République Algérienne Démocratique et Populaire Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique



Université de Batna2

Faculté de Technologie Département d'électrotechnique

THESE



Présentée pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT EN SCIENCES

EN ELECTROTECHNIQUE Option: Matériaux électrotechniques

Par

BOUFLIGHA MESSAOUD

Maitre assistant (A) à l'université de Laghouat Magister en électrotechnique (Option: Matériaux électrotechniques), université de Batna, 2005 Ingénieur d'état en électrotechnique (Option: Machines électriques), université de Bejaïa, 1992

<u>THEME</u>

CONTRIBUTION A LA MODELISATION DU COMPORTEMENT DES MATERIAUX FERROMAGNETIQUES A L'ECHELLE DES DOMAINES MAGNETIQUES PAR LA THEORIE DU MICROMAGNETISME

Soutenue le 02/11/2019 devant le jury composé de:

| Prof. Chaghi Abdelaziz | Université Mustapha Benboulaid, Batna2 | Président |
|-----------------------------|---|-------------|
| Prof. Boukhtache Sebti | Université Mustapha Benboulaid, Batna2 | Rapporteur |
| Prof. Zouzou Salaheddine | Université Mohamed Khider, Biskra | Examinateur |
| Prof. Souri Mohamed Mimoune | Université Mohamed Khider, Biskra | Examinateur |
| Prof. Dib Abderrahmane | Université Larbi Ben M'hidi, Oum El Bouaghi | Examinateur |
| Prof. Guettafi Amor | Université Mustapha Benboulaid, Batna2 | Examinateur |

Remerciements

Ce travail de thèse a été réalisé au sein de laboratoire d'électrotechnique de l'université Batna2.

Mes sincères remerciements vont à dieux tout puissant pour la volonté qu'il m'a donnée pour achever cette thèse.

Je tiens particulièrement à remercier mon encadreur **Boukhtache Sebti**, professeur à l'université Mustafa Benboulaid (Batna2) pour ses idées, sa disponibilité et son soutien moral durant l'étude et la réalisation de cette thèse.

Je souhaite également remercier Monsieur **Chaghi Abdelaziz** Professeur à l'université Mustafa Benboulaid (Batna2) pour l'honneur qu'il m'a fait d'avoir accepté de présider ce jury.

Je voudrais aussi remercier Messieurs **Zouzou Salaheddine** professeur à l'université Mohamed khider (Biskra), **Souri Mohamed Mimoune** professeur à l'université Mohamed khider (Biskra), **Dib Abderrahmane** professeur à l'université Larbi Ben M'hidi (Oum El Bouaghi), **Guettafi Amor** professeur à l'université Mustafa Benboulaid (Batna2) pour l'intérêt qui ont bien voulu apporter à ce thème de recherche et de m'honorer par leur présence en acceptant d'examiner ce travail.

Un grand merci s'adresse à tous les professeurs et enseignants qui ont collaboré à ma formation depuis le magister.

Enfin, je remercie mon ami **Boutamine abdelmounaime** pour son soutien moral.

Mr. Boufligha Messaoud

Dédicaces

A mes parents

A ma femme

A mes enfants Loai, Heitem et Hiba

A mes frères et sœurs

A mes amis et collègues

Contribution à la modélisation du comportement des matériaux ferromagnétiques à l'échelle des domaines magnétiques par la théorie du micromagnetisme

Résumé

Nous avons fourni les bases théoriques et numériques nécessaires pour effectuer une modélisation micromagnétique à l'échelle des domaines magnétiques. Nous avons focalisé sur l'étude de l'évolution temporelle de l'aimantation lors du processus de retournement dans une couche mince ferromagnétique de Permalloy. Les simulations micromagnétiques ont été effectuées en utilisant nos codes développés. Nous avons montré l'effet de certains paramètres sur le processus de retournement, sur la qualité des résultats et sur le temps de calcul. De même, nous avons illustré l'évolution temporelle de la distribution de l'aimantation durant le processus du retournement. Les résultats obtenus par les deux codes ont été comparés. Une validation de ces outils de calcul a été effectuée. Malgré que l'importance a été donnée au modèle micromagnétique, nous avons proposé une étude de l'évolution de l'aimantation par un modèle de type Ising.

Mots clés: Simulation; micromagnétique; aimantation ; couche mince.

A contribution to the modeling of the behavior of ferromagnetic materials at magnetic domains scale by the theory of micromagnetism

Summary

We provided the theoretical and numerical bases necessary to carry out micromagnetic modeling at magnetic domains scale. We focused on the study of the temporal evolution of magnetization during the reversal process in a ferromagnetic thin film of Permalloy. The micromagnetic simulations were achieved using our developed codes. We showed the effect of certain parameters on the reversal process, on the quality of the results and on the computational time. In the same way we illustrate the temporal evolution of the magnetization distribution during the reversal process. The results obtained by the two codes were compared. A validation of our computational tools was carried out. Although the importance was given to the micromagnetic model, we proposed a study of the evolution of magnetization by a Like-Ising model.

Key words: Simulation; micromagnetic, aimantation, thin film

Table des Matières

| Table des Matières | Ι |
|--|----|
| Liste des figures | VI |
| Liste des symboles | Х |
| Introduction Générale | 1 |
| CHAPITRE I INTRODUCTION AUX MATERIAUX FERROMAGNETIQUES | 5 |
| Introduction | 6 |
| I.1 Etat magnétique de la matière | 6 |
| I.1.1 Introduction | 6 |
| I.1.2 Le magnétisme à l'échelle atomique | 6 |
| I.1.2.1 Structure atomique | 6 |
| I.1.2.2 Moment magnétique | 6 |
| I.1.2.3 Moment magnétique orbital | 7 |
| I.1.2.4 Moment magnétique de spin | 8 |
| I.1.2.5 Moment magnétique atomique | 9 |
| I.1.3 Du microscopique au macroscopique | 9 |
| I.2 Classification des matériaux magnétiques | 10 |
| I.2.1 Matériaux sans ordre magnétique | 10 |
| I.2.1.1 Matériaux diamagnétiques | 10 |
| I.2.1.2 Matériaux paramagnétiques | 10 |
| I.2.2 Matériaux avec ordre magnétique | 11 |
| I.2.2.1 Matériaux ferrimagnétiques | 11 |
| I.2.2.2 Matériaux antiferromagnétiques | 12 |
| I.2.2.3 Matériaux ferromagnétiques | 12 |
| I.3 Interprétation du ferromagnétisme | 14 |
| I.3.1 Théories des moments localisés | 14 |
| I.3.1.1 Théorie de champ moyen de Weiss | 14 |
| I.3.1.2 Théorie de Heisenberg | 15 |
| I.3.2 Théories des moments non localisés | 15 |
| I.3.2.1 Théorie de bande de stoner | 15 |
| I.3.2.2 Théorie de bande de Vonsovsky et Zener | 15 |
| I.4 Réponse des matériaux magnétiques à un champ extérieur | 16 |
| I.5 Propriétés qualitatives des matériaux ferromagnétiques | 16 |

| I.6 | Catégories des matériaux ferromagnétiques | 17 |
|-----|--|----|
| | I.6.1 Caractéristiques des matériaux ferromagnétiques doux | 17 |
| | I.6.2 Caractéristiques des matériaux ferromagnétiques durs | 18 |
| Сс | onclusion | 18 |
| Bik | bliographie de chapitre I | 18 |

| СН | APITRE II THEORIE DES DOMAINES ET PROCESSUS D'AIMANTATION | 20 |
|-------|--|----|
| Intro | oduction | 21 |
| II.1 | Evolution de la théorie des domaines | 21 |
| | II.1.1 Théorie de Weiss et concept de domaine | 21 |
| | II.1.2 Analyse et observation expérimentale des domaines | 21 |
| | II.1.3 Le concept de la paroi | 21 |
| | II.1.4 L'effet des efforts résiduels | 22 |
| | II.1.5 L'effet de la magnétostriction et de l'anisotropie | 22 |
| | II.1.6 Compétition énergétique et structure en domaines | 22 |
| II.2 | Structures et modèles des domaines | 23 |
| II.3 | Limites de la théorie des domaines | 24 |
| II.4 | Mécanismes d'aimantation dans les matériaux ferromagnétiques | 24 |
| II.5 | Ancrage des parois lors de leurs mouvements | 24 |
| II.6 | Cycle d'hystérésis | 25 |
| II.7 | Les pertes dans la matière | 25 |
| Con | iclusion | 26 |
| Bib | liographie de chapitre II | 26 |
| СН | APITRE III THEORIE DU MICROMAGNÉTISME | 28 |
| Intro | oduction | 29 |
| III.1 | Le magnétisme et les échelles d'observation | 29 |
| | III.1.1 Echelle atomique | 29 |
| | III.1.2 Echelles nanoscopique | 29 |
| | III.1.3 Echelle microscopique | 30 |
| | III.1.4 Echelles mésoscopique | 30 |
| | III.1.5 Echelle macroscopique | 30 |
| III.2 | Evolution de la théorie du magnétisme | 31 |
| | III.2.1 Introduction | 31 |
| | III.2.2 Théorie de Maxwell | 31 |
| | III.2.3 Théorie quantique | 32 |

| III.3 Théorie du micromagnétisme | 32 |
|--|------|
| III.3.1 Naissance de la théorie du micromagnétisme | 32 |
| III.3.2 Les Concepts de la théorie du micromagnétisme | . 32 |
| III.3.3 Le but de la théorie du micromagnétisme | 33 |
| III.3.4 Hypothèses de la théorie du micromagnétisme | 33 |
| III.3.5 Les paramètres micromagnétiques | 34 |
| III.4 Comparaison des modèles atomistique et micromagnétique | 34 |
| III.5 Energie libre d'un système ferromagnétique | 35 |
| III.6 Contributions à l'énergie libre d'un système ferromagnétique | 36 |
| III.6.1 L'énergie d'échange | 36 |
| III.6.2 L'énergie d'anisotropie magnéto-cristalline | 37 |
| III.6.3 L'énergie Zeeman | 38 |
| III.6.4 L'énergie magnétostatique | 39 |
| III.6.5 La magnétostriction et l'énergie magnétoélastique | 41 |
| III.7 Energie totale d'un système ferromagnétique | 42 |
| III.8 Développement des équations micromagnétiques | 43 |
| III.8.1 Les équations de Brown | 43 |
| III.8.2 Equation de la dynamique d'aimantation | 44 |
| Conclusion | 47 |
| Bibliographie de chapitre III | 47 |

CHAPITRE IV METHODOLOGIE DE CALCUL NUMERIQUE MICROMAGNETIQUE.....

| Introduction | 50 |
|---|----|
| IV.1 Les caractères des équations micromagnétiques | 50 |
| IV.2 Solution analytique des équations micromagnétiques | 50 |
| IV.3 Le calcul numérique micromagnétique | 50 |
| IV.4 La méthode statique | 51 |
| IV.4.1 Introduction | 51 |
| IV.4.2 Choix de la méthode de minimisation | 51 |
| IV.4.2.1 Les algorithmes déterministes | 51 |
| IV.4.2.2 Les algorithmes stochastiques | 52 |
| IV.5 La méthode dynamique | 52 |
| IV.5.1 Choix du système de coordonnées | 53 |
| IV.5.2 Evaluation de champ effectif | 53 |

| IV.5.2.1 Contributions au champ effectif en coordonnées | |
|--|----|
| Cartésiennes | 53 |
| IV.5.2.1.1 Contribution de champ extérieur | 53 |
| IV.5.2.1.2 Contribution de champ d'anisotropie | |
| magnetocristalline | 53 |
| IV.5.2.1.3 Contribution de champ d'échange | 54 |
| IV.5.2.1.4 Contribution de champ démagnétisant | 55 |
| IV.5.2.1.5 Contribution de champ thermique | 56 |
| IV.5.2.2 Contributions au champ effectif en coordonnées sphériques | 57 |
| IV.5.2.2.1 Contribution de champ extérieur | 57 |
| IV.5.2.2.2 Contribution de champ d'anisotropie | |
| Magnetocristaline | 58 |
| IV.5.2.2.3 Contribution de champ d'échange | 58 |
| IV.5.2.2.4 Contributions des champs thermique et | |
| démagnétisant | 59 |
| IV.5.3 Solution de l'équation de la dynamique de l'aimantation | 59 |
| IV.5.4 Choix du schéma d'intégration temporelle et critère d'arrêt | 60 |
| IV.5.5 Organigramme de calcul numérique micromagnétique | 62 |
| Conclusion | 62 |
| Bibliographie de chapitre IV | 63 |

| Introduction | 66 |
|---|----|
| V.1 Etude de l'évolution de l'aimantation par le modèle micromagnétique | 66 |
| V.1.1 Les modes de retournement de l'aimantation | 66 |
| V.1. 2 Notion d'une couche mince | 66 |
| V.1. 3 Choix et caractéristiques du matériau | 66 |
| V.1. 4 Les outils de calcul micromagnétique | 66 |
| V.1. 5 Les approximations implémentées dans les codes de calcul | 66 |
| V.1. 6 Présentation des résultats | 67 |
| V.1.6.1 L'effet de la taille de la cellule de discrétisation | 68 |
| V.1.6. 2 Evolution temporelle de la distribution de l'aimantation | |
| durant le processus de retournement | 69 |
| V.1.6. 3 L'effet de la température | 72 |

| V.1.6. 5 L'effet de l'aimantation à saturation et de la constante d'échange V.1.6. 6 L'effet de nombre d'essais (NE) | |
|---|----------------------------------|
| d'échange V.1.6. 6 L'effet de nombre d'essais (NE) | |
| V.1.6. 6 L'effet de nombre d'essais (NE) | 74 |
| V 1 6 7 Lloffet de la telérence désirée | 76 |
| V.1.6. / L'effet de la tolerance desiree | 78 |
| V.1.7 Comparaison des résultats obtenus par les deux codes de calcul | 79 |
| V.1.8 Validation | 80 |
| Conclusion | 82 |
| Bibliographie de chapitre V | 82 |
| | |
| Conclusion générale | 84 |
| | |
| Annexes | 86 |
| | |
| Annexe.A Etude de l'évolution de l'aimantation par un modèle de type | |
| Ising | 87 |
| | |
| | |
| A.1 Le modèle Phi-4 dipolaire | 87 |
| A.1 Le modèle Phi-4 dipolaire 8 A.2 Les contributions à l'énergie totale 8 | 87 37 |
| A.1 Le modèle Phi-4 dipolaire8A.2 Les contributions à l'énergie totale8A.3 Equation dynamique d'Allen Cahn dans l'espace de fourrier8 | 87 87 38 |
| A.1 Le modèle Phi-4 dipolaire. 8 A.2 Les contributions à l'énergie totale. 8 A.3 Equation dynamique d'Allen Cahn dans l'espace de fourrier. 8 A.4 Simulation des domaines magnétiques. 8 | 87 87 88 39 |
| A.1 Le modèle Phi-4 dipolaire. 8 A.2 Les contributions à l'énergie totale. 8 A.3 Equation dynamique d'Allen Cahn dans l'espace de fourrier. 8 A.4 Simulation des domaines magnétiques. 8 Bibliographie de l'annexe.A. 9 | 87 87 88 89 92 |
| A.1 Le modèle Phi-4 dipolaire. 8 A.2 Les contributions à l'énergie totale. 8 A.3 Equation dynamique d'Allen Cahn dans l'espace de fourrier. 8 A.4 Simulation des domaines magnétiques. 8 Bibliographie de l'annexe.A. 9 | 87 87 88 89 92 |
| A.1 Le modèle Phi-4 dipolaire. 8 A.2 Les contributions à l'énergie totale. 8 A.3 Equation dynamique d'Allen Cahn dans l'espace de fourrier. 8 A.4 Simulation des domaines magnétiques. 8 Bibliographie de l'annexe.A. 9 Annexe.B Conversion des grandeurs entre le système CGS et le système | 87 87 88 89 92 |
| A.1 Le modèle Phi-4 dipolaire. 8 A.2 Les contributions à l'énergie totale. 8 A.3 Equation dynamique d'Allen Cahn dans l'espace de fourrier. 8 A.4 Simulation des domaines magnétiques. 8 Bibliographie de l'annexe.A. 9 Annexe.B Conversion des grandeurs entre le système CGS et le système international (SI) 9 | 87 87 88 89 92 |
| A.1 Le modèle Phi-4 dipolaire. 8 A.2 Les contributions à l'énergie totale. 8 A.3 Equation dynamique d'Allen Cahn dans l'espace de fourrier. 8 A.4 Simulation des domaines magnétiques. 8 Bibliographie de l'annexe.A. 9 Annexe.B Conversion des grandeurs entre le système CGS et le système international (SI) 9 | 87 87 88 89 92 93 |
| A.1 Le modèle Phi-4 dipolaire. 8 A.2 Les contributions à l'énergie totale. 8 A.3 Equation dynamique d'Allen Cahn dans l'espace de fourrier. 8 A.4 Simulation des domaines magnétiques. 8 Bibliographie de l'annexe.A. 8 Annexe.B Conversion des grandeurs entre le système CGS et le système international (SI) 6 Annexe.C Conversion des constantes physiques entre le système CGS 6 | 87 87 88 89 92 93 |

Liste des figures de chapitre l

| Fig.I.1 Str | ructure atomique | 6 |
|--------------|--|----|
| Fig.I.2 Mo | oment magnétique dipolaire | 7 |
| Fig.I.3 Mo | oment magnétique ampérien | 7 |
| Fig.I.4 illu | stration du mouvement orbital d'un électron | 8 |
| Fig.I.5 illu | stration du mouvement d'un électron autour de lui-même | 8 |
| Fig.I.6 Var | riation de la susceptibilité des matériaux diamagnétiques en fonction de La | |
| températur | re | 10 |
| Fig.I.7 Co | ouplage paramagnétique | 10 |
| Fig.I.8 Var | riation de la susceptibilité des matériaux paramagnétiques en fonction de la | |
| températur | re | 11 |
| Fig.I.9 Co | ouplage ferrimagnétique | 11 |
| Fig.I.10 C | Couplage antiferromagnétique | 12 |
| Fig.I.11 Va | ariation de la susceptibilité des matériaux antiferromagnétiques en fonction | |
| de la temp | pérature | 12 |
| Fig.I.12 C | Couplage ferromagnétique | 13 |
| Fig.I.13 E | ffet de la température sur l'aimantation des matériaux ferromagnétiques | 13 |
| Fig.I.14 C | Classification des éléments du tableau périodique suivant leurs | |
| comportem | nents magnétiques à la température ambiante | 14 |
| Fig.I.15 E | volution de l'aimantation des principaux matériaux magnétiques en réponse | |
| à l'applicat | tion d'un champ extérieur | 16 |

Liste des figures de chapitre ll

| Fig.II.1 Transition de l'aimantation entre deux domaines, a) Transition brutale, | |
|---|----|
| b) Transition progressive | 22 |
| Fig.II.2 Aspect de la répartition en domaines | 23 |
| Fig.II.3 a)Structure de Landau pour Q<<1. b) Structure de Landau-Kittel pour Q>1. | |
| c) Structure de Kittel pour Q>>1 | 23 |
| Fig.II.4 Structures des domaines, a) En bulles, b) En rubans, c) En bandes | 23 |
| Fig.II.5 Courbe d'aimantation d'une substance ferromagnétique | 24 |
| Fig.II.6 illustration du phénomène d'ancrage de la paroi lors du son déplacement | 25 |
| Fig.II.7 Cycle d'hystérésis d'un matériau aimanté | 25 |
| Fig.II.8 Représentation des courants induits microscopiques autour d'une paroi en | |
| Mouvement | 25 |

Liste des figures de chapitre III

| Fig.III.1 Structure à l'échelle atomique | 29 |
|--|----|
| Fig.III.2 Structure à l'échelle nanoscopique | 30 |
| Fig.III.3 Structure à l'échelle microscopique | 30 |
| Fig.III.4 Structure à l'échelle mésoscopique | 30 |
| Fig.III.5 Exemple d'une illustration du comportement à l'échelle macroscopique | 31 |
| Fig.III.6 Aimantation moyennée sur un volume | 33 |
| Fig.III.7 Structure magnétique selon le modèle atomistique | 35 |
| Fig.III.8 Structure magnétique selon le modèle micromagnétique | 35 |
| Fig.III.9 Représentation de deux spins adjacents en interaction | 36 |
| Fig.III.10 Représentation de deux moments magnétiques adjacents en interaction | 37 |
| Fig.III.11 Définition des cosinus directeurs | 38 |
| Fig.III.12 Représentation graphique de la notion de l'énergie Zeeman | 38 |
| Fig.III.13 Représentation d'un système ferromagnétique | 39 |
| Fig.III.14 illustration du phénomène des pôles magnétiques engendrant le champ | |
| démagnétisant | 39 |
| Fig.III.15 Précession sans amortissement de l'aimantation autour du champ | |
| magnétique | 45 |
| Fig.III.16 illustration des différentes couples figurant dans l'équation de Gilbert. | |
| a)Sans amortissement. b) Avec amortissement | 46 |
| Fig.III.17 illustration des différentes couples figurant dans l'équation (LLG) avec et | |
| sans amortissement | 47 |

Liste des figures de chapitre IV

| Fig.IV.1 | Exemples de schéma de discrétisation d'un système, a) 2D,b) 3D | 51 |
|------------|--|----|
| Fig.IV.2 | Représentation d'un système en coordonnées sphériques qui définit | |
| l'orientat | ion de l'aimantation, M dans un repère cartésien | 53 |
| Fig.IV.3 | Représentation des six moments proches voisins du moment m (i, j, k) | 54 |
| Fig.IV.4 | Organigramme de calcul numérique micromagnétique | 62 |

