GDR MEETICC

(Matériaux, Etats ElecTroniques, Interactions et Couplages non-Conventionnels)

Introduction

Cette réunion thématique du GDR MEETICC (Matériaux, Etats ElecTroniques, Interactions et Couplages non-Conventionnels) a pour but d'exposer à la communauté les problématiques, challenges et avancées les plus récentes en magnétisme. Elle se divisera en plusieurs sessions «apport de la diffusion neutronique pour l'étude du magnétisme», « couplages magnétoélectriques, multiferroiques et magnétorésistants», «applications du magnétisme», « matériaux pour le magnétisme», «théorie et modélisation».

Cette réunion est destinée à une large audience, incluant chimistes et physiciens, théoriciens et expérimentateurs. En partenariat avec la Fédération Française de Diffusion Neutronique (2FDN), les derniers accomplissements expérimentaux et nouvelles possibilités d'études en diffusion neutronique seront présentés. Le couplage entre le magnétisme et autres degrés de libertés, les applications, la recherche en nouveaux matériaux, ainsi que les nouvelles approches théoriques et modélisations seront abordés dans cette réunion. Cette réunion se veut contribuer au renforcement du réseau de collaboration à l'intérieur du GDR en réunissant théoriciens, expérimentateurs physiciens et chimistes, et à faire émerger les challenges dans le domaine du magnétisme.

Organisateurs

- Comité d'organisation local : Alain Pautrat, Vincent Hardy (Laboratoire CRISMAT)
- Bureau du GDR MEETICC
- Fédération Française de la Diffusion Neutronique

Remerciements

Les organisateurs remercient la communauté de communes Caen la mer, la délégation CNRS Normandie, le Laboratoire CRISMAT pour leurs soutiens logistiques et financiers, ainsi que le CNRT matériaux pour son accueil.

Programme réunion thématique "Magnétisme", GDR MEETICC

Jeudi 3 Octobre 2019

Accueil à partir de 10H au CNRT de Caen, Campus 2 côte de nacre

Café

10H45 **session diffusion neutronique (en collaboration avec la 2FDN)**

10h45- Invitée : Apport de la diffusion neutronique pour l'étude du magnétisme. ***Béatrice Grenier*** *(ILL, Univ. Grenoble-Alpes)*

11H20 - Local magnetic anisotropy by polarized neutron powder diffraction: application of magnetically induced preferred crystallite orientation. ***Iurii Kibalin*** *(LLB, Saclay)*

11H45- Quantum Kagome Antiferromagnets: Zn-Substituted Barlowite $Zn_xCu_{4-x}(OH)_6FBr$. ***Brendan Le Pennec*** *(LPS Orsay)*

12H10- Anharmonic magnon excitations in noncollinear and charge ordered $RbFe^{2+}Fe^{3+}F_6$. ***Manila Songvilay*** *(Univ. Edimburgh, UK)*

12H35- Pause déjeuner formule cocktail déjeunatoire au RU de l'université (salle administrative privatisée)

14H00 **session couplages magnetoélectriques et multiferroïques**

14h00- Invité : Multiferroïques RMn_2O_5 sous pression : Etude par diffraction de neutrons. ***Maxime Deutsch*** *(Univ. Lorraine, Nancy)*

14H35- Couplage magnétoélectrique statique et dynamique dans les triangles de spin frustrés. ***Athanassios Boudalis*** *(POMAM, Strasbourg)*

15H00- New advances on the RMn_2O_5 multiferroics family. ***A.Vaunat*** *(LPS, Orsay)*

15H25 - Pause café + posters

16H30 **session applications**

16h30 - Invitée : High performance micro-magnets for lab-on-chip applications. ***N. M. Dempsey*** *(Institut Néel, Grenoble)*

17H05 - Étude structurale et magnétique de composés intermétalliques à l'uranium. ***Pierric Lemoine*** *(ISCR rennes)*

17H30- Highly (001)-textured $La_{0.67}Sr_{0.33}MnO_3$ thin films integrated onto glass substrates using $Ca_2Nb_3O_{10}$- nanosheets as template layer. ***Alexis Boileau*** *(CRISMAT, Caen)*

17H55 - Optimization of thin film La2/3Sr1/3MnO3 magnetic field sensor. ***Luiz Enger*** *(GREYC, Caen)*

Fin 18H20

RDV à partir de 19H30 à la fabrique (côté terre), place St Sauveur dans le centre ville de Caen

Cocktail dînatoire à l'étage privatisé.

Vendredi 4 Octobre 2019

8H30 **session matériaux**

8h30- Invité : Surstoechiométrie en oxygène dans les oxydes magnétiques 1D à base de cobalt. ***B. Raveau*** *(CRISMAT Caen)*

9H05- Hybrides lamellaires magnétique et ferroélectriques: synthèse, structures, propriétés. ***Pierre Rabu*** *(IPCMS, Strasbourg)*

9H30- Epsilon-iron as a spin-smectic state. ***Tommaso Gorni*** *(ESPCI, Paris)*

9H55- Pause café+posters

10H30 **session théorie et modélisation**

10h30-Invité- Théorie et modélisation. ***Ludovic Jaubert*** *(LOMA Bordeaux)*

11H05 - Theoretical and experimental study of magneto elastic interactions in two AF systems. ***Andres Saul*** *(CINM, Marseille)*

11H30- Quantum Spin Superfluid from Bose-Einstein Condensation of Spinons in Pyrochlore Spin Ice. ***Imam Makhfudz*** *(GREMAN, Tours)*

11H55- Effect of perturbations on the kagome S=1/2 antiferromagnet at all temperatures. ***Laura Messio*** *(LPTMC, Paris)*

Fin 12H20.

Pause déjeuner formule buffet au RU de l'université (salle administrative privatisée)

Pour le CS, repas plateaux en salle de réunion du CRISMAT.

Table des matières

Introduction

Programme

Apport de la diffusion neutronique pour l'étude du magnétisme **1**

Apport de la diffusion neutronique pour l'étude du magnétisme, Grenier Béatrice 1

Local magnetic anisotropy by polarized neutron powder diffraction: application of magnetically induced preferred crystallite orientation, Kibalin Iurii 3

Quantum Kagome Antiferromagnets: Zn-Substituted Barlowite ZnxCu4-x(OH)6FBr, Le Pennec Brendan 4

Anharmonic magnon excitations in noncollinear and charge ordered RbFe2+Fe3+F6, Songvilay Manila [et al.] 5

Couplages magnétoélectriques et multiferroiques **6**

Multiferroïques RMn2O5 sous pression : Etude par diffraction de neutrons, Deutsch Maxime 6

Couplage magnétoélectrique statique et dynamique dans les triangles de spin frustrés, Boudalis Athanassios [et al.] 8

New advances on the RMn2O5 multiferroics family, Vaunat Antoine 9

Magnétisme et applications **10**

High performance micro-magnets for lab-on-chip applications, Dempsey N. M. . . 10

Étude structurale et magnétique de composés intermétalliques à l'uranium, Lemoine Pierric [et al.] 12

Highly (001)-textured La0.67Sr0.33MnO3 thin films integrated onto glass substrates using Ca2Nb3O10- nanosheets as template layer, Boileau Alexis [et al.] . . 13

Optimization of thin film La2/3Sr1/3MnO3 magnetic field sensor, Enger Luiz [et al.] 14

Magnétisme et matériaux **15**

Surstoechiométrie en oxygène dans les oxydes magnétiques 1D à base de cobalt, Raveau Bernard 15

Hybrides lamellaires magnétique et ferroélectriques: synthèse, structures, propriétés, Rabu Pierre 17

Epsilon-iron as a spin-smectic state, Gorni Tommaso 18

Magnétisme : théorie et modélisation **19**

Théorie et modélisation, Jaubert Ludovic 19

Theoretical and experimental study of magneto elastic interactions in two antiferromagnetic systems, Saul Andres 21

Quantum Spin Superfluid from Bose-Einstein Condensation of Spinons in Pyrochlore Spin Ice, Makhfudz Imam 22

Effect of perturbations on the kagome S=1/2 antiferromagnet at all temperatures, Messio Laura [et al.] 23

Posters **24**

Dipoles magnétiques à champ ajustable, Bernstein Pierre [et al.] 24

Fragmentation quantique dans les systèmes magnétiques frustrés, Leger Mélanie [et al.] 26

Frittage SPS appliqué à des poudres d'aimants REFeB recyclées, Souriou David [et al.] 27

From spin-fluctuations to ferromagnetism in the U3TGe5 family (T = transition element from columns 4 to 6), Pasturel Mathieu 28

Magneto-transport properties under high pressure of V5S8 single crysitals, Yang Hancheng 29

Mechanism of MIT in the quasi-2D BaCoS2 system: effect of chemical pressure and electronic doping, Abushammala Haneen 30

Metamagnetic transitions versus magnetocrystalline anisotropy in novel cobalt arsenates with low-D Co2+ units, Mentre Olivier 31

Propriétés magnétiques de nanoparticules de MnWO4 de composition, cristallinité et morphologie contrôlées, Payen Christophe 32

Pulsed High Magnetic Fields for Synchrotron and Neutron Applications, Duc Fabienne 33

Relation structure-propriété magnétique de métallophosphonates obtenus à partir d'acides phosphoniques rigides, Rueff Jean-Michel [et al.] 34

Scanning tunneling microscopy combined with high frequency: Recent devellopement and futur prospects, Hervé Marie [et al.] 35

Spin-lattice coupling in the quantum spin ice candidate Tb2Ti2O7 revealed by THz spectroscopy, Alexanian Yann 36

Structure-properties investigations in a new family of multiferroic compounds, Tailleur Elodie 37

The iron-based spin ladder BaFe2Se3: from multiferroic to superconductor, Zheng Wengen [et al.] 38

Liste des participants **39**

Programme synthétique **41**

Apport de la diffusion neutronique pour l'étude du magnétisme

Apport de la diffusion neutronique pour l'étude du magnétisme

Béatrice Grenier
Univ. Grenoble Alpes et CEA, IRIG/MEM/MDN, Grenoble

La diffusion neutronique est un outil de choix pour l'étude du magnétisme en matière condensée, comme nous allons le voir au travers d'une sélection assez vaste, mais néanmoins non exhaustive, de résultats expérimentaux.

Je commencerai par rappeler brièvement les propriétés des neutrons et leurs mécanismes d'interaction, nucléaire et magnétique, élastique et inélastique. Puis je développerai chacun de ces deux derniers cas, en présentant les instruments les plus couramment utilisés (principe et type d'informations qu'ils permettent d'obtenir) et des exemples de mesures ainsi réalisées.

La diffusion élastique (= diffraction) magnétique permet de déterminer tout ce qui est statique. J'illustrerai cela au travers d'exemples d'études de structures magnétiques (par diffraction de poudre ou sur monocristaux), de réseaux de vortex dans les supraconducteurs ou de skyrmions (grâce à la diffraction aux petits angles), d'ordres magnétiques dans des multicouches magnétiques (par réflectivité), …

La diffusion magnétique inélastique et quasi-élastique des neutrons, quant à elle, permet de sonder tout ce qui est dynamique (excitations, fluctuations, …). Pour commencer, nous verrons l'exemple des magnons et des spinons, dans les composés à couplages antiferromagnétiques tridimensionnels et unidimensionnels, respectivement. Ensuite je passerai en revue des exemples de spectroscopie magnétique (niveaux de champ cristallins et spectroscopie moléculaire), ainsi que des mesures d'excitations magnétiques dans les supraconducteurs (pic de résonnance, fluctuations magnétiques) et dans les pyrochlores (excitations de monopoles magnétiques).

Recommandations de lectures :

Neutrons and magnetism, collection SFN, volume 13 (2014), EDP Sciences, https://www.neutron-sciences.org/articles/sfn/abs/2014/01/contents/contents.html.

Thermal neutron scattering, G. L. Squires, Cambridge University Press (1978).

Theory of Neutron scattering from condensed matter, S. W. Lovesey, Oxford, Clarendon Press (1984).

Local magnetic anisotropy by polarized neutron powder diffraction: application of magnetically induced preferred crystallite orientation

I.A. Kibalin[1,2] and A. Gukasov[1]
[1] *Laboratoire Léon Brillouin (CEA-CNRS), UMR12, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette France.*
[2] *PNPI NRC ``Kurchatov Institute'' Orlova rosha Gatchina 188300 Leningrad region Russia.*

Polarized neutron diffraction allows to determine the local susceptibility tensor on the magnetic site both in single crystals and powders. It is widely used in the studies of single crystals, but it is still hardly applicable to a number of highly interesting powder materials, like molecular magnets or nanoscale systems because of the low luminosity of existing instruments and the absence of an appropriate data analysis software. These difficulties can be overcome by using a large area detector in combination with the two-dimensional Rietveld method and powder samples with magnetically induced preferred crystallite orientation. This is demonstrated by revisiting highly anisotropic spin-ice compound $Ho_2Ti_2O_7$. The values of susceptibility tensors of $Ho_2Ti_2O_7$ at various temperatures and fields were found in perfect agreement with these found earlier in single crystal experiments. The magnetically induced preferred crystallite orientation was used to study the local susceptibility of a single-molecule magnet $Co([(CH_3)_2N]_2CS)_2Cl_2$.

