

Смещение атомов в кристаллической решётке MnGe под воздействием температуры и давления

Г. А. Вальковский¹, Е. Г. Яшина^{1,2}, А. В. Цвященко³, С. В. Григорьев^{1,2}

¹ Санкт-Петербургский Государственный Университет

² Петербургский Институт Ядерной Физики НИЦ КИ, Гатчина

³ Институт физики высоких давлений, Троицк

Введение

28,09	14	Si			
			Mn ²⁵	Fe ²⁶	Co ²⁷
			МАРГАНЕЦ	ЖЕЛЕЗО	КОБАЛЬТ
72,59	32	Ge			

Состоят из близких элементов в таблице Менделеева

MNSi FEGE fes

CoSi COGE



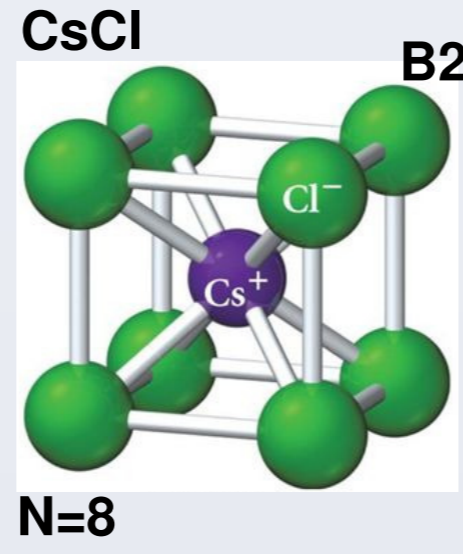
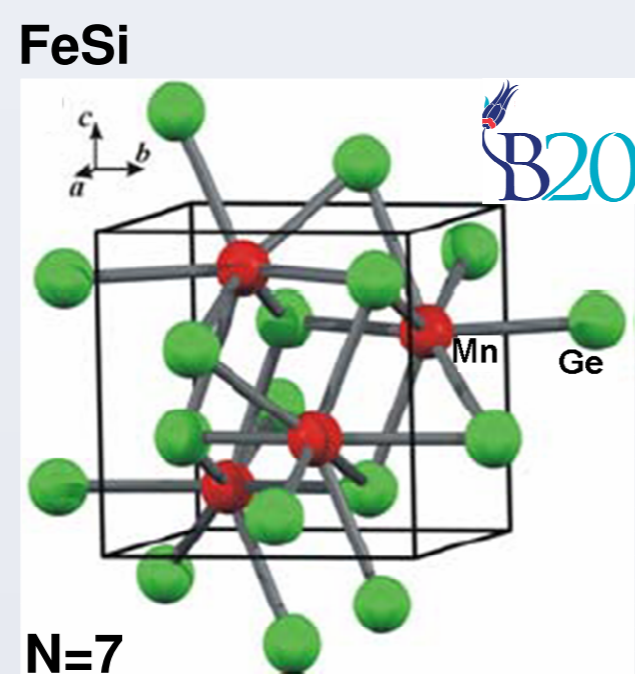
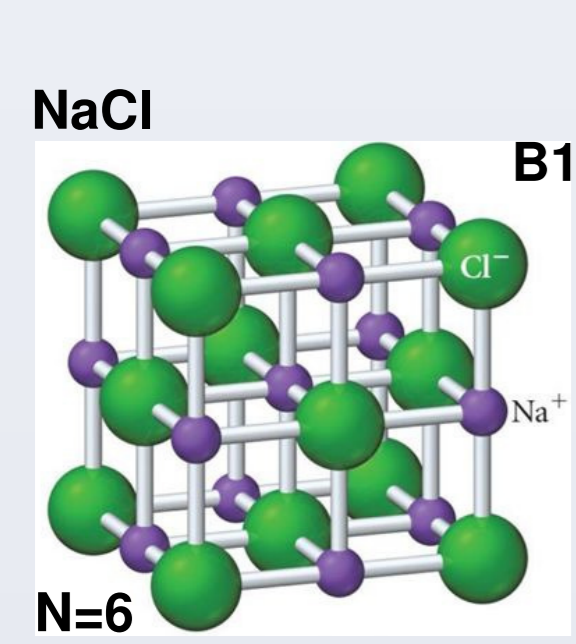
геликоидальные - ферромагнитные, металлы

парамагнетик, узкощелевой полупроводник - металл (с температурой)

