

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Abderrahmane Mira de Béjaïa



Faculté des Sciences Exactes
Département de Physique

Mémoire

En Vue de l'Obtention du Diplôme de Master en Physique
Spécialité : Physique des Matériaux et Nano-composites.

Thème

Simulation du Modèle Magnétique de Heisenberg par la Dynamique de Spin.

Réalisé par :

M^r AMMARI Amirouche

M^r TEBBAA Fayssal

Soutenu devant le jury composé de :

<i>M^r</i> KASRI Yazid	MCA	UAMB	Président
<i>M^r</i> ZENIA Hand	MCB	UAMB	Rapporteur
<i>M^r</i> BOUFALA Khaled	MCB	UAMB	Examineur
<i>M^r</i> HOUARI Abdeslam	Professeur	UAMB	Examineur

Juin 2016

Remerciements

Les travaux présentés dans ce mémoire ont été réalisés au sein de l'université de Béjaïa au département physique de la faculté des sciences exactes.

Nos remerciements s'adressent tout d'abord à tous les enseignants qui ont contribué de près ou de loin à notre formation universitaire.

*Nous témoignons une reconnaissance particulière pour notre promoteur que M^r : **H. Zenia** reçoit l'expression de toute notre reconnaissance pour ses précieuses contributions, soutien moral, sa disponibilité , conseils et orientations.*

*Nos plus sincères remerciements vont aux membres du jury M^r **Y. Kasri** , M^r **A. Houari** et M^r **K. Boufala** qui nous ont fait l'honneur d'en faire partie.*

Nous remercions aussi tous nos camarades du département physique en particulier nos amis de la promotion, et nous les prions de trouver ici le témoignage de notre profonde gratitude pour l'aide précieuse qu'ils nous ont apportée tout au long de notre cursus.

Finalement, nous remercions toute personne ayant contribué de près ou de loin à l'élaboration de notre mémoire, sans oublier tous ceux qui nous ont encouragé le long de notre parcours universitaire. .

A. AMMARI & F. TEBBAA

Dédicaces

Rien n'est aussi beau à offrir que le fruit d'un labeur qu'on dédie du fond du cœur à ceux qu'on aime et qu'on remercie en exprimant la gratitude et la reconnaissance durant toute notre existence.

Je dédie ce modeste travail :

A mes très chers parents qui m'ont soutenu et encouragé tout au long de mes formation scolaires et universitaires.

A mes frères Farouk et Abdalatif.

A mes sœurs Malia, Zahia, Kafia, Wassila, Latifa, Ilham et Lamia.

A toute la famille TEBBAA.

A la mémoire de mes grands-parents puisse Dieu les accueillir dans son vaste paradis.

Et aussi à tout mes amis et à toutes les personnes que j'ai connues et qui m'ont aidées.

TEBBAA Fayssal

Je dédie ce mémoire :

A mes très cher parents qui m'ont soutenu et encouragé tout au long de mes formation scolaires et universitaires.

A mes frères Zahir, Mustapha, Ali, et Kaçi.

A ma sœur Naima.

A toute la famille AMMARI

A la mémoire de mon oncle et sa femme puisse Dieu les accueillir dans son vaste paradis.

Et aussi a tout mes amis et à toutes les personnes que j'ai connues et qui m'ont aidées.

AMMARI Amirouche

Table des matières

Liste des figures	iv
Liste des tableaux	vi
Introduction Générale	1
1 Origine du Magnétisme et ces Applications	3
1.1 Introduction	4
1.2 Domaines d'applications	4
1.2.1 Enregistrement magnétique	4
1.2.2 Médecine	5
1.2.3 Électronique et électrotechnique	5
1.3 Origine des moments magnétiques atomiques	5
1.3.1 Moment magnétique en physique classique	5
1.3.2 Moment magnétique en mécanique quantique	6
1.3.2.1 Moment magnétique orbital :	7
1.3.2.2 Moment magnétique de spin :	8
1.3.2.3 Modèle vectoriel de l'atome :	8
1.4 Interaction dipolaire	9
1.5 Interaction d'échange	10
1.6 Anisotropie magnétique	12
1.6.1 Définition	12
1.6.2 Origine de l'anisotropie magnétique	12
1.6.2.1 Le type de la structure cristalline du matériau magnétique	12
1.6.2.2 La forme géométrique du matériau magnétique	12
1.6.2.3 Les surfaces et interfaces des matériaux magnétiques	13
1.6.2.4 Les contraintes élastiques	13
1.7 Aimantation et susceptibilité	13
1.7.1 Aimantation	13
1.7.2 La susceptibilité magnétique	14

1.8	Énergie interne et chaleur spécifique	14
2	Phases et Modèles Magnétiques	15
2.1	Introduction	16
2.2	Phases magnétiques	16
2.2.1	Phase paramagnétique	16
2.2.2	Phase ferromagnétique	17
2.2.3	Phase antiferromagnétique	17
2.2.4	Phase ferrimagnétique	18
2.2.5	Phase diamagnétique	18
2.3	Transitions de phases	19
2.3.1	Classification des transitions de phases	19
2.3.1.1	Les transitions de phases de premier ordre	20
2.3.1.2	Les transitions de phases de second ordre	20
2.3.2	Théorie de Landau sur les transition de phases	20
2.3.2.1	Définition de paramètre d'ordre	20
2.3.2.2	Paramètre d'ordre en fonction de la température	20
2.3.2.3	Comportement de la capacité calorifique	22
2.3.2.4	Comportement de la susceptibilité	22
2.3.3	Fonction de corrélation-longueur de corrélation	23
2.3.4	Exposants critiques et classes d'universalités	24
2.3.4.1	Classe d'universalité	24
2.4	Modèles magnétiques	25
2.4.1	Le modèle de Heisenberg	25
2.4.2	Le modèle d'Ising	25
2.5	Champ moléculaire de Weiss	26
2.5.1	Approximation du champ moléculaire de Weiss ou champ moyen	26
3	Méthodes de Simulation	28
3.1	Introduction	29
3.2	Monte Carlo	29
3.2.1	Échantillonnage simple	29
3.2.2	Échantillonnage par importance	30
3.2.3	Algorithme Metropolis	31
3.3	La dynamique de spin	32
3.3.1	Quelques applications de la dynamique de spin	32

3.3.1.1	Enregistrement magnétique	32
3.3.1.2	Transfert de spin par un courant polarisé en spintronique	32
3.3.1.3	Ondes de spins	33
3.3.2	Équation du mouvement	33
3.3.3	Historique du modèle de Langevin	35
3.3.4	La dynamique de Langevin	36
3.3.5	Méthode de Heun	38
3.3.5.1	Définition	38
3.3.6	Méthode de Heun pour le cas d'un système de spins	38
3.3.6.1	Test sur un seul spin	39
3.3.7	Test de simulation d'un seul spin avec l'effet de champ thermique	42
4	Simulation du Modèle de Heisenberg à Température Finie	44
4.1	Introduction	45
4.2	Résultats et Discussions	45
4.2.1	Courbe de l'aimantation Moyenne	45
4.2.2	Courbe de l'énergie moyenne par spin	46
4.2.3	Courbe de la chaleur spécifique	48
4.2.4	Courbe de la Susceptibilité magnétique	50
4.2.5	Le cumuland de Binder	52
	Conclusion et perspectives	54
	Bibliographie	55

Table des figures

1.1	Le moment magnétique élémentaire et la surface élémentaire d'une boucle avec un courant élémentaire I.	6
2.1	Phase paramagnétique	17
2.2	Phase ferromagnétique	17
2.3	Phase antiferromagnétique	18
2.4	Phase ferrimagnétique	18
2.5	(a) Variation de l'aimantation en fonction du champ appliqué et (b) la susceptibilité en fonction de la température pour un matériaux diamagnétique.	19
2.6	Solution numérique de l'équation transcendante donnant la valeur moyenne du spin $\langle S^z \rangle$	27
3.1	Mouvement d'un objet brownien (bleu) dans un liquide (rouge). Les mouvements de toutes ces particules sont représentées par leur flèches respectives [24].	36
3.2	Visualisation des forces qui agissent sur le spin de couleur rouge dont la précession autour du champ effectif local en bleu est matérialisée par un cercle en pointillé blanc. Le sens de rotation est donné par la flèche verte. L'amortissement est représenté par la flèche orange. La jaune est un exemple de force fluctuante aléatoire [24].	37
3.3	L'évolution temporelle d'un spin unique dans un champ magnétique pour $\lambda = 0.1$	40
3.4	L'évolution temporelle d'un spin unique dans un champ magnétique pour $\lambda = 0.05$	40
3.5	La différence entre la solution analytique et calculée pour $\lambda = 0.1$	41
3.6	La différence entre la solution analytique et calculée pour $\lambda = 0.05$	41
3.7	La distribution de probabilité angulaire en fonction de l'angle θ pour $\Delta t = 1$ fs.	43
3.8	La distribution de probabilité angulaire en fonction de l'angle θ pour $\Delta t = 0.1$ fs.	43
4.1	Aimantation par spin du modèle de Heisenberg 3d sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L, obtenue par la dynamique de spin.	45
4.2	Aimantation par spin, comparaison entre la dynamique de spin et Monte Carlo pour une taille de L =28.	46

4.3	Énergie moyenne par spin du modèle de Heisenberg 3d sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L	47
4.4	Énergie moyenne par spin, comparaison entre la dynamique de spin et Monte Carlo pour une taille $L = 28$, obtenue par la dynamique de spin.	47
4.5	Chaleur spécifique du modèle de Heisenberg 3d sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L , obtenue par la dynamique de spin.	49
4.6	Chaleur spécifique par spin, comparaison entre la dynamique de spin et Monte Carlo pour une taille $L = 28$	50
4.7	Susceptibilité magnétique du modèle de Heisenberg 3d sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L , obtenue par la dynamique de spin.	51
4.8	Susceptibilité magnétique par spin, comparaison entre la dynamique de spin et Monte Carlo pour une taille $L = 28$	51
4.9	Cumulant de Binder du modèle de Heisenberg 3d sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L	52

Liste des tableaux

2.1	Quelques exemples de paramètre d'ordre.	21
2.2	Quelques exemples de classes d'universalités et leur exposants critiques.	24

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Le magnétisme est un domaine de la physique de la matière condensée qui ne cesse de nous surprendre par sa grande variété de phénomènes, souvent liés à l'émergence de nouveaux types de matériaux.

Le magnétisme a été un sujet d'intérêt remarquable dans la recherche scientifique, aussi bien que dans l'histoire de la science. La recherche théorique moderne qui a commencé avec l'avènement de la mécanique quantique a permis des progrès importants dans notre compréhension du magnétisme [1].

Le modèle atomique des matériaux magnétiques, où les atomes sont considérés comme possédant un moment magnétique local est à l'origine du modèle d'Ising, c'est le premier modèle des transitions de phases ferromagnétiques-paramagnétique. Le modèle d'Ising est largement utilisé dans l'étude des transitions de phases. Ce modèle où le spin ne peut prendre que deux valeurs possibles, ne peut être utilisé pour la simulation des systèmes dynamiques. L'extension du modèle d'Ising permet au spin atomique de varier librement dans l'espace [2] [3], ce qui donne le modèle classique de Heisenberg.

La simulation du modèle de Heisenberg classique avec la méthode Monte Carlo permet d'étudier les propriétés des modèles magnétiques cités, en fonction de la température. Vu l'absence du paramètre temps dans la méthode de Monte Carlo, elle ne peut être utilisée pour décrire les propriétés dynamiques des systèmes magnétiques. La dynamique de spin repose sur l'évolution temporelle des spins en interaction, décrite par l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert. En ajoutant un terme de Langevin à cette équation, elle peut être utilisée pour étudier les propriétés d'équilibre des systèmes magnétiques. Mais l'avantage de la méthode réside dans l'étude des propriétés dynamiques, comme l'évolution temporelle de l'aimantation sous l'effet d'un champ magnétique variable.

Aujourd'hui, la simulation atomique des matériaux magnétiques est devenue un outil essentiel dans la compréhension des processus régissant le comportement complexe des nanomatériaux magnétiques : effets de l'anisotropie de surface magnétique des nanoparticules, les effets de microstructure, les effets de la température et l'étude des supports d'enregistrement magnétiques. Dans ce travail nous avons implémenté l'intégration numérique des équations de mouvement de la

dynamique de spin. Pour valider notre implémentation nous avons simulé le modèle de Heisenberg ferromagnétique sur un réseau cubique simple et pour un nombre de différentes températures. Afin de vérifier la validité de nos résultats nous avons simulé le même système à l'aide de la méthode de Monte Carlo.

1

Origine du Magnétisme et ces Applications

1.1 Introduction

De nos jours, l'intérêt des matériaux magnétiques n'a pas cessé de croître à cause de leur importance et de leur utilisation dans plusieurs domaines : la médecine, les industries du génie électrique et l'électronique. Il est alors nécessaire de connaître et de comprendre certains phénomènes magnétiques en lien avec ces application. L'explication, la maîtrise et la modélisation de l'ensemble de ces phénomènes liés au magnétisme restent toujours d'actualités. Ce chapitre est consacré à l'étude de l'origine du magnétisme et aussi aux domaines d'application. Dans la première partie de ce chapitre nous parlerons de quelques applications des matériaux magnétiques dans l'industrie et dans le domaine médical et dans la deuxième partie nous nous intéressons à l'origine du magnétisme dans la physique classique et dans la mécanique quantique.

1.2 Domaines d'applications

Les matériaux magnétiques peuvent être considérés maintenant comme étant indispensables dans la technologie moderne. Ils ont été utilisés en tant que composants dans une large gamme de produits industriels et de l'équipement médical. On cite dans ce qui suit quelques exemples de domaines d'application.

1.2.1 Enregistrement magnétique

Les progrès récents autour de la conservation des données ont entraîné l'avènement du disque dur [4], grâce au développement de technique de stockage. Cela est dû à la maîtrise et la compréhension des phénomènes magnétiques qui se déroulent à l'échelle microscopique et au progrès de la théorie du magnétisme des matériaux.

Un disque dur est constitué d'un disque magnétique qui tourne autour d'un axe et d'un levier portant une tête qui effectue un mouvement rectiligne radial au-dessus du disque. Le mouvement combiné de rotation du disque et celui de la tête permet à celle-ci d'atteindre toutes les régions de la surface du disque où l'information peut être stockée. La tête sert à la fois à lire et à écrire l'information sur le disque.

Actuellement un concurrent du disque magnétique est entré sur le marché : le disque d'état solide SSD (solid state drive). Ce dernier offre des avantages appréciables par rapport au disque magnétique, comme la rapidité d'accès à l'information stockée, vu que le SSD ne possède pas de pièces mobiles. Il n'en reste pas moins qu'en termes de coût par Gigaoctet, le disque dur magnétique est de loin plus compétitif à présent.

L'enregistrement magnétique est un domaine d'activité qui est classé au premier rang des applications des matériaux magnétiques en cinquante ans avec un chiffre d'affaires qui dépasse, et de

loin, celui de toutes les autres applications réunies [5].

1.2.2 Médecine

Imagerie médicale : est une technique de diagnostic non invasive. Elle exploite l'aimantation des protons (ions d'hydrogène) du corps humain en présence de deux champs magnétiques : un champ intense produit par des matériaux supraconducteurs et un champ magnétique variable (radio) de faible intensité.

Electro-encéphalographie : est un magnétomètre ultra sensible qui enregistre l'activité cérébrale qui génère de faibles courants électriques au niveau du cerveau.

Particules magnétiques : utilisées dans le cadre thérapeutique, ces particules peuvent s'agripper à une tumeur et elle peuvent être chauffées, pour détruire la tumeur, par un champ magnétique alternatif appliqué [6].

1.2.3 Électronique et électrotechnique

Le magnétisme a une large application dans le domaine de l'électronique et l'électrotechnique. L'une de ces applications est le moteur électrique. Son principe de fonctionnement est simple : On place à l'intérieur d'un aimant en U une bobine à l'intérieur de laquelle on fait circuler un courant qui doit toujours aller dans le même sens par rapport à l'aimant en U.

Parmi les domaines d'utilisation de ces moteurs, on peut citer les machines électriques, les robots, l'automobile, électroménager et le transport (trains, tramways ...).

