

Различные механизмы
формирования
основного состояния
в низкоразмерных
металлооксидах

Квази-одномерные магнитные системы

$(VO)_2P_2O_7$ – альтернированные цепочки

$SrCu_2O_3$ – спиновая лестница с двумя ножками

Y_2BaNiO_5 – $S = 1$ – цепочка Холдейна

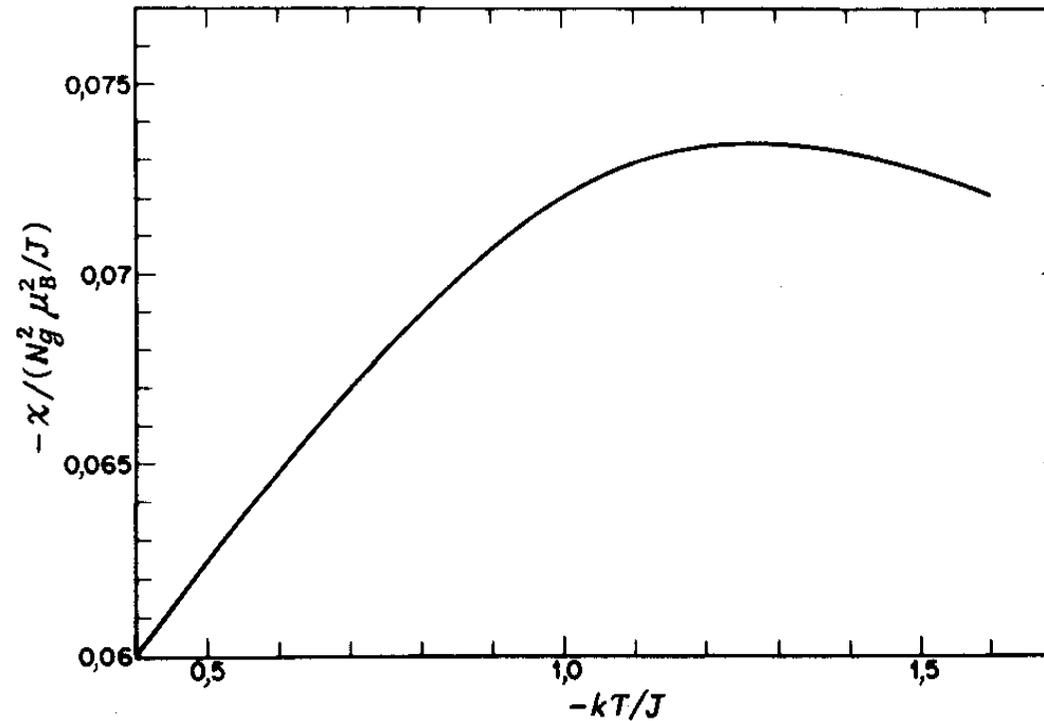
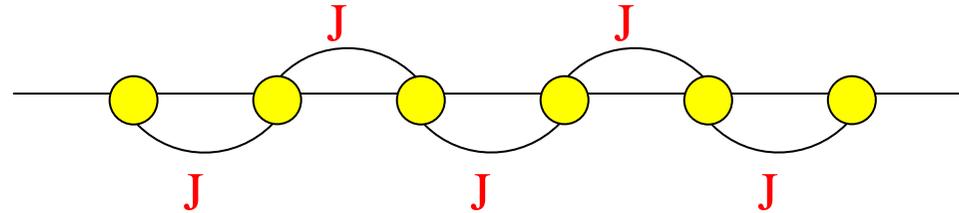
$SrCuO_2$ – $S = 1/2$ – антиферромагнетик при $T < 5$ K

$CuGeO_3$ – спин-Пайерлс

NaV_2O_5 – зарядовое упорядочение

$NaTiSi_2O_6$ – орбитальное упорядочение

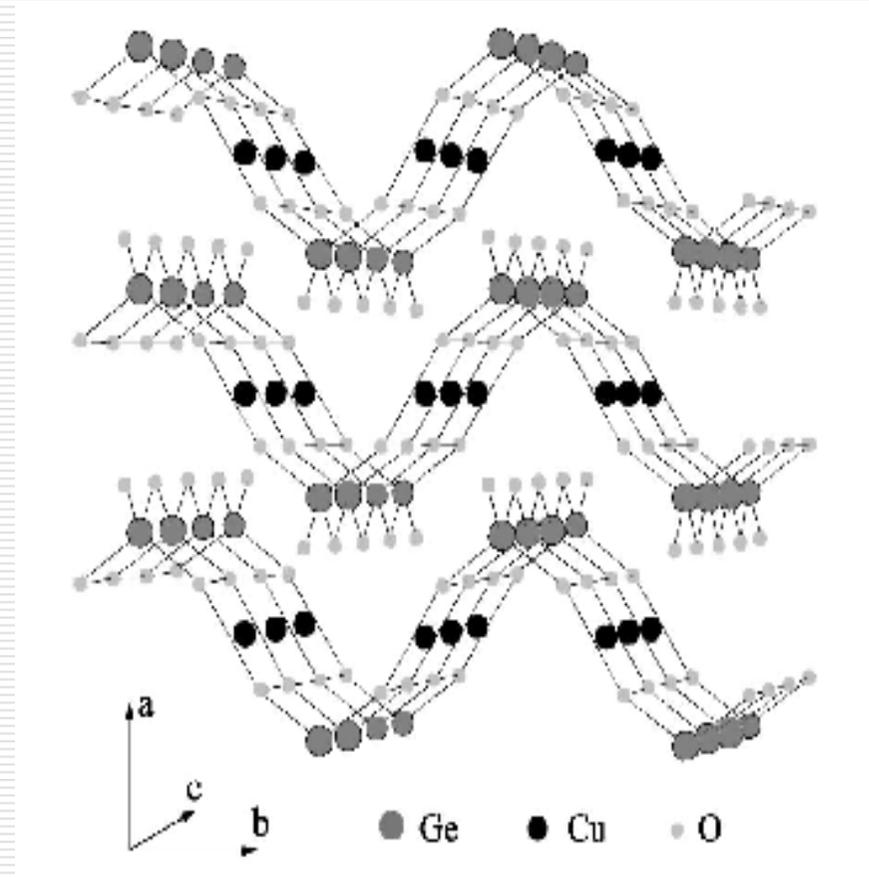
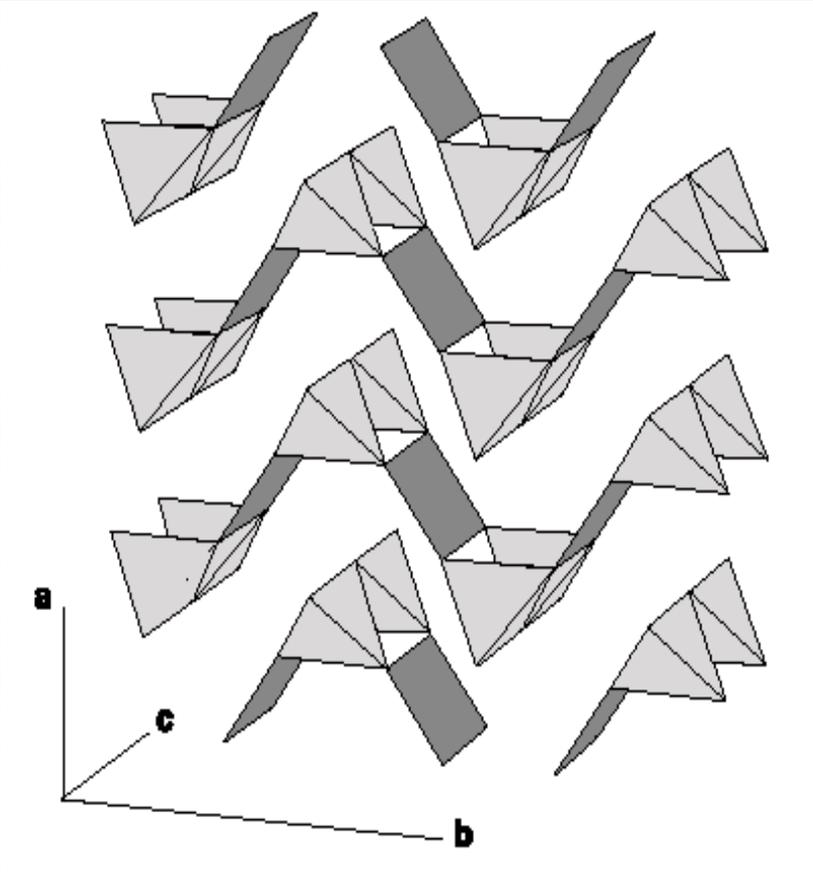
Цепочка спинов $S = 1/2$ с однородным обменом, $\Delta = 0$