Liste des figures de chapitre V

| Fig.V.1 | Représentation | géométrique | de la couche | mince | 68 |
|---------|----------------|-------------|--------------|-------|----|
|---------|----------------|-------------|--------------|-------|----|

| Fig.V.2 Evolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne, <mx></mx> | |
|---|----|
| durant le processus de retournement à T= 0 K. La couche mince est discrétisée en | |
| cellules de tailles 2.5x2.5x2.5 nm ³ et 5x5x5 nm ³ | 68 |
| Fig.V.3 Evolution temporelle de la distribution de l'aimantation, M durant le processus | |
| de retournement à T=0 K. La couche mince est discrétisée en cellules de taille | |
| 5x5x5nm ³ , Ne, étant le nombre d'enregistrements à des Instants distincts | 71 |
| Fig.V.4 Distribution de l'aimantation M selon l'enregistrement (Ne =3122). La couche | |
| mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5nm ³ | 71 |
| Fig.V.5 Evolution temporelle des composantes de l'aimantation moyenne, <m> durant</m> | |
| le processus de retournement dans une couche mince de permalloy discrétisée en | |
| cellules de taille 5x 5x5 nm ³ . a) Evolution de <mx>,<my> et <mz>, b) Evolution de</mz></my></mx> | |
| <my> et <mz></mz></my> | 72 |
| Fig.V.6 Evolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne, <mx></mx> | |
| durant le processus de retournement pour différentes valeurs de T. La couche mince | |
| est discrétisée en cellules de taille 5x5x5nm ³ | 73 |
| Fig.V.7 Evolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne, <mx>durant</mx> | |
| le processus de retournement pour différentes valeurs de T. La couche mince est | |
| discrétisée en cellules de taille 2.5x2.5x2.5 nm ³ | 73 |
| Fig.V.8 Evolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne, <mx></mx> | |
| durant le processus de retournement pour différents valeurs de champ appliqué, H | |
| à T=0 K .La couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5nm ³ | 74 |
| Fig.V.9 Evolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne,< Mx > | |
| durant le processus de retournement pour différentes valeurs de Ms à T=0 K. La | |
| couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5nm ³ | 75 |
| Fig.V.10 Evolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne < Mx > | |
| durant le processus de retournement pour différentes valeurs de la constante | |
| d'échange à T=0 K.la courbe correspondante à A_{exch} = 1.3x10 ⁻¹¹ J/m est tracée avec | |
| une période de stockage des valeurs égale à 500 | 75 |
| Fig.V.11 Evolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne, <mx></mx> | |
| durant le processus de retournement pour différents valeurs de nombre d'essais | |
| (NE) à T= 0 K .La couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5 nm ³ | 76 |
| Fig.V.12 Evolution temporelle de nombre de pas rejetés, (NPR) durant le processus | |
| de retournement pour différents valeurs de nombre d'essais, (NE) à T= 0 K. La | |
| couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5 nm ³ | 76 |

Fig.V.13 Evolution temporelle de nombre de pas rejetés, (NPR) durant le processus de retournement. pour différents valeurs de nombre d'essais, (NE) à T= 0 K. La couche mince est discrétisée en cellules de taille 2.5 x 2.5 x 2.5 nm³..... 77 Fig.V.14 Evolution temporelle de nombre de pas acceptés (NPA) durant le processus de retournement pour différents valeurs de nombre d'essais, (NE) à T= 0K. La couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5 nm³. 77 Fig.V.15 Evolution temporelle de nombre de pas acceptés (NPA) durant le processus de retournement pour différents valeurs de nombre d'essais, (NE) à T= 0 K. La couche mince est discrétisée en cellules de taille 2.5 x 2.5 x 2.5 nm³..... 78 Fig.V.16 Evolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne, <Mx> durant le processus de retournement pour différents valeurs de ε à T= 0 K. La couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5 nm³..... 78 Fig.V.17 Evolutions temporelles des composantes d'aimantation moyennes, <Mx> durant le processus de retournement issus de la solution de l'équation de Gilbert calculée avec le code Fortran et celle de la solution de l'équation (LLG) calculée avec le code Matlab. La couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5nm³..... 79 Fig.V.18 Evolutions temporelles des composantes de l'aimantation moyenne, <M> obtenues avec le test de la fréquence de précession de Larmor. La couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5nm³.Le calcul est effectué en utilisant le code Fortran. 80 Fig.V.19 Evolutions temporelles des composantes des aimantations movennes <My> obtenues avec le test de la fréquence de la précession de Larmor. Le calcul est effectué en utilisant les codes (Fortran et Matlab) 81 Fig.V.20 Projection du vecteur de l'aimantation moyenne, <M> sur le plan (x-y), a) En absence de l'amortissement (α =0), b) En présence de l'amortissement (α =0.5) 81

Liste des symboles et abréviations

Liste des symboles

| Μ | Aimantation |
|-----------------------------|--|
| M _{ij} | Aimantation dans une cellule, (i,j) |
| <m></m> | Aimantation moyenne |
| M _s | Aimantation à saturation |
| M _{initiale} | Aimantation initiale |
| $M(\mathbf{r}, \mathbf{t})$ | Aimantation à la position, r et l'instant, t |
| θ | Angle polaire |
| φ | Angle azimuthal |
| ϕ_{exch} | Angle entre deux spins en interaction |
| H(r,t) | Champ magnétique à la position, r et l'instant, t |
| н | Champ appliqué |
| H _{ext} | Champ extérieur |
| H _{exch} | Champ d'échange |
| H _{anis} | Champ d'anisotropie magnetocristalline |
| H _{therm} | Champ thermique |
| H _{dem} | Champ démagnétisant |
| H _{mol} | Champ moléculaire |
| H_{eff} | Champ effectif |
| H _m | Champ maximal |
| H _a | Champ d'anisotropie |
| H _c | Champ coercitif |
| E | Champ électrique |
| h _{eff x} | Composante réduite de champ effectif suivant l'axe x |
| h _{eff y} | Composante réduite de champ effectif suivant l'axe y |
| $h_{\text{eff }z}$ | Composante réduite de champ effectif suivant l'axe z |
| $H_{eff\theta}$ | Composante polaire de champ effectif |
| $H_{\text{eff}\phi}$ | Composante azimutal de champ effectif |

| $\boldsymbol{H}_{eff\thetaext}$ | Contribution polaire de champ extérieur au champ effectif |
|---------------------------------|--|
| $\boldsymbol{H}_{eff\phiext}$ | Contribution azimutal de champ extérieur au champ effectif |
| $H_{eff\theta anis}$ | Contribution polaire de champ d'anisotropie magnétocristalline au Champ effectif |
| $H_{eff\phi anis}$ | Contribution azimutal de champ d'anisotropie magnétocristalline au Champ effectif |
| $H_{eff\theta exch}$ | Contribution polaire de champ d'échange au champ effectif |
| $H_{eff\phiexch}$ | Contribution azimutal de champ d'échange au champ effectif |
| $h_{eff\theta}$ | Composante polaire réduite de champ effectif |
| $h_{eff\phi}$ | Composante azimuthal réduite de champ effectif |
| ħ | Constante de Planck |
| С | Constante de curie |
| K _u | Constante d'anisotropie uniaxilae |
| $\lambda_{ m w}$ | Constante de champ de weiss |
| $\mathbf{A}_{\mathrm{exch}}$ | Constante d'échange |
| k _i | Constantes d'anisotropies cubiques |
| ar | Constante de réseau |
| λ_{100} | Constante de magnétostriction à saturation mesurée suivant la |
| | direction <100> |
| λ_{111} | Constante de magnétostriction à saturation mesurée suivant la |
| | direction <111>. |
| \mathbf{B}_{i} | Constantes de couplage magnetoelastiques |
| K _b | Constante de Boltzmann |
| S _f | Coefficient de sécurité pour l'ajustement de pas d'intégration |
| | temporelle |
| λ_0 | Coefficient de magnétostriction en volume |
| $\alpha_{_G}$ | Coefficient de dissipation proposé par Gilbert |
| λ_{L} | Coefficient de dissipation proposé par Landau et Lifshitz |
| α | Coefficient d'amortissement |
| q _m | Charge magnétique fictive |
| σ | Contrainte mécanique |
| α_{i} | Cosinus directeurs |
| | |

| m _x | Composante de l'aimantation réduite suivant l'axe x |
|--------------------|---|
| m _y | Composante de l'aimantation réduite suivant l'axe y |
| m _z | Composante de l'aimantation réduite suivant l'axe z |
| <mx></mx> | Composante de l'aimantation moyenne suivant l'axe x |
| <my></my> | Composante de l'aimantation moyenne suivant l'axe y |
| <mz></mz> | Composante de l'aimantation moyenne suivant l'axe z |
| J _e | Densité de courant électrique |
| ρ_{e} | Densité des charges volumiques électriques |
| ε _{ij} | Déformation |
| d | Distance entre deux moments voisins en interaction |
| r _{i,j} | Distance entre deux spins en interaction |
| e _{anis} | Densité d'énergies d'anisotropie magnétocristalline |
| e _{exch} | Densité d'énergie d'échange |
| ds | Elément de surface |
| ΔV | Elément de volume |
| E _{exch} | Energie d'échange |
| U | Energie interne |
| \mathbf{S}_{ent} | Entropie |
| E _{loc} | Energie local |
| E _{anis} | Energie d'anisotropie magnétocristalline |
| E _{zeem} | Energie Zeeman |
| E _{mel} | Energie magnétoélastique |
| G _s | Energie libre de Gibbs |
| E _σ | Energie magnétoélastique induite par une contrainte |
| E _{dem} | Energie démagnétisante |
| E therm | Energie thermique |
| e ₁ | Erreur liée au pas courant |
| g | Facteur de Landé |
| Q | Facteur de qualité |
| В | Induction magnétique |
| | |

| D | Induction électrique |
|--|---|
| \mathbf{J}_{ij} | Intégrale d'échange |
| l _{exch} | Longueur d'échange |
| m _e | Masse d'un électron |
| $\mu_{\rm m}^{\rm dip}$ | Moment magnétique dipolaire |
| μ_m^{am} | Moment magnétique ampérien |
| $\mu_m^{orbital}$ | Moment magnétique orbital |
| μ_m^{spin} | Moment magnétique de spin |
| μ_{mi} | Moment magnétique d'un atome i |
| μ_m^{tot} | Moment magnétique totale |
| J | Moment cinétique total |
| L | Moment cinétique orbital |
| S | Moment cinétique de spin |
| μ_{B} | Magnéton de Bohr |
| λ_{s} | Magnétostriction à saturation |
| | |
| M_d | Moment dipolaire |
| M _d N _x | Moment dipolaire Nombre de cellules de discrétisation suivant l'axe x |
| M _d N _x N _y | Moment dipolaire Nombre de cellules de discrétisation suivant l'axe x Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe y |
| M _d N _x N _y N _z | Moment dipolaire Nombre de cellules de discrétisation suivant l'axe x Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe y Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe z |
| M_{d} N_{x} N_{y} N_{z} $(\delta t)_{0}$ | Moment dipolaire Nombre de cellules de discrétisation suivant l'axe x Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe y Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe z Nouveau pas d'intégration temporelle |
| M_{d} N_{x} N_{y} N_{z} $(\delta t)_{0}$ μ_{0} | Moment dipolaire Nombre de cellules de discrétisation suivant l'axe x Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe y Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe z Nouveau pas d'intégration temporelle Perméabilité du vide |
| M_{d} N_{x} N_{y} N_{z} $(\delta t)_{0}$ μ_{0} μ | Moment dipolaire Nombre de cellules de discrétisation suivant l'axe x Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe y Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe z Nouveau pas d'intégration temporelle Perméabilité du vide Perméabilité |
| M_d N_x N_y N_z $(\delta t)_0$ μ_0 μ T_{lar} | Moment dipolaire Nombre de cellules de discrétisation suivant l'axe x Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe y Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe z Nouveau pas d'intégration temporelle Perméabilité du vide Perméabilité Période de Larmor |
| M_d N_x N_y N_z $(\delta t)_0$ μ μ T_{lar} ϕ_m | Moment dipolaire Nombre de cellules de discrétisation suivant l'axe x Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe y Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe z Nouveau pas d'intégration temporelle Perméabilité du vide Perméabilité Période de Larmor Potentiel scalaire |
| M_{d} N_{x} N_{y} N_{z} $(\delta t)_{0}$ μ T_{lar} ϕ_{m} δt | Moment dipolaire Nombre de cellules de discrétisation suivant l'axe x Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe y Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe z Nouveau pas d'intégration temporelle Perméabilité du vide Perméabilité Période de Larmor Potentiel scalaire Pas d'intégration temporelle |
| M_{d} N_{x} N_{y} N_{z} $(\delta t)_{0}$ μ T_{lar} ϕ_{m} δt $(\delta t)_{l}$ | Moment dipolaire Nombre de cellules de discrétisation suivant l'axe x Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe y Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe z Nouveau pas d'intégration temporelle Perméabilité du vide Perméabilité Période de Larmor Potentiel scalaire Pas d'intégration temporelle Pas d'intégration temporelle |
| M_{d} N_{x} N_{y} N_{z} $(\delta t)_{0}$ μ T_{lar} ϕ_{m} δt $(\delta t)_{1}$ $d \tau$ | Moment dipolaire Nombre de cellules de discrétisation suivant l'axe x Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe y Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe z Nouveau pas d'intégration temporelle Perméabilité du vide Perméabilité Période de Larmor Potentiel scalaire Pas d'intégration temporelle Pas d'intégration temporelle courant Pas d'intégration temporelle adimensionnel |
| M_{d} N_{x} N_{y} N_{z} $(\delta t)_{0}$ μ T_{lar} ϕ_{m} δt $(\delta t)_{1}$ $d \tau$ h_{x} | Moment dipolaire Nombre de cellules de discrétisation suivant l'axe x Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe y Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe z Nouveau pas d'intégration temporelle Perméabilité du vide Perméabilité Période de Larmor Potentiel scalaire Pas d'intégration temporelle Pas d'intégration temporelle courant Pas d'intégration temporelle adimensionnel Pas de discrétisation spatiale suivant l'axe x |
| M_{d} N_{x} N_{y} N_{z} $(\delta t)_{0}$ μ T_{lar} ϕ_{m} δt $(\delta t)_{1}$ $d \tau$ h_{x} h_{y} | Moment dipolaire Nombre de cellules de discrétisation suivant l'axe x Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe y Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe z Nouveau pas d'intégration temporelle Perméabilité du vide Perméabilité Période de Larmor Potentiel scalaire Pas d'intégration temporelle Pas d'intégration temporelle courant Pas d'intégration temporelle adimensionnel Pas de discrétisation spatiale suivant l'axe x Pas de discrétisation spatiale suivant l'axe y |
| $\begin{split} \mathbf{M}_{d} \\ \mathbf{N}_{x} \\ \mathbf{N}_{y} \\ \mathbf{N}_{z} \\ (\delta t)_{0} \\ \mu_{0} \\ \mu \\ \mathbf{T}_{lar} \\ \mathbf{\phi}_{m} \\ \delta t \\ (\delta t)_{l} \\ \mathbf{d} \tau \\ \mathbf{h}_{x} \\ \mathbf{h}_{y} \\ \mathbf{h}_{z} \end{split}$ | Moment dipolaire Nombre de cellules de discrétisation suivant l'axe x Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe y Nombre de cellules de discretisation suivant l'axe z Nouveau pas d'intégration temporelle Perméabilité du vide Perméabilité Période de Larmor Potentiel scalaire Pas d'intégration temporelle Pas d'intégration temporelle courant Pas d'intégration temporelle adimensionnel Pas de discrétisation spatiale suivant l'axe x Pas de discrétisation spatiale suivant l'axe y Pas de discrétisation spatiale suivant l'axe z |

| $\gamma_{\rm L}$ | Rapport gyromagnétique dans l'équation de landau-lifshitz |
|---|---|
| γ | Rapport gyromagnétique dans l'équation (LLG) |
| χ | Susceptibilité magnétique |
| | |
| А | Surface délimité par la boucle de courant i |
| Т | Température |
| T _N | Temperature de Néel |
| T _c | Temperature de curie |
| $R_{LL}(M, H_{eff})$ | Terme dissipatif introduit par landau et lifshitz |
| $R_{G}(M, H_{eff})$ | Terme dissipatif introduit par Gilbert |
| T(r-r') | Tenseur démagnétisant. |
| δE_{tot} | Variation de l'énergie |
| V_{cel} | Volume d'une cellule de discrétisation |
| $\Delta \theta$ | Variation de l'angle polaire |
| $\Delta \phi$ | Variation de l'angle azimutal |
| ΔM | Variation de l'aimantation |
| $\langle \mathrm{H}_{\mathrm{therm}} \rangle$ | Valeur moyenne du champ thermique |

Liste des abréviations

| 2D | Deux dimensions |
|------------------|--|
| Ne | Nombre d'enregistrements |
| NE | Nombre d'essais |
| NPA | Nombre de pas acceptés |
| NPR | Nombre de pas rejetés |
| FFT | (Fast Fourier Transform) Transformé de fourrier rapide |
| LLG | Landau-Lifshitz-Gilbert |
| TF | Transformé de fourier |
| TF ⁻¹ | Transformé de fourier inverse |
| 3D | Trois dimensions |
| vpx | Voisins proches dans la direction x |
| vpy | Voisins proches dans la direction y |
| vpz | Voisins proches dans la direction z |

Introduction générale

Les matériaux ferromagnétiques ont une grande importance technologique. Leurs applications se repartissent en général dans les dispositifs de production d'énergie, de télécommunication, de lecture et de stockage de l'information. Ils sont utilisés sous formes: massif, tôle, ruban, couche mince et ultramince.

Souvent, le processus de magnétisation dans ces matériaux peut impliquer des phénomènes complexes liés aux microstructures magnétiques, à savoir la nucléation des domaines et la propagation des parois. En mouvement, les parois sont épinglées par des sites d'ancrages distribués aléatoirement engendrant des pertes. L'amélioration des performances et l'optimisation de ces matériaux nécessitent la compréhension avec précision de ces phénomènes magnétiques.

L'évolution de la théorie du magnétisme est marquée par le développement de plusieurs théories liées à des échelles différentes. Du fait que le concept de l'échelle est primordial en magnétisme, à l'échelle des parois et domaines certaines théories sont insuffisantes ou s'opposent à la description des phénomènes magnétiques. Par conséquent, nous ne pouvons pas comprendre le comportement complexe des matériaux ferromagnétiques à cette échelle sans la modélisation par la théorie du micromagnétisme. Cette théorie est fondée sur le même principe de la théorie des domaines magnétiques postulée par **Weiss** et révisée par **Kittel**. La théorie du micromagnétisme décrit l'aimantation par un champ continue M(r, t) ou r est la position à l'instant, t. Elle était apparue pour étudier et analyser les configurations d'équilibre, l'effet de l'hystérésis, le retournement et la dynamique de l'aimantation dans les matériaux ferro-ferrimagnétiques à l'échelle micromagnétique. Toutefois, nous n'oublions pas de signaler qu'il existe une autre catégorie de modèles qui peut être liée à cette théorie. C'est celle des modèles de type Ising (**Annexe. A**).

La modélisation du comportement des matériaux ferromagnétiques par la théorie du micromagnétisme a débuté par les travaux de Landau et Lifshitz en 1935. Ils ont attribué à chaque phénomène physique dans le matériau une énergie et ont confirmé que la configuration en domaine est le résultat d'une minimisation de l'énergie totale. En1940, ce problème de minimisation a été surmonté menant aux équations de Brown destinées au micromagnétisme statique. Gilbert a formulé une nouvelle équation de la dynamique d'aimantation en introduisant un paramètre

d'amortissement en 1955. Cette équation est équivalente à une ancienne version déjà développée par Landau et Lifshitz. Les équations micromagnétiques sont couplées, non linéaires et non locales. Cela a forcé le micromagnétisme d'être au début seulement une théorie analytique. Parmi les modèles qui ont admet une solution analytique, on peut citer ceux : de Stoner et Wohlfarth, de la nucléation des domaines dans des dispositifs de géométrie spéciales et de la résonance ferromagnétique. Malheureusement, ces modèles ont des solutions basées sur des simplifications et sont limités en applications.

Pour inclure les effets thermiques dans le calcul micromagnétique, **Brown** a proposé l'idée d'ajouter un champ thermique aux autres contributions de champ effectif. Ce champ qui figure dans l'équation de la dynamique la transformait en sa forme stochastique. L'équation de la dynamique de l'aimantation et celles de Brown gouvernaient la théorie du micromagnétisme qui a substitué complètement la théorie des domaines en 1963.

L'évolution des méthodes numériques a permet au début la minimisation de l'énergie d'une paroi à une dimension en 1965. Un peu plus tard, Labonte а développé cette minimisation en deux dimensions (2D). De même, l'évolution des moyens de calcul en particulier dans les années 80 s'accompagnait d'un développement des calculs numériques micromagnétiques. Ce progrès était accentué en particulier après l'implémentation de la technique de la transformé de fourrier rapide(Fast Fourier Transform, FFT) dans le calcul du champ démagnétisant en 1990. Cela a encouragé plusieurs groupes de recherche à développer leurs personnels. Certains sont publics comme (Object Oriented simulateurs Micromagnetic Framwork) (OOMMF) et Magpar développés respectivement par Donahue et Sholtz. D'autres, sont commerciaux à l'image de LLGsimilator et Micromagus développés respectivement par Scheinfein et Berkov. Beaucoup d'efforts ont été fournis. Ils ont pointé sur la modélisation et la simulation des comportements magnétiques des dispositifs de tailles réduites tels que ceux destinés à l'enregistrement magnétique et magnéto-optique. L'objectif était la compréhension de la dynamique et de l'inversion de l'aimantation. Récemment, la communauté micromagnétique s'intéresse à l'injection de courant polarisé en spin et au couplage du magnétisme avec les effets thermiques et magnetoélastiques. Toutefois, avec l'avènement des moyens de calcul parallèle l'extension des calculs micromagnétiques à des systèmes de grandes tailles est accessible. Dans ces

dispositifs réels, souvent employés en électrotechnique, le processus complexe de nucléation des domaines et de propagation de parois est prépondérant. De plus, une modélisation en trois dimensions (3D) est inévitable. De même, l'utilisation des simulateurs micromagnétiques existants est influencée par certains facteurs devenus comme des contraintes. A savoir, la licence d'utilisation, les méthodes de discrétisations spatiales et temporelles, le langage de programmation et l'accès à certaines librairies. En effet, une éventuelle extension nécessite des moyens de calcul flexibles.

Le but assigné à cette thèse se place en partie dans le contexte d'une contribution à la modélisation du comportement des matériaux ferromagnétiques par la théorie du micromagnétisme. Il consiste à

- Fournir les bases théoriques et numériques nécessaires pour effectuer une modélisation à l'échelle des domaines.
- Etudier l'évolution de l'aimantation lors du processus de retournement dans une couche ferromagnétique mince en (2D)
- Effectuer les calculs numériques liés à cette étude en utilisant des outils de calcul développés.

Afin d'atteindre ces objectifs nous proposons une subdivisons de ce manuscrit en cinq chapitres.

Au chapitre 1, nous présenterons une description de l'état magnétique de la matière. Nous présenterons aussi les différentes classes des matériaux magnétiques et nous comparerons la réponse de ces derniers à l'application d'un champ extérieur. Nous focaliserons ensuite sur le ferromagnétisme, en l'interprétant par différentes théories. Nous n'oublierons pas de rappeler les propriétés qualitatives des matériaux ferromagnétiques et d'envisager une simple comparaison des caractéristiques des matériaux doux et durs. Le chapitre sera clôturé avec une conclusion et une bibliographie

Au chapitre 2, nous présenterons l'évolution de la théorie des domaines et nous précisons ses limites. Ensuite nous rappellerons brièvement les différents mécanismes d'aimantation. Puis, nous illustrerons le phénomène d'ancrage des parois en mouvement. Nous rappellerons le concept phénoménologique de l'hystérésis et nous donnerons un bref aperçu sur les pertes dans la matière. Le chapitre sera clôturé avec une conclusion et une bibliographie.

