

*Совместное использование магнитной рентгеновской дифракции и дифракции поляризованных нейтронов при исследовании намагниченности в  $YTiO_3$ .*

**B. Gillon, A.G. Gukasov, I.A. Kibalin, A. Bataille, F. Porcher:**

Laboratoire Léon Brillouin, France.

**A.B. Voufack, N. Claiser, M. Souhassou, C. Lecomte:**

Institut Jean Barriol, France.

**J.M. Gillet, Z.Y. Yan:** Laboratoire SPMS, France.

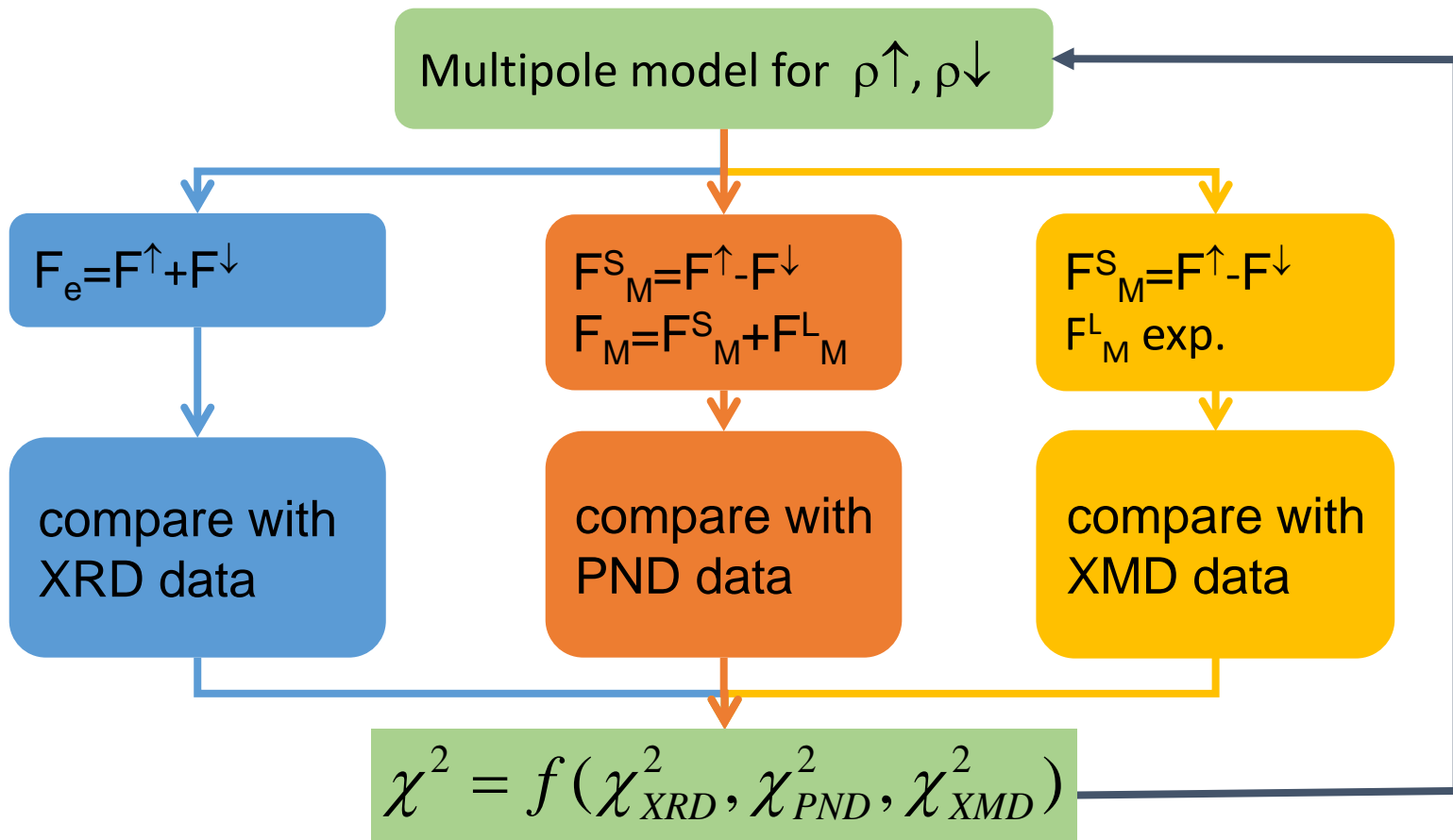
**M. Ito, H. Sakurai, K. Suzuki:** Gunma University, Japan.

