

## Étude théorique des systèmes magnétocaloriques avancés

**Contact :** Mike ZHITOMIRSKI DRF//INAC/PHELIQS/GT [mike.zhitomirsky@cea.fr](mailto:mike.zhitomirsky@cea.fr) 04 38 78 43 30

**Stage pouvant se poursuivre en thèse :** Oui

### Résumé :

Un champ magnétique externe affecte l'entropie d'un système magnétique et provoque des variations de température qui peuvent être utilisées pour la réfrigération magnétique. Une technologie de refroidissement alternative de ce type est de plus en plus importante aujourd'hui pour les télescopes spatiaux, les expériences en physique des particules et l'informatique quantique. A ce moment, la plupart des réfrigérateurs de démagnétisation adiabatique utilisent des sels paramagnétiques qui ont une capacité limitée pour des températures supérieures à 1 K. Récemment, deux nouvelles familles de matériaux magnétocaloriques adaptées aux applications dans la gamme de température 1-4 K ont été proposées: systèmes de spin à géométrie frustrée et aimants dipolaires. Nous envisageons d'étudier les propriétés magnétocaloriques de ces matériaux en utilisant des Monte Carlo simulations de modèles de spin réel approprié pour les matériaux connus, tel que  $Gd_3Ga_5O_{12}$  et  $GdLiF_4$ , ainsi que pour les matériaux magnétocaloriques prospectifs,  $Yb_2Ti_2O_7$  et  $Yb_3Ga_5O_{12}$ . L'étude théorique bénéficiera d'une collaboration proche avec les études expérimentales en cours à l'INAC.

### Sujet détaillé :

Les simulations informatiques jouent un rôle de plus en plus important dans la façon dont les scientifiques acquièrent des connaissances sur la Nature. Les méthodes de Monte Carlo développées au cours des 50 dernières années ont révolutionné le domaine de la Physique Statistique. Initialement utilisés pour étudier que des modèles simples idéaux, les techniques modernes de Monte Carlo peuvent être appliquées à des systèmes physiques réels. Ce projet se concentre sur l'étude théorique des propriétés magnétocaloriques pour quelques matériaux magnétiques. Parallèlement à la recherche fondamentale, cette enquête comporte une importante composante appliquée liée au domaine de la réfrigération magnétique à basse température.

La performance actuelle des réfrigérateurs de démagnétisation adiabatique est déterminée par la température de l'ordonnement du matériau réfrigérant. Par conséquent, les propriétés magnétocaloriques peuvent être améliorées en utilisant des matériaux magnétiques avec des réseaux dits frustrés, dont la géométrie empêche un simple ordre magnétique. Dans le passé, nous avons développé l'algorithme Monte Carlo hybride très efficace et l'utilisé pour étudier diverses propriétés d'aimants géométriquement frustrés. La première tâche à résoudre par un étudiant sur ce projet est de développer un code informatique pour des réseaux avec un remplissage partiel de sites magnétiques. Le code modifié sera utilisé pour étudier l'effet de la dilution non magnétique sur les propriétés magnétocaloriques en vue d'optimiser les propriétés magnétocaloriques des systèmes réels. Une étude fondamentale complémentaire sera consacrée à l'ordre de désordre' effets dans des aimants frustrés dilués, qui consiste à sélectionner des types exotiques d'ordre magnétique dans des aimants dégénérés et frustrés uniquement par le désordre structurel.

Une autre classe de solides magnétiques avec l'ordonnance faible inclut des matériaux avec des interactions d'échange réduites comme dans  $GdLiF_4$ . Pourtant, les interactions dipôle-dipôle entre les ions magnétiques sont toujours présentes et affectent les propriétés du matériau. Les matériaux de ce type ont un excellent potentiel technologique pour la réfrigération magnétique. Pour découvrir ce potentiel, il faut compétement comprendre leurs propriétés physiques de base. La tâche de l'étudiant inclut les calculs analytiques des états magnétiques basiques possibles pour un aimant dipolaire dans les champs magnétiques zéro et dans les champs magnétiques appliqués se concentrant sur  $GdLiF_4$ . En plus, les codes de Monte Carlo doivent être modifiés pour tenir compte de la propriété de longue distance des interactions dipolaires. Ceux-ci seront utilisés pour l'étude théorique des transitions de phase et des diagrammes de phase dans les aimants dipolaires des deux et trois dimensions.



INSTITUT NANOSCIENCES  
ET CRYOGÉNIE

la recherche, ressource fondamentale  
research - a fundamental resource

MEM | PHELIQS | SBT | SPINTEC | SYMMES

[inac.cea.fr](http://inac.cea.fr)

**Compétences requises :**

Bases de programmation et de physique des solides