## ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 537.611:537.635

# СПИНОВЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В НЕКОЛЛИНЕАРНОЙ МАГНИТНОЙ ФАЗЕ СОЕДИНЕНИЯ LaMn<sub>2</sub>O<sub>5</sub>

## © 2019 г. В. В. Меньшенин\*

Институт физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия \*e-mail: menshenin@imp.uran.ru Поступила в редакцию 01.11.2018 г. После доработки 11.12.2018 г. Принята к публикации 17.12.2018 г.

Исследована спиновая динамика соединения  $LaMn_2O_5$ , содержащего ионы марганца с разными зарядами в двух кристаллографических позициях. Описание динамики основано на уравнениях движения для неприводимых спиновых операторов. Показано, что наличие неколлинеарного антиферромагнитного упорядочения ионов марганца в разных кристаллографических позициях приводит к необходимости помимо определения частот спиновых возбуждений формулировать также условия устойчивости магнитного состояния, относительно которого рассматриваются динамические процессы.

*Ключевые слова:* манганат лантана, неприводимые спиновые операторы, неколлинеарность спинов, магнитный резонанс

DOI: 10.1134/S0015323019050115

#### **ВВЕДЕНИЕ**

Соединение  $LaMn_2O_5$  относится к классу магнитных систем с общей формулой  $RMn_2O_5$  (R-редкоземельный элемент, Bi или Y), представляющих интерес в связи с тем, что для редкоземельных элементов тяжелее неодима, а также для Bi или Y, в магнитоупорядоченной фазе этих соединений наблюдается электрическая поляризация. В оксиде  $LaMn_2O_5$  спонтанная электрическая поляризация не обнаружена экспериментально, однако она может проявляться в динамических процессах, благодаря магнитоэлектрическому эффекту. Поэтому представляет интерес исследовать динамические эффекты, связанные с магнитной подсистемой этого соединения.

Нейтронографическое исследование оксида LaMn<sub>2</sub>O<sub>5</sub> показало наличие при температурах ниже 31 К пиков, соответствующих волновому вектору  $\mathbf{k} = (0, 0, 1/2)$  [1]. Эти пики указывают на магнитное упорядочение с магнитной решеткой, удвоенной в направлении оси *z* кристалла. Было установлено, что магнитные моменты ионов Mn<sup>3+</sup> (позиция 4*h*) имеют упорядочение *G* и *A* типа, а магнитные моменты ионов Mn<sup>4+</sup> (позиция 4*f*) упорядочиваются по *C*-типу. Найденному волновому вектору магнитной структуры в пространственной группе Pbam (D<sup>9</sup><sub>2h</sub>) соответствуют только одномерные неприводимые представления, совпадающие с представлениями для волнового вектора  $\mathbf{k} = 0$ . Это позволяет довольно просто определить, базисными функциями каких представлений являются векторы G, A и C-типа, определяющие основное состояние магнитной подсистемы рассматриваемого соединения. При этом нужно принять во внимание четность или нечетность элементов симметрии пространственной группы по отношению к перестановка магнитных ионов [2, 3]. В работе [4] было показано, что С-тип упорядочения связан с полностью симметричным представлением (т<sub>1</sub> в обозначениях монографии [5]), тогда как G- и A-типы связаны с представлением  $\tau_2$ , в котором инверсия является нечетным элементом симметрии для обоих типов магнитного упорядочения, т.е. для ионов Mn<sup>3+</sup> может наблюдаться магнитоэлектрический эффект. Базисные функции всех неприводимых представлений, выраженные через компоненты магнитных векторов соединения LaMn<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, приведены в работах [3, 6].

Поскольку в данном соединении имеется восемь магнитных подрешеток, то описание динамики этой подсистемы является непростой задачей. В рамках феноменологического подхода, например, необходимо написать уравнения движения для векторов магнитных моментов всех подрешеток и ре-

шить полученную систему уравнений. Решение этой системы уравнений в принципе позволяет определить частоты спиновых возбуждений оксида, в частности, частоты магнитного резонанса, относительно найденного из экспериментальных данных основного состояния. Упрощение этой задачи может достигаться путем использования спин-волновых представлений [2], позволяющих существенно сократить число динамических переменных, которые нужно принять во внимание, для разных типов магнитных возбуждений. Целью работы является определение частот магнитного резонанса в соединении LaMn<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. Для решения этой задачи мы воспользуемся общей процедурой вычисления собственных частот однородных колебаний спиновой подсистемы магнетика, предложенной в работе [7]. При этом учет симметрии системы проводится в процессе написания и линеаризации уравнений движения. Уравнения движения пишутся для неприводимых относительно пространственной группы спиновых операторов, которые в общем случае не являются операторами малых отклонений спинов от равновесного направления [7].

