Dynamique et topologie des vortex magnétiques

Alberto Verga

Université d'Aix-Marseille, IM2NP. Faculté de sciences, Marseille. alberto.verga@univ-amu.fr

Résumé. Les nanostructures ferromagnétiques supportent des textures à la topologie non triviale, comme des vortex ou skyrmions. Soumises à un courant polarisé en spin l'aimantation évolue par effet du spin-transfert torque. On étudie les mécanismes de dissipation à l'origine des changements de topologie observés, et on propose une généralisation de l'équation de Landau-Lifshitz, pour tenir compte de la source de topologie.

Abstract. The magnetization texture in ferromagnetic nanostructures often possesses a nontrivial topology, as in the case of vortices or Skyrmions. Under the action of a spin-polarized current, this texture evolves through the effect of the spin-transfer torque. We investigate the dissipation mechanisms responsible of the topological changes and generalize the Landau-Lifshitz equation in order to take into account the topology source.

1 Introduction

Le champ d'aimantation dans les métaux ferromagnétiques ou chiraux (possédant un fort couplage spin-orbite), peut prendre des configurations ayant une topologie non triviale, comme des vortex et skyrmions. Ces textures évoluent sous l'action d'un courant polarisé en spin, par l'effet de spin-transfert torque, et au-dessus d'un seuil, changent de topologie : le cœur du vortex est renversé, le skyrmion s'annihile, des nouveaux vortex sont générés [1]. Du point de vue microscopique, le système se compose d'un réseau de spins fixes couplés aux spins itinérants par l'interaction d'échange. Dans la limite continue, l'approximation quasi-adiabatique permet d'éliminer les électrons, et d'obtenir une équation de Landau-Lifshitz complétée par un terme de spin-transfert torque. Or, cette équation conserve la topologie de l'aimantation. Dans ce travail, on met en évidence les mécanismes de changement de topologie, à partir d'un modèle semi-classique pour les spins fixes et quantique pour les spins itinérants. La dynamique des électrons est gouvernée par l'équation de Heisenberg,

$$i\hbar\dot{c}_i(t) = H_e(t, S_i)c_i(t), \qquad (1)$$

où c_i est l'opérateur d'annihilation d'un électron au site *i* d'un réseau carré, et où l'hamiltonien H_e contient, en plus de l'énergie cinétique, les potentiels d'impuretés et les champs appliqués, le couplage J_s avec les spins fixes S_i . Le champ d'aimantation $S_i(t)$ évolue avec la loi (Landau-Lifshitz)

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{S}_i = \boldsymbol{S}_i \times (\boldsymbol{f}_i + J_s \boldsymbol{s}_i), \qquad (2)$$

avec f_i le champ magnétique effectif (crée par les couplages d'échange, spin-orbite, anisotropie, etc.) et $s_i = \frac{\hbar}{2} \langle c_i^{\dagger} \boldsymbol{\sigma} c_i \rangle$ le spin des électrons ($\boldsymbol{\sigma}$ est le vecteur des matrices de Pauli). À la différence de l'approche micromagnétique, des effets fortement non-adiabatiques (localement les spins fixes peuvent suivre les spins électroniques) constituent une source de topologie. En effet, les spins itinérants génèrent un champ magnétique interne,

$$b = \mathbf{n} \cdot \partial_x \mathbf{n} \times \partial_y \mathbf{n}, \quad \mathbf{n} = \mathbf{s}/s.$$
(3)

par l'intermédiaire d'un champ de jauge \boldsymbol{a} lié au changement d'axe de quantification en chaque point $\boldsymbol{x} = (x, y) : b = \hat{\boldsymbol{z}} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{a}).$

© Non Linéaire Publications, Avenue de l'Université, BP 12, 76801 Saint-Étienne du Rouvray cedex

