



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

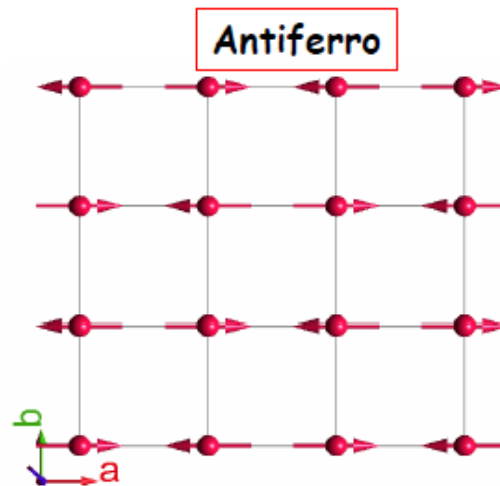
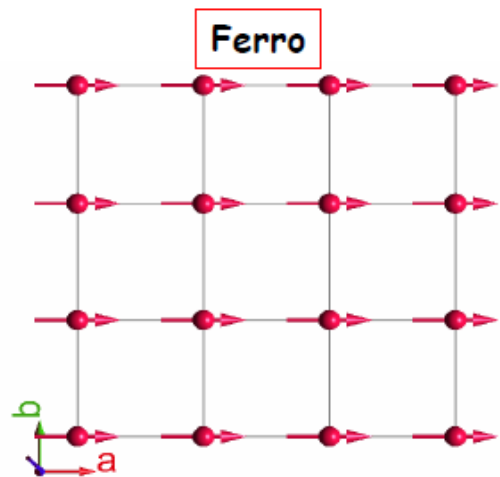
Для чего надо знать магнитную структуру?

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

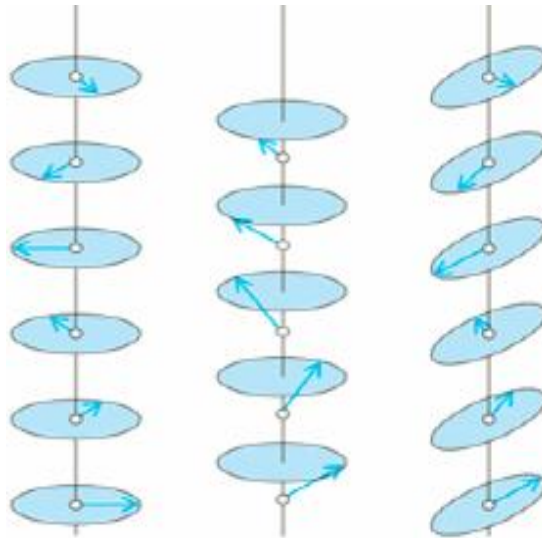
Магнитный момент нейтрона взаимодействует с полем \mathbf{V} , создаваемым спиновыми и орбитальными моментами электронов.



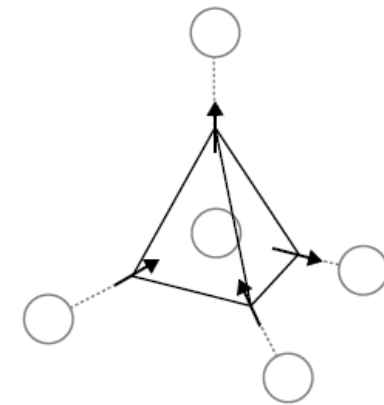
Некоторые типы магнетиков



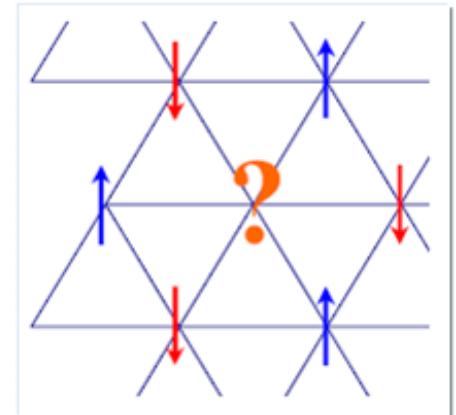
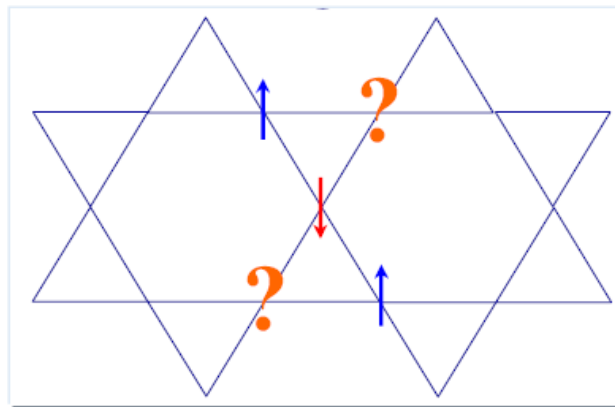
Spiral



