

Чернівецький державний університет
ім. Ю.Федьковича

УДК 621.315.592:535

**ТРИФАНЕНКО
ДМИТРО МИКОЛАЙОВИЧ**

**ЕФЕКТ ФАРАДЕЯ В НАПІВМАГНІТНИХ
НАПІВПРОВІДНИКОВИХ МАТЕРІАЛАХ ТИПУ $A_{1-x}M_xB^VI$**
(01.04.10 - фізика напівпровідників і діелектриків)

АВТОРЕФЕРАТ
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Чернівці - 1997



221.373.597
534.226
Дисертацією є рукопис

Робота виконана на кафедрі теоретичної фізики
державного університету ім. Ю.Федьковича

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор
Мельничук Степан Васильович, Чернівецький
держуніверситет, професор кафедри теоретичної
фізики

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор
Семенов Юрій Григорович, Інститут напівпровідників
НАНУ, зав. лабораторією
доктор фізико-математичних наук, старший науковий
співробітник Паранчич Степан Юрійович, Чернівецький
держуніверситет, професор кафедри фізичної електроніки

Провідна організація: Інститут Фізики НАНУ, лабораторія спектроскопії
кристалів, м.Київ

Захист відбудеться " 31 " жовтня 1997 р. о 15 год. на засіданні
спеціалізованої вченої ради Д 76.051.01 при Чернівецькому державному
університеті ім. Ю.Федьковича за адресою: 274012, м.Чернівці,
вул.Кошубинського, 2.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Чернівецького
державного університету ім. Ю.Федьковича (вул. Л.Українки, 23).

Автореферат розісланий " ___ " _____ 1997р.

Вчений секретар

спеціалізованої вченої ради

М.В. Курганецький

ДВ - 38, 634

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми досліджень. Останнім часом ведуться інтенсивні дослідження порівняно нового класу напівпровідникових матеріалів, які поєднують в собі властивості звичайних напівпровідників і магнітних матеріалів - напівмагнітних напівпровідників (НМН). До цього класу належать напівпровідникові тверді розчинки, що містять магнітну компоненту.

Змінюючи вміст магнітної компоненти, температуру і зовнішнє магнітне поле можна змінювати властивості цих матеріалів і виділити ті особливості, що зумовлені магнітними атомами. Характерною особливістю НМН є їх здатність перебувати в діамагнітному, парамагнітному, антиферо- чи феромагнітному станах, а також в стані спінового скла, в залежності від вмісту магнітної компоненти і температури. Взаємодія між локалізованими магнітними моментами іонів і зонними носіями струму приводить поряд із іншими ефектами до гігантського ефекту Фарадея, який зумовлений зєсманівським розщепленням енергетичних рівнів системи в магнітному полі. Величина ефекту Фарадея безпосередньо пов'язана із константами обмінної взаємодії магнітних іонів з зонними носіями і пропорційна намагніченості магнітної підсистеми. Ефект Фарадея є досить ефективним при вивченні переходу парамагнетик-спінове скло.

В НМН спостерігається і обернений ефект Фарадея. Це ефект намагнічення речовини потужним циркулярно - поляризованим випромінюванням. Важливість спостереження оберненого ефекту Фарадея в НМН пов'язана із можливістю отримання нової інформації про процеси спінового обміну і спин-граткової релаксації в кристалах такого типу.

В зв'язку з прогресом в освоєнні епітаксійних методів отримання тонких шарів напівпровідників, помітно зріс інтерес до плівкових зразків НМН. Особливо уваги заслуговують створені на їх основі багатшарові структури, що отримали назву спінових надграток. Причому магнетооптичні ефекти, що мають місце в об'ємних кристалах НМН зберігають свої особливості і у випадку їх плівкових аналогів. Окрім того, для спінових надграток при зміні ширини шару в куті Фарадея властєся спостерігати нові закономірності, що зумовлені обмеженням руху електронів в межах ями.

Цікавість до об'ємних кристалів НМН і до плівкових зразків пов'язана з можливістю практичного застосування НМН. Наприклад, вони застосовуються для створення незасмєних пристроїв (оптичних ізоляторів), високочастотних волоконних датчиків магнітного поля - пристроїв, в основу роботи яких покладено гігантський ефект Фарадея в подібних матеріалах.

ЛНБ ім. В. Стефанька
АН України

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Робота виконувалась в межах координаційної програми Міністерства Освіти України: "Дослідження фізичних характеристик масивних і просторовообмежених систем і конденсованих середовищ під дією зовнішніх полів."

Метою роботи є дослідження магнетооптичних явищ та надобмінних взаємодій в напівамагнітних напівпровідниках.

Завдання, які розв'язуються у дисертаційній роботі, наступні:

дослідження спектральної залежності кута фарадесівського обертання для систем $Cd_{1-x}Fe_xTe$ і $Cd_{1-x}Co_xTe$;

вивчення характеру надобмінної взаємодії в системах типу $A_{1-x}^{II}M_x^{VI}$;

теоретичні розрахунки константи надобмінної взаємодії J_{NN} ;

дослідження анізотропії температуриної і магнетонольової залежностей кута Фарадея;

Наукова новизна.

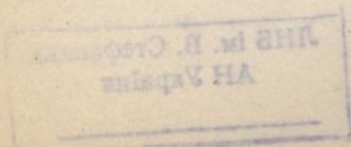
Вперше досліджено вплив внутріцентричних переходів на характер спектральної залежності кута фарадесівського обертання для систем $Cd_{1-x}Fe_xTe$ і $Cd_{1-x}Co_xTe$. При цьому, знайдено спектри і хвильові функції іонів Co^{2+} і Fe^{2+} , що походять від атомних збуржених рівнів 3H і 4P в зовнішньому магнітному полі.

