

Delia

THESE

présenté par

Brindusa Maria KEVORKIAN

pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE JOSEPH FOURIER-GRENOBLE I

(Arrêtés ministériels du 5 juillet 1984 et du 30 mars 1992)

Spécialité : Physique

Contribution à la modélisation du retournement d'aimantation.

Application à des systèmes magnétiques nanostructurés

ou de dimensions réduites

Date de soutenance : 7 juillet 1998

Composition du jury :

E. Burzo

D. Givord

R. Maynard (président)

J. Miltat (rapporteur)

D. Stoeffler (rapporteur)

J.C. Toussaint

Thèse préparée au sein du Laboratoire de Magnétisme Louis Néel

Remerciements

Je voudrais remercier tout d'abord Jean-Christophe Toussaint, qui a encadré mon travail de thèse. Un grand merci pour tout ce qu'il m'a appris dans le domaine de la physique mais aussi des méthodes numériques et de l'informatique. Grâce à un dialogue continu, cette thèse a abouti à la réalisation d'un ensemble d'outils numériques efficaces et précis qui permettent de comprendre les comportements des systèmes magnétiques réels. Je le remercie également pour son amitié et sa bonne humeur pendant toutes ces années.

Je tiens à remercier Dominique Givord, directeur du Laboratoire de Magnétisme Louis Néel et co-directeur de cette thèse, de m'avoir accueillie au laboratoire ainsi que pour ses conseils et sa disponibilité à répondre toujours à mes questions.

Je tiens à remercier également M. Roger Maynard, Professeur à l'Université Joseph Fourier, d'avoir présidé le jury de cette thèse.

Je remercie M. Daniel Stoeffler pour l'intérêt porté à ce travail, en acceptant d'être rapporteur. Je remercie également M. Jacques Miltat pour avoir accepté d'examiner ce travail. Ses remarques pertinentes m'ont permis d'améliorer la présentation de la thèse.

Je voudrais aussi remercier M. Emil Burzo, Professeur à l'Université Babes-Bolyai, Cluj-Napoca, pour la participation au jury et pour l'attention avec laquelle il a lu ce manuscrit.

Mes remerciements vont aussi à mes collègues expérimentateurs avec lesquels j'ai collaboré : Jean Voiron, Sibylle Wüchner, Olivier Fruchart, Jean-Pierre Nozières et Stéphane David. Les résultats fructueux de ces collaborations ont contribué au bon déroulement de cette thèse. Je remercie également tous les membres du laboratoire pour l'atmosphère agréable et conviviale que j'ai trouvée ici.

Je remercie tout particulièrement mes parents pour leur confiance et leur soutien constant pendant mes études en France. Je remercie aussi mon mari pour ses conseils pertinents dans le domaine de l'informatique et pour son aide à la rédaction de ce manuscrit.

Table des matières

INTRODUCTION	11
--------------------	----

Chapitre I : Mécanismes de coercitivité

1. COERCITIVITÉ DES MATÉRIAUX FERROMAGNÉTIQUES DURS	17
2. RENVERSEMENT D'AIMANTATION D'UN GRAIN HOMOGÈNE ISOLÉ.....	19
2.1 CAS DU RETOURNEMENT UNIFORME	19
2.2 CAS DU RETOURNEMENT NON-UNIFORME	21
2.2.1 <i>Systèmes à pure anisotropie de forme</i>	21
2.2.1.1 Dépendance angulaire du champ coercitif.....	24
2.2.2 <i>Systèmes à forte anisotropie magnétocristalline</i>	25
3. RENVERSEMENT D'AIMANTATION DANS LES MATÉRIAUX RÉELS HÉTÉROGÈNES (MÉCANISMES DE COERCITIVITÉ)	26
3.1 MÉCANISMES INITIAUX : MODÉLISATION DU DÉFAUT À L'ORIGINE DE LA NUCLÉATION ET PASSAGE DE LA PAROI DANS LA PHASE PRINCIPALE	27
3.1.1 <i>Profil en marche d'escalier</i>	28
3.1.2 <i>Profil en biseau</i>	29
3.1.3 <i>Perturbation d'anisotropie quasi-harmonique</i>	29
3.2 MÉCANISME DE PROGRESSION DE LA PAROI : EXPANSION DU NOYAU D' AIMANTATION INVERSE DANS LA PHASE PRINCIPALE	30
3.3 MÉCANISME DE PIÉGEAGE : MODÉLISATION DES DÉFAUTS - PIÈGES	33

Chapitre II : Micromagnétisme et méthodes de minimisation

1. INTRODUCTION	39
2. MICROMAGNÉTISME	39
2.1 HYPOTHÈSES DU MICROMAGNÉTISME.....	39
2.2 ENERGIE LIBRE DE GIBBS DU SYSTÈME FERROMAGNÉTIQUE	40
2.2.1 <i>Energie Zeeman</i>	40
2.2.2 <i>Energie du champ démagnétisant</i>	40
2.2.3 <i>Energie d'anisotropie magnétocristalline</i>	41
2.2.4 <i>Energie d'échange</i>	41
2.3 ETAT D'ÉQUILIBRE DU SYSTÈME FERROMAGNÉTIQUE	42
2.4 MAGNÉTOSTATIQUE (ÉVALUATION DU CHAMP DIPOLAIRE)	44
2.4.1 <i>Résolution de l'équation avec des dérivées partielles</i>	44
2.4.2 <i>Théorèmes de la magnétostatique</i>	48

2.4.3 Majorant de l'énergie dipolaire.....	49
2.4.4 Minorant de l'énergie dipolaire.....	50
2.4.5 Inégalités de Brown.....	50
3. MÉTHODES DE MINIMISATION DE L'ÉNERGIE LIBRE.....	54
3.1 MÉTHODES ITÉRATIVES	55
3.2 INTÉGRATION TEMPORELLE DE L'ÉQUATION DE LANDAU-LIFSHITZ-GILBERT (LLG)	57
3.2.1 Formulation du problème	57
3.2.2 Méthodes exactes de résolution de l'équation de LLG pour un champ local constant.....	60
3.2.2.1 Résolution exacte de l'équation de LLG sans amortissement.....	60
3.2.2.2 Résolution exacte de l'équation de LLG avec amortissement	62
3.2.3 Méthodes numériques de résolution de l'équation de LLG pour un champ local	63
3.2.3.1 Méthode d'Euler	63
3.2.3.2 Méthodes du type Runge-Kutta	64
3.2.3.3 Comparaison des méthodes numériques avec le calcul analytique.....	65
3.2.4 Méthodes générales de résolution de l'équation de LLG pour un champ non-local	68
3.2.4.1 Méthode d'Euler explicite	69
3.2.4.2 Méthode d'Euler implicite.....	69
3.2.4.3 Méthode de Crank-Nicholson.....	70
3.3 MÉTHODES VARIATIONNELLES ET APPLICATION AUX ÉLÉMENTS FINIS	72
3.3.1 Application à la méthode des éléments finis	74

Chapitre III : Présentation du modèle

1. INTRODUCTION	79
2. EVALUATION DU CHAMP DÉMAGNÉTISANT	80
2.1 MÉTHODE DES DIFFÉRENCES FINIES (MD- ϕ)	81
2.1.1 Méthode de sur-relaxation	87
2.1.2 Méthode du gradient conjugué.....	91
2.1.3 Approche multi-grille.....	92
2.2 CALCUL DU CHAMP DÉMAGNÉTISANT PAR UNE MÉTHODE INTÉGRALE	95
2.2.1 Transformée de Fourier continue	95
2.2.2 Transformée de Fourier discrète.....	96
2.2.3 Transformée de Fourier en dimension L	96
2.2.4 Transformée de Fourier rapide unidimensionnelle.....	96
2.2.5 Transformée de Fourier rapide en dimension L	99
2.2.6 Transformée de Fourier par l'algorithme FFTW.....	99
2.2.7 Application des transformées de Fourier au calcul du champ démagnétisant	100
2.2.7.1 Méthode MI-H.....	100
2.2.7.2 Méthode MI- ϕ	105

3. EVALUATION DU CHAMP D'ÉCHANGE	107
4. EVALUATION DE L'ÉNERGIE TOTALE	110
5. MINIMISATION DE L'ÉNERGIE LIBRE DU SYSTÈME PHYSIQUE.....	111
5.1 MÉTHODE DU VECTEUR TOURNANT AUTOUR D'UN CHAMP EFFECTIF	112
5.2 MÉTHODE DE CHANGEMENT DE BASE FONDÉE SUR L'INTÉGRATION EXACTE DE L'ÉQUATION DE LLG	112
5.3 TEST DE CONVERGENCE.....	114
5.4 ETUDE DE LA STABILITÉ DU SCHÉMA EXPLICITE D'INTÉGRATION DES ÉQUATIONS LLG	114
5.5 SCHÉMA MIXTE D'INTÉGRATION	120

Chapitre IV : Application à des systèmes magnétiques réels

1. INTRODUCTION	125
2. TRI-COUCHES MAGNÉTIQUES À BASE D'ALLIAGES AMORPHES DE TERRES RARES ET DE COBALT	126
2.1 PRÉSENTATION DES SYSTÈMES PHYSIQUES ÉTUDIÉS	126
2.2 RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX POUR LE SYSTÈME FERRIMAGNÉTIQUE À BASE DE SM-Co/Gd-Co/SM-Co'	127
2.3 RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX POUR LE SYSTÈME FERROMAGNÉTIQUE À BASE DE SM-Co/Zr-Co/SM-Co'	129
2.4 COMPARAISON DES COMPORTEMENTS DES DEUX SYSTÈMES.....	131
2.5 RÉSULTATS NUMÉRIQUES	132
2.5.1 <i>Retournement d'aimantation dans une couche douce couplée par échange - simulation versus modèle analytique</i>	<i>134</i>
2.5.2 <i>Retournement d'aimantation des couches coercitives couplées par échange.....</i>	<i>136</i>
2.5.3 <i>Processus d'aimantation dans l'état à une paroi - Calcul numérique et analytique</i>	<i>138</i>
2.6 CONCLUSION.....	143
3. PLOTS SUBMICRONIQUES ÉPITAXIÉS ULTRAMINCES	144
3.1 PRÉSENTATION DU SYSTÈME PHYSIQUE	144
3.2 SYSTÈME MODÈLE POUR LES SIMULATIONS.....	147
3.3 DÉFINITION DE PARAMÈTRES NUMÉRIQUES ADAPTÉS	148
3.3.1 <i>Influence du pas de maillage.....</i>	<i>148</i>
3.3.2 <i>Brisures de symétrie et influence de l'orientation du champ appliqué</i>	<i>151</i>
3.3.2.1 <i>Cas du plot carré.....</i>	<i>151</i>
3.3.2.2 <i>Cas d'une particule ronde</i>	<i>153</i>
3.4 FACTEUR EFFECTIF DE QUALITÉ Q.....	154
3.5 INFLUENCE DE DIVERS PARAMÈTRES PHYSIQUES SUR LE MÉCANISME DE RETOURNEMENT	156
3.5.1 <i>Influence de la forme de l'énergie d'anisotropie</i>	<i>156</i>
3.5.2 <i>Influence de la forme de la particule</i>	<i>158</i>
3.5.3 <i>Influence de la taille latérale (L) de la particule</i>	<i>160</i>

3.5.4 Influence de l'épaisseur (e) de la particule.....	162
3.6 DÉPENDANCE ANGULAIRE DU CHAMP COERCITIF - CALCUL VERSUS EXPÉRIENCE	163
3.7 CONCLUSION.....	164
4. MATÉRIAUX MAGNÉTIQUES NANOSTRUCTURÉS	165
4.1 MODÈLE 1D DE SKOMSKI ET COEY.....	167
4.1.1 Calcul analytique	167
4.1.2 Calcul numérique	169
4.2 MODÈLE DE RENFORCEMENT DE L' AIMANTATION RÉMANENTE	170
4.3 MATÉRIAUX MAGNÉTIQUES DURS NANOSTRUCTURÉS À BASE DE NDFEB DE TYPE "EXCHANGE SPRING MAGNETS"	172
4.3.1 Résultats expérimentaux.....	172
4.3.2 Système modèle	173
4.3.3 Choix du maillage et précision du calcul.....	174
4.3.4 Influence de la taille des grains	175
4.3.5 Influence du champ démagnétisant.....	181
4.3.6 Influence de la nature de la phase douce sur les propriétés magnétiques d'un aimant du type spring- magnet.....	183
4.4 CONCLUSION.....	183
CONCLUSION	187
LISTE DES PUBLICATIONS ISSUES DE CE TRAVAIL	189
RÉFÉRENCES.....	191

Introduction

Introduction

La coercitivité est la propriété caractéristique des matériaux ferromagnétiques durs. Elle se mesure par la valeur du champ inverse, appelé champ coercitif, à appliquer sur le système magnétique pour observer le retournement de son aimantation. Les résultats expérimentaux révèlent que cette propriété dépend fortement des propriétés magnétiques intrinsèques du matériau dur mais reste très sensible aux inhomogénéités de nature chimique différente de la phase principale, de tailles très diverses. Il demeure que les mécanismes de retournement d'aimantation qui déterminent in fine la valeur du champ coercitif sont encore très mal compris.

Dans ce contexte, les modèles habituellement développés dans le cadre du micromagnétisme pour décrire le comportement des aimants permanents restent approximatifs par manque d'information sur la distribution des défauts. Ils permettent tout au plus de donner quelques idées sur les sources de réduction de la coercitivité à basse température.

L'approche analytique ou numérique peut retrouver son intérêt dans les systèmes magnétiques modèles, lorsque le retournement de l'aimantation n'est plus sensible aux défauts ou lorsque les hétérogénéités où s'initie la nucléation sont de grandes dimensions par rapport aux longueurs caractéristiques du matériau magnétique. Pour de tels systèmes, dès que les dimensions deviennent finies, la simulation numérique supplante très vite l'approche analytique.

Mon arrivée au Laboratoire Louis Néel a coïncidé avec la création d'une nouvelle activité dans le domaine de la simulation numérique en micromagnétisme développé par J.C. Toussaint. L'arrivée d'ordinateurs de plus en plus puissants a permis de mettre en place de nouvelles techniques d'analyse pour mieux appréhender les mécanismes de renversement d'aimantation dans les matériaux magnétiques durs et doux.

Les objectifs de ma thèse ont été de développer des techniques mathématiques efficaces et un ensemble d'outils numériques spécifiques au micromagnétisme, pour calculer des configurations magnétiques à l'équilibre et hors équilibre. Un soin particulier a été apporté dans leur domaine de validité et d'application.

Un échange fructueux d'idées a eu lieu avec les autres membres expérimentateurs du laboratoire lors de l'application de nos modèles à l'étude de systèmes réels modèles :

- tri-couches magnétiques à base d'alliages amorphes terres rares-cobalt. Cette étude a commencé dans le cadre de la thèse de S. Wuchner sous la direction de J. Voiron ;
- plots submicroniques de fer (110) epitaxiés, à anisotropie planaire - collaboration avec O. Fruchart et J.P. Nozières ;

Les études menées dans ces deux projets ont bénéficié des progrès réalisés ces dernières années dans l'élaboration des matériaux. Ils ont permis de réaliser des échantillons dont les caractéristiques sont de mieux en mieux maîtrisées. Ils ont indirectement contribué à l'élargissement du champ d'application des simulations numériques.

Par ailleurs, mon travail s'inscrit dans un effort de la compréhension des matériaux nanostructurés qui connaissent actuellement un développement extraordinaire en raison de leurs grandes potentialités d'applications.

Les progrès réalisés sur ces systèmes reposent sur l'élaboration de matériaux originaux dont la taille des cristallites en font des systèmes de choix pour la simulation numérique, si bien que les résultats obtenus commencent à jouer un rôle significatif dans le choix de nouveaux matériaux. Cette démarche a trouvé sa pleine illustration lors de la collaboration avec S. David, étudiant en thèse, travaillant dans le développement de nouveaux matériaux pour le projet Brite Euram EMERGE.

Le premier chapitre de ce mémoire donne une revue des modèles de base pour décrire l'origine de la coercitivité dans les matériaux ferromagnétiques. Il montre aussi les limites de validité de ces modèles lorsque l'influence des défauts sur le mécanisme de renversement d'aimantation n'est plus négligeable.

La première partie du chapitre II est consacrée aux hypothèses du micromagnétisme et les équations d'Euler gouvernant l'état d'équilibre du système ferromagnétique sont énoncées. Les théorèmes généraux sur le minorant et le majorant de l'énergie démagnétisante sont abordés. Dans la seconde partie de ce chapitre, une revue des méthodes de minimisation de l'énergie libre est présentée.

Le chapitre III présente l'approche micromagnétique que nous avons développée au cours de cette thèse. Une étude comparative de la précision et la rapidité de deux techniques de calcul du champ démagnétisant est abordée. La méthode de minimisation par intégration des équations Landau-Lifshitz-Gilbert, utilisée dans nos simulations, est énoncée. Plusieurs schémas d'intégration numérique sont proposés et leur stabilité est étudiée.

Dans le chapitre IV, nous appliquons les techniques d'analyse numérique exposées dans le chapitre précédent à l'étude de systèmes magnétiques réels déjà cités et nous discutons les résultats des simulations numériques à la lumière des résultats expérimentaux.

Chapitre I

Mécanismes de coercitivité

1. Coercitivité des matériaux ferromagnétiques durs

Les matériaux magnétiques sont aujourd'hui des composantes indispensables de nombreux dispositifs industriels. Les efforts de recherche dans le domaine des aimants permanents sont dirigés vers l'obtention de matériaux de haute performance qui pourraient être intégrés dans des systèmes électrotechniques (moteurs, actionneurs) pouvant fournir des densités d'énergies importantes. D'autres recherches portent sur les matériaux pour l'enregistrement avec l'objectif d'atteindre des capacités d'enregistrement de plus en plus fortes.

La coercitivité et l'aimantation rémanente sont les deux propriétés essentielles qui caractérisent un matériau magnétique. L'aimantation rémanente M_r , ou aimantation en champ interne nul, fixe la limite d'induction que peut fournir un matériau, elle est liée à l'aimantation spontanée, qui est un paramètre physique intrinsèque. La coercitivité est la capacité d'un matériau ferromagnétique dur à résister à l'influence d'un champ magnétique tendant à inverser son aimantation. Le champ nécessaire pour renverser l'aimantation, de manière irréversible, est le champ coercitif H_c . La coercitivité est une propriété physique extrinsèque qui est le résultat de la compétition de paramètres intrinsèques et est intimement liée au procédé métallurgique d'élaboration.

Un aimant soumis à un champ magnétique inverse inférieur au champ coercitif, qui peut être son propre champ démagnétisant, se trouve dans un état métastable de l'énergie : l'orientation des moments magnétiques antiparallèlement au champ correspond à un puits d'énergie moins profond que celui qui correspond à l'état où les moments sont parallèles au champ. Ces deux minima sont séparés par une barrière d'énergie qui est à l'origine de la coercitivité (Figure 1).