Spin ice



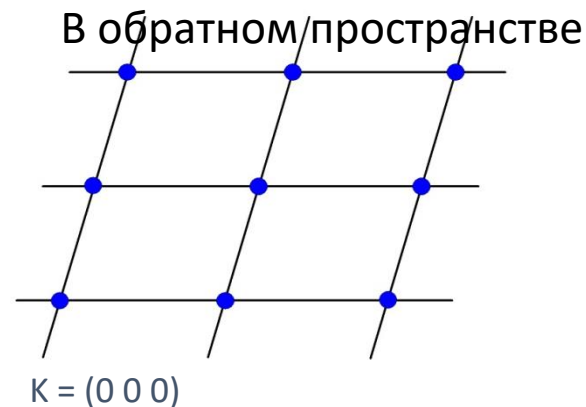
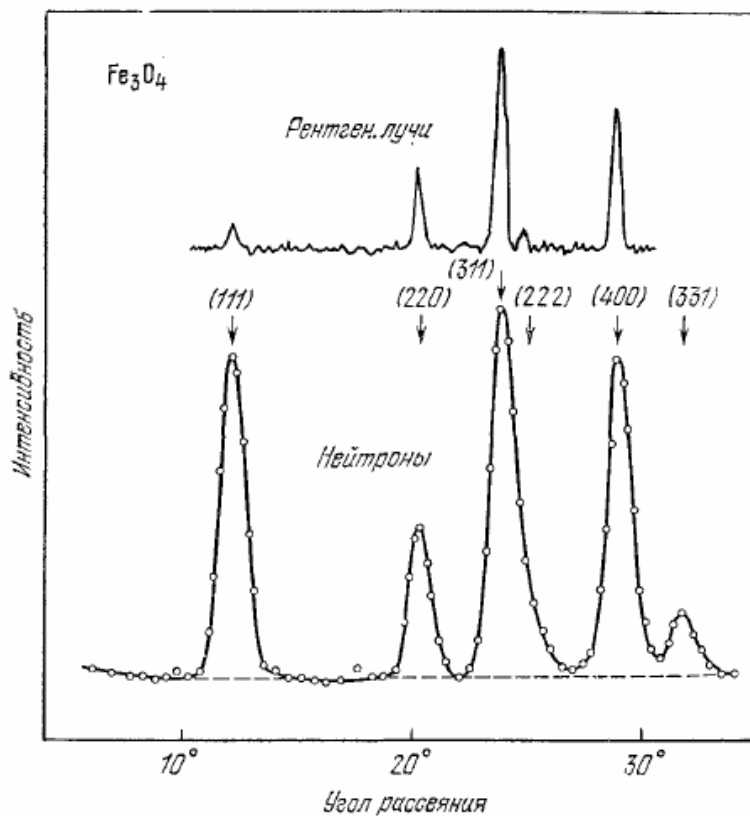
Frustrated



Общие представления о магнитном рассеянии

1. Упругое магнитное рассеяние в ферромагнетике

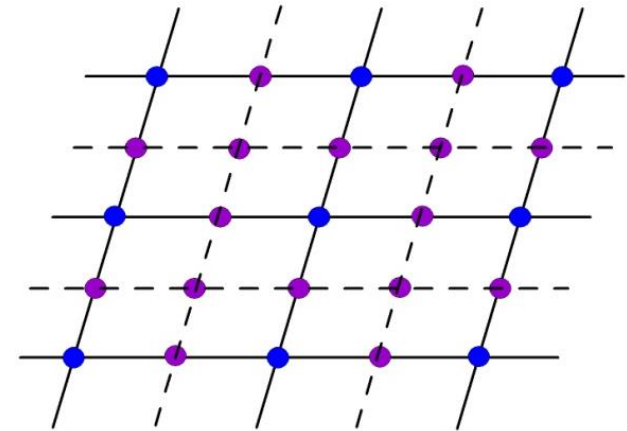
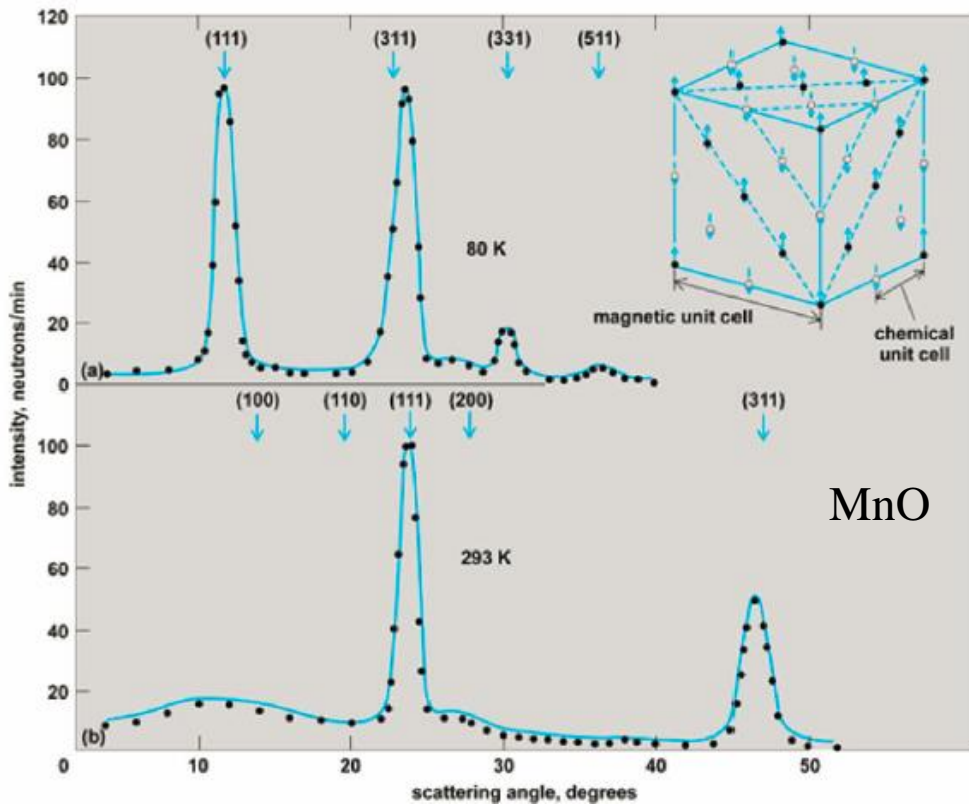
$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_f} \right)_{el} = \left(\frac{\gamma r_0}{2\mu_B} \right)^2 N \frac{(2\pi)^3}{V_0} \sum_{\tau} e^{-2i\mathbf{Q}\cdot\boldsymbol{\tau}} \delta(\mathbf{Q}-\boldsymbol{\tau}) \left| [\hat{\boldsymbol{\tau}} \times [\mathbf{F}(\boldsymbol{\tau}) \times \hat{\boldsymbol{\tau}}]]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