We demonstrate that using “magnetically textured” powder and the 2D Rietveld refinement allows to obtain the precision in the determination of the susceptibility parameters close to that obtained in the single crystal diffraction experiments. By applying this procedure to a single-molecule magnet in polycrystalline form we obtained the local susceptibility tensor for cobalt atom, which can be now confronted to the theory. More generally we suggest that the magnetic structure determination by applying 2D Rietveld method to the “magnetically textured” samples has significant perspectives, as it does not require high instrumental resolution due to the fact that different types of reflections with similar Bragg angles are spread over the Debye cones. Hence, the studies of local magnetic anisotropy in powder systems might now become accessible.

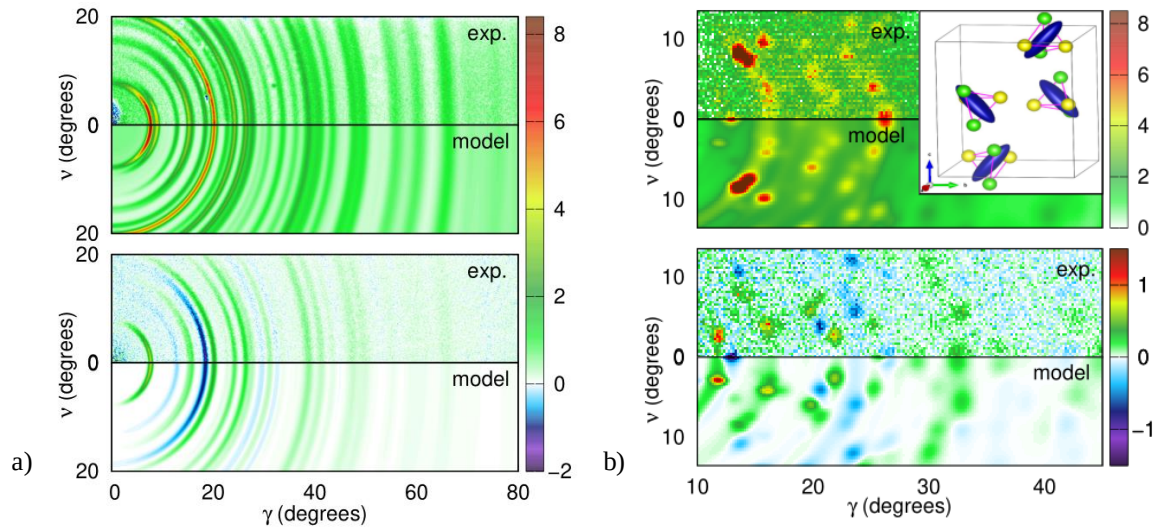


Fig. The measured and calculated flipping sum (top) and difference (bottom) 2D diffraction patterns collected on $Ho_2Ti_2O_7$ at diffractometer 5C1, T = 5K, H = 1T (a) and on $Co([(CH_3)_2N]_2CS)_2Cl_2$ at diffractometer 6T2, T = 2K, H = 5T (b). The insert shows Co magnetization ellipsoids surrounded by S (yellow) and Cl (green).

Quantum Kagome Antiferromagnets: Zn-Substituted Barlowite $Zn_xCu_{4-x}(OH)_6FBr$

Brendan Le Pennec[1], Kate Tunstain[2], Lucy Clark[2,3], Edwin Kermarrec[1], Philippe Mendels[1] and Fabrice Bert[1]

[1] *Laboratoire de Physique des Solides, University of Paris-Sud, Orsay, France*

[2] *Department of Chemistry and Materials Innovation Factory, University of Liverpool, Liverpool, United Kingdom*

[3] *Department of Physics, University of Liverpool, Liverpool, United Kingdom*

Geometrical magnetic frustration is a key ingredient to produce new exotic quantum states of matter such as Quantum Spin Liquids (QSL). A QSL is a highly entangled state which can sustain fractionalized excitations[1]. The Kagome Heisenberg AntiFerromagnet (KHAF) is one emblematic model that could host some kind of QSL state. Experimentally, the most promizing candidate is the Herbersmithite $ZnCu_3(OH)_6Cl_2$ mineral which presents a structurally perfect Kagome lattice. While the nature of the ground state is still under active debate in this compound, other materials are needed to produce experimental realization of a QSL.

We explored a new chemical realization of the KHAF model named Barlowite $Cu_4(OH)_6FBr$[2]. As Herbersmithite, Barlowite features a structurally perfect Kagome lattices decorated by S=1/2 Cu^{2+} ions (Cu1) with strong antiferromagnetic correlations ($\theta_{CW} \approx -130$K). The Kagome planes are separated by some interplane Cu^{2+} (Cu2) that are magnetically coupled with Cu1. This coupling produces a 3D magnetic structure and the compound orders magnetically at T_N=15K which hides the intrinsic physics of the Kagome planes. However nonmagnetic atom such as Zinc can susbtitute selectively the interplane Cu_2 and supress the magnetic order[3][4]. One previous study suggested the appearence of a gapped QSL state in the fully Zn substituted compound[5]. Interestingly, the spin gap seems to close by increasing the magnetic field in the sample revealing the presence of fractionalized excitations.

We performed a similar ^{19}F NMR study for few different Zn-substituted compounds and found that above x= 0.66 there is no more bulk magnetic order and the magnetic system remains dynamical at low temperature. Our NMR shift seems to behave as found in the previous study [5] but our relaxation time T_1 measurements show that the gap, if any, is opening with the magnetic field. Our results suggest that ^{19}F NMR may not probe the Kagome physics in isolation but also some remaining Cu2 due to an incomplete Zn substitution and call for a more refined analysis of the spin gap issue in Zn-Barlowite.

[1] L. Balents, Nature 464 (2010)
[2] P. Elliot and M. A. Coope, Mineralogical Magazine 74, 797 − 800(2010)
[3] D. Guterding et al., Phys. Rev. B 94, 125136 (2016)
[4] Feng et al., Phys. Rev. B 98, 155127 (2018)
[5] Feng et al., Chin. Phys. Lett. 34, 077502 (2017)

Anharmonic Magnon Excitations in Noncollinear and Charge-Ordered $RbFe^{2+}Fe^{3+}F_6$

M. Songvilay[1], E. E. Rodriguez[2], R. Lindsay[3], M. A. Green[3], H. C. Walker[4], J. A. Rodriguez-Rivera[5,6] and C. Stock[1]

[1]School of Physics and Astronomy and Centre for Science at Extreme Conditions, University of Edinburgh, Edinburgh EH9 3FD, United Kingdom

[2]Department of Chemistry and Biochemistry, University of Maryland, College Park, Maryland 20742, USA

[3]School of Physical Sciences, University of Kent, Canterbury CT2 7NH, United Kingdom

[4]ISIS Neutron and Muon Source, Rutherford Appleton Laboratory, Chilton, Didcot OX11 0QX, United Kingdom

[5]NIST Center for Neutron Research, National Institute of Standards and Technology, 100 Bureau Drive, Gaithersburg, Maryland 20899, USA

[6]Department of Materials Science, University of Maryland, College Park, Maryland 20742, USA

$RbFe^{2+}Fe^{3+}F_6$ is a charge-ordered antiferromagnet, belonging to the family of mixed-metal fluorides $AM^{2+}M^{3+}F_6$ (A = alkali metal or NH4; M is a metal). Although $RbFe^{2+}Fe^{3+}F_6$ is usually presented as a pyrochlore system [1,4], its structure can also be described as interpenetrating chains of corner-shared $Fe^{3+}F_6$ and $Fe^{2+}F_6$ octahedra, running along the b and a axes respectively. Neutron diffraction and magnetisation measurements show that this system orders below $T_N = 16$ K [1], where the spins associated to Fe^{3+} (S = 5/2) and spins associated to Fe^{2+} (S = 2) form a non collinear orthogonal structure. Moreover, the magnetic moment related to Fe^{3+} is significantly reduced in the ordered state. Inelastic neutron scattering on single crystals highlights two well separated spin wave bands due to the two charge-ordered chains. Interestingly, high resolution measurements show a broad continuum located at an energy scale of twice the lower spin wave mode, where two magnon processes are kinematically allowed. Taking into account the strong reduction of the Fe^{3+} magnetic moment, as well as the non-collinearity of the spin structure in this system, this continuum is interpreted as magnon decay, in agreement with theoretical views on non-collinear two dimensional antiferromagnets [5,6]. In this case, magnon decay is thought to arise from the interaction between the longitudinal fluctuations of the Fe^{3+} spins and the transverse excitations of Fe^{2+} spins, thanks to interchain interactions. $RbFe^{2+}Fe^{3+}F_6$ is therefore a unique example illustrating a coupling between charge and spin ordering through multi-magnon processes [7].

[1] S. W. Kim et al., Chem. Sci. 3, 741 (2012).
[2] M. V. Gorev et al., J. Solid State Chem. 237, 330 (2016).
[3] M. S. Molokeev, E. Bogdanov, S. Misyul, A. Tressaud, and I. Flerov, J. Solid State Chem. 200 (2013).
[4] N. P. Raju, J. E. Greedan, M. A. Subramanian, C. P. Adams, and T. E. Mason, Phys. Rev. B 58, 5550 (1998).
[5] A. Chernyshev and M. Zhitomirsky, Phys. Rev. Lett. 97, 207202 (2006).
[6] A. Chernyshev and M. Zhitomirsky, Phys. Rev. B 79, 174402 (2009).
[7] M Songvilay et al., Phys. Rev. Letters 121, 087201 (2018).

Couplages magnétoélectriques et multiferroiques

Multiferroïques RMn_2O_5 sous pression : Etude par diffraction de neutrons

M. Deutsch,[1, 2] W. Peng,[3] P. Foury-Leylekian,[3] V. Balédent,[3] S. Chattopadhyay,[4] M. T. Fernandez-Diaz,[5] T. C. Hansen,[5] A. Forget,[6] D. Colson,[6] M. Greenblatt,[7] M.-B. Lepetit,[8, 5] S. Petit,[2] and I. Mirebeau[2]

[1] *Université de Lorraine, CNRS, CRM2,UMR 7036, F-54000 Nancy, France*
[2] *LLB, CEA, CNRS, Université Paris-Saclay, Centre de Saclay, F-91191 Gif-sur Yvette France*
[3] *LPS, Université Paris-Sud, Université Paris-Saclay, CNRS-UMR 8502, 91405 Orsay Cedex, France*
[4] *Hochfeld-Magnetlabor Dresden (HLD-EMFL), Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, 01328 Dresden,*
[5] *Institut Laue Langevin, 71 avenue des Martyrs CS 20156, 38042 GRENOBLE Cedex 9, France*
[6] *SPEC, CEA, Université Paris-Saclay,Centre de Saclay, F-91191 Gif-sur Yvette France*
[7] *Department of Chemistry and Chemical Biology, Rutgers,the State University of New Jersey, New Jersey, USA*
[8] *Institut Néel, CNRS UPR 2940, BP 166, 38042 Grenoble Cedex 9, France*

Les composés multiferroïques suscitent un intérêt renouvelé car ils permettent d'imaginer des dispositifs futurs pour la spintronique ou le stockage de données. Le couplage entre les paramètres d'ordre magnétique et électrique est un outil prometteur pour manipuler les propriétés magnétiques par le biais d'un champ électrique ou vice versa.

Dans les composés RMn_2O_5 (R= terre-rare, Bi ou Y), la nature du couplage spin-structure a été largement débattue et deux mécanismes principaux sont généralement invoqués. L'interaction Dzyaloshinskii-Moryia inverse, généralement invoquée pour les structures magnétiques non colinéaires, et l'« échange striction » dans les structures antiferromagnétiques colinéaires. Il semble que l'un ou l'autre mécanisme peut dominer selon le composé ou la plage de température considérée. Les composés RMn_2O_5 étant frustrés, des structures magnétiques complexes sont stabilisées, qui diffèrent selon la terre-rare. De plus, ces composés subissent une cascade de transitions magnétiques lorsque l'on baisse la température, donnant lieu à une grande variété de structures magnétiques et une grande variété de périodicités (commensurable ou incommensurables) [1,2].

L'application d'une pression permet d'étudier le couplage magnétoélectrique dans les multiferroïques [3]. Le changement des distances interatomiques influence le subtil équilibre entre les interactions magnétiques frustrées, ce qui modifie la structure magnétique. La diffraction des neutrons à haute pression permet d'étudier ces changements à un niveau microscopique.

Malgré la grande diversité des phases à pression ambiante, une phase commensurable unique est observée sous pression dans de nombreux composés RMn_2O_5 (R= Y, Tb, Dy, Pr, Gd, Sm, Nd) [4,5]. Un modèle simple d'interactions permet d'expliquer qualitativement cette observation [5].

