



# Анализ магнитных структур методом неприводимых представлений в программном пакете FullProf

Докладчик:  
Коршунов А. Н.

Гатчина, 2017

# Содержание:

1. Взаимодействие нейтрона с веществом
  - Некоторые типы магнетиков
  - Общие представления о магнитном рассеянии
2. Методы описания магнитных структур
3. Метод неприводимых представлений

# Для чего надо знать магнитную структуру?

- Фундаментальные свойства конденсированного состояния. Обменные взаимодействия, связанные с электронной структурой.
- Первая стадия изучения динамики магнитной решетки методом неупругого рассеяния нейтронов.
- Дорога к спиновой электронике

# Для чего надо знать магнитную структуру?

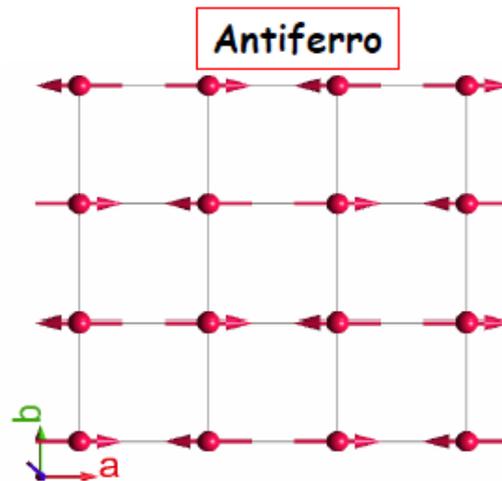
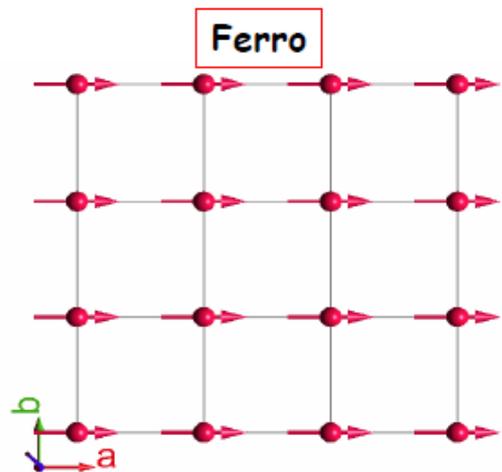
- Фундаментальные свойства конденсированного состояния. Обменные взаимодействия, связанные с электронной структурой.
- Первая стадия изучения динамики магнитной решетки методом неупругого рассеяния нейтронов.
- Дорога к спиновой электронике

---

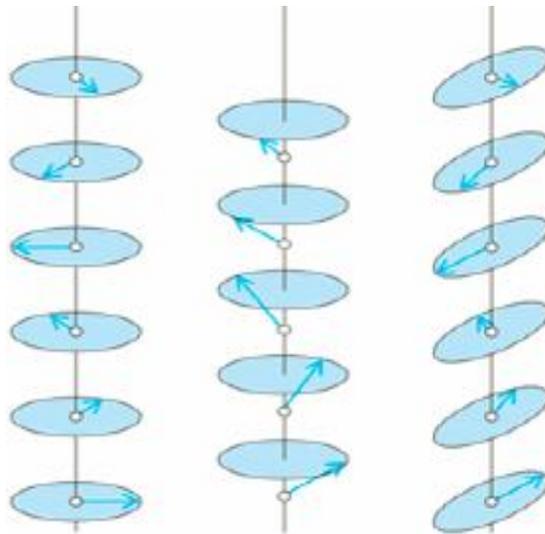
Магнитный момент нейтрона взаимодействует с полем  $\mathbf{V}$ , создаваемым спиновыми и орбитальными моментами электронов.



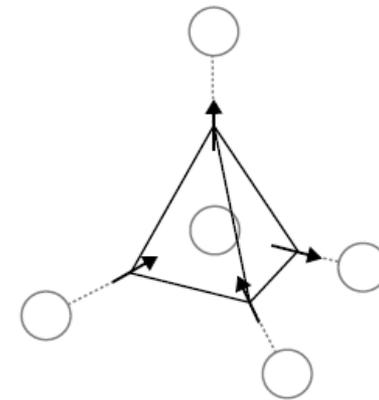
# Некоторые типы магнетиков



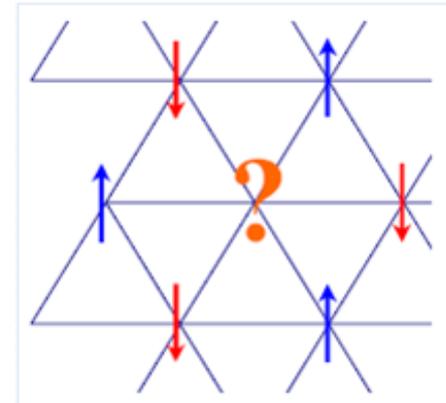
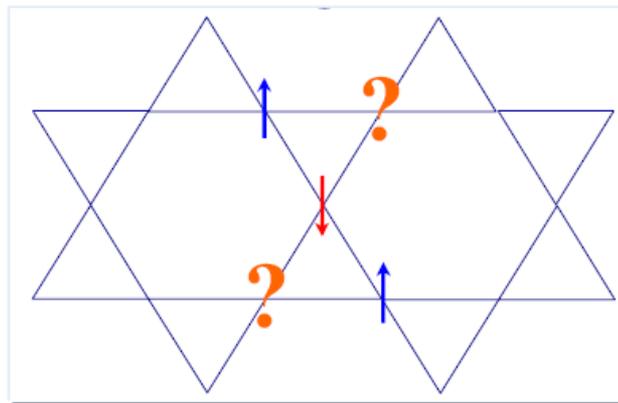
Spiral



