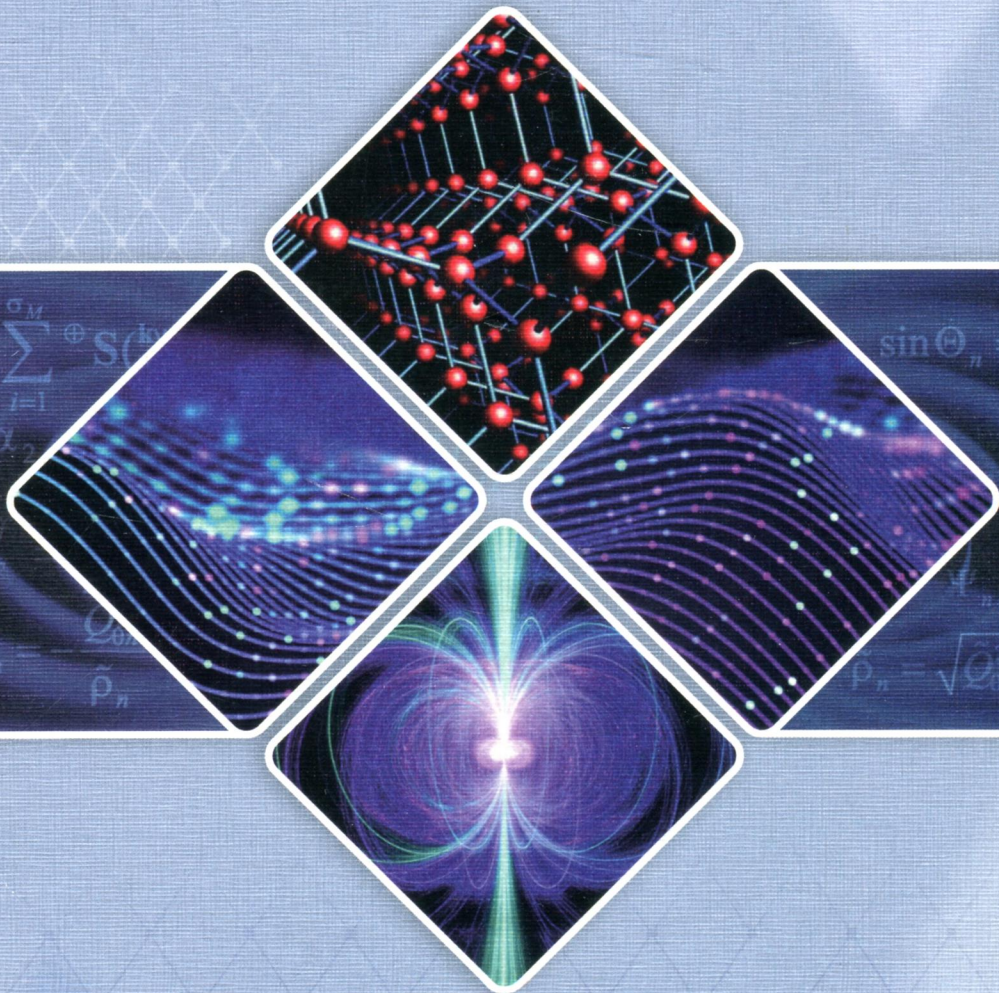


Л. Э. Гончарь

**МОДЕЛИ СВЕРХОБМЕННОГО  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ  
В ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ  
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАНГАНИТАХ**



Федеральное агентство железнодорожного транспорта  
Уральский государственный университет путей сообщения

**Л. Э. Гончарь**

**МОДЕЛИ СВЕРХОБМЕННОГО  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ  
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАНГАНИТАХ**

Монография

**L. E. Gonchar**

**MODELS OF SUPEREXCHANGE INTERACTION  
IN JAHN-TELLER INSULATING MANGANITES**

Monograph

Екатеринбург  
УрГУПС  
2023

УДК 538.955  
ББК 22.373  
Г65

Рецензенты:

*Н. В. Казанцева*, д-р физ.-мат. наук, УрГУПС  
*С. В. Стрельцов*, д-р физ.-мат. наук, профессор РАН, член-корреспондент РАН,  
Институт физики металлов им. М. Н. Михеева УрО РАН

**Гончарь, Л. Э.**

Г65 Модели сверхобменного взаимодействия в ян-теллеровских диэлектрических манганитах : монография / Л. Э. Гончарь. – Екатеринбург : УрГУПС, 2023. – 159, [1] с.

ISBN 978-5-94614-526-8

Ян-теллеровские магнитные оксиды – это соединения, вызывающие интерес как в фундаментальных, так и в прикладных исследованиях в связи с наличием сильного взаимодействия между решеточной, зарядовой, орбитальной и магнитной подсистемами кристалла. Кристаллы редкоземельных манганитов со структурой перовскита, допированные щелочноземельными элементами, – это яркие примеры данного класса соединений.

