



N° d'ordre :

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et
de la Recherche Scientifique

Université Mohamed Boudiaf -M'sila
Faculté des Sciences
Département de Physique

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

MASTER

Domaine : **Sciences de la matière**

Filière : **Physique**

Option : **Physique théorique : Physique des particules a haute**
énergies

Par

BOUDERBALA ILHAM

THEME

Interaction de Dzyaloshinskii-Moriya et Skyrmions Magnétique

Soutenu le : /06/2015

Devant le jury composé de :

S.MENOUAR

MCA Univ. de Setif

Président

N.BAADJI

MCA Univ. de M'sila

Rapporteur

S.MEDJBER

MAA Univ. de M'sila

Examineur

Promotion Juin 2016

Table de matière :

Introduction générale

Chapitre I : Modèle Hamiltonien et Méthode BGFS

I-1- Introduction.....	4
I.2-Limite non relativiste de l'Hamiltonien de Dirac.....	4
I.3-Anisotropie magnétique (couplage spin-orbite).....	5
I.4-Champ d'anisotropie ionique.....	6
I-5-échange direct entre spins (Heisenberg).....	7
I.6-interaction Dzyaloshinskii.....	8
I.7- Interaction Moriya	9
I.8-Modèle hamiltonien.....	11
I.9Méthodes Broyden fletcher –Goldfar Shanno.....	14
I.10-Algorithmes.....	14
I.11 -Méthode BGFS d'étude de l'énergie.....	15
I.12- Conclusion.....	15

Chapitre II

Etude méthode Monte Carlo température non nulle

<i>II.1 Introduction</i>	17
<i>II.2 Echantillonnage aléatoire et pondéré</i>	17
<i>II.3 Chaîne de Markov pour échantillonner le système à l'équilibre</i>	19
<i>II.4 Algorithme de Métropoli</i>	22
<i>II.5 Convergence vers une loi de distribution invariante imposée</i>	25
<i>II.5.1 Echantillonnage de $f(x) e^{-\beta E(x)} / Z$</i>	25
<i>II.6 Algorithme de Métropolis (échantillonnage)</i>	26
<i>II.7 Conclusion</i>	27

Chapitre III

Résultats de discussion

<i>III-1 Introduction</i>	29
<i>III. 2. Cas ferromagnétique</i>	30
<i>III.3. Cas antiferromagnétique</i>	33
<i>III.4. Effet de la température</i>	34
<i>III.5. Module Continu</i>	34
<i>a- Énergie de Zeeman</i>	34
<i>5.1- États modulés sous l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya</i>	34
<i>5.1 a- Modulations One-dimensionnelles</i>	35
<i>5.b-2 Modulations deux dimensions</i>	35

Conclusion

-bibliographie

Table des figures

Figure I.1: direction de spin ($S_i + S_j$)et($S_i \times S_j$)	7
Figure I.2: graphe de forme ferromagnétique et antiferromagnétique.....	12
Figure I.3 : Configuration non colinéaire des spins	13
Figure III.1: directions de spin de l'espace one démontions et l'absence anisotropie et champs magnétique nulle.....	29
Figure III.2: direction de spin de l'espace one dimension et anisotropie nulle.....	30
Figure III.3: direction de spin de l'espace one dimension à champ nul ($D = -0.2, B=0, K = -0.01$).30	
Figure III.4: Représentations vectorielle (a) et continue (b) des orientations de spins calculées pour un système à deux dimension comparés aux résultats expérimentaux de SP-STM : une monocouche Mn/W balayée par une pointe d'une polarisation in plane (c) et out of plane (d).....	31
Figure III.5 : Représentation vectorielle des orientations des spins à une (a) et deux dimensions (d) dans le cas d'un couplage antiferromagnétique et décomposition en deux sous-réseaux de différentes chiralités (b) et (c).....	32
Figure III.6 : Représentation vectorielle des orientations des spins dans l'état fondamental (a) la configuration représentative à $T=0.05 \text{ J/K}_B$ (b) et $T=0.1 \text{ J/K}_B$ (c) et la configuration représentative à $T=0.05 \text{ J/K}_B$ et à deux dimensions (d) dans le cas d'un couplage ferromagnétique et en absence de champ et d'anisotropie.....	33

Introduction

Générale

Introduction générale

Récemment, on a pu observer des structures magnétiques non colinéaires qui sortent du cadre de magnétisme conventionnel. Cette non-colinéarité a été attribuée aux interactions non centrosymétriques et plus précisément à l'interaction de Dzyaloshinskii-Moriya. En tenant compte de ce terme on a pu montrer par exemple que le (MnSi) possède une structure magnétique non-colinéaire et qui était mal compris avant. Ce terme vient de s'ajouter aux termes communément utilisés en magnétisme notamment le terme de Heisenberg, l'anisotropie magnétique et le terme de Zeeman. Le terme de Dzyaloshinskii-Moriya a été proposé pour la première fois par Dzyaloshinskii, qui en se basant sur des arguments de symétrie et pour expliquer le faible ferromagnétisme des substances antiferromagnétique, en forme d'un produit vectoriel des spins. Moriya a dérivé l'expression de ce terme en tenant compte le couplage spin-orbite en perturbation et il a montré qu'il en premier ordre en constante de structure fine. Dans Ce mémoire on suivra la dérivation de Moriya, pour ce terme. On va exprimer le terme spin-orbite en fonction d'interaction spin-spin et le terme de Heisenberg et de Zeeman sont aussi considérés. Ces dérivations vont nous permettre d'apprécier l'ordre de grandeur de chaque un des termes et discuter leurs signes. Le modèle obtenu est utilisé pour trouver la configuration fondamentale de N spins classiques répartie sur un réseau à une, deux et trois dimensions. Cette configuration à température nulle est obtenue par une minimisation de l'énergie totale par rapport aux orientations des spins. La minimisation analytique étant impossible pour plus de deux spins, on a dû recourir à la minimisation numérique par la méthode de Broyden –fletcher – Goldfarb-Shanno. Cette méthode a été implémentée et on a pu étudier l'effet de chaque paramètre de l'hamiltonien sur la configuration des spins

Pour certaines valeurs des paramètres de l'hamiltonien, les spins présentent un structure chirale qui on peut qualifier comme étant une quasi-particule dite skyrmion.

L'effet de la température est de varier l'occupation de l'état fondamental et des états excités. A chaque température il existe un état représentatif ($\langle \bar{M} \rangle$). Cet état sera évalué par la méthode Monte Carlo et on a implémenté l'algorithme de métropoles pour étudier effet de la température combinées avec d'autres termes. La configuration de l'état fondamental et la configuration seront exposés dans le chapitre des résultats.

Ce travail est réparti en trois chapitres :

Dans le premier chapitre, nous exposons le modèle hamiltonien considéré et la dérivation de chaque un des termes constitutifs ainsi que la méthode de BGFS.

Dans le deuxième chapitre la méthode de Monte Carlo et l'algorithme de métropoles seront présentés.

Enfinement Dans le troisième chapitre, les résultats de la simulation seront discutés et on termine notre étude par une conclusion générale et des perspectives.

CHAPITRE I

Modèle Hamiltonien et Méthode BGFS

Chapitre I :Modèle Hamiltonien et Méthode BGFS

I. Interaction Dzyaloshinskii- Moriya:

I.1.Introduction:

Les interactions entre électrons sont souvent importantes et d'une extraordinaire complexité. Heureusement, par l'intermédiaire du principe de Pauli, la mécanique quantique restreint tellement les fonctions d'ondes possibles d'un système d'électrons, qu'on peut dans la plupart des solides isolants ramener ce problème d'interaction électronique à un problème de spins couplés. Ce chapitre est consacré comment ramener le problème électronique à un problème des spins en interaction. L'hamiltonien est non-triviale et les différents termes interaction spin-spin qui sont souvent difficiles à justifier rigoureusement.[Livre][1]

On commence par dériver les différents termes d'interaction spin-spin, essentiellement celui de l'anisotropie (spin-orbite), de Heisenberg et l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya, et considérer l'interaction du spin avec un champ extérieur (terme de Zeeman $H = \vec{B}\vec{S}$).

I.2.Limite non relativiste de l'Hamiltonien de Dirac:

Le magnétisme est un phénomène relativiste qui peut être décrit à partir de l'équation de Dirac, qui régit le mouvement quantique relativiste d'un électron dans des champs statiques (électrique $E = -\nabla\phi$) et magnétique $B = \nabla \times A$, il suffit de prendre la limite non-relativiste, via la transformation de Foldy-Wouthuysen, de l'Hamiltonien de Dirac:

$$H = [\beta(mc^2 + V(r)) + c\alpha \cdot (p - eA)] \quad (I.1)$$

Les matrices de Dirac:

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} \quad (I.2)$$

sont exprimées en fonction des matrices de Pauli σ , on distingue alors quatre contributions principales à l'Hamiltonien non-relativiste H^1 (sont négligées les contributions relativistes non magnétique $P^4/4m^4$ et le terme de Darwin)

$$H = H_o + H_s + H_{so} + V(r) \quad (I.3)$$

et

$$H_o = \frac{1}{2m} (p - eA)^2 \quad (\text{I.4})$$

$$H_s = -gs \frac{e}{2m} S \cdot B \quad (\text{I.5})$$

$$H_{so} = \frac{-\hbar e}{4mm^*c^2} \sigma [E \times (p - eA)] \quad (\text{I.6})$$

$$V(r) = e\varphi(r) \quad (\text{I.7})$$

H_o : l'Hamiltonien d'une particule libre sans spin dans un champ magnetique

H_s : l'Hamiltonien de spin ($S = \hbar\sigma/2$)

H_{os} : decrit l'interaction spin-orbite

$V(r) = e\varphi(r)$: le potentiel electrostatique

l'Hamiltonien H_o est la somme de trois termes

$$H_o = \frac{p^2}{2m^*} + H_L + H_D \quad (\text{I.8})$$

Ou'

$$H_L = -\frac{eB}{2m^*} (xp_y - yp_x) = \frac{e}{2m} g_L L \cdot B \quad (\text{I.9})$$

$$H_D = \frac{e^2 B^2}{8m} (x^2 + y^2) \quad (\text{I.10})$$

H_L est la contribution du moment angulaire au magnetisme orbital

Remarque:

$$g_L = \frac{m}{m^*} \quad (\text{I.11})$$

H_D est une contribution orbitale diamagnetique.

