



Developpement d'un code de calcul micromagnetique 2D et 3D: Application a des systemes reels de types films, plots et fils

Liliana-Daniela Buda

► To cite this version:

Liliana-Daniela Buda. Developpement d'un code de calcul micromagnetique 2D et 3D: Application a des systemes reels de types films, plots et fils. Matière Condensée [cond-mat]. Université Louis Pasteur - Strasbourg I, 2001. Français. <NNT : >. <tel-00003049>

HAL Id: tel-00003049

<https://theses.hal.science/tel-00003049v1>

Submitted on 25 Jun 2003

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



HAL Authorization

THÈSE

présentée par

Liliana-Daniela BUDA

pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE LOUIS PASTEUR DE STRASBOURG

spécialité

PHYSIQUE DE LA MATIERE CONDENSEE

**DEVELOPPEMENT D'UN CODE DE CALCUL
MICROMAGNETIQUE 2D ET 3D:
APPLICATION A DES SYSTEMES REELS DE
TYPES FILMS, PLOTS ET FILS**

Soutenue le 11 décembre 2001

Composition du jury

<i>Rapporteurs:</i>	Hugues DREYSSE Martha PARDAVI-HORVATH André THIAVILLE
<i>Examineur:</i>	Jean-Christophe TOUSSAINT
<i>Directeur de thèse:</i>	Kamel OUNADJELA
<i>Invités:</i>	Ursula EBELS Emil BURZO

Résumé

Le comportement des systèmes magnétiques submicroniques suscite un vif intérêt, motivé par le progrès continu des techniques de nano-fabrication et entretenu par une multitude d'applications potentielles (mémoires non-volatiles). La compréhension des effets induits par le confinement de la taille latérale des systèmes magnétiques combine le micromagnétisme expérimental et numérique. L'objectif de ce travail est de développer des outils numériques appropriés à l'étude du magnétisme des structures de dimensions réduites, en utilisant la modélisation micromagnétique. L'approximation des différences finies est utilisée pour l'évaluation des énergies et des champs internes qui décrivent l'état du système. L'algorithme de la minimisation de l'énergie libre repose sur l'intégration temporelle de l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert. L'amélioration de l'approche numérique (la précision du calcul, la stabilité du schéma d'intégration) ainsi que sa validation à travers des problèmes test et des résultats expérimentaux représentent les premières étapes de nos travaux. Cette approche numérique flexible nous a permis d'étudier des systèmes bi- et tri-dimensionnels, périodiques et non-périodiques. Ainsi, les détails de la structure interne des parois de domaines dans des couches minces de Co à anisotropie magnétocristalline uniaxiale planaire ou perpendiculaire ont été obtenus et analysés en fonction de l'épaisseur de la couche et du champ externe appliqué. L'étude menée sur les plots cylindriques de Co nous a permis d'établir les limites de stabilité des différents états magnétiques en fonction de la taille latérale et des paramètres de matériau. Notamment l'état de type vortex, favorisé par la symétrie circulaire de l'objet, a été analysé pour un champ appliqué perpendiculairement au plan du plot. Le caractère tridimensionnel des parois de domaines dans des nanofils de Co épitaxiés à anisotropie magnétocristalline parallèle ou perpendiculaire à l'axe du fil a été mis en évidence.

Developpement of a 2D and 3D micromagnetic codes and their application to confined magnetic systems: films, dots and wires

Abstract

The magnetic behavior of lateral confined ferromagnetic systems is of great interest both from a fundamental and a technological point of view. The understanding of the effects induced by reducing the system sizes requires a combined experimental and theoretical study. The aim of this work is to develop specific numerical tools for the investigation of ferromagnetic systems based on micromagnetic modelling. A finite differences method is used for the evaluation of the energies and the fields describing the magnetic configuration of the system. The minimization procedure of the free energy includes the time integration of the Landau-Lifshitz-Gilbert equation. The improvement of the numerical precision, the enhancement of the stability of the integration scheme and the validation of the codes developed against standard problems as well as against experimental results, has been a permanent effort throughout this work. The flexibility of such a numerical approach allows us to investigate bi- and tri-dimensional, periodic and non-periodic systems. In particular, the details of the magnetization configuration of domain walls in Co thin films with in-plane or out-of-plane magnetocrystalline anisotropy have been obtained and analyzed as a function of the thickness of the film and the externally applied field. The 3D simulation studies of the cylindrical Co dots have established the limits of stability of different magnetic configurations depending on the dot sizes and the material parameters. Special attention has been given to the evolution of the vortex state and its stability under a perpendicular applied field. The tri-dimensional features of the domain walls in epitaxial Co wires with magnetocrystalline anisotropy parallel or perpendicular to the wire axis have been confirmed.

Discipline

Physique de la matière condensée

Mots-clés

Micromagnétisme, Simulation numérique, Parois de domaines, Retournement d'aimantation, Couches minces, Plots cylindriques, Vortex, Fils nanométriques

Laboratoire

Groupe d'Etude des Matériaux Métalliques
Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg (UMR 7504 du CNRS)
23, rue du Loess F-67037 Strasbourg

Remerciements

Je croyais ne jamais arriver à cette phase de la thèse: l'écriture des remerciements. Il aurait pourtant été dommage de ne pouvoir le faire, tellement il y a de gens qui m'ont aidé au cours de mon travail.

Un grand merci tout d'abord à ceux qui m'ont accueilli à l'Institut de Physique et Chimie de Matériaux de Strasbourg (**IPCMS**) au sein du groupe d'Étude des Matériaux Métalliques (**GEMM**). Je veux commencer par témoigner toute ma gratitude à **Kamel Ounadjela** qui m'a proposé le thème de recherche et a dirigé cette thèse ainsi qu'à **Ursula Ebels** qui m'a encadrée au jour le jour pendant ces trois années. Leur enthousiasme et leur dynamisme ont pour beaucoup contribué à faire de mon initiation à la recherche une expérience inédite.

Mes remerciements vont également à Mme **Martha Pardavi-Horvath**, à M. **Hugues Dreyssé** et à M. **André Thiaville** d'avoir accepté la lourde et ingrate tâche de rapporteurs. Je suis très reconnaissante à mon examinateur M. **Jean-Christophe Toussaint** pour ses commentaires constructifs qui ont amplement contribué à l'amélioration du manuscrit.

Je voudrais exprimer ma profonde reconnaissance au prof. **Emil Burzo** celui qui m'a ouvert la porte du magnétisme roumain et français. *Mulțumesc mult de tot, domnule profesor!*

Mes remerciements s'adressent plus particulièrement à **Lucian Prejbeanu** mon époux et mon collègue de laboratoire avec qui j'ai partagé le bien et le moins bien à la maison et au travail.

Cette thèse n'aurait tout simplement pas pu avoir lieu si un certain nombre de personnes n'avaient, un jour ou un autre, donné un coup de pouce sans même se douter combien leur rôle aura pu m'être précieux. Merci à **Marc Demand**, **Daniel Stoeffler**, **Yves Henry** et **Victor Da Costa** pour leurs conseils scientifiques et linguistiques. Je voudrais remercier à tous ceux qui ont apporté de bonne humeur à mon séjour à Strasbourg:

permanents: **Gérard Wurtz, Jacek Arabski, Francine Lapp, Claude Demangeat, Pierre Panissod, Aziz Dinia, Christian Mény, Véronique Pierrot-Bohnes, Eric Beaurepaire, Daniel Spor, Rodolfo Jalabert, Jean-Paul Kappler...**

thésards ou post-docs : **Clara Cornea, Adriana Popa, Dana Stănescu, Mair Chshiev, Coriolan Tiușan, Theodoros Dimopoulos, Ovidiu Ersen, Ștefan Stănescu, Sorin Jurca, Michel Guth, Adrian Iovan, Salvador Meza-Aguilar, Silviu Coliș, Iosif Galanakis ...**

Mon travail à Strasbourg a été possible grâce au support financier offert par divers contrats européens : **NanoPTT** G5RD-CT1999-00135 et **Nanowires** BRPR-CT95-0001. Quant aux moyens de calcul je suis reconnaissante au centre de calcul de l'IPCMS (**Fabien Muller** et **Hubert Hollender**) et de l'IDRIS.

Finalement sans pouvoir exprimer avec des mots mes sentiments envers eux, je voudrais dédier ce travail à ma famille: mes parents Ioan et Dochia, mes beaux-parents Ion et Lucia, Luminița, Andreea et Mihai. Qu'il trouve dans cette thèse l'aboutissement de leur soutien durant toutes mes années d'études. *Din inima dedic aceasta teza parintilor mei.*

Table des matières

Introduction	1
Chapitre I: Micromagnétisme.....	5
I. 1. Formalisme du micromagnétisme.....	7
I. 2. Energie libre d'un système ferromagnétique.....	8
I. 2. 1. Energie d'échange.....	8
I. 2. 2. Energie d'anisotropie magnétocristalline.....	10
I. 2. 3. Energie Zeeman.....	11
I. 2. 4. Energie magnétostatique.....	11
I. 2. 5. Energie totale.....	13
I. 3. Etat d'équilibre et les équations micromagnétiques.....	14
I. 4. Equation de Landau- Lifshitz –Gilbert.....	18
Références bibliographiques I.....	21
Chapitre II: Calcul numérique.....	23
II. 1. Introduction.....	25
II. 2. Energie et champ d'échange.....	27
II. 3. Energie et champ d'anisotropie magnétocristalline.....	29
II. 4. Energie Zeeman et champ externe.....	29
II. 5. Energie et champ magnétostatique.....	30
II. 5. 1. Calcul bidimensionnel 2D.....	31
II. 5. 1. 1. Méthode intégrale 2D.....	31
II. 5. 1. 2. Méthode du champ locale 2D.....	33
II. 5. 2. Calcul tridimensionnel 3D.....	36
II. 5. 2. 1. Méthode intégrale 3D.....	36
II. 5. 2. 2. Approximation dipolaire 3D.....	38
II. 5. 3. Transformée Fourier rapide (FFT).....	41
II. 5. 3. 1. Théorème du produit de convolution.....	42
II. 5. 3. 2. Discrétisation et le produit de convolution.....	42
II. 5. 3. 3. Système non-périodique.....	44
II. 5. 3. 4. Système périodique.....	45
II. 5. 4. Périodicité.....	45
II. 5. 4. 1. Calcul 2D périodique.....	46
II. 5. 4. 2. Calcul 3D périodique.....	47
II. 6. Intégration temporelle de l'équation de Landau - Lifshitz – Gilbert.....	49
II. 6. 1. Méthodes d'intégration numérique.....	50
II. 6. 2. Méthode de Crank – Nicholson.....	52

II. 6. 3. Condition d'arrêt.....	55
II. 6. 4. Stabilité du schéma d'intégration temporelle.....	56
II. 6. 5. Influence du coefficient d'amortissement α	58
II. 7. Erreurs dues à la discrétisation.....	60
II. 8. Problème standard 3.....	64
II. 9. Modélisation du signal MFM.....	66
II. 10. Logiciels.....	68
Références bibliographiques II.....	70
 Chapitre III: Structures magnétiques des parois dans des couches minces de cobalt....	75
III. 1. Introduction.....	77
III. 2. Paroi de domaines dans de couches de $Co(10\bar{1}0)$ à anisotropie magnétocristalline planaire.....	79
III. 3. Structure en domaines des couches de $Co(0001)$ à anisotropie magnétocristalline perpendiculaire.....	86
III. 3. 1. Considérations sur les configurations magnétiques stables dans les simulations 2D périodiques.....	86
III. 3. 1. 1. Périodicité des domaines en bandes parallèles.....	87
III. 3. 1. 2. Effet du facteur de qualité Q	90
III. 3. 2. Description du système physique étudié.....	92
III. 3. 3. Configurations magnétiques à champ nul.....	93
III. 3. 3. 1. Périodicité des bandes $L = L(e)$	94
III. 3. 3. 2. Profils de l'aimantation.....	96
III. 3. 3. 3. Rémanence planaire.....	98
III. 3. 4. Cycle d'aimantation planaire.....	100
III. 3. 5. Résonance Ferromagnétique.....	106
III. 3. 5. 1. Résultats expérimentaux.....	108
III. 3. 5. 2. Discussions.....	108
III. 4. Conclusions chapitre III.....	114
Références bibliographiques III.....	115
 Chapitre IV: Nano-objets magnétiques: plots et fils de cobalt.....	119
IV. 1. Introduction.....	121
IV. 2. Plots circulaires de cobalt.....	122
IV. 2. 1. Observations MFM sur de plots circulaires de cobalt.....	122
IV. 2. 2. Bilan énergétique.....	126
IV. 2. 3. Effet du diamètre du plot.....	128

IV. 2. 4. Structure interne de l'état vortex.....	129
IV. 2. 5. Effet de l'épaisseur.....	134
IV. 2. 6. Diagrammes des états fondamentaux.....	137
IV. 2. 7. Evolution sous champ externe.....	138
IV. 2. 8. Couplage dipolaire entre les plots.....	146
IV. 2. 9. Influence de la forme de l'objet.....	148
IV. 3. Fils nanométriques.....	151
IV. 3. 1. Anisotropie magnétocristalline parallèle à l'axe du fil.....	152
IV. 3. 1. 1. Paroi transverse.....	154
IV. 3. 1. 2. Une paroi inédite.....	156
IV. 3. 1. 3. Paroi vortex.....	159
IV. 3. 1. 4. Paroi piégée sur une constriction géométrique.....	159
IV. 3. 2. Anisotropie magnétocristalline perpendiculaire à l'axe du fil.....	162
IV. 3. 2. 1. Domaines en bandes parallèles.....	163
IV. 3. 2. 2. Etat à deux domaines antiparallèles.....	165
IV. 3. 2. 3. Effet de l'épaisseur du fil sur la structure de la paroi.....	166
IV. 4. Conclusions du chapitre IV.....	169
Références bibliographiques IV.....	170
Conclusion.....	175
Annexes.....	179
Annexe A : Problème standard 4.....	180
Annexe B-I : Energie magnétostatique des domaines en bandes parallèles périodiques.....	183
Annexe B-II : Modèle de Kittel pour une structure en bandes parallèles.....	186
Annexe B-III : Modèle de Kooy et Enz des domaines en bandes parallèles périodiques sous champ appliqué hors du plan.....	187
Annexe B-IV : Modèle de Muller des domaines en bandes parallèles périodiques dans un champ appliqué dans le plan.....	188
Annexe B-V : Oscillations couplées dans des couches à anisotropie perpendiculaire $Q \gg 1$	189
Annexe C : Distribution de l'aimantation à l'intérieur d'un vortex magnétique.....	194
Liste des publications	198

Introduction

Depuis toujours la matière fascine et la compréhension de son comportement soulève de nombreuses questions qui font naître des hypothèses et des théories explicatives. C'est de cette façon que la théorie du micromagnétisme est apparue au début des années 30^{1,2}, pour expliquer le processus de renversement de l'aimantation et les effets d'hystérésis dans les milieux ferromagnétiques. Aujourd'hui, au niveau expérimental et également au niveau numérique, le micromagnétisme est devenu, pour plusieurs raisons, un domaine de recherche extrêmement actif.

Sur le plan numérique, grâce à l'arrivée d'ordinateurs de plus en plus performants, à partir des années 80, la voie vers le micromagnétisme numérique à une grande échelle a été ouverte. Parce que le traitement analytique des problèmes micromagnétiques est rarement possible³, le développement de nombreux algorithmes micromagnétiques est encouragé. Diverses techniques numériques, appropriées aux équations différentielles non-linéaires, sont exploitées pour résoudre les équations micromagnétiques⁴.

Du point de vue expérimental, le développement et l'amélioration continue des techniques de micro-fabrication (lithographie, gravure...) permettent de réaliser des systèmes de plus en plus miniaturisés. Ces nouvelles structures magnétiques présentant des dimensions inférieures au micromètre (couches uniques, multicouches, nano-éléments, fils...) possèdent des propriétés fort intéressantes du point de vue fondamental mais laissent également entrevoir de riches applications potentielles. Ainsi, un nombre important d'études expérimentales et théoriques sont nécessaires afin de comprendre la stabilité des configurations magnétiques de ces systèmes et leur dynamique de retournement de l'aimantation. De plus, la taille réduite du système physique est tout à fait adaptée au traitement numérique.

¹ L. Landau, E. Lifshitz, *Physik. Z. Sowjetunion* **8**, 153 (1935). *On the theory of magnetic permeability in ferromagnetic bodies*

² W. F. Brown, Jr. : *Micromagnetics*, Interscience Publishers, J. Wiley and Sons, New York (1963).

³ M. W. Muller, *Phys. Rev.* **122**, 1485 (1961). *Distribution of the magnetization in a ferromagnet*

⁴ J. Fidler, T. Schrefl, *J. Phys. D : Appl. Phys.* **33**, 135 (2000). *Micromagnetic modelling –the current state of the art*

Les techniques expérimentales d'analyse de la distribution interne de l'aimantation dans des objets à dimensionalité réduite permettent d'obtenir soit des informations globales (la magnétométrie optique à effet Kerr), soit des informations locales (la microscopie à force magnétique ou la microscopie Lorentz). Les techniques locales sont limitées en résolution et, selon la méthode, fournissent soit une moyenne le long de l'épaisseur (la microscopie Lorentz), soit une moyenne des charges de volume et de surface (la microscopie à force magnétique). C'est pourquoi, pour accéder à la structure fine des configurations magnétiques et pour reproduire à l'échelle nanométrique les processus de renversement de l'aimantation, des simulations micromagnétiques sont indispensables.

C'est sur la relation biunivoque entre *la simulation* et *l'expérience* que se focalise ce travail de thèse. Dans ce mémoire, nous nous sommes attachés à développer des outils numériques efficaces, spécifiques au micromagnétisme pour s'en servir dans l'étude de divers systèmes ferromagnétiques. De plus, les particularités du système physique: infini ou fini, périodique ou non-périodique ont imposé l'adaptation de nos techniques au calcul bi et tridimensionnel. Ce travail de modélisation numérique suit de près les thématiques de recherches développées au sein du laboratoire sur le plan du micromagnétisme expérimentale. Il s'agit notamment des couches minces de cobalt à anisotropie magnétocristalline perpendiculaire étudiées par M. Hehn⁵ et U. Ebels⁶, ensuite découpées dans des plots cylindriques par M. Demand⁷. Les couches de cobalt à anisotropie magnétocristalline planaire ont servi à L. Prejbeanu⁸, comme point de départ, pour la fabrication des fils nanométriques dédiés à l'étude des configurations micromagnétiques par des mesures de magnéto-transport. Des échanges fructueux ont eu lieu avec le groupe de Y. Chen de Laboratoire de Microstructures et de Microélectronique de Bagneux, sur les plots et les anneaux circulaires de cobalt polycristallin⁹.

⁵ M. Hehn, S. Padovani, K. Ounadjela, J. P. Bucher, Phys. Rev. B **53**, 3428 (1996). *Nanoscale magnetic domain structures in epitaxial Co films*

⁶ U. Ebels, L. D. Buda, K. Ounadjela, P. E. Wigen, Phys. Rev. B **63**, 174437/1-16 (2001). *Ferromagnetic resonance excitation of two-dimensional wall structures in magnetic stripe domains*

⁷ M. Demand, M. Hehn, K. Ounadjela, R. L. Stamps, E. Cambril, A. Cornette, F. Rousseaux, J. Appl. Phys. **87**, 5111 (2000). *Magnetic domain structures in array of submicron Co dots studied with magnetic force microscopy*

⁸ I. L. Prejbeanu, L. D. Buda, U. Ebels, M. Viret, C. Fermon, K. Ounadjela, IEEE Trans. Magn. **37**, 2108 (2001). *Domain structures in epitaxial Co(10 $\bar{1}$ 0) Co wires*

⁹ S. Li, D. Peyrade, M. Natali, A. Lebib, Y. Chen, U. Ebels, L. D. Buda, K. Ounadjela, Phys. Rev. Lett. **86**, 1102 (2001). *Flux closure state in cobalt rings*

Ce mémoire est organisé en deux parties. La première partie, qui réunit les chapitres I et II, est consacrée à la description de la modélisation micromagnétique continue et numérique des matériaux ferromagnétiques. Les résultats issus de l'application de la modélisation numérique à l'étude de plusieurs systèmes ferromagnétiques, sont présentés dans la deuxième partie (chapitres III et IV).

Le premier chapitre est une brève revue des hypothèses et des concepts micromagnétiques. Il s'agit de l'introduction des termes énergétiques, de la définition d'états magnétiques stables et du champ interne. Les équations qui gouvernent les états d'équilibres et la dynamique de l'aimantation sont également présentées.

Nous exposons au *chapitre II*, la forme numérique de l'approche que nous avons conçue. Chaque contribution à l'énergie libre et au champ interne du système ferromagnétique est analysée du point de vue numérique. Plusieurs approximations sont proposées et comparées dans l'évaluation des contributions magnétostatiques. Les traitements spécifiques de systèmes à deux ou trois dimensions périodiques ou non-périodiques sont également débattus. Ensuite, la minimisation de l'énergie libre par l'intégration temporelle de l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert est détaillée. Un soin particulier a été accordé à la stabilité du schéma d'intégration et aux possibles sources d'erreurs ainsi qu'à la validation du calcul à travers des problèmes standard définis dans la littérature¹⁰.

Le troisième chapitre est consacré à l'application de l'approche numérique aux systèmes bidimensionnels telles les couches minces de cobalt à anisotropie magnétocristalline uniaxiale planaire ou perpendiculaire au plan de la couche. En particulier, la dépendance en épaisseur de la structure interne de parois de domaines dans des couches sera analysée.

Pour *le dernier chapitre* nous avons réservé deux systèmes tridimensionnels: les plots circulaires et les fils. Les états magnétiques d'un plot circulaire seront présentés en fonction de divers paramètres (taille, anisotropie magnétocristalline, champ externe...). Puis une comparaison entre les plots et les anneaux circulaires sera faite afin d'étudier l'influence de la forme sur les propriétés magnétiques du nano-objet. Enfin, nous présenterons l'étude de la structure interne de paroi de domaines dans des fils à section carrée et à anisotropie magnétocristalline parallèle, respectivement perpendiculaire, à l'axe du fil.

¹⁰ <http://www.ctcms.nist.gov/~rdm/mumag.org.html>

CHAPITRE I

Micromagnétisme

Qu'est ce que le micromagnétisme? Dans ce premier chapitre, nous allons tenter d'en donner quelques éléments de réponse. Nous commencerons par une brève présentation de la théorie du micromagnétisme et de ses hypothèses. Ensuite, les concepts micromagnétiques applicables dans un milieu ferromagnétique seront détaillés sous la forme des énergies qui quantifient les interactions mises en jeu. En appliquant le principe variationnel, les champs internes seront définis et les relations qui gouvernent et, en conséquence, stabilisent les états d'équilibre statique du système ferromagnétique en seront dérivées. Dans la deuxième partie de ce chapitre, l'équation de Landau - Lifshitz - Gilbert décrivant la dynamique de l'aimantation et ses implications dans les problèmes de micromagnétisme seront débattues.

Plan du chapitre I

I. 1. Formalisme du micromagnétisme

I. 2. Energie libre d'un système ferromagnétique

I. 2. 1. Energie d'échange

I. 2. 2. Energie d'anisotropie magnétocristalline

I. 2. 3. Energie Zeeman

I. 2. 4. Energie magnétostatique

I. 2. 5. Energie totale

I. 3. Etat d'équilibre et les équations micromagnétiques

I. 4. Equation de Landau - Lifshitz - Gilbert

Références bibliographiques I

I. 1. Formalisme du micromagnétisme

La théorie du micromagnétisme, telle que Brown l'a définie [Brown 63], est par essence une théorie conçue pour décrire des milieux ferro et ferrimagnétiques continus. Elle passe sous silence les détails atomiques de l'origine de l'ordre magnétique, mais elle permet de décrire le magnétisme à l'échelle des domaines et des parois de domaines magnétiques. C'est pourquoi, *des variables continues* sont utilisées pour décrire des grandeurs thermodynamiques telles que l'aimantation, les champs internes ou l'énergie du système, même si leur source se trouve bien évidemment au niveau atomique. Ces variables continues doivent être, d'un côté, en accord avec la théorie de l'électromagnétisme de Maxwell, et d'un autre côté, cohérentes avec la description microscopique du ferromagnétisme. L'application de la théorie du micromagnétisme est donc limitée à des systèmes pour lesquels *les grandeurs thermodynamiques varient doucement* avec la position.

Dans la matière, à l'échelle atomique, les moments magnétiques interagissent entre eux et avec leur environnement. Il en résulte un comportement collectif qui se manifeste en dessous d'une certaine température critique par l'existence de l'ordre magnétique spontané même en l'absence d'un champ externe appliqué. Au-dessus de cette température critique, l'ordre magnétique spontané disparaît, détruit par l'agitation thermique. L'existence de l'aimantation spontanée (égale au moment magnétique par l'unité de volume) constitue une des hypothèses fondamentales du micromagnétisme: le vecteur de l'aimantation $\vec{M}$ est un vecteur à *module constant* $|\vec{M}| = M_s$ (où M_s est l'aimantation à saturation). L'orientation de l'aimantation peut varier dans l'espace tandis que son amplitude reste constante.

De manière générale, un système magnétique est entièrement décrit par des potentiels thermodynamiques. Si ces potentiels prennent des valeurs minimales, le système se trouve dans un état d'équilibre. Parmi ces potentiels thermodynamiques on compte l'énergie libre qui, lorsque le système est ordonné, comporte plusieurs contributions. Il s'agit des contributions internes qui proviennent des interactions intrinsèques et des contributions externes comme l'énergie Zeeman due à l'excitation externe par un champ appliqué. Certaines interactions impliquent seulement un nombre restreint de moments magnétiques et elles sont forte dépendantes de l'environnement local. Parmi ces interactions, on peut identifier l'énergie d'anisotropie magnétocristalline, l'énergie d'échange et l'énergie Zeeman. En revanche, l'énergie magnétostatique quant à elle est une contribution globale car toutes les parties du système interagissent entre elles. Nous allons maintenant introduire les termes énergétiques,

définir l'état d'équilibre et en déduire les équations qui le gouvernent. Puis nous nous intéressons à l'équation de Landau - Lifshitz - Gilbert qui permet de déterminer les états d'équilibre et qui décrit l'évolution de l'aimantation entre deux états d'équilibre.

I. 2. Energie libre d'un système ferromagnétique

I. 2. 1. Energie d'échange

L'interaction d'échange est par essence de nature quantique, à courte portée entre des moments magnétiques individuels. Elle est le résultat du recouvrement des fonctions d'onde électroniques des atomes du réseau et de l'application du principe d'exclusion de Pauli. Ce type d'interaction est en générale plusieurs ordre de grandeur plus intense entre spins adjacents que les autres énergies mises en jeu. Pour les matériaux ferromagnétiques, elle favorise un alignement parallèle des spins. Selon la théorie développée par Heisenberg [Kittel RMP 49], l'énergie d'échange d'un système de N spins $\{\vec{S}_i | i=1, \dots, N\}$ s'exprime de la façon suivante:

$$E_{ex} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N J_{ij} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) \quad \text{I-1}$$

où J_{ij} est l'intégrale d'échange ($J_{ij} > 0$), $\vec{S}_i$ et $\vec{S}_j$ est le spin de l'atome i respectivement j (figure I-1). Comme l'interaction d'échange

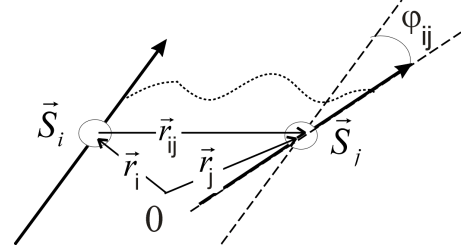


Figure I-1: Deux spins en interaction d'échange.

permet seulement un faible écart entre les orientations de deux spins $\vec{S}_i$ et $\vec{S}_j$ adjacents, leur produit scalaire devient ¹:

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = |\vec{S}|^2 \left\{ 1 - \frac{1}{2} [(\vec{r}_{ij} \cdot \vec{\nabla}) \vec{m}(\vec{r}_i)]^2 \right\} \quad \text{I-2}$$

Cette relation est obtenue en supposant que tous les spins sont identiques $\vec{S}_i = \vec{S}_j = \vec{S}$ et en considérant que le vecteur unitaire $\vec{m}$, qui donne la direction de $\vec{S}$, est une variable continue

¹ $|\vec{S}_j - \vec{S}_i|^2 = \vec{S}_i^2 + \vec{S}_j^2 - 2(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) \Rightarrow \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \frac{1}{2} [\vec{S}_i^2 + \vec{S}_j^2 - |\vec{S}_j - \vec{S}_i|^2]$

Lorsque $\vec{S}(\vec{r})$ est une fonction continue de position dans la limite des faibles déviations la relation suivante est valable: $\vec{S}(\vec{r}_j) \cong \vec{S}(\vec{r}_i) + (\vec{r}_{ij} \cdot \vec{\nabla}) \vec{S}(\vec{r}_i)$.

en espace. Ainsi l'ensemble de spins discrets $\{\vec{S}_i \mid i=1, \dots, N\}$ sera décrit par une fonction continue de l'espace $\vec{m} = \vec{m}(\vec{r})$ de norme constante $|\vec{m}|=1$. L'expression générale pour l'énergie d'échange est:

$$E_{ex} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N J_{ij} |\vec{S}_i|^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} J_{ij} |\vec{S}_i|^2 \left[(\vec{r}_{ij} \cdot \vec{\nabla}) \vec{m}(\vec{r}_i) \right]^2 \quad \text{I-3}$$

Lorsque l'interaction d'échange est isotrope $J_{ij} = J$ comme dans un cristal cubique simple, l'excès en densité d'énergie d'échange par rapport à la configuration des spins parallèles prend la forme condensée ²:

$$e_{ex}(\vec{r}_i) = A_{ex} [\vec{\nabla} \vec{m}(\vec{r}_i)]^2 \quad \text{I-4}$$

où $A_{ex} = \frac{1}{2a} J |\vec{S}|^2$ représente la constante d'échange et a le paramètre de maille du réseau cubique simple considéré. Dans l'approximation continue, le surplus d'énergie d'échange dû au non-parallélisme entre les spins est donné par l'intégrale sur le volume V du système ferromagnétique:

$$E_{ex} = \int_V A_{ex} \left\{ [\vec{\nabla} m_x(\vec{r})]^2 + [\vec{\nabla} m_y(\vec{r})]^2 + [\vec{\nabla} m_z(\vec{r})]^2 \right\} dV. \quad \text{I-5}$$

La fonction E_{ex} atteint sa plus basse valeur lorsque tous les moments magnétiques sont parfaitement alignés dans le même sens ($E_{ex} \equiv 0$). Pour les matériaux ferromagnétiques usuels tels que le permalloy, le cobalt ou le nickel la constante d'échange se situe autour de $10^{-11} \text{ J/m} (10^{-6} \text{ erg/cm})$ (e. g. cobalt $1,8 \times 10^{-11} \text{ J/m}$ [Schrefl JMMM 99]). Cependant, en réalité, A_{ex} n'est pas une vraie constante car, à travers le paramètre de maille a , elle est reliée à la température du système. Les choses se compliquent davantage lorsque le cristal possède une symétrie plus complexe (hexagonale ou quadratique). Dans ces cas précis, la constante d'échange A_{ex} est remplacée par une constante d'échange effective qui est la seule accessible expérimentalement.

² $[\vec{\nabla} \vec{m}]^2 = \left(\frac{\partial m_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial m_x}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial m_x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial m_y}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial m_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial m_y}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial m_z}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial m_z}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial m_z}{\partial z} \right)^2$

I. 2. 2. *Energie d'anisotropie magnétocristalline*

L'énergie d'anisotropie magnétocristalline est le résultat du couplage des moments magnétique au réseau cristallin. Dans un cristal, les atomes, et par conséquent les moments magnétiques sont rangés suivant le réseau du cristal. La distribution spatiale des charges électroniques et ioniques du réseau est la source d'un gradient de champ électrique qui conserve la symétrie du réseau. Ce gradient de champ agit sur les orbitales électroniques incomplètes en modifiant les niveaux d'énergie magnétique. Comme d'un moment magnétique à son voisin les directions ne changent que très peu, la forme du réseau donnera des directions privilégiées d'alignement en fonction de l'encombrement de moments magnétiques voisins (les axes de facile aimantation). Selon la symétrie du réseau, l'anisotropie magnétocristalline peut être cubique, hexagonale, quadratique ou uniaxiale. Au voisinage de la surface du cristal, la brisure de la symétrie peut induire une anisotropie surfacique importante.

Une expression phénoménologique de l'énergie d'anisotropie magnétocristalline qui tient compte que de l'orientation de l'aimantation $\vec{m}$, peut être déterminée à l'aide d'un développement en puissances des cosinus directeurs du moment magnétique pour chacun des sites. Pour une symétrie hexagonale, l'énergie d'anisotropie magnétocristalline se présente sous la forme :

$$E_{anis} = \int_V \left\{ K_1 \left[1 - (\vec{u}_K \cdot \vec{m}(\vec{r}))^2 \right] + K_2 \left[1 - (\vec{u}_K \cdot \vec{m}(\vec{r}))^2 \right]^2 \right\} dV \quad \text{I-6}$$

où K_1 , K_2 sont les constantes d'anisotropie d'ordre 2, respectivement 4, et $\vec{u}_K$ est le vecteur de l'axe d'anisotropie magnétocristalline (axe c). Lorsqu'on parle d'une anisotropie uniaxiale, l'énergie d'anisotropie magnétocristalline est exprimée à l'aide du seul terme d'ordre 2:

$$E_{anis} = \int_V K_u \left[1 - (\vec{u}_K \cdot \vec{m}(\vec{r}))^2 \right] dV. \quad \text{I-7}$$

L'amplitude de la constante d'anisotropie dans le cas des couches minces peut varier de quelques dizaines de J/m^3 dans les matériaux très doux à $10^7 - 10^8 J/m^3$ dans des alliages de terres rares. Dans une couche épitaxiée de cobalt hexagonal, la constante d'anisotropie magnétocristalline effective se situe autour de $(5-6) \times 10^5 J/m^3$, mais sa valeur est dépendante de la température.

I. 2. 3. *Energie Zeeman*

L'énergie Zeeman quantifie l'influence d'un champ externe appliqué $\vec{H}_{app}$ qui peut varier dans l'espace et le temps $\vec{H}_{app} = \vec{H}_{app}(\vec{r}, t)$. Lorsque un champ externe est appliqué, l'aimantation a tendance à s'aligner suivant l'orientation du champ $\vec{H}_{app}$. L'écart entre l'aimantation $\vec{M}$ et le champ appliqué $\vec{H}_{app}$ se traduit par une contribution à l'énergie libre du système telle que:

$$E_{zeem} = -\mu_0 \int_V (\vec{M} \cdot \vec{H}_{app}) dV = -\mu_0 M_s \int_V [\vec{m}(\vec{r}) \cdot \vec{H}_{app}(\vec{r})] dV \quad \text{I-8}$$

où $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ H/m}$ est la perméabilité magnétique du vide.

I. 2. 4. *Energie magnétostatique*

Les contributions que nous venons de mentionner auparavant, ne peuvent pas expliquer l'apparition des domaines magnétiques. Prenons par exemple le cas d'une couche mince caractérisée par une anisotropie magnétocristalline uniaxiale perpendiculaire (selon OZ). Lorsqu'on réduit lentement le champ externe, en partant de l'état saturé hors du plan (+OZ), les moments magnétiques ont tendance à rester alignés selon la direction du champ appliqué. L'alignement entre l'aimantation et le champ appliqué est imposé par le couplage Zeeman et par l'interaction d'échange qui empêche que les moments magnétiques soient désalignés. De plus, l'orientation des moments magnétiques selon +OZ, s'avère énergiquement favorable du point de vue magnétocristallin car l'anisotropie cristalline est indifférente au sens du moment magnétique (+OZ ou -OZ). Cependant l'existence des domaines magnétiques à aimantation antiparallèle (domaines en bulles) est une évidence expérimentale [Chapitre III]. Le facteur responsable de la division en domaines *up* et *down*, qui joue un rôle décisif lorsqu'il s'agit de systèmes à dimensions réduites, est l'interaction magnétostatique.

La distribution de l'aimantation à l'intérieur d'un système ferromagnétique est responsable de l'apparition de charges magnétiques de volume et de charges magnétiques de surface qui, à leur tour, sont les sources d'un champ magnétostatique (démagnétisant) $\vec{H}_{dem}$.

Du point de vue magnétostatique, l'aimantation $\vec{M}$ est reliée à l'induction magnétique $\vec{B}$, au champ magnétique $\vec{H}$ et à la distribution de courant $\vec{j}_0$ par les équations de Maxwell:

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}) \quad \text{I-9}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad \text{I-10}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{j}_0. \quad \text{I-11}$$

L'induction du champ magnétique $\vec{H}$ est une sommation des contributions provenant des courants libres (externes) $\vec{j}_0$ et des courants liés, associés à la matière aimantée $\vec{j}_m$:

$$\vec{H} = \vec{H}_0 + \vec{H}_{dem} \quad \text{I-12}$$

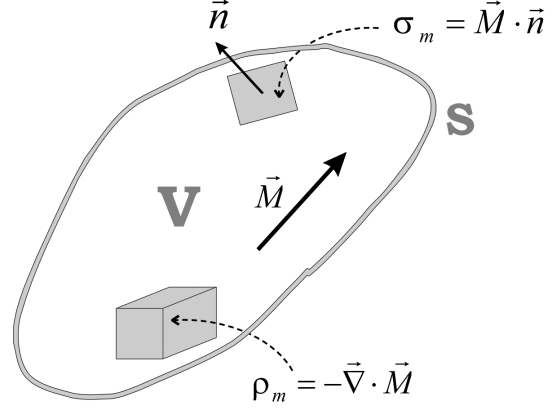


Figure I-2: Géométrie du système ferromagnétique.

Pour une distribution donnée de l'aimantation $\vec{M}$, la densité volumique de courants liés est définie comme:

$$\vec{j}_{m,v} = \vec{\nabla} \times \vec{M} \quad \text{I-13}$$

alors que la densité surfacique sur la surface de vecteur unitaire normale $\vec{n}$ est donnée par:

$$\vec{j}_{m,s} = \vec{M} \times \vec{n}. \quad \text{I-14}$$

Le champ créé par les courants libres vérifie les relations:

$$\begin{cases} \vec{\nabla} \times \vec{H}_0 = \vec{j}_0 \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{H}_0 = 0 \end{cases} \quad \text{I-15}$$

tandis que la contribution due à la distribution de l'aimantation satisfait les équations :

$$\begin{cases} \vec{\nabla} \times \vec{H}_{dem} = \vec{0} \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{H}_{dem} = -(\vec{\nabla} \cdot \vec{M}) \end{cases} \quad \text{I-16}$$

Selon l'approche coulombienne, $\vec{H}_{dem}$ dans l'équation I-16 étant irrotationnel, il dérive d'un potentiel scalaire ϕ_m :

$$\vec{H}_{dem} = -\vec{\nabla} \phi_m \quad \text{I-17}$$

Compte tenu des conditions de passage aux interfaces, le potentiel scalaire est la solution du problème suivant:

$$\begin{cases} \Delta\phi_m = \begin{cases} -\rho_m, & \vec{r} \in V \\ 0, & \vec{r} \notin V \end{cases} \\ \phi_{m,int} = \phi_{m,ext}, & \vec{r} \in S \\ \left. \frac{\partial\phi_m}{\partial\vec{n}} \right|_{ext} - \left. \frac{\partial\phi_m}{\partial\vec{n}} \right|_{int} = -\sigma_m, & \vec{r} \in S \\ \phi_m(\vec{r} \rightarrow \infty) \rightarrow 0 \end{cases} \quad \text{I-18}$$

où

$$\rho_m = -\vec{\nabla} \cdot \vec{M} \quad \text{I-19}$$

est la densité volumique des charges magnétiques et

$$\sigma_m = \vec{M} \cdot \vec{n} \quad \text{I-20}$$

représente la densité surfacique des charges magnétiques (figure I-2). Le problème I-18 admet pour le potentiel scalaire une solution unique:

$$\phi_m(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV' + \frac{1}{4\pi} \oint_S \frac{\sigma(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dS' \quad \text{I-21}$$

qui conduit au champ magnétostatique (démagnétisant) :

$$\vec{H}_{dem}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_V \rho(\vec{r}') \frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} dV' + \frac{1}{4\pi} \oint_S \sigma(\vec{r}') \frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} dS'. \quad \text{I-22}$$

La forme intégrale de l'énergie magnétostatique est :

$$E_{dem} = -\frac{1}{2} \mu_0 \int_V (\vec{M} \cdot \vec{H}_{dem}) dV = -\frac{1}{2} \mu_0 M_s \int_V [\vec{m}(\vec{r}) \cdot \vec{H}_{dem}(\vec{m}(\vec{r}))] dV. \quad \text{I-23}$$

ou en utilisant le potentiel scalaire:

$$E_{dem} = \frac{1}{2} \mu_0 \left(\int_V [\rho_m(\vec{r}) \phi_m(\vec{r})] dV + \oint_S [\sigma_m(\vec{r}) \phi_m(\vec{r})] dS \right). \quad \text{I-24}$$

I. 2. 5. *Energie totale*

L'énergie totale stockée par le système ferromagnétique réunit toutes ces contributions:

$$E_{tot} = E_{ex} + E_{anis} + E_{zeem} + E_{dem} \quad \text{I-25}$$

et pour un cristal uniaxe elle prend la forme intégrale:

$$E_{tot}[\vec{m}] = \int_V \left\{ A_{ex} [\vec{\nabla} \vec{m}(\vec{r})]^2 + K_1 [1 - (\vec{u}_K \cdot \vec{m}(\vec{r}))^2] - \mu_0 M_s [\vec{m}(\vec{r}) \cdot \vec{H}_{app}(\vec{r})] - \frac{1}{2} \mu_0 M_s [\vec{m}(\vec{r}) \cdot \vec{H}_{dem}(\vec{m}(\vec{r}))] \right\} dV. \quad I-26$$

En plus de ces contributions, le bilan énergétique pourrait inclure des termes dus aux effets magnéto-élastiques, à l'anisotropie de surface et ceux associés aux différents défauts. Cependant, dans la suite de ce manuscrit ces termes d'énergie seront négligés car nous avons limité les études aux systèmes idéals (sans imperfections). Il nous faut préciser une limitation sévère du micromagnétisme: la température et ses effets. En générale, les simulations micromagnétiques n'incluent pas directement l'influence de la température et ses effets tels que les fluctuations thermiques de l'aimantation. La température intervient indirectement dans les valeurs de l'aimantation à saturation $M_s = M_s(T)$, de la constante d'échange $A_{ex} = A_{ex}(T)$ et de la constante d'anisotropie magnétocristalline $K_u = K_u(T)$. "Les calculs micromagnétiques sont des calculs à $T = 0K$ ".

I. 3. Etat d'équilibre du système ferromagnétique

Etant donnée la fonctionnel de l'énergie libre E_{tot} (I-26), nous nous intéressons aux états d'équilibre. Une certaine configuration magnétique caractérisée par la distribution de l'aimantation:

$$\vec{m} = \{\vec{m}(\vec{r}) \mid \vec{r} \in V, |\vec{m}| = 1\} \quad I-27$$

est un état d'équilibre du système ferromagnétique si elle minimise la fonctionnel de l'énergie libre. Les équations que l'état d'équilibre doit satisfaire sont dérivées à partir du principe du calcul variationnel [Brown 63, Miltat 94].

$$\begin{aligned} \delta E_{tot}[\vec{m}] &= 0 \\ \delta^2 E_{tot}[\vec{m}] &> 0 \end{aligned} \quad I-28$$

Une variation faible de l'aimantation telle que $\vec{m} \rightarrow \vec{m} + \delta\vec{m}$ ($(\delta\vec{m})^2 \rightarrow 0$), implique une variation de l'énergie totale:

$$\delta E_{tot} = E_{tot}[\vec{m} + \delta\vec{m}] - E_{tot}[\vec{m}]. \quad I-29$$

Prenant chaque contribution de l'énergie:

- échange ³

$$\delta E_{ex} = 2A_{ex} \left[\oint_S \delta \vec{m} \cdot \frac{\partial \vec{m}}{\partial n} dS - \int_V \delta \vec{m} \cdot \Delta \vec{m} dV \right] \quad \text{I-30}$$

- anisotropie magnétocristalline

$$\delta E_{anis} = -\mu_0 M_s \int_V \delta \vec{m}(\vec{r}) \cdot \left[\frac{2K_1(\vec{u}_K \cdot \vec{m})}{\mu_0 M_s} \vec{u}_K \right] dV \quad \text{I-31}$$

- Zeeman

$$\delta E_{zeem} = -\mu_0 M_s \int_V \delta \vec{m}(\vec{r}) \cdot \vec{H}_{app}(\vec{r}) dV \quad \text{I-32}$$

- magnétostatique ⁴

$$\delta E_{dem} = -\mu_0 M_s \int_V \delta \vec{m}(\vec{r}) \cdot \vec{H}_{dem}(\vec{r}) dV \quad \text{I-33}$$

la variation de l'énergie totale est :

$$\delta E_{tot} = -\mu_0 M_s \int_V \delta \vec{m} \cdot \left[\frac{2A_{ex}}{\mu_0 M_s} \Delta \vec{m} + \frac{2K_1(\vec{u}_K \cdot \vec{m})}{\mu_0 M_s} \vec{u}_K + \vec{H}_{app} + \vec{H}_{dem} \right] dV + 2A_{ex} \oint_S \delta \vec{m} \cdot \frac{\partial \vec{m}}{\partial n} dS \quad \text{I-34}$$

La deuxième intégrale est calculée sur la surface S qui limite le volume V, et $\vec{n}$ est le vecteur unitaire normal à la dite surface. La conservation de la norme du vecteur de l'aimantation $|\vec{m}|^2 = 1$ implique $\delta \vec{m} \perp \vec{m}$ et donc $\delta \vec{m}$ peut s'exprimer comme $\delta \vec{m} = \delta \vec{\theta} \times \vec{m}$ où $\delta \vec{\theta}$ est une rotation infinitésimale de l'aimantation. La variation de l'énergie s'exprime alors:

$$\delta E_{tot} = -\mu_0 M_s \int_V (\vec{m} \times \vec{H}_{eff}) \cdot \delta \vec{\theta} dV + 2A_{ex} \oint_S \left(\vec{m} \times \frac{\partial \vec{m}}{\partial n} \right) \cdot \delta \vec{\theta} dS \quad \text{I-35}$$

où

³

$$\delta E_{ex} = 2A_{ex} \int_V [\vec{\nabla}(m_x) \cdot \vec{\nabla}(\delta m_x) + \vec{\nabla}(m_y) \cdot \vec{\nabla}(\delta m_y) + \vec{\nabla}(m_z) \cdot \vec{\nabla}(\delta m_z)] dV$$

L'identité $\vec{\nabla} \cdot (a\vec{b}) = a\vec{\nabla} \cdot \vec{b} + \vec{b} \cdot \vec{\nabla}a$ nous permet d'obtenir la relation : $\vec{\nabla}(m) \cdot \vec{\nabla}(\delta m) = \vec{\nabla} \cdot [\delta m \vec{\nabla}(m)] - \delta m \Delta m$ valable pour chaque composante de l'aimantation. Le théorème de Gauss $\int_V (\vec{\nabla} \cdot \vec{b}) dV = \oint_S (\vec{b} \cdot \vec{n}) dS$ est utilisé

pour passer d'une intégrale de volume vers une intégrale de surface :

$$\int_V [\vec{\nabla}(m) \cdot \vec{\nabla}(\delta m)] dV = \int_V \{ \vec{\nabla} \cdot [\delta m \vec{\nabla}(m)] - \delta m \Delta m \} dV = \oint_S \delta m [\vec{\nabla}(m) \cdot \vec{n}] dS - \int_V \delta m \Delta m dV.$$

⁴ Dans la déduction de la variation de l'énergie magnétostatique l'identité:

$$\int_V \delta \vec{m}(\vec{r}) \cdot \vec{H}_{dem}(\vec{r}) dV = \int_V \vec{m}(\vec{r}) \cdot \delta \vec{H}_{dem}(\vec{r}) dV$$

a été appliquée (voir [Miltat 94, page 239]).

$$\vec{H}_{eff} = \frac{2A_{ex}}{\mu_0 M_s} \Delta \vec{m} + \frac{2K_1}{\mu_0 M_s} (\vec{u}_K \cdot \vec{m}) \vec{u}_K + \vec{H}_{app} + \vec{H}_{dem} \quad \text{I-36}$$

joue le rôle d'un champ effectif local. Ainsi, le champ effectif est proportionnel à la dérivée variationnelle de l'énergie libre totale par rapport à l'aimantation :

$$\vec{H}_{eff} = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\delta E_{tot}}{\delta \vec{m}}. \quad \text{I-37}$$

L'annulation de la variation d'énergie $\delta E_{tot} = 0$ (I-34) se réalise si les deux contributions s'annulent simultanément. Le terme de volume conduit à 'la condition du couple' :

$$[\vec{m} \times \vec{H}_{eff}](\vec{r}) = \vec{0} \quad \forall \vec{r} \in V \quad \text{I-38}$$

tandis que le terme de surface se réduit à :

$$\left(\vec{m} \times \frac{\partial \vec{m}}{\partial n} \right)(\vec{r}) = \vec{0} \quad \forall \vec{r} \in S \quad \text{I-39}$$

En plus, puisque $|\vec{m}|^2 = 1$ sur la surface $\vec{m} \cdot \frac{\partial \vec{m}}{\partial n} = 0 \Rightarrow \vec{m} \perp \frac{\partial \vec{m}}{\partial n}$ et $\vec{m} \times \frac{\partial \vec{m}}{\partial n} = \vec{0} \Rightarrow \vec{m} // \frac{\partial \vec{m}}{\partial n}$,

donc forcément $\frac{\partial \vec{m}}{\partial n}(\vec{r}) = 0, \vec{r} \in S$. Les deux conditions ainsi déduites constituent les équations de Brown. Les équations qui nous donnent les états d'équilibre (I-37, I-38) sont des équations intégral-différentielles. Les dérivées partielles qui interviennent sont d'ordre II car l'expression du champ effectif inclut, à travers le terme d'échange, les dérivées partielles d'ordre II de l'aimantation. La conservation de l'amplitude de l'aimantation est responsable de leur non-linéarité tandis que les champs non locaux (d'échange et magnétostatique) impliquent le couplage entre les composantes de l'aimantation. A cause de ce caractère non-local, leur linéarisation est rarement possible (Annexe B-IV).

A ce stade, quelques remarques peuvent être faites.

- Dans le contexte du champ effectif local $\vec{H}_{eff}$ (I-35), les équations micromagnétiques affirment qu'à l'équilibre l'aimantation $\vec{m}$ et le champ effectif $\vec{H}_{eff}$ sont alignés en chaque point du système $\vec{m} // \vec{H}_{eff}$. A l'équilibre le couple exercé par le champ local $\vec{H}_{eff}$ sur l'aimantation $\vec{m}$ doit s'annuler.
- Le champ effectif $\vec{H}_{eff}$ (I-36) n'est pas défini de manière unique. C'est à dire qu'en ajoutant à $\vec{H}_{eff}$ un terme proportionnel à l'aimantation $\vec{m}$ tel que

$\vec{H}_{eff} \rightarrow \vec{H}_{eff} + C\vec{m}$, $C \in \Re$ la condition du couple $\vec{m} \times \vec{H}_{eff} = 0$ reste toujours satisfaite $\forall C \in \Re$. Par exemple, l'énergie d'anisotropie magnétocristalline d'un cristal uniaxe peut être exprimée sous deux formes, chacune des deux conduisant à une autre expression du champ d'anisotropie (effectif) :

$$\begin{aligned} E_{anis} = K_u(1 - m_z^2)V &\Rightarrow \vec{H}_{anis} = \frac{2K_u}{M_s} (0, 0, m_z) \\ E_{anis} = K_u(m_x^2 + m_y^2)V &\Rightarrow \vec{H}'_{anis} = \frac{2K_u}{M_s} (-m_x, -m_y, 0) \end{aligned}$$

La différence entre les deux champs est un multiple de l'aimantation:

$$\vec{H}_{anis} - \vec{H}'_{anis} = \frac{2K_u}{M_s} \vec{m}.$$

- La condition de surface (I-39) fournit une condition aux limites de type Neumann pour la distribution de l'aimantation (la stationnarité sur la surface libre).
- Les solutions des équations I-38, 39 représentent des états d'équilibre du système tels que l'état mono ou multidomaines. Lorsqu'il s'agit d'un état multidomaines, les domaines sont séparés par des parois de domaines. Ces parois de domaines ont une extension spatiale dictée aussi bien par les paramètres intrinsèques du matériau que par leur configuration interne. Selon la structure interne de la paroi, deux longueurs caractéristiques sont introduites pour un matériau donné:
 - le paramètre de la paroi Bloch Δ_0 directement lié à la largeur de la paroi de type Bloch dans un matériau uniaxe massif ($\delta_{Bloch} = \pi\Delta_0$). Il traduit la compétition entre l'énergie d'échange et l'énergie d'anisotropie magnétocristalline:

$$\Delta_0 = \sqrt{\frac{A_{ex}}{K_u}} \quad \text{I-40}$$

- la longueur d'échange l_{ex} qui décrit la largeur d'un vortex d'une ligne de Bloch. Elle est un paramètre qui quantifie la compétition entre l'interaction d'échange et l'interaction magnétostatique:

$$l_{ex} = \sqrt{\frac{2A_{ex}}{\mu_0 M_s^2}} \quad \text{I-41}$$

A coté des ces deux longueurs caractéristiques, la notion de facteur de qualité Q qui rapport l'intensité de l'anisotropie magnétocristalline à l'intensité des interactions magnétostatiques:

$$Q = \frac{2K_u}{\mu_0 M_s^2} \quad \text{I-42}$$

sert à la caractérisation du système ferromagnétique.

Pour résoudre numériquement les équations I-38,39 les méthodes classiques itératives peuvent être appliquées [LaBonte JAP 69, Trouilloud JMMM 87]. Leur principal inconvénient dérive du fait qu'elles ne tiennent pas compte de l'évolution réelle de l'aimantation, de sa dynamique temporelle entre deux états magnétiques parce qu'il s'agit seulement de la minimisation de l'énergie. De plus, leur application dans l'étude de processus de renversement et de dynamique de l'aimantation n'est pas adéquate. La méthode appropriée pour résoudre cette sorte de problème doit être fondée sur une équation de mouvement de l'aimantation et sera développée dans la section suivante.

I. 4. Equation de Landau - Lifshitz - Gilbert

Les équations présentées auparavant (I-38,39) nous donnent la possibilité d'accéder aux états d'équilibre sans fournir d'informations sur les trajectoires qui assurent le passage d'un état stable à un autre. Les aspects dynamiques de l'évolution temporelle de l'aimantation entre deux états d'équilibre ont demandé l'introduction d'une nouvelle équation capable de décrire le mouvement de l'aimantation. Il s'agit de l'équation de Landau - Lifshitz - Gilbert (LLG).

Lorsqu'un champ magnétique homogène $\vec{H}$ agit sur le moment magnétique $\vec{M}$ il exerce un couple égal à:

$$\mathbf{M} = \vec{M} \times \mu_0 \vec{H} \quad \text{I-43}$$

Hors équilibre ($\mathbf{M} \neq \mathbf{0}$), le moment magnétique a une réaction gyroscopique décrite par l'équation:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \mu_0 (\vec{M} \times \vec{H}) \quad \text{I-44}$$

où γ représente le facteur gyromagnétique $\gamma = \frac{g|e|}{2m_e} > 0$ avec $|e|$ la valeur absolue de la charge de l'électron, m_e la masse de l'électron et g le facteur de Landé qui a une valeur proche de 2 pour la plupart des matériaux ferromagnétiques. Cette équation décrit le

mouvement de précession de l'aimantation $\vec{M}$ autour du champ $\vec{H}$, mouvement qui conserve à la fois l'amplitude de l'aimantation $|\vec{M}| = M_s$ et l'inclinaison de l'aimantation par rapport au champ $\langle \vec{M}, \vec{H} \rangle = \theta_0$ (figure I-3(a)). Ce mouvement périodique s'effectue avec une périodicité $T_0 = \frac{2\pi}{\gamma(\mu_0 H)}$ qui vaut 35 ns pour un champ de $\mu_0 H = 1 \text{ mT} (= 10 \text{ Oe})$ et continue indéfiniment car aucun mécanisme de dissipation n'est pris en compte. Par contre, les mesures expérimentales prouvent que si le champ externe est suffisamment grand, l'aimantation s'aligne parallèlement au champ quel que soit l'état magnétique initial. Ainsi la saturation est atteinte et la précession s'arrête car $\vec{M} \times \vec{H} = 0$. L'équation I-44 ne peut pas expliquer le changement de l'inclinaison de l'aimantation par rapport au champ, et pour corriger cet aspect, un terme dissipatif de type Rayleigh est introduit de manière phénoménologique:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma(\vec{M} \times \mu_0 \vec{H}) + \frac{\alpha}{M_s} \left(\vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \right) \quad \text{I-45}$$

où α est le coefficient d'amortissement (sans dimension) révélateur du taux de pertes énergétiques. Le terme dissipatif, réunissant toutes les pertes d'énergie, ralentit la précession de l'aimantation qui progressivement relaxe vers la direction du champ et atteint l'équilibre statique (figure I-3(b)).

L'équation I-45, connue comme l'équation de Gilbert, peut se transformer dans la limite d'un faible amortissement [Mallinson IEEE 87] sous la forme proposée par Landau et Lifshitz:

$$(1 + \alpha^2) \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma(\vec{M} \times \mu_0 \vec{H}) - \frac{\alpha\gamma}{M_s} [\vec{M} \times (\vec{M} \times \mu_0 \vec{H})] \quad \text{I-46}$$

Les équations précédentes, valables pour un champ externe $\vec{H}$, sont généralisées dans le cas du champ local effectif $\vec{H}_{\text{eff}}$ (I-36). Compte tenu de l'équation I-46 réduite à

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = -(\vec{m} \times \vec{H}_{\text{eff}}) - \alpha [\vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}_{\text{eff}})], \quad \text{I-47}$$

par le changement de variable $t \leftarrow \frac{t\gamma\mu_0}{1+\alpha^2}$, trois équations (une pour chaque composante de l'aimantation) sont obtenues. Le mouvement de l'aimantation décrit par l'équation de LLG (I-47) continue de conserver l'amplitude de l'aimantation $|\vec{m}| = 1$ même après l'insertion du terme de relaxation.

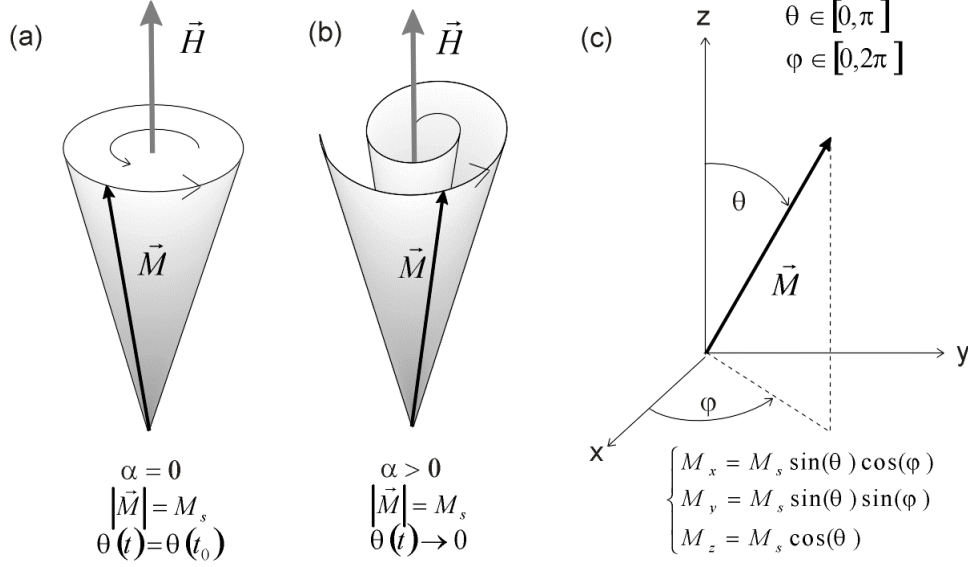


Figure I-3: Trajectoire de l'aimantation dans un mouvement sans amortissement (a) et avec amortissement (b) après l'application d'un champ externe. (c) Définition des axes et des angles.

Le passage des coordonnées cartésiennes (m_x, m_y, m_z) vers les angles directeurs (θ, φ) [Fabian GJI 96] conduit à deux équations :

$$\begin{aligned} (1 + \alpha^2) \frac{\partial \theta}{\partial t} &= -\frac{\gamma \mu_0}{M_s} \left\{ \alpha \frac{\delta E_{tot}}{\delta \theta} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\delta E_{tot}}{\delta \varphi} \right\} \\ (1 + \alpha^2) \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= \frac{\gamma \mu_0}{M_s} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\delta E_{tot}}{\delta \theta} - \frac{\alpha}{\sin^2 \theta} \frac{\delta E_{tot}}{\delta \varphi} \right\} \end{aligned} \quad \text{I-48}$$

Ainsi le nombre de degrés de liberté est diminué de 3 à 2 et la contrainte de la conservation de la norme est toujours satisfaite. Cependant, l'axe polaire doit être choisi de manière à éviter les cas extrêmes : $\theta = 0$ ou $\theta = \pi$ où l'angle φ est indéterminé.

Le coefficient d'amortissement α qui décrit globalement la décroissance de l'énergie totale du système ferromagnétique par l'intermédiaire des divers mécanismes de relaxation est un paramètre mal connu. Dans le cas des matériaux ferromagnétiques usuels α n'a pas de valeur constante et peut dépendre d'une façon non-linéaire de l'aimantation. Des informations sur la valeur de α peuvent être fournies par la largeur des raies d'absorption dans les mesures de résonance ferromagnétique. D'habitude, dans les calculs, des hypothèses simplificatrices fixent la valeur de α entre 0,1 et 1. Une valeur de α proche de l'amortissement critique contribue à l'augmentation de la vitesse de calcul. Lorsque le problème micromagnétique est réduit aux états d'équilibre le terme de précession est négligé et nous retrouvons l'approximation de l'amortissement infini. Cette approximation a été implémentée comme un algorithme de minimisation de l'énergie [Trouilloud JMMM 87, Berkov PSS 93].

En utilisant la théorie du micromagnétisme, les problèmes de nucléation et de retournement de l'aimantation dans des systèmes ferromagnétiques peuvent être résolus [Aharoni 96, Hubert 98]. Leur traitement n'est pas toujours possible analytiquement à cause de la complexité des équations micromagnétiques. Dans ce cas, ce sont les approches numériques telles que celles que nous présentons au chapitre II qui interviennent.

Références bibliographiques I

- [Aharoni 96] A. Aharoni, *Introduction to the theory of ferromagnetism*, Clarendon Press, Oxford (1996).
- [Brown 63] J. F. Brown, Jr. : *Micromagnetics*, Interscience Publishers, J. Wiley and Sons, New York (1963).
- [Berkov PSS 93] D. V. Berkov, K. Ramstock, A. Hubert, Phys. Stat. Sol. a **137**, 297 (1993). *Solving micromagnetic problems - towards on optimal numerical*
- [Fabian GJI 96] K. Fabian, A. Kirchner, W. Williams, F. Heider, T. Leibl, A. Hubert, Geophys. J. Int. **124**, 89 (1996). *Three-dimensional micromagnetic calculations of magnetite using FFT*
- [Hubert 98] A. Hubert, R. Schäfer, *Magnetic Domains*, Springer (1998).
- [Kittel RMP 49] C. Kittel, Rev. Mod. Phys. **21**, 541 (1949). *Physical theory of Ferromagnetic Domains*
- [LaBonte JAP 69] A. E. LaBonte, J. Appl. Phys. **40**, 2450 (1969). *Two-Dimensional Bloch-Type Domains Walls in Ferromagnetic Films.*
- [Mallinson IEEE 87] J. Mallinson, IEEE Trans. Magn. **MAG-23** 2003 (1987). *On the damped gyromagnetic precession*
- [Miltat 94] J. Miltat, dans *Applied Magnetism*, édité par R. Gerber, C. D. Wright et G. Asti, NATO ASI Series (Kluwer, Dordrecht), 221 (1994). *Domains and domains walls in soft magnetic materials mostly*
- [Schrefl JMMM 99] T. Schrefl, J. Magn. Magn. Mat. **207**, 45 (1999). *Finite elements in numerical micromagnetics*
- [Trouilloud JMMM 87] P. Trouilloud, J. Miltat, J. Magn. Magn. Mat. **66**, 194 (1987). *Néel lines in ferromagnetic garnet epilayers with orthorhombic anisotropy and canted magnetization*

CHAPITRE II

Calcul numérique

Parmi les problèmes du micromagnétisme, il y a très peu qui comportent une solution complètement analytique dû en particulier, au caractère non-local du champ magnétostatique. Au dehors des études de la nucléation dans de cylindres infinis [Brown PR 57, Frei PR 57] ou de sphères [Aharoni PR 63, Eisenstein JAP 76], fondées sur la linéarisation des équations micromagnétiques, les autres études demandent, pour la plus part d'elles, l'utilisation de l'analyse numérique.

Avant toute présentation des résultats, c'est nécessaire de décrire les programmes que nous avons utilisés lors des simulations, de faire connaître leurs limites d'applicabilité et leur validité. Nous commencerons par reprendre les concepts continus introduits dans le premier chapitre, mais cette fois du point de vue numérique. Les expressions continues des énergies et des champs sont transposées sous une forme discrète qui représente la base de départ de l'approche numérique que nous avons développée.

La compréhension de la structure des parois et des domaines dans les couches minces ou du processus de renversement de l'aimantation dans des plots ou des fils, requiert de logiciels qui tiennent compte de la spécificité de chaque système. C'est pour cette raison, que deux logiciels s'appuyant sur l'approximation des différences finies, ont été développés afin d'étudier de systèmes à deux dimensions (2D) ou trois dimensions (3D), périodiques ou non-périodiques. Il nous a semblé impérativement nécessaire d'examiner l'impact de plusieurs voies d'évaluation de l'énergie et du champ magnétostatique ainsi que de comparer plusieurs schémas d'intégration temporelle de l'équation de Landau - Lifshitz - Gilbert. Ensuite, une description détaillée et critique de la précision du calcul et des sources des erreurs, est présentée.

La validité des calculs numériques peut être testée à la fois par de problèmes tests (benchmark problem), et/ou par la comparaison directe avec les résultats expérimentaux (MFM, MOKE,...). Dans cet esprit, un modèle simple pour simuler le contraste MFM a été conçu comme un sort d'interface simulation- expérience. La mise en pratique des algorithmes numériques sur la forme des logiciels monoprocesseur et multiprocesseurs, achève ce deuxième chapitre.

Plan du chapitre II

II. 1. Introduction

II. 2. Energie et champ d'échange

II. 3. Energie et champ d'anisotropie magnétocristalline

II. 4. Energie Zeeman et champ externe

II. 5. Energie et champ magnétostatique

II. 5. 1. Calcul bidimensionnel 2D

II. 5. 1. 1. Méthode intégrale 2D

II. 5. 1. 2. Méthode du champ locale 2D

II. 5. 2. Calcul tridimensionnel 3D

II. 5. 2. 1. Méthode intégrale 3D

II. 5. 2. 2. Approximation dipolaire 3D

II. 5. 3. Transformée Fourier rapide (FFT)

II. 5. 3. 1. Théorème du produit de convolution

II. 5. 3. 2. Discrétisation et le produit de convolution

II. 5. 3. 3. Système non-périodique

II. 5. 3. 4. Système périodique

II. 5. 4. Périodicité

II. 5. 4. 1. Calcul 2D périodique

II. 5. 4. 2. Calcul 3D périodique

II. 6. Intégration temporelle de l'équation de Landau - Lifshitz – Gilbert

II. 6. 1. Méthodes d'intégration numérique

II. 6. 2. Méthode de Crank - Nicholson

II. 6. 3. Condition d'arrêt

II. 6. 4. Stabilité du schéma d'intégration temporelle

II. 6. 5. Influence du coefficient d'amortissement α

II. 7. Erreurs dues à la discrétisation

II. 8. Problème standard 3

II. 9. Modélisation du signal MFM

II. 10. Logiciels

Références bibliographiques II

II. 1. Introduction

Depuis une quinzaine d'années l'amélioration continue des moyennes de calcul numérique (logiciels et machines), a généré un développement sans précédent de la simulation numérique. Cette tendance, visible aussi dans le domaine des simulations micromagnétiques où une palette très riche de modèles numériques existe [Fidler JPD 00], est intensifiée davantage grâce aux progrès remarquables enregistrés par les techniques de nano-fabrication. Facilement les tailles des systèmes ont été réduites au niveau de dizains de manomètres, ceci étant idéal pour les simulations micromagnétiques car les calculs sont à la fois plus rapides et la reproductibilité des résultats expérimentaux plus probable.

Le traitement numérique nous oblige à partager le système ferromagnétique dans des unités de base soit de volume en cas tridimensionnel (cellules tétraédriques, cubiques, orthorhombiques, hexagonales,..), soit de surface en cas bidimensionnel (prismes infinis à section triangulaire, carrée, rectangulaire,..). Selon la régularité des unités de discrétisation des modèles micromagnétiques utilisant la méthode des éléments finis [Fredkin IEEE 87, Bagnérés IEEE 91, Schrefl JMMM 99] ou l'approximation des différences finies [Schabes JAP 88, Nakatani JAP 89, Scheinfein PRB 91, Berkov PSS 93] ont été conçus. La méthode des éléments finis, est très rependue dans le domaine du calcul technique tel que l'analyse structurelle, la dynamique des fluides, le transport de chaleur ou le calcul du champ électromagnétique. Malheureusement, sa grande flexibilité dont le traitement d'objets d'une géométrie irrégulière, s'appuie sur un appareillage mathématique sophistiqué. Les équations micromagnétiques sont des équations aux dérivées partielles et la méthode la plus directe pour les résoudre, est fondée sur l'approximation des différences finies. Une telle approche, malgré le fait qu'elle impose la contrainte sévère d'utilisation d'un maillage régulier, s'avère très efficace grâce à l'implémentation de la transformée Fourier rapide dans le calcul des contributions magnétostatiques [Mansuripur IEEE 88].

Les travaux dédiés à la modélisation numérique de la théorie du micromagnétisme, peuvent être divisés en deux grandes catégories selon la manière générale dont laquelle les équations micromagnétiques sont abordées. *Les méthodes intégrales*, qui forment une première classe, reposent sur la discrétisation de l'expression continue de l'énergie du système $E_{tot} = E_{tot}(m_i, i = 1, \dots, N)$ qui doit être minimisée par rapport à l'aimantation. A partir de cette expression discrète par différentiation l'expression discrète du champ effectif

$\vec{H}_{eff}(i) = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\delta E_{tot}}{\delta \vec{m}_i}$ est déduite [Schabes JAP 88, Schrefl JMMM 99]. En revanche, la deuxième catégorie *les méthodes du champ direct*, est fondée sur la discretization de l'expression continue du champ effectif H_{eff} tandis que l'énergie du système est évaluée par intégration numérique cette fois [Labrune JMMM 95]. Ensuite, le champ effectif intervient dans l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert qui décrit l'évolution temporelle de l'aimantation.

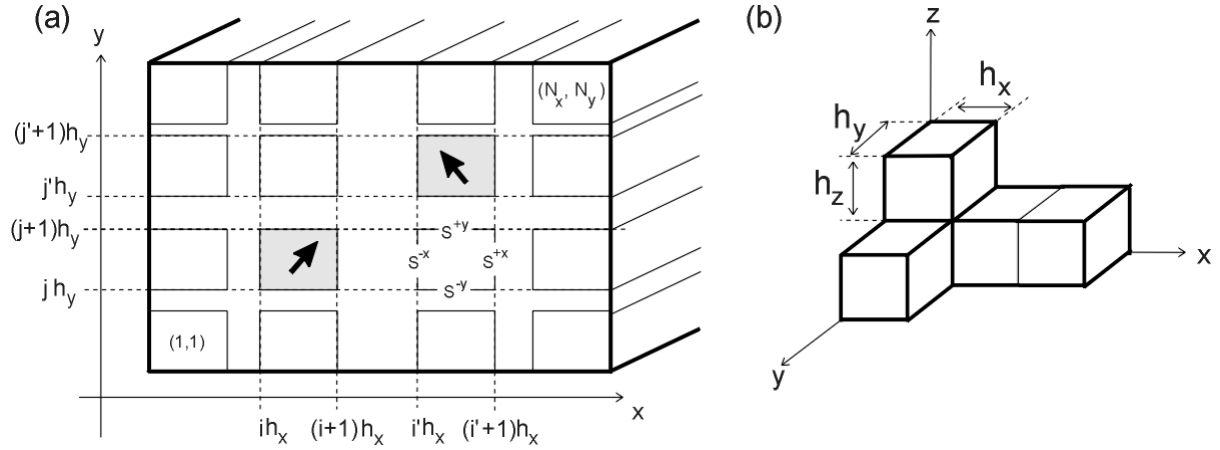


Figure II-1 : Schéma de discrétisation d'un système 2D (a) et 3D (b).

Durant notre travail, une approche s'appuyant sur l'approximation des différences finies a été développée. Sur la figure II-1 les types des maillages appliqués sont présentés. Les systèmes magnétiques à deux dimensions sont divisés dans $N_x \times N_y$ prismes rectangulaires de surface $h_x h_y$, infinis selon la direction OZ: $h_z \rightarrow \infty$ (figure II-1(a)). Un maillage $N_x \times N_y \times N_z$ avec des cellules orthorhombiques de volume $h_x h_y h_z$ a été préféré dans de systèmes tridimensionnels (figure II-1(b)). Comme par la suite nos études numériques vont traiter des systèmes réels 3D assez larges, coûteux en espace mémoire et en temps de calcul, l'approximation des cellules uniformément aimantée, a été choisie [Ramstöck JMMM 94, Schabes IEEE 87]. Concernant le champ effectif, il est obtenu par différentiation à partir de l'expression discrète de l'énergie totale. Nous allons présenter la forme discrète de chaque contribution de l'énergie et du champ effectif que nous avons utilisé dans le calcul.

II. 2. Energie et champ d'échange

L'évaluation de l'énergie d'échange E_{ex} peut se faire soit à partir du produit scalaire des moments magnétiques adjacents (I-1) selon l'approche de type Heisenberg [Zhu JAP 88, Nakatani JAP 89] soit en passant par l'évaluation des dérivées de premier ordre de l'aimantation (I-5) selon le modèle continu [LaBonte JAP 69].

Ce sont les accroissements finis et leur passage à la limite qui ont conduit à la notion de dérivée partielle. Il est tout à fait justifié donc d'appliquer le démarche à l'inverse pour estimer numériquement les dérivées de premier ordre de l'aimantation telle que $\frac{\partial m_\alpha}{\partial \beta}(ijk)$ où $\alpha, \beta = x, y, z$. En développant en série Taylor l'aimantation autour de la cellule (ijk) selon la direction OX nous arrivons à :

$$m(i+1, j, k) = m(i, j, k) + h_x \frac{\partial m}{\partial x}(i, j, k) + O(h_x^2) \quad \text{II-1}$$

ainsi la première dérivée sera estimée par la suite comme :

$$\frac{\partial m}{\partial x}(i, j, k) = \frac{m(i+1, j, k) - m(i, j, k)}{h_x} + O(h_x) \quad \text{II-2}$$

Après avoir tenu compte de la condition du ferromagnétisme $|\vec{m}|^2 = 1$ et en ajoutant toutes les contributions (OX, OY et OZ) l'expression de l'énergie d'échange générale est :

$$E_{ex} = A_{ex} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} \left(\sum_{vp_x} \frac{1 - \vec{m}_{ijk} \cdot \vec{m}_{vp_x}}{h_x^2} + \sum_{vp_y} \frac{1 - \vec{m}_{ijk} \cdot \vec{m}_{vp_y}}{h_y^2} + \sum_{vp_z} \frac{1 - \vec{m}_{ijk} \cdot \vec{m}_{vp_z}}{h_z^2} \right) h_x h_y h_z \quad \text{II-3}$$

où par $vp\alpha$ nous avons désigné les voisins les plus proches selon la direction α (par exemple selon OX pour la cellule ijk : $vp_x = i-1, i+1$). Pour un maillage cubique ($h_x = h_y = h_z = h$)

l'expression de l'énergie d'échange se simplifie à :

$$E_{ex} = A_{ex} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} \sum_{vp} (1 - \vec{m}_{ijk} \cdot \vec{m}_{vp}) h. \quad \text{II-4}$$

La dérivation de l'expression discrète de l'énergie d'échange (II-3) $-\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\partial E_{ex}}{\partial \vec{m}_{ijk}}$ nous conduit au champ d'échange:

$$\vec{H}_{ex}(ijk) = \frac{2A_{ex}}{\mu_0 M_s} \left[\frac{\sum_{vp_x} \vec{m}_{vp_x} - 2\vec{m}_{ijk}}{h_x^2} + \frac{\sum_{vp_y} \vec{m}_{vp_y} - 2\vec{m}_{ijk}}{h_y^2} + \frac{\sum_{vp_z} \vec{m}_{vp_z} - 2\vec{m}_{ijk}}{h_z^2} \right]. \quad \text{II-5}$$

Les sommes précédentes impliquant les plus proches voisins s'appliquent à chaque cellule du maillage même aux cellules situées sur la surface libre du système qui n'ont pas un de leurs plus proches voisins (eg. la cellule $(1, j, k)$ n'a pas le voisin $(0, j, k)$). La condition de Brown qui stipule la stationnarité de l'aimantation aux interfaces $\frac{\partial \vec{m}}{\partial n} = 0$ nous permet de résoudre ce problème en introduisant une unité de maillage supplémentaire: $\vec{m}(0, j, k) = \vec{m}(1, j, k)$ [Scheinfein PRB 91].

Lorsque le système ferromagnétique est périodique selon une certaine direction, les conditions de périodicité de l'aimantation interviennent directement dans l'évaluation du champ et de l'énergie d'échange. En reprenant l'exemple précédent, lorsque la condition $\vec{m}(i + N_x, j, k) = \vec{m}(i, j, k) \quad \forall i \in Z$ est ajoutée, le voisin à gauche devient $\vec{m}(0, j, k) = \vec{m}(N_x, j, k)$.

