

Ce:YIG 自旋-轨道耦合对磁光效应的影响*

杨杰慧 潘留占

(河南省洛阳师范专科学校物理系, 洛阳 471022)

徐 游

(南京大学物理系, 南京 210008)

(1999 年 5 月 22 日收到, 1999 年 6 月 27 日收到修改稿)

计算了 Ce:YIG 中 Ce^{3+} 离子自旋-轨道耦合对磁光效应的影响, 计算结果表明, Ce^{3+} 离子基态的自旋-轨道耦合对磁光效应有很大影响, Faraday 旋转与 λ_f (基态的自旋-轨道耦合系数与其正常值的比值) 不是线性关系, 在 λ_f 约为 0.3 时, Faraday 旋转有明显的峰值, 激发态的自旋-轨道耦合对磁光效应影响很小.

PACC: 7820L; 7520

1 引 言

近年来, 磁光效应的研究取得了较大的进展, 自旋-轨道耦合、塞曼效应、晶格参量等微观机理, 尤其是自旋-轨道耦合对磁光效应的影响, 文献中已有一些报道. Misemer^[1]对 MnBi 的理论分析, 主要结论是磁光系数与自旋-轨道耦合强度近似线性关系. Oppeneer 等^[2]在对 Ni 金属的研究中指出, Kerr 效应主要由自旋-轨道耦合所致, Kerr 旋转与自旋-轨道耦合强度成线性关系. Dionne 和 Aller^[3,4]指出, Bi:YIG 的强 Faraday 旋转是 Bi^{3+} 离子激发态自旋-轨道耦合使其激发态产生大的能级劈裂所致. 然而, 这些研究缺乏系统的理论计算, 自旋-轨道耦合在磁光效应中的作用还不清楚. 我们曾对 Pr:YIG 和 PrF₃ 作过系统的计算, 结果表明, Pr^{3+} 离子激发态的自旋-轨道耦合对磁光效应的影响很小, 而基态自旋-轨道耦合的影响却很大, 当基态自旋-轨道耦合系数约为正常值的 0.3 倍时, Faraday 旋转出现峰值^[5]. Ce:YIG 是一种性能优良的新型的磁光材料, 它是迄今最强磁光效应的材料, 我们以前的系统理论研究^[6,7]对实验现象作了很好地解释, 但其强磁光特性的微观机理还有待进一步研究. 系统研究 Ce:YIG 自旋-轨道耦合对强磁光效应的作用是不可少的, 不仅具有重要的理论意义, 而且具有重要的应用价值. 本文用量子理论系统计算了 Ce^{3+} 离子 4f 和

5d 自旋-轨道耦合对磁光效应的影响及其温度特性, 所得结论与 Pr:YIG^[5]一致.

2 计算理论

在 Ce:YIG 中, 作用于 Ce^{3+} 离子的微扰哈密顿量可写为

$$H = H_{so} + H_{cf} + H_{ch}, \quad (1)$$

式中 H_{so} 是自旋-轨道耦合作用项, H_{cf} 是晶场, H_{ch} 是超交换作用项, 根据作用的强弱程度, 首先求解久期方程

$$\| J J_z | H_{so} + H_{cf} | J' J'_z - E_c \delta_{J J'} \delta_{J_z J'_z} \| = 0 \quad (2)$$

得到各种情况下 $H_{so} + H_{cf}$ 引起的 Ce^{3+} 离子 4f 和 5d 能级劈裂和所属的波函数, 进而求解久期方程

$$\| \phi_i | H_{so} + H_{cf} + H_{ch} | \phi_j - E_g \delta_{ij} \| = 0 \quad (3)$$

得到最终的能级和波函数, 式中 $\phi_i | H_{so} + H_{cf} | \phi_i$ 和 $|\phi_i\rangle$ 是由 (2) 式得到的本征能级和所属本征波函数. 根据分子场近似, 超交换作用可表示为^[8]

$$H_{ch} = 2\mu_B H_O S_Z, \quad (4)$$

其中 H_O 是两个 YIG 分子自发磁化的分子场, 可写为

$$H_O = n(1 + \gamma T) M_{YIG}, \quad (5)$$

式中 M_{YIG} 是两个 YIG 分子自发磁化的磁矩^[9].