1.3 Origine des moments magnétiques atomiques

1.3.1 Moment magnétique en physique classique

En électromagnétisme classique le mouvement des électrons autour de leur propre noyau est assimilé à la circulation d'un courant électrique I à l'intérieur d'une boucle (voir la figure 1.1). Ce courant électrique donne alors naissance à un moment dipolaire magnétique qu'on peut exprimer sous la forme suivante [7] :

$$d\mu = IdS, \quad (1.1)$$

où $d\mu$ est le moment magnétique d'un élément de surface dS , et I le courant électrique. Le moment magnétique $d\mu$ est perpendiculaire au plan de la boucle de courant, et peut donc être soit parallèle soit antiparallèle au vecteur de moment cinétique associé à la charge en mouvement

autour de la boucle.

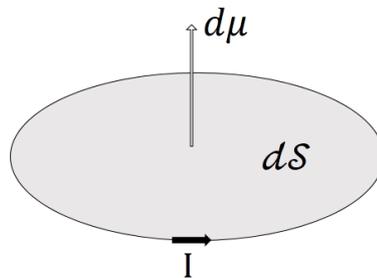


FIGURE 1.1 – Le moment magnétique élémentaire et la surface élémentaire d’une boucle avec un courant élémentaire I .

1.3.2 Moment magnétique en mécanique quantique

Les propriétés physiques des milieux matériels sont portées essentiellement par les électrons. L’étude de base de la mécanique quantique à propos de l’atome conduit à la résolution de l’équation de Schrödinger pour obtenir des informations sur les niveaux et les états quantiques qui peuvent être occupés par les électrons [21]. Les états sont caractérisés par quatre nombres quantiques :

1. nombre quantique principal n :

C’est un indice qui donne la taille de l’orbite et son énergie. On peut dire aussi qu’il numérote la couche électronique. Dans le cas d’atomes poly-électroniques l’orbitale et son énergie deviennent modifiés légèrement du fait des interactions mutuelles des électrons.

2. Le nombre quantique orbital l :

C’est un entier positif et sa valeur est telle que $0 \leq l \leq n - 1$. On dit qu’il numérote la sous couche et s’appelle aussi nombre quantique secondaire ou azimutal. Le moment cinétique orbital I décrit le moment angulaire du mouvement orbital des électrons. Pour une valeur donnée de l , le moment cinétique d’un électron en mouvement orbital est égal à $\hbar\sqrt{l(l+1)}$. Aux valeurs $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ sont associés les sous couches électroniques s, p, d, f, g, ... ,respectivement.

3. nombre quantique magnétique m_l :

C'est un entier positif ou négatif et il peut prendre des valeurs telles que $-l \leq m_l \leq +l$. Il sert à décrire la composante du moment cinétique orbital selon une direction de quantification. En présence d'un champ magnétique appliqué \mathbf{H} , l'axe de quantification est pris comme étant la direction de \mathbf{H} .

4. nombre quantique de spin m_s :

Le spin est caractérisé par un nombre quantique quaternaire qui sert à décrire la composante du spin de l'électron, suivant la direction de l'axe de quantification. Dans le cas classique le spin d'un électron correspond à la vitesse angulaire intrinsèque de la rotation de l'électron autour d'un axe de rotation interne. Cette interprétation classique peut aider à visualiser le mouvement de spin. Toutefois, le spin est en fait purement un phénomène quantique qui n'a aucune équivalence classique. En mécanique quantique m_s ne prend qu'une des deux valeurs $m_s = \pm \frac{1}{2}$, qui correspondent aux deux projections du moment intrinsèque $\pm \frac{\hbar}{2}$. Le principe d'exclusion de Pauli interdit à deux électrons d'occuper un même état quantique. Toutefois deux électrons peuvent occuper un même état orbital à condition qu'ils aient deux projections de spin différentes. Les états sont caractérisés par l'ensemble des nombres quantiques n, l, m_l, m_s ; (n, l) déterminent les couches atomiques. Le nombre maximum d'électrons occupant une couche n est donnée par :

$$2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2. \quad (1.2)$$

1.3.2.1 Moment magnétique orbital :

Ainsi à tout mouvement orbital d'un électron autour du noyau d'un atome va correspondre un moment magnétique orbital défini par :

$$\boldsymbol{\mu}_l = -\frac{|e|\hbar}{2m} \mathbf{l} = -\mu_B \mathbf{l}, \quad (1.3)$$

où μ_B est le magnéton de Bohr. La valeur absolue du moment magnétique est donnée par :

$$\mu_l = \mu_B \sqrt{l(l+1)}. \quad (1.4)$$

Sa projection sur l'axe Oz dit de quantification est :

$$\mu_{lz} = -m_l \mu_B. \quad (1.5)$$

1.3.2.2 Moment magnétique de spin :

Le moment magnétique de spin associé à \mathbf{s} est défini par :

$$\boldsymbol{\mu}_s = -g_e \frac{|e|\hbar}{2m} \mathbf{s} = -g_e \mu_B \mathbf{s}, \quad (1.6)$$

où g_e est le facteur de séparation spectroscopique du spin électronique de valeur $g_e = 2.002290716(10) \approx 2$. La projection du moment magnétique de spin sur un axe de quantification Oz est :

$$\mu_{sz} = \pm \mu_B \quad (1.7)$$

Le moment magnétique atomique total d'un électron est la somme des deux moments orbital et de spin $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_l + \boldsymbol{\mu}_s$. Dans le cas de l'atome d'hydrogène, l'état fondamental est caractérisé par $n = 1$, et $l = 0$, et par conséquent il ne reste que le moment de spin. Des complications vont apparaître quand on a affaire à des ions à plusieurs électrons, et c'est le sujet de ce qui suit.

1.3.2.3 Modèle vectoriel de l'atome :

Dans le cas d'un atome poly-électronique, la description de l'origine du magnétisme est basée sur le moment magnétique orbital total et le moment magnétique de spin total des électrons et les interactions entre eux. Le moment magnétique angulaire est donné par :

$$\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{l}_i, \quad (1.8)$$

où la sommation est effectuée sur tous les électrons ($i = 1 \dots Z$). Le moment magnétique de spin de tous les électrons est donné par :

$$\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{s}_i \quad (1.9)$$

Le moment cinétique total résultant \mathbf{J} est donné par :

$$\mathbf{J} = \sum_i (\mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i) \quad (1.10)$$

Pour le cas d'un atome ou d'un ion isolé le moment magnétique atomique $\boldsymbol{\mu}$ est contrôlé par la nature du couplage entre les moments orbitaux \mathbf{l}_i et les moments de spins \mathbf{s}_i . Les deux types de couplages sont :

a. Couplage RS [Russel-Saunders] : ce couplage est spécifique aux atomes ayant un nombre d'électrons $Z \leq 50$ et manifestant un faible couplage spin-orbite. On calcul d'abord \mathbf{L} et \mathbf{S} , puis on calcul $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$.

b. Couplage JJ : ce couplage est appliqué pour les atomes qui possèdent le nombre d'électrons $Z > 50$ (les atomes lourds). On calcul $\mathbf{j}_i = \mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i$ et puis $\mathbf{J} = \sum_i \mathbf{j}_i$.

Dans le cas du couplage RS, des règles empiriques existent pour la prédiction des moments magnétiques d'atomes ou d'ions libres. Ces règles, dites de Hund, permettent de trouver les valeurs de L, S et J de l'état fondamental. La configuration électronique de l'état fondamental d'un atome ou d'un ion correspond à :

1. une valeur maximale de S.
2. une valeur maximale de L, compatible avec la règle précédente.
3. une valeur de $J = L - S$ pour les couches atomiques moins qu'à moitié pleine et $J = L + S$ pour les couches atomique plus qu'à moitié pleine. L'état fondamental de l'atome ainsi obtenu est représenté par la notation spectroscopique suivante

$$^{(2S+1)}L_J \quad (1.11)$$

Ces règles de Hund sont valides dans des cas où le couplage spin-orbite est faible. Le moment magnétique de l'atome ou ion à l'état fondamental est ainsi donnée par :

$$\boldsymbol{\mu} = g\mu_B\mathbf{J} \quad |\boldsymbol{\mu}| = g\mu_B\sqrt{J(J+1)},$$

où g est le facteur de Landé donné par :

$$g \approx 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}. \quad (1.12)$$

Nous venons de voir qu'un atome ou ion libre peut porter un moment magnétique à l'état fondamental. Lorsqu'un solide est formé à partir de ces atomes, des modifications ont lieu. En effet dans la plupart des solides le caractère magnétique est perdu. Dans d'autres le caractère magnétique se trouve affaibli mais ne disparaît pas totalement ; c'est le cas des solides à base des éléments de transition. Lorsqu'on met ces ions magnétiques dans un solide, des interactions apparaissent entre les moments magnétiques. Nous parlerons à présent de quelques unes de ces interactions les plus en vue.

1.4 Interaction dipolaire

La première interaction censée jouer un rôle crucial dans les phénomènes du magnétisme est l'interaction magnétique dipolaire. L'énergie de deux dipôles magnétiques $\boldsymbol{\mu}_1$ et $\boldsymbol{\mu}_2$ dont la

position relative est \mathbf{r} est donnée par :

$$\mathcal{H}_{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left(\boldsymbol{\mu}_1 \cdot \boldsymbol{\mu}_2 - \frac{3}{r^2} (\boldsymbol{\mu}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\mu}_2 \cdot \mathbf{r}) \right), \quad (1.13)$$

où μ_0 est la perméabilité du vide. \mathcal{H}_{dip} dépend donc de la séparation des deux dipôles magnétiques et de leur degré d'alignement mutuel. Nous pouvons facilement estimer l'ordre de grandeur de cet effet pour deux moments chacun de $\mu \approx 1\mu_B$, séparés par $r = 1\text{\AA}$, soit approximativement $\mu^2/4\pi r^3 \sim 10^{-23} J$, qui est équivalent à une température d'environ $1K$. Cette interaction est donc trop faible pour rendre compte de l'ordre magnétique dans la plupart des matériaux magnétiques qui ont une température de transition de l'ordre de $1000K$. Néanmoins, elle peut être importante dans les propriétés des matériaux pour des températures d'ordre de milli kelvin [7].

L'interaction dipolaire est souvent ignorée dans les simulations atomistiques de la dynamique de spin. En effet cette interaction est bien plus faible que l'interaction d'échange. Ses effets à de courtes échelles de temps et aux hautes températures sont par conséquent négligeables [8].

Pour expliquer les hautes températures de transitions une autre forme d'interaction doit être à l'œuvre : c'est l'interaction d'échange.

1.5 Interaction d'échange

Considérons un modèle simple avec seulement deux électrons qui ont des coordonnées spatiales \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 , respectivement. La fonction d'onde de l'état commun peut être écrite comme un produit d'états de deux électrons, de sorte que le premier électron est dans un état $\psi_a(\mathbf{r}_1)$ et le second électron est dans l'état $\psi_b(\mathbf{r}_2)$. Alors la fonction d'onde commune est $\psi_a(\mathbf{r}_1) \psi_b(\mathbf{r}_2)$. Cependant cet état de produit ne respecte pas la symétrie d'échange, car si nous échangeons les deux électrons nous obtenons $\psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1)$ qui n'est pas un multiple de la fonction d'onde initiale [7].

La fonction d'onde totale est un produit d'une fonction orbitale et d'une fonction de spin. Nous pouvons donc écrire la fonction d'onde pour le cas singulet Ψ_S et le cas de triplet Ψ_T comme

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(\mathbf{r}_1) \psi_b(\mathbf{r}_2) + \psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1)] \chi_S \quad (1.14)$$

$$\Psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(\mathbf{r}_1) \psi_b(\mathbf{r}_2) - \psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1)] \chi_T \quad (1.15)$$

où les deux parties spatiales et de spin de la fonction d'onde sont incluses. Les énergies des deux états possibles sont :

$$E_S = \int \psi_S^* \hat{\mathcal{H}} \psi_S d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (1.16)$$

$$E_T = \int \psi_T^* \hat{\mathcal{H}} \psi_T d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (1.17)$$

avec l'hypothèse que les parties de spin de la fonction d'onde χ_S et χ_T sont normalisées. La différence entre les deux énergies est :

$$E_S - E_T = 2 \int \psi_a^*(\mathbf{r}_1) \psi_b^*(\mathbf{r}_2) \hat{\mathcal{H}} \psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (1.18)$$

On voit que malgré le fait que l'hamiltonien des deux électrons est indépendant du spin, le résultat final est que l'énergie du système des deux électrons dépend bien de leur état de spin. La différence $E_S - E_T$ est ce qu'on appelle l'énergie d'échange. Le nom échange vient du membre droit de l'équation où on voit \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 échanger de places.

La différence entre les états singulet et triplet peuvent être paramétrés en utilisant $\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$. Pour l'état singulet $\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 = -\frac{3}{4}$ tandis que pour l'état triplet $\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 = \frac{1}{4}$. Alors le hamiltonien peut être écrit sous la forme d'un hamiltonien effectif :

$$\hat{\mathcal{H}}_{eff} = \frac{1}{4}(E_S + 3E_T) - (E_S - E_T) \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2. \quad (1.19)$$

Ceci est la somme d'un terme constant et d'un terme qui dépend de spin. La constante peut être absorbée par d'autres termes d'énergie constants, mais le second terme est plus intéressant. La constante d'échange (ou intégrale d'échange), J est définie par

$$J = \frac{E_S - E_T}{2} = \int \psi_a^*(\mathbf{r}_1) \psi_b^*(\mathbf{r}_2) \hat{\mathcal{H}} \psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (1.20)$$

Le hamiltonien peut être écrit sous la forme suivante :

$$\hat{\mathcal{H}}^{spin} = -2J \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (1.21)$$

Si $J > 0$, ($E_S > E_T$) et l'état triplet $S = 1$ est favorisé. Si $J < 0$, ($E_S < E_T$) et l'état singulet $S = 0$ est favorisé [7]. On fait alors l'analogie avec des moments classique et on va dire que dans le premier cas $J > 0$ les spins sont parallèles, dans le deuxième cas $J < 0$ les spins sont antiparallèles. Pour un système de N ions magnétiques, la généralisation de l'hamiltonien donnera le modèle de Heisenberg. Nous allons discuter ce modèle dans le second chapitre.

1.6 Anisotropie magnétique

Nous venons de voir que l'interaction d'échange peut favoriser un alignement parallèle ou anti-parallèle des moments dipolaires dans un solide. Cette interaction ne détermine cependant pas une direction préférentielle pour l'alignement des moments magnétiques. Ceci est le rôle joué par l'anisotropie magnétique. Bien qu'elle soit très faible devant l'interaction d'échange, l'anisotropie magnétique est importante pour déterminer les directions selon lesquelles l'aimantation va se diriger.

1.6.1 Définition

Par définition, l'expression « anisotropie magnétique » se réfère à la dépendance des propriétés magnétiques de la direction dans laquelle elles sont mesurés [12]. En général les propriétés magnétiques d'un matériau ferromagnétique ou ferimagnétique sont définis d'une part par les grandeurs de l'aimantation rémanente \mathbf{M}_R et de l'aimantation \mathbf{M}_S de saturation propre à ce matériau et d'autre part par les directions spatiales manifestés par les vecteurs (\mathbf{M}_R et \mathbf{M}_S). Ainsi l'action d'un champ magnétique externe \mathbf{H} sur ces matériaux et suivant différentes directions spatiales va donner lieu à différentes réponses. En pratique ce comportement est révélé expérimentalement à travers les différentes boucles d'hystérésis de différentes formes résultant d'une application d'un champ magnétique externe \mathbf{H} suivant différentes directions.

1.6.2 Origine de l'anisotropie magnétique

1.6.2.1 Le type de la structure cristalline du matériau magnétique

L'anisotropie magnéto-cristalline(cubique et uni-axiale) est manifestée respectivement par les matériaux cristallins de structure cubique et hexagonale. L'anisotropie magnéto-cristalline va prédominer le reste des anisotropies magnétiques possibles dans le cas des milieux magnétiques massifs. Cette anisotropie est causée par l'interaction spin-orbite. Ce couplage, qui est responsable de l'orientation des spins en fonction de la symétrie du réseau, tend à aligner les moments magnétiques le long des directions cristallographiques préférentielles. Il en résulte certains axes ou plans d'aimantation facile ou difficile.

L'anisotropie uniaxiale est essentielle pour le stockage de l'information. En effets, les deux orientations stables de l'aimantation permettent l'encodage binaire de l'information.

1.6.2.2 La forme géométrique du matériau magnétique

L'anisotropie de forme va prédominer le reste des anisotropie magnétiquest possible dans le cas des systèmes magnétique a faible dimension ou des nanoparticules de forme non sphérique.