C'est intéressant de noter qu'en utilisant les différences finies, les dérivées d'ordre II de l'aimantation, évaluées comme :

$$\frac{\partial^2 m}{\partial x^2}(i, j, k) = \frac{m(i+1, j, k) - 2m(i, j, k) + m(i-1, j, k)}{h_x^2} + O(h_x) \quad \text{II-6}$$

introduites dans l'expression continue du champ d'échange (I-36) conduit aussi à la formule déduite par différenciation (II-5).

Parmi les interactions qui agissent dans les systèmes ferromagnétiques, l'interaction d'échange se situe largement en tête du point de vue de l'intensité. Son caractère dominant oblige à une haute précision lors de l'évaluation numérique. Plusieurs approximations sont utilisées pour l'estimation de la première dérivée comme par exemple celle des différences centrées [Kevorkian thèse]:

$$\frac{\partial m}{\partial x}(i, j, k) = \frac{m(i+1, j, k) - m(i-1, j, k)}{2h_x} + O(h_x^2)$$

qui est d'ordre II. Des approches plus complexes ont été conçues pour l'évaluation du champ d'échange telle que celle décrite dans [Trouilloud JMMM 87, Berkov PSS 93, Labrune JMMM 95, Fabian GJI 96] qui se reposent sur le développement Taylor d'ordre 4 de l'aimantation afin d'augmenter la précision du calcul. Les études comparatives menées par

[Donahue PB 97] sur les diverses façons d'évaluation de l'énergie d'échange, attirent l'attention sur les effets indésirables d'un pas de maillage trop large. Dans notre cas l'utilisation d'un pas de maillage assez fin nous a permis d'obtenir une précision suffisante. Notre but a été de développer un outil numérique s'appuyant sur la méthode des différences finies afin de mieux apprendre à maîtriser les artefacts numériques rencontrés en micromagnétisme tout en préservant la simplicité et une vitesse de calcul satisfaisante.

II. 3. Energie et champ d'anisotropie magnétocristalline

Dans des matériaux uniaxes l'énergie d'anisotropie magnétocristalline (I-7) prend la forme discrète:

$$E_{anis} = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} K_u(ijk) \left\{ 1 - [\vec{m}(ijk) \cdot \vec{u}_K(ijk)]^2 \right\} (h_x h_y h_z). \quad \text{II-7}$$

Si le milieu est homogène, la constante d'anisotropie et le vecteur de l'axe d'anisotropie magnétocristalline sont indépendantes de position: $K_u(ijk) = K_u$, $\vec{u}_K(ijk) = \vec{u}_K$. Le caractère polycristallin du système se traduit par une constante d'anisotropie d'amplitude constante $K_u(ijk) = K_u$ et par une orientation aléatoire de l'axe d'anisotropie $\vec{u}_K(ijk)$ d'une cellule à une autre ou d'un groupe de cellules à un autre (ça dépende combien de cellules forment un grain monocristallin). Le champ d'anisotropie magnétocristalline dérivé est :

$$\vec{H}_{anis}(ijk) = \frac{2K_u(ijk)}{\mu_0 M_s} [\vec{m} \cdot \vec{u}_K]_{ijk} \vec{u}_K(ijk). \quad \text{II-8}$$

Lorsque l'anisotropie magnétocristalline appartient à une autre symétrie que celle uniaxiale, les formes discrètes de l'énergie et du champ magnétocristalline doivent être changées en conséquence.

II. 4. Energie Zeeman et champ externe

L'expression continue de l'énergie Zeeman (I-8) se traduit en numérique ainsi :

$$E_{Zeem} = -\mu_0 M_s \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} [\vec{m}(ijk) \cdot \vec{H}_{app}(ijk)] (h_x h_y h_z) \quad \text{II-9}$$

où nous avons considéré que le champ appliqué $\vec{H}_{app}$ peut varier dans l'espace. Le plus souvent, le champ appliqué est considéré homogène dans l'espace et indépendant du temps mais l'algorithme s'applique de la même manière lorsqu'il s'agit d'un champ externe variable dans le temps et/ou dans l'espace.

II. 5. Energie et champ magnétostatique

La contribution magnétostatique à l'énergie totale et au champ effectif est la plus délicate à prendre en compte en raison de son caractère global. Toutes les parties du matériau interagissent entre elles et cette nature non-locale du champ magnétostatique alourdit considérablement les simulations. Du point de vue magnétostatique le système ferromagnétique est équivalent soit à une distribution des charges magnétiques (de volume et de surface) soit à une distribution de dipôles magnétiques. Lorsqu'on s'intéresse aux charges magnétiques le point de départ est la distribution de l'aimantation. Le premier modèle utilisé fut celui de l'aimantation constante dans l'unité de maillage [LaBonte JAP 69, Schabes JAP 88, Zhu JAP 88, Yuan PRB 91] qui induit que de charges de surfaces constantes aux surfaces des cellules de maillage. L'interpolation linéaire ou quadratique de l'aimantation entre les centres des cellules de maillage fait apparaître de charges de volume et de surface interagissant réciproquement [Ramstöck JMMM 94]. L'approximation dipolaire a été exploitée dans des approches telle que celle introduite par Nakatani [Nakatani JAP 89] ou Berkov [Berkov JMMM 91].

De manière générale, le champ magnétostatique est relié à l'aimantation à travers le tenseur demagnétisant $[TG]$:

$$\vec{H}_{dem} = -[TG]\vec{M}.$$

Prenant l'exemple une particule de forme ellipsoïdale, uniformément aimantée, d'aimantation $\vec{M}$, dans le repère des axes principaux (xyz) le champ magnétostatique à l'intérieur $\vec{H}_{dem}$ est donné par:

$$\vec{H}_{dem} = - \begin{pmatrix} TG_x & 0 & 0 \\ 0 & TG_y & 0 \\ 0 & 0 & TG_z \end{pmatrix} \vec{M}, \quad TG_x + TG_y + TG_z = 1$$

où les composantes du tenseurs dépendent de la forme et de la taille de la particule [Hubert 98 page 120]. Lorsque le système ferromagnétique est divisé dans un réseau de cellules, le champ magnétostatique est couplé avec ses sources (charges magnétique de volume, de surfaces, dipôles) à travers une relation tensorielle qui, dans l'approximation de unité de maillage uniformément aimantées, se réduit à:

$$\vec{H}_{dem}(I) = -M_s \sum_{I'=1}^N \begin{pmatrix} TG_{xx} & TG_{xy} & TG_{xz} \\ TG_{yx} & TG_{yy} & TG_{yz} \\ TG_{zx} & TG_{zy} & TG_{zz} \end{pmatrix}_{(I,I')} \begin{pmatrix} m_x \\ m_y \\ m_z \end{pmatrix}_{I'} \quad \text{II-10}$$

alors que l'énergie magnétostatique est:

$$E_{dem} = \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 \sum_{I=1}^N (m_x \quad m_y \quad m_z)_I \sum_{I'=1}^N \begin{pmatrix} TG_{xx} & TG_{xy} & TG_{xz} \\ TG_{yx} & TG_{yy} & TG_{yz} \\ TG_{zx} & TG_{zy} & TG_{zz} \end{pmatrix}_{(I,I')} \begin{pmatrix} m_x \\ m_y \\ m_z \end{pmatrix}_{I'} V_{cell} \quad \text{II-11}$$

Dans les expressions II-10,11 par V_{cell} nous avons nommé le volume 3D: $V_{cell} = h_x h_y h_z$ respective la surface 2D: $V_{cell} = h_x h_y$ de l'unité de maillage et les sommes s'effectuent sur toutes les cellules de maillage $I, I'=1..N$. Dans nos simulations plusieurs méthodes d'évaluation du champ magnétostatique ont été testées et comparées. Les expressions du tenseur **[TG]** seront détaillées par la suite, pour un système bidimensionnel (2D, section II.5.1) et tridimensionnel (3D, section II.5.2). Afin de rendre efficace en temps calcul les simulations nous avons appliqué la transformé Fourier rapide dans l'évaluation du champ magnétostatique. L'utilisation de FFT doit tenir compte du caractère périodique ou non-périodique du système comme nous montrerons dans la section (II. 5. 3.) et (II. 5. 4.).

II. 5. 1. Calcul bidimensionnel 2D

II. 5. 1. 1. Méthode intégrale 2D

Cette méthode repose sur le calcul de l'énergie d'interaction magnétostatique des deux prismes infinis, uniformément aimantés. Elle a été premièrement introduite par LaBonte [LaBonte JAP 69] pour le calcul de la structure des parois dans de couches minces de permalloy ayant une anisotropie magnétocristalline planaire. Puis elle a été reprise dans les travaux de [Trouilloud JMMM 87, Miltat JMMM 89, Jakubovics JAP 91, Aharoni IEEE 91, Ramstöck JMMM 94]. Considérant les prismes (i, j) et (i', j') uniformément aimantés (figure II-1(a)), leur énergie de l'interaction magnétostatique (I-24) est évaluée à partir de l'intégrale:

$$E_{dem}(ij, i' j') = \frac{1}{8\pi} \mu_0 \int_{S_{ij}} dS \int_{S'_{j'}} dS' \frac{\sigma_m(\vec{r}) \sigma_m(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad \text{II-12}$$

où la surface d'intégration est $S_{\alpha\beta} = S_{\alpha\beta}^{+x} \cup S_{\alpha\beta}^{+y} \cup S_{\alpha\beta}^{-x} \cup S_{\alpha\beta}^{-y}$, $\alpha\beta = ij, i' j'$. Le système ferromagnétique comporte une dimension infinie (OZ) et par la suite l'énergie

magnétostatique sur l'unité de longueur est celle qui nous intéresse. L'ensemble des intégrales doubles (II-12) se réduit au calcul des paires de surfaces en interaction : surfaces parallèlement ou perpendiculairement réciproque orientées (voir figure II-1(a)).

- deux surfaces infinies parallèles

$$\begin{aligned}
 S^x &= \{(ih_x, y) \mid ih_x, jh_y \leq y \leq (j+1)h_y\} \\
 S'^x &= \{(i'h_x, y') \mid i'h_x, j'h_y \leq y' \leq (j'+1)h_y\} \\
 I_{xx}[i, j, i', j'] &= I_{xx}[i-i', j-j'] = I_{xx}[I, J] = \int_{jh_y}^{(j+1)h_y} dy \int_{i'h_y}^{(i'+1)h_y} dy' G_{00}((i-i')h_x, y-y') = \\
 &= G_{02}[Ih_x, (J-1)h_y] - 2G_{02}[Ih_x, Jh_y] + G_{02}[Ih_x, (J+1)h_y]
 \end{aligned} \tag{II-13}$$

- deux surfaces infinies perpendiculaires

$$\begin{aligned}
 S^x &= \{(ih_x, y) \mid ih_x, jh_y \leq y \leq (j+1)h_y\} \\
 S'^y &= \{(x', j'h_y) \mid i'h_x \leq x' \leq (i'+1)h_x, j'h_y\} \\
 I_{xy}[i, j, i', j'] &= \int_{jh_y}^{(j+1)h_y} dy \int_{i'h_x}^{(i'+1)h_x} dx' G_{00}(ih_x - x', jh_y - y') = \\
 &= -G_{11}[(I-1)h_x, (J+1)h_y] + G_{11}[(I-1)h_x, Jh_y] + G_{11}[Ih_x, (J+1)h_y] - G_{11}[Ih_x, Jh_y]
 \end{aligned} \tag{II-14}$$

Pendant la dérivation des expressions précédentes nous avons tenu compte de la relation :

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\int_{-L/2}^{+L/2} dz \int_{-L/2}^{+L/2} dz' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|}}{L} = -\ln[(x-x')^2 + (y-y')^2] \tag{II-15}$$

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}$$

et les suivantes fonctions auxiliaires définies dans [Hubert 98 page 128, Ramstöck JMMM 94] ont été employées:

$$\begin{aligned}
 G_{00}(x, y) &= -\ln(x^2 + y^2) \\
 G_{01}(x, y) &= \int G_{00}(x, y) dy = -y \ln(x^2 + y^2) - 2x \arctan\left(\frac{y}{x}\right) + 2y \\
 G_{11}(x, y) &= \int G_{01}(x, y) dx = -xy \ln(x^2 + y^2) - x^2 \arctan\left(\frac{y}{x}\right) - y^2 \arctan\left(\frac{x}{y}\right) + 3xy \\
 G_{02}(x, y) &= \int G_{01}(x, y) dy = -\frac{1}{2}(y^2 - x^2) \ln(x^2 + y^2) - 2xy \arctan\left(\frac{y}{x}\right) + \frac{3}{2}y^2
 \end{aligned} \tag{II-16}$$

Surfaces du prisme (i, j)	σ_m
$S^{-x} = \{(x, y) ih_x, jh_y \leq y \leq (j+1)h_y\}$	$-M_s m_x$
$S^{+x} = \{(x, y) (i+1)h_x, jh_y \leq y \leq (j+1)h_y\}$	$+M_s m_x$
$S^{-y} = \{(x, y) ih_x \leq x \leq (i+1)h_x, jh_y\}$	$-M_s m_y$
$S^{+y} = \{(x, y) ih_x \leq x \leq (i+1)h_x, (j+1)h_y\}$	$+M_s m_y$

Tableau II-1 : Surfaces et densités de charges de surface d'un prisme infini uniformément aimanté.

Les surfaces et les densités des charges de surfaces σ_m d'un prisme (i, j) sont indiquées sur le tableau II-1. Après avoir inclut toutes les combinaisons, l'énergie magnétostatique sur l'unité de longueur peut être exprimée à l'aide du tenseur démagnétisant **TG** (II-11) ayant les composantes suivantes :

$$TG_{xx}(i-i', j-j') = \frac{1}{4\pi(h_x h_y)} \{I_{xx}[i, j, i', j'] - I_{xx}[i, j, i'+1, j'] - I_{xx}[i+1, j, i', j'] + I_{xx}[i+1, j, i'+1, j']\}$$

$$TG_{xy}(i-i', j-j') = \frac{1}{4\pi(h_x h_y)} \{I_{xy}[i, j, i', j'] - I_{xy}[i, j, i', j'+1] - I_{xy}[i+1, j, i', j'] + I_{xy}[i+1, j, i', j'+1]\}$$

$$TG_{xz} = TG_{yz} = TG_{zx} = TG_{zy} = TG_{zz} = 0.$$

Les intégrales I_{yx}, I_{yy} ainsi que les composantes TG_{yx}, TG_{yy} s'obtiennent par permutations circulaires.

II. 5. 1. 2. Méthode du champ locale 2D

L'approche du champ local consiste dans l'évaluation ponctuelle du champ magnétostatique [Yuan PRB 91, Labrune JMMM 95]. Connaissant la distribution de charges magnétiques dans le système le champ magnétostatique est calculé au centre de chaque prisme :

$\left[\left(i + \frac{1}{2} \right) h_x, \left(j + \frac{1}{2} \right) h_y \right]$. Le champ magnétique $\vec{H}_{dem}$ créé par une ligne infinie, uniformément chargée avec la densité des charges λ sur l'unité de longueur (figure II-2), à la distance $\vec{r}$ d'elle est:

$$\vec{H}_{dem}(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi} \lambda \frac{\vec{r}}{r^2}.$$

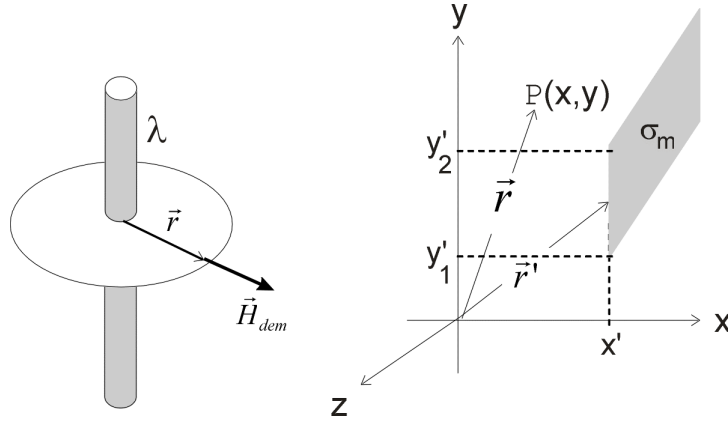


Figure II-2 : Géométrie du système pour le calcul du champ magnétostatique locale.

Le champ magnétostatique dû à une surface $S^x = \{(x', y') \mid x', y'_1 \leq y' \leq y'_2\}$ uniformément chargée avec la densité de charges de surface σ_m est :

$$H_{dem,x}(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_{y'_1}^{y'_2} \sigma_m dy' \frac{x - x'}{(x - x')^2 + (y - y')^2} = -\frac{\sigma_m}{4\pi} \left[2 \arctan\left(\frac{y - y'_2}{x - x'}\right) - 2 \arctan\left(\frac{y - y'_1}{x - x'}\right) \right]$$

$$H_{dem,y}(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_{y'_1}^{y'_2} \sigma_m dy' \frac{y - y'}{(x - x')^2 + (y - y')^2} = -\frac{\sigma_m}{4\pi} \ln \left[\frac{(x - x')^2 + (y - y'_2)^2}{(x - x')^2 + (y - y'_1)^2} \right]$$

En cumulant la contribution de chaque surface chargée au point central de la cellule (ij) nous obtenons un champ démagnétisant tel que :

$$\vec{H}_{dem} \left[\left(i + \frac{1}{2} \right) h_x, \left(j + \frac{1}{2} \right) h_y \right] = - \sum_{i'=1}^{N_x} \sum_{j'=1}^{N_y} M_s \begin{pmatrix} TG_{xx} & TG_{xy} & 0 \\ TG_{yx} & TG_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{i-i', j-j'} \begin{pmatrix} m_x \\ m_y \\ m_z \end{pmatrix}_{i'j'}$$

où les composantes du tenseur **[TG]** sont:

$$TG_{xx}(i - i', j - j') = \frac{1}{4\pi} \left\{ g_1[(i - i' + 0.5)h_x, (j - j' + 0.5)h_y] - g_1[(i - i' + 0.5)h_x, (j - j' - 0.5)h_y] - \right. \\ \left. - g_1[(i - i' - 0.5)h_x, (j - j' + 0.5)h_y] + g_1[(i - i' - 0.5)h_x, (j - j' - 0.5)h_y] \right\}$$

$$TG_{yx}(i - i', j - j') = \frac{1}{4\pi} \left\{ g_2[(i - i' + 0.5)h_x, (j - j' + 0.5)h_y] - g_2[(i - i' + 0.5)h_x, (j - j' - 0.5)h_y] - \right. \\ \left. - g_2[(i - i' - 0.5)h_x, (j - j' + 0.5)h_y] + g_2[(i - i' - 0.5)h_x, (j - j' - 0.5)h_y] \right\}$$

exprimées à l'aide des fonctions auxiliaires:

$$g_1(x, y) = 2 \arctan\left(\frac{y}{x}\right).$$

$$g_2(x, y) = \ln(x^2 + y^2)$$

L'énergie magnétostatique est évaluée à partir du champ magnétostatique calculé au centre de la cellule extrapolé au prisme entier $\vec{H}_{dem}(ij) = \vec{H}_{dem} \left[\left(i + \frac{1}{2} \right) h_x, \left(j + \frac{1}{2} \right) h_y \right]$:

$$E_{dem} = -\frac{1}{2} \mu_0 M_s \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} [\vec{m}(ij) \cdot \vec{H}_{dem}(ij)] (h_x h_y).$$

Comparaison entre les deux méthodes 2D

Nous avons voulu comparer les deux méthodes invoquées. Pour cela, la densité de l'énergie magnétostatique d'un prisme en cobalt ($M_s = 1400 \times 10^3 \text{ A/m}$) infini uniformément aimanté selon OX ou OY a été calculée (figure II-3). La hauteur du prisme a été fixée à $h_y = 2 \text{ nm}$ tandis que sa largeur h_x varie de façon à passer d'un prisme à section carrée vers un plan infini.

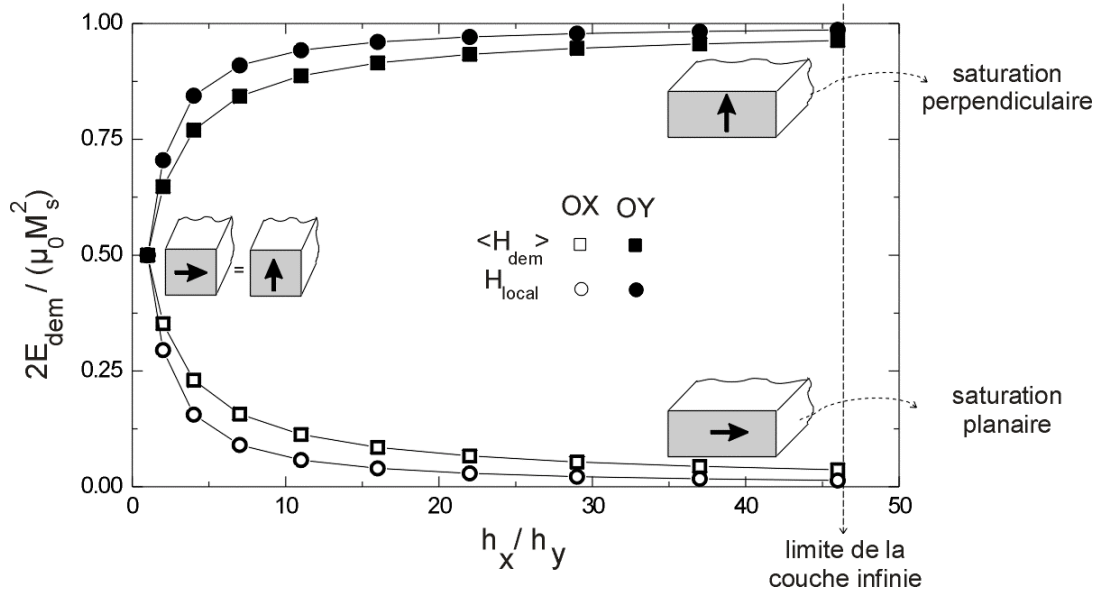


Figure II-3 : Comparaison entre le calcul intégral $\langle H_{dem} \rangle$ (II.5.1.1) et la méthode du calcul du champ local H_{local} (II.5.1.2) pour un prisme infini de Co. L'hauteur du prisme est constant $h_y = 2 \text{ nm}$ et la largeur h_x est modifiée permettant ainsi de passer d'un prisme à section carrée à un plan infini.

Les deux calculs sont équivalents lorsque la section du prisme est carrée ou si le prisme va asymptotiquement vers un plan infini $h_x / h_y \rightarrow \infty$. Par contre, dans un régime intermédiaire l'écart entre les résultats reste significatif. Selon la méthode intégrale le champ magnétostatique représente une moyenne sur l'unité de maillage. Quant à la méthode locale, elle ne tient pas compte du fait que le champ magnétostatique varie à l'intérieur de la cellule

de maillage (large proche des surfaces et moins forte vers le centre). Nous avons préféré opter pour une section carrée $h_x = h_y$ qui s'avère indépendante de la méthode du calcul utilisée. Nous devons aussi remarquer que le temps de calcul consommé par les deux méthodes n'est pas très différent mais c'est la précision qui fait la différence lorsqu'une la section du prisme n'est pas carrée.

II. 5. 2. Calcul tridimensionnel 3D

II. 5. 2. 1. Méthode intégrale 3D

La base de cette méthode réside dans le calcul de l'énergie d'interaction magnétostatique entre deux unités de maillage uniformément aimantées. Ce calcul d'énergie magnétostatique, porté à terme par Schabes et Aharoni [Schabes IEEE 87] pour des petites particules cubiques uniformément aimantées $h_x = h_y = h_z$, nous l'avons utilisé sur sa forme généralisée pour des particules orthorhombiques quelconque $h_x \neq h_y \neq h_z$. Dans chaque unité de volume la variation de l'aimantation est très petite, par conséquent l'aimantation peut être considérée constante. Dans ces conditions, les seules charges magnétiques qui vont interagir sont les charges de surfaces σ_m stockées sur la surface latérale:

$$S = S^{+x} \cup S^{-x} \cup S^{+y} \cup S^{-y} \cup S^{+z} \cup S^{-z}.$$

Il en résulte une énergie magnétostatique d'interaction entre la cellule (ijk) et $(i'j'k')$:

$$E_{dem}(ijk, i'j'k') = \frac{1}{8\pi} \mu_0 \int_{S_{ijk}} dS \int_{S_{i'j'k'}} dS' \frac{\sigma_m(\vec{r}) \sigma_m(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}.$$

Deux types d'intégrales interviennent en fonction de l'orientation relative des surfaces en interactions :

- deux surfaces parallèles

$$S^x = \{ (ih_x, y, z) \mid ih_x, jh_x \leq y \leq (j+1)h_y, kh_z \leq z \leq (k+1)h_z \}$$

$$S'^x = \{ (i'h_x, y', z') \mid i'h_x, j'h_y \leq y' \leq (j'+1)h_y, k'h_z \leq z' \leq (k'+1)h_z \}$$

$$I_{xx}[i, j, k, i', j', k'] = \int_{jh_y}^{(j+1)h_y} dy \int_{j'h_y}^{(j'+1)h_y} dy' \int_{kh_z}^{(k+1)h_z} dz \int_{k'h_z}^{(k'+1)h_z} dz' \frac{1}{\sqrt{((i-i')h_x)^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}}$$

$$\begin{aligned}
I_{xx}[i, j, k, i', j', k'] &= I_{xx}(i - i', j - j', k - k') = I_{xx}(I, J, K) = \\
&= F_{022}[Ih_x, (J+1)h_y, (K+1)h_z] - 2F_{022}[Ih_x, (J+1)h_y, Kh_z] + F_{022}[Ih_x, (J+1)h_y, (K-1)h_z] - \\
&- 2F_{022}[Ih_x, Jh_y, (K+1)h_z] + 4F_{022}[Ih_x, Jh_y, Kh_z] - 2F_{022}[Ih_x, Jh_y, (K-1)h_z] + \\
&+ F_{022}[Ih_x, (J-1)h_y, (K+1)h_z] - 2F_{022}[Ih_x, (J-1)h_y, Kh_z] + F_{022}[Ih_x, (J-1)h_y, (K-1)h_z]
\end{aligned}$$

- deux surfaces perpendiculaires

$$\begin{aligned}
S^x &= \{ (ih_x, y, z) \mid ih_x, jh_x \leq y \leq (j+1)h_y, kh_z \leq z \leq (k+1)h_z \} \\
S^y &= \{ (x', j'h_y, z') \mid i'h_x \leq x' \leq (i'+1)h_x, j'h_y, k'h_z \leq z' \leq (k'+1)h_z \}
\end{aligned}$$

$$I_{xy}[i, j, k, i', j', k'] = \int_{jh_y}^{(j+1)h_y} dy \int_{kh_z}^{(k+1)h_z} dz \int_{i'h_z}^{(i'+1)h_z} dx' \int_{k'h_z}^{(k'+1)h_z} dz' \frac{1}{\sqrt{(ih_x - x')^2 + (y - j'h_y)^2 + (z - z')^2}}$$

$$\begin{aligned}
I_{xy}[i, j, k, i', j', k'] &= I_{xy}(i - i', j - j', k - k') = I_{xy}(I, J, K) = \\
&- F_{112}[Ih_x, (J+1)h_y, (K+1)h_z] + 2F_{112}[Ih_x, (J+1)h_y, Kh_z] - F_{112}[Ih_x, (J+1)h_y, (K-1)h_z] + \\
&+ F_{112}[(I-1)h_x, (J+1)h_y, (K+1)h_z] - 2F_{112}[(I-1)h_x, (J+1)h_y, Kh_z] + F_{112}[(I-1)h_x, (J+1)h_y, (K-1)h_z] + \\
&+ F_{112}[Ih_x, Jh_y, (K+1)h_z] - 2F_{112}[Ih_x, Jh_y, Kh_z] + F_{112}[Ih_x, Jh_y, (K-1)h_z] - \\
&- F_{112}[(I-1)h_x, Jh_y, (K+1)h_z] + 2F_{112}[(I-1)h_x, Jh_y, Kh_z] - F_{112}[(I-1)h_x, Jh_y, (K-1)h_z]
\end{aligned}$$

Les fonctions auxiliaires F_{022} et F_{112} sont définies dans [Hubert 98 page 123] :

$$\begin{aligned}
F_{000}(x, y, z) &= \frac{1}{r} \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} & L_x(x, y, z) &= \frac{1}{2} \ln \left(\frac{r-x}{r+x} \right) \\
F_{ijk}(x, y, z) &= \int \int \dots \int F_{000}(x, y, z) d^i x d^j y d^k z & P_x(x, y, z) &= x \arctan \left(\frac{yz}{xr} \right)
\end{aligned}$$

$$F_{022}(x, y, z) = \frac{1}{2} [y(z^2 - x^2)L_y + z(y^2 - x^2)L_z] - yzP_x + \frac{1}{6} r(3x^2 - r^2)$$

$$F_{112}(x, y, z) = xyzL_z + \frac{1}{2} x \left(z^2 - \frac{1}{3} x^2 \right) L_y + \frac{1}{2} y \left(z^2 - \frac{1}{3} y^2 \right) L_x - \frac{1}{6} z^2 P_z - \frac{1}{2} z(xP_x + yP_y) - \frac{1}{3} xyr$$

Le sommaire des surfaces et des densités des charges des surfaces impliquées se trouve dans le tableau II-2.

Surfaces du cube (ijk)	σ_m
$S^{-x} = \{ (x, y, z) \mid ih_x, jh_x \leq y \leq (j+1)h_y, kh_z \leq z \leq (k+1)h_z \}$	$-M_s m_x$
$S^{+x} = \{ (x, y, z) \mid (i+1)h_x, jh_x \leq y \leq (j+1)h_y, kh_z \leq z \leq (k+1)h_z \}$	$+M_s m_x$
$S^{-y} = \{ (x, y, z) \mid ih_x \leq x \leq (i+1)h_x, jh_y, kh_z \leq z \leq (k+1)h_z \}$	$-M_s m_y$
$S^{+y} = \{ (x, y, z) \mid ih_x \leq x \leq (i+1)h_x, (j+1)h_y, kh_z \leq z \leq (k+1)h_z \}$	$+M_s m_y$
$S^{-z} = \{ (x, y, z) \mid ih_x \leq x \leq (i+1)h_x, jh_x \leq y \leq (j+1)h_y, kh_z \}$	$-M_s m_z$
$S^{+z} = \{ (x, y, z) \mid ih_x \leq x \leq (i+1)h_x, jh_x \leq y \leq (j+1)h_y, (k+1)h_z \}$	$+M_s m_z$

Tableau II-2: Surfaces et densités de charges de surface d'une particule orthorhombique uniformément aimantée.

Le terme diagonal du tenseur $[\mathbf{TG}]$ est :

$$TG_{xx}(i-i', j-j', k-k') = \frac{1}{4\pi(h_x h_y h_z)} \left\{ I_{xx}[i, j, k, i', j', k'] - I_{xx}[i, j, k, i'+1, j', k'] \right. \\ \left. - I_{xx}[i+1, j, k, i', j', k'] - I_{xx}[i+1, j, k, i'+1, j', k'] \right\}$$

et le terme mixte :

$$TG_{xy}(i-i', j-j', k-k') = \frac{1}{4\pi(h_x h_y h_z)} \left\{ I_{xy}(i, j, k, i', j', k') - I_{xy}(i, j, k, i', j'+1, k') \right. \\ \left. - I_{xy}(i+1, j, k, i', j', k') + I_{xy}(i+1, j, k, i', j'+1, k') \right\}.$$

Les autres termes sont obtenus par permutations circulaires.

Des programmes micromagnétiques tels que celui de Schabes [Schabes JMMM 91], de NIST [OOMMF-site, Newell JGR 93] et de Ferré [Ferré CPJ 97] utilisent cette méthode pour l'évaluation des contributions magnétostatiques.

II. 5. 2. 2. Approximation dipolaire 3D

Le point de départ de cette méthode est représenté par l'approximation dipolaire. Selon cette approximation, le champ magnétostatique $\vec{H}_{dem}$ à l'endroit $\vec{r}$ créé par le moment de dipôle $\vec{M}_d$ situé à l'endroit $\vec{r}'$, $|\vec{r}| \gg |\vec{r}'|$ est :

$$\vec{H}_m(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \left\{ \frac{\vec{M}_d(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} - 3 \frac{[\vec{M}_d(\vec{r}') \cdot (\vec{r} - \vec{r}')] (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^5} \right\}.$$

Considérant maintenant une cellule 3D uniformément aimantée $\vec{M}_{i'j'k'}$. Elle va générer au centre de la cellule (ijk) un champ magnétostatique tel que :

$$\vec{H}_{dem} \left[\left(i + \frac{1}{2} \right) h_x, \left(j + \frac{1}{2} \right) h_y, \left(k + \frac{1}{2} \right) h_z \right] = - \int_{i'h_x}^{(i'+1)h_x} dx' \int_{j'h_y}^{(j'+1)h_y} dy' \int_{k'h_z}^{(k'+1)h_z} dz' \frac{1}{4\pi} \left\{ \frac{\vec{M}_{i'j'k'}}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} - 3 \frac{[\vec{M}_{i'j'k'} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')] (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^5} \right\}$$

$$\vec{r} - \vec{r}' = ((i + 0.5)h_x - x' \quad (j + 0.5)h_y - y' \quad (k + 0.5)h_z - z')$$

Lorsque la cellule de maillage est très fine, la valeur du champ magnétique au centre de la cellule est considérée comme la valeur moyenne sur la cellule entière. Le développement de la formule précédente en termes des composantes du tenseur démagnétisant **[TG]** donne pour le terme diagonal :

$$TG_{xx}(i - i', j - j', k - k') = \frac{1}{4\pi} \int_{i'h_x}^{(i'+1)h_x} dx' \int_{j'h_y}^{(j'+1)h_y} dy' \int_{k'h_z}^{(k'+1)h_z} dz' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \left[1 - 3 \left(\frac{x - x'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right)^2 \right]$$

$$\vec{r} - \vec{r}' = ((i + 0.5)h_x - x' \quad (j + 0.5)h_y - y' \quad (k + 0.5)h_z - z')$$

et pour le terme mixte :

$$TG_{xy}(i - i', j - j', k - k') = - \frac{1}{4\pi} \int_{i'h_x}^{(i'+1)h_x} dx' \int_{j'h_y}^{(j'+1)h_y} dy' \int_{k'h_z}^{(k'+1)h_z} dz' \frac{3(x - x')(y - y')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^5}$$

$$\vec{r} - \vec{r}' = ((i + 0.5)h_x - x' \quad (j + 0.5)h_y - y' \quad (k + 0.5)h_z - z')$$

L'évaluation des intégrales de volume conduit à :

$$TG_{xx}(I, J, K) = - \frac{1}{4\pi} \sum_{\alpha=0}^1 \sum_{\beta=0}^1 \sum_{\gamma=0}^1 (-1)^{\alpha+\beta+\gamma} \arctan \left| \frac{\left(K + \gamma - \frac{1}{2} \right) h_z \left(J + \beta - \frac{1}{2} \right) h_y}{r \left(I + \alpha - \frac{1}{2} \right) h_x} \right|$$

$$TG_{xy}(I, J, K) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\alpha=0}^1 \sum_{\beta=0}^1 \sum_{\gamma=0}^1 (-1)^{\alpha+\beta+\gamma} \log \left| \frac{\left(K + \gamma - \frac{1}{2} \right) h_z}{r} \right|$$

$$r = \sqrt{\left[\left(I + \alpha - \frac{1}{2} \right) h_x \right]^2 + \left[\left(J + \beta - \frac{1}{2} \right) h_y \right]^2 + \left[\left(K + \gamma - \frac{1}{2} \right) h_z \right]^2}$$

où $I = i - i'$, $J = j - j'$, $K = k - k'$.

Cette approche est utilisée par Nakatani [Nakatani JAP 89] et Berkov [Berkov JMMM 91]. Une variante moins précise est celle implantée par Boerner [Boerner IEEE 97] qui substitue la cellule uniformément aimantée par un moment de dipôle équivalent situé à son centre.

Comparaison entre les deux méthodes 3D

Pour comparer les deux méthodes du calcul tridimensionnel nous nous sommes servis d'une particule orthorhombique uniformément aimantée. Sa densité d'énergie magnétostatique calculée selon les deux méthodes est rapportée sur la figure II-4 pour deux orientations de l'aimantation. La taille de la particule selon OY et OZ a été fixée à $h_y = h_z = 2\text{ nm}$ alors que selon OX elle a été modifiée afin de passer d'un cube à un prisme à section carré très allongé.

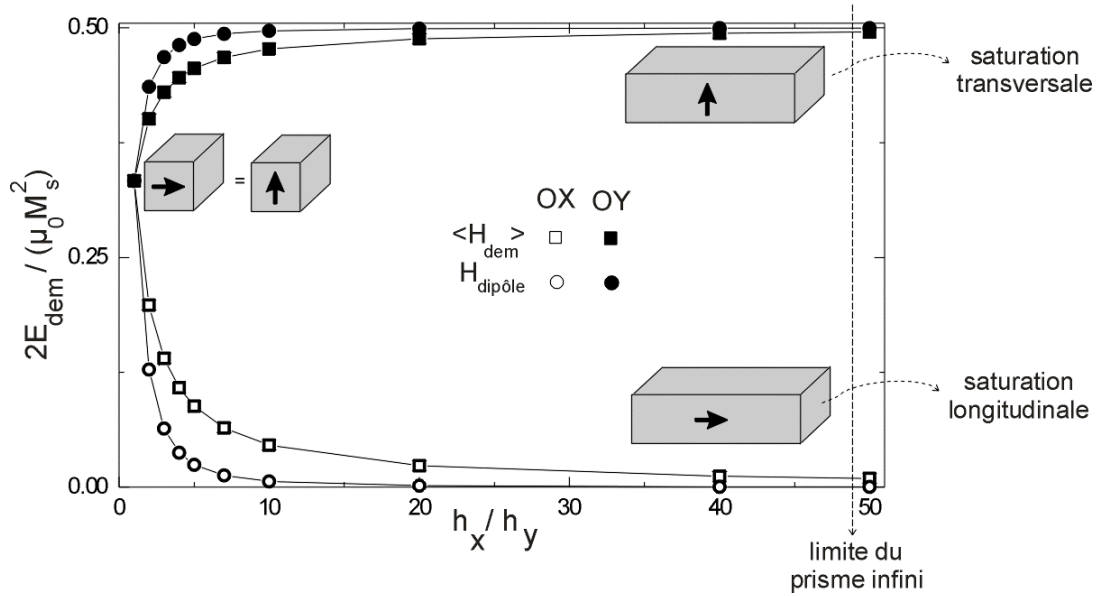


Figure II-4: Variation de l'énergie magnétostatique d'une particule orthorhombique $h_y = h_z = 2\text{ nm}$ uniformément aimantée en fonction de sa longueur h_x selon la méthode intégrale et l'approximation dipolaire.

Lorsque la particule est cubique les deux méthodes fournissent la même énergie magnétostatique. Si la particule devient un prisme très allongé qu'il soit transversal ou longitudinal aimanté, les résultats vont de manière asymptotique vers la limite analytique. Pour de longueurs intermédiaires la variation de l'énergie d'après un calcul intégral est toujours plus lente que d'après le calcul ponctuel. Cette différence provient du fait que le calcul intégral passe par le champ magnétostatique moyen sur le volume de l'unité de maillage tandis que l'approximation dipolaire utilise que la valeur du champ magnétostatique au centre de l'unité. Nos simulations 3D font appel au calcul intégral du champ et de l'énergie magnétostatique.

II. 5. 3. Transformée Fourier rapide (FFT)

La longue portée de l'interaction dipolaire fait que l'évaluation du champ magnétostatique (II-10) et de l'énergie magnétostatique (II-11) demande la sommation sur toutes les cellules du maillage. Le coût en temps de calcul direct de la somme (II-11) comportant $(N_x N_y N_z)^2$ termes pour un système 3D s'avère très élevé même pour un nombre réduit des cellules de maillage. Cependant, toute troncature des sommes dans la relation II-11 aux voisins proches est exclue par le caractère non-local et le rayon large d'action du couplage magnétostatique. Une solution très élégante et extrêmement efficace pour surmonter la difficile tâche d'évaluation des contributions magnétostatiques s'appuie sur l'exploitation de la régularité du maillage. L'idée de base repose sur la propriété que le champ dipolaire représente le produit de convolution du tenseur démagnétisant **[TG]** et de l'aimantation $\vec{M}$:

$$\vec{H}_{dem}(ijk) = -M_s \sum_{i'=1}^{N_x} \sum_{j'=1}^{N_y} \sum_{k'=1}^{N_z} \left[\begin{pmatrix} TG_{xx} & TG_{xy} & TG_{xz} \\ TG_{yx} & TG_{yy} & TG_{yz} \\ TG_{zx} & TG_{zy} & TG_{zz} \end{pmatrix}_{(i-i', j-j', k-k')} \begin{pmatrix} m_x \\ m_y \\ m_z \end{pmatrix}_{i'j'k'} \right]$$

et nous permettent d'utiliser, pour son calcul, un algorithme fondé sur la transformé Fourier rapide (FFT). Les premiers à s'en servir de la transformée Fourier rapide pour le calcul du champ magnétostatique, sont Mansuripur et Giles [Mansuripur IEEE 88, Giles JAP 90] dans le cas d'une configuration magnétique périodique à deux dimensions. L'extension de FFT aux systèmes non-périodique est due à Berkov [Berkov PSS 93] et à Yuan [Yuan IEEE 92] pour de systèmes à deux dimensions. Une vue générale sur l'application de FFT en micromagnétisme est présentée par Hayasi [Hayasi JAP 96].

Nous allons expliciter par la suite la manière selon laquelle nous avons appliqué la technique de la transformée Fourier dans le calcul des termes magnétostatiques. Nous n'insisterons pas sur les méthodes de calcul rapide de la transformée Fourier telles que celle développées par Cooley et reprise par Danielson qui sont fréquemment traitées dans la littérature [Press 92 page 537]. Ces algorithmes rapides font possible la réduction du calcul de produit de convolution de N^2 à $N \log_2 N$ opérations. Les sous-programmes que nous avons utilisés pour FFT appartient à la librairie FFTW [FFTW-site] pour le calcul monoprocesseur et à la librairie Scalapack pour le calcul parallèle en ShMem [IDRIS-site].

II. 5. 3. 1. Théorème du produit de convolution

A une fonction f définie sur l'espace direct $f : [-\infty, +\infty] \rightarrow \mathfrak{R}$ nous pouvons associer la transformée Fourier directe définie sur l'espace inverse $F : [-\infty, +\infty] \rightarrow \mathfrak{R}$. La connexion entre les deux fonctions est donnée par les relations :

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{i2\pi kx} dx$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{-i2\pi kx} dk.$$

Soit deux fonctionnelles réelles $f, g : [-\infty, +\infty] \rightarrow \mathfrak{R}$, leur produit de convolution c'est une fonction $f \otimes g : [-\infty, +\infty] \rightarrow \mathfrak{R}$ définie comme

$$(f \otimes g)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x') g(x - x') dx'.$$

Le théorème du produit de convolution affirme que la transformée Fourier directe du produit de convolution $TF(f \otimes g)$ est le produit des transformées Fourier directes des fonctions individuelle f et g :

$$TF(f \otimes g) = TF(f) TF(g).$$

II. 5. 3. 2. Discrétisation et le produit de convolution

Du point de vue numérique, une fonction continue f définie sur l'intervalle fini $[a, b]$:

$$f : [a, b] \rightarrow \mathfrak{R}$$

est représentée par un ensemble fini de points tel que:

$$f \equiv \{f_j = f(x_j) \mid j = 0, \dots, N-1\}$$

où x_j sont les points d'échantillonnage du domaine de définition, distribués d'habitude régulièrement $x_j = jh_x$. Dans ces conditions, la transformée Fourier directe F de la fonction f est :

$$F \equiv \{F_n = F(k_n) \mid n = 0, \dots, N-1\}$$

où les points d'échantillonnage de l'espace inverse sont $k_n = n \left(\frac{1}{Nh_x} \right)$. Le passage vers l'espace inverse se fait en utilisant la transformée Fourier directe discrète selon la relation:

$$F_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=0}^{N-1} f_j e^{i \frac{2\pi}{N} j n} h_x.$$

Alors que si on revient dans l'espace direct selon la transformée Fourier inverse discrète:

$$\tilde{f}_j = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{N-1} F_n e^{-i \frac{2\pi}{N} j n} \frac{1}{Nh_x}$$

ce n'est pas tout à fait la fonction f que nous retrouvons. Concrètement, la transformée Fourier discrète directe et inverse sont toutes les deux de fonctions périodiques:

$$F_{n+N} = F_n \quad \forall n = 0..N-1$$

$$\tilde{f}_{j+N} = \tilde{f}_j \quad \forall j = 0..N-1$$

malgré le fait que la fonction continue de départ f n'est pas périodique. Cette périodicité est un effet introduit par la discrétisation des fonctions continues et modifie drastiquement le calcul du produit de convolution discret:

$$f \otimes g \equiv \{(f \otimes g)_n \mid n = 0, \dots, N-1\}$$

$$(f \otimes g)(x_i) = \sum_{j=0}^{N-1} f(x_j) g(x_i - x_j) h_x$$

Sur la figure II-5 nous avons illustré le produit de convolution de deux fonctions créneaux continues. Pour le cas non-périodique (figure II-5(a)) le produit de convolution est défini comme:

$$(f \otimes g)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x') g(x - x') dx'$$

alors que si des conditions périodiques sont appliquées sur l'intervalle $[0, B]$ (figure II-5(b)) le produit de convolution est donné par :

$$(f \otimes g)(x) = \int_0^B f(x') g(x - x') dx'.$$

Le deuxième calcul s'avère d'être fort différent de résultat (a) mais on retrouve le résultat exact lorsque la période des fonctions vérifie la condition $B = 2b$ (figure II-5(c)). Cette

procédure qui consiste à dupliquer la taille du domaine de définition afin d'éviter les effets polluants de la discrétisation est connue comme la méthode de *zero padding*.

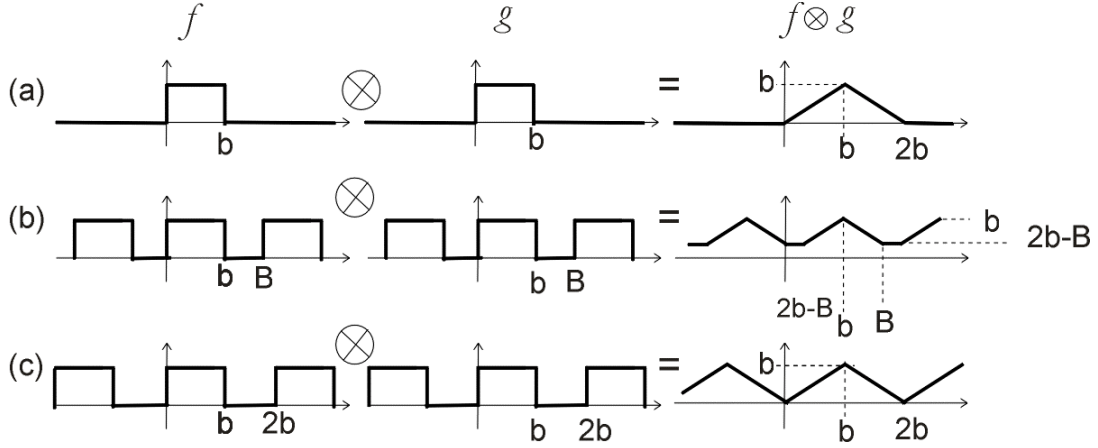


Figure II-5 : Produit de convolution des fonctions créneaux (a) non-périodiques et (b) périodiques. (c) Particularisation du cas (b) lorsque l'intervalle de définition est doublé $B = 2b$.

II. 5. 3. 3. Système non-périodique

L'application de la technique de *zero padding*, nous permet d'éviter les effets dus au fait que les fonctions manipulées ne sont pas de fonctions périodiques et que la transformée Fourier discrète suppose a priori que les fonctions doivent être périodiques. La manière selon laquelle nous avons fait les calculs, sera présentée dans le cas unidimensionnel, sa généralisation aux dimensions supérieures suit la même logique. Le but donc est d'évaluer les valeurs de la fonction $H(ih)$ dans chaque nœud du maillage à partir de l'expression :

$$H(ih) = \sum_{i'=0}^{N-1} TG(ih - i'h)m(i'h).$$

Premièrement, la taille du tableau de stockage de valeurs de l'aimantation doit être doublée de N à $2N$, la partie ajoutée étant remplie avec de zéros:

$$\tilde{m} = \{m(ih) \mid i = 0, \dots, N-1\} \cup \{0 \mid i = N, \dots, 2N-1\}.$$

Le tableau associé au tenseur **[TG]** sera rempli ainsi :

$$T\tilde{G} = \{TG(ih) \mid i = 0, \dots, N\} \cup \{TG(ih - 2Nh) \mid i = N+1, \dots, 2N-1\}$$

Les transformées Fourier discrètes directes $TF(\tilde{m})$, $TF(T\tilde{G})$ sont évaluées par les sous-programmes de FFT, suivi par la multiplication des éléments $TF(\tilde{m})_i TF(T\tilde{G})_i$, $i = 0, \dots, 2N-1$ est leur stockage dans le tableau:

$$TF(\tilde{H}) = \{TF(\tilde{H})_i \mid i = 0, \dots, 2N-1\}.$$

La transformée Fourier inverse discrète appliquée au tableau $TF(\tilde{H})$ conduit au tableau

$$\tilde{H} = TF^{-1}(TF(\tilde{H})) = \{ \tilde{H}_i \mid i = 0, \dots, 2N-1 \}.$$

Les premiers N éléments du tableau $\tilde{H}$ sont les valeurs de la fonction H que nous recherchons.

II. 5. 3. 4. Système périodique

Si le système étudié est périodique selon une direction de l'espace, l'application de FFT se fait sans la modification de taille selon la direction respective. Le tableau de stockage de valeurs de l'aimantation est dans ce cas:

$$\tilde{m} = \{ m(ih) \mid i = 0, \dots, N-1 \}.$$

Cependant les coefficients du tenseur démagnétisant doivent être modifiés afin de tenir compte de la périodicité du système en introduisant le tenseur périodique $[TG_p]$, cet aspect sera traité dans la section prochaine (II.5.4). Le tableau associé au tenseur $[TG_p]$ est rempli ainsi :

$$TG = \{ TG_p(ih) \mid i = 0, \dots, N/2 \} \cup \{ TG_p(ih - Nh) \mid i = N/2 + 1, \dots, N-1 \}.$$

Lorsque le système ferromagnétique comporte simultanément de directions périodiques et non-périodiques, la procédure périodique et non-périodique doivent être appliquées en même temps.

II. 5. 4. Périodicité

Le fait que le système magnétique présente une configuration en domaines périodiques entraîne des modifications importantes dans les évaluations des énergies et des champs non-locales : magnétostatique et d'échange. La région du calcul coïncide avec l'unité de la périodicité. Elle se trouve en interaction magnétostatique avec tout le reste du système qui est infini. En supposant que notre système est périodique selon la direction OX, le calcul du champ démagnétisant passe par l'évaluation des sommes infinies telles que:

$$H(i, j, k) = -M_s \sum_{\lambda=-\infty}^{+\infty} \left[\sum_{i'=0}^{N_x-1} \sum_{j'=0}^{N_y-1} \sum_{k'=0}^{N_z-1} TG(i - (i' + \lambda N_x), j - j', k - k') m(i' + \lambda N_x, j', k') \right]. \quad \text{II-17}$$

En utilisant la périodicité de l'aimantation:

$$m(i'+\lambda N_x, j', k') = m(i', j', k'), \quad \forall \lambda \in \mathbb{Z} \quad \text{II-18}$$

l'expression II-17 devient:

$$H(i, j, k) = -M_s \sum_{i'=0}^{N_x-1} \sum_{j'=0}^{N_y-1} \sum_{k'=0}^{N_z-1} \left[\sum_{\lambda=-\infty}^{+\infty} TG(i - (i' + \lambda N_x), j - j', k - k') \right] m(i', j', k') \quad \text{II-19}$$

Nous introduisons le tenseur démagnétisant périodique **[TG_p]**:

$$TG_p(i - i', j - j', k - k') = \sum_{\lambda=-\infty}^{+\infty} TG(i - (i' + \lambda N_x), j - j', k - k') \quad \text{II-20}$$

qui dans les calculs périodiques remplace le tenseur **[TG]**. Pour évaluer les valeurs des composantes du tenseur périodique **[TG_p]** des sommes infinies doivent être calculées. La seule voie de surmonter cet obstacle consiste d'établir une limite pour la variable $|\lambda| \leq NV$.

La somme (II-20) est arrêtée après qu'on a inclus NV unités de périodicité à gauche et NV unités de périodicité à droite (figure II-6). Les effets induits par la troncature sur l'évaluation de l'énergie magnétostatique sont discutés par la suite pour un système 2D respectivement 3D.

II. 5. 4. 1. Calcul 2D périodique

Afin d'étudier l'influence du nombre de voisins NV pris en compte dans l'évaluation du tenseur démagnétisant périodique **[TG_p]** d'un système 2D, le cas d'une couche mince saturée dans le plan (figure II-6(a)) ou hors du plan (figure II-6(b)) a été choisi. En utilisant un pas de maillage constant $h_x = h_y = 2 \text{ nm}$ la densité d'énergie magnétostatique a été évaluée en fonction du nombre de voisins considérés. Les trois unités de période $N_x \times N_y$ analysées ont montré que l'augmentation du nombre des voisins NV induit de modifications significatives si $NV < 100$ lorsque si $NV \geq 200$ le raffinement est quasiment accompli.

L'influence du pas de maillage utilisé sur le calcul de l'énergie magnétostatique dans une couche de cobalt saturée hors du plan, est rapportée sur la figure II-7. Une unité de période de $40 \text{ nm} \times 20 \text{ nm}$ a été discrétisée avec un pas de maillage de plus en plus petit ($h_x = h_y$). Pour chaque nombre de voisins ($NV = 10, 20, \dots, 200$) considéré dans le tenseur **[TG_p]** l'effet du pas de maillage est pratiquement négligeable. Si $NV = 200$ l'écart de la densité d'énergie magnétostatique évaluée numériquement par rapport à celle obtenue analytiquement descend sous 0.1%. Dans tous les calculs sur les couches minces rapportés en chapitre III le nombre de voisins considérés a été limité à $NV = 200$.

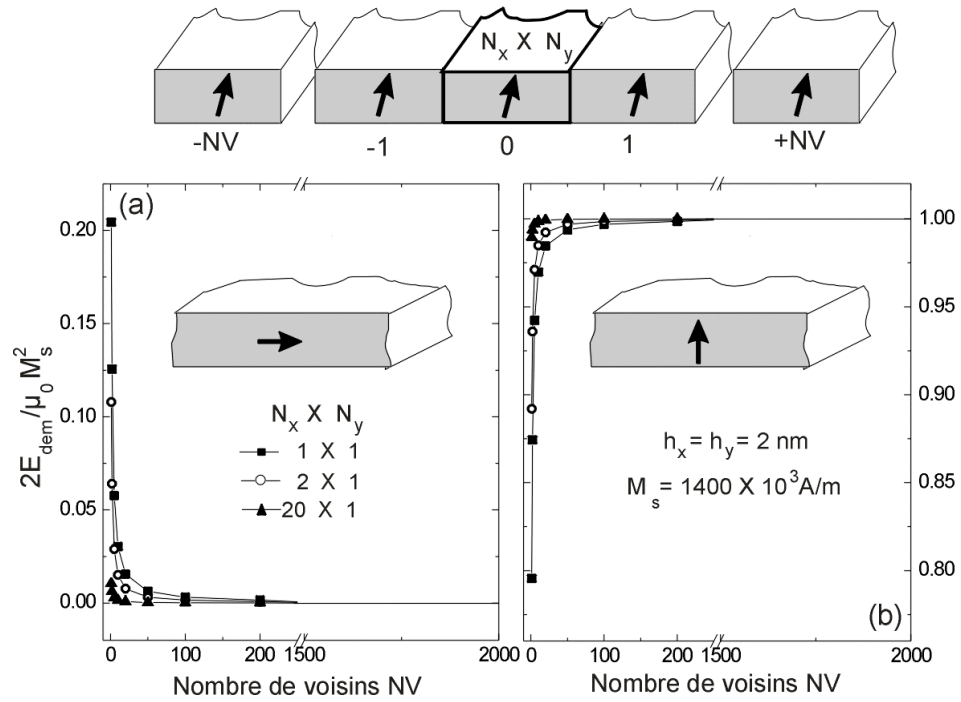


Figure II-6 : Dépendance de la densité d'énergie magnétostatique d'une couche uniformément aimantée dans le plan (a) et perpendiculairement (b) au plan de la couche en fonction du nombre des voisins NV comptés dans le tenseur périodique [TG_p].

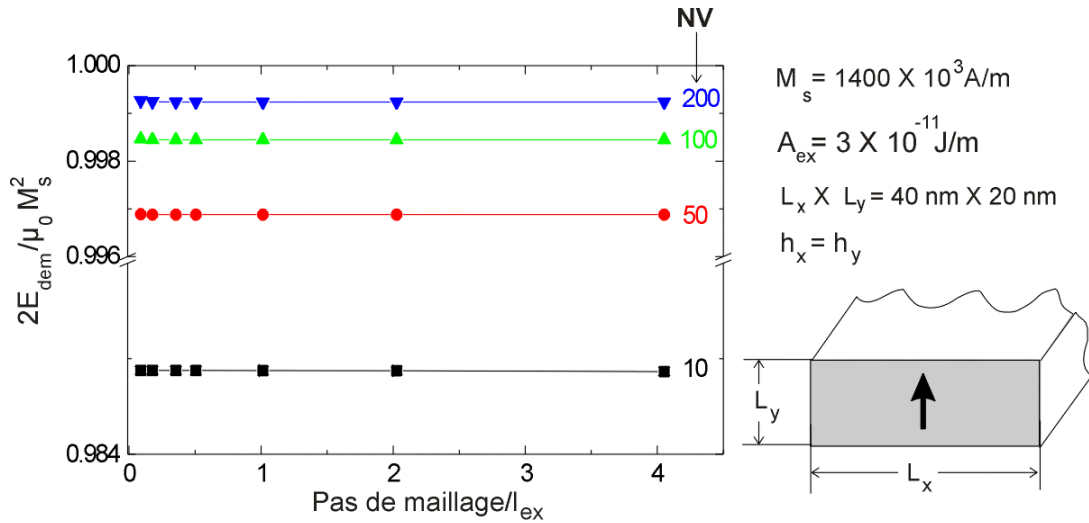


Figure II-7 : Dépendance de l'énergie magnétostatique du pas de maillage et du nombre de voisins considérés pour une couche mince de Co d'épaisseur de 20 nm saturée perpendiculairement. L'unité de période dans le plan a été fixée à 40 nm.

II. 5. 4. 2. Calcul 3D périodique

La densité de l'énergie magnétostatique d'un fil infini selon la direction OX, ayant une section transversale carrée, uniformément aimanté longitudinal ou transversal est évaluée en fonction du tenseur [TG_p]. L'unité de période a été divisée en $10 \times 10 \times 10$ cellules cubiques avec un

pas de maillage de 2.5 nm de côté. Les deux états connus analytiques sont les états saturés parallèlement et perpendiculairement à l'axe du fil. Sur la figure II-8 nous avons représenté l'évolution de la densité d'énergie magnétostatique en fonction de nombre des unités voisines NV . Lorsque la somme (II-20) est coupée après les premiers voisins l'écart entre la valeur numérique et celle analytique se situe autour de 10%. Cette différence décroît rapidement avec l'augmentation du nombre de voisins et après environ 10 voisins les valeurs analytiques sont atteintes. En augmentant davantage le nombre des voisins impliqués une amélioration très faible voire insignifiante est apportée. Comme règle générale, pour chaque système périodique un calcul préalable comme celui présenté ici doit établir la troncature de la somme (II-10) en fonction de la taille de du maillage h_x, h_y, h_z et la taille de l'unité de périodicité $L_x L_y L_z$. Ainsi durant l'étude des systèmes 3D périodiques (chapitre IV), à partir de 20 voisins dans l'évaluation du tenseur $[TG_p]$ aucune amélioration significative n'apparaît.

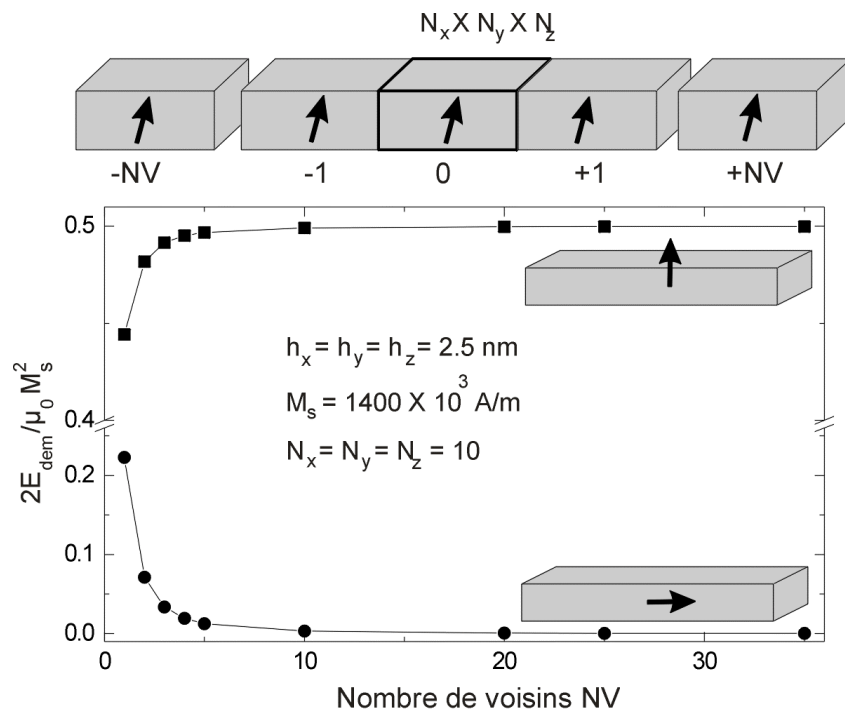


Figure II-8 : Effet du nombre des voisins considérés dans le tenseur $[TG_p]$ sur l'énergie magnétostatique pour un fil de Co infini à section carré.

A titre de conclusion, nous aimerions souligner l'efficacité du calcul lorsque la transformée Fourier est utilisée pour évaluer les contributions magnétostatiques. Dès que les précautions nécessaires ont été prises suivant le caractère périodique ou non-périodique du système étudié, l'atout principal du calcul magnétostatique en passant par FFT est sa rapidité due au fait que:

- les composantes du tenseur **[TG]** où **[TG_p]** sont évaluées une seule fois au début du calcul et restent stockées durant l'exécution de la minimisation;
- les sous-programmes de calcul de FFT sont de plus en plus performantes
 - l'adaptabilité pour chaque plate-forme de travail
 - le fait que les fonctions manipulées l'aimantation $\vec{m}$ et le tenseur démagnétisant **[TG]** sont de fonctions réelles, permet de réduire les tailles de tableaux alloués pour leur stockage.

Après avoir établi la formulation discrète de chaque contribution à l'énergie libre et au champ effectif, la mise en pratique de la minimisation de l'énergie libre est détaillée par la suite.

II. 6. Intégration temporelle de l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert

Afin de trouver l'état d'équilibre statique et de suivre la dynamique du processus de renversement de l'aimantation nous avons choisi de résoudre numériquement l'équation que Landau et Lifshitz l'ont proposée (I-46). Dans le contexte des différences finies, celle-ci devient:

$$\left(1 + \alpha^2\right) \frac{\partial \vec{m}}{\partial t} \Big|_{ijk} = -\gamma \mu_0 \left(\vec{m} \times \vec{H}_{eff} \right) \Big|_{ijk} - \alpha \gamma \mu_0 \left[\vec{m} \times \left(\vec{m} \times \vec{H}_{eff} \right) \right] \Big|_{ijk} . \quad \text{II-21}$$

$$i = 1, \dots, N_x; \quad j = 1, \dots, N_y; \quad k = 1, \dots, N_z$$

Ces équations doivent être intégrées tout en satisfaisant dans chaque nœud du réseau de discrétisation la contrainte de la conservation de la norme de l'aimantation:

$$|\vec{m}(i, j, k)| = 1, \forall (ijk) \quad i = 1, \dots, N_x; \quad j = 1, \dots, N_y; \quad k = 1, \dots, N_z . \quad \text{II-22}$$

Le champ effectif $\vec{H}_{eff}$ réunit dans chaque point du maillage (i, j, k) les contributions dues à l'interaction d'échange, à l'anisotropie magnétocristalline, magnétostatique et celle externe appliqué:

$$\vec{H}_{eff}(i, j, k) = \vec{H}_{ex}(i, j, k) + \vec{H}_{anis}(i, j, k) + \vec{H}_{dem}(i, j, k) + \vec{H}_{app}(i, j, k) . \quad \text{II-23}$$

Les termes non-locaux du champ effectif (d'échange et magnétostatique) sont responsables du couplage qui existe entre les moments magnétiques de deux unités de maillage:

$$\vec{m}(i, j, k) = F \left[\vec{m}(i', j', k'), i' = 1, \dots, N_x, \quad j' = 1, \dots, N_y, \quad k' = 1, \dots, N_z \right] .$$

Ainsi les équations II-21 forment un système d'équations non-linéaires en

$$\{\vec{m}(i, j, k) \mid i = 1, \dots, N_x, j = 1, \dots, N_y, k = 1, \dots, N_z\}. \quad \text{II-24}$$

d'ordre III. Lorsqu'il n'y a pas de forces extérieures pour fournissent constamment de l'énergie, la distribution d'aimantation $\vec{m}(i, j, k, t)$ doit converger vers une configuration d'équilibre $\vec{m}(i, j, k, t \rightarrow \infty)$ qui représente la solution des équations dissipatives (II-21).

II. 6. 1. Méthodes d'intégration numérique

Pour résoudre II-21 numériquement nous utiliserons une méthode d'accroissements finis [Press 92]. En résumé, toute méthode d'accroissements finis consiste en l'obtention à partir d'une équation différentielle $\frac{\partial m}{\partial t}(t) = f(t, m(t))$ et d'une condition initiale $m(t_0) = m_0$ (ou une condition de contour, ou toutes les deux), une succession de paires de valeurs (t_n, m_n) pour m et t qui approchent au maximum la solution continue du problème.

Dans notre cas, en introduisant la variable $T = \frac{\gamma \mu_0 t}{1 + \alpha^2}$ et en tenant compte de la conservation de la norme du vecteur de l'aimantation $|\vec{m}| = 1$, la fonction f prend la forme suivante :

$$\vec{f}(T, \vec{m}(T)) = -(\vec{m} \times \vec{H}_{eff}) - \alpha [(\vec{m} \cdot \vec{H}_{eff}) \vec{m} - \vec{H}_{eff}] \quad \text{II-25}$$

L'aimantation $\vec{m}$ est une fonction de position $\vec{r}$ et du temps T alors que le champ effectif est à son tour une fonction de temps et de l'aimantation:

$$\begin{aligned} \vec{m} &= \vec{m}(\vec{r}, T) \\ \vec{H}_{eff} &= \vec{H}_{eff}(T, \vec{m}(T, \vec{r})). \end{aligned}$$

Selon l'instante auquel la fonction $\vec{f}$ est évaluée plusieurs schémas d'intégration sont possibles.

- Lorsque la fonction $\vec{f}$ intervient dans le calcul de la façon suivante :

$$\frac{\vec{m}^{T+\Delta T} - \vec{m}^T}{\Delta T} = \vec{f}^T \quad \text{II-26}$$

l'avancement en temps est fait de manière explicite (la méthode d'Euler explicite):

$$\vec{m}^{T+\Delta T} = \vec{m}^T + \vec{f}^T \Delta T + O(\Delta T^2). \quad \text{II-27}$$

Il suffit de connaître la distribution de l'aimantation à l'instant T pour trouver la distribution correspondante au moment du temps $T + \Delta T$.

- Par contre si :

$$\frac{\vec{m}^{T+\Delta T} - \vec{m}^T}{\Delta T} = \vec{f}^{T+\Delta T} \quad \text{II-28}$$

un schéma implicite (la méthode d'Euler implicite) est dérivé :

$$\vec{m}^{T+\Delta T} - \vec{f}^{T+\Delta T} \Delta T = \vec{m}^T + O(\Delta T^2). \quad \text{II-29}$$

- Une troisième possibilité combinant le schéma explicite et implicite est exploitée sous le nom de la méthode de *Crank- Nicholson* (semi-implicite) :

$$\frac{\vec{m}^{T+\Delta T} - \vec{m}^T}{\Delta T} = \frac{1}{2} (\vec{f}^{T+\Delta T} + \vec{f}^T) \quad \text{II-30}$$

qui permet l'avance à l'instant $T + \Delta T$ ainsi:

$$\vec{m}^{T+\Delta T} - \frac{\Delta T}{2} \vec{f}^{T+\Delta T} = \vec{m}^T + \frac{\Delta T}{2} \vec{f}^T + O(\Delta T^2). \quad \text{II-31}$$

Les méthodes implicite (II-29) et semi-implicite (II-31) font intervenir dans l'équation à travers le terme $\vec{f}^{T+\Delta T}$ des termes inconnus à l'instant T , c'est qui complique l'avancement de $\vec{m}^T$ à $\vec{m}^{T+\Delta T}$.

Un développement en série Taylor de l'aimantation autour de l'instant T :

$$\vec{m}^{T+\Delta T} \cong \vec{m}^T + \Delta \vec{m} \quad \text{II-32}$$

implique une variation du champ effectif telle que:

$$\vec{H}_{eff}^{T+\Delta T} \cong \vec{H}_{eff}^T + \Delta \vec{H}_{eff}. \quad \text{II-33}$$

La fonction (II-25) à l'instante $T + \Delta T$ devient alors:

$$\begin{aligned} \vec{f}^{T+\Delta T} \cong & \vec{f}^T - \vec{m} \times \Delta \vec{H}_{eff} - \alpha \left[(\vec{m} \cdot \Delta \vec{H}_{eff}) \vec{m} - \Delta \vec{H}_{eff} \right] - \alpha (\vec{m} \cdot \vec{H}_{eff}) \Delta \vec{m} \\ & - \Delta \vec{m} \times \vec{H}_{eff} - \alpha (\Delta \vec{m} \cdot \vec{H}_{eff}) \vec{m} + O(\Delta T^2) \end{aligned} \quad \text{II-34}$$

La contrainte de conservation de la norme de l'aimantation $|\vec{m}^{T+\Delta T}| = |\vec{m}^T| = 1$ exprimée à l'aide du développement de Taylor (II-32) conduit à:

$$\vec{m}^T \cdot \Delta \vec{m} = 0. \quad \text{II-35}$$

La méthode explicite (II-27) satisfait la contrainte (II-35) lorsque le terme d'ordre deux $O(\Delta T^2)$ est négligé alors que pour la méthode implicite (II-29) et semi-implicite (II-31) la norme est conservée si en plus les deux derniers termes du développement de $\vec{f}^{T+\Delta T}$ sont éliminés:

$$f^{T+\Delta T} \equiv f^T - \vec{m} \times \Delta \vec{H}_{eff} - \alpha \left[(\vec{m} \cdot \Delta \vec{H}_{eff}) \vec{m} - \Delta \vec{H}_{eff} \right] - \alpha (\vec{m} \cdot \vec{H}_{eff}) \Delta \vec{m} \quad \text{II-36}$$

Dans la pratique, le système est forcé de satisfaire la contrainte de conservation de la norme par une rénormalisation de l'aimantation après chaque pas d'itération. Le schéma explicite et implicite apparaissent en [Nakatani JAP 89] comme *forward difference method* et respectivement *backward difference method* tandis que une approche de type Crank–Nicholson est utilisé par Albuquerque et al. [Albuquerque JAP 01]. Des approches différentes basées sur l'algorithme d'Adams [Zhu JAP 88] ou *corrector-predictor* [OOMMF] ont été développés. Lorsque la variation du champ effectif en temps est très faible la méthode explicite du vecteur tournant est employée [Kevorkian thèse, Fruchart PRB 98] tandis qu'un algorithme fondé sur la théorie des matrices Toeplitz est préféré par Labbé et al. [Labbé JMMM 99]. De méthode explicites plus élaborées telles que la méthode Runge-Kutta d'ordre II et IV sont souvent utilisées [Ferré thèse, Lopez IEEE 99].

L'implantation numérique de la méthode d'Euler explicite est la plus simple, mais malheureusement étant une méthode de premier ordre en temps sa stabilité est fortement liée au choix du pas d'intégration. Lorsque de conditions adéquates assurent sa stabilité, l'avantage évident de cette méthode, est son efficacité en temps d'exécution car une seule évaluation du champ effectif par itération est nécessaire. Pour la plus part de nos simulations, la méthode semi-implicite (méthode d'ordre 2 en temps), développée dans le paragraphe qui suit, a été préférée étant donné sa grande stabilité numérique.

II. 6. 2. Méthode de Crank - Nicholson

Compte tenu de la relation (II-36), l'équation (II-31) devient:

$$\left[\frac{1}{\Delta T} + \frac{1}{2} \alpha (\vec{m}^T \cdot \vec{H}_{eff}^T) \right] \Delta \vec{m} + \frac{1}{2} \left\{ \vec{m}^T \times \Delta \vec{H}_{eff} + \alpha \left[(\vec{m}^T \cdot \Delta \vec{H}_{eff}) \vec{m}^T - \Delta \vec{H}_{eff} \right] \right\} = - \left\{ \vec{m} \times \vec{H}_{eff} + \alpha \left[(\vec{m} \cdot \vec{H}_{eff}) \vec{m} - \vec{H}_{eff} \right] \right\}^T \quad \text{II-37}$$

Lorsque le système est découpé en $N = N_x N_y N_z$ unité de discrétisation, de manière générale, le champ effectif $\vec{H}_{eff,n}$ à la position $n = (ijk)$ $i = 1, \dots, N_x$; $j = 1, \dots, N_y$; $k = 1, \dots, N_z$ s'exprime sous une forme matricielle telle que:

$$\vec{H}_{eff,n} = \sum_{q=1}^N [A]_{n,q} \vec{m}_q = \sum_{q=1}^N \begin{pmatrix} A_{xx} & A_{xy} & A_{xz} \\ A_{yx} & A_{yy} & A_{yz} \\ A_{zx} & A_{zy} & A_{zz} \end{pmatrix}_{n,q} \vec{m}_q \quad \text{II-38}$$

Le champ effectif $\vec{H}_{eff,n}$ dans la cellule $n = (ijk)$ est relié avec ses sources : l'aimantation $\vec{m}_q$ de la cellule $q = (i'j'k')$, à travers la matrice de couplage $[A]_{n,q}$ qui cumule toutes les contributions: magnétostatique, d'échange, de l'anisotropie magnétocristalline et Zeeman. L'expression de la matrice du couplage $[A]_{n,q}$, pour un système 3D uniaxe selon OZ s'initialise ainsi:

- pour $q = n$ (le terme *self*)

$$[A]_{n,n} = -M_s [TG]_{0,0,0} + \frac{2A_{ex}}{\mu_0 M_s} \left(-\frac{2}{h_x^2} - \frac{2}{h_y^2} - \frac{2}{h_z^2} \right) [E] + \frac{2K_u}{\mu_0 M_s} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{II-39}$$

où $[E]$ représente la matrice identité d'ordre 3

- pour $q \neq n$ mais q est un voisin proche selon la direction β : $q = vp\beta$

$$[A]_{n,vp\beta} = -M_s [TG]_{(n,q)} + \frac{2A_{ex}}{\mu_0 M_s} \left(\frac{1}{h_\beta^2} \right) [E]. \quad \text{II-40}$$

- pour $q \neq n$, $q \neq vp\beta$

$$[A]_{n,vp\beta} = -M_s [TG]_{(n,q)} \quad \text{II-41}$$

Une variation de l'aimantation $\Delta \vec{m}_q$ génère une variation du champ effectif $\Delta \vec{H}_{eff,n}$:

$\Delta \vec{H}_{eff,n} = \sum_{q=1}^N [A]_{n,q} \Delta \vec{m}_q$. Alors la relation (II-37) se réduit à:

$$\sum_{q=1}^N \left\{ \delta_{nq} \left[\frac{1}{\Delta T} + \frac{1}{2} \alpha (\vec{m}_n \cdot \vec{H}_{eff,n}) \right] [E] + \frac{1}{2} [TM]_n [A]_{n,q} \right\} \Delta \vec{m}_q = -[TM]_n \cdot \vec{H}_{eff,n} \quad \text{II-42}$$

$n = 1, \dots, N$

où δ_{nq} est le symbole de Kronecker: $\delta_{nq} = \begin{cases} 1, & n = q \\ 0, & n \neq q \end{cases}$. La notation $[TM]$ désigne la matrice

dérivée à partir du terme $\vec{m} \times \vec{H}_{eff} + \alpha [(\vec{m} \cdot \vec{H}_{eff}) \vec{m} - \vec{H}_{eff}]$:

$$[TM]_n = \begin{pmatrix} \alpha(m_x^2 - 1) & -m_z + \alpha m_x m_y & m_y + \alpha m_x m_z \\ m_z + \alpha m_y m_x & \alpha(m_y^2 - 1) & -m_x + \alpha m_y m_z \\ -m_y + \alpha m_z m_x & m_x + \alpha m_z m_y & \alpha(m_z^2 - 1) \end{pmatrix}_n. \quad \text{II-43}$$

Dans le système d'équations (II-42), la matrice $[A]_{n,q}$ est différente de zéro pour chaque pair de cellules (n,q) . Pour résoudre (II-42), il faut inverser une matrice dense de grandes dimensions (N unités de maillage implique une matrice carrée d'ordre $3N \times 3N$). Un compromis intéressant à faire pour dépasser cette difficulté consiste à garder pour chaque n seulement le couplage avec ses voisins proches:

$$\begin{aligned} & \left\{ \left[\frac{1}{\Delta T} + \frac{1}{2} \alpha (\vec{m}_n \cdot \vec{H}_{eff,n}) \right] [E] + \frac{1}{2} [TM]_n [A]_{n,n} \right\} \Delta \vec{m}_n + \\ & + \sum_{q=vp} \left\{ \frac{1}{2} [TM]_n [A]_{n,q} \right\} \Delta \vec{m}_q = -[TM]_n \cdot \vec{H}_{eff,n} \quad \text{II-44} \\ & n = 1, \dots, N \end{aligned}$$

L'approximation que nous venons de faire s'appuie sur la décroissance du champ magnétostatique en $\frac{1}{r^3}$ avec la distance et sur le fait que entre deux moments successifs en temps la variation de l'aimantation $\Delta \vec{m}$ reste relativement faible.