Общие представления о магнитном рассеянии

2. Упругое магнитное рассеяние в антиферромагнетике

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

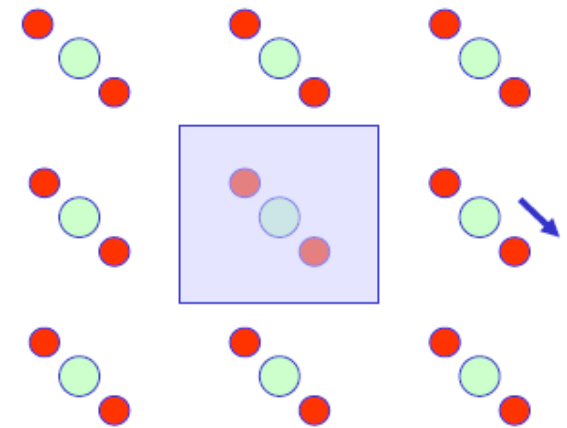
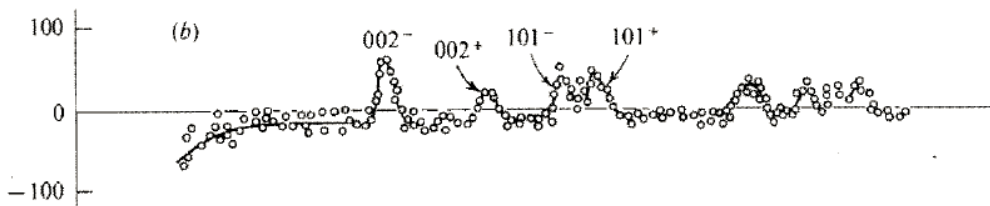
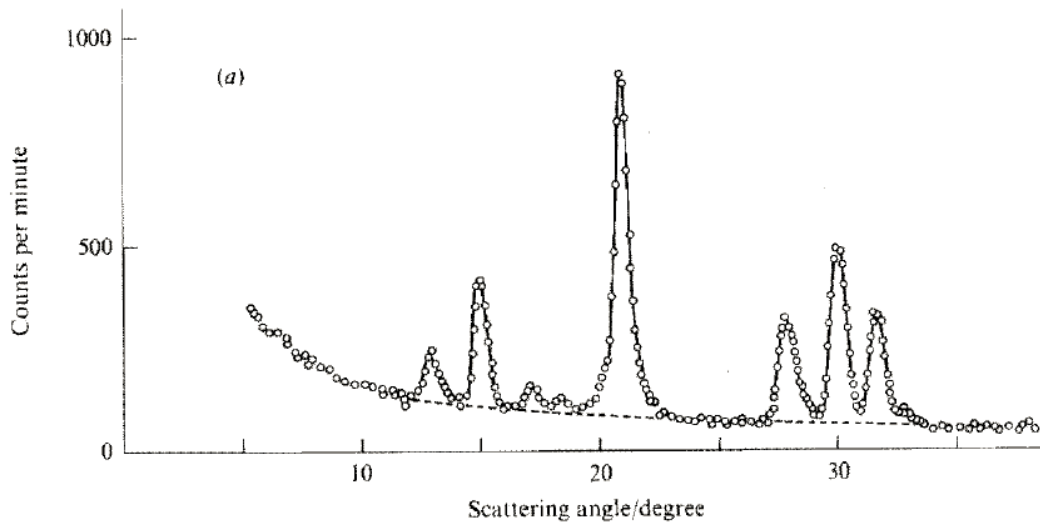


