

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ И МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ $\text{La}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{MnO}_3$ В РОМБОЭДРИЧЕСКОЙ И ОРТОРОМБИЧЕСКОЙ ФАЗАХ

**В.Е.Архипов, В.С.Гавико, К.М.Демчук, В.П.Дякина, А.В.Королев,
Я.М.Муковский*, Э.А.Нейфельд, Р.В.Поморцев¹⁾**

**Институт физики металлов Уральского отделения РАН
620219 Екатеринбург, Россия**

* **Московский институт стали и сплавов
117939 Москва, Россия**

Поступила в редакцию 30 декабря 1999 г.

На монокристалле соединения $\text{La}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{MnO}_3$ обнаружен и исследован структурный переход из орторомбической в ромбическую фазу. В области сосуществования фаз изучено влияние магнитного поля (до 12 Тл) и гидростатического давления (до 5 кбар) на температурные зависимости электросопротивления. Показано, что магнитное поле и давление понижают температуру перехода и качественно одинаково влияют на электросопротивление в области структурного перехода.

PACS: 72.15.Gd, 81.40.Vw

В настоящей работе выполнены рентгенографические исследования соединения $\text{La}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{MnO}_3$ в температурном интервале 80 – 300 К, а также изучены зависимости электросопротивления от магнитного поля и давления в интервале температур 160 – 200 К, где был обнаружен структурный фазовый переход первого рода.

Исследуемые образцы были вырезаны из монокристалла $\text{La}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{MnO}_3$, выращенного методом плавающей зоны с радиационным разогревом зоны ксеноновой лампой. Измерения гальваномагнитных свойств проводились на постоянном токе четырехконтактным методом. Измерения при гидростатическом сжатии выполнены в камере высокого давления, в которой средой, передающей давление, являлся гелий. Кроме перечисленных выше свойств для аттестации исследуемой системы измерена термоэдс, которая равна $\approx 8 \text{ мкВ/К}$ при 300 К и $\approx -7 \text{ мкВ/К}$ при 30 К. Смена знака термоэдс происходит при $T \approx 240$ К.

Кристаллическая структура и фазовый состав образцов исследовались с помощью автоматизированного рентгеновского дифрактометра типа ДРОН в монохроматизированном $\text{Cr } K_{\alpha}$ -излучении на порошковых образцах, изготовленных из монокристалла.

На рис.1 приведены температурные зависимости параметров кристаллической решетки $\text{La}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{MnO}_3$. В области температур $80 < T < 185$ К на дифрактограммах наблюдаются дифракционные линии только орторомбической ($Pbnm$) фазы. При 185 К наряду с отражениями орторомбической фазы появляются слабые дифракционные линии ромбоэдрической ($R\bar{3}c$) фазы. С повышением температуры относительная интенсивность линий $R\bar{3}c$ фазы возрастает, тогда как интенсивность линий $Pbnm$ фазы уменьшается, и выше $T = 196$ К дифракционные линии этой фазы практически исчезают. Характер появления отражений ромбоэдрической фазы и

¹⁾ e-mail: pomor@imp.uran.ru

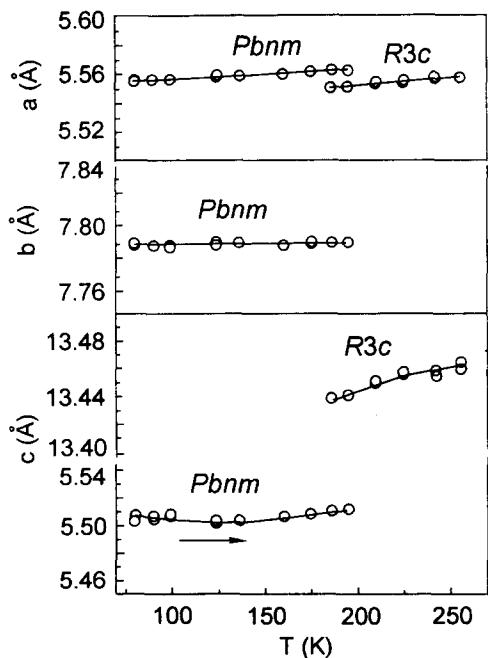


Рис.1. Температурные зависимости параметров кристаллической решетки $\text{La}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{MnO}_3$

наличие двухфазной области свидетельствуют, что наблюдаемый фазовый переход в $\text{La}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{MnO}_3$ является переходом первого рода. При переходе от орторомбической к ромбоэдрической структуре при нагреве образца наблюдается уменьшение объема приведенной кристаллической ячейки. Уменьшение объема, приходящегося на одну формулярную единицу, составляет $\approx 0.65\%$.