L'existence de cette barrière d'énergie est directement liée à une anisotropie de l'énergie magnétique. Celle-ci peut avoir deux sources : une anisotropie agissant au niveau atomique sur chaque moment individuel, ou une anisotropie macroscopique, due aux interactions dipolaires à longue distance. Comme les interactions dipolaires sont à l'origine du champ démagnétisant, cette dernière forme d'anisotropie dépend fortement de la géométrie du grain.

Du point de vue expérimental, la valeur de H_c est déduite des courbes d'aimantation $M_H(H)$, où M_H est la composante de l'aimantation parallèle à la direction du champ appliqué. Pour un aimant permanent, la définition physique de H_c est le champ pour lequel le plus grand nombre de grains retournent leur aimantation. La susceptibilité $\chi_{irr} = dM_H^{irr} / dH$ y est alors maximale.

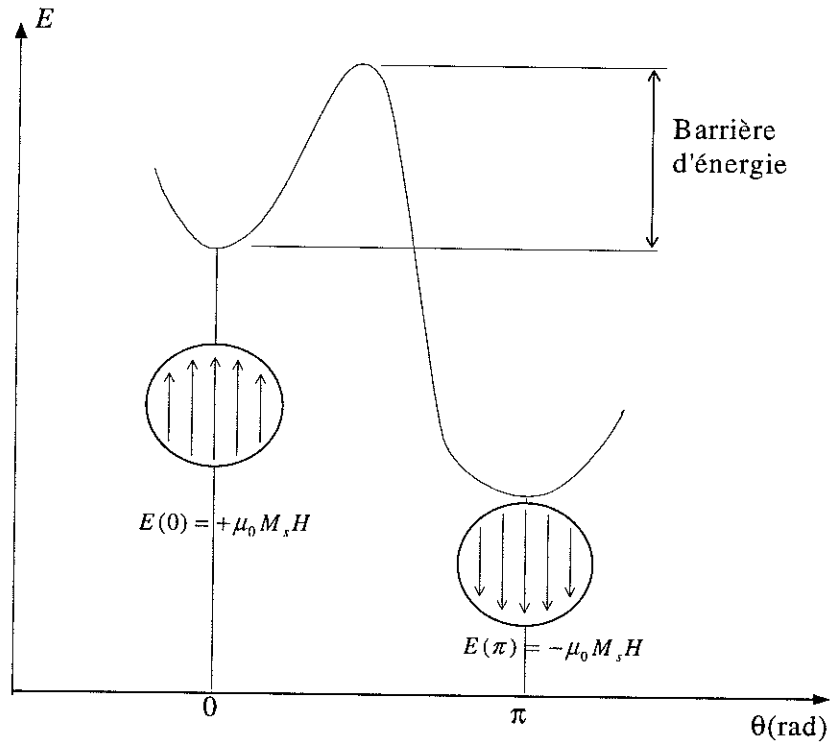


Figure 1 : L'état coercitif métastable (pour $\theta=0$) et barrière d'énergie

La définition industrielle est le champ pour lequel l'aimantation s'annule. Ces deux définitions peuvent donner des valeurs différentes quand une rotation réversible ou un déplacement de paroi de domaine permet à l'aimantation de devenir négative avant le passage de la barrière d'énergie.

Malgré de nombreuses observations expérimentales, les mécanismes de renversement d'aimantation dans les aimants permanents sont encore mal compris. Ces mécanismes sont de natures variées et agissent à des échelles différentes, mettant en jeu des hétérogénéités de nature et de taille diverses. Les défauts microstructuraux semblent jouer un rôle essentiel dans la coercitivité. Les modèles théoriques existants proposent des descriptions schématiques de l'influence de tels défauts, mais leur validité est limitée à des cas particuliers. L'utilisation des méthodes numériques et l'augmentation de la puissance des ordinateurs ont permis, ces dix dernières années, de résoudre des problèmes plus complexes qui tiennent compte d'un plus grand nombre de paramètres.

2. Renversement d'aimantation d'un grain homogène isolé

2.1 Cas du retournement uniforme

Stoner et Wohlfarth ont proposé en 1948 un modèle de rotation cohérente de l'aimantation d'une particule ferromagnétique [Stoner 48]. Il suppose que sa forme est ellipsoïdale de grand axe c et que l'aimantation reste uniforme, générant un champ démagnétisant homogène. L'énergie dipolaire associée se comporte dans ce cas comme une anisotropie de forme. Leur modèle permet de calculer le champ de retournement de l'aimantation en fonction de l'inclinaison du champ par rapport à c .

Examinons d'abord le cas où le champ appliqué est parallèle à l'axe c . Sous l'effet d'un champ inverse, l'aimantation reste parallèle à l'axe c , tant que l'énergie libre de la particule est minimale. Lorsque le champ appliqué atteint une valeur critique H_c , suffisamment forte pour estomper la barrière d'énergie, l'aimantation se renverse. H_c est appelé champ de retournement de l'aimantation et est donné par :

$$H_c = -N_{eff} M_s, \quad N_{eff} = N_{//} - N_{\perp} \quad (1)$$

où $N_{\perp}$ et $N_{//}$ sont les facteurs de forme du champ démagnétisant respectivement dans la direction perpendiculaire et parallèle à l'axe c .

Ainsi, le champ coercitif est égal au champ de forme de la particule. Le retournement de l'aimantation au champ coercitif est brutal et n'est précédé d'aucune rotation.

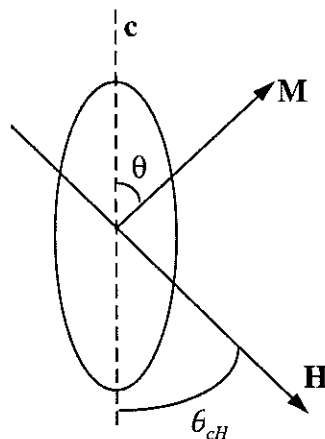


Figure 2 : Configuration d'aimantation dans un grain de forme ellipsoïdale dans le modèle de Stoner-Wohlfarth

Si le champ est appliqué avec un angle θ_{cH} par rapport à l'axe c (Figure 2), le retournement d'aimantation est toujours brutal, mais est précédé et suivi d'une rotation de l'aimantation en direction du champ. Le champ de retournement varie avec l'angle selon :

$$H_c(\theta_{cH}) = \frac{H_a}{(\cos^{2/3} \theta_{cH} + \sin^{2/3} \theta_{cH})^{3/2}} \quad (2)$$

avec $H_a = (N_{\perp} - N_{\parallel})M_s$. Le champ coercitif est toujours inférieur au champ d'anisotropie de forme H_a et atteint sa valeur minimale pour $\theta_{cH} = \pi/4$ (Figure 3).

Dans le cadre de ce modèle, la barrière d'énergie ΔE est donnée par la différence des énergies entre l'état d'énergie maximale et l'état initial. Pour un champ appliqué dans la direction de l'axe c , la barrière ΔE vaut :

$$\Delta E = \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 (N_{\perp} - N_{\parallel}) (1 - H/H_a)^2 \quad (3)$$

par unité de volume de la particule. On retrouve la valeur du champ coercitif $H_c = H_a$ lorsque la barrière s'estompe.

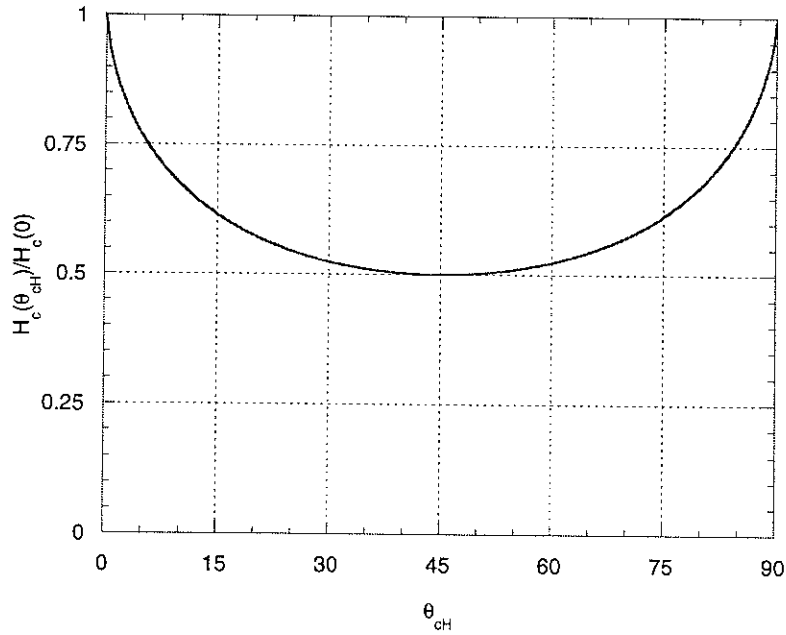


Figure 3 : Dépendance angulaire du champ coercitif dans le modèle de Stoner-Wohlfarth

2.2 Cas du retournement non-uniforme

Le désalignement des moments magnétiques, qui apparaît dans tout processus non-uniforme de retournement, conduit à une augmentation de l'énergie d'échange. La comparaison entre cette perte d'énergie et le gain éventuel d'un autre type d'énergie indique si le processus pris en compte est plus favorable que la rotation cohérente.

2.2.1 Systèmes à pure anisotropie de forme

On s'intéresse d'abord aux systèmes dans lesquels l'anisotropie intrinsèque magnétocristalline peut être négligée.

Les calculs s'appuient sur les équations différentielles non-linéaires de la théorie du micromagnétisme, théorie présentée dans le chapitre II. Le mode de renversement est imposé a priori. En utilisant une méthode variationnelle et la condition de Brown sur les bords, on obtient une équation différentielle qui peut être linéarisée tant qu'on reste dans le domaine des faibles variations des moments par rapport à l'état saturé. Le champ de nucléation est le champ minimal à appliquer pour observer une déviation de l'aimantation par rapport à son état saturé. En fonction des dimensions du système physique, des diagrammes de phase peuvent être établis, donnant en chaque point la valeur du champ de nucléation et le mode de nucléation le plus favorable énergétiquement.

Plusieurs formes de particules ont été prises en compte pour ces calculs, en considérant différents modes de renversement. Par exemple, Frei [Frei 57] et Aharoni [Aharoni 58], [Aharoni 63] ont comparé la rotation cohérente et des processus non-uniformes (curling, buckling, twisting) dans le cas d'un ellipsoïde allongé et son cas particulier - le cylindre infini. Des calculs sur des particules sphériques ont été aussi effectués [Frei 57], [Aharoni 86a]. Des calculs qui incluent l'anisotropie magnétocristalline ont été également présentés dans la littérature [Brown 57], [Aharoni 86b], [Aharoni 88].

A titre d'exemple, intéressons-nous aux modes de renversement de l'aimantation qui peuvent intervenir dans une particule de forme cylindrique. Le cylindre infini a un rayon R et un axe de révolution parallèle à Oz . La déviation du vecteur aimantation avec l'axe Oz notée ω est supposée uniforme dans tout le cylindre.

- rotation uniforme

Comme on l'a vu, ce mode conduit à une courbe d'hystérésis rectangulaire. Le champ de nucléation correspond au champ coercitif et est égal au champ d'anisotropie de forme puisque K_I est supposé négligeable dans ce paragraphe :

$$H_n = H_a = M_s(N_{\perp} - N_{\parallel}) \quad (4)$$

Pour un cylindre infini, $N_{\perp} = 1/2$, $N_{\parallel} = 0$ et, par conséquent, on obtient :

$$H_n = 0.5M_s \quad (5)$$

- "curling" (enroulement de l'aimantation)

Ce mode respecte la symétrie cylindrique de la particule car le vecteur aimantation n'a de composantes que selon l'axe du cylindre et l'axe orthoradial. Cette distribution ne génère aucune charge de volume, ni de surface et, par conséquent, minimise complètement l'énergie démagnétisante. En revanche, elle engendre un coût en énergie d'échange puisque l'aimantation n'est pas uniforme. La résolution de l'équation d'Euler linéarisée conduit à l'expression suivante du champ de nucléation :

$$H_n = \frac{2Ax_1^2}{\mu_0 M_s} \frac{1}{R^2} \quad (6)$$

où $x_1 = 1.841$ est le premier maximum de la fonction de Bessel du premier ordre $J_1(x)$. A est la constante d'échange du matériau. En introduisant une longueur caractéristique

$R_0 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \pi \sqrt{\frac{A}{\mu_0 M_s^2}}$, le champ de nucléation s'écrit sous la forme :

$$H_n = 0.54 M_s \left(\frac{R}{R_0} \right)^{-2} \quad (7)$$

En conclusion, pour $R < R_0$ c'est la rotation cohérente qui est favorisée, tandis que, pour les grands diamètres c'est le curling qui gouverne la nucléation. Le rayon critique qui délimite les deux régimes est donné par :

$$R_c = 1.04 R_0 \quad (8)$$

Aharoni [Aharoni 58] a montré que la courbe d'hystérésis pour un cylindre infini soumis à un champ parallèle à son axe a une forme rectangulaire et symétrique. Le champ de nucléation coïncide avec le champ coercitif.

- “buckling” (flambage)

La rotation uniforme et le curling sont des cas extrêmes, pour lesquels soit l'énergie d'échange, soit l'énergie démagnétisante s'annule. A l'intersection de ces deux domaines, un autre mode, appelé buckling peut être favorisé.

Dans ce mode, l'aimantation effectue de petites oscillations autour de l'axe Oz avec une pulsation ω . Les charges de surface qui interviennent dans le calcul de l'énergie démagnétisante sont proportionnelles à ω , tandis que les charges volumiques, proportionnelles à ω^2 , peuvent être totalement négligées.

Pour des dimensions inférieures à R_0 , le champ de nucléation coïncide avec celui de la rotation cohérente tandis que, dans la limite des grands diamètres, son expression asymptotique s'écrit :

$$H_n = 0.65 M_s \left(\frac{R}{R_0} \right)^{-2/3} \quad (9)$$

Pour les diamètres intermédiaires, le champ est déterminé numériquement.

Un récapitulatif des dépendances du champ de nucléation dans les différents modes en fonction du diamètre du cylindre est présenté sur la Figure 4. Les champs sont indiqués en

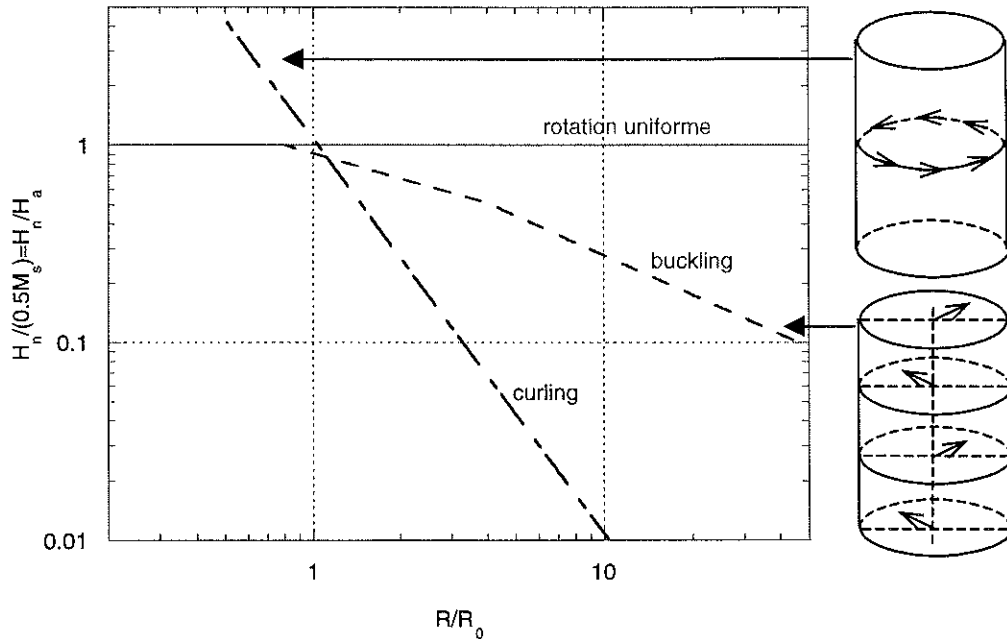


Figure 4 : Comparaison entre les champs de nucléation des modes de retournement présents dans une particule de forme cylindrique en fonction de la dimension de la particule

unités réduites par rapport au champ d'anisotropie de forme et les dimensions en unités de R_0 .

2.2.1.1 Dépendance angulaire du champ coercitif

Considérons le cas d'une particule ellipsoïdale allongée ou cylindrique tel que R est beaucoup plus grand que R_0 (ex. $R \cong 10R_0$). Dans ces conditions, le champ de retournement est bien inférieur au champ d'anisotropie ($H_c \cong 0.01H_a$). Quand une particule est placée dans un champ incliné avec un angle θ_{cH} par rapport à son axe, le renversement irréversible de l'aimantation apparaît pour des valeurs du champ qui dépendent de cet angle. Des processus uniforme et non-uniforme donnent des dépendances angulaires très différentes.

La composante du champ perpendiculaire à l'axe de la particule provoque une rotation réversible des moments. Néanmoins, la rotation réversible des moments est très faible avant le retournement d'aimantation si le champ coercitif est beaucoup plus petit que le champ d'anisotropie. C'est le cas en général pour les modes non-uniformes de renversement. Par conséquent, la composante du champ parallèle à l'axe de la particule reste pratiquement antiparallèle aux moments magnétiques et détermine leur retournement quand $H \cos \theta_{cH} \cong H_c$. Ainsi, la dépendance angulaire du champ coercitif pour un mode non-uniforme type curling doit ressembler à une loi en $1/\cos \theta_{cH}$. Ce comportement est souvent observé

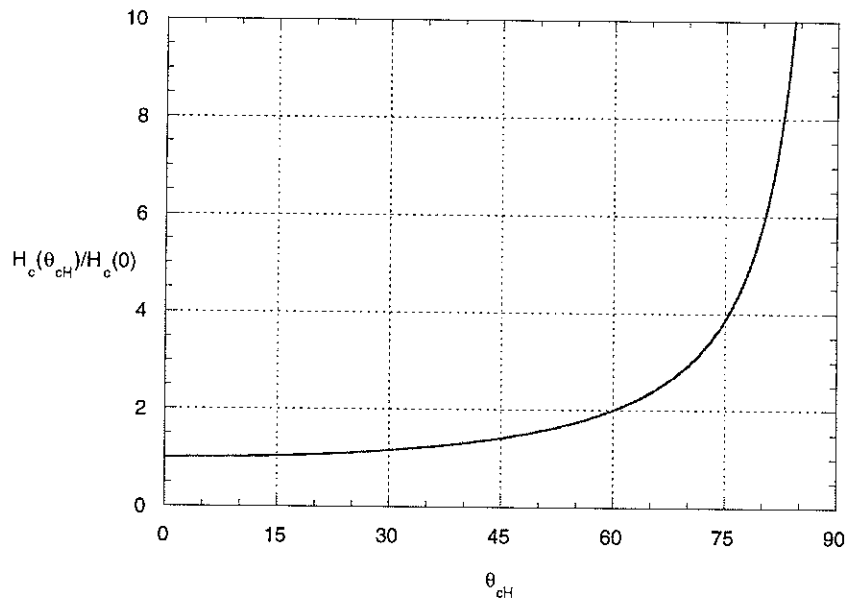


Figure 5 : Dépendance angulaire calculée pour un champ coercitif sans rotation des moments (loi en $1/\cos \theta_{cH}$)

expérimentalement et caractérise les systèmes avec un champ coercitif beaucoup plus faible que le champ d'anisotropie.