## НЕПРИВОДИМЫЕ СПИНОВЫЕ ОПЕРАТОРЫ

Опрелеление частот магнитного резонанса. т.е. однородных колебаний магнитной подсистемы, в данном подходе предполагает знание гамильтониана магнитной подсистемы изучаемого оксида. Построение этого гамильтониана будет проведено аналогично построению термодинамического потенциала в феноменологическом подходе, когда известны базисные функции неприводимых представлений (НП) пространственной группы кристалла и четность элементов пространственной симметрии относительно перестановок магнитных атомов. Использование этих базисных функций и их свойств симметрии в микроскопическом подходе для записи магнитного гамильтониана было предложено в работе [7], где введено понятие неприводимых спиновых операторов, которые обладают тем свойством. что средние значения компонент этих операторов являются базисными функциями НП пространственной группы. Это означает, что под действием элементов пространственной группы эти компоненты преобразуются аналогично их средним значениям.

Обозначим через  $\hat{S}^{\alpha}_{m\mu}$  компоненту  $\alpha$  (*x*, *y*, *z*) спинового оператора для спина, локализованного на магнитном ионе *m*-й элементарной ячейки, в позиции µ в этой ячейке. Поскольку ионы лантана не обладают магнитным моментом, эти компоненты относятся только к ионам марганца. При температуре T = 0 в однородном случае гамильтониан оксида можно записать через величины [7]

$$\hat{S}^{\alpha}_{\mu} = \sum_{m} \hat{S}^{\alpha}_{m\mu},\tag{1}$$

где суммирование проводится по всем элементарным ячейкам кристалла. Эти величины имеют смысл компоненты  $\alpha$  оператора магнитного момента  $\mu$ -й магнитной подрешетки оксида. Этот индекс принимает значения  $\mu = 1, 2, 3, 4$  для ионов  $Mn^{4+}$  и  $\mu = 5, 6, 7, 8$  для ионов  $Mn^{3+}$ . Выражения для неприводимых спиновых операторов ионов  $Mn^{4+}$  имеют вид

$$\hat{L}_{1}^{A} = \hat{S}_{1} - \hat{S}_{2} - \hat{S}_{3} + \hat{S}_{4}, 
\hat{L}_{1}^{G} = \hat{S}_{1} - \hat{S}_{2} + \hat{S}_{3} - \hat{S}_{4}, 
\hat{L}_{1}^{C} = \hat{S}_{1} + \hat{S}_{2} - \hat{S}_{3} - \hat{S}_{4}, 
\hat{M}_{f} = \hat{S}_{1} + \hat{S}_{2} + \hat{S}_{3} + \hat{S}_{4}.$$
(2)

Для ионов Мп<sup>3+</sup>

$$\hat{L}_{2}^{A} = \hat{S}_{5} - \hat{S}_{6} - \hat{S}_{7} + \hat{S}_{8}, 
\hat{L}_{2}^{G} = \hat{S}_{5} - \hat{S}_{6} + \hat{S}_{7} - \hat{S}_{8}, 
\hat{L}_{2}^{C} = \hat{S}_{5} + \hat{S}_{6} - \hat{S}_{7} - \hat{S}_{8}, 
\hat{M}_{h} = \hat{S}_{5} + \hat{S}_{6} + \hat{S}_{7} + \hat{S}_{8}.$$
(3)

Компоненты спиновых операторов, средние значения которых являются базисными функциями НП пространственной группы, также можно считать базисными функциями этих же НП.

## МАГНИТНЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН

Учитывая равенства (2) и (3) и таблицу базисных функций НП пространственной группы, гамильтониан магнитной подсистемы можно записать в виде

$$H = H_{Mn^{4+} - Mn^{4+}} + H_{Mn^{3+} - Mn^{3+}} + H_{Mn^{3+} - Mn^{4+}}, \qquad (4)$$

