

УДК 535.37:546.65

**Л.В. Красильникова, М.В. Степихова, Н.В. Юрасова, З.Ф. Красильник,
В.Г. Шенгуров, А.С. Коломийцев**

СТРУКТУРЫ $\text{Si/Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er/Si}$ ДЛЯ КРЕМНИЕВОЙ НАНОФОТОНИКИ*

Рассмотрены перспективы создания на базе структур $\text{Si/Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er/Si}$ приборов и устройств кремниевой нанофотоники, в частности, источников излучения и лазеров с диапазоном длин волн 1,54 мкм, совместимых по технологии изготовления с современными СБИС. Приводятся результаты анализа волноводных свойств гетероструктур $\text{Si/Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er/Si}$ и их взаимосвязь с параметрами гетерослоя $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er}$. Рассмотрены возможные варианты волноводов и резонаторов, разрабатываемых на базе структур $\text{Si/Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er/Si}$, и пути их практической реализации, обсуждаются люминесцентные свойства структур $\text{Si/Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er/Si}$, где отдельное внимание уделяется проблеме релаксации гетерослоя $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er}$. В работе приводится оценка квантовой эффективности полученных структур $\text{Si/Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er/Si}$ и показана возможность достижения в структурах этого типа инверсной населенности энергетических уровней редкоземельной примеси при оптической накачке.

Ионы Er^{3+} ; гетероструктуры Si/SiGe ; компоненты нанофотоники; фотолюминесценция.

**L.V. Krasilnikova, M.V. Stepikhova, N.V. Yurasova, Z.F. Krasilnik,
V.G. Shengurov, A.S. Kolomiytsev**

 $\text{Si/Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er/Si}$ STRUCTURES FOR SILICON Nanophotonics

In this work, we discuss the prospects for the realization of silicon nanophotonic device structures on $\text{Si/Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er/Si}$ basis. In particular, the light emitters and lasers for the wavelength range of 1.54 μm being compatible with the modern VLSI technology are considered. The results of the analysis carried out to demonstrate the waveguiding properties of $\text{Si/Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er/Si}$ structures and their correlation with the parameters of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er}$ heterolayers are presented. The possible variants of the waveguides and resonators being developed on the basis of $\text{Si/Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er/Si}$ structures as well the ways for their practical realization are discussed. The special attention is devoted to the luminescent properties of $\text{Si/Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er/Si}$ structures and the problem of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er}$ layer relaxation. Finally, the estimation for the luminescence quantum efficiency of $\text{Si/Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er/Si}$ structures is given, and the ability to achieve the population inversion of Er ion states in such structures under optical pumping was demonstrated.

Er^{3+} ions; Si/SiGe heterostructures; nanophotonic components; photoluminescence.

Создание эффективных источников излучения на кремнии является одной из приоритетных задач нанофотоники – области исследований, интенсивно развивающейся в последнее время [1].

Особый интерес здесь представляют структуры на основе кремния, легированного примесью эрбия, являющегося редкоземельным элементом. Излучательный переход $^4\text{I}_{13/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ иона Er^{3+} на длине волны 1,54 мкм совпадает с окном прозрачности кварцевого волокна, что позволяет говорить о перспективах использования структур на основе Si:Er в системах волоконно-оптической связи. Более того, как показывают результаты теоретического анализа [2], коэффициент усиления в структурах Si:Er с выделенным типом оптически активных центров редкоземельной примеси может достигать значительной величины, порядка 30 см^{-1} , что позволяет говорить о перспективах создания лазера.

* Работа поддержана РФФИ (проект № 11-02-00963-а) и программами фундаментальных исследований ОФН РАН.

Одним из необходимых условий для создания лазерных структур на основе Si:Er является эффективная локализация излучения в активном слое. Для реализации этого условия могут быть использованы гетероструктуры Si/Si_{1-x}Ge_x:Er/Si с активным волноведущим каналом Si_{1-x}Ge_x, легированным эрбием. Показатель преломления слоев Si_{1-x}Ge_x зависит от содержания германия (x) и может варьироваться в широких пределах [3], обеспечивая, таким образом, необходимый для формирования эффективного волновода скачок показателя преломления. На рис. 1 приведены результаты численного анализа коэффициента оптического ограничения (Γ), показывающего степень локализации электромагнитной волны в активной области, проведенного для TE-мод в планарных структурах Si/Si_{1-x}Ge_x:Er/Si с разным содержанием германия (x) и толщиной волноводного слоя Si_{1-x}Ge_x:Er ($d_{\text{Si}1-x\text{Ge}x:\text{Er}}$). Толщина покровного слоя кремния для всех моделируемых структур составляла 0,2 мкм. В силу того, что в анализируемых структурах Si/Si_{1-x}Ge_x:Er/Si коэффициенты оптического ограничения для TE-мод превышают значения Γ для TM-мод, результаты расчетов последних не приводятся. Как видно из рис. 1, максимальные значения коэффициента Γ в структурах этого типа достигаются при значительных толщинах гетерослоя Si_{1-x}Ge_x:Er (более 0,5 мкм) и высоком содержании германия в нем ($x > 30\text{--}40\%$). При таких параметрах гетерослоя величина Γ может достигать значений $\sim 0,98$, что соответствует локализации моды в активном волноводном слое $\sim 98\%$, однако в данном случае в волноводе будут распространяться не только основная (TE₀), но и возбужденные (TE₁, TE₂, ...) моды [4, 5].