**Y. Sakurai:** Japan Synchrotron Radiation Research Institute, Japan.

**Школа по физике поляризованных нейтронов**

**16 декабря 2016 г.**

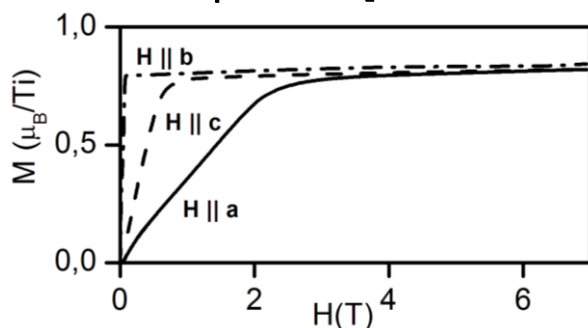
# Одна физическая модель для описания экспериментальных данных различного типа



# Объект исследования – $YTiO_3$

★  $YTiO_3$  ферромагнетик,  $T_C=30K$   
[Greedan1985].

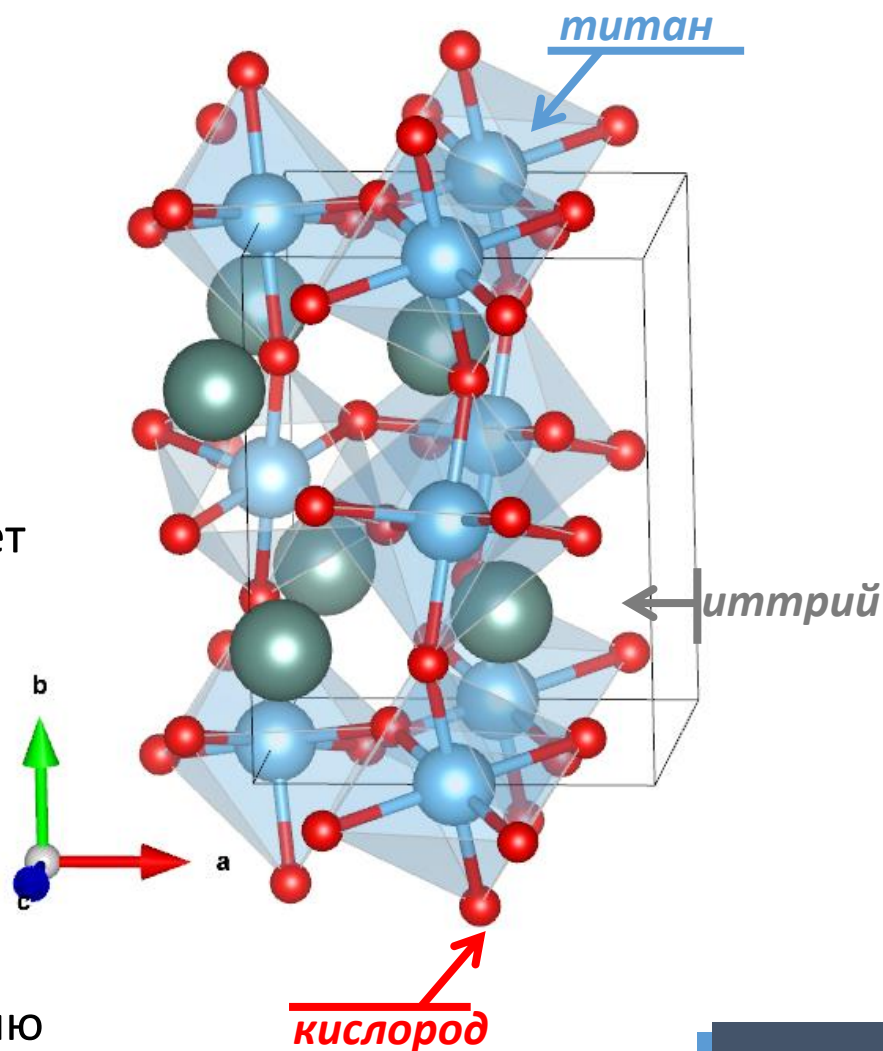
★ SQUID измерения [Kovaleva 2007].