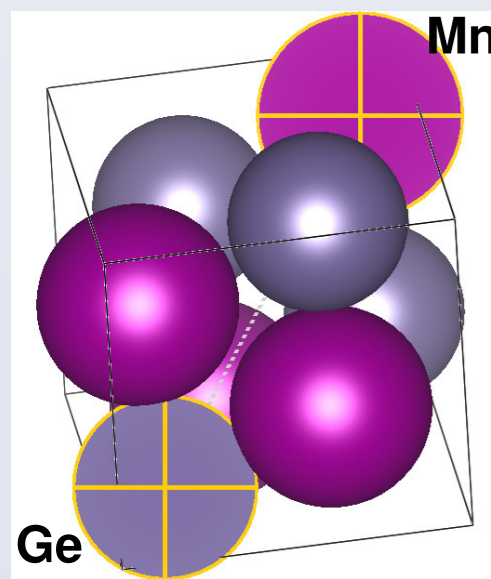
диамагнитные, полуметаллы

геликоидальный - ферромагнитный, металл - полуметалл (под давлением)

Но физические свойства разные. Почему?



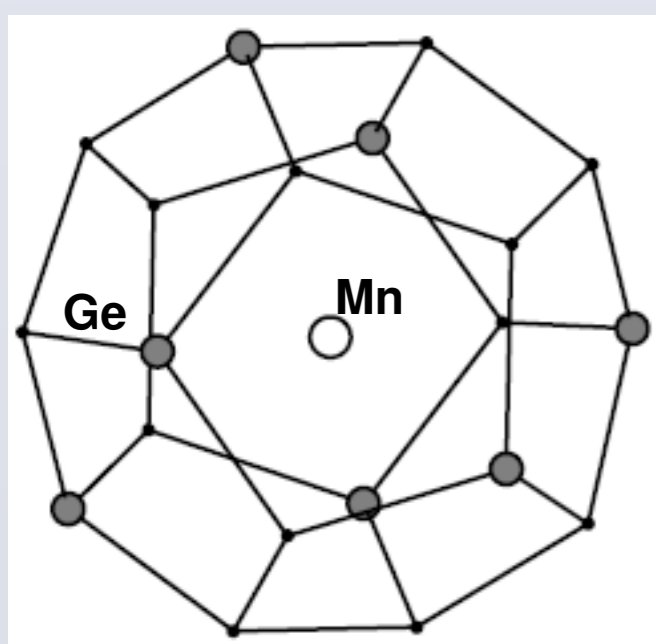
Кристаллическая структура B20 кубическая, но низкосимметричная



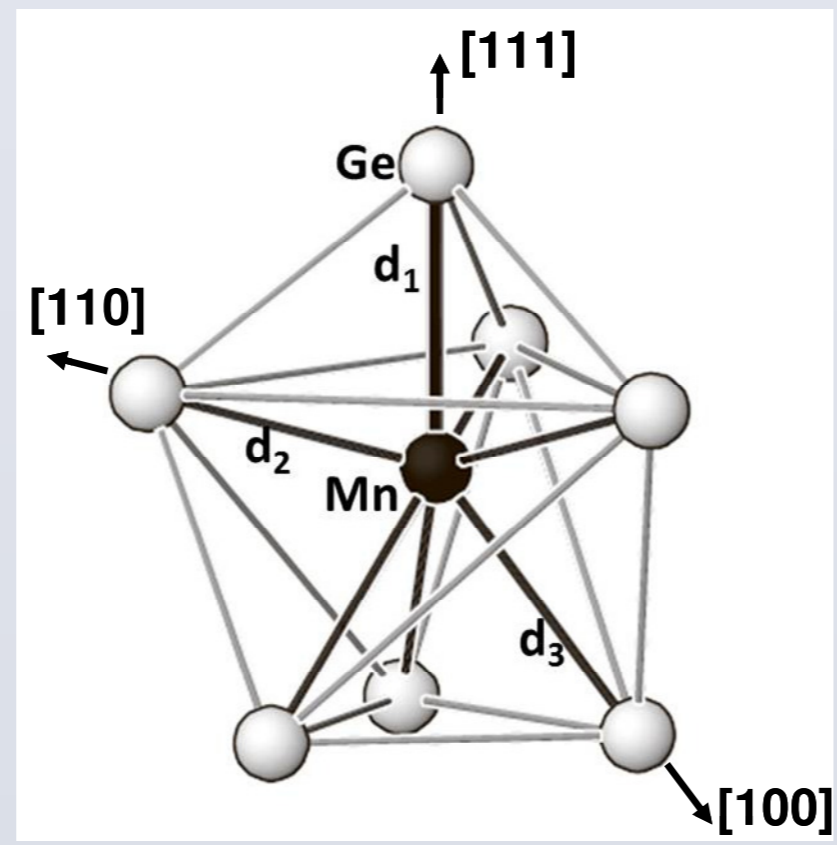
В «идеальной B20» координаты обоих атомов $U_{Ge} = 1 - U_{Mn} = 1/4\tau = 0.15451$,

