

Анализ механизма увеличения эффекта Керра в Mn/Dy/Vi

© С.Г. Овчинников, Л.В. Буркова, В.А. Середкин, В.Ю. Яковчук

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук,
660036 Красноярск, Россия

E-mail sgo@iph.krasnoyarsk.su

(Поступила в Редакцию 2 июня 1998 г.)

Приведены результаты исследований структурных, магнитных и магнитооптических свойств пленок Mn/Dy/Vi, полученных с помощью мультислойной технологии. Показано, что в таких пленках максимальный угол вращения Керра равен $\theta_k = 2.25^\circ$. Рассмотрены возможные причины столь значительного увеличения эффекта Керра: увеличение вероятности $6p-3d$ -переходов вследствие искажения симметрии, поляризация $6p$ -зоны Vi, изменение плотности состояний вблизи уровня Ферми. Проведен анализ последней причины с помощью моделирования электронной структуры Mn/Dy/Vi наложением уровней Dy на зонную структуру MnVi, что позволило выявить возможные дополнительные переходы, которые могут возникать в результате введения прослойки Dy и давать вклад в магнитооптический эффект Керра.

Поликристаллические пленки MnVi являются одним из первых материалов [1], в которых был обнаружен большой эффект Керра при комнатной температуре ($\theta_k = 0.7^\circ$) [2]. В пленках Mn/Dy/Vi, получаемых в последнее время с использованием мультислойной технологии, наряду с уменьшением среднего размера кристаллитов до 15 nm и увеличением перпендикулярной анизотропии получен угол вращения 2.25° [3], что представляет значительный как научный, так и практический интерес. Экспериментальные результаты показывают, что при введении в объем пленки примесей, например, Ti [4], Zn, Te [5], Sb [6], V, Cr, Cu, Ni [7], Ag, Au, In, Pt [8], а также Dy [9] происходит ухудшение магнитооптических (МО) свойств. Допирование Al [8,10] приводит к увеличению эффекта Керра до 2° , однако при этом уменьшается перпендикулярная анизотропия в 2 раза. Использование в качестве примеси Sm, Ce, Pr [11] позволяет получить угол вращения $2-2.5^\circ$, но при этом коэффициент прямоуглольности петли гистерезиса меньше единицы.

Результаты самосогласованного вычисления спин-поляризованной зонной структуры MnVi, в котором спин-орбитальное взаимодействие рассматривалось как возмущение, показали, что основной вклад в магнитооптический эффект должны вносить переходы Vi $6p \downarrow \rightarrow Mn 3d \downarrow$ [12]. Релятивистский расчет электронной структуры в приближении локального функционала плотности методом присоединенных сферических волн (LDA-ASW) позволил получить спектральную зависимость эффекта Керра MnVi, которая хорошо согласуется с экспериментом [13,14]. Использование такого подхода при анализе микроскопической природы эффекта Керра в MnVi дало возможность авторам объяснить причину его больших значений сочетанием значительного магнитного момента на Mn, большой спин-орбитальной связи Vi, которая, как считается, в 10 раз больше, чем в $3d$ -металлах [15], и сильной гибридизации между d -зоной Mn и p -состояниями Vi [14]. Теоретическое рассмотрение влияния примесей на эффект Керра [13,16] показывает, что их наличие приводит к изменению намагниченности Mn и спин-орбитальной связи Vi [16], к

перераспределению плотности состояний вблизи уровня Ферми, оказывает влияние на гибридизацию [13,16], а величина МО эффекта в значительной степени зависит от положения атомов примеси в элементарной ячейке MnVi [13]. Последний вывод согласуется с результатами вычислений в рамках кластерной модели [17]. Анализ экспериментальных данных дает основание предполагать, что соотношение вклада рассматриваемых причин в эффект Керра определяется спецификой вводимой примеси [8,11].

В данной работе приводятся результаты исследований структурных, магнитных, магнитооптических свойств пленок Mn/Dy/Vi и анализируется механизм наблюдаемого в них значительного увеличения эффекта Керра ($\theta_k = 2.25^\circ$).

1. Образцы и методика эксперимента

Пленки Mn/Dy/Vi изготавливались последовательным осаждением чередующихся слоев Vi, Dy, Mn, Dy и т.д. на стеклянные подложки при комнатной температуре в вакууме $3 \cdot 10^{-6}$ Torr [18]. Сразу после испарения образцы отжигались в вакууме $5 \cdot 10^{-6}$ Torr при температуре $250-270^\circ\text{C}$. Длительность отжига выбиралась 60, 30, 15 и 7 min в зависимости от толщины и количества слоев [19]. Толщины слоев Vi и Mn выбирались таким образом, чтобы выполнялось атомное соотношение 1:1, и изменялись в пределах 12.5–100 nm для Vi, 4–39 nm для Mn. Толщина Dy выбиралась в интервале от 3 до 40 nm.

Структурные свойства пленок изучались с помощью просвечивающей электронной микроскопии. Химический состав и толщина образцов определялись с помощью спектрального флуоресцентного анализа. Оже-спектры позволили получить распределение компонентов по толщине. Анализ химических связей проводился на основе рентгеновских фотоэлектронных спектров. Намагниченность насыщения (M_s) и константа перпендикулярной анизотропии (K_u) определялись на торсионном магнитометре. Угол вращения полярного эффекта

Керра (θ_k) и его спектральные зависимости снимались со стороны подложки при комнатной температуре на магнитооптической установке в полях до 16 кОе. Коэрцитивная сила (H_c) определялась из керровских петель гистерезиса.

2. Экспериментальные результаты

В результате оптимизации по толщине и количеству слоев в исходном состоянии были получены пленки Mn/Dy/Bi с параметрами: средний размер кристаллитов 15 nm, $H_c = 6$ кОе, $K_u = 1 \cdot 10^7$ эрг/см³, $\theta_k = 2.25^\circ$ при $\lambda = 633$ nm. Эти пленки до отжига состояли из чередующихся слоев Bi, Dy и Mn толщиной 49.5, 5 и 17 nm соответственно, с общим количеством слоев, равным 7. Их отжиг проводился при температуре 270°C в течение 30 min.