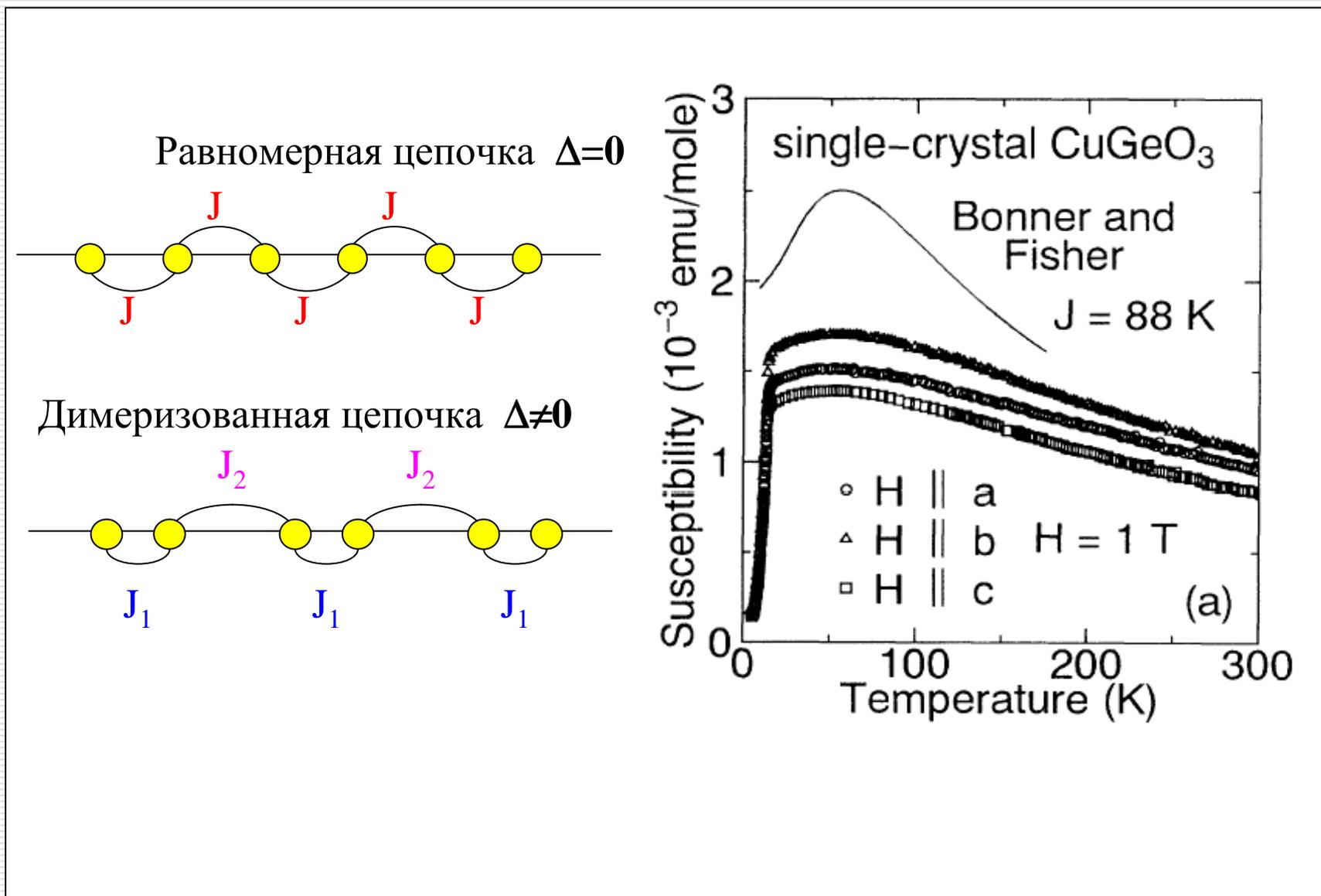
Спин-Пайерлсовский магнетик CuGeO_3

**1993 - Hase, Terasaki,
Uchinokura**

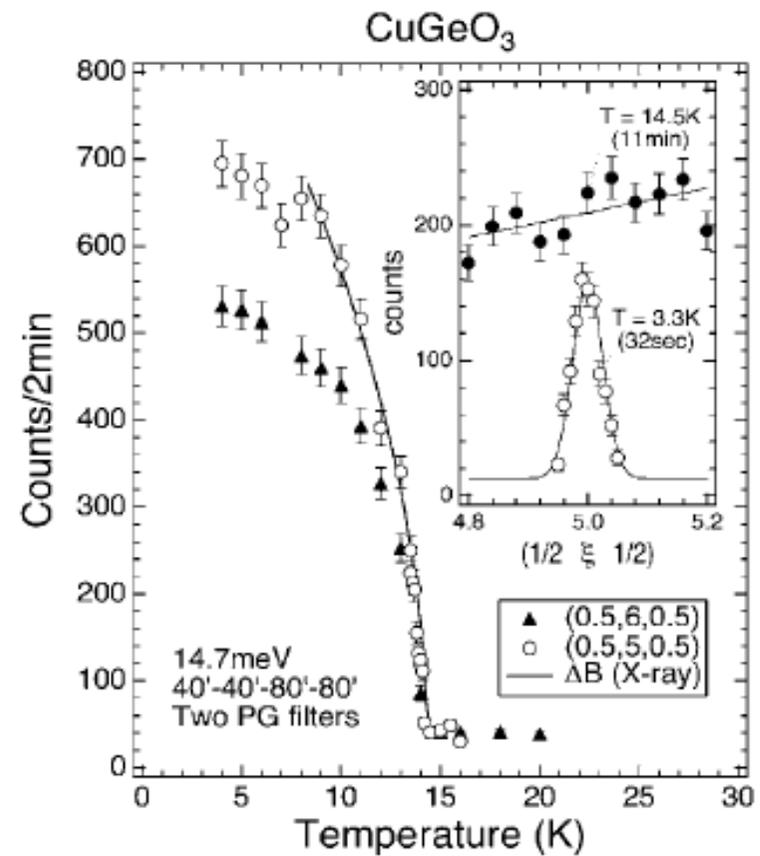
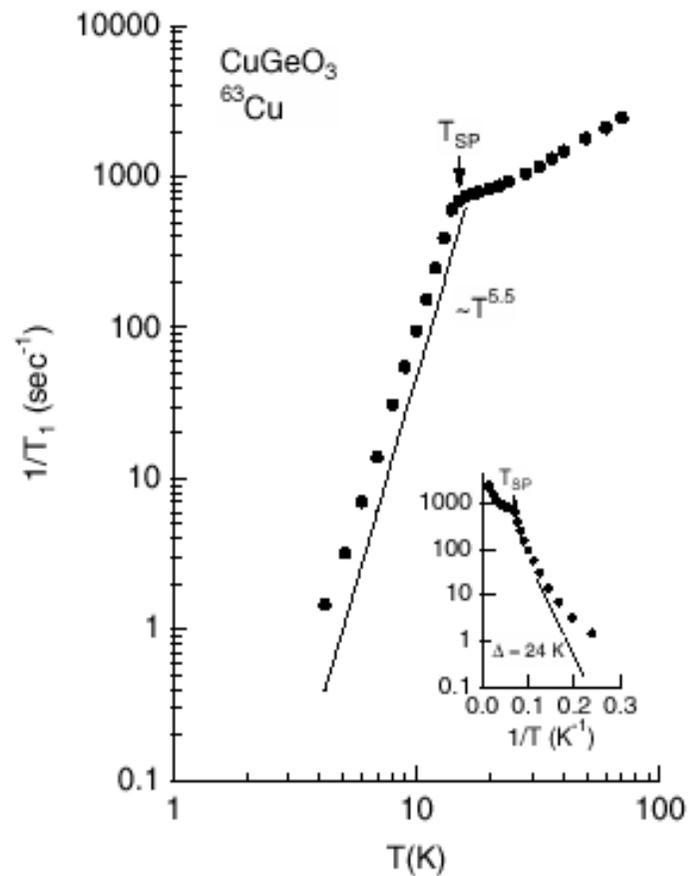
Кристаллическая структура CuGeO_3