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

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



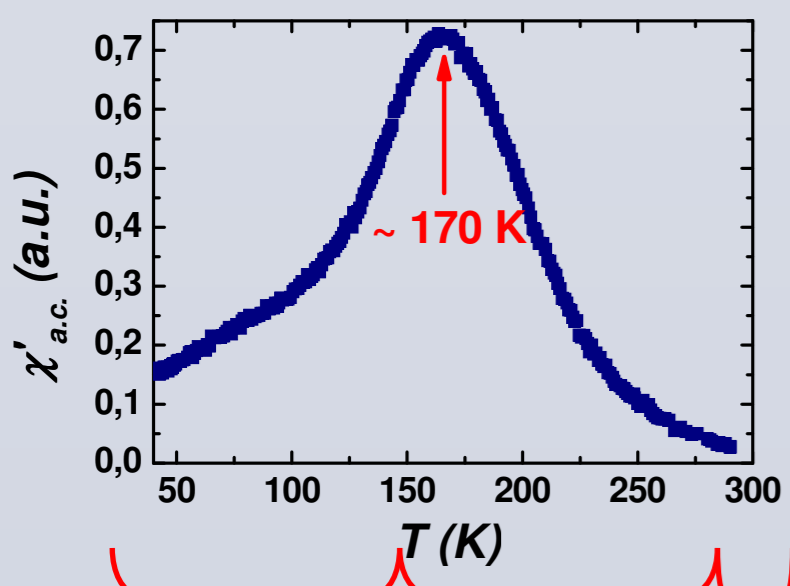
В «идеальной B20» все 7 связей Mn - Ge эквивалентны



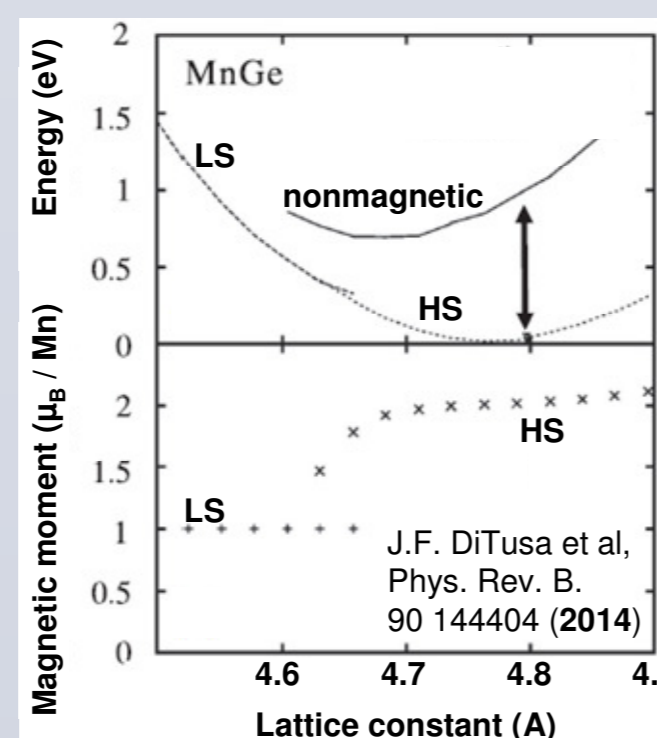
Для MnGe $d_1 = 2.439 \text{ \AA}$, $d_2 = 2.512 \text{ \AA}$, $d_3 = 2.684 \text{ \AA}$

