

Электронная структура ступенчатых ферромагнитных цепочек и условия возникновения изоляторного состояния в манганитах

© С.М. Дунаевский, В.В. Дериглазов

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Российской академии наук,
188300 Гатчина, Ленинградская обл., Россия

E-mail: dunaevsk@pnpi.spb.ru

(Поступила в Редакцию 2 апреля 2007 г.

В окончательной редакции 30 мая 2007 г.)

Методом сильной связи в рамках гамильтониана двойного обмена с бесконечным внутриаомным хундовским взаимодействием выполнены расчеты спектра e_g электронов манганитов для различных магнитных структур, составленных из ферромагнитных ступенчатых (зигзагообразных) спиновых цепочек, содержащих от двух до восьми спинов в одномерной элементарной ячейке. Получены значения концентрации носителей x , при которых в антиферромагнитных структурах манганитов типа $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$, состоящих из рассмотренных цепочек, может возникнуть состояние „зонного“ изолятора. Кроме известных спектров цепочек (1×1) и (2×2) впервые получен спектр зигзагообразной цепочки (3×3) . Трехмерная элементарная ячейка, построенная из таких цепочек, содержит 24 атома марганца и качественно правильно описывает экспериментальную атомную и магнитную структуры манганита $\text{La}_{1/3}\text{Ca}_{2/3}\text{MnO}_3$.

PACS: 75.10.Pq, 75.47.Lx

1. Введение

Одним из замечательных свойств легированных манганитов со структурой перовскита $R_xA_{1-x}\text{MnO}_3$ ($R = \text{La}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}$; $A = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) является богатое разнообразие их магнитных структур. В зависимости от химического состава и степени легирования эти соединения могут либо находиться в ферромагнитном (ФМ) состоянии, либо иметь различные типы антиферромагнитного (АФ) порядка. Наряду с простыми АФ-структурами типов G , A и C могут возникать и более сложные, ступенчатые структуры. Наиболее известным примером такого рода является структура типа CE , обнаруженная в ряде манганитов при половинном легировании. Она была теоретически предсказана в работе [1] и впервые экспериментально обнаружена в $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ [2], а несколько позже — в $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ [3], $\text{Nd}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$ [4] и ряде других соединений. В структуре CE магнитные моменты ионов Mn образуют зигзагообразные ФМ-цепочки с взаимным АФ-упорядочением в плоскости. В перпендикулярном направлении ФМ-цепочки транслируются с АФ-чередованием спинов. Элементарная ячейка структуры CE содержит шестнадцать атомов марганца.

АФ-зигзагообразная структура, аналогичная структуре CE , но с несколько иным чередованием цепочек в перпендикулярном направлении, была выявлена также в манганите $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ [5].

В работах [6–8] в рамках модели двойного обмена были выполнены теоретические расчеты электронного спектра носителей $E(\mathbf{k})$ CE -структуры в приближении бесконечно большого хундовского взаимодействия между e_g - и t_{2g} -электронами, которое запрещает электронные перескоки между цепочками. Таким образом, задача расчета спектра трехмерной структуры сводит-

ся к задаче расчета спектра одномерной ступенчатой цепочки с четырьмя атомами в ее 1D-элементарной ячейке. Результаты расчетов показали, что манганиты с CE -структурой являются „зонными“ изоляторами, в которых две нижние зоны, где могут находиться два электрона, отделены от других зон энергетической щелью. В CE -структуре эти зоны полностью заполнены, а соединение является зонным изолятором. Выполненные в работе [9] аналогичные расчеты спектра одномерных ступенчатых цепочек с двумя атомами в одномерной элементарной ячейке позволили предсказать существование новой изоляторной АФ-структуры типа E , которая позднее была обнаружена экспериментально в HoMnO_3 [10].

Хотя механизм возникновения запрещенной зоны в спектре носителей у таких структур до конца не ясен, по-видимому, щель непременно должна появляться в структурах, состоящих из ступенчатых (зигзагообразных) ФМ-цепочек (таких, как CE и E). При определенных значениях концентрации носителей в манганитах типа $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ наличие запрещенных зон в спектре приводит к возникновению изоляторного состояния. Заметим, что в спектрах e_g -электронов трехмерных АФ-структур типов G , C , A и ФМ-структуры, а также прямых ФМ-цепочек щель отсутствует.

В данной работе методом сильной связи выполнены расчеты спектра e_g -электронов $E(\mathbf{k})$ и соответствующих плотностей состояний для различных ФМ-ступенчатых цепочек атомов марганца, содержащих от двух до восьми атомов в одномерной элементарной ячейке. В результате вычислений получены значения концентрации носителей, при которых в АФ-структурах, состоящих из рассмотренных цепочек, может возникнуть состояние „зонного“ изолятора.