2.2.2 Systèmes à forte anisotropie magnétocristalline

Lorsque l'anisotropie magnétocristalline domine, l'alternative au retournement uniforme de l'aimantation est un passage par un état transitoire multi-domaine. Cela implique un écart à la saturation dans une zone du matériau de volume v_0 qui doit être au moins égal au volume atomique (Figure 6). La rotation des moments du volume v_0 par rapport aux moments situés à l'extérieur coûte en énergie d'échange. Ce surcoût $\Delta E_\mu(\theta)$ dépend de l'angle de rotation. L'énergie totale s'écrit :

$$E(\theta) = (-\mu_0 H M \cos \theta + K_1 \sin^2 \theta) v_0 + \Delta E_\mu(\theta) \quad (10)$$

en négligeant la variation de l'énergie démagnétisante.

Les deux premiers termes du bilan énergétique décrivent l'énergie d'une particule de volume v_0 dont l'aimantation tourne d'un angle θ de manière cohérente. Le troisième est un terme positif, ce qui indique qu'un processus non-uniforme coûte plus en énergie que la rotation cohérente.

En conclusion pour les systèmes homogènes à forte anisotropie magnétocristalline, le champ d'anisotropie s'impose comme limite inférieure théorique du champ coercitif. Néanmoins, les valeurs expérimentales obtenues dans des matériaux à forte anisotropie intrinsèque, sont bien

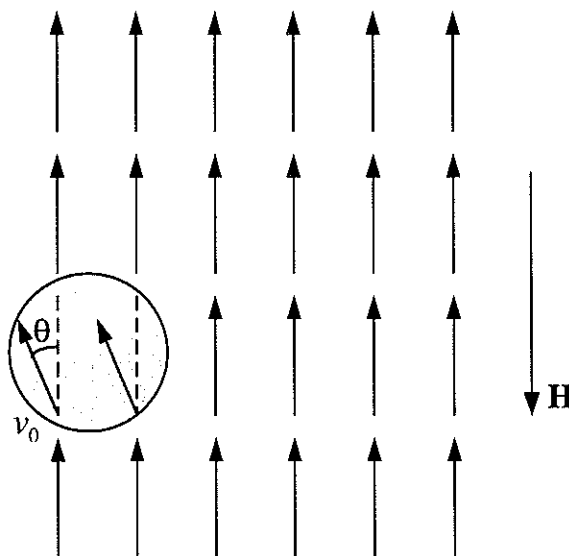


Figure 6 : Déviation locale des moments magnétiques dans un volume v_0

inférieures au champ d'anisotropie. Ce phénomène est connu sous le nom de "paradoxe de Brown" [Brown 63]. La raison profonde du désaccord est l'existence d'hétérogénéités structurales dans les systèmes magnétiques réels. Elles sont caractérisées par de variations locales de l'anisotropie et de l'échange et favorisent la création de petits volumes dans lesquels le renversement d'aimantation apparaît, avant de se propager à travers le système.

3. Renversement d'aimantation dans les matériaux réels hétérogènes (mécanismes de coercitivité)

Les matériaux magnétiques réels sont constitués d'une assemblée de grains et présentent une structure hétérogène. Ces hétérogénéités structurales gouvernent le renversement d'aimantation, car : (i) elles génèrent une distribution de barrières d'énergie, (ii) elles peuvent conduire à une diminution des barrières d'énergie d'anisotropie due aux interactions dipolaires.

Dans ces conditions, le renversement d'aimantation à partir de l'état saturé, sous l'influence d'un champ inverse, est un mécanisme complexe qui concerne à la fois les défauts et la phase principale. Le processus débute avec la nucléation d'un domaine d'aimantation inverse dans un défaut. La paroi créée pendant la nucléation pénètre ensuite dans la phase principale et se propage dans tout le système. Le comportement global du système au cours du renversement peut être divisé schématiquement en quatre étapes qui se succèdent et qui correspondent chacune à un mécanisme caractéristique avec un champ critique spécifique :

- nucléation pour un champ caractéristique H_n : formation d'un domaine d'aimantation inverse avec apparition d'une paroi dans une zone où l'anisotropie est la plus faible ;
- passage caractérisé par le champ H_p : déplacement de la paroi du défaut vers la phase principale ;
- expansion pour un champ H_{exp} : progression de la paroi dans la phase principale ;
- ancrage : accrochage de la paroi sur des défauts (hétérogénéités magnétiques) ou sur des pièges dus à des contraintes topologiques de la paroi. Un champ H_{dp} est nécessaire pour dépiéger la paroi.

Le renversement d'aimantation est gouverné par le mécanisme dont le champ est le plus important.

3.1 Mécanismes initiaux : modélisation du défaut à l'origine de la nucléation et passage de la paroi dans la phase principale

Les modèles théoriques de la coercitivité cherchent à décrire les différents types de défauts existants dans des systèmes réels, sources de réduction du champ coercitif par rapport au champ d'anisotropie.

Les calculs du champ coercitif s'appuient sur la résolution des équations différentielles non-linéaires dans le cadre de la théorie du micromagnétisme, qui sera présentée en détail dans le chapitre II. Dans la limite où les moments s'écartent peu de l'état saturé, la linéarisation des équations permet de définir un champ de nucléation, limite inférieure du champ de retournement H_c . En général, sa détermination précise pour un modèle donné n'est possible que dans le cadre d'une approche numérique.

Les modèles analytiques présentés dans la littérature reposent sur une représentation unidimensionnelle des hétérogénéités. Ils traitent essentiellement de l'influence des défauts d'anisotropie. Plusieurs profils simples ont été proposés (Figure 7) : en marche d'escalier, en biseau [Abraham 60], [Aharoni 60] ou encore quasi-harmonique [Kronmüller 87].

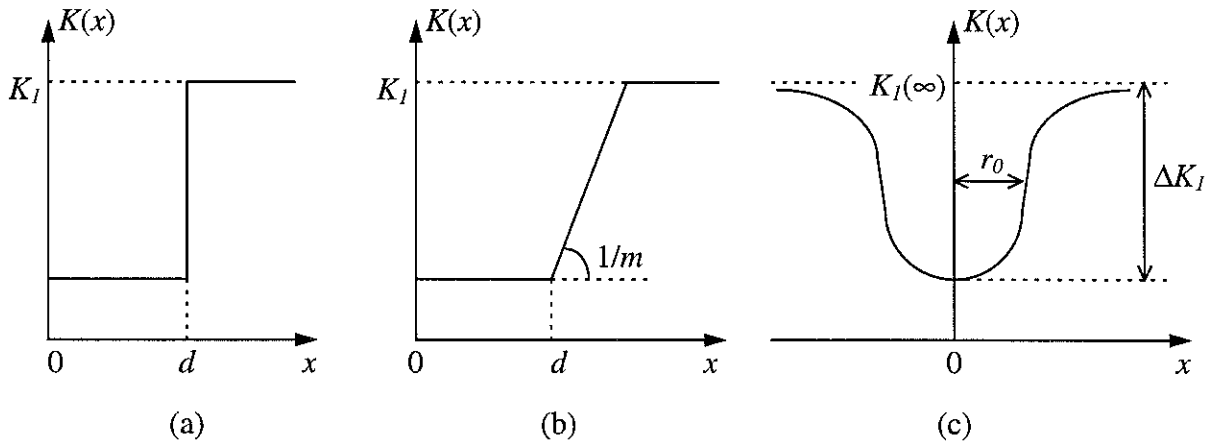


Figure 7 : Profils de défauts d'anisotropie : (a) marche d'escalier, (b) en biseau, (c) perturbation quasi-harmonique

Ils supposent que la direction de facile aimantation coïncide avec l'axe Oz du champ appliqué. Pour minimiser les interactions dipolaires, les moments magnétiques résident dans le plan perpendiculaire à Ox . En notant $\omega(x)$ leur inclinaison par rapport à Oz , l'énergie totale du système s'écrit :

$$F_l = \int \left(A \left(\frac{d\omega}{dx} \right)^2 + K_1(x) \sin^2 \omega(x) + \mu_0 M_s H \cos \omega(x) \right) dx \quad (11)$$

où la constante d'échange et l'aimantation à la saturation sont supposées homogènes dans tout le système. L'angle ω et sa dérivée sont supposés continus en tout point.

La configuration d'équilibre stable ou métastable, pour un champ H donné, est solution de l'équation d'Euler $\delta F_l = 0$:

$$2A \frac{d^2 \omega}{dx^2} + 2K_1(x) \sin \omega(x) \cos \omega(x) - \mu_0 M_s H \sin \omega(x) = 0 \quad (12)$$

respectant la condition $d\omega/dx|_{bord} = 0$ sur les bords. En définissant le champ de nucléation comme celui qui provoque le premier écart à la saturation, les angles $\omega(x)$ sont proches de zéro et l'équation précédente peut être linéarisée :

$$2A \frac{d^2 \omega}{dx^2} - (2K_1(x) + \mu_0 M_s H) \omega(x) = 0 \quad (13)$$

Différentes solutions sont obtenues, en fonction de la forme du profil d'anisotropie.

3.1.1 Profil en marche d'escalier

La description analytique du profil d'anisotropie est :

$$K_1(x) = \begin{cases} K_1 & \text{si } |x| \geq d \\ 0 & \text{si } |x| < d \end{cases} \quad (14)$$

La résolution de l'équation (13) avec la forme du profil d'anisotropie ci-dessus conduit à une relation de "dispersion" :

$$k_0 \operatorname{tg}(k_0 d) = k \quad (15)$$

où $k_0^2 = -\mu_0 M_s H / 2A$ et $k^2 = (2K_1 + \mu_0 M_s H) / 2A$.

Si d est beaucoup plus petit que la largeur de paroi dans la phase principale $\delta_B = \pi \sqrt{A / K_1}$, le champ de nucléation tend vers $H_a = 2K_1 / \mu_0 M_s$ et diminue quand l'étendue de la zone douce augmente. Pour $d = \delta_B / 4$, il vaut $H_n = 0.5H_a$ et tend à s'annuler pour $d \equiv \delta_B$.

Une fois la paroi créée par nucléation, elle passe du défaut vers la phase principale en franchissant une barrière d'anisotropie de hauteur maximale K_l . La propagation de la paroi

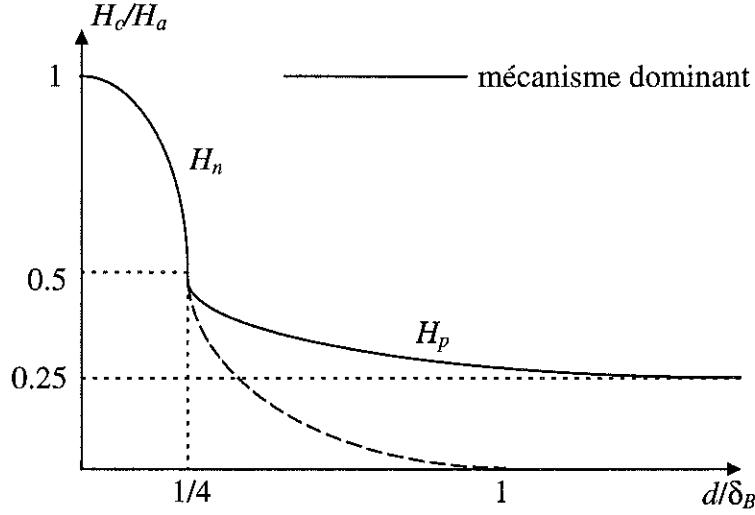


Figure 8 : Champ critique en fonction de la taille du défaut
(mécanismes de nucléation et passage)

dans la phase principale est gouvernée par le champ de passage H_p . Il présente une variation en fonction de d différente de celle du champ de nucléation. Pour $d \leq \delta_B / 4$, H_p coïncide avec le champ de nucléation, cela signifie que la nucléation pilote le renversement complet de l'aimantation. Par contre pour $d > \delta_B / 4$, le champ appliqué doit être bien supérieur au champ de nucléation pour retourner l'aimantation. Contrairement à H_n , H_p tend vers la valeur limite $0.25H_a$ pour des hétérogénéités de grande taille par rapport à δ_B (Figure 8).

3.1.2 Profil en biseau

Abraham [Abraham 60] a proposé une autre description d'un défaut, en supposant une variation linéaire de l'anisotropie, au passage entre la phase principale et la région sans anisotropie. Dans ce cas, le champ de nucléation présente le même comportement que dans le modèle précédent.

3.1.3 Perturbation d'anisotropie quasi-harmonique

De la même manière, Kronmüller [Kronmüller 87] a étudié l'influence d'une région de demi-largeur r_0 , dans laquelle l'anisotropie suit une variation spatiale de la forme :

$$K_1(x) = K_1(\infty) - \frac{\Delta K_1}{\cosh^2(x/r_0)} \quad (16)$$

où $K_1(\infty)$ est la constante d'anisotropie dans la phase principale, loin de la perturbation et ΔK_1 l'abaissement d'anisotropie au centre du défaut. Le champ de nucléation obtenu est de la forme :

$$H_n = H_a \left(1 - \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{\delta_B}{r_0} \right)^2 \left(1 - \sqrt{1 + \left(\frac{2\pi r_0}{\delta'} \right)^2} \right)^2 \right) \quad (17)$$

où $\delta' = \pi \sqrt{A / \Delta K_1}$ est une largeur de paroi effective faisant intervenir ΔK_1 au lieu de K_1 . Elle est plus grande que la largeur de paroi de Bloch δ_B . La relation précédente montre que le champ de nucléation décroît régulièrement avec la largeur du défaut.

Lorsque la taille de l'inclusion est grande par rapport à δ' , le champ de nucléation coïncide avec le champ d'anisotropie pris au centre du défaut :

$$H_a^{\text{déf}} = H_a - \frac{2\Delta K_1}{\mu_0 M_s} \quad (18)$$

tandis qu'il tend vers le champ d'anisotropie du matériau sans défaut lorsque $r_0 \ll \delta'$:

$$H_n = H_a \left(1 - \pi^2 \left(\frac{r_0 \delta_B}{\delta'^2} \right)^2 \right) \quad (19)$$

L'analyse de ces trois modèles permet de mettre en évidence la réduction du champ de nucléation par rapport au champ d'anisotropie de la phase principale quand la taille du défaut augmente. Lorsque la taille du défaut dépasse la largeur de la paroi de la phase dure, c'est le champ d'anisotropie propre au défaut qui détermine la nucléation.

3.2 Mécanisme de progression de la paroi : expansion du noyau d'aimantation inverse dans la phase principale

Dans les modèles que nous venons de présenter, les auteurs concluent en général que la propagation de la paroi après nucléation s'effectue librement. Cependant, dans une approche à une dimension, on ne tient pas compte de l'augmentation de surface nécessaire à la pénétration de la paroi dans le matériau magnétique dur, qui peut être une source de coercitivité supplémentaire. Le même phénomène doit être présent dans le cas de la propagation, la paroi ne se déplaçant pas de façon rigide, mais par déformation locale.

Le modèle proposé par Nozières [Nozières 84] suppose que le matériau dur est homogène et que les sources de piégeage sur les hétérogénéités sont négligeables.

L'énergie de formation d'un noyau d'aimantation inverse s'écrit alors dans le cadre d'une approche phénoménologique :

$$E = -2\mu_0 M_s H \nu + \gamma s \quad (20)$$

où ν et s sont le volume et la surface du noyau respectivement. Dans cette approche simpliste, l'effet du champ démagnétisant n'est pas pris en compte.

Au début du renversement d'aimantation, la paroi se propage à travers une surface de petite taille comme par exemple un disque de rayon r_0 . Pour simplifier, on considère un noyau de forme conique dont l'énergie de formation s'écrit :

$$E = -\frac{2}{3}\pi r^2 z \mu_0 M_s H + \pi r \gamma \sqrt{z^2 + r^2} \quad (21)$$

où r est le rayon de la base circulaire et z sa hauteur.

Deux modes de croissance du noyau sont envisagés :

Mode 1 : le noyau croît en gardant une base constante de rayon $r = r_0$ (Figure 9a).

Mode 2 : la taille du noyau croît de manière homothétique avec un rapport $\tan \beta = r/z$ constant (Figure 9b). Ce mode ne peut apparaître que si $r \geq r_0$.

L'analyse énergétique en fonction de z est présentée sur la Figure 10 pour différentes valeurs

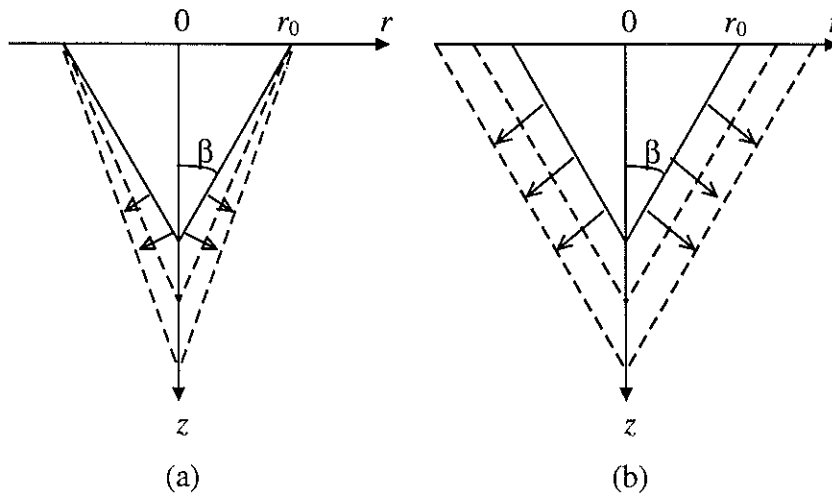


Figure 9 : Modes de croissance d'un noyau de forme conique

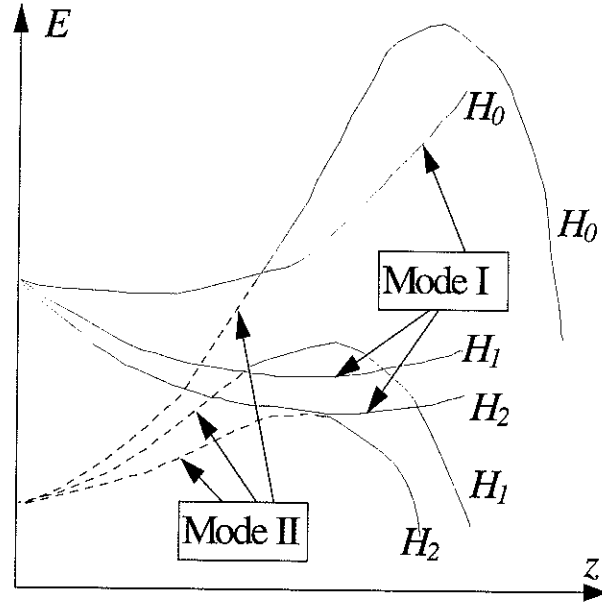


Figure 10 : Variation de l'énergie en fonction de z pour les deux modes de croissance d'un noyau conique

du champ appliqué. Le renversement débute avec le mode 1 exclusivement. Il permet un gain important en énergie Zeeman tout en gardant pratiquement constante l'énergie de paroi. L'énergie de ce mode devient minimale et vaut :

$$E_{min}^{(1)} = \frac{2\pi\mu_0 M_s H r_0^4}{3z_{min}^{(1)}} \text{ avec } z_{min}^{(1)} = \frac{2\mu_0 M_s H r_0^2}{\sqrt{(3\gamma)^2 - (2\mu_0 M_s H r_0^2)^2}} \quad (22)$$

lorsque la hauteur du cône atteint la valeur $z = z_{min}^{(1)}$ et tant que le champ appliqué reste inférieur à $3\gamma / 2\mu_0 M_s r_0$. Pour une valeur du champ plus élevée, ce minimum cesse d'exister et l'énergie présente une décroissance monotone avec z croissant.