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

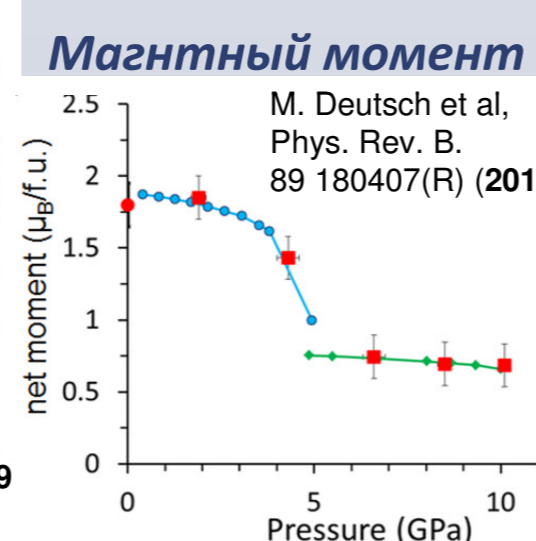
Магнитная восприимчивость MnGe



геликоид промежу- парамагнетик точная фаза



Спиновый переход под давлением в MnGe



MnGe - особое поведение магнитных свойств с температурой и давлением

Список литературы и благодарность

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

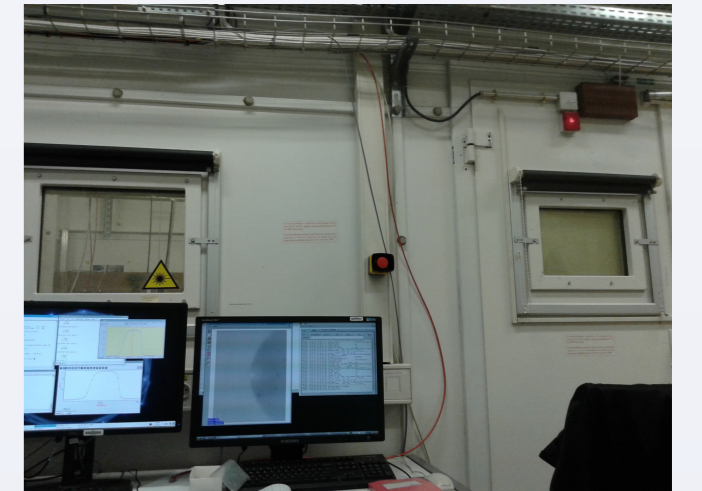
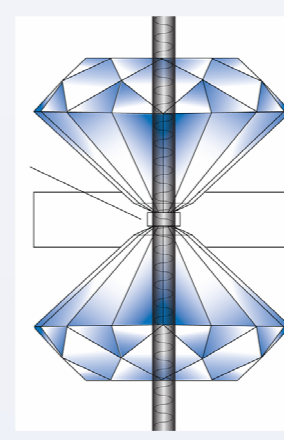
Авторы благодарят грант РФФИ 14-22-01073, Д.Ю. Чернышова, В. Дядкина, Л. Дубровинского, М. Быкова, Е. Быкову, А.Суханова

