



# Смещение атомов в кристаллической решётке MnGe под воздействием температуры и давления

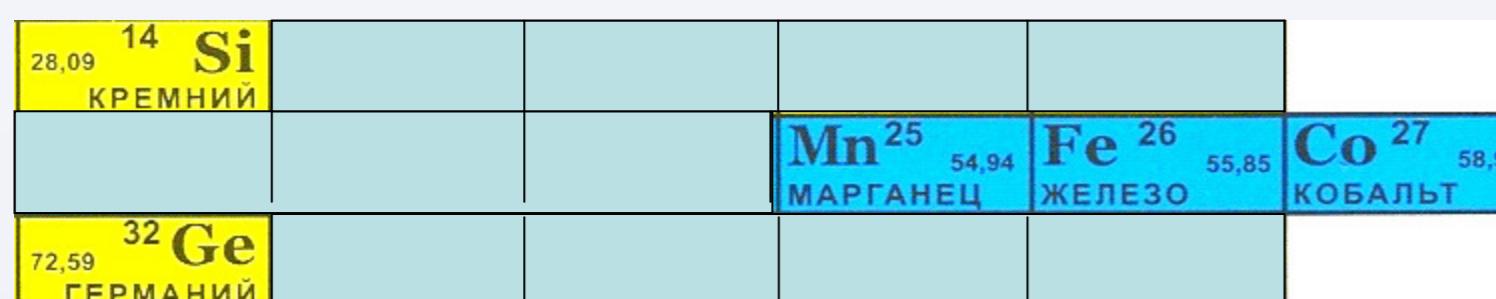
Г. А. Вальковский<sup>1</sup>, Е. Г. Яшина<sup>1,2</sup>, А. В. Цвященко<sup>3</sup>, С. В. Григорьев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский Государственный Университет

<sup>2</sup> Петербургский Институт Ядерной Физики НИЦ КИ, Гатчина

<sup>3</sup> Институт физики высоких давлений, Троицк

## Введение



Состоят из близких элементов в таблице Менделеева

**MNSi** **FEGe**

**fesi**

**COSi** **CoGe**

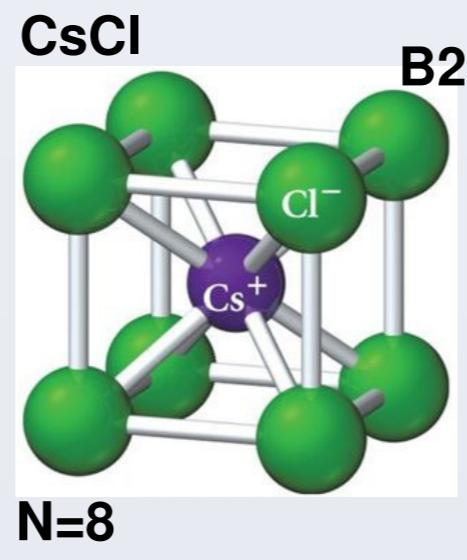
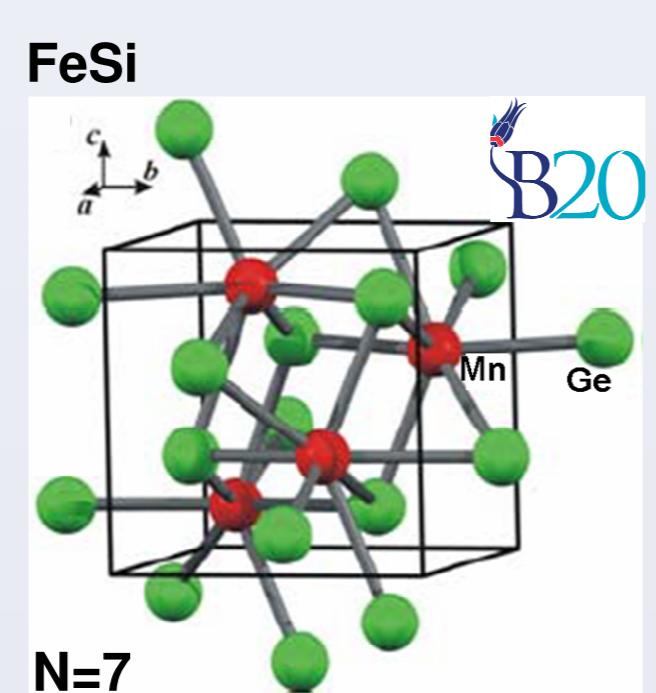
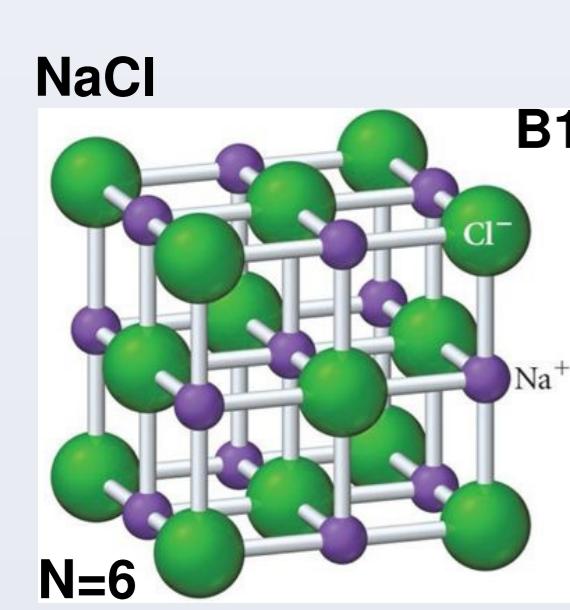
геликоидальные - ферромагнитные, металлы