$k = (\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$, AFM
соразмерная структура

Общие представления о магнитном рассеянии

3. Упругое магнитное рассеяние в спиральной магнетике

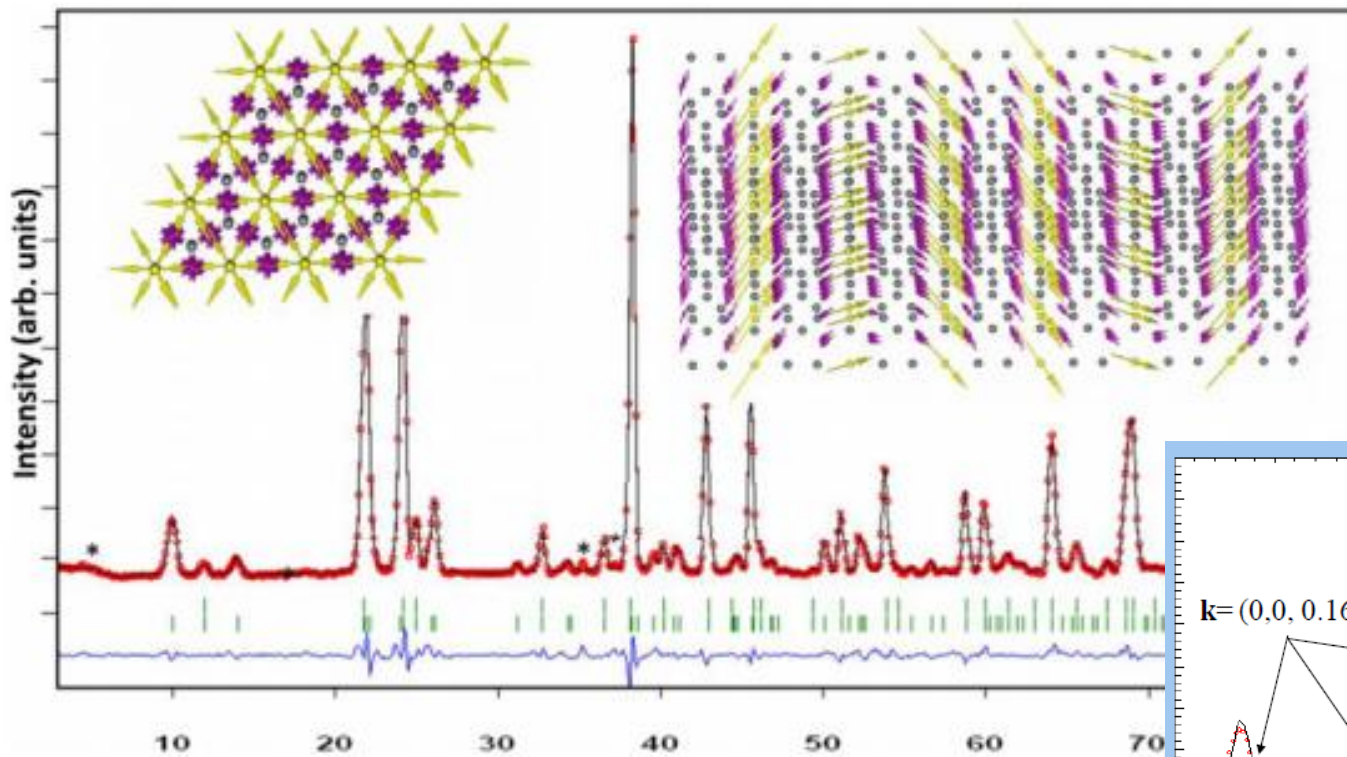
$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_f} \right)_{\text{el}} = (\gamma r_0)^2 |F(\mathbf{Q})|^2 e^{-2W} \frac{\langle S \rangle^2}{4} \left(1 + (\hat{Q}^z)^2 \right) \frac{(2\pi)^3}{V_0} N \sum_{\tau} \left(\delta(\mathbf{Q} + \mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}) + \delta(\mathbf{Q} - \mathbf{q} - \boldsymbol{\tau})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



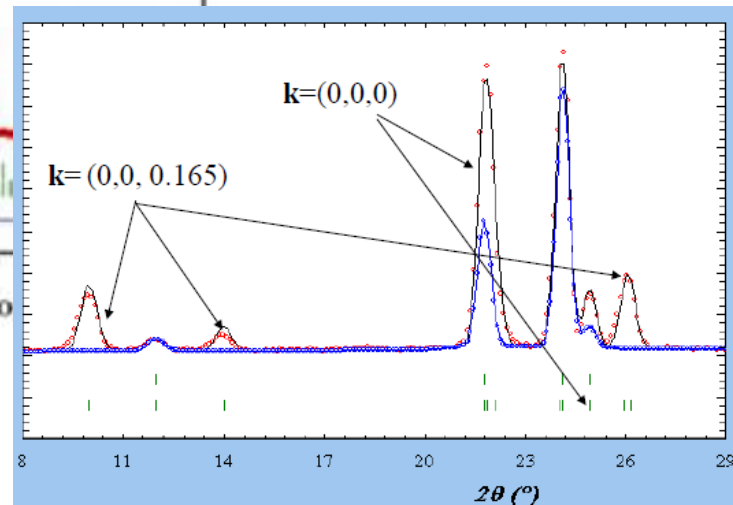
- Magnetic reflections
- Nuclear reflections