Au chapitre 3, nous citerons les différentes échelles dont dépend l'étude du magnétisme. Ensuite, nous présenterons les deux principales théories liées à l'échelle atomique et macroscopique. Puis, et par nécessité, nous aborderons la théorie du micromagnétisme. Dans un premier temps, nous comparerons le modèle atomistique et le modèle micromagnétique. Nous présenterons ensuite les concepts, le but, les hypothèses simplificatrices portés par cette théorie et les différents paramètres micromagnétiques. Nous décrierons les différentes énergies et interactions en compétition dans un système ferromagnétique. Nous établirions l'équation de l'énergie totale libre qui une fois minimisée elle mène aux équations de Brown destinées au micromagnétisme statique. De même, nous développerons les différentes formes de l'équation de la dynamique d'aimantation. Le chapitre sera clôturé avec une conclusion et une bibliographie.

Au chapitre 4, nous présenterons les différents caractères des équations micromagnétiques. Nous citerons ensuite certains cas possibles ou ces équations admettent une solution analytique. Puis, nous aborderons les méthodes de calcul numérique micromagnétique. Nous commencerons par la méthode statique, ou nous rappellerons les algorithmes et les méthodes de minimisation de l'énergie totale. Ensuite, nous décrierons les étapes de la solution numérique de l'équation de la dynamique de l'aimantation. Puis, nous élaborerons un organigramme simple pour le calcul numérique micromagnétique. Le chapitre sera clôturé par une conclusion et une bibliographie.

Au chapitre 5, nous présenterons les résultats issus de l'étude de l'évolution de l'aimantation lors de processus de retournement dans une couche ferromagnétique mince. Cependant, nous commencerons d'abord par un bref rappel des modes de retournement, de la notion d'une couche mince et des critères du choix du matériau. Ensuite nous évoquerons quelques approximations présentes dans les outils de calcul. Nous comparerons les résultats obtenus et nous procéderons à une validation de nos codes de calcul et résultats. La clôture de ce chapitre sera une conclusion et une bibliographie.

Les perspectives liées à ce travail seront évoquées en conclusion générale.

CHAPITRE I INTRODUCTION AUX MATERIAUX FERROMAGNETIQUES

| Introduction | 6 |
|--|----|
| I.1 Etat magnétique de la matière | 6 |
| I.1.1 Introduction | 6 |
| I.1.2 Le magnétisme à l'échelle atomique | 6 |
| I.1.2.1 Structure atomique | 6 |
| I.1.2.2 Moment magnétique | 6 |
| I.1.2.3 Moment magnétique orbital | 7 |
| I.1.2.4 Moment magnétique de spin | 8 |
| I.1.2.5 Moment magnétique atomique | 9 |
| I.1.3 Du microscopique au macroscopique | 9 |
| I.2 Classification des matériaux magnétiques | 10 |
| I.2.1 Matériaux sans ordre magnétique | 10 |
| I.2.1.1 Matériaux diamagnétiques | 10 |
| I.2.1.2 Matériaux paramagnétiques | 10 |
| I.2.2 Matériaux avec ordre magnétique | 11 |
| I.2.2.1 Matériaux ferrimagnétiques | 11 |
| I.2.2.2 Matériaux antiferromagnétiques | 12 |
| I.2.2.3 Matériaux ferromagnétiques | 12 |
| I.3 Interprétation du ferromagnétisme | 14 |
| I.3.1 Théories des moments localisés | 14 |
| I.3.1.1 Théorie du champ moyen de Weiss | 14 |
| I.3.1.2 Théorie de Heisenberg | 15 |
| I.3.2 Théories des moments non localisés | 15 |
| I.3.2.1 Théorie de bande de stoner | 15 |
| I.3.2.2 Théorie de bande de Vonsovsky et Zener | 15 |
| I.4 Réponse des matériaux magnétiques à un champ extérieur | 16 |
| I.5 Propriétés qualitatives des matériaux ferromagnétiques | 16 |
| I.6 Catégories des matériaux ferromagnétiques | 17 |
| I.6.1 Caractéristiques des matériaux ferromagnétiques doux | 17 |
| I.6.2 Caractéristiques des matériaux ferromagnétiques durs | 18 |
| Conclusion | 18 |
| Bibliographie de chapitre I | 18 |

Introduction

La compréhension de comportement des matériaux magnétiques nécessite dans un premier temps la connaissance de l'origine physique de magnétisme et de ces différentes manifestations.

En effet, Nous débuterons ce chapitre introductif par une description de l'état magnétique de la matière. Ensuite, nous présenterons les différentes classes des matériaux magnétiques et nous comparerons leurs réponses à l'application d'un champ extérieur. Nous porterons une attention au ferromagnétisme que nous l'interpréterons par les théories des moments localisés et non localisés. Nous rappellerons les propriétés qualitatives des matériaux ferromagnétiques et nous comparerons les caractéristiques des matériaux doux et durs.

I.1 Etat magnétique de la matière

I.1.1 introduction

Pour décrire et comprendre l'état magnétique de la matière, il faut d'abord mener une analyse à l'échelle atomique pour préciser l'origine physique du magnétisme, puis progressivement passer à l'échelle de l'arrangement d'atomes, du cristal et en fin à la totalité de du matériau.

I.1.2 Le magnétisme à l'échelle atomique

I.1.2.1 Structure atomique

Toute substance matérielle est formée d'un ensemble d'atomes. Chaque atome est composé d'un noyau autour duquel des électrons gravitent (Fig.I.1).



Fig.I.1 Structure atomique

I.1.2.2 Moment magnétique

L'élément essentiel du magnétisme est le moment magnétique. Deux approches sont à envisager [Robert, 1989], [Brissonneau, 1997].

• L'approche coulombienne

Un dipôle magnétique est constitué de deux charges magnétiques fictives de signes opposées séparées par une distance I, (Fig.I.2). Le moment magnétique associé à ce dipôle porte le non de moment magnétique dipolaire, μ_m^{dip} défini par

$$\mu_m^{dip} = lq_m$$
 (I.1)



• L'approche ampérienne

Le courant ampérien est un petit courant circulaire censé d'exister à l'échelle atomique. Il résulte du mouvement de l'électron autour du noyau, (Fig.I.3). Le moment magnétique associé porte le non de moment magnétique ampérien, μ_m^{am} défini par la relation suivante

$$\mu_{\rm m}^{\rm am} = i \, A \tag{1.2}$$

Ou A est la surface délimitée par le courant circulaire, i.



Fig.I.3 Moment magnétique ampérien

I.1.2.3 Moment magnétique orbital

Un électron de charge, -e et de masse, m_e en mouvement autour du noyau avec une vitesse, ν suivant une orbite de rayon, r donne naissance à un moment

magnétique orbital orientée perpendiculairement au plan de l'orbite. Un moment cinétique orbital, L est associé à ce moment magnétique, orienté suivant la direction opposée du moment magnétique orbital. (Fig.I.4).



Fig.I.4 illustration du mouvement orbital d'un électron

Ce moment magnétique orbital est définit comme suit

$$\mu_{m}^{\text{orbital}} = -\gamma L \tag{1.3}$$

Ou γ est le rapport gyromagnétique.

I.1.2.4 Moment magnétique de spin

En tournant autour de lui-même, l'électron acquiert un moment magnétique de spin, μ_m^{spin} [Brissonneau, 1997], [Bogart, 2010]. A ce moment magnétique de spin est associé un moment cinétique de spin, S qui peut prendre deux valeurs distinctes selon le sens de rotation comme il est illustré par (Fig.I.5).



Fig.I.5 illustration du mouvement d'un électron autour de lui même.

I.1.2.5 Moment magnétique atomique

Le moment magnétique atomique total est la somme des deux moments magnétiques, orbital et de spin. Les moments de spins se couplent entre eux pour donner le moment de spin total

$$S = \sum_{i} s_{i}$$
 (1.4)

Il est de même pour les moments orbitaux, ils se couplent pour donner le moment orbital total

$$L = \sum_{i} l_{i}$$
 (1.5)

Les moments totaux orbitaux, L et de spin, S se couplent entre eux pour donner un moment cinétique total, J. A partir du ce dernier, on obtient facilement le moment magnétique de l'atome exprimé de la façon suivante

$$\mu_{\rm m} = \frac{-g\mu_{\rm B}}{\hbar} J \tag{I.6}$$

Ou g est le facteur de Landé, μ_B est le magnéton de Bohr et \hbar est la constante de Planck.

I.1.3 Du microscopique au macroscopique

Le moment résultant dans un élément de volume, ΔV comportant, N atomes de moments magnétiques, μ_{mi} peut être écrit sous la forme suivante

$$\mu_m^{\text{tot}} = \sum_{i=1}^N \mu_{mi}$$
 (1.7)

L'aimantation, M est définie par

$$\mathbf{M} = \lim_{\Delta \mathbf{v} \to \mathbf{0}} \left(\frac{1}{\Delta \mathbf{v}} \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{\mu}_{mi} \right)$$
(1.8)

La valeur moyenne de l'aimantation est définie lorsque la somme est considérée sur le volume entier de l'échantillon. Cependant, lorsque la somme est effectuée seulement sur les moments dans l'élément de volume, l'aimantation, M est caractérisée par la densité volumique des moments magnétiques.

I.2 Classification des matériaux magnétiques

Lorsque les atomes s'assemblent, les moments magnétiques de chacun d'eux interagissent plus ou moins entre eux. Cela permet de les classer en deux catégories [Mohamed, 2007], [Cullity, 2009], [Xuenming, 2012], [Djerfaf, 2012].

- Les matériaux sans ordre magnétique.
- Les matériaux avec ordre magnétique

I.2.1 Matériaux sans ordre magnétique

I.2.1.1 Matériaux diamagnétiques

Le diamagnétisme est une propriété fondamentale (intrinsèque) de la matière généralement faible. Les substances diamagnétiques sont composées d'atomes qui n'ont pas de moments magnétiques permanents (toutes les couches électroniques sont remplies et tous les électrons sont appariés). Le diamagnétisme est le comportement non collectif des électrons lorsqu'ils sont exposés à un champ magnétique appliqué. Il provient de la déformation des orbites électroniques des atomes sous l'action d'un champ extérieur. L'intensité de la magnétisation induite est dans la direction opposée du champ appliqué. Ce phénomène est réversible puisque lorsque le champ disparaît, l'action disparaît. Les matériaux diamagnétiques (Cu, Au, Si, Ge...) sont caractérisés par une susceptibilité négative de l'ordre de -10⁻⁶ à -10⁻⁵. Cette susceptibilité est indépendante de la température. (Fig.I.6).



Fig.I.6 Variation de la susceptibilité des matériaux diamagnétiques en fonction de la température

I.2.1.2 Matériaux paramagnétiques

Dans ces matériaux, les moments individuels ne sont pas ordonnés magnétiquement et l'aimantation est nulle lorsque le champ est supprimé (Fig.I.7).



Fig.I.7 Couplage paramagnétique

En présence d'un champ, il y'a un alignement partiel des moments magnétiques atomiques dans la direction du champ magnétique. Les matériaux paramagnétiques tels que (Al, Mg,..) ont une susceptibilité positive de l'ordre de 10⁻⁵ à 10⁻³. Le paramagnétisme est un phénomène faible et réversible, mais qui tend à renforcer l'action du champ inducteur. L'agitation thermique désoriente les dipôles magnétiques élémentaires. (Fig.1.8) montre la dépendance de la susceptibilité de la température décrite par la loi de curie qui peut être écrite sous la forme

$$\chi = \frac{C}{T}$$
(I.9)



Fig.I.8 Variation de la susceptibilité des matériaux paramagnétiques en fonction de la température

I.2.2 Matériaux avec ordre magnétique

I.2.2.1 Matériaux ferrimagnétiques

Les matériaux ferrimagnétiques présentent différents sous-réseaux dont les aimantations sont antagonistes et la compensation n'est pas totale de sorte qu'une aimantation spontanée subsiste (Fig.I.9). Le moment magnétique net n'est pas nul lorsque le champ externe est nul. Le comportement ferrimagnétiques à donné son nom à la grande classe des ferrites, constitués des oxydes magnétiques tels que, Feo, Mno...



Fig.I.9 Couplage ferrimagnétique

I.2.2.2 Matériaux antiferromagnétiques

La structure cristalline d'un matériau antiferromagnétique conduit à la subdivision des moments magnétiques en deux réseaux de moments magnétiques, de directions opposées et d'amplitudes identiques (Fig.I.10).



Fig.I.10 Couplage antiferromagnétique

La résultante de ces moments à l'échelle du matériau est donc nulle: les moments se compensent. L'étude a permet d'identifier le passage de l'état ordonné à l'état désordonné à une température critique, T_N dénommée température de Néel. (Fig.I.11) montre qu'en dessus de la température de Néel, la susceptibilité suit la loi de curie-Weiss donnée par

$$\chi = \frac{C}{T_{\rm N} + T}$$
 (I.10)



Fig.I.11 Variation de la susceptibilité des matériaux antiferromagnétiques en fonction de la température

I.2.2.3 Matériaux ferromagnétiques

Dans les matériaux ferromagnétiques, les moments magnétiques de chaque atome s'alignent spontanément dans des régions appelées domaines, même en absence du champ externe. Le moment magnétique résultant est nul parce que les différents domaines ont des orientations différentes et leurs effets s'annulent. C'est le cas de certains ions des métaux de transitions (Fe, Co, Ni). Ces derniers présentent des distances interatomiques suffisamment petites pour que ceux-ci interagissent. L'ordre magnétique est issu de la compétition entre deux énergies: l'énergie d'échange et l'énergie de l'agitation thermique. (Fig.I.12), illustre le couplage des moments magnétiques.



Fig.I.12 Couplage ferromagnétique

Tous les corps ferromagnétiques deviennent paramagnétiques au-dessus de la température de curie, T_{C} . (Fig.I.13) montre l'effet de la température sur l'aimantation des matériaux ferromagnétiques. m est l'aimantation réduite.



Fig.I.13 Effet de la température sur l'aimantation des matériaux ferromagnétiques

Dans ces matériaux la susceptibilité suit la loi de curie-Weiss qui s'écrit comme suit

$$\chi = \frac{C}{T - T_{\rm C}}$$
(I.11)

En résumé de cette section,(Fig.I.14) qui représente le tableau ci-dessous, montre la classification des éléments du tableau périodique suivant leurs comportements magnétiques à la température ambiante.





I.3 Interprétation du ferromagnétisme

L'interprétation du phénomène du ferromagnétisme dans les matériaux ferromagnétiques dépend de la théorie choisie pour décrire ce phénomène. Ils existent deux catégories de théories [Michael et al. 2010], [Morecroft, 2003], [Keatly, 2008].

- Théories des moments localisés
- Théories des moments non localisés

I.3.1 Théories des moments localisés

Selon la théorie des moments localisés, les électrons responsables du ferromagnétisme sont attachés aux atomes et ne peuvent pas bouger dans le cristal. Ces électrons contribuent un certain moment magnétique à chaque atome et ce moment est localisé dans chaque atome.

I.3.1.1 Théorie de champ moyen de Weiss

Selon la théorie du champ moléculaire, les corps ferromagnétiques sont constitués de cristaux dont leurs atomes sont porteurs de moments magnétiques. Chaque atome est soumit au champ magnétique moyen moléculaire, H_{mol} issu des autres atomes et qui a pour expression

 $H_{mol} = \lambda_w M$

(I.12)

Ou λ_w est une constante indépendante de la température.

I.3.1.2 Théorie de Heisenberg

L'origine physique du champ moléculaire n'est pas connue jusqu'à 1928, ou Heisenberg a montré qu'il est causé par l'interaction d'échange. La force d'échange est une conséquence du principe d'exclusion de Pauli: deux électrons ne peuvent pas posséder la même énergie sauf s'ils ont les spins opposés. Si les spins sont parallèles, les deux électrons tendent de s'éloigner. L'énergie électrostatique est modifiée par l'orientation des spins. Cela veut dire que la force d'échange est d'origine électrostatique. Heisenberg a montré que l'énergie d'échange joue un rôle décisif en ferromagnétisme

I.3.2 Théories des moments non localisés

La théorie de Weiss et l'approche de Heisenberg sont basées sur l'hypothèse des moments locaux sur les atomes. Cependant, dans les métaux et leurs alliages cette hypothèse est incorrecte. C'est pour cette raison que les théories de bandes sont développées. Selon ces théories, les tentatives de localiser les électrons extérieurs des atomes sont abandonnés. La théorie des bandes appelée aussi, théorie des électrons collectifs ou théorie des électrons itinérants postule que les électrons responsables du ferromagnétisme sont capables de se déplacer. Plusieurs théories peuvent exister dans cette catégorie entre outre

I.3.2.1 Théorie de bande de Stoner

Elle est connue sous le non de la théorie des électrons collectifs dans laquelle les interactions entre les électrons de conduction sont considérées.

I.3.2.2 Théorie de bande de Vonsovsky et Zener

Les électrons de la couche 3d sont supposés localisés. les électrons de conduction de la couche 4s sont non localisés et sont en interaction avec les électrons localisés de la couche 3d par l'interaction d'échange. Les spins parallèles de la couche 3d sont considérés comme un champ magnétique interne qui est en interaction avec les électrons de la couche 4s.Le résultat est la polarisation des spins des électrons de la couche 4s car leurs spins tendent à s'aligner avec les spins des électrons de la couche 3d afin de minimiser l'énergie d'échange.

I.4 Réponse des matériaux magnétiques à un champ extérieur

La réponse d'un matériau à l'application d'un champ magnétique extérieur H_{ext} conduit à la relation suivante

$$M = \chi H_{ext}$$
(I.13)

Ou χ est la susceptibilité magnétique [Djerfaf, 2012], [Trémolet, 1999]. Cette réponse peut être linéaire ou non linéaire, (Fig.I.15).



Fig.I.15 Evolution de l'aimantation des principaux matériaux magnétiques en réponse à l'application d'un champ extérieur

I.5 Propriétés qualitatives des matériaux ferromagnétiques

- Les matériaux ferromagnétiques ont un comportement plus complexe que celles des diamagnétiques et des paramagnétiques [Repiquet,2004].
- Ils peuvent présenter une aimantation spontanée en absence du champ appliqué
- Les phénomènes d'aimantation liés à ces matériaux sont d'un ordre de grandeur plus élevé que pour les matériaux paramagnétiques et diamagnétiques.

- Ils présentent un cycle d'hystérésis.
- Le comportement des matériaux ferromagnétiques dépend de la température.
 Leur aimantation globale tend à diminuer lorsque la température s'approche de la température de curie.
- La forme des matériaux ferromagnétiques a une grande influence sur leurs comportements.

I.6 Catégories des matériaux ferromagnétiques

Les matériaux ferromagnétiques sont classés en deux catégories selon leurs coercivités. [Lacroux, 1989], [Mazaleyrat, 2006], [Lebourgeois et al. 2002].

- Les matériaux doux
- Les matériaux durs

I.6.1 Caractéristiques des matériaux ferromagnétiques doux

- Ils s'aimantent et se désaimantent facilement.
- Ils ont une perméabilité, une induction et une aimantation rémanente élevées. Cependant, ils possèdent un champ coercitif faible.

On peut subdiviser la classe des matériaux ferromagnétiques doux en trois familles

1. L'alliage Fe-3%Si

Le Fer pur présente des propriétés magnétiques, mais il ne peut être directement utilisé pour la conception des dispositifs électrotechniques, à cause des pertes élevées. Pour une diminution de ces derniers, le fer est feuilleté et utilisé en ajoutant du silicium. On distingue les tôles à grains orientés et les tôles à grains non orientés.

2. Les alliages spécifiques

• Les alliages Fe-Ni

Connue sous le non de "permalloy" et utilisé sur une large gamme de composition en Ni. Une grande quantité en Ni permet d'avoir une perméabilité élevé, tandis que une faible quantité entraine une forte résistivité. Pour des compositions spéciales la magnétostriction est nulle.

• Les alliages FeCo

Ils représentent des matériaux ferromagnétiques doux de haute technologie. Leurs développements restent confinés dans des applications de miniaturisation des circuits magnétiques, travaillant à des inductions élevés et à des fréquences voisines de quelques centaines. Ces conditions sont considérer comme inaccessibles aux

tôles en fer-silicium. Ces alliages présentent de très bonnes propriétés magnétiques (faible constante d'anisotropie, forte aimantation a saturation....).

3. Les ferrites

Mélanges d'oxydes ferrimagnétiques frittés, la formule générale de ce type de ferrite est $MeFe_2O_4$ ou Me correspond à un métal de transition divalent ou une combinaison d'ions.

I.6.2 Caractéristiques des matériaux ferromagnétiques durs

- Ils s'agissent des aimants qui demeurent aimantés.
- Ils sont caractérisés par un champ coercitif élevé et une aimantation rémanente faible.

Parmi ces matériaux typiques, on peut citer les alliages ALNICO, les ferrites dures, Pt-Co, SmCo, Néodyme- Fer- Bore

Conclusion

Nous avons essayé d'abord de décrire et comprendre l'état magnétique de la matière. En se basant sur le mécanisme du couplage et la distribution des moments magnétiques une classification des matériaux magnétiques a été présentée. L'importance totale a été donnée au phénomène du ferromagnétisme interprété par certaines théories.

Une comparaison de la réponse des matériaux magnétiques à l'application d'un champ extérieur a été effectuée. Nous avons rappelé les propriétés qualitatives des matériaux ferromagnétiques et comparé les caractéristiques des matériaux doux et durs.

Après ce chapitre introductif nous estimons que nous pourrons aborder la théorie des domaines qui est réellement une fondation de la théorie de micromagnétisme.

Bibliographie du chapitre I

[Robert, 1989] P.Robert, Matériaux électrotechniques, volume II, presse polytechniques Romandes 3^{éme} édition, 1989.

[Brissonneau, 1997] P.Brissonneau, Magnétisme et matériaux magnétiques pour l'électrotechnique, Edition Hermes, Paris, France, 1997.

[Bogart, 2010] L.K.Bogart, An investigation of the structure, pinning and magnetoresistance of domain walls in $Ni_{81}Fe_{19}$ planar nanowires, thesis, Durham university pp.7-9, 2010.
15,2007.