парамагнетик, узкощелевой полупроводник - металл (с температурой)

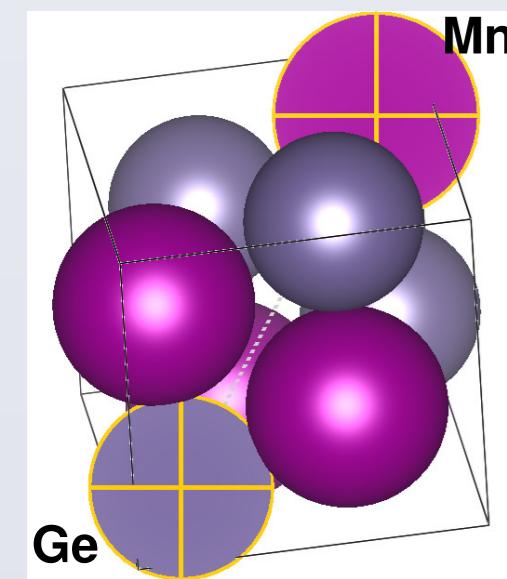
диамагнитные, полуметаллы

геликоидальный - ферромагнитный, металл - полуметалл (под давлением)

Но физические свойства разные. Почему?



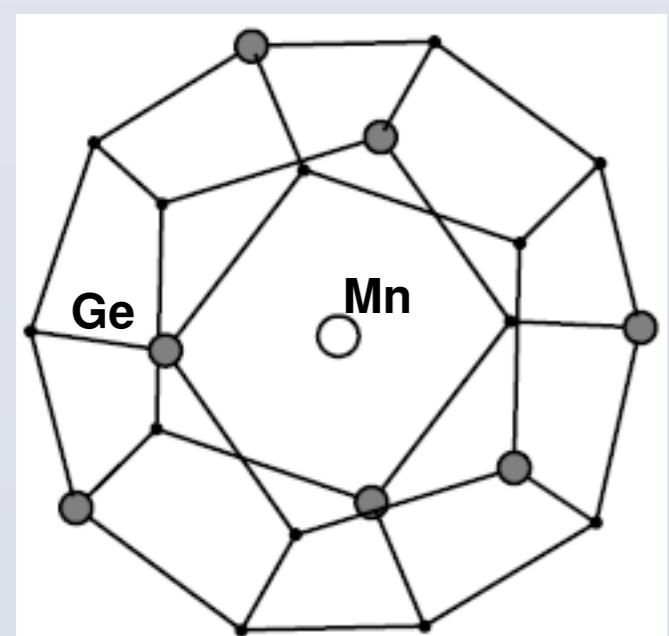
Кристаллическая структура B20 кубическая, но низкосимметричная



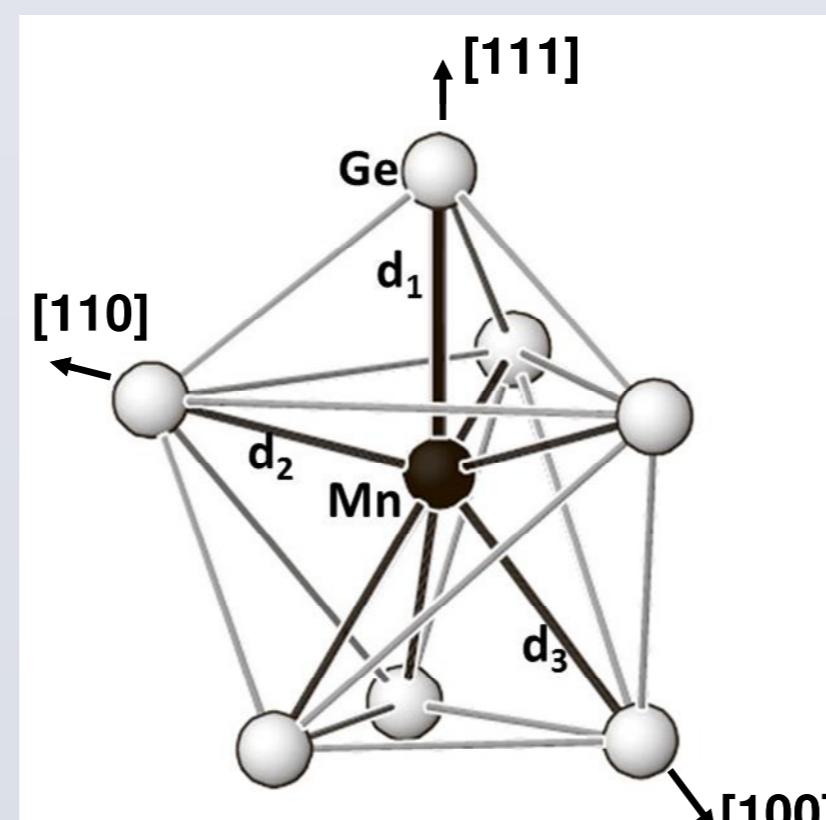
В «идеальной B20» координаты обоих атомов  $U_{Ge} = 1 - U_{Mn} = 1/4\tau = 0.15451$ ,

