

# Фрустрированные спиновые структуры в геликоидальных магнитных кристаллах типа MnSi

В.А.Чижиков, В.Е.Дмитриенко

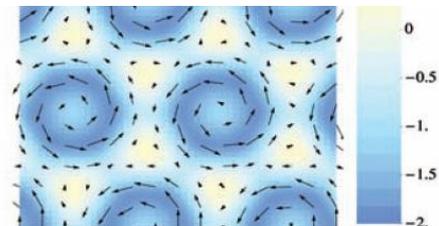
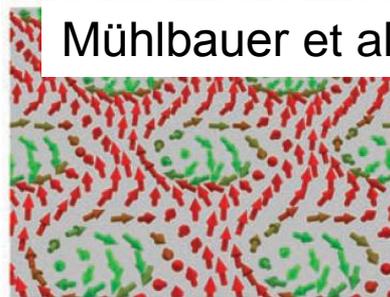
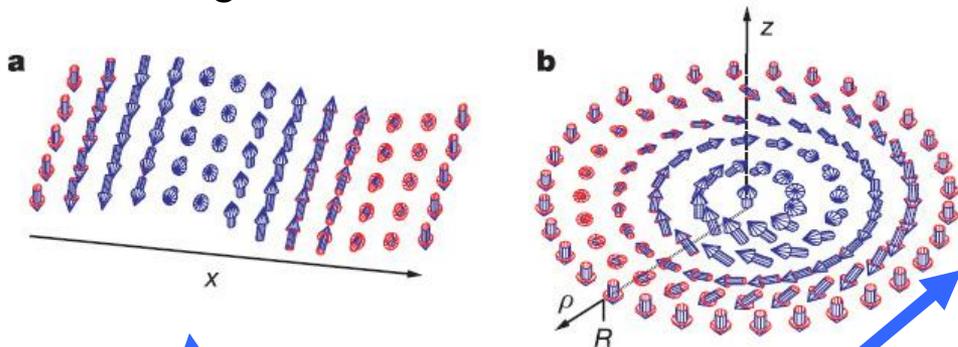