Références :

[1] Radelli *et al* J. Phys.: Condens. Matter 20 (2008) 434213
[2] Noda *et al* J. Phys.: Condens. Matter 20 (2008) 434206
[3] E. Gilioli and L. Ehm, IUCrJ 1, 590 (2014)
[4] Deutsch, M. *et al* Phys. Rev. B, 92, 060410 (2015)
Kozlenko, D.P. *et al* Phys. Rev. B 92, 134409 (2015)
Peng, W. *et al* Phys. Rev. B 96, 054418 (2017)
Peng, W. *et al* Phys. Rev. B 99, 245109 (2019)
[5] Deutsch, M. *et al*, Phys. Rev. B, 98, 024408 (2018)

Couplage magnétoélectrique statique et dynamique dans les triangles de spin frustrés

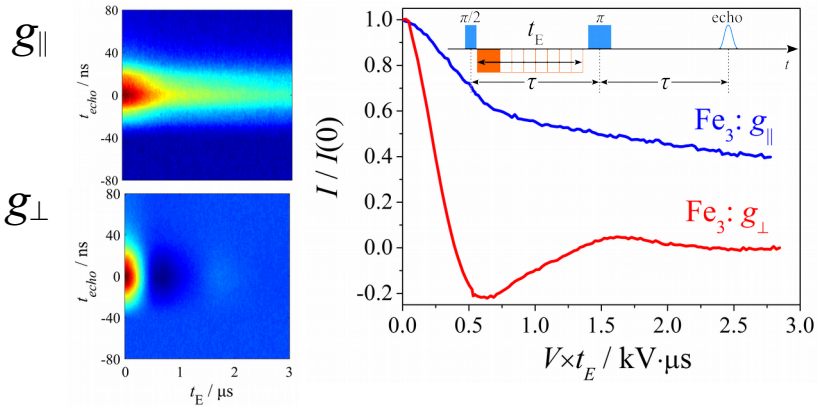
Athanassios K. Boudalis[1], Jérôme Robert[2], Nathalie Parizel[1], Philippe Turek[1],

[1]*Institut de Chimie de Strasbourg (UMR 7177, CNRS-Unistra), Université de Strasbourg, 4 rue Blaise Pascal, CS 90032, F-67081 Strasbourg, France*

[2]*Sorbonne Université, CNRS, Laboratoire Jean Perrin, LJP, F-75005 Paris, France*

Les triangles antiferromagnétiques de spins demi-entiers, ou " triangles de spin " ont récemment attiré l'attention de la communauté en raison de leurs potentialités en tant que qubits de spin, soit par l'exploitation de leur projection de spin total, soit en considérant leur chiralité de spin. Dans le cadre de cette dernière approche, il est proposé d'implémenter des qubits dépourvus de décohérence due aux interactions hyperfines, et électriquement contrôlables.[1] Le contrôle électrique d'objets magnétiques est considéré comme un développement révolutionnaire pour les applications spintroniques, et il a été décrit pour peu de classes de matériaux. Les mécanismes sous-jacents sont encore peu ou mal compris.

En utilisant la spectroscopie de Résonance Paramagnétique Électronique (RPE) nous avons récemment découvert et décrit le couplage magnétoélectrique (ME) dans le triangle moléculaire $[Fe_3O(PhCOO)_6(py)_3](ClO_4)\cdot py$ (**Fe₃**) sous champ électrique statique [2]. Dans le cadre du développement de qubits à chiralité de spin, nous nous sommes particulièrement intéressés aux paramètres qui déterminent l'intensité du couplage ME. Les transitions liées à la chiralité de spin chirales étant induites par des dipôles électriques, leur promotion devrait donc être liée à la force du couplage ME. Nous présentons ici les études réalisées par RPE impulsionnelle pour **Fe₃** et son homologue $[Cr_3O(PhCOO)_6(py)_3](ClO_4)\cdot 0.5py$ (**Cr₃**) sous champ électrique pulsé (Fig. 1). Notre analyse comparative indique des corrélations entre l'intensité du couplage ME et la force des interactions d'échange de type Dzyaloshinskii-Moriya.



[1] (a) Trif et al., *Phys. Rev. Lett.*, **2008**, *101*, 217201. (b) Trif et al., *Phys. Rev. B*, **2010**, *82*, 045429. (c) Troiani et al., *Phys. Rev. B*, **2012**, *86*, 161409.

[2] A. K. Boudalis, J. Robert, P. Turek, *Chem. Eur. J.*, **2018**, *24*, 14896.

New advances on the RMn_2O_5 multiferroics family

A.Vaunat, [1] V. Balédent,[1] S.Petit,[2] M.B. Lepetit[3] and P. Foury-Leylekian[1]
[1]*Laboratoire de Physique des Solides, CNRS, Univ. Paris-Sud, Université Paris-Saclay 91405 Orsay cedex, France*
[2]*Laboratoire Léon Brillouin, 91191 Gif sur Yvette, France*
[3]*Institut Néel, 38042 Grenoble, France*

RMn_2O_5 are a family of magneto-electric multiferroic materials, where the ferroelectricity and magnetism influence each other.
This family presents a great diversity of interesting properties originating from the existence of at least 5 different exchange interactions J_i, a magnetic frustration and the presence of two different Mn valences.
The structure is built of Mn4+O6 octahedra forming chains along the c direction and $Mn^{3+}O^5$ square-based pyramids. In the (a, b) plane, edge-sharing $Mn^{4+}O^6$ octahedra and $Mn^{3+}O^5$ pyramids form pentagons. There are one antiferromagnetic (AFM) super-exchange interaction J_5 between Mn^{3+} ions through a common oxygen, two other AFM super-exchange interactions J_3 and J_4 between Mn^{3+} and Mn^{4+} ions and two inequivalent AFM super-exchange couplings J_1 and J_2 between Mn^{4+}. The pentagonal geometry of the spins and their AFM coupling results in the magnetic frustration which leads to a complex phase diagram with incommensurate magnetic orderings notably. [1]
In addition, for members of the series with magnetic R^{3+} ions, another exchange coupling between Mn^{3+} and R^{3+} has to be considered, as well as the anisotropy term related to the R^{3+}. This leads to a more complex panel of magnetic orderings with various propagation wave vectors.
Furthermore, the presence of exotic excitations such as electromagnons is attested for many members of the series, like YMn_2O_5, $TbMn_2O_5$ and potentially $GdMn_2O_5$. [2] [3] [4]
The aim of this presentation is to give a brief overview of the properties of RMn_2O_5 and to focus on $GdMn_2O_5$ [5]. This compound presents the most prominent properties of the series with a strong electric polarization and a rich magnetic phase diagram. The presence of Gd^{3+} ions, with a null spin-orbit coupling is of particular interest to understand the magnetic phase diagram as well as the magnetic excitations. We will thus present our recent inelastic neutron measurements made at the LLB will be presented to illustrate this point.

[1] L. Chapon, «A neutron diffraction study of RMn2O5,» *IOPscience,* 2008.

[2] J.-H. Kim, «Magnetic Excitations in the Low-Temperature Ferroelectric Phase of Multiferroic YMn2O5 Using Inelastic Neutron Scattering,» *Physical Review Letter,* 2011.

[3] S. Petit, «Investigation of the electromagnon excitations in the multiferroic TbMn2O5,» *PHYSICAL REVIEW B 87, 140301(R),* 2013.

[4] A. B. Sushkov, «Electromagnons in multiferoic YMn2O5 and TbMn2O5,» *Physical Review Letter,* 2007.

[5] G. Yahia, «Experimental evidence for the microscopic mechanism of the unusual spin-induced electric polarization in GdMn2O5,» *PHYSICAL REVIEW B 97, 085128 ,* 2018.

Magnétisme et applications

High performance micro-magnets for lab-on-chip applications

Nora M. Dempsey

Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, Institut Néel, 38000 Grenoble, France

Magnetic flux sources are used to manipulate biological entities (cells, embryos, DNA, proteins…). The magnetic field gradients produced by a flux source scales up as its size is decreased, resulting in increased force per unit volume. Hard magnetic flux sources are particularly interesting for compact and / or portable applications while the force produced by soft magnetic flux sources on a target object are easily varied. There is thus great potential for using both hard and soft micro-magnets as flux sources in biology and medicine.

In this talk I will briefly review our work on the development and micro-patterning of magnetic films, in particular Rare Earth - Transition Metal hard magnetic films [1,2], and the low-cost fabrication of micro-magnet arrays based on powder-polymer composites [3] and paper-powder composites [4]. I will then give examples of bio-medical applications of the micro-magnets we have developed [5-12]. Finally, I will discuss potential uses of high intensity pulsed magnetic field sources in bio-medical applications [13, 14].

References

[1] M. Kustov, P. Laczkowski, D. Hykel, et al., J. Appl. Phys. 108 063914 (2010)
[2] D. Le Roy, Gorky Shaw, R.Haettel, et al., Mat. Today Comm. 6, 50 (2016)
[3] N. M. Dempsey, D. Le Roy et al., Appl. Phys. Lett. 104, 262401 (2014)
[4] M. Fratzl, B. S. Chang, S. Oyola-Reynoso, et al., ACS Omega 3 (2018) 2049
[5] V. Zablotskii, A. Dejneka, S. Kubinova, et al., PLoS ONE 8, e70416 (2013)
[6] O. Osman, S. Toru, F. Dumas-Bouchiat, et al., Biomicrofluidics 7, 054115 (2013)
[7] T. Brunet, A. Bouclet, P. Ahmadi, et al., Nat. Comm. 4, 2821 (2013)
[8] J. Pivetal, S. Toru et al., Chemical Sensors Actuators B 195, 581 (2014)
[9] J. Pivetal, D. Royet, G. Ciuta, et al., J. Magn. Magn. Mat., 380, 72 (2015)
[10] D. Mitrossilis, J.-C. Röper, D. Le Roy et al., Nat. Comm, 8, 13883 (2017)
[11] S. Delshadi, G.Blaire, P. Kauffmann, et al., Bioanalysis 9, 517 (2017)
[12] C. M. Bidan, M. Fratzl, A. Coullomb et al., Scientific Reports, 8 (2018) 1464
[13] D. Royet, Y. Hériveaux, J. Marchalot et al., JMMM 427, 306 (2017)
[14] M. Uzhytchak, A. Lynnyk et al., Appl. Phys. Lett. 111 (2017) 243703

Etude structurale et magnétique de composés intermétalliques à l'uranium

Pierric Lemoine[1], *Anne* Vernière[2], *Mathieu* Pasturel[1], *Bernard* Malaman[2]
[1]*Univ Rennes, CNRS, ISCR-UMR 6226, Rennes, France*
[2]*Université de Lorraine, IJL, UMR-CNRS 7198, Nancy, France*

Des études expérimentales et théoriques ont révélé que l'insertion de carbone dans les composés RCr_2Si_2 (R = élément 4*f*) conduit à une transition structurale et à une modification drastique de leur comportement magnétique.[1] En effet, tandis que les composés RCr_2Si_2 (R = Y, Sm, Gd-Lu, Th) isotypes de $ThCr_2Si_2$ (*I*4/*mmm*)[2] présentent une mise en ordre antiferromagnétique du sous-réseau de chrome à très haute température (T_N > 600 K),[3-6] les composés RCr_2Si_2C (R = Y, La-Sm, Gd-Er)[7,8] isotypes de $CeCr_2Si_2C$ (*P*4/*mmm*)[7] sont caractérisés par une mise en ordre ferromagnétique du sous-réseau R à très basse température ($T_C \leq 30$ K) et l'absence de moment magnétique porté par les atomes de chrome.[1]

Récemment, l'étude du composé UCr_2Si_2C (isotype de $CeCr_2Si_2C$) par diffraction neutronique a révélé une mise en ordre antiferromagnétique inattendue du sous-réseau de chrome à haute température (T_N > 300 K), tandis que le sous-réseau d'uranium reste non ordonné magnétiquement jusqu'à 2 K.[9] Le comportement magnétique du composé à l'uranium, inverse par rapport à celui des composés isotypes RCr_2Si_2C où R est magnétique, est discuté en relation avec la singularité de sa structure cristallographique parmi cette série de composés. De plus, les structures cristallographiques du composé UCr_2Si_2C mais aussi de deux autres composés quaternaires découverts dans le système U-Cr-Si-C (*i.e.* UCr_3Si_2C (isotype de YCr_3Si_2C, *P*6/*mmm*)[10] et $U_2Cr_3Si_2C_3$ (propre type structural, *Pbam*)[9]) sont discutées et comparées à celles des composés ternaires correspondants. Cette étude cristallochimique met en évidence l'importance de l'insertion de carbone sur la stabilité structurale de ces composés intermétalliques.

À ces motivations fondamentales, l'étude de l'existence et de l'arrangement structural de ces carbures présente un intérêt pour l'industrie nucléaire avec la compréhension des interactions entre le combustible nucléaire UC, sa gaine en SiC et un séparateur métallique (métal de transition des colonnes IVB à VIB) envisagé pour les centrales de génération IV, mais aussi entre le combustible nucléaire U_3Si_2 et les gaines en Zircaloy contenant du chrome et du carbone dans les réacteurs de recherche et d'essais.

[1] Klosek *et al.*, *Phys. Rev. B* 78 (2008) 104419. [2] Ban *et al.*, *Acta Crystallogr.* 18 (1965) 594. [3] Ijjaali *et al.*, *J. Alloys Compd.* 279 (1998) 102. [4] Moze *et al.*, *J. Alloys Compd.* 308 (2000) 60. [5] Moze *et al.*, *Eur. Phys. J. B* 36 (2003) 511. [6] Szytula *et al.*, *Solid State Commun.* 152 (2012) 1027. [7] Tang *et al.*, *J. Alloys Compd.* 299 (2000) 1. [8] Pohlkamp *et al.*, *Z. Naturforsch., B* 56 (2001) 1143. [9] Lemoine *et al.*, *Inorg. Chem.* 57 (2018) 2546. [10] Lemoine *et al.*, *J. Solid State Chem.* 201 (2013) 293.

Highly (001)-textured $La_{0.67}Sr_{0.33}MnO_3$ thin films integrated onto glass substrates using $Ca_2Nb_3O_{10}^-$ nanosheets as template layer.