$$\tau = \frac{(1 + \sqrt{5})}{2}$$

Для MnGe  $U_{Ge} \approx 0.156$ ,  $1 - U_{Mn} \approx 0.137$



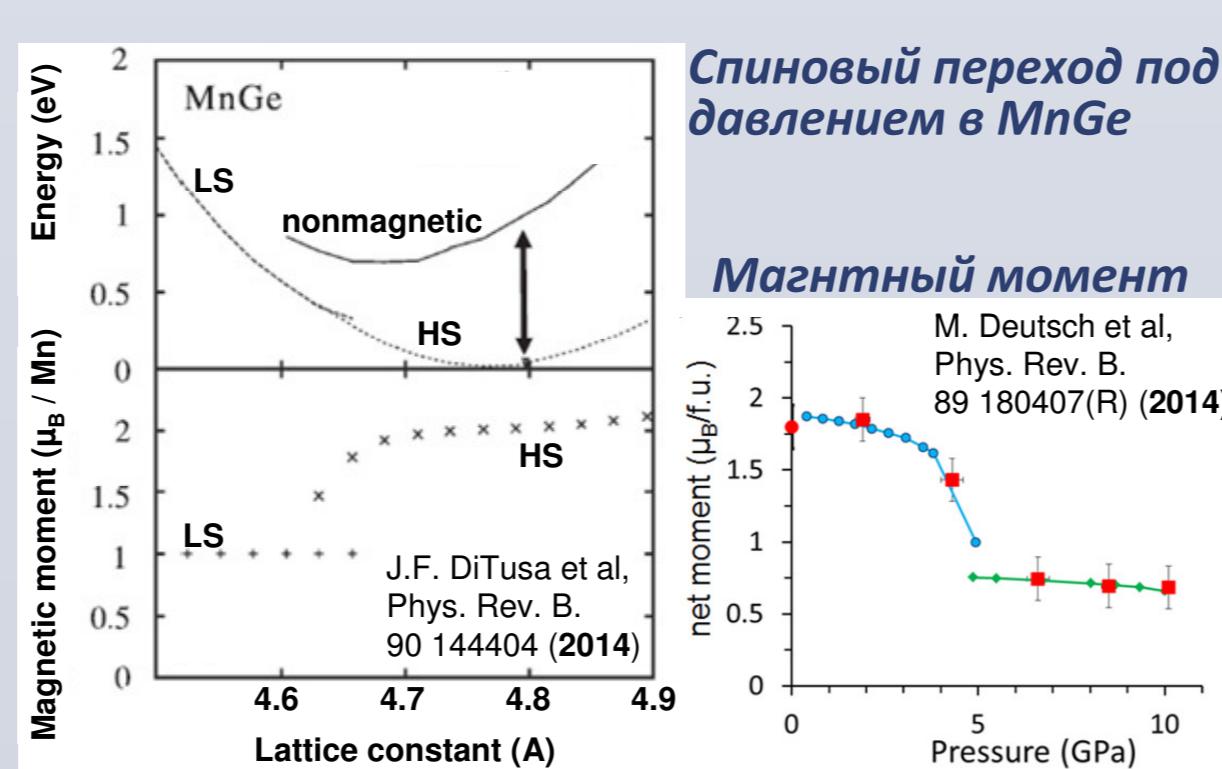
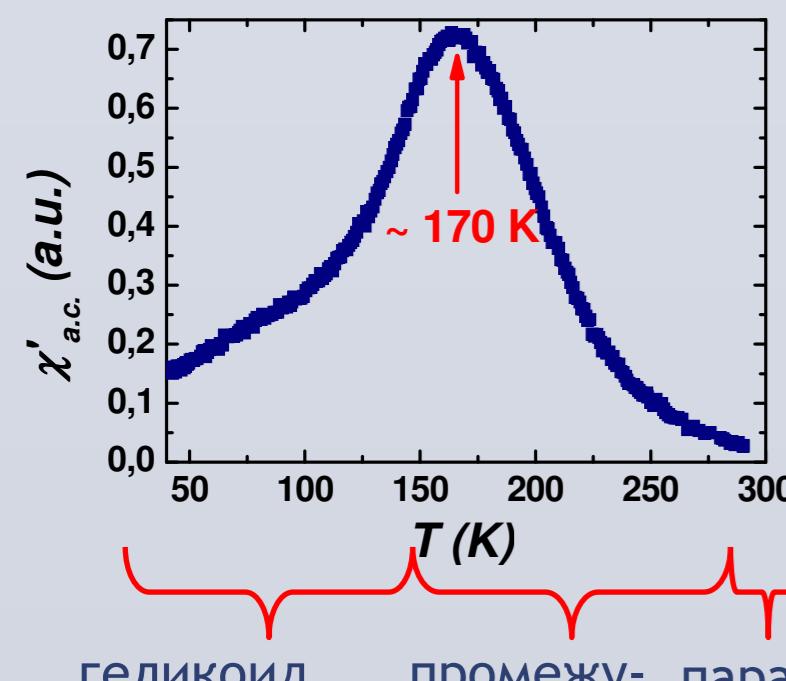
В «идеальной B20» все 7 связей Mn - Ge эквивалентны



