

**ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ
ХАРАКТЕРИСТИК ИК (1,5-3μ) ЛАЗЕРОВ НА ОСНОВЕ
ПОЛУПРОВОДНИКОВ A^{II}B^{VI}, ЛЕГИРОВАННЫХ ИОНАМИ
Fe²⁺, Co²⁺ и Ni²⁺**

Е.Ф. Кустов¹, И.С. Курчатова²

¹Национальный исследовательский университет «МЭИ»

РФ 111250, Москва, ул. Красноказарменная, д. 14

тел.: 7 (495)-362-75-60; e-mail: universe@mpei.ac.ru

²Научно-исследовательский институт технического стекла

РФ 117218, Москва, ул. Кржижановского, д. 29, корп. 5

тел.: 7(499)-129-16-36; e-mail: info@intg.org

doi: 10.15518/isjaee.2015.10-11.014

Заключение совета рецензентов: 06.05.15 Заключение совета экспертов: 20.05.15 Принято к публикации: 03.06.15

Исследованы спектрально-люминесцентные характеристики ионов Fe²⁺, Co²⁺ и Ni²⁺ в полупроводниковых материалах типа A^{II}B^{VI} (ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdO, CdS, CdSe, CdTe) и соотношение энергии полос поглощения и люминесценции с шириной запрещенной зоны полупроводников A^{II}B^{VI}. Оценивается возможность получения лазерного эффекта на этих материалах в окне прозрачности волоконно-оптических линий связи в диапазоне 1,5–3 микрон. Полученные результаты актуальны для других применений перенастраиваемых по длине волны полупроводниковых лазеров.

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

**RESEARCH OF SPECTRAL CHARACTERISTICS OF IR LASERS
OF SEMICONDUCTORS A^{II}B^{VI} DOPED WITH Fe²⁺, Co²⁺ AND Ni²⁺ IONS**

E.F. Kustov¹, I.S. Kurchatov²

¹National Research University "Moscow Power Engineering Institute"

14 Krasnokazarmennaya Str., Moscow, 111250 Russian Federation

ph.: 7 (495)-362-75-60; e-mail: universe@mpei.ac.ru

²JSC «Institute of Technical Glass»

5 build, 29 Krzhizhanovsky Str., Moscow, Russian Federation

ph.: 7(499)-129-16-36; e-mail: info@intg.org

Referred 6 May 2015 Received in revised form 20 May 2015 Accepted 3 June 2015



The article presents the research of spectral properties of Fe^{2+} , Co^{2+} and Ni^{2+} ion energy structure in semiconductor materials $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ (ZnO , ZnS , ZnSe , ZnTe , CdO , CdS , CdSe , CdTe) and the ratio of these spectral structures of absorption and luminescence transitions with band gap of materials $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$. This article evaluates the possibility of obtaining laser action on these materials in 1.5–3 microns range, as optic fiber data lines have a transparency window in that range. The results are valuable for various other applications of tunable semiconductor lasers.

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



Кустов Евгений Федорович
Evgenij F. Kustov

Сведения об авторе: д-р физ.-мат. наук, профессор ФТЭМК, НИУ «МЭИ».

Образование: МЭИ.

Область научных интересов: полупроводники.

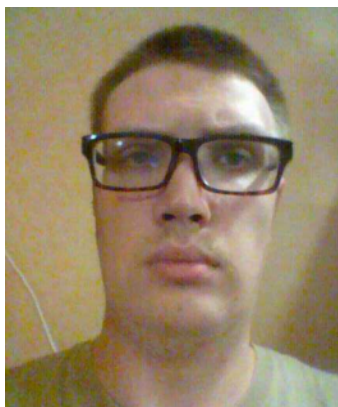
Публикации: более 100.

Information about the author: DSc (physics and mathematics), professor of FTEMK, MPEI.

Education: MPEI.

Research area: semiconductors.

Publications: more than 100.



Курчатова Иван Сергеевич
Ivan S. Kurchatov

Сведения об авторе: аспирант МЭИ, инженер-технолог ОАО «НИТС».

Образование: МГУ.

Область научных интересов: полупроводники.

Публикации: 6.

Information about the author: post-graduate of MPEI, engineer of NITG.

Education: MSU.

Research area: semiconductors.

Publications: 6.

Введение

В полупроводниковых оптоэлектронных устройствах альтернативной энергетики имеется проблема преобразования светового излучения в излучение ближнего и среднего ИК диапазона. Созданные к настоящему времени преобразующие системы являются громоздкими, что ограничивает область их применения. А созданные полупроводниковые лазеры имеют ограниченное количество полос излучения в области прозрачности оптических волокон. Одним из вариантов решения проблемы является создание новых материалов путём введения в полупроводниковые материалы ионов группы железа, преобразующих спектральный диапазон излучения полупроводников в ИК область. Кроме того, введе-

ние этих ионов создает широкие полосы поглощения в запрещенной зоне полупроводников, что может увеличить спектральный диапазон и чувствительность солнечных преобразователей энергии на полупроводниках.

Полупроводниковые лазеры применяются в волоконно-оптических линиях связи (ВОЛС), технологиях формообразования, резки и сварки различных материалов, медицине для диагностики и лечения различных заболеваний, системах военного назначения, научных исследованиях, измерительной технике и др [1]. Лазеры этого типа имеют большой диапазон генерируемой мощности в непрерывном и импульсном режимах, высокое быстродействие при импульсной модуляции, а частота их излучения может перестраиваться в пределах области люминесценции. По

сравнению с другими типами лазеров они имеют меньшие вес и габариты и наибольший коэффициент полезного действия. Наиболее широко полупроводниковые лазеры применяются в волоконно-оптических линиях связи.

Известно, что полоса прозрачности ВОЛС в диапазоне длин волн (1,5–3) мкм значительно шире спектров передаваемых сигналов, поэтому для повышения экономической эффективности ВОЛС перспективна передача сигналов на новых, ещё не используемых частотах. Вероятно, 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. Теоретические и экспериментальные исследования в этом направлении выполнялись на отдельном типе полупроводника, легированного одним из ионов [2, 3]. После создания

общей теории лигандной структуры окружения ионов группы железа (Co^{2+} , Ni^{2+} и Fe^{2+}) [4–7] появилась возможность рассчитать весь набор параметров областей люминесценции ионов группы железа в полупроводниках $A^{II}B^{VI}$. В настоящей статье опубликованы результаты расчёта параметров массива областей люминесценции для Fe^{2+} , Co^{2+} и Ni^{2+} в полупроводниках $A^{II}B^{VI}$.

Матрицы и диаграммы энергетических уровней электронных конфигураций d^7 (d^3), d^6 (d^4) Матрицы и энергия состояний конфигурации d^7 (d^3)

В таблице 1 представлены матрицы состояний конфигурации d^7 в кластерах и комплексах кубических групп симметрии.