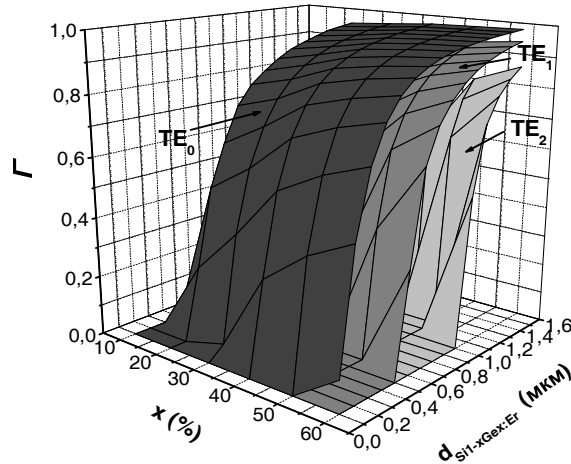


Рис. 1. Зависимость коэффициента оптического ограничения для TE-мод в планарных волноводных структурах Si/Si_{1-x}Ge_x:Er/Si от толщины активного слоя $d_{\text{Si}1-x\text{Ge}x:\text{Er}}$ и содержания германия в нем (x)

Более эффективными по сравнению с планарными волноводными структурами являются симметризованные полосковые волноводы Si/Si_{1-x}Ge_x:Er/Si. На рис. 2 показано рассчитанное методом эффективного показателя преломления [6] распределение поперечных электрических мод в симметризованном полосковом волноводе Si/Si_{1-x}Ge_x:Er/Si с содержанием германия 30% и толщиной активного гетерослоя $d_{\text{Si}1-x\text{Ge}x:\text{Er}} = 1$ мкм, толщина покровного слоя кремния в структуре составляла $d_{\text{Si}} = 0,2$ мкм, ширина полоска $W = 50$ мкм.

Для волноводов такого типа в качестве резонаторов могут быть использованы резонаторы Фабри–Перо, зеркала которых служат торцы (сколы) структуры либо резонатор Фабри–Перо с Брэгговскими зеркалами типа Si/воздух/Si/воздух/Si.../Si.

Формирование последних требует высокого качества торцов и прецизионной точности травления, что может быть реализовано с использованием методик травления фокусированными ионными пучками (ФИП).

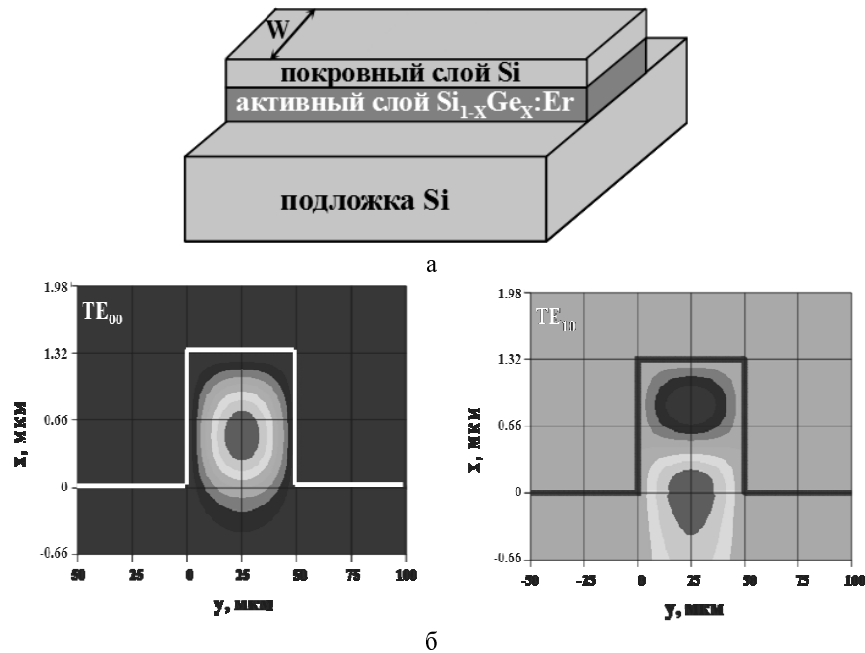


Рис. 2. Схематическое представление симметризованного полоскового волновода $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$ (а) и распределение поперечных электрических мод в нем (б). Градиент цвета соответствует распределению интенсивности волны в волноводе

