

ЦИРКУЛЯРНАЯ МАГНИТООПТИКА ФЕРРИТОВ-ГРАНАТОВ:
МИКРОСКОПИЧЕСКИЙ МОДЕЛЬНЫЙ РАСЧЕТ

А. В. Зенков, А. С. Москвин

Основными магнитооптическими центрами ферритов-гранатов (ФГ) $R_3Fe_5O_{12}$ являются октаэдрические FeO_6^{3-} и тетраэдрические FeO_4^{5-} комплексы. При переходе электрона с преимущественно лигандной молекулярной орбитали $2p$ -типа в пустую молекулярную орбиталь $3d$ -типа центрального Fe^{3+} -иона комплекса возникает возбужденная конфигурация комплекса с переносом заряда (ПЗ) [1]. В соответствии с возможными вариантами комбинации «промежуточных» квантовых чисел кислородной и железной подсистем сравнительно небольшое число «одноэлектронных» переходов с ПЗ порождает обилие «многоэлектронных» переходов с ПЗ, большинство из которых запрещено в электродипольном приближении, так как не удовлетворяют соответствующим правилам отбора по четности, спину и квазиуглому [1]. Разрешены лишь переходы типа ${}^6A_{1g} - {}^6T_{1u}$, ${}^6A_1 - {}^6T_2$ в комплексах FeO_6^{3-} и FeO_4^{5-} соответственно. Энергии одноэлектронных переходов с ПЗ (см. таблицу) получены из данных СП— X_α —ДВ расчета энергетического спектра октакомплексов [2] и тетракомплексов [3]. Энергия многоэлектронного перехода с ПЗ может несколько отличаться от ее одноэлектронного значения [1].

Характеристики разрешенных переходов с ПЗ в комплексах FeO_6^{3-} и FeO_4^{5-} в ИФГ'

	Переход	Энергия, эВ		Сила осциллятора, ед. 10^{-3}	Полуширина линии, эВ
		СП— X_α —ДВ расчет	модельная подгонка		
FeO_6^{3-}	$t_{2u} - t_{2g}$	3.1	2.8	4	0.2
	$t_{1u}(\pi) - t_{2g}$	3.9	3.6	30	0.3
	$t_{2u} - e_g$	4.4	4.3	60	0.3
	$t_{1u}(\sigma) - t_{2g}$	5.1	4.8	40	0.3
	$t_{1u}(\pi) - e_g$	5.3	5.2	200	0.3
	$t_{1u}(\sigma) - e_g$	6.4	6.1	200	0.3
FeO_4^{5-}	$1t_1 - 2e$	3.4	3.4	30	0.4
	$6t_2 - 2e$	4.3	4.6	20	0.3
	$1t_1 - 7t_2$	4.5	4.7	40	0.3
	$5t_2 - 2e$	5.0	4.9	30	0.3
	$6t_2 - 7t_2$	5.4	5.1	20	0.3
	$1e - 7t_2$	5.6	5.6	10	0.3
	$5t_2 - 7t_2$	6.0	6.0	20	0.3

Циркулярная магнитооптика определяется аксиальным вектором гирации g [1]. В ФГ в линейном приближении g выражается через векторы ферромагнетизма m_a , m_d для a - и d -подрешеток и вектор внешнего магнитного поля H в виде суммы [4]

$$g = A_a m_a + A_d m_d + CH$$

ферромагнитных (ФМ) и полевого вкладов соответственно, возникающих вследствие расщепления и смешивания возбужденных ${}^6T_{1u}$ (6T_2)-состояний за счет спин-орбитального взаимодействия и орбитальной части зеемановского взаимодействия.

Нами проведен модельный расчет ФМ-вклада переходов с ПЗ в окта- и тетракомплексах в g для иттриевого феррита-граната (ИФГ) $Y_3Fe_5O_{12}$. Силы осцилляторов и полуширины линий (см. таблицу) для переходов

с ПЗ в окта- и тетракомплексах получены из визуальной подгонки спектральной зависимости мнимой части изотропной поляризуемости ИФГ [5, 6]. Использовались теоретические значения эффективных параметров типа константы спин-орбитальной связи для состояний с ПЗ в комплексах FeO_6^{9-} и FeO_4^{5-} [3].