*Институт кристаллографии РАН, Москва*

# Магнитные структуры в кристаллах типа MnSi

Rößler, Bogdanov, Pfleiderer // Nature, 2006

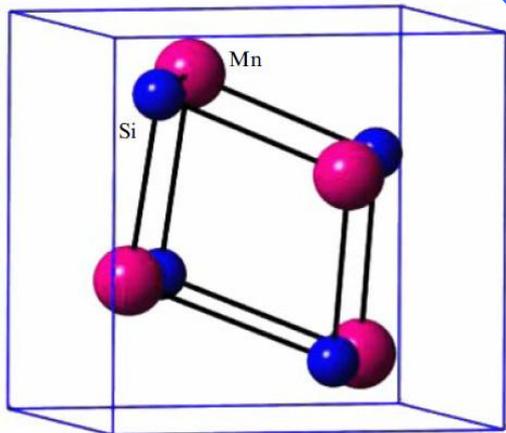
Mühlbauer et al. // Science, 2009, MnSi



спирали

скирмионы

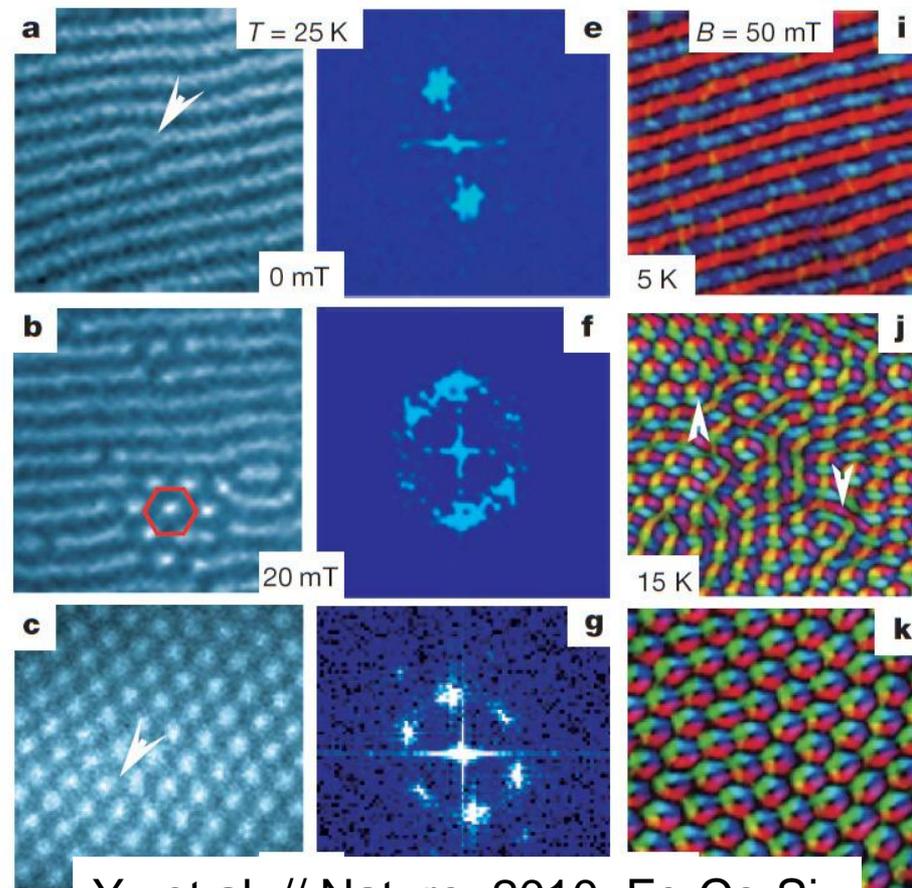
A-фаза



голубые фазы?

??

С.М.Стишов, А.Е.Петрова // УФН, 2011



Yu et al. // Nature, 2010, Fe-Co-Si

# Магнитные структуры в MnSi и их описание

Для теоретического описания магнитных структур в MnSi используется феноменологическая модель, основанная на энергии Ландау-Гинзбурга

$$E = \int \left( \mathcal{J} \frac{\partial M_n}{\partial r_m} \frac{\partial M_n}{\partial r_m} + \mathcal{D} \mathbf{M} \cdot [\nabla \times \mathbf{M}] - \mathbf{H} \cdot \mathbf{M} \right) d\mathbf{r}$$

и микроскопическая модель Гейзенберговского ферромагнетика с энергией

$$E = \sum_{\{ij\}} (-J \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + \mathbf{D}_{ij} \cdot [\mathbf{s}_i \times \mathbf{s}_j]) - g\mu_B \sum_i \mathbf{H} \cdot \mathbf{s}_i$$

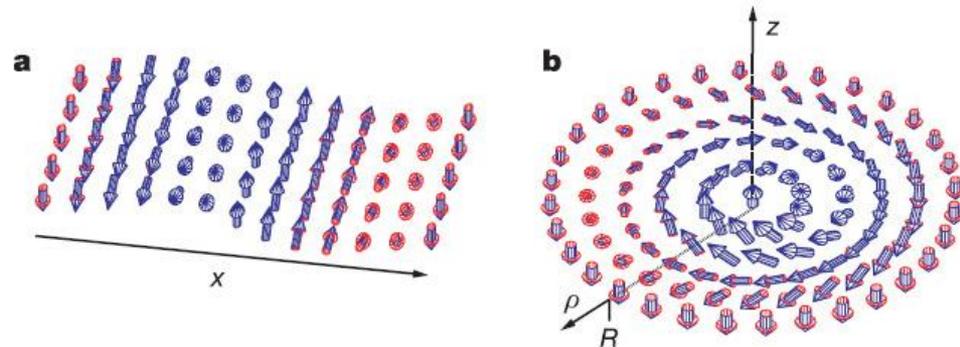
**Как связаны параметры двух моделей?**

$$\mathcal{J} \neq J, \quad \mathcal{D} \neq \mathbf{D}$$

Модели описывают широкое многообразие закрученных магнитных структур, включая спираль

$$\mathbf{M} = M(\cos kz, \sin kz, 0), \quad k = \mathcal{D}/2\mathcal{J}$$

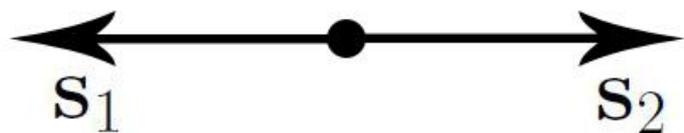
скирмионы, А-фазу, возможные кубические фазы (?) и т.д.