Другим вариантом резонаторов, перспективным с точки зрения создания приборных структур кремниевой нанофотоники, являются активно разрабатываемые в настоящее время кольцевые и дисковые микрорезонаторы. Существенное преимущество резонаторов этого типа заключается в высоком значении добротности, достигающей $Q \sim 10^8$ [7]. В качестве примера на рис. 3,а приведены результаты расчета поля в системе, состоящей из кремниевого микрорезонатора в виде диска с радиусом $r = 2,5$ мкм, высотой $h = 1,7$ мкм и полоскового волновода с шириной $W = 0,3$ мкм, расположенного на расстоянии $d = 0,2$ мкм от диска. Волновод в данном случае выполняет функцию сопряжения с резонатором, обеспечивая ввод (и вывод) излучения. Как видно из результатов расчета распределения z -компоненты напряженности электрического поля (в цилиндрической системе координат), на частоте $f = 59180$ ГГц внутри микрорезонатора реализуется собственная мода шепчущей галереи с азимутальным индексом $n = 7$ (рис. 3,а). При этом условия сопряжения полоскового волновода существенным образом сказываются как на добротности, так и на условиях функционирования системы. Расчет электромагнитного поля в системе выполнялся методом конечно-разностных элементов во временной области.

Можно продемонстрировать возможность практической реализации микродисковых резонаторов на базе структур $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$ (рис. 3,б,в). Для формирования микродисков в данной работе использовался метод высокоточного травления ФИП. В основе метода лежит локальное ионно-лучевое травление мате-

риалов ионами галлия, при размерах ионного пучка $\sim 10\text{--}15$ нм [8]. Формирование микродисковых резонаторов производилось на электронном микроскопе с системой ФИП Nova NanoLab 600 (FEI Company, Нидерланды). Для определения оптимальных режимов формирования микрорезонаторов параметры ионно-лучевого травления варьировались в широких пределах: ток ионного пучка – от 1 до 20 нА, время воздействия пучка в каждой точке – от 400 нс до 1 мкс, величина ускоряющего напряжения составляла 30 кэВ. При разных режимах травления ФИП был сформирован ряд микродисковых резонаторов диаметром 54 мкм (рис. 3,б). В качестве исходных подложек в работе использовались структуры $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er}/\text{Si}$, выращенные методом сублимационной молекулярно-лучевой эпитаксии в атмосфере германа [9]. Толщина активного гетерослоя в процессируемых структурах составляла $\sim 1,1$ мкм, содержание германия $x = 23 \pm 1$ %. Дисковые резонаторы с наименьшей шероховатостью граней и минимальным отклонением грани от вертикали были получены при условии дополнительной низкотокковой полировки поверхности фокусированным ионным пучком. Наименьшее отклонение граней микрорезонатора от вертикали в данном случае составило $\sim 5,6^\circ$, шероховатость граней $\sim 0,7$ % диаметра диска.