I.3. Anisotropie magnétique (couplage spin-orbite)

Pour le terme H_{SO} pour un potentiel de symétrie sphérique l'Hamiltonien spin-orbite prend la forme:

$$H_{SO} = -\frac{\hbar}{4mm^*c} \left(-\frac{1}{r} \frac{dv}{dr} \right) \sigma(r \times p) = \frac{1}{2mm^*c} \left(\frac{1}{r} \frac{dv}{dr} \right) L \cdot S = \lambda L \cdot S \quad (I.12)$$

Dans la plupart des composés et des matériaux, le magnétisme se réduit à celui du spin dans l'état fondamental. En fait, certains états excités ont un moment orbital et contribuent, au second ordre en théorie des perturbations, au magnétisme de l'état fondamental. Afin de comparer ces différentes contributions, on peut utiliser un Hamiltonien magnétique effectif (Zeeman + SO) agissant sur les états de spins du sous-espace $|0\rangle$. Au second ordre

$$H_{eff} = \langle 0 | H_{SO} + H_z | 0 \rangle = \frac{g_s |e|}{2m} S \cdot B - \sum_n \frac{|\langle n | g_L \frac{|e|}{2m} L \cdot B + \lambda L \cdot S | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0} \quad (I.13)$$

Où on somme sur tous les états excités (n) du système, qu'on peut classer à l'aide des représentations irréductibles du groupe ponctuel de symétrie du cristal. L'Hamiltonien de spin $H_S \propto S \cdot B$, ne contribue pas au second ordre en théorie des perturbations (second terme), car il n'agit pas sur les fonctions d'ondes orbitales des états excités, orthogonales à l'état fondamental. En développant la carré de l'élément matriciel (I.13), on exprime

$$H_{eff} = \frac{g_s |e|}{2m} S \cdot B - \frac{g_L |e|}{2m} \lambda \sum_{i,j} \Lambda_{i,j} S_i B_j - \lambda^2 \sum_{i,j} \Lambda_{i,j} S_i S_j - \left(\frac{g_L |e|}{2m} \right)^2 \sum_{i,j} \Lambda_{i,j} B_i B_j \quad (I.14)$$

Où λ est le coefficient de l'interaction spin-orbite

$$\Lambda_{ij} = \sum_n \frac{\langle 0 | L_i | n \rangle \langle n | L_j | 0 \rangle}{E_n - E_0} \quad (I.15)$$

Le tenseur Λ a en général trois axes principaux et trois valeurs propres associées. Par conséquent, le facteur de Landé est aussi un tenseur $g_{ij} = (g_s \delta_{ij} - g_L \lambda \Lambda_{ij})$ qui se diagonalise également dans la même base que Λ_{ij} .

Lorsque le tenseur Λ_{ij} n'a que deux valeurs propres Λ_{\parallel} , Λ_{\perp} l'Hamiltonien suivant l'orientation du champ magnétique, les valeurs propres

$$E_m^{\parallel} = E_0 + g_{\parallel}\mu_B mB - \left(\frac{g_{\perp}|e|\hbar}{2m}\right)^2 \Lambda_{\parallel} B^2 \quad (\text{I.16})$$

$$E_m^{\perp} = E_0 + g_{\perp}\mu_B mB - \left(\frac{g_{\perp}|e|\hbar}{2m}\right)^2 \Lambda_{\perp} B^2 \quad (\text{I.17})$$

Seuls les seconds termes dépendent du nombre quantique magnétique m .

I. 4. Champ d'anisotropie ionique:

Le troisième terme de l'équation (I.7) représente la structure fine ou l'anisotropie ionique. Les axes principaux du tenseur Λ_{ij} ont la symétrie du cristal.

Exemple: seuls sont non-nuls $\Lambda_{xx} = \Lambda_{yy} = \Lambda_{zz}$ sur un cristal cubique. Ce terme se réduit alors à une constante. Par contre sur un cristal tétragone $\Lambda_{zz} = \Lambda_{\parallel} \neq \Lambda_{\perp} = \Lambda_{xx} = \Lambda_{yy}$.

On définit alors $k = \lambda^2 (\Lambda_{\parallel} - \Lambda_{\perp})$, et en omettant le terme de Van-Vleck, l'Hamiltonien a une anisotropie ionique

$$H = g_{\parallel}\mu_B S_z B_z + g_{\perp}\mu_B (B_y S_x + B_x S_y) + k S_z^2 + \lambda^2 \Lambda_{\perp} S(S+1) \quad (\text{I.18})$$

Le dernier terme, qui est une constante, est généralement omis, car il peut être absorbé dans l'énergie du fondamental.

Lorsque le cristal est orthorhombique ou a une symétrie inférieure, les axes \hat{x} et \hat{y} ne sont plus équivalents et il est nécessaire d'introduire la nouvelle constante d'anisotropie $E = \lambda^2 (\Lambda_{xx} - \Lambda_{yy})$. L'Hamiltonien de spin devient

$$H = g_z \mu_B S_z B_z + g_x \mu_B B_x S_x + g_y \mu_B B_y S_y + k S_z^2 + E (S_y^2 - S_x^2) \quad (\text{I.19})$$

Lorsque le cristal est hexagonal compact ou triclinique, il faut des bases non orthonormées pour diagonaliser Λ . Ici on va considérer que le facteur de Landé est isotrope $g_z = g_x = g_y = g$ et le cristal possède un axe d'anisotropie ($E = 0$). Dans ce cas l'Hamiltonien précédent devient

$$H = g \mu_B S B + k S_z^2 \quad (\text{I.20})$$

1.5.Échange direct entre spins(Heisenberg):

Le magnétisme électronique provient de l'interaction Coulombienne entre électrons qui force, à cause du principe de Pauli, les spins à s'ordonner. En effet le principe de Pauli impose que la fonction d'onde de n fermions soit complètement antisymétrique lorsque deux particules (y compris leurs spins) sont échangées. Si on néglige les interactions spin-orbite (en première approximation), la fonction d'onde est le produit d'une fonction d'onde spatiale et d'une fonction d'onde de spin. La symétrie de la fonction d'onde spatiale est déterminée par l'interaction Coulombienne qui doit être minimale dans l'état fondamental. Compte tenu de la contrainte d'antisymétrie globale, la fonction d'onde de spin est alors imposée

Dans cette section on montre que l'Hamiltonien d'un solide avec ses forces électrostatiques complexes, peut être paramétrées seulement en termes des spins des ions qui le composent. Les paramètres de cet Hamiltonien effectif font intervenir les recouvrements des fonctions d'ondes exactes des ions dans le solide. Le plus souvent ce Hamiltonien effectif est de Heisenberg [2, 3,4].

$$H_{eff} = - \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j \quad (I.21)$$

Où

J_{ij} : Sont les constantes d'échanges

S_i : Le spin total de l'ion i du solide.

Dans les cristaux sans centre de symétrie, certaines interactions d'échange introduisent un autre type d'anisotropie cristalline. L'énergie d'échangé peut être décomposée en partie symétrique et antisymétrique par rapport à l'échangé des spins (S_i) et (S_j)

La partie antisymétrique donne lieu à l'anisotropie de spin de Dzyaloshinskii-Moriya

$$H_{DM} = D S_i \times S_j \quad (I.22)$$

Qui favorise les arrangements non-colinéaires de spins .

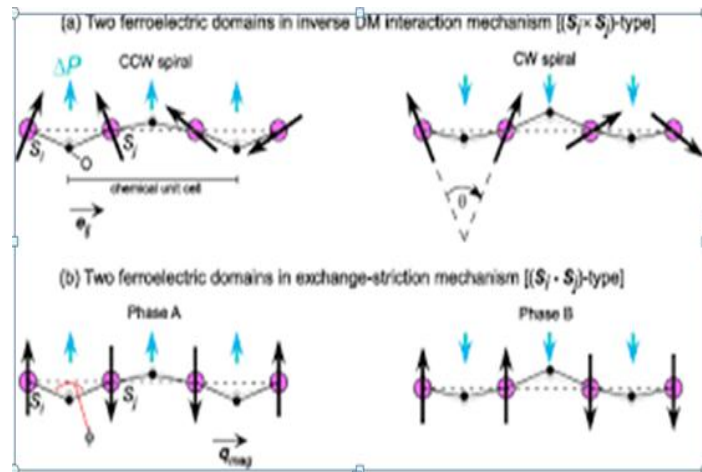
1.6. Interaction dzyaloshinskii:

Afin d'expliquer le faible ferromagnétisme dans substances antiferromagnétisme, tel que : αFe_2O_3 , $CoCo_3$, $Mnco_3$, Dzyaloshinskii a développé sur la base de la théorie de Landau et des arguments de symétrie une contribution phénoménologique à l'interaction magnétique entre deux spins (S_i) et (S_j). Cette interaction peut être décrite par l'hamiltonien quantique:[5,6]

$$H_{ED} = D_{ij} \cdot (S_i \times S_j) \quad (I.23)$$

D: est un vecteur et S_i est le spin de site i.

Cette équation (I.23) a été dérivée par Moriya, et on va détailler cette dérivation dans la section suivante.



Figure(1):direction de spin ($S_i + S_j$) et ($S_i \times S_j$).

1.7 Interaction Moriya.

Les fonctions d'ondes des électrons sont des fonctions de Wannier localisées au niveau des positions des ions magnétique et sont perpendiculaire entre elles, la première partie de l'hamiltonien électronique ($\frac{p^2}{2m} + V(r)$) est diagonale dans la base des fonctions de Wannier désignées par $\psi(r - R)_{\downarrow n}$, $\psi(r - R)_{\uparrow n}$. [7]

En tenant compte du couplage spin-orbite, ces fonctions ne sont pas des vecteurs propres de la composante S_z mais des mélanges des up+et downs -.