Для MnGe  $d_1 = 2.439 \text{ \AA}$ ,  $d_2 = 2.512 \text{ \AA}$ ,  $d_3 = 2.684 \text{ \AA}$

Связи Mn-Ge в направлениях <100> растянуты - отклонение от «идеальной B20»

## Магнитная восприимчивость MnGe



MnGe - особое поведение магнитных свойств с температурой и давлением

## Список литературы и благодарность

1. J.F. DiTusa, S. B. Zhang, K. Yamaura, et al., Phys. Rev. B, 90, 144404 (2014).
2. M. Deutsch, O.L. Makarova, T.S. Hansen et al., Phys. Rev. B 89, 180407(R) (2014).
3. N. Martin, M. Deutsch, F. Bert et al, arXiv:1602.01756v1, (2016).

Авторы благодарят грант РФФИ 14-22-01073, д.ю. Чернышова, В. Дядькина, Л. Дубровинского, М. Быкову, Е. Быкову, А. Суханова

Цель: рентгеноструктурный анализ MnGe под воздействием температуры и давления, используя CoGe как практический немагнитный репер

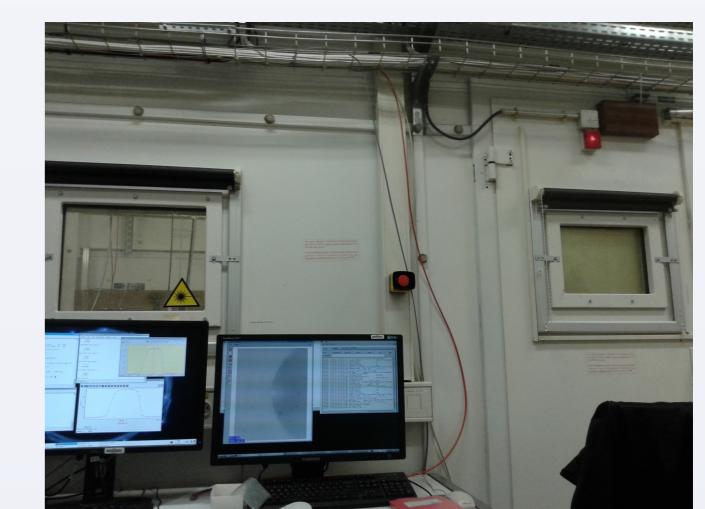


BM01A (SNBL),  
ID09A

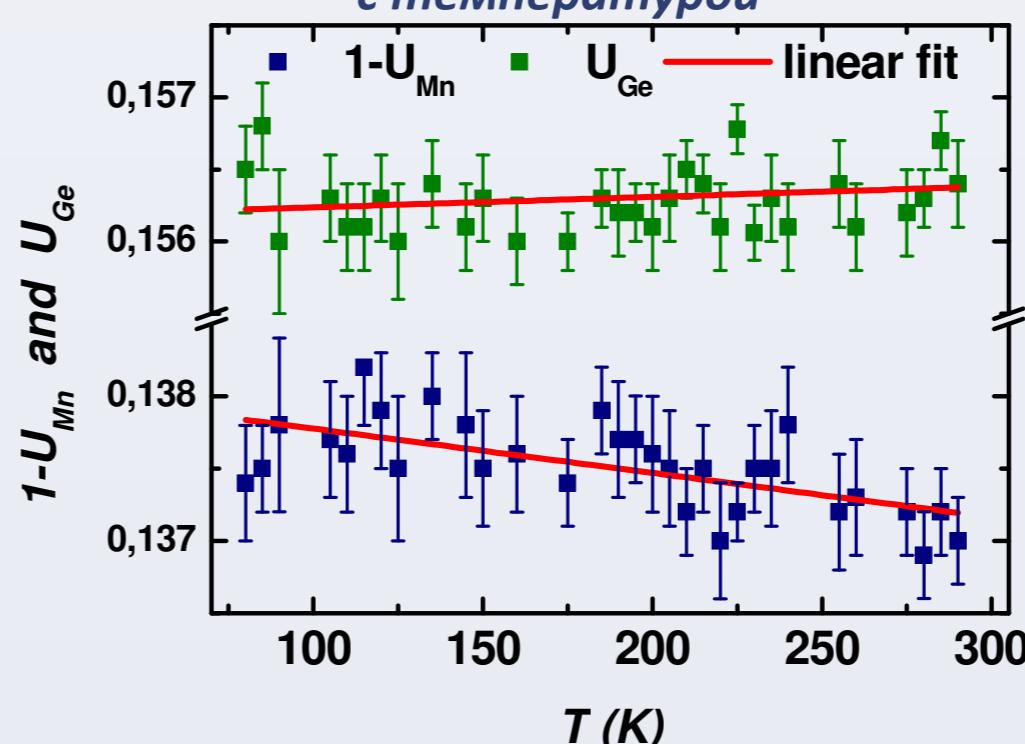
Монокристальная  
дифракция



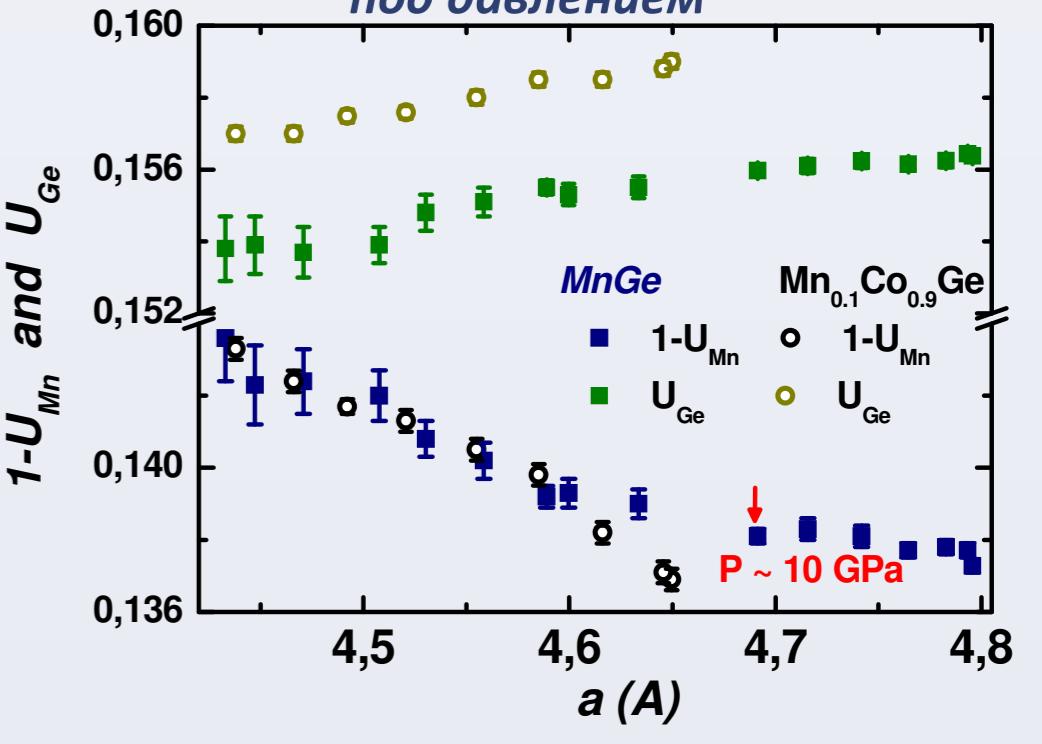
## Результаты



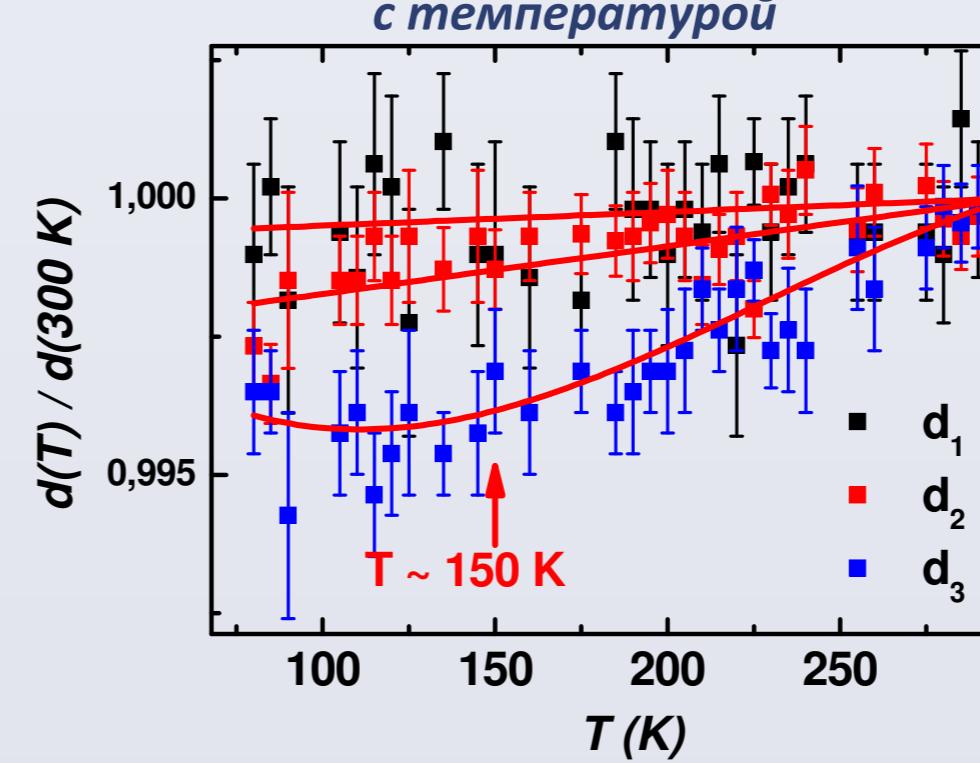
### Изменение координат атомов MnGe с температурой