Dans le mode 2, une augmentation de l'énergie est observée pour les petites valeurs de z car la contribution surfacique est plus grande que la contribution volumique, puis la tendance s'inverse. Ces deux comportements sont séparés par un maximum en énergie :

$$E_{max}^{(2)} = \frac{1}{3} \pi \mu_0 M_s H (r_{max}^{(2)})^2 z_{max}^{(2)} \quad (23)$$

correspondant à des dimensions de noyau :

$$z_{max}^{(2)} = \frac{\gamma}{\mu_0 M_s H \sin \beta}, \quad r_{max}^{(2)} = \frac{\gamma}{\mu_0 M_s H \cos \beta} \quad (24)$$

Le passage du mode 1 vers le mode 2 ne peut s'opérer que lorsque $z_{max}^{(2)}$ coïncide avec $z_{min}^{(1)}$, permettant de définir un champ critique :

$$H_{crit} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\gamma}{\mu_0 M_s r_0} \quad (25)$$

En ce point et pour cette valeur du champ, les courbes d'énergie des deux modes sont tangentes, comme l'indique la Figure 10.

Le champ critique définit le champ pour lequel le noyau inverse peut s'étendre à l'infini dans la phase principale, car aucune barrière d'énergie ne s'oppose au retournement de son aimantation. L'angle β au point de contact est égal à 35.26° ($\cos \beta = \sqrt{2/3}$), qui conduit à un cône de volume maximum pour une surface donnée : le rapport entre le gain en énergie Zeeman et le coût en énergie de paroi est optimisé. Comparé au champ d'anisotropie de la phase principale, le champ critique obtenu pour ce mécanisme vaut :

$$H_{crit} = \frac{\sqrt{6}}{\pi} \frac{\delta_B}{r_0} H_a \quad (26)$$

Pour $r_0 \equiv \delta_B$, le champ critique est de l'ordre de $0.8H_a$, ce qui montre qu'un champ assez important est obtenu par ce modèle.

3.3 Mécanisme de piégeage : modélisation des défauts - pièges

La méthode classique pour décrire les interactions d'une paroi de domaine avec un point de piégeage est de traiter la paroi comme une membrane déformable fixée en différents points de sa surface. Sous l'effet d'une pression magnétique $2\mu_0 M_s H$, créée par le champ appliqué, la paroi se déplace dans la phase principale tant qu'elle ne rencontre pas de défauts capables de l'arrêter. Les points de piégeage sont caractérisés par une force d'accrochage maximale, proportionnelle au gradient de l'énergie de paroi $f = (\partial \gamma / \partial z)_{max}$.

La paroi se trouve bloquée sur le réseau de défauts s'ils sont suffisamment nombreux et si la force f est assez forte. Notons par S la surface de la paroi de domaine avec laquelle le défaut interagit. Pour une valeur donnée de la force f , plus la surface S est petite, plus l'efficacité du piégeage est grande. Le champ critique nécessaire pour dépiéger la paroi localisée sur site unique d'ancrage s'exprime par :

$$H_{dp} = \frac{f}{2\mu_0 M_s S} \quad (27)$$

Comme S diminue quand la densité ρ de sites de piégeage augmente, il est clair que, pour obtenir une coercitivité importante, il est essentiel d'avoir un grand nombre de défauts.

En appliquant un champ H parallèlement à la direction des moments magnétiques, la paroi se déforme, en augmentant la surface d'interaction avec chaque site d'accrochage, ce qui fait diminuer localement le champ de dépiégeage. Quand le champ H croît, la paroi se décolle du centre d'ancrage. Elle se propage dans le volume avant de s'ancrer sur un autre piège, de surface d'interaction encore plus petite. Par conséquent, le champ doit être encore augmenté pour libérer de nouveau la paroi.

Le paramètre pertinent dans ce modèle est la surface d'interaction S , qui dépend du mécanisme par lequel une distribution de centres de piégeage interagit avec les parois. Gaunt [Gaunt 83] a estimé cette surface à :

$$S = \sqrt{\pi\gamma / 3\mu_0 M_s H\rho} \quad (28)$$

en utilisant une analogie avec un modèle développé par Friedel pour décrire le déplacement des dislocations [Friedel 63].

Dans ce modèle, le champ de dépiégeage s'exprime selon :

$$H_{dp} = \frac{3\rho f^2}{4\pi\mu_0 M_s} = 0.24 \frac{\rho f^2}{\mu_0 M_s} \quad (29)$$

Cette relation n'est valable que dans le cas d'un fort piégeage dans la limite où $\beta = 3f / 8\pi\gamma b > 1$. $4b$ est la dimension du piège du même ordre de grandeur que la largeur de paroi.

Si les sites d'accrochages sont distribués uniformément, l'énergie du système est indépendante de la position de la paroi et f devient négligeable, car $\partial\gamma / \partial z \rightarrow 0$ et, par conséquent, $H_{dp} \rightarrow 0$. L'accrochage est alors directement lié aux fluctuations de la densité des pièges [Kronmüller 78].

La densité de sites de piégeage requise pour obtenir des valeurs significatives du champ de dépiégeage est de l'ordre de $\rho \approx 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, ce qui représente 1% de la densité atomique. Des valeurs si importantes pour les points d'ancrage ne sont pas réalistes. Cela indique que le piégeage est dû à l'existence de zones riches en hétérogénéités magnétiques.

Dans ce cas, un modèle uni-dimensionnel permet d'évaluer le champ H_{dp} (équation (11)), en calculant l'énergie d'une paroi perturbée par la présence d'une région de largeur d . Les constantes d'échange ($A' = A \pm \Delta A$) et d'anisotropie ($K'_1 = K_1 \pm \Delta K_1$) dans le défaut subissent des fluctuations ΔA et ΔK_1 par rapport à celles de la phase principale.

En champ nul, l'état d'énergie minimum est celui d'une paroi centrée sur le défaut. Quand un champ faible est appliqué, la paroi devient asymétrique. Le champ qui détermine le décrochage de la paroi est [Hilzinger 75], [Kronmüller 78] :

$$H_{dp} = \begin{cases} H_a \frac{d}{\delta_B} \left[\frac{A}{A'} - \frac{K'_1}{K_1} \right] & \text{si } d \ll \delta_B \\ H_a \frac{1}{4} \left[\frac{A}{A'} - \frac{K'_1}{K_1} \right] & \text{si } d \gg \delta_B \end{cases} \quad (30)$$

Quelques remarques s'imposent :

- dans le cas de défauts étroits, le facteur d / δ_B indique que l'efficacité du piégeage dépend de la taille du défaut par rapport à la largeur de la paroi ;
- pour les défauts larges, le champ H_{dp} est indépendant de la taille d et c'est l'interface défaut - phase principale qui constitue le piège. L'expression trouvée ici pour H_{dp} , en prenant $\Delta A = 0, \Delta K_1 = K_1$ correspond au champ calculé dans le cadre du modèle d'Aharoni pour une discontinuité de l'anisotropie en marche d'escalier ($H_{dp} = H_a / 4$).

Pour une perturbation d'anisotropie quasi-harmonique caractérisée par $\Delta K_1 = K_1$ et $r_0 \equiv d / 2$, on obtient un champ de dépiégeage :

$$H_{dp} = H_a \frac{2\delta_B}{3\pi r_0} \quad (31)$$

En conclusion, on peut dire que le champ de dépiégeage varie comme d / δ_B pour les défauts étroits et comme δ_B / d pour les défauts larges (Figure 11). Quand d est de l'ordre de la largeur de la paroi, l'effet du piégeage est maximum et le champ H_{dp} est de l'ordre de $0.3H_a$.

Cette valeur est inférieure aux valeurs obtenues pour les mécanismes initiaux, fondés sur la nucléation (paragraphe 3.1).

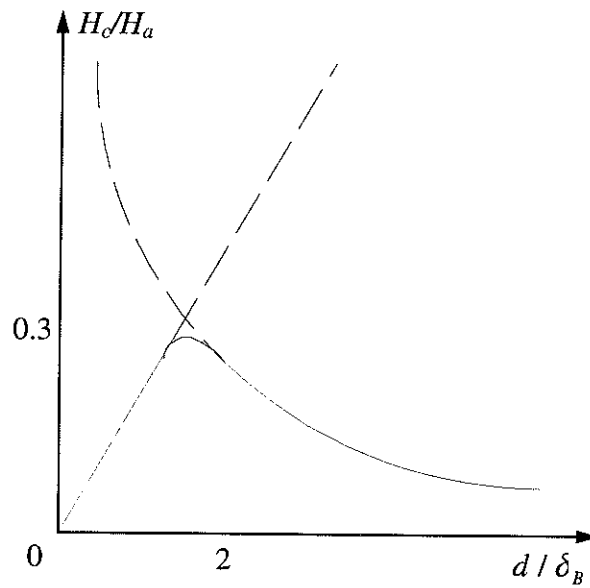


Figure 11 : Dépendance du champ de dépiégeage en fonction de la taille du défaut

Tous les modèles présentés prévoient un champ critique proportionnel au champ d'anisotropie. A l'exception du modèle de Stoner-Wohlfarth, le champ critique reste inférieur au champ d'anisotropie. La description réaliste des défauts reste un problème complexe ; dans les exemples présentés, l'influence des défauts est décrite d'une façon simpliste.

Chapitre II

Micromagnétisme et méthodes de minimisation

1. Introduction

Ce chapitre comporte deux parties. La première (section 2) est consacrée aux hypothèses du micromagnétisme et à la présentation des différents termes de l'énergie libre d'un système ferromagnétique (paragraphe 2.1 et 2.2). Une approche variationnelle de l'énergie libre permet de définir les conditions d'équilibre et les différents champs ressentis localement par l'aimantation (paragraphe 2.3). Parmi ceux-ci se trouve le champ démagnétisant. Différentes formulations de ce champ sont présentées dans le paragraphe 2.4 ainsi qu'un ensemble de théorèmes sur le minorant et le majorant de l'énergie magnétostatique, menant aux inégalités de Brown.

La deuxième partie (section 3) propose une revue des techniques de minimisation utilisées en micromagnétisme. Le paragraphe 3.1 fait le point sur les difficultés rencontrées dans l'emploi des méthodes de Jacobi et Gauss-Seidel. Elles sont de nos jours de plus en plus délaissées au profit de méthodes plus phénoménologiques, comme celle fondée sur l'intégration des équations de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG). Ces équations décrivent la précession des moments magnétiques avec dissipation autour d'un champ effectif local (paragraphe 3.2). Lorsque le champ est fixe, l'intégration exacte est connue et mène aux relations du paragraphe 3.2.2. Dans le cas général, l'utilisation des techniques numériques s'avère nécessaire (paragraphe 3.2.3 et 3.2.4). Ce chapitre présente finalement les bases des calculs micromagnétiques dans l'approximation des éléments finis (paragraphe 3.3). Ce paragraphe sert à argumenter l'approche différente que nous avons développée au cours de cette thèse.

2. Micromagnétisme

2.1 Hypothèses du micromagnétisme

Le micromagnétisme est une théorie des milieux continus, qui décrit le comportement des matériaux ferromagnétiques. L'échelle utilisée est suffisamment petite pour décrire les détails des domaines magnétiques et, en même temps, assez grande pour approximer l'angle entre les directions des spins atomiques par une fonction continue. Dans ces conditions, la direction de l'aimantation spontanée $\mathbf{M} = M_s \mathbf{m}$ varie d'une façon continue, en fonction de la position, et garde un module constant. La compétition entre les termes de l'énergie libre détermine la distribution d'équilibre du système.

2.2 Energie libre de Gibbs du système ferromagnétique

L'énergie libre de Gibbs pour un système ferromagnétique placé dans un champ magnétique extérieur est la somme de plusieurs termes [Brown 63] :

$$F_t = F_H + F_D + F_{ex} + F_K \quad (1)$$

où F_H est l'énergie Zeeman, F_D l'énergie du champ démagnétisant, F_{ex} l'énergie d'échange et F_K l'énergie d'anisotropie. L'expression de l'énergie totale s'écrit :

$$F_t = \int_V (-\mu_0 M_s \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}} - \frac{1}{2} \mu_0 M_s \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}_D \{\mathbf{m}(\mathbf{r})\} - P_K [\mathbf{u}_K \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r})] + A (\nabla \mathbf{m}(\mathbf{r}))^2) d^3 r \quad (2)$$

où $\mathbf{H}_D \{\mathbf{m}(\mathbf{r})\}$ désigne le champ dipolaire issu des interactions dipolaires entre les moments magnétiques, $\mathbf{u}_K$ est le vecteur unité de la direction de l'axe d'anisotropie, P_K est un polynôme qui décrit l'anisotropie magnétocristalline et A est la constante d'échange. La notation $(\nabla \mathbf{m}(\mathbf{r}))^2$ s'identifie à $\sum_{\alpha=\{x,y,z\}} \sum_{\beta=\{x,y,z\}} (\partial_\alpha m_\beta)^2$ en coordonnées cartésiennes.

2.2.1 Energie Zeeman

L'énergie Zeeman

$$F_H = -\mu_0 M_s \int_V \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}} d^3 r \quad (3)$$

représente l'interaction du système ferromagnétique avec le champ magnétique appliqué.

2.2.2 Energie du champ démagnétisant

Les configurations magnétiques non-homogènes et les charges de surface sont les sources du champ démagnétisant. L'énergie qui leur est associée

$$F_D = -\frac{1}{2} \mu_0 M_s \int_V \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}_D \{\mathbf{m}(\mathbf{r})\} d^3 r \quad (4)$$

est une self-énergie (énergie mutuelle) qui décrit l'interaction des moments magnétiques avec leur propre champ.

2.2.3 Energie d'anisotropie magnétocristalline

L'énergie magnétocristalline est le terme d'énergie qui respecte la symétrie du réseau cristallin. Pour un cristal avec une symétrie quadratique ou hexagonale, l'énergie d'anisotropie a la forme :

$$\begin{aligned} F_K &= \int_V (K_1 \sin^2(\mathbf{u}_K, \mathbf{m}(\mathbf{r})) + K_2 \sin^4(\mathbf{u}_K, \mathbf{m}(\mathbf{r})) + K_3 \sin^6(\mathbf{u}_K, \mathbf{m}(\mathbf{r}))) d^3r \\ &= - \int_V P_K[\mathbf{u}_K \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r})] d^3r \end{aligned} \quad (5)$$

où K_1 , K_2 , K_3 sont les constantes d'anisotropie expérimentales. P_K est un polynôme ayant comme variable le cosinus de l'angle entre l'aimantation et l'axe de facile aimantation.

2.2.4 Energie d'échange

Les interactions coulombiennes ne peuvent pas justifier l'ordre ferromagnétique qui existe dans certains matériaux, puisque sa forme classique ne dépend pas du spin. Par conséquent, la réponse sur l'origine du ferromagnétisme est donnée dans le cadre de la mécanique quantique. Les interactions qui conduisent à un ordre magnétique sont les interactions d'échange. L'expression de l'énergie d'échange qui provient de l'hamiltonien de Heisenberg est :

$$F_{ex} = - \sum_i \sum_{j \text{ voisin } i} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (6)$$

où J_{ij} est une constante de couplage. Dans le cas des interactions d'échange isotropes et pour un spin constant, en considérant uniquement les interactions entre les plus proches voisins, l'expression précédente se simplifie :

$$F_{ex} = -JS^2 \sum_i \sum_{j \text{ voisin } i} \cos \varphi_{ij} \quad (7)$$

où φ_{ij} est l'angle entre les directions de deux spins. Dans l'hypothèse où l'angle φ_{ij} est faible, l'approximation des milieux continus est valide et consiste à remplacer les orientations discrètes des spins $\{\mathbf{m}_i\}$ par un champ de vecteurs $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ tel que $|\mathbf{m}(\mathbf{r})| = 1$. L'expression précédente devient :

$$F_{ex} = \text{const} + \frac{1}{2} JS^2 \sum_i \sum_{j \text{ voisin } i} [(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \cdot \nabla \mathbf{m}|_i]^2 \quad (8)$$

où $\mathbf{r}_i$ désigne la position du spin i et $\nabla \mathbf{m}|_i$ le gradient du champ $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ près de $\mathbf{r}_i$.

