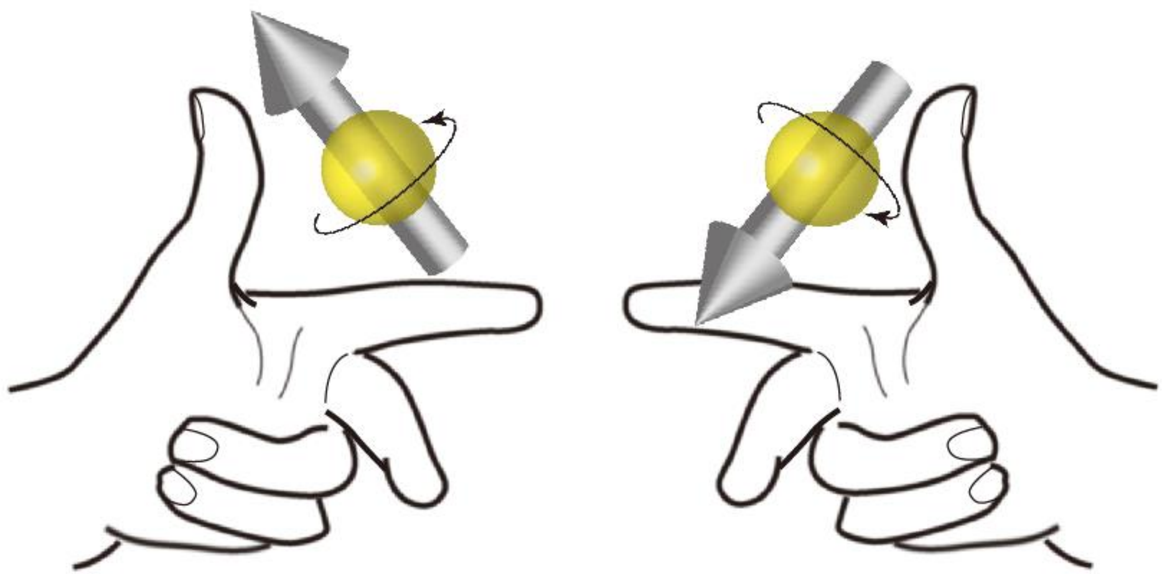
新潟大学集中講義

# 複雑磁気構造と群論

岸根順一郎（放送大学）



# 凝縮系理論（特に電子系の理論）

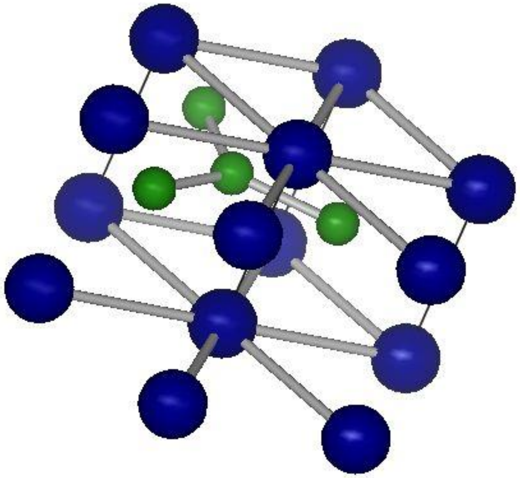
1. 結晶構造と電子状態
2. モデル構築
3. 安定（基底）状態
4. 素励起
5. 応答

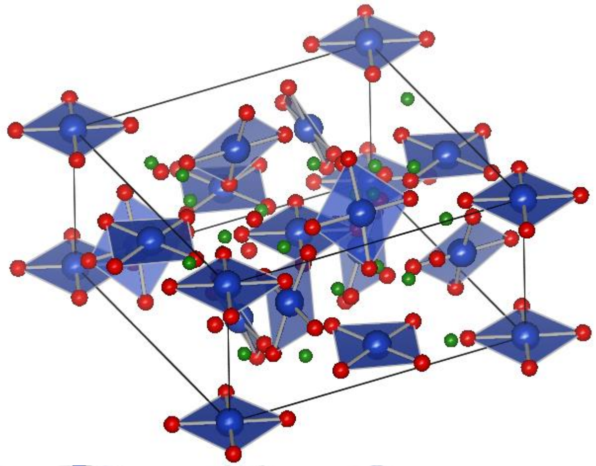
# 構造
# 〜対称性・表現・不変量〜

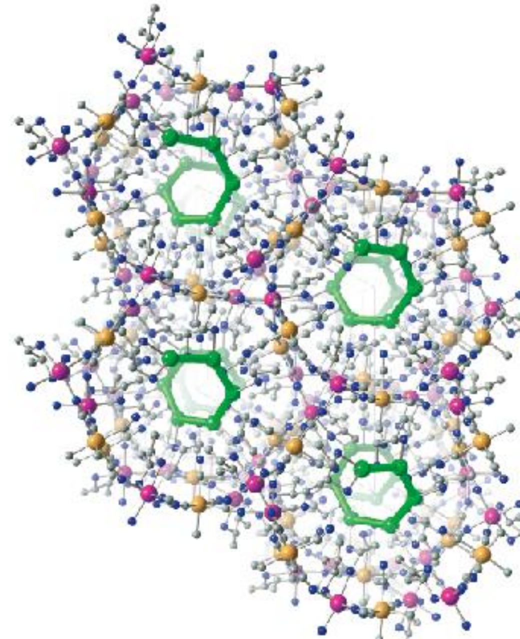
※構造　＝　結晶構造、磁気構造

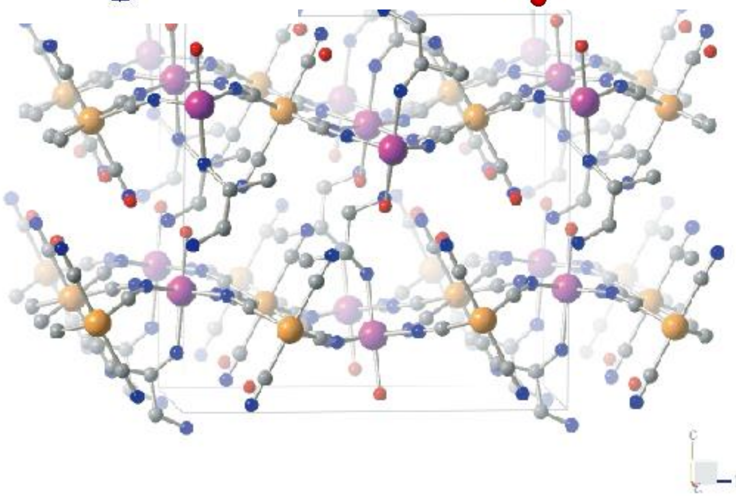
# 込み入った話をはじめるまえに

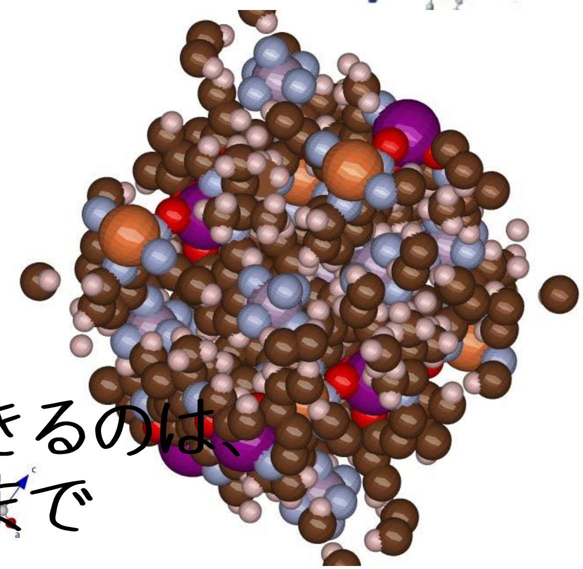
# 単純か複雑か











目の子で磁気構造が予想（想像？）できるのは、
ユニットセルにせいぜい磁性原子２個まで

# 物質科学の理論 ⊂ 物性理論

機能の種
スピン・電荷・軌道
どう並べる
非結晶
生物物質科学
結晶
Symmetry
並進対称性
Start
電子状態
素過程
巨視的対称性
巨視的機能
Goal
Hamiltonian
エネルギースケール
相互作用の繰り込み
Landau理論
Lagrangian
有効 Lagrangian
Energetics

FEAR OF PHYSICS ——A Guide for the Perplexed

〈数理を愉しむ〉シリーズ

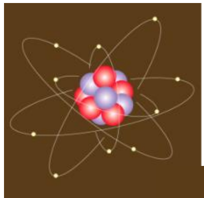
# 物理学者はマルがお好き

牛を球とみなして始める
物理学的発想法

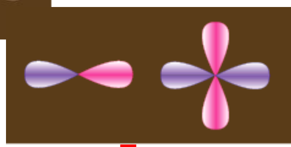
ローレンス・M・クラウス
青木薫・訳

早川書房

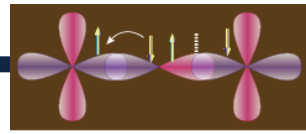
# 物理と化学



原子軌道



ミクロな素過程

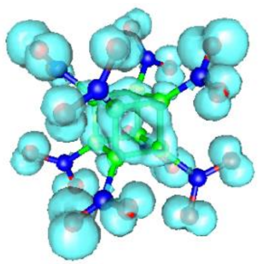


細かい構造は積極的に捨象
⇒ 物理現象としての普遍性
(More is different, P. W. Anderson)

