HAL
open science

Modélisation par éléments finis des dispositifs pour la spintronique : couplage auto-cohérent des équations du micromagnétisme et du transport dépendant du spin

Magali Sturma

To cite this version:

Magali Sturma. Modélisation par éléments finis des dispositifs pour la spintronique : couplage auto-cohérent des équations du micromagnétisme et du transport dépendant du spin. Matière Condensée [cond-mat]. Université Grenoble Alpes, 2015. Français. NNT : 2015GREAY032 . tel-01250954

HAL Id: tel-01250954

https://theses.hal.science/tel-01250954v1

Submitted on 5 Jan 2016

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.

UNIVERSITÉ GRENOBLE ALPES

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ GRENOBLE ALPES

Spécialité : **Physique / Nanophysique**

Arrêté ministériel : 7 août 2006

Présentée par

Magali Sturma

Thèse codirigée par **Jean-Christophe Toussaint** et **Daria Gusakova**

préparée au sein du **Laboratoire SPINTEC et de l'Institut Néel** dans **l'École Doctorale de Physique**

Modélisation par éléments finis des dispositifs pour la spintronique : couplage auto-cohérent des équations du micromagnétisme et du transport dépendant du spin

Thèse soutenue publiquement le **9 octobre 2015**, devant le jury composé de :

Mr Olivier FRUCHART Directeur de recherche CNRS, Institut Néel, Grenoble.	Président
Mr André THIAVILLE Directeur de recherche CNRS, Université Paris-Sud, Paris.	Rapporteur
Mr Stéphane MANGIN Professeur des universités, Institut Jean Lamour, Nancy.	Rapporteur
Mr François ALOUGES Professeur des universités, CMAP, Palaiseau.	Examinateur
Mr Yves HENRY Chargé de recherche CNRS, IPCMS, Strasbourg.	Examinateur
Mr Jean-Christophe TOUSSAINT Professeur des universités, INP Grenoble, Grenoble.	Directeur
Mme Daria GUSAKOVA Chargée de recherche CNRS, SPINTEC, Grenoble.	Co-directrice

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier mes encadrants Daria Gusakova et Jean-Christophe Toussaint qui m'ont soutenue et guidée pendant ces trois années de thèse. Merci à Daria pour sa grande compréhension et pour son encadrement quotidien qui m'ont permis de réaliser ses travaux ainsi que pour la confiance qu'elle m'a accordée en fin de thèse. Merci à JC de m'avoir fait découvrir son bébé numérique d'y mettre mon grain de sel. Je ressors grandie et épanouie de cette expérience à leurs côtés. Je les remercie pour les nombreux moments de complicité que nous avons passés, et leur souhaite un très bel avenir personnel et professionnel … feeLLGood forever.

Je tiens également à remercier Olivier Fruchart, Alexis Wartelle et Christophe Thirion ainsi que les membres de l'équipe MNM de l'Institut Néel pour le soutien et les précieux conseils qu'ils m'ont prodigués durant la thèse et la préparation de la soutenance.

J'adresse également mes remerciement aux membres de mon jury de thèse pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail et pour leurs remarques constructives.

Je voudrais également remercier Bertrand Raquet de l'INSA Toulouse et Evelyne Gil de l'Institut Pascal de m'avoir fait confiance et soutenue ainsi que d'avoir cru en moi dès le début de mes études malgré ma situation difficile. Merci à ceux de m'avoir donné une chance et de l'espoir.

Durant ces trois années, le laboratoire SPINTEC fut mon bureau, ma maison, mon cocon. J'ai eu la chance d'y faire de très belles rencontres. Un grand merci à ce laboratoire qui m'a accueillie et fait confiance. L'ambiance, que j'y ai trouvée et que je quitte le cœur lourd, fut extraordinaire. Merci à mes collègues permanents Stéphane, Vincent, Claire, Hélène, Olivier, Gilles et Mihai, Mair, Gregory, Guillaume, Ursula, Bernard D., Jean-Pierre, Lucian, Liliana, Bernard R., Isabelle, Philipe, Ricardo. Un grand merci à Catherine, Rachel et Sandra dont la gentillesse n'a d'égale que leur compétence et leur professionnalisme. Un merci tout particulier aux non permanents avec qui j'ai passé de merveilleux moments: Alexou, Paulo, Eldar, Marine, Ali, Cécile Alex, Jérôme, Sapheer, Antoine, Kamil, Matthieu, Sylvain, les 2 Thomas.

Merci également à Cyril qui m'a rejointe pour son stage de M1. Son investissement et la qualité de son travail m'a permis de reprendre confiance. Sa sympathie et notre complicité firent de ce stage un moment particulièrement agréable de ma thèse.

Merci aussi à Hongxhin, Tan, Selma, Lamprini, mes co-bureaux avec qui j'ai eu des fous rires mémorables. Merci à Guillermo d'avoir écouté au quotidien mes peines, mes joies et mes conseils de vie.

La thèse m'a permis également de rencontrer mes amis d'aujourd'hui et de demain : Florian et Etienne, Victor et Simon, Stéphane, Benjamin, Kim et William, Robin et Julie, Robi et Marina ainsi que mes amis de la danse Jon et Fanny, Xavier et Léa, Erwan

Bien évidemment, je remercie de fond du cœur le noyau inoubliable de doctorants avec qui j'ai passé mes midis, mes soirées, et mes week-ends parfois. D'abord collègues, nous avons passé des moments extraordinaires où se mêlaient soutien, réconfort, fous rires et délires. Pierre-Yves et son éponge à récurer, Christophe et son pull Big Lebowski, Alex Lopez et ses vidéos Blender, Alex Mouillon et son ananas, Yvan et son angoisse des magasins de fille, Lamprini, Melissa, Claire, Léa pour leur immense gentillesse et leur grand soutien ainsi que Cécile pour nos moments de confidences. Les filles vous avez été des copines de thèse d'enfer et j'espère refaire des soirées girly, délires, gossips et petits légumes.

Mes remerciements s'adressent enfin à ma famille qui m'a permis d'être celle que je suis devenue et d'être allé au bout de ce parcours académique. Un chemin qui fut long, difficile, parfois terrible mais qui constitue aujourd'hui ma force et mon histoire. Leur amour et leur soutien m'ont permis de me relever quand mes forces s'épuisaient. Les moments de bonheur, qu'ils m'ont offert, ont sans cesse illuminés mes périodes sombres.

Merci aux familles Soleilland-Magnan et Lacourie. En particulier à Pascale et Jean-François pour leur immense hospitalité et Jacques pour nos moments de partage. Un énorme big up pour l'infini soutien de mes cousines Camille et Pauline, mon cousin Nicolas, ses parents Jean-Jacques et Marie-Claude, mon tonton et parrain Christian et ma tata Fanchon (un jour tu nous as demandé de te faire des petits remerciements, ce n'est pas Paris Match, ni Bouillon de culture mais c'est déjà ça).

Pour finir, j'envoie des millions de mercis aux étoiles qui brillent chaque jour dans mon cœur pour mes grands-parents Paulette et André Laporte ainsi qu'aux étoiles vertes qui illuminent le village occitan de mes grands-parents Nicole et Pierre Sturma.

Je quitte SPINTEC le cœur lourd, mais j'embarque avec moi le meilleur pour commencer une nouvelle vie. Merci du fond du cœur à Marc Drouard mon collègue, mon ami, mon fiampé. Pendant ces trois années ses conseils, son soutien, sa patience et nos délires m'ont permis de me relever et de devenir une femme amoureuse, accomplie, et heureuse.

Merci à mes parents Chantal et Didier pour leur soutien et leur amour infinis.
Les mots ne suffisant pas, cette thèse et mon parcours académique tout entier leur sont dédiés.

Tables des matières

Introduction **3**

Chapitre I : Bases de micromagnétisme **7**
1. Description des matériaux ferromagnétiques 9
2. Formalisme du micromagnétisme 11
3. Equation de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) 17
4. Etude d'un objet micromagnétique: la paroi de domaines 18
5. Conclusion du chapitre 23

Chapitre II : Introduction du transport dépendant du spin dans l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert **25**
1. Formalisme 27
2. Modèle diffusif de *Zhang et Li* 30
3. Modèle diffusif généralisé (GDD) 35
4. Forme de *Thiaville* du couple de transfert de spin 39
5. Estimation du paramètre de non-adiabaticité d'un système 43
6. Conclusion du chapitre 47

Chapitre III : Couplage numérique auto-cohérent entre micromagnétisme et transport **49**
1. Micromagnétisme numérique 52
2. Le logiciel micromagnétique éléments finis feeLLGood 54
3. Formulation faible du couplage des équations de transport polarisé en spin et de l'équation du micromagnétisme 64
4. Limitations dues à l'introduction de termes de transport dans feeLLGood 67
5. Conclusion du chapitre 70

Chapitre IV : Parois transverses dans des rubans à section rectangulaire **71**
1. Validation du code micromagnétique 73
2. Propagation de parois transverses dans le modèle non local de *Zhang et Li* 77
3. Propagation de parois transverses dans le modèle diffusif généralisé (GDD) 85
4. Conclusion du chapitre 91

Chapitre V : Parois transverses dans les fils à section circulaire **93**
1. Validation de feeLLGood étendu pour l'étude d'une paroi transverse dans un fil à section circulaire 97
2. Distribution d'aimantation statique dans la constriction d'un fil 98
3. Impact d'une constriction sur la dynamique d'une paroi transverse soumise à un courant polarisé en spin dans un fil 102
4. Non-adiabaticité géométrique 110
5. Conclusion du chapitre 112

Conclusion **113**

Formulaire **117**

Références **119**

Introduction

Les composants électroniques conventionnels sont fondés sur l'utilisation de matériaux conducteurs et semi-conducteurs dans lesquels l'information est stockée sous forme de charges électroniques et transmise par un courant électrique. L'électronique de spin ou spintronique utilise les propriétés magnétiques de l'électron pour transférer et stocker l'information. Cette discipline a émergé avec le constat que la résistance perçue par un courant électrique dépend de la direction de l'aimantation des couches qu'il traverse. La découverte de ce phénomène appelé magnétorésistance géante par *Fert et al.* et *Grünberg et al.* fut récompensée par le prix Nobel de physique en 2007 (Baibish, et al., 1988; Binasch, et al., 1989). L'utilisation de cette découverte dans les nouvelles générations de têtes de lecture de disques durs a permis d'augmenter nettement la capacité de stockage dès les années 90. Parallèlement, *L. Berger* (Berger, 1996) et *J.C. Slonczewski* (Slonczewski, 1996) prédirent que l'aimantation d'une couche ferromagnétique pouvait être contrôlée par un courant électrique via un transfert de spin entre le courant et la couche aimantée. La découverte de ce phénomène de transfert de spin permit d'agrandir le champ d'application de la spintronique aux mémoires à accès aléatoire (Magnetic-RAMs), aux oscillateurs micro-ondes (Spin-Torque Oscillators), aux composants logiques ou encore aux mémoires à haute densité comme les « Racetrack Memories » basées sur la propagation de parois de domaines (Parkin, 2004; Parkin, et al., 2008; Brataas, et al., 2012). Dans ce type de mémoires, l'information est stockée dans des fils nanométriques tridimensionnels sous forme de séquences de parois de domaines présentant une aimantation alternée. Une fois l'information écrite, un courant polarisé en spin déplace la séquence jusqu'à une tête de lecture fixe. L'intégration des mémoires usuelles est limitée à des

structures bidimensionnelles, ces mémoires étendraient le stockage de l'information à la troisième dimension.

Les techniques expérimentales actuelles permettent de créer des réseaux tridimensionnels de fils magnétiques nanométriques auto-organisés à diamètre modulable (Pitzschel, et al., 2011; Liew, et al., 2011; Da Col, et al., 2012; Bonilla, et al., 2013; Minguez-Bacho, et al., 2014). D'autre part, les expérimentateurs sont également capables de faire propager des parois de domaines en appliquant un courant polarisé en spin dans diverses structures ferromagnétiques comme les fils à section rectangulaire ou circulaire (Yamanouchi, et al., 2004; Klaui, et al., 2005; Yamaguchi, et al., 2006; Hayashi, et al., 2006; Beach, et al., 2006; Burrowes, et al., 2008; Parkin, et al., 2008; Cucchiara, et al., 2012; Ryu, et al., 2012). Durant le déplacement de la paroi, sa position est contrôlée par des sites de piégeage. La paroi se stabilisant énergétiquement dans les zones resserrées de la structure pour diminuer son énergie magnétostatique, une technique de piégeage consiste donc à ancrer la paroi au sein d'une constriction géométrique d'un ruban (Kläui, et al., 2003; Faulkner, et al., 2004; Bedau, et al., 2008; Martinez, et al., 2009; Bogart, et al., 2009; Kunz, et al., 2010; Lepadatu, et al., 2010; Noh, et al., 2012; Yuan, et al., 2014) ou d'un fil magnétique (Cayssol, et al., 2004; Ivanov, et al., 2011). Récemment, *Chandra et al*. ont montré qu'une zone dilatée d'un fil peut agir comme un site faible de piégeage (Chandra Sekhar, et al., 2014). En outre, certaines équipes proposent de piéger la paroi au niveau de l'interface entre un tube et un fil magnétiques (Salazar-Aravenaa, et al., 2013; Espejo, et al., 2015; Neumann, et al., 2015). De leur côté, *Hiramatsu et al*. proposent d'utiliser des ilots de permalloy dans des fils de Co/Ni comme sites artificiels de piégeage (Hiramatsu, et al., 2013). Enfin, une méthode de piégeage de paroi prometteuse est le contrôle local de l'anisotropie (Franchin, et al., 2011; Gerhardt, et al., 2014).

Le développement des dispositifs basés sur la propagation de paroi de domaines nécessite un soutien de modélisation important afin d'analyser les résultats expérimentaux et de prédire de nouvelles configurations fonctionnelles. L'expérience antérieure de notre équipe dans ce domaine a permis de mettre en œuvre un code numérique micromagnétique permettant d'intégrer l'équation Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) (Landau, et al., 1935) qui décrit la dynamique de l'aimantation dans une approche éléments finis (Szambolics1, 2008; Kritsikis, 2008; Kritsikis, et al., 2014). Ce code appelé feeLLGood repose sur un schéma numérique robuste et convergent (Alouges, et al., 2012; Alouges, et al., 2014). Son approche éléments finis offre la possibilité de modéliser des structures 3D présentant des géométries complexes. Mon projet de thèse a consisté à étendre le code de base en introduisant la physique du transport électronique dépendant du spin et à l'appliquer à l'étude de la propagation de parois de domaines soumises à un courant polarisé en spin dans des rubans et des fils ferromagnétiques (Sturma, et al., 2015).

Quand un courant polarisé en spin est appliqué à une couche aimantée, un transfert de spin apparaît et modifie à la fois la distribution d'aimantation et la distribution de courant. C'est pourquoi ce phénomène implique deux modèles physiques distincts couplés par le terme de transfert de spin : le micromagnétisme qui décrit la dynamique de l'aimantation et le transport dépendant du spin qui décrit la distribution des courants de charge et de spin. Dans le cas d'une paroi de domaines présentant un faible gradient d'aimantation, un modèle local permet d'obtenir une expression étendue de l'équation LLG décrivant la dynamique de l'aimantation soumise à un courant polarisé en spin (Thiaville, et al., 2005). Ce modèle local de transport a permis de mener de nombreuses études sur la propagation de parois de domaines dans les rubans et les fils (Thiaville, et al., 2006; Mougin, et al., 2007; Yan, et al., 2010; Yan, et al., 2011; Jang, et al., 2012; Chandra Sekhar, et al., 2014). Cependant, son application n'est plus justifiée dans le cas de forts gradients d'aimantation

pour lesquels le phénomène non local de diffusion de spin doit être pris en compte (Manchon, et al., 2011; Claudio-Gonzalez, et al., 2012; Lee, et al., 2013; Akosa, et al., 2015). De plus, certains dispositifs fonctionnels peuvent présenter des géométries complexes qui engendrent de forts gradients d'aimantation et de courant renforçant la non-localité des effets de transport (Strelkov, et al., 2010; Strelkov, et al., 2011). La simulation de telles structures requiert donc un couplage numérique auto-cohérent des équations du micromagnétisme et du transport dépendant du spin.

Le couplage des équations de transport diffusif et de l'équation LLG dans une approche différences finies permit à *Claudio-Gonzalez et al.* de mettre en évidence des différences de vitesses de propagation de parois larges dans des rubans par rapport au modèle local (Claudio-Gonzalez, et al., 2012). En outre, le couplage proposé par *Lee et al*. impliquant un modèle de transport balistique montre que l'effet de la diffusion de spin d'une paroi quasi-unidimensionnelle augmente avec le gradient d'aimantation (Lee, et al., 2013).

Dans ce contexte, l'objectif principal de ma thèse était de coupler numériquement de façon auto-cohérente les équations du micromagnétisme et du transport dépendant du spin dans une approche éléments finis pour décrire simultanément l'évolution du courant polarisé en spin et la distribution de l'aimantation dans des structures complexes. Pour ce faire, je me suis concentrée sur deux modèles de transport : le modèle diffusif de *Zhang et Li* (Zhang, et al., 2004) bien adapté à l'étude de parois de domaines soumises à un courant polarisé en spin, et le modèle diffusif généralisé plus complet proposé par *Petitjean et al.* (GDD) (Petitjean, et al., 2012). Ce dernier complète le modèle de *Zhang et Li* en introduisant des termes supplémentaires et une nouvelle longueur caractéristique afin de prendre en compte les effets balistiques d'absorption de spin transverse agissant sur la dynamique de l'aimantation. Au cours de ma thèse, j'ai pu constater que l'introduction des équations de ces modèles au sein d'un code micromagnétique n'est pas triviale d'un point de vue numérique. En effet, ce type de développement peut perturber le schéma numérique micromagnétique et les conditions d'application doivent être étudiées.

Ces deux versions couplées du code m'ont permis de mettre en évidence la non-localité des effets du transport dans des structures présentant de forts gradients d'aimantation ou de courant à travers deux études distinctes. Tout d'abord, j'ai étudié l'impact des effets de la diffusion de spin prise en compte dans les modèles non locaux de *Zhang et Li* et *GDD*, et celui de l'absorption de spin transverse propre au modèle GDD sur la dynamique de l'aimantation à travers l'étude de la non-adiabaticité du système. Puis, dans le cadre des recherches expérimentales sur la propagation de parois de domaines dans les fils et pour tirer profit de l'approche éléments finis de feeLLGood, je me suis intéressée à l'impact d'une géométrie confinée sur la dynamique de spin et de l'aimantation dans un fil à section circulaire.

Ce manuscrit est divisé en cinq chapitres :

- l**e premier chapitre** présente les bases théoriques du micromagnétisme. Les hypothèses d'utilisation de ce modèle, les énergies magnétiques mises en jeu ainsi que les conditions d'équilibre sont tout d'abord évoquées. Puis, l'équation fondamentale de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG), qui décrit la dynamique de l'aimantation des objets micromagnétiques, est présentée. Cette équation est ensuite appliquée pour décrire le comportement statique et dynamique des parois de domaines dans les rubans et les fils ferromagnétiques. Enfin, une attention particulière est portée à la définition de largeurs de parois tridimensionnelles utilisées dans les études numériques de cette thèse.

- **le second chapitre** expose les modèles de transport dépendant du spin que nous avons considérés: le modèle diffusif de *Zhang et Li* (Zhang, et al., 2004), le modèle diffusif généralisé (GDD) (Petitjean, et al., 2012) et le modèle local de Thiaville (Thiaville, et al., 2005). Afin d'illustrer l'impact du modèle de transport sur la dynamique de l'aimantation, le profil de la distribution du paramètre de non-adiabaticité et la vitesse de propagation d'une paroi de Bloch unidimensionnelle en fonction des longueurs caractéristiques de chacun de ces modèles sont exposés.

- **le troisième chapitre** détaille l'outil numérique micromagnétique éléments finis feeLLGood utilisé pour mener les études numériques. L'accent est mis sur le schéma numérique convergent d'ordre deux ainsi que sur les optimisations du calcul du champ démagnétisant implémentées durant cette thèse. Ce chapitre se clôt par une discussion sur les limites numériques causées par l'introduction des termes de transport et liées au choix du maillage et du pas de temps.

- **Le quatrième chapitre** met en évidence les effets de la diffusion de spin et d'absorption de spin transverse sur la dynamique de l'aimantation dans le cadre des modèles diffusif de *Zhang et Li* et diffusif généralisé (GDD). Tout d'abord, l'étude de la non-adiabaticité dans un ruban de permalloy d'une paroi transverse présentant un fort gradient d'aimantation en fonction de la longueur de diffusion de spin et la longueur de cohérence quantique est proposée. Puis, l'impact de la non-adiabaticité est quantifié par la vitesse de déplacement de la paroi ainsi que par le courant critique de *Walker*. La comparaison de mes résultats avec d'autres études de la littérature sur les parois de domaines dans les rubans est également proposée.

- **Le cinquième chapitre** est dédié à la modélisation des distributions statique et dynamique de l'aimantation et de spins dans une géométrie confinée. L'étude de la dynamique d'une paroi transverse dans un fil et la caractérisation des différents régimes dynamiques sont proposées. Puis, les conditions de dépiégeage de la paroi et de transition entre différents régimes dynamiques en fonction de la tension appliquée et du rapport des diamètres de la constriction et du fil sont présentées. Enfin, une contribution supplémentaire à la non-adiabaticité du système liée à sa géométrie confinée est mise en évidence.

Chapitre I :

Bases de micromagnétisme

1. Description des matériaux ferromagnétiques 9

1.1. Approche de l'électromagnétisme 9
1.2. Approche quantique 10
1.3. Approche mésoscopique : le micromagnétisme 10

2. Formalisme du micromagnétisme 11

2.1. Hypothèses du micromagnétisme 11
2.2. Energies magnétiques 11
2.3. Formation de domaines magnétiques et de parois de domaines 14
2.4. Conditions de Brown et d'équilibre 15

3. Equation de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) 17

4. Etude d'un objet micromagnétique: la parois de domaines 18

4.1. Distribution d'aimantation de parois de domaines à l'équilibre 18
4.2. Dynamique d'une paroi transverse sous champ magnétique extérieur 20
4.3. Estimation de la largeur d'une paroi transverse 21
4.4. Estimations de la vitesse de propagation d'une paroi transverse 22

5. Conclusion du chapitre 23

Le micromagnétisme permet de décrire le comportement statique et dynamique des structures magnétiques de l'ordre du micromètre et du nanomètre grâce à une variable continue de l'espace : l'aimantation. Tout d'abord, les hypothèses de ce modèle, les énergies magnétiques mises en jeu et les conditions d'équilibre d'un système micromagnétique sont introduites. Ensuite, l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) qui décrit la dynamique d'un système micromagnétique est présentée. Enfin, l'étude statique et sous champ magnétique d'un objet micromagnétique est proposée. Dans cette dernière partie, les définitions des largeurs de parois utilisées pour traiter les résultats numériques des chapitres IV et V sont discutées.

1. Description des matériaux ferromagnétiques

Les matériaux ferromagnétiques possèdent la propriété de s'aimanter quand ils sont exposés à un champ magnétique et de conserver l'orientation magnétique lorsque ce champ est supprimé. La quantification de cette propriété est apparue avec la naissance de l'électromagnétisme au XIXème siècle. Mais il a fallu attendre le début du XXème et les théories quantiques pour en expliquer l'origine. Ces deux approches séparées, qui se sont succédées, ne permettaient cependant pas de décrire le comportement macroscopique des matériaux ferromagnétiques, c'est pourquoi une théorie intermédiaire a été développée : le micromagnétisme.

1.1. Approche de l'électromagnétisme

Pour décrire du point de vue macroscopique une matière aimantée, on la caractérise par une distribution locale d'aimantation **M**(**r**). La généralisation des équations de Maxwell impose l'introduction de deux champs de vecteurs : **B**, l'induction magnétique mesurée en Tesla et **H**, le champ magnétique mesuré en A/m. Ils sont reliés par la relation locale :

$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}) \tag{I.1}$$

avec μ_0 la perméabilité du vide. Pour modéliser la réponse du système au champ magnétique, on introduit des lois de comportement reliant **M** à **H**. Dans la limite des champs faibles, loin de la saturation, et suffisamment forts par rapport aux champs de dépiégeage sur des défauts, l'aimantation **M** suit une loi assez linéaire avec le champ magnétique **H** de la forme:

$$\mathbf{M} = \chi \mathbf{H} \tag{I.2}$$

avec χ la susceptibilité magnétique. L'aimantation peut être vue comme la réponse linéaire du matériau à un champ magnétique. La valeur de χ des matériaux ferromagnétiques doux est importante de l'ordre de 10^5. En revanche, la valeur de χ des matériaux diamagnétiques reste faible de l'ordre de 10^{-5} à l'exception des matériaux supraconducteurs où $\chi=-1$. L'électromagnétisme permet donc de quantifier les propriétés magnétiques des matériaux mais pas d'en expliquer l'origine (Kronmüller, et al., 2003).

1.2. Approche quantique

La physique quantique a permis de définir l'aimantation des matériaux magnétiques à partir d'une grandeur atomistique : le moment magnétique. Par analogie avec le moment magnétique classique, le moment magnétique quantique est associé à chaque particule chargée en mouvement. Le moment magnétique des atomes des métaux ferromagnétiques est lié au spin des électrons de la couche électronique *3d* incomplète, par la relation :

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_{atome} = \gamma \hat{\mathbf{S}}^d \tag{I.3}$$

avec $\gamma = -\frac{e}{m_e} = -\frac{2\mu_B}{\hbar}$ le rapport gyromagnétique de l'électron et $\mu_B = -\frac{e\hbar}{2m_e}$ le magnéton de Bohr.

L'aimantation **M** d'un matériau est alors définie comme la valeur moyenne des moments magnétiques du matériau:

$$\mathbf{M} = \gamma \left\langle \hat{\mathbf{S}}^d \right\rangle . \tag{I.4}$$

La physique quantique donne donc une nouvelle définition de l'aimantation des matériaux et permet de calculer sa valeur théorique. Cependant, elle ne permet pas d'expliquer simplement l'ordre magnétique macroscopique des matériaux ferromagnétiques. C'est pourquoi une théorie intermédiaire liant l'approche macroscopique continue de Maxwell et l'approche atomistique quantique a été développée.

1.3. Approche mésoscopique : le micromagnétisme

Le premier pas vers le développement d'une théorie mésoscopique fut la mise en évidence, en 1905, par *P. Langevin* d'un champ "moléculaire" liant les moments magnétiques microscopiques. Il expliqua ainsi la notion d'ordre magnétique. *W. Heisenberg* démontra, en 1929, l'origine quantique de ce champ (§0 de ce chapitre). *P. Weiss*, en 1907, supposa que les matériaux ferromagnétiques sont composés de domaines dans lesquelles l'aimantation est uniforme. La compréhension de ces domaines fut améliorée par l'introduction de l'anisotropie magnéto-cristalline qui tend à aligner les moments suivant des axes préférentiels du réseau cristallin (§0 de ce chapitre). En 1935, *L.D. Landau* et *E. Lifshitz* expliquèrent la formation des domaines magnétiques dans un matériau (§2.3 de ce chapitre). Suite aux progrès dans la compréhension des microstructures, *W. F. Brown* publia en 1963 un papier fondamental (Brown, 1963) dans lequel il échafauda l'approche micromagnétique moderne à travers laquelle l'aimantation est vue comme un continuum qui tend à minimiser l'énergie magnétique totale à laquelle est soumis un échantillon magnétique. Par la suite, la théorie du micromagnétisme se consolida et devint un outil efficace pour décrire les processus d'aimantation microscopiques (Kronmüller, et al., 2003).

2. Formalisme du micromagnétisme

Le micromagnétisme permet de faire le lien, pour les matériaux ferromagnétiques, entre leur description électromagnétique et quantique grâce à l'aimantation. En effet, l'aimantation est introduite comme une variable continue dans les équations de Maxwell et est définie comme la valeur moyenne locale des moments magnétiques du matériau dans la théorie quantique. En conservant ces deux caractéristiques, l'aimantation, introduite dans le micromagnétisme, permet de décrire les propriétés et le comportement magnétique d'objets dont la taille est supérieure à l'échelle atomistique mais inférieure à celle d'un domaine magnétique (§2.3 de ce chapitre). Le micromagnétisme s'intéresse, en particulier, à la distribution d'aimantation qui se développe dans les objets magnétiques micro-nanométriques en minimisant les différentes énergies magnétiques. Ce paragraphe décrit les hypothèses d'application de la théorie du micromagnétisme, les différentes énergies magnétiques et les conditions d'équilibre d'un objet magnétique.

2.1. Hypothèses du micromagnétisme

L'aimantation est une fonction continue de l'espace. Dans un domaine magnétique, l'amplitude de l'aimantation est supposée constante et égale à l'aimantation à saturation M_s. Elle s'écrit alors:

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = M_s \mathbf{m}(\mathbf{r}) \tag{I.5}$$

avec **m** un vecteur unitaire de même direction que l'aimantation. En micromagnétisme, l'aimantation s'exprime sous sa forme normalisée **m** et sa norme est constante et égale à 1, soit :

$$|\mathbf{m}| = 1 \Leftrightarrow \mathbf{m}^2 = 1 \tag{I.6}$$

ce qui implique :

$$\mathbf{m} \cdot \partial_k \mathbf{m} = 0 \tag{I.7}$$

avec $k=\{x,y,z\}$.

2.2. Energies magnétiques

Ce paragraphe décrit les principales énergies magnétiques considérées dans cette thèse. En outre, d'autres énergies magnétiques apparaissent dans certains systèmes comme celle liées aux propriétés magnéto-élastiques du système, à la prise en compte de l'effet de la température ou encore du champ Oersted créé par la circulation de charges dans un matériau conducteur (Kronmüller, et al., 2003).

Energie locale d'échange

L'énergie d'échange est l'énergie magnétique principale. D'origine quantique, elle est responsable de l'alignement parallèle des moments magnétiques dans les matériaux ferromagnétiques.
Elle se calcule à partir de l'intégrale d'échange entre les spins $\boldsymbol{\sigma}_i$ et $\boldsymbol{\sigma}_J$ situés en position r_i et r_j :

$$E_{ex} = -\sum_{<j,i>} J \boldsymbol{\sigma}_\mathbf{i}(\mathbf{r}_i) \cdot \boldsymbol{\sigma}_\mathbf{j}(\mathbf{r}_j) \tag{I.8}$$

avec J la constante de couplage d'échange entre les spins $\boldsymbol{\sigma}_i$ ($\mathbf{r}_i$) et $\boldsymbol{\sigma}_j$ ($\mathbf{r}_j$). En faisant tendre cette expression vers la limite continue et en la généralisant à un système 3D de spins disposés sur un réseau cubique, on obtient :

$$E_{ex} = \int_V A_{ex} \left(\nabla \mathbf{m}(\mathbf{r})\right)^2 dV \,. \qquad \text{(I.9)}$$

avec $A_{ex} = \frac{JS^2}{a}$ la constante d'échange, S l'amplitude du spin et a la taille de la maille du réseau. Comme le gradient d'aimantation apparaît quadratiquement dans l'expression de l'énergie d'échange, une déviation de l'aimantation à partir d'un état homogène augmente cette énergie. L'énergie d'échange assure donc l'ordre magnétique.

Energie locale magnéto-cristalline

Les propriétés magnétiques des cristaux ordonnés révèlent en générale une forte anisotropie. En effet, il est possible d'approcher leur aimantation à saturation avec un champ fort et un champ plus faible suivant l'orientation du cristal. Ceci révèle la présence d'axes de facile et difficile aimantation. Dans les matériaux de transition, les électrons responsables du magnétisme sont les électrons *3d*. Les orbitales *3d* des atomes du cristal interagissent fortement entre elles, elles sont donc liées aux axes cristallins. Via l'interaction spin-orbite[1], le moment de spin est ainsi également lié aux axes cristallins. L'énergie magnéto-cristalline oriente l'aimantation le long de certains axes cristallographiques définis. Comme elle doit être invariante suivant une rotation de 180°, son expression est une fonction paire avec le cosinus de l'aimantation et doit prendre en compte les axes de symétries du cristal. Quand l'anisotropie est uniaxiale, le matériau ne présente qu'un seul axe de facile aimantation $\mathbf{u}_k$, l'énergie d'anisotropie magnéto-cristalline s'écrit :

$$E_k = \int_V K\left[1 - \left(\mathbf{u}_k \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r})\right)^2\right] dV \qquad \text{(I.10)}$$

avec $K>0$ la constante d'anisotropie uniaxiale, si $K<0$, $\mathbf{u}_k$ devient un axe de difficile aimantation.

Energie locale de Zeeman

L'énergie associée à un champ appliqué extérieur $\mathbf{H}_{\mathbf{ext}}$ est appelée énergie de Zeeman et peut s'écrire comme la somme des énergies d'interaction des moments locaux avec le champ appliqué :

$$E_z = -\mu_0 M_s \int_V \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}_{ext} dV \,. \qquad \text{(I.11)}$$

Ainsi, si un système magnétique est soumis à un champ extérieur $\mathbf{H}_{\mathbf{ext}}$, l'aimantation $\mathbf{m}$ subit un couple qui tend à l'aligner suivant la direction du champ afin de minimiser l'énergie de Zeeman.

Energie démagnétisante

L'aimantation locale crée elle aussi un champ magnétique qui s'étend sur tout le système. Généralement, ce champ tend à s'opposer à l'aimantation, d'où son nom de démagnétisant. L'énergie démagnétisante d'un système est issue de l'énergie de Zeeman et du champ généré par le système magnétique lui-même via l'aimantation.

En l'absence de courant et de champ magnétique extérieur, le champ magnétostatique dans le milieu aimanté coïncide donc avec le champ démagnétisant. C'est un champ non local difficile à calculer. Pour le déterminer, il faut résoudre les équations de Maxwell suivantes:

[1] Interaction entre le spin et le mouvement de l'électron

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \tag{I.12}$$

$$\nabla \times \mathbf{H}_d = 0. \tag{I.13}$$

avec $\mathbf{H}_d$ et $\mathbf{B}$ liés par la relation (I.1).
A l'interface des milieux 1 et 2 (aimant/aimant ou aimant/air), les conditions de passage imposent :

$$\mathbf{n}_{12} \cdot \left[\mathbf{B}^1 - \mathbf{B}^2\right] = 0, \tag{I.14}$$

$$\mathbf{n}_{12} \times \left[\mathbf{H}_d^1 - \mathbf{H}_d^2\right] = 0. \tag{I.15}$$

On remarque que seule la composante tangentielle de $\mathbf{H}_d$ est continue. Sa composante normale subit un saut dû au changement de l'aimantation :

$$\mathbf{n}_{12} \cdot \left[\mathbf{H}_d^1 - \mathbf{H}_d^2\right] = -\mathbf{n}_{12} \cdot \left[\mathbf{M}^1 - \mathbf{M}^2\right], \tag{I.16}$$

En pratique, comme le rotationnel de $\mathbf{H}_d$ (I.13) est nul, il est judicieux d'introduire la notion de potentiel scalaire magnétique φ_m par analogie avec l'électrostatique par l'intermédiaire de la relation suivante :

$$\mathbf{H_d} = -\nabla \cdot \varphi_m. \tag{I.17}$$

Le potentiel est supposé continu et deux fois dérivable. La loi locale de conservation de l'induction du champ magnétique $\mathbf{B}$ (I.12) se transforme alors en une équation de Poisson :

$$\nabla \cdot \mathbf{H_d} = -\nabla \cdot \mathbf{M} \tag{I.18}$$

où l'on identifie $\rho_m = -\nabla \cdot \mathbf{M}$ à une densité volumique de pseudo-charges magnétiques. On a alors :

$$-\Delta\varphi_m = \rho_m. \tag{I.19}$$

Le problème est bien posé à condition de préciser les conditions aux limites.

Pour un système de taille finie, on montre que le potentiel magnétique φ_m ainsi que le champ $\mathbf{H}_d$ s'annulent à l'infini. L'introduction de φ_m permet de définir les conditions de passage dont l'une sur la conservation de la composante tangentielle devient redondante avec l'équation (I.15). Les conditions de passage entre les milieux 1 et 2 deviennent :

$$\varphi_m^1 = \varphi_m^2, \tag{I.20}$$

$$\mathbf{n}_{12} \cdot \left[\nabla\varphi^1 - \nabla\varphi^2\right] = -\sigma_m \tag{I.21}$$

où $\sigma_m = \mathbf{n}_{12} \cdot \left[\mathbf{M}^1 - \mathbf{M}^2\right]$ est une densité surfacique de pseudo-charges magnétiques.

En poursuivant l'analogie avec l'électrostatique, le potentiel φ_m est souvent déterminé en micromagnétisme en utilisant la forme intégrale suivante (Jackson, 1999) :

$$\varphi_m(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi}\int_V \frac{\rho_m(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}dV' + \frac{1}{4\pi}\oint_s \frac{\sigma_m(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}dS'. \tag{I.22}$$

Le champ démagnétisant s'écrit alors :

$$\mathbf{H}_d = \frac{1}{4\pi}\int_V \frac{\rho_m(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')dV' + \frac{1}{4\pi}\oint_s \frac{\sigma_m(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')dS'. \tag{I.23}$$

La méthode numérique de calcul du champ démagnétisant à partir de cette dernière expression est décrite au §2.3.2 du chapitre III.

Par analogie avec l'énergie de Zeeman, l'énergie démagnétisante est définie comme suit :

$$E_d = -\frac{\mu_0 M_s}{2}\int_V \mathbf{m}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{H}_d dV \ . \qquad \text{(I.24)}$$

Comme les cibles et les sources du champ démagnétisant sont des moments magnétiques, la somme doit être divisée par deux pour ne pas compter deux fois les interactions de paires.

2.3. Formation de domaines magnétiques et de parois de domaines

Dans un système magnétique macroscopique, une aimantation uniforme crée des pseudo-charges magnétiques en surface qui engendrent une forte accumulation d'énergie démagnétisante. Pour la réduire et atteindre un état d'équilibre, le système se divise en domaines magnétiques dans lesquels l'aimantation vaut sa valeur à saturation M_s qui est uniforme et constante à. Ainsi, le nombre de charges magnétiques en surface diminue, voire s'annule pour une distribution d'aimantation en boucle qui satisfait totalement la conservation du flux magnétique (Figure I.1). En l'absence de champ magnétique extérieur, il y a une répartition égale des domaines comme le montre l'observation au microscope à force magnétique (MFM) d'un échantillon magnétique de la Figure I.1(d). Ainsi, au niveau macroscopique, l'aimantation totale est nulle. Ces domaines magnétiques sont séparés par des parois de domaines au sein desquelles l'aimantation tourne progressivement d'une configuration à une autre.

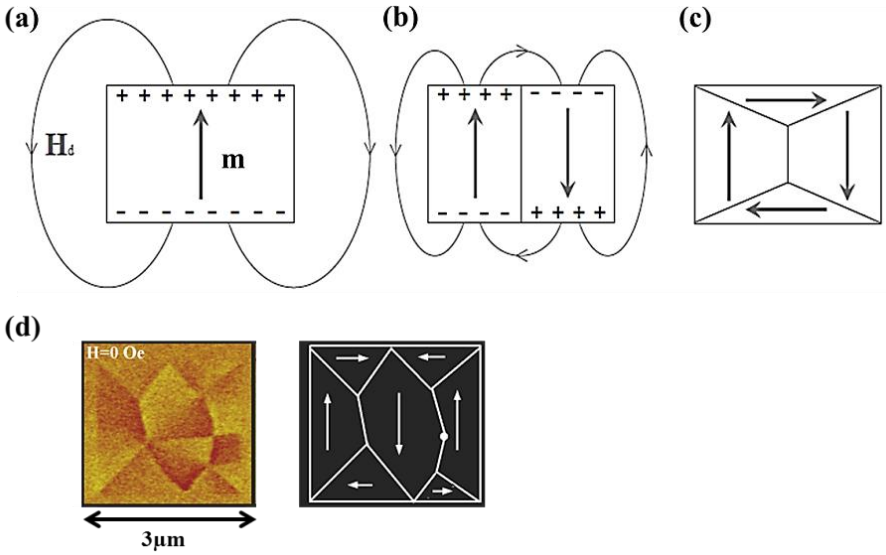

Figure I.1 : Représentation du champ démagnétisant et des charges magnétiques dans un matériau ferromagnétique créés par (a) un unique domaine magnétique, (b) deux domaines magnétiques, (c) plusieurs domaines qui permettent la fermeture du flux magnétique. (d) Observation MFM et représentation schématique des domaines magnétiques d'un échantillon carré de permalloy en l'absence de champ magnétique extérieur (Gomez, et al., 1999).

Les parois de domaines : un compromis énergétique

Bien que l'énergie démagnétisante soit l'énergie magnétique principale qui crée les domaines magnétiques, les énergies d'échange et d'anisotropie magnéto-cristalline interviennent aux niveaux des parois de domaines. Le système ne peut minimiser individuellement toutes les énergies magnétiques. En effet, l'énergie d'échange est minimale pour des moments magnétiques voisins alignés. Or, comme décrit précédemment, un tel alignement engendre la création de charges magnétiques en surface de l'objet et l'augmentation de l'énergie démagnétisante. Les effets des deux champs sont donc opposés. Le système doit donc présenter, au niveau de la paroi de

domaines, une distribution d'aimantation résultant d'un compromis entre ces différentes interactions.

La paroi de 1D de Bloch

Il est possible de minimiser analytiquement les énergies d'échange et d'anisotropie dans le cas d'une paroi 1D unidimensionnelle séparant deux domaines magnétiques infinis, afin d'obtenir la distribution d'aimantation d'équilibre appelée paroi de Bloch (Hubert, et al., 2009). Par analogie, nous définissons comme distribution de Bloch la distribution d'aimantation 1D qui se développe en présence des énergies d'échange et démagnétisante. Les composantes d'aimantation de cette distribution de Bloch sont:

$$\begin{cases} m_x = 0 \\ m_y = \sin\theta \\ m_z = -\cos\theta \end{cases} \tag{I.25}$$

avec $\theta(z) = 2\arctan\left[\exp\left(\frac{z}{\Delta_B}\right)\right]$ l'angle entre deux moments magnétiques successifs suivant l'axe z et $\Delta_B = \sqrt{\frac{2A_{ex}}{\mu_0 M_s^2}}$ la largeur de paroi de Bloch.

Cette distribution 1D, tracée en rouge sur la Figure I.4(b) et la Figure I.6(c) pour différentes valeurs de Δ_B, nous a permis de prédire qualitativement le comportement de nos parois transverses 3D sous un courant polarisé en spin dans le chapitre II. Pour obtenir les distributions d'aimantation d'équilibre de distributions plus complexes, on a recours au calcul numérique (voir chapitre III).

2.4. Conditions de Brown et d'équilibre

Dans le cas d'un système 3D, la minimisation des énergies magnétiques induit deux conditions fondamentales pour simuler correctement la dynamique de l'aimantation. Ces conditions s'obtiennent à partir de l'énergie magnétique totale suivante :

$$E_{tot} = \int \left\{ A_{ex}(\nabla \mathbf{m}(\mathbf{r}))^2 + K\left[1 - (\mathbf{u}_k \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}))^2\right] - \mu_0 M_s \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}_{ext}(\mathbf{r}) - \frac{\mu_0 M_s}{2} \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}_d(\mathbf{m}(\mathbf{r})) \right\} dV. \tag{I.26}$$

Cette expression est une intégrale fonctionnelle de l'aimantation. L'équilibre est atteint si la distribution d'aimantation satisfait les conditions suivantes :

$$\begin{cases} \delta E_{tot}(\mathbf{m}) = 0 \\ \delta^2 E_{tot}(\mathbf{m}) > 0. \end{cases} \tag{I.27}$$

Si on applique une petite variation à $\mathbf{m} \to \mathbf{m} + \delta(\mathbf{m})$, la variation de l'énergie totale vaut : $\delta E_{tot}(\mathbf{m}) \to E_{tot}(\mathbf{m} + \delta(\mathbf{m})) - E_{tot}(\mathbf{m})$. Une analyse variationnelle de chaque énergie permet d'obtenir la valeur de δE_{tot} :

$$\delta E_{tot} = \int_S 2A_{ex} \delta\mathbf{m} \cdot \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \mathbf{n}} dS - \int_V \mu_0 M_s \delta\mathbf{m} \cdot \left[\frac{2A_{ex}}{\mu_0 M_s} \Delta\mathbf{m} - \frac{2K}{\mu_0 M_s} (\mathbf{u}_k \cdot \mathbf{m}) \mathbf{u}_k - \mathbf{H}_{ext} - \mathbf{H}_d(\mathbf{m}) \right] dV. \tag{I.28}$$

Pour satisfaire la première condition du système (I.27), il faut que les deux intégrales soit nulles.

Sachant que $|\mathbf{m}| = 1$, la variation de $\mathbf{m}$ peut s'écrire en fonction d'une rotation $\delta\boldsymbol{\theta}$, soit : $\delta\mathbf{m} = \mathbf{m} \times \delta\boldsymbol{\theta}$.

L'intégrale sur la surface s'annule lorsque :

$$\int_S 2A_{ex} \delta\mathbf{m} \cdot \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \mathbf{n}} dS = \int_S 2A_{ex} (\mathbf{m} \times \delta\boldsymbol{\theta}) \cdot \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \mathbf{n}} dS = 0. \tag{I.29}$$

En utilisant la propriété de permutation circulaire du produit mixte, l'expression précédente équivaut à :

$$\int_S 2A_{ex}\left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \mathbf{n}}\cdot \mathbf{m}\right)\times \delta\mathbf{m}\, dS = 0\,, \tag{I.30}$$

ce qui implique :

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \mathbf{n}} = 0 \tag{I.31}$$

avec **n** la normal à la surface. Cette condition de bord de Neumann valide sur toute la surface est appelée condition de Brown. Dans nos simulations, cette condition fondamentale est appliquée aux surfaces des structures étudiées.

Le champ effectif agissant sur l'aimantation peut être extrait de l'équation (I.28):

$$\mathbf{H}_{eff} = -\frac{2A_{ex}}{\mu_0 M_s}\Delta\mathbf{m} + \frac{2K}{\mu_0 M_s}(\mathbf{u}_k\cdot\mathbf{m})\mathbf{u}_k + \mathbf{H}_{ext} + \mathbf{H}_d(\mathbf{m})\,. \tag{I.32}$$

De la même façon, on montre que l'intégrale sur le volume de l'expression (I.28) s'annule si localement :

$$\mathbf{m}\times\mathbf{H}_{eff} = 0. \tag{I.33}$$

C'est la condition de couple, elle indique que la distribution d'aimantation est à l'équilibre si l'aimantation et le champ effectif sont colinéaires (Brown, 1963).

Dans cette thèse, les structures étudiées sont composées d'un unique matériau, c'est pourquoi nous n'utiliserons que la condition de *Brown* comme condition de bord. Dans le cas de structures composées de plusieurs matériaux comme les composants multicouches, de nouvelles conditions d'interfaces apparaissent (Vaysset, 2012). Enfin, la minimisation des énergies magnétiques par des calculs variationels devient extrêmement complexe pour des parois réelles 3D. C'est pourquoi, on a recours à l'équation Landau-Lifshitz-Gilbert qui décrit la relaxation de l'aimantation vers l'équilibre.

3. Equation de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG)

A l'échelle de l'atome, quand l'électron est soumis à un champ magnétique extérieur, son moment de spin précesse autour de ce champ : c'est la précession de *Larmor* (voir Figure I.2). En effet, le champ magnétique **B** exerce un couple sur le moment magnétique de spin de l'électron **μ** dont l'expression est : $\mathbf{\Gamma} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}$. *L. D. Landau* et *E. Lifshitz* se basent sur la description microscopique des spins par la précession de Larmor pour établir l'équation décrivant la dynamique de l'aimantation ou équation de *Landau-Lifshitz-Gilbert* (LLG) (Landau, et al., 1935):

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = -\gamma_0 \left[\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff}\right] + \alpha \left[\mathbf{m} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t}\right] \qquad \text{(I.34)}$$

avec: **m** l'aimantation locale, $\mathbf{H_{eff}}$ la somme des champs magnétiques auxquels est soumise l'aimantation locale, α le coefficient d'amortissement, μ_0 la perméabilité du vide et $\gamma_0=-\gamma\mu_0>0$ avec γ le facteur gyromagnétique.

Le premier terme du second membre de l'équation est directement issu de la précession de Larmor : il induit un mouvement de précession perpétuelle de **m** autour de $\mathbf{H}_{\text{eff}}$. Le second terme est le terme d'amortissement phénoménologique sous la forme de *Gilbert* (Gilbert, 1955; Gilbert, 2004). Ce dernier permet de simuler la dissipation d'énergie issue de l'interaction des moments magnétiques avec leur environnement (Figure I.2).

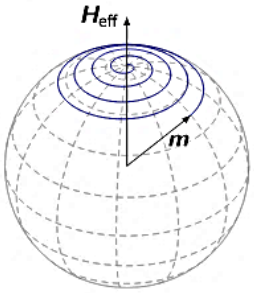

Figure I.2 : Précession et amortissement de l'aimantation suivant un champ magnétique effectif.

Grâce à l'équation LLG, il est possible de connaître l'aimantation à l'instant *t* à partir de celle à l'instant *t+dt* en suivant la routine suivante :

- faire un bilan des énergies magnétiques qui s'appliquent au système (I.26),
- en déduire l'expression du champ effectif via les expressions des champs liés aux différentes énergies magnétiques (I.32),
- injecter l'expression du champ effectif dans l'équation LLG (I.34),
- déduire la distribution d'aimantation à l'instant *t+dt* présentant une norme égale à 1.

Cette routine permet de simuler la dynamique de l'aimantation des structures magnétiques micrométriques. Deux approches sont alors possibles. Soit on ne s'intéresse qu'à l'évolution d'un unique moment magnétique soumis à un champ effectif : c'est l'approche « macrospin ». Soit on s'intéresse à l'évolution d'une distribution spatiale de moments magnétiques qui interagissent entre eux, c'est l'approche micromagnétique. Dans ce cadre, notre équipe a développé un logiciel micromagnétique dans une approche éléments finis appelé feeLLGood et présenté au chapitre III. Il a permis de réaliser toutes les études numériques de cette thèse.

4. Etude d'un objet micromagnétique: la paroi de domaines

Pour créer des parois de domaines stables, il est nécessaire que la structure magnétique ait au moins une direction d'aimantation préférentielle. En l'absence d'anisotropie magnéto-cristalline, dans le cas d'objets présentant une géométrie confinée comme les rubans et les fils, le champ démagnétisant confine l'aimantation suivant l'axe principal pour limiter la création de charges magnétiques en surface. Le premier paragraphe de cette partie présente les parois de domaines qui se développent dans des rubans et des fils magnétiques à l'équilibre. Le deuxième paragraphe décrit les mécanismes d'action qui permettent de déplacer une paroi 1D simplifiée quand un champ magnétique est appliqué. Enfin, dans le dernier paragraphe, les définitions de largeurs de parois utilisées dans cette thèse sont discutées.

