

# Influence de l'ordre antiferromagnétique sur le spectre de phonons de $\text{MnF}_2$

R. Schleck, Y. Nahas, R. Lobo<sup>1</sup>, J. Varignon, M. B. Lepeitit<sup>2</sup>, C. S. Nelson<sup>3</sup>, R. L. Moreira<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*LPEM ESPCI-CNRS, Paris, France*

<sup>2</sup>*CRISMAT ENSICAEN, Caen, France*

<sup>3</sup>*NSLS Brookhaven national laboratory, Upton, NY, USA*

<sup>4</sup>*Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brasil*

Nous avons mesuré la dépendance en température du spectre de réflectivité de  $\text{MnF}_2$  entre 4K et 300K. L'analyse de la dynamique des ions de ce cristal montre une renormalisation claire des paramètres de phonons à  $T_N$  révélant l'existence d'un couplage spin-phonons semblable à celui observé dans les matériaux multiferroïques. Les données infrarouges ont été accompagnées par des mesures de diffraction de rayons X ainsi que par des calculs *ab-initio*. Le fait que les calculs *ab-initio* parviennent à prédire correctement l'amplitude et le sens des changements des paramètres de phonons observés à  $T_N$  suggère que ces derniers sont principalement dus à l'ordre magnétique. L'important changement des paramètres de maille mesurés par rayons X ainsi que l'amolissement du phonon  $A_{2u}$  en dessous de  $T_N$  montrent que les distortions d'origine magnétique dans  $\text{MnF}_2$  sont compatibles avec les instabilités ferroélectriques observées dans d'autres composés de type rutile tels que  $\text{TiO}_2$ .

We measured the temperature dependent infrared reflectivity spectra of  $\text{MnF}_2$  between 4 K and room temperature. The analysis of the lattice dynamics in this compound shows a clear renormalization of the phonon spectrum at  $T_N$  revealing the existence of spin-phonon coupling similar to the one observed in multiferroic materials. The infrared data was complemented by x-ray diffraction and *ab-initio* calculations. The *ab-initio* results accurately predict the magnitude and the sign of the phonon parameters changes across the antiferromagnetic transition, strongly suggesting that these changes are mainly induced by the magnetic order. A large change in the lattice parameters with temperature seen by X-ray diffraction experiments as well as the  $A_{2u}$  phonon softening below  $T_N$  indicate that magnetic order induced distortions in  $\text{MnF}_2$  are compatible with ferroelectric instabilities observed in other rutile compounds such as  $\text{TiO}_2$ .