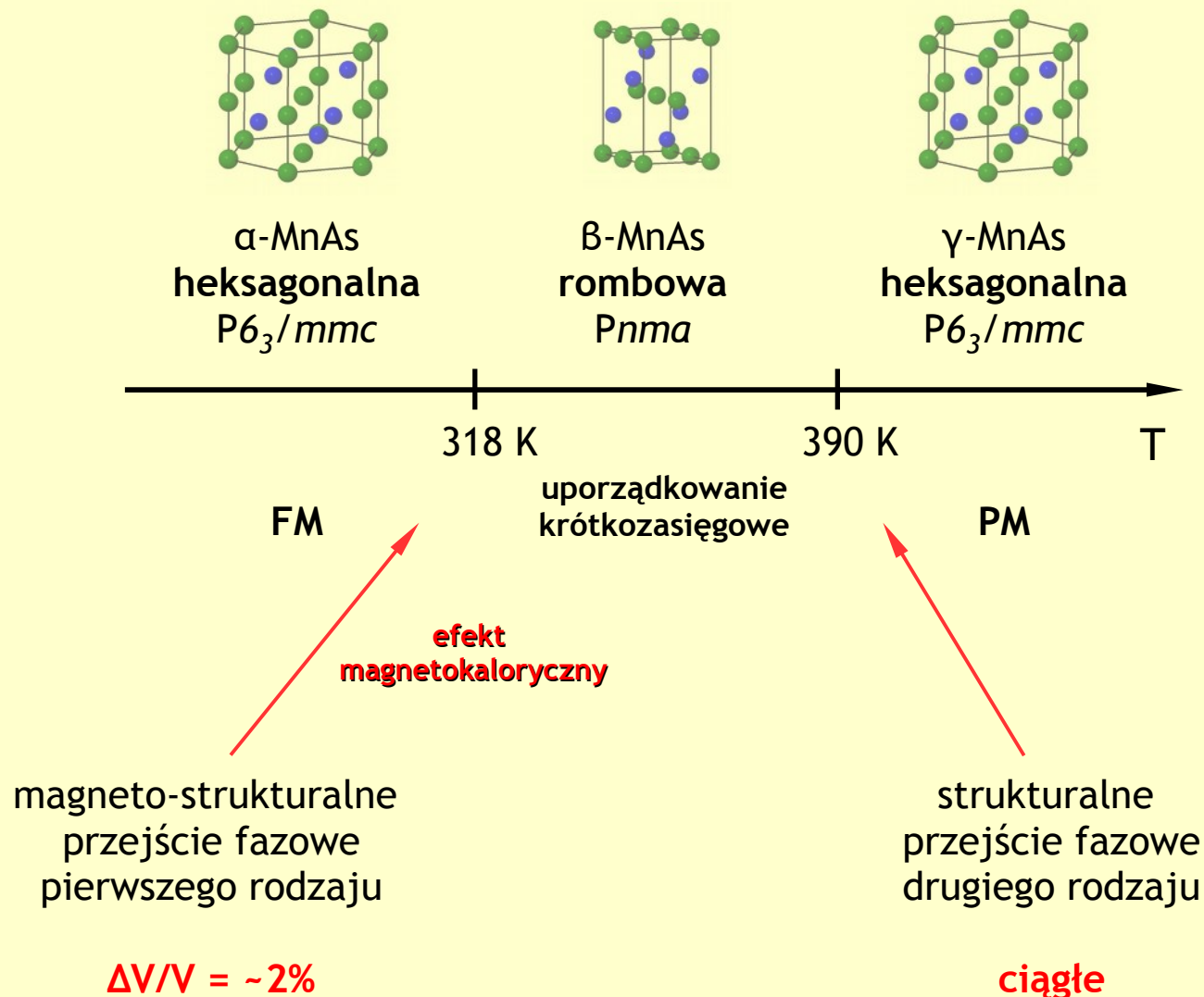
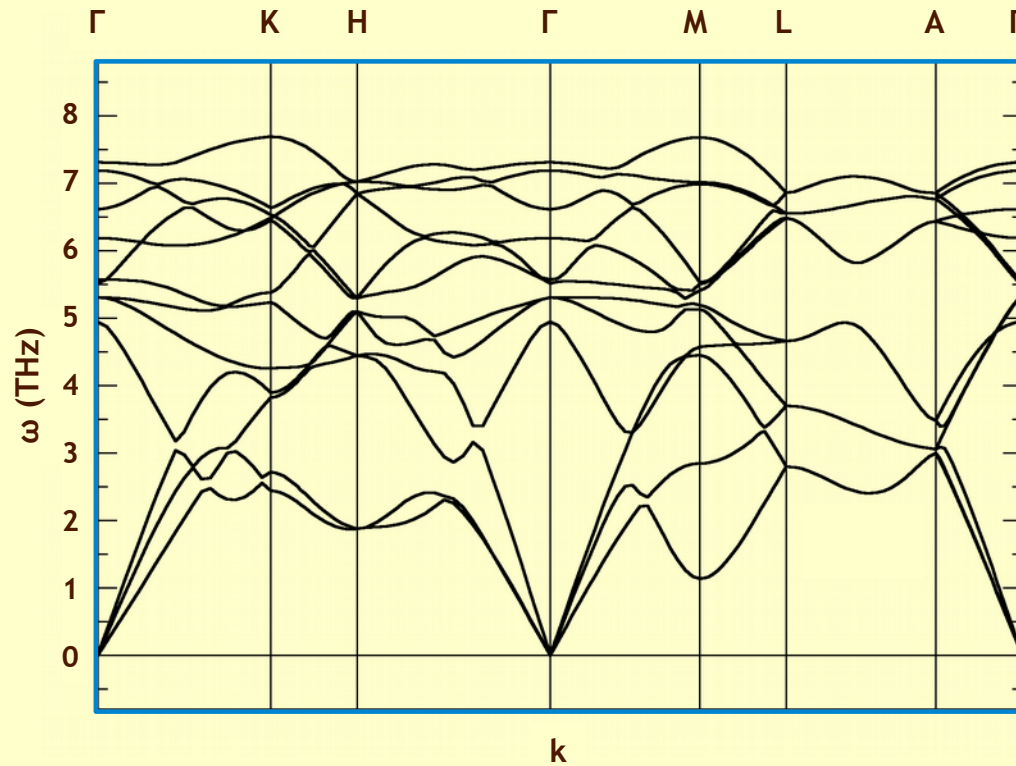


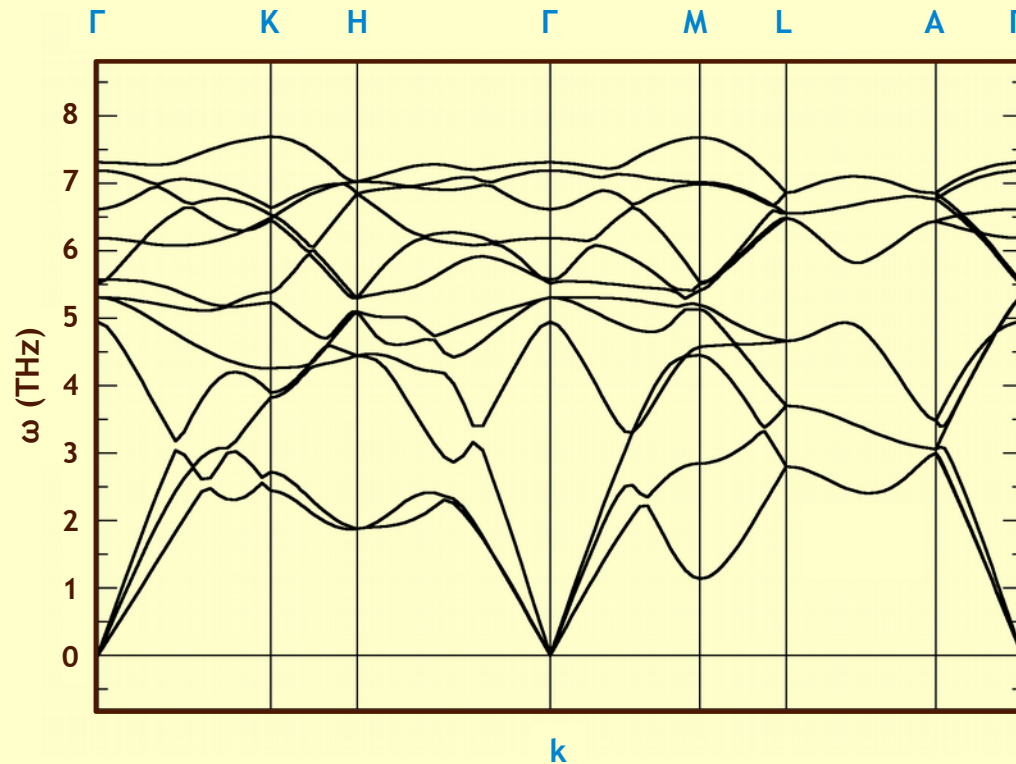
PRZYKŁAD: arsenek manganu (MnAs)



