

УДК 538.69

МАГНИТООПТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ В ПНИКТИДАХ МАРГАНЦА С NiAs-СТРУКТУРОЙ

Э. Т. Кулатов, А. Г. Наргизян, Ю. А. Успенский, С. В. Халилов

Проведены первопринципные релятивистские расчеты электронного строения и магнитооптических спектров (угол Керра, эллиптичность и оптическая проводимость) в бинарных пниктидах марганца $MnAs$, $MnSb$ и $MnBi$. Результаты расчетов находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными.

Исследование соединений с высокой магнитооптической (МО) активностью имеет большое значение как для практических приложений, так и для более глубокого понимания электронной структуры и магнитных свойств твердых тел. В последнее время много внимания как в экспериментальном, так и в теоретическом плане уделяется интерметаллическому соединению гейслера типа ($PtMnSb$) с кубической структурой типа $C1_b$. Этот интерес обусловлен в первую очередь возможностью использования этого соединения в качестве рабочего тела в МО дисках для оптической записи информации в связи с открытием гигантского эффекта Керра в массивных образцах с углом Керра $\theta_K = -1,3^\circ$ [1] и на тонких пленках с $\theta_K = -2^\circ$ [2] при комнатной температуре и энергии $\hbar\omega = 1,7$ эВ. Однако почти полное отсутствие магнитокристаллической анизотропии не только в массивных образцах, но и в тонких пленках $PtMnSb$, связанное с высокосимметричной кубической структурой соединения, ставит под сомнение возможность практического использования этого вещества. Дело в том, что в МО дисках главным требованием, помимо, естественно, величины эффекта Керра, является наличие перпендикулярной (одноосной) магнитной анизотропии.

Вместе с тем, недавно были получены пленки на основе $MnSb$ с кристаллической гексагональной структурой типа $NiAs$, обладающие перпендикулярной магнитной анизотропией [3]. Более того, замещение части атомов Sb на атомы Pt в комбинации со специальной обработкой полученных пленок резко усиливает эффект Керра, который

достигает 1° при длине волны падающего излучения $\lambda = 500$ нм и комнатной температуре [4]. Интересно отметить, что при сравнении гексагональной типа $NiAs$ и кубической типа $C1_b$ структур между ними обнаруживается сходство.

Пниктиды марганца $MnAs$, $MnSb$ и $MnBi$ являются ферромагнетиками соответственно с $T_C = 318, 573$ и 623 К. Величины локальных магнитных моментов достигают $3,2 - 3,5 \mu_B$ на атоме Mn и составляют $-0,2 - -0,3 \mu_B$ на атоме пниктида [5]. Указанные вещества интересны и с точки зрения влияния спин-орбитального взаимодействия на МО спектры изоструктурных и изоэлектронных соединений, обладающих к тому же примерно одинаковым обменным расщеплением.

Нами проведены первопринципные полностью релятивистские расчеты электронных структур $MnAs$, $MnSb$ и $MnBi$ методом ЛМТО [6] в приближении функционала локальной спиновой плотности [7]. Базисный набор в разложении блоховской волновой функции включал орбитали с $l_{max} = 3$ для атомов Mn и $l_{max} = 2$ для атомов пниктида. Все расчеты выполнены на сетке из 126 k-точек в $1/24$ неприводимой части зоны Бриллюэна. Результаты настоящих расчетов (электронная структура, плотность электронных состояний) находятся в хорошем согласии с результатами наших предыдущих расчетов [8]. Зонные энергии и волновые функции были использованы для вычисления межзонной поглощающей части тензора диэлектрической проницаемости (ДП) в соответствии с [9]:

$$\epsilon_{\alpha\beta}^{inter,abs}(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2 \hbar^2}{m^2 \omega^2 \Omega} \sum_{i,f} \int dk p_{\alpha}^{i,f}(\mathbf{k}) p_{\beta}^{f,i}(\mathbf{k}) \delta(E_f(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k}) - \hbar\omega) [\theta(E_f(\mathbf{k})) - \theta(E_i(\mathbf{k}))], \quad (1)$$

где i и f относятся к начальному и конечному зонным состояниям, а матричный элемент перехода между этими состояниями равен $p_{\beta}^{f,i}(\mathbf{k}) = \langle f\mathbf{k} | \hbar \nabla_{\beta} / i | i\mathbf{k} \rangle$. Внутризонная часть диагональных компонент тензора $\epsilon_{\alpha\beta}(\omega)$ описывается, как правило, с помощью формулы Друде:

$$\epsilon_{xx}^{intra}(\omega) = 1 - \frac{\tilde{\omega}_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (2)$$

$$\tilde{\omega}_p^2 = \frac{4\pi e^2 m}{\hbar \Omega} \sum_i \int dk \delta(E_i(\mathbf{k}) - E_F) (\nabla_{k_x} E_i(\mathbf{k}))^2. \quad (3)$$