2. Гамильтониан

В качестве эффективного гамильтониана в работе был использован гамильтониан модели двойного обмена [6–9], который для одномерных ФМ-цепочек локализованных спинов t_{2g} -электронов ионов марганца в приближении бесконечно большого хундовского взаимодействия сводится к гамильтониану метода сильной связи

$$H = \sum_{i\alpha\sigma} \varepsilon_{i\alpha} d_{i\alpha}^\dagger d_{i\alpha} + \sum_{ij\alpha\beta} t_{ij}^{\alpha\beta} d_{i\alpha}^\dagger d_{j\beta}. \quad (1)$$

Здесь индексы α и β нумеруют атомные e_g -орбитали, а индексы i и j — ионы марганца. Операторы $d_{i\alpha}^\dagger$ и $d_{j\alpha}$ представляют собой операторы рождения и уничтожения e_g -электрона в состоянии α на узле i со спином („вверх“), направленным вдоль локализованных спинов. Энергия атомной e_g -орбитали со спином „вверх“ была принята за начало отсчета $\varepsilon_{i\alpha} = 0$. Роль ионов кислорода, которые в цепочках расположены между ионами марганца, сводится к тому, что эффективные интегралы перескока между локальными компонентами e_g -спиноров ближайших ионов марганца $t_{ij}^{\alpha\beta}$ выражаются через интеграл перескока t между e_g -орбиталью марганца и p -орбиталью ближайшего иона кислорода (параметр Костера–Слэтера $V_{pd\sigma}$) во втором порядке теории возмущений [11]. Перескок электронов между АФ-упорядоченными цепочками в приближении бесконечно большого хундовского взаимодействия запрещен. В работе рассматривался случай вырожденного e_g -уровня, $\varepsilon_{i\alpha} = \varepsilon_{i\beta} = 0$, для которого получить щель в спектре наиболее сложно.

3. Электронный спектр ступенчатых ферромагнитных цепочек

Для простой квадратной решетки с расстоянием a_0 между соседними атомами все ступенчатые цепочки будем записывать в виде $(n1 \times m1 \times n2 \times m2 \times \dots)$, где $n1, n2, \dots$ — число шагов для первой, второй и т.д. ступенек вдоль оси X , а $m1, m2, \dots$ — вдоль оси Y .

3.1. Прямая ферромагнитная цепочка. Простейшим случаем является случай прямой ФМ-цепочки с периодом a_0 , для которой спектр e_g -электронов находится из решения секулярного уравнения второго порядка. Для орбитального базиса $|1\rangle = |x^2\rangle, |2\rangle = |y^2 - z^2\rangle$ на всех ионах марганца спектр имеет особенно простой вид:

$$E_1(k) = -2t \cos ka_0, \quad E_2(k) = 0, \\ -\pi/a_0 < k < \pi/a_0. \quad (2)$$

Здесь k — волновой вектор, направленный вдоль цепочки. Не представляет труда получить спектр прямой

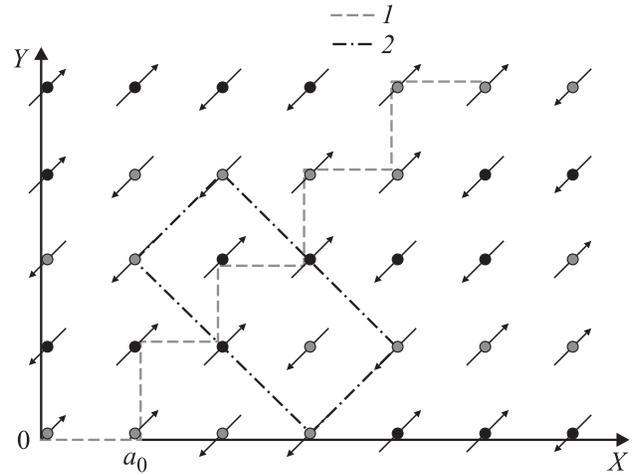


Рис. 1. Магнитная E -структура, которую можно построить из ступенчатых ферромагнитных цепочек (1×1) с двумя атомами в одномерной элементарной ячейке (1), и 2D-элементарная ячейка, содержащая четыре атома (2).

одноатомной цепочки для произвольного базиса $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$

$$\begin{pmatrix} |\alpha\rangle \\ |\beta\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta^o}{2} & \sin \frac{\theta^o}{2} \\ -\sin \frac{\theta^o}{2} & \cos \frac{\theta^o}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |z^2\rangle \\ |x^2 - y^2\rangle \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где θ^o — угол орбитального смешивания. Очевидно, что в случае вырожденного e_g -уровня вид спектра от выбора базиса не зависит. Две ветви спектра перекрываются, делая такую цепочку при наличии носителей металлом.