zbiór wszystkich drgań możliwych przy zadanej symetrii kryształu

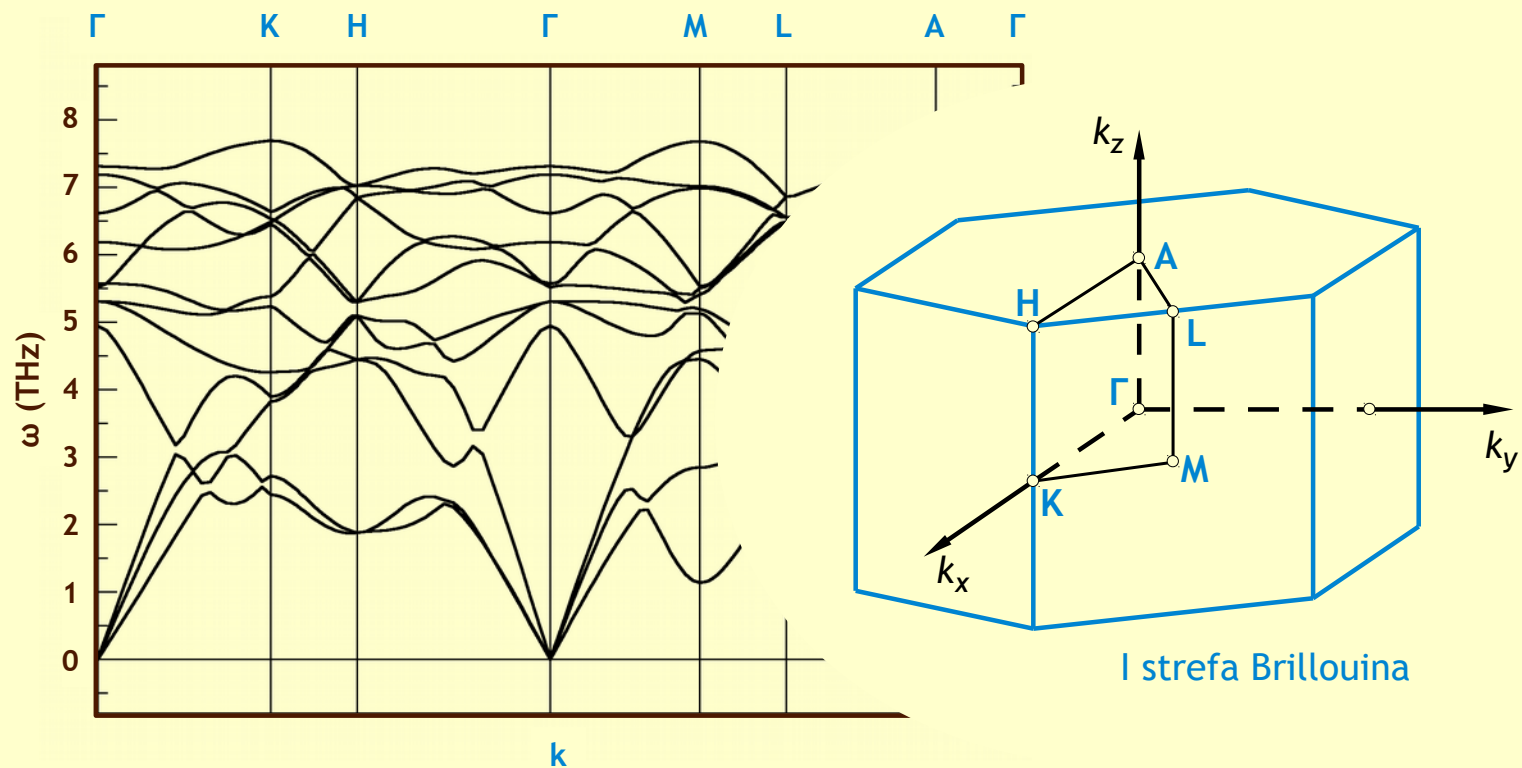


zbiór wszystkich drgań możliwych przy zadanej symetrii kryształu



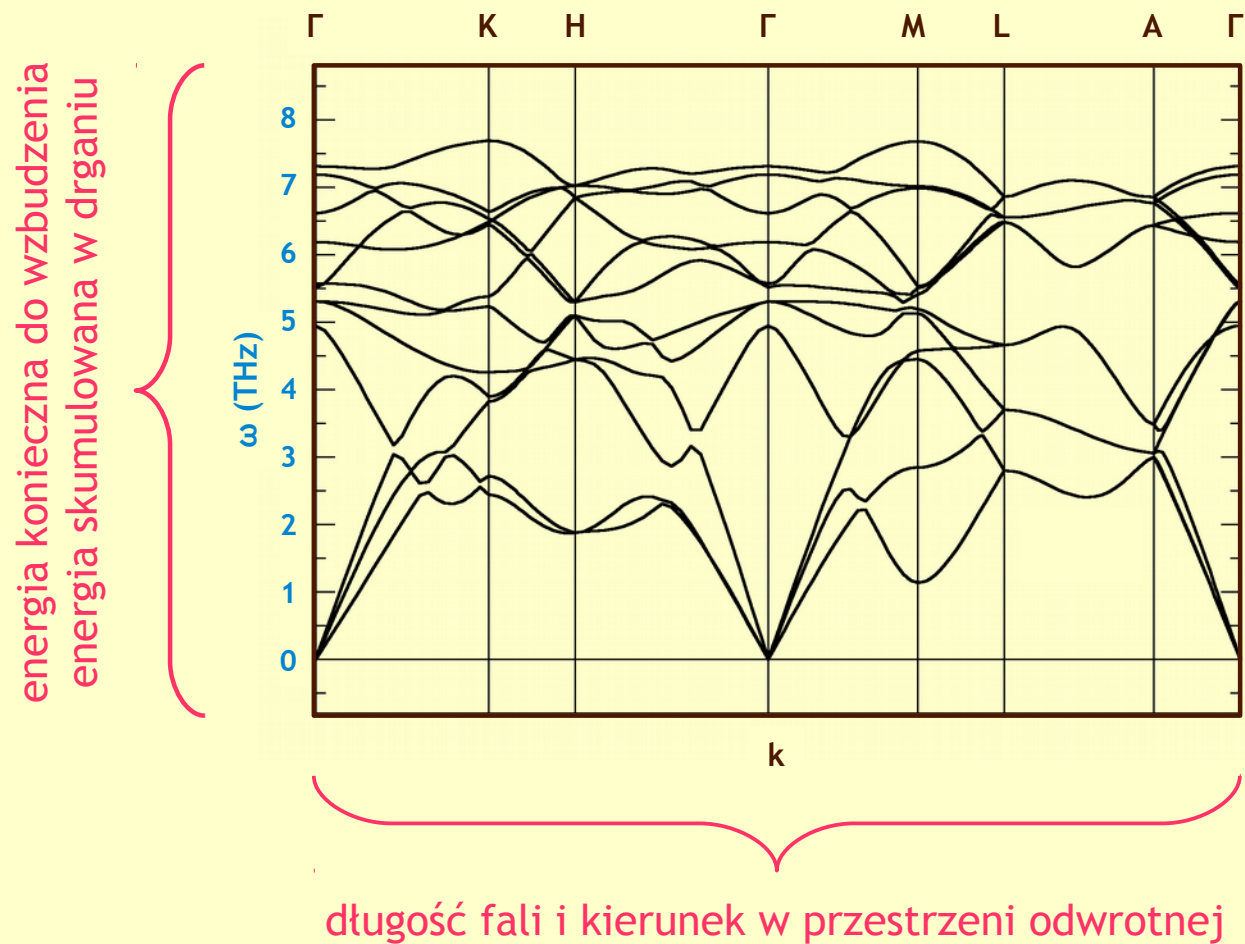
długość fali i kierunek w przestrzeni odwrotnej

zbiór wszystkich drgań możliwych przy zadanej symetrii kryształu

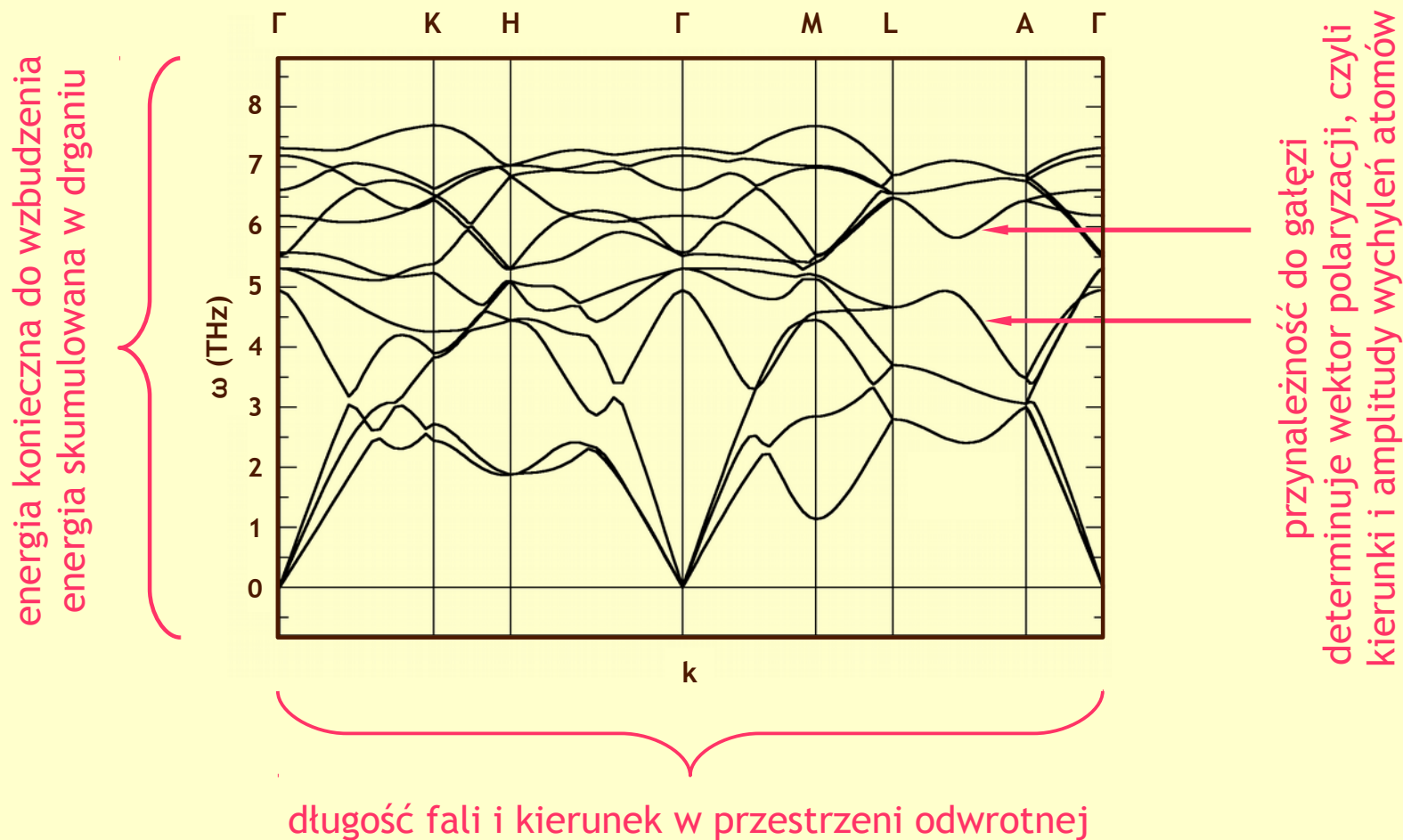


długość fali i kierunek w przestrzeni odwrotnej

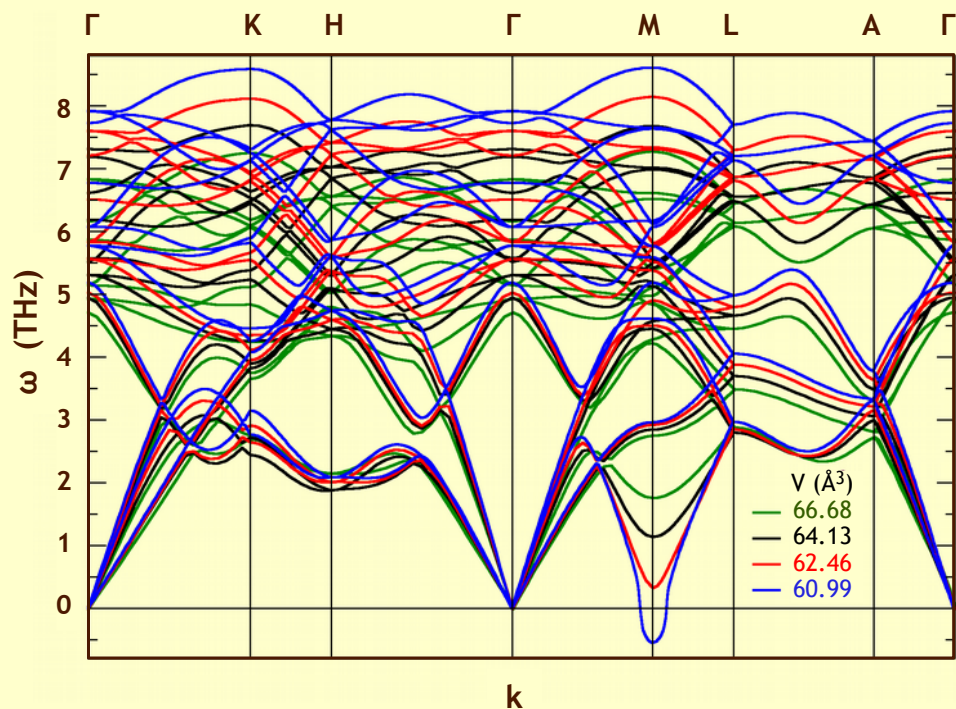
zbiór wszystkich drgań możliwych przy zadanej symetrii kryształu



zbiór wszystkich drgań możliwych przy zadanej symetrii kryształu

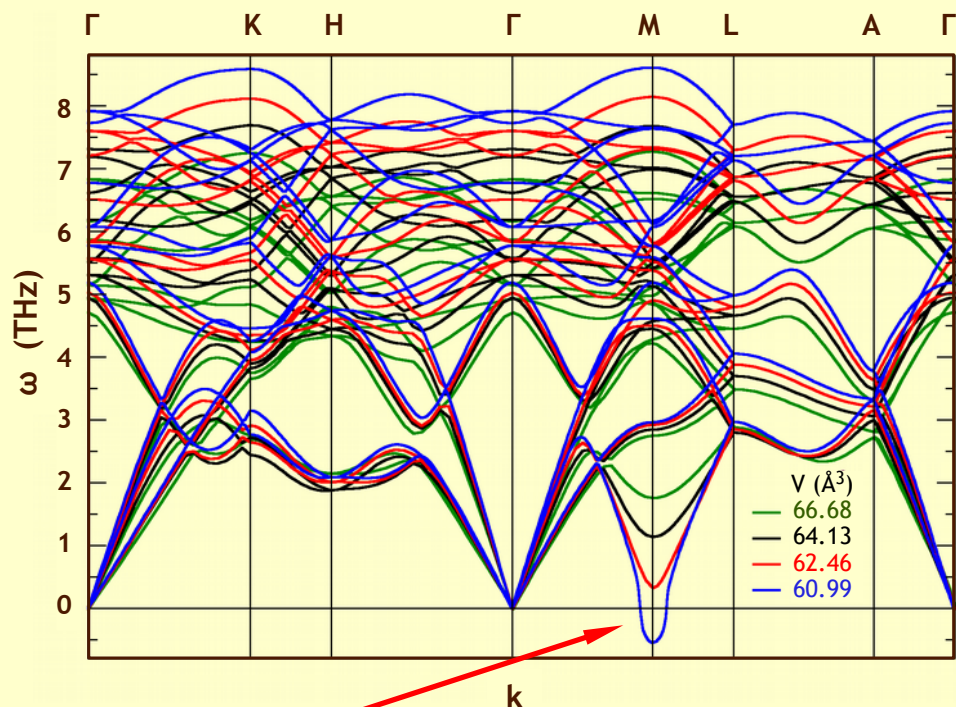


relacje dyspersji fononów w α -MnAs



V (\AA^3)	$\Delta V / V$ (%)	ω_{soft} (THz)	m (μ_B)
66.68	4.0	1.756	3.24
64.13	0.0	1.133	3.05
62.46	-2.6	0.322	2.93
60.99	-4.9	-0.546	2.81