Spin ice



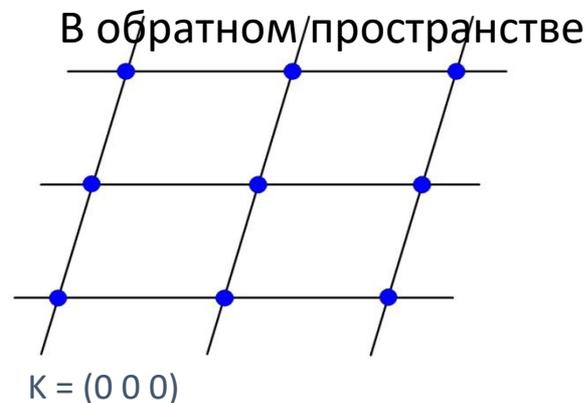
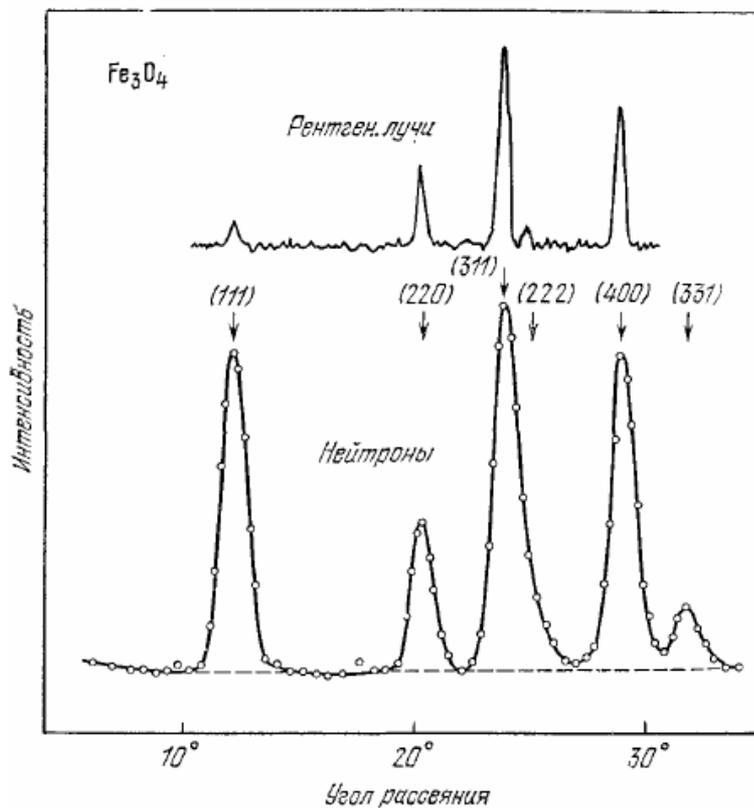
Frustrated



# Общие представления о магнитном рассеянии

## 1. Упругое магнитное рассеяние в ферромагнетике

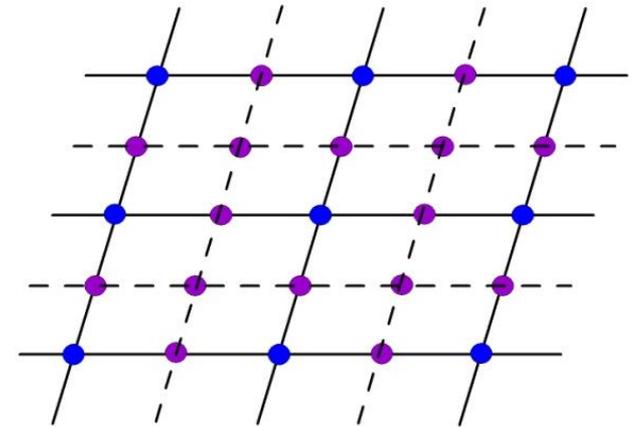
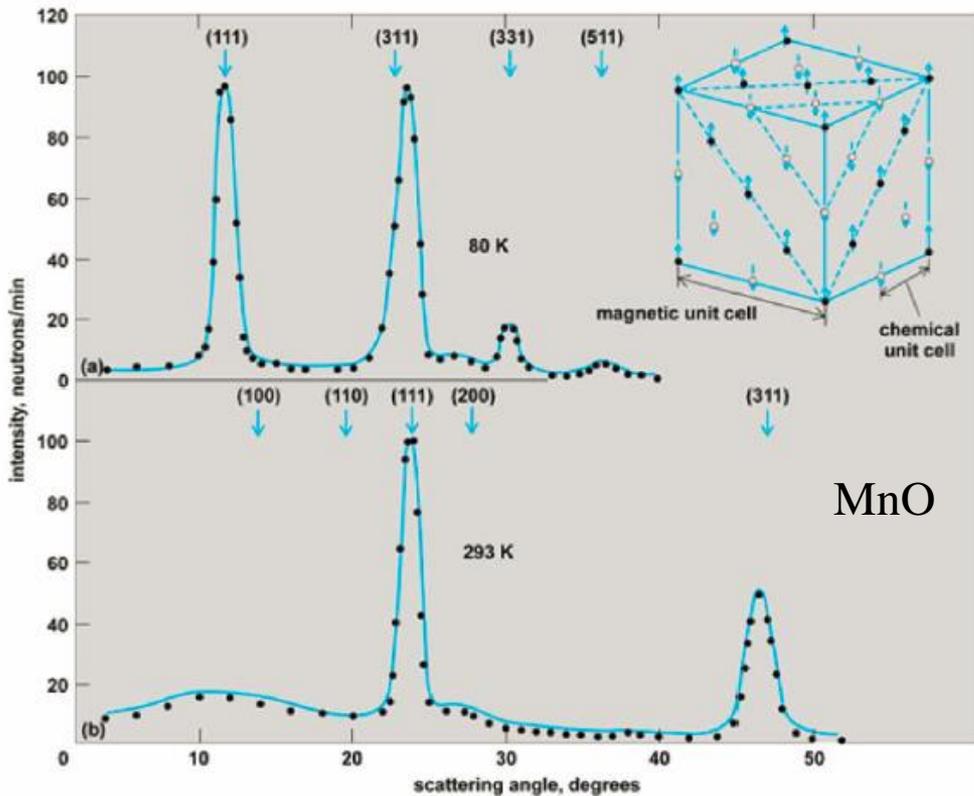
$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_f}\right)_{el} = \left(\frac{\gamma r_0}{2\mu_B}\right)^2 N \frac{(2\pi)^3}{V_0} \sum_{\tau} e^{-2i\mathbf{Q}\cdot\boldsymbol{\tau}} \delta(\mathbf{Q}-\boldsymbol{\tau}) \left| [\hat{\mathbf{t}} \times [\mathbf{F}(\boldsymbol{\tau}) \times \hat{\mathbf{t}}]] \right|^2$$