3.2. Двухатомная ступенчатая цепочка (1×1) . Простейшей ступенчатой цепочкой с расстоянием a_0 между атомами марганца является цепочка, в элементарной ячейке которой содержатся два атома. Если упорядочить эти ФМ-цепочки в пространстве антиферромагнитно относительно друг друга, то можно получить магнитную E -структуру, предсказанную впервые в [9] и изображенную на рис. 1. В стандартном базисе $|z^2\rangle, |x^2 - y^2\rangle$ матрица гамильтониана такой цепочки имеет вид

$$H^E = H^{1 \times 1} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & \frac{1}{2}(a+b) & -\frac{\sqrt{3}}{2}(a-b) \\ 0 & \varepsilon_2 & -\frac{\sqrt{3}}{2}(a-b) & \frac{3}{2}(a+b) \\ \frac{1}{2}(a^*+b^*) & -\frac{\sqrt{3}}{2}(a^*-b^*) & \varepsilon_1 & 0 \\ -\sqrt{3}(a^*-b^*) & \frac{\sqrt{3}}{2}(a^*+b^*) & 0 & \varepsilon_2 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где $a = t \exp(ik_x a_0), b = t \exp(-ik_y a_0), k_x = K \cos \alpha, k_y = k \sin \alpha, \alpha$ — угол между волновым вектором \mathbf{k} и осью x .

Соответствующее секулярное уравнение $\det ||H_{mn} - E\delta_{mn}|| = 0$ имеет вид

$$\begin{aligned} & (\varepsilon_1 - E)^2(\varepsilon_2 - E)^2 - \frac{3}{4}(\varepsilon_1 - E)(\varepsilon_2 - E) \\ & \times [1 - \cos(k_x + k_y)a_0]t^2 - \frac{1}{8}[1 + \cos(k_x + k_y)a_0] \\ & \times [9(\varepsilon_1 - E)^2 + (\varepsilon_2 - E)^2]t^2 + \frac{9}{16}t^4 = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

В вырожденном случае, когда $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$, уравнение (5) переходит в уравнение

$$E^4 - E^2t^2 \left(2 + \frac{\cos(k_x + k_y)a_0}{2} \right) + \frac{9}{16}t^4 = 0, \quad (6)$$

решения которого даются выражениями

$$\begin{aligned} E_1(k_1) &= -\frac{t}{2} \left(\cos k_1 a_0 + \sqrt{\cos^2 k_1 a_0 + 3} \right), \\ E_2(k_1) &= -\frac{t}{2} \left(\sqrt{\cos^2 k_1 a_0 + 3} - \cos k_1 a_0 \right), \\ E_3(k_1) &= +\frac{t}{2} \left(\sqrt{\cos^2 k_1 a_0 + 3} - \cos k_1 a_0 \right), \\ E_4(k_1) &= +\frac{t}{2} \left(\cos k_1 a_0 + \sqrt{\cos^2 k_1 a_0 + 3} \right). \end{aligned} \quad (7)$$

Впервые эти зависимости были приведены в [9]. Для удобства в (7) введен параметр k_1 : $k_1 = (k_x + k_y)/2$. Для цепочки (1×1) угол $\alpha = \pi/4$, $k_1 = k/\sqrt{2}$, $-\pi/\sqrt{2}a_0 < k < \pi/\sqrt{2}a_0$, $-\pi/2a_0 < k_1 < \pi/2a_0$. Две нижние зоны отделены от двух верхних зон щелью порядка t , поэтому в случае, когда на каждый атом Mn приходится по одному e_g -электрону (LaMnO_3), имеем зонный изолятор.

3.3. Цепочки, содержащие нечетное число атомов. Секулярное уравнение трехатомной цепочки (2×1) имеет вид

$$E^6 - 3E^4 + \frac{1}{2}E^3 \cos(2k_x + k_y)a_0 + \frac{3}{2}E^2 = 0. \quad (8)$$

Для цепочки (2×1) $k_x = k \times 2/\sqrt{5}$, $k_y = k \times 1/\sqrt{5}$, $-\pi/\sqrt{5}a_0 < k < \pi/\sqrt{5}a_0$. Цепочка является зонным изолятором для концентраций электронов $x = 1/3, 2/3, 1$. 2D-элементарная ячейка магнитной структуры, состоящей из подобных цепочек, содержит 24 атома. Магнитных структур с такой элементарной ячейкой в манганитах пока не обнаружено.

Не обнаружено и магнитных структур, состоящих из пятиатомных цепочек (3×2) , (4×1) и $(2 \times 1 \times 1 \times 1)$. Цепочка (4×1) является зонным изолятором для концентраций электронов $x = 1/5, 2/5, 3/5, 4/5, 1$. 2D-элементарная ячейка магнитной структуры, состоящей из подобных цепочек, содержит 40 атомов. Столько же атомов содержится и в 2D-элементарной ячейке магнитной структуры, составленной из цепочек (3×2) и $(2 \times 1 \times 1 \times 1)$. Семиатомные цепочки (6×1) , (5×2) ,

