



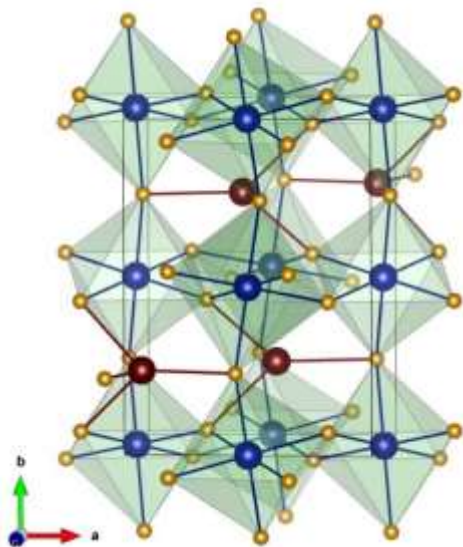
Эволюция энергетической щели в TbFeO_3 и YbFeO_3 при низких температурах

*И.А. Зобкало
НИЦ КИ - ПИЯФ*

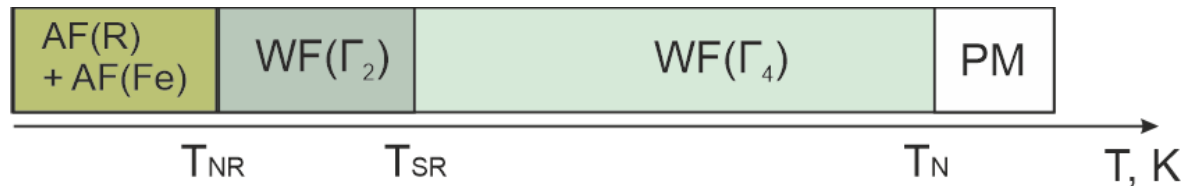


Ортоферриты $RFeO_3$

Space group $Pnma$



Магнитная фазовая диаграмма



$$T_N = 600 \div 700 K$$

$$T_{SR} = 8 \div 50 \div 70 \div 450 K$$

$$T_{NR} < 10 K$$

$$\Gamma_1 = G_x C_y A_z$$

$$\Gamma_2 = C_x G_y F_z$$

$$\Gamma_3 = F_x A_y C_z$$

$$\Gamma_4 = A_x F_y G_z$$

А.К. Звездин, А.А. Мухин. Магнитоэлектрические взаимодействия и фазовые переходы в новом классе мультиферроиков с несобственной электрической поляризацией. *Письма в ЖЭТФ*, 88(8), 581 (2008).

