

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТООПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОХАЛЬКОГЕНИДОВ ЕВРОПИЯ EuO И EuS

© Э.Т.Кулатов, Ю.А.Успенский, С.В.Халилов

Институт общей физики Российской академии наук,
117942 Москва, Россия
(Поступила в Редакцию 20 февраля 1996 г.)

Проведен расчет электронной структуры и магнитооптических характеристик монокалькогенидов европия EuO и EuS .

Монокалькогениды европия, кристаллизующиеся в структуре NaCl , относятся к числу наиболее изученных соединений редкоземельных металлов [1]. Многие необычные свойства этих ферромагнитных полупроводников (магнитный момент порядка $7\mu_B$ и низкая температура магнитного упорядочения, сильная зависимость ширины полупроводниковой щели от магнитного поля и температуры) связаны со 100% спиновой поляризацией сильно локализованных $4f$ -электронов, заполняющих обменно-расщепленную $4f$ -зону европия наполовину. Одним из самых ярких свойств монокалькогенидов европия является их рекордно высокая магнитооптическая (МО) активность, характеризующаяся двумя узкими резонансно-подобными экстремумами с энергиями $\hbar\omega \approx 2$ и 4eV . Цель данной работы — вычислить из «первых принципов» спектральные зависимости углов вращения плоскости поляризации света в МО-эффектах Керра и Фарадея ($\theta_K(\omega)$ и $\theta_F(\omega)$) для соединений EuO и EuS , а также объяснить происхождение МО-резонансов в этих соединениях.

Расчет электронной структуры EuO и EuS проводился самосогласованным релятивистским методом ЛМТО [2] с $l_{\text{max}} = 4$ и с включением в базис элементарной ячейки двух пустых атомных сфер (для увеличения степени упаковки). Интегрирование в k -пространстве проводилось методом тетраэдров по 250 k -точкам в $1/16$ неприводимой части ГЦК-зоны Бриллюэна. Рассчитанный спиновый магнитный момент m в EuO равен $6.95\mu_B$ ($6.99\mu_B$ на атоме Eu , — $0.08\mu_B$ на кислороде и $0.04\mu_B$ в межузельной области (empty)). Для EuS значения спиновых моментов следующие: $m(\text{EuS}) = 6.91\mu_B$, $m(\text{Eu}) = 6.93\mu_B$, $m(\text{O}) = -0.04\mu_B$, $m(\text{empty}) = 0.02\mu_B$.

Вычисление МО-характеристик выполнялось по той же схеме, что и в наших ранних работах [3,4]: рассчитывалась мнимая часть диэлектрического тензора, затем с помощью преобразования Крамерса-Кронига восстанавливалась его действительная часть и по известным

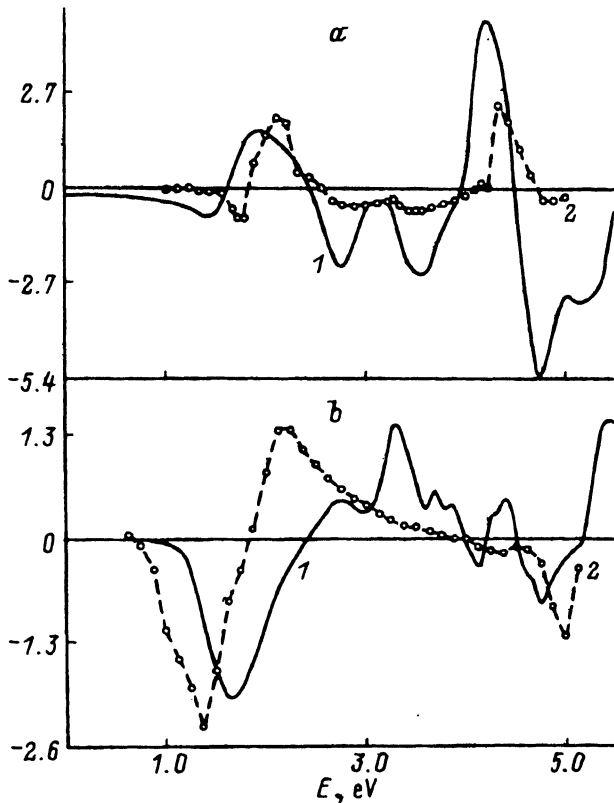


Рис. 1. Рассчитанные энергетические зависимости фарадеевского вращения (в ед. 10^6 deg/cm) для EuS (a) и эффекта Керра (в ед. deg) для EuO (b) в сравнении с экспериментальными данными.

1 — расчет, 2 — эксперимент [6].

формулам магнитооптики [5] вычислялись $\theta_K(\omega)$ и $\theta_F(\omega)$. Результаты расчетов вместе с экспериментальными данными [6] представлены на рис. 1. Для обоих соединений расчет достаточно хорошо воспроизводит форму спектральных зависимостей $\theta_K(\omega)$ (EuO) и $\theta_F(\omega)$ (EuS) с двумя мощными МО-резонансами. При этом положение особенностей в EuS воспроизводится почти точно, тогда как в EuO низкоэнергетический экстремум сдвинут относительно экспериментального на 0.3 eV, а высокочастотный — на 0.2 eV. Отметим также, что ширина полупроводниковой оптической щели и величина статической диэлектрической проницаемости в EuS воспроизводятся достаточно хорошо: $\Delta_{\text{opt}} = 1.5 \text{ eV}$ (экспериментальное значение составляет 1.65 eV), $\epsilon_{\text{stat}} = 5.0 \text{ eV}$ (4.7 eV), тогда как в EuO эти величины имеют заметные погрешности: $\Delta_{\text{opt}} = 1.3 \text{ eV}$ (1.12 eV), $\epsilon_{\text{stat}} = 3.5 \text{ eV}$ (4.6 eV).

