

Nr umowy: 2019/03/X/ST3/01968

Tytuł: Implementacja metody macierzy dynamicznej do wyznaczania relacji dyspersji magnonów w oprogramowaniu do symulacji magnetycznych Vampire

Cel projektu

Projekt ma na celu odbycie 3-miesięcznego stażu na Wydziale Fizyki na Uniwersytecie w Yorku, gdzie głównym założeniem jest opracowanie i zaimplementowanie teoretycznego modelu propagacji fal spinowych za pomocą metody macierzy dynamicznej w oprogramowaniu Vampire [1]. Spinowe wzbudzenia elementarne (fale spinowe, magnony) w materiałach magnetycznie uporządkowanych otrzymuje się rozwiązując równania Landaua-Lifszycza-Gilberta w pobliżu konfiguracji odpowiadającej równowadze. W przypadku uporządkowania przestrzennie periodycznego wzbudzenia te mają charakter fal Blocha. Ich częstości są wartościami własnymi, a odpowiadające im profile precesji spinów są wektorami własnymi macierzy dynamicznej [2,3]. Środowisko Vampire pozwala uzyskać magnetyczne konfiguracje równowagowe na podstawie parametrów struktury krystalicznej i oddziaływań magnetycznych na poziomie atomowym. Taki model atomistyczny w porównaniu z modelami mikromagnetycznymi pozwala dokładnie oszacować wpływ temperatury na własności magnetyczne układu oraz z dobrym przybliżeniem wyznaczyć takie parametry jak temperatura Curie czy temperatura kompensacji w układach antyferromagnetycznych gdzie występują dwie podsieci magnetyczne. Dużą zaletą oprogramowania Vampire jest wykonywanie obliczeń z wykorzystaniem procesów równoległych MPI oraz wykorzystywanie technologii CUDA opracowanych dla układów kart graficznych, co z kolei znacznie podnosi wydajność obliczeniową i pozwala na symulowanie układów o rozmiarach mikroskopowych, co w przypadku takich metod jak teoria funkcjonału gęstości (DFT) jest nieosiągalne ze względu na duże rozmiary układu. Rozszerzenie oprogramowania Vampire o moduł do wyznaczania i diagonalizacji macierzy dynamicznej pozwoli na symulowanie dynamiki m.in. dużych układów nanostrukturyzowanych, cienkich wielowarstw czy układów antyferromagnetycznych. Propagacja fal spinowych w układach o nietrywialnej geometrii ma duże znaczenie w spintronice i obecnie jest szeroko badana. Proponowany projekt dotyczy problemów, które do tej pory nie były badane ze względu m.in. na duże utrudnienia związane ograniczoną mocą obliczeniową (w przypadku DFT) czy w związku z ograniczeniami modelu mikromagnetycznego.

[1] <https://vampire.york.ac.uk>

[2] M. Grimsditch, F. Montoncello et al., Phys. Rev. B 70, 054409 (2004)

[3] Roberto Zivieri and Giancarlo Consolo, Advances in Condensed Matter Physics, Vol. 2012, 765709, p. 16, DOI: 10.1155/2012/765709

