

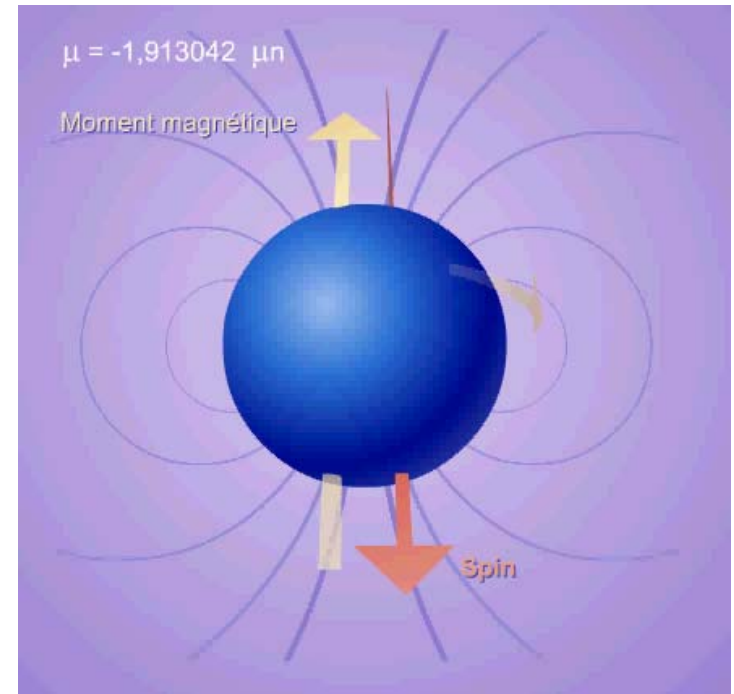
V. Magnetismus

- I. magnetische Wechselwirkung**
- II. Bestimmung der magnetischen Struktur**
- III. Magnetische Anregungen**
- IV. Polarisationsanalyse**

V.I Magnetische Wechselwirkung

Das Neutron besitzt spin $\frac{1}{2}$
und ein magnetisches Dipolmoment

$$\vec{\mu}_n = -\gamma\mu_B \frac{m_e}{m} \vec{\sigma}$$



Wechselwirkung zwischen Neutron und dem Magnetfeld ungleich komplizierter → aufwendigere Theorie

Erinnerung Quantenmechanik :

Drehimpulsmomente

S_x , S_y und S_z sind die x,y,z-Komponenten eines Drehimpulses
in Einheiten von \hbar
(gleichgültig ob Spin oder orbitales Moment)

$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ jeder der S_x , S_y und S_z vertauschen mit S^2
aber nicht untereinander

$$[S^2, S_x] = [S^2, S_y] = [S^2, S_z] = 0$$

aber $[S_x, S_y] = i S_z$ etc.

man definiert : $S^+ = S_x + iS_y$ und $S^- = S_x - iS_y$ Auf- und Absteiger

Eigenfunktionen existieren zu S^2, S_z

Eigenwerte : $S^2 : S(S+1)$ für $S=0, 1/2, 1, 3/2, \dots$

$S_z : -S, -S+1, \dots, +S$

$$S^+ |S, m\rangle = \{(S-m)(S+m+1)\}^{1/2} |S, m+1\rangle \quad \text{also } S^+ |S, S\rangle = 0$$

$$S^- |S, m\rangle = \{(S+m)(S-m-1)\}^{1/2} |S, m-1\rangle \quad \text{also } S^- |S, -S\rangle = 0$$

Erinnerung : Quantenmechanik : Pauli-Spinoperatoren

Für $S=0.5$ nur 2 S_z -Eigenfunktionen

$$|1/2, 1/2\rangle =: u \quad |1/2, -1/2\rangle =: v$$

$$\langle u|u\rangle = \langle v|v\rangle = 1 \quad \text{und} \quad \langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle = 0$$

$$S^+u=0 \quad S^+v=u \quad S^-u=v \quad S^-v=0$$

Pauli-Spinoperatoren : $\sigma_x = 2S_x$ etc.
werden nur für $S = 1/2$ benutzt

$$\sigma_x = S^+ + S^- \quad \sigma_y = -i(S^+ - S^-)$$

- **wichtig** : σ_x und σ_y flippen den Spin (des Neutrons)

V.I.1 Grundlagen

Dipolmoment des Neutrons

$$\boldsymbol{\mu}_n = -\gamma\mu_N\boldsymbol{\sigma},$$

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p}$$

m_p ist die Protonenmasse und e die Elektronenladung, $\gamma=1.913$

Nukleares magneton μ_N ist kleiner als elektronisches μ_B

$$\boldsymbol{\mu}_e = -2\mu_B\boldsymbol{s},$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

V.I.1 Grundlagen

Elektron mit Impuls \mathbf{p} \rightarrow magnetisches Feld bei \mathbf{R} aufgrund des Dipolmoments

$$\mathbf{B}_S = \text{curl } \mathbf{A}, \quad \mathbf{A} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\boldsymbol{\mu}_e \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2}, \quad \text{Feld des e-Dipolmoments}$$

$$\mathbf{B}_L = \frac{\mu_0}{4\pi} I \frac{d\mathbf{l} \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2}. \quad \begin{array}{l} \text{Biot-Savart} \\ \text{Impuls des Elektrons (Strom)} \end{array}$$

$$I d\mathbf{l} = -\frac{e}{m_e} \mathbf{p} = -\frac{2\mu_B}{\hbar} \mathbf{p}. \quad \begin{array}{l} \text{Strom-Element des bewegten} \\ \text{Elektrons} \end{array}$$

Gesamtfeld :
$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_S + \mathbf{B}_L = \frac{\mu_0}{4\pi} \left\{ \text{curl} \left(\frac{\boldsymbol{\mu}_e \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2} \right) - \frac{2\mu_B}{\hbar} \frac{\mathbf{p} \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2} \right\}.$$

$$-\boldsymbol{\mu}_n \cdot \mathbf{B} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \gamma \mu_N 2\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{W}_S + \mathbf{W}_L),$$

Potential des Neutrons im
Feld

$$\mathbf{W}_S = \text{curl} \left(\frac{\mathbf{s} \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2} \right),$$

$$\mathbf{W}_L = \frac{1}{\hbar} \frac{\mathbf{p} \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2}.$$

V.I.1 Grundlagen

$$\text{curl}\left(\frac{\mathbf{s} \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2}\right) = \frac{1}{2\pi^2} \int \hat{\mathbf{q}} \times (\mathbf{s} \times \hat{\mathbf{q}}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) d\mathbf{q},$$
$$\int \frac{\hat{\mathbf{R}}}{R^2} \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}) d\mathbf{R} = 4\pi i \frac{\hat{\boldsymbol{\kappa}}}{\kappa}.$$

Fourier-Koeffizienten

darin treten nur die Komponenten senkrecht zu \mathbf{q} auf !!!

- bei allem folgenden ist dies der Grundsatz !!

V.I.2 differentieller Streuquerschnitt

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} \right)_{\sigma\lambda \rightarrow \sigma'\lambda'} = \frac{k'}{k} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |\langle \mathbf{k}' \sigma' \lambda' | V_m | \mathbf{k} \sigma \lambda \rangle|^2 \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega).$$

-Übergang mit eventuellem Spin-Flip

k, σ Neutron λ Probe V_m magnetisches Potential

Spin-Komponente :

Elektron i:

\mathbf{r}_i \mathbf{S}_i

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}' | \mathbf{W}_{Si} | \mathbf{k} \rangle &= \int \exp(-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) \operatorname{curl} \left(\frac{\mathbf{s}_i \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2} \right) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \int \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}) \hat{\mathbf{q}} \times (\mathbf{s}_i \times \hat{\mathbf{q}}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) d\mathbf{q} d\mathbf{r}. \\ &\quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_i + \mathbf{R}. \end{aligned}$$

Statt über \mathbf{r} kann man über \mathbf{R} integrieren und ausnutzen :

$$\int \exp\{i(\boldsymbol{\kappa} + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}\} d\mathbf{R} = (2\pi)^3 \delta(\boldsymbol{\kappa} + \mathbf{q}).$$

V.I.2 differentieller Streuquerschnitt

Thus $\langle k' | \mathbf{W}_{Si} | k \rangle = 4\pi \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_i) \{ \hat{\boldsymbol{\kappa}} \times (\mathbf{s}_i \times \hat{\boldsymbol{\kappa}}) \}.$

-für die orbitale Komponente :

$$\begin{aligned} \langle k' | \mathbf{W}_{Li} | k \rangle &= \frac{1}{\hbar} \int \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}) \frac{\mathbf{p}_i \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2} d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{\hbar} \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_i) \int \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}) \frac{\mathbf{p}_i \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2} d\mathbf{R} \\ &= \frac{4\pi i}{\hbar \kappa} \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_i) (\mathbf{p}_i \times \hat{\boldsymbol{\kappa}}). \end{aligned}$$

Diese Operatoren kommutieren !

$$\sum_i \langle k' | \mathbf{W}_{Si} + \mathbf{W}_{Li} | k \rangle = 4\pi \mathbf{Q}_\perp$$

where $\mathbf{Q}_\perp = \sum_i \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_i) \left\{ \hat{\boldsymbol{\kappa}} \times (\mathbf{s}_i \times \hat{\boldsymbol{\kappa}}) + \frac{i}{\hbar \kappa} (\mathbf{p}_i \times \hat{\boldsymbol{\kappa}}) \right\}.$

V.I.2 differentieller Streuquerschnitt

Die verschiedenen Konstanten kann man zusammenfassen zu :

$$-\frac{\mu_0}{4\pi} \gamma \mu_N 2\mu_B \frac{m}{2\pi\hbar^2} 4\pi = -\frac{\mu_0}{4\pi} \gamma \frac{e\hbar}{2m_p} \frac{e\hbar}{2m_e} \frac{m}{\pi\hbar^2} 4\pi$$

$$= -\gamma r_0,$$

where

$$r_0 = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{e^2}{m_e}.$$

r_0 ist der klassische Elektronen-Radius $2.818 \cdot 10^{-15} \text{m}$ ($0.28 \cdot 10^{-12} \text{cm}$)

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} \right)_{\sigma\lambda \rightarrow \sigma'\lambda'} = (\gamma r_0)^2 \frac{k'}{k} |\langle \sigma'\lambda' | \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{Q}_\perp | \sigma\lambda \rangle|^2 \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega).$$

Vergleich : nukleare und magnetische Streuung :

$$b_j \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_j). \quad -\gamma r_0 \boldsymbol{\sigma} \cdot \left\{ \hat{\boldsymbol{\kappa}} \times (\mathbf{s}_i \times \hat{\boldsymbol{\kappa}}) + \frac{i}{\hbar\kappa} (\mathbf{p}_i \times \hat{\boldsymbol{\kappa}}) \right\} \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_i).$$

bei Wellenvektor $\mathbf{0}$ „streut“ ein Elektron (μ_B) wie Streulänge $0.27 \cdot 10^{-12} \text{cm}$

V.I.2 Magnetisierung :

a) Spin-Teil :

$$\mathbf{Q}_{\perp S} = \sum_i \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_i) \{ \hat{\boldsymbol{\kappa}} \times (\mathbf{s}_i \times \hat{\boldsymbol{\kappa}}) \}.$$

$$\mathbf{Q}_{\perp S} = \hat{\boldsymbol{\kappa}} \times (\mathbf{Q}_S \times \hat{\boldsymbol{\kappa}}).$$

$$\mathbf{Q}_S = \sum_i \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_i) \mathbf{s}_i.$$

\mathbf{Q}_S ist Fourier-Transformierte der
Spin-Dichte

$$\boldsymbol{\rho}_S(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \mathbf{s}_i$$

$$\mathbf{Q}_S = \int \boldsymbol{\rho}_S(\mathbf{r}) \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

V.I.2 Magnetisierung :

$$\mathbf{M}_S(\mathbf{r}) = -2\mu_B \rho_S(\mathbf{r}).$$

$$\mathbf{Q}_S = -\frac{1}{2\mu_B} \mathbf{M}_S(\boldsymbol{\kappa}),$$

$$\mathbf{M}_S(\boldsymbol{\kappa}) = \int \mathbf{M}_S(\mathbf{r}) \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Spin-Anteil der
Magnetisierung

b) Orbital-Komponente :

$$\mathbf{Q}_{\perp L} = \frac{i}{\hbar \kappa} \sum_i \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_i) (\mathbf{p}_i \times \hat{\boldsymbol{\kappa}}) = -\frac{1}{2\mu_B} \hat{\boldsymbol{\kappa}} \times \{\mathbf{M}_L(\boldsymbol{\kappa}) \times \boldsymbol{\kappa}\}$$

where

$$\mathbf{M}_L(\boldsymbol{\kappa}) = \int \mathbf{M}_L(\mathbf{r}) \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

$$\mathbf{Q}_{\perp L} = \hat{\boldsymbol{\kappa}} \times (\mathbf{Q}_L \times \hat{\boldsymbol{\kappa}}),$$

$$\mathbf{Q}_L = -\frac{1}{2\mu_B} \mathbf{M}_L(\boldsymbol{\kappa}).$$

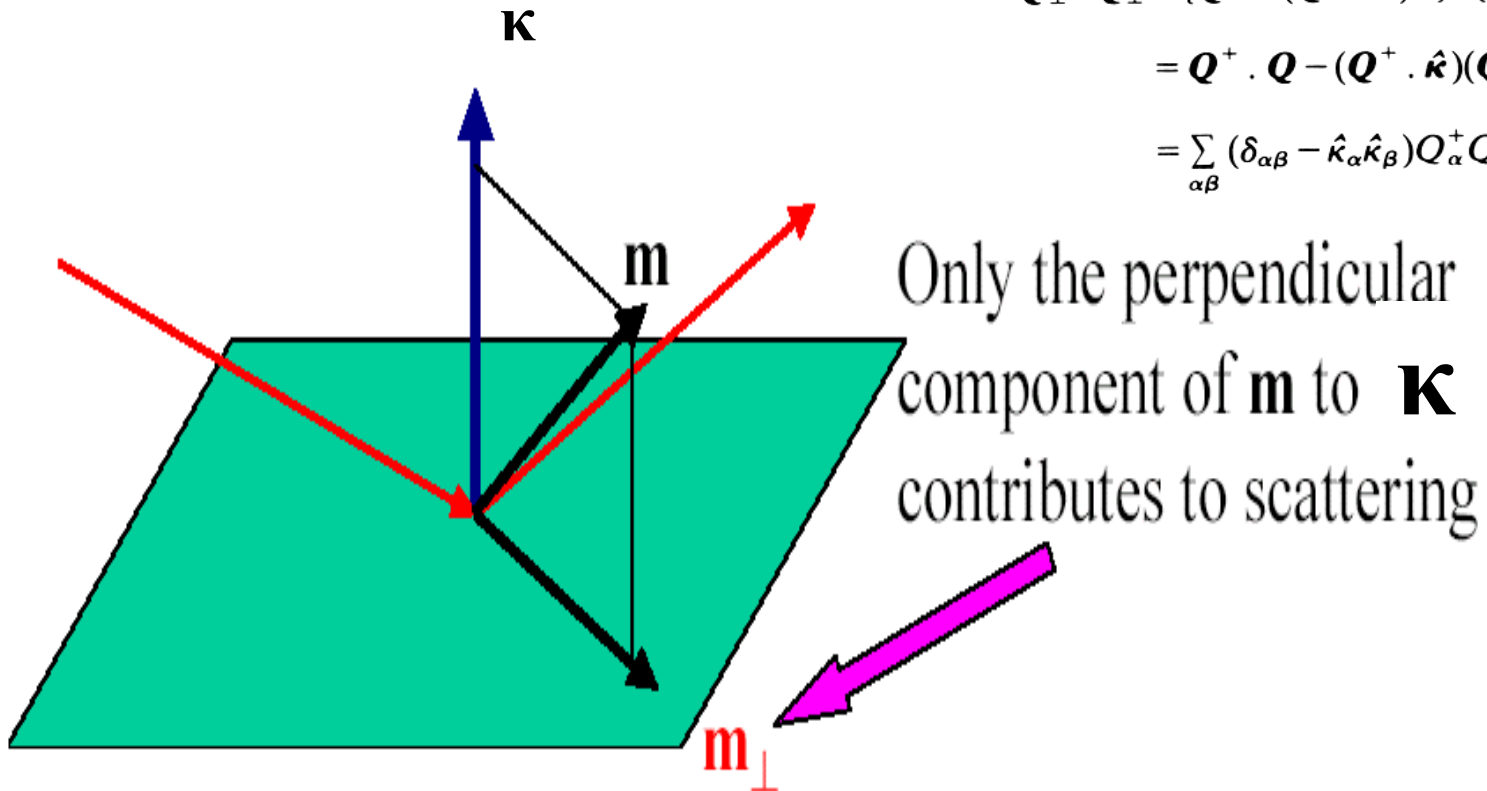
Orbitale Magnetisierung

Bedeutung der \perp Komponenten :

Projektion der Magnetisierung senkrecht zum Streuvektor

$$\mathbf{Q}_{\perp} = \mathbf{Q} - (\mathbf{Q} \cdot \hat{\mathbf{k}})\hat{\mathbf{k}}.$$

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{\perp}^+ \cdot \mathbf{Q}_{\perp} &= \{\mathbf{Q}^+ - (\mathbf{Q}^+ \cdot \hat{\mathbf{k}})\hat{\mathbf{k}}\} \cdot \{\mathbf{Q} - (\mathbf{Q} \cdot \hat{\mathbf{k}})\hat{\mathbf{k}}\} \\ &= \mathbf{Q}^+ \cdot \mathbf{Q} - (\mathbf{Q}^+ \cdot \hat{\mathbf{k}})(\mathbf{Q} \cdot \hat{\mathbf{k}}) \\ &= \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - \hat{k}_{\alpha}\hat{k}_{\beta}) Q_{\alpha}^+ Q_{\beta}, \end{aligned}$$



Einfluss der Polarisation :

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}\right)_{\sigma\lambda \rightarrow \sigma'\lambda'} = \frac{k'}{k} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |\langle \mathbf{k}'\sigma'\lambda' | V_m | \mathbf{k}\sigma\lambda \rangle|^2 \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega).$$

Hierbei ist V_m Produkt von Dipolmoment Neutron und Feld

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z$$

Wählt man z als Quantisierungsrichtung entsprechend den Zuständen u,v → nur quadratische Terme $\sigma_x^2 \dots$ für unpol. Neutronen !

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} &= (\gamma r_0)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\lambda\lambda'} p_\lambda \sum_{\alpha} \langle \lambda | Q_{\perp\alpha}^+ | \lambda' \rangle \langle \lambda' | Q_{\perp\alpha} | \lambda \rangle \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega) \\ &= (\gamma r_0)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - \hat{\kappa}_\alpha \hat{\kappa}_\beta) \\ &\quad \times \sum_{\lambda\lambda'} p_\lambda \langle \lambda | Q_\alpha^+ | \lambda' \rangle \langle \lambda' | Q_\beta | \lambda \rangle \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega). \end{aligned}$$

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{R}_{ld} + \mathbf{r}_\nu.$$

Streuung von Elektron ν mit S_ν

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_S = \sum_{ld} \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_{ld}) \sum_{\nu(d)} \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_\nu) S_\nu.$$

Summe der Elektronen

$$\langle \lambda' | \mathbf{Q} | \lambda \rangle_{ld} = \left\langle \lambda' \left| \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_{ld}) \sum_{\nu(d)} \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_\nu) S_\nu \right| \lambda \right\rangle.$$

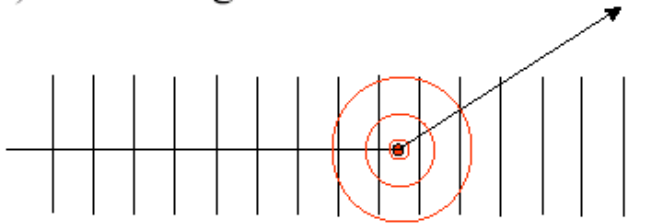
$$= F_d(\boldsymbol{\kappa}) \langle \lambda' | \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_{ld}) S_{ld} | \lambda \rangle,$$

$$F_d(\boldsymbol{\kappa}) = \int \phi_d(\mathbf{r}) \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

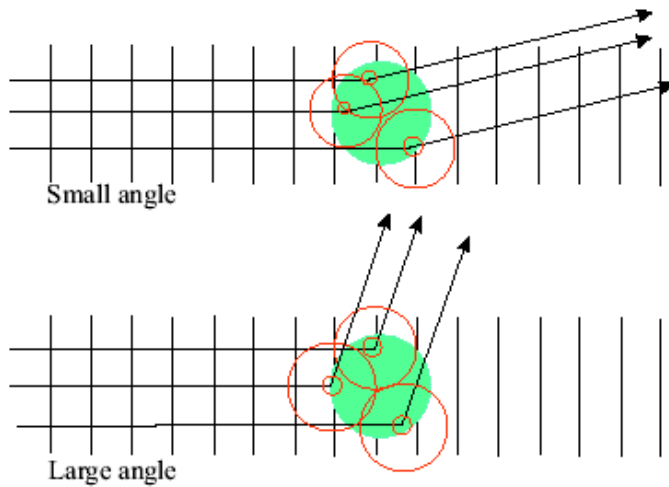
Herausziehen als Integral
und **Gesamtspin**

Magnetischer Formfaktor

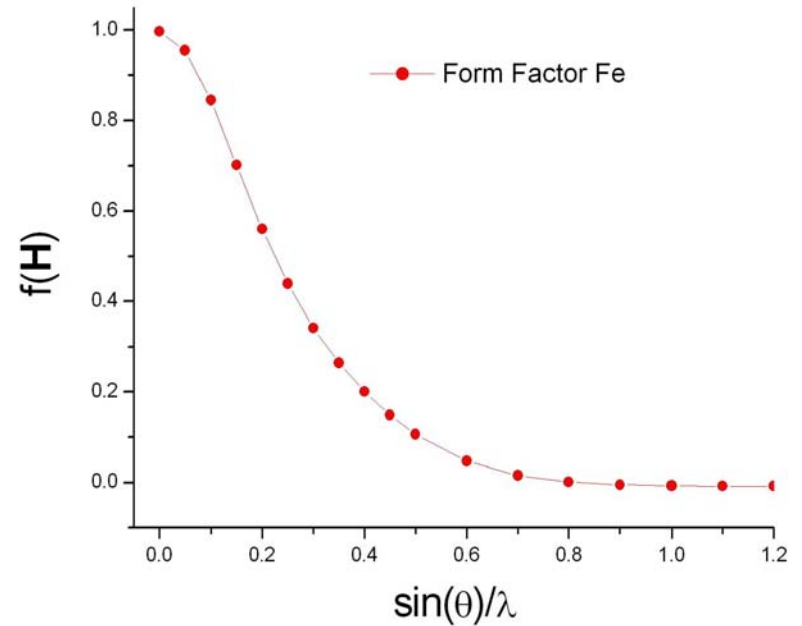
(a) scattering from nucleus



(b) scattering from electrons



Magnetischer Formfaktor



$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} &= (\gamma r_0)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - \hat{\kappa}_\alpha \hat{\kappa}_\beta) \sum_{l'd'} \sum_{ld} F_{d'}^*(\boldsymbol{\kappa}) F_d(\boldsymbol{\kappa}) \\ &\quad \times \sum_{\lambda\lambda'} p_\lambda \langle \lambda | \exp(-i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_{l'd'}) S_{l'd'}^\alpha | \lambda' \rangle \\ &\quad \times \langle \lambda' | \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_{ld}) S_{ld}^\beta | \lambda \rangle \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega). \end{aligned}$$

Summe über die Komponenten bei Atom **ld** !

Bei Seltenen Erden kann man L,S aus den freien Ionen benutzen !

$$\frac{1}{2}gF(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2}g_S \mathcal{J}_0 + \frac{1}{2}g_L (\mathcal{J}_0 + \mathcal{J}_2),$$

$$g = g_S + g_L,$$

$$g_S = 1 + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{J(J+1)},$$

$$g_L = \frac{1}{2} + \frac{L(L+1) - S(S+1)}{2J(J+1)},$$

$$\mathcal{J}_n = 4\pi \int_0^\infty j_n(\kappa r) \rho(r) r^2 dr.$$

-Aufspaltung von L und S-Teil

mittels Bessel-Funktionen und J

Summe über die Komponenten bei Atom **ld** !

Bei Seltenen Erden kann man L,S aus den freien Ionen benutzen !

$$\frac{1}{2}gF(\kappa) = \frac{1}{2}g_S \mathcal{I}_0 + \frac{1}{2}g_L (\mathcal{I}_0 + \mathcal{I}_2),$$

$$g = g_S + g_L,$$

$$g_S = 1 + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{J(J+1)},$$

$$g_L = \frac{1}{2} + \frac{L(L+1) - S(S+1)}{2J(J+1)},$$

$$\mathcal{I}_n = 4\pi \int_0^\infty j_n(\kappa r) \sigma(r) r^2 dr.$$

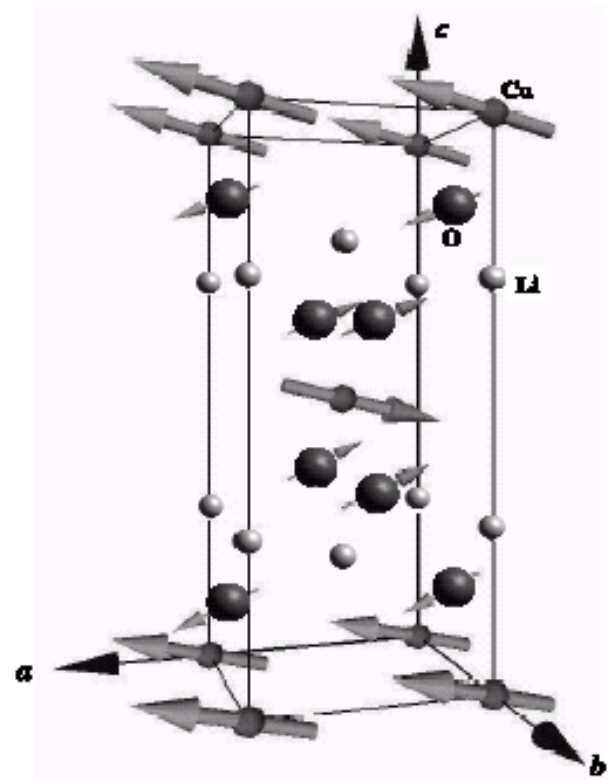
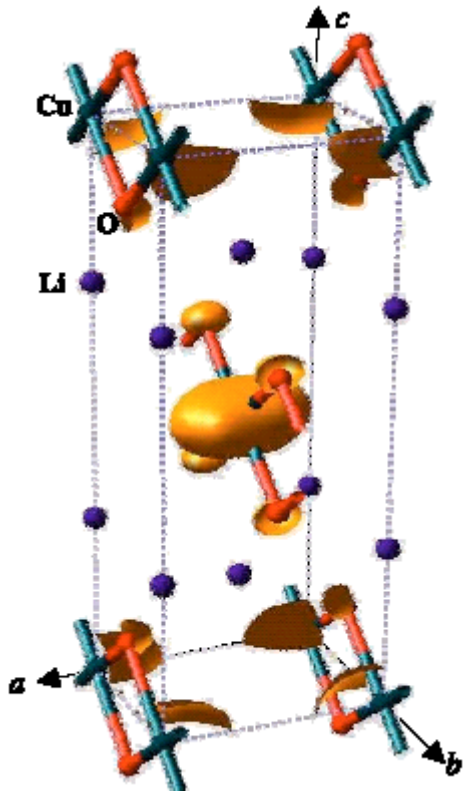
-Aufspaltung von L und S-Teil

mittels Bessel-Funktionen und J

V.II Bestimmung der magnetischen Struktur

a) Pulververfahren

Praxis ! Anwendung von Pulververfahren in grober Kenntniss der Theorie !



