

Micromagnétisme hiérarchique pour la modélisation des propriétés des matériaux

Romain Claveau

Master 2 Modèles non-linéaires - Université François Rabelais

23 novembre 2023



Sommaire

1 Contexte du stage

- Introduction
- Energie du système
- Dynamique de Landau-Lifshitz-Gilbert
- Dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch

2 Approche numérique

- Introduction
- Influence de la température sur une nano-plaquette ferromagnétique
- Dynamique d'un gaz de skyrmions

3 Conclusion

- Conclusion générale
- Pour aller plus loin
- Questions ?

Contexte du stage

1 Contexte du stage

- Introduction
- Energie du système
- Dynamique de Landau-Lifshitz-Gilbert
- Dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch

2 Approche numérique

- Introduction
- Influence de la température sur une nano-plaquette ferromagnétique
- Dynamique d'un gaz de skyrmions

3 Conclusion

- Conclusion générale
- Pour aller plus loin
- Questions ?

Contexte du stage

Introduction

Notre objectif

Modéliser la dynamique de l'aimantation d'une assemblée de spins en interaction.

Approches utilisées

- Approche atomistique (description discrète)
- Approche micromagnétique (description continue)

Dynamiques étudiées

- Equation de Landau-Lifshitz-Gilbert (température nulle)
- Dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch (température finie)

Contexte du stage

Energie du système

Energie totale du système

$$E = E_{exch} + E_{ani} + E_{zee} + (E_{demag}) \quad (1)$$

avec

- E_{exch} l'énergie d'échange liée aux couplages des spins
- E_{ani} l'énergie d'anisotropie liée à une anisotropie magnéto-cristalline
- E_{zee} l'énergie de Zeeman induite par un champ magnétique
- E_{demag} l'énergie de désaimantation

Définition du champ effectif

$$\vec{H}_{eff} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\delta^2 E}{\delta \vec{M} \delta V} \quad (2)$$

Contexte du stage

Equation de Landau-Lifshitz-Gilbert

Equation de la précession (équation gyromagnétique)

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = -\gamma\mu_0\vec{H}_{eff} \times \vec{m} \quad (3)$$

avec

- γ le rapport gyromagnétique de l'électron
- \vec{M} l'aimantation du système
- M_s l'aimantation à saturation du matériau
- $\vec{m} = \vec{M}/M_s$ l'aimantation réduite
- \vec{H}_{eff} le champ effectif ressenti par l'aimantation

Contexte du stage

Equation de Landau-Lifshitz-Gilbert

Equation de Landau-Lifshitz-Gilbert

$$(1 + \alpha^2) \frac{d\vec{m}}{dt} = -\gamma\mu_0 \vec{m} \times \vec{H}_{eff} - \gamma\mu_0 \alpha \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}_{eff}) \quad (3)$$

avec

- α une constante sans dimension appelée *facteur d'amortissement*

Contexte du stage

Equation de Landau-Lifshitz-Gilbert

Conservation de la norme de l'aimantation

$$\vec{m} \cdot \frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = 0 \Rightarrow \text{conservation de la norme de } \vec{m} \quad (3)$$

Bien que l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert traduise une perte d'énergie, nous ne pouvons déterminer l'origine de cette perte.

Constatacion

Afin de traduire l'interaction explicite entre notre système et un bain thermique, nous devons utiliser une autre dynamique que celle-ci.