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

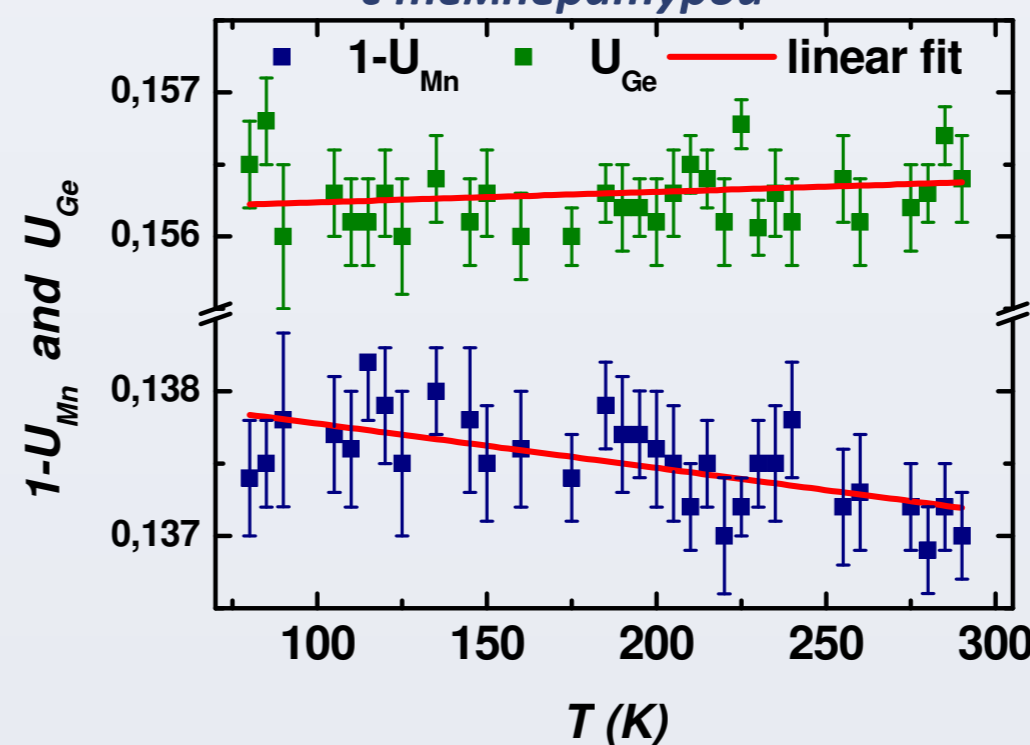
Результаты

BM01A (SNBL), ID09A ESRF

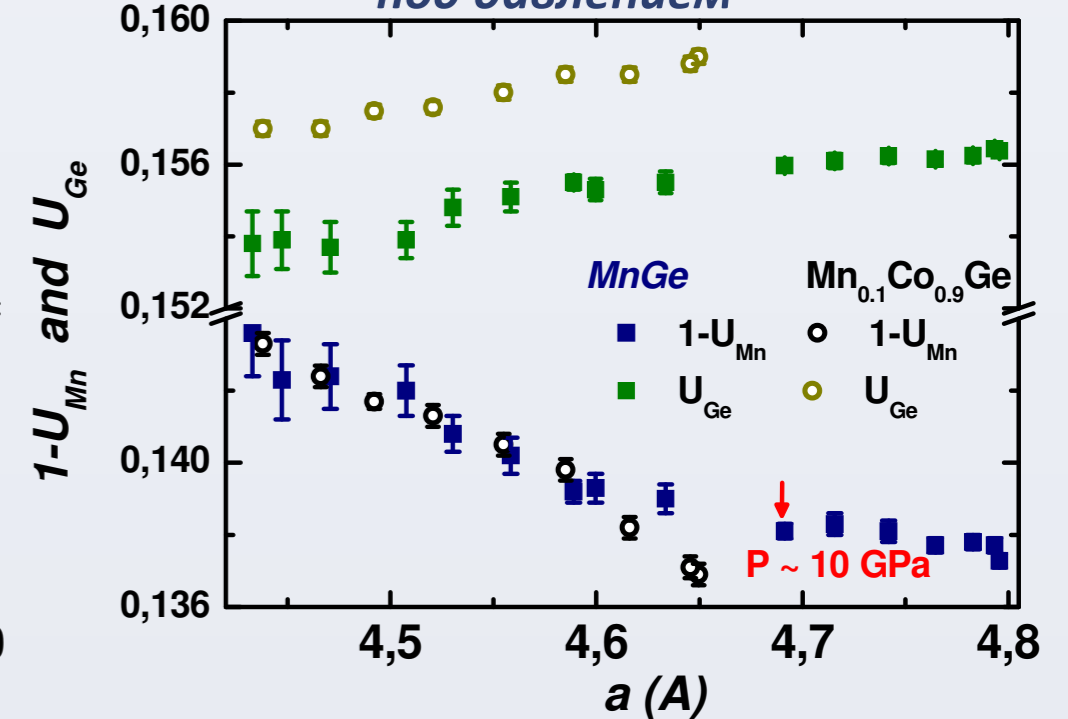
Монокристаллическая дифракция



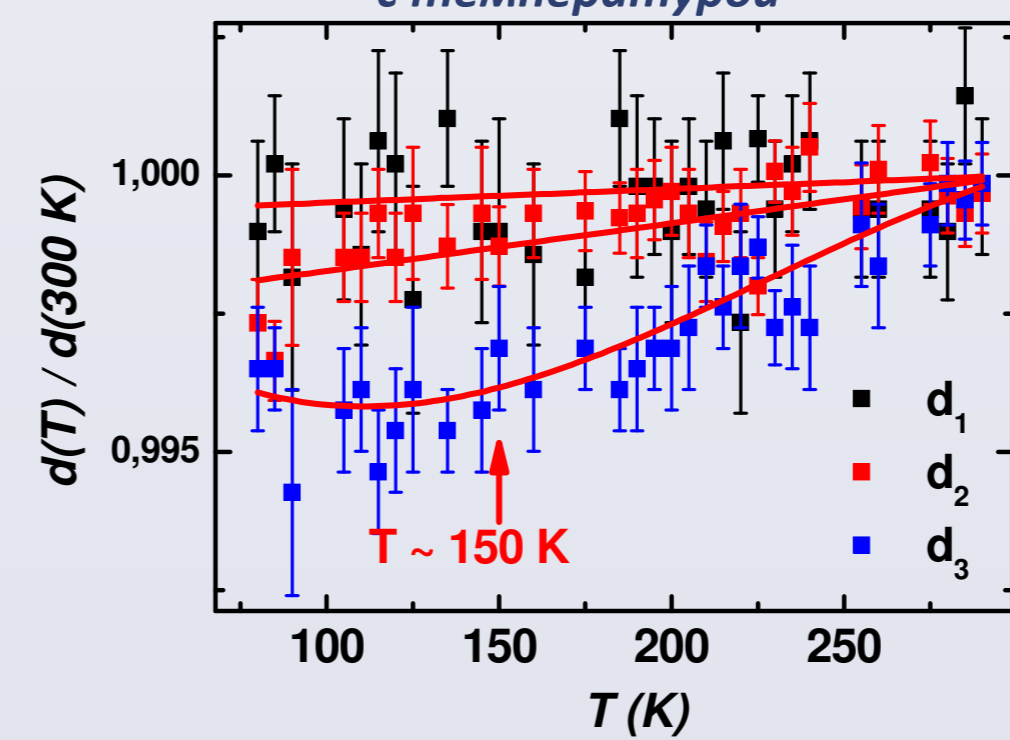
Изменение координат атомов MnGe с температурой