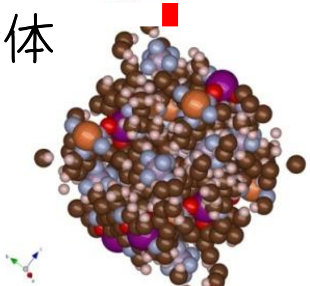
物理

Universality

分子軌道



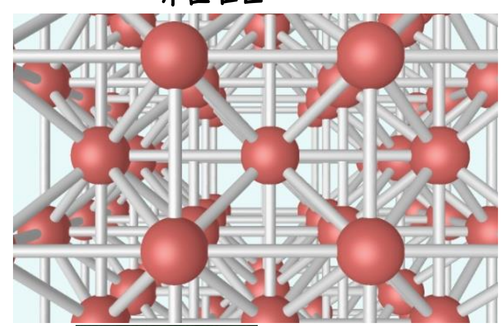
錯体

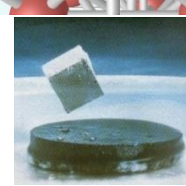


化学

モジュールの高設計性/多様性
Architecture/Diversity

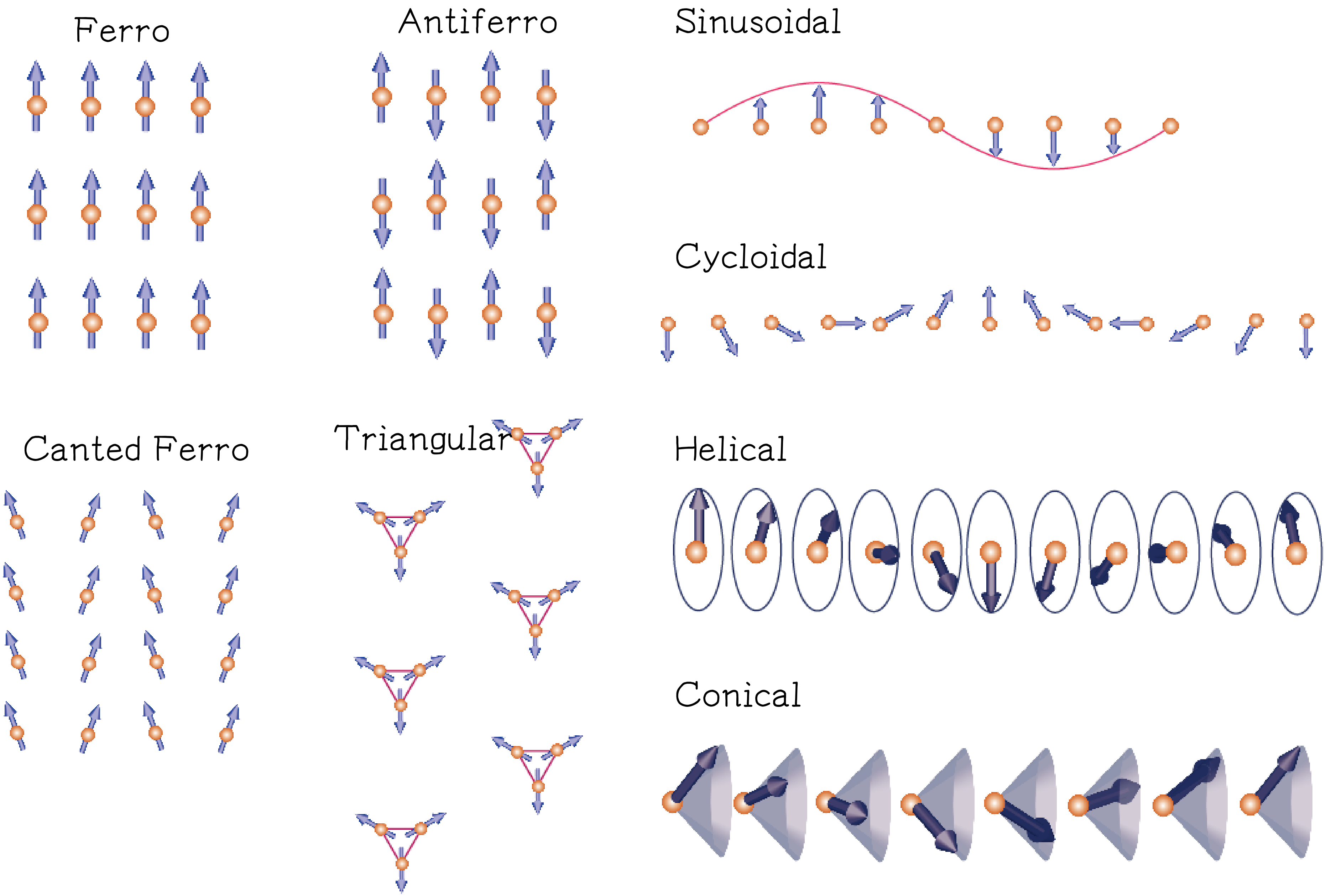
結晶





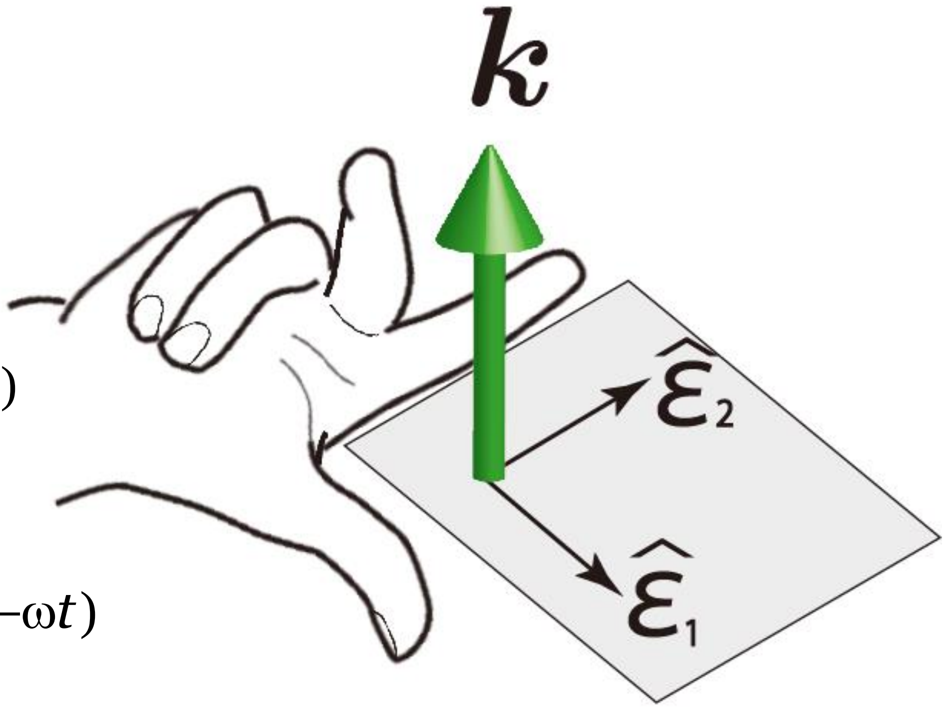
物性・機能
Functionality

# 磁気構造


Ferro
Antiferro
Sinusoidal
Cycloidal
Canted Ferro
Triangular
Helical
Conical

# 基底 と 伝播ベクトル

## 例：偏光




$$\vec{E}(\vec{r},t)=\left(\hat{\varepsilon}_1E_1+\hat{\varepsilon}_2E_2\right)e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$

$$\vec{E}(\vec{r},t)=E_0\left(\hat{\varepsilon}_1\pm i\,\hat{\varepsilon}_2\right)e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$

$$\Rightarrow\begin{cases}\mathrm{Re}\,E_x(\vec{r},t)=E_0\cos(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)\\ \mathrm{Re}\,E_y(\vec{r},t)=\pm E_0\sin(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)\end{cases}$$

＋右回り円偏光
－左回り円偏光

# 磁気構造　＝　基底　＋　伝播ベクトル

特定の既約表現

基底ベクトル

磁気モーメント

$$\vec{m}_{j,\vec{k}} = \boxed{\vec{\Psi}^{\nu}_{j,\vec{k}}}\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{t}}$$

伝播ベクトル

ゼロブロック内の
どの磁性原子か

特定の波数

並進ベクトル

※2次相転移の場合だけ考える
※不変性理論と表現論

# 磁気構造の分類

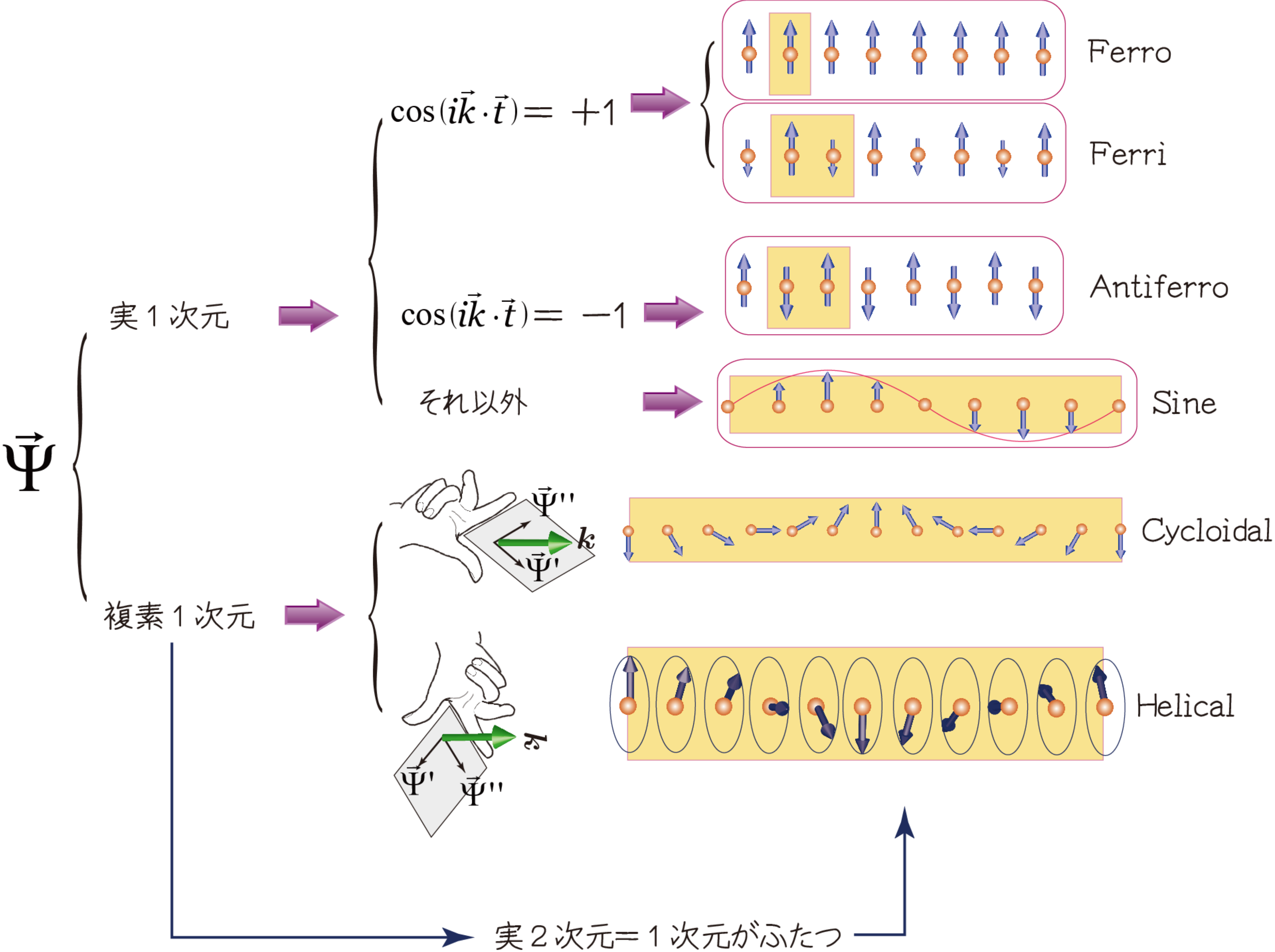
基底ベクトルは一般に複素数

$$\boxed{\vec{\Psi}' + i\,\vec{\Psi}''}$$

$$\vec{m} = \vec{\Psi}\exp\left(-i\vec{k}\cdot\vec{t}\,\right)$$

$$\Longrightarrow \boxed{\vec{\Psi}'\cos\left(i\vec{k}\cdot\vec{t}\,\right) + \vec{\Psi}''\sin\left(i\vec{k}\cdot\vec{t}\,\right)}$$

実部を
取り出す



$\vec{\Psi}$
実１次元
$\cos(i\vec{k}\cdot\vec{t}) = +1$
Ferro
Ferri
$\cos(i\vec{k}\cdot\vec{t}) = -1$
Antiferro
それ以外
Sine
複素１次元
$\vec{\Psi}''$
$\vec{\Psi}'$
$k$
Cycloidal
Helical
実２次元＝１次元がふたつ