162 A. Verga

Le résultat principal de ce travail est que le torque non-adiabatique $\tau = \tau(x, t)$, dans la limite continue, contient un terme source de topologie dont la forme est,

$$\boldsymbol{\tau} = \beta_s \boldsymbol{s} \times (\boldsymbol{v}_s \cdot \nabla \boldsymbol{s}), \qquad (4)$$

où $\psi = \psi(\boldsymbol{x}, t)$ est le spinor des électrons, et \boldsymbol{v}_s la vitesse des spins itinérants; β_s est une constante sans dimensions caractéristique de la dissipation. Ce terme apparaît naturellement dans la limite nonadiabatique, dans laquelle l'écart du spin fixe par rapport à sa valeur moyenne est donné par la valeur du spin des électrons $\delta \boldsymbol{S} \sim \boldsymbol{s}(\boldsymbol{x}, t)$. L'intégration numérique directe des équations couplées spins fixesélectrons montre la riche phénoménologie du changement de topologie.

2 Equation de Landau-Lifshitz modifiée par une source de topologie

Dans la limite continue, l'équation de mouvement des électrons (1) devient,

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t) = H_e(t,\boldsymbol{S})\psi(\boldsymbol{x},t), \qquad (5)$$

avec l'hamiltonien

$$H_e = \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla + eEt\hat{\boldsymbol{x}})^2 - J_s \boldsymbol{S}(\boldsymbol{x}, t) \cdot \boldsymbol{\sigma} + V(\boldsymbol{x}), \qquad (6)$$

où E est le champ électrique uniforme appliqué (m masse effective de l'électron, e > 0 la charge élémentaire). Le potentiel V tient compte des impuretés et autres effets aléatoires pouvant contribuer à la relaxation de spin. Il convient d'introduire le système d'unité avec la masse m, la longueur $l_0 = \hbar/\sqrt{mJ_s}$ et le temps $t_0 = \hbar/J_s$, dans lequel $m = \hbar = J_s = e = 1$. Des valeurs typiques sont $t_0 \sim 10^{-14}$ s et $l_0 \sim 0.3 \, 10^{-9}$ m.

Dans la même limite continue, l'équation pour l'évolution de la texture magnétique (2), s'écrit,

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S} \times (\boldsymbol{f} - \alpha \boldsymbol{S} \times \boldsymbol{f} + \boldsymbol{s}), \quad \boldsymbol{f} = J\nabla^2 \boldsymbol{S} - KS_z \hat{\boldsymbol{z}} + D\nabla \times \boldsymbol{S},$$
(7)

avec J la constante d'échange, K l'anisotropie et D la constante de Dzialoshinskii-Moriya (couplage spinorbite); on a aussi introduit explicitement le coefficient α d'amortissement de la précession. Il faut noter que dans (7) le terme de spin torque contient la valeur moyenne du spin microscopique $\mathbf{s} = \langle \hat{\mathbf{s}} \rangle$ sur les états quantiques, qui tient compte d'un ensemble d'électrons (moyenne définie par $\langle \ldots \rangle = \text{Tr}[\rho \ldots]$, avec ρ la matrice densité, qui se réduit à la distribution de Dirac pour un système à l'équilibre thermodynamique). On dérive une équation pour la densité de spin microscopique $\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2}\psi^{\dagger}\boldsymbol{\sigma}\psi$, directement de (5),

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\boldsymbol{s}} + Et\hat{\boldsymbol{x}}\cdot\nabla\hat{\boldsymbol{s}} + \nabla\cdot\Im(\frac{1}{2}\psi^{\dagger}\boldsymbol{\sigma}\otimes\nabla\psi) = \hat{\boldsymbol{s}}\times\boldsymbol{S} - \boldsymbol{\Gamma}, \qquad (8)$$

où Γ est le terme de dissipation dû à la diffusion avec les impuretés qui peuvent en général changer le spin par collision. La moyenne sur l'état quantique de (8) peut donc s'écrire :