Contexte du stage

Dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch

Modélisation des fluctuations thermiques par une variable Gaussienne aléatoire

$$\langle \tilde{\omega}_i \rangle = 0 \quad (4)$$

$$\langle \tilde{\omega}_i(t) \tilde{\omega}_j(t') \rangle = \frac{D}{\tau} \delta_{ij} \exp \left(-\frac{|t - t'|}{\tau} \right) \quad (5)$$

avec

- $\langle \circ \rangle$ la moyenne sur le bruit
- $D \propto k_B T$ la force du bruit, liée à la température par la relation d'Einstein.
- τ le temps d'autocorrélation lié à la couleur du bruit
- δ_{ij} le symbole de Kronecker

Contexte du stage

Dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch

Définition de la pulsation effective

$$\vec{\omega} = -\frac{\gamma}{M_s} \frac{\delta^2 E}{\delta \vec{s} \delta V} \quad (4)$$

Equation stochastique de Landau-Lifshitz-Gilbert

$$\frac{\partial}{\partial t} s_i = \frac{1}{1 + \alpha^2} \epsilon_{ijk} s_k [\omega_j + \tilde{\omega}_j - \alpha \epsilon_{jlm} \omega_l s_m] \quad (5)$$

avec

- $s_i = \vec{s} \cdot \hat{e}_i$ la composante i de l'aimantation réduite \vec{m}
- $\omega_j = \vec{\omega} \cdot \hat{e}_j$ la composante j de la pulsation effective $\vec{\omega}$
- $\tilde{\omega}_j = \vec{\tilde{\omega}} \cdot \hat{e}_j$ la composante j de la variable aléatoire $\vec{\tilde{\omega}}$

Contexte du stage

Dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch

Moyenne sur le bruit

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle s_i \rangle = \frac{1}{1 + \alpha^2} \epsilon_{ijk} [\omega_j \langle s_k \rangle + \langle \tilde{\omega}_j s_k \rangle - \alpha \epsilon_{jlm} \omega_l \langle s_k s_m \rangle] \quad (4)$$

Il nous faut trouver les dynamiques des fonctions de corrélation $\langle \tilde{\omega}_j s_k \rangle$ et $\langle s_k s_m \rangle$. La méthode employée provient de l'article *Closing the hierarchy for non-Markovian magnetization dynamics*.

Méthode de Shapiro-Loginov

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \tilde{\omega}_i s_j \rangle = \langle \tilde{\omega}_i \frac{\partial}{\partial t} s_j \rangle - \frac{1}{\tau} \langle \tilde{\omega}_i s_j \rangle \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle s_i s_j \rangle = \langle \frac{\partial s_i}{\partial t} s_j \rangle + \langle s_i \frac{\partial s_j}{\partial t} \rangle \quad (6)$$

Contexte du stage

Dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch

Dynamique des composantes de l'aimantation

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle s_i \rangle = \frac{1}{1 + \alpha^2} \epsilon_{ijk} \left[\omega_j \langle s_k \rangle + \langle \tilde{\omega}_j s_k \rangle - \alpha \epsilon_{jlm} \omega_l \langle s_k s_m \rangle \right] \quad (4)$$

Dynamique des composantes de la fonction de corrélation $\langle \tilde{\omega}_i s_j \rangle$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \tilde{\omega}_i s_j \rangle = & -\frac{1}{\tau} \langle \tilde{\omega}_i s_j \rangle + \frac{1}{1 + \alpha^2} \left[\epsilon_{jkl} \omega_k \langle \tilde{\omega}_j s_l \rangle + \epsilon_{jil} \frac{D}{\tau} \langle s_l \rangle \right] \\ & - \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} \left[\alpha \epsilon_{jkl} \epsilon_{kmn} \omega_m (\langle s_l \rangle \langle \tilde{\omega}_i s_n \rangle + \langle s_n \rangle \langle \tilde{\omega}_i s_l \rangle) \right] \end{aligned} \quad (5)$$