Arbeitsmaterial:

The Determination of Magnetic Structures

W. Prandl

ed. H. Dachs, Neutron Diffraction, Springer-Verlag 1978, S. 113

Magnetic Structures

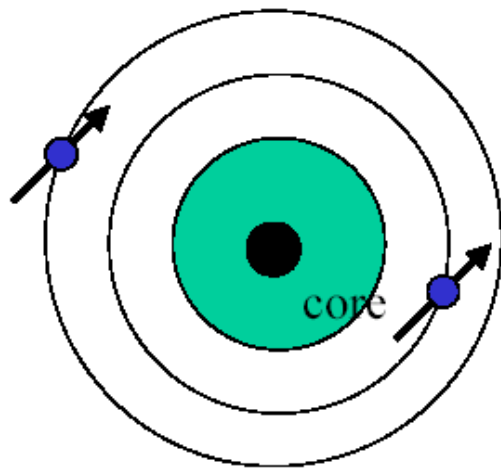
J. Rossat-Mignot

in: Methods of Experimental Physics

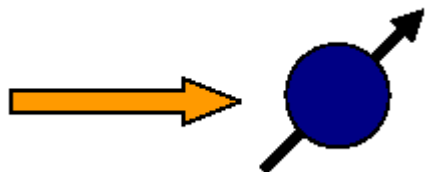
ed. K. Sköld, D.L. Price, Academic Press 1987

Was braucht man für eine Magnetstruktur?

(kristallinen) Festkörper mit Atomen, die permanente magnetische Momente besitzen:



Ni^{2+}



3d: Übergangsmetalle:

Cr, Mn, Fe, Co, Ni

4f: Seltene Erden:

Ce, Nd, Pr, ... Tb, Dy, Ho, Er, Tm

5f: Aktinide: U, Np

Magnetisches Moment \mathbf{m} (Vektor)

$\mathbf{m} = g_s \mathbf{S}$ (Übergangsmetall)

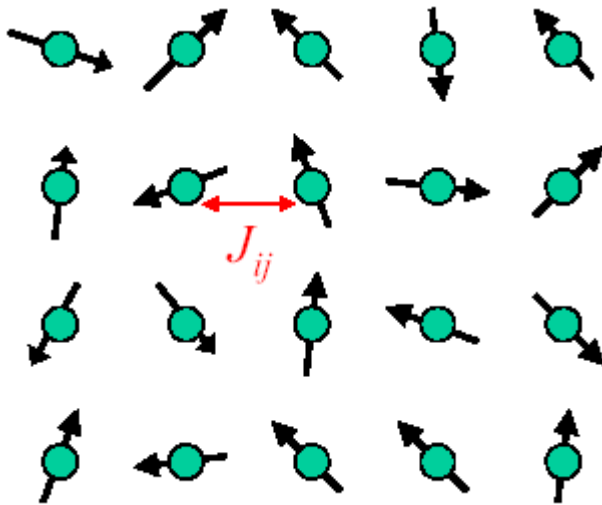
$\mathbf{m} = g_J \mathbf{J}$ (Selten-Erd Atom)

Was ist eine Magnetstruktur?

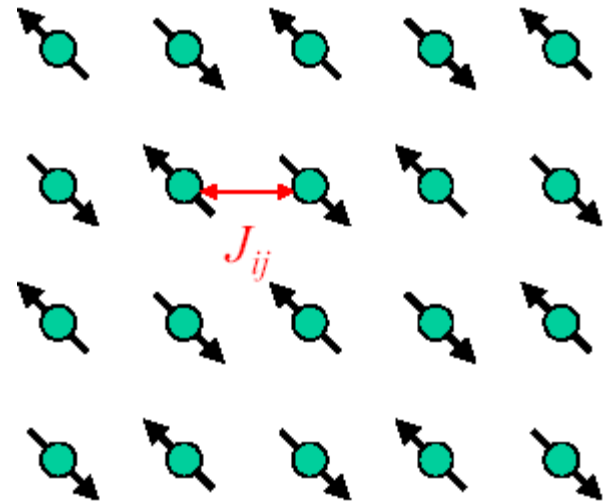
Dreidimensionale Ordnung von magnetischen Momenten unterhalb einer Ordnungstemperatur (T_0):

⇒ *magnetische Wechselwirkung J_{ij}* : $E = - J_{ij} S_i S_j$

⇒ *Phasenübergang (vgl. Kondensation)*



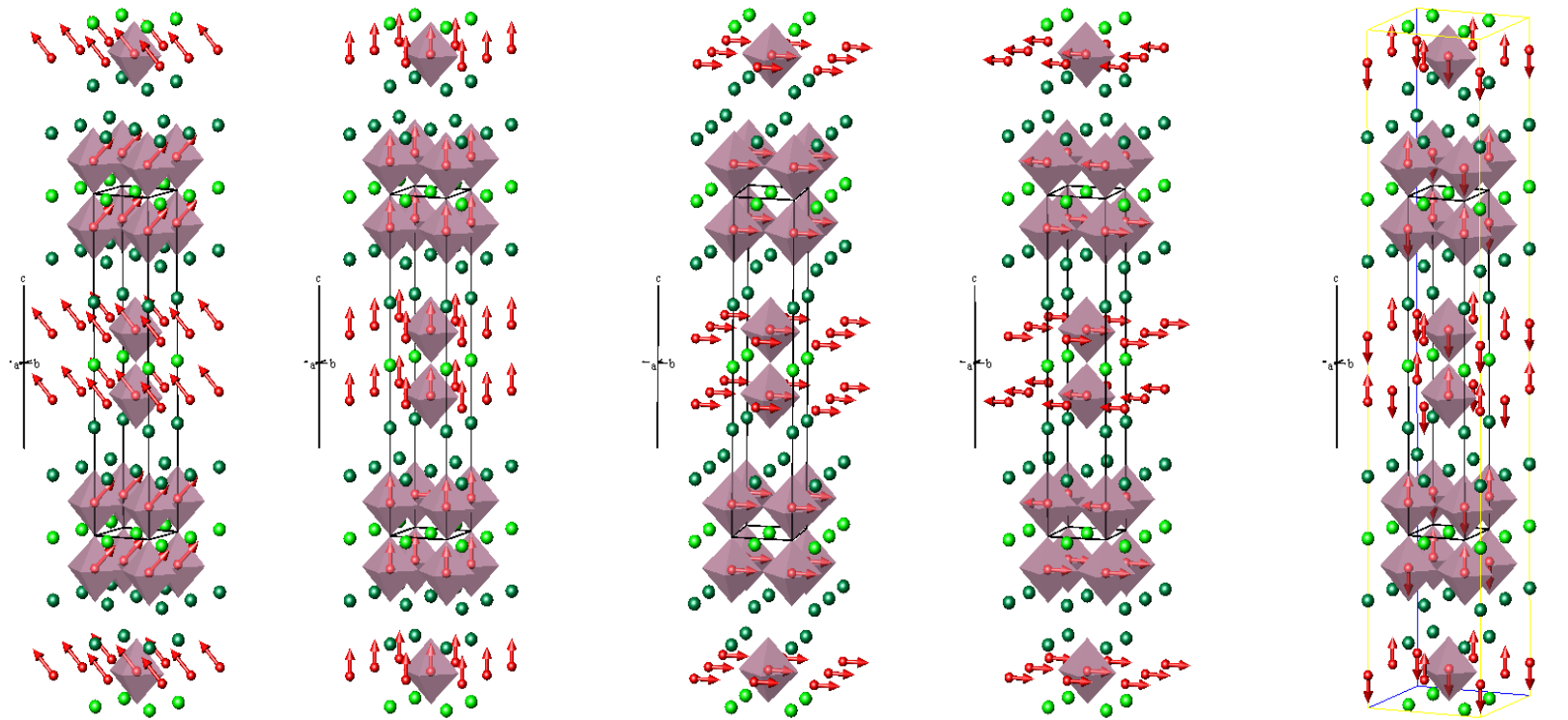
Paramagnet: $\langle S_i \rangle = 0$ für $T > T_0$:



Antiferromagnet: $\langle S_i \rangle \neq 0$ für $T < T_0$:

Beispiel: 3-dimensionale Magnetstrukturen

$\text{La}_{2-2x}\text{Sr}_{1+2x}\text{Mn}_2\text{O}_7$ (P. Radelli, ISIS)



CAF (A')

FM(c)

FM(ab)

AFM(A)

AFM(G)

0.00

0.30

0.32

0.34

0.40

0.50

1.00

Mn^{3+}

x in $\text{La}_{2-2x}\text{Sr}_{1+2x}\text{Mn}_2\text{O}_7$

Mn^{4+}

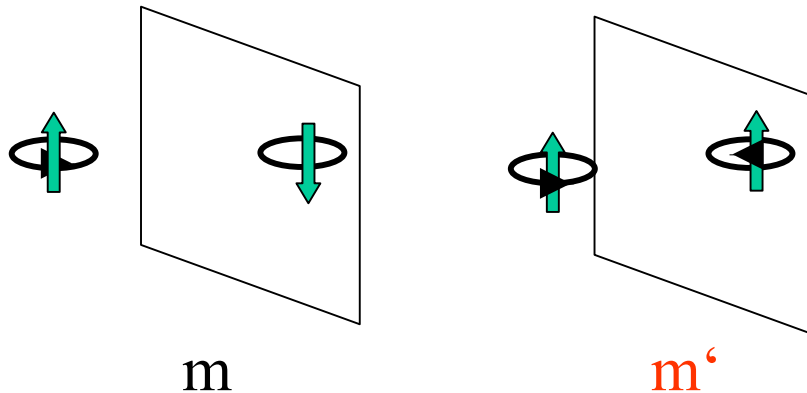
Beschreibung von geordneten Magnetstrukturen (1)

Magnetische Raumgruppen (Shubnikov-Gruppen)

Wie wirken Symmetrie-Elemente auf magnetische Momente?

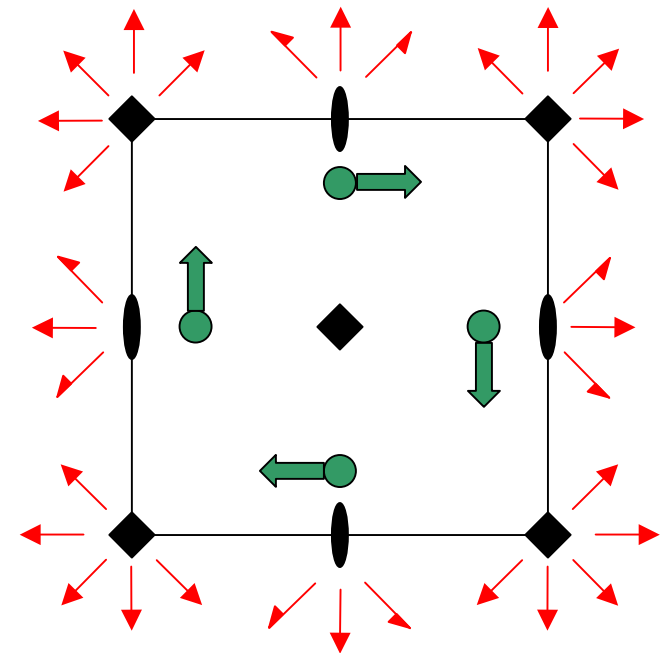
Zeitumkehroperator (E')

$$E' \left(\begin{array}{c} \uparrow \\ \circlearrowright \end{array} \right) = \begin{array}{c} \downarrow \\ \circlearrowright \end{array}$$

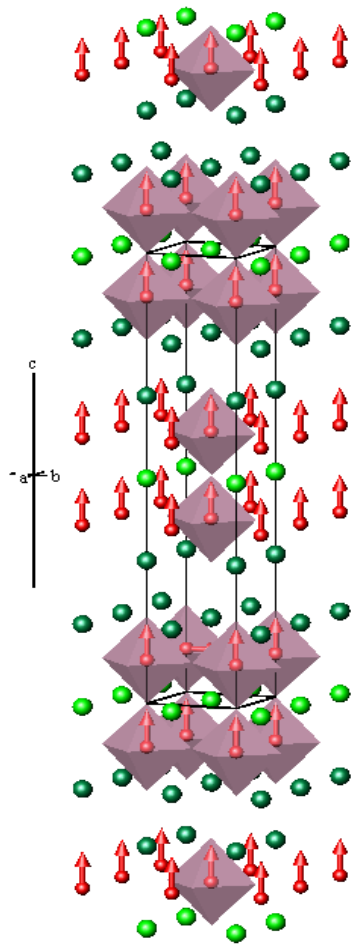


230 kristallogr. Raumgruppen
1421 magnetische Raumgruppen

$P42'2'$



Magnetische Raumgruppen (Shubnikov-Gruppen)



FM(*c*)

kristallographische Raumgruppe
magnetische Raumgruppe

I4/mmm
I4/m'm'm'

magnetische Punkt- und Raumgruppen
tabelliert in:

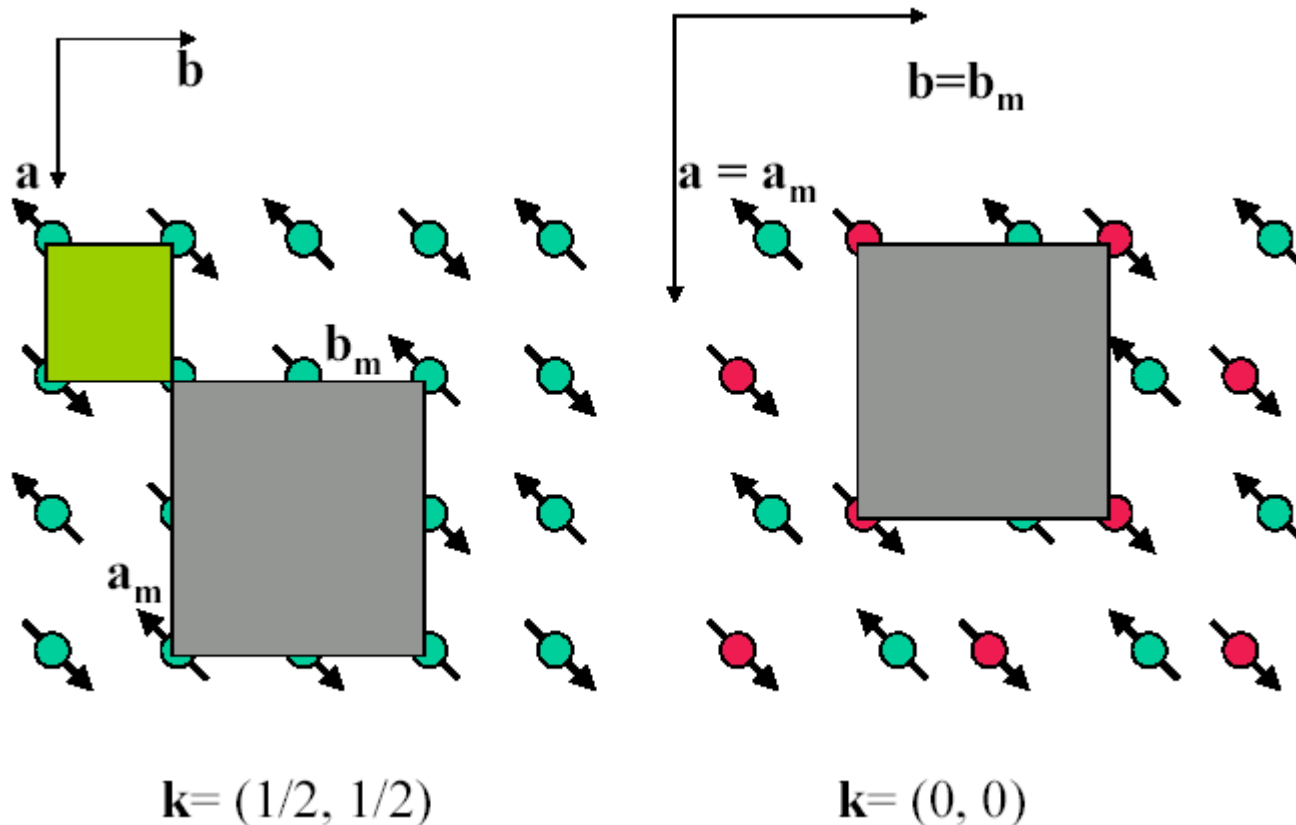
Magnetic Symmetry

W. Opechowski, R. Guccione

in Magnetism Vol IIA, ed. Rado & Suhl,
Academic Press, New York, 1963, 105.

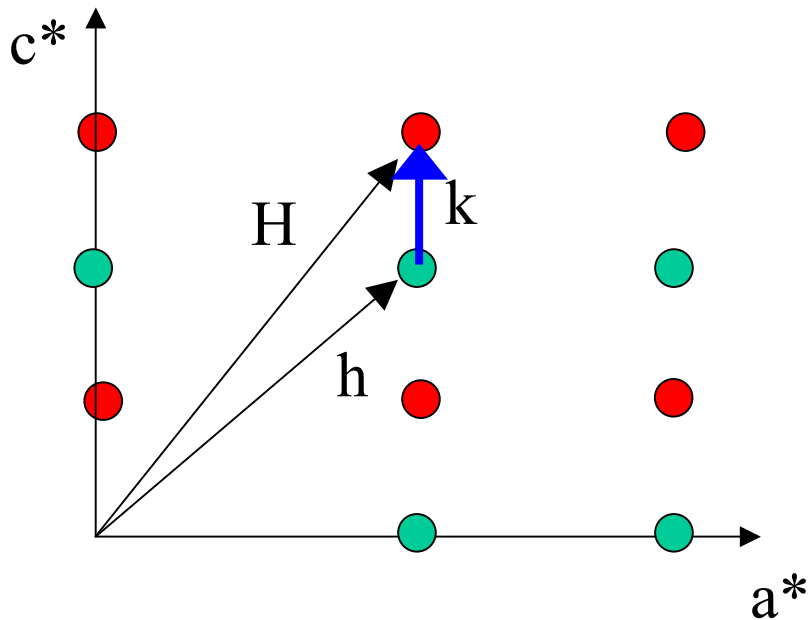
II. Beschreibung von geordneten Magnetstrukturen (2)

- ⇒ Ausbreitungsvektor (“propagation vector”) \mathbf{k}
- ⇒ Kopplung, Richtung und Größe der magnetischen Momente
- ⇒ Momente parallel in Ebenen senkrecht zu \mathbf{k}



Konzept des Ausbreitungsvektors ("propagation vector"):

- ⇒ *Translationssymmetrie einer Magnetstruktur*
- ⇒ *definiert im reziproken Gitter*



Beispiel:

$$\mathbf{h} = (h, k, l)$$

$$\mathbf{k} = 1/2 \mathbf{c}^* = (0, 0, 1/2)$$

$$\mathbf{H} = (h, k, l+k_z)$$

Einheitszelle: $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$

reziproke Zelle: $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$

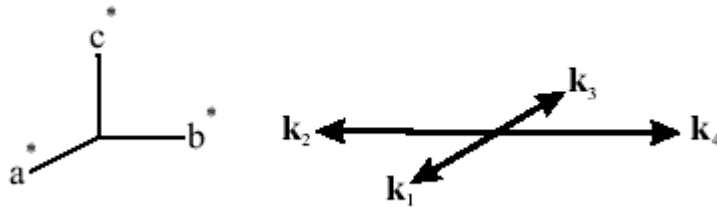
$$\mathbf{h} = h \mathbf{a}^* + k \mathbf{b}^* + l \mathbf{c}^*$$

$$\mathbf{k} = k_x \mathbf{a}^* + k_y \mathbf{b}^* + k_z \mathbf{c}^*$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{h} + \mathbf{k}$$

“Stern” des Ausbreitungsvektors

nicht-äquivalente Vektoren aus Punktsymmetrieoperationen



$$I4/mmm, \mathbf{k}=(k_x \ 0 \ 0)$$

$$\mathbf{k}_1=(k_x \ 0 \ 0)$$

$$\mathbf{k}_2=(0 \ -k_x \ 0)$$

$$\mathbf{k}_3=(-k_x \ 0 \ 0)$$

$$\mathbf{k}_4=(0 \ k_x \ 0)$$

single-k : 1 k-Vektor in einer Domäne

versus

multi-k : mehrere k-Vektoren in einer Domäne

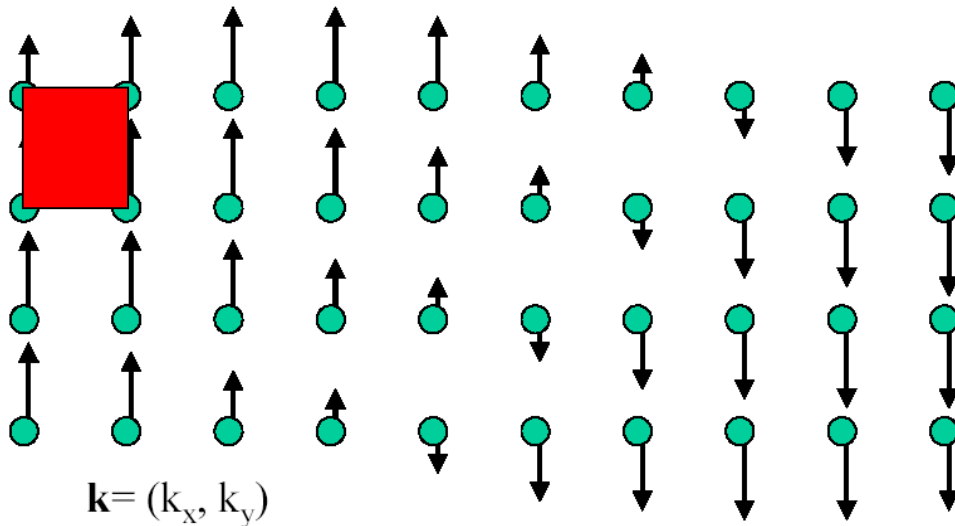
Fourierentwicklung der Momentverteilung

$$m_s = \sum_k m_k \exp\{2\pi i k R_s\}$$

magnetisches Moment

Fourierkoeffizienten

Single-k Struktur: (Beispiel Sinusmodulation)



$$m_s = A_k \cos\{2\pi k R_s\}$$

Typen von Magnetstrukturen

kommensurable Strukturen:

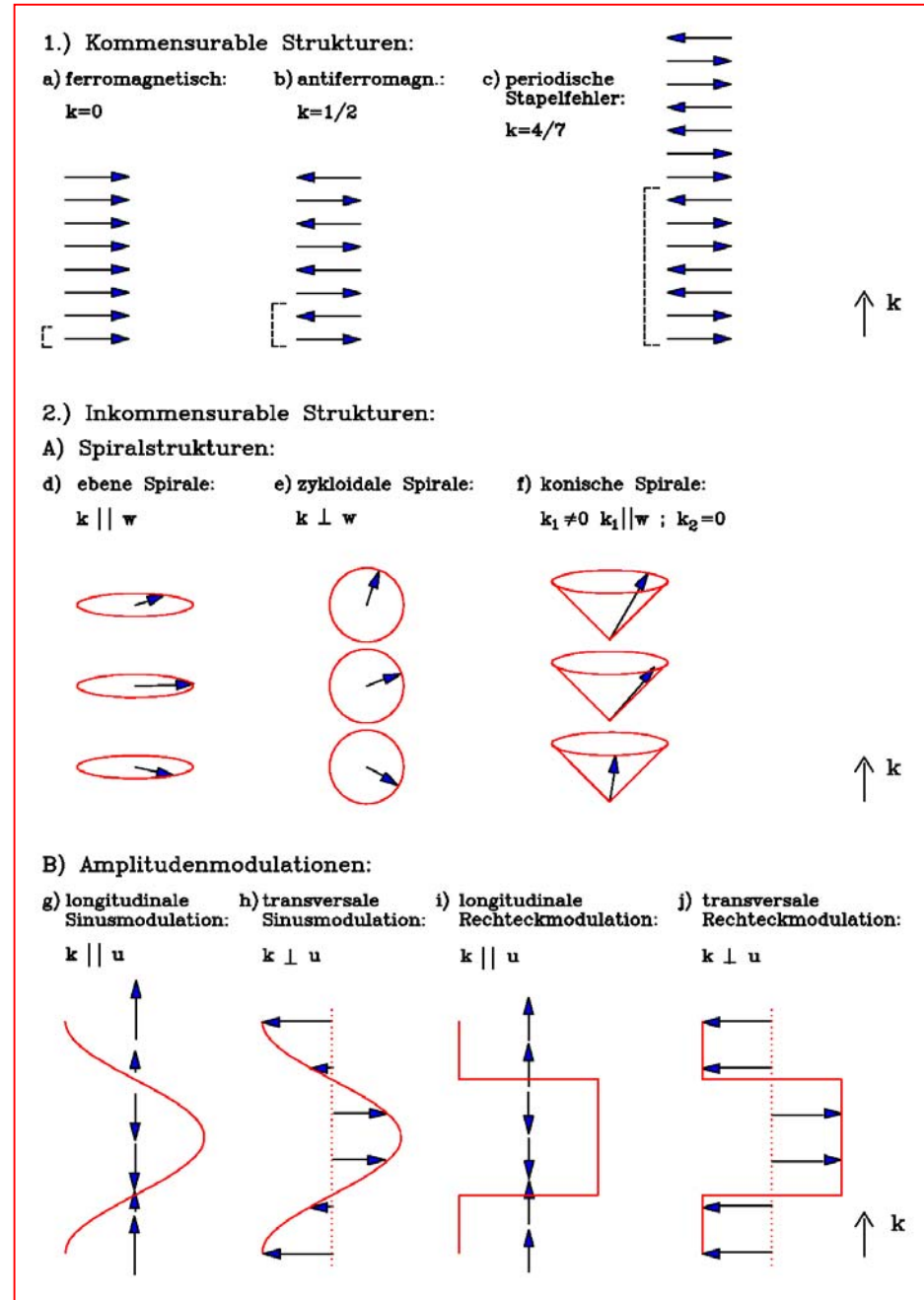
$k_i = q / p$ rational
magnetische Einheitszelle mit Bezug auf chemische Zelle

inkommensurable Strukturen:

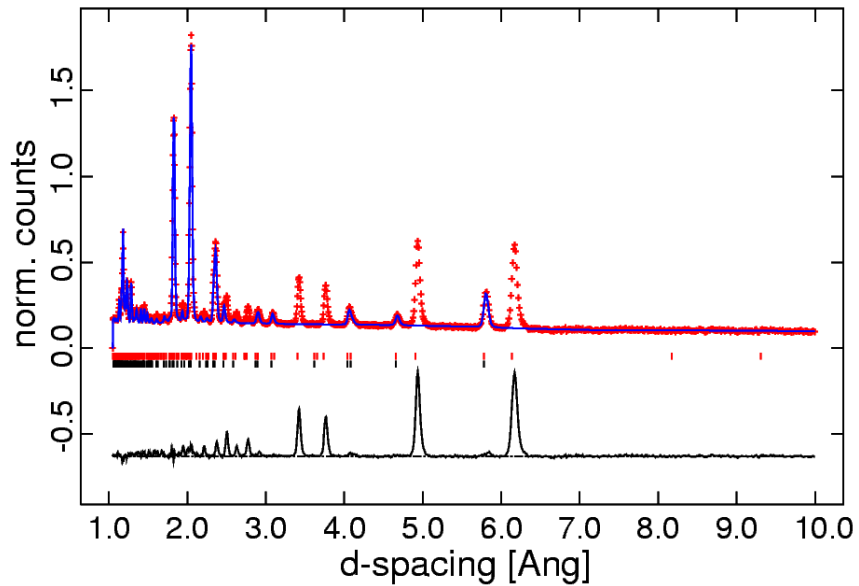
$k_i =$ beliebig
inkommensurables Verhältnis

keine magnetische Einheitszelle

➔ höher-dimensionale Beschreibung



Magnetische Neutronenstreuung



Neutronenbeugungsdiagramm

TbNi₁₀Si₂

1.6 K

ROTAX an ISIS

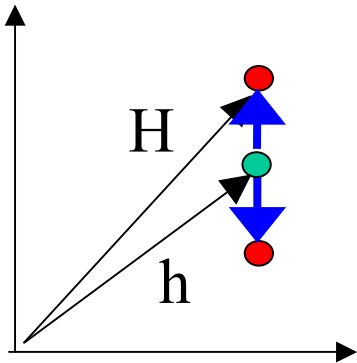
W. Kockelmann

Positionen der Braggreflexe

Bragg-Gleichung für Kernreflexe

$$1/d_{hkl} \equiv |\mathbf{h}| = 2 \sin(\theta) / \lambda$$

⇒ Kernreflexe \mathbf{h} sind Fundamentalreflexe



“Bragg-Gleichung für Magnetintensitäten”

\mathbf{k}

$$(1/d_{HKL})^\pm \equiv |\mathbf{H}| = |\mathbf{h} \pm \mathbf{k}| = 2 \sin(\theta^\pm) / \lambda$$

⇒ Magnetreflexe \mathbf{H} sind Satelliten von Fundamentalreflexen

Intensitäten der Braggreflexe

Bragg-Intensität für unpolarisierte Neutronenstreuung

$$I_{hkl} = I_N + I_M = I_0 \cdot L \cdot A \cdot j \cdot (|F_N|^2 + |F_{M\perp}|^2)$$

⇒ Kern und Magnetreflexe addieren sich im Beugungsdiagramm

Kernstreuung

$$F_N(\mathbf{h})$$

Magnetstreuung

$$|F_{M\perp}|^2 = |F_M|^2 - |\mathbf{e}_H \cdot F_M|^2$$

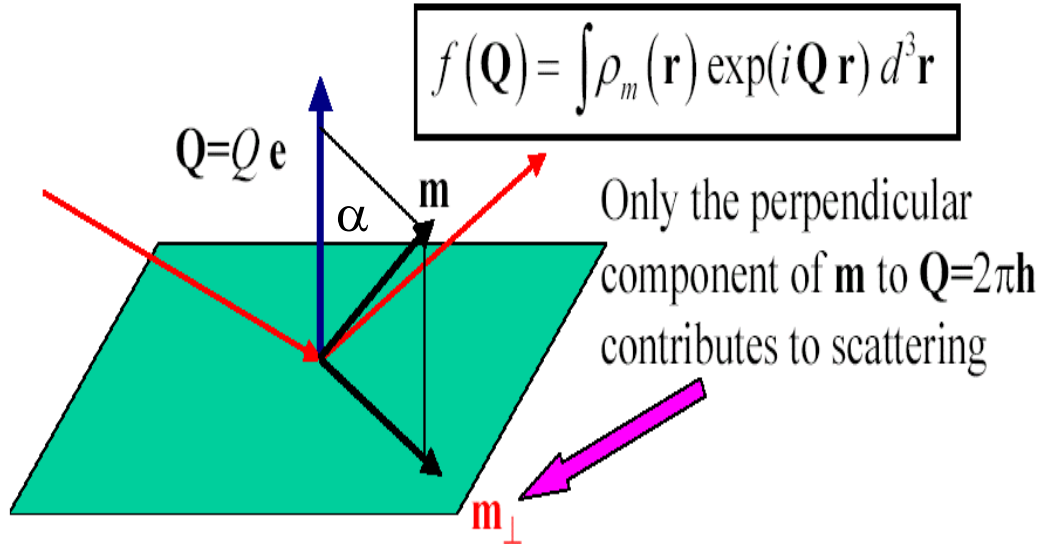
$$F_M(\mathbf{H}) = F_0 \sum_j f_j \mathbf{m}_j \exp \{ 2\pi i \mathbf{H} \mathbf{r}_j \}$$

magn.
Formfaktor

magn. Moment

⇒ "sin²α"-Auslöschung für Magnetreflexe

Magnetische Neutronenstreuung



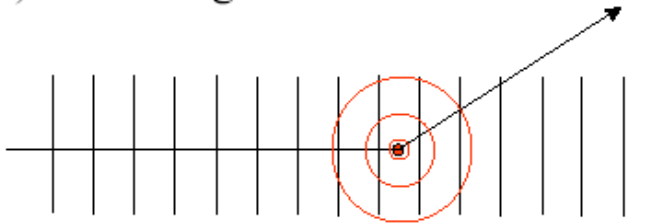
“ $\sin^2\alpha$ ”-Auslöschung für Magnetreflexe:

- nur die Momentkomponente m_{\perp} in der Netzebene trägt zur Streuung bei
- $I=0$ für \mathbf{m} parallel zum Streuvektor

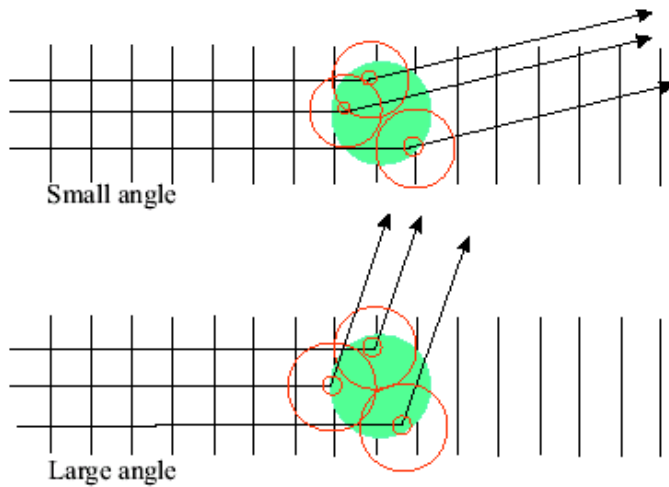
wichtig zur Bestimmung der Momentrichtung!

Magnetische Neutronenstreuung

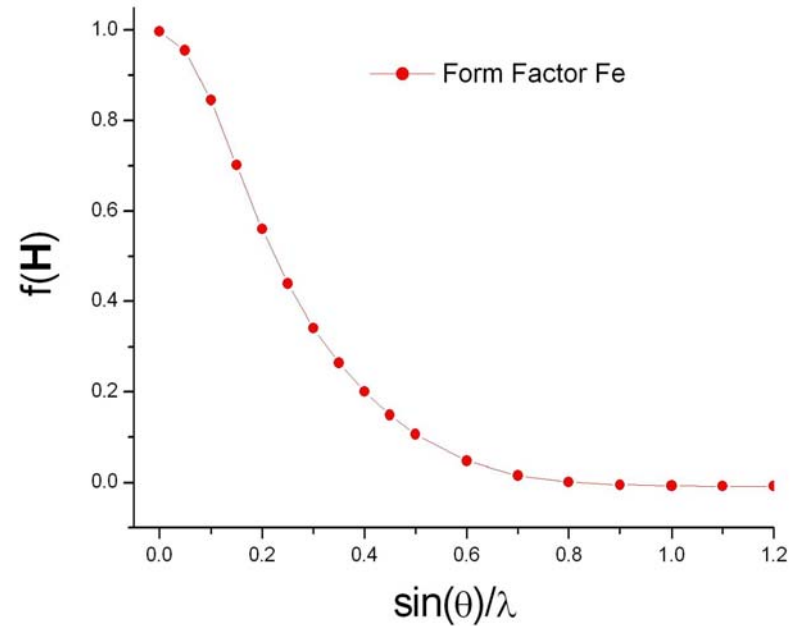
(a) scattering from nucleus



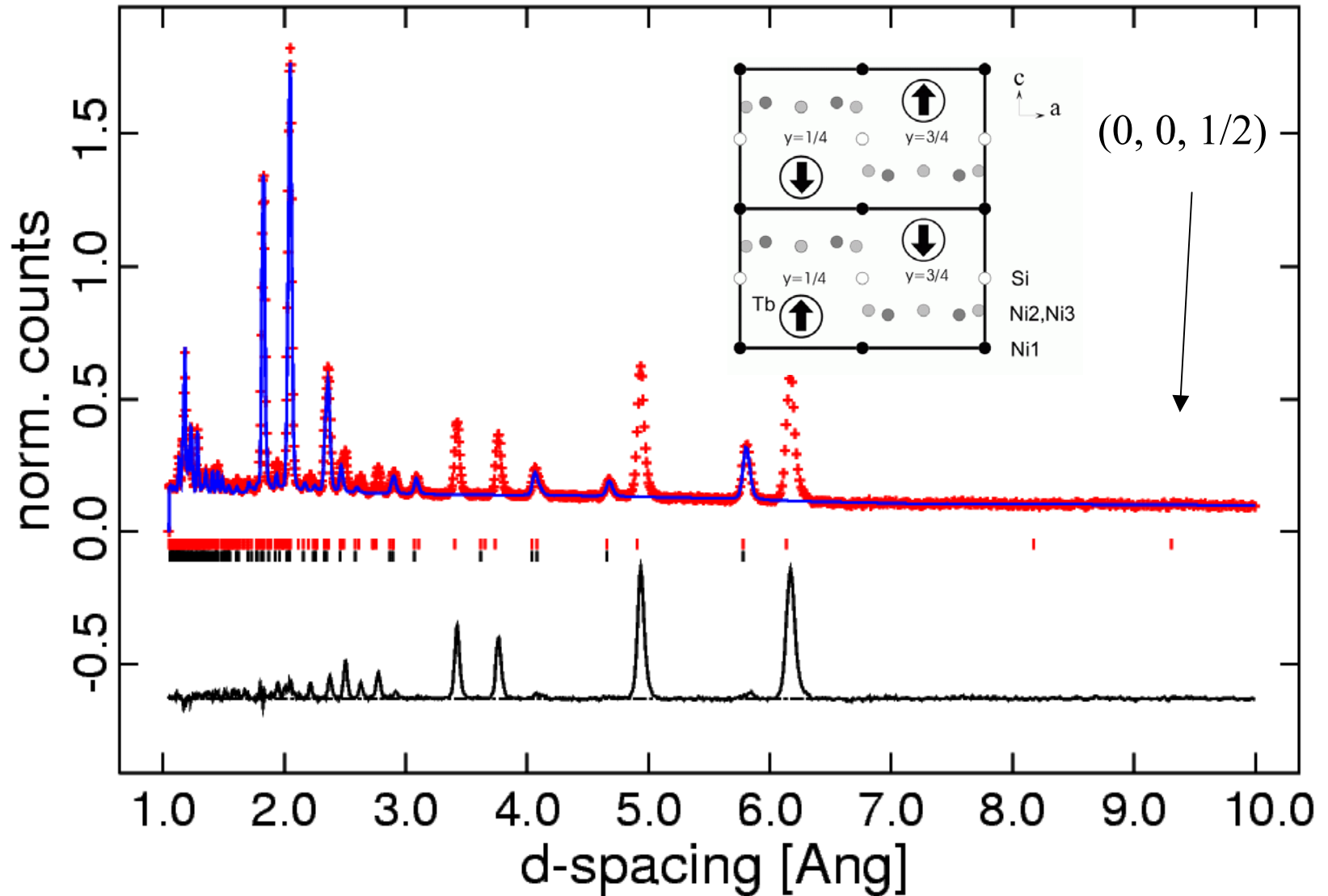
(b) scattering from electrons



Magnetischer Formfaktor

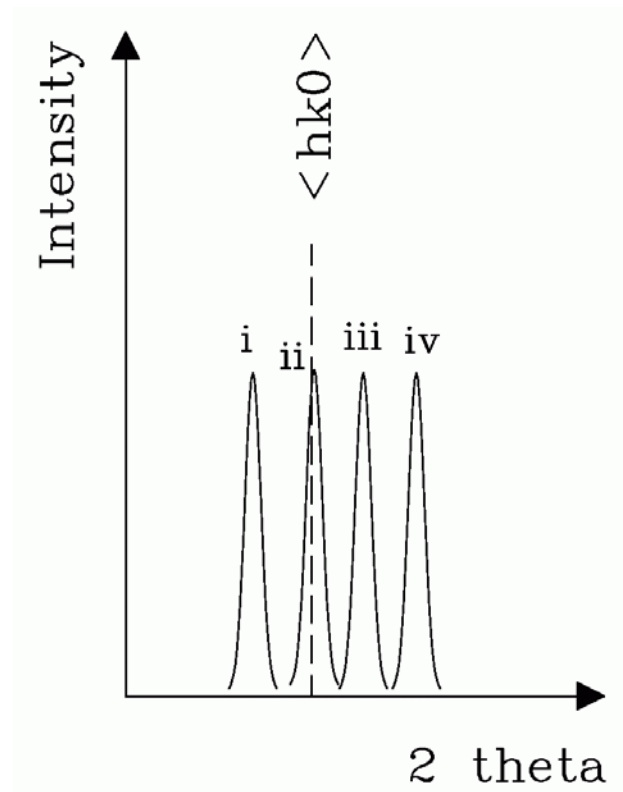
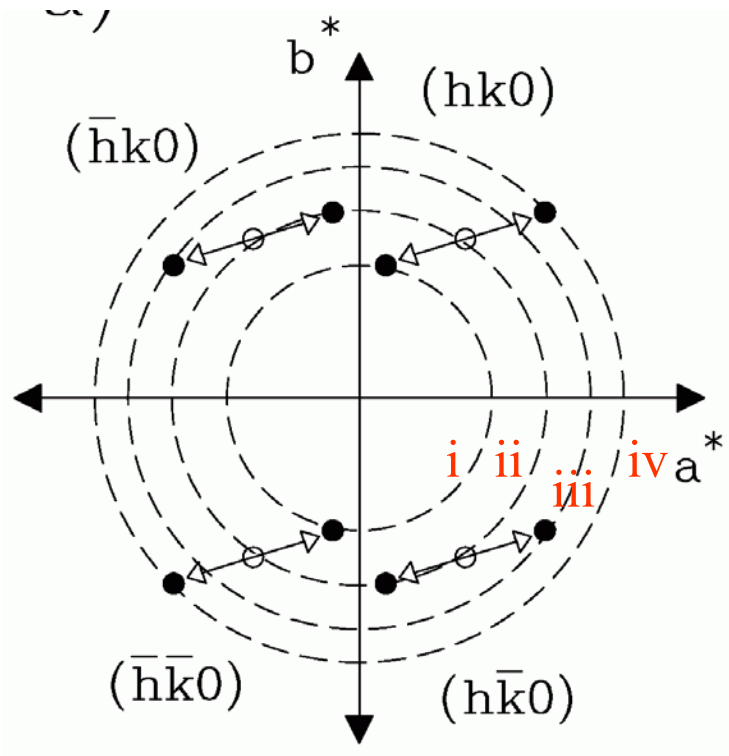


Magnetische Neutronenstreuung

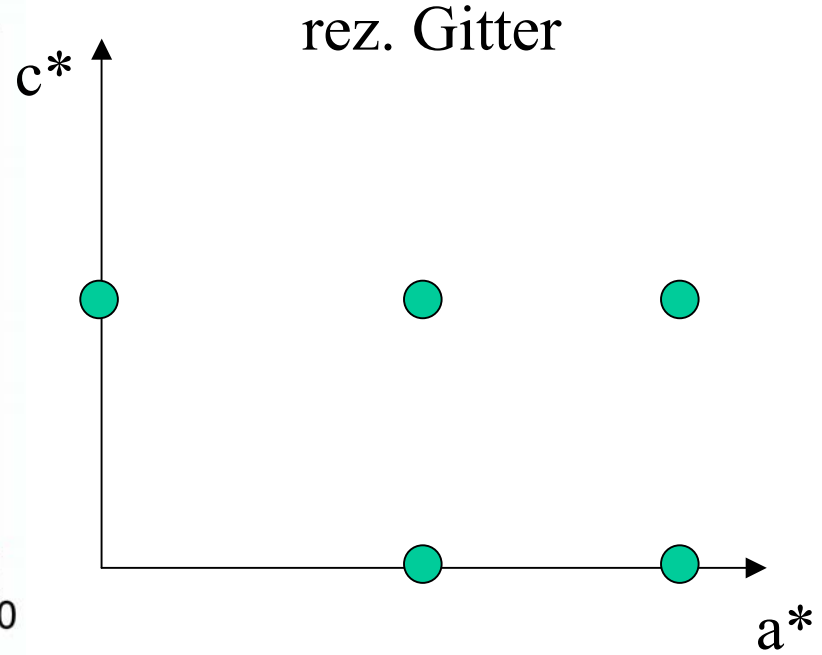
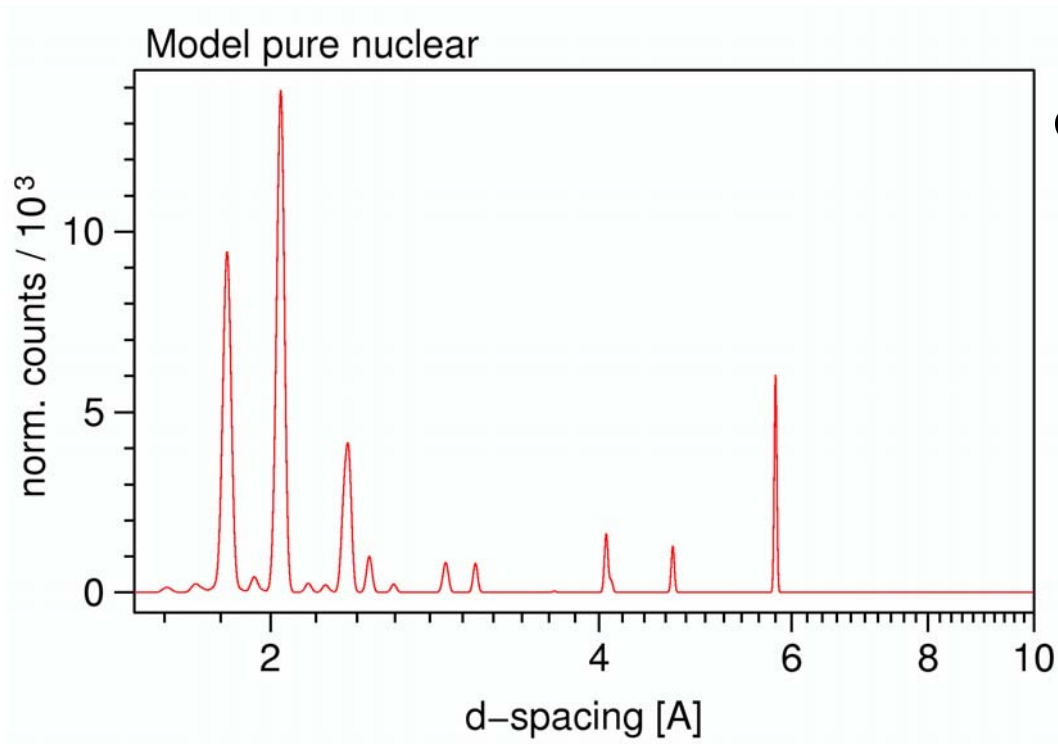


Magnetreflexe im Pulverdiagramm

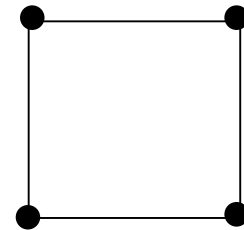
$$\left(\frac{1}{d_{hkl}} \right)^{\pm} \equiv |\mathbf{H}| = |\mathbf{h} \pm \mathbf{k}| = 2 \sin(\theta^{\pm n}) / \lambda$$



Magnetstrukturtypen im Beugungsbild

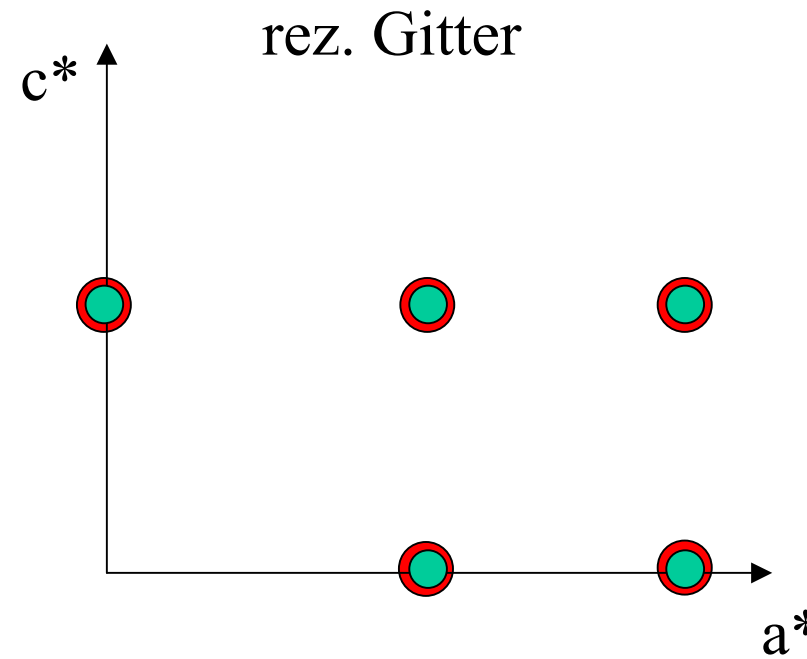
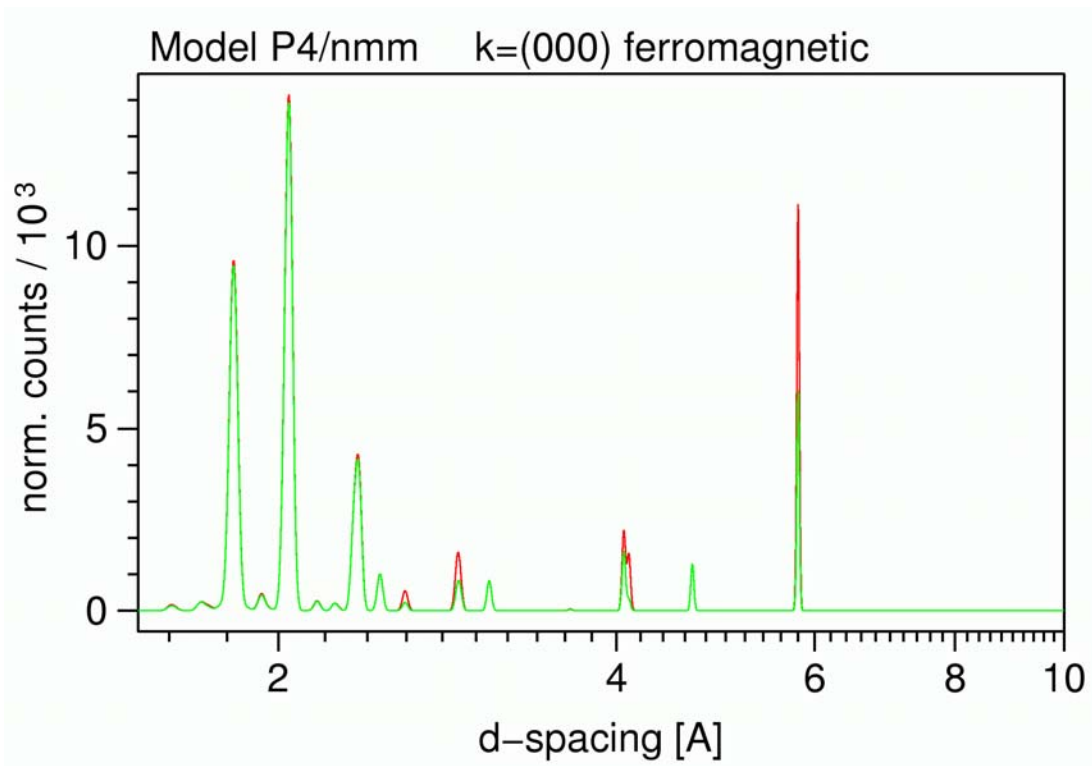