Alexis Boileau[1], Marie Dallocchio[1], Florent Baudouin[2], Adrian David[1], Ulrike Lüders[1], Bernard Mercey[1], Alain Pautrat[1], Valérie Demange[2], Maryline Guilloux-Viry[2], Wilfrid Prellier[1], Arnaud Fouchet[1]

[1]NORMANDIE UNIV, ENSICAEN, UNICAEN, CNRS, CRISMAT, 14000 CAEN, France

[2] Univ Rennes, CNRS, ISCR – UMR 6226, F-35000 Rennes, France

$La_{0.67}Sr_{0.33}MnO_3$ (LSMO) thin films have been deposited by pulsed laser deposition onto glass substrates (GS) coated with $Ca_2Nb_3O_{10}^-$ nanosheets (NS). NS have been prepared by exfoliation process of $KCa_2Nb_3O_{10}$ powder and deposited onto GS using the Langmuir-Blodgett method. X-ray diffraction and Electron backscatter diffraction mapping confirm the local epitaxial stabilization of LSMO on each NS leading to a strong out-of-plane (001) texture for the entire LSMO film, whereas the growth of LSMO films on pristine substrates exhibit a non-textured polycrystalline phase. The growth temperature was also investigated and demonstrates that the properties of LSMO film deposited on NS at 550°C are close to those the 650°C one, whereas a strong degradation of the LSMO crystalline structure is observed without NS. Transport and magnetism measurements have shown that LSMO films grown on NS coated GS exhibit physical properties fairly close to those of a monocrystalline LSMO film deposited on (001)-oriented $SrTiO_3$ substrate used as reference in this work (high magnetization and low coercivity). However, textured LSMO films on NS exhibit a rise of the Curie temperature and strong magnetoresistance at low temperature with a low field effect. In contrast, LSMO polycrystalline films have physical properties typically close to those of the bulk material. This study demonstrates the opportunity to integrate functional (001)-textured LSMO thin films of high quality on GS using a $Ca_2Nb_3O_{10}^-$ NS layer as growth template. Moreover, the magnetic properties can be tuned by the presence of NS. The use of a NS layer offers new perspectives for the integration of functional materials on any substrate at moderate temperature.

Optimization of thin film $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ magnetic field sensor

L. G. Enger[1], S. Flament[1], O. Rousseau[1], B. Guillet[1], M. Lam Chok Sing[1], S. Chaluvadi[1], V. Pierron[1], S. Lebargy[1], V. Muñoz[2], R. Guerrero[2], M. T. González[2], J. Camarero[2], L. Méchin[1]

[1]*Normandie Univ, UNICAEN, ENSICAEN, CNRS, GREYC, 14000 Caen, France*
[2]*IMDEA Nanociencia, Campus de Cantoblanco, 28049 Madrid, Spain*

ByAxon[1] is a European project funded by the Horizon 2020 Research and Innovation programme. Its goal is to develop a device that acts as a bypass for neuronal signals in regions with spinal cord injuries. To detect such signals, a magnetic field sensor can be employed, placing it near the spinal cord. This in turn sets several constraints for the sensor itself. It must be of reduced size, operate at zero or very small external biasing field and achieve low detectivity in low frequencies, while operating at body temperature (Figure 1).

I will present sensors that make use of Anisotropic Magnetoresistance properties existing in thin films of $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$, a semi-metallic ferromagnetic material below Curie temperature. Such material is a suitable candidate due to its very low intrinsic $1/f$ noise[2]. Samples are manufactured in-lab, employing Pulsed Laser Deposition, photolithography and Ion Beam Etching steps. Sensor elements are patterned in Wheatstone Bridge design and electrically characterized with a 4-probes station with temperature, magnetic field and vacuum control. Results of fabricated sample of $300pT/Hz^{1/2}$ detectivity with a 30nm thick film deposited over vicinal 4° $SrTiO_3$ (001) substrate[3] will be shown. Then, the discussion will focus on how to optimize the sensor to reach even smaller detectivities, and sense weaker magnetic fields, following two approaches: reducing sample electric noise or increase sample sensitivity.

[1] http://www.byaxon-project.eu/ FET Open 2017-2020
[2] L Méchin et al 2013 J. Phys. D: Appl. Phys.46 202001
[3] P Perna et al Adv. Funct. Mater. 2017, 27, 1700664

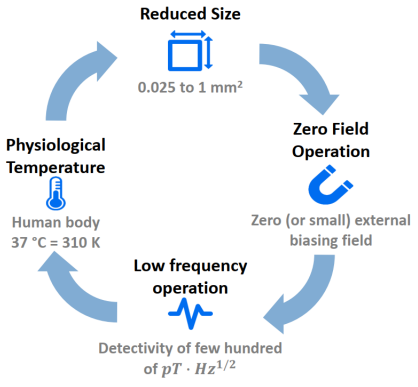


Figure 1: Sensor constraints.

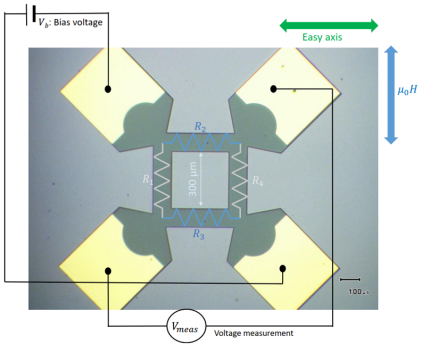


Figure 2: Fabricated sensor.

Magnétisme et matériaux

Surstoechiométrie en oxygène dans les oxydes magnétiques 1D à base de cobalt

Bernard Raveau

Dans les oxydes des métaux de transition, notamment pour M=Cu, Co, Mn, Fe, la présence de cations alcalino-terreux (A=Ca, Sr, Ba) est susceptible de favoriser des états d'oxydation supérieurs en présence de l'oxygène de l'air. Nous exposons ici le cas des oxydes 1D dérivés de Ca_3CoMnO_6 et $Sr_4Mn_2CoO_9$ étudiés pour leurs propriétés magnétiques et dont les chaines de polyèdres sont constituées d'octaèdres MnO_6 et de prismes CoO_6 joints par les faces. Sur la base des études structurales actuellement en cours (**V. Caignaert, O. Perez**) nous démontrons la possibilité d'incorporer de l'oxygène additionnel dans les oxydes stoechiométriques « Mn^{4+}-Co^{2+} » apériodiques $A_{1+x}Mn_{1-x}Co_xO_3$ et de générer ainsi une nombreuse famille de structures apériodiques $A_{1+x}Mn_{1-x}Co_xO_{3+\delta}$. Cette incorporation «d'extra oxygène» modifie non seulement le caractère apériodique de la structure (rapport du nombre de sites prismatiques au nombre de sites octaédriques), mais implique la présence de lacunes cationiques dans les sites prismatiques. Il en résulte une oxydation partielle significative de Co^{2+} en Co^{3+} qui devra aussi être prise en considération dans l'étude des propriétés magnétiques de ces matériaux.

Hybrides lamellaires magnétique et ferroélectriques: synthèse, structures, propriétés

Yanhui Wang [1], *Quentin* Evrard[1], *Emilie* Delahaye[2], *Pierre* Rabu[1], *Guillaume* Rogez[1]
[1]*IPCMS, CNRS-Université de Strasbourg, Strasbourg, France*
[2]*LCC CNRS-UPR 8241, Toulouse, France*

La versatilité chimique et structurale des hydroxydes ou oxydes lamellaires permet l'insertion et le greffage de nombreux types de molécules fonctionnelles au sein de feuillets magnétiques ou ferroélectriques ce qui est réellement prometteur pour générer une multifonctionnalité. De nombreuses propriétés peuvent être exploitées telles que conductivité, luminescence, chiralité, magnétisme, électro-activité, catalyse etc. De plus, ces fonctionnalités peuvent être facilement modulées en changeant la structure hôte ou les espèces insérées. Cette chimie "Lego©" semble très appropriée, et nous avons obtenus de nombreux systèmes magnétiques (2D-3D),[1] magnéto-luminescents,[2, 3] et plus récemment magnéto-électriques.[4] Cependant, un meilleur contrôle a priori de la synthèse, limitant la « sérendipité » de l'approche, et une connaissance précise des structures de ces édifices hybrides est nécessaire pour aider à la compréhension des propriétés de ces nouveaux systèmes élaborés à partir de briques prédéfinies.

Nous présenterons nos résultats récents concernant les hydroxydes et oxydes hybrides lamellaires magnétiques et multifonctionnels en focalisant sur la synthèse et la compréhension des mécanismes d'insertion et de greffage permettant d'élargir le panel d'espèces moléculaires greffables dans l'espace inter lamellaire dans des conditions d'activation variées.[4-6] Nous décrirons aussi les techniques et les procédures de caractérisation adaptées telles que microscopie électronique (MEB & MET, tomographie), diffraction des rayons X (Poudre et analyse de Fourier 1D de la densité électronique dans la direction de l'empilement des feuillets, analyse PDF) mises en œuvre pour préciser au mieux les propriétés structurales de ces matériaux hybrides. Ces résultats permettent une meilleure compréhension des relations entre synthèse, structure et propriétés de ces phases, et une approche plus rationnelle de leur conception.

1. P. Rabu, E. Delahaye and G. Rogez, *Nanotechnology Reviews*, 2015, **4**, 557–580.
2. E. Delahaye, S. Eyele-Mezui, M. Diop, C. Leuvrey, P. Rabu and G. Rogez, *Dalton Trans.*, 2010, **39**, 10577-10580.
3. P. Farger, C. Leuvrey, M. Gallart, P. Gilliot, G. Rogez, P. Rabu and E. Delahaye, *Magnetochemistry*, 2017, **3**, 1.
4. Q. Evrard, Z. Chaker, M. Roger, C. M. Sevrain, E. Delahaye, M. Gallart, P. Gilliot, C. Leuvrey, J.-M. Rueff, P. Rabu, C. Massobrio, M. Boero, A. Pautrat, P.-A. Jaffrès, G. Ori and G. Rogez, *Adv.Func.Mater.*, 2017, **27**, 1703576-n/a.
5. Q. Evrard, C. Leuvrey, P. Farger, E. Delahaye, P. Rabu, G. Taupier, K. D. Dorkenoo, J.-M. Rueff, N. Barrier, O. Pérez and G. Rogez, *Crystal Growth & Design*, 2018, **18**, 1809-1817.
6. Y. Wang, C. Leuvrey, E. Delahaye, F. Leroux, P. Rabu, C. Taviot-Guého and G. Rogez, *J. Solid State Chem.*, 2019, **269**, 532-539.

Epsilon-iron as a spin-smectic state

Blair W. Lebert[1,2], Tommaso Gorni[1], Michele Casula[1], Stefan Klotz[1], François Baudelet[2], James M. Ablett[2], Thomas C. Hansen[3], Amélie Juhin[1], Alain Polian[1,2], Pascal Munsch[1], Gilles Le Marchand[4], Zailan Zhang[1], Jean-Pascal Rueff[2,5], Matteo d'Astuto[2,6]

[1] *IMPMC, UMR CNRS 7590, Sorbonne Universités-UPMC University, MNHN, 4 Place Jussieu, F-75005 Paris, France*
[2] *Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, BP-48 Saint-Aubin, 91192 Gif-sur-Yvette, France*
[3] *Institut Laue-Langevin, Grenoble, France*
[4] *IGDR, UMR 6290 CNRS -UR1, Campus Santé de Villejean, Faculté de Médecine, 2 Avenue du Professeur Léon Bernard, 35043 Rennes Cedex*
[5] *Sorbonne Université, CNRS, Laboratoire de Chimie Physique - Matière et Rayonnement, LCPMR, 75005 Paris, France*
[6] *Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, Institut Néel, 38000 Grenoble, France*

Iron's alpha-epsilon transition, induced by hydrostatic compression around 13 GPa, marks the passage from the well-known bcc, ferromagnetic alpha-phase, to the more elusive hcp epsilon-phase, whose magnetic properties have been object of study and debate for several decades, their interest spanning from geophysics to the unconventional superconducting state arising at low temperatures. The experimental evidence provided so far has proven to be difficult to reconcile within a single picture and has left room to different theoretical interpretations, ranging from a perfect paramagnet to a long-range ordered antiferromagnetic state. Here we discuss some new experimental results of x-ray emission spectroscopy and neutron powder diffraction, which find appreciable local magnetic moments, but no magnetic long-range order until very low temperatures (≈ 2 k) in epsilon-iron. We propose an interpretation based on first-principles calculations, which reveal a 'spin-smectic' state lower in energy than previous results. This state forms antiferromagnetic bi-layers separated by null spin bilayers, which allows a complete relaxation of the inherent frustration of antiferromagnetism on a hexagonal close-packed lattice. The magnetic bilayers are likely orientationally disordered, owing to the soft interlayer excitations and the near-degeneracy with other smectic phases. The spin-smectic phase may shed some light on the aforementioned contradictions in high-pressure iron and could be integral to explaining its puzzling superconductivity [1].

[1] B.W. Lebert, T. Gorni, et al., *PNAS*, in press (2019) [arXiv:1903.04792].

Magnétisme : théorie et modélisation

Théorie et Modélisation

Ludovic Jaubert[1]

[1] *CNRS, Université de Bordeaux, LOMA, UMR 5798, 33400 Talence, France*

De nombreuses sondes expérimentales sont disponibles pour étudier les matériaux magnétiques, que ce soit au niveau macroscopique (chaleur spécifique, SQUID ...) ou microscopique (diffraction de neutron, μSR, RMN ...). Cette diversité de techniques offre autant d'angles d'approche complémentaires pour modéliser les propriétés du matériau et construire sa théorie. Mais il n'existe pas une méthode théorique unique capable d'englober tous les systèmes, et de se comparer à toutes les sondes expérimentales. Ces dernières années, il y a même eu un développement important de nouvelles approches, notamment numériques.

