ВЕСТНИК ПЕРМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

2026 • ФИЗИКА • Вып. 3

УДК 538.955
PACS 771.70.Gm, 71.70.Ej, 75.50.Ee

Моделирование сверхобменных взаимодействий в низкоразмерных магнетиках $KCuF_3$ и K_2CuF_4

Л. Э. Гончарь[1,2]

[1] Уральский государственный университет путей сообщения, Екатеринбург, Россия
[2] Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
† l.e.gonchar@yandex.ru

В работе предложено уточнение для зависимости сверхобменного взаимодействия от орбитального упорядочения в модельных низкоразмерных магнетиков $KCuF_3$ и K_2CuF_4. Орбитальная сверхструктура в данных соединениях появляется за счет кооперативного эффекта Яна–Теллера на подрешетке магнитных ионов двухвалентной меди. Приведены выражения для определения углов орбитальной структуры каждого кристалла в зависимости от искажений октаэдра ионов фтора – ближайшего окружения магнитного иона. Эффективный гамильтониан обменной пары, состоящей из ионов меди в октаэдрическом окружении ионов фтора с общим узлом, записан вдоль трёх координатных осей и усреднён на волновых функциях взаимодействующих ионов. Таким образом, построена зависимость сверхобменных параметров от угла смешивания орбитальных функций, характеризующего основные состояния взаимодействующих магнитных ионов Cu^{2+}. В зависимости обменного взаимодействия от орбитального состояния выделена часть, зависящая от конфигурации сверхобменной связи, и часть, зависящая только от углов смешивания орбитальных состояний пары. Коэффициенты зависимости найдены феноменологически из предшествующих экспериментов. Показано, что в данной конфигурации могут образоваться разные типы магнитных упорядочений. Так, упорядочения *A*-, *G*-, *C*- типа возможны для кристалла структуры перовскита. Двумерный ферромагнетик или двумерный антиферромагнетик –виды возможного магнитного порядка для кристалла слоистого перовскита. Определены критические показатели орбитальной зависимости, при которых меняется тип магнитной структуры в обоих случаях. Качественно рассмотрено влияние давления на магнитную структуру $KCuF_3$ и родственного двумерного перовскита Na_2CuF_4.

Ключевые слова: эффект Яна–Теллера; орбитальная структура; сверхобменное взаимодействие

Поступила в редакцию 18.05.2026; после рецензии 24.06.2026; принята к опубликованию 24.06.2026

Modeling superexchange interactions in low-dimensional magnets $KCuF_3$ and K_2CuF_4

L. E. Gonchar[1,2]

[1] Ural State University of Railway Transport, Yekaterinburg, Russia
[2] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia
† l.e.gonchar@yandex.ru

The study deals with superexchange interaction dependency upon orbital ordering in model low-dimensional magnets $KCuF_3$ and K_2CuF_4. The orbital superstructure in these compounds appears due to the cooperative Jahn-Teller effect on the sublattice of magnetic ions of divalent copper. The

© Гончарь Л. Э., 2026

распространяется на условиях лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0).

paper provides expressions for determining the angles of the orbital structure of each crystal depending on the distortions of the fluorine octahedron, forming the immediate environment of the magnetic ion. We have found the effective Hamiltonian of the exchange pair, consisting of copper ions in an octahedral environment of fluorine ions with a common center, along the three coordinate axes. These expressions are averaged on the wave functions of the interacting ions. Thus, we propose the dependence of superexchange parameters on the angle of mixing of orbital functions, which characterizes the basic states of interacting magnetic ions Cu^{2+}. Within the exchange interaction, the factor of superexchange bond configuration and the factor of orbital mixing angles of the pair are distinguished. Dependence coefficients were found phenomenologically from previous experiments. It is shown that different types of magnetic orders can be formed in this configuration. *A*, *G*, *C* orderings are possible for a perovskite crystal structure, and a two-dimensional ferromagnet or two-dimensional antiferromagnet are possible for a crystal of layered perovskite. Critical values of orbital dependence parameters at which the type of magnetic structure changes were determined. The effect of pressure on the magnetic structure of $KCuF_3$ and the related two-dimensional perovskite Na_2CuF_4 is qualitatively estimated.