Запропоновано можливий механізм обмінної взаємодії і вперше знайдено константи надобмінної взаємодії для сполук $A_{1-x}^{II}M_x^{VI}$.

В єдиному підході пояснено анізотропію температуриної і магнетонольової залежності кута фарадесівського обертання для системи $Cd_{1-x}Fe_xTe$ для різних напрямків магнітного поля.

Зроблено прогноз на поведінку спектру кристалу $Cd_{1-x}Co_xTe$ при накладанні зовнішніх одноосіах деформацій.

Практичне значення роботи полягає в можливості використання теоретичних результатів для пояснення експериментальних даних по спектральній залежності кута фарадесівського обертання в НМН та прогнозу нових фізичних явищ. Дані результати сприяють кращому розумінню механізму надобмінних взаємодій в цих системах і є суттєвими в матеріалознавчих дослідженнях. Вивчення магнетооптичних властивостей напівамагнітних напівпровідникових матеріалів можуть знайти реальне практичне застосування при розробці різного роду оптоелектронних пристроїв, основою роботи яких є ефект Фарадея.



На захист виносити:

1. Спектри іонів Fe^{2+} і Co^{2+} в зовнішньому магнітному полі, що отримані з допомогою методу проміжного кристалічного поля із врахуванням спіно-орбітальної та зєсманівської взаємодії.
2. Спектральна залежність кута фарадєєвського обертання для $Cd_{1-x}Co_xTe$ та $Cd_{1-x}Fe_xTe$.
3. Величина обмінного інтегралу J_{NN} для систем $A_{1-x}M_xV^{VI}$ (де $M = Mn-Fe-Co$). Алгоритми розрахунку та пакет програм для знаходження багатоцентрових обмінних інтегралів та інтегралів перекриття.
4. Магнетопольова і температурна залежність постійної Верде в сильних магнітних полях при низьких температурах.

Публікації і особистий внесок дисертанта. За матеріалами дисертаційної роботи опубліковано 8 наукових робіт, перелік яких наведено в кінці автореферату.

В роботах [1, 2] дисертант приймав участь у постановці задач, обговоренні отриманих результатів та провів розрахунок матричних елементів і кута Фарадея. В роботах [3 - 8] дисертант приймав участь в постановці задач та проведенні чисельних розрахунків константи надобмінної взаємодії. Всі експериментальні результати отримані Савчуком А.Й. та Михайлевським Я.М.

Апробація роботи. Основні результати дисертаційної роботи заповідались і обговорювались на конференціях і нарадах: I Міжнародна науково-технічна конференція "Матеріалознавство алмазоподібних і халькогенідних напівпровідників" (Чернівці, 1994); Наукова конференція, присвячена 120-річчю від дня заснування Чернівецького університету (Чернівці, 1995); XXV Міжнародна конференція з фізики напівпровідникових сполук (Ясківець, Польща 1996); Науковий семінар з статистичної теорії конденсованих систем (Львів, 1997).

Структура і об'єм дисертації. Дисертація складається з вступу, чотирьох глав, висновків, додатку, списку цитованої літератури і примітки. Робота викладена на 117 сторінках, включає 21 рисунок, 7 таблиць і список літератури, що містить 114 джерел, що розташовані на 10 сторінках.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

На початку дисертаційної роботи обговорюється актуальність теми, коротко описано зміст роботи, сформульовані положення, що виносяться на захист, новизна, наукова і практична цінність задач, що розв'язуються у дисертації. В подальшому зроблено аналіз теоретичних і експериментальних робіт, присвячених вивченню магнетооптичних властивостей напівмагнітних напівпровідників і розглянуто механізми надобмінних взаємодій між магнітними іонами у цих системах.

З використанням методу матриці густини отримано вираз для спектральної залежності кута фарадєєвського обертання. Знайдено спектр іонів Co^{2+} та Fe^{2+} в зовнішньому магнітному полі з допомогою теорії збурень та із застосуванням теоретико-групових міркувань проведено класифікацію отриманих енергетичних рівнів по точковій групі симетрії базової матриці.

Причиною виникнення ефекту Фарадея є поява в магнітному полі особливостей характеристик середовища по відношенню до ліво- і правополяризованих компонент випромінювання. Кут повороту площини поляризації θ через показник заломлення n можна записати у вигляді

$$\theta = \frac{E d}{2hc} (n^-(E) - n^+(E)) \quad (1)$$

$E = \hbar\omega$ - енергія фотонів, ω - частота випромінювання, d - віддаль яку проходить світло в середовищі, c - швидкість світла в вакуумі, n^\pm - показник заломлення (індекси плюс і мінус відповідають двом протилежним поляризаціям світла σ^\pm).

У рамках квантово-механічного підходу причиною виникнення різниці $\Delta n^\pm(E)$ є вплив магнітного поля на електронні переходи між рівнями i, j з енергіями $E_{i,j}$.

