**Теоретическое описание магнитных свойств и поведения спиновой модели класса систем MnAA'O6 на примере соединения MnSnTeO6 (пример заявки)**

**Е.В. Комлева, С.В. Стрельцов**, Х.Х. Некто1

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург

1Институт ни сесть ни встать, г. Неназванный

****С помощью первопринципных и модельных расчётов показано, что магнитное основное состояние MnSnTeO6 имеет сложную природу, формируется в результате фрустраций и описывается набором циклоид. Продемонстрировано, что доминирующим для ионов Mn является обменное взаимодействие между четвёртыми соседями, причём лишь половиной из них. Такая особенность обусловлена геометрией системы. Механизм этого взаимодействия – сверх-сверхобменный, через перекрывающиеся *p*-орбитали двух кислородов, принадлежащих разным ионам Mn. На основании этого предложена спиновая модель для описания класса изоструктурных систем MnAA'O6, где A и A' – *p*-элементы. Как показано на рисунке, она наглядно представима в виде трёх эквивалентных взаимопроникающих кубических решёток, связанных между собой двумя обменными взаимодействиями – фрустрирующим (в плоскости ***ab***) и нефрустрирующим (по оси ***c***). Анализ данной модели позволяет из первых принципов предсказать возможные магнитные свойства входящих в этот класс соединений.

Рисунок - 1 Упрощённая спиновая модель класса соединений MnAA'O6, представимая в виде трёх эквивалентных взаимопроникающих кубических решёток (**J3**=**J6**), связанных между собой двумя обменными взаимодействиями – фрустрирующим (**J1**=**J2** в плоскости ***ab***) и нефрустрирующим (**J4** по оси ***c***)

***Публикация:***

1. [MnSnTeO6: A Chiral Antiferromagnet Prepared by a Two-Step Topotactic Transformation](https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.9b03423) / E. Zvereva, K. Bukhteev, M. Evstigneeva, E. Komleva, G. Raganyan, K. Zakharov, Ye. Ovchenkov, A. Kurbakov, M. Kuchugura, A. Senyshyn, S. Streltsov, A. Vasiliev, V. Nalbandyan // Inorganic chemistry.—2020.—V.59.—P.1532—1546.

*Актуальность* исследования: соединение MnSnTeO6 было впервые синтезировано нашими коллегами в данной работе [1], и экспериментальные исследования показали наличие необычных магнитных свойств.

*Цель* нашего теоретического исследования: описать магнитные свойства MnSnTeO6 и исследовать характерные особенности предложенной нами спиновой модели.

*Задачи* исследования:

1) рассчитать и интерпретировать параметры изотропного обменного взаимодействия в модели Гайзенберга; 2) смоделировать температурную зависимость магнитной восприимчивости и оценить температуру магнитного перехода, сравнить поведение с экспериментом; 3) предложить спиновую модель класса соединений MnAA'O6 (где A и A' – *p*-элементы) и исследовать её поведение при оценке температуры магнитного перехода.

*Объект* исследования: кристалл хирального антиферромагнетика MnSnTeO6.

*Методы* исследования: первопринципные расчёты (теория функционала электронной плотности), метод Монте-Карло.

*Авторский вклад* сотрудников ИФМ: идея исследования, постановка задачи, проведение расчёта, анализ результатов исследования, написание текста статьи.

**1. Рассчитаны и проинтерпретированы параметры изотропного обменного взаимодействия в модели Гайзенберга** $H=\sum\_{ij}^{} J\_{ij} \vec{S\_{i}} \vec{S\_{j}}$**.**

Рисунок - 2 Обменные пути **J**1-**J**7 в MnSnTeO6, соответствующие рассчитанным параметрам, приведённым в таблице

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | ***J1*** | ***J2*** | ***J3*** | ***J4*** | ***J5*** | ***J6*** | ***J7*** |
| meV | 0.12 | 0.15 | 0.60 | 0.12 | 0.02 | 0.60 | 0.02 |

Для корректного описания необходим учёт 2-ух типов внутриплоскостных и 5-ти типов межплоскостных обменных путей. Все взаимодействия носят антиферомагнитный характер.

Магнитное основное состояние описывается набором циклоид, заметны сильные магнитные фрустрации.

Хиральная кристаллическая структура приводит к неэквивалентным «правовинтовым» (***J3***, ***J6***) и «левовинтовым» (***J5***, ***J7***) взаимодействиям между ионами Mn, принадлежащими соседним плоскостям.

Наиболее сильными магнитными взаимодействиями являются «правовинтовые» (***J3***, ***J6***) между ионами Mn соседних плоскостей. Его природа – **сверх-сверхобменное взаимодействие** посредством перекрывающихся *p*-обриталей двух атомов кислорода из соседних октаэдров MnO6 вдоль одной из диагоналей боковой грани призмы Mn6. Взаимодействие вдоль второй диагонали той же грани пренебрежимо мало.

**2. Смоделирована температурная зависимость магнитной восприимчивости и оценена температура магнитного перехода.**

Теоретическая оценка температурной зависимости магнитной восприимчивости методом Монте-Карло для классической модели Гайзенберга с использованием рассчитанных обменных взаимодействий прекрасно согласуется с экспериментальным поведением (Рис. 3).

Рисунок - 3 Экспериментальная (красный) и рассчитанная (чёрный) температурные зависимости магнитной восприимчивости.

Для адекватного описания магнитных свойств MnSnTeO6 в модели Гайзенберга достаточно ограничиться следующими двумя параметрами: ***J(1)***=***J1***=***J2***=***J4***; ***J(2)***=***J3***=***J6***; ***J5***=***J7***=0.

Выбранная модель успешно воспроизводит температуру установления дальнего магнитного порядка в соединении (~10 K).

**3. Предложена упрощённая спиновая модель для класса соединений MnAA'O6 и исследовано поведение температуры магнитного перехода.**

Магнитные свойства класса систем MnAA'O6, где A и A' – атомы *p*-элементов (Sn, Sb, Te) могут быть описаны упрощённой спиновой моделью с тремя параметрами обменного взаимодействия.

Рисунок - 4 Оценка температуры магнитного упорядочения в предложенной модели.

Такая модель может быть интерпретирована как три взаимопроникающие кубические решётки, заданные сильнейшим обменным взаимодействием («правовинтовым» ***J3***=***J6***) (Рис. 1).

Эти решётки связаны между собой посредством фрустрирующего внутриплоскостного (***J1***=***J2***) и нефрустрирующего межплоскостного (***J4***) взаимодействий.

Оценена относительная зависимость температуры максимума магнитной восприимчивости от отношения параметров внутри- и лидирующего межплоскостного обменных взаимодействий (Рис. 4).

**Выводы**:

Магнитное основное состояние MnSnTeO6 имеет сложную природу, формируется в результате фрустрации и описывается набором циклоид.

Вопреки простейшим моделям, доминирующим является обменное взаимодействие Mn-Mn между половиной из вторых соседей между плоскостями. Эта особенность обусловлена геометрией системы. Механизм этого взаимодействия – сверх-сверхобменный, через перекрывающиеся *p*-орбитали двух кислородов, принадлежащих разным ионам Mn.

Класс систем MnAA'O6 может быть описан спиновой моделью, наглядно представимой в виде трёх эквивалентных взаимопроникающих кубических решёток, связанных между собой двумя обменными взаимодействиями – фрустрирующим (в плоскости ***ab***) и нефрустрирующим (по оси ***c***).