На рис. 1 (сплошная линия) изображена расчетная спектральная зависимость z-компоненты реальной части вектора гирации $\text{Re } g_z(\omega)$ (определяющей фарадеевское вращение Θ_F) в ИФГ с учетом только разрешенных

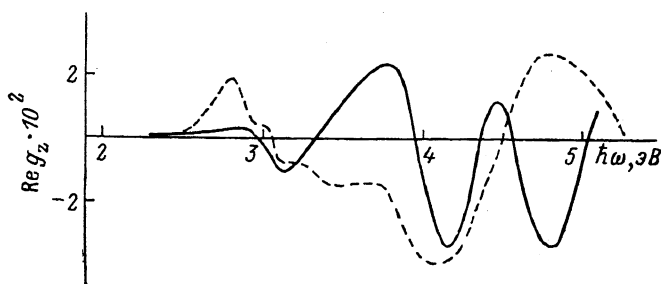


Рис. 1. ФМ-вклад в вещественную часть вектора гирации $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$.

переходов с ПЗ, с теоретическими значениями резонансных частот ω_{0i} . Штриховой линией отмечены экспериментальные данные [6]. Не претендуя на точность, данный вариант расчета отражает тем не менее ряд особенностей экспериментального спектра, в частности максимальные значения g_z в полосе с ПЗ.

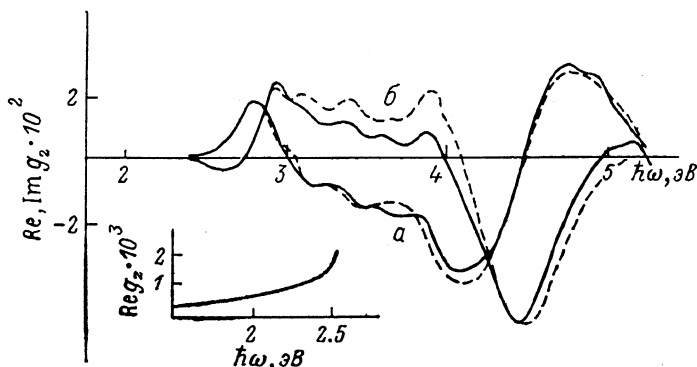


Рис. 2. ФМ-вклад в реальную (а) и мнимую (б) части вектора гирации $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$.

Сплошные линии — модельный расчет, учитывающий разрешенные переходы с ПЗ с измененными энергиями, расщепление ${}^6T_{1u}$ (6T_2)-термов за счет НКП, а также запрещенные переходы с ПЗ. Штриховые линии — эксперимент [6]. На вставке в увеличенном масштабе представлена зависимость $\text{Re } g_z(\omega)$ в области 1.5—2.5 эВ.

В более совершенном расчете необходимо учесть упомянутое выше смещение линий переходов по сравнению со СП— X_u —ДВ данными (см. таблицу), влияние расщепления орбитально вырожденных ${}^6T_{1u}$ (6T_2)-термов некубическим кристаллическим полем (НКП) на форму линий переходов с ПЗ, а также вклад электродипольно запрещенных переходов с ПЗ, запрет с которых снимается за счет НКП. Учет всех этих факторов кардинально улучшает согласие модельного расчета с экспериментом (рис. 2). Расчетная величина $\text{Re } g_z$ на длинноволновом «хвосте» полосы с ПЗ ($\lambda=0.63$ мкм), практически полностью определяемая смешиванием различных ${}^6T_{1u}$ (6T_2)-термов, обеспечивает величину $\Theta_F=860$ град/см, близкую к экспериментальному значению 830 град/см в ИФГ [7]. Расчетные значения парциальных вкладов окта- и тетрапереходов с ПЗ в Θ_F для ИФГ, равные соответственно 6500 и -5640 град/см, также удовлетворительно согласуются с экспериментальными (8670 и -7840 град/см [7] соответственно). Таким образом, модельный расчет правильно отражает экспе-

риментальный факт практической взаимокompенсации окта- и тетраэдров в Θ_F для ИФГ в видимой и ближней УФ-области с уменьшением на порядок суммарной величины Θ_F по сравнению с величинами каждого из вкладов. На рис. 2 представлена также мнимая часть $g_z(\omega)$ (определяющая магнитный круговой дихроизм) в ИФГ.