[Mohamed, 2007] S.Mohamed, Imagerie magnéto-optique du retournement de l'aimantation dans les couches minces de La_{0.7}Sr_{0.3}Mn_{0.3}, thèse, université de Caen, pp.11-

[Cullity et al., 2009] B.D.Cullity, C.D.Graham, Introduction to magnetic materials, IEEE Press. Second edition, 2009.

[Xuenming, 2012] Ju.Xuenming, Micromagnetic simulation of field-coupled devices thin film Co/pt nanomagnets, pp.17-19, 2012.

[Djerfaf, 2012] F.Djerfaf, Caractérisation large bande diélectrique et magnétique des couches minces et de substrats, thèse de doctorat, université de Sétif, pp.4-12, 2012.

[Michael et al., 2010] J.Michael, D.Coey, Magnetism and magnetic material, Cambridge, 2010.

[Morecroft, 2003] D. Morecroft, In-Situ magnetoresistance measurement during patterning of spin valve devices, dissertation, university of Cambridge, pp.17-19, 2003.

[Keatly, 2008] P.S.Keatly, Time resolved magneto-optical investigation of picosecond magnetism dynamics in array of no-ellipsoidal ferromagnetic nanoelements, thesis, university of Exeter, pp.55-57, 2008.

[Trémolet, 1999] E. du Trémolet de Lacheisserie, Magnétisme I: Fondement, éditeur, presses universitaires de Grenoble, 1999.

[Repiquet,2004] K.S.Repiquet, Matériaux ferromagnétiques: Influence d'un espaceur non magnétique et homogénéisation d'agencements multicouches en présence de couplage sur la frontière, thèse, université paris13, pp.13-14,2004

[Lacroux, 1989] G.Lacroux, Les aimants permanents, édition techniques et documentation, Lavoisier, Paris, France, 1989.

[Mazaleyrat, 2006] F.Mazaleyrat, Introduction à la physique des matériaux magnétiques, I.U.F des maitres, Créteil, pp.51-67,2006.

[Lebourgeois et al., 2002] R.Lebourgeois, F.Nguyen Van Dau, Matériaux magnétiques pour l'électronique, l'actualité chimique, pp.84-87, 2002.

CHAPITRE II THEORIE DES DOMAINES ET PROCESSUS D'AIMANTATION

| Intr | Introduction | | |
|------|--|----|--|
| II.1 | Evolution de la théorie des domaines | 21 | |
| | II.1.1 Théorie de Weiss et concept de domaine | 21 | |
| | II.1.2 Analyse et observation expérimentale des domaines | 21 | |
| | II.1.3 Le concept de la paroi | 21 | |
| | II.1.4 L'effet des efforts résiduels | 22 | |
| | II.1.5 L'effet de la magnétostriction et de l'anisotropie | 22 | |
| | II.1.6 Compétition énergétique et structure en domaines | 22 | |
| II.2 | Structures et modèles des domaines | 23 | |
| II.3 | Limites de la théorie des domaines | 24 | |
| II.4 | Mécanismes d'aimantation dans les matériaux ferromagnétiques | 24 | |
| II.5 | Ancrage des parois lors de leurs mouvements | 24 | |
| II.6 | Cycle d'hystérésis | 25 | |
| II.7 | Les pertes dans la matière | 25 | |
| Cor | nclusion | 26 | |
| Bib | Bibliographie de chapitre II | | |

Introduction

Un matériau ferromagnétique présente une distribution en domaines magnétiques résultat d'un équilibre énergétique. Cette hypothèse issue de la théorie des domaines est confirmée par des observations expérimentales. Le processus d'aimantation s'effectue selon des mécanismes gouvernés par le mouvement des parois. Ces dernières sont accrochées par les défauts présents dans le matériau engendrant des pertes.

Dans ce chapitre, nous présenterons d'abord l'évolution de la théorie des domaines. Ensuite, nous décrierons brièvement les différents mécanismes d'aimantation. Nous illustrerons le phénomène d'ancrage des parois en mouvement. Nous présenterons le concept phénoménologique de l'hystérésis et nous donnerons un aperçu sur les pertes.

II.1 Evolution de la théorie des domaines [Spargo, 2002], [Masseboeuf, 2008]

II.1.1 Théorie de Weiss et concept de domaine

Weiss a analysé de façon statistique la distribution des aimants moléculaires. Il a publié son hypothèse qui se résume en : Un matériau ferromagnétique à l'état désaimanté est divisé en un nombre de petites régions. Chaque région est magnétisée spontanément à saturation (domaine magnétique).

La théorie de weiss propose le concept de domaine sans préciser son origine.

II.1.2 Analyse et observation expérimentale des domaines

La première confirmation expérimentale du concept du domaine magnétique est effectuée par Barkhausen. Il a observé que le processus d'aimantation dans un matériau ferromagnétique est discontinu et s'opère par des petits sauts. Au début, ces sauts avaient été interprétés comme les retournements soudains des domaines. Aujourd'hui la validité de cette interprétation n'est pas considérée.

En 1931, Bitter a montré les premières images des domaines par la méthode de la poudre magnétique.

II.1.3 Le concept de la paroi

L'analyse du processus de magnétisation a mené Langmuir à la conclusion suivante: les sauts mentionnés ci-dessus pourraient se produire seulement par un processus dans l'espace inhomogène par la propagation d'une frontière entre les domaines de magnétisations opposées. Il a développé l'idée de retournement pour définir le concept de la paroi magnétique. Cette hypothèse a été confirmée par les

21

expériences de Sixtus et Tonks. Le concept de la paroi est inspiré par Bloch pour analyser théoriquement la transition entre deux domaines magnétiques. (Fig.II.1(a)) et (Fig.II.1(b)) montrent respectivement les transitions, brutale et progressive de l'aimantation entre deux domaines magnétiques adjacents.



Fig.II.1 Transition de l'aimantation entre deux domaines. a) Transition brutale. b) Transition progressive

II.1.4 L'effet des efforts résiduels

Becker a étudié l'effet de la microstructure cristallographique sur le comportement de la magnétisation. Il a tenté d'expliquer qualitativement les propriétés de la magnétisation des matériaux magnétiques doux. Il a développé le modèle de la magnétisation rigide. Ce modèle postule que les domaines magnétiques sont une conséquence d'une inhomogénéité dans la distribution des efforts résiduels internes. Ainsi, la structure en domaines dépend des irrégularités microscopiques dans la structure de cristal.

II.1.5 L'effet de la magnétostriction et de l'anisotropie

La théorie des domaines est améliorée par Honda, Becker et Akuluv en tenant compte de l'effet de la magnétostriction, d'anisotropie et des efforts internes sur la microstructure magnétique. Leurs résultats importants étaient: la tendance de l'aimantation à s'aligner suivant les axes du réseau cristallin.

II.1.6 Compétition énergétique et structure en domaines

En se basant sur les observations des domaines et les analyses théoriques effectués par Bloch, Landau et Lifshitz affirment que la division en domaines comme illustré par (Fig.II.2) est un compromis entre les contributions à l'énergie totale d'un système ferromagnétique. Elles sont à savoir, les énergies d'échange, d'anisotropie et magnétostatique.



Fig.II.2 Aspect de la répartition en domaines

II.2 Structures et modèles des domaines

A l'équilibre, plusieurs structures en domaines peuvent se manifester comme ceux illustrés par (Fig.II.3).



Fig.II.3 a) Structure de Landau pour Q<<1. b) Structure de Landau-Kittel pour Q>1. c) Structure de Kittel pour Q>>1

Dans le cas des matériaux à anisotropie perpendiculaire, d'autres structures peuvent être rencontrées comme ceux illustré par (Fig.II.4). Ou h est l'épaisseur de la couche et D est la période de la structure en domaines.



Fig.II.4 Structures des domaines. a) En bulles. b) En rubans. c) En bandes

II.3 Limites de la théorie des domaines

Cette théorie est révisée par kittel [kittel, 1949], elle considère les domaines et néglige les parois.

II.4 Mécanismes d'aimantation dans les matériaux ferromagnétiques

On peut distinguer trois mécanismes d'aimantation [Ramarotafika, 2012] qui se produisent successivement selon l'intensité du champ appliquée. La courbe d'aimantation représentée par (Fig.II.5) peut être interprétée selon les trois régions, A, B, et C



Fig.II .5 Courbe d'aimantation d'une substance ferromagnétique

• Le premier mécanisme d'aimantation (région A)

Ce mécanisme se produit aux bas champs, il est caractérisé par le mouvement élastique des parois entre domaines.

• Le deuxième mécanisme d'aimantation (région B)

Ce mécanisme d'aimantation se produit aux champs moyens, il est caractérisé par le mouvement irréversible des parois entre domaines magnétiques.

• Le troisième mécanisme d'aimantation (région C)

Ce mécanisme d'aimantation se produit aux champs élevés. Le matériau ne comporte que des domaines possédant une composante alignée avec les directions d'aimantation facile des cristaux les plus proches de la direction du champ.

II.5 Ancrage des parois lors de leurs mouvements

Le phénomène d'ancrage des parois lors de leurs mouvements contribue bien au processus d'aimantation des matériaux ferromagnétiques. Il est du à la présence des défauts dans le matériau tels que les impuretés, les inclusions, les précipités. (Fig.II.6) illustre le phénomène d'ancrage d'une paroi en mouvement entre deux domaines magnétiques.



Fig. II.6 illustration du phénomène d'ancrage de la paroi lors du son déplacement

II .6 Cycle d'hystérésis

Souvent on représente l'aimantation, M en fonction de H. Le champ appliqué varie entre deux valeurs extrêmes, $-H_m$ et $+H_m$ [Verite, 2002]. La variation de l'aimantation n'est plus linéaire. Elle décrit un cycle d'hystérésis (Fig.II.7).



Fig II.7. Cycle d'hystérésis d'un matériau aimanté

II .7 Les pertes dans la matière

Chaque matériau magnétique soumis à un champ extérieur variable est le siège des pertes de fer [Benabou, 2002]. Ces pertes consistent en

 Les pertes dues aux courants induits microscopiques localisés et liés aux déplacements des parois (Fig.II.8).



Fig. II.8 Représentation des courants induits microscopiques autour d'une paroi en mouvement

• Les pertes dus aux courants de Foucault qui se développent à l'échelle macroscopique et qui sont liés au fonctionnement en régime dynamique.

Selon Bertotti, la dissipation d'énergie résulte de la génération des courants induits dans le matériau suivant des échelles spatiales et temporelles différents [Bertotti, 1984], [Bertotti, 1988].

- A l'échelle microscopique, les courants induits sont dus aux sauts de Barkhausen et sont responsables des pertes par hystérésis.
- A l'échelle intermédiaire (échelle des domaines), les courants induits sont générés autour des parois en mouvement et sont la source des pertes supplémentaires.
- A l'échelle macroscopique (la structure des domaines est négligée), les courants induits sont responsables des pertes classiques.

Conclusion

Nous avons présenté l'évolution de la théorie des domaines et précisé ses limites. Ensuite, nous avons décrit les différents mécanismes d'aimantation. Puis nous avons illustré le phénomène d'ancrage des parois en mouvement. Nous avons présenté le concept phénoménologique de l'hystérésis et donné un aperçu sur les pertes dans un matériau ferromagnétique. La théorie des domaines est une fondation de la théorie de micromagnétisme. Cette dernière, sera l'objet du troisième chapitre.

Bibliographie de chapitre II

[Spargo, 2002] A.W.Spargo, Finite element analysis of magnetization reversal in granular thin films, thesis, university of Wales, Bangor, pp.22-26, 2002
[Masseboeuf, 2008] J.Masseboeuf, Imagerie magnétique dans un microscope électronique en transmission pour l'étude du magnétisme à l'échelle du nanomètre, thèse, CEA-Grenoble, pp.6-8,2008

[Kittel,1949] C.Kittel], Physical theory of ferromagnetic domains, Reviews of modern physics,vol.21,N.4,pp.541-583,1949

[Ramarotafika, 2012] R.Ramarotafika, Modélisation stochastique de la variabilité des propriétés magnétiques des matériaux ferromagnétiques: application sur des stators de machine électriques, thèse, institut de technologie de paris, pp.19-20,2012

[Verite, 2002] M.Verite, Etude de dépôts de ferrites pour dispositif intégrés micro-ondes non réciproques, thèse, université de Limoges, pp.23-24,2002

[Benabou, 2002] A.Benabou, Contribution à la caractérisation et à la modélisation des matériaux magnétiques en vue d'une implémentation dans un code de calcul du champ, thèse, université de Lille, pp.30-35,2002

[Bertotti,1984] G.Bertotti, A general statistical approach to the problem of eddy current J.Magn.Magn.Mat, vol.41, pp.253-260, 1984

[Bertotti, 1988] G.Bertotti, General properties of power losses in soft ferromagnetic materials,IEEEtrans.Magn,vol.24,pp.621-630,1988

CHAPITRE III THEORIE DE MICROMAGNÉTISME

| Introduction | | |
|--|------|--|
| III.1 Le magnétisme et les échelles d'observation | 29 | |
| III.1.1 Echelle atomique | 29 | |
| III.1.2 Echelles nanoscopique | 29 | |
| III.1.3 Echelle microscopique | 30 | |
| III.1.4 Echelles mésoscopique | 30 | |
| III.1.5 Echelle macroscopique | 30 | |
| III.2 Evolution de la théorie de magnétisme | 31 | |
| III.2.1 Introduction | 31 | |
| III.2.2 Théorie de Maxwell | 31 | |
| III.2.3 Théorie quantique | 32 | |
| III.3 Théorie de micromagnétisme | 32 | |
| III.3.1 Naissance de la théorie de micromagnétisme | 32 | |
| III.3.2 Les Concepts de la théorie de micromagnétisme | . 32 | |
| III.3.3 Le but de la théorie de micromagnétisme | 33 | |
| III.3.4 Hypothèses de la théorie de micromagnétisme | 33 | |
| III.3.5 Les paramètres micromagnétiques | 34 | |
| III.4 Comparaison des modèles atomistique et micromagnétique | . 34 | |
| III.5 Energie libre d'un système ferromagnétique | 35 | |
| III.6 Contributions à l'énergie libre d'un système ferromagnétique | . 36 | |
| III.6.1 L'énergie d'échange | . 36 | |
| III.6.2 L'énergie d'anisotropie magnéto-cristalline | 37 | |
| III.6.3 L'énergie Zeeman | 38 | |
| III.6.4 L'énergie magnétostatique | 39 | |
| III.6.5 La magnétostriction et l'énergie magnétoélastique | . 41 | |
| III.7 Energie totale d'un système ferromagnétique | . 42 | |
| III.8 Développement des équations micromagnétiques | 43 | |
| III.8.1 Les équations de Brown | 43 | |
| III.8.2 Equation de la dynamique d'aimantation | 44 | |
| Conclusion | 47 | |
| Bibliographie de chapitre III | | |

Introduction

L'évolution du magnétisme est marquée par le développement de plusieurs théories liées à des échelles différentes. Le concept de l'échelle est primordial en magnétisme, en conséquence, la théorie de micromagnétisme a été développée.

Dans un premier temps, nous présenterons les différentes échelles dont dépend la description du magnétisme. Ensuite, nous rappellerons les deux principales théories liées respectivement aux échelles atomique et macroscopique. En abordant la théorie du micromagnétisme, nous débuterons par une présentation de ces concepts, son but, ces hypothèses simplificatrices ainsi que les différents paramètres micromagnétiques. Nous envisagerons une simple comparaison des modèles atomistique et micromagnétique et nous décrierons les différentes énergies en compétition dans un système ferromagnétique. Nous nous intéresserons à l'établissement de l'équation de l'énergie totale et au développement des équations micromagnétiques.

III. 1 Le magnétisme et les échelles d'observation

Le comportement des matériaux ferromagnétiques peut être décrit par des théories liées aux différents échelles d'observation ci-dessous [Romain, 2010] [Maloberti, 2006].

III. 1.1 Echelle atomique

Au niveau atomique (Fig.III.1), l'origine des interactions mutuelles entre moments magnétiques élémentaires est décrite. Les propriétés telles que l'aimantation à saturation, la constante d'échange entre moments et la constante d'anisotropie sont alors définis.



Fig.III.1 Structure à l'échelle atomique

III. 1.2 Echelle nanoscopique

À cette échelle, les éléments de la matière sont vus comme des éléments de volumes, de l'ordre de quelques nanomètres. Ils contiennent un nombre conséquent

de moments magnétiques. La distribution spatiale de ces moments est uniforme dans un domaine magnétique ou rotationnel dans une paroi magnétique (Fig.III.2).



Fig.III.2 Structure à l'échelle nanoscopique

III.1.3 Echelle microscopique

À cette échelle, on peut observer ce qu'on appelle la structure magnétique caractéristique d'un matériau ferromagnétique. La structure se présente très souvent sous la forme de domaines et parois magnétiques (Fig.III.3).



Fig.III.3 Structure à l'échelle microscopique

III.1.4 Echelle mésoscopique

À cette échelle, les domaines et les parois sont traités d'une manière ensembliste. (Fig.III.4).



Fig.III.4 Structure à l'échelle mésoscopique

III.1.5 Echelle macroscopique

La dernière échelle d'observation correspond à la pièce ou à l'échantillon considéré. Nous n'avons plus accès qu'à son comportement moyenné (cycle d'hystérésis) (Fig.III.5).



Fig.III.5 Exemple d'une illustration du comportement à l'échelle macroscopique

III.2 Evolution de la théorie de magnétisme

III.2.1 Introduction

L'évolution de la théorie du magnétisme est marquée par le développement de deux principales théories liées à des échelles différentes.

III.2.2 Théorie de Maxwell

Maxwell synthétisa les efforts fournis en magnétisme avec les quatre équations suivantes

$$\nabla .D = \rho_{e}$$
(III.1)

$$\nabla \mathbf{B} = \mathbf{0} \tag{III.2}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial \mathbf{t}}$$
(III.3)

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_{e} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$
(III.4)

Ou E et D représentent respectivement le champ et l'induction électrique. H et B représentent respectivement le champ et l'induction magnétique. J_e et ρ_e représentent respectivement la densité du courant est la densité volumique des charges électriques. Ces équations constituent avec la loi de la force de Lorentz, la théorie classique d'électromagnétisme macroscopique [Spargo, 2002], [Pennec, 2003].

Cette théorie décrit les propriétés des matériaux par des lois constitutives utilisant des quantités macroscopiques moyennées en volume. Elle fournit les variations spatio-temporelles des champs électromagnétiques et des courants au sein d'une structure.

La théorie de Maxwell écarte toute description du processus d'aimantation sur une échelle microscopique [Marins, 2011].

III.2.3 Théorie quantique

La théorie quantique a été utilisée pour étudier les propriétés magnétiques des solides et leurs structures électroniques. A ce niveau, le spin de l'électron est vu comme une entité fondamentale de magnétisme dans les solides.

La physique quantique permet de définir l'aimantation des matériaux magnétiques et sa valeur théorique à partir d'une grandeur atomistique. Avec la théorie quantique, il est impossible de décrire la structure en domaines magnétiques.

III.3 Théorie de micromagnétisme

III.3.1 Naissance de la théorie de micromagnétisme

Les domaines de validité des deux théories ci-dessus empêchent donc la considération d'importants aspects comme la structure en domaines (description microscopique).

En effet, une modélisation du comportement des matériaux magnétiques sur une échelle intermédiaire s'avère plus que nécessaire. Un compromis d'ignorer la nature atomique de la matière et d'utiliser la physique classique dans un milieu continu est inévitable.

Dans ce contexte la théorie de micromagnétisme a été développée et a substitué celle des domaines magnétiques en 1963.

III.3.2 Les concepts de la théorie du micromagnétisme

En micromagnétisme, des variables continues [Fidler et al. 2000], [Brown, 1963] sont utilisées pour décrire des grandeurs thermodynamiques tels que l'aimantation, les champs internes et l'énergie du système. Ces variables continues sont d'un coté en accord avec la théorie de Maxwell, et d'un coté, cohérentes avec la description microscopique du ferromagnétisme.

Le principe de cette théorie est d'attribuer à chaque phénomène physique dans un matériau ferromagnétique une énergie

32

C'est une théorie construite comme la théorie des domaines sur le principe de minimisation de l'énergie totale.

III.3.3 Le but de la théorie de micromagnétisme

L'objectif de la théorie de micromagnétisme est de

- Déterminer la direction de l'aimantation et sa distribution
- Expliquer le comportement non linéaire des matériaux ferromagnétiques.
- Décrire la dynamique de l'aimantation des milieux ferromagnétiques et ferrimagnétiques.
- Expliquer le retournement et l'hystérésis dans les matériaux ferromagnétiques et ferrimagnétiques

III.3.4 Hypothèses de la théorie de micromagnétisme

La théorie de micromagnétisme est basée sur les hypothèses suivantes

 Le système est décrit par l'aimantation, M ,(Fig.III.6). qui est le moment magnétique moyenné sur un volume grand par rapport aux distances interatomiques



Fig.III.6 Aimantation moyennée sur un volume

- Les variations spatiales et temporelles de l'aimantation M(r,t)sont lentes par rapport à la position.
- Les grandeurs thermodynamiques utilisées pour décrire un système ferromagnétique telles que l'aimantation, le champ magnétique, H(r,t) et l'énergie libre de Gibbs sont des fonctions continues dans l'espace.

- L'aimantation est de norme constante et uniforme, sa valeur est égale à: $M(r,t) = M_s m(r,t)$ avec |m(r,t)| = 1
- L'activation thermique est négligée [Firastrau, 2004].

III.3.5 Les paramètre micromagnétiques

Les paramètres micromagnétiques sont des grandeurs importantes. Ils renseignent sur les ordres des grandeurs des différentes contributions énergétiques d'un système ferromagnétique. Ils permettent d'établir un lien entre les mécanismes se produisant à l'échelle de la maille atomique et des quantités plus générales permettant de donner une description macroscopique. Les principaux paramètres micromagnétiques [Hubert et al., 1998] sont

- La constante d'échange, A_{exch}
- Les constantes d'anisotropies, k_i
- L'aimantation à saturation , M_s

Ces paramètres figurent dans

 Le paramètre de l'épaisseur de la paroi entre domaines magnétiques défini par

$$\delta_0 = \sqrt{\frac{A_{exch}}{k_1}} \tag{III.5}$$

• La longueur d'échange définie par

$$l_{\text{exch}} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}}$$
(III.6)

Ces deux derniers paramètres caractérisent les échelles de longueur sur lesquelles l'aimantation change d'orientation.

III.4 Comparaison des modèles atomistique et micromagnétique

Selon les modèles atomistiques, la structure magnétique est représentée par un ensemble de moments magnétiques distribués d'une façon discrète sur un réseau régulier. (Fig.III. 7).