Матрицы состояний конфигурации d^7 в кластерах и комплексах октаэдрической симметрии

Таблица 1

Table 1

Matrix of d^7 configuration states in clusters and complexes of octahedral symmetry

2F_2				
$12Dq+105F_4$	$-3\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$-5\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$4F_2+50F_4$	$2F_2-10F_4$
	$2Dq-6F_2+135F_4$	$3(F_2-5F_4)$	$-3\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$-3\sqrt{3}(F_2-5F_4)$
		$2Dq+4F_2+85F_4$	$\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$-\sqrt{3}(F_2-5F_4)$
			$-8Dq+6F_2+145F_4$	$10(F_2-5F_4)$
				$-8Dq-2F_2+115F_4$

2F_1				
$12Dq-6F_2+135F_4$	$-3(F_2-5F_4)$	$3(F_2-5F_4)$	0	$-2\sqrt{3}(F_2-5F_4)$
	$2Dq+103F_2$	$-3(F_2-5F_4)$	$3(F_2-5F_4)$	$3\sqrt{3}(F_2-5F_4)$
		$2Dq-6F_2+135F_4$	$-3(F_2-5F_4)$	$-\sqrt{3}(F_2-5F_4)$
			$-8Dq-6F_2+135F_4$	$2\sqrt{3}(F_2-5F_4)$
				$-8Dq-2F_2+115F_4$

2E			
$12Dq-6F_2+135F_4$	$-6\sqrt{2}(F_2-5F_4)$	$-3\sqrt{2}(F_2-5F_4)$	0
	$2Dq+8F_2+170F_4$	$10(F_2-5F_4)$	$\sqrt{3}(2F_2+25F_4)$
		$2Dq-F_2+110F_4$	$2\sqrt{3}(F_2-5F_4)$
			$-18Dq-8F_2+180F_4$

4F_1	
$2Dq-3F_2+15F_4$	$6(F_2-5F_4)$
	$-8Dq-12F_2+60F_4$

$$\begin{aligned} {}^4A_2 & 12Dq-15F_2+75F_4 \\ {}^4F_2 & 2Dq-15F_2+75F_4 \\ {}^2A_1 & 2Dq-11F_2+160F_4 \\ {}^2A_2 & 2Dq+9F_2+60F_4 \end{aligned}$$

Энергии уровней состояний конфигурации d^7 зависят от двух параметров электростатического взаимодействия между электронами F_2 и F_4 и параметра взаимодействия с окружением Dq . При $Dq = 0$ состояния свободного атома конфигурации d^7 совпада-

ют с состояниями электронной конфигурации d^3 , представленные на рис. 1.

Здесь также для всех соотношений параметров F_2/F_4 состояние 4F является основным; в октаэдрических структурах оно расщепляется на три уровня:

4A_2 , 4F_2 и 4F_1 , – имеющих одинаковую энергию при $Dq = 0$. Это состояние остается преобладающим в большом интервале соотношений параметров F_2/F_4 . Однако при $F_2/F_4 > 10$ имеется тенденция смены основного состояния на 2G с уровнями уровня 2A_1 , 2F_2 ,

2F_1 , и 2E , что будет проявляться в магнитных свойствах элементов с конфигурацией d^7 .

На рисунке 1 представлена зависимость энергии E/F_2 уровней конфигурации d^7 от значений относительного параметра Dq/F_2 при $F_2/F_4 = 14$.

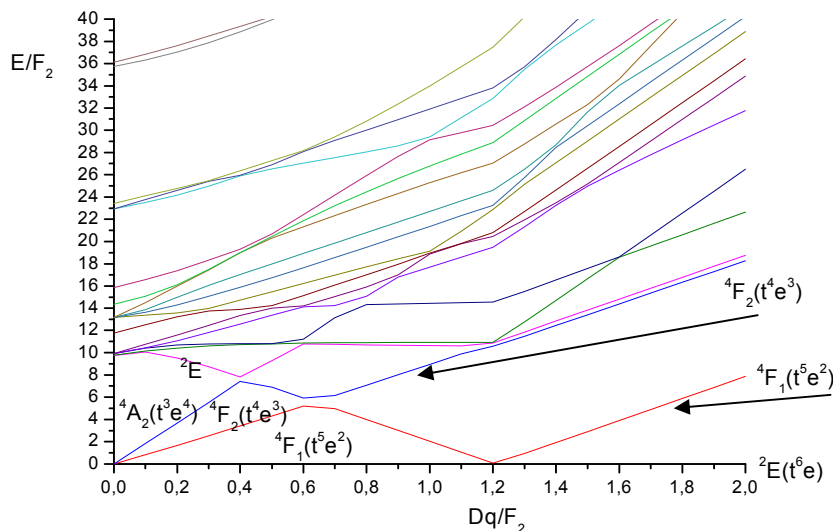


Рис. 1. Зависимость энергии E/F_2 уровней конфигурации d^7 от значений относительного параметра Dq/F_2 при $F_2/F_4 = 14$

Fig. 1. The relation of E/F_2 energy levels for d^7 configuration to relative parameter Dq/F_2 for $F_2/F_4 = 14$

На рисунках 2 и 3 даны диаграммы энергетических уровней электронной конфигурации d^7 для положительно и отрицательно координированных структур при значении относительного параметра

внутримолекулярного поля $-2 < Dq/F_2 < 2$ и соотношении параметров межэлектронного взаимодействия $F_2/F_4 = 14$.

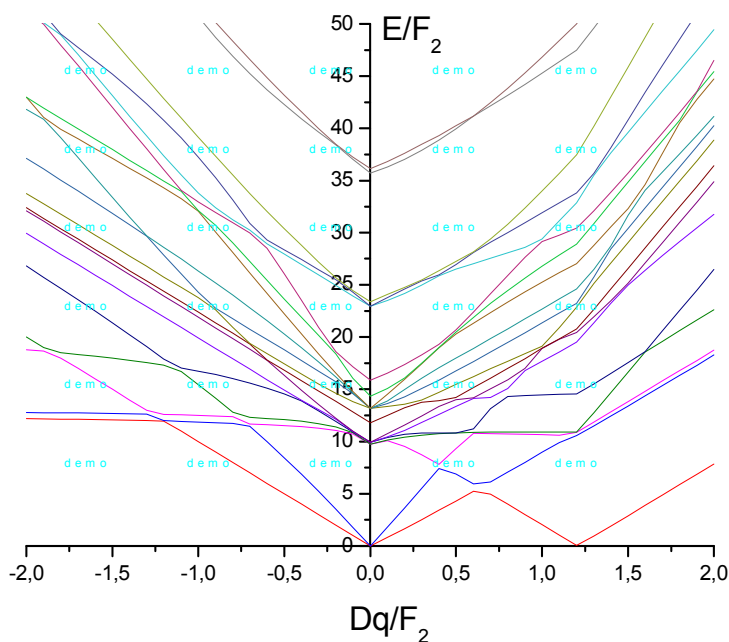


Рис. 2. Зависимость энергии E/F_2 уровней конфигурации d^7 от значений относительного параметра

$-2 < Dq/F_2 < 2$ при $F_2/F_4 = 14$

Fig. 2. The relation of E/F_2 energy levels for d^7 configuration to relative parameter $-2 < Dq/F_2 < 2$ for $F_2/F_4 = 14$

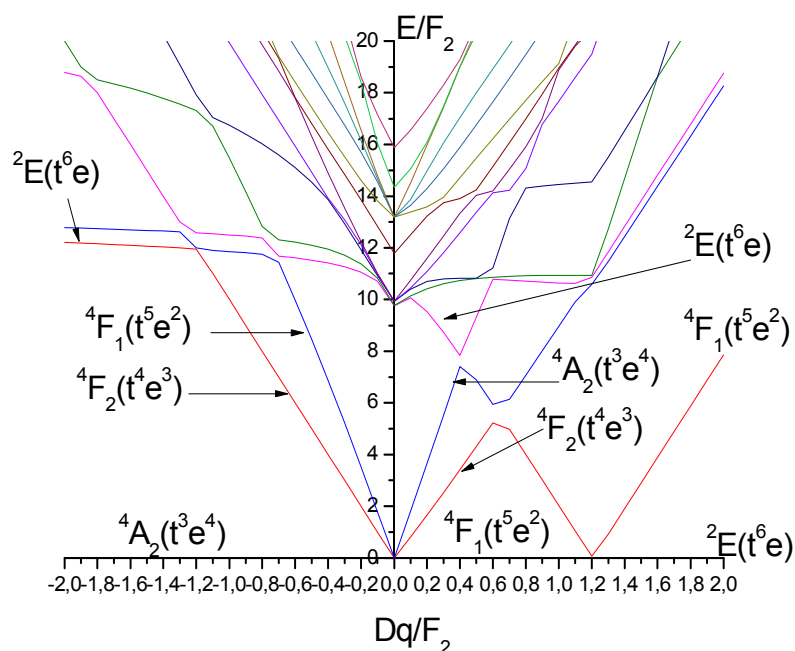


Рис. 3. Зависимость нижних уровней энергии E/F_2 конфигурации d^7 от значений относительного параметра $-2 < Dq/F_2 < 2$ при $F_2/F_4 = 14$