Contexte du stage

Dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch

Dynamique des composantes de la fonction de corrélation $\langle s_i s_j \rangle$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \langle s_i s_j \rangle = & + \frac{1}{1 + \alpha^2} \epsilon_{jkl} \left[\omega_k \langle s_i s_l \rangle + \epsilon_{jkl} (\langle s_i \rangle \langle \tilde{\omega}_k \rangle + \langle s_l \rangle \langle \tilde{\omega}_k s_i \rangle) \right] \\
 & - \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} \epsilon_{jkl} \epsilon_{kmn} \omega_m [\langle s_i \rangle \langle s_l s_n \rangle + \langle s_l \rangle \langle s_i s_n \rangle] \\
 & - \frac{\alpha}{1 + \alpha^2} \epsilon_{jkl} \epsilon_{kmn} \omega_m [\langle s_n \rangle \langle s_i s_l \rangle - 2 \langle s_i \rangle \langle s_l \rangle \langle s_n \rangle] \\
 & + (i \leftrightarrow j)
 \end{aligned} \tag{4}$$

Il ne reste plus qu'à intégrer ce système de vingt-et-une équations différentielles non-linéaires couplées !

Contexte du stage

Dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch

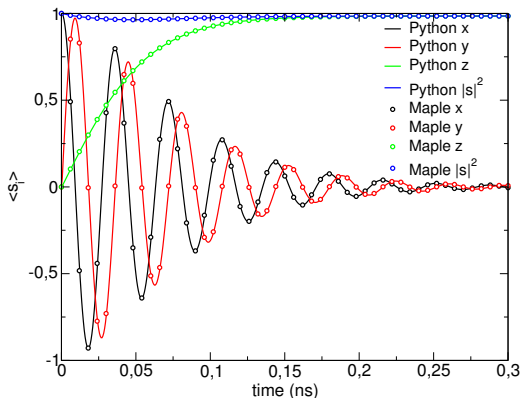
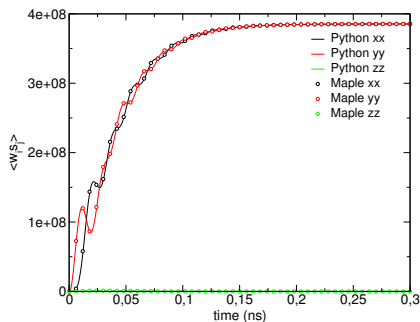


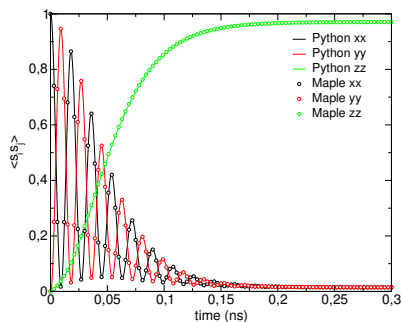
FIGURE – Composantes et normes de l'aimantation $\langle s_i \rangle$ d'un seul spin

Contexte du stage

Dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch



(a) Fonction de corrélation $\langle \tilde{\omega}_i s_j \rangle$



(b) Fonction de corrélation $\langle s_i s_j \rangle$

FIGURE – Composantes diagonales des fonctions de corrélation d'un seul spin

Approche numérique

Sommaire

1 Contexte du stage

- Introduction
- Energie du système
- Dynamique de Landau-Lifshitz-Gilbert
- Dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch

2 Approche numérique

- Introduction
- Influence de la température sur une nano-plaquette ferromagnétique
- Dynamique d'un gaz de skyrmions

3 Conclusion

- Conclusion générale
- Pour aller plus loin
- Questions ?

Approche numérique

Introduction

Notre outil

Nous avons développé un programme en *Python* permettant d'intégrer les équations de Landau-Lifshitz-Bloch avec un intégrateur explicite RK4.

Première étude

Obtenir la dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch de l'aimantation en température finie, en considérant l'approche micromagnétique.

Deuxième étude

Étudier la dynamique d'un gaz de skyrmions en température finie, en considérant l'approche atomistique.

Approche numérique

Influence de la température sur une nano-plaquette ferromagnétique

Nous cherchons à simuler des nano-plaquettes en température finie.
Pour cela, nous voulons considérer l'influence de :

- la température
- la taille du système

Ce que nous attendons

Nous pensons obtenir une **courbe de Curie**. Ainsi, **la taille du système aura une réelle importance sur la dynamique** de l'aimantation.