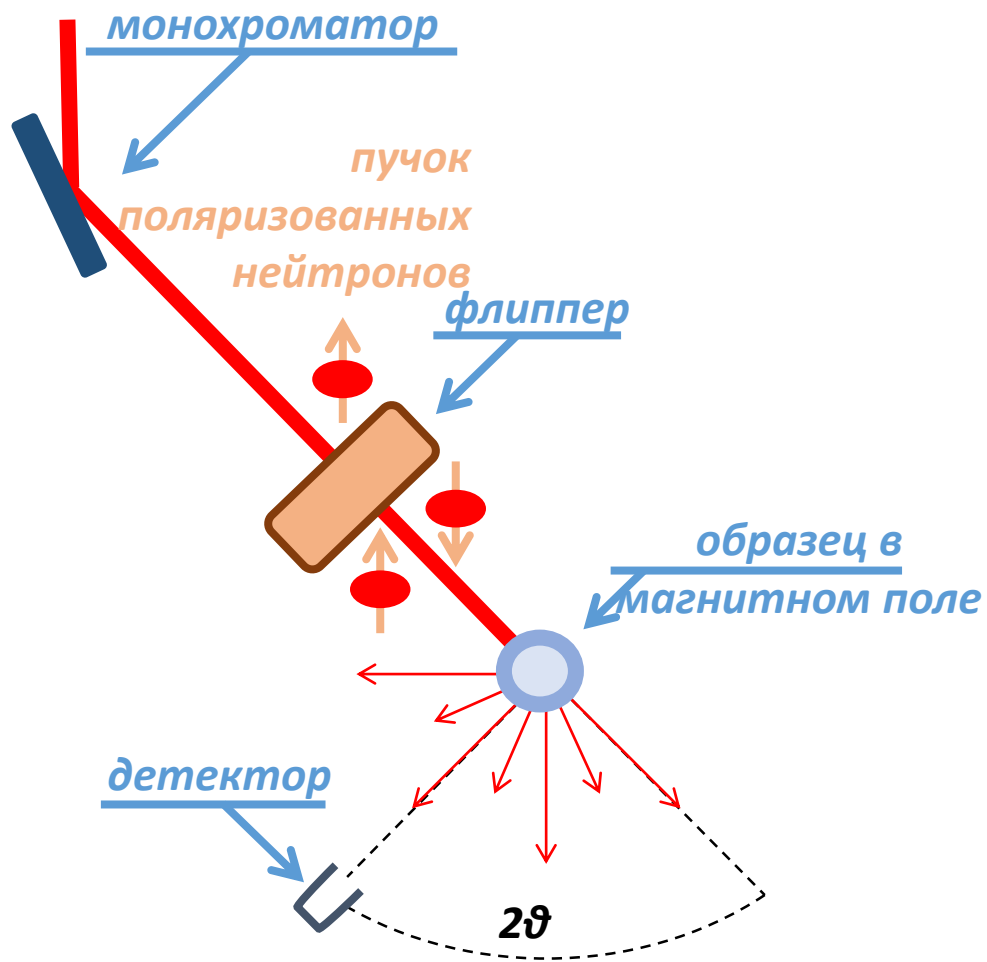
★ Неспаренный электрон титана может занимать две из пяти 3d орбиталей (zx и yz орбитали)

★ Орбитали антиферромагнитно упорядочены [Akimitsu 2001].

★ Орбитальный член в магнитный структурных фактор  $F_M^L$  близок к нулю [Suzuki 2009].



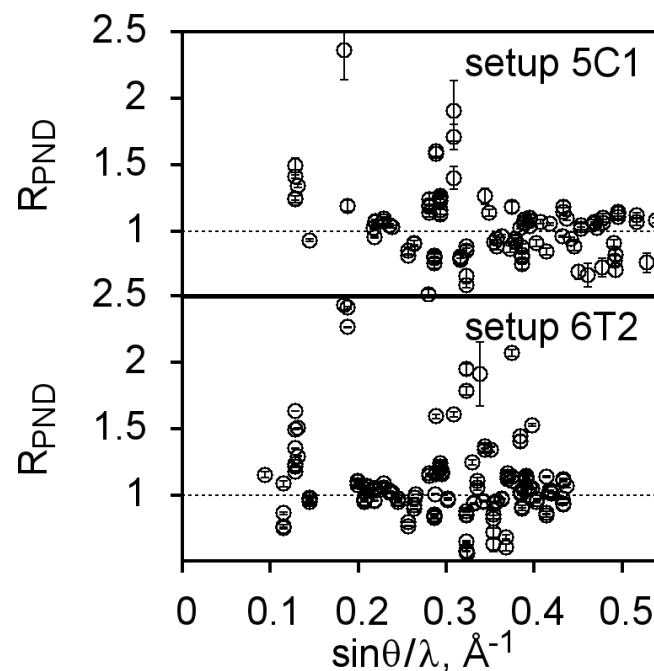
## Принципиальная схема:



$$R_{hkl} = \frac{I_+}{I_-} = \frac{(F_N^2 + 2Pq^2F_NF_M + q^2F_M^2)}{(F_N^2 - 2Peq^2F_NF_M + q^2F_M^2)}$$

## Условия эксперимента

дифрактометры	5C1, 6T2
температура	2, 5 К
магнитные поля	5, 6 Т



# Анализ структуры (дифрактометр 5С2, LLB)

## Условия эксперимента

Длина волны	0.83 Å
Температура	14К, 40К, 90К, RT
Число измеренных / уникальных рефлексов	1318 / 282
R factor внутренний	2.1%