L'énergie de l'état fondamental s'écrit alors[8] :

$$E = \sum_R \sum_n E(R)_n [\alpha(R)_{n\uparrow}^* \alpha(R)_{n\uparrow} + \alpha(R)_{n\downarrow}^* \alpha(R)_{n\downarrow}] + \sum_{R \neq R'} \sum_{n,n'} \{b(R' - R)_{n,n'} [\alpha(R')_{n\uparrow}^* \alpha(R)_{n\uparrow} + \alpha(R')_{n\downarrow}^* \alpha(R)_{n\downarrow}] C(R' - R)_{n',n}^Z [\alpha(R')_{n\uparrow}^* \alpha(R)_{n\uparrow} + \alpha(R')_{n\downarrow}^* \alpha(R)_{n\downarrow}]\} \quad (I.24)$$

Ou:

$$b(R' - R)_{n',n} + C(R' - R)_{n',n}^Z = \int \psi(r - R)_{n\uparrow}^* H_1 \psi(r - R)_{n\uparrow} dt \quad (I.25)$$

$$b(R' - R)_{n',n} - C(R' - R)_{n',n}^Z = \int \psi(r - R)_{n\downarrow}^* H_1 \psi(r - R)_{n\downarrow} dt \quad (I.26)$$

$$C(R' - R)_{n',n}^- = \int \psi(r - R)_{n\downarrow}^* H_1 \psi(r - R)_{n\downarrow} dt \quad (I.27)$$

$$C(R' - R)_{n',n}^+ = \int \psi(r - R)_{n\uparrow}^* H_1 \psi(r - R)_{n\uparrow} dt \quad (I.28)$$

et

$$H_1 = \frac{p^2}{2m} + V(r) + \left(\frac{\hbar}{2m^2 e^2} \right) S[\text{grad}V(r) \times p] = \frac{p^2}{2m} + V(r) + \lambda L.S \quad (I.29)$$

$$C(R' - R)_{n',n}^\pm = C(R' - R)_{n',n}^x \pm i C(R' - R)_{n',n}^y \quad (I.30)$$

$\alpha(R)_{n\uparrow}$ et $\alpha(R)_{n\uparrow}^*$ sont l'annihilation et la création opérateur des électrons dans l'état $\psi(r - R)_{n\uparrow}$ on a $[\Psi(r - R)_{\uparrow(\downarrow)n} = \alpha(R)_{n\uparrow(\downarrow)}^+ |0 >$

En second ordre d'un calcul de perturbation, nous obtenons le terme de superéchange isotrope habituel et on montrera que la correction d'ordre 2 s'écrit

$$E_{R,R'}^{(2)} = J_{R,R'}^{(2)} (S(R).S(R')) + D_{R,R'}^{(2)} (S(R) \times S(R')) + S(R) \Gamma_{R,R}^{(2)} S(R') \quad (I.31)$$

On négligeable terme $S(R) \Gamma_{R,R}^{(2)} S(R')$

Car il est Sont vecteur et tenseurs quantités est:

$$J_{R,R'}^{(2)} = \frac{2 \left(b(R' - R) \right)^2}{U} \quad (I.32a)$$

$$D_{R,R'}^{(2)} = \frac{4i}{U} [(b(R - R')_{n,n} C(R - R')_{n,n'} - C(R - R')_{n,n'} b(R - R')_{n,n})] \quad (I.33b)$$

$$\Gamma_{R,R'}^{(2)} = \left(\frac{4}{U}\right) [C(R-R)_{n,n} C(R'-R)_{n',n} + C(R'-R)_{n,n} C(R-R)_{n,n'} - C(R-R)_{n,n} C(R'-R)_{n',n}] \quad (I.34c)$$

L'expression de $J_{R,R'}^{(2)}$ a été obtenu par Anderson nous suppose que l'état d'un ion est dégénère.

n, n' : Les états de Wannier des ions a R et R' respectivement.

U : L'énergie nécessaire pour transférer un électron

Le terme b est l'intégrale de saut (transfert). Par une méthode perturbation, on obtient

$$C(R'-R)_{n',n} = \frac{-\lambda}{2} \left(\sum_{m'} \frac{\Delta_{ij,mn}}{\varepsilon(R)m' - \varepsilon(R)n'} b(R'-R)_{m',n} + \sum_m \frac{\Delta_{ij,mn}}{\varepsilon(R)m - \varepsilon(R)n} b(R'-R)_{n',m} + c(R'-R) \right) \quad (I.35)$$

et

$$c(R'-R) = \frac{\hbar}{4m^2e^2} \int \varphi(r-R)_{n'}^* \times [\text{grad}V(r) \times p] \varphi(r-R)_n dt \quad (I.36)$$

n, n' sont les états fondamentaux, m et m' sont les états excités.

$\Delta_{ij,mn}$: L'élément de matrice et le moment angulaire orbital d'ion R

$\varphi(r-R)$ Fonction d'ion R.

A partir (I.35) l'amplitude du terme C est à peu près $\frac{\Delta g}{g}$ fois supérieure du terme b, avec g est le rapport gyromagnétique et Δg est sa déviation par rapport à la valeur d'un électron libre, les ordres de grandeurs de D et Γ sont: [9]

$$D \sim \left(\frac{\Delta g}{g}\right) J, \Gamma \sim \left(\frac{\Delta g}{g}\right)^2 \quad (I.37)$$

$$\Delta g = \lambda \quad (I.38)$$

I.8 Modèle hamiltonien

Ayant dérivé les différents termes, on peut considérer le modèle simple gouverné par l'hamiltonien suivant:

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j + k \sum_i S_{iz}^2 + D \sum S_i \times S_j + g\mu\beta H \sum S_j \quad (I.39)$$

On va considérer la limite classique (modèle de macro-magnétisme discret) en prenant S comme un vecteur d'un module constant ($\|S\| = S = 1$) et pas un opérateur et l'énergie sera

$$E = \sum_{\langle i,j \rangle} (JS_i \cdot S_j + DS_i \times S_j) + \sum_i (kS_{iz}^2 + B \cdot S_j) \quad (1.40)$$

$$\|S\| = S = \text{Cst}$$

Avec de mettre en évidence la contribution de chaque terme on considère le cas le plus simple de deux spins, un orienté selon l'axe z et l'autre fait un angle θ . L'expression de l'énergie devient

$$E = JS^2 \cos \theta + DS^2 \sin \theta + KS^2 \sin^2 \theta + B_z S + B_z \cos \theta \quad (I.41)$$

Dans le cas ou ($K = 0, B = 0$) l'énergie devient:

$$E = JS^2 \cos \theta + DS^2 \sin \theta \quad (I.42)$$

L'état fondamental correspond à l'énergie minimale, à température nulle. Donc en minimisant E par rapport à θ :

$$\frac{\partial E}{\partial \theta} = 0$$

$$-JS^2 \sin \theta + DS^2 \cos \theta = 0 \quad (I.43)$$

$$JS^2 \sin \theta = DS^2 \cos \theta$$

Danc :

$$\tan \theta = \frac{D}{J} \quad (I.44)$$

Selon les valeurs de J, D on obtient des différents états fondamentaux. Dans la limite $D \rightarrow 0$ on obtient une configuration colinéaire ($\theta = 0, \pi$) ferromagnétique ou antiferromagnétique, selon la valeur de J , négative ou positive respectivement.

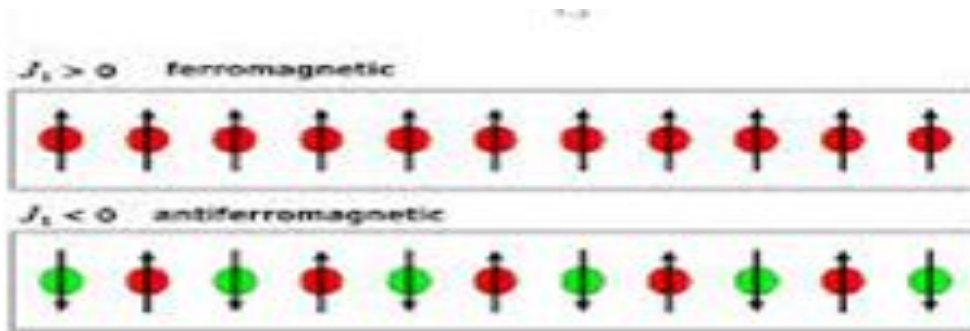


Figure2: graphe de forme ferromagnétique et antiferromagnétique

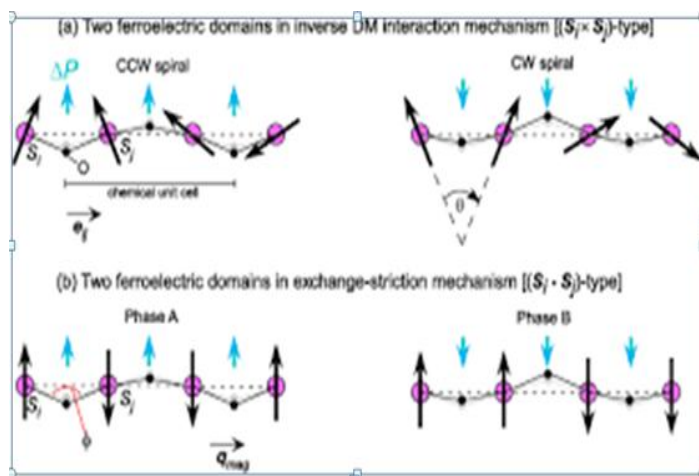


Figure 3 : Configuration non colinéaire des spins

Si dans le cas contraire $D \neq 0$ on obtient on configuration non colinéaire $\theta \neq 0$

Dans le cas de plusieurs spins on utilise les coordonnées sphériques pour chaque spin (θ, φ) :

$$\begin{cases} S_{xi} = \sin \theta_i \cos \varphi_i \\ S_{yi} = \sin \theta_i \sin \varphi_i \\ S_{zi} = \cos \theta_i \end{cases} \tag{I.45}$$

Où bien

$$S_i = (\cos \varphi_i \sin \theta_i, \sin \theta_i \sin \varphi_i, \cos \theta_i)$$

$$\text{Danc : } E^0 = \min E(\theta_i, \varphi_i)$$

Il est impossible déterminer le minimum de l'énergie analytiquement pour plus de deux spins. Pour cela on va utiliser des méthodes numériques pour obtenir ce minimum. A température nulle on utilisera la méthode BFGS, qu'on exposera dans la section suivante. Pour des températures non nulles on utilisera la méthode de Monte Carlo qu'on décrira dans le chapitre suivant.

I.9 .Méthodes Broyden –fletcher –Goldfarb-Shanno:

Définition BFGS : En mathématique, la méthode de **Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS)** est une méthode permettant de résoudre un problème d'optimisation non linéaire sans contraintes.[10]

La méthode BFGS est une solution souvent utilisée lorsque l'on veut un algorithme à directions de descente.

L'idée principale de cette méthode est d'éviter de construire explicitement la matrice Hessienne et de construire à la place une approximation de l'inverse de la dérivée seconde de la fonction à minimiser, en analysant les différents gradients successifs. Cette approximation des dérivées de la fonction permet l'application de la méthode de quasi-newton (une variante de la méthode de Newton) de manière à trouver le minimum dans l'espace des paramètres.

La matrice Hessienne n'a pas besoin d'être recalculée à chaque itération de l'algorithme. Cependant, la méthode suppose que la fonction peut être approchée localement par un développement limite quadratique autour de l'optimum.

La recherche de la direction de descente P_K à l'espace K est donnée par la solution de l'équation suivante, équivalents à l'équation de Newton:

$$B_K P_k = -\nabla f(x_k) \quad (\text{I.46})$$

Une recherche sera dans la direction P_K est utilisée pour appliquer le prochain point x_{k+1}

Plutôt que disposer de calculer B_{k+1} comme la matrice Hessienne au point x_{k+1} , la Hessienne approchée à l'itération k est mise à jour en ajoutant deux matrices.

U_k et V_k sont des matrices symétriques de rang 1 mais on des bases différences, Une matrice symétrique de rang 1 si et seulement si elle peut s'écrire sous la forme $C = aa^T$ où a est une matrice colonne et C un scalaire.