Fig.III.7 Structure magnétique selon un modèle atomistique

Cependant, selon le modèle micromagnétique, la structure magnétique est représentée par un champ de vecteurs d'aimantation continu (Fig.III .8).



Fig.III.8 Structure magnétique selon le modèle micromagnétique

En effet, la transition d'un modèle atomistique au modèle micromagnétique est caractérisée par une transition qualitative d'une représentation discrète à une représentation continue.

III.5 Energie libre d'un système ferromagnétique

L'énergie libre de Gibbs, G_s d'un système ferromagnétique est définie par

$$G_{s}(T, M(r)) = U(T, M(r)) - TS_{ent} - \mu_{o} \int M.H_{ext} dV$$
 (III.7)

Ou U est l'énergie interne du système, S _{ent} est l'entropie et T, la température [Tayade, 2014]. Selon Landau, l'énergie libre peut s'écrire de la manière suivante

$$G_{s}(0, M(r)) = U(0, M(r)) - \mu_{0} \int M.H_{ext} dV$$
 (III.8)

III.6 Contributions à l'énergie libre totale d'un système ferromagnétique.

Les principales énergies qui contribuent à l'énergie totale d'un système ferromagnétique peuvent être divisées en deux catégories [Popa, 2004].

Les énergies locales

Elles sont basées sur les densités d'énergies qui sont données seulement par les valeurs locales de la direction d'aimantation. Ces énergies locales se calculent avec une intégrale simple sur tout l'échantillon de la façon suivante

$$E_{loc} = \int f(m) dV$$
 (III.9)

Ou f(m) est la densité d'énergie qui dépend de l'aimantation.

Les énergies non locales.

Ces termes d'énergie contiennent un couple de vecteur d'aimantation qui dépend à chaque point de la direction de l'aimantation de tous les autres points. Ces énergies non locales se calculent avec une intégrale double

III.6.1 L'énergie d'échange

L'interaction d'échange entre les moments magnétiques est de nature quantique et à courte portée. Elle est le résultat du recouvrement des fonctions d'ondes électroniques des atomes du réseau et de l'application du principe de Pauli. Elle est responsable de l'ordre magnétique.

Selon Heisenberg, si s_i et s_i sont les spins (de l'atome i respectivement j) sont en interaction (Fig.III.9), l'énergie d'échange peut être formulée de la manière suivante

$$E_{exch} = -2J_{exch}S_iS_j\cos\varphi_{exch}$$

Ou J_{exch} est l'intégral d'échange et ϕ_{exch} est l'angle entre les directions des spins en interaction. r_{i,j} étant la distance entre les deux spins en interaction.

Fig.III.9 Représentation de deux spins adjacents en interaction



(III.10)

Selon l'approche continue (modèle micromagnétique), si m_i et m_j sont deux moments magnétiques en interaction, le vecteur de déplacement est défini de la façon suivante (Fig.III.10).

$$\mathbf{m}_{i} - \mathbf{m}_{i} = (\Delta \mathbf{r}_{ij} \cdot \nabla) \mathbf{m}$$
(III.11)



Fig.III.10 Représentation de deux moments magnétiques en interaction

Si la densité de l'énergie d'échange est exprimée par

$$\mathbf{e}_{\text{exch}} = \mathbf{A}_{\text{exch}} \left[(\nabla \mathbf{m}_{x})^{2} + (\nabla \mathbf{m}_{y})^{2} + (\nabla \mathbf{m}_{z})^{2} \right]$$
(III.12)

Alors, l'énergie d'échange prend la forme suivante

$$E_{\text{exch}} = \iiint A_{\text{exch}} \left\{ [\nabla m_x(r)]^2 + [\nabla m_y(r)]^2 + [\nabla m_z(r)]^2 \right\} dV = \iiint A_{\text{exch}} [\nabla m(r)]^2 dV$$
(III.13)

III.6.2 L'énergie d'anisotropie magnétocristalline

L'anisotropie magnétocristalline est une propriété intrinsèque d'un matériau. Elle trouve son origine dans le couplage spin-orbite. Elle permet l'orientation de l'aimantation suivant des axes de faciles aimantations. L'énergie d'anisotropie magnetocristalline est la différence d'énergie pour passer d'une direction de facile aimantation à une direction de difficile aimantation. La direction de la magnétisation.[Getzlaff, 2008] est définie par les cosinus directeurs α_i suivants(Fig.III.11).

 $\alpha_1 = \sin\theta \, \cos\phi$ $\alpha_2 = \sin\theta \, \sin\phi$ $\alpha_3 = \cos\theta$

 α_3 z M θ α_2 y x

Fig.III.11 Définition des cosinus directeurs

Pour un système cubique, l'énergie d'anisotropie magnetocristalline s'exprime comme suit

$$E_{anis} = K_0 + K_1 \left(\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_1^2 \alpha_3^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 \right) + K_2 \alpha_1^2 \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \dots$$
 (III.15)

Ou k_0 , K_1 et K_2 sont les constantes d'anisotropie magnetocristalline cubique. Lorsque l'anisotropie est uniaxiale, l'énergie d'anisotropie magnétocristalline peut s'écrire de la façon suivante

$$E_{anis} = K_u \sin^2 \theta$$
 (III.16)

Ou K_u est la constante d'anisotropie uniaxiale et θ est l'angle défini par l'axe de facile aimantation et la direction de l'aimantation.

III.6.3 L'énergie Zeeman

L'énergie Zeeman quantifie l'influence d'un champ externe H_{ext} sur l'aimantation (Fig.III.12). Lorsque ce champ est appliqué, l'aimantation tend à s'aligner suivant l'orientation de ce champ.



Fig.III.12 Représentation graphique de la notion de l'énergie Zeeman

38

(III.14)

L'écart entre l'orientation de l'aimantation M et du champ externe se traduit par une contribution à l'énergie libre du système donner par

$$E_{zeem} = -\mu_0 \iiint (M.H_{ext}) dV$$
(III.17)

III.6.4 L'énergie magnétostatique

Du point de vue magnétostatique, l'aimantation est équivalente soit à une distribution de charges magnétiques (de volumes ou de surfaces) (Fig.III.13), soit à une distribution de dipôles magnétiques.



Fig.III.13 Représentation d'un système ferromagnétique

Dans la figure ci-dessus, ρ_m et σ_m représentent respectivement la densité volumique et la densité surfacique des charges magnétiques. Quand un matériau est soumis à un champ externe, un champ dipolaire à l'intérieur est dirigé en sens inverse de l'aimantation, M, c'est le champ démagnétisant, H_{dem}. (Fig.III.14).



Fig.III.14 illustration du phénomène des pôles magnétiques engendrant le champ démagnétisant

Ce champ démagnétisant satisfait les relations suivantes

$$\nabla \times \mathbf{H}_{dem} = \mathbf{0} \tag{III.18}$$

 $\nabla . H_{dem} = -\nabla . M \tag{III.19}$

Selon l'approche coulombienne, $\,H_{_{dem}}\,$ dérive d'un potentiel scalaire $\,\phi_{_m}\,$ qui vérifie l'équation suivante

$$H_{dem} = -\nabla \phi_m$$
(III.20)

À l'intérieur du système ferromagnétique $\phi_{\scriptscriptstyle m}$ obéit à l'équation de poisson suivante

$$\Delta \phi_{m int} = -\rho_m \tag{III.21}$$

Ou

$$\rho_{\rm m} = -\nabla .M \tag{III.22}$$

Cependant, à l'extérieur, $\phi_{\rm m}$ obéit à l'équation de Laplace

$$\Delta \phi_{m_{ext}} = 0 \tag{III.23}$$

Selon la théorie des fonctions de Green, et en tenant compte des conditions du passage aux interfaces, le potentiel scalaire est donné par

$$\varphi_{\rm m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} - \iiint \frac{\rho_{\rm m}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{V}' + \frac{1}{4\pi} \oiint \frac{\sigma_{\rm m}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}_{\rm r}\mathbf{r}'|} d\mathbf{S}'$$
(III.24)

Alors que le champ démagnétisant peut être exprimé par

$$H_{dem}(r) = \frac{1}{4\pi} \iiint \rho_{m}(r') \frac{(r-r')}{|r-r'|^{3}} dV' + \frac{1}{4\pi} \oiint \sigma_{m}(r') \frac{(r-r')}{|r-r'|^{3}} dS'$$
(III.25)

La forme intégrale de l'énergie magnétostatique est donnée par

$$E_{dem} = -\frac{1}{2}\mu_0 \iiint (M.H_{dem}) dV$$
 (III.26)

En introduisant le potentiel scalaire cette dernière équation deviendra

$$E_{dem} = \frac{1}{2} \mu_0 \left(\iiint [\rho_m(r) \phi_m(r)] dV + \oiint [\sigma_m(r) \phi_m(r)] dS \right)$$
(III.27)

III.6.5 La magnétostriction et l'énergie magnétoélastique

Les effets magnétostrictifs subis par un cristal ont deux origines [Viana, 2010] [Sultan, 2000].

• La première origine

Si un cristal est magnétisé, il subit une dilatation élastique isotrope de forme. En effet, l'énergie d'anisotropie impose que les moments magnétiques des atomes soient alignés avec des axes de facile aimantation. Il s'ensuit une variation de volume de la maille élémentaire. Cet effet est caractérisé par un coefficient de magnétostriction en volume donné par

$$\lambda_0 = \frac{\partial \mathbf{V}}{\mathbf{V}}$$
(III.28).

• La deuxième origine

Sous l'effet du champ, H_{ext} , il apparaît une déformation de la maille dépendant de la direction du champ appliqué. On mesure cette déformation selon une direction γ par rapport au référentiel déformé défini par ses cosinus directeurs. La déformation relative selon la direction γ est définie par.

$$\lambda = \frac{\Delta l}{l} \tag{III.29}$$

Ou 1 est la longueur mesurée selon la direction lorsque l'échantillon n'est pas déformé et dl la variation de longueur relevée selon γ . Pour un cristal cubique, défini par les cosinus directeurs, β_1 , β_2 , β_3 relatives aux axes cristallographiques lorsqu'un un

changement de l'état désaimantée à l'état de saturation défini par les cosinus directeurs, $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ la magnétostriction à saturation peut s'écrire comme suit

$$\lambda_{s} = \frac{3}{2}\lambda_{100} \left(\alpha_{1}^{2}\beta_{1}^{2} + \alpha_{2}^{2}\beta_{2}^{2} + \alpha_{3}^{2}\beta_{3}^{2} - \frac{1}{3} \right) + 3\lambda_{111} \left(\alpha_{1}\alpha_{2}\beta_{1}\beta_{2} + \alpha_{2}\alpha_{3}\beta_{2}\beta_{3} + \alpha_{3}\alpha_{1}\beta_{3}\beta_{1} \right)$$
(III.30)

Ou λ_{100} et λ_{111} sont respectivement les constantes de magnétostriction à saturation mesurées suivant les directions <100> et <111>.

Lorsque les déformations ont lieu (spontanée par magnétostriction, ou imposé par une contrainte mécanique) des variations d'énergie libre apparaissent. Il convient d'introduire via un couplage magnétomécanique un terme énergétique qui exprime l'effet des déformations, ε_{ij} sur l'énergie d'anisotropie magnétocristalline. Ce terme est appelé énergie magnétoélastique, E_{mel} .

Pour un cristal de symétrie cubique, l'énergie magnétoélastique s'écrit

$$\mathbf{E}_{\text{mel}} = \mathbf{B}_1 \left(\alpha_1^2 \varepsilon_{11} + \alpha_2^2 \varepsilon_{22} + \alpha_3^2 \varepsilon_{33} \right) + \mathbf{B}_2 \left(\alpha_1 \alpha_2 \varepsilon_{12} + \alpha_1 \alpha_3 \varepsilon_{13} + \alpha_2 \alpha_3 \varepsilon_{12} \right)$$
(III.31)

ou α_i sont les cosinus directeurs de l'aimantation suivant les axes cristallographiques, et B_i son les constantes de couplages magnetoélastiques.

De même, si le cristal cubique est soumis à une contrainte mécanique, σ de cosinus directeurs, γ_1 , γ_2 , γ_3 suivant les axes cristallographiques, l'énergie magnetoélastique [Chikazumi, 1964] s'écrit comme suit

$$E_{\sigma} = -\frac{3}{2}\lambda_{100}\sigma(\alpha_1^2\gamma_1^2 + \alpha_2^2\gamma_2^2 + \alpha_3^2\gamma_3^2) - 3\lambda_{111}\sigma(\alpha_1\alpha_2\gamma_1\gamma_2 + \alpha_2\alpha_3\gamma_2\gamma_3 + \alpha_3\alpha_1\gamma_3\gamma_1)$$
(III.32)

III.7 Energie totale d'un système ferromagnétique

L'énergie totale d'un système ferromagnétique est donnée par

$$E_{tot} = E_{exch} + E_{anis} + E_{dem} + E_{zeem}$$
(III.33)

En plus de ces quatre termes d'énergie, d'autres contributions peuvent être ajoutées, telles que l'énergie magnétoélastique, E_{mel} et l'énergie thermique, E_{therm} .

III.8 Développement des équations micromagnétiques [Buda, 2001].

III.8.1 Les équations de Brown

L'équilibre d'un système ferromagnétique est obtenu lorsque l'énergie totale vérifiera la condition suivante

$$\delta E_{tot}[m] = 0 \tag{III.34}$$

Les variations correspondantes respectivement à chaque contribution à l'énergie totale sont données par

$$\delta E_{exch} = 2A_{exch} \left[\oint_{S} \delta m \cdot \frac{\partial m}{\partial n} dS - \iiint \delta m \cdot \Delta m dV \right]$$
(III.35)

$$\delta E_{anis} = -\mu_0 M_s \iiint \delta m(r) \left[\frac{2K_1(u_k.m)}{\mu_0 M_s} u_k \right] dV$$
(III.36)

$$\delta E_{zeem} = -\mu_0 M_s \iiint \delta m(r) H_{ext}(r) dV$$
(III.37)

$$\delta E_{dem} = -\mu_0 M_s \iiint \delta m(r) H_{dem}(r) dV$$
(III.38)

La variation de l'énergie totale peut donc être exprimée par

$$\delta E_{tot} = -\mu_0 M_s \iiint \delta m \left[\frac{2A_{exch}}{\mu_0 M_s} \Delta m + \frac{2K_1(u_k \cdot m)}{\mu_0 M_s} u_k + H_{ext} + H_{dem} \right] dV + 2A_{exch} \oiint \delta m \cdot \frac{\partial m}{\partial n} dS$$
(III.39)

Ou

 $\delta m = \delta \theta \times m \tag{III.40}$

et $\delta\theta$ est une rotation infinitésimale de l'aimantation. De plus on peut dériver le champ effectif total, H_{eff} de la façon suivante

$$H_{eff} = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\delta E_{tot}}{\delta m}$$
(III.41)

De même, ce champ est exprimé en fonction des différentes contributions dérivées respectivement à partir des énergies correspondantes comme suit

$$H_{eff} = \frac{2A_{exch}}{\mu_0 M_s} \Delta m + \frac{2K_1(u_k.m)}{\mu_0 M_s} u_k + H_{ext} + H_{dem}$$
(III.42)

La variation de l'énergie totale peut être donc écrite sous la forme suivante

$$\delta E_{tot} = -\mu_0 M_s \iiint (m \times H_{eff}) \delta \theta dV + 2A_{exch} \oint_{S} \left(m \times \frac{\partial m}{\partial n} \right) \delta \theta dS$$
(III.43)

A l'équilibre on a

$$m(r) \times H_{eff} = 0 \quad \forall r \in V$$
 (III.44)

et

 $\frac{\partial m}{\partial n} = 0 , \forall r \in s$ (III.45)

Ces deux dernières équations représentent les équations de Brown.

III.8.2 Equation de la dynamique d'aimantation

L'équation de la dynamique se présente sous les différentes formes ci-dessous

• Equation de Landau-Lifshitz sans dissipation

Selon la mécanique quantique [Keller, 2007] la relation entre le moment magnétique et le moment cinétique orbital, L est donnée par

$$m = -\gamma_e L \tag{III.46}$$

De plus, la relation entre le taux de variation de moment cinétique au couple exercé par un champ, H est donnée par

$$\frac{dL}{dt} = \mu_0 m \times H$$
 (III.47)

En utilisant l'équation (III.46) et en substitue, L dans l'équation (III.47), cette dernière deviendra

$$\frac{dm}{dt} = -\mu_0 \gamma_e m \times H$$
(III.48)

L'équation (III.48) est valable pour chaque moment magnétique, $\,m_{j}\,$ dans un volume élémentaire, Δv , on pourra donc écrire

$$\frac{\mathrm{dm}_{\mathrm{j}}}{\mathrm{dt}} = -\gamma \mathrm{m}_{\mathrm{j}} \times \mathrm{H} \tag{III.49}$$

En moyennant les deux parties de l'équation précédente on a

$$\frac{1}{\Delta V} \frac{d\sum_{j} m_{j}}{dt} = -\gamma \frac{\sum_{j} m_{j}}{\Delta V} \times H$$
(III.50)

(111.51)

De la définition du vecteur d'aimantation on peut écrire

$$\frac{dM}{dt} = -\gamma M \times H$$

Cette équation est appelé équation de Landau-Lifshitz sans amortissement. Elle décrit la précession de l'aimantation, M autour d'un champ magnétique (Fig.III.15).

Précession

imantation



l'aimantation autour du champ magnétique

Champ magnétique

• Equation de Landau-Lifshitz avec dissipation

L'équation (III.51) ne peut pas expliquer le changement de l'inclinaison de l'aimantation par rapport au champ. Pour corriger cet aspect, Landau et Lifshitz ont introduit un terme dissipatif, $R_{LL}(M, H_{eff})$ [Landau et al. 1935] d'une manière phénoménologique de la manière suivante.

$$\frac{dM}{dt} = -\gamma_{L}M \times H_{eff} + R_{LL}(M, H_{eff})$$
(III.52)

Ou

$$R_{LL}(M, H_{eff}) = -\frac{\lambda_L}{M_s} M \times (M \times H_{eff})$$
(III.53)

 $\lambda_{_{\rm L}}$ étant le coefficient de dissipation, la dynamique de l'aimantation est donc décrite par l'équation suivante

$$\frac{dM}{dt} = -\gamma_{L} \left(M \times H_{eff} \right) - \frac{\lambda_{L}}{M_{s}} M \times \left(M \times H_{eff} \right)$$
(III.54)

• Equation de Gilbert

Gilbert [Gilbert, 1955] a proposé un nouveau terme de relaxation, $R_{G}(M, H_{eff})$ donné par

$$R_{G}(M, H_{eff}) = \frac{\alpha_{G}}{M_{s}} M \times \frac{dM}{dt}$$
(III.55)

L'équation de la dynamique de l'aimantation prendra donc la forme suivante

$$\frac{dM}{dt} = -\gamma_{G} \left(M \times H_{eff} \right) + \frac{\alpha}{M_{s}} \left(M \times \frac{\partial M}{\partial t} \right)$$
(III.56)

Ou α représente le coefficient d'amortissement (sans dimension). (Fig.III.16) illustre les différents couples figurant dans l'équation de Gilbert.



Fig.III.16 illustration des différentes couples figurant dans l'équation de Gilbert. a) Sans amortissement. b) Avec amortissement

• Equation de Landau-Lifshitz-Gilbert

La forme implicite de l'équation (III.56) est transformée en une forme explicite comparable à celle de l'équation (III.54) en utilisant l'identité de Grassmann qui nous permet d'écrire

$$M \times \frac{dM}{dt} = -\gamma M \times \left(M \times H_{eff}\right) - \alpha M_{s} \frac{dM}{dt}$$
(III.57)

Cette dernière relation nous permet la formulation d'une équation équivalente à celle de (III.56). Elle est appelée équation de Landau-Lifshitz-Gilbert et donnée par

$$\frac{dM}{dt} = -\frac{\gamma}{1+\alpha^2} \left(M \times H_{eff} \right) - \frac{\alpha \gamma}{\left(1+\alpha^2 \right) M_s} M \times \left(M \times H_{eff} \right)$$
(III.58)

(Fig.III.17) illustre les différents couples figurant dans l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert.



Fig.III.17 illustration des différentes couples figurant dans l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert avec et sans amortissement

Pour introduire les effets thermiques, Brown a proposé l'idée d'ajouter le champ thermique aux autres contributions standards du champ effectif. L'équation de la dynamique s'écrira donc sous sa forme stochastique [Brown, 1963b].

Conclusion

Nous avons présenté d'abord les différentes échelles dont dépend l'étude de magnétisme. Nous avons aussi présenté l'évolution de magnétisme marqué par le développement des théories de Maxwell et quantique. Par nécessité, la théorie de micromagnétisme a été développée. Une comparaison des modèle atomistique et micromagnétique a été effectuée. Nous avons décrit les différentes énergies et interactions en compétition dans un système ferromagnétique. L'équation de l'énergie totale libre menant à la formulation des équations de Brown a été établit. De même les différentes formes de l'équation de la dynamique d'aimantation ont été développées.

Le caractère des équations micromagnétiques exige souvent le recours aux méthodes numériques pour une éventuelle solution. Le chapitre suivant sera l'objet donc d'une description méthodologique de calcul numérique micromagnétique.

Bibliographie du chapitre III

[Romain, 2010] M.Romain, Contribution à la modélisation de magnétisme statique et dynamique pour le génie électrique, thèse, université Claude Bernard Lyon1, pp .17-19,2010 [Maloberti, 2006] O.Maloberti, Contribution à la modélisation de la dynamique d'aimantation dans les matériaux magnétique doux: caractérisation et simulation, thèse, INP de Grenoble, pp.74-76,2006

[Pennec, 2003] Y.Pennec, Dynamique de l'aimantation: d'un film simple aux systèmes couplés, thèse, université Joseph Fourier, Grenoble I, pp.39-40, 2003

[Spargo, 2002] A.W.Spargo, Finite element analysis of magnetization reversal in granular thin films, thesis, university of Wales, Bangor, pp.22-26, 2002

[Marins,2011] M.Marins De Castro Souza, Commutation précessionnelle de mémoire magnétique avec polarisateur à anisotropie perpendiculaire, thèse, Grenoble INP,pp.13-14,2011

[Fidler et al., 2000] J.Fidler,T.Schrefl, Micromagnetic modeling-the current state of the art, J.Phys.D:Appl.Phys.33, pp.135-156, 2000

[Brown, 1963] W.F.Brown, Micromagnetics, Wiley Interscience, New york, 1963

[Firastrau,2004] I.Firastrau, Développement d'un environnement de modélisation micromagnétique couplage macroscopique-microscopique, thèse, INPG, pp.49-54,2004

[Hubert et al., 1998] A.Hubert, R.Schäfer, Magnetic domains, the analysis of magnetic microstructures, Springer, 1998

[Tayade, 2014] R.Tayade, Theoretical and experimental contribution to the study of exchange spring magnets, thesis, pp.83-84, 2014

[POPA, 2004] A.P.POPA, Elaboration et caractérisation de nanostructures magnétiques, thèse, université J.Fourier Grenoble, pp.10-11,2004

[Getzlaff, 2008] M.Getzlaff, Fundamentals of Magnetism, Springer verlag Berlin Heidelberg, New york, 2008.

