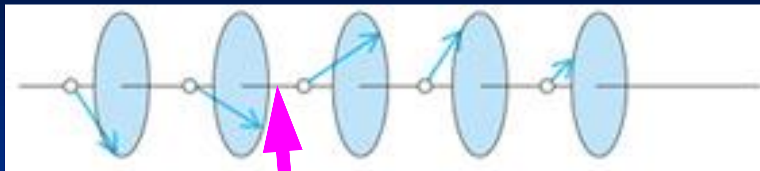
Закрутка и скосы в спиновой структуре MnSi при учёте взаимодействия нескольких магнитных сфер

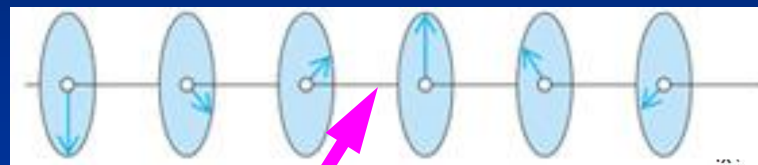
В. А. Чижиков, В. Е. Дмитриенко

- Моделирование спиновой структуры, скосы
- Феноменологические константы
- «Обменные» координаты атомов
- Мультиферроик Cu_2OSeO_3

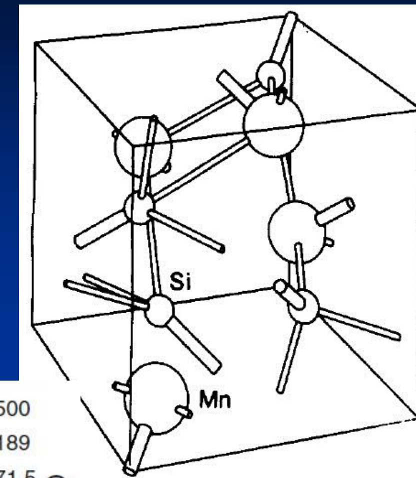
ФКС-2013, 14 марта 2013 г.