$$F = S_1 + S_2 + S_3 + S_4$$

$$G = S_1 - S_2 + S_3 - S_4$$

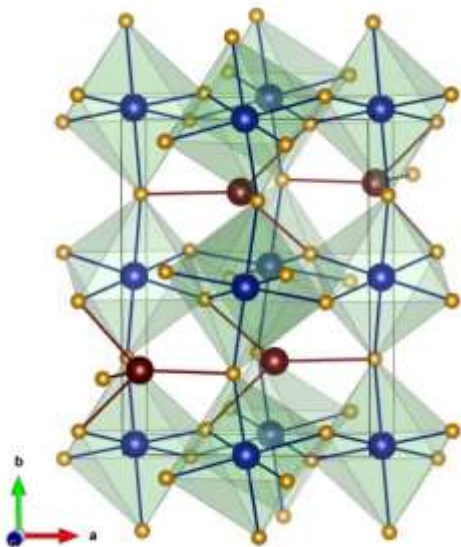
$$A = S_1 - S_2 - S_3 + S_4$$

$$C = S_1 + S_2 - S_3 - S_4$$

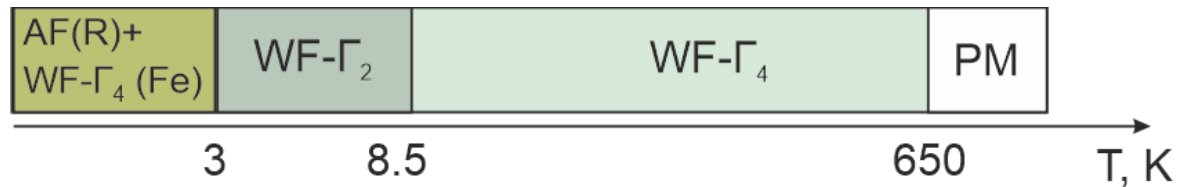


Ортоферриты TbFeO_3 , YbFeO_3

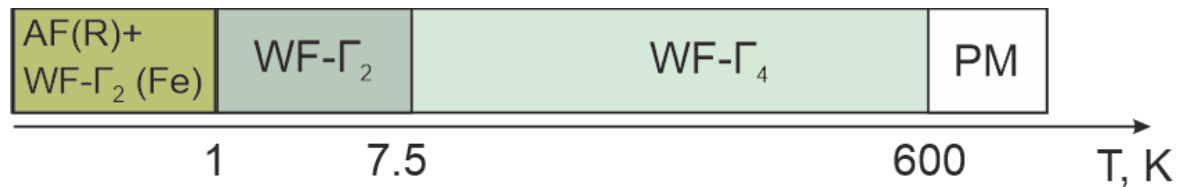
Space group $Pnma$



TbFeO_3



YbFeO_3



Thermal TAS PUMA (MLZ)

Cold TAS IN12 (ILL)

Diffractometer D23 (ILL)



Ортоферриты TbFeO₃, YbFeO₃

Кристаллическая структура

Pnma

TbFeO ₃		300 K ($\chi^2 = 3.19$)	4 K ($\chi^2 = 3.19$)
a, Å		5.5996(3)	5.5919(1)
b, Å		7.6404(4)	7.6345(2)
c, Å		5.3273(2)	5.3306(1)
Fe 4(b)	x	0.0	0.0
	y	0.0	0.0
	z	0.5	0.5
Tb 4(c)	x	0.06315(40)	0.06445(41)
	y	0.25	0.25
	z	-0.0158(8)	-0.0174(8)
O1 4(c)	x	0.4662(44)	0.4809(50)
	y	0.25	0.25
	z	0.1186(39)	0.1362(45)
O2 8(d)	x	0.2745(44)	0.2732(39)
	y	0.0733(21)	0.0583(20)
	z	0.2653(50)	0.2974(36)
Fe-O1-Fe, J_b^{Fe}	ang. dist.	141.8 ± 1.2 deg 4.044 ± 0.011 Å	138 ± 1.4 deg 4.088 ± 0.014 Å
Fe-O2-Fe, J_{ac}^{Fe}	ang. dist.	146.6 ± 0.9 deg 4.030 ± 0.042 Å	149.9 ± 1.0 deg 4.000 ± 0.042 Å