Взаємодія електромагнітного випромінювання із різною довжиною хвилі λ з напівпровідниковим кристалом супроводжується електронними переходами різного типу (екситонними, міжзонними, внутрізонними та іншими). Всі перераховані вище переходи, можуть робити свій внесок у кут Фарадея. Вивчається вплив внутріцентричних переходів, що мають місце в іонах з незаповненою d -оболонкою на характер спектральної залежності кута Фарадея. Кут фарадєєвського обертання задається співвідношенням

$$\theta(\omega) = \frac{\pi \omega e^2 N (\langle n \rangle^2 + 2)^2}{9 m c \langle n \rangle} \sum_{a, b} \frac{(\omega + \frac{i}{2} \Gamma_{ba}) [f_{ba}^+ - f_{ba}^-]}{\omega_{ba} [\omega_{ba}^2 - \omega^2 + \frac{1}{4} \Gamma_{ba}^2] - i \omega \Gamma_{ba}} \quad (2)$$

f_{ba}^{\pm} - сила осциляторів, визначає ймовірність переходу із рівня $|a\rangle$ на рівень $\langle b|$

Вираз для f_{ba}^{\pm}

$$f_{ba}^{\pm} = \left(\frac{2 m \omega_{ba}}{\hbar e^2} \right) \left| \langle b | \left(\frac{e}{m \omega} \right) \left\{ i m \omega_{ba} \Gamma_{\pm} - \frac{1}{2} i \hbar \left[(\vec{1} + 2\vec{s}) \times \vec{k} \right]_{\pm} + \dots \right\} | a \rangle \right|^2 \rho^{\circ} \quad (3)$$

У формулі (2) сумування ведеться по всіх можливих квантових станах кристалу, між якими здійснюються переходи. Для врахування вкладу внутріцентричних переходів, що здійснюються на атомах магнітної компоненти в (НМН) необхідно знайти спектр і хвильові функції іона в зовнішньому магнітному полі.

Гамільтоніан такої задачі має вигляд

$$H = H_0 + H_{\text{КП}} + H_{\text{СО}} + H_Z \quad (4)$$

H_0 - гамільтоніан вільного атома, $H_{\text{КП}}$ - енергія взаємодії вільного атома з кристалічним оточенням, $H_{\text{СО}}$ - гамільтоніан спин-орбітальної взаємодії, H_Z - зесманівський доданок. Наближення середнього кристалічного поля, яке справедливе для таких систем означає, що $|H_0| \gg |H_{\text{КП}}| \gg |H_{\text{СО}}| \gg |H_Z|$. Останні нерівності виправдовують використання теорії збурень.

Розв'язування рівняння Шредингера із гамільтоніаном (4) в другому порядку теорії збурень по спин-орбітальній взаємодії для іонів Co^{2+} та Fe^{2+} приводить до:

а) розщеплення першого збудженого атомного рівня ${}^4P(\text{Co}^{2+})$ на терми $\Gamma_7, \Gamma_8^{\Psi}, \Gamma_8^{\Phi}, \Gamma_6$. Основним є терм - Γ_8 ;

б) розщеплення атомного рівня ${}^3H(\text{Fe}^{2+})$ на терми $\Gamma_1, \Gamma_3, \Gamma_4, \Gamma_5$. Основним є терм - Γ_1 ;

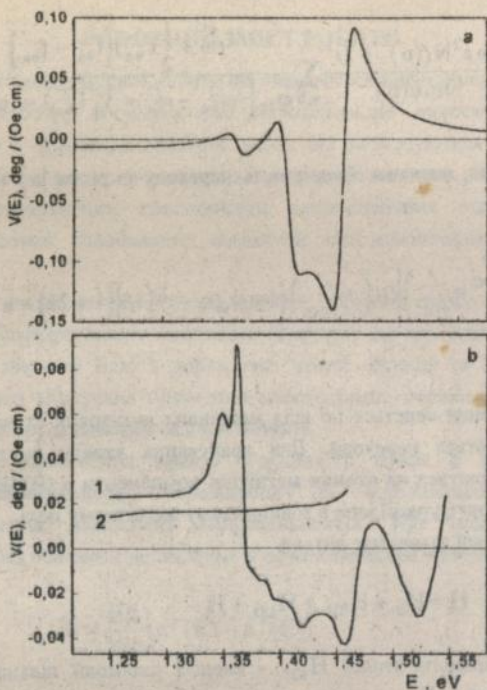


Рис. 1 Спектральна залежність константи Верде для $\text{Cd}_{1-x}\text{Co}_x\text{Te}$ а - розрахунок, б-експеримент ; 1) - 5 К, 2) - 295 К.

Як показують експериментальні дослідження в області краю фундаментального поглинання спектральна залежність постійної Верде $V(E)$ для $\text{Cd}_{1-x}\text{Co}_x\text{Te}$ має немонотонний характер (рис. 1б). При температурі рідкого гелію залежність $V(E)$ містить декілька екстремумів. На інтервалах 1.25-1.40 eV, 1.40-1.46 eV, 1.46-1.50 eV $V(E)$ змінює знак і має немонотонний характер. На відповідній кривій при кімнатній температурі (крива 2 рис. 1) відсутні будь-які спектральні особливості і вона якісно подібна дисперсії фарадеевського обертання для базового кристалу CdTe.

Для розрахунку спектральної залежності кута фарадеевського обертання в цих системах використовувався вираз (2). Для проведення конкретного розрахунку

обчислювались сили осциляторів f_{ba}^{\pm} для ліво- і правополяризованих компонент електромагнітного випромінювання. При цьому використовувалось електродипольне наближення

$$f_{ba}^{\pm} = (2m\omega_{ba}/\hbar e^2) \langle b | (r \frac{e}{\omega}) \omega_{ba} r_{\pm} | a \rangle^2 \rho_a^0 \quad (5)$$

Для обчислення матричних елементів типу $\langle b | r_{\pm} | a \rangle$ для Co^{2+} і Fe^{2+} відповідно, використовувався метод еквівалентних операторів, згідно якого розрахунок матричного елементу оператора \hat{r} зводиться до обчислення матричних елементів оператора моменту \hat{L}

$$\langle b | r_{\pm} | a \rangle = C \langle b | L_{\pm} | a \rangle \quad (6)$$

де C - розмірна числова константа.