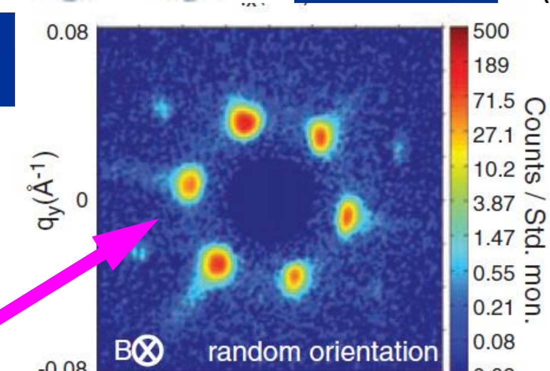
MnSi



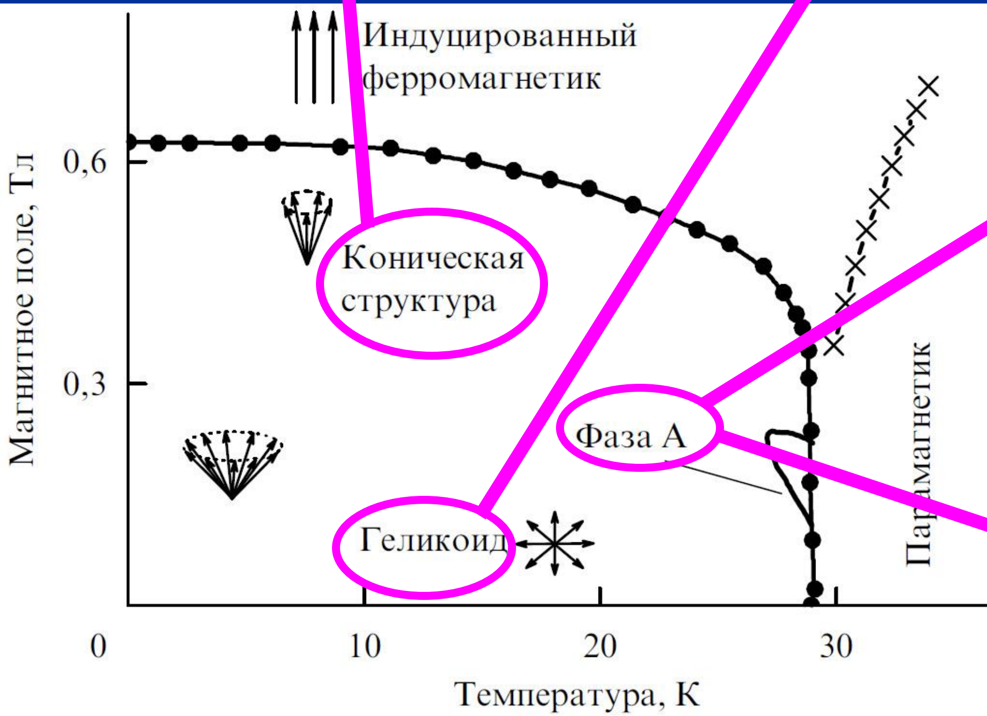


Пр. группа $P2_13$
Структура $B20$





Mühlbauer et al. // Science, 2009, MnSi

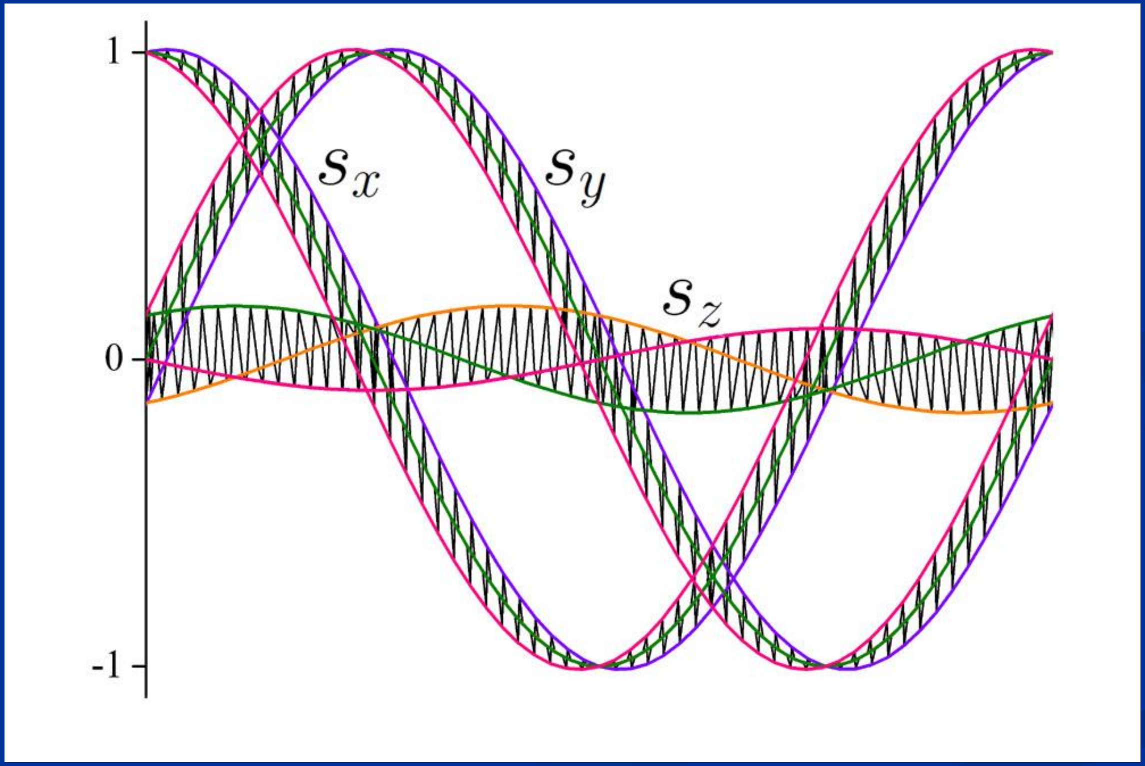


С.М.Стишов, А.Е.Петрова // УФН, 2011

Yu et al. // Nat. Mater., 2011, FeGe

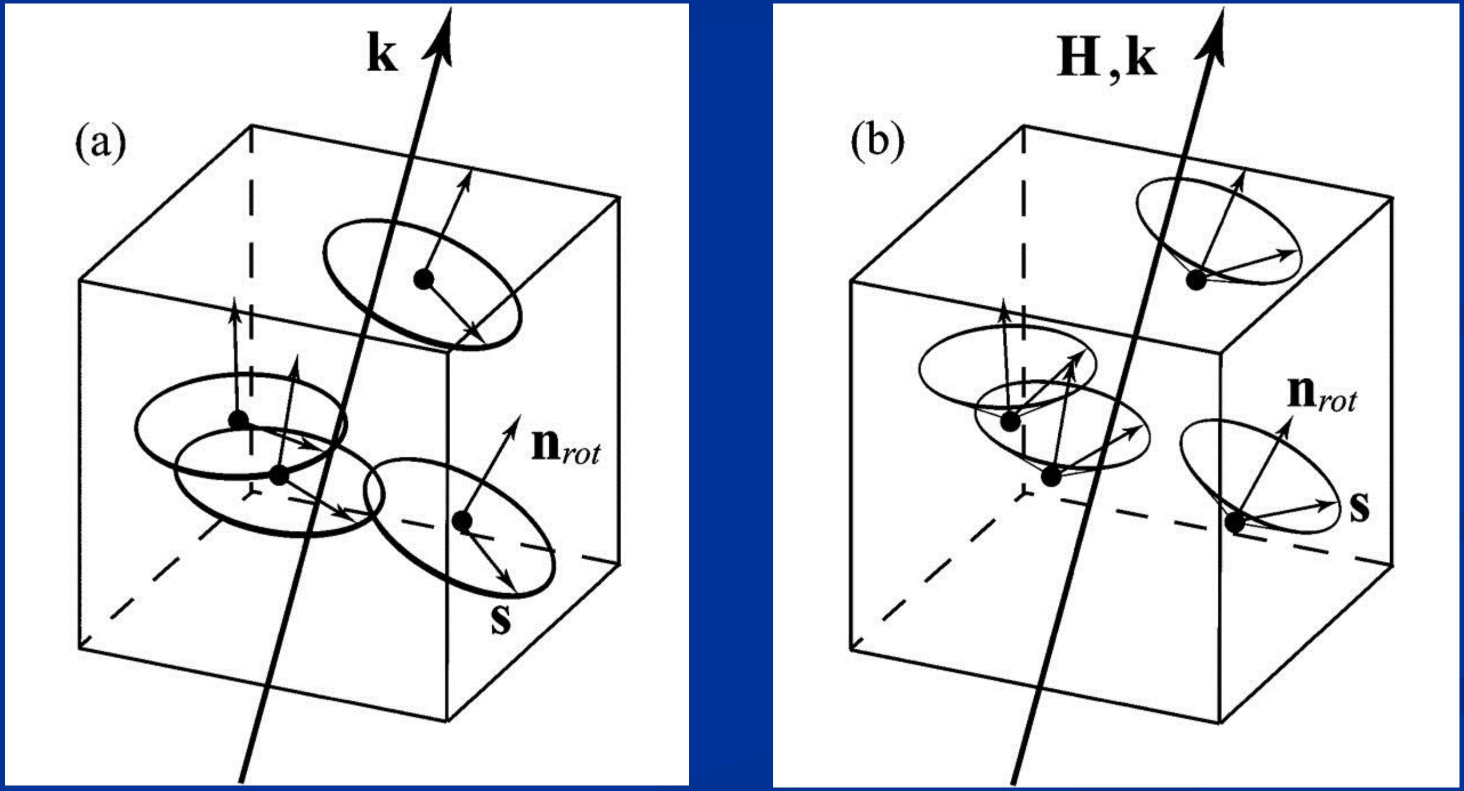
Моделирование спиновой структуры, скосы

