

Densités de charge et de spin expérimentales de la perovskite YTiO_3 obtenues par affinement joint.

Nicolas Claiser¹, Ariste Bolivard Voufack¹, Mohamed Souhassou¹, Claude Lecomte¹, Zeyin Yan², Jean-Michel Gillet², Iurii Kibalin^{1,3}, Arsen Gukasov³, Florence Porcher³, Béatrice Gillon³, Masahisa Ito⁴

¹CRM2, Université De Lorraine/CNRS, Vandoeuvre-lès-nancy, France,

²SPMS UMR8580, CentraleSupélec, Université Paris-Saclay, Chatenay-Malabry, France,

³LLB, CEA-CNRS, CEA Saclay, Gif-sur-Yvette, France,

⁴Gunma University, Kiryu 1-5-1, Gunma, Japan

Notre étude porte sur la pérovskite YTiO_3 qui présente un ordre de spin ferromagnétique accompagné d'un ordre orbital antiferromagnétique en dessous de 30 K. A partir de mesures de diffraction rayons X à haute résolution (ligne BL 02 B1 à Spring8, 20 K) et de diffraction de neutrons polarisés (LLB Saclay, 5 K), nous avons construit un modèle expérimental commun de densité électronique (Deutsch *et al.* IUCrJ (2014) 1,194–199) affiné conjointement sur ces différentes données. Ce modèle permet de décrire les densités de charge et de spin de ce matériau en dessous de la température de transition et autorise une exploration plus fine des origines de son comportement singulier.

Cette affiche présentera les spécificités de la méthode, en particulier dans le cas de ce cristal présentant une absorption importante et sujet à l'extinction. En nous appuyant en parallèle sur des calculs théoriques, nous décrirons l'état électronique de ce matériau à très basse température.