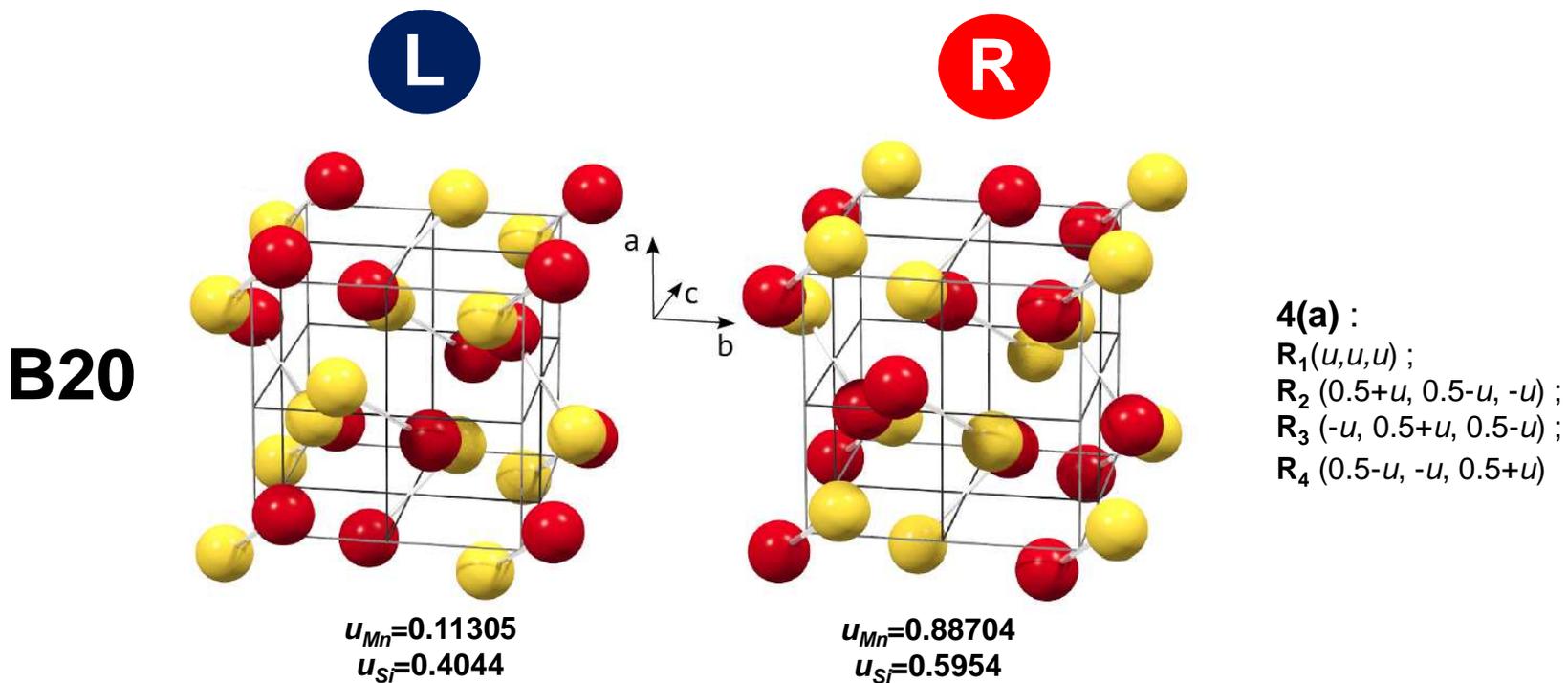


В. Дмитриев, Д. Чернышев, С. Григорьев, В. Дядькин

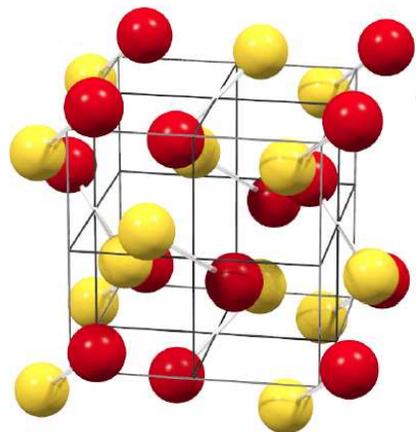
Взаимосвязь структурной и магнитной киральностей

Структура B20

Структуры MnSi, FeSi, их твердых растворов и допированных аналогов имеют пространственную группу $P2_13$ и принадлежат к структурному типу B20



