

A  
17658

На правах рукописи

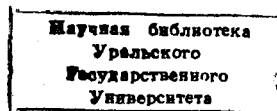
Гончарь Людмила Эдуардовна

МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА И СПЕКТР МАГНОНОВ  
ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ МАГНИТНЫХ ДИЭЛЕКТРИКОВ

01.04.07—физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук



Екатеринбург—2001

Работа выполнена в Уральском государственном университете им.  
А. М. Горького на кафедре компьютерной физики

Научный руководитель— доктор физико-математических наук,  
профессор А. Е. Никифоров

Официальные оппоненты— доктор физико-математических наук,  
Н. Г. Бебенин

доктор физико-математических наук,  
В. Я. Митрофанов

Ведущее учреждение— Уральский государственный техниче-  
ский университет (УГТУ-УПИ)

Защита состоится «14» июня 2001 г. в 16 часов на заседании диссерта-  
ционного совета Д212.286.01 по защите докторских диссертаций в  
Уральском государственном университете (620083, г. Екатеринбург, К-  
83, пр. Ленина 51, комн. 248).

С диссертационной работой можно ознакомиться в библиотеке Ураль-  
ского государственного университета.

Автореферат разослан «14» мая 2001 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,  
доктор физико-математических наук



Баранов Н.В.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Изучение ян-теллеровских (ЯТ) магнетиков всегда представляло большой физический интерес. Он связан, прежде всего, с необычными свойствами этих соединений. Открытие высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) и колоссального магнитосопротивления (КМС) явилось причиной интенсивных исследований в этой области. Как в ВТСП, так и в КМС соединениях присутствуют ЯТ ионы:  $\text{Cu}^{2+}$  (в купратах) и  $\text{Mn}^{3+}$  (в манганитах), соответственно. Данные эффекты наблюдаются в допированных кристаллах, однако, для понимания природы явлений не менее важным является изучения частных случаев, в том числе — случай чистого кристалла. Кроме ВТСП и КМС, в ЯТ кристаллах наблюдаются такие явления, как орбитальное и зарядовое упорядочения (ОУ и ЗУ), гигантская магнитострикция и др.

Для ЯТ соединений характерной является сильная связь спиновых, зарядовых и орбитальных степеней свободы. Об этой взаимосвязи неоднократно упоминалось в исследованиях, посвященных ЯТ магнетикам. Однако наибольшее внимание обычно уделяется взаимному влиянию магнитных и транспортных свойств, реже исследуется взаимосвязь структурных и магнитных характеристик. Феномен ЗУ представляет интерес, так как здесь возникает необходимость учитывать все аспекты физики КМС манганитов (локализация зарядов, структурные искажения, орбитальное упорядочение, магнитные взаимодействия).

В настоящее время отсутствует теория для определения магнитной структуры и спектров спиновых возбуждений для ЯТ диэлектриков, в которой бы в полной мере была учтена орбитальная структура. По поводу механизмов орбитального и магнитного упорядочения, а также их взаимосвязи, единое мнение отсутствует. Общеизвестными считаются сегодня три механизма упорядочения орбиталей, вызванные следующими взаимодействиями [1]: 1) квадруполь-квадрупольное взаимодействие; 2) обменное взаимодействие; 3) электронно-колебательное взаимодействие (ЭЯТ). В современных исследованиях для описания орбитальных структур в соединениях с ЯТ подрешеткой меди или марганца используются модели 2 и 3.

Работа посвящена теоретическому описанию магнитных свойств манганитов. Предполагается, что в манганитах существует сильная электронно-колебательная связь, которая является основной причиной орбитального упорядочения, которое, в свою очередь, определяет магнитную

структуру. Кроме того, в диэлектрической фазе единственным видом обменного взаимодействия считается сверхобмен. В рамках этой модели применяется концепция орбитально-зависимых магнитных взаимодействий, которая позволяет описать и предсказать магнитные структуры и спектры магнитных возбуждений для всего ряда редкоземельных и зарядово-упорядоченных манганитов.

Цель работы. В рамках приближения сильного электронно-колебательного взаимодействия исследовать влияние кристаллической, орбитальной и зарядовой структур на обменное и зеемановское взаимодействия, а также одноионную анизотропию, и провести расчет магнитной структуры и спектра спиновых возбуждений исследуемых веществ. Для осуществления этой цели были решены следующие задачи:

- ◊ В рамках известной орбитальной структуры и при известной зависимости обменного взаимодействия от орбитальной структуры найти орбитальную зависимость зеемановского взаимодействия и провести расчет магнитной структуры, спектров магнитного резонанса и спиновых волн для фторидов  $\text{KCuF}_3$  и  $\text{K}_2\text{CuF}_4$  в модели многих подрешеток; определить влияние кристаллической и орбитальной структур на угловые зависимости спектров магнитного резонанса; отработать методику расчета магнитной структуры и спектров многоподрешеточных магнетиков;
- ◊ Установить орбитальную зависимость обменного и зеемановского взаимодействий, а также одноионной анизотропии для пар ионов  $\text{Mn}^{3+} - \text{Mn}^{3+}$ ,  $\text{Mn}^{3+} - \text{Mn}^{4+}$ ,  $\text{Mn}^{4+} - \text{Mn}^{4+}$  в кислородном окружении, учитывая их микроскопическую природу; установить влияние янтеллеровских и поворотных искажений на магнитные взаимодействия;
- ◊ Выяснить, как влияет на магнитные взаимодействия и спектры магнитных возбуждений подрешетка ионов редкоземельных и щелочноземельных элементов, которая непосредственно не участвует в обменном взаимодействии марганцевой подсистемы, в регулярных ( $\text{RMnO}_3$ ) и зарядово-упорядоченных ( $\text{R}_{0.5}\text{A}_{0.5}\text{MnO}_3$ ,  $\text{R}_{0.5}\text{A}_{1.5}\text{MnO}_4$ ,  $\text{RA}_2\text{Mn}_2\text{O}_7$ ) манганитах;
- ◊ Провести разбиение на магнитные подрешетки в этих соединениях, провести расчет магнитной структуры и спектров антиферромагнитного резонанса и спиновых волн; определить влияние орбитальной структуры и возможной избыточности магнитных подрешеток на

спектры; объяснить нетривиальные особенности экспериментальных спектров АФМР и спиновых волн.

Научная новизна работы.

1. На примере ЯТ соединений  $\text{KCuF}_3$  и  $\text{K}_2\text{CuF}_4$  выяснено влияние орбитально-зависимого зеемановского взаимодействия на спектры магнитного резонанса;
2. В рамках приближения сильного электронно-колебательного взаимодействия описаны орбитальные структуры регулярного ( $x=0$ ) и зарядово-упорядоченного ( $x=0.5$ ) манганитов; установлена и проанализирована орбитальная зависимость сверхобменного взаимодействия, одноионной анизотропии и зеемановского взаимодействия в регулярных и зарядово-упорядоченных манганитах;
3. Объяснены магнитные структуры вышеназванных соединений; показано, что их характерные особенности обусловлены орбитальным упорядочением; показано, что модель орбитально-зависимых магнитных взаимодействий полностью описывает спектры спиновых волн и антиферромагнитного резонанса в  $\text{LaMnO}_3$ ; описана экспериментальная полевая зависимость намагниченности в  $\text{LaMnO}_3$ ; предсказаны величины обменных параметров и температур Нееля для некоторых других редкоземельных манганитов;
4. Впервые определены обменные параметры и оценены температуры Нееля для ЗУ соединений  $\text{Pr}_{0.5}\text{Sr}_{0.41}\text{Ca}_{0.09}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ ,  $\text{Tb}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ ; предсказаны дисперсионные зависимости спиновых волн для  $\text{Pr}_{0.5}\text{Sr}_{0.41}\text{Ca}_{0.09}\text{MnO}_3$ ,  $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ ,  $\text{Tb}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ ; оценены обменные параметры для  $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_3$  и  $\text{RSr}_2\text{Mn}_2\text{O}_7$  ( $R = \text{La}, \text{Nd}$ ) и рассчитаны примерные дисперсионные зависимости спектра спиновых волн.