4.1. Distribution d'aimantation de parois de domaines à l'équilibre

Compte tenu de l'intérêt applicatif des parois de domaines dans des structures confinées (Parkin, 2004; Parkin, et al., 2008), les distributions d'aimantation qui se développent dans un ruban ou un fil sont largement étudiées par les expérimentateurs et les numériciens. Nous allons voir que ces distributions dépendent de la géométrie de la structure (McMichael, et al., 1997; Foster, et al., 2002; Hertel, et al., 2004; Nakatani, et al., 2005; Thiaville, et al., 2006; Otalora, et al., 2013; Jamet, et al., 2015).

4.1.1. Paroi transverse dans un ruban

Dans le ruban de permalloy schématisé sur la Figure I.3, le compromis entre l'énergie d'échange et l'énergie démagnétisante engendre deux distributions d'aimantation stables: la distribution de paroi transverse et de paroi vortex.

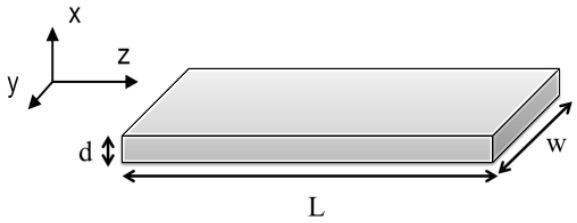

Figure I.3 : Schéma d'un ruban de longueur *L*, largeur *w* et hauteur *d*.

Une paroi transverse de type *tail-to-tail* est représentée sur la Figure I.4. La distribution d'aimantation varie dans le plan du ruban et devient triangulaire quand la largeur du ruban augmente afin de diminuer l'énergie magnétostatique. La Figure I.4(b) représente les distributions d'aimantation longitudinale et transversale de la paroi transverse. La ligne rouge est la distribution 1D de Bloch (I.25) avec $\Delta_B=15$nm. L'étude de la dynamique de cette structure, soumise à un courant polarisé en spin, est l'objet du chapitre IV.

Une paroi transverse crée des charges magnétiques sur les faces latérales du ruban. Quand l'épaisseur du ruban augmente, le nombre de ces charges augmente également. C'est pourquoi, la distribution en paroi vortex (Figure I.5) devient énergétiquement plus favorable. Pour ce type de paroi, l'aimantation tourne autour du centre de la distribution et sort du plan du ruban au centre du vortex.

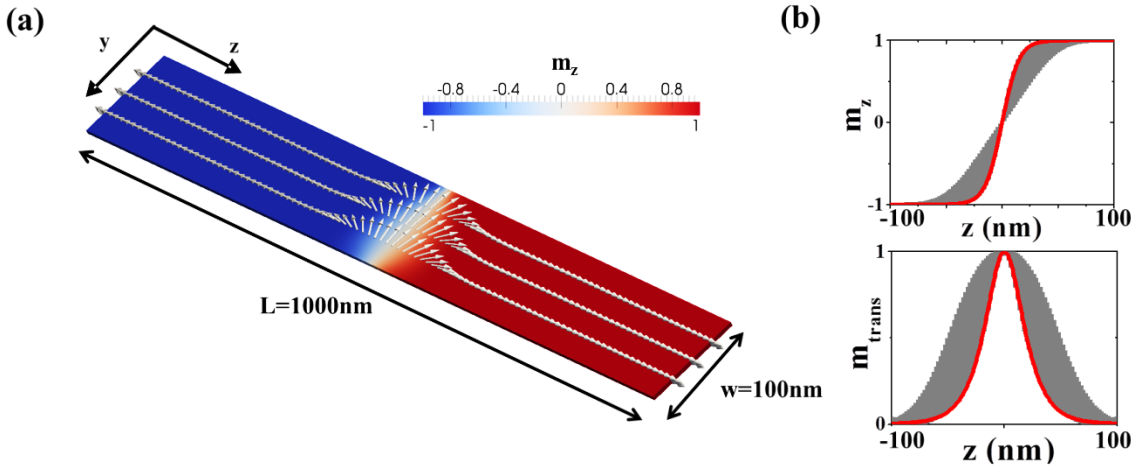

Figure I.4 : (a) Distribution spatiale (zoom) de la composante longitudinale de l'aimantation m_z d'une paroi transverse *tail-to-tail* dans un ruban de dimensions *1000x100x5*nm obtenue avec notre code micromagnétique. (b) Distributions d'aimantation longitudinale et transversale. En une coordonnée *z* donnée, la barre grise décrit la dispersion de la composante de l'aimantation donnée dans le plan *(xy)*. Les lignes rouges sont les distributions 1D de Bloch (I.25) avec $\Delta_B=15$nm.

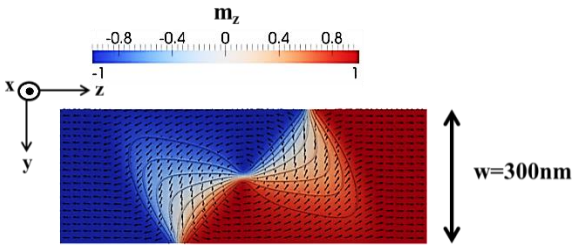

Figure I.5 : Distribution spatiale (zoom) de la composante longitudinale de l'aimantation m_z d'une paroi vortex dans un ruban de dimensions *1500x300x5*nm obtenue avec notre code micromagnétique.

4.1.2. Paroi transverse dans un fil à section circulaire

Dans le cas d'un fil à section circulaire (Figure I.6(a)), la paroi transverse est également la distribution d'équilibre développée pour des petits diamètres du fil. La Figure I.6(a) présente la distribution d'aimantation de la paroi suivant l'axe central du fil. La coupe de la distribution micromagnétique suivant l'axe *z* de la Figure I.6(b) montre que la distribution transverse est similaire à celle d'un ruban. Enfin, la Figure I.6(c) représente les distributions d'aimantation longitudinale et transverse de la paroi. Les lignes rouges sont les distributions 1D de Bloch (I.25) avec $\Delta_B=10$nm. L'étude de la dynamique de cette structure, soumise à un courant polarisé en spin, est l'objet du chapitre V.

Si le diamètre du fil est supérieur à *35*nm, le nombre de charges magnétiques en surface augmentent également et la distribution dite point de Bloch devient plus favorable (Hertel, et al., 2004; Jamet, et al., 2015).

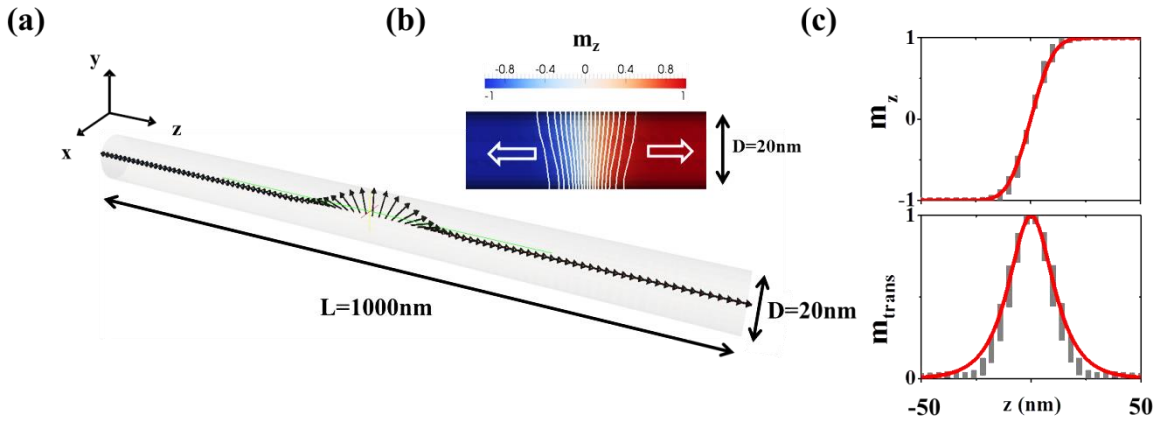

Figure I.6 : (a) Distribution 3D de l'aimantation d'une paroi transverse *tail-to-tail* dans un fil de longueur *L=1000*nm et *D=20*nm suivant l'axe central du fil. (b) Coupe de la distribution spatiale de la composante longitudinale de l'aimantation m_z (zoom) de la paroi obtenue avec notre code micromagnétique. Les traits blancs représentent les isovaleurs m_z. (c) Distributions d'aimantation longitudinale et transverse. En une coordonnée *z* donnée, la barre grise décrit la dispersion de la composante de l'aimantation donnée dans le plan *(xy)*. Les lignes rouges sont les distributions 1D de Bloch (I.25) avec $\Delta_B=10$nm.

4.2. Dynamique d'une paroi transverse sous champ magnétique extérieur

Une fois la paroi à l'équilibre dans un ruban ou un fil, il est possible de la déplacer en appliquant un champ extérieur. A partir de la paroi 1D simplifiée de la Figure I.7(a) et de l'équation LLG (I.34), nous présentons les mécanismes de propagation d'une paroi sous champ magnétique.

Lorsque le champ $\mathbf{H}_{\mathbf{ext}}$ est appliqué, l'aimantation subit le couple $\mathbf{T}_{\mathbf{ext}} = -\mu_0[\mathbf{m}\times\mathbf{H}_{\mathbf{ext}}]$ et précesse autour de ce champ (cercle rouge). L'inclinaison de l'aimantation induite par cette précession crée des charges magnétiques le long de la paroi (signes violets). L'apparition de ces charges crée un champ démagnétisant $\mathbf{H}_d$. L'aimantation subit alors deux nouveaux couples $\mathbf{T}_\alpha = \alpha\left[\frac{\partial\mathbf{m}}{\partial t}\times\mathbf{m}\right]$ et $\mathbf{T}_d = -\mu_0[\mathbf{m}\times\mathbf{H}_d]$. Le premier stoppe la précession à un angle stationnaire en s'opposant à $\mathbf{T}_{\mathbf{ext}}$ et le second induit la précession de l'aimantation autour de l'axe *x*. Tant que $\mathbf{T}_{\mathbf{ext}}$ est inférieur $\mathbf{T}_{\boldsymbol{\alpha}}$, c'est-à-dire tant que le champ appliqué est inférieur à un champ critique appelé champ critique de *Walker*, la paroi se déplace à vitesse constante, sans variation de largeur, par rotation simultanée de tous les moments magnétiques dans le sens du champ magnétique (Figure I.7 (b)). C'est le régime laminaire, le mouvement est équivalent à une simple translation du système. En revanche, si le champ appliqué est supérieur au champ critique de *Walker*, $\mathbf{T}_{\mathbf{ext}}$ est supérieur à $\mathbf{T}_{\boldsymbol{\alpha}}$, l'aimantation précesse autour de l'axe *z* : c'est le régime précessionnel de *Walker* (Schryer, et al., 1974), la vitesse de propagation varie (Jué, 2013; Da Col, 2014).

Les simulations micromagnétiques d'une paroi 3D transverse dans un ruban soumis à un champ magnétique, présentées au chapitre IV, ont confirmé l'apparition des deux régimes dynamiques.

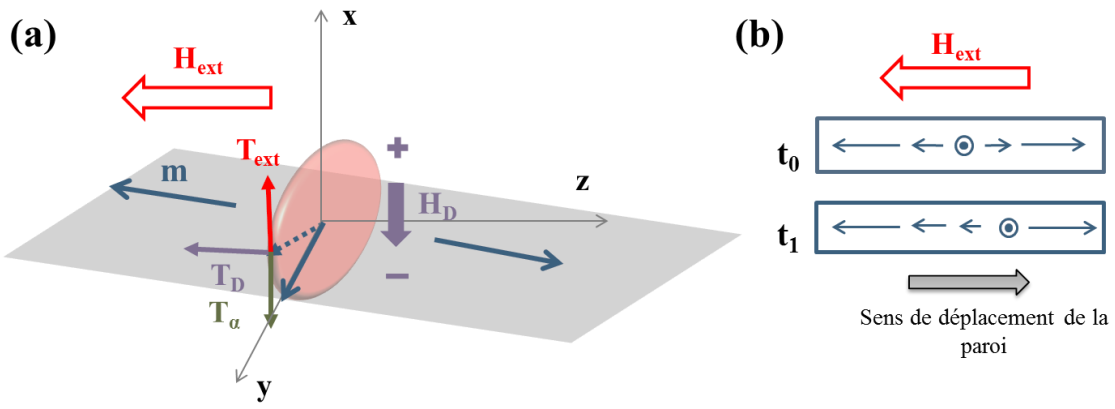

Figure I.7 : (a) Représentation des couples agissant sur une paroi transverse en présence d'un champ magnétique extérieur. (b) Représentation de la projection de la paroi suivant l'axe *x* avant (t_0) et après (t_1) l'application du champ magnétique.

4.3. Estimation de la largeur d'une paroi transverse

Nous verrons par la suite que la largeur de la paroi de domaine impacte la dynamique d'aimantation lors de l'application d'un courant polarisé en spin. C'est pourquoi, les différentes définitions de la largeur d'une paroi transverse utilisées dans cette thèse sont présentées ici. Bien qu'il existe de nombreuses définitions de la largeur de paroi (Lilley, 1950; Jakubovics, 1978), nous nous restreints aux largeurs de Bloch et de Thiele et nous avons introduit une estimation de largeur liée à l'écart type de l'aimantation.

Largeur de Bloch

Il est possible d'estimer la largeur de paroi avec la largeur de Bloch (I.25) en superposant la distribution d'aimantation réelle moyenne et une distribution de Bloch avec Δ_B adapté, comme sur la Figure I.4(b) et la Figure I.6(c) Nous verrons au chapitre IV, qu'elle donne une bonne estimation des parois dans des rubans quasi-1D.

Largeur de Thiele

Cette largeur de paroi Δ_{Thiele} est définie à partir du comportement dynamique d'une paroi quelconque, de largeur constante, se déplaçant à vitesse constante, dans une structure parfaitement symétrique (Thiele, 1973; Thiaville, et al., 2006). Dans le cas d'une distribution 3D, elle s'écrit :

$$\Delta_{\text{Thiele}} = \frac{2\text{Sect}}{\int_V \left[\left(\frac{\partial m_x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial m_y}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial m_z}{\partial z} \right)^2 \right] dxdydz} \qquad \text{(I.35)}$$

avec Sect la section du fil ou du ruban, V le volume de la structure et z la direction de propagation. Pour la distribution de Bloch (I.25), on obtient analytiquement $\Delta_{Thiele} = \Delta_B$. Cette longueur exprime le gradient d'aimantation du système et est indépendante de la géométrie de la structure. Elle sera utilisée au chapitre IV pour estimer la largeur de parois dans les rubans.

Largeur de paroi liée à l'écart type de l'aimantation longitudinale

Pour estimer la largeur d'une paroi tridimensionnelle non rigide, nous calculons l'écart type de la composante d'aimantation longitudinale selon la formule :

$$\sigma\left(m_z^2\right)=\sqrt{\frac{1}{V}\int_V\left(m_z^2-<m_z^2>\right)^2 dxdydz} \tag{I.36}$$

avec V le volume de la structure, m_z l'aimantation longitudinale locale et $<m_z>$ l'aimantation longitudinale moyenne.
Dans le cas d'une distribution 1D de Bloch, on obtient analytiquement:

$$\Delta_B=\frac{3L\sigma^2\left(m_z^2\right)}{4}. \tag{I.37}$$

Contrairement à la définition dynamique de la largeur de Thiele, cette définition de largeur de paroi ne s'appuie pas sur l'hypothèse d'une paroi rigide se propageant à vitesse constante. De plus, il est possible d'introduire une expression équivalente pour quantifier la largeur de distribution de l'accumulation de spin afin de suivre simultanément l'évolution des sous-systèmes magnétique et de spin au sein de la même géométrie (voir Figure V.9). En revanche, cette expression dépend de la géométrie de la structure, ce qui rend délicat la comparaison de largeurs de parois dans différentes géométries. Cette dernière définition sera utilisée au chapitre V pour étudier la dynamique des sous-systèmes magnétique et de spin d'une paroi de largeur variable se déplaçant au sein d'un fil de diamètre variable.

4.4. Estimations de la vitesse de propagation d'une paroi transverse

Afin de caractériser le déplacement d'une paroi de domaines, on estime la vitesse de propagation. Selon la situation, nous utiliserons l'une des définitions suivantes.

Vitesse à partir de l'aimantation moyenne

La vitesse moyenne de propagation suivant l'axe z peut être estimée à partir de la distribution d'aimantation longitudinale moyenne $<m_z>$ suivant la formule :

$$v=\frac{d<m_z>}{dt}\frac{L}{2} \quad . \tag{I.38}$$

avec L la longueur du ruban. Cette méthode d'évaluation de la vitesse est idéale pour les structures présentant une géométrie régulière comme les rubans ou les fils des chapitres IV et V.

Vitesse de front

Dans le cas d'une géométrie confinée, la définition précédente doit être corrigée. C'est pourquoi, la vitesse de propagation d'une paroi dans les fils présentant une constriction du chapitre V est évaluée à partir de la vitesse instantanée des points situés au centre de la paroi ou vitesse de front.

Vitesse de Thiele

Dans le cas particulier où la paroi est déplacée sous l'action d'un courant polarisé en spin (chapitre II), *Claudio-Gonzalez et al.* définissent la vitesse de propagation d'une paroi quelconque à partir de la distribution d'aimantation de la paroi suivant la formule suivante (Claudio-Gonzalez, et al., 2012):

$$v_{\text{Thiele}}=-\frac{\int_V \mathbf{s}\cdot\frac{\partial\mathbf{m}}{\partial z}}{M_s\alpha\tau_{sd}\int_V\left(\frac{\partial\mathbf{m}}{\partial z}\right)^2}=-\frac{\int_V\left[s_x\frac{\partial m_x}{\partial z}+s_y\frac{\partial m_y}{\partial z}+s_z\frac{\partial m_z}{\partial z}\right]dxdydz}{M_s\alpha\tau_{sd}\int_V\left[\left(\frac{\partial m_x}{\partial z}\right)^2+\left(\frac{\partial m_y}{\partial z}\right)^2+\left(\frac{\partial m_z}{\partial z}\right)^2\right]dxdydz} \tag{I.39}$$

avec s_k l'accumulation de spin suivant l'axe k et τ_{sd} le temps d'échange *s-d*. Ces variables sont explicitées au chapitre suivant. Cette définition lie la vitesse et la largeur de la paroi. Nous verrons au chapitre IV que cette vitesse est une bonne estimation de la vitesse de propagation d'une paroi transverse dans un ruban dans le modèle couplé car elle dépend de la largeur de paroi contrairement à la vitesse définie dans le modèle local.

5. Conclusion du chapitre

La théorie du micromagnétisme permet de décrire le comportement statique et dynamique d'un système micro ou nanomagnétique comme une paroi de domaines. La distribution d'aimantation d'équilibre s'obtient en minimisant l'énergie magnétique totale du système. En outre, l'application de l'équation Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) permet de décrire l'évolution de sa dynamique. Pour résoudre l'équation LLG sur une distribution d'aimantation 3D, on a recours à un logiciel micromagnétique comme celui développé au sein de notre équipe et présenté au chapitre III. Ce type de logiciel permet de calculer la distribution d'équilibre et la dynamique d'une paroi de domaines 3D dans un ruban ou un fil. Une paroi de domaines étant définie comme la variation spatiale et continue de l'aimantation, nous avons choisi d'estimer sa largeur grâce à la définition de largeur de Bloch pour les distributions de Bloch 1D, à la largeur de Thiele pour les parois 3D rigides des rubans du chapitre IV et grâce à l'écart type de l'aimantation longitudinale pour les parois des structures complexes du chapitre V. Enfin, d'après l'équation LLG, l'application d'un champ magnétique extérieur permet de déplacer une paroi de domaines, nous allons voir, dans le chapitre suivant, qu'il est également possible de la propager en injectant un courant polarisé en spin dans le système.

Chapitre II :

Introduction du transport dépendant du spin dans l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert

1. Formalisme 27

1.1. Couple de transfert de spin (*Spin Transfert Torque*) 27
1.2. Courant de spin et accumulation de spin 28

2. Modèle diffusif de *Zhang et Li* 30

2.1. Equations de transport polarisé en spin du modèle de *Zhang et Li* 30
2.2. Longueurs caractéristiques du modèle de *Zhang et Li* 32
2.3. Couplage avec le micromagnétisme 33

3. Modèle diffusif généralisé (GDD) 35

3.1. Equations de transport polarisé en spin du modèle GDD 36
3.2. Longueurs caractéristiques du modèle GDD 36
3.3. Couplage avec le micromagnétisme 37

4. Forme de *Thiaville* du couple de transfert de spin 39

5. Estimation du paramètre de non-adiabaticité d'un système 43

5.1. Paramètre de non-adiabaticité dans le modèle de *Zhang et Li* 43
5.2. Paramètre de non-adiabaticité dans le modèle de diffusion généralisée (GDD) 43
5.3. Paramètre de non-adiabaticité effectif 45

6. Conclusion du chapitre 47

Quand un courant électrique est injecté dans une couche ferromagnétique, le spin des électrons du courant s'aligne avec l'aimantation de la couche. On dit que le courant se polarise en spin. Les modèles de transport dépendant du spin ont pour objectif de décrire l'évolution de ce courant polarisé (Stiles, et al., 2006). Ce phénomène est issu d'une interaction entre le spin des électrons porteurs du courant et le moment magnétique des électrons responsables des propriétés magnétiques du matériau. Cette interaction se manifeste par un couple appelé couple de transfert de spin (STT) qui affecte le courant polarisé et la distribution d'aimantation (Berger, 1996; Slonczewski, 1996). Ce chapitre expose les deux modèles de transport dépendant du spin exploités dans cette thèse qui permettent d'exprimer le STT afin de l'introduire dans l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) (I.34) et d'étudier son effet sur la dynamique de l'aimantation.

Dans la première partie de ce chapitre, le STT ainsi que le formalisme mathématique semi-classique qui permet de le décrire sont présentés. La deuxième partie de ce chapitre présente le modèle de transport diffusif proposé par *Zhang et Li* (Zhang, et al., 2002; Zhang, et al., 2004). La troisième partie décrit le modèle diffusif généralisé (GDD) proposé par *Petitjean et al*. (Petitjean, et al., 2012) qui complète le modèle précédent en intégrant les effets balistiques agissant sur la dynamique de l'aimantation. Pour illustration, l'application de ces modèles à une distribution statique d'aimantation 1D de Bloch est proposée. La quatrième partie de ce chapitre est dédiée au modèle local de *Thiaville* obtenu dans la limite d'une paroi longue (Zhang, et al., 2004; Thiaville, et al., 2005). Nous verrons que ce dernier modèle permet de décrire analytiquement la propagation d'une paroi de domaines soumise à un courant polarisé en spin. Dans la dernière partie, le paramètre de non-adiabaticité d'un système qui quantifie l'action du courant est défini et discuté en fonction des longueurs caractéristiques des modèles diffusif de *Zhang et Li* et diffusif généralisé (GDD).

L'implémentation de ces modèles de transport dépendant du spin dans notre code micromagnétique éléments finis m'a permis de réaliser les études numériques présentées aux chapitres IV et V.

1. Formalisme

Cette première partie est dédiée à la description du couple de transfert de spin (ou STT). Le premier paraphage décrit qualitativement l'action du STT sur une couche magnétique et le second donne les bases théoriques du transport dépendant du spin permettant de quantifier le STT.

1.1. Couple de transfert de spin (*Spin Transfer Torque*)

La Figure II.1 représente schématiquement le mécanisme d'action du STT. Un courant d'électron polarisé en spin est injecté dans une couche ferromagnétique. Si les spins des électrons du courant ne sont pas colinéaires avec l'aimantation locale **m**, l'interaction d'échange *s-d* induit leur alignement suivant **m**. Le moment magnétique perdu est alors transféré à l'aimantation locale. Dans le cas d'une couche magnétique texturée comme une paroi de domaines, ce transfert de spin peut engendrer le déplacement de la paroi (Slonczewski, 1996; Berger, 1996).

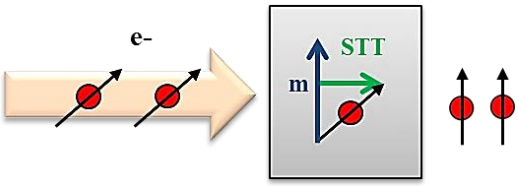

Figure II.1 : Représentation schématique du mécanisme de transfert de spin entre un courant polarisé en spin et une couche magnétique via le couple de transfert de spin (STT).

1.2. Courant de spin et accumulation de spin

Pour quantifier le STT, les évolutions spatiale et temporelle des spins portées par le courant sont formalisées par les notions d'accumulation et de courant de spin.

Définition de l'accumulation de spin

En mécanique quantique, la densité de charge peut être définie par :

$$2n_0 = e\left(\Psi^{*\uparrow}\Psi^{\uparrow} + \Psi^{\downarrow *}\Psi^{\downarrow}\right) = e\left(n^{\uparrow} + n^{\downarrow}\right) \tag{II.1}$$

avec $\Psi = \begin{bmatrix} \Psi^{\uparrow} \\ \Psi^{\downarrow} \end{bmatrix}$ le spineur composé des fonctions d'onde qui décrivent l'état quantique d'un électron portant un spin *up* et un spin *down*. Le produit $\Psi^{*}\Psi$ est la densité de probabilité de présence et $\int \Psi^{*}\Psi dV = 1$.

De la même façon, la densité de spin **S** peut être définie par :

$$2\mathbf{S} = \mu_B \Psi^{*} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \Psi \tag{II.2}$$

avec $\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$, $\hat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{bmatrix}$, $\hat{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ les matrices de Pauli.

Si la direction d'aimantation est choisie suivant l'axe *z* (l'axe de quantification), la composante de **S** suivant l'axe *z* peut se voir comme la différence entre la densité de porteurs de spin *up* et de porteurs de spin *down* :

$$S_z = \frac{\mu_B}{2}\left(\Psi^{\uparrow *}\Psi^{\uparrow} - \Psi^{\downarrow *}\Psi^{\downarrow}\right) = \frac{\mu_B}{2}\left(n^{\uparrow} - n^{\downarrow}\right). \tag{II.3}$$

La densité de moment de spin peut-être décomposée en deux termes :

$$\mathbf{S} = \mathbf{s}_{\mathbf{eq}} + \mathbf{s}_{\mathbf{hors\ equi}} \tag{II.4}$$

avec $\mathbf{s}_{\mathbf{eq}}$ la densité de spin à l'équilibre et $\mathbf{s}_{\mathbf{hors\ equi}}$ la densité de spin hors équilibre aussi appelée accumulation de spin. Par la suite, pour alléger les notations, l'accumulation de spin est désignée par **s**.

Dynamique de l'accumulation de spin

Lors de l'injection d'un courant polarisé en spin dans une couche ferromagnétique, l'accumulation de spin des électrons de conduction *s* mobiles ressent la distribution d'aimantation portée par les électrons *d* fixes via l'interaction d'échange *s-d*. Cette interaction est décrite par l'hamiltonien du modèle d'électrons libres *s-d* bien adapté dans le cas de matériaux ferromagnétiques comme le cobalt, le nickel ou le fer:

$$\hat{H} = \frac{p_k^2}{2m_e}\hat{I} + \frac{J_{sd}}{2}\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{m}\right) \tag{II.5}$$

où $k \in \{x, y, z\}$. Le premier terme est l'observable correspondant à l'énergie cinétique du système avec $p_k^2 = \left(-i\hbar\partial_k\right)^2$. Le second terme représente l'interaction *s-d*, avec J_{sd} la constante d'interaction *s-d* et **m** l'aimantation normalisée locale.

On définit les composantes du courant de charge créé par un déséquilibre spatial des charges par l'expression suivante :

$$j_k^{charge} = \frac{i\hbar e}{4m_e}\left(\partial_k\Psi^*\Psi - \Psi^*\partial_k\Psi\right) . \tag{II.6}$$

avec $k \in \{x, y, z\}$.Via l'équation de Schrödinger[2], on obtient la relation de conservation de densité de charge n_0:

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} + \sum_k \partial_k j_k^{charge} = 0 . \tag{II.7}$$

avec $k \in \{x, y, z\}$. De même, on définit le courant de spin créé par un déséquilibre spatial des spins par l'expression suivante (Stiles, et al., 2002):

$$\mathbf{j}_k^{spin} = \frac{i\hbar\mu_B}{4m_e}\left(\partial_k\Psi^*\hat{\boldsymbol{\sigma}}\Psi - \Psi^*\hat{\boldsymbol{\sigma}}\partial_k\Psi\right). \tag{II.8}$$

avec $k \in \{x, y, z\}$. Le courant de spin est un tenseur de l'espace réel cartésien et de l'espace des spins. Comme pour le courant de charge, via l'équation de Schrödinger[2] on obtient l'évolution temporelle de l'accumulation de spin **s** :

$$\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} + \sum_k \partial_k \mathbf{j}_k^{spin} = \mathbf{T} . \tag{II.9}$$

avec $k \in \{x, y, z\}$. Contrairement à l'équation (II.7), le courant de spin n'est pas l'unique contribution à la variation temporelle de l'accumulation de spin. Cette dernière n'est donc pas conservée. En effet, un terme supplémentaire **T** créé par l'interaction *s-d* apparaît. Ce terme est le couple de transfert de spin (STT).

---

[2] L'équation de Schrödinger décrit l'évolution temporelle d'une fonction d'onde $|\boldsymbol{\psi}\rangle$: $-i\hbar\frac{\partial|\boldsymbol{\psi}\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\boldsymbol{\psi}\rangle$ avec $\hat{H}$ l'opérateur Hamiltonien.

2. Modèle diffusif de *Zhang et Li*

Pour s'affranchir de la complexité des calculs quantiques, on peut sous certaines conditions, travailler sur les valeurs moyennées dans le modèle diffusif semi-classique (Stiles, et al., 2002; Xiao, et al., 2004; Xiao, et al., 2007). Ce modèle issu de l'approximation de l'équation de Boltzmann a largement été exploité dans le cadre de l'étude de la magnéto-résistance géante (Valet, et al., 1993). Par la suite, *Zhang et al.*, puis *Lee et al.*, ont étendu son utilisation à l'étude d'une distribution d'aimantation texturée (Zhang, et al., 2002; Zhang, et al., 2004; Lee, et al., 2013).

Dans ce modèle, le libre parcours moyen d'un électron (environ *1*nm) est supposé inférieur aux dimensions caractéristiques de la structure étudiée. Autrement dit, l'électron est diffusé de multiple fois et la cohérence quantique est rapidement perdue. Il est alors plus facile de travailler sur l'évolution de grandeurs moyennées (ici l'accumulation de spin). De plus, pour tenir compte du processus de diffusion avec les impuretés magnétiques du réseau, on introduit dans l'équation (II.9) un terme phénoménologique qui prend en compte la relaxation de l'accumulation de spin en τ_{sf}. On suppose que cette relaxation suit une loi exponentielle. Enfin, pour différencier l'approche quantique de l'approche semi-classique, le courant de spin sera noté $\mathbf{j}^s$ et le courant de charge $\mathbf{j}^e$. Sous ces hypothèses, l'équation (II.9) devient:

$$\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} + \sum_k \partial_k \mathbf{j}_k^s = -\frac{\mathbf{s}}{\tau_{sf}} + \mathbf{T}_{ZL} \,. \qquad \text{(II.10)}$$

avec $k=\{x,y,z\}$, $\mathbf{T}_{ZL} = \frac{1}{\tau_{sd}}[\mathbf{m}\times\mathbf{s}]$ le couple de transfert de spin, τ_{sf} le temps caractéristique de diffusion de spin et $\tau_{sd} = \frac{\hbar}{J_{sd}}$ le temps caractéristique d'interaction *s-d*. Le couple de transfert de spin $\mathbf{T}_{ZL}$ engendre la précession des spins des électrons du courant autour du champ créé par l'interaction *s-d*.

2.1. Equations de transport polarisé en spin du modèle de *Zhang et Li*

Zhang et Li proposent d'exprimer les courants de charge et de spin à partir de leur réponse linéaire à un gradient de potentiel électrique φ, en négligeant la variation de densité de charge n_0 :

$$j_k^e = -C_0\, \partial_k \varphi + \frac{ePD_0}{\mu_B} \mathbf{m}\cdot\partial_k \mathbf{s} \,, \qquad \text{(II.11)}$$

$$\mathbf{j}_k^s = \frac{\mu_B P C_0}{e} \partial_k \varphi\, \mathbf{m} - D_0 \partial_k \mathbf{s} \qquad \text{(II.12)}$$

avec $k=\{x,y,z\}$, C_0 est la conductivité du matériau, $P = \frac{n^\uparrow - n^\downarrow}{n^\uparrow + n^\downarrow}$ le paramètre de polarisation en spin (Zhang, et al., 2002), $D_0 = \frac{2C_0}{e^2 N_F}$ le coefficient de diffusion du matériau où N_F la densité d'états au niveau de Fermi.

Pour illustrer les notions d'accumulation de spin, de sa projection sur l'axe de l'aimantation s_{para} et de courant de spin j^m_z, la Figure II.2 schématise leurs distributions spatiales dans des structures idéalisées unidimensionnelles en présence d'un courant électrique. Pour simplifier, le vecteur d'aimantation est supposé colinéaire à l'axe *z*, le vecteur l'accumulation de spin ne possède donc qu'une seule composante s_z.

Dans le cas d'une couche ferromagnétique infinie uniformément aimantée selon l'axe *z* (Figure II.2 (a)), la différence entre les porteurs de spin *up* (spins majoritaires parallèles à l'aimantation) et les porteurs de spin *down* (spins minoritaires antiparallèles à l'aimantation) ne varie pas dans l'espace. Dans un matériau ferromagnétique, cette différence est proportionnelle à la différence des états au niveau de Fermi entre les électrons de spin *up* et de spin *down*. En conséquence, il n'y pas d'accumulation de spin supplémentaire (ou hors équilibre) et le courant de spin est constant. Ici, le courant de spin est positif car les spins majoritaires se propagent dans la même direction que l'aimantation.

Dans le cas de deux couches ferromagnétiques semi-infinies uniformément aimantées selon deux directions opposées (Figure II.2(b) ou Figure II.2(c)), on observe l'apparition d'une accumulation de spin à la frontière entre les deux régions. Le signe de l'accumulation de spin dépend de la direction du courant électrique. Ici, si les électrons se propagent de gauche à droite (Figure II.2(b)), les spins majoritaires de la couche de gauche deviennent minoritaires en arrivant dans la couche de droite car elle ne présente pas suffisamment d'états disponibles pour les accueillir et ils s'accumulent à la frontière. Dans ce cas, une accumulation de spin hors équilibre apparaît. De plus, le courant de spin est négatif à gauche car les spins majoritaires se propagent dans la direction opposée à l'aimantation. C'est l'inverse dans la région de droite. Quand le courant électrique se propage dans la direction opposée (Figure II.2(c)), ce sont les spins de direction opposée au cas précèdent qui s'accumulent à la frontière entre les deux régions. De plus, le courant de spin correspondant change de signe.

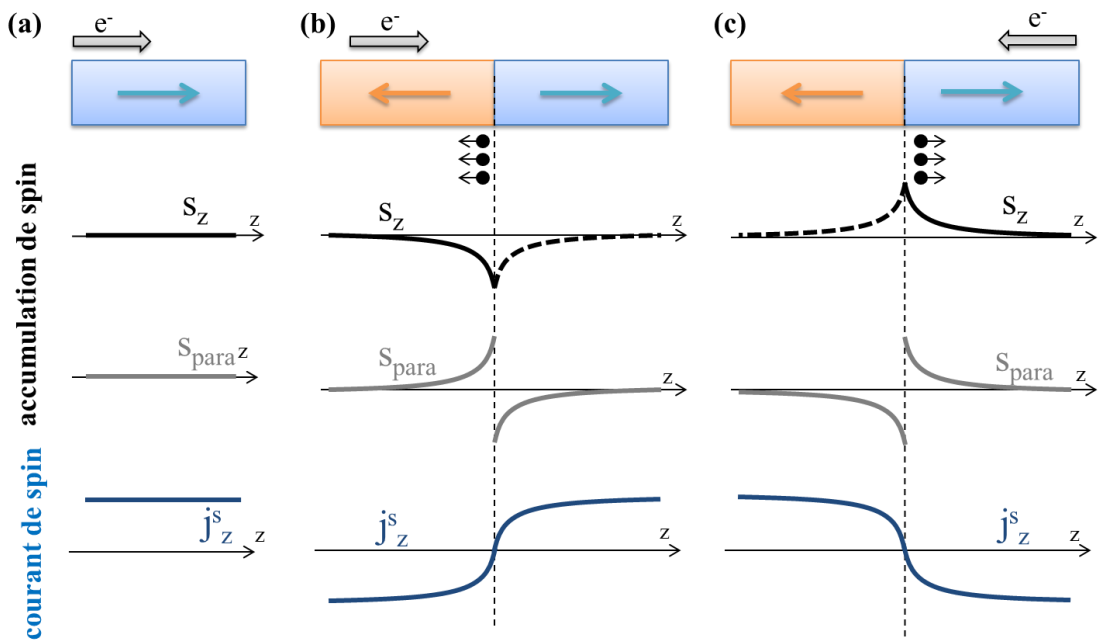

Figure II.2 : Schémas représentants l'accumulation de spin s_z, sa projection sur l'axe de l'aimantation s_{para} et le courant de spin correspondant j^m_z en présence d'un courant de charge dans les structures ferromagnétiques unidimensionnelles idéalisées suivantes: (a) une couche ferromagnétique infinie uniformément aimantée, (b,c) deux couches semi-infinies d'aimantation opposée suivant axe *z* pour deux directions de courant électrique.

2.2. Longueurs caractéristiques du modèle de *Zhang et Li*

On introduit deux longueurs caractéristiques du modèle de *Zhang et Li* :

$l_{sd} = \sqrt{D_0 \tau_{sd}}$ la longueur d'interaction d'échange *s-d* et $l_{sf} = \sqrt{D_0 \tau_{sf}}$ la longueur de diffusion de spin ou « spin flip length ». Afin d'illustrer leur sens physique, il est pratique de décomposer l'accumulation de spin en deux termes :

$$\mathbf{s} = \mathbf{s}_{\mathbf{para}} + \mathbf{s}_{\mathbf{trans}} \tag{II.13}$$

$\mathbf{s}_{\mathbf{para}}$ est la composante parallèle à l'aimantation et $\mathbf{s}_{\mathbf{trans}}$ la composante transverse à l'aimantation (voir schéma Figure II.3(a)). Par la suite, ces composantes sont simplement appelées composantes parallèle et transverse de l'accumulation de spin.

D'après le système constitué des équations [(II.7),(II.10),(II.11),(II.12)], dans le régime stationnaire, dans le cas d'une distribution d'aimantation homogène, les amplitudes des composantes $\mathbf{s}_{\mathbf{para}}$ et $\mathbf{s}_{\mathbf{trans}}$, sont décrites par le système d'équations suivant:

$$\begin{cases} \partial_z^2 s_{para} = \dfrac{s_{para}}{l_{sf}} \\ \partial_z^2 s_{trans} = \dfrac{s_{trans}}{l_m} \end{cases} \tag{II.14}$$

avec $\dfrac{1}{l_m^2} = \dfrac{1}{l_{sf}^2} \pm i \dfrac{1}{l_{sd}^2}$. Selon ce système, les composantes s_{para} et s_{trans} relaxent suivant les lois exponentielles suivantes :

$$\begin{cases} s_{para} \propto \exp\left[-\dfrac{z}{l_{sf}^2}\right] \\ s_{trans} \propto \exp\left[-\dfrac{z}{l_m^2}\right] \end{cases} \tag{II.15}$$

La Figure II.3 représente le comportement typique de s_{para} et s_{trans} dans une couche ferromagnétique uniformément aimantée obtenu en résolvant le système (II.14). Il apparaît que la décroissance de l'amplitude de $\mathrm{s}_{\mathbf{para}}$ est gouvernée par la longueur l_{sf}. En revanche, la décroissance de l'amplitude de $\mathbf{s}_{\mathbf{trans}}$ est dominée par la longueur la plus courte soit l_{sd}. En outre, dans une structure multicouches par exemple, $\mathrm{s}_{\mathbf{trans}}$ qui contribue au couple de transfert de spin, apparaît aux interfaces et décroît rapidement en s'en éloignant. C'est pourquoi on dit que, dans ces structures, le transfert de spin est un phénomène d'interface.

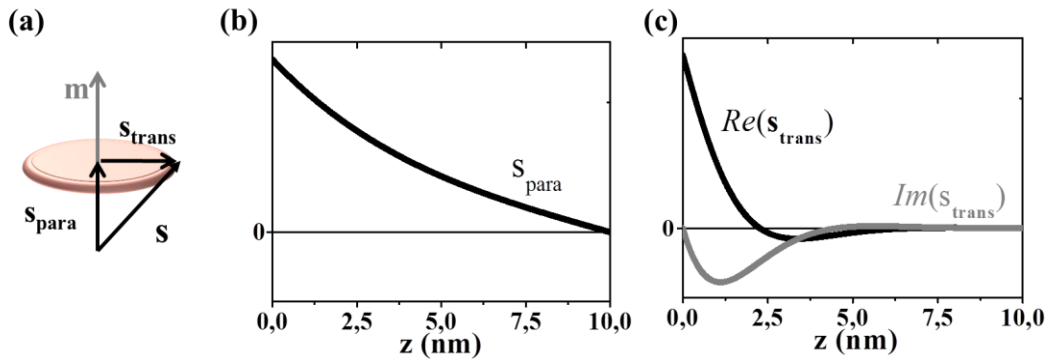

Figure II.3 : (a) Schéma des composantes de l'accumulation de spin parallèle et transverse à l'aimantation **m.** (b) Distribution de s_{para} à partir d'une interface dans une couche ferromagnétique uniformément

aimantée. Sa décroissance est gouvernée par la longueur l_{sf}=5nm. (c) Idem pour les parties réelle et imaginaire de s_{trans}. Leur décroissance est dominée par la longueur la plus courte l_{sd}=1nm.

Dans le cas d'une texture magnétique non-homogène, comme une paroi de domaines, la décroissance de $\mathbf{s}_{\mathbf{trans}}$ est moins drastique. En effet, j'ai résolu le système constitué des équations [(II.7),(II.10),(II.11),(II.12)] dans le cas d'une distribution 1D de Bloch (I.25) avec Δ_B=5nm et Δ_B=10nm avec le logiciel *COMSOL Multiphysics*. Les distributions des amplitudes de $\mathbf{s}_{\mathbf{para}}$, de $\mathbf{s}_{\mathbf{trans}}$ et du courant de spin obtenues sont tracées sur la Figure II.4. Il apparaît que les distributions sont similaires à ceux de la paroi idéale schématisée sur la Figure II.2(b). On remarque également que plus la largeur de paroi diminue, plus les gradients des distributions sont importants.

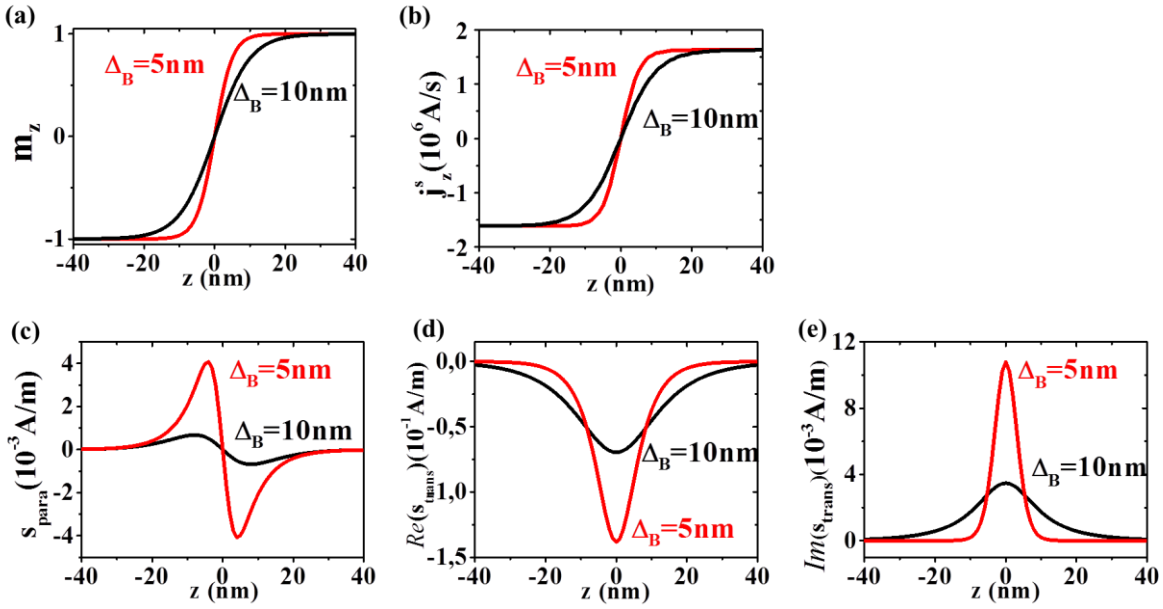

Figure II.4 : (a) Distribution d'aimantation suivant l'axe *z*. (b) Distribution du courant de spin suivant l'axe *z*. (c), (d), (e) Distributions des amplitudes de la composante parallèle de l'accumulation de spin et des parties réelle et imaginaire de la composante transverse de l'accumulation de spin. (a), (b), (c), (d) et (e) sont calculés pour les distributions de Bloch (I.25) avec Δ_B=5nm et Δ_B=10nm d'un fil de longueur L=1000nm pour $C_0=4\cdot10^6$ [Ωm]$^{-1}$, P=0.7, $D_0=2{,}3\cdot10^{-3}$ m^2/s, l_{sd}=1nm, l_{sf}=5nm, V_0=0,1V.

2.3. Couplage avec le micromagnétisme

Le couple de transfert de spin est calculé à partir des distributions d'aimantation et d'accumulation de spin. Puis, il est introduit dans l'équation LLG. En résumé, pour connaître l'évolution temporelle d'une distribution d'aimantation soumise à un courant polarisé en spin dans le modèle de *Zhang et Li*, il faut résoudre le système suivant :

$$\begin{cases} \sum_k \partial_k j_k^e = 0 \\ \frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} + \sum_k \partial_k \mathbf{j}_k^s = -\frac{\mathbf{s}}{\tau_{sf}} + \frac{1}{\tau_{sd}}[\mathbf{m}\times\mathbf{s}] \\ \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = -\gamma_0[\mathbf{m}\times\mathbf{H}] + \alpha\left[\mathbf{m}\times\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t}\right] - \frac{1}{M_s\tau_{sd}}[\mathbf{m}\times\mathbf{s}] \end{cases} \quad . \qquad \text{(II.16)}$$

avec $k=\{x,y,z\}$.

Le couple de transfert de spin $\mathbf{T}_{ZL} = \frac{1}{\tau_{sd}}[\mathbf{m} \times \mathbf{s}]$ apparaît dans deux des équations du système, elles sont donc mathématiquement couplées. Par ailleurs, le temps caractéristique du transport est de l'ordre 10^{-12}s, ce qui est bien inférieur à l'ordre de grandeur du temps caractéristique du micromagnétisme 10^{-9}s (Lee, et al., 2013). Ainsi, lors de la résolution numérique, le STT est calculé à partir des équations de transport dans le régime stationnaire. Puis, il est injecté dans l'équation LLG. Cette résolution auto-cohérente des équations de transport et du micromagnétisme a été implémentée au sein de notre code éléments finis feeLLGood pour modéliser l'action du courant polarisé en spin sur la dynamique de l'aimantation dans le modèle de *Zhang et Li* (voir chapitre III §3). Par ailleurs, l'étude de l'impact de ce modèle sur la dynamique d'une paroi transverse dans un ruban est l'objet de la première partie du chapitre IV.

3. Modèle diffusif généralisé (GDD)

Dans le modèle de *Zhang et Li*, on suppose que la composante transverse de l'accumulation de spin relaxe sur une longueur proche de la longueur d'échange *s-d* l_{sd}. Or, il a été montré qu'à l'interface entre deux matériaux ferromagnétiques aimantés différemment, la composante transverse à l'aimantation est absorbée par des mécanismes purement balistiques qui induisent une décohérence de spin entre les différentes directions de propagation (Stiles, et al., 2002). L'absorption de la composante transverse réduit donc le moment magnétique transféré à la couche et donc la non-adiabaticité du système. Dans ce contexte, *Petitjean et al.* proposent, dans le modèle diffusif généralisé (GDD), d'ajouter un terme au courant de spin et au STT afin de prendre en compte l'absorption de la composante transverse de l'accumulation de spin. De plus, les auteurs introduisent une nouvelle longueur caractéristique l_p appelée longueur de cohérence de spin transverse qui estime la distance au bout de laquelle la composante transverse est absorbée (Petitjean, et al., 2012).

Haney et al. introduisent un terme phénoménologique supplémentaire similaire à celui proposé par *Petitjean et al.* qu'ils nomment terme de déphasage (Haney, et al., 2013). Ils précisent que le déphasage apparaît quand deux spins arrivent en un même point avec une précession incohérente. Une telle précession peut, entre autres, être causée par l'arrivée non simultanée de spins diffusés présentant la même vitesse et la même phase. Dans ce cas, la composante transverse de l'accumulation de spin peut être détruite par compensation sur une distance l_p inférieure à l_m. C'est pourquoi, comme l'illustre le schéma de la Figure II.5, pour les matériaux comme le permalloy pour lesquels $l_p<l_m$, l'amplitude de $\mathbf{s_{trans}}$ décroît plus rapidement dans le modèle GDD que dans le modèle de *Zhang et Li*.

Il est également intéressant de noter que *Akosa et al.* proposent un modèle diffusif semi-classique dans lequel un terme de déphasage similaire au terme d'absorption de spin transverse du modèle GDD est introduit. Les auteurs obtiennent une expression analytique du paramètre de non-adiabaticité et de la vitesse de propagation d'une paroi 1D de Bloch selon, entre autres, la largeur de paroi, de la longueur de diffusion de spin et la longueur de cohérence de spin (Akosa, et al., 2015).