Структура B20



$P2_13$

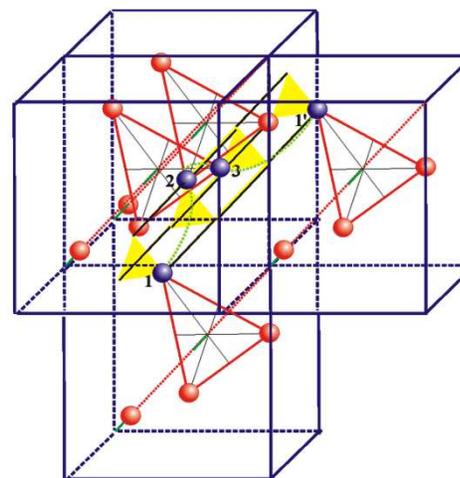
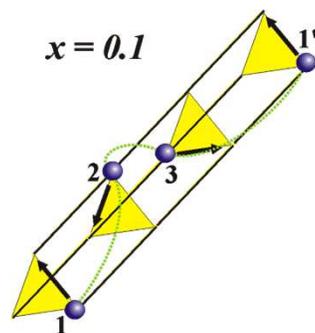
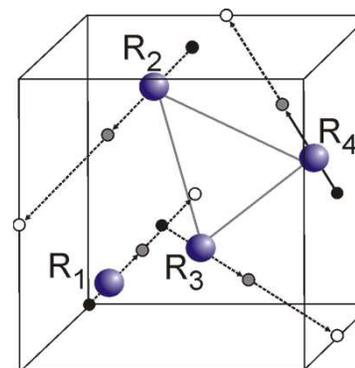
4(a) :

$$R_1(u, u, u) ;$$

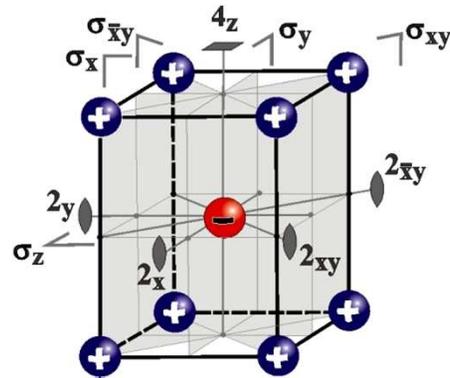
$$R_2(0.5+u, 0.5-u, -u) ;$$

$$R_3(-u, 0.5+u, 0.5-u) ;$$

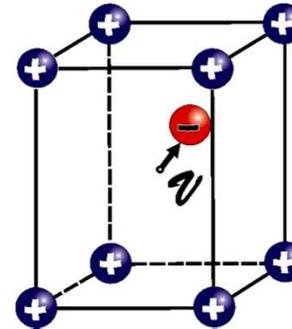
$$R_4(0.5-u, -u, 0.5+u)$$



Гипотетический фазовый переход в тетрагональном кристалле



$T > T_c$



$T < T_c$

$$\nu = (\nu_x, \nu_y, \nu_z)$$

$$F(T, P, \nu)$$

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \vec{\nu}} \right|_{T, P} = 0 \quad \rightarrow \quad \nu_{eq}$$

$$F_{eq}(T, P) = F(T, P, \nu_{eq})$$

Предположения теории непрерывных переходов:

- Изменения ν непрерывны в точке перехода T_c
- Свободная энергия F непрерывна и дифференцируема во всем интервале изменений T и P

Возможно разложение F вблизи (T_c, P_c, ν_0)

$$\begin{array}{ccc} \nu=0 & & \nu_0 \neq 0 \\ & T_c & \\ G_0 & & G_d \end{array}$$

Прафаза для структуры B20

B20

$P2_13$

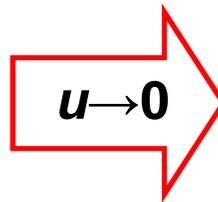
4(a) :

$$R_1(u, u, u) ;$$

$$R_2(0.5+u, 0.5-u, -u) ;$$

$$R_3(-u, 0.5+u, 0.5-u) ;$$

$$R_4(0.5-u, -u, 0.5+u)$$



$Fm-3m$

4(a) :

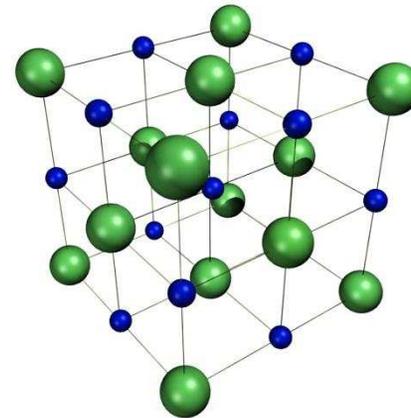
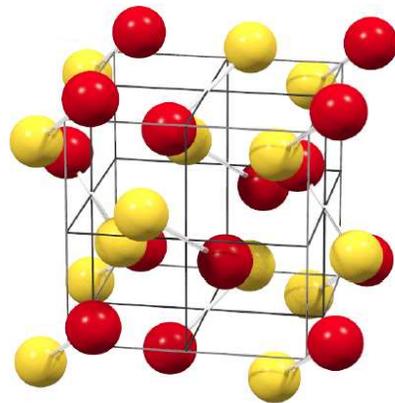
$$R_1(0,0,0) ;$$

$$R_2(0.5, 0.5, 0) ;$$

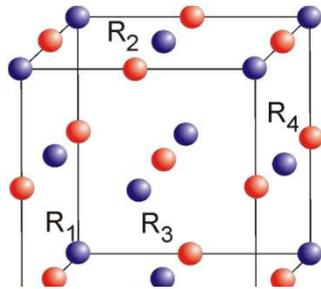
$$R_3(0, 0.5, 0.5) ;$$

$$R_4(0.5, 0, 0.5)$$

B1



Структурный фазовый переход В1- В20

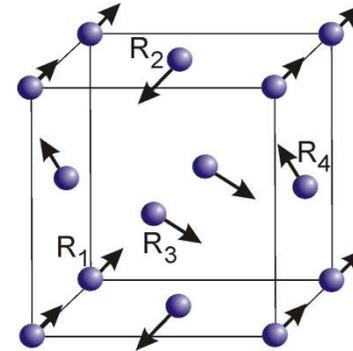


Fm-3m(Z=1)