где первое слагаемое в последнем равенстве учитывает взаимодействие спинов ионов  $Mn^{4+}$ , второе слагаемое описывает взаимодействие спинов ионов  $Mn^{3+}$ , а последний член учитывает их взаимодействие между собой. Явные выражения этих слагаемых в гамильтониане имеют вид:

$$\begin{split} H_{\mathrm{Mn}^{4+}-\mathrm{Mn}^{4+}} &= C_{1z} (\hat{L}_{1z}^{C})^{2} + C_{1y} (\hat{L}_{1y}^{C})^{2} + \\ &+ C_{1x} (\hat{L}_{1x}^{C})^{2} + A_{1z} (\hat{L}_{1z}^{A})^{2} + A_{1y} (\hat{L}_{1y}^{A})^{2} + A_{1x} (\hat{L}_{1x}^{A})^{2} + \\ &+ G_{1z} (\hat{L}_{1z}^{G})^{2} + G_{1y} (\hat{L}_{1y}^{G})^{2} + G_{1x} (\hat{L}_{1x}^{G})^{2} + \\ &+ F_{1z} (\hat{M}_{fz})^{2} + F_{1y} (\hat{M}_{fy})^{2} + F_{1x} (\hat{M}_{fx})^{2} + \\ &+ Q_{1} \hat{M}_{fx} \hat{L}_{1y}^{C} + Q_{2} \hat{M}_{fy} \hat{L}_{1x}^{C} + \\ &+ D_{1xy} \hat{L}_{1x}^{A} \hat{L}_{1y}^{G} + D_{2xy} \hat{L}_{1x}^{G} \hat{L}_{1y}^{A}, \end{split}$$
(5)

$$H_{\mathrm{Mn}^{3+}-\mathrm{Mn}^{3+}} = C_{2z}(\hat{L}_{2z}^{C})^{2} + C_{2y}(\hat{L}_{2y}^{C})^{2} + C_{2x}(\hat{L}_{2x}^{A})^{2} + A_{2z}(\hat{L}_{2z}^{A})^{2} + A_{2y}(\hat{L}_{2y}^{A})^{2} + A_{2x}(\hat{L}_{2x}^{A})^{2} + G_{2z}(\hat{L}_{2z}^{G})^{2} + G_{2y}(\hat{L}_{2y}^{G})^{2} + G_{2x}(\hat{L}_{2x}^{G})^{2} + F_{2z}(\hat{M}_{hx})^{2} + F_{2y}(\hat{M}_{hy})^{2} + F_{2x}(\hat{M}_{hx})^{2} + Q_{3}\hat{M}_{hx}\hat{L}_{2y}^{C} + Q_{4}\hat{M}_{hy}\hat{L}_{2x}^{C} + D_{3xy}\hat{L}_{2x}^{G}\hat{L}_{2y}^{A} + D_{4xy}\hat{L}_{2x}^{A}\hat{L}_{2y}^{G},$$

$$H_{abc} = -W_{abc}\hat{T}^{C}\hat{T}^{C} + W_{abc}\hat{T}^{G}\hat{T}^{A} + W_{abc}\hat{T}^{G}\hat{T}^{G} + W_{abc}\hat{T}^{C}\hat{T}^{C} + W_{abc}\hat{T}^{T$$

$$\begin{split} H_{\mathrm{Mn}^{3+}-\mathrm{Mn}^{4+}} &= W_{1}L_{1z}^{c}L_{2z}^{c} + W_{2}L_{1z}^{c}L_{2y}^{A} + W_{3}L_{1z}^{c}L_{2x}^{O} + \\ &+ W_{4}\hat{L}_{1x}^{A}\hat{L}_{2z}^{A} + W_{5}\hat{L}_{1y}^{G}\hat{L}_{2z}^{A} + W_{6}\hat{L}_{1y}^{A}\hat{L}_{2z}^{G} + \\ &+ W_{7}\hat{L}_{1x}^{G}\hat{L}_{2z}^{C} + W_{8}\hat{L}_{1z}^{A}\hat{L}_{2x}^{A} + W_{9}\hat{L}_{1z}^{A}\hat{L}_{2y}^{G} + \\ &+ W_{10}\hat{L}_{1y}^{C}\hat{L}_{2y}^{C} + W_{11}\hat{L}_{1x}^{C}\hat{L}_{2x}^{C} + F_{3}\hat{M}_{fx}\hat{M}_{hx} + \\ &+ F_{4}\hat{M}_{fy}\hat{M}_{hy} + F_{5}\hat{M}_{fz}\hat{M}_{hz} + Q_{5}\hat{M}_{fx}\hat{L}_{2y}^{C} + \\ &+ Q_{6}\hat{M}_{hx}\hat{L}_{1y}^{C} + Q_{7}\hat{M}_{fy}\hat{L}_{2x}^{C} + Q_{8}\hat{M}_{hy}\hat{L}_{1x}^{C}. \end{split}$$

