

# Влияние вырождения $d$ -уровня и эффекта Яна-Теллера на электронную структуру манганитов в приближении сильной связи

© С.М. Дунаевский

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Российской академии наук, 188350 Гатчина, Ленинградская обл., Россия

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

(Поступила в Редакцию 18 апреля 2001 г.)

В рамках метода сильной связи проведен расчет дисперсионных кривых  $E(\mathbf{k})$  носителей заряда в перовскитах типа  $\text{LaMnO}_3$  для основных типов скошенного антиферромагнитного упорядочения подрешетки Mn. Расчет спектра  $E(\mathbf{k})$  антиферромагнитных структур впервые выполнен с учетом вырождения  $e_g$ -уровня марганца и ян-теллеровских искажений кубической структуры перовскита, что потребовало диагонализации матриц гамильтониана восьмого порядка. Получены аналитические выражения для функции  $E(\mathbf{k})$  в отдельных точках и на отдельных линиях соответствующей зоны Бриллюэна. Выполненные расчеты показали, что в системе  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$  не может быть "электрон-дырочной" симметрии свойств.

Работа выполнена при поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований № 00-02-16729 и 00-02-81205 Бел2000-а.

Легированные манганиты  $\text{R}_{1-x}\text{L}_x\text{MnO}_3$  ( $\text{R} = \text{La}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}$ ;  $\text{L} = \text{Ca}, \text{Ba}, \text{Sr}$ ) в настоящее время являются объектами интенсивных экспериментальных и теоретических исследований, направленных на изучение их уникальных физических свойств (колоссальное магнитосопротивление, переход металл–изолятор, зарядовое упорядочение и пр.) [1]. Сейчас стало очевидным, что для правильного описания фазовых диаграмм и транспортных свойств манганитов необходимо наряду со спиновыми и зарядовыми степенями свободы учитывать и дополнительную степень свободы, связанную с двукратным орбитальным вырождением  $e_g$ -уровня марганца [2,3].

В основе объяснения аномалий электропроводности манганитов вблизи точки Кюри лежит модель "двойного обмена" (double-exchange — DE) Зинера–Андерсона–Хасегавы [4–6], с помощью которой вычисляются зонный спектр  $E(\mathbf{k})$  и кинетическая энергия носителей заряда различных магнитных фаз кристаллической структуры перовскита. В рамках DE-модели интеграл перескока  $t_{ij}$  между ионами марганца зависит от угла  $\theta$  между магнитными моментами ближайших ионов  $\text{Mn}^{4+}$  как  $t_{ij} = t \cos(\theta_{ij}/2)$ . Для вычисления спектра  $E(\mathbf{k})$  определенной магнитной структуры (в манганитах обычно рассматривается только подрешетка марганца) необходимо задать эти углы  $\theta_{ij}$  и решить соответствующее секулярное уравнение, порядок которого равен произведению числа атомных орбиталей на число неэквивалентных в магнитном отношении ионов марганца.

В настоящее время хорошо известен вид зонной структуры основных магнитных структур манганитов без учета орбитального вырождения (см. [7])  $e_g$ -уровня, а с учетом его двукратного вырождения — только для ферромагнитного (ФМ) состояния подрешетки марганца [8]. К сожалению, результаты, полученные для ФМ-случая, нередко используются [2,9] для расчета кинетической энергии носителей в антиферромагнитных (АФ) струк-

турах и построения фазовых диаграмм легированных манганитов. С точки зрения теории подобный метод расчета спектра не оправдан, поскольку он игнорирует увеличение числа неэквивалентных атомов (размера соответствующего секулярного уравнения) в элементарной ячейке при переходе от ФМ- к АФ-случаю. Поэтому для правильного теоретического анализа полной энергии, а также орбитального, зарядового и спинового упорядочения в рассматриваемых оксидах необходимо рассчитывать  $E(\mathbf{k})$  различных АФ-структур с учетом вырождения  $e_g$ -уровня, ян-теллеровских (ЯТ) искажений решетки и возможного зарядового упорядочения.