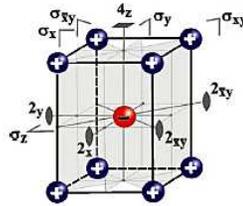
4(a) :

- $R_1(0,0,0)$;
- $R_2(0.5, 0.5, 0)$;
- $R_3(0, 0.5, 0.5)$;
- $R_4(0.5, 0, 0.5)$

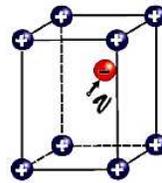
Параметр порядка и его симметрия



Параметр порядка



$T > T_c$



$T < T_c$

$$\varphi_{01}(z) = v_z$$

$$\varphi_{02}(x, y) = (v_x, v_y)$$

$$\Delta\rho(\vec{r}) = \rho_d(\vec{r}) - \rho_0(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}, i} \eta_{\vec{k}, i} \varphi_{\vec{k}, i}(\vec{r})$$

Каждый из наборов $\{\eta_{ki}\}$ и $\{\phi_{ki}(r)\}$ образует базис соответствующего НП и, следовательно, любой из них может использоваться в качестве вариационного параметра для свободной энергии. В теории Ландау принято оперировать скалярными $\{\eta_{ki}\}$.



Владимир ДМИТРИЕВ



Низкосимметричная структура симметрии G_d рассматривается как слегка искаженная симметричным образом высокосимметричная G_0 . Вследствие этого изменение плотности вероятности распределения атомов в структуре при переходе может быть разложено по симметричным базисным функциям $\phi_{ki}(\mathbf{r})$ неприводимых представлений группы G_0 :

$$\Delta\rho(\mathbf{r}) = \rho_d(\mathbf{r}) - \rho_0(\mathbf{r}) = \sum \eta_{ki} \phi_{ki}(\mathbf{r}), \quad (1.1)$$

где η_{ki} – компоненты ПП, \mathbf{k} – вектор обратного пространства, характеризующий изменение при переходе трансляционной симметрии кристалла; i – номер неприводимого представления. Набор скалярных величин $\{\eta_{ki}\}$ характеризует «вес» соответствующего «элементарного» симметричного искажения в общем искажении структуры при фазовом переходе.



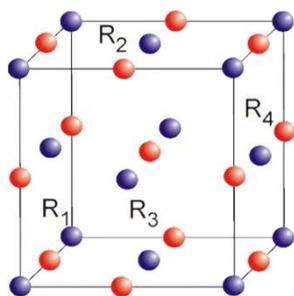
Владимир ДМИТРИЕВ



Феноменологическая теория
фазовых переходов
(Часть 1)

Структурный фазовый переход B1- B20

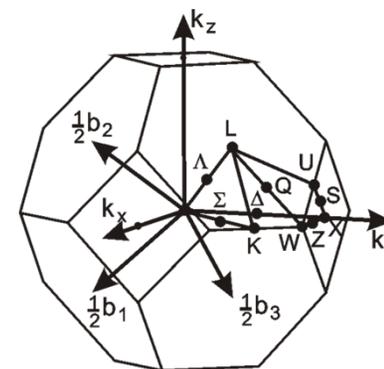
$Fm-3m(1) - P2_13(4)$



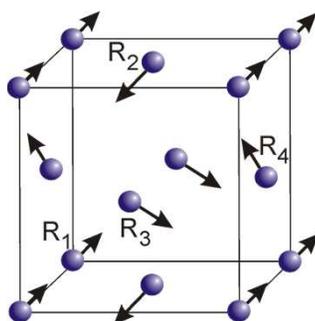
B1 – B20

$Fm-3m(Z=1) - P2_13(Z=4)$

X-точка ГЦК зоны Бриллюэна
[3-лучевая звезда $\mathbf{k}^{(1)} = (\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)/2$]



$Fm-3m(Z=1)$



$$\mathcal{M}_{(a)} = X_2^- + X_5^-$$

$$X_2^- : \quad \psi_1 = z_1 + z_2 - z_3 - z_4, \quad \psi_2 = y_1 - y_2 - y_3 + y_4, \quad \psi_3 = x_1 - x_2 + x_3 - x_4;$$

$$X_5^- : \quad \phi_1 = x_1 + x_2 - x_3 - x_4, \quad \phi_2 = y_1 + y_2 - y_3 - y_4, \quad \phi_3 = z_1 - z_2 - z_3 + z_4,$$

$$\phi_4 = x_1 - x_2 - x_3 + x_4, \quad \phi_5 = y_1 - y_2 + y_3 - y_4, \quad \phi_6 = z_1 - z_2 + z_3 - z_4.$$

4(a) :

$R_1(0,0,0)$;

$R_2(0.5, 0.5, 0)$;

