

Спиральные магнитные структуры в кубических перовскитах

© С.М. Дунаевский

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова,
НИЦ „Курчатовский институт“,
Гатчина, Россия

E-mail: dunaevsk@mail.pnpi.spb.ru

Детально рассматриваются одномерные спиральные структуры в случае конечного хундовского взаимодействия. В рамках метода сильной связи получены аналитические выражения для электронного спектра носителей в простейших одномерных и трехмерных спиральных структурах на простой кубической решетке, которая моделирует подрешетку марганца в кристаллической структуре перовскита. Показано, что в данном подходе удастся качественно объяснить возникновение антиферромагнитной A -структуры в манганите LaMnO_3 .

1. Известно, что в зависимости от химического состава и степени легирования оксиды переходных элементов с кристаллической структурой перовскита (манганиты, кобальтиты и др.) могут иметь различные типы магнитного упорядочения. Наряду с ферромагнитными и простыми антиферромагнитными (АФ) структурами типа G , A и C , в этих соединениях возникают и более сложные магнитные структуры. Наиболее известными примерами такого рода являются структуры типа CE [1], E [2], а также ферримагнитная H -фаза [3], наблюдаемая в сильных магнитных полях. Все упомянутые выше магнитные фазы являются коллинеарными. На эксперименте, однако, в нелегированных манганитах кроме коллинеарных наблюдаются и спиральные магнитные структуры, которые допускают возникновение спонтанного электрического момента. Заметим, что неколлинеарные магнитные структуры наблюдаются не только в манганитах TbMnO_3 и HoMnO_3 , но и в кубических перовскитах железа (ферратах) SrFeO_3 и BaFeO_3 . Настоящая работа посвящена детальному изучению простейших спиральных структур в кубической подрешетке марганца в случае конечного хундовского взаимодействия.

2. В большинстве перовскитов магнитная структура образована t_{2g} -электронами, которые считаются локализованными. Для диагонализации взаимодействия между e_g - и t_{2g} -электронами на каждом атоме марганца i вводится локальная система координат с осью Z_i вдоль локального спина \mathbf{S}_i и используются хорошо известные правила преобразования компонент спинора при вращении локальной системы координат. В качестве модельного гамильтониана, описывающего свойства оксидов со структурой перовскита, используется стандартный модельный гамильтониан [4–6]

$$H = H_{DE} + H_{AF}. \quad (1)$$

Гамильтониан двойного обмена для вырожденного e_g -уровня марганца имеет вид

$$H_{DE} = - \sum_{(i,j)\sigma\sigma'}^{\alpha\beta} t_{ij}^{\alpha\beta} \{ d_{i\alpha\sigma}^\dagger [(U^+(\theta_i, \varphi_i)U(\theta_j, \varphi_j)]_{\sigma\sigma'} \times d_{j\beta\sigma'} + H.c. \} - J_H S \sum_{i\alpha} (d_{i\alpha\uparrow}^\dagger d_{i\alpha\uparrow} - d_{i\alpha\downarrow}^\dagger d_{i\alpha\downarrow}) \quad (\sigma, \sigma' = \uparrow, \downarrow). \quad (2)$$

Здесь $d_{i\alpha\sigma}^\dagger$ и $d_{i\alpha\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения e_g -электрона в состоянии $\alpha(\beta)$ на узле i со спином, направленным либо вдоль, либо против локального спина t_{2g} -электронов S_i , который считается классическим ($|S_i| = |S_j| = S = 3/2$); J_H — интеграл хундовского обмена e_g - и t_{2g} -электронов; $t_{ij}^{\alpha\beta}$ — эффективный интеграл перескока e_g -электронов между локальными компонентами спиноров ближайших ионов марганца с номерами i и j . Состояние $\alpha(\beta)$ на узле i представляет собой орбитальное состояние e_g -электрона, которое в свою очередь является линейной комбинацией базисных орбиталей $|1\rangle \sim z^2$, $|2\rangle \sim x^2 - y^2$. Гамильтониан Гейзенберга:

$$H_{AF} = J_S \sum_{(i,j)} S_i \cdot S_j \quad (3)$$

описывает антиферромагнитный обмен между локальными спинами S_i и S_j соседних ионов, J_S — обменный параметр Гейзенберга. Преобразование компонент спинора

$$U(\theta_i, \varphi_i) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_i}{2} e^{i\varphi_i/2} & \sin \frac{\theta_i}{2} e^{-i\varphi_i/2} \\ -\sin \frac{\theta_i}{2} e^{i\varphi_i/2} & \cos \frac{\theta_i}{2} e^{-i\varphi_i/2} \end{pmatrix} \quad (4)$$