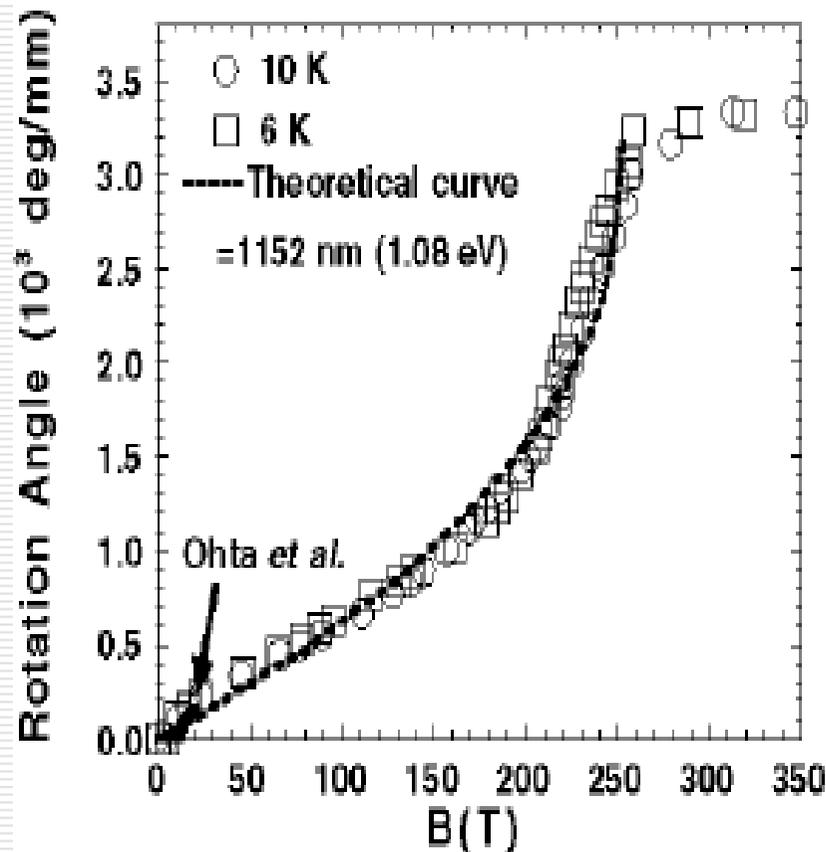
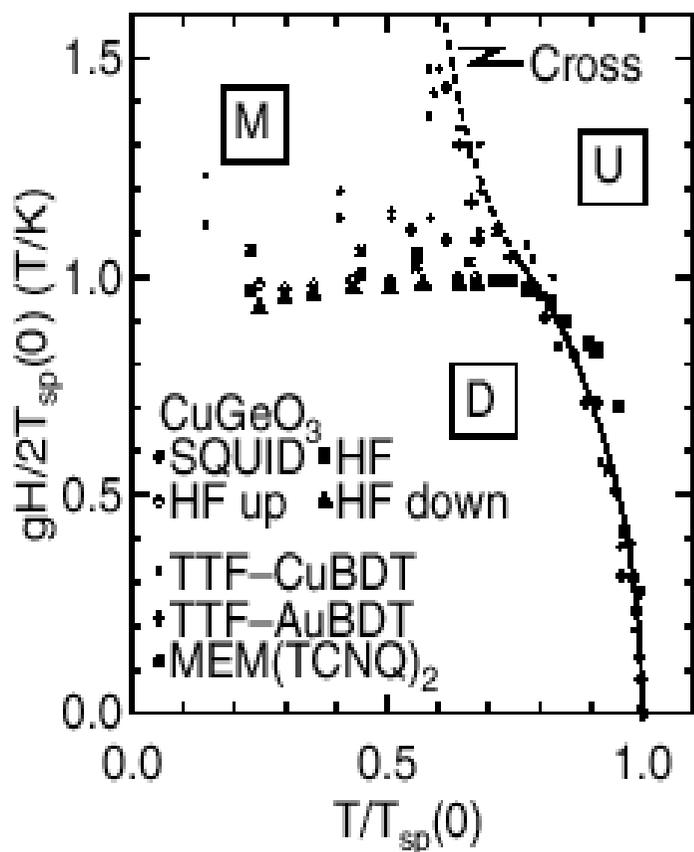
$S = 1/2$ переход спин-Пайерлса $\Delta \neq 0$



CuGeO_3 , результаты исследования ЯМР и дифракции нейтронов



CuGeO_3 , фазовая диаграмма, Фарадеевское вращение плоскости поляризации

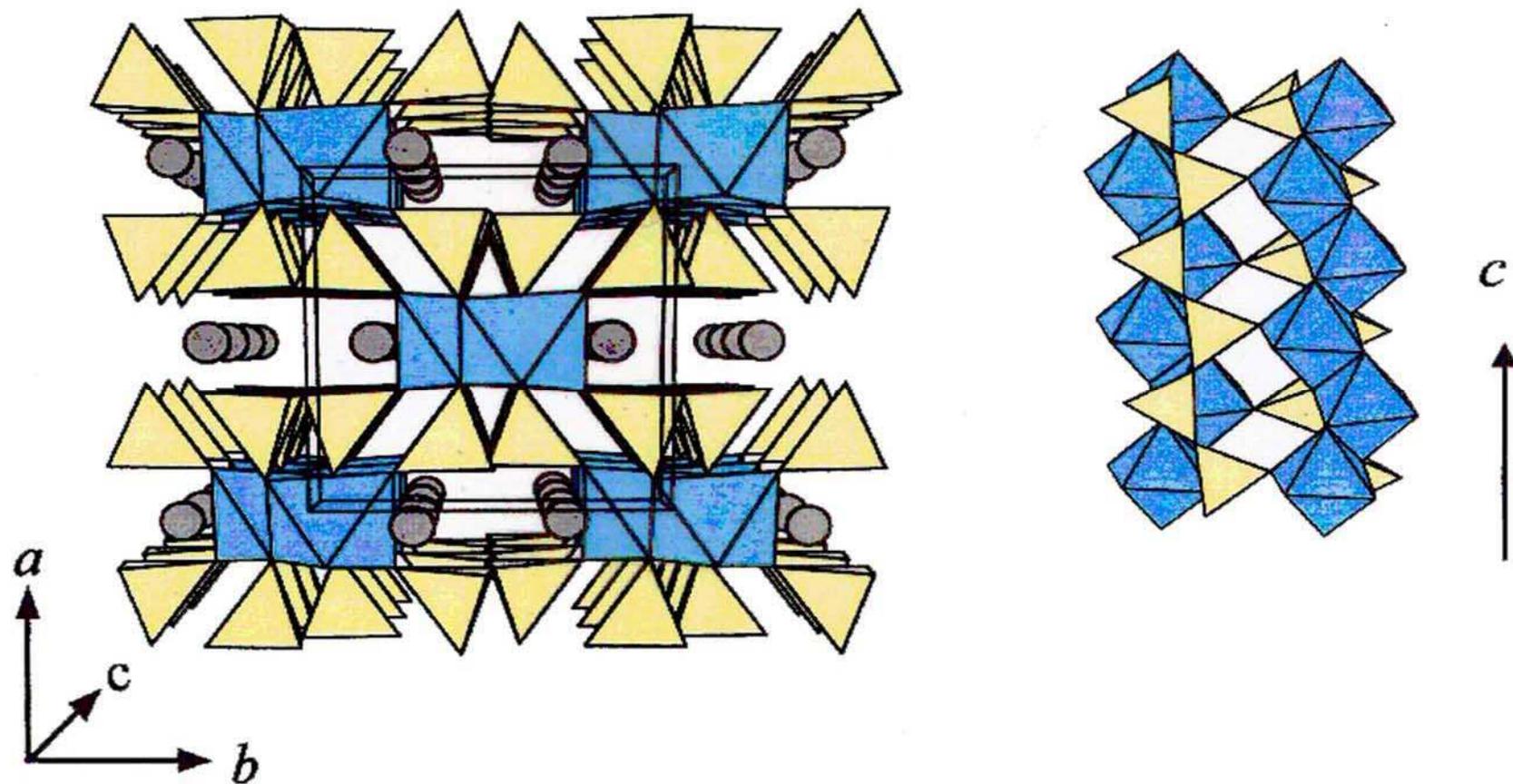


Механизмом формирования немагнитного (синглетного) основного состояния в CuGeO_3 является магнитоупругое взаимодействие в изначально нестабильной цепочке спинов $S = 1/2$