De manière équivalente, U_k et V_k produisent une matrice de mise à jour de rang 2 qui est robuste vis-à-vis des problèmes d'échelle, qui pénalisent souvent les méthodes de gradient (comme la méthode de Broyden, l'analogue multidimensionnel de la méthode de la sécant). Les conditions imposées pour la mise à jour sont:

$$B_{k+1}(x_{k+1} - x_k) = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) \quad (\text{I.47})$$

I.10. Algorithme:

À partir d'une valeur initiale x_0 et une matrice Hessienne approchée B_0 les itérations:

$$\text{Trouver } P_k \text{ en résolvant : } B_k P_k = -\nabla f(x_k) \quad (\text{I.48})$$

Effectuer une recherche linéaire pour trouver le pas optimal α_k dans la direction trouvée dans la première partie, et ensuite mettre jour $x_{k+1} = x_k + \alpha_k P_k = x_k + S_k$

$$y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) \quad (\text{I.49})$$

$$B_{k+1} = B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T S_k} - (B_k S_k S_k^T B_k / S_k^T B_k S_k) \quad (\text{I.50})$$

$f(x)$ Est la fonction à minimiser La convergence peut être testée en calculant la norme du gradient $|\nabla f(x_k)|$, En pratique B_0 peut être initialisé avec $B_0 = I$, et la première itération sera alors équivalente à celle de l'algorithme du gradient, mais les autres itérations le raffineront de plus en plus grâce à B , l'approximation de la Hessienne.

On peut calculer l'intervalle de confiance l'inverse de la solution à partir de l'inverse de la matrice Hessienne finale.

I.11 Méthode BGFS d'étude de l'énergie :

Cette méthode BGFS nous permet de calculer l'énergie dans le cas de la température nulle en minimisant l'expression de l'énergie (1.40) par rapport aux variables θ_i, φ_i

I.12.Conclusion:

Dans ce chapitre on a dérivé les différents termes de l'hamiltonien des spins en interaction et étudié le cas simple de deux spins. Le cas général de n spins en interaction sera étudié par la méthode de BGFS et Monte Carlo.

Chapiter II

Méthode Monte Carlo

II.1 Introduction

Une fois que la modélisation d'un système physique donné a été choisie (l'hamiltonien), la deuxième étape du travail consiste à déterminer les propriétés statistiques du modèle en effectuant une simulation. Si l'on s'intéresse aux propriétés statistiques du modèle, on sait que le calcul de la fonction de partition du système se ramène au calcul d'une intégrale ou d'une somme discrète (de configuration) de la forme:

$$Z = \sum_i \exp(-\beta U(i)) \quad (\text{II.1})$$

Où i est un indice parcourant l'ensemble des configurations accessibles au système. Si l'on prend le simple exemple d'un modèle de gaz sur réseau tridimensionnel dont la dimension linéaire est 10, le nombre de configurations est égal à $2^{1000} \cong 10^{301}$, ce qui rend impossible le calcul complet de la somme dans l'équation (II.1). Pour un système continu, il est de toute façon nécessaire de discrétiser l'intégrale. En prenant 10 points pour chaque coordonnée d'espace et avec 100 particules évoluant dans un espace à 3 dimensions, le nombre de points est alors égal à 10^{300} , ce qui est du même ordre de grandeur que pour un système sur réseau précédent qui avait un nombre de particules beaucoup plus grand. Il est donc nécessaire de trouver des méthodes spécifiques pour évaluer les intégrales multidimensionnelles. La technique utilisée est la méthode dite de Monte Carlo avec un algorithme d'échantillonnage d'importance [11].

II.2 Echantillonnage aléatoire et pondéré

Pour comprendre l'utilité d'un échantillonnage pondéré, nous allons tout d'abord considérer l'exemple le plus simple, celui d'une intégrale unidimensionnelle

$$I = \int_a^b dx f(x). \quad (\text{II.2})$$

Cette intégrale peut être réécrite sous la forme

$$I = (b - a) \langle f(x) \rangle \quad (\text{II.3})$$

Où $\langle f(x) \rangle$ représente la moyenne de la fonction sur l'intervalle $[a; b]$. En choisissant aléatoirement et uniformément N_r Points le long de l'intervalle $[a, b]$ et en calculant la valeur de la fonction pour chacun De ces points, on obtient une estimation de l'intégrale par l'expression

$$I_{N_r} = \frac{(b-a)}{N_r} \sum_{i=1}^{N_r} f(x_i) \quad (\text{II.4})$$

La convergence de cette méthode peut être estimée en calculant la variance, σ^2 de la somme I_{N_r} .

Or, on a

$$\sigma^2 = \frac{1}{N_r^2} \sum_{i=1}^{N_r} \sum_{j=1}^{N_r} \left((f(x_i) - \langle f(x) \rangle)(f(x_j) - \langle f(x) \rangle) \right) \quad (\text{II.5})$$

Les points étant choisis indépendamment, les termes croisés s'annulent, et on obtient

$$\sigma^2 = \frac{1}{N_r^2} (\langle f(x)^2 \rangle - \langle f(x) \rangle^2) \quad (\text{II.6})$$

La dépendance en $1/N_r$ donne une convergence a priori assez lente, mais il n'y a pas de modifications simples pour obtenir une convergence plus rapide. On peut à l'inverse modifier de façon importante

L'écart-type. Pour cela, il paraît clair que si la fonction f ne prend des valeurs significatives que sur des petites régions de l'intervalle $[a, b]$, il est inutile de calculer la fonction en des points où sa valeur est très faible. En utilisant une distribution aléatoire non uniforme avec un poids $\omega(x)$, l'intégrale se réécrit

$$I = \int_a^b dx \frac{f(x)}{\omega(x)} \omega(x). \quad (\text{II.7})$$

Si $\omega(x)$ est toujours positif, on peut définir $du = \omega(x)dx$ avec $u(a) = a$ et $u(b) = b$, et

$$I = \int_a^b du \frac{f(x(u))}{\omega(x(u))} \quad (\text{II.8})$$

on a alors une estimation de l'intégrale qui est donnée par

$$I \simeq \frac{(b-a)}{N_r} \sum_{i=1}^{N_r} \frac{f(x(U_i))}{W(x(U_i))} \quad (\text{II.9})$$

avec la distribution de poids $\omega(x)$. De manière similaire, la variance de l'estimation devient alors

$$\sigma^2 = \frac{1}{N_r} \left(\left\langle \left(\frac{f(x(u))}{\omega(x(u))} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{f(x(u))}{\omega(x(u))} \right\rangle^2 \right) \quad (\text{II.10})$$

En choisissant la fonction de poids ω proportionnelle a f , la variance s'annule. Cette merveilleuse astuce n'est possible qu'a une dimension. En dimension supérieure, le changement de variables dans une integrale multiple fait intervenir la valeur absolue d'un jacobien et on ne peut donc pas trouver de manière intuitive le changement de variable a effectuer pour obtenir une fonction de poids satisfaisante.

2. La distribution de points x_i étant choisis uniformément sur l'intervalle $[a, b]$, le théorème de la limite centrale s'applique et l'intégrale est convergente vers la valeur avec une probabilité gaussienne.

II.3 Chaîne de Markov pour échantillonner le système à l'équilibre

Reprenons notre problème de mécanique statistique : nous sommes intéressés le plus souvent par le calcul de la moyenne thermique d'une grandeur et non directement par la fonction de partition

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A_i \exp(-\beta U_i)}{Z} \quad (\text{II.11})$$

Rappelons que

$$p_i = \frac{\exp(-\beta U_i)}{Z} \quad (\text{II.12})$$

Definit la probabilité d'avoir la configuration i à l'équilibre (p_i est toujours positif et $\sum_i p_i = 1$). Si l'on était capable de générer des configurations avec ce poids, la moyenne thermique de A serait estimée par

$$\langle A \rangle \simeq \frac{1}{N_r} \sum_i^{N_r} A_i \quad (\text{II.13})$$

où N_r est le nombre de configurations calculées où A est évalué. De cette manière, la moyenne thermique se ramène à une moyenne arithmétique.

L'astuce imaginée par Metropolis, Rosenbluth et Teller en 1953 est d'avoir imaginé une méthode, générant une dynamique stochastique Markovienne stationnaire, entre configurations successives qui, converge vers la distribution d'équilibre p_{eq} .

Avant d'explicitier ce point, nous allons introduire quelques définitions. Considérant l'ensemble des configurations i , on introduit un temps t prenant les valeurs discrètes associées au comptage des itérations dans la simulation. Ce temps n'a pas de relation directe avec le temps réel du système. On appelle $P(i, t)$ la probabilité du système d'être dans la configuration i au temps t .

Reprenons maintenant les termes de la dynamique choisie : dynamique stochastique signifie que la probabilité d'aller vers une configuration j à l'instant $t + dt$, $dt = 1/N$

(où N est le nombre de particules dans le système), sachant que le système était dans la configuration i à l'instant t , ne dépend pas des configurations du système pour des instants antérieurs (mémoire limitée à l'instant t) ; cette probabilité conditionnelle est notée $W(i \rightarrow j) dt$. L'équation d'évolution du système est alors donnée par l'équation matricielle suivante :

$$p(i, t + dt) = p(i, t) + \sum_j (w(j \rightarrow i) p(j, t) - w(i \rightarrow j) p(i, t)) dt \quad (\text{II.14})$$

Cette équation traduit le bilan suivant : à l'instant $t + dt$, la probabilité du système d'être dans l'état i est égale à celle de l'instant précédent, augmentée par la possibilité que le système qui se trouve dans n'importe quelle autre configuration puisse aller dans l'état i et diminuée par la possibilité que le système qui se trouvait dans l'état i puisse aller vers n'importe quelle autre configuration.

A l'instant $t = 0$, le système est placé dans une configuration initiale i_0 qui s'exprime comme

$P(i) = \delta_{i_0,i}$, ce qui signifie que, quel que soit le choix de cette configuration, le système ne satisfait pas $p(i) = p_{eq}(i)$ qui est la condition recherchée.

Afin que le système converge vers un état stationnaire, avec l'équation d'évolution, Eq. (III.14), on obtient l'ensemble des conditions suivantes

$$\sum_j W(j \rightarrow i) p_{eq}(j) = p_{eq}(i)$$

Une solution simple de ce système d'équations est donnée par

$$W(j \rightarrow i) p_{eq}(j) = W(i \rightarrow j) p_{eq}(i) \quad (\text{II-15})$$

Cette relation, (II.15), est connue sous le nom de micro-réversibilité ou de bilan détaillé. Elle exprime le fait que, dans l'état stationnaire, (ou état d'équilibre si le processus n'a pas engendré une brisure d'ergodicité), la probabilité que le système puisse aller d'un état d'équilibre i vers un état j est la même que celle d'aller d'un état d'équilibre j vers un état i .

Ajoutons que cette condition n'est qu'une condition suffisante, car nous n'avons pas prouvé simultanément que la solution du système d'équations (II-14) est unique et que l'équation (II.15) est la meilleure solution. Pour des raisons pratiques la quasi-totalité des algorithmes Monte Carlo repose sur cette solution.