$R_3(0, 0.5, 0.5)$;

$R_4(0.5, 0, 0.5)$

Структурный фазовый переход B1- B20

$Fm-3m(1) - P2_13(4)$



Владимир ДМИТРИЕВ



Феноменологическая теория
фазовых переходов
(Часть 1)

$Fm-3m(Z=1) - P2_13(Z=4)$

$$\eta_1 = \eta_3 = \eta_5 \neq 0 \leftrightarrow \varphi_1 = \varphi_3 = \varphi_5 \neq 0,$$

$$\eta_2 = \eta_4 = \eta_6 = 0 \leftrightarrow \varphi_2 = \varphi_4 = \varphi_6 = 0.$$

$$\varphi_1 = x_1 + x_2 - x_3 - x_4, \quad \varphi_2 = y_1 + y_2 - y_3 - y_4, \quad \varphi_3 = z_1 - z_2 - z_3 + z_4,$$

$$\varphi_4 = x_1 - x_2 - x_3 + x_4, \quad \varphi_5 = y_1 - y_2 + y_3 - y_4, \quad \varphi_6 = z_1 - z_2 + z_3 - z_4.$$

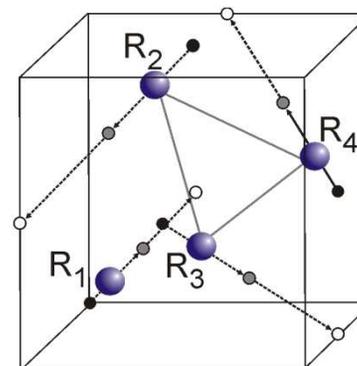
$$F(T, P, \nu)$$

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \vec{\nu}} \right|_{T, P} = 0 \rightarrow \nu_{eq}$$

$$F_{eq}(T, P) = F(T, P, \nu_{eq})$$



ФКС- 45 Райвола, 2011



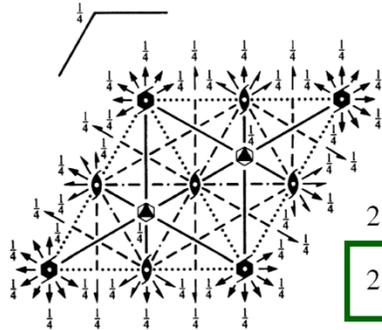
4. Реконструктивные фазовые переходы



Реконструктивный фазовый переход в гексагональном кристалле

No. 194

$P 6_3/m 2/m 2/c$

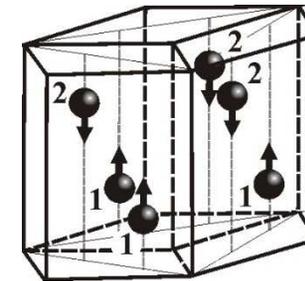


B_{1g}

$\phi = \zeta_1 - \zeta_2$

2	d	$\bar{6}m2$	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{3}{4}$	$\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}$
2	c	$\bar{6}m2$	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{4}$	$\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{3}{4}$
2	b	$\bar{6}m2$	$0, 0, \frac{1}{4}$	$0, 0, \frac{3}{4}$
2	a	$\bar{3}m$	$0, 0, 0$	$\bar{6}m2$

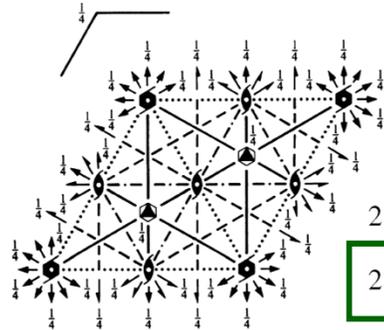
$G_0 = P6_3/mmc \rightarrow G_d = \bar{P}3m1$



Реконструктивный фазовый переход в гексагональном кристалле

No. 194

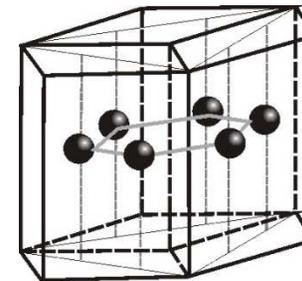
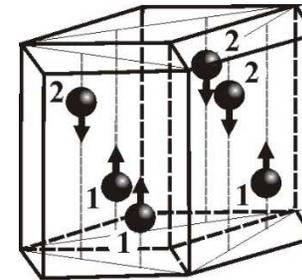
$P 6_3/m 2/m 2/c$



B_{1g}

$\phi = \zeta_1 - \zeta_2$

2	d	$\bar{6}m2$	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{3}{4}$	$\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}$
2	c	$\bar{6}m2$	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{4}$	$\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{3}{4}$
2	b	$\bar{6}m2$	$0, 0, \frac{1}{4}$	$0, 0, \frac{3}{4}$
2	a	$\bar{3}m.$	$0, 0, 0$	$\bar{6}m2$



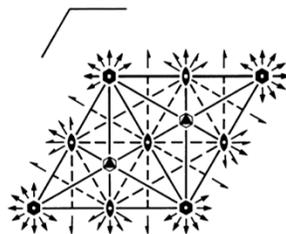
$G_0 = P6_3/mmc$ $G_d = \bar{P}3m1$ $G_d' = P6/mmm$