# 複雑磁気構造決定のレシピ

Step 1. 結晶空間群G、磁性原子のワイコフ位置決定

Step 2. 伝播ベクトル$\boldsymbol{k}$を適当に仮定する ← 中性子で決まり

Step 3. $\boldsymbol{k}$ を不変にする群（k群） $G_k$ を定める

Step 4. 磁性原子の巡回群$G_{perm}$を定める

Step 5. 軸性ベクトル群$G_{axial}$を定める

Step 6. $G_{perm} \times G_{axial}$を$G_k$の既約表現に分解する

Step 7. 各既約表現ごとに基底ベクトルを作る（射影演算子法）

Step 8. 基底 ＋ $\boldsymbol{k}$ ＝ 磁気構造！

Step 9. 磁気構造の候補を安定化する模型を作って解析、磁化データなどなどと比較して整合性をチェック

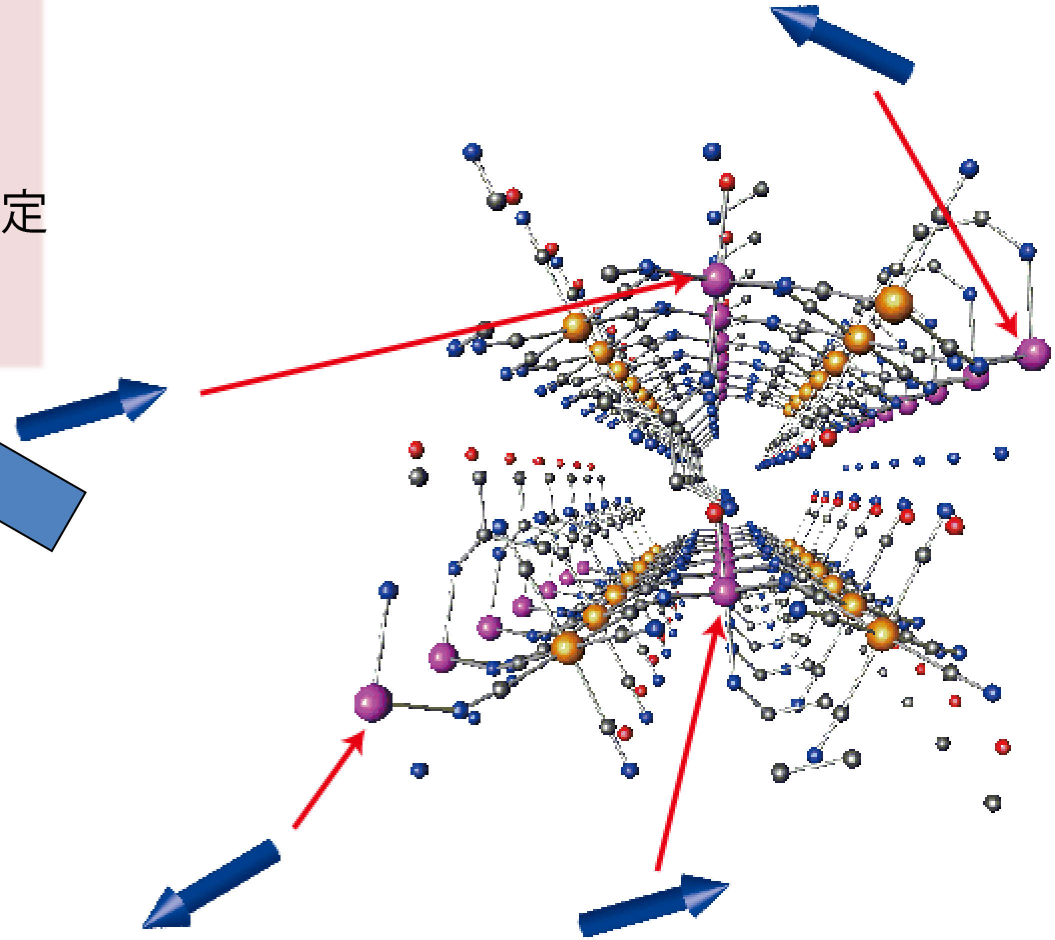
結晶構造データだけで
可能な磁気構造をご提案します

# 磁気構造を決める
# ＝磁性原子サイトに
# 古典スピン（軸性ベクトル）を割り当てる

点群(32)
↓
空間群(230)
↓
変調ベクトルk (incommensurate)の指定
↓
k群＝伝搬ベクトルkの群

既約分解

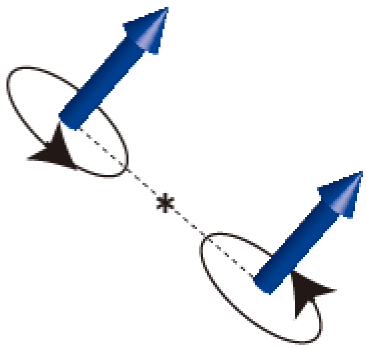
対称性と適合した既約表現空間
＝可能な正しい磁気構造の基底



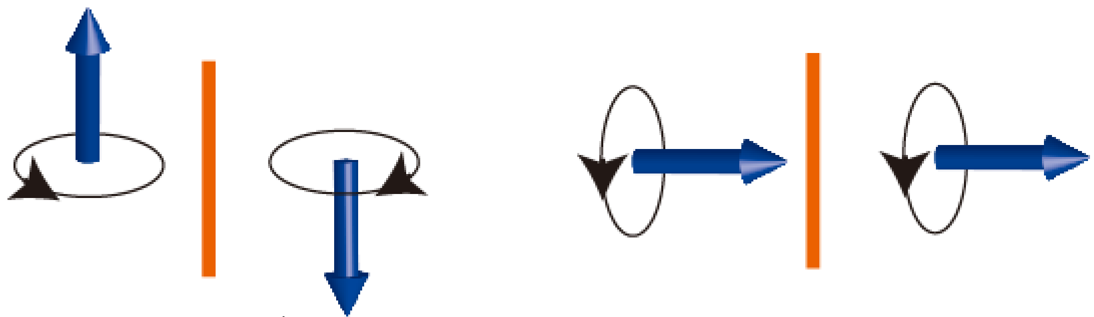
Not invariance but representatio

# 古典スピン＝軸性ベクトル

$$\boxed{\det(I)}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{pmatrix}$$



反転操作に対して不変

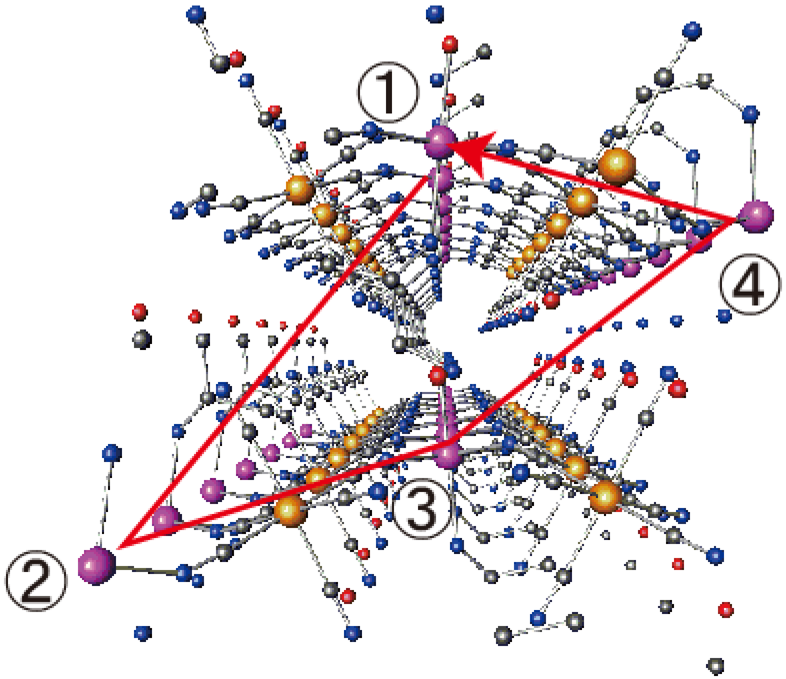


鏡面成分が反転

電気分極、原子変位
→　極性ベクトル

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -P_x \\ -P_y \\ -P_z \end{pmatrix}$$

# Wyckoff 軌道上の巡回




Ex.　対称操作gによって

① → ②

③ → ④

$$\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$\longrightarrow$

指標

$$g(\vec{r}_i) = \vec{r}_j$$

$$\Gamma_{Wyckoff} = \mathrm{Tr}P = 0$$

# 長周期磁性構造の表現空間

磁気構造表現　　Wycoff巡回表現　　軸性ベクトル表現

$$\Gamma_{magnetic} = \Gamma_{Wycoff} \otimes \Gamma_{axial}$$

表現の指標

$$\chi_{magnetic} = \chi_{Wycoff} \otimes \chi_{axial}$$

$$\Gamma_{magnetic} = \sum_{\nu} n_{\nu} \Gamma_{\nu}$$

K群の既約表現に既約分解

同じ表現が何回現れるか

$$n_{\nu} = \frac{1}{n(G_k)} \sum_{g \in G_k} \chi_{\Gamma_{magnetic}}(g)\, \chi_{\Gamma_{\nu}}(g)^*$$