## 1. Метод расчета

Настоящая работа посвящена расчету спектра  $E(\mathbf{k})$  с учетом орбитального вырождения  $e_g$ -электронов в манганитах для различных типов магнитного упорядочения (скошенного антиферромагнитного) в системе. Как и в большинстве современных работ, предполагается, что спин носителя всегда ориентируется вдоль локального спина иона марганца, образованного тремя  $t_{2g}$ -электронами. Экспериментально установлено несколько основных типов магнитного упорядочения подрешетки марганца в перовскитах: **A** — АФ-упорядочение соседних ФМ-плоскостей (100), наблюдаемое в соединении  $\text{LaMnO}_3$  ( $\theta_{ij} = \theta_z = \pi$ ), **G** — АФ-упорядочение ближайших соседей ( $\text{CaMnO}_3$ ,  $\theta_{ij} = \pi$ ), **C** — АФ-упорядочение в плоскости (100) ( $\theta_{ij} = \theta_{xy} = \pi$ ), **F** — ФМ-упорядочение ( $\theta_{ij} = 0$ ). Для скошенного антиферромагнитного упорядочения угол  $\theta_{ij} \neq \pi$ . Элементарная ячейка перовскита для случаев **A**, **G** и **C** содержит два неэквивалентных атома марганца. В рамках метода сильной связи с учетом вырождения  $e_g$ -уровня для расчета спектра необходимо диагонализировать матрицу гамильтониана, построенную в базисе

восьми блоховских функций. Для случая когда оба угла  $\theta_{xy}$  и  $\theta_z$  одновременно отличны от нуля, блоховских комбинаций должно быть как минимум двенадцать. Понятно, что спектр АФ-структур (особенно **G**) нельзя моделировать спектром ФМ-состояния с двумя интегралами перескока, зависящими от  $\theta_{xy}$  и  $\theta_z$ , как это было сделано в [2].

В приближении бесконечно большого внутриатомного хундовского обмена, когда внутриатомная энергия много больше интеграла перескока  $JS \gg t$ , можно ограничиться рассмотрением матриц четвертого порядка и получить аналитические выражения дисперсионных кривых, однако в данной работе рассмотрен общий случай, когда  $JS$  сравним с  $t$  ( $JS \approx 3-5t$ ). В качестве гамильтониана системы рассматривается гамильтониан двойного обмена

$$H_{DE} = \sum_{i\alpha\sigma} \varepsilon_{i\alpha\sigma} d_{i\alpha\sigma}^+ d_{i\alpha\sigma} + \sum_{ij\alpha\beta\sigma'\sigma} t_{ij\alpha\beta}^{\sigma\sigma'} \left(\frac{\theta_{ij}}{2}\right) d_{i\alpha\sigma}^+ d_{j\beta\sigma'} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma}, \quad (1)$$

где

$$t_{ij\alpha\beta}^{\sigma\sigma'} \left(\frac{\theta_{ij}}{2}\right) = \begin{cases} t_{\alpha\beta} \cos\left(\frac{\theta_{ij}}{2}\right), & \sigma = \sigma', \\ \pm t_{\alpha\beta} \sin\left(\frac{\theta_{ij}}{2}\right), & \sigma \neq \sigma', \end{cases}$$

$i, j$  — индексы атомов,  $\alpha, \beta$  — атомные орбитали  $|z^2\rangle$  и  $|x^2 - y^2\rangle$ ,  $\varepsilon_{i\alpha\sigma}$  — энергия вырожденного  $d$ -уровня иона  $Mn^{3+}$  типа  $\alpha$  ( $\alpha = 1, 2$ ),  $\sigma$  — спиновый индекс,  $\theta_{ij}$  — угол между локальными магнитными моментами **S** ( $S = 3/2$ ) ближайших ионов  $Mn^{4+}$ ,  $t_{ij\alpha\beta}^{\sigma\sigma'}$  — интеграл перескока между вырожденными орбиталями ближайших соседей. Значения интеграла перескока зависят от направлений перескока в декартовой системе координат  $x, y$  и  $z$  и выражаются в виде матриц

$$t_{ij\alpha\beta} \equiv t_{ij}^{\alpha\beta} = -t \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{-\sqrt{3}}{4} \\ \frac{-\sqrt{3}}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix} \text{ вдоль оси } x, \\ -t \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{\sqrt{3}}{4} \\ \frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix} \text{ вдоль оси } y, \quad -t \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ вдоль оси } z, \quad (2)$$