# Общие представления о магнитном рассеянии

## 2. Упругое магнитное рассеяние в антиферромагнетике

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega_f} \right)_{el} = (\gamma r_0)^2 N_m \frac{(2\pi)^3}{V_{0m}} \langle S^z \rangle^2 \sum_{\tau_m} |F(\tau_m)|^2 e^{-2W} \left( 1 - (\tau_m^z)^2 \right) \sum_d \sigma_d e^{i\tau_m \cdot r_d} \delta(\mathbf{Q} - \tau_m)$$

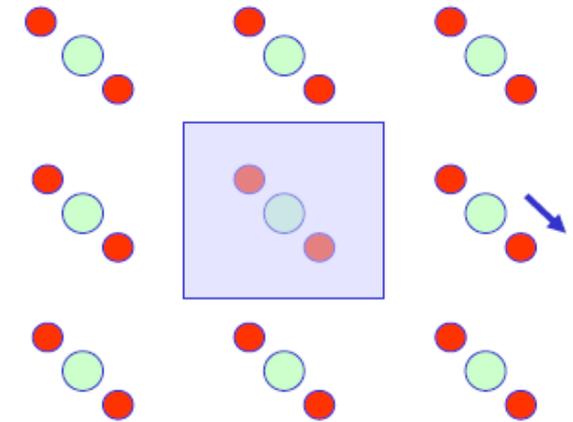
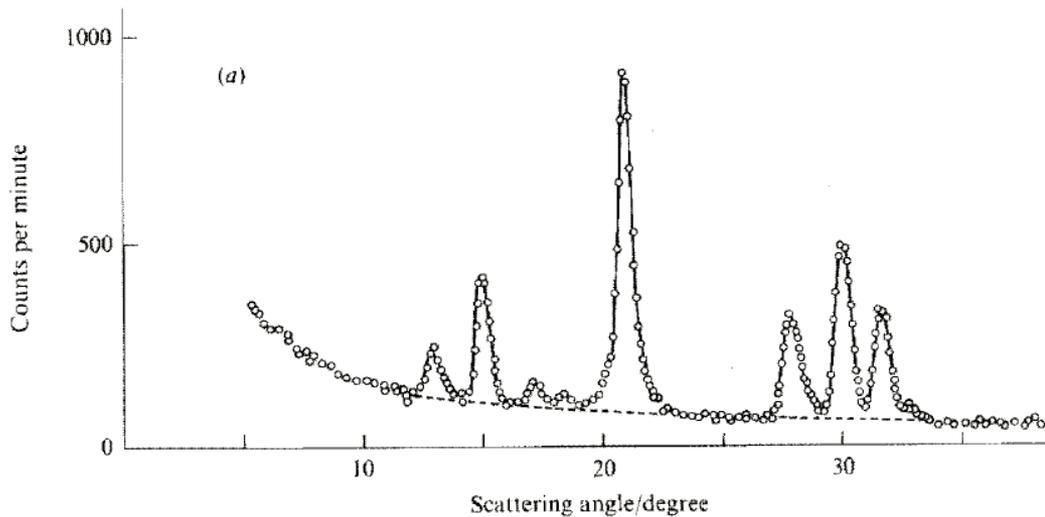


$k = (\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ , AFM  
соразмерная структура

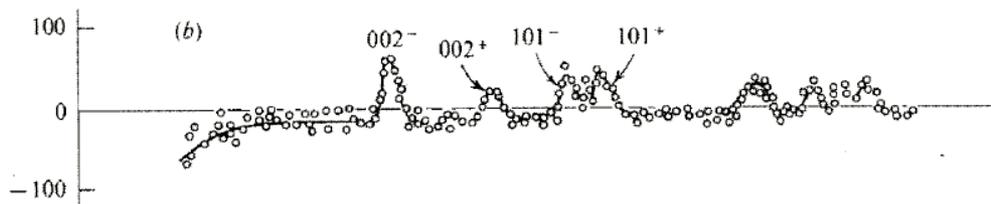
# Общие представления о магнитном рассеянии

## 3. Упругое магнитное рассеяние в спиральной магнетике

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega_f} \right)_{\text{el}} = (\gamma r_0)^2 |F(\mathbf{Q})|^2 e^{-2W} \frac{\langle S \rangle^2}{4} \left( 1 + (\hat{Q}^z)^2 \right) \frac{(2\pi)^3}{V_0} N \sum_{\tau} \left( \delta(\mathbf{Q} + \mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}) + \delta(\mathbf{Q} - \mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}) \right)$$