Approche numérique

Influence de la température sur une nano-plaquette ferromagnétique

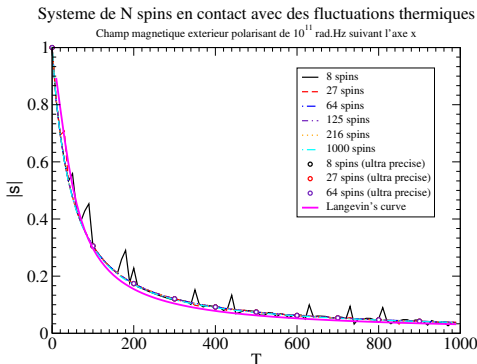


FIGURE – Influence de la température sur l'aimantation pour différentes tailles de systèmes

Approche numérique

Influence de la température sur une nano-plaquette ferromagnétique

Ce que nous obtenons

- L'aimantation suit une courbe de Langevin.
- La taille du système n'influence pas la dynamique produite.
- Le *Python* ne permet pas le calcul de très grosses structures.

Conclusion

Notre système, bien que ferromagnétique, se comporte comme une particule unique suivant une dynamique paramagnétique. La taille n'influençant pas la dynamique, **nous retrouvons le cas du superparamagnétisme** (il n'y a pas d'accommodation de corrélations à longues portées).

Approche numérique

Dynamique d'un gaz de skyrmions

Ajout de l'interaction de Dzyaloshinskii-Moriya (frustration magnétique)

$$\vec{\omega}_{DMI,I} = -\frac{1}{\hbar} \frac{\delta H_{DMI}}{\delta \vec{S}_I} = -\frac{\kappa}{\hbar} \sum_{\langle K \rangle} \vec{S}_K \times \vec{r}_{IK} \quad (4)$$

avec

- $\vec{\omega}_{DMI,I}$ la pulsation du champ de Dzyaloshinskii-Moriya au site I
- κ une constante d'interaction
- $\vec{S}_K \propto \vec{m}_K$ un vecteur au site K , unitaire
- \vec{r}_{IK} un vecteur unitaire reliant les sites I et K

Approche numérique

Dynamique d'un gaz de skyrmions

Objectif

Nous ajoutons un terme supplémentaire dans notre pulsation effective et voulons observer son effet sur les solutions équilibrées de notre système.

Ce que nous attendons

L'interaction de Dzyaloshinskii-Moriya traduit un phénomène quantique contraignant l'orientation des spins et permet l'apparition de structure topologique stable nommées skyrmions.

Approche numérique

Dynamique d'un gaz de skyrmions

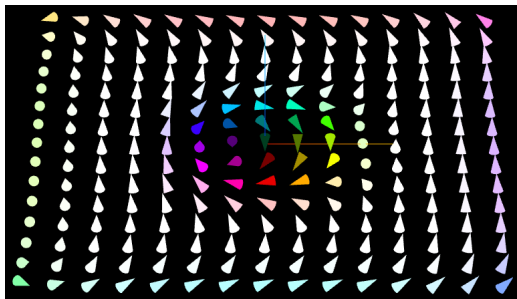


FIGURE – Un *skyrmion* créé avec la dynamique de Landau-Lifshitz-Gilbert sur un réseau de 15×15 spins, initialement tous *down*, soumis à un champ magnétique suivant z de l'ordre de 10 T. Les champs internes pris en compte sont le champ d'échange avec $J = 10$ meV et le champ DMI avec $D = 8$ meV.

Approche numérique

Dynamique d'un gaz de skyrmions

Ce que nous obtenons

Comme prévu, nous obtenons bien l'accommodation d'un skyrmions sur une nano-plaquette de 15×15 spins, avec l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert.

