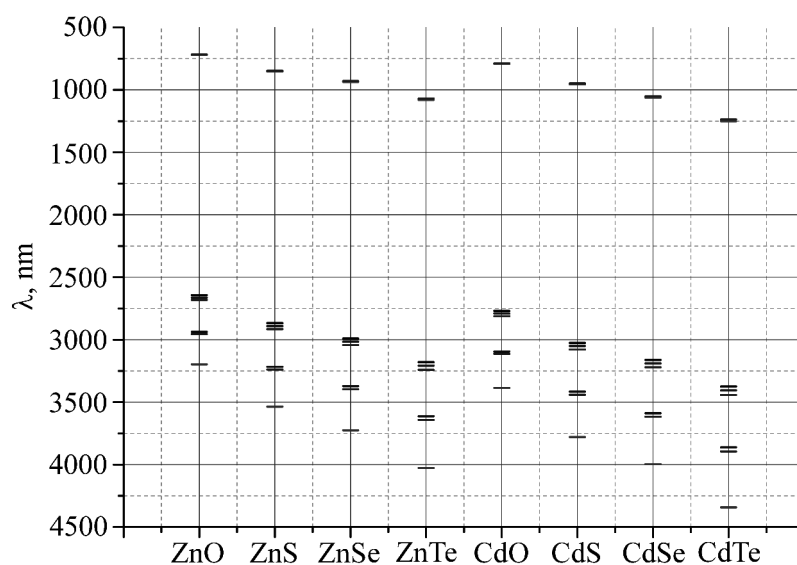


Рис. 3: Длины волн переходов Fe^{2+} в кристаллах ZnO , ZnS , $ZnSe$, $ZnTe$, CdO , CdS , $CdSe$, $CdTe$.

По сравнению с материалами, легированными кобальтом и никелем, легированные железом полупроводники имеют гораздо меньше полос люминесценции в окне прозрачности оптических волокон 1.5–3 мкм. Только ZnO , ZnS и CdO , легированные Fe^{2+} , име-

ют полосы на краю окна прозрачности 2500–3000 нм. Полосы люминесценции остальных материалов имеют слишком большую длину волны, чтобы попасть в пределы окна.

Заключение. С использованием нового способа аппроксимационной параметризации матриц, нами были определены длины волн переходов ионов Co^{2+} , Ni^{2+} и Fe^{2+} в полупроводниковых материалах ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdO, CdS, CdSe, CdTe. Полученные расчетные значения спектральных областей люминесценции совпадают со значениями, полученными в ранее выполненных экспериментальных исследованиях, что подтверждает правильность выбранного метода расчета.

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

Показано, что применяемый метод расчета энергетических уровней и полос люминесценции позволяет исследовать и другие аналогичные системы.

Работа выполнена при частичной поддержке грантов РФФИ 15-02-03559-а, 14-02-00602-а, 14-02-31515 мол_а, 14-02-92019 ННС_а.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Е. Ф. Кустов, Известия академии Инженерных Наук им. А.М. Прохорова, № 1, 92 (2013).
- [2] E. F. Kustov, V. M. Novotortsev, M. E. Kustov, Russian Journal of Inorganic Chemistry **58**(14), 1624 (2013).
- [3] Е. Ф. Кустов, И. Т. Басиева, Матрицы энергии и сил осцилляторов электродипольных переходов в ионах $3d^n$ ($n = 2, 3, 4, 6, 7, 8$) конфигураций (Cr^{2+} , Co^{2+} , Fe^{2+} , Ni^{2+}) в кристаллических полях любой симметрии: Реестр базы данных № 2012621086 от 19.10.2012.
- [4] Е. Ф. Кустов, И. Т. Басиева, Расчет оптических спектров ионов Cr^{2+} , Cr^{3+} , Cr^{4+} , Co^{2+} , Co^{3+} , Fe^{2+} , Ni^{2+} в полупроводниках $A^{II}B^{VI}$, $A^{III}B^V$: Реестр программ для ЭВМ № 2012619507 от 19.10.2012.

Поступила в редакцию 3 декабря 2014 г.