$P6/mmm$

D_{6h}^1

No. 191

$P 6/m 2/m 2/m$

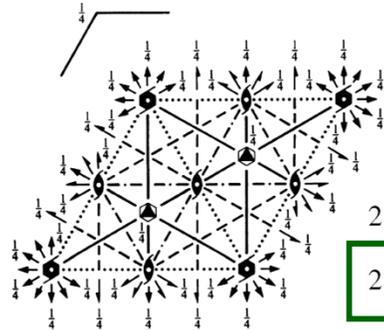


2	d	$\bar{6}m2$	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2}$	$\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}$
2	c	$\bar{6}m2$	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0$	$\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0$
1	b	$6/mmm$	$0, 0, \frac{1}{2}$	
1	a	$6/mmm$	$0, 0, 0$	

Реконструктивный фазовый переход в гексагональном кристалле

No. 194

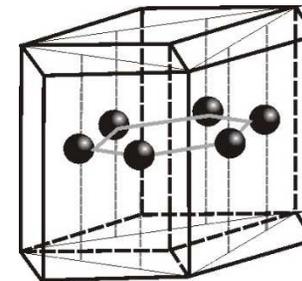
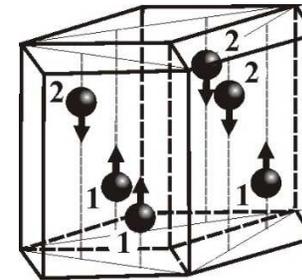
$P 6_3/m 2/m 2/c$



B_{1g}

$\phi = \zeta_1 - \zeta_2$

2	d	$\bar{6}m2$	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{3}{4}$	$\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}$
2	c	$\bar{6}m2$	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{4}$	$\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{3}{4}$
2	b	$\bar{6}m2$	$0, 0, \frac{1}{4}$	$0, 0, \frac{3}{4}$
2	a	$\bar{3}m.$	$0, 0, 0$	$0, 0, \frac{1}{2}$



$G_0 = P6_3/mmc$ $G_d = \bar{P}3m1$ \Rightarrow $G_{d'} = P6/mmm$

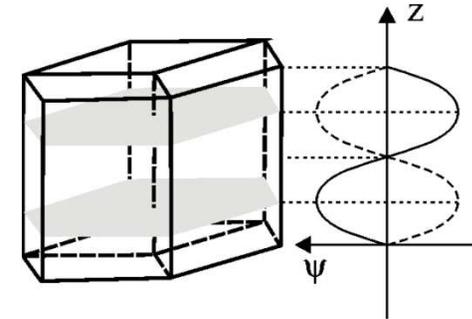
$G_{d'} = P6/mmm$ $G_d = \bar{P}3m1$ \Rightarrow $G_0 = P6_3/mmc$

Волны плотности

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N A_j e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{R}_j)} \quad \text{+к.с.}$$

Структура кристалла и механизм конкретного фазового перехода позволяют ограничить рассмотрение:

- а) одной подрешетки [атомы в двухкратной позиции $2(c)$],
- б) единственным вектором $k=2\pi/c \cdot [001]=c^*$,
- в) первыми гармониками ряда Фурье.



$$\psi_0(z) = \frac{A}{2} \{ \text{Cos}[c^* \cdot (z_{10} - z)] + \text{Cos}[c^* \cdot (z_{20} - z)] \}$$

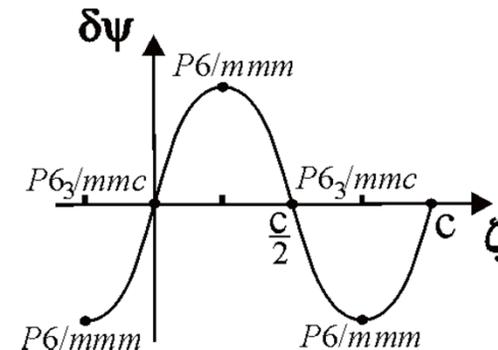
$$\psi_d(z, \zeta) = \frac{A}{2} \{ \text{Cos}[c^* \cdot (z_{10} + \zeta_1 - z)] + \text{Cos}[c^* \cdot (z_{20} + \zeta_2 - z)] \}$$

$$\delta\psi(z, \zeta) = \psi_0(z) - \psi_d(z, \zeta) = \frac{A}{2} \left[\text{Cos } c^* \left(\frac{c}{4} + \zeta - z \right) + \text{Cos } c^* \left(-\frac{c}{4} - \zeta - z \right) - \text{Cos } c^* \left(-\frac{c}{4} - z \right) - \text{Cos } c^* \left(\frac{c}{4} - z \right) \right]$$

