

P17-2002-245

В. С. Шахматов, Н. М. Плакида, Н. С. Тончев¹

ОРБИТАЛЬНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД
В $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$

Направлено в журнал «Письма в ЖЭТФ»

¹Институт физики твердого тела БАН, 1784 София

В работе [1] были приведены новые структурные данные о фазовом переходе (ФП) в манганите $\text{Pr}_{0.6}\text{Ca}_{0.4}\text{MnO}_3$ в состояние с зарядовым и орбитальным упорядочением. Экспериментальные результаты были интерпретированы как наблюдение упорядоченных поляронов Зенера в низкотемпературной фазе. Кроме того, был сделан вывод о том, что подобное электронное состояние иона марганца может быть основным состоянием в манганитах, в которых при уровне легирования $x=0,5$ наблюдается ФП с зарядовым и орбитальным упорядочением. Это электронное состояние характеризуется тем, что ионы марганца в кристалле имеют одинаковую валентность, в отличие от состояния [2,3], в котором происходит зарядовое разделение, а ионы Mn^{3+} и Mn^{4+} пространственно упорядочены.

Заметим, что сложная взаимосвязь орбитальных и зарядовых упорядочений характерна для манганитов и при других уровнях легирования (см., например, [4,5]).

В настоящей работе, на основе симметричного анализа, построена феноменологическая теория Ландау ФП в $\text{Pr}_{0.6}\text{Ca}_{0.4}\text{MnO}_3$. Показано, что этот ФП является орбитальным ФП, а два состояния [1] и [2,3] являются двумя типами орбитального упорядочения одного орбитального параметра порядка (ПП) (для данного ПП возможны три типа орбитального упорядочения). Таким образом, орбитальные, а не зарядовые степени свободы являются «мягкими» и их конденсация приводит к ФП.

ФП в $\text{Pr}_{0.6}\text{Ca}_{0.4}\text{MnO}_3$ происходит из кристаллической фазы с симметрией $Pnma (D_{2h}^{16})$ и связан с волновым вектором $\mathbf{k}_1 = (1/2, 0, 0)$ [1-3] (декартова система координат, принятая в данной работе, показана на рис. 1). Согласно Ковалеву [6], ПП данного ФП является двухкомпонентным и может иметь симметрию неприводимого представления (НП) τ_1 или τ_2 . Используя два инварианта, $I_1 = \varphi_1^2 + \varphi_2^2$ и $I_2 = \varphi_1^2 \varphi_2^2$, для двухкомпонентного ПП $\{\varphi_1, \varphi_2\}$ разложение свободной энергии запишем в виде:

$$F_1 = F_\varphi + F_{\varphi\psi} + F_\psi, \quad (1)$$

$$F_\varphi = \frac{1}{2}r(\varphi_1^2 + \varphi_2^2) + \frac{1}{4}u(\varphi_1^2 + \varphi_2^2)^2 + \frac{1}{2}v\varphi_1^2\varphi_2^2, \quad (2)$$

$$F_{\varphi\psi} = \beta_1(\varphi_1^2 - \varphi_2^2)\psi, \quad F_\psi = \frac{1}{2}r_1\psi^2. \quad (3)$$

Здесь коэффициент $r = \alpha(T - T_c)$; T_c - затравочная температура ФП; $\alpha, \beta_1, r_1, u, v$ - феноменологические константы, которые не зависят от температуры. $\{\varphi_1, \varphi_2\}$ - основной двухкомпонентный ПП с волновым вектором $\mathbf{k}_1 = (1/2, 0, 0)$, а ψ - вторичный ПП с волновым вектором $\mathbf{k}_2 = (0, 0, 0)$.