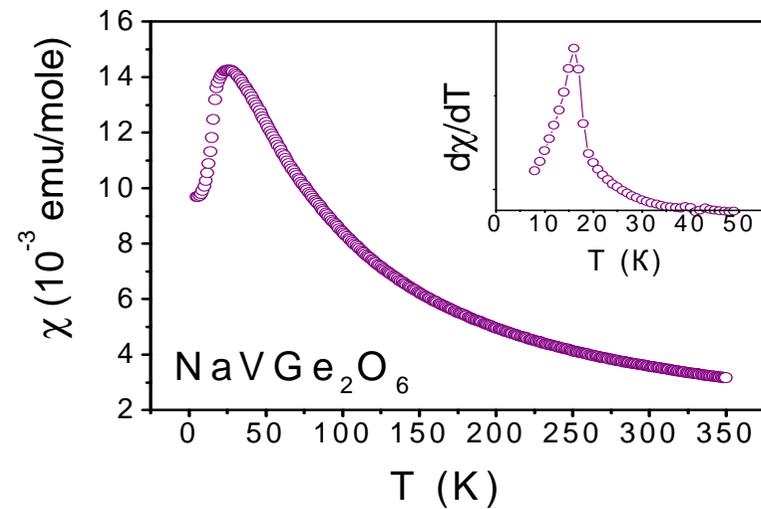
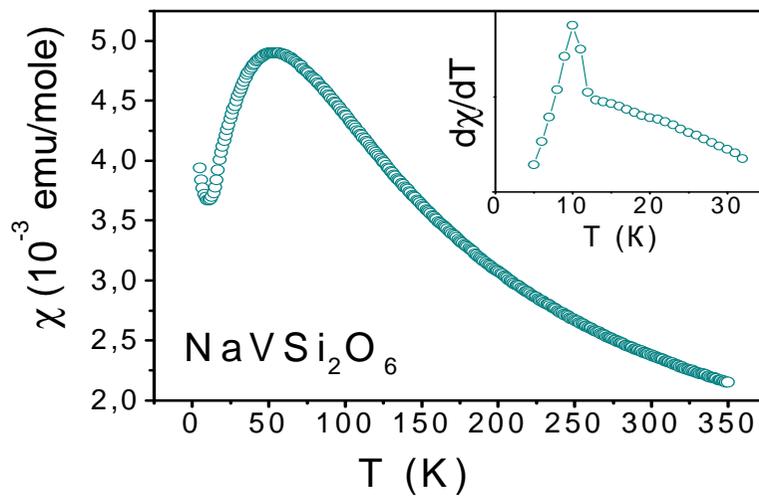
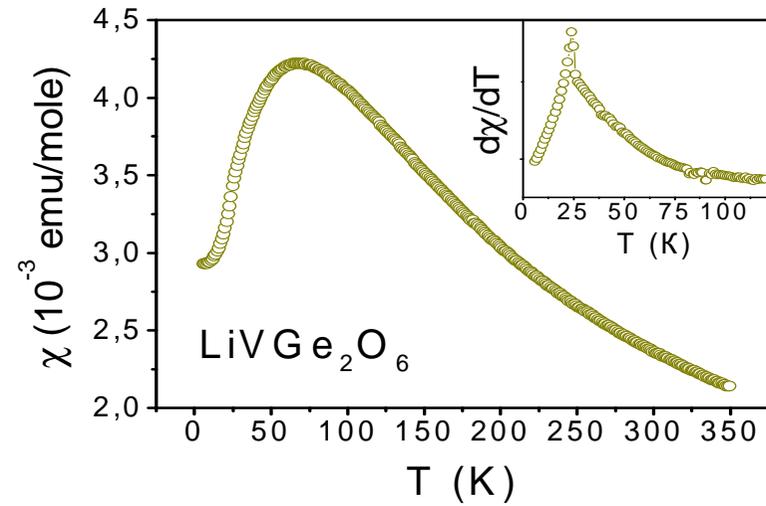
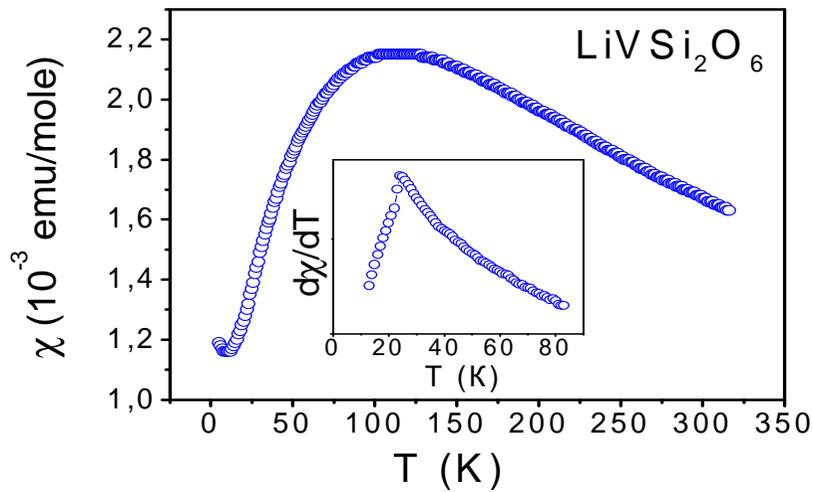
Орбитальное упорядочение в
 $\text{NaTiSi}_2\text{O}_6$

**2002 – E. Ninomiya, M. Isobe,
Yu. Ueda, A. Vasiliev**

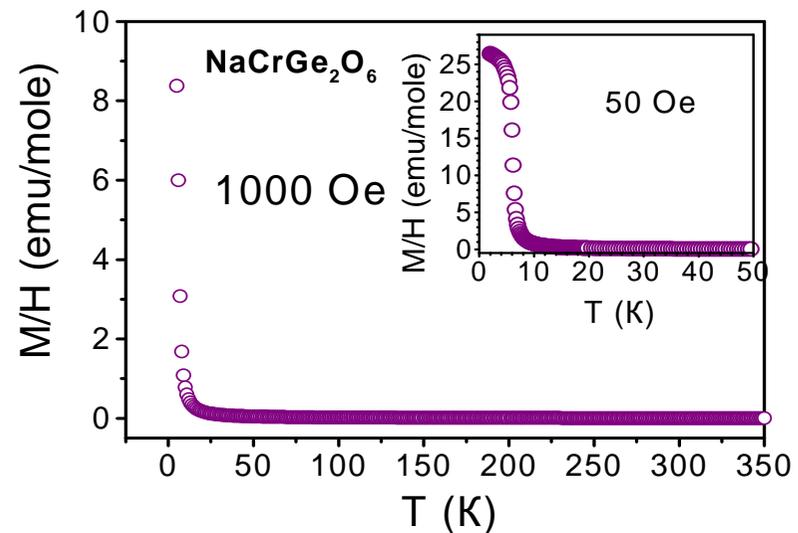
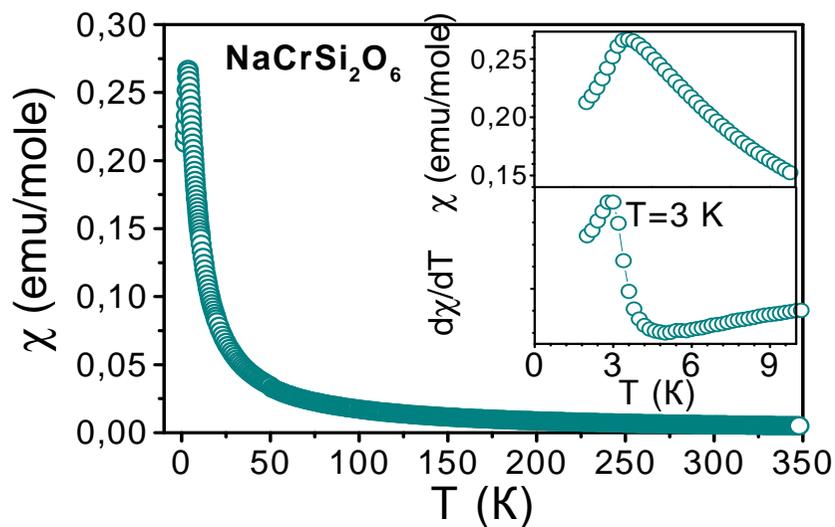
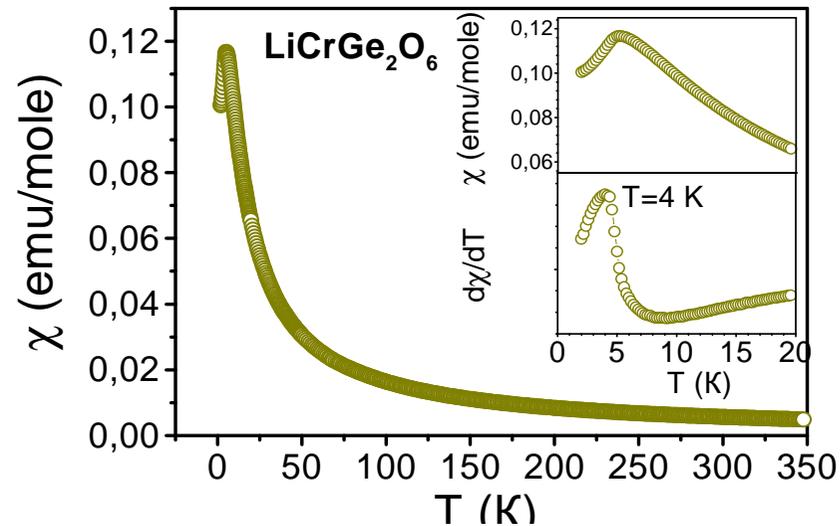
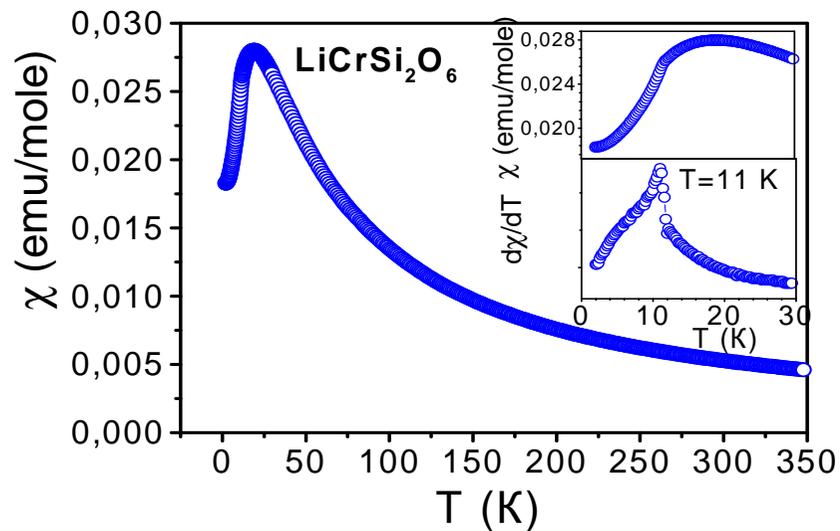
Кристаллическая структура пироксенов (Li,Na)M(Si,Ge)₂O₆ (M = Sc, Ti, V, Cr)