Спиновая спираль вдоль направления [110] в MnSi, результат численного моделирования с использованием гейзенберговского потенциала, параметры выбраны произвольно.

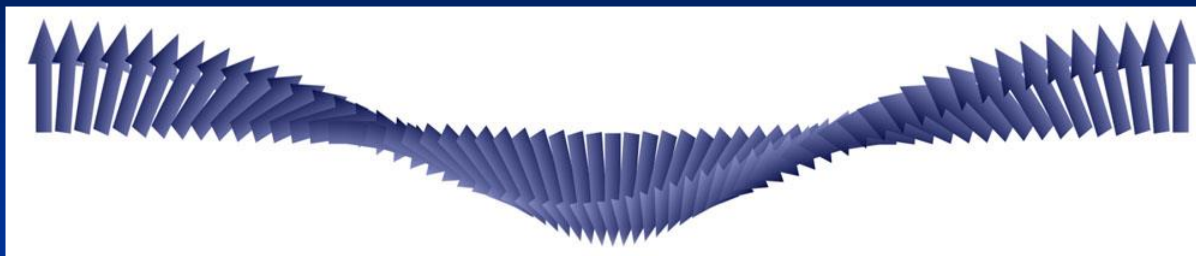


Моделирование спиновой структуры, скосы

Скосы между 4 спиралями в MnSi : (a) простая спираль, (b) ферромагнитная спираль в магнитном поле. Спирали имеют общий волновой вектор, но отличаются фазами и плоскостями вращения спинов.