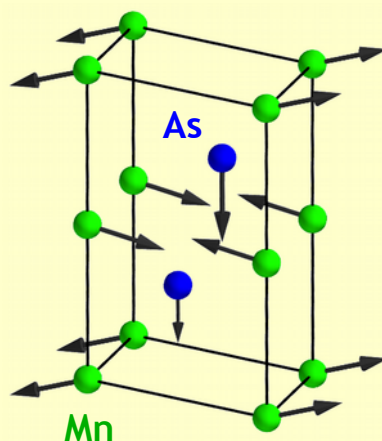
MnAs: analiza miękkiego drgania



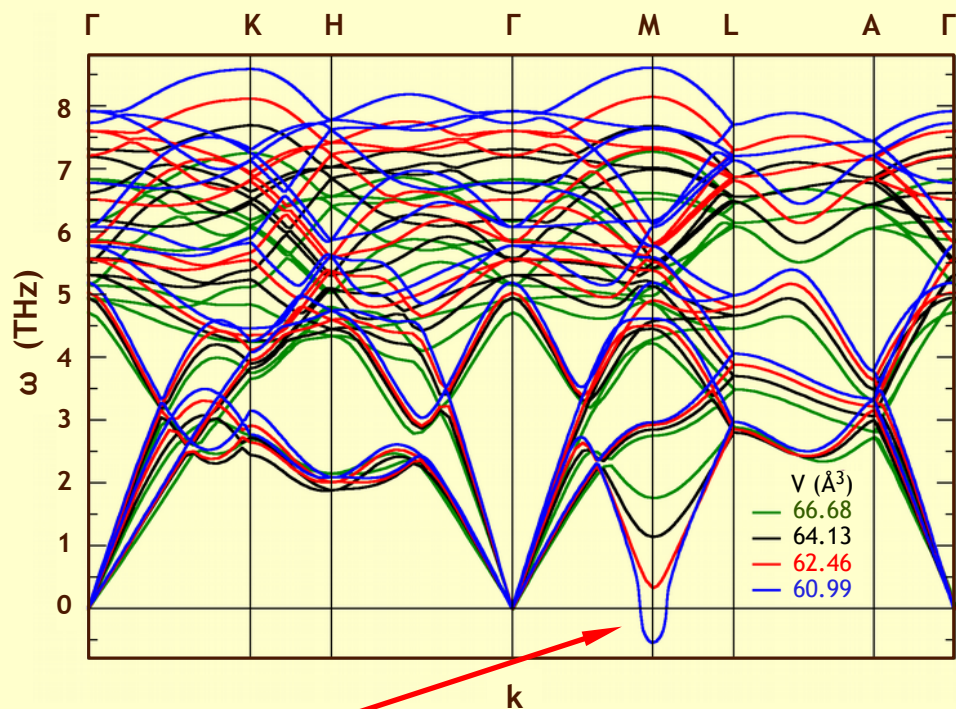
V (Å ³)	ΔV / V (%)	ω _{soft} (THz)	m (μ _B)
66.68	4.0	1.756	3.24
64.13	0.0	1.133	3.05
62.46	-2.6	0.322	2.93
60.99	-4.9	-0.546	2.81

miękki mod

wektor polaryzacji modu
w sposób ścisły określa
przemieszczenie atomów
w kryształ

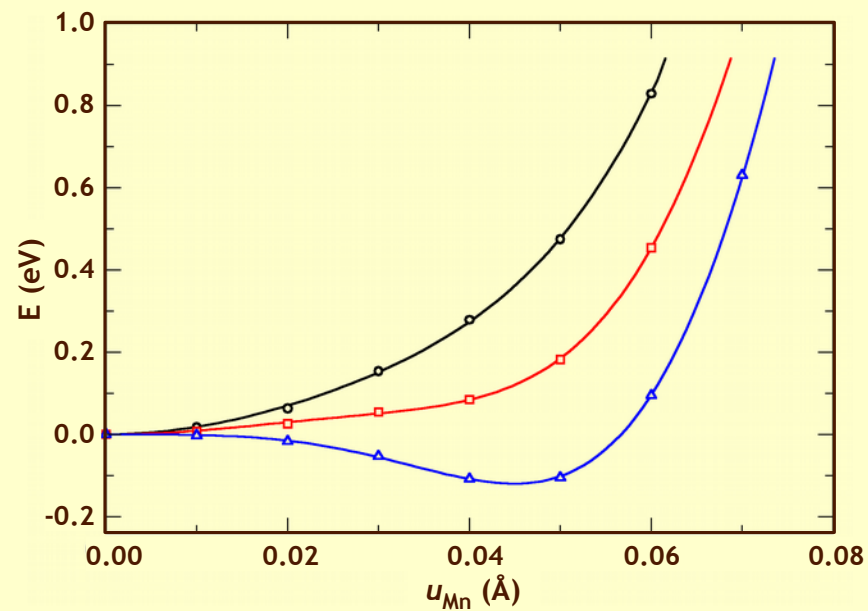
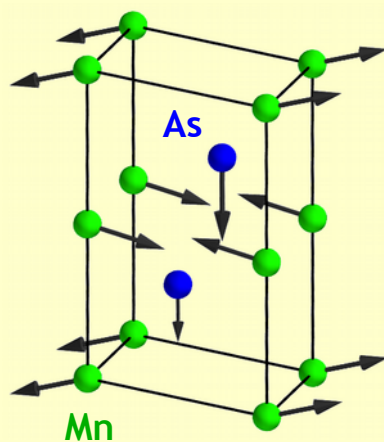


MnAs: analiza miękkiego drgania

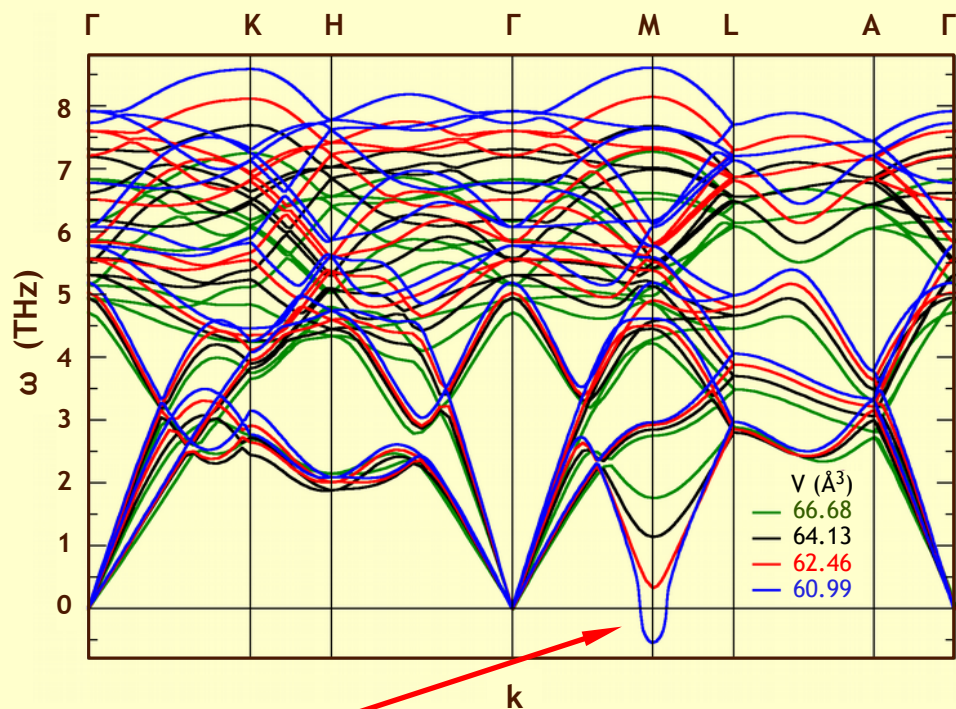


miękki mod

wektor polaryzacji modu
w sposób ścisły określa
przemieszczenie atomów
w kryształ

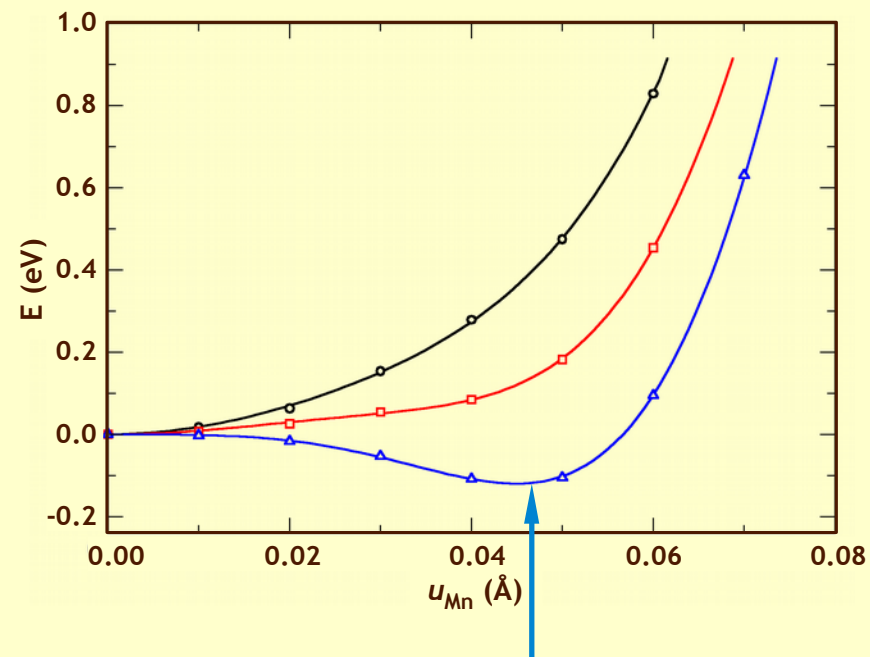
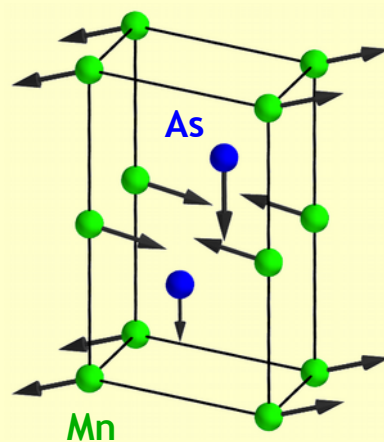


