

掺铋钇铁石榴石薄膜材料磁光性能的计算机辅助设计*

韦江维 何华辉

(华中理工大学固体电子学系 武汉 430074)

摘 要

从介电张量表达式出发, 利用相应模型对微观表达式进行简化, 得到了法拉第旋转角和光吸收系数的计算公式. 进一步建立了描述 Bi-YIG 磁光性能的理论模型和参数数据库, 在此基础上实现了 Bi-YIG 磁光性能的计算机辅助设计, 其结果与实验符合得较好.

关键词 Bi-YIG 薄膜材料, 磁光性能, 计算机辅助设计

分类号 O 436, O 484

1 引言

目前, 人们对掺铋钇铁石榴石 (Bi-YIG) 单晶磁光薄膜材料的研究, 仍然采用传统“炒菜”方法, 显然, 这种研究方法带有很大的偶然性和盲目性. 虽然法拉第旋转谱和吸收谱的理论计算已有一些文献报道, 但在这些工作中, 有些计算的理论模型过于简单, 他们^[1,2]假定激发态的自旋轨道劈裂能 Δ 很小, 而忽略了 Δ 的二次以上的量 (没有考虑到由于 Bi 的掺入对 Δ 的影响); 有的也只是在定性基础上半定量计算^[3,4]; 有的仅仅是为了解释某一具体的实验结果和微观机理而进行的拟合计算^[5]. 本文的目的就是在这些作者的研究工作基础上, 从材料设计角度出发, 尝试利用计算机对 Bi-YIG 材料的磁光性能进行辅助设计.

2 理论

2.1 法拉第旋转角的计算公式

到目前为止, 关于磁光效应的微观理论都是采用以下关系式^[6]

$$\varepsilon_1 = \frac{2\pi N e^2}{m} \sum_{ab} \frac{\beta_a(f_{ab}^+ - f_{ab}^-)}{\omega_{ab}} \cdot \frac{\Gamma_{ab}(\omega_{ab}^2 + \omega^2 + \Gamma_{ab}^2) - i\omega(\Gamma_{ab}^2 + \omega^2 - \omega_{ab}^2)}{(\omega_{ab}^2 - \omega^2 + \Gamma_{ab}^2)^2 + 4\omega^2\Gamma_{ab}^2} \quad (1)$$

式中: m 为电子的质量, e 为电子的电荷, n 为离子浓度, β_a 是电子处于基态 a 的概率, $f_{ab}^\pm = (2\pi m \omega_{ab}/h) |\int \psi_a^*(x \pm iy) \psi_b dv|^2$ 分别为右、左圆偏振光的振子强度, ω 为入射光的频率. 法拉第旋转角 θ_F 为

$$\theta_F = (\omega/2cn) \text{Im}(\varepsilon_1) \quad (2)$$

* 1997-04-14 收到初稿, 05-05 收到修改稿
国家教委博士点基金资助项目 (9348709)

对于铁磁性材料, 由于自旋简并而产生的超交换场很强, 从而阻碍了塞曼劈裂, 使基态变成自旋单态^[7], 因此 Bi-YIG 的法拉第效应的主要来源为激发态由于自旋轨道相互作用劈裂 2Δ 而导致的抗磁型跃迁^[8], 于是

$$\theta_F = -\frac{\pi N e^2 \omega^2}{m c n} \cdot f \cdot \left(\frac{\omega^2 - (\omega_0 - \Delta)^2 + \Gamma^2}{(\omega_0 - \Delta) \{[(\omega_0 - \Delta)^2 + \Gamma^2 - \omega^2]^2 + 4\omega^2 \Gamma^2\}} - \frac{\omega^2 - (\omega_0 + \Delta)^2 + \Gamma^2}{(\omega_0 + \Delta) \{[(\omega_0 + \Delta)^2 + \Gamma^2 - \omega^2]^2 + 4\omega^2 \Gamma^2\}} \right) \quad (3)$$

对纯 YIG, 用 Δ_1 表示激发态的自旋轨道劈裂能, (3) 式可写成

$$\theta_F = A \sum_j N_j \sum_i F_1(f_i(j), \Gamma_i(j), \omega, \omega_{0i}(j), \Delta_{1i}(j)), A = -\pi e^2 / (c n m) \quad (4)$$

其中 N_j 为单位体积中 j 次晶格位跃迁中心数. 对 Bi-YIG, 由于 Bi 的掺入使激发态的自旋轨道劈裂增大, 设增大后的自旋轨道劈裂能用 Δ_2 表示, 则 (3) 式变成

$$\theta_F = A \sum_j N_j \sum_i F_2(F_i(j), \Gamma_i(j), \omega, \omega_{0i}(j), \Delta_{2i}(j)) \quad (5)$$

其中 N_j 为单位体积中 j 次晶格位杂化轨道的数目. 设 Bi 的含量为 x (分子式为 $Y_{3-x}Bi_xFe_5O_{12}$), 则 $N_j = 16x/a^3$, a 为 Bi-YIG 的晶格常数.