Отметим, что в разложении (2) мы ограничились слагаемыми четвертой степени по ПП, что достаточно для описания двух низкосимметричных фаз, $\varphi_i \neq 0, \varphi_j = 0$ и $\varphi_1 = \varphi_2 \neq 0$ (см., например, [7]). Для описания промежуточной фазы, $\varphi_1 \neq \varphi_2 \neq 0$, необходимо учитывать слагаемые до восьмой степени по ПП включительно. Полный симметричный анализ этого ФП будет сделан в отдельной работе. Кроме того, в (3) имеется еще одно инвариантное слагаемое, $F_{\varphi\psi'} = \beta_1'\varphi_1\varphi_2\psi'$. Однако в орбитальных структурах, обсуждаемых в настоящей работе, ПП ψ' не реализуется.

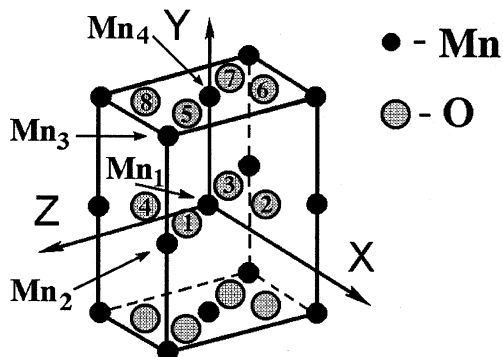


Рис.1. Структура подрешетки ионов марганца в кристаллической фазе *Pnma*. Стрелками показаны четыре неэквивалентных атома марганца в примитивной ячейке кристалла, а цифрами 1,...,8 обозначены неэквивалентные ионы кислорода, лежащие в плоскостях MnO_2

Структура орбитального упорядочения орбиталей типа d_{z^2} иона Mn^{3+} , в случае двух типов конденсации ПП, $\varphi_1 = \varphi_2 \neq 0$ и $\varphi_1 \neq 0, \varphi_2 = 0, \psi \neq 0$, показана на рис. 2а и б, соответственно. При анализе предполагалось, что в фазе *Pnma* орбиталь типа d_{z^2} лежит в плоскости MnO_2 и имеет два возможных направления, вдоль $O_4-Mn_1-O_2$ или вдоль $O_1-Mn_1-O_3$ (см. рис. 1). В случае симметрии ПП τ_1 направление орбитали в соседней плоскости MnO_2 (при смещении вдоль оси Y) не изменяется, а для τ_2 - меняется.

Орбитальные ПП $\{\varphi_1, \varphi_2\}, \psi$ имеют физический смысл вероятностей заполнения электроном орбитали типа d_{z^2} . При конденсации ПП типа $\varphi_1 = \varphi_2 \neq 0$ (см. рис. 2а) вероятности заполнения орбитали типа d_{z^2} на всех ионах марганца одинаковы, что дает одинаковую валентность для ионов марганца. В случае конденсации ПП

нейтронных дифракционных исследований [1-3]. Длинные связи Mn-O, обозначенные на рис. 3 через L, указывают на направление орбитали типа d_{z^2} в октаэдре MnO_6 [8,9]. Сравнивая рис.2а, б и рис.3а, б, видим, что построенные орбитальные структуры полностью согласуются с экспериментальными данными [1-3].

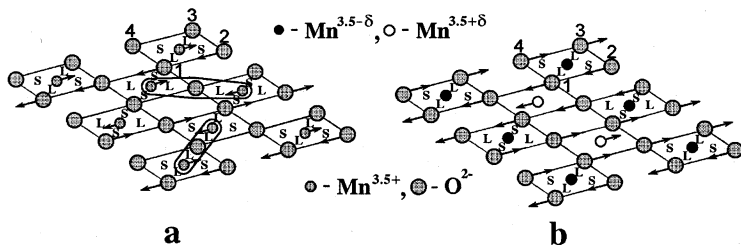


Рис.3. Смещения атомов кислорода и марганца в плоскости MnO_2 . Смещения атомов показаны стрелками. L - и S - длинные и короткие длины связей Mn-O в октаэдре MnO_6 . а). Смещения атомов в низкотемпературной фазе манганита $Pr_{0.6}Ca_{0.4}MnO_3$ [1]. Выделенные фрагменты структуры, Mn-O-Mn, представляют собой поляроны Зенера [1]. б). Смещения атомов в низкотемпературных фазах $La_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ [2] и $Pr_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ [3]