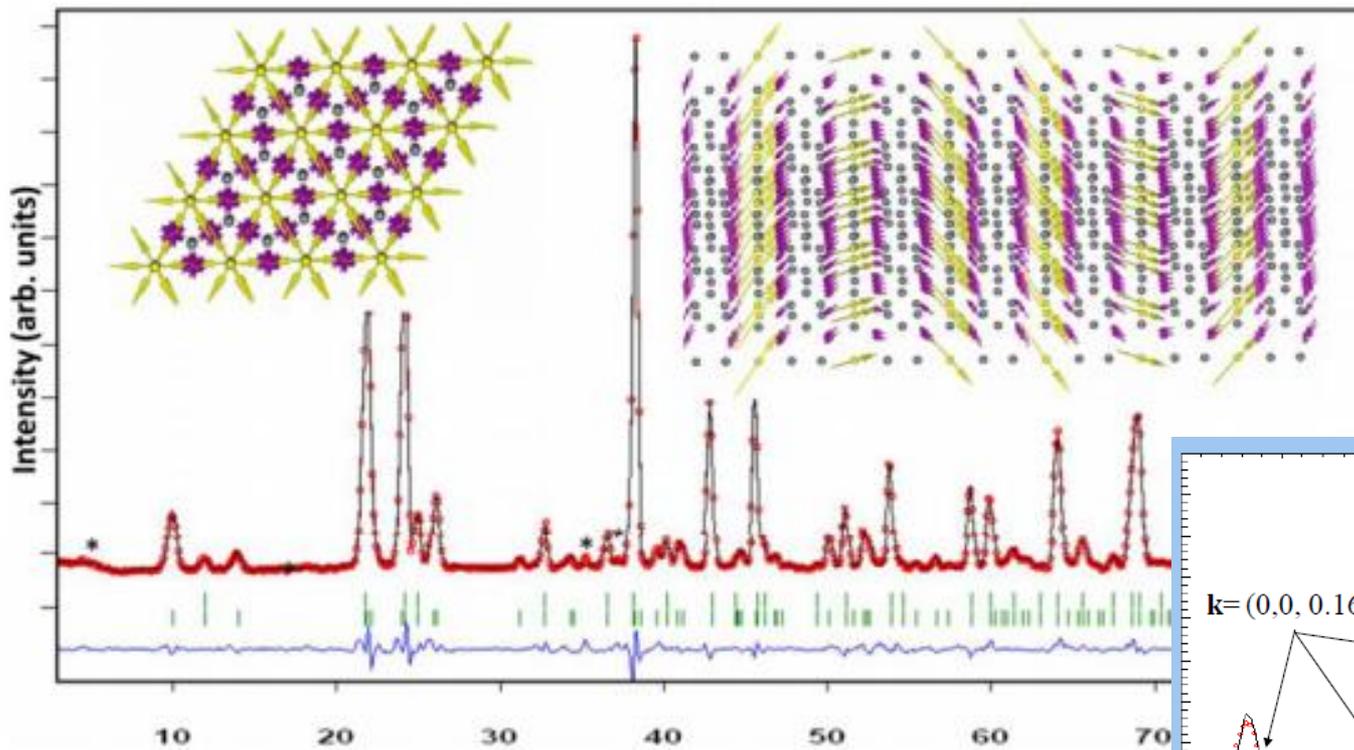


- Magnetic reflections
- Nuclear reflections

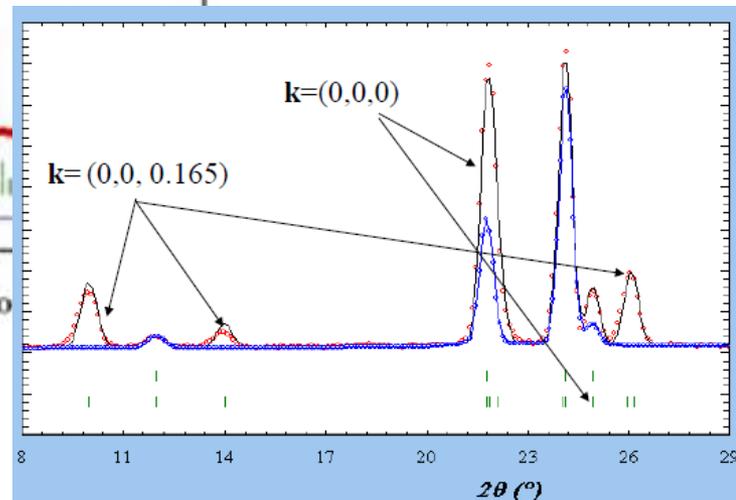


# Общие представления о магнитном рассеянии

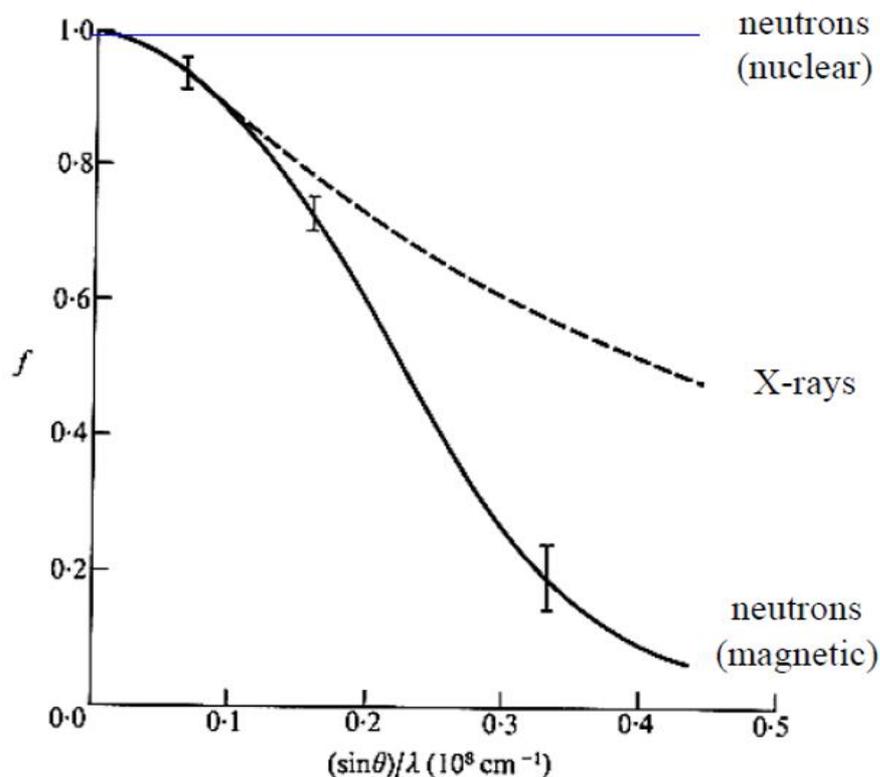
## Magnetic structure of $\text{DyMn}_6\text{Ge}_6$



Conical structure with **two** propagation vectors



# Общие представления о магнитном рассеянии



магнитный формфактор  
очень быстро спадает с  
ростом  $|Q| = \sin\theta/\lambda$



магнитный вклад - только  
в области малых  $2\theta$   
(больших времен TOF)

# Что хотелось бы уметь делать?

## I. Классифицировать магнитные структуры

- однозначно и полно характеризовать конкретную структуру,
- характеризовать все разнообразие структур

## II. Проводить анализ неизвестных магнитных структур

- определять все возможные варианты, совместимые (по симметрии) с атомной структурой

# Анализ (классификация) магнитных структур

## I. Шубниковские группы

1951 А. В. Шубников “Антисимметрия”

1955 Н. В. Белов, Н. Н. Неронова, Т.С.