2.2 吸收系数的计算公式

YIG 的吸收系数 α 为^[9]

$$\alpha = \frac{2\pi}{\lambda n} \varepsilon''_{11} = \frac{\omega}{c n} \varepsilon''_{11} \quad (6)$$

$$\varepsilon''_{11} = \frac{4\pi N e^2}{m} \sum_{gn} \frac{\rho_g^{(0)} f_{gn}^x 2\omega \Gamma_{gn}}{(\omega_{gn}^2 - \omega^2 + \Gamma_{gn}^2)^2 + 4\omega^2 \Gamma_{gn}^2} \quad (7)$$

式中: c : 光速, ω : 入射光角频率, ε''_{11} : 介电张量的虚部, N : 单位体积的吸收中心数, e : 电子电荷, m : 电子质量, Γ_{gn} : 跃迁线宽, f_{gn} : 振子强度, $\rho_g^{(0)}$: 电子处于态 (g) 的概率.

对 Bi-YIG, 用 Δ 表示自旋轨道劈裂能, 则吸收系数为:

$$\text{抗磁型跃迁} \quad \alpha = \frac{4\pi N e^2 \omega}{c n m} \left(\frac{2f\omega\Gamma}{[(\omega_0 - \Delta)^2 - \omega^2 + \Gamma^2]^2 + 4\omega^2 \Gamma^2} + \frac{2f\omega\Gamma}{[(\omega_0 + \Delta)^2 - \omega^2 + \Gamma^2]^2 + 4\omega^2 \Gamma^2} \right) \quad (8)$$

$$\text{顺磁型跃迁} \quad \alpha = \frac{4\pi N e^2 \omega}{c n m} \frac{2f\omega\Gamma}{(\omega_0^2 - \omega^2 + \Gamma^2)^2 + 4\omega^2 \Gamma^2} \quad (9)$$

可以看出, 计算中所涉及的参数很多, 除了入射光能量 ω 是人为控制外, 其它参数的取值是由外延膜的成分、结构决定的. 另外, 在计算过程中, 不仅要考虑顺磁型、抗磁型跃

迁的贡献, 而且还要考虑不同的次晶格内所有跃迁的贡献. 基于以上原因, 目前在这方面所进行的计算只能是一些简单的计算, 而且效率也很低.

3 程序设计及有关计算结果

根据目前对 Bi-YIG 单晶薄膜材料磁光特性研究特点, 程序功能设计如下: (1) 给定 Bi 浓度, 计算法拉第旋转角; (2) 给定法拉第旋转角, 预测 Bi-YIG 中 Bi 的含量; (3) 法拉第旋转谱的拟合计算; (4) 法拉第旋转角随 Bi 浓度变化曲线的拟合计算; (5) 吸收谱的拟合计算; (6) 吸收系数随 Bi 浓度变化曲线的拟合计算; (7) 磁光优值的辅助设计. 另外, 系统还设有与该材料领域有关的知识查询功能, 如查询国内外一些典型实验 (包括实验工艺、测试结果等); 以及一个由经验、实验数据组成的数据库, 为各计算模块提供所需要的参数, 例如跃迁能 ω_0 、线宽 Γ 、自旋轨道劈裂能 Δ 和振子强度 f 等.

为了检验以上的理论公式 (模型) 和程序设计的正确性, 我们给出功能模块 (3) 的计算结果 (如图 1 中的实线所示) 和功能模块 (5) 的计算结果 (如图 2 中的实线所示), 并分别给出相应的实验曲线 (如图 1、2 中的带圆圈的实线所示).