Fig. 3. The relation of E/F_2 energy low level for d^7 configuration to relative parameter $-2 < Dq/F_2 < 2$ for $F_2/F_4 = 14$

На рисунке 3 показана идентификация нижних уровней с обозначением спина и орбитального состояния и конфигурации внутримолекулярного поля. Идентификация остальных уровней приведена в таблице 2.

Таблица 2

Идентификация состояний электронной конфигурации d^7 для положительно и отрицательно координированных структур

Table 2

Identification of d^7 states for positive and negative coordinated structures

$Dq/F_2 = -1,5$			$Dq/F_2 = 1,5$		
E	S	Терм	E	S	Терм
0	1,5	4A_2	0	0,5	2E
12,078	0,5	2E	2,886	1,5	4F_1
12,687	0,5	2F_1	13,408	0,5	2F_1
15	1,5	4F_2	13,825	0,5	2F_2
18,002	0,5	2F_2	16,641	1,5	4F_2
21,364	1,5	4F_1	17,558	0,5	2F_1
24,943	0,5	2A_1	24,971	0,5	2F_2
27,033	0,5	2F_2	25,152	1,5	4F_1
27,391	0,5	2F_1	26,586	0,5	2A_1
28,785	0,5	2E	29,041	0,5	2F_1
31,862	0,5	2F_1	30,406	0,5	2E
33,388	1,5	4F_1	31,642	1,5	4A_2
37,118	0,5	2F_2	32,295	0,5	2F_2
37,952	0,5	2A_2	34,834	0,5	2F_1
42,017	0,5	2F_1	35,724	0,5	2F_2
43,144	0,5	2F_2	39,593	0,5	2A_2
45,172	0,5	2E	40,805	0,49999	2E
48,521	0,5	2F_1	45,848	0,50001	2F_1
61,285	0,5	2F_2	53,979	0,49999	2E
62,59	0,5	2E	57,979	0,5	2F_2

Энергетические уровни ионов с конфигурациями d^7 с учетом спин-орбитального взаимодействия

На рисунках 4 и 5 приведены диаграммы энерге-

тических уровней ионов с электронной конфигурацией d^7 в зависимости от значений $-2 < Dq/F_2 < 0$ при константе спин-орбитального взаимодействия $\lambda(^4F)/F_2 = 0$ и $-0,1$.

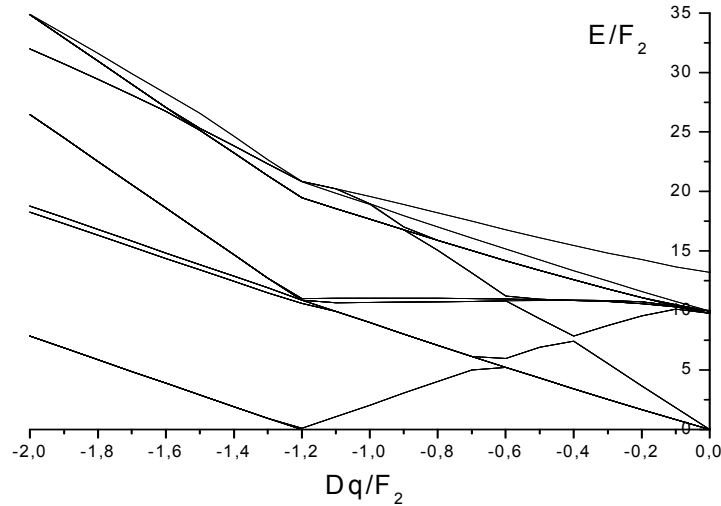


Рис. 4. Энергетические уровни ионов с электронной конфигурацией d^7 в зависимости от значений $-2 < Dq/F_2 < 0$ при константе спин-орбитального взаимодействия $\lambda/F_2 = 0$

Fig. 4. Energy levels for ions of d^7 electron configuration in relation to parameter $-2 < Dq/F_2 < 0$ for spin-orbital constant set as $\lambda/F_2 = 0$

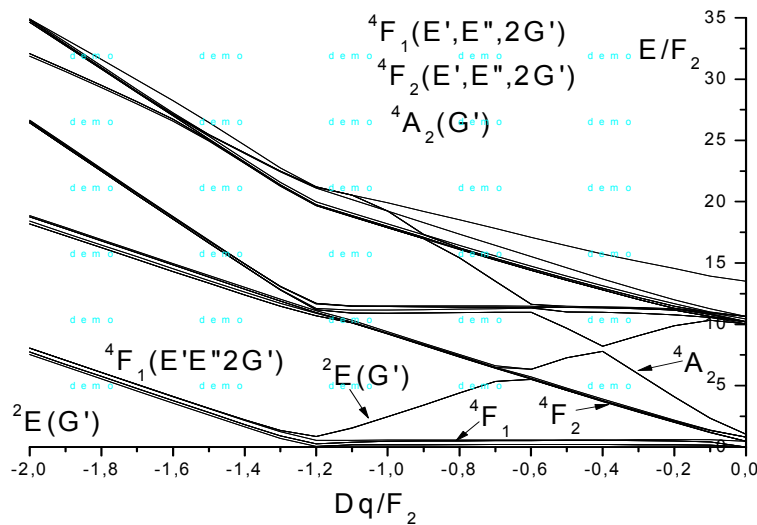


Рис. 5. Энергетические уровни ионов с электронной конфигурацией d^7 в зависимости от значений $-2 < Dq/F_2 < 0$ при константе спин-орбитального взаимодействия $\lambda(^4F)/F_2 = -0,1$

Fig. 5. Energy levels for ions of d^7 electron configuration in relation to parameter $-2 < Dq/F_2 < 0$ for spin-orbital constant set as $\lambda(^4F)/F_2 = -0.1$

Как видно из сравнения двух диаграмм, малое спин-орбитальное взаимодействие приводит к небольшому расщеплению уровней при сохранении основных зависимостей от Dq/F_2 . Расщепление основного состояния за счет взаимодействия спин-орбитального типа с верхними состояниями не происходит.

Диаграмма энергетических уровней при $\lambda(^4F)/F_2 = 0$ совпадает с аналогичной диаграммой на рисунках 1-3.