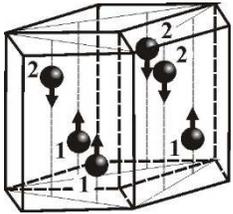
$$\frac{c^* c}{4} = \frac{\pi}{2}$$

$$\delta\psi(z, \zeta) = -2A \cdot \text{Sin}(c^* z) \cdot \text{Cos}(c^* \zeta)$$

$$\eta(\zeta) = \eta_0 \cdot \text{Sin}(c^* \zeta)$$



Потенциал Ландау. Фазовая диаграмма

 B_{1g}

$$\phi = \zeta_1 - \zeta_2$$

$$F_L[\eta(\zeta)] = a_1 \eta(\zeta)^2 + a_2 \eta(\zeta)^4 + a_3 \eta(\zeta)^6$$

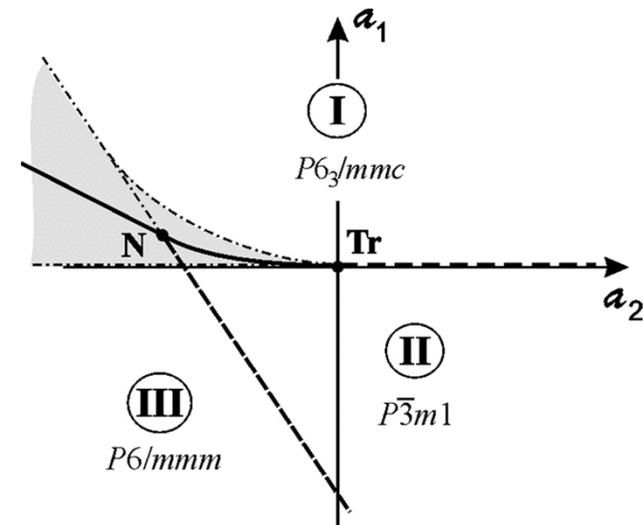
$$\frac{\partial F_L}{\partial \zeta} = \frac{\partial F_L}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial \zeta} = 0$$

$$2\eta \cdot \frac{\partial \eta}{\partial \zeta} \cdot (a_1 + 2a_2 \eta^2 + 3a_3 \eta^4) = 0$$

$$\eta_I = 0$$

$$(a_1 + 2a_2 \eta^2 + 3a_3 \eta^4) = 0 \rightarrow \eta_{II} \neq 0$$

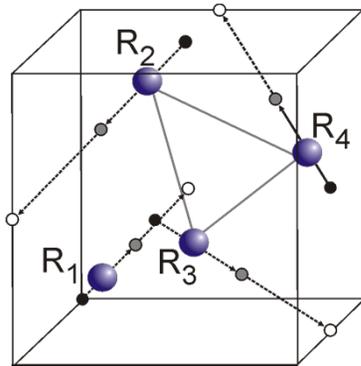
$$\frac{\partial \eta}{\partial \zeta} = 0 \rightarrow \eta_{III} = \eta_0 = \text{const}$$



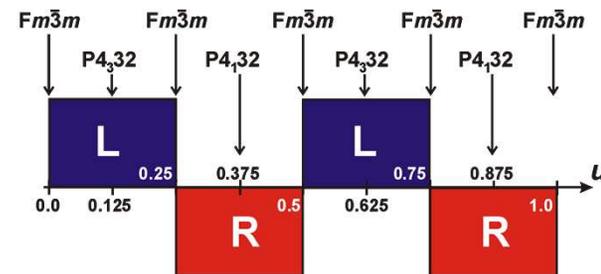
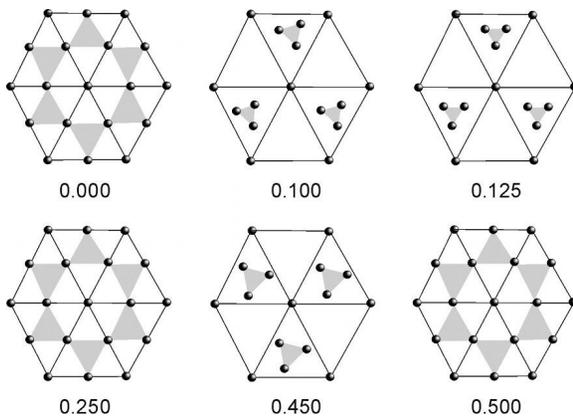
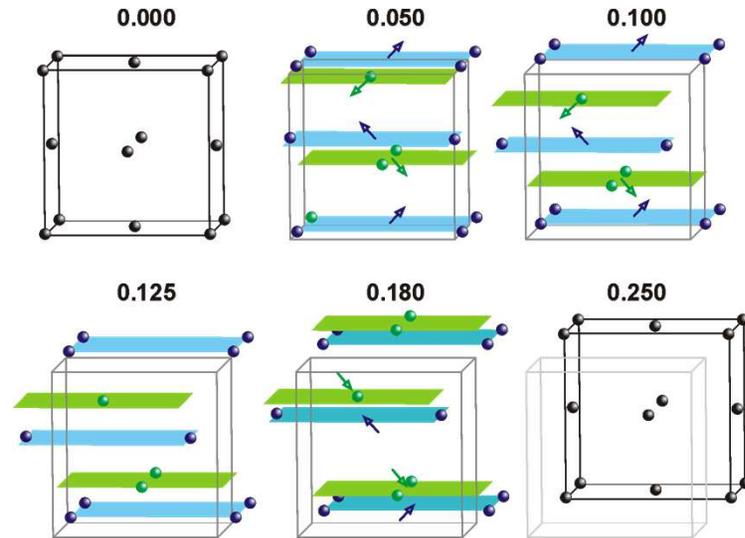
$$\frac{\partial^2 F}{\partial \eta^2} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial \zeta} + \frac{\partial F}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial^2 \eta}{\partial \zeta^2} \geq 0$$

$$2(a_1 + 2a_2 \eta^2 + 3a_3 \eta^4) \left\{ \left(\frac{\partial \eta}{\partial \zeta} \right)^2 + \eta \frac{\partial^2 \eta}{\partial \zeta^2} \right\} + 8\eta^2 \left(\frac{\partial \eta}{\partial \zeta} \right)^2 (a_2 + 3a_3 \eta^2) \geq 0$$