Для описания деформаций октаэдров MnO_6 введем фоновые ПП, которые взаимодействуют с основным орбитальным ПП. Такими ПП являются двухкомпонентный ян-теллеровский ПП $\{\eta_1, \eta_2\}$ с волновым вектором $k_1=(1/2,0,0)$ и симметрией основного ПП и вторичный ПП ξ с волновым вектором $k_2=(0,0,0)$. Разложение свободной энергии, учитывающее орбитальные и фоновые степени свободы, имеет вид

$$F = F_1 + F_{\varphi\eta} + F_{\eta} + F_{\varphi\xi} + F_{\xi}, \quad (4)$$

$$F_{\varphi\eta} = r_3(\varphi_1\eta_1 + \varphi_2\eta_2), \quad F_{\eta} = \frac{1}{2}r'_3(\eta_1^2 + \eta_2^2), \quad (5)$$

$$F_{\varphi\xi} = \beta_2(\varphi_1^2 - \varphi_2^2)\xi, \quad F_{\xi} = \frac{1}{2}r_2\xi^2. \quad (6)$$

Таким образом, полный набор сконденсированных орбитальных и фононных ПП для двух обсуждаемых случаев имеет вид

$$\varphi_1 \neq 0, \psi \neq 0, \eta_1 \neq 0, \xi \neq 0 \text{ и } \varphi_1 = \varphi_2 \neq 0, \eta_1 = \eta_2 \neq 0. \quad (7)$$

Отметим, что, аналогично (3), в (6) имеется дополнительное слагаемое, $F_{\varphi\xi} = \beta'_2 \varphi_1 \varphi_2 \xi'$, которое, в общем случае, необходимо учитывать. Однако для описания атомных смещений, показанных на рис.2 и 3, фононный ПП ξ' можно не рассматривать.

Орбитальный ПП имеет волновой вектор $k_1=(1/2,0,0)$ и симметрию НП τ_1 или τ_2 . Следовательно, из кристаллической фазы с симметрией $Pnma$ возможны шесть различных ФП:

$$Pnma(D_{2h}^{16}) - \tau_1 \rightarrow P2_1 / m(C_{2h}^2), Pmn2_1(C_{2v}^7), Pm(C_s^1), \quad (8)$$

$$Pnma(D_{2h}^{16}) - \tau_2 \rightarrow P2_1 / c(C_{2h}^5), Pna2_1(C_{2v}^9), Pc(C_s^2). \quad (9)$$

Низкосимметричные фазы в (8) и (9) расположены в порядке конденсации ПП, $\varphi_1 \neq 0$, $\varphi_1 = \varphi_2 \neq 0$ и $\varphi_1 \neq \varphi_2 \neq 0$, соответственно. В экспериментах [1-3] наблюдались фазы с симметрией $P2_1 / m(C_{2h}^2)$, $Pmn2_1(C_{2v}^7)$ и $Pm(C_s^1)$, поэтому необходимо взять НП τ_1 . Ниже выписаны только те фононные базисные векторы для НП τ_1 , которые необходимы для описания экспериментально наблюдаемых атомных смещений (см. рис. 3).

Симметризованные базисные векторы атомных смещений, $E(i)$, для двумерного НП τ_1 запишем в виде

$$E(i) \equiv \begin{pmatrix} e_1(i) \\ e_2(i) \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Здесь единичные базисные векторы $e_1(i)$ и $e_2(i)$ определены в пространстве атомных смещений и связаны с фононным ПП $\{\eta_1, \eta_2\}$.