Что касается внутризонного вклада в недиагональные компоненты тензора диэлектрической проницаемости, то, несмотря на неоднократное обсуждение этого вопроса (см.,

напр., [9]), соответствующее микроскопическое выражение пока еще не получено. После сглаживания $\epsilon_{\alpha\beta}^{inter,abs}(\omega)$ с обратным временем жизни $\tau^{-1} = 0,1\hbar\omega$, необходимого для учета конечной ширины энергетических уровней вблизи уровня Ферми, мы использовали преобразования Крамерса – Кронига для нахождения межзонной дисперсионной части тензора ДП.

Полный тензор ДП $\epsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \epsilon_{1,\alpha\beta}(\omega) + i\epsilon_{2,\alpha\beta}(\omega)$ далее был использован для расчета полярного угла Керра $\theta_K(\omega)$ и эллиптичности $\epsilon_K(\omega)$:

$$\theta_K(\omega) + i\epsilon_K(\omega) = \epsilon_{xy}(\omega)/[(1 - \epsilon_{xx}(\omega))\sqrt{\epsilon_{xx}(\omega)}]. \quad (4)$$

Последнее уравнение справедливо для кубических и гексагональных кристаллов с направлением магнитного момента $\mathbf{M} \parallel [001], [0001]$. При этой конфигурации поглощение света определяется компонентами $\epsilon_{2,xx}(\omega)$ и $\epsilon_{1,xy}(\omega)$.

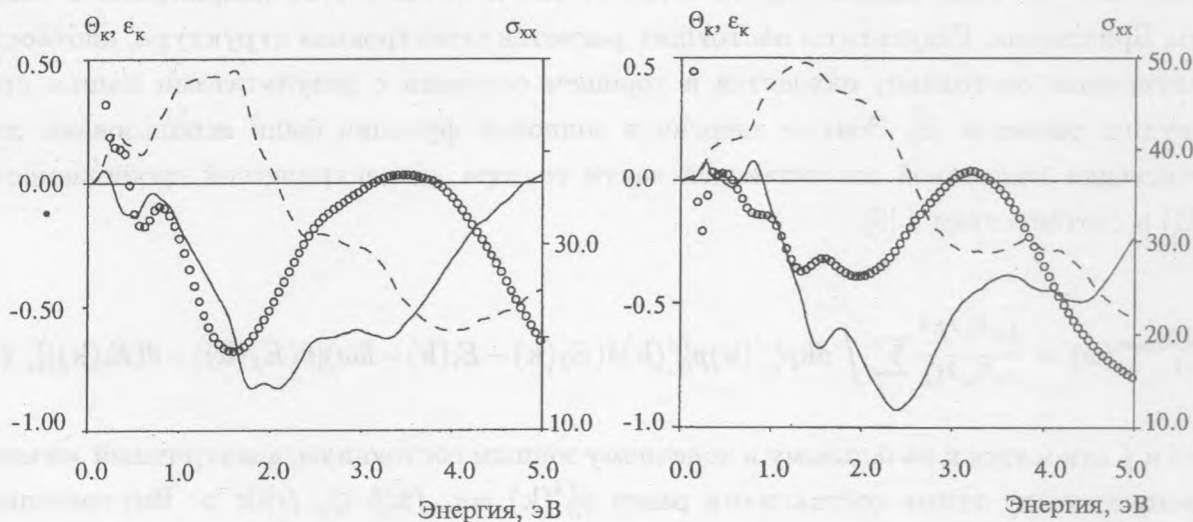
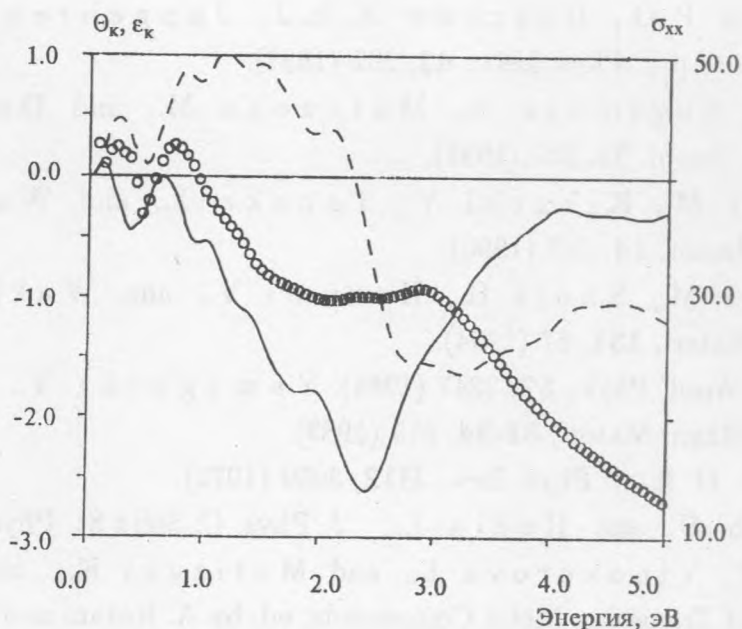