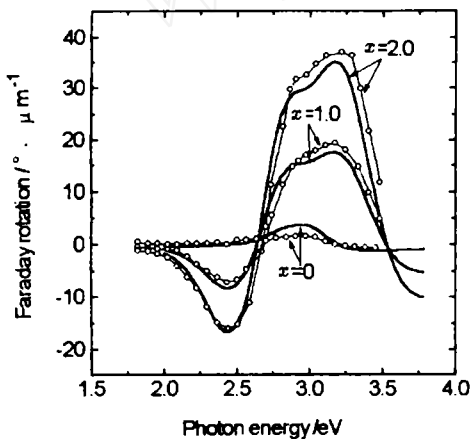


图 1 $Y_{3-x}Bi_xFe_5O_{12}$ 的法拉第旋转谱

Fig.1 Faraday rotation spectra of

$Y_{3-x}Bi_xFe_5O_{12}$

Solid curve: calculated value, line+circle: experimental value

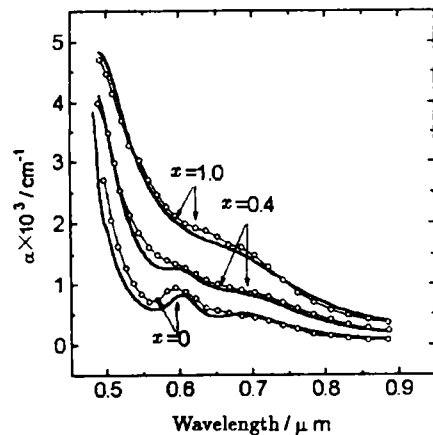


图 2 $Y_{3-x}Bi_xFe_5O_{12}$ 的吸收谱

Fig.2 Optical absorption spectra of

$Y_{3-x}Bi_xFe_5O_{12}$

Solid curve: calculated value, Line+circle: experimental value

在计算法拉第旋转谱和吸收谱时, 分别利用了表 1、2 中的参数. 在计算吸收谱时, 对抗磁型跃迁, 当 $x=0$ 时, Δ 分别取 0.008 和 0.08eV, 当 $x \neq 0$ 时, Δ 分别取 0.010 和 0.18eV. 结果表明, 理论计算与实验结果相比符合很好, 这有力支持了关于 Bi 的浓度与跃迁中心数之间的定量描述的理论^[5], 也说明了我们建立的 Bi-YIG 磁光特性理论模型已基本能描述实际情况; 在此基础上实现计算机辅助设计也是可行的.

利用表 1、2 的数据, 我们对功能模块 (4) 和 (6) 也分别进行了计算, 其结果都与相应的实验值吻合较好. 图 3 是对磁光优值进行拟合计算的结果, 从图 3 可以看出, $|\theta_F|/\alpha$ 随

表 1 法拉第旋转谱理论计算引用参数 [1,6~8]

Table 1 Parameters for calculating faraday rotation spectra

Type of transition	Transition energy ω_0/eV	Width Γ/eV	Splitting Δ_1/eV	Splitting Δ_2/eV	Oscillator strength f
$t_{2\mu} \rightarrow t_{2g}^*$	2.4	0.29	0.008	0.12	0.098
$t_{1\mu} \rightarrow t_{2g}^*$	2.6	0.29	0.008	0.12	0.098
$t_1 \rightarrow e$	3.3	0.28	0.10	0.22	0.28
$t_2 \rightarrow e$	2.8	0.28	0.10	0.22	0.28

表 2 吸收谱理论计算引用参数 [3,8~10]

Table 2 Parameters for calculating optical absorption spectra

Transition energy ω_0/eV	Width Γ/eV		Oscillator strength $f \times 10^{-3}$	
	$x=0$	$x=0.4$	$x=0$	$x=0.4$
1.7	0.18	0.18	0.28	0.28
1.8	0.10	0.18	0.13	0.13
2.05	0.09	0.12	0.42	0.42
2.46	0.18	0.18	1.2	2.0
2.56	0.04	0.12	1.0	1.6
2.8	0.025	0.25	1.1	1.4
3.0	0.12	0.28	1.3	1.3
3.3	0.12	0.28	1.2	1.5

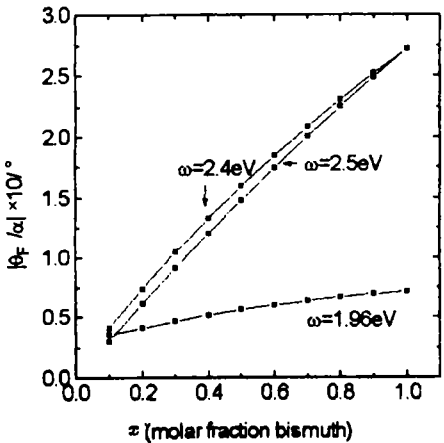


图 3 磁光优值 $|\theta_F|/\alpha$ 随 Bi 浓度变化曲线
Fig.3 Magneto-optical figure of merit- $|\theta_F|/\alpha$ changes with Bismuth content