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{s} + \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{s}} \cdot \nabla \boldsymbol{s} = -\nabla \cdot \mathcal{J}_{p} + \boldsymbol{s} \times \boldsymbol{S} - \langle \Gamma \rangle, \quad \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{s}} = \Im \langle \psi^{\dagger} (\nabla - \mathrm{i} E t \hat{\boldsymbol{x}}) \psi \rangle, \tag{9}$$

où on a séparé du tenseur courant de spin $\mathcal{J} = \frac{1}{2}\Im\langle\psi^{\dagger}\boldsymbol{\sigma}\otimes\nabla\psi\rangle$ le terme d'advection et le terme de courant « pur » de spin, $\mathcal{J} = \boldsymbol{v}_s \otimes \boldsymbol{s} + \mathcal{J}_p$. Une propriété importante de l'équation de Landau-Lifshitz du micromagnetisme $\dot{\boldsymbol{S}} = \boldsymbol{S} \times \boldsymbol{f}$, est qu'elle conserve, en plus de la norme de \boldsymbol{S} , la charge topologique Q = const, pour \boldsymbol{f} un champ continu et dérivable arbitraire. La charge topologique (un entier pour les textures magnétiques dans le plan) est définie par,

$$Q = \int \frac{d\boldsymbol{x}}{4\pi} q(\boldsymbol{x}, t), \ Q_{+} = \int \frac{d\boldsymbol{x}}{4\pi} |q(\boldsymbol{x}, t)|, \quad q = \boldsymbol{S} \cdot \partial_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{S} \times \partial_{\boldsymbol{y}} \boldsymbol{S}, \quad |\boldsymbol{S}| = 1$$
(10)

avec q la densité de charge; on introduit aussi Q_+ , qui est une mesure de nombre de vortex dans le système. Or, l'équation (7) est stochastique, puisqu'elle dépend de la réalisation du potentiel aléatoire V. On se propose de dégager de (5) et (7) une source effective de topologie, tout en gardant le caractère continu et déterministe de l'évolution de la texture magnétique S moyennée sur le bruit.

L'objectif est d'éliminer des équations (5) et (7) le potentiel aléatoire en séparant la contribution moyenne de la fluctuante dans le spinor $\psi \to \psi + \delta \psi$; de même on a $\mathbf{s} \to \mathbf{s} + \delta \mathbf{s}$ et $\mathbf{S} \to \mathbf{S} + \delta \mathbf{S}$, où maintenant on note \mathbf{S} et \mathbf{s} les valeurs moyennes indépendantes du bruit. L'équation différence entre le spin fixe total (7) et sa fluctuation (termes $\mathcal{O}(\delta)$), donne une équation pour les valeurs moyennées sur le potentiel aléatoire plus un terme de fluctuation,

$$\frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{S} = \boldsymbol{S} \times (\boldsymbol{f} - \alpha \boldsymbol{S} \times \boldsymbol{f} + \boldsymbol{s}) + \delta \boldsymbol{S} \times \delta \boldsymbol{s}, \qquad (11)$$

qui est apparemment d'ordre supérieur $\mathcal{O}(\delta\delta)$, mais qui contient en fait une contribution « lente », combinaison de deux contributions « rapides ». Parmi les multiples termes $\mathcal{O}(\delta)$ de l'équation pour δS on ne retient que le bilan $\delta \dot{S} \sim \delta S \times s$, seul susceptible de changer la charge topologique totale, en combinaison avec δs . Plus précisément, on ne garde que des termes pouvant donner une contribution parallèle à S, car les contributions strictement perpendiculaires conservent la topologie. Or la solution « lente » de cette équation est simplement

$$\deltam{S}\sim\pmm{s}$$
 ,

qui annule le spin-transfert torque à cet ordre. Il faut insister sur le fait que $\delta S \sim s$ recouvre un effet fortement non adiabatique, la fluctuation du spin fixe suit le spin de l'électron plutôt que le contraire où le spin itinérant s'alignerait sur le spin fixe (limite adiabatique $\delta S = 0$).