Сравнительный анализ кристаллической структуры таких пленок и пленок MnBi, полученных нами по обычной технологии [20], показывает, что значительное уменьшение размера кристаллитов в первых является следствием введения Dy в виде прослойки. В пленках MnBi после отжига наблюдается большое количество крупных кристаллитов размером 250–400 nm, отдельные кристаллиты имеют размер 1000–3000 nm. В оптимальных по структурным свойствам пленках Mn/Dy/Bi средний размер кристаллитов в результате отжига уменьшается с 300 до 15 nm, т.е. почти на два порядка по сравнению с MnBi. Электронограммы пленок Mn/Dy/Bi до отжига показывают поликристаллическое состояние Bi, Dy и Mn, при этом средний размер кристаллитов Bi и Mn примерно 300 nm, а размер кристаллитов Dy на порядок меньше. После отжига кроме образовавшейся фазы MnBi остается небольшая объемная доля Mn и Bi в свободной фазе. Объемная доля чистого Dy в результате отжига значительно уменьшается, что может быть обусловлено его вхождением в кристаллическую решетку MnBi. Возможно также образование соединений Dy с кислородом и/или с окисью Mn, что подтверждается наличием рефлекса DyMnO₃ на электронограммах и следует из рентгеновских фотоэлектронных спектров. Эти спектры

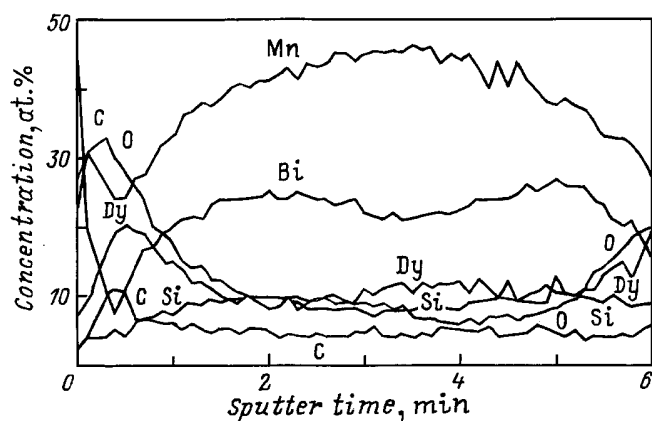


Рис. 1. Оже-профиль пленки Mn/Dy/Bi.

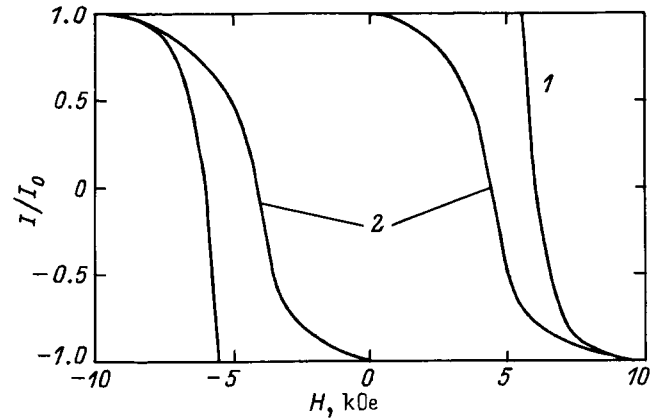


Рис. 2. Петли гистерезиса пленок Mn/Dy/Bi (1) и MnBi (2).

показывают, что Bi и Mn в металлическом состоянии, а Dy как в металлическом, так и окисленном состоянии.

На рис. 1 представлен Оже-профиль пленки Mn/Dy/Bi, который показывает, что распределение каждого компонента в объеме пленки достаточно однородно. Повышенное содержание кислорода и диспрозия в приповерхностной и в приподложечной областях можно объяснить характерной для РЗ-элементов тенденцией мигрировать к поверхности пленки и там подвергаться окислению [21].

Детальное рассмотрение особенностей структурных свойств пленок Mn/Dy/Bi в сравнении с пленками MnBi позволяет сделать вывод, что использование многослойной технологии способствует формированию мелкокристаллической структуры [3]. Допирование Dy именно с помощью введения соответствующей прослойки способствует более однородному распределению атомов Dy в объеме пленки при отжиге и их вхождению в кристаллическую решетку, причем есть основание предполагать, что с большей вероятностью они должны занимать промежуточные положения в элементарной ячейке MnBi и/или замещать Bi [11], но не Mn [4]. Не исключается и то, что незначительная часть Dy не будет участвовать в образовании твердого раствора и выделится в отдельную фазу. Эта фаза при небольших количествах вводимой примеси, по-видимому, будет распределяться по границам кристаллитов MnBi, а при больших количествах будут образовываться включения из чистого Dy.

На рис. 2 изображена петля гистерезиса пленки Mn/Dy/Bi с оптимальными параметрами, снятая при комнатной температуре. Сравнение с приведенной на этом же рисунке петлей гистерезиса пленки MnBi, полученной нами по обычной технологии, показывает, что в результате введения прослойки Dy значительно улучшается прямоугольность петли гистерезиса, которая для всех полученных пленок Mn/Dy/Bi равна единице. В табл. 1 приведены магнитные и магнитооптические параметры пленок Mn/Dy/Bi, имевших различные толщины и количество слоев до отжига. Приведены также