Dans cette présentation, nous allons donner une brève revue de méthodes théoriques en magnétisme. En particulier, nous allons discuter comment celles-ci sont utilisées pour modéliser et décrire les expériences ; quelles sont leurs avantages et leurs limitations. Cette discussion sera illustrée par des exemples concrets de composés, pris souvent dans le cadre du magnétisme frustré qui offre un riche éventail de problèmes. En conclusion, nous donnerons également quelques pistes vers lesquelles l'intelligence artificielle pourrait nous être utile.

Theoretical and experimental study of magneto elastic interactions in two antiferromagnetic systems

Marcelo Jaime [1], Guillaume Radkte [2], Myron Salomon [3], Diana Vaclavkova [4], Marek Potemski [4], Clément Faugeras [4], and Andrés Saúl [5]

[1] *Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, USA*

[2] *IMPMC Université Pierre et Marie Curie, CNRS, Paris, France*

[3] *Department of Physics, The University of Texas at Dallas, Richardson, USA*

[4] *LNCMI - CNRS, BP 166, 38042 Grenoble, France*

[5] *CINaM Université Aix-Marseille/CNRS Marseille, France*

The first system is the Shastry-Sutherland compound $SrCu_2(BO_3)_2$ where the magnetically active Cu^{2+} ions form a spin-1/2 2D arrangement of mutually orthogonal dimers where the nearest-neighbor (intradimer) and next-nearest-neighbor (interdimer) exchange integrals J and J' are both positive leading to frustrated antiferromagnetic (AFM) interactions. The signature of the frustration is the presence of jumps and plateaus in the magnetization vs magnetic field curves. The interesting point is that the macroscopic deformation vs magnetic field also show jumps and plateaus mimicking the magnetization. Our density functional-based calculations have shown that the driving force behind the magnetoelastic coupling is the CuOCu superexchange angle that, due to the orthogonal Cu^{2+} dimers acting as pantographs, can shrink significantly (0.44%) with minute (0.01%) variations in the lattice parameters. As these atomic displacements can be associated to a Raman-active optical mode, I will also discuss recent Raman experiments performed under applied magnetic fields up to 45 T.

The second system is $MnPS_3$ is formed by the stacking along the c axis of PS-Mn-PS sandwiches. The Mn^{2+} atoms form a distorted spin-5/2 honeycomb lattice and the S atoms two distorted triangular lattices. Raman experiments versus temperature show a red shift of the Raman active modes at 110 and 155 cm^{-1}. Density Functional Theory calculations have been performed to estimate the effective exchange interactions and calculate the Raman active phonon modes. From our calculations, we conclude that the peculiar behavior with temperature of the two low energy phonon modes can be explained by the symmetry of their corresponding normal coordinates which involve the virtual modification of the super-exchange angles associated with the leading AFM interactions.

Quantum Spin Superfluid from Bose-Einstein Condensation of Spinons in Pyrochlore Spin Ice

Imam Makhfudz[1]

[1] *Department of Electrical Engineering, 17 August 1945 University, 45 Semolowaru Street, Surabaya, East Java 60118, Indonesia*

PACS 75.10.Kt – Quantum spin liquids, valence bond phases and related phenomena
PACS 75.10.Jm – Quantized spin models, including quantum spin frustration
PACS 75.10.Hk – Classical spin models

Abstract – Quantum spin ice in pyrochlore lattice exemplifies three-dimensional frustrated spin systems. In existing studies, Bose-Einstein condensation of bosonic spinons gives rise to magnetically ordered ground state. A truly liquid quantum spin superfluid state that manifests a deconfined Higgs condensate of spinons is demonstrated. This state is shown to occur in the fully antiferromagnetic case of the non-Kramers quantum spin ice with a fluctuation-induced first-order quantum phase transition from the $U(1)$ spin liquid to the spin superfluid. The spin superfluid density jump is obtained analytically [1].

REFERENCES

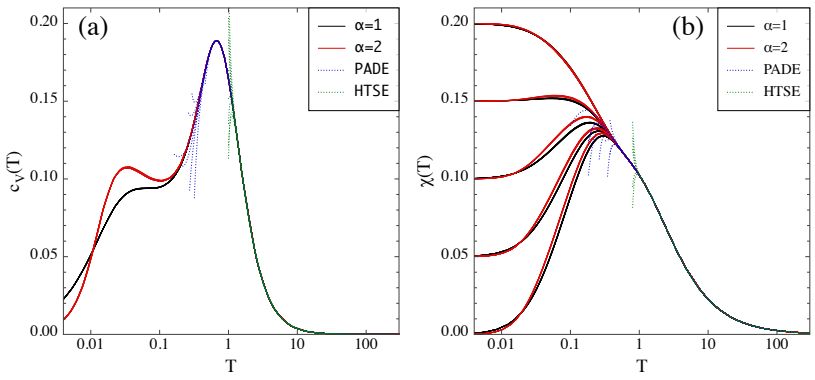
[1] I. Makhfudz, Europhysics Letters 123, 67002 (2018).

Effect of perturbations on the kagome $S = 1/2$ antiferromagnet at all temperatures

Bernard BERNU[1], Laurent PIERRE[2], Karim ESSAFI[1], Laura MESSIO[1]

[1] *Sorbonne Université, CNRS, Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée, LPTMC, F-75005 Paris, France*
[2] *Paris X, Nanterre, France*

The ground state of the $S = 1/2$ kagome Heisenberg antiferromagnet is now recognized as a spin liquid. But its precise nature remains unsettled, even if more and more clues point towards a gapless spin liquid. With this hypothesis in mind, we use high temperature series expansions (HTSE) to propose an evolution of the specific heat c_V and of the magnetic susceptibility χ with respect to temperature T. HTSE are extrapolated over the full range of T using an improved entropy method. Using optimized algorithms, we extend the HTSE up to unprecedented orders (20 in β) and calculate the coefficients as exact functions of the magnetic field. We calculate c_V and χ when various terms perturb the Heisenberg Hamiltonian: magnetic field, Ising anisotropy, Dzyaloshinskii-Moriya interactions, second and first neighbors interactions, and randomly distributed site vacancies. The possibility of a large zero temperature susceptibility is discussed.



Specific heat c_V and magnetic susceptibility: raw series (order 20), their Padé approximants and the entropy method results. $\alpha = 1$ or 2 indicates two possible low temperature behaviors of $c_V \sim T^\alpha$. Note that the $\chi(T = 0)$ value, the ground state energy e_0 and α are input parameters furnished to use the entropy method.

Poster

Dipôles magnétiques à champ ajustable

Pierre Bernstein, Jacques Noudem et Yiteng Xing
CRISMAT, Université de Caen, Caen, France

La focalisation du faisceau électronique dans les synchrotrons s'effectue avec des dipôles et des quadrupôles magnétiques. Pour ajuster la finesse du faisceau il faut régler aussi précisément que possible le champ dans leurs entrefers. Le champ étant actuellement créé par des aimants permanents, on fait varier mécaniquement la largeur de l'entrefer du circuit magnétique à cette fin. Nous présentons ici la démonstration de principe d'un dipôle statique associant aimant permanents, noyaux de fer doux et un disque supraconducteur à haute température critique. Le supraconducteur est aimanté par des pulses de courant appliqués à une bobine en fil de Litz (voir figure). Suivant la polarité des pulses, le champ dans l'entrefer peut varier de ±10% autour de sa valeur initiale. De plus, en envoyant une séquence adéquate de pulses dans la bobine, on peut ajuster le champ à la valeur désirée. Les conditions de fonctionnement de ce dispositif et les résultats obtenus seront exposés dans le poster.

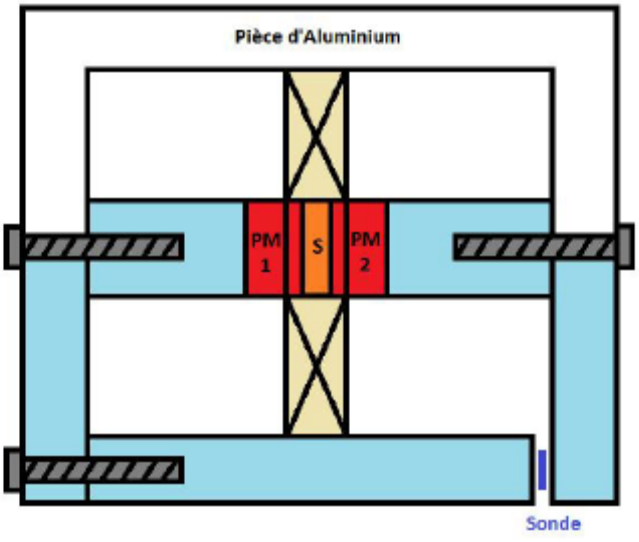


Schéma du dipôle magnétique à champ ajustable étudié

Fragmentation quantique dans les systèmes magnétiques frustrés

M.Léger[1], E.Lhotel[1], S.Petit[2] et M.Ciomaga Hatnean[3]
[1]*Institut Néel - CNRS, Grenoble, France*
[2]*Laboratoire Léon Brillouin – CEA Saclay, Gif sur Yvette, France*
[3]*University of Warwick – Coventry, United Kingdom*

Dans les composés pyrochlores, systèmes magnétiques frustrés dans lesquels les atomes magnétiques sont situés sur des tétraèdres connectés par leurs sommets, un état particulier, l'état glace de spins peut être stabilisé. Il est constitué de configurations magnétiques dégénérées respectant la loi : chaque tétraèdre doit porter deux spins entrants et deux spins sortants. Cet état peut être décrit par un électromagnétisme émergent. Ce cadre théorique a permis de prévoir l'existence de phases fragmentées dans lesquelles le moment magnétique se décompose entre une composante ordonnée et une composante présentant des corrélations de type glace de spins.

Dans le composé pyrochlore $Nd_2Zr_2O_7$, une température de Curie positive est déduite de la susceptibilité magnétique. Ceci indique l'existence d'interactions ferromagnétiques, qui devraient stabiliser un état fondamental glace de spins. Expérimentalement un ordre antiferromagnétique partiel est observé, avec une structure où tous les spins sont entrants ou sortants selon le tétraèdre considéré, appelée "all in – all out" [1]. En mesurant les excitations du système via des expériences de temps de vol des neutrons (IN5 – ILL), des excitations singulières sont observées, composées d'un mode plat et d'un mode dispersif [2]. Ces excitations ont pu être interprétées par un mécanisme de fragmentation quantique dans le cadre d'une théorie développée par O.Benton [3]. Cette théorie sert également de cadre pour tenter de déterminer un Hamiltonien qui pourrait expliquer l'ensemble des phénomènes physiques observés expérimentalement.

Afin de mieux comprendre la fragmentation quantique et l'état fondamental observé, il est intéressant de regarder les effets qu'un défaut pourrait produire. Dans le cadre de ma thèse, j'étudie l'influence de différentes substitutions : titane à la place de zirconium provoquant un changement dans les interactions magnétiques et lanthane à la place du néodyme afin de réduire le nombre d'atomes magnétiques.

Mon poster présente les résultats obtenus dans l'étude menée sur un échantillon dopé lors d'expériences de diffusion de neutrons effectuées au LLB et à l'ILL ainsi que des mesures sur magnétomètrie à très basse température réalisées à l'Institut Néel. Les mesures mettent en évidence une augmentation de la température critique et du moment ordonné. Ces résultats montrent que la substitution renforce les interactions en plus de modifier la stabilité du domaine de l'état fragmenté.

[1] E.Lhotel et al, Physical Review Letters 115, 197202 (2015)

[2] S. Petit et al, Nature Physics 12, 746 (2016)

[3] O.Benton, Physical Review B 94, 104430 (2016)

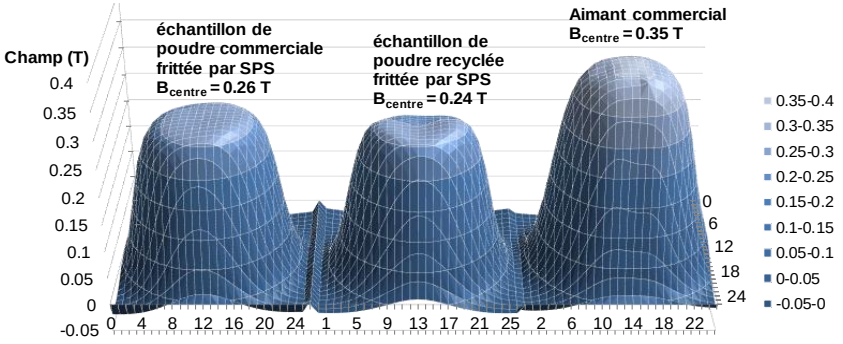
Frittage SPS appliqué à des poudres d'aimants REFeB recyclées

David Souriou[1], *Pierre* Bernstein[1], *Jacques* Noudem[1] *Christelle* Bilot[1], *Jérôme* Lecourt[1], *Sylvain* Marinel[1], *Sophie* Rivoirard[2]

[1]*Normandie Univ, ENSICAEN, UNICAEN, CNRS, CRISMAT, Caen, France*

[2] *Université Grenoble Alpes, CNRS, Institut Néel, Grenoble, France.*

Les aimants en terres rares de type $RE_2Fe_{14}B$ (RE = Nd, Pr…) sont utilisés dans les moteurs électriques, disques durs et accélérateurs magnétiques en raison de leurs fortes propriétés magnétiques. Les aimants en fin de vie s'entassent dans les gisements urbains alors que les demandes pour ce type d'aimant sont croissantes et soutenues (+9% par an). Il apparaît intéressant de recycler ces matériaux afin d'élaborer des aimants de seconde vie tout en assurant l'indépendance pour l'approvisionnement pour ce type d'aimant. Nous présentons ici les travaux de recherche menées dans le cadre d'un projet ANR. Une série d'essais de faisabilité de frittage par Spark Plasma Sintering (SPS) sont réalisés à l'aide d'une poudre commerciale de $RE_2Fe_{14}B$ (REFB). Les propriétés magnétiques des échantillons ainsi que leur composition et microstructure après frittage sont caractérisées afin de comprendre les mécanismes intervenant pendant la densification du matériau. L'ensemble des résultats sont corrélés aux conditions de frittage expérimentées afin de déterminer le cycle permettant une optimisation des propriétés magnétiques telles que l'aimantation à saturation Ms, l'aimantation rémanente Mr, le champ coercitif Hc et le produit magnétique BH_{max}. Ce cycle est alors appliqué à une poudre issue du recyclage. L'ensemble des résultats et propriétés obtenues lors de ce travail de recherche seront exposés et discutés dans le poster. Des cartographies de champ magnétique obtenues par balayage de la surface des échantillons à l'aide d'une sonde de Hall seront également présentées.