[Viana ,2010] A.Viana, Etude de la magnetoélasticité en champ magnétique faible et contraintes mécaniques fortes, thèse, université de Grenoble, pp.20-24,2010.

[Sultan,2002] M.Sultan, Approche du bruit magnétomécanique, application au suivi de la fatigue en flexion rotative, thèse, INSA de Lyon, pp.29-30,2002

[Chikazumi, 1964] S.Chikazumi, Physics of magnetism, J. Willey and sons, p.161, 1964

[Buda, 2001] L.D.Buda, Développement d'un code de calcul micromagnétique 2D et 3D : application à des systèmes réels de types Films, plots et fils, thèse université Louis Pasteur de Strasburg, pp.12-16, 2001.

[Keller, 2007] M.Keller, Gilbert damping and noise in magnetic GMR multilayer, thesis, university of Antwerpen, pp.9-10, 2007

[Landau et al., 1935] L.Landau, E.Lifshitz, On the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies, phys. Z. soviet union, vol.8, pp.153-169, 1935.

[Gilbert,1955] T.L.Gilbert, A lagrangian formulation of gyromagnetic equation of magnetization field, Phys.rev. vol.100, p1243, 1955

48

CHAPITRE IV METHODOLOGIE DE CALCUL NUMERIQUE MICROMAGNÉTIQUE

| Introduction | 50 |
|--|----|
| IV.1 Les caractères des équations micromagnétiques | 50 |
| IV.2 Solution analytique des équations micromagnétiques | 50 |
| IV.3 Le calcul numérique micromagnétique | 50 |
| IV.4 La méthode statique | 51 |
| IV.4.1 Introduction | 51 |
| IV.4.2 Choix de la méthode de minimisation | 51 |
| IV.4.2.1 Les algorithmes déterministes | 51 |
| IV.4.2.2 Les algorithmes stochastiques | 52 |
| IV.5 La méthode dynamique | 52 |
| IV.5.1 Choix du système de coordonnées | 53 |
| IV.5.2 Evaluation de champ effectif | 53 |
| IV.5.2.1 Contributions au champ effectif en coordonnées | |
| Cartésiennes | 53 |
| IV.5.2.1.1 Contribution de champ extérieur | 53 |
| IV.5.2.1.2 Contribution de champ d'anisotropie | |
| magnétocristalline | 53 |
| IV.5.2.1.3 Contribution de champ d'échange | 54 |
| IV.5.2.1.4 Contribution de champ démagnétisant | 55 |
| IV.5.2.1.5 Contribution de champ thermique | 56 |
| IV.5.2.2 Contributions au champ effectif en coordonnées sphériques | 57 |
| IV.5.2.2.1 Contribution de champ extérieur | 57 |
| IV.5.2.2.2 Contribution de champ d'anisotropie | |
| magnétocristalline | 58 |
| IV.5.2.2.3 Contribution de champ d'échange | 58 |
| IV.5.2.2.4 Contributions des champs thermique et | |
| démagnétisant | 59 |
| IV.5.3 Solution de l'équation de la dynamique de l'aimantation | 59 |
| IV.5.4 Choix du schéma d'intégration temporelle et critère d'arrêt | 60 |
| IV.5.5 Organigramme de calcul numérique micromagnétique | 62 |
| Conclusion | 62 |
| Bibliographie de chapitre IV | |

Introduction

Les équations micromagnétiques ont des caractères complexes. En effet, le recours aux traitements numériques pour leurs solutions est inévitable.

Nous rappellerons d'abord ces caractères et nous citerons certains cas ou une solution analytique est possible. Nous présenterons les méthodes employées en calcul numérique micromagnétique et nous rappellerons les algorithmes et les méthodes utilisées en minimisation. Nous décrierons les étapes de la solution des équations de Gilbert et (LLG). Dans ce contexte, nous intéresserons d'abord à l'évaluation des différentes contributions au champ effectif selon le choix du système des coordonnées. Ensuite, nous donnerons un aperçu sur les schémas d'intégrations temporelles de ces équations. En fin, nous élaborerons un organigramme simple pour le calcul numérique micromagnétique.

IV.1 Les caractères des équations micromagnétiques

Les équations micromagnétiques sont des équations couplées non linéaires et non locales. En effet, les matériaux ferromagnétiques ont des comportements complexes. Leurs états d'équilibre et l'évolution spatio-temporelle de l'aimantation ne peuvent être obtenus que par des calculs numériques [Firastrau, 2004].

IV.2 Solution analytique des équations micromagnétiques

La solution analytique des équations micromagnétiques est rarement possible sauf dans certains cas simples. On peut citer

- Le modèle statique de Stoner et Wohlfarth [Stoner et al., 1948]
- La nucléation des domaines dans des cylindres infinis ou dans des sphères [Brown, 1957] et [Aharoni, 1963]
- La résonance ferromagnétique [Ramesh et al., 1988].

IV.3 Le calcul numérique micromagnétique

Le calcul numérique mène à la discrétisation spatiale du système ferromagnétique. Cette discrétisation est fondée sur deux approches

• L'approche de la méthode des éléments finis

Cette approche est valable pour un maillage quelconque.

• L'approche des différences finis

Cette approche suppose un maillage régulier du système en des unités de bases de surfaces (2D), (Fig.IV.1(a)) ou de volumes (3D), (Fig.IV.1(b)). h_x , h_y et h_z , désignent les pas de discrétisations spatiales respectivement suivant les axes x, y et z.



Fig.IV.1 Exemple de schéma de discrétisation d'un système, a) 2D, b) 3D

En calcul numérique micromagnétique, deux méthodes sont employées

- La méthode statique
- La méthode dynamique

IV.4 La méthode statique

IV.4.1 Introduction

Elle est employée pour déterminer la distribution de l'aimantation d'équilibre d'un système ferromagnétique. Cela revient, soit à la résolution des équations de Brown ou chaque moment est soumis à l'action d'un couple interne qui est nul à l'équilibre statique [Lopez, 1999], soit à la minimisation de l'énergie totale du système [Brown et al. 1965] ,[Labonte, 1969].

IV.4.2 Choix de la méthode de minimisation

Pour choisir la méthode de minimisation, il faut prendre en compte les critères suivants [Berkov et al. 1993], [Berkov et al. 2005], [Liu et al. 2006]

- Les caractéristiques du problème micromagnétique.
- Le nombre des variables indépendantes.
- Le calcul du gradient d'énergie(le champ effectif)

En minimisation, différentes algorithmes sont utilisés.

IV.4.2.1 Les algorithmes déterministes

Ces algorithmes cherchent le plus proche minimum local d'énergie. Plusieurs méthodes sont employées.

• Méthode statique itérative

Selon cette méthode, le vecteur d'aimantation de chaque subdivision est tourné graduellement à la direction de champ effectif en cette position. Ce processus de

faire tourner les vecteurs d'aimantation dans chaque cellule se suit jusqu' à ce que l'angle maximal soit inferieur à une tolérance imposée.

• La méthode de descente de gradient

Elle est connue par sa convergence lente. Due à son caractère de performer plusieurs petite pas d'itérations, cette méthode est peu utilisée en micromagnétisme.

La méthode de gradient conjugué

La méthode de gradient conjugué peut être utilisée en minimisation. Cependant, elle présente des inconvénients lorsqu'elle est appliquée aux problèmes micromagnétiques. Avant de l'implémenter, il faut passer à la conversion des coordonnées cartésiennes en coordonnées sphériques. Réécrire les formules correspondantes de champ effectif et l'évaluation de l'énergie, car, il faut que durant le processus de magnétisation, les composantes du moment magnétique obéirent à la condition suivante

$$M_x^2 + M_y^2 + M_z^2 = C^{te}$$
 (IV.1)

IV.4.2.2 Les algorithmes stochastiques

Ces algorithmes cherchent le minimum global qui est unique pour le système étudié et qui ne dépend pas de l'état initial mais ils sont lents. Parmi ces méthodes employées, on peut citer

La méthode de Monte Carlo

La méthode Monte Carlo est une technique de minimisation utilisée dans plusieurs domaines de la physique statistique. Selon cette méthode, le système atteint son minimum d'énergie suivant l'algorithme de Metropolis [Fukuma et al., 1997] et [Maitre,2012].

La méthode du recuit simulé

C'est une méthode utilisée pour trouver les configurations d'énergie minimale en employant des processus aléatoires.

IV.5 La méthode dynamique

Cette méthode est basée sur la solution de l'équation de la dynamique de l'aimantation. L'idée de base est de construire une procédure de relaxation. Plusieurs étapes doivent être suivies lors de la recherche de cette solution

IV.5.1 Choix du système de coordonnées

Le choix du système de coordonnées est important lors de la résolution de l'équation de la dynamique de l'aimantation.

- En coordonnées cartésiennes, l'amplitude de vecteur de magnétisation dans une cellule change et ils y a trois dégrées de libertés.
- En coordonnées sphériques, (Fig.IV.2), ils n'y a que deux degrés de liberté.



Fig.IV.2 Représentation d'un système en coordonnées sphériques qui définit l'orientation de l'aimantation, M dans un repère cartésien

IV.5.2 Evaluation de champ effectif

Le champ effectif total, H_{eff} comprend quatre termes standards. Ils sont dérivés respectivement des énergies correspondantes et évalués selon le choix du système de coordonnées

IV.5.2.1Contributions au champ effectif en coordonnées cartésiennes [Buda,2001] IV.5.2.1.1 Contribution de champ extérieur

L'expression discrète de l'énergie Zeeman d'un système est définie par

$$E_{zeem} = -\mu_0 V_{cel} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} M_s.m.H_{ext}$$
(IV.2)

Ou V_{cel} est le volume d'une cellule. N_x, N_y et N_z sont les nombres des cellules respectivement suivant les axes x ,y et z. La contribution au champ effectif est le champ extérieur , H_{ext} qui peut être variable dans le temps et dans l'espace.

IV.5.2.1.2 Contribution de champ d'anisotropie magnetocristalline

Dans les matériaux uniaxes, l'énergie d'anisotropie magnetocrstalline prend la forme discrète suivante

$$E_{anis} = -\mu_0 V_{cel} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} K_u \left\{ l - [m.u_k]^2 \right\}$$
(IV.3)

L'expression de champ d'anisotropie magnetocristalline prend la forme suivante

$$H_{anis} = \frac{2K_u}{\mu_0 M_s} [m.u_k] u_k$$
(IV.4)

Ou u_k est la direction de l'axe de l'anisotropie.

IV.5.2.1.3 Contribution de champ d'échange

L'énergie d'échange est donnée par

$$E_{exch} = V_{cel} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} A_{exch} \left\{ \sum_{vpx} \frac{1 - m \cdot m_{vpx}}{h_x^2} + \sum_{vpy} \frac{1 - m \cdot m_{vpy}}{h_y^2} + \sum_{vpz} \frac{1 - m \cdot m_{vpz}}{h_z^2} \right\}$$
(IV.5)

Ou vpx, vpy et vpz désigne respectivement les voisins proches de chaque moment magnétiques respectivement dans la direction x, y et z. (Fig.IV.3) montre les six proches voisins du moment magnétique, m (i,j,k).



Fig.IV.3 Représentation des six moments proches voisins du moment m(i.i.k)

Le champ d'échange est donc défini par

$$H_{exch} = \frac{2A_{exch}}{\mu_0 M_s} \left[\frac{\sum_{vpx} m_{vpx} - 2m}{h_x^2} + \frac{\sum_{vpy} m_{vpy} - 2m}{h_y^2} + \frac{\sum_{vpz} m_{vpz} - 2m}{h_z^2} \right]$$
(IV.6)

L'équation (III.45) nous permet de résoudre le problème qui se pose aux interfaces. Une unité de maillage supplémentaire est introduite de la manière suivante
$$m(0, j, k) = m(2, j, k).$$
 (IV.7)

De même, si le système ferromagnétique est périodique selon une certaine direction, la condition suivante doit être vérifiée

$$m(i + N_x, j, k) = m(i, j, k) \quad \forall i \in z$$
(IV.8)

Une cellule est ajoutée, le voisin à gauche sera défini comme suit

$$m(0, j, k) = m(N_x, j, k)$$
 (IV.9)

IV.5.2.1.4 Contribution de champ démagnétisant

Ils existent deux catégories de méthodes pour le calcul de champ démagnétisant.

- Les méthodes intégrales
- Les méthodes du potentiel.

Dans cette thèse, on se limite à la description d'une des méthodes intégrales: la méthode du tenseur démagnétisant connue aussi sous le non de l'approximation dipolaire [Nakatani et al. 1989]. Selon cette approximation, la valeur de champ démagnétisant au centre de chaque cellule est considérée comme la valeur moyenne sur la cellule entière. En effet, le champ démagnétisant, H_{dem} à l'endroit, r crée par un moment dipolaire, M_d situé à l'endroit, r' est donné par

$$H_{dem}(r) = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{M_{d}(r')}{|r-r'|^{3}} - 3 \left[\frac{M_{d}(r')(r-r')}{|r-r'|^{5}} \right] (r-r') \right)$$
(IV.10)

Il est possible de définir le champ démagnétisant comme étant la convolution d'un tenseur est d'une matrice d'aimantation de la façon suivante

$$H_{dem}(r) = T(r - r') * M(r')$$
 (IV.11)

Ou T(r-r') est le tenseur démagnétisant et, (*) représente le produit de convolution. Le développement des composantes de la diagonal du tenseur démagnétisant s'écrit comme suit

$$T_{xx}(i-i',j-j',k-k') = \frac{1}{4\pi} \int_{i'h_x}^{(i'+1)h_x} dx' \int_{j'h_y}^{(j'+1)h_y} dy' \int_{k'h_z}^{(k'+1)h_z} dz' \frac{1}{|r-r'|^3} \left[1 - 3\left(\frac{x-x'}{|r-r'|}\right) \right]$$
(IV.12)

Et pour le terme mixte, il peut s'écrire

$$T_{xy}(i-i', j-j', k-k') = \frac{1}{4\pi} \int_{i'h_x}^{(i'+1)h_x} dx' \int_{j'h_y}^{(j'+1)h_y} dy' \int_{k'h_z}^{(k'+1)h_z} dz' \frac{3(x-x')(y-y')}{|r-r'|^5}$$
(IV.13)

L'évaluation des intégrales de volumes conduit aux différents termes du tenseur. Pour le terme de la diagonal, il est donnée par

$$T_{xx}(I, J, K) = -\frac{1}{4\pi} \sum_{a=0}^{1} \sum_{b=0}^{1} \sum_{c=0}^{1} (-1)^{a+b+c} \arctan \left| \frac{(K+c-0.5)hz(J+b-0.5)hy}{r(I+a-0.5)hx} \right|$$
(IV.14)

Pour le terme mixte, il s'exprime comme suit

$$T_{xy}(I, J, K) = \frac{1}{4\pi} \sum_{a=0}^{1} \sum_{b=0}^{1} \sum_{c=0}^{1} (-1)^{a+b+c} Ln | (K+c-0.5)hz + r |$$
 (IV.15)

Ou r est donné par

$$r = \sqrt{\left[(I + a - 0.5)h_x \right]^2 + \left[(J + b - 0.5)h_y \right]^2 + \left[(K + c - 0.5)h_z \right]^2}$$
(IV.16)

et a, b et c sont des constantes. I,J et K sont les indices des cellules. Les autres termes mixtes et diagonaux sont trouvés par la permutation circulaire de I,J et K et h_x , h_y et h_z selon les axes x, y et z. Le champ démagnétisant peut être évalué de la façon suivante

$$H_{dem} = TF^{-1} (TF(T(r-r')).TF(M(r')))$$
(IV.17)

Ou TF et TF^{-1} désignent les transformés de fourrier directe et inverse.

IV.5.2.1.5 Contribution de champ thermique

La dynamique de l'aimantation n'est pas purement déterministe. Le vecteur d'aimantation oscille à cause des fluctuations thermiques qui sont d'un ordre de grandeur plus rapide que le mouvement dynamique micromagnétique. En effet, on ajoute un champ magnétique thermique stochastique, H_{therm} [Brown, 1963] qui peut s'écrire sous la forme suivante.

$$H_{therm} = G_{\sqrt{\frac{2\alpha k_{b}T}{\gamma M_{s} V_{cel} \delta t}}}$$
(IV.18)

Ou G est un vecteur tridimensionnel dont les éléments de ces composantes sont générés par un générateur des nombres aléatoires. k_b étant la constante de boltzmann.

IV.5.2.2 Contributions au champ effectif en coordonnées sphériques

Une rotation du vecteur d'aimantation définie par le couple des variations des angles polaire et azimuthal ($\Delta \theta, \Delta \phi$) [Mansuripur, 1995], [Ballentine, 2002] conduit à une variation de l'énergie totale qui peut s'écrire

$$\Delta E_{tot} = -H \Delta M = -M_s H_{eff\theta} \Delta \theta - M_s H_{eff\phi} \sin \theta \Delta \phi$$
 (IV.19)

En se servant de la définition de champ effectif, on pourra dériver les expressions de ces composantes polaire et azimutal de la manière suivante

$$H_{eff\theta} = -\frac{1}{M_s} \frac{\partial E_{tot}}{\partial \theta}$$
(IV.20)

$$H_{eff\phi} = -\frac{1}{M_{s} \sin\theta} \frac{\partial E_{tot}}{\partial \phi}$$
(IV.21)

IV.5.2.2.1 Contribution de champ extérieur

En utilisant les formules de conversion des coordonnées cartésiennes en coordonnées sphériques, les composantes de champ extérieur peuvent êtres exprimées par

$$H_{eff \,\theta ext} = H_{effx} \cos \theta \cos \varphi + H_{effy} \cos \theta \sin \varphi - H_{effz} \sin \theta$$
 (IV.22)

$$H_{eff \phi ext} = -H_{effx} \sin \phi + H_{effy} \cos \phi$$
 (IV.23)

IV.5.2.2.2 Contribution de champ d'anisotropie magnetocristalline

Soit une cellule , (i,j) qui a une aimantation définie par

$$M = M_{ij}u_r$$
 (IV.24)

Ou $M_{ij} = M_s$ et u_r est la direction de l'aimantation dans cette cellule. Si l'axe local de l'anisotropie a une direction arbitraire, u_0 dans l'espace et spécifié en coordonnées sphériques par le couple des angles, (θ_0, ϕ_0) , la densité d'énergie d'anisotropie magnetocristalline uniaxiale sera exprimée par

$$e_{anis} = K_u \left[1 - (u_r . u_0)^2 \right]$$
 (IV.25)

Dans ce cas, les composantes de champ d'anisotropie sont données par

$$H_{eff \,\theta anis} = -\frac{K_u}{M_s} \left\{ \sin 2\theta \left[\cos^2 \theta_0 - \sin^2 \theta_0 \cos^2 \left(\phi - \phi_0 \right) \right] - \cos 2\theta \sin 2\theta_0 \cos \left(\phi - \phi_0 \right) \right\}$$
(IV.26)

$$H_{eff \phi anis} = -\frac{K_u}{M_s} \left[\sin \theta \sin^2 \theta_0 \sin^2 (\phi - \phi_0) + \cos \theta \sin^2 \theta_0 \sin^2 (\phi - \phi_0) \right]$$
(IV.27)

IV.5.2.2.3 Contribution de champ d'échange

Si M et M_1 sont deux proches voisins en interaction et séparés par une distance, d, la densité d'énergie d'échange peut être donnée par

$$\mathbf{e}_{\text{exch}} = \frac{2\mathbf{A}_{\text{exch}}}{d^2} \left(1 - \frac{\mathbf{M}}{|\mathbf{M}_{\text{s}}|} \cdot \frac{\mathbf{M}_{1}}{|\mathbf{M}_{\text{s}}|} \right)$$
(IV.28)

En coordonnées sphériques, elle prendra la forme suivante

$$e_{exch} = \frac{2A}{d^2} \left[1 - \cos\theta \cos\theta_1 - \sin\theta \sin\theta_1 \cos(\phi - \phi_1) \right]$$
(IV.29)

Les composantes de champ effectif d'échange résultantes de l'interaction de M avec M_1 se réduisent à

$$H_{eff \,\theta exch} = -\frac{2A}{M_{s}d^{2}} \left[\sin \theta \cos \theta_{1} - \cos \theta \sin \theta_{1} \cos (\varphi - \varphi_{1}) \right]$$
(IV.30)

peut écrire

$$H_{eff \phi exch} = -\frac{2A}{M_{s}d^{2}} \sin \theta_{1} \sin (\phi - \phi_{1})$$
(IV.31)

IV.5.2.2.4 Contributions des champs thermique et démagnétisant

Les contributions des champs thermique et démagnétisant seront calculées d'abord en coordonnées cartésiennes puis doivent subir une conversion en coordonnées sphériques.