где

$$\alpha, \beta = |1\rangle = |z^2\rangle, |2\rangle = |x^2 - y^2\rangle, \quad t = \frac{V_{pd\sigma}^2}{E_d - E_p}.$$

Матрицу гамильтониана скошенных антиферромагнитных структур удобно записать в виде

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_1(\mathbf{k}) & H_{12}(\mathbf{k}) \\ \hat{H}_{12}^*(\mathbf{k}) & H_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где матрицы  $H_1, H_2$  описывают взаимодействие между орбиталями одного типа, а матрица  $H_{12}$  — между вырожденными орбиталями разного типа. Явный вид матриц

$H_i$  для различных магнитных структур следует из формул, приведенных в работе автора [7]. Так, для структуры **G**-типа имеем

$$H_i(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} E'_{di} - JS & 0 & t_i(\mathbf{k}) \cos \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}) \sin \frac{\theta}{2} \\ 0 & E'_{di} + J(S+1) & -t_i(\mathbf{k}) \sin \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}) \cos \frac{\theta}{2} \\ t_i(\mathbf{k}) \cos \frac{\theta}{2} & -t_i(\mathbf{k}) \sin \frac{\theta}{2} & E'_{di} - JS & 0 \\ t_i(\mathbf{k}) \sin \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}) \cos \frac{\theta}{2} & 0 & E'_{di} + J(S+1) \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где  $t_1(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2}t(\cos k_x + \cos k_y) - 2t \cos k_z$ ,  $t_2(\mathbf{k}) = -\frac{3}{2}t \times (\cos k_x + \cos k_y)$ ,  $t = \frac{V_{pd\sigma}^2}{\Delta}$ ,  $\Delta = E_d - E_p$ .

Здесь  $E'_{di} = E_{di} + U \langle n_{-\sigma} \rangle$  — энергии  $e_g$ -уровней иона марганца,  $E_p$  — энергия  $p$ -уровня кислорода,  $t$  — эффективный интеграл перехода между орбиталями ближайших ионов марганца, записанный во втором порядке теории возмущений по интегралу перехода Костера–Слетера  $V_{pd\sigma}$  между  $e_g$ -орбиталью марганца и  $p$ -орбиталью ближайшего иона кислорода. Параметр  $t$  в манганитах положителен, так как в соответствии с результатами численных кластерных расчетов [10] уровень  $E_p$  лежит ниже уровней  $E_{di}$ . Поскольку вдоль оси  $z$  переход возможен лишь между орбиталями типа  $|z^2\rangle$ , матрица  $H_{12}(\mathbf{k})$ , зависит только от перпендикулярной составляющей волнового вектора  $\mathbf{k}_\perp$  и имеет вид

$$H_{12}(\mathbf{k}_\perp) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \cos \frac{\theta}{2} & t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \sin \frac{\theta}{2} \\ 0 & 0 & -t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \sin \frac{\theta}{2} & t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \cos \frac{\theta}{2} \\ t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \cos \frac{\theta}{2} & -t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \sin \frac{\theta}{2} & 0 & 0 \\ t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \sin \frac{\theta}{2} & t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \cos \frac{\theta}{2} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где