Смирнова впервые представлен список всех

1651 шубниковских групп

1965 W. Opechowski and R. Guccione “Magnetic Symmetry”

1966 В. А. Копцик “Шубниковские группы”

2001 D. Litvin Таблицы с полным описанием всех Шубниковских групп

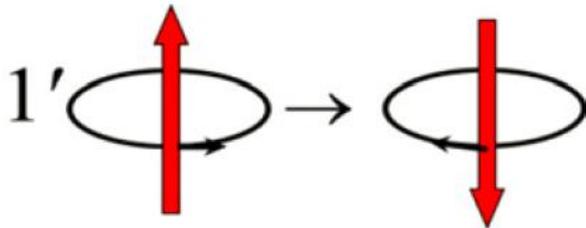
Acta Cryst. **A57**, 729-730

## II. Представления федоровских групп

1937 Л. Д. Ландау “Фазовые переходы 2 рода”

1968 E. F. Bertaut “Representation analysis of magnetic structures”

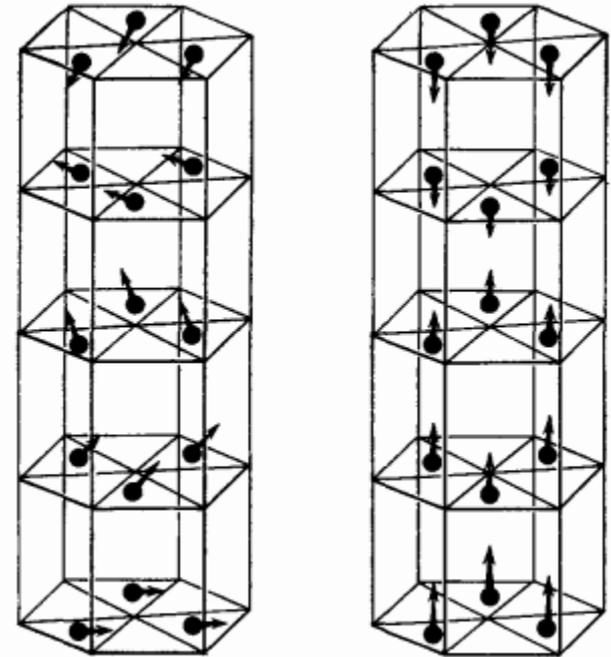
1979 Ю. А. Изюмов и др. “Симметричный анализ магнитных структур” Представлены точные формулы для нахождения базисных функций неприводимых представлений



Магнитная структура рассматривается как результат фазового перехода из парамагнитной в упорядоченную фазу. При этом используется формализм волнового вектора магнитной структуры  $\mathbf{k}$ .

# Описание магнитных структур методом неприводимых представлений

- + Проверенная и отработанная методика
- + Работа с несоразмерными структурами
- + Работа с модулированными структурами



# Магнитная структура как фазовый переход

1. Магнитная структура рассматривается как результат фазового перехода из **парамагнитной** в **упорядоченную** фазу.
2. Представлением пространственной группы симметрии является набор элементов с такой же таблицей умножения, например, набор  $3 \times 3$  матриц, соответствующих ее элементам симметрии.
3. Переход к неприводимому представлению – перевод матриц к блок-диагональному виду.
4. Концепция одного неприводимого представления (Ландау): достаточно одного неприводимого представления для описания магнитной структуры

# Основы поиска магнитной структуры методом неприводимых представлений:

Нахождение симметрии кристаллической решетки  
(пространственная группа)



Установление волнового вектора магнитной структуры



Симметричный анализ магнитной решетки  
(рассмотрение фазового перехода от пространственной группы к магнитному упорядочению)

# Стадии определения магнитной структуры по данным порошковой дифракции

## Шаг

Волновой вектор(a)  
*k\_search*

Симметричный анализ  
*BasIreps*

Решение магнитной структуры  
*FullProf*

## Ввод

*Положения пиков*  
⇐ *магнитных рефлексов*  
*Параметры решетки*

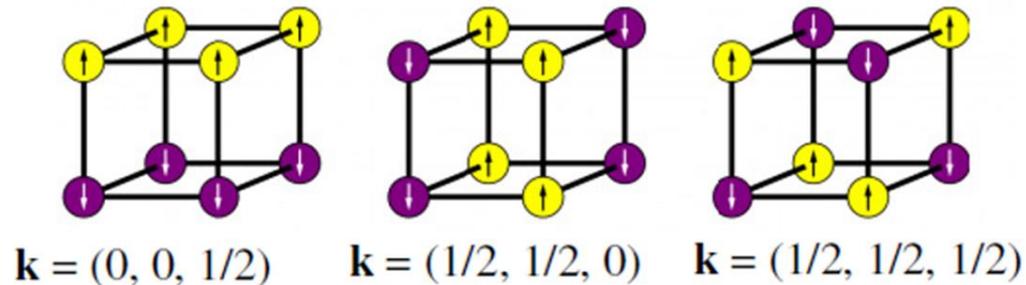
*Вектор распространения*  
⇐ *Пространственная группа*  
*Позиции атомов*

*Интегральные интенсивности*  
⇐ *Атомные компоненты базовых функций*

# Волновой вектор $k$

Информацию о трансляционных свойствах магнитной структуры кристалла удобно выразить с помощью понятия волнового вектора.