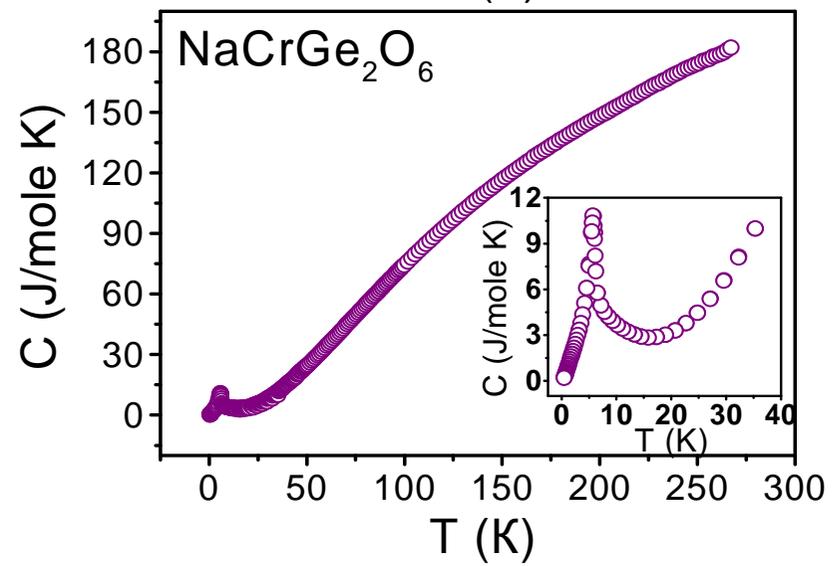
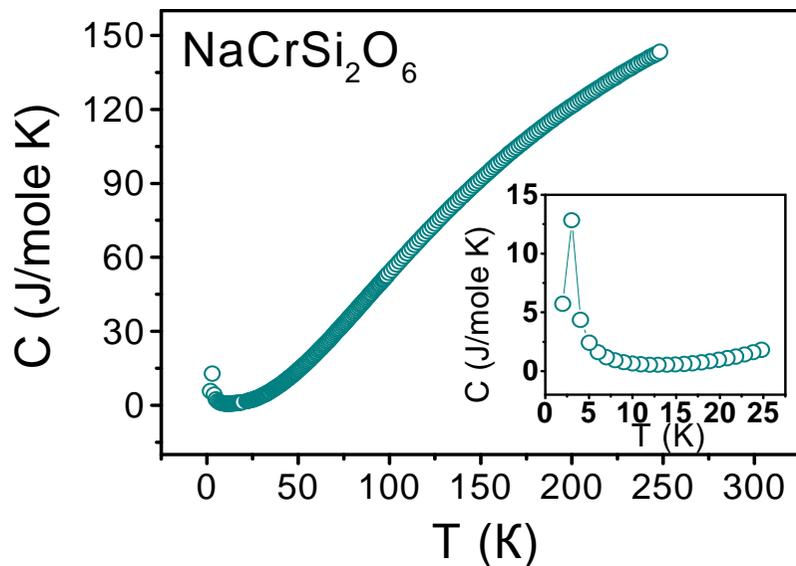
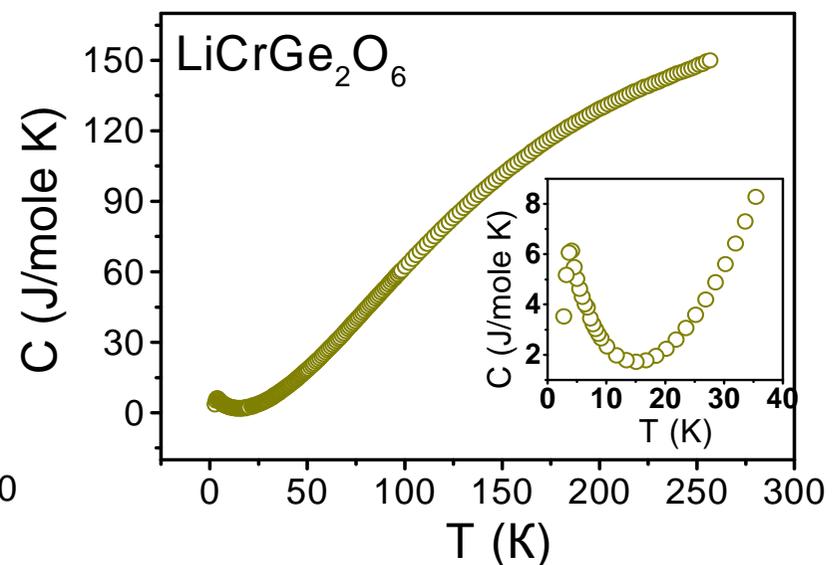
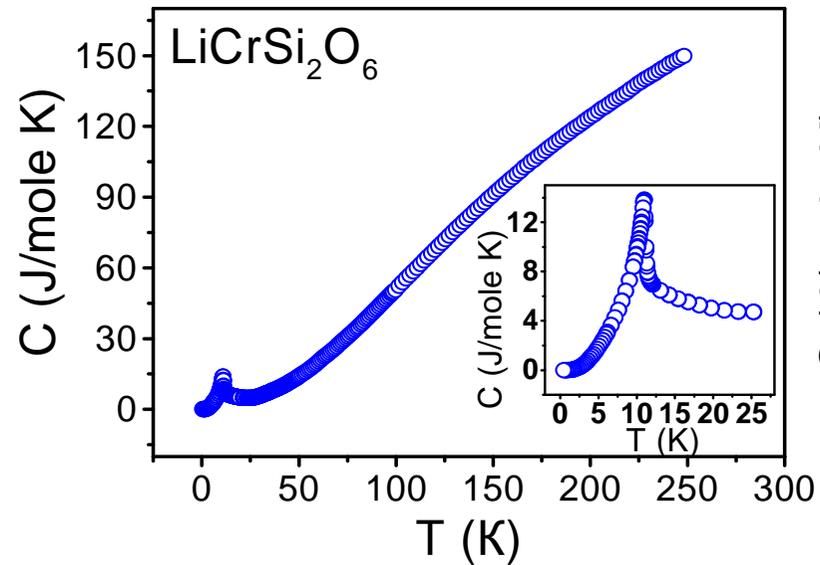
Магнитная восприимчивость ванадиевых пироксенов



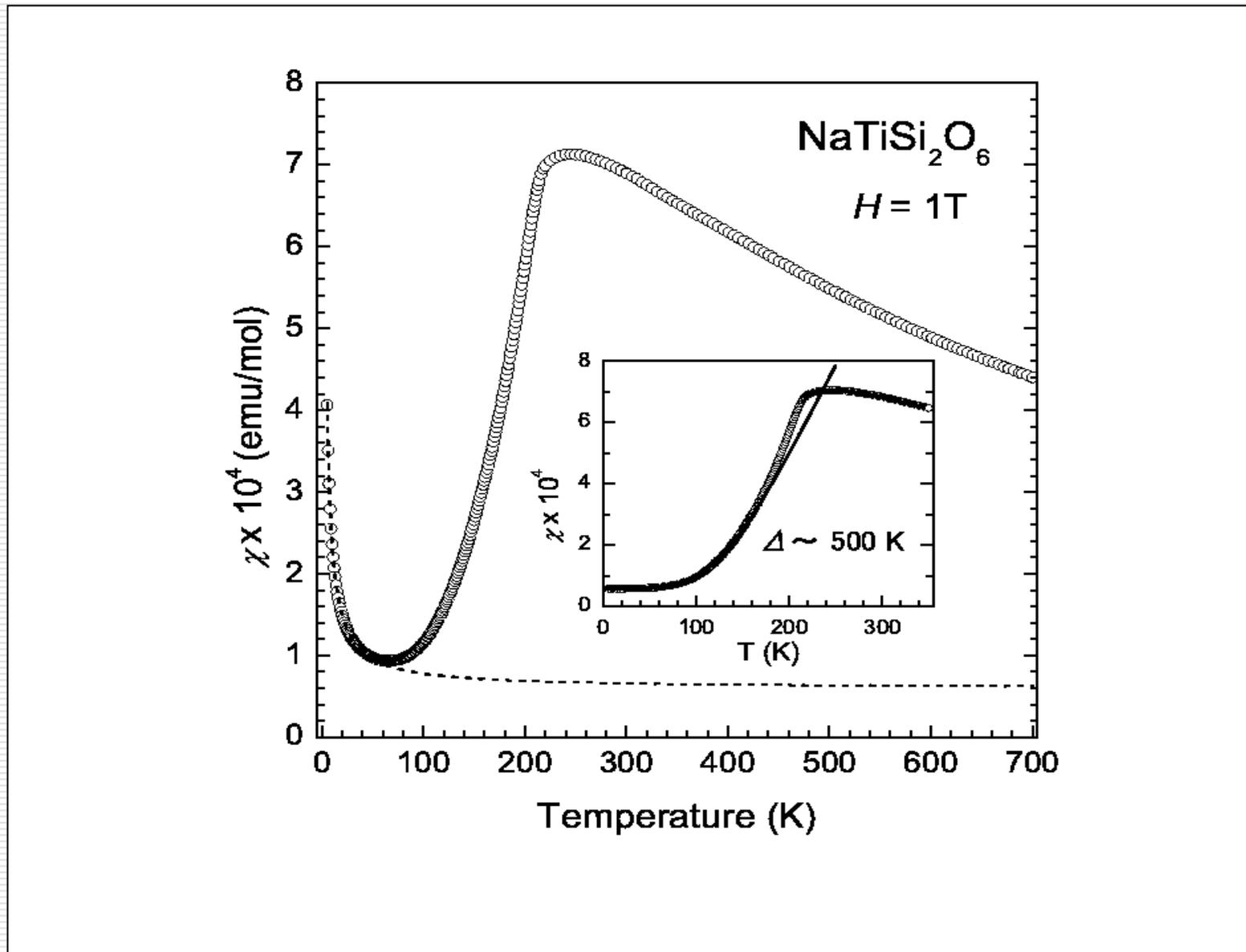
Магнитная восприимчивость хромовых пироксенов