Objectif n°2

Nous voulons accommoder un *skyrmion* sur cette même nano-plaquette mais en considérant la dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch.

Approche numérique

Dynamique d'un gaz de skyrmions

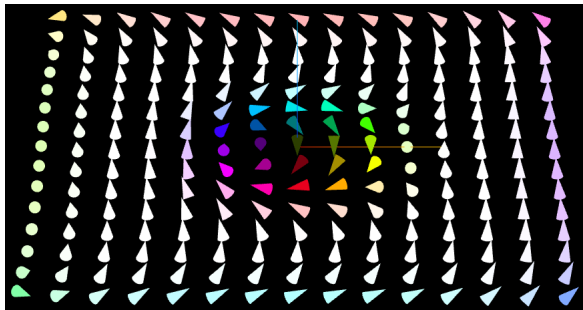


FIGURE – Un *skyrmion* créé avec la dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch sur un réseau de 15×15 spins, initialement tous *down*, soumis à un champ magnétique suivant z de l'ordre de 10 T. Les champs internes pris en compte sont le champ d'échange avec $J = 10$ meV et le champ DMI avec $D = 8$ meV.

Approche numérique

Dynamique d'un gaz de skyrmions

Ce que nous obtenons

La hiérarchie de Landau-Lifshitz-Bloch permet d'obtenir un ***skyrmion*** comme solution stable à température nulle.

Objectif n°3

Nous cherchons maintenant à mesurer l'influence de la température sur la stabilité des skyrmions.

Introduction de la charge topologique

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int \vec{s} \cdot \left(\frac{\delta \vec{s}}{\delta \vec{x}} \times \frac{\delta \vec{s}}{\delta \vec{y}} \right) dx dy \quad (4)$$

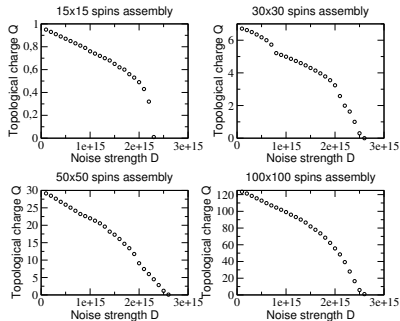
Approche numérique

Dynamique d'un gaz de skyrmions

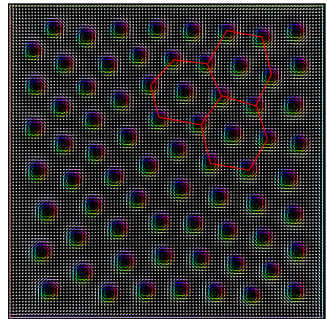
Lancer l'animation

Approche numérique

Dynamique d'un gaz de skyrmions



(a) Charge topologique totale de plaquettes de spins en fonction de la température pour un champ magnétique externe constant de 25 T.



(b) skyrmions se stabilisant dans un réseau hexagonal à température nulle, avec un champ magnétique extérieur de 25 T

Approche numérique

Dynamique d'un gaz de skyrmions

Ce que nous obtenons

Nous observons que la taille du système n'a pas d'influence réelle sur la température critique de disparition des skyrmions.

Objectif n°4

Nous cherchons maintenant à mesurer l'influence du champ magnétique extérieur sur la stabilité des skyrmions lorsqu'ils sont soumis à une température finie.

Approche numérique

Dynamique d'un gaz de skyrmions

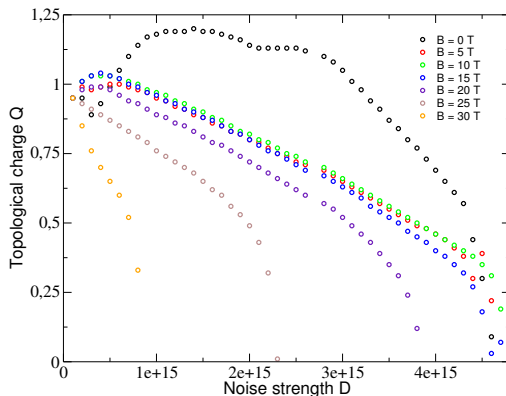


FIGURE – Influence du champ magnétique appliqué lors de la relaxation sur la stabilité d'un *skyrmion* en température finie.