- Вектор в обратном пространстве
- Определен в пределах первой зоны Брюллюэна
- Описывает периодичность магнитной структуры (компоненты записаны в единицах, обратных к параметрам ячейки)

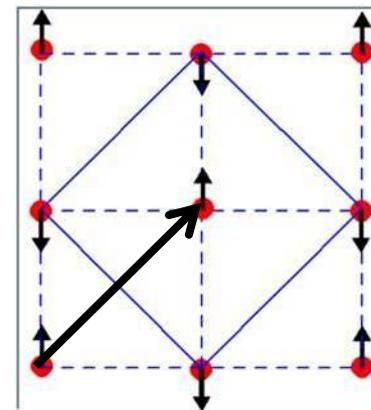
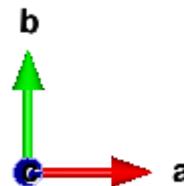
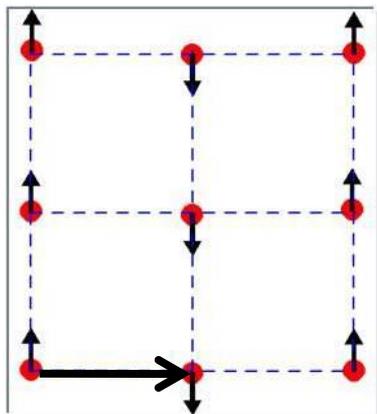


Нет принципиальных требований к компонентам  $k$ : являются они рациональными долями  $a^*$ ,  $b^*$ ,  $c^*$  или нет. Это позволяет использовать формализм волнового вектора и **представленческий анализ** для описания любых модулированных магнитных структур с любой периодичностью.

# Волновой вектор $k$

По определению, волновой вектор  $k$  магнитной структуры связывает спин  $\mu_{in}$   $i$ -го атома в ячейке с номером  $n$  со спином  $\mu_{j0}$   $j$ -го атома в нулевой ячейке посредством соотношения:

$$\mu_{in} = \exp(2\pi i k R_n) \cdot \mu_{j0}$$



$$k = (1/2 \ 0 \ 0)$$

$$A = 2a, B = b, C = c$$

Для  $\mu_0 = (0 \ 1 \ 0)$  и  $R_n = (a \ 0 \ 0)$ :

$$\mu_a = \exp[2\pi i (1/2 \ 0 \ 0) \cdot (a \ 0 \ 0)] \cdot \mu_0 = (-1)^a \mu_0$$

$$\mu_b = \exp[2\pi i (1/2 \ 0 \ 0) \cdot (0 \ b \ 0)] \cdot \mu_0 = \mu_0$$

$$k = (1/2 \ 1/2 \ 0)$$

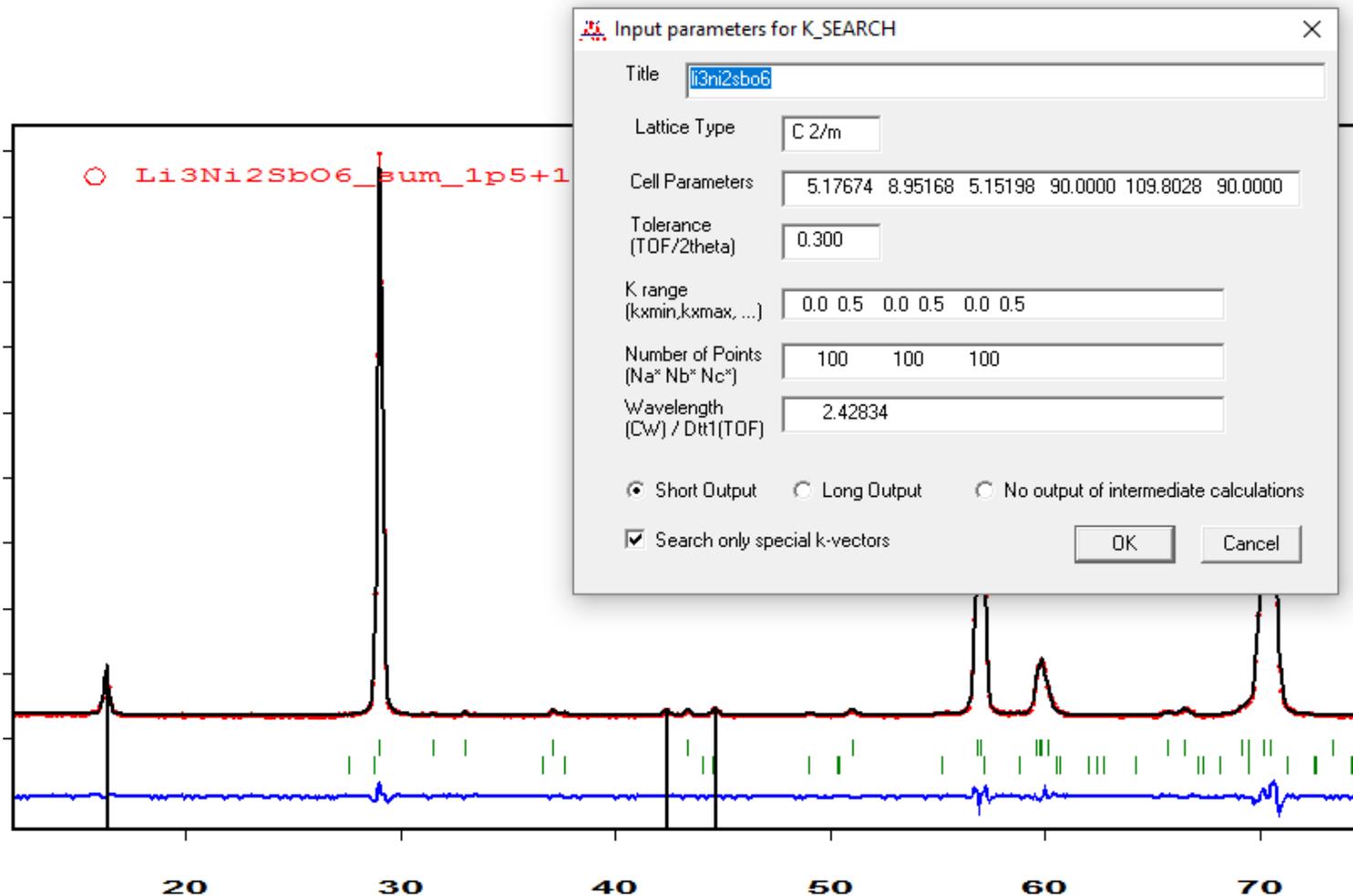
$$A = 2a, B = 2b, C = c$$

Для  $\mu_0 = (0 \ 1 \ 0)$  и  $R_n = (a \ 0 \ 0)$

$$\mu_a = \exp[2\pi i (1/2 \ 1/2 \ 0) \cdot (a \ 0 \ 0)] \cdot \mu_0 = (-1)^a \mu_0$$

$$\mu_b = \exp[2\pi i (1/2 \ 1/2 \ 0) \cdot (0 \ b \ 0)] \cdot \mu_0 = (-1)^b \mu_0$$

# Нахождение волнового вектора k (программа k-search)



Таким образом была учтена трансляционная симметрия. Следующим шагом является учет симметрии элементарной ячейки (т.е. каким образом преобразуется магнитный момент для конкретной позиции атома).