A ce stade le système II-44 ayant les inconnues $\{\Delta \vec{m}_n \mid i = 1, \dots, N\}$ peut être résolu soit par inversion de matrice, soit par un processus itératif avec une fonction d'essai de départ. A cause de la taille du système réel nous avons préféré de le résoudre en utilisant une méthode itérative. La solution de départ $\{\Delta \vec{m}_n^{(0)} = 0 \mid n = 1, \dots, N\}$ est récursivement améliorée selon la relation:

$$\begin{aligned} & \left\{ \left[\frac{1}{\Delta T} + \frac{1}{2} \alpha (\vec{m}_n \cdot \vec{H}_{eff,n}) \right] [E] + \frac{1}{2} [TM]_n [A]_{n,n} \right\} \Delta \vec{m}_n^{(i+1)} = -[TM]_n \cdot \vec{H}_{eff,n} \\ & - \sum_{q=vp} \left\{ \frac{1}{2} [TM]_n [A]_{n,q} \right\} \Delta \vec{m}_q^{(i)} \quad \text{II-45} \\ & n = 1, \dots, N \end{aligned}$$

jusqu'à la condition suivante est satisfaite:

$$\max \left\{ \left| \Delta \vec{m}_n^{(i+1)} - \Delta \vec{m}_n^{(i)} \right| \mid n = 1, \dots, N \right\} < \varepsilon \quad \text{II-46}$$

Pour chaque nœud du réseau n , l'aimantation à l'itération $(i+1)$: $\{\Delta\vec{m}_n^{(i+1)} = 0 | n=1, \dots, N\}$ est trouvée à partir de l'aimantation $\{\Delta\vec{m}_n^{(i)} = 0 | n=1, \dots, N\}$, en utilisant la méthode Gauss-Jordan [Press 92, page 36]. La valeur de ε doit décroître au-dessous de 10^{-6} afin d'atteindre une précision acceptable. En imposant une tolérance ε plus serrée d'ordre de 10^{-10} la précision est améliorée mais le prix à payer se traduit par une augmentation considérable du nombre d'itérations nécessaires pour passer de T à $T + \Delta T$. Lorsque n est l'indice d'une unité de maillage (ijk) située sur la surface libre, la matrice $[A]_{n,q}$ qui le lie à ses voisins q et le vecteurs $\Delta\vec{m}_q$ doivent tenir compte des conditions de stationnarité de l'aimantation aux interfaces: $\left. \frac{\partial(\Delta\vec{m})}{\partial n} \right|_q = 0$ ou des conditions de périodicité : $\Delta\vec{m}_q = \Delta\vec{m}_{q+Np}$.

Les méthodes implicite et semi-implicite sont de point de vue numérique de méthodes inconditionnellement stables [Press 92, page 658]. Cependant, l'approximation que nous avons fait pour obtenir le système II-44 altère la stabilité inconditionnelle de notre schéma d'intégration en résultant ainsi une limite supérieure pour le pas de temps (section II.6.4).

II. 6. 3. Condition d'arrêt

L'état d'équilibre d'un système ferromagnétique est atteint lorsque la condition du couple (I-38) est vérifiée. Numériquement, l'annulation du couple est satisfaite lorsque la plus grande valeur du torque descend au-dessous d'une certaine tolérance ε :

$$\max_{i=1, \dots, N} \frac{|\vec{m} \times \vec{H}_{eff}|}{M_s} \leq \varepsilon . \quad \text{II-47}$$

Dans la littérature la valeur de la tolérance varie de $\varepsilon = 10^{-3}$ [Schrefl JAP 99], $\varepsilon = 10^{-4}$ [Berkov PSS 93] à 10^{-6} [Ferre CPC 97]. Durant notre travail une valeur critique de $\varepsilon \leq 10^{-6}$ a été choisie. Il y a certaines variantes de la condition du couple qui sont aussi utilisées comme condition d'arrêt. Il s'agit du monitoring de l'angle entre l'aimantation $\vec{m}$ et le champ effectif $\vec{H}_{eff}$, dès que celui-ci descend au-dessous de 10^{-5} rad l'état d'équilibre est atteint. Une variante moins fréquente, consiste à suivre la variation de la composante du champ effectif perpendiculaire à l'aimantation. Si le champ effectif perpendiculaire atteint une fraction du

champ d'anisotropie magnétocristalline caractéristique $H_K = \frac{2K_u}{\mu_0 M_s}$, le système se trouve dans état d'équilibre [Rave IEEE 00].

II. 6. 4. Stabilité du schéma d'intégration temporelle

Le choix du pas du temps Δt joue un rôle important sur la stabilité du schéma d'intégration. Comme la plupart de nos travaux sont focalisés sur les systèmes en cobalt nous avons considéré le cas simple d'une petite particule magnétique cubique $(12.5\text{nm})^3$ de Co. Les paramètres de matériau utilisés dans les simulations ont été: $K_u = 0\text{ J/m}^3$, $M_s = 1400 \times 10^3\text{ A/m}$, $A_{ex} = 1.4 \times 10^{-11}\text{ J/m}$ et le pas de maillage cubique de 2.5 nm . Le processus de renversement de l'aimantation de cette particule est simulé par la méthode explicite d'Euler et celle semi-implicite de Crank - Nicholson. Au départ la particule se trouve dans un état saturé 1° incliné par rapport à l'axe $+OZ$ et puis un champ externe inverse de $\vec{H}_{app} = (0, 0, -2000\text{ Oe})$ est appliqué.

Méthode d'Euler explicite

L'évolution en temps de la valeur moyenne de l'aimantation selon la direction du champ appliqué $\langle m_z \rangle$ d'après le schéma Euler explicite est rapportée sur la figure II-9(a) pour un coefficient d'amortissement $\alpha = 1$ et différentes valeurs du pas du temps Δt . Lorsque le pas de temps Δt est plus petit que 0.3 ps l'état final trouvé $\langle m_z \rangle = -1$ est indépendant de Δt car le retournement de l'aimantation est complet. Au-dessus d'un pas de temps de 0.4 ps la méthode Euler explicite est instable, ce qui est mis en évidence par un changement de $\langle m_z \rangle$ finale. En plus, des oscillations des composantes transversales apparaissent (fig. II-9(b)) qui sont relativement faibles mais reflètent l'impossibilité de satisfaire la condition d'arête (II-47).

Lorsque le champ interne est dominé par l'échange les études rigoureuses sur la *stabilité numérique du schéma d'intégration explicite* [Toussaint 96, Kevorkian thèse] ont établi un critère de stabilité qui relie le pas de temps à la discrétisation dans l'espace et au coefficient d'amortissement:

$$\Delta t \leq \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\gamma(\mu_0 M_s)} \frac{1}{\left(\frac{l_{ex}}{h_x}\right)^2 + \left(\frac{l_{ex}}{h_y}\right)^2 + \left(\frac{l_{ex}}{h_z}\right)^2} . \quad \text{II-48}$$

En appliquant ce critère pour les paramètres de nos simulations, on obtient que le pas de temps doit être inférieur à 0.3 ps alors que nos études indiquent une limite empirique près de 0.3 – 0.4 ps (figure II-9(b)) .

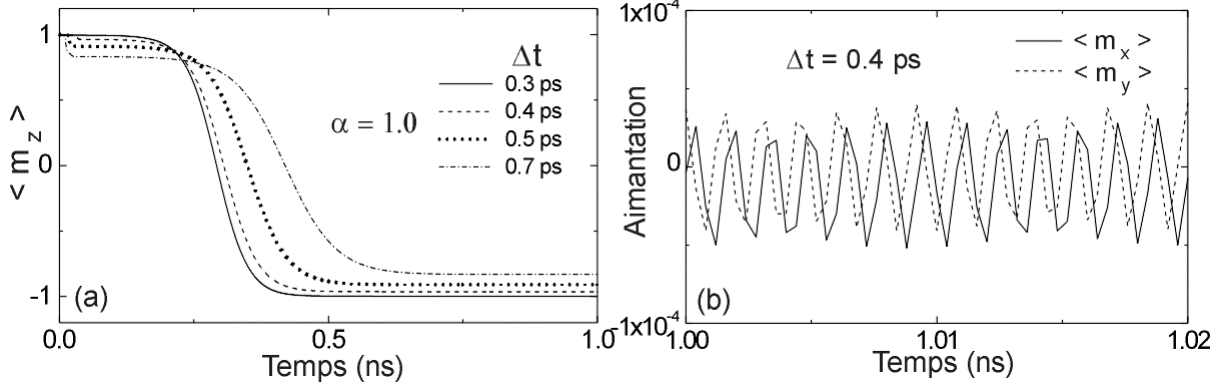


Figure II-9 : Evolution de l'aimantation avec le temps d'après un schéma d'Euler explicite.

Méthode de Crank - Nicholson

Nous avons repris le même calcul en utilisant le schéma de Crank – Nicholson qui a conduit aux résultats rapportés sur la figure II-10(a). Cette fois, le schéma d'intégration est stable largement au-dessus de $\Delta t = 1$ ps . Le pas de temps peut augmenter jusqu'à $\Delta t = 20$ ps sans produire des instabilités. Désormais lorsque de pas de temps trop larges sont considérés ($\Delta t = 30$ ps), les signes évidents de l'instabilité sont remarqués dans les oscillations de l'aimantation transverse au champ appliqué (figure II-10(b)). La durée de temps t_0 éculée jusqu'à $\langle m_z \rangle = 0$ est dépendante du pas de temps utilisé (figure II-10(c)) tandis que l'état stable final n'est pas affecté par la discrétisation temporelle. Les états transitoires sont légèrement décalés par rapport au pas de temps utilisé.

Selon la théorie des équations aux dérivées partielles, les méthodes implicite et semi-implicite sont inconditionnellement stables. La valeur du pas de temps, n'est pas bornée mais pour l'équation de LLG, le phénomène physique lui-même impose de limites. Il s'agit d'utiliser de pas de temps plus petit que les temps caractéristiques afin d'obtenir une précision du calcul suffisante. Parmi le temps caractéristiques on peut compter la période d'une précession complète de l'aimantation autour du champ effectif (section I.4) Par exemple dans

un champ homogène de $H = 10 \text{ Oe}$ la période du mouvement de précession est de 35 ns alors que si le champ augmente à $H = 1000 \text{ Oe}$ la période décroît à 35 ps .

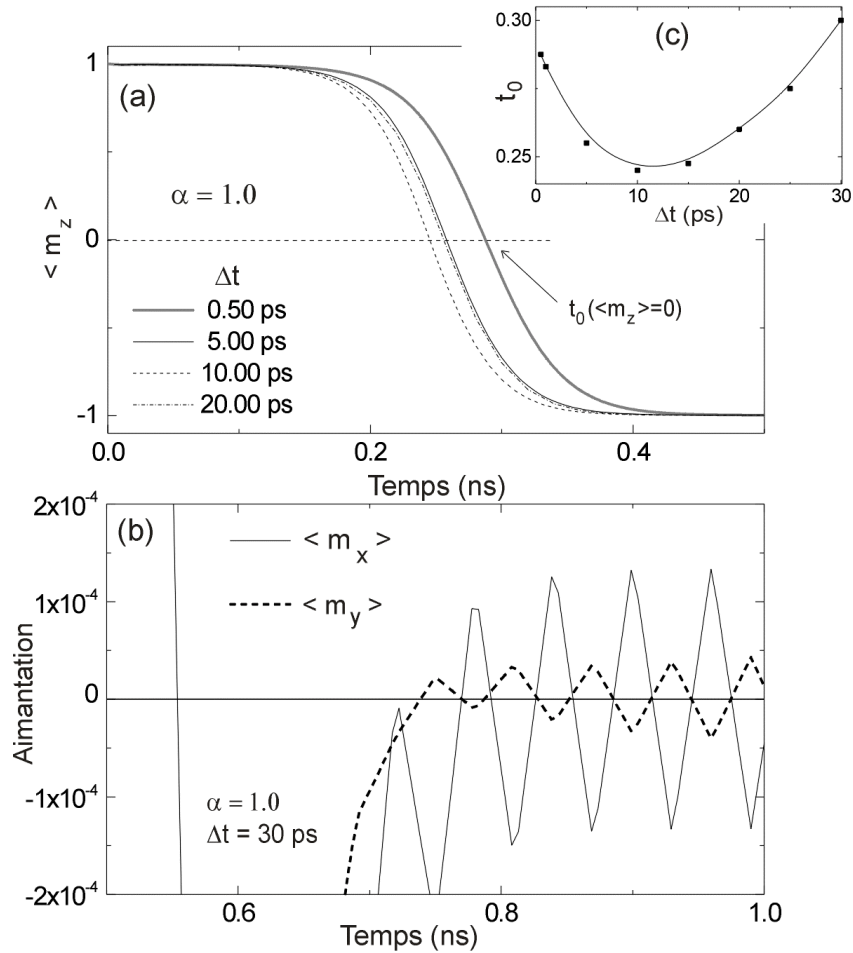


Figure II-10: Evolution de l'aimantation avec le temps d'après le schéma de Crank- Nicholson.

A titre comparatif, lorsque le pas de temps est très petit ($\Delta t \leq 0.1 \text{ ps}$) les deux méthodes d'intégration temporelle convergent vers le même état final en passant pratiquement par les mêmes états transitoires. Les limites de stabilité que nous avons présentées jusqu'à maintenant sont valables pour $\alpha = 1.0$.

II. 6. 5. Influence du coefficient d'amortissement α

Un autre paramètre de la simulation impliqué indirectement dans le schéma d'intégration est le coefficient d'amortissement α . Sur la figure II-11 l'évolution de l'aimantation moyenne selon la direction du champ appliqué en fonction du temps pour différentes valeurs du coefficient d'amortissement est rapportée. Le schéma Crank - Nicholson a été employé avec un pas de temps fixé à $\Delta t = 1 \text{ ps}$. Le coefficient α qui décrit les pertes

d'énergie du système modifie significativement le temps de renversement t_0 . Le plus rapide renversement se produit lorsque $\alpha = 1$ (il s'agit du régime d'amortissement critique) comme Ryoichi Kikuchi a prédit [Kikuchi JAP 56].

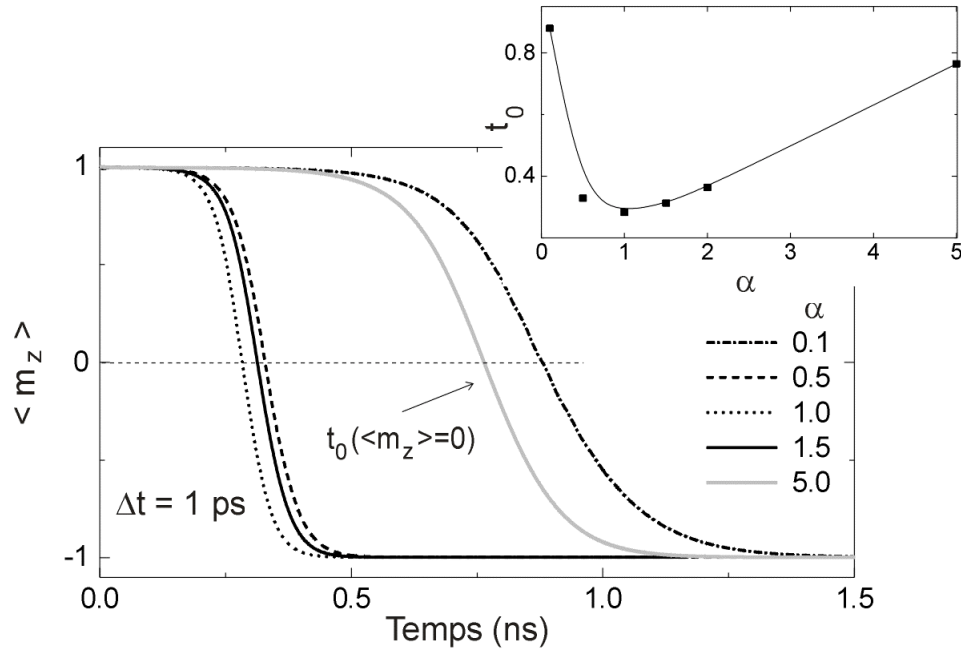


Figure II-11: (a) Evolution temporelle de l'aimantation si le coefficient d'amortissement est modifié et le pas de temps est constant. (b) Dépendance du temps t_0 du coefficient d'amortissement.

Une vue générale de la précession du vecteur de l'aimantation moyenne sur l'action du champ inverse est offerte pour l'amortissement sous-critique $\alpha = 0.1$ (figure II-12 (a)) et critique $\alpha = 1$ (figure II-12 (b)).

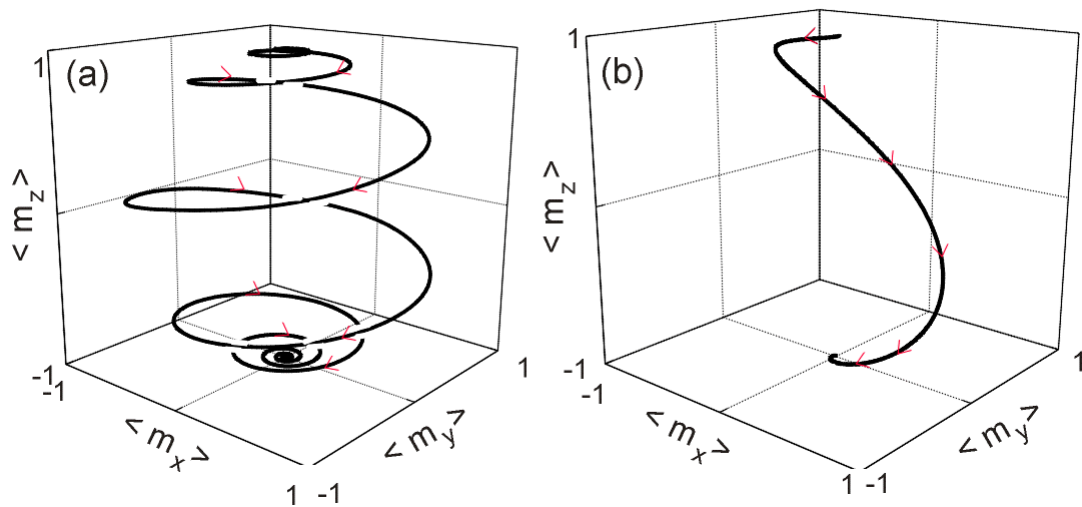


Figure II-12: Trajectoire du vecteur de l'aimantation sur la sphère unité correspondantes à l'amortissement sous-critique $\alpha = 0.1$ (a) et critique $\alpha = 1$ (b).

Lorsque nous sommes intéressés que par les états d'équilibre statiques et non par les états intermédiaires (transitoires) le choix de l'amortissement n'est pas essentiel il faut juste qu'ensemble avec le pas du temps, la stabilité numérique du calcul soit assurée. Pour le même état de départ, différentes valeurs du pas de temps et du coefficient d'amortissement (figure II-10, II-11) le même état d'équilibre est trouvé. D'habitude pour de raison de temps de calcul l'amortissement critique est appliqué pour le calcul quasi-statique.

Au contraire, lorsque les détails de la dynamique de l'aimantation nous intéressent la valeur du α est décisive car c'est elle qui contrôle la dynamique. De plus, les résultats du problème standard 4 [OOMMF-site, Annexe A] montrent clairement que pour les simulations dynamiques ce n'est pas que le coefficient α qui compte mais c'est tout l'algorithme numérique (l'évaluation des énergies et des champs, les schémas d'intégration temporelle) qui contrôle la réponse du système ferromagnétique. Dans le cas de calculs dynamiques un critère d'autocohérence a été conçu afin de suivre de très proche les plus fines modifications de la distribution de l'aimantation [Albuquerque JAP 01].

II. 7. Erreurs dues à la discrétisation

La première source d'erreurs qui intervient dans les calculs micromagnétiques se trouve dans l'hypothèse fondamentale du micromagnétisme: l'approximation continue transforme un système discret (e.g. l'ensemble des moments magnétiques atomiques) dans un système continu (e.g. la distribution continue de l'aimantation). Puis pour résoudre numériquement les problèmes micromagnétiques nous sommes forcés à discrétiser ce système continu [Lewis PB 97] (figure II-13). Le fait de diviser le système *continu* dans d'éléments et de considérer que l'aimantation est constante à l'intérieur de chacun d'éléments, introduit des erreurs d'estimation de l'énergie libre et par conséquent du champ effectif.

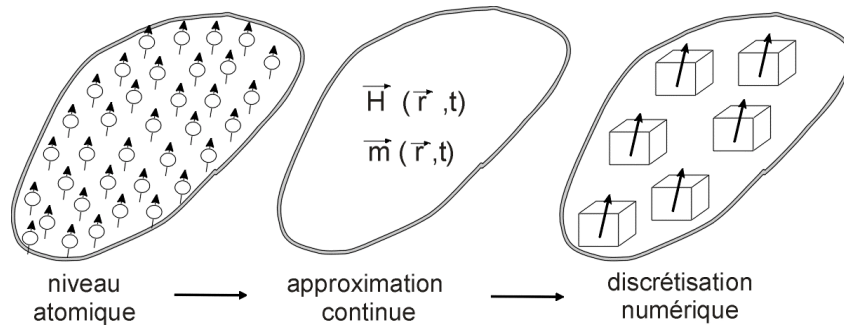


Figure II-13: Etapes de la modélisation du système ferromagnétique.

Nous allons maintenant nous intéresser aux modifications que la discrétisation apporte aux contributions de l'énergie. Pour cela le cas de deux éléments de volume cubiques adjacents uniformément aimantés, a été choisi (figure II-14) qui ont une taille latérale de 2.5nm ($L = 2.5\text{nm}$). Les énergies calculées selon les relations discrètes présentées dans les sections précédentes sont rapportées aux énergies obtenues si une variation continue de l'aimantation entre les centres des cubes est supposée. Pour les deux configurations analysées: la variation de type Bloch et de type Néel, la déviation angulaire θ par rapport à l'axe d'anisotropie (K_u) suivit une loi telle que :

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & , \quad 0 < x < L/2 \\ \frac{\pi}{2} - 2 \arctan \left(\exp \left(\frac{x}{\Delta} - \frac{L}{2\Delta} \right) \right) & , \quad L/2 < x < 3L/2 \\ \theta_2 & , \quad 3L/2 < x < 2L \end{cases} \quad \text{II-49}$$

où le paramètre Δ est trouvé à partir de la condition de continuité de la fonction $\theta(x)$ pour

$$x = 3L/2 : \frac{\Delta}{L} = \left[\ln \left(\tan \left(\frac{\theta_2}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \right) \right]^{-1}.$$

- Une importante source d'erreurs vient du calcul de **l'énergie d'échange**. L'approche discontinue que nous utilisons conduit à une sous-estimation d'énergie d'échange qui devient de plus en plus significative lorsque l'écart angulaire des moments adjacents augmente.
- Les erreurs reliées à l'évaluation de **l'énergie d'anisotropie magnétocristalline** sont moins importantes que celles associées à l'énergie d'échange. Dans ce cas, pour des petits angles d'écartement entre les moments adjacents, l'énergie calculée avec la discrétisation est plus petite que celle correspondant à une variation continue.
- Les contributions de l'énergie de l'échange et de l'énergie d'anisotropie magnétocristalline ont été indépendantes de la variation continue de l'aimantation soit de type Bloch soit de Type Néel. Au contraire, **l'énergie magnétostatique** varie différemment. Une variation continue de type Bloch implique la sous-estimation de l'énergie magnétostatique tandis que pour une variation de type Néel l'énergie magnétostatique est surestimée.

En générale, nous pouvons conclure que la valeur de l'erreur commise dans l'évaluation de l'énergie et, en conséquence, des configurations magnétiques trouvées, reste

petite si les variations de l'orientation des vecteurs aimantation des éléments voisins ne sont pas très grandes (voir au-dessous de 30° de déviation).

Une autre source d'erreur du calcul est celle associée à l'existence d'une surface libre. En fonction du nombre des unités de maillage que nous prenons lors de la discrétisation, la surface libre réelle est plus ou moins bien retrouvée dans le calcul. La reconstruction d'un petit objet magnétique qui a une géométrie circulaire avec des unités de maillage orthorhombiques fait intervenir des erreurs supplémentaires qui peuvent être vues comme une espèce de rugosité numérique aux bords. Ce genre d'erreurs est indissociable de l'approche que nous avons développée, et ne peut pas être éliminé même si le pas de maillage est extrêmement fin. Les effets de maillage fini peuvent être diminués et contrôlés mais pas supprimés.

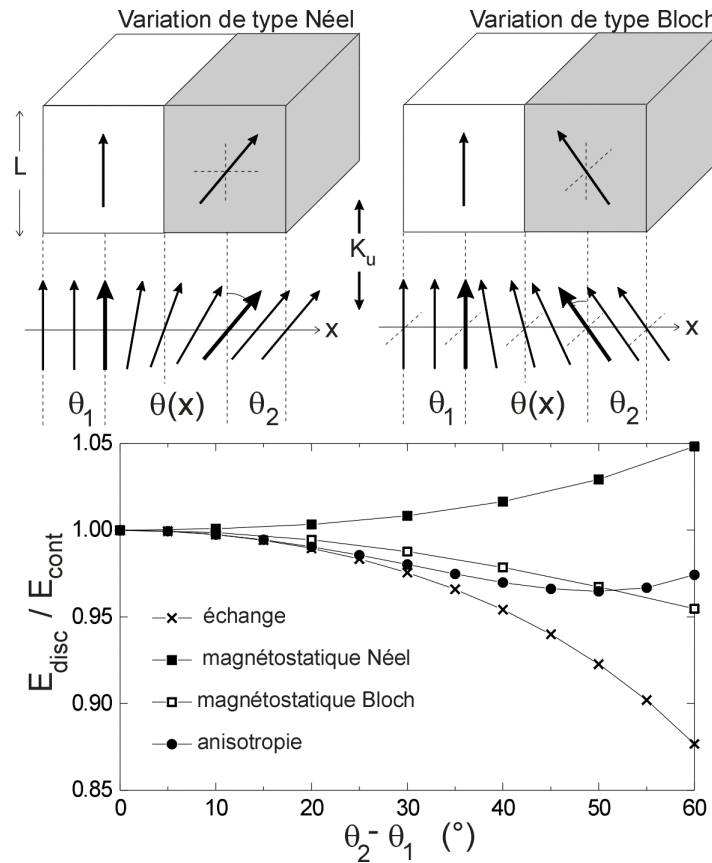


Figure II-14 : Rapport entre les énergies calculées avec la discrétisation et le calcul des énergies supposant une variation continue de l'aimantation. Les paramètres de simulation ont été : $M_s = 1400 \times 10^3 \text{ A/m}$, $A_{ex} = 1.4 \times 10^{-11} \text{ J/m}$ et $K_u = 500 \times 10^3 \text{ J/m}^3$.

Pour éviter des erreurs trop importantes et pour rendre visible les détails fins de la distribution de l'aimantation, le choix du pas de maillage s'avère crucial. Le nombre d'éléments de la discrétisation sera choisi par la suite, en fonction des paramètres microscopiques du matériau. Nous avons toujours considéré une taille du maillage plus petite

par rapport aux longueurs caractéristiques des variations de l'aimantation dans le système (voir section I.3. (I-40, I-41)), tout en restant grande par rapport aux distances interatomiques. Les effets du pas de maillage sur la structure d'un état vortex dans un plot circulaire de $Co(0001)$ sont présentés sur la figure II-15. Les paramètres de matériau utilisés sont : l'aimantation à saturation $M_s = 1400.0 \times 10^3 \text{ A/m}$, la constante d'échange $A_{ex} = 1.4 \times 10^{-11} \text{ J/m}$, la constante d'anisotropie magnétocristalline $K_u = 500.0 \times 10^3 \text{ J/m}^3$ qui donnent une longueur d'échange de $l_{ex} = 3.37 \text{ nm}$ et un paramètre de la paroi de Bloch de $\Delta_0 = 5.3 \text{ nm}$. La limite du pas de maillage, doit être rapportée à la longueur d'échange l_{ex} car c'est elle la plus petite parmi les longueurs caractéristiques du système simulé : $l_{ex} < \Delta_0$. Nous avons représenté les profils radiaux de l'aimantation hors du plan (OZ) en fonction du pas de maillage h (cubique $h_x = h_y = h_z = h$).

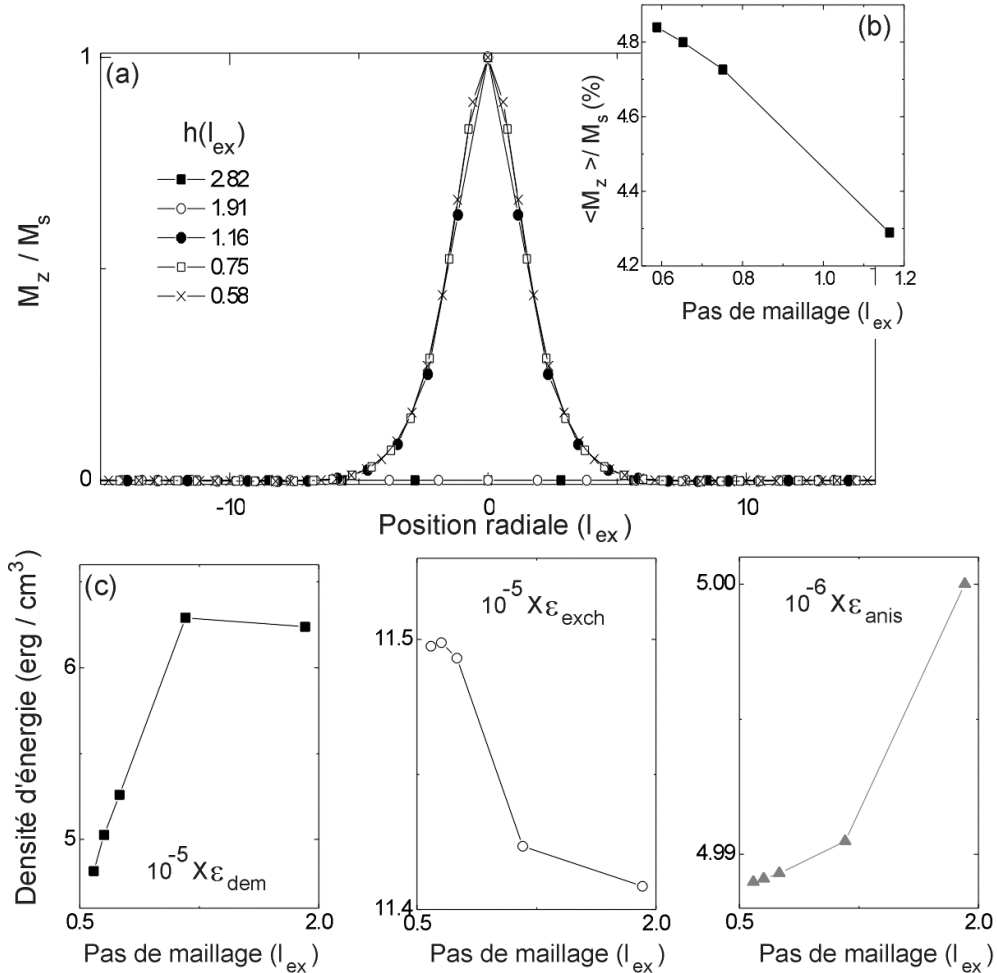


Figure II-15 : Influence du pas de maillage sur l'état vortex d'un plot circulaire de Co a forte anisotropie magnétocristalline perpendiculaire au plan (OZ) du plot de 200 nm de diamètre et 2.5 nm d'épaisseur: (a) profils et (b) valeur moyenne de l'aimantation hors du plan (c) les densités d'énergie.

Lorsque le pas de maillage est autour de 2 fois la longueur d'échanges les détails de la structure interne du vortex sont perdus (le cœur du vortex est absente). Si le pas de maillage est comparable à la longueur d'échange ou au-dessous, le vortex est de plus en plus mieux représenté. Après que les détails du vortex sont visibles, une légère dépendance des énergies et de l'aimantation moyenne $\langle M_z \rangle$ du pas de maillage, est remarquée.

La méthode la plus fréquemment utilisée pour minimiser les effets du maillage sur les contributions à l'énergie totale consiste à mener des simulations avec de pas de maillage de plus en plus petit et d'extrapoler les résultats vers $h \rightarrow 0$. Bien évidemment une telle approche implique des ressources de temps calcul et de mémoire importantes qui imposent à leur tour des limites dans le choix du pas de maillage. La discrétisation dans le temps, couplée à la discrétisation dans l'espace peut introduire des erreurs significatives qui agissent sur la stabilité du schéma d'intégration temporelle discutée dans la section II. 6. 4.

Dans les sections précédentes, les détails de l'algorithme numérique que nous avons conçu ont été présentés. Puis ses limites en stabilité et en précision de calcul ont été montrées à travers différents cas test. Maintenant, nous voulons comparer les résultats de son application sur un problème standard.

II. 8. Problème standard 3

Nous consacrons ce paragraphe à la comparaison des résultats obtenus par des autres groupes de recherche [Rave JMMM 98] et nous dans le cas précis d'un problème à trois dimensions. Il s'agit du problème standard 3 [μ mag-site].

Le but de ces travaux consiste à déterminer les états magnétiques stables d'une petite particule cubique en fonction de sa taille latérale L . Une anisotropie magnétocristalline uniaxiale est supposée selon le côté OZ de la particule et un facteur de qualité de $Q = 0.1$ caractérise le matériau. Deux configurations stables de l'aimantation ont été identifiées: l'état fleur (figure II-16 (a)) et l'état vortex (figure II-16 (b)). Pour chaque taille latérale plusieurs pas de maillage ont été utilisés afin d'obtenir la densité d'énergie totale correspondante à une variation continue de l'aimantation (pas de maillage infiniment petit). Les résultats rapportés sur la figure II-16(c) indiquent l'existence d'une taille latérale critique pour laquelle les deux états magnétiques ont la même énergie totale.

Nos calculs conduisent à une taille critique de $L_{cr} = 8.49l_{ex}$ et une densité d'énergie de $\varepsilon_{cr} = 0.3021(\mu_0 M_s^2 / 2)$ qui sont proches des ceux rapportés par Rave [µmag-site] $L_{cr} = 8.47l_{ex}$ respectivement $\varepsilon_{cr} = 0.3027(\mu_0 M_s^2 / 2)$. Ceci étant indicatif sur la validité des nos calculs. Pourtant la validation la plus rigoureuse est donnée par une comparaison directe entre les résultats numériques et ceux expérimentaux. C'est pour cette raison qu'il nous a semblé important de présenter le modèle que nous utilisons pour simuler les images MFM.

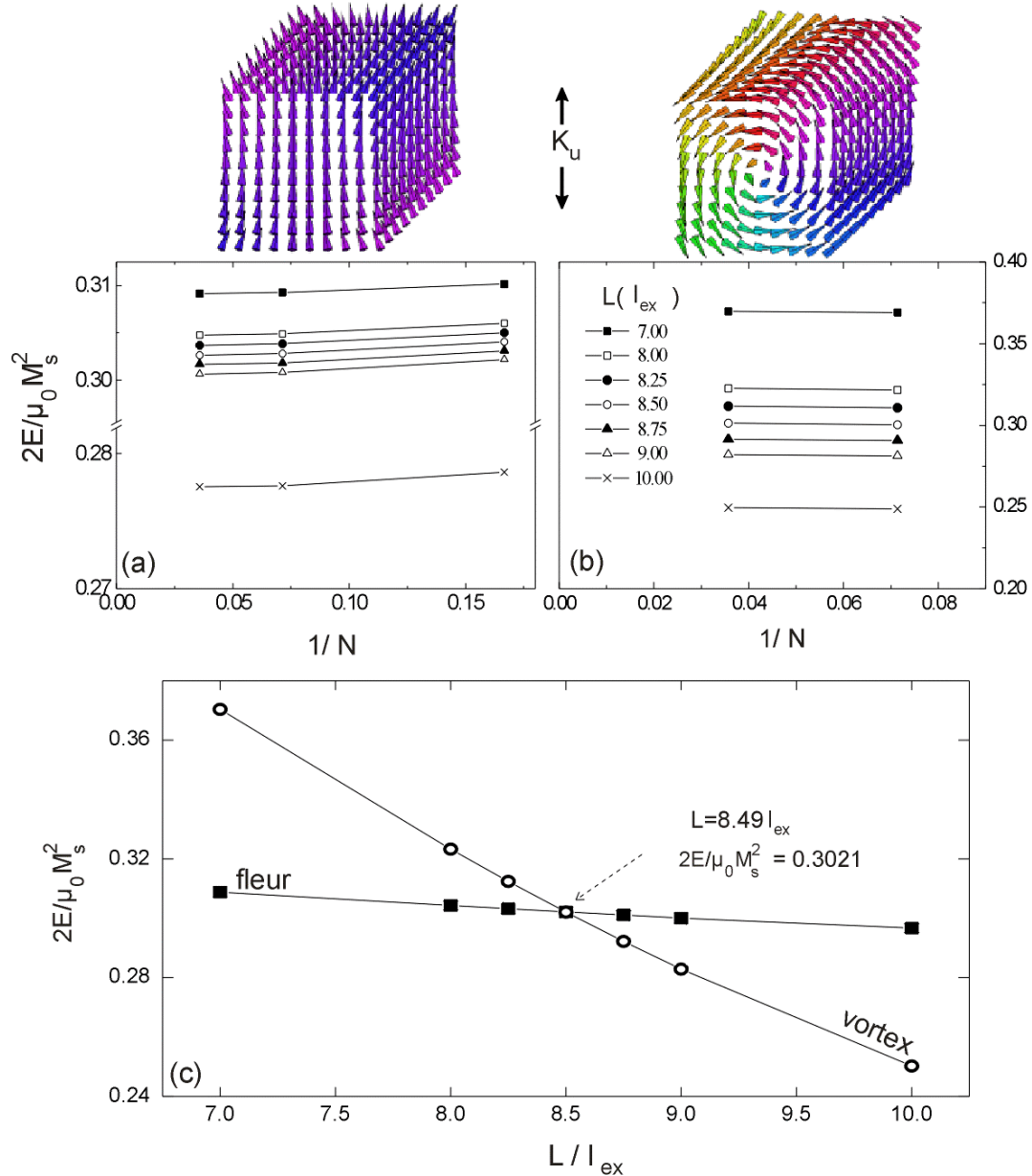


Figure II-16 : Evolution de l'énergie de l'état fleur (a) et de l'état vortex (b) en fonction du pas de maillage pour diverses taille latérale L . (c) Diagramme d'énergie obtenue par extrapolation $1/(N_x N_y N_z) \rightarrow 0$. L'état fleur représente l'état monodomaine du système alors que l'état vortex est un état multidomaines (deux domaines antiparallèles orientés selon l'axe d'anisotropie magnétocristalline).

II. 9. Modélisation du signal MFM

La microscopie à force magnétique (MFM) qui permet de visualiser la structure en domaines des échantillons magnétiques à partir du champ de fuite généré par la distribution interne de l'aimantation, peut servir comme liant entre l'expérience et la simulation. Grâce aux images MFM les états stables du système trouvés expérimentalement et numériquement peuvent être comparés contribuant indirectement ainsi à la validation des calculs.

La réaction de la point MFM à une perturbation externe telle que le champ de fuite émergé d'un échantillon, se traduit par la modification de la fréquence de résonance Δf du levier par rapport à la fréquence propre f (en l'absence d'une excitation externe). La théorie de MFM [Hug JAP 98] établie que le signal enregistré est proportionnel au gradient de la force $\vec{F} = (F_x, F_y, F_z)$ qui agit sur la pointe MFM:

$$\frac{\Delta f}{f} \propto \frac{\partial F_z}{\partial z} \quad \text{II-50}$$

où la direction OZ coïncide avec la direction d'oscillation du levier. La force $\vec{F}$ dérive de l'énergie d'interaction pointe- échantillon E_{int} par la relation:

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} E_{\text{int}}. \quad \text{II-51}$$

L'expression générale pour l'énergie d'interaction est:

$$E_{\text{int}} = -\frac{\mu_0}{2} \left[\int_{V_{\text{éch}}} (\vec{M}_{\text{éch}} \cdot \vec{H}_p) dV_{\text{éch}} + \int_{V_p} (\vec{M}_p \cdot \vec{H}_{\text{éch}}) dV_p \right] \quad \text{II-52}$$

où $\vec{H}_{\text{éch}}$ est le champ de fuite créé par l'aimantation $\vec{M}_{\text{éch}}$ de l'échantillon, et il agit sur l'aimantation $\vec{M}_p$ de la pointe qu'elle à son tour est la source du champ $\vec{H}_p$. Le principe d'action et de réaction réduit l'énergie à :

$$E_{\text{int}} = -\mu_0 \int_{V_p} (\vec{M}_p \cdot \vec{H}_{\text{éch}}) dV_{\text{éch}} \quad \text{II-53}$$

et le gradient de la force devient:

$$\frac{\partial F_z}{\partial z} = \mu_0 \int_{V_p} \left(\vec{M}_p \cdot \frac{\partial^2 \vec{H}_{\text{éch}}}{\partial z^2} \right) dV_{\text{éch}} \quad \text{II-54}$$

si nous supposons que l'aimantation de la pointe est rigide. L'implantation numérique de cette relation permet d'obtenir à partir de la configuration interne de l'échantillon l'image MFM.

Notre approche s'appuie sur l'approximation que la distribution interne de l'aimantation de l'échantillon ne souffre pas de modifications causées par la présence de la pointe MFM. Cette hypothèse est valable lorsque durant le vol la pointe est suffisamment loin de la surface de l'échantillon pour que toute influence soit négligeable. Ces limitations nous empêchent d'extraire d'informations quantitatives [Tomlinson JMMM 96, Garcia APL 01] cependant notre but est de comparer seulement qualitativement les images simulées et mesurées expérimentalement [Proksch APL 95]. La pointe MFM en trois dimensions a été reconstituée en utilisant de petits cubes magnétiques comme sur la figure II-17(a). Seules les cellules extérieures (grises) sont magnétiques et l'orientation de l'aimantation varie d'un élément à l'autre comme les flèches noires nous indiquent sur la vue en section transversales II-17(b). Pour la discrétisation de la pointe un pas de maillage identique que celui utilisé pour l'échantillon est appliqué (autour de 2-4 nm).

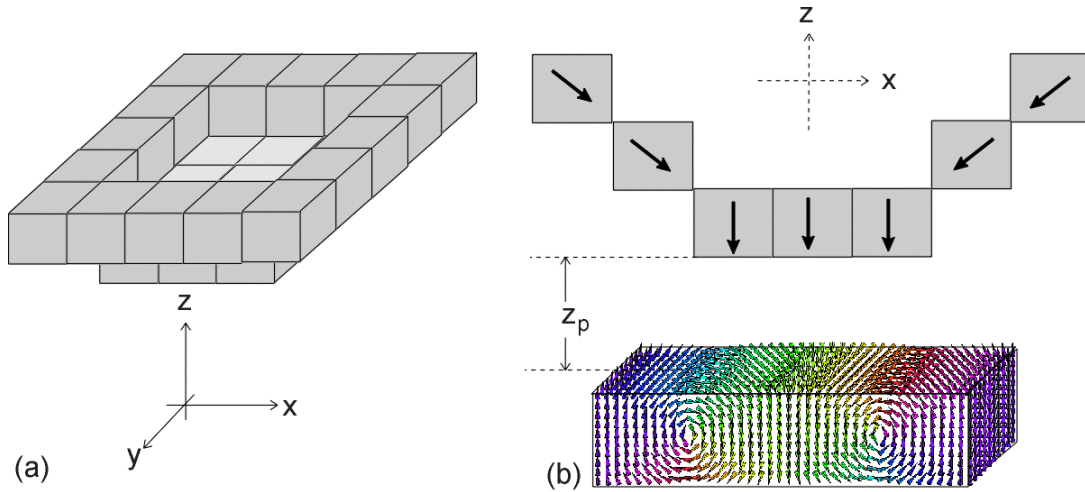


Figure II-17: (a) Discretisation de la pointe MFM avec des petits cubes magnétiques. (b) Dans une section transversale les flèches noires donnent la distribution de l'aimantation de la pointe qui survole l'échantillon à une hauteur z_p de sa surface.

Après avoir en préalable trouvé la configuration magnétique de l'échantillon (voir de couches ou de plots) la dérivée secondaire du champ de fuite créé par l'échantillon est évaluée dans chaque cellule magnétique de la pointe. Ensuite les contributions de chaque cellule vont donner le signal MFM final de la pointe. La variation du nombre de plans XOY considérés dans la discrétisation de la pointe nous ont permis de manipuler l'effet de convolution de la pointe sur le signal MFM. Bien que le modèle soit assez simple il nous a permis d'approfondir certains aspects liés aux parois de domaines dans de couches minces de Co à anisotropie magnétocristalline planaire comme ceux rapportés par Prejbeanu et al. [Prejbeanu APL 00].

II. 10. Logiciels

De manière synthétique, les programmes numériques conçus pour résoudre les problèmes micromagnétiques 2D et 3D ont un chemin logique tel que celui montré sur la figure II-18. Dans les blocks de l'évaluation des champs et de l'intégration des équations de LLG, multiples combinaisons peuvent être mises en place.

Les programmes monoprocesseur **Simul2D** et **Simul3D** ont été développés en langage **C** et optimisés sur de plate-formes **UNIX** et **LINUX**. La version multiprocesseur **Micro3D** spécialement développée sur une machine **CRAY T3E** [IDRIS-site], utilise le langage **Fortran 90**. Au dehors des sous-programmes de calcul de FFT, tous les autres sous-programmes utilisés ont été conçus par moi-même, cela m'a permis de bien maîtriser les outils de calcul numérique et de faire les modifications appropriées aux études plus spéciales.

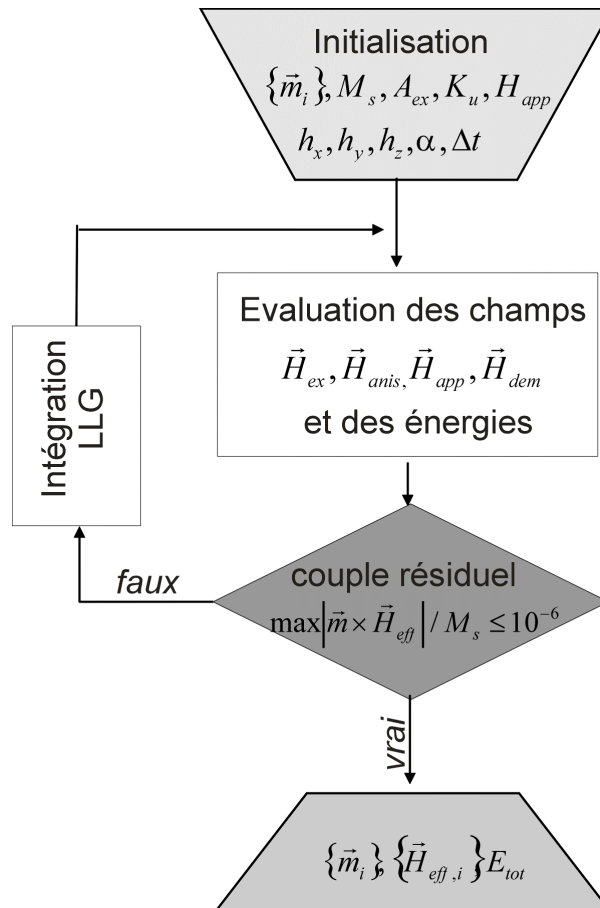


Figure II-18 : Organigramme du calcul numérique.

Lorsque la taille du système étudié est large ou lorsque l'utilisation d'un pas de maillage plus fin s'impose les moyens en temps calcul et mémoire nécessaires, offerts par une station de travail ordinaire (Silicon Grafics R4400) sont insuffisants. L'utilisation des machines

massivement parallèles telle que CRAY T3E nous a permis d'un côté de réduire le temps calcul et d'autre coté d'augmenter la taille de système ferromagnétique étudié afin de nous rapprocher des tailles des systèmes réels étudiés au sein de notre groupe. Le principe de l'algorithme parallèle de notre code repose essentiellement sur la distribution sur les différents processeurs du calcul des transformées Fourier impliquées dans l'évaluation du champ magnétostatique. Les tableaux de l'aimantation, du tenseur démagnétisant et des champs sont partagés sur un nombre N de processeurs. Pour communiquer les données entre les processeurs nous utilisons la bibliothèque spécialisée ShMem qui est très accessible du point de vue de la programmation. Afin de démontrer l'efficacité du code parallélisé, nous avons choisi un fil à section carrée de $16 \times 16 \times 512$ unités de maillage. Une telle taille est pratiquement impossible à traiter avec le code monoprocasseur car il faut rappeler qu'à cause de *zero padding*, la taille du système numérique est le double de celle du système physique ($2 \times 2 \times 2 \times 131072 = 1048576$ unités de maillage). Le temps écoulé pour calculer 10 itérations sur un système de $16 \times 16 \times 512$ est représenté sur la figure II-19 en fonction de nombre de processeurs utilisés.

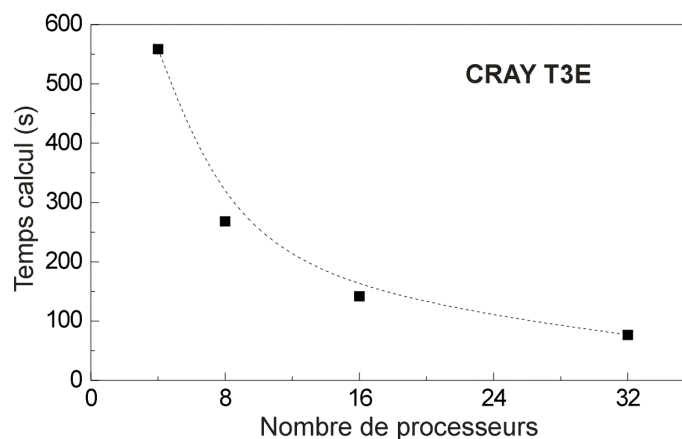


Figure II-19 : Variation du temps de calcul en fonction du nombre de processeurs pour un système divisé en $16 \times 16 \times 512$ unités de maillage.

Le calcul parallèle permet d'accélérer l'étude de tout type de systèmes mais il y a des cas qui ne pourraient pas être envisagés sans le calcul parallèle. Compte tenu du fait que T3E (256 processeurs) est une machine nationale, l'accès à cette machine est limité et dont nous avons réservé que les cas impossibles à les traiter en monoprocasseur.

La construction des nos outils numériques a été faite progressivement. Nous avons commencé au départ par élaborer un code 2D simple pour étudier la structure des parois dans des couches minces à anisotropie magnétocristalline planaire. Lorsque l'anisotropie cristalline

est devenue perpendiculaire au plan de la couche, le passage vers le calcul 2D périodique s'est imposé à cause des domaines en bandes parallèles (une structure périodique de l'aimantation). L'étude des petits objets (les plots et les fils), a demandé la généralisation au calcul 3D. Graduellement, les schémas de minimisation de l'énergie ont été améliorés ainsi que la parallélisation du code, a été faite. La dernière étape a été focalisée sur l'incorporation des conditions périodiques dans le calcul 3D. Nous n'avons pas la prétention que notre approche soit la meilleur, ni la plus vite mais nous avons réussi adapter le calcul numérique afin tenir compte des particularités de chaque système ferromagnétique étudié. A travers les chapitres qui suivent, nos études numériques vont tenter de donner quelques réponses à la question : *A quoi peut servir le micromagnétisme numérique?*

Références bibliographiques II

- [Aharoni PR 63]** A. Aharoni, Phys. Rev. **131**, 1478 (1963). *Complete eigenvalue spectrum for the nucleation in a ferromagnetic prolate spheroid*
- [Aharoni IEEE 91]** A. Aharoni, IEEE Trans. Magn. **27**, 3539 (1991). *Magnetostatic energy calculations*
- [Albuquerque JAP 01]** G. Albuquerque, J. Miltat et A. Thiaville, J. Appl. Phys. **89**, 6791 (2001). *Self-consistency based control scheme for magnetization dynamics*
- [Bagnérés IEEE 91]** A. Bagnérés-Viallix, P. Bara, J. B. Albertini, IEEE Trans. Magn. **27**, 3819 (1991). *2D and 3D calculations of micromagnetic wall structures using finite elements*
- [Berkov JMMM 91]** D. V. Berkov, J. Magn. Magn. Mat. **99**, 7 (1991). *Micromagnetics of the single cylindrical particle.*
- [Berkov PSS 93]** D. V. Berkov, K. Ramstock, A. Hubert, Phys. Stat. Sol. a **137**, 297 (1993). *Solving Micromagnetic problems-towards on Optimal Numerical*
- [Boerner IEEE 97]** E. D. Boerner, H. N. Bertram, IEEE Trans. Magn. **33**, 3052 (1997). *Dynamics of thermally activated reversal in nonuniformly magnetized single particles*
- [Brown PR 57]** W. F. Brown Jr., Phys. Rev. **105**, 1479 (1957). *Criterion for uniform micromagnetization*
- [Donahue PB 97]** M. J. Donahue, R. D. McMichael, Physca B **233**, 272 (1997). *Exchange energy representations in computational micromagnetics*
- [Eisenstein JAP 76]** I. Eisenstein, A. Aharoni, J. Appl. Phys. **47**, 321 (1976). *Magnetization curling in a sphere*

-
- [Fabian GJI 96]** Fabian, A. Kirchner, W. Williams, F. Heider, T. Leibl, A. Hubert, *Geophys. J. Int.* **124**, 89 (1996). *Three-dimensional micromagnetic calculations of magnetite using FFT*
- [Ferré CPC 97]** R. Ferré, *Computer. Phys. Comm.* **105**, 169 (1997). *Large scale micromagnetic calculations for finite and infinite 3D ferromagnetic systems using FFT*
- [Ferré thèse]** R. Ferré Gimenez, thèse Université Joseph Fourier, Grenoble (1995).
- [Fidler JPD 00]** J. Fidler, T. Schrefl, *J. Phys. D : Appl. Phys.* **33**, 135 (2000). *Micromagnetic modelling – the current state of the art*
- [FFTW-site]** <http://www.fftw.org>
- [Fredkin IEEE 87]** D. R. Fredkin, T. R. Koehler, *IEEE Trans. Magn.* **MAG-23**, 3385 (1987). *Numerical micromagnetics by the finite element method*
- [Frei PR 57]** E. H. Frei, S. Shtrikman, D. Treves, *Phys. Rev.* **106**, 446 (1957). *Critical size and nucleation field of ideal ferromagnetic particles*
- [Fruchart PRB 98]** O. Fruchart, J. –P. Nozieres, B. Kevorkian, J.-C. Toussaint, D. Givord, F. Rousseaux, D. Decanini, F. Carcenac, *Phys. Rev. B* **57**, 2596 (1998). *High coercivity in ultrathin epitaxial micrometer-sized particles with in-plane magnetization: experiment and numerical simulation*
- [Garcia APL 01]** J. M. Garcia, A. Thiaville, J. Miltat, K. J. Kirk, J. N. Chapman, F. Alouges *Appl. Phys. Lett.* **79**, 656 (2001) *Quantitative interpretation of magnetic force microscopy images from soft patterned elements*
- [Giles JAP 90]** R. C. Giles, P. R. Kotiuga, F. B. Humphrey, *J. Appl. Phys.* **67**, 5821 (1990). *Three-dimensional micromagnetic simulations on the connection machine*
- [Hayashi JAP 96]** N. Hayashi, K. Saito, Y. Nakatani *J. Appl. Phys.* **35**, 6065 (1996). *Calculation of demagnetizing field distribution based on Fast Fourier Transform of convolution*
- [Hubert 98]** A. Hubert, R. Schäfer, *Magnetic Domains*, Springer (1998).
- [Hug JAP 98]** H. J. Hug, B. Stiefel, P. J. A. van Schendel, A. Moser, R. Hofer, S. Martin, H. –J. Gunherodt, S. Porthun, L. Abelmann, J. C. Lodder, G. Bochi, R. C. O'Handley, J. *Appl. Phys.* **83**, 5609 (1998). *Quantitative magnetic force microscopy on perpendicularly magnetized samples*
- [IDRIS-site]** <http://www.idris.fr>
- [Jakubovics JAP 91]** J. P. Jakubovics, *J. Appl. Phys.* **69**, 4029 (1991). *Interaction of Bloch-walls pairs in thin ferromagnetic films*
- [Kevorkian thèse]** B. M. Kevorkian, thèse Université Joseph Fourier, Grenoble (1998).

-
- [Kikuchi JAP 56]** Ryoichi Kikuchi, J. Appl. Phys. **27**, 1352 (1956). *On the minimum of magnetization reversal time*
- [Labbé JMMM 99]** S. Labbé, P. -Y. Bertin, J. Magn. Magn. Mat. **206**, 93 (1999). *Microwave polarizability on ferrite particles with non-uniform magnetization*
- [LaBonte JAP 69]** A. E. LaBonte, J. Appl. Phys. **40**, 2450 (1969). *Two-Dimensional Bloch-Type Domains Walls in Ferromagnetic Films.*
- [Labrune JMMM 95]** M. Labrune, J. Miltat, J. Magn. Magn. Mat. **151**, 231 (1995). *Wall structures in ferro/antiferromagnetic exchange-coupled bilayers : a numerical micromagnetic approach*
- [Lewis PB 97]** D. Lewis, E. Della Torre, Physica B **233**, 348 (1997). *Smoothing errors in micromagnetic calculations*
- [Lopez IEEE 99]** L. Lopez-Diaz, J. Eicke, E. Della Torre, IEEE Trans. Magn. **35**, 1207 (1999). *A Comparison of Micromagnetic Solvers*
- [Mansuripur IEEE 88]** M. Mansuripur, R. Giles, IEEE Trans. Magn. **24**, 2326 (1988). *Demagnetizing field computation for dynamic simulation of the magnetization reversal process*
- [Miltat JMMM 89]** J. Miltat, A. Thiaville, P. Trouilloud, J. Magn. Magn. Mat. **82**, 297 (1989). *Néel lines structures and energies in uniaxial ferromagnets with quality factor $Q > 1$*
- [Nakatani JAP 89]** Y. Nakatani, Y. Uesaka, N. Hayashi, J. Appl. Phys. **28**, 2485 (1989). *Direct solution of the Landau-Lifshitz-Gilbert Equation for Micromagnetics*
- [Newell JGR 93]** A. J. Newell, W. Williams, D. J. Dunlop, J. Geophys. Research **98**, 9551 (1993). *A generalisation of the demagnetizing tensor for nonuniform magnetization*
- [OOMMF-site]** <http://math.nist.gov/oommf/>
- [Prejbeanu APL 00]** I. L. Prejbeanu, L. D. Buda, U. Ebels, K. Ounadjela, Appl. Phys. Lett. **77**, 3066 (2000). *Observation of asymmetric Bloch walls in epitaxial Co films with strong in plane uniaxial anisotropy*
- [Press 92]** W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, New York (1992) .
- [Proksch APL 95]** R. B. Proksch, T. E. Schäffer, B. M. Moskowitz, E. D. Dahlberg, D. A. Bazylinski, R. B. Frankel, Appl. Phys. Lett. **66**, 2583 (1995). *Magnetic force microscopy of submicronic magnetic assembly in a magnetotactic bacterium*
- [Ramstöck JMMM 94]** K. Ramstöck, T. Leibl, A. Hubert, J. Magn. Magn. Mat. **135**, 97 (1994). *Optimizing stray field computations in finite-element micromagnetics*

-
- [Rave JMMM 98] W. Rave, K. Fabian, A. Hubert, J. Magn. Magn. Mat. **190**, 332 (1998). *Magnetic states of small cubic particles with uniaxial anisotropy*
- [Rave IEEE 00] W. Rave, A. Hubert, IEEE Trans. Magn. **36**, 3886 (2000). *Magnetic ground state of a thin-film element*
- [Schabes IEEE 87] M. E. Schabes, A. Aharoni, IEEE Trans. Magn. **MAG-23**, 3882 (1987). *Magnetostatic interaction fields for a three-dimensional array of ferromagnetic cubes*
- [Schabes JAP 88] M. E. Schabes, H. N. Bertram, J. Appl. Phys. **64**, 1347 (1988). *Magnetization processes in ferromagnetic cubes*
- [Schabes JMMM 89] M. E. Schabes, J. Magn. Magn. Mat. **95**, 249 (1989). *Micromagnetic theory of non-uniform magnetization processes in magnetic recording particles*
- [Scheinfein PRB 91] M. R. Scheinfein, J. Unguris, J. Blue, K. Coakley, D. Pierce, R. Celotta, P. J. Ryan, Phys. Rev. B **43**, 3395 (1991). *Micromagnetics domain walls at surfaces*
- [Schrefl JMMM 99] T. Schrefl, J. Magn. Magn. Mat. **207**, 45 (1999). *Finite elements in numerical micromagnetics*
- [Schrefl JAP 99] T. Schrefl, J. Fidler, K. J. Kirk, J. N. Chapman, J. Appl. Phys. **85**, 6169 (1999). *Simulation of magnetization reversal in polycrystalline patterned Co elements*
- [Tomlinson JMMM 96] S. L. Tomlinson, E. W. Hill, J. Magn. Magn. Mat. **161**, 385 (1996). *Modelling the perturbative effect of MFM tips on soft magnetic thin films*
- [Trouilloud JMMM 87] P. Trouilloud, J. Miltat, J. Magn. Magn. Mat. **66**, 194 (1987). *Néel lines in ferromagnetic garnet epilayers with orthorhombic anisotropy and canted magnetization*
- [Toussaint 96] J.C. Toussaint, B. Kevorkian, D. Givord, M. F. Rossignol, Proceedings of the 9th International Symposium Magnetic Anisotropy and Coercivity in Rare-Earth Transition Metal Alloys **2**, 59-68 (1996). *Micromagnetic modeling of magnetization reversal in permanent magnets*
- [Yuan PRB 91] S. W. Yuan, H. N. Bertram, Phys. Rev. B **44**, 12395 (1991). *Domain-wall dynamic transition in thin films*
- [Yuan IEEE 92] S. W. Yuan, H. N. Bertram, IEEE Trans. Magn. **28**, 2031 (1992). *Fast adaptive algorithms for micromagnetics*
- [Zhu JAP 88] J-G. Zhu, H.N. Bertram, J. Appl. Phys. **63**, 3248 (1988). *Micromagnetic studies of thin metallic films.*
- [Zhu 01] J. -G. Zhu, Y. Zheng, *Spin Dynamics in Confined Structure*, Springer (2001). *The micromagnetics of magnetoresistive random access memory*
- [umag-site] <http://www.ctcms.nist.gov/~rdm/mumag.org.html>

CHAPITRE III

Structures magnétiques des parois dans des couches minces de cobalt

Les outils numériques spécifiques au calcul bidimensionnel, décrits dans le chapitre précédent, ont été appliqués à l'étude de systèmes à deux dimensions tels que les couches minces de cobalt. Il s'agit de couches de cobalt hexagonal compact obtenues par croissance épitaxiale et caractérisées par une forte anisotropie magnétocristalline uniaxiale de l'ordre de $K_u = (5-6) \times 10^5 \text{ J/m}^3$. Cependant, l'intensité de l'interaction magnétostatique spécifique du cobalt ($M_s = 1.4 \times 10^5 \text{ A/m}$) est supérieure à l'anisotropie magnétocristalline et il en résulte un facteur de qualité modéré $Q = 0.4 - 0.5$.

Dans une première étape, nous avons étudié par simulations 2D non-périodiques la structure interne des parois de domaines dans des couches minces de $\text{Co}(10\bar{1}0)$, caractérisées par une forte anisotropie magnétocristalline uniaxiale planaire. Nous présenterons ici juste un bref résumé des simulations car la corrélation simulation/expérience et ses interprétations font l'objet d'une description détaillée rapportée ailleurs [Prejbeanu thèse, Prejbeanu APL 00].

La deuxième partie de ce chapitre est dédiée aux études numériques des couches minces de $\text{Co}(0001)$, qui possèdent une forte anisotropie magnétocristalline uniaxiale perpendiculaire au plan de la couche. L'influence de l'épaisseur de la couche et du champ externe appliqué sur la structure en domaines a été analysée par de calculs 2D périodiques.

Les résultats statiques ont servi comme support des études expérimentales de résonance ferromagnétique (RFM) afin de mieux comprendre la réponse dynamique des couches de $\text{Co}(0001)$ face aux faibles perturbations externes périodiques.

Plan du chapitre III

III. 1. Introduction

III. 2. Paroi de domaines dans de couches de Co(10·0) à anisotropie magnétocristalline planaire

III. 3. Structure en domaines des couches de Co(0001) à anisotropie magnétocristalline perpendiculaire

III. 3. 1. Considérations sur les configurations magnétiques stables dans les simulations 2D périodiques

III. 3. 1. 1. Périodicité des domaines en bandes parallèles

III. 3. 1. 2. Effet du facteur de qualité Q

III. 3. 2. Description du système physique étudié

III. 3. 3. Configurations magnétiques à champ nul

III. 3. 3. 1. Périodicité des bandes $L = L(e)$

III. 3. 3. 2. Profils de l'aimantation

III. 3. 3. 3. Rémanence planaire

III. 3. 4. Cycle d'aimantation planaire

III. 3. 5. Résonance Ferromagnétique

III. 3. 5. 1. Résultats expérimentaux

III. 3. 5. 2. Discussions

III. 4. Conclusions chapitre III

Références bibliographiques III

III. 1. Introduction

Depuis que Weiss [Weiss 07] a émis l'hypothèse de l'existence de domaines au sein des matériaux ferromagnétiques, des preuves expérimentales et théoriques la confirment sans cesse pour des innombrables systèmes. Quel qu'il soit le système ferromagnétique considéré: des matériaux à l'état massif, des couches minces uniques [Hubert PPS 69, Miltat 94, Bochi JAP 95, Castro JMMM 00] ou des multicouches [Belliard JAP 97] ou bien des objets nanostructurés [Hubert 98], les domaines représentent le résultat de la minimisation de l'énergie du système. Dans ce contexte, les parois de domaines ont été vues, au début, juste comme une interface nécessaire entre les domaines adjacents, mais aujourd'hui elles sont à l'origine prouvée de certains phénomènes spécifiques tels que la magnétorésistance de parois [Gregg PRL 96].

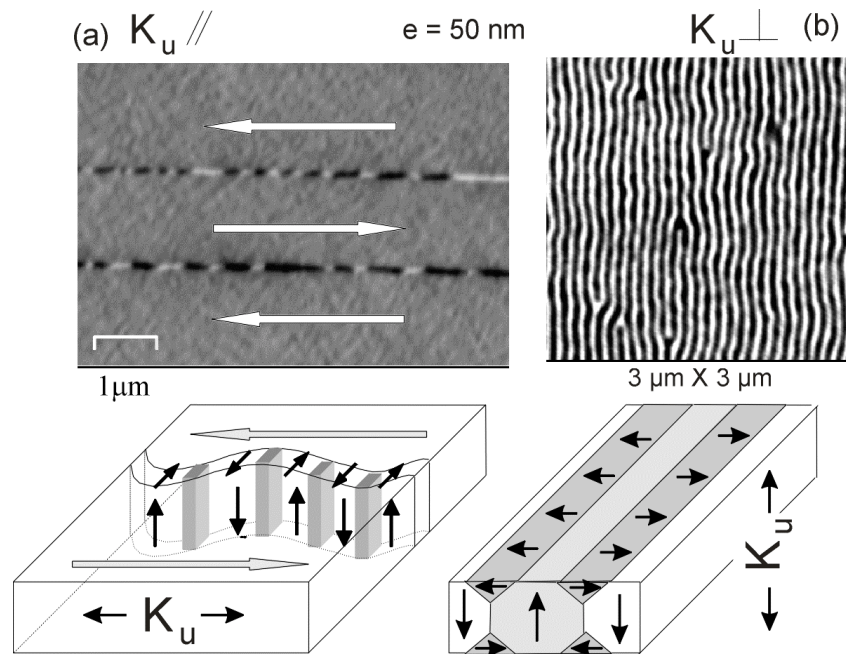


Figure III-1: Images MFM obtenues sur de couches de cobalt de 50 nm d'épaisseur lorsque l'anisotropie magnétocristalline est (a) parallèle [Prejbeanu APL 00] et (b) perpendiculaire au plan de la couche [Hehn PRB 96]. Les structures magnétiques internes de couches correspondantes aux images MFM sont schématisées.

C'est pourquoi nous avons choisi ici d'analyser, par des simulations micromagnétiques, la structure des parois de domaines dans des couches minces de cobalt, caractérisées par une forte anisotropie magnétocristalline uniaxiale. Selon l'orientation: parallèle ou perpendiculaire de l'axe de l'anisotropie magnétocristalline par rapport au plan de la couche, de l'épaisseur de la couche (variant entre quelques couches atomiques et des dizaines de nanomètres) et de

l'histoire magnétique parcourue, une large diversité de configurations de l'aimantation a été mise en évidence.

Lorsque l'axe cristallin se trouve dans le plan de la couche, l'anisotropie magnétocristalline s'ajoute à l'anisotropie de forme (le résultat des interactions magnétostatiques). Ainsi l'aimantation de la couche est partout planaire sauf dans les régions des parois [Prejbeanu thèse]. Sur la figure III-1(a), l'image MFM enregistrées sur une couche de $\text{Co}(10\bar{1}0)$ à anisotropie planaire, après une désaimantation hors du plan, est présentée. Les régions grises indiquent les domaines qui ont une aimantation orientée suivant l'axe d'anisotropie cristalline. Les lignes avec des segments des contrastes blancs et noirs représentent les parois de domaines.

Au contraire, lorsque l'axe d'anisotropie magnétocristalline est perpendiculaire au plan, l'anisotropie magnétocristalline entre en compétition avec l'anisotropie de forme. Il en résulte ainsi une caractéristique essentielle de ces couches de $\text{Co}(0001)$: la stabilisation, au-dessus d'une épaisseur critique, des domaines à aimantation perpendiculaire au plan en bandes parallèles ou en bulles [Donnet JAPD 95, Hehn thèse]. Sur la figure III-1(b) le contraste caractéristique de domaines en bandes parallèles est illustré pour une couche de 50 nm d'épaisseur. L'image a été obtenue après une désaimantation planaire de l'échantillon [Hehn PRB 96].

Les différences entre les deux types de couches de cobalt, évidentes au niveau de la configuration en domaines se retrouve aussi au niveau des structures internes des parois de domaines. De plus, la configuration micromagnétique des parois évolue en fonction de l'épaisseur de couche, comme nous allons rapporter tout au long de ce chapitre.

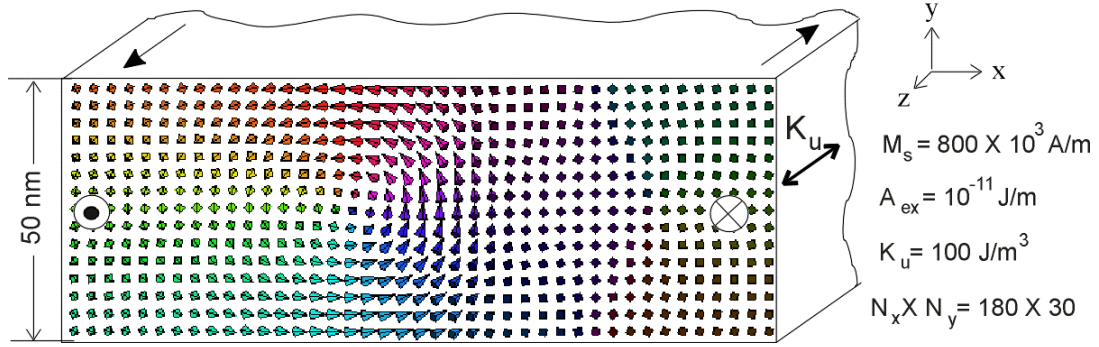
III. 2. Paroi de domaines dans de couches de $Co(10\bar{1}0)$ à anisotropie magnétocristalline planaire

Au début de la théorie du micromagnétisme, c'est Bloch [Bloch 32] suivi par Néel [Néel 55] qui proposent de solutions analytiques pour le profil des parois de domaines dans un milieu ferromagnétique infini uniaxe parois (figure III-3(a)). C'est tout à fait normal donc que les premiers calculs numériques [LaBonte JAP 69] aient visé l'étude de la structure interne de ces parois de domaines. Ainsi le micromagnétisme numérique a permis de montrer les modifications induites dans la structure interne des parois par la réduction de la taille du système, lorsqu'on passe d'un matériau massif à un matériau sous forme de couches minces. Cette réduction implique surtout une diversification des types de parois possibles, avec notamment l'apparition de parois de structure hybride telles que les parois de Bloch asymétrique et symétrique ou les parois de Néel asymétrique et symétrique [Hubert 98 page 238].

L'étude de la structure micromagnétique des parois dans des couches minces à anisotropie magnétocristalline uniaxiale planaire, fait appel au calcul 2D non-périodique. Avant de mener les simulations pour le cas précis des couches de $Co(10\bar{1}0)$, nous avons voulu valider notre approche 2D non-périodique. Dans cet esprit, le cas bien connu de la paroi de Bloch asymétrique dans une couche de permalloy, a été choisi. En appliquant le calcul 2D non-périodique, nous avons pu retrouver les résultats rapportés par LaBonte [Labonte JAP 69] pour la paroi de Bloch asymétrique (*la paroi vortex*) dans une couche de permalloy de 50 nm d'épaisseur, caractérisée par une anisotropie magnétocristalline uniaxiale planaire (fig. III-2).

L'évolution de la structure interne des parois de domaines dans des couches minces à anisotropie planaire, en fonction de l'épaisseur des couches est bien connue expérimentalement et numériquement pour des couches magnétiques douces (un facteur de qualité faible $Q \ll 1$ tel que le permalloy $Q = 0.000248$ [Labonte JAP 69, Hubert 98]). L'augmentation du facteur de qualité vers des valeurs modérées ($Q = 0.5$) est réfléchiée par la modification de la structure interne des parois et de leur stabilité en fonction de l'épaisseur de couches. Ce sont ces modifications que nous présenterons, dans le cas des couches minces de $Co(10\bar{1}0)$ [Prejbeanu thèse] caractérisées par un facteur de qualité $Q = 0.40$. Tous les calculs

ont été faits en champ externe nul, en appliquant l'amortissement critique pour l'intégration de l'équation de LLG.



	ϵ_{tot}	$\epsilon_{ex} / \epsilon_{tot}$	$\epsilon_{dem} / \epsilon_{tot}$	$\epsilon_{anis} / \epsilon_{tot}$	S
LaBonte	8.7488	0.883	0.116	0.001	1.0095
Simul2D	8.7504	0.883	0.1152	0.00085	1.000003

Figure III-2: Distribution de l'aimantation à l'intérieur d'une paroi de Bloch asymétrique pour une couche de permalloy de 50 nm d'épaisseur avec une anisotropie magnétocristalline planaire. Sur le tableau, les résultats de LaBonte [Labonte JAP 69] sont comparés avec les valeurs obtenues dans le cadre de notre modèle. Les énergies sont exprimées dans des unités A_{ex} et la grandeur S désigne le paramètre d'auto-cohérence (*self-consistency*) défini par Aharoni [Aharoni JAP 68].

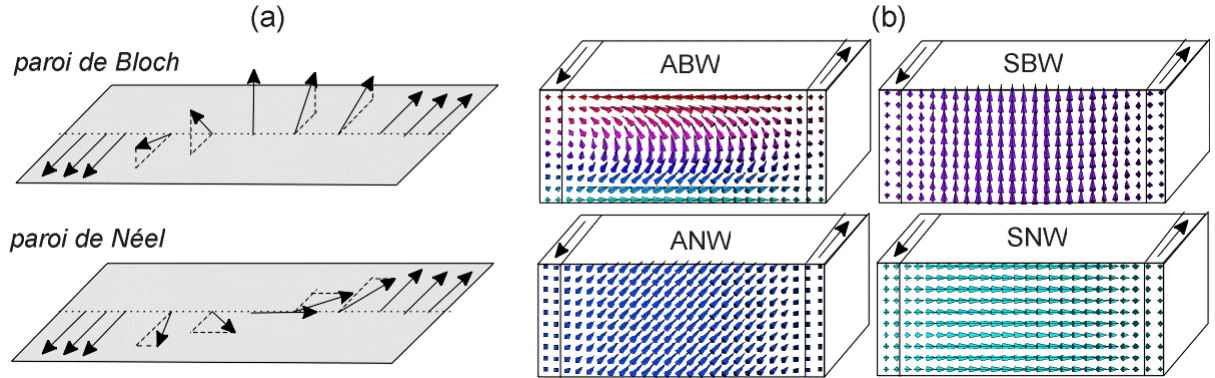


Figure III-3: (a) Vue schématique d'une paroi de Bloch et de Néel. (b) Configurations de départ utilisées lors de la minimisation de l'énergie libre de la couche afin de trouver différents types de parois: de Bloch asymétrique (symétrique) ABW (SBW) et de Néel asymétrique (symétrique) ANW (SNW).

Les valeurs de l'aimantation à saturation $M_s = 1400 \times 10^3 \text{ A/m}$ et de la constante d'anisotropie magnétocristalline $K_u = 500 \times 10^3 \text{ J/m}^3$, proches des valeurs évaluées expérimentalement, ont servi comme paramètres de simulations, alors que la constante d'échange a été fixée à $A_{ex} = 1.4 \times 10^{-11} \text{ J/m}$. Un pas de maillage de $h_x = h_y = 2 \text{ nm}$ ($l_{ex} = 3.4 \text{ nm}$, $\Delta_0 = 5.3 \text{ nm}$) a été appliqué indépendamment de l'épaisseur de la couche. Les domaines orientés antiparallèlement (l'aimantation a été fixée sur les bords) sont séparés

toujours par une distance de 200 nm. En utilisant plusieurs configurations de départ (figure III-3(b)) nous avons réussi à identifier, pour chaque épaisseur, la structure de la paroi qui a la plus basse énergie libre. Pour certaines épaisseurs, un pas de maillage plus fin ($h_x = h_y = 1 \text{ nm}$) a été employé afin de mieux distinguer entre les énergies libres des solutions proches sans que pour autant, cette réduction change les conclusions des calculs. Les résultats sont rapportés sur la figure III-4.