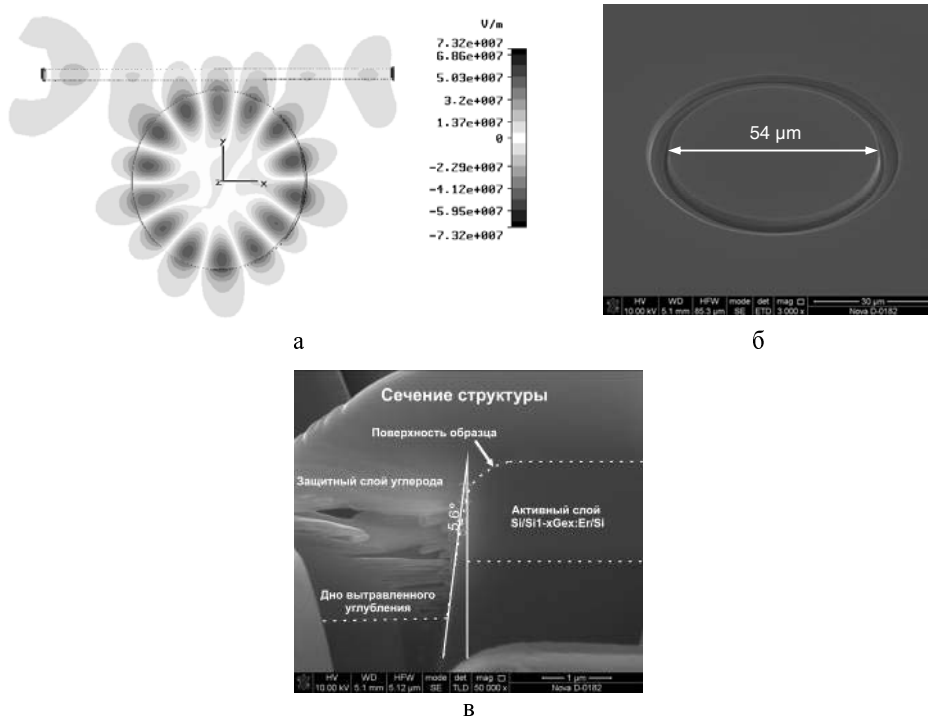


Рис. 3. Распределение электрического поля (E_z) в системе, состоящей из микродискового резонатора и полоскового волновода (а); РЭМ-изображение микродискового резонатора диаметром 54 мкм (б); поперечное сечение микродискового резонатора, сформированного методом ФИП (ток ионного пучка в процессе травления – 3 нА, время воздействия пучка в каждой точке – 1 мкс) после дополнительной низкотокковой полировки поверхности (в)

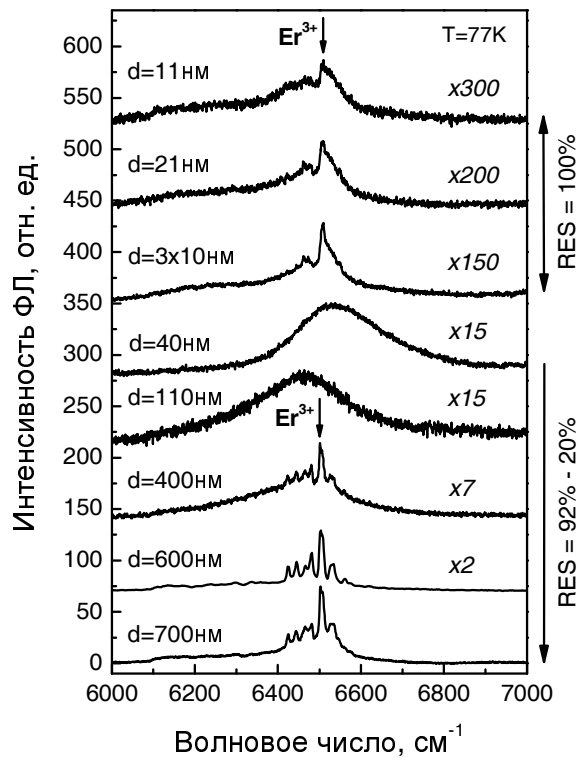
Рассматривая люминесцентные свойства структур $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er}/\text{Si}$, особое внимание следует уделить проблеме релаксации упругих напряжений в гетерослое $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:Er}$ [10]. Как было показано выше, высокая степень локализации оптиче-

ских мод в волноводных структурах $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$ имеет место при высоком содержании германия и большой толщине активного слоя, что на практике реализуется только в релаксированных структурах $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$. Ниже приводятся результаты люминесцентных исследований структур $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$, рассмотрена взаимосвязь излучающих свойств этих материалов с параметрами гетерослоя. Все исследованные структуры были выращены методом сублимационной МЛЭ в атмосфере германа (GeH_4) [9]. Как и в случае стандартной методики сублимационной МЛЭ, при формировании активного слоя поток атомов Er создавался испарением поликристаллического источника Si, легированного этой примесью. Поступление германия в активный слой осуществлялось за счет разложения газа GeH_4 на разогреваемой током поверхности роста. Образцы выращивались на подложках c-Si марки КЭФ-4.5 (100) при температуре роста 480–500 °С, давление газа германа в камере роста $\sim (4-5) \cdot 10^{-4}$ Торр. Процессу роста слоев $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}$ предшествовало формирование буферного слоя c-Si толщиной $\sim 0,2$ мкм. Толщина покровного слоя кремния, осаждаемого поверх активных гетерослоев, составляла 0,1–0,2 мкм. Толщина активного волноводящего слоя варьировалась изменением времени роста. Содержание Ge в выращенных гетерослоях $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}$ изменялось от 20 до 30 %, толщина слоев варьировалась от 11 до 1000 нм, величина остаточных упругих напряжений (RES), характеризующая степень релаксации слоя, – 100 ÷ 20 %.