MnAs: analiza miękkiego drgania

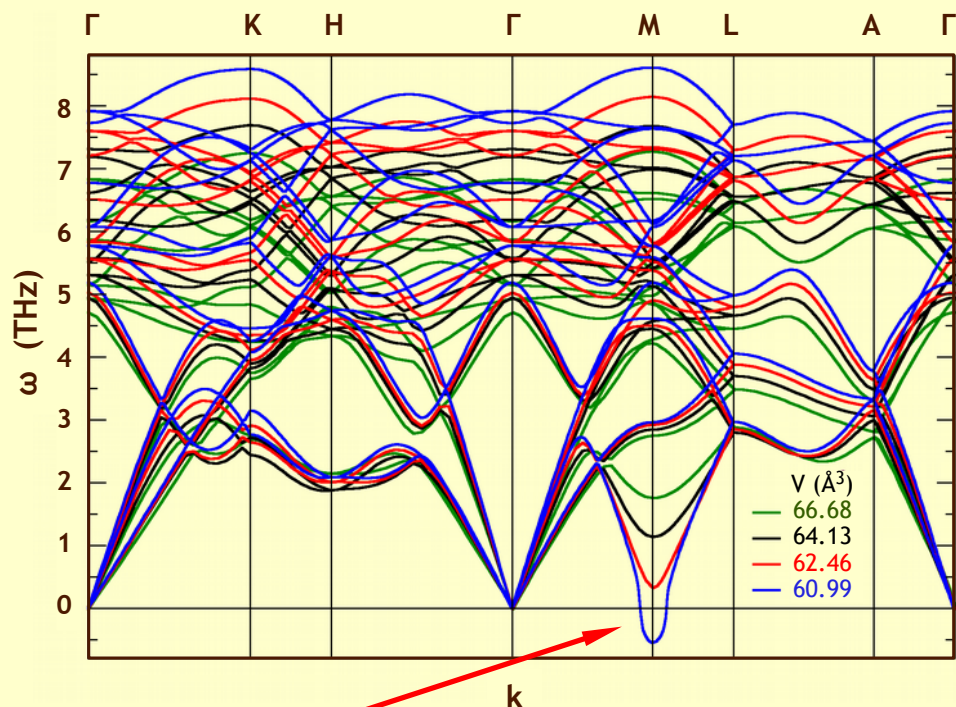


miękki mod

wektor polaryzacji modu w sposób ścisły określa przemieszczenie atomów w kryształ

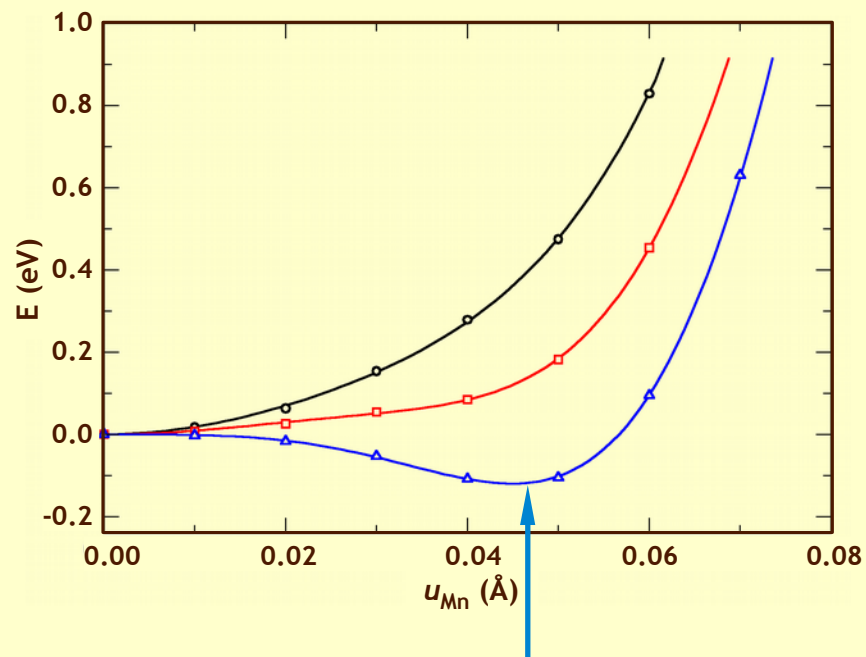
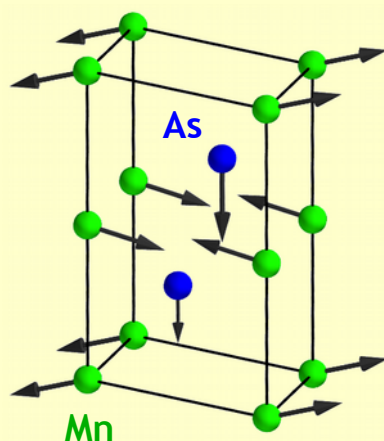


minimum energii odpowiadające fazie rombowej (amplituda drgań atomów zgodna z wartością eksp.)



miękki mod

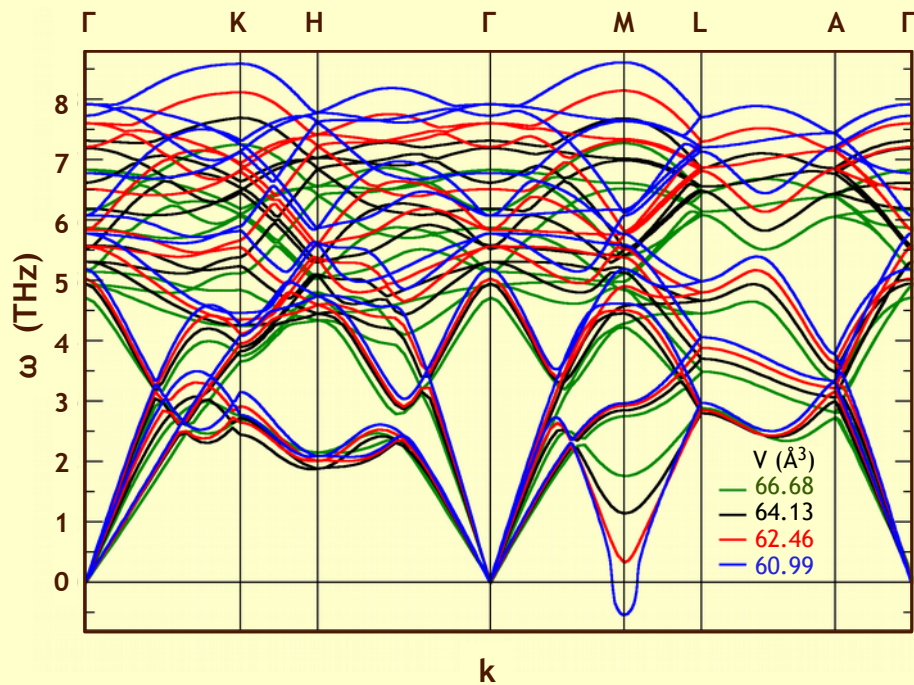
wektor polaryzacji modu w sposób ścisły określa przemieszczenie atomów w kryształ



minimum energii odpowiadające fazie rombowej (amplituda drgań atomów zgodna z wartością eksp.)

Wniosek1: znalezione miękkie drganie prowadzi do struktury rombowej obserwowanej powyżej przejścia magnetokalorycznego

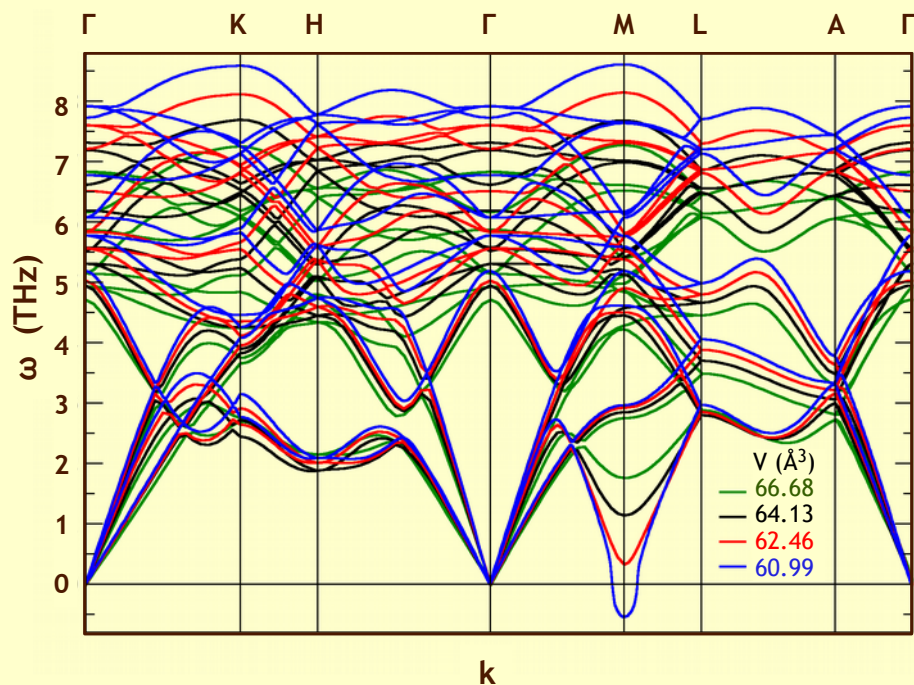
zmiany objętości



$\omega_{\text{soft}}(V), m(V)$

V (\AA^3)	$\Delta V / V$ (%)	ω_{soft} (THz)	m (μ_B)
66.68	4.0	1.756	3.24
64.13	0.0	1.133	3.05
62.46	-2.6	0.322	2.93
60.99	-4.9	-0.546	2.81

zmiany objętości



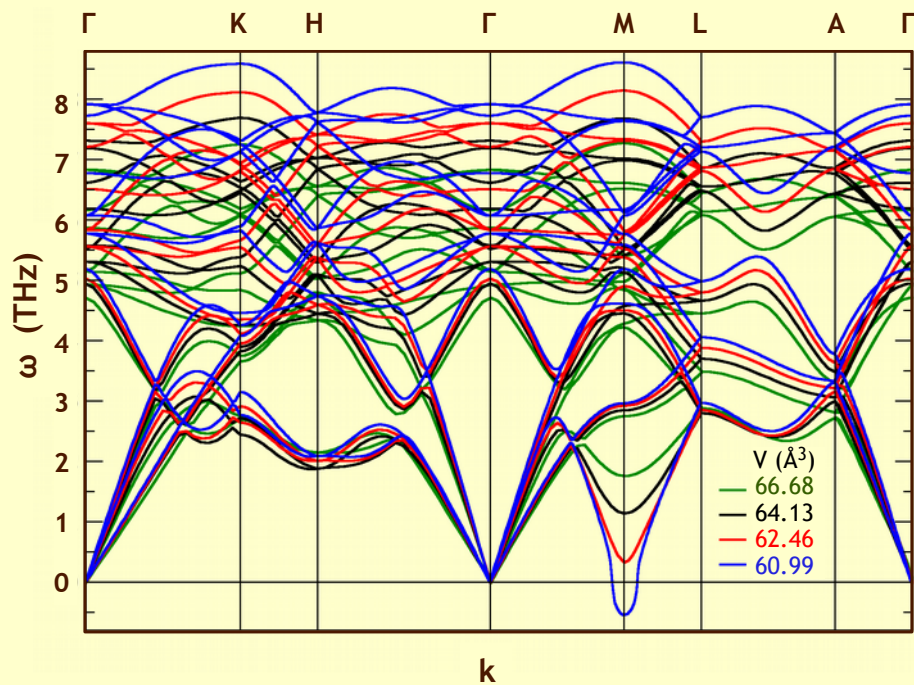
$\omega_{\text{soft}}(V), m(V)$

V (Å ³)	$\Delta V / V$ (%)	ω_{soft} (THz)	m (μ_B)
66.68	4.0	1.756	3.24
64.13	0.0	1.133	3.05
62.46	-2.6	0.322	2.93
60.99	-4.9	-0.546	2.81