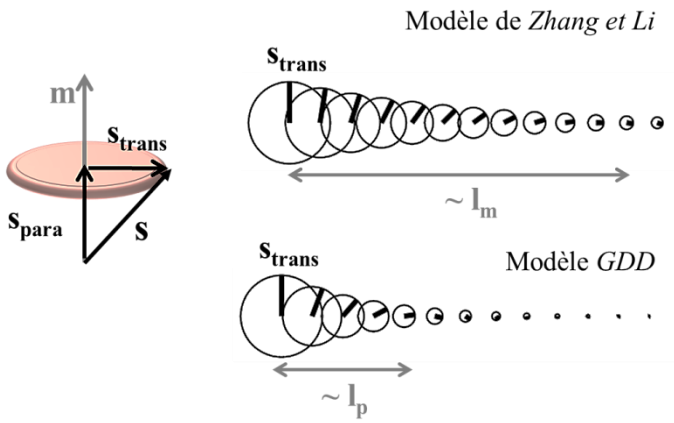

Figure II.5 : Schéma d'évolution de $\mathbf{s_{trans}}$ à partir avec la distance dans les modèles de *Zhang et Li* et GDD dans le cas du permalloy pour lequel $l_p<l_m$.

3.1. Equations de transport polarisé en spin du modèle GDD

A partir de la théorie appelée *continous random matrix theory (CMRT)* (Borlenghi, et al., 2011; Rychkov, et al., 2009), *Petitjean et al.* expriment le courant de charge et de spin grâce aux expressions suivantes:

$$-l^*\partial_x\varphi = j_k^e - P\left(\mathbf{m}\cdot\mathbf{j}_k^s\right) \tag{II.17}$$

$$-l^*\partial_k\mathbf{s} = \mathbf{j}_k^s - Pj_k^e\mathbf{m} + \frac{l^*}{l_p}\left(\mathbf{m}\times\mathbf{j}_k^s\right)\times\mathbf{m} - \frac{l^*}{l_L}\left(\mathbf{m}\times\mathbf{j}_k^s\right) \tag{II.18}$$

avec $k=\{x,y,z\}$, φ le voltage appliqué, l^* le libre parcours moyen de l'électron dans le matériau $l^{*-1} = l_\uparrow^{-1} + l_\downarrow^{-1}$ où $l_\uparrow$ (resp. $l_\downarrow$) est le libre parcours moyen des électrons majoritaires (resp. minoritaires), l_L la longueur de précession de spin et l_p la longueur de cohérence de spin transverse. Dans ce modèle, les variables φ et **s** et les courants sont exprimées en Joules mais par la suite nous les exprimons en fonctions des unités du modèle *Zhang et Li*. De plus, le système d'équation précédent est complété par la relation de conservation de densité de charges:

$$\sum_k \partial_k j_k^e = 0\,, \tag{II.19}$$

et par l'équation d'évolution de l'accumulation de spin dans la limite stationnaire :

$$\sum_k \partial_k \mathbf{j}_k^s = -\frac{l_*}{l_{sf}^2}\mathbf{s} + \frac{1}{l_L}\left(\mathbf{m}\times\mathbf{s}\right) - \frac{1}{l_p}\left(\mathbf{m}\times\mathbf{s}\right)\times\mathbf{m}\,. \tag{II.20}$$

avec $k=\{x,y,z\}$. Le second membre de cette équation présente les différentes contributions à l'évolution de l'accumulation de spin. Le premier terme représente la relaxation de l'accumulation de spin liée à la longueur de diffusion de spin l_{sf}. Le second terme décrit la précession de l'accumulation de spin autour du champ d'échange *s-d* sur la longueur de précession de spin l_L. Le dernier terme illustre l'absorption de la partie transverse de l'accumulation de spin sur la distance l_p. Quand la longueur de cohérence de spin est infinie ($l_p \to +\infty$), l'accumulation de spin transverse n'est jamais absorbée, c'est pourquoi le terme d'absorption tend vers 0 et n'influe pas sur la distribution d'accumulation de spin. Dans le modèle GDD, le couple de transfert de spin est la somme des deux derniers termes de cette équation.

3.2. Longueurs caractéristiques du modèle GDD

La résolution du système d'équation [(II.17)-(II.20)] pour les amplitudes des composantes parallèle et transverse de l'accumulation de spin dans le régime stationnaire donne les mêmes équations que dans le modèle de *Zhang et Li* (II.14) avec :

$$\frac{1}{l_m^2} = \left(\frac{1}{l^*} + \frac{1}{l_p} - i\frac{1}{l_L}\right)\left(\frac{l^*}{l_{sf}^2} + \frac{1}{l_p} - i\frac{1}{l_L}\right) \tag{II.21}$$

où l_m dépend des quatre longueurs caractéristiques du modèle de GDD.

Les auteurs précisent que, dans la plupart des systèmes, on peut écrire : $\frac{1}{l_m} \approx \frac{1}{l_p} - i\frac{1}{l_L}$.

Dans ce modèle, la décroissance de l'amplitude de $\mathbf{s_{para}}$ est gouvernée par la longueur l_{sf}. En revanche, la décroissance de l'amplitude de $\mathbf{s_{trans}}$ est gouvernée par les longueurs l_L et l_p.

3.3. Couplage avec le micromagnétisme

Comme dans le modèle de *Zhang et Li*, une fois calculé, le couple de transfert de spin est ajouté à l'équation LLG pour décrire l'évolution de la dynamique de l'aimantation en présence d'un courant polarisé en spin. Néanmoins, pour assurer l'homogénéité de l'équation LLG, nous introduisons un préfacteur et le couple de transfert de spin dans le modèle GDD devient:

$$\mathbf{T}_{GDD} = -\frac{\mu_B C_0}{M_S e^2 l^*}\left[\frac{1}{l_L}(\mathbf{m}\times\mathbf{s}) - \frac{1}{l_p}(\mathbf{m}\times\mathbf{s})\times\mathbf{m}\right] \quad . \qquad \text{(II.22)}$$

Dans le modèle GDD, deux termes contribuent au couple de transfert de spin. Le premier est similaire au STT du modèle de *Zhang et Li*. Il décrit la précession de l'aimantation autour du champ d'échange *s-d*. Le second décrit l'absorption balistique de l'accumulation de spin transverse qui diminue l'efficacité du STT pour l_p court. On remarque que lorsque ($l_p \rightarrow +\infty$), ce dernier terme est négligeable et $\mathbf{T}_{GDD}$ devient similaire à $\mathbf{T}_{ZL}$, le couple de transfert de spin du modèle de *Zhang et Li*.

Pour illustrer la décroissance de $\mathbf{s}_{trans}$ dans le cas d'une texture magnétique non-homogène comme une paroi de domaines, j'ai résolu le système d'équation [(II.17)-(II.20)] dans le cas d'une distribution 1D de Bloch (I.25) grâce au logiciel *COMSOL Multiphysics*. La distribution de la composante hors du plan des deux termes qui composent le STT dans le modèle GDD est tracée sur la Figure II.6(a). Comme le montre la formule (II.22), les deux termes qui constituent le STT sont opposés. De plus, la Figure II.6(b) montre que la composante hors du plan de $\mathbf{T}_{GDD}$, responsable du déplacement de la paroi, diminue avec l_p. En effet, plus l_p est petit, plus le second terme est prédominant. Ainsi, la composante transverse de l'accumulation de spin est rapidement absorbée et le couple transmis est réduit.

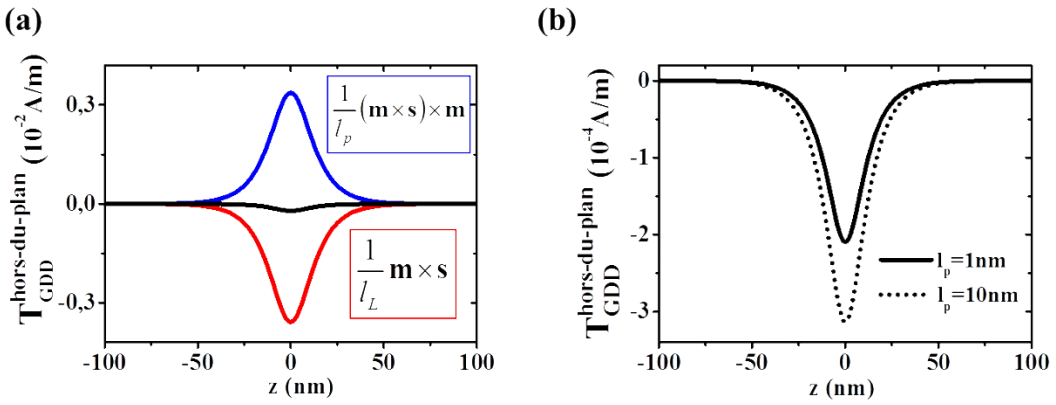

Figure II.6 : (a) Distribution des composantes hors du plan des termes qui composent T_{GDD} le STT dans le modèle GDD pour l_p=*1*nm. La somme des deux termes est tracée en noir. (b) Distribution de la composante hors du plan de T_{GDD} pour l_p=*1*nm *et* l_p=*10*nm. (a) et (b) sont calculés dans le modèle de GDD pour une distribution de Bloch avec Δ_B=*10*nm, *P=0,76*, V_0=*0,01*V, *l*=1,72*nm, l_L=*0,7*nm, l_{sf}= *5,5* nm.

Pour résumer, pour connaître l'évolution temporelle d'une distribution d'aimantation soumise à un courant polarisé en spin dans le modèle GDD, il faut résoudre le système d'équation suivant:

$$\begin{cases} \sum_k \partial_k j_k^e = 0 \\ \sum_k \partial_k \mathbf{j}_k^s = -\frac{l*}{l_{sf}^2}\mathbf{s} + \left[\frac{1}{l_L}(\mathbf{m}\times\mathbf{s}) - \frac{1}{l_p}(\mathbf{m}\times\mathbf{s})\times\mathbf{m}\right] \\ \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = -\gamma_0[\mathbf{m}\times\mathbf{H}] + \alpha\left[\mathbf{m}\times\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t}\right] - \frac{\mu_B C_0}{M_S e^2 l*}\left[\frac{1}{l_L}(\mathbf{m}\times\mathbf{s}) - \frac{1}{l_p}(\mathbf{m}\times\mathbf{s})\times\mathbf{m}\right] \end{cases} \quad \text{(II.23)}$$

avec *k={x,y,z}*.Comme dans le modèle de *Zhang et Li*, le couple de transfert de spin $\mathbf{T_{GDD}}$ couple deux équations de ce système. L'ordre de grandeur du temps caractéristique du transport est identique au modèle de *Zhang et Li*, c'est pourquoi la procédure de résolution est identique (voir §2.3 de ce chapitre).

Durant ma thèse, j'ai implémenté le système d'équation (II.23) au sein de notre logiciel micromagnétique feeLLGood afin de résoudre de façon auto-cohérente ces équations couplées pour modéliser l'action du courant polarisé en spin sur la dynamique de l'aimantation dans le modèle GDD. Ce modèle de transport dépendant du spin permet de conserver le terme de diffusion de spin et de prendre en compte les effets balistiques d'absorption de la composante transverse de l'accumulation de spin. L'étude de l'impact de ces termes sur la dynamique d'une paroi transverse dans un ruban est l'objet de la seconde partie du chapitre IV.

4. Forme de *Thiaville* du couple de transfert de spin

Sous certaines approximations, il est possible de découpler les équations de transport et du micromagnétisme (II.16) dans le modèle du *Zhang et Li* afin d'obtenir une expression analytique qui décrit l'évolution d'une distribution d'aimantation non homogène présentant un faible gradient d'aimantation, comme une paroi de domaines longue, sous un courant polarisé en spin. Parallèlement aux travaux de *Zhang et Li*, *Thiaville et al*. proposent une expression phénoménologique locale du STT proche de celle obtenue par *Zhang et Li* (Thiaville, et al., 2005) et valable également dans la limite des parois longues $(\Delta >> l_{sf})$.

Expression simplifiée du couple de transfert de spin

Zhang et Li injectent les expressions des courants de charge (II.11) et de spin (II.12) dans l'équation (II.10). Après quelques simplifications et en supposant le courant de charge homogène, les auteurs obtiennent l'évolution temporelle de l'accumulation de spin :

$$\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} = \frac{\mu_B P}{e}\left(j_k^e \partial_k \mathbf{m}\right) - \frac{\mathbf{s}}{\tau_{sf}} + D_0 \partial_k^2 \mathbf{s} + \frac{1}{\tau_{sd}}\left[\mathbf{m} \times \mathbf{s}\right]. \qquad \text{(II.24)}$$

On rappelle que **s** définit la composante hors équilibre de l'accumulation.
Le second membre de cette équation présente les différentes contributions à l'évolution de l'accumulation de spin dans une couche ferromagnétique. Le premier terme décrit la création d'accumulation de spin lors de l'injection d'un courant électrique dans une couche présentant une aimantation non homogène. Le second terme décrit la relaxation de l'accumulation de spin suivant l'aimantation locale et le troisième terme représente la diffusion spatiale de l'accumulation de spin. Le dernier terme est le couple de transfert de spin qui décrit la précession de l'accumulation de spin autour du champ d'échange *s-d*.

Les auteurs font les approximations suivantes :

i. Les équations de transport sont résolues dans le régime stationnaire d'où $\partial_t \mathbf{s}=0$.
ii. La largeur de paroi est grande par rapport aux longueurs caractéristiques du transport l_{sd} et l_{sf}. Les variations spatiales de l'accumulation de spin sont donc négligeables par rapport à celles de l'aimantation ce qui implique que le terme de diffusion d'accumulation de spin peut-être négligé dans l'équation (II.24).

Sous ces conditions, l'équation (II.24) devient locale et s'écrit:

$$-\frac{\mu_B P}{e}\left(j_k^e \partial_k \mathbf{m}\right) = -\frac{\mathbf{s}}{\tau_{sf}} + \frac{1}{\tau_{sd}}\left[\mathbf{m} \times \mathbf{s}\right]. \qquad \text{(II.25)}$$

A partir de cette équation, les auteurs extraient l'expression de **s**:

$$\mathbf{s} = \frac{\tau_{sd}}{1 + \left[\frac{\tau_{sd}}{\tau_{sf}}\right]^2}\left(\frac{\tau_{sd}}{\tau_{sf}} \frac{\mu_B P}{e} j_k^e \partial_k \mathbf{m} + \frac{\mu_B P}{e} \mathbf{m} \times j_k^e \partial_k \mathbf{m}\right) \qquad \text{(II.26)}$$

Puis, ils obtiennent l'expression du STT:

$$\mathbf{T}_{ZL} = \frac{1}{\tau_{sd}}[\mathbf{m}\times\mathbf{s}] = \frac{1}{1+\left[\frac{\tau_{sd}}{\tau_{sf}}\right]^2}\left(-\frac{\mu_B P}{e} j_k^e \partial_k \mathbf{m} + \frac{\tau_{sd}}{\tau_{sf}}\frac{\mu_B P}{e}\mathbf{m}\times j_k^e \partial_k \mathbf{m}\right) \quad \text{(II.27)}$$

En posant $1+\left[\frac{\tau_{sd}}{\tau_{sf}}\right]^2 \approx 1$ et $j_k^e = -j_k^e$, on obtient la forme de *Thiaville* du STT à ajouter à l'équation LLG et valable dans le cas de parois longues ($\Delta >> l_{sf}$) (Thiaville, et al., 2005):

$$\mathbf{T_T} = -[\mathbf{U_T}\cdot\nabla]\mathbf{m} + \beta_T \mathbf{m}\times([\mathbf{U_T}\cdot\nabla]\mathbf{m}) \quad \text{(II.28)}$$

avec $\mathbf{U_T} = \frac{\mu_B P}{eM_S}\mathbf{j_e}$ où $\mathbf{j_e}$ est la densité de courant appliqué et $\beta_T = \frac{\tau_{sd}}{\tau_{sf}} = \left(\frac{l_{sd}}{l_{sf}}\right)^2$ le paramètre de non-adiabaticité qui représente l'efficacité du STT.

Les termes qui constituent le STT dans le modèle local de *Thiaville* sont appelés respectivement terme adiabatique et non-adiabatique. On remarque que le STT et la composante transverse de l'accumulation de spin s'expriment en fonction de la variation spatiale de l'aimantation et du courant injecté.

Le paramètre de non-adiabaticité β_T quantifie l'efficacité du couple de transfert de spin sur l'aimantation et est discuté au §5 de ce chapitre. Bien que le modèle de Thiaville convient à l'étude de la propagation des parois de domaines, on peut apprécier l'impact de la longueur de diffusion de spin à l'interface entre deux couches magnétiques dont l'aimantation est différente. Si $l_{sf} \rightarrow 0$, l'accumulation de spin s'aligne avec l'aimantation locale dès son entrée dans la couche magnétique. Autrement dit, le moment magnétique des électrons de conduction est transféré instantanément à l'aimantation locale. Dans ce cas, l'efficacité du STT et le paramètre de non-adiabaticité β_T sont grands. A l'inverse, si $l_{sf} \rightarrow +\infty$, l'accumulation de spin ne s'aligne jamais avec l'aimantation locale, le moment magnétique des électrons de conduction n'est pas transféré à la couche magnétique, le STT n'est pas efficace et le paramètre de non-adiabaticité β_T est nul.

L'équation LLG augmentée du couple de transfert $\mathbf{T}_\mathrm{T}$ est appelée forme locale de *Thiaville* et s'écrit :

$$\frac{\partial\mathbf{m}}{\partial t} = -\gamma_0(\mathbf{m}\times\mathbf{H}_{eff}) + \alpha\left(\mathbf{m}\times\frac{\partial\mathbf{m}}{\partial t}\right) - [\mathbf{U_T}\cdot\nabla]\mathbf{m} + \beta\mathbf{m}\times([\mathbf{U_T}\cdot\nabla]\mathbf{m}). \quad \text{(II.29)}$$

Interprétation géométrique du couple de transfert de spin

Le premier terme du STT dans le modèle local de *Thiaville* $\mathbf{T_A} = -[\mathbf{U_T}\cdot\nabla]\mathbf{m}$ est le terme adiabatique. Il représente le transfert total de la composante transverse de l'accumulation de spin, colinéaire au gradient d'aimantation locale qui conduit à l'alignement de l'accumulation de spin suivant l'aimantation (Boulle, et al., 2011). Dans le cas de la paroi 1D simplifiée de la Figure II.7(a), $\mathbf{T_A}$ est orienté dans le plan de l'aimantation. Le couple adiabatique agit donc comme le couple créé par un champ appliqué suivant l'axe de difficile aimantation. Ainsi, si l'intensité du courant appliqué est suffisante, $\mathbf{T_A}$ oriente l'aimantation suivant l'axe *z* et déplace la paroi (Figure II.7(b)).

Le second terme du STT, $\mathbf{T_{NA}} = \beta_T \mathbf{m} \times ([\mathbf{U_T} \cdot \nabla]\mathbf{m})$ est le terme non-adiabatique. Dans la limite d'une paroi longue, ce terme est issu de la relaxation du spin causé par la diffusion avec des impuretés magnétiques (Boulle, et al., 2011). $\mathbf{T_{NA}}$ est orthogonal au terme adiabatique $\mathbf{T_A}$. Il est donc orthogonal au plan d'aimantation de la paroi simplifiée (Figure II.7(a)). Il agit comme le couple créé par un champ appliqué suivant l'axe de facile aimantation (voir le §4.2 du chapitre I). En effet, $\mathbf{T_{NA}}$ induit la précession de l'aimantation autour de l'axe *z* et l'apparition d'un champ démagnétisant. Ce champ démagnétisant crée un couple $\mathbf{T_D}$ colinéaire à $\mathbf{T_A}$. La somme des deux couples déplace la paroi en induisant la rotation simultanée de tous les moments magnétiques à l'intérieur de la paroi (Figure II.7(b)). De plus, $\mathbf{T_D}$ et $\mathbf{T_A}$ engendrent l'apparition d'un couple d'amortissement $\mathbf{T_\alpha}$ qui leur est opposé. Ainsi, suivant la valeur de β_T et U_T, plusieurs régimes apparaissent :

i) Si $\boldsymbol{\beta_T \neq \alpha}$, *Mougin et al.* montrent qu'il existe un courant critique U_{Walker} appelé courant critique de *Walker* séparant deux régimes de vitesses linéaires (Figure II.8) (Mougin, et al., 2007):

$$U_{Walker} = 2\pi M_s \frac{\gamma_0 \alpha \Delta}{|\beta_T - \alpha|} |N_y - N_x| \qquad \text{(II.30)}$$

avec N_i le facteur démagnétisant suivant l'axe *i*.

- si $U_T < U_{Walker}$: l'intensité de $\mathbf{T_{NA}}$ est compensée par $\mathbf{T_\alpha}$ et la paroi se déplace sans se déformer à la vitesse :

$$\mathbf{v}_T = \frac{\beta_T}{\alpha} \mathbf{U_T} . \qquad \text{(II.31)}$$

C'est le régime laminaire, le mouvement est équivalent à une simple translation du système.

- si $U_T > U_{Walker}$, $\mathbf{T_\alpha}$ ne compense plus $\mathbf{T_{NA}}$, l'aimantation précesse autour de l'axe *z* et se propage sous l'action de $\mathbf{T_A}$: c'est le régime précessionnel, la structure devient instable. Les auteurs montrent que la vitesse moyenne de propagation de la paroi dans ce régime vaut:

$$< v_T > = \frac{1 + \alpha \beta_T}{1 + \alpha^2} U_T . \qquad \text{(II.32)}$$

ii) Si $\boldsymbol{\beta_T = 0}$, seul $\mathbf{T_A}$ agit pour déplacer l'aimantation (Figure II.7 (a.1)). Si l'intensité du courant est suffisante, la paroi se déplace dans le régime précessionnel.

iii) Si $\boldsymbol{\beta_T = \alpha}$, les couples $\mathbf{T_{NA}}$ et $\mathbf{T_\alpha}$ se compensent quelle que soit la valeur du courant (Figure II.7(a.2)). La paroi se déplace dans le régime laminaire sous l'action de $\mathbf{T_A}$ à la vitesse $v_T = U_T$.

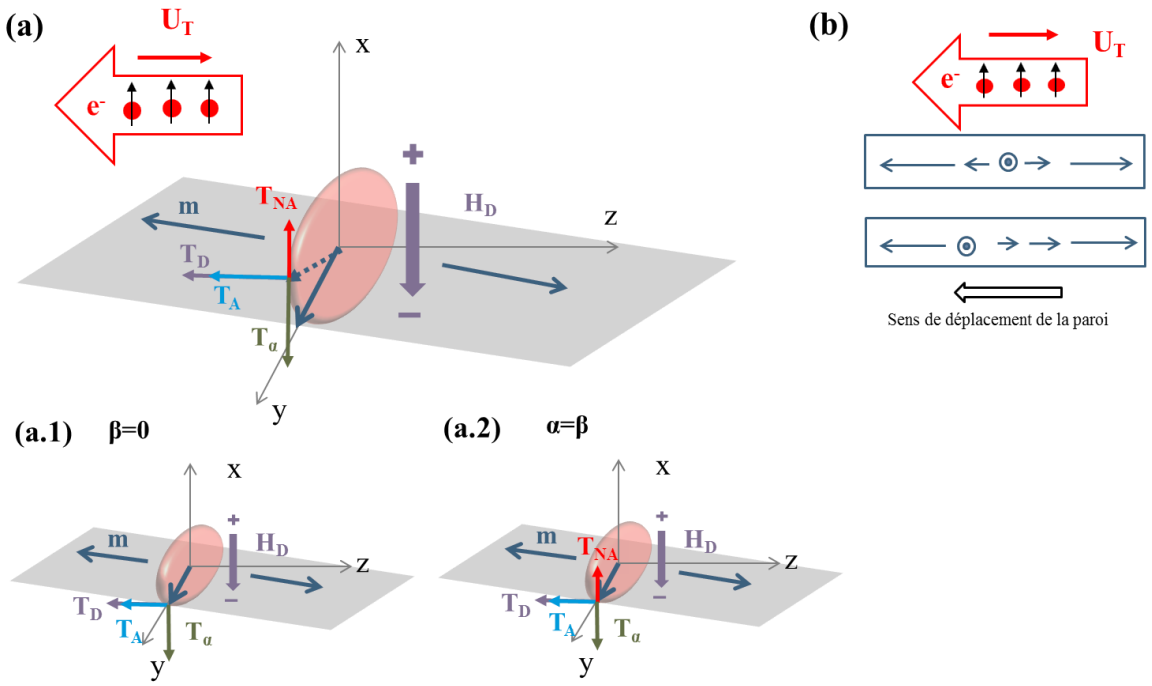

Figure II.7: (a) Représentations schématiques des couples agissant sur l'aimantation d'une paroi transverse 1D soumise à un courant polarisé en spin dans le cas où $\alpha \neq \beta$, $\beta=0$, $\alpha=\beta$. (b) Représentation de la projection de la paroi suivant l'axe *y* avant et après l'application du courant polarisé en spin (Jué, 2013; Da Col, 2014).

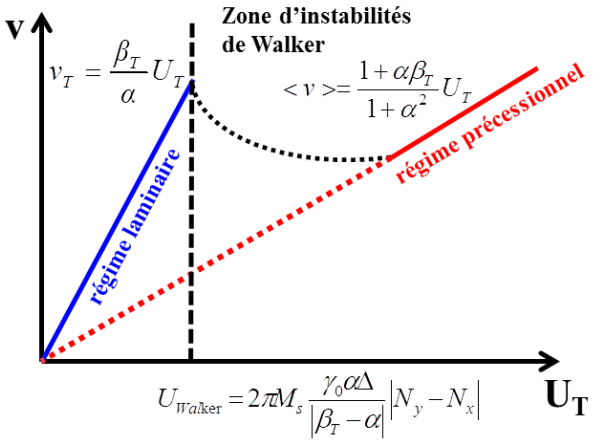

Figure II.8 : Représentation schématique des deux régimes de vitesses de part et d'autre du courant critique de *Walker* dans le cas $\beta_T > \alpha$. Dans le régime laminaire (bleu), la paroi se déplace sans se déformer à la vitesse v_T. Dans le régime précessionnel (rouge) : la paroi se déplace en se déformant à la vitesse moyenne <v>. Les pointillés noirs représentent le régime intermédiaire appelé zone d'instabilités de *Walker*.

5. Estimation du paramètre de non-adiabaticité d'un système

Le paramètre de non-adiabaticité β définit l'efficacité du couple de transfert de spin (STT) d'un système. Plus la non-adiabaticité est élevée, plus l'action du courant de spin sur l'aimantation est importante et donc plus la paroi se déplace rapidement. Il est défini comme le rapport local du terme non-adiabatique sur le terme adiabatique.

5.1. Paramètre de non-adiabaticité dans le modèle de *Zhang et Li*

Les graphes de la Figure II.9(a) représentent les distributions de $\beta(z)$ calculées à partir du rapport local du terme non-adiabatique sur le terme adiabatique avec le logiciel *COMSOL mutiphysics*, dans le cas particulier d'une distribution 1D de Bloch (I.25) avec le modèle de *Zhang et Li*. Il apparaît que la distribution de β n'est pas constante et présente un pic au centre de la paroi. Plus Δ_B diminue, plus le gradient d'aimantation est important ce qui semble augmenter l'amplitude de β. Plus Δ_B est grand, plus on se rapproche de la limite de $\beta_T=(l_{sd}/l_{sf})^2$ constant et tracé en pointillé sur les graphes de la Figure II.9(a)

Nous avons vu au §4 de ce chapitre, que dans le modèle local de *Thiaville*, en dessous du courant critique de *Walker*, la vitesse de déplacement d'une paroi dans un ruban est proportionnelle à β_T non nul selon la formule (II.31). Par analogie, dans le chapitre IV, nous estimerons le paramètre de non-adiabaticité des systèmes de parois transverses dans le régime laminaire à partir des vitesses de propagation v_{simu} calculées dans le modèle de *Zhang et Li* suivant la formule:

$$\beta_{simu} = \frac{v_{simu}\alpha}{U_T}. \qquad \text{(II.33)}$$

5.2. Paramètre de non-adiabaticité dans le modèle de diffusion généralisée (GDD)

Comme précédemment, les graphes de la Figure II.9(b) représentent les distributions du paramètre de non-adiabaticité $\beta(z)$ calculées à partir du rapport local du terme non-adiabatique sur le terme adiabatique dans le cas particulier d'une distribution 1D de Bloch (I.25) dans le modèle GDD. Comme dans le modèle de *Zhang et Li*, β varie avec le gradient d'aimantation et présente un pic au centre de la paroi. Cependant, l'amplitude de la distribution de β est largement diminuée par rapport au modèle de *Zhang et Li*, et plus l_p diminue, plus la valeur moyenne de β diminue également.

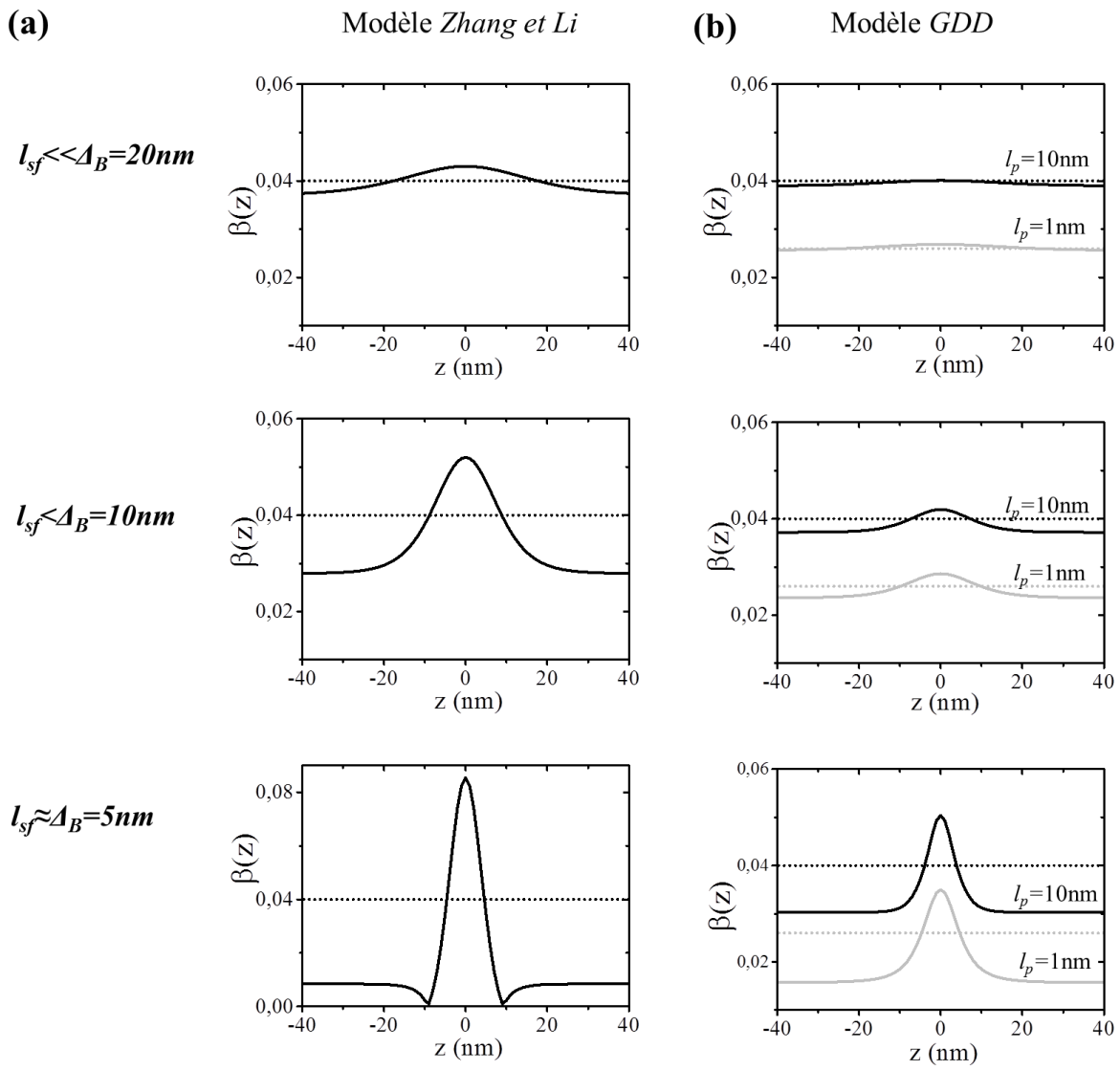

Figure II.9 : Distributions du paramètre de non-adiabaticité β correspondant aux distributions 1D de Bloch avec Δ_B=*{20,10,5}*nm pour l_{sf}=*5,5*nm (a) dans le modèle de *Zhang et Li* avec l_{sd}=*1,1* nm, β_T est constant et tracé en pointillé, (b) dans le modèle GDD avec, l^*=*1,72*nm, l_L=*0,7*nm, l_p=*1*nm et l_p=*10*nm. Le paramètre β_{GDD} est constant et tracé en pointillé pour deux valeurs de l_p. Les graphes sont tracés pour *P=0,76*, C_0=*3,436·10*^{6} [Ωm], D_0=*2,3·10*$^{-3}$m^2/s, V_0=*0,1*V.

Dans le cas d'une paroi longue *($\Delta_B >> l_{sf}$), Petitjean et al.* proposent l'expression suivante du paramètre de non-adiabaticité (Petitjean, et al., 2012):

$$\beta_{GDD} = \frac{l_L l^*}{l_{sf}^2}\left(1+\frac{l^* l_L^2}{l_p l_{sf}^2}+\left(\frac{l_L}{l_p}\right)^2\right)^{-1} . \qquad \text{(II.34)}$$

La valeur de β_{GDD} est tracée en pointillé sur les graphes de la Figure II.9(b) pour les deux valeurs de l_p.

L'évolution du rapport β_{GDD}/β_T en fonction de l_p est tracée sur le graphe de la Figure II.10. Plus l_p est petit, plus $\mathbf{s_{trans}}$ est absorbée. Ceci diminue la quantité de moment magnétique transmis à l'aimantation locale et donc le paramètre de non-adiabaticité. En revanche, pour l_p grand, les effets balistiques d'absorption de $\mathbf{s_{trans}}$ sont négligeables, β_{GDD} tend vers β_T le paramètre de non-adiabaticité du modèle de *Thiaville*.

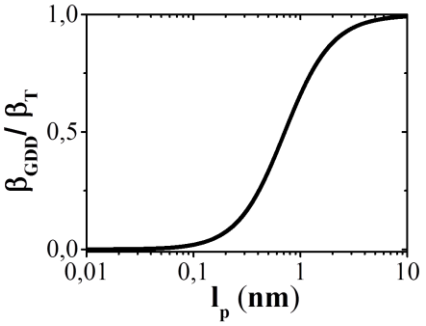

Figure II.10 : Evolution du rapport β_{GDD}/β_T en fonction de l_p avec l_{sf}= 5,5nm, l^*=1,72nm, l_L=0,7nm suivant la formule (II.34). Pour l_p grand: $\beta_{GDD}\rightarrow\beta_T$, pour l_p petit: $\beta_{GDD}\rightarrow 0$.

L'étude de l'impact de la longueur de cohérence de spin transverse l_p sur la propagation de paroi transverse dans le modèle GDD est l'objet de la seconde partie du chapitre IV. Comme précédemment, nous estimerons le paramètre de non-adiabaticité des parois transverses 3D dans le régime laminaire à partir des vitesses de propagation v_{simu} calculées dans le modèle de GDD suivant la formule:

$$\beta_{simu} = \frac{v_{simu}\alpha}{U_{GDD}} \qquad \text{(II.35)}$$

avec $U_{GDD} = \frac{P\mu_B}{M_s e^2\left(1-P^2\right)} j^e$.

5.3. Paramètre de non-adiabaticité effectif

Nous avons vu précédemment que la distribution de $\beta(z)$ n'est pas constante dans les deux modèles (Figure II.9). C'est pourquoi *Claudio-Gonzalez et al.* proposent de définir un paramètre de non-adiabaticité effectif à partir de la distribution d'aimantation **m** d'une paroi rigide quelconque dans un ruban soumis à un courant polarisé en spin (Claudio-Gonzalez, et al., 2012):

$$\beta^{eff} = \frac{\int_V \beta(x,y,z)\left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial z}\right)^2}{\int_V \left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial z}\right)^2} \qquad \text{(II.36)}$$

avec $\beta(x,y,z)$ la distribution spatiale du paramètre non-adiabatique et z la direction de propagation de la paroi.

Dans le cas particulier d'une distribution 1D de Bloch (I.25), le paramètre de non-adiabaticité effectif devient :

$$\beta^{eff\,1D} = \frac{1}{2\Delta_B} \frac{\int_V \beta(z)}{\int_V \cosh^2\left[\frac{z}{\Delta_B}\right]} dz \qquad \text{(II.37)}$$

avec $\beta(z)$ la distribution spatiale unidimensionnelle du paramètre non-adiabatique et z la direction de propagation de la paroi. Dans la suite, $\beta(z)$ est calculé à partir du rapport local du terme non-adiabatique sur le terme adiabatique avec le logiciel *COMSOL multiphysics*.

Les graphes de la Figure II.11(a,b) donnent l'écart relatif entre le paramètre de non-adiabaticité effectif et théorique constant pour une distribution de Bloch 1D en fonction de la largeur de paroi Δ_B dans les deux modèles. On remarque que le paramètre de non-adiabaticité effectif augmente quand la largeur de paroi diminue. On s'attend donc à ce que la vitesse de propagation augmente dans le cas des parois courtes. De plus, l'écart relatif augmente avec la longueur de diffusion de spin l_{sf} . En effet, plus le gradient d'aimantation est important, comme dans le cas des parois courtes, plus l'accumulation de spin ressent d'importantes variations d'aimantation via la diffusion de spin, ce qui augmente la non-adiabaticité du système. En outre, plus l_{sf} est grand, plus l'accumulation de spin ressent la variation d'aimantation sur une longue distance via la diffusion de spin.

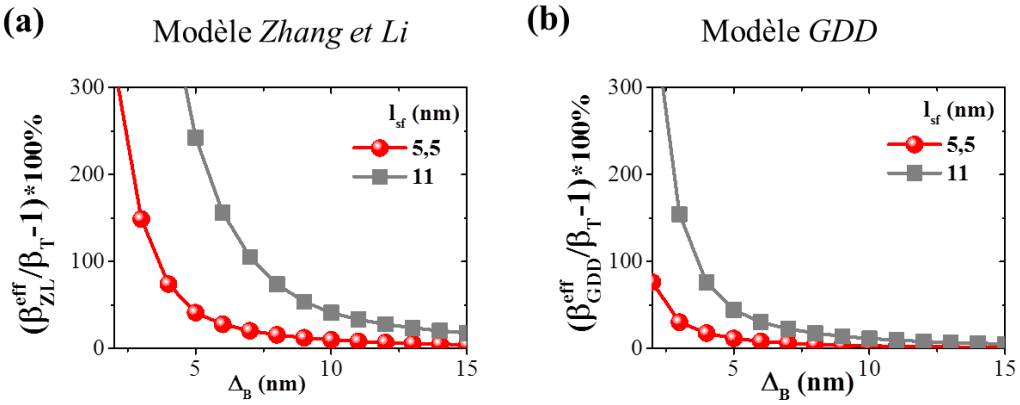

Figure II.11 : Ecart relatif entre le paramètre de non-adiabaticité effectif et la valeur théorique pour une distribution de Bloch 1D en fonction de la largeur de paroi et pour $l_{sf}=5{,}5$nm et $l_{sf}=11$nm (a) dans le modèle de *Zhang et Li* β_{ZL}^{eff1D} pour avec $l_{sd}=1{,}1$nm (b) dans le modèle GDD $\beta_{GDD}^{eff\ 1D}$ pour $l_p=1$nm. L'effet de la diffusion est d'autant plus marquée que la largeur de paroi est petite et l_{sf} est grand. (a) et (b) sont tracés pour $P=0{,}76$, $C_0=3{,}436\cdot10^6$ [Ωm], $D_0=2{,}3\cdot10^{-3}$m^2/s, $V_0=0{,}1$V.

6. Conclusion du chapitre

Les modèles de transport dépendant du spin permettent de décrire l'évolution temporelle de l'accumulation de spin et du couple de transfert de spin. Dans cette thèse, je me suis focalisée sur deux modèles de transport : le modèle diffusif de *Zhang et Li* (Zhang, et al., 2004) et le modèle diffusif généralisé (GDD) (Petitjean, et al., 2012) qui complète le modèle précèdent en prenant en compte l'absorption balistique de spin transverse de l'accumulation de spin. J'ai résolu les équations de transport dans le cas d'une distribution 1D de Bloch afin d'obtenir la distribution d'accumulation de spin et du paramètre de non-adiabaticité pour chacun des modèles.

Le couplage auto-cohérent des modèles de transport avec l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) permet de décrire la dynamique d'une aimantation soumise à un courant polarisé en spin. Sous certaines hypothèses, le modèle diffusif de *Zhang et Li* permet d'obtenir une extension de l'équation LLG appelée forme de *Thiaville* qui permet d'étudier analytiquement la dynamique de paroi sous courant (Thiaville, et al., 2005). Cependant, ce modèle local ne prend pas en compte le phénomène non local de diffusion de spin.

J'ai constaté que dans les modèles de *Zhang et Li* et GDD, l'effet non local de la diffusion de spin se manifeste par l'augmentation de la non-adiabaticité des parois transverses courtes présentant un fort gradient d'aimantation d'autant plus marquée que la longueur de diffusion de spin l_{sf} est grande. Ces résultats confirment les prédictions théoriques et numériques issues de différents modèles de transport (Manchon, et al., 2011; Lee, et al., 2013; Chureemart, et al., 2015; Akosa, et al., 2015). D'autre part, l'étude du modèle GDD montre que l'introduction de la longueur de cohérence de spin transverse l_p induit une renormalisation du paramètre de non-adiabaticité du système. Plus l_p est faible, plus l'absorption balistique de la composante transverse de l'accumulation de spin diminue le moment magnétique transféré à l'aimantation, ce qui diminue la non-adiabaticité du système.

Le chapitre suivant décrit l'implémentation du couplage des deux modèles de transport au sein de notre code micromagnétique éléments finis feeLLGood. L'étude de l'impact de ces deux modèles de transport sur la propagation d'une paroi transverse 3D dans un ruban est l'objet du chapitre IV.

Chapitre III :

Couplage numérique auto-cohérent entre micromagnétisme et transport

1. Micromagnétisme numérique 52

2. Le logiciel micromagnétique éléments finis feeLLGood 54

2.1. Formulations faibles de l'équation LLG 54
2.2. Schémas temporels 56
2.3. Calcul du champ démagnétisant 60

3. Formulation faible du couplage des équations de transport polarisé en spin et de l'équation du micromagnétisme 64

4. Limitations dues à l'introduction de termes de transport dans feeLLGood 67

4.1. Impact du maillage 67
4.2. Simulation d'une structure de longueur infinie et impact du pas de temps 68

5. Conclusion du chapitre 70

Pour étudier la dynamique de l'aimantation dans une structure ferromagnétique soumise à un courant polarisé en spin, on résout l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) éventuellement couplée aux équations de transport. On peut ainsi modéliser le comportement d'un ensemble de moments magnétiques soumis à un champ effectif ou à un courant polarisé en spin en tenant compte des interactions à courte et longue portée entre les moments et des conditions de bord imposées. La majorité des codes micromagnétiques publics sont accessibles sur la page web (ESMJMS, 2014)

Mon projet de thèse fut dédié à l'ajout d'un module résolvant de manière couplée l'équation LLG et les équations de transport dépendant du spin au sein du logiciel micromagnétique éléments finis feeLLGood *(Finite Element LLG Oriented Object Development).* En plus de mon travail d'implémentation numérique des équations de transport, j'ai participé à l'optimisation de ce code. En effet, durant ma thèse, deux modifications majeures ont été introduites dans la nouvelle version du code: la parallélisation du calcul du champ démagnétisant et l'implémentation d'un schéma numérique temporel semi-implicite d'ordre deux convergent et inconditionnellement stable (Alouges, et al., 2014).

La première version de feeLLGood a été développée sous la direction de *J.C. Toussaint* à partir de la proposition de *F. Alouges et P. Jaisson* de projeter l'équation LLG sur un ensemble de fonctions tests appartenant au plan tangent à l'aimantation (Alouges, et al., 2006). Après le travail préliminaire de *H. Szambolics* (Szambolics1, et al., 2008; Szambolics2, et al., 2008), *E. Kritsikis* implémenta une formulation faible innovante de l'équation LLG, un schéma numérique temporel convergent du premier ordre (Alouges, et al., 2012; Kritsikis, et al., 2014) et un traitement optimisé du champ démagnétisant (Kritsikis, et al., 2008). Il créa ainsi notre logiciel micromagnétique éléments finis 3D feeLLGood dont l'utilisation fut étendue grâce à l'ajout du terme de *Slonczewski* (Slonczewski, 1996) pour l'étude de la dynamique de l'aimantation induite par transfert de spin dans des oscillateurs magnétiques (Vaysset, 2012). Par la suite, des modules de post-traitement ont été développés comme celui de *S. Jamet* pour simuler la réponse XMCD-PEEM[3] d'une paroi transverse ou point de Bloch dans un fil cylindrique (Da Col, et al., 2014). Mon projet de thèse s'inscrit dans la continuité de ces travaux et a permis d'étendre l'utilisation de feeLLGood à l'étude de la dynamique de l'aimantation soumise à un courant polarisé en spin en présence de forts gradients de courant et d'aimantation.

La première partie de ce chapitre présente la démarche qui nous a menés au développement d'une approche éléments finis. Puis, une formulation faible innovante de l'équation LLG et son schéma numérique temporel d'ordre deux sont établis dans la deuxième partie de ce chapitre. La méthode d'optimisation de calcul du champ démagnétisant implémentée dans notre logiciel feeLLGood est également présentée. Dans la troisième partie de ce chapitre, nous nous focalisons sur le couplage des équations de transport et de l'équation LLG. Enfin, certaines limitations dues à l'introduction de termes de transport supplémentaires sont discutées dans une dernière partie.

A noter que dans ce chapitre, pour plus de clarté, on utilisera la notation suivante $\partial_t \equiv \frac{\partial}{\partial t}$.

[3] Time-Resolved X-ray Magnetic Circular Dichroism Photoemission Electron Microscopy

1. Micromagnétisme numérique

Plusieurs approches de discrétisation spatiale sont utilisées en micromagnétisme numérique : les approches différences finies (FD) ou volumes finis (FV) adaptées aux géométries parallélépipédiques et l'approche éléments finis (FEM) adaptée aux géométries complexes.

L'approche FD/FV a largement été utilisée pour créer des logiciels micromagnétiques au cours de la dernière décennie, le plus connu étant le logiciel OOMMF (Donahue, et al., 2014). Cette approche FD/FV utilise un schéma temporel explicite pour intégrer l'équation LLG et une méthode optimisée pour calculer le champ démagnétisant (voir §2.3). Elle est bien adaptée pour traiter les systèmes parallélépipédiques pouvant être discrétisés par des mailles régulières. Cependant, comme le montre la Figure III.1(a), ce type de maillage crée une rugosité numérique sur les bords incurvés des structures. La Figure III.1(b) représente la distribution d'aimantation, calculée avec une approche FD[4], d'un plot cylindrique de permalloy (*NiFe)* de diamètre *100*nm et de hauteur *10*nm, possédant une anisotropie magnéto-cristalline uniaxiale dans le plan $K_u=1000$ J/m^3. On remarque que la composante de l'aimantation suivant l'axe de facile aimantation n'est pas invariante quand on tourne le pilier par rapport aux axes du maillage. Autrement dit, l'orientation du maillage introduit un artefact dans les résultats micromagnétiques qui semble diminuer avec la taille des mailles (Figure III.1(c)). *Garcia et al.* proposent une méthode pour lisser les bords en FD/FV mais la technique d'interpolation utilisée est difficile à mettre en œuvre en 3D (Garcia-Cervera, et al., 2003). Une solution alternative bien connue des physiciens consiste à utiliser les éléments finis qui sont adaptés pour décrire des géométries courbes et dont le maillage ne favorise pas d'axe particulier. En effet, dans cette approche, une structure est maillée en N_e éléments irréguliers comme des triangles en 2D ou des tétraèdres en 3D.

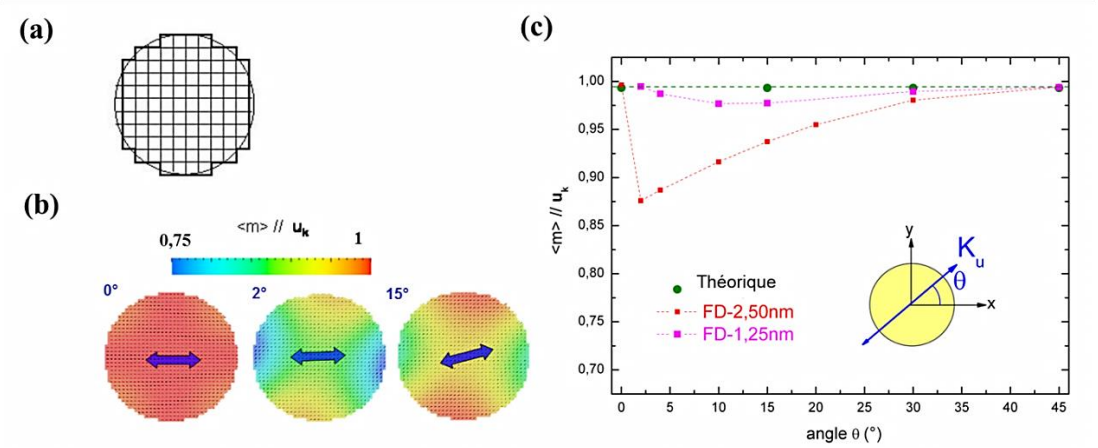

Figure III.1 : (a) Maillage régulier (FD) d'une géométrie courbe qui crée une rugosité numérique. (b) Distribution de la composante moyenne de l'aimantation <**m**> suivant l'axe de facile aimantation $\mathbf{u_k}$ (double flèche bleue) d'un plot cylindrique de permalloy dans une approche FD avec un maillage régulier. (c) Composante moyenne de l'aimantation suivant l'axe de facile aimantation $\mathbf{u_k}$ en fonction de l'angle θ entre l'axe de facile aimantation et les axes du maillage dans une approche FD avec un maillage régulier grossier (carrés rouges) et fin (carrés magenta). La valeur théorique est constante (ronds verts). La rugosité du maillage FD induit un artéfact numérique.

[4] Les résultats en différences finies sont obtenus avec le code GL-FFT développé par *J.C. Toussaint* et validé par comparaison avec la littérature.

Jusqu'à très récemment, les composants de spintronique utilisant le déplacement de parois de domaines étaient principalement composés de structures magnétiques de types rubans ou couches magnétiques à section rectangulaire. C'est pourquoi, de nombreuses études micromagnétiques de qualité ont été menées avec l'approche FD. En revanche, depuis quelques années, de nouveaux composants prometteurs présentant des géométries non régulières plus complexes comme les piliers ou les fils cylindriques à section modulable sont expérimentés (voir chapitre V). Dans ce cadre, l'approche FEM de notre logiciel feeLLGood présente un grand intérêt.