L'anisotropie de forme appelée aussi énergie magnétostatique provient du champ démagnétisant, ce dernier dépend de l'orientation de l'aimantation par rapport à la forme du matériau. La présence de ce champ démagnétisant rend anisotropes les propriétés magnétiques du matériau selon sa forme, ce champ est dû à l'interaction dipolaire. En effet, lorsque le matériau est sphérique, l'énergie magnétostatique est nulle, mais elle prend des valeurs non négligeables si la symétrie n'est plus sphérique.

L'anisotropie de forme conduit à la formation de domaines magnétiques séparés par des parois de Bloch dans des systèmes de taille mesoscopiques. Pour de petites particules, la formation d'une paroi étant trop coûteuse, un seul domaine magnétique s'y forme.

1.6.2.3 Les surfaces et interfaces des matériaux magnétiques

L'origine des anisotropies de surfaces et interfaces, provient de la rupture (ou changement de la symétrie) de translation des atomes des plans de surfaces. Ce comportement est à l'origine de la modification des propriétés magnétiques des atomes de ces plans de surfaces et interfaces. Les atomes de surface ont une symétrie inférieure comparée à celle des atomes au sein du matériau. Leur influence sur l'énergie de la particule peut dépendre de l'orientation de l'aimantation. Cela donne lieu à l'anisotropie de surface qui peut aussi être dépendante des impuretés adsorbées à la surface.

1.6.2.4 Les contraintes élastiques

Les contraintes élastiques intérieures ou extérieures sont à l'origine d'une anisotropie magnétoélastique qui est essentiellement générée soit par les défauts d'empilement soit par des contraintes extérieures appliquées sur le matériau magnétique. La déformation change la direction de l'aimantation au sein du matériau et induit donc une modification des propriétés magnétiques. L'existence d'une anisotropie magnétoélastique est essentiellement due au couplage spin-orbite.

1.7 Aimantation et susceptibilité

1.7.1 Aimantation

L'aimantation \mathbf{M} d'un solide constitué de N atomes est la somme des moments magnétiques associés à chaque atome, par unité de volume V :

$$\mathbf{M} = \frac{1}{V} \sum_i^N \boldsymbol{\mu}_i \quad (1.22)$$

1.7.2 La susceptibilité magnétique

La susceptibilité magnétique χ_m est un paramètre qui exprime la réponse d'un milieu matériel à un champ appliqué (externe) \mathbf{H} . On définit la susceptibilité magnétique par :

$$\chi_m = \frac{\partial M}{\partial H} \quad (1.23)$$

Lorsque $\chi_m < 0$, le milieu matériel est dit diamagnétique. Lorsque $\chi_m > 0$, le milieu matériel est dit milieu paramagnétique. Dans la simulation on utilise la relation suivante :

$$\chi_m = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{k_B T}, \quad (1.24)$$

où $\langle M^2 \rangle$ et $\langle M \rangle^2$ est la valeur moyenne au carré de l'aimantation et la valeur moyenne de l'aimantation, respectivement.

1.8 Énergie interne et chaleur spécifique

L'énergie libre F d'un système est donnée par la relation suivante :

$$F = E - TS, \quad (1.25)$$

où, E est l'énergie interne, T la température et S l'entropie. A l'équilibre F est minimale. A $T = 0$, $F = E$ est minimale quand E est minimale : le système favorise l'ordre. Par contre à T élevée, c'est le terme TS qui va minimiser F ; on dit que notre système est gouverné par le désordre.

La chaleur spécifique à champ externe constant d'un système est donnée par :

$$C_H = \frac{\partial E}{\partial T} \quad (1.26)$$

Dans la simulation on utilise la relation suivante :

$$C_H = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}, \quad (1.27)$$

où $\langle E^2 \rangle$ et $\langle E \rangle$ est la valeur moyenne au carré de l'énergie et la valeur moyenne de l'énergie, respectivement.

2

Phases et Modèles Magnétiques

2.1 Introduction

L'étude des propriétés magnétiques des matériaux a connu une énorme progression ces derniers temps. En général, l'étude des propriétés magnétiques s'avère extrêmement difficile. Cette difficulté est due en grand partie aux nombreux types de comportements magnétiques identifiés dans les solides. Nous citons entre autres le diamagnétisme, paramagnétisme, ferromagnétisme, antiferromagnétisme... Cette diversité de comportements magnétiques est due aux diverses interactions spin-spin observées dans les matériaux.

Dans ce chapitre nous introduisons quelques notions importantes qui nous serviront pour la discussion des résultats de nos simulations. Nous parlerons essentiellement de quelques ordres et modèles magnétiques et de la notion de transition de phase en général, et de transition de phase magnétique en particulier .

2.2 Phases magnétiques

Les propriétés magnétique des matériaux proviennent de leur moments magnétiques atomiques produits par le spin et le moment cinétique de leurs électrons. Les matériaux sont classés en fonction de leur comportement dans un champ magnétique extérieur. En effet, certains matériaux sont beaucoup plus magnétique que d'autre. Les matériaux sont classés, en fonction de leur comportement magnétique, en deux catégories : les matériaux non-magnétiques tels que les diamagnétiques, les paramagnétiques, et les matériaux magnétiques ordonnés tels que les ferromagnétiques, les antiferromagnétiques et les ferrimagnétiques [9].

2.2.1 Phase paramagnétique

La caractéristique des milieux matériels dit paramagnétiques est gouvernée par le désordre où les spins sont indépendants et sans interactions mutuelles car ils sont suffisamment éloignés les uns des autres. Par conséquent, l'aimantation est nulle (voir la figure 2.1). Quand on applique un champ magnétique externe H , les moments magnétiques de spin du matériau deviennent orientés suivant la direction du champ externe. Cependant, l'alignement n'est pas parfait à cause de l'agitation thermique.

De plus le paramagnétisme est un caractère connu avec une susceptibilité de signe positif ($\chi_{pm} > 0$), de valeur entre 10^{-5} à 10^{-2} cm³/mol. La susceptibilité magnétique varie inversement avec la température thermodynamique, c'est la loi Curie :

$$\chi_{pm} = \frac{c}{T}, \quad (2.1)$$

où c est une constante.

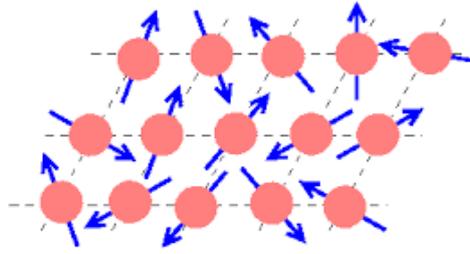


FIGURE 2.1 – Phase paramagnétique .

2.2.2 Phase ferromagnétique

Elle est une caractéristique des milieux matériels manifestant un ordre magnétique à longue distance, où les moments magnétiques (μ_s) sont alignés parallèlement les uns aux autres, avec des amplitudes égales, en absence d'un champ magnétique externe \mathbf{H} (voir la figure 2.2), et à des températures inférieures à la température critique (T_c), dite température de Curie, qui est propre aux matériaux. L'augmentation de la température donne lieu à une agitation thermique des moments magnétiques de spin ce qui provoque une diminution de l'aimantation et une transition de phase vers la phase paramagnétique à la température T_C . Il faut noter aussi que tous les systèmes ferromagnétiques sont paramagnétiques à des températures suffisamment élevées.

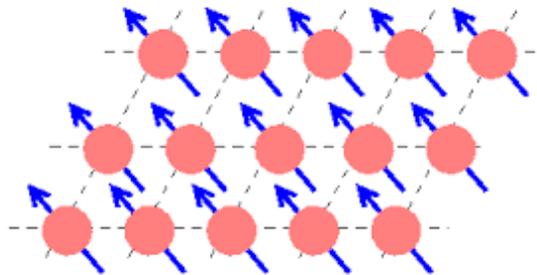


FIGURE 2.2 – Phase ferromagnétique

2.2.3 Phase antiferromagnétique

Dans la phase anti-ferromagnétique typique chaque moment magnétique est anti-parallèle à ses plus proches voisins(voir la figure 2.3). Le système est alors subdivisé en deux sous-réseaux qui ont une aimantation chacun, mais dont la somme algébrique est nulle. Comme dans le cas ferromagnétique, la phase anti-ferromagnétique est stable au-dessous d'une température critique T_N , dite température de Néel. A mesure que la température augmente l'aimantation de chacun des deux sous-réseaux diminue et s'annule à T_N , où le système subit une transition de phase vers

la phase paramagnétique.

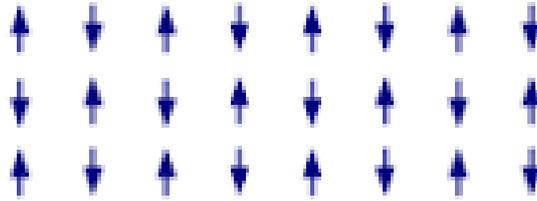


FIGURE 2.3 – Phase antiferromagnétique

2.2.4 Phase ferrimagnétique

Dans un matériau ferrimagnétique, les directions des moments magnétiques sont parallèles et les sens des moments magnétiques voisins sont opposés, ce qui devrait mener à une aimantation globale nulle. Mais ici, les amplitudes des moments magnétiques sont légèrement différentes, de sorte qu'on obtient une aimantation spontanée du matériau, même en absence de champ magnétique extérieur appliqué. A la température de Curie, un matériau ferrimagnétique perd son aimantation spontanée et devient paramagnétique.

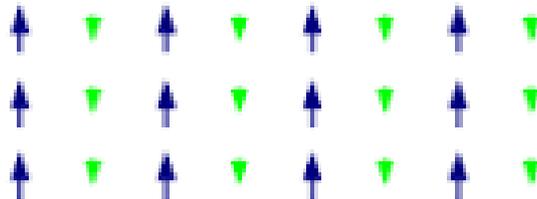


FIGURE 2.4 – Phase ferrimagnétique

2.2.5 Phase diamagnétique

Le diamagnétisme est une propriété magnétique fondamentale des matériaux diamagnétiques, et cette caractéristique est faible par rapport aux autres propriétés magnétiques. Sous l'influence d'un champ magnétique extérieure, le mouvement orbital des électrons est légèrement modifié. L'aimantation des milieux matériels diamagnétiques est proportionnelle au champ magnétique appliqué (voir la figure 2.5). Ce type de matériaux ont une susceptibilité relative négative et

très faible. Quand on applique un champ magnétique le matériau s'aimante faiblement et l'aimantation est perdue dès que le champ magnétique est supprimé. Contrairement à la phase paramagnétique, dans les diamagnétiques, il n'y a pas de moments dipolaires dans le système.

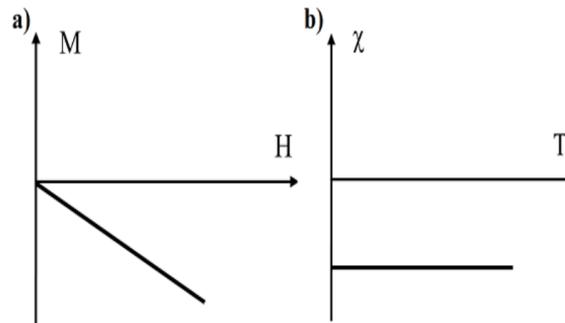


FIGURE 2.5 – (a) Variation de l'aimantation en fonction du champ appliqué et (b) la susceptibilité en fonction de la température pour un matériaux diamagnétique.

2.3 Transitions de phases

L'étude des transitions de phases est un domaine très important de la physique statistique et de la physique de la matière condensée. Une transition de phase est une transformation du système étudié provoquée par la variation d'un paramètre extérieur particulier (température, champ...).

Les états de la matière ont des propriétés physiques uniformes. Au cours d'une transition de phase, certaines propriétés d'un système thermodynamique donné, change de manière discontinue. L'exemple fondamental le plus connu de transition de phase est celui de l'eau, qui passe de l'état solide, à l'état liquide, et à l'état gazeux. Mais il existe d'autres transitions de phases : on pourra citer les cas du ferromagnétisme, de la supraconductivité, et des transitions ordre-désordre dans les alliages.

2.3.1 Classification des transitions de phases

Le premier qui a classifié les transition de phases est Paul Ehrenfest [10]. Cette classification se base sur l'étude de la continuité des dérivées n^{eme} de l'énergie libre.

2.3.1.1 Les transitions de phases de premier ordre

Les transitions de phases de premier ordre sont celles pour lesquelles la dérivée de l'énergie par rapport à une des variables thermodynamiques (P , T , V) est discontinue. Elles sont aussi caractérisées par l'existence d'une chaleur latente non nulle. Au cours de ces transitions le système absorbe ou émet une quantité d'énergie fixe à T finie. Par exemple les transitions solide/liquide/gaz sont de premier ordre.

2.3.1.2 Les transitions de phases de second ordre

Les transitions de phases de second ordre sont celles pour lesquelles la dérivée première par rapport à une des variables thermodynamiques de l'énergie libre est continue, mais la dérivée seconde est en revanche discontinue et il n'y a pas de chaleur latente associée. C'est le cas par exemple de la transition ferromagnétique/paramagnétique.

Même si il a échoué dans sa description des systèmes réels, Ehrenfest a permis d'introduire des idées nouvelles dans son époque.

2.3.2 Théorie de Landau sur les transition de phases

2.3.2.1 Définition de paramètre d'ordre

Le premier qui a introduit la notion de paramètre d'ordre est le physicien Lev Landau pour l'étude des transitions de phases. La transition d'une phase peut avoir lieu sous l'effet de la variation d'un paramètre extérieur tels que la température, le champ magnétique appliqué ou la pression.

2.3.2.2 Paramètre d'ordre en fonction de la température

Les phases avant et après une transition de phase possèdent souvent des symétries [10]. La phase haute température est généralement plus symétrique que la phase basse température. On parle alors de brisure de symétrie lors du passage de haute température vers basse température. Pour décrire les transitions de phases avec changement de symétrie, Landau a introduit la notion de paramètre d'ordre m .

- . $m = 0$ dans la phase haute température, symétrique, désordonnée.
- . $m \neq 0$ dans la phase basse température, moins symétrique, ordonnée.

L'ordre d'une transition au sens de Landau est défini comme ceci : les transitions du premier ordre sont celles pour lesquelles le paramètre d'ordre est discontinu à la transition, et les transitions du second ordre sont celles pour lesquelles le paramètre d'ordre est continu à la transition. Quelques exemples de paramètre d'ordre sont donnés dans le tableau 2.1.

Nature de la transition	Paramètre d'ordre	Champ conjugué
gaz-liquide	$ \rho - \rho_{gaz} $	potentiel chimique μ
para-ferromagnétique	aimantation M	champ magnétique H
para-antiferromagnétique	aimantation sous réseau M_1, M_2	
para-ferroélectrique	polarisation P	champ électrique E
ordre-désordre	prob. d'occupation des deux sites	diff. potentiels chimiques
séparation d'un binaire AB	fractions molaires x_A, x_B	diff. potentiels chimiques
supraconductivité	gap supraconducteur Δ	
superfluidité	fonction d'onde superfluide	

TABLE 2.1 – Quelques exemples de paramètre d'ordre.

Considérons une transition de phase avec brisure de symétrie pour laquelle on peut définir un paramètre d'ordre m . A une température donnée, l'état d'équilibre correspond à une valeur de m qui minimise l'énergie libre $F(m, T)$. Au voisinage de la température de transition le paramètre d'ordre est petit, et Landau a postulé qu'on peut écrire un développement limité de l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre. Ceci donne

$$F(m, T) = F_0 + A_0(T)m + A(T)m^2 + B(T)m^3 + C(T)m^4 + \dots \quad (2.2)$$

où on arrête le développement à l'ordre quatre. Si on se spécifie au cas magnétique, on voit que pour des raisons de symétrie, les termes de puissance impaire ne doivent pas figurer dans l'expression de F . En effet, il ne doit pas y avoir de différence d'énergie entre une aimantation positive et négative. Par ailleurs, la constante C qui multiplie m^4 doit être positive pour assurer la stabilité du système pour une valeur finie ou nulle de m .