Научная и практическая ценность работы состоит в следующем

- ⊕ установлена количественная связь между орбитальной и магнитной подсистемами в чистых и ЗУ манганитах; полученные параметры орбитальных зависимостей обменного взаимодействия для пар ионов  $\text{Mn}^{3+}-\text{Mn}^{3+}$ ,  $\text{Mn}^{3+}-\text{Mn}^{4+}$  в кислородном окружении могут быть использованы для моделирования влияния внешних воздействий (магнитного поля и давления) на кристаллическую и орбитальную структуры манганитов. На основе этих зависимостей может быть исследовано влияние орбитальной структуры на эффект КМС;
- ⊕ расширены представления о спиновой динамике многоподрешеточных магнетиков; рассчитанные спектры могут дать возможность экс-

периментального изучения магнетиков со сложной структурой методами магнитного резонанса и нейтронного рассеяния, а также оптическими методами; эти спектры также являются необходимыми для изучения эффекта КМС;

6. создан комплекс программ для расчета магнитной структуры и спектров спиновых волн многоподрешеточных магнетиков.

На защиту выносятся следующие положения и результаты:

1. Формирование орбитальной структуры чистого манганита обусловлено кооперативным эффектом Яна-Теллера; формирование зигзагообразной орбитальной структуры в ЗУ манганитах происходит за счет полносимметричного искажения вокруг ионов  $Mn^{4+}$ , ЯТ искажения вокруг  $Mn^{3+}$  и подстройки решетки под эти искажения, выражающейся в сдвиге подрешетки четырехвалентного марганца из симметричной позиции.
2. Обменное и зеемановское взаимодействия, а также одноионная анизотропия зависят от характера упорядочения орбиталей в чистых и ЗУ ЯТ манганитах. Эти зависимости являются количественным обобщением правил Гудинафа-Канамори на случай многоэлектронных орбиталей и учитывает все промежуточные случаи.
3. Магнитная структура ЯТ магнетиков с сильным электронно-колебательным взаимодействием, в основном, определяется орбитальной структурой через орбитально-зависимое обменное взаимодействие. Подобная модель позволяет интерпретировать все имеющиеся магнитные структуры диэлектрических манганитов;
4. Орбитально-зависимые магнитные взаимодействия являются причиной *магнитной* анизотропии (одноионной или индуцированной внешним магнитным полем), которая определяет детали магнитной структуры;
5. Результаты расчетов обменных параметров, спектров магнитных возбуждений для регулярных и зарядово-упорядоченных манганитов.

Апробация результатов работы. Результаты работы докладывались на I и II Уральской региональной школе-семинаре молодых ученых и студентов по физике конденсированного состояния вещества (1997 и 1998, Екатеринбург, Россия); XXVII Международной зимней школе-симпозиуме физиков теоретиков «Коуровка-98» (1998, Екатеринбург-Челябинск, Россия); VI Российской научной студенческой конференции по физике твердого тела (1998, Томск, Россия); XXXI Совещания по физике низких температур (1998, Москва, Россия); IV Bilateral Russian-

German Symposium "Physics and Chemistry of Novel Materials" (1999, Екатеринбург, Россия); Пятой Всероссийской Научной Конференции студентов-физиков и молодых ученых ВКНСФ-5 (1999, Екатеринбург, Россия); XXXVII Международной научной студенческой конференции «студент и научно-технический прогресс» (1999, Новосибирск, Россия); Молодежной школе-семинаре физиков-теоретиков «миниКоуровка-99» (1999, Екатеринбург, Россия); V Всероссийской научной конференции «Оксиды. Физико-химические свойства» (2000, Екатеринбург, Россия); Второй объединенной конференции по магнитоэлектронике (международной) (2000, Екатеринбург, Россия); XXVIII Международной зимней школе физиков-теоретиков «Коуровка-2000» (2000, Екатеринбург, Россия); школе-семинаре «Новые магнитные материалы микроэлектроники НМММ XVII» (2000, Москва, Россия); International Symposium on Physics in Local Lattice Distortions (2000, Ibaraki, Japan); The Fifteenth International Symposium on the Jahn-Teller Effect (2000, Boston, USA); XXXII Всероссийском совещании по физике низких температур (2000, Казань, Россия); Euro-Asian Symposium "Trends in Magnetism EASTMAG-2001" (2001, Екатеринбург, Россия).

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 14 работ. Список публикаций приведен в конце автореферата.

Работа выполнена на кафедре компьютерной физики Уральского Государственного университета им. А. М. Горького (УрГУ) и в отделе оптоэлектроники НИИ ФПМ при УрГУ при частичной финансовой поддержке Госкомвуза РФ (грант №95-0-7.4-110), Российского фонда фундаментальных исследований (грант №96-03-32130а), International Soros Science Educational Program (грант № s98-600), Award № REC-005 of the US Civil Research Development Foundation for the Independent States of Former Soviet Union (CRDF), Министерства образования РФ (грант № E00-3.4-277), а также Правительства РФ (именная стипендия за 1999/2000 год) и Губернатора Свердловской области (именная стипендия за 2000/2001 год).

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения, одного приложения и списка литературы. Общий объем работы составляет 134 страницы, включая 40 рисунков, 23 таблицы и список литературы из 120 наименований.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении дано обоснование актуальности выбранной темы диссертации, сформулирована цель работы и задачи исследования, обозначены основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе рассмотрен класс ЯТ перовскитоподобных кристаллов и их особенности. Рассматриваются кристаллические структуры и микроскопические механизмы взаимосвязи орбитальных и магнитных степеней свободы. При этом подразумеваются следующие ограничения: кристалл обладает регулярной структурой и является полностью стехиометричным; параметры кристаллической структуры определены экспериментально в других работах; сильное одноцентровое электронно-колебательное взаимодействие является причиной кооперативных ЯТ искажений, а также причиной установления орбитального упорядочения в кристалле; орбитальная структура адиабатически следует за кристаллическим упорядочением; кристалл является диэлектрическим; единственным видом обменного взаимодействия является сверхобмен; имеющаяся электронная конфигурация ионов в кристалле устойчива; орбитальная структура является первичной по отношению к магнитному порядку; взаимодействие между орбитальной и магнитной подсистемами является гораздо более слабым, чем электронно-колебательное взаимодействие.

Здесь рассмотрены структуры перовскитоподобных кристаллов: собственно перовскит  $ABX_3$ , однослойный  $A_2BX_4$  и двухслойный  $A_3B_2X_7$  перовскиты. В перовските октаэдрические комплексы  $[BX_6]$  имеют общий ион  $X$  вдоль всех кубических осей. В слоистых перовскитах комплексы  $[BX_6]$  имеют общий ион  $X$  только в одной плоскости. Вдоль третьего направления в однослойном перовските слои из  $[BX_6]$  разделены слоями ионов  $A$ ; в двухслойном перовските через два слоя из  $[BX_6]$ , имеющих промежуточный ион  $X$ , следует слой ионов  $A$ . В качестве ионов  $B$  мы рассматриваем магнитный  $d$ -ион, а в качестве ионов  $X$  — немагнитный анион.