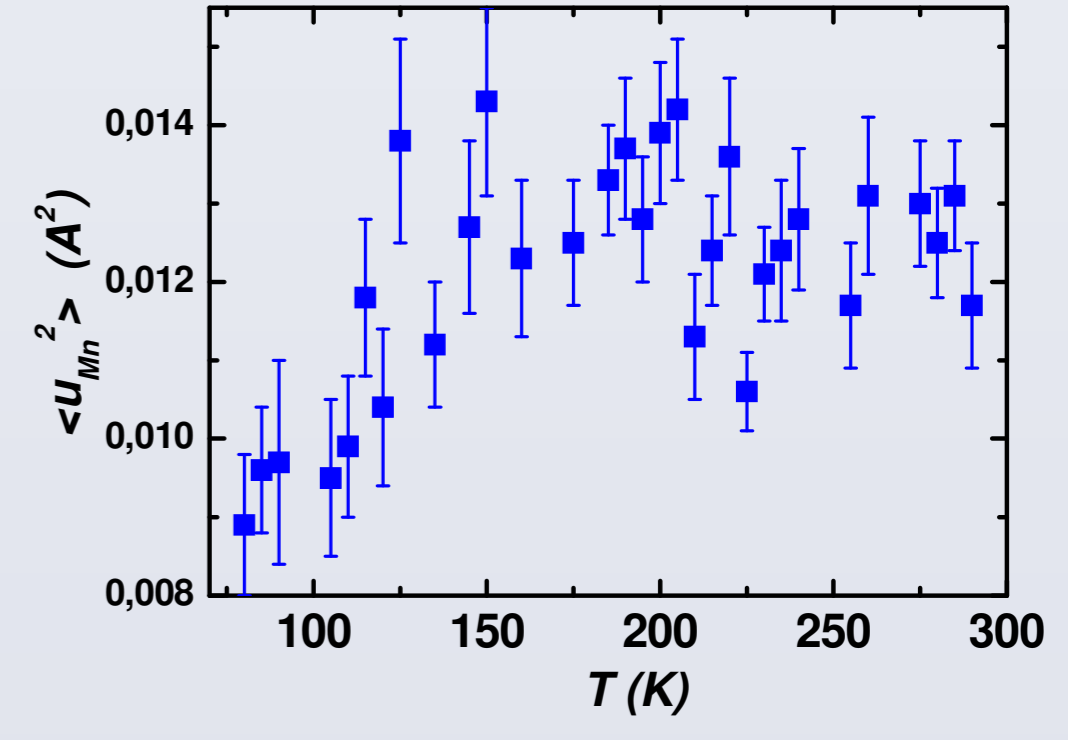
Координаты атомов MnGe и Mn_{0.1}Co_{0.9}Ge под давлением



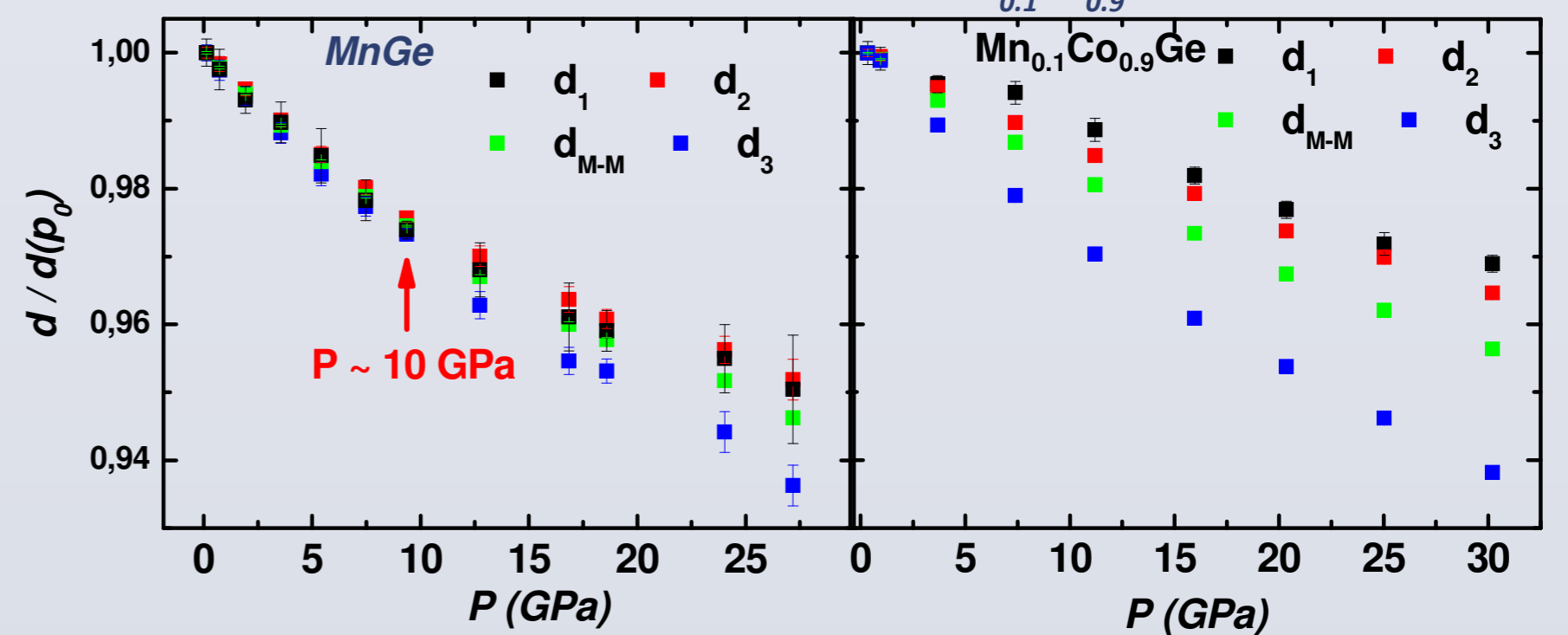
Изменение длин связей MnGe с температурой