Общие представления о магнитном рассеянии

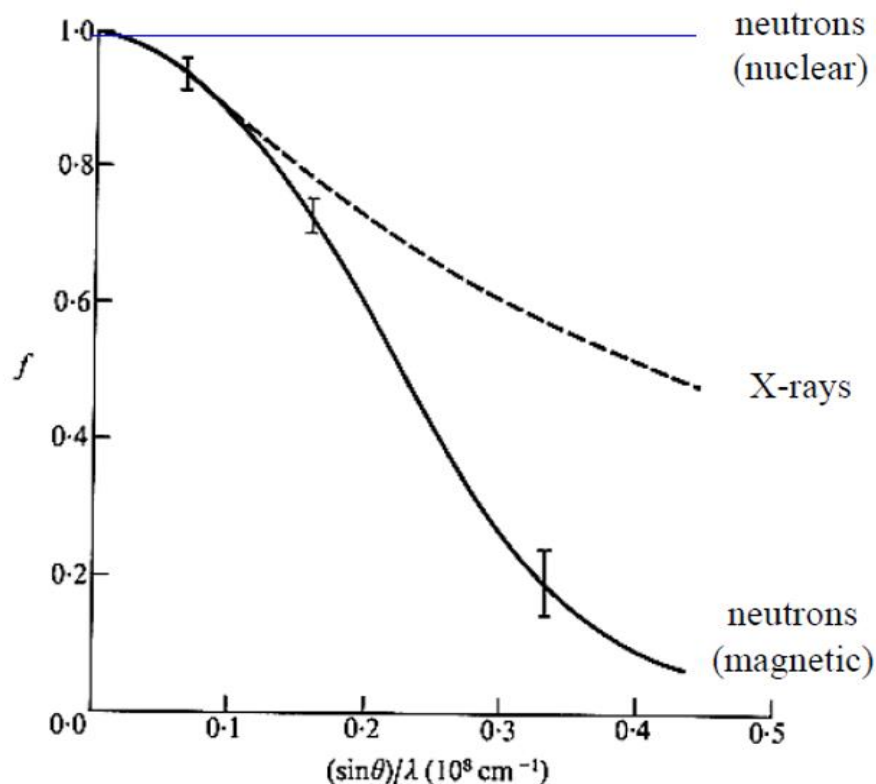
Magnetic structure of DyMn_6Ge_6



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 2θ
(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

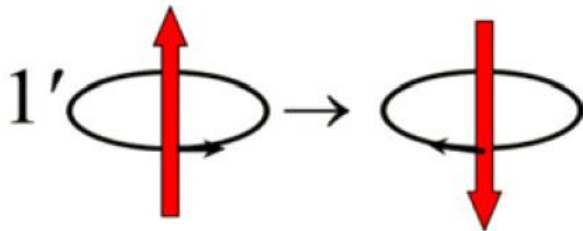
Acta Cryst. **A57**, 729-730

II. Представления федоровских групп

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

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

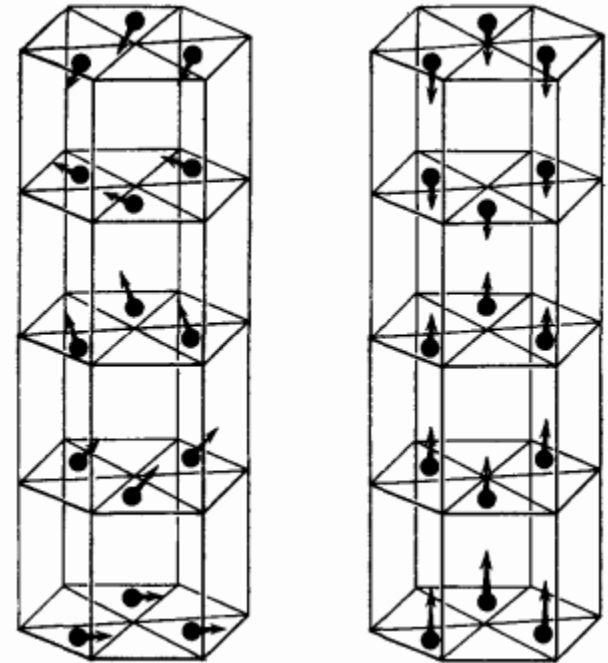
1979 Ю. А. Изюмов и др. “Симметричный анализ магнитных структур” Представлены точные формулы для нахождения базисных функций неприводимых представлений



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 несоизмерными 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 3×3 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