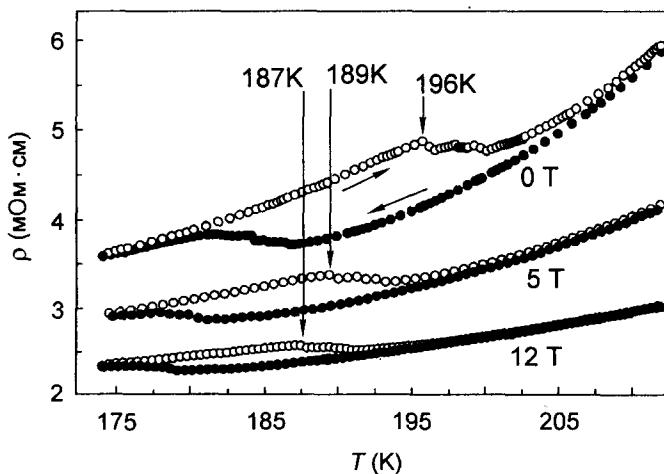


Рис.2. Температурные зависимости электросопротивления $\text{La}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{MnO}_3$ в магнитных полях 0; 5 и 12 Тл

На рис.2 представлены температурные зависимости сопротивления в магнитных полях $H = 0, 5$ и 12 Тл в интервале температур $175 - 210 \text{ К}$, полученные при нагреве и охлаждении образца. В области температур, где наблюдается структурный фазовый переход, отчетливо виден температурный гистерезис. С ростом магнит-

ного поля петля гистерезиса смещается в сторону низких температур, а разница в электросопротивлении низкотемпературной и высокотемпературной фаз уменьшается. Отметим, что похожий структурный переход наблюдался в $\text{La}_{0.88}\text{Sr}_{0.12}\text{MnO}_3$ при $T = 145$ К, где в ферромагнитном состоянии авторы обнаружили переход из орторомбической фазы в псевдокубическую [1]. Одновременно со структурным переходом они наблюдали переход металл – диэлектрик, при этом как температура перехода, так и величина скачка электросопротивления зависела от внешнего магнитного поля.

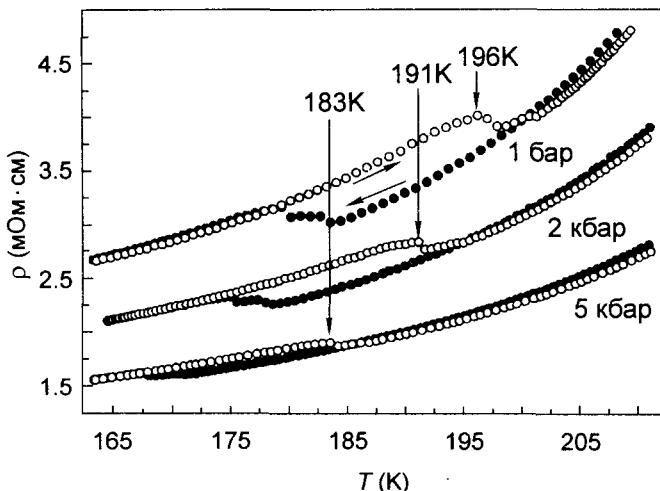


Рис.3. Температурные зависимости электросопротивления $\text{La}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{MnO}_3$ при гидростатическом сжатии 1 бар, 2 и 5 кбар

На рис.3 представлены температурные зависимости электросопротивления под действием гидростатического давления. Петля гистерезиса с ростом давления смещается в сторону низких температур, и уменьшается разница сопротивлений низкотемпературной и высокотемпературной фаз, что аналогично поведению сопротивления в магнитном поле.

В мanganитах лантана с перовскитной структурой ионы марганца расположены в центре октаэдра, в вершинах которого находятся ионы кислорода. Вершины, соприкасаясь друг с другом, образуют пространственную сетку. Трехвалентные ионы лантана La^{3+} и замещающие их двухвалентные ионы допионирующего элемента находятся в пространстве между октаэдрами MnO_6 . Для трехвалентного иона марганца Mn^{3+} электронная конфигурация имеет вид $3d^4$. Если хундловское внутриатомное расщепление велико, то электронная конфигурация иона Mn^{3+} будет $t_{2g}^3 e_g$. Электроны в состоянии t_{2g} локализованы и формируют магнитный момент ($S = 3/2$). Электронные состояния e_g , сильно гибридизированные с $2p$ -состояниями кислорода, формируют зону проводимости, проводимость в которой осуществляется дырками, возникающими при замене ионов La^{3+} двухвалентными элементами [2–5].

Как известно, в модели двойного обмена [4, 5] матричный элемент t_{ij} , описывающий переход носителей между узлами i и j , занимаемыми ионами марганца, имеет вид $t_{ij} = t \cos(\theta/2)$, где θ – угол между магнитными моментами S_i и S_j , локализованными в узлах i и j . Величина t характеризует степень перекрытия волновых функций соответствующих состояний тех узлов, между которыми происходят перескоки. Из-за сильной гибридизации e_g -состояний марганца и $2p$ -состояний кислорода

величина t зависит от угла ($\text{Mn}-\text{O}-\text{Mn}$)-связи φ , который в кубических перовскитных соединениях равен 180° .

В мanganитах лантана отклонение угла φ от 180° определяется относительными величинами эффективных радиусов трехвалентного лантана, замещающего его двухвалентного элемента и эффективных радиусов ионов Mn^{3+} и Mn^{4+} . Поэтому величина угла φ зависит не только от состава, но и от уровня допирования [6].