Дано определение статического эффекта Яна-Теллера (ЭЯТ) на одном центре и в кристалле. ЭЯТ заключается в снятии орбитального вырождения иона за счет кристаллических искажений ближайшего окружения этого иона. Кооперативный ЭЯТ (КЭЯТ) имеет место, когда ионы с орбитальным вырождением образуют в кристалле упорядоченную структуру. В связи с этим коллективные искажения с определенным волновым



вектором в кристалле влекут за собой установление орбитальной структуры при наличии сильного электронно-колебательного взаимодействия. Под *орбитальной структурой* мы понимаем установление на каждом ЯТ ионе в кристалле определенного орбитального состояния, которое периодически распространено по кристаллу. Для d-ионов с основным орбитальным термом E основное состояние иона после снятия вырождения выглядит как [2]

$$\begin{aligned}\Psi_n &= -\cos \frac{\Phi_n}{2} \varphi_{n\theta} + \sin \frac{\Phi_n}{2} \varphi_{n\epsilon}, V_e > 0 \\ \Psi_n &= \sin \frac{\Phi_n}{2} \varphi_{n\theta} + \cos \frac{\Phi_n}{2} \varphi_{n\epsilon}, V_e < 0\end{aligned}\quad (1)$$

где  $V_e$  — константа линейного ЯТ взаимодействия,  $\varphi_{n\theta}$  и  $\varphi_{n\epsilon}$  — волновые функции E-состояния  $n$ -го иона. Параметр  $\Phi_n$ , определяющий орбитальную структуру, приближенно выражается как

$$\sin \Phi_n = \frac{Q_{en}}{\sqrt{Q_{\theta n}^2 + Q_{en}^2}}, \quad \cos \Phi_n = \frac{Q_{\theta n}}{\sqrt{Q_{\theta n}^2 + Q_{en}^2}}\quad (2)$$

где  $Q_{\theta n}$  и  $Q_{en}$  — симметризованные координаты кристалла.

Особого рассмотрения заслуживает случай неизовалентного допирования ЯТ кристаллов, поскольку именно в этом случае наблюдаются эффекты ВТСП и КМС, наиболее важные для практического применения. Для рассматриваемых кристаллов редкоземельных манганитов, как правило, производится неизовалентное замещение редкоземельного (трехвалентного) иона на щелочноземельный (двухвалентный) ион, в результате чего образуется нескомпенсированный положительный заряд. В общем случае носители заряда являются причиной появления проводимости в кристалле. При некоторых степенях легирования ( $x = 1/6, 1/4, 1/2, 3/4$ , и т.п.) эти носители локализуются на ЯТ ионах и образуют упорядоченную структуру — диэлектрическую *зарядово-упорядоченную фазу* (ЗУФ). Эта фаза может быть разрушена повышением температуры и приложением магнитного поля.

Особенно важным в этой главе является рассмотрение орбитально-зависимых взаимодействий. Между d-ионами, в зависимости от орбитального состояния, возможно несколько типов обменного взаимодействия, включающего не только спиновые, но и орбитальные операторы. В случае перовскитоподобного кристалла для пары d-ионов а и б при  $180^\circ$ -обменной связи на Рис. 1–Рис. 3 изображены зависимости угловой части параметров обменного взаимодействия от орбитальной структуры.

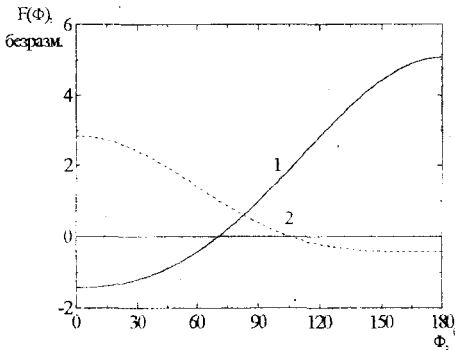


Рис. 1. Зависимость угловой части обменных параметров от орбитальной структуры для кластера  $[Cu_2F_{11}]$ .

$$J_{ab}^i = \frac{\cos^2 \varphi}{J_0^{Cu-F}} J_0^{Cu-F} F_i^{Cu-F}(\Phi)$$

$$1: F_z^{Cu-F}(\Phi) = 1 + 2\alpha^{Cu-F} \cos\Phi + \beta^{Cu-F} \cos^2\Phi$$

$$2: F_{xy}^{Cu-F}(\Phi) = 1 - \alpha^{Cu-F} \cos\Phi + \beta^{Cu-F} (\cos^2\Phi - 3/4)$$

$$J_0^{Cu-F} = 1.71 \cdot 10^3 \text{ K} \cdot \text{\AA}^{-10}$$

$$\alpha^{Cu-F} = -1.62, \beta^{Cu-F} = 0.82$$

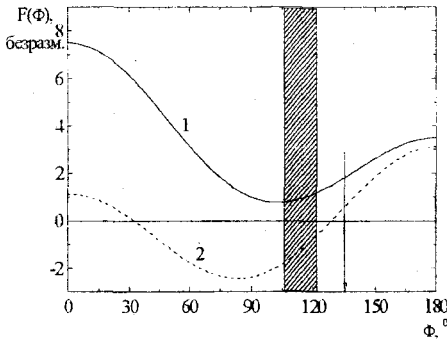


Рис. 2. Зависимость угловой части обменных параметров от орбитальной структуры для кластера  $[Mn_2O_{11}]$ .

$$J_{z\bar{z}}^i = \frac{\cos^2 \varphi}{J_0^{Mn-O}} J_0^{Mn-O} F_i^{Mn-O}(\Phi)$$

$$1: F_z^{Mn-O}(\Phi) = 1 + 2\alpha^{Mn-O} \cos\Phi + \beta^{Mn-O} \cos^2\Phi$$

$$2: F_{xy}^{Mn-O}(\Phi) = 1 - \alpha^{Mn-O} \cos\Phi + \beta^{Mn-O} (\cos^2\Phi - 3/4)$$

$$J_0^{Mn-O} = 1.69 \cdot 10^4 \text{ K} \cdot \text{\AA}^{10}$$

$$\alpha^{Mn-O} = 1.0, \beta^{Mn-O} = 4.5$$

Штриховкой обозначен диапазон экспериментально наблюдаемых в манганитах углов.

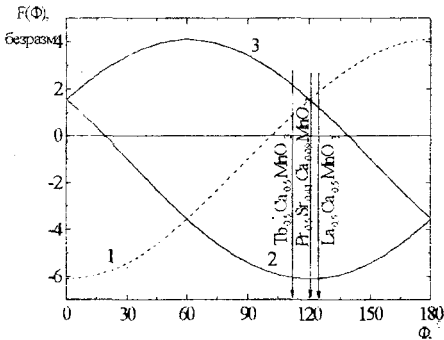


Рис. 3. Зависимость угловой части обменных параметров от орбитальной структуры для кластера  $[Mn^{3+}Mn^{4+}O_{11}]$ .

$$J_{ab}^i = \frac{\cos^2 \varphi}{J_0^{Mn-O}} J_0^{Mn-O} F_i^{Mn-O}(\Phi)$$

$$1: -F_z^{Mn-O}(\Phi) = -(1 + \alpha^{Mn-O} \cos\Phi)$$

$$2: -F_y^{Mn-O}(\Phi) = -1 + 1/2 \alpha^{Mn-O} (\cos\Phi - \sqrt{3} \sin\Phi)$$

$$3: -F_x^{Mn-O}(\Phi) = -1 + 1/2 \alpha^{Mn-O} (\cos\Phi + \sqrt{3} \sin\Phi)$$

$$J_0^{Mn-O} = -4.9 \cdot 10^3 \text{ K} \cdot \text{\AA}^{10}$$

$$\alpha^{Mn-O} = 5.1$$

Знак "—" взят для учета знака параметра  $J_0^{Mn-O}$ . Стрелками обозначены наблюдаемые углы орбитальной структуры.