$$t_{12}(\mathbf{k}_\perp) = \frac{\sqrt{3}}{2} t (\cos k_x - \cos k_y).$$

Для структуры **A**-типа получаем

$$H_i(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \mathcal{E} - JS & 0 & t_i(\mathbf{k}_z) \cos \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}_z) \sin \frac{\theta}{2} \\ 0 & \mathcal{E} + J(S+1) & -t_i(\mathbf{k}_z) \sin \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}_z) \cos \frac{\theta}{2} \\ t_i(\mathbf{k}_z) \cos \frac{\theta}{2} & -t_i(\mathbf{k}_z) \sin \frac{\theta}{2} & \mathcal{E} - JS & 0 \\ t_i(\mathbf{k}_z) \sin \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}_z) \cos \frac{\theta}{2} & 0 & \mathcal{E} + J(S+1) \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где  $E'_{di} + t_i(\mathbf{k}_\perp) = \mathcal{E}$ ,  $t_1(k_z) = -2t \cos k_z$ ,  $t_2(k_z) \equiv 0$ ,  $t_1(\mathbf{k}_\perp) = -\frac{1}{2}t(\cos k_x + \cos k_y)$ ,  $t_2(\mathbf{k}_\perp) = -\frac{3}{2}t \times (\cos k_x + \cos k_y)$ .

Формулы (4)–(6) записаны в предположении, что индекс 1 соответствует  $d$ -орбитали типа  $|z^2\rangle$ , а индекс 2 — орбитали  $|x^2 - y^2\rangle$ . Из (6) следует, что  $H_2(\mathbf{k})$  для структуры **A**-типа имеет диагональный вид. Очевидно, что в этом случае и матрица  $H_{12}(\mathbf{k})$  будет иметь диагональный вид  $H_{mn}(\mathbf{k}_\perp) = t_{12}(\mathbf{k}_\perp) \delta_{mn}$  ( $m, n = 1-4$ ).

Для структуры С-типа имеем

$$H_i(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \bar{\mathcal{E}} - JS & 0 & t_i(\mathbf{k}_\perp) \cos \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}_\perp) \sin \frac{\theta}{2} \\ 0 & \bar{\mathcal{E}} + J(S+1) & -t_i(\mathbf{k}_\perp) \sin \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}_\perp) \cos \frac{\theta}{2} \\ t_i(\mathbf{k}_\perp) \cos \frac{\theta}{2} & -t_i(\mathbf{k}_\perp) \sin \frac{\theta}{2} & \bar{\mathcal{E}} - JS & 0 \\ t_i(\mathbf{k}_\perp) \sin \frac{\theta}{2} & t_i(\mathbf{k}_\perp) \cos \frac{\theta}{2} & 0 & \bar{\mathcal{E}} + J(S+1) \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где  $E'_{di} + t_i(\mathbf{k}_z) = \bar{\mathcal{E}}$ . Матрица  $H_{12}(\mathbf{k}) = H_{12}(\mathbf{k}_\perp)$  совпадает с аналогичной матрицей структуры G-типа.

## 2. Результаты и их обсуждение

На основе полученных выражений (3)–(7) были рассчитаны дисперсионные кривые для различных скошенных антиферромагнитных структур как без учета, так и с учетом статических ЯТ-искажений идеальной кубической структуры решетки перовскита. Эти искажения приводят к появлению различных значений интеграла переноса вдоль различных направлений и расщепляют уровни  $E_{d1}$  и  $E_{d2}$ . Зависимость интегралов переноса (параметра  $V_{pd\sigma}$ ) от расстояния, которая определялась по Харрисону [11], фактически не влияет на результаты расчета дисперсионных кривых. Наиболее важным результатом ЯТ-искажений является расщепление  $e_g$ -уровня. При достижении определенного критического значения этого расщепления в нижней вырожденной зоне магнитной структуры А-типа ( $\text{LaMnO}_3$ ) возникает диэлектрическая щель. Без учета ЯТ-эффекта вырождение  $e_g$ -уровня приводит к тому, что А-структура (даже без легирования) всегда является металлом, что противоречит многочисленным экспериментальным данным. Для G-структуры щель возникает при гораздо меньшем значении ЯТ-искажений. Для идеальных структур ( $\theta = \pi$ ) все зоны оказываются двукратно вырожденными. В этом случае для отдельных точек и направлений в зоне Бриллюэна (ЗБ) можно легко получить аналитические выражения дисперсионных кривых  $E(\mathbf{k})$ . В общем случае проще выполнить численную диагонализацию секулярного уравнения восьмого порядка для произвольных значений угла  $\theta$  и волнового вектора  $\mathbf{k}$  в ЗБ орторомбической решетки. Ввиду малости орторомбических искажений и учета одной лишь марганцевой подрешетки все расчеты проводились для ЗБ кубической решетки (в общепринятых обозначениях работы [8]).