Rößler, Bogdanov, Pfleiderer // Nature, 2006

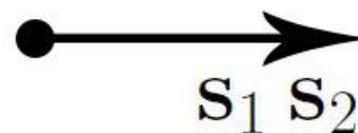
# Взаимодействие Дзялошинского-Мории

$$J > 0 \quad J(\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2)$$



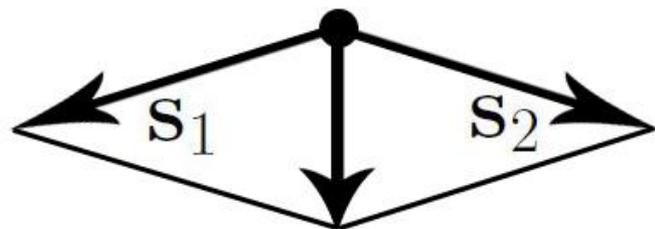
антиферромагнетик

$$J < 0$$

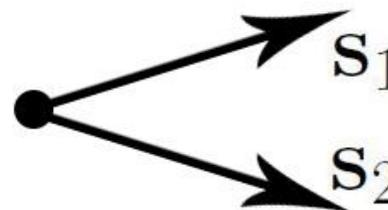


ферромагнетик

$$\mathbf{D}_{12}[\mathbf{s}_1 \times \mathbf{s}_2]$$

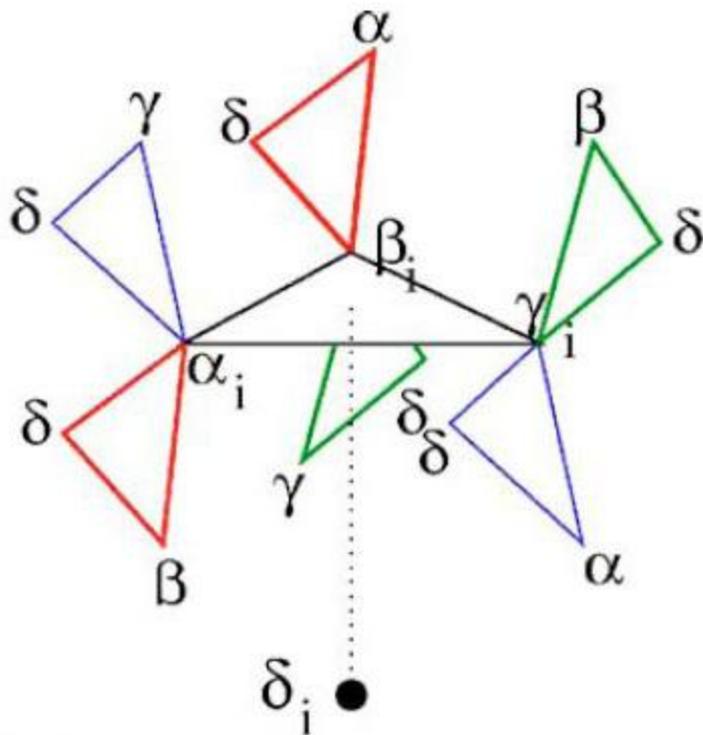


слабый ферромагнетик



слабый  
антиферромагнетик

## Структура кристалла типа MnSi и векторы ДМ

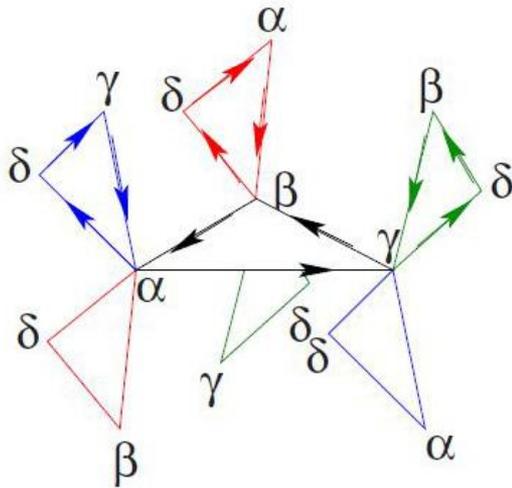


Решётка «трилистников»  
(trillium lattice)

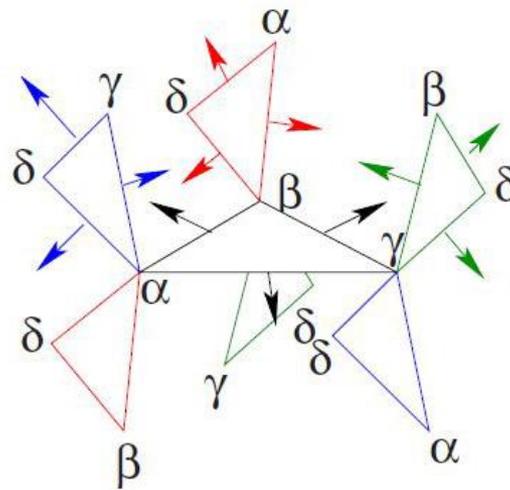
$ij$	$r^{ij}$	$\mathbf{D}^{(ij)}$
12	$(-2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - 2x)$	$(D_x, D_y, D_z)$
13	$(\frac{1}{2} - 2x, -2x, \frac{1}{2})$	$(D_z, D_x, D_y)$
14	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} - 2x, -2x)$	$(D_y, D_z, D_x)$
21	$(2x, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} + 2x)$	$(-D_x, D_y, -D_z)$
23	$(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2} - 2x, 2x)$	$(-D_y, D_z, -D_x)$
24	$(-\frac{1}{2} + 2x, -2x, -\frac{1}{2})$	$(-D_z, D_x, -D_y)$
31	$(-\frac{1}{2} + 2x, 2x, \frac{1}{2})$	$(-D_z, -D_x, D_y)$
32	$(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} + 2x, -2x)$	$(-D_y, -D_z, D_x)$
34	$(2x, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} - 2x)$	$(-D_x, -D_y, D_z)$
41	$(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} + 2x, 2x)$	$(D_y, -D_z, -D_x)$
42	$(\frac{1}{2} - 2x, 2x, -\frac{1}{2})$	$(D_z, -D_x, -D_y)$
43	$(-2x, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} + 2x)$	$(D_x, -D_y, -D_z)$