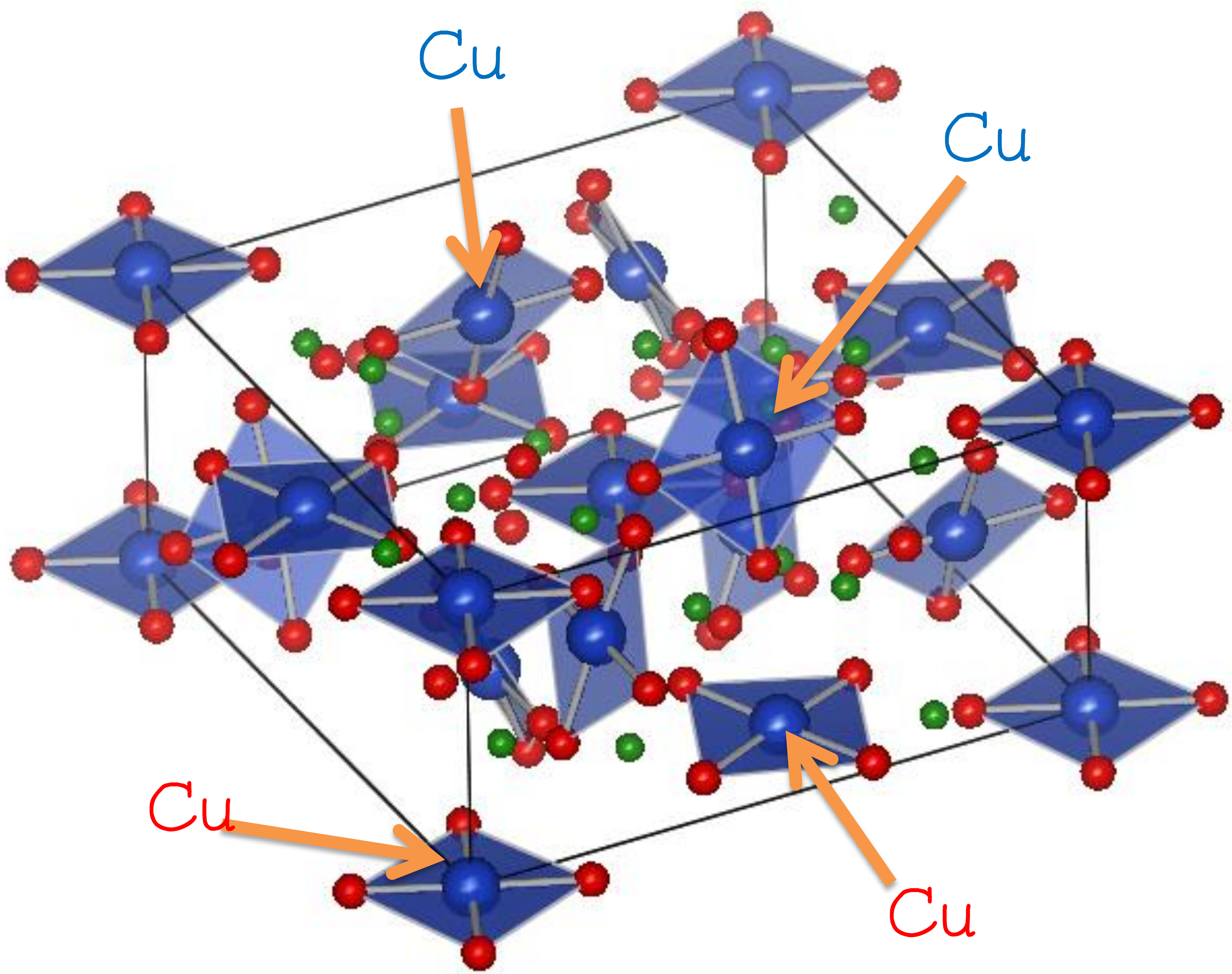
# 最後に可能な磁気構造の基底ベクトルを探し出す

射影演算子によって基底ベクトルを取り出す

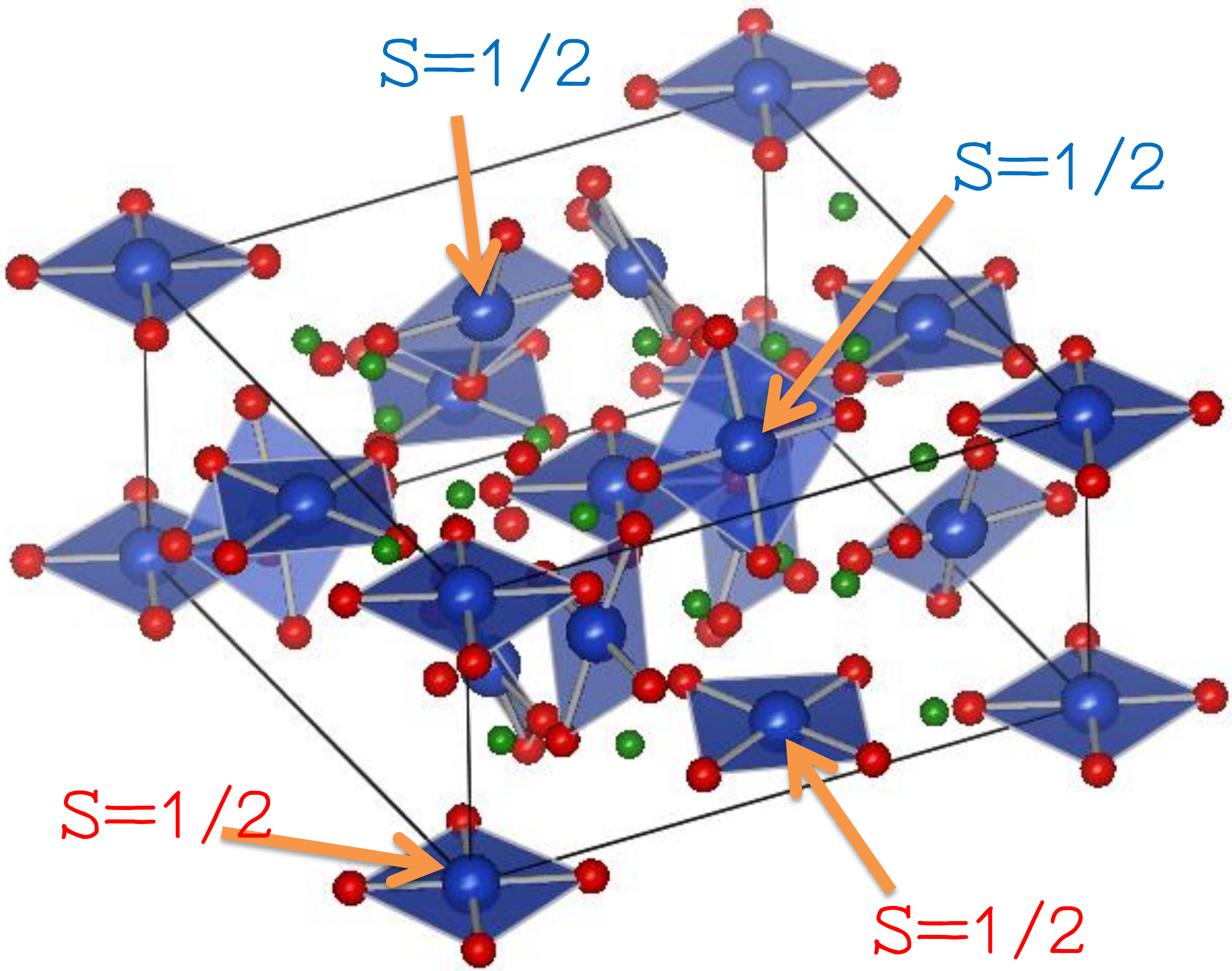
$$\vec{\Psi}^{\lambda}_{i,\nu} = \sum_{g\in G_k} D^{\lambda}_{\nu}{}^{*}(g) \sum_{i} \delta_{i,gi} \det(g)\, g\, \vec{\phi}_{\alpha}$$