On demande à F d'avoir un minimum pour $m = 0$ aux températures supérieures à T_C . Ce qui correspond à une valeur positive de A pour $T > T_C$. Par contre, F doit avoir un minimum pour une valeur de $m \neq 0$ aux températures inférieures à T_C . La constante A doit alors être négative pour $T < T_C$. Une manière simple de rendre compte du comportement de A est de l'écrire comme $A = \alpha(T - T_C)$, où α est une constante positive indépendante de la température. On obtient alors la forme suivante pour F :

$$F(m, T) = F_0 + \alpha(T - T_C)m^2 + cm^4 \quad (2.3)$$

La valeur de m qui minimise F est solution de

$$\frac{\partial F}{\partial m} = 2\alpha(T - T_C)m + 4cm^3 = 0 \quad (2.4)$$

Pour $T > T_C$ la seule solution est $m = 0$. Pour $T < T_C$, on a trois solutions : un maximum en $m = 0$ et 2 minima pour $m = \pm \sqrt{\alpha(T_C - T)/2c}$. Au voisinage de T_C le paramètre d'ordre se comporte comme $\sqrt{T_C - T}$.

2.3.2.3 Comportement de la capacité calorifique

On peut examiner le comportement de la capacité calorifique à la transition [10] :

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V$$

avec $S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -\frac{\partial F_0}{\partial T} - \alpha m^2$.

Dans la phase de haute symétrie, pour des températures au voisinage de T_0 et pour un paramètre d'ordre $m = 0$:

$$C_V = \left(-T \frac{\partial^2 F_0}{\partial T^2} \right)_{T=T_C}$$

Dans la phase de basse symétrie, pour des températures au voisinage de T_C , et pour un paramètre d'ordre $m \neq 0$:

$$C_V = \left(-T \frac{\partial^2 F_0}{\partial T^2} \right)_{T=T_C} + \frac{\alpha^2 T_C}{2c}$$

On voit que C_v est discontinue à la transition avec une discontinuité de $\Delta C_v = -\alpha^2 T_C / 2C$.

2.3.2.4 Comportement de la susceptibilité

On peut aussi examiner le comportement de la susceptibilité du paramètre d'ordre :

$$\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial h} \right)_T,$$

où h est la variable conjuguée de m .

Le potentiel thermodynamique est donné par :

$$F^* = F(T, m) - mh$$

dont l'équation de minimisation est donnée par :

$$\frac{\partial F^*}{\partial m} = 2\alpha(T - T_C)m + 4cm^3 - h = 0,$$

et a pour solution $m(T, h)$. En dérivant par rapport a h , on a

$$2\alpha(T - T_C)\chi + 12\chi cm^2 - 1 = 0.$$

Dans la phase haute température $m=0$ et la susceptibilité est :

$$\chi = \frac{1}{2\alpha(T-T_C)}$$

dans la phase basse température ($m^2 = \frac{\alpha(T_C-T)}{2c}$)

et

$$\chi = \frac{1}{4\alpha(T_C-T)}$$

On remarque que χ varie en $\frac{1}{|T-T_C|}$ et diverge à la transition.

2.3.3 Fonction de corrélation-longueur de corrélation

Dans l'étude des transitions de phases une quantité très importante est la fonction de corrélation définie par : [10]

$$G(\vec{r}) = \langle \mathbf{S}(0) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle - \langle \mathbf{S}(0) \rangle \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle \quad (2.5)$$

où $\mathbf{S}(0)$ est le spin à un point choisi comme origine, $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ est le spin à la position \mathbf{r} et $\langle \dots \rangle$ signifie la moyenne thermique .

La phase désordonnée c'est à dire loin de la température de transition T_C la fonction de corrélation est nulle. La fonction de corrélation est non nulle ($G(\mathbf{r}) \neq 0$) lorsque on est proche de la température critique T_C .

On définit la longueur de corrélation " ξ " comme la distance pour laquelle $G(\mathbf{r})$ n'est plus significative, c'est à dire les fluctuations de deux spins à une distance $r < \xi$ sont dites corrélées. Par définition la longueur de corrélation est défini par l'expression suivante :

$$G(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{S}(0) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle = A \frac{\exp\left(\frac{-r}{\xi}\right)}{r^{\frac{d-1}{\xi}}}, \quad (2.6)$$

où A est une constante et d est la dimension de l'espace .

Dans le cas de la transition du premier ordre les phases ordonnée coexistent et la longueur de corrélation par conséquent est finie. Dans le cas de la transition du deuxième ordre la longueur de corrélation diverge (tend vers l'infinie) près du point critique, c'est-à-dire que tous les spins

du système sont corrélés à la transition.

2.3.4 Exposants critiques et classes d'universalités

Dans le cas d'une transition du seconde ordre on peut définir les exposants critiques au voisinage de la température T_C pour étudier le comportement des grandeurs physiques telles que la capacité calorifique, la susceptibilité... On les représente comme des lois de puissance de $|T - T_c|$. Il sont définis par

$$m \sim |T - T_0|^\beta \qquad C_h \sim |T - T_0|^{-\alpha}$$

$$\chi \sim |T - T_C|^{-\gamma} \qquad \xi \propto \left(\frac{T-T_C}{T_C}\right)^{-\nu}$$

où $\alpha, \beta, \gamma, \nu$, sont des exposants critiques, et m, χ, C_h, ξ , représentent respectivement le paramètre d'ordre, la susceptibilité, la chaleur spécifique et la longueur de corrélation.

2.3.4.1 Classe d'universalité

Le grand intérêt des exposants critiques est qu'ils ne dépendent que de propriétés très générales des systèmes et non du détail des interactions. Ainsi, pour les systèmes ayant des interactions à courte portée, comme les liquides ou les matériaux ferromagnétiques, les exposants critiques ne dépendent que de la dimensionnalité spatiale d du système et de celle du paramètre d'ordre m . Ce sont donc d'excellentes quantités pour caractériser un système au voisinage du point critique et pour tester la validité des modèles. On dit qu'ils obéissent à des lois d'universalité car ils permettent de définir des classes qui englobent des transitions de phase qui peuvent paraître à première vue très différentes [11]. Un exemple de quelques classes d'universalité est donnée dans le tableau 2.2.

Classe	Sym	α	β	γ	ν	η	T_c
2d Ising	Z_2	0	$\frac{1}{8}$	$\frac{7}{4}$	1	$\frac{1}{4}$	2.27(carré)
2d Potts(q=3)	Z_3	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{9}$	$\frac{13}{9}$	$\frac{5}{6}$	$\frac{4}{15}$	0.36
2d Potts(q=4)	Z_4	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{7}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{3}$
3d Ising	Z_2	0.11	0.325	1.241	0.63	0.031	4.51(cub.)
3d XY	O(2)	-0.007	0.345	1.316	0.663	0.033	2.24(cub.)
3d Heisenberg	O(3)	0.115	0.3645	1.386	0.705	0.033	1.45(cub.)
Champ moyen		0	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2}$	0	

TABLE 2.2 – Quelques exemples de classes d'universalités et leur exposants critiques.

2.4 Modèles magnétiques

2.4.1 Le modèle de Heisenberg

Dans la théorie du magnétisme, le modèle de Heisenberg est un modèle de spin à trois composantes. L'interaction entre les spins \mathbf{S}_i et \mathbf{S}_j localisés aux sites \mathbf{r}_i et \mathbf{r}_j s'écrit :

$$- J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.7)$$

où J_{ij} représente la constante d'échange [13]. Dans le cas le plus simple où les interactions sont limitées aux spins les plus proches voisins et que ces constantes d'échanges sont identiques, égales à J , le hamiltonien de Heisenberg pour un solide s'écrit :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \quad (2.8)$$

où la somme s'effectue sur les paires de spins premiers voisins. Pour $J > 0$, \mathcal{H} est minimal quand les spins sont parallèles. C'est l'état fondamental ferromagnétique [18]. Dans le cas où $J < 0$, \mathcal{H} est minimal quand les spins voisins sont antiparallèles. C'est l'état fondamental antiferromagnétique [18].

2.4.2 Le modèle d'Ising

Le modèle d'Ising (parfois aussi appelé modèle de Lenz-Ising), dénommé d'après le physicien Ernst Ising, est un modèle de physique statistique issu du modèle de Heisenberg auquel on rajoute une forte anisotropie uniaxiale. Il a été utilisé pour modéliser différents phénomènes dans lesquels des effets collectifs sont produits par des interactions locales entre particules à deux états. Ce modèle est beaucoup utilisé dans l'étude des transitions de phase, il sert non seulement pour décrire les spins dans le cas de forte anisotropie axiale, mais aussi pour modéliser quelques systèmes à deux états, tels que les alliages binaires où il y a un mélange de deux types d'atomes A et B, représentés par les spins $+1(\uparrow)$ et $-1(\downarrow)$. Le hamiltonien d'Ising est donné par : [14]

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z \quad (2.9)$$

Il est relativement facile de résoudre le modèle d'Ising à une dimension et il ne possède pas de transition de phase. A deux dimension, ce modèle a aussi été exactement résolu par Onsager en (1944) et a une transition de phase à une température critique finie [15] [14].

Le modèle d'Ising à trois dimension n'est toujours pas résolu, mais il existe des solutions numériques basés sur des simulation Monte-Carlo.

2.5 Champ moléculaire de Weiss

Cette théorie du champ moléculaire de Weiss permet d'expliquer une grande partie des propriétés magnétiques propre aux milieux matériels, c'est la première théorie qui a permis d'expliquer le comportement des matériaux ferromagnétiques et les matériaux ferrimagnétique introduisant la notion d'ordre magnétique. L'hypothèse du champ moléculaire permet aussi de retrouver l'ensemble des propriétés essentielles des ferromagnétiques (aimantation spontanée, transition de phase vers un état paramagnétique) [16].

2.5.1 Approximation du champ moléculaire de Weiss ou champ moyen

La théorie de Landau permet de décrire les états magnétiques de la matière au voisinage de leurs température critique. Toutefois, cette description néglige l'effet des fluctuations, une hypothèse qui semble convenir davantage aux faible températures devant la température critique. Lorsqu'on néglige les fluctuations gaussiennes du paramètre d'ordre, il est en effet possible de construire une théorie microscopique du magnétisme qui généralise la théorie de Landau à toutes températures. C'est la théorie du champs moyen ou champ moléculaire. Malgré ses limitations, cette méthode permet de décrire quantitativement presque tous les ordres magnétiques possibles des matériaux magnétiques. De plus, de nombreux raffinements ont été apportés à cette théorie. C'est donc devenu un outil incontournable en physique de la matière condensée [15]. On peut illustrer l'approximation en l'appliquant au modèle d'Ising. Le hamiltonien du système en absence de champ externe est donné.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z \quad (2.10)$$

La théorie du champ moyen consiste à remplacer la valeur de tous les spins proches voisins par leurs valeurs moyennes $\langle S^z \rangle$. Dans ce cas on a un système d'un seul spin dans un champ effectif $H = -zJ \langle S^z \rangle$, le hamiltonien du système devient alors

$$\mathcal{H} = -zJ \langle S^z \rangle \sum_i S_i, \quad (2.11)$$

où z représente le nombre des spins proches voisins. La valeur moyenne de $\langle S^z \rangle$ est :

$$\langle S^z \rangle = \frac{+1 \times e^{zJ\langle S^z \rangle/k_bT} - 1 \times e^{-zJ\langle S^z \rangle/k_bT}}{e^{zJ\langle S^z \rangle/k_bT} + e^{-zJ\langle S^z \rangle/k_bT}} \quad (2.12)$$

On obtient donc

$$\langle S^z \rangle = \tanh \left(\frac{zJ}{k_bT} \langle S^z \rangle \right) \quad (2.13)$$

C'est une équation transcendante, et sa résolution doit se faire graphiquement ou numériquement comme montré sur la figure 2.6.

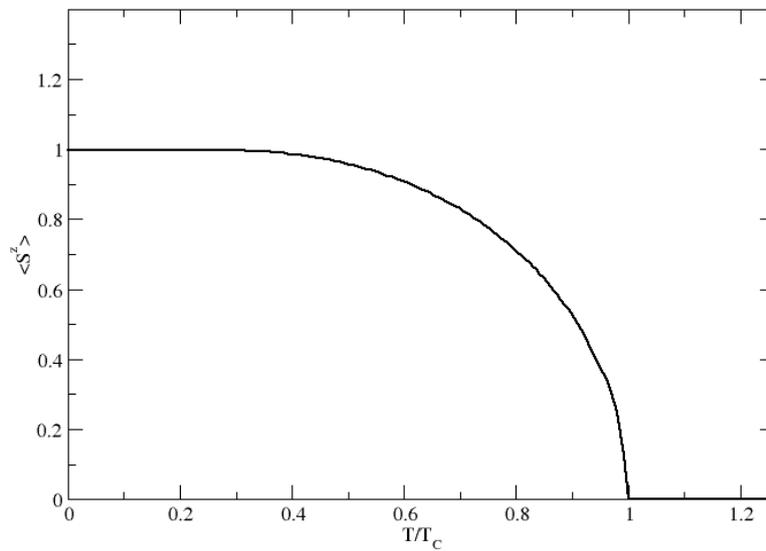


FIGURE 2.6 – Solution numérique de l'équation transcendante donnant la valeur moyenne du spin $\langle S^z \rangle$

3

Méthodes de Simulation

3.1 Introduction

L'étude de la plupart des systèmes physiques réels ne peut se faire par des méthodes analytiques seules. Le recours à des méthodes de simulations numériques est par conséquent indispensable. Dans ce chapitre nous allons discuter de deux méthodes de simulation adaptées à l'étude de systèmes de spins en interaction : il s'agit de la méthode de Monte Carlo et de la méthode de la dynamique de spin. La première est bien plus efficace pour la description des propriétés d'équilibre de ces systèmes. Quant à la deuxième, elle est nécessaire pour l'étude des propriétés dynamiques. C'est cette méthode qui est implémentée dans ce travail et nous en parlerons un peu plus en détail.

3.2 Monte Carlo

Monte Carlo réfère à un large éventail de méthodes numériques basées sur l'échantillonnage par la biais de nombres aléatoires. Ces méthodes peuvent être utilisées par exemple pour estimer des intégrales, notamment à de larges dimensions où les autres méthodes de quadrature ne sont plus utilisables. En physique, la première utilisation de la méthode a été pour la description d'un système de sphères dures [17]. Elle a ensuite été adaptée à bien d'autres problèmes : on peut citer l'étude des propriétés d'équilibre de systèmes de spins, et le problème de diffusion (Monte Carlo cinétique).

Pour étudier un systèmes de spins en interaction, il faut calculer des moyennes statistiques d'observables, telles que l'énergie et l'aimantation. Dans la méthode Monte Carlo cela équivaut à générer des configurations aléatoirement dans l'espoir d'échantillonner au mieux l'espace des configurations (ou espace des phases). La méthode la plus simple consiste à affecter de manière aléatoire des orientations à chacun des spins dans le système. Mais cette façon de faire n'est pas satisfaisante du fait qu'on passe beaucoup de temps à échantillonner des régions de l'espace des configurations dont la contribution au moyennes statistiques recherchées est négligeable. Cette méthode porte le nom d'échantillonnage simple. Une amélioration de cette méthode permet d'échantillonner les configurations qui contribuent le plus aux moyennes statistiques. Cette façon de faire s'appelle échantillonnage par importance. Dans ce qui suit nous parlerons de ces deux méthodes, avec un exemple simple d'application au modèle d'Ising.

3.2.1 Échantillonnage simple

On se spécifie au cas du modèle d'Ising pour illustrer l'échantillonnage simple. Dans ce modèle un spin quelconque ne peut être que dans deux états possibles : up ou +1 et down ou -1. L'échantillonnage simple consiste à générer N configurations aléatoires du système. Dans une

configuration donnée on affecte de manière aléatoire un état (up ou down) à chacun des spins formant le système. La valeur moyenne d'une observable A est alors donnée par :

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{s=1}^N A(s) \exp[-\beta E(s)]}{\sum_{s=1}^N \exp[-\beta E(s)]}, \quad (3.1)$$

avec $\beta = \frac{1}{k_B T}$ est où la sommation s'effectue sur toutes les configurations générées. La valeur moyenne $\langle A \rangle$ dépend du nombre de configurations : c'est-à-dire quand N augmente, la précision de la valeur moyenne augmente.