При проведении численных расчетов удобно вычислять  $E(\mathbf{k})$  в единицах  $t$ . Конкретные значения этого параметра в  $\text{LaMnO}_3$  лежат в интервале от величины 0.1–0.15 eV [12], полученной в зонном формализме функционала плотности, до величины  $\approx 0.30$  eV [10], найденной в формализме функционала плотности для кластера  $[\text{La}_4\text{Mn}_2\text{O}_{11}]^{4-}$ . Расщепление  $e_g$ -уровня в кристаллическом поле на осно-

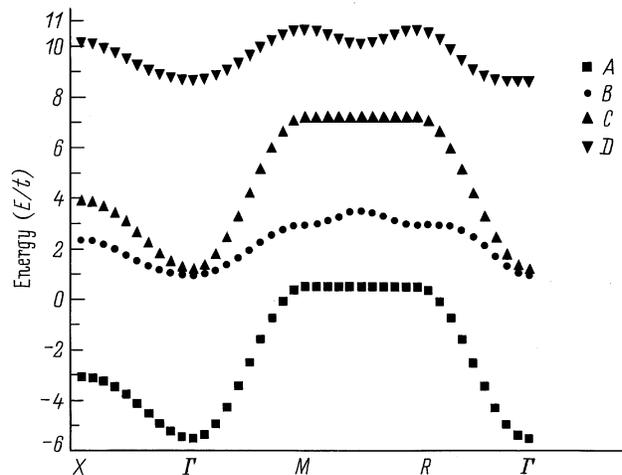


Рис. 1. Спектр антиферромагнитной структуры А-типа для основных симметричных направлений зоны Бриллюэна, рассчитанный при следующих значениях параметров:  $\theta = \pi$ ,  $J = 1.67t$ ,  $E_{d1} = 5t$ ,  $E_{d2} = 0$ . Все зоны (A, B, C, D) двукратно вырождены.

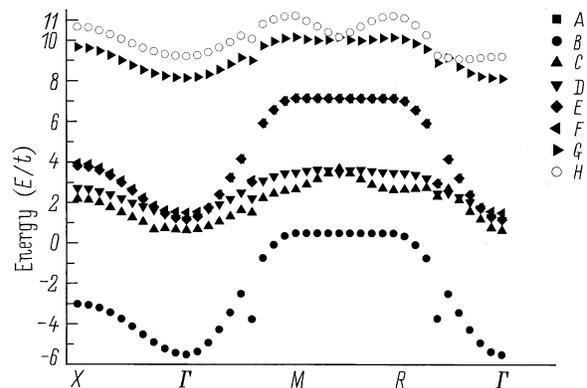
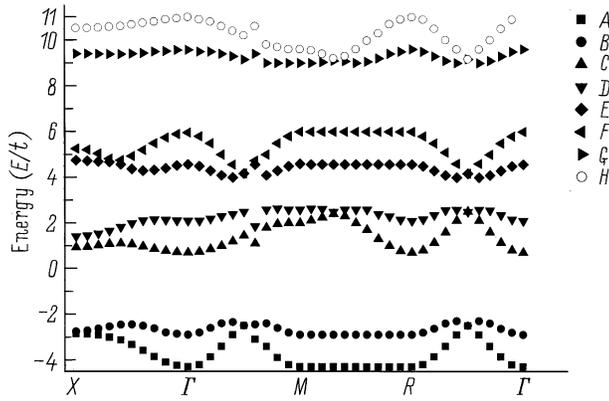


Рис. 2. Спектр скошенной антиферромагнитной структуры А-типа, рассчитанный при  $\theta = 0.8\pi$ ,  $J = 1.67t$ ,  $E_{d1} = 5t$ ,  $E_{d2} = 0$ . Зоны, отмеченные индексами A, B и E, F и отвечающие орбиталям  $|x^2 - y^2\rangle$ , в данных симметричных направлениях практически совпадают, поэтому на рисунке различаются всего шесть зон.