Keywords: Jahn-Teller effect; orbital ordering; superexchange interaction

Received 18 May 2026; revised 24 June 2026; accepted 24 June 2026

doi: 10.17072/1994-3598-2026-3-66-73

1. Введение

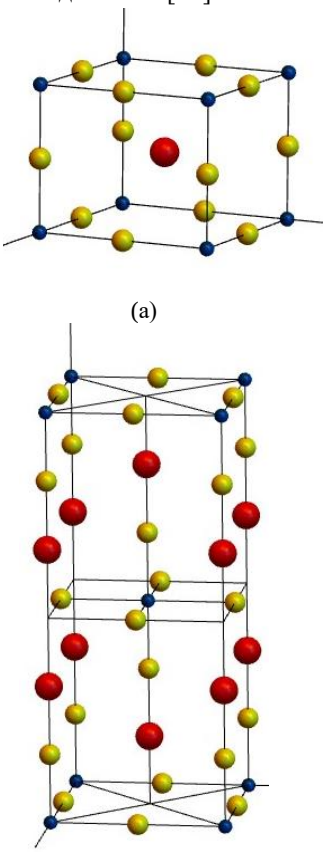
$KCuF_3$ и K_2CuF_4 являются классическими примерами диэлектрических низкоразмерных магнетиков, позволяющих проверять теоретические модели с помощью экспериментальных исследований. Эти кристаллы обладают псевдоперовскитной структурой ($KCuF_3$ [1, 2]) или структурой слоистого перовскита (K_2CuF_4 [3]), в которой ионы Cu^{2+} находятся в октаэдрическом окружении ионов F^- (см. рис.1).

Фторовые октаэдры вокруг ионов меди искажены в связи с тем, что орбитальное состояние Cu^{2+} в симметричном окружении является вырожденным, и в кристаллах имеет место кооперативный эффект Яна–Теллера (КЭЯТ) [4]. Кроме того, $KCuF_3$ существует в двух структурных модификациях с пространственными симметриями D_{4h}^{18} и D_{4h}^{5} [5].

КЭЯТ оказывает существенное влияние на особенности магнитной структур этих соединений. Так, $KCuF_3$ является квазиодномерным антиферромагнетиком, в котором сверхобменные взаимодействия вдоль оси *c* значительно сильнее, чем в плоскости *ab* [6]. Температура Нееля имеет характерную для низкоразмерного магнетика малую величину T_N= 39 K [1].

K_2CuF_4 является двумерным ферромагнетиком [7]. КЭЯТ приводит не столько к низкой магнитной размерности, которая обусловлена кристаллической структурой, сколько к ферромагнитному характеру упорядочения [4, 7], не свойственному диэлектрическим кристаллам. Температура Нееля для этого соединения ещё ниже – T_N= 6.25 K [8].

Обменное взаимодействие в этих соединениях, связанное с наличием орбитального упорядочения, рассматривалось и в более ранних работах [4, 9]. Однако описание свойств различных соединений в этих моделях не учитывает того, что расстояния и углы сверхобменных связей влияют на величину обменного взаимодействия [10].



(а)

(б)

Рис. 1. *Структура перовскита (а) и слоистого перовскита (б). Большие (красные) сферы – ионы K^+, малые (синие) сферы – ионы Cu^{2+}, средние (желтые) сферы – ионы F^-.*

В последние десятилетия интерес к данным соединениям возобновился в связи с возможностями расчёта [13, 14] и новыми экспериментальными

данными, обнаружившими необычное поведение этих модельных кристаллов и родственных им соединений в нейтронном и рамановском рассеяниях [2,15], в магнитном резонансе [16] и при приложении внешнего давления [17–19]. Однако первопринципные расчёты требуют больших вычислительных мощностей и не всегда подходят для объяснения экспериментальных данных. Необходимо предложить более простой способ учесть изменения магнитных взаимодействий, связанные с составом или внешним давлением.

В данной работе представлена полуфеноменологическая модель обменных взаимодействий в кристаллах $KCuF_3$ и K_2CuF_4, модифицированная по сравнению с работами [4, 9] и позволяющая учесть влияние внешних факторов не только на орбитальную структуру, но и на параметры кристаллической ячейки в целом. Аналогичная модель, созданная для манганитов, успешно описала влияние давления на температуру Нееля в $LaMnO_3$ [10].

2. Кристаллическая и орбитальная структура

Кристаллическая и орбитальная структуры данных соединений были хорошо изучены ранее, например, в работах [1–9, 11]. Однако в большей части работ (см., например, [1, 4]) орбитальная структура описана качественно. В работе [9] приведены общие формулы для расчёта ЯТ-искажений в любом октаэдрическом окружении. Тем не менее, готовые выражения симметризованных искажений для заданной симметрии кристалла упростят дальнейшие исследования изоструктурных соединений и позволят проанализировать влияние конкретных локальных искажений на обменные взаимодействия. Данный раздел посвящён получению зависимости симметризованных искажений и орбитальной структуры от локальных сдвигов октаэдрического окружения меди и параметров кристаллической решетки соединений.

2.1. $KCuF_3$

Данное соединение обладает псевдоперовскитной структурой. ЯТ-искажения приводят к двум одновременно наблюдаемым фазам: D_{4h}^{18} ($\{k_{13}\}\ \tau_5$) и D_{4h}^{5} ($\{k_{11}\}\ \tau_5$) [5]. Различие кристаллических структур в этих фазах, тем не менее, не играет значительной роли для цели данной работы, поэтому можно ограничиться рассмотрением наиболее исследованной фазы – D_{4h}^{18}.

