

УДК 548 : 537.621

© 1990

## ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ И ПОГЛОЩЕНИЙ СВЕТА В ФЕРРОМАГНИТНОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ $\text{CdCr}_2\text{S}_4$

В. А. Гавричков, М. Ш. Ерухимов, С. Г. Овчинников

Вычислен вклад оптических переходов с переносом заряда в край поглощения соединения  $\text{CdCr}_2\text{S}_4$ . Установлены основные изменения в плотности состояний в соединении  $\text{CdCr}_2\text{X}_4$  ( $\text{X}=\text{Se}, \text{S}$ ) при замене Se на S. Голубой сдвиг края  $\sim 0.05$  эВ в работе получается кажущимся, т. е. имеет место только при величине поглощения больше некоторого  $K_0$ .

Для описания физических свойств магнитных полупроводников в [1] предложена многоэлектронная модель, обобщающая периодическую модель Андерсона с учетом магнитных конфигураций  $d^2$  ( ${}^3T_1$ ),  $d^3$  ( ${}^4A_2$ ),  $d^4$  ( ${}^5E$ ,  ${}^3T_1$ ) ионов хрома и  $sd$ -обменного взаимодействия.

В настоящей работе на основе такой модели вычисляются спектр поглощения, его температурная зависимость, а также плотность состояний в ферромагнитном полупроводнике  $\text{CdG}_2\text{S}_4$ .

Существующие работы по изучению оптических свойств  $\text{CdCr}_2\text{S}_4$  свидетельствуют о том, что частота края поглощения в этом соединении близка к частоте внутренних переходов  $\text{Cr}^{3+}$ :  ${}^4A_2 \rightarrow {}^2T_1$ ,  ${}^2E$ ,  ${}^4T_2$ . С этим, в частности, связывают наличие голубого сдвига края поглощения в  $\text{CdCr}_2\text{S}_4$  [2]. Соединения же аналогии  $\text{CdCr}_2\text{Se}_4$  и  $\text{HgCr}_2\text{Se}_4$ , где край поглощения образуют оптические переходы с переносом заряда, обладают красным сдвигом края с понижением температуры. Однако однозначно идентифицировать все оптические переходы на краю поглощения в соединении  $\text{CdCr}_2\text{S}_4$  не удается [2]. Для выяснения роли оптических переходов с переносом заряда в существовании голубого сдвига в этом соединении мы рассчитали методом, изложенным в [1], одночастичную плотность состояний, спектр поглощения и его температурную зависимость. Из сопоставления с данными [2] по спектру поглощения определили параметры модели.

Как следует из результатов расчета, замена Se на более компактный и электроотрицательный ион S приводит к возрастанию величины кристаллического поля с инверсией  ${}^3T_1$  и  ${}^5E$  термов иона  $\text{Cr}^{2+}$ , что обусловлено увеличением роли ионной связи. Соответствующие параметры  $\Omega_\alpha = -0.9$  эВ,  $\Omega_\gamma > \Omega_\alpha$ ,  $\Omega_\beta = -0.9$  эВ, где  $\Omega_i$  ( $i = \alpha, \beta, \gamma$ ) —  $d$ -уровни, связанные с термами  ${}^3T_1$  ( $\text{Cr}^{2+}$ ),  ${}^3T_1$  ( $\text{Cr}^{4+}$ ),  ${}^5E$  ( $\text{Cr}^{2+}$ ) [1]. При увеличении разности электроотрицательностей катиона и аниона возрастает величина щели  $E_g$  между широкими зонами проводимости и валентной до 2.2 эВ за счет понижения потолка широкой валентной зоны по отношению к узким  $d$ -подобным зонам  $\Omega_i$  (рис. 1). Вычисленная спектральная зависимость коэффициента поглощения показана на рис. 2. Купол  $A$  на краю поглощения, возникающий в дополнение к внутриионным переходам, аналогичен по своей природе  $B$ -пику на 2.2 эВ в спектре  $\text{CdCr}_2\text{Se}_4$  [1]. Голубой сдвиг в данной работе (0.05 эВ) получается кажущимся, т. е. имеет место только при величине коэффициента поглощения больше некоторого  $K_0$ . В результате инверсии  ${}^5E$  и  ${}^3T_1$  термов и увеличения  $E_g$  в оптическом переходе, соответствующем краю поглощения, участвуют только узкие  $d$ -