Таблица 1. Магнитные и магнитооптические свойства пленок Mn/Dy/Bi, MnBiDy и MnBi

Состав	Толщина			Общее количество слоев	Время отжига, min	H_c , kOe	M_s , G	$K_u \cdot 10^{-7}$, erg/cm ³	θ_k , deg
	Bi, nm	Mn, nm	Dy, nm						
Mn/Dy/Bi	49.5	17	5	3	30	2	485	1	1.5
Mn/Dy/Bi	49.5	17	20	3	60	5	—	—	1.4
Mn/Dy/Bi	50	18	4	7	30	1.6	520	1.2	1.9
Mn/Dy/Bi	104	39	5	3	60	4.7	320	0.7	1.0
Mn/Dy/Bi	49.5	17	5	7	30	6	330	1.4	2.25
MnBiDy		148			30	8			0.35
MnBi		148			60	3.5	400	1.4	1.3
MnBi [13]		148			300	0.8	620	20	0.7

параметры пленок MnBiDy и MnBi, полученных нами по обычной технологии, и литературные данные для последних. Как видно из таблицы, для всех пленок Mn/Dy/Bi угол вращения Керра значительно больше, чем опубликованные значения для MnBi. Максимальное значение $\theta_k = 2.25^\circ$ имеют отмеченные выше пленки с оптимальными параметрами. В пленках, полученных нами с помощью обычного введения примеси Dy в эквивалентном процентном соотношении, угол МО вращения значительно меньше и составляет 0.35° (табл. 1). На рис. 3 представлена дисперсионная зависимость θ_k для пленок Mn/Dy/Bi, которая имеет максимум в области длин волн $\lambda = 633$ nm. Видно, что этот максимум несколько смещен в сторону более коротких длин волн по сравнению с зависимостью для пленок MnBi, которая также представлена на этом рисунке.

3. Обсуждение результатов

Обращает на себя внимание большой угол вращения Керра в пленках Mn/Dy/Bi, максимальное значение которого более чем в 1.5 раза превосходит значение для пленок MnBi, полученных нами (табл. 1). Как указывалось выше, вращение Керра зависит от спин-орбитальной связи, намагниченности и плотности состояний [15]. Проведенные нами измерения показали, что намагниченность пленок Mn/Dy/Bi примерно на 30%

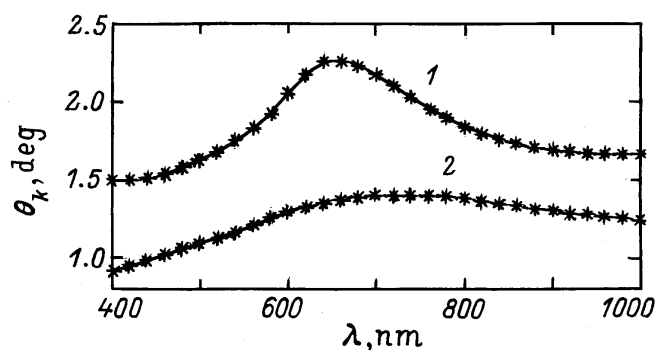


Рис. 3. Дисперсионные зависимости θ_k пленок Mn/Dy/Bi (1) и MnBi (2).

меньше, чем в полученных нами пленках MnBi. Это в немалой степени может быть связано с возникновением мелкокристаллической структуры [17]. Расчеты показывают, что при введении примеси, например Al в MnBi, происходит уменьшение спин-орбитального взаимодействия из-за гибридизации состояний примеси и Bi [16]. Поэтому маловероятно, что две первые причины могут вносить вклад в увеличение θ_k , и таковую следует искать в изменении электронной структуры, которое происходит в результате введения прослойки Dy.

Чтобы более ясно представить механизм усиления эффекта Керра, необходимо рассмотреть зонную структуру MnBi [12], расчет которой дает картину плотности состояний, изображенную на рис. 4, а–с. Как видно из рисунка, наибольшая вероятность оптических переходов связана с переходами $6p\downarrow \rightarrow 3d\downarrow$ с энергией 1.5–2 eV. Количественные расчеты подтверждают этот вывод [13,14]. Вычисленная спектральная зависимость имеет максимум при 1.8 eV, что согласуется как с нашими (рис. 3), так и с опубликованными другими авторами экспериментальными данными.

При феноменологическом рассмотрении угол вращения Керра определяется недиагональным членом тензора оптической проводимости [15]

$$\theta_k = \frac{4\pi}{\omega} \operatorname{Re} \left[\frac{\sigma_{xy}}{(1 - (n + ik)^2)(n + ik)} \right], \quad (1)$$

где $n + ik$ — комплексный показатель преломления на частоте ω . Для объяснения большого эффекта Керра в пленках Mn/Dy/Bi предлагается несколько причин микроскопического уровня, которые могут привести к увеличению σ_{xy} при введении прослойки Dy.

1) Как отмечалось выше, к большому эффекту Керра в MnBi приводят электронные переходы $6p-3d$ (см. рис. 4, а–с), матричные элементы которых входят в σ_{xy} . Введение атомов Dy в решетку MnBi может приводить к искажению симметрии и обусловленному этим возрастанию вероятности $6p-3d$ -переходов, т. е. к увеличению их матричных элементов. Искажение симметрии происходит, если атомы примеси занимают промежуточные положения в элементарной ячейке MnBi [13]. Как отмечалось выше, атомы Dy в пленках Mn/Dy/Bi с большей