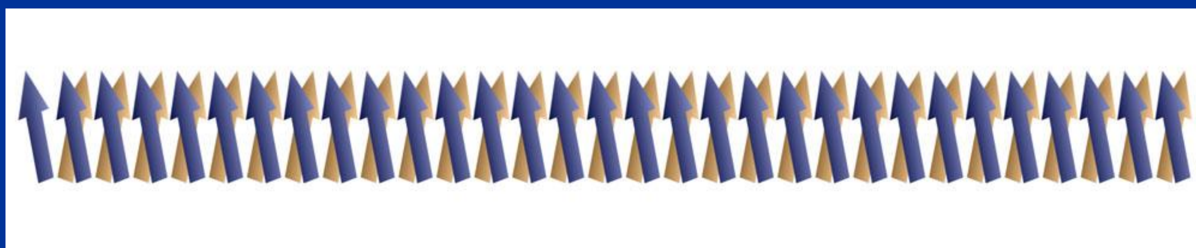


Моделирование спиновой структуры, скосы

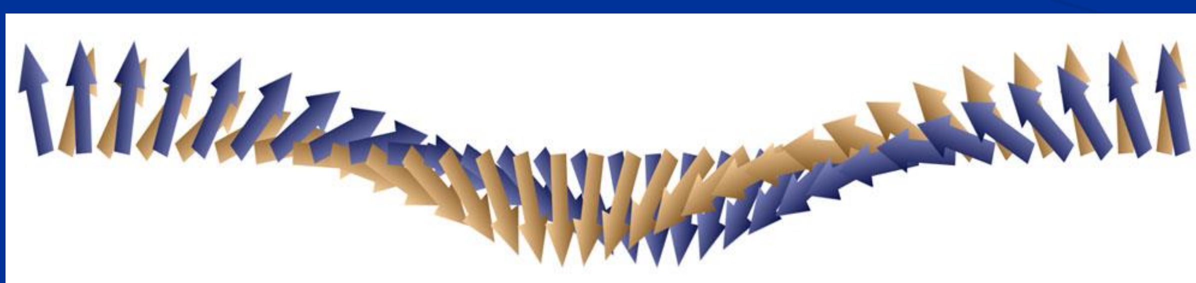


закрутка

+



скосы



закрутка
+
скосы

Феноменологические константы

Для описания хиральных магнитных структур используют два различных подхода : **микроскопический** (с дискретными спинами) и **макроскопический** (с непрерывной плотностью магнитного момента).

Гейзенберговская модель:

$$E = \frac{1}{2}\sum_i \sum_j \left(-J_{ij}\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + \mathbf{D}_{ij} \cdot [\mathbf{s}_i \times \mathbf{s}_j]\right)$$

??

Феноменологическая модель:

$$E = \int_V d\mathbf{r} \left(\mathcal{J}\frac{\partial m_\alpha}{\partial r_\beta}\frac{\partial m_\alpha}{\partial r_\beta} + \mathcal{D}\mathbf{m} \cdot [\nabla \times \mathbf{m}]\right)$$

Ответ на вопрос о связи между параметрами двух моделей позволяет вычислять макроскопические (феноменологические) константы из первых принципов.

Феноменологические константы

В **приближении ближайших соседей** феноменологические константы определяются простыми линейными выражениями :

$$\mathcal{J} = \frac{3}{4} J$$

$$\mathcal{D} = D_x - 2D_y - D_z$$

Здесь J – константа обменного взаимодействия пары соседних спинов,

(D_x, D_y, D_z) – вектор Дзялошинского–Мории (ДМ) одной из эквивалентных связей.

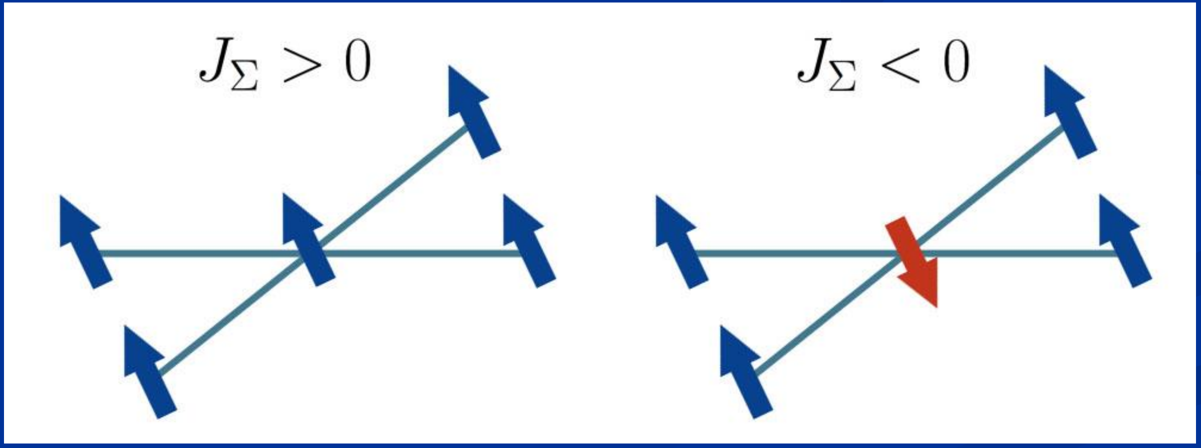
Обменные константы

В **приближении нескольких магнитных сфер** закрученное ферромагнитное состояние определяется двумя обменными параметрами :

$$J_\Sigma > 0, \qquad \mathcal{J} > 0$$

Первое условие определяет ферромагнитное упорядочение спинов,

второе – малость пространственных градиентов магнитного момента.