Более поздние экспериментальные работы показали, что кристаллическая структура $KCuF_3$ не является строго тетрагональной и нуждается в пересмотре. Одно из таких уточнений предложено в работе [2] и приведено в табл. 1 и 2. Структура, предположенная в работе [2], описывается группой симметрии D_2^4 с малыми ромбическими искажениями. Для описания орбитального состояния эти малые искажения не влияют на результат. Поэтому для расчётов использованы результаты этой экспериментальной работы, но обменное взаимодействие и дальнейшее обсуждение проводятся в рамках тетрагональной структуры.

Таблица 1. *Координаты атомов в базисе примитивной ячейки D_2^4. Имеется только одна общая позиция, в качестве позиций указаны позиции группы D_{4h}^{18} (v_r=0). По сравнению с D_{4h}^{18} ячейка удвоена, оси координат повернуты на $\pi/4$*

Ион (позиция)	X (a)	Y(b)	Z(c)
K(1)–2a	¼	¼	¼
K(2)	¾	¼	¼
Cu(1)–2c	0	0	0
Cu(2)	½	0	0
F(1)–2d	v_r	v_r	¼
F(2)	$-v_r$	$-v_r$	¾
F(3)–4h	¼–v_t	0	0
F(4)	0	¼+v_t	0
F(5)	0	¼–v_t	½
F(6)	¾+v_t	0	0

Таблица 2. *Параметры структуры $KCuF_3$ при комнатной температуре*

a=b (Å)	c (Å)	v_r	v_t	Ф	
8,270	7,841	0,0115	0,0233	0,60π	[2]
8,282	7,8474	–	0.0194	0,62π	[5]

Подрешётка ионов двухвалентной меди присутствует в данном кристалле как кубическая подрешётка магнитных ЯТ-ионов (см. рис. 1, *а*). Каждый ион меди окружен фторовым октаэдром. Симметризованные искажения кристалла *е*-типа можно найти, используя выражения работы [9] и позиции ионов в кристалле. Для имеющейся структуры (табл. 1, 2), независимо от ромбических искажений, можно найти симметризованные координаты ЯТ-моды и записать:

$$Q_\theta = \tfrac{1}{\sqrt{12}}(c-a), \quad Q_\varepsilon = 2av_t. \qquad (1)$$

Орбитальное состояние каждого иона меди описывается многоэлектронной волновой функцией [9]:

$$\Psi_n = \sin\frac{\Phi_n}{2}\,|\theta\rangle + \cos\frac{\Phi_n}{2}\,|\varepsilon\rangle, \qquad (2)$$

где $|\theta\rangle, |\varepsilon\rangle$ – собственные функции вырожденного многоэлектронного состояния ионов Cu^{2+}, характеризуемого термом ^2E. Для симметризованных искажений Q_θ, Q_ε углы смешивания орбитальных функций (2) определяются из соотношений [9]:

$$\sin\Phi_n = \frac{Q_{\varepsilon n}}{\sqrt{Q_{\theta n}^2 + Q_{\varepsilon n}^2}}, \quad \cos\Phi_n = \frac{Q_{\theta n}}{\sqrt{Q_{\theta n}^2 + Q_{\varepsilon n}^2}}. \qquad (3)$$

Распределение ЯТ-искажений, образующее орбитальную структуру $KCuF_3$ в решётке, можно опи-

сать соотношением углов смешивания орбитальных функций (см. рис. 2):

$$\Phi_1 = -\Phi_2 = \Phi_3 = -\Phi_4 = \Phi. \qquad (4)$$

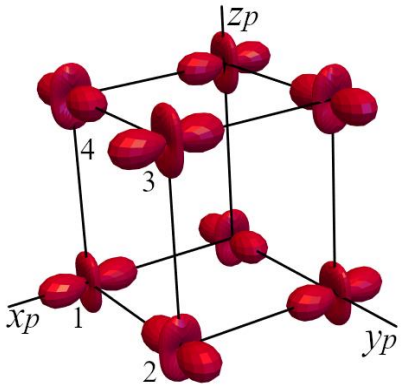


Рис. 2. *Орбитальная структура $KCuF_3$ (для симметрии D_{4h}^{18}. Числа нумеруют различные орбитальные состояния, буквы обозначают псевдоперовскитные оси*

2.2. K_2CuF_4

Данный кристалл обладает структурой искажённого слоистого перовскита и описывается пространственной группой симметрии D_{2h}^{18}, которая получается при наложении кооперативных ЯТ искажений из высокосимметричной структуры D_{4h}^{17} [11] Параметры структуры кристалла K_2CuF_4 приведены в табл. 3, 4.