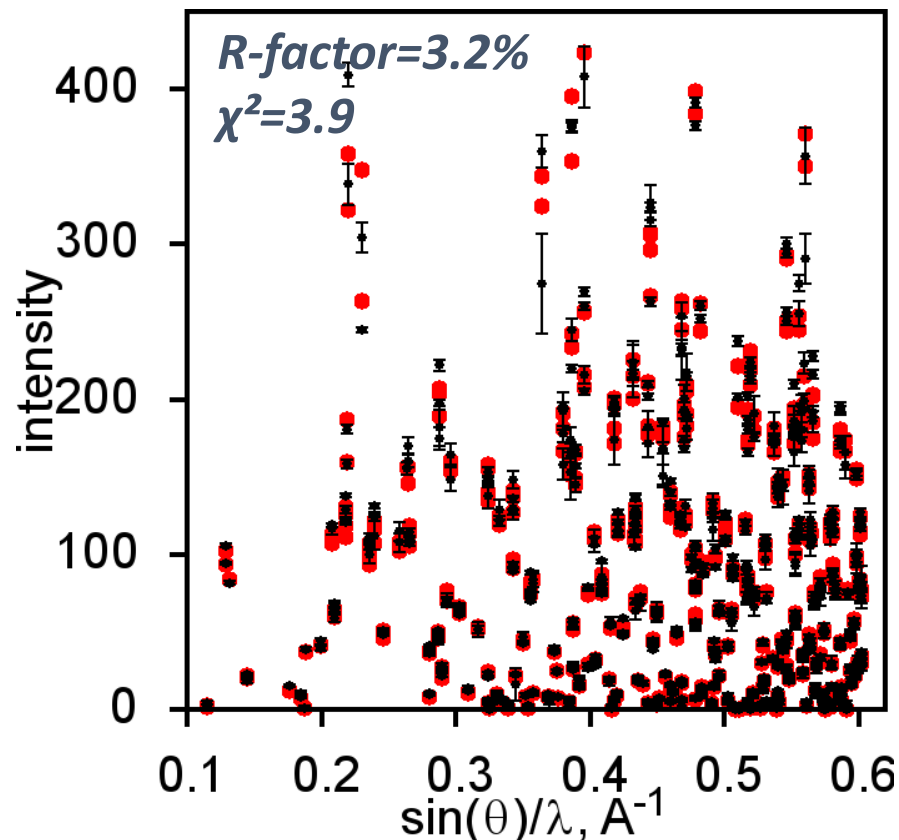
$$I_{hkl} \sim y \cdot F_N^2$$

**Учет экстинкции в FullProf:**

$$y = \left( 1 + 2.5 \cdot 10^{-4} \frac{q F_N^2 \lambda^3}{\sin(2\theta)} \right)^{-0.5}$$

$$q = (q_1 h^2 + q_2 k^2 + q_3 l^3 + q_4 hk + q_5 hl + q_6 kl) \cdot \left( \frac{\lambda}{\sin\theta} \right)^2$$

$$q_1 = 1.25(6) \quad q_2 = 1.72(5) \quad q_3 = 1.75(6)$$
$$q_4 = 0.38(6) \quad q_5 = -0.52(6) \quad q_6 = -1.14(5)$$

