

« Phases magnétiques et transitions de phases magnétiques dans les oxydes antiferromagnétiques frustrés multiferroïques : étude par simulations numériques »

Le but de ce projet de recherche est l'étude des propriétés magnétiques (détermination des différentes phases magnétiques et transitions de phases magnétiques) et du couplage magnéto-électrique dans les oxydes antiferromagnétiques frustrés, principalement les delafossites. Dans ces oxydes, nous souhaitons étudier :

- l'effet de la substitution (aléatoire ou contrôlée) d'un élément chimique par un autre sur l'ordre magnétique à basse température, la température de transition T_N et le couplage magnéto-électrique. Plus précisément, nous souhaitons établir les conditions pour lesquelles cet ordre magnétique intervient à une température de transition T_N suffisamment élevée (c'est-à-dire proche de la température ambiante), le fort couplage magnéto-électrique étant préservé afin de pouvoir manipuler la structure magnétique (polarisation électrique) par application d'un champ électrique (champ magnétique).

- les phases magnétiques sous champs magnétiques intenses. Compte tenu de l'existence d'un ordre antiferromagnétique non colinéaire à basse température, les configurations magnétiques et donc la polarisation électrique sont fortement dépendantes du champ magnétique appliqué. Il est à noter que les résultats de simulation existants qui ont été obtenus sur un modèle 2D simple [1] ne sont pas en accord avec les résultats expérimentaux [2,3].

- l'effet d'un champ magnétique modéré sur la polarisation électrique. Des résultats expérimentaux indiquent une dépendance de la polarisation électrique en fonction d'un champ magnétique appliqué d'intensité modérée (quelques Teslas) mais il n'y a pas à l'heure actuelle d'interprétation claire de ces résultats. Une interprétation en terme de stabilité des domaines magnétiques a été proposée [4], nous souhaitons élucider ce point.

Cette étude sera réalisée au moyen de simulations numériques. Nous utiliserons la méthode Monte Carlo qui est bien adaptée à la détermination des différentes phases magnétiques et à l'étude des transitions de phases magnétiques. Les paramètres magnétiques (intégrales d'échange, constantes d'anisotropie) qui sont des paramètres d'entrée nécessaires aux simulations Monte Carlo seront calculés par la méthode de la fonctionnelle de la densité (calculs *ab initio*) dans le cadre d'une collaboration en cours avec Y. Kvashnin de l'Université d'Uppsala (Suède). Les simulations Monte Carlo seront réalisées sur le supercalculateur du Centre Régional Informatique et d'Applications Numériques de Normandie (CRIANN).

Il est à noter que ce travail fait suite à une étude réalisée entre 2014 et 2018 dans le cadre d'un projet LABEX dont les résultats ont donné lieu à 3 publications [5-7] dans la revue *Physical Review B* qui est une revue scientifique internationale de haut niveau. Ces publications attestent de l'expérience solide acquise dans le domaine de la modélisation des oxydes de métaux de transition multiferroïques par notre équipe.

[1] S-Z Lin, K. Barros, E. Mun, J-W Kim, M. Frontzek, S. Barilo, S. V. Shiryayev, V. S. Zapf and C. D. Batista, *Phs. Rev. B* **89**, 220405(R) (2014)

[2] E. Mun, M. Frontzek, A. Podlesnyak, G. Ehlers, S. Barilo, S. V. Shiryayev and V. S. Zapf, *Phys. Rev. B* **89**, 054411 (2014)

[3] A. Miyata, O. Portugall, D. Nakamura, K. Ohgushi and S. Takeyama, *Phys. Rev. B* **96**, 180401(R) (2017)

[12] J. Xue-Fan, L. Xian-Feng, W. Lin-Zhong and H. Jiu-Rong, *Chin. Phys. B* **21**, 077502 (2012)

[4] K. Kimura, H. Nakamura, K. Ohgushi and T. Kimura, *Phys. Rev. B* **78**, 140401(R) (2008)

[5] A. Albaalbak, Y. Kvashnin, D. Ledue, R. Patte and R. Frésard, *Phys. Rev. B* **96**, 064431 (2017)

[6] A. Albaalbak, Y. Kvashnin, R. Patte, R. Frésard and D. Ledue, *Phys. Rev. B* **98**, 174403 (2018)

[7] A. Albaalbak, Y. Kvashnin, R. Patte and D. Ledue, *Phys. Rev. B* **99**, 104415 (2019)

Mots-clés :

Multiferroïsme, couplage magnéto-électrique, polarisation électrique, antiferromagnétisme, frustration magnétique, ordre magnétique hélicoïdal, phases magnétiques, transitions de phases, simulations Monte Carlo, calculs *ab initio*

Financement :

Allocation régionale (environ 1400 euros net/mois)

Contact :

Pr. D. Ledue, Enseignant-Chercheur

Mail : denis.ledue@univ-rouen.fr

**« Magnetic phases and magnetic phase transitions
in multiferroic frustrated antiferromagnetic oxides :
a study by numerical simulations »**

The goal of this project is to investigate the magnetic properties (magnetic phases and magnetic phase transitions) and the magneto-electric coupling in frustrated antiferromagnetic oxides. More precisely, we wish to study :

- the effect of chemical substitution on the magnetic order at low temperature, the transition temperature and the magneto-electric coupling. The goal is to find the conditions for having a transition temperature high enough (close to room temperature) with a sufficient magneto-electric coupling to be able to manipulate the electric polarisation by a magnetic field or the magnetic structure by an electric field ;
- the magnetic phases under applied field ;

This study will be carried out using numerical simulations :

- the Monte Carlo method which is well suited to determine the stable magnetic phases and the phase transitions ;
- density functional theory calculations (ab initio calculations) to provide the magnetic parameters (exchange interactions, anisotropy constants) necessary to the Monte Carlo simulations. This part will be performed in collaboration with another research team.

It should be noted that this work is in continuation with a previous study carried out between 2014 and 2018. The results of this study have been published in 3 articles in Physical Review B.

- [1] A. Albaalbak, Y. Kvashnin, D. Ledue, R. Patte and R. Frésard, Phys. Rev. B 96, 064431 (2017)
- [2] A. Albaalbak, Y. Kvashnin, R. Patte, R. Frésard and D. Ledue, Phys. Rev. B 98, 174403 (2018)
- [3] A. Albaalbak, Y. Kvashnin, R. Patte and D. Ledue, Phys. Rev. B 99, 104415 (2019)

Keywords

Multiferroicity, magneto-electric coupling, electric polarisation, antiferromagnetism, magnetic frustration, helical magnetic order, magnetic phases, phase transitions, Monte Carlo simulations, ab initio calculations.

Skills required

The candidate should have good skills in magnetism in solids and should be attracted to numerical simulations.

Financial support :

Grant from region of Normandy (about 1400 euros /month)

Contact :

Pr. D. Ledue

Mail : denis.ledue@univ-rouen.fr