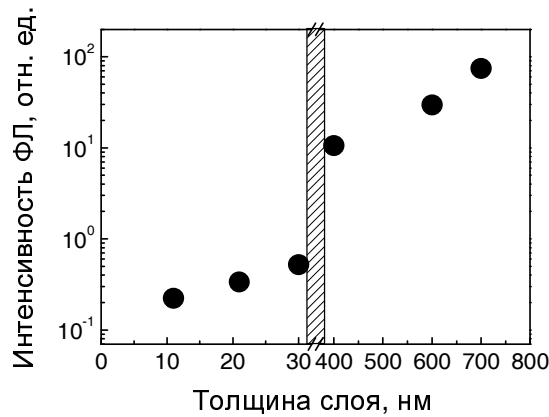
Экспериментально было показано, что преобладающий вклад в люминесцентный отклик структур $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$ с напряженными (RES = 100 %) и релаксированными слоями $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}$ достаточной толщины ($d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}} > 200$ нм) вносят компоненты, связанные с присутствием в структурах оптически активных центров иона Er^{3+} (рис. 4). Тип и структура оптически активных центров редкоземельного иона, формирующихся в гетероэпитаксиальных слоях $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}$, непосредственно зависят от примесного состава и содержания германия в слое (рис. 5). В слоях с содержанием германия, превышающим 25 %, наблюдается характерная серия линий фотолюминесценции (ФЛ) германийсодержащего центра иона Er^{3+} , центра Er-Ge1. В структурах $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$ с $x = 20-25$ % и достаточно высокой концентрацией кислорода доминирующий вклад в люминесцентный отклик вносят линии изолированного, кислородсодержащего центра редкоземельного иона (центр Er-O1), наблюдающегося, в том числе, и в структурах $\text{Si}/\text{Si}:\text{Er}$ [11].

Примечательно что в структурах $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$ со значительными толщинами гетерослоя ($d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}} > 400$ нм) наличие релаксации и, как следствие, структурных дефектов в гетерослое фактически не сказывается на процессах спонтанного излучения редкоземельной примеси. Сигнал эрбиевой ФЛ в этих структурах характеризуется типичными для редкоземельной примеси временами затухания $\tau \sim 0,7$ мс ($T = 77$ К). Вклад дефектов проявляется лишь в кинетике спада сигнала ФЛ на волне длиной 1,54 мкм, где наличие коротковременных компонент сигнала с характерными временами затухания $\tau < 10$ мкс объясняется присутствием в структурах $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$ дефектов и дефектно-примесных комплексов. По интенсивности сигнала ФЛ отклик «дефектной» природы на несколько порядков меньше величины люминесцентного отклика, связываемого с присутствием в структурах оптически активных центров иона Er^{3+} [12].

Полученное значение внешней квантовой эффективности ФЛ выращенных структур $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$ составляет $\sim 6,3 \cdot 10^{-5}$ при $T = 77$ К (длина волны возбуждающего излучения – 532 нм, мощность накачки – 84 мВт), что сравнимо с лучшими результатами, достигаемыми в материалах $\text{Si}/\text{Si}:\text{Er}$ [2].



а



б

Рис. 4. Низкотемпературные ($T = 77\text{ K}$) спектры ФЛ структур $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$ с варьируемой толщиной гетерослоя ($d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}} = 11\text{--}700\text{ нм}$), с содержанием германия $x = 27\text{--}30\%$ (а). (Приведенный на рисунке фактор RES отражает изменение степени релаксации гетерослоя $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}$.) Зависимость интенсивности сигнала эрбиевой ФЛ структур $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$ от толщины гетерослоя (б) (Заштрихованная область на рисунке соответствует интервалу толщин гетерослоя, где преимущественный вклад в сигнал ФЛ вносят линии дефектной (дислокационной) природы [13].)

