

**La pression comme contrôle du couplage entre propriétés magnétiques et électriques**

**Cadre général :** L'effet magnéto-électrique couple les propriétés magnétiques et électriques d'un matériau. Il permet donc de contrôler une propriété en agissant sur l'autre. Par exemple il est possible de modifier la polarisation d'un système par l'application d'un champ magnétique ou inversement l'aimantation par l'application d'un champ électrique. Ces systèmes multifonctionnels sont dits multiferroïques et attirent beaucoup d'attention tant dans le domaine de la recherche fondamentale (il faut comprendre), que dans celui des applications (micro-électronique, conception de composants, stockage de données, électronique de spin, composants micro-onde, etc.).

Les composés magnéto-électriques sont peu nombreux, les couplages en général faibles et les domaines de températures où le couplage existe en général bien en dessous de la température ambiante. Il est donc crucial de comprendre tant les mécanismes microscopiques responsables de l'existence d'un couplage, que les raisons qui font que celui-ci est de grande amplitude à une température donnée. Des travaux récents montrent que l'application de contraintes extérieures peut notablement influencer sur ces propriétés. C'est par exemple le cas de la pression.

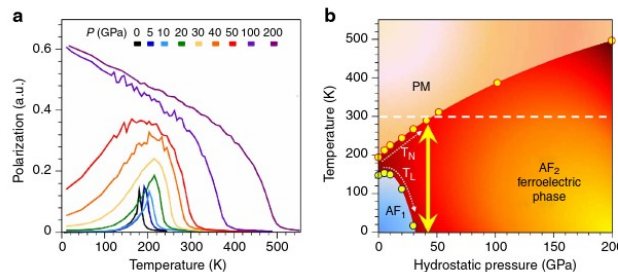


Diagramme de phase temperature–pression pour CuO. Nature Com. 4, 251 (2013)

**Sujet exact, moyens disponibles :** L'objectif de ce travail théorique sera donc de poser les jalons du calcul du couplage magnéto-électrique en fonction de la pression dans un cas modèle. L'étudiant devra donc

- s'initier au calcul aux bases théoriques sous tendant le calcul du couplage magnéto-électrique
- s'initier aux techniques du calcul de structure électronique
- apprendre à extraire l'information pertinente des calculs et à la modéliser.

Pour cela l'étudiant aura accès aux centres de calcul intensifs régionaux et nationaux.

**Interactions et collaborations éventuelles :** L'étudiant sera amené à travailler avec d'autres théoriciens de différents laboratoires français (ILL Grenoble, ISCR Rennes, CINAM Marseille) et à discuter avec les expérimentateurs travaillant sur le même sujet.

**Ce stage pourra se poursuivre par une thèse.**

**Formation / Compétences :** L'étudiant devra avoir une bonne connaissance de la mécanique quantique ainsi que des connaissances de base en informatique.

**Période envisagée pour le début du stage :** entre janvier et mars 2020

**Contact :** Lepetit Marie-Bernadette, Institut Néel – CNRS.

Tél 04 76 88 12 89.

Mel : Marie-Bernadette.Lepetit@neel.cnrs.fr

Plus d'informations sur : <http://neel.cnrs.fr>