Pour compléter le calcul il nous reste à déterminer δs , ce qui nécessite de résoudre à l'ordre $\mathcal{O}(\delta)$ l'équation (9); comme dans le cas de S on cherche les termes qui peuvent contribuer au changement de topologie, directement liés à la dissipation. À l'ordre $\mathcal{O}(\delta)$, on peut écrire que la dissipation $\langle \Gamma \rangle \sim \delta s/\tau_c$, avec τ_c le temps de collision de retournement du spin itinérant, est balancée par la dérivée convective de set le spin torque. Comme le torque $\delta S \times s$ s'annule, on doit avoir (encore négligeant la dérivée temporelle)

$$\delta \boldsymbol{s} \sim -\tau_c \boldsymbol{v}_s \cdot \nabla \boldsymbol{s}$$

plus des termes perpendiculaires à S. Combinant les deux expressions de δS et δs dans (11), on aboutit à l'équation modifiée de Landau-Lifshitz,

$$\frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{S} = \boldsymbol{S} \times (\boldsymbol{f} - \alpha \boldsymbol{S} \times \boldsymbol{f} + \boldsymbol{s}) + \beta_s \boldsymbol{s} \times (\boldsymbol{v}_s \cdot \nabla \boldsymbol{s}), \quad \boldsymbol{s} = \frac{1}{2} \langle \psi^{\dagger} \boldsymbol{\sigma} \psi \rangle$$
(12)

dans laquelle on a le coefficient sans dimensions $\beta_s = \tau_c J_s/\hbar$ qui caractérise le processus de dissipation à l'origine de la source de topologie. En outre, le spin itinérant en (12) est calculé à l'aide de la fonction d'onde moyenne, qui satisfait l'équation de Schrödinger,

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t) = -\frac{1}{2}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x},t) - \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{\sigma}\psi(\boldsymbol{x},t).$$
(13)

La présence du terme de spin-transfert torque $S \times s$ et de la source permettent de tenir compte des effets adiabatiques et faiblement non-adiabatiques de couplage entre les spins itinérants et fixes. Par exemple, si $s \sim S$ le terme en β_s se réduit au terme habituel de spin-transfert torque [2] (qui conserve la norme des spins fixes).

La source dans (12) brise la conservation de la charge topologique et de la norme de S, ce qui permet d'anticiper que la phénoménologie du changement de la charge topologique sera modifiée par rapport aux changements associés à la discrétisation des modèles micromagnétiques [3]. Le signe $\beta_s > 0$ correspond à un amortissement de la partie de S parallèle à s, puisque $s \times (v_s \cdot \nabla s) \sim -S_{\parallel}$, comme on peut le voir de (9). Avec le signe contraire, en principe possible, il tend à rallonger la norme de S, et au même temps, à inhiber la formation de structures localisées de topologie non triviale (défauts topologiques).

164 A. Verga



Figure 1. Annihilation d'un skyrmion par un courant polarisé en spin. Aimantation aux $t = 0, 260, 350, 500 t_0$, panneaux à gauche ; évolution de la charge topologique (en noir) et du nombre de vortex (en rouge), à droite. Les flèches correspondent aux composantes (S_x, S_y) , et la couleur à S_z $(S_z = -1 \text{ noir}, S_z = -1 \text{ blanc})$. La taille de la boîte est de $64 \times 64 l_0^2$. La deuxième image correspond au moment où s'effectue le changement de topologie ; la troisième image montre l'expansion d'une forte onde de spin, générée par l'annihilation des structures de charges topologiques opposées.

3 Phénoménologie du changement de topologie

On a effectué des simulations numériques de l'évolution des textures de spin bi-dimensionnelles soumises à un courant polarisé en spin, par intégration numérique des équations couplés de Schrödinger (13) et Landau-Lifshitz (12) avec le terme de dissipation qui permet de rendre compte des changements de topologie dans la limite continue. Le code numérique utilise un algorithme pseudo-spectral pour les dérivées spatiales, une méthode de Runge-Kutta pour le pas de temps de spins fixes et une méthode utilisant des opérateurs unitaires (qui conservent la norme) pour l'évolution de la fonction d'onde. Le système considéré est un carré, avec des conditions de bord périodiques, de côté $L = 64 l_0$. La discrétisation spatiale se fait sur une grille de 128^2 ou 256^2 (avec de résultats sensiblement identiques). La condition initiale est d'abord relaxée pour s'assurer que la distribution des spins fixes est une solution stationnaire de l'équation de Landau-Lifshitz en absence de courant; on applique ensuite le champ électrique pour suivre la dynamique des spins couplés.