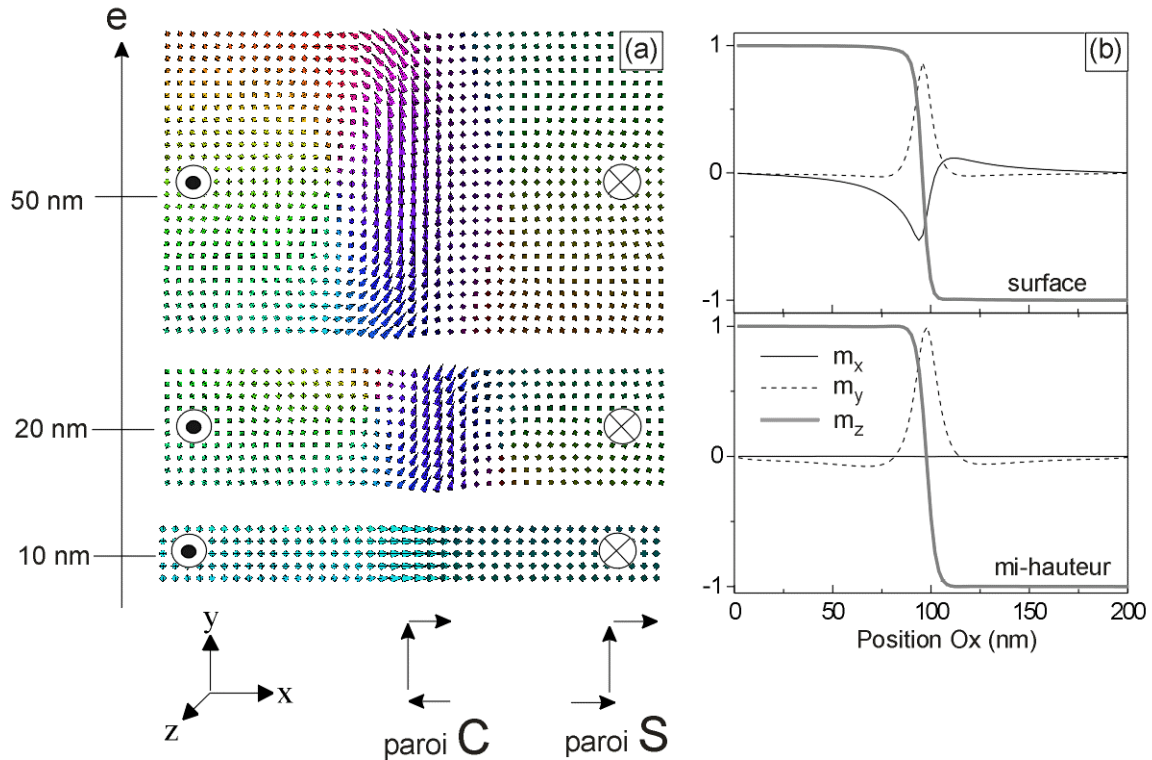


Figure III-4: (a) Modification de la structure interne de la paroi induite par l'augmentation de l'épaisseur de la couche de $\text{Co}(10\bar{1}0)$. Seulement la région de la paroi a été visualisée en section transversale où chaque flèche représente une cellule du maillage. (b) Profils des composantes de l'aimantation à la surface et à mi-hauteur d'une couche qui fait 100 nm d'épaisseur.

- Dans les couches très fines ($e \leq 10 \text{ nm}$), l'aimantation tourne de manière continue d'un domaine à un autre et reste toujours dans le plan de la couche. Ce type de structure de paroi correspond à la structure de type Néel symétrique et contient uniquement de charges magnétiques de volume.
- Lorsque l'épaisseur monte autour de $e = 20 \text{ nm}$ la paroi la moins énergétique est la paroi de type Néel asymétrique. Pour ce type de paroi, près des surfaces libres, l'aimantation a tendance à s'aligner parallèlement à la couche alors que vers le plan médian l'aimantation devient presque perpendiculaire au plan de la couche. Le passage d'une paroi de Néel symétrique vers une paroi de Néel asymétrique, est déterminé par la redistribution de charges

magnétiques dans le système. Le changement de l'orientation de l'aimantation dans le plan médiane de parallèle vers perpendiculaire à la couche, implique la réduction des charges magnétiques de volume. Le prix à payer pour cette réorientation de l'aimantation est l'apparition de charges magnétiques de surface. Le compromis énergétique favorable donc est de former une paroi hybride, une combinaison entre la paroi de Néel idéale et la paroi de Bloch idéale.

- Ce caractère dual de la paroi s'accroît au fur et à mesure que l'épaisseur de la couche augmente. Une structure de type Bloch asymétrique est préférée au-dessus de 30 nm. La partie centrale de la paroi a un caractère prédominant Bloch ($|m_y| \leq 1$, $m_x = 0$), comme nous montrent les profils de l'aimantation à mi-hauteur d'une couche de 100 nm d'épaisseur représentés sur la figure III-4(b). Cette composante Bloch de la paroi diminue au voisinage des surfaces mais reste cependant importante ($|m_y| \leq 0.8$) malgré le fait que le caractère Néel est plus prononcé ($|m_x| \leq 0.6$).
- En augmentant davantage l'épaisseur de la couche, les parties de surface (*Néel caps*) conservent leur structure et leur volume tandis que seule la partie Bloch s'étend. De plus, dans les couches épaisses ($e \geq 80 \text{ nm}$) la paroi de Bloch asymétrique qui a les deux parties Néel orientées dans des sens opposés (paroi **C**) respectivement dans le même sens (paroi **S**) devient presque dégénérée du point de vue énergétique. Pour ces épaisseurs, les parties Néel sont suffisamment éloignées l'une de l'autre pour qu'elles soient considérées découplées.

A partir de la structure interne simulée des parois, les signaux MFM ont pu être obtenus (section II. 9) et comparés avec ceux mesurés expérimentalement. Ainsi la transition entre une paroi de Néel asymétrique et une paroi de Bloch asymétrique lorsque l'épaisseur de la couche augmente, a été qualitativement prouvée [Prejbeanu APL 00].

Le caractère hybride de la paroi implique que la largeur varie le long de l'épaisseur de la couche. Si on s'interroge sur la largeur de la paroi, il faut tout d'abord la définir, car ceci n'est pas toujours évidente malgré la multitude de définitions proposées dans la littérature [Hubert 98 page 219]. Lorsqu'on se situe au centre de la couche, la paroi est plutôt de type Bloch. Ainsi il semble juste à utiliser le modèle d'une paroi de Bloch idéale pour estimer sa largeur. A l'intérieur de la paroi de Bloch infinie ($e \rightarrow \infty$) la composante m_z de l'aimantation varie selon la loi:

$$\begin{cases} m_z(x) = \pm \tanh\left(\frac{x}{\Delta_0}\right) & x \in (-\infty, +\infty) \\ \Delta_0 = \Delta_0(e \rightarrow \infty) = \sqrt{\frac{A_{ex}}{K_u}} \end{cases}$$

La largeur de la paroi peut être exprimée à l'aide de la dérivée de m_z (figure III-5(a)) ainsi:

$$\delta(e \rightarrow \infty) = 2 \left(\frac{\partial m_z}{\partial x} \Big|_{x=0} \right)^{-1}.$$

Par analogie avec ce modèle, la courbe notée $\delta(I)$ a été obtenue après avoir eu déterminé la pente de l'aimantation à l'origine pour chaque épaisseur (figure III-5(c)) à mi-hauteur de la couche. Parce que $\delta(I)$ s'approche asymptotiquement de la limite du massif, la partie centrale de la paroi est quasiment Bloch idéale dans la limite des couches épaisses.

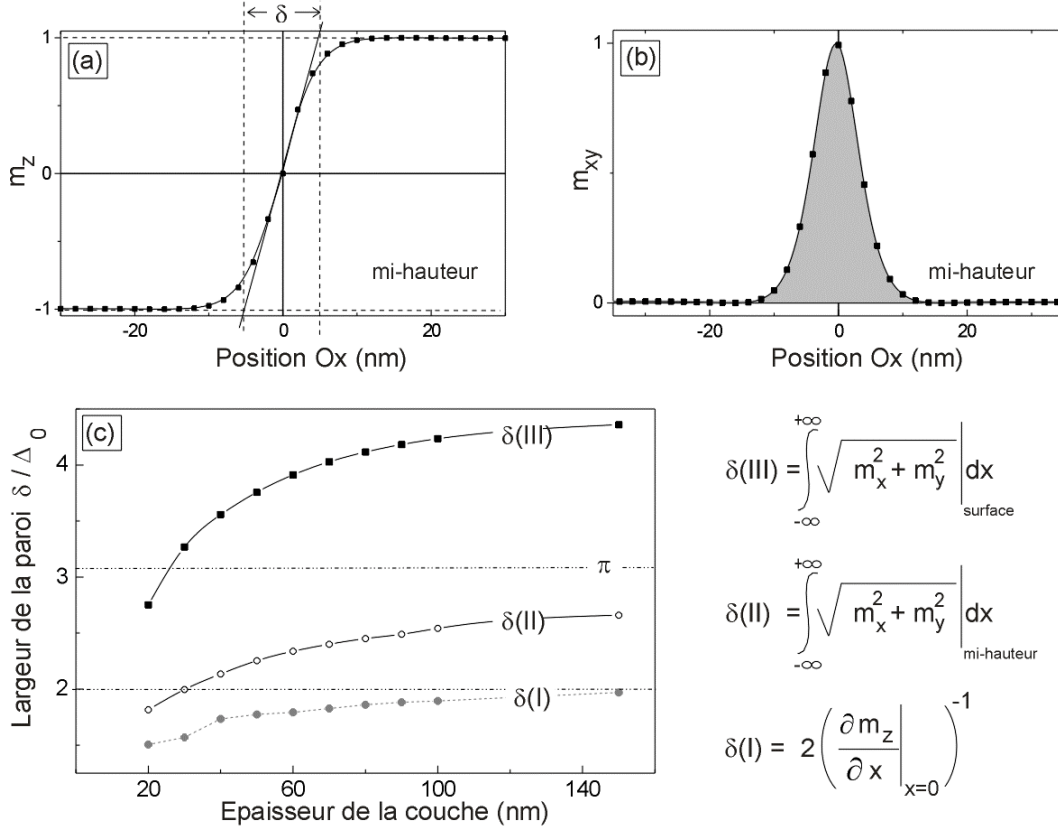


Figure III-5: Définition de la largeur de la paroi à partir de (a) la pente de la composante m_z à l'origine et (b) l'intégrale de la composante m_{xy} . Les profils obtenus pour la couche de 100 nm d'épaisseur ont été utilisés pour cette illustration. (c) Variation de la largeur de la paroi en fonction de l'épaisseur de la couche, en utilisant différentes définitions.

Afin de mettre en évidence le changement de la structure de la paroi lorsqu'on se déplace du centre vers la surface de la couche, une deuxième définition a été exploitée. Celle-

ci tient compte de la composante de l'aimantation perpendiculaire à l'axe cristalline m_{xy} (figure III-5(b)) dans une évaluation de type intégral:

$$\delta = \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{m_x^2 + m_y^2} dx.$$

Pour une paroi de Bloch idéale, cette définition conduit vers une largeur de paroi de:

$$\delta_B(e \rightarrow \infty) = \pi \Delta_0$$

Cette limite n'est pas tout à fait atteinte par la courbe numérique $\delta(II)$ obtenue à la mi-hauteur de la couche. La courbe $\delta(III)$ correspondante au profil de la paroi sur la surface de la couche augmente avec l'épaisseur de manière similaire avec la courbe $\delta(II)$. Près de la surface, la paroi est nettement plus étendue qu'au centre de la couche car les effets magnétostatiques sont dominants et forcent l'aimantation à s'allonger dans le plan. Les résultats que nous venons de rapporter s'avèrent en bon accord avec ceux obtenus numériquement par Rave pour des couches de $Q = 0.1$ [Rave JMMM 97]. Malheureusement, il y a très peu d'évidences expérimentales quantitatives [Scheinfein PRB 91] qui pourraient fournir des valeurs concrètes sur la largeur de la paroi et notamment sur sa dépendance au travers l'épaisseur de la couche.

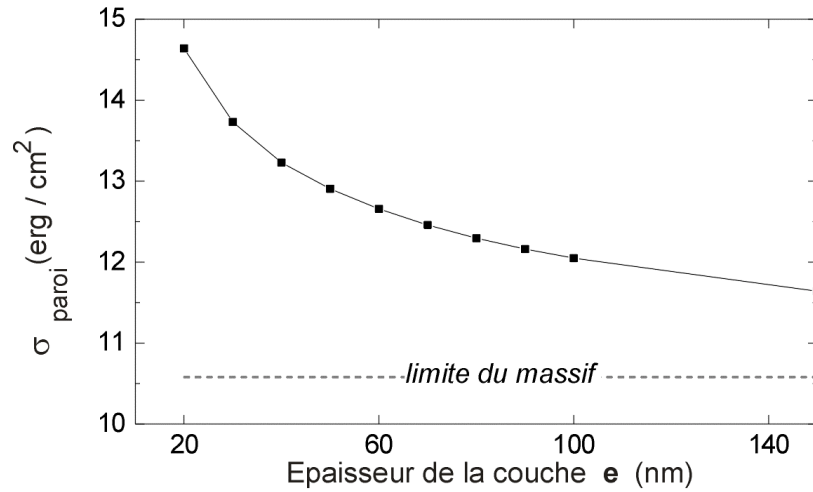


Figure III-6: Evolution de la densité d'énergie de la paroi en fonction de l'épaisseur de la couche. La limite correspondante à une paroi de Bloch infinie est indiquée en trait pointillé.

Un autre paramètre sensible à l'évolution de la structure interne de la paroi en fonction de l'épaisseur de la couche est sa densité d'énergie sur l'unité de surface $\sigma_{paroi}(e)$. Si la largeur de la paroi a été définie localement (à mi-hauteur ou à la surface de la couche) la densité d'énergie décrit de manière globale la paroi. Les parois dans les couches fines ont une

densité d'énergie de l'ordre de 15 erg/cm^2 alors que pour d'épaisseurs considérables leur densité d'énergie décroît vers la limite du massif 10.6 erg/cm^2 ($\sigma_{\text{paroi}}(e \rightarrow \infty) = 4\sqrt{A_{\text{ex}}K_u}$) (figure III-6).

En réalité, la structure interne de la paroi n'est pas contrôlée uniquement par l'épaisseur de la couche. Il y a une multitude de facteurs qui peuvent la changer, tels que les défauts (des inclusions non-magnétiques, des déformations du réseau cristallin) aussi bien que l'histoire magnétique (des états désaimantés ou rémanents) [Prejbeanu APL 00]. Sur la figure III-7, l'effet d'une variation locale de la constante d'anisotropie magnétocristalline sur la structure d'une paroi de Bloch asymétrique est montré. Dans la région de la paroi nous supposons que la constante d'anisotropie magnétocristalline varie de $K_1 = 500 \times 10^3 \text{ J/m}^3$ à $K_2 = 100 \text{ J/m}^3$. Ce type de *défaut* implique, dans une première étape, l'élargissement de la paroi. Lorsque la région affectée par la déformation est suffisamment large, la structure exhibée par la paroi semble à celle d'une *paroi vortex* (figure III-2).

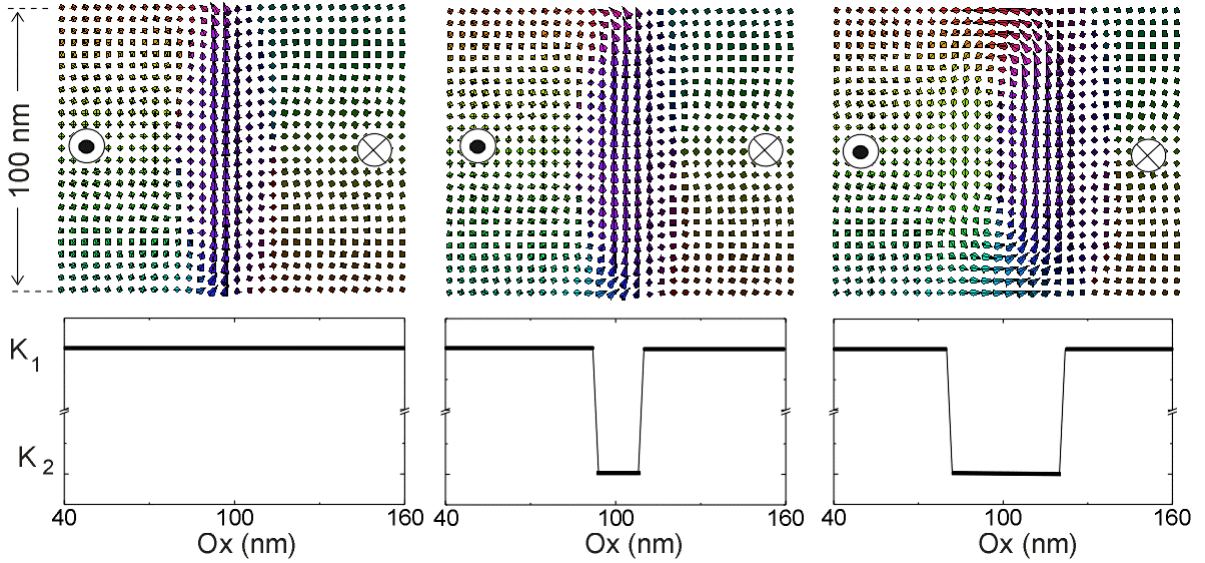


Figure III-7: Modification de la structure de la paroi de Bloch asymétrique dans une couche de 100 nm d'épaisseur, induite par l'altération de l'anisotropie magnétocristalline planaire. La région déformée augmente de 16 nm à 40 nm. Dans la vue transversale une flèche remplace (2 X 2) cellules du maillage.

Des modifications radicales interviennent dans la structure magnétique du système si l'orientation de l'anisotropie magnétocristalline change de parallèle vers perpendiculaire au plan de la couche. Nous allons voir dans les paragraphes prochains l'impact de l'anisotropie magnétocristalline perpendiculaire sur la structure en domaines des couches minces. Tout particulièrement les couches de cobalt (0001) sont visées.

III. 3. Structure en domaines des couches de $\text{Co}(0001)$ à anisotropie magnétocristalline perpendiculaire

La méthode numérique décrite dans le chapitre II, spécialement conçue pour de systèmes à deux dimensions (2D) périodiques, nous permet d'étudier des configurations d'aimantation possédant une symétrie de translation selon une ou deux directions dans le plan de la couche. Plus précisément, il s'agit des structures en domaines telles que: l'état uniforme planaire ou perpendiculaire (une symétrie de translation selon les deux directions planaires) ou l'état en domaines en bandes parallèles périodiques (translation selon un axe du plan et périodicité selon l'autre axe, figure III-1(b)).

III. 3. 1. Considérations sur les configurations magnétiques stables dans les simulations 2D périodiques

En partant d'une configuration de l'aimantation bien définie, le système ferromagnétique relaxe forcément vers un minimum local de la fonctionnelle de l'énergie libre totale. Afin d'identifier tous les états magnétiques stables possibles dans des couches minces, un nombre assez large de configurations d'aimantation doit être sondé.

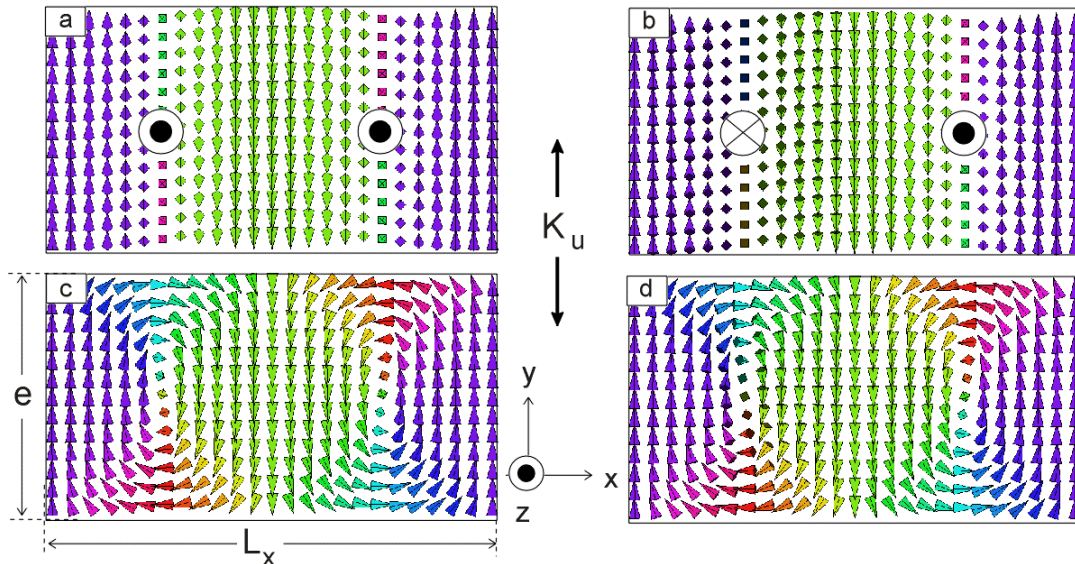


Figure III-8: États de départ (a,b) et leurs états stables correspondants (c,d) trouvés à champ nul (c,d). Les paramètres de simulation utilisés sont : $M_s = 1400 \times 10^3 \text{ A/m}$, $K_u = 600 \times 10^3 \text{ J/m}^3$, $A_{ex} = 3.0 \times 10^{-11} \text{ J/m}$, le pas de maillage est de $h_x = h_y = 2 \text{ nm}$. La couche fait $e = 100 \text{ nm}$ d'épaisseur et la périodicité des domaines a été fixée à $L_x = 194 \text{ nm}$.

Le nombre d'états magnétiques stables, qui apparaissent dans notre système, étant discret, il est possible qu'en utilisant des configurations initiales différentes, le même minimum d'énergie soit trouvé. Les configurations de l'aimantation qui correspondent à des minimums de l'énergie libre totale, sont présentées sur la figure III-8 en vue en section transversale (XOY), avec leurs configurations de départ associées.

Ces configurations de départ figure III-8(a,b) ont été le plus fréquemment utilisées parce qu'elles sont avantageuses du point de vue du temps de calcul. Les calculs ont permis d'identifier deux structures en bandes stables à champ nul différenciées par l'orientation relative entre les parties Bloch des parois. L'état dont les deux parties Bloch orientées parallèlement (figure III-8(c), les deux cœurs pointent vers (+OZ) ou (-OZ)) est énergiquement plus favorable par rapport à celui qui a les deux cœurs orientés antiparallèlement (fig. III-7(d)). Cependant l'écart énergétique reste très faible $\varepsilon_{para}/\varepsilon_{anti}=0.998$ et repose sur l'interaction d'échange entre les queues des parois.

En réduisant progressivement le champ appliqué à partir d'un état saturé planaire, toutes les parties Bloch des parois restent bloquées selon la direction du champ. Dans ce cas, la structure en domaines stabilisée coïncide à l'état fondamental. Au contraire, le processus de désaimantation planaire (le champ appliqué est diminué à partir du champ de saturation jusqu'à zéro en suivant une sinusoïde amortie) conduit à l'état de minimum local, les deux orientations possibles de la partie Bloch étant équiprobables.

III. 3. 1. 1. Périodicité des domaines en bandes parallèles

Avant de commencer notre présentation, une remarque importante s'impose qui concerne l'investigation numérique des domaines en bandes parallèles dans des couches minces à anisotropie magnétocristalline uniaxiale perpendiculaire au plan de couche. En plus de l'épaisseur de la couche e , des paramètres de matériau M_s , K_u , A_{ex} et des conditions externes $\vec{H}_{app}$, un paramètre supplémentaire intervient dans les calculs: il s'agit de la périodicité des bandes (L_x). La périodicité de la distribution de l'aimantation $\vec{m}$ implique que l'énergie totale ε_{tot} ait la même périodicité:

$$\vec{m} = \vec{m}(L_x) \Rightarrow \varepsilon_{tot} = \varepsilon_{tot}[\vec{m}(L_x)].$$

Pour une valeur fixée de la périodicité, reflétée directement dans le calcul par le nombre de cellules de maillage N_x considérées, une certaine structure en domaines en bandes est obtenue. Cependant, en modifiant légèrement la périodicité, une autre structure en domaines en bandes est trouvée caractérisée par une densité d'énergie peu différente. Parmi toutes ces configurations en bandes, celle qui a la plus basse énergie par unité de surface correspond à la configuration qui minimise l'énergie du système par rapport à la périodicité. La procédure à suivre pendant les simulations des structures périodiques doit donc inclure deux minimisations successives :

1. la minimisation de l'énergie par rapport à la distribution de l'aimantation $\vec{m}$
2. la minimisation de l'énergie par rapport à la périodicité du système N_x .

Les résultats synthétisés dans ce chapitre ont été obtenus en appliquant les considérations précédentes sauf pour quelques exceptions que nous présenterons plus tard. La figure III-9 montre l'évolution de la densité de l'énergie totale ε_{tot} d'une structure en domaines en bandes parallèles en fonction de la périodicité des bandes. La couche de $Co(0001)$ fait $e = 68 nm$ d'épaisseur et les autres paramètres de simulation sont indiqués dans la légende de la figure III-9. La densité d'énergie totale par unité de période atteint sa valeur de minimum pour une périodicité de $N_{x,opt} = 78$.

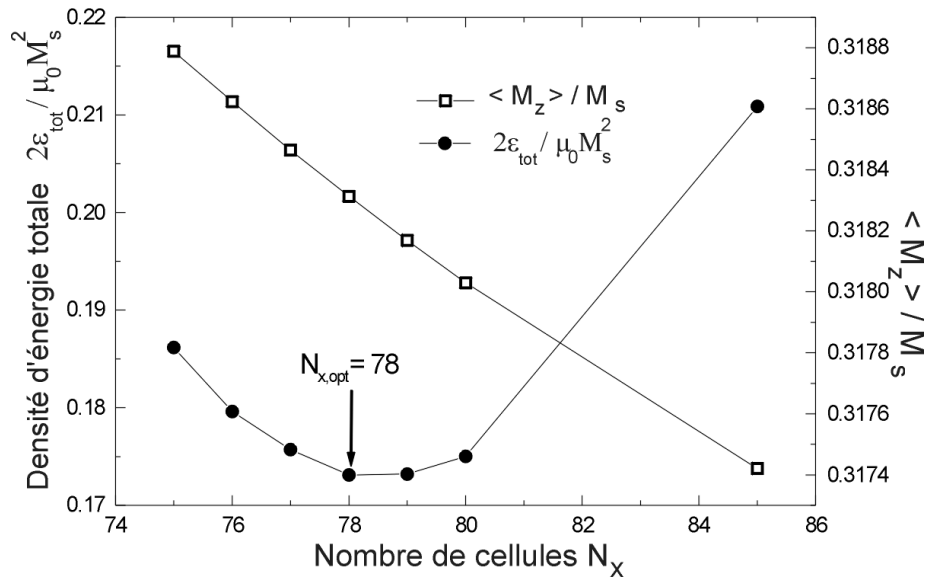


Figure III-9: Optimisation de la périodicité d'une structure en domaines en bandes parallèles pour une couche de $e = 68 nm$ d'épaisseur. Les paramètres de simulation utilisés sont les suivants: $A_{ex} = 3.0 \times 10^{-11} J/m$, $M_s = 1400 \times 10^3 A/m$, $K_u = 600 \times 10^3 J/m^3$ et $h_x = h_y = 2 nm$.

Au contraire, la valeur moyenne de l'aimantation planaire $\langle M_z \rangle = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} M_z(i, j)$

décroît plutôt linéairement avec l'augmentation de la période. La modification de la périodicité se traduit par la modification de la largeur des domaines, tandis que les parois elles-mêmes ne changent pratiquement pas de structure. Ceci implique une conservation de l'aimantation totale:

$$\mathbf{M}_z = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} M_z(i, j).$$

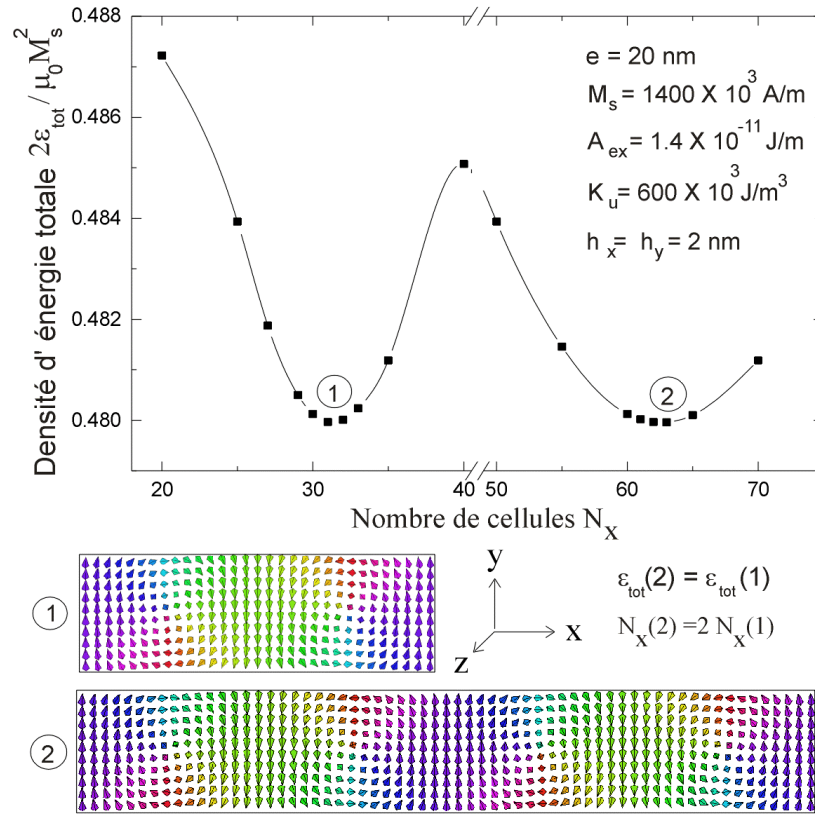


Figure III-10: Evolution de la densité d'énergie totale en fonction du nombre de cellules considérées selon la direction OX pour une couche de 20 nm d'épaisseur. Les simulations avec les paramètres indiqués nous ont conduit aux minimums d'énergie (1) et (2), dont les distributions de l'aimantation sont représentées en dessous du graphique.

Plus généralement, l'aspect périodique de la densité d'énergie totale par rapport à la largeur des domaines est illustré sur la figure III-10. La taille réduite du système (voir les paramètres de simulation indiqués sur la figure III-10) nous a permis de modifier dans un intervalle assez vaste la largeur des domaines (N_x) pour mettre en évidence que :

$$\varepsilon_{tot}[\bar{m}(N_{x,opt})] = \varepsilon_{tot}[\bar{m}(2N_{x,opt})].$$

La distribution de l'aimantation correspondante au minimum d'énergie (1) et (2) est illustrée en bas de la figure III-10. L'unité de période du minimum (2) est double par rapport à celle du minimum (1).

La périodicité des domaines en bandes parallèles aussi bien que leur distribution interne de l'aimantation, sont contrôlées par les paramètres du matériau et l'épaisseur de la couche. Après avoir établi le schéma qui nous conduit à la période optimale de domaines en bandes, nous allons voir dans la section suivante l'effet du facteur de qualité sur la structure micromagnétique interne des domaines en bandes parallèles.

III. 3. 1. 2. Effet du facteur de qualité Q

Une mesure de la compétition entre l'anisotropie magnétocristalline et l'anisotropie de forme (effets magnétocristallins versus effets magnétostatiques) est donnée par le facteur de qualité $Q = \frac{2K_u}{\mu_0 M_s^2}$. Les couches minces caractérisées par un facteur de qualité largement supérieur à l'unité $Q \gg 1$ (grenat, ferrite) ont été intensivement étudiées à cause de leurs applications technologiques. Elles présentent à champ nul des domaines en bandes parallèles très bien définis.

Afin d'illustrer le rôle du facteur de qualité Q , nous avons choisi une couche de Co_3Pt de 100 nm d'épaisseur caractérisée par un facteur de qualité de $Q = 2.9$ [Folks JMSJ 99] et nous avons comparé sa structure interne avec celle d'une couche de $\text{Co}(0001)$, d'épaisseur identique, mais qui a un facteur de qualité inférieur $Q = 0.5$. Les sections transverses de leurs structures en domaines obtenues après l'optimisation de la périodicité sont montrées sur la figure III-11. Les simulations ont été faites avec les paramètres des matériaux indiqués dans le tableau incrusté et en utilisant un pas de maillage de $h_x = h_y = 2 \text{ nm}$. La périodicité résultante est de $L_x = 194 \text{ nm}$ pour $\text{Co}(0001)$ et de $L_x = 212 \text{ nm}$ pour Co_3Pt . Malgré le faible décalage de périodicité, la différence essentielle entre les deux systèmes réside dans la distribution interne de l'aimantation au niveau des parois de domaine.

- Les couches minces à anisotropie magnétocristalline perpendiculaire faible $Q \ll 1$ ($Q[\text{NiFe}] \cong 0.00025$) ou modérée $Q < 1$ ($Q[\text{Co}] \cong 0.5$) sont caractérisées par la formation des domaines *up* et *down* séparés par des parois de domaines assez complexes. Ces parois ont

une structure qui varie en profondeur de l'épaisseur de la couche et présentent une partie centrale de type Bloch et des régions de surface de type Néel. Lorsque le facteur de qualité Q est faible, les parties Néel (*Néel caps*) occupent un volume considérable et deviennent ainsi des vrais domaines de fermeture.

- Au contraire, si l'anisotropie magnétocristalline domine l'interaction magnétostatique $Q > 1$ ($Q[\text{Co}_3\text{Pt}] \cong 2.4$) les parties Néel s'atrophient et les parois de type Bloch sont prépondérantes même au voisinage des surfaces de la couche. Cette fois-ci, il s'agit des parois de domaines très étroites tout au long de l'épaisseur de la couche.

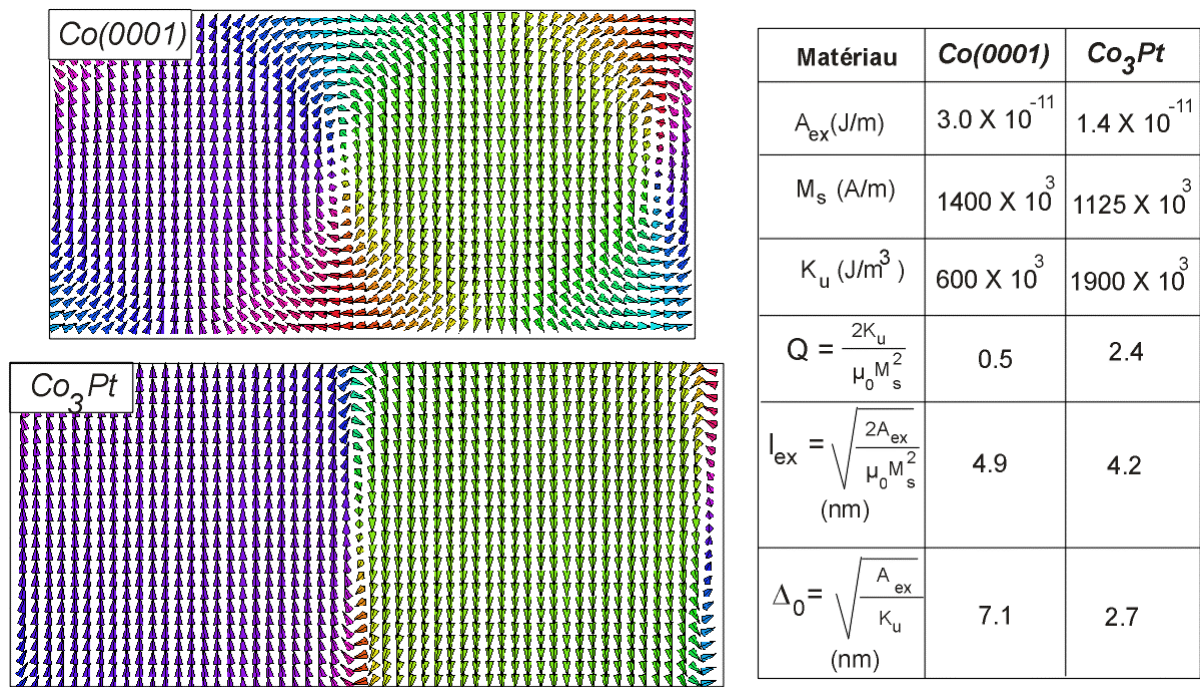


Figure III-11: Effet du facteur de qualité Q sur la structure en domaines en bandes parallèles d'une couche de 100 nm d'épaisseur. Les deux configurations de l'aimantation sont représentées à la même échelle afin de comparer les détails de la distribution de l'aimantation (1 flèche / 2X2 cellules).

Un autre facteur décisif pour la structure en domaines en bandes parallèles est l'épaisseur de la couche. Dans les sections prochaines nous essayerons de montrer l'impact de la modification de l'épaisseur sur la structure magnétique de couches de Co(0001). Ensuite l'évolution de cette structure en fonction du champ appliqué dans le plan de la couche sera débattue.

III. 3. 2. Description du système physique étudié

Nous avons restreint les calculs 2D périodiques à des couches minces de $\text{Co}(0001)$ à forte anisotropie magnétocristalline uniaxiale perpendiculaire au plane de la couche, intensivement étudiées au sein de notre groupe. Les couches ont été élaborées par épitaxie par jet moléculaire dans une structure multicouche de type $\text{Ru} / \text{Co} / \text{Ru}$. La couche tampon de ruthénium déposée sur un substrat de mica assure la croissance du Co dans une structure hexagonale compacte (0001). Plus de détails sur la préparation et la caractérisation des échantillons sont présentés dans la thèse de Michel Hehn [Hehn thèse]. L'épaisseur de la couche de Co a été variée de 12 nm à 100 nm avec un pas de 8 nm (figure III-12). Des mesures in-situ RHEED et ex-situ de diffraction de rayons X ont mis en évidence la structure cristalline hexagonale compacte de Co d'une très bonne homogénéité cristalline. La largeur des raies de diffraction a montré l'existence d'une phase hexagonale unique et d'une inter-diffusion négligeable des espèces atomiques aux interfaces.

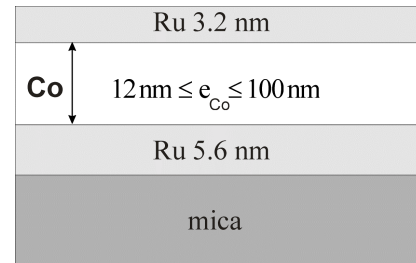


Figure III-12 : Vue schématique de la structure stratifiée du système.

Les études expérimentales de magnétométrie *SQUID* (Superconducting Quantum Interference Device), de microscopie à force magnétique (*MFM*) et de résonance ferromagnétique (*RFM*) ont été effectuées par *Ursula Ebels* à Ohio State University, Columbus, Etats Unis. Les données expérimentales indiquent une réorientation de la direction de l'aimantation lorsque l'épaisseur augmente de 12 nm à 100 nm. Pour les couches très fines ($e < 28 \text{ nm}$), lorsque le champ est appliqué perpendiculairement au plan de la couche, les courbes d'aimantation (figure III-13(a)) possèdent la signature nette d'un renversement par rotation cohérente décrite par le modèle de Stoner et Wohlfarth. Dans ce régime d'épaisseur, l'axe de croissance coïncide à l'axe de difficile aimantation, l'aimantation étant essentiellement planaire. Ces caractéristiques sont également confirmées par des observations par *MFM* (3III-12(a)). L'augmentation de l'épaisseur de Co induit l'apparition des domaines en bandes parallèles (figure III-13(b)) et l'aimantation est majoritairement orientée perpendiculairement au plan de la couche. L'image *MFM* enregistrée pour une épaisseur de 92 nm nous révèle un contraste magnétique typique d'une structure de domaines en bandes parallèles à partir du quel la périodicité des domaines peut être évaluée.

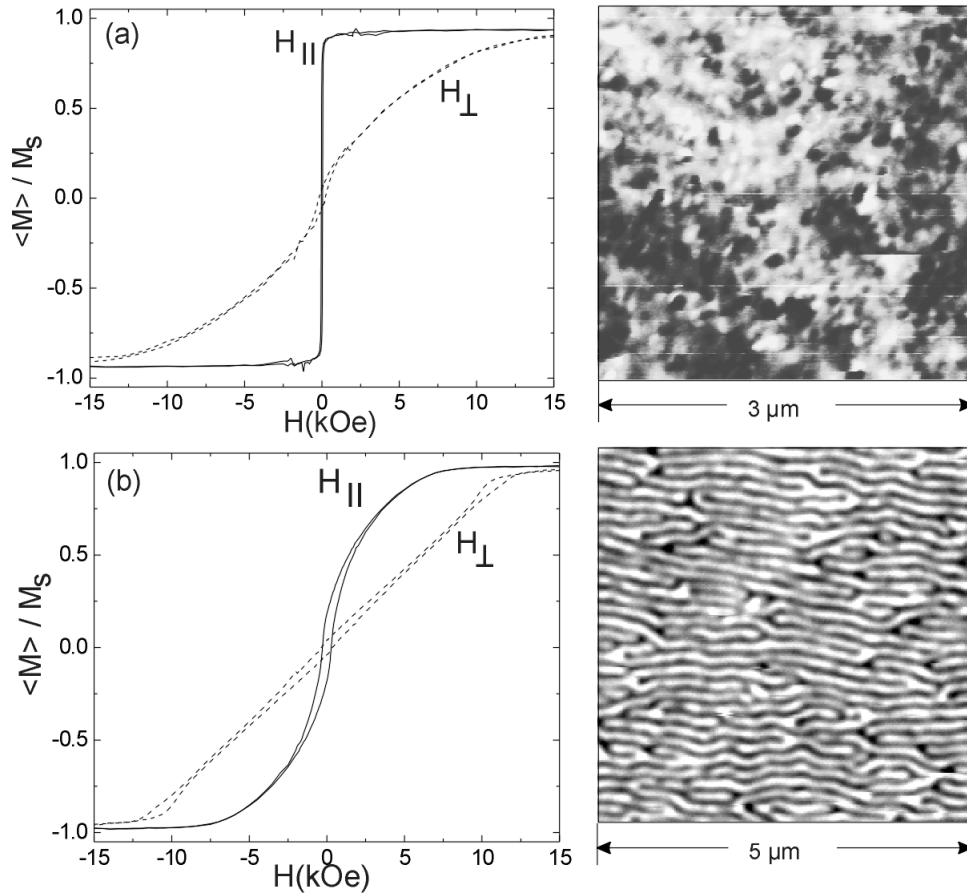


Figure III-13: Cycles d'aimantation avec le champ appliqué dans le plan et perpendiculairement au plan de la couche et images MFM à la rémanence planaire, pour des couches de cobalt de (a) 20 nm et (b) 92 nm d'épaisseur.

III. 3. 3. Configurations magnétiques à champ nul

La structure en domaines en bandes caractéristique des couches de Co(0001) de facteur de qualité modéré $Q = 0.5$ est assez complexe: des domaines *up* et *down*, des zones de fermeture et des parois. Malgré la présence des domaines de fermeture, les domaines *up* et *down* ne sont pas complètement fermés. La structure de parois séparant les domaines change d'une structure de parois de type Bloch (au centre de la couche) vers une structure de parois de type Néel à la surface de la couche. Pourtant le facteur de qualité n'est pas assez élevé pour empêcher l'apparition des domaines de fermeture (cas $Q \gg 1$) ni assez bas pour fermer le flux de manière complète (le cas $Q \ll 1$) [Hubert 98]. La propriété essentielle des domaines en bandes parallèles est leur périodicité et leur structure interne dépendantes de l'épaisseur de la couche que nous présenterons dans les sections prochaines.

III. 3. 3. 1. Périodicité des bandes en fonction de l'épaisseur

En suivant la procédure présentée dans la section III.3.1.1., la variation de la largeur des domaines D_x en fonction de l'épaisseur e de la couche rapportée sur la figure III-14, est obtenue à champ nul. Sur le même graphique, sont représentés les résultats simulés avec deux valeurs distinctes de la constante d'échange A_{ex} ainsi que les données extraites à partir des images de microscopie à force magnétique MFM [EbelsP RB 01, Hehn PRB 96]. Les courbes en traits pointillés représentent des interpolations de type $D_x \propto \sqrt{e}$. Une telle loi de variation a été prédite par le modèle développé par Kittel [Kittel PR 46, Annexe B-II], et généralisé après par Kooy et Enz [Kooy PRR 60, Annexe B-III].

Les études expérimentales nous ont fourni les valeurs de l'aimantation à saturation M_s , à la constante d'anisotropie magnétocristalline K_u et à leur variation en fonction de l'épaisseur de la couche de Co ou la température [Hehn thèse, Paige JMMM 84]. La valeur moyenne de l'aimantation à saturation se situe autour de $M_s = 1400 \times 10^3 \text{ A/m}$ et à la température ambiante la constante d'anisotropie magnétocristalline vaut $K_u \cong 600 \times 10^3 \text{ J/m}^3$.

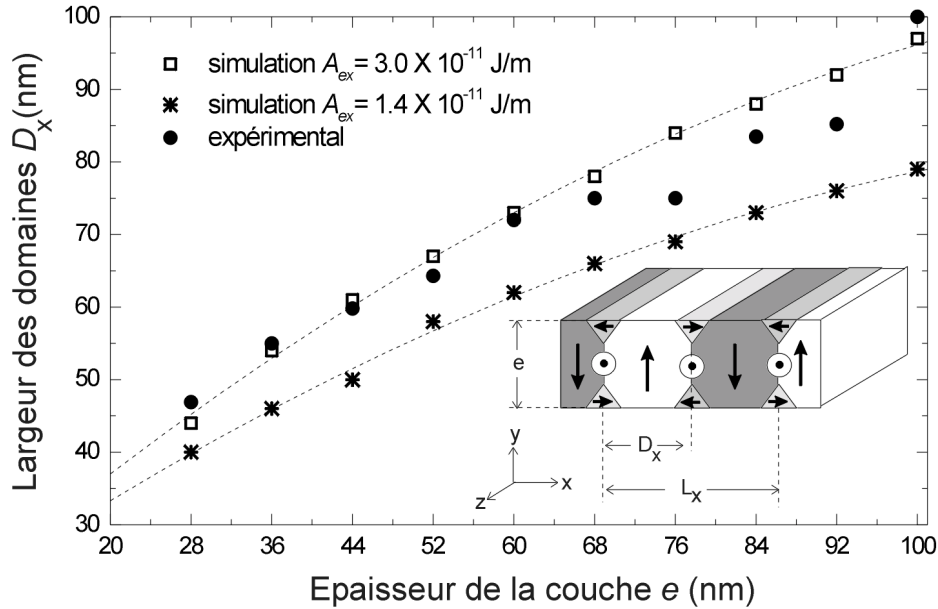


Figure III-14: Variation de la largeur des domaines en bandes pour des couches de Co(0001), en fonction de l'épaisseur de la couche. Les paramètres utilisés pour les simulations sont: $M_s = 1400 \times 10^3 \text{ A/m}$, $K_u = 600 \times 10^3 \text{ J/m}^3$ et un pas de maillage de $h_x = h_y = 2 \text{ nm}$ a été appliqué.

Parmi les paramètres intrinsèques du matériau, le seul qui n'est pas bien connu est la constante d'échange A_{ex} . Le rôle joué par la constante d'échange A_{ex} sur les résultats des simulations est illustré sur la figure III-15, où la variation de l'aimantation rémanente en fonction de l'épaisseur de la couche est représentée (voir aussi figure III-14). Deux valeurs de la constante d'échange A_{ex} ont été testées afin d'obtenir une bonne concordance avec les résultats expérimentaux. Nous avons pris les valeurs rapportées dans la littérature de spécialité pour le cobalt: $A_{ex} = 3.0 \times 10^{-11} \text{ J/m}$ [Labrune JMMM 92] et $A_{ex} = 1.4 \times 10^{-11} \text{ J/m}$ [Zhu 01]. La comparaison entre les résultats numériques et ceux déduits à partir des mesures SQUID, montre que la simulation la plus proche de l'expérience correspond à une valeur assez large de la constante d'échange $A_{ex} = 3.0 \times 10^{-11} \text{ J/m}$. C'est cette valeur qui a servi par la suite dans les calculs.

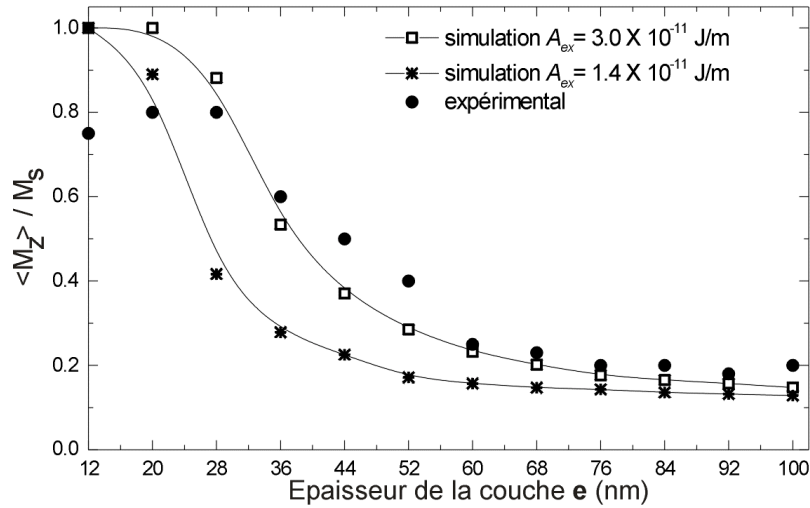


Figure III-15: Variation de l'aimantation planaire rémanente pour des couches de $\text{Co}(0001)$, en fonction de l'épaisseur de cobalt obtenue si $M_s = 1400 \times 10^3 \text{ A/m}$, $K_u = 600 \times 10^3 \text{ J/m}^3$ et un pas de maillage de $h_x = h_y = 2 \text{ nm}$ ont été utilisés.

L'écart entre l'expérience et la simulation à ce niveau du calcul, après avoir optimisé les paramètres d'entrée (M_s, K_u, A_{ex}), peut être attribué en dehors des défauts non-inclus en simulation, à la déviation de la structure en bandes réelle par rapport à une structure en bandes parfaitement parallèles. En réalité, les domaines en bandes n'ont pas tous pratiquement la même largeur (infinie dans les calculs). Par exemple, pour une épaisseur donnée, leur périodicité est loin d'être idéale, car les domaines ne sont pas infinis et puis, comme on peut voir sur la figure III-13(b), certains domaines peuvent colapser.

III. 3. 3. 2. Profils de l'aimantation

Examinons maintenant les détails de la distribution de l'aimantation. La variation de l'épaisseur de la couche induit des modifications importantes dans la structure magnétique à la rémanence des couches $Co(0001)$ comme la vue générale de la distribution de l'aimantation le prouve (figure III-16) reprises après en divers profils sur la figure III-17.

- L'augmentation de l'épaisseur de la couche provoque le passage d'un régime de *weak stripes* ($e = 28 \text{ nm}$) vers une structure en domaines en bandes parallèles complètement développées ($e = 100 \text{ nm}$).
- Au voisinage de la surface, les composantes m_x et m_y (figure III-17(a,b)) ont des variations sinusoïdales comme celles indiquées par les modèles de Muller [Muller PR 61, Hubert 98 page 299, Annexe B-IV].

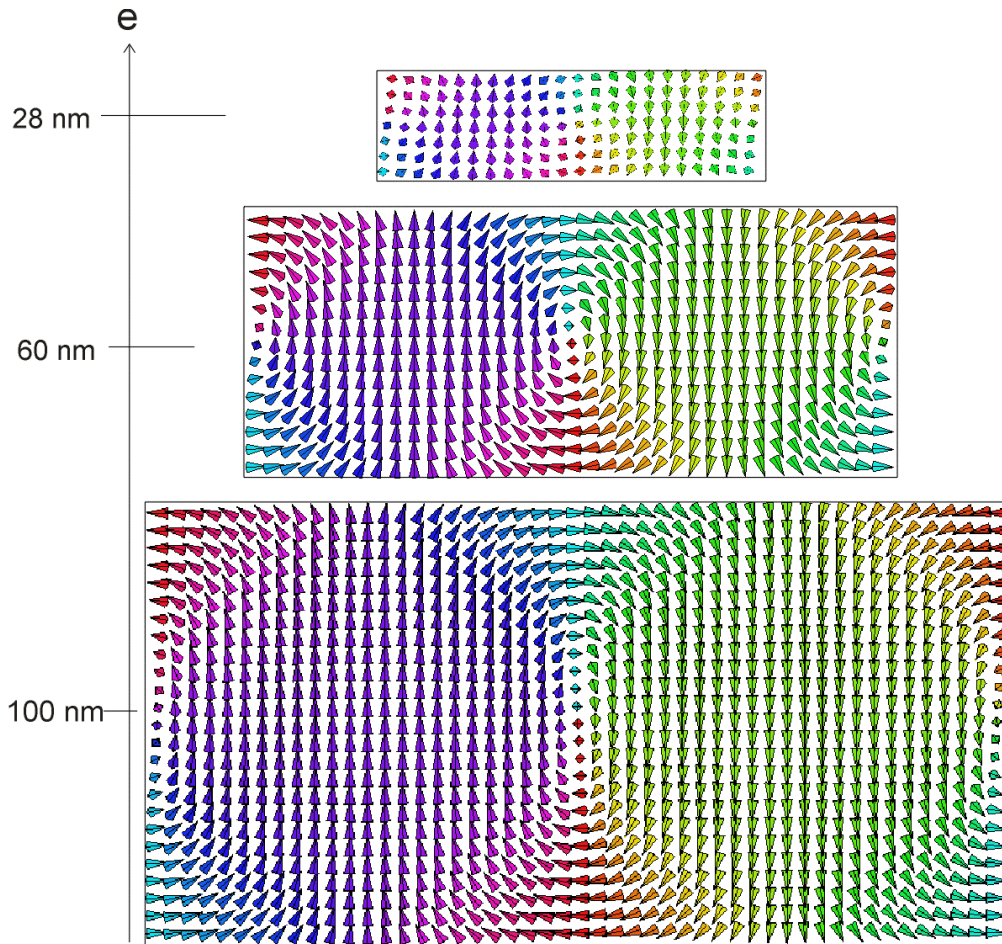


Figure III-16 : Vue en section transversale (XOY) de la distribution de l'aimantation pour différentes épaisseurs de la couche à champ nul. Chaque flèche désigne 2X2 cellules du maillage.

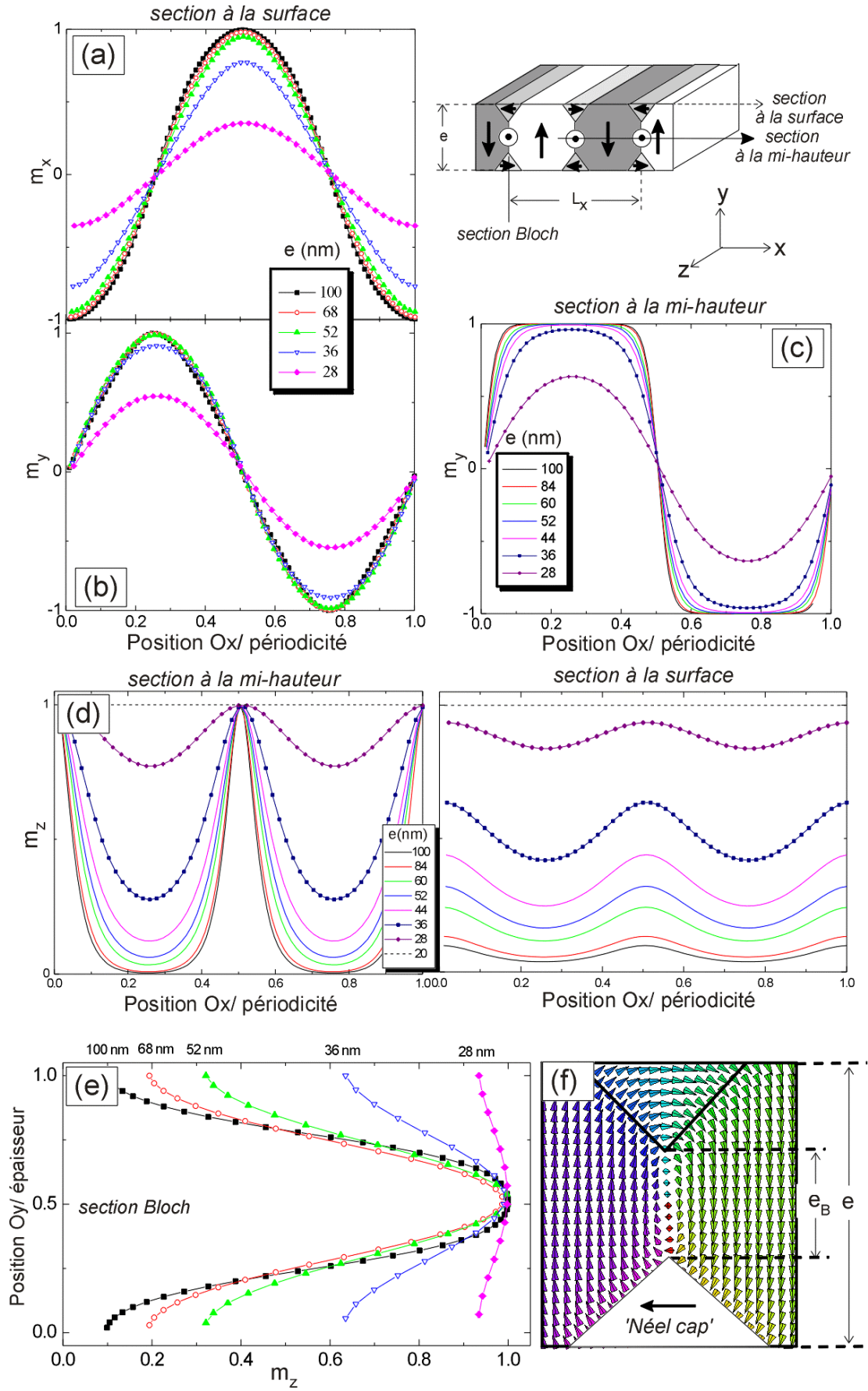


Figure III-17 : Evolution de l'aimantation en fonction de l'épaisseur e de la couche selon diverses directions dans l'espace, à champ nul.

- Au contraire, en s'approchant de la mi-hauteur de la couche, seules les couches très fines exhibent un comportement sinusoïdal pour la composante de l'aimantation hors du plan m_y (figure III-17(c)). Lorsque l'épaisseur de la couche augmente le profil de m_y change vers une variation rectangulaire typique pour les domaines d'aimantation *up* et *down*.
- Dans la limite des épaisseurs larges, des vrais domaines *up* et *down* se forment comme on peut le distinguer d'après la dépendance de m_z (figure III-17(d)), car au milieu des domaines, l'aimantation m_z s'annule. Cependant, il faut remarquer que les domaines de fermeture ne sont pas tout à fait unis entre eux.

III. 3. 3. Rémanence planaire

Les valeurs moyennes de l'aimantation selon certaines directions de l'espace en fonction de l'épaisseur de la couche sont représentées sur la figure III-18. Nous avons pu extraire des informations intéressantes sur la répartition du volume de l'échantillon entre les domaines *up* et *down*, les domaines de fermeture et les parois de type Bloch.

- La fraction du volume de l'échantillon qui revient aux domaines *up* et *down* est proportionnelle à la somme :

$$V_D \propto \langle |m_y| \rangle \quad \text{où} \quad \langle |m_y| \rangle = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} |m_y(i, j)|.$$

On peut constater que si l'épaisseur de la couche de cobalt est plus large de 60 nm, le volume des domaines *up* et *down* cumule plus de 75% de volume total (figure III-18(a)). A partir de cette épaisseur, les domaines *up* et *down* sont des 'vrais' domaines *up* et *down* car à l'intérieur d'eux l'aimantation devient parfaitement perpendiculaire au plan de la couche, comme la variation de la valeur maximale de l'aimantation $\max |m_y|$ au centre des domaines nous le prouve.

- De manière similaire, le volume des domaines de fermeture est donné par $V_{DF} \propto \langle |m_x| \rangle$. Sur la figure III-18(b) le volume du cœur des domaines de fermeture, défini comme la région où la composante m_x de l'aimantation a une amplitude supérieure à 0.90, a été représenté en fonction de l'épaisseur de la couche. Ainsi le volume du cœur des domaines

de fermeture à été estimé à environ 6% du volume de l'échantillon si l'épaisseur dépasse $e = 60 \text{ nm}$.

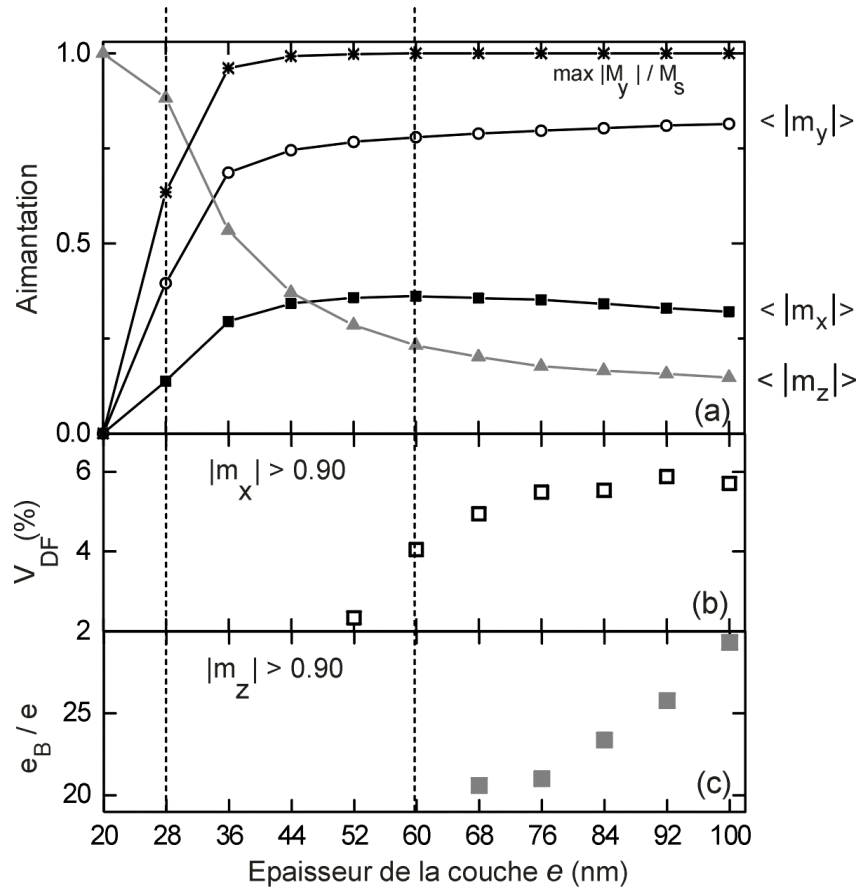


Figure III-18 : (a) Valeurs moyennes de l'aimantation en fonction de l'épaisseur de la couche. (b) Fraction du volume de l'échantillon correspondante au cœur des domaines de fermeture. (c) Hauteur relative de la paroi Bloch e_B par rapport à l'épaisseur de la couche e .

- Relative aux parois de Bloch, nous pouvons conclure qu'au-dessus de 60 nm, il y a une vraie paroi de Bloch à 180° et que sa hauteur relative à l'épaisseur de la couche (figure III-17(f)) dépasse 25 %. Lorsque l'épaisseur de la couche décroît en dessous de 60 nm, l'aimantation des domaines de fermeture (figure III-17(a) profil de m_x en section à la surface) et l'aimantation des domaines *up* et *down* est réorientée dans le plan de la couche selon la direction du cœur Bloch (figure III-17(e) profil de m_z en section Bloch). Dans ces conditions, il n'y a pas une différence nette entre les régions de l'aimantation telles que les domaines et les parois.

L'effet majeur de l'épaisseur de la couche sur une structure en domaines en bandes, se concrétise sur la forme d'une réorientation de l'axe de facile aimantation: de hors du plan vers le plan de la couche lorsque l'épaisseur varie de 60 nm à 36 nm. Le modèle de Muller

[Annexe B-IV] prédit une valeur de transition autour de 44 nm. Cette réorientation se produit de façon continue et elle est induite par l'augmentation de l'anisotropie de forme par rapport à l'anisotropie magnétocristalline lorsque la couche devient de plus en plus fine. Dans la limite des épaisseurs faibles, dans les matériaux à facteur de qualité modéré $Q > 1$, l'anisotropie de forme emporte l'anisotropie magnétocristalline et force l'aimantation s'allonger dans le plan de la couche. Au contraire, dans les couches caractérisées par un facteur de qualité supérieur à l'unité $Q > 1$ la réduction de l'épaisseur induit l'apparition de l'état uniformément aimanté perpendiculaire [Folks JMSJ 99].

III. 3. 4. Cycle d'aimantation planaire

Après avoir suivi la façon selon laquelle la distribution interne de l'aimantation est influencée par la variation de l'épaisseur de la couche de $\text{Co}(0001)$, on s'intéresse maintenant au rôle joué par le champ externe. Dans cette section les études ont été concentrées sur l'application d'un champ externe homogène, tandis que les aspects dynamiques seront développés dans la section dédiée à la résonance ferromagnétique (section III.3.5.). L'application du champ se fait dans le plan de la couche selon la direction de bandes parallèles (OZ).

La symétrie de translation imposée au système nous empêche à étudier en profondeur le mécanisme de nucléation des domaines en bandes à partir d'un état saturé parfaitement planaire. Le couple exercé par le champ effectif sur l'aimantation dans l'état saturé planaire, s'annihile partout dans l'échantillon car celui-ci est infini dans le plan et en conséquence le système reste bloqué dans cet état saturé. En analysant les états saturés dans des champs quasiment plans mais qui présentent de légères déviations hors du plan (1° , 2°) nous avons pu constater que le système évolue finalement vers une structure en bandes parallèles. Au contraire, les courbes d'aimantation obtenues sont fortement liées à l'amplitude de la déviation du champ appliqué.

Afin d'éviter ce genre de difficulté provenant de l'extension infinie du système, le calcul de la courbe d'hystérésis est fait en suivant un chemin différent du chemin expérimental. La configuration en domaines en bandes parallèles obtenue en champ nul qui est symétrique par rapport à l'orientation des parois Bloch (l'état à haute rémanence, figure

III-8(c)) est soumise à de champs externes planaires de plus en plus forts jusqu'à ce que la saturation soit atteinte. La valeur du champ est incrémentée chaque fois avec un pas de champ relativement petit ainsi les détails de la courbe d'aimantation sont bien sondés. Dès que l'équilibre est atteint pour une certaine valeur du champ appliqué, cet état sert d'état de départ pour la valeur de champ suivante. Bien évidemment la *reproduction* du cycle d'aimantation est suffisamment fidèle si l'état d'équilibre trouvé à chaque valeur du champ externe, correspond à la *réalité*.

Dans la section III.3.1. nous avons présenté la problématique des simulations des systèmes 2D périodiques. Normalement pour chaque valeur du champ appliqué la procédure de la minimisation de l'énergie doit inclure l'optimisation de la périodicité. Les résultats d'une telle procédure sont rapportés sur la figure III-19.

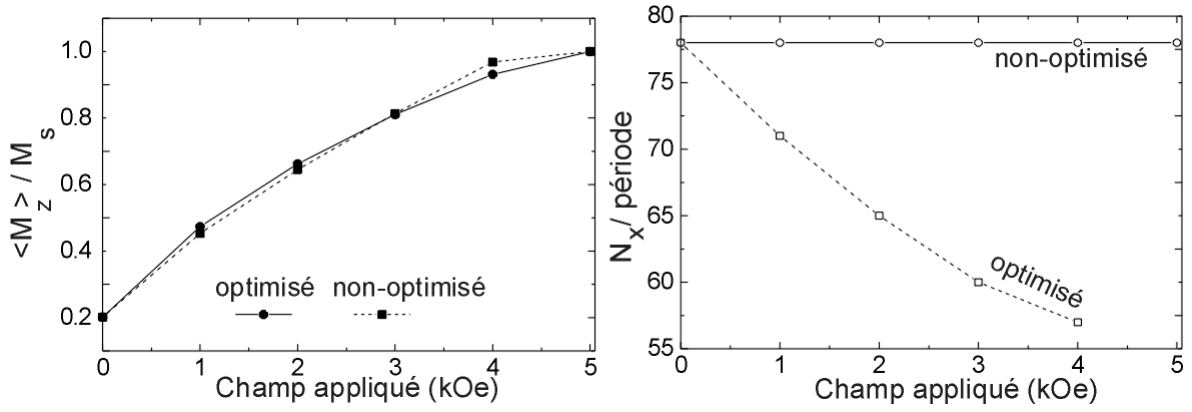


Figure III-19 : Evolution de l'aimantation moyenne et de la période en fonction du champ appliqué, obtenue sans ou avec optimisation de la période des domaines pour une couche de $e = 68 \text{ nm}$. Les calculs faits avec l'optimisation de la périodicité, ont démarrés pour chaque valeur du champ appliqué à partir de la configuration présentée sur la figure III-8(a).

La période change considérablement avec l'intensité du champ appliqué et une loi similaire est prédite par le modèle unidimensionnel valable pour des matériaux $Q \gg 1$ [Annexe III-5, Ramesh thèse, Vukadinovic EPJB 00]. Si la variation du champ entraîne la modification de la périodicité, on se rend compte que l'état d'équilibre trouvé pour $\vec{H}_{app}$ de période L_x ne peut plus servir comme état de départ pour $\vec{H}_{app} + \Delta\vec{H}$ qui à une période légèrement différente $L_x + \Delta L$. Par la suite, la contrainte d'une période fixe, tout au long d'une courbe d'aimantation, est prise en compte préservant ainsi la liaison qui existe entre deux états consécutifs. Cette approche nous a semblé comme étant la plus proche de la réalité car une certaine continuité dans l'évolution sous champ de l'aimantation, est préservée. Des calculs effectués en utilisant la procédure décrite auparavant sont présentés dans la

référence [Labrune JAP 94] pour des couches d'alliage de *NiCo* possédant un axe d'anisotropie magnétocristalline uniaxiale incliné par rapport à la normale de la couche.

Nous avons pu simuler ainsi la courbe d'hystérésis illustrée sur la figure III-20 pour une couche de 100 nm d'épaisseur. Puisque la courbe d'aimantation donne accès à la valeur moyenne de l'aimantation, l'interprétation du processus d'aimantation demande l'analyse détaillée de la distribution locale de l'aimantation pour chaque partie de l'échantillon.

L'état de départ dans le calcul est une configuration en domaines en bandes à aimantation perpendiculaire séparés par des parois dont l'aimantation à leur centre est dirigée dans le même sens (figure III-8(a)). Si le sens d'application du champ externe coïncide ou pas avec le sens des parois de type Bloch centrales, l'aimantation évolue différemment.

L'évolution de la distribution interne de l'aimantation sous l'application d'un champ planaire externe sera discutée pour une couche de 100 nm pour laquelle la courbes simulée et mesurée expérimentalement sont donnés sur la figure III-20.

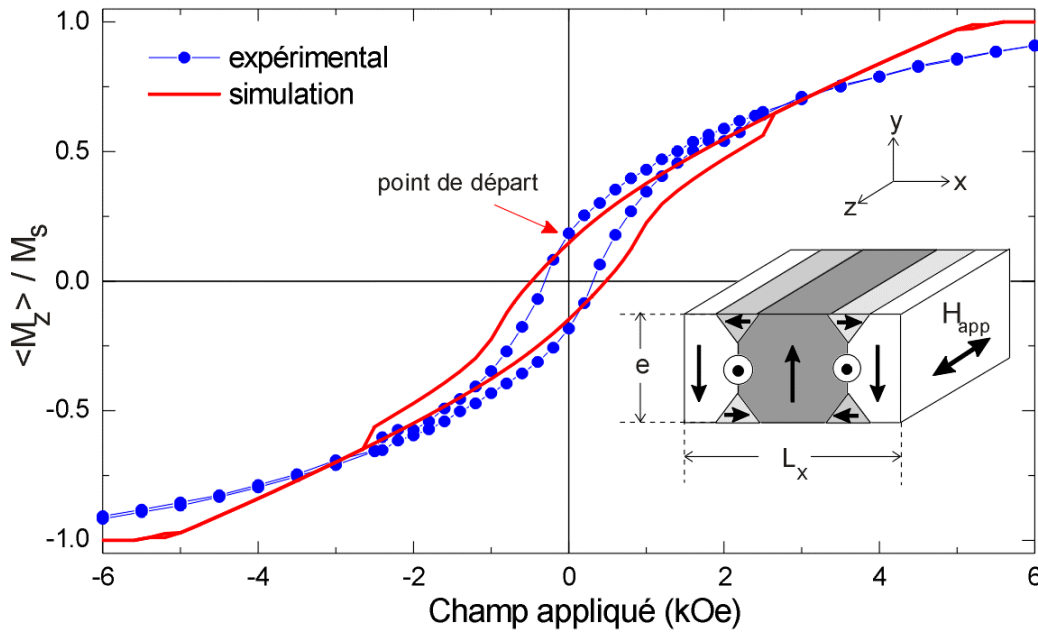


Figure III-20 : Cycles d'aimantation planaire mesuré et simulé pour une couche de 100 nm d'épaisseur, $M_s = 1400 \times 10^3 \text{ A/m}$, $K_u = 600 \times 10^3 \text{ J/m}^3$, $A_{ex} = 3.0 \times 10^{-11} \text{ J/m}$, $h_x = h_y = 2 \text{ nm}$. Le champ appliqué H_{app} est incrémenté chaque fois de 100 Oe.

Champ direct

Lorsque le champ magnétique est appliqué dans le sens du cœur des parois de Bloch, l'aimantation des domaines *up* et *down* et celle des parois de Bloch et de Néel s'orientent progressivement vers la direction du champ. Les domaines *up* et *down* et les domaines de

fermeture suivent une rotation lente et collective au fur et à mesure que le champ augmente. En même temps, les parties centrales des parois Bloch s'élargissent de plus en plus comme nous pouvons le voir sur la figure III-21 où la distribution de l'aimantation est représentée en fonction du champ appliqué. En approchant des champs de plus en plus élevés, juste avant la saturation $H_{app} < H_{sat}$, nous retrouvons une structure en domaines magnétiques de type *weak stripe*. C'est cet état quasi-saturé caractérisé par une déviation faible de l'aimantation par rapport à la saturation, qui a permis à Muller à développer le modèle de nucléation des domaines en bandes, présenté dans l'annexe B-IV. Enfin pour valeurs larges du champ externe, l'anisotropie de forme et le champ appliqué qui favorisent une orientation planaire de l'aimantation arrivent à vaincre l'anisotropie magnétocristalline qui force l'aimantation à être perpendiculaire au plan de la couche et la saturation est acquise.

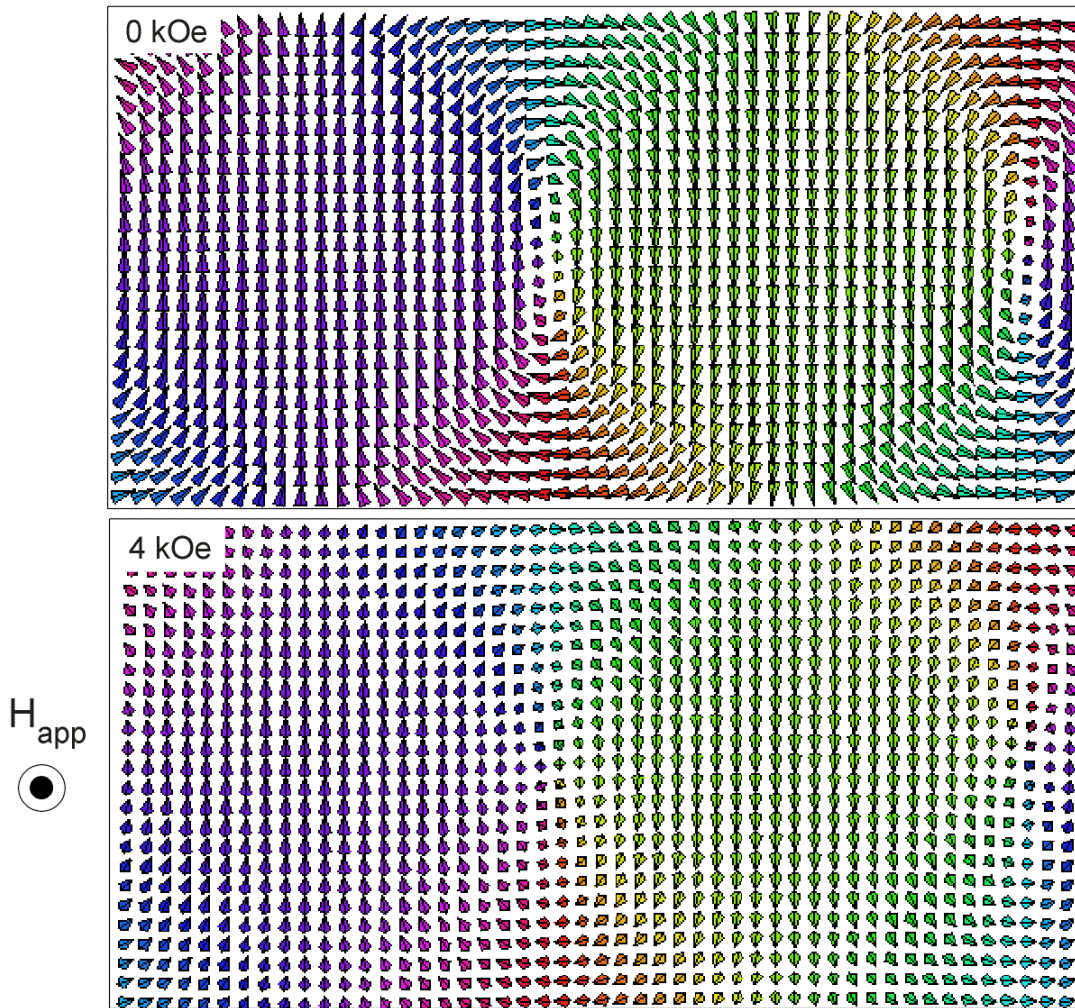


Figure III-21 : Influence d'un champ planaire direct sur la distribution de l'aimantation d'une couche mince de 100 nm d'épaisseur. La période de domaines parallèles correspond à celle optimisée en champ nul: $L_x = 194 \text{ nm}$.

