

НЕТРАДИЦИОННАЯ МОДЕЛЬ ПЕРЕХОДА ИЗОЛЯТОР-«ПЛОХОЙ» МЕТАЛЛ В ОРТОНИКЕЛАТАХ $RNiO_3$

А.С. Москвин^{1,2}

¹Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

²Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Alexander.moskvin@urfu.ru

Ортоникелаты редкоземельных элементов $RNiO_3$ (R = редкая земля, или иттрий Y) относятся к широкому классу ян-теллеровских (ЯТ) магнетиков, соединений на основе ян-теллеровских $3d$ - и $4d$ -ионов с конфигурациями типа $t_{2g}^{n_1}e_g^{n_2}$ в высокосимметричном октаэдрическом, кубическом или тетраэдрическом окружении и с орбитальным E_g -дублетом в основном состоянии [1]. Все ЯТ-конфигурации d -ионов включают один e_g -электрон или одну e_g -дырку сверх устойчивых, полностью или наполовину заполненных, оболочек. Эти конфигурации являются неустойчивыми относительно реакции диспропорционирования так что для ЯТ-ионов мы имеем дело с конкуренцией между эффектом Яна-Теллера, приводящим к орбитальному упорядочению, и эффектом анти-ЯТ-диспропорционирования, приводящим к формированию системы электронных и дырочных центров S -типа с орбитально невырожденным основным состоянием [1]. Все ЯТ-магнетики являются сильно коррелированными системами в том смысле, что они не могут быть адекватно описаны в рамках методов теории функционала плотности (DFT) (или их гибридных расширений типа LDA+U), так что для корректного описания свойств таких материалов требуется выход за пределы DFT-методов. В частности, мы указываем на необходимость принципиального пересмотра традиционного подхода [2] к описанию перехода «металл-изолятор» в ЯТ-магнетиках. В ортоникелатах переход «изолятор-металл» связывается с разрушением низкотемпературного зарядового порядка (CO) и переходом CO-NO в неупорядоченное «металлоподобное» состояние (bad metal). В рамках модели зарядовых триплетов с учетом электронно-колебательного взаимодействия нами развита простая количественная теория перехода.

References

- [1] A.S. Moskvin, Jahn–Teller Magnets, *Magnetochemistry*, **9**, 224 (2023)
- [2] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, Metal-insulator transitions, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998)