В формулі (2) виділяється внесок, що стосується внутріцентрих переходів для Co^{2+} і Fe^{2+} відповідно. У випадку $Cd_{1-x}Co_xTe$ досліджувана область спектру відповідає переходам із орбітального синглету ${}^4\Gamma_2({}^4F)$ на орбітальний триплет ${}^4\Gamma_3({}^4P)$. Параметр кристалічного поля для Co^{2+} в $CdTe$ $Dq = 11400 \text{ см}^{-1}$ і константи спин-орбітальної взаємодії для вказаних термів $\lambda_{\Gamma_2} = -120 \text{ см}^{-1}$ і $\lambda_{\Gamma_4} = -180 \text{ см}^{-1}$ [1]. Результати чисельних розрахунків внеску від внутріцентрих переходів приведені на рис. 1а. Видно, що дві найбільш інтенсивні позитивні полюси (крива 1 на рис. 1б) з максимумами при $E=1.348 \text{ eV}$ і $E=1.362 \text{ eV}$ можна співставити переходам $\Gamma_8({}^4\Gamma_2) \rightarrow \Gamma_7, \Gamma_8^{\dagger}, \Gamma_8^{\psi}, \Gamma_6({}^4\Gamma_4)$. З іншого боку, розбіжності для третього короткохвильового піку при $E=1.485 \text{ eV}$ зумовлені впливом від'ємного по знаку внеску в кут фарадеєвського обертання від s, p-d обмінної взаємодії між магнітними моментами зонних носіїв і магнітними моментами іонів. Оцінити цей внесок важко, оскільки відсутні дані про обмінні константи для кристалу $Cd_{1-x}Co_xTe$. Однак, очевидно, що такий внесок зростає по мірі наближення енергії фотонів до значення E_g , що і відображається на формі спостережуваної експериментально (рис. 1б) спектральної залежності фарадеєвського обертання. Внутріцентриві переходи, що порушують монотонну спектральну залежність в НМН для Co^{2+} не проявляються для Fe^{2+} . Хоча, як показано в [1] для Fe^{2+} внутріцентриві переходи мають місце. Це пов'язано із тим, що матричні елементи операторів L_+ і L_- на функціях основного стану і лінійних комбінаціях збудженого стану-співпадають. Оскільки кут Фарадея, як видно із (2) визначається

різницею ($f_{ba}^+ - f_{ba}^-$) то $\theta_{\text{вн}} = 0$. Для системи $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ вклад внутріщегрихових переходів в кут Фарадея - відсутній. Це пов'язано із тим, що для цієї системи перший збуджений атомний рівень знаходиться на віддалі 2.1 eV від основного і попадає на фон міжзонних переходів.

В дисертаційній роботі вивчається надобмінна взаємодія в системах $\text{A}_{1-x}\text{M}_x\text{B}^{\text{VI}}$. Знайдено інтеграли надобмінної взаємодії J_{NN} між магнітними іонами в цих системах. Створено пакет програм для розрахунку багатозонних обмінних та інтегралів перекриття.

Величина обмінного інтегралу J_{NN} обумовлена як прямою d-d взаємодією, так і рядом інших непрямих процесів. Серед непрямих механізмів обміну виділяють надобмін між магнітними іонами через проміжний немагнітний атом, механізм Бломбергера-Роуанда (БР), що зумовлений віртуальними міжзонними процесами та механізм Рудемана-Кіттеля-Косуя-Іосіди (РККІ) - взаємодія магнітних моментів через вільні носії заряду. Для широкозонних НМН найбільш суттєвою є надобмінна взаємодія магнітних іонів. Гамільтоніан надобмінної взаємодії описується співвідношенням [2]

$$H_{\alpha\alpha} = \sum_{d_1, d_2, d\delta} I(d_1, d_2, d\delta) R_{\alpha_i}^{1d_1} R_{\alpha_i}^{1d_2} (V^i(\vec{S}_1) \bullet V^i(\vec{S}_2)) [V^d(\Gamma_1) \times V^d(\Gamma_2)]_0^T \quad (7)$$

де $0 \leq d_1 \leq 2L_1$, $0 \leq d_2 \leq 2L_2$, $|d_1 - d_2| \leq d \leq d_1 + d_2$, d_1, d_2, d - індекси додавання моментів. $V^d(J)$ - одиничні незвідні тензорні оператори рангу d , $R_{\alpha_i}^{1d}$ - параметри Рака.

$$R_{\alpha_i}^{1d} = \sum_{L, S_1} 3N[d][L][S] G_{L, S_1}^{LS} (-1)^{L+L_1+4+S_1+5+3/2} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & d \\ L & L & L_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1/2 & 1/2 & 1 \\ S & S & S_1 \end{Bmatrix} \quad (8)$$

$\left\{ \begin{matrix} \dots \\ \dots \end{matrix} \right\}$ - символи Вігнера, G_{L, S_1}^{LS} генеалогічні коефіцієнти, $[d] = 2d+1$. Для $I(d_1, d_2, d\delta)$ маємо.

$$I(d_1, d_2, d\delta) = \sum_{\delta_1, \delta_2, \delta} \begin{Bmatrix} d_1 & d_2 & d \\ \delta_1 & \delta_2 & \delta \end{Bmatrix} R_{\alpha_i}^{1d} E_{\delta_1, \delta_2}^{d, 0}(\vec{R}_1) E_{\delta_1, \delta_2}^{d, 0}(\vec{R}_2) \quad (9)$$

де $\left[\begin{smallmatrix} \dots \\ \dots \end{smallmatrix} \right]$ коефіцієнти Клебша - Гордона, індекси χ_0 і χ_1 символізують врахування основного стану немагнітного і магнітних іонів відповідно. Γ_1 і Γ_2 - незвідні представлення точкової групи симетрії кристалічного поля.