Обменные константы

В приближении 4 магнитных сфер :

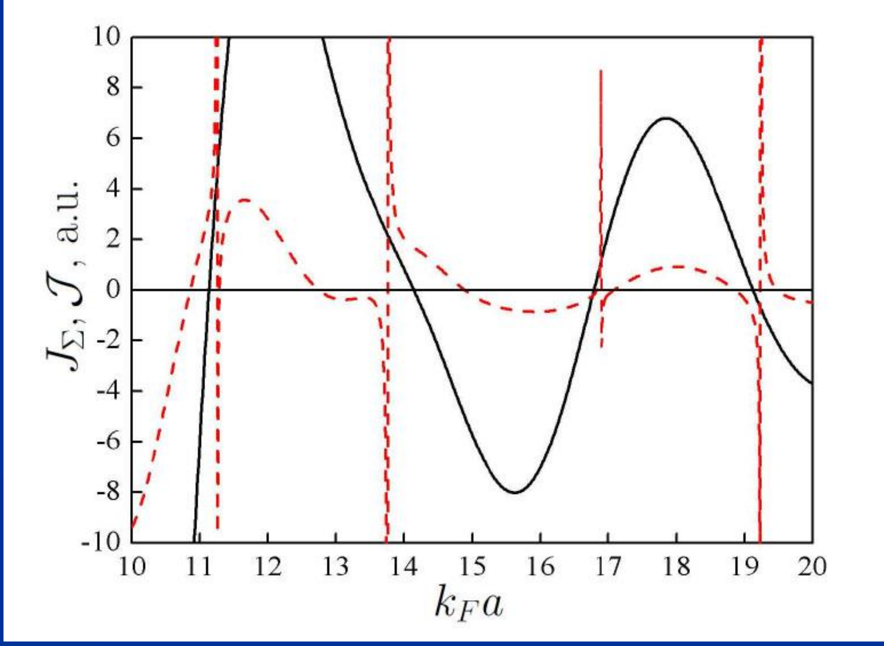
$$J_\Sigma = \sum_j J_{ij} = 6(J_1 + J_2 + J_3 + J_4)$$

$$\mathcal{J} = \frac{3J_1^2 + 3J_2^2 + 3J_3^2 + 10J_1J_2 + 10J_1J_3 + 22J_2J_3}{4(J_1 + J_2 + J_3)} + 2J_4$$

В приближении РККИ эти параметры можно представить как функции k_Fa.

Реальное значение $k_Fa = 16.4$ попадает в область отрицательных значений параметров.

(Может ли MnSi быть слабым ферромагнетиком?)



Параметр Дзялошинского-Мории

Какие проекции векторов Дзялошинского–Мории отвечают за закрутку?

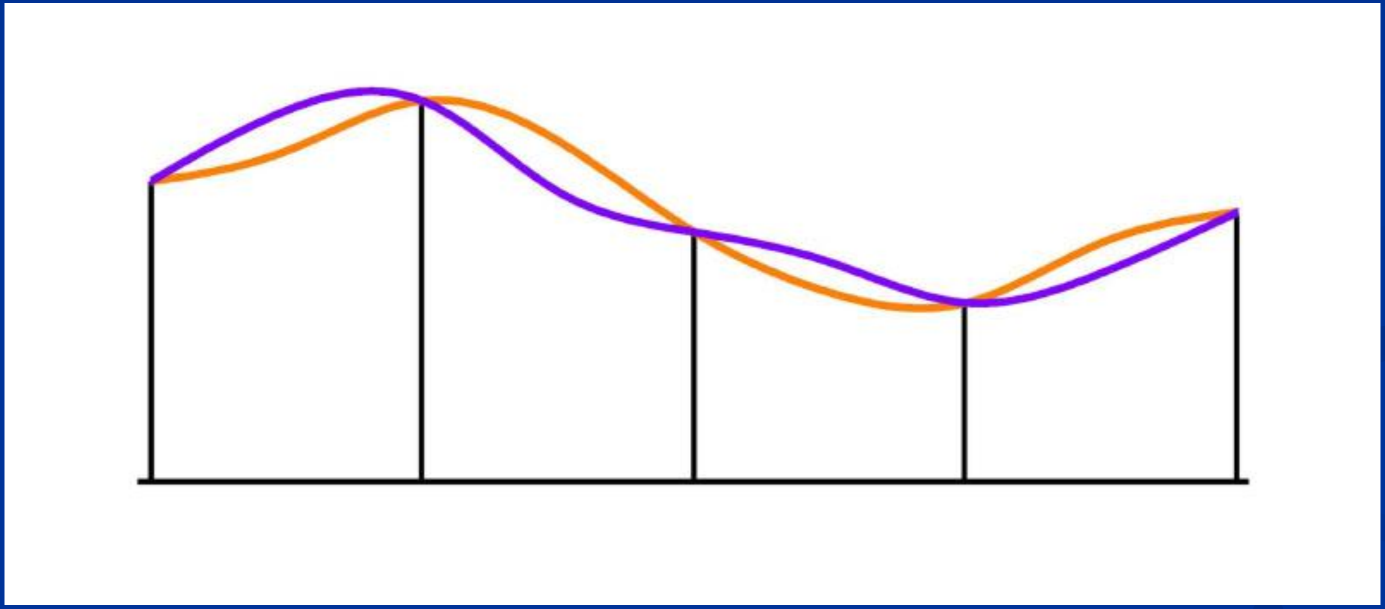
- За закрутку отвечают проекции векторов ДМ на направления связей (Hopkinson, Kee // PRB, 2009)