В равенствах (5)–(7) все константы  $C_{i\alpha}$ ,  $A_{i\alpha}$ ,  $G_{i\alpha}$ ,  $F_{i\alpha}$ ,  $D_{i\alpha\beta}$  ( $i = 1, 2, \alpha, \beta = x, y, z$ ),  $Q_j$  (j = 1,...,8),  $F_n$  (n = 3, 4, 5) и  $W_p$  (p = 1,...,11) являются независимыми величинами, поскольку входят в качестве коэффициентов при независимых инвариантах относительно преобразований пространственной группы. Константы  $C_{i\alpha}$ ,  $A_{i\alpha}$ ,  $G_{i\alpha}$ ,  $F_{i\alpha}$  содержат часть, связанную с изотропными обменными взаимодействиями между спинами в одной и той же кристаллографической позиции атомов Mn. Константы W<sub>n</sub> (p = 1, 10, 11) включают часть, соответствующую изотропному обменному взаимодействию между спинами атомов Mn в разных кристаллографических позициях. Обратим внимание на следующее обстоятельство. В основном состоянии для ионов  ${
m Mn}^{3+}$  отличны от нуля средние значения  $\langle \hat{L}^G_{2x} \rangle$ ,  $\left< \hat{L}^{A}_{2y} \right>$  соответствующих операторов, тогда как для ионов Mn<sup>4+</sup> не равно нулю среднее значение  $\langle \hat{L}_{2z}^{C} \rangle$ . Принимая во внимание наличие изотропного обмена между спинами ионов марганца в разных кристаллографических позициях, это означает наличие неколлинеарного магнитного упорядочения.

Частоты магнитного резонанса будем определять из системы линейных дифференциальных уравнений для неприводимых спиновых операторов, имеющих вид [7]

$$i\dot{a} = [a, H],\tag{8}$$

где a — один из неприводимых спиновых операторов, приведенных выше. Линеаризация этих уравнений в приближении, аналогичном приближению случайных фаз [7], соответствует при температуре T = 0 спин-волновому приближению. Линеаризация производится с помощью замены произведения двух операторов  $\hat{a}\hat{b}$  на выражение  $\hat{a}\hat{b} \rightarrow \langle \hat{a}\rangle\langle \hat{b}\rangle + \hat{a}\langle \hat{b}\rangle + \hat{a}\langle \hat{b}\rangle + \langle \hat{a}\rangle\hat{b}$ , где  $\langle \hat{a}\rangle, \langle \hat{b}\rangle$  —

средние значения неприводимых спиновых операторов.

Для компонент спиновых операторов выполняются следующие коммутационные соотношения, которые просто выводятся на основании равенств (2), (3) и коммутационного соотношения для оператора углового момента:

$$[\hat{M}_{x}, \hat{M}_{y}] = [\hat{L}_{x}^{A}, \hat{L}_{y}^{A}] = [\hat{L}_{x}^{G}, \hat{L}_{y}^{G}] = = [\hat{L}_{x}^{C}, \hat{L}_{y}^{C}] = iM_{z}, [\hat{M}_{x}, \hat{M}_{y}^{A}] = [\hat{L}_{x}^{C}, \hat{L}_{y}^{C}] = i\hat{L}_{z}^{A},$$
(9)  
  $[\hat{M}_{x}, \hat{M}_{y}^{C}] = [\hat{L}_{x}^{G}, \hat{L}_{y}^{A}] = i\hat{L}_{z}^{C}, [\hat{M}_{x}, \hat{M}_{y}^{G}] = [\hat{L}_{x}^{C}, \hat{L}_{y}^{A}] = i\hat{L}_{z}^{G},$ 

а остальные коммутаторы получаются циклической перестановкой индексов *x*, *y*, *z*. Операторы, относящиеся к разным кристаллографическим позициям, коммутируют между собой.