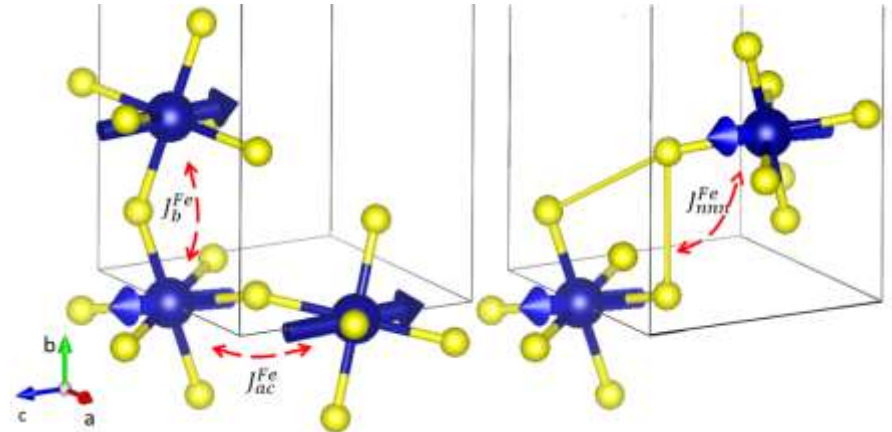
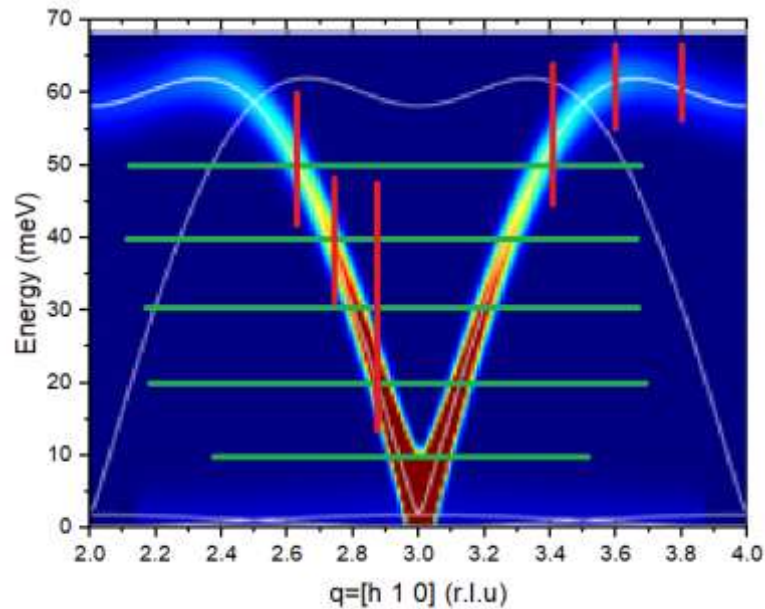
YbFeO ₃		300 K ($\chi^2 = 2.69$)	5 K ($\chi^2 = 1.60$)
a, Å		5.5620(4)	5.5563(2)
b, Å		7.5709(6)	7.5545(3)
c, Å		5.2317(4)	5.2222(2)
Fe 4(b)	x	0.0	0.0
	y	0.0	0.0
	z	0.5	0.5
Yb 4(c)	x	0.0727(5)	0.0724(4)
	y	0.25	0.25
	z	0.9752(6)	0.9783(6)
O1 4(c)	x	0.3765(57)	0.3676(43)
	y	0.25	0.25
	z	0.0928(56)	0.1357(38)
O2 8(d)	x	0.3408(41)	0.3435(30)
	y	0.0731(27)	0.0725(20)
	z	0.6682(38)	0.6617(28)
Fe-O1-Fe, J_b^{Fe}	ang. dist.	132.2 ± 1.7 deg 4.142 ± 0.020 Å	123.2 ± 1.1 deg 4.294 ± 0.015 Å
Fe-O2-Fe, J_{ac}^{Fe}	ang. dist.	131.4 ± 1.2 deg 4.19 ± 0.04 Å	130.3 ± 0.8 deg 4.202 ± 0.024 Å

TbFeO₃

Моделирование дисперсии спиновых волн

$$T > T_{SR}$$

$$H^{Fe-Fe} = \sum_{ij} S_i^{Fe} \cdot J_{ij}^{Fe} \cdot S_j^{Fe} + \sum_i S_i^{Fe} \cdot A_i^{Fe} \cdot S_i^{Fe} + \sum_{mn} S_m^{Fe} \cdot D_{mn}^{Fe} \cdot S_n^{Fe}$$



$$T < T_{NR}$$

$$H^{Fe-Tb} + H^{Tb-Tb} = \sum_{ij} S_i^{Fe} \cdot J_{ij}^{Fe-Tb} \cdot S_j^{Tb} + \sum_{mn} S_m^{Tb} \cdot J_{mn}^{Tb-Tb} \cdot S_n^{Tb}$$

TbFeO₃

Thermal TAS PUMA (MLZ):