IV.5.3 Solution de l'équation de la dynamique de l'aimantation

Nous commençons par l'équation de Gilbert qui sous sa forme réduite elle est donnée par

$$\frac{dm}{d\tau} = -m \times h_{eff} + \alpha m \times \frac{dm}{d\tau}$$
(IV.32)
ou $h_{eff} = \frac{H_{eff}}{M_s}, m = \frac{M}{M_s}$, $d\tau = dt\gamma M_s$ représentent respectivement les formes
réduites de champ effectif, de l'aimantation et du pas d'intégration temporelle. Selon
l'hypothèse de conservation de l'amplitude de l'aimantation [Albuquerque, 2002], on

$$dm = d\theta e_{\theta} + \sin \theta d\phi e_{\phi}$$
 (IV.33)

Le calcul des deux quantités de la partie droite de l'équation(III.32) permet d'écrire la relation suivante

$$\frac{d\theta}{d\tau}e_{\theta} + \sin\theta\frac{d\phi}{d\tau}e_{\phi} = h_{eff\phi}e_{\phi} - h_{eff\theta}e_{\phi} + \alpha\left(-\sin\theta\frac{d\phi}{d\tau}e_{\theta} + \frac{d\theta}{d\tau}e_{\phi}\right)$$
(IV.34)

Ou $h_{eff \theta}$ et $h_{eff \phi}$ sont respectivement les composantes réduites des composantes polaire et azimutal de champ effectif. Cette dernière relation nous permet de formuler le système d'équations utilisé en simulation suivant

$$\frac{d\theta}{d\tau} = \alpha h_{eff\theta} + h_{eff\phi}$$
(IV.35)

$$\frac{d\phi}{d\tau} = \frac{1}{\sin\theta} \left(-h_{eff\theta} + \alpha h_{eff\phi} \right)$$
(IV.36)

Les coordonnées cartésiennes sont souhaitables dans le cas de l'équation (LLG). Le développement nous mène au système d'équations couplées suivant

$$\frac{\mathrm{d}m_{x}}{\mathrm{d}\tau} = -\frac{1}{1+\alpha^{2}} \left[\left(m_{y} h_{effz} - m_{z} h_{effy} \right) + \alpha m_{y} \left(m_{x} h_{effy} - m_{y} h_{effx} \right) - \alpha m_{z} \left(m_{z} h_{effx} - m_{x} h_{effz} \right) \right]$$
(IV.37)

$$\frac{\mathrm{d}m_{y}}{\mathrm{d}\tau} = -\frac{1}{1+\alpha^{2}} \left[\left(m_{z}h_{effx} - m_{x}h_{effz} \right) + \alpha m_{z} \left(m_{y}h_{effz} - m_{z}h_{effy} \right) - \alpha m_{x} \left(m_{x}h_{effy} - m_{y}h_{effx} \right) \right]$$
(IV.38)

$$\frac{\mathrm{d}m_{z}}{\mathrm{d}\tau} = -\frac{1}{1+\alpha^{2}} \left[\left(m_{x}h_{effy} - m_{y}h_{effx} \right) + \alpha m_{x} \left(m_{z}h_{effx} - m_{x}h_{effz} \right) - \alpha m_{y} \left(m_{y}h_{effz} - m_{z}h_{effy} \right) \right]$$
(IV.39)
Ou

- h_{effx}, h_{effy} et h_{effz} sont respectivement les composantes réduites des composantes de champ effectif suivant les axes x, y et z
- m_x, m_y et m_z sont respectivement les composantes réduites des composantes de l'aimantation suivant les axes x, y et z.

IV.5.4 Choix de schéma d'intégration temporelle et critère d'arrêt

L'intégration temporelle de l'équation de la dynamique de l'aimantation nous conduit à utiliser une procédure qui à partir d'une condition initial définie par

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}_{i}, \mathbf{t} = 0) = \mathbf{M}_{\text{initiale}}(\mathbf{r}_{i})$$
(IV.40)

Et une équation différentielle donnée par

$$\frac{\partial M(r_i, t)}{\partial t} = f(t, M(r_i, t))$$
(IV.41)

Une succession des paires (t_n, M_n) qui approximent la solution de l'équation sont calculées. La méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 est l'une des méthodes les plus utilisées pour résoudre les problèmes micromagnétiques. A chaque pas d'intégration temporelle on peut écrire

$$M(t + \partial t) = M(t) + \frac{K_1}{6} + \frac{K_2}{3} + \frac{K_3}{3} + \frac{K_4}{6}$$
 (IV.42)

Pour améliorer la qualité de cette méthode , un algorithme à pas temporel variable a été développé [Romeo et al.,2008] selon un algorithme qui utilise six évaluations et deux approximations exprimées comme suit

$$M_{n+1} = M_n + c_1 K_1 + c_2 K_2 + c_3 K_3 + c_4 K_4 + c_5 K_5 + c_6 K_6$$
 (IV.43)

$$M_{n+1}^{*} = M_{n} + c_{1}'K_{1} + c_{2}'K_{2} + c_{3}'K_{3} + c_{4}'K_{4} + c_{5}'K_{5} + c_{6}'K_{6}$$
(IV.44)

Ou les constantes c_i et c_i sont ceux donnés par Cash-Karp.

La différence entre les deux approximations est utilisée comme une estimation de l'erreur. Cette dernière est utilisée pour adapter la taille du pas temporel. Elle est exprimée par

$$e_{n+1} = M_{n+1} - M_{n+1}^* = \sum_{i=1}^{6} (c_i - c'_i) K_i$$
 (IV.45)

L'adaptation du pas peut être réalisée de la façon suivante. Soit e_0 , la tolérance désirée. Si on prendra un pas $(\delta t)_1$ et on obtiendra une erreur, e_1 . Dans le cas ou e_0 est inferieur à e_1 le nouveau pas est donné par

$$\left(\delta t\right)_{0} = S_{f} \left(\delta t\right)_{1} \left| \frac{e_{0}}{e_{1}} \right|^{0.25}$$
(IV.46)

.Sinon il prendra la forme suivante

$$\left(\delta t\right)_{0} = S_{f} \left(\delta t\right)_{l} \left|\frac{e_{0}}{e_{1}}\right|^{0.2}$$
(IV.47)

Ou S_f=0.9 est un coefficient de sécurité d'adaptation.

Le critère d'arrêt est définit comme étant un facteur de control du processus de simulation. Il peut être

- Le temps de simulation
- Le nombre de pas temporel de simulation
- Un état ou une configuration magnétique est à obtenir

IV.5.5 Organigramme de calcul numérique micromagnétique

(Fig.IV.4) représente un organigramme simple de calcul micromagnétique



Fig.IV.4 Organigramme de calcul numérique micromagnétique

Conclusion

Nous avons d'abord présenté les caractères des équations micromagnétiques et cité les cas ou une solution analytique est possible. Ensuite, nous avons rappelé les deux méthodes employées en calcul micromagnétique ainsi que les algorithmes et les méthodes de minimisation de l'énergie totale. Puis, nous avons décrit les étapes de la solution numérique de l'équation de la dynamique de l'aimantation. Nous avons intéressé à l'évaluation des différentes contributions au champ effectif selon le choix du système de coordonnées. Un aperçu sur les méthodes d'intégrations temporelles a été donné et un organigramme simple pour le calcul numérique micromagnétique a été élaboré.

Le dernier chapitre sera l'objet d'une présentation des résultats issus de l'évolution de l'aimantation durant le processus de retournement dans une couche ferromagnétique mince.

Bibliographie de chapitre IV

[Firastrau, 2004] I.Firastrau, Développement d'un environnement de modélisation micromagnétique:Couplage macroscopique-microscopique,thèse,INP de Grenoble, p.57, 2004.

[Stoner et al.,1948] E.C.Stoner,E.P.Wohlfarth, A mechanism of magnetic hysteresis in heteregenous alloys,Phil.Trans.Roy.soc ,A 240,599-6421,1948

[Brown,1957] W.F.Brown Jr, Creteriom for uniform micromagnetisation, Phys.Rev.105, pp.1479-1482,1957

[Aharoni,1963] A.Aharoni, Complete eigenvalue spectrum for the nucleation in a ferromagnetic prolate spheroid", phys.Rev.131, pp.1478-1482, 1963.

[Ramesh et al.,1988] M.Ramesh,P.E.Wegen, Ferromagnetic resonance of parallel stripe [Lopez,1999] L.Lopez-Diaz, A comparison of micromagnetics solvers, IEEE Transactions on magnetics, vol.35, No.3, pp.1207-1210, 1999

[Brown et al.,1965] W.F.Brown , A.E.Labonte, Structure and energy of one-dimensional domain walls in ferromagnetic thin films, J.appl. phys. vol.36, No.4, pp.1380-1386, 1965 [Labonte, 1969] A.E.Labonte, Two-dimensional Bloch type domain walls in ferromagnetic films, J.Appl.phys, vol.40, pp.2450- 2458, 1969.

[Berkov et al.,1993] D.V.Berkov, K. Ramstok, A.Hubert, Solving micromagnetic problems:Towards an optimal numerical method, phys, stat, sol (a) 137,pp.207-225,1993

[Liu et al., 2006] Yi Liu, D.J.Sellmyer, D.Shindo Numerical simulation of quasistatic and dynamic remagnetisation processes with special applications to thin films and nanoparticles Handbook of advanced magnetic materials, Tsinghua university, springer, pp.421-479, 2006

[Fukuma et al., 1997] K.Fukuma, D.J. Dunlop, Monte carlo simulation of two dimensional domain structures in magnetite, J.of geophysical research,vol.102,N.B3, pp.5135-5143,1997

[Maitre,2012] A.Maitre, Etude par simulation numériques des bicouches FM/AFM à anisotropie d'échange, thèse, université de Rouen, pp.33-38,2012

[Buda, 2001] L.D. Buda, Développement d'un code de calcul micromagnétique 2D et 3D : Application à des systèmes réels de types films, plots et fils, thèse université Louis Pasteur de Strasburg, pp.25-26,2001.

[Nakatani et al.,1989] Y.Nakatani,Y.Uesaka, N. Hayachi, Direct solution of Landau-Lifshitz-Gilbert equation for micromagnetics, J. Appl. Phys. Vol.28,No.12, pp. 2485-2507, 1989.

[Brown,1963] W.F. Brown, Thermal fluctuations of single-domain particle, Phys. Review Vol.130, issue.5,pp.1677-1686,1963

[Mansuripur, 1995] M. Mansuripur, The physical principles of magneto-optical recording, Cambridge university press, 1995.

[Ballentine, 2002] G.Ballentine, Comparaison of time resolved micromagnetic dynamics experiments on Ni₈₀Fe₂₀ and Landau-Lifshitz-Gilbert micromagnetic simulation, thesis, university of Alberta, Canada, pp.44-46, 2002

[Albuquerque, 2002] G.Marcos Baiao DE Albuquerque, Précession de L'aimantation en géométrie confiné : aspect physique et numérique, thèse, université Paris XI, pp.25, 2002.

[Romeo et al., 2008] A.Romeo, G.Finocchio, M.Carpentieri, L.Torres, G.Consolo, B.Azzerboni, A numerical solution of the magnetization reversal modeling in a permalloy thin film fifth order runge-kutta method with adaptive step-size control, Physica B.403, pp.464-468, 2008.

CHAPITRE V

ETUDE DE L'EVOLUTION DE L'AIMANTATION DANS UNE COUCHE FERROMAGNÉTIQUE MINCE

| Introduction | 66 |
|---|----|
| V.1 Etude de l'évolution de l'aimantation par le modèle micromagnétique | 66 |
| V.1.1 Les modes de retournement de l'aimantation | 66 |
| V.1.2 Notion d'une couche mince | 66 |
| V.1.3 Choix et caractéristiques du matériau | 66 |
| V.1.4 Les outils de calcul micromagnétique | 66 |
| V.1.5 Les approximations implémentées dans les codes de calcul | 67 |
| V.1.6 Présentation des résultats | 67 |
| V.1.6.1 L'effet de la taille de la cellule de discrétisation | 68 |
| V.1.6.2 Evolution temporelle de la distribution de l'aimantation | |
| durant le processus de retournement | 69 |
| V.1.6.3 L'effet de la température | 72 |
| V.1.6.4 L'effet de l'intensité de champ appliqué | 74 |
| V.1.6.5 L'effet de l'aimantation à saturation et de la constante | |
| d'échange | 74 |
| V.1.6.6 L'effet de nombre d'essais (NE) | 76 |
| V.1.6.7 L'effet de la tolérance désirée | 78 |
| V.1.7 Comparaison des résultats obtenus par les deux codes de calcul | 79 |
| V.1.8 Validation | 80 |
| Conclusion | 82 |
| Bibliographie de chapitre V | 82 |

Introduction

L'étude de l'évolution de l'aimantation dans une couche mince ferromagnétique et en particulier son retournement est basée sur la solution numérique de l'équation de Gilbert ou (LLG).

Dans ce contexte, nous rappellerons d'abord les modes de retournement et la notion d'une couche mince. Ensuite, nous citerons les critères du choix et les caractéristiques du matériau. Puis, nous rappellerons les approximations présentées dans les outils de calcul micromagnétique. Nous présenterons et nous comparerons les résultats obtenus par nos codes développés. De même, nous procéderons à une validation de ces outils de calcul en utilisant le test de la fréquence de la précession de Larmor.

V.1. Etude de l'évolution de l'aimantation par le modèle micromagnétique V.1.1 Les modes de retournement de l'aimantation

Le retournement de l'aimantation est le phénomène par leguel un matériau ferromagnétique peut voir le sens de son aimantation changer sous l'action d'un champ magnétique [Fadil, 2011]. Il se produira selon des échelles spatiales différentes. On peut distinguer les retournements: précessionnel, uniforme, non uniforme, par nucléation des domaines et propagation des parois [Balestrière, 2011].

V.1.2 Notion d'une couche mince

Une couche mince d'un matériau est caractérisée par son épaisseur qui est fortement réduite .Elle s'exprime souvent en nanomètre.

V.1.3 Choix et caractéristiques du matériau

le permalloy (Ni₈₀Fe₂₀). Cet alliage, avec cette Le matériau choisit est composition en Nickel et fer est utilisé dans la majorité des expériences. Il est aussi employé dans plusieurs applications et fabrications des dispositifs magnétiques.

Il se magnétise et se démagnétise facilement. Il possède aussi une grande perméabilité, une anisotropie et une magnétostriction négligeable.

V.1.4 Les outils de calcul micromagnétique

Nous avons procédé à développer nos codes (Fortran et Matlab) [Hunt et al. 2001] [Luc, 2011] selon l'organigramme présenté au chapitre précédent. Différentes approximations sont employées.

V.1.5 Les approximations implémentées dans les codes de calcul

Les approximations concernent

La discrétisation spatiale

Certains groupes ont utilisé la méthode des éléments finis [Fredkin, 1987] ou la méthode mixte des éléments finis et des intégrales de frontières [Schrefl, 1999]. D'autres ont employé la méthode des différences finis [Shabes et al., 1988] qui sera utilisée dans cette thèse.

Le calcul de champ d'échange

Les approximations utilisées en calcul de champ d'échange sont celles des "quatre" "six" et "huit" proches voisins. Nos calculs seront basés sur la première approximation.

• Le calcul de champ démagnétisant

Plusieurs méthodes ont été utilisées, telles que celles de potentiel scalaire, de l'énergie et des charges de surfaces [Shabes et al., 1987], [Maicas et al., 1998]. Dans ce manuscrit nous utiliserons l'approximation dipolaire. Pour réduire le temps de calcul, nous emploierons la technique de la transformé de fourrier rapide dans le code (Fortran). Elle a été inspirée de l'algorithme de Garcia [Garcia, 2000].

L'intégration temporelle

Différents schémas d'intégration temporelle ont été utilisés tels que ceux de Crank-Nicholson [Albuquerque et al., 2001] et de Runge-Kutta [Victora., 1987]. Dans cette thèse, l'équation de Gilbert sera intégrée en utilisant l'algorithme de Cash-Karp-Runge-Kutta, alors que l'équation (LLG) sera intégrée par la méthode standard de Runge-Kutta.

V.1.6 Présentation des résultats

Nous mentionnons d'abord que nous se limitons au traitement d'un problème en (2D). La couche mince de Permalloy (Ni₈₀Fe₂₀) ayant la taille 160x80xL_znm³ à donc une seule cellule suivant l'axe z.

La taille de chaque cellule est inferieur à la longueur d'échange l_{exch}. Les paramètres intrinsèques sont la constante d'échange, A_{exch}=1.3 x10⁻¹¹J/m, l'aimantation à saturation, M_s = 8.0x10⁵ A/m et la constante d'anisotropie uniaxiale $K_{\mu}=0J/m^{3}$, [Kronmuller et al, 2000], [Rave et al, 2000].

Les paramètres extrinsèques sont le coefficient gyromagnétique $\gamma = 2.21 \times 10^{5} m/(As)$ et la constante d'amortissement α=0.08.L'aimantation initiale M_{initiale} est orientée suivant la direction x-positive. Le champ H est appliqué selon la direction x-négative (Fig.V.1).



Fig.V.1. Représentation géométrique de la couche mince

En étudiant l'évolution temporelle de l'aimantation durant le processus de retournement dans la couche mince, nous intéressons à la solution numérique de l'équation (IV.32). Les calculs sont effectués avec le code (Fortran). Nous montrons l'effet de certains paramètres sur ce retournement tels que

V.1.6.1 L'effet de la taille de la cellule de discrétisation

Nous supposons que la tolérance désirée, ε et le nombre d'essais, (NE) pour ajuster la taille du pas temporel sont respectivement égaux à 10^{-7} et 5, alors que le champ appliqué, H=150kA/m. La température est négligeable.



Fig.V.2 Evolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne, <Mx> durant le processus de retournement à T= 0 K. La couche mince est discrétisée en cellules de tailles 2.5x2.5x2.5 nm³ et 5x5x5 nm³.

(Fig.V.2) représente l'évolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne, <Mx> durant le processus de retournement. La couche mince est discrétisée en cellules de tailles (5x5x5nm³) et (2.5x2.5x2.5nm³). La figure montre que la vitesse de retournement augmente légèrement avec la réduction de la taille de la cellule de discrétisation.

V.1.6.2 Evolution temporelle de la distribution de l'aimantation durant le processus de retournement

La taille de la cellule de discrétisation retenue est 5x5x5nm³. Cependant, la tolérance est prise égale à 10⁻⁹. Les valeurs de nombre d'essais et de champ appliqué sont maintenues. La température est toujours négligée.







Fig.V.3 Evolution temporelle de la distribution de l'aimantation, M durant le processus de retournement à T= 0 K. La couche mince est discrétisée en cellules de taille $5x5x5nm^3$, Ne, étant le nombre d'enregistrements à des instants distincts.

(Fig.V.3) représente une série d'enregistrements , (Ne) à des instants distincts de la distribution de l'aimantation, M durant le processus de retournement. La figure montre qu'en partant de l'état initial (mono-domaine) illustré par l'enregistrement (Ne=0), les énergies d'échange et demagnétisante entrent en compétition en absence de l'énergie d'anisotropie magnétocristalline comme il est montré par les enregistrements (Ne=500 et Ne=1000). A partir de l'enregistrement (Ne=1500) la structure multi-domaines est apparue et des zones de transitions (parois) sont crées. Selon l'enregistrement (Ne=3122) illustré par (Fig.V.4) un équilibre s'établit.



Fig.V.4 Distribution de l'aimantation, M selon l'enregistrement (Ne = 3122).La couche mince est discrétisée en cellules de taille $5x5x5nm^3$.

Cette figure montre que la structure est formée de trois domaines. De plus, il apparaît que les vecteurs d'aimantation des deux domaines(en rouge) compensent celle du troisième domaine(en vert).

La création d'un domaine dépend de l'énergie de la paroi (E_{paroi}) et de l'énergie démagnétisante (E_{dem}). De plus, l'état multi-domaines est énergiquement favorable si la consommation de l'énergie pour former une paroi est inferieur à la différence entre les deux énergies demagnétisantes des états mono-domaine et multi-domaines.

Cette structure en domaines peut être justifiée. A l'instant t_{3122} , les trois composantes de l'aimantation sont égales respectivement aux valeurs suivantes: $(Mx(t_{3122}))=3.297x10^{-5}$, $(My(t_{3122}))=-9x10^{-8}$, $(Mz(t_{3122}))=10^{-8}$.Leur résultante pourrait être considérée comme la valeur de l'aimantation moyenne (M) (M>=0). (Fig.V.5).

La structure multi-domaines commence à disparaître dés l'enregistrement (Ne=4500). Le nouveau état de saturation est illustré par l'enregistrement (Ne=8000).



Fig.V.5 Evolution temporelle des composantes de l'aimantation moyenne, <M> durant le processus de retournement dans une couche mince de permalloy discrétisée en cellules de taille 5x 5x5 nm³ a) Evolution de <Mx>,<My> et <Mz>,b) Evolution de <My> et <Mz>.

V.1.6.3 L'effet de la température

Dans ce cas, le champ thermique est ajouté aux autres contributions de champ effectif. Cela conduit à la solution numérique de l'équation de la dynamique de l'aimantation sous sa forme stochastique.

La tolérance désirée, $\varepsilon = 10^{-7}$, tandis que les valeurs de nombre d'essais , (NE) et de champ appliqué, H sont maintenues.



Fig.V.6 Evolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne , <Mx> durant le processus de retournement pour différentes valeurs de T. La couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5nm³.



Fig.V.7 Evolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne, <Mx> durant le processus de retournement pour différentes valeurs de T. La couche mince est discrétisée en cellules de taille 2.5x2.5x2.5 nm³.

(Fig.V.6) et (Fig.V.7) illustrent respectivement l'évolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne, <Mx> dans la couche mince discrétisée

respectivement en cellules de tailles (5x5x5nm³) et (2.5x2.5x2.5nm³) pour différentes valeurs de températures. Il est important de signaler que la vitesse de retournement de l'aimantation augmente avec la température en particulier lorsque la taille de la cellule de discrétisation est réduite.

Lorsque l'énergie thermique augmente, les fluctuations thermiques permettent en général à l'aimantation de tourner [Tsiantos et al., 2002].

V.1.6.4 L'effet de l'intensité de champ appliqué

Il est intéressant de montrer l'effet de l'intensité de champ appliqué, H sur le processus de retournement de l'aimantation. Dans ce contexte, la tolérance désirée, $\epsilon = 10^{-9}$, le nombre d'essais, (NE) reste égal à la valeur précédente.



Fig.V.8 Evolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne, < Mx > durant le processus de retournement pour différentes valeurs de champ appliqué, H à T= 0 K. La couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5nm³

(Fig.V.8) montre bien que la vitesse du retournement augmente avec l'intensité de champ appliqué. Dans ces circonstances, le champ agit comme une pression.

V.1.6.5 L'effet de l'aimantation à saturation et de la constante d'échange

En littérature, différentes valeurs ont été attribuées aux paramètres du permalloy en particulier l'aimantation à saturation, Ms et la constante d'échange A_{exch}. En effet, nous montrons l'effet de la variation de ces deux paramètres sur nos résultats de simulations.

Le nombre d'essais, (NE) est égal à 5. Le champ appliqué est de nouveau pris égale à 150kA/m. La tolérance désirée, $\varepsilon = 10^{-9}$.



Fig.V.9 Evolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne, < Mx > durant le processus de retournement pour différentes valeurs de Ms à T= 0 K.La couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5nm³.



Fig.V.10 Evolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne , <Mx> durant le processus de retournement pour différentes valeurs de la constante d'échange à T=0 K. la courbe correspondante à $A_{exch} = 1.3 \times 10^{-11}$ J/m est tracée avec une période de stockage des valeurs égale à 500.

(Fig.V.9) et (Fig.V.10) montrent bien que le choix des valeurs de Ms et A_{exch} n'a pas d'influence sur les résultats.