возникает в результате вращения локальной системы координат на каждом из атомов марганца, которое сопровождает любую трансляцию на вектор прямой решетки. При вращениях вокруг одной оси трансляционная инвариантность решетки сохраняется (см. обзор [7]), что позволяет использовать теорему Блоха для построения волновой функции и расчета спектра $E(\mathbf{k})$ неколлинеарных магнитных структур.

Основным результатом преобразования (4) оказалось появление недиагональных по спиновым индексам матричных элементов гамильтониана между ближайшими соседями.

3. Гамильтониан (2) сразу же позволяет получить явные выражения матрицы $H(k, q)$ неколлинеарных структур с вектором \mathbf{k} и волновым вектором спирали \mathbf{q} , если задать $\varphi_i(\mathbf{q})$ и $\theta_i(\mathbf{q})$. Для спирали, показанной на рис. 1, $\theta_i = \theta_j$, а $\varphi_j - \varphi_i = q(R_j - R_i)$. Для плоской циклоиды $\theta_j - \theta_i = q(R_j - R_i)$, $\varphi_j - \varphi_i = 0$. В работе [8]

приведены матрицы гамильтониана, соответствующие спиральным A и C структурам манганитов. Там же найден спектр одномерных магнитных спиралей, из которых образована магнитная структура TbMnO₃. В общем случае спектр одномерной спирали, изображенной на рис. 1, имеет вид

$$E_{1,2} \left(k, \frac{q}{2} \right) = -2t \cos(ka_0) \cos \frac{qa_0}{2} \pm \sqrt{4JS^t \cos \theta \sin(ka_0) \sin \left(\frac{qa_0}{2} \right) + J^2 S^2 + 4t^2 \sin^2(ka_0) \sin^2 \left(\frac{qa_0}{2} \right)}, \quad (5)$$

где a_0 — постоянная простой кубической решетки. На рис. 2 показана зависимость энергии магнитной спирали $E(k, q/2)$ в единицах t для значения $JS = 3t$ и $\cos \theta = 0$. Аналогичные зависимости могут быть построены для произвольных значений угла θ .

Очевидно, что образование магнитной спирали зависит от заполнения нижней зоны, минимум энергии которой лежит в точке $\mathbf{q} = 0, \mathbf{k} = 0$. Для полностью заполненной нижней зоны минимуму полной энергии соответствует „плоская“ спираль ($\cos \theta = 0, \Delta\varphi = \pi$). В случае, когда зона заполнена не целиком, минимуму полной энергии отвечает спираль с $q \neq \pi/2a_0$. Это возможно только в довольно узком интервале дырочного легирования, поэтому с ростом числа дырок в нижней зоне основным состоянием становится ферромагнитное состояние с $q = 0$. Если теперь учесть для незаполненной зоны (CaMnO₃) гейзенбер-

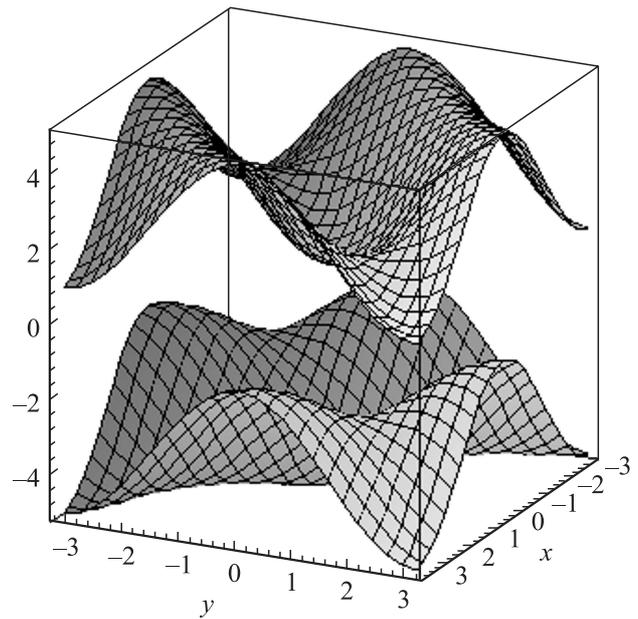


Рис. 2. Спектр магнитной спирали ($x = ka_0, y = qa_0/2, JS = 3t, t = 1$).