K群の要素　K群の要素　Wyckoff　軸性変換　試行基底

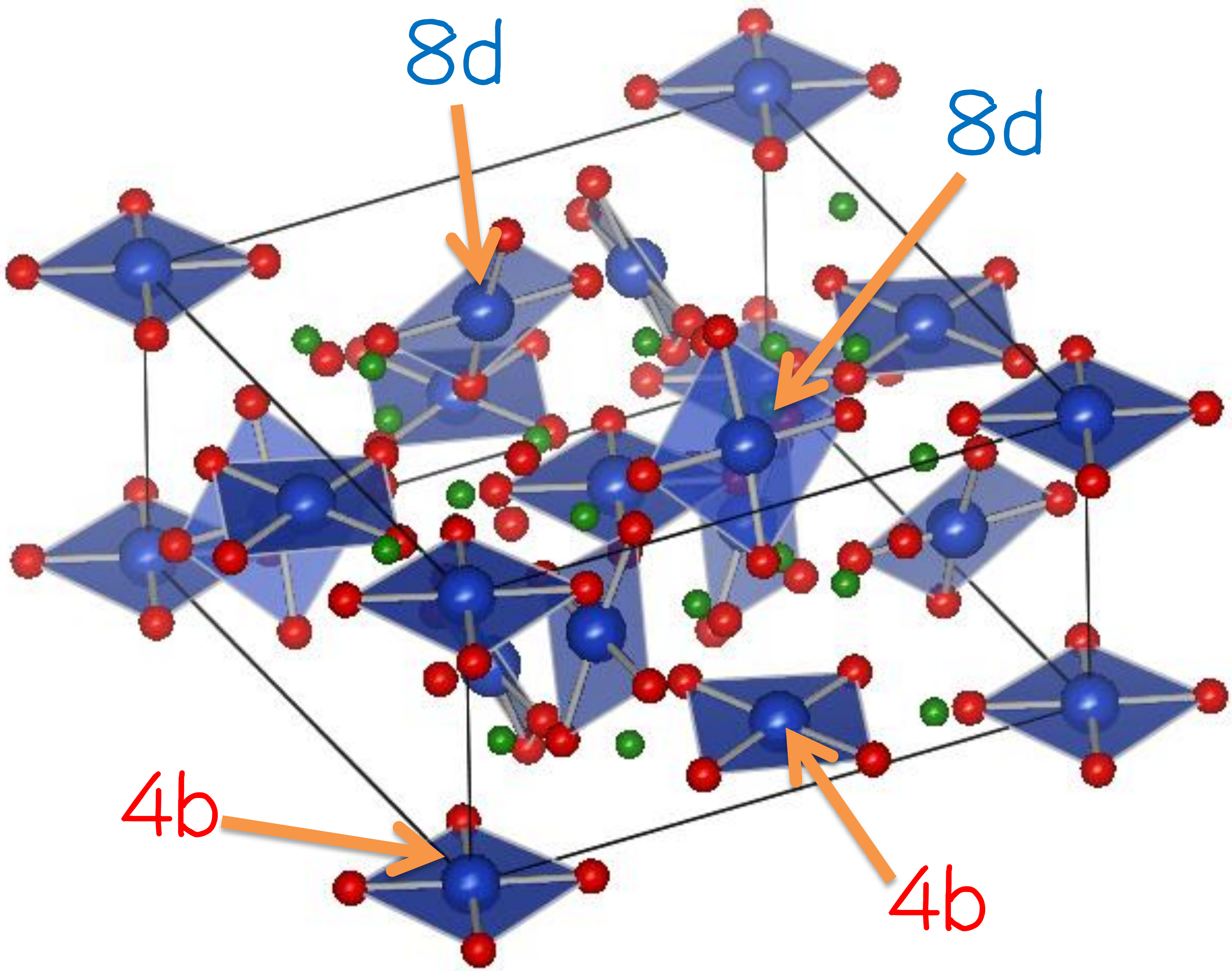
# $CuB_2O_4$：結晶構造



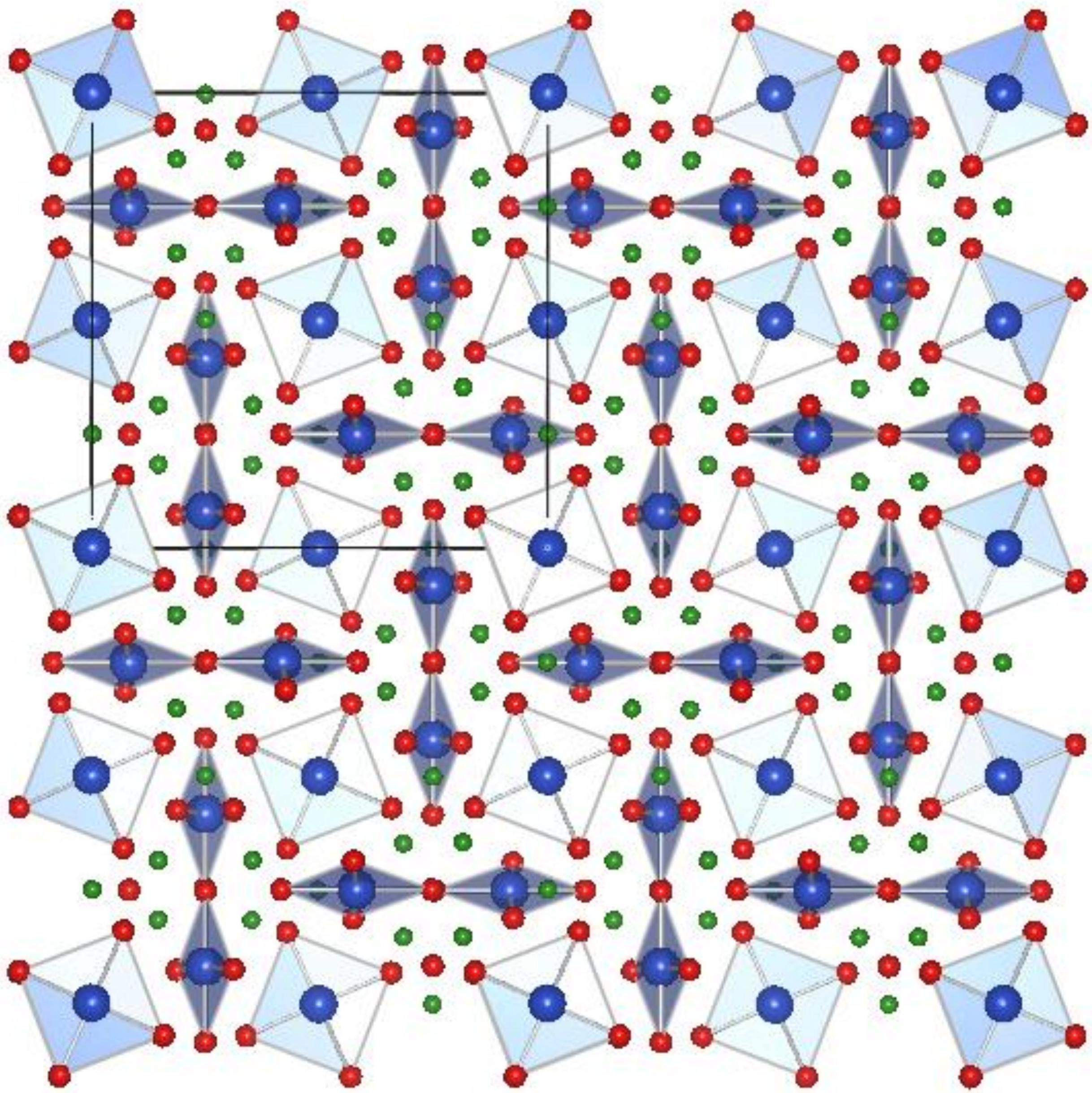
# $CuB_2O_4$：スピン



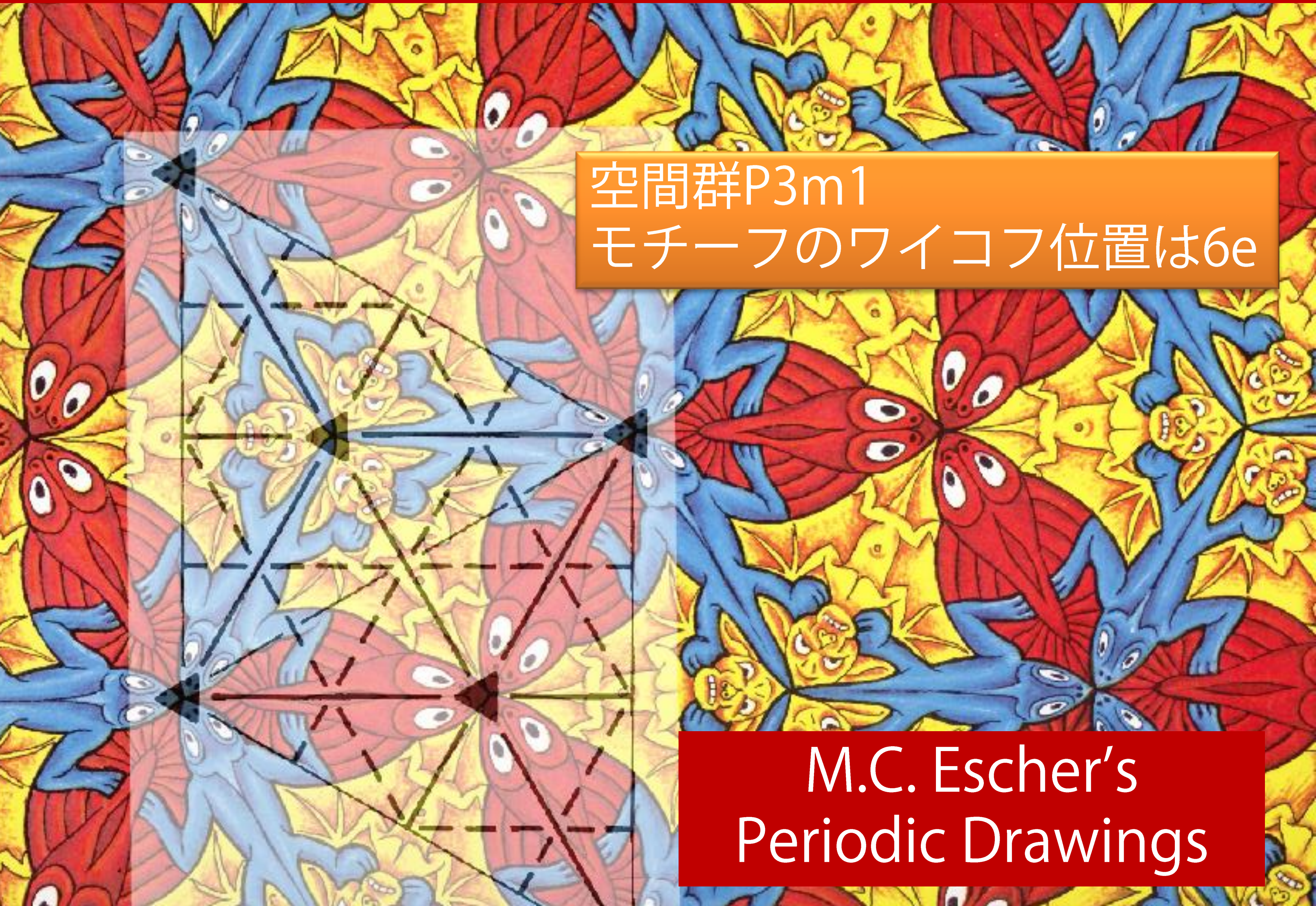
# $CuB_2O_4$：Cuのワイコフ位置



# 結晶構造＝zeroth block ＋ 並進操作



# 結晶学

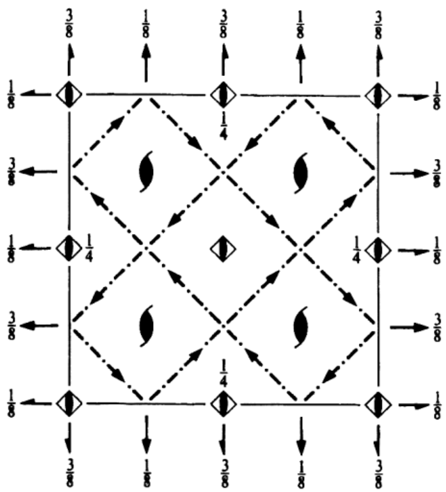


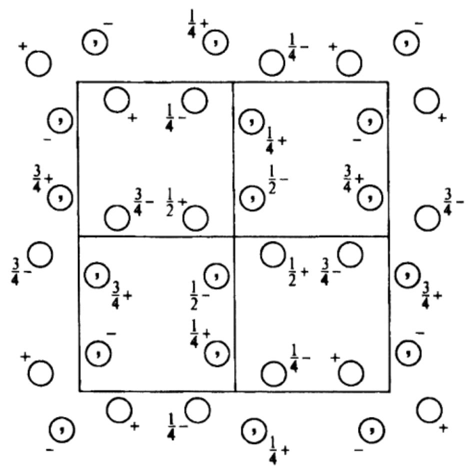
空間群P3m1
モチーフのワイコフ位置は6e

M.C. Escher's
Periodic Drawings

# International Table of Crystallography

| | | | |
|---|---|---|---|
| $I\bar{4}2d$ | $D_{2d}^{12}$ | $\bar{4}2m$ | Tetragonal |
| No. 122 | $I\bar{4}2d$ | | Patterson symmetry $I4/mmm$ |





**Generators selected** (1); $t(1,0,0)$;

**Positions**

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

(0,0,

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 16 | $e$ | 1 | (1) $x,y,z$ <br> (5) $\bar{x}+\frac{1}{2},y,\bar{z}+\frac{3}{4}$ | |
| 8 | $d$ | $.2.$ | $x,\frac{1}{4},\frac{1}{8}$ | $\bar{x},\frac{3}{4},\frac{1}{8}$ |
| 8 | $c$ | $2..$ | $0,0,z$ | $0,0,\bar{z}$ |
| 4 | $b$ | $\bar{4}..$ | $0,0,\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2},0,\frac{1}{4}$ |
| 4 | $a$ | $\bar{4}..$ | $0,0,0$ | $\frac{1}{2},0,\frac{3}{4}$ |

**Origin** at $\bar{4}$

**Asymmetric unit** $0 \le x \le \frac{1}{2}$; $0 \le y \le 1$; $0 \le z \le \frac{1}{8}$

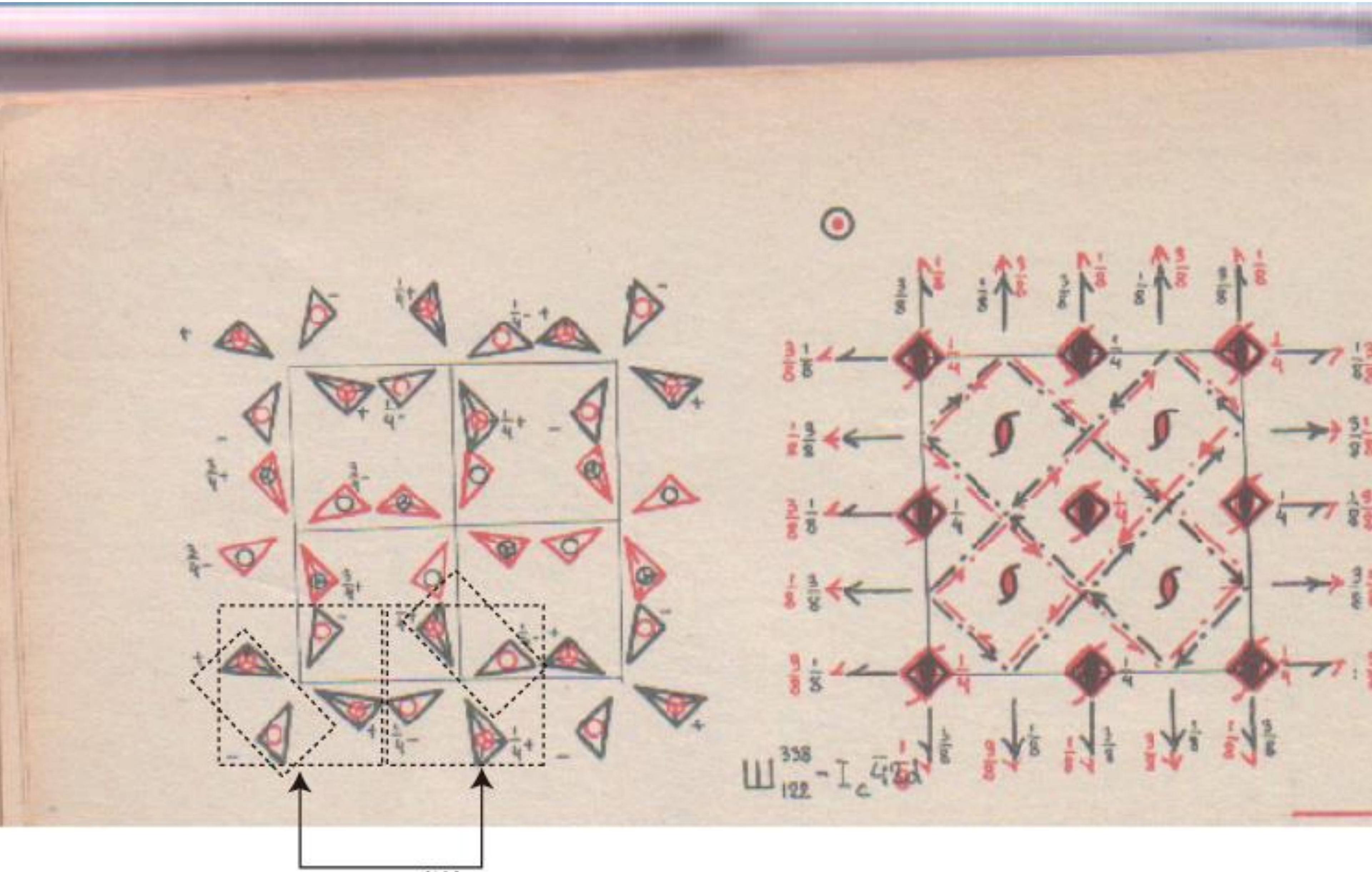
**Symmetry operations**

For $(0,0,0)+$ set

| | | | |
|---|---|---|---|
| (1) $1$ | (2) $2$ $0,0,z$ | (3) $\bar{4}^{+}$ $0,0,z$; $0,0,0$ | (4) $\bar{4}$ $0,0,z$; $0,0,0$ |
| (5) $2$ $\frac{1}{4},y,\frac{3}{8}$ | (6) $2(\frac{1}{2},0,0)$ $x,0,\frac{3}{8}$ | (7) $d(\frac{1}{4},-\frac{1}{4},\frac{3}{4})$ $x+\frac{1}{4},\bar{x},z$ | (8) $d(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4})$ $x+\frac{1}{4},x,z$ |