Pour un cristal à une symétrie hexagonale ou quadratique, dans la limite des milieux continus, le surplus d'énergie d'échange dû au non-parallélisme entre spins est :

$$F_{ex} = \int_V (A_{\perp} ((\nabla m_x(\mathbf{r}))^2 + (\nabla m_y(\mathbf{r}))^2) + A_{\parallel} (\nabla m_z(\mathbf{r}))^2) d^3r \quad (9)$$

où $A_{\perp}$ et $A_{\parallel}$ sont les constantes d'échange respectivement perpendiculaire et parallèle à l'axe c du cristal, supposé orienté selon Oz . Les constantes d'échange dépendent du paramètre de maille. Expérimentalement, on peut uniquement déterminer une constante effective A , ce qui donne :

$$F_{ex} = \int_V A (((\nabla m_x(\mathbf{r}))^2 + (\nabla m_y(\mathbf{r}))^2 + (\nabla m_z(\mathbf{r}))^2) d^3r \quad (10)$$

2.3 Etat d'équilibre du système ferromagnétique

Les conditions d'équilibre d'un système magnétique sont obtenues en minimisant $F_t\{\mathbf{m}(\mathbf{r}), \nabla \mathbf{m}(\mathbf{r})\}$ par rapport au champ de vecteurs $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ avec la contrainte $|\mathbf{m}(\mathbf{r})| = 1$.

$$\begin{aligned} \delta F_t|_{\text{eq}} &= 0 \\ \delta^2 F_t|_{\text{eq}} &> 0 \end{aligned} \quad (11)$$

En utilisant la méthode variationnelle, les variations des termes d'énergie s'écrivent :

- variation de l'énergie Zeeman :

$$\delta F_H = -\mu_0 M_s \int_V \delta \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}} d^3r \quad (12)$$

- variation de l'énergie du champ démagnétisant (voir paragraphe 2.4.2) :

$$\delta F_D = -\mu_0 M_s \int_V \delta \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}_D \{\mathbf{m}(\mathbf{r})\} d^3r \quad (13)$$

- variation de l'énergie d'anisotropie :

$$\delta F_K = - \int_V \frac{\partial P_K}{\partial \mathbf{m}} [\mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{u}_K] (\delta \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{u}_K) d^3r \quad (14)$$

- variation de l'énergie d'échange :

$$\delta F_{ex} = F_{ex}(m_x + \delta m_x, m_y + \delta m_y, m_z + \delta m_z) - F_{ex}(m_x, m_y, m_z) \quad (15)$$

$$\delta F_{ex} \equiv 2 \int_V A (\nabla \delta m_x \nabla m_x + \nabla \delta m_y \nabla m_y + \nabla \delta m_z \nabla m_z) d^3r \quad (16)$$

En tenant compte de l'identité :

$$\nabla(\delta m_i) \nabla m_i = \text{div}(\delta m_i \nabla m_i) - \delta m_i \Delta m_i \quad (17)$$

on obtient deux termes, un terme de surface et un terme de volume :

$$\delta F_{ex} = 2 \iint_S A \sum_i \delta m_i (\nabla m_i \cdot d\mathbf{s}) - 2 \int_V A \sum_i \delta m_i \Delta m_i d^3r \quad (18)$$

Le terme de surface peut encore s'écrire :

$$\begin{aligned} 2 \iint_S A \sum_i \delta m_i (\nabla m_i \cdot d\mathbf{s}) &= 2 \iint_S A \sum_i \delta m_i \left(\frac{\partial m_i}{\partial n} \cdot d\mathbf{s} \right) = \\ &= 2 \iint_S A \delta \mathbf{m} \cdot \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} d\mathbf{s} \end{aligned} \quad (19)$$

Puisque $m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 = 1$, on a :

$$\sum_i m_i \frac{\partial m_i}{\partial n} = \mathbf{m} \cdot \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} = 0 \quad (20)$$

La variation d'un vecteur tournant s'écrit :

$$\delta \mathbf{m} = \delta \theta \times \mathbf{m} \quad (21)$$

où $\delta \theta$ est un vecteur rotation perpendiculaire à $(\mathbf{m}, \delta \mathbf{m})$. Le terme de surface devient :

$$\begin{aligned} 2 \iint_S A \delta \mathbf{m} \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} d\mathbf{s} &= 2 \iint_S A (\delta \theta \times \mathbf{m}) \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} d\mathbf{s} = \\ &= 2 \iint_S A \delta \theta (\mathbf{m} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n}) d\mathbf{s} \end{aligned} \quad (22)$$

qui pour $\delta F_{ex\,surf} = 0$ donne :

$$\mathbf{m} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} = 0 \quad (23)$$

De (20) et (23) nous obtenons :

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} = 0 \quad (24)$$

qui est la condition de Brown à la surface d'un matériau magnétique.

La variation du terme de volume est :

$$\delta F_{ex\,vol} = -2 \int_V A \sum_i \delta m_i(\mathbf{r}) \Delta m_i(\mathbf{r}) d^3r = -2 \int_V A \delta \mathbf{m}(\mathbf{r}) \Delta \mathbf{m}(\mathbf{r}) d^3r \quad (25)$$

Avec la relation supplémentaire (20), on obtient la solution de la minimisation :

$$\delta F_t = -\int_V \mu_0 M_s \delta \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}_t(\mathbf{r}) d^3r + 2A \iint_S \delta \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \frac{\partial \mathbf{m}(\mathbf{r})}{\partial n} ds = 0 \quad (26)$$

où $\mathbf{H}_t$ est le champ magnétique total ressenti par le moment magnétique :

$$\mathbf{H}_t(\mathbf{r}) = \frac{2A}{\mu_0 M_s} \Delta \mathbf{m}(\mathbf{r}) + \frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\partial P_K}{\partial \mathbf{m}} [\mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{u}_K] \mathbf{h}_K + \mathbf{H}_{\text{ext}} + \mathbf{H}_D(\mathbf{r}) \quad (27)$$

Comme nous l'avons vu, l'annulation du terme de surface donne la condition de Brown (24). La condition d'équilibre issue de l'intégrale volumique s'écrit en tout point du matériau en tenant compte de la condition (20) :

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}_t(\mathbf{r}) = \mathbf{0} \quad (28)$$

c'est-à-dire, à l'équilibre, la distribution d'aimantation en tout point du matériau est orientée dans la direction du champ total local. L'annulation du couple à l'équilibre et la conservation de la norme de $\mathbf{m}$ peuvent se résumer par la relation suivante :

$$\mathbf{H}_t(\mathbf{r}) - \lambda \mathbf{m}(\mathbf{r}) = \mathbf{0} \quad (29)$$

où λ est un multiplicateur de Lagrange.

Dans l'expression du champ total le terme d'échange agit à courte distance (premiers voisins) ; le champ d'anisotropie et le champ appliqué sont des termes locaux. En revanche, le terme démagnétisant agit à longue distance et il est le plus difficile à estimer, car il dépend de la distribution globale de l'aimantation.

2.4 Magnétostatique (évaluation du champ dipolaire)

2.4.1 Résolution de l'équation avec des dérivées partielles

La distribution d'aimantation dans un matériau magnétique crée un champ exciteur $\mathbf{H}$ dans tout l'espace qui coïncide avec le champ démagnétisant $\mathbf{H}_D$ à l'intérieur du système. L'approche potentiel scalaire consiste à faire une analogie entre électrostatique et magnétostatique, en définissant des charges fictives de volume, dues à la non-uniformité de l'aimantation dans le matériau, et des charges fictives de surface et d'interface, dues aux relations de continuité du potentiel.

En magnétostatique, en absence des courants tourbillonnaires, on a :

$$\nabla \times \mathbf{H}_D(\mathbf{r}) = \mathbf{0} \quad (30)$$

Le champ de vecteurs $\mathbf{H}_D(\mathbf{r})$ est irrotationnel et donc, par analogie avec l'électrostatique, il dérive d'un potentiel scalaire ϕ par la relation :

$$\mathbf{H}_D(\mathbf{r}) = -\nabla \phi(\mathbf{r}) \quad (31)$$

Le potentiel ϕ est gouverné, à l'intérieur du matériau magnétique, par l'équation de Poisson :

$$-\Delta \phi_{int}(\mathbf{r}) = \rho_m(\mathbf{r}) \quad (32)$$

avec $\rho_m(\mathbf{r}) = -\text{div} \mathbf{M}(\mathbf{r})$ (densité volumique de charges magnétiques). A l'extérieur, il est gouverné par l'équation de Laplace :

$$-\Delta \phi_{ext}(\mathbf{r}) = 0 \quad (33)$$

A la surface S du matériau magnétique, les relations de passage pour le potentiel sont obtenues en écrivant la continuité de la composante tangentielle de $\mathbf{H}_D$. La composante normale présente une discontinuité à cause des charges de surface [Aharoni 91a] :

$$\phi_{int}|_S = \phi_{ext}|_S \quad (34)$$

$$\left. \frac{\partial \phi_{int}}{\partial n} \right|_S - \left. \frac{\partial \phi_{ext}}{\partial n} \right|_S = \sigma_m \quad (35)$$

avec $\sigma_m(\mathbf{r}) = \mathbf{M}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r})$ (densité surfacique de charges magnétiques).

D'après la théorie des équations aux dérivées partielles, les équations (32) et (33) avec les conditions de passage (34), (35) et la condition supplémentaire d'annulation du potentiel à l'infini ont une solution unique :

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\rho_m(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r' + \frac{1}{4\pi} \oint_S \frac{\sigma_m(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} ds' \quad (36)$$

Le potentiel magnétique ϕ est donné par une intégrale de volume sur les charges de volume et une intégrale de surface sur les charges de surface. Le champ démagnétisant est le gradient du potentiel de l'expression précédente, il s'exprime :

$$\mathbf{H}_D(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_V \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho_m(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^3 r' + \frac{1}{4\pi} \oint_S \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sigma_m(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} ds' \quad (37)$$

La contribution du champ démagnétisant à l'énergie libre F_l peut s'écrire comme l'interaction des charges magnétiques avec le potentiel ϕ :

$$\begin{aligned} F_D &= -\frac{1}{2}\mu_0 \int_V M_s(\mathbf{m}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{H}_D(\mathbf{r}')) d^3 r' \\ &= \frac{1}{2}\mu_0 \int_{V_e} \rho_m(\mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}') d^3 r' + \frac{1}{2}\mu_0 \oint_S \sigma_m(\mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}') ds' \end{aligned} \quad (38)$$

en accord avec l'analogie électrostatique - magnétostatique.

A partir de la relation (32) nous pouvons associer au potentiel ϕ une fonction de Green telle que :

$$\Delta G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (39)$$

où G est la fonction de Green :

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (40)$$

La solution de l'équation (32) prend la forme :

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) &= \int_V G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho_m(\mathbf{r}') d^3 r' + \oint_S G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sigma_m(\mathbf{r}') ds' \\ &= [G * \rho_m](\mathbf{r}) + [G * \sigma_m](\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (41)$$

où $G * \rho_m$ et $G * \sigma_m$ sont les produits de convolution entre la fonction de Green et les charges de volume et de surface au sens des distributions. L'expression du champ démagnétisant devient :

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_D(\mathbf{r}) &= -\int_V \nabla G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho_m(\mathbf{r}') d^3 r' - \oint_S \nabla G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sigma_m(\mathbf{r}') ds' \\ &= -[\nabla G * \rho_m](\mathbf{r}) - [\nabla G * \sigma_m](\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (42)$$

Les équations (37) et (42) sont des formes intégrales pour calculer le champ démagnétisant. Le calcul peut être fait directement, en calculant les intégrales, ou en utilisant les transformées de Fourier.

Le calcul direct du champ démagnétisant revient à estimer deux intégrales (de volume et de surface) pour chaque point $\mathbf{r}$ considéré. La méthode des transformées de Fourier utilise le théorème du produit de convolution. Celui-ci stipule que la transformée de Fourier du produit de convolution de deux fonctions est le produit direct des transformées de Fourier des

fonctions individuelles. Pour estimer le champ $\mathbf{H}_D$, il suffit de calculer dans (42) les transformées de Fourier de ∇G et des deux densités ρ_m et σ_m , de faire un produit et d'appliquer la transformée inverse au produit.

Une autre possibilité pour calculer le champ démagnétisant est de partir de l'équation de Maxwell pour l'induction $\mathbf{B}_D$:

$$\nabla \cdot \mathbf{B}_D(\mathbf{r}) = 0 \quad (43)$$

Le champ $\mathbf{B}_D$ est solénoïdal et, par conséquent, il peut s'écrire comme le rotationnel d'une grandeur vectorielle $\mathbf{A}$, appelée potentiel vecteur :

$$\mathbf{B}_D(\mathbf{r}) = \mu_0(\mathbf{H}_D(\mathbf{r}) + \mathbf{M}(\mathbf{r})) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (44)$$

Le vecteur $\mathbf{A}$ n'est pas unique, car il n'est défini qu'à un gradient près. Pour résoudre le problème d'unicité, il est toujours possible d'imposer une condition de jauge, comme celle de Coulomb ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$). En appliquant l'opérateur $\nabla \times$ sur l'équation (44) et en tenant compte de la relation (30) et de la jauge de Coulomb, on obtient les équations pour le potentiel vecteur à l'intérieur du matériau :

$$-\Delta \mathbf{A}_{\text{int}}(\mathbf{r}) = \mu_0 \nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r}) \quad (45)$$

et à l'extérieur du système physique :

$$-\Delta \mathbf{A}_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = 0 \quad (46)$$

Les conditions de passage du potentiel vecteur sont déduites de celles pour le flux magnétique $\mathbf{B}_D$: continuité de sa composante normale et discontinuité de sa composante tangentielle à cause des courants qui traversent la surface.

$$\mathbf{A}_{\text{int}}|_S = \mathbf{A}_{\text{ext}}|_S \quad (47)$$

$$\left. \frac{\partial \mathbf{A}_{\text{int}}}{\partial n} \right|_S - \left. \frac{\partial \mathbf{A}_{\text{ext}}}{\partial n} \right|_S = \mu_0 \mathbf{M} \times \mathbf{n} \quad (48)$$

De la même manière que pour le potentiel scalaire, les équations aux dérivées partielles pour $\mathbf{A}$, combinées avec les conditions de passage et la condition d'annulation du potentiel vecteur à l'infini, conduisent à la solution suivante :

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \frac{\nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' + \frac{\mu_0}{4\pi} \oint_S \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}') \times \mathbf{n}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} ds' \quad (49)$$

où $\nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r})$ a la signification d'une densité de courant ampérien et $\mathbf{M}(\mathbf{r}) \times \mathbf{n}(\mathbf{r})$ d'une densité de courant surfacique. A partir de la relation ci-dessus, on peut calculer le flux magnétique $\mathbf{B}_D$ et le champ démagnétisant $\mathbf{H}_D$.

2.4.2 Théorèmes de la magnétostatique

En travaillant avec l'énergie du champ démagnétisant, quelques identités sont utiles. Elles peuvent être obtenues en partant du théorème d'orthogonalité pour deux champs de vecteurs [Asselin 86] : si $\mathbf{H}$ et $\mathbf{B}$ sont deux champs irrotationnels et solénoïdaux, qui décroissent à l'infini plus rapidement que $1/r^2$, l'intégrale

$$\int_{V \rightarrow \infty} \mathbf{H} \cdot \mathbf{B} d^3r = 0 \quad (50)$$

sur tout l'espace, s'annule.

A l'intérieur de la matière, en absence de source extérieure de champ magnétique, le champ excitateur $\mathbf{H}$ correspond au champ démagnétisant $\mathbf{H}_D$. L'énergie dipolaire est définie par :

$$F_D = -\frac{1}{2} \mu_0 \int_{V_c} \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}_D d^3r = -\frac{1}{2} \mu_0 \int_{V \rightarrow \infty} \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}_D d^3r \quad (51)$$

car $\mathbf{M} = \mathbf{0}$ à l'extérieur du système magnétique (V_c est le volume du corps ferromagnétique).

Comme pour tout champ de vecteurs, l'aimantation peut être décomposée en une composante solénoïdale et une composante irrotationnelle :

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}_D - \mathbf{H}_D \\ \nabla \times \mathbf{H}_D &= \mathbf{0} \\ \nabla \cdot \mathbf{B}_D &= 0 \end{aligned} \quad (52)$$

Il en résulte une énergie démagnétisante de la forme :

$$F_D = -\frac{1}{2} \int_{V \rightarrow \infty} (\mathbf{B}_D - \mu_0 \mathbf{H}_D) \cdot \mathbf{H}_D d^3r = \frac{1}{2} \mu_0 \int_{V \rightarrow \infty} H_D^2 d^3r \quad (53)$$

Deux autres expressions analogues de l'énergie dipolaire peuvent être obtenues en remplaçant $\mathbf{H}_D$ dans la définition (51) par $\frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}_D - \mathbf{M}$:

$$F_D = \frac{1}{2} \mu_0 \int_{V_c} M_s^2 d^3r - \frac{1}{2} \int_{V \rightarrow \infty} \mathbf{M} \cdot \mathbf{B}_D d^3r \quad (54)$$

et puis en substituant $\mathbf{M}$ dans le deuxième terme de la relation précédente par $\frac{1}{\mu_0}\mathbf{B}_D - \mathbf{H}_D$ et en tenant compte du théorème d'orthogonalité :

$$F_D = \frac{1}{2}\mu_0 \int_{V_c} M_s^2 d^3r - \frac{1}{2\mu_0} \int_{V \rightarrow \infty} B_D^2 d^3r \quad (55)$$

En utilisant les relations précédentes, Brown [Brown 62] propose deux fonctionnelles pour résoudre les problèmes de magnétostatique. Elles dépendent soit d'un potentiel magnétique scalaire, soit d'un potentiel magnétique vectoriel et elles peuvent être utilisées pour résoudre les équations par des méthodes numériques [Aharoni 91b].

2.4.3 Majorant de l'énergie dipolaire

A partir d'un champ arbitraire solénoïdal $\mathbf{B}$ tel que $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$, on peut former un majorant de l'énergie démagnétisante F_D :

$$U(\mathbf{M}, \mathbf{B}) = F_D + \frac{1}{2\mu_0} \int_{V \rightarrow \infty} |\mathbf{B} - \mathbf{B}_D|^2 d^3r \quad (56)$$

En utilisant l'expression (55) du paragraphe précédent, on obtient après développement :

$$U(\mathbf{M}, \mathbf{B}) = \frac{1}{2}\mu_0 \int_{V_c} M_s^2 d^3r - \frac{1}{\mu_0} \int_{V \rightarrow \infty} \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}_D d^3r + \frac{1}{2\mu_0} \int_{V \rightarrow \infty} B^2 d^3r \quad (57)$$

Comme $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$, le deuxième terme s'identifie à $\int_{V_c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{M} d^3r$. La relation précédente fait apparaître une identité remarquable et devient après transformation :

$$U(\mathbf{M}, \mathbf{B}) = \frac{1}{2\mu_0} \int_{V \rightarrow \infty} |\mathbf{B} - \mu_0 \mathbf{M}|^2 d^3r \quad (58)$$

$U(\mathbf{M}, \mathbf{B})$ est une forme quadratique positive et un majorant de F_D à condition que $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$. En pratique, nous utiliserons la formulation $U(\mathbf{M}, \nabla \times \mathbf{a})$, où $\mathbf{a}$ est un champ de vecteurs quelconques.

Pour une distribution d'aimantation donnée, la minimisation de $U(\mathbf{M}, \nabla \times \mathbf{a})$ par rapport à un champ de vecteurs $\{\mathbf{a}\}$ revient à résoudre $-\frac{1}{\mu_0} \Delta \mathbf{a} = \nabla \times \mathbf{M}$, en utilisant la jauge de Coulomb

$\nabla \cdot \mathbf{a} = 0$, avec une condition d'annulation du potentiel vecteur à l'infini. Cette dernière condition est en général difficile à respecter en simulation numérique et elle est souvent

appliquée sur un contour ou une surface trop proche du système magnétique étudié. Dans la limite où la surface est repoussée à grande distance, les effets de taille finie disparaissent et l'estimation du potentiel vecteur $\mathbf{a}$ tend vers la valeur exacte $\mathbf{A}$. Le majorant $U(\mathbf{M}, \nabla \times \mathbf{a})$ tend par conséquent vers la valeur exacte de l'énergie dipolaire.