Спиновые возбуждения, которые ниже будут рассмотрены. представляют собой однородные колебания, соответствующие волновому вектору возбуждения, равному нулю. Рассмотрение этих колебаний в рамках используемого подхода оказывается возможным, поскольку НП пространственной группы, как выше отмечено, совпадают для нулевого волнового вектора и волнового вектора, соответствующего магнитной структуре. Упрощение описания этих возбуждений основывается на использовании спин-волновых представлений [2, 3], которые позволяют отобрать те динамические переменные, которые оказываются связанными при спиновых возбуждениях. Способ их определения для одномерных представлений описан в [2]. Рассмотрим спин-волновые представления для НП т2. Относительно этого представления, базисными функциями которого являются средние  $\langle \hat{L}_{2x}^{G} \rangle$ ,  $\langle \hat{L}_{2y}^{A} \rangle$ , спин-волновыми представлениями оказываются  $\tau_{56}$ ,  $\tau_{78}$ ,  $\tau_{12}$ . Представление  $\tau_{56}$ характеризуется следующими операторами, являющимися динамическими переменными задачи  $\hat{M}_{_{fy}}, \hat{M}_{_{hy}}, \hat{L}^{C}_{_{1x}}, \hat{L}^{C}_{_{2x}}, \hat{L}^{A}_{_{1y}}, \hat{L}^{G}_{_{1x}}, \hat{L}^{G}_{_{2z}}$ , для представления  $au_{_{78}}$ динамическими переменными будут  $\hat{L}^{A}_{1z}$ ,  $\hat{L}^{A}_{2x}$ ,  $\hat{L}^{G}_{2y}$ ,  $\hat{M}_{fz}, \, \hat{M}_{hz}$ , представление  $au_{12}$  задают следующие переменные  $\hat{L}_{1z}^{C}, \hat{L}_{2z}^{C}, \hat{L}_{1z}^{G}, \hat{L}_{2v}^{A}, \hat{L}_{2v}^{G}$ .

#### ЧАСТОТЫ МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА

Рассмотрим сначала частоты однородных спиновых колебаний, соответствующие спин-волновому представлению  $\tau_{78}$ . Исходя из уравнения (8) с учетом расцепления операторов, приведенного

ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ И МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ том 120 № 5 2019

выше, уравнения движения для операторов динамических переменных имеют вид

$$\frac{dM_{hz}}{dt} + K_1 \hat{L}_{2x}^A - K_2 \hat{L}_{2y}^G = 0,$$

$$\frac{d\hat{L}_{2x}^A}{dt} + K_5 \hat{L}_{2y}^G - K_6 \hat{M}_{hz} = 0,$$

$$\frac{d\hat{L}_{2y}^G}{dt} - K_3 \hat{L}_{2x}^A + K_4 \hat{M}_{hz} = 0,$$
(10)

где величины  $K_i$  (i = 1,...,6) равны

$$K_{1} = 2A_{2y} \left\langle \hat{L}_{2y}^{A} \right\rangle + (D_{3xy} + D_{4xy}) \left\langle \hat{L}_{2x}^{G} \right\rangle,$$

$$K_{2} = 2G_{2x} \left\langle \hat{L}_{2x}^{G} \right\rangle + (D_{3xy} + D_{4xy}) \left\langle \hat{L}_{2y}^{A} \right\rangle,$$

$$K_{3} = K_{5} = W_{1} \left\langle \hat{L}_{1z}^{C} \right\rangle, \qquad(11)$$

$$K_{4} = 2G_{2} \left\langle \hat{L}_{0}^{G} \right\rangle + D_{2} \left\langle \hat{L}_{1}^{A} \right\rangle + 2F_{2} \left\langle \hat{L}_{0}^{G} \right\rangle$$

$$K_{4} = 2G_{2x} \langle L_{2x} \rangle + D_{3xy} \langle L_{2y} \rangle + 2F_{2z} \langle L_{2x} \rangle,$$
  

$$K_{6} = 2A_{2y} \langle \hat{L}_{2y}^{A} \rangle + D_{3xy} \langle \hat{L}_{2x}^{G} \rangle - 2F_{2z} \langle \hat{L}_{2y}^{A} \rangle.$$

Коэффициенты в последнем из равенств (11) описывают обменную связь между спинами ионов марганца с разными зарядовыми состояниями, при этом направления спинов на ионах Mn<sup>4+</sup> остаются неизменными. Частоты однородных колебаний определяются из решения уравнения

$$-i\omega^{3} + i\omega(K_{1}K_{3} + K_{2}K_{4} + K_{6}K_{5}) + K_{1}K_{5}K_{4} - K_{2}K_{3}K_{6} = 0.$$
(12)

Это уравнение имеет действительные корни только в том случае, если свободный член обращается в нуль, т.е.