2. Le logiciel micromagnétique éléments finis feeLLGood

Notre logiciel feeLLGood repose sur une approche éléments finis. L'aimantation est échantillonnée aux *N* nœuds d'un maillage en tétraèdres jointifs 2 à 2. Une interpolation par des polynômes de Lagrange[5] d'ordre 1 permet d'estimer la valeur de l'aimantation en tous points de l'espace. Pour connaître l'évolution du profil d'aimantation, l'équation LLG est résolue aux nœuds du maillage grâce à la méthode de Galerkin:

- l'équation LLG est projetée sur un ensemble de fonctions tests pour obtenir une formulation faible respectant la contrainte de la norme de l'aimantation,
- l'aimantation est interpolée par des polynômes de Lagrange dans chaque élément,
- pour tout nœud du maillage, la formulation faible de l'équation LLG est appliquée et s'écrit comme une somme d'intégrales élémentaires sur chaque élément : on obtient alors un système d'équations linéaires où le membre de gauche, écrit sous forme matricielle, fait intervenir des intégrales élémentaires et le membre de droite des vecteurs élémentaires,
- les matrices et vecteurs élémentaires associés à chaque élément sont assemblés respectivement dans une matrice globale et dans un vecteur second membre global,
- le système linéaire obtenu est résolu par un solveur d'équations linéaires. Dans feeLLGood, le solveur utilise la méthode itérative[6] du bigradient conjugué[7] avec un pré-conditionneur diagonal.

2.1. Formulations faibles de l'équation LLG

Pour obtenir une formulation faible de l'équation LLG, on la projette sur des fonctions vectorielles localisées en chaque nœud *i* du maillage appelées fonctions tests. Ces fonctions constituent une base de l'espace dans laquelle s'exprime l'inconnue $\partial_t\mathbf{m}$. Chacune des composantes de ces fonctions tests ressemble à un chapeau et s'annule en tous nœuds du maillage sauf celui localisé en *i* (Figure III.2).

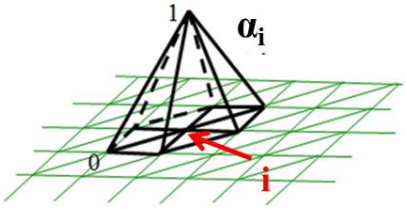

Figure III.2 : Représentation schématique d'une fonction test qui s'annule en tous points du maillage sauf au nœud localisé en *i*.

[5] Les polynômes de Lagrange permettent d'interpoler la valeur d'une variable aux nœuds par un polynôme qui passe exactement par tous les nœuds.

[6] Une méthode itérative est un procédé algorithmique utilisé pour rechercher une solution d'un système d'équations. Elle procède par itérations au cours desquelles elle détermine une succession de solutions approximatives qui se rapprochent graduellement de la solution. Elle est moins couteuse en opérations que la méthode directe qui résout le système linéaire en une seule itération.

[7] La méthode du gradient conjugué permet de résoudre des systèmes d'équations linéaires dont la matrice est symétrique définie positive.

Projection de l'équation LLG dans R^3 (Fredkin, et al., 1998)

Dans une première tentative, *Yang et Fredkin* suggèrent de projeter l'équation LLG sur un ensemble de fonctions tests linéaires de R^3 (Fredkin, et al., 1998). Cependant, si $\partial_t\mathbf{m}$ s'exprime dans cet espace la condition d'orthogonalité $\mathbf{m}\cdot\partial_k\mathbf{m}=\mathbf{0}$ (I.7) n'a pas de raison d'être conservée aux nœuds du maillage. D'ailleurs, *Szambolics et al.* observent en pratique une surdissipation de l'énergie pour de faibles valeurs du coefficient d'amortissement α. En effet, la Figure III.3 représente la relaxation d'un ensemble 2D de moments magnétiques couplés par l'énergie d'échange dans un ruban à section carré *2x2nm* pour $\alpha=0{,}02$. A l'instant initial, l'aimantation présente une distribution sinusoïdale qui s'aligne durant la relaxation. Il apparaît que l'énergie dissipée par le système est plus importante que celle obtenue avec l'approche FD[8]. L'amortissement créé par la projection sur l'ensemble de R^3 est donc trop grand (Szambolics2, et al., 2008).

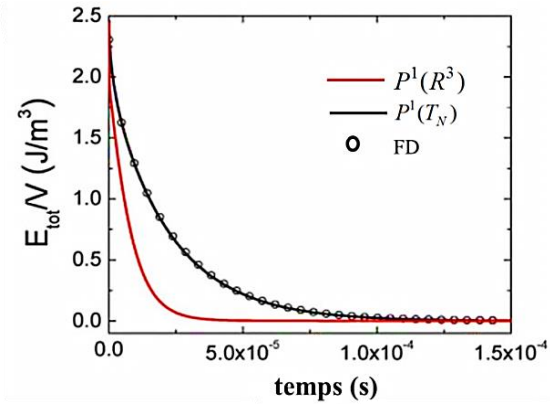

Figure III.3 : Energie volumique totale d'une distribution d'aimantation sinusoïdale soumise à l'interaction d'échange en fonction du temps. La projection de l'équation LLG sur un ensemble de fonction de R^3 engendre une surdissipation de l'énergie du système lors de la relaxation (trait rouge) par rapport à celle obtenue en FD (ronds noirs). En revanche, l'évolution d'énergie obtenue avec la projection dans le plan tangent (trait noir) est cohérente avec l'approche FD (Szambolics2, et al., 2008). $\alpha=0{,}02$.

Projection l'équation LLG dans le plan tangent (Alouges, et al., 2006)

En 2006, *F. Alouges* et *P. Jaisson* suggèrent de travailler sur une équation modifiée de LLG. Pour se rapprocher d'une équation de diffusion, ils proposent d'appliquer à l'équation LLG une rotation de 90° autour de l'aimantation locale. Ceci revient à appliquer $\mathbf{m}\times$(LLG). On obtient la forme forte suivante :

$$\alpha\partial_t\mathbf{m}+[\mathbf{m}\times\partial_t\mathbf{m}]=\gamma_0\left[\mathbf{H}_{eff}-(\mathbf{m}\cdot\mathbf{H}_{eff})\mathbf{m}\right]. \qquad \text{(III.1)}$$

De plus, les auteurs proposent également de projeter l'équation LLG sur un ensemble de polynômes de Lagrange définis dans le plan tangent à l'aimantation :

$$P^1(T_N)=\left\{\mathbf{w}(\mathbf{r})=\sum_{i=0}^{N}\mathbf{e}_i\alpha_i(\mathbf{r}),\ \ \alpha_i\in P^1,\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{m}_i=0\right\}. \qquad \text{(III.2)}$$

Cette nouvelle projection permet de calculer le terme $\partial_t\mathbf{m}$ dans le plan tangent à l'aimantation et de respecter la condition d'orthogonalité $\mathbf{m}\cdot\partial_k\mathbf{m}=\mathbf{0}$ (I.7) à chaque pas de temps et en chaque nœud du maillage. En reprenant le cas test précèdent, présenté sur Figure III.3, *Szambolics et al.* montrent que la nouvelle formulation faible avec projection dans le plan tangent permet d'obtenir un amortissement en accord avec celui obtenu avec une approche FD[7] (Szambolics2, et al., 2008).

[8] Les résultats en différences finies sont obtenus avec le code GL-FFT développé par *J.C. Toussaint* et validé par comparaison la littérature.

Une fois projetée dans le plan tangent à l'aimantation, l'équation LLG s'écrit sous la forme faible suivante, implémentée dans feeLLGood:

$$\alpha \int_V \partial_t \mathbf{m} \cdot \mathbf{w} + \int_V [\mathbf{m} \times \partial_t \mathbf{m}] \cdot \mathbf{w} = \gamma_0 \int_V [\mathbf{H}_{eff} - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_{eff})\mathbf{m}] \cdot \mathbf{w} \,. \qquad \text{(III.3)}$$

Pour résoudre numériquement un tel système linéaire, $\partial_t\mathbf{m}$ doit être exprimé en fonction de **m**. Pour cela, un schéma temporel est mis en place.

2.2. Schémas temporels

L'équation LLG décrit le comportement dynamique de l'aimantation sur une durée t_f. Pour la résoudre numériquement, le temps est discrétisé en pas de temps Δt. A partir de la distribution $\mathbf{m}^n$ d'aimantation à l'instant t, on détermine la nouvelle distribution $\mathbf{m}^{n,1}$ selon le schéma numérique suivant:

$$\mathbf{m}^{n,1} = \mathbf{m}^n + \mathbf{v}\Delta t \,, \qquad \text{(III.4)}$$

suivi d'une phase de normalisation (Figure III.4) pour imposer la norme unitaire de l'aimantation $\mathbf{m}^{n+1}$ à l'instant $n+1$:

$$\mathbf{m}^{n+1} = \frac{\mathbf{m}^{n,1}}{\left|\mathbf{m}^{n,1}\right|} \,. \qquad \text{(III.5)}$$

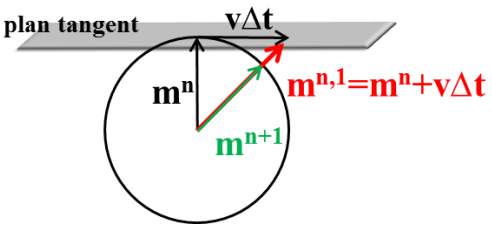

Figure III.4 : Schéma de normalisation du vecteur aimantation **m**. **v** étant calculé dans le plan tangent à l'aimantation, le vecteur $\mathbf{m}^{n,1}$ n'est pas unitaire, c'est pourquoi on doit le normalise pour obtenir $\mathbf{m}^{n+1}$.

On dit que le schéma est d'ordre p si l'erreur locale est en $\vartheta(\Delta t)^{p+1}$. Sur la durée t_f , l'erreur globale se réduit à $\frac{t_f}{\Delta t}\vartheta(\Delta t)^{p+1} = \vartheta(\Delta t)^p$. Dans la suite, une application pédagogique de ce schéma, limitée à un moment magnétique est présentée.

2.2.1. Schéma numérique explicite et application de la notion de plan tangent

Si **v** est calculé à l'instant n : $\mathbf{v}=\mathbf{v}^n=\partial_t\mathbf{m}$ alors $\mathbf{m}^{n,1} = \mathbf{m}^n + \mathbf{v}\Delta t$. Par analogie avec le développement limité de **m** à l'ordre 1 en temps $\mathbf{m}(t+\delta t)=\mathbf{m}(t)+\partial_t\mathbf{m}\delta t+\vartheta(\Delta t^2)$, l'erreur de calcul à chaque pas de temps est en $\vartheta(\Delta t^2)$. Pour cette expression de **v**, le schéma numérique (III.4) est donc du premier ordre.

Pour comprendre comment l'équation LLG est résolue numériquement dans le plan tangent à l'aimantation avec ce schéma explicite, nous nous intéressons à l'évolution temporelle d'un moment unique soumis à un champ effectif $\mathbf{H}_{\mathbf{eff}}$ (Figure III.5(a)).
A chaque itération n, on définit le plan tangent $\{\mathbf{e}^n_p, \mathbf{e}^n_q\}$ de normale $\mathbf{m}^n$, la projection de la forme d'Alouges (III.1) génère un système de deux équations à deux inconnues :

$$\begin{cases} \mathbf{e}^n{}_p \cdot \alpha\, \mathbf{v}^n + \mathbf{e}^n{}_p \cdot \left[\mathbf{m}^n \times \mathbf{v}\right] = \mathbf{e}_p \cdot \gamma_0 \mathbf{H}^n{}_{eff} \\ \mathbf{e}^n{}_q \cdot \alpha\, \mathbf{v}^n + \mathbf{e}^n{}_q \cdot \left[\mathbf{m}^n \times \mathbf{v}\right] = \mathbf{e}_q \cdot \gamma_0 \mathbf{H}^n{}_{eff} \end{cases} \tag{III.6}$$

On peut encore simplifier ce système en faisant intervenir les composantes de $\mathbf{v}\{v_p, v_q\}$dans le plan tangent. On obtient :

$$\begin{cases} \alpha\, v_p^n - v_q^n = \gamma_0 \mathbf{e}_p \cdot \mathbf{H}^n{}_{eff} \\ \alpha\, v_q^n + v_p^n = \gamma_0 \mathbf{e}_q \cdot \mathbf{H}^n{}_{eff} \end{cases} \tag{III.7}$$

La résolution de ce système linéaire permet d'obtenir les valeurs de v_p et v_q qui sont injectées dans le schéma numérique (III.4). Après renormalisation de l'aimantation, on obtient la valeur de $\mathbf{m}^{\mathbf{n+1}}$. La Figure III.5(b) présente l'évolution temporelle des composantes m_x, m_y et m_z de l'aimantation. Les effets des termes de précession et d'amortissement de l'aimantation autour du champ effectif $\mathbf{H}_{\mathbf{eff}}$ décrits par l'équation LLG apparaissent distinctement.

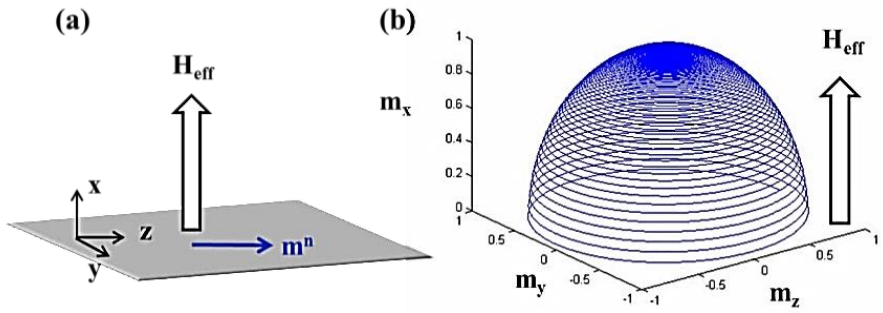

Figure III.5 : (a) Schéma d'un unique moment magnétique soumis à un champ effectif. (b) Représentation de l'évolution temporelle des composantes de l'aimantation lors de l'application d'un champ effectif.

Une telle méthode peut être utilisée pour résoudre la formulation faible (III.3). On montre qu'elle admet toujours une solution. Cependant, elle peut devenir instable si le pas de temps n'est pas suffisamment petit. Par analogie avec l'équation bien connue de diffusion de la chaleur, un schéma temporel semi-implicite a été implémenté afin de stabiliser le schéma numérique.

2.2.2. Schéma numérique semi-implicite d'ordre 1

Dans un schéma numérique semi-implicite $\mathbf{v}$ est évalué à l'instant $n+\theta$, soit : $\mathbf{v}=\mathbf{v}^{n+\theta}=\mathbf{v}^n + \theta\Delta t\, \partial_t^2 \mathbf{m}^n$. Dans ce cas le schéma numérique devient $\mathbf{m}^{n,1} = \mathbf{m}^n + \mathbf{v}^n \Delta t + \theta \Delta t^2 \partial_t^2 \mathbf{m}^n + \vartheta\left(\Delta t^3\right)$ et la formulation faible (III.3) s'écrit alors :

$$\alpha \int_V \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} + \int_V \left[\mathbf{m}^n \times \mathbf{v}\right] \cdot \mathbf{w} - \gamma_0 \theta \Delta t \int_V \frac{\partial \mathbf{H}_{\mathbf{eff}}}{\partial \mathbf{m}} \cdot \mathbf{w} = \gamma_0 \int_V \mathbf{H}_{eff}^n \cdot \mathbf{w} + \theta\left(\Delta t\right). \tag{III.8}$$

Pour obtenir cette formulation faible les termes en Δt ont été négligés : le schéma numérique reste d'ordre 1. Néanmoins, nous allons voir que ce schéma est inconditionnellement stable.

Etude de la stabilité dans le cas du champ principal : le champ d'échange $\mathbf{H}_{\mathbf{eff}} = \Delta \mathbf{m}$

Après quelques opérations et l'application de la condition de Brown (I.31), l'équation (III.8) devient pour le champ d'échange:

$$\int_V \alpha \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} + \int_V \left[\mathbf{m}^n \times \mathbf{v}\right] \cdot \mathbf{w} + \theta \Delta t C \int_V \nabla \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{w} = -C \int_V \nabla \mathbf{m}^n \cdot \nabla \mathbf{w} \tag{III.9}$$

avec $C = \gamma_0 \dfrac{2A_{ex}}{\mu_0 M_s}$.

L'énergie dissipée à chaque itération est proportionnelle au gradient d'aimantation :

$$E(\mathbf{m}) = \frac{1}{2}\int_V (\nabla \mathbf{m})^2 \ . \tag{III.10}$$

Ainsi, la variation de l'énergie entre deux itérations successives vaut:

$$E(\mathbf{m}^{n,1}) - E(\mathbf{m}^n) = -\int_V \alpha \mathbf{v}^2 - \int_V \left(\theta - \frac{1}{2}\right)\Delta t^2 (\nabla \mathbf{v})^2 \ . \tag{III.11}$$

Si $\theta \geq 1/2$, la variation d'énergie entre deux itérations est négative, le système est dissipatif et inconditionnellement stable. De plus, si on pose $w=v$ dans l'équation (III.9), tous les termes de cette équation sont de même signe, l'unicité de la solution est alors également acquise.

Théorème de Bartels - renormalisation

L'aimantation $\mathbf{m}^{n,1}$ obtenue n'est pas unitaire et doit être normalisée pour obtenir $\mathbf{m}^{n+1}$. Le théorème de Bartels (Bartels, 2007) montre que l'opération de renormalisation de l'aimantation décrite par la relation (III.5) tend à stabiliser le schéma en dissipant de l'énergie d'échange, autrement dit:

$$\int_V \left|\nabla \mathbf{m}^{n+1}\right|^2 \leq \int_V \left|\nabla \mathbf{m}^{n,1}\right|^2 \ . \tag{III.12}$$

Toutefois, il est nécessaire que l'aimantation soit échantillonnée sur un maillage en tétraèdres dans lesquels l'angle de chaque dièdre est inférieur à $\pi/2$ ou sur un maillage en pavés droits.

2.2.3. Schéma numérique semi-implicite d'ordre 2

Dans le but d'avoir un schéma numérique qui conserve la propriété de stabilité du schéma précédent mais du second ordre, on souhaite obtenir :

$$\mathbf{m}^{n+1} = \frac{\mathbf{m}^n + \mathbf{v}\Delta t}{\left|\mathbf{m}^n + \mathbf{v}\Delta t\right|} = \mathbf{m}^n + \mathbf{v}\Delta t - \frac{\Delta t^2}{2}\left|\mathbf{v}\right|^2 \mathbf{m}^n + \vartheta(\Delta t^3). \tag{III.13}$$

Pour se faire, *Alouges et al.* proposent de définir **v** comme (Alouges, et al., 2014) :

$$\mathbf{v} = P\left(\partial_t \mathbf{m}^n + \frac{\Delta t}{2}\partial_t^2 \mathbf{m}^n\right). \tag{III.14}$$

avec P la projection dans le plan tangent à l'aimantation.

En différenciant la formulation forte (III.1) par rapport au temps, en remarquant que $\frac{d\mathbf{H}_{eff}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{H}_{eff}}{\partial \mathbf{m}}\partial_t \mathbf{m}$ et en écrivant $\partial_t \mathbf{m}^n = \mathbf{v} + \vartheta(\Delta t)$, les auteurs obtiennent l'égalité suivante :

$$\alpha v + [\mathbf{m} \times \mathbf{v}] = \gamma_0 P\left[\mathbf{H}_{eff} + \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial \mathbf{H}_{eff}^n}{\partial \mathbf{m}}\partial_t \mathbf{v} - \frac{\Delta t}{2}\left[(\mathbf{m}^n \cdot \mathbf{H}_{eff}^n)\partial_t \mathbf{v}\right]\right] + \theta(\Delta t). \tag{III.15}$$

La forme faible de cette équation est obtenue en la projetant sur les fonctions tests appartenant au plan tangent à l'aimantation, soit :

$$\int_V \left[\alpha + \gamma_0 \frac{\Delta t}{2}\left(\mathbf{m}^n \cdot \mathbf{H}_{eff}^n(\mathbf{m}^n)\right)\right]\mathbf{v}\cdot\mathbf{w} + \int_V \left[\mathbf{m}^{n+\theta} \times \mathbf{v}\right]\cdot \mathbf{w} - \gamma_0 \theta \frac{\Delta t}{2}\int_V \frac{\partial \mathbf{H}_{eff}^n}{\partial \mathbf{m}}(\mathbf{v})\cdot \mathbf{w} = \gamma_0 \int_V \mathbf{H}_{eff}^n(\mathbf{m}^n)\cdot \mathbf{w} + \theta(\Delta t)^2 \tag{III.16}$$

Dans ce cas, la précision locale de **v** est d'ordre 2. Ainsi, le schéma numérique est bien d'ordre 2.

Etude de stabilité et limiteur de pente

L'étude de la stabilité est identique à celle menée au paragraphe précédent dans le cas du champ d'échange avec un coefficient d'amortissement renormalisé par $\alpha'=\alpha+X\Delta t$ avec $X\Delta t = \gamma_0\left(\mathbf{m}^n \cdot \mathbf{H}_{eff}^n\left(\mathbf{m}^n\right)\right)\frac{\Delta t}{2}$.

Le nouveau coefficient d'amortissement α' est lié au pas de temps. Pour s'assurer que cette renormalisation ne déstabilise pas la convergence du schéma numérique, en particulier pour les grand pas de temps, on majore $\alpha+X\Delta t$ de la façon suivante (voir Figure III.6) :

- Si $X\Delta t \geq 0$, le système est dissipatif quel que soit le pas de temps. Néanmoins, pour éviter une trop grande dissipation, on impose la limite suivante : si $X\Delta t \geq \alpha r$ avec r fixé alors $\alpha' = \alpha + \alpha r$. Ainsi, pour un pas de temps trop grand, le système sous dissipe de l'énergie.
- Si $X\Delta t \leq 0$, on distingue deux cas :

  (i) si $\left|X\Delta t\right| \geq \alpha$ le système n'est plus dissipatif, c'est pourquoi on fixe la valeur du coefficient d'amortissement renormalisé à $\alpha' = \frac{\alpha}{1+r}$ avec r fixé.

  (ii) si $\left|X\Delta t\right| \leq \alpha$, le système est dissipatif. Néanmoins, pour éviter une surdissipation pour une valeur de $\left|X\Delta t\right|$ proche de α, α' est approximé par $\alpha' = \frac{\alpha}{1-\frac{X\Delta t}{\alpha}}$.

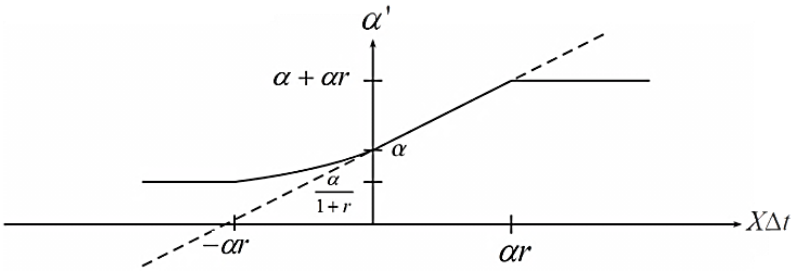

Figure III.6 : Limiteur de pente du coefficient d'amortissement renormalisé afin d'assurer la stabilité du schéma numérique.

2.2.4. Application numérique : test du θ-schéma

Pour valider expérimentalement l'ordre 2 de l'erreur engendrée par le θ-schéma précèdent, *Alouges et al*. proposent d'étudier la relaxation d'une distribution vortex au sein d'un pilier de permalloy de *20nm* d'épaisseur et *200*nm de diamètre, maillé avec des tétraèdres de *4*nm de côté (Alouges, et al., 2014). Les paramètres matériaux sont ceux du permalloy (*NiFe*), le coefficient d'amortissement est de $\alpha=0,05$. La Figure III.7 représente l'écart entre l'énergie calculée et l'énergie théorique en fonction du pas de temps. L'erreur engendrée suit une loi quadratique en Δt^2 : le schéma numérique est bien de l'ordre 2.

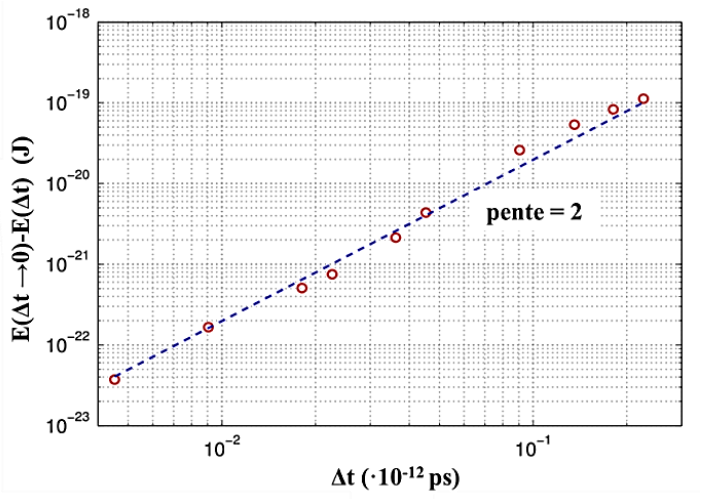

Figure III.7 : Différence entre l'énergie calculée et l'énergie théorique (ronds rouges). Il apparaît que l'erreur suit une loi quadratique (trait pointillés) : l'erreur est d'ordre 2 en temps (Alouges, et al., 2014).

L'implémentation de la formulation faible innovante de l'équation LLG (III.16) proposée par *Alouges et al.* permet d'assurer la stabilité et la convergence de notre code micromagnétique éléments finis feeLLGood. Elle nous permis de mener les simulations présentées aux chapitres IV et V sur la propagation de parois transverses dans des rubans et des fils. Cependant, nous allons voir que le calcul du champ démagnétisant est le facteur limitant.

2.3. Calcul du champ démagnétisant

En micromagnétisme, le champ démagnétisant est le seul champ à longue portée. Les *N* nœuds du maillage contribuent au calcul du champ en chacun des nœuds. Le calcul direct est donc en $\vartheta(N^2)$. Le premier paragraphe de cette partie présente la méthode « fast multipoles » (FMM) du calcul du champ démagnétisant implémentée dans feeLLGood et parallélisée au cours de ma thèse. Pour les études numériques menées sur des rubans réguliers, nous avons développé une version hybride transverse [9] de feeLLGood détaillée dans un second paragraphe. Cette version présente le même schéma numérique que feeLLGood mais le champ démagnétisant est calculé par transformées de Fourier. Cette version hexaédrique du code est appelée Hex-feeLLGood et n'est applicable que dans le cas d'un maillage régulier.

2.3.1. Calcul du champ démagnétisant par la méthode des « fast multipoles » (feeLLGood)

Au §0 du chapitre I, nous avons vu que les équations de Maxwell peuvent se résumer en l'absence de courant par l'équation de Poisson magnétique suivante:

$$\mathbf{H_d} = -\nabla \varphi_m \qquad \text{(III.17)}$$

$$\Delta \varphi_m = \nabla \cdot \mathbf{M} \qquad \text{(III.18)}$$

avec φ_m le potentiel magnétique. Il est possible d'utiliser l'équation précédente comme formulation forte et de l'intégrer avec une approche FE (Szambolics1, 2008). Cependant, le temps de calcul croît en loi de puissance $\vartheta(N^{4/3})$ en 2D et devient important en pratique. De plus, cette méthode est très sensible à la taille finie du domaine de calcul.

L'approche la plus efficace à ce jour pour calculer le potentiel magnétique est celle des « fast multipoles » (FMM) proposée par *Greengard, et al*. (Greengard, et al., 1987). On écrit le potentiel

[9] *Fast Frourier Transform*

magnétique φ_m sous la forme d'intégrales de volume et de surface faisant intervenir la fonction de Green suivante:

$$G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\,. \tag{III.19}$$

L'expression de φ_m est discrétisée sur un maillage éléments finis et intégrée par la méthode de Gauss :

$$\varphi_m(\mathbf{r}) = \sum_{i=0}^{M} \rho_i G(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)\,. \tag{III.20}$$

où ρ_i est la distribution discrète de charges aux points de Gauss et M les points sources désignant les charges surfaciques et volumiques. Les N nœuds du maillage où est évalué φ_m sont les points cibles. Pour bien comprendre en quoi consiste la méthode « fast multipoles » (FMM), nous nous limitons à une distribution 2D de sources et de cibles afin d'utiliser la représentation affine 2D du potentiel au point *r(x,y)* en nous appuyant sur le papier pédagogique de *Greengard* et *Rokhlin* (Greengard, et al., 1987).

Soit m sources situées dans une boule[10] fermée de rayon r centrée à l'origine et schématisée sur la Figure III.8. Le potentiel magnétique $\varphi_{\rho i}$ créé par chaque source i d'affixe z_i au point cible d'affixe z extérieur à la boule est de la forme *:*

$$\varphi_{\rho_i}(z) = \rho_i \log(z - z_i)\,. \tag{III.21}$$

En faisant un développement en série, on montre que le potentiel magnétique total créé au point cible d'affixe z peut s'écrire comme un développement multipolaire tronqué à p termes:

$$\varphi_m(z) = R\log z + \sum_{k=1}^{p} \frac{1}{z^k} \sum_{i=1}^{m} \frac{-\rho_i z_i^{\,k}}{k}\,. \tag{III.22}$$

avec $R = \sum_{k=1}^{m} \rho_i$ et m le nombre de sources prises en comptent dans le développement. On montre que l'erreur décroît avec p d'autant plus vite que $r/|z|$ est petit par rapport à 1. Ainsi, plus le point cible d'évaluation du potentiel magnétique est loin des points sources, plus le rayon r de la boule peut augmenter et donc le nombre de points sources m pris en compte dans le développement à p termes également.

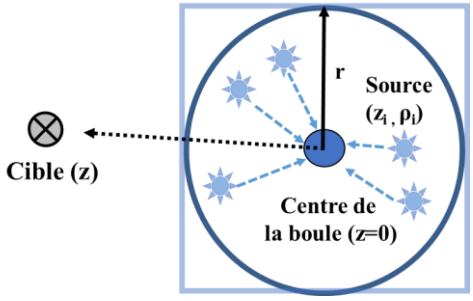

Figure III.8: Représentation schématique d'une boule de rayon r centrée en l'origine contenant m sources d'affixe z_i. Les charges contenues dans le boule créent le potentiel $\varphi_{\rho i}$ sur le point cible d'affixe z.

Cette factorisation du potentiel magnétique permet de propager l'information des sources vers des points intermédiaires (ou « middleman »), puis des points intermédiaires vers les cibles. Pour des raisons de convergence de la série et pour encore optimiser le temps de calcul, on fait intervenir plusieurs niveaux de sites intermédiaires. De plus, la mise en application de l'algorithme nécessite

[10] Dans un espace euclidien, une boule fermée centrée en l'origine et de rayon réel r, est l'ensemble des points dont la distance à l'origine est inférieure ou égale à r.

des opérations de tri. Ainsi, le temps de calcul, qui aurait pu être linéaire avec le nombre *N* de sources, nécessite en fait NlogN opérations. La méthode FMM permet donc de réduire les $\vartheta(N^2)$ opérations d'un calcul direct à ϑ(NlogN) opérations (voir Figure III.9).

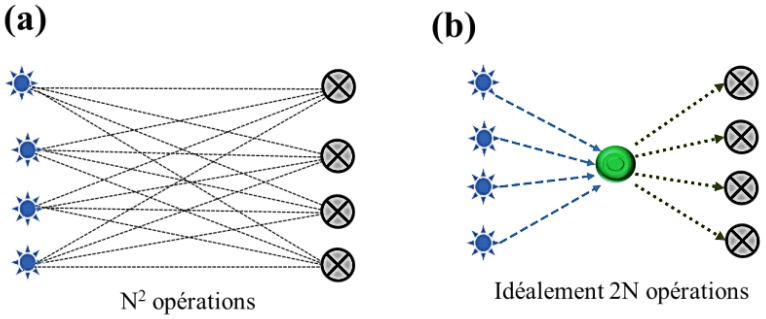

Figure III.9 : Représentations schématiques du calcul du champ démagnétisant (a) direct où les *N* sources (étoiles) interagissent avec les *N* cibles, (b) par le biais d'un site intermédiaire ou « middleman » dans la méthode des « fast multipole » (FMM).

Dans la version initiale de feeLLGood, *E. Kritsikis* a introduit un module FMM monocoeur (Ying, et al., 2004). Durant ma thèse, une collaboration avec l'INRIA Bordeaux nous a permis de tester une librairie de FMM parallélisée multicoeurs sur une même machine (INRIA, 2015). La Figure III.10(a) représente le temps de calcul du champ démagnétisant avec le module FMM monocoeur et le module FMM multicoeurs en fonction du nombre de nœuds de la structure et suivant le nombre de cœurs utilisés. Pour le nombre typique de nœuds de nos structures soit 10^5, le module FMM multicoeurs réduit le temps de calcul du champ démagnétisant de *10*s à *0,6*s pour 4 cœurs. Comme le montre la Figure III.10(b), la vitesse de calcul augmente encore pour 8 puis 16 cœurs mais sature rapidement avec le nombre de cœurs, le calcul limitant étant alors l'évaluation du développement multipolaire de chaque niveau.

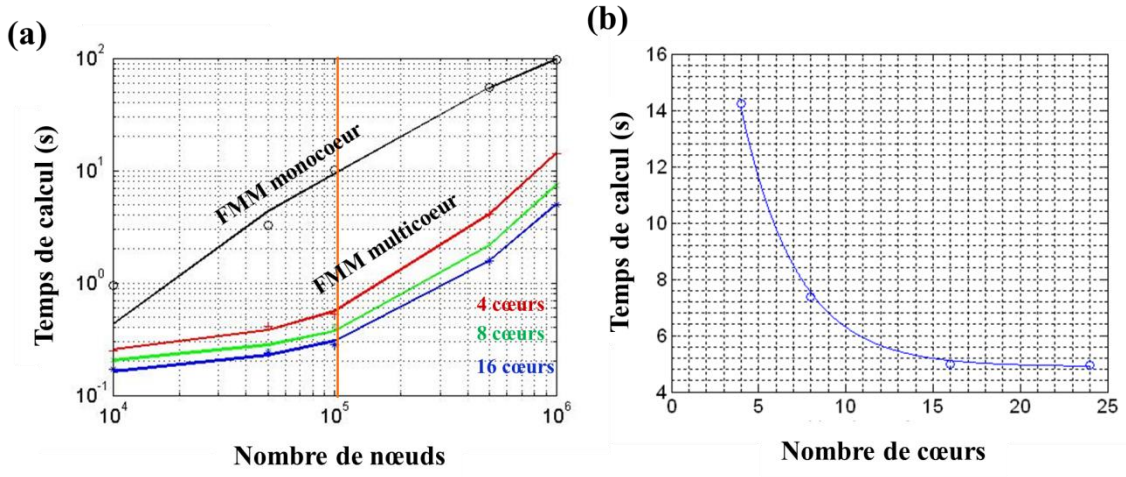

Figure III.10 : Temps de calcul du champ démagnétisant (a) en fonction du nombre de nœuds avec le module FMM monocoeur et le module FMM multicoeurs, la droite vertical orange représente l'ordre de grandeur du nombre de nœuds que présentent nos structures, (b) en fonction du nombre de cœurs avec le module FMM multicoeurs pour un maillage d'environ 10^5 nœuds.

2.3.2. Calcul du champ démagnétisant à base de FFT (Hex-feeLLGood)

Comme une partie de nos études numériques concernent la modélisation de rubans magnétiques à section rectangulaire, nous avons développé une version hybride FE/FFT de feeLLGood appelée Hex-feeLLGood qui conserve la formulation faible de l'équation LLG (III.16) mais dont le calcul du champ démagnétisant utilise des transformées de Fourier (FFT).

Pour ce faire, on discrétise la structure sur un maillage en hexaèdres droits en faisant intervenir la technique d'interpolation de Gauss. L'expression intégrale du champ démagnétisant (I.23) s'écrit alors :

$$\mathbf{H_d}(\mathbf{r}) = \int_V \rho_m(\mathbf{r}')\nabla G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')dV' + \oint_s \sigma_m(\mathbf{r}')\nabla G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')dS' \qquad \text{(III.23)}$$

avec *G(**r**)* la fonction de Green (III.19). Comme le champ est calculé à partir du produit de convolution du gradient de Green par la densité de charges volumiques et surfaciques, on utilise un théorème bien connu de la transformée de Fourier (FT) d'un produit de convolution. Le champ démagnétisant peut alors s'écrire :

$$\mathbf{H_d} = FT^{-1}\left[FT(\rho_m)FT(\nabla G) + FT(\sigma_m)FT(\nabla G)\right] \qquad \text{(III.24)}$$

avec FT^{-1} la transformée de Fourier inverse.

Le calcul d'une transformée de Fourier par l'algorithme des «Fast Frourier Transform» (FFT) n'est possible que si les charges surfaciques et volumiques se trouvent sur un réseau à pas constant. Cette méthode n'est donc utilisable que dans le cas d'un maillage régulier pour lequel les charges volumiques sont définies aux centres des mailles et les charges surfaciques aux centres des surfaces des mailles (Figure III.11 (b)). Grâce à cette méthode, le champ démagnétisant est calculé au centre des mailles et de leur surface correspondant à la position du point de Gauss utilisé pour l'interpolation.

Sur l'histogramme de la Figure III.11(c), il apparaît que le recours aux FFT permet de réduire le temps de calcul du champ démagnétisant par rapport aux méthodes multipolaires, d'environ 3 fois dans le cas de l'utilisation du module FMM multicoeurs.

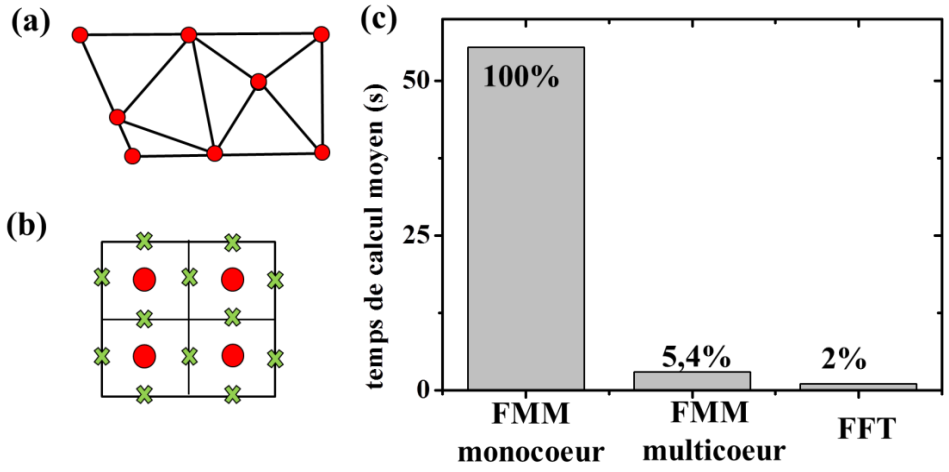

Figure III.11 : (a) Schéma d'un maillage irrégulier d'une approche élément finis: le champ démagnétisant est calculé via le potentiel magnétique aux nœuds du maillage. (b) Schéma d'un maillage régulier d'une approche différences finies : le champ démagnétisant est calculé directement au centre des mailles à partir des charges magnétiques volumiques (points rouges) et surfaciques (croix). (c) Histogramme du temps de calcul moyen sur 10 itérations du champ démagnétisant d'un ruban régulier de permalloy de dimensions *L=1000*nm, *w=40*nm et *d=5*nm présentant *26163* nœuds. Le pourcentage est calculé par rapport au temps de calcul du champ démagnétisant avec le module FMM monocoeur.

3. Formulation faible du couplage des équations de transport polarisé en spin et de l'équation du micromagnétisme

Au chapitre II, plusieurs modèles de transport permettant d'exprimer le couple de transfert de spin ont été présentés: le modèle diffusif de *Zhang et Li* (Zhang, et al., 2004), et le modèle diffusif généralisé (GDD) (Petitjean, et al., 2012). Le cœur de mes travaux de thèse fut l'implémentation de ces modèles de transport au sein de notre code feeLLGood. Cette partie est dédiée à la description de la méthode de couplage des équations de transport du modèle de *Zhang et Li* et de l'équation LLG (II.16). La méthode de couplage des équations de transport du modèle GDD et de l'équation LLG est similaire. En outre, la formulation faible de la forme de *Thiaville* est également présentée.

A chaque itération, à partir des distributions d'aimantation $\mathbf{m}^n$ et d'accumulation $\mathbf{s}^n$ à l'instant *n*, on résout de manière stationnaire les équations de transport du système (II.16) à partir de l'expression de $\mathbf{j}^s$ du modèle de *Zhang et Li* afin de calculer le couple de transfert de spin en chaque point du maillage. Le couple de transfert de spin est ensuite injecté dans l'équation LLG pour d'obtenir la valeur de l'aimantation à l'instant *n+1* en tous points du maillage. Le schéma de la Figure III.12 illustre ce couplage numérique.

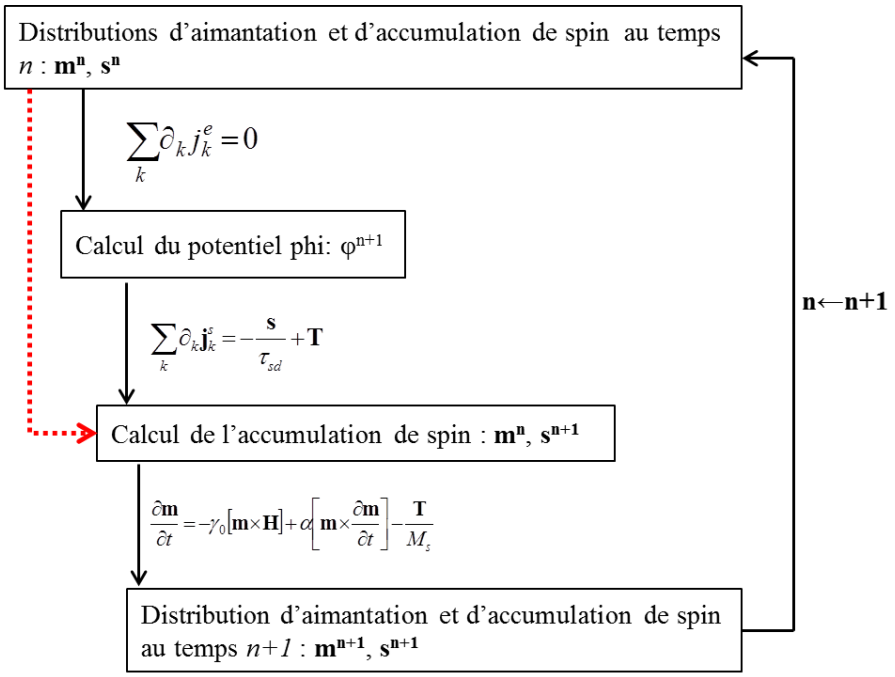

Figure III.12 : Routine de couplage alterné et parallèle (flèche rouge) des équations de transport et de l'équation LLG.

Dans le modèle de *Zhang et Li*, $\mathbf{j}^e$ évolue suivant l'équation de conservation de charge (II.16) dont la formulation faible après projection sur des fonctions tests appartenant à R^3 est:

$$\int_V \sum_k \partial_k j_k^e \alpha_i = 0 \qquad \text{(III.25)}$$

avec $k=\{x,y,z\}$, $j_k^e = -C_0 \partial_k \varphi + \frac{ePD_0}{\mu_B} \sum_h m_h \cdot \partial_k s_h$ et $h=\{x,y,z\}$.

En supposant que le courant électrique reste tangent à la surface, on résout cette équation à partir de des distributions d'aimantation $\mathbf{m}^n$ et d'accumulation de spin $\mathbf{s}^n$ à l'instant *n* pour obtenir les distributions du potentiel électrique φ^{n+1}, des courants de charge $\mathbf{j}^e$ et de spin $\mathbf{j}^s$ à l'instant *n+1*. Puis, on résout la seconde équation de transport du système (II.16) qui décrit l'évolution de l'accumulation de spin dans le régime stationnaire ($\partial_t\mathbf{s}$=0). La forme faible de cette équation après projection sur les fonctions sur des fonctions tests appartenant à R^3 est:

$$\int_V \sum_k \partial_k \mathbf{j}_k^s \cdot \mathbf{w} = -\int_V \frac{\mathbf{s}}{\tau_{sd}} \cdot \mathbf{w} - \int_V \frac{1}{\tau_{sd}} [\mathbf{s} \times \mathbf{m}] \cdot \mathbf{w} \qquad \text{(III.26)}$$

avec $k=\{x,y,z\}$, $\mathbf{j}_k^s = \frac{\mu_B P C_0}{e} \partial_k \varphi \, \mathbf{m} - D_0 \partial_k \mathbf{s}$. En supposant que le courant de spin reste tangent à la surface, on résout cette équation à partir des distributions d'aimantation $\mathbf{m}^n$, du potentiel électrique φ^{n+1}, et des courants de charge $\mathbf{j}^e$ et de spin $\mathbf{j}^s$ à l'instant *n+1* pour obtenir la distribution $\mathbf{s}^{n+1}$ de l'accumulation de spin à l'instant *n+1*. Il est également possible de résoudre les deux équations de transport simultanément comme illustré en pointillé rouge sur la Figure III.12.

Une fois la distribution de l'accumulation de spin $\mathbf{s}^{n+1}$ calculée, elle est injectée dans la formulation faible de l'équation LLG (III.16) à laquelle est intégré le couple de transfert de spin (STT) afin d'obtenir la distribution $\mathbf{m}^{n+1}$ d'aimantation spin à l'instant *n+1*.

Forme locale de Thiaville

Afin de comparer le modèle couplé de *Zhang et Li* avec le modèle local, nous avons implémenté, dans feeLLGood, l'équation LLG étendue dans le modèle local de *Thiaville* (II.29) (Thiaville, et al., 2005) dont la forme forte est :

$$\alpha \partial_t \mathbf{m} + [\mathbf{m} \times \partial_t \mathbf{m}] = \gamma_0 \mathbf{H}_{eff} - [\mathbf{m} \times [\mathbf{U}_T \cdot \nabla] \mathbf{m}] - \beta [\mathbf{U}_T \cdot \nabla] \mathbf{m} . \qquad \text{(III.27)}$$

Cette équation est projetée dans le plan tangent et on utilise le schéma numérique décrit au §2.2.3. Elle permet d'obtenir l'évolution temporelle de l'aimantation sans le calcul intermédiaire de l'accumulation de spin.

Comparaison des temps de calcul entre les modèles non local de Zhang et Li et local de Thiaville

La Figure III.13 représente le temps de calcul moyen avec Hex-feeLLGood d'une distribution d'aimantation soumise à un courant polarisé en spin avec la forme locale de *Thiaville* et avec le couplage numérique complet dans le modèle de *Zhang et Li*. Les paramètres de simulation sont détaillés dans le Tableau IV.1 pour le micromagnétisme et dans le Tableau IV.2 pour le transport. Il apparaît que les temps de calcul du champ magnétostatique et de la résolution de l'équation LLG (module micromagnétisme) sont similaires. Cependant, dans le cas du couplage numérique, la résolution des équations de transport augmente le temps de calcul total. C'est pourquoi, l'étude de l'impact de l'introduction des termes de transport dans feeLLGood sur la convergence du schéma numérique, présentée dans le paragraphe suivant, a été menée avec la forme forte du modèle local de *Thiaville* (III.27) .

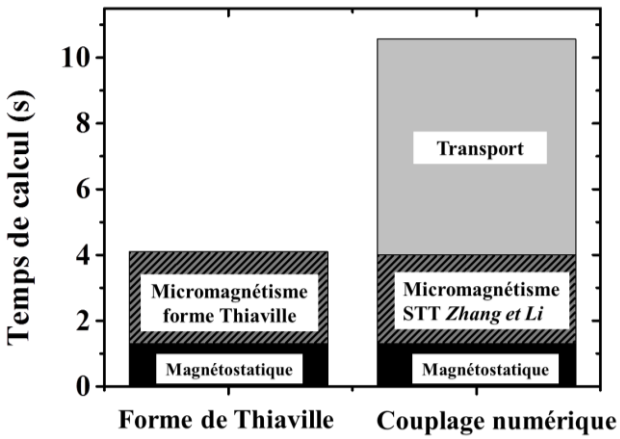

Figure III.13 : Temps de calcul moyen sur 10 itérations de la distribution d'aimantation d'un ruban de permalloy de dimensions $1000\times40\times5\text{nm}^3$ présentant *31563* nœuds et soumise à un courant polarisé en spin $j^e=4\cdot10^{10}\text{A/m}^2$ avec l'expression locale de *Thiaville* et avec le couplage numérique complet dans le modèle de *Zhang et Li*.

4. Limitations dues à l'introduction de termes de transport dans feeLLGood

Le couplage numérique des équations de transport et de l'équation LLG dans feeLLGood nous a permis de simuler la dynamique d'une distribution d'aimantation en présence d'un courant polarisé en spin. Cependant, nous avons observé que l'introduction de termes de transport dans la formulation faible (III.16) perturbe la convergence du schéma. Cette partie est dédiée à la description des instabilités liées au choix du maillage, du référentiel et du pas de temps. Pour estimer ces perturbations, nous avons étudié la dynamique d'une paroi transverse soumise à une différence de potentiel $V_0=0{,}01V$ dans un ruban de permalloy de dimensions $1000\times40\times5nm^3$ présentant *31563* nœuds. Les autres paramètres de simulation sont détaillés dans le Tableau IV.1 pour le micromagnétisme et le Tableau IV.2 pour le transport.

4.1. Impact du maillage

Nous avons tout d'abord calculé la vitesse de propagation d'une paroi transverse dans un ruban discrétisé par trois différents maillages : Delaunay et octopus traités avec feeLLGood et un maillage hexaédrique traité avec Hex-feeLLGood, tous représentés sur la Figure III.14(a). Ces maillages ont été générés par le mailleur *gmsh* à l'exception du maillage octopus créé par un code « maison ». Dans le cas du maillage Delaunay, aucune symétrie particulière n'est observée aux nœuds. En revanche, pour les maillages octopus et régulier, la symétrie des branches en chaque nœuds est élevée comme sur un maillage FD. Le graphe de la Figure III.14(c) représente l'évolution temporelle de la position moyenne de la paroi sur l'axe *z* pour les trois maillages. On observe que les dynamiques obtenues avec les maillages réguliers et octopus sont en accord avec le comportement linéaire théorique $v_T=\beta_T/\alpha U_T$ (II.31). En revanche, la dynamique calculée avec le maillage Delaunay dévie fortement des résultats précédents.