Cartographie de champ magnétique d'échantillons REFeB frittés par SPS comparée à celle d'un aimant commercial.

From spin-fluctuations to ferromagnetism in the U_3TGe_5 family (T = transition element from columns 4 to 6)

Chantal Moussa[1], Nicolas Brisset[1], Grzegorz Chajewski[2], M. Samsel-Czekała[2], P. Boulet[3], H. Noël[1], M. Pasturel[1], A. Pikul[2], O. Tougait[1,4]

[1] *Univ Rennes, CNRS, ISCR-UMR6226, Rennes, France*

[2] *Inst. of Low Temperature and Structure Research, Wrocław, Poland*

[3] *IJL, UMR CNRS7198, Université de Lorraine, Nancy, France*

[4] *Univ. Lille, CNRS, UMR8181 - UCCS, Lille, France*

The U_3TGe_5 (T = Ti, V, Cr, Mn, Zr, Nb, Mo, Hf, Ta, W) compounds have been found to crystallize in the hexagonal anti-$CuHf_5Sn_3$ structure type ($P6_3/mcm$ space-group, Z = 2, a ≃8.5 Å, c≃5.7 Å, V≃360 Å^3) [1]. In this crystal structure, the uranium atoms are forming zig-zag chains which were found of uttermost importance for coexistence of superconductivity and ferromagnetism in uranium germanides [2]. Within the chains, the U-U interatomic distances ($3.42 \leq d_{U-U} \leq 3.52$ Å) and angles (≃111°) are intermediate between those encountered in the binary UGe_2 and the ternaries UT'Ge (T'=Co,Rh).

Investigation of the magnetic properties of the three purest samples, namely for T = Ti, V and Cr, confirms the ferromagnetic (FM) ordering of U_3TiGe_5 below T_C=73 K [3] and reveals (i) an antiferromagnetic (AFM) ordering in U_3VGe_5 below T_N=25 K and a metamagnetic transition (MT) between 1 and 3 T at 2 K, and (ii) a paramagnetic (PM) behaviour for U_3CrGe_5. Specific heat and electrical resistivity measurements confirm the magnetic ordering for T = Ti and V. Both the shape of ρ(T) and an upturn of the C_p/T=f(T^2) curve at low temperature for U_3CrGe_5 are characteristic of a spin fluctuating (SF) system.

Ab initio band structure calculations of these three U_3TGe_5 compounds were performed, showing nested Fermi surface which may be associated to the presence of Dirac cones for the magnetically ordered phases, *i.e.* for T=Ti, V.

Preliminary measurements on the other members of this isostructural family tend to confirm the strong dependence of the physical properties on the column of the transition metal, with FM ordering at elevated T_C for T = Zr, Hf, AFM + MT at intermediate T_N for T = Nb and PM+SF behaviour for T = Mo.

[1] C. Moussa *et al.*, J. Solid State Chem., 277 (2019) 260-270.

[2] D. Aoki *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn., 83 (2014) 061011.

[3] P. Boulet *et al.*, J. Solid State Chem., 144 (1999) 311-317.

Magneto-transport properties under high pressure of V_5S_8 single crysitals

H. YANG, Y. KLEIN, A. GAUZZI

Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux et de Cosmochimie (IMPMC) UMR7590, Sorbonne Université/CNRS/Museum National d'Histoire Naturelle, 4 place Jussieu, 75005 Paris, France

V_5S_8 is an antiferromagnet with the Néel temperature at about 32K[1] and has a monoclinic structure derived from a metal-deficient NiAs-type structure. This material can also be relabeled by $V_{0.25}VS_2$ to show the V atoms intercalated between the VS_2 layers. The NMR and neutron diffraction measurements show that the intercalated V atoms are responsible for its magnetism. However the origin of the antiferromagnetism remains unclear, because itinerant magnetism and localized magnetism characters are found in different types of experimentals.

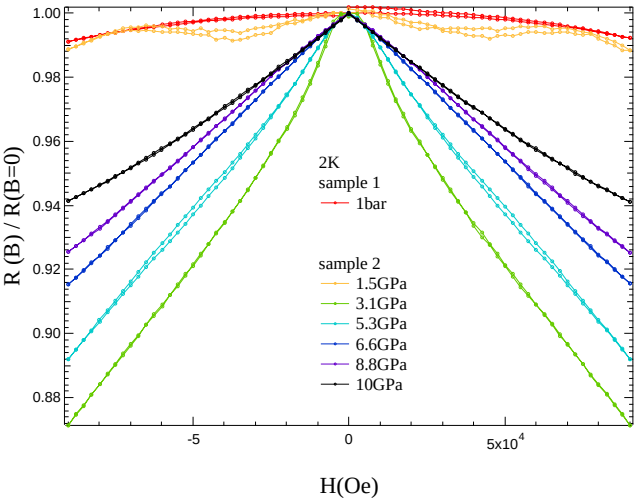


FIG.1 Magneto-resistance of V_5S_8 under high pressure at 2K

To further investigate the magnetic properties of V_5S_8 single crystals, we have carried out a series of magneto-transport measurements under high pressure. The experimental results show that the antiferromagnetic ordering is suppressed by high pressure. We also observed a large negative magneto-resistance under high pressure and at low temperature, which might be explained by Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida interaction.

Ref

[1] A.B. De Vries and C.Haas, J. Phys. Chem. Solid. 34 (1973) 651

[2] Nozaki, H. Ishizawa, Y. Saeki, M. Nakahira, M. Phys. Lett. A 1975, 54, 29−30.

[3] Kitaoka, Y.; Yasuoka, H.. J. Phys. Soc. Jpn. 1980, 48, 1949−1956.

[4] Nishihara, H.; Yasuoka, H.; Oka, Y.; Kosuge, K.; Kachi, S. J. Phys. Soc. Jpn. 1977, 42, 787−790.

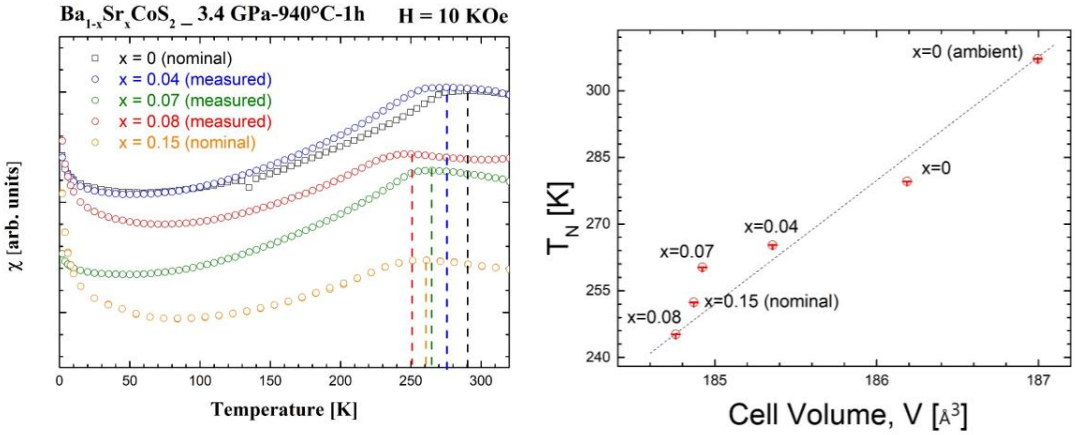
Mechanism of MIT in the quasi-2D $BaCoS_2$ system: effect of chemical pressure and electronic doping

Haneen Abushammala[1], *P. Toulemonde*[2], *Yannick Klein*[1], *Andrea Gauzzi*[1]
[1]*IMPMC, Sorbonne Université, CNRS, MNHN, 4, place Jussieu, 75005 Paris, France*
[2]*Institut Néel, 25 Avenue des Martyrs, 38042 Grenoble, France*

The 2D $BaCo_{1-x}Ni_xS_2$ (BCNS) system has attracted a great deal of interest due to a metal-insulator transition (MIT) controlled by doping, similar to that found in cuprates and Fe-based superconductors. In BCNS, doping is achieved by partially substituting Co for Ni in a peculiar network of puckered edge-sharing $(Co/Ni)S_5$ pyramids forming a square lattice. The metallic phase, stable for $x > 0.22$, is paramagnetic, while the insulating one exhibits an antiferromagnetic (AFM) order of the Co/Ni ions in the *ab* plane at low temperature. In spite of several studies, the mechanism of the MIT remains little understood. Recently, it was found that the semimetallic endmember (x=1) displays a unique electronic structure characterised by Dirac nodes arising from the non symmorphic crystal symmetry. The question arises whether this property is preserved across the MIT. In order to address this issue, we have attempted to stabilise the semimetallic phase by applying chemical pressure to the insulating phase (x = 0). Indeed, chemical pressure is expected to increase the bandwidth without introducing any disorder in the electronically active Co site.

To the best of our knowledge, only aliovalent substitution at the Ba site has been hitherto reported. With such substitutions, one can not separate the effect of the bandwidth control parameter from that of the filling control parameters.

In this context, we have synthesised $Ba_{1-x}Sr_xCoS_2$ using high pressure. Different substitution levels (x) have been tested in order to determine the solubility limit of Sr. We found that the unit cell volume of $BaCoS_2$ is progressively reduced with x. Concomitant to this effect, a weakening of AFM order upon chemical pressure was observed and the magnetic order temperature unexpectedly decreases from the value, $T_N = 300$ K for x = 0, down to $T_N = 240$ K for x = 0.08.



Metamagnetic transitions versus magnetocrystalline anisotropy in novel cobalt arsenates with low-D Co^{2+} units

Bastien Leclercq[1], *Houria* Kabbour[1], *Alain* Pautrat[2], *Claire* Colin[3], *Angel* Arevalo-Lopez[1], *Olivier* Mentré[1]

[1] *UCCS, UMR-CNRS 8181, Université Lille–ENSCL, Villeneuve d'Ascq, France*
[2] *Crismat, Caen, France*
[3] *Institut Néel, Grenoble, France*

The large SOC and single-ion anisotropy of Co^{2+} is beneficial to design Ising-ferromagnetic one dimensional (1D) units in chains. Clearly in the field of hybrid molecular magnets, this ion plays a central role because strong magnetocrystalline anisotropy together with magnetic easy-axis are required for realizing single chain magnets, i.e. systems with strongly decoupled 1D-units and slow spin dynamics. We investigated original cobalt arsenates based on Co^{2+} octahedral edge-sharing chains, where their different magnetocrystalline anisotropies induce different types of metamagnetic transition, spin-flop versus spin-flip. In all compounds, a strong local anisotropy (Ising spins) is favored by the spin-orbit coupling present in the CoO_6 octahedra while ferromagnetic (FM) exchanges predominate in the chains. $Co_2(As_2O_7)$, $2H_2O$ (1) orders antiferromagnetically below T_N = 6.7 K. The magnetic structure is a non-collinear antiferromagnetic spin arrangement along the zigzag chains with DFT calculations imply frustrated chains and weakened anisotropy. A metamagnetic transition suggests a spin-flop process above μ_0H = 3.2 T. On the contrary, $BaCo_2As_2O_8.2H_2O$ (2) linear chains are arranged in disconnected layers, with only inter-chain ferromagnetic exchanges and therefore increasing its magnetocrystalline anisotropy. The magnetic structure is collinear with a magnetic easy axis that allows a spin-flop to a sharp spin-flip transition below T_N= 15.1 K and above μ_0H = 6.2 T.

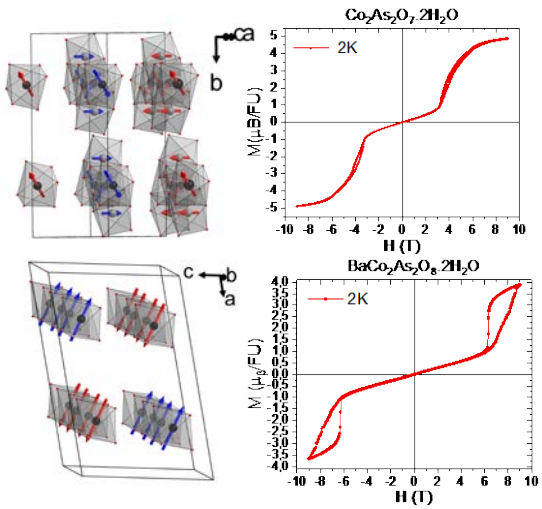


Figure 1 : Refined magnetic structure and related spin flop vs spin flip magnetization response.