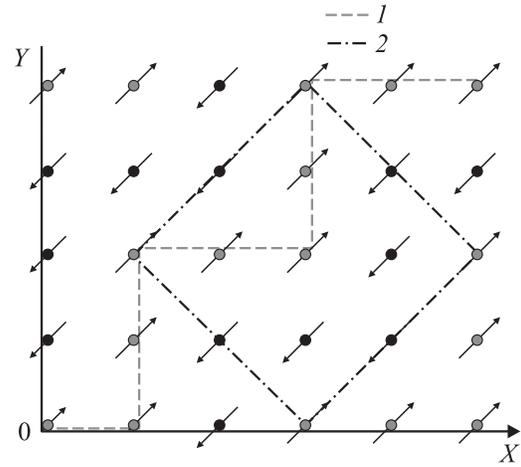


Рис. 2. Простая квадратная решетка с расстоянием a_0 между ближайшими соседями, на которой показана магнитная SE -структура, построенная из симметричных ступенчатых ферромагнитных цепочек, упорядоченных относительно друг друга антиферромагнитно (1), и 2D-элементарная ячейка, содержащая восемь атомов (2).

(4×3) , $(4 \times 1 \times 1 \times 1)$ и другие в работе подробно не рассматривались из-за очень большого размера 2D-ячейки.

3.4. Четырехатомные цепочки. Существует всего два вида ступенчатых цепочек с четырьмя атомами в элементарной ячейке (3×1) и (2×2) .

Наиболее интересной является симметричная цепочка (2×2) . Именно из таких цепочек строится магнитная SE -структура, показанная на рис. 2. Элементарная ячейка цепочки содержит четыре атома — два угловых („corner“), 1 и 3, и два мостиковых („bridge“), 2 и 4. Для базиса $|z^2\rangle$ и $|x^2 - y^2\rangle$ на атоме 1, $|x^2\rangle$ и $|y^2 - z^2\rangle$ на атоме 2, $|z^2\rangle$ и $|x^2 - y^2\rangle$ на атоме 3, $|y^2\rangle$ и $|z^2 - x^2\rangle$ на атоме 4 матрица гамильтониана имеет вид

$$H^{CE} = \begin{matrix} & |1\rangle_1 & |2\rangle_1 & |1\rangle_2 & |2\rangle_2 & |1\rangle_3 & |2\rangle_3 & |1\rangle_4 & |2\rangle_4 \\ \begin{matrix} |1\rangle_1 \\ |2\rangle_1 \\ |1\rangle_2 \\ |2\rangle_2 \\ |1\rangle_3 \\ |2\rangle_3 \\ |1\rangle_4 \\ |2\rangle_4 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{3}a & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}b & 0 \\ a^* & -\sqrt{3}a^* & 0 & 0 & a & -\sqrt{3}a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & b^* & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{3}a & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}b^* & 0 \\ b^* & \sqrt{3}b^* & 0 & 0 & b & \sqrt{3}b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix}. \quad (9)$$

Четыре собственных значения энергии нулевые, $E_5 = E_6 = E_7 = E_8 = 0$. Остальные ветви спектра находятся из уравнения

$$E^4 - 4t^2E^2 + \frac{1}{2}(7 - \cos k_1 a_0)t^4 = 0. \quad (10)$$

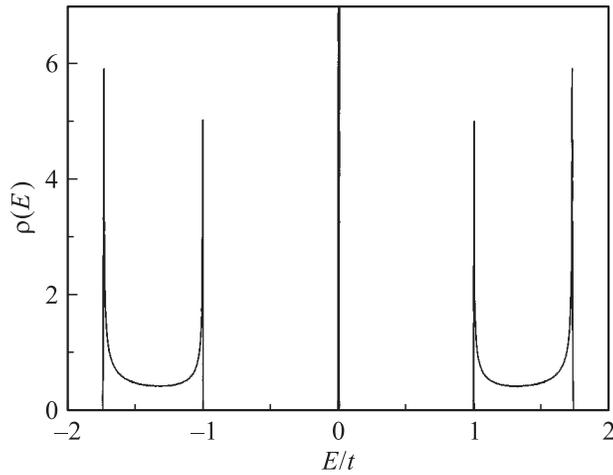


Рис. 3. Плотность состояний CE -структуры (цепочки 2×2). Нижняя и верхняя зоны двукратно вырождены. Центральный пик отвечает четырехкратно вырожденному уровню $E_5 = E_6 = E_7 = E_8 = 0$.