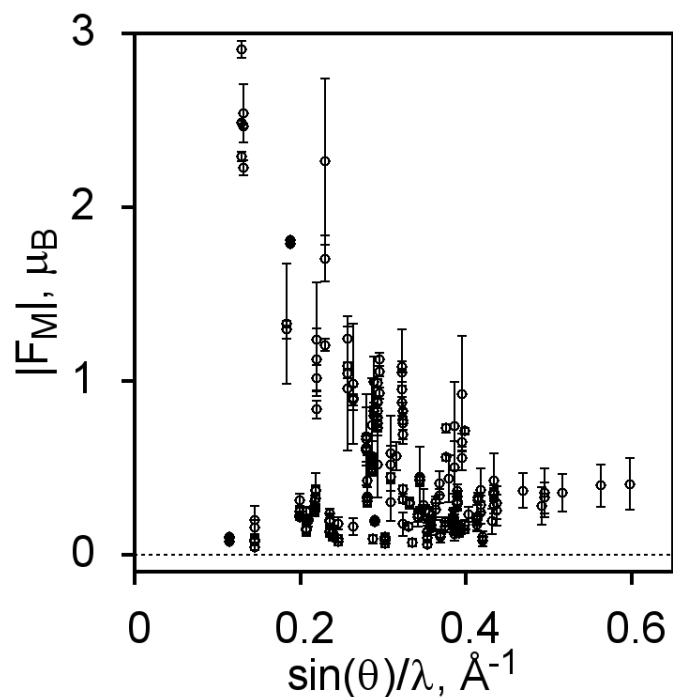




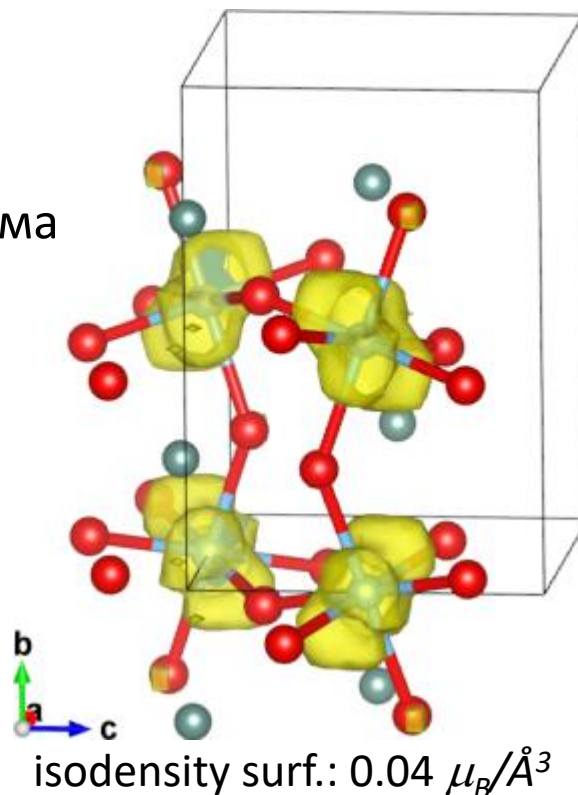
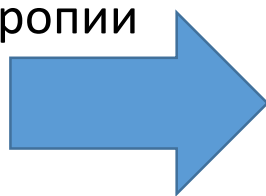
# Поправка на экстинкцию при расчете $F_M$

$$R_{exp.} = \frac{I_+}{I_-} = \frac{y^+}{y^-} \cdot R_0 = \frac{y^+}{y^-} \cdot \frac{(F_N^2 + 2Pq^2 F_N F_M + q^2 F_M^2)}{(F_N^2 - 2Peq^2 F_N F_M + q^2 F_M^2)}$$

$$y^\pm = \left( 1 + 2.5 \cdot 10^{-4} \frac{q(F_N \pm F_M)^2 \lambda^3}{\sin(2\theta)} \right)^{-0,5}$$



Метод максимума энтропии



# Выражения для расчета флип отношений (реализовано в программе tflorrc)

$$\psi_l(\vec{r}) = R_l(r) \sum_m A_l^{\pm m} Y_l^{\pm m}(\vec{r}_0)$$

$$\rho(\vec{r}) = p |\psi_l(\vec{r})|^2$$

$$F_M^S(\vec{Q}) = V \int \rho(\vec{r}) \exp[-i \vec{Q} \cdot \vec{r}] d\vec{r}$$

$$F_M(\vec{Q}) = F_M^S(\vec{Q}) + F_M^L(\vec{Q})$$

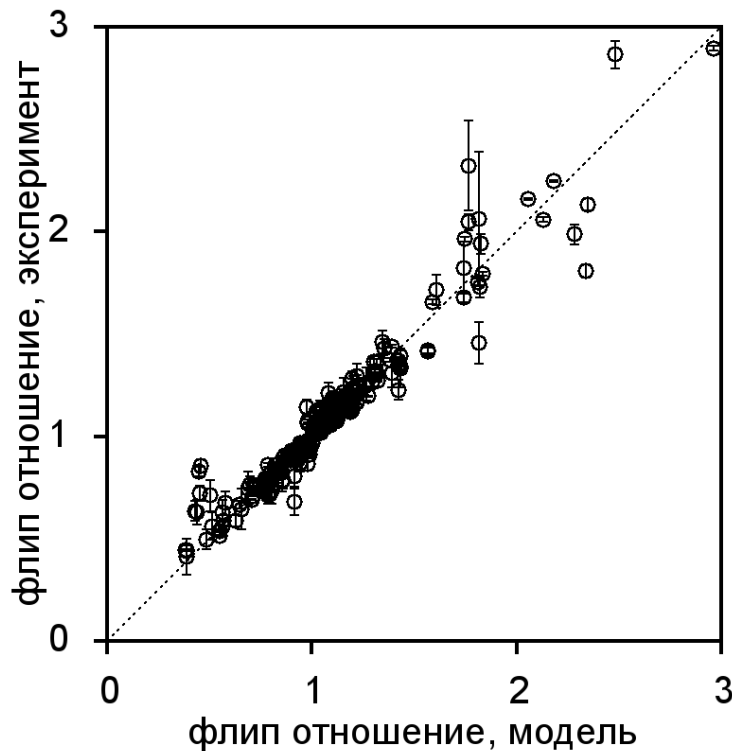
for YTiO<sub>3</sub> the  $F_M^L$  is close to zero

$$R_{PND} = \frac{y^+}{y^-} \cdot \frac{(F_N^2 + 2Pq^2 F_N F_M + q^2 F_M^2)}{(F_N^2 - 2Peq^2 F_N F_M + q^2 F_M^2)}$$