- За закрутку отвечают проекции векторов ДМ на кристаллографические направления, близкие к направлениям связей (приближение ближайших соседей, Chizhikov, Dmitrienko // PRB, 2012)

- За закрутку отвечают проекции векторов ДМ на некие иррациональные направления, определяемые **«обменными»** координатами атомов

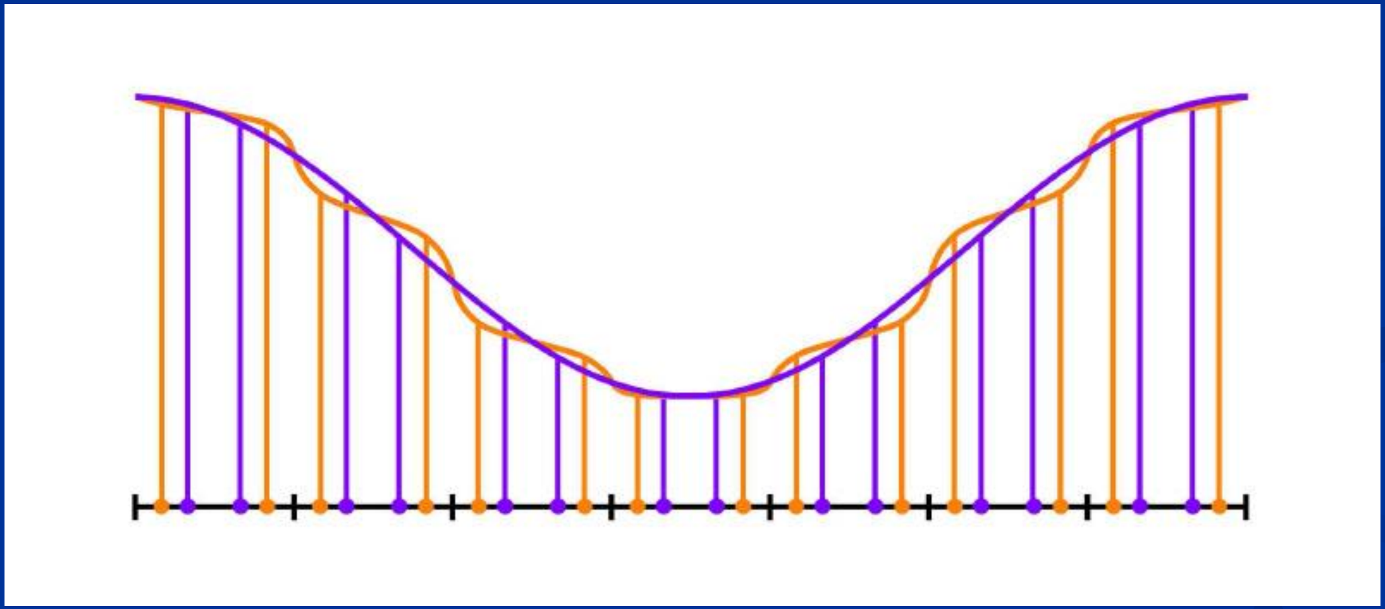
«Обменные» координаты атомов

Возможность выбора фиктивных координат атомов связана с неоднозначностью перехода от дискретных спинов к непрерывной плотности магнитного момента :



«Обменные» координаты атомов

Скоординированным смещением магнитных атомов в элементарной ячейке можно убрать несоответствие фаз отдельных («скошенных») спиралей и получить более гладкую намагниченность :



Параметр Дзялошинского-Мории

Условие на связи $\mathbf{b}_{ij}$

$$\sum_j J_{ij}\mathbf{b}_{ij} = 0$$

даёт фиктивную координату атомов как функцию обменных констант :

$$x_{exch} = \frac{J_1 + 3J_2 - J_3}{8(J_1 + J_2 + J_3)}$$

При использовании «обменных» координат псевдоскаляр Дзялошинского–Мории преобретает простой вид (в приближении 4 магнитных сфер) :

$$\mathcal{D} = -4(\mathbf{D}_1 \cdot \mathbf{b}_1 + \mathbf{D}_2 \cdot \mathbf{b}_2 + \mathbf{D}_3 \cdot \mathbf{b}_3 + \mathbf{D}_4 \cdot \mathbf{b}_4)$$