Для атомов марганца имеются 3 базисных вектора

$E(i) \equiv \begin{pmatrix} e_1(i) \\ e_2(i) \end{pmatrix}, i = 1, 2, 3$, которые записываются в виде

$$\begin{aligned} \sqrt{2}e_1(1) &= u_x(Mn_2) + u_x(Mn_3), \quad \sqrt{2}e_2(1) = -u_x(Mn_1) - u_x(Mn_4), \\ \sqrt{2}e_1(2) &= u_y(Mn_2) - u_y(Mn_3), \quad \sqrt{2}e_2(2) = -u_y(Mn_1) + u_y(Mn_4), \\ \sqrt{2}e_1(3) &= u_z(Mn_2) + u_z(Mn_3), \quad \sqrt{2}e_2(3) = u_z(Mn_1) + u_z(Mn_4), \end{aligned} \quad (11)$$

где $u_x(Mn_i)$ - единичное смещение атома Mn_i в направлении x . Смещения атомов марганца, показанные на рис. 3а и б, описываются функциями

$$[-e_1(3) - e_2(3)] \exp(-ik_1 \mathbf{R}_n) \quad \text{и} \quad e_1(3) \exp(-ik_1 \mathbf{R}_n), \quad (12)$$

соответственно. Здесь $\mathbf{R}_n \equiv n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$, $\{n_i\}$ - целые числа, $\{\mathbf{a}_i\}$ - основные векторы трансляции для кристаллической фазы *Pnma*. Первая функция в (12) связана с конденсацией фононного ПП типа $\eta_1 = \eta_2 \neq 0$, а вторая - с $\eta_1 \neq 0, \eta_2 = 0$.

Для атомов кислорода в плоскостях MnO_2 существует шесть базисных векторов $E(i)$. Ниже приводятся только те из них, $E(i)$, $i=4,5,6,7$, которые описывают смещения в плоскости (x,z) :

$$\begin{aligned} 2e_1(4) &= u_x(O_1) - u_x(O_3) + u_x(O_5) - u_x(O_7), \\ 2e_2(4) &= -u_x(O_2) - u_x(O_4) - u_x(O_6) - u_x(O_8), \\ \\ 2e_1(5) &= u_x(O_2) - u_x(O_4) + u_x(O_6) - u_x(O_8), \\ 2e_2(5) &= -u_x(O_1) - u_x(O_3) - u_x(O_5) - u_x(O_7), \\ \\ 2e_1(6) &= u_z(O_1) - u_z(O_3) + u_z(O_5) - u_z(O_7), \\ 2e_2(6) &= u_z(O_2) + u_z(O_4) + u_z(O_6) + u_z(O_8), \\ 2e_1(7) &= u_z(O_2) - u_z(O_4) + u_z(O_6) - u_z(O_8), \\ 2e_2(7) &= u_z(O_1) + u_z(O_3) + u_z(O_5) + u_z(O_7). \end{aligned} \quad (13)$$

Смещения атомов кислорода, показанные на рис. 3а и б, описываются следующими функциями:

$$\begin{aligned} & \left\{ \alpha_1 [e_1(6) + e_2(6)] + \alpha_2 [e_1(7) + e_2(7)] \right\} \exp(-ik_1 \mathbf{R}_n) \text{ и} \\ & \left[\alpha'_1 e_1(6) + \alpha'_2 e_1(7) \right] \exp(-ik_1 \mathbf{R}_n) \end{aligned} \quad (14)$$

соответственно. Первая функция в (14) связана с конденсацией фононного ПП типа $\eta_1 = \eta_2 \neq 0$, а вторая - с $\eta_1 \neq 0, \eta_2 = 0$. Все различные коэффициенты смешивания, $\{\alpha_i\}$, $\{\alpha'_i\}$, ..., удовлетворяют условиям нормировки $\sum_i \alpha_i^2 = 1$, $\sum_i \alpha_i'^2 = 1, \dots$.