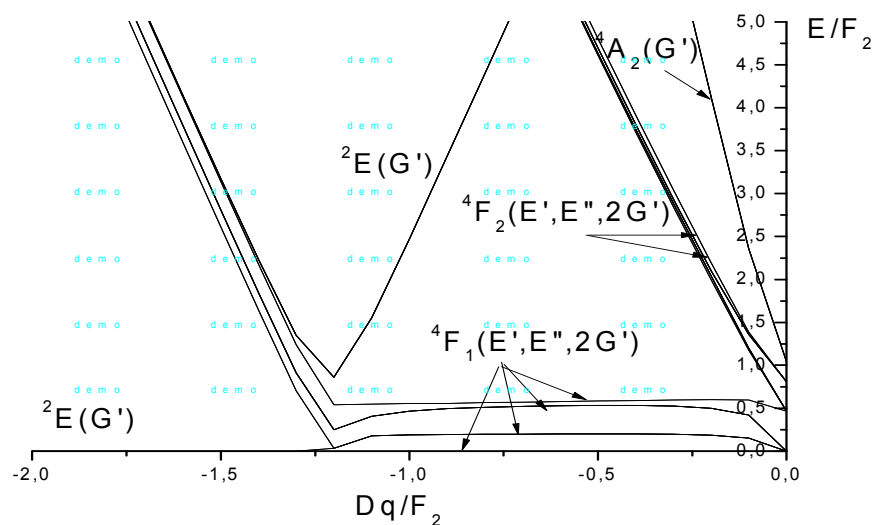


Рис. 6. Энергетические уровни ионов с электронной конфигурацией d^7 в зависимости от значений $-2 < Dq/F_2 < 0$ при константе спин-орбитального взаимодействия $\lambda^4 F/F_2 = -0,1$ в области энергии основного состояния $0 < E/F_2 < 5,0$
Fig. 6. Energy levels for ions of d^7 electron configuration in relation to parameter $-2 < Dq/F_2 < 0$ for spin-orbital constant set as $\lambda^4 F/F_2 = -0.1$ the ground state being $0 < E/F_2 < 5,0$

На рисунке 6 показаны энергетические уровни ионов с электронной конфигурацией d^7 в зависимости от значений $-2 < Dq/F_2 < 0$ при константе спин-орбитального взаимодействия $\lambda^4 F/F_2 = -0,1$ в области энергии основного состояния $0 < E/F_2 < 5,0$.

Обозначение спин-орбитальных уровней производится по неприводимым представлениям двойных

точных групп, которые в случае групп кубической сингонии имеют несколько обозначений: $\Gamma_6 \equiv E'(2)$, $\Gamma_7 \equiv E''(2)$, $\Gamma_8 \equiv G'(4)$. В скобках приведены размерности представлений.

Редукция неприводимых представлений групп полных вращений на представления двойных групп кубической сингонии приведены в таблице 3.

Таблица 3

Редукция неприводимых представлений групп полных вращений на представления двойных групп кубической сингонии

Table 3

Reduction of irreducible representations of complete rotations to represent binary groups of the cubic system

J	1/2	3/2	5/2	7/2	9/2	11/2
O_h, O, T_d	Γ_6	Γ_8	$\Gamma_6 + \Gamma_8$	$\Gamma_6 + \Gamma_7 + \Gamma_8$	$\Gamma_6 + 2\Gamma_8$	$\Gamma_6 + \Gamma_7 + 2\Gamma_8$

Для значений $-1,2 < Dq/F_2 < 0$ нижними уровнями являются четыре СО уровня $\Gamma_6 + \Gamma_7 + 2\Gamma_8$ или $E' + E'' + 2G'$, получающиеся из спин-орбитального взаимодействия мультиплета 4F_1 .

Магнитные свойства в этом интервале внутримолекулярных полей определяются заселенностями этих четырех уровней и их магнитными моментами. В этом интервале магнитные моменты зависят от температуры, особенно в области малых температур.

Для значений $Dq/F_2 < -1,2$ нижними уровнями являются один СО уровень Γ_8 или G' , получающиеся из спин-орбитального взаимодействия мультиплета 2E . В этом интервале магнитные моменты не зависят от температуры.

Энергетические состояния элементов с электронной конфигурацией $d^6(d^4)$

В таблице 4 представлены матрицы состояний конфигурации d^6 в кластерах и комплексах кубической симметрии.

Энергии уровней состояний конфигурации d^6 зависят от двух параметров электростатического взаимодействия между электронами F_2 и F_4 и параметра взаимодействия с окружением Dq . При $Dq = 0$ матрицы описывают состояния свободного атома с электронной конфигурацией d^6 .

Таблица 4

Матрицы состояний конфигурации d^6 в кластерах и комплексах октаэдрической симметрии

Table 4

Matrix of d^6 configuration states in clusters and complexes of octahedral symmetry

1E

$16Dq-9F_2+290F_4$	$6(F_2-5F_4)$	$\sqrt{2}(2*(F_2-5F_4)+35*F_4)$	$-2(F_2-5F_4)$	$-4(F_2-5F_4)$
	$6Dq-6F_2+240F_4$	$-3\sqrt{2}(F_2-5F_4)$	$-12(F_2-5F_4)$	0
		$-4Dq+5F_2+255F_4$	$10\sqrt{2}(F_2-5F_4)$	$-10\sqrt{2}(F_2-5F_4)$
			$-4Dq+6F_2+285F_4$	0
				$-4Dq-3F_2+225F_4$

3F_2

$6Dq-9F_2+185F_4$	$-5\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$\sqrt{6}(F_2-5F_4)$	$\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$-\sqrt{6}(F_2-5F_4)$
	$6Dq-5F_2+235F_4$	$-3\sqrt{2}(F_2-5F_4)$	$3(F_2-5F_4)$	$\sqrt{2}(3F_2+5F_4)$
		$-4Dq-13F_2+205F_4$	$-2\sqrt{2}(F_2-5F_4)$	$-6(F_2-5F_4)$
			$-4Dq-9F_2+185F_4$	$3\sqrt{2}(F_2-5F_4)$
				$-14Dq-8F_2+215F_4$

1F_1

$6Dq-3F_2+225F_4$	$5\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$3(F_2-5F_4)$	$\sqrt{6}(F_2-5F_4)$
	$6Dq-3F_2+295F_4$	$-5\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$\sqrt{2}(F_2+30F_4)$
		$-4Dq-3F_2+225F_4$	$-\sqrt{6}(F_2-5F_4)$
			$-14Dq-16F_2+325F_4$

3E

$6Dq-13F_2+205F_4$	$-4(F_2-5F_4)$	0
	$6Dq-10F_2+190F_4$	$-3\sqrt{2}(F_2-5F_4)$
		$-4Dq-11F_2+195F_4$

3A_2

$6*Dq-12F_2+270F_4$	$6(F_2-5F_4)$
	$-4Dq-3F_2+225F_4$

3F_1

$16Dq-15F_2+250F_4$	$-\sqrt{6}(F_2-5F_4)$	$-3\sqrt{2}(F_2-5F_4)$	$\sqrt{2}(2F_2+25F_4)$	$-2\sqrt{2}(F_2-5F_4)$	0	0
	$6Dq-11F_2+195F_4$	$5\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$-\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$3(F_2-5F_4)$	$\sqrt{6}(F_2-5F_4)$
		$6Dq-3F_2+225F_4$	$-3(F_2-5F_4)$	$-3(F_2-5F_4)$	$5\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$\sqrt{2}(F_2+30F_4)$
			$-4Dq-F_2+215F_4$	$-10(F_2-5F_4)$	0	$3\sqrt{2}(F_2-5F_4)$
				$-4Dq-9F_2+185F_4$	$-2\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$3\sqrt{2}(F_2-5F_4)$
					$-4Dq-11F_2+195F_4$	$\sqrt{6}(F_2-5F_4)$
						$-14Dq-16F_2+225F_4$