$$K_5(K_1K_4 - K_2K_3) = 0. (13)$$

Фактически это уравнение определяет условие устойчивости магнитного состояния системы. Это следует из того факта, что при отличном от нуля свободном члене в уравнении (12) оно имеет чисто мнимое решение, т.е. квадрат частоты оказывается отрицательным. Это обстоятельство указывает на неустойчивость магнитной конфигурации, относительно которой рассматривается возбуждение. Обращение в нуль константы  $K_5$ , как видно из (11), означает отсутствие обменной связи между спинами ионов марганца с разными зарядовыми состояниями. Поэтому это условие не представляет интереса, ввиду наличия такого взаимодействия. Обращение в нуль второго сомножителя в равенстве (13) эквивалентно условию

$$\begin{pmatrix} 2A_{2y} \langle \hat{L}_{2y}^{A} \rangle + (D_{3xy} + D_{4xy}) \langle \hat{L}_{2x}^{G} \rangle \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} 2G_{2x} \langle \hat{L}_{2x}^{G} \rangle + D_{3xy} \langle \hat{L}_{2y}^{A} \rangle + 2F_{2z} \langle \hat{L}_{2x}^{G} \rangle \end{pmatrix} = \\ = \begin{pmatrix} 2G_{2x} \langle \hat{L}_{2x}^{G} \rangle + (D_{3xy} + D_{4xy}) \langle \hat{L}_{2y}^{A} \rangle \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} 2A_{2y} \langle \hat{L}_{2y}^{A} \rangle + D_{3xy} \langle \hat{L}_{2x}^{G} \rangle - 2F_{2z} \langle \hat{L}_{2y}^{A} \rangle \end{pmatrix}.$$

$$(14)$$

Оно может быть реализовано, например, если справедливы соотношения

$$\left\langle \hat{L}_{2y}^{A} \right\rangle = \left\langle \hat{L}_{2x}^{G} \right\rangle, \ G_{2x} = A_{2y}, \ F_{2z} = 0.$$
 (15)

В рассматриваемой ситуации частота однородных колебаний спинов равна

$$\omega = (K_1 K_3 + K_2 K_4 + K_5 K_6)^{1/2}.$$
 (16)

Подставляя в правую часть уравнения (12) значения констант из (11), получим выражение для частоты однородных колебаний, выраженные через независимые константы гамильтониана

$$\omega = \left( 4A_{2y}[A_{2y} - F_{2z}] \left\langle \widehat{L_{2x}^{A}} \right\rangle^{2} + 4G_{2x}[G_{2x} + F_{2z}] \left\langle \widehat{L_{2x}^{G}} \right\rangle^{2} + (A_{2y} + G_{2x})(4D_{3xy} + 2D_{4yx}) \left\langle \widehat{L_{2y}^{A}} \right\rangle \left\langle \widehat{L_{2x}^{G}} \right\rangle + \left\langle W_{1}\widehat{L_{2z}^{C}} \right\rangle^{2} \right)^{1/2}.$$

$$(17)$$

Эта мода представляет собой оптическое спиновое возбуждение.

Рассмотрим теперь спин-волновое представление  $\tau_{12}$ . В этом случае в однородном колебательном движении участвуют компоненты  $\hat{L}_{1z}^{C}$ ,  $\hat{L}_{1y}^{A}$ ,  $\hat{L}_{1x}^{G}$ . Уравнения движения для неприводимых спиновых операторов имеют вид

$$\frac{d\widehat{L_{2z}^{C}}}{dt} - K_{1}'\widehat{L_{2x}^{G}} - K_{2}'\widehat{L_{2y}^{A}} = 0$$

$$\frac{d\widehat{L_{2y}^{A}}}{dt} - K_{3}'\widehat{L_{2z}^{C}} - K_{4}'\widehat{L_{2x}^{G}} = 0,$$

$$\frac{d\widehat{L_{2x}^{G}}}{dt} - K_{5}'\widehat{L_{2z}^{C}} - K_{6}'\widehat{L_{2y}^{A}} = 0.$$
(18)

Гле

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{1}^{'} &= 2(G_{2x} - A_{2y}) \left\langle \hat{L}_{2y}^{A} \right\rangle - 2D_{3xy} \left\langle \hat{L}_{2x}^{G} \right\rangle - W_{2} \left\langle \hat{L}_{2z}^{C} \right\rangle, \\ \mathbf{K}_{2}^{'} &= 2(G_{2x} - A_{2y}) \left\langle \hat{L}_{2x}^{A} \right\rangle + 2D_{3xy} \left\langle \hat{L}_{2y}^{A} \right\rangle, \\ \mathbf{K}_{3}^{'} &= 2(C_{2z} - G_{2x}) \left\langle \hat{L}_{2x}^{G} \right\rangle - D_{3xy} \left\langle \hat{L}_{2y}^{A} \right\rangle, \\ \mathbf{K}_{4}^{'} &= -\mathbf{K}_{6}^{'} = \mathbf{K}_{3}, \\ \mathbf{K}_{5}^{'} &= 2(A_{2y} - G_{2z}) \left\langle \hat{L}_{2y}^{A} \right\rangle - D_{3xy} \left\langle \hat{L}_{2x}^{G} \right\rangle - W_{2} \left\langle \hat{L}_{1z}^{C} \right\rangle. \end{aligned}$$
(19)