Величины используемых параметров зависимостей оценены в работе феноменологически. Характерной особенностью обменного взаимодействия является зависимость величины и знака обмена от направления в кристалле. Таким образом, подобное рассмотрение обменного взаимодействия позволяет расширить эмпирические правила Гудинафа-Канамори.

Для полноценного описания магнитной подсистемы кристалла, ограничиваясь квадратичными по спину вкладами, необходимо также рассмотреть анизотропно-обменные и одноионные вклады. Они играют значительную роль в случаях, когда одноионная анизотропия мала или отсутствует.

$$H_{ex} = \sum_{i,j} J_{ij} S_{ai} S_{bj}, \quad (i, j = x, y, z), \quad (3)$$

где  $J_{ij}$  — действительные обменные параметры. Этот гамильтониан можно переписать и в традиционном виде:

$$H_{ex} = J(\mathbf{S}_a \cdot \mathbf{S}_b) + \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij}^c (S_{ai} S_{bj} + S_{aj} S_{bi}) + (\mathbf{A} \cdot [\mathbf{S}_a \times \mathbf{S}_b]),$$

$$J = \frac{1}{3} \sum_i J_{ii}, \quad J_{ij}^c = \frac{1}{2} (J_{ij} + J_{ji}) - J \delta_{ij}, \quad (4)$$

$$A_x = \frac{1}{2} J_{yz}^{ac}, \quad A_y = \frac{1}{2} J_{zx}^{ac}, \quad A_z = \frac{1}{2} J_{xy}^{ac}, \quad J_{ij}^{ac} = \frac{1}{2} (J_{ij} - J_{ji})$$

Первое слагаемое описывает изотропный обмен, второе слагаемое — симметричный анизотропный обмен, третье слагаемое — антисимметричный обмен Дзялопинского-Мория. Поскольку орбитальная зависимость этих взаимодействий имеет сложную структуру и несущественна для данной работы, ограничимся обычным симметрично-эмпирическим подходом. Так, для определения направления вектора антисимметричного обмена существует полуэмпирическое правило  $\mathbf{A}_{ab} \sim [\mathbf{r}_a \times \mathbf{r}_b]$ , где  $\mathbf{r}_a$  и  $\mathbf{r}_b$  — радиус-векторы от магнитных ионов пары до общего лиганда.

Выражение для одноионной анизотропии иона  $Mn^{3+}$  в локальных осях кислородных октаэдров, зависящее от угла орбитального упорядочения:

$$H_{an}^{(n)} = D_n S_{nz}^2 + E_n (S_{ny}^2 - S_{nx}^2), \quad D_n = 3P \cos \Theta_n, \quad E_n = \sqrt{3}P \sin \Theta_n \quad (5)$$

$P = -1.15$  К найдено из величины щели в экспериментальных спектрах спиновых волн и рассмотрено в Приложении.

Вследствие эффекта Яна-Теллера g-тензоры соседних ионов  $Mn^{3+}$  и  $Su^{2+}$  не являются эквивалентными. Это значительно усложняет магнитную структуру соединения при внешнем ненулевом магнитном поле. Ве-

личины компонент  $g$ -тензоров тоже зависят от угла  $\Phi$ . Можно записать эффективный спиновый гамильтониан в локальных осях кислородных октаэдров

$$H_{\text{зем}} = \mu_B \sum_i (\mathbf{H} \cdot \mathbf{g}^i \cdot \mathbf{S}_i) \quad (6)$$

где

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} g_1 + g_2 \cos(\Phi_i - 2\pi/3) & 0 & 0 \\ 0 & g_1 + g_2 \cos(\Phi_i + 2\pi/3) & 0 \\ 0 & 0 & g_1 + g_2 \cos(\Phi_i) \end{pmatrix} \quad (7)$$

Оценка параметров  $g_1$  и  $g_2$  проводилась для иона  $\text{Cu}^{2+}$  из экспериментальных данных. Для иона  $\text{Mn}^{3+}$  экспериментальные данные по определению  $g$ -фактора, отсутствуют, поэтому параметры  $g_1$  и  $g_2$  оценены во втором порядке теории возмущений. Их примерные величины:

$$\text{Cu}^{2+} \text{ (в кластере } [\text{Cu}^{2+}\text{F}_6]) \quad g_1=2.23, g_2=0.301, \quad (8)$$

$$\text{Mn}^{3+} \text{ (в кластере } [\text{Mn}^{3+}\text{O}_6]) \quad g_1=1.89, g_2=0.047. \quad (9)$$

Наличие возможных поворотных искажений октаэдра учитывается, если спин-гамильтониан записан в локальных осях октаэдра по спиновым переменным для каждого иона и переведен в общую систему координат.

В конце главы сформулированы основные выводы: 1) благодаря КЭЯТ в кристаллах устанавливается пространственное упорядочение орбитальных состояний магнитных ионов, полностью определяемое кристаллической структурой; 2) зависимость обменного взаимодействия от орбитальной структуры является настолько существенной, что изменение орбитальной структуры при *неизменной симметрии* кристаллической структуры может вызвать спин-переориентационный переход; 3) магнитная структура определяется не только величиной ЯТ искажений, но и их волновым вектором, в каждой из областей зависимости обмена от угла орбитальной структуры—по-разному; 4) вследствие зависимости одноионной анизотропии от орбитальной структуры возможно различие локальных легких осей (легких плоскостей) для различных ионов в магнитной ячейке (в соединениях, где одноионная анизотропия существенна); 5) возможно существенное усложнение поведения ЯТ соединений в магнитном поле, так как  $g$ -тензоры анизотропны и могут быть неэквивалентными для различных ионов в магнитной ячейке.

Вторая глава имеет обзорный характер и посвящена методикам нахождения магнитных структур и спектра спиновых возбуждений во многоподрешеточном магнетике.

В начале главы рассмотрена методика классификации магнитных структур по волновым векторам.

Учтя все квадратичные по спину взаимодействия в кристалле, можно записать спин-гамильтониан:

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j) + \sum_{i,j,\alpha,\beta} D_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta + \sum_{i=j} (\mathbf{d}_{ij} \cdot [\mathbf{s}_i \times \mathbf{s}_j]) + \mu_B \sum_{i,\alpha,\beta} H_{\alpha\beta} \mathbf{g}_{\alpha\beta}^i S_i^\beta. \quad (10)$$

Используя этот гамильтониан, приближение ближайших соседей и приближение молекулярного поля, можно найти магнитную структуру кристалла и температуру Нееля. Проблемой в данной области является выбор магнитной ячейки кристалла. Поскольку обменные взаимодействия различны в разных направлениях, а анизотропия может различаться на ионах, необходимо брать максимальную ячейку, которая позволит учесть все взаимодействия. Магнитная структура находится минимизацией энергии, полученной из гамильтониана (10). В приближении молекулярного поля не учитывается квантовая природа спина и межспиновые температурные корреляции, при этом температура Нееля завышена по сравнению с экспериментальной. Тем не менее, данное приближение хорошо подходит для оценки этих характеристик в трехмерных кристаллах. В главе подробно рассмотрено приближение молекулярного поля. Кроме того, подробно рассмотрена методика расчета спектра спиновых волн для гамильтониана (10) в линейном приближении. Эти методы легли в основу программы для расчета магнитной структуры и спектров спиновых волн и АФМР.