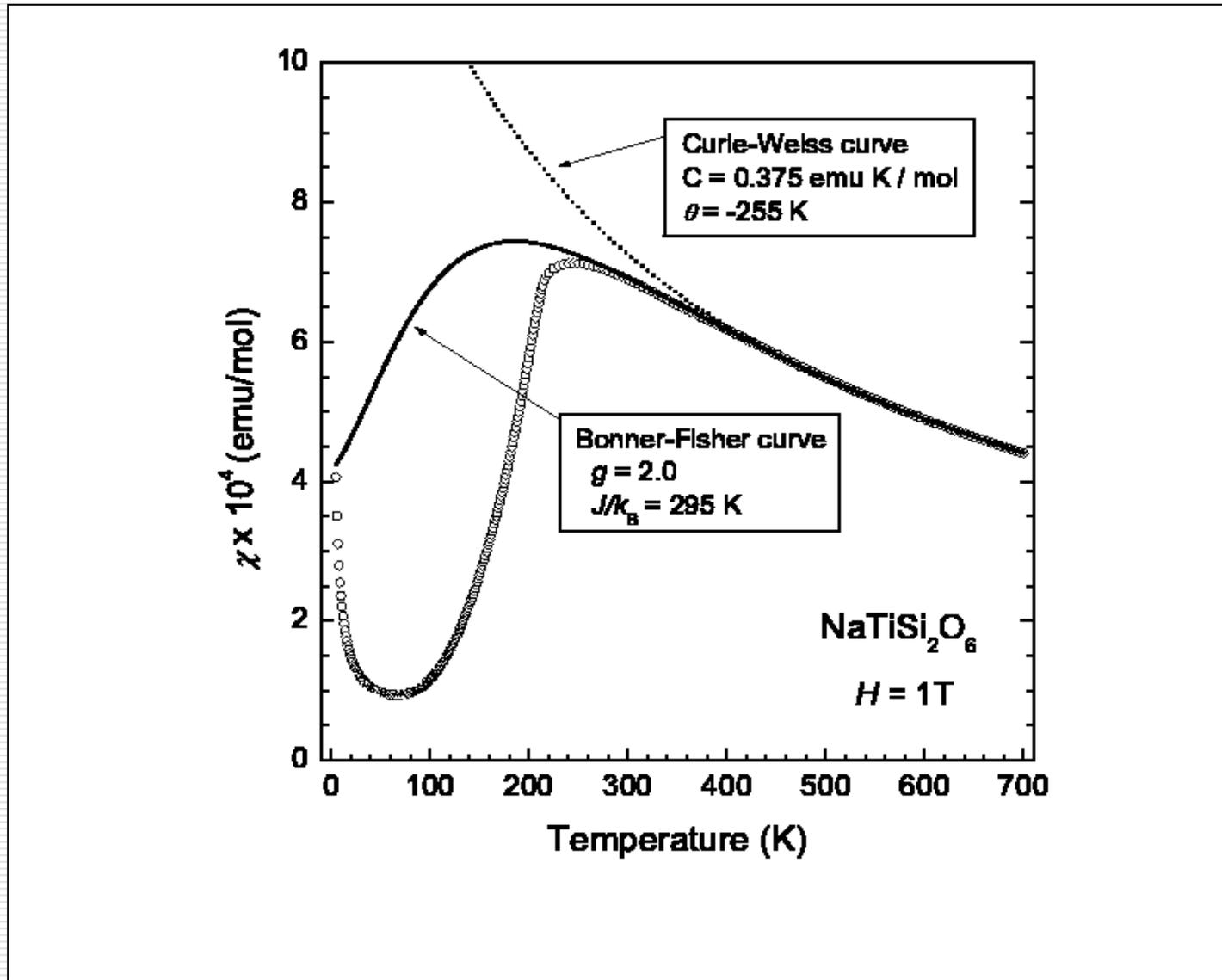
Теплоемкость хромовых пироксенов



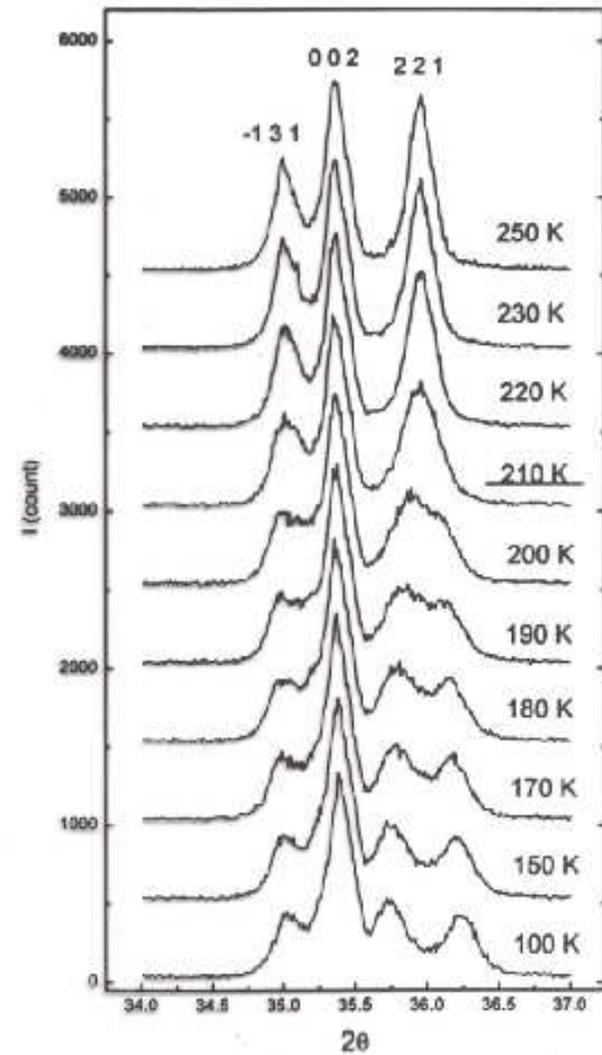
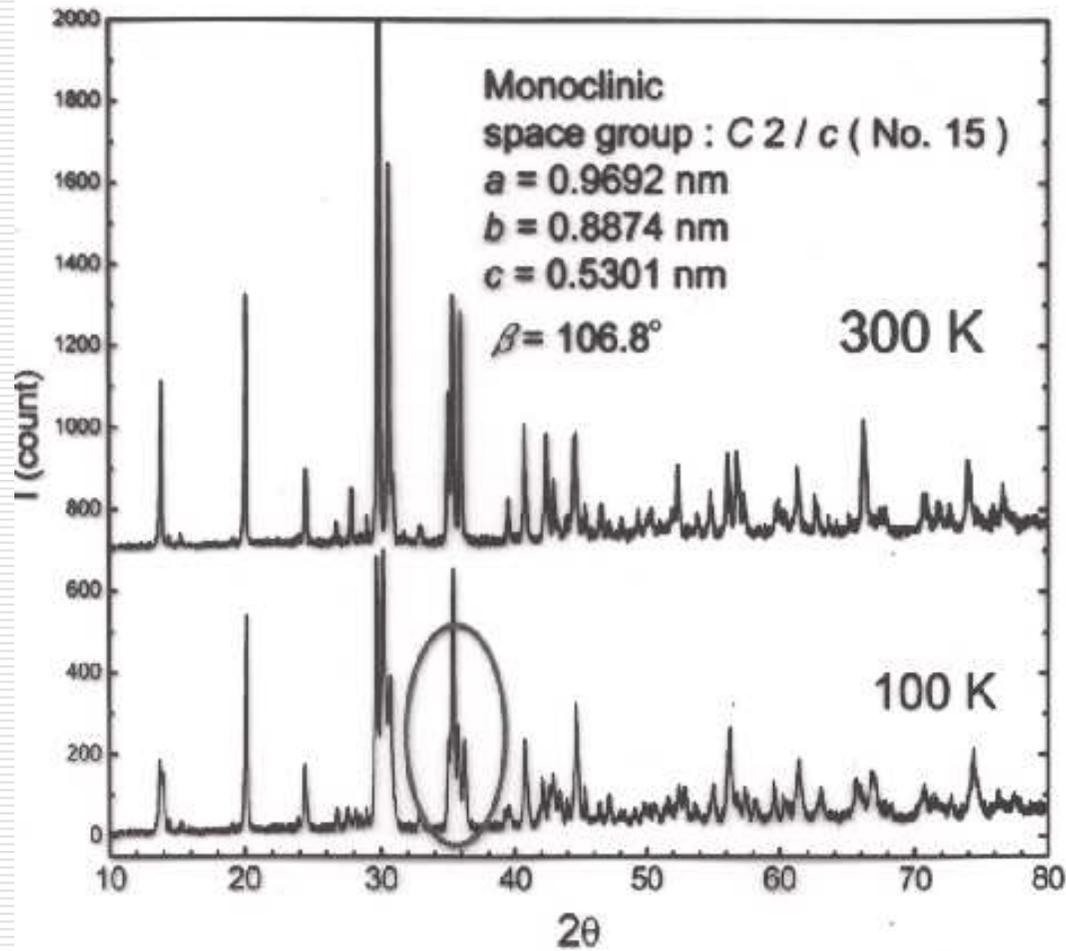
Магнитная восприимчивость $\text{NaTiSi}_2\text{O}_6$