Для $E_{\delta_1, \delta_0}^{4,0}(\vec{R}_1)$ і $E_{\delta_2, \delta_0}^{4,0}(\vec{R}_2)$ маємо вирази

$$E_{\delta_1, \delta_0}^{4,0}(\vec{R}_1) = \sum_{\substack{m_1, m_1' \\ m_1, m_1'}} (-1)^{l_1 + m_1 + 1 + m_1'} \begin{pmatrix} l_1 & d_1 & l_1 \\ m_1 & \delta_1 & -m_1' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_0 & 0 & l_0 \\ m_0 & \delta_0 & -m_0' \end{pmatrix} \langle l_1 m_1 l_0 m_0 | \frac{e^2}{r_{1\alpha}} P_{1\alpha} | l_1 m_1' l_0 m_0' \rangle \quad (10)$$

$\left(\begin{smallmatrix} \dots \\ \dots \end{smallmatrix} \right)$ - 3j символи Вігнера. $\langle l_1 m_1 l_0 m_0 | \frac{e^2}{r_{1\alpha}} P_{1\alpha} | l_1 m_1' l_0 m_0' \rangle$ - двоцентровий обмінний інтеграл, який береться на одноелектронних хвильових функціях, \hat{R}_1 - радіус вектор, що визначає положення магнітного іона М.

$$E_{\delta_2, \delta_0}^{4,0}(\vec{R}_2) = \sum_{\substack{m_2, m_2' \\ m_2, m_2'}} (-1)^{l_2 + m_2 + 1 + m_2'} \begin{pmatrix} l_2 & d_2 & l_2 \\ m_2 & \delta_2 & -m_2' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_0 & 0 & l_0 \\ m_0 & \delta_0 & -m_0' \end{pmatrix} \langle l_2 m_2 l_0 m_0 | P_{2\beta} | l_2 m_2' l_0 m_0' \rangle \quad (11)$$

де $\langle l_2 m_2 l_0 m_0 | P_{2\beta} | l_2 m_2' l_0 m_0' \rangle$ - двоцентрові інтеграли перекриття.

Оператор (7) є досить загальним, оскільки в ньому окрім ізотропної частини обмінної взаємодії, містять ще і різноманітні анізотропні доданки, як орбітального, спінового так і змішаного типів. Беручи матричні елементи від оператора (7) на функціях основного стану магнітних і немагнітного іонів для надобмінного інтегралу J_{NN} отримується вираз

$$J_{NN} = \frac{I(10000)(R_1^{10})^2}{(2S+1)} \left(1 + \sum_{\delta_1, \delta_2} \frac{I(d_1 d_2 d \delta) R_1^{14} R_2^{14}}{I(10000)(R_1^{10})^2} (Q_{\delta}^4)_{\Gamma, \Gamma} \right) \quad (12)$$

$(Q_{\delta}^4)_{\Gamma, \Gamma}$ - діагональний матричний елемент оператора $[V^4(\Gamma_1) \times V^4(\Gamma_2)]_{\delta}^4$ в (7) задається виразом

$$\begin{aligned}
 (Q_{\delta}^d)_{l_1, l_2} = & \sum_{\substack{\delta_1, \delta_2 \\ m_1, m_2 \\ m', m'}} C_{l_1, m_1}^{d_1} C_{l_1, m_1'}^{d_1} C_{l_2, m_2}^{d_2} C_{l_2, m_2'}^{d_2} (-1)^{d_1 - d_2 + \delta_1 + l_2 - m_1 - m_2} \sqrt{2d+1} \\
 & \times \begin{pmatrix} d & d & d \\ \delta_1 & \delta_2 & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_1 & d & L_1 \\ -m_1 & \delta_1 & m_1' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_2 & d & L_2 \\ -m_2 & \delta_2 & m_2' \end{pmatrix}
 \end{aligned}
 \tag{13}$$

Розрахунок J_{NN} проведено для різних магнітних матеріалів Mn^{2+} , Fe^{2+} , Co^{2+}) а також для різних базових матриць $CdTe$, $CdSe$, CdS , $ZnSe$, ZnS). В якості одноелектронних хвильових функцій брались слетерівські орбіталі, що при розрахунку обмінних інтегралів та інтегралів перекриття розкладались по гаусовим орбіталям. Результати розрахунків та експериментальні данні [3] для вказаних матеріалів приведені в таблиці

Таблиця. Інтегралі надобмінної взаємодії $J_{NN}(K)$.

M	Mn		Fe		Co	
	Теорія	Експеримент	Теорія	Експеримент	Теорія	Експеримент
CdMTe	6.6	6.2	26.7			
CdMSe	9.6	7.6, 8.1	24.8	19.0	44.2	37.0
CdMS	7.2	9.7, 11.0	18.3		26.0	
ZnMSe	15.0	12.3	25.5	22.3	56.3	49.5
ZnMS	19.4	16.1	31.2	>22.0	53.5	47.5

Як видно із даних таблиці величина J_{NN} суттєво залежить від типу магнітних іонів і зростає в ряді Mn - Fe - Co. Результати розрахунків досить добре узгоджуються із даними експериментів. Як показують чисельні розрахунки із набору величин $I(d, d, \delta)$ максимальними є $I(10000)$. Тобто, обмінна взаємодія між магнітними моментами іонів в НМН, має в основному спінову природу. У роботі досліджується анізотропія кута фарадєєвського обертання для системи $Cd_{1-x}Fe_xTe$. Знайдено спектр іона Fe^{2+} в сильному зовнішньому магнітному полі для різних напрямків прикладеного поля по відношенню до кристалографічних осей. Отримано магнетопольову і температурну залежності кута фарадєєвського обертання.