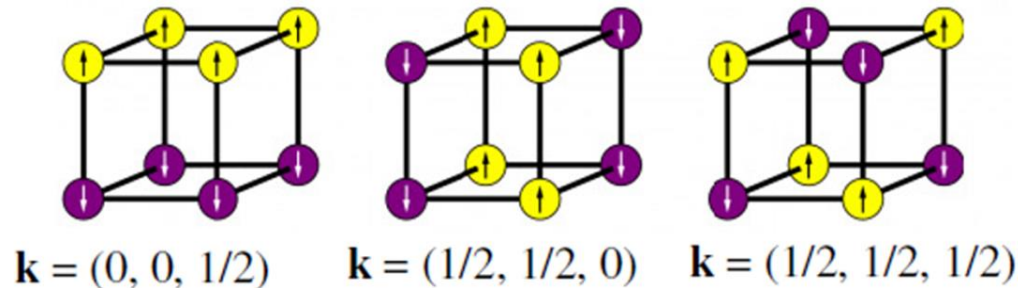
Вектор распространения
⇐ *Пространственная группа*
Позиции атомов

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)

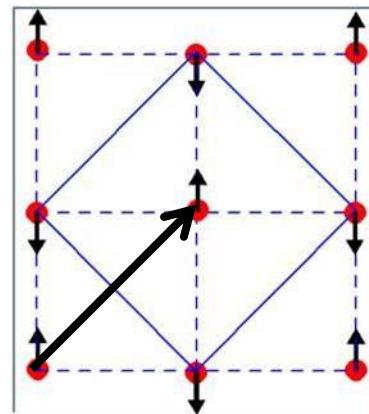
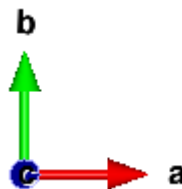
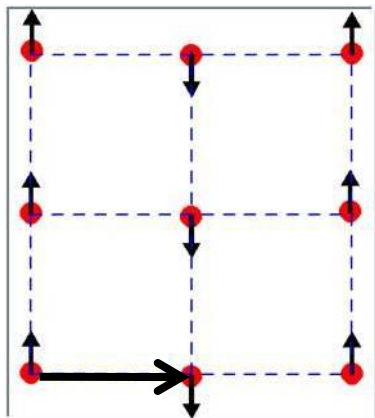


Нет принципиальных требований к компонентам K : являются они рациональными долями a^* , b^* , c^* или нет. Это позволяет использовать формализм волнового вектора и **представленческий анализ** для описания любых модулированных магнитных структур с любой периодичностью.

Волновой вектор k

По определению, волновой вектор k магнитной структуры связывает спин μ_{in} i -го атома в ячейке с номером n со спином μ_{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 $R_n = (a \ 0 \ 0)$:

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

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

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

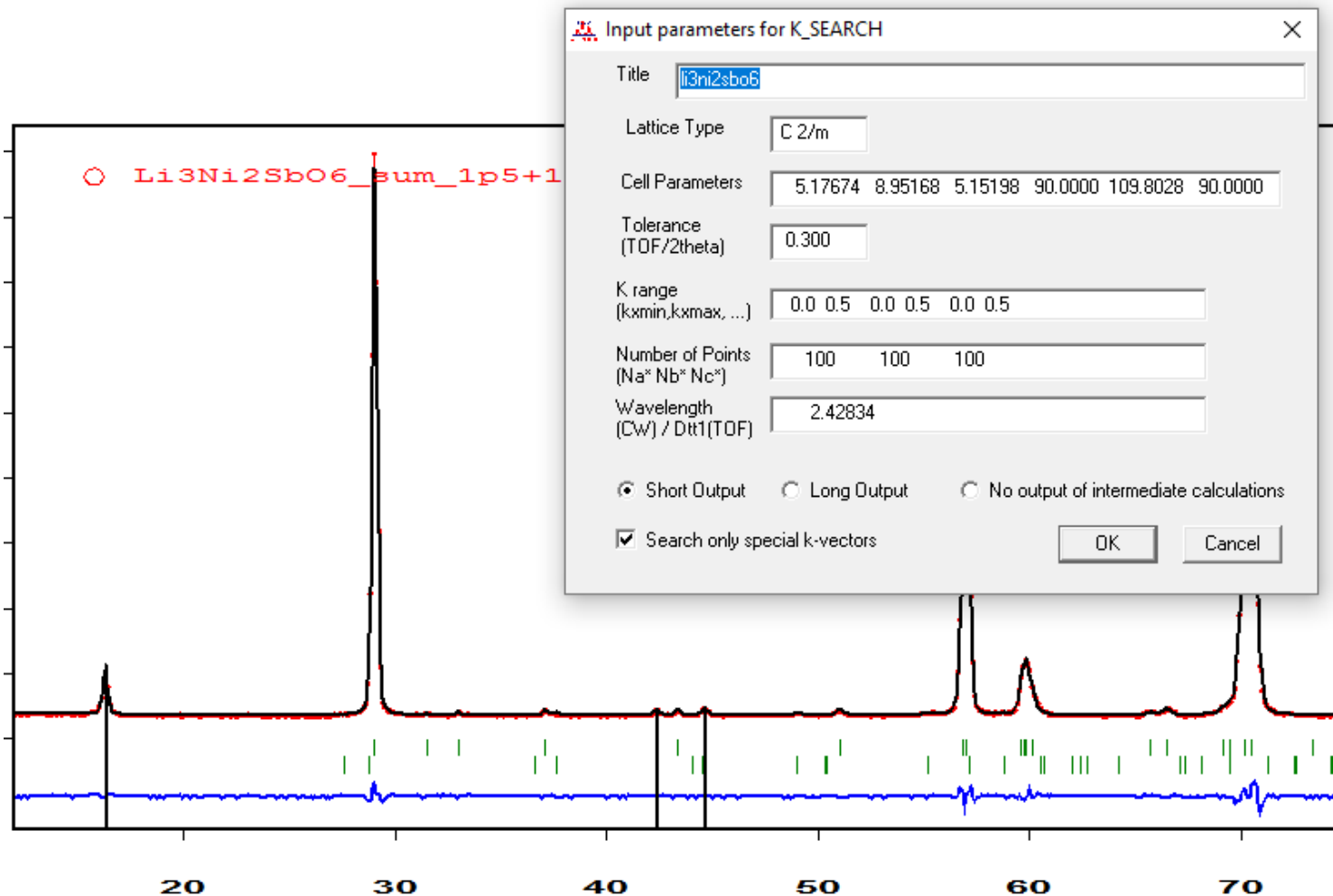
$$A = 2a, B = 2b, C = c$$

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).

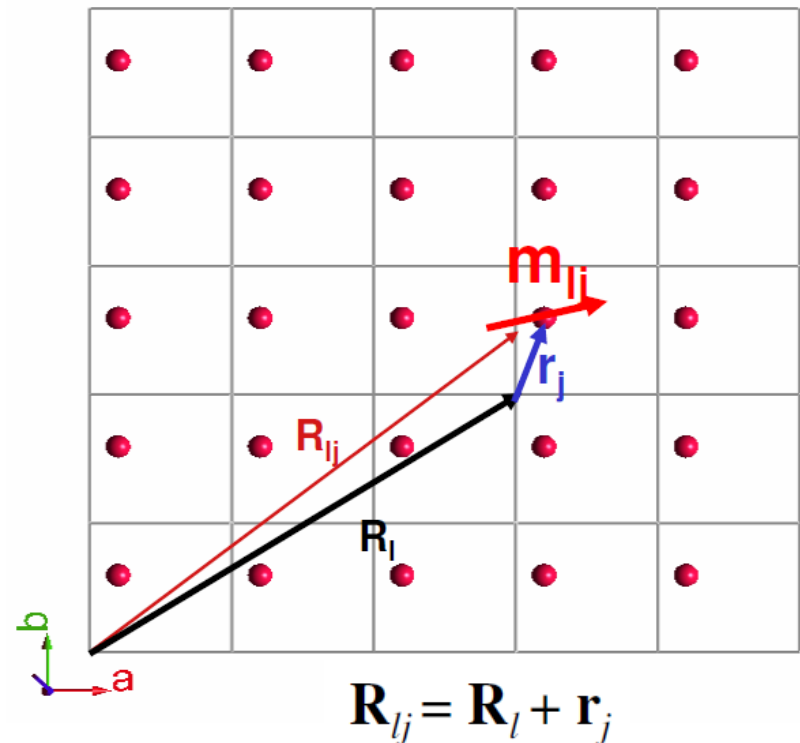
Для этого магнитный момент \mathbf{m}_{lj} раскладывают в ряд Фурье по базисным векторам неприводимого представления:

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

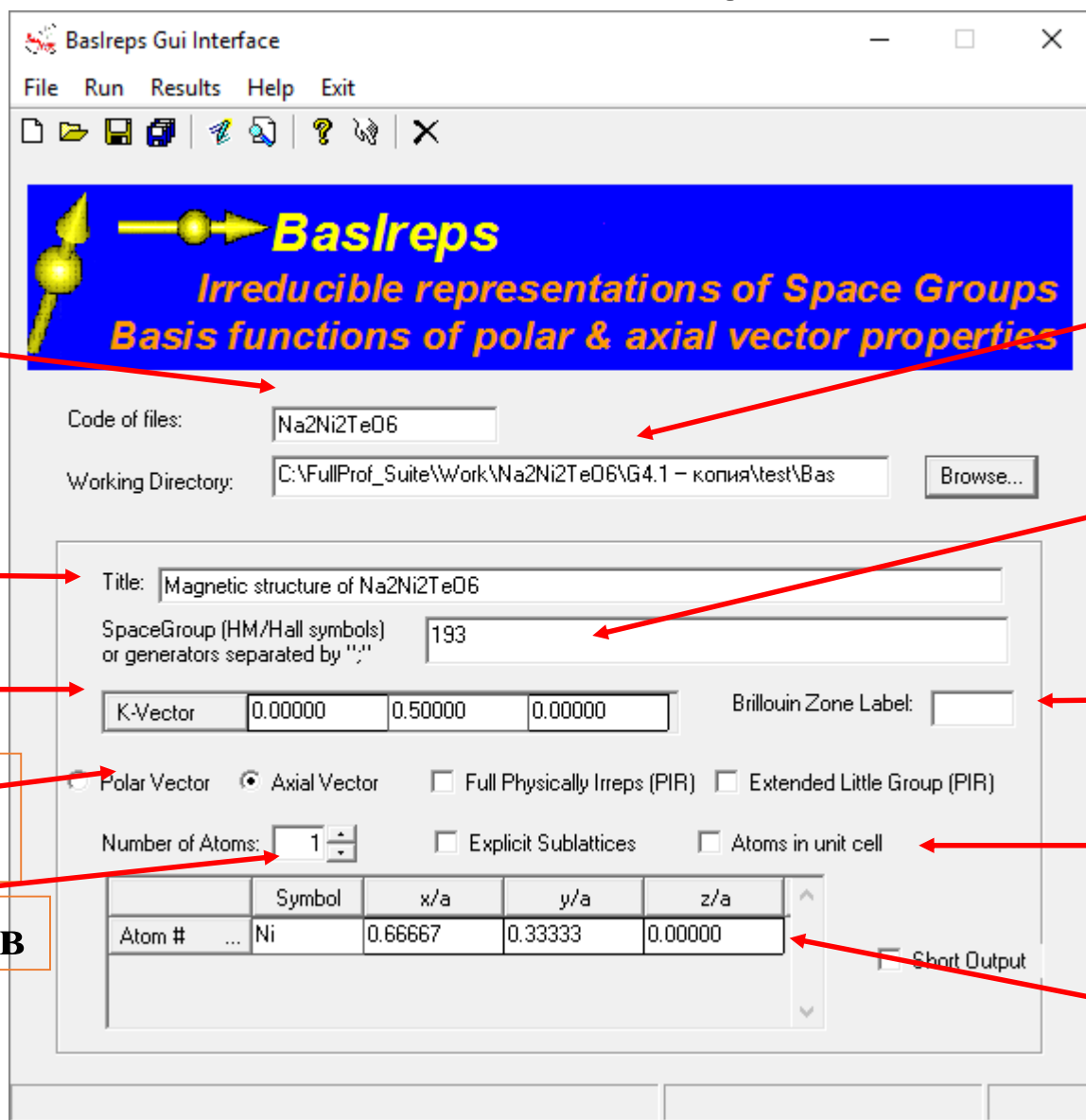
$\mathbf{S}_{\mathbf{k}j}$ – Фурье компоненты (базисные вектора неприводимого представления),
 \mathbf{R}_l – вектор трансляции,
 \mathbf{k} – волновой вектор.

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 Бриллюэна

Атомы в элем.ячейке

Позиции атомов

 Output of BasIREPS for FullProf

The group of lines starting with the symbol of space group
 finishing with the last keyword BASI, may be pasted

```

      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**.

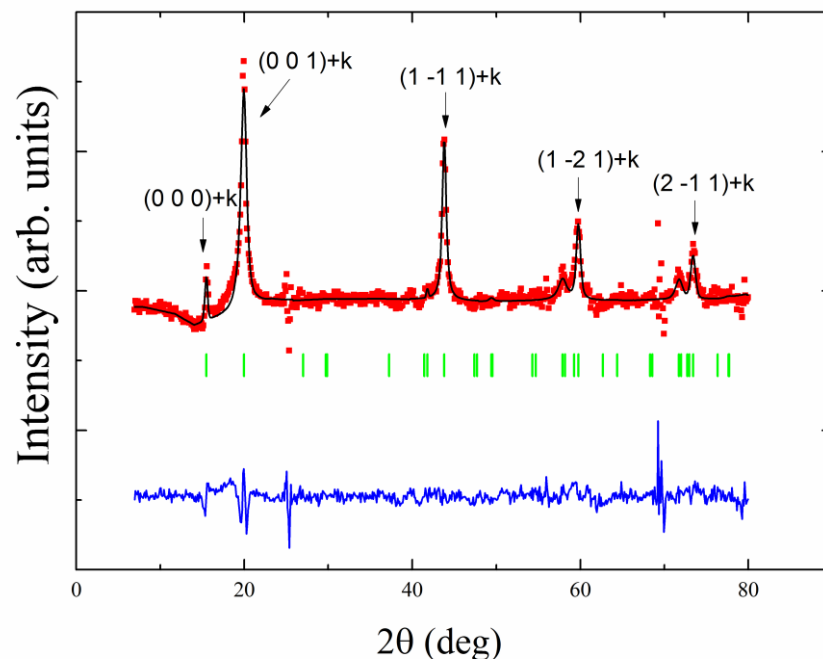
Неоднозначность
выбора волнового
вектора



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 μ_i
- направление магнитных моментов $\mu = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$

Спасибо за внимание!