Cette méthode souffre de deux inconvénients majeurs. Le premier est le fait que les configurations ainsi générées correspondent au maximum de l'entropie et par conséquent sont plutôt caractéristiques des hautes températures. Si on veut étudier le système à des températures de l'ordre de ou inférieures à l'interaction mutuelle entre les spins, les configurations générées par l'échantillonnage simple auront un poids statistique négligeable et ne permettent pas un échantillonnage représentatif de l'espace des configurations possibles. Le deuxième inconvénient est que cette méthode est totalement "symétrique", et par conséquent ne permet pas d'observer une éventuelle transition de phase en diminuant la température. Il est vrai que ce problème peut être remédié en introduisant un faible champ appliqué/extérieur qui permettrait de briser la symétrie. C'est pour remédier au plus sérieux problème que la méthode de l'échantillonnage par importance est mise en avant.

3.2.2 Échantillonnage par importance

En utilisant toujours le modèle d'Ising pour illustration, l'échantillonnage par importance s'agit de générer comme précédemment des configurations de spins de manière aléatoire, mais avec une distribution qui suit de près la distribution de Boltzmann. Ceci permet en effet un meilleur échantillonnage de l'espace des configurations et par conséquent de meilleures moyennes statistiques, comparativement à l'échantillonnage simple. La valeur moyenne d'une grandeur physique A est maintenant donnée par :

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N A(s), \quad (3.2)$$

où N est le nombre de configurations choisies à la température T , et $A(s)$ est la valeur de A dans la configuration s . L'échantillonnage par importance peut être implémenté par un algorithme simple, appelé Metropolis et que nous détaillerons à présent.

3.2.3 Algorithme Metropolis

L'algorithme de Metropolis est l'algorithme Monte Carlo le plus célèbre. Il a été créé par Nicolas Metropolis et ces collègues dans les années cinquante pour des simulations de gaz de sphères dures. Il est utilisé aussi pour illustrer plusieurs des concepts généraux impliqués dans un calcul Monte Carlo réel, y compris l'équilibration, la mesure de valeurs moyenne et le calcul des erreurs [17].

Un cycle Monte Carlo consiste à visiter en moyenne tous les spins du système et à tenter de les flipper un à un. On choisit un spin au hasard et puis on calcule la différence d'énergie ΔE qui résulterait si on flipperait le spin, c'est à dire si on changeait S_i en $-S_i$. Si ΔE est négatif, on accepte le flip en accord avec la minimisation de l'énergie interne. Si ΔE est positif, on accepte le flip avec une probabilité de $\exp[-\Delta E/T]$. Ceci est fait pour rendre compte des effets de l'agitation thermique qui permet au système de surpasser des barrières énergétiques afin d'explorer l'espace des configurations. En pratique, on génère un nombre aléatoire r et on le compare à $\exp[-\Delta E/T]$. Le flip est accepté si $r < \exp[-\Delta E/T]$. Si le flip est accepté, on met à jour l'énergie totale et l'aimantation pour tenir compte du changement. Et puis un autre spin est tiré au hasard et on tente de le flipper. On procède de cette manière un nombre de fois égal au nombre de spins dans le système. Le tirage des spins se fait au hasard pour limiter les corrélations entre les différentes configurations ainsi générées. Et en moyenne on visite chaque spin une fois dans un cycle Monte Carlo. En se spécifiant au modèle d'Ising sur un réseau carré à deux dimensions, les étapes du déroulement de l'algorithme de Metropolis sont les suivantes :

1. On fixe les paramètres du système à simuler : la taille latérale L du système, la constante d'échange J , la température T , et la liste des premiers voisins de chaque spin. Dans cette étape on génère également l'état initial de chaque spin en lui affectant aléatoirement $+1$ ou -1 .
2. On thermalise le système en effectuant un nombre important de cycles Monte Carlo, afin de ramener la température effective du système à la température à laquelle on veut le simuler.
3. On procède à effectuer un nombre important de cycles Monte Carlo afin d'effectuer des mesures. Afin de limiter les corrélations on laisse le système évoluer un certain nombre de cycles entre deux mesure successives.
4. On calcule les moyennes des observables mesurées (énergie totale par exemple) et on calcule d'autres observables qui dépendent de ces moyennes (chaleur spécifique par exemple).

3.3 La dynamique de spin

Les simulations informatiques ont révolutionné notre capacité à comprendre le comportement de nombreux types de modèles en physique statistique. Parmi ces méthodes nous avons vu la Monte Carlo, qui offre des informations sur les propriétés statiques des systèmes mais ne peut rendre compte des propriétés en fonction du temps. En revanche la simulation par la dynamique moléculaire et la dynamique de spin permet l'amélioration de notre compréhension des propriétés dynamiques du système à plusieurs corps [20].

La dynamique de spin est similaire à la dynamique moléculaire. En dynamique moléculaire, les équations (newtoniennes) de mouvement des atomes sont intégrées numériquement. Les forces qui agissent sur un atome donné sont dérivées du potentiel d'interaction entre cet atome et ses voisins. Ainsi on a à tout instant connaissance des positions et des vitesses des atomes qui constitue le système. Pour ce qui est des spins, les forces sont plutôt des couples qui agissent sur chaque spin. Le couple de force appliqué sur un spin donné est dérivé lui aussi du "potentiel" d'interaction entre ce spin et ses voisins. En présence d'un champ magnétique appliqué un couple supplémentaire agit sur tous les spins du système. L'effet net de tous les couples qui agissant sur un spin est le changement de l'orientation spatiale du spin, sans pour autant changer son module.

3.3.1 Quelques applications de la dynamique de spin

3.3.1.1 Enregistrement magnétique

La réduction de la taille d'un bit d'information nécessite l'augmentation de l'énergie d'anisotropie afin de réduire la probabilité de renversement de l'aimantation par agitation thermique. Ceci veut dire également qu'il devient impossible d'écrire de l'information à l'aide d'une tête d'écriture dont le champ magnétique est limité à $1.8 T$. Une alternative est possible : celle d'utiliser un laser pour chauffer localement le disque est réduire ainsi son anisotropie effective, de sorte que la tête de lecture puisse être utilisée. Une autre possibilité est le tout-optique (all-optical), où le chauffage à lui seul induit un renversement de l'aimantation, permettant ainsi d'écrire sur le disque sans avoir recours au champ magnétique produit par une tête d'écriture. Ces phénomènes ont lieu à des échelles de temps de l'ordre du picoseconde ou moins, et leur compréhension passe par le type de simulation offert par la dynamique de spin [8].

3.3.1.2 Transfert de spin par un courant polarisé en spintronique

Une jonction à effet tunnel magnétique est composée de deux couches magnétiques séparées par une barrière non-magnétique, qui peut être conductrice –effet GMR (Giant Magnetoresistance)– ou isolante –effet TMR (Tunneling Magnetoresistance)–. Une des deux couches magnétique possède une aimantation fixe par la proximité d'une couche anti-ferromagnétique. La deuxième

couche magnétique a une aimantation qui peut changer de direction : elle peut être parallèle ou anti-parallèle à l'aimantation de la couche fixe, et on parle alors de couche libre. En passant un courant d'électron de la partie fixe vers la partie libre, l'aimantation de cette dernière peut être aligné selon la direction de l'aimantation de la première. En inversant le sens du courant on inverse la direction de l'aimantation de la couche libre, qui devient alors anti-parallèle à celle de la couche fixe. Bien sur, le renversement a lieu seulement si le courant est suffisamment élevé. La résistance de la jonction passe d'une valeur faible lorsque les deux aimantations sont parallèles, à une valeur élevée quand les deux aimantations sont anti-parallèles. Ces deux états de résistance peuvent donc servir à encoder "1" et "0", respectivement. Ces jonctions à effet tunnel magnétique sont à la base d'un nouveau type de mémoire appelée STT-MRAM (Spin Torque Transfer Magnetic Random Access Memory), dont les avantages par rapport aux autres types de mémoire incluent la non-volatilité et une consommation moindre, de l'énergie électrique [19]. La dynamique de spin peut être utilisée pour étudier plusieurs aspect du transfert de spin : on peut citer la dynamique de l'aimantation, le temps de renversement de l'aimantation, et les courants critiques.

3.3.1.3 Ondes de spins

Le facteur de structure dynamique peut être calculé par la dynamique de spin, et la relation de dispersion des ondes de spin est obtenue à partir des pics du facteur de structure. Comme exemple, dans [22] un calcul du facteur de structure dynamique de $RbMnF_3$ à l'aide de la dynamique de spin est rapporté, avec une comparaison concluante avec le facteur obtenu par la technique de la diffusion inélastique de neutrons.

3.3.2 Équation du mouvement

Le premier terme dans l'équation de mouvement d'un spin en présence d'un champ magnétique est donné par

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\gamma_L \mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}. \quad (3.3)$$

Ce terme peut être obtenu à partir de la physique classique et de la mécanique quantique. Il décrit la précession du dipôle magnétique (spin) autour du champ magnétique.

L'introduction d'un terme d'amortissement est nécessaire pour deux raisons :

1. Dans la réalité le système de spins n'est pas totalement indépendant, mais il est couplé à nombre d'autres degrés de libertés, tels que les phonons et les électrons. Pour tenir compte de ce couplage, il est nécessaire d'introduire un terme phénoménologique supplémentaire

qui tient compte de la dissipation de l'énergie et de l'amortissement du "mouvement" des spins. Landau et Lifshitz ont introduit un terme sous la forme

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\frac{\lambda_L}{M_s} \mathbf{M} \times (\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}) \quad (3.4)$$

Mais comme on le verra plus bas, une autre formulation est possible, et c'est elle qui est utilisée de nos jours.

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\gamma_L \mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} - \frac{\lambda_L}{M_s} \mathbf{M} \times (\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}) \quad (3.5)$$

2. On sait que l'effet d'un champ magnétique extérieur est d'aligner l'aimantation selon sa propre direction. Or le terme qui décrit la précession seule ne peut conduire à cet alignement. Un autre terme est donc nécessaire, et il paraît que la présence de l'amortissement conduit également à un alignement de l'aimantation avec un champ appliqué.

Gilbert a introduit un terme d'amortissement qui est proportionnel au taux de variation temporelle de l'aimantation. Il ressemble en ce sens au terme d'amortissement dans le mouvement d'une particule classique, qui est lui proportionnel à la vitesse de la particule. L'équation de mouvement s'écrit alors

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\gamma \mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} - \frac{\lambda}{M_s} \mathbf{M} \times \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t}, \quad (3.6)$$

où λ est la constante d'amortissement. Il est facile d'obtenir l'équation de Landau-Lifshitz à partir de la présente équation. On écrit

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\frac{\gamma}{1 + \lambda^2} \mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} - \frac{\gamma \lambda}{1 + \lambda^2} \frac{1}{M_s} \mathbf{M} \times \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t}, \quad (3.7)$$

et on fait les correspondances suivantes

$$\gamma_L = \frac{\gamma}{1 + \lambda^2} \quad (3.8)$$

$$\lambda_L = \frac{\gamma \lambda}{1 + \lambda^2} \quad (3.9)$$

On remarque que dans la limite d'un grand amortissement, l'équation de Landau-Lifshitz et l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert se comporte différemment. En effet dans cette limite, la première donne $\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} \rightarrow \infty$ et la deuxième donne $\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} \rightarrow 0$. On sait que dans la réalité quand l'amortissement est important, le mouvement devient lent. Donc, on voit bien que c'est l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert qui décrit le mieux la réalité.

Si on remplace le vecteur de l'aimantation par le vecteur de spin, l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) s'écrit sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} = -\frac{\gamma}{1 + \lambda^2} \mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_{eff}^i - \frac{\gamma \lambda}{1 + \lambda^2} \mathbf{S}_i \times (\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_{eff}^i), \quad (3.10)$$

où \mathbf{S}_i est le vecteur qui représente l'orientation du moment magnétique de spin au site i , γ le facteur gyromagnétique, \mathbf{H}_{eff}^i est le champs magnétique effectif au site i , et λ est l'amortissement. L'équation atomistique LLG décrit l'interaction d'un moment de spin atomique i avec un champ magnétique effectif, qui est obtenu à partir de la première dérivée négative de l'hamiltonien de spin complet :

$$\mathbf{H}_{eff}^i = -\frac{1}{\mu_s} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i}, \quad (3.11)$$

où μ_s est le moment de spin local. L'inclusion de moment du spin dans le champ effectif est important tel que le champ effectif est exprimé en unité de Tesla, étant donné que l'hamiltonien est exprimé en joules. Les énergies typiques dans l'hamiltonien sont dans la gamme (10 μeV -100 meV). On obtient des champs typiquement dans la gamme de (0.1-100 T), le moment de spin étant de même ordre que celui de moment magnétique de Bohr [23].

L'équation de mouvement du spin telle que formulée jusqu'à présent correspond à $T = 0K$, où le spin prend une direction bien définie qui minimise son énergie, en s'orientant parallèlement au champ effectif. En réalité, et à cause du couplage aux autres degrés de libertés et à température finie, le système de spins échange constamment de l'énergie avec les autres systèmes. A température finie l'orientation d'un spin donné n'est donc pas fixe : elle fluctue de manière continue. C'est pour incorporer ces effets de la température, que nous introduisons dans ce qui suit la dynamique de Langevin.

3.3.3 Historique du modèle de Langevin

En 1827, le botaniste R. Brown remarque dans son microscope le mouvement incessant et irrégulier de petites particules de pollen en suspension dans l'eau. On parle de mouvement brownien lorsque une particule est en suspension dans un fluide et le rapport entre sa masse et la masse des molécules du fluide est très supérieur à un. L'idée selon laquelle le mouvement de la particule brownienne est une conséquence du mouvement des molécules d'un fluide, s'est ré pondue au 19ème siècle. Il faut attendre le début du 20ème avec Albert Einstein pour obtenir la première interprétation de ce phénomène [24]. Le lien du mouvement brownien avec le magnétisme à été introduit pour la première fois en 1905 par Paul Langevin. L'idée est que le moment magnétique d'un corps peut être la somme des moments magnétiques de chaque atome. L'effet (ou l'augmentation) de la température va perturber le système qui désorientant les moment magnétiques des

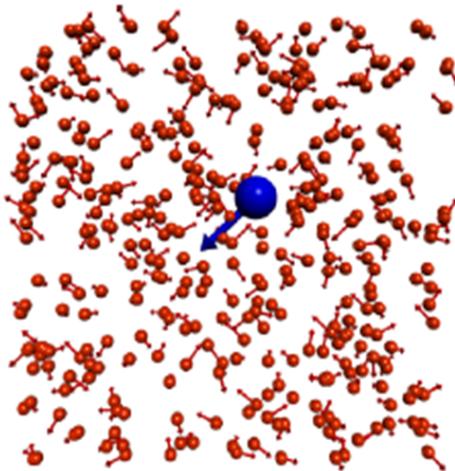


FIGURE 3.1 – Mouvement d’un objet brownien (bleu) dans un liquide (rouge). Les mouvements de toutes ces particules sont représentées par leur flèches respectives [24].

atomes [24].

L’interprétation des propriétés magnétiques des matériaux est exprimée en termes de compétition entre l’agitation thermique qui favorise le désordre et le champ magnétique qui favorise l’ordre.

3.3.4 La dynamique de Langevin

L’idée de base dans la dynamique de Langevin est de supposer que les fluctuations thermiques sur chaque site atomique peuvent être représentées par un terme gaussien de bruit blanc. Quand la température augmente, la largeur de la distribution gaussienne augmente, ce qui représente de plus fortes fluctuations thermiques.