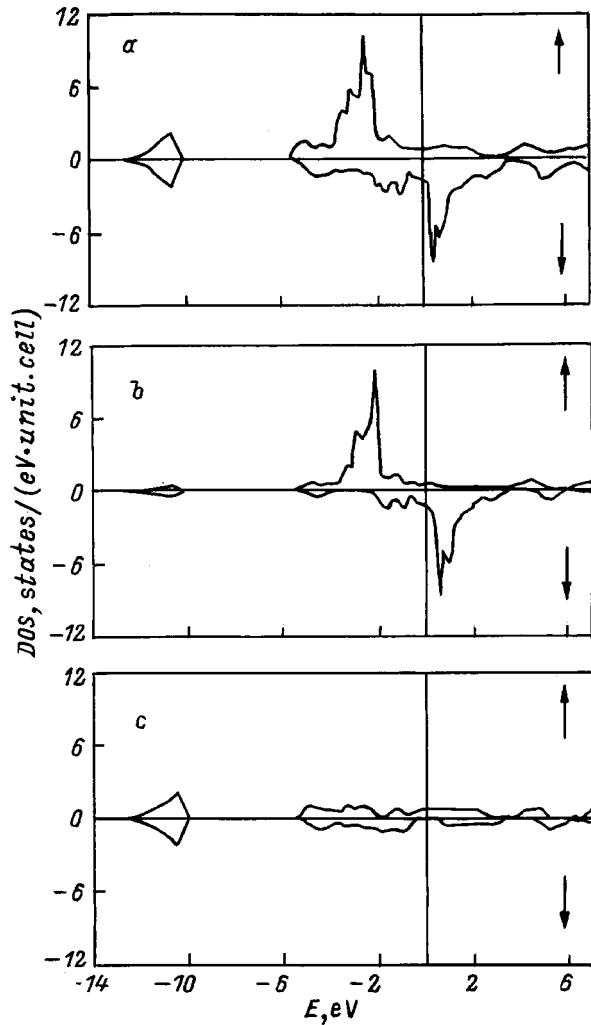


Рис. 4. Плотности состояний MnBi [12]. *a* — суммарная плотность состояний, *b* — плотность $3d$ Mn-состояний, *c* — плотность $6p$ Bi-состояний. Вертикальные стрелки на рис. 4–6 обозначают направления спинов.

вероятностью занимают промежуточные положения, и это может быть одной из причин увеличения эффекта Керра. В пленках MnBiDy, полученных нами с помощью одновременного осаждения компонентов, что больше способствует замещению атомов Mn [4] атомами Dy, величина θ_k значительно меньше (табл. 1).

2) Недиагональный член тензора оптической проводимости может быть разложен на члены, зависящие от ориентации спинов электронов [15],

$$\sigma_{xy} = \sigma_{xy}(\uparrow\uparrow) + \sigma_{xy}(\downarrow\downarrow) + \sigma_{xy}(\uparrow\downarrow) + \sigma_{xy}(\downarrow\uparrow). \quad (2)$$

Сравнение энергетических зависимостей этих членов показывает, что переходы с перемешиванием спинов дают незначительный вклад, а расчеты показывают [13], что магнитооптический переход в MnBi главным образом определяется переходами из $6p$ -состояния Bi со спином вниз в $3d$ -Mn со спином вниз. Из рис. 4, *b* видно, что $3d$ -зона Mn полностью поляризована и примеси на

нее не должны оказывать заметного влияния. Анализ электронной структуры пленок MnBiAl позволил сделать вывод, что при добавлении Al происходит значительная поляризация $6p$ -зоны Bi, т.е. увеличивается количество $6p$ -электронов со спином вниз и дырок со спином вверх, и это должно приводить к увеличению МО эффекта [17]. Подобным образом может действовать Dy в пленках Mn/Dy/Bi. Возможным механизмом такого воздействия может быть гибридизация $4f$ - и $5d$ -состояний Dy с $6p$ -состояниями Bi (рис. 4, *c*), увеличивающая плотность состояний последнего ниже уровня Ферми, что, в свою очередь, должно привести к увеличению вероятности оптических переходов.

3). Для обсуждения эффекта Керра в Mn/Dy/Bi можно смоделировать электронную структуру этой системы наложением уровней Dy на зонную структуру MnBi. В соединении s - и d -электроны PЗ атома образуют металлическую связь, а $4f$ -электроны, по-видимому, могут рассматриваться в однопримесном приближении, как совокупность изолированных (без учета гибридизации с Mn и Bi) локальных термов. Эти термы могут сдвинуться относительно чистого металла. Согласно данным рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS), такой сдвиг зависит от процентного содержания PЗ-элемента [22] и, например, для аморфных пленок Tb₂₁Fe₇₉ составляет примерно 1 eV [23]. По мнению авторов, причиной смещения может быть гибридизация между d -состояниями Fe и Tb. В спектре Tb₂₁Fe₇₉ существует низкоэнергетический максимум с энергией связи 2–3 eV, соответствующий $4f$ -электронам Tb. В области малых энергий связи $E_b \approx 1$ –3 eV основной вклад в плотность состояний PЗ-элемента вносят $5d$ -электроны (что также подтверждается XPS-данными для чистых PЗ [24]), обеспечивающие максимум в оптической проводимости $\sigma(\omega)$ при $\hbar\omega \approx 2$ eV [25]. Поскольку переходы PЗ $5d \rightarrow$ Mn $3d$ запрещены оптическими правилами отбора, d -состояния PЗ-элемента несущественны с точки зрения оптических переходов.

В пленках Mn/Dy/Bi $4f$ -электроны находятся в ферромагнитной матрице и могут быть подмагничены за счет s – f -обменного взаимодействия. Однако в этом случае, в отличие от чистых PЗ металлов, где определяющим является внутриатомное s – f -объемное взаимодействие $J_{s-f} \sim 1$ eV [26], имеет место также и взаимодействие спинов $4f$ -электронов с зонными электронами Mn, которое на порядок меньше. Поэтому можно пренебречь обменным расщеплением $4f$ -уровней и модель зонной структуры Mn/Dy/Bi можно представить как наложение на рис. 4, *a* плотности состояний Dy. Вследствие отсутствия в литературе данных о плотности состояний Dy в соединении, для этой цели можно воспользоваться локальной плотностью состояний Tb [27], выведенной непосредственно из XPS и XPS⁻¹ спектров для Tb₂₁Fe₇₉ [23]. Такая плотность с учетом общего вида вычисленной плотности состояний ферромагнитного Gd [28] изображена на рис. 5, *a* штриховыми и штрихпунктирными линиями для $4f$ - и $5d$ -электронов