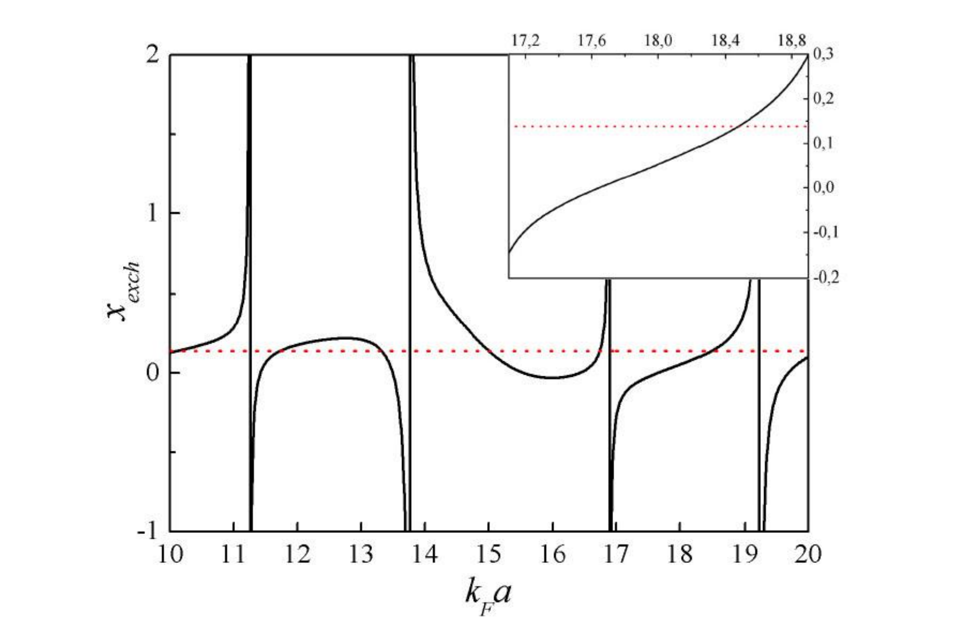
Параметр Дзялошинского-Мории

В предположении, что **векторы ДМ перпендикулярны связям** (правило Кеффера, квантово-механические расчёты), константа ДМ имеет вид :

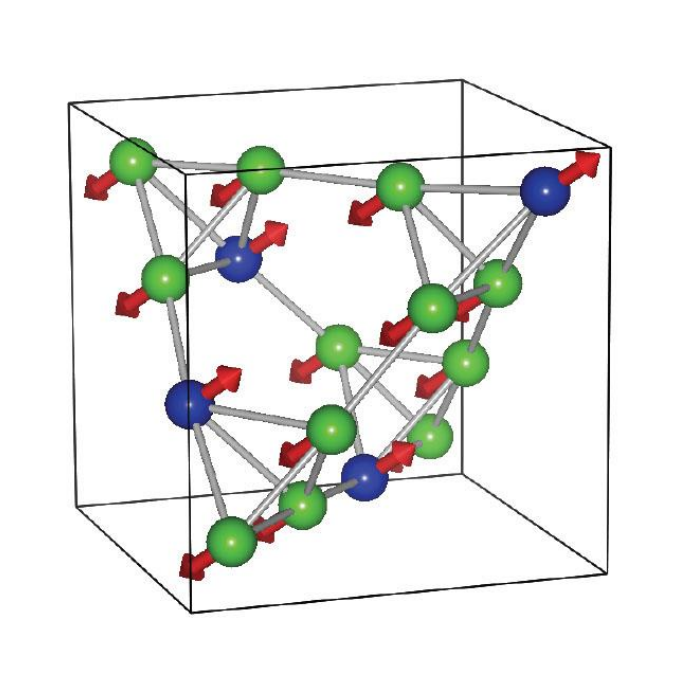
$$\mathcal{D} = 8D_+(x_{exch} - x_{real})$$

Здесь $D_+=D_{1x}+D_{1z}+D_{2x}+D_{2z}+D_{3x}+D_{3z}$ – комбинация компонент векторов ДМ, которая также отвечает за скосы. Разность (x_{exch}-x_{real}) определяет степень и знак (хиральность) закрутки.

Обменная координата в приближении РККИ как функция $k_F a$



Мультиферроик Cu_2OSeO_3



Cu_2OSeO_3 – ферримагнетик, мультиферроик

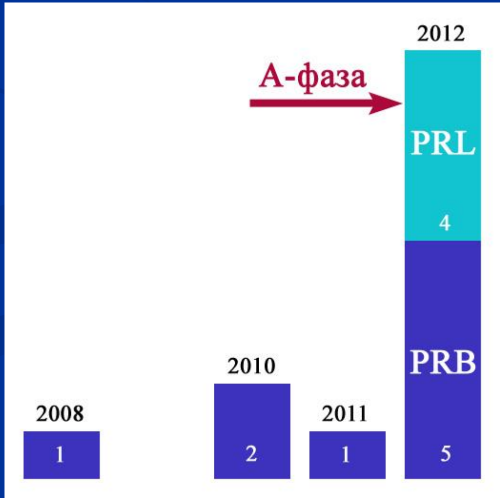
Пространственная группа – $P2_13$.