La méthode de la dynamique de Langevin est largement utilisée pour la simulation de la dynamique de spin et incorpore le champ effectif thermique dans l’équation de LLG pour simuler l’effet thermique [25] [26]. Les fluctuations thermiques sont représentés par la distribution gaussienne $\Gamma(t)$ à trois dimension avec une moyenne de zéro. Le champ effectif thermique pour chaque spin i est donné par [23] :

$$\mathbf{H}_{th}^i = \Gamma(t) \sqrt{\frac{2\lambda k_B T}{\gamma \mu_s \Delta t}}, \quad (3.12)$$

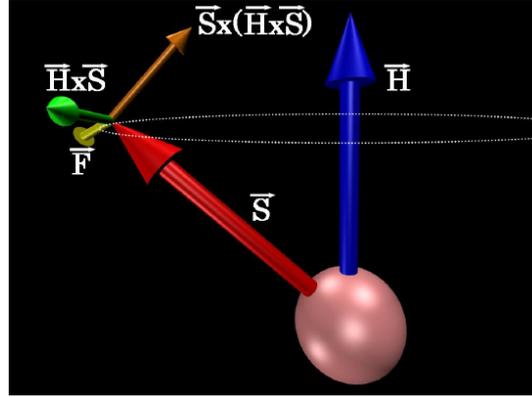


FIGURE 3.2 – Visualisation des forces qui agissent sur le spin de couleur rouge dont la précession autour du champ effectif local en bleu est matérialisée par un cercle en pointillé blanc. Le sens de rotation est donné par la flèche verte. L’amortissement est représenté par la flèche orange. La jaune est un exemple de force fluctuante aléatoire [24].

où k_B est la constante de Boltzmann, T est la température du système, λ est le paramètre d’amortissement de Gilbert, μ_s est la grandeur du moment magnétique atomique, Δt est le pas de temps d’intégration. $\Gamma(t)$ est le nombre aléatoire tiré de la distribution gaussienne avec une variance $\sigma = 1$. Dans l’implémentation nous avons utilisé la méthode de Ziggurat implémentée dans la librairie GSL (Gnu Scientific Library). On rajoute le champ thermique au terme du champ effectif dans l’équation LLG avec la dynamique de Langevin :

$$\mathbf{H}_{eff}^i = -\frac{1}{\mu_s} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} + \mathbf{H}_{th}^i. \quad (3.13)$$

La dynamique de spin est appropriée pour décrire les phénomènes magnétiques à des échelles d’espace de l’ordre de quelques nanomètres et des échelles de temps de l’ordre du picoseconde. Aux échelles inférieures, la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) est la plus utilisée. D’ailleurs on peut obtenir les paramètres utilisés dans la dynamique de spin à partir de calculs DFT : on peut citer le moment magnétique, l’énergie d’échange, et l’énergie d’anisotropie. Aux échelles supérieures (de l’ordre de quelques nanomètres à quelques microns), des approches continues sont utilisées. Elles font appel aux équations de Maxwell et on parle de micromagnétisme.

En vue de la complexité évidente des équations de mouvement pour un système de spin, il est nécessaire de recourir à des méthodes numériques pour leur intégration. Nous présentons dans ce qui suit une méthode appropriée : c’est la méthode de Heun.

3.3.5 Méthode de Heun

3.3.5.1 Définition

C'est une méthode numérique développée par Karl Heun, et qui sert à intégrer numériquement les équations différentielles ordinaires . Elle est connue aussi sous d'autre appellations, telles que la méthode d'Euler améliorée et la méthode de Rung-Kutta d'ordre 2. L'équation différentielle de premier ordre avec une condition initiale est donnée par :

$$y'(t) = f(t, y(t)) \quad y(t_0) = y_0. \quad (3.14)$$

Par le biais de la méthode de Heun, on discrétise d'abord l'intervalle et on calcule la valeur intermédiaire \tilde{y}_{i+1} , puis l'approximation finale y_{i+1} au point d'intégration suivant :

$$\tilde{y}_{i+1} = y_i + hf(t, y(t)) \quad (3.15)$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(t, y(t)) + f(t_{i+1}, \tilde{y}_{i+1})] \quad (3.16)$$

où h est le pas d'intégration et $t_{i+1} = t_i + h$.

3.3.6 Méthode de Heun pour le cas d'un système de spins

Dans la méthode de Heun la première étape (predicteur) est le calcul de la nouvelle direction de spin \mathbf{S}'_i pour un champ effectif \mathbf{H}_{eff}^i , en effectuant une étape d'intégration d'Euler standard, donnée par :

$$\mathbf{S}'_i = \mathbf{S}_i + \Delta\mathbf{S} \Delta t, \quad (3.17)$$

où

$$\Delta\mathbf{S} = -\frac{\gamma}{1 + \lambda^2}[\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_{eff}^i + \lambda\mathbf{S}_i \times (\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_{eff}^i)] \quad (3.18)$$

Le schéma de Heun ne préserve pas le module de spin, donc il est essentiel de renormaliser l'unité de la longueur de vecteur de spin \mathbf{S}_i après cette étape .

Dans la seconde étape (correcteur) on utilise alors la position de spin prédite et le champ effectif \mathbf{H}_{eff}^i pour calculer la position de spin finale. L'étape d'intégration complète est donnée par :

$$\mathbf{S}_i^{t+\Delta t} = \mathbf{S}_i^t + \frac{1}{2}[\Delta\mathbf{S} + \Delta\mathbf{S}']\Delta t, \quad (3.19)$$

où

$$\Delta \mathbf{S}' = -\frac{\gamma}{1 + \lambda^2} [\mathbf{S}'_i \times \mathbf{H}'_{eff} + \lambda \mathbf{S}'_i \times (\mathbf{S}'_i \times \mathbf{H}'_{eff})] \quad (3.20)$$

L'étape de prédiction de l'intégration est effectuée sur chaque spin dans le système avant de procéder à évaluer l'étape correction pour chaque spin. Les très longs temps de calculs nécessaires pour produire de bonnes statistique sont dus au fait qu'il faut utiliser un pas d'intégration temporelle très petit (0.1 fs). Il est par contre possible de procéder à une implémentation parallèle, soit en utilisant de multiples CPUs ou carrément des cartes graphiques GPUs (Graphical Processing Units).

3.3.6.1 Test sur un seul spin

Nous avons commencé par implémenter la méthode de Heun pour le cas simple d'un seul spin, en présence d'un champ magnétique appliqué \mathbf{H} . Seuls les termes de précession et d'amortissement sont inclus dans l'équation de mouvement. Initialement le spin est aligné suivant l'axe (OX). Le champ magnétique est appliqué suivant la direction positive de l'axe (OZ). Il se trouve qu'une solution analytique existe pour l'évolution temporelle du spin : les composantes sont données par

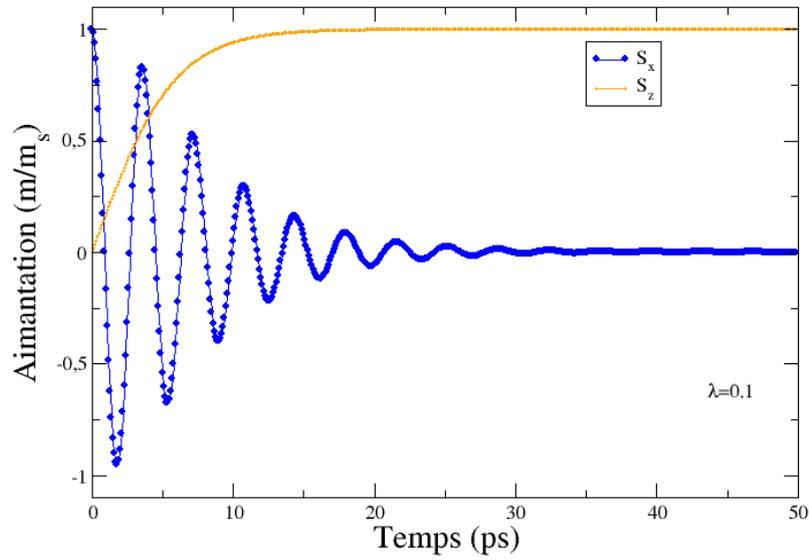
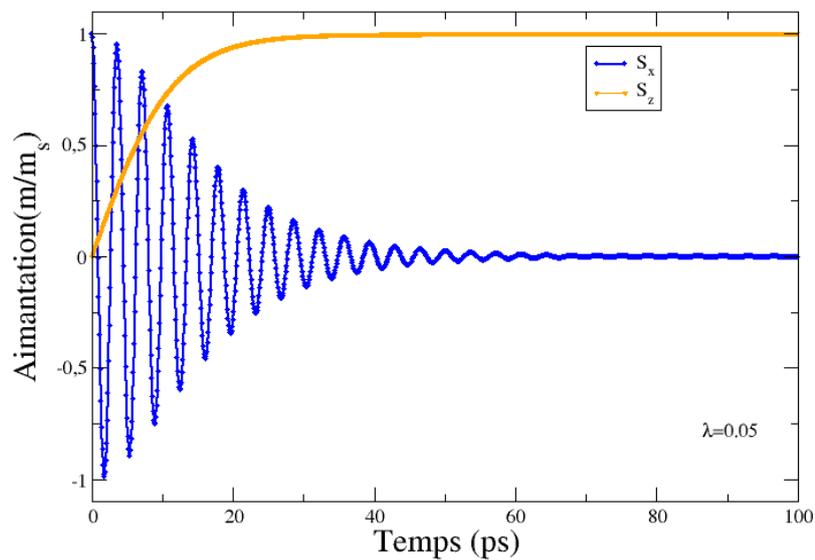
$$S_x(t) = \operatorname{sech} \left(\frac{\lambda \gamma H}{1 + \lambda^2} t \right) \cos \left(\frac{\gamma H}{1 + \lambda^2} t \right), \quad (3.21)$$

$$S_y(t) = \operatorname{sech} \left(\frac{\lambda \gamma H}{1 + \lambda^2} t \right) \sin \left(\frac{\gamma H}{1 + \lambda^2} t \right), \quad (3.22)$$

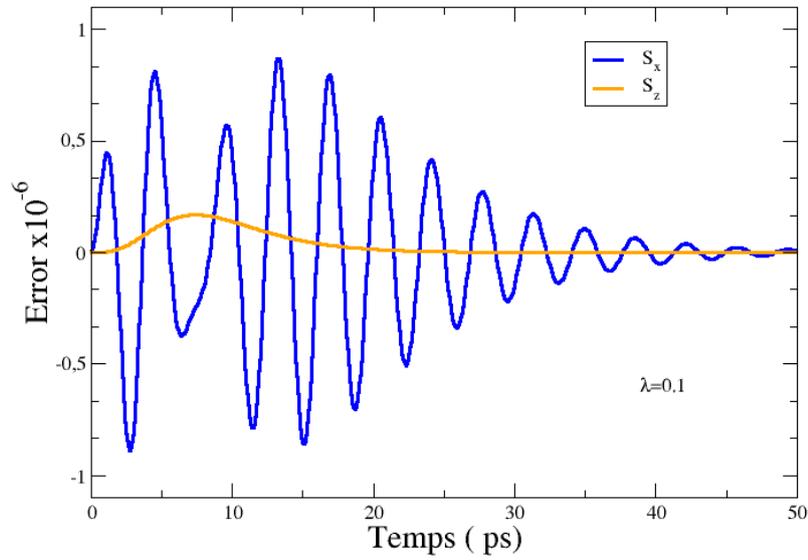
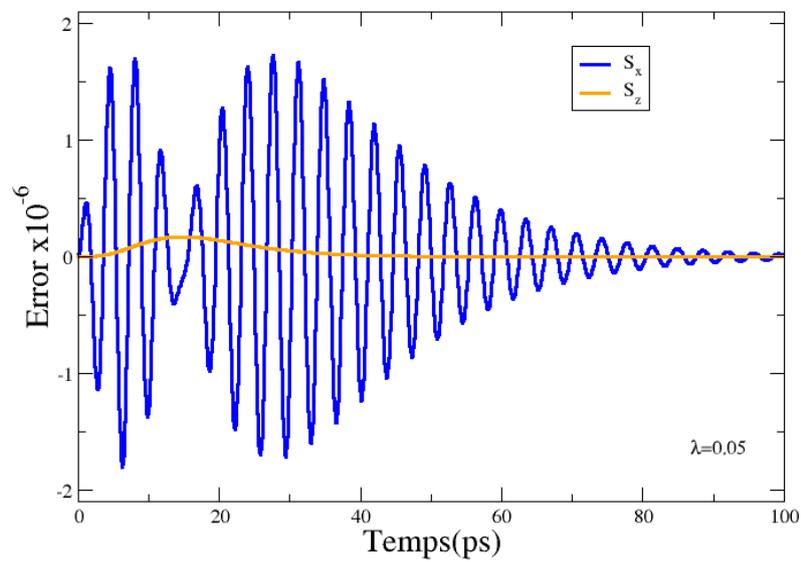
et

$$S_z(t) = \tanh \left(\frac{\lambda \gamma H}{1 + \lambda^2} t \right). \quad (3.23)$$

Pour effectuer la simulation, nous avons pris une valeur de 10 T pour le champ magnétique, et nous avons utilisé un pas temporel d'intégration de $\Delta t = 10^{-15}$ s. Nous avons effectué deux simulations : une pour une valeur de $\lambda = 0.1$ et une autre pour une valeur de $\lambda = 0.05$. Les résultats de simulation seront confrontés à la solution exacte. qui sont tracés dans les figures 3.3 et 3.4. Les figures 3.3 et 3.4 montrent l'évolution en fonction de temps d'un spin unique isolée dans un champ magnétique avec un pas de temps $h = 1$ fs, la première figure est pour $\lambda = 0.1$ et la deuxième pour $\lambda = 0.05$. Elles montrent la relaxation de l'aimantation suivant l'axe (OZ) et la précession suivant l'axe (OX), les points sont le résultat d'intégration de l'équation LLG et les lignes sont la solution exacte tracées d'après les équations (3.21), (3.22), (3.23). Les figures 3.5 et 3.6 montrent les tracés d'erreur (la différence entre la solution calculée et la solution analytique),

FIGURE 3.3 – L'évolution temporelle d'un spin unique dans un champ magnétique pour $\lambda = 0.1$.FIGURE 3.4 – L'évolution temporelle d'un spin unique dans un champ magnétique pour $\lambda = 0.05$.

la première pour la constante d'amortissement $\lambda = 0.1$ et la deuxième pour $\lambda = 0.05$.

FIGURE 3.5 – La différence entre la solution analytique et calculée pour $\lambda = 0.1$.FIGURE 3.6 – La différence entre la solution analytique et calculée pour $\lambda = 0.05$.

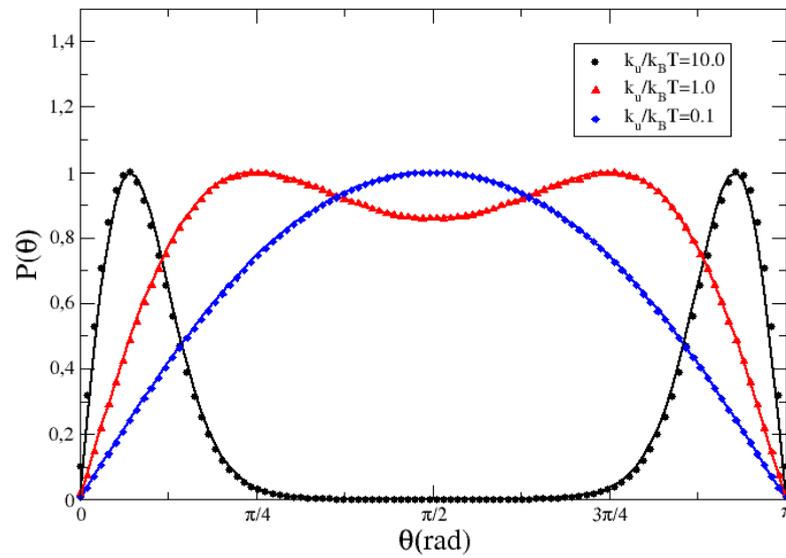
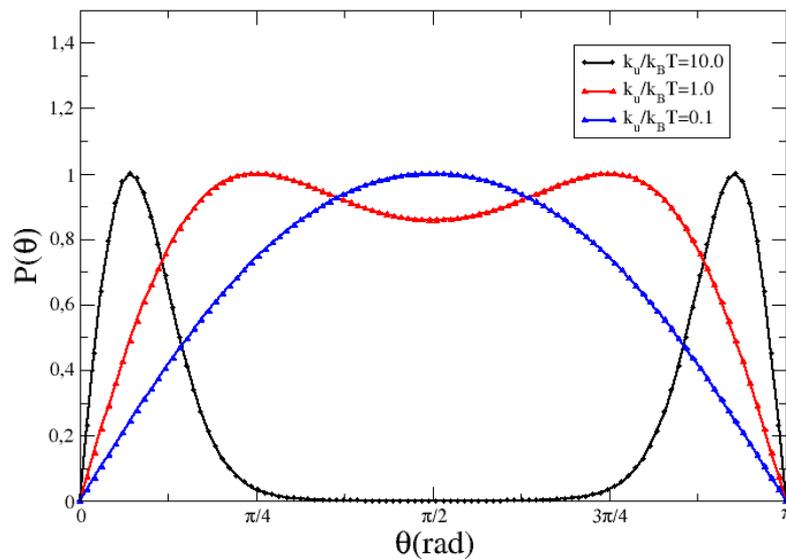
3.3.7 Test de simulation d'un seul spin avec l'effet de champ thermique

Après avoir validé l'implémentation de la méthode de Heun dans le cas d'un spin en présence d'un champ appliqué, nous passons maintenant à l'inclusion du terme de Langevin. Nous prenons le cas d'un seul spin encore une fois, en présence d'une anisotropie uniaxiale et du champ thermique de Langevin, mais en absence d'un champ magnétique appliqué. Initialement, le spin est orienté parallèlement à l'axe d'anisotropie (de facile aimantation pris comme étant l'axe (OZ)). Il est clair qu'à température nulle, le spin restera indéfiniment dans sa position initiale. A température finie, l'effet de l'agitation thermique est d'éloigner le spin l'orientation parallèle à l'axe (OZ). On définit θ comme étant l'angle que fait le spin avec l'axe (OZ). Le but de la simulation est de trouver la distribution de probabilité de l'angle θ . Cette distribution peut être obtenue analytiquement et elle a la forme [23] :

$$P(\theta) \propto \sin \theta \exp\left(-\frac{k_u \sin^2 \theta}{k_B T}\right) \quad (3.24)$$

où θ est l'angle entre l'axe facile aimantation et le vecteur de spin, k_u est la constante d'anisotropie. Pour effectuer la simulation, nous avons pris une valeur de $k_u = 6.69 \times 10^{-24}$ J/atome, et une valeur de $\lambda = 0.1$. Nous avons effectué deux séries de simulation : une avec $\Delta t = 1$ fs et une avec $\Delta t = 0.1$ fs. Dans chaque série, trois valeurs de la température, en unité de k_u sont considérées : $k_u/k_B T = 0.1, 1.0, \text{ et } 10.0$. La thermalisation est effectuée pour un temps de 0.5 ns, et les mesures sont effectuées pendant 1 μs . Pour chaque valeur de température et de Δt , nous avons calculé une moyenne sur trois calculs différents.