V.1.6.6 L'effet du nombre d'essais (NE)

La tolérance désirée, ε est prise égale à 10⁻⁷. Le champ appliqué, H=150kA/m.



Fig.V.11 Evolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne, <Mx> durant le processus de retournement pour différents valeurs de nombre d'essais (NE) à T=0K .La couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5 nm³.

(Fig.V.11) représente l'évolution temporelle de la composante moyenne de l'aimantation , <Mx> durant le processus de retournement pour différents valeurs de nombre d'essais (NE). Elle montre que les résultats de simulation sont sensiblement affectés par ce paramètre. Toutefois, selon (Fig.V.12) et (Fig.V.13) qui représentent l'évolution temporelle de nombre de pas rejetés (NPR) pour différents nombres d'essais (NE) respectivement lorsque la couche est discrétisée en cellules de tailles (5x5x5nm³) et (2.5x2.5x2.5nm³).



Fig.V.12 Evolution temporelle de nombre de pas rejetés, (NPR) durant le processus de retournement pour différents valeurs de nombre d'essais, (NE) à T= 0 K. La couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5 nm³.



Fig.V.13 Evolution temporelle de nombre de pas rejetés, (NPR) durant le processus de retournement pour différents valeurs de nombre d'essais, (NE) à T= 0 K. La couche mince est discrétisée en cellules de taille 2.5x2.5x2.5 nm³.

et (Fig.V.14), (Fig.V.15) qui représentent l'évolution temporelle de nombre de pas acceptés (NPA) pour différents nombres d'essais (NE) respectivement lorsque la couche est discrétisée en cellules de tailles citées ci-dessus.



Fig.V.14 Evolution temporelle de nombre de pas acceptés, (NPA) durant le processus de retournement pour différents valeurs de nombre d'essais, (NE) à T= 0 K. La couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5 nm³.



Fig.V.15 Evolution temporelle de nombre de pas acceptés, (NPA) durant le processus de retournement pour différents valeurs de nombre d'essais, (NE) à T= 0 K. La couche mince est discrétisée en cellules de taille $2.5x2.5x2.5 \text{ nm}^3$.

Il est intéressant de noter que le nombre de pas rejetés, (NPR) et le nombre de pas acceptés, (NPA) augmentent avec le nombre d'essais, (NE) en particulier lorsque la taille de la cellule de discrétisation est réduite. Cette augmentation peut affecter le temps de calcul.

V.1.6.7 L'effet de la tolérance désirée

Nous supposons maintenant que, (NE) est égal à, 5 et, H=150kA/m.



Fig.V.16 Evolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne, <Mx> durant le processus de retournement pour différents valeurs de ε à T=0 K. La couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5 nm³.

(Fig.V.16) représente l'évolution temporelle de la composante de l'aimantation moyenne , <Mx> pour différents valeurs de ε , il s'avère clairement que la tolérance désirée a un impact sur les résultats de simulation.

V.1.7 Comparaison des résultats obtenus par les deux codes de calcul

Tout d'abord nous dressons le tableau Tab(V.1) qui regroupe certaines particularités des deux codes.

Tab(V.1) Particularités des deux codes

| Code | Fortran | Matlab |
|--------------------------------------|---------------------------------------|-----------------------|
| Equation de | Gilbert | LLG |
| Système d'unité (annexe.B, annexe.C) | CGS | SI |
| Système de coordonnées | Sphérique | Cartésien |
| Schéma d'intégration temporelle | Cash-Karp-Runge-Kutta | Runge-Kutta |
| FFT | Inspirée de l'algorithme de Garcia | Fonction de Matlab |

Nous supposons aussi que les deux paramètres de simulation utilisés dans le code (Fortran), à savoir le nombre d'essais, (NE) et la tolérance désirée, ε sont respectivement égaux à 5 et 10⁻⁹. L'effet thermique est négligé. Le champ appliqué, H=150kA/m. (Fig.V.17) illustre les résultats simultanés issus respectivement de la solution de l'équation de Gilbert calculée avec le code Fortran et de celle de l'équation (LLG) calculée avec le code Matlab.



Fig.V.17 Evolutions temporelles des composantes d'aimantations moyennes, <Mx> durant le processus de retournement, issus de la solution de l'équation de Gilbert calculée par le code Fortran et celle de la solution de l'équation (LLG) calculée par le code (Matlab). La couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5nm³.

Il apparaît que le retournement de l'aimantation est presque atteint en même temps. Les causes de la différence des allures des trajectoires des évolutions d'aimantations moyennes, <Mx> peuvent être attribuées aux

- Equations de Gilbert et (LLG) qui sont équivalentes mathématiquement, mais ne sont pas toujours physiquement identiques.
- Schémas d'intégration temporelle différents
- Algorithmes de la transformé de fourrier rapide employés pour l'évaluation de champ démagnétisant

V.1.8 Validation

La validation est une confirmation de l'implémentation correcte des équations de Gilbert, (LLG) et des deux méthodes d'intégrations temporelles dans nos codes de calcul. Elle est effectuée en utilisant le test de la fréquence de la précession de Larmor [Stöhr et al.,2006]. Dans ce test, le coefficient gyromagnétique $\gamma = 2.21 \times 10^5 \text{ m/(As)}$ et la constante d'amortissement, α =0. L'aimantation initiale, $M_{initiale}$ est orientée suivant la direction (1,1,1). La seule contribution au champ effectif est le champ appliqué, H=10⁶ A/m orienté dans la direction z-positive. La couche mince est discrétisée en cellules de taille (5x5x5nm³). (Fig.V.18) représente les évolutions temporelles des composantes <Mx>, <My> et <Mz> de l'aimantation <M> calculées avec le code(Fortran).



Fig.V.18 Evolutions temporelles des composantes de l'aimantation moyenne, <M> obtenues avec le test de la fréquence de précession de Larmor. La couche mince est discrétisée en cellules de taille 5x5x5nm³.Le calcul est effectué avec le code Fortran.

De même, (Fig.V.19) illustre les évolutions temporelles de la composante de l'aimantation moyenne <My> calculées avec les deux codes.



Fig.V.19 Evolutions temporelles des composantes des aimantations moyennes,<My> obtenues avec le test de la fréquence de la précession de Larmor. Le calcul est effectué en utilisant les codes (Fortran et Matlab).

Selon ces deux dernières figures, les trajectoires des évolutions temporelles des composantes moyennes <My> peuvent être approximées par des sinusoïdes. Il apparaît que la période de ces sinusoïdes s'approchent de celle de Larmor, i.e. T_{Lar} =28.428x10⁻¹²s. [Najafi , 2011]. De même (Fig.V.20(a)) et (Fig.V.20(b)) illustrent la projection du vecteur d'aimantation sur le plan (x-y) respectivement en absence de l'amortissement (α =0.05). Ils s'avèrent qu'ils sont en accord avec les prédictions théoriques.



Fig.V.20 Projection du vecteur de l'aimantation moyenne, $\langle M \rangle$ sur le plan (x-y), a) En absence de l'amortissement (α =0), b) En présence de l'amortissement (α =0.05).

Ces derniers résultats représentent avec ceux du test de la fréquence de la précession de Larmor une première validation de nos codes de calcul et aussi de nos résultats.

Conclusion

Nous avons d'abord rappelé les différents modes de retournement, la notion d'une couche mince, les critères du choix et les caractéristiques du matériau. De même, nous avons rappelé les différentes approximations implémentées dans les codes de calcul. En présentant les résultats, nous avons montré l'effet de certains paramètres sur la qualité des résultats et le temps de calcul. Nous avons aussi procédé à une comparaison généralisée et une validation des résultats et des outils de calcul.

Bibliographie de chapitre V

[Fadil, 2011] D.Fadil, Etude de retournement de l'aimantation par microscopie magnétooptique Kerr et de la magnétorésistance dans des couches minces de La_{0.7}Sr_{0.3}Mno₃ vicinales à température ambiante, thèse, Caen/Basse-Normandie, pp.11-13,2011 [Balestriere, 2011] P.Balestriere, Dynamique de l'aimantation assisté par un champ électrique dans les dispositifs à base de (Ga, Mn) As, thèse, Paris-sud 11, pp.35-38,2011 [Hunt et al., 2001] R.Hunt, R. Lipsman, J.Rosenberg, K.Coombes, J.Osborn, G.Stuck, A guide to Matlab for beginners and experienced users, Cambridge university press, 2001 [Luc, 2011] M. Luc, Cours de Fortran 90, université de Bordeaux, Institut de mathématiques de Bordeaux,pp.1-108,2011

[Fredkin,1987] D.Fredkin,Numerical micromagnetics by the finite element method,IEEE Trans on magnetics, 23 , pp. 3385-3387, 1987

[Schrefl,1999] T.Schrefl, Finite elements in numerical micromagnetics part II: Patterned magnetic elements, J. Magn. Magn. Mat, vol. 207, pp. 66-77, 1999

[Shabes et al., 1987] M.Scabes, A.Aharoni, Magnetostatic fields for a three-dimensional array of ferromagnetic cubes, IEEE transactions on magnetics, vol. Mag-23, No.6, pp.3882-3888,1987

[Maicas etal., 1998] M.Maicas, E.Lopez, M.C.Sanchez, C.Aroca, P.Sanchez,

Magnetostatic energy calculations in two- and three-dimensional arrays of ferromagnetic prisms, IEEE transactions on magnetics, vol.34, No.3, pp.601-607, 1998

[Garcia, 2000] A.L.Garcia, Numerical methods for physics, 2nd edition, 2000

[Victora.,1987] R.H.Victora, Quantitative theory for hysteretic phenomena in CoNi magnetic thin films,Phys.Rev.Lett.,vol.58,pp.1788-1791,1987

[Kronmuller et al, 2000] H. Kronmuller, R.Hertal, Computational of magnetic structures and magnetisation processes in small particles, J. Magn.Magn.Mat, vol.2, pp.11-17, 2000

[Rave et al, 2000] W. Rave, A. Hubert, Magnetic ground state of a thin film element, IEEE transactions on magnetics, vol. 36, No. 6, pp. 3886-3898, 2000

[Tsiantos et al., 2002] V.Tsiantos, W. Scholz, D.suess, T.Schrefl, J.Fidler, The effect of the cell size in langevin micromagnetic simulations, J.Magn.Magn.Mat.vol.242-245, pp.999-1001, 2002.

[Stöhr et al., 2006] J.Stöhr, H.C.Siegmann, Magnetism: from fundamentals to nanoscale dynamics, Springer-verlag, Berlin ,Heidelberg,2006

[Najafi , 2011] Najafi Maryam Negari, Micromagnetic modeling by computational science integrated development environment (SIDE), Dissertation, humburg, p.47, 2011.

Conclusion générale

Dans cette thèse, nous avons fourni les bases théoriques et numériques micromagnétiques nécessaires pour effectuer une modélisation du comportement des matériaux ferromagnétiques à l'échelle des domaines magnétiques. Nous étions limités à l'étude de l'évolution temporelle de l'aimantation lors du processus de retournement dans une couche ferromagnétique mince de Permalloy.

Les résultats comparés de cette étude sont obtenus en utilisant nos codes développés. Ces outils ont été validés en utilisant le test de la fréquence de la précession de Larmor. L'introduction des effets thermiques a mené à la résolution de l'équation de la dynamique de l'aimantation sous sa forme stochastique. La technique de la transformé de fourrier rapide (FFT) inspirée de l'algorithme de Garcia a été implémentée avec succès dans le code fortran.

Nous avons montré l'effet de certains paramètres sur le retournement de l'aimantation tels que la taille de la cellule de discrétisation, la température, le champ appliqué. De même, nous avons procédé à suivre l'évolution temporelle de la distribution de l'aimantation associée a ce processus. Une structure en domaines séparées par des zones de transition (parois) a été observée. L'étude a montré également que le choix du nombre d'essais et la tolérance désirée affectent sensiblement le temps de calcul et la qualité des résultats. Cependant, ces derniers sont en accord avec les prédictions théoriques.

Malgré que l'importance a été donnée au modèle micromagnétique, nous avons proposé une étude de l'évolution de l'aimantation par un modèle de type Ising. Une diversité des configurations en domaines a été évoquée.

Vu la complexité de la modélisation du comportement des matériaux ferromagnétiques par la théorie du micromagnétisme en trois dimensions (3D), notre étude a été limitée au traitement d'un problème en (2D). Cette complexité est due aux

- Caractères des équations micromagnétiques.
- Ecarts entre les échelles spatiales et temporels des processus micromagnetiques et ceux se passant à une échelle supérieure.
- Différentes imperfections des matériaux réels distribuées aléatoirement.

84

Ce travail que nous disposons représente une description méthodologique théorique et numérique nécessaire pour une modélisation micromagnétique d'une part et des outils de calcul flexibles à une éventuelle extension d'autre part. Toutefois, nous estimons qu'il nécessite une amélioration et un développement. Dans ce contexte, les suggestions qu'on peut apporter sont

- L'extension de calcul micromagnétique en (3D) et à des tailles plus grandes (dans la limite du possible).
- L'introduction des effets magnetoélastiques, de conduction et l'accès à une courbe d'aimantation complète.
- La simulation des domaines magnétiques.

ANNEXES

| Annexe.A Etude de l'évolution de l'aimantation par un modèle de type | |
|--|----|
| Ising | 87 |
| | |
| A.1 Le modèle Phi-4 dipolaire | 87 |
| A.2 Les contributions à l'énergie totale | 87 |
| A.3 Equation dynamique d'Allen Cahn dans l'espace de fourrier | 88 |
| A.4 Simulation des domaines magnétiques | 89 |
| Bibliographie de l'annexe.A | 92 |
| Annexe.B Conversion des grandeurs entre le système CGS et le système | |
| international (SI) | 93 |
| Annexe.C Conversion des constantes physiques entre le système CGS | |
| et le système international (SI) | 93 |

Annexe.A Analyse de l'évolution de l'aimantation par un modèle de type Ising

A.1 Le modèle Phi- 4 dipolaire

Le modèle Phi-4 dipolaire est un modèle de type Ising. Il peut être lié à la théorie du micromagnétisme [Attane, 2003]. Selon ce modèle, une variable scalaire $\psi(\mathbf{r})$ qui représente l'aimantation perpendiculaire au plan (x-y) au lieu de prendre seulement les valeurs ± 1 comme dans le modèle d'Ising, elle peut prendre des valeurs intermédiaires entre -1 et 1. Ce modèle peut être décrit par l'équation dynamique d'Allen-Cahn définie par [Jagla, 2004], [Kudo et al., 2006].

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial t} = -\lambda_{p} \frac{\delta(\mathbf{E}_{anis} + \mathbf{E}_{exch} + \mathbf{E}_{dem})}{\delta \psi(\mathbf{r})}$$
(A.1)

Ou λ_p est un paramètre de proportionnalité et $E_{anis} + E_{exch} + E_{zeem} + E_{dem}$ est la somme des contributions à l'énergie totale.

A.2 Contributions énergétiques

Les contributions à l'énergie totale du système sont données par

• Contribution de l'anisotropie magnetocristalline

Cette contribution est donnée par

$$E_{anis 0} = \alpha_{anis 0} \int \left(-\frac{\psi(r)^2}{2} + \frac{\psi(r)^4}{4} \right) dr$$
 (A.2)

Ou α_{anis0} est le paramètre d'anisotropie

Contribution Zeeman

Cette contribution peut être écrite comme suit

$$E_{zeem} = -h_{ext0} \int \psi(r) dr$$
 (A.3)

Ou h_{ext0} est le champ extérieur.

• Contribution de l'échange

Cette contribution est définie par

$$E_{\text{exch}} = \beta_{\text{exch}\,0} \int \frac{\left|\nabla \psi(\mathbf{r})\right|^2}{2} d\mathbf{r}$$
(A.4)

Ou β_{exch0} est le paramètre d'échange

Contribution magnétostatique

Cette contribution s'exprime de la façon suivante

$$E_{dem} = \gamma_{dipo_0} \int \psi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'$$
(A.5)

Ou γ_{dipo_0} et $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ représentent respectivement le paramètre dipolaire est la fonction de green.

En substituant les quatre contributions, précédentes dans l'équation (A.1), cette dernière deviendra

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial t} = -\lambda_{p} \left(\alpha_{anis0} \left(-\psi + \psi^{3} \right) - h_{ext0} - \beta_{exch0} \Delta \psi + \gamma_{dip00} \int \psi(\mathbf{r}') G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \right) d\mathbf{r} d\mathbf{r}'$$
(A.6)

A.3 Equation dynamique d'Allen Cahn dans l'espace de fourrier

Dans l'espace de fourrier, l'équation précédente s'écrit sous la forme suivante

$$\frac{\partial \Psi_{K}}{\partial t} = -\lambda_{p} \left[\alpha_{anis 0} \left(-\Psi + \Psi^{3} \right)_{K} - h_{ext 0} \delta \left(K \right) + \left(\beta_{exch 0} K^{2} + \gamma_{dipo 0} G_{K} \right) \right] \Psi_{K}$$
(A.7)

En utilisation certains transformations, (A.7) deviendra

$$\frac{\partial \Psi_{K}}{\partial t} = \left[\alpha_{anis} \left(\Psi - \Psi^{3} \right) \right]_{K} + h_{ext} \delta(K) - \left(\beta_{exch} K^{2} + \gamma_{dipo} G_{K} \right) \Psi_{K}$$
(A.8)

Ou α_{anis} , β_{exch} et γ_{dipo} représentent respectivement les nouveaux paramètres d'anisotropie, d'échange et dipolaire qui sont tous positifs. De même G_K est la transformé de fourrier de G(r,0) et peut être écrite

$$\mathbf{G}_{\mathrm{K}} = \mathbf{a}_{0} - \mathbf{a}_{1}\mathbf{k} \tag{A.9}$$

Ou a_1 , est une constante universelle égale à 2π et a_0 une constante à fixer.

A.4 Simulation des domaines magnétiques

Le matériau est supposé ayant une anisotropie perpendiculaire. La discrétisation temporelle de l'équation (A.8) mène à

$$\frac{\Psi_{k}^{t+\delta t}}{\delta t} = \alpha_{anis} \left(\Psi - \Psi^{3} \right)_{k}^{t} + h \delta(k) - \gamma_{dip0} G_{k} \Psi_{k}^{t} - \beta_{exch} k^{2} \Psi_{k}^{t+\delta t}$$
(A.10)

En simulation, la taille de la cellule de discrétisation spatiale est prise égale à l'unité. L'état initial est aléatoire. Tous les paramètres sont sans dimension. Le champ appliqué et le pas d'intégration temporelle sont respectivement égaux à 1 et 0.2. Dans toutes les figures suivantes, les couleurs noir (blanche) indique respectivement les régions ou la magnétisation est négative (positive). Dans un premier temps nous supposons que les paramètres d'échange et dipolaire sont fixés respectivement à β_{exch} =0.06, γ_{dipo} =0.03. (Fig.A1) montre la configuration en domaines pour différentes valeurs du paramètre d'anisotropie.



Fig.A1 Configurations des domaines obtenus par la simulation de l'équation (A.10) pour différentes valeurs du paramètre d'anisotropie. Les paramètres d'échange et dipolaire sont fixés à β_{exch} =0.06 , γ_{dipo} =0.03.

On assiste à une structure stable en bandes.

Maintenant, les paramètres d'échange et d'anisotropie sont fixés respectivement à β_{exch} =0.06 et α_{anis} =1.6. (Fig.A2) présente la configuration en domaines magnétiques, ainsi que l'évolution de l'aimantation associée, ψ pour différents valeurs du paramètre dipolaire.




 γ_{dipo} =0.0005

Fig.A2 Configurations des domaines magnétiques et évolution de l'aimantation associée, ψ obtenus par la simulation de l'équation (A.10), pour différents valeurs du paramètre dipolaire. Les paramètres d'échange et d'anisotropie sont fixés à β_{exch} =0.06 et α_{anis} =1.6

Pour les faibles valeurs de γ_{dipo} =0.03, on assiste à la formation des domaines en bandes. Cependant, pour les valeurs très faibles, la structure monodomaine est dominante.

En fin, nous fixons les paramètres dipolaire et d'anisotropie respectivement à $\gamma_{dipo}=0.03$ et $\alpha_{anis}=1.6$. (Fig.A3) montre la configuration en domaines magnétiques, pour différents valeurs du paramètre d'échange.



Fig.A3 Configurations des domaines magnétiques obtenues par la simulation de l'équation (A10) pour différents valeurs du paramètre d'échange. Les paramètres, dipolaire et d'anisotropie sont fixés à γ_{dipo} =0.03 et α_{anis} =1.6

On peut observer qu'avec la décroissance du paramètre d'échange, la densité des labyrinthes augmente.

Bibliographie

[Attane, 2003] Jean-Phylipe Attane, Interactions entre parois magnétiques et défauts structuraux et mise en ordre chimique par irradiation observées dans des couches minces d'alliage FePt(Pd), thèse, université Joseph Fourrier, Grenoble I, pp.67-74,2003

[Jagla,2004] E.A.Jagla, Numerical simulations of two dimensional magnetic domain patterns, arXiv: cond-mat, 0402406, vol.2, 2004

[Kudo et al., 2006] K.Kudo,M.Mino,K.Nakamura, Magnetic domain patterns depending on the sweeping rate of magnetc fields, arXiv: cond-mat,0610142,vol.3,2006

Annexe.B Conversion des grandeurs entre le système CGS et le système International(SI)

| Grandeur | symbole | SI | CGS | Conversion |
|---------------|---------|-----|-------------------------------------|--|
| Longueur | L | m | cm | 1m=10 ² cm |
| Temps | Т | S | S | - |
| Induction | В | Т | G | 1T=10⁴G |
| magnétique | | | | |
| Champ | Н | A/m | Oe | 1A/m=1.2566x10 ⁻² Oe |
| magnétique | | | | |
| Magnétisation | М | A/m | ergG ⁻¹ cm ⁻³ | 1A/m=10 ⁻³ emu cm ⁻³ |
| | | | emucm⁻³ | |

Annexe.C Conversion des constantes physiques entre le système CGS Et le système international (SI)

| Constante | Notation | Valeur en cgs | Valeur enSI |
|----------------------|-------------------------|-------------------------------|--|
| Constante de | k _B | 1.381X10 ⁻¹⁶ erg.s | 1.381X10 ⁻²³ J/deg |
| Boltzmann | | | |
| Perméabilité du vide | μ_0 | 1 | 4πx10 ⁻⁷ H/m |
| Rapport | $\gamma = \frac{ge}{1}$ | 1.758X10 ⁷ rad/s/G | 1.758X10 ¹¹ C ⁻¹ .Kg ⁻¹ |
| gyromagnétique | $2m_e$ | | |