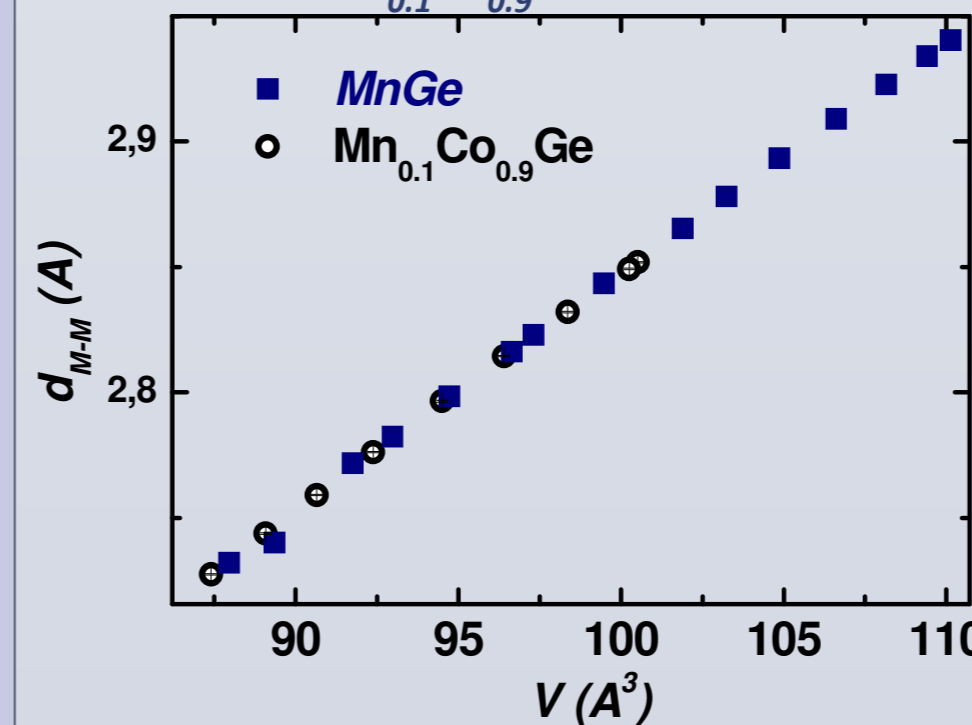
Изменение среднего квадрата тепловых смещений Mn в MnGe с температурой