Realraum



paramagnetisch

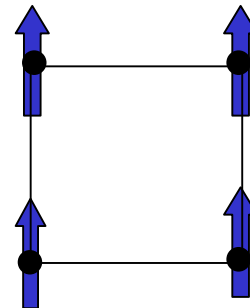
Magnetstrukturtypen im Beugungsbild



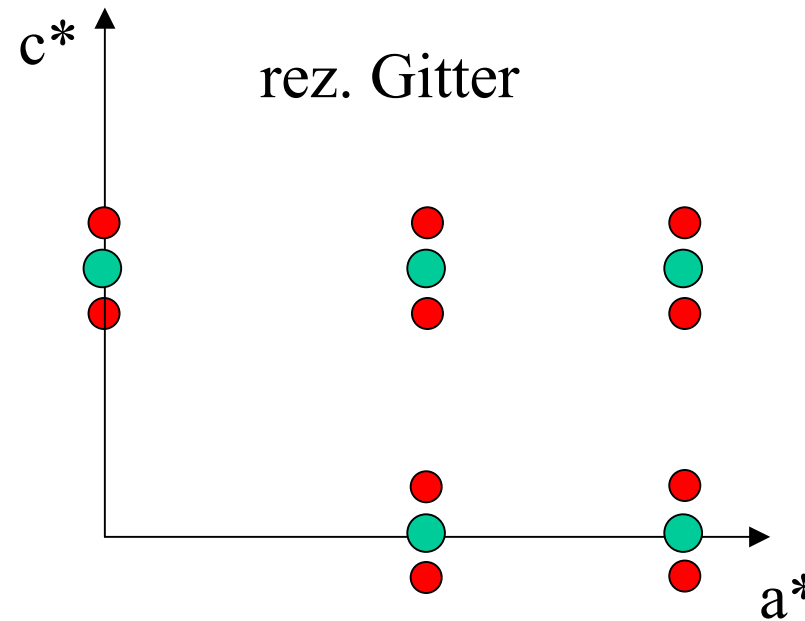
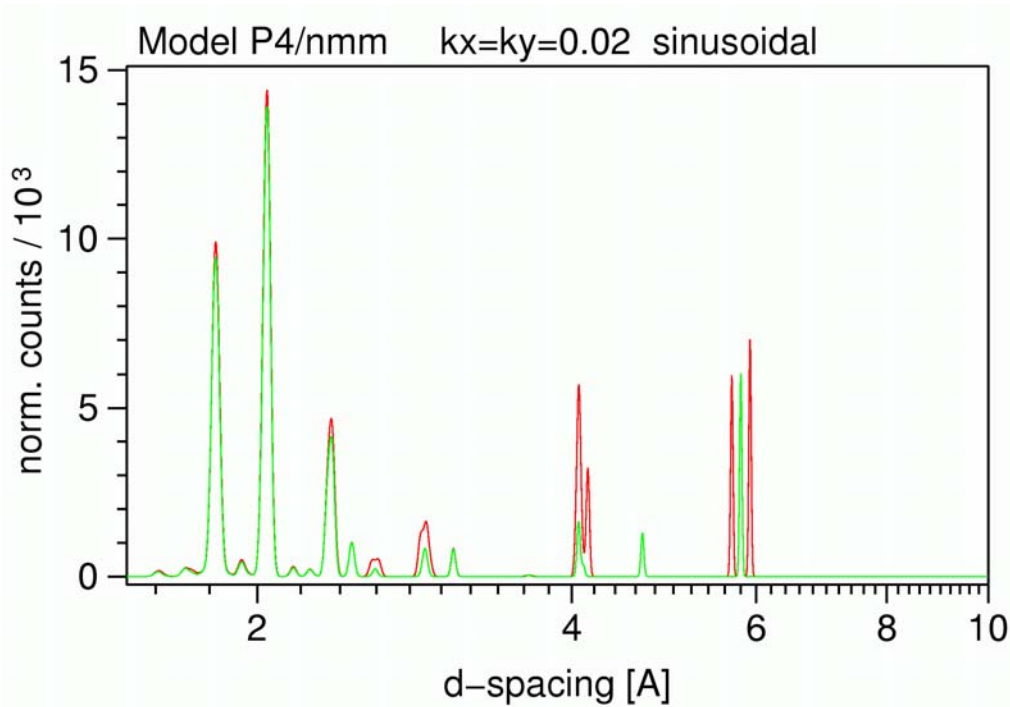
ferromagnetisch

$k=(0, 0, 0)$

Realraum

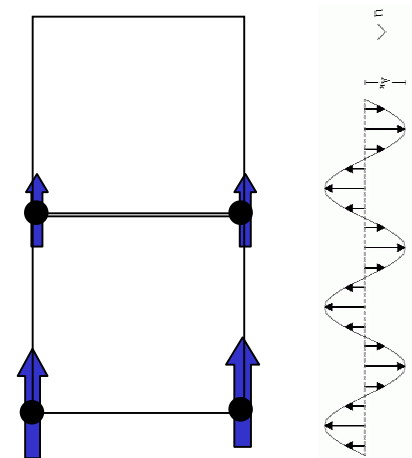


Magnetstrukturtypen im Beugungsbild

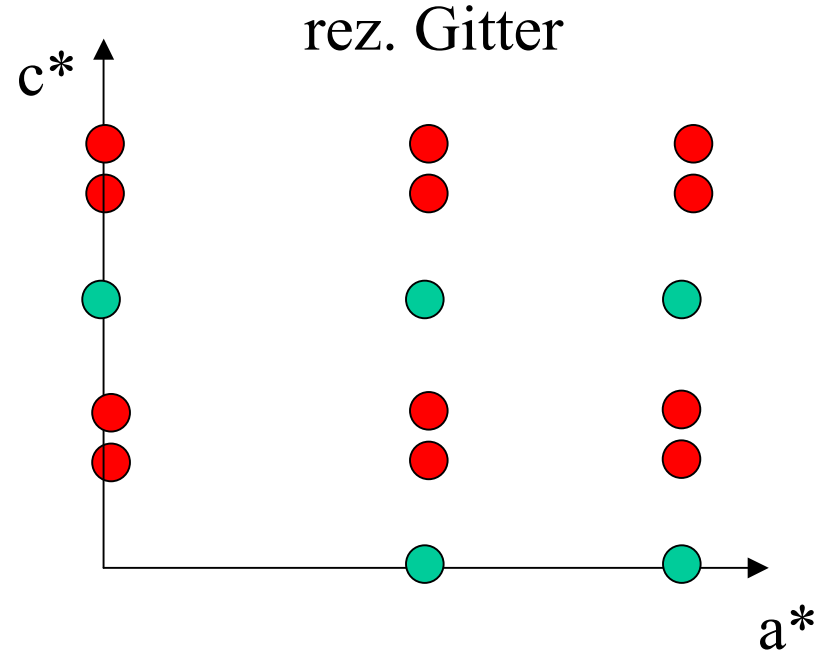
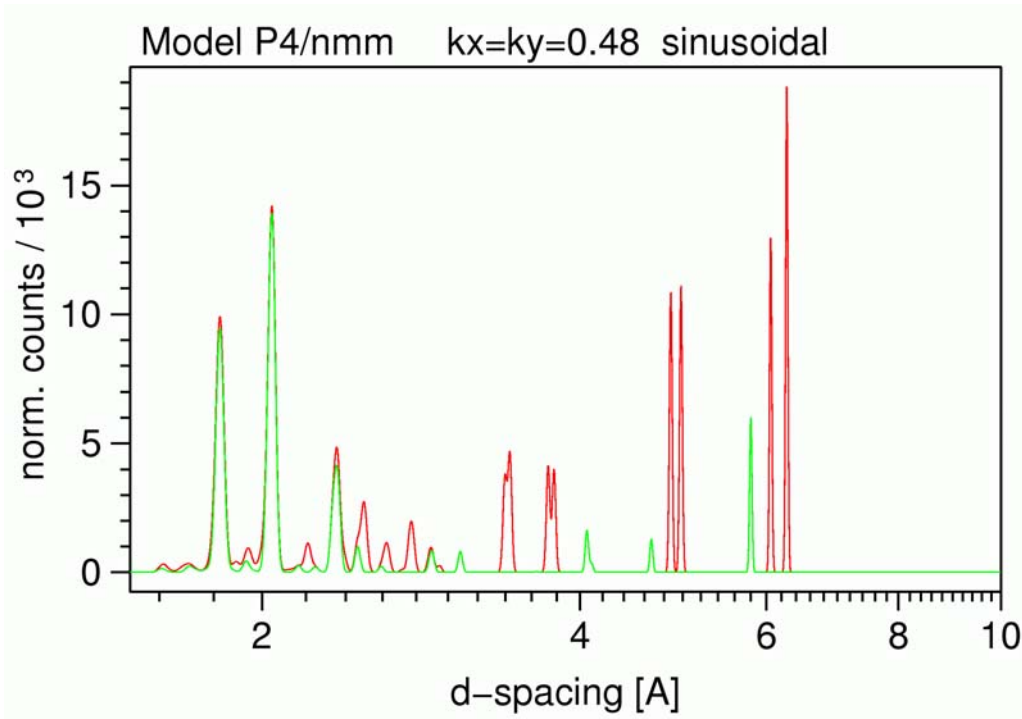


sinusmoduliert

$$\mathbf{k}=(0, 0, 0.02)$$



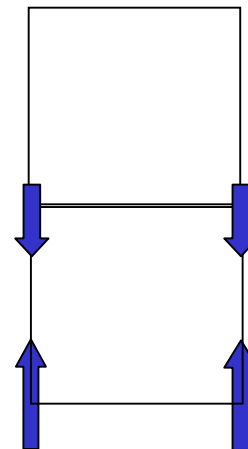
Magnetstrukturtypen im Beugungsbild



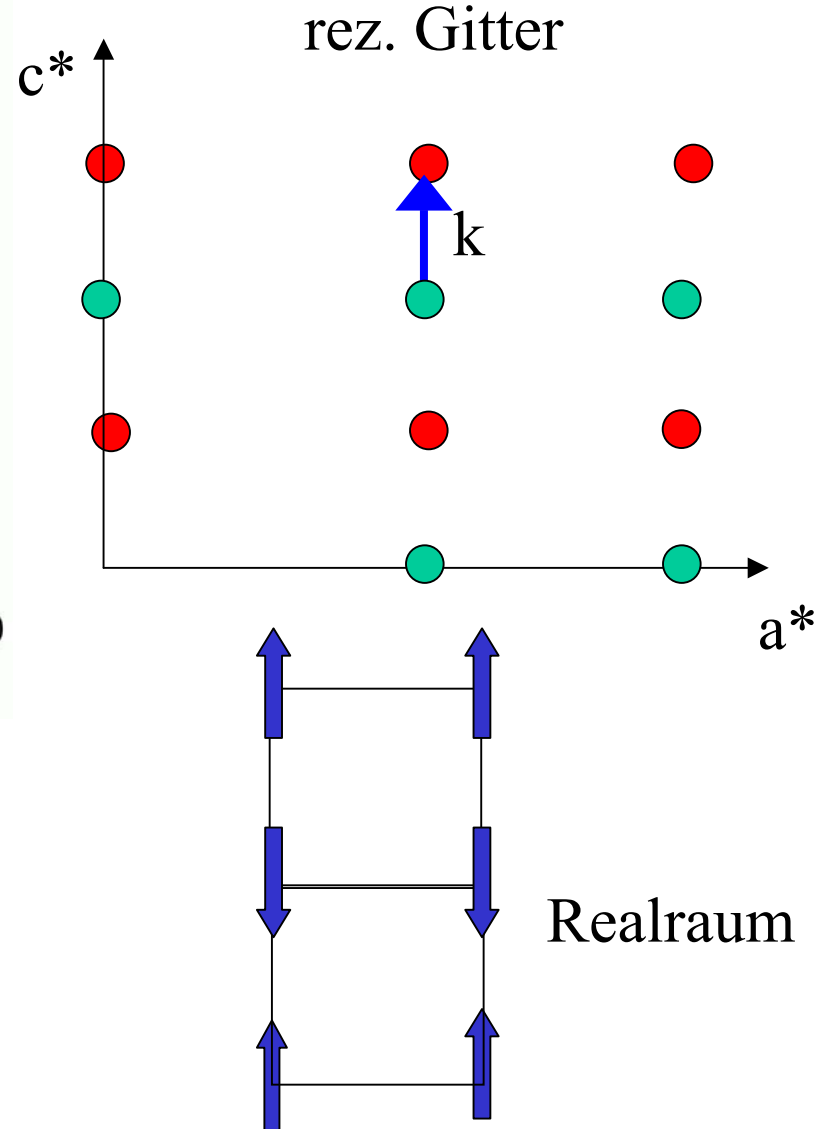
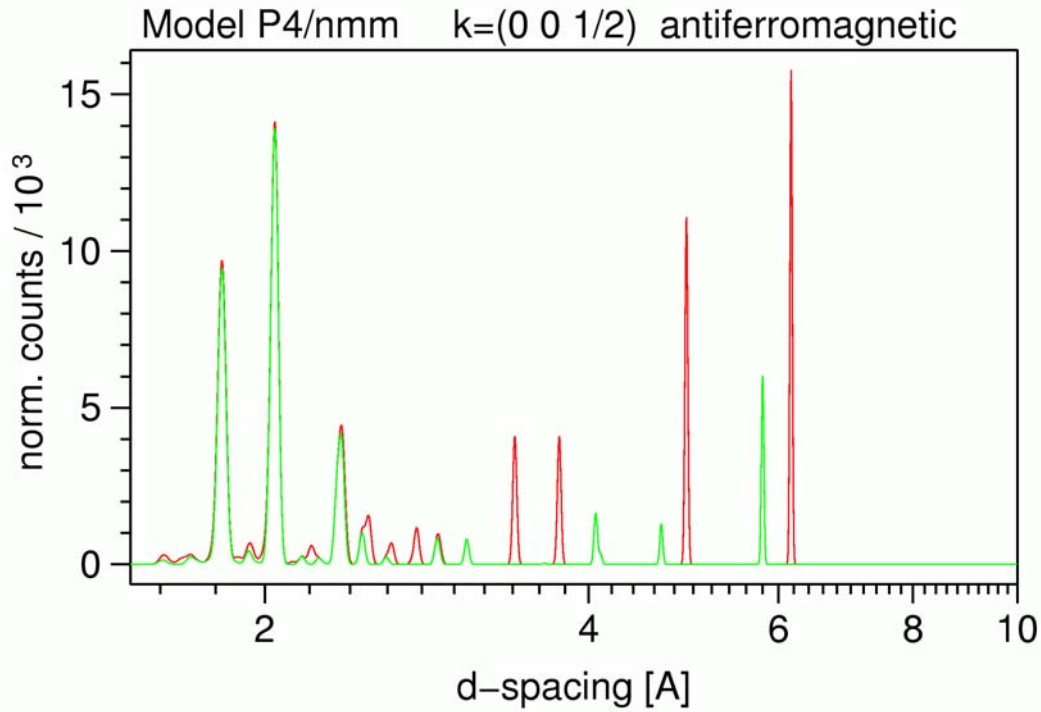
antiferromagnetisch

sinusmoduliert

$$\mathbf{k}=(0, 0, 0.5\pm 0.02)$$



Magnetstrukturtypen im Beugungsbild



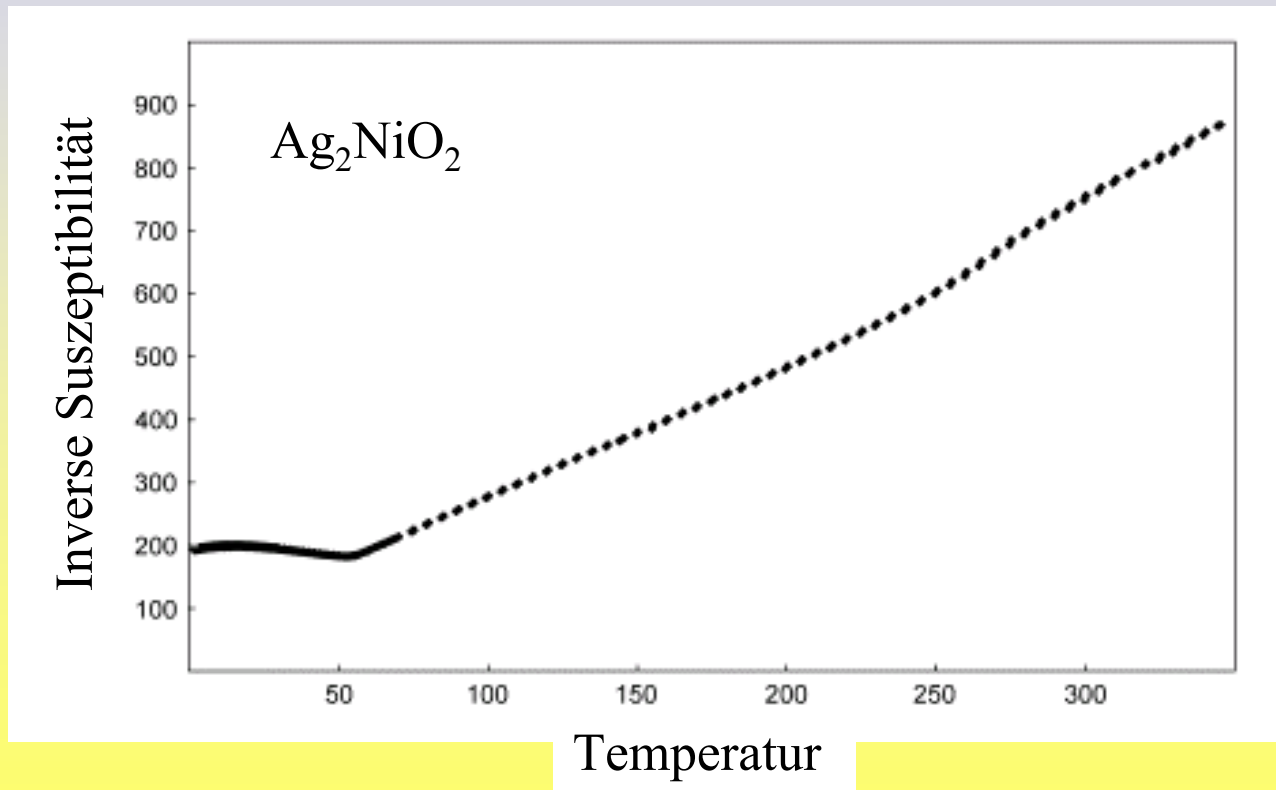
antiferromagnetisch

$$k=(0, 0, 1/2)$$

Vor der Neutronenbeugung:

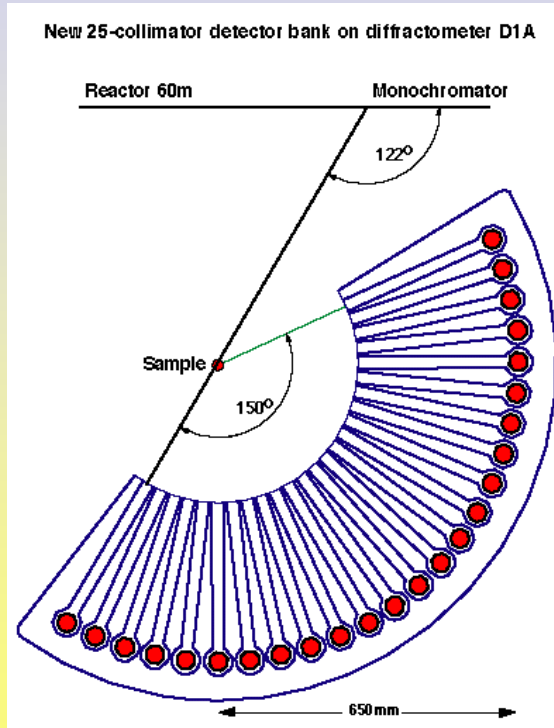
Röntgenpulvermessungen
magnetische Suszeptibilität, etc

AF Ordnung unterhalb $T_N=60$ K

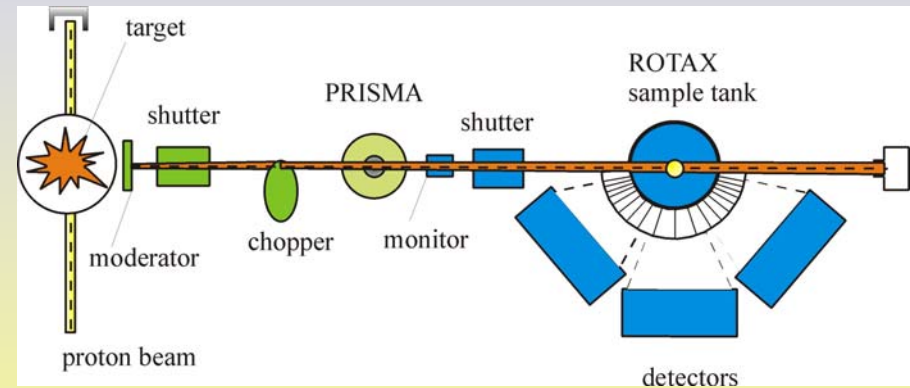


Vergleich konst. Wellenlänge - Flugzeitmethode

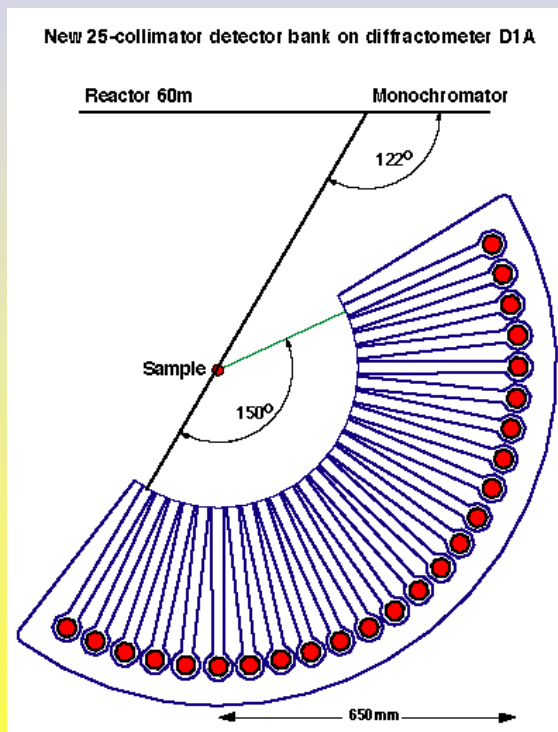
Constant Wavelength (D1A, ILL)



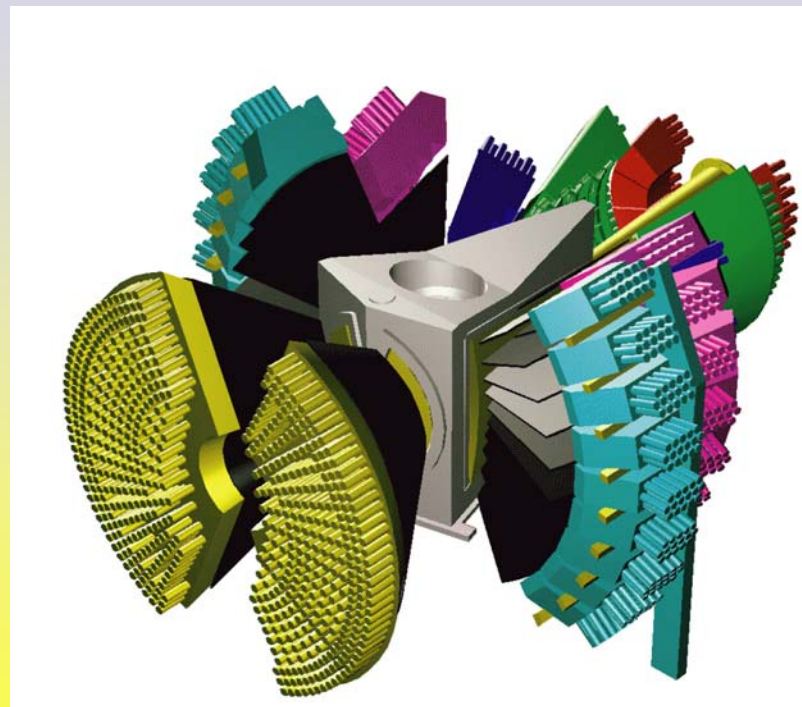
Time-of-Flight (ROTAX, ISIS)



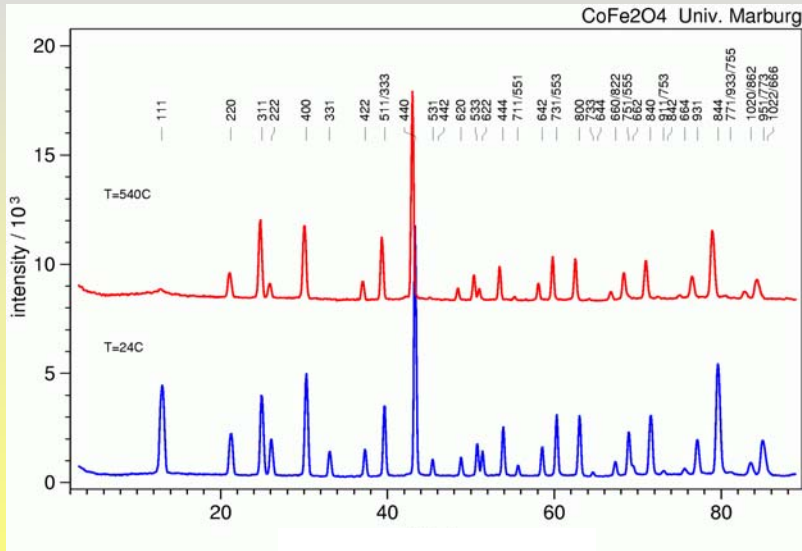
Constant Wavelength (D1A, ILL)



Time-of-Flight (GEM, ISIS)

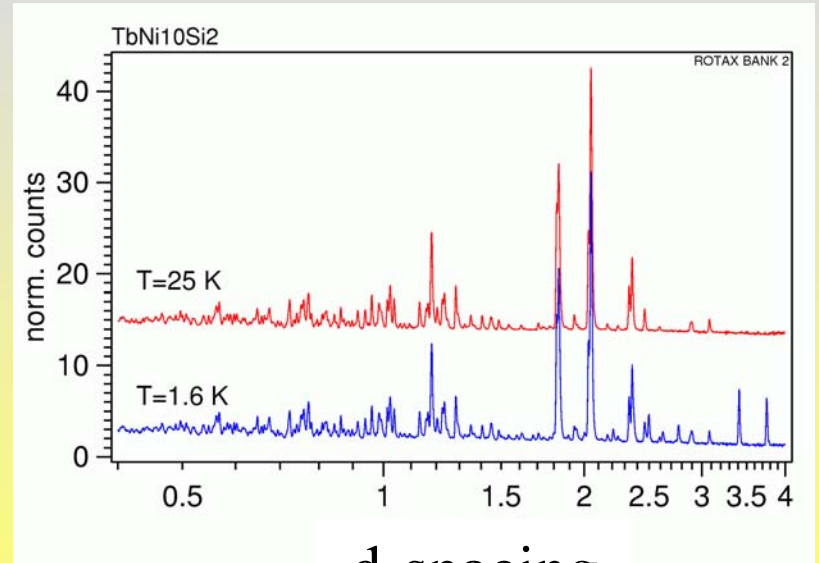


Constant Wavelength
angle-dispersive
SV7 Jülich



2theta

Time-of-Flight
energy+angle-dispersive
ROTAX ISIS



d-spacing

Magnetstrukturanalyse mit Neutronen

- Schritt 1: Kristallstrukturverfeinerung
(paramagnetische Phase)**
- Schritt 2: Bestimmung der magnetischen Braggreflexe**
- Schritt 3: Indizierung:
Suche nach den Ausbreitungsvektoren**
- Schritt 4: Aufstellung des magnetischen Modells
magnetische Auslöschungen
Symmetrieanalyse**
- Schritt 5: Modell-Verfeinerung (Rietveld)
Fullprof, GSAS, CCLSL**

Rietveld-Programme zur Magnetstrukturanalyse

FULLPROF Refinement of powder diffraction data
J. Rodriguez-Carvajal
download : <http://www-llb.cea.fr/fullweb> or ILL-page
(setup_Fullprof_suite.exe)

GSAS Generalized Structure Analysis Software
A.C. Larson, R.B. VonDreele
download : <http://www.ccp14.ac.uk>
(gsas_expgui.exe)

CCSL The Cambridge Crystallography Subroutine Library
P.J. Brown & J.C. Matthewman
VMS Rietveld versions: W.I.F. David & J.C. Matthewman

DOS/PC versions: PRODD/MPRODD
J.P. Wright & J.B. Forsyth
program available from J.P. Wright: wright@esrf.fr

Schritt 1: Kristallstrukturverfeinerung

Paramagnetische Phase:

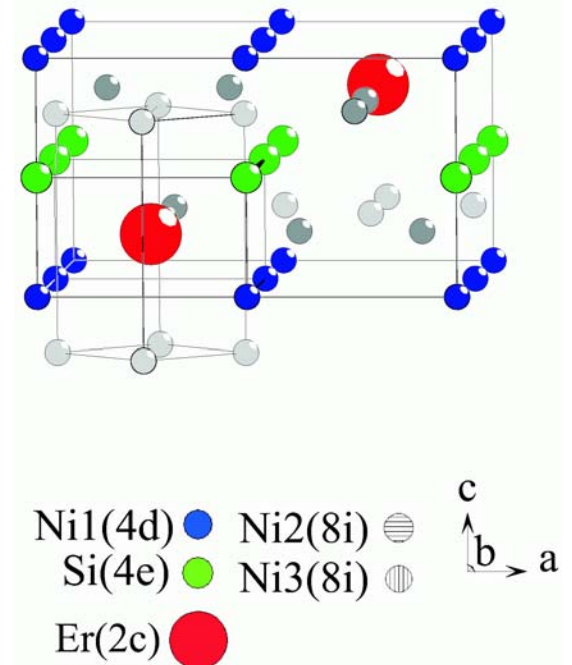
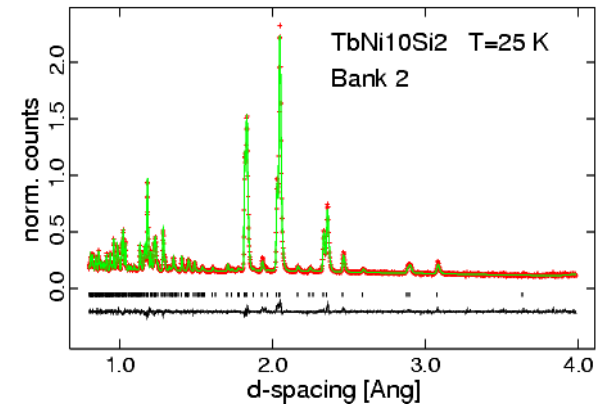
Wo sind die magnetischen Atome?