Dans la figure 1 on montre une séquence de l'évolution d'un skyrmion de Belavin et Polyakov, conjointement à la charge topologique. Cette condition initiale possède une charge topologique Q = -1. On remarque que la charge topologique, bien que proche de -1 sur un temps long, progressivement diminue (en valeur absolue) pour brusquement s'annuler autour de $t = 260 t_0$. Ceci confirme l'action du terme de dissipation, source de topologie, qui rend la transition plus douce et progressive que dans le cas où les échelles dominantes sont celles du réseaux microscopique. La distribution des spins fixes évolue en réponse au courant de spins itinérants, par un mouvement de précession qui ne modifie pas la topologie. Progressivement le cœur du skyrmion se déforme et diminue de taille, comme on peut le constater en comparant les deux premières images de la figure 1, avec la condition initiale et le champ juste avant le changement de topologie ($t \approx 260 t_0$). Après le changement de topologie, une forte onde de spin se propage, laissant derrière elle le résidu du noyau du skyrmion qui a subi une transformation irréversible, avec une diminution de la longueur de spins fixes (les deux dernières images).

Les détails de la disparition du cœur du skyrmion autour de $t = 260 t_0$ sont montrés dans les panneaux de la figure 2. Les spins fixes (premier panel à gauche) passent de la valeur $S_z = 1$ (blanc) dans la périphérie, à $S_z = -1$ au centre (noir). Les spins itinérants (deuxième panel) ont une distribution spatiale (et temporelle) plus complexe, avec une tendance à se polariser selon les z positifs (ceci est assuré numériquement par un faible champ magnétique n'agissant que sur les électrons). Les spins itinérants et fixes ne sont pas alignés sur une large région du centre du skyrmion, ce qui se traduit par un important spin-transfert torque (troisième panel). On peut aussi mentionner que le cœur du skyrmion agit comme une barrière de potentiel pour les spins itinérants : la densité d'électrons dans cette région a donc tendance à diminuer. C'est justement quand le courant de spin pénètre le cœur des vortex magnétiques, que l'interaction entre les spins fixes et mobiles peut conduire vers des modifications de la topologie. Il est aussi important de remarquer la différence d'échelles caractéristiques de variation de la texture magnétique,



Figure 2. Détail du changement de topologie : aimantation, spin et spin torque (de gauche à droite). Les lignes de contour correspondent à $S_z = \text{const}$, la couleur, de noir-bleu à rouge-blanc, est proportionnel à la composante z du vecteur représenté. (Région centrale $32 \times 32 l_0^2$.) Le panel de droite montre le champ magnétique interne b au moment de la transition ($t \approx 260 t_0$). Ce champ est presque nul partout, sauf dans des régions localisées autour du cœur du skyrmion, où les structures de topologie non triviale se multiplient (noir b = -0.5, blanc b = 1).

supportée par les spins fixes, et des spins itinérants. À la différence de spins fixes dont la norme est pratiquement conservée, la norme des spins quantiques s est arbitraire (elle dépend de la densité de probabilité des électrons); en outre, leurs échelles d'évolution temporelle et spatiales sont bien plus rapides que celles des spin fixes, dont les variations sont essentiellement celles dominées par les interactions d'échange.