Спектр іона для Fe^{2+} в кристалі в зовнішньому магнітному полі знаходиться в моделі середнього КП. Гамільтоніан такої системи із врахування найближчих сусідів, спин-орбітальної взаємодії і зовнішнього магнітного поля має вигляд

$$H = H_0 + H_{CF} + \lambda LS + \mu_B B(L + 2S) \quad (14)$$

H_0 - гамільтоніан ізольованого іона, H_{CF} - гамільтоніан кристалічного поля, λ - константа спин-орбітальної взаємодії.

В наближенні еквівалентних операторів H_{CF}

$$H_{CF} = A [1/8 (L_+^2 + L_-^2)^2 + 3/2 L_z^4 - 6L_z^2 - 12/5] \quad (15)$$

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y$$

A - константа, що характеризує величину кристалічного поля, B - індукція зовнішнього магнітного поля, μ_B - магнетон Бора.

У відсутності зовнішнього магнітного поля спин-орбітальна взаємодія приводить до розщеплення орбітального дублета 5E в другому порядку теорії збурень на рівні $\Gamma_1, \Gamma_4, \Gamma_3, \Gamma_5, \Gamma_2$ енергетична віддаль між якими $\sim 6 \frac{\lambda^2}{\Delta}$ (для іона Fe^{2+} $\Delta = 6A = 2500 \text{ cm}^{-1}$ і $\lambda = -100 \text{ cm}^{-1}$), яке складає $\sim 24 \text{ cm}^{-1}$. Для сильних магнітних полів ($B \sim 150 \text{ kGs}$) $\mu_B B \sim 10 \text{ cm}^{-1}$. Оскільки, як показують оцінки, наведені енергетичні віддалі між спин-орбітальними і розщепленими магнітним полем рівнями, мають один і той же порядок величини, то це приводить до необхідності одночасного врахування спин-орбітальної і земаанівської взаємодії. Діагоналізація гамільтоніану (14) приводить до спектру, що зображений на рис 2.

Отриманий спектр підставляємо у вираз (2) для кута фарадесівського обертання і знаходимо магнетопольову (рис 3.) і температури (рис 4.) залежності кута Фарадея. Як видно із наведених залежностей має місце задовільне узгодження експериментальних даних і теоретичних розрахунків. Анізотропія кута фарадесівського обертання пов'язана з особливостями поведінки спин-орбітальних рівнів в сильних магнітних полях (рис. 2). Нижній рівень Γ_1 є слабо анізотропним, величина розщеплення наступного рівня Γ_4 суттєво відрізняється для орієнтацій поля $B \parallel [100]$ і $B \parallel [111]$, рівень Γ_3 при напрямку поля $B \parallel [111]$ залишається двократно виродженим, в той час як в полі $B \parallel [100]$ має місце помітне його розщеплення.

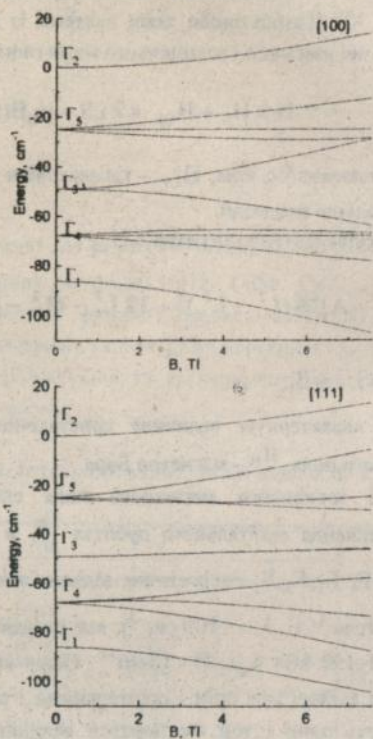


Рис. 2 Магнито-польова залежність спин-орбітальних рівнів, що походять від орбітального терма 5E для різних напрямків магнітного поля

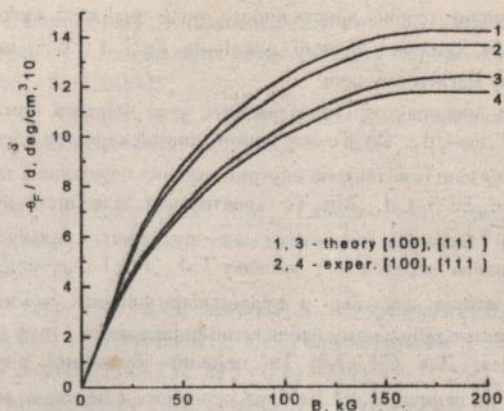


Рис. 3 Залежність кута фарадеевського обертання від магнітного поля в $\text{Cd}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Te}$ ($x=0.03$) при $T=5$ К, $E=1.459$ eV для різних орієнтацій поля відносно кристалографічних осей.