Du point de vue numérique, le fait que le système n'est pas loin de la saturation s'est traduit également par l'augmentation considérable du nombre d'itérations nécessaires pour atteindre l'état d'équilibre. La tolérance imposée au couple a été fixée à $|\vec{m} \times \vec{H}|/(M_s) < 10^{-6}$. De plus, l'amélioration de la solution demande beaucoup d'itérations si le système s'approche d'une transition: d'un état de type *weak stripe* $\rightarrow$ l'état saturé.

Champ inverse

Lorsque le champ appliqué est opposé par rapport au sens du cœur des parois de Bloch le processus d'aimantation comporte plusieurs étapes. Tout d'abord, les domaines *up* et *down* et de fermeture suivent continuellement la direction du champ appliqué tandis que les parois de Bloch se rétrécissent.

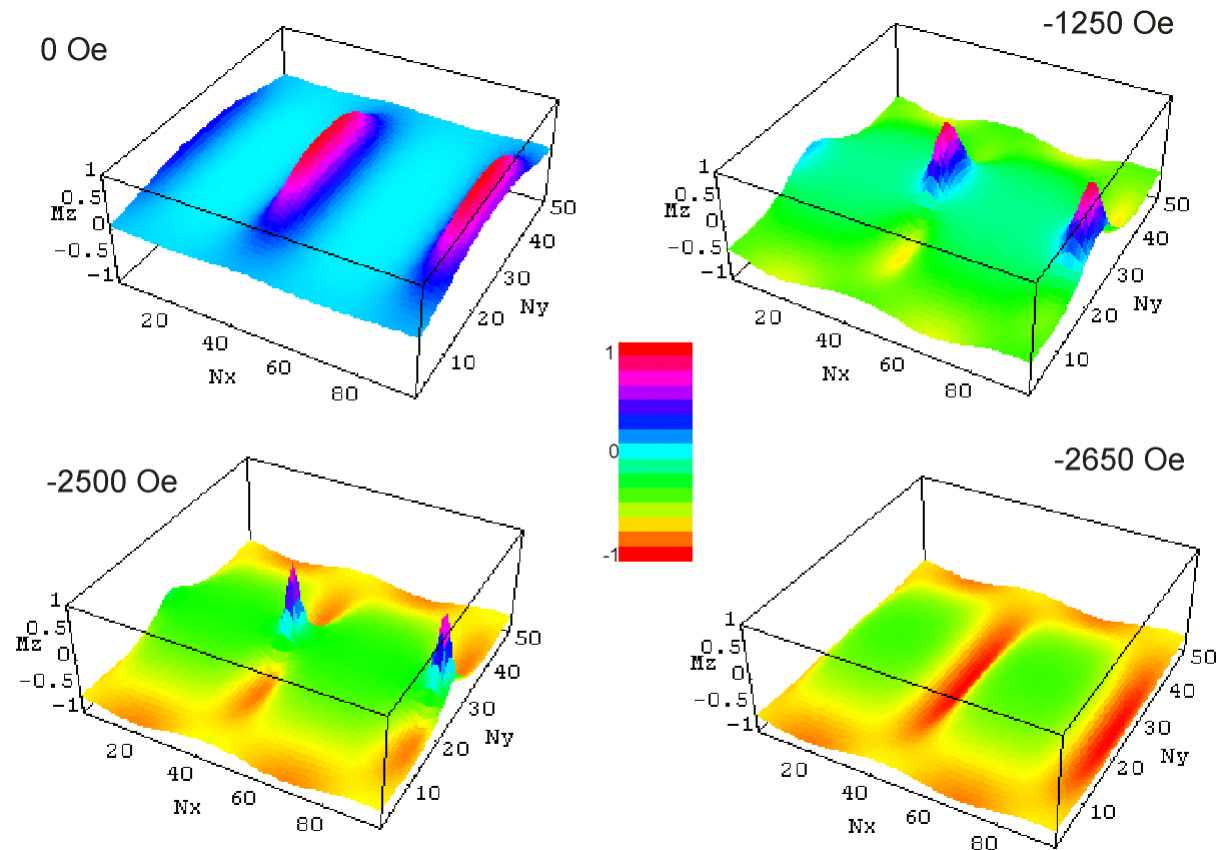


Figure III-22 : Evolution sous champ inverse de la composante m_z de l'aimantation correspondante à la courbe d'aimantation présentée sur la figure III-20.

La partie centrale des parois, d'orientation opposée au champ appliqué, reste bloquée dans cet état mais son volume diminue continuellement comme nous l'indique la figure III-22, où la composante planaire m_z de l'aimantation est représentée en fonction du champ inverse appliqué. Le renversement du cœur des parois de Bloch est déclenché par le champ effectif local et plus précisément par la contribution d'échange due aux domaines qui les entourent. Le retournement des parois entraîne un saut dans la courbe d'aimantation $\Delta\langle m_z \rangle$, qui correspond à la transition d'un état ayant les parties de Bloch selon la direction positive $B(++)$ vers l'état ayant les parties de Bloch selon la direction négative $B(--)$ [Labrune JAP 94]. Le calcul montre que le renversement du cœur de parois de Bloch ne se produit pas exactement au champ coercitif $\vec{H}_{coer}$, défini comme le champ pour lequel l'aimantation totale selon le champ appliqué est nulle: $\langle m_z \rangle = 0$. Le cycle d'aimantation est achevé lorsque la saturation est complète. Le renversement du cœur des parois c'est un problème délicat du point de vue micromagnétique car il implique un sort de singularité et doit être traité avec précaution. La transition se produit mais les détails de sa dynamique restent encore de questions ouvertes.

Sur la figure III-23 nous avons regroupé le sommaire des calculs des courbes d'aimantation planaires.

- La variation de l'épaisseur de la couche induit tout d'abord la modification de la forme de courbe d'aimantation et le déplacement du champ de saturation (figure III-23(a)).
- Le champ de saturation planaire calculé varie en fonction de l'épaisseur d'une manière similaire au champ déduit expérimentalement à partir de mesures de SQUID, mais l'accord des valeurs est seulement qualitatif (figure III-23(b)).
- La transition $B(++)$ vers $B(--)$ se produit pratiquement à la même valeur du champ inverse, indépendamment de l'épaisseur de la couche (figure III-23(c)) mais la hauteur du saut de l'aimantation m_z augmente lorsque l'épaisseur diminue (figure III-23(d)). Pour toutes les épaisseurs, juste avant la saturation négative de la couche, c'est le cœur des parois de Bloch (voir un nombre réduit de spins) qui renverse. En effet, ce reste du cœur de paroi de Bloch n'est pas différent d'une épaisseur à une autre et c'est la raison pour laquelle son renversement se produit pratiquement à la même valeur du champ inverse.
- L'évolution de la structure interne des couches de $Co(0001)$ en fonction à la fois de champ appliqué et de l'épaisseur que nous venons de rapporter, sera utilisé par la suite dans l'interprétation de la réponse des couches à l'action d'une perturbation externe

périodique. Cette comparaison *expérience* - *simulation* est bénéfique en même temps pour les simulations (validation) et pour les résultats expérimentaux (compréhension).

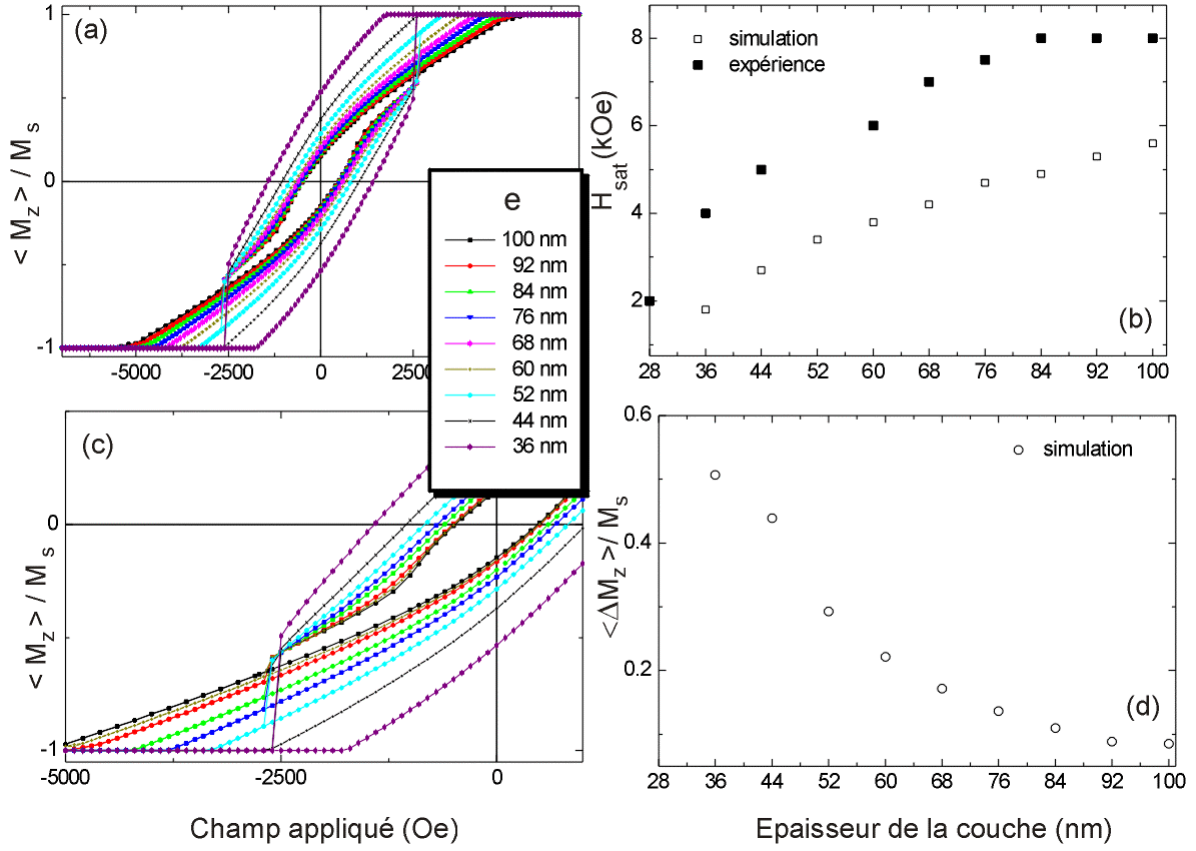


Figure III-23 : (a) Résumé des calculs des courbes d'hysteresis planaires. (b) Evolution du champ de saturation planaire en fonction de l'épaisseur de la couche d'après les calculs et l'expérience. (c) Zoom sur la région de transition B(++) vers B(--) des courbes d'aimantation. (d) Hauteur du saut de l'aimantation induite par la transition B(++) vers B(--).

III. 3. 5. Résonance ferromagnétique

Des informations concernant la distribution locale de l'aimantation à l'intérieur d'un système ferromagnétique peuvent être fournies indirectement par les spectres d'absorption de radiation de micro-ondes [Ebels 01]. L'application d'un champ externe exciteur $\vec{h}_{rf}$ induit la précession des moments magnétiques $\vec{M}$ autour de leur position d'équilibre si le couple qu'il exerce est non-nul: $\vec{M} \times \vec{h}_{rf} \neq 0$. Les mécanismes internes de relaxation du système font que le système perd d'énergie et qu'après un certain intervalle de temps, l'amplitude de la précession décroît et le système retrouve son état d'équilibre d'avant la perturbation. Afin d'entretenir ce mouvement de précession, l'excitation externe doit agir d'une manière

périodique en temps $\omega = 2\pi f$ pour compenser la perte d'énergie. Lorsque la fréquence à laquelle l'énergie externe est pompée coïncide avec la fréquence propre de la précession des spins du système, un phénomène d'absorption à la résonance est observé (ω_{res}). Usuellement, dans une expérience de RFM la pulsation $\omega = 2\pi f$ du champ excitateur $\vec{h}_{rf}$ est fixée et la valeur du champ magnétique statique externe $\vec{H}_0$ doit être ajustée à la valeur H_{res} à laquelle la résonance se produit.

Lorsque la structure magnétique interne de l'échantillon est non-uniforme, la distribution du champ interne local est inhomogène. Cette distribution du champ interne est responsable de la distribution de fréquences propres de résonance sur l'ensemble de l'échantillon. Dans chaque point de l'échantillon, la valeur de la fréquence de résonance propre est fortement liée à l'aimantation de l'environnement local mais ainsi à la totalité de la configuration magnétique. Parmi les matériaux intensivement étudiés par RFM qui présentent une structure largement inhomogène on compte les grenats et les ferrites, caractérisés par un facteur de qualité très large $Q \gg 1$ [Smit PRR 55, Artman JAP 78, Ramesh JMMM 88, Luhrmann APA 93]. Leur structure magnétique interne à champ nul se réduit aux domaines *up* et *down* séparés par des parois de domaines de 180° quasiment unidimensionnelles de type Bloch. Trois modes de résonance ont pu être identifiés: la résonance des domaines (**RD**) dégénérée dans un mode acoustique (précession en phase) et un mode optique (précession antiphase) et la résonance des parois de Bloch (**RPD**), qui sont en mouvement oscillatoire autour de leur position d'équilibre.

Au cours des précédentes sections, nous avons montré que si le facteur de qualité est modéré comme c'est le cas pour le cobalt $Co(0001)$, la structure en domaines se complique par la présence des domaines de fermeture qui occupent un volume relativement important de l'échantillon. La contribution des domaines de fermeture à la réponse RFM se matérialise par la multiplication des modes de résonance comme les résultats expérimentaux nous la prouvent [Ebels PRB 01].

La compréhension du rôle joué par chaque région de l'échantillon s'avère difficile car le signal RFM n'est pas local mais collectif, dû à l'ensemble de l'échantillon, et chaque région interagit dynamiquement avec le reste de l'échantillon. Des études approfondies de RFM et une bonne connaissance de la distribution de l'aimantation en fonction de l'épaisseur de la couche et du champ appliqué ont permis d'identifier l'origine des modes de résonance.

III. 3. 5. 1. Résultats expérimentaux

En appliquant le champ statique $\vec{H}_0$ dans le plan de la couche et suivant la direction des bandes, la variation de l'orientation du champ excitateur $\vec{h}_{rf}$ permet de sonder sélectivement différentes parties ($\vec{M} \times \vec{h}_{rf} \neq 0$) de l'échantillon (figure III-24(a)). Dans une configuration **[X]**, les spins des domaines *up* et *down* et les spins des parois de Bloch réagissent à l'excitation externe. Si le champ de pompage $\vec{h}_{rf}$ est hors du plan de la couche (configuration **[Y]**), les régions impliquées sont les domaines de fermeture et les spins des parois de Bloch. Lorsque le champ de pompage $\vec{h}_{rf}$ est parallèle aux bandes (configuration **[Z]**), seuls les spins des domaines *up*, *down* et de fermeture vont contribuer au signal RFM.

En partant d'une structure proche de celle montrée sur la figure III-16 ($e=100\text{ nm}$), les spectres RFM enregistrés sont très riches. En effet, en variant l'orientation du champ excitateur, jusqu'à 7 modes de résonance ont pu être identifiés (figure III-24(b)). La loi de dispersion $\omega = \omega(H)$ déduite expérimentalement (figure III-24(c)) pour une couche de $e = 76\text{ nm}$ indique des dépendances linéaires du champ de résonance H_{res} pour presque tous les modes sauf pour le mode **2**. Ce mode change de pente dans la gamme des hautes fréquences. La dépendance en fonction de l'épaisseur du champ de résonance est résumée sur la figure III-24(d). Egalement, le champ de saturation planaire H_{sat} est représenté par ligne discontinue. Le mode **1** se transforme et le mode **2** se manifeste en même temps lorsque l'inclinaison du champ excitateur planaire est modifiée d'une configuration **[X]** vers une configuration **[Z]** (figure III-24(e)).

III. 3. 5. 2. Discussions

Par rapport aux modes de résonance caractéristiques aux matériaux de facteur de qualité $Q \gg 1$, les spectres de résonance du cobalt $\text{Co}(0001)$ incluent aussi les modes de résonance supplémentaires liés à la présence des domaines de fermeture. Sur la figure III-25 nous avons représenté le mouvement de précession de l'aimantation autour de la position d'équilibre pour les trois configurations de pompage **[X]**, **[Y]**, **[Z]** qui peut contribuer au signal RFM. Nous présenterons ici juste un bref résumé sur l'allocation des modes de résonance. Une interprétation rigoureuse et approfondie est présentée ailleurs [Ebels PRB 01].

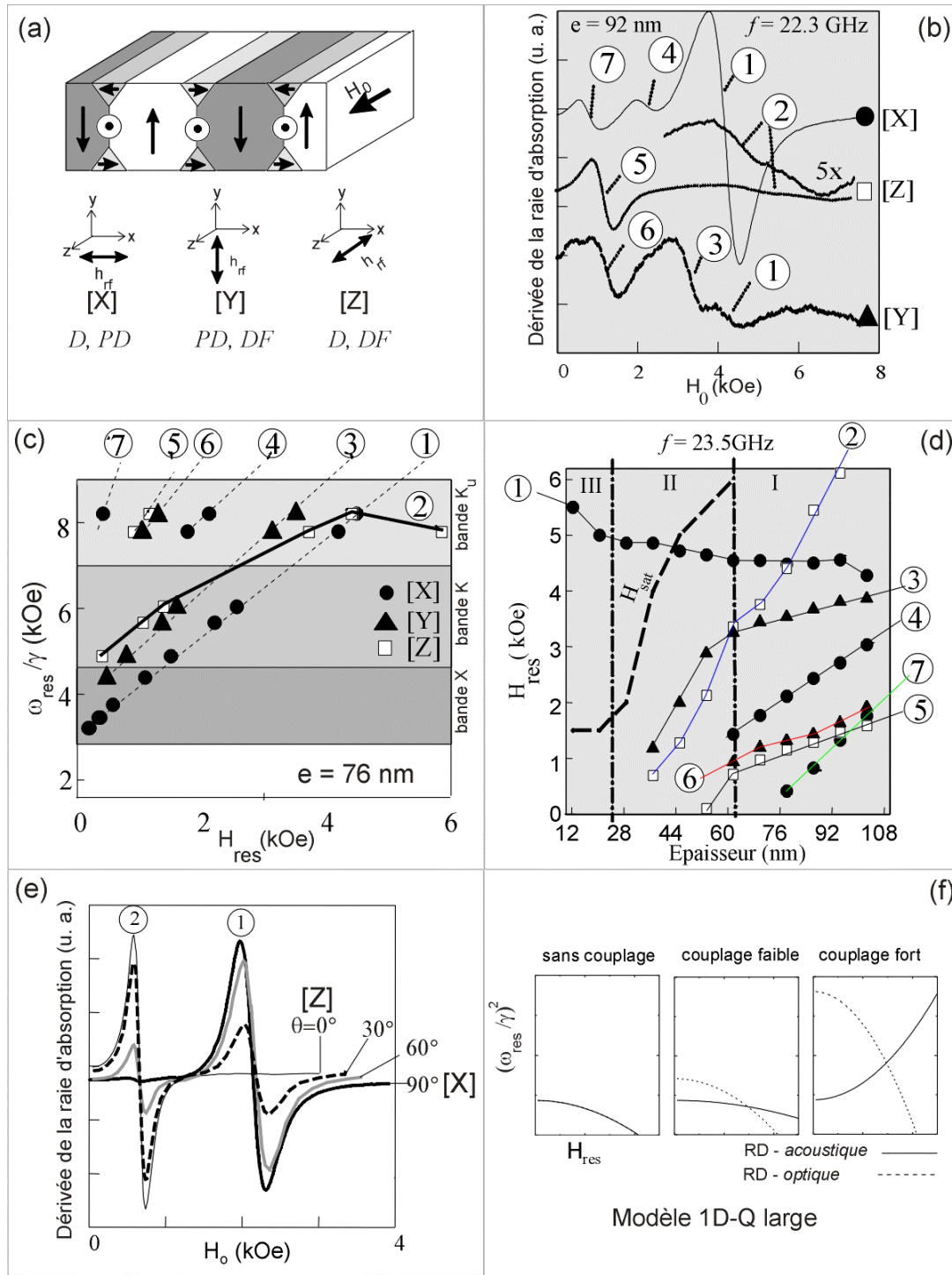


Figure III-24: (a) Définition des configurations de pompage par rapport à la géométrie du système. (b) Courbes d'absorption en bande K_u ($f=22.3$ GHz) enregistrées pour une couche de $e=92$ nm obtenues pour différentes configurations de pompage [X], [Y] et [Z]. (c) Relation de dispersion expérimentale obtenue pour une couche de $e=76$ nm d'épaisseur. (d) Dépendance du champ de résonance H_{res} en fonction de l'épaisseur de la couche correspondant à la bande K_u ($f=23.5$ GHz). (e) Courbes d'absorption obtenues en variant l'angle θ entre le champ de pompage $\vec{h}_f$ et la direction des bandes (OZ) pour une couche de 68 nm en bande K_u ($f=22.3$ GHz) [Ebels 01]. (f) Loi de dispersion calculée selon le modèle unidimensionnel $Q \gg 1$ [Ramesh JMMM 88] en fonction du couplage entre les oscillations des domaines adjacentes.

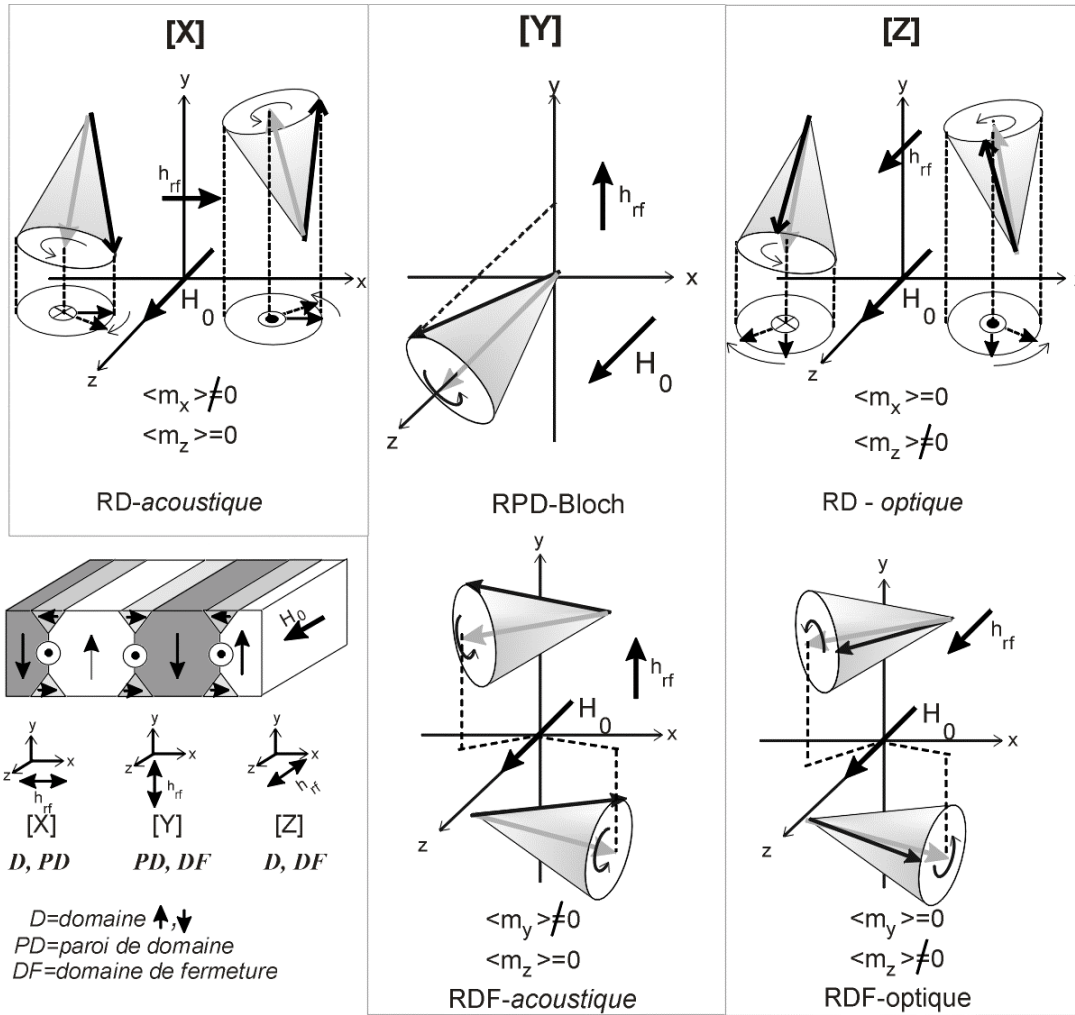


Figure III-25: Vue schématique de la précession de l'aimantation pour chaque configuration de pompage. La position d'équilibre de l'aimantation est représentée par des flèches grises et la position dynamique sur le cône de précession par des flèches foncées.

Résonance des domaines up et down

Dans chaque domaine *up* et *down* l'aimantation qui est *presque homogène* précesse plus au moins à l'unisson (précession uniforme) lorsque le champ excitateur est appliqué selon **[X]** ou **[Z]**. Le volume des domaines *up* et *down* dépasse 70% du volume de l'échantillon si l'épaisseur de la couche est $e > 44 \text{ nm}$ (figure III-18(a)). L'intensité du signal d'absorption à la résonance est directement proportionnelle au volume impliqué et par conséquent les raies les plus intenses seront fournies par les domaines. Les plus prononcés absorptions signalées dans la configuration **[X]** et **[Z]** sont celles correspondantes au mode **1** et **2** (figure III-24(b,e)).

Lorsque $\vec{h}_{rf}$ est dans le plan de la couche et perpendiculaire aux bandes (configuration [X]), seul le mode 1 est observé avec une forte intensité. Pour les orientations intermédiaires, $\theta = 30^\circ$ et $\theta = 60^\circ$, les modes 1 et 2 sont excités simultanément et leurs intensité décroît respectivement augmente avec la réduction de l'angle. Si $\vec{h}_{rf}$ est parallèle aux bandes (configuration [Z]) une seule raie forte correspondant au mode 2 apparaît.

Le mode 1 est les seul mode à avoir le champ de résonance supérieur au champ de saturation $H_{res} > H_{sat}$ (figure III-24(d)). Après la saturation planaire quand la structure en domaines en bandes parallèles n'existe plus, ce mode s'identifie au mode de la résonance uniforme.

Les études menées sur des systèmes des deux couches magnétiques séparées par une couche non-magnétique tels que Co/Ru/Co [Zhang PRB 94] ont montré que le couplage d'échange est responsable de l'apparition de deux modes de résonance: le mode acoustique et le mode optique. Très similairement, dans les couches de Co(0001), la variation locale de l'orientation de l'aimantation des domaines adjacents génère l'apparition de charges magnétiques dynamiques (de volume et de surface) qui induisent un couplage dipolaire dynamique entre les oscillations individuelles des domaines. La modélisation du couplage des domaines dipolaire (figure III-24(f)) selon la procédure unidimensionnelle $Q \gg 1$ proposée par Ramesh [Ramesh JMMM 88, Annexe B-V] montre que dans un régime d'un fort couplage le mode acoustique et optique ont des lois de dispersion tout à fait différentes et que le mode optique change même de concavité (figure III-24(c) mode 2). Ces évidences permettent à associer le mode 1 et le mode 2 à la résonance acoustique (RD-acoustique) et optique (RD-optique) des domaines respectivement.

Résonance des parois de Bloch

L'aimantation des parois de Bloch ($m_z = 1$) régit à l'excitation lorsque le champ excitateur $\vec{h}_{rf}$ est appliqué selon la direction [Y] ($\vec{M} \times \vec{h}_{rf} \neq 0$, figure III-25) par un mouvement oscillatoire des parois de Bloch autour de leur position d'équilibre, sans que leur structure magnétique interne soit modifiée. Expérimentalement dans la configuration [Y] deux modes supplémentaires sont observés: 3 et 6. Les échantillons épais présentent un mode 3 important tandis que la réduction progressive de l'épaisseur produit un changement radical

du mode 3 (figure III-24(d)). Une telle évolution s'appuie sur la dépendance de l'aimantation en fonction de l'épaisseur (figure III-26(a)). Dans la limite des couches épaisses, $e > 60 \text{ nm}$, le profil de la paroi s'approche du profil d'une paroi de Bloch idéale à 180° , occupant environ 20% de l'épaisseur de la couche (figure III-18(c)). En dessous de 60 nm les parois de Bloch 180° s'atrophient car l'aimantation des domaines *up*, *down* et de fermeture est réorientée dans le plan de la couche.

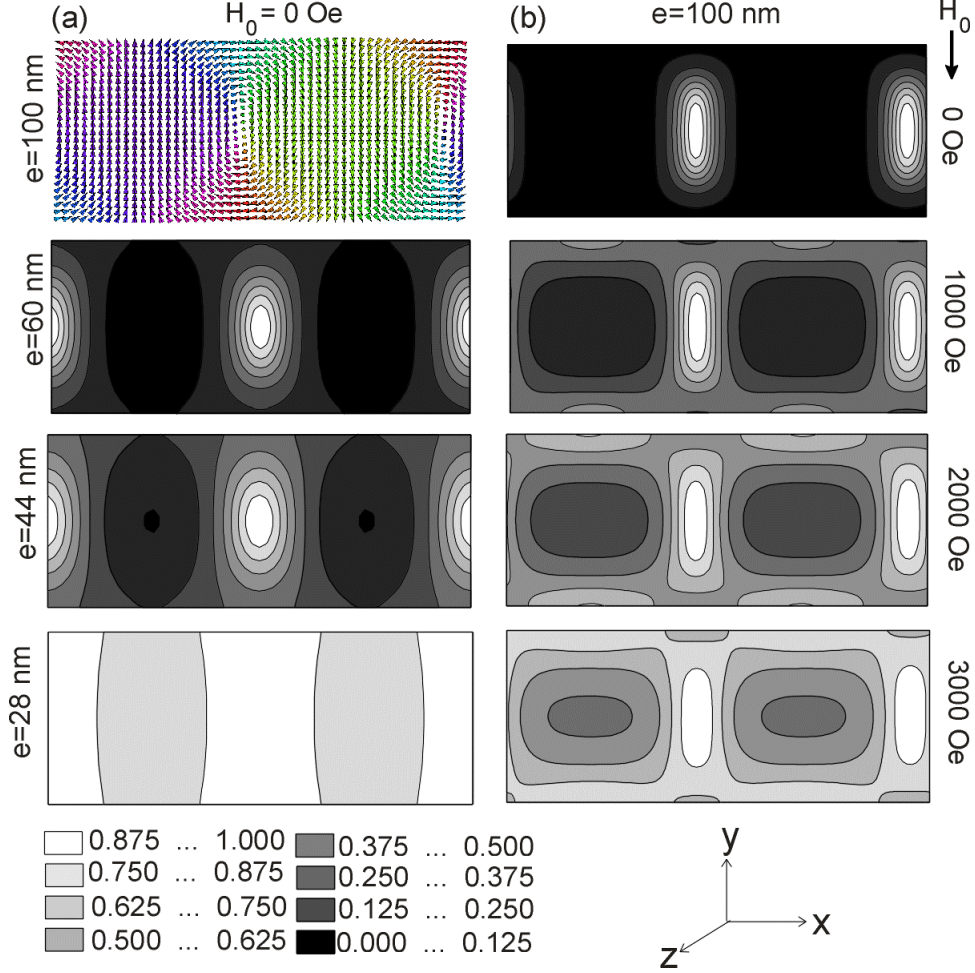


Figure III-26: (a) Evolution de la distribution de la composante m_z de l'aimantation en fonction de l'épaisseur de la couche à champ appliqué nul $H_0 = 0 \text{ Oe}$. (b) Evolution sous champ externe H_0 de la distribution de la composante m_z de l'aimantation pour une couche de $e = 100 \text{ nm}$ d'épaisseur.

Le champ de résonance $\vec{H}_{res}$ correspondant au mode 3 se situe au-dessus de 3 kOe . Cette valeur est assez large pour modifier de manière significative la structure interne de l'aimantation de l'échantillon. A ces valeurs élevées, l'aimantation des domaines de fermeture est déjà en grande partie alignée au champ appliqué (parallèlement au cœur de la paroi Bloch figure III-26(b)). Les domaines de fermeture s'approchent de la structure de la paroi de Bloch et la configuration magnétique globale de l'échantillon correspond au modèle 1D-Q large

[Ramesh JMMM 88]. Ces remarques nous donnent le droit d'associer le mode 3 au mode de la résonance des parois de Bloch de domaines (RPD-Bloch) au moins dans la limite des hautes fréquences.

Résonance des domaines de fermeture

Avec l'allocation du mode 3 nous avons épuisé les modes de résonance typiques pour les couches qui ont un facteur de qualité $Q \gg 1$. Il nous reste donc à interpréter encore 4 modes (4, 5, 6 et 7 sur la figure III-24(d)), qui apparaissent seulement pour des épaisseurs supérieures à 60 nm.

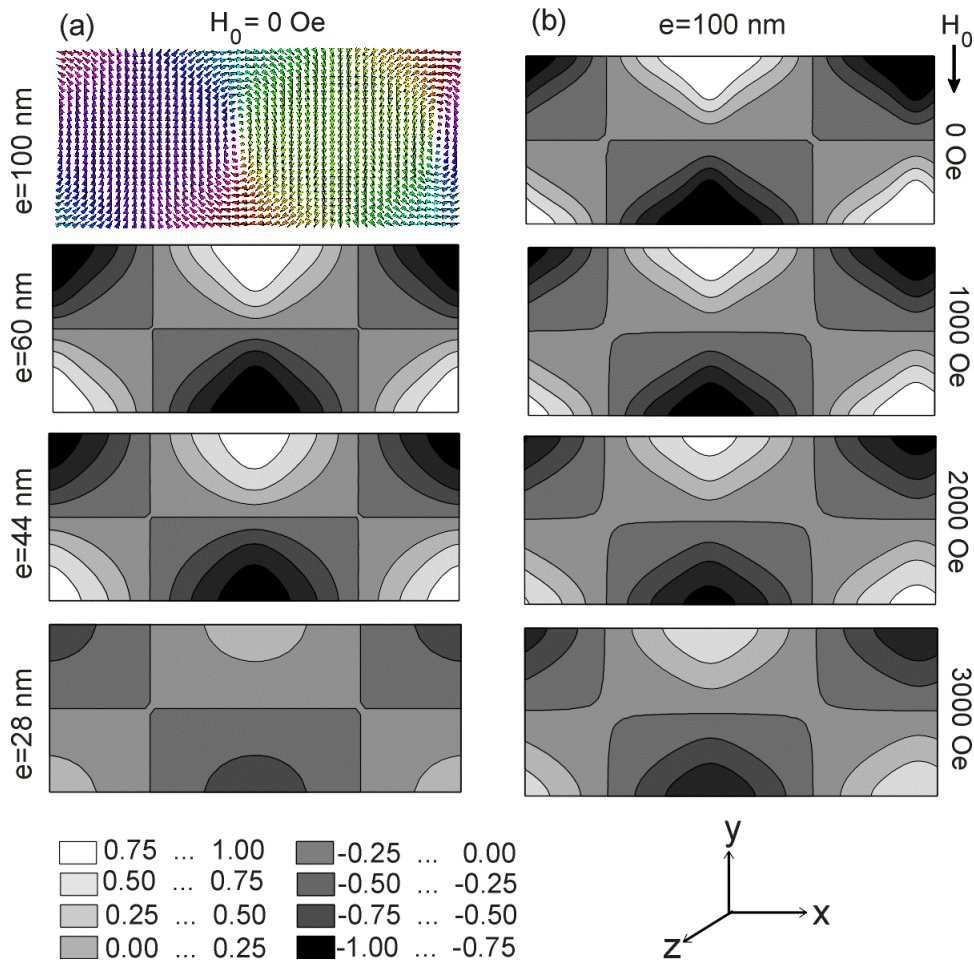


Figure III-27: (a) Evolution de la distribution de la composante m_x de l'aimantation en fonction de l'épaisseur de la couche à champ appliqué nul $H_0 = 0$ Oe (pour chaque épaisseur la taille est mise à l'échelle de l'épaisseur). (b) Evolution sous champ externe H_0 de la distribution de la composante m_x de l'aimantation pour une couche de $e = 100$ nm.

L'épaisseur de la couche modifie de manière significative la structure des domaines en bandes (figure III-17), agissant directement sur la répartition des spins en domaines *up*, *down*,

de fermeture et en parois de Bloch. Lorsqu'elle décroît en-dessous de $e = 60 \text{ nm}$, le volume des domaines de fermeture (VDF) est considérablement réduit comme nous le montre la distribution de la composante m_x de l'aimantation représentée sur la figure III-27(a)). La similarité entre la dépendance en fonction de l'épaisseur de VDF et des modes cités nous indique clairement leur corrélation aux domaines de fermeture. A partir d'épaisseurs larges $e > 60 \text{ nm}$, les domaines de fermeture représentent environ 5-6% du volume de l'échantillon (figure III-18(b)) qui n'est pas négligeable du point de vue du signal RFM. Dans ces conditions, le comportement des domaines de fermeture soumises à un champ exciteur $\vec{h}_{rf}$ est très similaire à celui des domaines *up* et *down* (figure III-25).

Les mesures expérimentales indiquent l'existence du mode 5 excité en configuration [Z] et du mode 6 visible en configuration [Y] qui sont très proches (figure III-24(c)) et qui ont pratiquement la même dépendance en épaisseur (figure III-24(d)). Le mode 5 et 6 semble à correspondre au mode de résonance des domaines de fermeture acoustique (RDF-acoustique) respectivement optique (RDF-optique).

Quant au mode 4 et 7, il est très probable qu'ils trouvent leurs origines dans le couplage des oscillations multiples du système. Notre approche statique ne permet pas d'aller dans la profondeur des origines dynamiques des modes RFM mais des approches telles que celles récemment développées, fondées sur le calcul dynamique pourraient fournir plus d'informations [Vukadinovic PRL 00, Toussaint JCP 01].

III. 4. Conclusion chapitre III

Ces études numériques bidimensionnels ont montré la forte dépendance de la structure interne de parois de domaines dans les couches minces de cobalt hexagonal compact, en fonction de l'orientation de l'axe d'anisotropie magnétocristalline: parallèle ou perpendiculaire au plan de la couche.

De manière générale, pour les deux orientations de l'axe de l'anisotropie magnétocristalline analysées ($//, \perp$), les parois ont un caractère mixte. Elles comportent une partie de type Bloch à la mi-hauteur de la couche alors qu'au voisinage de la surface libre on retrouve une partie de type Néel. L'élargissement de la paroi, proche de la surface de la couche, est la signature claire des effets magnétostatiques, et cela malgré un facteur de qualité modéré $Q = 0.4 - 0.5$ du cobalt hc.

Ces études systématiques en fonction de l'épaisseur de la couche indiquent que:

1. dans les couches à anisotropie planaire, la paroi change d'une paroi de type Néel asymétrique vers une paroi de type Bloch asymétrique lorsque l'épaisseur augmente de 20 nm à 30 nm ;
2. lorsque l'anisotropie magnétocristalline est perpendiculaire, un état uniforme planaire est favorisé en-dessous d'une épaisseur de 28 nm alors que pour d'épaisseurs supérieures l'état magnétique stable est un état en domaines en bandes parallèles. Les valeurs de la périodicité des domaines en bandes à champ nul et de l'aimantation à la rémanence, évaluées numériquement sont en bon accord avec les mesures expérimentales. L'évolution des domaines en bandes sous champ appliqué dans le plan et en fonction de l'épaisseur de la couche, a permis une meilleure compréhension des spectres de résonance ferromagnétique.

Références bibliographiques III

- [Aharoni JAP 68] A. Aharoni, J. Appl. Phys. **39**, 861 (1968). *Measure of self-consistency in 180° domain wall models*
- [Artman JAP 78] J. Artman, S. H. Charap, J. Appl. Phys. **49**, 1587 (1978). *Ferromagnetic resonance in periodic stripe domains structures*
- [Belliard JAP 97] L. Belliard, J. Miltat, V. Kottler, V. Mathet, C. Chappert, T. Valet, J. Appl. Phys. **81**, 5315 (1997). *Stripe domains morphology versus layers thickness in CoPt multilayers*
- [Bloch 32] F. Bloch, Z. für Physik **74**, 295 (1932).
- [Bochi PRL 95] G. Bochi, H. J. Hug, D. I. Paul, B. Stifel, A. Moser, I. Parashikov, H. -J. Güntherodt, R. C. O'Handley, Phys. Rev. Lett. **75**, 1839 (1995). *Magnetic domain structure in ultrathin films*
- [Castro JMMM 00] J. Castro, G. A. Gehring, S. J. Robinson, J. Magn. Magn. Mat. **214**, 85 (2000). *On the stripe domain structure of ferromagnetic ultrathin films*
- [Donnet JAPD 95] D. M. Donnet, K. M. Krishnan, Y. Yajima, J. Phys D: Appl. Phys. **28** 1942 (1995). *Domain structures in epitaxially grown cobalt thin films*
- [Ebels PRB 01] U. Ebels, L. D. Buda, K. Ounadjela, P. E. Wigen, Phys. Rev. B **63**, 174437/1-16 (2001). *Ferromagnetic resonance excitation of two-dimensional wall structures in magnetic stripe domains*

-
- [Ebels 01]** U. Ebels, L. D. Buda, P. Wigen, K. Ounadjela, *Spin Dynamics in Confined Structure*, Springer (2001). *The excitation spectrum of stripes domains*
- [Folks JMSJ 99]** L. Folks, U. Ebels, R. Sooryakumar, R. Rohklin, D. Weller, R. F. C. Farrow, J. Magn. Soc. Jpn. **23**, 85 (1999). *Domain structure of Co₃Pt films*
- [Gregg PRL 96]** J. F. Gregg, W. Allen, K. Ounadjela, M. Viret, M. Hehn, S. M. Thompson, J. M. D. Coey, Phys. Rev. Lett. **77**, 1580 (1996). *Giant magnetoresistive effects in a single element magnetic thin film*
- [Hehn thèse]** M. Hehn, thèse de doctorat, Université Louis Pasteur Strasbourg (1997).
- [Hehn PRB 96]** M. Hehn, S. Padovani, K. Ounadjela, J. P. Bucher, Phys. Rev. B **53**, 3428 (1996). *Nanoscale magnetic domain structures in epitaxial Co films*
- [Hubert PPS 69]** A. Hubert, Phys. Stat. Sol. **32**, 519 (1969). *Stray-field-free magnetization configurations*
- [Hubert 98]** A. Hubert, R. Schäfer, *Magnetic Domains*, Springer (1998).
- [Kittel PR 46]** C. Kittel, Phys. Rev. **70**, 965 (1946). *Theory of the structure of ferromagnetic domains in films and small particles*
- [Kooy PRR 60]** C. Kooy et U. Enz, Philips Res. Rep. **15**, 7 (1960). *Experimental and theoretical study of the domain configuration in thin layer of BaFe₁₂O₁₉*
- [LaBonte JAP 69]** A. E. LaBonte, J. Appl. Phys. **40**, 2450 (1969). *Two-dimensional Bloch-type domains walls in ferromagnetic films.*
- [Labrune JMMM 92]** M. Labrune, J. Miltat, J. P. Jakubovics, A. M. Thompson, J. N. Chapman, J. Magn. Magn. Mat. **104-107**, 343 (1992). *Wall structure in cobalt thin films*
- [Labrune JAP 94]** M. Labrune et J. Miltat, J. Appl. Phys. **75**, 2156 (1994). *Strong stripes as a paradigm of quasi-topological hysteresis*
- [Luhmann APA 93]** Luhmann, H. Dötsch, S. Sure, Appl. Phys. A **57**, 533 (1993). *Frequency Excitations of Stripe Domain Lattices in Garnet Films*
- [Miltat 94]** J. Miltat, dans *Applied Magnetism*, édité par R. Gerber, C. D. Wright et G. Asti, NATO ASI Series (Kluwer, Dordrecht), 221 (1994). *Domains and domains walls in soft magnetic materials mostly*
- [Muller PR 61]** M. W. Muller, Phys. Rev. **122**, 1485 (1961). *Distribution of the magnetization in a ferromagnet*
- [Néel 55]** L. Néel, C. R. Acad. Sci. Paris **241**, 533 (1955).

-
- [Paige JMMM 84]** D. M. Paige, B. Szpunar, B. K. Tanner, J. Magn. Magn. Mat. **44**, 239 (1984). *The magnetocrystalline anisotropy of cobalt*
- [Prejbeanu thèse]** I. L. Prejbeanu thèse de doctorat, Université Louis Pasteur Strasbourg (2001).
- [Prejbeanu APL 00]** I. L. Prejbeanu, L. D. Buda, U. Ebels, K. Ounadjela, Appl. Phys. Lett. **77**, 3066 (2000). *Observation of asymmetric Bloch walls in epitaxial Co films with strong in plane uniaxial anisotropy*
- [Ramesh JMMM 88]** M. Ramesh, P. E. Wigen, J. Magn. Magn. Mat. **74**, 123 (1988). *Ferromagnetic resonance of parallel stripe domains-domain wall system*
- [Rave JMMM 98]** W. Rave, A. Hubert, J. Magn. Magn. Mat. **184**, 179 (1997). *Micromagnetic calculation of the thickness dependence of surface and interior width of asymmetrical Bloch walls*
- [Scheinfein PRB 91]** M. R. Scheinfein, J. Unguris, J. L. Blue, K. J. Coakley, D. T. Pierce, R. J. Celotta, P. J. Ryan, Phys. Rev. B **43**, 3395 (1991). *Micromagnetics domain walls at surfaces*
- [Smit PRR 55]** S. Smit and S. Beljirs, Philips Res. Rep. **10**, 113 (1955).
- [Toussaint JCP 01]** J. C. Toussaint, A. Marty, N. Vukadinovic, J. Ben Youssef, M. Labrune, J. Comp. Phys. (2001). *A new technique for ferromagnetic resonance calculations*
- [Vukadinovic EPJB 00]** N. Vukadinovic, H. Le Gall, J. Ben Youssef, V. Gehanno, Marty, Y. Samson, B. Gilles, Eur. Phys. J. B **13**, 445 (2000). *Magnetization dynamics and relaxation in epitaxial FePd thin films with a stripe domain structure*
- [Vukadinovic PRL 00]** N. Vukadinovic, O. Vacus, M. Labrune, O. Acher, D. Pain, Phys. Rev. Lett. **85**, 2817 (2000). *Magnetic excitations in a weak-stripe-structure: a 2D dynamic micromagnetic approach*
- [Yafet PRB 88]** Y. Yafet, E. M. Gyorgy, Phys. Rev. B **38**, 9146 (1988). *Ferromagnetic stripe domains in an atomic monolayer*
- [Weiss 07]** P. Weiss, J. de Phys. Rad. **6**, 661 (1907).
- [Zhang PRB 94]** Z. Zhang, L. Zhou, P. E. Wigen, K. Ounadjela, Phys. Rev. B **50**, 6094 (1994). *Angular dependence of ferromagnetic resonance in exchange coupled Co/Ru/Co trilayer structures*
- [Zhu 01]** J.-G. Zhu, Y. Zheng, *Spin Dynamics in Confined Structure*, Springer (2001). *The micromagnetics of magnetoresistive random access memory*

CHAPITRE IV

Nano-objets magnétiques: plots et fils de cobalt

Après les couches minces, c'est le tour des petits objets ferromagnétiques qu'ils soient au centre de nos préoccupations. En réduisant de plus en plus les tailles latérales du système, de propriétés inédites par rapport aux couches minces de départ entre sur scène. Ces propriétés sont forte dépendantes des paramètres de matériaux (l'aimantation à saturation, l'anisotropie magnétocristalline...) mais c'est la taille et la forme de l'objet qui sont les facteurs clé.

Parmi la diversité de géométries existantes, nous avons choisi à s'intéresser tout particulièrement à la géométrie circulaire intensivement étudiée expérimentalement au sein de notre groupe [Demand JAP 00, Prejbeanu thèse]. Dans ce sens les états magnétiques statiques en champ nul d'un plot cylindrique de cobalt ont été analysés en fonction de sa taille et de différents paramètres du matériau notamment l'anisotropie magnétocristalline. Une attention spéciale a été accordée à l'étude de l'état vortex et à son évolution sous l'application d'un champ magnétique externe perpendiculairement au plan du plot.

Dans la limite de plots extrêmement épais et étroits, nous retrouvons la géométrie filiforme, à la quelle la deuxième parti de ce chapitre, est dédiée. Les effets de cette géométrie sur la structure interne des parois de domaines seront résumés lorsque l'axe d'anisotropie magnétocristalline est parallèle respectivement perpendiculaire à l'axe du fil.

Plan du chapitre IV

IV. 1. Introduction

IV. 2. Plots circulaires de cobalt

IV. 2. 1. Observations MFM sur de plots circulaires de cobalt

IV. 2. 2. Bilan énergétique

IV. 2. 3. Effet du diamètre du plot

IV. 2. 4. Structure interne de l'état vortex

IV. 2. 5. Effet de l'épaisseur

IV. 2. 6. Diagrammes des états fondamentaux

IV. 2. 7. Evolution sous champ externe

IV. 2. 8. Couplage dipolaire entre les plots

IV. 2. 9. Influence de la forme de l'objet

IV. 3. Fils nanométriques

IV. 3. 1. Anisotropie magnétocristalline parallèle à l'axe du fil

IV. 3. 1. 1. Paroi transverse

IV. 3. 1. 2. Une paroi inédite

IV. 3. 1. 3. Paroi vortex

IV. 3. 1. 4. Paroi piégée sur une constriction géométrique

IV. 3. 2. Anisotropie magnétocristalline perpendiculaire à l'axe du fil

IV. 3. 2. 1. Domaines en bandes parallèles

IV. 3. 2. 2. Etat à deux domaines antiparallèles

IV. 3. 2. 3. Effet de l'épaisseur du fil sur la structure de la paroi

IV. 4. Conclusions chapitre IV

Références bibliographiques IV

IV. 1. Introduction

Quand on se penche sur un article qui traite de nano-objets magnétiques, le plus suivant, leurs vertus applicatrices dans le domaine d'enregistrement magnétique sont invoquées de début. Cet aspect pratique qui repose sur les propriétés intrinsèques de petits éléments magnétiques qui pourraient servir à coder le bit d'information sur la forme d'un état magnétique stable bien précis, connaît depuis dix années, une ampleur significative grâce à l'action concertante des plusieurs facteurs.

- Tout d'abord, on peut citer l'amélioration continue des techniques de nano-fabrication qui font possible aujourd'hui de descendre à quelques dizaines de nanomètres en taille latérale (~ 10 nm) [Chou JVST 97]. Pour ces dimensions, la densité d'enregistrement dans de futur média nanostructurés peut facilement monter vers 100 Gb/in^2 [Lohau APL 01] et une compétition avec les media longitudinaux actuels est déjà ouverte.
- Davantage, les supports de stockage d'information magnétiques commercialisés (des couches minces continues à aimantation planaire) sont en traîne d'atteindre leurs limites en densité à cause de problèmes de bruit (du à la granularité du matériau magnétique) et de stabilité thermique (car la taille des graines est près de la limite superparamagnétique) [White JMMM 00]. Dans ces conditions, il ne s'agit plus d'une compétition entre les différents sorts de média [Zhu 01] mais plutôt d'une nécessité de remplacer le média à aimantation longitudinale par un media discret (*patterned media*).
- Au delà de ces aspects, de propriétés telles que la non-volatilité, la robustesse face à l'usure et le temps d'accès réduit font des mémoires magnétiques nanostructurés une alternative tout à fait réaliste.

Le défis lancé par la miniaturisation continue des nanostructures, est efficace seulement dans la mesure dans laquelle les propriétés magnétiques de ces systèmes peuvent être contrôlées. Ceci veut dire d'avoir des états magnétiques stables, bien individualisés et d'être capable de contrôler la transition d'un état à l'autre d'une manière simple et reproductible. Afin de répondre à ces exigences pratiques, une étude approfondie du comportement magnétique des systèmes nanostructurés est indispensable. Cependant, avant tout intérêt technologique, le magnétisme des objets à tailles latérales réduites est et reste, par lui-même, extrêmement intéressant du point de vue fondamental. Lorsque les couches minces sont découpées dans de petits éléments qui ont la taille de l'ordre de grandeur des longueurs

caractéristiques du matériau magnétique (de domaines, de parois de domaines), des nouveaux phénomènes physiques apparaissent et c'est dans cet esprit que notre travail s'est déroulé. La taille submicronique des nanostructures magnétiques est parfaitement adaptée au calcul numérique du point de vue des ressources de mémoire et de temps de calcul, engagées. Ainsi les simulations micromagnétiques et les observations expérimentales peuvent se compléter réciproquement dans l'aboutissement de l'étude des nanostructures magnétiques.

IV. 2. Plots circulaires de cobalt

L'univers des nano-objets magnétiques s'appuie sur une diversité remarquable de formes et de matériaux. Qu'elles soient de plaquettes rectangulaires [Rave IEEE 00, Miltat 01] ou carrées [Hehn Science 96, Cowburn APL 98], de particules ellipsoïdales [Fernandez JMMM 98] ou cylindriques [Miramond JMMM 97, Kleiber PRB 98, Cowburn PRL 99, Demand JAP 01], ou encore de pentagones, de triangles [Cowburn JPD 00] et d'anneaux [Li PRL 01, Rothman PRL 01] faits en Co, Ni, Fe, NiFe... leur principale caractéristique est d'exhiber une variété surprenante d'états magnétiques possibles [Hubert 98]. La réduction de la taille latérale se traduit du point de vue énergétique par une redistribution de rôles joués par les interactions impliquées. C'est surtout l'interaction magnétostatique liée à la forme et à la taille de l'objet qui met sa signature sur la distribution interne de l'aimantation comme les études menées par par Hehn [Hehn thèse] et Ferré [Ferré JMMM 97] sur les réseaux de plots de Co hcp (0001) de $0.5\mu\text{m}$ de côté l'ont montré. Lorsque les plots deviennent cylindriques [Demand thèse] et leur taille est diminuée à $0.2\mu\text{m}$ certains états magnétiques sont davantage privilégiés notamment l'état vortex qui préserve la symétrie circulaire du système. Les implications de cette géométrie circulaire sur les états magnétiques d'une petite particule, constituent l'objet des nos études numériques.

IV. 2. 1. Observations MFM sur de plots circulaires de cobalt

Tout particulièrement, nous avons visé deux systèmes de plots de cobalt circulaires arrangés dans de réseaux carrés périodiques, dont nous connaissons bien leur comportement magnétique expérimentalement à travers d'études de microscopie à force magnétique et de magnétométrie à effet Kerr (figure IV-1).

- Le premier système représenté par des réseaux des plots de cobalt $\text{Co}(0001)$ épitaxiés, fabriqués et caractérisés par Marc Demand [Demand thèse], possède une anisotropie magnétocristalline uniaxiale perpendiculaire au plan du plot, expérimentalement évaluée à $K_u = 500 \times 10^3 \text{ J/m}^3$. Pour un diamètre fixe de $\phi = 200 \text{ nm}$, différentes épaisseurs ont été considérées: $e = 10 \text{ nm} - 35 \text{ nm}$ alors qu'une séparation S égale à deux fois le diamètre a été appliquée indépendamment de l'épaisseur du plot.
- Le deuxième système choisi est un système polycristallin. Il s'agit de réseaux de plots de Co fabriqués par nano-impression par Marco Natali [Natali PRL]. Dans ce cas, pour une épaisseur comprise entre $e = 10 \text{ nm} - 50 \text{ nm}$, le diamètre varie de $\phi = 170 \text{ nm} - 1000 \text{ nm}$ alors que différents espacements des plots ont été appliqués.

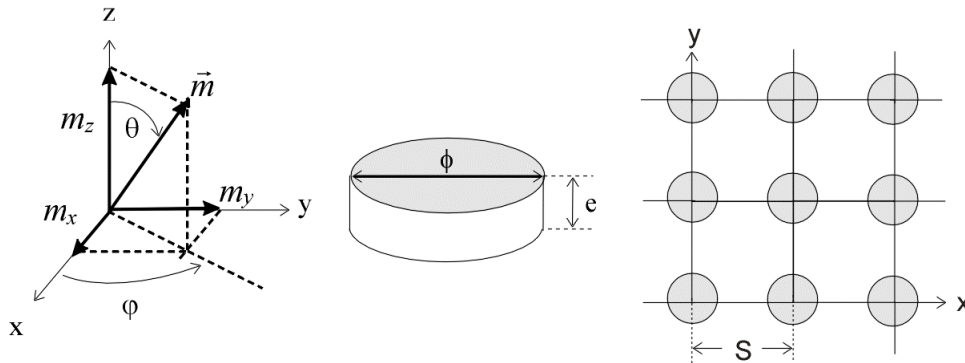


Figure IV-1: Géométrie du système de coordonnées, du plot cylindriques et du réseau carré.

A partir de mesures de microscopie à force magnétique des informations locales sur la structure en domaines d'un plot individuel, peuvent être extraites. Selon l'histoire magnétique (état désaimanté/rémanent planaire/perpendiculaire) et la taille des plots (diamètre/épaisseur), les études de microscopie à force magnétique entreprises ont mis en évidence l'existence de plusieurs contrastes et par conséquent l'existence de plusieurs états magnétiques stables.

La plupart des plots de $\text{Co}(0001)$ fins ($e < 20 \text{ nm}$) exhibent des contrastes dipolaires blanc/noir lorsque le champ externe est appliqué dans le plan du plot et progressivement réduit jusqu'à zéro (figure IV-2(a)). Ces contrastes sont typiques de plots monodomaines qui ont l'aimantation orientée dans le plan du plot comme les simulations le confirment. Des images similaires ont été rapportées dans des plots de cobalt polycristallin ellipsoïdaux [Fernandez JMMM 98] et cylindrique [Kleiber PRB 98]. En revanche, après la saturation hors du plan, beaucoup de plots présentent un fort contraste au centre, entouré par une région où le contraste MFM est très faible. Ce type de contraste est indicatif pour la présence d'une structure de type vortex : l'aimantation tourne à l'intérieur du plot de manière à fermer le flux

magnétique et au centre elle sort du plan pour de raison de topologie. Un tel contraste a déjà été observé dans des plots cylindriques de permalloy [Miramond JMMM 97] et, plus récemment, Shinjo et al. [Shinjo Science 00] a mis en évidence de vortex blanc et noir sur de plots de permalloy désaimantés perpendiculairement.

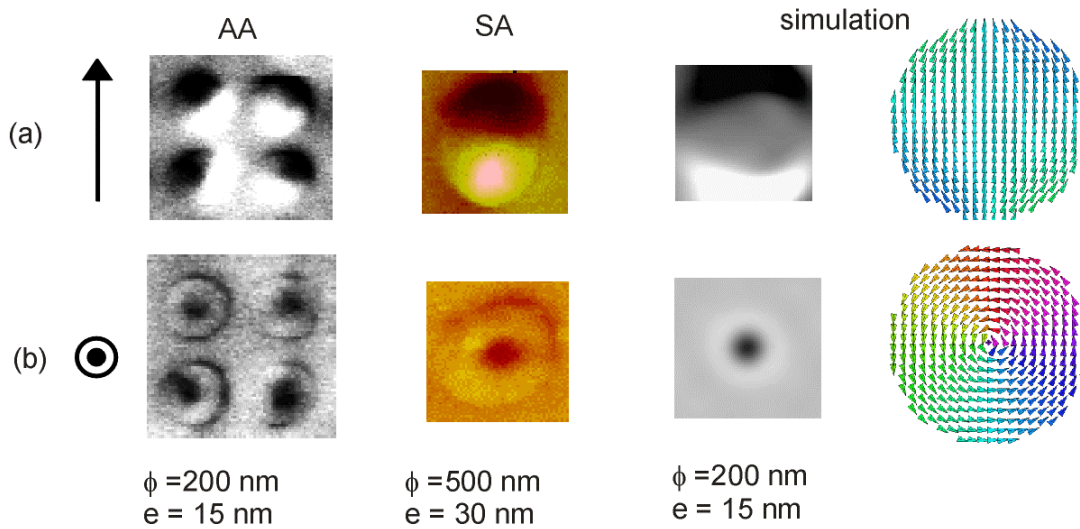


Figure IV-2: Images MFM enregistrées à la rémanence (a) planaire et (b) perpendiculaire sur de plots de Co avec (AA) et sans (SA) anisotropie magnétocristalline perpendiculaire. Distribution de l'aimantation typique d'un état monodomaine planaire et d'un état vortex qui génère de contrastes MFM caractéristiques (simulation). La flèche noire indique la direction selon la quelle le champ de saturation préalable a été appliqué.

L'expérience montre qu'au sein du même réseau après avoir subi la même histoire magnétique, les plots peuvent exhiber de comportements magnétiques différents. Cette distribution du comportement des plots repose sur les particularités de chacun d'entre eux notamment de défauts aux bords, de légères variations de la taille latérale et de la forme. Ainsi, le plot peut être bloqué dans un état magnétique différent de celui attendu pour la taille et l'histoire magnétique respective. Parfois on enregistre la modification de la structure magnétique interne des plots sur l'action d'une perturbation externe faible telle que le champ de fuite créé par la pointe MFM [Kleiber PRB 98]. Sur la figure IV-3, après avoir saturé en préalable hors du plan l'échantillon de $Co(0001)$ de 15 nm d'épaisseur, la majorité des plots donne un contraste MFM correspondant à l'état vortex (scan 1). Désormais, il en reste quelques contrastes dipolaires qui nous indiquent la présence de l'état monodomaine planaire. Durant le deuxième passage de la pointe MFM, au-dessus de la même région de l'échantillon (scan 2) une image MFM différente est enregistrée. Sur la seconde image, le nombre de plots en état vortex a augmenté car certaines plots, qui au début étaient en état monodomaine, ont basculé vers l'état vortex, de manière irréversible. La géométrie de la pointe MFM, sa position

par rapport à l'échantillon et les défauts locaux de l'échantillon sont des facteurs qui déterminent la relaxation du système vers un état moins énergétique.

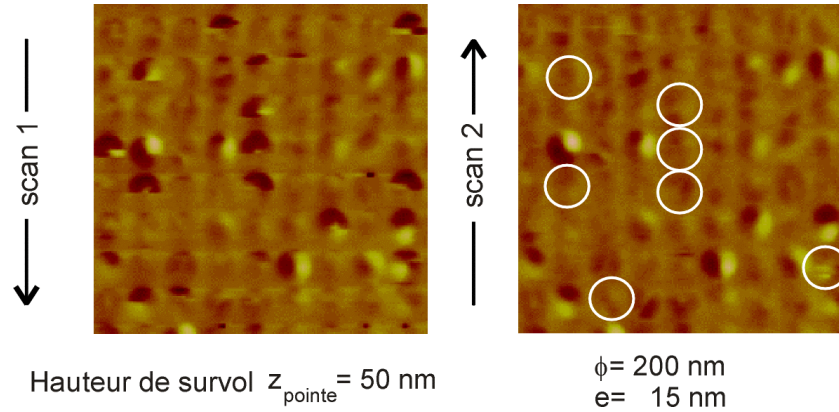


Figure IV-3: Influence de la pointe MFM sur la structure magnétique de plots circulaires de $\text{Co}(0001)$. Quelques plots monodomaines qui ont basculé vers l'état vortex sont entourés par un cercle blanc. La région de balayage de $(3.6\mu\text{m})^2$ a été survolée à une hauteur de 50 nm (échantillons fournis par M. Demand).

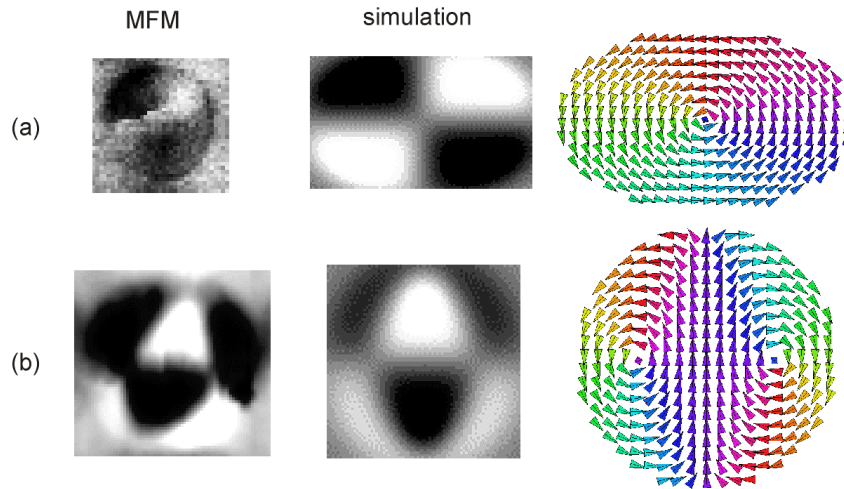


Figure IV-4: Différentes configurations micromagnétiques observées expérimentalement. (a) Image MFM obtenue sur un plot de $\text{Co}(0001)$ [Demand JAP 00] qui présente une structure avec 4 contrastes et qui est très similaire avec le contraste généré par une structure en vortex dans un disque plutôt elliptique que circulaire. (b) Image MFM enregistrée sur un plot polycristallin de Co ($\phi = 1000 \text{ nm}$, $e = 30 \text{ nm}$) indicative pour l'existence de l'état double vortex [Prejbeanu thèse].

Finalement, lorsque l'épaisseur des plots de $\text{Co}(0001)$ augmente au-dessus de 25 nm, les signaux MFM deviennent plus complexes [Demand JAP 00]. Egalement, dans les plots de Co polycristallin de diamètre supérieur à 1000 nm, de contrastes MFM indicatifs de la présence d'une structure qui comporte deux vortex ont été enregistrés (figure IV-4(b)). Ainsi le décodage des images MFM s'alourdit surtout que la taille des structures magnétiques s'avère d'être proche de la limite de la résolution du manip de MFM. Nous voulons juste rappeler que la résolution dans l'espace du manip de MFM se situe au-dessus de 20 nm et pour le cobalt, à l'état massif, la paroi de Bloch de 180° a une largeur de $\delta_B \cong 17 \text{ nm}$.

($A_{ex} = 1.4 \times 10^{-11} \text{ J/m}$, $K_u = 5 \times 10^5 \text{ J/m}^3$, $\delta_B = \pi \sqrt{A_{ex} / K_u}$). L'image MFM représente une topographie du champ de fuite qui émerge de l'ensemble de l'échantillon (dû aux charges magnétiques de volume et aux charges magnétiques de surface) ce qui fait que la reconstitution de la distribution de l'aimantation à l'intérieur de l'échantillon n'est pas toujours ni directe, ni unique [Vellekoop JMMM 98]. L'interprétation de ces différentes images MFM à champ nul, sans parler de leur l'évolution sous champ appliqué, demande l'utilisation de techniques d'analyse micromagnétique numériques.

IV. 2. 2. Bilan énergétique

Afin de trouver l'explication de l'existence des multiples contrastes MFM pour un plot, il faut regarder de côté de son bilan énergétique. De travaux dédiés à la géométrie rectangulaire telle que la plaquette de permalloy caractérisée par un facteur de forme 2:1 [Rave IEEE 00, Miltat 01] ou également aux petits éléments carrés en permalloy [Cowburn APL 98, Cowburn PRB 98], ont montré l'existence de plusieurs états magnétiques stables d'énergies légèrement décalées. De manière plus générale, pour la même forme, taille et les mêmes paramètres du matériau, l'énergie libre d'un petit objet magnétique peut présenter plusieurs minimums locaux.

Du point de vue expérimental, chacun de ces minimums locaux est accessible par une histoire magnétique bien spécifique. Numériquement l'identification des minima énergétiques signifie un travail d'essayage de diverses configurations de départ pour la minimisation de l'énergie libre du plot (les états saturés dans le plan et hors du plan du plot, l'état à quatre domaines planaires, l'état désordonné...). Ainsi, en champ nul, en utilisant un pas de maillage de $h_x = h_y = h_z = 2,5 \text{ nm}$ (section II.7) pour les plots de 200 nm de diamètre et 5 nm d'épaisseur, deux configurations de l'aimantation ont été identifiées qui minimisent l'énergie libre (fig. IV-5).

- L'état monodomaine planaire (MD), a été obtenu en partant de la saturation planaire tout en réduisant le champ externe jusqu'à zéro. Cet état possède une symétrie en miroir par rapport à la direction du champ initial et aussi une aimantation moyenne planaire à haute rémanence suivant l'orientation de la saturation préalable. En regardant de plus près la distribution de l'aimantation, on réalise que l'état monodomaine est plutôt un état quasi-monodomaine. Il y a de régions sur le bord du plot où l'aimantation suit la courbure de la

surface et, par endroit, la déviation de l'aimantation par rapport à la direction moyenne peut monter jusqu'à 45° dans un plot de 200 nm de diamètre. Lorsque le diamètre du plot est de plus en plus petit, les déviations de l'aimantation près du bord s'atténuent et l'état MD se transforme dans l'état uniforme planaire.

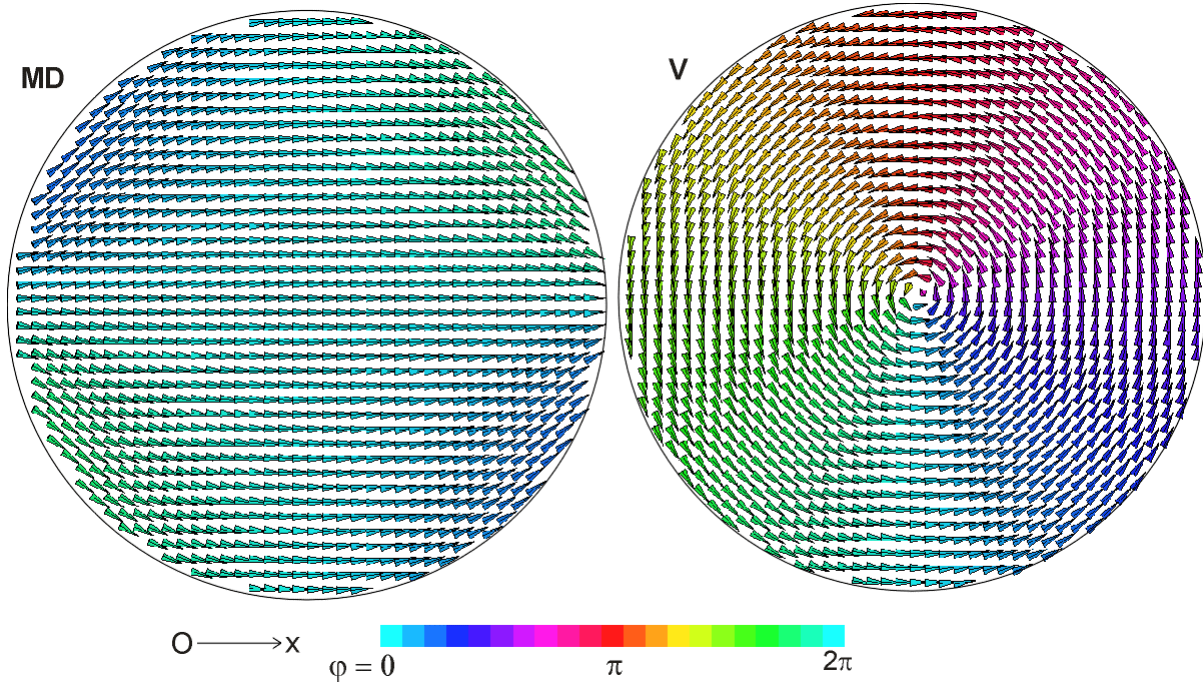


Figure IV-5: Distribution de l'aimantation de l'état monodomaine planaire (MD) et de l'état vortex (V) d'un plot de $\phi = 200 \text{ nm}$ de diamètre et $e = 5 \text{ nm}$ d'épaisseur avec une anisotropie magnétocristalline perpendiculaire au plan. Les paramètres de simulation sont: $K_u = 500 \times 10^3 \text{ J/m}^3$ ($A_{ex} = 1.4 \times 10^{-11} \text{ J/m}$, $M_s = 1400 \times 10^3 \text{ A/m}$). La couleur des flèches varie en fonction de l'angle φ entre le vecteur de l'aimantation et l'axe Ox.

- L'état vortex (V), induit lorsqu'on revient à la rémanence après une saturation hors du plan du plot, préserve la symétrie circulaire du plot. La grande majorité de l'aimantation se trouve dans le plan du plot et tourne de manière continue, parallèlement avec la surface latérale afin de fermer le flux magnétique. Au centre du plot l'aimantation sort du plan et devient parfaitement perpendiculaire à celui-ci.

Pour le plot de $\phi = 200 \text{ nm} / e = 5 \text{ nm}$, l'état vortex est caractérisé par une densité d'énergie $\varepsilon(V) = 0.4188(\mu_0 M_s^2 / 2)$ plus basse que celle de l'état monodomaine: $\varepsilon(MD) = 0.4378(\mu_0 M_s^2 / 2)$. Dans ces conditions, l'état vortex coïncide avec l'état fondamental

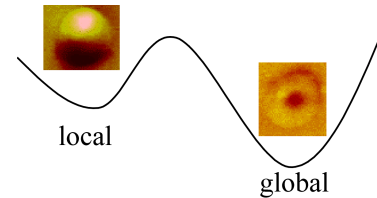


Figure IV-6: Vue schématique de la surface de l'énergie libre des plots cylindriques dans l'espace des configurations, présentant deux minimums.

du système tandis que l'état monodomaine, étant moins favorable énergiquement, est juste un minimum local de l'énergie libre (figure IV-6).

Bien évidemment, toute modification de la taille (diamètre ou/et épaisseur) ou des paramètres de matériau, change le rapport entre les énergies mises en jeu avec de répercussions directes sur le profil de l'énergie libre dans l'espace des configurations. C'est pourquoi le statut d'état fondamental varie également et c'est cet aspect qui nous analysons, par la suite, dans le cas de plot avec et sans anisotropie magnétocristalline uniaxiale perpendiculaire.

IV. 2. 3. Effet du diamètre du plot

La dépendance de la densité d'énergie libre ε_{tot} de l'état vortex et de l'état monodomaine, en fonction du diamètre du plot sont représentées sur la figure IV-7(a), pour une épaisseur de $e = 5\text{ nm}$. Nous avons marqué par des symboles pleins/vide les résultats obtenus sur des plots avec respectivement sans l'anisotropie magnétocristalline uniaxiale perpendiculaire au plan du plot. De manière générale, lorsque le diamètre du plot est supérieur à une valeur critique ($\phi_{AA} = 67.5\text{ nm}$, $\phi_{SA} = 62.5\text{ nm}$) les plots (avec et sans anisotropie magnétocristalline) ont comme état fondamental l'état vortex. En réduisant le diamètre au-dessous de la valeur critique, l'état monodomaine devient moins énergétique et, par conséquence, il correspond à l'état fondamental. Derrière cette commutation d'état fondamental se cache la compétition entre les énergies (figure IV-7(b)). L'état monodomaine est économique de la part de l'énergie d'échange car les spins sont plus ou moins alignés, mais c'est l'énergie magnétostatique originaire des charges magnétiques cumulées sur la surface latérale qui prédomine. Quant à l'état vortex, lui il est dominé par l'interaction d'échange car à cause de la circulation de l'aimantation, la contribution magnétostatique est largement réduite.

D'autre part, l'anisotropie magnétocristalline perpendiculaire au plan du plot (AMP) n'affecte pas l'état MD planaire comme nous indique la valeur moyenne de l'aimantation planaire $\langle m_{xy} \rangle$ représentée sur la figure IV-7(c). Du point de vue énergétique, l'anisotropie magnétocristalline provoque juste une translation de l'énergie du plot avec AMP par rapport à l'énergie du plot sans AMP (figure IV-7(a)). Cette translation est égale à la contribution de l'anisotropie magnétocristalline K_u car pour l'état MD l'aimantation est allongée toujours dans le plan perpendiculaire à l'axe d'anisotropie.

Concernant maintenant l'état vortex, lui il est plus sensible à la présence de l'AMP que l'état monodomaine. Naturellement, la partie centrale du vortex (là où l'aimantation est alignée suivant l'axe du cristal) est renforcée par l'anisotropie magnétocristalline perpendiculaire. Ce renforcement se traduit par l'augmentation de la valeur moyenne de l'aimantation hors du plan $\langle m_z \rangle$ (figure IV-7(d)). En parlant de l'état vortex et de sa dépendance énergétique du diamètre du plot, nous allons présenter les détails fins de sa structure interne.

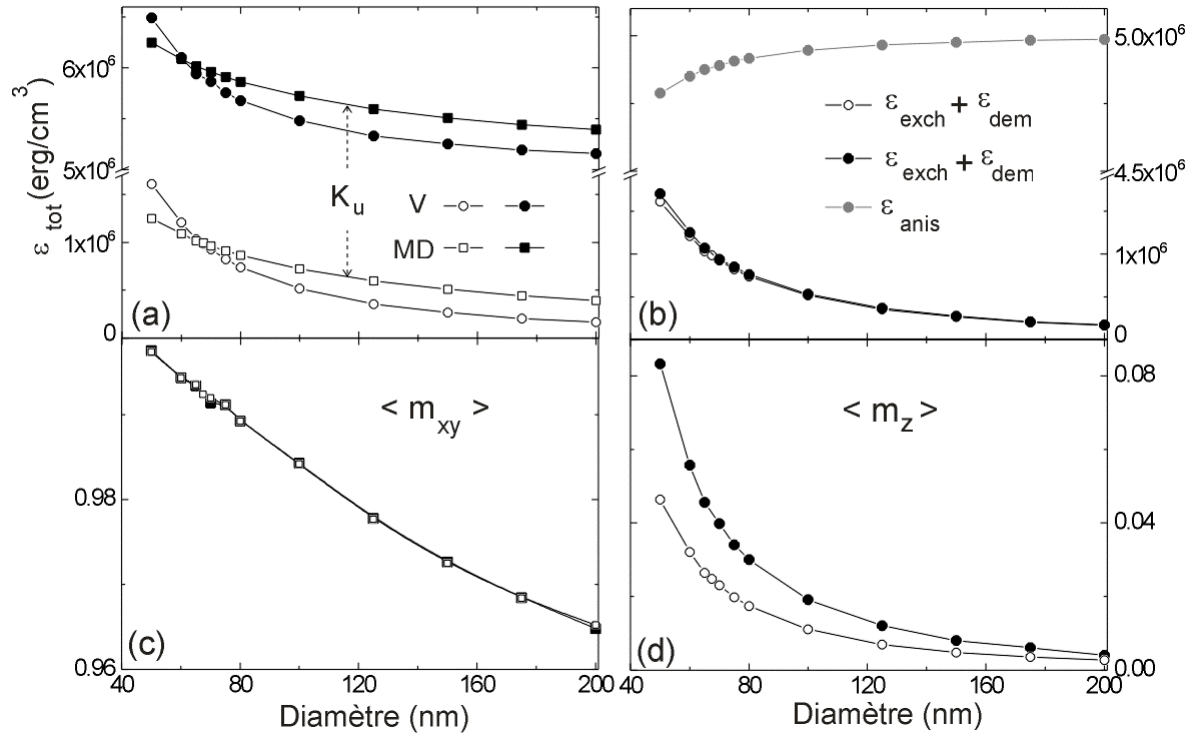


Figure IV-7: Sommaire des calculs sur les plots avec (AA, pleins) et sans (SA, ouvert) anisotropie magnétocristalline perpendiculaire d'épaisseur égale à $e = 5\text{ nm}$. (a) Variation de l'énergie libre ϵ_{tot} de l'état monodomaine planaire (MD) et de l'état vortex (V) en fonction du diamètre du plot. (b) Bilan énergétique de l'état vortex. Evolution avec le diamètre (c) de l'aimantation planaire $\langle m_{xy} \rangle$ de l'état monodomaine et (d) de l'aimantation hors du plan $\langle m_z \rangle$ de l'état vortex.