Таблица 3. *Координаты атомов в базисе примитивной ячейки D_{2h}^{18}*

Ион (позиция)	$X(a)$	$Y(b)$	$Z(c)$
K(1)–2*d*	0	V_K	0
K(2)–2*d*'	0	$-V_K$	0
Cu–2*a*	0	½	0
F(1)–2*d*	0	*u*	0
F(2)–2*d*'	0	–*u*	0
F(3)–4*f*	¼–*v*	½	¼–*v*

Таблица 4. *Параметры структуры K_2CuF_4 [3]. Величины, характеризующие ион калия, опущены*

$a=c$ (Å)	b (Å)	*u*	*v*	Φ
5,8655	12,734	0,1523	0,01758	0,66π

Основное орбитальное состояние иона меди в кристалле K_2CuF_4 такое же, как в $KCuF_3$, и описывается формулой (2). Симметризованные искажения кристалла *e*-типа можно найти таким же образом, как для $KCuF_3$, используя выражения работы [9] и позиции ионов в кристалле. Симметризованные ЯТ-искажения *e*- типа в зависимости от параметров кристаллической структуры описываются как

$$\begin{aligned} Q_\theta &= -\tfrac{1}{\sqrt{6}}a + \tfrac{2}{\sqrt{3}}ub, \\ Q_\varepsilon &= 2\sqrt{2}av. \end{aligned} \qquad (5)$$

Орбитальную структуру соединения в каждой плоскости можно характеризовать рис. 3 и соотношением

$$\Phi_1 = -\Phi_2 = -\Phi_3 = \Phi_4 = \Phi. \qquad (6)$$

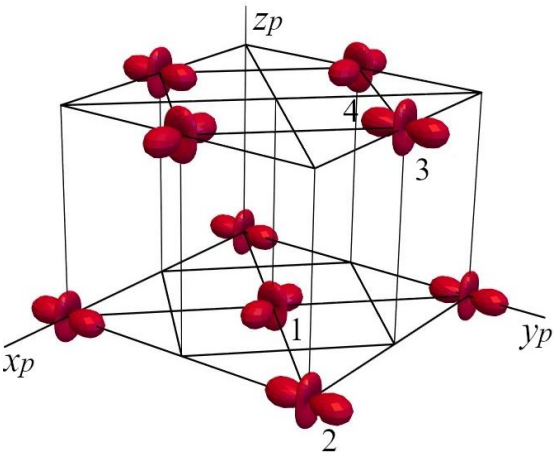


Рис. 3. *Орбитальная структура K_2CuF_4. Числа нумеруют различные орбитальные состояния, буквы обозначают псевдоперовскитные оси*

3. Обменное взаимодействие во фторидах меди

Ион Cu^{2+} имеет вырожденное орбитальное состояние ^2E в идеальном октаэдрическом окружении за счёт дырки на e_g-уровне. Будем считать осью z линию соединения двух октаэдрических кластеров. Тогда обменное взаимодействие вдоль этой оси имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ex}^{z} = \tfrac{\cos^2\varphi_z}{r_z^{10}}\Big[J + J_1\left(X_\theta^a + X_\theta^b\right) + \\ + J_2 X_\theta^a X_\theta^b\Big]\left(\mathbf{S}_a \cdot \mathbf{S}_b\right), \end{aligned} \qquad (7)$$

где φ_z – угол сверхобменной связи Cu–F–Cu вдоль оси *z*; r_z – среднее расстояние Cu–F в паре вдоль оси *z*.

Орбитальные операторы $X_\theta^a, X_\varepsilon^b$ в пространстве собственных функций $|\theta\rangle_n$, $|\varepsilon\rangle_n$ ($n = a, b$) имеют вид

$$X_\theta^n = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \; X_\varepsilon^n = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (8)$$

Чтобы получить гамильтониан обменного взаимодействия между ионами *a* и *b*, расположенными вдоль других осей куба, необходимо провести преобразование координат, которое перевело бы ось *z* в оси *x* или *y*. Тогда гамильтониан обменного взаимодействия имеет вид:

$$\hat{H}_{ex}^{x} = \frac{\cos^2\varphi_x}{r_x^{10}}\Big[J - \\ -\tfrac{1}{2}J_1\left(X_\theta^a - \sqrt{3}X_\varepsilon^a + X_\theta^b - \sqrt{3}X_\varepsilon^b\right) + \\ +\tfrac{1}{4}J_2\left(X_\theta^a - \sqrt{3}X_\varepsilon^a\right)\left(X_\theta^b - \sqrt{3}X_\varepsilon^b\right)\Big](\mathbf{S}_a\cdot\mathbf{S}_b), \\ \hat{H}_{ex}^{y} = \frac{\cos^2\varphi_y}{r_y^{10}}\Big[J - \\ -\tfrac{1}{2}J_1\left(X_\theta^a + \sqrt{3}X_\varepsilon^a + X_\theta^b + \sqrt{3}X_\varepsilon^b\right) + \\ +\tfrac{1}{4}J_2\left(X_\theta^a + \sqrt{3}X_\varepsilon^a\right)\left(X_\theta^b + \sqrt{3}X_\varepsilon^b\right)\Big](\mathbf{S}_a\cdot\mathbf{S}_b), \qquad (9)$$

где φ_x, φ_y – углы связи Cu–F–Cu вдоль осей *x*, *y*; r_x, r_y – средние расстояния Cu–F в паре вдоль осей *x* или *y*, соответственно.