# Моделирование структуры

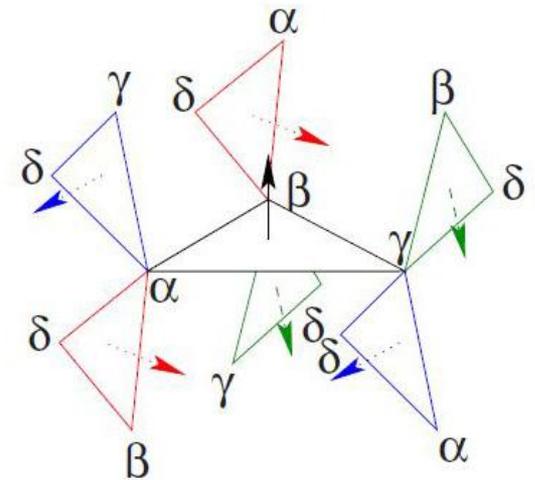
J. M. Hopkinson, H.-Y. Kee // Phys. Rev. B **79**, 014421 (2009)



“almost perfect  
helimagnets with spin  
structures pinned in  
the plane orthogonal  
to the propagation  
direction”



“internal structure and  
only very weak canting”



“no evidence of  
canting”

*Как спираль узнает,  
куда направлены  
межатомные связи?*

## Скосы (canting) и их вклад в энергию

Можно перейти от микроскопической теории к феноменологической:

$$E = \int \left( \mathcal{J} \frac{\partial \hat{s}_n}{\partial r_m} \frac{\partial \hat{s}_n}{\partial r_m} + \mathcal{D} \hat{s} \cdot [\vec{\nabla} \times \hat{s}] \right) d\mathbf{r} - NJ \left( 12 + 2 \left( \frac{D_x + D_z}{J} \right)^2 \right)$$

с параметрами

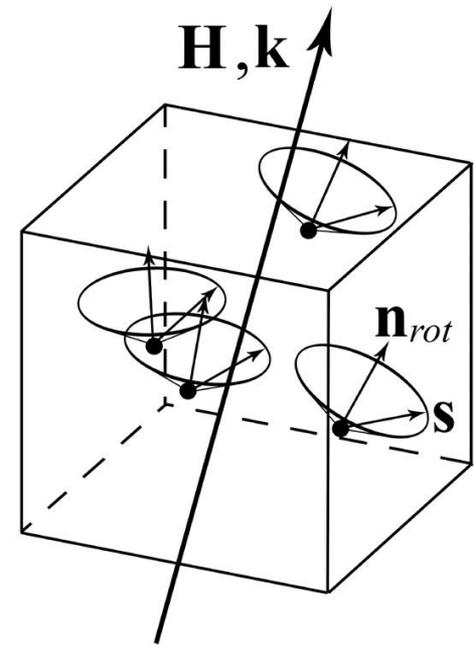
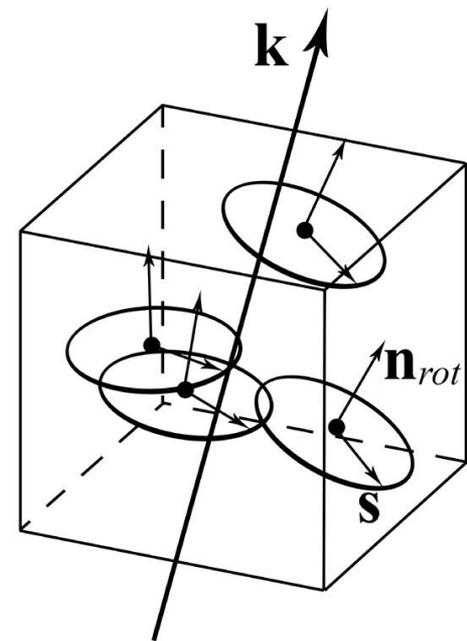
$$\mathcal{J} = \frac{3J}{4} \quad \mathcal{D} = D_x - 2D_y - D_z$$

Член  $\sim (D_x + D_z)^2 / J$  связан со **скосами** между соседними спинами (или разориентацией осей вращения 4 спиралей, связанных с 4 разными атомными позициями Mn).