IV. 2. 4. Structure interne de l'état vortex

Le vortex comme une structure magnétique particulière a attiré depuis long temps l'attention. Sa présence dans des objets triangulaires de Co a été mise en évidence expérimentalement par holographie électronique [Tonomura RMP 87]. Alors que Gillies et al. [Gillies JMMM 96] ont réussi à introduire et à contrôler une structure de type vortex dans les couches minces de $Ni_{80}Fe_{20}$ à l'aide d'un champ externe appliqué perpendiculairement à la couche. Aharoni [Aharoni JAP 90], Usov [Usov JMMM 93] et, plus récemment, Gusliencko

[Guslienکو PRB 01] se sont intéressés plutôt à l'état vortex dans de systèmes ferromagnétiques qui ont une symétrie intrinsèque cylindrique tels que les plots circulaires ou les cylindres infinis. Ils ont trouvé des solutions analytiques approximatives pour la configuration de l'état vortex qui minimise la fonctionnel de l'énergie libre, fondée sur l'hypothèse que la distribution de l'aimantation $\vec{m}$ de l'état vortex n'induit pas de charges de volume $\vec{\nabla} \cdot \vec{m} = 0$ [Annexe C]. Leurs approches sont équivalentes avec nos calculs sauf que nous utilisons les techniques numériques pour minimiser l'énergie et que la configuration interne du vortex est trouvée sans l'application de la contrainte $\vec{\nabla} \cdot \vec{m} = 0$.

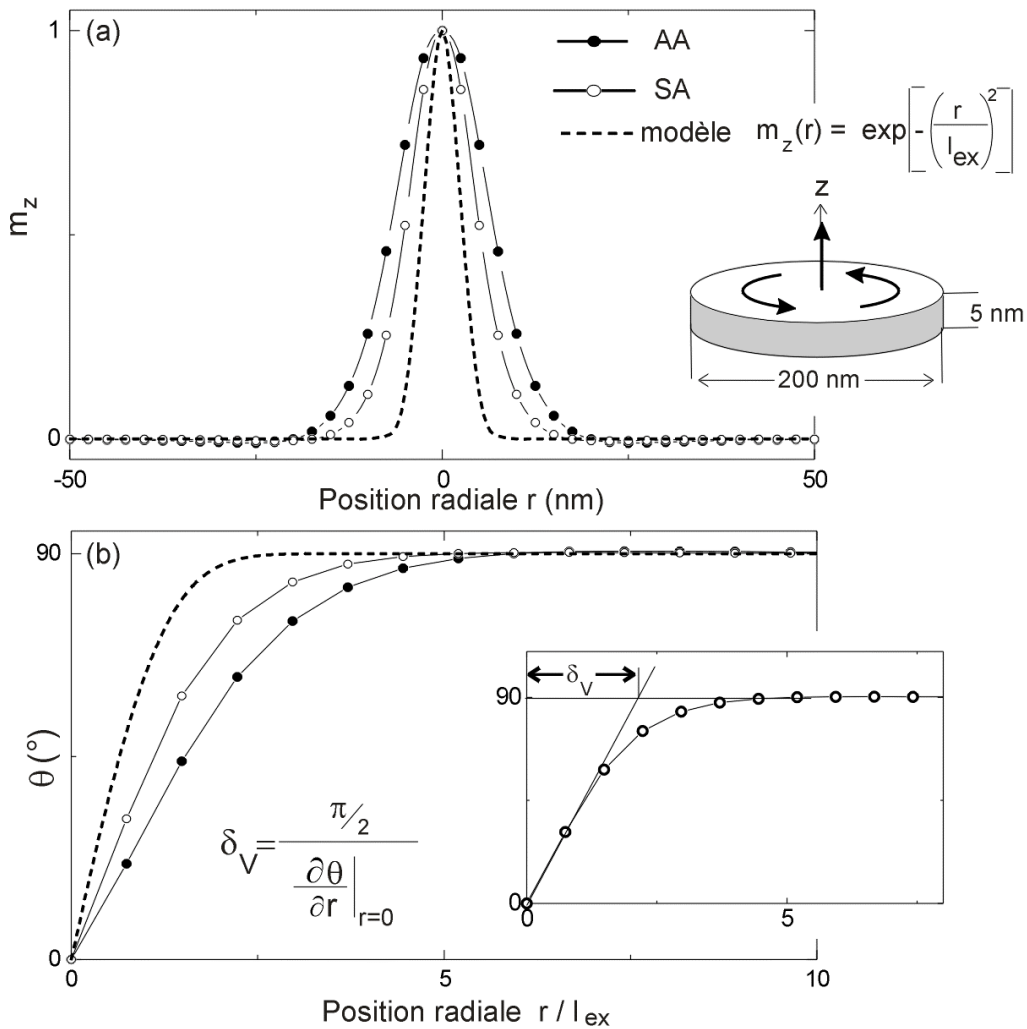


Figure IV-8: (a) Structure du vortex dans un plot de $\phi = 200\text{ nm} / e = 5\text{ nm}$ avec (AA) et sans (SA) anisotropie magnétocristalline. (b) Variation radiale de l'angle θ entre l'aimantation et l'axe OZ.

Sur la figure IV-8(a) le profil de l'aimantation m_z de l'état vortex obtenu par simulation dans un plot $\phi = 200\text{ nm} / e = 5\text{ nm}$ avec et sans anisotropie magnétocristalline a été représenté.

Egalement, la variation de l'aimantation m_z selon le modèle proposé par Miltat [Miltat 94, Annexe C] est indiquée en trait pointillé.

Comme attendu, les formes des profils de l'aimantation m_z sont très similaires entre elles malgré les différences qui existent entre les largeurs du cœur du vortex défini comme la région où l'aimantation sort du plan $|m_z| > 0$. La formation de l'état vortex dans un plot sans anisotropie magnétocristalline, est le résultat de la compétition entre l'interaction d'échange et l'interaction magnétostatique. L'interaction d'échange implique une réorientation graduelle de l'aimantation du plan $\theta = 90^\circ$ vers hors du plan $\theta = 0^\circ$ (figure IV-8(b)). Une telle variation lente dans l'espace induit l'apparition des charges magnétiques de surface significatives sur le plan inférieur et supérieur du plot. Ces charges augmentent considérablement la contribution magnétostatique à l'énergie totale du plot. Ainsi, pour de raisons magnétostatiques, le cœur du vortex veut qu'il soit très étroit alors que l'interaction d'échange veut empêcher une variation brutale de l'aimantation sur une distance très courte. Il en résulte une largeur du vortex définie

comme:

$$\delta_v = \frac{\pi}{2} \left(\frac{\partial \theta}{\partial r} \Big|_{r=0} \right)^{-1}$$

et qui selon le modèle analytique, auquel nous nous rapportons, vaut $\delta_v = l_{ex}$ ($l_{ex} = 3.4 \text{ nm}$) (voir l'image incrustée sur la figure IV-8(b) pour la définition géométrique de la largeur du vortex δ_v). Numériquement, pour le même plot SA (les mêmes paramètres de matériau) nous trouvons une valeur légèrement plus large $\delta_v = 7 \text{ nm}$. Cette différence repose sur l'évaluation de l'énergie magnétostatique dans les deux cas. Lorsque l'axe de l'anisotropie magnétocristalline est orienté selon la direction OZ, l'échange et l'anisotropie magnétocristalline agissent ensemble sur l'élargissement du cœur du vortex et conduisent vers une largeur de $\delta_v = 10 \text{ nm}$. Les largeurs, que nous venons de mentionnées, reflètent donc la compétition entre différentes interactions impliquées et à travers l'interaction magnétostatique elles sont connectées à la taille du plot (diamètre / épaisseur). En réduisant le diamètre du plot, on trouve que le cœur du vortex reste presque inchangé comme les profils de l'aimantation hors du plan m_z , représentés sur la figure IV-9, le prouvent. Seule la région où l'aimantation est planaire $m_{xy} = 1$ diminue lorsque le diamètre décroît. En effet, la réduction du diamètre représente un déplacement de conditions aux bords $\theta(r \rightarrow r_c) = 90^\circ$. Dès que le diamètre du plot s'approche de la taille du cœur du vortex (autour de 50 nm pour un plot de $e = 10 \text{ nm}$ d'épaisseur avec AMP), pratiquement toute l'aimantation est réorientée selon l'axe

de symétrie (OZ). Pour des diamètres plus petits on ne peut plus parler de l'état vortex mais plutôt de l'état monodomaine hors du plan.

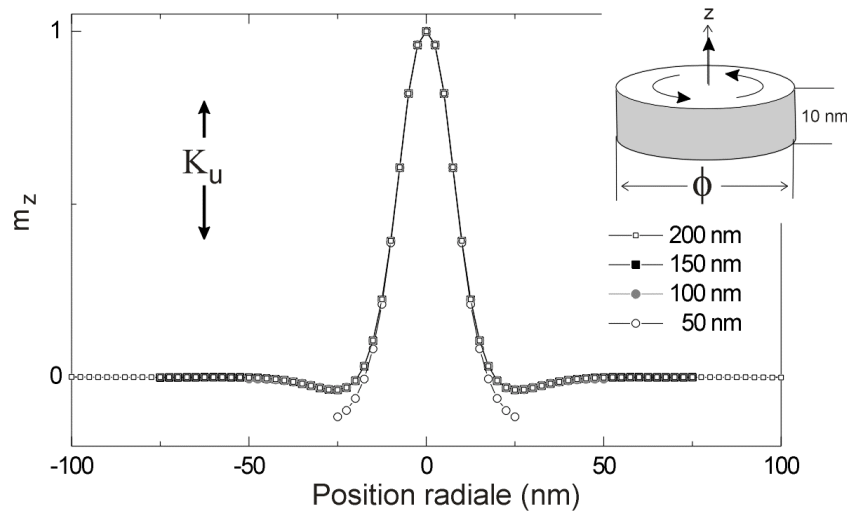


Figure IV-9: Profil du vortex en fonction du diamètre du plot, lorsque l'épaisseur est égale à 10 nm et l'anisotropie magnétocristalline perpendiculaire est considérée.

Tous les profils présentés jusqu'à maintenant ont été pris à la surface supérieure du plot, là où les effets magnétostatiques sont les plus prononcés. Prenant le cas d'un plot de 200 nm de diamètre et de 15 nm d'épaisseur avec anisotropie magnétocristalline perpendiculaire (figure IV-10) et en utilisant un pas de maillage de 2.5 nm pour modéliser ce plot, 6 plans de maillage sont nécessaires le long de l'épaisseur. Une comparaison du profil à la surface et à la mi-hauteur du plot montre qu'au voisinage de la surface le profil souffre une légère compression. Cependant, les déviations enregistrées restent non significatives dans la régime d'épaisseur que nous avons étudié ($e \leq 25 \text{ nm} = 7.5 l_{ex}$) [Annexe C].

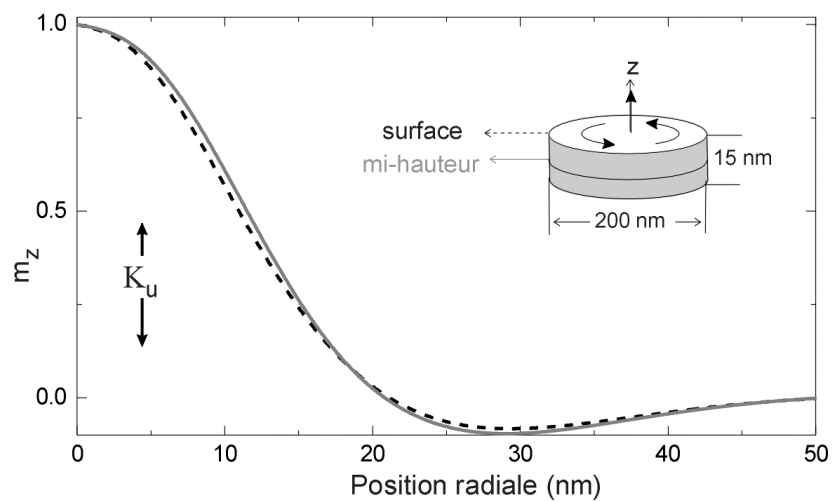


Figure IV-10: Evolution du profil de l'aimantation hors du plan m_z lorsqu'on se déplace de la surface vers le plan médian d'un plot de $\phi = 200 \text{ nm}$ et $e = 15 \text{ nm}$.

Au dehors, du diamètre du plot beaucoup d'autres paramètres peuvent modifier la structure interne d'un vortex tels que: l'anisotropie magnétocristalline K_u , la constante de l'échange A_{ex} , l'aimantation à saturation M_s , l'épaisseur du plot e et le champ externe $\vec{H}_{app}$. Lorsque l'anisotropie magnétocristalline est absente, la largeur du cœur du vortex est le résultat de la compétition entre l'interaction d'échange A_{ex} et les effets magnétostatiques M_s . Afin d'analyser l'influence des paramètres de matériaux sur la structure interne du vortex, nous avons considéré un plot de 200 nm de diamètre et 15 nm d'épaisseur (figure IV-11.). Quand l'échange entre les spins s'intensifie en passant de $A_{ex} = 1.4 \times 10^{-11} \text{ J/m}$ à $A_{ex} = 3.0 \times 10^{-11} \text{ J/m}$, la partie centrale du vortex augmente. La décroissance de l'aimantation à la saturation de $M_s = 1.4 \times 10^6 \text{ A/m}$ à $M_s = 1.2 \times 10^6 \text{ A/m}$ détermine un changement de facteur de qualité de $Q = 0.40$ à $Q = 0.55$. Le profil de l'aimantation hors du plan exhibe une faible caractère oscillatoire. Comme nous avons vu dans le chapitre III, les couches minces ayant un facteur de qualité modéré $Q = 0.5$ et une anisotropie magnétocristalline perpendiculaire ont tendance à former des structures en domaines en bandes. Au niveau de plots caractérisés par un facteur de qualité de même ordre de grandeur, nous retrouvons donc le comportement des couches continues. Le passage entre une structure de type vortex et une structure en domaine en bandes est plus évident lorsque l'épaisseur du plot augmente.

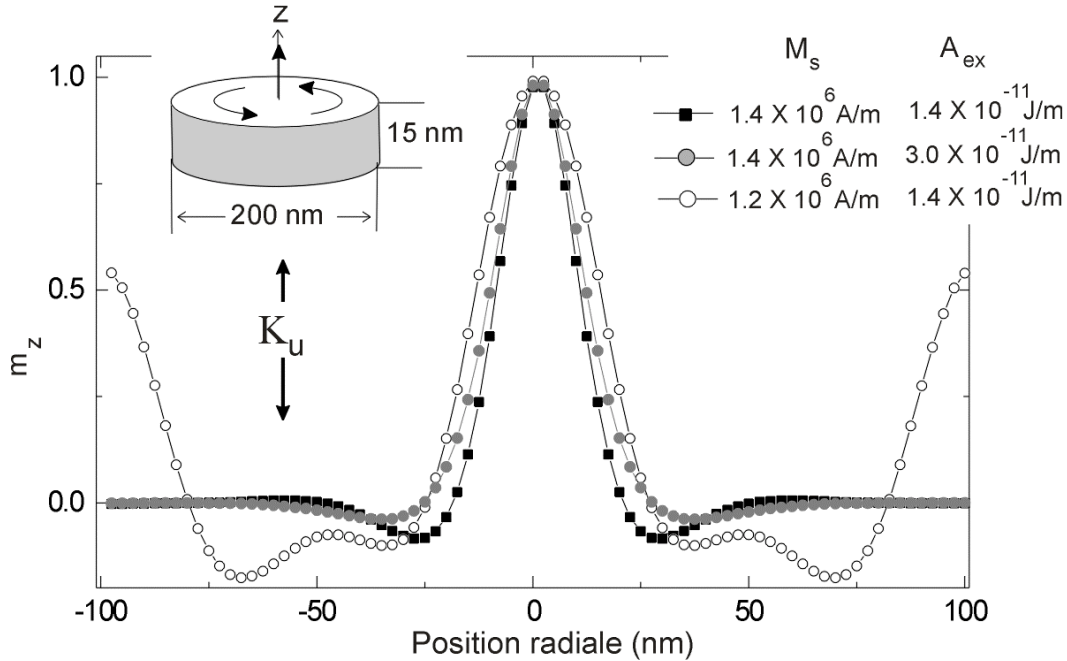


Figure IV-11: Modification du profil de l'aimantation hors du plan, due à la constante d'échange A_{ex} ou à l'aimantation à la saturation M_s pour un plot avec anisotropie magnétocristalline perpendiculaire $K_u = 5 \times 10^{-6} \text{ J/m}^3$.

IV. 2. 5. Effet de l'épaisseur

C'est bien connu que dans les couches minces avec anisotropie magnétocristalline perpendiculaires au plan, l'augmentation de l'épaisseur entraîne la réorientation de l'aimantation du plan vers perpendiculaire au plan (chapitre III). Pour le cas précis des couches de cobalt $\text{Co}(0001)$ la transition état uniforme planaire – état en domaines en bandes se produit dans l'intervalle d'épaisseur de $e = 20 - 30 \text{ nm}$. Lorsque la couche continue est découpée dans de petits éléments tels que les plots cylindriques nous attendons à retrouver cette caractéristique.

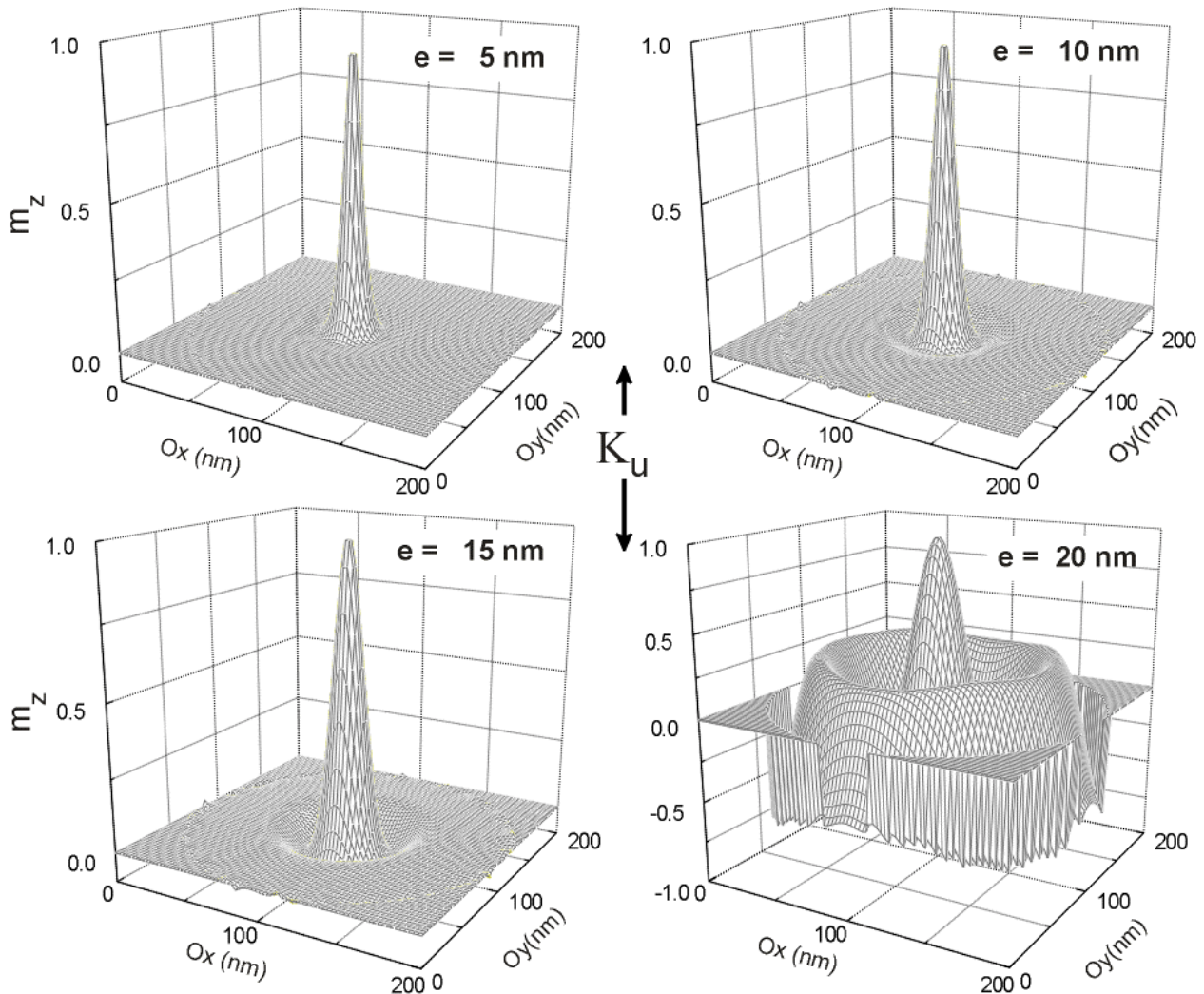


Figure IV-12: Modification de l'aimantation hors du plan lorsque l'épaisseur du plot augmente. Le diamètre du plot est égal à 200 nm et une anisotropie magnétocristalline perpendiculaire au plan du plot est considérée. Les configurations $e=5, 10, 15 \text{ nm}$ ont été obtenues en partant de l'état saturé hors du plan en réduisant lentement le champ externe jusqu'à l'annulation. L'état $e=20 \text{ nm}$ a l'énergie la plus basse que nous avons pu identifier. ($M_s = 1.4 \times 10^6 \text{ A/m}$, $A_{\text{ex}} = 1.4 \times 10^{-11} \text{ J/m}$).

En correspondance avec les couches, nous avons suivi l'évolution de l'état vortex dans un plot de 200 nm de diamètre lorsque l'épaisseur augmente de 5 nm à 20 nm (figure IV-12) tout en supposant qu'il possède une anisotropie magnétocristalline perpendiculaire au plan égale à $K_u = 5 \times 10^5 \text{ J/m}^3$.

Pour le plot fin $e = 5 \text{ nm}$ la structure interne du vortex est celle classique et l'aimantation est majoritairement planaire. Entre 10 nm et 15 nm la structure interne du vortex est altérée par la présence des certaines modulations de plus en plus prononcées si l'épaisseur est plus large. Ces ondulations de l'aimantation hors du plan s'accroissent et évoluent finalement vers des domaines circulaires dans lesquels l'aimantation est orientée suivant l'axe d'anisotropie magnétocristalline. Autour de 20 nm une structure de type *weak stripe* circulaires se forme (figure IV-13(a)).

L'existence d'une telle structure en domaines en bandes circulaires dans des petits objets de $\text{Co}(0001)$ a été déjà rapportée par Hehn et al.[Hehn Science 96]. Après une désaimantation planaire, les plots carrés de 500 nm de taille latérale et 25 nm d'épaisseur exhibent un contraste magnétique formé de régions alternatives blanches et noires concentriques (figure IV-13(b)). Sur 500 nm on peut compter autour de 10 domaines, c'est qui fait une largeur de domaine d'environ 50 nm. Cette valeur est proche de celle que nous avons déduit, à partir des simulations 2D périodiques (section III.3.3.1, figure III-14). Pour les couches continues de $\text{Co}(0001)$ d'environ 30 nm d'épaisseur, la largeur des domaines se situe autour de 40–50 nm. Les paramètres de matériaux utilisés lors des simulations sont: $M_s = 1.4 \times 10^6 \text{ A/m}$, $K_u = 6 \times 10^5 \text{ J/m}^3$, $A_{ex} = 3 \times 10^{-11} \text{ J/m}$.

Dans le cas de plots cylindriques, en passant de 20 nm à 25 nm d'épaisseur, le domaine circulaire extérieur est expulsé sur le bord (figure IV-14) et la largeur des domaines augmente. Toutes ces estimations sur la période des domaines sont valables seulement pour les paramètres que nous avons utilisés. Les variations des paramètres du matériau: M_s , K_u et A_{ex} vont induire des modifications telles que celles discutées dans la section IV.2.4..
expulsion

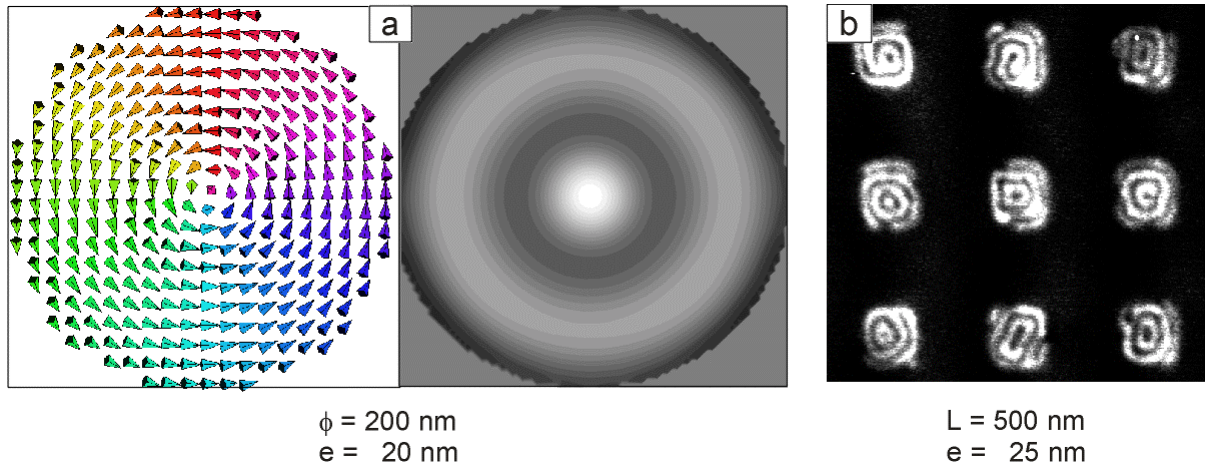


Figure IV-13: (a) Distribution de l'aimantation et de sa composante hors du plan (blanc signifie *up* et noir *down*) d'un plot circulaire de Co(0001) de 200 nm de diamètre et 20 nm d'épaisseur. (b) Image MFM pour des plots carrés de Co(0001) de 500 nm de côté et 25 nm d'épaisseur, enregistrée après une désaimantation planaire [Hehn Science 96].

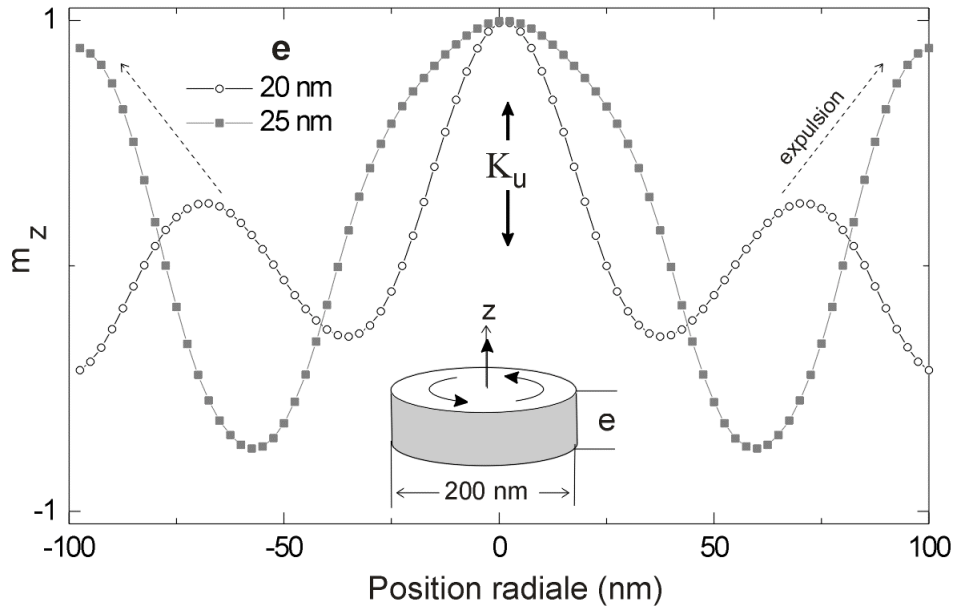


Figure IV-14: Evolution de l'aimantation hors du plan d'une structure de type *weak stripes* lorsque l'épaisseur du plot augmente de 20 nm à 25 nm. Le plot est 200 nm de diamètre.

Dans la limite de faible épaisseur ($e < 20$ nm), les couches continues de Co(0001) préfèrent l'état uniforme planaire à l'état de type *weak stripe*. C'est le cas également pour les plots extrêmement plats $\phi \gg e$ de la même épaisseur que les couches continues. Lorsque la taille latérale du système diminue (couche $\rightarrow$ plot) les effets magnétostatiques, dus à la surface latérale, s'amplifient. Leur conséquence directe est le déplacement de la limite entre l'état uniforme planaire et l'état de type *weak stripe* vers d'épaisseurs plus fines que celles correspondantes aux couches continues.

IV. 2. 6. Diagrammes des états fondamentaux

En variant l'épaisseur $e \leq 6l_{ex}$ et le diamètre $\phi \leq 60l_{ex}$ du plot avec respectivement sans anisotropie magnétocristalline, l'état fondamental a été identifié et les résultats ont été synthétisés sous la forme d'un diagramme des états fondamentaux (figure IV-15).

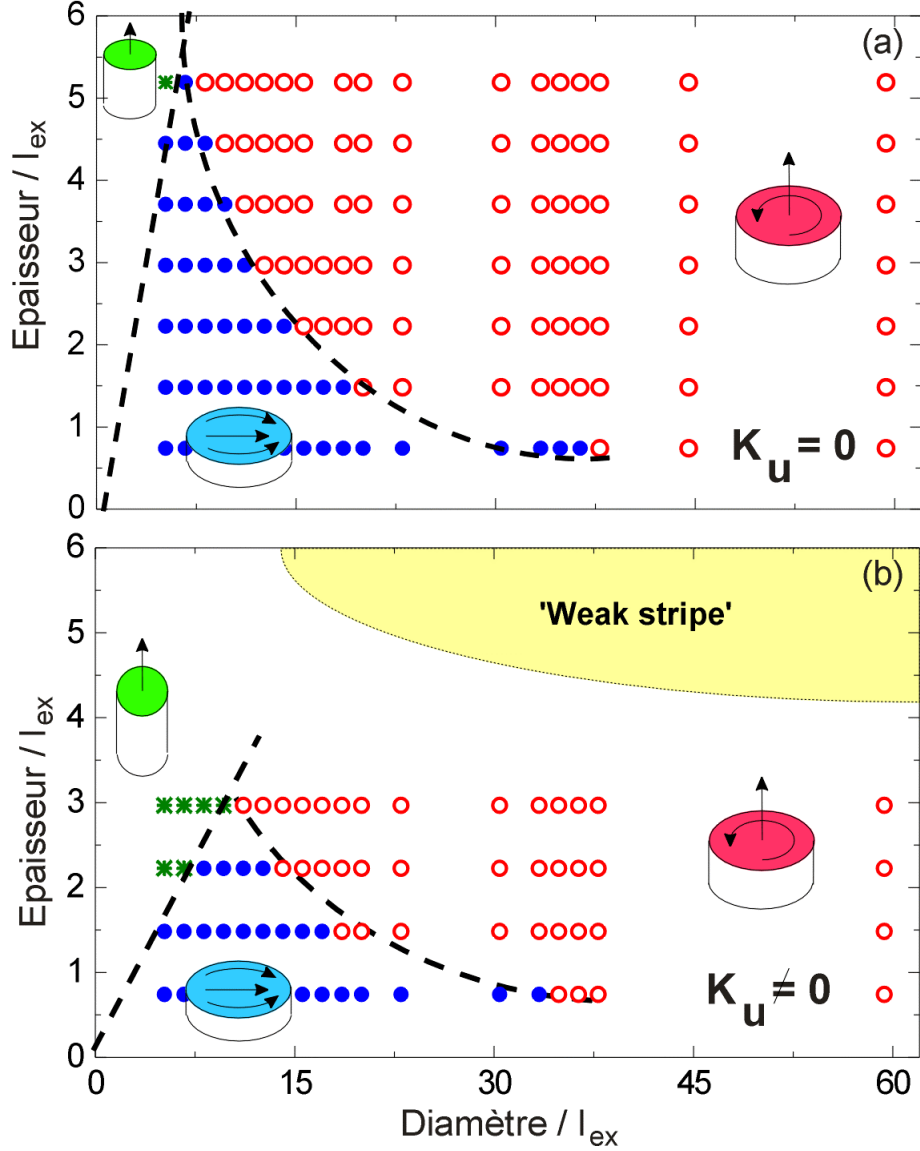


Figure IV-15: Diagramme des états fondamentaux en champ nul des plots circulaires (a) sans et (b) avec anisotropie magnétocristalline. Les paramètres des simulation ont été $M_s = 1.4 \times 10^6 \text{ A/m}$, $A_{ex} = 1.4 \times 10^{-11} \text{ J/m}$ et le pas de maillage cubique $h_x = h_y = h_z = 2.5 \text{ nm}$.

Pour les plots sans anisotropie magnétocristalline, dans la limite des dimensions que nous avons analysées, trois régions ont été délimitées (figure IV-15(a)). L'état vortex est préféré dans les plots larges (intermédiaires) et épais. En réduisant le diamètre et l'épaisseur,

l'état fondamental devient l'état monodomaine planaire. Lorsque le diamètre égale l'épaisseur (le disque devient un fil), l'état fondamental est représenté par l'état monodomaine hors du plan (le long de l'axe du fil). La transition état monodomaine/ état vortex suit une loi de type $e_{cr} \propto \frac{1}{\phi_{cr}}$.

L'effet d'une anisotropie magnétocristalline perpendiculairement au plan du plot de $K_u = 5 \times 10^5 \text{ J/m}^3$ se traduit par le déplacement des limites de régions et par l'apparition d'états magnétiques supplémentaires (figure IV-15(b)). Dans les plots de plus en plus épais, l'anisotropie magnétocristalline devient comparable à l'anisotropie de forme, c'est qui induite l'apparition des domaines en bandes parallèles avec l'aimantation orientée perpendiculairement au plan du plot.

Concernant la limite entre l'état monodomaine planaire et l'état vortex dans les plots circulaires de Co polycristallin, une bonne similarité a été trouvée avec les résultats rapportés par Cowburn [Cowburn PRL 99] pour des plots cylindriques de superpermalloy polycristallin (MoFeNi: $M_s = 8 \times 10^5 \text{ A/m}$). Cependant dans le permalloy les effets magnétostatiques sont moins faibles que dans le cobalt (Co $M_s = 14 \times 10^5 \text{ A/m}$) et, alors, la courbe critique $e = e(\phi)$ est translatée vers d'épaisseur plus larges : $e_{cr}(\text{Co}) < e_{cr}(\text{MoFeNi})$.

IV. 2. 7. Evolution sous champ externe

Les problèmes de retournement de l'aimantation résolus à l'aide du micromagnétisme numérique ne réunissent pas toujours l'accord unanime de la communauté du micromagnétisme. Aharoni [Aharoni 96 page 260] reste encore assez sceptique *"In my mind allowing the computer to decide on how to stay on one branche (of a solution), and at which point to jump to another, involves a too-optimistic view of the ability of the computer"*. Malgré les réticences qu'on peut avoir face aux solutions numériques, dans la plupart des problèmes l'approche numérique est la seule capable d'analyser et de donner une certaine réponse. Ainsi, la validité de la solution numérique doit être traitée avec précaution et certifiée par des résultats expérimentaux si possible.

Les courbes d'aimantation que nous avons simulées, suivent l'algorithme décrit par Schabes [Schabes JMMM 91]. L'état de départ est supposé saturé selon la direction du champ appliqué (soit la direction positive). Toute faible réduction du champ externe

$\vec{H}_{app}(i) \rightarrow \vec{H}_{app}(i+1)$ implique la modification de l'énergie libre dans l'espace des configurations. C'est possible que l'état magnétique $\vec{m}(i)$ (l'état d'équilibre correspondant au champ appliqué $\vec{H}_{app}(i)$) ne soit plus l'état favorable du point de vue énergétique correspondante au champ $\vec{H}_{app}(i+1)$. Alors, le système évolue vers un nouvel état d'équilibre afin de minimiser son énergie $\vec{m}(i) \rightarrow \vec{m}(i+1)$. La façon selon laquelle l'aimantation varie entre les deux états d'équilibre (le chemin qu'elle décrit dans l'espace des configurations) est dictée par l'équation de Landau - Lifshitz - Gilbert et son coefficient d'amortissement α (section II.6.5). D'habitude, pour réduire le temps de calcul, l'amortissement critique est appliqué. Ceci peut conduire vers l'état final réel mais en passant par des états transitoires différents de ceux réels. Le cas extrême qu'il faut éviter c'est la contamination des résultats par la valeur du coefficient d'amortissement. Plus précisément, il faut que les états d'équilibre trouvés soient indépendants de α même si les trajectoires qui les relient ne sont pas tout à fait les mêmes. Pour surmonter cette difficulté le champ externe appliqué doit varier lentement, surtout lorsqu'on s'approche d'un point critique sur la courbe d'aimantation (e. g. le champ de retournement).

La plupart des travaux actuels est focalisée sur la réaction de plots lorsque le champ externe est appliqué dans le plan du plot. En fonction de la taille (diamètre / épaisseur) le renversement de l'aimantation dans le plan s'effectue soit par une rotation cohérente soit par la nucléation d'un vortex. Ces deux types de comportement ont pu être identifiés à partir de mesures de MOKE [Cowburn PRL 99] et visualiser par des études de MFM sous champ [Prejbeanu JAP]. Lorsque le renversement est inhomogène (via l'état vortex) les études par microscopie Lorentz prouvent la nucléation d'un vortex au bord du plot, sa propagation perpendiculairement à la direction du champ appliqué et son annihilation [Schneider APL 00] confirmant ainsi les calculs analytiques [Guslienko PRB 01].

Par rapport à ces analyses dans une géométrie plane, nos études traitent surtout l'application du champ externe perpendiculairement au plan du plot. Nous privilégions l'état vortex et sa réaction à l'application d'un champ perpendiculaire et visons l'analyse du rôle joué par l'anisotropie magnétocristalline sur le renversement de l'aimantation.

Champ directe: Sur la figure IV-16(a) les courbes simulées pour un plot individuel avec et sans anisotropie magnétocristalline perpendiculaire (AMP) sont rapportées lorsque le champ externe est appliqué parfaitement perpendiculaire au plan du plot. Le plot de $\phi = 200\text{nm}/e = 15\text{nm}$, a été divisé en $80 \times 80 \times 6$ unités de maillage. La courbe expérimentale mesurée par MOKE pour un réseau carré de plots avec AMP de la même taille est également marquée [Demand thèse].

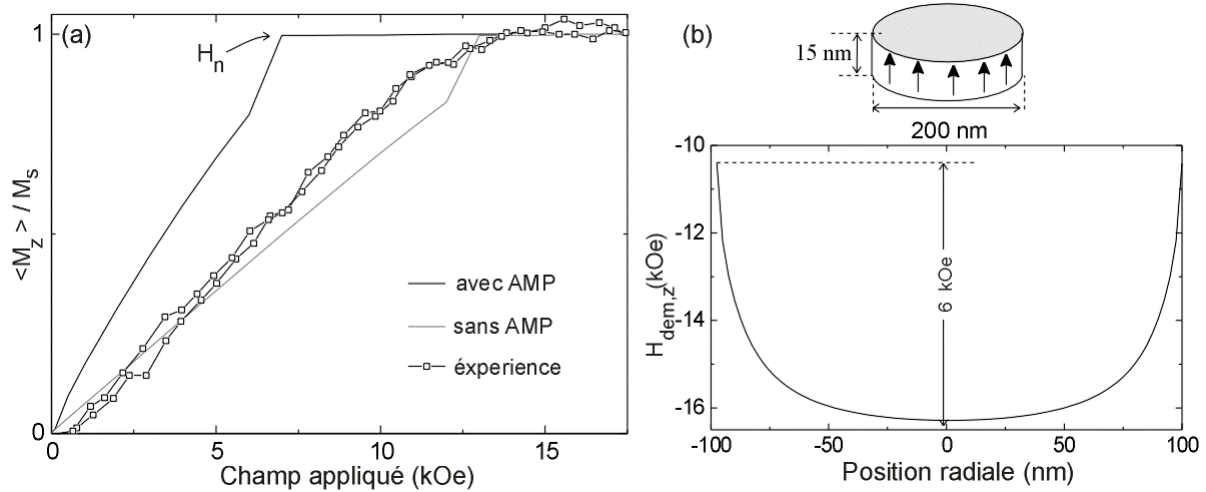


Figure IV-16: (a) Partie supérieure de la courbe d'aimantation simulée sous champ perpendiculaire pour un plot avec et respectivement sans anisotropie magnétocristalline perpendiculaire (AMP). Le diamètre du plot est de 200 nm et son épaisseur de 15 nm. La courbe expérimentale mesurée par MOKE à la température ambiante, sur un réseau de plots de Co(0001) de la même taille est figurée par de carrés [Demand JAP 00]. (b) Profil radial de la composante perpendiculaire du champ démagnétisant près de la surface supérieure du plot lorsque le plot se trouve dans l'état parfaitement saturé hors du plan.

Proche de l'état saturé hors du plan, la distribution interne de l'aimantation est quasi-uniforme mais, par contre, la distribution du champ interne est très inhomogène. Cette inhomogénéité est introduite par le champ démagnétisant $\vec{H}_{dem}$ (figure IV-16(b)) qui, au voisinage de la surface supérieure du plot, augmente d'environ 6 kOe lorsqu'on va du bord vers le centre du plot. L'état saturé *up* reste l'état d'équilibre du système tant que le champ appliqué se situe au dessus d'un certain seuil $H_{app} > H_n$. A ce champ les effets magnétostatique emportent le couplage Zeeman et ainsi l'état quasi-saturé hors du plan (*état fleur*) n'est plus favorable du point de vue énergétique. La réaction du système se traduit par la formation d'une structure de symétrie circulaire dans laquelle l'aimantation a tendance à s'allonger dans le plan du plot et à tourner de manière continue afin de fermer le flux magnétique. Les régions, le moins touchée par la nucléation de cet état non-uniforme, sont les bords et le centre du plot qui préservent leur orientation initiale (pointent vers le haut). La variation de l'énergie libre et du couple résiduel pendant le passage entre l'état quasi-uniforme et l'état non-uniforme sont rapportés

sur la figure IV-17. La nucléation de l'état non-uniforme implique l'apparition d'un saut dans l'évolution de l'aimantation moyenne suivant le champ appliqué comme l'image incrustée sur la figure IV-17 l'indique.

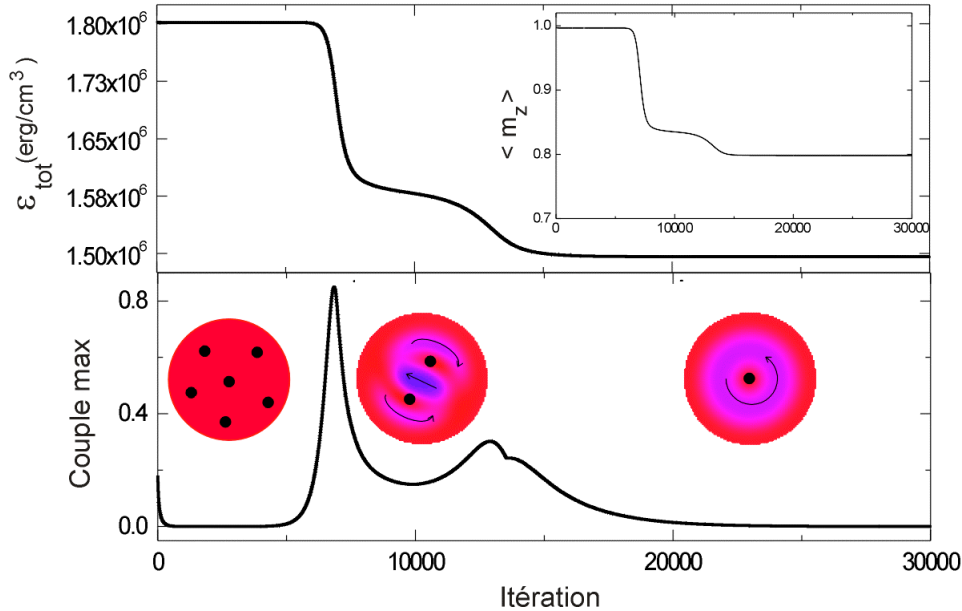


Figure IV-17: Variation de l'énergie totale, du couple résiduel et de l'aimantation hors du plan $\langle m_z \rangle$ pendant la 'nucléation' de l'état non-uniforme dans un plot avec AMP pour une valeur du champ appliqué de 6kOe. Les distributions de l'aimantation m_z correspondantes aux paliers de l'énergie libre sont aussi schématiquement représentées. Le calcul a été fait avec un amortissement critique ($\alpha = 1$).

En réduisant davantage le champ appliqué la structure non-uniforme finit par aboutir, en champ nul, à une structure de type vortex classique (figure IV-18) qui a une aimantation prépondérante planaire. Le long du bord du plot l'aimantation flote dans le champ appliqué tandis que le cœur de la structure non-uniforme point toujours vers le haut.

La présence de l'anisotropie magnétocristalline perpendiculaire au plan du plot n'affect pas trop les étapes de l'évolution de la structure interne de l'aimantation du plot, elle étant responsable seulement de leur décalage en champ (figure IV-18).

Les aspects liés à la nucléation de l'état non-uniforme semblent à être très délicats surtout quand il s'agit que l'ordinateur *décide* l'évolution du système. Nous voulons par la suite éclaircir certains point d'interrogation sur la nucléation de l'état non-uniforme comme par exemple son possible dépendance de l'orientation du champ appliqué, de l'aimantation à la saturation et de la constante d'échange.

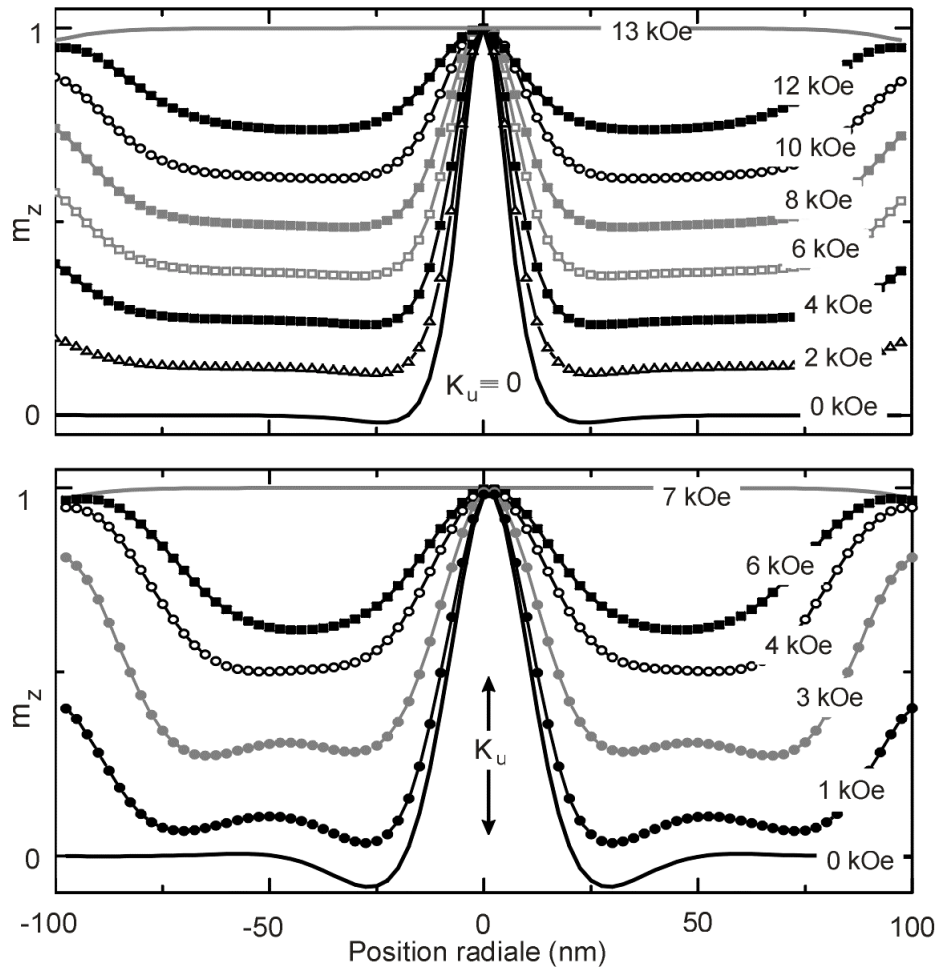


Figure IV-18: Profils de l'aimantation m_z obtenus lorsque le champ appliqué est réduit à partir de l'état saturé hors du plan sans respectivement avec anisotropie magnétocristalline.

Pour commencer, l'orientation du champ externe appliqué a été légèrement inclinée de 1° par rapport à la direction perpendiculaire (figure IV-19). Une telle désorientation du champ appliqué est tout à fait raisonnable du point de vue expérimentale. Deux sorts de maillage ont été appliqués selon le nombre de cellules le long du diamètre du plot: pair $80 \times 80 \times 6$ ou impair $79 \times 79 \times 6$. En appliquant le champ externe parfaitement perpendiculaire au plan, pour tous les deux sorts de maillage, on obtient un saut dans l'aimantation moyenne (figure IV-19(a)). Cependant, l'état quasi-saturé *up* semble qu'il est plus stable lorsque le maillage est impair que lorsque le maillage est pair. Cette différence est directement liée à la manière selon laquelle les détails fins de l'aimantation sont reproduits sous une forme discrète. Prenant par exemple, l'état vortex en champ nul dans un plot de 15 nm d'épaisseur (figure IV-19(b)) obtenu avec un pas de maillage cubique $h_x = h_y = h_z = 2.5 \text{ nm}$. En utilisant un maillage impair ($79 \times 79 \times 6$) on trouve que le spin central de l'état vortex est parfaitement orienté *up* ($m_z = 1$). Au contraire, si le maillage est pair ($80 \times 80 \times 6$) la valeur unitaire n'est pas atteinte

($m_z \leq 0.98$) et ainsi le spin central *up* du vortex ne peut pas être vu. Pour éviter un tel artéfact le champ externe est appliqué de début incliné et un maillage impaire est utilisé. Cette fois le passage entre l'état saturé *up* et l'état non-uniforme se fait graduellement selon une courbe qui ressemble à la courbe expérimentale (figure IV-16(a)). L'inclinaison du champ appliqué constitue une brisure de la symétrie de la configuration magnétique du plot par rapport: à la géométrie cylindrique et à la symétrie du maillage cubique.

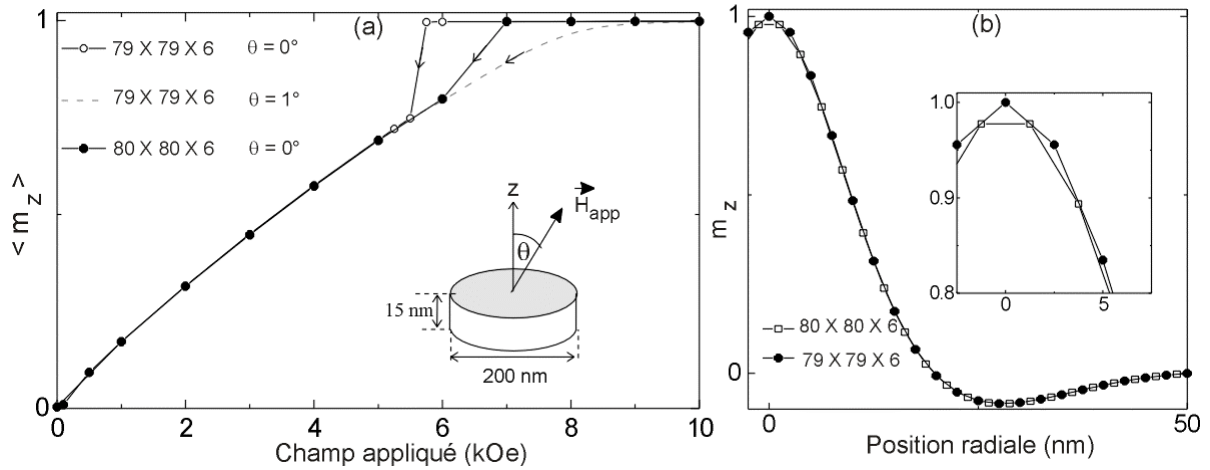


Figure IV-19: (a) Courbes d'aimantation simulées en fonction du maillage et de l'inclinaison du champ appliqué. (b) Profil du vortex, en champ nul, obtenu avec un maillage pair respectivement impair.

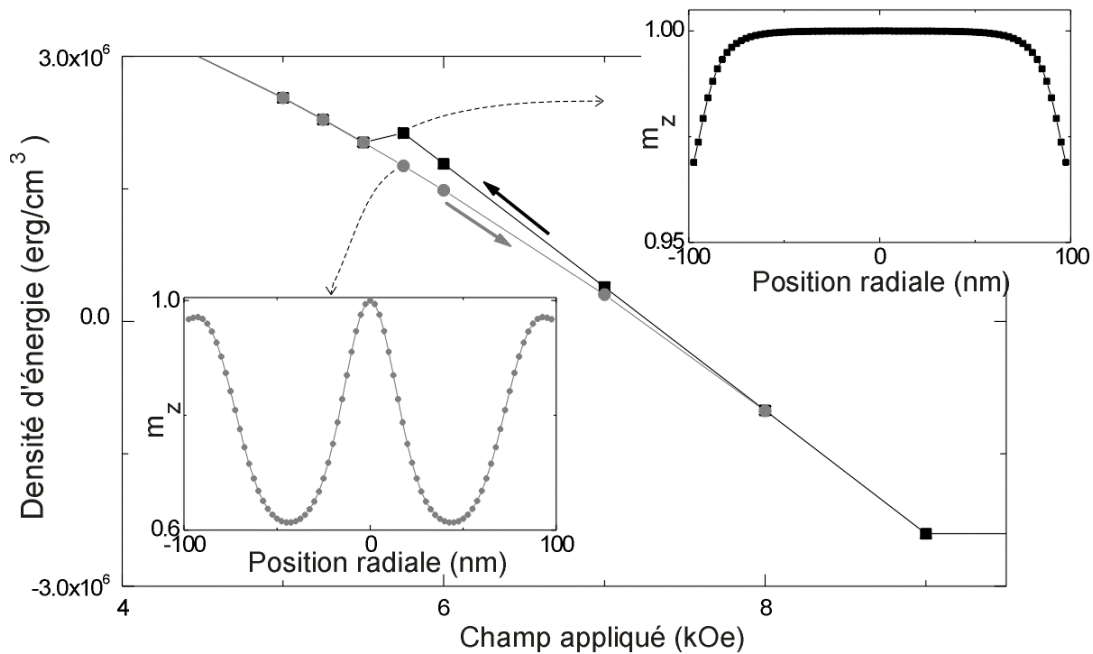


Figure IV-20: Variation de l'énergie libre en fonction du champ appliqué. En noir est la courbe obtenue lorsqu'on part de l'état saturé *up* en diminuant le champ. Lorsque l'état de départ est l'état vortex en champ nul avec le cœur dirigé vers le haut la courbe grise est obtenue si le champ appliqué augmente vers la saturation positive. Les images incrustées indiquent les profils de l'aimantation hors du plan correspondante à une valeur du champ appliqué de 6kOe selon le deux chemins.

Le long d'une courbe d'aimantation le système ne passe pas forcément par son état fondamental. Sur la figure IV-20, les carrés noirs indiquent l'évolution de l'énergie libre du plot divisé en $79 \times 79 \times 6$ cellules avec le champ appliqué parfaitement perpendiculaire au plan du plot ($\theta = 0^\circ$). Après l'arrivée à champ nul avec la stabilisation de l'état vortex symétrique (le cœur qui pointe vers le haut), nous avons à nouveau augmenté le champ vers la saturation positive ($\theta = 0^\circ$). Ainsi la courbe grise a été obtenue, légèrement décalée vers de valeurs moins énergétiques que la courbe noire. Le saut dans la courbe d'aimantation IV-19(a) est le résultat du blocage du plot dans un état quasi – saturé *up*.

Champ inverse : Lorsque le champ externe augmente vers de valeurs négatives, le système régit de la manière suivante (figure IV-21). Tout d'abord, c'est l'aimantation de régions du bord qui suit librement le champ appliqué (figure IV-21(a)).

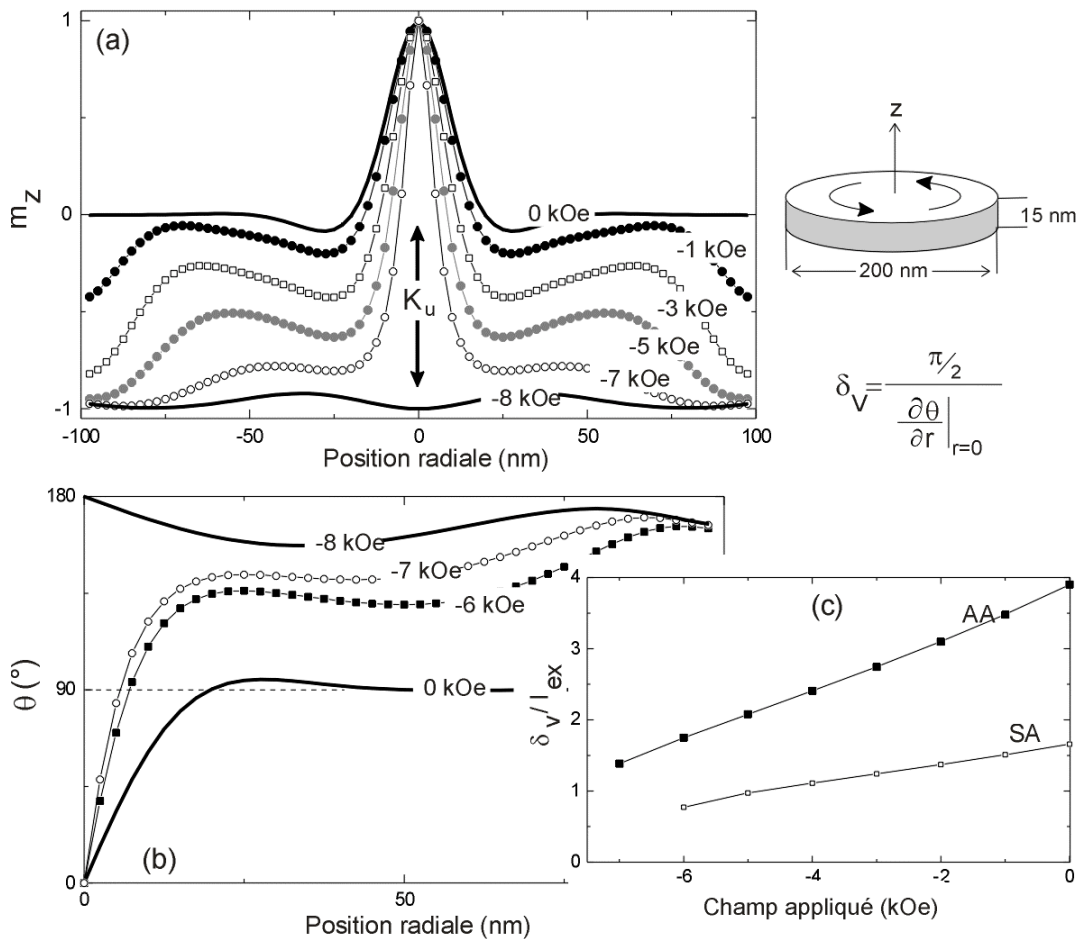


Figure IV-21: Evolution du vortex en champ inverse. (a) Les profils de l'aimantation hors du plan et (b) les profils de l'angle θ pour le plot avec anisotropie. (c) Evolution de la taille du cœur du vortex pour un plot AA et SA.

Simultanément, la région centrale du plot où l'aimantation est antiparallèle au champ appliqué souffre une compression graduelle (figure IV-21(b)). La réduction de la largeur du cœur du vortex en fonction de champ appliqué représentée sur la figure IV-21(c) montre que le retournement du cœur du vortex (transition $up \rightarrow down$) se produit lorsque $\delta_v \rightarrow l_{ex}$. Ce passage se produit entre $(7-8)kOe$ et $(6-7)kOe$ pour le plot avec (AA) respectivement sans (SA) anisotropie magnétocristalline perpendiculaire. Malheureusement, il y a très peu d'évidences expérimentales concernant l'évolution de l'état vortex sous champ perpendiculaire et surtout des informations qui pourraient éclaircir le mécanisme de renversement en champ perpendiculaire. La taille du vortex est extrêmement réduite est le renversement au mois selon les calculs numériques semble à se produire à des valeurs relativement large du champ appliqué. Ceci rend difficile les analyses au niveau microscopique à l'aide de la microscopie à force magnétique sous champ (au moins pour le manip disponible à l'IPCMS).

Cependant pour de plots de permalloy $\phi/e = 400nm/50nm$, Okuno et al. [Okuno JMMM 01] ont montré que le champ de retournement du vortex se situe au-dessus de 2.5 kOe (figure IV-22(a),(b)). L'application d'un champ inverse de 3.5kOe produit le basculement d'un vortex indiqué par le changement du contraste central noir $\rightarrow$ blanc. Egalement, la largeur de la distribution du champ de retournement parfaitement perpendiculaire au plan du plot est relativement large, comprise entre 2.5-5 kOe.

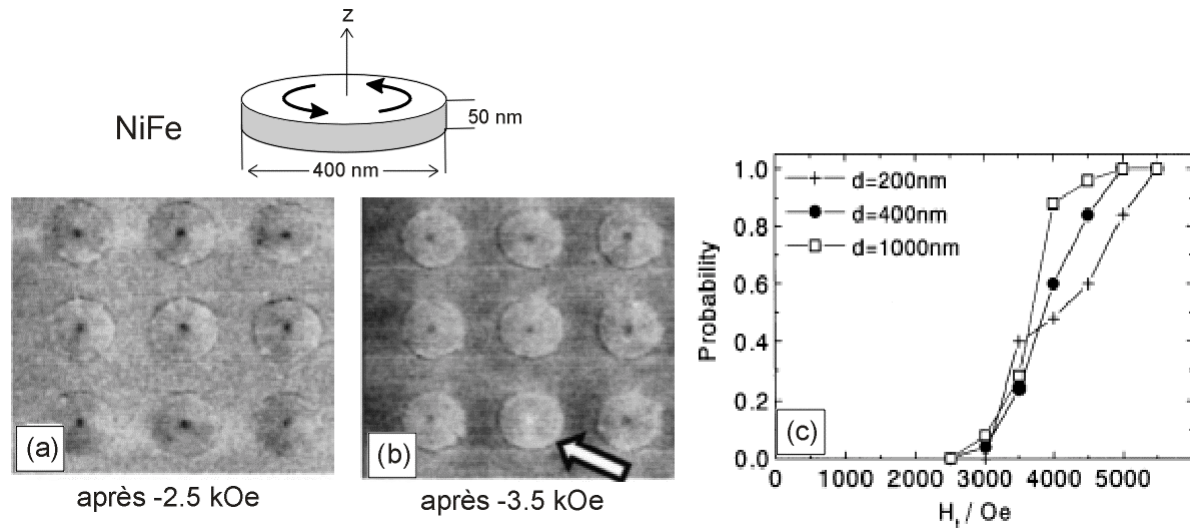


Figure IV-22: Images MFM enregistrée après l'application d'un champ inverse de (a) -2.5 kOe et (b) -3.5 kOe pour un plot de permalloy $\phi/e = 400nm/50nm$. (c) Probabilité de retournement de l'orientation du vortex en fonction du champ appliqué évaluée à partir des images MFM sous champ nul [Okuna JMMM 01].

Il nous semble judicieux d'ajouter que toute analyse dynamique reliée directement au processus de renversement, dépasse nos possibilités surtout que les calculs que nous résumons ici sont de calculs quasi-statiques. A partir de ces calculs nous pouvons juste conclure que l'aimantation du vortex bascule mais comment ce processus se déroule reste encore à explorer.

C'est intéressant de noter que nos calculs ne tiennent pas compte de la température et que les études menées par Hehn et al. [Hehn APL 97] sur des plots carrés de $\text{Co}(0001)$ ont montré que le facteur température s'avère être essentiel pour le comportement magnétique des petits objets (figure IV-23). Au fur et à mesure que la température décroît, le cycle d'hysteresis en champ perpendiculaire, s'ouvre et des sauts de plus en plus prononcés apparaissent proche de saturation. La réduction de la température du système implique la diminution des fluctuations thermiques et la modification des paramètres de matériau (M_s , K_u).

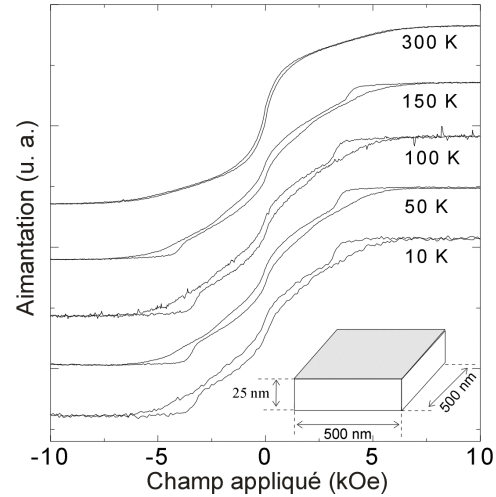


Figure IV-23: Courbes d'hysteresis en champ perpendiculaire mesurées à différentes températures pour un réseau de plots carrés [Hehn APL 97]. Les dimensions des plots correspondantes sont indiquées sur l'image incrustée.

IV. 2. 8. Couplage dipolaire entre les plots

Tous les calculs présentés dans les sections précédentes ont considéré que le plot est individuel et isolé. Afin de se rapprocher des conditions proprement dites de l'expérience nous nous sommes interrogé sur l'interaction dipolaire entre les plots rassemblés dans un réseau périodique. Dans le contexte d'un réseau chaque plot interagit avec le champ magnétostatique créé par lui-même et par tous les autres plots du réseau. Deux facteurs sont décisifs pour le champ magnétostatique du couplage: le premier est la distance de séparation entre les plots (S) et le deuxième est représenté par l'état magnétique des plots eux-mêmes. Lorsque les plots sont saturés leur moment magnétique effectif est le plus large et en conséquence nous attendons un couplage dipolaire forte.

En prenant comme paramètres de simulation la géométrie des plots de $\text{Co}(0001)$ l'énergie d'interaction dipolaire avec les voisins proches a été évaluée (figure IV-24) et comparée pour des plots saturés soit dans le plan (OX), soit hors du plan (OZ). Prenant tout d'abord le cas de la saturation selon OX (figure IV-24(a,b)). Lorsqu'on s'éloigne du plot central le long de l'axe OX, l'énergie d'interaction s'approche de zéro en venant des valeurs négatives larges (e. g. $2\pi M_s^2 \cong 12.31 \times 10^6 \text{ erg/cm}^3$). Ceci signifie que l'interaction dipolaire est favorable à ce genre d'orientation relative de l'aimantation des plots. Au contraire, si on s'éloigne du plot central perpendiculairement à l'axe OX, l'énergie d'interaction décroît vers zéro à partir de valeurs positives larges et donc une telle configuration n'est pas souhaitable du point de vue dipolaire.

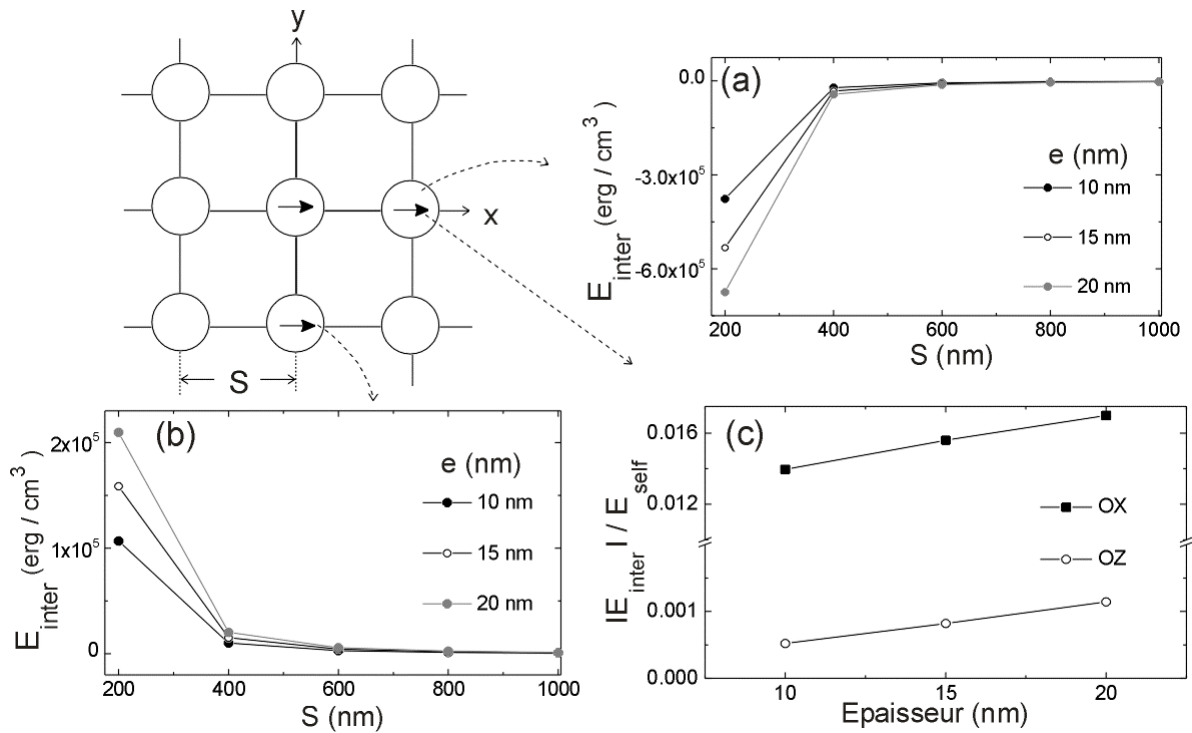


Figure IV-24: Evolution de l'énergie d'interaction magnétostatique en fonction de la distance de séparation des plots saturés selon OX en suivant la direction OX (a) et OY (b). Le diamètre du plot a été fixé à 200 nm et l'aimantation à la saturation $M_s = 1400 \times 10^3 \text{ A/m}$. (c) Influence de l'épaisseur sur le couplage dipolaire lorsque les plots sont saturés dans le plan ou hors du plan d'un plot de 15 nm d'épaisseur situé à $S = 400 \text{ nm}$ selon OX du plot central. L'énergie d'interaction dipolaire a été normalisée par l'énergie magnétostatique propre du plot centrale. Les flèches en ligne interrompue indiquent la position du plot correspondant à chaque graphique.

Si les plots sont saturés selon OX éloignés à une distance de deux fois le diamètre du plot, le couplage dipolaire augmente au fur à mesure que l'épaisseur devient plus large car le moment magnétique des plots augmente (figure IV-24(c)). La même tendance est obtenue si les plots sont saturés hors du plan seulement que l'intensité du couplage est cette fois plus

faible. Ce couplage est fortement diminué voir absent si la structure magnétique des plots correspond à l'état vortex caractérisé par un moment magnétique net hors du plan autour de $(0.03 - 0.05)M_s$ (figure IV-7(d)). Si on compare la contribution énergétique du couplage interplots et l'énergie self du plot on réalise qu'elle est non-significative pour les dimensions que nous avons précisées

Cependant lorsque les tailles de plots atteignent de valeurs relative larges les effets dipolaires s'avèrent forte polluants en modifiant de manière radicale le comportement collectif des plots [Tsymbal APL 00]. Dans certaines conditions les interactions dipolaires mènent jusqu'à l'existence d'une ordre antiferromagnétique évidente au niveau d'un réseau compacte [Guslienko APL 99].

Les diagrammes des états fondamentaux que nous avons obtenus (figure IV-15) restent valables lorsque le couplage dipolaire s'inscrit dans la limite d'une faible perturbation mais dès qu'il dépasse cette approximation le problème général change. L'impact des interactions dipolaires sur de réseaux serrés des plots cylindriques de Co polycristallin a été récemment analysé profondément par MFM et Kerr [Natali PRL 01, Prejbeanu thèse]. Ces études prouvent clairement le rôle active du couplage dipolaire qui superposé à distribution de forme, des tailles et aux défauts intrinsèques du réseau rendent difficile le contrôle de l'état magnétique d'un plot.

IV. 2. 9. Influence de la forme de l'objet

Depuis la fabrication des premiers objets nanostructurés [Hehn Science 96, Miramond JMMM 97] une large variété des formes a été explorée [Cowburn JAD 00] afin de trouver leur influence sur les propriétés magnétiques de l'objet. De ce point de vue, le passage d'un plot circulaire vers un anneau est tout à fait naturel [Zhu JAP 00, Li PRL 01, Rothman PRL 01]. Dans ce paragraphe, nous examinons les modifications induites sur l'énergétique d'un élément circulaire lorsque la partie centrale du plot cylindrique est découpée.

Les calculs ont été faits en supposant que le plot et l'anneau ont une anisotropie magnétocristalline négligeable ($K_u \cong 0$) comme c'est le cas expérimentalement [Li PRL 01].

Leur épaisseur a été fixée à 5 nm. Le diamètre interne de l'anneau ϕ_{int} a été choisi d'être plus large que le cœur du vortex $\phi_{\text{int}} = 50 \text{ nm}$ (figure IV-25). Pour l'anneau, à champ nul deux états magnétiques stables ont été identifiés: l'état monodomaine (MD) appelé '*onion state*' par Rothman [Rothman PRL 01] et l'état de fermeture du flux (FF).

- Les états monodomaine du plot et de l'anneau ont de distributions internes de l'aimantation très similaires. De plus, dans l'anneau pour l'état MD il y a des charges magnétiques de surfaces supplémentaires sur la surface interne, qui augmente légèrement son énergie par rapport à l'état MD du plot.
- L'état de fermeture du flux est l'équivalent de l'état vortex dans des plots complets après l'élimination du cœur du vortex. En supprimant le vortex, l'énergie d'échange est pratiquement à son minimum. La circulation de l'aimantation ferme le flux magnétique d'une manière presque complète à l'intérieur d'anneau en réduisant ainsi les effets magnétostatiques. Ces deux facteurs font de l'état de fermeture du flux (FF) l'état le plus favorable énergiquement. L'état monodomaine quant à lui, il reste toujours un minimum local de l'énergie libre (figure IV-25(b)).

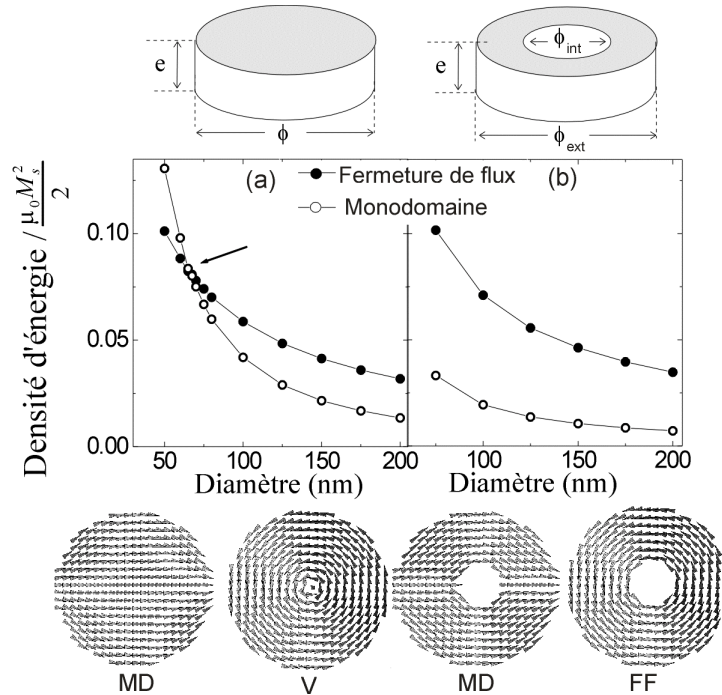


Figure IV-25: Evolution de l'énergie totale de l'état monodomaine planaire MD et de fermeture du flux (FF or V): (a) d'un plot circulaire et (b) d'un anneau. L'épaisseur des objets est de 5 nm et les paramètres: $M_s = 1.4 \times 10^6 \text{ A/m}$, $A_{\text{ex}} = 1.4 \times 10^{-11} \text{ J/m}$, $h_x = h_y = h_z = 2.5 \text{ nm}$ ont été utilisés.