говский обмен между t_{2g} -электронами, то мы получим антиферромагнитную G-структуру. Для бесконечно большого хундовского взаимодействия между цепочками выражение (5) дает спектр спиральной C-структуры.

Выражение (5) легко обобщить и получить спектр трехмерной спиральной структуры, у которой все локальные магнитные моменты в плоскости XY параллельны

$$E_{1,2} \left(k, \frac{q}{2} \right) = -2t \left[\cos k_z \cos \frac{q}{2} + \cos k_x + \cos k_y \right] \pm 4t^2 \left\{ \left[\cos k_z \cos \frac{q}{2} + \cos k_x + \cos k_y \right]^2 - 4t^2 \left[\cos \left(k_z - \frac{q}{2} \right) \cos \left(k_z + \frac{q}{2} \right) + (\cos k_x + \cos k_y)^2 + 2 \cos k_z (\cos k_x + \cos k_y) \cos \frac{q}{2} \right] + 4JS^t \cos \theta \sin ka_0 \sin \frac{qa_0}{2} + J^2 S^2 \right\}^{1/2}. \quad (6)$$

В предельном случае $q = 0$ формула (6) переходит в формулу для спектра простой кубической решетки. Численные расчеты показывают, что эта энергия для полностью заполненной нижней зоны, как и в одномерном случае, минимальна при $q_0 = \pi/a_0, \Delta\varphi = \pi$. Таким образом, мы получаем A-структуру, наблюдаемую в LaMnO₃.

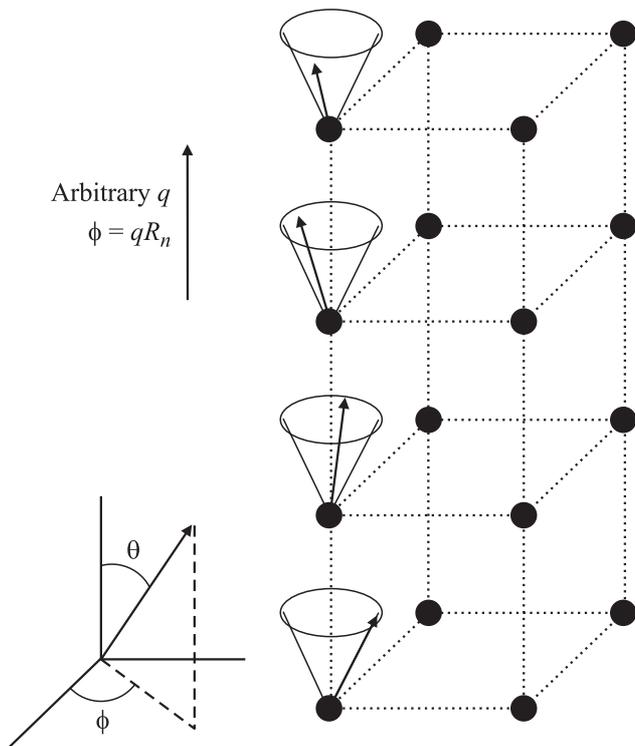


Рис. 1. Магнитная спираль вдоль оси Z.

Список литературы

- [1] E.O. Wollan, W.C. Koehler. Phys. Rev. **100**, 545 (1955).
- [2] T. Hotta, M. Moraghebi, A. Feiguin, A. Moreo, S. Yunoki, E. Dagotto. Phys. Rev. Lett. **90**, 247 203 (2003).
- [3] С.М. Дунаевский, В.В. Дериглазов. ФТТ **46**, 495 (2004).
- [4] T. Mizokawa, A. Fujimori. Phys. Rev. B **56**, R493 (1997).
- [5] T. Hotta, A.L. Malvezzi, E. Dagotto. Phys. Rev. B **62**, 9432 (2000).
- [6] S.M. Dunaevsky, V.V. Deriglazov. Phys. Rev. B **71**, 094 414 (2005).
- [7] L.N. Sandratskii. Adv. Phys. **47**, 91 (1998).
- [8] С.М. Дунаевский. ФТТ **53**, 86 (2011).