

Роль локальной геометрии в формировании спиновой и орбитальной структуры соединений переходных металлов

Кугель К.И.<sup>1,\*</sup>, Хомский Д.И.<sup>2</sup>, Сбойчаков А.О.<sup>1</sup>, Стрельцов С.В.<sup>3</sup>

<sup>1)</sup> Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, Москва, Россия

<sup>2)</sup> П. Physikalisches Institut, Universität zu Köln, Germany

<sup>3)</sup> Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

\*E-mail: kugel@orc.ru

Сильнокоррелированные электронные системы с орбитальным упорядочением уже многие годы являются предметом активного исследования в физике твёрдого тела. Орбитальное упорядочение не только сопровождается изменениями кристаллической структуры (или вызывается ими), но и в значительной степени определяет магнитные свойства многих материалов, например, оксидов переходных металлов..

В случае двукратного орбитального вырождения в простых кристаллических решётках, например, в перовскитах  $\text{AMO}_3$ , где октаэдры  $\text{MO}_6$  имеют общие вершины, типичная ситуация такова, что ферро-орбитальное упорядочение приводит к антиферромагнитному обменному взаимодействию между спинами, а антиферро-орбитальное упорядочение способствует спиновому ферромагнетизму. Это утверждение стало уже чем-то вроде "фольклора", и оно часто используется для объяснения или предсказания типа магнитного упорядочения в конкретных системах. Однако оно применимо только для систем с определённым типом геометрии, а именно там, где реализуется 180-градусный сверхобмен металл-кислород-металл (М-О-М). В твёрдых телах реализуется много других ситуаций, где это общее положение (ферро-орбитали-антиферро-спины и наоборот) может не работать и действительно не работает. Одна из таких ситуаций возникает тогда, когда у соседних ионов переходного металла имеется два общих кислорода, т.е. для систем, где октаэдры  $\text{MO}_6$  имеют общую сторону и сверхобмен М-О-М уже 90-градусного типа. Обе эти ситуации, когда октаэдры  $\text{MO}_6$  либо общую вершину, либо общую сторону, довольно хорошо изучены теоретически. Существует, однако, еще и третья, хуже изученная ситуация, когда октаэдры  $\text{MO}_6$  имеют общую грань. Здесь сверхобмен осуществляется через три кислорода. В этом случае ситуация с орбитальным упорядочением и с соответствующим обменным взаимодействием (спиновым и орбитальным) практически не исследовалась. Тем не менее, существует множество соединений переходных металлов с такой геометрией. Таковы, например, гексагональные кристаллы  $\text{BaCoO}_3$  и  $\text{CsCuCl}_3$ , содержащие бесконечные цепочки октаэдров с общими гранями, и ряд подобных систем с конечными отрезками таких цепочек, в частности,  $\text{BaIrO}_3$  или  $\text{BaRuO}_3$ .

Мы рассматриваем вид спин-орбитального сверхобмена для соединений переходных металлов с двукратным и трехкратным орбитальным вырождением, когда соседние ионы переходных металлов окружены кислородными октаэдрами с общими гранями. Одним удивительным результатом нашего исследования является то, что в отличие от систем с двукратным орбитальным вырождением типа перовскитов со 180-градусными М-О-М связями, где орбитальная часть в гамильтониане имеет довольно сложную анизотропную форму, в геометрии с общими гранями для орбиталей реализуется симметричная модель гейзенберговского типа. Зачастую в такой геометрии октаэдры  $\text{MO}_6$  имеют тригональные искажения. Эти локальные искажения ведут к расщеплению трехкратно вырожденных  $t_{2g}$ -уровней на синглет  $a_{1g}$  и дублет  $e_g^\pi$ . Мы демонстрируем, что для частично заполненного дублета  $e_g^\pi$  вид сверхобменного гамильтониана практически такой же, как и для "настоящих"  $e_g$ -электронов, но в этом случае орбитальный момент не заморожен и ненулевая спин-орбита приводит к весьма нетривиальным эффектам, которых мы также касаемся в нашем докладе [1, 2].

1. Kugel K.I., Khomskii D.I., Sboychakov A.O., Streltsov S.V., Phys. Rev. B, **91**, 155125 (2015)

2. Кугель К.И., Хомский Д.И., Сбойчаков А.О., Стрельцов С.В., ЖЭТФ, **149**, № 3 (2016), в печати