L'équation (II.15) peut être aisément réécrite sous la forme:

$$\frac{w(i \rightarrow j)}{w(j \rightarrow i)} = \frac{p_{eq}(j)}{p_{eq}(i)} = \exp(-\beta(U(j) - U(i))) \quad (\text{II.16})$$

$$\beta = \frac{1}{K_B T}$$

Cela implique que les inconnues $W(i \rightarrow j)$ que l'on cherche à déterminer ne dépendent pas de la fonction Z , mais uniquement du facteur de Boltzmann.

II.4 Algorithme de Métropoli

Le choix du processus Markovien pour satisfaire l'ensemble des équations (II.15) est l'une des solutions. Afin d'obtenir des solutions des équations (III.15) ou, en d'autres termes d'obtenir la matrice de transition ($W(i \rightarrow j)$), notons que le processus stochastique élémentaire dans un algorithme Monte Carlo est la succession de deux étapes :

1. A partir d'une conguration i , on tire au hasard une conguration j , avec une probabilité

$$\alpha(i \rightarrow j).$$

2. Cette nouvelle conguration est acceptée avec une probabilité $\Pi(i \rightarrow j)$

Ainsi, on a

$$W(i \rightarrow j) = \alpha(i \rightarrow j) \Pi(i \rightarrow j). \quad (\text{II.17})$$

Dans l'algorithme original de Metropolis (et dans la plupart des algorithmes Monte Carlo), on choisit $\alpha(i \rightarrow j) = \alpha(j \rightarrow i)$; nous nous limiterons à ce cas dans le reste du chapitre.

Dans ce cas, les équations (III.15) se réexpriment comme

$$\frac{\Pi(i \rightarrow j)}{\Pi(j \rightarrow i)} = \exp(-\beta(U(j) - U(i))) \quad (\text{II.18})$$

La solution choisie par Metropolis et al. est

$$\Pi(i \rightarrow j) = \begin{cases} \exp(-\beta(U(j) - U(i))) & \text{if } U(j) > U(i) \\ 1 & \text{if } U(j) \leq U(i) \end{cases} \quad (\text{II.19})$$

Comme nous allons le voir plus loin, cette solution est, dans la plupart des cas, très simple à mettre en oeuvre. Nous verrons au chapitre 5 des méthodes plus élaborées pour l'étude des transitions de phase, mais il est conseillé de toujours commencer par un algorithme de type Metropolis pour simuler un système : on obtient ainsi une référence utile avant de mettre en oeuvre des algorithmes plus compliqués.

Quelques commentaires concernant la mise en place ou l'utilisation d'un algorithme Monte Carlo:

Le calcul d'une moyenne thermique ne peut commencer que lorsque le système a atteint l'équilibre, c'est à dire quand $p \approx p_{eq}$. Ainsi dans une simulation Monte Carlo, il y a généralement deux périodes : la première, où partant d'une configuration initiale, on réalise une dynamique afin d'amener le système près de l'équilibre ; la seconde période, où le système évolue au voisinage de l'équilibre, et où le calcul des moyennes est réalisé. Pour estimer le temps de relaxation vers l'équilibre, il y a plusieurs méthodes. En l'absence de critère précis, la durée de la première période n'est pas facilement prévisible. Une première technique a consisté pendant longtemps à suivre l'énergie instantanée du système et à considérer que l'équilibre est atteint lorsque l'énergie se stabilise autour d'une valeur quasi-stationnaire. Une méthode plus précise consiste à estimer le temps de relaxation de fonction de corrélation et de choisir un temps assez nettement supérieur à ce temps pour commencer la deuxième période. Pour des systèmes sans désordre gelé, et pour des températures assez supérieures à une transition de phase, ce critère reste raisonnable, en première approximation.

Des critères plus précis sont apparus au cours des vingt dernières années pour déterminer le moment où un système peut être considéré comme équilibré. Nous en discuterons dans les prochains chapitres. Nous allons maintenant considérer quelques systèmes modèles et appliquer pratiquement l'algorithme décrit ci-dessus. Pour démarrer une simulation Monte Carlo, il faut tout d'abord définir une configuration initiale qui peut être par exemple:

- 1. l'état fondamental avec tous les spins égaux à +1 ou
2. un état à température infinie : pour chaque spin on tire un nombre aléatoire compris entre 0 et 1 à partir d'une distribution uniforme. Si le nombre est compris entre 0 et 0.5, le spin du site est choisi égal à +1 ; si le nombre est compris entre 0.5 et 1, le spin est choisi égal à -1.

Comme nous l'avons mentionné précédemment, la dynamique est constituée de deux étapes élémentaires : en premier, le choix d'une nouvelle configuration et en second son acceptation ou son refus.

Afin que la nouvelle configuration ait des chances raisonnables d'être acceptée (sinon le système reste trop longtemps dans un état qui devient en quelque sorte un piège), il est nécessaire que cette nouvelle configuration où se trouve le système.

Il est nécessaire que la différence d'énergie entre deux configurations successives soit modeste, ce qui est réalisé si l'on choisit de ne modifier que l'état d'un seul spin. Pour que le choix entre configurations successives reste bien aléatoire, on ne doit pas sélectionner les spins selon un ordre régulier.

La séquence itérative de la dynamique Métropolie pour un système de spins est la suivante :

1. On sélectionne un site, en tirant au hasard un nombre entier i compris entre 1 et le nombre total de sites du réseau.
2. On calcule la différence d'énergie entre la nouvelle configuration dans laquelle le spin sélectionné a été retourné et l'ancienne configuration. Pour une interaction à courte portée, cette différence d'énergie est en quelque sorte locale car elle ne fait intervenir que le site du spin sélectionné et ses proches voisins.
3. Si la nouvelle configuration est d'énergie plus basse, la nouvelle configuration est acceptée.

Si la nouvelle configuration est d'énergie plus haute, on tire au hasard un nombre entre 0 et 1, si ce nombre est inférieur à $\exp(\beta(U(i) - U(j)))$ la nouvelle configuration est acceptée, sinon on garde l'ancienne configuration.

Pour un système continu, on génère une configuration en déplaçant aléatoirement une particule, choisie elle-même au hasard parmi l'ensemble des particules. Ainsi, pour le déplacement élémentaire d'une particule évoluant dans un espace tridimensionnel, l'algorithme est le suivant

$$x'_i \rightarrow x_i + \Delta(\text{rand} - 0,5) \quad (\text{II.20})$$

$$y'_i \rightarrow y_i + \Delta(\text{rand} - 0,5) \quad (\text{II.21})$$

$$z'_i \rightarrow z_i + \Delta(\text{rand} - 0,5) \quad (\text{II.22})$$

Avec la condition que $(x'_i - x_i)^2 + (y'_i - y_i)^2 + (z'_i - z_i)^2 \leq \Delta^2/4$ (cette condition correspond à considéré des déplacements isotropes) et où rand désigne un nombre aléatoire compris entre 0 et 1, choisi dans une distribution uniforme.

Δ Est une distance de déplacement maximum dans un pas élémentaire, que l'on se donne a priori. La valeur de (Δ) doit être choisie au départ de la simulation et celle-ci est déterminée n d'avoir un taux d'acceptation des nouvelles configurations sur l'ensemble des configurations visitées de l'ordre de 20%.

II.5 Convergence vers une loi de distribution invariante imposée:

- Si "la loi de transition" $p(x \rightarrow y)$ est ergodique, c'est à dire que pour tout (x, y) couple d'états il existe une probabilité non nulle de passer de l'un à l'autre en n étapes [donc tous les états sont "visités"]
- si $p(x \rightarrow y)$ satisfait à la condition "de micro réversibilité"

$$[f(x)p(x \rightarrow y) - f(y)p(y \rightarrow x)] = 0 \tag{II.23}$$

Cette condition de micro réversibilité est encore appelée principe du bilan détaillé par référence à l'équation maitresse et au principe du bilan détaillé qui en découle en thermodynamique.

Alors la loi de distribution de la chaîne de Markov correspondante converge vers une distribution invariante qui est proportionnelle à $f(x)$.

II.5.1 Echantillonnage de $f(x) = e^{-\beta E(x)} / Z$:

Etant donnée une chaîne de Markov de loi de transition $(p(y \rightarrow x))$, nous allons "échantillonner" une suite de points $\{x_1, x_2, x_3, \dots, x_t, \dots\}$ ($x_i \in R^d$) suivant cette chaîne, x_t ayant été obtenu, le point suivant x_{t+1} est "tiré" suivant la loi de probabilité $p(x_t \rightarrow x_{t+1})$.

Si $p(x_t \rightarrow x_{t+1})$ satisfait la relation (III.22) du bilan détaillé, avec $f(x) = e^{-\beta E(x)} / Z$, c'est à

dire:
$$\left[\frac{e^{-\beta E(x_t)}}{Z} p(x_t \rightarrow x_{t+1}) - \frac{e^{-\beta E(x_{t+1})}}{Z} p(x_{t+1} \rightarrow x_t) \right] = 0 \tag{II.24}$$

Alors après un certain "temps d'équilibre", c'est à dire pour $n > N$ (N suffisamment grand) les x_t sont distribués suivant la densité de probabilité $e^{-\beta E(x)} / Z$.

On peut multiplier chaque membre de l'équation ci-dessus par Z :

$$[e^{-\beta E(x_t)} p(x_t \rightarrow x_{t+1}) - e^{-\beta E(x_{t+1})} p(x_{t+1} \rightarrow x_t)] = 0 \tag{II.25}$$

La connaissance de la constante de normalisation (ici fonction de partition Z) devient absolument inutile pour l'échantillonnage suivant la loi de probabilité $e^{-\beta E(x)} / Z$.

II.6 Algorithme de Métropolies (échantillonnage):

L'algorithme le plus utilisée pour engendrer une chaine de Markov qui satisfasse le principe du bilan détaillé à été proposé par Métropolie.[12]

Partant d'une configuration $x_t = x$, d'énergie $E(x)$ on définit une configuration d'essai y En déplaçant une ou plusieurs particules et on calcule sa nouvelle énergie $E(y)$. Cette configuration d'essai est acceptée pour nouvelle configuration avec

La probabilité $p(x \rightarrow y) = \{1, e^{-\beta E(y)} / e^{-\beta E(x)}\}$, sinon, elle est rejetée et on prend pour nouvelle configuration $x_{t+1} = x_t = x$ à dire:

- {- $x_{t+1} = y$ avec la probabilité p
- { $x_{t+1} = x_t = x$ Avec la probabilité (1)

En pratique :

{Si $E(y) < E(x)$ alors $x_{t+1} = y$, la configuration d'essai est acceptée avec certitude ($p = 1$)

{Si $E(y) > E(x)$ alors on "tire" un nombre η suivant la loi uniforme dans le segment $[0,1]$

et on accepte pour nouvelle configuration la configuration d'essai y si $\frac{e^{-\beta E(y)}}{e^{-\beta E(x)}} > \eta$ si non la nouvelle configuration est identique à l'ancienne:

$$x_{t+1} = x_t = x$$

Cette technique simple, similaire à la méthode de réjection de Von Neman décrite précédemment, impose le fait que la configuration d'essai est acceptée avec la

probabilité $p(x \rightarrow y) = \min \frac{e^{-\beta E(y)}}{e^{-\beta E(x)}}$

Il nous reste à vérifier que cette probabilité $p(x \rightarrow y)$ satisfait effectivement l'équation du bilan détaillé.