Le dernier panel, à droite, permet de donner une explication qualitative au changement de topologie. On y représente le champ interne b de l'équation (3), crée par un champ de jauge a dont l'origine réside dans le changement d'axe de quantification en chaque point (et chaque instant) dû à la présence de la texture magnétique, qui apparaît dans l'hamiltonien (6) comme un champ extérieur instationnaire et inhomogène. En effet, à l'aide d'une rotation U(x,t) on ramène l'axe local de quantification vers l'axe z, ce qui se traduit par l'apparition d'un champ vecteur $\boldsymbol{a} = -\mathrm{i}U^{\dagger}\nabla U$. Au prix de l'introduction du champ de jauge, on sépare complètement les spins plus et moins dans l'équation de Schrödinger, permettant donc de définir des états propres de spin. Le champ interne b résulte du choix de l'axe du spin itinérant comme axe de quantification. Ce choix, contraire à celui usuel de l'axe selon S, sert à visualiser le champ b associé aux spins des électrons, lequel étant en fait une densité de charge topologique (comparer à (10)), va intervenir dans la dynamique du changement de topologie des spins fixes. On voit effectivement dans la figure 2 (panel de droite) que le champ b, durant le changement de topologie du skyrmion, se distribue autour du novau sur des multiples concentrations auxquelles on peut associer une charge de -1/2 (noir) à 1 (blanc). Rappelons que la charge du skyrmion est de -1. Le changement de topologie que fait passer le système de sa charge initiale -1 vers un état de topologie triviale, de charge nulle Q = 0, nécessite par conséquent la nucléation d'une charge Q = 1. Or, ce qu'on observe c'est précisément l'apparition de telles structures de charge topologique Q = 1, non pas dans le champ de spins fixes mais dans celui du courant de spins mobiles. Le mécanisme de changement de topologie requiert en définitive l'asservissement des spins fixes du cœur des vortex, aux spins itinérants : c'est par leur intermédiaire que les structures de charge topologique opposée indispensables au changement de topologie sont formées. L'annihilation d'objets de charge topologique opposées permet ce passage. Il s'agit d'un processus proche d'une singularité (en absence de dissipation), qui déclenche l'émission des fortes ondes de spin (dont le début et le front de propagation sont visibles dans la deuxième et la troisième image de la figure 1, respectivement).

4 Conclusion

L'hypothèse d'une contribution au spin-transfert torque provenant d'une réponse des spins fixes $\delta S \sim s$ dans la direction des spins itinérants conduit à une modification de l'équation de Landau-Lifshitz du micromagnétisme qui rend compte de la brisure de la conservation de la charge topologique. La présence

166 A. Verga

du terme source de spin-transfert torque d'origine dissipative, modifie qualitativement l'évolution de la texture de spin étendant en particulier la région au cœur du vortex où les processus de génération et interaction de défauts topologiques se produisent. Cependant, le mécanisme de changement de topologie reste essentiellement le même qu'en absence de dissipation, il est gouverné par l'asservissement à l'échelle du noyau du vortex, des spins fixes à la dynamique des spins mobiles. La différence étant que l'échelle de coupure n'est pas celle du réseau microscopique, mais elle est déterminée par le mécanisme dissipation qui agit notamment sur la norme des spins fixes (contribution parallèle à S).

Une augmentation de la résolution spatiale ne modifie pas le scénario de changement de topologie. Cependant elle permet de confirmer l'étalement de la charge topologique générée par les spins itinérants sur plusieurs cellules de calcul. La différence la plus importante vient du décalage dans le temps du point de changement de topologie, changement qui se produit par paliers, jusqu'à l'effondrement soudain du cœur accompagné de la brusque émission d'ondes de spin. Ce point, qui a trait à la dynamique de la singularité magnétique, mérite une étude supplémentaire.

Dans quelle mesure pourrait-on remplacer le terme source, dépendant de la dynamique rapide des électrons, par un terme de dissipation phénoménologique dépendant exclusivement de S, reste à rechercher. L'avantage d'une telle approche serait d'éliminer les échelles fortement variables au bénéfice de la dynamique lente de la texture magnétique.

Références

- R. G. ELIAS & A. VERGA, Topological changes of two-dimensional magnetic textures, arXiv:1301.0924 [cond-mat.mes-hall] (2013).
- S. ZHANG & Z. LI, Roles of nonequilibrium conduction electrons on the magnetization dynamics of ferromagnets, *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 127204 (2004).
- A. THIAVILLE, J. M. GARCÍA, R. DITTRICH, J. MILTAT & T. SCHREFL, Micromagnetic study of Blochpoint-mediated vortex core reversal, *Phys. Rev. B*, 67, 094410 (2003).