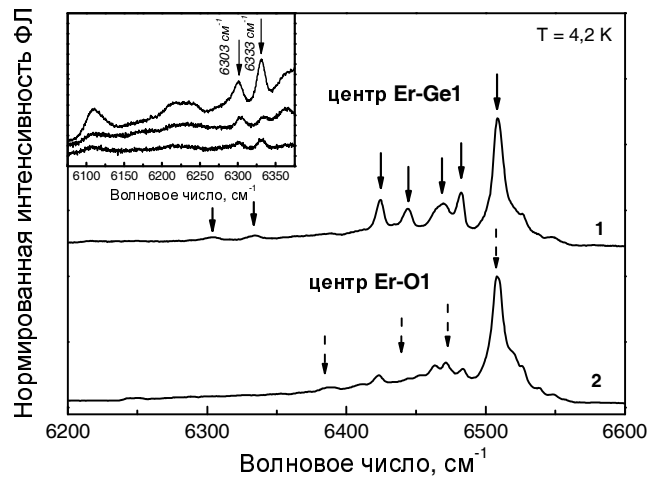


Рис. 5. Спектры ФЛ высокого разрешения структур $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$ с $x = 27\text{--}30\%$ (1) и $x = 20\text{--}25\%$ (2) (Стрелками на рисунке показано положение линий ФЛ оптически активных центров иона Er^{3+} , преобладающих в люминесцентном отклике структур. На вставке к рисунку приведена длинноволновая часть спектра ФЛ, измеренная для нескольких образцов с содержанием германия $x = 27\text{--}30\%$ и отражающая воспроизводимость линий ФЛ в серии линий оптически активного центра Er-Ge1 .)

Необходимым условием создания лазера является возможность реализации в этих материалах инверсной населенностей энергетических уровней иона Er^{3+} , в частности, при оптической накачке. Последнее может быть проанализировано по результатам исследований кинетики ФЛ. Решая систему кинетических уравнений, описывающих процессы, связанные с возбуждением редкоземельной примеси (уравнения для электронов и дырок, свободных экситонов и ионов эрбия), можно показать, что в квазистационарном состоянии, при фиксированных условиях, относительная концентрация ионов эрбия в возбужденном состоянии будет определяться временами нарастания и спада сигнала ФЛ. Условием достижения инверсной населенности энергетических уровней иона Er^{3+} будет соотношение $N^*/N_{\text{Er}} \geq 0,5$, где N^* – число ионов эрбия, находящихся в возбужденном состоянии, а N_{Er} – полная концентрация оптически активной примеси эрбия. Таким образом, изучение кинетики эрбиевой ФЛ в структурах $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$, типичный вид которых представлен на рис. 6,а, позволяет провести анализ наличия инверсной населенности. Как было показано экспериментально, инверсия населенностей энергетических уровней иона Er^{3+} в структурах $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$ наблюдается при плотностях мощности возбуждающего излучения $\sim 0,1\text{--}0,2 \text{ Вт/см}^2$ (рис. 6,б.) Максимальное значение инверсии, полученное в этих материалах, составляет ~ 4 , что соответствует 80 % оптически активных ионов эрбия в возбужденном состоянии [14].

Таким образом, все приведенное выше свидетельствует о перспективах создания на базе структур $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$ эффективных источников излучения диапазона длин волн 1,54 мкм, включая лазеры, совместимые по технологии изготовления с современными СБИС.

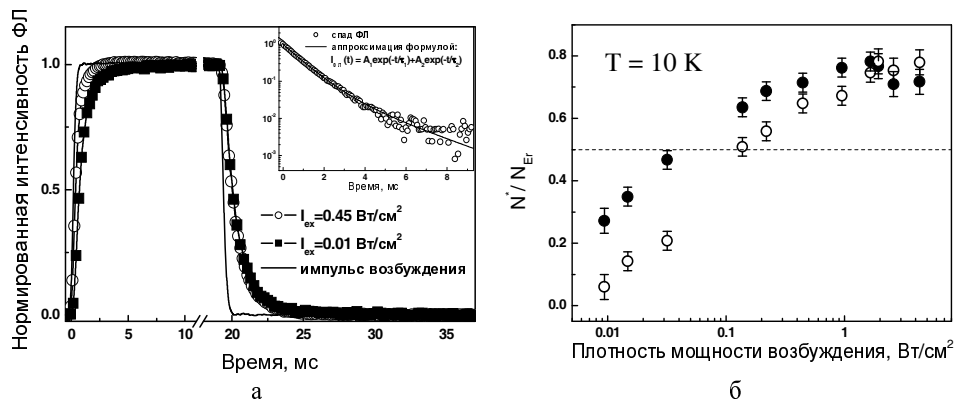


Рис. 6. Временные зависимости сигнала ФЛ на волне длиной 1,54 мкм, измеренные для структуры $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$ с $x = 26\%$ и $d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}} = 1$ мкм при двух разных интенсивностях возбуждения, $T = 10$ К (а) (На вставке к рисунку показана кинетика спада сигнала ФЛ и ее аппроксимация.) Рассчитанные зависимости N^*/N_{Er} от плотности мощности возбуждающего излучения для структуры $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}$ с $x = 26\%$ и $d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}} = 1$ мкм (б) (Пунктирная линия на рисунке соответствует пороговому значению $N^*/N_{\text{Er}} = 0,5$, при котором наблюдается инверсия населенностей энергетических уровней оптически активной примеси Er.)