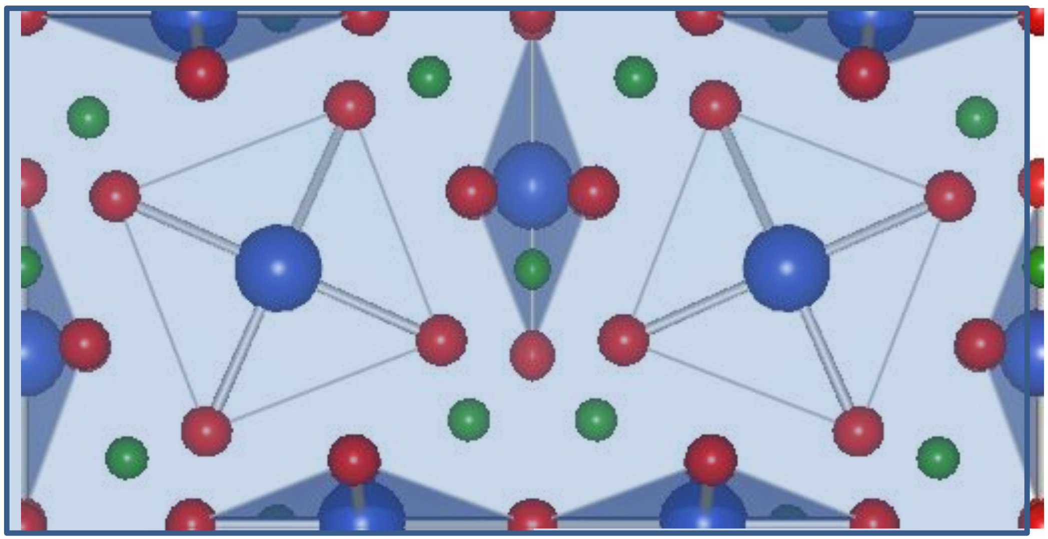
For $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})+$ set

| | | | |
|---|---|---|---|
| (1) $t(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ | (2) $2(0,0,\frac{1}{2})$ $\frac{1}{4},\frac{1}{4},z$ | (3) $\bar{4}^{+}$ $\frac{1}{2},0,z$; $\frac{1}{2},0,\frac{1}{4}$ | (4) $\bar{4}^{-}$ $0,\frac{1}{2},z$; $0,\frac{1}{2},\frac{1}{4}$ |
| (5) $2(0,\frac{1}{2},0)$ $0,y,\frac{1}{8}$ | (6) $2$ $x,\frac{1}{4},\frac{1}{8}$ | (7) $d(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})$ $x+\frac{1}{4},\bar{x},z$ | (8) $d(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})$ $x-\frac{1}{4},x,z$ |



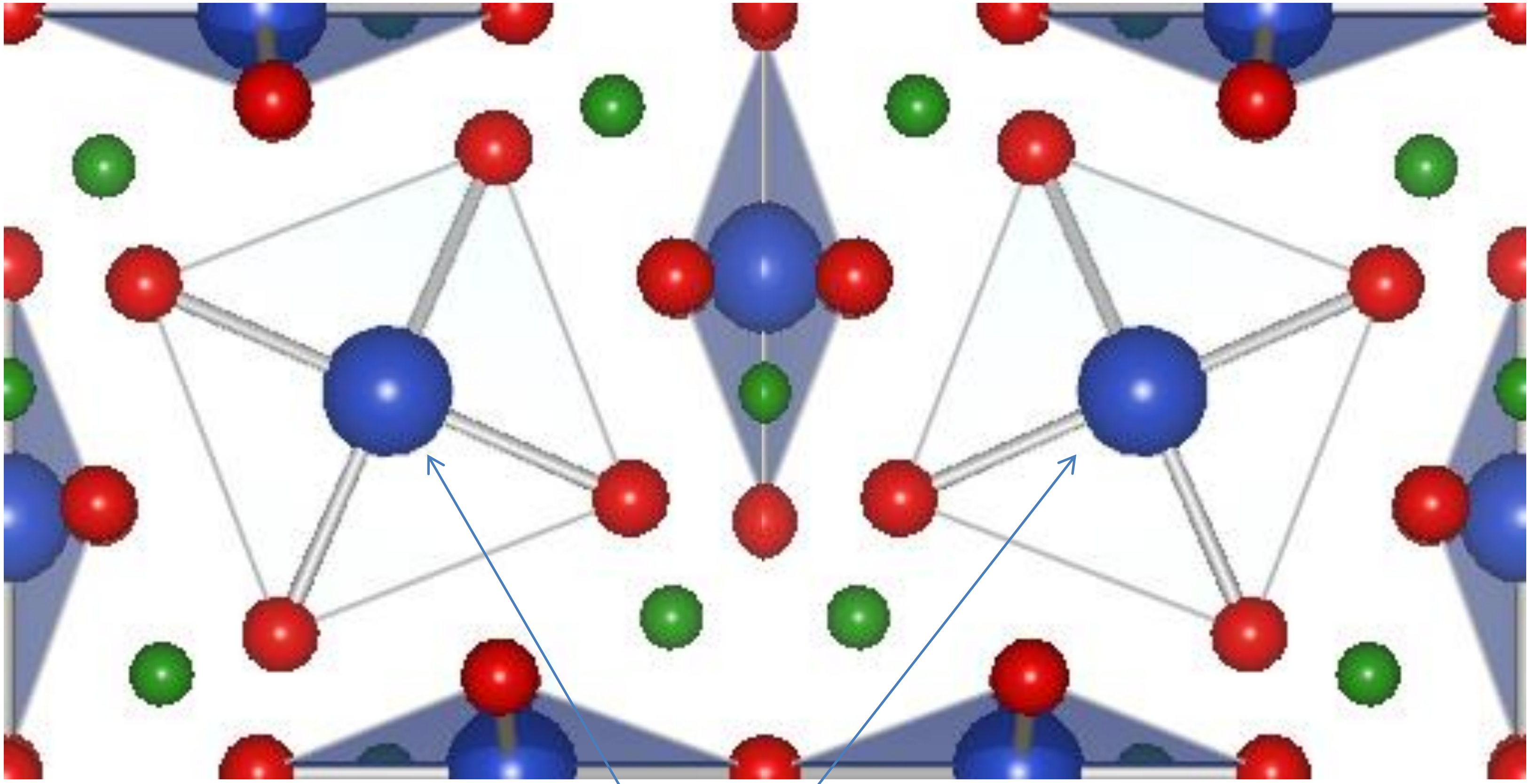

chiralityが逆

centerin
g



# Zeroth block

Zeroth blockに含まれる磁性原子に磁気フレームが貼りつく



ふたつの orbit

# $I\bar{4}2d$

# Try $k = (k_a, 0, 0)$

k群

| $g_n$ | $R$ | $g_n = \{R \mid \boldsymbol{\tau}\}$ |
|---|---|---|
| $g_1$ | $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ | $\{E \mid 0\ 0\ 0\}$ |
| $g_2$ | $\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ | $\{C_{2z} \mid 0\ 0\ 0\}$ |
| $g_8$ | $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ | $\{\sigma_{db} \mid 1/2\ 0\ 3/4\}$ |
| $g_7$ | $\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ | $\{\sigma_{da} \mid 1/2\ 0\ 3/4\}$ |

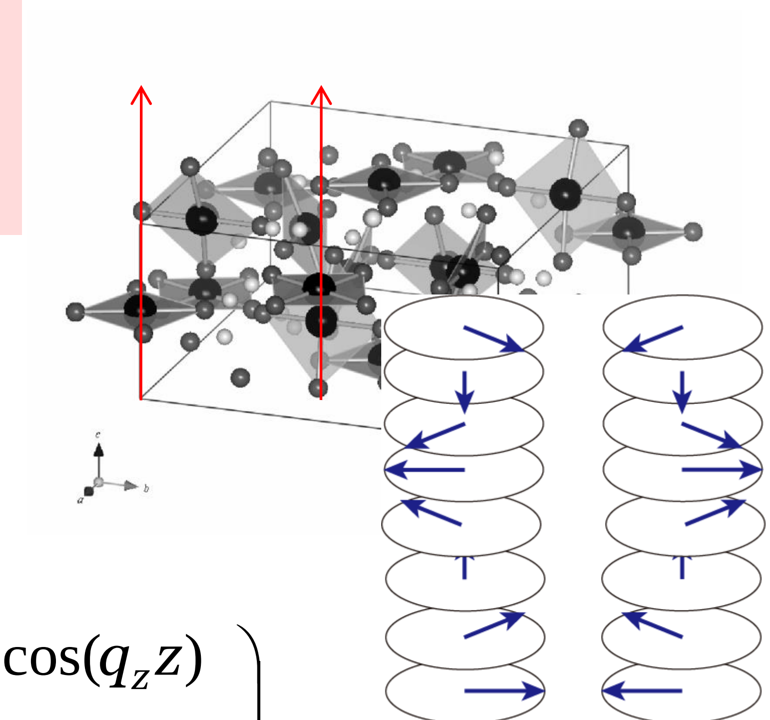
| | | | $m_{\parallel a}$ | $m_{\parallel b}$ | $m_{\parallel c}$ | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $\Gamma_1$ | $\psi_1$ | 1 | 0 | 0 | 4 | Ferro |
| | | 2 | 0 | 0 | $-e^{-3ik_z c/2} e^{ik_z}$ | |
| $\Gamma_2$ | $\psi_2$ | 1 | 0 | 0 | 4 | Antiferro |
| | | 2 | 0 | 0 | $e^{-3ik_z c/2} e^{ik_z}$ | |
| $\Gamma_3$ | $\psi_3$ | 1 | 4 | 0 | 0 | |
| | | 2 | 0 | $-e^{-3ik_z c/2} e^{ik_z}$ | 0 | |
| | $\psi_4$ | 1 | 0 | 4 | 0 | |
| | | 2 | $-e^{-3ik_z c/2} e^{ik_z}$ | 0 | 0 | Helix |
| $\Gamma_4$ | $\psi_5$ | 1 | 4 | 0 | 0 | |
| | | 2 | 0 | $e^{-3ik_z c/2} e^{ik_z}$ | 0 | |
| | $\psi_6$ | 1 | 0 | 4 | 0 | |
| | | 2 | $e^{-3ik_z c/2} e^{ik_z}$ | 0 | 0 | |

$$\Gamma^{Cu_A}_{magnetic} = \Gamma_1 \oplus \Gamma_2 \oplus 2\Gamma_3 \oplus 2\Gamma_4$$