MnAs jest metalem

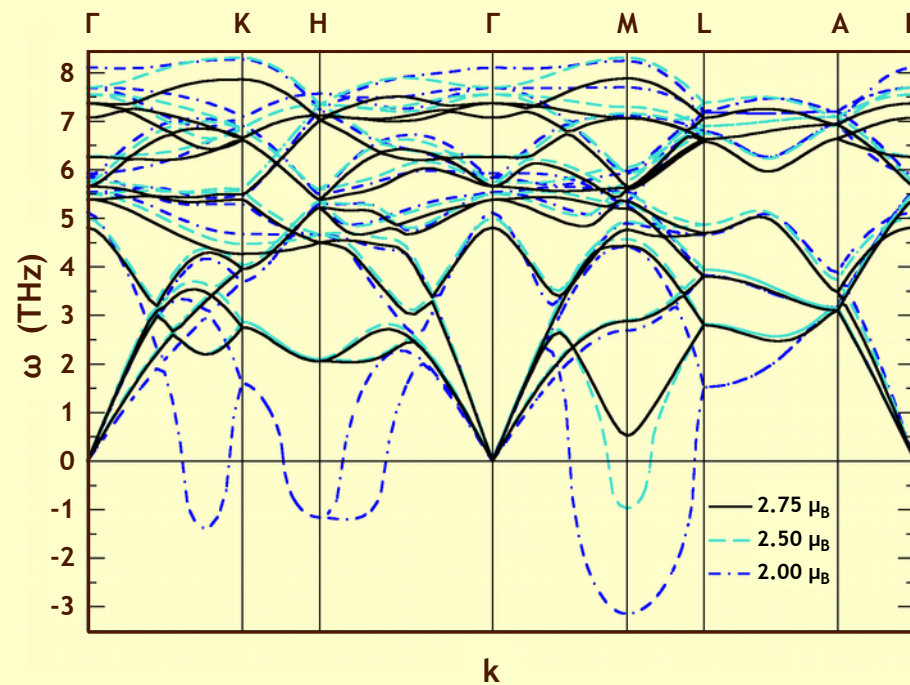
(w metalach: magnetyzm pasmowy z momentem magnetycznym zależnym od lokalnego potencjału)

zmiany objętości



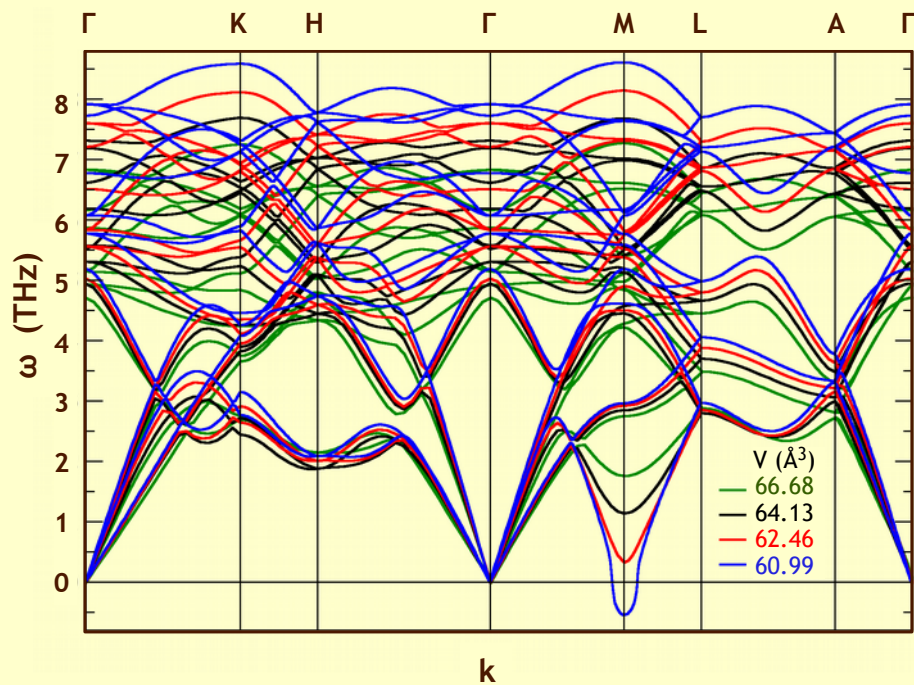
$\omega_{\text{soft}}(V), m(V)$

zmiany całkowitego momentu magn.



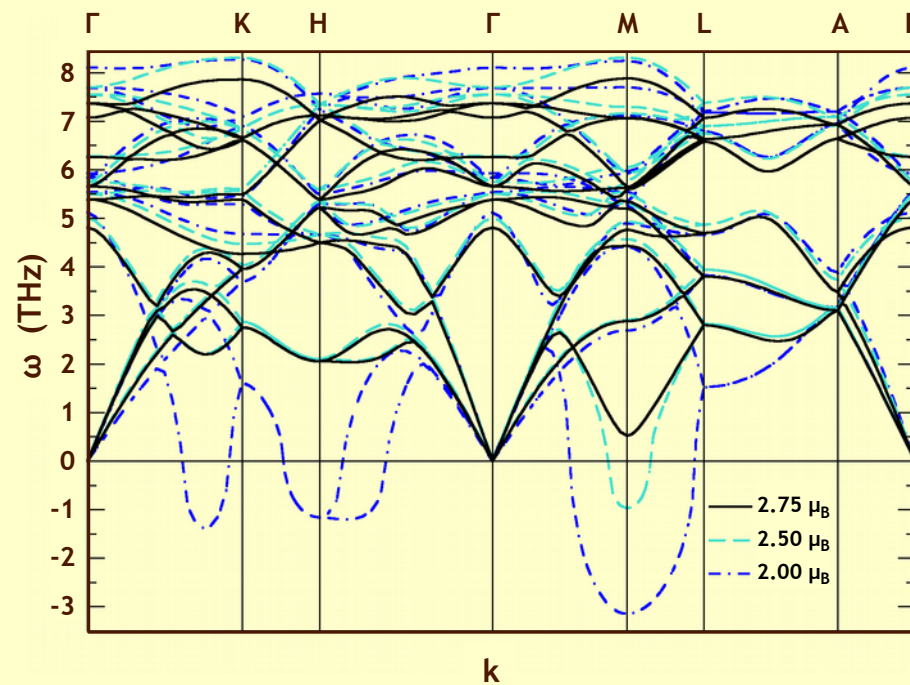
$\omega_{\text{soft}}(m)$

zmiany objętości



$\omega_{\text{soft}}(V), m(V)$

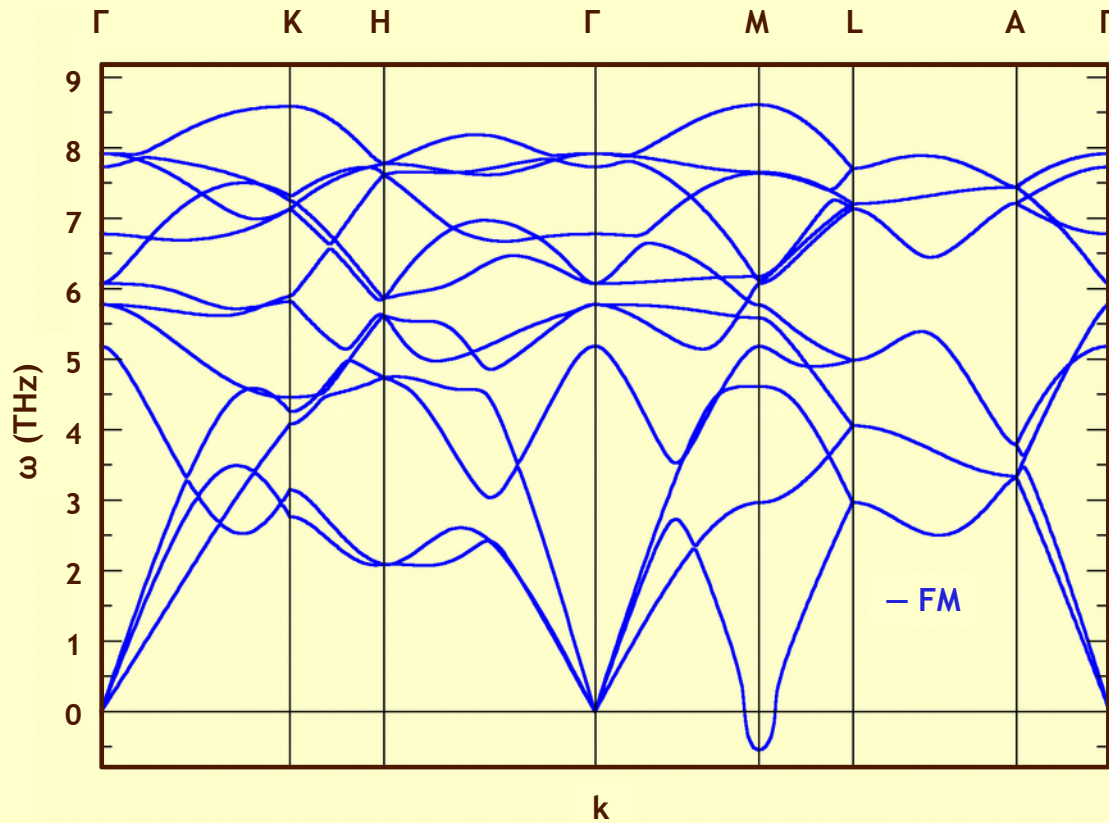
zmiany całkowitego momentu magn.



$\omega_{\text{soft}}(m)$

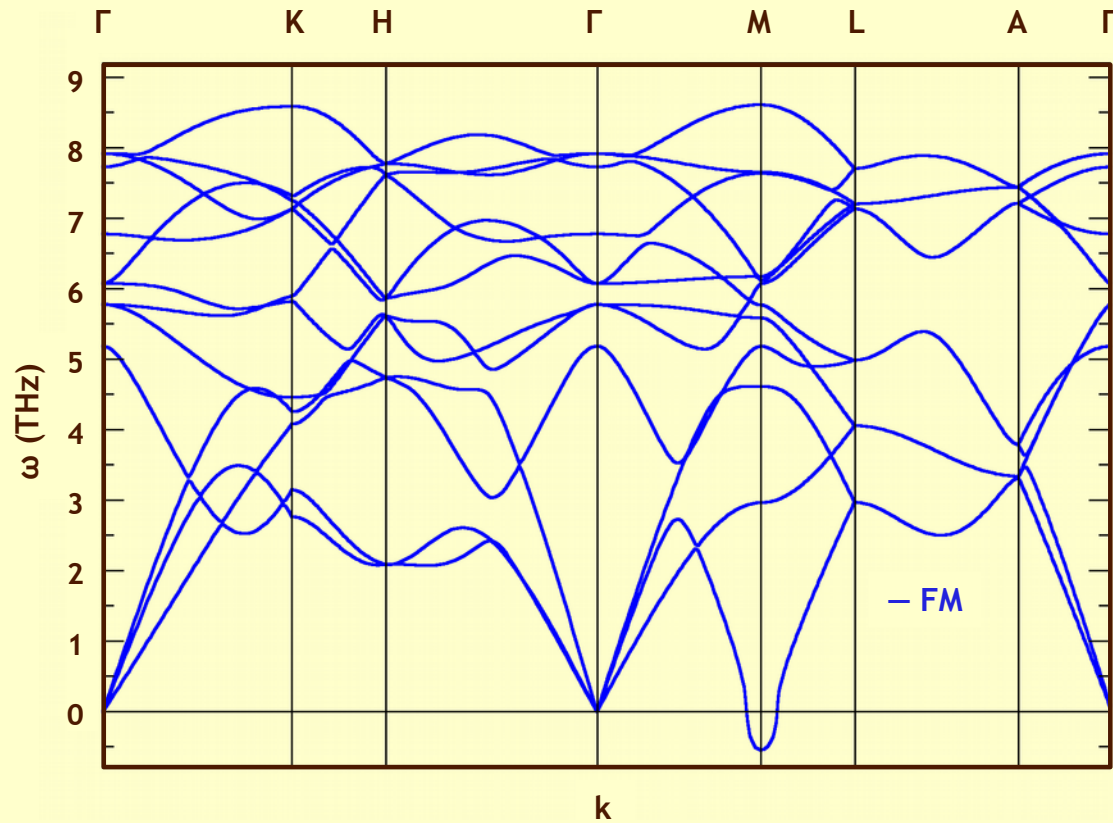
Wniosek2: istnieje bardzo silne sprzężenie pomiędzy momentem magnetycznym a miękkim drganiem