вании кластерных расчетов составляет  $E_{d1} - E_{d2} = 0.3 - 0.5$  eV [10], а из оптических данных [13] следует, что  $E_{d1} - E_{d2} = 1$  eV. Параметр  $J \approx 0.25$  eV был получен автором в результате проведения хартри-фоковских расчетов электронной структуры иона  $\text{Mn}^{3+}$  с использованием известного комплекса программ RAINE [14]. Этот параметр определялся для  $S = 3/2$  из соотношения  $J(2S + 1) = E_{\text{tot}}[\text{Mn}^3(S = 2)] - E_{\text{tot}}[\text{Mn}^{3+}(S = 1)] \approx 0.97$  eV, где  $E_{\text{tot}}$  — полная энергия иона  $\text{Mn}^{3+}$  в соответствующем спиновом состоянии. Атомная оценка практически совпадает с зонной оценкой [12], где разность этих энергий равна  $\approx 0.9$  eV.

На рис. 1 представлен спектр АФ-структуры А-типа, рассчитанный при следующих значениях параметров:



**Рис. 3.** Спектр скошенной антиферромагнитной структуры **G**-типа, рассчитанный при тех же значениях параметров, что и на рис. 2. В данной магнитной структуре вырождение зон возникает только в отдельных точках зоны Бриллюэна. Аналогичный по форме спектр имеет и антиферромагнитная **C**-структура.

$\theta = \pi$ ,  $J = 1.67t$ ,  $E_{d1} = 5t$ ,  $E_{d2} = 0$ ,  $S = 3/2$ . По форме он достаточно хорошо совпадает с участком спектра вблизи уровня Ферми, рассчитанным в приближении LDA (local density approximation) [12]. Для **A**-типа на элементарную ячейку рассматриваемой структуры приходится два электрона, которые полностью заполняют нижнюю двукратно вырожденную **A**-зону, образованную орбиталями типа 2. Без учета ЯТ-искажений эта зона перекрывается с верхней зоной **B** (типа 1) и соединение является металлом. Щель в спектре возникает лишь тогда, когда ЯТ-искажения достаточны для расщепления  $d$ -уровня, превышающего некоторое критическое значение  $E_{d1} - E_{d2} \geq 5t$ . Аналогичная ситуация имеет место и в [12]. Величина непрямого щели составляет  $E_g \approx t \approx 0.1-0.3$  eV, а прямой щели —  $2.5t$ . Дно верхней незаполненной зоны находится в точке  $\Gamma(0, 0, 0)$ , а потолок нижней зоны — на линии  $M(1/2, 1/2, 0)-R(1/2, 1/2, 1/2)$ , что приводит к появлению пика плотности состояний вблизи соответствующей энергии. С ростом расщепления вырожденного уровня может возникнуть перекрытие зон **B** и **C** (типа 2) с разным направлением спина.

На рис. 2 представлен спектр скошенной антиферромагнитной структуры **A**-типа, рассчитанный для угла  $\theta = 0.8\pi$ . Обращает на себя внимание то, что вдоль приведенных симметричных направлений зоны **A** и **B**, **E** и **F** типа 2 остаются двукратно вырожденными. Расщепляются лишь зоны типа 1 (**C**, **D**, **G** и **H**). Полное расщепление зон возникает в произвольных несимметричных точках ЗБ, но, как показывают расчеты, оно невелико. Так, в направлении  $\Gamma-X$  расщепление нижней зоны равно  $\approx 0.05t$  и на рисунке не показано. Однако из рисунка хорошо видно перекрытие зон **C**, **D** (типа 1) и **E**, **F** (типа 2) с разным направлением спина.