Ce^{3+} 离子 4f 和 5d 之间由电偶极跃迁产生的

* 国家自然科学基金(批准号:19674023)和河南省自然科学基金(批准号:984052000)资助的课题.

Faraday 旋转为^[10]

$$\theta_F = \frac{N\pi(n^2 + 2)^2}{9cn\hbar} \sum_{df} A_{df} \cdot \{ |d|V_-|f|^2 - |d|V_+|f|^2 \} \rho_f, \quad (6)$$

式中 N 为单位体积内 Ce^{3+} 离子数; n 为 YIG 晶体的平均折射率; A_{df} 是频率因子; $|f\rangle, |d\rangle$ 分别是 Ce^{3+} 离子 4f 和 5d 的波函数; $d|V_-|f\rangle, d|V_+|f\rangle$ 分别是左右圆偏振光激发的电偶极跃迁矩阵元; ρ_f 是 $|f\rangle$ 态的占有概率. 频率因子 A_{df} 可写为

$$A_{df} = \frac{\omega^2(\omega_{df}^2 - \omega^2 - \Gamma_{df}^2)}{(\omega_{df}^2 - \omega^2 + \Gamma_{df}^2)^2 + 4\omega^2\Gamma_{df}^2}. \quad (7)$$

(7) 式中 ω 为入射光的圆频率, $\hbar\omega_{df}$ 为 $|d\rangle$ 和 $|f\rangle$ 态的能级差, $\hbar\Gamma_{df}$ 为谱线半宽度, 在远离共振峰处, 频率因子可化为

$$A_{df} = \frac{\omega^2}{\omega_{df}^2 - \omega^2}. \quad (8)$$

占有概率为

$$\rho_f = \frac{e^{-E_f/kT}}{\sum_f e^{-E_f/kT}}. \quad (9)$$

3 计算结果与讨论

为计算方便, 4f 和 5d 的自旋-轨道耦合分别写为 $\lambda_f \xi_f \mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$ 和 $\lambda_d \xi_d \mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$ 的形式, ξ_f 和 ξ_d 分别为 4f 和 5d 自旋-轨道耦合系数的正常值, λ_f 和 λ_d 在 0—4 之间取适当值. 为便于比较, 计算中所用参量全部取自文献 [6, 7].

在磁光效应的理论研究中, 晶场能级和波函数是非常重要的, 不仅决定磁光的主要性能, 而且决定磁光谱的主要特征. 在 λ_f 和 λ_d 分别取不同值时, 由 (2) 式求得相应的晶场能级和波函数, 表 1 列出了 4f 态的计算结果. $\lambda_f = 1$ 时的计算结果与文献 [7] 完全相同.

表 1 Ce^{3+} 离子 4f 态的晶场能级 (cm^{-1})

λ_f	能 级*						
0	-1307.18	-1098.93	-746.45	-551.14	-468.92	1456.02	2716.61
0.1	-1327.82	-1106.51	-725.29	-612.28	-406.45	1456.21	2722.15
0.3	-1483.34	-1117.01	-823.51	-578.74	-220.90	1459.03	2764.48
0.5	-1705.93	-1154.73	-1010.05	-411.35	-30.48	1470.16	2842.40
1	-2320.97	-1655.09	-1235.84	47.35	448.49	1574.11	3141.95
2	-3593.68	-2878.08	-2012.48	998.28	1409.80	2131.73	3944.44
4	-6161.74	-5407.04	-4266.85	2921.64	3336.89	3811.82	5765.27

* 表中能级都具有二重简并性.

在 $\lambda_d = 1$ 条件下, 由 (6) 式分别计算了 λ_f 取不同值时室温下的磁光谱, 计算结果表明, λ_f 不改变磁光谱的特征, 但对磁光谱的绝对值有很大影响, 图 1 给出了 λ_f 分别为 0.1, 0.3 和 1 时的计算结果, 其中 $\lambda_f = 1$ 的计算结果与文献 [6, 7] 完全相同. 在 $\lambda_f = 1$ 条件下, λ_d 取不同值时的磁光谱计算结果几乎没有变化, 为了使图清晰可辨, 在图 1 中仅给出了 $\lambda_d = 1$ 和 $\lambda_d = 0$ 时的计算结果. 由图 1 可以看出, 当 $\lambda_f = 0.1$ 时, 谱线强度虽小于 $\lambda_f = 1$ 的强度, 但已达到出人意料的程度, 当 $\lambda_f = 0.3$ 时, 谱线强度远远大于 $\lambda_f = 1$ 的强度, 这个结果更是出人意料的.