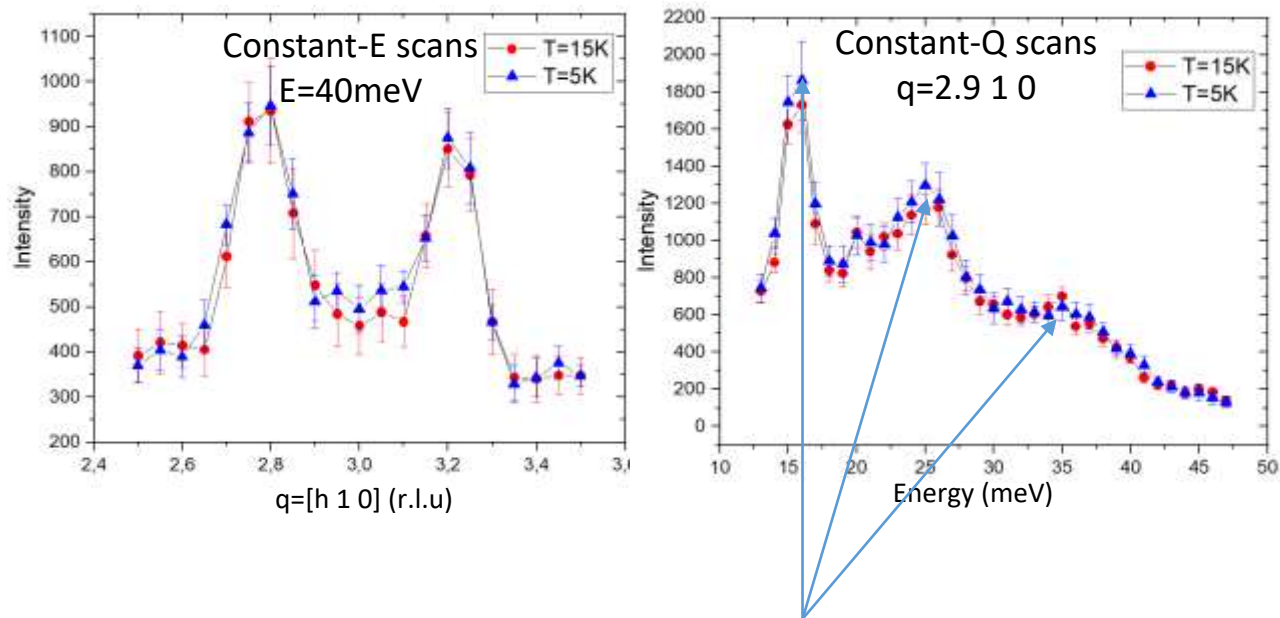
$E = 5 \div 75 \text{ meV}$

$\Delta E \sim 1 \text{ meV}$

15 K – Γ_4

5 K – Γ_2

Сканы в окрестностях узла [3 1 0]



Пики в районе 15 meV, 25 meV, 35 meV – уровни КЭП!

TbFeO₃

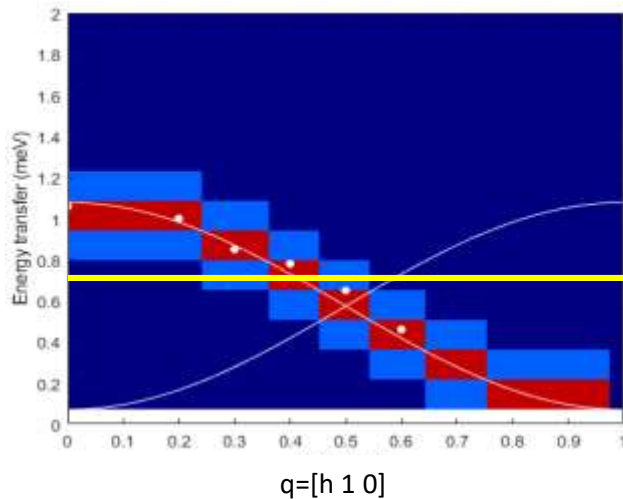
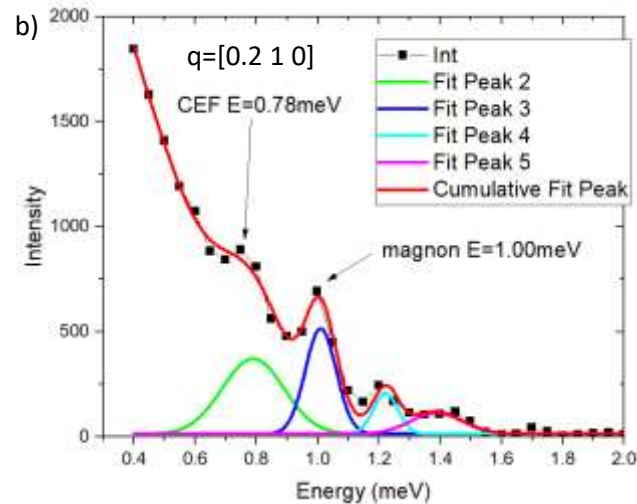
Cold TAS IN12 (ILL):

$E = 0.2 \div 2$ meV

$\Delta E = 0.05$ meV

2 К – Г4

Скан в окрестностях узла [1 1 0]



Расчитанная и измеренная карты дисперсии в TbFeO₃ при низких энергиях. Белые точки – позиции неупругих пиков, белые линии расчетные кривые дисперсии, желтая линия – уровень КЭП.