MnAs: kondensacja miękkiego modu i kolaps objętości



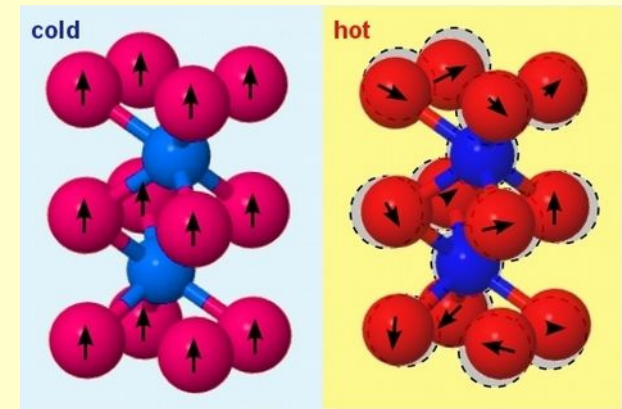
sym. heksagonalna, FM, $V = 60.99 \text{ \AA}^3$

MnAs: kondensacja miękkiego modu i kolaps objętości

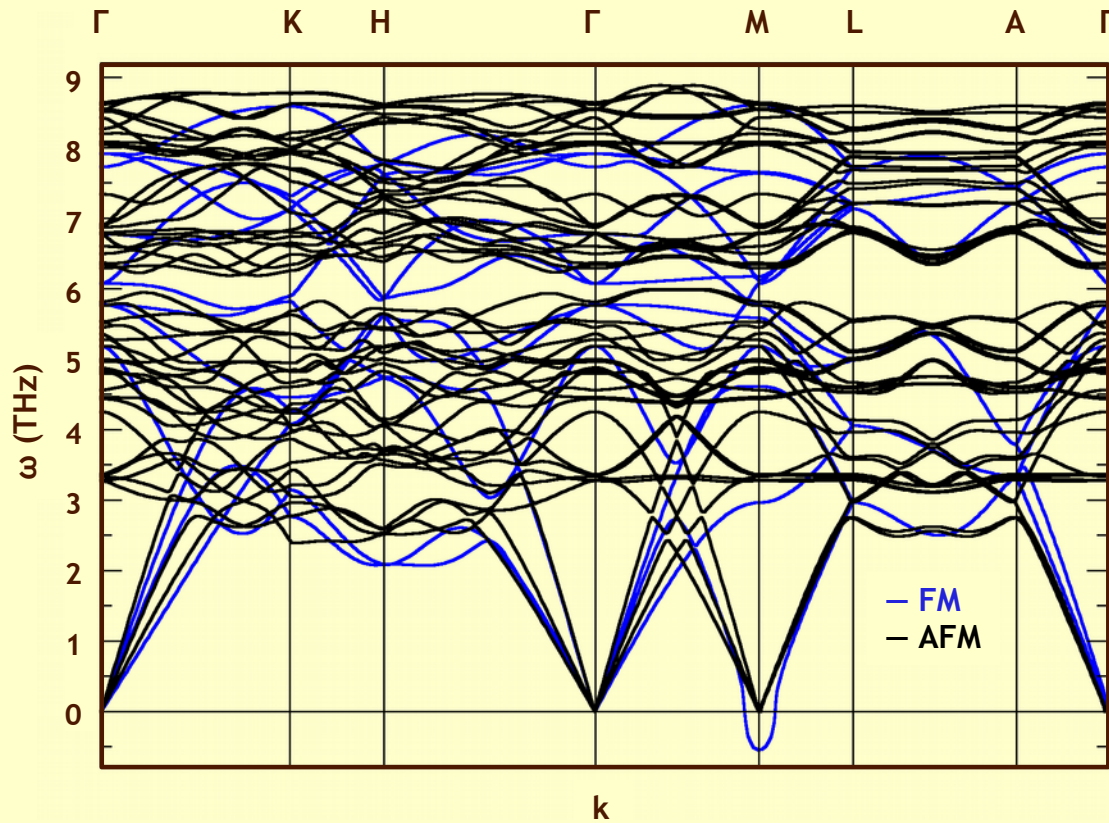


sym. heksagonalna, FM, $V = 60.99 \text{ \AA}^3$

- + deformacja e_{soft}
- + rozporządkowanie momentów



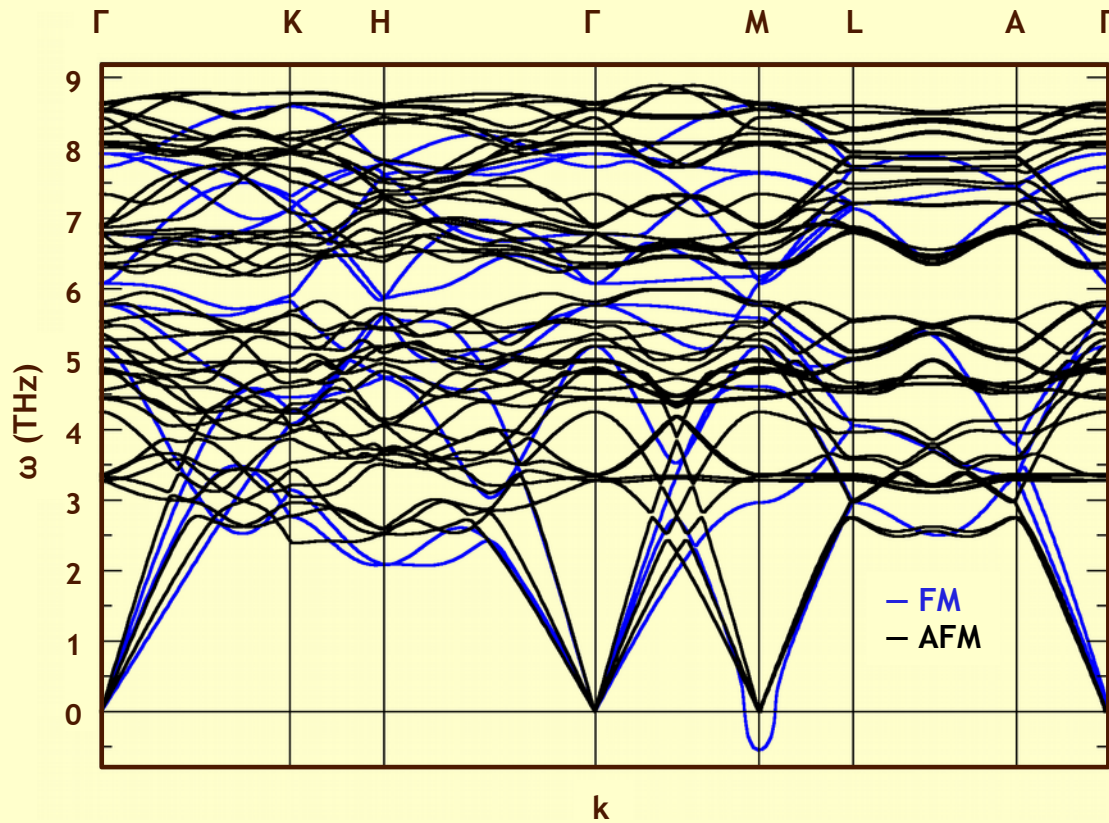
MnAs: kondensacja miękkiego modu i kolaps objętości