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Silicon Nanophotonics: Basic Principles, Present Status and Perspectives / ed. by L. Khriatchev - World Scientific, 2008. – 400 p.
2. Krasilnik Z.F., Aleshkin V.Ya., Andreev B.A. et al. SMBE grown uniformly and selectively doped Si:Er structures for LEDs and lasers // in “Towards the First Silicon Laser” Eds. L. Pavesi, S. Gaponenko, L. Dal Negro. NATO Science Series. Kluwer Academic Publishers. – 2003. – P. 445-454.
3. Humlicek, J. Properties of Strained and Relaxed Silicon Germanium // ed. by E. Kasper, INSPEC, the Institution of Electrical Engineers, London, U.K. – 1995. – P. 121-131.
4. Stepihova M., Krasil'nikova L., Krasil'nik Z. et al. Si/SiGe:Er/Si Structures for Laser Realization: Theoretical Analysis and Luminescent Studies // Journal of Crystal Growth. – 2006. – Vol. 288, № 1. – P. 65-69.
5. Krasilnik Z.F., Andreev B.A., Gregorkievicz T. et al. Erbium doped silicon single- and multi-layer structures for light-emitting device and laser applications // Journal of Materials Research. – 2006. – Vol. 21, № 3. – P. 574-583.
6. Адамс М. Введение в теорию оптических волноводов. – М.: Мир, 1984. – 512 с.
7. Armani D.K., Kippenberg T.J., Spillane S.M. et al. Ultra-high- Q toroid microcavity on a chip // Nature. – 2003. – Vol. 421. – P. 925-928.
8. Нанотехнология: физика, процессы, диагностика / Под ред. В.В. Лучинина, Ю.М. Таирова. – М.: Физматлит, 2006. – 552 с.
9. Светлов С.П., Шенгуров В.Г., Чалков В.Ю. и др. Гетерозпитаксиальные структуры $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}(100)$, полученные сублимационной молекулярно-лучевой эпитаксией кремния в среде GeH_4 // Изв. РАН, сер. физическая. – 2001. – Т. 65, № 2. – С. 203-206.
10. Paul D.J. Si/SiGe heterostructures: from material and physics to devices and circuits // Semiconductor Science and Technology. – 2004. – Vol. 19. – P. R75-R108.
11. Красильникова Л.В., Степихова М.В., Байдакова Н.А. и др. Оптически активные центры в гетероструктурах $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}$, связанные с ионами Er^{3+} // ФТП. – 2009. – Т. 43. – Вып. 7. – С. 909-916.
12. Krasilnikova L., Stepihova M., Drozdov Y. et al. On the role of heterolayer relaxation in luminescence response of Si/SiGe:Er structures // Physica Status Solidi C. – 2011. – Vol. 8, №. 3. – P. 1044-1048.

13. *Степихова М.В., Красильникова Л.В., Дроздов Ю.Н. и др.* Излучающие свойства гетероструктур $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}$ // Труды XV Международного симпозиума “Нанофизика и наноэлектроника”. – Нижний Новгород, 2011. – Т. 2. – С. 527-528.
14. *Степихова М.В., Жигунов Д.М., Шенгуров В.Г. и др.* Инверсная населенность уровней энергии ионов эрбия при передаче возбуждения от полупроводниковой матрицы в структурах на основе кремния/германия // Письма в ЖЭТФ. – 2005. – Т. 81. – Вып. 10. – С. 614-617.

Статью рекомендовал к опубликованию д.т.н., профессор О.А. Агеев.

Красильникова Людмила Владимировна

Институт физики микроструктур РАН.

E-mail: luda@ipm.sci-nnov.ru.

603950, г. Нижний Новгород, ул. Ульянова, 46.

Тел.: 88314385037.

Научный сотрудник отдела физики полупроводников.

Степихова Маргарита Владимировна

E-mail: mst@ipm.sci-nnov.ru.

Научный сотрудник отдела физики полупроводников.

Юрасова Надежда Валерьевна

E-mail: yurasova@ipm.sci-nnov.ru.