Элементарная ячейка содержит 16 магнитных атомов: Cu(I) в позициях 4*a*, Cu(II) в позициях 12*b*. Спины Cu(I) и Cu(II) противоположно направлены.

Кристалл – диэлектрик, есть связь между магнитным моментом и поляризацией.

Недавно обнаружена А-фаза (Seki et al. // Science, 2012).

Число статей в PRB и PRL, в названиях которых присутствует Cu_2OSeO_3



Мультиферроик Cu_2OSeO_3

Обобщение условия для «обменных» координат на случай ферримагнетиков (c_j=±1) :

$$\sum_j J_{ij} c_j \mathbf{b}_{ij} = 0$$

Используя данные работы [Yang et al. // PRL, 2012] по константам обменного взаимодействия, можно вычислить фиктивные координаты атомов Cu(I) и Cu(II) :

$$\begin{aligned} x_{I,real} &= 0.8860, & x_{I,exch} &= 0.9417 \\ x_{II,real} &= 0.1335, & x_{II,exch} &= -0.0042 \\ y_{II,real} &= 0.1211, & y_{II,exch} &= 0.0202 \\ z_{II,real} &= 0.8719, & z_{II,exch} &= 0.8969 \end{aligned}$$

Мультиферроик Cu_2OSeO_3

Феноменологические константы можно выразить в виде простых сумм по связям, если в $\mathbf{b}_{ij}$ входят «обменные» координаты атомов :

$$\mathcal{J} = \frac{1}{12}\sum_i \sum_j J_{ij} c_i c_j |\mathbf{b}_{ij}|^2$$

$$\mathcal{D} = -\frac{1}{6}\sum_i \sum_j c_i c_j \mathbf{D}_{ij} \cdot \mathbf{b}_{ij}$$

Используя данные [Yang et al. // PRL, 2012], можно вычислить волновое число спирали $q=J/4\pi D$=0.0118.

Без учёта скосов q=0.0104 (Yang et al. // PRL, 2012).

Экспериментальное значение q=0.014 (Adams et al. // PRL, 2012; Seki et al. // PRB, 2012).

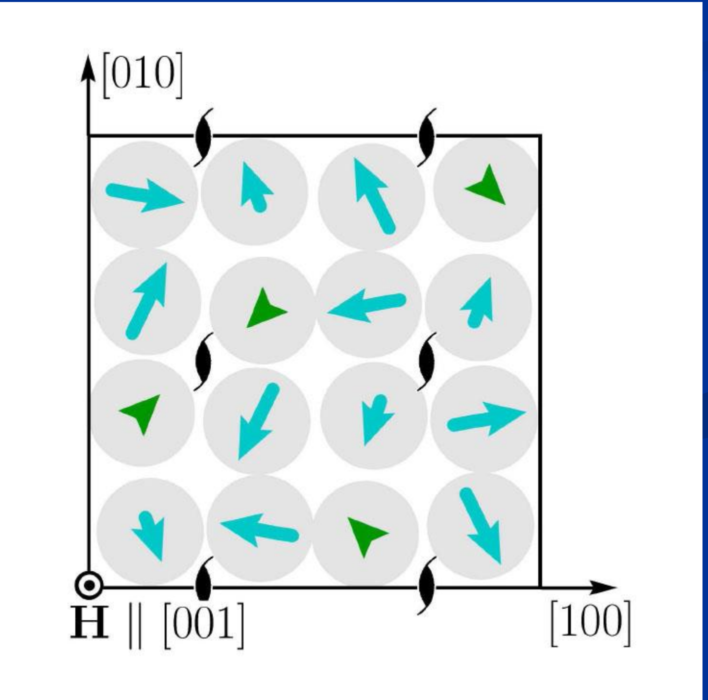
Мультиферроик Cu_2OSeO_3

С учётом скосов спины отдельных атомов можно представить в виде :

$$\mathbf{s}_i = c_i \boldsymbol{\mu} + [\boldsymbol{\rho}_i \times c_i \boldsymbol{\mu}]$$

Здесь **μ** – единичный вектор параллельный намагниченности, а «векторы подкрутки» **ρ** эквивалентных атомов связаны преобразованиями симметрии точечной группы.

Скосы в магнитной структуре, «раскрученной» внешним магнитным полем **H** || [001].



БЛАГОДАРИМ ЗА ВНИМАНИЕ !

Вячеслав Чижиков, chizhikov@crys.ras.ru

Владимир Дмитриенко, dmitrien@crys.ras.ru