

Éffets magnétiques sur le spectre de phonons infrarouge du composé MnF_2

Julien Varignon¹, Marie-Bernadette Lepetit¹, R. Schlek², Y. Nahas²,
R. P. S. M. Lobo²

¹*Laboratoire de Cristallographie et Sciences des Matériaux CRISMAT
ENSICAEN-CNRS UMR 6508 6 boulevard Maréchal Juin, 14050 Caen,
France E-mail : julien.varignon@ensicaen.fr*

²*Laboratoire de Physique et Étude des matériaux, LPEM ESPCI, CNRS UPR5
Université Pierre et Marie Curie 10 rue Vauquelin, 75231 Paris, France*

Les matériaux multiferroïques possèdent un couplage magnéto-électrique entre la ferroélectricité et le magnétisme. Ils sont habituellement divisés en deux catégories :

- les matériaux multiferroïques de type I, tels que BiFeO_3 , pour lesquels les transitions ferroélectrique et magnétique sont indépendantes et le couplage magnéto-électrique est faible
- les matériaux multiferroïques de type II, tels que TbMnO_3 , pour lesquels la ferroélectricité est induite par l'ordre magnétique et le couplage magnéto-électrique est fort.

Des études précédentes ont montré que dans les matériaux de type II, tels que MnO et CoO , il y a une renormalisation de la fréquence des phonons à la transition magnétique. Cependant, ce phénomène est-il du à un effet magnétostrictif ou est-ce une conséquence du couplage magnéto-électrique ? Afin de comprendre l'importance relative des deux phénomènes, nous avons étudié théoriquement et expérimentalement la réponse infrarouge d'un composé simple présentant seulement le premier effet : MnF_2 . En effet, ce composé subit une transition antiferromagnétique à $T_N=68\text{K}$ sans transition de phase structurale.

Nous avons utilisé la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) pour différentes fonctionnelles et pour des configurations de spins ferromagnétique (FM) et antiferromagnétique (AFM). Les spectres de phonons déterminés expérimentalement et théoriquement sont en bon accord pour les phases paramagnétique (PM) et antiferromagnétique. Nous avons observé une renormalisation de la fréquence de certains phonons actifs infrarouge à T_N . Cette renormalisation peut être expliquée par la dépendance du couplage magnétique aux déplacements atomiques associés aux phonons.

- [1] T. Rudolf, C. Kant, F. Mayr and A. Loidl, *Phys. Rev. B*, **77**, 024421 (2008).
[2] C. Kant, T. Rudolf, F. Schrettle, F. Mayr, J. Deisenhofer, P. Lunkenheimer, M. V. Eremin and A. Loidl, *Phys. Rev. B*, **78**, 245103 (2008).
[3] B3LYP : A. D. Becke, *J. Chem. Phys.*, **98**, 5648 (1993).
[4] B1PW : D. I. Bilc, R. Orlando, R. Shaltaf, G. M. Rignanesi, J. Iniguez. and Ph. Ghosez, *Phys. Rev. B*, **77**, 165107 (2008).