2.4.4 Minorant de l'énergie dipolaire

A partir d'un champ arbitraire de vecteurs $\mathbf{H}$ vérifiant $\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{0}$ ou encore $\mathbf{H} = -\nabla \varphi$, on peut former le minorant :

$$U(\mathbf{M}, \mathbf{H}) = F_D - \frac{1}{2} \mu_0 \int_{V \rightarrow \infty} |\mathbf{H} - \mathbf{H}_D|^2 d^3 r \quad (59)$$

En utilisant l'expression (53) de F_D , nous obtenons après développement :

$$\begin{aligned} U(\mathbf{M}, \mathbf{H}) &= -\frac{1}{2} \mu_0 \int_{V \rightarrow \infty} H^2 d^3 r - \mu_0 \int_{V_c} \mathbf{H} \cdot \mathbf{M} d^3 r \\ &= -\frac{1}{2} \mu_0 \int_{V \rightarrow \infty} (\nabla \varphi)^2 d^3 r + \mu_0 \int_{V_c} \mathbf{M} \cdot \nabla \varphi d^3 r \\ &= U(\mathbf{M}, -\nabla \varphi) \end{aligned} \quad (60)$$

Une estimation de l'énergie démagnétisante peut être obtenue en maximisant $U(\mathbf{M}, -\nabla \varphi)$ par rapport au champ scalaire φ .

2.4.5 Inégalités de Brown

Les conclusions des deux derniers paragraphes, nous permettent d'écrire les inégalités de Brown [Brown 62] :

$$U(\mathbf{M}, -\nabla \varphi) \leq F_D \leq U(\mathbf{M}, \nabla \times \mathbf{a}) \quad (61)$$

Ces inégalités se transforment en égalités dans la limite où les évaluations de φ et $\mathbf{a}$ tendent vers leurs valeurs exactes respectives ϕ et $\mathbf{A}$.

Les minima locaux de $U(\mathbf{M}_{\text{fixé}}, \nabla \times \mathbf{a})$ correspondent à ceux de F_D bien qu'un gradient arbitraire puisse être ajouté au potentiel vecteur (changement de jauge).

Pour mieux comprendre les notions présentées, nous allons vérifier les inégalités de Brown sur un système unidimensionnel étendu parallèlement à l'axe Ox de longueur $2a$ et enfermé dans une boîte externe de longueur $2L$, sur laquelle on impose une condition aux limites du

type Dirichlet (Figure 1). Le système est uniformément aimanté d'abord selon Ox et après selon Oy.

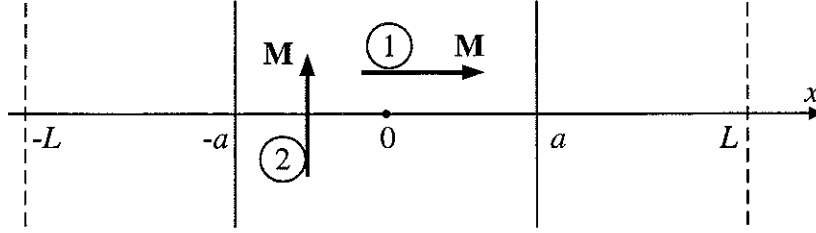


Figure 1 : Exemple de système unidimensionnel pour le calcul du champ démagnétisant

- cas 1 : $\mathbf{M} = M_s \mathbf{u}_x$

* calcul du champ démagnétisant en utilisant le potentiel scalaire ϕ

$$\text{équation laplacienne : } \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0 \text{ à l'intérieur et à l'extérieur} \quad (62)$$

$$\text{conditions aux limites : } \phi(-L) = \phi(L) = 0 \quad (63)$$

$$\phi(-a^-) = \phi(-a^+)$$

$$\phi(a^-) = \phi(a^+)$$

$$\text{conditions de passage : } -\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{-a^+} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{-a^-} = -M_s \quad (64)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{a^-} - \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{a^+} = M_s$$

$$\text{potentiel scalaire : } \phi(x) = M_s \left(1 - \frac{a}{L} \right) x \quad (65)$$

$$\text{champ démagnétisant : } H_{D,x} = -\frac{\partial \phi}{\partial x} = -M_s \left(1 - \frac{a}{L} \right) = H_\infty + M_s \frac{a}{L} \quad (66)$$

* calcul du champ démagnétisant en utilisant le potentiel vecteur $\mathbf{A}$

$$\text{équation laplacienne : } \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial x^2} = \mathbf{0} \text{ à l'intérieur et à l'extérieur} \quad (67)$$

$$\text{conditions aux limites : } \mathbf{A}(-L) = \mathbf{A}(L) = 0$$

$$\mathbf{A}(-a^-) = \mathbf{A}(-a^+)$$

$$\mathbf{A}(a^-) = \mathbf{A}(a^+)$$

$$\text{conditions de passage : } -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x} \Big|_{-a^+} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x} \Big|_{-a^-} = 0 \quad (68)$$

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x} \Big|_{a^-} - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x} \Big|_{a^+} = 0$$

$$\text{potentiel vecteur : } \mathbf{A}(x) = 0 \quad (69)$$

$$\text{champ démagnétisant : } \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = \mu_0 (\mathbf{H}_D + \mathbf{M}) = 0 \quad (70)$$

$$\Rightarrow \mathbf{H}_D = -\mathbf{M} \quad (71)$$

Le comportement des expressions du champ, calculées par les deux formulations, est présenté sur la Figure 2. Le champ calculé par l'intermédiaire du potentiel scalaire est toujours supérieur à celui calculé à l'aide du potentiel vecteur, qui dans ce cas coïncide avec le calcul exact. Quand la dimension de la boîte externe tend vers l'infini, les effets de taille finie disparaissent et le champ calculé par le potentiel scalaire tend aussi vers la valeur exacte.

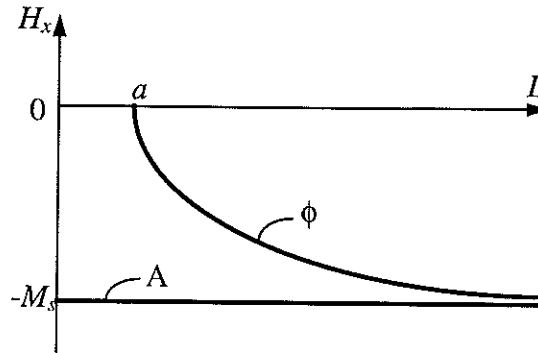


Figure 2 : Variation du champ démagnétisant avec la dimension de la boîte externe pour l'exemple 1

- cas 2 : $\mathbf{M} = M_s \mathbf{u}_y$

* calcul du champ démagnétisant en utilisant le potentiel scalaire ϕ

$$\text{équation laplacienne : } \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0 \text{ à l'intérieur et à l'extérieur} \quad (72)$$

$$\text{conditions aux limites : } \phi(-L) = \phi(L) = 0 \quad (73)$$

$$\begin{aligned}
\phi(-a^-) &= \phi(-a^+) \\
\phi(a^-) &= \phi(a^+) \\
\text{conditions de passage : } -\frac{\partial\phi}{\partial x}\Big|_{-a^+} + \frac{\partial\phi}{\partial x}\Big|_{-a^-} &= 0 \\
\frac{\partial\phi}{\partial x}\Big|_{a^-} - \frac{\partial\phi}{\partial x}\Big|_{a^+} &= 0
\end{aligned} \tag{74}$$

$$\text{potentiel scalaire : } \phi(x) = 0 \tag{75}$$

$$\text{champ démagnétisant : } \mathbf{H}_D = \mathbf{0} = \mathbf{H}_\infty \tag{76}$$

* calcul du champ démagnétisant en utilisant le potentiel vecteur $\mathbf{A}$

$$\text{équation laplacienne : } \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial x^2} = \mathbf{0} \text{ à l'intérieur et à l'extérieur} \tag{77}$$

$$\text{conditions aux limites : } \mathbf{A}(-L) = \mathbf{A}(L) = 0 \tag{78}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}(-a^-) &= \mathbf{A}(-a^+) \\
\mathbf{A}(a^-) &= \mathbf{A}(a^+) \\
-\frac{\partial A_z}{\partial x}\Big|_{-a^+} + \frac{\partial A_z}{\partial x}\Big|_{-a^-} &= 0 \\
\text{conditions de passage : } \frac{\partial A_z}{\partial x}\Big|_{a^-} - \frac{\partial A_z}{\partial x}\Big|_{a^+} &= 0 \\
-\frac{\partial A_z}{\partial x}\Big|_{-a^+} + \frac{\partial A_z}{\partial x}\Big|_{-a^-} &= \mu_0 M_s \\
\frac{\partial A_z}{\partial x}\Big|_{a^-} - \frac{\partial A_z}{\partial x}\Big|_{a^+} &= -\mu_0 M_s
\end{aligned} \tag{79}$$

$$\text{potentiel vecteur : } A_z(x) = -\mu_0 M_s \left(1 - \frac{a}{L}\right)x \tag{80}$$

$$\begin{aligned}
\text{champ démagnétisant : } B_y &= \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} = \mu_0 M_s \left(1 - \frac{a}{L}\right) \\
&= \mu_0 (H_{D,y} + M_s)
\end{aligned} \tag{81}$$

$$\Rightarrow H_{D,y} = -M_s \frac{a}{L} = H_\infty - M_s \frac{a}{L} \tag{82}$$

Les résultats du calcul du champ pour ce système sont synthétisés sur la Figure 3.

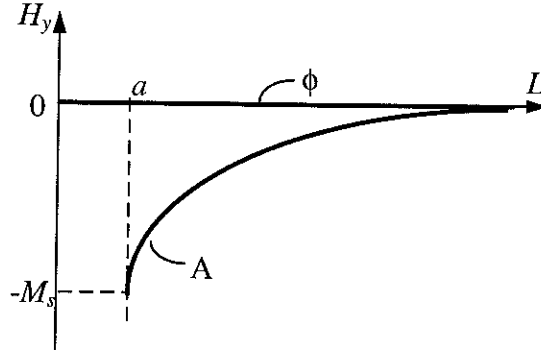


Figure 3 : Variation du champ démagnétisant avec la dimension de la boîte externe pour l'exemple 2

On observe de nouveau des effets de taille finie perturbant dans ce cas les valeurs du champ obtenues par une formulation potentiel vecteur. La formulation potentiel scalaire donne ici le résultat exact.

Maintenant il nous reste à vérifier les inégalités de Brown :

- cas 1

$$\begin{aligned}
 F_D &= \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 V \\
 U_\phi &= \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 V - \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 \frac{a^2}{L^2} V \quad \Rightarrow U_\phi \leq F_D = U_A \\
 U_A &= \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 V
 \end{aligned} \tag{83}$$

- cas 2

$$\begin{aligned}
 F_D &= 0 \\
 U_\phi &= 0 \quad \Rightarrow U_\phi = F_D \leq U_A \\
 U_A &= \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 \frac{a^2}{L^2} V
 \end{aligned} \tag{84}$$

où U_ϕ et U_A sont des formes approximatives pour estimer l'énergie du champ démagnétisant calculées par une ou l'autre des deux formulations.

3. Méthodes de minimisation de l'énergie libre

La résolution des équations aux dérivées partielles du micromagnétisme dans une approche continue consiste à calculer les valeurs de l'orientation de l'aimantation $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ en tout point $\mathbf{r}$

du système physique. Le cas idéal est de pouvoir résoudre analytiquement ce type de problème comme nous l'avons vu dans le premier chapitre. Malheureusement, les solutions analytiques, quoique fort intéressantes, ne sont pas légion et l'aide de l'ordinateur s'avère indispensable. Il est alors nécessaire d'échantillonner les valeurs du champ $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ en un nombre fini de points de calcul.

Les techniques discrètes de minimisation de l'énergie sont des méthodes itératives car les équations du micromagnétisme font intervenir un couplage fort entre la distribution d'aimantation et la distribution du champ local $\mathbf{H}_i$ ressenti par chaque moment. Elles dépendent aussi, fortement, de la méthode de discrétisation du système physique. Dans une approche différences finies, où tous les points de calcul reposent sur un réseau de Bravais, il est possible de définir en tout noeud une estimation du champ total $\mathbf{H}_i$ et d'orienter progressivement l'aimantation locale $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ en direction de $\mathbf{H}_i$ [LaBonte 69], [Della Torre 86], [Jakubovics 91]. Une variante plus physique consiste à mimer l'évolution de l'aimantation vers l'état d'équilibre en intégrant les équations de précession de Landau-Lifshitz-Gilbert. Plusieurs formes de cette équation ont été utilisées pour décrire l'évolution dynamique d'un système ferromagnétique : la limite de l'amortissement infini [Schabes 88a], [Berkov 91] pour les matériaux à forte interaction d'échange ou avec une constante d'amortissement finie [Zhu 89], [Nakatani 89].

Pour traiter des systèmes de formes complexes, plusieurs auteurs ont tenté de généraliser les calculs micromagnétiques dans le cadre de l'approximation des éléments finis [Chen 93], [Schrefl 94a]. La distribution d'équilibre est obtenue par minimisation directe d'une formulation discrète de l'énergie libre.

3.1 Méthodes itératives

En partant d'un état initial donné, il existe deux possibilités [Della Torre 86] pour procéder à la minimisation, en fonction de la méthode de mise à jour des directions d'aimantation.

La méthode de Jacobi utilise la distribution de l'aimantation calculée à l'itération précédente afin de calculer le champ effectif pour chaque noeud du maillage et d'en déduire à chaque noeud.

La méthode de Gauss-Seidel [Del Vecchio 89] calcule le champ démagnétisant pour un noeud donné du maillage. Le vecteur aimantation est ensuite orienté dans la direction du champ

effectif local. Un autre point est ensuite visité, le champ est recalculé et l'aimantation est mise à jour. L'itération est terminée lorsque tous les noeuds du maillage ont été visités. L'algorithme est répété jusqu'à ce qu'un ensemble de vecteurs champ démagnétisant et aimantation stationnaires soit obtenu pour tout le maillage. Des méthodes de sur-relaxation [Torfeh-Isfahani 83], [Della Torre 84] ont été développées pour permettre d'obtenir des solutions en des temps raisonnables.

La vitesse de convergence de la méthode de Jacobi est inférieure à celle de Gauss-Seidel, mais elle a l'avantage de pouvoir être facilement parallélisée. Comme la mise à jour des directions d'aimantation se réalise dynamiquement pour la méthode de Jacobi, on a besoin d'un seul tableau pour stocker les orientations de l'aimantation, par rapport à la méthode de Gauss-Seidel, où deux tableaux sont nécessaires. D'après Schabes [Schabes 91], si les variations d'aimantation entre deux itérations sont faibles, l'état final d'équilibre ne dépend pas de la procédure d'itération utilisée, ni de la manière choisie pour parcourir les noeuds du maillage dans la méthode de Gauss-Seidel. Par conséquent, un choix judicieux du chemin peut accélérer la convergence.

La technique de Gauss-Seidel s'avère dangereuse en micromagnétisme et peut mener à des solutions erronées car l'évolution de l'aimantation locale à chaque itération n'est pas synchrone dans tout le système physique. Des instabilités caractérisées par des variations spatiales rapides de l'aimantation en cours de résolution ont été observées et permettent au système de franchir artificiellement des barrières d'énergie.

L'alignement de l'aimantation parallèlement au champ total à chaque itération peut engendrer des oscillations [LaBonte 69] dans les valeurs calculées pour certaines formes de l'expression du champ total. Trouilloud [Trouilloud 87] propose une méthode différente, où l'aimantation d'un noeud est changée pendant le processus itératif et la nouvelle direction de l'aimantation est calculée en minimisant le couple : pour chaque noeud, le champ total et le couple sont calculés. Le couple dépend de la composante $\mathbf{H}_t^\perp$ du champ total, normale à l'aimantation.

L'aimantation est tournée d'un petit angle dans une direction parallèle à $\mathbf{H}_t^\perp + p|\mathbf{H}_t^\perp|\mathbf{m}$, (p donnant l'angle de rotation) et le couple (proportionnel à $|\mathbf{H}_t^\perp|$) associé à la nouvelle direction de l'aimantation est recalculé. Si le module du couple décroît par rapport à l'ancienne orientation, la nouvelle orientation est gardée et le processus est répété pour le même noeud jusqu'au moment où le module du couple devient plus petit qu'une valeur seuil. Si le module

augmente, la nouvelle orientation n'est pas gardée et un angle de rotation plus petit (le paramètre p étant multiplié par 2) est pris en compte. L'algorithme est repris pour tous les noeuds du maillage.

Lorsque les orientations des vecteurs d'aimantation ont toutes été changées, la nouvelle configuration est stockée et utilisée comme point de départ pour l'itération suivante. La configuration d'équilibre est atteinte quand le maximum du couple en tout point du maillage devient plus petit qu'une valeur choisie comme critère d'arrêt. Le système se trouve dans un minimum local d'énergie.

3.2 Intégration temporelle de l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG)

3.2.1 Formulation du problème

Afin de trouver l'état d'équilibre et en même temps décrire la dynamique du renversement d'aimantation, la méthode d'intégration des équations de Landau-Lifshitz-Gilbert peut être utilisée. Ces équations de caractère phénoménologique décrivent l'évolution des orientations des moments magnétiques qui tournent chacun autour du champ magnétique local.

Le point de départ pour introduire l'équation LLG est la définition du couple qui agit sur un moment magnétique. Comme on l'a vu précédemment, le champ magnétique total ressenti par un moment magnétique est calculé en différentiant l'énergie libre par rapport aux composantes du moment magnétique. En considérant le champ magnétique total $\mathbf{H}_t(\mathbf{r})$ comme une force généralisée et les composantes du moment magnétique $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ comme les coordonnées généralisées, le couple s'écrit :

$$\mathbf{L}(\mathbf{r}) = \mathbf{M}(\mathbf{r}) \times \mu_0 \mathbf{H}_t(\mathbf{r}) \quad (85)$$

La condition d'équilibre de la direction de l'aimantation est obtenue en annulant le couple :

$$\mathbf{L} = \mathbf{0} \quad (86)$$

La complexité du problème réside dans le fait que $\mathbf{L}$ est une fonction complexe des directions de l'aimantation et de ses dérivées ; la condition d'équilibre est une équation non-linéaire aux dérivées partielles pouvant mener à des configurations d'aimantation très différentes, qui ne sont pas toutes stables. Pour vérifier si l'état d'équilibre obtenu est stable, il faut qu'une petite déviation arbitraire par rapport à l'état d'équilibre produise un couple qui ramène le système vers l'état d'équilibre.

La généralisation de l'équation d'équilibre pour un comportement dynamique conduit à :

$$\frac{d\mathbf{G}}{dt} = \mathbf{L} \quad (87)$$

où $\mathbf{G}d^3r$ est le moment cinétique associé au moment magnétique $\mathbf{M}d^3r$. En accord avec la théorie quantique,

$$\mathbf{G} = \frac{\mathbf{M}}{\gamma} \quad (88)$$

où $\gamma = \frac{ge}{2m}$ est le rapport gyromagnétique, avec e et m la charge ($e = -|e|$) et la masse de l'électron respectivement et g un facteur proche de 2 quand le moment est d'origine électronique. En éliminant $\mathbf{G}$ entre les deux dernières relations, on obtient l'équation du mouvement de l'aimantation :

$$\frac{d\mathbf{M}(t)}{dt} = \gamma \mathbf{L}(t) \quad (89)$$

En tenant compte de la définition du couple, l'équation du mouvement devient :

$$\frac{d\mathbf{M}(t)}{dt} = \mu_0 \gamma \mathbf{M}(t) \times \mathbf{H}_t(t) \quad (90)$$

où $\mathbf{H}_t(t)$ est le champ total ressenti par le moment magnétique, supposé faiblement variable avec le temps. Le second membre dans la relation (90) a la forme $\omega \times \mathbf{M}$, avec

$$\omega = -\mu_0 \gamma \mathbf{H}_t \quad (91)$$

et par conséquent cette relation décrit la rotation d'un vecteur $\mathbf{M}$ avec une vitesse angulaire ω autour du champ local $\mathbf{H}_t$. En général, le champ total $\mathbf{H}_t$ a une forme complexe et dépend du vecteur aimantation du point considéré et des autres points.