Les figures 3.7 et 3.8 montrent la distribution de probabilité en fonction de l'angle θ pour un seul spin avec anisotropie pour différentes températures $k_u/k_B T$, les lignes sont la solution analytique obtenue à partir de l'équation (3.24). La première figure pour $\Delta t = 1$ fs et la deuxième figure pour $\Delta t = 0.1$ fs, initialement le spin est orienté suivant la direction facile aimantation avec l'effet de champ thermique \mathbf{H}_{th} va perturber le spin et il va faire un angle θ avec la direction facile aimantation, les deux figures montrent ces effets thermiques sur le spin.

FIGURE 3.7 – La distribution de probabilité angulaire en fonction de l'angle θ pour $\Delta t = 1$ fs.FIGURE 3.8 – La distribution de probabilité angulaire en fonction de l'angle θ pour $\Delta t = 0.1$ fs.

4

Simulation du Modèle de Heisenberg à Température Finie

4.1 Introduction

Dans ce chapitre nous exposerons les résultats de nos simulations du modèle classique de Heisenberg ferromagnétique sur un réseau cubique simple et pour différentes tailles : $L = 8, 16, 20, 28$ (conditions aux limites périodiques). Nous avons fait appel à la méthode de la dynamique de spin, et pour vérifier sa validité nous avons comparé nos résultats à ceux de Monte Carlo. Pour effectuer la simulation, nous avons pris une constante d'échange $J = 6 \times 10^{-21}$ J/liaison, nous avons pris une constante d'amortissement $\lambda = 1$, et un pas d'intégration $\Delta t = 0.01$ fs. Pour le cas de la dynamique de spin, nous avons pris un nombre de pas pour la thermilisation $N_t = 5000000$ et un nombre de pas pour les mesures $N_m = 5000000$. Pour le cas de Monte Carlo, nous avons pris un nombre de cycles pour la thermilisation $N_t = 100000$ et un nombre de cycles pour les mesures $N_m = 1000000$. Nous avons simulé le modèle sur la plage de températures $[0, 1000]K$ en commençant par la plus haute température pour thermiliser le système.

4.2 Résultats et Discussions

4.2.1 Courbe de l'aimantation Moyenne

La figure 4.1 montre la variation de l'aimantation en fonction de la température pour différentes tailles du système. Sur la figure 4.1 on remarque que pour des basses températures $\sim (0K)$ l'ai-

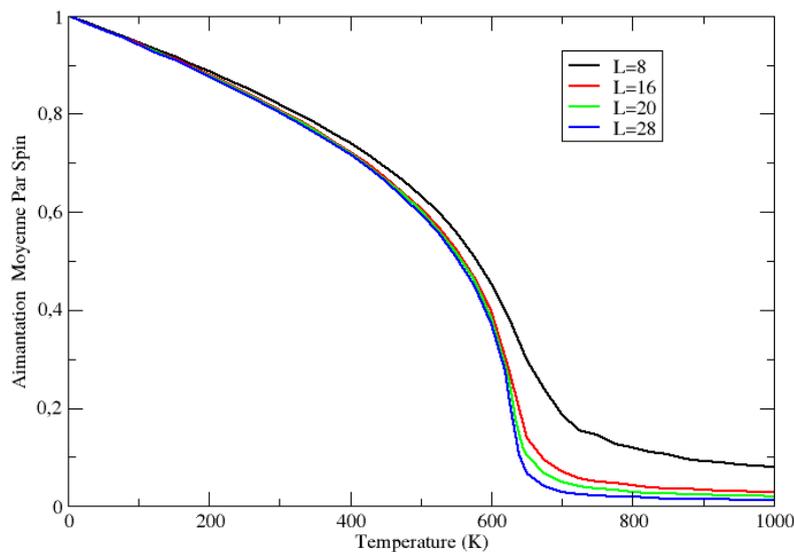


FIGURE 4.1 – Aimantation par spin du modèle de Heisenberg 3d sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L , obtenue par la dynamique de spin.

l'aimantation prend une valeur $M_0 = 1$ pour chacune des tailles du système, tous les réseaux de spins s'ordonnent suivant un ordre ferromagnétique. Pour une légère augmentation de la température on remarque une diminution de l'aimantation, cette diminution continue avec l'augmentation de la température jusqu'à une température critique propre à chaque taille du système. Pour de hautes températures l'aimantation continue de diminuer lentement, les spins transiteront vers la phase désordonnée paramagnétique. Donc on peut dire que on a une transition de phase ferromagnétique-paramagnétique. Ce qui correspond aussi résultats obtenus dans l'article de Evans et al [23].

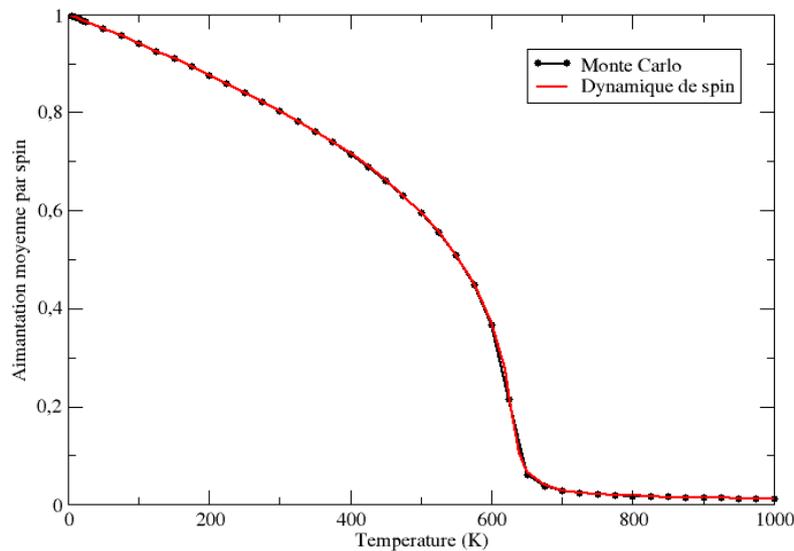


FIGURE 4.2 – Aimantation par spin, comparaison entre la dynamique de spin et Monte Carlo pour une taille de $L = 28$.

La figure 4.2 montre la variation de l'aimantation en fonction de la température pour une taille du système de $L = 28$, où nous comparons les résultats de simulation de la méthode dynamique de spin à ceux obtenus avec la méthode Monte Carlo. Comme on peut le voir sur la figure, les résultats des deux méthodes sont concordants, ce qui justifie la validité de la méthode de la dynamique de spin et notre implémentation de cette méthode comparée à Monte Carlo.

4.2.2 Courbe de l'énergie moyenne par spin

La figure 4.3 montre la variation de l'énergie moyenne par spin en fonction de la température pour différentes tailles du système. On observe que pour de très basses températures ($T \approx 0K$)

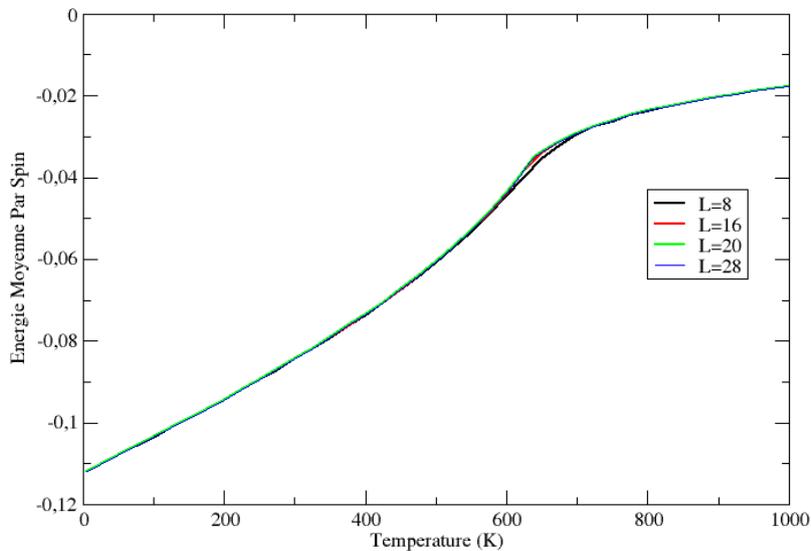


FIGURE 4.3 – Énergie moyenne par spin du modèle de Heisenberg 3d sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L.

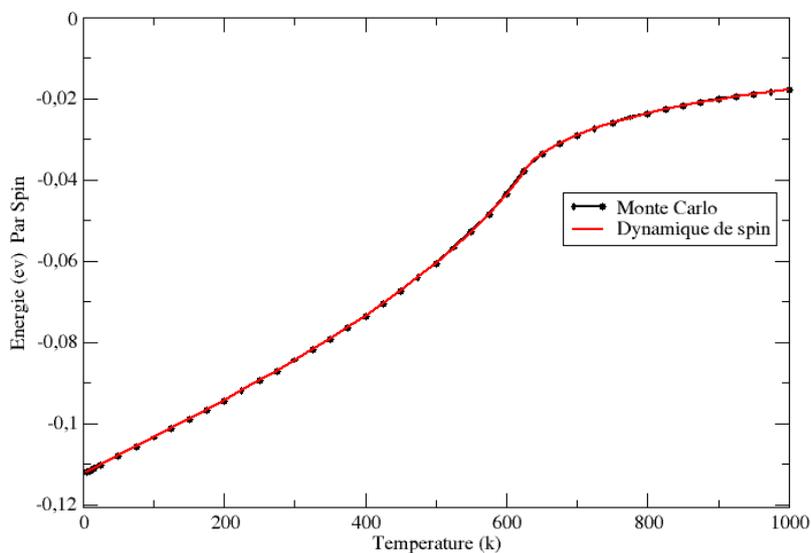


FIGURE 4.4 – Énergie moyenne par spin, comparaison entre la dynamique de spin et Monte Carlo pour une taille L =28, obtenue par la dynamique de spin.

l'énergie par spin prend une valeur $E = -0.112$ eV. À $T = 0$ le système minimise son énergie interne en se mettant dans l'état fondamental où tous les spins sont alignés, suivant une seule direction. Soit tous les S_i prennent la valeur $+1$, auquel cas on parle d'aimantation positive, soit ils prennent tous la valeur -1 , auquel cas l'aimantation est négative. Mais bien sûr le choix de négatif ou positif est arbitraire, et c'est pour cela que l'état fondamental est doublement dégénéré. À trois dimensions chaque spin est entouré de six voisins. L'énergie interne donne alors :

$$\langle E \rangle = \frac{-J}{2N} \sum_i (1 \cdot (1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1)) = -3J \quad (4.1)$$

Donc $E = -3J$ où J est la constante d'échange ($J = 6 \cdot 10^{-21} J = 0.037449$ eV) pour chaque taille de système ($L = 8, 16, 20, 28$). L'énergie augmente avec l'augmentation de la température jusqu'à ce qu'elle atteigne la température critique. Au dessus de cette température, l'augmentation devient de moins en moins prononcée. On remarque que les courbes de l'énergie se superposent avec l'augmentation de la taille du système. L'énergie est continue à la température critique. L'augmentation de l'énergie moyenne est due à l'augmentation de l'énergie thermique $k_B T$ absorbée par le système de spin. La figure 4.4 représente la variation de l'énergie en fonction de la température pour une taille du système $L = 28$. Elle représente aussi la comparaison entre les résultats de la simulation entre les deux méthodes que nous avons utilisées, qui conforte la validité de notre implémentation de la méthode de la dynamique de spin comparée à Monte Carlo.

4.2.3 Courbe de la chaleur spécifique

La figure 4.5 montre l'évolution de la chaleur spécifique en fonction de la température pour différentes tailles du système ($L = 8, 16, 20, 28$). On voit que la simulation donne une valeur de $C_h \sim k_B$ aux très basses températures (proches de zéro). Et comme il est montré aussi sur la figure 4.6, la simulation Monte Carlo donne la même valeur. Or on sait d'après la théorie des ondes de spin (magnons) que la chaleur spécifique doit tendre vers zéro comme $C_h \sim T^{\frac{3}{2}}$ [13]. Il se trouve que pour retrouver ce comportement de la chaleur spécifique, on doit faire usage de la dispersion des ondes de spin $\omega_k \propto k^2$ au très grandes longueurs d'onde, et ensuite utiliser la distribution de Bose-Einstein pour l'occupation moyenne d'un mode de magnons. En somme, on doit faire appel à la mécanique quantique. Et le résultat est alors conforme non-seulement à l'expérience, mais aussi à la troisième loi de la thermodynamique. Le résultat de nos simulations est différent en ce que nous simulons un modèle classique. Et pour rendre compte de ce résultat on doit utiliser la physique statistique classique. On peut alors invoquer le fameux théorème de l'équipartition de l'énergie. Ce théorème énonce que chaque degré de liberté qui apparaît sous forme quadratique dans le hamiltonien, contribue $\frac{k_B T}{2}$ à l'énergie moyenne du système. Aux très basses températures, les magnons sont les seules excitations existant au-dessus de l'état fondamental ferromagnétique.

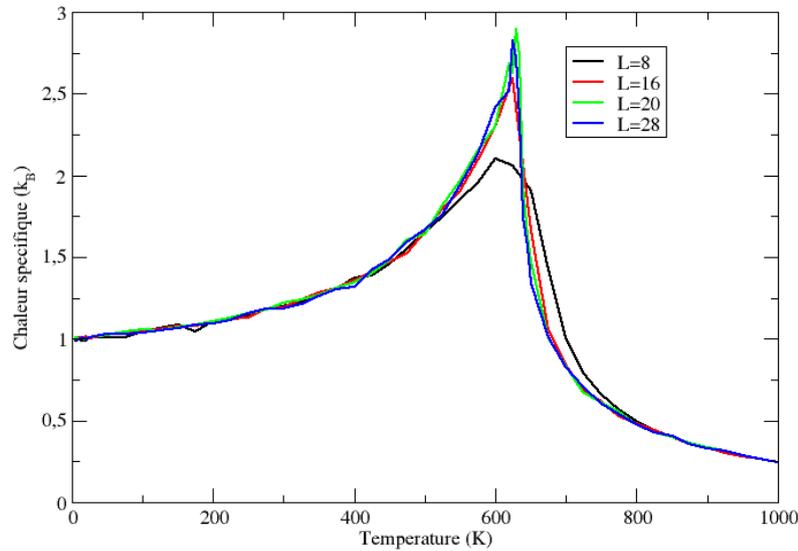


FIGURE 4.5 – Chaleur spécifique du modèle de Heisenberg 3d sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L , obtenue par la dynamique de spin.