Спецификой многоподрешеточного магнетика (в особенности с неколлинеарными подрешетками) является громоздкость вычислений. В процессе поиска собственных значений гамильтониана может возникнуть необходимость отбора из  $n$  мод тех, которые наблюдаются на эксперименте, поскольку количество магнитных подрешеток может оказаться завышенным по сравнению с количеством различных направлений спинов. В работе предлагается производить отбор мод в  $\Gamma$ -точке магнитной зоны Бриллюэна так же, как для двухподрешеточного магнетика [3] (в резонансе наблюдаются только те моды, для которых суммарная переменная намагниченность не равна нулю).

Третья глава посвящена медным фторидам  $\text{KCuF}_3$  и  $\text{K}_2\text{CuF}_4$ . На их примере рассматривается влияние орбитальной структуры на обмен и зеемановское взаимодействие. Поскольку одноионная анизотропия в этих соединениях отсутствует, основное влияние на спектр оказывают анизотропные неэквивалентные  $g$ -тензоры, которые являются следстви-

ем орбитальной структуры. Благодаря ним в этих соединениях имеет место индуцируемая внешним магнитным полем анизотропия, которая является причиной периодической угловой зависимости поля магнитного резонанса в плоскости  $ab$  (период  $\pi/2$  — см. Рис. 4 и Рис. 5). Таким образом, делается вывод о влиянии орбитальной структуры на симметрию магниторезонансных спектров.

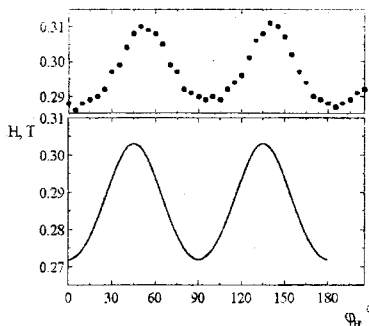


Рис. 4. Угловая зависимость резонансного поля АФМР в  $\text{KCuF}_3$ . Поле направлено в базисной плоскости под углом  $\varphi_H$  к псевдоперовскитной оси  $x$ .

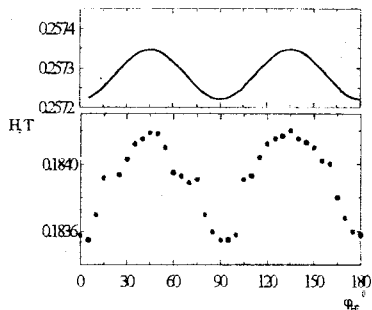


Рис. 5. Угловая зависимость резонансного поля АФМР в  $\text{K}_2\text{CuF}_4$ . Поле направлено в базисной плоскости под углом  $\varphi_H$  к орторомбической оси  $x$ .

Основные выводы главы: 1) орбитально-зависимый обмен может стать причиной образования в трехмерном кристалле квазиодномерной магнитной структуры; 2) орбитальная структура становится причиной индуцируемой внешним магнитным полем анизотропии, которая имеет тетрагональную симметрию (ось четвертого порядка совпадает с кристаллической) и обуславливает нетривиальное поведение магниторезонансных спектров.

Четвертая глава посвящена редкоземельным перовскитоподобным манганитам — соединениям, которые широко исследуются в настоящее время в связи с открытием эффекта КМС в кристаллах на их основе. Рассмотрены диэлектрические соединения регулярных редкоземельных манганитов  $\text{RMnO}_3$  ( $R = \text{La, Nd, Pr, Tb, Ho, Dy, Er, Y}$ ). Орбитальные и магнитные структуры этих соединений изображены на Рис. 6.

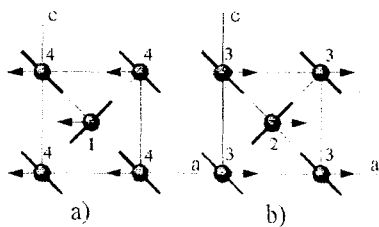


Рис. 6. Орбитальная (С-тип) и магнитная (А-тип) структуры чистого манганита. Темные шарики —  $Mn^{3+}$ , ионы кислорода и редкоземельного элемента опущены; жирные черточки обозначают направление  $e$ -орбиталей, стрелки показывают направления магнитных моментов. Части а) и б) показывают две соседние плоскости вдоль оси  $Y$ . Числа нумеруют магнитные подрешетки.

Для моделирования магнитной структуры, спектров спиновых волн и АФМР в  $R MnO_3$  использована модель четырех магнитных подрешеток (см. Рис. 6), где  $J_{12}=J_{34}=J_b$ ,  $J_{23}=J_{14}=J_{ac}$ , а одноионная анизотропия и зеемановское взаимодействие взяты в виде (5)–(7). Для  $La MnO_3$  на основе экспериментальных данных [4] были проведены расчеты магнитной структуры. Для рассчитанной орбитальной структуры  $La MnO_3$  величины обменных параметров равны следующим значениям:  $J_b=13.2$  К,  $J_{ac}=-18.0$  К. Для других редкоземельных манганитов ( $R = Pr, Nd, Dy, Ho, Tb, Er, Y$ ) также были сделаны оценки обменных параметров и температуры Нееля.

Магнитная структура чистого манганита из минимума энергии имеет вид  $(A_x F_y G_z)$ , что соответствует экспериментальным данным для  $La MnO_3$  [5] и  $Pr MnO_3$  [6].

В работе рассмотрено поведение магнитной структуры  $La MnO_3$  во внешнем магнитном поле, направленном вдоль легкой оси. Полевая зависимость имеет довольно сложный характер. Это, в первую очередь, связано с учетом неколлинеарных компонент магнитной структуры. Полное насыщение в нашей модели не достижимо вследствие неэквивалентности  $g$ -тензоров. Величины критических полей составили  $H_{c1}=19$  Тл (спин-флоп),  $H_{c2}=52.5$  Тл,  $H'_{c2}\sim 100$  Тл (спин-флип). Значение поля  $H_{c1}$  согласуется с найденным на эксперименте в работе [7] 21 Тл. Значения других критических полей измерены не были. Исходя из приведенных результатов, была также построена полевая зависимость суммарной намагниченности. Наши расчеты довольно точно воспроизвели характерные особенности этой зависимости, найденной экспериментально [7]. Численные расхождения можно отнести на счет наличия в реальном кристалле структурных доменов.

Для гамильтониана чистого манганита в линейном приближении спиновых волн исследованы дисперсионные зависимости магнонов. Вследствие четырехподрешеточной модели магнитной структуры спектр спиновых волн имеет четыре ветви. Спектр разделен на две зоны по две

близкорасположенных ветви в каждой. При  $k=0$  энергетический спектр магнитных возбуждений можно наблюдать с помощью АФМР.

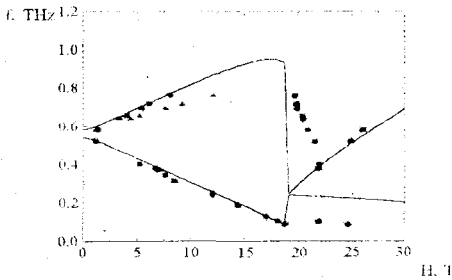


Рис. 7. Зависимость нижних частот АФМР  $f$  от внешнего магнитного поля  $H$ . Линия — результат данной работы (расчет), точки — результат работы [7] (эксперимент).