1F_2

$16Dq-9F_2+290F_4$	$3\sqrt{2}(F_2-5F_4)$	$-5\sqrt{6}(F_2-5F_4)$	0	$-2\sqrt{2}(F_2-5F_4)$	$\sqrt{2}(2F_2+20F_4)$	0
	$6Dq-9F_2+255F_4$	$-5\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$3(F_2-5F_4)$	$-3(F_2-5F_4)$	$-3(F_2-5F_4)$	$-\sqrt{6}(F_2-5F_4)$
		$6Dq+3F_2+265F_4$	$-3\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$5\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$-5\sqrt{3}(F_2-5F_4)$	$\sqrt{2}(3F_2+20F_4)$
			$-4Dq-9F_2+255F_4$	$-6(F_2-5F_4)$	0	$-3\sqrt{6}(F_2-5F_4)$
				$-4Dq-3F_2+225F_4$	$-10(F_2-5F_4)$	$\sqrt{6}(F_2-5F_4)$
					$-4Dq+5F_2+255F_4$	$\sqrt{6}(F_2-5F_4)$
						$-14Dq+245F_4$

1A_1

$16Dq+350F_4$	$-12\sqrt{2}(F_2-5F_4)$	$\sqrt{2}(4F_2+50F_4)$	$2\sqrt{2}(F_2-5F_4)$	0
	$6Dq+210F_4$	$-12(F_2-5F_4)$	$-6(F_2-5F_4)$	0
		$-4Dq+14F_2+315F_4$	$20(F_2-5F_4)$	$\sqrt{6}(2F_2+20F_4)$
			$-4Dq-3F_2+225F_4$	$2\sqrt{6}(F_2-5F_4)$
				$-24Dq-16F_2+360F_4$

5E $6Dq-21(F_2-5F_4)$

5F_2 $-4Dq-21(F_2-5F_4)$

3A_1 $6Dq-12F_2+80F_4$



На рисунке 7 представлены зависимости энергии уровней свободного атома конфигурации d^6 от значений относительного параметра $-1/10 < F_2/F_4 < 1/20$ и $Dq = 0$.

Основным состоянием для всех соотношений параметров F_2/F_4 является состояние 5D , которое в октаэдрических структурах расщепляется на два уровня 5E и 5F_2 , имеющих одинаковую энергию при $Dq = 0$.

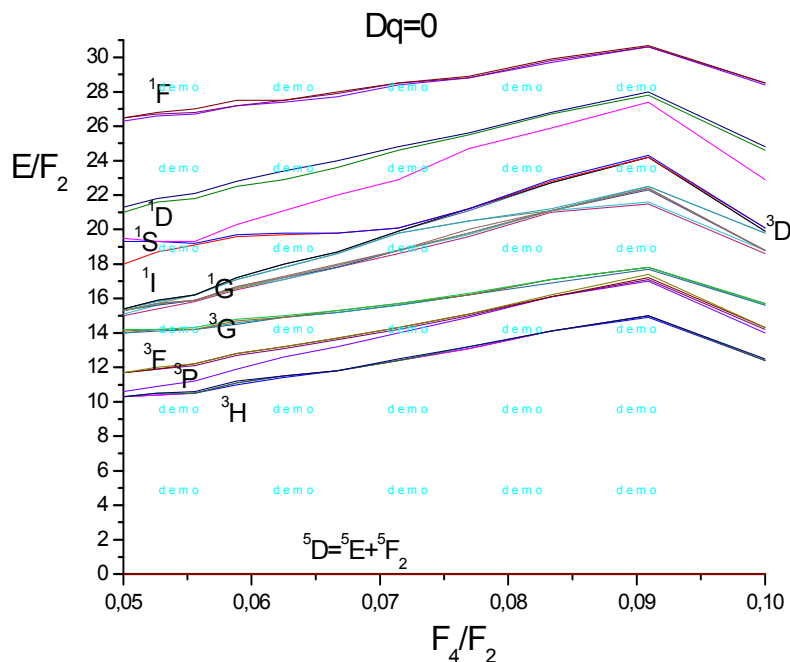


Рис. 7. Зависимость энергии уровней конфигурации d^6 от значений относительного параметра $-1/10 < F_2/F_4 < 1/20$
Fig. 7. The relation of E/F_2 energy levels for d^6 configuration to relative parameter $-1/10 < F_2/F_4 < 1/20$

На рисунках 8 и 9 представлена зависимость энергии E/F_2 уровней конфигурации d^6 от значений относительного параметра Dq/F_2 при $F_2/F_4 = 14$.

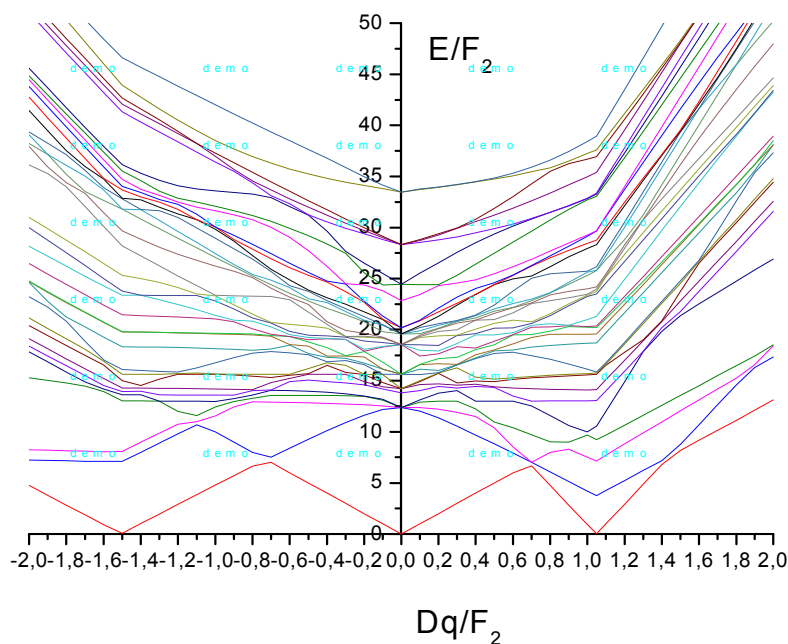


Рис. 8. Зависимость энергии E/F_2 уровней конфигурации d^6 от значений относительного параметра Dq/F_2 при $F_2/F_4 = 14$
Fig. 8. The relation of E/F_2 energy levels for d^6 configuration to relative parameter Dq/F_2 for $F_2/F_4 = 14$

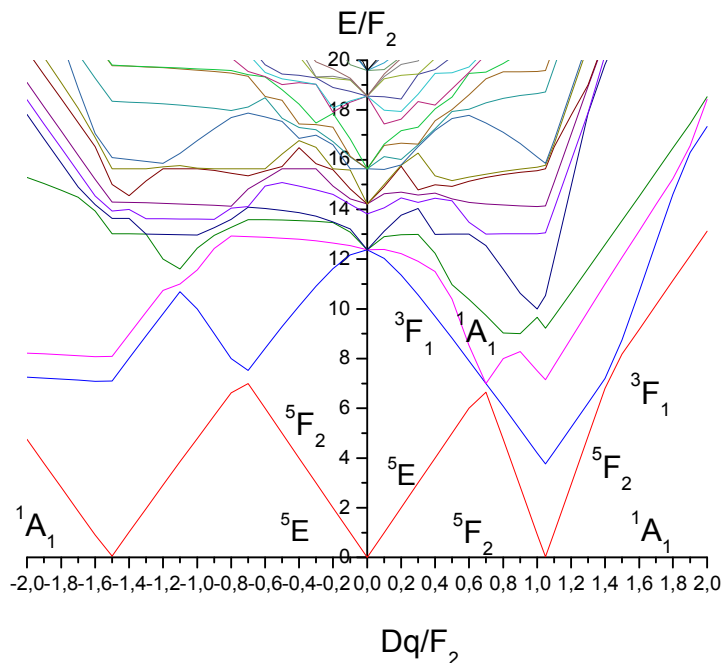


Рис. 9. Зависимость энергии E/F_2 нижних уровней конфигурации d^6 от значений относительного параметра Dq/F_2 при $F_2/F_4 = 14$

Fig. 9. The relation of E/F_2 energy levels for d^6 configuration to relative parameter Dq/F_2 for $F_2/F_4 = 14$

Идентификация уровней энергии конфигурации d^6 для положительно и отрицательно координированных систем проводится в соответствии с таблицей 5.

