

Министерство образования и науки Российской Федерации

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе СПбГУ

_____ Туник С.П.

«___» _____ 20__ г.

**ОТЧЕТ
О ВЫПОЛНЕННЫХ РАБОТАХ**

**«СВЯЗЬ СТРУКТУРНЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ БЕЗ ЦЕНТРА
ИНВЕРСИИ ТИПА В20, СИНТЕЗИРОВАННЫХ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ»**

2015-14-588-0004-009

Государственный контракт от «5» ноября 2015 г. № 14.616.21.0046
в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям
развития научно-технологического комплекса на 2014-2020 годы»

(заключительный)

Этап № 1: «Связь структурных и магнитных свойств кристаллов без центра инверсии»

Руководитель работ

С.В.

_____ Григорьев

подпись, дата

Санкт-Петербург 2015

В ходе выполнения проекта были получены следующие результаты:

1) Проведен анализ научно-технической и научно-исследовательской документации, а также других материалов, относящихся к исследованиям свойств кристаллов без центра инверсии. В проекте мы сфокусировали свое внимание на возможностях исследования кристаллической и магнитной структуры моногерманидов переходных металлов, используя методы исследования с помощью синхротронного излучения.

2) Определены направления решения задачи установления связи между структурными и магнитными свойствами кристаллов без центра инверсии типа B20, а также определения характера этой связи. Для достижения поставленной цели необходимо было решить широкий круг задач – от синтеза новых соединений, через их исследование методами синхротронного и нейтронного рассеяния, к анализу полученных результатов и теоретических расчетов для их подтверждения.

3) В результате многочисленных опытов по синтезу образцов моногерманидов переходных металлов под высоким давлением были синтезированы поликристаллы чистых бинарных соединений FeGe, MnGe, CoGe, RhGe и твердые растворы на их основе $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}$, $\text{Mn}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}$ и $\text{Mn}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Ge}$. Синтезированные образцы были аттестованы методом рентгенофазного анализа, который показал что полученные соединения кристаллизуются в решетку типа B20. Небольшие примеси составляют 1-2 %.

4) Проведено дифракционное исследование образцов $\text{Mn}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Ge}$, $\text{Mn}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}$ в широком диапазоне температур. Были получены температурные зависимости параметра ячейки соединений в диапазоне 80-500 К. На основании полученных данных с использованием уравнения Дебая-Грюнайзена были определены следующие характеристики исследованных соединений: a_0 – параметр элементарной ячейки, аппроксимированный к температуре $T = 0$ К, Θ_D – температура Дебая, α – высокотемпературная асимптота коэффициента теплового расширения. Получены температурные зависимости коэффициента теплового расширения для исследуемых соединений. Было проведено сравнение полученных данных с соединениями MnGe и $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ge}$. Установлено, что с повышением концентрации иона замещающего ионы Mn в решётке MnGe, эффективные термодинамические параметры меняются. Можно предположить, что причинами изменения параметров в MnGe может являться магнито-объемный эффект и/или нестабильности спинового состояния атомов марганца.

5) Исследована надатомная структура образцов $\text{Mn}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}$ и $\text{Mn}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Ge}$ в широком диапазоне размеров от 1 до 1000 нм для соединений с различными концентрациями твердого раствора x методом малоуглового рассеяния нейтронов. Установлено, что образцы $\text{Mn}_{1-x}\text{Co}_x\text{Ge}$ во всем диапазоне концентраций твердого раствора x представляют собой кристаллы, с нарушениями атомной структуры в виде конгломераций дефектов, описываемых дендроидами с логарифмическим фрактальным распределением, во всем диапазоне размеров от 1 до 1000 нм. Показано, что образцы Mn_{1-x}

$x\text{Rh}_x\text{Ge}$ во всем диапазоне концентраций твердого раствора x состоят из кристаллитов, с рыхлой поверхностью, описываемых поверхностным фрактальным распределением, во всем диапазоне размеров от 1 до 1000 нм. Эти особенности внутреннего строения являются следствием кристаллизации образцов в камере высокого давления.

6) Методом дифракции синхротронного излучения с длиной волны вблизи края поглощения определена абсолютная структура (структурная киральность) монокристаллов многокомпонентного состава $(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{1-y}\text{Mn}_y\text{Si}$.

7) Методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов проведено исследование знака магнитной киральности образцов соединений $\text{Mn}_{1-y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_y\text{Si}$ ($x = 0.2 - 0.5$, $y = 0.8 - 1$). Установлено, что значения произведения магнитной и структурной киральностей для каждого из соединений равно $\Gamma_c \times \gamma_m = -1$, что соответствует противоположному знаку структурной и магнитной киральностей в этих соединениях.

8) Разработана новая методика определения кристаллографической киральности крупных ($\sim 4000 \times 4000 \times 100$ мкм) образцов за счёт использования высокоэнергетичного пучка синхротронного излучения и получения карт киральности благодаря сканированию по поверхности образца микропучком. Киральность определённая для одних и тех же образцов в виде дисков исследованных на ID11 и цилиндров на BM01A совпадает. Установлено, что киральность статистически воспроизводится для образцов полученных при одинаковых условиях синтеза.

9) Апробирован способ определения энантиомерного избытка в структуре поликристаллитов моногерманидов переходных металлов методом дифракции синхротронного излучения с микрофокусировкой. Показана принципиальная возможность экспериментов такого рода. Отмечены методологические трудности такого эксперимента и возможные пути преодоления этих сложностей.

10) Выполнены расчеты из первых принципов (*ab initio*) пространственного распределения неколлинеарного магнитного момента в элементарных ячейках моногерманидов переходных металлов марганца, железа, кобальта и родия с использованием программного пакета QUANTUM ESPRESSO, использующего теорию функционала плотности с релятивистскими потенциалами, необходимыми для учёта спин-орбитального взаимодействия. Показано, что моногерманиды марганца и железа, которые являются довольно сильными хиральными ферромагнетиками, существенно отличаются по магнитным свойствам от моногерманидов кобальта и родия, в которых каждый атом представляет собой тороидную магнитную структуру с очень малым средним магнитным моментом. Таким образом, первопринципные вычисления предсказывают существование в моногерманидах кобальта и родия нового типа магнетизма. Интересно, что такой же тип магнитного упорядочения предсказывается и для атомов германия в FeGe , которые традиционно полагаются немагнитными.

11) Споры предыдущих лет о конкуренции исследований с помощью нейтронного и синхротронного излучений на сегодняшний день утихли. Показано, что эти методики

являются совершенно комплементарными. Так в области дифракции на атомной структуре синхротронное излучение многократно побеждает нейтронное излучение как по размеру образцов, так и по времени исследования, однако магнитную структуру и динамику гораздо удобнее исследовать с помощью нейтронного рассеяния.

Научный руководитель работ



С. В. Григорьев