. Supposons $E(y) > E(x)$, alors :

$$p(y \rightarrow x) = 1 \text{ Et } p(x \rightarrow y) = e^{-\beta E(y)} / e^{-\beta E(x)} \tag{II.26}$$

La relation

$$p(y \rightarrow x) e^{-\beta E(y)} = p(x \rightarrow y) e^{-\beta E(x)} \tag{II.27}$$

Est bien vérifiée.

$$p(y \rightarrow x) = 1$$

Donc

$$e^{-\beta E(y)} = p(x \rightarrow y)e^{-\beta E(x)} \quad (\text{II.28})$$

$$p(x \rightarrow y) = -1 \quad (\text{II.29})$$

$$e^{-\beta E(y)} = -e^{-\beta E(x)}$$

Logarithme

$$\log e^{-\beta E(y)} = -\log e^{-\beta E(x)}$$

$$-\beta E(y) = \beta E(x)$$

$$E(y) \leq E(x) \quad (\text{II.30})$$

La vérification pour le cas $E(y) \leq E(x)$ analogue.

Conclusion:

à partir de travail et en utilise méthode Monte Carlo en présence de variable aléatoire nous pouvons calculer l'énergie et utiliser algorithme de Métropolies pour calculer les différentes directions de spin.

Chapiter III

Résultat Discussion

III .1. Introduction:

Après avoir élaboré le modèle hamiltonien et les procédures d'évaluation de l'état fondamental, on va étudier les effets des paramètres associés à chaque terme. Dans cette étude les différents paramètres s'expriment en fonction de J , c.-à-d. $|J|=1$. On limite l'interaction aux plus proches voisins (PPV). Pour $J=-1$ le couplage entre les PPV est ferromagnétique tandis qu'il est antiferromagnétique pour $J=1$. La température s'écrit elle aussi en fonction de J . Les valeurs considérées $D=+-0.2J$. Pour des systèmes réels les valeurs de J est de l'ordre (meV) tandis que Λ est de l'ordre de micro-à-milli eV. Le champ magnétique de l'ordre de micro eV, et D peut varier de micro à milli eV. Le code de calcul qu'on écrit permettra de prendre en compte les systèmes de différentes dimensionnalité et différentes tailles. Ces résultats préliminaires mettront en évidence l'effet de l'interaction de Dzyaloshinskii-Moriya sur les structures de spins. On a pu comparer les résultats de ce modèle avec les images de Spin Polarized Scanning tunneling microscopy (SPSTM) où des ondulations de spins peuvent être observées.

III .2. Cas ferromagnétique:

Dans ce cas on prend $J=-1$ et on discutera selon les valeurs de D , K et H . Sur la figure suivante on présente les orientations de spins, à une seule dimension pour $D=-0.2$ (A) et $D=0.2$ (B) et $K=H=0$, obtenues par l'algorithme de BGFS.

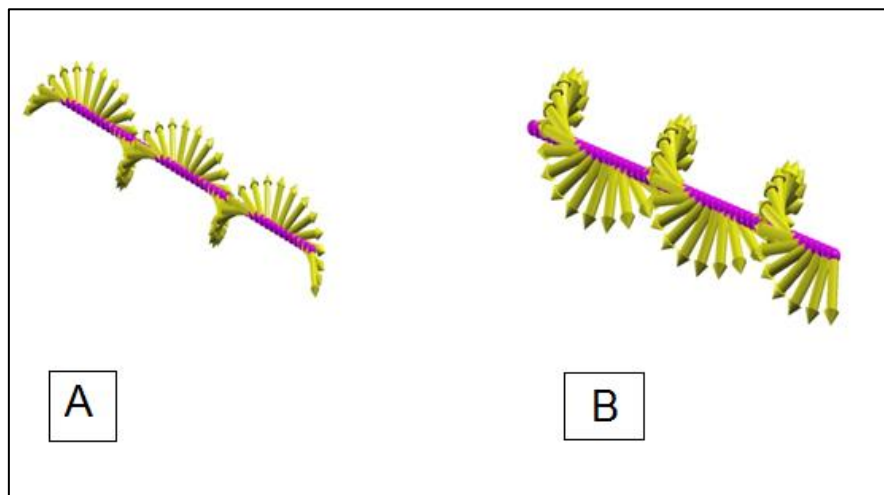


Figure1: directions de spin de l'espace one démontions et l'absence anisotropie et champs magnétique nulle.

Cette figure montre que les spins présentent une structure hélicoïdale avec deux différentes hélicités. Une hélicité positive, anti-clockwise, (A) et négative, clockwise, (B). Ces ondes solitiques peuvent être associées à une particule de deux états d'hélicité qu'on appelle skyrmion magnétique. Le concept de Skyrmion est décrit dans une section ultérieure. D'une manière générale l'hélicité de spin est déterminée par le signe de D . Ces configurations magnétiques correspondent aux valeurs périodiques des angles θ et ϕ . La période est déterminée par le rapport de D/J , Sur la figure une période de 11 sites approximativement est observée pour $|D/J|=0.2$.

Sur les figure2 et 3 on présentera l'effet de l'anisotropie et le champ magnétique. On montrera que ces deux paramètres affectent peu le système de spins. Il faut noter que comme le terme l'anisotropie contient une puissance paire de S_z alors que celui de Zeeman est impaire (si $B//z$). Les ondulations de spins se confinent de plus en plus dans le plan xz car les valeurs prises sont négatives et ces termes favorisent les orientations selon l'axe z .

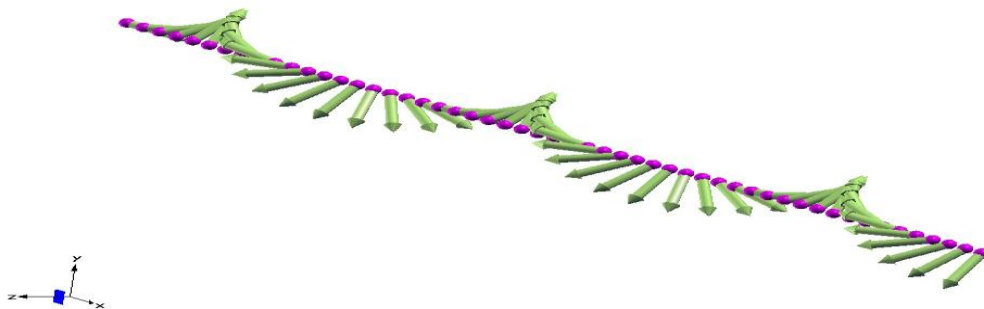


Figure2:direction de spin de l'espace one dimension et anisotropie nulle

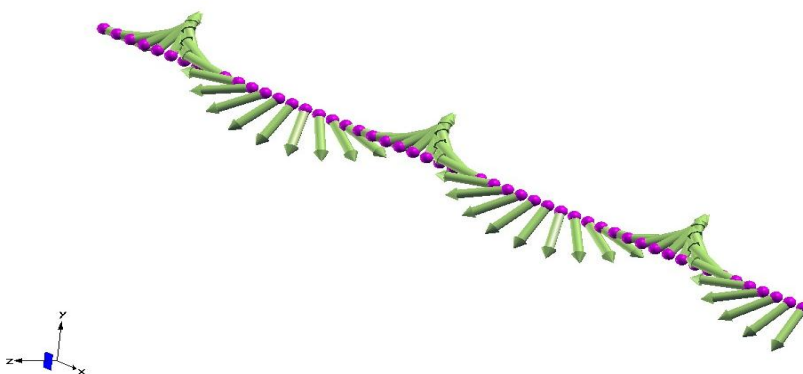


Figure3:direction de spin de l'espace one dimension à champ nul ($D = -0.2, B=0, K = -0.01$)

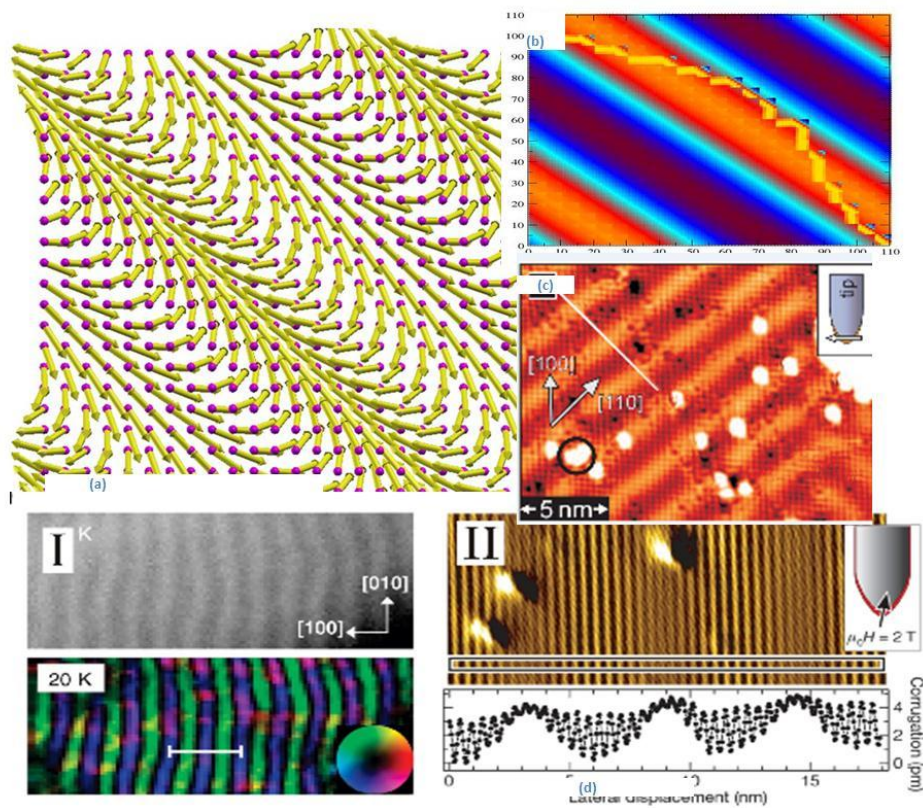


Figure 4: Représentations vectorielle (a) et continue (b) des orientations de spins calculées pour un système à deux dimensions comparées aux résultats expérimentaux de SP-STM : une monocouche Mn/W balayée par une pointe d'une polarisation in plane (c) et out of plane (d). [13], [14]

Sur la figure 4 on présente la représentation vectorielle des orientations de spins pour un système à deux dimensions ainsi que la représentation continue de la composante S_z obtenue par une interpolation des valeurs discrètes sur une grille fine. Ces deux représentations montrent par des oscillations des valeurs des projections des spins. Dans la représentation continue (en couleur) la couleur jaune correspond à un maximum de S_z tandis que la couleur magenta à un minimum. Ces résultats sont obtenus pour des valeurs de $D = -0.2J$ et $H = K = 0$. Dans les deux spectres expérimentaux, qui représentent deux images SP-STM obtenues par deux pointes polarisées in (c) et out of plane (d). On peut voir que ces spectres présentent aussi des oscillations de projections de S_z . Donc par un modèle simple considéré dans ce travail les résultats expérimentaux peuvent être expliqués et les paramètres du système réels peuvent être extraies, d'un côté, et de

l'autre ces expériences montre la pertinence du choix du modèle hamiltonien. Toute déviation entre le spectre théorique et expérimental peut être éliminée par un contrôle des conditions expérimentales et raffinement du modèle théorique.