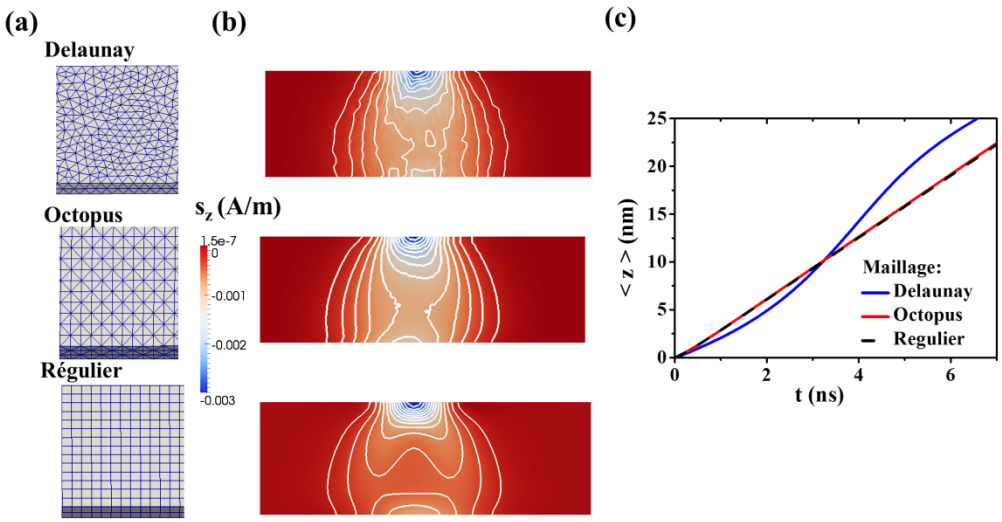

Figure III.14 : (a) Représentation de la surface des trois maillages du ruban. (b) Distributions spatiales (zoom) de la composante longitudinale de l'accumulation de spin s_z de la paroi pour chacun des maillages. (c) Déplacement de la paroi obtenu avec les trois maillages dans un ruban de permalloy de dimensions $1000\times40\times5\text{nm}^3$ présentant *31563* nœuds et soumis à un courant polarisé en spin $j^e=4\cdot10^{10}\text{A/m}^2$.

Comme nous l'avons vu, la distribution d'aimantation est interpolée par des fonctions linéaires dans chaque élément du maillage. De ce fait, la dérivée spatiale de l'aimantation est constante par élément. Comme on peut le voir sur la Figure III.14(b), la distribution d'accumulation de spin, calculée à partir de la dérivée spatiale de l'aimantation suivant la formule (II.26), ressent donc fortement le maillage. Le manque de symétrie locale aux nœuds du maillage semble augmenter la perturbation. En effet, les maillages réguliers ou octopus, totalement symétriques aux nœuds présentent une distribution d'accumulation de spin moins perturbée que le maillage Delaunay. Comme le couple de transfert de spin qui propage la paroi est lié à la distribution d'accumulation de spin, il ressent également l'orientation locale du maillage. C'est pourquoi la propagation de la paroi est plus perturbée par le maillage Delaunay. Néanmoins, pour une taille de maille suffisamment petite, cet effet diminue.

Pour résumer, le maillage régulier décrit la dynamique attendue pour les rubans, c'est donc celui que nous avons utilisé pour simuler la propagation de parois dans les rubans du chapitre IV. Néanmoins, comme nous l'avons vu au §1 de ce chapitre, les géométries courbes comme les fils à section circulaire ne peuvent être décrites par un maillage régulier. C'est pourquoi, pour modéliser la propagation de parois dans les structures complexes du chapitre V, nous avons utilisé un maillage de Delaunay fin *(<2nm).*

4.2. Simulation d'une structure de longueur infinie et impact du pas de temps

Dans les chapitres IV et V, nous étudions la propagation de parois de domaines dans des rubans et des fils de taille finie présentant une longueur bien supérieure aux autres dimensions. Pour diminuer le temps de calcul, nous avons choisi de travailler sur des structures courtes et de simuler une longueur infinie. Pour cela, il est nécessaire de supprimer les charges magnétiques des extrémités pour éviter le retournement d'aimantation. De plus, pour simuler une géométrie infinie à partir d'une structure finie, nous avons utilisé les deux méthodes suivantes: le recentrage de la paroi dans le référentiel fixe du laboratoire et le suivi de la paroi dans son référentiel mobile. Nous allons voir que la méthode utilisée influe la dynamique en fonction du pas de temps choisi.

Recentrage dans un référentiel fixe

La distribution d'aimantation se déplace dans un référentiel géométrique supposé fixe. On définit une boîte de recentrage de longueur l petite par rapport à la longueur totale de la structure contenant la distribution d'aimantation. Quand la paroi arrive à l'extrémité de la boîte, c'est-à-dire quand la position moyenne maximale de la paroi vaut l, la distribution d'aimantation est translatée à l'entrée de la boîte, et ainsi de suite durant toute la propagation.

Référentiel mobile

La distribution d'aimantation peut-être calculée dans un référentiel géométrique mobile qui suit la paroi. A chaque itération, le référentiel se déplace sur la même distance que celle parcourue par la paroi. Soit v_0 la vitesse de la paroi de domaines suivant l'axe z avec $\{z,t\}$ le référentiel fixe et $\{z',t'\}$ le référentiel mobile liés par le changement de variable suivant : $\begin{cases} z = z' + v_0 t \\ t = t' \end{cases}$.

Les dérivées partielles dans le référentiel fixe peuvent s'exprimer en fonction de celles dans le référentiel mobile :

$$\begin{cases} \partial z = \partial z' \\ \partial t = \partial t' - v_0 \partial z' \end{cases} \tag{III.28}$$

Ces expressions des dérivées partielles sont introduites dans la formulation forte de l'équation LLG (III.1) qui devient :

$$\alpha \partial_{t'} \mathbf{m} + [\mathbf{m} \times \partial_{t'} \mathbf{m}] = \gamma_0 v_0 \partial_{z'} \mathbf{m} - [\mathbf{m} \times \partial_{z'} \mathbf{m}] + [\mathbf{H}_{eff} - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_{eff}) \mathbf{m}], \tag{III.29}$$

à laquelle est ajouté le couple de transfert de spin. La dynamique de parois obtenue dans ces deux référentiels devrait être identique. Or nous allons voir qu'elle dépend du pas de temps choisi.

Influence du pas de temps

Dans feeLLGood, pour minimiser le temps de calcul, le pas de temps est adaptatif. Ainsi, si la variation d'aimantation entre deux itérations est supérieure à une valeur fixée, l'itération est rejetée et le pas de temps est divisé par 2. Or, nous avons observé que le choix du pas de temps dépend du référentiel. En effet, le Tableau III.1 indique l'erreur relative de calcul de la vitesse de la paroi transverse en fonction du pas de temps pour les deux référentiels. On constate que la vitesse calculée converge vers la vitesse théorique pour un pas de temps de l'ordre de 10^{-12}s pour le référentiel mobile et de 10^{-13}s pour le référentiel fixe.

Dans le cas d'une paroi transverse soumise aux champs d'échange et démagnétisant, le limiteur de pente du schéma numérique décrit au §2.2.3 de ce chapitre surdissipe l'énergie totale d'autant plus que le pas de temps est grand. Le coefficient d'amortissement est alors surestimé. Or, d'après les formules (II.31) et (II.32), la vitesse de propagation d'une paroi transverse dans un ruban est inversement proportionnelle au coefficient d'amortissement. Ainsi, de manière générale avec ce schéma numérique, la vitesse de propagation de parois dans un ruban est sous-estimée pour les grands pas de temps.

Par ailleurs, comme c'est le référentiel mobile qui se déplace et non la paroi, la variation de la distribution d'aimantation entre deux itérations est très faible. Le pas de temps, qui assure une variation d'aimantation minimum fixée, est donc plus grand que dans le référentiel fixe. Le schéma converge donc plus vite et le temps de calcul est plus court dans le référentiel mobile.

Tableau III.1 : Ecart relatif entre la vitesse de propagation de paroi simulée et théorique en pourcent en fonction du pas de temps dans les référentiels fixe et mobile.

Pas de temps Δt (s)	$\lvert v_{simu}-v_T \rvert / v_T$ (%) référentiel fixe	$\lvert v_{simu}-v_T \rvert / v_T$ (%) référentiel mobile
10^{-12}	$4 \cdot 10^{-1}$	$2 \cdot 10^{-1}$
10^{-13}	$2 \cdot 10^{-2}$	$3 \cdot 10^{-3}$
10^{-14}	$8 \cdot 10^{-3}$	$2{,}5 \cdot 10^{-3}$
10^{-15}	$8 \cdot 10^{-3}$	$2{,}5 \cdot 10^{-3}$

5. Conclusion du chapitre

L'expérience antérieure de notre équipe a permis de concevoir un logiciel éléments finis micromagnétique feeLLGood qui permet de simuler avec précision la dynamique de l'aimantation soumise à un champ effectif. L'objectif de ma thèse était d'étendre son utilisation à la simulation de la dynamique d'aimantation soumise à un courant polarisé en spin en présence de fort gradient de courant et d'aimantation.

Au cours de ma thèse, nous avons optimisé notre propre code éléments finis micromagnétique feeLLGood en implémentant un schéma numérique semi-implicite d'ordre deux en temps, convergent et inconditionnellement stable qui simule avec précision la dynamique de l'aimantation pour un facteur d'amortissement réaliste. Nous avons également optimisé le temps de calcul du champ démagnétisant :

- en créant une version hybride FE/FFT pour simuler la dynamique de l'aimantation dans les rubans appelée Hex-feeLLGood,
- en utilisant une méthode « fast multipole » parallélisée pour les structures complexes.

Pour modéliser la dynamique de l'aimantation sous un courant polarisé en spin, nous avons intégré au sein de feeLLGood un module permettant de coupler numériquement et de façon auto-cohérente les équations de transport avec l'équation LLG dans les modèles diffusif de *Zhang et Li* et diffusif généralisé (GDD). Nous avons également créé une version de feeLLGood contenant les termes de transport locaux du modèle local de *Thiaville* ajoutés à l'équation LLG. Ainsi, le version hexaédrique de feeLLGood, Hex-feeLLGood, nous a permis de réaliser les études numériques sur la propagation de paroi dans les rubans du chapitre IV et la version tétraédrique de feeLLGood celles des structures plus complexes du chapitre V.

Nous avons pu constater que l'ajout d'un terme de transport à une équation de diffusion peut perturber la convergence du schéma numérique qui dépend du choix du maillage et du pas de temps. En effet, si la variation d'aimantation est trop importante il crée une surdissipation de l'énergie qui perturbe la dynamique. De plus, il est apparu que le terme de transport est très sensible à la symétrie locale du maillage

Pour s'affranchir de ces contraintes, deux solutions sont envisageables :

- mettre en place un mailleur de type « bubble meshing » qui augmenterait la symétrie locale du maillage éléments finis (Shimada, et al., 1995; Mughal, et al., 2012),
- développer un schéma numérique qui présenterait une précision spatiale d'ordre 2.

Enfin, nous avons également mis en évidence l'importance du choix de repère d'étude et du pas de temps sur la convergence du schéma numérique.

Chapitre IV :

Parois transverses dans des rubans à section rectangulaire

1. Validation du code micromagnétique 73

1.1. Diagramme de phase 74
1.2. Propagation d'une paroi transverse sous champ magnétique extérieur 74
1.3. Propagation d'une paroi transverse sous courant dans le modèle local de *Thiaville* ... 76

2. Propagation de parois transverses dans le modèle non local de *Zhang et Li* 77

2.1. Distribution spatiale de l'accumulation de spin 78
2.2. Vitesse de propagation en fonction de la largeur de paroi Δ_{Thiele} 79
2.3. Vitesse de propagation en fonction du courant appliqué 81

3. Propagation de parois transverses dans le modèle diffusif généralisé (GDD) 85

3.1. Vitesse de propagation en fonction de la largeur de paroi Δ_{Thiele} 86
3.2. Impact de la longueur de cohérence de spin sur la vitesse de propagation de la paroi 86
3.3. Vitesse de propagation en fonction du courant appliqué 88

4. Conclusion du chapitre 91

Ce chapitre est consacré à l'étude numérique de l'impact des modèles de transport dépendant du spin présentés au chapitre II sur la dynamique d'aimantation dans des rubans à section rectangulaire (Figure IV.1) à savoir : le modèle diffusif non local de *Zhang et Li* (Zhang, et al., 2004) qui prend en compte l'effet non local de diffusion de spin et le modèle diffusif généralisé (GDD) qui intègre en plus les effets balistiques d'absorption de spin transverse (Petitjean, et al., 2012). Dans ce chapitre, nos résultats sont comparés avec ceux obtenus dans le modèle local de *Thiaville* (Thiaville, et al., 2005).

Après avoir validé l'utilisation de feeLLGood pour l'étude de la propagation de parois transverses dans les rubans, nous verrons que la prise en compte des effets de diffusion de spin ou d'absorption de spin transverse peut jouer sur la non-adiabaticité du système et par conséquent impacter la dynamique d'aimantation. Les études numériques de ce chapitre ont été réalisées avec la version hexaédrique de notre code micromagnétique éléments finis Hex-feeLLGood, présentée au chapitre précèdent, au sein de laquelle les équations de transport des différents modèles sont couplées de façon auto-cohérente avec l'équation LLG (I.34).

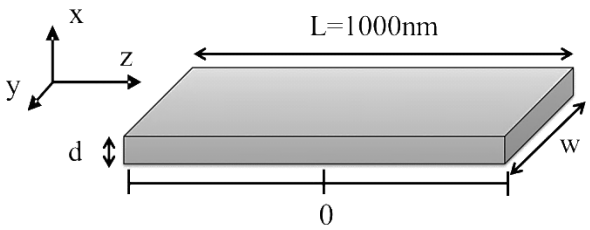

Figure IV.1 : Schéma du ruban étudié de longueur *L=1000*nm, de largeur *w* et d'épaisseur *d*.

1. Validation du code micromagnétique

Tout d'abord, j'ai souhaité valider l'utilisation de notre code micromagnétique pour l'étude de la propagation de parois transverses sous champ magnétique et sous courant polarisé en spin dans un ruban de permalloy. J'ai ainsi reproduit des études statiques et dynamiques de référence de la littérature. Pour cela, j'ai utilisé la formulation forte de l'équation LLG (III.1) implémentée dans Hex-feeLLGood. Les paramètres de simulation micromagnétiques sont ceux usuellement utilisés pour simuler le permalloy ($Ni_{80}Fe_{20}$) et détaillés dans le Tableau IV.1. Le ruban, de longueur *L=1000*nm, est discrétisé en pavés de côtés de longueur inférieure ou égale à *4*nm.

Tableau IV.1 : Paramètres de simulation du micromagnétisme

Aimantation à saturation M_s	$800 \cdot 10^3$	A/m
Constante d'échange A_{ex}	$1 \cdot 10^{-11}$	J/m
Coefficient d'amortissement α	*0,02*	1
Longueur *L*	*1000*	nm
Largeur *w*	*variable*	nm
Hauteur *d*	*variable*	nm

1.1. Diagramme de phase

En premier lieu, je me suis intéressée aux distributions d'aimantation d'équilibre qui se développent dans un ruban ferromagnétique en l'absence de champ magnétique extérieur et de courant électrique et présentées au §4.1 du chapitre I. J'ai reproduit sur la Figure IV.2(a) le diagramme de phase publié par *Y. Nakatani et al.* (Nakatani, et al., 2005). Il permet de déterminer les configurations géométriques du ruban qui favorisent soit une paroi transverse, soit une paroi vortex, en fonction de la largeur *w* et de l'épaisseur *d* du ruban. La transition de phase entre ces deux types de paroi est une transition du premier ordre. C'est-à-dire que les deux distributions existent en dehors de leur zone de stabilité dans un état métastable. De fait, pour construire le diagramme, j'ai calculé les énergies magnétiques obtenues après la relaxation numérique de parois transverses et vortex hors équilibres pour différentes géométries du ruban. Les valeurs de ces énergies sont indiquées sur la Figure IV.2(b) qui reproduit les résultats obtenus par *McMichael et al.* (McMichael, et al., 1997). La paroi énergétiquement plus favorable est ainsi déduite pour chaque géométrie. Les résultats obtenus étant similaires à ceux de la littérature, l'utilisation de notre code pour l'étude des parois de domaines à l'équilibre dans un ruban est validée.

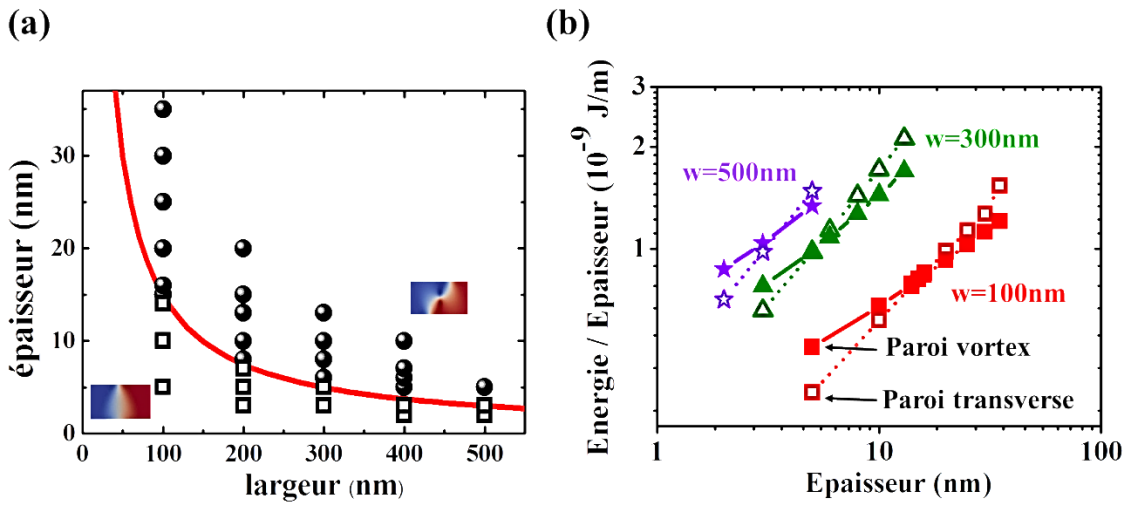

Figure IV.2 : (a) Diagramme de phase représentant la structure micromagnétique la plus favorable entre une paroi transverse et une paroi vortex en fonction de la largeur *w* et de l'épaisseur *d* d'un ruban de permalloy. La courbe rouge représente la formule analytique proposée par *Nakatani et al.* (Nakatani, et al., 2005). Les carrés représentent les géométries pour lesquelles la configuration de paroi transverse est énergétiquement plus favorable. Les ronds représentent les géométries pour lesquelles la configuration de paroi vortex est énergétiquement plus favorable. (b) Energie magnétique totale d'une distribution de paroi transverse (formes vides) et d'une distribution de paroi vortex (formes pleines) par unité d'épaisseur dans un ruban de largeur *w* en fonction de l'épaisseur. Ces deux graphes sont semblables à ceux de la littérature (McMichael, et al., 1997; Nakatani, et al., 2005).

1.2. Propagation d'une paroi transverse sous champ magnétique extérieur

Une fois le code validé pour l'étude statique d'une paroi de domaines dans un ruban, je me suis intéressée au comportement dynamique d'une paroi transverse sous un champ magnétique extérieur en l'absence de courant. Les dimensions latérales du ruban étudié sont fixées à *w=120*nm, *d=5*nm et le champ magnétique est appliqué suivant l'axe principal *z*. La configuration magnétique initiale correspond à une paroi de domaines transverse de type *head-to-head* relaxée au centre du ruban (Figure IV.3). J'ai observé les deux régimes dynamiques décrits au §4 du chapitre II et illustrés sur les images de la Figure IV.3. Pour un champ d'intensité inférieure à une valeur critique, la paroi se déplace sans se déformer à vitesse constante : c'est le régime laminaire (Figure IV.3(a)). En

revanche, si le champ appliqué présente une intensité supérieure à une valeur critique, un vortex apparaît sur le côté latéral du ruban et se propage sur toute la largeur du ruban jusqu'à inverser la distribution de la paroi. Dans ce cas, la vitesse de propagation est ralentie : c'est le régime précessionnel de *Walker* (Figure IV.3(b)).

La Figure IV.4 représente la vitesse de propagation de la paroi en fonction de l'intensité du champ appliqué. On observe la relation linéaire entre le champ appliqué et la vitesse de propagation caractéristique du régime laminaire ainsi que le ralentissement de la paroi du régime précessionnel de *Walker*. Ce graphe est similaire à celui obtenu par *Thiaville et al*. dans une approche différences finies (Thiaville, et al., 2004; Thiaville, et al., 2006). Ainsi, la validité de notre code pour l'étude de parois se propageant sous un champ magnétique extérieur est acquise.

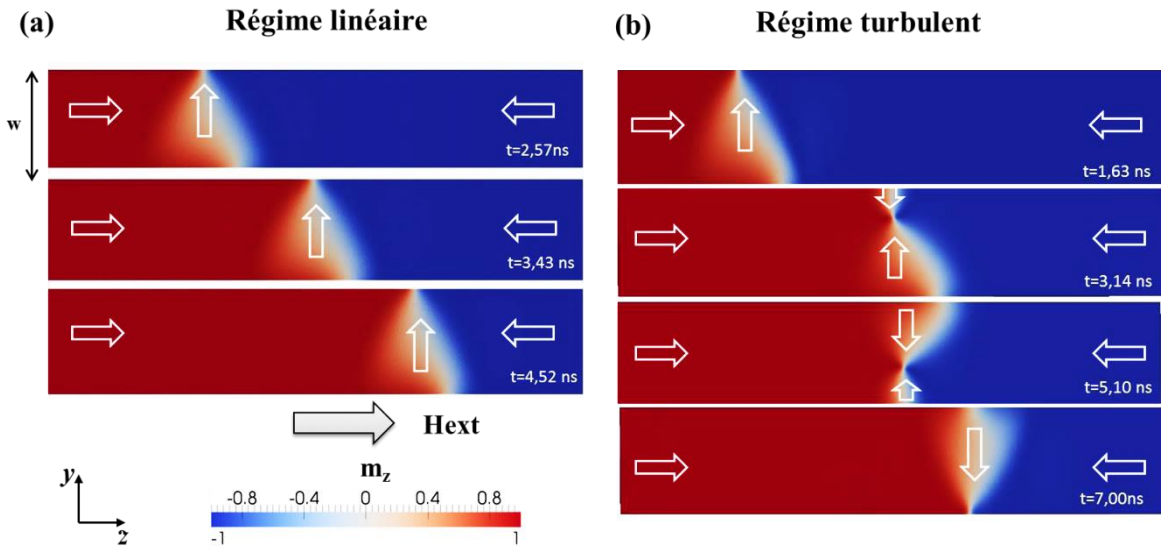

Figure IV.3 : Distributions spatiales de l'aimantation longitudinale m_z (zoom) à des temps successifs d'une paroi transverse soumise à un champ magnétique d'intensité : (a) *1*mT pour le régime laminaire (b) *4*mT pour le régime précessionnel de *Walker*. Les flèches schématisent le sens de l'aimantation locale. (a) et (b) sont tracés pour un ruban de permalloy de largeur *w=120*nm et d'épaisseur *d=5*nm.

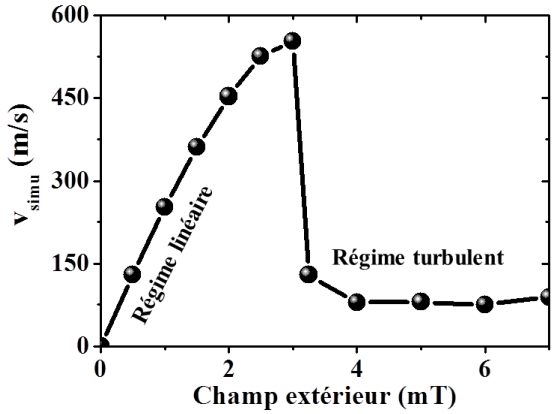

Figure IV.4 : Vitesse de propagation d'une paroi de domaines en fonction de l'intensité du champ appliqué dans un ruban de permalloy de largeur *w=120*nm et d'épaisseur *d=5*nm. La vitesse augmente linéairement avec l'intensité du champ jusqu'au régime précessionnel de *Walker* pour lequel la vitesse diminue drastiquement. Ces résultats sont semblables à ceux publiés dans la littérature (Thiaville, et al., 2004; Thiaville, et al., 2006),

1.3. Propagation d'une paroi transverse sous courant dans le modèle local de *Thiaville*

Une fois le module micromagnétique de Hex-feeLLGood validé, j'ai validé l'implémentation de la forme forte de l'équation LLG étendue avec les termes adiabatique et non-adiabatique du modèle local de *Thiaville* (II.29). Pour ce faire, j'ai étudié la propagation d'une paroi transverse de type *tail-to-tail* relaxée au centre d'un ruban de permalloy de largeur $w=120$nm et d'épaisseur $d=5$nm dont la distribution micromagnétique est donnée sur la Figure IV.5(a) en fonction du courant appliqué $U_T = \frac{P\mu_B}{eM_s} j^e$.

J'ai ainsi retrouvé les vitesses de déplacement de la paroi obtenues par *Thiaville et al.* dans une approche différences finies pour différentes valeurs du paramètre de non-adiabaticité $\beta_T=(l_{sd}/l_{sf})^2$ (Figure IV.5(b)) (Thiaville, et al., 2005).

J'ai observé les régimes dynamiques décrits au §4 du chapitre II suivant la valeur de β_T. Pour une valeur non nulle de β_T et un courant inférieur au courant critique de *Walker*, qui vaut $U_{Walker}=550$m/s pour $\beta_T=0{,}04$, ou pour $\beta_T=\alpha$, la paroi se déplace sans se déformer à la vitesse donnée par la relation $v_T=\beta_T U_T/\alpha$ (II.31). Pour un courant supérieur à U_{Walker} et pour le cas particulier où $\beta_T=0$, le régime précessionnel apparaît et la vitesse de déplacement suit alors la relation (II.32). Ainsi, la validité de notre code pour l'étude de parois se propageant sous courant polarisé en spin est confirmée.

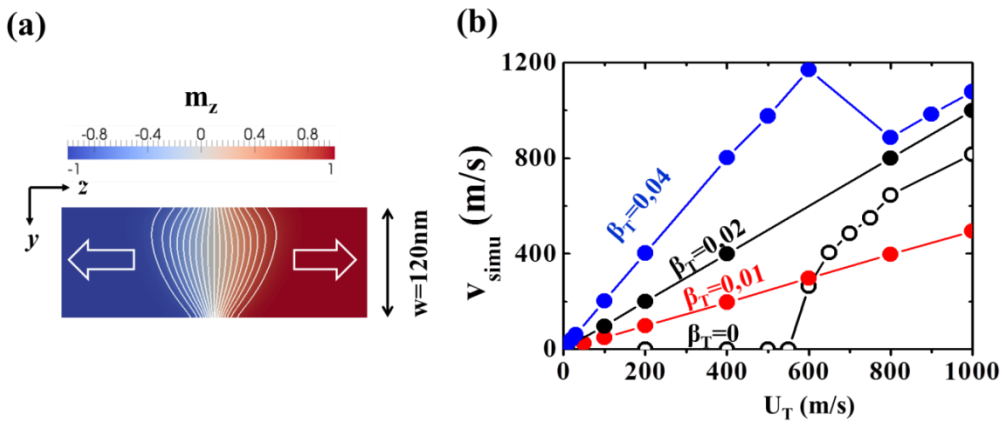

Figure IV.5 : (a) Distribution spatiale de la composante longitudinale m_z de l'aimantation (zoom) d'une paroi transverse de type *tail-to-tail* dans un ruban de permalloy de largeur $w=120$nm et d'épaisseur $d=5$nm. Les lignes blanches représentent les isovaleurs de l'aimantation longitudinale. (b) Vitesses de déplacement de la paroi en fonction du courant U_T pour différentes valeurs de β_T. La vitesse augmente linéairement avec l'intensité du courant suivant la relation (II.31) jusqu'au courant critique de *Walker* après lequel la vitesse est diminuée et suit la relation (II.32). Ces résultats sont semblables à ceux publiés dans la littérature (Thiaville, et al., 2005).

En reproduisant les comportements statique et dynamique d'une paroi transverse dans le modèle local de *Thiaville* décrits dans la littérature, je montre que notre logiciel micromagnétique éléments finis feeLLGood, ainsi que sa version hexaédrique, sont des outils fiables pour étudier la propagation des parois de domaines dans des rubans ferromagnétiques sous courant polarisé en spin.

2. Propagation de parois transverses dans le modèle non local de *Zhang et Li*

Cette partie est dédiée à l'étude de la propagation de parois transverses dans le modèle non local de *Zhang et Li*. Elle fut réalisée grâce au couplage numérique auto-cohérent du système (II.16) des équations de transport du modèle de *Zhang et Li* et de l'équation LLG au sein de notre code Hex-feeLLGood. Dans cette partie, je mets tout d'abord en évidence la non-adiabaticité du système engendrée par l'effet non local de diffusion de spin dans le cas d'une paroi transverse présentant un fort gradient d'aimantation en fonction de la longueur de diffusion de spin. Puis, je quantifie l'impact de la non-adiabaticité grâce à l'estimation de la vitesse de déplacement de la paroi et du courant critique de *Walker*.

Les paramètres de simulations sont ceux usuellement utilisés pour simuler le permalloy ($Ni_{80}Fe_{20}$) et détaillés respectivement dans le Tableau IV.1 pour le micromagnétisme et le Tableau IV.2 pour le transport. L'épaisseur du ruban est fixée à $d=5$nm. Compte tenu des longueurs caractéristiques du transport dépendant du spin, la structure est discrétisée en pavés droits dont les côtés mesurent *1*nm.

Tableau IV.2: Paramètres de simulation de transport dans le modèle de *Zhang et Li*.

Conductivité C_0	*0,004*	1/(Ω·nm)
Polarisation P	*0,7*	1
Coefficient de diffusion D_0	$2{,}3\cdot 10^{-3}$	m^2/s
Densité d'états au niveau de Fermi $N_0(E_F)$	*1,344*	$1/J\cdot nm^3$
Longueur de diffusion de spin l_{sf}	*variable*	nm
Longueur d'échange *s-d* l_{sd}	*1*	nm
Courant local $U_T = \frac{P\mu_B}{M_s e} j^e$	*variable*	m/s

La configuration initiale est une paroi transverse *tail-to-tail* relaxée au centre du ruban dont la distribution micromagnétique est donnée sur la Figure IV.6 (c). Les composantes d'aimantation et d'accumulation de spin suivant l'axe *z* sont appelées composantes longitudinales. Les composantes transverses de l'aimantation et de l'accumulation de spin sont les moyennes arithmétiques des composantes suivant les axes *x* et *y*. La condition de Brown (I.31) est imposée comme condition de Neumann sur les surfaces latérales du ruban. On suppose que les courants de charge et de spin sont tangents à la surface et que l'accumulation de spin tend vers zéro aux extrémités du ruban, loin des forts gradients d'aimantation $\mathbf{s}(-L/2)=\mathbf{s}(L/2)=0$. On impose également aux extrémités du ruban les potentiels électriques suivants : $\varphi(-L/2)=0$ et $\varphi(L/2)=+V_0$. La différence de potentiel V_0 initie le déplacement de la paroi suivant le flux des électrons, c'est-à-dire suivant le sens positif de l'axe *z*.

2.1. Distribution spatiale de l'accumulation de spin

La résolution du système d'équations (II.16) permet d'obtenir la distribution d'accumulation de spin d'une distribution d'aimantation quelconque. Ici, nous étudions la paroi transverse représentée sur la Figure IV.6(c) de largeur $\Delta_{\text{Thiele}}=30$nm dans un ruban de largeur $w=120$nm et d'épaisseur $d=5$nm soumis à une différence de potentiel $V_0=0{,}01$V. La distribution des composantes d'aimantation de cette paroi suivant les axes *x*, *y* et *z* est représentée en gris sur la Figure IV.6(b). Sur ce même graphe, nous avons représenté en vert la distribution des composantes d'accumulation de spin suivant les mêmes axes. La Figure IV.6(d) représente les distributions spatiales des composantes de l'accumulation de spin. On remarque que les distributions d'accumulation de spin présentent des profils comparables à celles obtenues pour une distribution de Bloch 1D (I.25) avec $\Delta_B=30$nm et calculées pour les mêmes paramètres grâce au logiciel *COMSOL Multiphysics* (Figure IV.6 (a)). Néanmoins, comme la paroi est tridimensionnelle, la distribution d'accumulation de spin est plus étendue spatialement. De plus, le pic de la distribution au niveau du centre de la paroi est plus prononcé. Nous verrons, par la suite, que cette augmentation d'amplitude engendre une vitesse de propagation plus élevée. Il apparaît également que les composantes suivant les axes *x*, *y* et *z* suivent l'allure des gradients d'aimantation.

La distribution d'accumulation de spin est fondamentale dans l'estimation de la vitesse de propagation de paroi et la non-adiabaticité du système car le couple de transfert de spin (STT) est proportionnel à l'accumulation de spin (II.10).

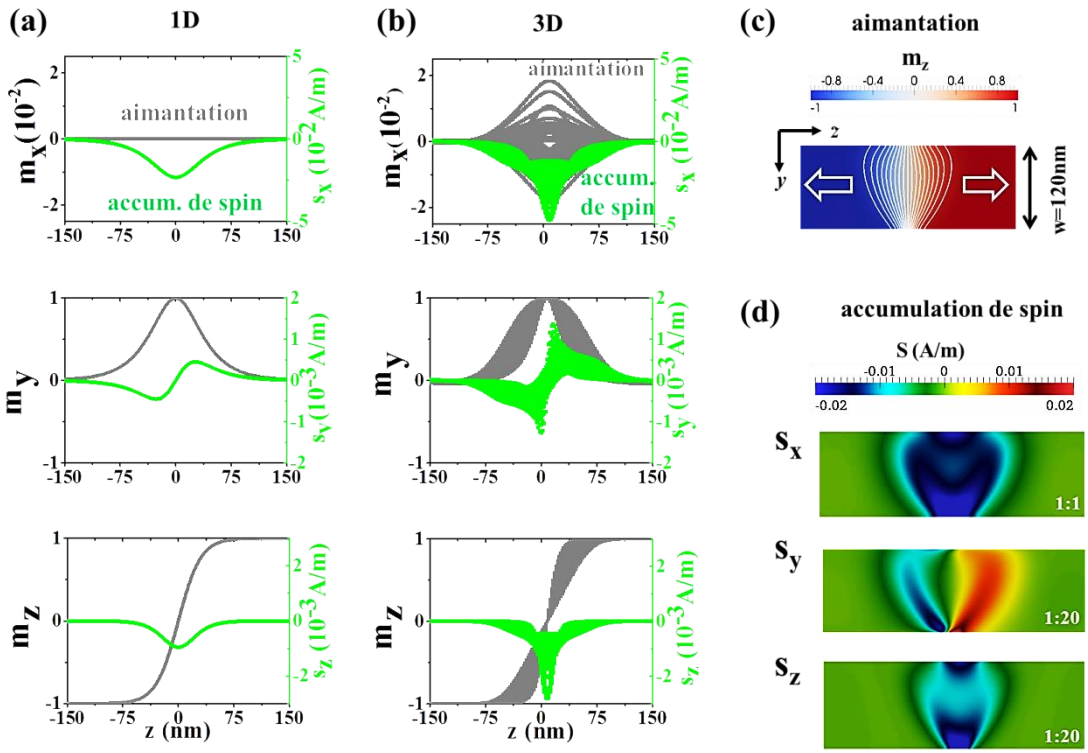

Figure IV.6 : (a) Distributions d'accumulation de spin calculées à partir d'une distribution d'aimantation 1D de Bloch (II.24) avec $\Delta_B=30$nm. (b) Distributions d'accumulation de spin de la paroi transverse 3D. (c) Distribution spatiale de la composante longitudinale de l'aimantation m_z de la paroi (zoom). Les lignes blanches représentent les isovaleurs de m_z. (d) Distributions spatiales des composantes de l'accumulation de spin (zoom). En une coordonnée *z* donnée, les barres décrivent la dispersion de la composante de l'aimantation donnée dans le plan *(xy)*. (b), (c) et (d) sont tracés pour une paroi transverse de largeur $\Delta_{\text{Thiele}}=30$nm dans un ruban de permalloy d'épaisseur $d=5$nm et de largeur $w=120$nm soumise à un courant de densité $j^e=4\cdot10^{10}$A/m^2 ($V_0=0{,}01$V, $I=2{,}4\cdot10^2$mA).

2.2. Vitesse de propagation en fonction de la largeur de paroi Δ_{Thiele}

Selon la Figure II.11(a), le paramètre de non-adiabaticité d'une paroi 1D augmente pour les parois courtes sous l'effet de la diffusion de spin. Il en est de même dans le cas de parois 3D transverses dans un ruban.

Pour rendre compte de cet effet, j'ai fait varier la largeur de paroi Δ_{Thiele} avec différentes largeur w de rubans d'épaisseur fixée d=5nm (Figure IV.7(a)). Plus le ruban est étroit, plus les charges magnétiques des surfaces latérales sont proches, ce qui augmente l'énergie démagnétisante du système. Le système tend alors à limiter le nombre de charges en surface en diminuant la largeur de la paroi. Ainsi, pour une largeur de ruban suffisamment petite, la paroi ressemble à une distribution de Bloch 1D. En outre, plus le ruban et la paroi sont étroits, plus le gradient d'aimantation est grand. Or la Figure IV.7(b) montre que, dans ce cas, l'amplitude de l'accumulation de spin est plus grande, le STT sera donc plus efficace et la non-adiabaticité du système plus importante. On s'attend donc à ce que la vitesse de propagation de la paroi soit plus importante dans le cas d'une paroi courte.

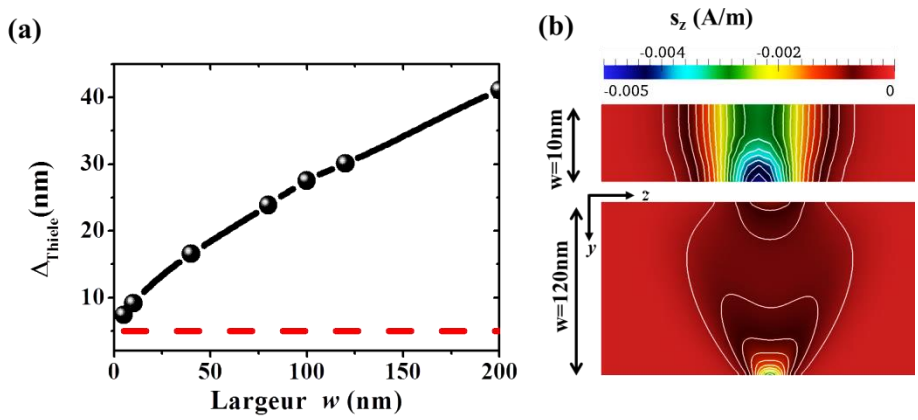

Figure IV.7 : (a) Largeur de paroi en fonction de la largeur du ruban (courbe noire). La ligne de tirets rouges représente la largeur de Bloch 1D analytique (I.25). (b) Distribution spatiale de la composante longitudinale de l'accumulation de spin s_z de la paroi transverse (zoom) dans un ruban d'épaisseur d=5nm et de largeur w=10nm et w=120nm pour l_{sf}=5nm.

Impact du couplage

En variant la largeur du ruban, j'ai pu calculer et représenter sur la Figure IV.8 les vitesses de propagation de parois transverses en fonction de Δ_{Thiele} pour deux valeurs de longueur de diffusion de spin. Les vitesses constantes obtenues dans le modèle local de *Thiaville* sont représentées par un trait rouge. Ces vitesses suivent la formule théorique $v_T=\beta_T U_T/\alpha$ (II.31). Elles sont donc indépendantes de la largeur de paroi Δ_{Thiele}.

En revanche, dans le modèle non local de *Zhang et Li*, la vitesse augmente nettement quand la largeur de la paroi diminue. Ce phénomène mis en évidence par l'étude 1D du §5.3 du chapitre II est la conséquence de la non localité de la diffusion de spin. Plus la paroi est courte, plus l'accumulation de spin ressent d'importantes variations d'aimantation : la non-adiabaticité du système et la vitesse de propagation augmentent. En outre, la vitesse semble tendre vers la vitesse limite obtenue avec le modèle local de *Thiaville* pour des parois longues présentant un faible gradient d'aimantation. Ceci confirme que le modèle local de *Thiaville* n'est valable que dans la limite des parois longues.

Les graphes de la Figure IV.8 indiquent également les vitesses de *Thiele* estimées à partir de la distribution d'aimantation 3D d'équilibre suivant la formule (I.39). Il apparaît que cette expression estime avec précision la vitesse de propagation de la paroi à partir de sa distribution 3D.

Enfin, les graphes de la Figure IV.8 représentent aussi les vitesses de propagation des distributions de Bloch 1D obtenues à partir du paramètre de non-adiabaticité effectif (II.37) $v_{ZL}^{1D} = \frac{\beta_{ZL}^{eff\,1D}}{\alpha} U_T$. On remarque que pour les petites valeurs de l_{sf}, les estimations 1D et 3D donnent un résultat proche pour les parois courtes. En effet, dans les rubans étroits, la paroi 3D se rapproche d'une distribution 1D. En revanche, pour les parois longues qui présentent une distribution d'aimantation triangulaire, on observe que l'écart entre les estimations 1D et 3D s'accroit. De plus, selon la Figure IV.6(a,b), l'amplitude de la distribution d'accumulation de spin 3D de la paroi de largeur $\Delta_{\text{Thiele}}=30$nm est plus grande que celle de la distribution 1D, c'est pourquoi ici la vitesse de propagation 3D est plus importante que la vitesse 1D. Cet effet est d'autant plus important que l_{sf} est grand car la structure magnétique ressent les dimensions latérales du ruban via la diffusion de spin. Il est possible que pour l_{sf} très grand, les estimations des vitesses de propagation 1D et 3D diffèrent pour la même raison.

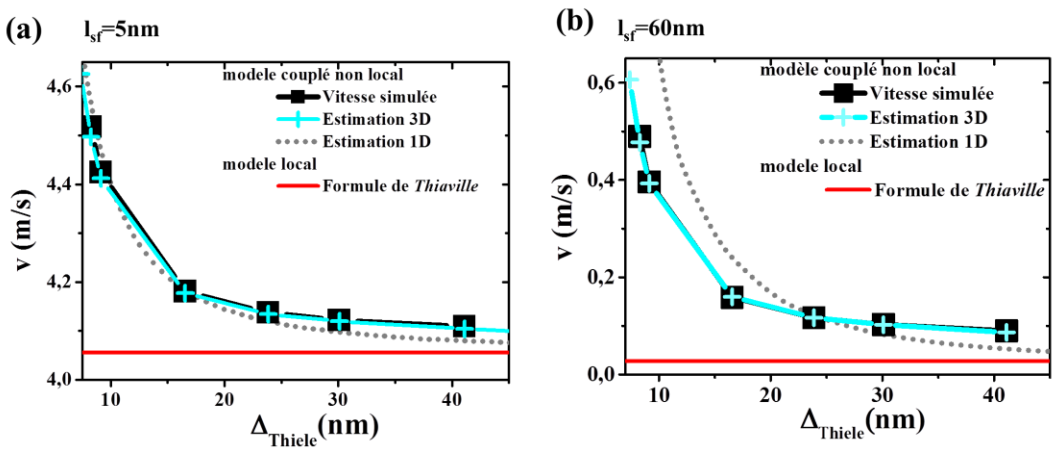

Figure IV.8 : Vitesses de propagation de paroi en fonction de la largeur de paroi Δ_{Thiele} pour (a) $l_{sf}=5$nm et (b) $l_{sf}=60$nm dans un ruban de permalloy d'épaisseur $d=5$nm et de largeur w variable, le courant local appliqué est $U_T=2{,}0278$m/s : il appartient au régime laminaire ($j^e=4\cdot10^{10}$A/m^2, $V_0=0{,}01$V).

Effet de la longueur de diffusion de spin

J'ai résumé la déviation des vitesses entre le modèle local de *Thiaville* et non local de *Zhang et Li* en fonction de la largeur de paroi pour différentes valeurs de l_{sf} sur la Figure IV.9(a) ainsi que les paramètres de non-adiabaticité correspondants (II.33). Les écarts relatifs des vitesses et des paramètres de non-adiabaticité entre le modèle local et non local sont représentés sur la Figure IV.9(b). Plus l_{sf} augmente, plus l'effet non local de la diffusion est marqué car l'accumulation de spin ressent la variation d'aimantation sur une plus longue distance.

Ainsi, on montre que, dans le modèle non local, la vitesse de propagation des parois transverses courtes augmente par rapport au modèle local, c'est la conséquence d'une renormalisation de la non-adiabaticité du système causée par l'effet non local de diffusion de spin.

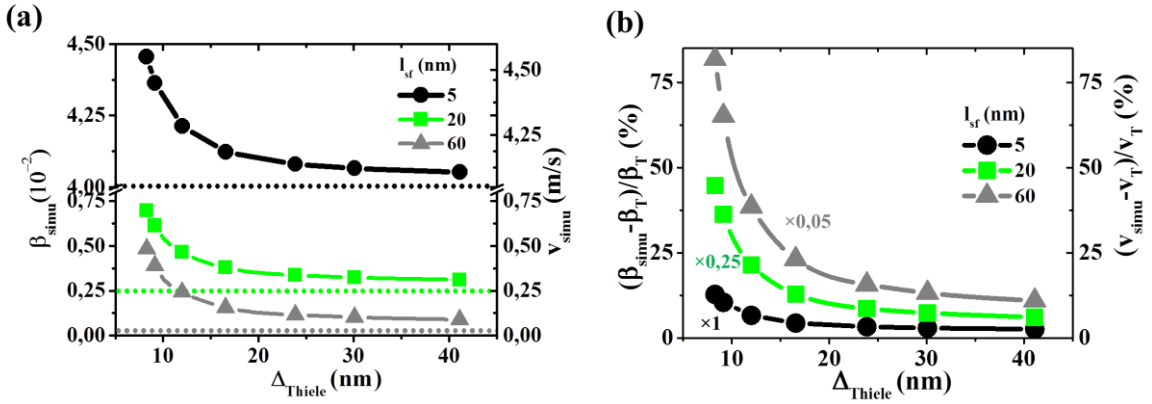

Figure IV.9 : (a) Vitesses simulées de propagation de parois transverses et paramètres de non-adiabaticité estimés avec $\beta_{simu}= v_{simu}\alpha/U_T$. Les lignes en pointillées représentent le paramètre de non-adiabaticité constant dans le modèle local $\beta_T=(l_{sd}/l_{sf})^2$. (b) Ecarts relatifs entre la vitesse calculée et la vitesse obtenue dans le modèle local en pourcent. (a) et (b) sont tracés en fonction de la largeur de paroi Δ_{Thiele} dans un ruban de permalloy d'épaisseur d=5nm et de largeur w variable pour différentes valeurs de l_{sf}. Le courant local appliqué est U_T=2,0278m/s : il appartient au régime laminaire ($j^e=4\cdot10^{10}$A/m^2, V_0=0,01V).

2.3. Vitesse de propagation en fonction du courant appliqué

Le paragraphe précédent montre que la prise en compte de la diffusion de spin engendre une renormalisation du paramètre de non-adiabaticité en fonction de la longueur de diffusion et du gradient d'aimantation d'une paroi transverse soumise à un courant polarisé en spin d'intensité constante. Dans ce paragraphe, je quantifie l'impact de l'effet non local de diffusion de spin sur la non-adiabaticité d'une paroi transverse à travers la vitesse de propagation de la paroi, la valeur du courant critique de *Walker* et celle du paramètre de non-adiabaticité dans le régime laminaire. La paroi étudiée est une paroi transverse *tail-to-tail* de largeur initialement estimée à Δ_{Thiele}=9,13nm dans un ruban de permalloy de largeur w=10nm et d'épaisseur d=5nm. La première colonne de la Figure IV.10 représente l'évolution de la vitesse de propagation de la paroi en fonction du courant local U_T pour différentes valeurs de la longueur de diffusion l_{sf} dans les modèles non local de *Zhang et Li* et local de *Thiaville.*

Les vitesses calculées dans le modèle de *Zhang et Li* sont supérieures à celles calculées dans le modèle local de *Thiaville*. Dans le régime laminaire, ces dernières se superposent avec une ligne de tirets verts suivant la formule analytique (II.31). La différence de vitesse est plus marquée pour les grandes valeurs de l_{sf} (ce qui correspond à β_T petit).

En revanche, les vitesses calculées dans les modèles local et non local semblent se superposent au-delà du domaine de *Walker*, dans le régime précessionnel, en suivant la pente de la formule (II.32) représentée par les lignes vertes pleines. Cette formule indique que dans le régime précessionnel, la vitesse est bien moins sensible à la valeur de β que dans le régime laminaire, c'est pourquoi une renormalisation de β perturbe peu la vitesse de propagation.