подобные состояния зон  $\Omega_\alpha$  и  $\Omega_\beta$ . С понижением температуры плотности  $d$ -состояний перераспределяются по противоположным спиновым подзонам и сила осциллятора перехода падает. Таким образом, рассчитанный сдвиг края в  $\text{CdCr}_2\text{S}_4$  не связан с  $sd$ -обменным взаимодействием, которое

здесь мало  $|J_c| \sim |J_b| \leq 0.1$  эВ, а происходит от многоэлектронной природы зон, участвующих в соответствующем оптическом переходе.

Результаты расчета согласуются также с выводами работы [2] о наличии на частоте 1.8 эВ неидентифицированных переходов с переносом заряда.

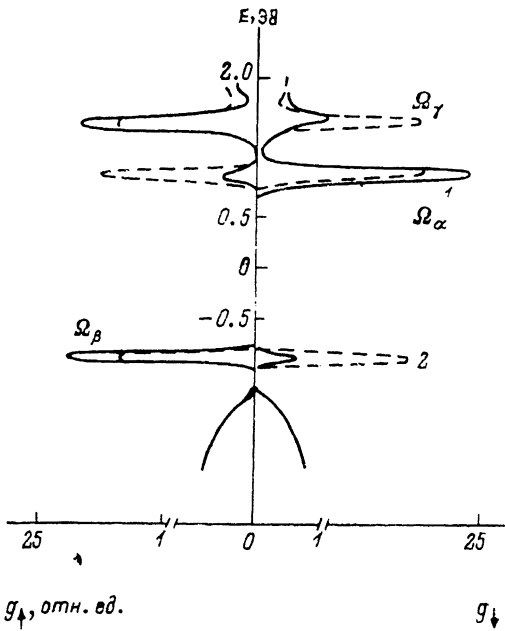


Рис. 1. Вычисленная плотность состояний соединения  $\text{CdCr}_2\text{S}_4$  для  $T=4.2$  (1) и 300 К (2).

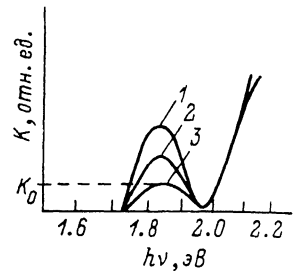


Рис. 2. Вычисленный спектр поглощения в соединении  $\text{CdCr}_2\text{S}_4$  при  $T=300$  (1), 78 (2) и 4.2 К (3).

Уменьшение  $sd$ -обменных интегралов  $J_c$  и  $J_b$ , а также параметра гибридизации  $V_c \sim 0.1$  эВ при замене Se на S может быть связано с уменьшением размера иона. Это, видимо, сказывается и на величине эффективного сверхобменного взаимодействия  $\text{Cr}-\text{S}-\text{Cr}$ , что приводит к более низкой температуре Кюри в соединении  $\text{CdCr}_2\text{S}_4$ .

#### Список литературы

- [1] Гавричков В. А., Ерухимов М. Ш., Овчинников С. Г., Эдельман И. С. // ЖЭТФ. 1986. Т. 90. № 4. С. 1275—1287.  
 [2] Berger S. B., Ekstrom Z. // Phys. Rev. Lett. 1969. V. 23. N 36. P. 1499—1503.

Институт физики им. Л. В. Киренского  
 СО АН СССР  
 Красноярск

Поступило в Редакцию  
 6 февраля 1990 г.