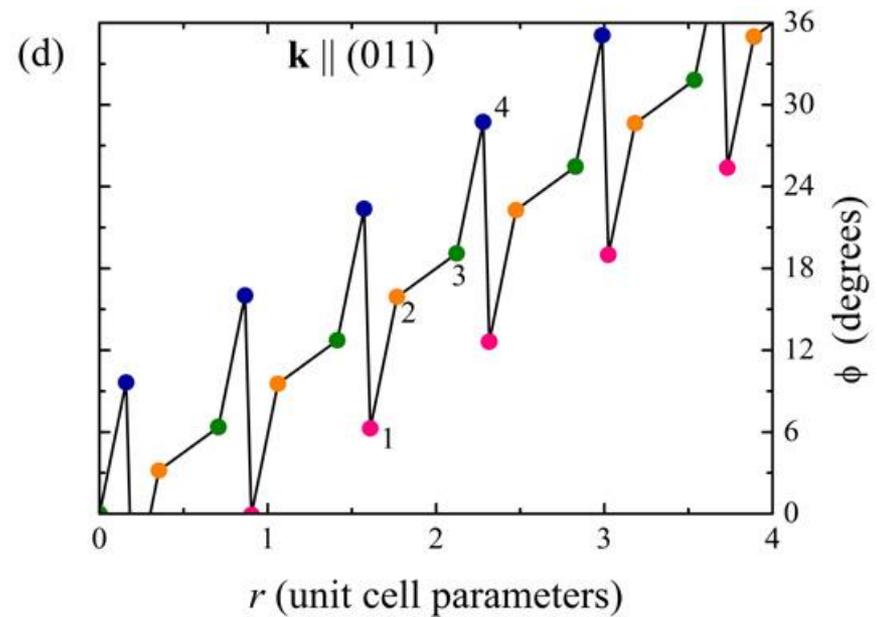
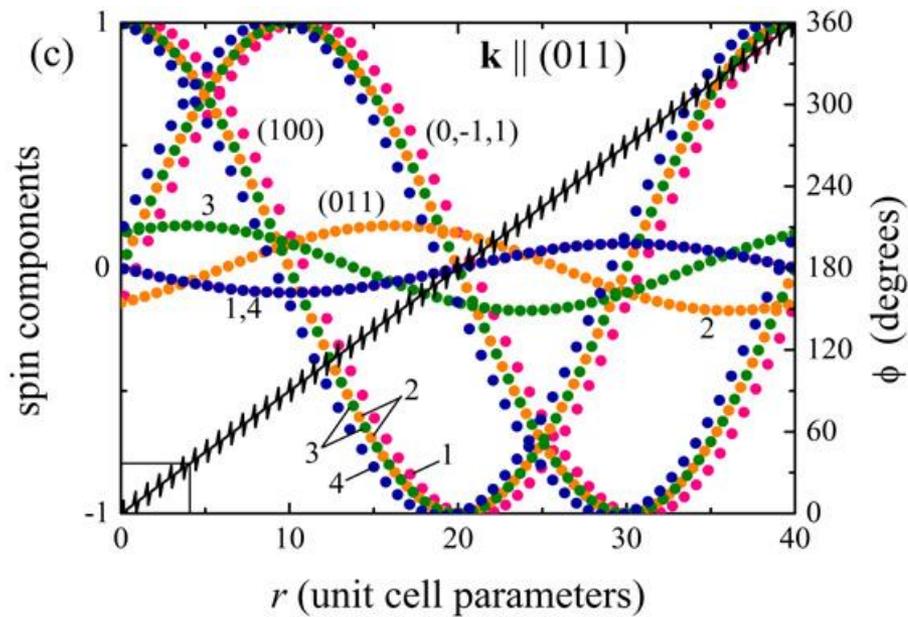
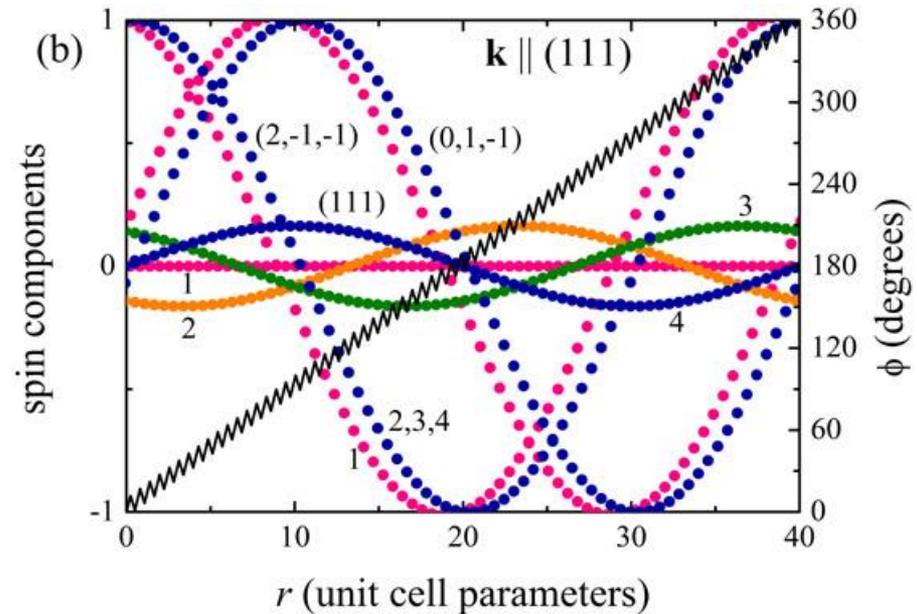
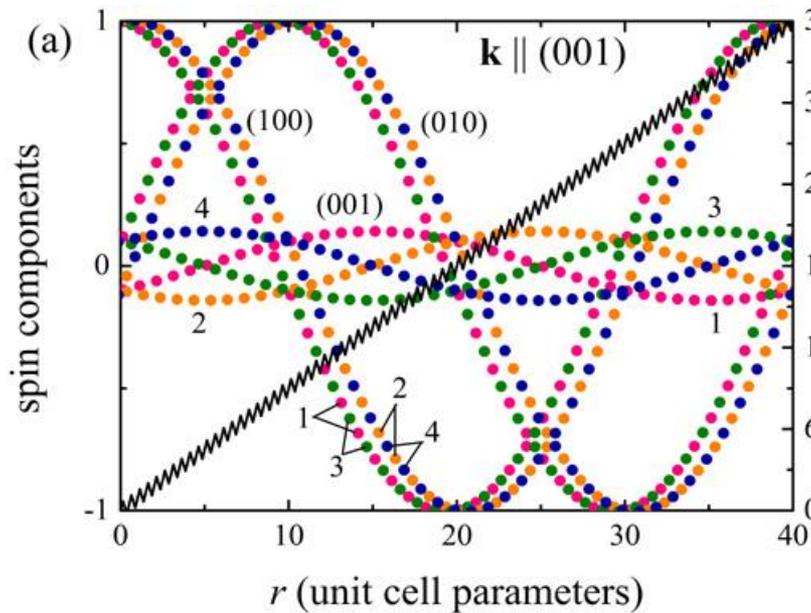
В магнитном поле спирали становятся коническими и при значении поля