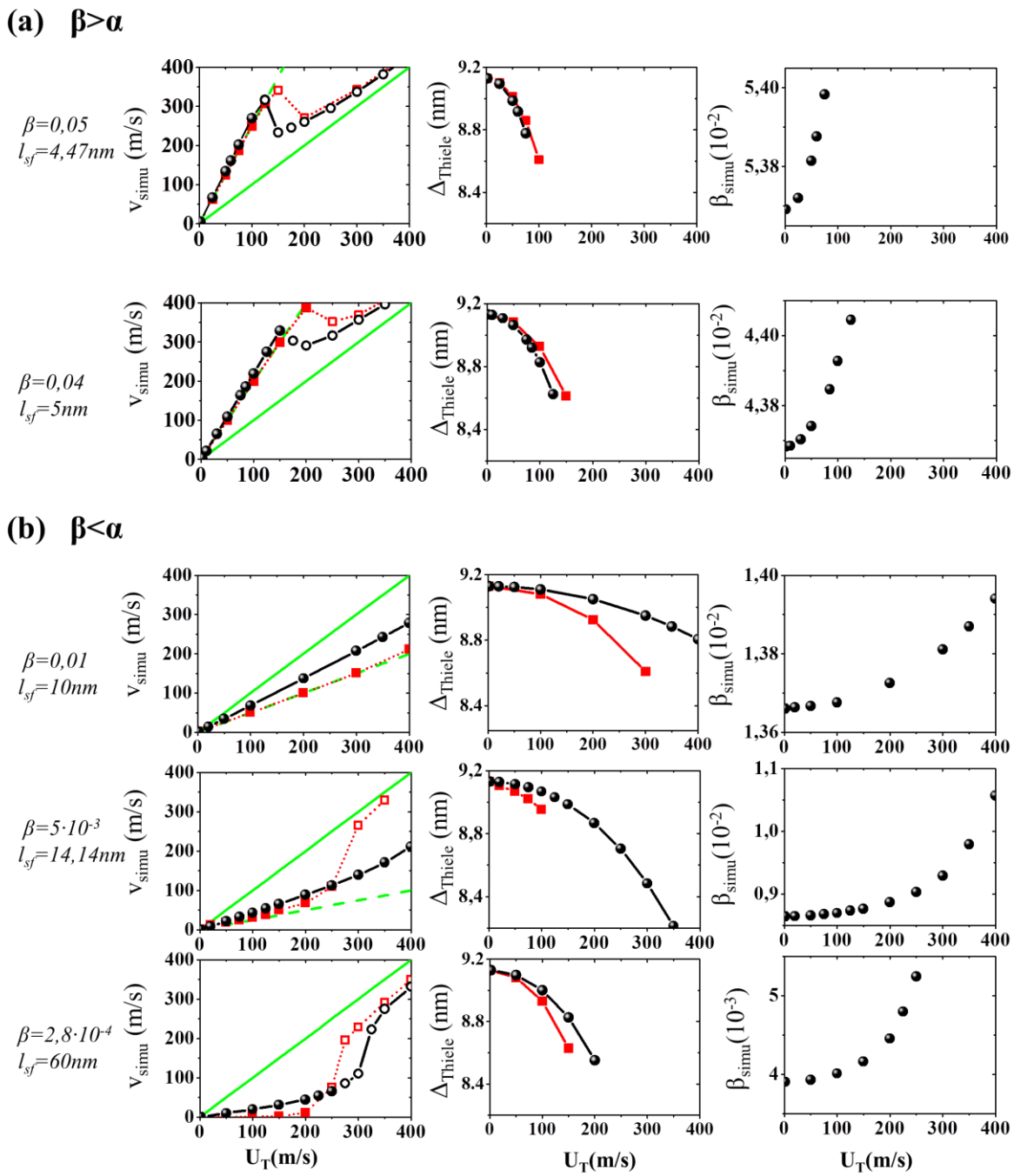

Figure IV.10: La 1ère colonne représente la vitesse de propagation de la paroi dans le modèle local de *Thiaville* (carrés rouges) et non local de *Zhang et Li* (cercles noirs). Les symboles pleins (resp. vides) identifient le régime laminaire (resp. précessionnel). Les lignes vertes représentent les formules analytiques issues du modèle local dans les régimes linéaire (ligne de tirets verts) et précessionnel (ligne pleine). La 2ème colonne représente l'évolution de la largeur de paroi Δ_{Thiele} dans le régime laminaire. La 3ème colonne représente l'évolution du paramètre de non-adiabaticité estimé à partir des vitesses calculées dans le régime laminaire par $\beta_{simu} = v_{simu}\ \alpha/U_T$. Ces trois courbes sont déclinées pour différentes valeurs de l_{sf} et donc de $\beta_T=(l_{sd}/\ l_{sf})^2$. Tous les graphes sont exprimés en fonction de l'intensité U_T du courant appliqué pour un ruban de permalloy de largeur $w=10$nm et d'épaisseur $d=5$nm et pour un coefficient d'amortissement $\alpha=0,02$.

Identification des deux régimes de propagation

Sur la 1ère colonne de la Figure IV.10, on retrouve les régimes laminaire et précessionnel évoqués au §1.3 de ce chapitre pour les modèles non local de *Zhang et Li* et local de *Thiaville*. Les évolutions temporelles de la position moyenne, de la vitesse et de la largeur de paroi Δ_{Thiele} dans les deux régimes, obtenus dans le modèle de *Zhang et Li*, sont données sur la Figure IV.11 pour l_{sf}=5nm. Le comportement de la paroi est qualitativement le même que celui obtenu dans le modèle local. En effet, dans le régime laminaire, une fois l'équilibre dynamique atteint, la paroi se propage à vitesse constante sans se déformer avec une largeur de paroi constante (Figure IV.11(a)). En revanche, dans le régime précessionnel, la propagation de la paroi est en escalier. De plus, la vitesse et la largeur de paroi oscillent autour d'une valeur moyenne (Figure IV.11(b)).

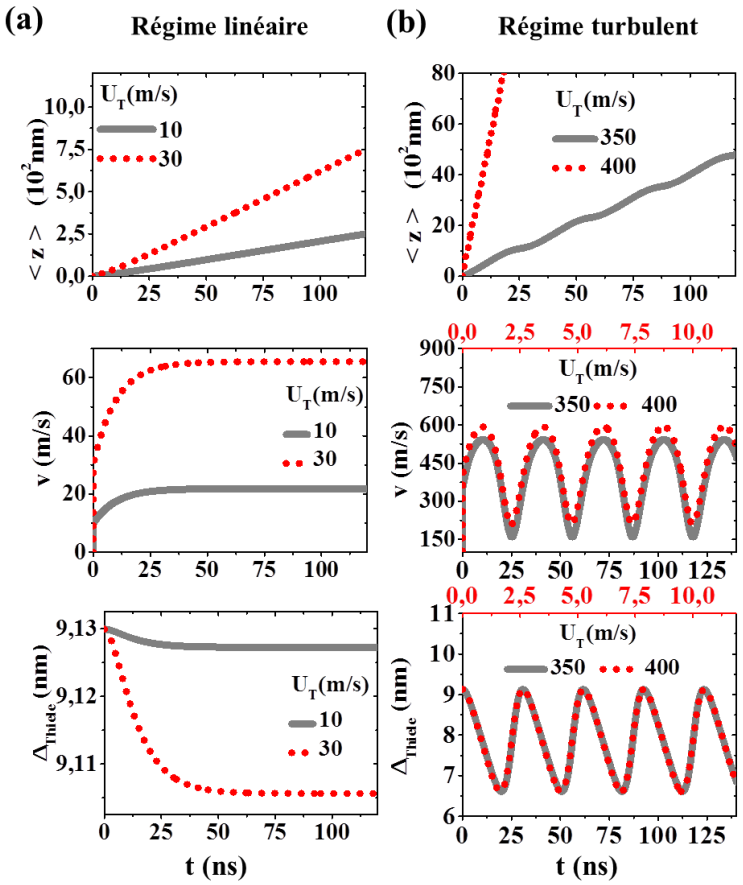

Figure IV.11 : Mise en évidence des régimes (a) laminaire et (b) précessionnel suivant la position moyenne de la paroi sur l'axe *z* (1ère ligne), la vitesse moyenne de propagation (2ème ligne) et la largeur de paroi Δ_{Thiele} (3ème ligne) en fonction du temps. Les graphes sont tracés pour une paroi transverse dans un ruban de permalloy de largeur *w=120*nm et d'épaisseur *d*=5nm dans le modèle non local de *Zhang et Li* pour l_{sf}=5nm.

Impact de la diffusion sur le courant critique de Walker

La renormalisation du paramètre de non-adiabaticité dans le modèle non local est également visible sur la position du domaine de *Walker*. Il apparaît que

- si $\beta_{simu}>\alpha$, les instabilités de *Walker* apparaissent pour un courant critique plus faible dans le modèle non local de *Zhang et Li* que dans le modèle local de *Thiaville*,
- si $\beta_{simu}<\alpha$, les instabilités de *Walker* apparaissent pour un courant critique plus élevé dans le modèle non local de *Zhang et Li* que dans le modèle local de *Thiaville*.

En effet, nous avons vu que la prise en compte de la diffusion augmente le paramètre de non-adiabaticité d'où $\beta_{local} < \beta_{ZL}$. Or, d'après la formule (II.30), le courant critique de *Walker* U_{Walker} suit les modifications schématisées sur la Figure IV.12 et observées dans les simulations:

- si $\beta_{simu} > \alpha$ alors $U_{Walker}(\beta)$ est une fonction décroissante de β d'où: $U_{Walker}(\beta_{ZL}) < U_{Walker}(\beta_{local})$,
- si $\beta_{simu} < \alpha$ alors $U_{Walker}(\beta)$ est une fonction croissante de β d'où : $U_{Walker}(\beta_{local}) < U_{Walker}(\beta_{ZL})$.

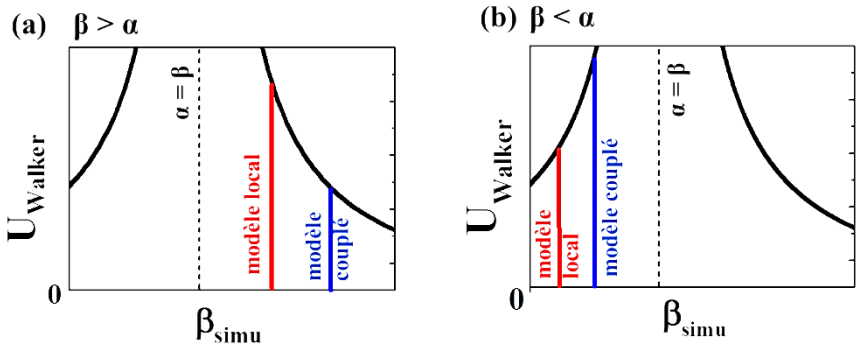

Figure IV.12 : Schéma représentant l'effet de la renormalisation du paramètre de non-adiabaticité sur le courant critique de *Walker*. La ligne verticale rouge (resp. bleu) identifie le courant critique obtenu dans le modèle local de *Thiaville* (resp. non local de *Zhang et Li*). L'augmentation du paramètre de non-adiabaticité dans le modèle non local induit (a) une diminution du courant critique de *Walker* dans le cas $\beta > \alpha$ et (b) une augmentation du courant critique *Walker* dans le cas $\beta < \alpha$.

Impact de la diffusion sur le paramètre de non-adiabaticité

Nous constatons que dans le modèle de *Zhang et Li*, dans le régime laminaire, la vitesse de propagation de la paroi en fonction de U_T dévie légèrement du comportement linéaire. C'est pourquoi, le paramètre de non-adiabaticité estimé à partir de la vitesse simulée $\beta_{simu} = v_{simu}\alpha / U_T$ (3ème colonne de la Figure IV.10) augmente avec U_T pour toutes les valeurs de l_{sf} . Il semble que ce comportement soit lié à celui de la largeur de paroi Δ_{Thiele} qui diminue avec U_T (2ème colonne de la Figure IV.10). En effet, l'augmentation du gradient d'aimantation engendre un accroissement du paramètre de non-adiabaticité. C'est pourquoi, les graphes de la 2ème et 3ème colonne de la Figure IV.10 évoluent de manière opposée. Dans le cas du modèle local de *Thiaville*, la largeur de paroi diminue également avec U_T. En revanche, le paramètre de non-adiabaticité local, défini par $\beta_T = (l_{sd} / l_{sf})^2$, est constant et ne dépend pas de la largeur de paroi.

En résumé, l'étude de la propagation d'une paroi transverse dans le modèle non local de *Zhang et Li* permet de mettre en évidence que la diffusion de spin renormalise le paramètre de non-adiabaticité du système. Nous allons voir dans le paragraphe suivant, au travers d'une étude similaire dans le modèle diffusif généralisé (GDD), que l'absorption balistique de spin transverse induit une nouvelle renormalisation du paramètre de non-adiabaticité.

3. Propagation de parois transverses dans le modèle diffusif généralisé (GDD)

Au cours du chapitre II, nous avons vu que le modèle diffusif généralisé (GDD) complète le modèle diffusif de *Zhang et Li*. Il introduit un terme supplémentaire dans l'expression du courant de spin et du couple de transfert de spin qui représente les effets balistiques d'absorption de la partie transverse de l'accumulation de spin issue de la perte de la cohérence de spin. Ces effets finis du courant de spin sont liés à une nouvelle longueur caractéristique appelée longueur de cohérence de spin l_p. Cette partie est dédiée à l'étude de la propagation de parois de domaines dans un ruban sous un courant polarisé en spin dans ce modèle. Nous allons voir que les effets liés à la diffusion de spin mis en évidence dans le paragraphe précédent sont conservés et qu'une nouvelle renormalisation du paramètre de non-adiabaticité dépendante de la valeur de l_p est introduite.

Cette étude fut réalisée grâce au couplage numérique du système d'équations de transport proposées par *Petitjean et al.* et de l'équation LLG (II.23) (Petitjean, et al., 2012) au sein de notre logiciel micromagnétique éléments finis Hex-feeLLGood. Les paramètres de simulation micromagnétiques sont ceux usuellement utilisés pour simuler le permalloy ($Ni_{80}Fe_{20}$) et donnés dans le Tableau IV.1. Quant aux paramètres de transports, ils sont obtenus à partir de calculs ab-initio (Carva, et al., 2007) dans le cas du permalloy et sont indiqués dans le Tableau IV.3. La hauteur du ruban est fixée à $d=5$nm. Compte tenu des longueurs caractéristiques du transport dépendant du spin, la structure est discrétisée en pavés droits dont les côtés mesurent *1*nm.

Tableau IV.3 : Paramètres de simulation de transport dans le modèle de GDD^{++}.

Polarisation P	*0,76*	1
Longueur de diffusion de spin l_{sf}	*variable*	nm
Libre parcours moyen d'un électron l^*	*1,72*	nm
Longueur de précession l_L	*0,7*	nm
Longueur de cohérence de spin l_p	*variable*	nm
Conductivité C_0	*0,003436*	1/(Ω·nm)
Courant local $U_{GDD} = \frac{P\mu_B}{M_s e\left(1-P^2\right)} j^e$	*variable*	m/s

$^{++}$ (Petitjean, et al., 2012).

La configuration d'aimantation initiale est une paroi transverse de type *tail-to-tail* relaxée au centre du ruban de la Figure IV.6 (c). Là encore, les composantes d'aimantation et d'accumulation de spin suivant l'axe z sont appelées composantes longitudinales. Les composantes transverses de l'aimantation et de l'accumulation de spin sont les moyennes géométriques des composantes suivant les axes x et y. Comme précédemment, la condition de Brown (I.31) est imposée comme condition de Neumann sur les surfaces latérales du ruban et on suppose que les courants de charge et de spin sont tangents à la surface et que l'accumulation de spin tend vers zéro aux extrémités du

ruban, loin des forts gradients d'aimantation $\mathbf{s}(-L/2)=\mathbf{s}(L/2)=0$. On impose également aux extrémités du ruban les potentiels électriques suivants : $\varphi(-L/2)=0$ et $\varphi(L/2)=+V_0$V. La différence de potentiel V_0 initie le déplacement de la paroi suivant le flux des électrons, c'est-à-dire suivant le sens positif de l'axe *z*.

3.1. Vitesse de propagation en fonction de la largeur de paroi Δ_{Thiele}

Dans le modèle GDD, l'effet de la diffusion est similaire à celui du modèle de *Zhang et Li* comme le montre les graphes de la Figure IV.13, qualitativement proches de ceux de la Figure IV.9.

Le graphe de la Figure IV.13(a) représente la vitesse de propagation absolue simulée en fonction de la largeur de paroi Δ_{Thiele} sous un courant local U_{GDD} pour deux valeurs de longueur de diffusion de spin l_{sf}. Il apparaît que la vitesse augmente nettement pour les parois courtes par rapport à la vitesse obtenue dans le modèle local à partir de la formule $v_{GDD}=\beta_{GDD}U_{GDD}/\alpha$ et tracée en pointillé.

Le graphe de la Figure IV.13(b) représente l'écart relatif entre la vitesse de propagation et la vitesse théorique obtenue dans la limite des parois longues à partir de la formule $v_{GDD}=\beta_{GDD}U_{GDD}/\alpha$ avec β_{GDD} constant (II.34) en fonction de la largeur de paroi Δ_{Thiele}. On observe que la vitesse de propagation dévie de la vitesse théorique et de façon plus marquée pour l_{sf} grand.

Ainsi, comme dans le modèle de *Zhang et Li*, la non-adiabaticité du système augmente pour des parois courtes sous l'effet non local de la diffusion de spin à travers une renormalisation de la vitesse de propagation de la paroi transverse.

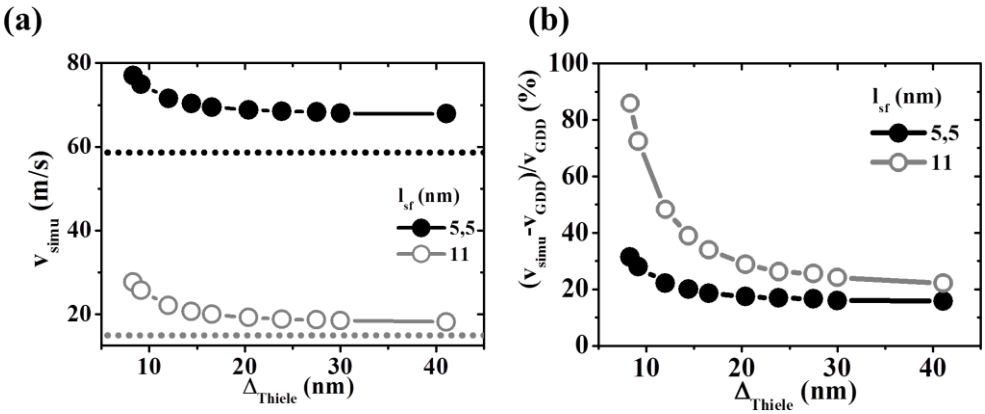

Figure IV.13 : (a) Vitesses de propagation simulées de la paroi transverse. Les lignes de pointillés représentent la vitesse théorique $v_{GDD}=\beta_{GDD}U_{GDD}/\alpha$. (b) Ecart relatif entre la vitesse calculée et la vitesse théorique v_{GDD} en pourcent. (a) et (b) sont tracés en fonction de la largeur de paroi pour $l_p=1$nm et pour $l_{sf}=5,5$nm et $l_{sf}=11$nm dans un ruban de permalloy d'épaisseur $d=5$nm et de largeur w variable soumis à un courant local $U_{GDD}=44,7$m/s ($j^e=3,4\cdot10^9$A/m^2, $V_0=0,1$V) qui appartient au régime laminaire.

3.2. Impact de la longueur de cohérence de spin sur la vitesse de propagation de la paroi

Le modèle GDD introduit une nouvelle longueur caractéristique : la longueur de cohérence de spin l_p. Les graphes de la Figure IV.14 représentent l'évolution de la vitesse de la paroi simulée et de la vitesse locale théorique dans le modèle GDD (trait plein rouge) en fonction de l_p. La Figure IV.14 résume les données pour $l_{sf}=5,5$nm et $l_{sf}=11$nm dans le cas de deux largeurs de paroi $\Delta_{\text{Thiele}}=9,13$nm et $\Delta_{\text{Thiele}}=30$nm qui correspondent respectivement aux largeurs de ruban $w=10$nm et

*w=120*nm. Toutes les valeurs des vitesses de la Figure IV.14 sont normalisées par la vitesse théorique v_T de *Thiaville* (i.e. vitesse locale du modèle *Zhang et Li*). Cette normalisation permet de voir que dans la limite où l_p tend vers l'infini, les deux expressions locales convergent.

La principale différence entre les modèles de *Zhang et Li* et GDD est l'introduction, dans le modèle GDD, de la longueur de cohérence transverse de spin l_p qui agit aussi sur la non-adiabaticité du système via le terme supplémentaire dans l'expression de couple de transfert de spin (II.22). Les deux modèles ne donnent jamais la même solution numérique. Néanmoins, pour l_p grand, l'absorption de spin transverse devient négligeable et on se rapproche du modèle de *Zhang et Li*, en particulier dans la limite des parois longues. C'est pourquoi les vitesses locales théoriques des deux modèles convergent vers la même valeur. A l'inverse, pour l_p petit, les effets d'absorption de spin transverse sont prédominants, le moment magnétique transmis à l'aimantation est faible et la non-adiabaticité du système tend vers *0*. On observe que dans ce cas les vitesses simulées tendent aussi vers zéro indépendamment de la largeur de paroi et de la longueur de diffusion.

Pour les valeurs intermédiaires de l_p, on remarque que les vitesses de propagation calculées suivent qualitativement le même profil que celui de la vitesse théorique v_{GDD}. En revanche, elles sont quantitativement supérieures. De plus comme attendu, la vitesse de la paroi de largeur $\Delta_{\text{Thiele}}=9{,}13$nm est supérieure à celle de largeur $\Delta_{\text{Thiele}}=30$nm et cette différence s'accentue avec l_{sf}. Cet effet, dû à la diffusion non locale de spin, est quantifié plus haut sur les graphes de la Figure IV.13.

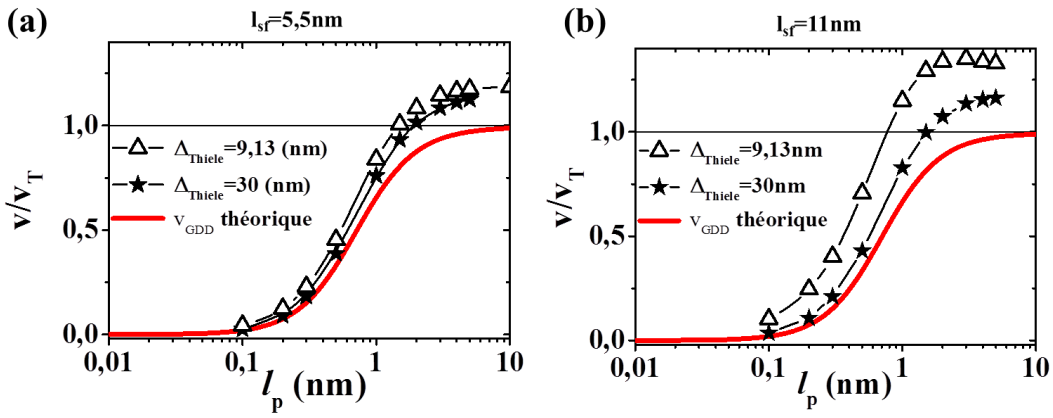

Figure IV.14 : Vitesse de propagation normée par la vitesse théorique dans le modèle local de *Thiaville*, d'une paroi transverse de largeur $\Delta_{\text{Thiele}}=9{,}13nm$ (triangles) et de largeur $\Delta_{Thiele}=30nm$ (étoiles) dans des rubans de permalloy de largeur *w=10*nm et *w=120*nm et d'épaisseur *d=5nm* en fonction de la longueur de cohérence l_p sous un courant local de $U_{GDD}=4{,}47$m/s qui appartient au régime laminaire ($j^e=3{,}4\cdot10^{10}$A/m^2, $V_0=0{,}01$V) pour (a) $l_{sf}=5{,}5$nm et (b) $l_{sf}=11$nm.

Le Tableau IV.4 indique les valeurs estimées des paramètres de transport qui permettent de calculer le β_{GDD} ainsi que le β_T correspondant (Petitjean, et al., 2012). Par exemple pour le permalloy, il apparaît que le paramètre de non-adiabaticité est quasiment deux fois plus grand dans le modèle de *Zhang et Li* par rapport au modèle GDD. C'est pourquoi sur la Figure IV.14, pour $l_p=1nm$, les vitesses obtenues pour une paroi longue sont donc deux fois plus grandes dans le modèle de *Zhang et Li* que dans le modèle de GDD. Dans le cas du permalloy, le modèle de *Zhang et Li* surestimerait donc le paramètre de non-adiabaticité du système. Autrement dit, le modèle GDD induirait une renormalisation du paramètre de non-adiabaticité en fonction de l_p et cette renormalisation devrait être prise en compte dans les post-traitements expérimentaux car elle modifie la vitesse ainsi que le courant critique de *Walker* comme nous allons le voir dans le paragraphe suivant.

Tableau IV.4 : Paramètres de transport dans le modèle GDD pour différents matériaux (Petitjean, et al., 2012).

	β_T^+	l_L(nm)	l^*(nm)	l_{sf}(nm)	l_p(nm)	β_{GDD}
Permalloy	*0,04*	*0,7*	*1,72*	*5,5*	*1*	*0,026*
Cobalt	*0,00063*	*0,34*	*6,67*	*60*	*0,75*	*0,00052*
Nickel	*0,0243*	*0,72*	*14,88*	*21*	*4,6*	*0,024*

$^+$ Par soucis de cohérence entre les deux modèles β_T est calculé en utilisant l'égalité : $l_{sd}^2 = l^* l_L$ dans l'expression (II.34)

3.3. Vitesse de propagation en fonction du courant appliqué

Dans ce paragraphe, l'impact de l'absorption de spin transverse sur la non-adiabaticité est quantifié dans le cas d'une paroi transverse de permalloy de manière similaire à l'étude présentée au §2.3 de ce chapitre dans le modèle de *Zhang et Li*. La distribution d'aimantation est une paroi transverse *tail-to-tail* de largeur initialement estimée à $\Delta_{\text{Thiele}}=9,13$nm dans un ruban de largeur $w=10$nm et d'épaisseur $d=5$nm, identique à celle étudiée au §2.3 de ce chapitre.

La première colonne de la Figure IV.15 représente l'évolution de la vitesse de propagation de la paroi en fonction du courant local U_{GDD} pour $l_{sf}=5,5$nm et pour différentes valeurs de longueur de cohérence de spin l_p. Elle montre que, dans le modèle GDD, on retrouve les régimes laminaire et précessionnel présentant les caractéristiques de la Figure IV.11. La vitesse théorique est représentée par la ligne de tirets verts pour le régime laminaire et est calculée à partir de la relation $v_{GDD}=\beta_{GDD}U_{GDD}/\alpha$. De même, la vitesse théorique pour le régime précessionnel, représentée par une ligne pleine verte, est calculée à partir de la relation : $< v_{GDD} >= \frac{1+\alpha\beta_{GDD}}{1+\alpha^2} U_{GDD}$.

Comme nous l'avons vu précédemment sur la Figure IV.14, sous l'effet de la diffusion de spin, les vitesses simulées sont supérieures à celles estimées avec la formule théorique.

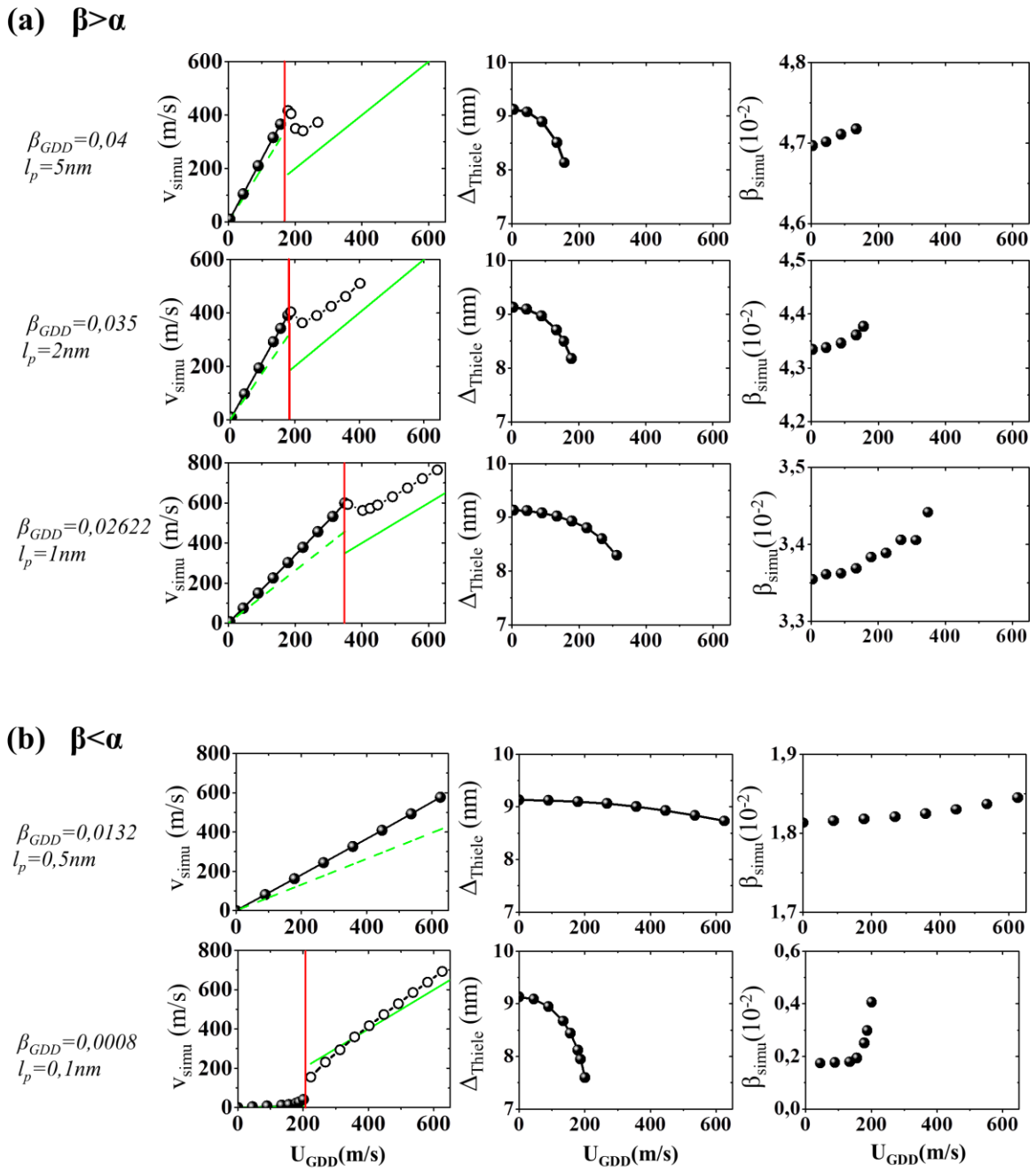

Figure IV.15 : La 1ère colonne représente la vitesse de propagation d'une paroi transverse dans le modèle GDD. Les ronds pleins (resp. vides) identifient le régime laminaire (resp. précessionnel). Les lignes représentent les formules théoriques dans les régimes laminaire $v_{GDD}=\beta_{GDD}U_{GDD}/\alpha$ (ligne de tirets verts) et précessionnel $<v_{GDD}>=(1+\alpha\beta_{GDD})/(1+\alpha^2)U_{GDD}$ (ligne pleine). Le trait rouge vertical indique le début des instabilités de *Walker*. La 2ème colonne représente l'évolution de la largeur de la paroi dans le régime laminaire. La 3ème colonne représente le paramètre de non-adiabaticité calculé à partir de la vitesse simulée $v_{simu}=\beta_{simu}U_{GDD}/\alpha$. Ces courbes sont déclinées pour différentes valeurs de l_p avec l_{sf}=5,5nm. Tous les graphes sont exprimés en fonction de l'intensité du courant U_{GDD} pour un ruban de permalloy de largeur w=10nm et d'épaisseur d=5nm et pour un coefficient d'amortissement α=0,02.

Les graphes de la 1ère colonne de la Figure IV.15 montrent également que la renormalisation du paramètre de non-adiabaticité est visible sur la position du régime précessionnel de *Walker* qui débute au niveau du trait rouge vertical. Il apparaît que :

- si $\beta>\alpha$ les instabilités de *Walker* apparaissent pour un courant critique qui diminue quand l_p augmente,
- si $\beta<\alpha$ les instabilités de *Walker* apparaissent pour un courant critique qui augmente quand la longueur de cohérence de spin l_p augmente.

En effet, nous avons vu que la prise en compte du terme d'absorption de spin transverse diminue le paramètre de non-adiabaticité d'autant plus que la longueur de cohérence de spin l_p est petite, d'où $\beta_{lp\ court}<\beta_{lp\ long}$. Or, d'après la formule (II.30), le courant critique de *Walker* U_{Walker} suit les variations schématisées sur la Figure IV.16 :

- si $\beta> \alpha$ alors $U_{Walker}(\beta)$ est une fonction décroissante de β d'où: $U_{Walker}(_{lp\ long})<U_{Walker}\ (\beta_{lp\ court})$,
- si $\beta<\alpha$ alors $U_{Walker}(\beta)$ est une fonction croissante de β d'où : $U_{Walker}(\beta_{lp\ court})<U_{Walker}(\beta_{lp\ long})$.

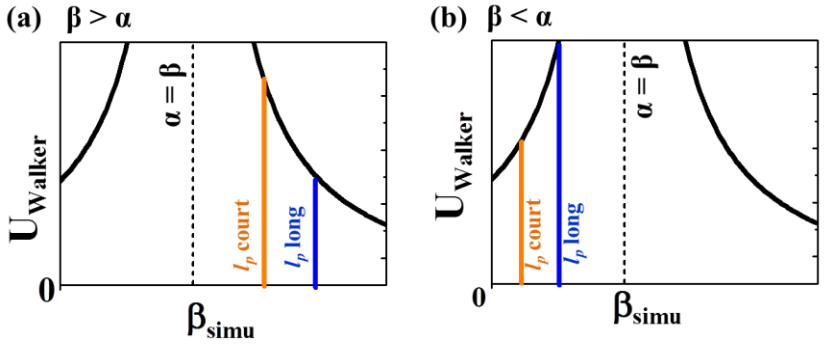

Figure IV.16 : Schémas représentants l'effet de la renormalisation du paramètre de non-adiabaticité en fonction de la longueur de cohérence de spin dans le modèle GDD sur le courant critique de *Walker*. La ligne orange (resp. bleue) identifie le courant critique obtenu pour l_p court (resp. l_p long). Quand l_p diminue, le paramètre de non-adiabaticité diminue également ce qui induit (a) une augmentation du courant critique de *Walker* dans le cas $\beta> \alpha$, (b) une diminution du courant critique de *Walker* dans le cas $\beta<\alpha$.

Enfin, l'augmentation du paramètre de non-adiabaticité causée par la diminution de la largeur de paroi avec le courant U_{GDD} mise en évidence dans le modèle de *Zhang et Li* sous l'effet de la diffusion de spin est conservée dans le modèle GDD. On peut également noter que les vitesses et les courants critiques de *Walker* obtenus avec le modèle de *Zhang et Li* pour $\beta_T=0,04$ (Figure IV.10) et le modèle de GDD pour l_p=5nm et $\beta_{GDD}=0,04$ (Figure IV.15) sont quantitativement proches.

4. Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, j'ai tout d'abord validé l'utilisation de la version hexaédrique de notre code éléments finis Hex-feeLLGood pour l'étude de la propagation de parois transverses dans un ruban ferromagnétique. Puis, j'ai mis en évidence l'impact de la diffusion de spin sur la dynamique d'une paroi transverse dans un ruban de permalloy dans les modèles de transport non locaux diffusif de *Zhang et Li* et diffusif généralisé (GDD).

Conformément aux prédictions 1D du chapitre II, nous avons montré que, dans les deux modèles de transport, la prise en compte du phénomène de diffusion de spin influe sur la non-adiabaticité du système. En effet, dans le modèle de non local de *Zhang et Li*, une renormalisation du paramètre de non-adiabaticité, par rapport au modèle local de Thiaville, apparaît à travers une augmentation de la vitesse de propagation et un décalage du courant critique de *Walker*. En outre, l'étude du modèle GDD, nous a permis d'apprécier les effets balistiques d'absorption de spin transverse sur la dynamique d'aimantation. Nous avons montré que la longueur caractéristique d'absorption de spin transverse propre à ce modèle induit une nouvelle renormalisation du paramètre de non-adiabaticité également visible sur la vitesse de propagation et sur le courant critique de Walker.

Pour les deux modèles, l'effet non local de la diffusion de spin obtenue grâce au couplage auto-cohérent des équations de transport et de la dynamique d'aimantation est plus marqué dans le cas de distributions d'aimantation présentant un fort gradient d'aimantation. Ceci confirme les prédictions théoriques de *Manchon et al.* (Manchon, et al., 2011). Afin d'obtenir de telles distributions, nous avons choisi dans ce chapitre de réduire la largeur des rubans pour travailler avec des parois courtes. De leur côté, *Lee et al.* ont choisi d'ajouter une anisotropie perpendiculaire pour réduire la taille de parois 1D. Ils observent également la renormalisation du paramètre de non-adiabaticité due à la diffusion locale de spin grâce à un couplage entre les équations de transport balistique et l'équation LLG (Lee, et al., 2013). Enfin, dans une approche différences finies, *Claudio-Gonzalez et al.* rapportent que l'effet de la diffusion est plus marqué pour les distributions vortex qui présente un très fort gradient d'aimantation au centre de la distribution (Claudio-Gonzalez, et al., 2012).

Cependant, comme nous l'avons vu sur le diagramme de phase de ce chapitre, les configurations géométriques qui permettent de stabiliser une distribution vortex sont des rubans larges et épais. Or nos études préliminaires de ces géométries requièrent, pour l'instant, un temps de calcul important, c'est pourquoi nous nous sommes concentrés sur les parois transverses. De plus, dans une distribution vortex le fort gradient d'aimantation est concentré sur quelques nanomètres au centre de la distribution. Or, le modèle diffusif n'est pas applicable pour des longueurs caractéristiques inférieures au libre parcours moyen de l'électron (*1*nm). Il est donc possible que ces distributions soient à la limite de la validité du modèle. Enfin, il est également possible de réduire la largeur des parois en introduisant des constrictions géométriques. Aussi, afin de tirer profit de notre approche éléments finis et d'étudier des structures qui ne présentent pas de domaine de *Walker* nuisible aux éventuelles applications, nous avons choisi d'étudier, dans le chapitre suivant, le comportement des parois dans des fils à section circulaire présentant une géométrie confinée.

Chapitre V :

Parois transverses dans les fils à section circulaire

1. Validation de feeLLGood étendu pour l'étude d'une paroi transverse dans un fil à section circulaire 97

2. Distribution d'aimantation statique dans la constriction d'un fil 98

2.1. Impact de la largeur *l* de la constriction 98

2.2. Impact du diamètre *d* de la constriction 100

3. Impact d'une constriction sur la dynamique d'une paroi transverse soumise à un courant polarisé en spin dans un fil 102

3.1. Diagramme de phase du dépiégage en fonction du diamètre de la constriction et du courant appliqué 102

3.2. Le cas particulier des régimes dynamiques amorti et amorti-oscillant 105

4. Non-adiabaticité géométrique 110

4.1. Mise en évidence des deux contributions à la distribution d'accumulation de spin... 110

4.2. Mise en évidence de l'augmentation de la non-adiabaticité en présence d'une constriction 111

5. Conclusion du chapitre 112

Ce chapitre est dédié à l'application de notre code micromagnétique éléments finis feeLLGood à l'étude de la dynamique d'aimantation sous courant polarisé en spin dans des géométries complexes. La discrétisation spatiale de telles géométries est rendue possible grâce au maillage irrégulier éléments finis (voir §1 du chapitre III). En outre, pour modéliser l'interaction réciproque entre le courant polarisé en spin et l'aimantation locale, nous avons choisi d'utiliser le modèle non local de transport dépendant du spin de *Zhang et Li* couplé numériquement avec l'équation LLG (II.16).

Au cours de ma thèse, j'ai étudié la dynamique d'une paroi transverse dans un fil tridimensionnel à section circulaire de permalloy présentant une irrégularité géométrique. Cette géométrie circulaire, parfaitement symétrique, n'impose aucune contrainte latérale à l'aimantation et la distribution obtenue est totalement tridimensionnelle. Les forts gradients de courant et d'aimantation engendrés par des obstacles géométriques, comme des constrictions, peuvent renforcer la non-localité des effets de transport de spin et modifier les propriétés du système (Strelkov, et al., 2010; Strelkov, et al., 2011). Dans ce cas, le recours au couplage numérique auto-cohérent des équations du micromagnétisme et du transport dépendant du spin est nécessaire.

Un fil présentant une constriction est un des éléments de base des mémoires magnétiques 3D imaginées par *S. Parkin* à partir de réseaux denses de fils ferromagnétiques (Parkin, 2004; Parkin, et al., 2008). La constriction permet de contrôler la position de la paroi en abaissant localement son énergie magnétostatique. L'étude du dépiégage de la paroi est l'objet de nombreux travaux expérimentaux (Kläui, et al., 2003; Faulkner, et al., 2004; Bedau, et al., 2008; Bogart, et al., 2009; Noh, et al., 2012) et de simulations micromagnétiques (He, et al., 2005; Kunz, et al., 2010; Dolocan, 2014; Chandra Sekhar, et al., 2014). En outre, *Yuan et al.* ont d'ailleurs récemment proposé une étude analytique du dépiégage d'une paroi dans la constriction (Yuan, et al., 2014).

Après avoir validé l'utilisation de feeLLGood pour l'étude de la propagation de parois transverses dans les fils, je me suis intéressée à l'impact d'une irrégularité géométrique sur les comportements statique et dynamique des distributions d'aimantation et de spin. Une partie des résultats de ce chapitre ont été publiés dans (Sturma, et al., 2015).

Le fil étudié présente une longueur de $L=300$nm orientée suivant l'axe principal z et un diamètre D. La géométrie du fil est représentée sur la Figure V.1(a). La configuration magnétique initiale correspond à une paroi transverse de type *tail-to-tail* relaxée au centre du fil en $z=0$ dont la distribution d'aimantation spatiale est donnée sur la Figure V.1(b). Les composantes d'aimantation et d'accumulation de spin suivant l'axe z sont appelées composantes longitudinales. Les composantes transverses de l'aimantation et de l'accumulation de spin sont les moyennes arithmétiques des composantes suivant les axes x et y.

La condition de Brown (I.31) est imposée comme condition de Neumann sur les surfaces latérales. On suppose que les courants de charge et de spin sont tangent à la surface et que l'accumulation de spin tend vers zéro aux extrémités du fil, loin des forts gradients d'aimantation : $\mathbf{s}(-L/2)=\mathbf{s}(L/2)=0$. On impose également aux extrémités les potentiels électriques suivants : $\varphi(z_L)=0$ et $\varphi(z_R)=+V_0$V. La différence de potentiel crée un courant qui initie le déplacement de la paroi suivant l'axe z. Compte tenu des longueurs caractéristiques du transport dépendant du spin, la structure est discrétisée en tétraèdres de côtés inférieurs à 2nm. Les paramètres de simulation micromagnétiques

et de transport sont ceux usuellement utilisés pour simuler le permalloy ($Ni_{80}Fe_{20}$) et sont détaillés respectivement dans le Tableau V.1 et dans le Tableau V.2.

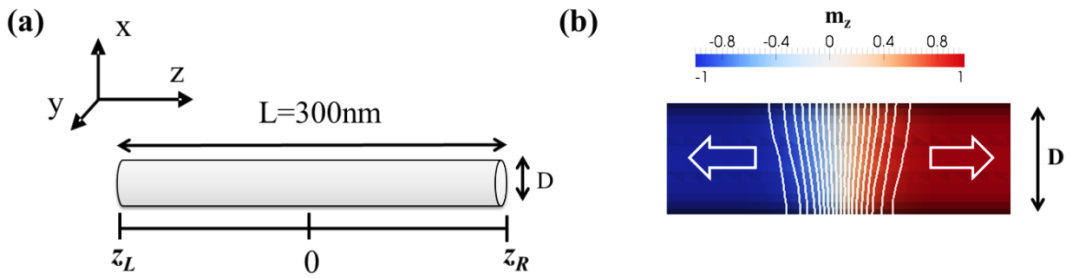

Figure V.1 : (a) Schéma du fil parfait étudié de longueur $L=300$nm et de diamètre D. (b) Distribution spatiale de la composante longitudinale m_z de la paroi transverse de type *tail-to-tail* (zoom). Les lignes blanches représentent les isovaleurs de l'aimantation longitudinale m_z.

Tableau V.1 : Paramètres de simulation du micromagnétisme

Paramètres de micromagnétisme

Aimantation à saturation M_s	$800 \cdot 10^3$	A/m
Constante d'échange A_{ex}	$1 \cdot 10^{-11}$	J/m
Coefficient d'amortissement α	*0,02*	1
Longueur L	*300*	nm
Diamètre D	*variable*	nm

Tableau V.2: Paramètres de simulation de transport dans le modèle de *Zhang et Li*.

Paramètres de transport

Conductivité C_0	*0,004*	1/(Ω·nm)
Polarisation β	*0,7*	1
Coefficient de diffusion D_0	$2{,}3 \cdot 10^{-3}$	m^2/s
Densité d'état au niveau de Fermi $N_0(E_F)$	*1,344*	$1/J.nm^3$
Longueur de diffusion de spin l_{sf}	*5*	nm
Longueur d'échange *s-d* l_{sd}	*1*	nm

1. Validation de feeLLGood étendu pour l'étude d'une paroi transverse dans un fil à section circulaire

Comme dans le cas des rubans, pour s'assurer de la valider de notre code micromagnétique pour l'étude de parois transverses soumises à un courant polarisé en spin dans un fil, j'ai reproduit l'étude micromagnétique proposée par *Yan et al.* (Yan, et al., 2010) dans le modèle de *Thiaville et al.* (Thiaville, et al., 2005). Cette étude décrit la dynamique d'une paroi transverse dans un fil de permalloy à section circulaire soumis à un courant polarisé en spin dans une approche éléments finis. Les graphes de la Figure V.2(b) représentent les vitesses de déplacement de la paroi en fonction du courant $U_T = \frac{P\mu_B}{eM_s} j^e$.

Il apparaît que la vitesse linéaire de propagation ne dépend ni du paramètre de non-adiabaticité β_T, ni du diamètre D du fil, mais uniquement du courant appliqué U_T. Autrement dit, quelle que soit la valeur de β_T, la propagation de la paroi est similaire au cas $\alpha=\beta_T$ et les instabilités de *Walker* n'apparaissent pas dans la limite des courants étudiés. De plus, la paroi tourne autour de l'axe de propagation et le sens de rotation dépend du rapport entre β_T et α. Ces résultats sont similaires à ceux obtenus dans (Yan, et al., 2010) et peuvent être expliqués simplement grâce au schéma de la Figure V.2(a). Contrairement au cas du ruban (§4 du chapitre II et Figure II.7), dans le cas particulier d'un fil à section circulaire, l'inclinaison de l'aimantation causée par le couple non-adiabatique $\mathbf{T_{NA}}$ n'engendre pas la création de charges magnétiques à cause de la symétrie circulaire du fil. $\mathbf{T_{NA}}$ et $\mathbf{T_\alpha}$ se compensent. On est dans le cas $\boldsymbol{\beta_T=\alpha}$, la paroi se propage à la vitesse $v_T = U_T$ et précesse autour de l'axe z à la vitesse $(\beta_T-\alpha)U_T$ (Wieser, et al., 2010).

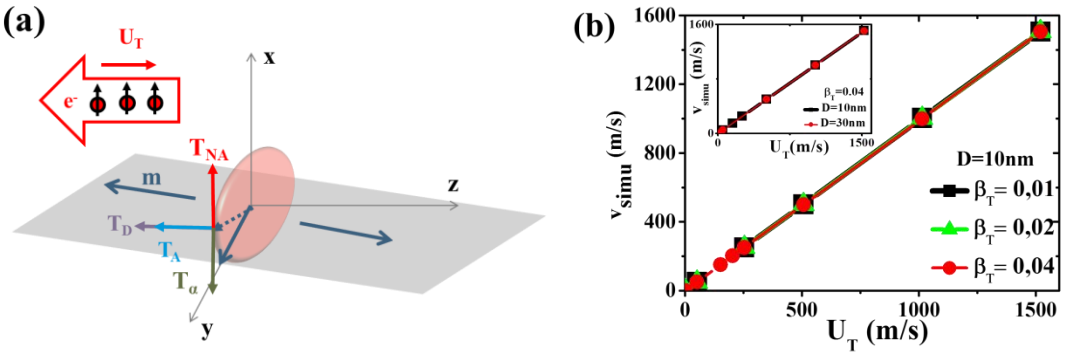

Figure V.2 : (a) Représentation des couples agissant sur une paroi transverse 1D soumise à un courant polarisé en spin dans le cas d'un fil à section circulaire parfaitement symétrique. (b) Vitesses linéaires de déplacement d'une paroi transverse dans un fil de *10nm* de diamètre en fonction du courant appliqué U_T pour différentes valeurs de β_T. L'encart représente la vitesse pour différents diamètres du fil et pour $\beta_T=0,04$. Dans tous les cas, la vitesse est indépendante de β_T et du diamètre du fil D. Ces résultats sont similaires avec ceux publiés dans (Yan, et al., 2010).

Cette étude permet de confirmer la pertinence de notre outil pour l'étude de la propagation de paroi sous courant polarisé en spin dans les fils ferromagnétiques. De plus, j'ai constaté que la vitesse de déplacement d'une paroi transverse dans un fil à section circulaire est indépendante de la valeur de β_T. Fort de cette validation, j'ai étudié l'impact de la géométrie de la structure sur les comportements statique et dynamique d'une paroi transverse.

2. Distribution d'aimantation statique dans la constriction d'un fil

Afin d'estimer l'impact de la géométrie sur l'équilibre et la dynamique d'une paroi transverse dans un fil parfaitement symétrique, nous nous intéressons à la géométrie décrite sur la Figure V.3(a) : un fil de section circulaire présentant une constriction en *z=0* dont le diamètre *d* et la largeur *l* varient. Le diamètre du fil est fixé à *D=20*nm et sa longueur totale à *L=300*nm. La configuration magnétique initiale correspond à une paroi transverse de type *tail-to-tail* relaxée au sein de la constriction du fil (Figure V.3(b,c)).

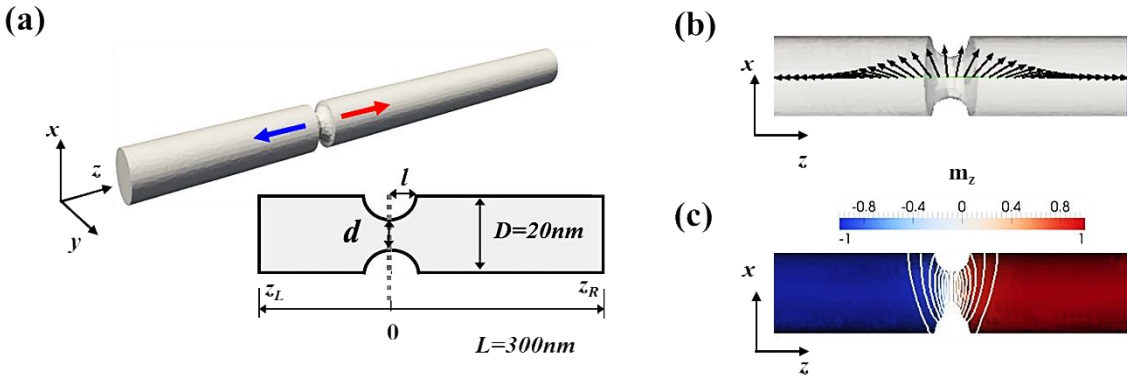

Figure V.3 : (a) Schéma du fil de diamètre *D* présentant une constriction de diamètre *d* et de largeur *l*. (b) Distribution 3D de l'aimantation suivant l'axe central du fil. (c) Distribution spatiale de la composante longitudinale de l'aimantation m_z de la paroi (zoom). Les traits blancs représentent les isovaleurs m_z.

Dans un premier temps, j'ai étudié le comportement d'une paroi transverse obtenue en relaxant numériquement la paroi à l'intérieur de la constriction en l'absence de courant. J'ai pu constater que l'obstacle géométrique influe sur la distribution d'aimantation.

