

Tisztelt Bíráló!

Köszönöm, hogy időt szánt doktori munkám alapos elolvasására és bírálatára. Megjegyzéseit köszönöm, azokat elfogadom. A felvetett kérdésekre válaszaimat pontokba szedve az alábbiakban közlöm:

1. Kérdés:

- a) Milyen módszerrel határozta meg az abszorpciós pozíciókat (4.3 ábra) a LiCoPO_4 -on történt mérések alapján? Az abszorpciós csúcsok maximumát olvasta le, vagy illesztette a görbéket? Meghatározható-e hiba a kapott értékekre?
- b) A jelölt két energián is megfigyelt gyenge abszorpciót (0.25 eV és 0.4 eV), ami nem esik egybe a kristály-tér számításokkal. Ezen csúcsok megjelenését lehetséges szennyezőkkel magyarázza. Milyen módszerekkel karakterizálta a mintát? Mik lehetnek ezek a szennyezők?

Válasz:

a) Az abszorpciós pozíciókat az abszorpciós csúcsok maximumhelyének leolvasásával határoztam meg, illesztést nem végeztem. Ezek az energiák elektron-átmenetekhez tartoznak, amiket sok tényező befolyásol, pl. spin-pálya csatolás, kristályterek, elektronok-fononok közti csatolás vagy hibridizáció. A kristálytér-átmenetek finomszerkezetének meghatározásával ezekről az energiakálákról nyerhetnénk információt. LiCoPO_4 -n végzett méréseimben azonban ezen felhasadásokkal összemérhető a csúcskiszélesedés, ezért a spektrum ezen részleteit nem tudtam felbontani. (Az átmenetek kiszélesedését nem az instrumentális felbontás határozta meg, mely a VIS tartományban $\sim 30\text{meV}$, a NIR tartományban $\sim 5\text{ meV}$ és a MIR tartományban $\sim 0.5\text{ meV}$ volt.)

b) A mintát Dr. Kocsis Vilmos, a minta növesztője pormintán végzett Röntgen diffrakciós mérésekkel, Laue-szórással és polarizációs mikroszkóppal karakterizálta, szennyezők jelenlétét nem mutatta ki. Továbbá a mágnesezettség és magnetoelektromos együttható méréseinek eredményei jól egyeznek a korábbi munkákkal. Ám igen alacsony dópolás is okozhat keskeny elnyelési sávokat, pl Al_2O_3 -ban a Cr 1-3% -os adalékolása már vörös színt eredményez (rubin). Ilyen kis mértékű szennyezést nehéz kimutatni. Energiadiszipatív Röntgen spektroszkópiát lehet még szennyezők kimutatására alkalmazni, de ez sem minden esetben elég érzékeny módszer.

A dópolás hatását célzottan lehetne vizsgálni szándékos adalékolással, így összevetve a tiszta (vagy annak gondolt) vegyület spektrumát az adalékolt változattal, és új, esetleg meglevő, de erősebb abszorpciós csúcsokat keresni. Ez viszont egy nehéz és költséges folyamat, több buktatót is hordoz. Ilyen például, hogy a dópoló anyag befolyásolja magát a növesztési folyamatot, elronthatja azt, illetve maga az adott növesztési módszer (floating zone) inkább tisztítja a mintát, az idegen anyag zárványokba gyűlik.

2. Kérdés:

A BiFeO_3 mágneses tulajdonságait egyebek mellett kisszögű neutron szórás technikával vizsgálta. A beérkező nyaláb polarizálva volt? Ha igen, milyen irányú volt a polarizáció?