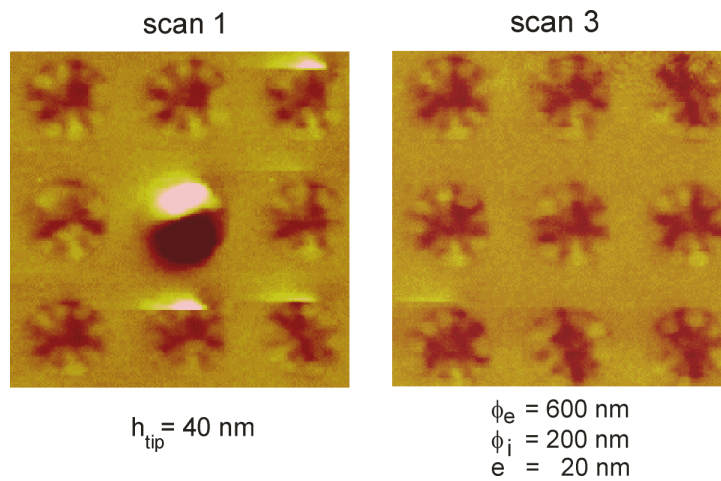


Figure IV-26: Relaxation de l'anneau de l'état monodomaine planaire vers l'état de fermeture du flux induite par la pointe MFM. (Echantillons fournis par S. Li L2M Bagneux)

Les études de microscopie à force magnétique menées sur les anneaux de Co polycristallin ont prouvé la métastabilité de l'état MD. En champ nul facilement l'anneau passe d'un état MD vers l'état de fermeture du flux (figure IV-26). C'est sur cette grande stabilité et simplicité (structure sans vortex) que se concentre l'utilisation potentielle des anneaux dans le domaine de MRAM proposé par Zhu et al. [Zhu JAP 00].

Le prolongement logique de nos études sur la forme de l'objet et ses implications sur le comportement magnétique de l'objet, est focalisé par la suite sur le cas de fils obtenus lorsque les plots sont extrêmement épais et étroits.

IV. 3. Fils nanométriques

Depuis les premières mesures expérimentales qui ont indiqué l'existence d'une résistance associée aux parois de domaine [Hong PRB 95, Gregg PRL 96], le sujet lié à la résistance d'une paroi suscite un vif intérêt. Malgré la multitude de systèmes ferromagnétiques dédiés à ces études: de couches minces [Gregg PRL 96, Viret PRB 96], de fils lithographies [Kent JP 01, Kim JMMM 98, Hong PRB 95] et de fils électrodeposés [Ebels PRL 00, Wegrowe PRL 99], la réponse à la question : *Quelle est la résistance de la paroi?* divise encore la communauté scientifique [Šimánek PRB 01]. La grande complexité de ce problème réside dans la difficulté de séparer la contribution intrinsèque de la paroi d'autres effets caractéristiques aux matériaux ferromagnétiques (la magnétorésistance anisotrope et la magnétorésistance de Lorentz).

Le modèle théorique proposé par Levy [Levy PRL 97] pour expliquer le mécanisme magnétorésistif d'une paroi, repose sur l'analogie entre la structure d'une paroi de Bloch qui sépare deux domaines antiparallèles et une structure de type CPP-GMR. Cependant, la structure interne des parois dans des systèmes à taille latérale réduite, s'éloigne de la structure idéale de la paroi de Bloch (chapitre III). A l'intérieur de parois, l'orientation de l'aimantation peut varier d'une direction parallèle à une direction perpendiculaire par rapport à la direction du courant, ce qui implique un effet de type AMR dû à la paroi. Expérimentalement pour enlever cette contribution AMR du signal global de la paroi il faudrait faire de mesures magnétoresistives selon toutes les directions de l'espace. Cela est difficilement réalisable, en pratique, pour des structures ferromagnétiques. Pourtant connaissant les détails fins de la structure magnétique des parois une séparation du signal CPP-GMR des autres contributions magnétoresistives est envisageable [Viret PRL 00]. En conclusion, un des facteurs majeurs impliqués dans le mécanisme de résistance de la paroi est sa structure interne et c'est pour cette raison que nous nous sommes intéressés à l'analyser à l'aide du micromagnétisme numérique pour le cas précis des fils de cobalt.

Dans le chapitre III, nous avons montré la forte dépendance de la distribution interne de l'aimantation des parois dans les couches minces, en fonction de paramètres tels que l'orientation de l'axe d'anisotropie magnétocristalline, l'épaisseur de la couche et le champ externe appliqué. En passant à une géométrie filiforme, la réduction de la taille latérale implique des effets magnétostatiques de plus en plus prononcés qui sont à l'origine des nouvelles modifications dans la configuration micromagnétique des parois. A travers les sections qui suivent, la structure magnétique des parois dans des fils à section rectangulaire

est analysée en fonction de l'orientation relative de l'axe d'anisotropie magnétocristalline et de l'axe du fil. Deux types de fils de cobalt ont été étudiés. Premièrement les fils qui ont l'axe d'anisotropie magnétocristalline parallèle avec l'axe du fil ($K_u //$) sont présentés. Dans la deuxième partie nous regardons de près quelles sont les modifications induites lorsque l'axe d'anisotropie devient perpendiculaire à l'axe du fil ($K_u \perp$).

IV. 3. 1. Anisotropie magnétocristalline parallèle à l'axe du fil

Du point de vue magnétostatique un fil est caractérisé par une forte anisotropie de forme. Ceci implique que l'aimantation d'un tel système, essaie préférentiellement à s'aligner suivant l'axe du fil et l'état magnétique le plus stable, en champ nul (l'état fondamental), est l'état monodomaine le long de l'axe du fil. Lorsqu'on ajoute une anisotropie magnétocristalline parallèle à l'axe du fil, l'alignement de l'aimantation selon l'axe du fil est davantage renforcé. Les états magnétiques multidomaines induites, par exemple, par un processus de désaimantation perpendiculaire à l'axe du fil sont moins favorables énergiquement et ils ont également l'aimantation le long de l'axe du fil.

Les études théoriques sur le retournement de l'aimantation d'un cylindre infini [Frei PR 57, Aharoni PR 58] ont prédit l'existence de plusieurs mécanismes possibles. En appliquant un champ le long de l'axe du fil cylindrique, lorsque le diamètre du fil est inférieur à une certaine valeur critique le renversement de l'aimantation se fait selon une rotation cohérente. Si le diamètre du cylindre dépasse la valeur critique, deux modes de retournement non-uniforme moins énergétiques sont envisageables: le retournement par enroulement de l'aimantation (*curling*) et le retournement par famblage de l'aimantation (*buckling*).

Lorsque le système n'est plus infini, comme c'est le cas des fils de 10-20 μm de longues, le retournement de l'aimantation se fait par la nucléation et la propagation des parois. Ce

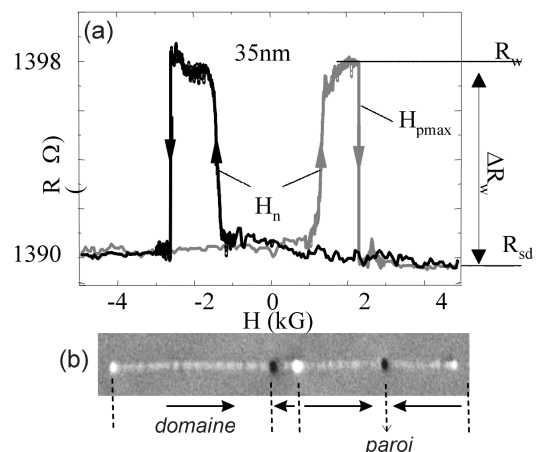


Figure IV-27: (a) Courbe de magnétorésistance mesurée sur un fil de Co électrodéposé de 35 nm de diamètre lorsque le champ est appliqué le long de l'axe du fil [Ebels PRL 00]. (b) Image MFM d'un fil électrodéposé dans un état désaimanté perpendiculaire avec 3 parois. Les sauts dans la courbe de MR sont liés à l'interface qui existe au niveau des parois de domaines tête-bêches.

mécanisme de retournement a été confirmé par des études expérimentales menées sur des fils uniques de nickel par Wernsdorfer et al. [Wernsdorfer PRL 96] ainsi que par de simulations micromagnétiques [Schabes JMMM 91, Ferré PRB 97] et par de simulations Monte Carlo [Heizke JMMM 00]. Des évidences indirectes sur l'existence des parois dans de fils pendant le retournement sous champ parallèle, sont fournies par les mesures de MR telles que celles rapportées par Ebels et al. [Ebels PRL 00] sur un fil de Co électrodéposé (figure IV-27(a)). Les études MFM montrent que, par une procédure de désaimantation selon une direction transversale à l'axe du fil, une structure magnétique multidomaines peut être induite qui possède de domaines tête - bêche séparés par des parois (figure IV-27(b)).

En utilisant une approche micromagnétique bidimensionnelle, McMichael et al. [McMichael IEEE 97] ont identifié deux sortes des parois de domaine tête-bêche possibles dans de fils de permalloy sans d'anisotropie magnétocristalline. Du point de vue énergétique, dans les fils fins (taille latérale petite) et plats (de faible épaisseur), une paroi de type transverse est favorisée (figure IV-28 (a)). Alors que si les tailles latérales sont suffisamment larges pour qu'elles puissent laisser se développer une structure de type vortex, la paroi la moins énergétique est de type vortex (figure IV-28 (b)). Les configurations représentées sur la figure IV-28, nous les avons reproduites prenant une seule cellule de maillage dans l'épaisseur du fil (e) et en ajoutant les conditions requises par la nature infinie du fil (l'aimantation fixée aux bouts du fil et l'élimination des effets de bords en ajoutant de surfaces uniformément aimantées aux extrémités du fil).

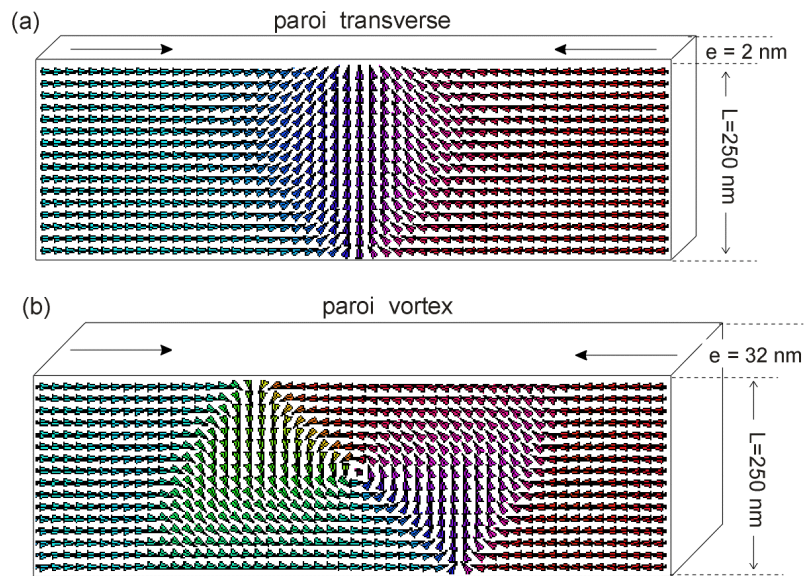


Figure IV-28: (a) Paroi transverse et (b) paroi vortex obtenue dans des fils de permalloy en utilisant les paramètres de simulation indiqués par [McMichael IEEE 97] : $M_s = 8 \times 10^5 \text{ A/m}$, $A_{ex} = 1.3 \times 10^{-11} \text{ J/m}$.

Les calculs de la structure magnétique de la paroi ont été repris pour de fils à section carrée faits en $\text{Co}(10\bar{1}0)$, caractérisés par une anisotropie magnétocristalline uniaxiale parallèle à l'axe du fil $K_u = 500 \times 10^3 \text{ J/m}^3$ [Prejbeanu thèse]. Notre intérêt pour les fils à section carrée est motivé surtout par mesures de transport faites sur de fils à section circulaire. Pour la géométrie carrée étant donné que les deux tailles transversales sont identiques une approche 2D [McMichael IEEE 97] qui ne tient pas compte de l'évolution de la paroi selon l'épaisseur du fil n'est pas tout à fait appropriée.

IV. 3. 1. 1. Paroi transverse

Pour explorer différentes structures internes d'une paroi tête-bêche, plusieurs états initiaux ont été relaxés (figure IV-29). Lorsqu'une variation de l'aimantation de type Bloch est supposée le long du fil de (figure IV-29(a)), le minimum local de l'énergie libre trouvé correspond à l'état avec deux domaines séparés par une paroi transverse telle que celles représentées sur la figure IV-30. Selon la valeur de l'angle ϕ imposé du départ (figure IV-29(a)) on obtient une paroi transverse à 0° ou à 45° .

La caractéristique générale de la paroi transverse est d'être composée de plusieurs parois transverses unidimensionnelles. Lorsqu'on prend un profil le long d'un segment parallèle à l'axe du fil ($i = i_0, j = j_0, 1 \leq k \leq N_z$) tous les moments se situent dans le même plan (plan de polarisation) mais

ce plan change d'un profil à l'autre. Reprenant maintenant la paroi transverse à 0° en vu le long de l'axe du fil (figure IV-31). La section obtenue au milieu du fil $y_2 = (N_y + 1)/2$ est similaire avec celle rapportée sur la figure IV-28(a) alors que si on s'éloigne du plan médian la structure de la paroi souffre de légères modifications (y_1, y_3). Il ne s'agit plus d'une structure qui comporte une symétrie de translation à travers la direction OY mais une qui se développe réellement suivant les trois dimensions de l'espace.

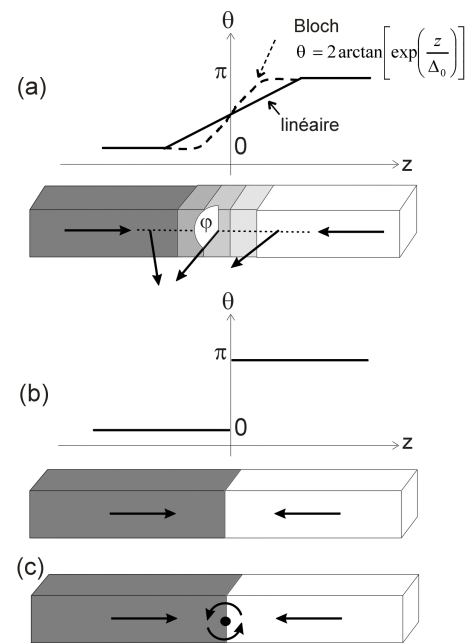


Figure IV-29: (a) Etat de départ de transversal (Bloch ou linéaire). L'angle θ est l'angle que l'aimantation le fait avec l'axe du fil (OZ). (b) Etat de départ de type head-to-head. (c) Etat de départ de type vortex.

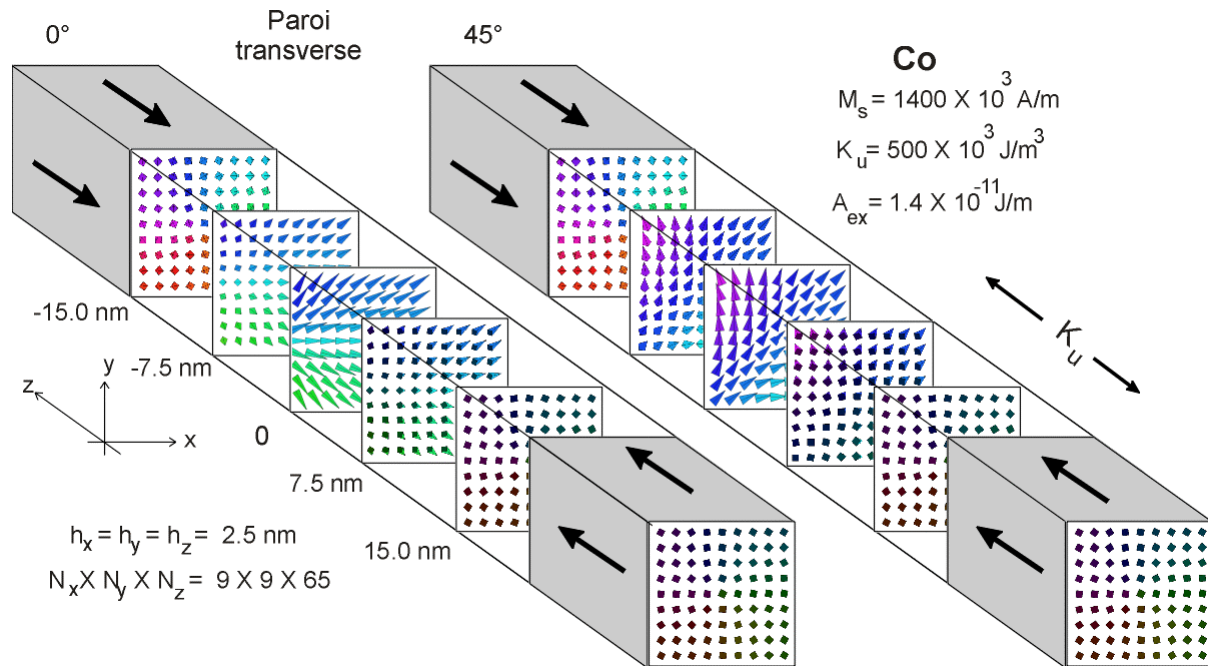


Figure IV-30: Vue générale d'une paroi transverse dans un fil idéal de Co uniaxial selon un calcul 3D. La section du fil est de 22.5 nm X 22.5 nm.

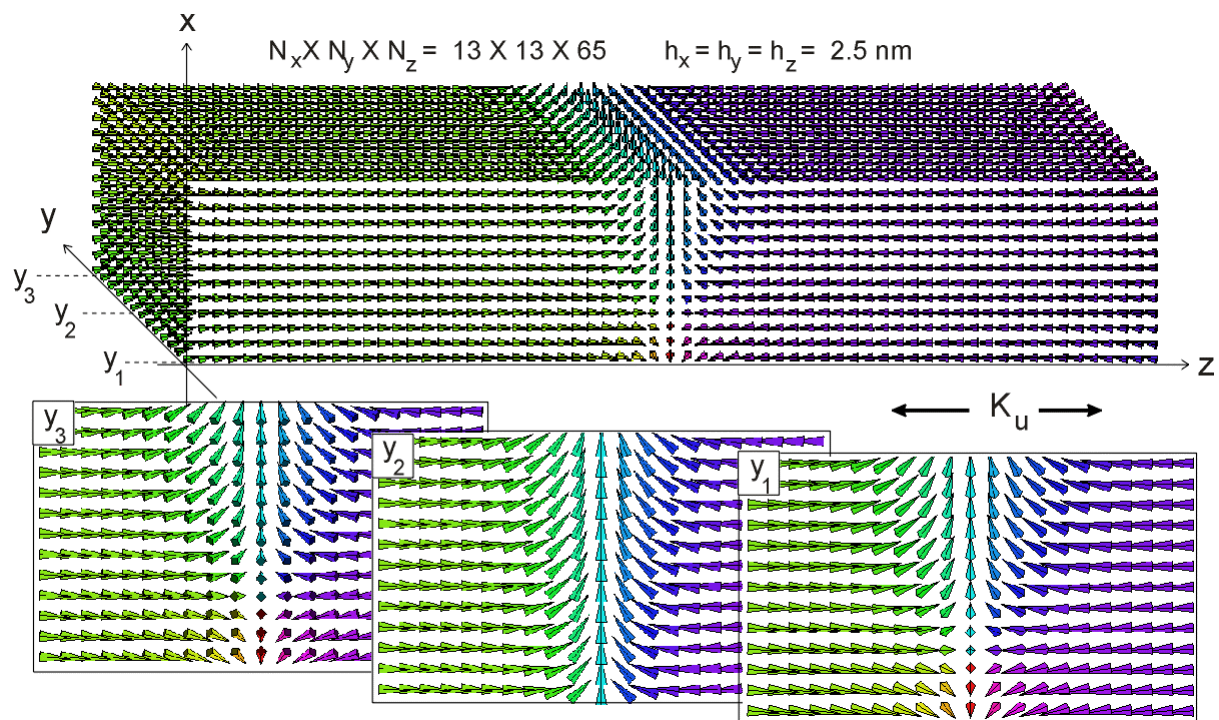


Figure IV-31: Paroi transverse obtenue par un calcul 3D dans un fil de Co avec anisotropie magnétocristalline le long de l'axe du fil. La région de calcul de (32.5 nm X 32.5 nm X 162.5 nm) est divisée en cellules cubiques de paramètre de maille de 2.5 nm. Les sections y_1, y_2 et y_3 sont perpendiculaires à l'axe OY.

La largeur de la paroi est directement liée à cette structure magnétique 3D. Elle varie selon la position dans le fil comme on peut voir à partir de profils de l'angle de l'aimantation avec l'axe du fil (figure IV-32). C'est difficile d'attribuer une largeur à la paroi alors que son profil connaît de changements importants d'une surface latérale à l'autre. Les valeurs de la largeur de la paroi sont distribuées autour de la largeur de la paroi de Bloch.

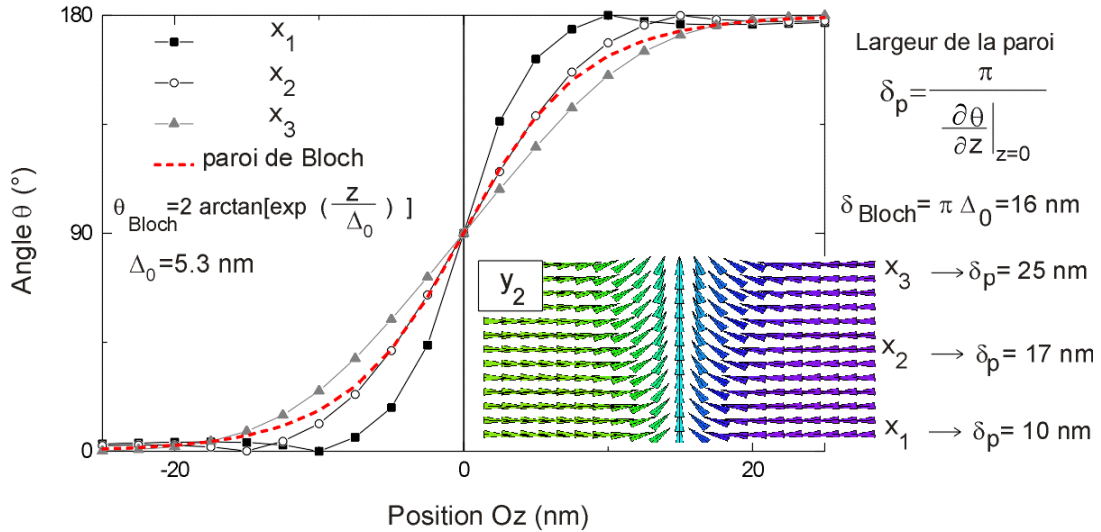


Figure IV-32: Profil de l'angle que l'aimantation le fait avec l'axe du fil correspondant à la paroi représentée sur la figure IV-31.

IV. 3. 1. 2. Une paroi inédite

Une deuxième solution pour la paroi tête – bêche a été trouvée par la minimisation de l'énergie à partir d'un état composé de deux domaines parfaitement antiparallèlement orientés (départ *head-to-head* figure IV-29(b)). L'état d'équilibre obtenu est celui représenté sur la figure IV-33(a). L'aimantation dans la région de la paroi s'oriente dans le plan transverse à l'axe du fil où elle suit un chemin de fermeture du flux, parallèle à la surface latérale du fil afin de réduire le plus possible les charges magnétiques de surface. A partir de tailles latérales situées au-dessus de 25 nm l'énergie de cette paroi est légèrement plus faible que celle de la paroi transverse.

La première question qu'on peut se poser: *Est-ce que ce type de paroi est réel ou pas?*. Pour répondre à cette question, tout d'abord, nous avons poursuivi à une réduction du pas de maillage de 2,5 nm à 1,5 nm, fait qui n'a pas changé la solution. En regardant de plus près la distribution de l'aimantation à l'intérieur de la paroi (figure IV-33(b)) et les profils de l'angle entre l'aimantation et l'axe du fil (figure IV-34), on réalise que perdue entre les mailles de discrétisation, une singularité magnétique se cache (figure IV-33(c)). Au voisinage de la

surface du fil, la paroi a un profil similaire avec celui d'une paroi de Bloch. Par contre, si on avance vers le centre du fil, le profil devient de plus en plus étroit. Ici l'angle entre deux spins adjacents selon la direction OZ dépasse 60° , même pour un maillage de 1,5 nm. Cet écart angulaire est largement au-dessus de la limite que nous avons fixée pour que les erreurs d'estimation de l'énergie d'échange soient raisonnables (section II.7).

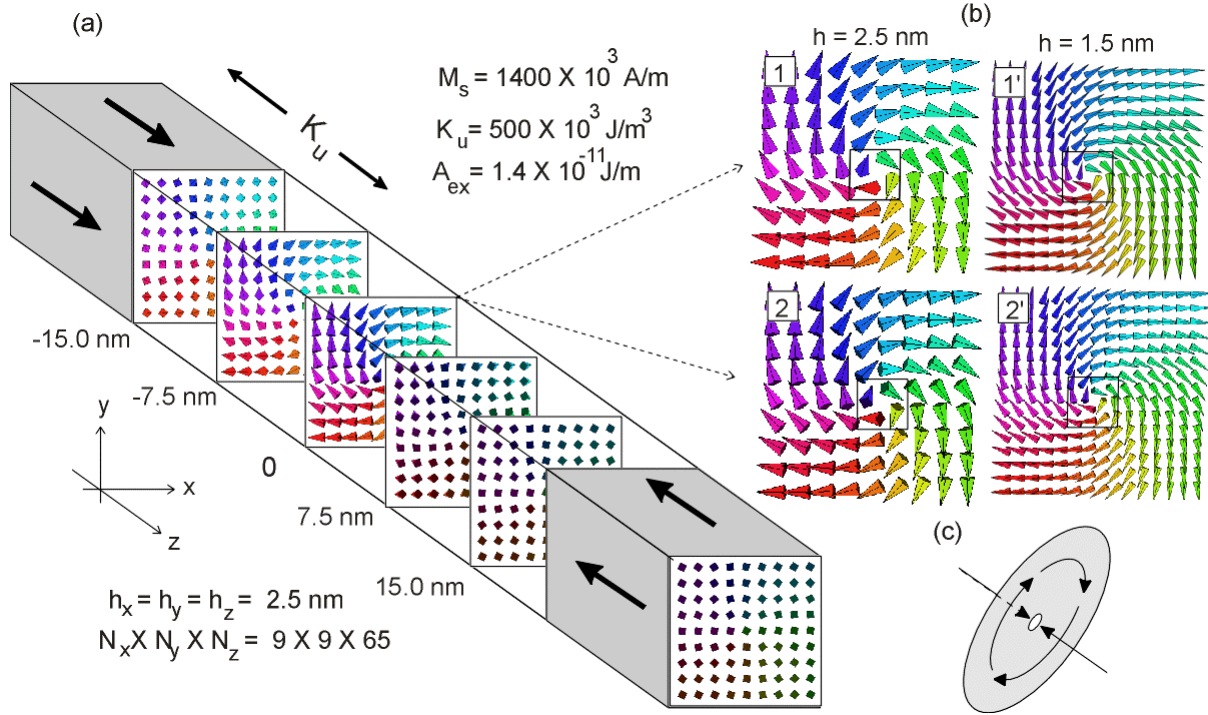


Figure IV-33: (a) Vue générale de la solution *head-to-head*. (b) Sections adjacentes perpendiculaires à l'axe du fil dans la région de la paroi pour un pas de maillage cubique de 2,5 nm et 1,5 nm. (c) Point de Bloch.

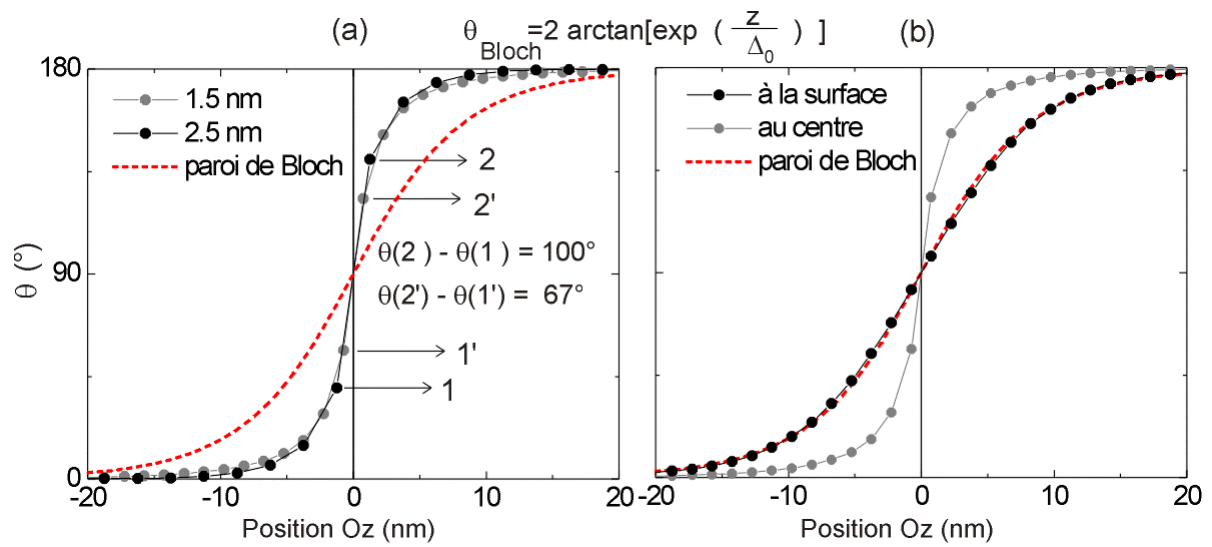


Figure IV-34: (a) Evolution de l'angle de l'aimantation par rapport à l'axe du fil (θ) proche du centre de la paroi pour deux pas de maillage. (b) Profils de l'angle θ à la surface et au centre du fil (section médiane) obtenus en utilisant le maillage de 1.5 nm.

Au plein cœur de la paroi, une transition $\theta = 0^\circ \rightarrow \theta = 180^\circ$ se produit qui ensemble avec le parcours circulaire de l'aimantation définit un point de Bloch tel que celui schématisé sur la figure IV-33(c). Du point de vue magnétique, le point de Bloch est une singularité de la distribution de l'aimantation. Son interprétation s'appuie sur la réduction graduelle vers zéro de l'amplitude de l'aimantation lorsqu'on avance vers la région centrale [Miltat 94 page 253]. Il s'agit tout simplement d'une violation de la conservation de l'amplitude du vecteur de l'aimantation: $|\vec{M}| = M_s$ c'est qui empêche toute analyse en utilisant une approche micromagnétique classique telle la notre (section I. 1.).

Pour résoudre ce genre de structures micromagnétiques singulières de modèles adaptés doivent être conçus tels que celui proposé par Nakatani [Nakatani IEEE 24] ou Stoeffler [Stoeffler COST 98]. Ce type de solution souligne les limites de notre approche numérique dont l'étude des structures singulières, limites qui son dues particulièrement à l'hypothèse que l'aimantation d'un système ferromagnétique est un vecteur à norme constante.

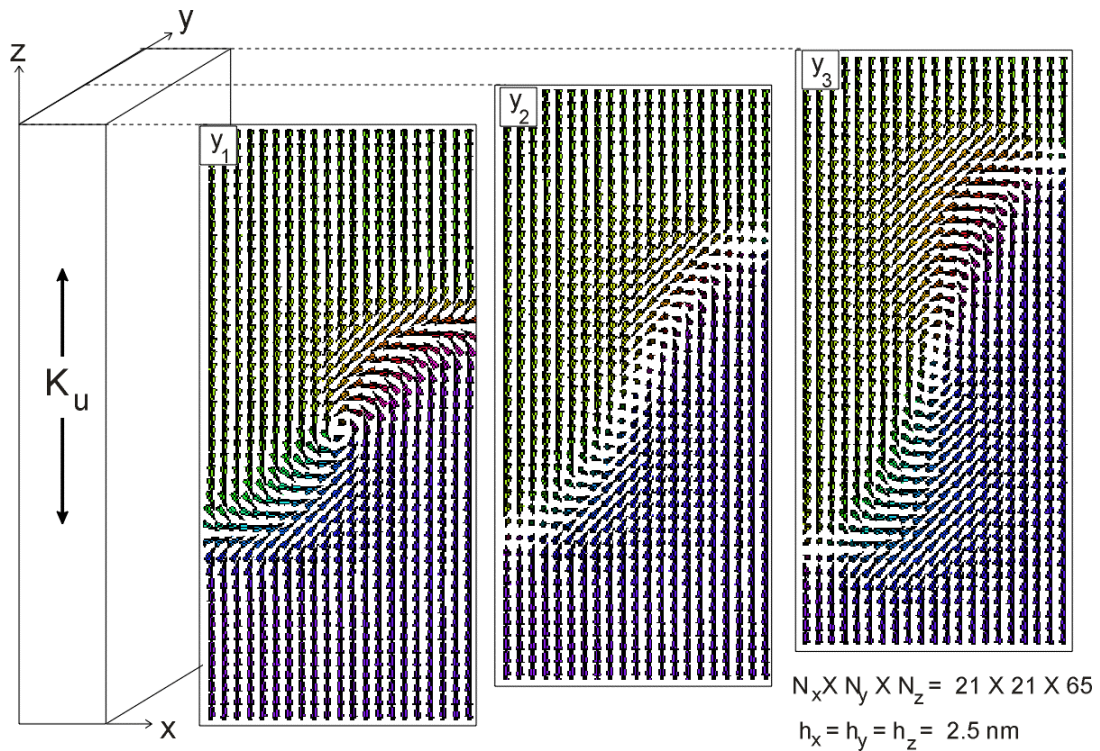


Figure IV-35: Paroi de type vortex dans un fil de Co $21 \times 21 \times 65$ qui a une taille latérale de 52.5 nm

IV. 3. 1. 3. Paroi vortex

Dans la limite de fils très fins (la taille latérale autour de quelques l_{ex}) la paroi transverse est favorisée. Lorsque la taille latérale du fil augmente vers $10l_{ex}$ une configuration de départ telle que celle schématiquement représentée sur la figure IV-29(c) conduit vers une paroi de type vortex (figure IV-35). La structure de type vortex est transversale à l'axe du fil et possède une inhomogénéité relative importante d'une surface latérale à l'autre. On remarque une ouverture significative de la structure du vortex à travers l'épaisseur du fil (selon la direction OY). Ce type de solution d'une paroi tête- bêche est l'équivalent 3D de la structure 2D indiquée sur la figure IV-28(b), au moins pour la section y_1 .

Les structures internes de la paroi régissent sous l'action d'un champ externe appliqué selon l'axe du fil et leurs mouvement dynamique fait l'objet des travaux très récents à la fois analytique et numériques dans de fils idéaux [Thiaville JMMM 01].

IV. 3. 1. 4. Paroi piégée sur une constriction géométrique

Les structures magnétiques des parois, auparavant présentées, sont valables en champ nul pour le cas des fils idéaux. En réalité, qu'il soit de fils lithographiés ou de fils électrodeposités, ils présentent une morphologie plus ou moins accidentée. Les fils électrodeposités sont composés de grains monocristallins ce qui fait qu'on associe des inhomogénéités au niveau des jointes de grains, des faibles variations de la taille latérale aussi que de légères fluctuations de l'axe d'anisotropie magnétocristalline le long du fil. Quant aux fils lithographies, ils sont moins exposés aux défauts locaux internes grâce à leur croissance épitaxiale, tandis que leur surfaces latérales peuvent présenter des écarts par rapport à la taille fixée durant le processus de lithographie.

Lorsque la paroi vient à la rencontre d'un défaut local, pour des raisons énergétiques, sa structure interne souffre une certaine accommodation par rapport à son nouvel environnement. Cette accommodation peut aller jusqu'à la modification radicale de la structure interne de la paroi comme c'est le cas pour une paroi piégée sur une constriction géométrique (modification de la taille du système dans certains régions de l'échantillon) analysé analytiquement par Bruno [Bruno PRL 99] dans de couches minces infinies.

D'études expérimentales de l'accrochage des parois au niveau d'une constriction géométrique ont été menées sur des fils lithographiés de $\text{Co}(10\bar{1}0)$ [Prejbeanu thèse]. L'analyse par MFM montre que la paroi est piégée sur la constriction (figure IV-36) et que pour son déblocage, de champs externes relativement larges doivent être appliqués le long du fil ($\sim 4\text{-}5$ kOe).

Pour comprendre l'interaction **paroi – piège**, nous avons comparé le cas d'une paroi dans un fil idéal et dans un fil avec une constriction géométrique. Le fil idéal fait 384 nm en longueur et il a une section carrée de 24 nm de côté. Au milieu de ce fil idéal nous avons supposé que la taille est réduite de moitié sur une longueur de 33 nm (figure IV-37) en résultant ainsi le fil avec la piège.

Au début du calcul au milieu de chaque fil nous avons introduit une paroi de 180° de type transverse sous champ nul. La région de la constriction est suffisamment large pour que la paroi à l'état initial ne soit pas déformée par les interfaces: fil gros/fil fin. Les paramètres utilisés dans les simulations sont ceux du $\text{Co}(10\bar{1}0)$: l'aimantation à saturation $M_s = 1400 \times 10^3 \text{ A/m}$, une anisotropie magnétocristalline uniaxiale $K_u = 500 \times 10^3 \text{ J/m}^3$ orientée suivant l'axe du fil et la constante d'échange $A_{ex} = 1.4 \times 10^{-11} \text{ J/m}$.

Pour le cas du fil idéal, sous l'application du champ externe légèrement incliné par rapport à l'axe du fil (1°), la paroi se déplace jusqu'au but du fil où elle est expulsée. Ce type de comportement n'est pas le même lorsque la paroi au départ se trouve sous la constriction. Cette fois l'augmentation progressive du champ appliqué provoque l'évolution résumée sur la figure IV-37(a) où en fonction du champ les profils de l'angle entre l'aimantation et l'axe du fil sont rapportés. L'effet du champ appliqué comporte plusieurs étapes.

- Premièrement la paroi souffre un mouvement de translation qui n'affecte pas sa structure interne car la paroi se trouve dans un puits énergétique (1 kOe).

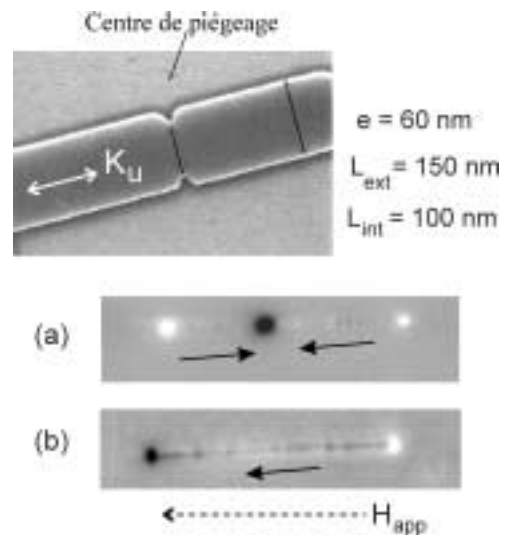


Figure IV-36: Au milieu d'un fil de 60 nm d'épaisseur et 150 nm de large, une constriction a été définie. Par endroit, la largeur du fil diminue à 100 nm. Structure en domaines de ce fil de $\text{Co}(10\bar{1}0)$ lithographié [Prejbeanu thèse] (a) état avec une paroi bloquée sur la piège et (b) état obtenu après l'application du champ externe de 4-5 kOe suivant l'axe du fil.

- Ce mouvement s'arrête lorsque l'extrémité de la paroi atteint l'interface: fil fin/ fil gros. Ensuite, la parti centrale de la paroi reste bloquée à l'interface (2 kOe).

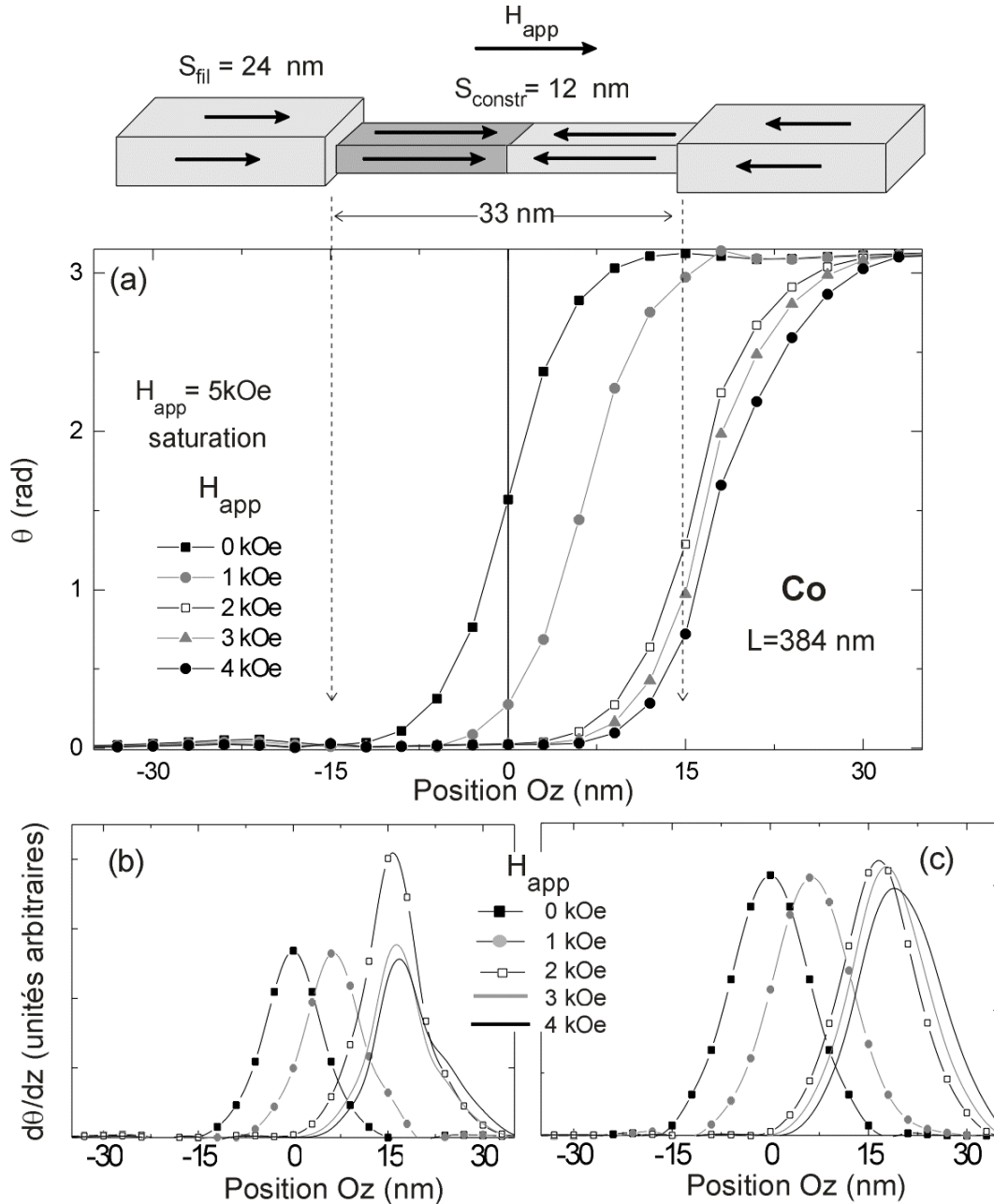


Figure IV-37: Géométrie du fil obturé, caractérisé par une anisotropie magnétocristalline parallèle à l'axe du fil. (a) Variation en fonction du champ appliqué, du profil de l'angle θ entre l'aimantation et l'axe du fil. Les profils suivent une ligne centrale du fil. Les courbes dérivées des profils de l'angle θ à la surface du fil (b) et au centre du fil (c). Ces résultats ont été obtenus avec un maillage cubique de $h_x = h_y = h_z = 3$ nm.

- En augmentant davantage le champ appliqué, la structure interne de la paroi est de plus en plus déformée ce qui se reflète par l'asymétrie des courbes dérivées $\frac{d\theta}{dz}$ indiquées sur la figure IV-37(b,c). La déformation de la paroi est légèrement moins prononcée au milieu du fil (c) que à la surface (b) (3-4 kOe).

- Dès que le champ appliqué dépasse le seuil du champ de déblocage, la paroi échappe à la piège (elle ne peut plus être déformée) et elle se propage jusqu'à son expulsion complète (5 kOe).

Malgré les différences de taille entre le système réel et celui modélisé, le comportement obtenu par simulation est en bon accord qualitatif avec celui observé expérimentalement.

IV. 3. 2. Anisotropie magnétocristalline perpendiculaire à l'axe du fil

Nos études, consacrées aux parois de domaines dans de fils à section carrée, continuent lorsque l'axe d'anisotropie magnétocristalline devient perpendiculaire à l'axe du fil. Pour cette orientation de l'axe d'anisotropie magnétocristalline la structure magnétique de fils se ressemble avec celle des couches minces à anisotropie perpendiculaire, décrites dans le paragraphe III 3. Selon la taille de fils (largeur/épaisseur) différentes structures magnétiques sont possibles, résumées par Prejbeanu et al. [Prejbeanu IEEE 01] pour le cas des fils de $\text{Co}(10\bar{1}0)$, sous la forme d'un diagramme (L, e) des états fondamentaux (figure IV-38(a)).

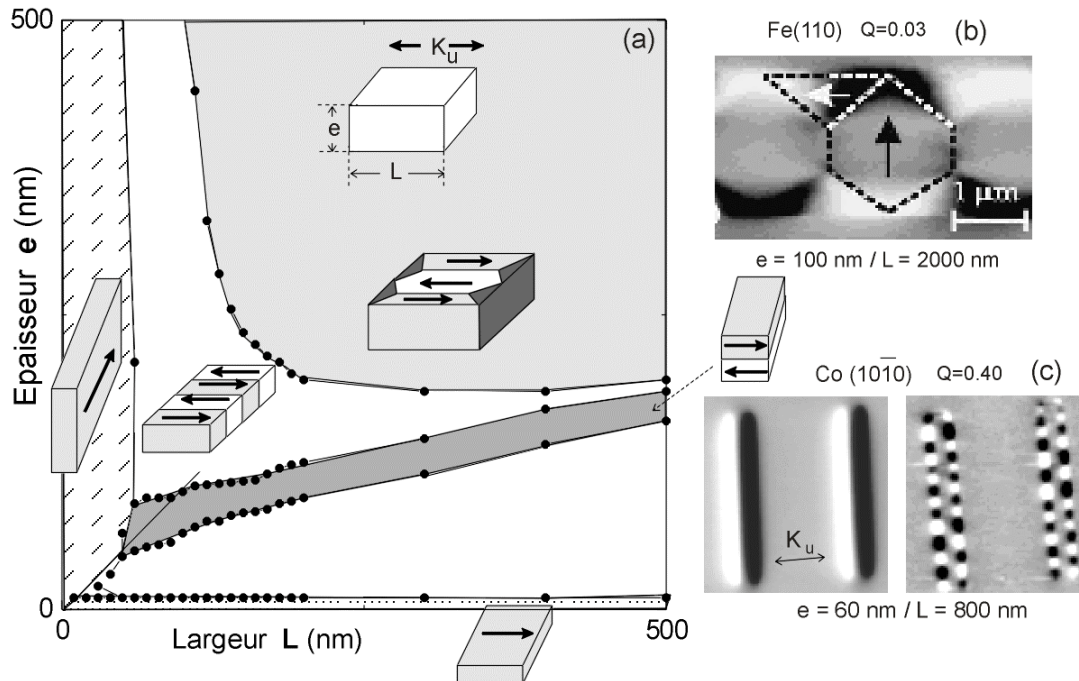


Figure IV-38: (a) Diagramme des états fondamentaux (L, e) des fils de $\text{Co}(10\bar{1}0)$ lorsque l'axe magnétocristallin est perpendiculaire à l'axe du fil [Prejbeanu IEEE 01]. (b) Images MFM obtenues sur des fils de (b) $\text{Fe}(110)$ [Rüdiger APL 98] et (c) $\text{Co}(10\bar{1}0)$ [Prejbeanu IEEE 01].

S'appuyant sur l'hypothèse des parois extrêmement fines (σ_{paroi}), des fils infinis et d'une structure magnétique périodiques, l'énergies des plusieurs états magnétiques possibles ont été comparées à partir des calculs similaires avec ceux proposés par de Kittel [Annexe B-II]. Expérimentalement, en fonction de l'histoire magnétique parcourue différents états magnétiques ont été observés: l'état monodomaine transversale, l'état en domaines en bandes parallèles (figure IV-38(b,c)). Pour de fils de $Fe(110)$ très larges et épais de contrastes MFM indicatifs pour la présences des domaines en bandes avec des domaines de fermeture importants ont été observés [Rüdiger APL 98]. Afin de savoir davantage sur les limites de stabilité de divers états prédits par un calcul simple et d'explorer les détails internes des parois nous avons appliqué le calcul micromagnétique tridimensionnel. Tout particulièrement, le cas de fils à section carrée a été analysé pour les mêmes raisons que celles mentionnées dans la section IV.3.1.

IV. 3. 2. 1. Domaines en bandes parallèles

La nature périodique de la distribution de l'aimantation dans les fils perpendiculaires à l'axe d'anisotropie magnétocristalline, fait intervenir les calculs tridimensionnels périodiques. Soit la direction OX parallèle à l'axe du fil la direction périodique du système (figure IV-39). Afin de trouver la structure en domaines en bandes qui minimise l'énergie du système à la fois du point de vue de la configuration interne de l'aimantation $\vec{m}$ et, en même temps, du point de vue de la périodicité L_x , nous avons appliqué la procédure décrite dans la section III.3.1.1.. Pour une périodicité fixée, en partant d'un état initial tel que celui représenté sur la figure IV-39(a), l'état d'équilibre correspondant à la périodicité (L_x) est obtenu (figure IV-39(b)).

Prenant maintenant le cas d'un fil infini à section carrée: $50nm \times 50nm$ divisé dans de petites cellules cubiques de paramètre $h_x = h_y = h_z = 2nm$. L'énergie libre de son état en domaines en bandes parallèles varie en fonction de la largeur de l'unité de période considérée L_x , selon la courbe représentée sur la figure IV-40(a). Lorsque la périodicité se situe autour de $L_x = 130nm$, la courbe de l'énergie libre atteint son minimum qui, par conséquence, constitue l'état en bande complètement minimisé.

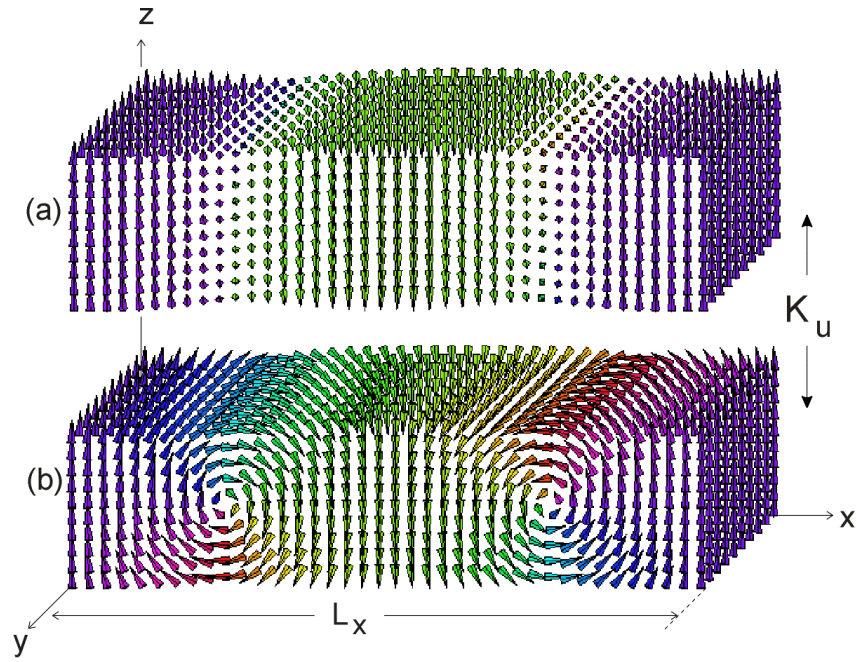


Figure IV-39: (a) Etat magnétique de départ utilisé dans le calcul 3D périodique afin d'induire (b) l'état en domaines en bandes parallèles dans un fil infini selon la direction OX

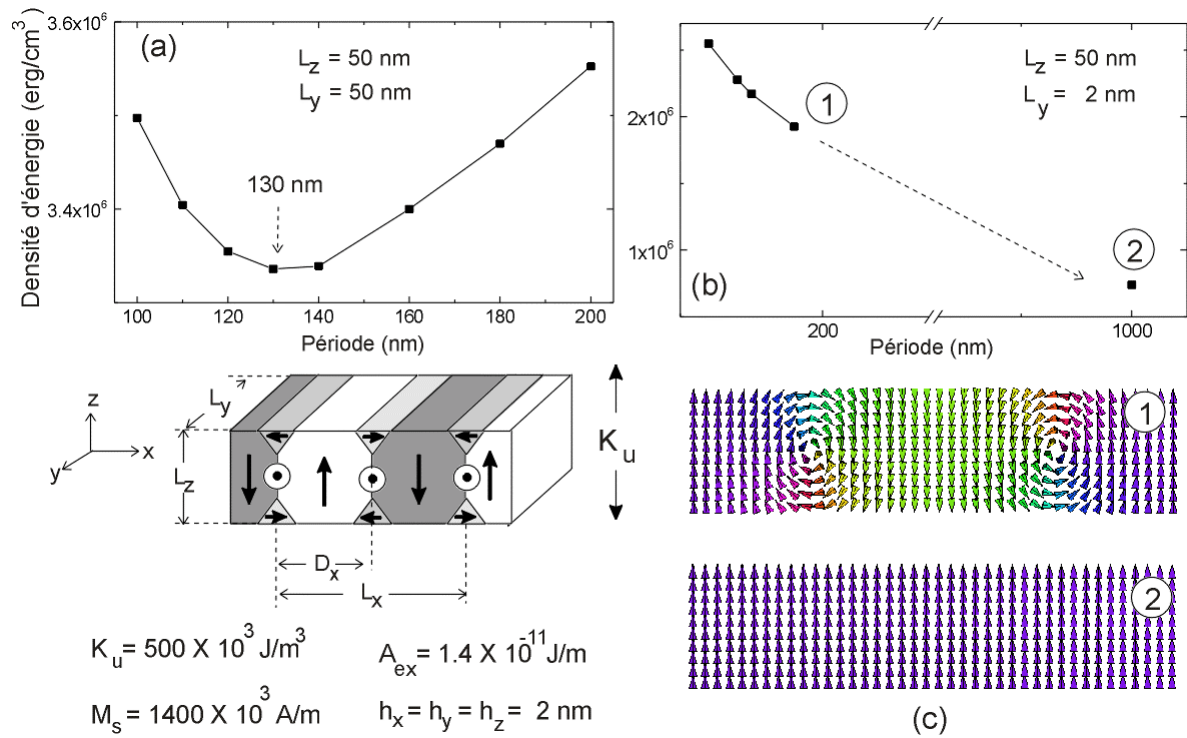


Figure IV-40: Variation de l'énergie libre de l'état en domaines en bandes en fonction de la périodicité pour le cas d'un fil à section carrée de $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ (a) et pour le cas d'un fil plat $50 \text{ nm} \times 2 \text{ nm}$ (b). Structures magnétiques correspondantes aux points 1 et 2 sur la figure (b). Les paramètres correspondants aux simulations sont indiqués sur la figure.

En diminuant l'épaisseur du fil (L_y) de 50 nm à 2 nm, l'énergie libre de l'état en domaines en bandes parallèles décroît de manière continue lorsque la périodicité augmente (figure IV-40(b)). Dans le régime des périodicités larges, la courbe de l'énergie libre va asymptotiquement vers la limite correspondante à l'état uniformément aimanté perpendiculaire à l'axe du fil (figure IV-40(c)). L'existence de cet état monodomaine a été montrée par de mesures expérimentales de MFM sur des fils de $Co(10\bar{1}0)$, extrêmement plats. Dans ces fils à la rémanence planaire perpendiculaire à l'axe du fil l'état monodomaine transversal est induit (figure IV-386(c)). Alors que si la section du fil est plutôt carrée seuls d'états multidomaines ont été observés [Prejbeanu IEEE 01].

Le comportement magnétique différent des fils plats et carrés est dû surtout à la compétition entre les effets d'anisotropie magnétocristalline et les effets magnétostatique (voir le rapport entre l'épaisseur L_y et la largeur L_z du fil). Lorsque le fil est extrêmement plat l'anisotropie de forme s'ajoute à l'anisotropie cristalline et force l'aimantation de rester dans un état monodomaine transverse. Au contraire, pour un fil à section carrée les deux directions (OY et OZ) perpendiculaires à l'axe du fil (OX) sont équivalentes du point de vue magnétostatique mais c'est l'axe cristallin qui favorise l'axe OZ. L'état uniforme transversal induit de charges magnétiques trop importantes sur les surfaces latérales et la division en domaines antiparallèles est inévitable.

IV. 3. 2. 2. Etat à deux domaines antiparallèles

Dans le fil à section carrée, l'état en bandes parallèles n'est pas le seul à apparaître. En partant de l'état presque saturé longitudinal (OX) numériquement il en résulte un état avec deux domaines antiparallèles (figure IV-41). Cet état bi-domaines s'avère d'être, pour les paramètres de simulation utilisés, moins énergétique $\varepsilon_{II} = 3292244 \text{ (erg/cm}^3\text{)}$ que l'état en domaines en bandes $\varepsilon_{bandes} = 3335964 \text{ (erg/cm}^3\text{)}$. Ainsi nous pouvons comprendre son apparition sur le diagramme approximatif IV-38(a).

Les études MFM menées par Henry et al. [Henry EPJ 01] sur de fils circulaires de Co électrodéposés de taille latérale grande (le régime où l'axe d'anisotropie magnétocristalline est perpendiculaire à l'axe du fil) ont montré l'existence d'un contraste indicatif pour la présence de d'état bi-domaines.

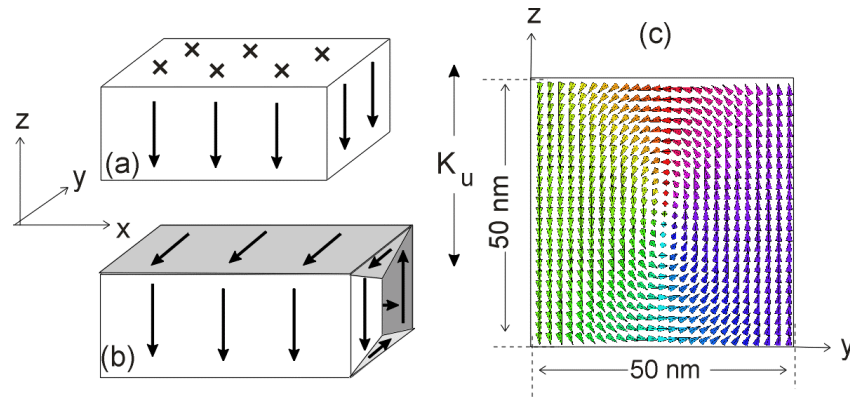


Figure IV-41: En partant de l'état saturé perpendiculaire (a) l'état multidomaines (b) est obtenu dans un fil de Co(10 $\bar{1}$ 0). (c) Vue transversale de la distribution de l'aimantation.

IV. 3. 2. 3. Effet de l'épaisseur du fil sur la structure de la paroi

La signature de la compétition entre l'interaction magnétostatique et la symétrie du cristal, peut être clairement vue sur la distribution de spins à l'intérieur de parois qui séparent les domaines. Dans ce sens un fil de $L_z = 50\text{ nm}$ de large a été considéré. La périodicité des domaines antiparallèlement orientés, a été fixée à $L_x = 120\text{ nm}$ alors que l'épaisseur du fil varie de 2 nm vers de valeurs de plus en plus larges afin de se rapprocher de la limite des couches minces. Les structures de domaines en bandes ainsi obtenues sont rapportées sur la figure IV-42. Une caractéristique principale des parois qui se forment est représentée par leur nature hybride étant donné que vers le centre du fil elles sont plutôt de type Bloch alors que proches des surfaces elles deviennent prépondérantes de type Néel. Cependant, les détails fins de leur structure sont directement liés à l'épaisseur du fil qui agit sur les effets magnétostatiques.

- Lorsque le fil est plat ($L_y = 2\text{ nm}$), les parois de domaines sont plutôt fines avec un cœur Bloch extrêmement réduit. La réduction du cœur Bloch est due principalement aux effets magnétostatiques qui veulent empêcher l'aimantation de sortir du plan du fil (XOZ). La composante Néel planaire (XOZ) se propage jusqu'à plein cœur de la paroi car nous nous trouvons dans la limite des couches minces à anisotropie uniaxiale planaire (section III.2) où, pour ce régime d'épaisseur, les parois sont de type Néel symétrique. Le fait d'avoir de parois relativement fines et comprimées nous laisse penser aux couches minces caractérisées par un facteur de qualité relative grand ($Q > 1$, III.3.1.2.)

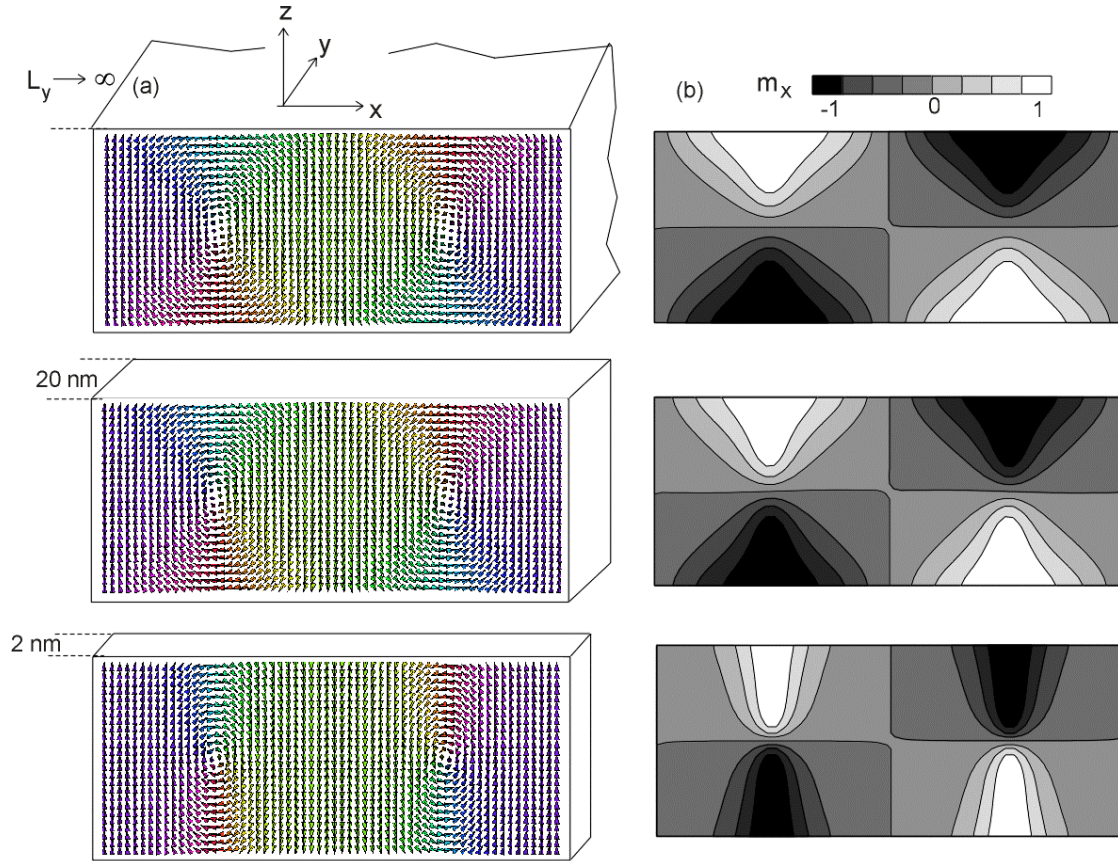


Figure IV-42: (a) Evolution de la distribution de l'aimantation lorsque l'épaisseur (L_y) du fil augmente vers la limite de couche infinie à anisotropie magnétocristalline perpendiculaire. La largeur du fil est de $L_z = 50\text{nm}$ et la période considérée de $L_x = 120\text{nm}$. (b) Distribution de la composante m_x de l'aimantation perpendiculaire aux domaines en bandes dans le plan XOZ médian $L_y/2$.

- En augmentant l'épaisseur du fil à $L_y = 20\text{nm}$, la parti Bloch centrale des parois s'élargit ainsi que les partie Néel proches des surfaces. Cette expansion de régions perpendiculaires à l'axe cristalline pourrait être vue comme induite par la diminution du facteur de qualité.
- Dans la limite d'épaisseurs larges la structure des parois évolue vers celle obtenue à partir de calculs 2D périodiques dans une couche mince à anisotropie perpendiculaire au plan de la couche (section II.3.3.) que nous avons représenté sur la figure IV-42(a) : $L_y \rightarrow \infty$.

Les profils de l'aimantation représentés sur la figure IV- 43, montre la complexité de la structure interne de la paroi et surtout la variation considérable de la largeur de la paroi selon l'épaisseur du fil. A la mi-hauteur du fil, dans un plan perpendiculaire à l'axe d'anisotropie les parois sont fines presque de type Bloch symétrique. En revanche, au voisinage de la surface elles sont extrêmement larges et l'aimantation a une composante importante suivant l'axe du fil (la direction selon laquelle le courant est appliqué dans les

mesures de transport). Nous espérons que prochainement la configuration magnétique du fil déduite numériquement pourrait servir comme paramètre *d'input* dans l'évaluation de la résistance anisotrope de la paroi. Ainsi nos calculs vont contribuer à la meilleure compréhension de la réponse résistive de la paroi.

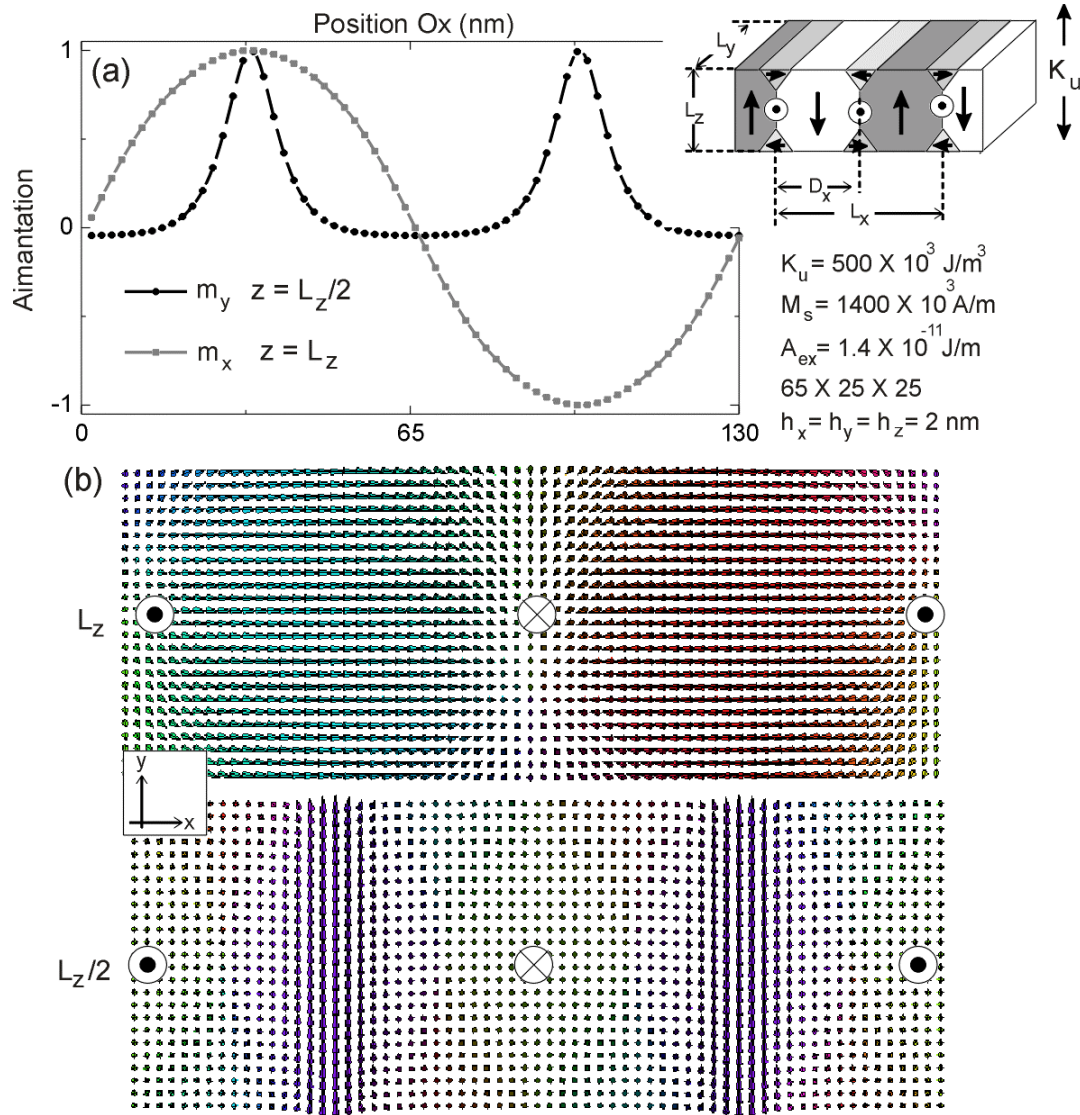


Figure IV-43: (a) Divers profils de l'aimantation dans un fil de $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ de taille latérale. (b) Distribution de l'aimantation dans des plans perpendiculaires à l'axe d'anisotropie près de la surface et à mi-hauteur du fil.

IV. 4. Conclusions chapitre IV

Cette fois-ci, nous nous sommes servis de l'approche tridimensionnelle pour accéder aux détails fins de la distribution de l'aimantation dans de plots et de fils de cobalt. Une importance spéciale a été accordée à la validation des solutions en utilisant de résultats expérimentaux (MFM, MOKE) afin d'éviter la contamination des résultats par des artefacts numériques.

1. Une étude systématique sur les états magnétiques possibles d'un plot cylindrique de cobalt a été faite en fonction sa taille latérale (diamètre/épaisseur). Les calculs ont été résumés sous la forme d'un diagramme des états fondamentaux d'un plot avec respectivement sans anisotropie magnétocristalline perpendiculaire au plan du plot. Pour les plots de 200 nm de diamètre et d'épaisseur inférieure à $e < 15 \text{ nm}$, en champ nul, l'élargissement de l'état vortex est l'effet principale de l'anisotropie magnétocristalline perpendiculaire. Lorsque l'épaisseur des plots augmente vers 20 nm, l'anisotropie magnétocristalline perpendiculaire est responsable de l'apparition des domaines en bandes circulaires. En ce qui concerne le retournement de l'aimantation d'un plot $\phi = 200 \text{ nm} / e = 15 \text{ nm}$ sous champ appliqué perpendiculaire à son plan, il se produit par la formation de l'état vortex en champ nul.
2. Dans les fils à section transversale carrée, de manière générale la structure interne des parois de domaines a un caractère tridimensionnel.
 - Lorsque l'axe de l'anisotropie magnétocristalline est parallèle à l'axe du fil les parois s'approche de la paroi de type Bloch si la taille latérale du fil est de quelques l_{ex} . Dans les fils de taille latérale supérieure à $10l_{ex}$ une paroi de type vortex peut se développer.
 - Si l'axe de l'anisotropie est perpendiculaire à l'axe du fil une structure en domaines en bandes est induite. Dans la limite de fils très fins l'état en domaine en bandes est remplacé par l'état monodomaine suivant l'axe d'anisotropie magnétocristalline.

Enfin, à travers ces études l'applicabilité, l'efficacité et les limites de notre approche numérique tridimensionnelle ont été illustrées.

