

## Étude théorique des effets thermiques sur la dynamique de spin

**Contact :** Mike JITOMIRSKI 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 :

Les simulations informatiques jouent un rôle de plus en plus important dans notre compréhension de la Nature. La modélisation Monte Carlo de systèmes de spin est l'une des véritables histoires à succès des études théoriques assistées par ordinateur. Ce pendant, les études numériques et analytiques des propriétés dynamiques des systèmes magnétiques sont beaucoup moins matures. La majorité des études théoriques utilisent les équations phénoménologiques Landau-Lifshitz-Gilbert. Ce projet est concentré sur une approche microscopique alternative basée sur les Hamiltoniens de spin qui décrivent les interactions entre les moments magnétiques atomiques. Les calculs numériques de dynamique de rotation en temps réel doivent être combinés avec les calculs thermiques de Monte Carlo. Cela permettra de modéliser des matériaux magnétiques à une température arbitraire au-dessus et au-dessous des transitions magnétiques possibles. Les résultats obtenus seront directement pertinents pour un large gamme d'études expérimentales effectuées sur les installations de neutrons et de synchrotron ainsi que pour le domaine de la spintronique et du nanomagnétisme.

### Sujet détaillé :

La tâche initiale d'un étudiant sur ce projet est d'implémenter et d'effectuer des tests comparatifs de quelques algorithmes numériques d'intégration temporelle, la comprenant méthode standard Runge-Kutta, les méthodes prédicteurs-correcteurs et la méthode de décomposition. L'algorithme choisi sera combiné avec les codes Monte Carlo existants. La partie centrale du projet sera consacrée à l'étude des similitudes et des différences dans la dynamique des spins des systèmes magnétiques colinéaires et non-colinéaires à température finie. Jusqu'à présent, des prédictions théoriques détaillées et des études numériques de la dynamique de spin dépendante de la température ont été réalisées uniquement pour les antiferromagnétiques colinéaires simples. La différence fondamentale entre les systèmes magnétiques colinéaires et non-colinéaires consiste en des types de nonlinéarités qui affectent leur dynamique de spins. Les simulations de dynamique de spins ainsi que la théorie analytique se concentrera sur l'atténuation des magnons en fonction de la température. À l'étape suivante, les effets thermiques sur la dynamique des excitations topologiques (vortices, skyrmions, etc.) seront explorés dans une perspective entièrement microscopique. Le comportement critique dynamique et la dynamique de spin diffuse dans l'état paramagnétique présentent également des problèmes intéressants et difficiles.

### Compétences requises :

bases de programmation et de physique des solides