Здесь $k_1 = k_x + k_y$, $\alpha = \pi/4$, $k_1 = \sqrt{2}k$, $-\pi/2\sqrt{2}a_0 < k < \pi/2\sqrt{2}a_0$, $-\pi/2a_0 < k_1 < \pi/2a_0$.

$$\begin{aligned} E_1(k_1) &= -t\sqrt{2 + \cos k_1 a_0}, \\ E_2(k_1) &= -t\sqrt{2 - \cos k_1 a_0}, \\ E_3(k_1) &= +t\sqrt{2 - \cos k_1 a_0}, \end{aligned}$$

$$E_4(k_1) = +t\sqrt{2 + \cos k_1 a_0}, \quad -\pi/2 \leq k_1 a_0 \leq \pi/2. \quad (11)$$

Впервые решения $E_2(k)$ и $E_3(k)$ были получены в [6] для двухатомной модели CE -цепочки. Из (11) легко аналитически получить (только для одномерных структур) плотность состояний $\rho(E)$:

$$\rho(E) = \frac{4tE}{\pi\sqrt{t^4 - (E^2 - 2t^2)^2}}, \quad -\sqrt{3}t \leq E \leq -t. \quad (12)$$

Таким образом, как следует из рис. 3, CE -структура при половинном заполнении ($x = 0.5$) является зонным изолятором, а полная энергия двух нижних заполненных зон $E_{\text{tot}} = \int E\rho(E)dE$ равна $-2.78t$.

Для несимметричной цепочки (3×1) нижняя зона расщепляется, а энергия, приходящаяся на один атом марганца при том же заполнении зон, что и у CE -структуры, уменьшается по абсолютной величине до значения $-0.66t$. Кроме того, 2D-элементарная ячейка магнитной структуры, состоящей из подобных цепочек, содержит шестнадцать атомов, а 3D-ячейка — 32 атома. Экспериментально магнитных структур для концентрации носителей $x = 0.5$, соответствующих цепочкам (3×1), пока не обнаружено.

Необходимо отметить, что цепочка (3×1) является зонным изолятором также для концентраций электронов $x = 1/4, 2/4, 3/4$ и 1.

Для дальнейшего удобно ввести матрицы взаимодействия: A (B) между угловыми и мостиковыми атомами в

направлении x (y), A_1 (B_1) между двумя мостиковыми атомами в направлении x (y), A_2 (B_2) между двумя угловыми атомами в направлении x (y).

$$\begin{aligned} A &= \begin{pmatrix} a & 0 \\ -\sqrt{3}a & 0 \end{pmatrix}, & B &= \begin{pmatrix} b & 0 \\ \sqrt{3}b & 0 \end{pmatrix}, \\ A_1 &= \begin{pmatrix} -2a & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, & B_1 &= \begin{pmatrix} -2b & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ A_2 &= \begin{pmatrix} -\frac{a}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}a \\ \frac{\sqrt{3}}{2}a & -\frac{3}{2}a \end{pmatrix}, & B_2 &= \begin{pmatrix} -\frac{b}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}b \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}b & -\frac{3}{2}b \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (13)$$

С помощью этих матриц легко записать матрицу гамильтониана вырожденной модели многоступенчатой цепочки вида $(n_1 \times m_1 \times n_2 \times m_2 \times \dots)$. Так, в новых обозначениях матрица гамильтониана CE -цепочки (2×2) принимает вид

$$H^{CE} = H^{2 \times 2} = \begin{pmatrix} 0 & A & 0 & B \\ \tilde{A}^* & 0 & \tilde{A} & 0 \\ 0 & A^* & 0 & B^* \\ \tilde{B}^* & 0 & B & 0 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

3.5. Шестиатомные цепочки (3×3), ($2 \times 1 \times 1 \times 2$), (5×1), ($3 \times 1 \times 1 \times 1$) и (4×2). 2D-элементарная ячейка магнитных структур, соответствующих цепочкам (3×3), ($2 \times 1 \times 1 \times 2$) и (5×1) содержит двенадцать атомов. Ранее спектр таких структур не рассчитывался.

На рис. 4 показана магнитная структура, которую можно построить из ступенчатых ФМ-цепочек (3×3)

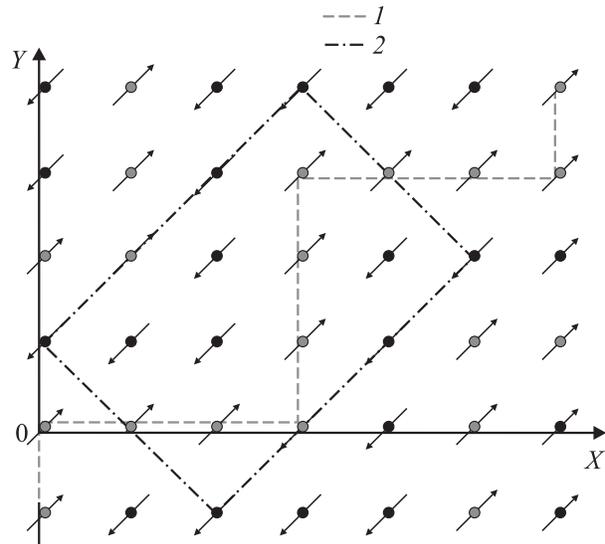


Рис. 4. Магнитная структура, которую можно построить из ступенчатых ферромагнитных цепочек (3×3) с шестью атомами в одномерной элементарной ячейке (1), и 2D-элементарная ячейка, содержащая двенадцать атомов (2). Именно такая магнитная 2D-элементарная ячейка наблюдалась в нейтронных исследованиях $\text{La}_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_3$.