$$J_{ij}^{Tb-Tb} \approx 0.20(3) \text{ meV}$$

TbFeO₃

Параметры взаимодействий

	J_b^{Fe}	J_{ac}^{Fe}	J_{nnn}^{Fe}	D1	D2
TbFeO ₃	4.77(1)	4.55(2)	0.10(2)	0.13(3)	0.10(3)
YbFeO ₃ [1]	4.675	4.675	0.15	0.086	0.027
HoFeO ₃ [2]	4.90	4.76	0.15	0.12	0.08
YFeO ₃ [3]	5.02	4.62	0.22	0.14	0.12

Параметры анизотропии

Compound	TbFeO ₃			YbFeO ₃ [1]		HoFeO ₃ [2]		YFeO ₃ [3]
	Γ_4 HT	Γ_2 LT	Γ_4 LT	Γ_4 HT	Γ_2 LT	Γ_4 HT	Γ_2 LT	Γ_4 HT
A_{ac}	0.007	0	0.012	0.033	0	0.008	0	0.0091
A_b	0	0.0076	0	0	0.023	0	0.017	0.0025

[1] S. E. Nikitin, L. S. Wu, A. S. Sefat, K. A. Shaykhtudinov, Z. Lu, et al., Phys. Rev. B 98, 064424 (2018)

[2] A.K. Ovsianikov, I.A. Zobkalo, W. Schmidt, S.N. Barilo, S.A. Guretskii, V. Hutanu, JMMM, Volume 507, (2020)

[3] K. Park, H. Sim, J. C Leiner, Y. Yoshida, J. Jeong, S. Yano, J. Gardner, P. Bourges, M. Klicpera, V. Sechovský, Journal of Physics: Condensed Matter (2018)

YbFeO₃

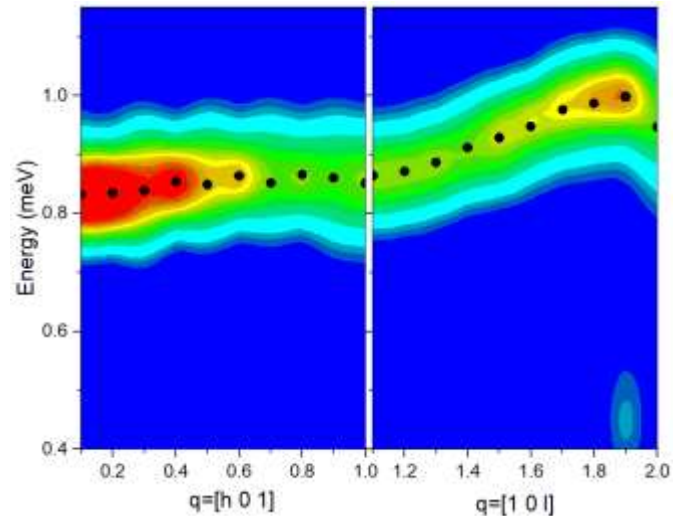
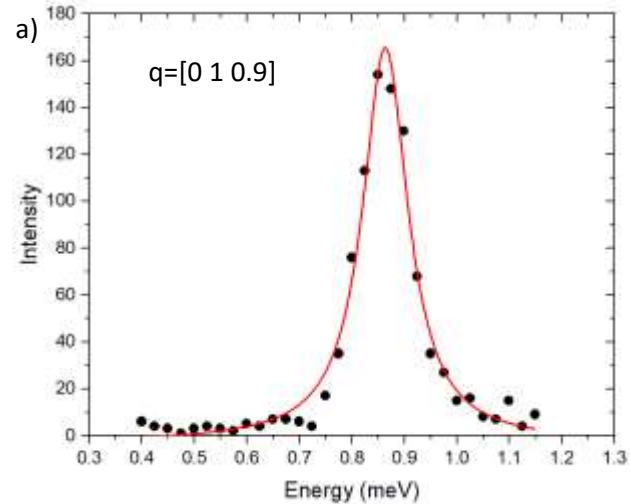
Cold TAS IN12 (ILL):

$E = 0.1 \div 2$ meV

$\Delta E = 0.05$ meV

2 K – Γ_2

Скан в окрестностях узла [1 0 1]



