

УДК 735.29.(32)

ТЕОРЕТИКО-ГРУППОВОЙ АНАЛИЗ ВОЗМОЖНЫХ МАГНИТНЫХ СТРУКТУР $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$

Назаренко И. И.¹

Научный руководитель – к. ф.-м. н. Софронова С. Н.²

¹*Сибирский государственный аэрокосмический университет имени академика М. Ф. Решетнева*

²*Институт физики имени Л. В. Киренского СО РАН*

Современный уровень технического развития требует всё более широкого использования новых магнитных материалов. Ежегодно в мире появляются новые вещества, зачастую под конкретную технологическую задачу. Большинство получаемых материалов, как правило, мало изучены, часто у них определена только структура. Знание одной лишь структуры не даёт полной информации обо всех физических свойствах кристалла, но позволяет провести теоретико-групповой анализ. На основании теоретико-группового анализа можно из соображений симметрии определить, какие типы колебаний присутствуют в кристалле, определить правила отбора для комбинационного рассеяния света и инфракрасного рассеяния. А если в кристалле имеются магнитные атомы, провести анализ возможных магнитных структур.

Кристалл $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$ принадлежащий к семейству котоитов, был выращен в Институте физики СО РАН. Стоит отметить, что данное соединение было синтезировано ранее в 1966 г., однако, не в виде монокристалла, а в виде порошка. $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$ является антиферромагнетиком с температурой Нееля ~ 50 К. Однако до настоящего времени ничего не известно о магнитной структуре этого кристалла. Знание магнитной структуры является важным для установления природы фазового перехода и понимания свойств этого соединения. *Целью исследования* было установление возможной магнитной структуры кристаллов $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$ методом теоретико-группового анализа и на основании имеющихся экспериментальных данных.

Для определения магнитной структуры кристалла необходимо разложить магнитные представления по неприводимым представлениям и для каждого из неприводимых представлений вычислить оператор проектирования, столбцы которого и будут задавать направления магнитных моментов.

Магнитное представление строиться по правилу:

$$T_{\alpha\beta}(\vec{k}, h) = H_{\alpha\beta} \delta(k, F_0[k', h])^* \exp\{i\vec{k}[x(k) - hx(k')]\}^* \delta_0,$$

где $\delta_0 = 1$, если $h \in (h_1 \dots h_{24})$ и $\delta_0 = -1$, если $h \in (h_{25} \dots h_{48})$,

δ - символ Кронекера

$x(k), x(k')$ - координаты атомов

h - элемент симметрии

k - волновой вектор

Определить сколько раз неприводимое представление встречается в приводимом можно по формуле:

$$C_s = H^{-1} \sum \chi(\vec{k}, h) \chi^{(s)}(\vec{k}, h)^*, \text{ где } H - \text{порядок группы.}$$

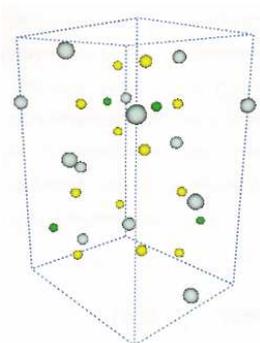


Рисунок 1. Элементарная ячейка

Направление магнитных моментов получаем умножая оператор проектирования на произвольный вектор, оператор проектирования определяем по правилу:

$$P_{\lambda\lambda'}^{(s)}(k) = \frac{f^s}{H} \sum_h \tau_{\lambda\lambda'}^{(s)}(\vec{k}, h) * T(\vec{k}, h),$$

где f^s - размерность неприводимого представления.

Кристалл $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$ принадлежит пространственной группе $Pn\bar{m}n$ (D_{2h}^{12}) с параметрами решетки: $a = 4.4688 \text{ \AA}$, $b = 5.4071 \text{ \AA}$, $c = 8.3155 \text{ \AA}$. В элементарную ячейку входят две формульных единицы, т.е. 22 атома. Магнитными атомами являются только Ni, таких атомов в элементарной ячейке 6. Позиции атомов показаны на рисунке 1 и приведены в таблице 1.

Зависимость намагниченности от температуры представлена на Рисунок 2. Зависимость намагниченности от температуры Пик при температуре $T = 46.3\text{K}$ указывает на наличие при этой температуре фазового перехода. Так же из рисунка видно, что данное соединение является антиферромагнетиком, с упорядочением магнитных моментов вдоль оси c. Следовательно, при температуре $T_N = 46.3 \text{ K}$ происходит фазовый переход антиферромагнетик-парамагнетик. Поле, приложенное к образцу $H_{DC} = 1$ килоэрстед. Как видно из Рисунка 2 магнитные моменты упорядочены антиферромагнитно вдоль оси c.

Таблица 1

ПОЗИЦИИ АТОМОВ

Атом	Цвет	Позиция	X	Y	Z
Ni ₁	●	2a	0	0	-1/2
Ni ₂	●	4f	0	1/2	0.18423
B	●	4g	0.45680	-0.25346	0
O ₁	●	8h	0.29841	-0.20176	0.14004
O ₂	●	4g	0.24657	0.32435	0

Пространственная группа $Pn\bar{m}n$ (D_{2h}^{12}) содержит элементы симметрии: $h_1, h_2, h_3, h_4, h_{25}, h_{26}, h_{27}, h_{28}$, где элементы h_2 и h_3 - винтовые оси, а h_{26}, h_{27}, h_{28} - плоскости скользящего отражения. Для каждого элемента симметрии было построено магнитное представление для различных точек зоны Бриллюэна. Затем для магнитных представлений вычислено разложение приводимых представлений по неприводимым представлениям. Проведен анализ возможных магнитных структур для $k_{19}=0$.