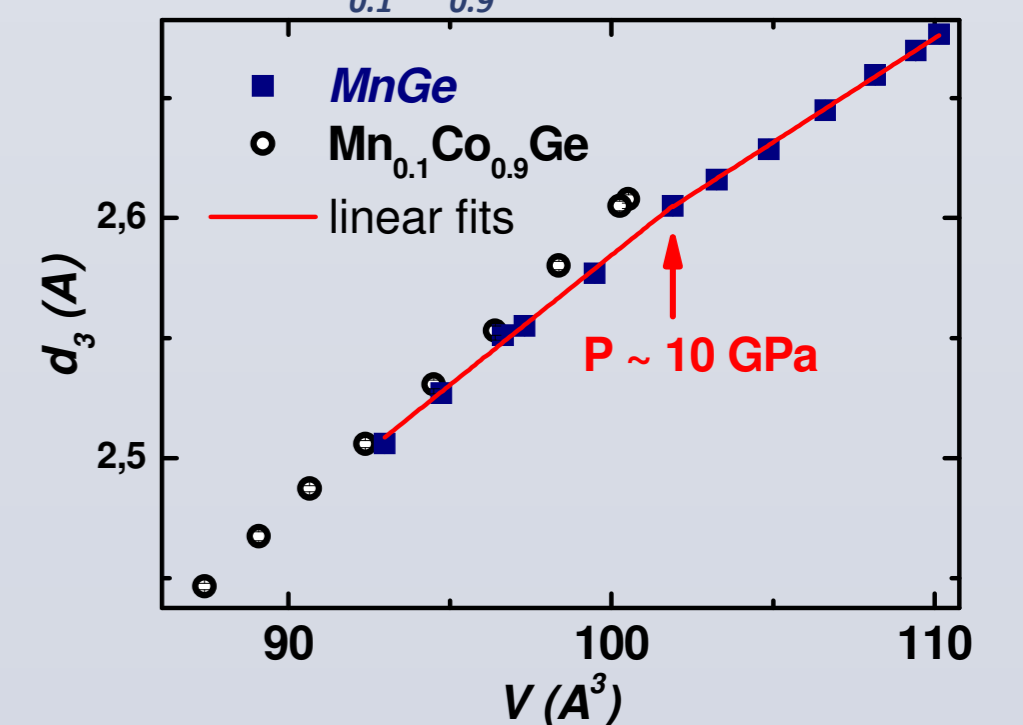
Изменение длин связей MnGe и Mn_{0.1}Co_{0.9}Ge с давлением



Длины связей металл-металл в MnGe и Mn_{0.1}Co_{0.9}Ge под давлением

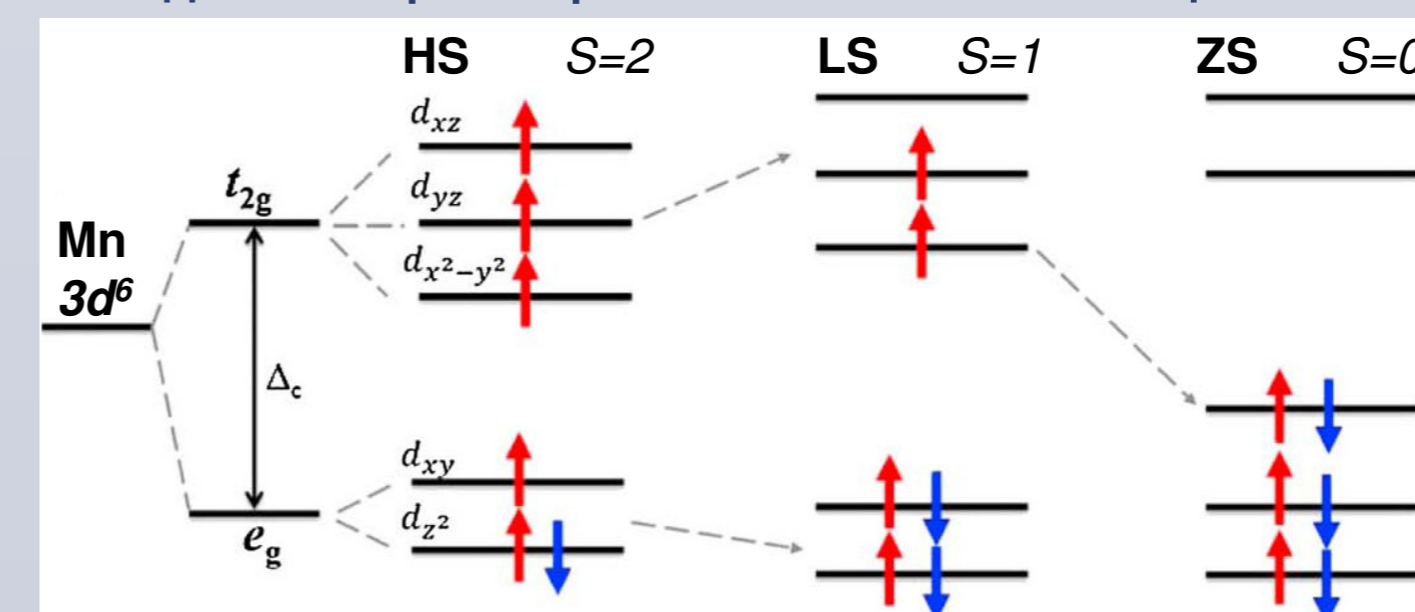


Длины связей металл-Ge в направлениях <100> для MnGe и Mn_{0.1}Co_{0.9}Ge под давлением



Заключение

Связи Mn-Ge в направлениях <100> удлиняются 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!