с шестью атомами в одномерной элементарной ячейке. Штрихпунктиром показана 2D-элементарная ячейка, содержащая двенадцать атомов. Размер соответствующей 3D-элементарной ячейки должен быть равен $(3a \times b \times 2c)$, $a = c = \sqrt{2}a_0$, $b = 2a_0$. Матрица гамильтониана цепочки (3×3) имеет вид

$$H^{3 \times 3} = \begin{pmatrix} 0 & A & 0 & 0 & 0 & B \\ \tilde{A}^* & 0 & A_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{A}_1^* & 0 & \tilde{A} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A^* & 0 & B^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tilde{B} & 0 & B_1^* \\ \tilde{B}^* & 0 & 0 & 0 & \tilde{B}_1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Из секулярного уравнения $E^{12} - 5E^{10} + 10.5E^8 - E^6[10 + \cos(k_1 a_0)/2] + 9E^4/16 = 0$ численно находится спектр $E(k)$, а на его основе — плотность состояний $\rho(E)$, которая представлена на рис. 5. В (15) $k_1 = 3(k_x + k_y)$, $\alpha = \pi/4$, $-\pi/3\sqrt{2}a_0 < k < \pi/3\sqrt{2}a_0$. Две нижние и две верхние зоны двукратно вырождены, поэтому магнитная структура, построенная из цепочек (3×3) , будет диэлектриком при $x = 1/3$ и $2/3$. Именно такая (скошенная) магнитная 2D (3D)-элементарная ячейка размером $(3a \times b \times 2c)$, $a = c = \sqrt{2}a_0$, $b = 2a_0$, состоящая из цепочек (3×3) , наблюдалась в нейтронных исследованиях диэлектрика $\text{La}_{1/3}\text{Ca}_{2/3}\text{MnO}_3$ [12].

Магнитные структуры, отвечающие цепочкам $(2 \times 1 \times 1 \times 2)$ и (5×1) и представленные на рис. 6 и 7, являются зонными диэлектриками для значений $x = 1/6, 2/6, 3/6, 4/6, 5/6$ и 1. 2D-элементарная ячейка цепочки (5×1) подобна элементарной ячейке магнитной структуры (3×3) .

2D-элементарная ячейка менее симметричных магнитных структур, соответствующих цепочкам (4×2) и $(3 \times 1 \times 1 \times 1)$, содержит 24 атома. В данной работе их спектр не вычислялся.

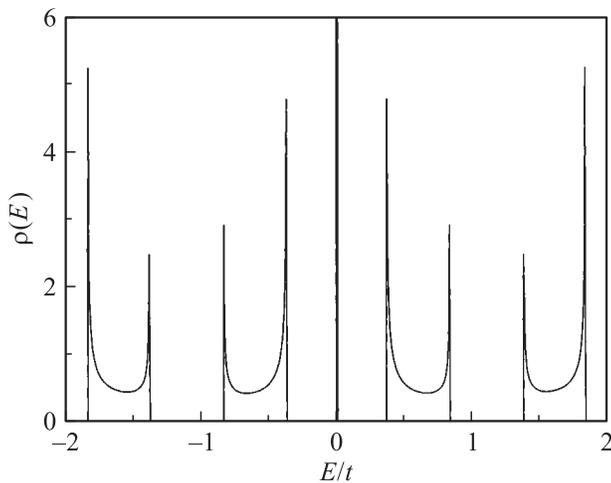


Рис. 5. Плотность состояний цепочки (3×3) .

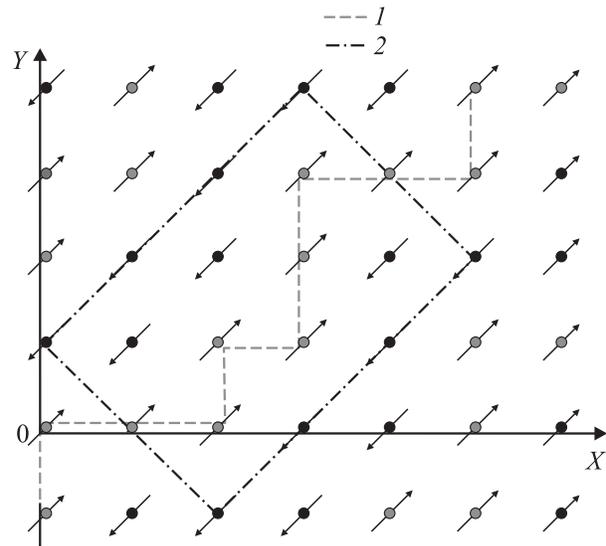


Рис. 6. Магнитная структура, которую можно построить из ступенчатых ферромагнитных цепочек $(2 \times 1 \times 1 \times 2)$ с шестью атомами в одномерной элементарной ячейке (1), и 2D-элементарная ячейка, содержащая двенадцать атомов (2).