$$H_{c2} = \frac{(D_x - 2D_y - D_z)^2}{6Jg\mu_B}$$

происходит полная «раскрутка» спиралей, однако скосы между спинами сохраняются, но уже в периодическом распределении.



# Компоненты спиновых спиралей

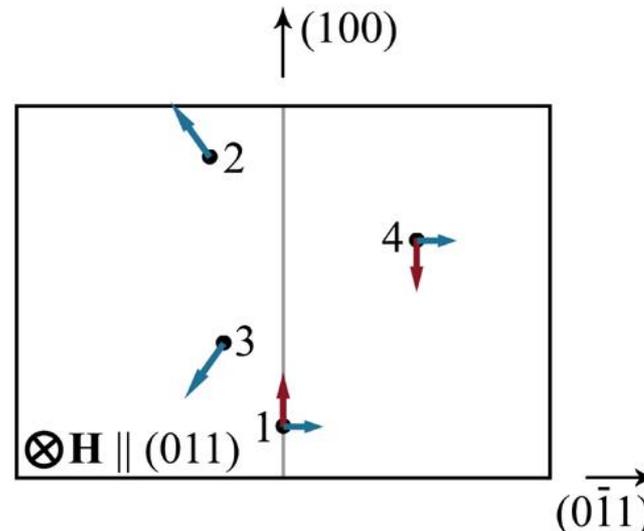
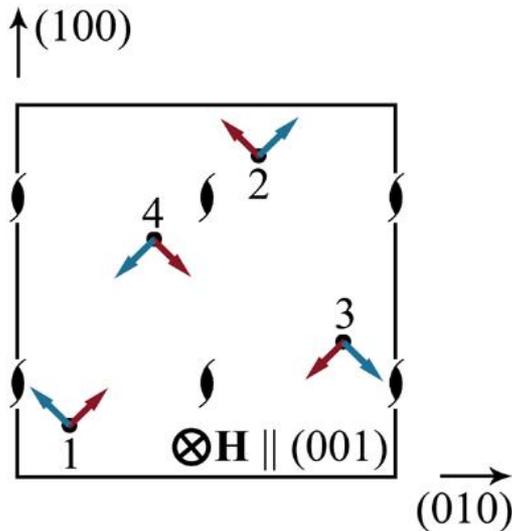
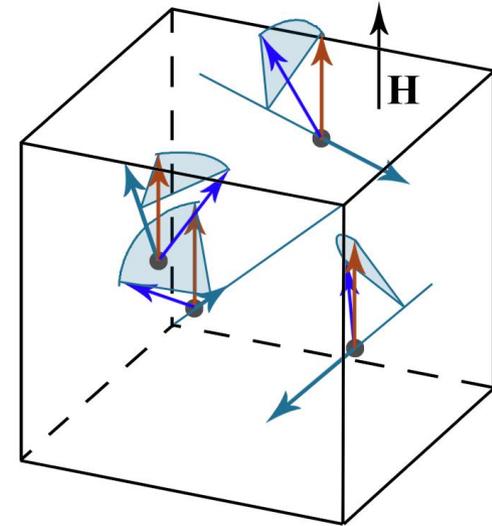


