

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕХОДА МЕЖДУ СПИНОВЫМИ СОСТОЯНИЯМИ ИОНОВ КОБАЛЬТА В LaCoO_3 МЕТОДОМ НЕЙТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Н.О.Голосова, Д.П.Козленко, Z. Jiráček*, В.П.Глазков**, С.Е. Кичанов, Б.Н.Савенко

Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна

* Institute of Physics, Cukrovarnická 10, 162 53 Prague 6, Czech Republic

** РНЦ "Курчатовский институт", 123182 Москва

Свойства кобальтита лантана LaCoO_3 имеют ряд уникальных отличий от других оксидов переходных металлов, что вызывает большой интерес к изучению этого соединения и других соединений на его основе уже на протяжении ряда лет. В нормальных условиях LaCoO_3 является полупроводником и имеет ромбоэдрическую кристаллическую структуру (пр. гр. $R\bar{3}c$). При низких температурах ионы Co^{3+} находятся в низкоспиновом (НС) состоянии (t_{2g}^6 , $S = 0$). Энергия расщепления основного состояния ионов кобальта в кристаллическом электрическом поле сравнима с энергией внутриатомного обменного взаимодействия, поэтому с ростом температуры возможно тепловое возбуждение электронов с t_{2g} на e_g – энергетический уровень [1, 2-4]. При $T \approx 100$ К ионы Co^{3+} претерпевают переход в промежуточное спиновое (ПС) состояние ($t_{2g}^5 e_g^1$, $S = 1$) [5], и система становится парамагнитной. Дальнейшее повышение температуры до $T = 500$ К приводит к возникновению высокоспинового (ВС) ($t_{2g}^4 e_g^2$, $S = 2$) парамагнитного состояния и переходу полупроводник - металл [5].

Исследование магнитных свойств LaCoO_3 также показало, что приложение высокого давления приводит к заметному увеличению разницы между уровнями энергии НС и ПС состояний, и как следствие - к значительному уменьшению заселенности ПС состояния [6]. Данная разница определяется энергией расщепления основного состояния ионов кобальта в кристаллическом электрическом поле, которая зависит от геометрии октаэдров CoO_6 и длины валентной связи Co-O .

Для количественного объяснения наблюдаемых в LaCoO_3 эффектов необходима информация об изменениях кристаллической структуры при высоких давлениях. В настоящей работе были проведены исследования влияния внешнего высокого давления на кристаллическую структуру кобальтита LaCoO_3 в области температур от 10 К до 300 К методом нейтронной дифракции.

Эксперименты по нейтронной дифракции проводились на спектрометре ДН-12 импульсного высокопоточного реактора ИБР-2 (ЛНФ им. И.М. Франка, ОИЯИ, Дубна) с использованием камер высокого давления с сапфировыми наковальнями в диапазоне внешних высоких давлений до 4.5 ГПа. Дифракционные спектры измерялись при углах рассеяния $2\theta = 90^\circ$ и 45.5° .

Полученные температурные зависимости объема V элементарной ячейки для LaCoO_3 при давлениях $P = 0, 2.8, 4.5$ ГПа представлены на рис. 1. Температурную зависимость объема V можно представить в виде суммы двух вкладов, один из которых связан с обычным тепловым расширением, описываемым формулой Грюнайзена-Эйнштейна, а другой – с индуцированным температурой переходом ионов Co^{3+} из НС в ПС состояние. Анализ полученных результатов показывает, что приложение внешнего высокого давления до 4.5 ГПа приводит к увеличению разницы между энергетическими уровнями основного НС

состояния и возбужденного ПС состояния примерно в 2 раза. Как следствие температура перехода в промежуточное спиновое состояние увеличивается.

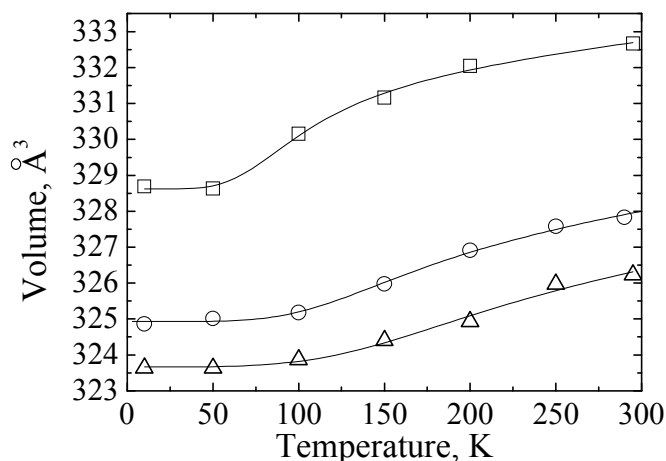


Рис. 1. Температурная зависимость объема элементарной ячейки для LaCoO_3 , полученная при давлениях 0 (□), 2.8 (○) и 4.5 (△) GPa. Сплошные линии – интерполяция экспериментальных данных функцией, учитывающей вклад обычного теплового расширения ($T_E = 283.1$ K), а также вклад, вызванный переходом ионов Co^{3+} из НС в ПС состояние.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант РФФИ № 03-02-16879.

Литература:

- [1] J.B. Goodenough. *J. Phys. Chem. Solids* **6**, 287 (1958).
- [2] J.B. Goodenough. *Progress in Solid State Chemistry* **5**, 145 (1971).
- [3] R.H. Potze, G.A. Sawatzky, and M. Abbate. *Phys. Rev.* **B51**, 11501 (1995).
- [4] M.A. Korotin, S.Yu. Ezhov, I.V. Solovyev, V.I. Anisimov, D.I. Khomskii, and G. A. Sawatzky. *Phys. Rev.* **B54**, 5309 (1996).
- [5] K. Asai, A. Yoneda, O. Yokokura, J.M. Tranquada, G. Shirane, and K. Kohn. *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 290 (1998).
- [6] K. Asai, O. Yokokura, M. Suzuki, T. Naka, T. Matsumoto, H. Takahashi, N. Mōri, and K. Kohn. *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 967 (1997).