Références bibliographiques IV

- [Aharoni PR 58] A. Aharoni, S. Shtrikman, Phys. Rev. **109**, 1522 (1958). *Magnetization curve of the infinite cylinder*
- [Aharoni JAP 90] A. Aharoni, J. Appl. Phys. **68**, 2892 (1990). *Upper bound to a single-domain behavior of a ferromagnetic cylinder*
- [Aharoni 96] A. Aharoni, *Introduction to the theory of ferromagnetism*, Clarendon Presss, Oxford (1996).
- [Bruno PRL 99] P. Bruno, Phys. Rev. Lett. **83**, 2425 (1999). *Geometrically constrained magnetic wall*
- [Chou JVST 97] S. Y. Chou, P. R. Krauss, W. Zhang, L. Guo, L. Zhuang, J. Vac. Sci. Technol. B **15**, 2897 (1997). *Sub-10 nm lithography and application*
- [Cowburn APL 98] R. P. Cowburn, M. E. Welland, Appl. Phys. Lett. **72**, 2041 (1998). *Phase transition in planar magnetic nanostructures*
- [Cowburn PRB 98] R. P. Cowburn, M. E. Welland, Phys. Rev. B **58**, 9217 (1998). *Micromagnetics of the single-domain state of square ferromagnetic nanostructures*
- [Cowburn PRL 99] R. P. Cowburn, D. K. Koltsov, A. O. Adeyeye, M. E. Welland, D. M. Tricker, Phys. Rev. Lett. **83**, 1042 (1999). *Single-domain circular nanomagnets*
- [Cowburn JPD 00] R. P. Cowburn, J. Phys. D: Appl. Phys. **33**, 1 (2000). *Property variation with shape in magnetic nanoelements*
- [Demand thèse] M. Demand, thèse de doctorat, Université Louis Pasteur Strasbourg (2000).
- [Demand JAP 00] M. Demand, M. Hehn, K. Ounadjela, R. L. Stamps, E. Cambril, A. Cornette, F. Rousseaux, J. Appl. Phys. **87**, 5111 (2000). *Magnetic domain structures in array of submicron Co dots studied with magnetic force microscopy*
- [Ebels PRL 00] U. Ebels, A. Radulescu, Y. Henry, L. Piraux, K. Ounadjela, Phys. Rev. Lett. **84**, 983 (2000). *Spin Accumulation and domain wall magnetoresistance in 35 nm Co wires*
- [Fernandez JMMM 98] A. Fernandez, M. R. Gibbson, M. A. Wall, C. J. Cerjan, J. Magn. Magn. Mater. **190**, 71 (1998). *Magnetic domain structure and magnetization reversal in submicron-scale Co dots*
- [Ferré JMMM 97] R. Ferré, M. Hehn, K. Ounadjela, J. Magn. Magn. Mater. **165**, 9 (1997). *Nanoscale magnetic domains in mesoscopic dots: micromagnetic investigation of magnetisation processes*

-
- [Ferré PRB 97]** R. Ferré, K. Ounadjela, J. M. George, L. Piraux, S. Dubois, Phys. Rev. B **56**, 14065 (1997). *Magnetization processes in nickel and cobalt electrodeposited nanowires*
- [Frei PR 57]** E. H. Frei, S. Shtrikman, D. Treves, Phys. Rev. **106**, 446 (1957). *Critical size and nucleation field of ideal ferromagnetic particles*
- [Gillies JMMM 96]** M. F. Gilles, J. N. Chapman, J. C. S. Kools, J. Magn. Magn. Mat. **161**, 17 (1996). *The stabilisation of magnetic vortex using a large vertical field*
- [Gregg PRL 96]** J. F. Gregg, W. Allen, K. Ounadjela, M. Viret, M. Hehn, S. M. Thompson, J. M. D. Coey, Phys. Rev. Lett. **77**, 1580 (1996). *Giant magnetoresistive effects in a single element magnetic thin film*
- [Gusliencko APL 99]** K. Yu. Gusliencko, Appl. Phys. Lett. **75**, 384 (1999). *Magnetostatic interdot coupling in two dimensional magnetic dot arrays*
- [Gusliencko PRB 01]** K. Yu. Gusliencko, K. L. Metlov, Phys. Rev. B **63**, 100403 (2001). *Evolution and stability of magnetic vortex in small cylindrical ferromagnetic particle under applied field*
- [Hehn thèse]** M. Hehn, thèse de doctorat, Université Louis Pasteur Strasbourg (1997).
- [Hehn PRB 96]** M. Hehn, S. Padovani, K. Ounadjela, J. P. Bucher, Phys. Rev. B **53**, 3428 (1996). *Nanoscale magnetic domain structures in epitaxial Co films*
- [Hehn Science 96]** M. Hehn, K. Ounadjela, J. –P. Bucher, F. Rousseaux, D. Decanini, B. Bartenlian, C. Chappert, Science **272**, 1782 (1996). *Nanoscale magnetic domain in mesoscopic magnets*
- [Hehn APL 97]** M. Hehn, K. Ounadjela, R. Ferré, W. Grange, F. Rousseaux, Appl. Phys. Lett. **71**, 2833 (1997). *Reorientational magnetic transition in mesoscopic cobalt dots*
- [Heizke JMMM 00]** D. Heizke, U. Nowak, J. Magn. Magn. Mater. **221**, 365 (2000). *Magnetization switching in nanowires: monte Carlo study with fast Fourier transformation for dipolar fields*
- [Henry EPJ 01]** Y. Henry, K. Ounadjela, L. Piraux, S. Dubois, J. –M. George, J.-L. Duvail, Eur. Phys. J. B **20**, 35 (2001). *Magnetic anisotropy and domain patterns in electrodeposited cobalt nanowires*
- [Hong PRB 95]** K. Hong, N. Girdano, Phys. Rev. B **51**, 9855 (1995). *Approach to mesoscopic magnetic measurements*
- [Hubert 98]** A. Hubert, R. Schäfer, *Magnetic Domains*, Springer (1998).
- [Kent JP 01]** A. D. Kent, J. Yu, U. Rudiger, S. S. P. Parkin, J. Phys. Condens. Matter. **13**, R461 (2001). *Domain wall resistivity in epitaxial thin films microstructures*

-
- [Kim JMMM 98]** S. G. Kim, Y. Otani, K. Fukamichi, S. Yuasa, M. Nyvlt, T. Katayama, J. Magn. Magn. Mater. **198-199**, 200 (1998). *Magnetic and transport properties of epitaxial Fe/MgO(0001) wires*
- [Kleiber PRB 98]** M. Kleiber, F. Kümmerlen, M. Löhdorf, A. Wadas, D. Weiss, R. Wiesendanger, Phys. Rev. B **58**, 5563 (1998). *Magnetization switching of submicrometer Co dots induced by a magnetic force microscope tip*
- [Levy PRL 97]** P. M. Levy, S. Zhang, Phys. Rev. Lett. **79**, 5110 (1997). *Resistivity due to domain wall scattering*
- [Li PRL 01]** S. Li, D. Peyrade, M. Natali, A. Lebib, Y. Chen, U. Ebels, L. D. Buda, K. Ounadjela, Phys. Rev. Lett. **86**, 1102 (2001). *Flux closure state in cobalt rings*
- [Lohau APL 01]** J. Lohau, A. Moser, C. T. Rettner, M. E. Best, B. D. Terris, Appl. Phys. Lett. **78**, 990 (2001). *Writing and reading perpendicular magnetic recording media patterned by a focus ion beam*
- [McMichael IEEE 97]** R. D. McMichael, M. J. Donahue, IEEE Trans. Magn. **33**, 4167 (1997). *Head to head domain wall structures in thin magnetic strips*
- [Miltat 01]** J. Miltat, G. Albuquerque, A. Thiaville, *Micromagnetics: Dynamical Aspects*, dans *Magnetism and Synchrotron Radiation*, édité par J. P. Kappler and E. Beaurepaire Springer (2001).
- [Miltat 94]** J. Miltat, in *Applied Magnetism*, édité par R. Gerber, C. D. Wright et G. Asti, NATO ASI Series (Kluwer, Dordrecht) 221 (1994). *Domains and domains walls in soft magnetic materials mostly*
- [Miramond JMMM 97]** C. Miramond, C. Fermon, F. Rousseaux, D. Decanini, F. Carcenac, J. Magn. Magn. Mater. **165**, 500 (1997). *Permalloy cylindrical submicron size dot arrays*
- [Nakatani IEEE 24]** Y. Nakatani, N. Hayashi, IEEE Trans. Magn. **24**, 3039 (1988). *Three-dimension calculation of vertical Bloch line and Bloch point*
- [New JVST 94]** R. M. H. New, R. F. W. Pease, R. L. White, J. Vac. Sci. Technol. B **12**, 3196 (1994). *Submicron patterning of thin cobalt films for magnetic storage*
- [Natali PRL]** M. Natali, I. L. Prejbeanu, A. Lebib, L. D. Buda, Y. Chen, K. Ounadjela, soumis à Phys. Rev. Lett. *Correlated magnetic vortex chains in mesoscopic cobalt dot arrays*
- [Okuno JMMM 01]** T. Okuno, K. Shigeto, T. Ono, K. Mibu, T. Shinjo, J. Magn. Magn. Mater sous press (2001). *MFM study of magnetic vortex cores in circular permalloy dots: behavior in external field*

-
- [Prejbeanu thèse]** I. L. Prejbeanu thèse de doctorat, Université Louis Pasteur Strasbourg (2001).
- [Prejbeanu JAP]** I. L. Prejbeanu, M. Natali, L. D. Buda, A. Lebib, Y. Chen, K. Ounadjela, J. Appl. Phys., *In-plane reversal mechanisms in circular Co dots*
- [Prejbeanu IEEE 01]** I. L. Prejbeanu, L. D. Buda, U. Ebels, M. Viret, C. Fermon, K. Ounadjela, IEEE Trans. Magn. **37**, 2108 (2001). *Domain structures in epitaxial Co(10 $\bar{1}$ 0) Co wires*
- [Rave IEEE 00]** W. Rave, A. Hubert, IEEE Trans. Magn. **36**, 3886 (2000). *Magnetic ground state of a thin-film element*
- [Rothman PRL 01]** J. Rhotman, M. Kläui, L. Lopez-Diaz, C. A. F. Vaz, A. Bleloch, J. A. C. Bland, Z. Cui, R. Speaks, Phys. Rev. Lett. **88**, 1098 (2001). *Observation of a bi-domain state and nucleation free switching in mesoscopic rings magnets*
- [Rüdiger APL 98]** U. Rüdiger, J. Yu, A. D. Kent, S. S. P. Parkin, Appl. Phys. Lett. **73**, 1298 (1998). *Magnetoresistance due to domain walls in an epitaxial microfabricated Fe wire*
- [Schneider APL 00]** M. Schneider, H. Hoffmann, J. Zweck, Appl. Phys. Lett. **77**, 2909 (2000). *Lorentz microscopy of circular ferromagnetic permalloy nanodisks*
- [Schabes JMMM 91]** M. E. Schabes, J. Magn. Magn. Mater. **91**, 249 (1991). *Micromagnetic theory of non-uniform magnetization processes in magnetic recording particles*
- [Shinjo Science 00]** T. Shinjo, T. Okuna, R. Hassdorf, K. Shigento, T. Ono, Science **289**, 930 (2000). *Magnetic vortex core observation in circular dots of permalloy*
- [Šimánek PRB 01]** E. Šimánek, Phys. Rev. B **63**, 224412/1-8 (2001). *Spin accumulation and resistance due to a domain wall*
- [Stoeffler COST 98]** D. Stoeffler, K. Ounadjela, COST Action P3, Micromagnetics Working Groupe Meeting, Manchester May 27-28 (1998). *Interconnection between micromagnetism and band structure non collinear magnetism*
- [Thiaville JMMM 01]** A. Thiaville, J. Miltat, JEMS'01 Grenoble (F042) (2001). *Domain wall dynamics in nanowires*
- [Tonomura RMP 87]** A. Tonomura, Rev. Mod. Phys. **59**, 639 (1987). *Applications of electron holography*
- [Tymbal APL 00]** E. Y. Tymbal, Appl. Phys. Lett. **77**, 2740 (2000). *Theory of magnetostatic coupling in thin-film rectangular magnetic elements*

-
- [Usov JMMM 93]** N. A. Usov, S. E. Peschany, J. Magn. Magn. Mater. **118**, 290 (1993). *Magnetization curling in a fine cylindrical particle*
- [Vellekoop JMMM 98]** B. Vellekoop, L. Abelman, S. Porthun, C. Lodder, J. Magn. Magn. Mater. **190**, 148 (1998). *On the determination of the internal magnetic structure by magnetic force microscopy*
- [Viret PRL 00]** M. Viret, Y. Samson, P. Warin, A. Marty, F. Ott, E. Söndergard, O. Klein, C. Fermon, Phys. Rev. Lett. **85**, 3962 (2000). *Anisotropy of domain wall resistance*
- [Wegrowe PRL 99]** J.-E. Wegrowe, D. Kelly, A. Franck, S. E. Gilbert, J. Ph. Ansermet, Phys. Rev. Lett. **82**, 3681 (1999). *Magnetoresistance of ferromagnetic nanowires*
- [Wernsdorfer PRL 96]** W. Wernsdorfer, B. Doudin, D. Mailly, K. Hasselbach, A. Benoit, J. Meier, J. –Ph. Ansermet, B. Barbara, Phys. Rev. Lett. **77**, 1873 (1996). *Nucleation of magnetization reversal in individual nanosized nickel wires*
- [White JMMM 00]** R. L. White, J. Magn. Magn. Mat. **209**, 1 (2000). *The physical boundaries to high-density magnetic recording*
- [Zhu 01]** J.-G. Zhu, Y. Zheng, *Spin Dynamics in Confined Structure*, Springer (2001). *The micromagnetics of magnetoresistive random acces memory*
- [Zhu JAP 00]** J. –G. Zhu, Y. Zheng, G. A. Prinz, J. Appl. Phys. **87**, 6668 (2000). *Ultrahigh density verical magnetoresistive random access memory*

Conclusion

L'objectif de ce travail de thèse a été de développer d'outils numériques appropriés à l'étude du magnétisme des structures de dimensions submicroniques en utilisant la modélisation micromagnétique. Pour l'évaluation des énergies et des champs internes qui décrivent l'état du système, un algorithme numérique, basé sur la méthode des différences finies, a été conçu. La minimisation de l'énergie libre du système, qui mène aux états stables, est fondée sur l'intégration temporelle de l'équation phénoménologique de Landau-Lifshitz-Gilbert. Afin d'améliorer la précision du calcul numérique, plusieurs méthodes d'évaluation des énergies et des champs ont été proposées et analysées en détail. Différents schémas d'intégration ont été développés et comparés afin d'assurer la stabilité numérique des solutions obtenues et permettre d'augmenter l'efficacité du calcul. L'application de cette approche numérique à l'étude du comportement magnétique de systèmes réels demande un traitement adéquat par rapport aux caractéristiques individuelles de chaque système. La dimension du système (*finie* ou *infinie*) et sa périodicité selon certaines directions de l'espace, nous ont contraint d'adapter l'algorithme à chaque cas précis.

Approche bidimensionnelle pour les couches minces

Dans une première étape, un code micromagnétique applicable à l'étude des systèmes infinis à deux dimensions (2D), tels que les couches minces, a été mis au point. Cette approche numérique a permis d'étudier les propriétés internes des films à l'échelle nanométrique pour des films de cobalt à forte anisotropie magnétocristalline. Nous nous sommes intéressés à deux systèmes dont la différence réside dans la direction du champ d'anisotropie.

- *Films de cobalt à anisotropie uniaxiale planaire*: Ce type de films dans lesquels l'aimantation est parallèle au plan du film, forment des domaines antiparallèles séparés par des parois à 180°. Lorsque l'épaisseur de la couche augmente la structure interne des parois change et une transition d'une paroi de type Néel asymétrique vers une paroi de type Bloch asymétrique est identifiée autour de 20 nm. Le signal MFM, déduit à partir de

la configuration micromagnétique simulée de la paroi, confirme de manière qualitative les profils MFM mesurés expérimentalement.

- *Films de cobalt à anisotropie uniaxiale perpendiculaire au plan des couches:* Leur caractéristique principale est l'existence des domaines magnétiques en bandes parallèles. Le traitement d'une telle structure périodique a nécessité l'extension du calcul 2D non périodique au calcul 2D périodique. La dépendance de la largeur des domaines en bandes en fonction de l'épaisseur de la couche déduite par simulation s'avère très proche des résultats expérimentaux. L'évaluation du champ interne inhomogène à partir de la distribution de l'aimantation simulée pour plusieurs champs externes appliqués dans le plan de la couche a permis une meilleure compréhension de la richesse des spectres de résonance ferromagnétique mesurés expérimentalement.

Approche tridimensionnelle pour les éléments nanostructurés

L'extension à un calcul tridimensionnel (3D) a représenté le but essentiel de la deuxième partie de ce travail de thèse. Ce type d'approche s'est révélé idéal pour étudier des systèmes ferromagnétiques de dimensions submicroniques, tels que des plots circulaires, des anneaux ou des fils. A l'aide de ce code micromagnétique, nous avons identifié les états magnétiques stables dont l'existence dépend des dimensions de l'objet étudié. Les cycles d'aimantation ainsi que le signal MFM attendu ont été simulés et comparés aux résultats expérimentaux.

- *Plots et anneaux:* Un aspect important de ce travail de thèse a consisté à étudier le renversement de l'aimantation dans des éléments submicroniques et de prédire les configurations magnétiques en fonction de la forme et la taille de l'objet. En particulier, les configurations circulaires de l'aimantation, qui constituent de futurs candidats pour des mémoires magnétiques à accès aléatoire, ont été étudiées. Dans ce type de composants, le point mémoire a en général une forme rectangulaire qui induit une aimantation linéaire et planaire. Cette géométrie rectangulaire rend le processus de renversement de l'aimantation non répétitif à cause de la présence de domaines magnétiques aux bords de l'élément. Ceci constitue un frein à son utilisation. Cette contrainte est levée dans le cas d'éléments circulaires comme des plots ou encore des anneaux. Des simulations systématiques en fonction du diamètre et de l'épaisseur d'un plot circulaire, corrélées avec des données expérimentales de MFM ont permis d'élaborer un diagramme de phase des états fondamentaux. L'état fondamental d'un plot est contrôlé par ses dimensions et par les paramètres du matériau, comme l'anisotropie magnétocristalline ou l'aimantation à

saturation. Ainsi, en dessous d'un diamètre et d'une épaisseur de plot critiques, l'état fondamental est l'état monodomaine planaire. Lorsqu'on augmente le diamètre et/ou l'épaisseur du plot, une structure de type vortex qui assure la fermeture du flux magnétique, est favorisée. Une attention spéciale a été accordée à l'étude de l'état vortex et à sa stabilité en présence d'un champ magnétique appliqué perpendiculairement au plan du plot. La présence de l'anisotropie cristalline induit un élargissement du cœur de vortex et augmente de manière significative sa stabilité en champ inverse. Pour mettre en évidence l'influence de la forme de l'élément sur ses propriétés magnétiques, des anneaux circulaires ont été analysés en parallèle. Lorsque la partie centrale d'un plot circulaire est absente, le cœur du vortex est éliminé et la stabilité d'un état de fermeture de flux augmente par rapport à celle d'un état monodomaine planaire.

- *Fils nanométriques*: Les fils nanométriques à section rectangulaire ou circulaire constituent des systèmes modèles pour l'étude de la contribution magnétoresistive d'une paroi de domaine. Afin d'isoler la contribution d'une paroi individuelle, il nous a fallu tout d'abord déterminer la configuration interne de la paroi en fonction de l'orientation de l'axe d'anisotropie magnétocristalline par rapport à l'axe du fil. Lorsque l'axe d'anisotropie est perpendiculaire à l'axe du fil, la structure de la paroi déterminée est plutôt complexe, avec des parties Néel en surface où l'aimantation s'oriente parallèlement à la surface du fil et une partie Bloch au cœur de la paroi. La structure en domaines en bandes parallèles périodiques, caractéristique pour cette géométrie, requiert la généralisation des calculs 3D non périodiques à des calculs 3D périodiques. Lorsque l'axe d'anisotropie magnétocristalline est parallèle à l'axe du fil, la structure interne de la paroi change. Dans les fils qui ont la taille latérale suffisamment petite (< 30 nm), la structure de la paroi s'approche de la structure d'une paroi de Bloch idéale. L'effet des constriction géométriques sur le mouvement d'une telle paroi en champ appliqué le long du fil a été analysé. Les valeurs du champ de déblocage des parois s'avèrent fortement liées à la nature de la constriction. Les résultats obtenus corroborent les observations expérimentales.

Ce travail montre que la simulation micromagnétique est un outil indispensable pour l'interprétation des données expérimentales et pour la compréhension fine des phénomènes internes mis en jeu dans le processus de renversement de l'aimantation. La flexibilité de

l'approche micromagnétique nous a permis d'étudier des systèmes à deux et à trois dimensions, périodiques et non-périodiques.

Perspectives

Ce travail offre de nombreux points à approfondir et ouvre d'intéressantes perspectives. Tout particulièrement deux directions seront privilégiées: d'un côté le développement davantage de notre approche numérique et d'autre côté son application à l'étude de nouveaux systèmes magnétiques.

Afin de suivre les nouvelles tendances du calcul micromagnétique qui se dirige surtout vers les aspects dynamiques¹, l'injection du courant polarisé en spin² et l'incorporation des effets thermiques³, nous sommes en train d'ajouter certaines parties au code. Il s'agit notamment d'apporter deux nouveaux sous-programmes: celui du calcul magnétostatique fondé sur l'approximation de charges de volume constantes et respectivement du calcul de contributions d'échange basé sur un développement d'ordre quatre de l'aimantation. Parallèlement, de nouveaux systèmes sont au centre de notre attention tels que les plaquettes lithographiées de CoFe⁴ ou les sphères magnétiques vides⁵.

¹ G. Albuquerque, J. Miltat et A. Thiaville, J. Appl. Phys. **89**, 6791 (2001). *Self-consistency based control scheme for magnetization dynamics*

² J. Miltat, G. Albuquerque, A. Thiaville, C. Vouille, J. Appl. Phys. **89**, 6982 (2001). *Spin transfer into an inhomogeneous magnetization distribution*

³ T. Schrefl, W. Scholz, D. Suess, J. Fidler, J. Magn. Magn. Mater., **226-230**, 1213 (2001). *Computational micromagnetics: prediction of time dependent and thermal properties*

⁴ *Magneto-Elasticity modelling for TRAM cells*, Nanomem PROJECT, **IST-1999-13471**.

⁵ E.L. Bizdoaca, M. Spasova, M. Farle, M. Hilgendorff, F. Caruso, J. Magn. Magn. Mater. sous presse, *Magnetically directed self-assembly of submicron spheres with a Fe₃O₂ nanoparticle shell*

Annexes

Annexe A : Problème standard 4

Annexe B-I : Energie magnétostatique des domaines en bandes parallèles périodiques

Annexe B-II : Modèle de Kittel pour une structure en bandes parallèles

Annexe B-III : Modèle de Kooy et Enz des domaines en bandes parallèles périodiques sous champ appliqué hors du plan

Annexe B-IV : Modèle de Muller des domaines en bandes parallèles périodique dans un champ appliqué dans le plan

Annexe B-V : Oscillations couplées dans des couches à anisotropie perpendiculaire $Q \gg 1$

Annexe C : Distribution de l'aimantation à l'intérieur d'un vortex magnétique

Problème standard 4

Le but des ces études est de tester l'applicabilité de notre approche numérique 3D dans l'étude de problème réel de dynamique. C'est pour cette raison que nous avons soumis une solution pour le problème standard numéro 4, proposé sur le site de NIST [<http://www.ctcms.nist.gov/~rdm/std4/spec4.html>].

Il s'agit de suivre l'évolution de l'aimantation dans une plaquette de permalloy: $A_{ex} = 1.3 \times 10^{-11} J/m$, $M_s = 8 \times 10^5 A/m$ sans anisotropie magnétocristalline $K_u = 0 J/m^3$ après l'application d'un champ externe uniforme. La plaquette considérée a une taille de : $L_x \times L_y \times L_z = 500nm \times 12nm \times 3nm$ et à chaque fois l'état de départ dans le calcul est représenté par l'état **S** (figure AII-1, AII-2). Une valeur réaliste est fixée pour le coefficient d'amortissement : $\alpha = 0.02$ et deux valeurs du champ externe sont comparées:

- le champ $H_1 = (-246, 43, 0)Oe$ qui fait un angle de 170° par rapport à l'aimantation moyenne de l'état initial (figure AII-1).
- le champ $H_2 = (-355, -63, 0)Oe$ incliné à 190° (figure A-1).

Prenant plusieurs pas de maillage, inférieurs à la longueur d'échange du permalloy ($l_{ex} = 5.68 nm$) et un pas de temps de 0.1ps nous avons pu constater que la réaction du système au champ H_1 s'avère être presque indépendante du choix du maillage (figure A-1(b)). Ce n'est pas le même cas lorsque le champ H_2 est appliqué (figure A-2(b)) pour lequel, de différences significatives sont enregistrées liées surtout des états transitoires parcourus par le système.

La comparaison entre diverses solutions proposées (figure AII-3) par des autres groupes de micromagnétisme numérique nous prouve que les simulations dynamiques sont extrêmement sensibles. Ce n'est pas seulement le choix du maillage qui décide la réaction du système mais, d'une façon plus générale, c'est le code numérique entier (l'évaluation des champs, des énergies et l'intégration de LLG) qui est essentiel.

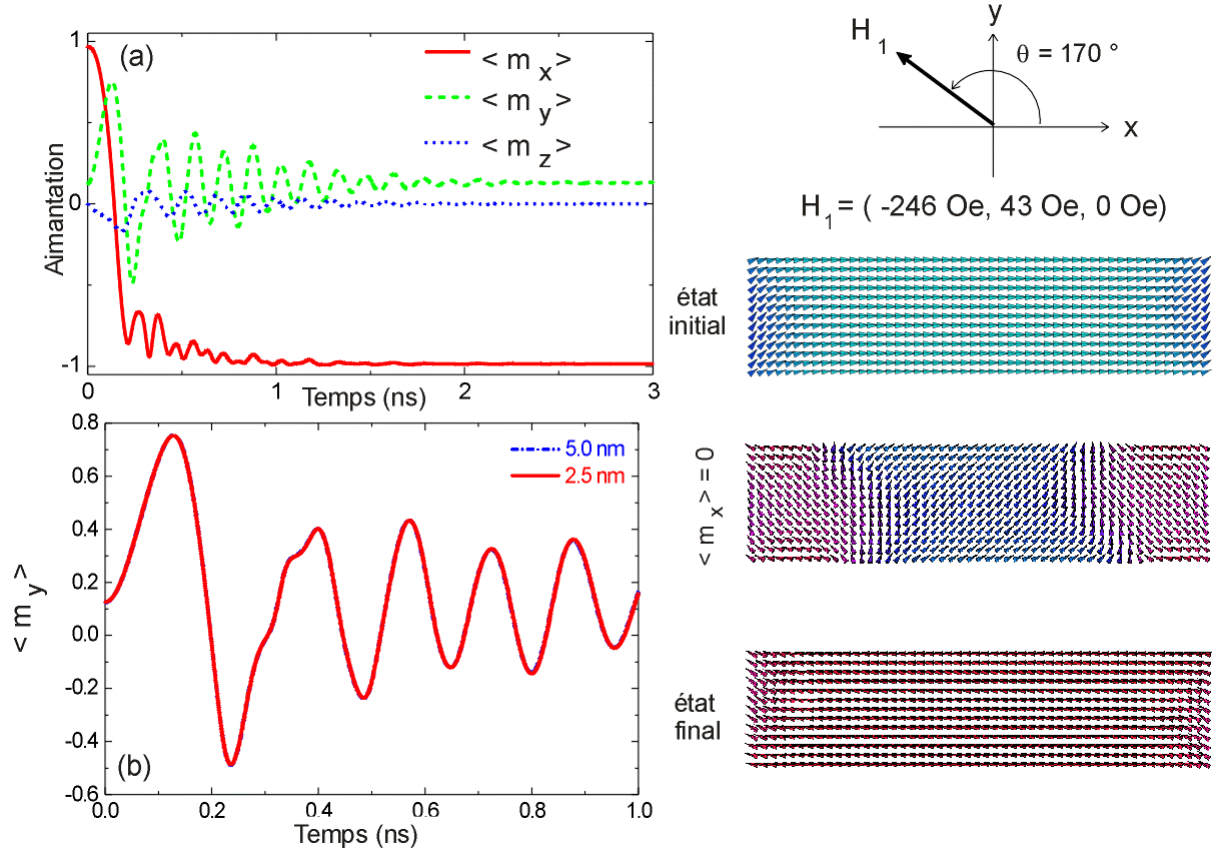


Figure A-1: Evolution de l'aimantation après l'application du champ externe $\vec{H}_1$.

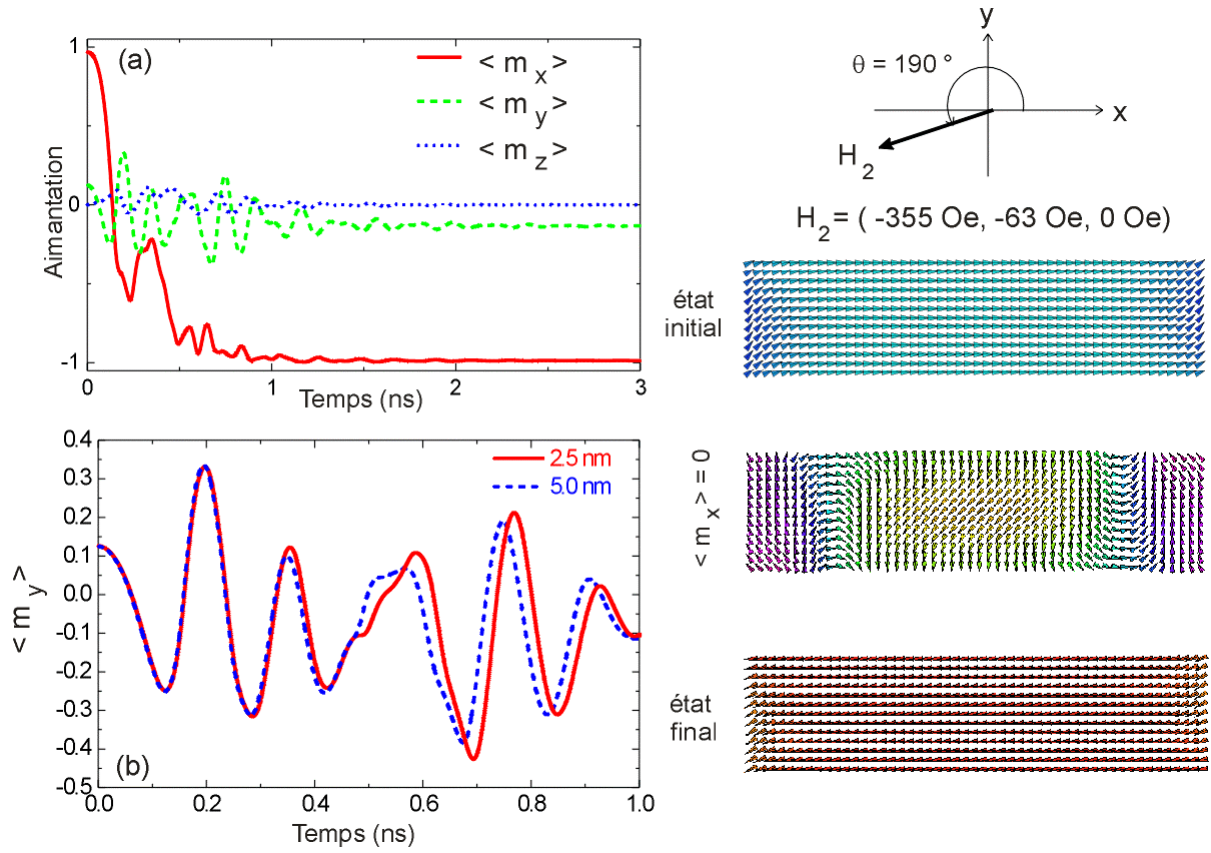


Figure A-2: Evolution de l'aimantation après l'application du champ externe $\vec{H}_2$.

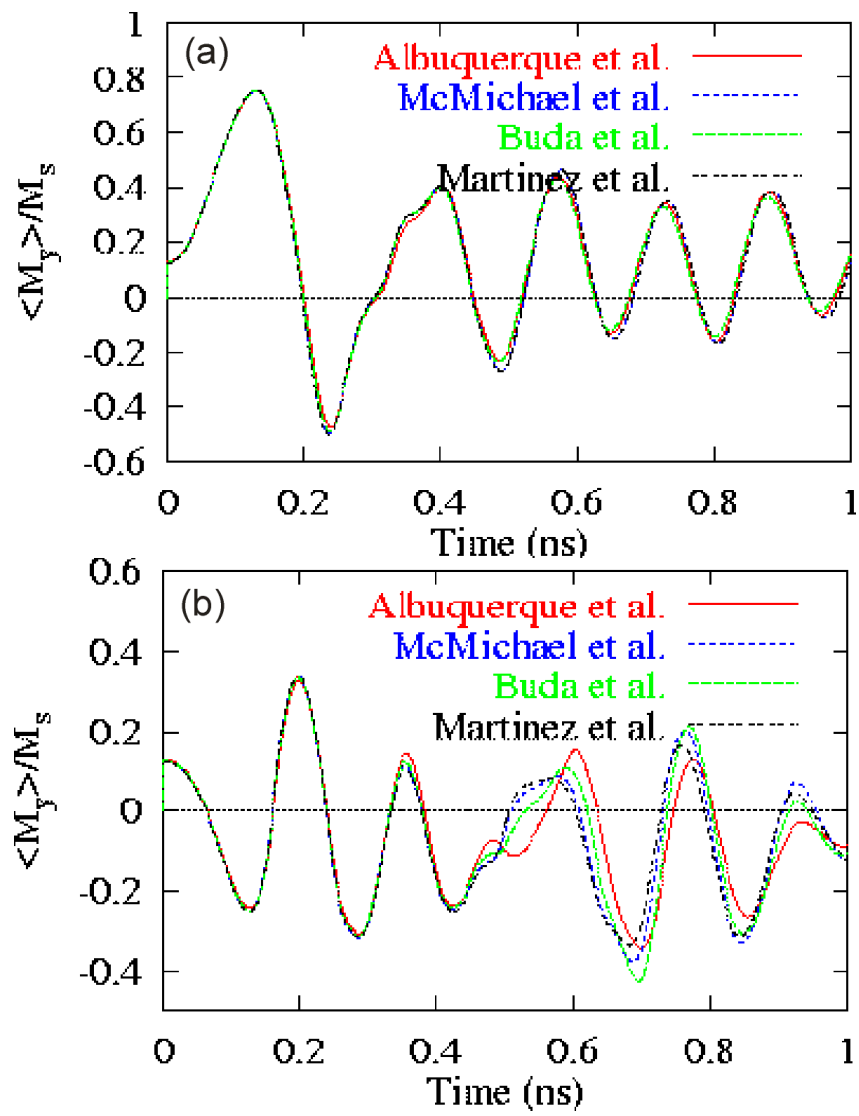


Figure A-3: Comparaison entre diverses solutions pour (a) le champ $\vec{H}_1$ et (b) le champ $\vec{H}_2$.

B-I: Energie magnétostatique des domaines en bandes parallèles périodiques

Le but est d'établir une expression générale de l'énergie magnétostatique d'une structure en domaines en bandes parallèles et périodiques qui par la suite sera appliquée dans de cas particuliers. Afin d'évaluer l'énergie magnétostatique stockée dans une structure en domaines en bandes parallèles (figure B-1) le potentiel scalaire ϕ_m est obtenu à partir de l'équation de Poisson. Dans ce cas précis le problème à résoudre est le suivant :

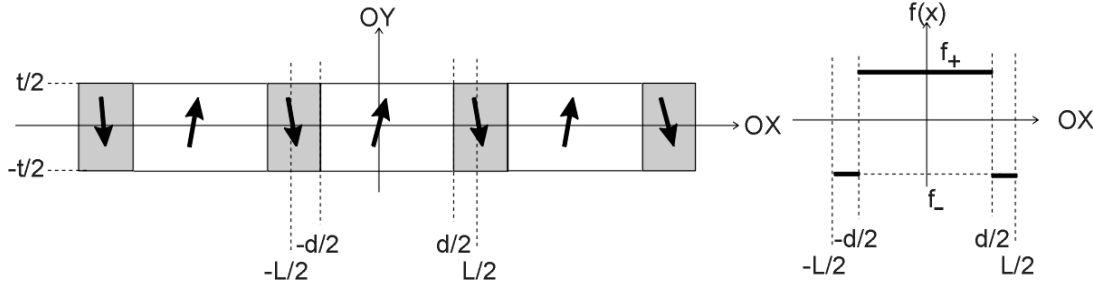


Figure B-1: Géométrie du système périodique de période L

- Equation de Poisson généralisée :

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \phi_m}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_m}{\partial y^2} = 0 & x \in \mathfrak{R}, y < -t/2 \\ \mu \frac{\partial^2 \phi_m}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_m}{\partial y^2} = 0 & x \in \mathfrak{R}, y \in [-t/2, +t/2] \\ \frac{\partial^2 \phi_m}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_m}{\partial y^2} = 0 & x \in \mathfrak{R}, y > +t/2 \end{cases}$$

où $\mu = 1 + \frac{\mu_0 M_s^2}{2K_u}$ est *rotational permeability* qui permet de prendre en compte la déviation de

l'aimantation des domaines vers le plan de la couche.

- les conditions de continuité aux interfaces

$$\begin{aligned} y = -t/2 \quad \phi_m(x, y \rightarrow -t/2, y < -t/2) &= \phi_m(x, y \rightarrow -t/2, y > -t/2) \quad \forall x \in \mathfrak{R} \\ y = t/2 \quad \phi_m(x, y \rightarrow t/2, y < t/2) &= \phi_m(x, y \rightarrow t/2, y > t/2) \quad \forall x \in \mathfrak{R} \end{aligned}$$

- les conditions de passage aux interfaces

$$y = -t/2 \quad \vec{n} = (0 \quad -1 \quad 0)$$

$$\left[-\frac{\partial \phi_m}{\partial y}(x, y \rightarrow -t/2, y < -t/2) \right] - \left[-\frac{\partial \phi_m}{\partial y}(x, y \rightarrow -t/2, y > -t/2) \right] = -\sigma_m(x, y = -t/2) \\ \forall x \in \mathfrak{R}$$

$$y = +t/2 \quad \vec{n} = (0 \quad +1 \quad 0)$$

$$\frac{\partial \phi_m}{\partial y}(x, y \rightarrow -t/2, y > t/2) - \frac{\partial \phi_m}{\partial y}(x, y \rightarrow t/2, y < t/2) = -\sigma_m(x, y = +t/2)$$

$$\forall x \in \mathfrak{R}$$

où la densité des charges magnétiques de surfaces $\sigma_m(x, y \in S)$, s'exprime comme $\sigma_m(x, y = t/2) = \vec{M} \cdot \vec{n} = M_s f(x)$, $\sigma_m(x, y = +t/2) = -\sigma_m(x, y = -t/2)$ à l'aide de la fonction:

$$f(x) = \begin{cases} f_-, & -L/2 < x < -d/2 \\ f_+, & -d/2 < x < +d/2 \\ f_-, & +d/2 < x < +L/2 \end{cases}$$

- les conditions d'annulation du potentiel à l'infini $\phi_m(x, y \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0 \quad \forall x \in \mathfrak{R}$
 $\phi_m(x, y \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0 \quad \forall x \in \mathfrak{R}$
- les conditions de symétrie
 - périodicité selon la direction OX : $\phi_m(x + L, y) = \phi_m(x, y) \quad \forall x \in \mathfrak{R}, y \in \mathfrak{R}$
 - parité selon OX : $\phi_m(-x, y) = \phi_m(x, y) \quad \forall x \in \mathfrak{R}, y \in \mathfrak{R}$
 - imparité par rapport à l'axe OY : $\phi_m(x, -y) = -\phi_m(x, y) \quad \forall x \in \mathfrak{R}, y \in \mathfrak{R}$

Pour solutionner l'équation du potentiel scalaire nous faisons appelle à la méthode de la séparation des variables : $\phi_m(x, y) = X(x) \cdot Y(y)$ qui nous conduit à une solution générale telle que:

$$\phi_m(x, y) = \begin{cases} C_{01}y + D_{01} + \sum_{n=1} \left(A_{n1} e^{i \frac{2\pi n}{L} x} + B_{n1} e^{-i \frac{2\pi n}{L} x} \right) \left(C_{n1} e^{-\frac{2\pi n}{L} y} + D_{n1} e^{\frac{2\pi n}{L} y} \right) & y < -t/2 \\ C_{02}y + D_{02} + \sum_{n=1} \left(A_{n2} e^{i \frac{2\pi n}{L} x} + B_{n2} e^{-i \frac{2\pi n}{L} x} \right) \left(C_{n2} e^{-\frac{2\pi n}{L} \sqrt{\mu} y} + D_{n2} e^{\frac{2\pi n}{L} \sqrt{\mu} y} \right) & -t/2 < y < t/2 \\ C_{03}y + D_{03} + \sum_{n=1} \left(A_{n3} e^{i \frac{2\pi n}{L} x} + B_{n3} e^{-i \frac{2\pi n}{L} x} \right) \left(C_{n3} e^{-\frac{2\pi n}{L} y} + D_{n3} e^{\frac{2\pi n}{L} y} \right) & t/2 < y \end{cases}$$

L'application de l'annulation du potentiel lorsque $y \rightarrow \pm\infty$ et des conditions de symétrie réduit la solution à:

$$\phi_m(x, y) = \begin{cases} A + \sum_{n=1} B_n \cos\left(\frac{2\pi n}{L} x\right) e^{\frac{2\pi n}{L} y}, & y < -t/2 \\ Cy + D + \sum_{n=1} E_n \cos\left(\frac{2\pi n}{L} x\right) \sinh\left(\frac{2\pi n}{L} \sqrt{\mu} y\right), & -t/2 < y < t/2 \\ F + \sum_{n=1} G_n \cos\left(\frac{2\pi n}{L} x\right) e^{-\frac{2\pi n}{L} y}, & t/2 < y \end{cases}$$

Les conditions de continuité et de passage aux interfaces et le développement en série Taylor de la fonction périodique f :

$$f(x) = \frac{f_+ d + f_- (L - d)}{L} + \frac{2(f_+ - f_-)}{\pi} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n} \sin\left(\frac{\pi n d}{L}\right) \cos\left(\frac{2\pi n x}{L}\right)$$

conduisent à la solution générale:

$$\begin{aligned} \phi_m(x, y) = & \begin{cases} -M_s \frac{f_+ d + f_- (L - d)}{L} \frac{t}{2} - M_s \frac{(f_+ - f_-)}{\pi^2} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{L}{n^2} \xi(\mu) \sin\left(\frac{\pi n d}{L}\right) \sinh\left(\frac{\pi n t \sqrt{\mu}}{L}\right) \cos\left(\frac{2\pi n}{L} x\right) e^{\frac{2\pi n}{L} \left(y + \frac{t}{2}\right)}, & y < -t/2 \\ M_s \frac{f_+ d + f_- (L - d)}{L} y + M_s \frac{(f_+ - f_-)}{\pi^2} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{L}{n^2} \xi(\mu) \sin\left(\frac{\pi n d}{L}\right) \sinh\left(\frac{2\pi n \sqrt{\mu}}{L} y\right) \cos\left(\frac{2\pi n}{L} x\right), & -t/2 < y < t/2 \\ M_s \frac{f_+ d + f_- (L - d)}{L} \frac{t}{2} + M_s \frac{(f_+ - f_-)}{\pi^2} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{L}{n^2} \xi(\mu) \sin\left(\frac{\pi n d}{L}\right) \sinh\left(\frac{\pi n t \sqrt{\mu}}{L}\right) \cos\left(\frac{2\pi n}{L} x\right) e^{-\frac{2\pi n}{L} \left(y - \frac{t}{2}\right)}, & t/2 < y \end{cases} \end{aligned}$$

En utilisant la relation (I-24) l'énergie magnétostatique par unité de surface est:

$$\frac{E_{dem}}{Lt} = \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 \left\{ \left[\frac{f_+ d + f_- (L - d)}{L} \right]^2 + \frac{2(f_+ - f_-)^2}{\pi^3} \frac{L}{t} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} \xi_n(\mu) \sin^2\left(\frac{\pi n d}{L}\right) \sinh\left(\frac{\pi n t \sqrt{\mu}}{L}\right) \right\}. \quad (B-1)$$

Lorsque la fonction f est $\begin{cases} f_+ = 1 \\ f_- = -1 \end{cases}$ la relation déduite par Kooy et Enz [Kooy PRR 60] est

retrouvée:

$$\frac{E_{dem}}{L} = \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 \left[\frac{[d - (L - d)]^2}{L^2} \frac{t}{2} + \frac{8}{\pi^3} \frac{1}{\sqrt{\mu} + 1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{L}{n^3} \sin^2\left(\frac{\pi n d}{L}\right) \left(1 - e^{-\frac{2\pi n t \sqrt{\mu}}{L}}\right) \right]$$

En plus si $\mu = 1$, $L = 2d$ et $t \gg d$: $\frac{E_{dem}}{L} = \frac{4.2}{\pi^3} \mu_0 M_s^2 \left(\frac{L}{2}\right) / \frac{E_{dem}}{L} (CGS) = 1.71 M_s^2 \left(\frac{L}{2}\right)$

qui représente l'expression de Kittel [Kittel PR 46, MaleK CJP 58].

B-II: Modèle de Kittel pour une structure en bandes parallèles

La plus simple approche développée pour décrire une structure en bandes périodiques dans des couches minces est due à C. Kittel [Kittel PR 46, Malek CJP 58]. En l'absence d'un champ externe, l'énergie totale inclut des contributions provenant de l'énergie magnétostatique E_{dem} , l'énergie d'anisotropie magnétocristalline E_{anis} et l'énergie des parois E_w .

$$E_{tot} = E_{dem} + E_{anis} + E_w$$

Dans ce modèle les parois de domaines sont considérées infiniment fines, caractérisées par une densité d'énergie de surface σ_w . L'anisotropie uniaxiale perpendiculaire au plan de la couche contribue avec $E_{anis} = K_u V$ où V est le volume de

domaines perpendiculaire à l'axe d'anisotropie cristalline (domaine de fermeture). Il a proposé de comparer les énergies des trois états possibles (figure B-2) :

(a) l'état monodomaines planaire

$$E_{tot}(a) = K_u t$$

(b) l'état en domaines en bandes parallèles sans domaines de fermeture (domaines ouverts)

$$E_{tot}(b) = 2 \frac{(\sigma_w t)}{L} + \frac{4.2}{\pi^3} \mu_0 M_s^2 \left(\frac{L}{2} \right) \Rightarrow L_{\min} = 2 \sqrt{\frac{\sigma_w t}{4.2 \mu_0 M_s^2}}, \quad E_{tot}(b) = 2 \sqrt{\frac{4.2 \mu_0 M_s^2}{\pi^3} \sigma_w t}$$

(c) l'état en domaines en bandes parallèles avec des domaines de fermetures (fermeture complète)

$$E_{tot}(c) = \left[2\sqrt{2} + \frac{2\left(t - \frac{L}{2}\right)}{L} \right] \sigma_w + K_u \frac{1}{2} \left(\frac{L}{2} \right) \Rightarrow L_{\min} = 2 \sqrt{\frac{2\sigma_w t}{K_u}}, \quad E_{tot}(c) = (2\sqrt{2} - 1) \sigma_w + \sqrt{2\sigma_w t K_u}$$

En appliquant ce modèle dans le cas d'une couche de Co(0001) : $M_s = 1400 \times 10^3 \text{ A/m}$, $K_u = 600 \times 10^3 \text{ J/m}^3$, $\sigma_w = 12 \times 10^{-3} \text{ J/m}^2$ (figure B-3) une transition entre l'état monodomaine (a) vers l'état en domaines en bandes parallèles avec des domaines de

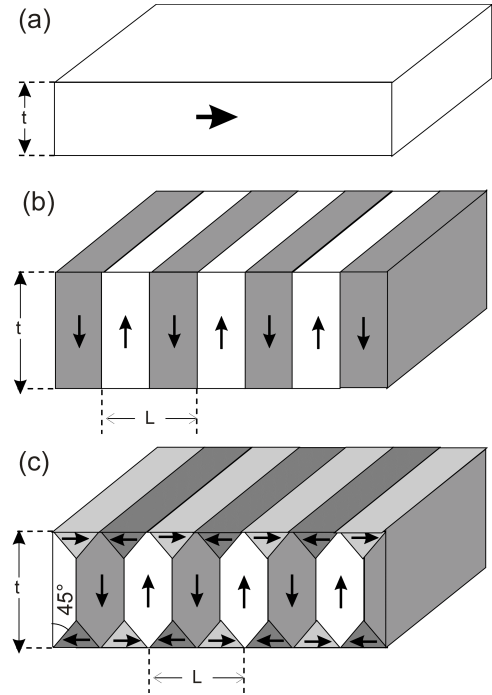


Figure B-2: Etats magnétiques stables comparés par Kittel.

fermeture (c) est identifiée autour d'une épaisseur de 100 nm. L'état avec des domaines ouverts (sans domaines de fermetures) s'avère le plus énergétique parmi les configurations possibles. En même temps la périodicité des domaines L dépend de l'épaisseur de la couche t selon une loi parabolique : $L \sim \sqrt{t}$.

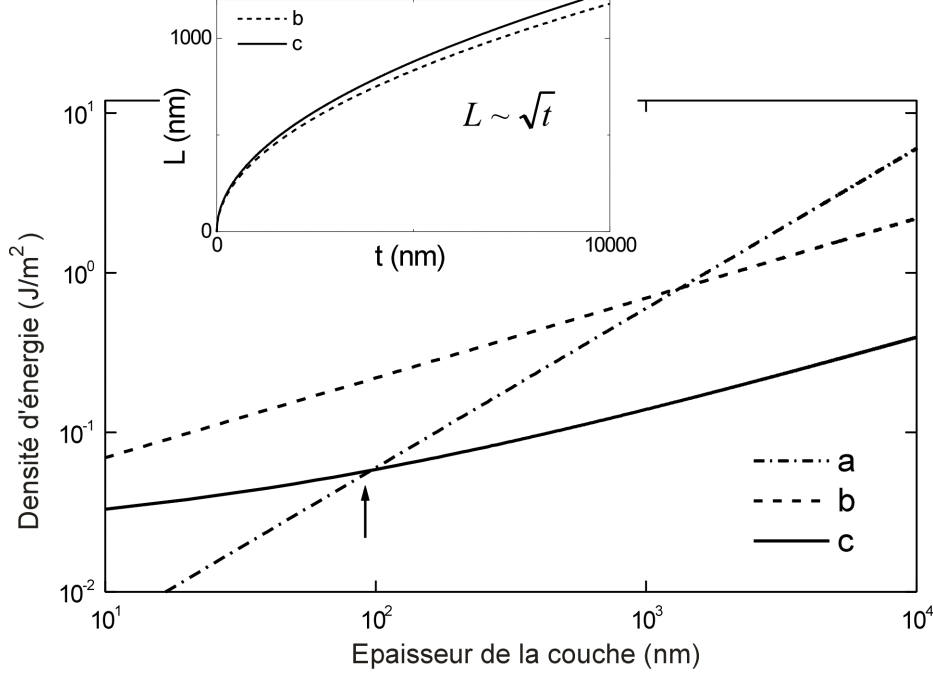


Figure B-3: Variation de la densité d'énergie des configurations (a,b,c) et de la périodicité des domaines L en fonction de l'épaisseur de la couche t selon le modèle de Kittel dans le cas des couches minces de Co(0001).

B-III: Modèle de Kooy et Enz des domaines en bandes parallèles périodiques sous champ appliqué hors du plan

Le modèle proposé par Kittel pour des domaines en bandes parallèles sans domaines de fermeture (figure B-2(b)) a été ultérieurement développé par Kooy et Enz [Kooy PRR 60] qui ont pris en compte l'application d'un champ externe normale au plan de la couche

$\vec{H}_{app} = (0 \quad H_{app} \quad 0)$. Les calculs sont faits dans l'approximation $Q = \frac{2K_u}{\mu_0 M_s^2} \gg 1$ dont les

domaines de fermetures n'existent pas. Comme même, à cause du champ appliqué un faible écart de l'orientation de l'aimantation en domaines par rapport à l'axe d'anisotropie

magnétocristalline est possible qui est introduit par l'intermédiaire du facteur $\mu = 1 + \frac{\mu_0 M_s^2}{2K_u}$ ('μ-effect')

dans l'équation de Poisson. Dans ces conditions l'énergie totale de système sur l'unité de surface s'exprime :

$$E_{tot} = 2 \frac{\sigma_w t}{L} - \mu_0 M_s H_{app} \frac{d - (L - d)}{L} + \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 \left[\frac{[d - (L - d)]^2}{L^2} \frac{t}{2} + \frac{4}{\pi^3} \frac{1}{\sqrt{\mu} + 1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{L}{n^3} \sin^2 \left(\frac{\pi n d}{L} \right) \left(1 - e^{-\frac{2\pi n t \sqrt{\mu}}{L}} \right) \right]$$

où la relation (B-1) a été utilisée pour l'énergie magnétostatique. Pour une épaisseur fixe t et un champ appliqué donné $\vec{H}_{app}$ l'énergie doit être minimisée par rapport à la période des bandes L et la largeur des domaines d : $\frac{\partial E_{tot}}{\partial L} = 0$, $\frac{\partial E_{tot}}{\partial d} = 0$ et ainsi la structure périodique est complètement déterminée (L, d). Le modèle s'avère limité lorsque le champ appliqué est large car l'augmentation du champ externe provoque l'évolution des domaines en bandes vers des domaines en bulles. Tout de même, c'est une façon simple d'estimer la périodicité L, d en fonction du champ appliqué $\vec{H}_{app}$ hors du plan de la couche.

B-IV: Modèle de Muller des domaines en bandes parallèles périodiques dans un champ appliqué dans le plan

Le modèle développé par Muller [Muller PR 61] s'applique pour une structure en domaine en bandes homogènes dans une couche mince ayant une anisotropie magnétocristalline uniaxiale (K_u) perpendiculaire au plan de la couche (la direction OY). Son but final est de décrire la nucléation des bandes à partir de l'état uniforme planaire (saturation selon OZ). La transition de l'aimantation d'un état uniforme planaire vers une structure en domaines en bandes parallèles est induite soit par la réduction du champ externe appliqué $\vec{H}_{app} = (0 \ 0 \ H_{app})$ soit par l'augmentation de l'épaisseur de la couche t . Cette approche permet de déduire :

1. la valeur critique de l'épaisseur de la couche t_{cr} , pour un champ appliqué donné, au-dessous de laquelle l'aimantation reste uniforme dans le plan de la couche
2. le champ nucléation pour une couche d'épaisseur donnée au-dessus duquel l'aimantation reste uniforme dans le plan.

Le point de départ est représenté par l'équation micromagnétique d'un état stable :

$$\vec{m} \times \vec{H}_{eff} = 0$$

où le champ effectif comporte contribution provenant de l'interaction d'échange, de l'anisotropie magnétocristalline, du champ externe et magnétostatique :

$$\vec{H}_{eff} = \frac{2A_{ex}}{\mu_0 M_s} \Delta \vec{m} - \begin{pmatrix} 0 & \frac{2K_u}{\mu_0 M_s} m_y & 0 \end{pmatrix} + \vec{H}_{app} + \vec{H}_{dem}.$$

Le champ magnétostatique est dérivé à partir du potentiel scalaire ϕ_m :

$$\vec{H}_{dem} = \left(-\frac{\partial \phi_m}{\partial x}, -\frac{\partial \phi_m}{\partial y}, -\frac{\partial \phi_m}{\partial z} \right)$$

qui satisfait l'équation du Poisson: $\Delta \phi_m = M_s (\vec{\nabla} \cdot \vec{m})$. En plus, nous sommes intéressés par la nucléation des domaines en bandes, en partant de la saturation planaire après l'application d'un champ externe large. Dans ces conditions les composantes de l'aimantation transversales au champ appliqué seront très petites : $m_x, m_y \ll 1$ et $m_z \cong 1$ (l'approximation des faibles perturbations). Ces conditions font possible la linéarisation de l'équation du couple en conduisant vers une distribution d'aimantation qui varie de façon périodique (sinusoïdale) selon la direction OX [Miltat 94].

Dans la limite de matériaux ayant $Q \ll 1$, Hubert [Hubert 98 page 298] propose une solution approximative avec une structure de fermeture de flux parfaite qui nous mène vers une épaisseur critique t_{cr} et une largeur de domaines L_{cr} de :

$$t_{cr} = 2\pi \sqrt{\frac{\frac{A_{ex}}{K_u}}{1 - \frac{H_{app} \mu_0 M_s}{2K_u}}}, \quad L_{cr} = t \sqrt{\frac{1 - \frac{H_{app} \mu_0 M_s}{2K_u}}{1 + \frac{H_{app} \mu_0 M_s}{2K_u}}}.$$

Dans le cas des couches de cobalt $K_u = 600 \times 10^3 J/m^3$, $A_{ex} = 3 \times 10^{-11} J/m$ en champ nul ($H_{app} \cong 0$) le modèle prédit que pour des épaisseurs plus large que $t_{cr} \cong 44 nm$ l'état en domaines en bandes est favorable.

B-V: Oscillations couplées dans des couches à anisotropie perpendiculaire $Q \gg 1$

Le modèle développé par Ramesh [Ramesh JMMM 88] nous permet déduire la loi de dispersion dans des matériaux caractérisés par un facteur de qualité très large $Q \gg 1$. La structure magnétique dans la limite $Q \gg 1$ se réduit aux domaines *up* et *down* séparés par des parois de Bloch presque unidimensionnelles (figure B-4).

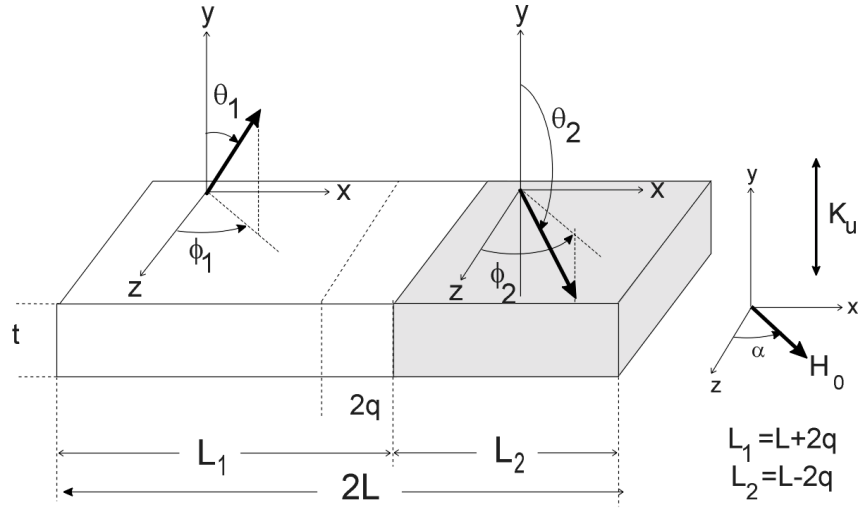


Figure B-4: Structure en domaines en bandes pour des matériaux $Q \gg 1$.

L'énergie libre du système est donnée par les contributions suivantes:

- *contribution Zeeman :*

$$\frac{E_{zeem}}{(L_1 + L_2)t} = -\mu_0 H_0 M_s (\cos \alpha \sin \theta_1 \cos \phi_1 + \sin \alpha \sin \theta_1 \cos \phi_1) \frac{L_1}{L_1 + L_2} -$$

$$-\mu_0 H_0 M_s (\cos \alpha \sin \theta_2 \cos \phi_2 + \sin \alpha \sin \theta_2 \cos \phi_2) \frac{L_2}{L_1 + L_2}$$

- *Contribution anisotropie magnétocristalline (uniaxiale selon OY) :*

$$\frac{E_{anis}}{(L_1 + L_2)t} = K_u \sin^2 \theta_1 \frac{L_1}{L_1 + L_2} + K_u \sin^2 \theta_2 \frac{L_2}{L_1 + L_2}$$

- *contribution magnétostatique des domaines:* à partir de la relation (B-1) l'énergie magnétostatique s'exprime comme :

$$\frac{E_{dem}}{(L_1 + L_2)t} = \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 \left[\frac{\cos \theta_1 L_1 + \cos \theta_2 L_2}{L_1 + L_2} \right]^2 +$$

$$+ \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 \frac{(\cos \theta_1 - \cos \theta_2)^2}{4} N_{yy}(L_1, L_2, t) +$$

$$+ \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 \frac{(\sin \theta_1 \sin \phi_1 - \sin \theta_2 \sin \phi_2)^2}{4} [1 - N_{yy}(L_1, L_2, t)]$$

$$\text{où } N_{yy}(L_1, L_2, t) = \frac{8}{\pi^3} \left(\frac{L_1 + L_2}{t} \right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} \sin^2 \left[\frac{\pi n L_1}{L_1 + L_2} \right] \frac{\sinh \left(\frac{\pi n t \sqrt{\mu}}{L_1 + L_2} \right)}{\sinh \left(\frac{\pi n t \sqrt{\mu}}{L_1 + L_2} \right) + \sqrt{\mu} \cosh \left(\frac{\pi n t \sqrt{\mu}}{L_1 + L_2} \right)}$$

est le facteur démagnétisant selon la direction hors du plan et $\mu = 1 + \frac{\mu_0 M_s^2}{2K_u}$ représente *rotational permeability*.

- *contribution de la paroi* qui inclut une contribution statique et une contribution dynamique

$$\frac{E_{par}}{(L_1 + L_2)t} = \frac{E_{par}^0}{(L_1 + L_2)t} + \frac{E_{par}^d}{(L_1 + L_2)t}.$$

En faisant le changement des variables: $L_1 = L + 2q$, $L_2 = L - 2q$ où q représente le déplacement de la paroi par rapport à sa position d'équilibre la densité d'énergie totale du système

$$\varepsilon_{tot} = \frac{E_{tot}}{2Lt} = \frac{E_{zeem} + E_{anis} + E_{dem} + E_{par}}{2Lt}$$

dépende des variables $X_1 = \theta_1$, $X_2 = \phi_1$, $X_3 = \theta_2$, $X_4 = \phi_2$, $X_5 = q$, $X_6 = \xi$. La variable ξ est le conjugué canonique de la variable q intervenant dans l'énergie dynamique de la paroi

$$\frac{E_{par}^d}{2Lt} = \frac{1}{2mL} \left[\frac{M_s (\cos \theta_1 - \cos \theta_2)}{\gamma_0} \right]^2 \xi^2$$

où m est la masse effective de la paroi.

Puisque la structure est périodique, l'état d'équilibre statique doit satisfaire en même temps les conditions:

$$\frac{\partial \varepsilon_{tot}}{\partial X_i} = 0, i = 1, \dots, 6 \quad \text{et} \quad \frac{\partial \varepsilon_{tot}}{\partial L} = 0.$$

A l'équilibre $q = 0$, $\xi = 0$, $\theta_2 = \pi - \theta_1$, $\phi_1 = \phi_2$ l'orientation de l'aimantation des domaines vérifie:

$$\sin \theta_1 = \frac{H_0}{\frac{2K_u}{\mu_0 M_s} - N_{yy} M_s}, \quad \phi_1 = \alpha.$$

et l'énergie statique de la paroi devient :

$$E_{par}^0 = \frac{\sigma_0}{2L} \int_{\theta_1}^{\pi - \theta_1} \left[(\sin \Theta - \sin \theta_1)^2 + 2 \left(\frac{\mu_0 N_{yy} M_s}{2K_u} \right) \sin \theta_1 (\sin \Theta - \sin \theta_1) \right]^{1/2} d\Theta.$$

Pour différentes valeurs du champ appliqué $\vec{H}_0$ la largeur des domaines à l'équilibre est obtenue numériquement à partir de l'équation :

$$\frac{\partial}{\partial L} \left(\varepsilon_{par}^0 + \frac{1}{2} \mu_0 N_{yy} (L, q=0, t) (M_s \cos \theta_1)^2 \right) = 0.$$

Le mouvement dynamique de l'aimantation des domaines est décrit par l'équation LLG :

$$\begin{cases} \frac{\partial \theta_i}{\partial t} = -\frac{\gamma_0}{M_s} \frac{1}{\sin \theta_i} \frac{\partial \varepsilon_{tot}}{\partial \phi_i} \\ \frac{\partial \phi_i}{\partial t} = \frac{\gamma_0}{M_s} \frac{1}{\sin \theta_i} \frac{\partial \varepsilon_{tot}}{\partial \theta_i} \end{cases}, i=1,2$$

tandis que le mouvement des parois est donné par les équations :

$$\begin{cases} \frac{\partial q}{\partial t} = \frac{\gamma_0 L}{2M_s (\cos \theta_1 - \cos \theta_2)} \frac{\delta \varepsilon_{tot}}{\delta q} \\ \frac{\partial \xi}{\partial t} = -\frac{\gamma_0 L}{2M_s (\cos \theta_1 - \cos \theta_2)} \frac{\delta \varepsilon_{tot}}{\delta \xi} \end{cases}.$$

En supposant une dépendance oscillatoire en temps $X_i - X_{i,eq} = \Delta X_i e^{i\omega t}$, $i=1..6$ le système général à résoudre est:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} - i\omega a & \varepsilon_{13} & \varepsilon_{14} & \varepsilon_{15} & \varepsilon_{16} \\ \varepsilon_{21} + i\omega a & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} & \varepsilon_{24} & \varepsilon_{25} & \varepsilon_{26} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} & \varepsilon_{34} - i\omega a & \varepsilon_{35} & \varepsilon_{36} \\ \varepsilon_{41} & \varepsilon_{42} & \varepsilon_{43} + i\omega a & \varepsilon_{44} & \varepsilon_{45} & \varepsilon_{46} \\ \varepsilon_{51} & \varepsilon_{52} & \varepsilon_{53} & \varepsilon_{54} & \varepsilon_{55} & \varepsilon_{56} + i\omega b \\ \varepsilon_{61} & \varepsilon_{62} & \varepsilon_{63} & \varepsilon_{64} & \varepsilon_{65} - i\omega b & \varepsilon_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta X_1 \\ \Delta X_2 \\ \Delta X_3 \\ \Delta X_4 \\ \Delta X_5 \\ \Delta X_6 \end{pmatrix} = 0$$

où les notations suivantes ont été utilisées:

$$\frac{\partial \varepsilon_{tot}}{\partial X_i} (X_j, j=1,..,6) = \left. \frac{\partial \varepsilon_{tot}}{\partial X_i} \right|_{eq} + \sum_{j=1}^6 \left. \frac{\partial^2 \varepsilon_{tot}}{\partial X_j \partial X_i} \right|_{eq} (X_j - X_{j,eq}) = \sum_{j=1}^6 \left. \frac{\partial^2 \varepsilon_{tot}}{\partial X_j \partial X_i} \right|_{eq} \Delta X_j,$$

$$a = \left. \frac{M_s \sin \theta_1}{2\gamma_0} \right|_{eq}, b = \left. \frac{M_s (\cos \theta_1 - \cos \theta_2)}{\gamma_0 L} \right|_{eq}.$$

La condition d'avoir une solution non-triviale nous permet d'obtenir les modes d'oscillation propres du système ferromagnétique ω . En exploitant la symétrie et en introduisant les variables $\Delta \theta_{\pm} = \Delta \theta_1 \pm \Delta \theta_2$, $\Delta \phi_{\pm} = \Delta \phi_1 \pm \Delta \phi_2$ nous arrivons au système linéaire:

$$\begin{pmatrix} A & -ia & 0 & 2\beta & 2\lambda & 0 \\ ia & C & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B & -ia & 0 & 0 \\ 2\beta & 0 & ia & D & 0 & 0 \\ \lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{55} & ib \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -ib & \varepsilon_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \theta_+ \\ \Delta \phi_+ \\ \Delta \theta_- \\ \Delta \phi_- \\ q \\ \Delta \xi \end{pmatrix} = 0$$

où $A = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{13}$, $B = \varepsilon_{11} - \varepsilon_{13}$, $C = \varepsilon_{22} + \varepsilon_{24}$, $D = \varepsilon_{22} - \varepsilon_{24}$

$$\beta = \frac{1}{16} \mu_0 N_{xx} M_s^2 \sin(2\theta_1) \sin(2\alpha) \Big|_{eq} = \varepsilon_{12} = \varepsilon_{21} = \varepsilon_{23} = \varepsilon_{32} = -\varepsilon_{14} = -\varepsilon_{41} = -\varepsilon_{43} = -\varepsilon_{34}$$

$$\lambda = -\frac{1}{2L} \mu_0 N_{xx} M_s^2 \sin(2\theta_1) \Big|_{eq} = \varepsilon_{15} = \varepsilon_{51} = \varepsilon_{35} = \varepsilon_{53}$$

Le paramètre λ est une mesure du couplage entre la précession des domaines et le déplacement des parois.

Lorsque $\lambda = 0$ et $\alpha = 0$ les lois de dispersion du mode acoustique ω^+ et optique ω^- sont :

$$\left(\frac{\omega^+}{\gamma} \right)^2 = \left[(H_u - M_s N_{yy})^3 - H_0^2 (H_u - M_s N_{yy} - M_s N_{xx}) \right] / (H_u - M_s N_{yy})$$

$$\left(\frac{\omega^-}{\gamma} \right)^2 = (H_u - M_s N_{yy} + M_s N_{xx}) \left[(H_u - M_s N_{yy})^2 - H_0^2 \right] / (H_u - M_s N_{yy})$$

Ces expressions ont servi pour déduire les diagrammes III-23(f) des couches de Co(0001) en supposant que si $N_{xx} = 0$ il n'y a pas de couplage entre les oscillations des domaines adjacents alors que si N_{xx} augmente le couplage s'intensifie de plus en plus.

Références bibliographiques

- [Hubert 98]** A. Hubert, R. Schäfer, *Magnetic Domains*, Springer (1998).
- [Kittel PR 46]** C. Kittel, Phys. Rev. **70**, 965 (1946). *Theory of the structure of ferromagnetic domains in films and small particles*
- [Kooy PRR 60]** C. Kooy et U. Enz, Philips Res. Rep. **15**, 7 (1960). *Experimental and theoretical study of the domain configuration in thin layer of BaFe₁₂O₁₉*
- [Málek CJP 58]** Z. Málek, V. Kamberský, Czechosl. Journ. Phys. **8**, 416 (1958). *On the theory of the domain structure of thin films of magnetically uni-axial materials*
- [Miltat 94]** J. Miltat, dans Applied Magnetism, édité par R. Gerber, C. D. Wright et G. Asti, NATO ASI Series (Kluwer, Dordrecht) 221 (1994). *Domains and domains walls in soft magnetic materials mostly*
- [Muller PR 61]** M. W. Muller, Phys. Rev. **122**, 1485 (1961). *Distribution of the magnetization in a ferromagnet*
- [Ramesh JMMM 88]** M. Ramesh, P. E. Wigen, J. Magn. Magn. Mat. **74**, 123 (1988). *Ferromagnetic resonance of parallel stripe domains-domain wall system*

Distribution de l'aimantation à l'intérieur d'un vortex magnétique

Nous allons présenter brièvement quelques modèles analytiques concernant la structure interne du vortex. Les composantes de l'aimantation $\vec{m} = \vec{m}(r, \varphi, z)$ en coordonnées cylindriques sont:

$$\vec{m} = (m_r \quad m_\varphi \quad m_z).$$

Par la suite les suivantes hypothèses simplificatrices seront considérées:

1. L'aimantation est invariable selon OZ.

$$\vec{m} = \vec{m}(r, \varphi)$$

2. La composante radiale de l'aimantation s'annule toujours:

$$m_r(r, \varphi) = 0.$$

3. La symétrie cylindrique supprime la dépendance selon la variable φ .

4. L'aimantation s'exprime en fonction de l'angle $\theta = \theta(r)$ (figure C-1) ainsi:

$$\begin{cases} m_r = 0 \\ m_\varphi = \sin \theta \\ m_z = \cos \theta \end{cases}$$

5. Au centre du plot, l'aimantation est parfaitement perpendiculaire au plan du plot:

$$m_z(0) = \pm 1.$$

6. Lorsqu'on s'éloigne du centre du plot à partir d'une certaine distance r_c l'aimantation reste complètement dans le plan du plot:

$$m_z(r \rightarrow r_c) = 0.$$

Dans ces condtions la densité volumique de **l'énergie d'échange** calculée à partir de la relation: $\varepsilon_{ex} = A_{ex}(\nabla \vec{m})^2$ a la forme suivante:

$$\varepsilon_{ex} = A_{ex} \left[\frac{\sin^2 \theta}{r^2} + \left(\frac{\partial \theta}{\partial r} \right)^2 \right]$$

En supposant une anisotropie magnétocristalline uniaxiale selon l'axe du cylindre OZ, la densité **d'énergie d'anisotropie magnétocristalline** s'exprime ainsi :

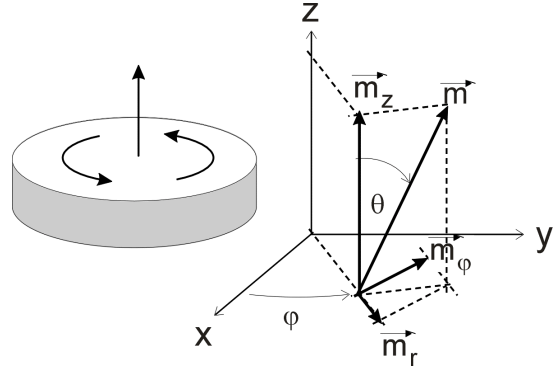


Figure C-1: Définition des coordonnées.

$$\varepsilon_{anis} = K_u (1 - m_z^2) = K_u \sin^2 \theta$$

Les charges magnétiques de volume associées à la distribution de l'aimantation définies comme : $\rho_v = -M_s (\vec{\nabla} \cdot \vec{m})$ s'annule partout dans l'espace lorsque les hypothèses (1-6) sont considérées. Les seules sources de **l'énergie magnétostatique** sont dues aux charges magnétiques de surface: $\sigma_s = (\vec{m} \cdot \vec{n})$. Il s'agit seulement des charges cumulées sur les surfaces en haut et en bas du plot car proche de la surface latérale l'aimantation tourne toujours parallèlement afin de fermer le flux magnétique.

L'énergie totale du système est donnée par l'intégration de la densité totale d'énergie sur le volume de l'échantillon:

$$E_{tot} = \int_0^h dz \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R (\varepsilon_{exch} + \varepsilon_{anis} + \varepsilon_{dem}) r dr =$$

$$= 2\pi h \int_0^R r \left\{ A_{ex} \left[\frac{\sin^2 \theta}{r^2} + \left(\frac{\partial \theta}{\partial r} \right)^2 \right] + K_u \sin^2 \theta + \varepsilon_{dem} \right\} dr$$

L'application du principe variationnel permet de déterminer la fonction $\theta = \theta(r)$ qui minimise

l'énergie totale du système tout en tenant compte des conditions de limite:
$$\begin{cases} \theta(r \rightarrow 0) = 0 \\ \theta(r \rightarrow r_c) = \frac{\pi}{2} \end{cases}$$

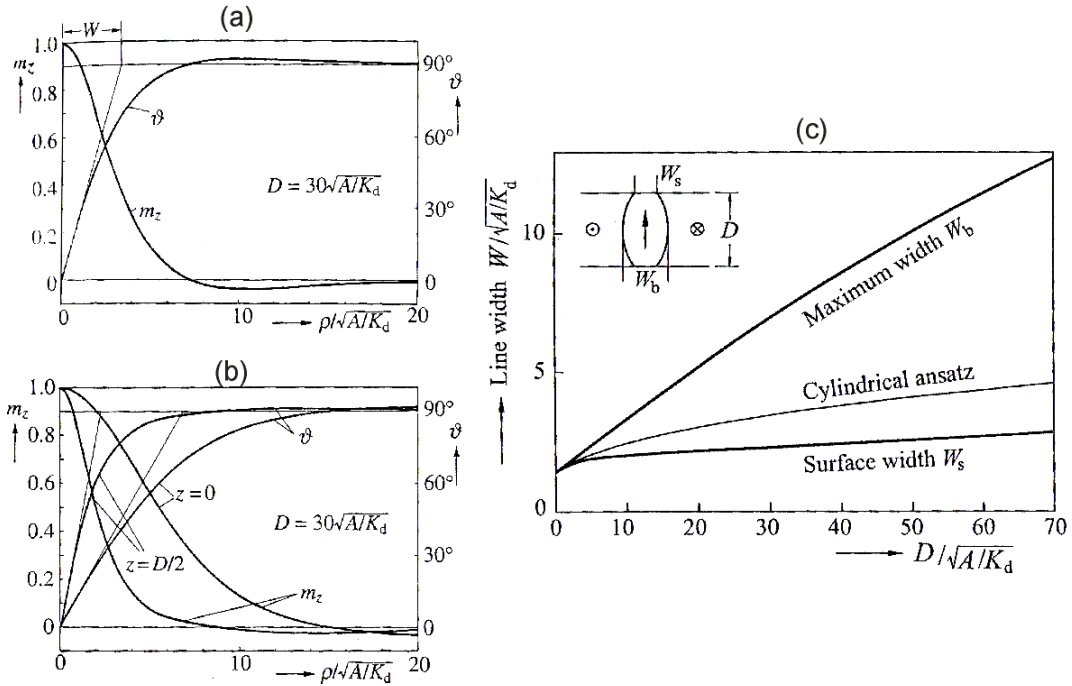


Figure C-5: Profil de l'aimantation d'une ligne Bloch circulaire dans une couche mince d'épaisseur D selon le modèle de Fredkeller (a) et celui de Hubert (b). Dépendance de la largeur de la ligne Bloch en fonction de l'épaisseur de la couche selon l'approche de Hubert [Hubert 98].

- Fredkeller et Thomas [Fredkeller PKM 65] intéressés pas les lignes Bloch circulaires dans des couches minces, partent de l'hypothèse que l'aimantation hors du plan m_z varie selon la relation:

$$m_z(r) = \exp\left(-2\frac{r^2}{b^2}\right)$$

où b est un paramètre d'optimisation. Cette hypothèse les a permit d'intégrer analytiquement l'énergie magnétostatique ε_{dem} et de déduire le profil représenté sur la figure C-2(a).

- Hubert [Hubert 98 page 265] a généralisé le calcul de Feldkeller en ajoutant une dépendance suivant l'épaisseur de la couche (du plot) qui conduit aux profils montrés sur la figure C-2(b). L'approche de Hubert prédit que la largeur du vortex (de la ligne Bloch) diminue lorsque on se déplace du milieu de la couche vers la surface (figure C-2(c)).

- Usov et al. [Usov JMMM 93] ont éliminé dans une première étape les effets magnétostatiques et de l'anisotropie magnétocristalline en considérant que c'est l'interaction d'échange qui prédomine. Dans ces conditions le problème variationnelle se réduit à:

$$\begin{cases} -\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \cos \theta \sin \theta = 0 \\ \theta(r \rightarrow 0) = 0 \\ \theta(r \rightarrow r_c) = \frac{\pi}{2} \end{cases}$$

et admet comme solution la fonction:

$$\theta(r) = \begin{cases} 2 \arctan\left(\frac{r}{r_c}\right) & 0 \leq r \leq r_c \\ \frac{\pi}{2} & r > r_c \end{cases},$$

où r_c représente le rayon du cœur du vortex. La deuxième étape à parcourir consiste à déterminer la valeur le rayon du cœur du vortex r_c à partir de la minimisation complète de l'énergie du système qui contient maintenant la contribution magnétostatique et magnétocristalline:

$$\frac{E_{tot}}{2\pi h R^2} = K_u \left[1 - \left(\frac{3}{4} - \ln(2) \right) \left(\frac{r_c}{R} \right)^2 \right] + \frac{2A_{ex}}{R^2} \left[2 - \ln\left(\frac{r_c}{R} \right) \right] + \frac{E_{mag}}{2\pi h R^2}.$$

- La solution proposée par Miltat [Miltat 94] considère que la composante d'aimantation perpendiculaire varie lentement sur une distance de l'ordre de grandeur de l'épaisseur du plot ainsi l'énergie magnétostatique est approximativement égale à :

$$\varepsilon_{dem} = \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 \cos^2 \theta .$$

Le problème variationnelle devient alors:

$$\begin{cases} -\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) + \left(\frac{1}{r^2} - \frac{1}{l_{ex}^2} \right) \cos \theta \sin \theta = 0 \\ \theta(r \rightarrow 0) = 0 \\ \theta(r \rightarrow \infty) = \frac{\pi}{2} \end{cases}$$

et la solution approximative proposée est:

$$\theta(r) \cong \arccos \left[\exp \left(-\frac{r^2}{r_c^2} \right) \right] \text{ où } r_c = \frac{\pi}{2} \frac{1}{\left. \frac{\partial \theta}{\partial r} \right|_{r=0}} \cong l_{ex} .$$

- Aharoni [Aharoni JAP 90] préoccupé par la stabilité de l'état vortex dans des particules cylindriques propose plusieurs modèles fondés sur de variations radiales de l'aimantation linaires ou paraboliques tout en satisfaisant la condition d'annulation de charges magnétiques de volume.

Références bibliographiques

- [Aharoni JAP 90]** A. Aharoni, J. Appl. Phys. 68, 2892 (1990). *Upper bound to a single-domain behavior of a ferromagnetic cylinder*
- [Hubert 98]** A. Hubert, R. Schäfer, *Magnetic Domains*, Springer (1998).
- [Fredkeller PKM 65]** E. Fredkeller, H. Thomas, Phys. Kondens. Materie **4**, 8 (1965). *Structure and energy of Bloch lines in thin ferromagnetic films*
- [Miltat 94]** J. Miltat, dans Applied Magnetism, édité par R. Gerber, C. D. Wright et G. Asti, NATO ASI Series (Kluwer, Dordrecht), 221 (1994). *Domains and domains walls in soft magnetic materials mostly*
- [Usov JMMM 93]** A. Usov, S. E. Peschany, J. Magn. Magn. Mater. 118, 290 (1993). *Magnetization curling in a fine cylindrical particle*

Liste des publications

1. I. L. Prejbeanu, L. D. Buda, U. Ebels, K. Ounadjela, Appl. Phys. Lett. **77**, 3066 (2000). *Observation of asymmetric Bloch walls in epitaxial Co films with strong in-plane uniaxial anisotropy*
2. L. D. Buda, I. L. Prejbeanu, M. Demand, U. Ebels, K. Ounadjela, IEEE Trans. Magn. **37**(4), 2061-2063 (2001). *Vortex states stability in circular Co (0001) dots*
3. I. L. Prejbeanu, L. D. Buda, M. Viret, U. Ebels, K. Ounadjela, C. Fermon, IEEE Trans. Magn. **37**(4), 2108-2110 (2001). *Domains structures in epitaxial (10 $\bar{1}$ 0) Co wires*
4. U. Ebels, L. D. Buda, K. Ounadjela, P. E. Wigen, Phys. Rev. B **63**, 174437/1-11 (2001). *Ferromagnetic resonance excitation of two-dimensional wall structures in magnetic stripes domains*
5. U. Ebels, L. D. Buda, P. Wigen, K. Ounadjela, dans *Spin Dynamics in Confined Magnetic Structures* édité par B. Hillebrands et K. Ounadjela, Springer (2001). *The excitation spectrum of stripes domains*
6. S. P. Li, D. Peyrade, M. Natali, Y. Chen, U. Ebels, L. D. Buda, K. Ounadjela, Phys. Rev. Lett. **86**, 1102 (2001). *Flux closure structures in cobalt rings*
7. C. Tiusan, T. Dimopoulos, L. D. Buda, V. Da Costa, K. Ounadjela, J. Appl. Phys. **89**, 6811 (2001). *Controlling the magnetostatic interactions in artificial ferrimagnet based magnetic tunnel junctions*
8. K. Ounadjela, I. L. Prejbeanu, L. D. Buda, U. Ebels, M. Hehn, dans *Spin electronics*, édité par M. Thornton et M. Ziese, Springer (2001). *Observation of micromagnetic configurations in mesoscopic magnetic elements*
9. I. L. Prejbeanu, M. Viret, L. D. Buda, U. Ebels, K. Ounadjela, J. Magn. Magn. Mat. **240**, 27 (2002). *Use of magnetotransport measurements as a tool to probe the micromagnetic configuration in epitaxial Co wires*
10. M. Natali, I. L. Prejbeanu, A. Lebib, L. D. Buda, K. Ounadjela, Y. Chen, en cours de publication dans Phys. Rev. Lett., *Correlated magnetic vortex chains in mesoscopic cobalt dot arrays*
11. L. D. Buda, I. L. Prejbeanu, U. Ebels, K. Ounadjela, accepté pour publication dans Comp. Mat. Sci., *3D micromagnetic simulations in circular Co dots*
12. L. D. Buda, I. L. Prejbeanu, U. Ebels, K. Ounadjela, accepté pour publication dans J. Magn. Magn. Mat., *Investigation of 3D micromagnetic configurations in circular nanoelements*
13. I. L. Prejbeanu, M. Natali, L. D. Buda, A. Lebib, Y. Chen, K. Ounadjela, accepté pour publication dans J. Appl. Phys., *In-plane reversal mechanisms in circular Co dots*