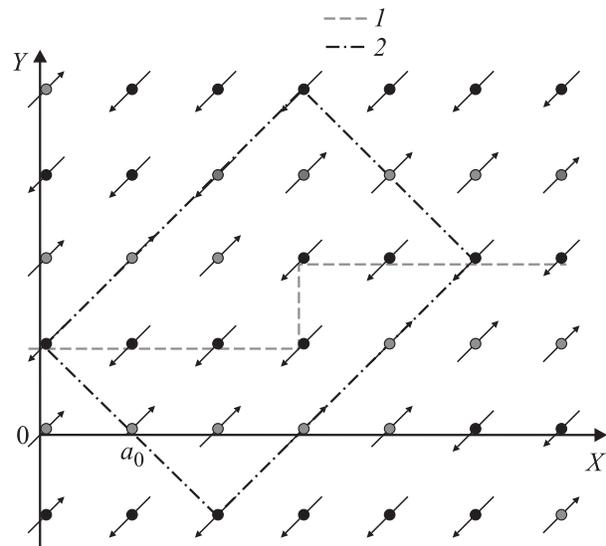


Рис. 7. Магнитная структура, которую можно построить из ступенчатых ферромагнитных цепочек (5×1) с шестью атомами в одномерной элементарной ячейке (1), и 2D-элементарная ячейка, содержащая двенадцать атомов (2).

3.6. Восьмиатомные цепочки. Несмотря на чисто академический интерес, нами были рассмотрены и все типы цепочек, содержащих восемь атомов в элементарной ячейке. Это цепочки (4×4) , $(3 \times 1 \times 1 \times 3)$, (7×1) , $(2 \times 1 \times 1 \times 2 \times 1 \times 1)$, $(1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 2 \times 2)$, (5×3) и (6×2) . 2D-элементарная ячейка магнитных структур, соответствующих цепочкам (4×4) , $(3 \times 1 \times 1 \times 3)$ и (7×1) , содержит шестнадцать атомов.

Матрица гамильтониана цепочки (4×4), показанной на рис. 8, имеет вид, аналогичный матрице цепочки (3×3):

$$H^{4 \times 4} = \begin{pmatrix} 0 & A & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & B \\ \tilde{A}^* & 0 & A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{A}_1^* A & 0 & A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{A}_1^* & 0 & \tilde{A} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A^* & 0 & B^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{B} & 0 & B_1^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{B}_1 & 0 & B_1^* \\ \tilde{B}^* & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{B}_1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Подобным образом легко пострить матрицы любого размера для цепочек ($m \times m$), ($m_1 \times n_1 \times m_2 \times n_2$) и др.

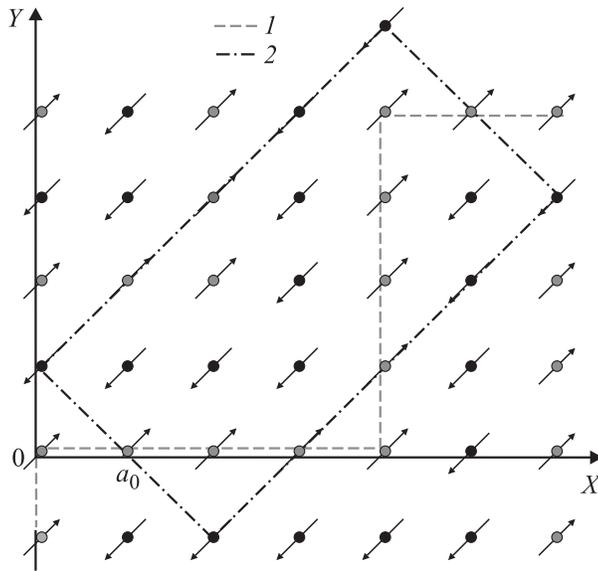


Рис. 8. Магнитная структура, которую можно пострить из ступенчатых ферромагнитных цепочек (4×4) с восемью атомами в одномерной элементарной ячейке (1), и 2D-элементарная ячейка, содержащая шестнадцать атомов (2).

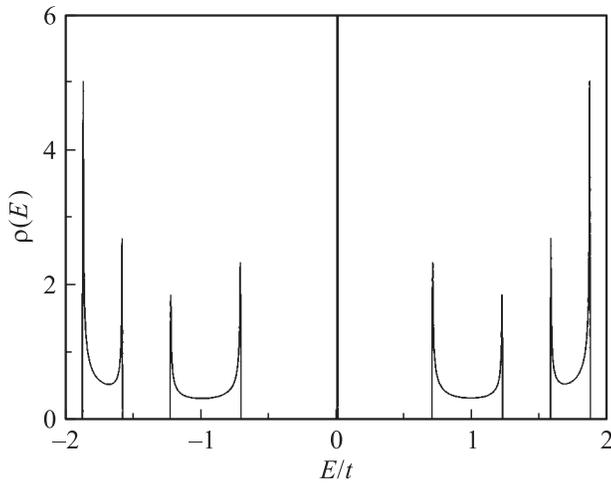


Рис. 9. Плотность состояний цепочки (4×4).