Approche numérique

Dynamique d'un gaz de skyrmions

Conclusion

Nous en concluons que le champ magnétique, appliqué lors de la relaxation du *skyrmion*, a une réelle influence sur la température critique. **Plus le champ magnétique appliqué est faible**, plus le *skyrmion* est grand, et **plus sa stabilité est grande à des températures élevées**.

Illustration du caractère critique de transition

Nous cherchons à montrer que la disparition des skyrmions est associable à une transition de phase, et donc à un exposant critique.

Approche numérique

Dynamique d'un gaz de skyrmions

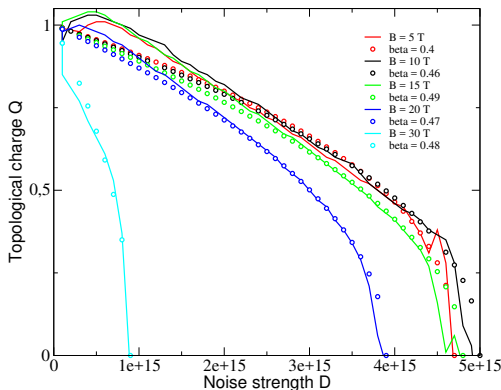


FIGURE – Calcul de l'exposant β de la relation $Q(T) \propto \left(\frac{D_c - D}{D_c} \right)^\beta$

Approche numérique

Dynamique d'un gaz de skyrmions

Coefficient β

Nous trouvons un coefficient $\beta = 0.45 \pm 0.05$, très proche de celui prédit par la théorie de Landau (qui est une théorie de champ moyen). **Ce résultat est en accord avec la nature de la hiérarchie de Landau-Lifshitz-Bloch** qui repose, en partie, sur les approximations :

- $\langle \omega_i s_j \rangle = \omega_i \langle s_j \rangle$
- $\langle \omega_i \tilde{\omega}_j \rangle = \omega_i \langle \tilde{\omega}_j \rangle$

Conclusion

L'apparition et la stabilisation des skyrmions constitue une phase ordonnée à part entière.

Conclusion

Conclusion générale

1 Contexte du stage

- Introduction
- Energie du système
- Dynamique de Landau-Lifshitz-Gilbert
- Dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch

2 Approche numérique

- Introduction
- Influence de la température sur une nano-plaquette ferromagnétique
- Dynamique d'un gaz de skyrmions

3 Conclusion

- Conclusion générale
- Pour aller plus loin
- Questions?

Conclusion

Conclusion générale

Conclusion générale

- La dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch permet de décrire convenablement une connexion thermique
- Si notre système est relativement petit, qu'il est ferromagnétique mais décrit une dynamique paramagnétique, il devient superparamagnétique.
- Les skyrmions se stabilisent dans un réseau hexagonal, formant ainsi une phase *skyrmionique*.

Conclusion

Pour aller plus loin

Pour aller plus loin

- Prendre en compte l'interaction dipôle-dipôle (équivalent au champ de désaimantation micromagnétique) et évaluer son influence sur la stabilité des skyrmions.
- Coder la dynamique de Landau-Lifshitz-Bloch micromagnétique avec l'interaction de Dzyaloshinskii-Moriya.
- Raffinement du modèle de Landau-Lifshitz-Bloch.
- Effectuer les calculs parallèlement plutôt que séquentiellement.
- S'intéresser aux structures topologiques stables tridimensionnelles.

Conclusion

Questions?

Je vous remercie pour votre attention.

Avez-vous des questions?