Таблица 2. Возможные переходы в пленках Mn/Dy/Vi при параллельной ориентации спинов Dy и Mn

№ п/п	Возможные переходы	Энергия перехода	Интервал вклада перехода, nm
1	$5d \uparrow \rightarrow 6p \uparrow$	$\Delta E > 0$	400–1000
2	$5d \downarrow \rightarrow 6p \downarrow$	$\Delta E > 0$	400–1000
3	$6p \uparrow \rightarrow 5d \uparrow$	$0 < \Delta E < E_{5d\uparrow}$	770–1000
4	$6p \downarrow \rightarrow 5d \downarrow$	$0 < \Delta E < E_{5d\downarrow}$	770–1000
5	$4f \uparrow \rightarrow 6p \uparrow$	$\Delta E > E_{f\uparrow}$	400–860
6	$4f \uparrow \rightarrow 3d \uparrow$	$\Delta E > E_{f\uparrow}$	400–860
7	$4f \uparrow \rightarrow 5d \uparrow$	$E_{f\uparrow} + E_{5d\uparrow} > \Delta E > E_{f\uparrow}$	400–860
8	$6p \downarrow \rightarrow 4f \downarrow$	$E_{f\downarrow} + \Delta E_{f\downarrow} > \Delta E > E_{f\downarrow}$	400–860
9	$3d \downarrow \rightarrow 4f \downarrow$	$E_{f\downarrow} + \Delta E_{f\downarrow} > \Delta E > E_{f\downarrow}$	400–860
10	$5d \downarrow \rightarrow 4f \downarrow$	$E_{f\downarrow} + \Delta E_{f\downarrow} > \Delta E > E_{f\downarrow}$	400–860

Таблица 3. Возможные переходы в пленках Mn/Dy/Vi при антипараллельной ориентации спинов Dy и Mn

№ п/п	Возможные переходы	Энергия перехода	Интервал вклада перехода, nm
1	$5d \uparrow \rightarrow 6p \uparrow$	$\Delta E > 0$	400–1000
2	$5d \downarrow \rightarrow 6p \downarrow$	$\Delta E > 0$	400–1000
3	$6p \uparrow \rightarrow 5d \uparrow$	$0 < \Delta E < E_{5d\uparrow}$	770–1000
4	$6p \downarrow \rightarrow 5d \downarrow$	$0 < \Delta E < E_{5d\downarrow}$	770–1000
5	$4f \downarrow \rightarrow 6p \downarrow$	$\Delta E > E_{f\downarrow}$	400–860
6	$4f \downarrow \rightarrow 3d \downarrow$	$E_{f\downarrow} + E_{3d\downarrow} + \Delta E_{3d\downarrow} > \Delta E > E_{f\downarrow} + E_{3d\downarrow}$	560–730
7	$4f \downarrow \rightarrow 5d \downarrow$	$E_{f\downarrow} + E_{5d\downarrow} > \Delta E > E_{f\downarrow}$	400–860
8	$6p \uparrow \rightarrow 4f \uparrow$	$E_{f\uparrow} + \Delta E_{f\uparrow} > \Delta E > E_{f\uparrow}$	400–500
9	$3d \uparrow \rightarrow 4f \uparrow$	$E_{f\uparrow} + \Delta E_{f\uparrow} > \Delta E > E_{f\uparrow}$	400–500
10	$5d \uparrow \rightarrow 4f \uparrow$	$E_{f\uparrow} + \Delta E_{f\uparrow} > \Delta E > E_{f\uparrow}$	400–500

при температуре $T = 0$. Здесь уже учтен эффект гибридизации $4f$ - и $5d$ -электронов Dy с $3d$ -электронами Mn. Рассмотрен случай параллельной ориентации спинов Dy и Mn, т.е. $M_{Dy} \uparrow \uparrow M_{Mn}$ и $J_{df} > 0$. Предполагается, что спиновое расщепление $5d$ -зоны Dy отсутствует или очень мало. В рамках предложенной модели из рис. 5, *a* можно определить, какие дополнительные переходы, вносящие вклад в увеличение эффекта Керра, могут возникнуть из-за введения Dy. Такие переходы перечислены в табл. 2. Исходя из рис. 4 и 5, *a*, можно ориентировочно оценить предполагаемые вклады от этих переходов. Переходы под номерами 1, 4, 5, 8 не должны давать вклад вследствие того, что плотность $6p$ -состояний уже должна быть реализована через переходы, которые наблюдаются в MnBi, т.е. через переходы Vi $6p$ –Mn $3d$. Очень незначительна интенсивность перехода 6, поскольку низка плотность незанятых $3d$ -состояний Mn со спином вверх. Вклады от остальных переходов примерно одного порядка. Из этих рисунков можно определить ограничения энергии каждого из переходов, которые также приведены в табл. 2. Под энергией перехода ΔE подразумевается разность энергий конечного и начального состояний. Индекс E_i обозначает ближайший к уровню Ферми край зоны плотности i -состояний.

В табл. 3 приведены аналогичные данные для случая антипараллельной ориентации спинов Dy и Mn. Картина плотности состояний для этого случая представлена на рис. 5, *b*. Рисунок позволяет определить, что переходы под номерами 1 и 4 не вносят вклада по указанной выше причине. Переходы № 2, 3, 5, 7–9 имеют интенсивности примерно одного порядка, поскольку плотности соответствующих им начальных и конечных состояний отличаются незначительно. Ощутимый вклад может быть от перехода под номером 10. Обращает на себя внимание переход $4f \downarrow \rightarrow 3d \downarrow$, который при соответствующей реализации может проявиться как сильный переход.