Был рассчитан также полевой вклад в g для ИФГ. При расчете использованы теоретические значения эффективных параметров типа орбитального фактора Ланде для состояний с ПЗ в окта- и тетракомплексах [3]. Несмотря на то что мы ограничились простейшим вариантом расчета, учитывающим только вклад разрешенных окта и тетрапереходов с ПЗ, расчетные значения Θ_F/H при $\lambda=0.7$ мкм (-10 град·см $^{-1}$ ·Тл $^{-1}$) и $\lambda=1.1$ мкм (-2.4 град·см $^{-1}$ ·Тл $^{-1}$) хорошо согласуются с соответствующими экспериментальными данными -12.4 [8] и -2.5 град·см $^{-1}$ ·Тл $^{-1}$ [9].

Результаты расчетов убедительно свидетельствуют о том, что определяющий вклад в циркулярную магнитооптику ФГ вносят переходы с ПЗ анион—катион в комплексах на основе Fe $^{3+}$ -ионов, учет которых позволяет объяснить практически все особенности в спектрах циркулярных магнитооптических эффектов ФГ в широком диапазоне частот. Принимаемая во внимание проведенный с аналогичных позиций в [1] анализ циркулярной магнитооптики ортоферритов (где, помимо отмеченных выше взаимодействий, важную роль играют обменно-релятивистские взаимодействия), представляется оправданным распространить этот вывод на весь класс ферритов в целом.

Список литературы

- [1] Ганьшина Е. А., Зенков А. В., Коцки С. В., Кринчик Г. С., Москвин А. С., Трифонов А. Ю. // Деп. в ВИНТИ. 1990. № 788-В90.
- [2] Лихтенштейн А. И., Москвин А. С., Губанов В. А. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 12. С. 3596—3605.
- [3] Зенков А. В., Москвин А. С., Юрьева Э. И., Губанов В. А. // Деп. в ВИНТИ. 1990. № 2349-В90.
- [4] Писарев Р. В. // ЖЭТФ. 1970. Т. 58. № 4. С. 1421—1427.
- [5] Kahn F. J., Pershan P. S., Remeika J. P. // Phys. Rev. 1969. V. 186. N 3. P. 891—918.
- [6] Wittekoek S., Popma T. J. A., Robertson J. M., Bongers P. F. // Phys. Rev. B. 1975. V. 12. N 7. P. 2777—2788.
- [7] Звездин А. К., Котов В. А. Магнитооптика тонких пленок. М., 1988. 192 с.
- [8] Харченко Н. Ф., Белый Л. И., Тутакина О. П. // ФТТ. 1968. Т. 10. № 9. С. 2819—2821.
- [9] Берденникова Е. В., Писарев Р. В. // ФТТ. 1976. Т. 18. № 1. С. 81—87.

Уральский государственный университет
им. А. М. Горького
Свердловск

Поступило в Редакцию
2 апреля 1990 г.

ЭЛЕКТРОННАЯ ЗОННАЯ СТРУКТУРА ДИСУЛЬФИДА ЛАНТАНА

В. П. Жуков, Н. И. Медведева, И. Г. Васильева, В. А. Губанов

Дисульфиды редкоземельных элементов являются новым классом слоистых соединений, свойства которых в последнее время интенсивно исследуются [1—3]. Из всего ряда РЗЭ только первые члены (La, Ce, Pr, Nd) образуют дисульфиды строго стехиометрического состава. Такие составы реализуются в двух полиморфных модификациях. Их кристаллическая структура известна [4, 5]. Низкотемпературная моноклинная α -фаза дисульфидов РЗЭ имеет число формульных единиц на элементарную ячейку