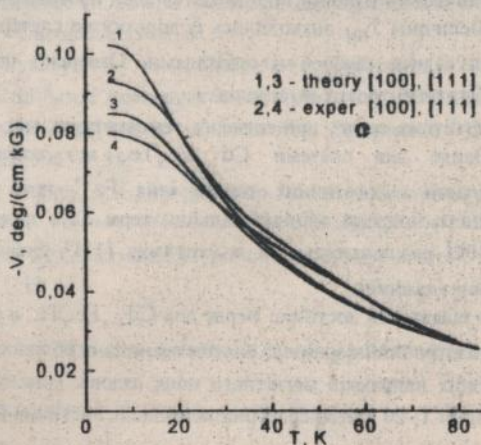


Рис. 4. Температурна залежність константи Верде в $\text{Cd}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Te}$ ($x=0.03$) при $B=135$ kGs, $E=1.459$ eV для різних орієнтацій магнітного поля відносно кристалографічних осей.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ І ВИСНОВКИ

1. Використовуючи теорію кристалічного поля знайдено енергетичні рівні та відповідні їм хвильові функції для іонів Fe^{2+} і Co^{2+} , що знаходяться в зовнішньому магнітному полі.
2. Встановлено, що спектральна залежність кута Фарадея при енергіях фотона $h\nu \approx 1.35\text{eV}$ для $Cd_{1-x}Co_xTe$ має немонотонний характер і декілька разів міняє знак. Це пов'язано із наявністю внутріцентричних переходів в такій системі.
3. Для $Cd_{1-x}Fe_xTe$ і $Cd_{1-x}Mn_xTe$ спектральна залежність кута Фарадея має монотонний характер, що вказує на відсутність вкладу в кут Фарадея внутріцентричних переходів. У випадку $Cd_{1-x}Fe_xTe$ це пов'язано із тим, що сили осциляторів для ліво- і правополяризованих компонент падаючого світла, в електродипольному наближенні-співпадають і тому не дають внеску в кут Фарадея. Для $Cd_{1-x}Mn_xTe$ перший збуджений рівень енергетично віддалений на величину $\sim 2.1\text{eV}$ від основного і переходи між цими рівнями відбуваються на фоні міжзонних переходів.
4. Величина J_{NN} обмінного інтегралу залежить від орбітального стану магнітного іона і зростає в ряді $Mn-Fe-Co$. Для твердих розчинів із Mn $J_{NN} \sim 10K$, Fe $J_{NN} \sim 20K$, Co $J_{NN} \sim 30K$. Основний вклад в обмінну d-d взаємодію магнітних центрів в напівпровідникових напівмагнітних матеріалах вносить механізм Крамерса-Андерсона. Величина J_{NN} знаходилась із допомогою слетерівських орбіталей, які апроксимувались гаусовими орбіталями. Створено пакет програм для розрахунку багаточентрових інтегралів.
5. В сильних магнітних полях при низьких температурах має місце анізотропія постійної Верде для системи $Cd_{1-x}Fe_xTe$, що пов'язана із різними характеристиками енергетичних термів іона Fe^{2+} при різних напрямках магнітного поля. Зокрема спин-орбітальний терм Γ_3 в полях $B \sim 100\text{ kGs}$ і в напрямку $[100]$ розщеплюється а в напрямку $[111]$ рівень Γ_3 залишається двохкратно виродженим.
6. Температурна залежність постійної Верде для $Cd_{1-x}Fe_xTe$, в сильних магнітних полях має анізотропний характер, що пов'язано із особливостями спектру іона Fe^{2+} для різних напрямків магнітного поля вздовж кристалографічних осей. При температурі $T \sim 20\text{ K}$ температурна залежність постійної Верде - зникає.

Основні результати дисертаційної роботи викладені в наступних публікаціях:

1. Мельничук С.В., Савчук А.И., Трифаненко Д.Н. *Внутрицентровые переходы в эффекте Фарадея в Со содержащих полумагнитных полупроводников* // ФТТ - 1996. -Т.38. - №5. - С.1320-1325.
2. Мельничук С.В., Савчук А.И., Трифаненко Д.Н. *Эффект Фарадея в полумагнитном полупроводнике $Cd_{1-x}Fe_xTe$* // ФТП - 1996. -Т.30. -№10. - С.1831-1837.
3. Мельничук С.В., Михайлевский Я.М., Савчук А.И., Трифоненко Д.Н. *Междоузонное обменное взаимодействие в системах $A_{1-x}M_xV^{VI}$* // ФТТ - 1997. - Т.39, № 2 -С.344-348
4. Мельничук С.В., Мельничук О.С., Савчук А.И., Трифаненко Д.Н. *Анизотропия угла фарадеевского вращения в Fe-содержащем полумагнитном полупроводнике* // ФТП - 1997-Т31, № 5 - С.517-519 .
5. Melnychuk S.V., Mykhaylevsky Y.M., Savchuk A.I., Trifonenko D.M. *Superexchange interaction in A2B6-based semimagnetic semiconductors* // Журнал фізичних досліджень - 1997 - Т 1, № 2, - С. 273-275.
6. Мельничук С.В., Савчук А.И., Трифаненко Д.М. *Внутрицентровое оптическое поглощение в кристаллах теллуриду кадмию, что легованы кобальтом* // The first International Conference on Material Science of Chalcogenide and Diamond Structure Semiconductors. - Chernivtsi, 1994. -P.
7. Melnychuk S.V., Mykhaylevsky Y.M., Savchuk A.I., Trifonenko D.M. *Superexchange interaction in A2B6-based semimagnetic semiconductors* // Abstracts of the XXV International school in physics of semiconducting Compounds " Jaszowiec '96" - Jaszowiec, Poland, 1996 - P.31;
8. Мельничук С.В., Савчук А.И., Трифоненко Д.М. *Магнетооптичні властивості напівпровідникових напівмагнітних матеріалів на основі сполук A_2B_6* // Науковий семінар з статистичної теорії конденсованих систем. Тези доповідей. м.Львів - 1997.- С.88.