Количественную оценку пределов для энергии возможных переходов можно сделать с учетом того, что границы $4f$ -зон Dy могут отличаться от приведенных на рис. 5, *a, b* для Tb. Опубликованные данные рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии свидетельствуют о том, что в соединении $REFe_2$ максимум плотности $4f$ -состояний Dy ближе к уровню Ферми, чем для Tb [29]. В табл. 2 и 3 приведены интервалы вклада возможных переходов, которые были определены в предположении, что зона заполненных $4f$ -состояний смещена в сторону уровня Ферми всего на 1 eV по сравнению с изображенной на рис. 4 и 5, *a*, т.е. $E_{f\downarrow} = -1.4$ eV, а остальные величины в соответствии с рисунком будут: $E_{3d\downarrow} = 0.3$ eV, $\Delta E_{3d\downarrow} = 0.5$ eV, $E_{f\uparrow} = 2.6$ eV, $\Delta E_{f\uparrow} = 3$ eV. Следует отметить, что одновременно с указанным смещени-

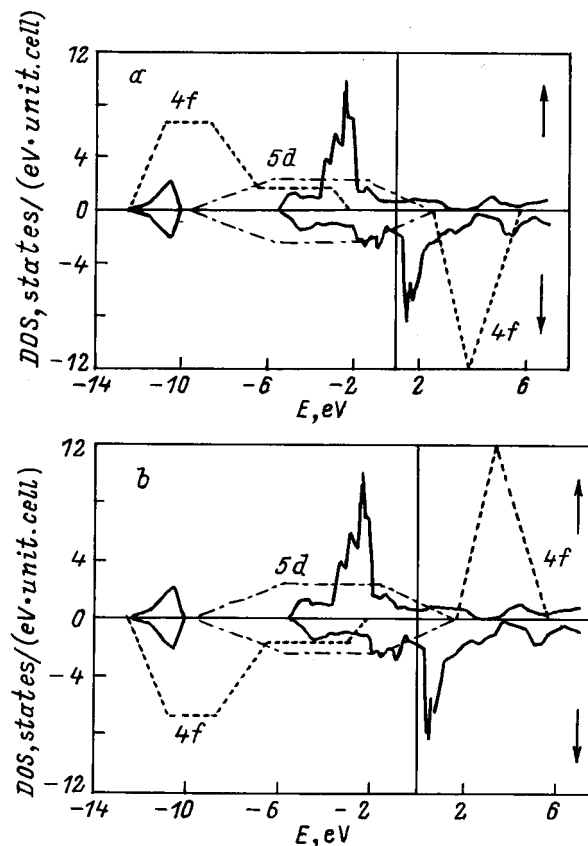


Рис. 5. Суперпозиция плотности состояний MnBi и Dy при параллельной (a) и (b) ориентации спинов Mn и Dy.

ем должно происходить примерно такое же смещение $4f$ -зоны незаполненных состояний в сторону больших энергий [27]. При этом исчезнут вклады от переходов, в которых конечным состоянием являются незаполненные $4f$ -состояния.

Как видно из табл. 2, в случае $M_{Dy} \uparrow \uparrow M_{Mn}$ вклады от возможных переходов должны быть равномерно распределены в рассматриваемом интервале длин волн 400–1000 nm. Интенсивности этих переходов примерно одного порядка, т.е. они могут приводить только к общему смещению спектральной кривой в область более высоких значений θ_k и не могут определять наблюдаемого для Mn/Dy/Bi смещения максимума по шкале энергий, который остается обеспеченным переходами Bi $6p \downarrow \rightarrow Mn 3d \downarrow$, как в MnBi. Для случая $M_{Dy} \downarrow \uparrow M_{Mn}$ получается примерно такая же картина. Однако реализуемый при этом переход $4f \downarrow \rightarrow 3d \downarrow$ должен давать значительный вклад в интервале длин волн, который будет определяться шириной пика незаполненных $3d \downarrow$ состояний Mn и в данном случае соответствует интервалу наблюдаемого максимума эффекта Керра. К сожалению, нет данных, позволяющих говорить о взаимной ориентации спинов Dy и Mn, а наблюдаемое в пленках Mn/Dy/Bi уменьшение намагниченности нельзя рассматривать как свидетельство их антипараллельной ориентации, поскольку оно может быть обусловлено уменьшением размера кристаллитов [17].

В соединениях Mn с Dy наблюдается как ферромагнитное [30], так и антиферромагнитное [31] упорядочение спинов этих элементов, причем магнитные свойства в значительной степени зависят от расстояния между атомами [32]. Можно предположить, что, как и в соединениях RE (Fe, Co) [33], упорядочение меняется от антиферромагнитного к ферромагнитному при увеличении расстояния между атомами P3 и Mn. Если атомы Dy входят в промежуточные положения элементарной ячейки MnBi, расстояние между атомами Mn и Dy больше, чем при замещении ими атомов Bi, т.е. во втором случае более вероятно антиферромагнитное упорядочение. Как уже отмечалось, положения Dy зависят от технологии введения этого элемента, следовательно, наблюдаемые в эксперименте отличия МО свойств пленок Mn/Dy/Bi и MnBiDy можно попытаться объяснить тем, что эти пленки в определенной степени различаются взаимным упорядочением спинов Mn и Dy и соответствующими ему вкладами рассмотренных выше переходов.