sym. heksagonalna, FM, $V = 60.99 \text{ \AA}^3$

sym. rombowa, AFM, $V = 57.06 \text{ \AA}^3$

MnAs: kondensacja miękkiego modu i kolaps objętości

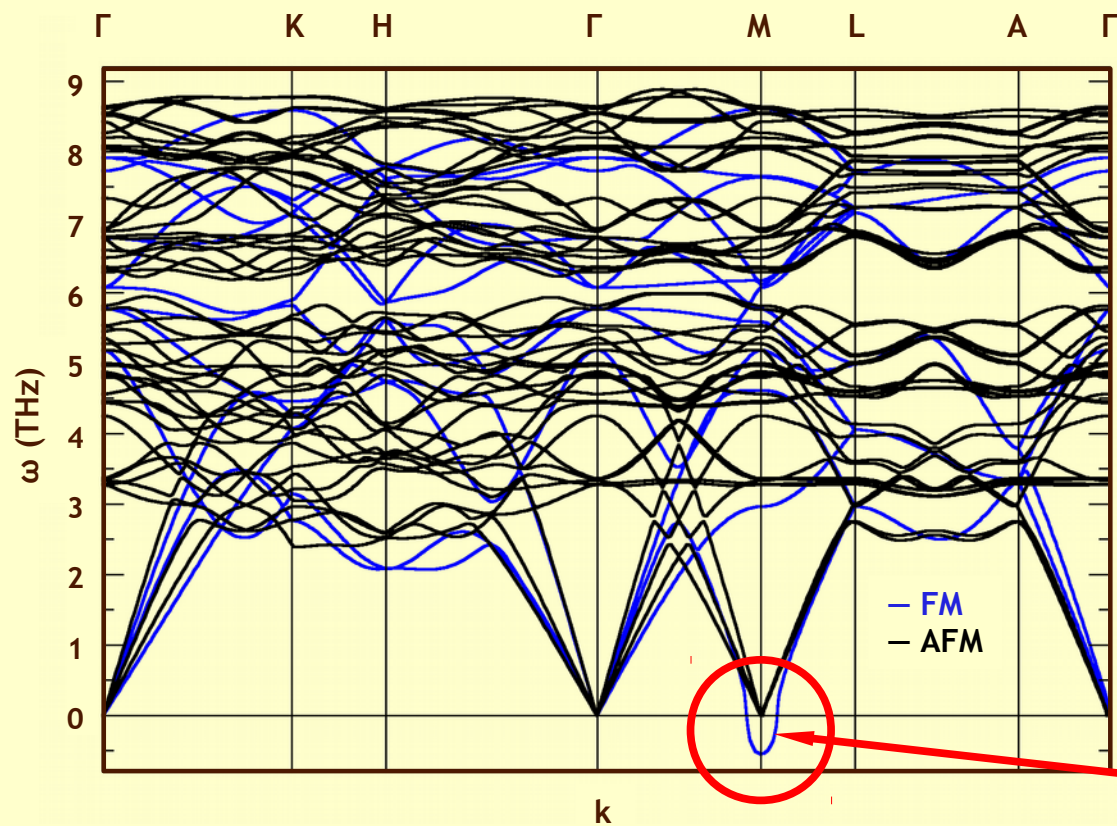


sym. heksagonalna, FM,
sym. rombowa, AFM,

$V = 60.99 \text{ \AA}^3$
 $V = 57.06 \text{ \AA}^3$

↑
kolaps
objętości

MnAs: kondensacja miękkiego modu i kolaps objętości



sym. heksagonalna, FM,
sym. rombowa, AFM,

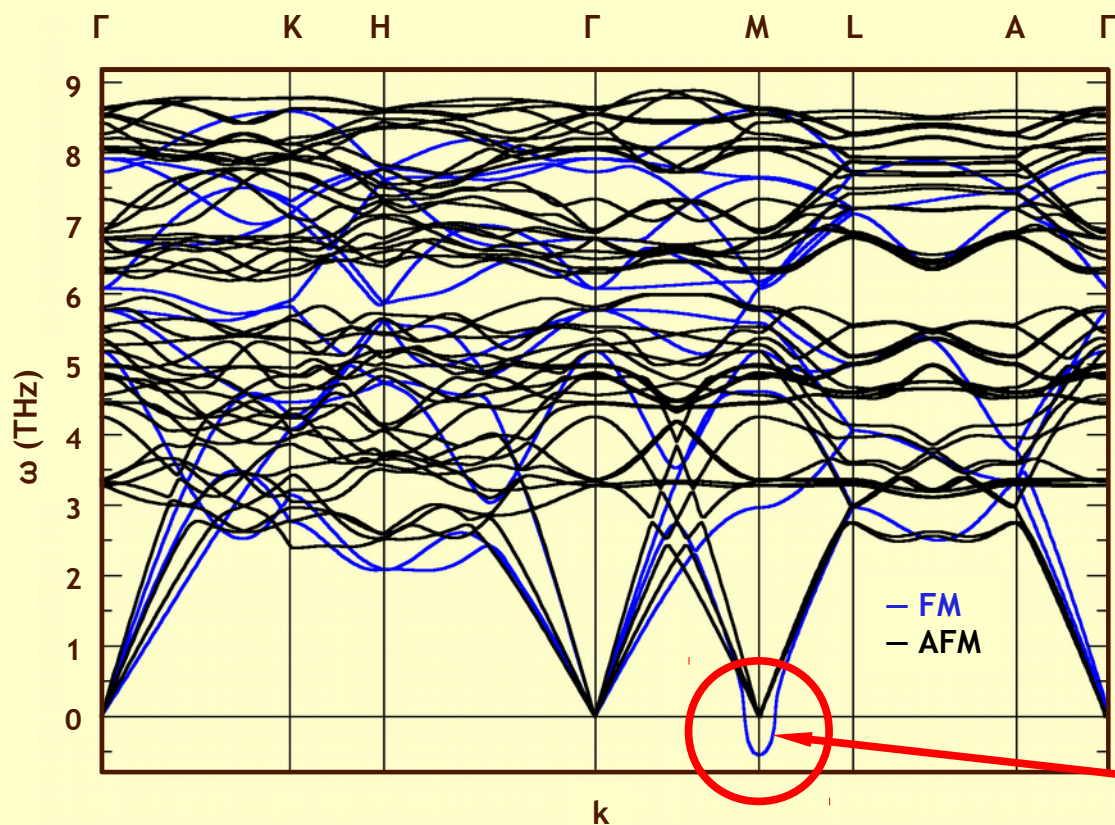
$$V = 60.99 \text{ \AA}^3$$

$$V = 57.06 \text{ \AA}^3$$

↑
kolaps
objętości

kondensacja miękkiego modu
(punkt M staje się punktem Γ)

MnAs: kondensacja miękkiego modu i kolaps objętości



sym. heksagonalna, FM,
sym. rombowa, AFM,

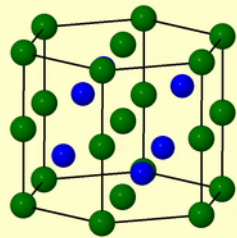
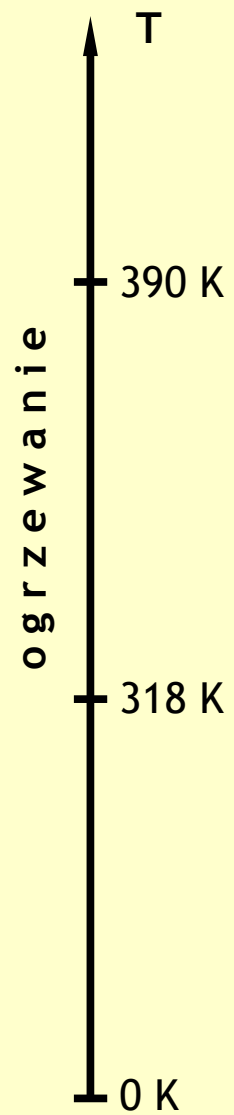
$$V = 60.99 \text{ \AA}^3$$

$$V = 57.06 \text{ \AA}^3$$

kolaps
objętości

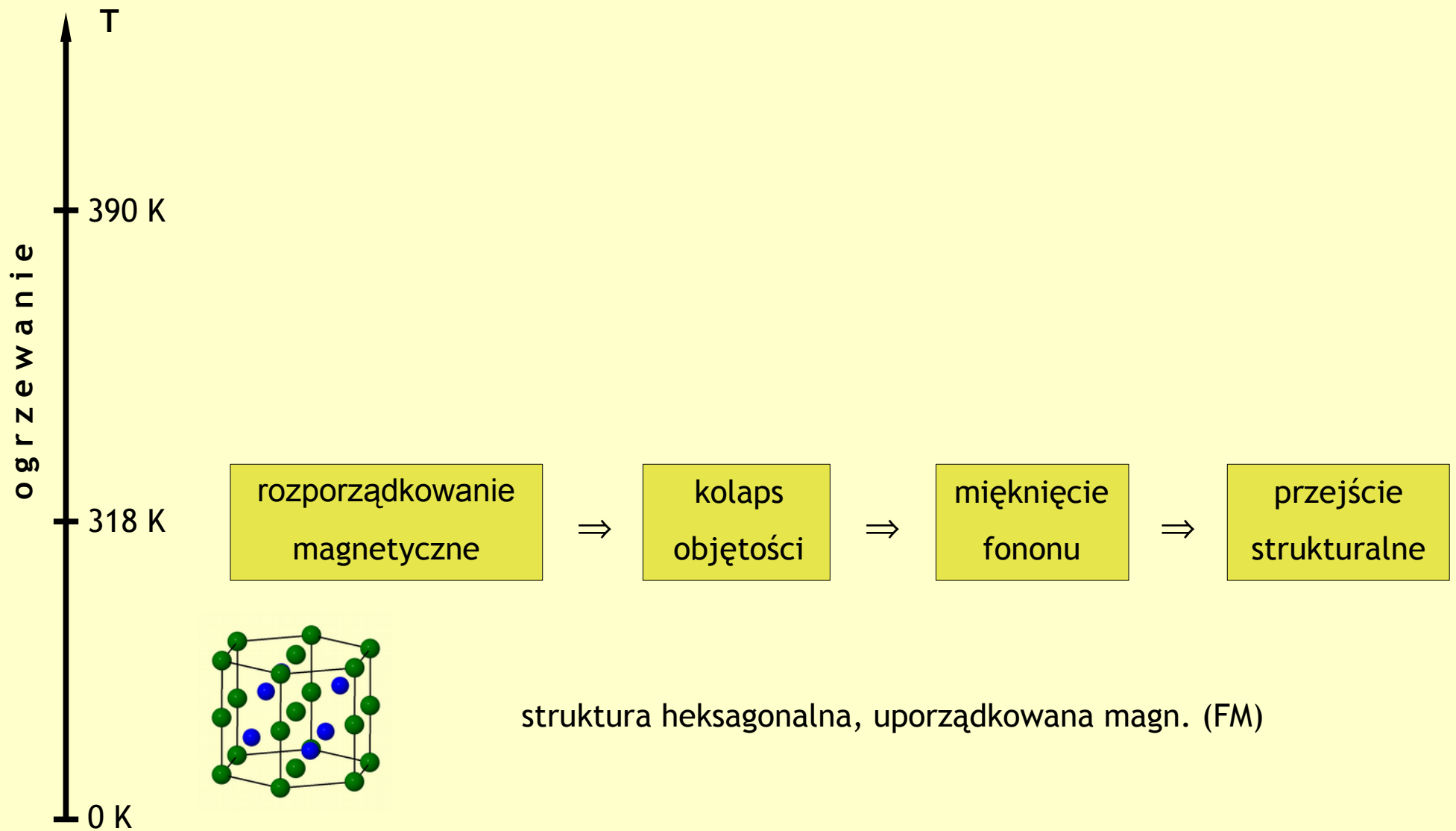
kondensacja miękkiego modu
(punkt M staje się punktem Γ)

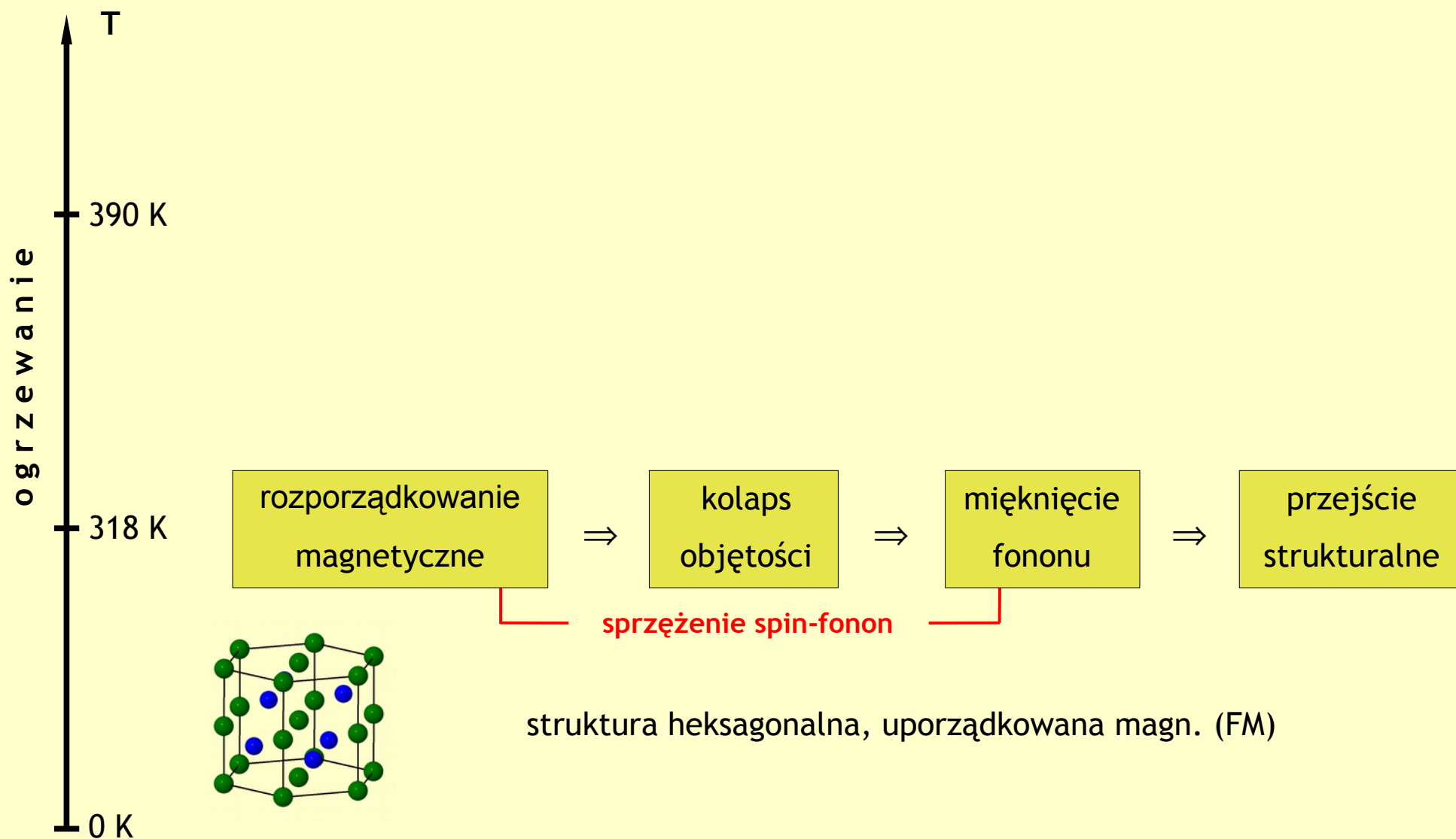
Wniosek3: magnetyczne rozporządkowanie prowadzi do kolapsu objętości i stabilizacji struktury rombowej przez kondensację miękkiego modu