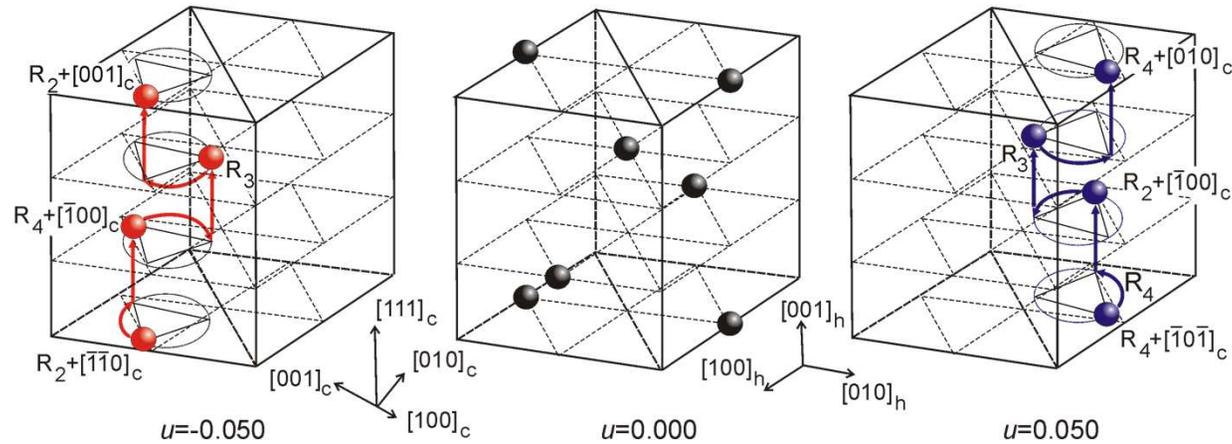
Реконструктивные фазовые переходы в структуре B1



$$\eta(u) = A \cdot \sin(4\pi u)$$



Структурная киральность производных от B1



$$h_S = h_S^+ + h_S^-$$

$$h_S = h_S^+ = U_{[111]} \cdot [\mathbf{R}_{34} \times \mathbf{R}_{32}]$$

$$h_S = h_S^- = U_{[111]} \cdot [\mathbf{R}_{32} \times \mathbf{R}_{34}]$$

$$\mathbf{R}_{ji} = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i$$

$$h_S^+ = U_{[111]} \cdot [\mathbf{R}_{jk} \times \mathbf{R}_{ji}] = - U_{[111]} \cdot [\mathbf{R}_{ji} \times \mathbf{R}_{jk}] = - h_S^-$$

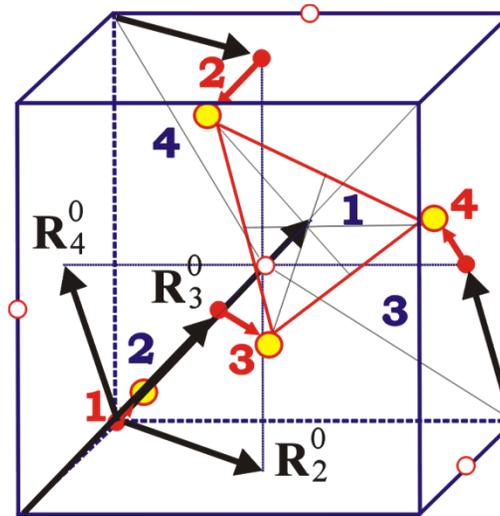
$$| h_S^+ | = | h_S^- |$$

Структурная киральность и параметр порядка

$$h_S = h_S^+ = \mathbf{U}_{[111]} \cdot [\mathbf{R}_{34} \times \mathbf{R}_{32}]$$

$$\mathbf{R}_{ji} = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i$$

$$\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_i^0 + \Delta \mathbf{R}_i$$



$$h_S = h_S^+ = \mathbf{U}_{[111]} \cdot [\mathbf{R}_{34} \times \mathbf{R}_{32}]$$

$$h_S = h_S^- = \mathbf{U}_{[111]} \cdot [\mathbf{R}_{32} \times \mathbf{R}_{34}]$$