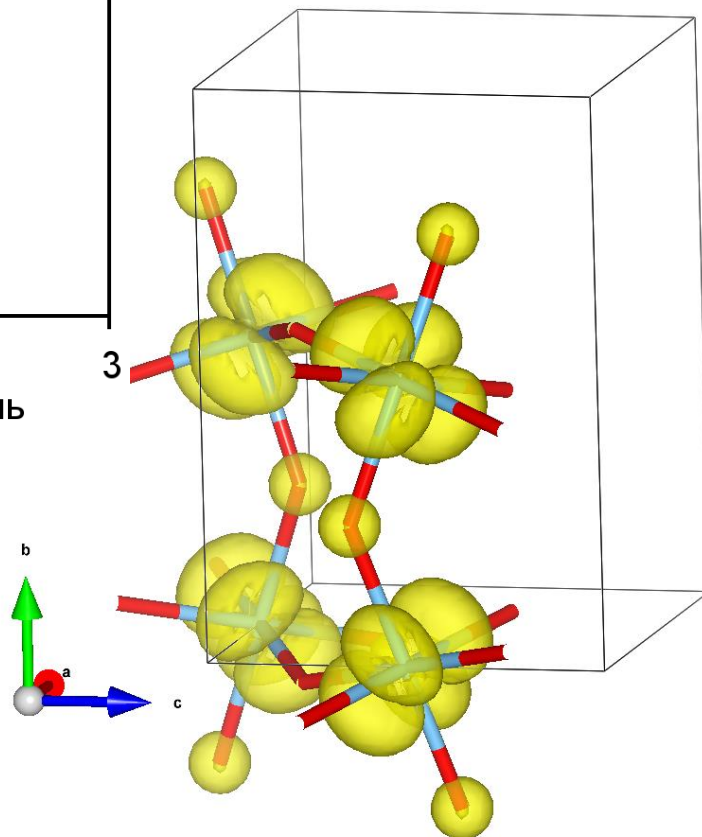
$F_M$  магнитный структурный фактор;  
 $F_M^S$  спиновый член  $F_M$ ;  
 $F_M^L$  орбитальный член  $F_M$ ;  
 $F_N$  ядерный структурный фактор;  
 $P$  поляризация падающего пучка;  
 $e$  эффективность флиппера;  
 $y^{+,-}$  поправки на экстинкцию;  
 $q$  синус угла между переданным моментом и магнитным полем;  
 $\rho$  плотность неспаренного электрона  
 $r$  магнитный момент атома;  
 $\psi$  волновая функция электрона;  
 $R$  радиальная функция, Slater type;  
 $Y_l^{mp}$  вещественные сферические гармоники.

# Подгонка PND данных

	PND
$\mu_{Ti} (\mu_B)$	0.718(5)
$d_{zx}$ orbital	0.42(2)
$d_{yz}$ orbital	0.58(3)
$\mu_{O_1} (\mu_B)$	0.027(4)
$\mu_{O_2} (\mu_B)$	0.012(3)
$\sqrt{\chi^2}$	5.6
$r1(r), \%$	5.3