Válasz:

Polarizált neutronszórással a szórési csúcsok eredetét (szerkezeti/mágneses) illetve karakterét lehet meghatározni. Korábbi polarizált kisszögű neutronszórás mérések [Ramazanoglu et al., PRL **107**, 207206 (2011)] már alátámasztották, hogy a BiFeO_3 -n a direkt nyaláb körül megjelenő Bragg-csúcsok a mágneses rend gyenge ferromágnességéből származnak. Így a dolgozatban tárgyalt méréseinkben a beérkező nyaláb polarizálatlan volt. Gyakorlati megfontolás is szerepet

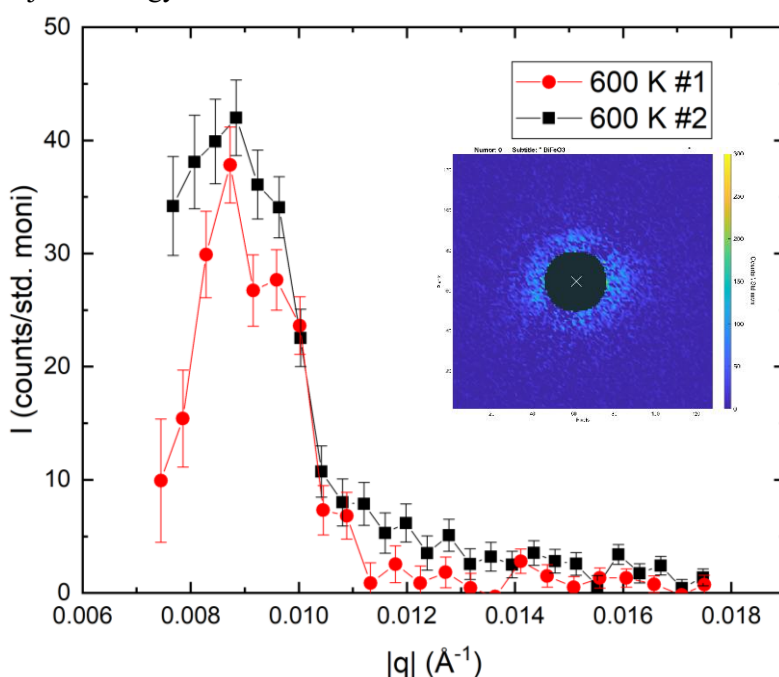
játszott a polarizálatlan neutronok használatában: polarizált méréshez szükséges berendezés kevésbé hozzáférhető. Emellett például egy olyan spallációs forrás, mint ami a Paul Scherrer Institutban rendelkezésünkre állt, egyébként is gyenge neutronfluxusa tovább gyengül, így egy szórási kép felvétele még több értékes mérési időt vesz igénybe és/vagy romlik a mérések jel/zaj viszonya.

3. Kérdés:

Az 5.7-es ábrán a BiFeO₃-on mért SANS diffrakciós csúcsok radiális eloszlása látható. A csúcsok pozícióját Gauss-illesztéssel határozta meg, ami egészen 550 K-ig egyértelmű. 600 K-en azonban egy kettős csúcs látható. Nem lehet ennek a csúcsfelhasadásnak fizikai jelentése?

Válasz:

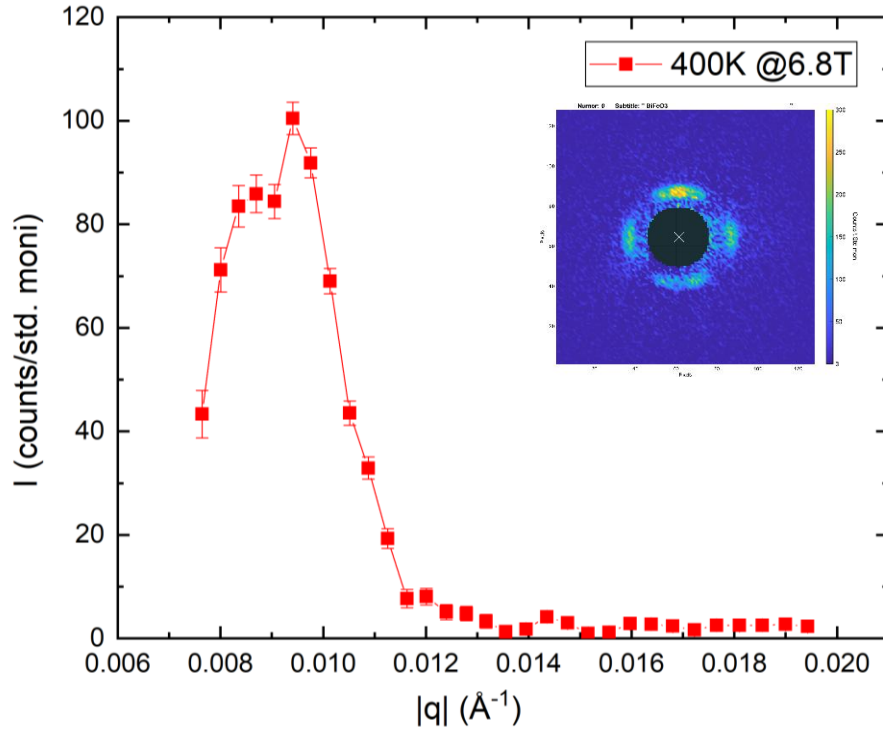
A mérés folyamán több alkalommal is készült szórási kép 600 K-en zérus mágneses térben. A tézis 5.7-es ábráján egy 660 K-ről 300 K-re történő hűlés közben készült szórások analíziséből származó eloszlásokat ábrázolom. Az alábbi 3.1 Ábrán ez a hűlés során vett intenzitáseloszlás az #1-es, pirossal jelzett adatsor. Vele együtt ábrázoltam feketével a #2-es adatsort, mely egy 600 K-en végzett térfüggés méréshez tartozik. Ezen már sokkal kevésbé prominens a kettős csúcs a hibajelzőket figyelembe véve.



3.1 Ábra. Szórási intenzitás eloszlása a hullámszámvektor hosszának függvényében két azonos hőmérsékleten, zérus térben felvett szórási képen. Az ezen a hőmérsékleten felvett tipikus szórási képet a kis kép illusztrálja.

A radiális eloszlásban látható dupla csúcs jelezhet kétféle modulációs hosszt, így esetleg kétféle modulált struktúra jelenlétére is utalhat. A BiFeO₃ esetén ez a kétféle struktúra például a cikloidális és a kónikus rendeződések lehetnek, amihez a hőmérséklet kellően nagy. A feltételezés vizsgálatához olyan szórási képet kellene elemezni, ahol bizonyosan a két fázis koegzisztenciája figyelhető meg. Ilyen kép készült 400 K-en. Ugyanazokkal a paraméterekkel, mint amikkel a dolgozatbeli radiális intenzitáseloszlás ábra készült, az alábbi 3.2 Ábrán látható eloszlást kaptam a fáziskoegzisztenciát mutató szórási képre. Ezen is megfigyelhető kettős

csúcs, viszont jelenlegi tudásom szerint a koegzisztenciához véges külső mágneses tér szükséges, ami a kérdésbeli 600 K-es mérésben nem volt meg.



3.2 Ábra. Szórási intenzitás eloszlása a hullámszámvektor hosszának függvényében 400 K-es hőmérsékleten, 6.8 T mágneses térben felvett szórási képen (kis ábra). Ezen tér és hőmérsékleti értékek mellett a BiFeO_3 mintában a cikloidális és transzverz kónikus fázis koegzisztenciája figyelhető meg.

4. Kérdés:

A felületre merőleges korrelációs hosszat a SANS vízszintes szórási csúcsokon mért „rocking curve-k” félértékszélességéből határozta meg. A félértékszélességet azonban sok tényező befolyásolja, mint a neutron nyaláb divergenciája és energiakiszélesedése, vagy a minta felületi érdessége. Figyelembe vette a jelölt az alábbi effektusokat?