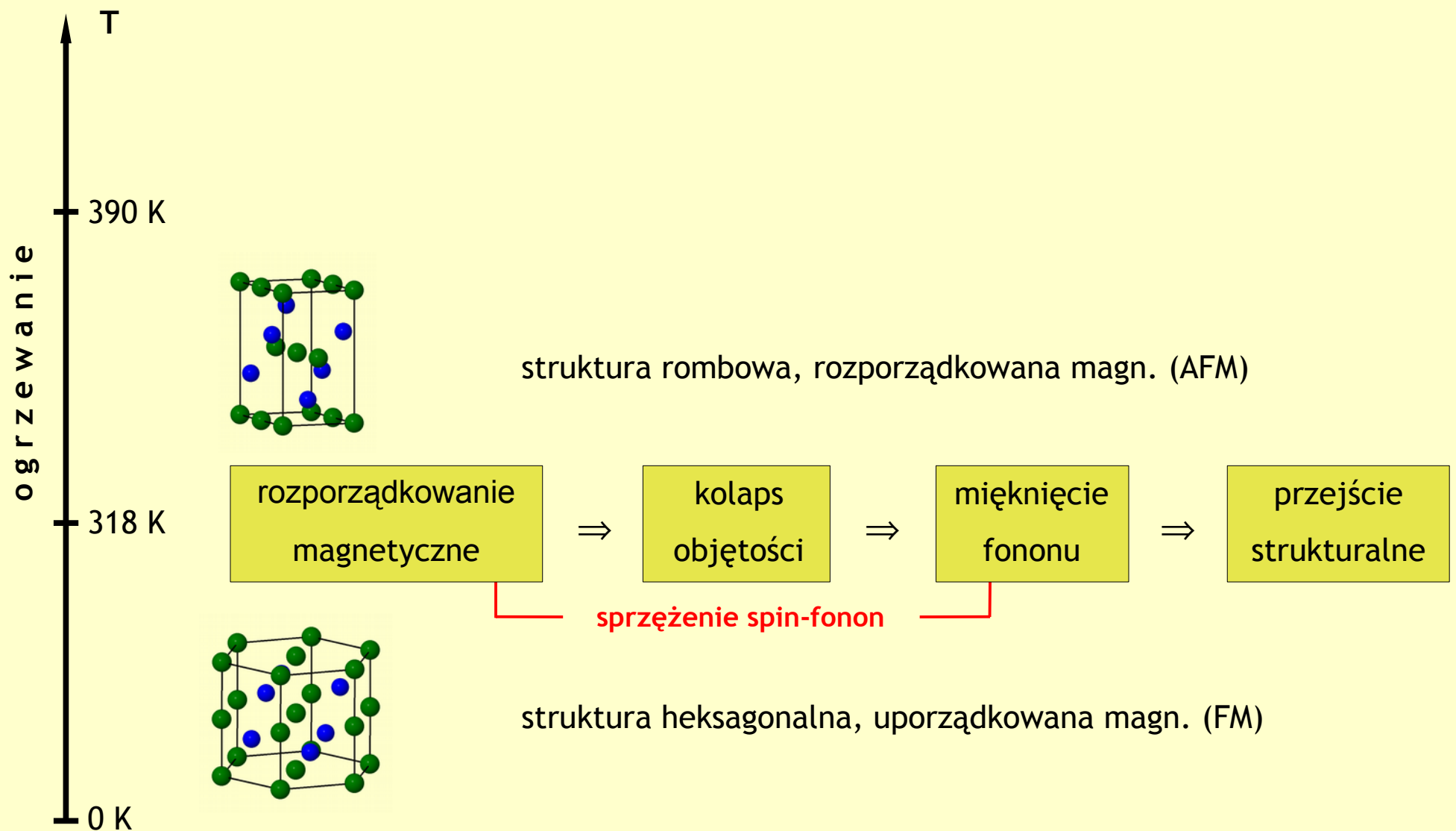
struktura heksagonalna, uporządkowana magn. (FM)

MnAs: mechanizm przejść fazowych

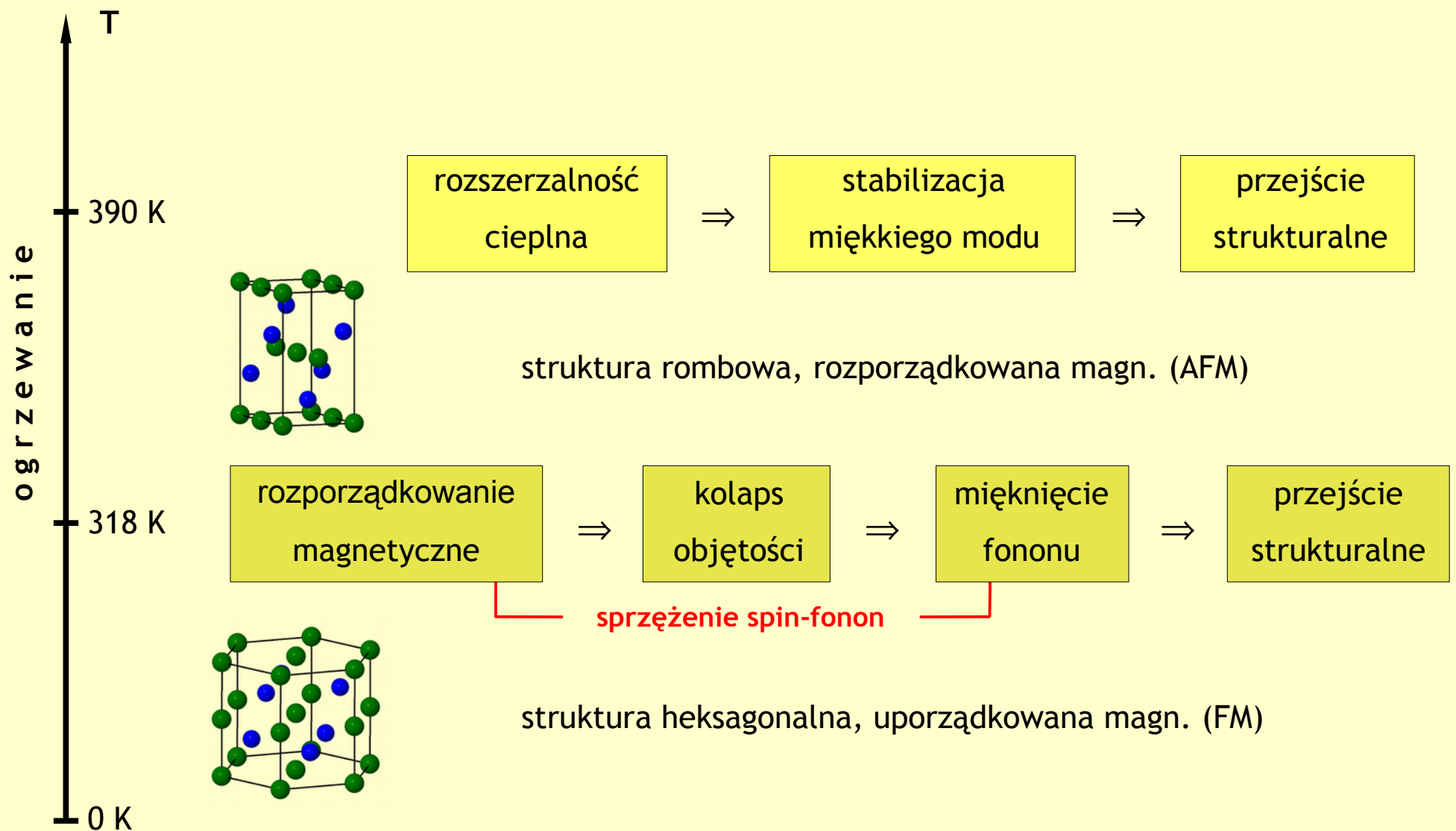




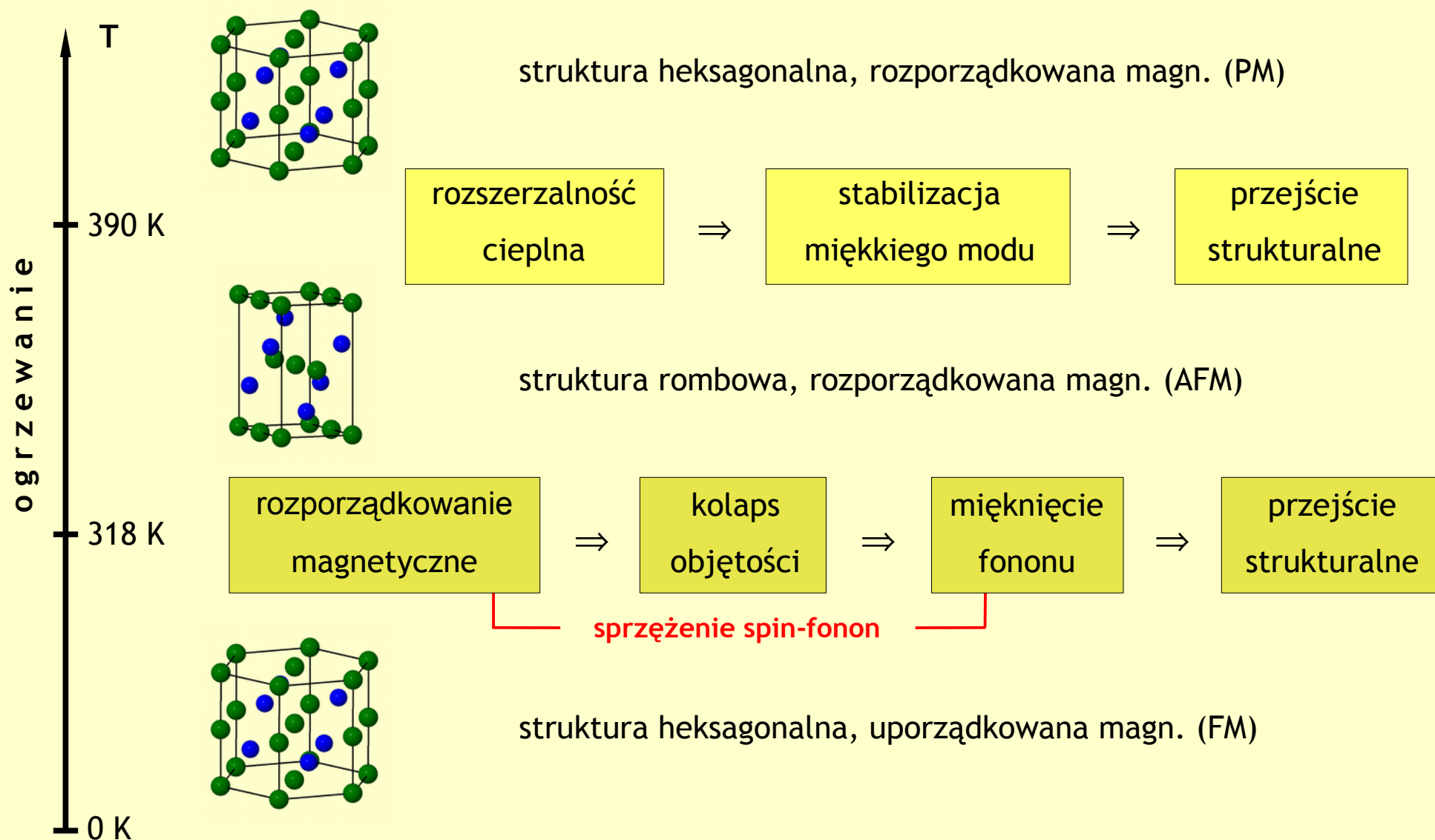
MnAs: mechanizm przejść fazowych



MnAs: mechanizm przejść fazowych



MnAs: mechanizm przejść fazowych



dziękuję za uwagę !