## Скосы в магнитном поле ( $H > H_{c2}$ )

В достаточно сильном ( $H > H_{c2}$ ) магнитном поле благодаря скосам сохраняются компоненты спинов, перпендикулярные полю. Спины могут быть рассчитаны по формуле

$$\mathbf{s}^t = \mathbf{s} + \frac{(D_x + D_z)}{4J} [\boldsymbol{\tau}_t \times \mathbf{s}], \quad \mathbf{s} = \frac{\mathbf{H}}{|\mathbf{H}|}$$

и дают вклад в «запрещённые» брэгговские отражения  $00l$ ,  $l=2n+1$ , тем самым допуская экспериментальную проверку теории дифракционными методами.  $\boldsymbol{\tau}$  – вектора типа  $(1,1,1)$  вдоль осей симметрии 3-го порядка.



# Структурные факторы «запрещённых» отражений

## Нейтроны

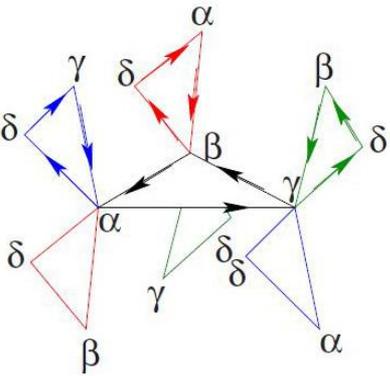
$$\begin{aligned} F(00\ell, \ell = 2n + 1) &= F_{AFM}(00\ell, \ell = 2n + 1) \\ &= 4b_m P \delta s_z (-s_y \cos 2\pi\ell x + i s_x \sin 2\pi\ell x). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_{\chi AFM}(00\ell, \ell = 2n + 1) \\ = 4b_m P s_z (s_y \cos 2\pi\ell x + i s_x \sin 2\pi\ell x). \end{aligned}$$

## Рентген

$$\begin{aligned} F_{\sigma\pi'}(00\ell, \ell = 2n + 1) &= F_{dd} + F_{AFM} \\ &= 4f_a \cos \theta (\cos \varphi \cos 2\pi\ell x - i \sin \varphi \sin 2\pi\ell x) \\ &\quad - 8\delta\mu_s f_m(\mathbf{Q}) \frac{\hbar\omega}{mc^2} \sin^2 \theta [(s_x \sin \theta + s_z \cos \theta \cos \varphi) \sin 2\pi\ell x \\ &\quad + i(s_y \sin \theta + s_z \cos \theta \sin \varphi) \cos 2\pi\ell x], \end{aligned}$$

# Сравнение с Хопкинсоном и Ки



“almost perfect helimagnets with spin structures pinned in the plane orthogonal to the propagation direction”

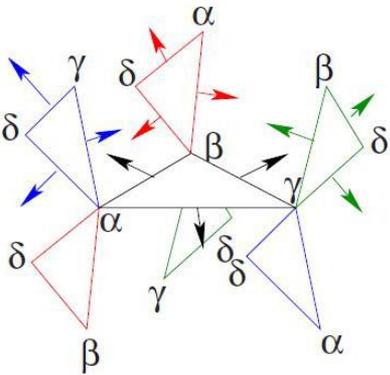
$$(-2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - 2x)$$

$$x = 0.138$$

$$(-0.276, 0.5, 0.224)$$

$$D_x - 2D_y - D_z$$

$$(1, -2, -1)$$



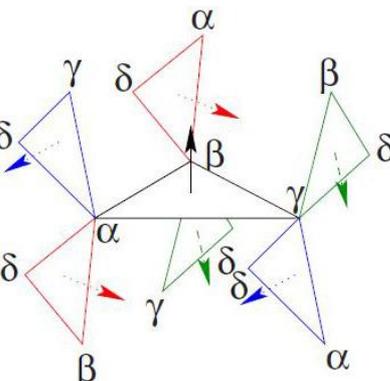
“internal structure and only very weak canting”

$$(1 - 2x, 4x - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2x)$$

$$(0.724, 0.052, 0.776)$$

$$D_x + D_z$$

$$(1, 0, 1)$$



“no evidence of canting”

$$(1, 1, -1)$$

$$D_x + D_y - D_z$$

**Компоненты векторов ДМ, ответственные за закрутку, направлены не вдоль связей, а вдоль близких кристаллографических направлений!**



## Плотность энергии при учёте 2-х соседей

Более точное выражение для энергии в модели Гейзенберговского магнетика, содержащее члены  $\sim D^2$ , имеет вид:

$$E = \sum_{cells} \left\{ \sum_{n, \{ij\}} \left[ -\tilde{J}_n \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + \mathbf{D}_{n,ij} \cdot [\mathbf{s}_i \times \mathbf{s}_j] - \frac{(\mathbf{D}_{n,ij} \cdot \mathbf{s}_i)(\mathbf{D}_{n,ij} \cdot \mathbf{s}_j)}{2J_n} \right] - g\mu_B \mathbf{H} \cdot \sum_{i=1}^4 \mathbf{s}_i \right\}$$

где  $n$  – номер координационной сферы.