2.1. Impact de la largeur *l* de la constriction

Nous avons vu au §2.3 du chapitre I que la largeur de paroi de domaines est déterminée par les paramètres matériaux. En l'absence d'anisotropie magnéto-cristalline, la largeur d'une distribution de Bloch 1D (I.25) est estimée par $\Delta_B = \sqrt{\frac{2A_{ex}}{\mu_0 M_s^2}} = 5nm$. Cette formule ne tient cependant pas compte de la géométrie de la structure. Or, l'étude analytique de *P. Bruno* montre que la présence d'une constriction géométrique joue sur la largeur de paroi (Bruno, 1999). L'auteur étudie l'impact d'une constriction sur une distribution 1D de Bloch soumise aux énergies d'échange et d'anisotropie. Pour cela, il considère un système magnétique homogène dont la section transversale *Sect(z)* varie suivant :

$$\begin{cases} Sect(z) = S_0 \quad \text{pour } |z| \le l \\ Sect(z) = S_1 > S_0 \quad \text{pour } |z| \ge l \end{cases} . \qquad \text{(V.1)}$$

Dans son modèle, l'aimantation est orientée suivant l'axe de facile aimantation qui est perpendiculaire à l'axe *z*. Il montre que la distribution d'aimantation dépend des rapports Δ_B/l et S_1/S_0. Il différencie alors trois cas limites que j'ai retrouvés à travers les trois géométries de constrictions de la 1ère ligne de la Figure V.4. Pour les trois cas, $d=10$nm, ainsi $S_1/S_0=2$ et la longueur l caractéristique de la géométrie de la constriction varie. La seconde ligne de la Figure V.2 présente en gris la distribution d'aimantation longitudinale calculée.

Le régime I ($\Delta_B/l \leq 1$) est obtenu pour une constriction large avec $l=10$nm. Dans ce cas, la largeur de la paroi est très inférieure à la largeur de la constriction. La paroi est alors entièrement confinée dans la constriction et ne ressent pas ses bords. Sa configuration est donc fortement influencée par les paramètres matériaux et $d=5$nm le diamètre de la constriction qui représente localement le diamètre du fil. La ligne bleue représente la distribution de Bloch 1D (I.25) avec $\Delta_B=5$nm. Comme d est petit, la distribution 3D est concentrée autour de la distribution 1D.

La situation est différente dans le régime II ($1 \leq \Delta_B/l \leq S_1/S_0$) qui est obtenu avec la constriction en demi-cercle pour $l=5$nm. La largeur de paroi est proche de celle de la constriction. La paroi est donc partiellement confinée. Sa configuration est déterminée principalement par les paramètres géométriques de la constriction et le diamètre du fil $D=20$nm. Pour ce régime, la distribution d'aimantation correspond bien aux résultats analytiques de *Bruno*. En effet, la distribution obtenue peut être encadrée par les distributions de Bloch $\Delta_B=3$nm (lié aux paramètres géométriques ligne rouge) et $\Delta_B=8$nm (proche de la largeur de paroi dans le fil parfait, ligne verte) ce qui correspond au résultat analytique obtenu par *P. Bruno* $\Delta_{\text{Bruno}}=8d/\pi^2=4{,}05$nm. De plus, on retrouve les mêmes profils de distribution de l'aimantation longitudinale moyenne en présence ou non de la constriction que ceux issus des calculs de *P. Bruno* (encart).

Enfin, dans le régime III ($S_1/S_0 \leq \Delta_B/r$) qui est obtenu pour une constriction fine avec $l=2{,}5$nm, la paroi est bien plus large que la constriction. Elle est donc très peu confinée et sa configuration est principalement déterminée par les paramètres matériaux et le diamètre du fil *D*. Les paramètres géométriques sont secondaires, ils n'imputent que la portion confinée de la paroi.

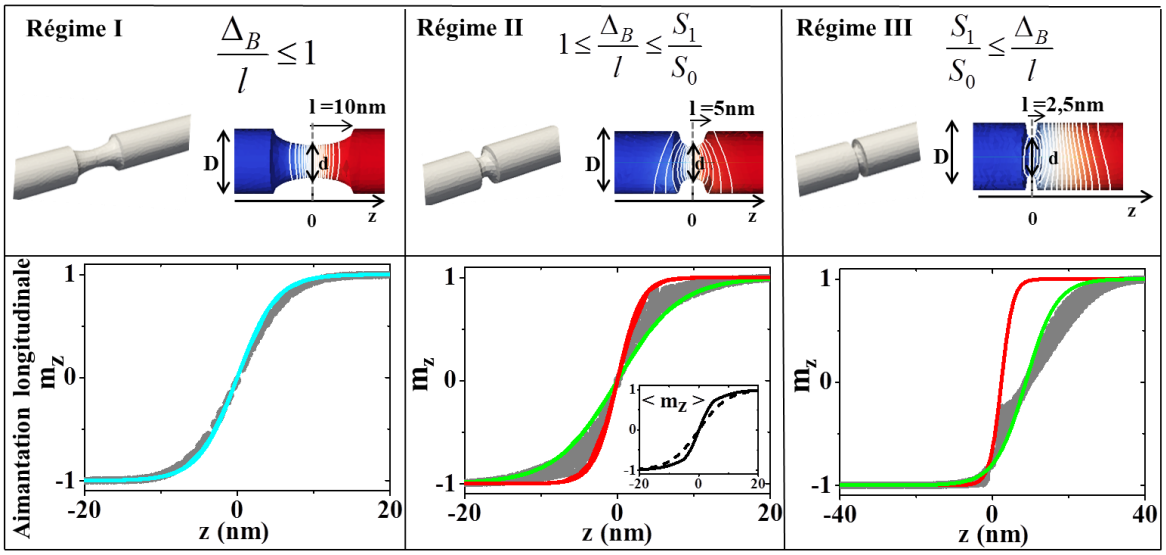

Figure V.4 : Structures illustrant les trois régimes définis par *P.Bruno* (Bruno, 1999). La 1ere ligne représente la géométrie de la structure et la distribution spatiale de la composante longitudinale de l'aimantation m_z obtenue (zoom). La 2nd ligne représente la distribution d'aimantation longitudinale (gris) ainsi que les distributions de Bloch (I.25) correspondantes avec $\Delta_B=3$nm lié aux paramètres géométriques (ligne rouge), $\Delta_B=5$nm (ligne bleue) correspondant à la largeur de paroi dans un fil de diamètre $d=10$nm, $\Delta_B=8$nm proche de la largeur de paroi dans un fil de diamètre $D=20$nm (ligne verte).

Bien que les géométries simulées reproduisent qualitativement les résultats de *Bruno* (Bruno, 1999), on ne retrouve pas les résultats quantitatifs des régimes I et III pour les raisons suivantes. Tout d'abord, *P. Bruno* considère une paroi 1D et les distributions d'aimantation simulées ici sont 3D, c'est pourquoi elles s'étendent autour de la distribution de Bloch sur les graphes de la Figure V.4. Ensuite, nos structures ne présentent pas d'anisotropie magnéto-cristalline et *Bruno* néglige l'énergie démagnétisante. Enfin, bien qu'elles n'aient pas la même géométrie, les trois structures sont proches de la limite du régime II.

En jouant sur la forme de la constriction, j'ai pu retrouver les trois régimes de distribution d'aimantation d'une paroi dans une structure confinée prédits par *P. Bruno*. Nous allons à présent nous focaliser sur le cas d'une paroi dont la largeur est proche de celle de la constriction (régime II). Nous allons voir que plus la paroi est confinée, plus sa distribution est déterminée par les paramètres géométriques.

2.2. Impact du diamètre *d* de la constriction

Dans ce paragraphe, nous constatons l'impact du diamètre *d* d'une constriction, dont la largeur caractéristique est proche de la largeur de paroi ($\Delta_B = l = 5$nm), sur les distributions d'aimantation et d'énergie.

2.2.1. Considérations géométriques

Les graphes de la Figure V.5(a,b) représentent les distributions d'aimantation longitudinale et transverse à l'équilibre dans des constrictions de diamètre *d* variable. Le trait noir représente les profils moyens d'aimantation. Les pointillés gris marquent les bords de la constriction. Il apparaît que la distribution d'aimantation est nettement perturbée par la présence de la constriction. En effet, le graphe de la Figure V.5(c) représente la largeur de paroi estimée à partir de l'écart type de la distribution longitudinale d'aimantation pour différents matériaux suivant la formule (I.37). On remarque que plus la taille de la constriction diminue plus les largeurs de parois sont similaires. Ainsi, pour des constrictions de petits diamètres, la distribution d'aimantation de la paroi est quasiment indépendante des paramètres matériaux et ne dépend que des paramètres géométriques.

2.2.2. Considérations énergétiques

Une paroi transverse a naturellement tendance à se placer au niveau de la constriction car celle-ci constitue un centre de piégeage en diminuant son énergie démagnétisante. La Figure V.6(a) représente l'énergie de la paroi en fonction de sa distance au centre de la constriction. Les tirets gris représentent l'énergie de la paroi dans un fil parfait. La présence de la constriction crée un puits de potentiel. Plus le diamètre de la constriction est petit, plus le puits de potentiel est profond et présente une pente raide, plus la paroi est stable (Figure V.6(b)). Ainsi, si une paroi est à proximité d'une constriction, elle aura tendance à dériver au centre de celle-ci. La Figure V.6(c) représente l'écart type de la distribution d'aimantation longitudinale (ou de sa largeur suivant l'expression (I.37)) en fonction de la distance de la paroi au centre de la constriction. Loin de la constriction, la paroi présente la configuration développée dans un fil parfait. A l'approche de la constriction, la paroi s'étire et « tombe » au centre de la constriction. Enfin, la Figure V.6(d) montre que l'énergie du système ne dépend pas seulement des dimensions de la constriction mais également de sa géométrie.

Cette étude statique m'a permis de déterminer les configurations d'équilibre d'une paroi transverse en présence d'un obstacle géométrique qui crée un puits énergétique dont la forme et la profondeur dépendent de la taille et de la géométrie de la constriction. Nous allons voir que ce puits de potentiel ainsi que l'énergie apportée par le courant polarisé en spin déterminent le comportement dynamique de la paroi.

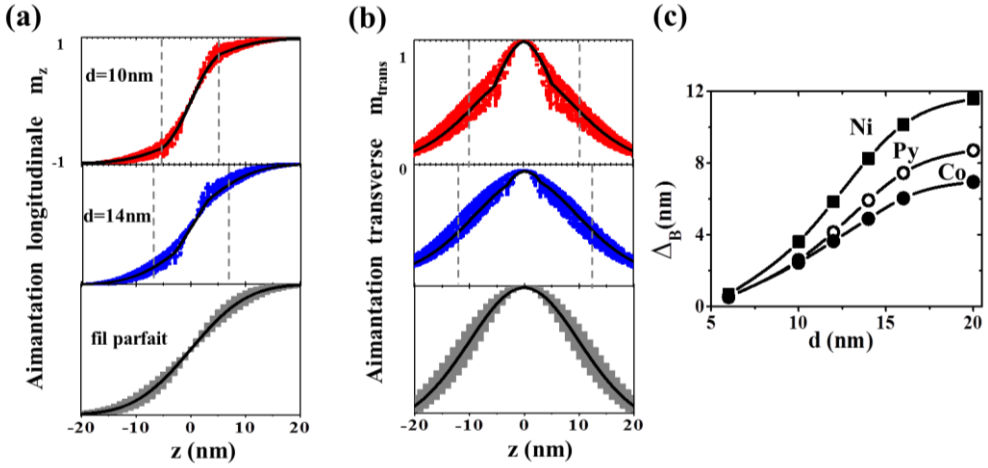

Figure V.5 : (a),(b) Distributions longitudinale et transverse de l'aimantation dans un fil parfait de permalloy et des fils de permalloy présentant une constriction de largeur *d=10*nm et *d=14*nm. Les lignes noires correspondent aux profils moyens de distribution de l'aimantation. Les lignes verticales en pointillé marquent les limites de la constriction. (c) Estimation de la largeur de paroi à partir de la formule (I.37) en fonction de la taille *d* de la constriction pour un matériau de type permalloy avec $M_S=8\cdot10^5$A/m, $A_{ex}=1\cdot10^{-11}$J/m, un matériau de type cobalt avec $M_S=1{,}4\cdot10^5$A/m, $A_{ex}=1{,}4\cdot10^{-11}$J/m et un matériau de type nickel avec $M_S=4{,}9\cdot10^5$A/m, $A_{ex}=0{,}9\cdot10^{-11}$J/m.

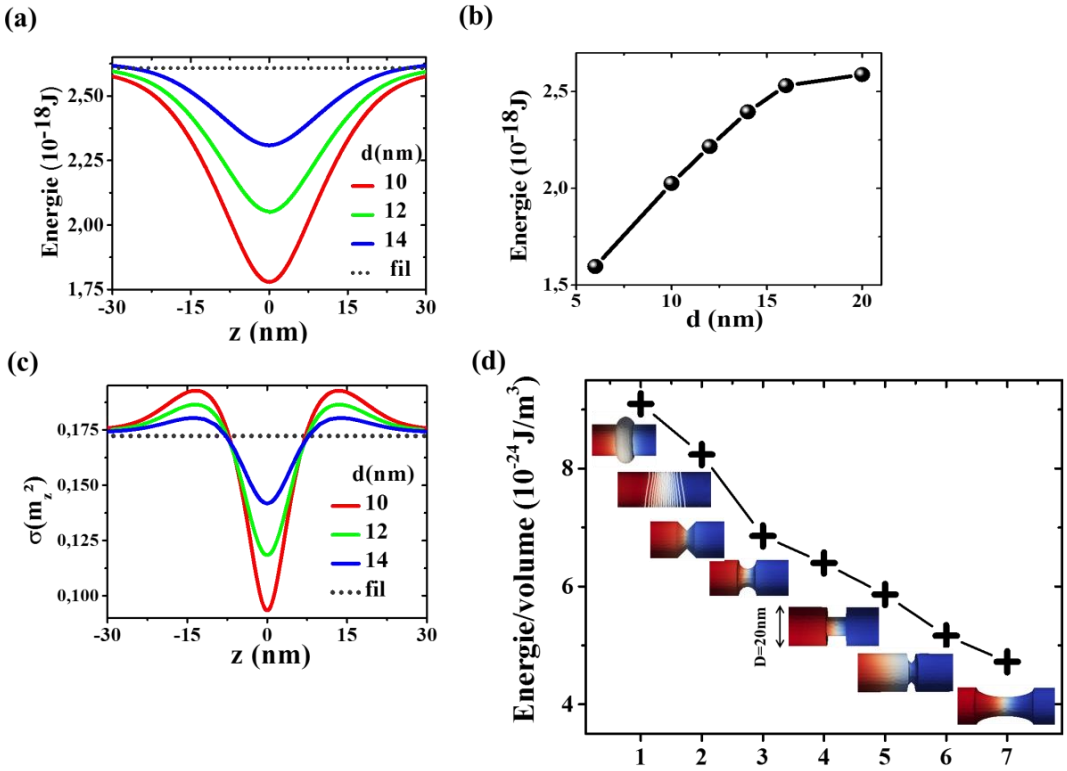

Figure V.6 : (a) Potentiel de piégeage en fonction de la distance au centre de la constriction. (b) Energie de la paroi au centre de constrictions de diamètre *d*. (c) Estimation de l'écart type de la distribution d'aimantation suivant l'axe *z* en fonction de la distance de la paroi au centre de piégeage. (d) Energie par unité de volume de parois transverses stabilisées dans des constrictions présentant les géométries suivantes : 1. anti-constriction, 2. fil parfait, 3. constriction triangulaire, 4. constriction circulaire, 5. constriction carré, 6. constriction fine, 7. constriction large. Le diamètre du fil est fixée à *D=20*nm.

3. Impact d'une constriction sur la dynamique d'une paroi transverse soumise à un courant polarisé en spin dans un fil

Une fois la paroi relaxée au centre de la constriction, un courant polarisé en spin est appliqué afin de la dépiéger. Dans le cas d'un fil parfait, l'application du courant initie spontanément le déplacement de la paroi dans le fil. La paroi se propage alors sans se déformer à une vitesse proportionnelle au courant appliqué (voir §1 de ce chapitre). Ce n'est pas le cas si la paroi est initialement relaxée dans une constriction. En effet, j'ai observé l'apparition de différents régimes de dépiégage en fonction du diamètre *d* de la constriction et du potentiel électrique appliqué. La largeur de la constriction est fixée à *l*=5nm.

3.1. Diagramme de phase du dépiégage en fonction du diamètre de la constriction et du courant appliqué

Les régimes de dépiégage de la paroi, initialement stabilisée au centre de la constriction, sont présentés sur le diagramme de phase de la Figure V.7 en fonction du diamètre *d* de la constriction et de la tension appliquée aux extrémités du fil. Les caractéristiques de ces régimes sont présentées sur la Figure V.8 pour une constriction de diamètre *d=2l=10*nm. Les images de la 1ère ligne de la Figure V.8 présentent les distributions de l'aimantation longitudinale qui se développent pendant le dépiégage. Les graphes de la 2ème ligne présentent l'évolution temporelle de la grandeur :

$$\sigma_m = \frac{\sigma\left(m_z^2\right)}{\sigma_{fil}\left(m_z^2\right)} \qquad \text{(V.2)}$$

qui est l'écart type de la distribution d'aimantation suivant l'axe *z* normalisé par celui obtenu dans le cas d'un fil parfait. On rappelle que d'après la formule (I.37), les variations de σ_m peuvent être assimilées aux variations de la largeur de paroi. Les graphes de la 2ème ligne de la Figure V.8 présentent l'évolution temporelle des énergies d'échange et démagnétisante. Les schémas de la dernière ligne illustrent l'angle d'ouverture de l'aimantation transverse dans le plan *x-y* pour chaque régime.

Pour chaque régime, le système évolue vers le comportement obtenu dans un fil parfait loin de la constriction. En effet, toutes les perturbations de la paroi, qui se créent aux abords de la constriction, disparaissent loin d'elle. Notons que les perturbations dynamiques ne sont pas liées aux instabilités de *Walker* car, comme nous l'avons vu au §1 de ce chapitre, le régime instable de *Walker* n'apparaît pas dans les fils à section circulaire pour les intensités de courants que l'on applique. De plus, dans nos calculs, les vitesses de propagation de paroi sont inférieures à *600*m/s ce qui est en deçà du régime magnonique. Dans ce régime, la vitesse de propagation est ralentie par l'émission d'ondes de spins de part et d'autre de la paroi (Yan, et al., 2011).

(i) Régime de piégeage

La paroi est énergétiquement stabilisée dans la constriction en l'absence de courant. Il faut donc appliquer un courant suffisant pour vaincre la barrière de potentiel géométrique et propager la paroi. En outre, cette barrière de potentiel augmente quand le diamètre de la constriction diminue.

C'est pourquoi la tension de seuil nécessaire pour dépiéger et propager la paroi est plus importante pour les constrictions présentant un petit diamètre.

(ii) Régime dynamique amorti

Au-dessus de la tension de seuil, le déplacement de la paroi est initié. Dans ce régime, la largeur de paroi s'agrandit en sortant de la constriction puis atteint la largeur développée dans un fil parfait loin de la constriction (Figure V.8(a)). Pendant la propagation de la paroi, aucun comportement périodique n'apparaît, les énergies du système varient peu et l'angle azimutal de l'aimantation qui correspond à l'ouverture maximale de la composante transverse est faible. Néanmoins, au-delà d'une certaine tension, ce régime se transforme soit en régime oscillant-amorti, soit en régime instable suivant le diamètre de la constriction.

(iii) Régime dynamique amorti-oscillant

Dans le régime amorti-oscillant (Figure V.8(b)), la configuration de la paroi est conservée. Elle reste bien définie dans l'espace, bien que l'angle d'ouverture de sa composante transverse s'agrandit. En effet, on observe que la paroi s'étire en éventail de part et d'autre du centre de la paroi (Figure V.10). Comme l'énergie d'échange est proportionnelle au gradient d'aimantation, elle suit le comportement oscillant de largeur de paroi en anti-phase avec l'énergie démagnétisante. De plus, l'amplitude des oscillations de la largeur de paroi et l'angle d'ouverture maximal augmentent avec la tension. Ce régime est l'intermédiaire entre les régimes dynamiques amorti et instable. Il est décrit en détail au paragraphe suivant (§3.2 de ce chapitre).

(iv) Régime dynamique instable

Pour une tension suffisante ou dans le cas des constrictions à petits diamètres présentant un profond puits de potentiel, un régime instable fortement perturbé se développe (Figure V.8(c)). Il est caractérisé par une configuration de la paroi qui devient complexe et désordonnée. Il semble que ce régime apparaît quand l'angle d'ouverture maximal de la composante transverse dans le plan *x-y* dépasse une valeur critique (180°), la distribution d'aimantation occupe alors tout l'espace de la structure transverse à l'axe principal du fil. La largeur de paroi évolue de façon incohérente et la déformation de la paroi implique une augmentation accrue de l'énergie d'échange. Un tel régime instable doit, à priori, être évité dans les éventuelles applications.

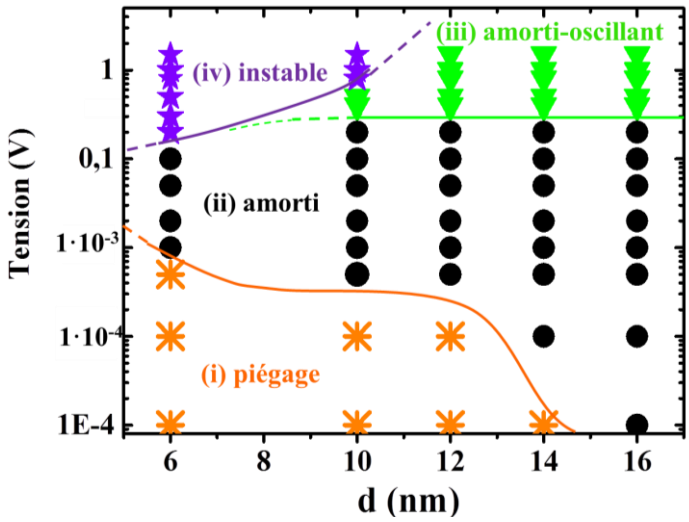

Figure V.7 : Diagramme de phase présentant les différents régimes de dépiégage qui se développent en fonction de diamètre *d* de la constriction et de la tension appliquée. Les traits sont des guides visuels qui délimitent les régimes.

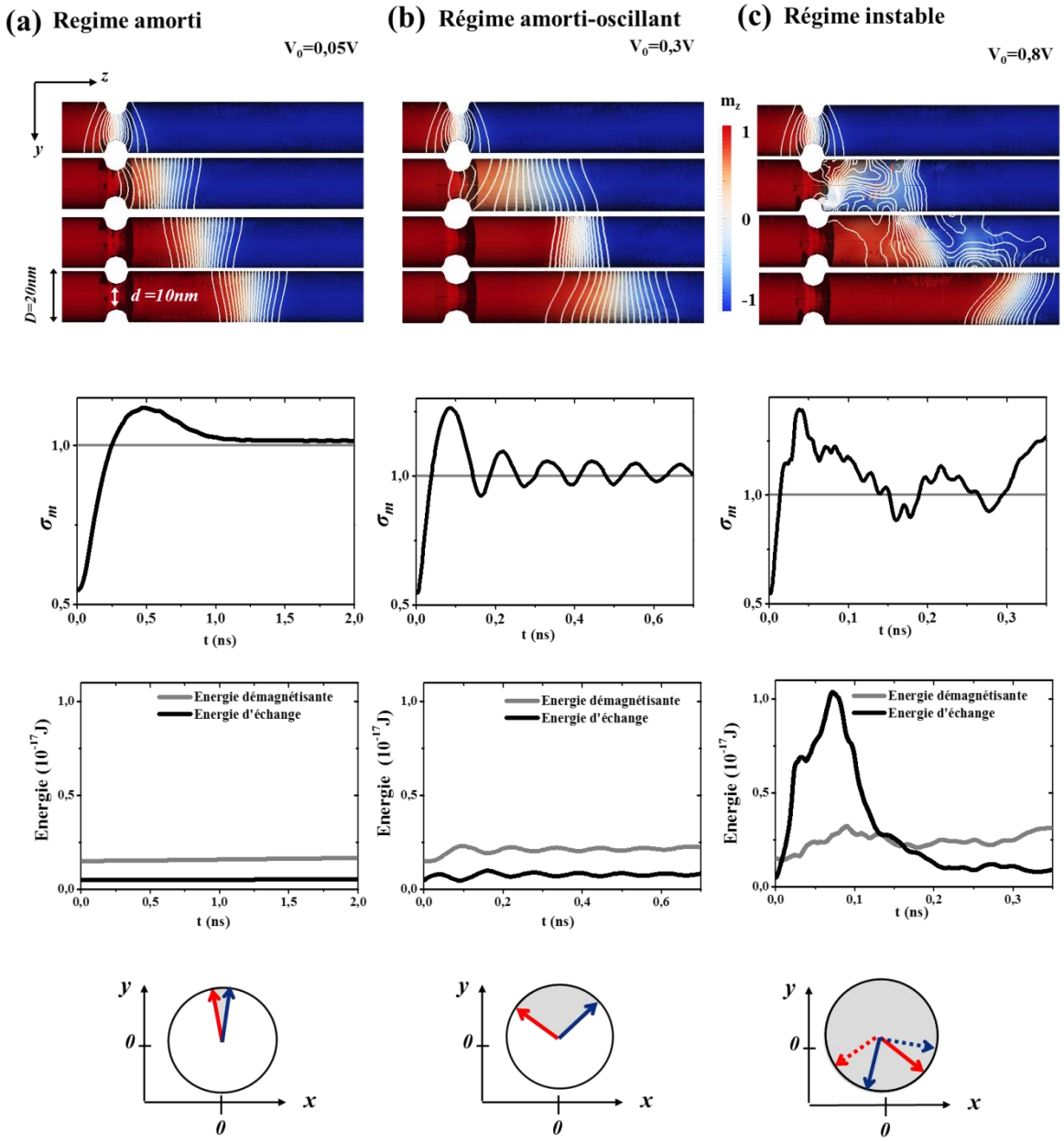

Figure V.8 : Les images de la 1ère ligne représentent les distributions spatiales de la composante longitudinale de l'aimantation m_z à des temps successifs (zoom). Les traits blancs représentent les isovaleurs m_z.. Les graphes de la 2ème et 3ème ligne représentent l'évolution temporelle de σ_m et des énergies d'échange (lignes noires) et démagnétisante (lignes grises) pour chaque régime. Les schémas de la dernière ligne illustrent l'angle d'ouverture de l'aimantation transverse dans le plan *x-y*. A l'instant initial, la paroi est relaxée au centre d'une constriction de diamètre *d=10*nm, l'application de différentes tensions électriques engendre l'apparition du (a) régime amorti pour $V_0=0{,}05$V ($j^e=6.67\cdot10^{12}$A/m², $I=0{,}21$mA), (b) régime amorti-oscillant pour $V_0=0{,}3$V($j^e=4\cdot10^{12}$A/m², $I=1{,}26$mA), (c) régime instable pour $V_0=0{,}8$V ($j^e=1{,}07\cdot10^{13}$A/m², $I=336$mA).

Selon la Figure V.6(d), l'énergie du système varie suivant la forme de la constriction, le diagramme de phase dépend donc au moins quantitativement de la géométrie de la constriction. L'identification des différents régimes est essentielle pour que les expérimentateurs puissent ultérieurement optimiser leurs conditions d'étude. Dans cette optique, le paragraphe suivant présente l'étude détaillée du régime oscillant-amorti.

3.2. Le cas particulier des régimes dynamiques amorti et amorti-oscillant

Dans le régime oscillant-amorti, la configuration transverse de la paroi est conservée mais sa largeur évolue durant la propagation. L'impact de cette variation sur la distribution d'accumulation de spin est tout d'abord présenté. Puis, l'oscillation de la composante transverse sera explicitée. Enfin, nous verrons que la réponse oscillante du système à l'application d'un courant polarisé en spin permet d'estimer les grandeurs caractéristiques du système.

3.2.1. Comportement dynamique de l'aimantation et de l'accumulation de spin

Par analogie avec l'écart type normalisé de la distribution d'aimantation longitudinale, on définit l'écart type normalisé de la distribution d'accumulation de spin transverse σ_s par :

$$\sigma_s = \frac{\sigma\left(\left|s_{trans}\right|\right)}{\sigma_{fil}\left(\left|s_{trans}\right|\right)}, \qquad \text{(V.3)}$$

avec $\sigma_{fil}\left(\left|s_{trans}\right|\right)$ l'écart type de la distribution d'accumulation de spin transverse qui se développe dans un fil parfait.

La Figure V.9(a) représente l'évolution temporelle de σ_m et de σ_s pour une paroi transverse initialement relaxée dans une constriction de diamètre $d=10$nm et soumise à une tension $V_0=0{,}3$V qui équivaut à une densité de courant $U_T=203$m/s, $j^e=4\cdot10^{12}$A/m² et à un courant de $I=1{,}26$mA dans le fil. A l'instant initial, la paroi de domaines est piégée au centre de la constriction. La ligne noire horizontale $(\sigma=1)$ représente le cas du fil parfait pour lequel la distribution et le gradient d'aimantation sont constants pendant la propagation. Dans le cas d'un fil avec constriction, σ_m et σ_s développent un comportement oscillant-amorti autour d'une valeur constante. Une valeur minimum de σ_m correspond à une paroi compacte présentant un fort gradient spatial d'aimantation ce qui donne lieu à une valeur maximum de la courbe σ_s. Ainsi, les deux courbes sont en opposition de phase. La surface grise délimite le régime de transition autour de la constriction.

Pour visualiser l'évolution de la largeur de paroi de domaines durant sa propagation, j'ai représenté les distributions spatiales de l'aimantation longitudinale et d'accumulation de spin transverse à des temps successifs sur la Figure V.9(b). Les temps choisis correspondent aux valeurs maximales et minimales de σ_m, indiqués par les flèches noires sur le graphe de la Figure V.9(a).

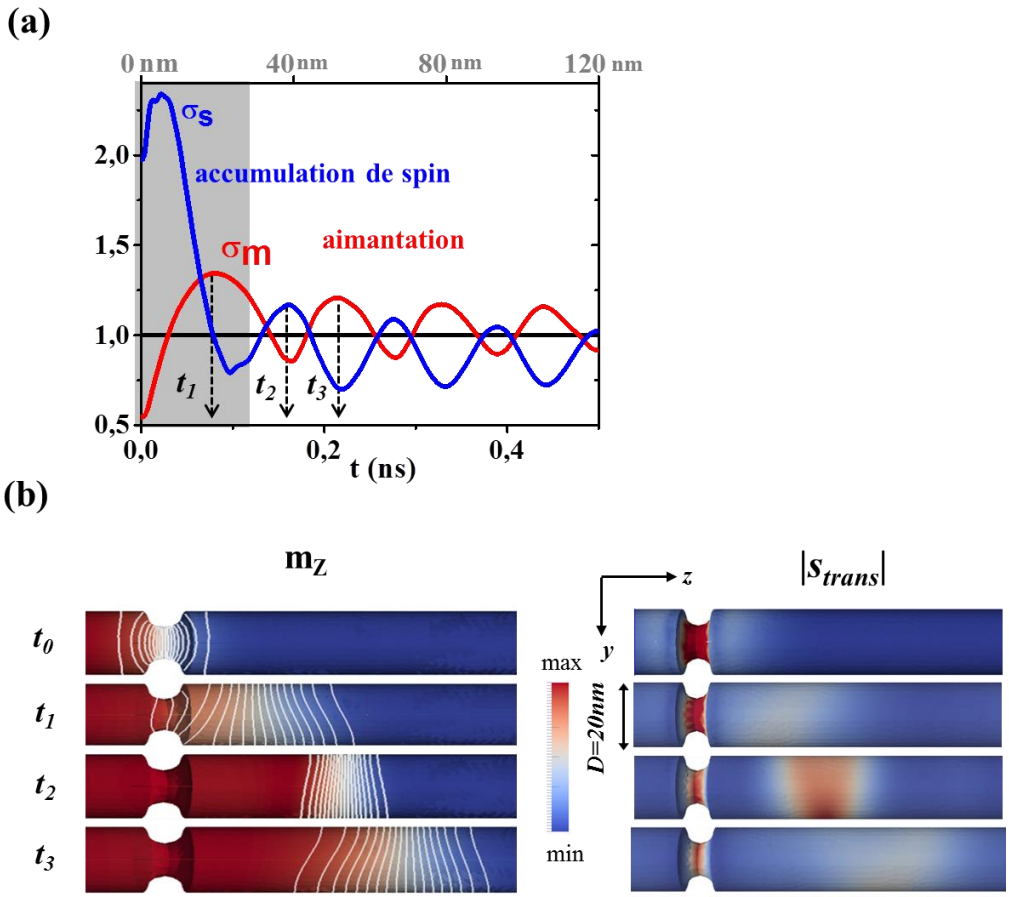

Figure V.9 : (a) Evolution temporelle des écarts types normalisés σ_m et σ_s. L'échelle grise au-dessus du graphe correspond à la distance parcourue par la paroi en *nm*. La surface grise correspond au régime transitoire autour de la constriction. (b) Distributions spatiales de la composante longitudinale de l'aimantation m_z et de l'accumulation de spin transverse $|\mathbf{s}_{trans}|$ successives (zoom) aux temps $t_0=0$ns, $t_1=0{,}078$ns, $t_2=0{,}16$ns et $t_3=0{,}21$ns pointés sur le graphe (a). Les traits blancs représentent les isovaleurs de m_z. (a) et (b) illustrent le cas d'une constriction de diamètre $d=10$nm, la tension appliquée est de $V_0=0{,}3$V ($j^e=4\cdot10^{12}$A/m², $I=1{,}26$mA).

Ainsi, durant la propagation, la paroi de domaines reste bien localisée dans l'espace mais l'aimantation longitudinale développe un mouvement de respiration suivant l'axe du fil.

3.2.2. Description des oscillations latérales

Le mouvement de respiration de l'aimantation suivant l'axe du fil est accompagné par des oscillations latérales en éventail de l'aimantation transverse dans le plan *x-y*. La Figure V.10 schématise les oscillations de la largeur d'une paroi transverse initialement relaxée dans une constriction et l'angle maximal d'ouverture de sa composante transverse à des temps τ successifs. Cette figure montre que la composante transverse oscille avec une période deux fois petite que la composante longitudinale. Les larges oscillations latérales de l'aimantation transverse sont caractéristiques des structures tridimensionnelles car la paroi de domaines possède un degré de liberté supplémentaire par rapport aux parois conventionnelles confinées dans des rubans minces. En effets, dans les rubans, ce type d'oscillation est rapidement atténué.

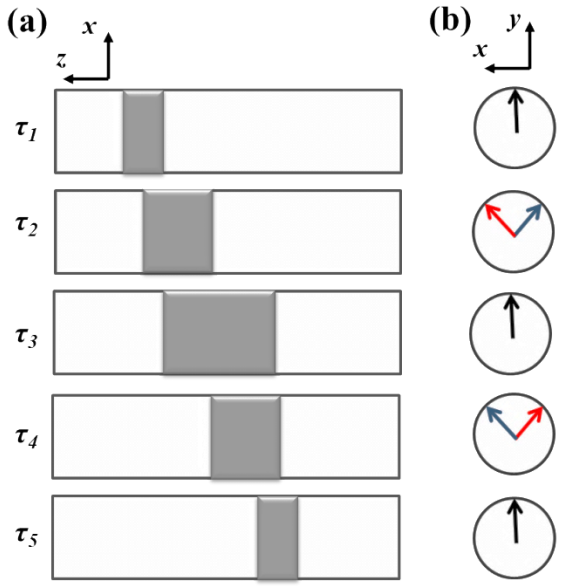

Figure V.10 : Représentation schématique à des temps successifs des oscillations (a) longitudinales dans le plan *x-z* (b) latérales de la paroi dans le plan *x-y* perpendiculaire à l'axe de propagation.

3.2.3. Similitudes avec la réponse linéaire d'un oscillateur harmonique

L'évolution de la largeur de paroi dans le régime amorti-oscillant ne suit pas une loi mathématique simple à cause de la forte non-linéarité du système couplé. Néanmoins, il existe quelques similitudes avec la réponse linéaire d'un oscillateur harmonique soumis à une perturbation extérieure décrite par l'équation:

$$\sigma_m(t) = Ae^{(-2\pi\xi\ f_0 t)}\sin(2\pi f_r t + \phi) \qquad \text{(V.4)}$$

avec ξ le facteur d'atténuation, f_0 la fréquence propre, $f_r = \sqrt{1-2\xi}\, f_0$ la fréquence de résonnance, ϕ la phase et A l'amplitude. La théorie de l'oscillateur harmonique prédit l'existence de différents régimes dynamiques suivant la valeur du facteur d'atténuation. Cette formule simplifiée nous permet de trier les tendances observées par rapport à la valeur de ξ. Pour les régimes amorti et amorti-oscillant, ξ est compris entre *0* et *1*. Dans ce modèle f_r et ξ s'expriment en fonction des paramètres caractéristiques du système. Bien que la dynamique du système ne soit pas linéaire et que l'analogie soit limitée, j'ai estimé les valeurs de f_r et ξ et apprécié leur variation en fonction du coefficient d'amortissement α, de la constante d'échange A_{ex}, de la valeur de l'aimantation à saturation $J_s=\mu_0 M_s$, du diamètre d de la constriction et de la tension V_0 appliquée.

Etude de σ_m dans un fil parfait

Afin de séparer les effets du transport des effets purement micromagnétiques, j'ai étudié l'évolution de σ_m durant la relaxation d'une paroi transverse hors équilibre dans un fil parfait de permalloy de diamètre *D=20nm* en l'absence de courant pour différentes valeurs de α, A_{ex} et J_s. Le graphe de la Figure V.11(a) représente l'évolution temporelle de σ_m en fonction du coefficient d'amortissement α. On retrouve le comportement amorti et oscillant-amorti suivant la valeur de α. En effet, l'augmentation de α engendre un amortissement du signal plus net et une diminution de l'amplitude des oscillations. La fréquence et le coefficient d'atténuation, extraits des graphes de σ_m, sont représentés sur les graphes de la Figure V.11 [b-d]. Il apparaît que l'estimation de f_r augmente quasi-linéairement en fonction de A_{ex} et J_s et que ξ est liée à α.

Variation du coefficient d'atténuation

La même étude a été menée pour un fil avec une constriction de diamètre d à laquelle la tension V_0 est appliquée. Dans ce cas, j'ai estimé ξ en fonction du paramètre géométrique d (Figure V.12(a)) et du paramètre de transport V_0 (Figure V.12(b)). Il apparaît que ξ augmente avec d et diminue avec V_0. En effet, réduire le diamètre de la constriction ou augmenter la tension induit une augmentation du gradient de courant et donc de l'efficacité du STT (voir §4.1 de ce chapitre). Si l'efficacité du STT est accrue, le système est plus perturbé et atteint moins rapidement sa configuration d'équilibre d'où un coefficient d'atténuation ξ plus faible. En outre, la Figure V.12(b) montre qualitativement qu'en augmentant le coefficient d'atténuation ξ de la réponse en diminuant la tension appliquée V_0, on passe du régime amorti au régime amorti-oscillant. En résumé le coefficient d'atténuation ξ est lié au facteur d'amortissement et à la force motrice associée au STT responsable du déplacement de la paroi.

Variation de la fréquence de résonance

La fréquence des oscillations ne semble pas dépendre de la taille de la paroi ni de la tension appliquée mais uniquement des paramètres matériaux A_{ex} et J_s. Pour donner un ordre de grandeur, pour $d=10$nm et $V_0=0,3$V ($j^e=4.10^{12}$A/m², $I=1,26$mA dans le fil), j'estime approximativement la fréquence de résonance à $f_r=8,8$GHz, la fréquence propre correspondante est $f_0=8,95$GHz. Cette valeur est proche de celle estimée dans le cas d'un fil parfait pour les mêmes paramètres matériaux soit $8,78$GHz.

Variation de l'amplitude des oscillations

La Figure V.12 montre également que l'amplitude initiale des oscillations diminue avec le diamètre de la constriction et augmente avec la tension. Les plus grandes amplitudes correspondent naturellement aux systèmes les plus perturbés.

La présence de la constriction ne perturbe pas seulement la dynamique d'aimantation, elle modifie également le flux du courant d'électrons polarisés en spin. En effet, la zone grise de la Figure V.9(a) met en évidence que la distribution spatiale du courant électrique engendre une augmentation significative de l'accumulation de spin aux abords de la constriction. Nous allons voir que cet accroissement de l'accumulation de spin, lié à la géométrie, augmente la non-adiabaticité du système.

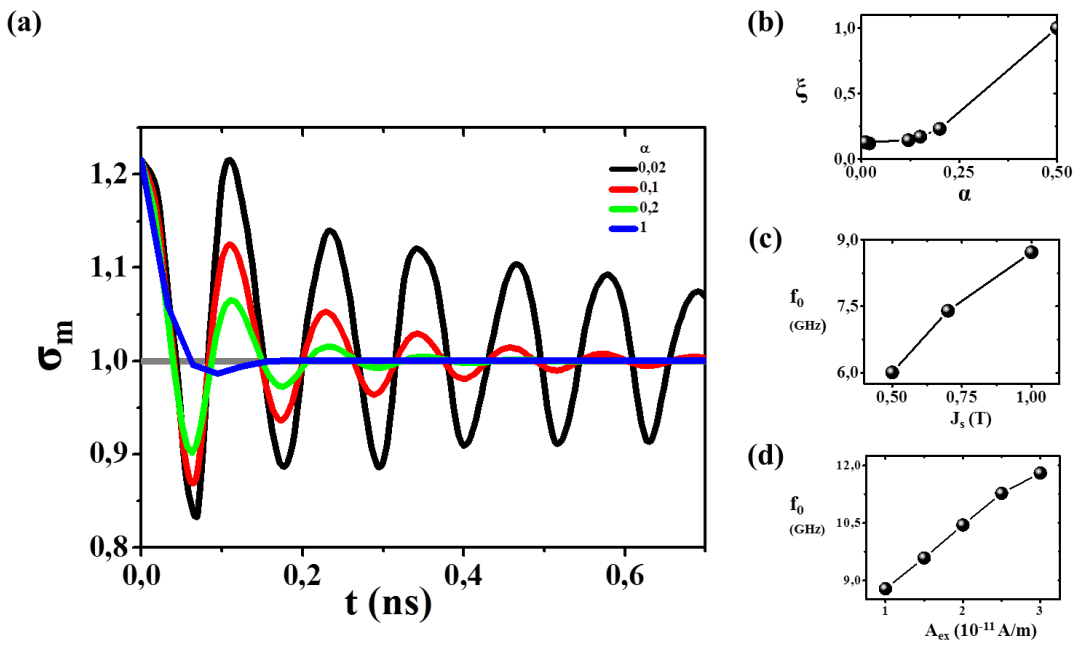

Figure V.11 : (a) Evolution temporelle de l'écart type normalisé de la distribution longitudinale de l'aimantation σ_m durant la relaxation d'une paroi transverse dans un fil parfait de diamètre $D=20$nm en l'absence de courant. Evolution de l'estimation (b) du facteur d'atténuation ξ en fonction de α, (c) de la fréquence de résonnance f_r en fonction de la constante d'échange A_{ex} et (d) de de la fréquence de résonnance f_r en fonction de la valeur de l'aimantation à saturation $J_s=\mu_0 M_s$.

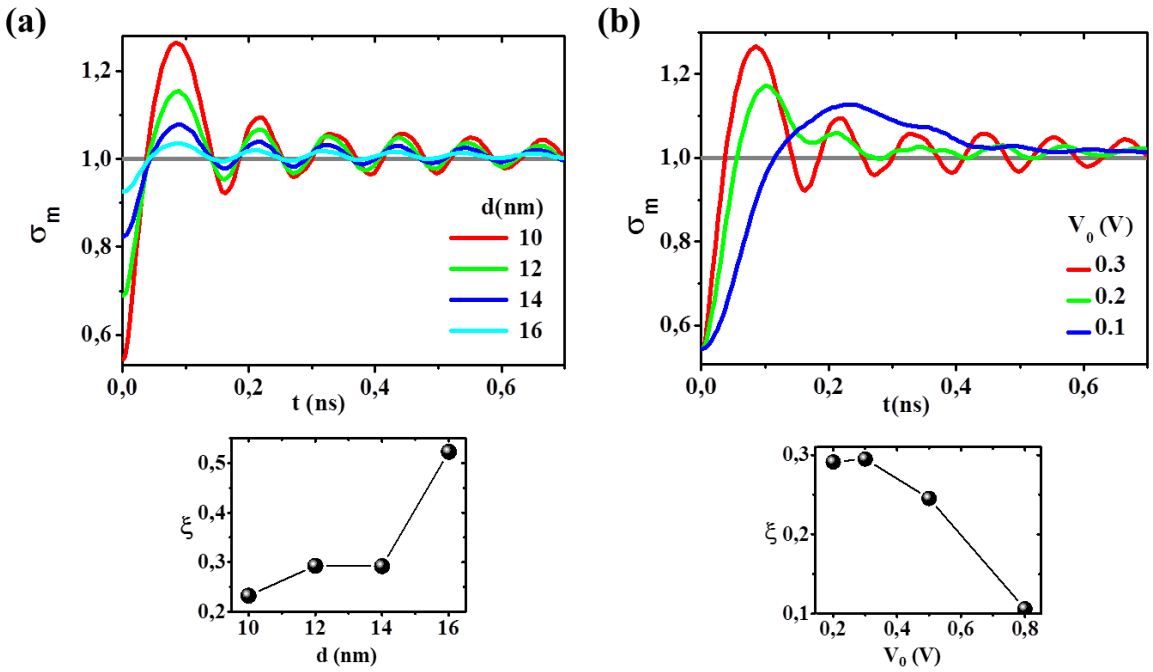

Figure V.12 : Evolution temporelle de l'écart type normalisé de la distribution de l'aimantation longitudinale σ_m durant le dépiégage de la paroi transverse (a) de constrictions de diamètres d différents soumise à la tension $V_0=0{,}3$V ($U_T=203$m/s, $j^e=4\cdot10^{12}$A/m², $I=1{,}26$mA), (b) d'une constriction de diamètre $d=10$nm soumise à différentes tensions. Les encarts représentent l'évolution de l'estimation du facteur d'atténuation ξ en fonction de d et V_0.

4. Non-adiabaticité géométrique

La présence d'une constriction dans un fil modifie également la distribution du courant, en créant localement une augmentation du gradient de courant. Or, la distribution d'accumulation de spin est principalement issue de la contribution des gradients d'aimantation et de courant. L'étude du dépiégage d'une paroi transverse initialement relaxée dans la constriction de largeur $l=5$nm et de diamètre d variable d'un fil de permalloy de diamètre $D=20$nm, par un courant polarisé en spin, m'a permis de mettre en évidence ces deux contributions ainsi que leur impact sur la dynamique de l'aimantation.

4.1. Mise en évidence des deux contributions à la distribution d'accumulation de spin

Dans le cas du fils parfait, le courant étant homogène, le gradient d'aimantation participe principalement à la distribution de l'accumulation de spin. En revanche, comme le montre le graphe de la Figure V.13(b), en présence d'une constriction, la densité de courant électrique au centre de la constriction décroît avec le diamètre de la constriction, le courant n'est plus homogène dans le fil. Dans ce cas, sa distribution d'accumulation de spin est liée au gradient spatial d'aimantation et au gradient de courant.

Les graphes de la Figure V.13(a.1) représentent la distribution spatiale de l'amplitude de l'accumulation de spin transverse $|s_{trans}|$ pour différents diamètres d de constriction, à l'instant initial ($t_0=0$ns) quand la paroi est relaxée à l'intérieur de la constriction. D'après ce qui précède, le pic central situé au niveau de la constriction résulte de la superposition des contributions des gradients de courant et d'aimantation. L'amplitude du pic d'accumulation de spin décroît drastiquement avec l'augmentation de d qui induit la diminution locale du gradient de courant jusqu'à une valeur minimale dans le cas du fil parfait ($d=D$).

Il est possible de distinguer les deux contributions sur les graphes de la Figure V.13(a.2) qui représentent la distribution spatiale de l'amplitude de l'accumulation de spin transverse $|s_{trans}|$ à l'instant $t_1>t_0$ quand la paroi a quitté la constriction, pour différents d et pour un fil parfait. On observe que le profil et l'amplitude du pic des distributions d'accumulation de spin transverses qui suivent le centre de la paroi de domaines (pic de droite) sont similaires pour toutes les géométries. Il s'agit de la contribution du gradient d'aimantation. Quand la paroi est loin de la constriction, les distributions d'aimantation et d'accumulation de spin tendent vers celles obtenues dans un fil parfait. A l'inverse, l'amplitude du pic de gauche situé au niveau du centre de la constriction varie considérablement avec d et disparaît pour un fil. Cette accumulation de spin résiduelle est principalement liée au gradient spatial de courant.

Les deux sources principales d'accumulation de spin sont ainsi mises en évidence. Nous allons voir que l'augmentation de l'amplitude de l'accumulation de spin liée à la géométrie augmente l'efficacité du STT et la non-adiabaticité du système.

4.2. Mise en évidence de l'augmentation de la non-adiabaticité en présence d'une constriction

La Figure V.13(c) représente le déplacement de la paroi de domaines en fonction du temps pour différents diamètres *d* de la constriction et pour un fil parfait soumis à la tension $V_0=0,3$V qui équivaut à la densité de courant $U_T=203$m/s, $j^e=4.10^{12}$A/m² et au courant $I=1,26$mA dans le fil. Pour un fil parfait, la paroi se déplace linéairement à la vitesse $v=203$m/s. En revanche, en présence d'une constriction, le déplacement dévie du comportement linéaire lors du dépiégage de la paroi puis le rejoint loin de la constriction. A proximité de la constriction, l'inclinaison de la pente de déplacement augmente quand *d* diminue. Nous avons vu, qu'à l'instant initial, à cause des forts gradients de courant et d'aimantation, la distribution d'accumulation de spin présente un pic au centre de la paroi. Or, le couple de transfert de spin (STT) est lié à la distribution d'accumulation de spin (II.10). Ainsi, à l'instant initial, la superposition des gradients de courant et d'aimantation augmente l'efficacité du STT et donc la non-adiabaticité du système et la paroi se déplace plus rapidement. Néanmoins, cette contribution géométrique décroît rapidement en fonction de la distance à la constriction et n'a qu'une faible influence sur la vitesse globale. En effet, la déviation de propagation n'est visible que sur des temps courts inférieurs à *1ns*. Au-delà, le comportement global du système est largement dominé par la relaxation micromagnétique.