Válasz: A kiszélesedést ezek valóban befolyásolják, ám ezekre léteznek korrekciók, melyek a figyelembe veszik a neutronnyaláb hullámhosszát ($\lambda = 8 \text{ \AA}$), energiakiszélesedését ($\Delta\lambda/\lambda = 0.1$), a detektor és kollimátor távolságot ($d_{\text{det}} = d_{\text{col}} = 15 \text{ m}$), illetve a direkt nyaláb szélességét ($\text{FWHM} = 0.058^\circ$).

$$\sigma_a = \frac{\text{FWHM}}{2\sqrt{2 \ln 2}}$$

$$\sigma_c = \frac{q_0 \lambda}{4\pi} \cdot \sqrt{\frac{4 \ln 2}{3} \frac{\Delta \lambda}{\lambda}}$$

$$\text{resolution(rocking)} = \sqrt{\sigma_a^2 + \sigma_c^2}$$

A síkbeli kiszélesedés σ_a , míg mélységbeli σ_c , a tipikus szórási hullámszámvektor

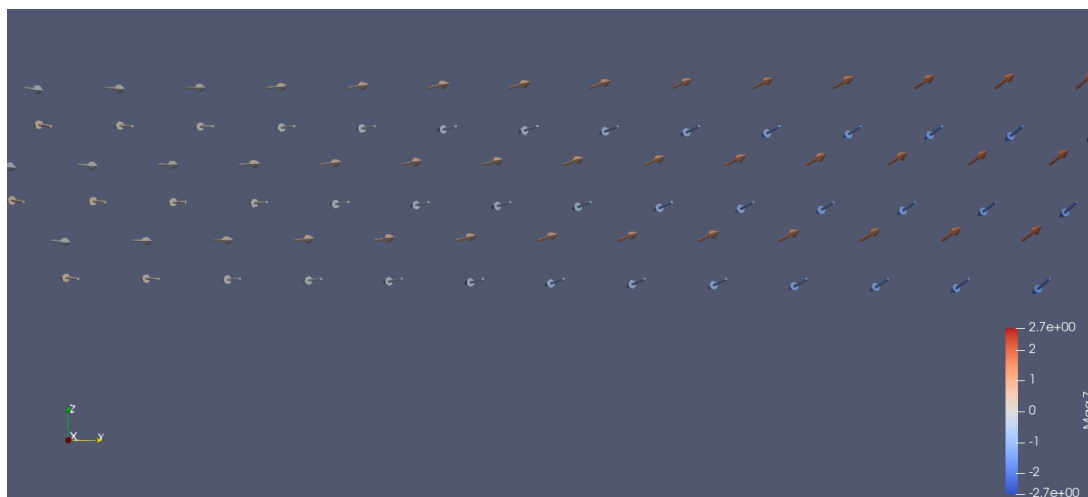
$q_0 = 0.01 \text{ \AA}^{-1}$. Ezek alapján a rocking görbék felbontása 0.025° , mely felbontás jóval meghaladja a görbék 1° nagyságrendbe eső félértékszélességét.

5. Kérdés:

A jelölt megemlíti, hogy mikromágneses szimulációk készültek a BiFeO_3 különböző mágneses szerkezeteiről, amik szépen egybe esnek a kísérleti adatokkal. A kérdésem, hogy miért nem mutatott be a dolgozatában néhány térbeli szimulációs ábrát, ami a különböző mágneses rendeződéseket reprodukálja?

Válasz:

A rendeződések sematikus rajzai szerepelnek az 5.2. ábra (b)—(d) paneljein. Mivel a moduláció hullámhossza az elemi cella méretéhez képest 150-szer nagyobb, a vizualizáció nehézkes. Ha pedig összenyomjuk a dimenziókat, nem hordoz több információt a szimulációból származó ábra, mint egy sematikus rajz. A kónikus fázis gerjesztett rezgéseit időben bemutató rövid videók azonban Dr. Rózsa Levente jóvoltából rendelkezésünkre állnak. Ebből látható egy képkocka az 5.2-es Ábrán:



5.2 Ábra. Képkocka egy, a kónikus fázis gerjesztéseit mikromágneses szimuláció alapján bemutató videóból. A videók készítője Dr. Rózsa Levente.

Az 5.2-es Ábrán a modulált szerkezet egy része látható, nem a teljes periódus. Már ezen a tartományon is nehéz követni a statikus modulációt, ezért választottam a rendeződés és a gerjesztések sematikus bemutatását.

Budapest, 2025. 06. 04.

Tóth Boglárka