Propriétés magnétiques de nanoparticules de $MnWO_4$ de composition, cristallinité et morphologie contrôlées

Pascaline Patureau[1], *Philippe* Deniard[1], *Luc* Lajaunie[1,2], *Nicolas* Stephant[1], *Bernard* Humbert[1], *Rémi* Dessapt[1], *Christophe* Payen[1]

[1]*Institut des Matériaux Jean Rouxel (IMN), Université de Nantes, CNRS, 2 rue de la Houssinière, BP 32229, 44322 Nantes cedex 3, France*

[2] *Universidad de Cádiz, España*

$MnWO_4$ est un matériau multiferroïque de type II bien connu dans la communauté travaillant sur les magnétoélectriques massifs. Trois transitions magnétiques sont observées à T_N = 13.5 K, T_2 = 12.5 K, $T_1 \approx$ 8 K. Multiferroïcité et fort couplage magnétoélectrique sont observés entre T_1 et T_2, pour une structure magnétique AF2 incommensurable à spirale hélicoïdale de spins S=5/2 portés par les ions Mn^{2+}.

Si les propriétés magnétiques et diélectriques de $MnWO_4$ ont été très étudiées pour des monocristaux, des poudres ou des céramiques micrométriques, il y a peu de travaux concernant les propriétés magnétiques des nanoparticules de $MnWO_4$. De façon plus générale, le nombre d'études portant sur les nanoparticules de matériaux multiferroïques et sur les effets de taille de cristallite est faible si l'on considère l'intérêt potentiel d'une « miniaturisation » des multiferroïques.

Des nanoparticules de type $MnWO_4$ ont été synthétisées à l'IMN par voie hydrothermale, sous forme de bâtonnets ou de galets, puis caractérisées par différentes méthodes (analyses élémentaires et thermiques, DRX, MEB, MET, spectroscopie IR, magnétométrie). Ces nanoparticules sont hydratées et hydroxylées. Un traitement thermique court à température modérée permet d'obtenir des nano*cristallites* de composition $MnWO_4$ et de dimensions comprises entre 20 nm et 80 nm. Nous présenterons les résultats de mesures d'aimantation et de susceptibilité obtenus pour des nanoparticules non densifiées, notamment à basse température pour le suivi des transitions T_N, T_2 et T_1.

Pulsed High Magnetic Fields for Synchrotron and Neutron Applications

Fabienne Duc
fabienne.duc@lncmi.cnrs.fr

Laboratoire National des Champs Magnétiques Intenses, UPR3228
CNRS-INSA-UJF-UPS, Toulouse et Grenoble, France

Over the past years, numerous efforts have been performed to combine high magnetic fields with X-ray and neutron scattering experiments. This combination is of significant interest as it provides new opportunities for the study of magnetic materials. In this context, pulsed magnetic fields play a central role, operating in the 30-40 T range, high above superconducting magnets.
In this poster, various pulsed field magnet devices jointly developed by the LNCMI-Toulouse, the ESRF, the ILL and the CEA, Grenoble will be reviewed.

Relation structure-propriété magnétique de métallophosphonates obtenus à partir d'acides phosphoniques rigides

Jean-Michel Rueff[1], *Félicien* Beaubras[1], *Alain* Pautrat[1], *Olivier* Perez[1], *Bernard* Raveau[1], *Vincent* Caignaert[1], *Guillaume* Roger[2], *Paul-Alain* Jaffrès[3]

[1]*Normandie Univ, ENSICAEN, UNICAEN, CNRS, CRISMAT, 6 Bd du Maréchal Juin, 14050 Caen Cedex, France.*

[2]*IPCMS, UMR Unistra-CNRS 7504, 23 rue du Loess, BP 43, 67034, Strasbourg Cedex 2, France.*

[3]*Univ Brest, CEMCA UMR CNRS 6521, 6 Avenue Victor Le Gorgeu, 29238 Brest, France.*

Dans les années 1970, Alberti et Clearfield réalisèrent la synthèse et caractérisation du premier phosphonate de Zirconium. Ce travail pionnier a ouvert la voie à un nombre important d'études concernant la recherche de matériaux hybrides fonctionnels de la famille des métallophosphonates. Depuis maintenant quinze ans, le laboratoire CRISMAT développe une thématique de recherche qui concerne la synthèse est l'étude de métallophosphonates possédant des propriétés de luminescences, bactéricides ou magnétiques originales. Les matériaux sont synthétisés par voie hydrothermale à partir d'un sel inorganique, et d'une molécule organique dont l'architecture est constituée d'un ou plusieurs acides phosphoniques connectés à une plateforme rigide (hétérocycle, cycle aromatique) sur laquelle peut être greffés des groupements fonctionnels plus ou moins électronégatifs (hydroxyl : OH, halogènes : Br, I, Cl,…) ou réactifs (carboxylique : COOH). Ainsi, en jouant sur la propriété et la nature du sel inorganique ou l'architecture de la molécule il est possible d'accéder à une multitude de combinaison et donc de matériaux. Généralement obtenue sous forme de cristaux, l'étude par diffraction des rayons X sur monocristal permet d'accéder à leur structure, étape nécessaire avant toute étude permettant d'établir le lien entre structure et propriété.

Nous présenterons ici quelques architectures originales obtenues à partir d'acides phosphoniques rigides concernant cette classe de matériaux ainsi que les propriétés magnétiques correspondantes à ces architectures.

Scanning tunneling microscopy combined with high frequency: Recent devellopement and futur prospects

Marie Hervé[1], Tristan Cren[1], Christophe Brun[1], François Debontridder[1] and Pascal David[1]

[1]*Institut des Nanosciences de Paris, Sorbonne Université and CNRS-UMR7588, 75005, Paris, France*

In condensed matter systems, the investigation of low energy magnetic excitations has been carried out using resonance method such as Electron Paramagnetic Resonance (EPR), Nuclear Magnetic resonance (NMR) or Ferromagnetic Resonance (FMR) [1]. Conventional magnetic resonance techniques are based on the inductive detection of an electromagnetic signal induced by the precession of an electron's or nucleus's magnetic moment and require to investigate macroscopic systems. With the development of low dimension electronic and quantum computing, one challenge in condensed matter physics is to develop radio frequency (rf)-based resonance experiments liable to sense low energy electronic, magnetic and vibronic excitations down to the single atom / molecule limit.

A tool to investigate electronic, magnetic, as well as vibronic excitations of single molecules or atoms on [2-4] surfaces in the sub-meV range is scanning tunnelling microscopy (STM). Indeed, such excitation spectrum can be probe using conventional STM as long as the energy separation between the states is larger than $3.2k_bT$, i.e., the Fermi-Dirac broadening at finite temperature. To give an example, at a temperature of 300 mK, the STM energy resolution is about 90 µeV. It can be enhanced down to 30 µeV with the use of a superconducting tip. To go further, a possibility would be to use a resonance technique: if combined to STM, it is liable to address electronic, magnetic and vibronic excitation spectrum down to few neVs resolution at the atomic scale. Access to such an extreme energy resolution and high frequency signal in STM was a long-standing problem. Conventional STM has a natural limitation to detect high frequency signal. This is due to the bandwidth of its transimpedence amplifier used to convert tunnelling current in the pA / nA range to manageable voltage. Typical bandwidths are around several kHz which is far too low to track high frequency signal corresponding to µeV energy splitting. In this communication we will present the recent development done to improve the STM energy resolution and our future prospects at INSP.

[1] C. P. **Slichter** *Principles of Magnetic Resonance* 1996).
[2] M. F. Crommie, C. P. Lutz, and D. M. Eigler, Science **262**, 218 (1993).
[3] A. J. Heinrich, J. A. Gupta, C. P. Lutz, and D. M. Eigler, Science **306**, 466 (2004).
[4] J. K. Gimzewski, E. Stoll, and R. R. Schlittler, Surface Science **181**, 267 (1987).

Spin-lattice coupling in the quantum spin ice candidate $Tb_2Ti_2O_7$ revealed by THz spectroscopy

Y. Alexanian[1], E. Constable[2], B. Langerome[3], K. Amelin[4], C. Decorse[5], J.-B. Brubach[3], P. Roy[3], T. Rõõm[4], R. Ballou[1], J. Robert[1], V. Simonet[1], and S. deBrion[1]

[1]*Institut Néel, CNRS-Université Grenoble Alpes, Grenoble, France*
[2]*Institute of Solid State Physics, Vienna University of Technology, Vienna, Austria*
[3]*Synchrotron SOLEIL, Gif-sur-Yvette, France*
[4]*National Institute of Chemical Physics and Biophysics, Tallinn, Estonia*
[5]*ICMMO, Université Paris-Sud, Orsay, France*

In geometrically frustrated magnetism, the very nature of the ground state of $Tb_2Ti_2O_7$, has remained a long standing conundrum. In this pyrochlore material, no conventional spin-ice or long-range magnetic order is stabilized, even at very low temperatures. Quantum fluctuations are suspected of being at the origin of such an exotic quantum phase, yet so far has lacked conclusive evidence. Using high-resolution synchrotron-based terahertz spectroscopy, it has been shown that a double hybridization of crystal-field-phonon modes is present across a broad temperature range from 200 K down to 6 K [1]. This so called vibronic process affects the electronic ground state that can no longer be described solely by electronic wave functions. We present here new results under static magnetic field up to 15 T and also down to lower temperatures down to 270 mK deep into the exotic magnetic phase. These data are confronted to calculations based on a spin-lattice hamiltonian and an electromagnetic approach.

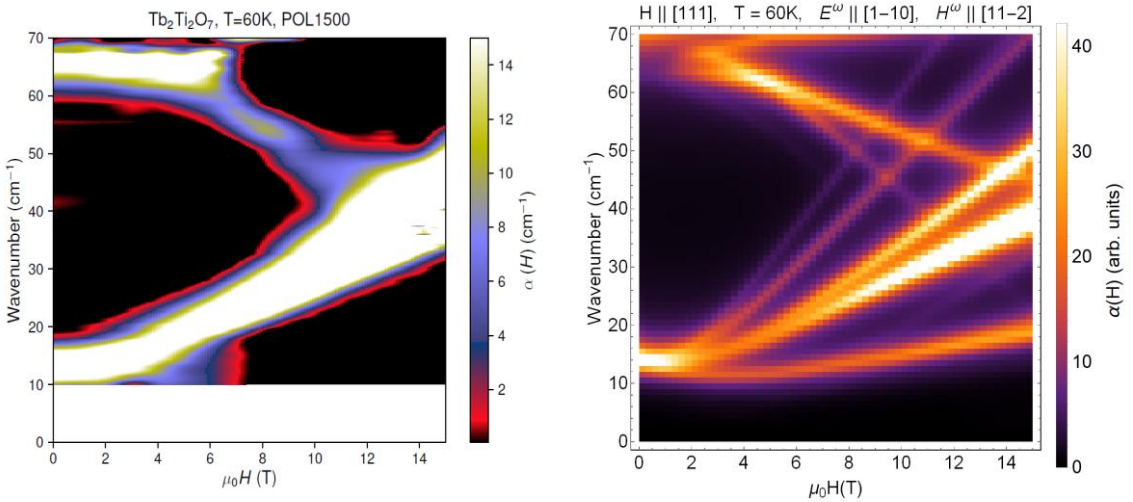


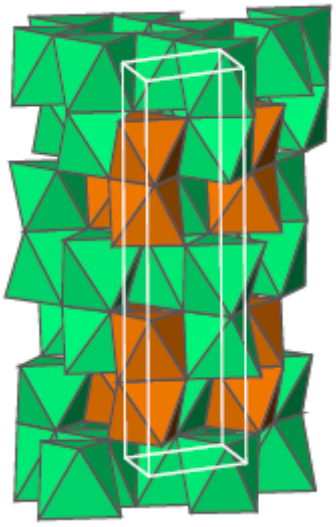
Figure 1: THz spectra of $Tb_2Ti_2O_7$ at T = 60K measured (left) and calculated (right).