Выражения (7), (9) отличаются от приведённого в работе [9, 11] добавочным множителем $\cos^2\varphi / r^{10}$, учитывающим конфигурацию сверхобменной связи. Зависимость от расстояния $\sim 1/r^{10}$, впервые предложена в работе [12] для учёта влияния гидростатического давления на магнитные свойства широкого ряда диэлектриков. Она используется для описания сверхобмена через промежуточный лиганд. Необходимость введения такого множителя обоснована в работе [10] для манганита лантана, она позволяет учесть изменение объёма элементарной ячейки вследствие приложения всестороннего давления. Кроме того, это способ учесть различие в расстояниях между взаимодействующими магнитными ионами и промежуточным лигандом в кристаллах с различающейся кристаллической решеткой или другим составом подрешётки, не участвующей в сверхобменном взаимодействии. Для фторидов меди, рассматриваемых в настоящем исследовании, угол сверхобменной связи в любом направлении принят $\varphi_i = \pi$.

При усреднении гамильтанианов (7), (9) на орбитальных функциях (2) получается эффективный спиновый гамильтониан в псевдоперовскитных осях, которые в общем случае отличаются от кристаллографических осей:

$$\hat{H}_{ex}^{i} = J_{ab}^{i}\left(\mathbf{S}_a\cdot\mathbf{S}_b\right),\ i=x_p, y_p, z_p, \qquad (10)$$

где $$J_{ab}^{i} = \frac{\cos^2\varphi_i}{r_i^{10}} J_0 F_i(\Phi). \qquad (11)$$

Угловые части зависимости в разных псевдоперевскитных направлениях $F_i(\Phi)$ выражаются как

$$F_z(\Phi) = 1 + 2\alpha\cos\Phi + \beta\cos^2\Phi,$$

$$F_x(\Phi) = F_y(\Phi) = 1 - \alpha\cos\Phi + \beta\left(\cos^2\Phi - \tfrac{3}{4}\right). \qquad (12)$$

Параметры зависимости сверхобмена (11)–(12), подогнанные по экспериментальным данным для $KCuF_3$ и K_2CuF_4 из работ [5, 7, 20, 21], равны $J_0 = 1.71\times10^5$ K×Å^{10}, $\alpha = -1.62$, $\beta = 0.82$. Орбитальные составляющие (12) обменных параметров (11) вдоль различных псевдоперовскитных осей изображены на рис. 4.

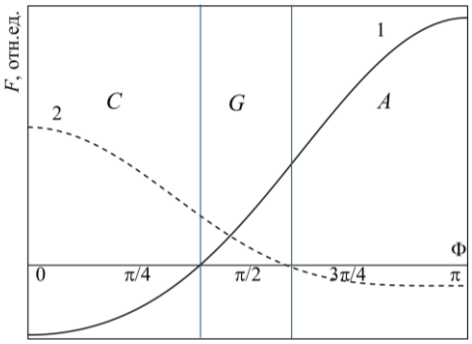


Рис.4. *Зависимость угловой части обменных параметров от орбитальной структуры. 1: F_z (Φ), 2: $F_{x,y}$ (Φ)*

4. Результаты и обсуждение

В соответствии с рис. 4 и при орбитальных структурах рис. 2, 3 возможные магнитные структуры для псевдоперовскитного кристалла, такого как $KCuF_3$, можно поделить на три группы:

I. $0 \le \Phi \le 0{,}39\pi$ *C*-тип магнитной структуры (ферромагнитные цепи, соединённые антиферромагнитно);

II. $0{,}39\pi < \Phi \le 0{,}59\pi$ *G*-тип магнитной структуры (чередующиеся направления магнитных моментах на соседних узлах);

III. $0{,}59\pi < \Phi \le \pi$ *A*-тип магнитной структуры (ферромагнитные плоскости, соединённые антиферромагнитно), причем $|J_z| >> |J_{x,y}|$.

Для K_2CuF_4, как двумерного магнетика, рассматривается только сверхобменное взаимодействие внутри плоскости (пунктирная линия на рис. 4). При $\Phi < 0.59\pi$ магнитная структура может перейти в двумерный антиферромагнетик.

Возможность изменения знаков обменных параметров и характерные значения угла орбитальной структуры Φ, при которых это изменение происходит, зависят, прежде всего, от соотношения параметров α и β.

Для ^2E состояния ионов меди, где в обменном взаимодействии участвуют только e_g-дырки, отношение $\alpha/\beta < -1$ (в данной работе это отношение получено равным –1,98).

Для различных зависимостей значение критического угла орбитальной структуры для возможного переориентационного перехода определяется соотношениями

$$z:\ \Phi_{cz} = \arccos\left(\frac{-\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 - \beta}}{\beta}\right),$$

$$x, y:\ \Phi_{cx} = \arccos\left(\frac{\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 4\beta(\beta - 1)}}{2\beta}\right). \qquad (13)$$

Условием существования переориентационного перехода вдоль одной из псевдокубических осей является условие неотрицательности соответствующих подкоренных выражений и отсутствие превышения единицы для выражений в скобках. Для рассматриваемых соединений соотношение параметров таково, что ян-теллеровская переориентация спинов теоретически возможна.