Таблица 5

Идентификация уровней энергии конфигурации d^6 для положительно и отрицательно координированных систем

Table 5

Energy levels identification of d^6 configuration for positive and negative coordinated structures

продолжение таблицы

$Dq/F_2 = -1,54$			$Dq/F_2 = 1,2$		
E/F_2	S	Терм	E/F_2	S	Терм
0	2	5E	0	0	1A_1
0,1	1	3F_1	2,9	2	3F_2
7	0	1F_2	5,3	1	3F_1
7,8	0	1E	8,7	1	3F_2
13,3	1	3E	10,8	0	1F_1
13,8	0	1A_1	15	2	5E
13,8	1	3F_1	16	1	3F_1
14,6	1	3F_2	17,1	1	3F_2
15,6	2	5F_2	18	0	1F_2
15,9	1	3A_1	18,5	1	3E
16,5	1	3A_2	18,7	1	3F_1
18,6	1	3E	21,7	1	3F_2
19,8	0	1F_2	22,7	0	1E
20,2	0	1A_2	23,1	0	1F_2
21,6	0	1F_1	23,2	0	1A_1
23,6	0	1E	24,8	1	3A_2
24	1	3F_1	26,5	0	1F_1
25,6	1	3F_2	27,5	0	1A_2
28,7	1	3F_1	28	1	3F_1
30,3	1	3F_2	28,4	1	3E
31,8	0	1A_1	28,7	0	1F_2

$Dq/F_2 = -1,54$			$Dq/F_2 = 1,2$		
32,3	1	3E	30,1	1	3F_2
33,2	1	3F_2	30,5	1	3A_1
33,3	0	1F_1	32,1	1	3F_1
33,9	0	1F_2	32,5	0	1E
34,5	0	1F_2	33,7	0	1F_2
35,4	0	1E	34	1	3E
36	1	3F_1	36,9	0	1E
36,7	0	1A_1	37,6	0	1A_2
41,6	0	1F_2	37,8	0	1A_1
42,6	0	1A_2	39,4	0	1F_1
43,5	0	1F_1	40,5	1	3A_2
44,6	1	3F_1	41,3	0	1F_2
47,1	1	3A_2	43,4	1	3F_1
50,7	0	1E	44,9	1	3F_2
51,2	1	3F_1	45,4	0	1F_2
53,3	0	1F_1	48,5	1	3F_1
54,6	1	3F_2	51,3	0	1F_1
58,4	0	1F_2	52,5	0	1A_1
63,4	0	1A_1	54,6	0	1E
65,4	0	1F_2	56,4	0	1E
66,1	0	1E	64,6	0	1F_2
82,6	0	1A_1	78,6	0	1A_1

Методика определения параметра Dq

Параметр Dq в ионной модели диэлектрических кристаллов определяется по следующей формуле:

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

где Z_L – заряд лигандов B ; r_{3d}^4 – радиус $3d$ оболочки иона $3d^n$ -конфигурации; 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 тетераэдрического окружения иона $k = 4$.

В работе [8] 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. На основании этих вычислений по формуле (1) были рассчитаны значения параметров Dq , B , C для Fe с использованием радиуса оболочки Fe $r_{3d}(Fe^{2+}) = 66$ Пм. Они получены параметризацией зависимости, построенной нами в работах [8–10], и приведены в таблице 6.

Таблица 6

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

Table 6

Spectroscopic parameters of Fe^{2+} ion in ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdO, CdS, CdSe, CdTe*
semiconductive crystals

L (ligand)	R_{AL} (Zn–L) Пм	R_{AL} (Cd–L) Пм	Dq (ZnL) см ⁻¹	Dq (CdL) см ⁻¹	B (ZnL) см ⁻¹	B (CdL) см ⁻¹	C (ZnL) см ⁻¹	C (CdL) см ⁻¹	Z_L (ZnL)	Z_L (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

* $R(Zn-L)$, $R(Cd-L)$ – сумма ковалентных радиусов цинка, кадмия и атомов лигандов L , $Dq(ZnL)$, $Dq(CdL)$ – параметр потенциала кристаллического поля кубической симметрии (см⁻¹); $B(ZnL)$, $B(CdL)$, $C(ZnL)$, $C(CdL)$ – параметры электростатического взаимодействия в соответствующих кристаллах; $Z_L(Zn)$, $Z_L(Cd)$ – числа лигандных зарядов.

Параметр электростатического взаимодействия B в ряду кристаллов незначительно уменьшается с увеличением межионного расстояния, поэтому в ряду кристаллов $A^{II}B^{VI}$ это уменьшение можно учесть, введя феноменологический коэффициент, который постоянен в этом ряду. Как следует из расчетов для свободного иона [12], второй параметр электростатического взаимодействия $C = 4,5 \cdot B$.

Параметр Dq , согласно формуле (1), 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 Со и

лигандами, перекрытием волновых функций и примесью ковалентной связи. Доля ковалентной связи зависит от разности электроотрицательности иона кобальта и атомов лигандов. При уменьшении этой разности увеличивается доля ковалентной связи, и результирующий заряд лигандов уменьшается. Заряды лигандов, полученные в работе [8], также представлены в таблице 6.

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

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

При расчете использовалась матрица всех взаимодействий электронной конфигурации d^6 210×210 с параметризацией B , C , Dq и 13-ю параметрами кристаллического поля низкой симметрии [6, 7]. В приводимых расчетах симметрия окружения иона кобальта в кристаллах $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ тетраэдрическая, поэтому

можно ограничиться одним параметром кристаллического поля Dq .

Авторами данной статьи были вычислены энергия уровней и сила осцилляторов переходов с 5D_4 уровней иона Fe^{2+} в CdO , CdS , CdSe , CdTe и ZnO , ZnS , ZnSe , ZnTe . Результаты этих расчетов приведены на рис. 10.

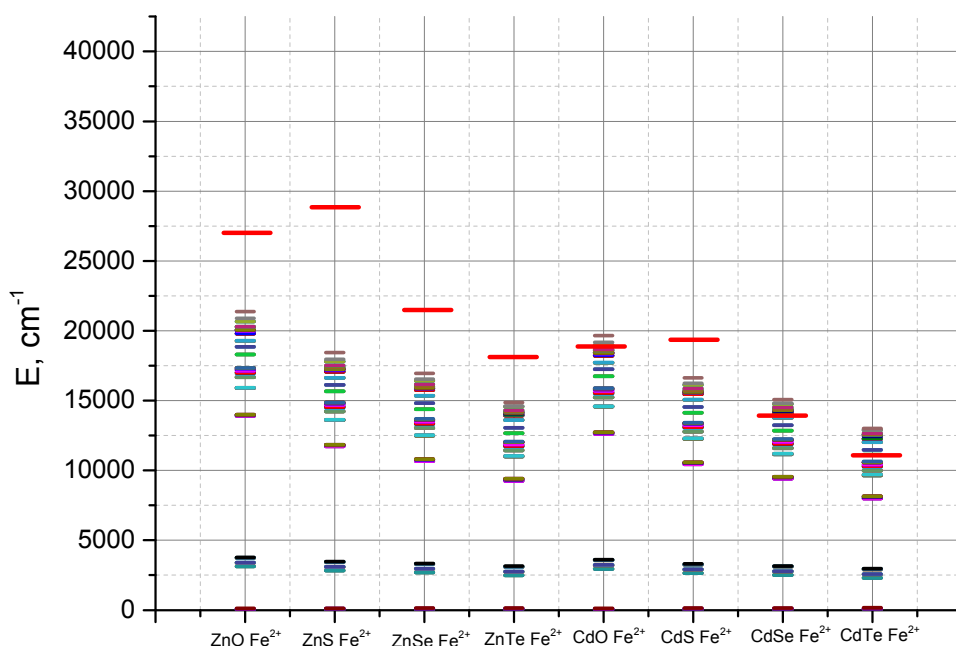


Рис. 10. Энергетические уровни $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ соединений, легированных ионами Fe^{2+} , на примере ZnO , ZnS , ZnSe , ZnTe , CdO , CdS , CdSe и CdTe