Le nombre de modes (ou de degrés de libertés) est deux fois le nombre de spins dans le système, puisqu'il y a deux directions transverses pour "les fluctuations" du spin. Ceci donne donc une énergie moyenne par spin de $2(\frac{k_B T}{2}) = k_B T$. La chaleur spécifique est alors égale à $C_h = k_B$, ou $C_h = 1$ si on prend k_B comme unité. La courbe continue à augmenter avec l'augmentation de la température jusqu'à atteindre une valeur maximale propre à chaque taille de système. On observe un pic intense avec l'augmentation des tailles du système au voisinage de la température critique T_c , puis on remarque une brutale diminution, elle continue de diminuer jusqu'à qu'elle atteigne des valeurs proche de zéro. À partir de la courbe on peut extraire la valeur de la température critique qui correspond au pic, et on obtient une valeur $T_c(C_h) = 625$ K par ce que nous avons pris ΔT de 5 K. Dans la figure 4.6 nous présentons les résultats de simulation de la dynamique de spin et Monte Carlo pour une taille du système de $L=28$. Sur la figure on remarque qu'il y a une légère différence entre les deux courbes. Nous pouvons remédier à ce problème, il suffit d'effectuer plusieurs calculs à la fin prendre des moyennes à fin qu'elles soit en accord.

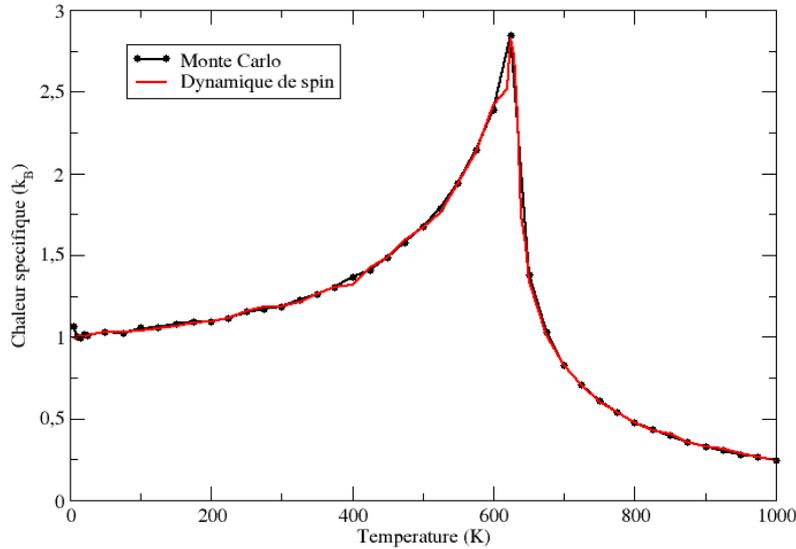


FIGURE 4.6 – Chaleur spécifique par spin, comparaison entre la dynamique de spin et Monte Carlo pour une taille $L = 28$.

4.2.4 Courbe de la Susceptibilité magnétique

La figure 4.7 montre la variation de la susceptibilité en fonction de la température pour différentes tailles du système. On observe à très basse température ($T = 0K$) que la susceptibilité prend une valeur nulle $\chi_0 = 0$ pour toutes les tailles du réseau ($L = 8, 16, 20, 28$). On peut également lier la susceptibilité aux fluctuations de l'aimantation par $\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{k_B T}$, l'aimantation est constante aux basses températures, et par conséquent les fluctuations de l'aimantation sont $\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \simeq 0$ ce qui donne une valeur nulle de la susceptibilité. Pour une petite variation de la température on remarque que la susceptibilité augmente. Elle continue d'augmenter pour chaque taille du système, et au voisinage de la température critique on remarque un pic qui devient plus prononcé avec l'augmentation de la taille du système. Pour des températures supérieures à la température critique, on observe une brutale diminution, et pour des températures beaucoup plus importantes, on remarque que la courbe de la susceptibilité suit la loi de Curie Weiss ($\chi \propto \frac{1}{T - T_C}$). Au hautes températures la susceptibilité diminue lentement jusqu'à ce qu'elle atteigne une valeur proche de zéro. A partir de la courbe on peut extraire la valeur de la température critique qui correspond au pic, on obtient une valeur $T_C(\chi) = 630K$ parce que nous avons pris un ΔT de 5 K.

La figure 4.8 montre la variation de la susceptibilité en fonction de la température pour une taille $L = 28$. Cette figure montre la comparaison entre les résultats de simulation avec la méthode de

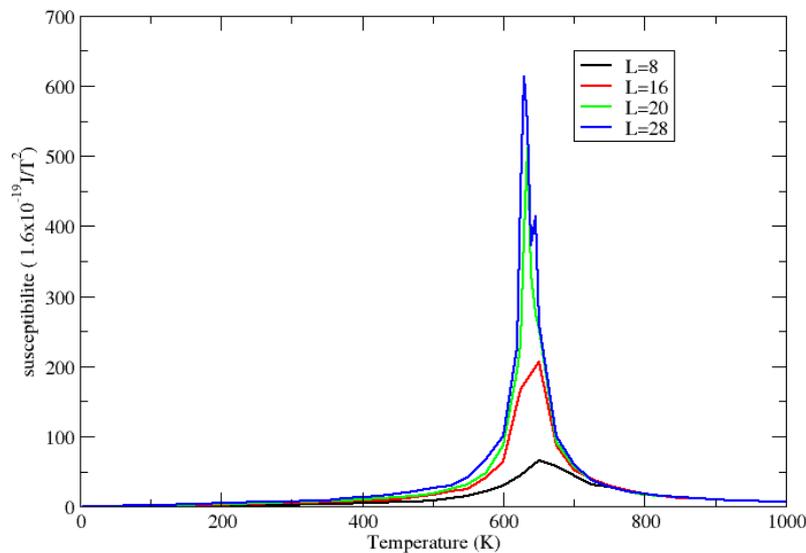


FIGURE 4.7 – Susceptibilité magnétique du modèle de Heisenberg 3d sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L , obtenue par la dynamique de spin.

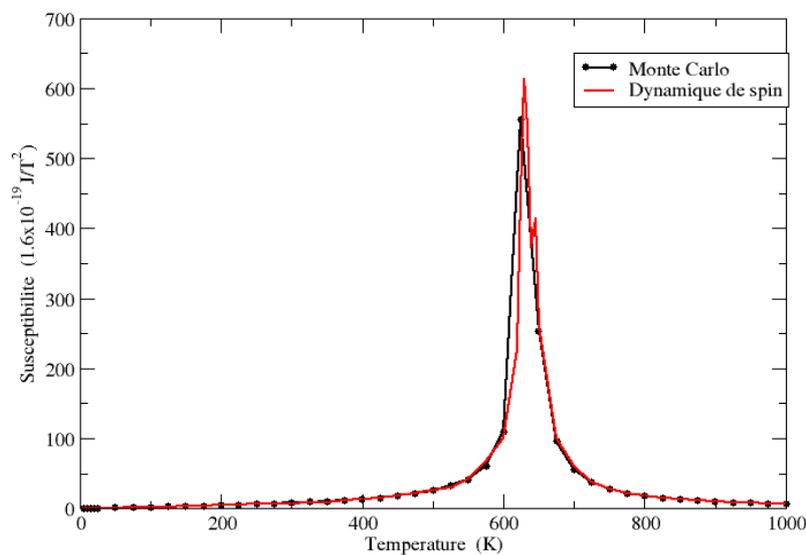


FIGURE 4.8 – Susceptibilité magnétique par spin, comparaison entre la dynamique de spin et Monte Carlo pour une taille $L = 28$.

la dynamique de spin et Monte Carlo. Sur la figure on remarque qu'il y a une légère différence

entre les deux courbes. Nous pouvons remédier à ce problème, il suffit d'effectuer plusieurs calculs à la fin prendre des moyennes à fin qu'elles soit en accord.

4.2.5 Le cumulants de Binder

Le cumulants de Binder est défini par :

$$U(T, L) = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2}, \quad (4.2)$$

où $\langle M^2 \rangle$ et $\langle M^4 \rangle$ sont le second et le quatrième moment, respectivement, du paramètre d'ordre, qui est l'aimantation. Dans la limite thermodynamique où la taille du système $L \rightarrow \infty$, $U \rightarrow 0$ pour $T > T_C$, et $U \rightarrow \frac{2}{3}$ pour $T < T_C$. Le cumulants de Binder a deux utilités : il permet de mieux distinguer la nature de la transition et donne une meilleur détermination du point critique. La figure 4.9 montre la variation de cumulants de Binder en fonction de la température pour différentes tailles de système.

L'intersection des cumulants de Binder des réseaux $L = 20$, $L = 28$ correspond à une température

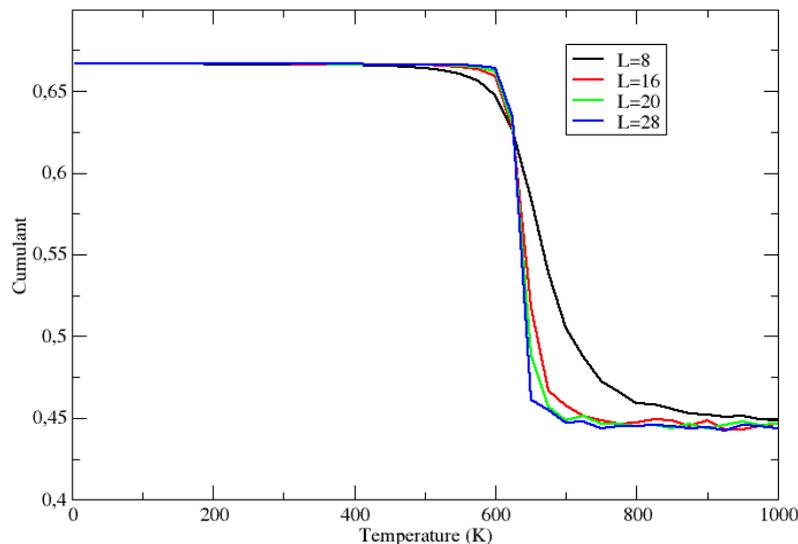


FIGURE 4.9 – Cumulants de Binder du modèle de Heisenberg 3d sur un réseau cubique simple pour différentes tailles L .

critique $T_C = 627.186K$. Pour vérifier le résultat que nous avons obtenu pour le cas de la température critique nous faisons référence à l'article de Holm et Janke [27]. Dans leur travail ils ont rapporté une température critique $k_B T_c = 1.443J$. Dans notre travail nous avons utilisé

une constante d'échange $J = 6 \times 10^{-21}$ J/liaison, on obtient alors une température critique de $T_c = 1.443 \times \frac{6.0 \times 10^{-21}}{1.3807 \times 10^{-23}} = 627.07K$. A partir des cumulants de Binder on obtient $T_C = 627.5K$, ce qui correspond approximativement à la valeur obtenue dans l'article de Holm et Janke [27]. Pour le cas de la chaleur spécifique on a trouvé une valeur $T_C(C_h) = 625 K$ et pour le cas de la susceptibilité on a trouvé une valeur $T_C(\chi) = 630 K$. La température critique est comprise entre ces deux valeurs. Dans l'article de Holm et Janke il reporté que $T_C(C_h)$ augmente avec la taille du système, et $T_C(\chi)$ diminue ou contraire. A partir d'une certaine taille les deux valeurs coïncident avec la valeur obetenue à partir des cumulants de Binder.

CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Dans ce travail nous avons utilisé la méthode de la dynamique de spin, décrite par l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert. Vu la complexité des équations du mouvement pour un système de spin, nous avons implémenté la méthode de Heun pour intégrer numériquement ces équations en fonction du temps. Dans la première partie de ce travail nous avons testé cette méthode sur deux cas : le premier cas sur un spin dans un champ magnétique appliqué et le deuxième cas sur un spin en présence de l'effet de champ thermique de Langevin et le terme d'anisotropie.

Dans la deuxième partie du travail nous avons étudié le modèle de Heisenberg classique ferromagnétique sur un réseau cubique simple de différentes tailles. Nous avons utilisé la méthode de la dynamique de spin et nous avons comparé nos résultats à ceux de Monte Carlo. Le but du présent travail n'est pas d'étudier les propriétés d'équilibre du modèle de Heisenberg en profondeur. Nous avons déjà mentionné que la méthode de Monte Carlo est bien plus appropriée pour ce genre de simulations. En effet, nous nous sommes fixés comme objectif de comprendre d'abord, puis d'implémenter nous-même la méthode de la dynamique de spin. Le manque de temps nous a contraint à nous limiter à la validation de notre implémentation, par le biais de comparaison des résultats obtenus avec ceux obtenus à l'aide de Monte Carlo.

Maintenant que nous avons validé l'implémentation de la méthode de la dynamique de spin en comparant à Monte Carlo, la suite du présent travail consiste à étudier les propriétés dynamiques, telles que la variation de l'aimantation en fonction du temps sous l'effet d'un champ magnétique variable.

Bibliographie

- [1] T. Moriya, "*Spin fluctuations in itinerant electron magnetism*", Springer-Verlag, (1985).
- [2] R. E. Watson, M. Blume, et G. H. Vineyard, Phys. Rev. 181, 811 (1969).
- [3] K. Binder, et H Rauch, Phys. Z. 219, 201 (1969).
- [4] M. Asbahi, "*Enregistrement magnétique ultra-haute densité sur médias discrets à aimantation perpendiculaire*", Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier de Grenoble, (2007).
- [5] J. Bornarel, "*Magnétisme*", EDP Sciences, (2000).
- [6] F. Gazeau, and C. Wilhem, "*Nanoparticules et stimuli magnétiques pour l'imagerie médicale et la thérapie*", JS'12 Cnam, 103 (2012).
- [7] S. Blundell, "*Magnetism in condensed matter*", Oxford University Press, (2001).
- [8] J. Barker, "*Atomistic models of magnetic systems with combined ferromagnetic and antiferromagnetic order*", PhD Thesis, University of York, (2013).
- [9] S. Zriouel, "*Contribution à l'étude Monte Carlo des propriétés magnétiques des nanomatériaux type graphène et graphone*", Thèse de Doctorat, Université Mohammed V Rabat, (2016).
- [10] V. Dupuis et G. Ferlat, "*Transitions de phases 2*", cours, LP350 État de la matière, Université Pierre et Marie Curie, (2015).

-
- [11] C. Ngô, et H. Ngô, "*Physique statistique : introduction, cours et exercices corrigés*", Dunod, (1995).
- [12] N. A. Spaldin, "*Magnetic materials : fundamentals and applications*", Cambridge University Press, (2003).
- [13] H. T. Diep, "*Physique de la matiere condensée*", Dunod, (2003).
- [14] P. Mohn, "*Magnetism in the solide state*", Springer-Verlag, (2006).
- [15] L. Laurent-Patrick, "*Magnétisme et supraconductivité*", EDP Sciences, (1997).
- [16] L. Djerroudi, "*Anisotropie uniaxiale et échange biquadratique dans la dynamique de spin ferromagnétique*", Mémoire de Magister, Université Mouloud Mammeri, (2012).
- [17] M. E. J. Newman, et G. T. Barkema, "*Monte Carlo methods in statistical physics*", Oxford University Press, (2001).
- [18] H. T. Diep, "*Physique statistique : cours, exercices et problèmes corrigés*", Ellipse, (2006).
- [19] R. Sbiaa, H. Meng, et S. N. Piramanayagam, Phys. status solidi RRL 5, 413 (2011).
- [20] M. P. Allen, et D. J. Tildesley, "*Computer simulation of liquids*", Oxford University Press, (1987).
- [21] K. H. J. Buschow, et F. R. de Boer, "*Physics of magnetism and magnetic materials*", Springer, (2003).
- [22] S. Ho Tsai, H. K. Lee, et D. P. Landau, Am. J. Phys. 73, 615 (2005).
- [23] R. F. L. Evans, W. J. Fan, P. Chureemart, T. A. Ostler, M. O. A. Ellis, et R. W. Chantrell, J. Phys. : Condens. Matter 26, 103202 (2014).

- [24] D. Beaujouan, "*Simulation des matériaux magnétiques à base de cobalt par dynamique moléculaire magnétique*", Thèse de Doctorat, Université Paris-Sud, (2012).
- [25] J. L. Garcia-Palacios et F. J. Lazaro, Phys. Rev. B 58, 14937 (1998).
- [26] U. Nowak, O. N. Mryasov, R. Weiser, K. Guslienko, et R. W. Chantrell, Phys. Rev. B 72, 172410 (2005).
- [27] C. Holm, et W. Janke, Phys. Rev. B 48, 936 (1993).