Увеличение локальных сдвигов *v* фторового окружения в рамках структуры $KCuF_3$, согласно соотношениям (1), меняет орбитальную структуру соединения в сторону меньших углов, а магнитную структуру – вплоть до изменения типа с *A* на *G* (см. рис. 4).

В рамках структуры K_2CuF_4 зависимость от локальных искажений не так очевидна. В соответствии с зависимостями (5), увеличение аксиального сдвига фторов *u* не приведёт к смене типа магнитной структуры, так как вызовет увеличение угла Ф. Увеличение величины сдвигов фторового окружения в плоскости *v* также приведёт к смене типа магнитного упорядочения вследствие уменьшения ЯТ-угла (см. рис. 4).

Орбитальная структура под давлением в $KCuF_3$ не приводит к переориентации спиновой структуры в связи с незначительными изменениями угла Ф [19].

Изменения орбитальной структуры в родственном соединении Na_2CuF_4 при искажениях кристаллической структуры, связанных со внешним давлением, экспериментально исследованы в работе [18]. Обнаружен фазовый переход первого рода между 2.4 и 2.9 ГПа, связанный с переориентацией длинных осей ЯТ-искажённых октаэдров [CuF_6].

Изменение типа орбитального упорядочения приведёт к пересмотру равенства $F_x(\Phi) = F_y(\Phi)$ модельных зависимостей (12):

$$F_{x,y}(\Phi) = 1 - \alpha\left(\cos\Phi \pm \sqrt{3}\sin\Phi\right) + \\ + \frac{\beta}{4}\left(\cos\Phi \pm \sqrt{3}\sin\Phi\right)^2. \quad (14)$$

За счёт этого изменения спиновая структура предположительно изменит тип упорядочения с ферромагнитного на антиферромагнитный в плоскости.

5. Заключение

$KCuF_3$ и K_2CuF_4 – ключевые модельные соединения для изучения низкоразмерных магнетиков.

Представленная модель орбитально-зависимых обменных взаимодействий – это не только уточнение данных о характере сверхобменных взаимодействий рассмотренных соединениях. Она позволяет предположить возможность ян-теллеровской переориентации магнитной структуры рассматриваемых соединений.

Изменения угла орбитальной структуры $KCuF_3$ под давлением не приводит к существенным изменениям магнитной структуры при экспериментальных величинах давления.

Изменение магнитной структуры при условии изменения кристаллической структуры можно описать в терминах смены типа орбитального упорядочения, что представленная в работе модель также позволяет сделать. Качественно предсказан тип магнитной структуры в Na_2CuF_4 под давлением.

Исследования выполнены в рамках Программы финансовой поддержки от АО «АЛЬФА-БАНК» «Альфа-Будущее Гранты преподавателям».

Список литературы

1. *Okazaki A., Suemune Y.* The crystal structure of $KCuF_3$ // J. Phys. Soc. Jpn. 1961. Vol. 16. P. 176–183. DOI: 10.1143/JPSJ.16.176
2. *Hidaka M., Eguchi T., Yamada I.* New superlattice crystal structure in $KCuF_3$ revealed by X-ray diffraction experiments // J. Phys. Soc. Jpn. 1998. Vol. 67, P. 2488–2494. DOI: 10.1143/JPSJ.67.2488.
3. *Eyert V., Hock K.-H.* Electronic structure, itinerant magnetism and orbital ordering of K_2NiF_4 compounds // J. Phys.: Condens. Matter. 1993. Vol. 5. P. 2987–3002. DOI: 10.1088/0953-8984/5/18/021
4. *Кугель К. И., Хомский Д. И.* Эффект Яна–Теллера и магнетизм // УФН. 1982. Т. 136, № 4. С. 621–664.
5. *Tsukuda N., Okazaki A.* Stacking disorder in $KCuF_3$ // J. Phys. Soc. Jpn. 1972. Vol. 33, № 4. P. 1088–1099. DOI: 10.1143/JPSJ.33.1088
6. *Kadota S., Yamada I., Yoneyama S., Hirakawa K.* Formation of one-dimensional antiferromagnetism in $KCuF_3$ with the perovskite structure // J. Phys. Soc. Jpn. 1967. Vol. 23, P. 751–756. DOI: 10.1143/JPSJ.23.751
7. *Hirakawa K., Ikeda H.* Investigation of two-dimensional ferromagnet K_2CuF_4 by neutron scattering. // J. Phys. Soc. Jpn. 1973. Vol. 35. P. 1328–1336. DOI: 10.1143/JPSJ.35.1328
8. *Yamada I.* Magnetic properties of K_2CuF_4 – A transparent two-dimensional ferromagnet // J. Phys. Soc. Jpn. 1972. Vol. 33. P. 979–988. DOI: 10.1143/JPSJ.33.979
9. *Nikiforov A. E., Shashkin S. Yu., Levitan M. L., Agamalyan T. H.* Cooperative Jahn-Teller ordering in $KCuF_3$ and K_2CuF_4 crystals // Phys. Stat. Sol. B. 1983. Vol. 118. P. 419–425. DOI: 10.1002/pssb.2221180149
10. *Гончарь Л. Э., Лескова Ю. В., Никифоров А. Е., Козленко Д. П.* Влияние давления на магнитные свойства манганита лантана // Журнал экспе-