Список цитованої літератури

1. Бабий П.И., Букивский П.Н., Гавалешко Н.П., Гнатенко Ю.П. Препринт ИФ АН УССР №21 Киев - 1982 - 25с
2. Москвин А.С. *Многоэлектронная теория сверхобмена* // ФТТ -1970 -Т.12, №11 - С.3208-3223.

3. Twardowski A., Swagten H.J.M., de Jonge W.J.M., Demianiuk M. *Magnetic properties of the diluted magnetic semiconductors.* // Phys. Rev. B. - 1991 - Vol.44, №5 - P.2280-2296.

Трифаненко Д.М. Эффект Фарадея в напівмагнітних напівпровідниках типу $A_{1-x}M_xB^{VI}$. - Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.10-фізика напівпровідників і діелектриків.- Чернівецький державний університет, Чернівці, 1997.

Захищається 8 наукових робіт, що містять дослідження спектральної залежності кута фарадеевського обертання в напівмагнітних напівпровідниках та константи надобмінної взаємодії для даних систем. Знайдено спектральну залежність кута Фарадея для системи $Cd_{1-x}Co_xTe$. Встановлено, що спектральна залежність кута Фарадея для $Cd_{1-x}Co_xTe$ при енергіях фотона $\hbar\omega \approx 1.30 - 1.40\text{eV}$ має немонотонний характер, що зв'язано з наявністю внутріцентричних переходів. Показано, що для системи $Cd_{1-x}Fe_xTe$ імовірності ліво- і правополяризованих переходів співпадають і тому вкладу в спектральну залежність кута Фарадея не вносять. З використанням методу матриці густини в наближенні лінійного відгуку системи на зовнішній вплив отримано вираз для спектральної залежності кута фарадеевського обертання. Знайдено вираз для гамільтоніану надобмінної взаємодії з використанням алгебри Рака.

Ключові слова: напівмагнітні напівпровідники, ефект Фарадея, надобмінна взаємодія, анізотропія.

Трифаненко Д.Н. Эффект Фарадея в полумагнитных полупроводниках типа $A_{1-x}M_xB^{VI}$. - Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико - математических наук по специальности 01.04.10 - физика полупроводников и диэлектриков; Черновицкий государственный университет, Черновцы, 1997.

Защищается 8 научных работ, содержащих исследование спектральной зависимости угла фарадеевского вращения в полумагнитных полупроводниках и констант сверхобменного взаимодействия для данных систем. Найдена спектральная зависимость угла Фарадея для системы $Cd_{1-x}Co_xTe$. Установлено что спектральная зависимость угла Фарадея для $Cd_{1-x}Co_xTe$ при энергиях фотона $\hbar\omega \approx 1.30 - 1.40\text{eV}$ имеет немонотонный характер, что связано с наличием внутрицентрических переходов. Показано, что для системы $Cd_{1-x}Fe_xTe$ вероятности

лево- и правополяризованных переходов совпадают и поэтому вклад в спектральную зависимость угла Фарадея не вносят. С использованием метода матрицы плотности в приближении линейного отклика системы на внешнее воздействие получено выражение для спектральной зависимости угла Фарадея. Найдено выражение для гамильтониана сверхобменного взаимодействия с использованием алгебры Рака.

Ключевые слова: полумагнитные полупроводники, эффект Фарадея, суперобменное взаимодействие, анизотропия.

Tryfonenko D.M. The Faraday effect in the semimagnetic semiconductors $A_{1-x}^{II}M_xB^{VI}$ type. -Manuscript.

Thesis on search of a scientific degree of the candidate of physical and mathematical sciences on the speciality 01.04.10 - Physics of Semiconductors and Dielectrics; Chernivtsi State University, Chernivtsi, 1997

8 scientific papers containing the researches of the spectrum dependence of the Faraday rotation angle in the semimagnetic semiconductors and superexchange interaction constants for these materials are under discussion. The spectrum dependence of Faraday rotation angle for $Cd_{1-x}Co_xTe$ is found. It is shown that the spectrum dependence of Faraday rotation angle for $Cd_{1-x}Co_xTe$ at the energy of the foton $\hbar\omega \approx 1.30-1.40$ eV have nonmonotonous character that connect with introcentral transformations. It is shown that probabilities of the left- and right polarised transformations are equal and then the contribution of the introcentral transformations is absent in the spectrum dependence of Faraday angle. The expression for the spectrum dependence of Faraday rotation angle with using the matrix of density method in the approximation of the linear reaction on external fields is obtained. The expression for hamiltonian of the superexchange interaction with using of Raca algebra is found.

Key words: semimagnetic semiconductors, Faraday effect, superexchange interaction, anisotropy.

Handwritten signature

... of the ...
... of the ...
... of the ...
... of the ...
... of the ...

... of the ...
... of the ...

... of the ...
... of the ...

... of the ...
... of the ...

... of the ...
... of the ...

... of the ...
... of the ...

... of the ...
... of the ...

... of the ...
... of the ...

... of the ...
... of the ...

... of the ...
... of the ...

Підписано до друку 22.09.97.
Формат 60х84/16.Папір друкарський.
Друк офсетний. Ум.друк.арк. 0,9.
Обл.-вид. арк. 1,0. Тираж 100 прим.-
Зам. 301:

Друкарня видавництва "Рута" Чернівецького держуніверситету
274012, Чернівці, вул. Коцюбинського, 2

124008

AB 38.634
AB 38.634