Lagenbesetzung \Rightarrow magn Untergitter
insb. Übergangsmetalle e.g. Mn, Fe, Co

Magnetisch geordnete Phase:

Größe der kristallographischen Zelle:

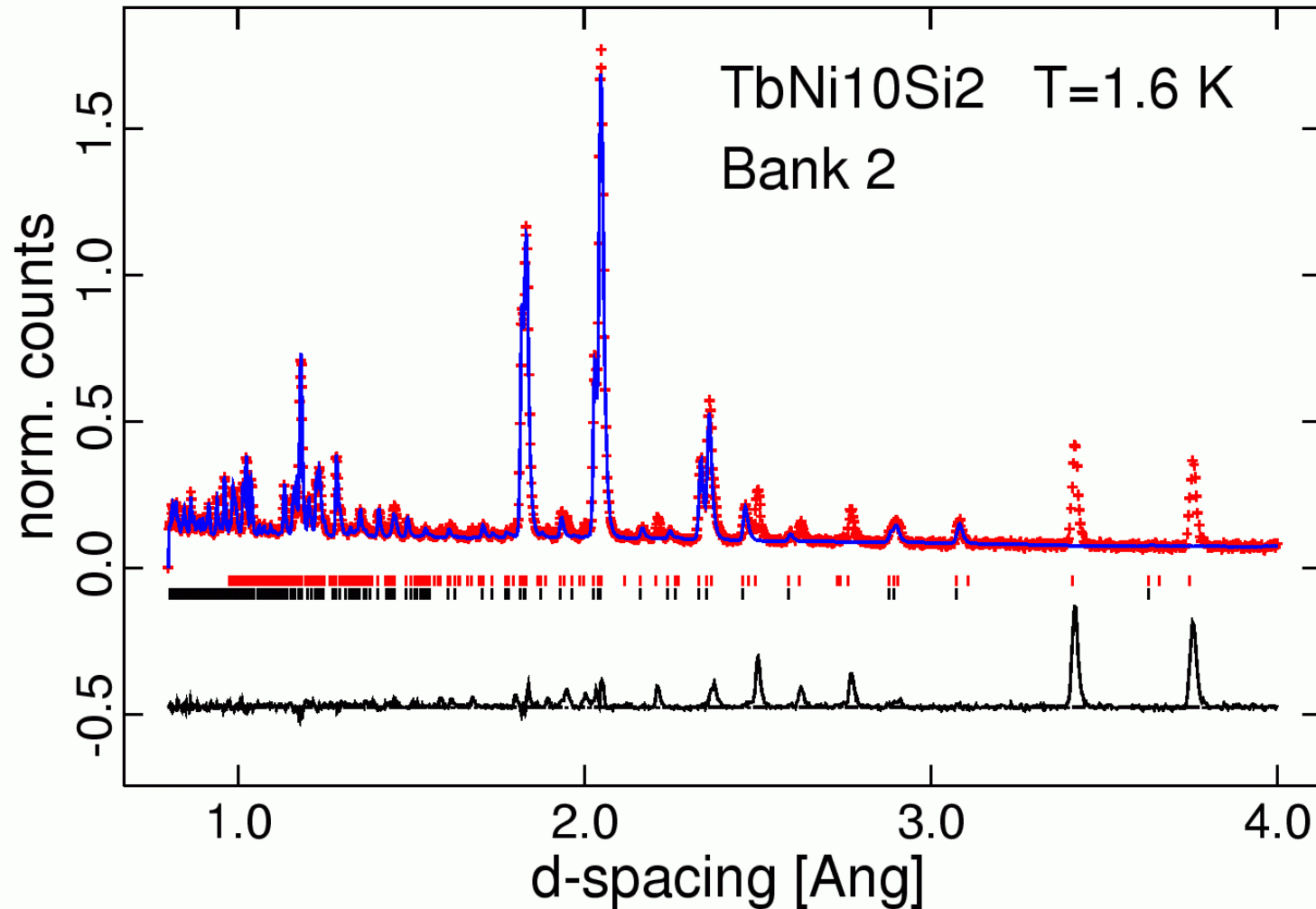
Gitterparameter \Rightarrow Suche nach k-Vektoren



Programme:

Fullprof, GSAS, CCSL, ...

Schritt 1: Beispiel Gitterparameterverfeinerung



Programm: GSAS

Schritt 2: Bestimmung der magn. Bragg-Reflexe

Temperatur-Differenzdiagramme:

rein magnetisches Neutronenbeugungsdiagramm

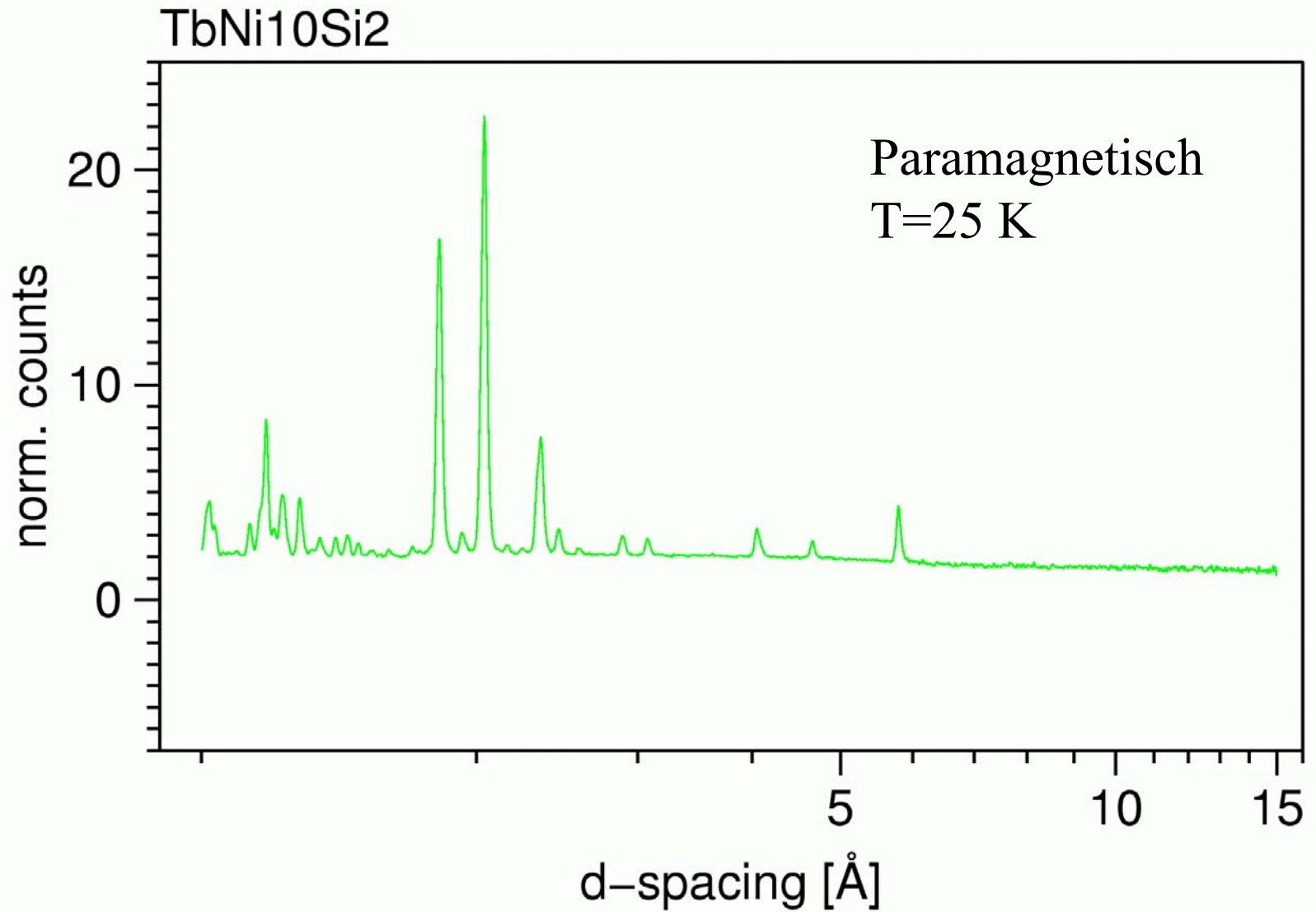
Temperaturabhängige Messungen:

- zur Bestätigung der Ordnungstemperatur
- **k**-Vektor, Ordnungsparameter, Momente

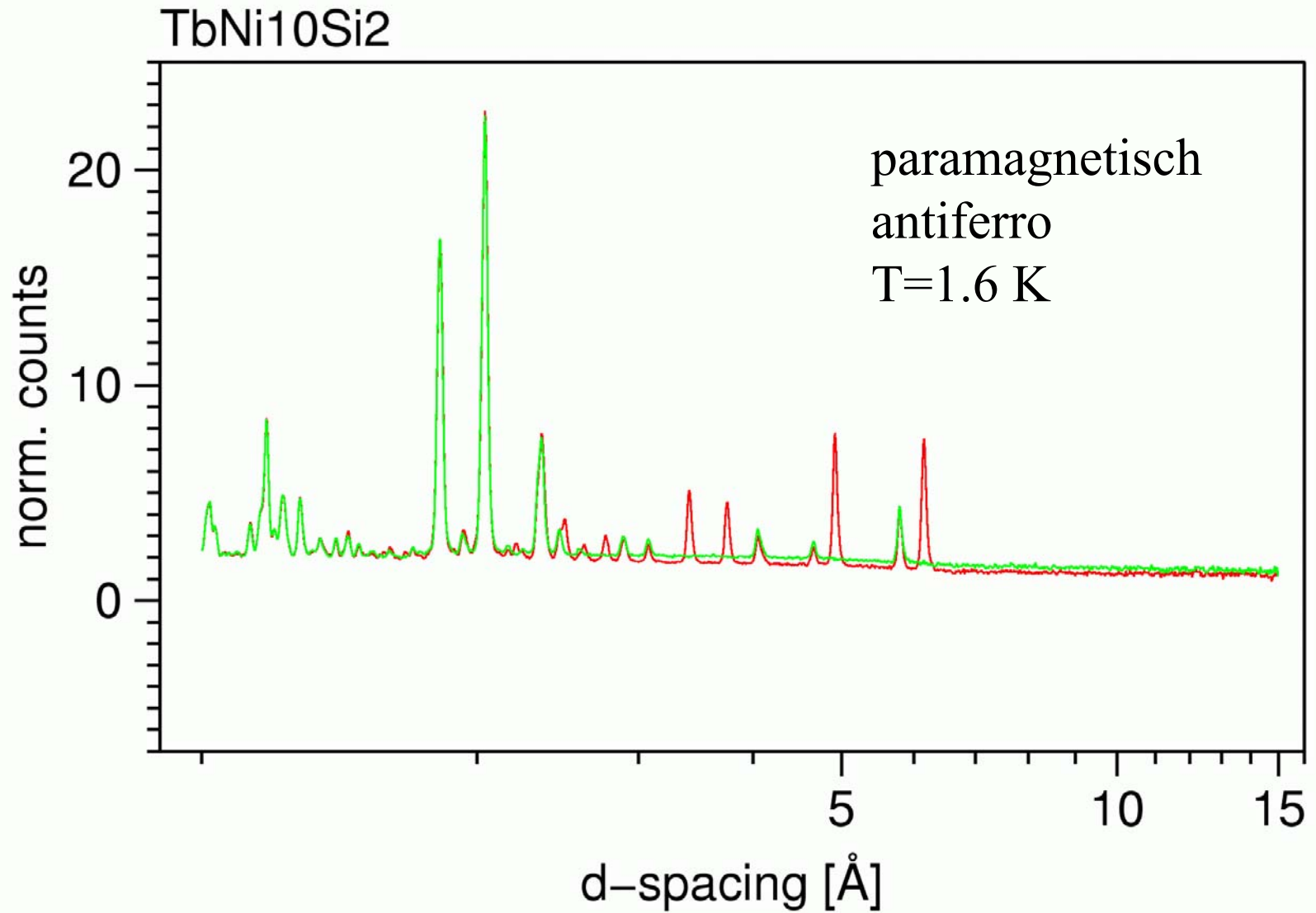
Ergebnis:

- Positionen und Intensitäten magnetischer Braggreflexe
- Temperaturverhalten

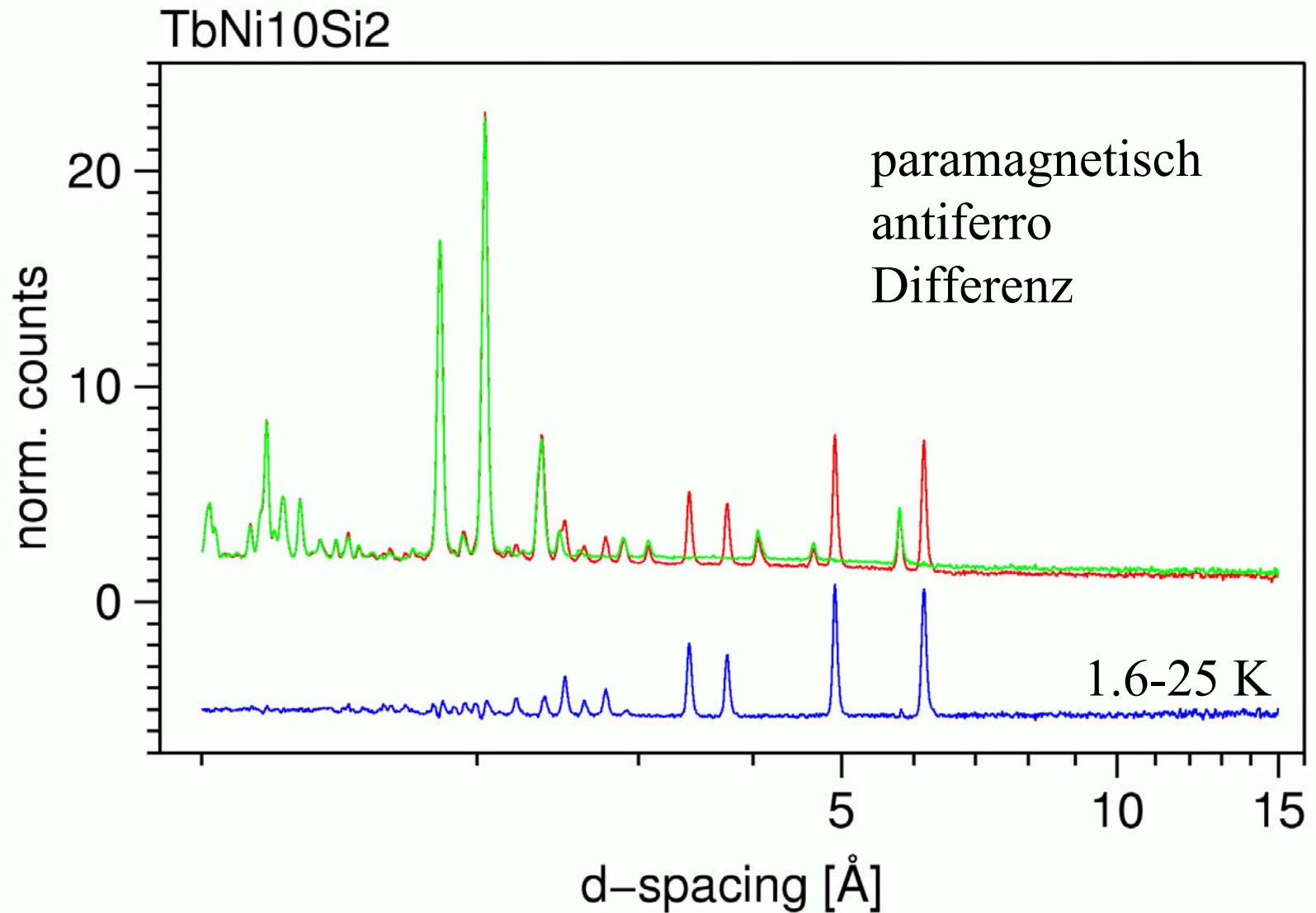
Schritt 2: Beispiel Differenzdiagramme



Schritt 2: Beispiel Differenzdiagramme

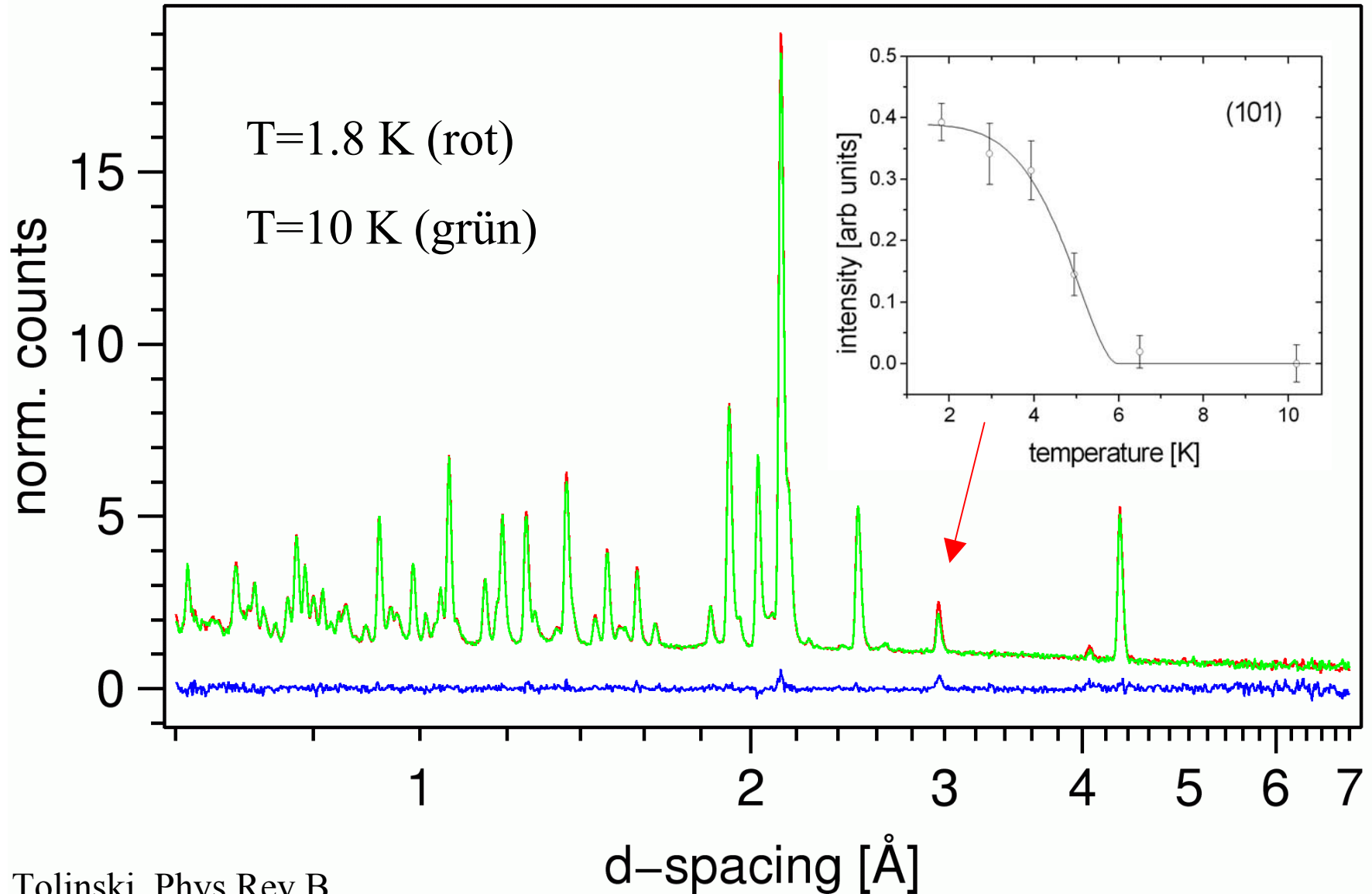


Schritt 2: Beispiel Differenzdiagramme

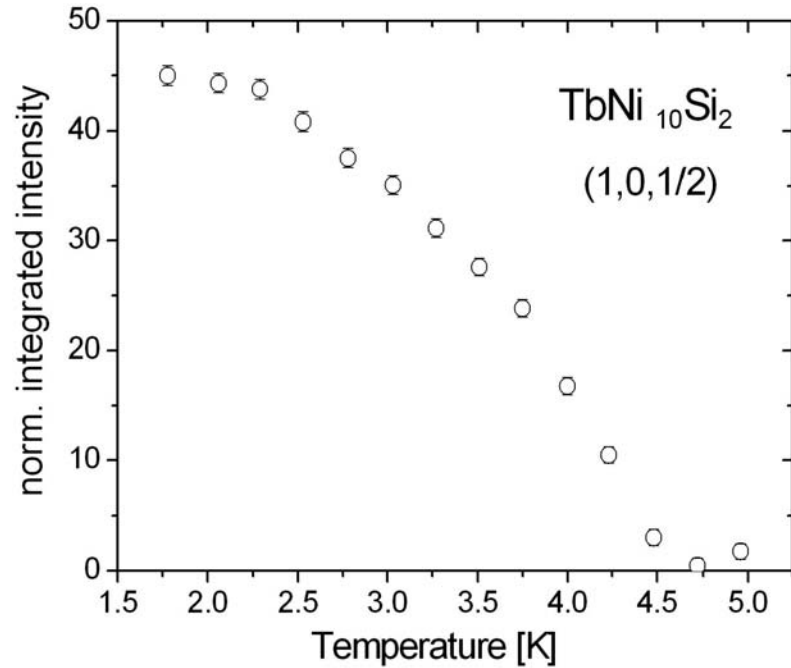


Schritt 2: Messung der magnetischen Bragg-Reflexe

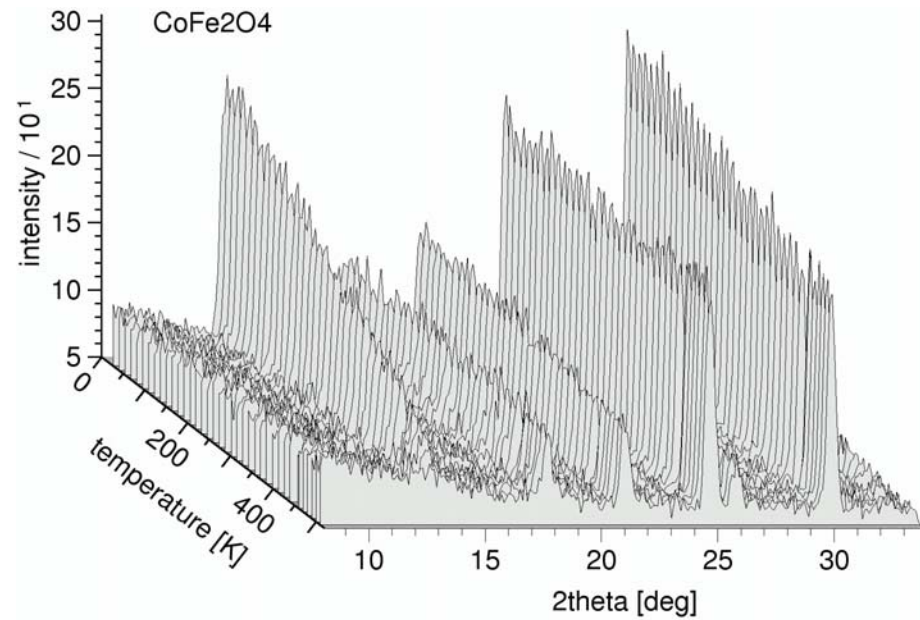
NdNi₄Al



Schritt 2: Beispiel Temperaturabhängigkeit

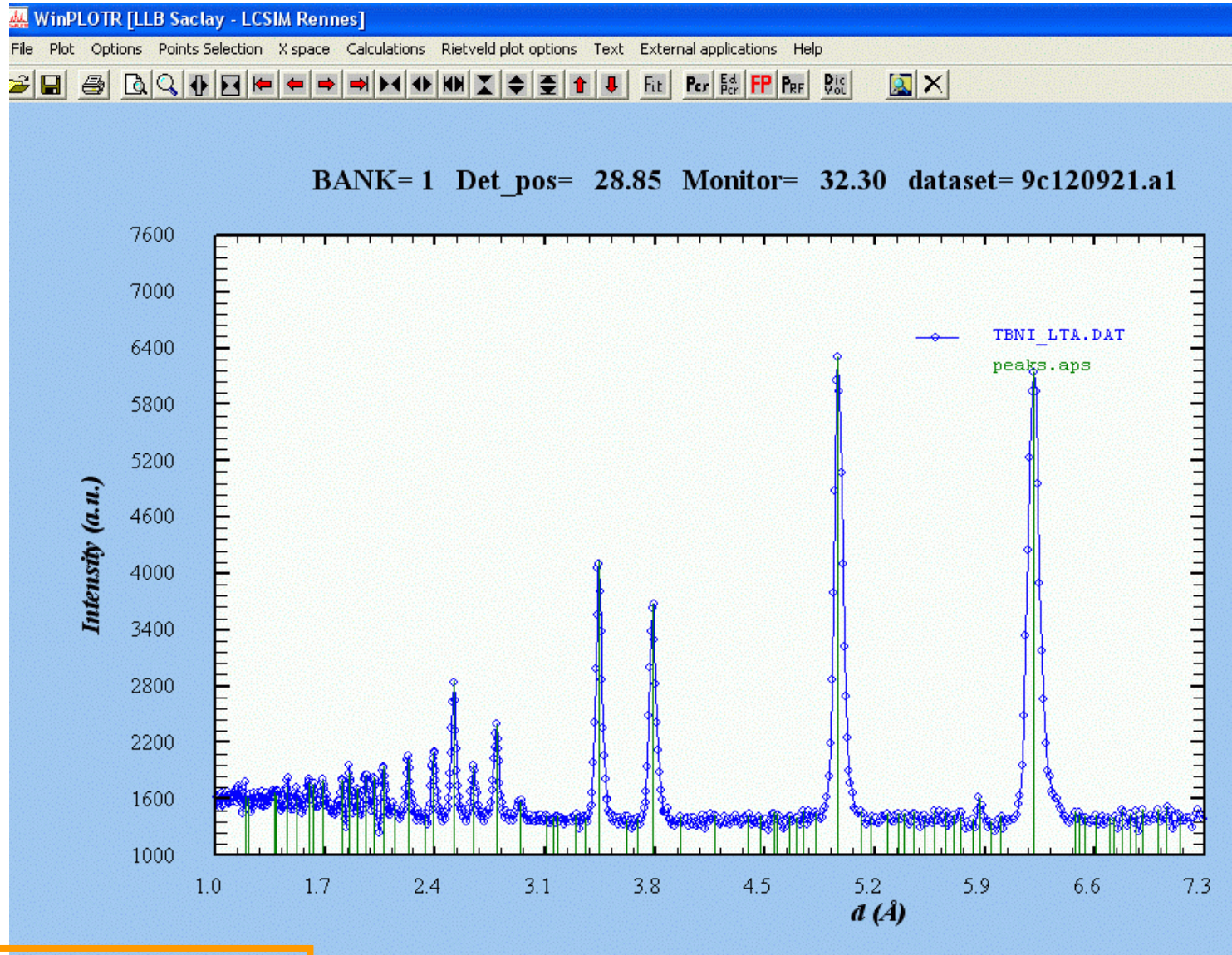


ROTAX, ISIS



SV7, Jülich

Schritt 2: Positionen der magnetischen Bragg-Reflexe



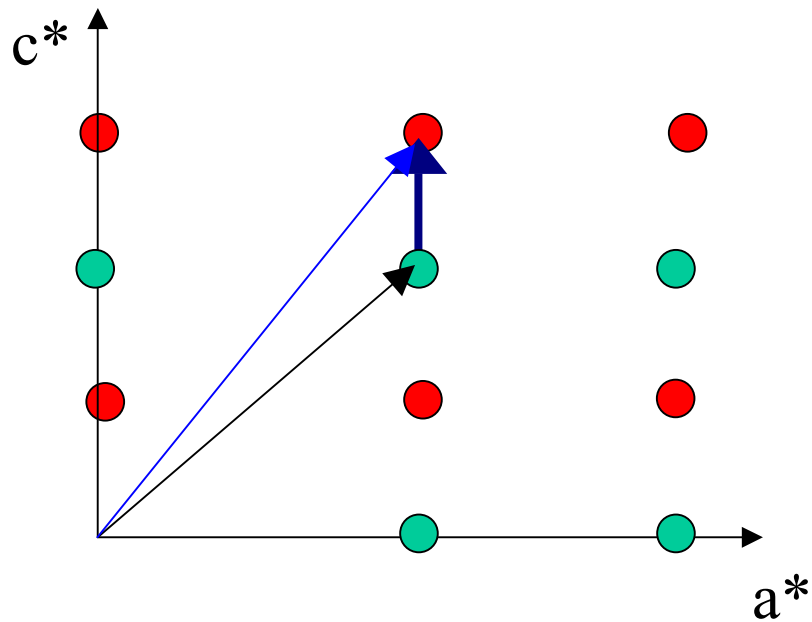
Schritt 3: Suche nach Ausbreitungsvektor = Bestimmung der magnetischen Zelle

$$(h, k, l)^{\pm} = | \mathbf{h} \pm \mathbf{k} | = (1/d_{hkl})^{\pm} = 2 \sin(\theta^{\pm n}) / \lambda$$

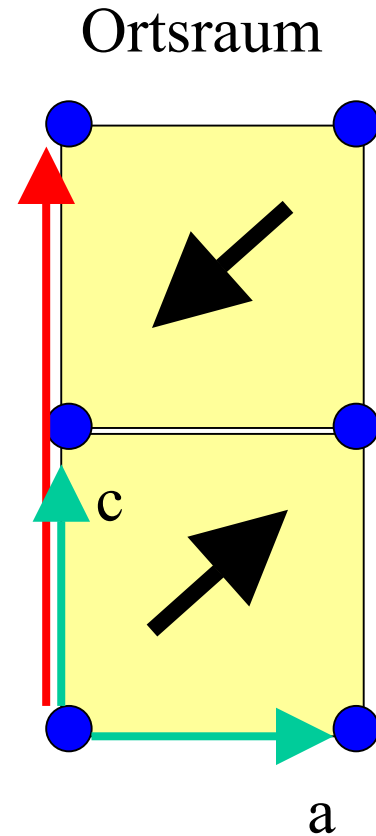
- **hkl-Listen auf Basis der Laue-Symmetrie**
mit den Gitterparametern der chemischen Zelle
POWLS, Fullprof
- **Einfache k-Vektoren**
magnetische = chem. Zelle: $k=(0,0,0)$
Zellverdopplungen: $k=(\frac{1}{2} 0 0)$ $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ $(0 0 \frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ etc.
POWLS, Fullprof
- **Einfache inkommensurable Strukturen**
graphische Lösung (vgl. J. Rossat-Mignot)
- **Inkommensurable Strukturen: „grid-search“-Programme**
Supercell (WinPlotR/FULLPROF), Ksearch (WK)
Wilkinson-Plot

Schritt 3: Indizierung der Ausbreitungsvektoren = Bestimmung der magnetischen Zelle

Beispiel: $\text{TbNi}_{10}\text{Si}_2$
reziproker Raum



$$\mathbf{k} = \frac{1}{2} \mathbf{c}^* = (0, 0, \frac{1}{2})$$



$$\begin{aligned} \mathbf{m} &= \mathbf{m}_0 \exp\{2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\} \\ &= \mathbf{m}_0 \cos \pi = -\mathbf{m}_0 \end{aligned}$$

Schritt 3: Suche nach Ausbreitungsvektor = Bestimmung der magnetischen Zelle

$$(h, k, l)^{\pm} = | \mathbf{h} \pm \mathbf{k} | = 1/d_{hkl}^{\pm} = 2 \sin(\theta^{\pm n}) / \lambda$$

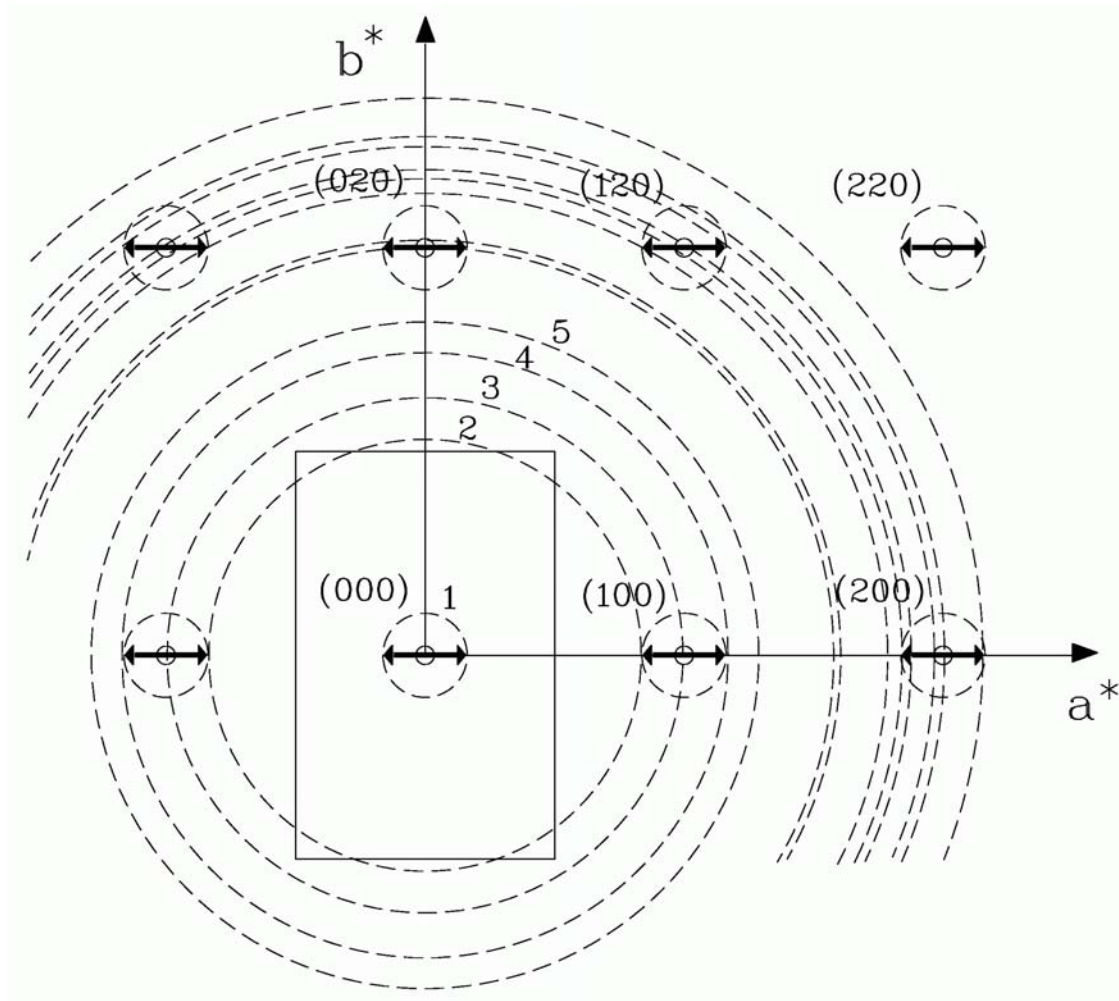
Orthorhombisch:

$$(1/d_{hkl}^{\pm})^2 = (h-k_x)^2/a^2 + (k-k_y)^2/b^2 + (l-k_z)^2/c^2$$

(000)[±]-Reflex“:

$$(1/d_{000}^{\pm})^2 = (k_x/a)^2 + (k_y/b)^2 + (k_z/c)^2$$

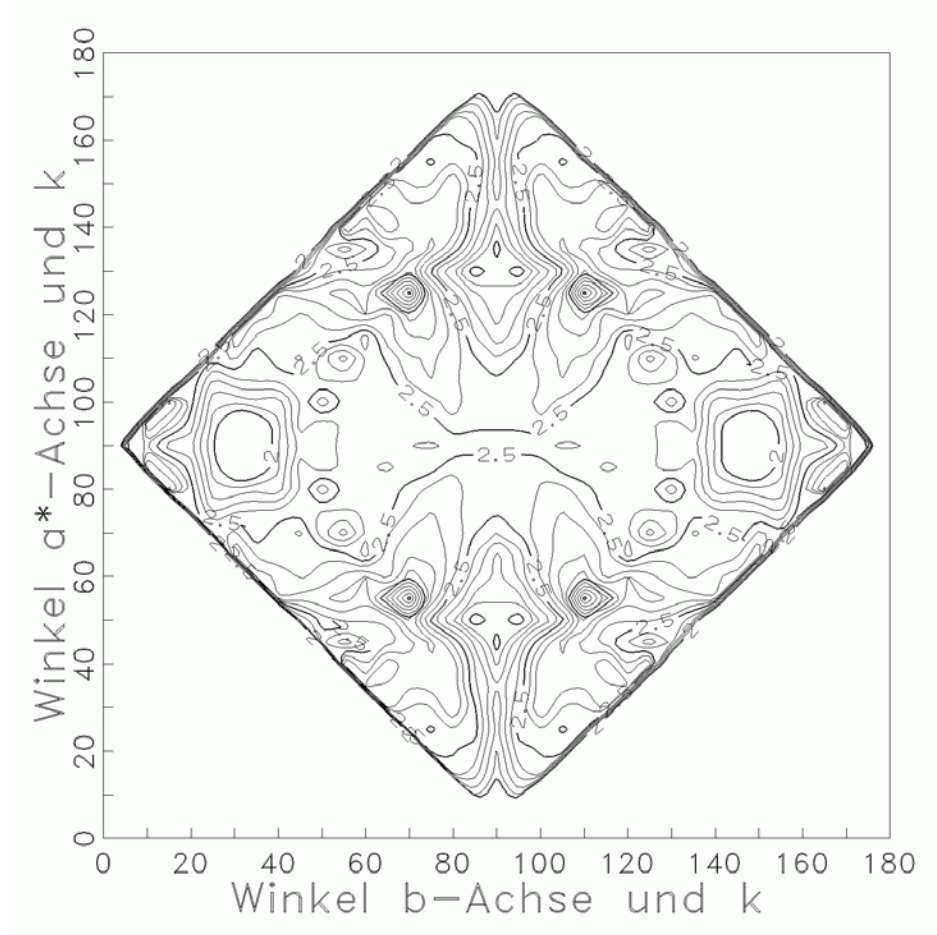
Schritt 3: Indizierung der Ausbreitungsvektoren = Bestimmung der magnetischen Zelle



$\text{TbCo}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{C}_2$ (1.5 K)

Graphische Lösung
nach J. Rossat-Mignot

Schritt 3: Indizierung der Ausbreitungsvektoren = Bestimmung der magnetischen Zelle



$\text{TbCo}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{C}_2$ (1.5 K)

Wilkinson-Plot

Wilkinson et al, J. Appl.
Cryst 24, 1991, p 365

Schritt 4: Modell-Aufstellung

Tips:

Auslöschungen: nutze „ $\sin^2\alpha$ “-Auslöschung

Symmetrie-Analyse bestimme “admissible components”
- bestimme Symmetrie der Magnetlagen
- wähle kompatible magnetische Raumgruppe

Opechowski & Guccione “Magnetic Symmetry”
W. Prandl, “Determination of magnetic structures”

(Symmetry-Analyse Programme: BasiRep, SARAH)

Magn. Formfaktoren Ce^{3+} Mn^{2+} Mn^{3+} etc
Koeffizienten aus: Int. Tables for Crystallography

Modell-Rechnungen POWLS, CCSL, etc

Schritt 5: Modell-Verfeinerung (Rietveld-Programme)

Rietveld-Methode dient zur Verfeinerung, nicht zur Lösung von Magnetstrukturen !

Fullprof:

- kann alle Magnetstrukturen behandeln
- Verfeinerung von Fourierkomponenten
- k-Vektoren oder magnetische Einheitszelle
- graphische Oberfläche WinPlotR
- Utility-Programme: Supercell, BasiRep, Studio, etc.

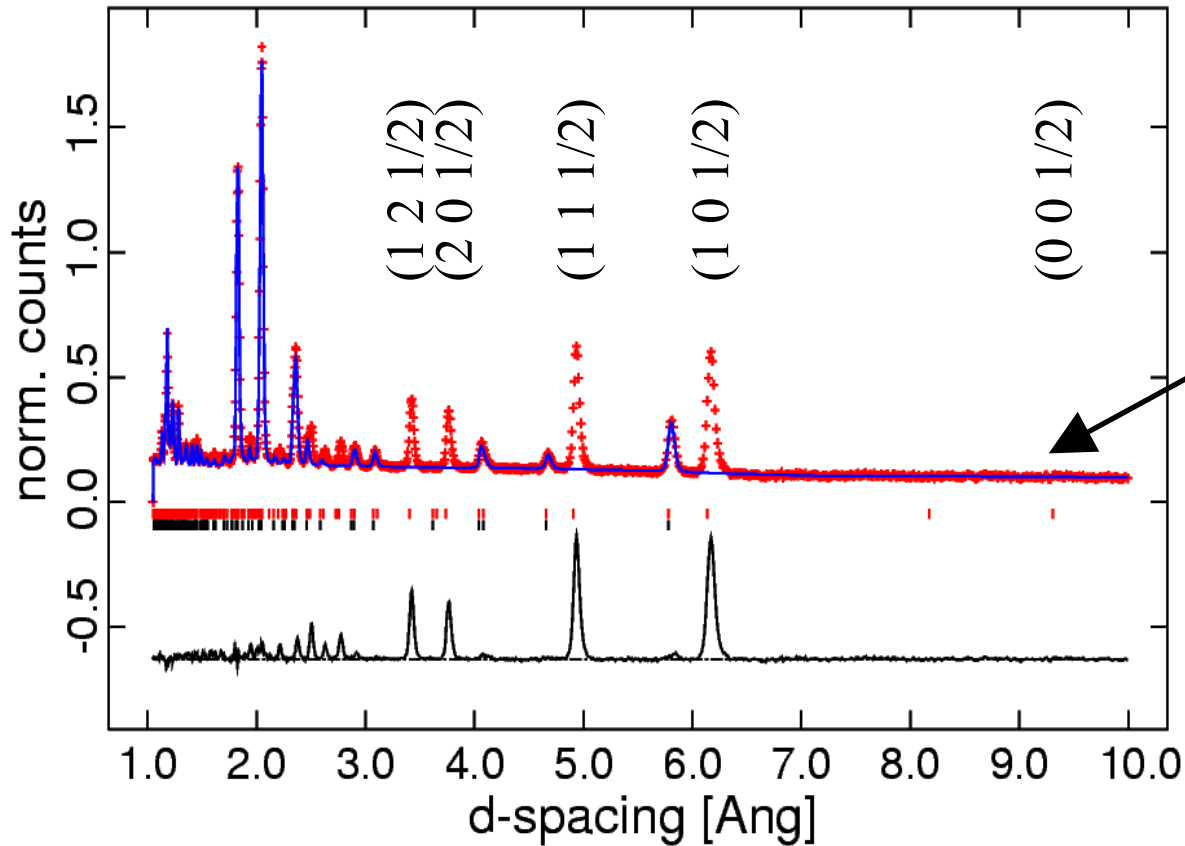
GSAS:

- sehr robust
- Symmetrie-Analyse für $k=(0,0,0)$
- Shubnikov-Gruppen
- graphische Oberfläche EXPGUI
- keine inkommensurablen Strukturen

CCSL TOF, sehr flexible Eingabe von Magnetstrukturmodellen

Magnetstruktur von $\text{TbNi}_{10}\text{Si}_2$

$\text{TbNi}_{10}\text{Si}_2$, Bank 1, 1.6 K, ROTAX



magnetischer
Ausbreitungsvektor

$$\mathbf{k}=[0\ 0\ 1/2]$$

Magnetreflexe: $\mathbf{h} \pm \mathbf{k}$
($h, k, l \pm k_z$)

$$I_M \propto \sin^2 \alpha,$$
$$\alpha = \angle(\mathbf{k}, \mathbf{m}) = 0$$

$\Rightarrow \mathbf{m}$ parallel c-Achse

```

COMM TbNi10Si2 1.6 K
NPATT 3
W_PAT 0.333 0.333 0.333
!Nph Dum las Nre Cry Opt Aut
 2 0 0 0 0 0
!Job Npr Nba Nex Nsc Nor Iwg Ilo Res Ste Uni Cor
-1 9 10 0 0 0 0 0 0 0 1 0
-1 9 10 0 0 0 0 0 0 0 1 0
-1 9 11 0 0 0 0 0 0 0 1 0
!File names of data(patterns) files
tbn_i_lta
tbn_i_ltb
tbn_i_ltc
!
!Mat Pcr Syo Rpa Sym Sho
0 1 0 1 1 1
!Lpr Ppl Loc Ls1 Ls2 Ls3 Prf Ins Hkl Fou Ana
0 0 1 0 0 0 -3 10 0 0 1
0 0 1 0 0 0 -3 10 0 0 1
0 0 1 0 0 0 -3 10 0 0 1
!
!Bkpos Wdt Iabscof for Pattern# 1
4900.000 4.2000 3
!Bkpos Wdt Iabscof for Pattern# 2
4900.000 4.2000 3
!Bkpos Wdt Iabscof for Pattern# 3
4900.000 4.2000 3
!NCY Eps R at R_an R_pr R_gl
1 0.10 0.90 0.90 0.90 0.90
!
! TOF-min <Step> TOF-max -> Patt#: 1
1908.1320 14.9235 19070.1563
! TOF-min <Step> TOF-max -> Patt#: 2
3655.0591 9.0872 18267.2949
! TOF-min <Step> TOF-max -> Patt#: 3
5348.5591 10.4491 18044.2520
!
!2Theta/TOF/E(Kev) Background for Pattern# 1
1913.201 1601.646
3224.231 1571.728
4670.886 1541.810
6162.748 1437.098
8242.314 1362.304
10186.257 1257.592
12627.485 1078.085
14752.260 1063.127
17329.113 1018.250
18866.184 973.373
!
!2Theta/TOF/E(Kev) Background for Pattern# 2
4634.720 1281.713
5936.708 1197.569
7383.363 1096.597
8540.688 1096.597
9878.843 1012.453
11506.329 928.310
12735.985 877.824
14905.969 793.680
16424.955 743.194
18088.609 743.194
!
!2Theta/TOF/E(Kev) Background for Pattern# 3
6734.177 5596.111
7398.734 5416.605
8411.393 5102.469
9803.798 4653.703
10974.684 4519.073
13158.228 4160.061
14107.595 3935.677
15215.190 3486.912
16132.912 3307.405
17018.988 3217.652
17873.418 2993.269
!
!-----> Profile Parameters for Pattern # 2
! Scale Extinc Bov Str1 Str2 Str3 Strain-Model
17.865 0.0001 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0
21.00000 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! Sig-2 Sig-1 Sig-0 Xt Yt Z1 Z0 Size-Model
2.942 30.395 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0
0.00 111.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! Gam-2 Gam-1 Gam-0 LStr LSiz
0.000 2.577 0.000 0.000 0.000
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! a b c alpha beta gamma
8.193478 8.193478 9.332191 90.000000 90.000000 90.000000
51.00000 51.00000 61.00000 0.00000 0.00000 0.00000
! Pref1 Pref2 alph0 beta0 alph1 beta1
0.000000 0.000000 0.000000 0.027250 0.139800 0.063330
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
!Absorption correction parameters
0.16469 71.00 0.00000 0.00 ABS: ABSCOR1 ABSCOR2
TbNi10Si2 magnetic
!
!Nat Dis Mom Jbt Isy Str Furth ATZ Nvk More
52 0 0 0 0 0 0 0.0000 0 0
!Contributions (0/1) of this phase to the 3 patterns
1 1 1
!lrf Npr Jtyp for Pattern# 1
0 9 -1
!Pr1 Pr2 Pr3 Brind. Rmuu Rmub Rmuc for Pattern# 1
0.000 0.000 1.000 1.000 0.000 0.000 0.000
!lrf Npr Jtyp for Pattern# 2
0 9 -1
!Pr1 Pr2 Pr3 Brind. Rmuu Rmub Rmuc for Pattern# 2
0.000 0.000 1.000 1.000 0.000 0.000 0.000
!lrf Npr Jtyp for Pattern# 3
0 9 -1
!Pr1 Pr2 Pr3 Brind. Rmuu Rmub Rmuc for Pattern# 3
0.000 0.000 1.000 1.000 0.000 0.000 0.000
!
P 1 <--Space group symbol
!Atom Typ X Y Z Bis0 Occ In Fin N_t Poi /Codes
Tb TB 0.25000 0.25000 0.11260 0.28000 1.00000 0 0 0 0
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
Tb TB 0.75000 0.75000 0.38740 0.28000 1.00000 0 0 0 0
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
Tb TB 0.25000 0.25000 0.61260 0.28000 1.00000 0 0 0 0
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
Tb TB 0.75000 0.75000 0.88740 0.28000 1.00000 0 0 0 0
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
Ni1 NI 0.00000 0.00000 0.00000 0.36000 1.00000 0 0 0 0
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
!-----> Profile Parameters for Pattern # 1
! Scale Extinc Bov Str1 Str2 Str3 Strain-Model
26.162 0.0001 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0
11.00000 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! Sig-2 Sig-1 Sig-0 Xt Yt Z1 Z0 Size-Model
1.040 70.755 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0
0.00 101.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! Gam-2 Gam-1 Gam-0 LStr LSiz
0.000 3.678 0.000 0.000 0.000
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! a b c alpha beta gamma
8.193478 8.193478 9.332191 90.000000 90.000000 90.000000
51.00000 51.00000 61.00000 0.00000 0.00000 0.00000
! Pref1 Pref2 alph0 beta0 alph1 beta1
0.000000 0.000000 0.000000 0.032400 0.219500 0.352700
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
!Absorption correction parameters
0.16469 71.00 0.00000 0.00 ABS: ABSCOR1 ABSCOR2
!-----> Profile Parameters for Pattern # 2
! Scale Extinc Bov Str1 Str2 Str3 Strain-Model
17.865 0.0001 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0
21.00000 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! Sig-2 Sig-1 Sig-0 Xt Yt Z1 Z0 Size-Model
2.942 30.395 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0
0.00 111.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! Gam-2 Gam-1 Gam-0 LStr LSiz
0.000 2.577 0.000 0.000 0.000
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! a b c alpha beta gamma
8.193478 8.193478 9.328356 90.000000 90.000000 90.000000
51.00000 51.00000 61.00000 0.00000 0.00000 0.00000
! Pref1 Pref2 alph0 beta0 alph1 beta1
0.000000 0.000000 0.000000 0.032400 0.219500 0.352700
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
!Absorption correction parameters
0.16469 71.00 0.00000 0.00 ABS: ABSCOR1 ABSCOR2
!-----> Profile Parameters for Pattern # 3
! Scale Extinc Bov Str1 Str2 Str3 Strain-Model
85.523 0.0001 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0
31.00000 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! Sig-2 Sig-1 Sig-0 Xt Yt Z1 Z0 Size-Model
3.921 53.720 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0
0.00 121.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! Gam-2 Gam-1 Gam-0 LStr LSiz
0.000 1.732 0.000 0.000 0.000
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
! a b c alpha beta gamma
8.193478 8.193478 9.328356 90.000000 90.000000 90.000000
51.00000 51.00000 61.00000 0.00000 0.00000 0.00000
! Pref1 Pref2 alph0 beta0 alph1 beta1
0.000000 0.000000 0.000000 0.027600 0.357300 0.011670
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
!Absorption correction parameters
0.16469 71.00 0.00000 0.00 ABS: ABSCOR1 ABSCOR2

```

TbNi10Si2 magnetic

P 1 <--Space group symbol

Magnetstruktureingabe in Fullprof

!Nsym Cen Laue MagMat

1 1 1 1

!