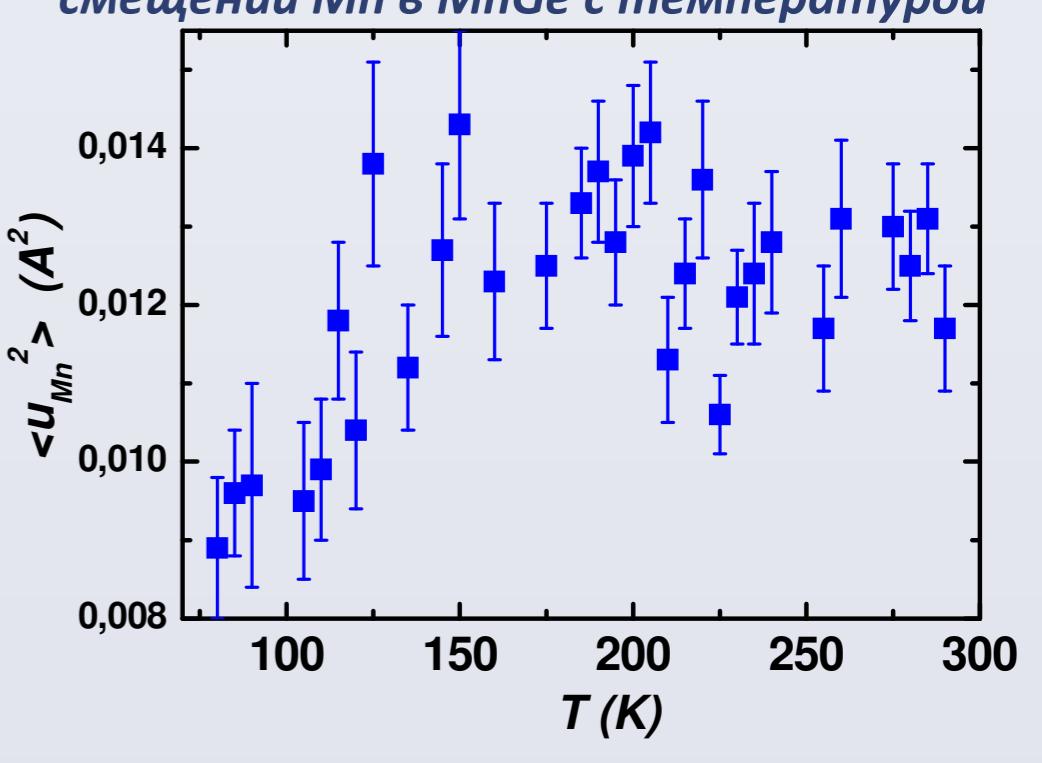
### Координаты атомов MnGe и Mn<sub>0.1</sub>Co<sub>0.9</sub>Ge под давлением