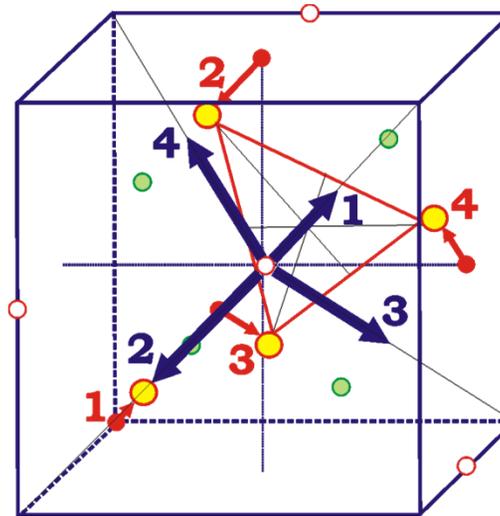
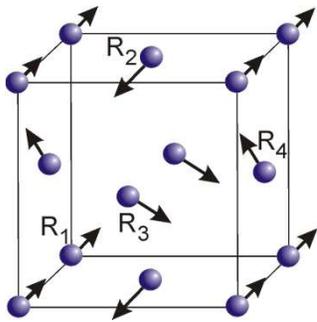
$$\mathbf{R}_{ji} = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i$$

Структурная киральность и параметр порядка

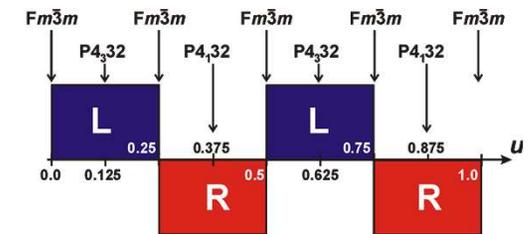
$$h_S = h_S^+ = \mathbf{U}_{[111]} \cdot [\mathbf{R}_{34} \times \mathbf{R}_{32}]$$

$$\mathbf{R}_{ji} = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i$$

$$\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_i^0 + \Delta \mathbf{R}_i$$



$$\eta(u) = A \cdot \sin(4\pi u)$$



Theory of helical magnetic structures and phase transitions in MnSi and FeGe

Per Bak and M Høgh Jensen

Physics Laboratory I, H C Ørsted Institute, Universitetsparken 5, DK-2100 Copenhagen, Denmark

$$\begin{aligned}
 F(\mathbf{r}) = & \frac{1}{2}A(S_x^2 + S_y^2 + S_z^2) + b\mathbf{S} \cdot (\nabla \times \mathbf{S}) \\
 & + \frac{1}{2}B_1[(\nabla S_x)^2 + (\nabla S_y)^2 + (\nabla S_z)^2] \\
 & + \frac{1}{2}B_2\left[\left(\frac{\partial S_x}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S_y}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial S_z}{\partial z}\right)^2\right] \\
 & + C(S_x^2 + S_y^2 + S_z^2)^2 \\
 & + D(S_x^4 + S_y^4 + S_z^4).
 \end{aligned}$$

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = (1/\sqrt{2})[\mathbf{S}_k \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \mathbf{S}_k^* \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})]$$

$$\begin{aligned}
 F(\mathbf{k}) = & \frac{1}{2}A |\mathbf{S}_k|^2 + i b \mathbf{k} \cdot (\mathbf{S}_k \times \mathbf{S}_k^*) \\
 & + \frac{1}{2}B_1 k^2 |\mathbf{S}_k|^2 \\
 & + \frac{1}{2}B_2 (k_x^2 |S_{kx}|^2 + k_y^2 |S_{ky}|^2 + k_z^2 |S_{kz}|^2)
 \end{aligned}$$

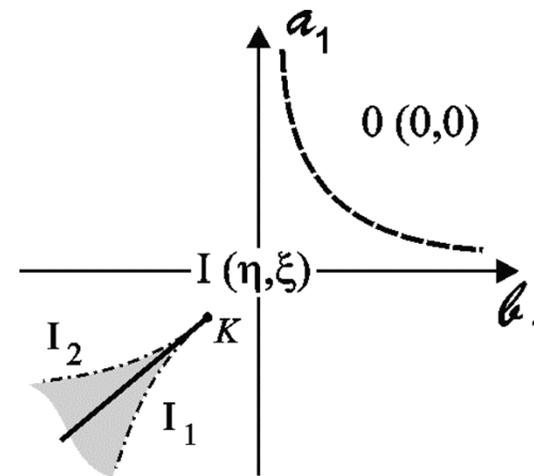
$$\mathbf{h}_S = \mathbf{U}_{[111]} \cdot (\mathbf{R}_{ji} \times \mathbf{R}_{jk})$$

Билинейная связь :
квазисобственные переходы

$$F_L(\eta, \xi) = a_1 \eta^2 + a_2 \eta^4 + b_1 \xi^2 + b_2 \xi^4 + \gamma_1 \eta \xi + \gamma_2 \eta^2 \xi^2$$

 $F_L(\eta)$
 $F_L(\xi)$
 $F_{INT}(\eta, \xi)$

$0 : \eta = \xi = 0 ; I : \eta = \xi \neq 0$



Выводы:

- Знак структурной киральности h_S определяется знаком параметра порядка структурного фазового перехода.
- Структурная киральность h_S имеет симметрию идентичную симметрии h_{DM} . Следствием этого факта является идентичный отклик обоих параметров на внешние воздействия.
- Изменение знака структурной киральности должно (может) вызывать изменение знака киральности магнитной.