SYMM x,y,z

MSYM u,v,w, 0.0

!

Tb JTB3 1 0 0.25000 0.25000 0.11260 0.13055 1.00000 0.000 0.000 8.831
0.00 0.00 0.00 71.00 0.00 0.00 0.00 81.00
0.00 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.00000
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00

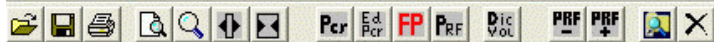
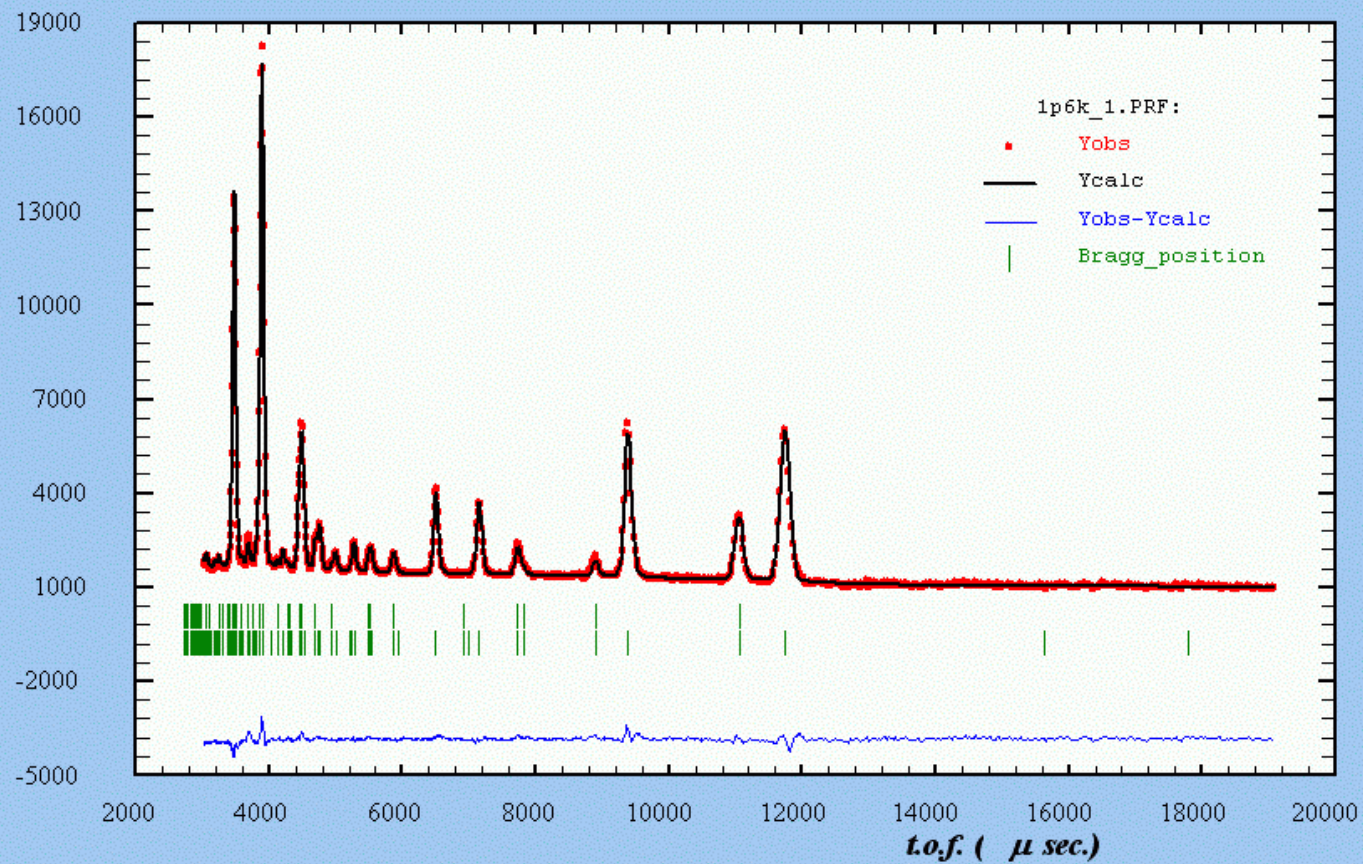
Tb JTB3 1 0 0.75000 0.75000 0.38740 0.13055 1.00000 0.000 0.000 -8.831
0.00 0.00 0.00 71.00 0.00 0.00 0.00 -81.00
0.00 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.00000
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00

Tb JTB3 1 0 0.25000 0.25000 0.61260 0.13055 1.00000 0.000 0.000 -8.831
0.00 0.00 0.00 71.00 0.00 0.00 0.00 -81.00
0.00 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.00000
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00

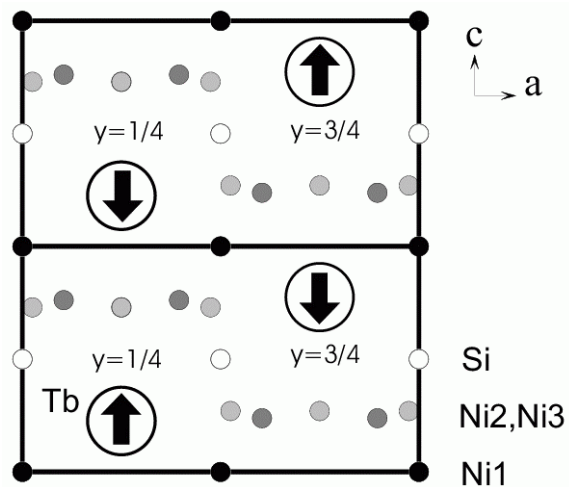
Tb JTB3 1 0 0.75000 0.75000 0.88740 0.13055 1.00000 0.000 0.000 8.831
0.00 0.00 0.00 71.00 0.00 0.00 0.00 81.00
0.00 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.00000
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00

! a b c alpha beta gamma

8.193933 8.193933 9.330480 90.000000 90.000000 90.000000
41.00000 41.00000 52.00000 0.00000 0.00000 0.00000

TbNi₁₀Si₂ 1.6 K

Magnetischer Phasenübergang von $\text{TbNi}_{10}\text{Si}_2$ bei $T_N = 4.5 \text{ K}$



Antiferromagn. Ordnung der Tb Momente
keine Ordnung der Ni-Lagen

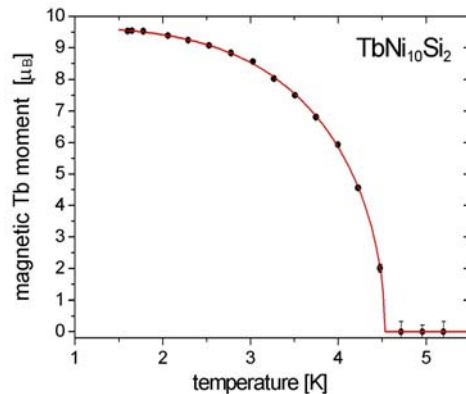
Ausbreitungsvektor: $\mathbf{k}=(0, 0, \frac{1}{2})$

Magn. Lagensymmetrie: $4m'$

Erlaubte Komponenten: $(0,0, m_z)$

Magn. Raumgruppe: $P_{2c} 4/nm' m'$

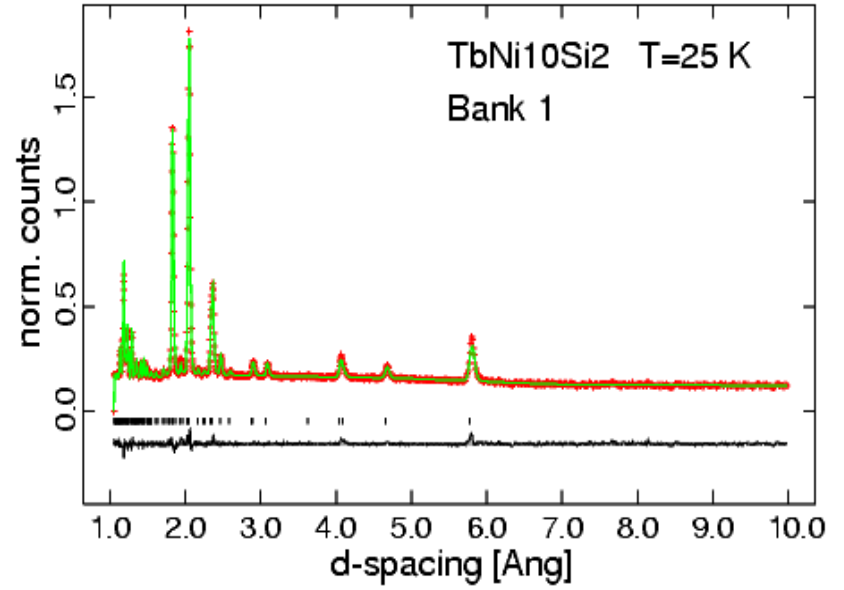
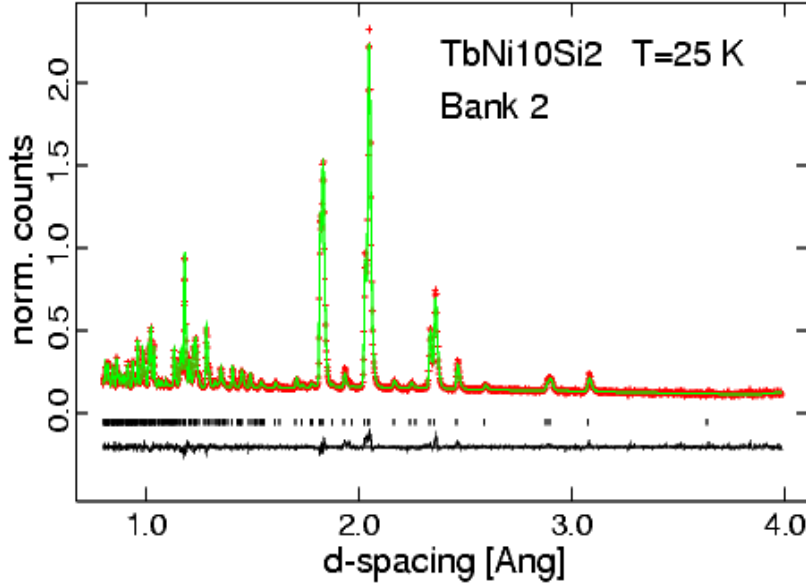
verfeinertes Moment (1.5 K): $\mu(\text{Tb})=8.9 \mu\text{B}$



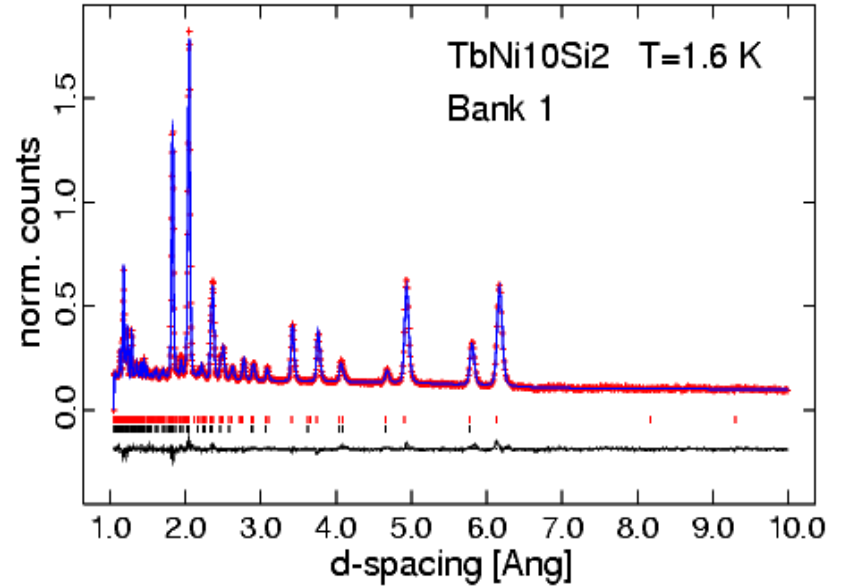
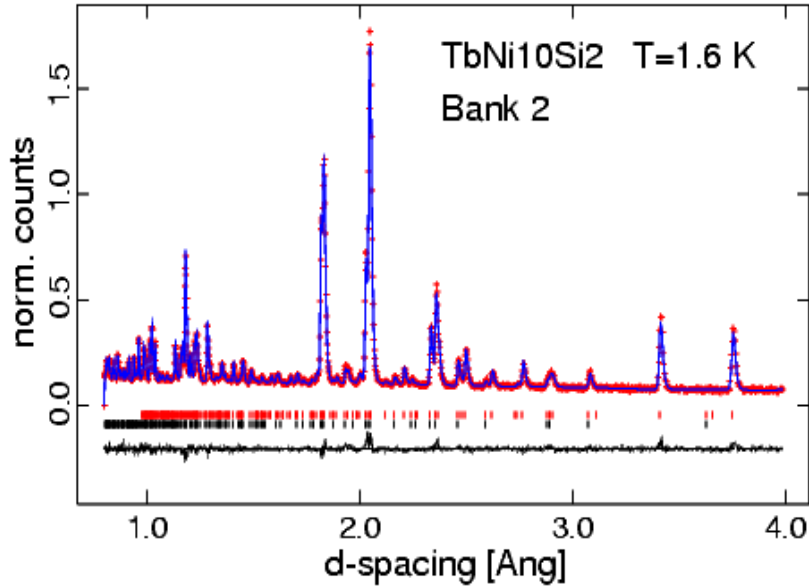
W. Kockelmann et al, Eur Phys J B, 2002

GSAS Verfeinerung: TbNi₁₀Si₂

Paramagn.



Antiferro



Magnetstruktureingabe in GSAS

Shubnikov-Gruppe: Pm-3m'

„Farbe“

```
Experiment title:
      Ce8Pd24Ga  1.9 K
The last history record is :
      HSTRY 67 EXPEDT Win32  Oct 02 19:07:15 2003                LA

EXPEDT data setup option (<<?>,D,F,K,L,P,R,S,X) >1 a 1
Phase No. 1; Phase has      5 atoms; Title: Ce8Pd24Ga          nucl + magn

SER TYPE      X      Y      Z      FRAC  NAME  UIISO  CODE  STSYM  MULT  FXU
              MX      MY      MZ      MCODE
  1 CE      0.25093  0.25093  0.25093  1.00000  Ce    0.00257  I XU  3M<111>  8 000
              0.211    0.211    0.211      M
  2 PD      0.25445  0.50000  0.50000  1.00000  Pd1   0.00334  I XU  4MM<100>  6 000
  3 PD      0.29333  0.00000  0.00000  1.00000  Pd2   0.00562  I XU  4MM<100>  6 000
  4 PD      0.25983  0.50000  0.00000  1.00000  Pd3   0.00441  I XU  MM2<100> 12 000
  5 GA      0.00000  0.00000  0.00000  0.85821  Ga    0.00434  IF U   M3M    1 000

Phase No. 1; Phase has      5 atoms; Title: Ce8Pd24Ga          nucl + magn

Give atom editing command
(<<?>,$,C,D,E,F,I,K,L,M,S,T,U,V,X,+,-,*,/) >m

1 of the following data refer to the current space group symbol
The unique symmetry operations and the associated spin colors are
  Mx  M110
  Black Red
The current d-star limit for magnetic reflections is 2.00
Ser Name      x      y      z      Site  n  Mx  n  My  n  Mz
  1 Ce      0.251  0.251  0.251  3M<111> 1  0.211 1  0.211 1  0.211
Enter magnetism editing option (<<?>,A,C,L,M,S,X) >_
```

magnetisches Atom

Momentvektor

Reduced moment magnetic ordering in $\text{Ce}_8\text{Pd}_{24}\text{Ga}$

D.T. Adroja et al, Phys. Rev. B67 (2003) 134419

Magnetic phase transition at 3.6 K

Antiferromagnetic order of the Ce^{3+} moments

Screening of local Ce moment by the Kondo effect

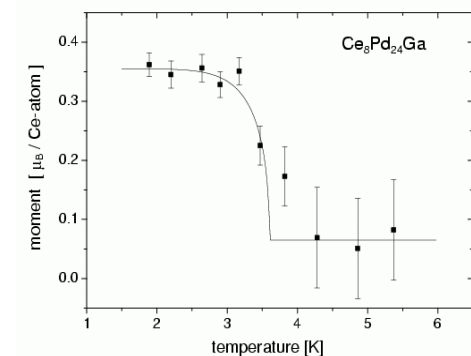
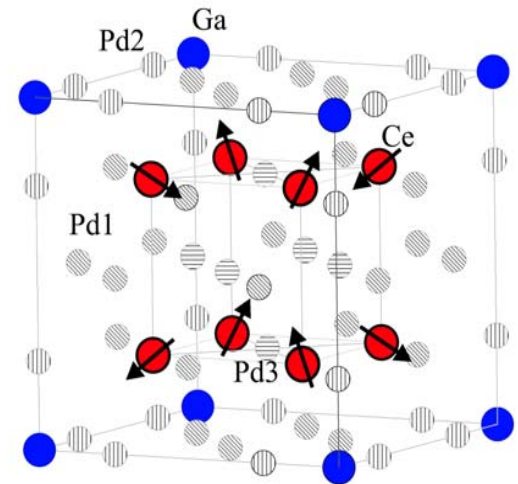
Propagation vector: $\mathbf{k}=(0, 0, 0)$

Magnetic site symmetry: $3m'$

Admissible components: (m_x, m_x, m_x)

Magnetic space group: $P m\bar{3}m'$

Refined moment: (1.9K) $\mu_x=0.21 \mu_B$
 $\mu(\text{Ce})=0.36 \mu_B$



Inkommensurable Momentmodulation in MnBi_2S_4

D. Kurowski, Dissertation Regensburg 2003

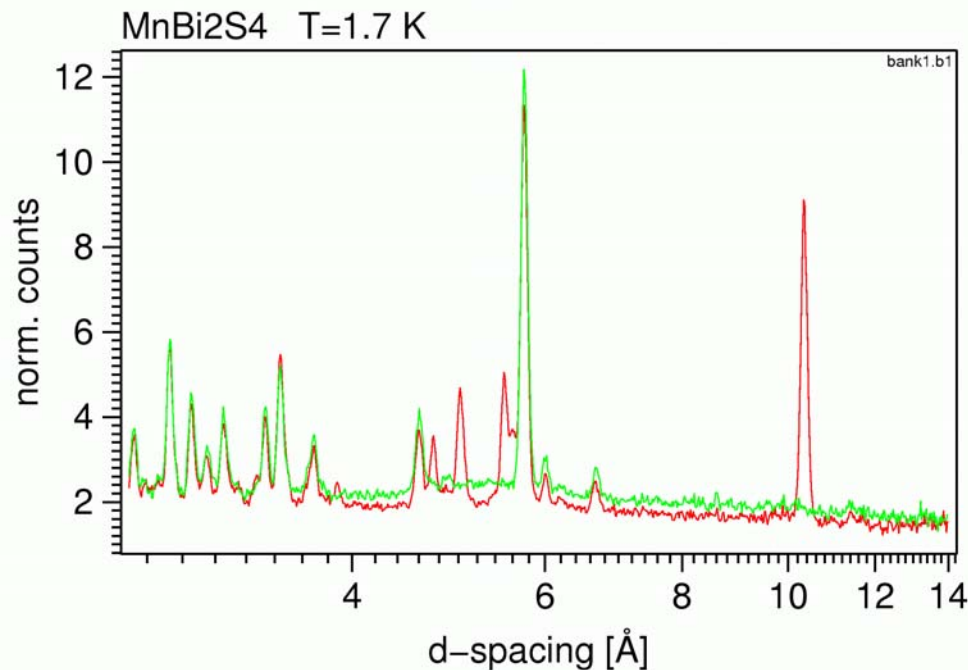
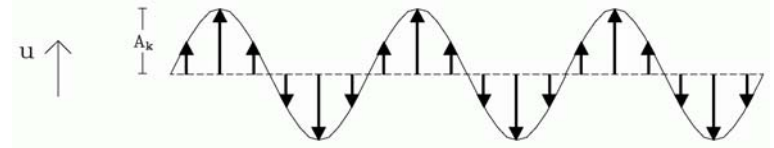
Sinusmodulation

$\mathbf{k}=(0, 377, 0)$ temperaturabhängig

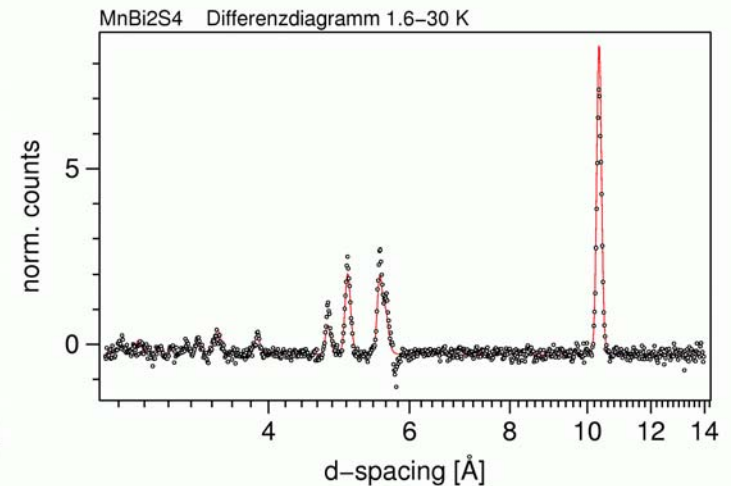
Magn. Lagensymmetrie: $2/m'$

Erlaubte Komponenten: $(m_x \ 0 \ m_z)$

Momentamplitude (1.6K): $A_k=6.0 \ \mu\text{B}$



Differenzdiagramm



Informationsverlust für Neutronenpulvermessungen

- kein Informationsverlust bzgl Ausbreitungsvektoren
- Verlust der Momentrichtung durch Pulver- und Domänenmittelung für höhersymmetrische Systeme

Welche Parameter können bestimmt werden?

Magnetische Konfigurations-Symmetrie	Kollineare Struktur Shirane (1959)	Nicht-kollineare Struktur Wilkinson & Lisher (1973)
Kubisch	Größe der magnetischen Momente	Größe der magnetischen Momente; relative Winkel zwischen Momentrichtungen;
tetragonal trigonal hexagonal	Größe der magnetischen Momente; Winkel der Momente zur Hauptachse	Größe der magnetischen Momente; relative Winkel zwischen Momentrichtungen; Winkel der Momente zur Hauptachse
orthorhombisch monoklin triklin	keine Beschränkungen	keine Beschränkungen

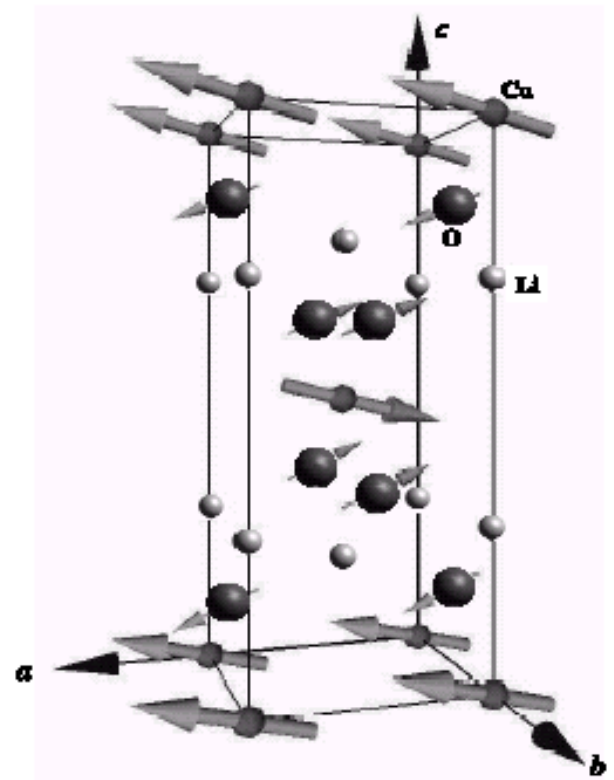
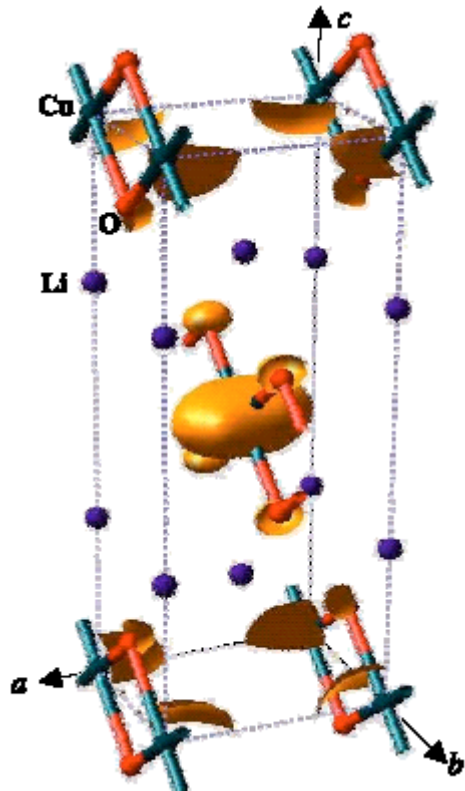
Zusammenfassung Pulverneutronendiffraktion

- Das Neutron ist die ideale Sonde zur Untersuchung von Magnetstrukturen
- Pulvermessungen stehen am Anfang einer Magnetstrukturbestimmung
 - Überblick über k-Vektoren und Ordnungsverhalten
 - allerdings oft keine eindeutigen Lösungen
(Einkristallmessungen, um zufällige Überlappungen zu umgehen)
- CW: keine λ -Abhängigkeiten, Zugang zu großen d-Werten
TOF: großer simultan abgedeckter d-Wert Bereich,
- Empirische und systematische Methoden
Symmetrieanalyse + Rietveldanalyse + "simulated annealing"
(Fullprof, Sarah)

V.II Bestimmung der magnetischen Struktur

b) Einkristallverfahren

Praxis ! Einkristallverfahren benötigen mehr Kenntniss der Theorie !