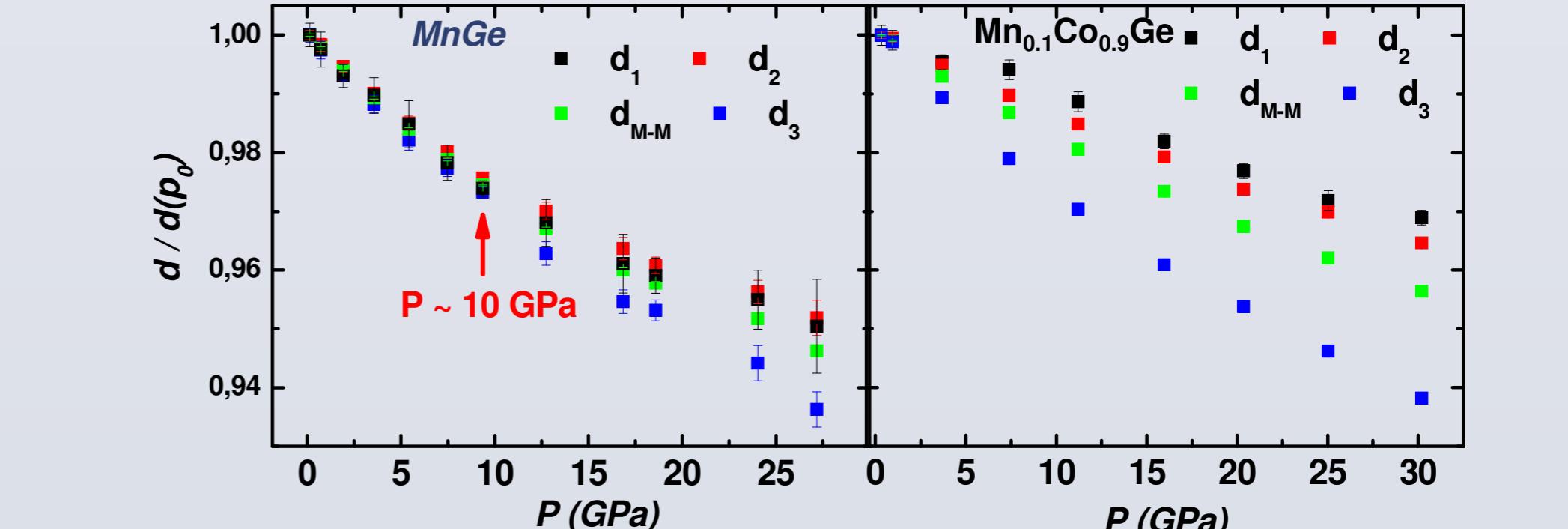
### Изменение длин связей MnGe с температурой



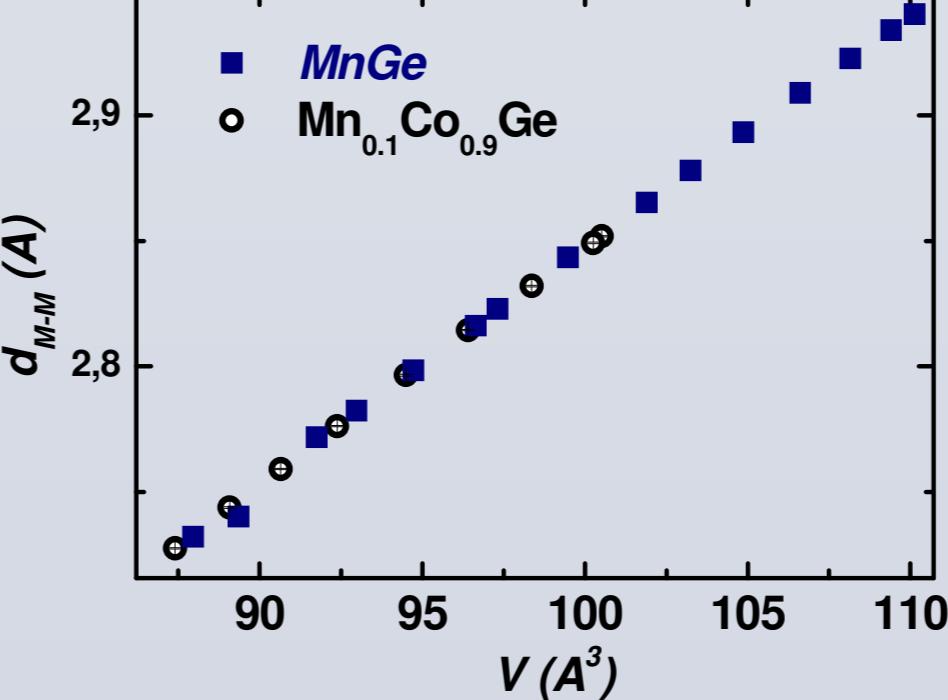
### Изменение среднего квадрата тепловых смещений Mn в MnGe с температурой