риментальной и теоретической физики. 2010. Т. 138, № 2. С. 221–225.
11. *Mitrofanov V. Ya., Nikiforov A. E., Shashkin S. Yu.* The influence of pressure on crystal and magnetic structures of K_2CuF_4 // Solid State Communications. 1997. Vol. 104. P. 499–504. doi: 10.1016/S0038-1098(97)00372-4.
12. *Bloch D.* The law for the volume dependence of superexchange // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1966. Vol. 27. P. 881–885. doi: 10.1016/0022-3697(66)90262-9.
13. *Pavarini E., Koch E.* Orbital Physics in Correlated Matter. Modeling and Simulation (Электронный ресурс). Forschungszentrum Jülich, URL: http://www.cond-mat.de/events/correl23 (дата обращения: 06.05.2026).
14. *Musshoff J., Zhang G., Koch E., Pavarini E.* Linear-response description of superexchange-driven orbital ordering in K_2CuF_4 // Phys. Rev. B. 2019. Vol. 100, 045116.
DOI: 10.1103/PhysRevB.100.045116
15. *Lee J. C. T., Yuan S., Lal S., et al.* Two-stage orbital order and dynamical spin frustration in $KCuF_3$ // Nature Physics. 2012. Vol. 8. P. 63–68. DOI: 10.1038/NPHYS2117
16. *Yamada I., Kato N.* Multi-sublattice structure of $KCuF_3$ caused by antisymmetric exchange interaction: Antiferromagnetic resonance measurements // J. Phys. Soc. Jpn. 1994. Vol. 63. P. 289–297. DOI: 10.1143/JPSJ.63.289
17. *Pillai S. B, Upadhyay D., Drapała J., Mazej Z., Kurzydłowski D.* Magnetostructural correlations in a layered perovskite: K_2CuF_4 at large compression // The Journal of Physical Chemistry C. 2024. Vol. 128. P. 17747–17755.
DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c05118
18. *Hiley C. I., Crawford C. A., Bull C. L., Funnell N. P., Dey U., Bristowe N. C., Walton R. I., Senn M. S.* Pressure-induced orbital reordering in Na_2CuF_4 // Phys. Rev. B. 2025. Vol. 112, 035126. DOI: 10.1103/m265-k2p4
19. *Zhou J.-S, Alonso J. A., Han J. T., Fernández-Díaz M. T., Cheng J.-G., Goodenough J. B.* Jahn–Teller distortion in perovskite $KCuF_3$ under high pressure // Journal of Fluorine Chemistry. 2011. Vol. 132. P. 1117–1121.
DOI: 10.1016/j.jfluchem.2011.06.047.
20. *Ikeda H.* Neutron scattering study of critical phenomena in restricted-dimensional magnets – Universality and scaling // J. Phys. Soc. Jpn. 1974. Vol. 37. P. 660–666. DOI: 10.1143/JPSJ.37.660
21. *Satija S. K., Axe J. D., Shirane G., Yoshizawa H., Hirakawa K.* Neutron scattering study of spin waves in one-dimensional antiferromagnet $KCuF_3$. // Phys. Rev. B. 1980. Vol. 21. P. 2001–2007. DOI: 10.1103/PhysRevB.21.2001

References

1. Okazaki A., Suemune Y. The crystal structure of $KCuF_3$. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1961, vol. 16, pp. 176–183. DOI: 10.1143/JPSJ.16.176
2. Hidaka M., Eguchi T., Yamada I. New superlattice crystal structure in $KCuF_3$ revealed by X-ray diffraction experiments. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1998, vol. 67, pp. 2488–2494. DOI: 10.1143/JPSJ.67.2488
3. Eyert V., Hock K.-H. Electronic structure, itinerant magnetism and orbital ordering of K_2NiF_4 compounds. *J. Phys.: Condens. Matter*, 1993, vol. 5, pp. 2987–3002. DOI: 10.1088/0953-8984/5/18/021
4. Kugel' K. I., Khomskii D. I. The Jahn-Teller effect and magnetism: transition metal compounds. *Sov. Phys. Usp.*, 1982, vol. 25, pp. 231–256.
5. Tsukuda N., Okazaki A. Stacking disorder in $KCuF_3$. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1972, vol. 33, № 4, pp. 1088–1099. DOI: 10.1143/JPSJ.33.1088
6. Kadota S., Yamada I., Yoneyama S., Hirakawa K. Formation of one-dimensional antiferromagnetism in $KCuF_3$ with the perovskite structure. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1967, vol. 23, pp. 751–756. DOI: 10.1143/JPSJ.23.751
7. Hirakawa K., Ikeda H. Investigation of two-dimensional ferromagnet K_2CuF_4 by neutron scattering. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1973, vol. 35, pp. 1328-1336. DOI: 10.1143/JPSJ.35.1328
8. Yamada I. Magnetic properties of K_2CuF_4 – A transparent two-dimensional ferromagnet. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1972, vol. 33, pp. 979–988. DOI: 10.1143/JPSJ.33.979
9. Nikiforov A. E., Shashkin S. Yu., Levitan M. L., Agamalyan T. H. Cooperative Jahn-Teller ordering in $KCuF_3$ and K_2CuF_4 crystals. *Phys. Stat. Sol. B*, 1983, vol. 118, pp. 419–425. DOI: 10.1002/pssb.
10. Gonchar L. E., Leskova Y. V., Nikiforov A. E., Kozlenko D. P. Effect of pressure on the magnetic properties of lanthanum manganite. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2010, vol. 111, pp. 194-198.
DOI 10.1134/S1063776110080054
11. Mitrofanov V. Ya., Nikiforov A. E., Shashkin S. Yu. The influence of pressure on crystal and magnetic structures of K_2CuF_4. *Solid State Communications*, 1997, vol. 104, no. 9, pp. 499–504. DOI: 10.1016/S0038-1098(97)00372-4
12. Bloch D. The law for the volume dependence of superexchange. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1966, vol. 27, pp. 881–885. DOI: 10.1016/0022-3697(66)90262-9
13. Pavarini E., Koch E. (eds.) *Orbital Physics in Correlated Matter*. Forschungszentrum Jülich. (Schriften des Forschungszentrums Jülich: Reihe Modeling and Simulation [Publications of Forschungszentrum Jülich. Modeling and Simulation