Fig. 10. Energy levels of $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ materials doped with Fe^{2+} ions for example ZnO , ZnS , ZnSe , ZnTe , CdO , CdS , CdSe and CdTe

Полученные при расчетах данные по полосам люминесценции совпадают с тремя основными полосами люминесценции ZnS и ZnSe , экспериментально измеренными в работе [3] в пределах погрешности. Кроме длин волн, рассчитаны силы осцилляторов переходов спектра люминесценции для каждого из этих материалов. В таблице 7 показаны

силы осцилляторов при переходах из основного состояния с 5D_4 иона Fe^{2+} на все остальные для CdO , CdS , CdSe , CdTe соответственно. Важно, что рассчитываются не только энергии 90-та уровней, но и силы осцилляторов переходов электро-дипольного типа, индуцированные нечетным потенциалом кристаллического поля.

Таблица 7

Энергия уровней и сила осцилляторов переходов с 5D_4 уровней иона Fe^{2+} в CdO, CdS, CdSe, CdTe

Table 7

Energy levels and oscillator strengths for transitions from 5D_4 energy levels of Fe^{2+} ion in CdO, CdS, CdSe and CdTe

№	Состав	CdO		CdS		CdSe		CdTe	
№	Уровни	$E, \text{см}^{-1}$	$f(10^{-7})$	$E, \text{см}^{-1}$	$f(10^{-7})$	$E, \text{см}^{-1}$	$f(10^{-7})$	$E, \text{см}^{-1}$	$f(10^{-7})$
1	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
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

Продолжение таблицы 7

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
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

Таким образом, основная цель проведенного аппроксимационного исследования – идентификация переходов и определение их энергии – достигнута.

Длины волн люминесценции при переходах с 5D_J уровней иона Fe^{2+} в диапазоне от 0 до 12 000 cm^{-1} приведены в нанометрах на рис. 11.

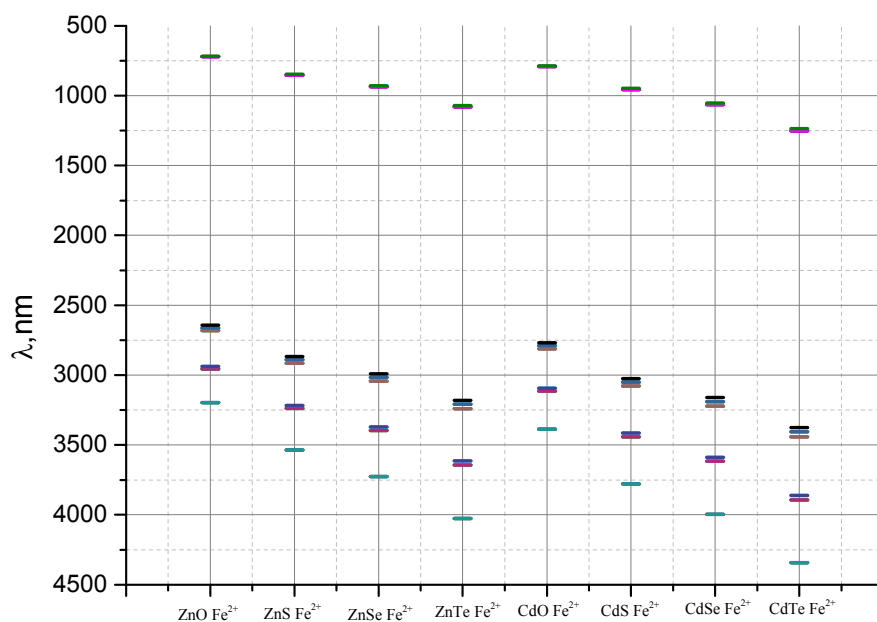


Рис. 11. Длины волн люминесценции переходов иона Fe^{2+} в кристаллах ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdO, CdS, CdSe, CdTe
Fig. 11. The wave lengths of luminescence of Fe^{2+} ions transitions in ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdO, CdS, CdSe, CdTe crystals

В ранних работах авторами данной статьи были проведены аналогичные расчеты для этого же набора кристаллов полупроводников $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$, но легирован-

ных ионами Co^{2+} и Ni^{2+} . На рисунках 12 и 13 приведены данные по нижним полосам массивов, легированных Co^{2+} и Ni^{2+} соответственно.

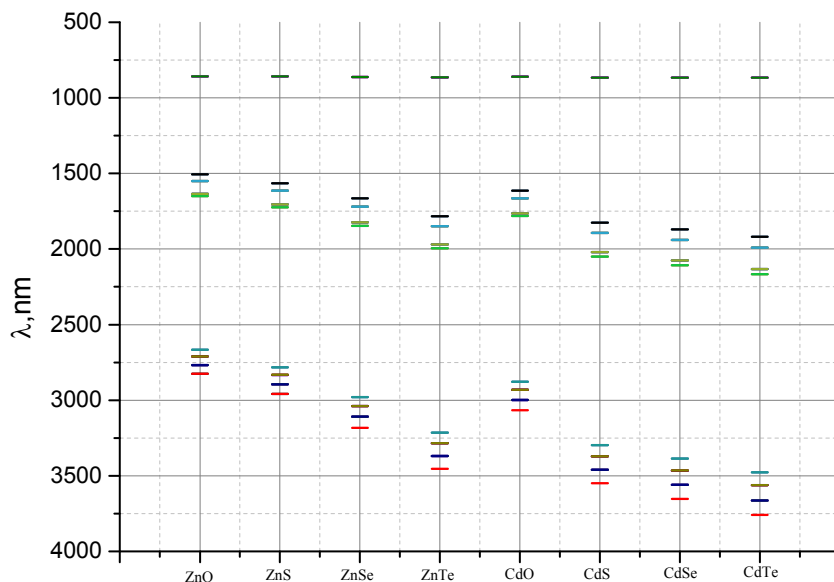


Рис. 12. Длины волн люминесценции переходов иона Co^{2+} в кристаллах ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdO, CdS, CdSe, CdTe
Fig. 12. The wavelengths of luminescence of Co^{2+} ions transitions in ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdO, CdS, CdSe, CdTe crystals