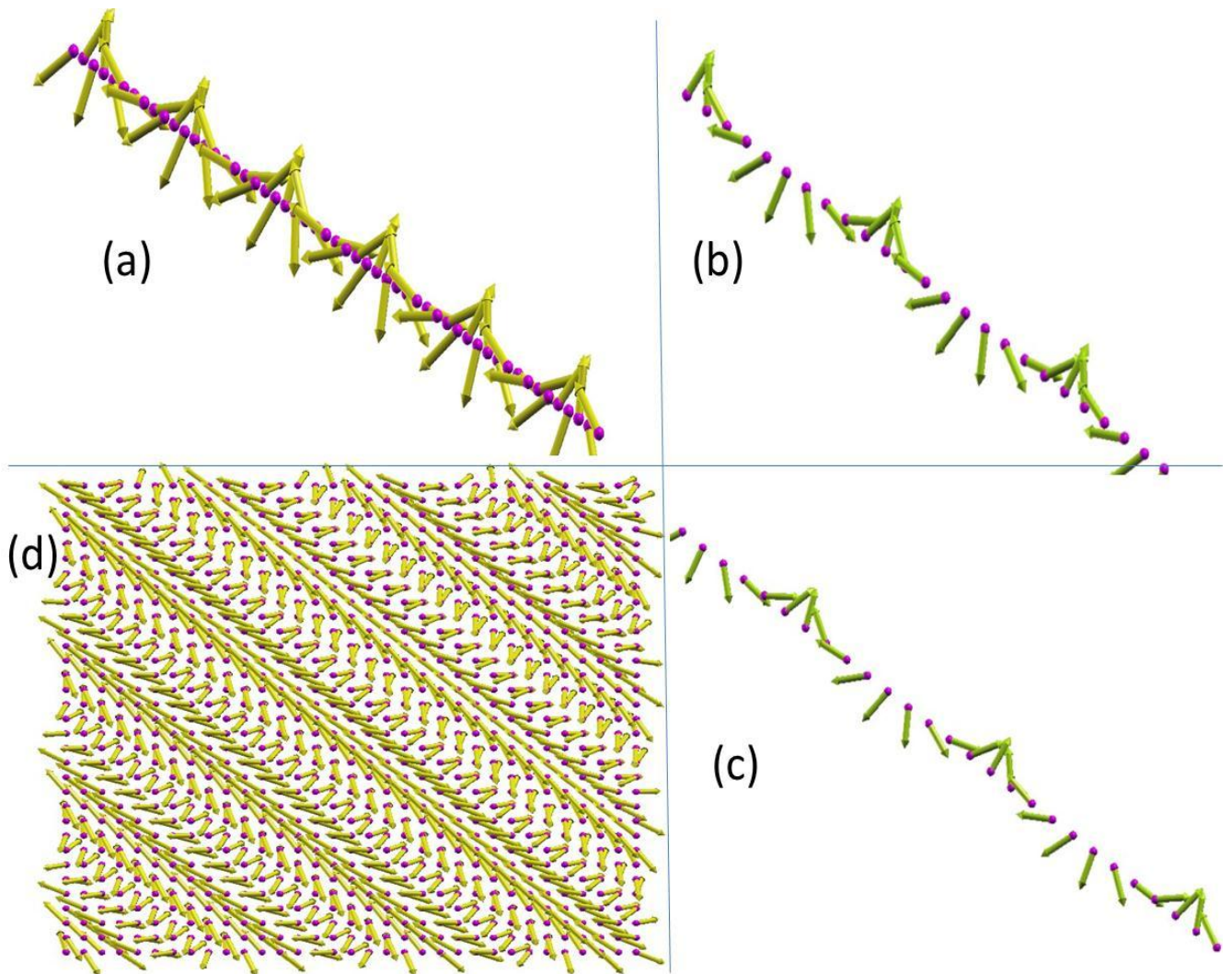


Figure 5 : Représentation vectorielle des orientations des spins à une (a) et deux dimensions (d) dans le cas d'un couplage antiferromagnétique et décomposition en deux sous-réseaux de différentes chiralités (b) et (c)

III.3. Cas antiferromagnétique :

Dans le cas où on considère une interaction antiferromagnétique entre les spins les plus proches voisins ($J=1$), à première vue, on a l'impression qu'on perd la structure chirale observée avant comme le montre la figure 5-a, mais l'antiferromagnétique peut être décomposé en deux sous-réseaux ferromagnétique dont chacun de ces deux réseaux présente une structure hélicoidale (Figure 5-b et c). En conclusion, pour un système antiferromagnétique et en présence de l'interaction de D-M, on observe les deux chiralités associées à chaque un de deux sous-réseaux et le même constat peut être tiré pour un système à deux dimensions (figure 5-d).

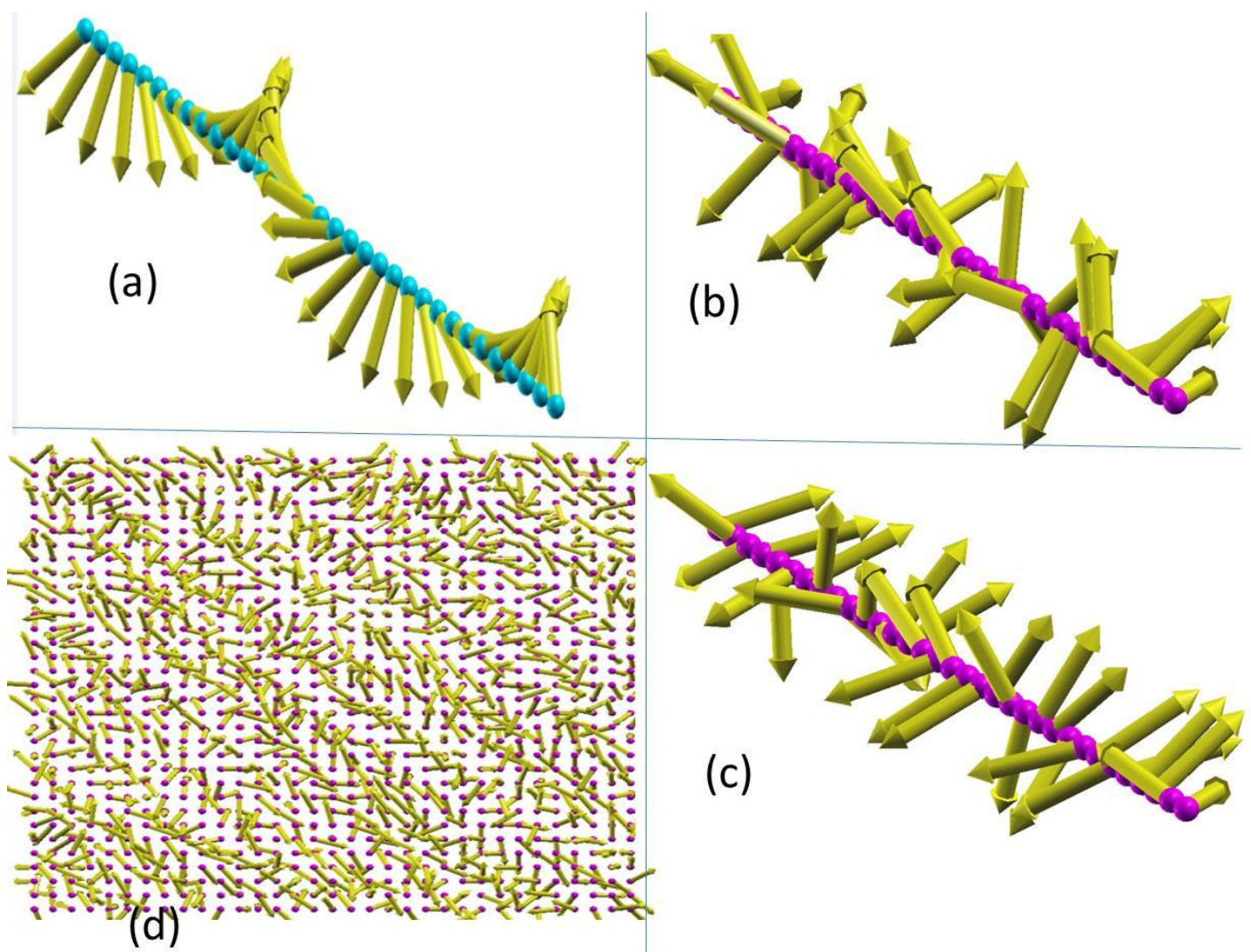


Figure 6 : Représentation vectorielle des orientations des spins dans l'état fondamental (a) la configuration représentative à $T=0.05 J/K_B$ (b) et $T=0.1 J/K_B$ (c) et la configuration

représentative à $T=0.05 \text{ J/K}_B$ et à deux dimensions (d) dans le cas d'un couplage ferromagnétique et en absence de champ et d'anisotropie.

III.4 Effet de la température:

Afin de mettre en évidence l'effet de la température sur la structure hélicoïdale des spins (dans le cas ferromagnétique), on a effectué de calculs de Monte-Carlo pour deux différentes températures $T=0.05 \text{ J/K}_B$ et $T=0.1 \text{ J/K}_B$ et comme montrer sur la figure 6-b et 6-c respectivement comparé à la configuration de de l'état fondamental 6-a. Ces calculs sont effectués sur un échantillonnage de 400 configurations obtenues après équilibrage de chaque site de N fois où N égale le nombre total des site plus 2 fois la dimensionnalité du système. La figure montre qu'à basse température les spins commencent à se désordonner graduellement et qu'à haute température les spins ne sont plus corrélés. Les mêmes conclusions pour les systèmes de spins à deux dimensions.

III-5Module Continue

On passe maintenant au modèle continue et au lieu de représenter l'aimantation comme un vecteur localisé sur le site i , elle sera présentée par une fonction continue de la position r $M=M(r)$. Les différents termes de l'hamiltonien discuté dans le premier chapitre vont être exprimés comme des intégrales.