Уравнение для определения частот записывается следующим образом

$$\omega^{3} + \omega(K_{1}'K_{5}' + K_{2}'K_{3}' + K_{4}'K_{6}') - (20) - i(K_{1}'K_{3}'K_{6}' + K_{2}'K_{4}'K_{5}') = 0,$$

ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ И МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ том 120 № 5 2019

а условие устойчивости магнитной конфигурации определяется теперь равенством

$$(K'_2K'_5 - K'_1K'_3) = 0.$$
(21)

Частота однородных колебаний равна

$$\omega = (-K_1'K_5' - K_2'K_3' - K_4'K_6')^{1/2}.$$
 (22)

В данном случае найденная мода колебаний оказывается антиферромагнитной модой, для которой имеет место обменное усиление. Действительно, в приближении

$$\left\langle \hat{L}_{2y}^{A} \right\rangle \sim \left\langle \hat{L}_{2x}^{G} \right\rangle, \ \left| A_{2y} \right| \sim \left| G_{2x} \right| > \left| W_{1} \right|$$

и других констант, получим следующее значение квадрата частоты однородных магнитных колебаний

$$\omega^{2} = -D_{3xy}[4(A_{2y} + G_{2x}) - 12C_{2z}] \left\langle \hat{L}_{2y}^{A} \right\rangle \left\langle \hat{L}_{2x}^{G} \right\rangle.$$
(23)

В равенстве (23) предполагается, что константа  $D_{3xy}$  положительна.

Рассмотрим теперь последнее возможное спинволновое представление  $\tau_{56}$ . В этом случае частоты однородных спиновых колебаний определяются из решения системы семи связанных линейных дифференциальных уравнений для динамических переменных  $\hat{M}_{fy}$ ,  $\hat{M}_{hy}$ ,  $\hat{L}_{1x}^{C}$ ,  $\hat{L}_{2x}^{A}$ ,  $\hat{L}_{1y}^{A}$ ,  $\hat{L}_{1x}^{G}$ ,  $\hat{L}_{2z}^{G}$ , относящихся к обеим кристаллографическим позициям ионов марганца. Получаемое уравнение для определения частот оказывается уравнением седьмой степени, точные решения которого можно найти только численно. Укажем, впрочем, частный случай, когда указанная система может быть проанализирована аналитически. Предположим, что выполняется условие

$$\left\langle \hat{L}_{2y}^{A} \right\rangle \sim \left\langle \hat{L}_{2x}^{G} \right\rangle \gg \left\langle \hat{L}_{2z}^{C} \right\rangle.$$
 (24)

Тогда слагаемыми, содержащими величину  $\langle \hat{L}_{1z}^{C} \rangle$ , можно пренебречь. В этом случае уравнения для динамических переменных, относящих-ся к ионам Mn<sup>4+</sup>, отщепляются. Возникают две пары связанных между собой уравнений, которые приводят к двум частотам однородных колебаний спинов этой подсистемы

$$\omega^{2} = W_{3} \left\langle \hat{L}_{2x}^{G} \right\rangle \left( W_{2} \left\langle \hat{L}_{2y}^{A} \right\rangle + W_{3} \left\langle \hat{L}_{2x}^{G} \right\rangle \right),$$
  
$$\omega^{2} = \left( W_{2} \left\langle \hat{L}_{2y}^{A} \right\rangle + W_{3} \left\langle \hat{L}_{2x}^{G} \right\rangle \right)^{2}.$$
 (25)

Однако для полного расцепления уравнений, описывающих колебания спинов ионов Mn<sup>3+</sup>и Mn<sup>4+</sup> необходимо выполнение условий

$$|A_{2y}|, |G_{2x}| \gg |W_{11}|, W_6, W_7, Q_7.$$
 (26)

ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ И МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ том 120 № 5 2019