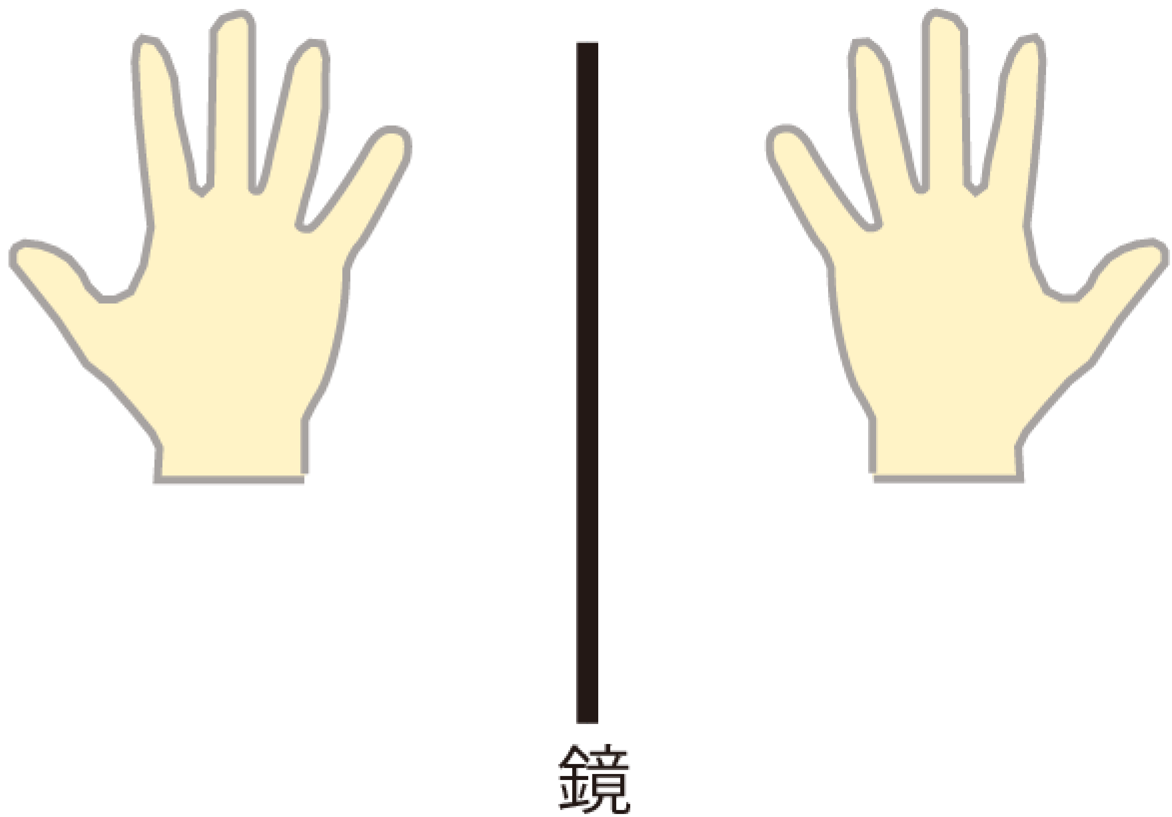
Magnetic structure

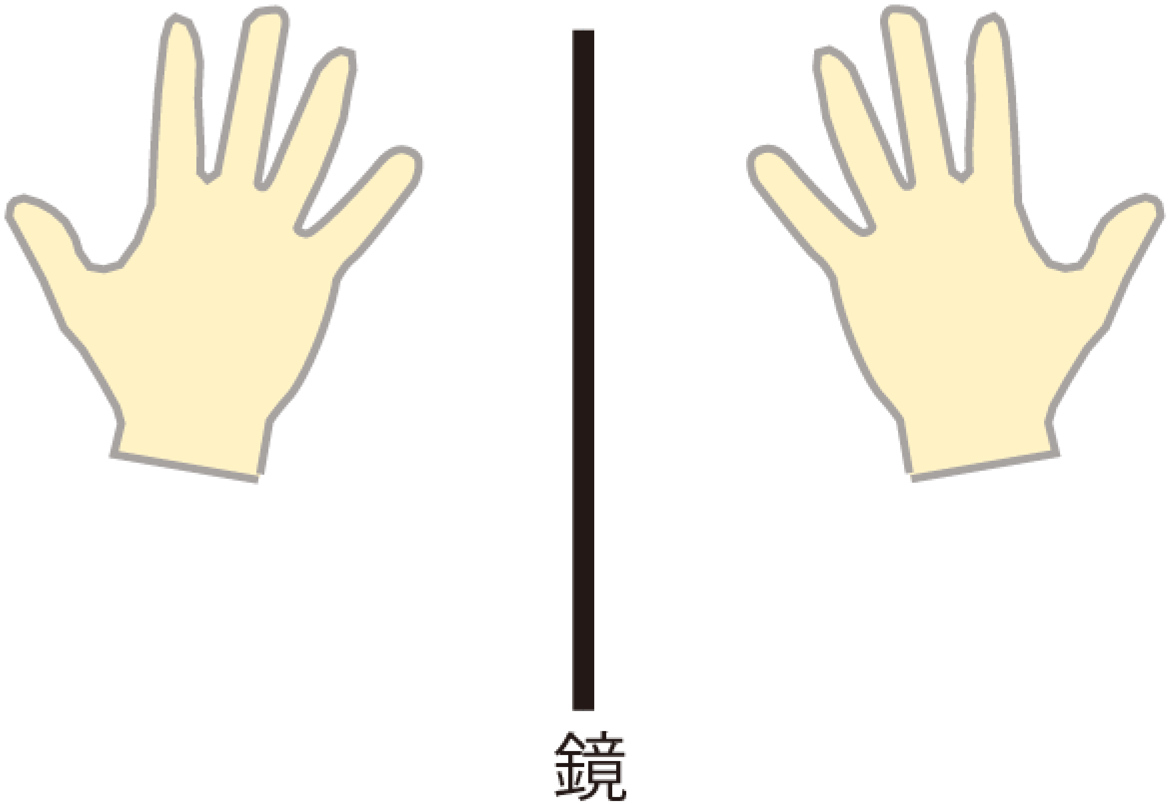
$$\vec{m}_{A1}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad \vec{m}_{A2}(\vec{k}) = -e^{i\phi} \begin{pmatrix} c_2 \\ c_1 \end{pmatrix}$$

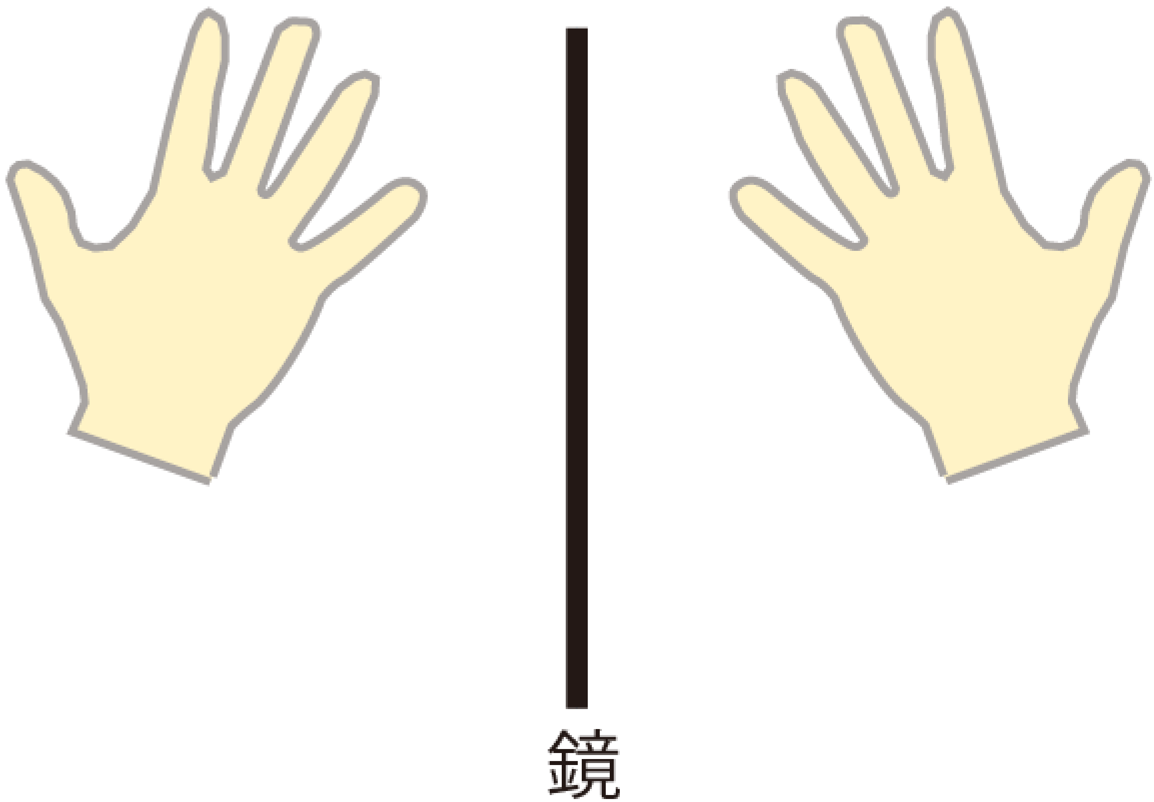
$$\Rightarrow \vec{m}_{A1}(\vec{k}) \propto m_{A1} \begin{pmatrix} \cos(q_z z) \\ \sin(q_z z) \end{pmatrix}, \quad \vec{m}_{A2}(\vec{k}) \propto m_{A2} \begin{pmatrix} \cos(q_z z) \\ -\sin(q_z z) \end{pmatrix}$$

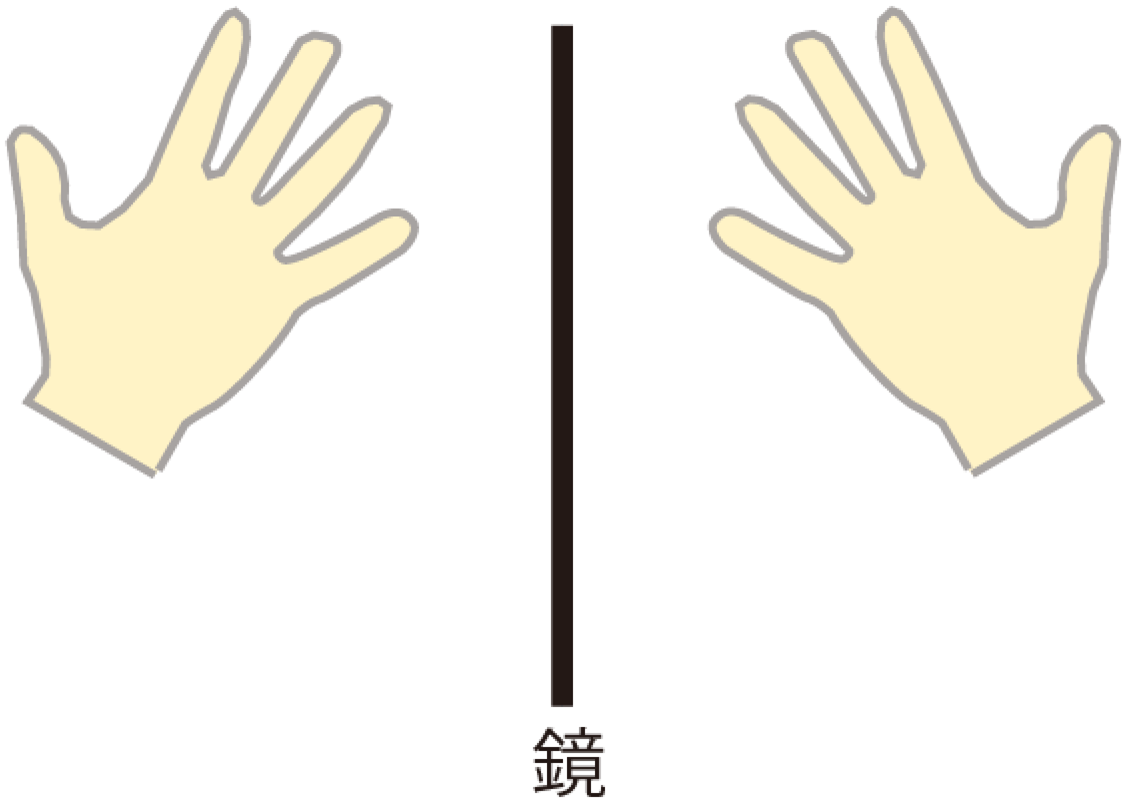



Anti−spiral possible!