Результаты расчета спектра скошенной **G**-структуры при тех же значениях параметров, что и на рис. 2, представлены на рис. 3. Здесь вырождение возникает только в отдельных точках на симметричных линиях ЗБ. Основной особенностью спектра является очень сильное сужение нижних зон **G**-структуры. Из рис. 2, 3 видно, что при одних и тех же параметрах полная ширина этих зон (не заполненных для  $\text{CaMnO}_3$ ) примерно в 4 раза меньше соответствующего значения для спектра **A**-структуры.

Аналогичным образом был рассчитан и спектр скошенной **C**-структуры. Поскольку этот спектр по своей форме и положению близок к спектру **G**-структуры, в настоящей работе он не приводится. Для симметричных линий спектр **C**-структуры легко получить аналитически при  $\theta = \pi$ .

Таким образом, как следует из стандартной DE-модели, поведение систем типа  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$  при малых  $x$  и  $x \approx 1$  должно быть подобным ("электрон-дырочная" симметрия). Эксперимент показывает, что дырочные и электронные соединения ведут себя совершенно различным образом. Так, при  $x < 0.5$  обычно возникает металлическое ФМ-состояние, а при  $x > 0.5$  — диэлектрическая фаза. Результаты настоящей работы позволяют дать качественное объяснение эксперимента. Из результатов численных расчетов следует, что при легировании  $\text{CaMnO}_3$  (структура **G**-типа) подвижность носителей (электронов) будет меньше подвижности дырок, которые возникают при легировании  $\text{LaMnO}_3$  (структура **A**-типа). Поэтому "электрон-дырочной" симметрии свойств  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$  наблюдаться не может. Чтобы подобная симметрия наблюдалась, необходимо иметь исходный электронный спектр, в котором форма изоэнергетических поверхностей для дырок вблизи потолка валентной зоны совпадала бы с формой изоэнергетических поверхностей для электронов вблизи дна зоны проводимости. Выполненные в данной работе расчеты показывают, что такой ситуации ни для одной из рассмотренных основных магнитных структур быть не может. В экспериментах "электрон-дырочной" симметрии также не наблюдается, о чем свидетельствуют многочисленные фазовые диаграммы манганитов (см. [1]).

Результаты расчета магнитной фазовой диаграммы манганитов на основе полученной электронной структуры предполагается опубликовать в отдельной работе.

## Список литературы

- [1] Colossal Magnetoresistance, Charge Ordering and Related Properties of Manganese Oxides/Ed. C.N.R. Rao and B. Raveau. World Scientific, Singapore (1998).
- [2] J. van den Brink, D. Khomskii. Phys. Rev. Lett. **82**, 1016 (1999).
- [3] T. Mizokava, D.I. Khomskii, G.A. Sawatzky. Phys. Rev. **B63**, 024 403 (2001).
- [4] P.W. Anderson, H. Hasegawa. Phys. Rev. **100**, 675 (1955).

- [5] E. Muller-Hartmann, E. Dagotto. Phys. Rev. **B54**, R6819 (1996).
- [6] K. Kubo, N. Ohata. J. Phys. Soc. Jpn. **33**, 21 (1972).
- [7] С.М. Дунаевский. ФТТ **41**, 12, 2179 (1999).
- [8] H. Shiba, R. Shina, A. Takahashi. J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 941 (1997).
- [9] G. Venketeswara Pai. Phys. Rev. **B63**, 064 431 (2001).
- [10] J.W. Liu, Z. Zeng, Q.Q. Zheng, H.Q. Lin. Phys. Rev. **B60**, 12 968 (1999).
- [11] У. Харрисон. Электронная структура и свойства твердых тел. Мир, М. (1983). Т. 1. 381 с.
- [12] S. Satpathy, Z.S. Popović, F.R. Vukajlović. Phys. Rev. Lett. **76**, 960 (1996).
- [13] M. Quijada, J. Černe, J.R. Simpson, H.D. Drew, K.H. Ahn, A.J. Millis, R. Shreekala, R. Ramesh, M. Rajeswari, T. Venkatesan. Phys. Rev. **B58**, 16 093 (1998).
- [14] I.M. Band, M.B. Trzhaskovskaya. Atom. Data Nucl. Data Tabl. **35**, 3 (1986).