Можно перейти к плотности энергии, выраженной через плотность магнитного момента и её производные по координатам:

$$\mathcal{E} = \mathcal{J} \frac{\partial m_\alpha}{\partial r_\beta} \frac{\partial m_\alpha}{\partial r_\beta} + \mathcal{D} \mathbf{m} [\nabla \times \mathbf{m}] + (\tilde{J}_1 + \tilde{J}_2)(4 - 16m^2) - 8\sqrt{2} |D_{1x} + D_{1z} + D_{2x} + D_{2z}| m \sqrt{1 - m^2} - \left( \frac{2D_1^2}{J_1} + \frac{2D_2^2}{J_2} \right) m^2 - 4g\mu_B \mathbf{H} \cdot \mathbf{m}$$

## Феноменологические константы при учёте 2-х соседей

феноменологические величины	ближайшие соседи	1-е и 2-е соседи, правило Кеффера
$\mathcal{J}$	$\frac{3\tilde{J}_1}{4}$	$\frac{(3\tilde{J}_1 + \tilde{J}_2)(\tilde{J}_1 + 3\tilde{J}_2)}{4(\tilde{J}_1 + \tilde{J}_2)}$
$\mathcal{D}$	$D_{1x} - 2D_{1y} - D_{1z}$	$\frac{2\tilde{J}_2(D_{1x} + D_{1z} + D_{2x} + D_{2z})}{\tilde{J}_1 + \tilde{J}_2}$
$k = \frac{\mathcal{D}}{2\mathcal{J}}$	$\frac{2(D_{1x} - 2D_{1y} - D_{1z})}{3\tilde{J}_1}$	$\frac{4\tilde{J}_2(D_{1x} + D_{1z} + D_{2x} + D_{2z})}{(3\tilde{J}_1 + \tilde{J}_2)(\tilde{J}_1 + 3\tilde{J}_2)}$
$(g\mu_B)H_{c2} = \frac{\mathcal{D}^2}{8\mathcal{J}}$	$\frac{(D_{1x} - 2D_{1y} - D_{1z})^2}{6\tilde{J}_1}$	$\frac{2\tilde{J}_2^2(D_{1x} + D_{1z} + D_{2x} + D_{2z})^2}{(\tilde{J}_1 + \tilde{J}_2)(3\tilde{J}_1 + \tilde{J}_2)(\tilde{J}_1 + 3\tilde{J}_2)}$

При учёте 2-х соседей за скосы и закрутку отвечают одни и те же компоненты векторов ДМ, т.е. **закрутка и скосы связаны!**

## Закрутка и скосы связаны?

Закрутка спирали характеризуется волновым числом

$$k = \frac{D}{2J} \approx \frac{4J_2(D_{1x} + D_{1z} + D_{2x} + D_{2z})}{(3J_1 + J_2)(J_1 + 3J_2)}$$

Спины четырёх подрешёток выражаются через магнитный момент:

$$\hat{s}_i = \mathbf{m} + \delta[\boldsymbol{\tau}_i \times \mathbf{m}]$$

где второе слагаемое возникает благодаря скосам ( $\boldsymbol{\tau}$  – вектора типа (1,1,1) вдоль осей симметрии 3-го порядка),

$$\delta = \frac{D_{1x} + D_{1z} + D_{2x} + D_{2z}}{4(J_1 + J_2 + g\mu_B H/8)} = \frac{(3J_1 + J_2)(J_1 + 3J_2)}{16J_2(J_1 + J_2 + g\mu_B H/8)} k$$

1. Компоненты векторов ДМ, ответственные за скосы отвечают и за закрутку. Случайно или нет? - **Возможно, скосы вызывают закрутку?**

2.  $\delta$  выражается через  $k$  и константы обменного взаимодействия (**без участия векторов ДМ!**), - можно проверить сравнением расчётов и эксперимента.

# Спасибо за внимание!

---

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты №№ 10-02-00768, 12-02-00985) и Программы фундаментальных исследований Президиума РАН "Теплофизика и механика экстремальных энергетических воздействий и физика сильно сжатого вещества".*

V.A.Chizhikov, V.E.Dmitrienko «Frustrated magnetic helices in MnSi-type crystals» // Phys. Rev. B **85**, 014421 (2012)

V.E.Dmitrienko, V.A.Chizhikov «Weak antiferromagnetic ordering induced by Dzyaloshinskii-Moriya interaction and pure magnetic reflections in MnSi-type crystals» // Phys. Rev. Lett., принята в печать (<http://arxiv.org/abs/1110.4968>).