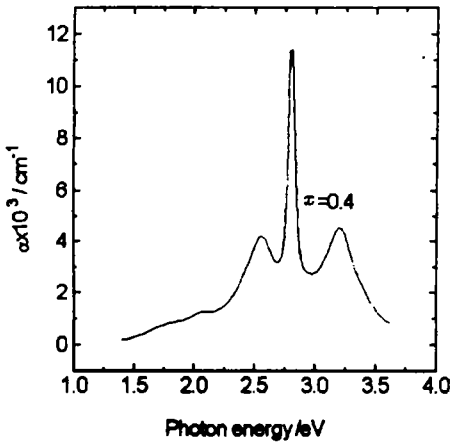


图 4 吸收系数随入射光能量变化曲线
Fig.4 Optical absorption coefficient changes with photon energy

着 Bi 浓度的增大, 而近似线性增大; 在一定的 Bi 浓度范围内, 对于给定的 x , $(|\theta_F|/\alpha)|_{\omega=2.5\text{eV}} < (|\theta_F|/\alpha)|_{\omega=2.4\text{eV}}$, 这说明对给定的 x , 磁光优值在一定的 ω 范围内随着 ω 的增大而增大, 超过某一临界 ω 值后, 将随 ω 的增大而减小. 这一现象可以从图 4 的 $\alpha \sim \omega$ 曲线 (模块 (5) 的计算结果) 得到解释: 从图中可以看出, 钇铁石榴石具有特殊的光窗特性, 即在入射光能量从 2.35~3.5eV 范围内, 光吸收显著增大, 超过这个范围, 光吸收就急剧减少. 这一点与 Scott^[11] 得出的结论 (YIG 在 0.8~5 μm 波长范围内光吸收最小) 是一致的. 整个吸

收谱由一主吸收峰和两个次吸收峰组成, 很显然, 在吸收峰的两侧 $|\theta_F|/\alpha$ 随 ω 的变化情况是不一样的.

4 结论

首先, 利用计算机对 Bi-YIG 薄膜材料磁光性能进行辅助设计, 能较好地完成由于计算过程中所涉及的参数和跃迁类型的迭代次数太多而手工很难完成的设计工作. 其次, 利用本系统还可以进行各种其它方面的拟合计算, 如给定实验值 x 、 ω 、 θ_F , 可以计算出 ω_0 、 Γ 、 Δ 、 f 跃迁中心数和杂化轨道数目中的任意一个参数 (以作为参数数据库的数据来源). 最后, 对磁光优值的辅助设计, 使我们能够更好地了解 Bi-YIG 薄膜材料的磁光特性, 从而选择合适的材料参数和工作波长, 最大限度地降低器件的插入损耗. 为研制 Bi-YIG 磁光薄膜材料提供了依据.

参 考 文 献

- 1 Matsumoto K, Sasaki S. *IEEE Trans. Magn.*, 1992, **28** (5): 2985-2987
- 2 Simsa Z, Gall H Le, Simeova J, et al. *IEEE Trans. Magn.*, 1984, **MAG-20** (5): 1001-1003
- 3 Scott G B, Lacklison D E, Page J L. *Phys. Rev.*, 1974, **B10** (3): 971-986
- 4 张 颖, 欧阳嘉, 苏 钧等, 功能材料, 1994, **25** (4): 296-299
- 5 胡华安, 何华辉. 河北师范大学学报 (自然科学版), 1995, **19**(增刊): 16-20
- 6 Kahn F J, Pershan P S, Remeika J P. *Phys. Rev.*, 1969, **186** (3): 891-918
- 7 Dionne G F, Allen G A. *J. Appl. Phys.*, 1993, **73** (10): 6127-6129
- 8 Wittekoek S, Popma T JA, Robertson J M, et al. *Phys. Rev.*, 1975, **B12** (7): 2777-2788
- 9 Paoletti A. Proceedings of the International School of Physics, Course LXX, Italian Physical Society, 1977, amsterdam: North-holland Publishing company
- 10 Hansen P, Witter K, Toksdof W. *J. Phys. Rev.*, 1983, **B27** (11): 6608-6625
- 11 Scott G B, Lacklison D E. *Phys. Rev.*, 1975, **B12** (7): 2562-2571

Computer Aided Design of Magneto optic Properties for Bi-YIG Film Materials

WEI Jiang-Wei HE Hua-Hui

(Department of Solid State Electronics, Huazhong University of Science and Technology
Wuhan 430074 China)

Abstract

Starting with the expressions of dielectric tensor, and using appropriate models to simplify these microscopic expressions, the calculated formulas of the Faraday rotation (θ_F) and the optic absorption coefficient (α) were obtained. The theoretic model of Bi-YIG magneto optic properties and the parametric data-base were established. On the basis of above works, the system of computer aided design of Bi-YIG magneto optic properties was developed, and the results were in good agreement with the experiment.

Key words Bi-YIG film materials, magneto optic properties, computer aided design