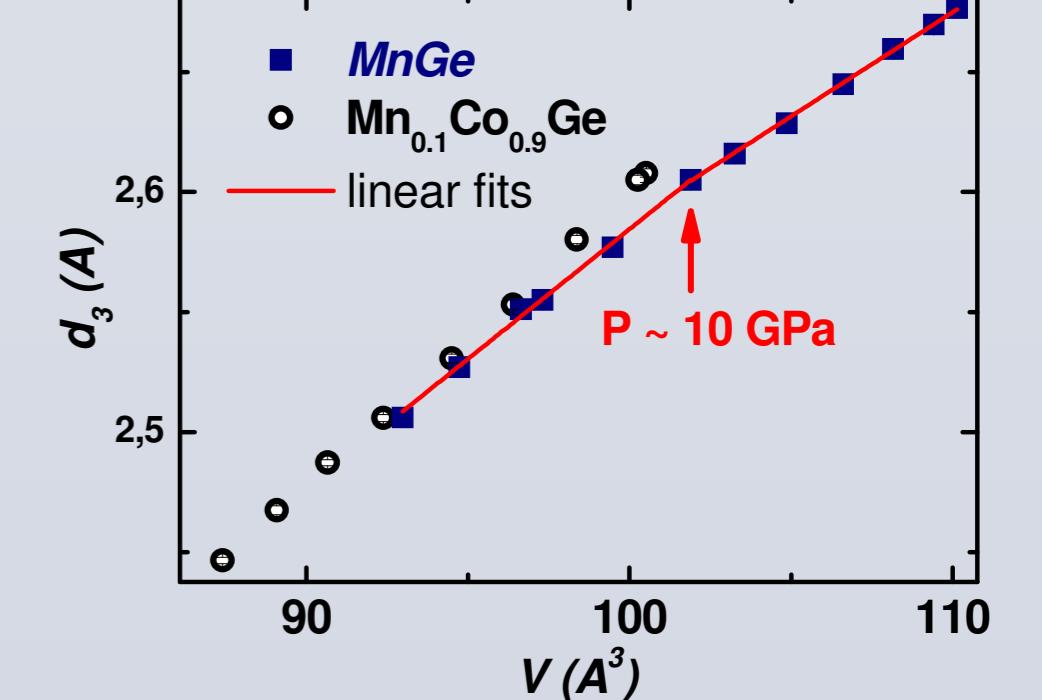
### Изменение длин связей MnGe и Mn<sub>0.1</sub>Co<sub>0.9</sub>Ge с давлением



### Длины связей металл-металл в MnGe и Mn<sub>0.1</sub>Co<sub>0.9</sub>Ge под давлением

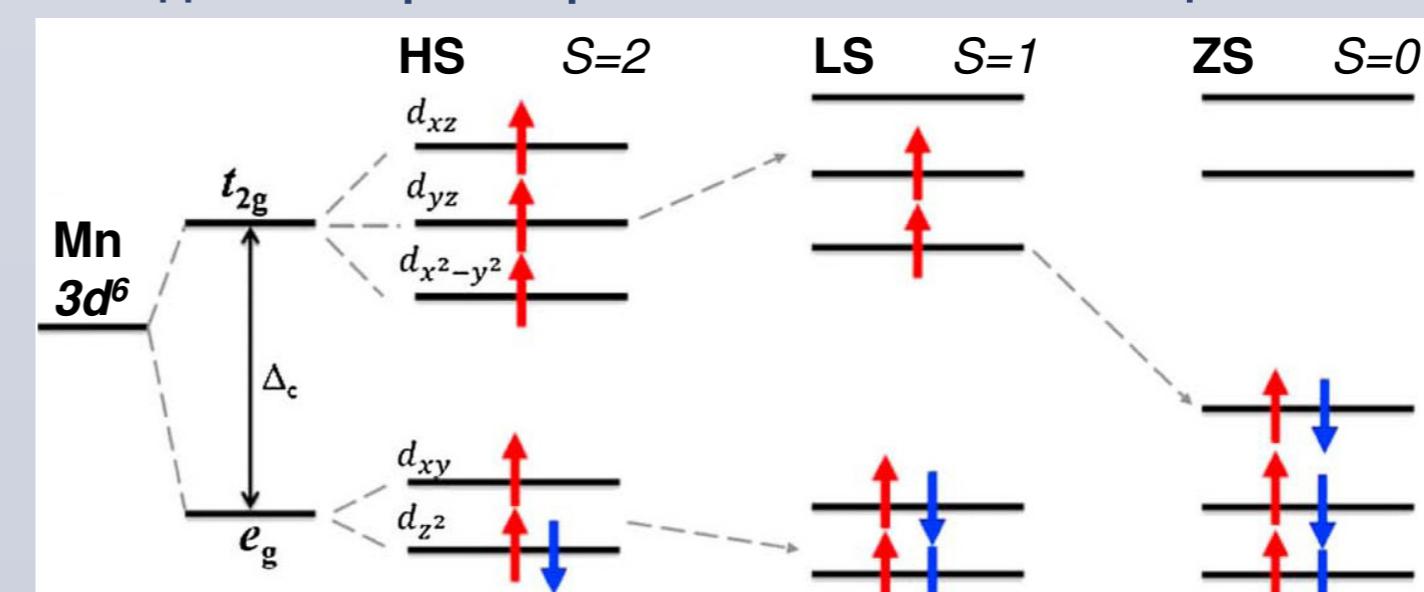


### Длины связей металл-Ge в направлениях <100> для MnGe и Mn<sub>0.1</sub>Co<sub>0.9</sub>Ge под давлением



## Заключение

Связи Mn-Ge в направлениях <100> удлинены в HS состоянии за счёт Хундовской энергии спаривания. При переходе в LS под давлением они быстро сжимаются, т.к. не выгодны с точки зрения кристаллического поля лигандов. Но при нагреве 150 - 300 К они ещё больше удлиняются.



Спасибо за внимание!