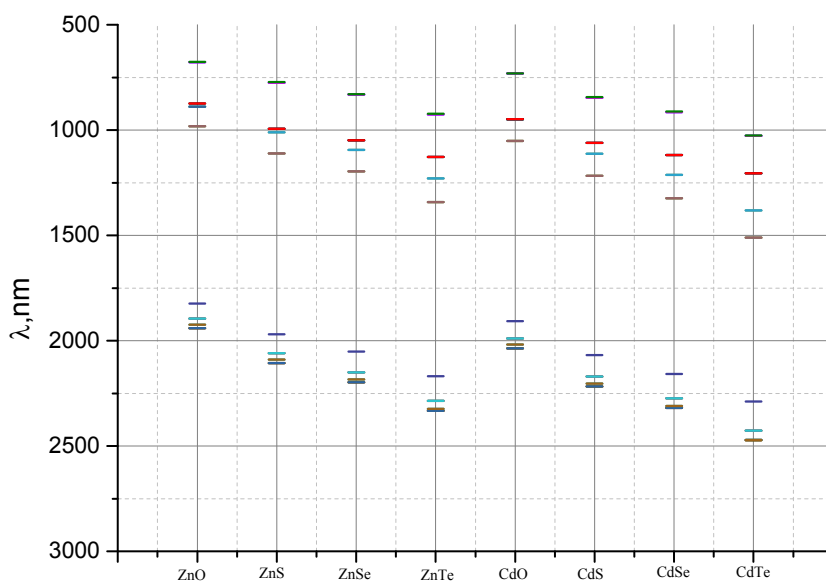


Рис. 13. Длины волн люминесценции переходов иона Ni^{2+} в кристаллах ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdO, CdS, CdSe, CdTe
Fig. 13. The wavelengths of luminescence of Ni^{2+} ions transitions in ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdO, CdS, CdSe, CdTe crystals

Заключение

В этой работе были определены длины волн люминесценции переходов ионов Co^{2+} , Ni^{2+} и Fe^{2+} в ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdO, CdS, CdSe, CdTe. Согласно полученным авторами статьи данным, легированные никелем кристаллы полупроводника имеют наибольшее количество полос люминесценции из исследованных материалов. В частности, все соединения, кроме CdTe ZnSe ZnTe, имеют по четыре полосы в пределах от 1 900 до 2 100 нм. С другой стороны, среди $A^{II}B^{VI}$ полупроводников, легированных железом, только ZnO, ZnS, ZnSe, CdO, а также CdTe имеют полосы в пределах 1,3–3 мкм.

Расчетные значения спектральных областей люминесценции совпадают со значениями, полученными в выполненных ранее другими авторами 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 Co^{2+} , Ni^{2+} и Fe^{2+} , наиболее подходящие из них для создания ИК лазеров с требуемыми значениями длины волны и спектральных характеристик излучения, перестраиваемых в широком диапазоне длин волн.

Список литературы

1. Гоголева Н.Г. Применение лазеров в науке, технике и медицине. Издательство СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2007.
2. Baranowski J.M., Allen J.W., Pearson G.L. Crystal-field spectra of 3dn impurities in II-VI and III-V compound semiconductors // *Physical Review*. 1967. Vol. 160. P. 627–632.
3. 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. P. 885–895.
4. Кустов Е.Ф. Орбитальная система структур наноразмерной дисперсности. Известия академии инженерных наук им. А.М. Прохорова. 2013. № 1. С. 92–124.
5. Kustov E.F., Novotortsev V.M., Kustov M.E. Orbital Structure of Vibrations of Nanoparticles, Clusters, and Coordination Polyhedra // *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2013. Vol. 58, No. 14. P. 1624–1646.
6. Кустов Е.Ф., Басиева И.Т. Матрицы энергии и сил осцилляторов электро-дипольных 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. Реестр базы данных № 2012621086 от

19.10.2012 [Электронный ресурс]: <http://www1.fips.ru>

7. Кустов Е.Ф., Басиева И.Т. Расчет оптических спектров ионов Cr^{2+} , Cr^{3+} , Cr^{4+} , Co^{2+} , Co^{3+} , Fe^{2+} , Ni^{2+}) в полупроводниках $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$, $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$. Реестр программ для ЭВМ № 2012619507 от 19.10.2012. [Электронный ресурс]: <http://www1.fips.ru>

8. Курчатова И.С., Бундюк А.В., Басиева И.Т., Кустов Д.М. Исследование материалов для ИК лазеров на основе полупроводников $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ и $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ легированных ионами Co^{2+} // Вестник СГТУ. 2014. № 2. С. 35–42.

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

10. Курчатова И.С., Кустов Д.М. Исследование материалов для ИК лазеров на основе полупроводников $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ легированных ионами Ni^{2+} // Вестник СГТУ. 2015. № 2. С. 32–38.

11. 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. P. 10516–10524.

12. Кустов Е.Ф., Новоторцев В.М. Магнетохимия молекулярных структур. Москва: URSS Crosand, 2014.

References

1. Gogoleva N.G. *Primenenie lazerov v nauke, tehnike i medicine*. SPbGÉTU «LÉTI» Publ., 2007 (in Russ.).

2. Baranowski J.M., Allen J.W., Pearson G.L. Crystal-field spectra of 3d impurities in II-VI and III-V compound semiconductors. *Physical Review*, 1967, vol. 160, pp. 627–632 (in Eng.).

3. 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 (in Eng.).

4. Kustov E.F. Orbital'naâ sistema struktur nanorazmernoj dispersnosti. *Izvestiâ akademii inženernyh nauk im. A.M. Prohorova*, 2013, no. 1, pp. 92–124 (in Russ.).

5. Kustov E.F., Novotortsev V.M., Kustov M.E. Orbital Structure of Vibrations of Nanoparticles, Clusters, and Coordination Polyhedra. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 2013, vol. 58, no. 14, pp. 1624–1646 (in Eng.).

6. Kustov E.F., Basieva I.T. Matricy ènergii i sil oscillâtorov èlektro-dipol'nyh perehodov v ionah 3dn($n=2,3,4,6,7,8$) konfiguracij (Cr^{2+} , Co^{2+} , Fe^{2+} , Ni^{2+}) v kristalličeskikh polâh lûboj simmetrii. Reestr bazy dannyh no. 2012621086 ot 19.10.2012. Available at: <http://www1.fips.ru> (in Russ.).

7. Kustov E.F., Basieva I.T. Rasčet optičeskikh spektrov ionov Cr^{2+} , Cr^{3+} , Cr^{4+} , Co^{2+} , Co^{3+} , Fe^{2+} , Ni^{2+}) v poluprovodnikah $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$, $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$. Reestr programm dlâ ÈVM no. 2012619507 ot 19.10.2012. Available at: <http://www1.fips.ru> (in Russ.).

8. Kurchatov I.S., Bundyuk A.V., Basieva I.T., Kustov D.M. Issledovanie materialov dlâ IK lazerov na osnove poluprovodnikov $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ i $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ legirovannyh ionami Co^{2+} . *Vestnik CGTU*, 2014, no. 2, pp. 35–42 (in Russ.).

9. Kustov D.M., Bundyuk A.V., Goncharov E.O., Kurchatov I.S. IK lazery na poluprovodnikah $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ i $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ s ionami Co^{2+} . *Izvestiâ Akademii inženernyh nauk im. Prohorova*, 2014, no. 2, pp. 49–52 (in Russ.).

10. Kurchatov I.S., Kustov D.M. Issledovanie materialov dlâ IK lazerov na osnove poluprovodnikov $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ legirovannyh ionami Ni^{2+} // *Vestnik CGTU*. 2015. no 2, pp. 32–38 (in Russ.).

11. 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, pp. 10516–10524 (in Eng.).

12. Kustov E.F., Novotorcev V.M. *Magнетохимия молекулярных структур*. Moscow: URSS Crosand Publ., 2014 (in Russ.).

Транслитерация по ISO 9:1995