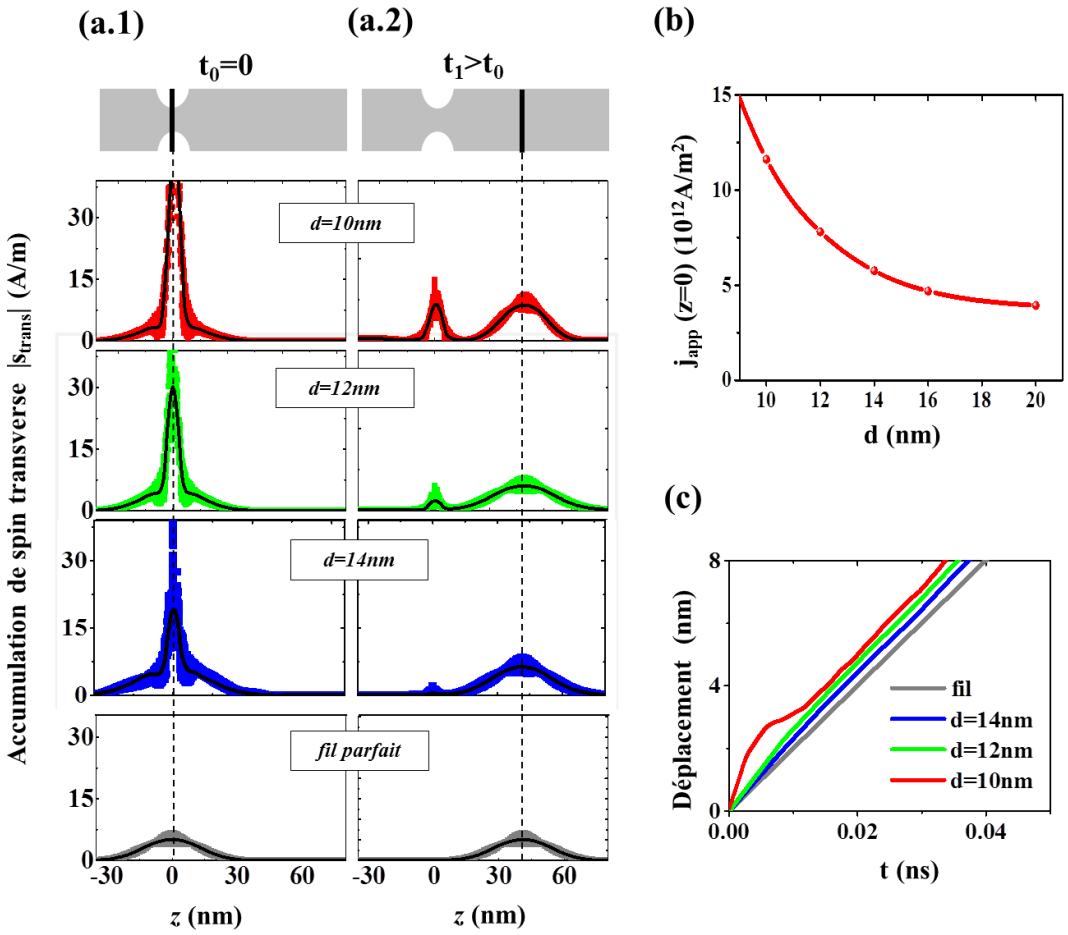

Figure V.13 : Distributions de l'amplitude de l'accumulation de spin transverse pour différents diamètres *d* de constrictions et pour un fil parfait (a.1) au temps initial ($t_0=0$ns) et (a.2) à un instant ultérieur ($t_1>t_0$). Les schémas permettent de visualiser la position de la paroi symbolisée par un trait noir vertical. (b) Amplitude maximale de la densité de courant électrique au centre de la constriction. (c) Déplacement de la paroi en fonction du temps pour différentes diamètres *d* de constrictions et pour un fil parfait. Pour (a), (b) and (c) la tension appliquée est de $V_0=0,3$V ($U_T=203$m/s, $j^e=4,10^{12}$A/m², $I=1,26$mA).

5. Conclusion du chapitre

La présence d'une irrégularité géométrique comme une constriction au sein d'un fil modifie profondément la configuration micromagnétique interne et la distribution de courant de spin dans le système. En effet, nous avons montré que la constriction constitue un puits énergétique dans lequel la paroi est stabilisée. Puis, nous avons vu que, dans des géométries confinées, la distribution d'aimantation dépend du rapport entre la largeur de la constriction et la largeur de paroi définie par les paramètres matériaux.

Par ailleurs, nos simulations nous ont permis de caractériser différents régimes dynamiques de dépiégage de la paroi en fonction de la tension appliquée et du rapport du diamètre de la constriction sur celui du fil. Cette étude a notamment révélé l'existence d'un régime pour lequel la largeur de paroi oscille en fonction des paramètres caractéristiques du matériau. En outre, l'observation d'oscillations latérales de la paroi nous a permis de mettre en évidence un comportement propre aux systèmes tridimensionnels à section circulaire.

L'étude dynamique du dépiégage de la paroi aux premiers moments de temps a dévoilé une contribution supplémentaire à la non-adiabaticité du système liée à la géométrie confinée. Bien que cet effet augmente avec la diminution du rapport d/D et qu'il doit être pris en compte lors de l'étude du dépiégage de la paroi, nous avons montré que pour des échelles de temps assez longues la relaxation micromagnétique domine largement sur les effets de transport qui assurent uniquement la propagation de la paroi. Nous avons constaté que loin de la constriction dans un fil présentant une symétrie cylindrique parfaite, le choix du modèle de transport ne joue pas un rôle majeur sur la dynamique d'aimantation et la vitesse résultante est peu impactée. En effet, bien que la prise en compte de la diffusion de spin dans le modèle non local de *Zhang et Li* induise une augmentation du paramètre de non-adiabaticité, les vitesses de propagation obtenues dans ce modèle suivent globalement la relation $v=U_T$ établie dans le modèle local quel que soit le paramètre de non-adiabaticité. De même, dans le cas d'un fil parfait, la différence des vitesses linéaires de propagation entre le modèle local et non local est de l'ordre de l'erreur numérique. En revanche, nous avons observé, sur quelques points, une différence entre les deux modèles sur la vitesse de rotation autour de l'axe du fil qui est liée au paramètre de non-adiabaticité.

D'un point de vue expérimental, il serait éventuellement possible de distinguer le régime de piégeage des régimes dynamiques, après l'application d'une impulsion de courant, par microscopie à force magnétique. Par contre, la différenciation des différents types de régimes dynamiques est plus difficile à traiter. Une solution serait de faire de mesures impulsionnelles de résistance en temps réel (Rüffer, et al., 2014).

Enfin, cette étude nous a permis de montrer que notre logiciel micromagnétique feeLLGood permet de simuler la dynamique d'aimantation soumise à un courant polarisé en spin dans des structures complexes tridimensionnelles dont la géométrie crée de forts gradients de courant et d'aimantation.

Conclusion

Résumé des travaux de la thèse :

Ces travaux de thèse concernent l'étude de l'interaction réciproque entre un courant polarisé en spin et une couche ferromagnétique. Nous avons couplé numériquement l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) qui décrit la dynamique de l'aimantation dans le cadre du micromagnétisme et les équations de transport dépendant du spin de différents modèles.

L'équation LLG permet, entre autres, d'étudier le comportement des distributions d'aimantation qui se développent dans les structures confinées tridimensionnelles ferromagnétiques comme les rubans ou les fils. En particulier, elle permet l'étude statique et dynamique des parois de domaines magnétiques dans lesquelles l'aimantation varie de façon continue d'une orientation à l'autre.

Quand un courant polarisé en spin traverse une couche magnétique, il interagit de façon réciproque avec l'aimantation via le couple de transfert de spin (Berger, 1996; Slonczewski, 1996) ce qui permet la propagation de parois de domaines (Klaui, et al., 2005; Yamaguchi, et al., 2006; Hayashi, et al., 2006; Beach, et al., 2006; Parkin, et al., 2008). Les modèles de transport dépendant du spin décrivent le comportement des spins d'un courant qui traverse une couche magnétique, afin de calculer le couple de transfert de spin transmis. Dans cette thèse, je me suis focalisée sur les modèles diffusif de *Zhang et Li* (Zhang, et al., 2004) et diffusif généralisé (GDD) (Petitjean, et al., 2012) qui complète le modèle de *Zhang et Li* en intégrant les effets balistiques d'absorption de spin transverse qui agissent sur l'aimantation. L'étude de la distribution de l'accumulation de spin et du

paramètre de non-adiabaticité, qui quantifie l'action du courant sur l'aimantation, d'une distribution de Bloch 1D m'a permis de prédire l'impact de chacun de ses modèles sur la dynamique de l'aimantation en fonction des longueurs caractéristiques. Nous avons constaté que la non-adiabaticité du système augmente pour les deux modèles dans le cas de forts gradients d'aimantation et de grandes longueurs de diffusion de spin. Ce phénomène est causé par la diffusion non locale de spins qui rend les spins du courant sensibles aux variations d'aimantation sur une grande distance (Manchon, et al., 2011; Claudio-Gonzalez, et al., 2012; Akosa, et al., 2015). Une même étude 1D dans le modèle GDD nous a permis de montrer que pour une longueur de cohérence de spin inférieure à la longueur d'échange *s-d*, le terme d'absorption de spin transverse introduit dans ce modèle, réduit la non-adiabaticité du système quand la longueur de cohérence de spin diminue.

Le couple de transfert de spin apparaît dans l'équation LLG et dans les équations de transport, il couple donc les modèles physiques du micromagnétisme et du transport dépendant du spin. Dans le cas de parois longues, *Thiaville et al*. proposent une expression locale du couple de transfert de spin (Thiaville, et al., 2005). Cependant, la prise en compte des effets non locaux comme la diffusion de spin n'est possible qu'avec un couplage numérique des modèles de micromagnétisme et de transport dépendant du spin. C'est pourquoi, nous avons choisi de coupler les équations de transport et l'équation LLG de façon auto-cohérente au sein de notre code micromagnétique éléments finis feeLLGood.

Notre logiciel micromagnétique feeLLGood « maison » repose sur un schéma numérique convergent du second ordre. Durant ma thèse, le calcul du champ démagnétisant a été optimisé par la création d'une version hexaédrique du code pour simuler la dynamique de l'aimantation dans des structures régulières comme les rubans et par l'implémentation d'une méthode « fast multipole » parallélisée pour les structures complexes. L'ajout de modules de transport à ce code permet d'étendre l'utilisation de feeLLGood à l'étude de la dynamique de l'aimantation sous courant polarisé en spin. Cependant, nous avons constaté que l'introduction des termes de transport perturbe la convergence du schéma numérique. En effet, si la variation d'aimantation est trop importante à chaque pas de temps, le schéma numérique engendre une surdissipation de l'énergie qui perturbe la dynamique. De plus, il est apparu que le terme de transport est très sensible à la symétrie locale du maillage. Conscients de ces limites d'utilisation, j'ai validé l'utilisation de notre code micromagnétique éléments finis pour l'étude de la propagation de parois de domaines dans des rubans et des fils magnétiques par comparaison avec la littérature. Puis, j'ai mené deux études majeures.

La première étude concerne l'impact du modèle de transport sur la dynamique d'aimantation d'une paroi transverse dans un ruban de permalloy. Conformément aux prédictions 1D, nous avons observé que la vitesse de propagation obtenue avec les modèles de transport non locaux augmente nettement par rapport à la vitesse calculée dans le modèle local dans le cas de forts gradients d'aimantation et d'autant plus que la longueur de diffusion est importante. Nous avons également relevé un décalage du courant critique de *Walker* dans le modèle non local de *Zhang et Li* par rapport au modèle local de *Thiaville*. Ces phénomènes marquent une augmentation de la non-adiabaticité du système issue de la diffusion non locale de spin. D'autre part, l'estimation des vitesses de propagation et du courant critique de *Walker* dans le modèle GDD, nous a permis de montrer une diminution du paramètre de non-adiabaticité pour de petites longueurs de cohérence de spin. Ainsi, nous avons mis en évidence les contributions à la non-adiabaticité d'une paroi de domaines qui complètent celle issue de la précession des spins autour de l'aimantation locale : la

diffusion et le déphasage de spin qui, dans le cas de parois courtes et des longueurs caractéristiques adéquates, respectivement augmente et diminue la non-adiabaticité du système

La seconde étude est dédiée à l'impact de la géométrie sur l'équilibre et la dynamique des distributions d'aimantation et d'accumulation de spin dans un fil circulaire de permalloy. A l'équilibre, une irrégularité géométrique comme une constriction représente un puits énergétique pour une paroi transverse. Elle tend donc à relaxer à l'intérieur de la constriction en modifiant sa distribution d'aimantation en fonction du rapport entre la taille de la constriction et celle de la paroi. L'application d'un courant polarisé en spin permet de dépiéger la paroi et de la propager dans le fil. J'ai mis en évidence différents régimes dynamiques de dépiégage spécifiques aux systèmes tridimensionnels en fonction de la tension appliquée et du rapport du diamètre de la constriction sur celui du fil. En particulier, je me suis focalisée sur la réponse oscillante de l'aimantation à l'application d'un courant continu permettant de caractériser le système par analogie avec un oscillateur harmonique. Enfin, nous avons constaté que le confinement de l'accumulation de spin dans la constriction crée une contribution supplémentaire à la non-adiabaticité du système dans les premiers moments de temps (Sturma, et al., 2015).

Perspectives

En vue de modéliser des mémoires à haute densité de stockage, notre outil numérique couplant les équations du micromagnétisme et du transport polarisé en spin permettrait d'étudier l'impact de différentes géométries de constrictions (Chandra Sekhar, et al., 2014) ou bien de plusieurs constrictions dans un même fil sur la dynamique d'aimantation (Dolocan, 2014) ou encore l'interaction magnétostatique entre des parois se propageant dans des fils voisins (Wu, et al., 2014). Il serait également possible de modéliser les structures multi-segmentées composées d'une succession de fils et de tubes magnétiques (Salazar-Aravenaa, et al., 2013; Espejo, et al., 2015; Neumann, et al., 2015).

En outre, on pourra envisager la prise compte d'interactions supplémentaires. En effet, pour augmenter la non-adiabaticité des systèmes, certains groupes s'intéressent à l'impact des mécanismes de couplage spin-orbite comme l'effet Rashba ou l'interaction de Dzyaloshinskii–Moriya sur la dynamique des parois de domaines (Khvalkovskiy, et al., 2009). Ces effets interviennent dans des matériaux non centro-symétriques comme le MnSi (Tretiakov, et al., 2010) ou à l'interface des structures asymétriques comme Co/Ni ou Co/Pt (Khvalkovskiy, et al., 2009; Seo, et al., 2012; Khvalkovskiy, et al., 2013; Ryu, et al., 2013). De plus, ce type de structure permet d'obtenir une nouvelle configuration magnétique appelée skyrmion qui se propage pour des courants plus faibles et est moins sensible aux défauts locaux que les parois de domaines (Chui, et al., 2015). Enfin, on peut noter que, dans le cas des fils, la configuration en cœur-coquille permettrait d'optimiser les effets d'interface (Rüffer, et al., 2014).

Les effets dus au couplage spin-orbite apparaissent à l'interface d'un matériau ferromagnétique et d'un matériau non magnétique. Pour étendre notre code au traitement de plusieurs matériaux en contact, il serait tout d'abord nécessaire de prendre en compte les conditions de passage entre plusieurs matériaux. D'ailleurs, l'approche éléments finis permet facilement d'ajouter des termes d'interface ou de surface. De plus, la modélisation des mécanismes de spin-orbite implique une révision de notre modèle de transport semi-classique diffusif. En effet, ce modèle est bien adapté pour l'étude des structures dont le courant est perpendiculaire aux interfaces (« Courant-Perpendicular-to-Plane »). Dans le cas de structures présentant un courant de charge parallèle aux

interfaces (« Courant-In-Plane ») (Hauet, et al., 2008), il serait nécessaire d'ajouter des corrections balistiques. Enfin, comme nous l'avons constaté dans cette thèse, il faut être vigilant lors de l'introduction de nouveaux termes de transport qui peuvent perturber la convergence du schéma numérique.

La limite du modèle diffusif est également atteinte lors de l'étude de configurations micromagnétiques présentant un très fort gradient d'aimantation comme les distributions vortex. En effet, l'aimantation hors plan est concentrée sur une distance de l'ordre du libre parcours moyen de l'électron qui est la distance minimale d'application du modèle diffusif. Une solution proposée par *Andreas et al*. pour étudier ce type de structures est le recours à une modélisation multi-échelle (Andreas, et al., 2014).

Formulaire

Constantes

e	Charge de l'électron	$1{,}6 \cdot 10^{-19}$	[C]
$\hbar$	Constante de Planck	$1{,}054 \cdot 10^{-34}$	[J·s]
m	Masse de l'électron	$9{,}109 \cdot 10^{-31}$	[kg]
μ_0	Susceptibilité du vide	$4\pi \cdot 10^{-7}$	[T·m/A]
μ_B	Magnéton de Bohr	$0{,}927 \cdot 10^{-23}$	[A·m^2]
g	Facteur de Landé de l'électron	2	[1]
γ_0	Facteur gyromagnétique	$2{,}21 \cdot 10^{5}$	[m/A·s]

Variables du micromagnétisme

α	Facteur d'amortissement	1
A_{ex}	Constante d'échange	A/m
$\mathbf{B}$	Induction magnétique	T
$\mathbf{H}_{\mathrm{eff}}$	Champ magnétique effectif	A/m
$\mathbf{H}_{\mathbf{d}}$	Champ démagnétisant	A/m
$\mathbf{M}$	Aimantation	A/m
M_s	Aimantation à saturation	A/m
$\mathbf{m}$	Aimantation normalisée	1
φ_m	Potentiel magnétique	A

Variables du transport dépendant du spin

C_0	Conductivité	1/Ω·m
P	Polarisation	1
V_0	Tension électrique	V
N_0	Densité d'états au niveau de Fermi	$1/\mathrm{J}\cdot\mathrm{m}^3$
D_0	Coefficient de diffusion $D_0 = \frac{2C_0}{e^2 N_F}$	m^2/s

Modèle diffusif de *Zhang et Li* (Zhang, et al., 2004)

j_k^e	Courant de charge	$\mathrm{A/m}^2$
$\mathbf{j}_k^s$	Courant de spin	A/s
l_{sd}	Longueur d'interaction *s-d*	m
l_{sf}	Longueur de relaxation de spin	m
$\mathbf{U_T}$	Courant local $\mathbf{U_T} = \frac{P\mu_B}{M_s e^2}\mathbf{j^e}$	m/s
$\mathbf{s}$	Accumulation de spin	A/m
τ_{sd}	Temps d'interaction *s-d*	s
$\mathbf{T_z}$	Couple de transfert de spin $\mathbf{T}_{ZL} = -\frac{1}{M_s \tau_{sd}}[\mathbf{m}\times\mathbf{s}]$	A/m·s
φ	Potentiel électrique	V

Modèle diffusif généralisé (Petitjean, et al., 2012)

j_k^e	Courant de charge	J
$\mathbf{j}_k^s$	Courant de spin	J
l_*	Libre parcours moyen	m
l_p	Longueur de déphasage	m
l_L	Longueur de précession autour champ *s-d*	m
$\mathbf{U_{GDD}}$	Courant local $\mathbf{U_{GDD}} = \frac{P\mu_B}{M_s e^2 (1-P^2)}\mathbf{j^e}$	m/s
$\mathbf{s}$	Accumulation de spin	J
$\mathbf{T_{GDD}}$	Couple de transfert de spin $\mathbf{T}_{GDD} = -\frac{\mu_B C_0}{M_S e^2 l*}\left[\frac{1}{l_L}(\mathbf{m}\times\mathbf{s}) - \frac{1}{l_p}(\mathbf{m}\times\mathbf{s})\times\mathbf{m}\right]$	A/m·s
φ	Potentiel électrique	J

Références

(**Akosa, et al., 2015)** A. Akosa, W.-S. Kim, A. Bisig, M. Kläui, K. Lee et A. Manchon, Role of spin diffusion in current-induced domain wall motion for disordered ferromagnets, *Physical Review B,* **91**, 094411, 2015.

(Alouges, et al., 2006). F. Alouges et P. Jaisson, Convergence of a finite element discretization for the Landau-Lifshtiz-Gilbert equations in micromagnetism, *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, **16**, 299, 2006.

(Alouges, et al., 2008) F. Alouges , A new finite element scheme for Landau-Lifchitz equations, *Discrete and Continuous Dynamical System Series S,* **2**, 187, 2008.

(Alouges, et al., 2012) F. Alouges, E. Kritsikis et J. Toussaint, A convergent finite element approximation for Landau-Lifschitz-Gilbert equation, *Physica B,* **407**, 1345, 2012.

(Alouges, et al., 2014) F. Alouges, E. Kritsikis, J. Steiner et J. Toussaint, A convergent and precise finite element scheme for Landau-Lifschitz-Gilbert equation, *Numerische Mathematik,* **126**, 2014.

(Andreas, et al, 2014) C. Andreas, K. Kakay et R. Hertel, Multiscale and multimodel simulation of Bloch-point dynamics, *Physical Review B,* **89**, 134403, 2014.

(Baibish , et al., 1988) M.N. Baibish, J.M. Broto, A. Fert, J. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Friederich et J. Chazelas, Giant

Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices, *Physical Review Letters,* **61**, 2472, 1988.

(Bartels, 2007) S. Bartels, A. Prohl, Constraint preserving implicit finite element discretization, *Mathematics of Computation,* **76**, 847, 2007

(Beach, et al., 2006) G. Beach, C. Knutson, C. Nistor et M. E. J. Tsoi, Nonlinear domain-wall velocity enhancement by spin-polarized electric current, *Physical Review Letters,* **97**, 057203, 2006.

(**Bedau, et al.,2008)** D. Bedau, M. Kläui, M. T. Hua, S. Krzyk, U. Rüdiger, G. Faini et L. Vila, Quantitative Determination of the Nonlinear Pinning Potential for a Magnetic Domain Wall, *Physical Review Letters,* **101**, 256602, 2008.

(Berger, 1996) L. Berger, Emission of spin waves by a magnetic multilayer traversed by a current, *Physical Review B,* **54**, 9353, 1996.

(Binasch, et al., 1989) G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach et W. Zinn, Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange, *Physical Review B,* **39**, 4828, 1989.

(Bogart, et al., 2009) L. K. Bogart, D. Atkinson, K. O'Shea, D. McGrouther et S. McVitie, Dependence of domain wall pinning potential landscapes on domain wall chirality and pinning site geometry in planar nanowires, *Physical Review B,* **79**, 054414, 2009.

(Bonilla, et al., 2013) F. Bonilla, A. Novikova, F. Vidal, Y. Zheng, E. Fonda, D. Demaille, V. Schuler, A. Coati, A. Vlad, Y. Garreau, M. Sauvage Simkin, Y. Dumont, S. Hidki et V. Etgens, Combinatorial Growth and Anisotropy Control of Self-Assembled Epitaxial Ultrathin Alloy Nanowires, *ACS Nano,* **7**, 4022, 2013.

(Borlenghi, et al., 2011) S. Borlenghi, V. Rychkov, C. Petitjean et X. Waintal, Multiscale approach to spin transport in magnetic multilayers, *Physical Review B,* **84**, 035412, 2011.

(Boulle et al., 2011) O. Boulle, G. Malinowski et M. Klaui, Current-induced domain wall motion in nanoscale ferromagnetic elements, *Materials Science and Engineering,* **72**, 159, 2011.

Brataas et al., 2012) A. Brataas, A. Kent et H. Ohno, Current-induced torques in magnetic materials, *Nature Materials,* **11**, 372, 2012.

(Brown, 1963) W. F. Brown, Micromagnetics, *Interscience Publisher,* 1963.

(Bruno, 1999) P. Bruno, Geometrically Constrained Magnetic Wall, *Physical Review Letters,* **83**, 2425, 1999.

(Burrowes, et al., 2008) C. Burrowes, D. Ravelosona, C. Chappert, S. Mangin et E. Fullerton, Role of pinning in current driven domain wall motion in wires with perpendicular anisotropy, *Applied Physics Letters,* **93**, 172513, 2008.

(Carva et Turek, 2007) K. Carva et I. Turek, Spin-mixing conductances of thin magnetic films from first principles, *Physical Review B,* **76**, 104409, 2007.

(Cayssol, et al., 2004] F. Cayssol, D. Ravelosona, C. Chappert et J. Ferre, Domain Wall Creep in Magnetic Wires, *Physical Review Letters,***92**, 107202, 2004.

(Chandra Sekhar, 2014) M. Chandra Sekhar, S. Goolaup, I. Purnama et W. Lew, Deppining assisted by domain wall deformation in cylindrical NiFe nanowires, *Journal of Applied Physics,* **115**, 08391, 2014.

(Chui, et al., 2015) C. Chui, M. Fusheng et Y. Zhou, Geometrical and physical conditions for skyrmion stability in a nanowire, *AIP Advances*, **5**, 047141, 2015.

(Chureemart, et al, 2015) P. Chureemart, I. D'Amico et R. Chantrell, Model of spin accumulation and spin torque in spatially varying magnetisation structures, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **27**, 146004, 2015.

(Claudio-Gonzalez, et al., 2012) D. Claudio-Gonzalez, A. Thiaville et J. Miltat, Domain Wall Dynamics under Nonlocal Spin-Transfer Torque, *Physical Review Letters*, **108**, 227208, 2012.

(Cucchiara, et al., 2012) J. Cucchiara, S. Le Gall, E. Fullerton, J.-V. Kim, D. Ravelosona, Y. Henry, J. A. Katine et A. D. Kent, Domain wall motion in nanopillar spin-valves with perpendicular anisotropy driven by spin-transfer torques, *Physical Review B*, **86**, 214429, 2012.

(Da Col, et al., 2014) S. Da Col, S. Jamet, N. Rougemaille, A. Locatelli, T. Mentes, B. Santos Burgos, R. Afid, M. Darques, L. Cagnon, J. Toussaint et O. Fruchart, Observation of Bloch-point domain walls in cylindrical magnetic nanowires, *Physical Review B*, **89**, 180405, 2014.

(Da Col, et al., 2012) S. Da Col, M. Darques, O. Fruchart et L. Cagnon, Reduction of magnetostatic interactions in self-organized arrays of nickel nanowires using atomic layer deposition, *Applied Physics Letters*, **98**, 112501, 2012.

(Da Col,2014) S. Da Col, Parois magnétiques dans les nanofils - Thèse de doctorat. Université de Grenoble, 2014.

(Dolocan, 2014) V. Dolocan, Domain wall pinning and interction in rough cylindrical nanowires, *Applied Physics Letters*, **105**, 162401, 2014.

(Donahue, et al., 2014) D. J. Donahue et D. Porter, The Object Oriented MicroMagnetic Framework (OOMMF) project at ITL/NIST, 12/03/2014. [En ligne]. Available: http://math.nist.gov/oommf/. [Accès le Juin 2015].

(ESMJMS, 2014) ESMJMS, Software and Tools - MAGNETISM - A gateway to the European community of Magnetism, 25/06/2014. [En ligne]. Available: http://magnetism.eu/43-software.htm. [Accès le juin 2015].

(Espejo, et al., 2015) A. Espejo, N. Vidal-Silva, J. López-López, D. Goerlitz, K. Nielsch et J. Escrig, Current-driven vortex domain wall motion in wire-tube nanostructures, *Applied Physics Letters*, **106**, 132405, 2015.

(Faulkner, et al., 2004) C. C. Faulkner, M. D. Cooke, D. A. Allwood, D. Petit, D. Atkinson et R. P. Cowburn, Artificial domain wall nanotraps in Ni81Fe19 wires,» *Journal of Applied Physics*, **95**, 16171, 2004.

(Foster, et al., 2002) H. Foster, T. Schrefl, W. Scholz, D. Suess, V. Tsiantos et J. Fidler, Micromagnetic simulation of domain wall motion in magnetic nano-wires, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **249**, 181, 2002.

(Franchin, et al., 2011) M. Franchin, A. Knittel, M. Albert, D. S. Chernyshenko, T. Fischbacher, A. Prabhakar et H. Fangohr, Enhanced spin transfer torque effect for transverse domain walls in cylindrical nanowires, *Physical Review B*, **84**, 094409, 2011.

(Fredkin, et al., 1998) D. Fredkin et B. Yang, Dynamical micromagnetics by the finite element, *IEEE Transactions on Magnetics*, **34**, 3842, 1998.

(Garcia-Cervera et al, 2003) C. Garcia-Cervera, Z. Gimbutas et Weinan E, Accurate numerical methods, *Journal of Computational*, **184**, 37, 2003.

(Gerhardt et al., 2014) T. Gerhardt, A. Drews et G. Meier, Current-driven domain wall depinning from an anisotropy boundary in nanowires, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **26**, 206001, 2014.

(Gilbert et al., 1955) T.L. Gilbert, A Lagrangian formulation of the gyromagnetic equation of the magnetic field", *Physical Review*, **100**, 1955.

(Gilbert et al., 2014) T.L. Gilbert, A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials, *IEEE Transactions on Magnetics*, **40**, 3443, 2004.

(Gomez, et al., 1999) R. D. Gomez, O. Park, T. Luu et I. Mayergoyz, Domain wall motion in micron-sized permalloy elements, *Journal of Applied Physics*, **85**, 4598, 1999.

(Greengard et al., 1987) L. Greengard et V. Rokhlin, A fast algorithm for particle simulations, *Journal of Computational Physics*, **73**, 1987.

(Haney, et al., 2013) P. M. Haney, H.-W. Lee, K.-J. Lee, A. Manchon et M. Stiles, Current induced torques and interfacial spin-orbit coupling: Semiclassical modeling, *Physical Review B*, **87**, 174411, 2013.

(Hauet, et al., 2008) T. Hauet, F. Montaigne, M. Hehn, Y. Henry et S. Mangin, Influence of an interface domain wall on spin-valve giant magnetoresistance, *Applied Physics Letters*, **93**, 222503, 2008.

(Hayashi, et al., 2006) M. Hayashi, L. Thomas, Y. B. Bazaliy, C. Rettner, R. Moriya, X. Jiang et S. Parkin, Influence of Current on Field-Driven DomainWall Motion in Permalloy Nanowires from Time Resolved Measurements of Anisotropic Magnetoresistance, **96**, 197207, 2006.

(He, et al., 2005) J. He, Z. Li et S. Zhang, Current-driven domain-wall depinning, *Journal of Applied Physics*, **98** , 016108, 2005.

(Hertel, et al., 2004) R. Hertel et J. Kirschner, Magnetic drops in a soft-magnetic cylinder, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **278**, L291, 2004.

(Hiramatsu, et al., 2013) R. Hiramatsu, T. Koyama, H. Hata, T. Ohno, D. Chiba, S. Fukami et N. Ishiwata, Domain wall pinning by a stray field from NiFe on a Co/Ni nanowire, *Journal of the Korean Physical Society*, **63**, 2013.

(Hubert, et al., 2009) A. Hubert et R. Schäfer, Magnetics Domains, New York: Springer, 2009.

(INRIA, 2015) INRIA, ScalFmm 02/04/2015. [En ligne]. Available: http://scalfmm-public.gforge.inria.fr/doc/.

(Ivanov, et al., 2011) A. Ivanov et V. Orlov, A Comparative Analysis of the Mechanisms of Pinning of a Domain Wall in a Nanowire, *Physics of the Solid State*, **53**, 2011.

(Jackson, 1999) J. Jackson, Classical electrodynamics, New York: Wiley, 1999.

(Jakubovics, 1978) J. Jakubovics, Comments on the definition of ferromagnetic domain wall width, *Philosophical Magazine B*, **38**, 401, 1978.

(Jamet, et al., 2015) S. Jamet, N. Rougemaille, J. Toussaint et O. Fruchart, Head-to-head domain walls in one-dimensional nanostructures: an extended phase diagram ranging from strips to cylindrical wires, chez *Magnetic Nano- and Microwires: Design, synthesis, properties and applications*, Woodhead, 2015.

(Jang, et al., 2012) Y. Jang, M. Mascaro, G. Beach et C. Ross, Current-driven domain wall motion in heterostructured ferromagnetic nanowires, *Applied Physics Letters*, **100**, 112401, 2012.

(Jué, 2013) E. Jué, Dynamique du déplacement de parois, Thèse de doctorat. Université de Grenoble, Grenoble, 2013.

(Khvalkovskiy, et al., 2009) A. V. Khvalkovskiy, K. Zvezdin, Y. Gorbunov, V. Cros, J. Grollier, A. Fert et A. Zvezdin, High Domain Wall Velocities due to Spin Currents Perpendicular to the Plane, *Physical Review Letters*, **102**, 027206, 2009.

(**Khvalkovskiy,et al., 2013)** A. Khvalkovskiy, V. Cros, D. Apalkov, V. Nikitin, M. Krounbi, K. Zvezdin, A. Anane, J. Grollier et A. Fert, Matching domain-wall configuration and spin-orbit torques for efficient domain-wall motion, *Physical Review B*, **87**, 020402, 2013.

(Kläui, et al., 2005) M. Kläui, H. Ehrke, U. Rüdiger, T. Kasama, R. Dunin-Borkowski, D. Backes, L. Heyderman, C. Vaz, J. Bland, E. Cambril, G. Faini et W. Wernsdorfer, Direct observation of domain-wall pinning at nanoscale constrictions, **87**, 102509, 2005.

(Kläui, et al., 2003) M. Kläui, C. A. F. Vaz, J. Rothman, J. A. C. Bland, W. Wernsdorfer, G. Faini et E. Cambril, Domain Wall Pinning in Narrow Ferromagnetic Ring Structures Probed by Magnetoresistance Measurements, *Physical Review Letters*, **90**, 097202, 2003.

(Kritsikis,et al., 2014) E. Kritsikis, A. Vaysset, L. Buda-Prejbeanu, F. Alouges et J.-C. Toussaint, Beyond first-order finite element schemes in micromagnetics, *Journal of Computational Physics*, **256**, 357, 2014.

(Kritsikis, et al., 2008) E. Kritsikis, J. Toussaint, H. Szambolics et L. Prejbeanu, Fast computation of magnetostatic fields by nonuniform fast Fourier transforms, *Applied Physics Letters*, **93**, 132508, 2008.

(Kritsikis, 2008) E. Kritsikis, Modélisation de la dynamique d'aimantation par une approche éléments finis,Thèse de doctorat. Université de Grenoble, Grenoble, 2008.

(Kronmüller, et al., 2003) H. Kronmüller et M. Fähnle , Micromagnetism and the Microstructure of Ferrmagnetic Solids, Cambridge: Cambridge University Press, 2003.

(Kunz et al., 2010) A. Kunz et J. Priem, Dynamic Notch Pinning Fields for Domain Walls in Ferromagnetic Nanowires, *IEEE Transactions on Magnetics*, **46**, 1559, 2010.

(**Landau et al., 1935)** L. D. Landau et E. M. Lifschitz, On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies, *Phys. Z. Sowjetunion*, **8**, 153, 1935.

(Lee, et al., 2013) K.-J. Lee, M. D. Stiles, H.-W. Lee, J.-H. Moon, K.-W. Kim et S.-W. Lee, Self-consistent calculation of spin transport and magnetization dynamics, *Physics Reports*, **531**, 89, 2013.

(**Lepadatu, et al., 2010)** S. Lepadatu, O. Wessely, A. Vanhaverbeke, R. Allenspach, A. Potenza, H. Marchetto, T. R. Charlton, S. Langridge, S. S. Dhesi et C. H. Marrows, Domain-wall spin-torque resonators for frequency-selective operation, **91**, 060402, 2010.

(**Liew et al., 2011)** H. Liew, S. Low et W. Lew, Fabrication of constricted compositionally-modulated NixFe1-x, *Journal of Physics: Conference Series*, **266**, 012058, 2011.

(**Lilley, 1950)** B. Lilley, Energies and widths of domain boundaries in ferromagnetics, *Philosophical Magazine*, **41**, 792, 1950.

(Manchon, et al., 2011) A. Manchon, W.-S. Kim et K.-J. Lee, Role of spin diffusion in current-induced domain wall motion, *arxiv:1110.3487v1,* 2011.

(Martinez, et al., 2009) E. Martinez, L. Lopez-Diaz, O. Alejos, L. Torres et M. Carpetieri, Domain-wall dynamics driven by short pulses along thin ferromagnetic strips: Micromagnetic simulations and analytical description, *Physical Review B,* **79**, 094430 , 2009.

(**McMichael, et al., 1997)** R. D. McMichael et M. J. Donahue, Head to head domain wall structures in thin magnetic strips, *IEEE Transactions on Magnetics,* **33**, 4167, 1997.

(Minguez-Bacho, et al., 2014) I. Minguez-Bacho, S. Rodriguez-López, M. Vázquez, M. Hernández-Vélez et K. Nielsch, Electrochemical synthesis and magnetic characterization of periodically modulated Co nanowires, *Nanotechnology,* **25**, 145301, 2014.

(Mougin, et al., 2007) A. Mougin, M. Cormier, J. Adam, P. Metaxas et J. Ferré, Domain wall mobility, stability and Walker breakdown in magnetic nanowires, *Europhysics Letters,* **78**, 57007, 2007

(Mughal, et al., 2012) A. Mughal, H. Chan, D. Weaire et S. Hutzler, Dense packings of spheres in cylinders, *arXiv:1203.3373v2* , 2012.

(Nakatani, et al., 2005) Y. Nakatani, A. Thiaville et J. Miltat, Head-to-head domain walls in soft nano-strips: a refined phase, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials,* **290**, 750, 2005.

(Neumann, et al., 2015) R.F. Neumann, M. Bahiana, S. Allende, D. Altbir, D. Görlitz et N. Nielsch, Tailoring the nucleation of domain walls along multi-segmented cylindrical nanoelements, *Nanotechnology,* **26**, 215701, 2015.

(Noh, et al. , 2012) S. Noh, M. Yasuyoshi, N. Hayashi, J. Lee et Y. Kim, Magnetic domain wall motion by current injection in CoPt nanowires consisting of notches, *Solid State Communications,* **152**, 1004, 2012.

(Otalora, et al., 2013) J. Otalora, J. Lopez-Lopez, P. Landeros et P. N. Vargas, Breaking of chiral symmetry in vortex domain wall propagation in ferromagnetic nanotubes, *Journal of magnetism and magnetic materials,* **341**, 86, 2013.

(Parkin, 2004) Shiftable magnetic shift register and method of using the same [Brevet] : US patent 6,834,005. - 21 décembre 2004.

(Parkin, et al., 2008) S.S.P. Parkin et L. Thomas, M. Hayashi, Magnetic Domain-Wall Racetrack Memory, *Sciences,* **320**, 190, 2008.

(Petitjean , et al., 2012) C. Petitjean, D. Luc et X. Waintal, Unified Drift-Diffusion Theory for Transverse Spin Currents in Spin Valves, DomainWalls, and Other Textured Magnets, *Physical Review Letters,* **109**, 117204, 2012.

(Pitzschel, et al., 2011) K. Pitzschel, J. Bachmann, S. Martens, J. M. Montero-Moreno, J. Kimling, G. Meier, J. Escrig, K. Nielsch et D. Görlitz, Magnetic reversal of cylindrical nickel nanowires with modulated diameters, *Journal of Applied Physics,* **109**, 033907 , 2011.

(Rüffer, et al., 2014) D. Rüffer, M. Slot, R. Huber, T. Schwarze, F. Heimbach, G. Tütüncüoglu, F. Matteini, E. Russo-Averchi, A. Kovács, R. Dunin-Borkowski, R. Zamani, J. Morante, J. Arbiol, A. Fontcuberta, I. Morral et D. D. Grundler, Anisotropic magnetoresistance of individual

CoFeB and Ni nanotubes with values of up to 1.4% at room temperature, *Applied Physics Letters Materials*, **2**, 076112, 2014.

(Rychkov, et al., 2009) V. Rychkov, S. Borlenghi, H. Jaffres, A. Fert et X. Waintal, Spin Torque and Waviness in Magnetic Multilayers: A Bridge between Valet-Fert Theory and Quantum Approaches, *Physical Review Letters*, **103**, 066602, 2009.

(Ryu, et al, 2012) K.-S. Ryu, L. Thomas et S. Parkin, Current Induced Tilting of Domain Walls in High Velocity Motion along Perpendicularly Magnetized Micron-Sized Co/Ni/Co Racetracks, *Applied Physics Express*, **5**, 093006, 2012.

(Ryu, et al., 2013) K.-S. Ryu, S.-H. Yang et S. Parkin, Chiral spin torque at magnetic domain wall, *Nature Nanotechnology*, **8**, 527, 2013.

(Salazar-Aravenaa, et al., 2013)D. Salazar-Aravena, R. Corona, D. Goerlitz, K. Nielsch et J. Escriga, Magnetic properties of multisegmented cylindrical nanoparticles with alternating magnetic wire and tube segments, **346**, 171, 2013.

(Schryer, et al., 1974) N. Schryer et L. R. Walker, The motion of 180A° domain walls in uniform dc magnetic fields, *Journal of Applied Physics*, **45**, 5406, 1974.

(Seo, et al., 2012) S.-M. Seo, K.-W. Kim, J. Ryu, H.-W. Lee et K.-J. Lee, Current-induced motion of a transverse magnetic domain wall in the presence of spin Hall effect, *Applied Physics Letters*, **101**, 022405, 2012.

(Shimada et al., 1995) K. Shimada et D. Gossard, Bubble mesh: automated triangular meshing of non-manifold geometry by sphere packing, *Proceeding SMA '95 Proceedings of the third ACM symposium on Solid modeling and applications*, 409, 1995.

(Slonczewski, 1996) J. Slonczewski, Current-driven excitation of magnetic multilayers,» *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **159**, L1, 1996.

(Stiles et al., 2006) M. Stiles et J. Miltat, Spin-transfert Torques and Dynamics, chez *Spin Dynamics in Confined Magnetic Structure III*, **101**, Berlin, Spinger-Verlag, 2006

(Stiles et al., 2002) M. Stiles et Zhangwill, A., Anatomy of spin-transfer torque, *Physical Review B*, **66**, 014407, 2002.

(Strelkov, et al., 2010) N. Strelkov, A. Vedyayev, D. Gusakova, L. Buda-Prejbeanu, M. Chshiev, S. Amara, A. Vaysset et B. Dieny, Finite Element Modeling of Charge- and Spin-Currents in Magnetoresistive Pillars With Current Crowding Effects, *IEEE Magnetics Letters*, **1**, 3000304, 2010.

(Strelkov, et al., 2011) N. Strelkov, A. Vedyayev, N. Ryzhanova, D. Gusakova, L. Buda-Prejbeanu, M. Chshiev, S. Amara, N. de Mestier, C. Baraduc et B. Dieny, Spin-current vortices in current-perpendicular-to-plane nanoconstricted spin valves, *Physical Review B*, **84**, 024416, 2011.

(Sturma, et al., 2015) M. Sturma, J.C. Toussaint et D. Gusakova, Geometry effects on magnetization dynamics in circular cross-section wires, *Journal of Applied Physics*, **117**, 243901, 2015.

(Szambolics, 2008) H. Szambolics, Nouvelles formulations éléments finis pour le micromagnétisme et déplacement de parois par courant polarise en spin, Thèse de Doctorat. Grenoble: Institut polytechnique de Grenoble, 2008.

(Szambolics1, et al., 2008) H. Szambolics, L. Buda-Prejbeanu, J.C. Toussaint et O. Fruchart, A constrained finite element formulation for the Landau–Lifshitz–Gilbert equations, *Computational Materials Science,* 253, 2008.

(Szambolics2, et al., 2008) H. Szambolics, J.C. Toussaint, L. Buda-Prejbeanu, F. Alouges, E. Kritsikis et O. Fruchart, Innovative Weak Formulation for the Landau-Lifshitz-Gilbert equations, *IEEE Transactions on Magnetics,* **44**, 3153, 2008.

(Thiaville, et al., 2004) A. Thiaville, Y. Nakatani, J. Miltat et N. Vernier, Domain wall motion by spin-polarized current: a micromagnetic study, *Journal of Applied Physics,* **95**, 7049, 2004.

(Thiaville, et al., 2005) A. Thiaville, Y. Nakatani, J. Miltat et Y. Suzuki, Micromagnetic understanding of current-driven domain wall motion in patterned nanowires, *Europhysics Letter,* **69**, 990, 2005

(Thiaville, et al, 2006). A. Thiaville et Y. Nakatani, Dynamics in Confined Magnetic Structures III, *Topics Applied Physics,* **101**, 161, 2006.

(Thiele, 1973) A. A. Thiele, Steady-State Motion of Magnetic Domains, *Physical Review Letters,* **30**, 230, 1973.

(Tretiakov , et al., 2010) O. Tretiakov et A. Abanov, Current Driven Magnetization Dynamics in Ferromagnetic Nanowires with Dzyaloshinskii-Moriya Interaction, *Physical Review Letters,* **105**, 157201, 2010.

(Valet, et al., 1993) T. Valet et A. Fert, Theory of the perpendicular magnetoresistance in magnetic multilayers, *Physical Review B,* **84**, 7099, 1993.

(**Vaysset, 2012)** A. Vaysset, Modélisation micromagnétique de dynamique d'aimantation induite par transfert de spin dans les nanopiliers,Thèse de doctorat. Université de Grenoble, Grenoble, 2012.

(Wieser, et al., 2010) R. Wieser, E. Vedmedenko, P. Weinberger et R. Wiesendanger, Current-driven domain wall motion in cylindrical nanowires, *Physical Review B,* **82**, 144430, 2010.

(Wu, et al., 2014) F.-S. Wu, L. Horng et J.-C. Wu, Fast moving Multiple Magnetic Bits in Permalloys Cylindrical Nanowires, *IEEE Transactions on magnetics,* **50**, 0018, 2014.

(Xiao, et al, 2004) J. Xiao, A. Zangwill et M. Stiles, Boltzmann test of Slonczewski's theory of spin-transfer torque, *Phsical Review B,* **70**, 172405, 2004.

(Xiao , et al., 2007) Xiao, A. Zangwill et M. Stiles, A numerical method to solve the Boltzmann equation for a spin valve, *European Physical Journal B,* **59**, 415, 2007.

(Yamanouchi, et al., 2004) M. Yamanouchi, D. Chiba, F. Matsukura et H. Ohno, Current-induced domain-wall switching in a ferromagnetic semiconductor structure, *Nature,* **428**, 2004.

(**Yamaguchi, et al., 2206)** A. Yamaguchi, T. Ono, S. Nasu, K. Miyake, K. Mibu et T. Shinjo, Real-Space Observation of Current-Driven Domain Wall Motion in Submicron Magnetic Wires, *Physical Review Letters,* **92**, 077205, 2006.

(Yan,et al., 2010) M. Yan, A. Kakay, S. Gliga et R. Hertel, Beating the Walker Limit with Massless Domain Walls in Cylindrical Nanowires, *Physical Review Letters,* **104**, 057201, 2010.

(Yan, et al., 2011) M. Yan, C. Andreas, A. Kakay, F. Garcia-Sanchez et R. Hertel, Fast domain wall dynamics in magnetic nanotubes: Suppression of Walker breakdown and Cherenkov-like spin wave emission,*Applied Physic Letters*, **99**, 122505, 2011.

(Ying, et al., 2004) L. Ying, G. Biros et D. Zorin, A kernel-independent adaptive Fast Multipole, *Journal of Computational Physics*, **192**, 591, 2004.

(**Yuan, et al., 2014)** H. Yuan et X. Wang, Domain wall pinning in notched nanowires, *Physical Review B*, **89**, 054423, 2014.

(Zhang, et al., 2002) S. Zhang, P. Levy et A. Fert, Mechanisms of Spin-Polarized Current-Driven Magnetization Switching, *Physical Review Letters*, **88**, 236601, 2002.

(**Zhang, et al., 2004)** S. Zhang et Z. Li, Roles of Nonequilibrium Conduction Electrons on the Magnetization Dynamics of Ferromagnets, *Physical Review Letters*, **93**, 127204, 2004.

Résumé

Cette thèse s'inscrit dans le contexte de l'électronique de spin et traite plus particulièrement de l'interaction réciproque entre un courant polarisé en spin et l'aimantation des structures magnétiques. Au cours de ce travail, les équations du transport diffusif dépendant du spin ont été couplées de façon auto-cohérente à l'équation de la dynamique de l'aimantation dans l'approche micromagnétique au sein du code éléments finis. Cet outil numérique est appliqué à l'étude de la dynamique de parois de domaines dans différentes géométries sous l'action d'un courant polarisé. Il a permis de mettre en évidence plusieurs nouveaux phénomènes liés à l'interaction mutuelle entre l'aimantation et les spins des électrons. Pour des rubans à section rectangulaire, l'impact de cette interaction, habituellement négligée dans les modèles simplifiés, est quantifié via le calcul de la vitesse de déplacement de parois et du courant critique de Walker. Ces paramètres ont été étudiés en fonction de la largeur de paroi, du courant appliqué et des longueurs caractéristiques du transport polarisé en spin. L'augmentation du paramètre de non-adiabaticité du système, liée à l'augmentation du gradient d'aimantation ainsi qu'à une forte non-localité du modèle couplé, a été démontrée. Pour des fils à section circulaire et à diamètre modulable, une contribution supplémentaire à la non-adiabaticité du système liée à la géométrie confinée, a été mise en évidence. Puis, les différents régimes dynamiques ainsi que les conditions de dépiégage de la paroi ont été caractérisés en fonction de la taille de constrictions.

Mots clés : Electronique de spin, Modélisation par éléments finis, Dynamique de l'aimantation, Modèles de transport dépendant du spin, Micromagnétisme, Parois de domaines.

Abstract

In the context of spintronics this thesis studies the mutual interaction between a spin polarised current and the magnetization of magnetic structures. During this work, the diffusive spin transport equations were coupled in a self-consistent manner with the magnetization dynamics equations in the micromagnetic approach in our homemade finite element code. This numerical tool applied to the study of domain walls dynamics in different geometries under the action of spin polarized current highlighted several new phenomena related to the mutual interaction between the magnetization and the spins of electrons. For rectangular cross section stripes, the impact of this interaction, usually neglected in simplified models, is quantified by the computation of the domain wall velocity and the Walker critical current. These quantities were studied as a function of the domain wall width, the applied current, and the spin polarised transport characteristic lengths. Increasing the non-adiabatic parameter of the system related to the increase in the magnetization gradient and a strong non-locality of the coupled model was demonstrated. For circular cross section wires with a modulated diameter, an additional contribution to the non-adiabaticity of the system related to the confined geometry is highlighted. Then the different dynamic regimes and domain wall unpinning conditions are characterised according to the constriction size.

Key words : Spintronics, Finite element modeling, Magnetizations dynamics, Spin dependent transport models, Micromagnetics, Domain walls.