Младший научный сотрудник отдела физики полупроводников.

Красильник Захарий Фишелевич

E-mail: director@ipm.sci-nnov.ru.

Тел.: 88314385555.

Директор.

Шенгуров Владимир Геннадьевич

Научно-исследовательский физико-технический институт Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского.

E-mail: Shengurov@phys.unn.runnet.ru.

603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23/3.

Тел.: 88314656914.

Заведующий лабораторией электроники твердого тела.

Коломийцев Алексей Сергеевич

Технологический институт федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Южный федеральный университет» в г. Таганроге.

E-mail: alexey.kolomytsev@gmail.com.

347928, г. Таганрог, ул. Шевченко, 2.

Тел.: 88634371611.

Кафедра технологии микро- и нанoeлектронной аппаратуры; аспирант.

Krasilnikova Lyudmila Vladimirovna

Institute for Physics of Microstructures RAS.

E-mail: luda@ipm.sci-nnov.ru.

46, Ul'yanova Street, Nizhny Novgorod, 603950, Russia.

Phone: +78314385037.

Researcher of Semiconductors Department.

Stepikhova Margarita Vladimirovna

E-mail: mst@ipm.sci-nnov.ru.

Researcher of Semiconductors Department.

Yurasova Nadezhda Valer'evna

E-mail: yurasova@ipm.sci-nnov.ru.

Junior Researcher of Semiconductors Department.

Krasilnik Zakharii Fischevich

E-mail: director@ipm.sci-nnov.ru.

Phone: +78314385555.

Director.

Shengurov Vladimir Gennad'evich

Physico-Technical Research Institute of University of Nizhny Novgorod.

E-mail: Shengurov@phys.unn.runnet.ru.

23/3, Gagarin Ave., Nizhny Novgorod, 603950, Russia.

Phone: +78314656914.

Head of Solid State Electronics Laboratory.

Kolomiytsev Alexey Sergeevich

Taganrog Institute of Technology – Federal State-Owned Autonomy Educational Establishment of Higher Vocational Education “Southern Federal University”.

E-mail: alexey.kolomiytsev@gmail.com.

2, Shevchenko Street, Taganrog, 347928, Russia.

Phone: +78634371611.

The Department of Micro- and Nanoelectronics; Postgraduate Student.

УДК 539.2;537.531

**А.А. Лаврентьев, Б.В. Габрельян, П.Н. Шкумат, И.Я. Никифоров,
И.Ю. Завалий, А.В. Извеков, О.Ю. Хижун**

**ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА Ti_4Fe_2O ПО ДАННЫМ ЗОННОГО РАСЧЕТА
“ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ” И РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

Получены экспериментальные ультрамягкие рентгеновские эмиссионные $TiL\alpha$ -, $FeL\alpha$ - и $OK\alpha$ -полосы. Модифицированным методом присоединенных плоских волн рассчитаны плотности электронных состояний всех составных атомов указанного оксида. Данные расчета, а также совмещение в единой энергетической шкале РЭС-полос, свидетельствуют о том, что $O2p$ -состояния в этом оксиде локализованы преимущественно у дна валентной зоны, а основной вклад у потолка валентной зоны осуществляют $Fe3d$ - и $Ti3d$ -состояния. Основной вклад в дно зоны проводимости вносят $Fe3d^$ - и $Ti3d^*$ -состояния.*

Электронная структура; плотность электронных состояний; рентгеновские спектры эмиссии; оксиды.

**A.A. Lavrent'ev, B.V. Gabrel'yan, P.N. Shkumat, I.Ya. Nikiforov, I.Yu. Zavaliy,
A.V. Izvekov, O.Yu. Xizhun**

**THE ELECTRONIC STRUCTURE OF Ti_4Fe_2O BY THE AB INITIO BAND
CALCULATION AND X-RAY INVESTIGATIONS**

Experimental soft X-ray emission $TiL\alpha$ -, $FeL\alpha$ - and $OK\alpha$ -bands have been recorded. The modified ab initio augmented plane wave (APW) method has been used to calculate densities of states for the constituent atoms of the oxide. Data of the APW calculations of Ti_4Fe_2O , as well as a comparison on a common energy scale of the soft X-ray emission bands, reveal that the $O2p$ -like states are located mainly at the bottom, whilst the $Ti3d$ - and $Fe3d$ -like states are the main contributions at the top of the valence band. The APW data reveal that the $Fe3d^$ - and $Ti3d^*$ -like states are the principal contributions into the bottom of the conduction band.*

Electronic structure; density of the electronic states; X-ray emission spectra; oxides.