Таким образом смещения атомов марганца и кислорода, показанные на рис. 3, описываются функциями (12) и (14) с волновым вектором $k_1 = (1/2, 0, 0)$. Однако наш симметричный анализ показывает (см. (7)), что имеется вторичный фононный ПП ξ с волновым вектором $k_2 = (0, 0, 0)$. Конденсация этого ПП приводит к дополнительным атомным смещениям. Базисные векторы для ПП ξ будем обозначать через $e(i)$. Для атомов кислорода в плоскостях MnO_2 базисные векторы записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} 2\sqrt{2}e(1) &= u_x(O_1) + u_x(O_2) - u_x(O_3) - u_x(O_4) + u_x(O_5) + u_x(O_6) - u_x(O_7) - u_x(O_8), \\ 2\sqrt{2}e(2) &= u_z(O_1) - u_z(O_2) - u_z(O_3) + u_z(O_4) + u_z(O_5) - u_z(O_6) - u_z(O_7) + u_z(O_8). \end{aligned} \quad (15)$$

Смещения атомов кислорода, показанные на рис. 2а, б и с, описываются функциями

$$\begin{aligned} & \left\{ \alpha_1 [e_1(4) + e_2(4)] - \alpha_2 [e_1(5) + e_2(5)] + \right. \\ & \left. + \alpha_3 [e_1(6) + e_2(6)] + \alpha_4 [e_1(7) + e_2(7)] \right\} \exp(-ik_1 \mathbf{R}_n), \\ & \alpha'_1 [\alpha_1 e_1(4) - \alpha_2 e_1(5) + \alpha_3 e_1(6) - \alpha_4 e_1(7)] \exp(-ik_1 \mathbf{R}_n) + \\ & + \alpha'_2 [\alpha'_1 e(1) + \alpha'_2 e(2)] \exp(-ik_2 \mathbf{R}_n) \end{aligned}$$

$$[\alpha_1 e(1) + \alpha_2 e(2)] \exp(-ik_2 \mathbf{R}_n) = \alpha_1 e(1) + \alpha_2 e(2) \quad (16)$$

соответственно. Первая функция в (16) связана с конденсацией фононного ПП типа $\eta_1 = \eta_2 \neq 0$, вторая функция в (16) - с $\eta_1 \neq 0$, $\xi \neq 0$, а третья - с $\xi \neq 0$.

Проведенный анализ показывает, что все атомные смещения, которые наблюдались в экспериментах [1-3], описываются в предложенной теории.

Сформулируем полученные результаты. На основе знания волнового вектора ФП, $k_1 = (1/2, 0, 0)$, было построено разложение свободной энергии (1)-(3), которое описывает все ФП из кристаллической фазы с симметрией $Pnma$ (см. (8) и (9)). Проведенный анализ показывает, что экспериментально наблюдаемые низкотемпературные фазы симметрии $P2_1/m(C_{2h}^2)$, $Pmn2_1(C_{2v}^7)$ и $Pm(C_s^1)$ возникают в результате трех типов конденсации ПП симметрии τ_1 , $\varphi_1 \neq 0$, $\varphi_1 = \varphi_2 \neq 0$ и $\varphi_1 \neq \varphi_2 \neq 0$ соответственно. Согласно экспериментальным данным [10,11], ФП в манганите $Pr_{1-x}Ca_xMnO_3$ ($0,3 < x < 0,7$) приводит к орбитальному и зарядовому упорядочениям. Следовательно, ПП данного ФП связан либо с орбитальными, либо с зарядовыми степенями свободы, причем орбитальные и зарядовые степени свободы могут взаимодействовать между собой. Наблюдение одинаковой валентности ионов марганца в низкотемпературной фазе $Pr_{0,6}Ca_{0,4}MnO_3$ [1] указывает на то, что ПП обсуждаемого ФП связан с орбитальными (орбиталь типа d_{z^2}), а не с зарядовыми степенями свободы. В нашей феноменологической теории ПП $\{\varphi_1, \varphi_2\}$ описывает усредненную по кристаллу вероятность заполнения электроном орбитали типа d_{z^2} на ионе Mn^{3+} , причем все орбитали типа d_{z^2} лежат в плоскости MnO_2 и имеют в фазе $Pnma$ два возможных направления (см. рис.2). В