[1] E. Constable et al., PRB 95, 020415(R) (2017)

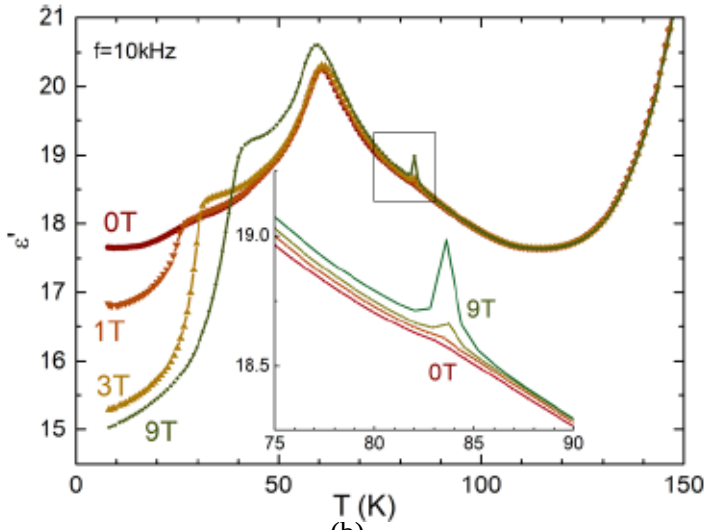
Structure-properties investigations in a new family of multiferroic compounds

E. Tailleur [1], F. Damay[1], A. Maignan[2], J.Sottmann[2], F.Fauth[3] and C. Martin [2]
[1] *Laboratoire Léon Brillouin, CEA-Saclay, Bât 563, 91191 Gif-Sur-Yvette Cedex*
[2] *CRISMAT, 6 Boulevard du Maréchal Juin, 14050 Caen Cedex*
[3] *CELLS-ALBA, Carrer de la Llum 2-26, 08290 Cerdanyola del Vallès, Barcelona, Spain*

Multiferroic materials are of particular interest due to their novel physical properties. They present a coupling between two ferroic orders such as ferroelectricity and (anti)ferromagnetism which is very appealing for applications in memory devices. In the scientific community, there is an important research effort towards novel materials with improved magnetoelectric coupling. In this context, the "429" family of compounds of formula $A_4X_2O_9$ (where A = Mn, Fe or Co and X = Nb or Ta) has been attracting a lot of attention. Indeed, varying the 3d orbitals filling and/or the size of the X cation leads to unusual and complex properties [1-5]. $Fe_4Ta_2O_9$ is probably one of the most intriguing members as it exhibits a series of low temperature magnetic transition (figure 1-b) with a rare combination of multiferroism and linear magnetoelectricity [1, 6].
The compounds reported in the literature crystalize in the $P\bar{3}c1$ space group with honeycomb lattice (figure 1-a). Their magnetic structures are still unknown or strongly debated [7, 8], and effects of the substitution of A transition metal and/or X cation have not been investigated yet. The aim of this research project is to establish the relationships between crystal and magnetic structures, and physical properties, in this family of multiferroics, depending on the nature of A and X, in order to understand the microscopic origin of multiferroicity in these compounds.



(a)



(b)

Figure 1 : (a) $Fe_4Ta_2O_9$ structure where the FeO_6 and TaO_6 octahedra are in green and orange, respectively, (b) $Fe_4Ta_2O_9$, real part of the dielectric permittivity (ε') collected at f= 10kHz as a function of T. The ε'(T)H curves have been registered for different external applied magnetic field H values indicated in the graph. Inset: enlargement of the 84K region showing the growth of the ε' peak as H increases.

[1] A. Maignan, Phys. Rev. Materials, 2 (2018) 091401 (1-5)
[2] A. Maignan, Phys. Rev. B, 97 (2018), 161106 (1-4)
[3] B. B. Liu, Material Letters, 164 (2016) 425-427
[4] L. H. Yin, Applied Physics Letters, 109 (2016) 032905 (1-5)
[5] Y. Cao, RSC Adv, 7, (2017) 13846-13850
[6] S. N. Panja, Phys. Rev. B, 98 (2018) 024410 (1-8)
[7] E. F. Bertaut, J. Phys. Chem. Solids, 21 (1961) 234-251
[8] Y. Cao, Scientific Report 7 (2017), 14079 (1-7)

The study of one-dimensional iron chalcogenides multiferroics.

W. Zheng, [1] V. Balédent,[1] M.B. Lepetit,[2, 3] P. Retailleau,[4] E. V. Elslande,[4] C. Pasquier,[1] P. Senzier,[1] A. Forget,[5] D. Colson,[5] and P. Foury-Leylekian[1]
[1]*Laboratoire de Physique des Solides, CNRS, Univ. Paris-Sud, Université Paris-Saclay 91405 Orsay cedex, France*
[2]*Institut Néel, 38042 Grenoble, France*
[3]*Institut Laue Langevin, 38000 Grenoble, France*
[4]*Institut de Chimie des Substances Naturelles, CNRS UPR 2301, Université Paris-Sud, Université Paris-Saclay, 1 avenue de la Terrasse, 91198 Gif-sur-Yvette , France.*
[5]*IRAMIS, SPEC, CEA, 91191 Gif sur Yvette, France*

In recent years, Fe-based multiferroics attract a huge interest of researchers because of its potential in technological applications and abstract problems of fundamental research. The iron chalcogenides $BaFe_2Se_3$ has been reported as multiferroic materials[1], [2]. We performed the neutron powder diffraction from 1.5 K to 300 K. The magnetic peaks appear below 175 K which is the Neal temperature. The refinement shows that the moment of Fe at 1.5 K is 2.7 μ_B. Meanwhile, a block-type antiferromagnetic structure has been confirmed. Whereas the previous publications suggested that BaFe2Se3 exhibits a CsAg2I3-type structure (Pnma space group)[1], [3]. We found that the Pmn21 should be the correct space group, which bears direct responsibility for the polarization in $BaFe_2Se_3$. In addition, the magnetic properties of $BaFe_2(Se_{0.85}Te_{0.15})_3$ have been investigated. Under ambient pressure, a superconductivity phase below 13 K has been detected by the susceptibility and resistivity measurements. The neutron powder diffraction verified the superconductivity in $BaFe_2(Se_{0.85}Te_{0.15})_3$. This is the first time that the superconductivity was identified under ambient pressure in one-dimensional iron-based materials. Based on this discovery, probably, a new family of superconductivity will be exploited.

[1] J. M. Caron, J. R. Neilson, D. C. Miller, A. Llobet, and T. M. McQueen, "Iron displacements and magnetoelastic coupling in the antiferromagnetic spin-ladder compound BaFe2Se3," *Physical Review B*, vol. 84, no. 18, p. 180409, 16 2011.
[2] P. Jain *et al.*, "Multiferroic Behavior Associated with an Order−Disorder Hydrogen Bonding Transition in Metal−Organic Frameworks (MOFs) with the Perovskite ABX3 Architecture," *Journal of the American Chemical Society*, vol. 131, no. 38, pp. 13625–13627, Sep. 2009.
[3] H. Lei, H. Ryu, A. I. Frenkel, and C. Petrovic, "Anisotropy in BaFe2Se3 single crystals with double chains of FeSe tetrahedra," *Physical Review B*, vol. 84, no. 21, p. 214511, 07 2011.

PARTICIPANTS

Abushammala Haneen	haneen.abushammala@upmc.fr	IMPMC, Paris
Alexanian Yann	yann.alexanian@neel.cnrs.fr	NEEL, Grenoble
Balédent Victor	victor.baledent@u-psud.fr	LPS, Orsay
Barrier Nicolas	nicolas.barrier@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
Beaubras Félicien	felicien.beaubras@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
Benoit-Gonin Aristée	aristee.benoit-gonin@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
Bernstein Pierre	pierre.bernstein@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
Bert Fabrice	fabrice.bert@u-psud.fr	LPS, Orsay
Boileau Alexis	alexis.boileau@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
Boudalis Athanassios	bountalis@unistra.fr	POMAM, Strasbourg
Breard Yohann	yohann.breard@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
Brun Christophe	christophe.brun@upmc.fr	Institut des Nanosciences, Paris
Burdin Sébastien	sebastien.burdin@u-bordeaux.fr	LOMA, Bordeaux
Caignaert Vincent	vincent.caignaert@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
Cazayous Maximilien	maximilien.cazayous@univ-paris-diderot.fr	MPQ, Paris
Chaboussant Gregory	gregory.chaboussant@cea.fr	LLB, Gif-sur -Yvette
Cheikh Aimane	aimane.cheikh@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
Dallocchio Marie	marie.dallocchio@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
David Adrian	adrian.david@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
Demange Valérie	valerie.demange@univ-rennes1.fr	ISCR, Rennes
Dempsey Nora M.	nora.dempsey@grenoble.cnrs.fr	NEEL, Grenoble
Deutsch Maxime	maxime.deutsch@univ-lorraine.fr	CRM2, Vandoeuvre-lès-Nancy
Duc Fabienne	fabienne.duc@lncmi.cnrs.fr	LNCMI, Toulouse
Enger Luiz	enger@ensicaen.fr	GREYC, Caen
Fouchet Arnaud	arnaud.fouchet@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
Foury Pascale	pascale.foury@u-psud.fr	LPS, Orsay
Gorni Tommaso	gornitom@gmail.com	LPEM, Paris
Greneche Jean-Marc	jean-marc.greneche@univ-lemans.fr	INP, Paris
Grenier Béatrice	grenier@ill.fr	CEA, Grenoble
Guillet Bruno	bguillet@unicaen.fr	GREYC, Caen
Guyot Herve	herve.guyot@neel.cnrs.fr	NEEL, Grenoble
Haïk Dunn Isaac	isaac.haik-dunn@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
Hamane Radia	hamaneradia_06@hotmail.fr	CRISMAT, Caen
Hardy Vincent	vincent.hardy@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
Hemme Pierre	pierre.hemme@univ-paris-diderot.fr	LMPQ, Paris

PARTICIPANTS

Hervé Marie	marie.herve@insp.upmc.fr	Institut des nanosciences de Paris
Hoez Antoine	antoine.hoez@icloud.com	CRISMAT, Caen
Janod Etienne	Etienne.Janod@cnrs-imn.fr	IMN, Nantes
Jaubert Ludovic	ludovic.jaubert@u-bordeaux.fr	LOMA, Bordeaux
Kibalin Lurii	iurii.kibalin@cea.fr	LLB, Gif-sur -Yvette
Le Pennec Brendan	brendan.le-pennec@u-psud.fr	LPS, Orsay
Léger Mélanie	melanie.leger@neel.cnrs.fr	NEEL, Grenoble
Lemoine Pierric	pierric.lemoine@univ-rennes1.fr	Institut des Sciences Chimiques de
Makhfudz Imam	imakhfudz@gmail.com	GREMAN, Tours
Martin Nicolas	nicolas.martin@cea.fr	LLB, Gif-sur-Yvette
Mechin Laurence	laurence.mechin@ensicaen.fr	GREYC, Caen
Mentré OLivier	olivier.mentre@ensc-lille.fr	UCCS, Lille
Messio Laura	laura.messio@lptmc.jussieu.fr	LPTMC, Paris
Pasturel Mathieu	mathieu.pasturel@univ-rennes1.fr	Institut des Sciences Chimiques, Rennes
Pautrat Alain	alain.pautrat@ensicaen.fr	CRISMAT,Caen
Payen Christophe	christophe.payen@cnrs-imn.fr	IMN, Nantes
Perez Olivier	olivier.perez@ensicaen.fr	CRISMAT,Caen
Petit Sylvain	sylvain.petit@cea.fr	LLB, Gif-sur-Yvette
Prellier Wilfrid	wilfrid.prellier@cnrs.fr	CRISMAT, Caen
Rabu Pierre	pierre.rabu@ipcms.unistra.fr	IPCMS, Strasbourg
Raveau Bernard	bernard.raveau@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
Rueff Jean-Michel	jean-michel.rueff@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
Rueff Jean-Pascal	jean-pascal.rueff@synchrotron-soleil.fr	SOLEIL, Saint Aubin
Ruyter Antoine	ruyter@univ-tours.fr	GREMAN, Tours
Sakly Nahed	saklynahed@yahoo.com	CRISMAT, Caen
Saul Andres	saul@cinam.univ-mrs.fr	Centre Interdisciplinaire de Nanoscience,
Scola Joseph	joseph.scola@uvsq.fr	GEMaC , Versailles
Seyfarth Gabriel	gabriel.seyfarth@grenoble.cnrs.fr	LNCMI Grenoble
Songvilay Manila	manila.songvilay@ed.ac.uk	School of Physics and Astronomy,
Souriou David	david.souriou@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
Tailleur Elodie	elodie.tailleur@cea.fr	LLB, Gif-sur-Yvette
Vaunat Antoine	antoine.vaunat@u-psud.fr	LPS, Orsay
Veillon Fabien	fabien.veillon@ensicaen.fr	CRISMAT, Caen
Viart Nathalie	viart@unistra.fr	IPCM, Strasbourg
Xing Yiteng	xingyiteng1995@gmail.com	CRISMAT, Caen
Yang Hancheng	hancheng.yang@upmc.fr	IMPMC, Paris
Zaaboul Ciham	ciham.zaaboul@u-psud.fr	LPS, Orsay
Zheng Wengen	wengen.zheng@u-psud.fr	LPS, Orsay

Jeudi 3 octobre	Vendredi 4 octobre
	Session matériaux
	8h30 - B. Raveau [Invité]
	9h05 - Pierre Rabu
	9h30 - Tommaso Gorni
Session diffusion neutronique (co-organisée avec la 2FDN)	9h55 - Pause café + posters
10h45 - *Béatrice GRENIER [Invitée]*	**Session théorie et modélisation**
11h20 - *Iurii KIBALIN*	10 :30 - - Ludovic Jaubert [Invité]
11h45 - *Brendan LE PENNEC*	11 :05 - Andres Saul
12h10 - *Manila SONGVILAY*	11h30 - Imam Makhfudz
	11h55 - Laura Messio
Déjeuner	
Session couplage magnétoélectrique et multiferroïques	Déjeuner formule buffet au RU de l'université
14h00 - Maxime DEUTSCH [Invité]	Conseil Scientifique : repas plateaux en salle de réunion du CRISMAT
14h35 - Athanassios BOUDALIS	
15h00 - A. Vaunat	
15h25- Pause café + posters	
Session Applications	
16h30 - N. M. DEMPSEY [Invité]	
17h05 - Pierric LEMOINE	
17h30 - Alexis BOILEAU	
17h55 - Luiz ENGER	
19h30 - Cocktail dinatoire, La Fabrique, centre-ville de Caen	