Le processus dynamique que nous venons de décrire est non-dissipatif, c'est-à-dire que dans un champ constant, la précession doit se poursuivre indéfiniment. La méthode la plus rapide pour introduire un terme dissipatif de manière phénoménologique consiste à ajouter au champ total $\mathbf{H}_t$ un terme proportionnel aux vitesses généralisées, avec η une constante positive.

L'équation du mouvement devient :

$$\frac{d\mathbf{M}(t)}{dt} = \mu_0 \gamma \mathbf{M}(t) \times (\mathbf{H}_t(t) - \eta \dot{\mathbf{M}}(t)) \quad (92)$$

Cette expression est l'équation du mouvement proposée par Gilbert (1955). Pour γ et η donnés, elle est équivalente à la forme proposée précédemment par Landau et Lifshitz (1935) :

$$\frac{d\mathbf{M}(t)}{dt} = \mu_0 \gamma' \mathbf{M}(t) \times \mathbf{H}_t(t) - \frac{\lambda}{M_s^2} \mathbf{M}(t) \times (\mathbf{M}(t) \times \mathbf{H}_t(t)) \quad (93)$$

où γ' et λ sont des paramètres qui dépendent de γ et η . Afin de vérifier l'équivalence des deux formulations, on procède à un changement de paramètres qui conduit à des formes similaires :

$$\frac{d\mathbf{M}(t)}{dt} = \gamma_G \mathbf{M}(t) \times \mathbf{H}_t(t) - \frac{\alpha_G}{M_s} \mathbf{M}(t) \times \frac{d\mathbf{M}(t)}{dt} \quad (94)$$

$$\frac{d\mathbf{M}(t)}{dt} = \gamma_L \mathbf{M}(t) \times \mathbf{H}_t(t) - \frac{\alpha_L}{M_s} \mathbf{M}(t) \times (\mathbf{M}(t) \times \mathbf{H}_t(t)) \quad (95)$$

Les calculs montrent que, en partant de l'équation (68), on retrouve l'équation (69) [Mallinson 87] avec :

$$\begin{aligned} \gamma_L &= \frac{1}{1 + \alpha_G^2} \gamma_G \\ \alpha_L &= \frac{\gamma_G}{1 + \alpha_G^2} \alpha_G \end{aligned} \quad (96)$$

Après les transformations $t \leftarrow |\gamma_G|t$ et respectivement $t \leftarrow |\gamma_L|t$ et le passage aux vecteurs unité de l'aimantation, (68) et (69) deviennent :

$$\frac{d\mathbf{m}(t)}{dt} = -\mathbf{m}(t) \times \mathbf{H}_t(t) - \alpha_G \mathbf{m}(t) \times \frac{d\mathbf{m}(t)}{dt} \quad (97)$$

$$\frac{d\mathbf{m}(t)}{dt} = -\mathbf{m}(t) \times \mathbf{H}_t(t) - \alpha_L \mathbf{m}(t) \times (\mathbf{m}(t) \times \mathbf{H}_t(t)) \quad (98)$$

C'est cette dernière équation que nous utiliserons dans nos simulations afin de décrire l'évolution du système vers l'état d'équilibre.

Le terme d'amortissement permet de dissiper de l'énergie pendant la dynamique et de converger progressivement vers l'état d'énergie minimum. Pour vérifier que l'énergie totale du système diminue d'une façon monotone, nous calculons sa variation infinitésimale δF_t dans un intervalle de temps δt , en supposant la variation du champ total négligeable pendant ce temps.

$$\delta F_t = -\mu_0 M_s \delta \mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_t = -\mu_0 M_s \frac{d\mathbf{m}}{dt} \cdot \mathbf{H}_t \delta t \quad (99)$$

En remplaçant la dérivée de l'aimantation par le second membre de l'équation (98), on obtient :

$$\delta F_t = -\mu_0 M_s \delta \mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_t = -\mu_0 M_s \alpha \delta t H_t^2 \sin^2(\mathbf{m}, \mathbf{H}_t) \leq 0 \quad (100)$$

Celle-ci montre bien que l'énergie diminue pendant le processus dynamique.

Pour les matériaux ferromagnétiques fortement couplés, l'angle entre le champ total et l'aimantation reste faible, même pendant le retournement irréversible. Par conséquent, le cône de précession a un angle petit et l'évolution dynamique de l'aimantation est dominée par le terme dissipatif. Dans la limite où le terme de précession est négligé, on obtient l'équation LLG avec amortissement infini. Cette équation a été utilisée par Schabes et Bertram [Schabes 88a], [Schabes 88b], [Schabes 90] pour calculer les états transitoires dans des petites particules. Berkov [Berkov 93] propose une méthode avec amortissement adaptatif pour calculer les distributions d'aimantation dans des matériaux à faible anisotropie. Sa technique permet de décrire : (i) la transition entre une paroi de Bloch asymétrique et une paroi de Néel dans une couche mince ; (ii) la structure d'une ligne de transition à l'intérieur d'une paroi de Bloch infinie dans un matériau avec anisotropie uniaxiale.

La validité de l'approximation de l'amortissement infini et une discussion détaillée sur le choix du paramètre α ont été données par Zhu et Bertram [Zhu 89] et Nakatani et al. [Nakatani 89].

A cause de la non-linéarité de l'équation LLG, il n'existe pas de procédure standard pour la résoudre. Plusieurs méthodes, pour intégrer ce type d'équations différentielles, sont citées par Schabes [Schabes 91]. Toutes mettent en évidence le problème crucial du choix du pas de temps pour conserver la stabilité du schéma d'intégration.

3.2.2 Méthodes exactes de résolution de l'équation de LLG pour un champ local constant

3.2.2.1 Résolution exacte de l'équation de LLG sans amortissement

Tout d'abord, nous allons passer en revue les méthodes de résolution de l'équation sans terme d'amortissement et pour un champ constant $\mathbf{H}$. L'équation LLG s'écrit :

$$\frac{d\mathbf{m}(t)}{dt} = -\mathbf{m}(t) \times \mathbf{H} \quad (101)$$

La méthode de résolution consiste à écrire le développement complet en série de Taylor de l'aimantation $\mathbf{m}(t + \delta t)$ en fonction de l'aimantation $\mathbf{m}(t)$:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}(t + \delta t) &= \mathbf{m}(t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\delta t)^n}{n!} \frac{d^n \mathbf{m}}{dt^n} = \\ &= \mathbf{m}(t) + \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(\delta t)^{2p+1}}{(2p+1)!} \frac{d^{2p+1} \mathbf{m}}{dt^{2p+1}} + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(\delta t)^{2p}}{(2p)!} \frac{d^{2p} \mathbf{m}}{dt^{2p}} \end{aligned} \quad (102)$$

En remarquant que :

$$\frac{d^{2n} \mathbf{m}}{dt^{2n}} = (-H^2)^{n-1} \frac{d^2 \mathbf{m}}{dt^2} = (-H^2)^{n-1} \mathbf{H} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} \quad (103)$$

et

$$\frac{d^{2n+1} \mathbf{m}}{dt^{2n+1}} = (-H^2)^n \frac{d\mathbf{m}}{dt} \quad (104)$$

on en déduit la relation :

$$\mathbf{m}(t + \delta t) = \mathbf{m}(t) + \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(\delta t)^{2p+1}}{(2p+1)!} (-1)^p H^{2p} \frac{d\mathbf{m}}{dt} + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(\delta t)^{2p}}{(2p)!} (-1)^{p-1} H^{2p-2} \mathbf{H} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} \quad (105)$$

qui laisse apparaître les développements en série des fonctions $\sin(H\delta t)$ et $\cos(H\delta t)$.

L'équation (105) devient :

$$\mathbf{m}(t + \delta t) = \mathbf{m}(t) + \frac{\sin(H\delta t)}{H} (\mathbf{H} \times \mathbf{m}(t)) + \frac{1 - \cos(H\delta t)}{H^2} \mathbf{H} \times (\mathbf{H} \times \mathbf{m}(t)) \quad (106)$$

Finalement, le schéma d'intégration suivant est obtenu :

$$\mathbf{m}(t + \delta t) = \mathbf{m}(t) \cos(H\delta t) + \frac{\sin(H\delta t)}{H} (\mathbf{H} \times \mathbf{m}(t)) + (1 - \cos(H\delta t)) \frac{\mathbf{m}(t) \cdot \mathbf{H}}{H^2} \mathbf{H} \quad (107)$$

qui pour un champ constant donne le résultat exact.

3.2.2.2 Résolution exacte de l'équation de LLG avec amortissement

Nous cherchons maintenant à résoudre l'équation (98) pour un champ constant $\mathbf{H}$ orienté selon l'axe Oz. Ce choix d'orientation n'affecte pas la généralité de la méthode, puisqu'on peut toujours choisir un système de coordonnées et appliquer ensuite une rotation.

La projection de l'équation sur les axes de coordonnées conduit à un système d'équations différentielles couplées du premier ordre :

$$\begin{cases} \dot{m}_x(t) = -Hm_y(t) - \alpha_L H m_x(t)m_z(t) \\ \dot{m}_y(t) = +Hm_x(t) - \alpha_L H m_y(t)m_z(t) \\ \dot{m}_z(t) = \alpha_L H(m_x^2(t) + m_y^2(t)) \end{cases} \quad (108)$$

avec les conditions initiales :

$$\begin{cases} m_x(0) = m_{0,x} \\ m_y(0) = m_{0,y} \\ m_z(0) = m_{0,z} \end{cases} \quad (109)$$

La troisième des équations (108) peut être facilement résolue en tenant compte de la condition sur la conservation de la norme $m_x^2(t) + m_y^2(t) = 1 - m_z^2(t)$. La solution a la forme :

$$m_z(t) = \tanh(\alpha_L H t + \epsilon_0) \quad (110)$$

avec :

$$\epsilon_0 = \operatorname{atanh}(m_{0,z}) \quad (111)$$

Dans les deux premières équations (108) on peut remplacer $m_z(t)$ par sa solution et introduire une variable complexe $m_{\perp} = m_x + im_y$, qui lie les équations et donne une équation combinée :

$$\dot{m}_{\perp}(t) = (i - \alpha_L \tanh(\alpha_L H t + \epsilon_0)) H m_{\perp}(t) \quad (112)$$

Après intégration et séparation des parties réelle et imaginaire, on obtient la solution :

$$\left\{ \begin{aligned} m_x(t) &= \frac{\cosh(\theta_0)}{\cosh(\alpha_L Ht + \theta_0)} (m_{0,x} \cos(Ht) - m_{0,y} \sin(Ht)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{1-m_{0,z}^2}} \frac{m_{0,x} \cos(Ht) - m_{0,y} \sin(Ht)}{\cosh(\alpha_L Ht + \operatorname{atanh}(m_{0,z}))} \\ m_y(t) &= \frac{\cosh(\theta_0)}{\cosh(\alpha_L Ht + \theta_0)} (m_{0,x} \sin(Ht) + m_{0,y} \cos(Ht)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{1-m_{0,z}^2}} \frac{m_{0,x} \sin(Ht) + m_{0,y} \cos(Ht)}{\cosh(\alpha_L Ht + \operatorname{atanh}(m_{0,z}))} \end{aligned} \right. \quad (113)$$

Les relations (110) et (113) ont été établies pour un champ $\mathbf{H}$ constant. Toutefois, elles peuvent être utilisées dans le cas d'un champ variable $\mathbf{H}_t(t)$ à condition que la variation de celui-ci dans l'intervalle de temps δt soit très faible.

3.2.3 Méthodes numériques de résolution de l'équation de LLG pour un champ local

Dans ce paragraphe, nous présentons les techniques numériques d'intégration des équations différentielles nécessaires à la résolution de l'équation de LLG lorsque le champ ressenti par le moment magnétique est local :

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{m}, t) = -\mathbf{m} \times (\mathbf{H}_t + \alpha_L \mathbf{m} \times \mathbf{H}_t) \quad (114)$$

avec une condition initiale $\mathbf{m}(0) = \mathbf{m}_0$ correspondant à la configuration initiale du moment magnétique.

3.2.3.1 Méthode d'Euler

C'est la méthode la plus simple mais conceptuellement la plus importante puisqu'elle permet d'introduire les notions de base utilisées par les autres méthodes.

Son principe repose sur le développement en série de Taylor de :

$$\mathbf{m}(t + \delta t) = \mathbf{m}(t) + \delta t \frac{d\mathbf{m}}{dt} + \vartheta(\delta t^2) \quad (115)$$

$$\mathbf{m}(t + \delta t) = \mathbf{m}(t) + \delta t \mathbf{f}(\mathbf{m}, t) \quad (116)$$

en supposant $\mathbf{m}(t)$ connu à l'instant t . En utilisant les différences à droite, le schéma numérique s'écrit :

$$\mathbf{m}(t + \delta t) = \mathbf{m}(t) + \delta t \mathbf{f}(\mathbf{m}(t), t) \quad (117)$$

La formulation est dite explicite car la solution est calculée en avançant d'un pas δt vers le futur. Elle nécessite naturellement la connaissance de la valeur de la dérivée à l'instant initial. On remarque que l'erreur à chaque pas δt est seulement d'une puissance de δt plus petite que la correction $\mathcal{O}(\delta t^2)$, par conséquent c'est une méthode d'ordre 1.

3.2.3.2 Méthodes du type Runge-Kutta

La méthode consiste à calculer la valeur $\mathbf{m}(t + \delta t)$ en connaissant $\mathbf{m}(t)$ et en introduisant des points intermédiaires de calcul afin de mieux approximer les dérivées intervenant dans le développement en série.

En fonction du nombre des points intermédiaires pris en compte, plusieurs formulations sont possibles :

- Formule à l'ordre 2 (méthode du point médian ou tangente améliorée)

Partant de la formule d'Euler (116) on utilise les différences centrées pour estimer la dérivée au point médian de l'intervalle δt :

$$\mathbf{m}(t + \delta t) = \mathbf{m}(t) + \delta t \mathbf{f}(\mathbf{m}(t + \delta t / 2), t + \delta t / 2) \quad (118)$$

Comme $\mathbf{m}(t + \delta t / 2)$ est inconnu, on le remplace par une estimation et la relation ci-dessus devient :

$$\begin{cases} k_1 = \delta t \mathbf{f}(\mathbf{m}(t), t) \\ k_2 = \delta t \mathbf{f}(\mathbf{m}(t) + \frac{1}{2} k_1, t + \frac{1}{2} \delta t) \\ \mathbf{m}(t + \delta t) = \mathbf{m}(t) + k_2 + \mathcal{O}(\delta t^3) \end{cases} \quad (119)$$

La symétrisation de l'équation annule les termes du premier ordre de l'erreur, conduisant à une méthode à l'ordre 2. Notons que pour évaluer $\mathbf{m}(t + \delta t)$, deux estimations de $\mathbf{f}$ sont nécessaires, pour obtenir k_1 puis k_2 .

- Formule à l'ordre 4 ("formule de Runge-Kutta" proprement dite)

La méthode d'ordre 4 est de loin la technique la plus utilisée parmi tous les schémas d'intégration du type Runge-Kutta. Elle impose quatre évaluations de la fonction $\mathbf{f}$, ce qui peut engendrer une perte de temps importante pour les fonctions compliquées. Le schéma numérique est le suivante :

$$\begin{cases} k_1 = \delta \mathbf{f}(\mathbf{m}(t), t) \\ k_2 = \delta \mathbf{f}(\mathbf{m}(t) + \frac{1}{2}k_1, t + \frac{1}{2}\delta t) \\ k_3 = \delta \mathbf{f}(\mathbf{m}(t) + \frac{1}{2}k_2, t + \frac{1}{2}\delta t) \\ k_4 = \delta \mathbf{f}(\mathbf{m}(t) + k_3, t + \delta t) \\ \mathbf{m}(t + \delta t) = \mathbf{m}(t) + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6} + \mathcal{O}(\delta t^5) \end{cases} \quad (120)$$

Cette méthode comporte de nombreux avantages : elle est facile à programmer et possède une meilleure stabilité que la méthode d'Euler (Figure 4). Seule la connaissance du premier terme $\mathbf{m}(0)$ est suffisante pour démarrer l'intégration. Elle est, par conséquent, très utilisée pour estimer les valeurs initiales nécessaires à l'initialisation des méthodes à pas multiples. Par contre, la méthode est plus lente que les méthodes présentées précédemment à cause du nombre d'estimations de la fonction $\mathbf{f}$.