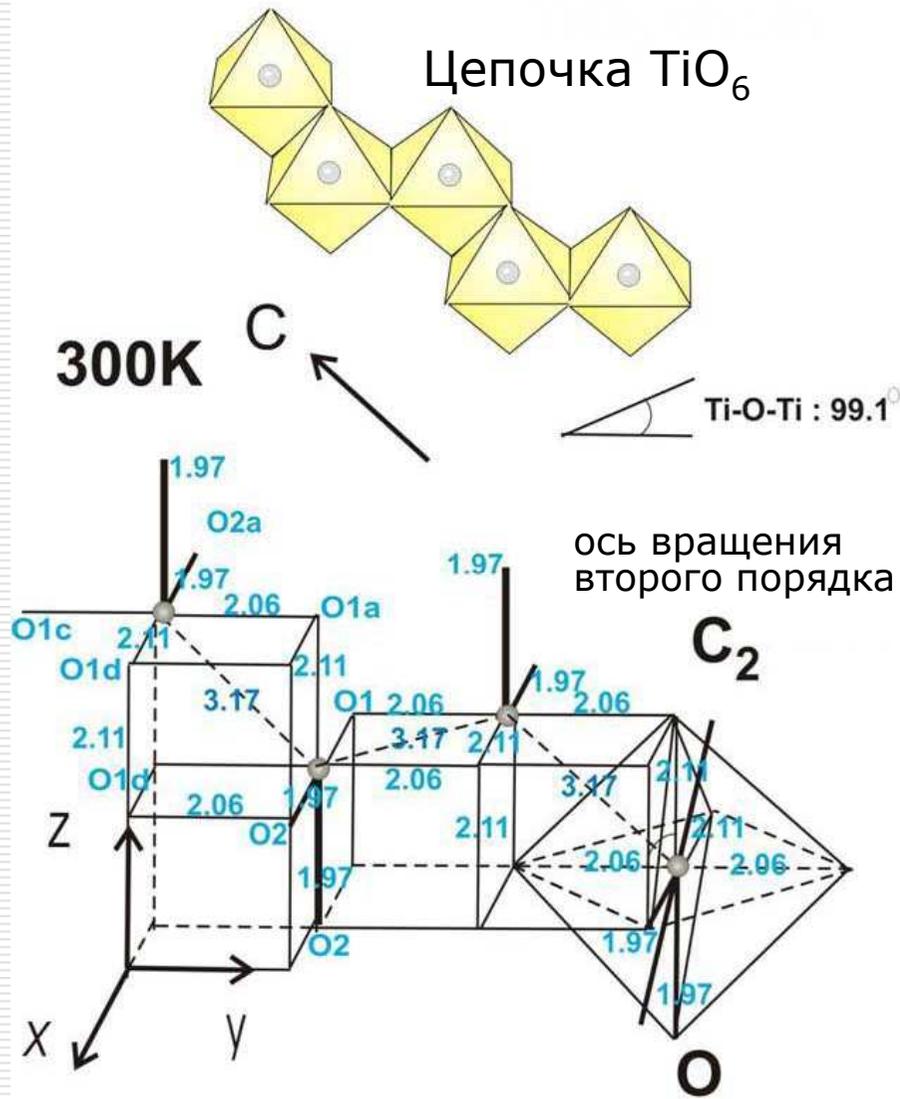
Моделирование восприимчивости



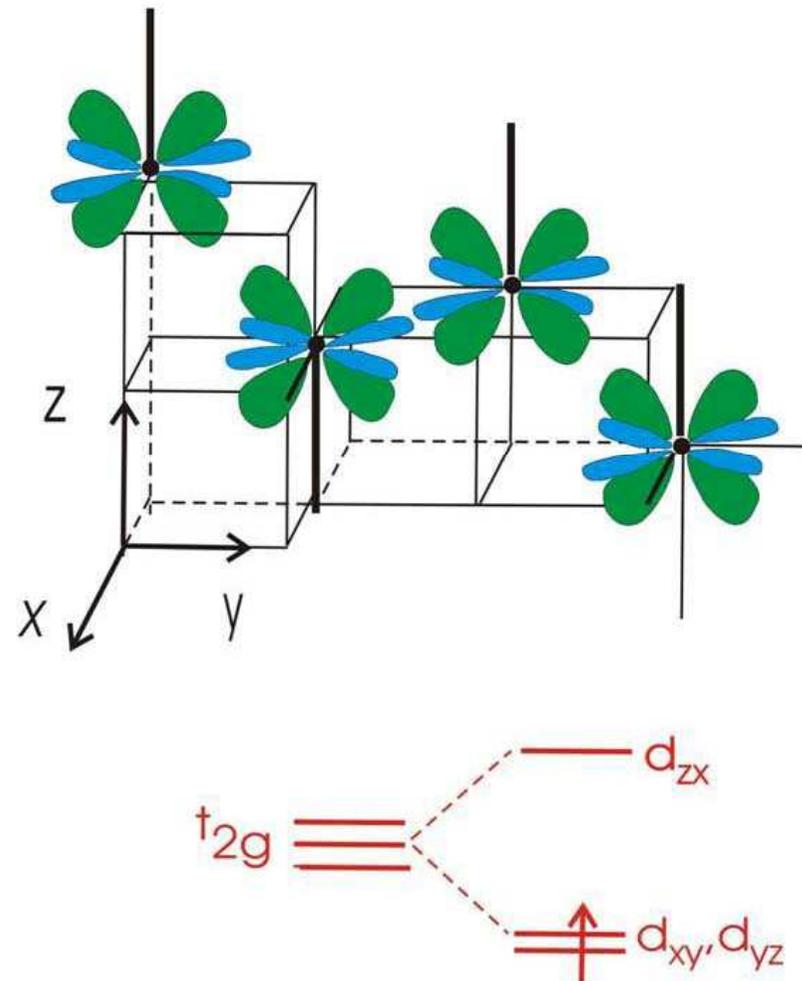
Рентгеновские спектры в $\text{NaTiSi}_2\text{O}_6$