Без внешнего магнитного поля нижние ветви спектра слабо расщеплены и отделены энергетической щелью. Величина щели, по нашим расчетам, составила  $\Delta E=0.563$  ТГц, а величина расщепления нижних ветвей —  $\delta E=0.043$  ТГц. Наши расчеты хорошо согласуются с экспериментальными значениями этих величин ( $\Delta E=0.652$  ТГц [8],  $0.628$  ТГц [9],  $0.551$  ТГц [7],  $0.526$  ТГц,  $\delta E=0.029$  ТГц [10]). Кроме этого, была построена полевая зависимость частот АФМР при магнитном поле, направленном вдоль легкой оси. Поведение полевой зависимости частот является характерным для легкоосного антиферромагнетика, однако, имеются особенности, связанные с влиянием орбитальной структуры: расщепление нижних ветвей, обычно вырожденных при нулевом внешнем поле, и неполное размягчение нижней моды при спин-флоп переходе.

Рассмотрено влияние редкоземельной подрешетки на спектры АФМР и спиновых волн. Влияние редкоземельной подрешетки на спектры магнитных возбуждений сводится к двум механизмам: 1) изменение кристаллической и орбитальной структур и, как следствие, изменение орбитально-зависимых параметров магнитных взаимодействий в подсистеме ионов марганца и 2) появление в спектрах связанных возбуждений марганцевой и редкоземельной подсистем [11].

В конце главы сформулированы выводы: 1) предположение о формировании орбитальной структуры за счет кристаллических искажений позволяет описать данные экспериментов по рентгеновскому и нейтронному рассеянию, а также АФМР; 2) орбитально-зависимые магнитные взаимодействия дают возможность учета влияния на магнитную структуру и спектры возбуждений изменения кристаллической структуры в



связи с заменой ионов редкоземельной подрешетки; 3) исходя из этого, можно сделать вывод о снижении температуры Нееля с увеличением ЯТ угла (которое, как правило, появляется с уменьшением радиуса редкоземельного иона в подрешетке); 4) магнитная структура полностью определяется орбитальным упорядочением и поворотными искажениями кристалла (тип орбитального (ЯТ) упорядочения определяет тип магнитной структуры и легкие оси тетрагональной анизотропии, а поворотные искажения позволяют выделить из легких осей одну и определяют слабый ферромагнетизм); 5) влияние редкоземельной подрешетки на спектры АФМР и спиновых волн определяется двумя механизмами: через изменение кристаллической (и орбитальной) структуры и через влияние электронной структуры самих редкоземельных ионов; 6) влияние орбитальной структуры на спектр АФМР обуславливает характерные особенности поведения во внешнем магнитном поле (отсутствие насыщения, отсутствие полного размягчения нижней моды АФМР при спин-флоп переходе также определяются орбитальным упорядочением).

В пятой главе рассмотрены магнитные структуры и спектры магнонов для зарядово-упорядоченных манганитов  $R_{0.5}A_{0.5}MnO_3$  ( $R = La, Pr, Tb, A = Ca, Sr$ ) и слоистых зарядово-упорядоченных манганитов  $La_{0.5}Sr_{1.5}MnO_3$ ,  $LaSr_2Mn_2O_7$ . Для  $Pr_{0.5}Sr_{0.41}Ca_{0.09}MnO_3$  на основе экспериментальных параметров кристаллической структуры [12] были проведены расчеты орбитальной структуры и оценка обменных параметров. Для  $La_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$  [13] и  $Tb_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$  [14] на основе экспериментальных структур также были рассчитаны обменные параметры. Для  $La_{0.5}Sr_{1.5}MnO_3$  и  $LaSr_2Mn_2O_7$ ,  $NdSr_2Mn_2O_7$  орбитальные структуры были взяты примерно, исходя из имеющихся экспериментальных данных [15, 16]. Обменные параметры для них были оценены. Подробно рассмотрен механизм формирования «зигзагообразной» орбитальной структуры при зарядовом упорядочении С-типа.

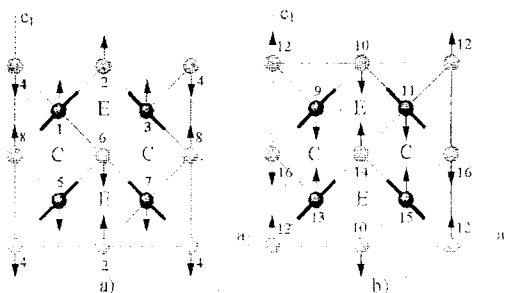


Рис. 8. Зарядовая (С-тип), орбитальная (А'-тип) и магнитная (СЕ-тип) структуры ЗУ соединения. Темные шарики—  $Mn^{3+}$ , светлые шарики—  $Mn^{4+}$ ; жирные черточки обозначают направление е-орбиталей, стрелки показывают направления магнитных моментов. Части а) и б) показывают две соседние плоскости вдоль оси Y. Числа нумеруют магнитные подрешетки.

Для моделирования магнитной структуры и спектра спиновых волн ЗУФ использовалась модель восьми (для однослойного перовскита) и шестнадцати (для перовскита и двухслойного перовскита) магнитных подрешеток (см. Рис. 8). Обменные параметры собраны в Табл. 1. Одноионная анизотропия для  $Mn^{3+}$  была взята в виде (5), анизотропия  $Mn^{4+}$  считалась несущественной.

Табл. 1. Обменные параметры некоторых ЗУ марганитов.

Соединение	$J_{mn}, K$							$T_N/\eta, K$	$T_N, K$
	$J_{12}, J_{18}, J_{45}$ $J_{56}, J_{19}, J_{16}, J_{15}$	$J_{23}, J_{38}, J_{67}, J_{47}$ $J_{1011}, J_{1116}$	$J_{14}, J_{116}, J_{25}$ $J_{59}, J_{19}, J_{12}, J_{914}$	$J_{35}, J_{34}, J_{78}$ $J_{27}, J_{112}$	$J_{19}, J_{513}$	$J_{311}, J_{715}$	$J_{210}, J_{412}$ $J_{614}, J_{816}$	— theor	— exper
$La_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$	-27	-28	6.7	6.9	31	30	15	163	155–180
$Tb_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$	-24	-21	12	10	18	19	14	135	120–140
$Pr_{0.5}Sr_{0.41}Ca_{0.09}MnO_3$	-31	-31	11	11	26	26	15	172	170
$La_{0.5}Sr_{1.5}MnO_4$	-29	-29	7.3	5.1	—	—	—	—	110
$LaSr_2Mn_2O_7$ (CE)	-30	-30	7.5	7.5	27	27	16	—	—
$LaSr_2Mn_2O_7$ , $NdSr_2Mn_2O_7$ (A*)	-27	-27	-2.3	-2.3	55	55	16	—	—
$LaSr_2Mn_2O_7$ , $NdSr_2Mn_2O_7$ (A**)	-17	-17	-17	-17	83	83	16	—	—

Наблюдаемая магнитная структура в группе  $R\bar{3}m$  для 3У фазы классифицируется как  $(G_X A'_Y C'_Z)$  для  $Mn^{3+}$  и  $(0 C_Y G_Z)$  для  $Mn^{4+}$  (или  $(C_X C_Y G_Z)$  для  $Mn^{3+}$  и  $(G_X 0 0)$  для  $Mn^{4+}$ ). Для описания этой структуры необходима модель десяти различных направлений магнитных моментов. В группе  $R2_1/m$  классификация магнитной структуры имеет вид  $(G_X G_Y C_Z)$  для каждой подрешетки  $Mn^{3+}$  для подрешетки  $Mn^{4+}$ . Она описывается двенадцатью различными направлениями спинов. Обе магнитные структуры по основным направлениям можно описать так называемой  $CE$ -структурой. Для этих структур характерно отсутствие ферромагнитной составляющей (в отличие от чистых манганитов). При этом образуются ферромагнитные зигзаги вдоль оси  $X$  ( $R\bar{3}ma$ ), которые расположены антиферромагнитно вдоль оси  $Z$  ( $R\bar{3}ma$ ). Для однослойного и двухслойного 3У манганитов получается шесть различных направлений спина. В однослойном манганите магнитная структура также имеет похожий на  $CE$  тип, а в двухслойном наблюдаются как  $CE$ -подобный ( $A'$ ) тип орбитального упорядочения, так и  $A$  тип магнитной структуры [16]. Данное различие хорошо может быть описано в предлагаемой модели орбитально-зависимых обменных параметров (см. Табл. 1).