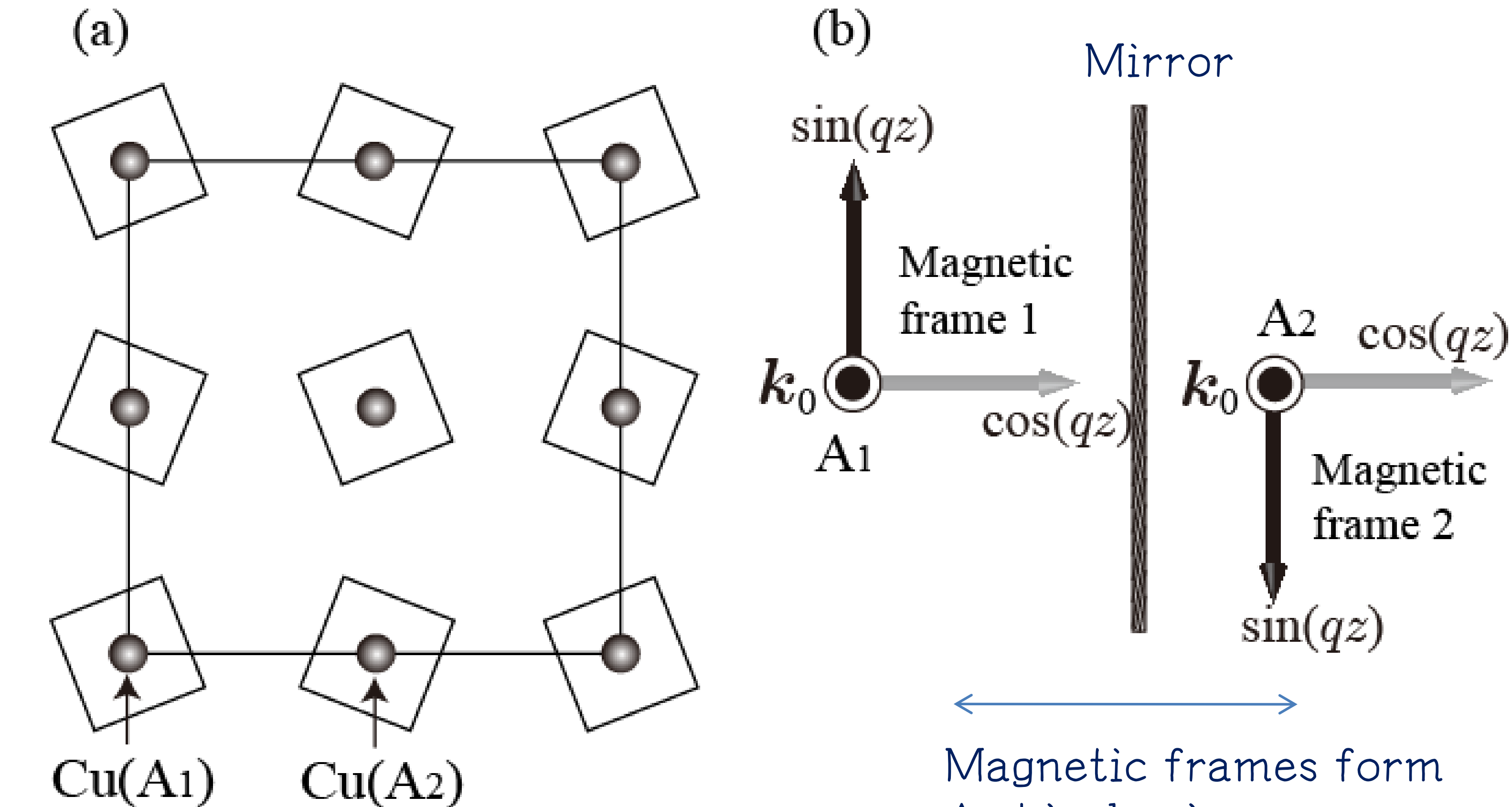

鏡


鏡


鏡


鏡

# Anti-chiral spiral ?

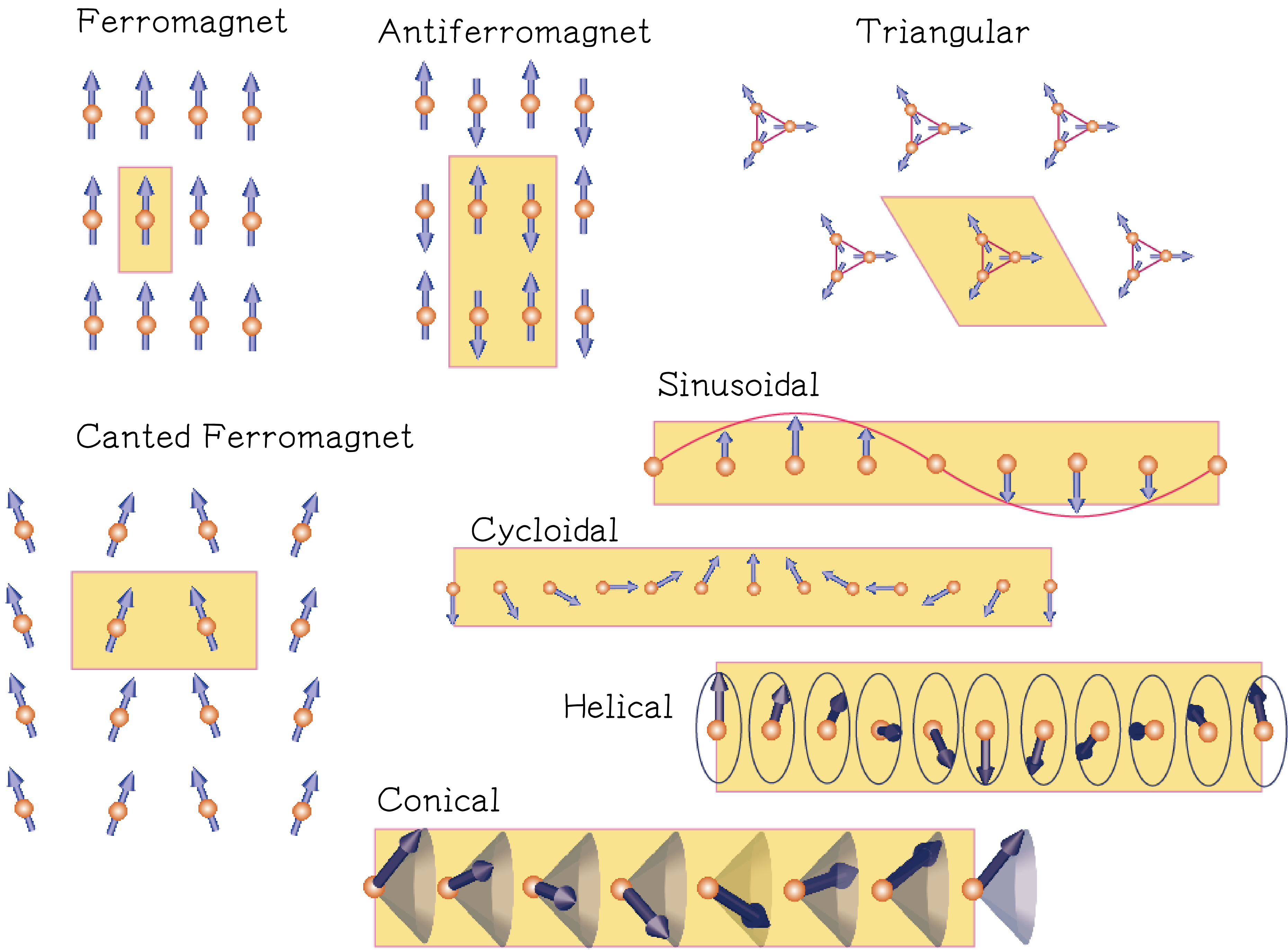



Magnetic frames form
A chiral pair

$$\{\sigma_d \,|\, \vec{\tau} = (a/2, 0, 3c/4)\}$$

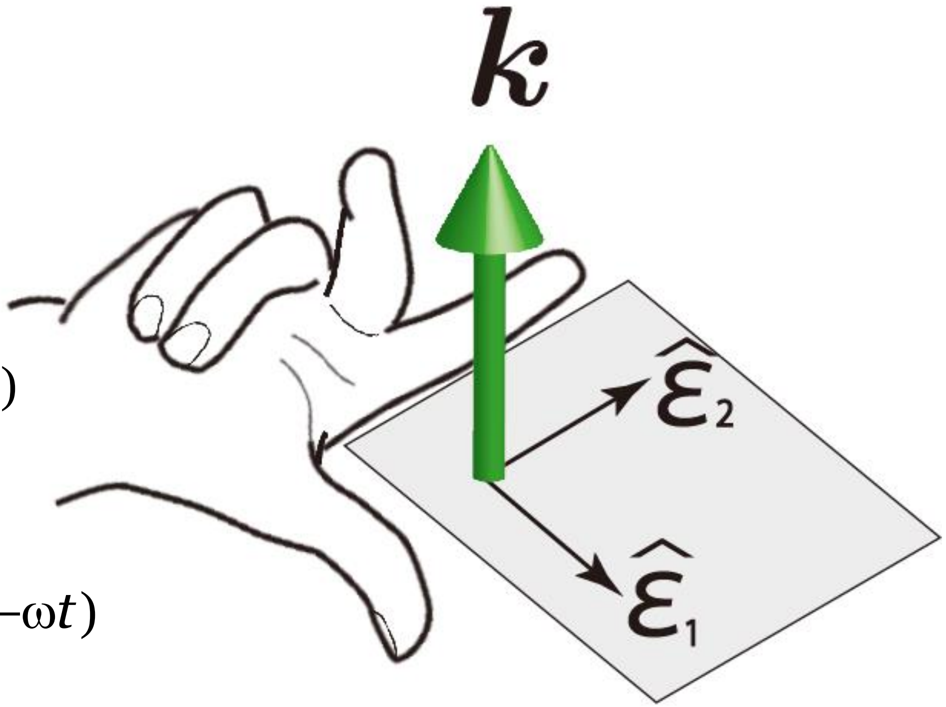
# ２次相転移のランダウ理論

２次相転移では、臨界的になる表現の基底ベクトルの
線形結合が対称性の観点から許される


Ferromagnet
Antiferromagnet
Triangular
Sinusoidal
Canted Ferromagnet
Cycloidal
Helical
Conical

# 基底 と 伝播ベクトル

## 例：偏光




$$\vec{E}(\vec{r},t)=(\hat{\varepsilon}_1 E_1+\hat{\varepsilon}_2 E_2)\,e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$

$$\vec{E}(\vec{r},t)=E_0(\hat{\varepsilon}_1 \pm i\,\hat{\varepsilon}_2)\,e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$

$$\Rightarrow\begin{cases}\mathrm{Re}\,E_x(\vec{r},t)=E_0\cos(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)\\ \mathrm{Re}\,E_y(\vec{r},t)=\pm E_0\sin(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)\end{cases}$$

＋右回り円偏光
－左回り円偏光