В случае $M_{Dy} \uparrow \uparrow M_{Mn}$, если зона незаполненных $4f$ -состояний достаточно узкая, то максимум эффекта Керра можно объяснить переходами в эту зону. Интервал вклада указанных переходов будет определяться шириной пика незаполненных $4f$ -состояний и, например, в случае $E_{f \downarrow} = 1.6 \text{ eV}$, соответствующем рис. 6, *a*, и при $\Delta E_{f \downarrow} \sim 0.8 \text{ eV}$ становится 520–770 nm. Следовательно, такие переходы могут привести к возникновению наблюдаемого как раз в этом интервале длин волн максимуму θ_k . Вычисления электронной структуры, проведенные с помощью максимально локализованного

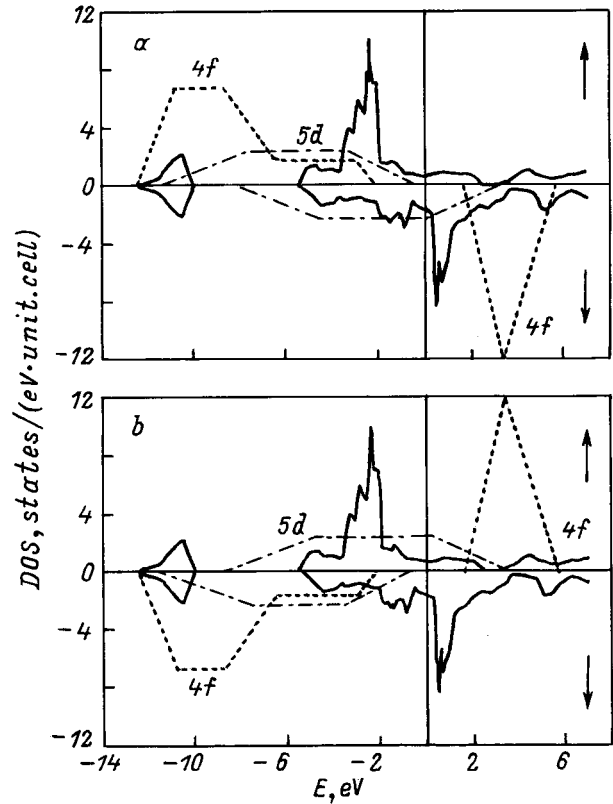


Рис. 6. Суперпозиция плотности состояний MnBi и Dy с учетом спинового расщепления $5d$ зоны Dy при параллельной (*a*) и антипараллельной (*b*) ориентации спинов Mn и Dy.

LMTO метода на основе приближения атомных сфер и рекурсивного метода, показали, что локализация и ширина пика незаполненных $4f$ -состояний в аморфных пленках "редкая земля–переходной металл" зависят от типа P3 [34]. Кроме того, было показано, что если изменять расстояние между атомами в пределах от 1 до 2% при одинаковом атомном содержании, то этот пик будет смещаться на 0.3 eV. Следовательно, существует возможность менять ширину и локализацию пика незаполненных $4f$ -состояний с помощью выбора соответствующего состава.

На рис. 6, *a, b* изображены плотности состояний с учетом спинового расщепления $5d$ -зоны для случая $J_{MnDy} > 0$ и $J_{MnDy} < 0$ соответственно. Хотя расщепление $> 4 \text{ eV}$ маловероятно [35], однако на этих рисунках для наглядности изображен именно такой предельный вариант. Оценка интенсивности дополнительных переходов при расщеплении показывает, что в случае $M_{Dy} \uparrow \uparrow M_{Mn}$ исчезают переходы с конечным состоянием $5d \uparrow$ (переходы 3, 7, табл. 2) и в случае $M_{Dy} \downarrow \uparrow M_{Mn}$ — с конечным состоянием $5d \downarrow$ (переходы 4, 7, табл. 3). Поскольку эти переходы в совокупности перекрывают весь рассматриваемый интервал длин волн, то можно считать, что в обоих случаях происходит общее снижение спектральной кривой, хотя можно отметить некоторое увеличение интенсивности для переходов с начальным состоянием

$5d \downarrow$ (10) в первом случае и с начальным состоянием $5d \uparrow$ — во втором (10). Все остальные переходы не изменяются.

Более подробное рассмотрение для случая $M_{Dy} \uparrow \uparrow M_{Mn}$ (см. рис. 6, *a*) показывает, что влияние расщепления зависит от температуры. С ростом температуры $5d \uparrow$ зона смещается по направлению к уровню Ферми и при некоторой температуре $T = T^*$ пересекает его. При температуре $T > T^*$ появляются исчезнувшие в результате расщепления переходы: $6p \uparrow \rightarrow Dy 5d \uparrow$, $Dy 4f \uparrow \rightarrow Dy 5d \uparrow$ и при этом наблюдается рост проводимости. Аналогичным образом происходит в случае $M_{Dy} \downarrow \uparrow M_{Mn}$ (см. рис. 6, *b*), т. е. при $T = T^*$ появляются исчезнувшие переходы: $6p \downarrow \rightarrow 5d \downarrow$ и $4f \downarrow \rightarrow 5d \downarrow$, в результате чего происходит общее смещение спектральной кривой θ_k в область более высоких значений.

Таким образом, предложенное модельное рассмотрение позволяет детально проанализировать вклад в МО эффекта возможных дополнительных переходов, которые могут появиться в результате введения примеси Dy. Можно сделать вывод о том, что, если в пленках Mn/Dy/Vi положение зоны заполненных $4f$ -состояний Dy достаточно близко к уровню Ферми, максимум в спектре θ_k может возникнуть только в случае антипараллельной ориентации спинов Dy и Mn и основной вклад в него будут вносить переходы $4f \downarrow \rightarrow 3d \downarrow$. Если зона незаполненных $4f$ -состояний узкая и достаточно близка к уровню Ферми, максимум в спектре возможен за счет новых переходов только в случае параллельной ориентации. В него могут давать вклад переходы: $6p \downarrow \rightarrow 4f \downarrow$, $3d \downarrow \rightarrow 4f \downarrow$, $5d \downarrow \rightarrow 4f \downarrow$. Как отмечалось выше, смещение зоны незаполненных $4f$ -состояний к уровню Ферми должно сопровождаться соответствующим сдвигом края зоны заполненных $4f$ -состояний в сторону больших энергий связи [27], и эта зона (т. е. переходы $4f \downarrow \rightarrow 3d \downarrow$) может определить максимум эффекта Керра, наблюдаемый в коротковолновой области [13]. Спиновое расщепление $5d$ -зоны приводит к общему снижению спектральной кривой θ_k , которая с ростом температуры опять поднимается.