рамках такой модели было показано, что ориентационное упорядочение орбиталей, в случае конденсации ПП типа $\varphi_1 = \varphi_2 \neq 0$, приводит к одинаковой валентности ионов марганца в низкотемпературной фазе симметрии $Pmn2_1(C_{2v}^7)$ (см. рис. 2, а), а при конденсации ПП типа $\varphi_1 \neq 0$ - к зарядовому разделению (появлению ионов $Mn^{3.5+\delta}$ и $Mn^{3.5-\delta}$) и к орбитальной структуре, которая показана на рис. 2b (симметрия низкотемпературной фазы - $P2_1/m(C_{2h}^2)$). Проведенный анализ атомных смещений также показывает, что все экспериментально наблюдаемые атомные смещения для двух электронных состояний марганца описываются в рамках предложенной феноменологической теории и соответствуют двум типам конденсации орбитального ПП, $\varphi_1 = \varphi_2 \neq 0$ и $\varphi_1 \neq 0, \varphi_2 = 0$. Низкотемпературная фаза симметрии $P2_1/m(C_{2h}^2)$, с конденсацией ПП типа $\varphi_1 \neq 0, \varphi_2 = 0$, возникает при условиях $\tilde{v} > 0, \tilde{u} > 0$, а фаза симметрии $Pmn2_1(C_{2v}^7)$, с конденсацией ПП $\varphi_1 = \varphi_2 \neq 0$, при $\tilde{v} < 0, \tilde{u} + \tilde{v}/2 > 0$, где $\tilde{v} \equiv v + \frac{4\beta_1^2}{r_1} + \frac{4\beta_2^2}{r_2}$ и $\tilde{u} \equiv u - \frac{2\beta_1^2}{r_1} - \frac{2\beta_2^2}{r_2}$ (см. аналогичный анализ в [7]). Следовательно, знак феноменологической константы \tilde{v} определяет появление одной или другой фазы. В работе [1] было обнаружено, что реальная симметрия низкотемпературной фазы манганита $Pr_{0.6}Ca_{0.4}MnO_3$ - $Pm(C_s^1)$. Наш анализ показывает, что это промежуточная фаза с конденсацией ПП типа $\varphi_1 \neq \varphi_2 \neq 0$, поэтому можно предположить, что при концентрации $x \sim 0,4$ феноменологическая константа \tilde{v} меняет знак. Таким образом, фазовую диаграмму манганита $Pr_{1-x}Ca_xMnO_3$ ($0,3 < x < 0,7$) [10,11] необходимо пересмотреть: при $x \sim 0,4$ манганит $Pr_{1-x}Ca_xMnO_3$ находится

в промежуточной фазе $\varphi_1 \neq \varphi_2 \neq 0$ [1], а в областях $0,3 < x < 0,4$ и $x > 0,4$ должны наблюдаться две различные орбитальные структуры, которые показаны на рис. 2. Для построения микроскопической теории орбитального и зарядового упорядочений можно использовать двухорбитальную модель двойного обмена (см., например, [14]).

Авторы выражают благодарность А.М.Балагурову и В.Ю.Помякушину за обсуждение результатов работы. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке в рамках проектов INTAS 01-2008, РФФИ 02-02-16864 и 01-F-23.