Электронная конфигурация $\text{NaTiSi}_2\text{O}_6$ выше температуры перехода



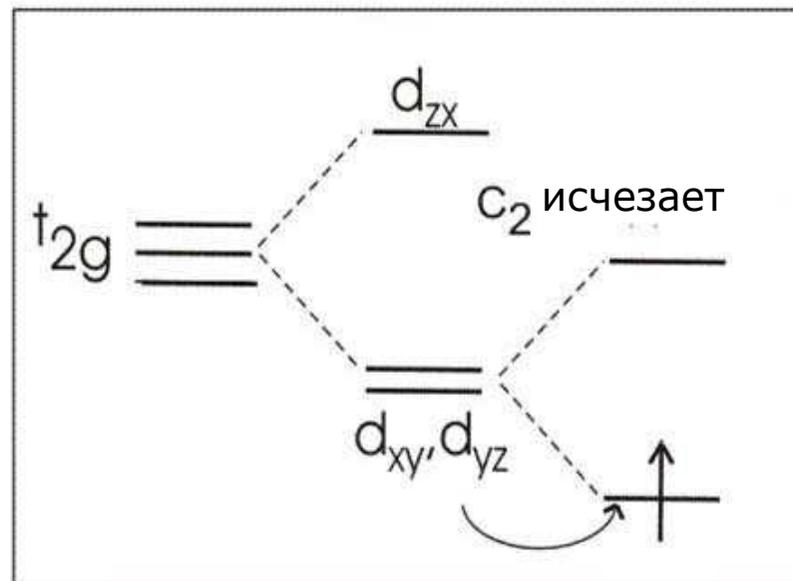
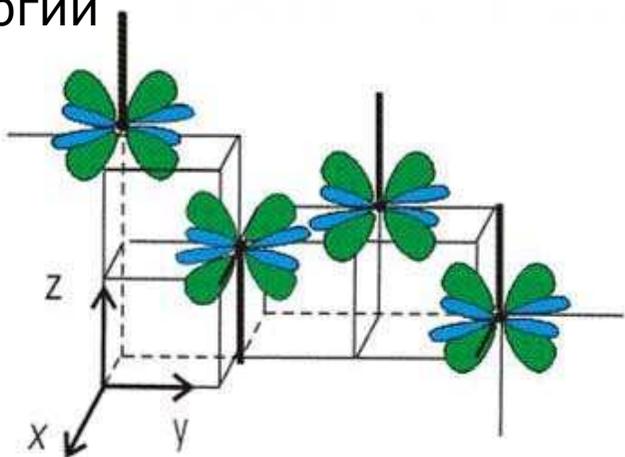
Орбитали d_{xy} и d_{xz} вырождены по энергии



При 300 K в $\text{NaTiSi}_2\text{O}_6$ сохраняются орбитальные степени свободы на t_{2g} группе орбиталей

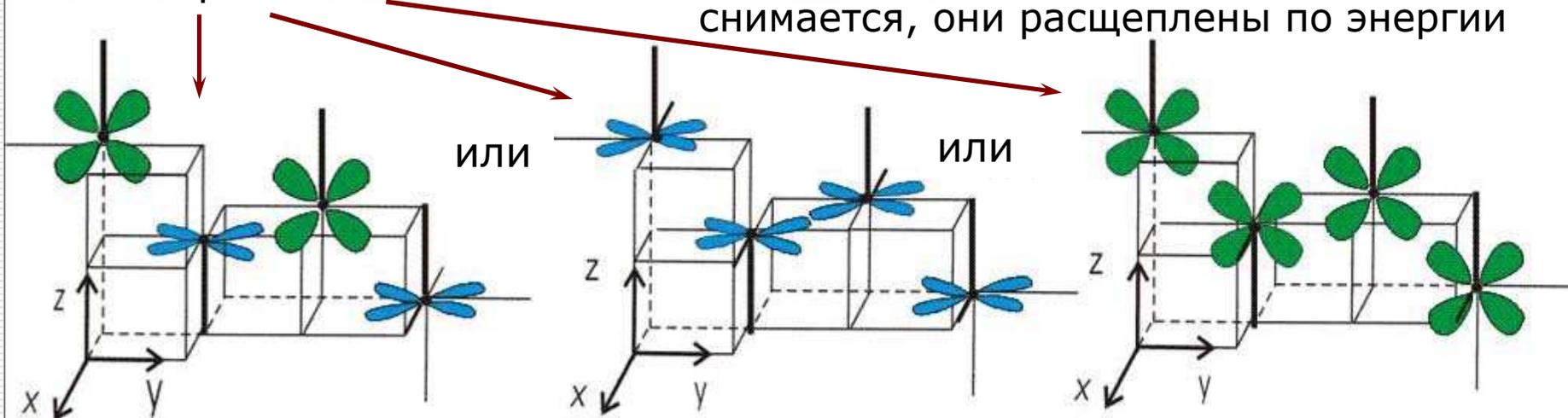
Изменение электронной конфигурации $\text{NaTiSi}_2\text{O}_6$ при структурном фазовом переходе

Выше перехода: симметрия C_2/c
орбитали d_{xy} и d_{xz} вырождены по энергии



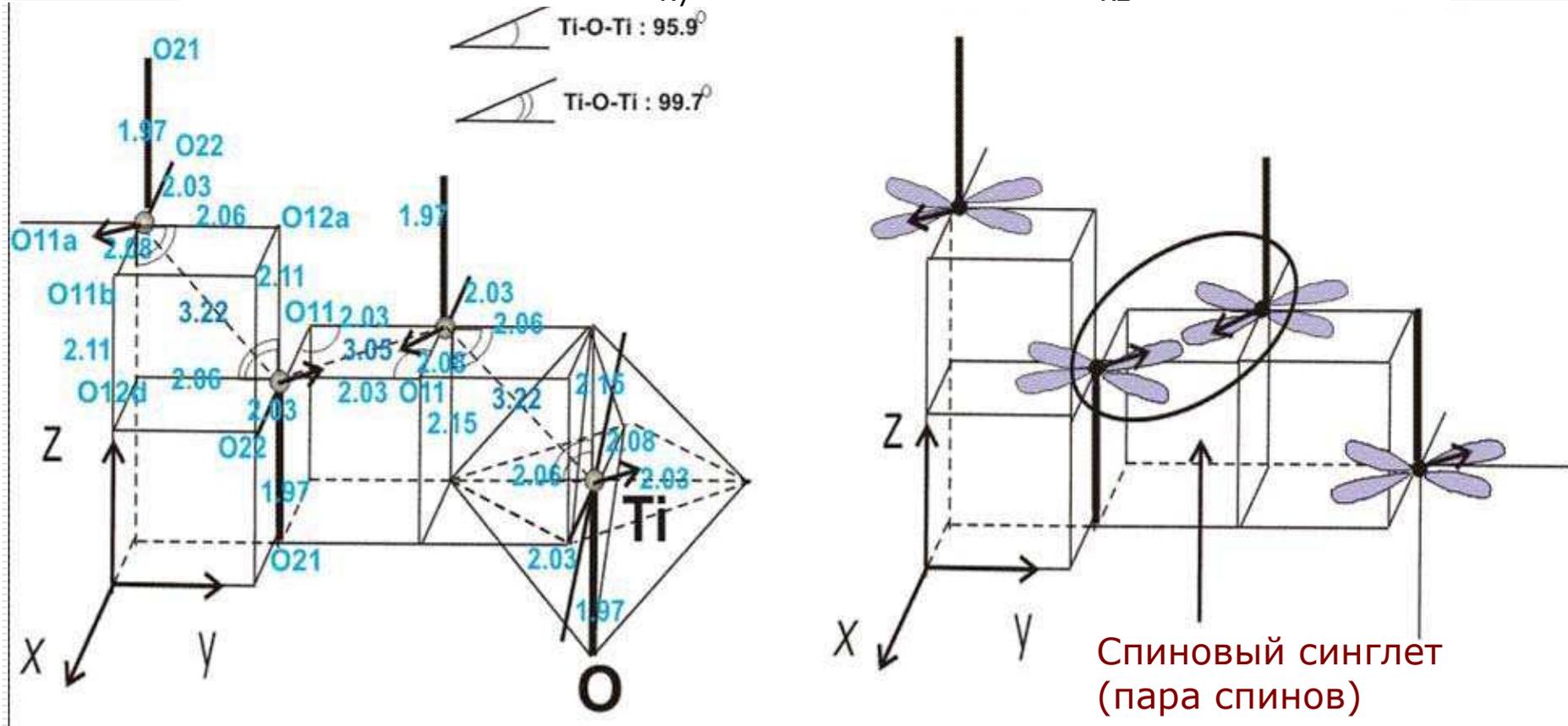
Ниже перехода:
симметрия $P-1$

При структурном фазовом переходе
исчезает C_2 , вырождение d_{xy} и d_{xz}
снимается, они расщеплены по энергии



Электронная конфигурация $\text{NaTiSi}_2\text{O}_6$ ниже температуры перехода

При 100 К орбиталь d_{xy} становится ниже d_{xz} по энергии



По данным структурного анализа, ниже перехода орбиталь d_{xy} становится наиболее энергетически выгодной



В цепочке происходит альтернирование расстояний Ti-Ti
Формируются димеры $\text{Ti}^{3+} - \text{Ti}^{3+}$ с немагнитным основным состоянием

- **Пироксены на базе ванадия** в основном состоянии являются **антиферромагнетиками**.

- **Пироксены на базе хрома** в основном состоянии могут быть **антиферромагнетиками** или **ферромагнетиками**.

- **Немагнитное основное состояние** в **пироксенах на базе титана** формируется в результате Ян-Теллеровского искажения кристаллической решетки и, как следствие, орбитального упорядочения.