В линейном приближении спиновых волн также исследованы дисперсионные зависимости магнонов. Характерные особенности дисперсии магнонов для зарядово-упорядоченной фазы, в отличие от чистого манганита, состоят в том, что дисперсионные зависимости вдоль осей  $a$  и  $c$  не являются одинаковыми, а дисперсионная зависимость вдоль оси  $b$  не симметрична относительно  $k=0.5$ . Последнее, скорее всего, связано с большим количеством различных обменных взаимодействий в кристалле и может быть объяснено зигзагообразными орбитальной и магнитной структурами. Также проведен анализ экспериментальных данных о влиянии внешнего магнитного поля на 3У манганиты.

В 3У манганитах, также как и в чистых манганитах, влияние редкоземельно-щелочноземельной подрешетки имеет два механизма — изменение параметров кристаллической структуры за счет лантаноидного сжатия и, как следствие, изменение орбитальной структуры и магнитных взаимодействий; и непосредственное влияние на спектр электронной структуры редкоземельных ионов. Кроме них, добавляется третий механизм, связанный со спецификой ЗУФ. Третий механизм влияния редкоземельно-щелочноземельной подрешетки — это зависимость возможного образования ЗУФ от среднего радиуса ионов в этой подрешетке.

В конце главы сформулированы выводы: 1) предположение о формировании зигзагообразной орбитальной структуры за счет кристаллических полносимметричных и ЯТ искажений и статической зарядовой структуры позволяет описать данные экспериментов по рентгеновскому и нейтронному рассеянию; 2) орбитально-зависимые магнитные взаимодействия дают возможность учета изменения кристаллической структуры в связи с заменой ионов редкоземельно-щелочноземельной подрешетки; 3) исходя из этого, можно сделать вывод о снижении температуры Нееля с уменьшением среднего радиуса редкоземельного (щелочноземельного) иона в подрешетке; 4) магнитная структура полностью определяется кристаллическими искажениями; тип орбитального (ЯТ) упорядочения определяет тип магнитной структуры и легкие оси, а поворотные искажения позволяют выделить из легких осей одну и определяют неколлинеарность; суммарный слабый ферромагнетизм в ЗУФ отсутствует; 5) влияние редкоземельно-щелочноземельной подрешетки на спектры АФМР и спиновых волн определяется тремя механизмами: через изменение кристаллической (и орбитальной) структуры; через влияние электронной структуры самих редкоземельных ионов и через разрушение зарядового порядка (при большом среднем радиусе иона) и образованием структур без статического орбитального порядка; 6) влияние внешнего магнитного поля на ЗУФ, согласно экспериментальным данным, проявляется в увеличении проводимости вплоть до полного разрушения ЗУФ.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Исследованы механизмы формирования орбитальной структуры в манганитах ( $x=0$  и  $x=0.5$ ). Установлено, что формирование орбитальной структуры чистого манганита обусловлено кооперативным эффектом Яна-Теллера. Показано, что формирование зигзагообразной орбитальной структуры в зарядово-упорядоченных манганитах происходит за счет полносимметричного и ян-теллеровского искажений, а также сдвига подрешетки четырехвалентного марганца.
2. Установлены явные зависимости обменных параметров, одноионной анизотропии и зеемановского взаимодействия от угла орбитальной структуры,  $\Phi$  для чистых и зарядово-упорядоченных манганитов. В соответствии с этими зависимостями оценены обменные параметры и температуры Нееля для манганитов с различными редкоземельно-щелочноземельными подрешетками.

3. Рассчитаны дисперсионные, полевые и угловые зависимости спектра магнонов соединений  $\text{KCuF}_3$  и  $\text{K}_2\text{CuF}_4$  в модели многих подрешеток. Показано, что орбитальная структура в этих соединениях создает тетрагональную магнитную анизотропию, индуцируемую внешним магнитным полем.
4. Построена модель взаимосвязи кристаллической, орбитальной и магнитной структур. Установлено, что в манганитах обменное взаимодействие определяет тип магнитной структуры, одноионная анизотропия определяет две легкие оси тетрагональной симметрии. Учет поворотных искажений кристалла в одноионной анизотропии понижает симметрию до орторомбической.
5. На основании расчетов полевой зависимости магнитной структуры и спектра АФМР для чистого  $\text{LaMnO}_3$  показано, что характерные особенности спектра определяются орбитальной структурой кристалла.
6. Впервые в рамках предложенной модели объяснены особенности спектров магнонов в диэлектрических манганитах. Результаты расчетов дисперсии спектров для  $\text{LaMnO}_3$  и некоторых ЗУ манганитов позволяют утверждать, что орбитальная структура в манганитах определяет анизотропные свойства дисперсионных зависимостей. Дисперсионные зависимости магнонов ЗУ манганитов заметно различаются в направлении вдоль орбитального зигзага и в перпендикулярном ему направлении.
7. Проведен анализ влияния редкоземельно-щелочноземельной подрешетки на спектры магнонов для регулярных и зарядово-порядоченных манганитов.

**Основные результаты диссертации изложены в следующих работах:**

1. Gontchar L. E., Nikiforov A. E., Popov S. E. Antiferromagnetic resonance spectrum in lanthanum manganite. Euro-Asian Symposium "Trends in Magnetism" EASTMAG-2001. Abstract book. p. 129. Ekaterinburg (2001)
2. Gontchar L. E., Nikiforov A. E., Popov S. E. Interplay between orbital, charge and magnetic orderings in  $\text{R}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$  ( $x=0, 0.5$ ). ЖМММ **223**, №2, p. 175-191 (2001)
3. Гончарь Л. Э., Никифоров А. Е., Попов С. Э. Спектр антиферромагнитного резонанса в  $\text{LaMnO}_3$ : взаимосвязь орбитальной структуры и магнитных свойств. ЖЭТФ **118**, №6(12), с. 1411-1420 (2000)