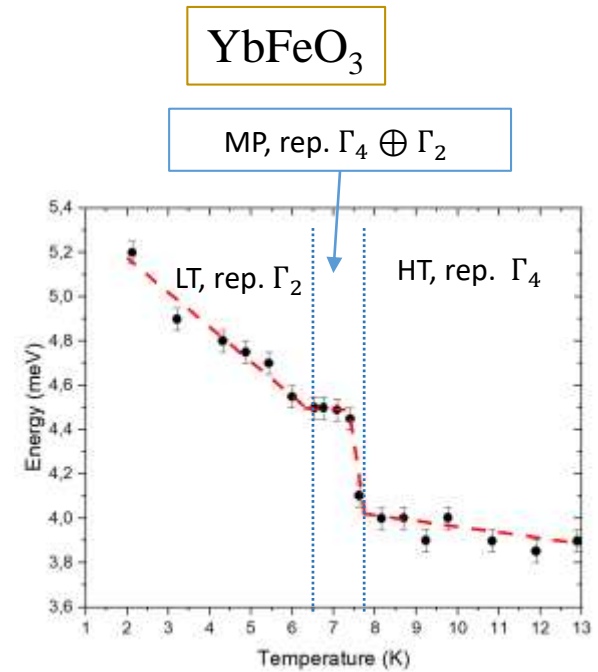
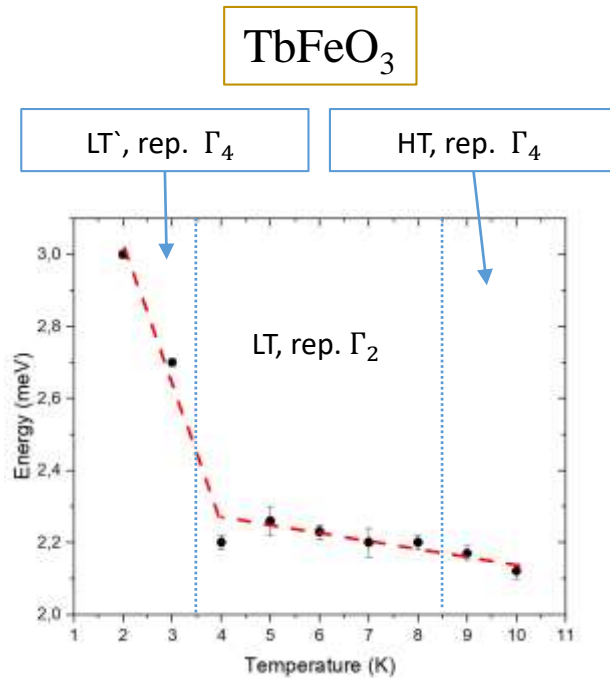
Измеренная карта дисперсии в YbFeO₃ при низких энергиях. Черные точки – позиции неупругих пиков.

TbFeO₃, YbFeO₃: эволюция энергетической щели

Cold TAS IN12 (ILL):

$E = 2 \div 6$ meV

$\Delta E = 0.05$ meV



Иерархия взаимодействий в TbFeO₃:

$$J_{ij}^{Fe-Fe} > J_{ij}^{Tb-Tb} > J_{ij}^{Fe-Tb}$$



Взаимодействия J_{ij}^{Tb-Tb} и J_{ij}^{Fe-Tb} имеют противоположные знаки, и при $T_{NR} = 3$ К компенсируют друг друга – возврат в Γ_4 .

Иерархия взаимодействий в YbFeO₃:

$$J_{ij}^{Fe-Fe} > J_{ij}^{Fe-Yb} > J_{ij}^{Yb-Yb}$$



Один ориентационный переход $\Gamma_4 \rightarrow \Gamma_2$



Участники работы

А.К. Овсяников, *НИЦ КИ – ПИЯФ, RWTH Aachen University*

О.В. Усманов, *НИЦ КИ – ПИЯФ*

W. F Schmidt, *Julich Centre for Neutron Science Outstation at Institut Laue-Langevin*

V. Hutanu, *RWTH Aachen University, Jülich Centre for Neutron Science at Heinz Maier-Leibnitz Zentrum*

К.А. Шайхутдинов, *Институт физики им. Киренского*

К.Ю. Терентьев, *НИЦ КИ – ПИЯФ, Институт физики им. Киренского*

С.В. Семенов, *Институт физики им. Киренского*



**Thank you
for
your attention!**