Плотность состояний цепочки (4×4) показана на рис. 9. Она является зонным изолятором для концентраций электронов $x = 2/8, 4/8, 5/8, 6/8, 7/8$ и 1. Цепочки (7×1), ($1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 2 \times 2$) и ($3 \times 1 \times 1 \times 3$) являются зонными изоляторами для концентраций электронов $x = 1/8, 2/8, 3/8, 4/8, 5/8, 6/8, 7/8$ и 1, а цепочка ($2 \times 1 \times 1 \times 2 \times 1 \times 1$) — для концентраций электронов $x = 2/8, 4/8, 6/8, 7/8$ и 1. Энергия, приходящаяся на один атом, при $x = 0.5$ для цепочки (4×4) равна $-0.676t$, для цепочки (7×1) — $-0.669t$, для остальных цепочек — $-0.659t$. Все эти значения находятся выше кинетической энергии CE -структуры, равной $-0.69t$.

4. Заключение

В рамках модели двойного обмена представлена методика расчета электронного спектра ФМ-ступенчатых цепочек, который в приближении бесконечно большого внутриатомного хундовского взаимодействия соответствует спектру трехмерных АФ-структур. В результате рассмотрения различных ступенчатых (зигзагообразных) цепочек обнаружено, что в одномерном спектре e_g -электронов всегда возникает ряд запрещенных зон, которые при определенных значениях концентрации электронов x обеспечивают возникновение в соответствующих трехмерных АФ-структурах изоляторного состояния. Кроме известных спектров E - и CE -цепочек в работе впервые получен спектр зигзагообразной цепочки (3×3) с тремя ионами марганца в каждой ступеньке. Среди всех ступенчатых цепочек с шестью атомами в элементарной ячейке цепочка (3×3) при $x = 2/3$ обладает минимальной энергией, а соответствующая ей трехмерная 3D-элементарная ячейка, состоящая из 24 атомов, качественно правильно описывает экспериментальную магнитную структуру манганита $\text{La}_{1/3}\text{Ca}_{2/3}\text{MnO}_3$. Дальнейшее теоретическое уточнение магнитной структуры данного соединения может быть выполнено в рамках подхода, предложенного авторами в [13]. Анализ зависимости спектра от формы цепочек показал, что минимальной энергии отвечают наиболее симметричные цепочки типа (2×2), (3×3) и т.д., 3D-элементарные ячейки которых обладают минимальными размерами.

Список литературы

- [1] J. Goodenough. Phys. Rev. **100**, 564 (1955).
- [2] E.O. Wollan, W.C. Koehler. Phys. Rev. **100**, 545 (1955).
- [3] Y. Tomioka, A. Asamitsu, H. Kuwahara, Y. Moritomo. Phys. Rev. B **53**, R 1689 (1996).
- [4] H. Kawano, R. Kajimoto, H. Yoshizawa, Y. Tomioka, Y. Kuwahara, Y. Tokura. Phys. Rev. Lett. **78**, 4253 (1997).
- [5] B.J. Sternlieb, J.P. Hill, U.C. Wildgruber, G.M. Luke, B. Nachumi, Y. Moritomo, Y. Tokura. Phys. Rev. Lett. **76**, 2169 (1996).

- [6] I.V. Solovyev, K. Terakura. Phys. Rev. Lett. **83**, 2825 (1999).
- [7] J. van den Brink, G. Khaliullin, D. Khomskii. Phys. Rev. Lett. **83**, 5118 (1999).
- [8] S. Yunoki, T. Hotta, E. Dagotto. Phys. Rev. Lett. **84**, 3714 (2000).
- [9] T. Hotta, M. Moraghebi, A. Feiguin, A. Moreo, S. Yunoki, E. Dagotto. Phys. Rev. Lett. **90**, 247 203 (2003).
- [10] A. Munoz, M.T. Casais, J.A. Alonso, M.J. Martinez-Lope, J.L. Martinez, M.T. Fernandez-Diaz. Inorg. Chem. **40**, 1020 (2001).
- [11] S.M. Dunaevsky, V.V. Deriglazov. Phys. Rev. B **68**, 212 406 (2003).
- [12] P.G. Radaelli, D.E. Cox, L. Capogna, S-W. Cheong, M. Marezio. Phys. Rev. B **59**, 14 440 (1999).
- [13] С.М. Дунаевский, В.В. Дериглазов. ФТТ **46**, 495 (2004).