В этом приближении квадрат частоты однородных спиновых колебаний для ионов Mn<sup>3+</sup> равен

$$\omega^{2} = -D_{3xy}[2(A_{2y} + G_{2x})] \left\langle \hat{L}_{2y}^{A} \right\rangle \left\langle \hat{L}_{2x}^{G} \right\rangle.$$
(27)

Снова имеет место обменно-усиленная антиферромагнитная мода.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрены однородные спиновые возбуждения с волновым вектором  $\mathbf{k} = 0$  в соединении LaMn<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, обладающем неколлинеарным упорялочением магнитных моментов, локализованных на ионах Mn в позициях 4*h* и 4*f*. Задачу решали с использованием неприводимых спиновых операторов [7], обладающих тем свойством, что проекции средних значений этих операторов являются базисными функциями НП пространственной группы рассматриваемого соединения, соответствующих волновому вектору  $\mathbf{k} = (0, 0, 1/2)$ . Важным свойством этой группы является то, что указанные представления совпадают с представлениями для нулевого вектора. Последнее условие позволяет анализировать однородные в пространстве динамические процессы магнитной подсистемы изучаемого оксида. Для анализа этих процессов записан гамильтониан магнитной системы с помощью неприводимых спиновых операторов. Динамику спинов описывали с помошью линеаризованных уравнений движения для неприводимых спиновых операторов. Упрощение описания динамики спинов достигали путем определения спин-волновых представлений, позволяющих определить те динамические переменные, которые участвуют в динамическом процессе. Показано, что относительно представления  $\tau_2$ пространственной группы, базисными функция-

ми которого являются средние  $\langle \hat{L}_{2x}^G \rangle$ ,  $\langle \hat{L}_{2y}^A \rangle$ , имеются три спин-волновых представления. При записи уравнений движения для динамических переменных принимали также во внимание, что для спинов, локализованных на ионах Mn<sup>4+</sup>, отлично от нуля среднее  $\left< \hat{L}_{1z}^{C} \right>$ . Показано, что наличие неколлинеарности магнитной структуры в системе приводит к тому. что динамические уравнения движения имеют решения, соответствующие положительным частотам только при выполнении условий, определяющих устойчивость спиновой конфигурации, относительно которой происходят спиновые возбуждения. При этом условия устойчивости получаются из тех же динамических уравнений для спиновых операторов, что и частоты колебаний. Установлено, что для спинволнового представления  $\tau_{78}$  мода однородных спиновых колебаний является оптической, энергетическая щель которой определяется в основном константами обменного взаимодействия. Представление  $\tau_{12}$  характеризуется антиферромагнитной модой с обменным усилением энергетической щели. В вышеописанных модах колебания совершают только спины, относящиеся к ионам марганца  $Mn^{3+}$ . Спины ионов  $Mn^{4+}$  не участвуют в этих колебаниях. Для представления  $\tau_{56}$  все динамические переменные принимают участие в спиновых возбуждениях. Однако анализ этих возбуждений в общем виде может быть проведен только численно.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта УрО РАН № 18-2-2-11.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

 Munoz A., Alonso J.A., Casais M.A., Martinez M. J., Martinez J.L., Fernandez-Diaz M.T. A study of the magnetic structure of LaMn<sub>2</sub>O<sub>5</sub> from powder diffraction data // Eur. J. Inorg. Chem. 2005. P. 685–691.

- 2. Туров Е.А., Колчанов А.В., Меньшенин В.В., Мирсаев И.Ф., Николаев В.В. Симметрия и физические свойства антиферромагнетиков. М.: Физматлит. 2001. 559 с.
- 3. *Меньшенин В.В.* Симметрийный анализ сложных оксидов переходных металлов // ФММ. 2014. Т. 115. № 11. С. 1121–1157.
- Меньшенин В.В., Гапонцева Н.Н. Магнитные фазовые переходы и динамическая электрическая поляризация в соединении LaMn<sub>2</sub>O<sub>5</sub> // ФТТ. 2017. Т. 59. № 5. С. 865–869.
- 5. *Ковалев О.В.* Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. М.: Наука. 1986. 387с.
- Меньшенин В.В. Взаимодействие оптических фононов с магнонами в орторомбических кристаллах. Влияние магнитного поля на структурные фазовые переходы // ФММ. 2007. Т. 103. № 5. С. 461–472.
- Барьяхтар В.Г., Витебский И.М., Яблонский Д.А. Симметрия и частоты магнитного резонанса в магнитоупорядоченных кристаллах // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. № 2. С. 1381–1391.