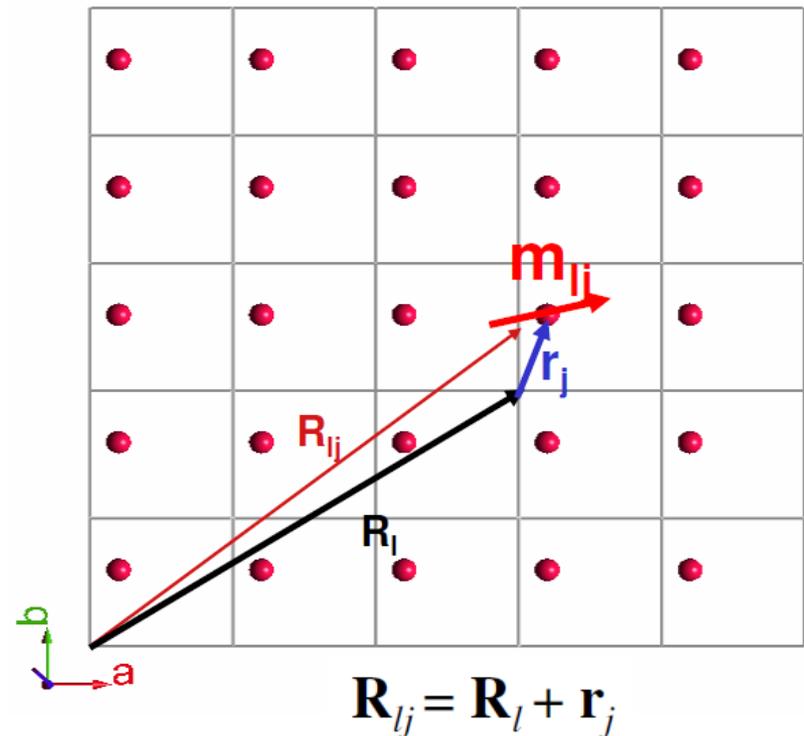
Для этого магнитный момент  $\mathbf{m}_{lj}$  раскладывают в ряд Фурье по базисным векторам неприводимого представления:

$$\mathbf{m}_{lj} = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{\mathbf{k}j} \exp(-2\pi i \mathbf{k} \mathbf{R}_l)$$

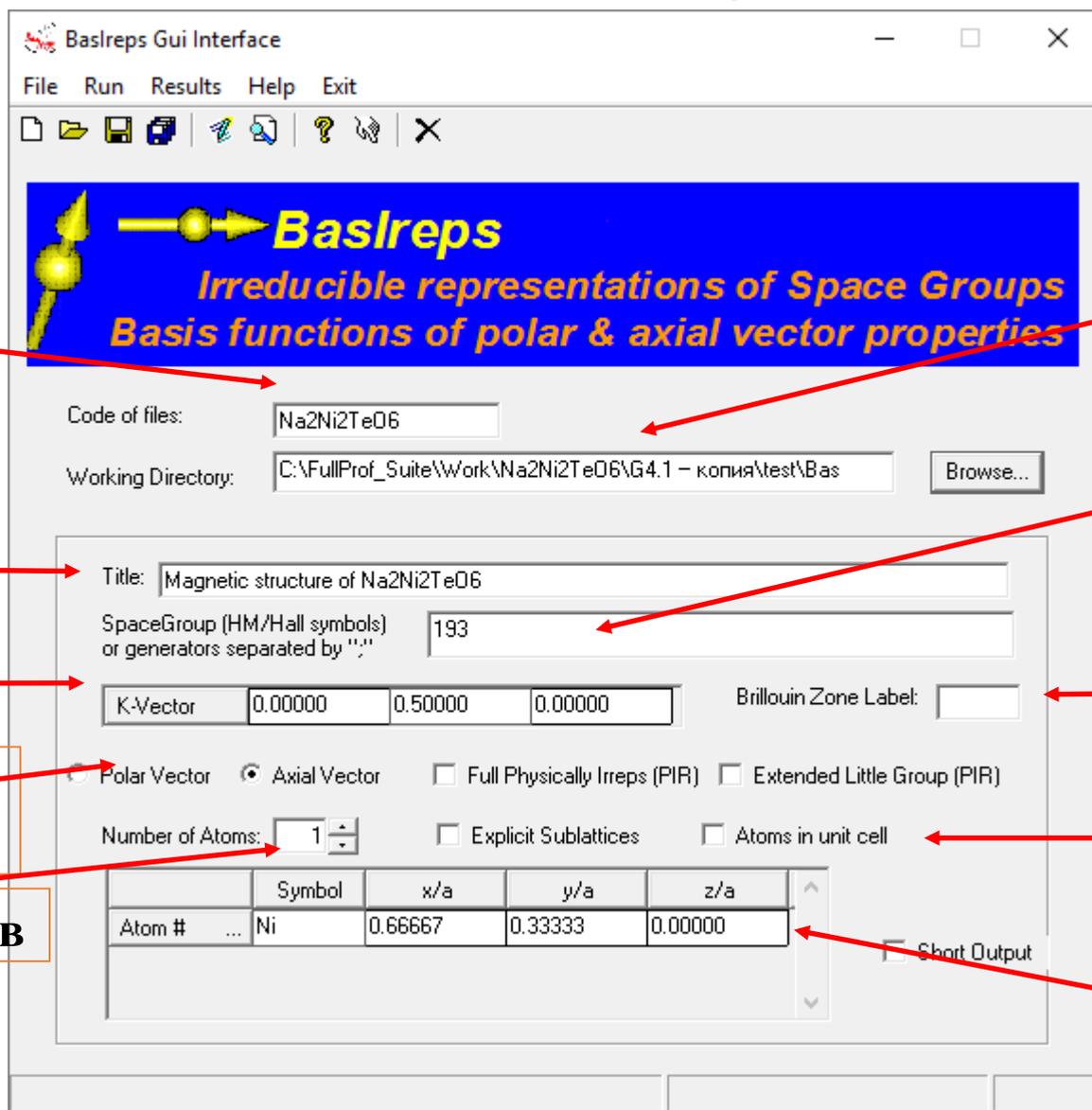
$\mathbf{S}_{\mathbf{k}j}$  – Фурье компоненты (базисные вектора неприводимого представления),  
 $\mathbf{R}_l$  – вектор трансляции,  
 $\mathbf{k}$  – волновой вектор.