Anwendung von Einkristallverfahren

- a) kleine geordnete Momente
- b) tiefe Ordnungstemperaturen (kleiner 1.5K)
- c) Abhängigkeit von H und P
- d) inkommensurable Strukturen
- e) stark absorbierende Verbindungen
- f) Verteilung der Spin-Dichten
- g) metall-organische Substanzen

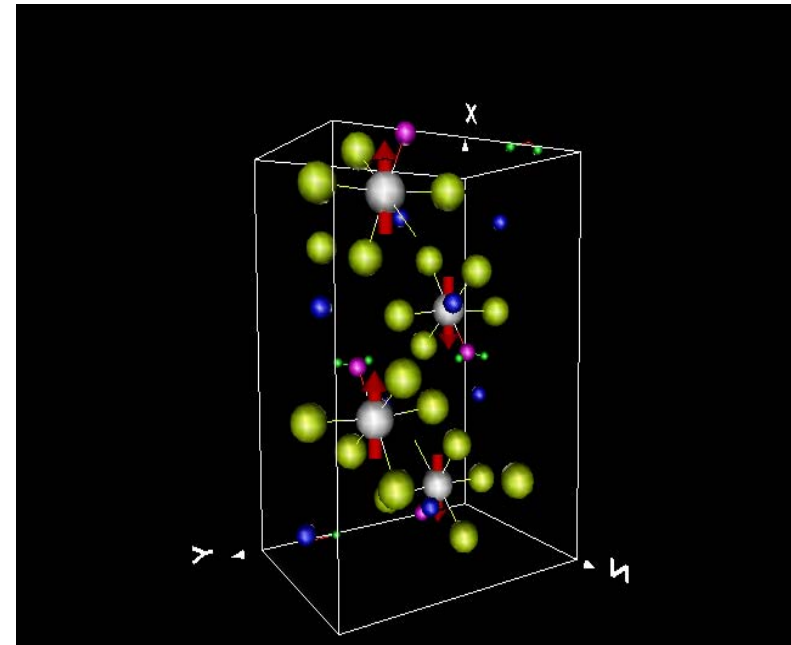
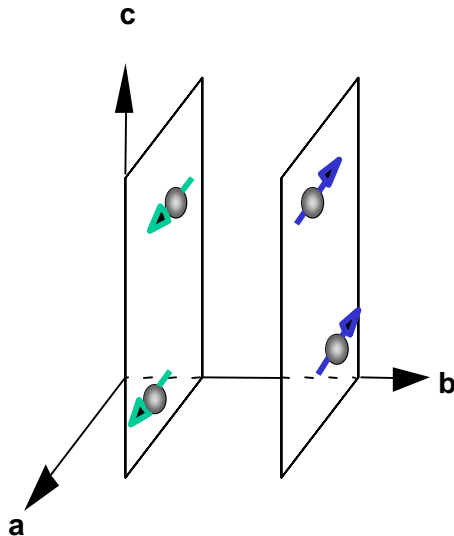
$A_2FeX_5 \cdot H_2O$ ($A=K, Rb, X=Cl, Br$)

Magnetische Struktur

J.Campo et al. 2000

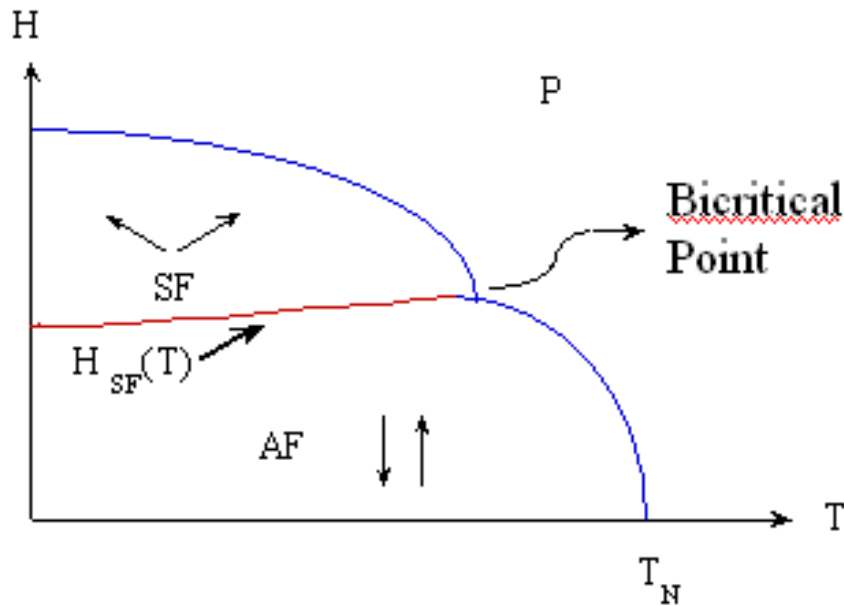
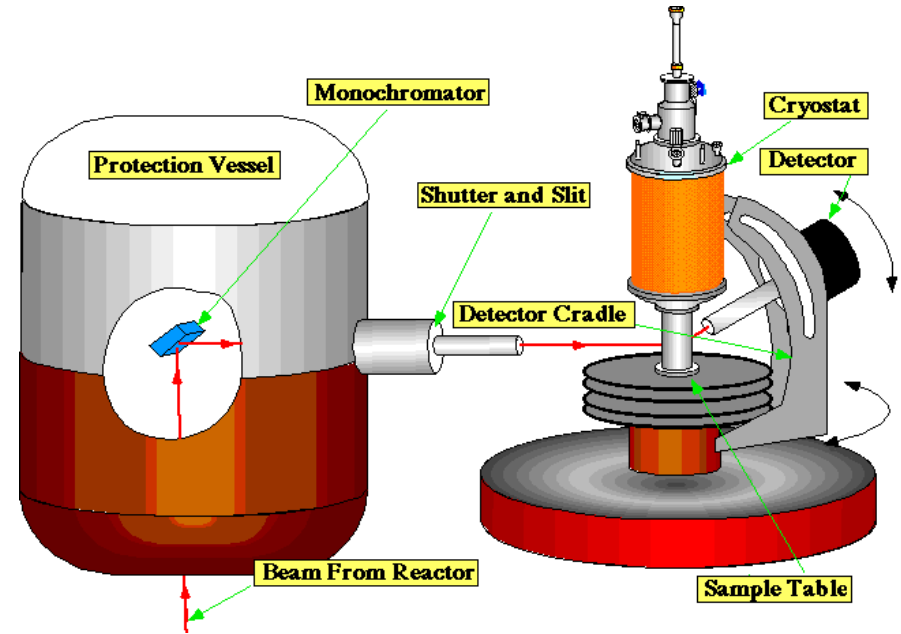
- kolinear AF mit $T_N = 14.06$ K
- Easy axis: a
- Ferromagnetic planes $\perp b$ -axis AF coupled

$$\mathbf{k} = (0 \ 0 \ 0)$$



$A_2FeX_5 \cdot H_2O$ (A=K, Rb, X=Cl, Br)

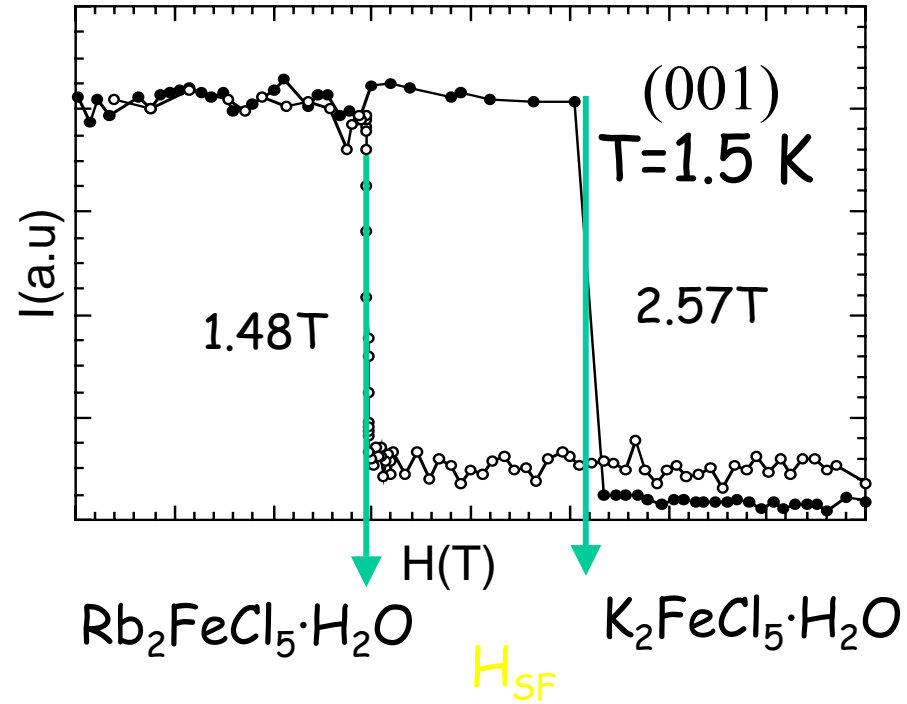
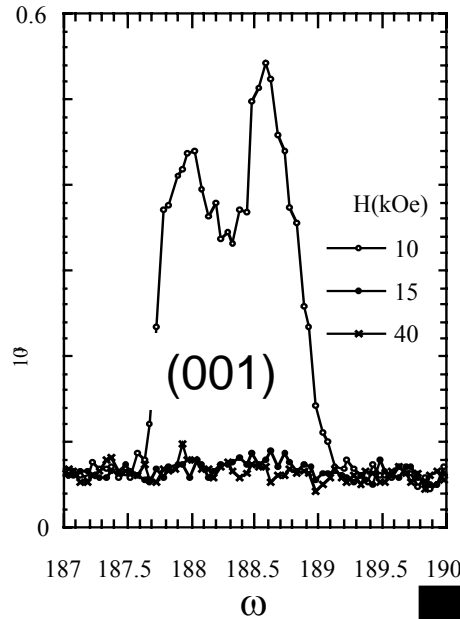
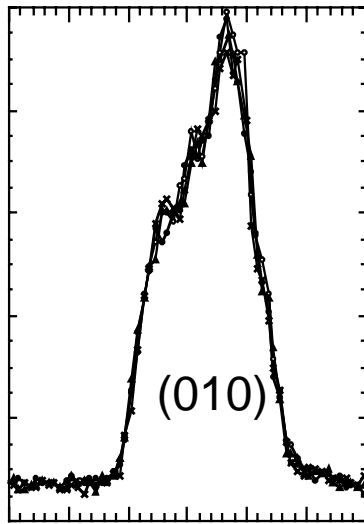
Spin flop transition under applied magnetic field



along the easy direction (a)

$A_2FeX_5 \cdot H_2O$ ($A=K, Rb, X=Cl, Br$)

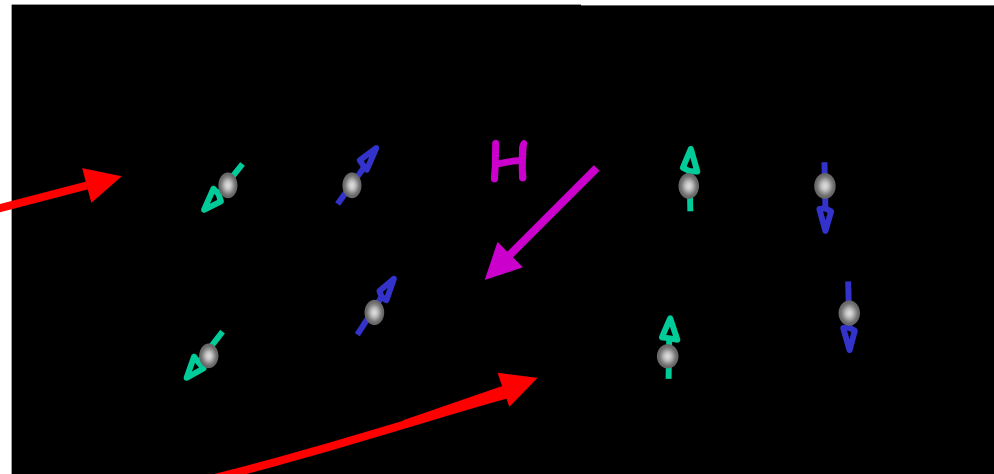
$Rb_2FeCl_5 \cdot H_2O$



• First order transition

• $H < H_{SF} \Rightarrow A_x$ Mode

• $H > H_{SF} \Rightarrow A_z$ Mode

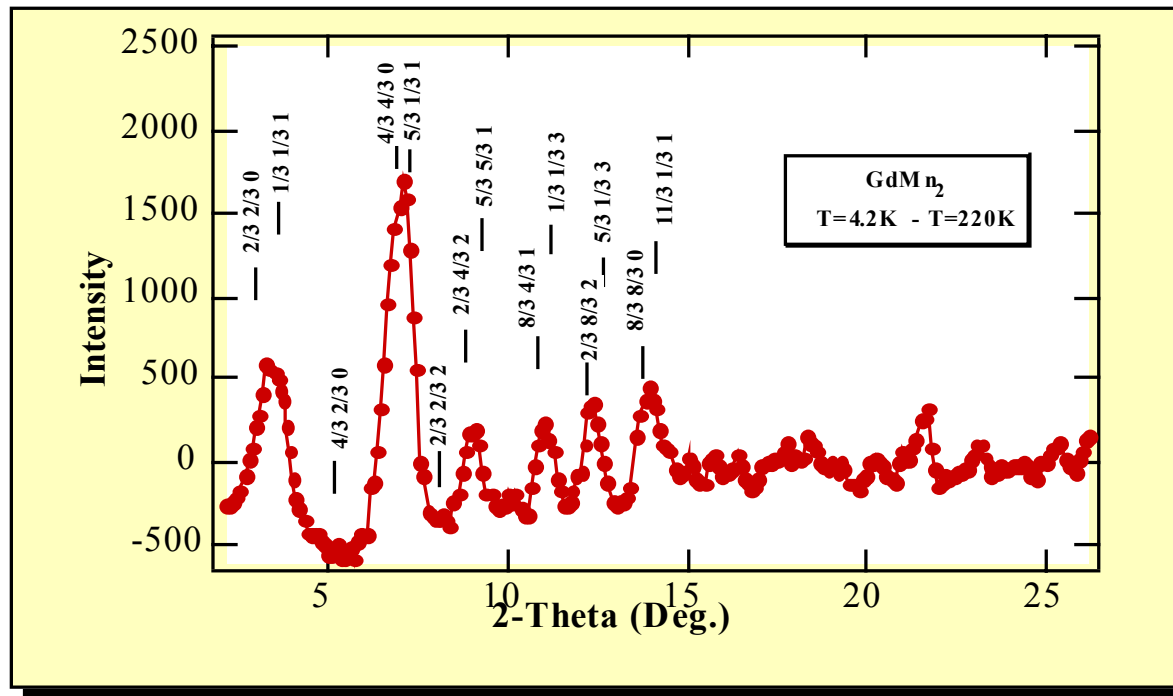


Magnetic ordering of $GdMn_2$

B.Ouladdiaf et al. 1999

Geometric frustration of Mn-Mn
antiferromagnetic interactions

Powder neutron diffraction with $\lambda=0.5 \text{ \AA}$



$$\vec{k} = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 3 & 3 & 0 \end{bmatrix}$$

Insufficient
resolution

Magnetic ordering of $GdMn_2$

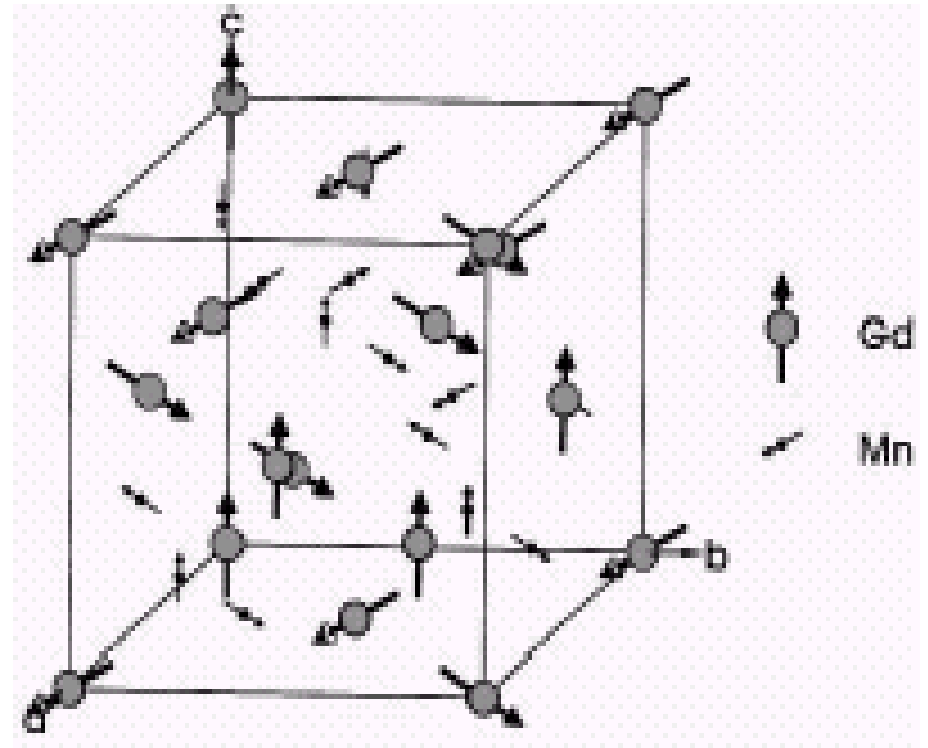
Single crystal experiment with $\lambda=0.5 \text{ \AA}$

Helimagnetic modulation
of Mn and Gd moments

$$m_{Mn} = 2.1 \mu_B$$

$$m_{Gd} = 4.6 \mu_B$$

Moments in the
(100) plane

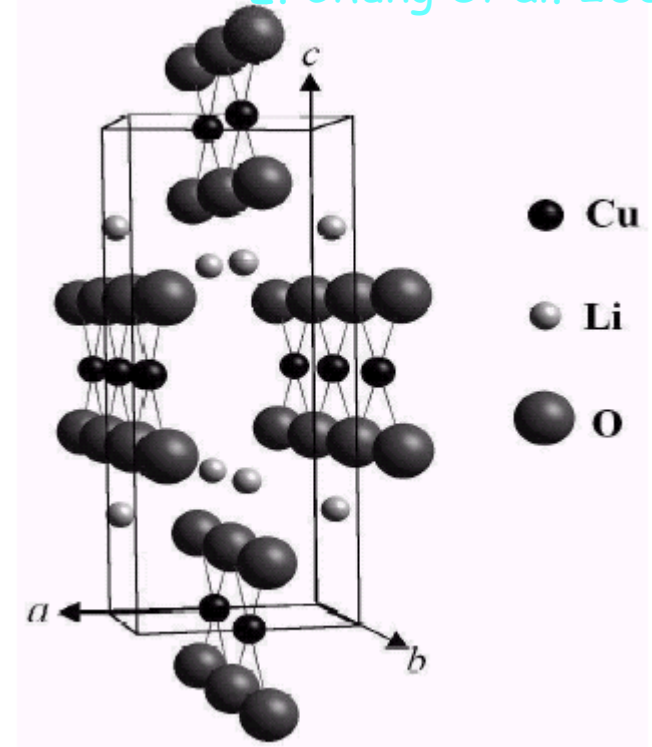
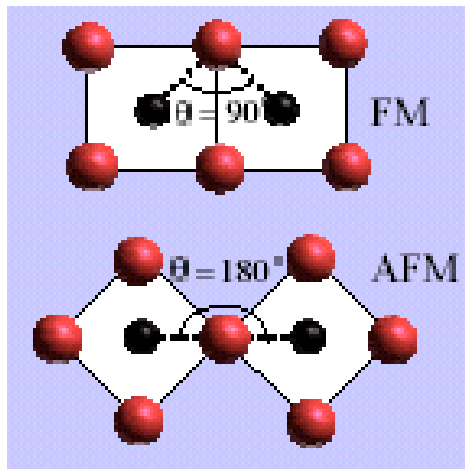


Magnetisches Moment auf einem Sauerstoff in Li_2CuO_2

1D chains of $S=1/2$ Cu atoms

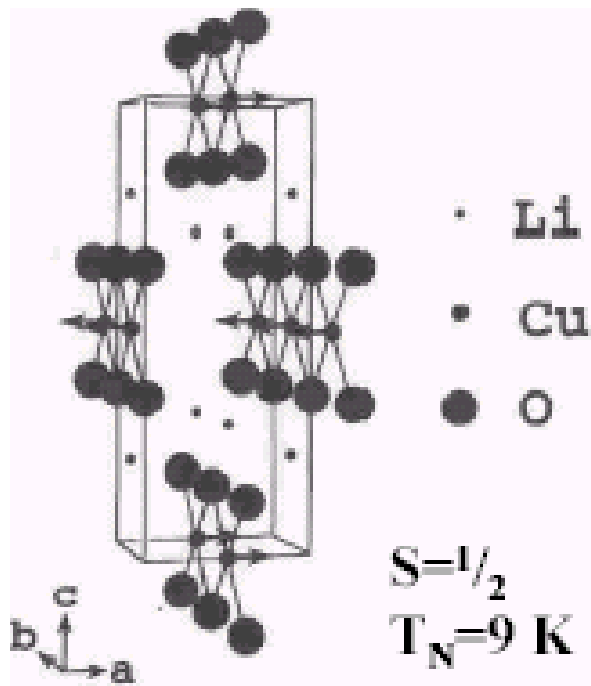
E. Chung et al. 2003

CuO_4 plaquettes (like in CuGeO_3 , High- T_c or chain-ladder system $\text{La}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$)

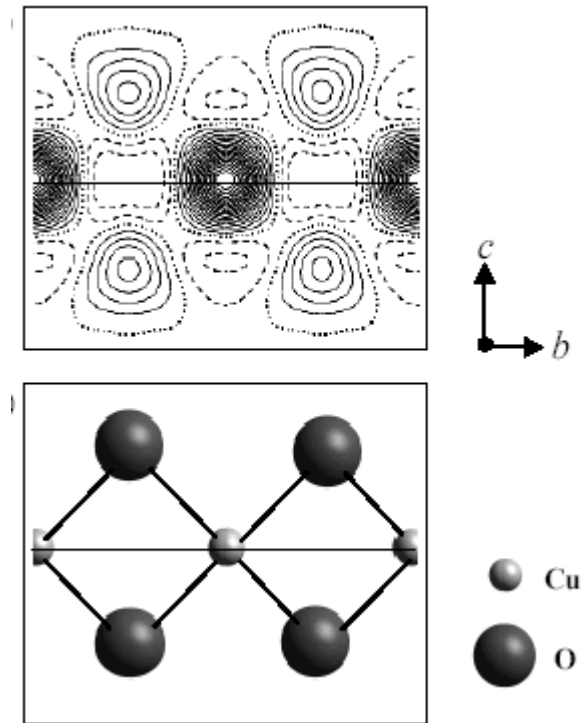


Li_2CuO_2 crossover between AFM and FM ordering

Sapiña *et al.*, 1990

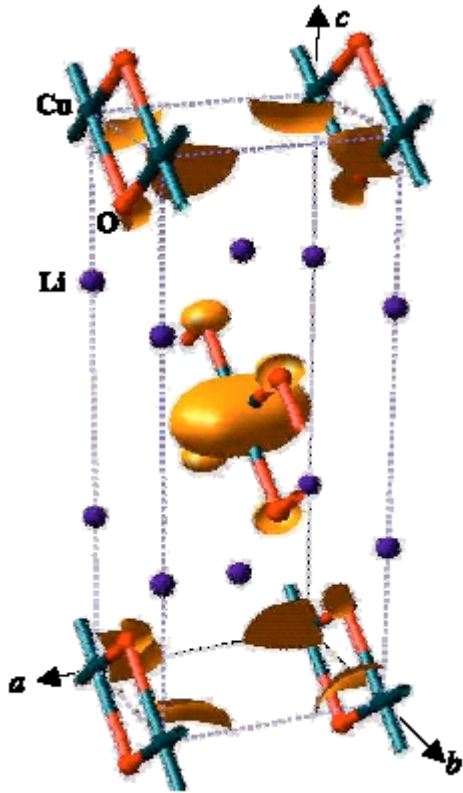


Powder neutron diffraction
at 1.5 K:
AF aligned FM chains of *a*-
axis ($0.96 \mu_B$) Cu moments



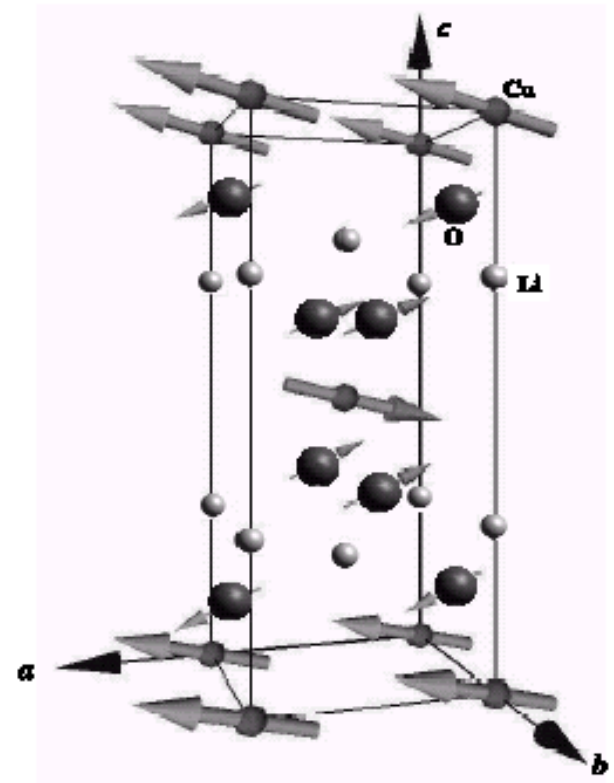
Spin-density Patterson
section generated from
observed magnetic
intensities

AF canted model



3-D spin density Patterson

Moments are canted in the a - c plane toward the c -axis. Canting of the Cu moments is almost fully compensated by counter-canting of the O moments



Cu moment: $0.91 \mu_B$
O moment: $0.12 \mu_B$

Literatur: Magnetstrukturen und magnetische Neutronenstreuung

Introduction to the Theory of Thermal Neutron

Scattering

G.L. Squires

Cambridge University Press 1978

Neutron Diffraction

G.E. Bacon

Clarendon Press, Oxford 1975

Neutron Diffraction of Magnetic Materials

Yu. A. Izyumov, V.E. Naish, P.P. Ozerov

Consultants Bureau, New York, 1991

The determination of magnetic structures

W. Prandl

Ed. H. Dachs, Neutron Diffraction, Springer-Verlag 1978, S. 113

Magnetic Symmetry

W. Opechowski, R. Guccione

in Magnetism Vol IIA, ed. G.T. Rado, H. Suhl, (Academic Press, New York, 1963) p. 105.

Magnetic form factors

P.J. Brown

in: International Tables for Crystallography, Vol C, ed. A.J.C. Wilson, Kluwer Academic Publishers 1995, p. 391.

V.F. Sears, Neutrons News **3**, 29 (1992)

A note on the magnetic intensities of powder neutron diffraction.

Shirane, G. (1959).

Acta Cryst. 12, 282-285.

The information on ordered magnetic structures which can be gained from unpolarized-neutron-diffraction data.

Wilkinson, C. & Lisher, E.J. (1973).

Acta Cryst. A29, 453-461.