Анализируя происхождение экстремумов $\theta_K(\omega)$ и $\theta_F(\omega)$, мы нашли, что они практически полностью обусловлены наличием соответствующих экстремумов мнимой части недиагональной проводимости $\sigma_{2,xy}(\omega)$. Чтобы объяснить причины возникновения последних, рассмотрим плотности электронных состояний со спином вверх и со спином вниз для EuS (рис. 2). Наиболее заметные их особенности связаны с Eu 4f-зоной, лежащей в интервале энергий от -2.1 до -1.3 eV (отно-

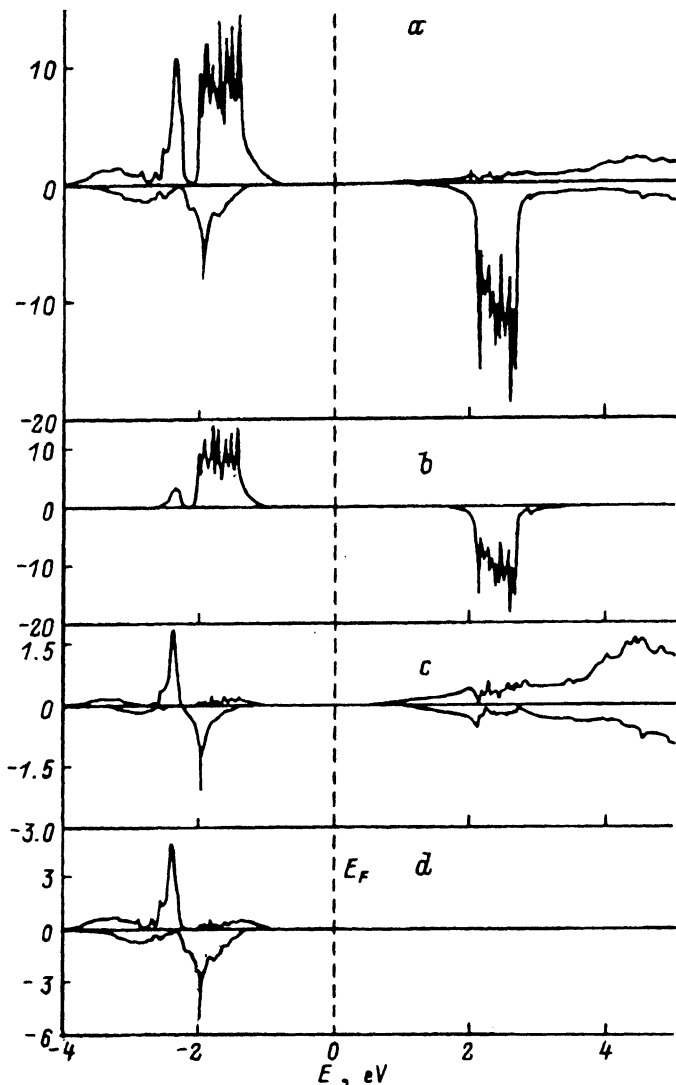


Рис. 2. Плотности электронных состояний (ПС) в EuS (в ед. states/eV/cell/spin). *a* — полная ПС, *b* — парциальные Eu-4*f* ПС, *c* — парциальные Eu-5*d* ПС, *d* — парциальные S-3*p* ПС. Верхние половины рисунков *a-d* — spin-up, нижние — spin-down.

сительно $E_F = 0$), и с Eu 4*f*-зоной, расположенной между 2.0 и 2.7 eV. Состояния S 3*p*-зоны образуют сильный максимум при энергии -2.4 eV, а S 3*p*-зоны — при -2.0 eV. Кроме того, эти валентные состояния серы заметно гибридизуются с Eu 5*d*-зоной. Проведенные нами численные эксперименты показали, что низкочастотный экстремум $\sigma_{2,xy}(\omega)$ вызван возбуждением Eu 4*f*-электронов в пустую Eu 5*d*-зону, а высокочастотный связан с переходами электронов из гибридизованной {S3*p* ↓ — Eu5*d* ↓}-зоны в пустую Eu 4*f*-зону. Аналогичная картина имеет место и для EuO. Таким образом, оба экспериментально наблюдаемых в монокристаллах европия МО-резонанса прямо связаны с обменно-расщепленными 4*f*-состояниями европия.

Данная работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 94-02-03680-а).

Список литературы

- [1] P. Wachter. Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earth **2**, 507 (1979).
- [2] O.K. Andersen. Phys. Rev. **B14**, 8, 3060 (1975).
- [3] Yu.A. Uspenskii, E.G. Maksimov, S.N. Rashkeev, I.I. Mazin. Z. Phys. **B53**, 4, 263 (1983).
- [4] Ю.А. Успенский, Э.Т. Кулатов, С.В. Халилов. ЖЭТФ **107**, 5, 1708 (1995).
- [5] А.В. Соколов. Оптические свойства металлов. М.(1961). 464 с.
- [6] W. Reim, J. Schoenes. Ferrmag. Mater. **5**, Ch. 2, 134 (1990).