В работе исследованы особенности орбитальных структур диэлектрических перовскитоподобных манганитов и их влияние на формирование магнитных структур в модели орбитально-зависимого сверхобменного взаимодействия. Показано, каким образом орбитально-зависимый сверхобмен формирует антиферромагнитные, ферромагнитные, неколлинеарные, низкоразмерные магнитные упорядочения манганитов, в том числе в случае конкуренции обменных взаимодействий. Описаны дисперсионные зависимости спектра спиновых волн, предложен механизм влияния внешних воздействий на магнитное упорядочение и спектры спиновых волн.

Монография предназначена для магистрантов, аспирантов и научных сотрудников, интересующихся теоретическими моделями магнитных свойств твердых тел.

Jahn-Teller's magnetic oxides are compounds of interest in both fundamental and applied research due to the strong interaction between the lattice, charge, orbital and magnetic subsystems of the crystal. Rare-earth manganites with a perovskite structure, doped with alkaline earth elements, are vivid examples of this class of compounds.

The paper investigates the orbital structures of insulating perovskite-like manganites and their influence on the magnetic structures within the framework of the orbitally-dependent superexchange model. It is shown how orbitally-dependent superexchange interaction forms antiferromagnetic, ferromagnetic, non-collinear, low-dimensional magnetic orderings of manganites, including the case of competition of exchange interactions. Dispersion dependencies of the spin wave spectrum are described, a mechanism of the external forces effects on magnetic ordering and spin wave spectra is proposed.

The monograph is intended for undergraduates, graduate students and researchers interested in theoretical models of the magnetic properties of solids.

УДК 538.955  
ББК 22.373

*Издано по решению редакционно-издательского совета УрГУПС*

ISBN 978-5-94614-526-8

© Гончарь Л. Э., 2023  
© Оформление. Уральский государственный  
университет путей сообщения, 2023

# ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение .....	5
<b>Глава 1. Кристаллическая и орбитальная структуры перовскитоподобных ян-теллеровских магнетиков как причина орбитально-зависимых магнитных взаимодействий .....</b>	<b>7</b>
1.1. Высокосимметричные структуры перовскитоподобных кристаллов .....	8
1.2. Электронное строение подрешетки <i>d</i> -ионов в неискаженных фазах .....	10
1.3. Низкосимметричные фазы и орбитальная структура .....	12
1.4. Зарядовая структура .....	22
1.5. Обменное взаимодействие и одноионная анизотропия в зависимости от орбитального состояния .....	23
1.6. Анизотропные обменные взаимодействия [16] .....	33
1.7. Орбитальная зависимость одноионной анизотропии для ионов $Mn^{3+}$ в октаэдрическом окружении .....	34
1.8. Орбитальная зависимость зеемановского взаимодействия для ионов $Mn^{3+}$ в октаэдрическом окружении .....	35
<b>Глава 2. Магнитная структура и спектры магнитных возбуждений ян-теллеровских перовскитоподобных магнетиков .....</b>	<b>37</b>
2.1. Классификация магнитных структур по волновым векторам .....	37
2.2. Гамильтониан магнитной подсистемы .....	39
2.3. Приближение молекулярного поля .....	40
2.4. Линейное приближение спиновых волн .....	43
2.5. Проблемы определения частот многоподрешеточного магнетика .....	51
<b>Глава 3. Редкоземельные манганиты с общей формулой <math>RMnO_3</math>. Взаимосвязь орбитальной и магнитной подсистем. Спектры магнитных возбуждений .....</b>	<b>53</b>
3.1. Кристаллическая и орбитальная структуры $RMnO_3$ .....	54
3.2. Обменное и зеемановское взаимодействия, одноионная анизотропия .....	64
3.3. Расчет магнитной структуры $RMnO_3$ .....	68

3.4. Влияние внешнего магнитного поля на магнитную структуру $\text{LaMnO}_3$ . Расчет дисперсионных и полевых зависимостей спектров спиновых волн в $\text{LaMnO}_3$ .....	75
3.5. Влияние редкоземельной подрешетки на спектры магнитных возбуждений в чистом манганите .....	81
3.6. Влияние температуры на магнитную структуру и спектры манганита лантана .....	84
3.7. Влияние давления на магнитную подсистему .....	86
3.8. Влияние допирования немагнитным ионом (химическое давление) .....	89
<b>Глава 4. Влияние кристаллической и зарядовой структур на орбитальную и магнитную структуры в зарядово-упорядоченных манганитах. Спектры магнитных возбуждений</b> .....	<b>95</b>
4.1. Кристаллическая, зарядовая и орбитальная структуры в зарядово-упорядоченной фазе .....	98
4.2. Обменное взаимодействие в зарядово-упорядоченной фазе, одноионная анизотропия .....	112
4.3. Магнитная структура зарядово-упорядоченных манганитов .....	114
4.4. Расчет дисперсионных и полевых зависимостей спектров спиновых волн в зарядово-упорядоченной фазе .....	127
4.5. Влияние редкоземельно-щелочноземельной подрешетки на спектры возбуждений в зарядово-упорядоченной фазе .....	132
4.6. Влияние внешнего магнитного поля на зарядово-упорядоченную фазу .....	133
Заключение .....	142
Приложение .....	143
Библиографический список .....	148