Для удовлетворить требованию вещественности магнитного момента, необходимо выполнение условия:

$$\mathbf{S}^*_{\mathbf{k}j} = \mathbf{S}_{-\mathbf{k}j}$$



# GUI для *Basreps*



Код файлов

Название

к-вектор

Аксиальный /полярный

Число атомов

Рабочая директория

Символ пространств. группы

Ярлык зоны Бриллюена

Атомы в элем.ячейке

Позиции атомов

-----  
 Output of BasIREPS for FullProf  
 -----

The group of lines starting with the symbol of sp  
 finishing with the last keyword BASI, may be past

```

      X      Y      Z      for site
-> Ni_1   :  0.6667  0.3333  0.0000  : (x,y,z)
-> Ni_2   : -0.6667 -0.3333  0.5000  : (-x,-y,z+1/2)
-> Ni_3   : -0.6667 -0.3333  0.0000  : (-x,-y,-z)
-> Ni_4   :  0.6667  0.3333  0.5000  : (x,y,-z+1/2)

=> Basis functions of Representation IRrep( 3) of dimer
Representation number   : 3 for Site 1
Number of basis functions: 2
  
```

```

----- Block-of-lines for PCR start just below this line
1 -1                                <--Space group symbol for
! Nsym  Cen  Laue  Ireps  N_Bas
   4     1     1     -1     2
! Real(0)-Imaginary(1) indicator for Ci
  0  0
SYMM x, y, z
BASR  ( 1  0  0 ) ( 0  0  1 )
BASR  ( 0  0  0 ) ( 0  0  0 )
SYMM -x, -y, z+1/2
BASR  -1  0  0  0  0  1
BASR   0  0  0  0  0  0
SYMM -x, -y, -z
BASR   1  0  0  0  0  1
BASR   0  0  0  0  0  0
SYMM x, y, -z+1/2
BASR  -1  0  0  0  0  1
BASR   0  0  0  0  0  0
----- End-of-block of lines for PCR
  
```

**Basireps** обеспечивает базисные вектора (нормальные моды) неприводимых представлений

$$\mathbf{m}_{ljs} = \sum_{\{\mathbf{k}\}} \mathbf{S}_{\mathbf{k}js} \exp\{-2\pi i \mathbf{k} \mathbf{R}_l\}$$

$$\mathbf{S}_{\mathbf{k}js} = \sum_{n\lambda} C_{n\lambda}^v \mathbf{S}_{n\lambda}^{\mathbf{k}v} (js)$$

$C_{n\lambda}^v$  – уточняемые параметры, которые пропорциональны величине магнитного момента

Выход **Basireps**

$$\mathbf{S}_{n\lambda}^{\mathbf{k}v} (js)$$



На этом «подготовительные операции» закончены.  
Далее начинается уточнение дифракционной картины  
методом **проб** и **ошибок**.

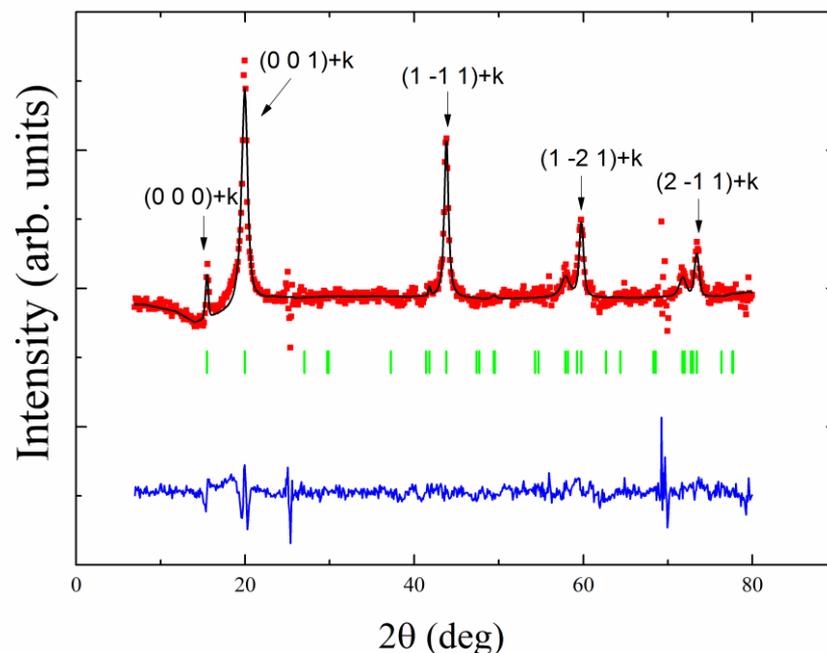
Неоднозначность  
выбора волнового  
вектора



Неоднозначность  
выбора неприводимого  
представления



Неоднозначность  
выбора модели  
магнитной структуры



# Нейтронный дифракционный анализ магнитной структуры (магнитная нейтронография)

Определение с помощью дифракционного эксперимента основных характеристик магнитной структуры кристалла, к которым относятся:

- параметры магнитной элементарной ячейки  $(a, b, c, \alpha, \beta, \gamma)$
- волновой вектор магнитной структуры  $K = (k_x, k_y, k_z)$
- координаты магнитных атомов  $(x_i, y_i, z_i)$
- величина магнитных моментов  $\mu_i$
- направление магнитных моментов  $\mu = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$

**Спасибо за внимание!**