Предложенное рассмотрение причин увеличения эффекта Керра в пленках Mn/Dy/Vi носит предварительный характер. Планируемые в дальнейшем структурные исследования таких пленок, а также теоретические расчеты с учетом различного положения атомов Dy в элементарной ячейке MnVi, изучение оптических и магнитооптических свойств в более широком интервале длин волн и при различных температурах в совокупности с результатами XPS-анализа позволят подтвердить влияние перечисленных причин на эффект Керра и, с другой стороны, количественно определить вклад каждой из них в его увеличение.

Авторы благодарят И.С. Эдельман за полезное обсуждение результатов.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 98-02-16139).

Список литературы

- [1] H.J. Williams, R.C. Sherwood, F.G. Foster, E.M. Kelley. J. Appl. Phys. **28**, 10, 1181 (1957).
- [2] K. Egashira, T. Yamada. J. Appl. Phys. **45**, 8, 3643 (1974).
- [3] Л.В. Буркова, А.С. Паршин, В.А. Середкин, В.Ю. Яковчук. Автометрия **2**, 39 (1995).
- [4] W.K. Unger, E. Wolfgang, H. Harms, H. Haudek. J. Appl. Phys. **43**, 6, 2875 (1972).
- [5] H. Gobel, E. Wolfgang, H. Harms. Phys. Stat. Sol. (a) **35**, 1, 89 (1976).
- [6] Y.J. Wang, J.X. Shen, Q. Tang. J. Magn. Magn. Mater. **74**, 3, 365 (1988).
- [7] A. Katsui, A. Shibukawa, H. Terui, K. Egashira. J. Appl. Phys. **47**, 11, 5069 (1976).
- [8] Y. Chen, C.P. Luo, Z.T. Guan, Q.Y. Lu, Y.J. Wang. J. Magn. Magn. Mater. **115**, 1, 55 (1992).
- [9] A. Katsui. J. Appl. Phys. **47**, 10, 4663 (1976).
- [10] Y.J. Wang. J. Magn. Magn. Mater. **84**, 1–2, 39 (1990).
- [11] D.S. Dai, R.Y. Fang, P. Long, S. Zhang, T.J. Ma, C. Dai, X.X. Zhang. J. Magn. Magn. Mater. **115**, 1, 66 (1992).
- [12] R. Coehoorn, R.A. de Groot. J. Phys. **F15**, 10, 2135 (1985).
- [13] J. Köhler, J. Kübler. J. Phys.: Condens. Mater. **8**, 8681 (1996).
- [14] P.M. Oppeneer, V.N. Antonov, T. Kraft, H. Eschrig, A.N. Yaresko, A.Ya. Perlov. J. Appl. Phys. **80**, 2, 1099 (1996).
- [15] D.K. Misemer. J. Magn. Magn. Mater. **72**, 3, 267 (1988).
- [16] S.S. Jaswal, J.X. Shen, R.D. Kirby, D.J. Sellmyer. J. Appl. Phys. **75**, 10, 6348 (1994).
- [17] Z.Q. Li, H.L. Luo, W.Y. Lai, Z. Zeng, Q.Q. Zheng. J. Magn. Magn. Mater. **98**, 1–2, 47 (1991).
- [18] В.А. Середкин, В.Ю. Яковчук, Л.В. Буркова, С.З. Склочев. А.с. 1718273 СССР (1992).
- [19] M. Masuda, I. Izawa, S. Yoshino, S. Shiomi, S. Uchiyama. Jpn. J. Appl. Phys. **26**, 5, 707 (1987).
- [20] D. Chen. J. Appl. Phys. **42**, 9, 3625 (1971).
- [21] R.B. van Dover, E.M. Gyorgy, R.P. Frankenthal, M. Hong, D.J. Siconolfi. J. Appl. Phys. **59**, 4, 1291 (1986).
- [22] А.С. Андреевко, Лин Жанда. ФТТ **30**, 5, 1530 (1988).
- [23] G.A.N. Connell, S.J. Oh, J. Allen, R. Allen. J. Non-Cryst. Sol. **61–62**, 1061 (1984).
- [24] P.O. Hedén, H. Löfgren, S.B.M. Hagström. Phys. Rev. Lett. **26**, 8, 432 (1971).
- [25] N. Ahmed-Mokhtar, J.P. Petrakian, R. Philip, R. Fraisse, B. Lazarides. Thin Solid. Films **88**, 2, 177 (1982).
- [26] R. Ahuja, S. Auluck, B. Johansson, M.S. Brooks. Phys. Rev. **B50**, 8, 5147 (1994).
- [27] G.A.N. Connell. J. Magn. Magn. Mater. **54–57**, 1561 (1986).
- [28] J. Sticht, J. Kübler. Solid. State Commun. **53**, 6, 529 (1985).
- [29] V.V. Nemoshkalenko, V.N. Uvarov, S.V. Borisenko, A.I. Senkevich, V.D. Borisenko. Металлофизика и новейшие технологии **17**, 10, 3 (1995).
- [30] S. Labroo, N. Ali, P. Robinson. J. Appl. Phys. **67**, 9, 5292 (1990).
- [31] K. Yoshimura, M. Shiga, Y. Nakamura. J. Phys. Soc. Jap. **55**, 10, 3585 (1986).
- [32] H. Wada, H. Nakamura, K. Yoshimura, M. Shiga, Y. Nakamura. J. Magn. Magn. Mater. **70**, 1–3, 134 (1987).
- [33] К. Тейлор, М. Дарби. Физика редкоземельных соединений. Мир, М. (1974). 374 с.
- [34] H. Tanaka, S. Takayama. J. Appl. Phys. **67**, 9, 5334 (1990).
- [35] Ю.В. Князев, Г.А. Болотин. ФММ **58**, 6, 1121 (1984).