4. Гончарь Л. Э., Никифоров А. Е. Влияние орбитального упорядочения на формирование магнитной структуры в ян-теллеровском магнетике  $\text{LaMnO}_3$ . ФТТ **42**, №6, с. 1038-1042 (2000)
5. Гончарь Л. Э., Никифоров А. Е., Попов С. Э., Шапкин С. Ю. Влияние давления на кристаллическую и магнитную структуры  $\text{KCuF}_3$ . В сб. Проблемы спектроскопии и спектрометрии. Екатеринбург. с. 113–125 (1998)
6. Гончарь Л.Э., Никифоров А.Е., Попов С.Э., Лескова Ю.В. Антиферромагнитный резонанс в манганите лантана: взаимосвязь орбитальной и магнитной структур. XXXII Всероссийское совещание по физике низких температур. Тезисы докладов секции ЛТ: Низкотемпературная физика твердого тела. с. 167 Казань (2000)
7. Gontchar L. E., Nikiforov A. E., Popov S. E. The crucial role of Jahn-Teller effect in forming of orbital and magnetic structures of charge ordered manganite  $\text{R}_{0.5}\text{A}_{0.5}\text{MnO}_3$ . International Symposium on Physics in Local Lattice Distortions. Abstracts. p. 85. Ibaraki, Japan (2000)
8. Gontchar L. E., Nikiforov A. E., Popov S. E. The crucial role of Jahn-Teller effect in forming of orbital and magnetic structures of charge ordered manganite  $\text{R}_{0.5}\text{A}_{0.5}\text{MnO}_3$ . The Fifteenth International Symposium on the Jahn-Teller Effect. Abstracts. Boston, USA (2000)
9. Алябьев А. В., Гончарь Л. Э., Никифоров А. Е. Взаимосвязь между орбитальным упорядочением и магнитной структурой ян-теллеровского магнетика  $\text{LaMnO}_3$ . Оксиды. Физико-химические свойства. Сборник трудов V Всероссийской научной конференции. Екатеринбург. с. 27-30 (2000)
10. Алябьев А. В., Гончарь Л. Э., Никифоров А. Е., Попов С. Э. Магнитная структура и спиновые волны в зарядово упорядоченном манганите  $\text{R}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$  ( $x=0.5$ ). Вторая объединенная конференция по магнитоэлектронике (международная). Тезисы докладов. Екатеринбург. с. 120 (2000)
11. Алябьев А. В., Гончарь Л. Э., Никифоров А. Е., Попов С. Э. Влияние эффекта Яна-Теллера на формирование орбитальной и магнитной структур зарядово-упорядоченного соединения  $\text{Pr}_{0.5}\text{Sr}_{0.41}\text{Ca}_{0.09}\text{MnO}_3$ . Новые магнитные материалы микроэлектроники. Сборник трудов XVII международной школы-семинара. Москва. с. 102-103 (2000)
12. Гончарь Л. Э., Никифоров А. Е. Расчет спектра антиферромагнитного резонанса в манганите лантана. XXVIII Международная зимняя шко-

ла физиков-теоретиков "Коуровка-2000". Программа. Екатеринбург. с. 23 (2000)

13. Gontchar L. E., Nikiforov A. E. Computer calculation of linear spin dynamics of  $\text{KCuF}_3$ . IV Bilateral Russian-German Symposium on "Physics and chemistry of novel materials". Program and abstracts. Ekaterinburg. p.2.12 (1999)
14. Гончарь Л. Э., Никифоров А. Е. Моделирование линейной спиновой динамики во многоподрешеточном  $\text{KCuF}_3$ . XXXI Совещание по физике низких температур. Тезисы докладов. Москва. с. 132 (1998)

#### Список цитированной литературы.

1. Кугель К. И., Хомский Д. И. Эффект Яна-Теллера и магнетизм. УФН **136**, №4, с. 621–664 (1982)
2. Nikiforov A. E., Shashkin S. Yu., Levitan M. L., Agamalyan T. H. Cooperative Jahn-Teller ordering in  $\text{KCuF}_3$  and  $\text{K}_2\text{CuF}_4$  crystals. Phys. Stat. Sol. B **118**, p. 419–425 (1983)
3. Гуревич А. Г., Мелков Г. А. Магнитные колебания и волны. 464с. М.: «Наука» (1994)
4. Huang Q., Santoro A., Lynn J.W., Erwin R.W., Borchers J.A., Peng J.L., Greene R.L. Structure and magnetic order in undoped lanthanum manganite Phys. Rev. B **55**, №22, 14987–14999 (1997)
5. Matsumoto G. Study of  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ . I. Magnetic structure of  $\text{LaMnO}_3$ . J. Phys. Soc. Jap. **29**, №3, p. 606–615 (1970)
6. Jiráček Z., Krupička S., Šimša Z., Dlouhá M., Vratislav S. Neutron diffraction study of  $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$  JMMM **53**, №1&2, 153-166 (1985)
7. Mitsudo S., Hirano K., Nojiri H., Motokawa M., Hirota K., Nishizawa A., Kaneko N., Endoh Y. Submillimeter wave ESR measurement of  $\text{LaMnO}_3$ . JMMM **177-181**, p. 877-878 (1998)
8. Moussa F., Hennion M., Rodriguez-Carvajal J., Moudden H., Pinsard L., Revcolevschi A. Spin waves in the antiferromagnet perovskite  $\text{LaMnO}_3$ . Phys. Rev. B **54**, №21, p. 15149-15155 (1996)
9. Hirota K., Kaneko N., Nishizawa A., Endoh Y. Two-dimensional planar ferromagnetic coupling in  $\text{LaMnO}_3$ . J. Phys. Soc. Jap. **65**, №12, p. 3736-3739 (1996)
10. Ivanov V. Yu., Travkin V. D., Mukhin A. A., Lebedev S. P., Volkov A. A., Pimenov A., Loidl A., Baibashov A. M., Mozhaev A. V. Magnetic, dielectric, and transport properties of  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  at submillimeter wavelengths. J. Appl. Phys. **83**, №11, p. 7180-7182 (1998)

11. В. Д. Травкин, В. Ю. Иванов, А. А. Мухин, А. М. Балбашов. Анизотропия магнитных свойств и электронные возбуждения в  $\text{PbMnO}_3$  и  $\text{NdMnO}_3$ . XXXII Всероссийское совещание по физике низких температур. Тезисы докладов секции ЛТ. Стр.48. Казань (2000).
12. Damay F., Jirak Z., Hervieu M., Martin C., Maignan A., Raveau B., Andre G., Bouree F. Charge ordering and structural transitions in  $\text{Pr}_{0.5}\text{Sr}_{0.41}\text{Ca}_{0.09}\text{MnO}_3$ . *JMMM* **190**, p. 221–232 (1998)
13. Radaelli P. G., Cox D. E., Marezio M., Cheong S.-W. Charge, orbital and magnetic ordering in  $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ . *Phys. Rev. B* **55**, № 5, p. 3015–3023 (1997)
14. Blasco J., Garcia J., de Teresa J. M., Ibarra M. R., Perez J., Algarabel P. A., Marquina C., Ritter C. Charge ordering at room temperature in  $\text{Tb}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ . *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, № 47, p. 10321–10331 (1997)
15. Sterblieb B. J., Hill J. P., Wildgruber U. C., Luke G. M., Nachumi B., Morimoto Y., Tokura Y. Charge and magnetic order in  $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ . *Phys. Rev. Lett.* **76**, №12, p. 2169–2172 (1996)
16. Ling C.D., Millburn J.E., Mitchell J.F., Argyriou D.N., Linton J., Bordallo H.N. Interplay of spin and orbital ordering in the layered colossal magnetoresistance manganite  $\text{La}_{2-2x}\text{Sr}_{1+2x}\text{Mn}_2\text{O}_7$ . *Phys. Rev. B* **62**, № 22, p. 15096–15111 (2000); Akimoto T., Moritomo Y., Ohoyama K., Okamoto S., Ishihara S., Maekawa S., Hirota K., Nakamura A. Orbital stability in the spin-ordered phase of bilayer manganites as investigated by neutron-diffraction measurements. *Phys. Rev. B* **61**, №17, p. 11270–11273 (2000)

---

Подписано в печать 10.05.01

Бумага для множительных аппаратов.

Тираж 100 экз.

Заказ № 52

Екатеринбург, ул. 8 Марта, 66. Редакционно-издательский отдел УрАГС

Формат 60×84 1/16

Усл печ. л. 1,5

Отпечатано на ризографе