为了弄清 Faraday 旋转随 λ_f 和 λ_d 的变化规律及其温度特性, 在入射光波长为 $\lambda = 633 \text{ nm}$, 温度分别为 294, 150 和 50 K 条件下, 当 $\lambda_d = 1$ 时, 计算得到 θ_F 与 λ_f 的关系曲线, 当 $\lambda_f = 1$ 时, 计算得到 θ_F 与 λ_d 的关系曲线, 计算结果分别如图 2 和图 3 所

示. 由图 2 可见, θ_F 与 λ_f 并非线性关系, λ_f 约在 0.3

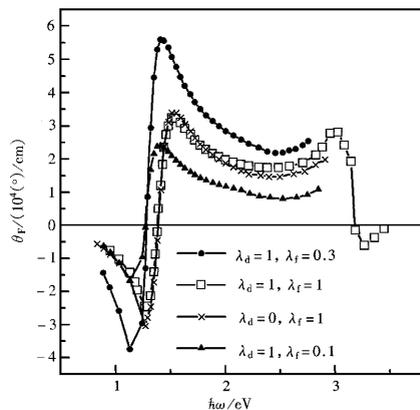


图 1 $Ce:YIG$ 室温下的磁光谱计算结果

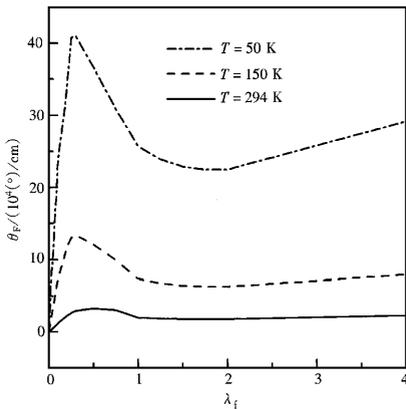


图2 波长为 633 nm Ce:YIG 的 Faraday 旋转与基态 λ_f 的关系($\lambda_d=1$)

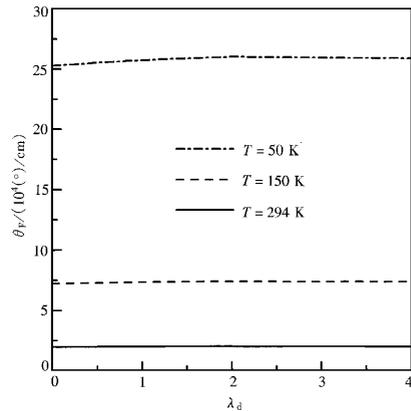


图3 波长为 633 nm Ce:YIG 的 Faraday 旋转与激发态 λ_d 的关系($\lambda_f=1$)

处导致 θ_F 出现明显的峰值,随温度降低 θ_F 的峰值更加尖锐.图 3 的计算结果表明,激发态的自旋-轨道耦合对磁光效应几乎没有影响.

由表 1 可以看出,晶场能级的劈裂随 λ_f 的增大而增大,如果单从能级劈裂去推测,就会得到磁光效应随基态自旋-轨道耦合的增强而增强的结论.事实上,自旋-轨道耦合对波函数的影响至关重要,计算表明,自旋-轨道耦合对波函数的影响主要表现在对矩阵元 $\phi_i |S_z| \phi_i$ 和 $\phi_i |S_z| \phi_j$ 的影响上,其中 $\phi_i |S_z| \phi_i$ 的绝对值随自旋-轨道耦合强度增大而减小,当 λ_f 分别为 0 和 1 时,对应的 $\phi_i |S_z| \phi_i$ 值分别为 -0.5 和 -0.1705 ,由(4)式可知,超交换作用随自旋-轨道耦合强度增强而减弱,从而使基态能级劈裂减小.在较低晶场能级的波函数之间, $\phi_i |S_z| \phi_j$ 的绝对值也随自旋-轨道耦合强度增大而减小,使基态波函数中各晶场波函数的相互混合减弱,在同一对 $|f\rangle$ 与 $|d\rangle$ 之间,使左、右圆偏振光激发的两个电偶极跃迁矩阵元绝对值差值减小.由此