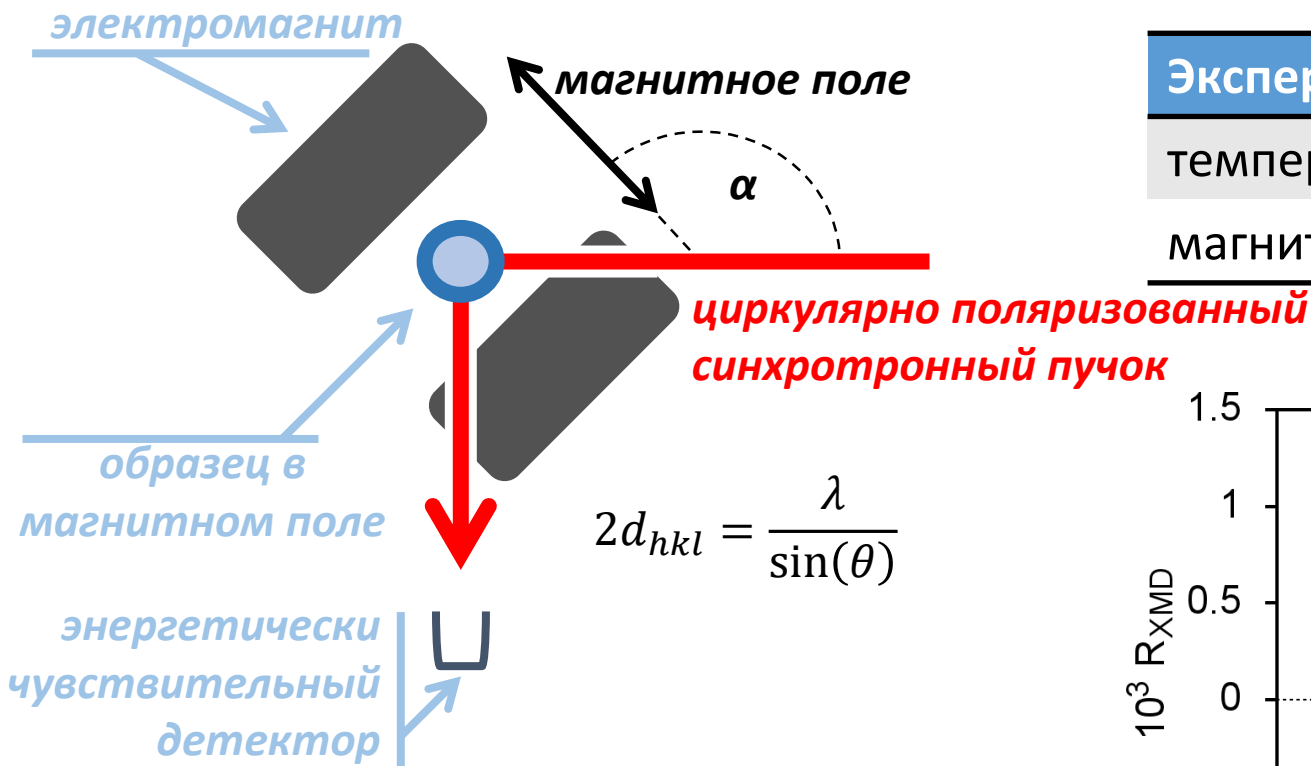
поверхностная  
изоплотность:  $0.02 \mu_B/\text{\AA}^3$





# Эксперимент по X-ray magnetic diffraction (XMD)

Принципиальная схема:



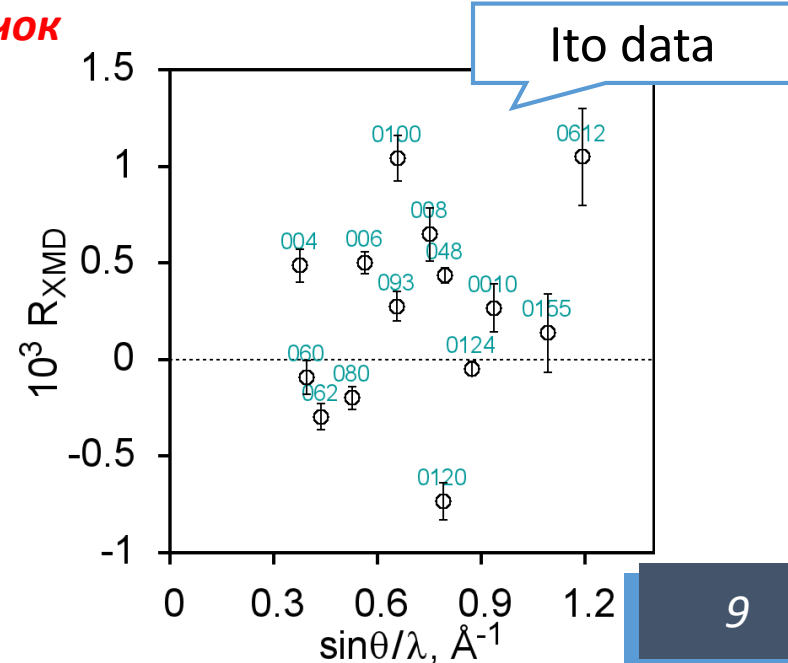
$$2d_{hkl} = \frac{\lambda}{\sin(\theta)}$$

$I_+$  и  $I_-$  интенсивность Брэгговского рефлекса при переключении магнитного поля

$$R_{hkl} = \frac{I_+ - I_-}{I_+ + I_-}$$

## Экспериментальные условия

температура	15 K
магнитное поле	0.85 T



## Выражения для расчета флип отношений в случае XMD

$$R_{XMD} = \gamma f_P \frac{F_M^S \sin(\alpha) + F_M^L (\cos(\alpha) + \sin(\alpha))}{F_e}$$