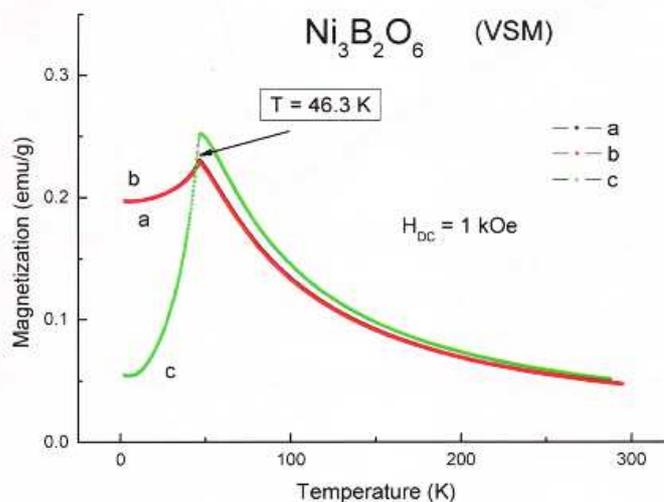


Рисунок 2. Зависимость намагниченности от температуры

Разложения по неприводимым представлениям для $k = 0$ и $k \neq 0$:

$$T(k_{19} = 0) = 2\tau_1 + \tau_2 + 4\tau_3 + 2\tau_4 + 4\tau_5 + 2\tau_6 + 2\tau_7 + \tau_8$$

$$T(k_{20} = \frac{1}{2} b_1) = 4\tau_1 + 5\tau_2$$

$$T(k_{21} = \frac{1}{2} b_2) = 5\tau_1 + 4\tau_2$$

$$T(k_{22} = \frac{1}{2} b_3) = 3\tau_1 + 6\tau_2$$

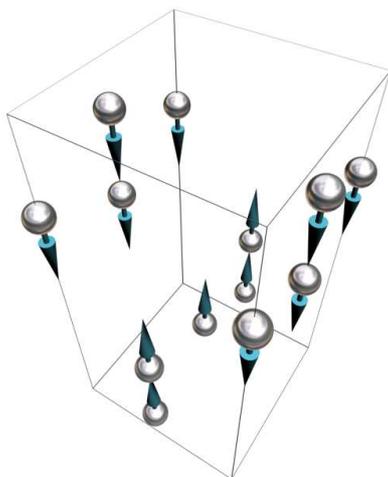


Рисунок 3. Магнитная структура соответствующая представлению τ_1 .

Следовательно, если фазовый переход связан с $k=0$, то он будет происходить по неприводимому представлению τ_1 .

В результате проведенного исследования освоено проведение теоретико-группового анализа, выполнен теоретико-групповой анализ возможной магнитной структуры кристалла $Ni_3V_2O_6$, построена возможная магнитная структура кристалла.

В Таблице 2 приведены направления магнитных моментов для различных неприводимых представлений для $k_{19} = 0$ (в этом случае магнитная ячейка совпадает с кристаллографической).

По теории Ландау фазовые переходы, как правило, связаны с одним неприводимым представлением, поэтому в качестве возможных мы рассматривали магнитные структуры, связанные с общими для обеих подрешеток представлениями: $\tau_1, \tau_3, \tau_5, \tau_7$. Как видно из таблицы 2, единственной антиферромагнитной структурой будет структура, соответствующая представлению τ_1 . Значит, по неприводимым представлениям τ_3 и τ_5 фазовый переход осуществляться не может, так же как и по τ_7 .

Таблица 2

НАПРАВЛЕНИЯ МАГНИТНЫХ МОМЕНТОВ НА ИОНАХ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ НЕПРИВОДИМЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ ТОЧЕК ЗОНЫ БРИЛЛУЭНА

Ион	A_1			A_2			A_3			A_4			A_5			A_6		
Координаты иона	$(0\ 0\ -1/4)$			$(1/2\ 1/2\ 1/4)$			$(0\ 1/2\ x-1/4)$			$(0\ 1/2\ -x-1/4)$			$(1/2\ 0\ 1/4-x)$			$(1/2\ 0\ 1/4+x)$		
Неприводимые представления																		
τ_1	0	0	-z	0	0	z	0	0	z	0	0	z	0	0	-z	0	0	-z
τ_2	0	0	0	0	0	0	0	0	z	0	0	-z	0	0	-z	0	0	z
τ_3	x	y	0	x	-y	0	x	y	0	x	y	0	x	-y	0	x	-y	0
τ_4	0	0	0	0	0	0	x	y	0	-x	-y	0	x	-y	0	-x	y	0
τ_5	x	y	0	x	y	0	x	y	0	x	y	0	-x	y	0	-x	y	0
τ_6	0	0	0	0	0	0	x	y	0	-x	-y	0	-x	y	0	x	-y	0
τ_7	0	0	z	0	0	z	0	0	z	0	0	z	0	0	z	0	0	z
τ_8	0	0	0	0	0	0	0	0	z	0	0	-z	0	0	z	0	0	-z