可见,自旋-轨道耦合对波函数的影响能导致磁光效应减弱.Ce:YIG 和 Pr:YIG 都在 λ_f 大约为 0.3 时 Faraday 旋转出现峰值的原因,有待进一步研究.

4 结 论

本文用量子理论系统计算了 Ce:YIG 晶体的自旋-轨道耦合在磁光效应中的作用,主要结论如下:1) Ce:YIG 中 Ce^{3+} 离子基态自旋-轨道耦合对磁光效应作用很大,但 Faraday 旋转与 λ_f 不是线性关系,在 λ_f 约为 0.3 时, Faraday 旋转出现较强的峰值.这个结论与文献 [1,2] 不同.2) Ce^{3+} 离子激发态自旋-轨道耦合虽然对激发态的能级和波函数有很大影响,但对磁光效应几乎没有作用,当 λ_d 在 0—4 之间变化时, Faraday 旋转几乎没有变化,即使令 $\lambda_d = 0$ 时, Faraday 旋转也没有多大变化.这个结论与文献 [3,4] 完全不同.以上两个结论与 Pr:YIG 晶体的结论^[5]一致.

- [1] D. K. Misemer, *J. Magn. Magn. Mater.*, **72** (1988) 267.
 [2] P. M. Oppeneer, J. Sticht, T. Maurer, J. Kubler, *Z. Phys.*, **B88** (1992) 309.
 [3] G. F. Dionne, G. Allen, *J. Appl. Phys.*, **73** (1993) 6127.
 [4] G. F. Dionne, G. Allen, *J. Appl. Phys.*, **75** (1994) 6372.

- [5] J. H. Yang, Y. Xu, M. Guillot, *J. Phys.: Condens. Matter*, **11** (1999) 3299.
 [6] J. H. Yang, G. Y. Zhang, Y. Xu, *Chinese Science Bulletin*, **38** (1993), 1860 [in Chinese] 杨杰慧、张国营、徐游, *科学通报*, **38** (1993), 1860.

- [7] Y. Xu , J. H. Yang , X. J. Zhang , *Phys. Rev.* , **B50**(1994) , 13428.
- [8] L. Néel , *Ann. Phys.* , **Paris** **3**(1948) , 127.
- [9] L. R. Gonano , E. Hunt , H. Meyer , *Phys. Rev.* , **156**(1967) , 521.
- [10] W. A. Crossley , E. W. Cooper , J. L. Page , R. P. van Staple , *Phys. Rev.* , **181**(1969) , 896.

EFFECT OF SPIN-ORBIT INTERACTION STRENGTH ON THE FARADAY ROTATION IN Ce-SUBSTITUTED YTTRIUM GARNET*

YANG JIE-HUI PAN LIU-ZHAN

(*Department of Physics , Luoyang Teachers College , Luoyang 471022 , China*)

XU YOU

(*Department of Physics , Nanjing University , Nanjing 210008 , China*)

(Received 22 May 1999 ; revised manuscript received 27 June 1999)

ABSTRACT

The effect of the spin-orbit interaction of both the ground and excited configurations on the Faraday rotation of Ce-substituted yttrium garnet has been calculated. It is found that the influence of spin-orbit coupling strength of the ground configuration on the Faraday rotation is large ; however , the Faraday rotation does not scale linearly with the spin-orbit coupling. It varies in a complex way as λ (the ratio of real value to the normal one of the spin-orbit coefficient in ground state) changes and reaches a maximum when λ_f is about 0.3. It is surprising that the influence of spin-orbit coupling strength of the excited configuration on the Faraday rotation is very small.

PACC : 7820L ; 7520

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19674023) and the Natural Science Foundation of Henan Province , China (Grant No. 984052000).