$$\gamma = \frac{\hbar\omega}{mc^2}$$

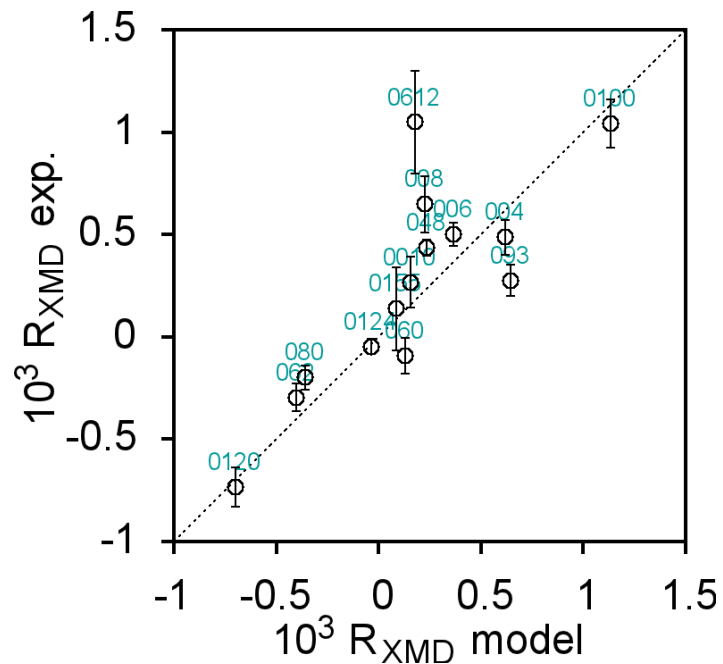
$$f_P = \frac{P_C}{1 - P_L}$$

В случае S-конфигурации ( $\alpha=135^\circ$ ):

$$R_{XMD} = \gamma f_P \frac{F_M^S}{\sqrt{2}F_e}$$

- $F_S$  спиновый член  $F_M$ ;
- $F_L$  орбитальный член  $F_M$ ;
- $F_e$  электронный структурный фактор;
- $\gamma$  энергетический фактор;
- $f_P$  фактор поляризации;
- $\alpha$  угол между падающим пучком и направлением намагничивания;
- $P_L$  степень линейной поляризации падающего излучения;
- $P_C$  степень циркулярной поляризации падающего излучения;

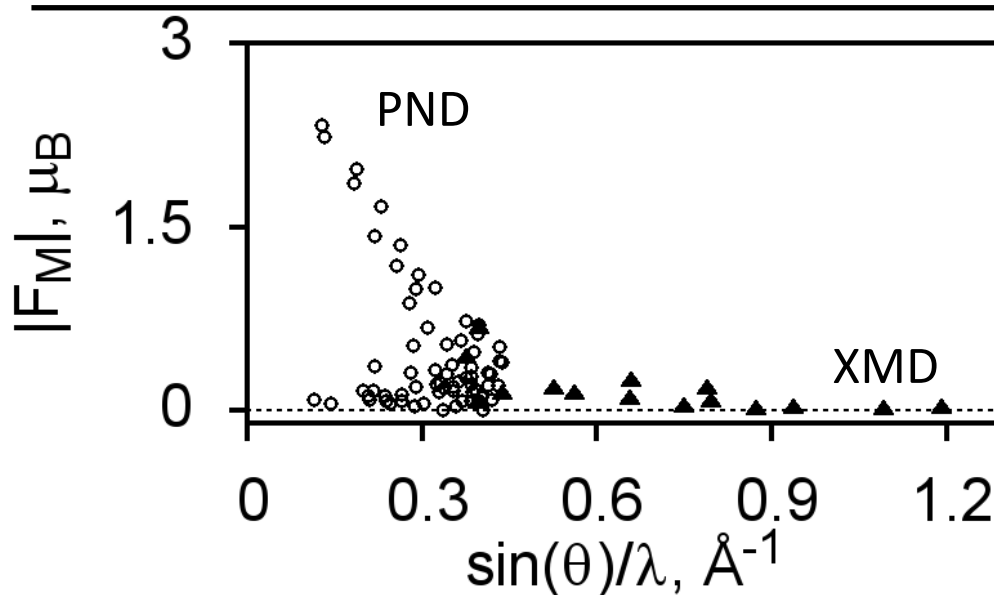
# Подгонка XMD данных



	XMD
$\mu_{Ti} (\mu_B)$	0.64(7)
$d_{zx}$ orbital	0.43(8)
$d_{yz}$ orbital	0.57(8)
$\mu_{O_1} (\mu_B)$	0.19(8)
$\sqrt{\chi^2}$	2.9

# Сравнение параметров двух моделей на основе PND и XMD данных

	PND	XMD
$\mu_{Ti} (\mu_B)$	0.718(5)	0.64(7)
$d_{zx}$ orbital	0.42(2)	0.43(8)
$d_{yz}$ orbital	0.58(3)	0.57(8)
$\mu_{O_1} (\mu_B)$	0.027(4)	0.19(8)
$\mu_{O_2} (\mu_B)$	0.012(3)	---
$\sqrt{\chi^2}$	5.6	2.9



*Спасибо за внимание*