

## Stan podstawowy jonu $Mn^{3+}$ w $LaMnO_3$ – ${}^5E_g$ czy $t_{2g}{}^3e_g{}^1$ ?\*

Z. Ropka<sup>1</sup> i R. J. Radwański<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Centrum Fizyki Ciała Stałego, ul. Św. Filipa 5, 31-150 Kraków

<sup>2</sup>Instytut Fizyki Akademii Pedagogicznej,  
ul. Podchorążych 2, 30-084 Kraków,

XII Krajowa Szkoła Nadprzewodnictwa:

"Układy skorelowanych elektronów wczoraj i dziś", Ustroń 14-18 IX 2006  
ABSTRACT, 31 Lipiec 2006

**Słowa  
kluczowe:** Silne korelacje elektronowe, pole krystaliczne, moment  
orbitalny,  $LaMnO_3$ ,

$LaMnO_3$  jest materiałem z potencjalnym zastosowaniem w spintronice po częściowej podmianie atomów La atomami Ca lub Sr. Te podstawienia prowadzą do stanu ferromagnetycznego i co ważne do wzrostu temperatury magnetycznego uporządkowania w pobliżu temperatury pokojowej co umożliwi praktyczne zastosowanie. Stan podstawowy jest /był przedmiotem długotrwałych kontrowersji. Wyniki naszych obliczeń, potwierdzających wcześniejsze obliczenia z teorii pola krystalicznego, o stanie  ${}^5E_g$  jako stanie podstawowym jonu  $Mn^{3+}$  w  $LaMnO_3$  nie uzyskały uznania w 2002 roku. Oponenty podnosili, że inni autorzy podają stan podstawowy jako  $t_{2g}{}^3e_g{}^1$ , zaś stan  $t_{2g}$  jako najniższy i  $e_g$  jako leżący powyżej.

W niniejszej pracy wyjaśnimy, że stan  ${}^5E_g$  jest jednym z 80 stanów konfiguracji  $t_{2g}{}^3e_g{}^1$  jonu  $Mn^{3+}$ . Znaczy to, że podawanie przez nas stanu podstawowego jako  ${}^5E_g$  jest bardziej konkretną informacją niż podawanie konfiguracji  $t_{2g}{}^3e_g{}^1$ . Pokażemy, że tworzenie stanu  ${}^5E_g$  jest przejawem silnych korelacji elektronowych, w tym m.in. reguł Hunda. Przeanalizujemy wpływ lokalnych dystorsji sieci, rozpatrywanych często jako efekt Jahn-Tellera oraz tworzenie stanu uporządkowania magnetycznego związanego z łamaniem symetrii odwrócenia czasu.

\*Autor do korespondencji: <sup>1</sup>R. J. Radwanski, Centrum Fizyki,  
Sw. Filip 5, 31-150 Krakow,  
sfradwan@cyf-kr.edu.pl,

Współczesne metody umożliwiają obliczenia struktury elektronowej z *pierwszych zasad*. Nasze obliczenia z *pierwszych zasad* umożliwiają rozpatrywanie struktury elektronowej w skali 1 meV. Dla tych obliczeń relatywistyczne oddziaływanie spin-orbita jest fundamentalnie ważne.

Nasze wieloletnie badania związków 3d badania odsłaniają ważność momentu orbitalnego i orbitalnego magnetyzmu wskazując, że najwyższy już czas „odmrozić” (unquench) moment orbitalny w związkach zawierających atomy z niezapełnioną powłoką 3d.

♣ English version of this abstract will appear in the next volume.

Online