Рис. 1. Частотные зависимости угла Керра θ_K (—) и эллиптичности ϵ_K (---) (в градусах) и оптической проводимости σ_{xx} (o o o) (в ед. 10^{14} c^{-1}) в арсениде марганца $MnAs$.

Рис. 2. То же, для антимонида марганца $MnSb$.

Расчетные энергетические зависимости $\theta_K(\omega)$, $\epsilon_K(\omega)$ и оптической проводимости $\sigma_{xx}(\omega) = (\omega/4\pi)\epsilon_{2,xx}(\omega)$ приведены на рис. 1 – 3 для $MnAs$, $MnSb$ и $MnBi$. Следует отметить, что в расчете мы ограничились компонентами тензора ДП, перпендикулярными оси c . К сожалению, экспериментальные данные по МО спектрам и оптической

Рис. 3. То же, для $MnBi$.

проводимости на настоящий момент имеются только для $MnAs$ и $MnSb$ [10 – 12]. Наши расчеты достаточно хорошо воспроизводят диагональную компоненту тензора ДП, т. е. $\sigma_{xx}(\omega)$. Особенность при 3 эВ по амплитуде и по положению практически совпадает с экспериментом. Незначительные расхождения имеются только в инфракрасной области спектра.

Расчетные МО спектры в целом неплохо согласуются с экспериментом. В частности, можно отметить, что измеренное максимальное вращение Керра по положению удовлетворительно описывается расчетом. Линейный ход эллиптичности в области 1 – 4 эВ [11] в $MnSb$ воспроизводится расчетом (рис. 2). Необходимо заметить, что поскольку мы не учитывали продольных компонент тензора, достигнутый уровень согласия с экспериментом позволяет надеяться на более точное совпадение с измеренными спектрами при учете всех компонент тензора ДП.

Данная работа финансировалась Российским фондом фундаментальных исследований (грант N 94-02-03680-а).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Van Engen P. G., Buschow K. H. J., Jongebreur R., and Erman M. Appl. Phys. Lett., **42**, 202 (1983).
- [2] Inukai T., Sugimoto N., Matsuoka M., and Ono K. J. Magn. Soc. Japan, **11**, Suppl. S1, 217 (1987).
- [3] Takahashi M., Kikuchi Y., Tanaka T., and Wakiyama T., J. Magn. Soc. Japan, **14**, 147 (1990).
- [4] Takahashi M., Shoji H., Hozumi Y., and Wakiyama T., J. Magn. Magn. Mater., **131**, 67 (1994).
- [5] Ido H., J. Appl. Phys., **57**, 3247 (1985). Yamaguchi Y., Watanabe H., J. Magn. Magn. Mater., **31-34**, 619 (1983).
- [6] Andersen O. K., Phys. Rev., **B12**, 3060 (1975).
- [7] Von Barth U. and Hedin L., J. Phys. C: Solid St. Phys., **5**, 1629 (1972).
- [8] Kulatov E., Vinokurova L., and Motizuki K., in Recent Advances in Magnetism of Transition Metal Compounds, ed. by A. Kotani and N. Suzuki. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, Singapore, 1993, p. 56.
- [9] Kulatov E. T., Uspenskii Yu. A., and Halilov S. V. Phys. Letters A, **165**, 220 (1994).
- [10] Stoffel A. M. and Schneider J. J. Appl. Phys., **41**, 1405 (1970).
- [11] Buschow K. H. J., Van Engen P. G., and Jongebreur R. J. Magn. Magn. Mater., **38**, 1 (1983).
- [12] Allen J. W. and Mikkelsen J. C. Phys. Rev., **B 15**, 2952 (1977).

Поступила в редакцию 12 января 1995 г.