Литература

1. A. Daoud-Aladine, J. Rodriguez-Carvajal, L. Pinsard-Gaudart, M.T. Fernandez-Diaz, A. Revcolevschi, *Phys. Rev. Lett.* **89**, N9, 097205-1 (2002).
2. P.G. Radaelli, D.E. Cox, M. Marezio, S.-W. Cheong, *Phys. Rev.* **B55**, 3015 (1997).
3. Z. Jirak, F. Damay, M. Hervieu, C. Martin, B. Raveau, *Phys. Rev.* **B61**, 1181 (2000).
4. S. Mori, C.H. Chen, S.-W. Cheong, *Nature*, **392**, 473 (1998).
5. M.V. Lobanov, A.M. Balagurov, V.Yu. Pomjakushin, P. Fischer, M. Gutmann, A.M. Abakumov, O.G. D'yachenko, E.V. Antipov, O.I. Lebedev, G. Van Tendeloo, *Phys. Rev.* **B61**, 8941 (2000).
6. О.В. Ковалев, *Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп*. Москва, Наука, 1986.
7. А. Брус, Р. Каули, *Структурные фазовые переходы*. Москва, Мир, 1984.
8. К.И. Кугель, Д.И. Хомский, *УФН*, **136**, N4, 621 (1982).
9. D.I. Khomskii, K.I. Kugel, *Europhys. Lett.*, **55**, 208 (2001); *cond-mat/0112340* (2001).

10. Z. Jirak, S. Krupica, Z. Simsa, M. Dlouha, S. Vratislav, *J. Magn. Magn. Mater.* **53**, 153 (1985).
11. M.v. Zimmermann, C.S. Nelson, J.P. Hill, Doon Gibbs, M. Blume, D. Casa, B. Keimer, Y. Murakami, C.-C. Kao, C. Venkataraman, T. Gog, Y. Tomioka, Y. Tokura, *Phys. Rev.* **B64**, 195133-1 (2001).
12. Y. Murakami, H. Kawada, H. Kawata, M. Tanaka, T. Arima, Y. Moritomo, Y. Tokura, *Phys. Rev. Lett.* **80**, N9, 1932 (1998).
13. J. Garcia, M.C. Sanchez, J. Blasco, G. Subias, M.G. Proietti, *J. Phys. Condens. Matter*, **13**, 3243 (2001).
14. G. Jackeli, N.B. Perkins, N.M. Plakida, *Phys. Rev.* **B62**, 372 (2000).

Получено 29 октября 2002 г.

Шахматов В. С., Плакида Н. М., Тончев Н. С.
Орбитальный фазовый переход в $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$

P17-2002-245

Развита феноменологическая теория фазового перехода в манганите $\text{Pr}_{0.6}\text{Ca}_{0.4}\text{MnO}_3$. Показано, что этот фазовый переход является орбитальным фазовым переходом, а два обсуждаемых в литературе электронных состояния иона марганца возникают в результате двух различных типов конденсации одного и того же орбитального параметра порядка. Таким образом, ион марганца в манганите $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($0,3 \leq x \leq 0,5$) может иметь одно или другое электронное состояние в зависимости от величин термодинамических параметров.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2002

Перевод авторов

Shakhmatov V. S., Plakida V. M., Tonchev N. S.
Orbital Phase Transition in $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$

P17-2002-245

A phenomenological theory of the phase transition in $\text{Pr}_{0.6}\text{Ca}_{0.4}\text{MnO}_3$ is developed. The phase transition is an orbital phase transition. Two electronic states of manganese ions discussed in literature appear as a result of condensation of the orbital order parameter. Thus, manganese ions in $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($0,3 \leq x \leq 0,5$) have one of the two electronic states in dependence on magnitudes of the thermodynamical parameters.

The investigation has been performed at the Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2002

Редактор *М. И. Зарубина*
Макет *Н. А. Киселевой*

Подписано в печать 20.11.2002.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 0,87. Уч.-изд. л. 0,79. Тираж 305 экз. Заказ № 53622.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@pds.jinr.ru

www.jinr.ru/publish/