Эффективным способом влияния на величину угла ($\text{Mn}-\text{O}-\text{Mn}$)-связи является внешнее гидростатическое давление [5]. Оставляя неизменным состав и эффективные радиусы ионов, внешнее давление приводит к уменьшению межатомных расстояний. В результате октаэдр MnO_6 под влиянием внешнего давления начинает разворачиваться. В системах, имеющих перовскитную структуру, увеличение давления приводит к росту угла φ . В приближении среднего поля лигандов матричный элемент перехода t пропорционален $\cos(\pi - \varphi)$, поэтому с ростом φ , когда угол φ приближается к 180° , матричный элемент t увеличивается [5]. Поскольку ширина зоны проводимости приблизительно пропорциональна t^2 , то внешнее давление приводит к ее росту и, следовательно, к уменьшению электросопротивления.

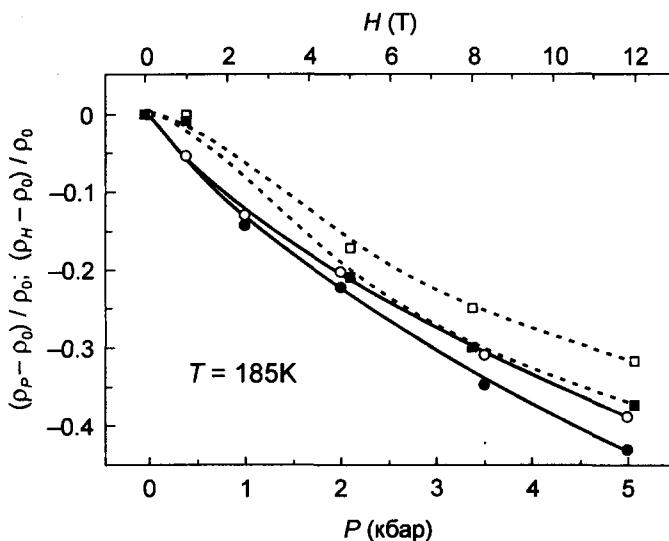


Рис.4. Магнитопольевые и барические зависимости электросопротивления от давления (сплошные кривые) и от магнитного поля (штриховые кривые) орторомбической (\square и ■) и ромбоэдрической (\circ и ●) фаз при $T = 185$ К

На рис.4 приведены барические зависимости величины $(\rho_p - \rho_0)/\rho_0$ для высокотемпературной и низкотемпературной фаз при $T = 185$ К. Здесь ρ_p – величина электросопротивления под давлением, а ρ_0 – величина сопротивления при $P = 1$ бар и $H = 0$. Видно, что с ростом давления электросопротивление низкотемпературной (орторомбической) фазы уменьшается быстрее, чем высокотемпературной (ромбоэдрической). При $P = 5$ кбар разница в их величинах достигает $\approx 10\%$. Поскольку уменьшение электросопротивления с ростом давления мы связываем, в основном, с увеличением угла ($\text{Mn}-\text{O}-\text{Mn}$)-связи, то полученные результаты свидетельствуют, что скорость изменения φ с ростом давления в орторомбической фазе выше, чем в ромбоэдрической. Здесь же показана зависимость магнитосопротивления $\Delta\rho/\rho$ от магнитного поля для обеих фаз при $T = 185$ К. Видно, что орторомбическая фаза имеет также большую по сравнению с ромбоэдрической фазой величину магнитосопротивления. При $H = 12$ Тл эта разница достигает $\approx 17\%$.

Из рис.2, 3 видно, что в исследованной области температур проводимость обеих фаз имеет металлический характер ($d\rho/dT > 0$), а величина сопротивления равна $\approx 3 \cdot 10^3$ мкОм·см при $H = 0$. Это значение близко к величине моттовского предела для сопротивления ρ_{max} , которое в случае $\text{La}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{MnO}_3$ находится в интервале $(5 - 10) \cdot 10^3$ мкОм·см. Таким образом, с точки зрения электрофизических свойств обе фазы $\text{La}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{MnO}_3$ в области температур $175 < T < 210$ К являются плохими металлами, у которых плотность состояний вблизи уровня Ферми мала и слабо зависит от энергии. В пользу этого свидетельствует величина термоэдс, которая, как было отмечено выше, мала и слабо зависит от температуры, а также качественно похожая зависимость сопротивления обеих фаз от магнитного поля и давления.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант 99-02-16280).

-
1. Y.Endoh, H.Nojiri, K.Kaneko et al., Mater. Scien. Engin. **B63**, 151 (1999).
 2. C.Zener, Phys. Rev. **82**, 403 (1951).
 3. P.G.de Gennes, Phys. Rev. **118**, 141 (1960).
 4. A.P.Ramirez, J. Phys.: Condens. Matter. **9**, 8171 (1997).
 5. M.Imada, A.Fujimori, and Y.Tokura, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039 (1998).
 6. R.Mahendiran, S.K.Tiwary, A.K.Raychandhuri et al., Phys. Rev. **B53**, 3348 (1996).