5.1-Energie de Zeeman:

Un moment magnétique va essayer de réduire son énergie en parallèlement à un externe Champ magnétique. L'énergie qui décrit l'interaction d'un moment magnétique champ applique H est appelé l'énergie Zeeman [16]:

$$E_H = - \int H \cdot M dV \quad (\text{III.1})$$

L'énergie Zeeman ainsi que anisotropies est terme d'énergie locale, à savoir sa contribution énergétique est déterminée seulement par les valeurs locales.

5.1- états modulés sons l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya:

la présence sous de l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya dans des aimant dans une grande variété de modulations spin avec une longue durée de la périodique et le sens de rotation fixe.

5-1 a- Modulations One-dimensionnelles:

En l'absence d'externe supplémentaire (champs magnétiques, anisotropies, courant) spirales sont les seuls stables structures modulées pour aimants non-centrosymétriques. Cette structure en spirale sur plusieurs de cellules unitaires. Par exemple la période de la spirale dans la *MnSi* est égal à 39 cellules unitaires (180\AA) en *FeGe*.

En outre Considérons une spirale, Elle peut être traitée comme un ensemble de plans parallèles perpendiculaires à la direction de propagation. Attribut caractéristique des parois de domaine Bloch est zéro impact de l'énergie de démagnétisation à la structure, Cette caractéristique est par les états modulés Bloch-like. Ce type de spirales est par interaction Dzyaloshinskii-Moriya $L_{zx}^{(y)} - L_{zy}^{(x)}$ se le long de l'axe(y).

Ensuite, l'énergie totale pour cette spirale dans la représentation des coordonnées sphériques $M = M_s(0, \sin \theta, \cos \theta)$

$$E = \frac{1}{L} \int_0^L [A \left(\frac{d\theta}{dy}\right)^2 - D \frac{d\theta}{dy} + K \sin^2 \theta + H M_s (1 - \cos \theta)] dy \quad (\text{III.2})$$

Dans le champ magnétique nul et anisotropie zéro une plan forme le s magnétique Etat comme un seul mode harmonique avec nombre d'onde $q = D = 2A$, où l'angle de phase varie linéairement le long de la direction de propagation $(y) = q y$. Dans le champ structure en spirale est remplacé par uniforme avec le long champ appliqué. En particulier pour anisotropie zéro.

$$H_H = \frac{\pi^2 D^2}{16 A M_s} \quad (\text{III.3})$$

5.2.a Modulations deux dimensions:

Dans des conditions supplémentaires cristaux posséder deux dimensions modulations. Premier mécanisme de réalisation de tels états a été proposé par Bogdanov et Yablonskii en 1989 .Ils ont que dans les aimants avec certaine classe de symétrie états de vortex sont réalisés en tant que thermodynamiquement structures stables dans certaine gamme de champs magnétiques appliqués Skyrmions isolés peuvent être considérés comme une isolées textures statiques localisés dans deux directions de l'espace qui peut être prolongée dans la troisième direction en tant que chaînes Skyrmions. Magnétisation dans le centre pion à un champ appliqué l'état le long du champ à la périphérie de Skyrmions. La façon d'aimantation torsion dépend de la

symétrie. Le comportement asymptotique de l'aimantation loin du centre Skyrmion est identique à la paroi ferromagnétique plane [17]:

$$\theta \propto \exp(-\rho\sqrt{A}\sqrt{HM_s} + K) \quad (\text{III.4})$$

Près du centre de la concurrence entre les échanges et couplages Dzyaloshinskii-Moriya détermine la configuration de magnétisation.

$$\theta \propto \frac{D}{A}\rho \quad (\text{III.5})$$

Ce comportement linéaire de structure magnétique près du centre Skyrmions facilement la taille pour Skyrmions isolées et liées. La taille de l'équilibre des Skyrmions isolés se pose en raison de la concurrence entre énergies et Zeeman:

$$R \propto \frac{A}{H} \quad (\text{III.6})$$

les systèmes et antisymétriques avec $D = 0$ solutions sont localisées radialement instable et sous de champ magnétique appliqué pour les Intégrer condensés de Skyrmions cette taille ne dépend pas de l'anisotropie magnétique champ ou:

$$R \propto \frac{A}{D} \quad (\text{III.7})$$

CONCLUSION

Générale

Conclusions Générale

Nous avons reporté dans ce mémoire l'étude de l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya et montré que la présence de ce terme dans l'hamiltonien conduit à une configuration non colinéaire des spins. Selon le signe de cette interaction, on obtient des ondes de différente chiralité. Ces ondes peuvent être associées à une quasi-particule dite skyrmion. On a montré que ce modèle simple permet d'expliquer des résultats expérimentaux de SPSTM. Les périodes de ces oscillations dépendent du rapport D/J . Ces résultats à température nulle sont obtenus par une minimisation de l'énergie en utilisant la méthode de BGFS. On a montré que l'effet de la température, incluse à travers la méthode de Monté Carlo, détruit ces ondes et que le système à haute température est complètement désordonné. Cette étude préliminaire basée sur une dérivation de chaque terme de l'hamiltonien, peut être étendu par l'inclusion d'autres termes qui sont au même ordre de grandeur de D , K et H . Finalement ce modèle discret peut être étendu au modèle continu et l'investigation des différentes phases nécessite un balayage de toutes les valeurs de D , K , H . Le modèle continu très utilisé en macro-magnétisme et peu justifié tandis que le modèle discret est utilisé en micro-magnétisme et beaucoup plus justifié car il est dérivé à partir des interactions fondamentales. Il faut noter ici qu'on a traité que le modèle statique et que le modèle dynamique est beaucoup plus riche.

Références et bibliographie:

[1] Laurent-Patrick Lévy: " *Magnétisme et supraconductivité*", InterEditions / CNRS Editions (1997).

[2] W. Heisenberg, Z. Phys. 38, 441 (1926).

[3] P.A.M. Dirac, Proc. Roy. Soc. 112A, 661 (1926).

[4] J.H. Van Vleck, "*The Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities*", Oxford University Press (1932).

[5] I. E. Dzyaloshinskii, Zh. Eksp. Fiz. [Sov. Phys. JETP 6, 821 (1957); *ibid.* 6,

[6] I.E. Dzyaloshinskii, *Thermodynamic Theory of "Weak" Ferromagnetism In Antiferromagnetic Substances*, Physical Problems Institute, Academy of Sciences, U.S.S.R. (Submitted to JETP editor February 19, 1957) ,J. Exptl. Theoret. Phys. (U.S.S.R.) 32, 1547-1562 (June, 1957)

[7] G. BUTENKO, Phenomenological theory of chiral states in magnets with Dzyaloshinskii-Moriya interactions Mag.-Phys. geboren am 04.10.1986 in Donezk, Ukraine

[8] T. MORIYA, Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism, Phys. Rev, **120**, 1 (1960).

[9] A. Sergienko and E. Dagotto *Role of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction in multiferroic perovskites*. Received 2 August 2005; published 23 March 2006

[10] Cet article est partiellement ou en totalité issu de l'article de Wikipédia en [anglais](#) intitulé « [BFGS method](#) »

[11] Méthodes de Monte-Carlo Michel ROGER, Service de Physique de l'Etat Condensé CEA Saclay 13 octobre 2008.

[12] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller et E. Teller, J. Chem. Phys. 21, 1087 (1953).

[13] [Wiki Loves Earth photo contest: Upload photos of natural heritage sites in Algeria to help Wikipedia and win fantastic prizes!](#)

[14] (expérimentale de (SP-STM maturément détecter a spin-spiral state in 1ML Mn/W)

[15] I. E. Dzyaloshinskii, Soviet Physics JETP 19, 960 (1964).

[16] A. Bogdanov and A. Hubert, J. Magn. Magn. Mater. 138, 255 (1994).

[17] Y. Togawa, T. Koyama, K. Takayanagi, S. Mori, Y. Kousaka, J. Akimitsu, S. Nishi-hara, K. Inoue, A. S. Ovchinnikov, and J. Kishine, Phys. Rev. Lett. 108, 107202 (2012).

الملخص:

قمنا في هذا العمل الموجز بدراسة تأثير التفاعل المغناطيسي ل: دزِيلشكي - موريا على بنية السبين حيث نعبر عن مجموعة السبينات بواسطة هاملتونية يحوي حد هيزنبرغ و حد الانزتروبي، حد زيمان و حد دزِيلشكي - موريا لتحديد الحالة الأساسية قمنا باستخدام طريقة BGFS لإيجاد الطاقة الدنيا . لإيجاد تأثير درجة الحرارة على جملة السبينات قمنا باستعمال طريقة مونت كارلو لحساب البنية التمثيلية لهذه الجملة . تبين من خلال هذه الدراسة وجود بنية شبه حلزونية و التي يمكن ربطها بشبه الجسيمة سكرميو المغناطيسية . تم دراسة تأثير مختلف العوامل على هذه البنية و تبين أن درجة الحرارة لها التأثير الأكبر و تؤدي إلى توزيع عشوائي لاتجاه السبينات . هذه الدراسة يمكن تعميمها بإدخال حدود أخرى للهاملتونية أو باستعمال النموذج المستمر لتفاعل .

Résumé:

Dans ce travail, on a étudié de l'effet de l'interaction de Dzyaloshinskii - Moriya sur la structure des spins. L'ensemble des spins est décrit par un Hamiltonien qui inclut le terme Heisenberg, l'anisotropie magnétique, le terme de Zeeman et terme de Dzyaloshinskii- moriya.

Pour déterminer l'état fondamental on a utilisé la méthode (BGFS.) pour minimiser l'énergie.

Pour trouver l'effet de la température sur le système des spins on a utilisé la méthode de Monte Carlo pour calculer la structure magnétique représentative.

On a trouvé à travers cette étude, la présence de la structure chirale, qui peut être liée à quasi-particule Skymion-magnétique. L'étude des effets de divers facteurs sur ces structures montre que la température a le plus grand effet et qu'elle conduit à une distribution aléatoire des directions des spins. Cette étude peut être généralisée en incluant d'autres termes à Hamiltonien ou en utilisant le modèle continu des interactions.

Abstract:

In this work, we study to the effect of Dzyaloshinskii - Moriya interaction the spin structure.

A spins system is described by a Hamiltonian which include the Heisenberg, magnetic anisotropy, Zeeman and Dzyaloshinskii-moriya terms.

The ground state is obtained by minimizing the energy using the BGFS algorithm.

To study of the effect of temperature on the spins system we used Monte Carlo method to calculate the representative structure.

It has been found through this study, the presence of the chiral structure, which may be related to quasi particle of magnetic Skymion. The study of the impact of various factors on these structures shows that the temperature has the greatest effect and leads to a random distribution of the direction of the spins.

This study can be generalized by including extra terms to the Hamiltonian or by using the continuous model of interactions.