Series.] Vol. 13. URL: http://www.cond-mat.de/events/correl23 (accessed: 06 May 2026).
14. Musshoff J., Zhang G., Koch E., Pavarini E. Linear-response description of superexchange-driven orbital ordering in K_2CuF_4. *Phys. Rev. B*, 2019, vol. 100, 045116. DOI: 10.1103/PhysRevB.100.045116
15. Lee J. C. T., Yuan S., Lal S., et al. Two-stage orbital order and dynamical spin frustration in $KCuF_3$. *Nature Physics*, 2012, vol. 8, pp. 63–68. DOI: 10.1038/NPHYS2117
16. Yamada I., Kato N. Multi-sublattice structure of $KCuF_3$ caused by antisymmetric exchange interaction: Antiferromagnetic resonance measurements. *J. Phys. Soc. Jpn*., 1994, vol. 63, pp. 289–297. DOI: 10.1143/JPSJ.63.289
17. Pillai S. B, Upadhyay D., Drapała J., Mazej Z., Kurzydłowski D. Magnetostructural correlations in a layered perovskite: K_2CuF_4 at large compression. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2024, vol. 128, pp. 17747–17755. DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c05118
18. Hiley C. I., Crawford C. A., Bull C. L., Funnell N. P., Dey U., Bristowe N. C., Walton R. I., Senn M. S. Pressure-induced orbital reordering in Na_2CuF_4. *Phys. Rev. B*, 2025, vol. 112, art. 035126. DOI: 10.1103/m265-k2p4
19. Zhou J.-S, Alonso J. A., Han J. T., Fernández-Díaz M. T., Cheng J.-G., Goodenough J. B. Jahn–Teller distortion in perovskite $KCuF_3$ under high pressure. *Journal of Fluorine Chemistry*, 2011, vol. 132, pp. 1117–1121. DOI: 10.1016/j.jfluchem.2011.06.047
20. Ikeda H. Neutron scattering study of critical phenomena in restricted-dimensional magnets - Universality and scaling. *J. Phys. Soc. Jpn*., 1974, vol. 37, pp. 660–666. DOI: 10.1143/JPSJ.37.660
21. Satija S. K., Axe J. D., Shirane G., Yoshizawa H., Hirakawa K. Neutron scattering study of spin waves in one-dimensional antiferromagnet $KCuF_3$. *Phys. Rev. B*, 1980, vol. 21, pp. 2001–2007. DOI: 10.1103/PhysRevB.21.2001

Просьба ссылаться на эту статью в русскоязычных источниках следующим образом:
Гончарь Л. Э. Моделирование сверхобменных взаимодействий в низкоразмерных магнетиках $KCuF_3$ и K_2CuF_4 // Вестник Пермского университета. Физика. 2026. № 3. С. 66–73. doi: 10.17072/1994-3598-2026-3-66-73

Please cite this article in English as:
Gonchar L. E. Modeling superexchange interactions in low-dimensional magnets $KCuF_3$ and K_2CuF_4. *Bulletin of Perm University. Physics*, 2026, no. 3, pp. 66–73. doi: 10.17072/1994-3598-2026-3-66-73

Сведения об авторах
Людмила Эдуардовна Гончарь, д-р. физ.-мат. наук, профессор кафедры «Естественнонаучные дисциплины», Уральский государственный университет путей сообщения, ул. Колмогорова, 66, Екатеринбург, 620034

Author information
Liudmila E. Gonchar, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Natural Sciences Department, Ural State University of Railway Transport; 66, Kolmogorova st., Yekaterinburg, 620034, Russia