3.2.3.3 Comparaison des méthodes numériques avec le calcul analytique

Regardons l'évolution d'une fluctuation $\delta \mathbf{m}$ d'origine numérique (erreur de troncature et d'arrondi) en fonction du temps. Soit un champ $\mathbf{H}$ constant, orienté selon l'axe Oz. Effectuons une variation infinitésimale de l'équation non-linéaire (98) :

$$\frac{d\delta \mathbf{m}}{dt} = -\delta \mathbf{m} \times \mathbf{H} - \alpha_L \delta \mathbf{m}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}) - \alpha_L \mathbf{m}(\delta \mathbf{m} \cdot \mathbf{H}) \quad (121)$$

où :

$$\mathbf{m} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad \delta \mathbf{m} = \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \\ \delta z \end{pmatrix} \quad \mathbf{H} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ H \end{pmatrix} \quad (122)$$

Les projections de l'équation différentiée s'écrivent sous la forme matricielle :

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \\ \delta z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha_L H z & -H & -\alpha_L H x \\ H & -\alpha_L H z & -\alpha_L H y \\ 0 & 0 & -2\alpha_L H z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \\ \delta z \end{pmatrix} = \mathbf{A} \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \\ \delta z \end{pmatrix} \quad (123)$$

où la matrice $\mathbf{A}$ dépend des valeurs de composantes de $\mathbf{m}$. Dans le cas particulier où $\mathbf{A}$ est une matrice à valeurs constantes, l'analyse de la stabilité des équations différentielles montre que le schéma d'intégration est stable lorsque :

$$\delta t < \frac{\rho}{\max |\lambda_i|} \quad (124)$$

où ρ est le rayon de stabilité et λ_i l'ensemble des valeurs propres de $\mathbf{A}$. Pour la méthode d'Euler et de la tangente améliorée, $\rho = 2$; pour la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4, $\rho = 2.8$

Dans notre cas où $\mathbf{A}$ est fonction des composantes de $\mathbf{m}$, ses valeurs propres sont :

$$\begin{cases} \lambda_1 = -2\alpha_L H z \\ \lambda_2 = -\alpha_L H z - iH \end{cases} \quad \text{avec } z \in [-1, 1] \quad (125)$$

En remplaçant la valeur maximale $\max |\lambda_i|$ par un majorant des $|\lambda_i|$ pour tout $z \in [-1, 1]$, on obtient pour le pas de temps limite :

$$\delta t < \begin{cases} \frac{\rho}{2\alpha_L H}, & \text{si } \alpha_L > \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{\rho}{\sqrt{1+\alpha_L^2} H}, & \text{si } \alpha_L \leq \frac{1}{\sqrt{3}} \end{cases} \quad (126)$$

Pour comparer les méthodes de résolution numérique présentées précédemment, nous avons résolu l'équation (98) pour $H = 1$ (u.a.), $\alpha_L = 1$, un pas de temps $\delta t = 1.05$ et une orientation initiale du moment selon Ox ($m_x(0) = 1$). Avec ce jeu de paramètres, on se place dans le cas

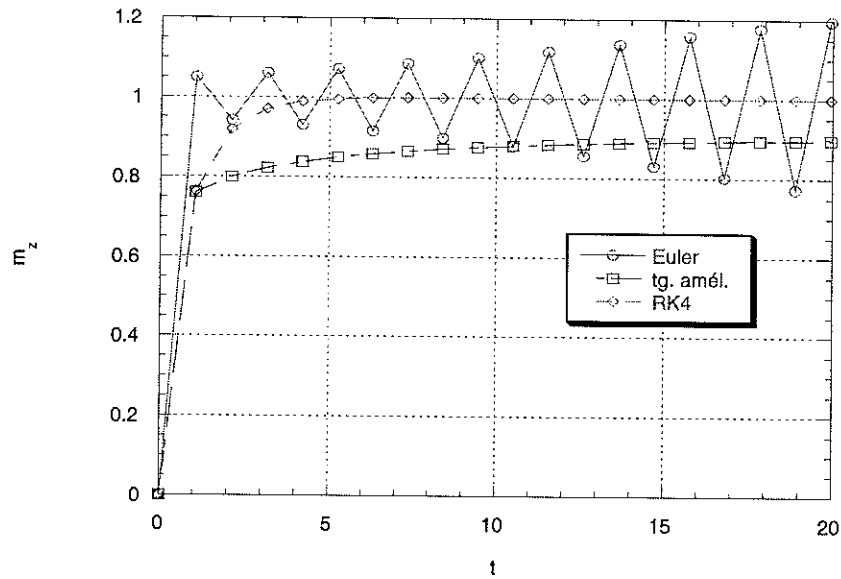


Figure 4 : Etude de la stabilité pour des différents schémas d'intégration numérique

$\delta t > \delta t_{\text{limite}} = 1/\alpha_L H$ pour la méthode d'Euler et de la tangente améliorée et dans le cas $\delta t < \delta t_{\text{limite}} = 1.4/\alpha_L H$ pour la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4.

D'après la Figure 4, on remarque que la méthode d'Euler donne une solution visuellement instable. Bien que l'évolution donnée par le schéma de la tangente améliorée soit monotone, la solution converge vers une valeur erronée. Elle est donc instable pour la valeur du pas choisi. Par contre, la méthode de Runge-Kutta est stable et relativement précise, par rapport au résultat exact. La précision sera d'autant meilleure que le pas d'intégration sera faible, comme l'indique la Figure 5 présentant les résultats obtenus pour deux pas différents ($\delta t = 1.05$ et $\delta t = 0.1$)

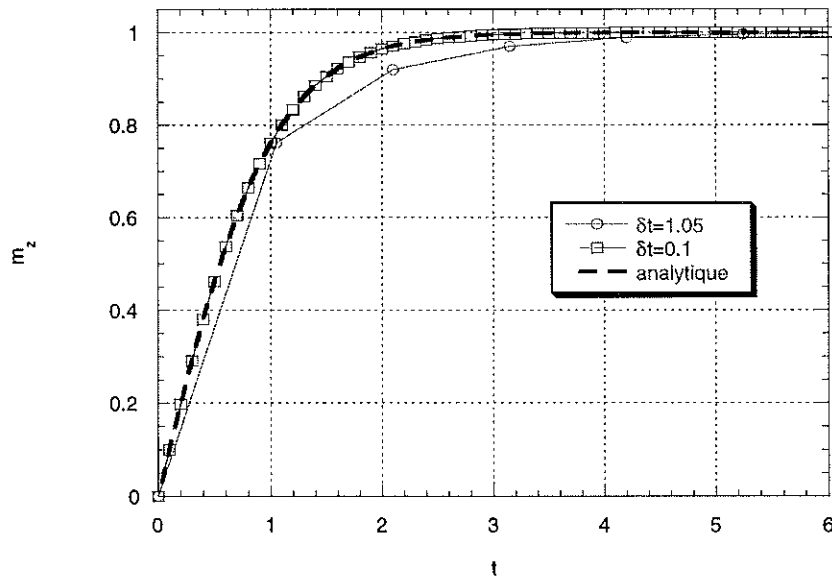


Figure 5 : Influence du pas de temps d'intégration sur la précision du calcul

Intéressons-nous maintenant au cas de l'amortissement sous-critique en prenant comme jeu de paramètres : $H = 1$ (u.a.), $\alpha_L = 0.4$ et $m_x(0) = 1$. La Figure 6 présente l'évolution dynamique du moment magnétique par une méthode Runge-Kutta d'ordre 4, pour deux valeurs de pas de temps. Dans le cas $\delta t = 2.53$ (Figure 6a), le schéma d'intégration reste stable, tandis que pour $\delta t = 2.55$ (Figure 6b) l'instabilité apparaît et les valeurs des composantes m_x et m_y augmentent de manière incontrôlée. Cette valeur limite est très proche de celle prédite par la relation (126) pour $\alpha_L \leq 1/\sqrt{3}$, $\delta t_{\text{limite}} = 2.59$.

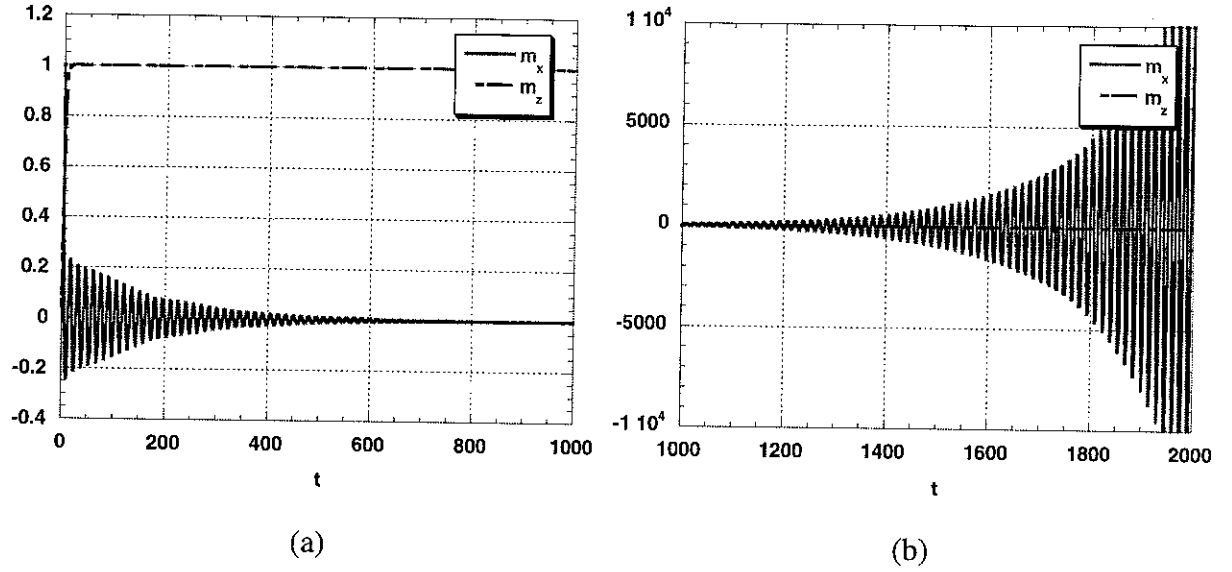


Figure 6 : Etude de la stabilité pour le schéma de type Runge-Kutta dans le cas de l'amortissement sous-critique : (a) $\delta t = 2.53$ et (b) $\delta t = 2.55$

3.2.4 Méthodes générales de résolution de l'équation de LLG pour un champ non-local

Dans le cas général le champ total (27) qui agit sur un moment magnétique n'est plus local et, par l'intermédiaire des termes d'échange et démagnétisant, il dépend des directions de l'aimantation et de ses dérivées en tout point du maillage. L'équation de LLG sans amortissement se transforme en une équation aux dérivées partielles :

$$\frac{d\mathbf{m}(t)}{dt} = -\mathbf{m}(t) \times \mathbf{H}_t(t) \quad (127)$$

Pour l'équation complète avec amortissement l'introduction de la notion de champ effectif :

$$\mathbf{H}_{\text{eff}}(t) = \mathbf{H}_t(t) + \alpha_{LG}(\mathbf{m}(t) \times \mathbf{H}_t(t)) \quad (128)$$

permet de transformer cette équation sous la forme :

$$\frac{d\mathbf{m}(t)}{dt} = -\mathbf{m}(t) \times \mathbf{H}_{\text{eff}}(t) \quad (129)$$

et de la résoudre en utilisant les méthodes employées pour l'équation sans amortissement en substituant $\mathbf{H}_{\text{eff}}$ à $\mathbf{H}_t$.

En fonction de l'instant où on évalue le second membre de l'équation précédente, plusieurs schémas de résolution sont possibles.

3.2.4.1 Méthode d'Euler explicite

La dérivée de $\mathbf{m}$ à l'instant t est remplacée par le rapport $\delta\mathbf{m}/\delta t$ où $\delta\mathbf{m} = \mathbf{m}(t + \delta t) - \mathbf{m}(t)$ est la variation au premier ordre de $\mathbf{m}$ entre t et $t + \delta t$ et le membre de droite est évalué à l'instant t . L'équation (127) prend la forme :

$$\mathbf{m}(t + \delta t) = \mathbf{m}(t) - (\mathbf{m}(t) \times \mathbf{H}_{\text{eff}}(t))\delta t \quad (130)$$

L'équation ci-dessus permet de calculer $\mathbf{m}(t + \delta t)$ de manière explicite en fonction de $\mathbf{m}(t)$. La conservation de la norme de $\mathbf{m}$ ($\mathbf{m} \cdot \delta\mathbf{m} = 0$) n'est satisfaite, comme le montre l'équation suivante, que si on néglige les termes d'ordre deux en δt .

$$\mathbf{m}(t) \cdot \delta\mathbf{m} = \mathbf{m}(t) \cdot (\mathbf{m}(t) \times \mathbf{H}_{\text{eff}}(t))\delta t + \vartheta(\delta t^2) = 0 + \vartheta(\delta t^2) \quad (131)$$

L'expérience montre que ceci n'est pas suffisant et qu'il est nécessaire de normer $\mathbf{m}$ à chaque itération.

L'inconvénient principal de cette méthode est qu'elle nécessite de choisir un pas de temps suffisamment petit pour garder la stabilité de l'équation. Théoriquement, il existe un pas de temps limite au-dessous duquel la stabilité est respectée.

3.2.4.2 Méthode d'Euler implicite

La dérivée de $\mathbf{m}$ est calculée de la même manière que pour la méthode explicite, mais le membre de droite de l'équation est évalué à l'instant $t + \delta t$:

$$\mathbf{m}(t + \delta t) + (\mathbf{m}(t + \delta t) \times \mathbf{H}_{\text{eff}}(t + \delta t))\delta t = \mathbf{m}(t) \quad (132)$$

Comme $\mathbf{H}_{\text{eff}}(t + \delta t)$ contient le terme démagnétisant qui dépend de l'ensemble des orientations $\mathbf{m}(\mathbf{r}, t + \delta t)$, la résolution de l'équation revient à inverser une matrice de dimensions très grandes.

Nakatani [Nakatani 89] utilise cette méthode pour l'équation avec amortissement (129) mais il suppose que la variation au premier ordre du champ démagnétisant ne dépend uniquement que des premiers voisins. En développant le couple au premier ordre en δt , en fonction de son expression à l'instant t , on obtient :

$$\frac{\delta\mathbf{m}}{\delta t} + \delta(\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}) = -\mathbf{m}(t) \times \mathbf{H}_{\text{eff}}(t) \quad (133)$$

avec :

$$\delta(\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}) = \mathbf{m}(t) \times \delta \mathbf{H}_{\text{eff}} + \delta \mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}(t) \quad (134)$$

$\delta(\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\text{eff}})$ est le développement au premier ordre du couple qui contient $\delta \mathbf{m}$. A la différence de la méthode explicite, l'équation implicite ne respecte pas toujours la contrainte de la conservation de la norme à cause de la présence du terme $\delta \mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}$. Dans ce cas, la norme de l'aimantation n'est pas conservée et la normation à chaque itération s'avère nécessaire. Nakatani [Nakatani 89] suppose que ce terme n'est uniquement qu'un terme correctif pour le couple et qu'on peut le négliger. Cela permet ainsi de conserver la norme de l'aimantation. L'équation (134) prend la forme :

$$\delta(\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}) = \mathbf{m}(t) \times \delta \mathbf{H}_{\text{eff}} \quad (135)$$

avec :

$$\delta \mathbf{H}_{\text{eff}} = \delta \mathbf{H}_i + \alpha_{L,G}(\mathbf{m}(t) \times \delta \mathbf{H}_i) + \alpha_{L,G}(\delta \mathbf{m} \times \mathbf{H}_i(t)) \quad (136)$$

L'avantage de la méthode implicite est qu'elle est inconditionnellement stable. La valeur du pas de temps n'est pas bornée mais la physique impose qu'elle soit plus petite que les temps caractéristiques intervenant dans le problème, afin d'obtenir une précision de calcul suffisante. Le désavantage de cette méthode réside dans le fait qu'à chaque instant t il faut calculer le couple, soit par une inversion de matrice, soit par un processus itératif avec une fonction d'essai comme point de départ, les deux nécessitant beaucoup de temps.

3.2.4.3 Méthode de Crank-Nicholson

Nous avons vu que le second membre de l'équation (127) ou (129) est évalué

- (i) à l'instant t dans une approche explicite
- (ii) à l'instant $t + \delta t$ dans un schéma implicite

La dérivée temporelle de l'aimantation locale est dans les deux cas exprimée comme un accroissement $\frac{d\mathbf{m}}{dt} \cong \frac{\mathbf{m}(t + \delta t) - \mathbf{m}(t)}{\delta t}$. Pour atteindre une précision à l'ordre deux en δt la méthode de Crank-Nicholson suppose que l'évaluation du second membre à l'instant intermédiaire $t + \frac{\delta t}{2}$, s'exprime comme la demi-somme des seconds membres calculés aux instants t et $t + \delta t$ respectivement.

Appliquons cette technique à l'équation de Gilbert (97) :

$$(\mathbf{1} + \alpha_G \mathbf{m}(t) \times) \frac{d\mathbf{m}(t)}{dt} = -\mathbf{m}(t) \times \mathbf{H}_t \quad (137)$$

ou encore sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} 1 & -\alpha_G m_z & \alpha_G m_y \\ \alpha_G m_z & 1 & -\alpha_G m_x \\ -\alpha_G m_y & \alpha_G m_x & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_t m_x \\ d_t m_y \\ d_t m_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{t,y} m_z - H_{t,z} m_y \\ H_{t,z} m_x - H_{t,x} m_z \\ H_{t,x} m_y - H_{t,y} m_x \end{pmatrix} \quad (138)$$

Nous supposons que le champ $\mathbf{H}_t$ ne varie pas d'une façon significative entre t et $t + \delta t$.

L'équation discrétisée s'écrit :

$$(\mathbf{1} + \alpha_G \mathbf{m}(t) \times - \frac{1}{2} \delta t \mathbf{H}_t \times) \mathbf{m}(t + \delta t) = (\mathbf{1} + \frac{1}{2} \delta t \mathbf{H}_t \times) \mathbf{m}(t) \quad (139)$$

ou encore :

$$\begin{pmatrix} 1 & -\alpha_G m_z(t) + \frac{1}{2} \delta t H_{t,z} & +\alpha_G m_y(t) - \frac{1}{2} \delta t H_{t,y} \\ +\alpha_G m_z(t) - \frac{1}{2} \delta t H_{t,z} & 1 & -\alpha_G m_x(t) + \frac{1}{2} \delta t H_{t,x} \\ -\alpha_G m_y(t) + \frac{1}{2} \delta t H_{t,y} & +\alpha_G m_x(t) - \frac{1}{2} \delta t H_{t,x} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_x(t + \delta t) \\ m_y(t + \delta t) \\ m_z(t + \delta t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} \delta t H_{t,z} & +\frac{1}{2} \delta t H_{t,y} \\ +\frac{1}{2} \delta t H_{t,z} & 1 & -\frac{1}{2} \delta t H_{t,x} \\ -\frac{1}{2} \delta t H_{t,y} & +\frac{1}{2} \delta t H_{t,x} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_x(t) \\ m_y(t) \\ m_z(t) \end{pmatrix} \quad (140)$$

L'avantage principal de cette méthode est que l'erreur de troncature est plus petite que pour les méthodes implicite ou explicite (grâce à l'estimation de la dérivée par rapport au temps à l'aide des différences centrées de pas $\delta t / 2$ au lieu de l'utilisation des différences à gauche ou à droite avec un pas δt).

En résumé, nous avons présenté trois schémas possibles pour résoudre l'équation du mouvement (127) ou (129) :

- forme explicite : $\frac{1}{\delta t} (\mathbf{m}(t + \delta t) - \mathbf{m}(t)) = f(\{\mathbf{m}(t)\})$

- forme implicite : $\frac{1}{\delta t} (\mathbf{m}(t + \delta t) - \mathbf{m}(t)) = f(\{\mathbf{m}(t + \delta t)\})$

- Crank-Nicholson :
$$\frac{1}{\delta t}(\mathbf{m}(t + \delta t) - \mathbf{m}(t)) = \frac{1}{2}[f(\{\mathbf{m}(t)\}) + f(\{\mathbf{m}(t + \delta t)\})]$$

où $f(\{\mathbf{m}\})$ est le couple qui dépend de l'ensemble des orientations des moments. Ces trois formes peuvent être unifiées dans la formule :

$$\frac{1}{\delta t}(\mathbf{m}(t + \delta t) - \mathbf{m}(t)) = \beta f(\{\mathbf{m}(t + \delta t)\}) + (1 - \beta) f(\{\mathbf{m}(t)\}) \quad (141)$$

où $\beta = 1$ donne la forme implicite, $\beta = 0$ celle explicite et $\beta = 1/2$ celle de Crank-Nicholson. Pour $\beta \geq 1/2$, la représentation est inconditionnellement stable pour les équations linéaires, tandis que pour $\beta < 1/2$ il existe un domaine borné de stabilité.

3.3 Méthodes variationnelles et application aux éléments finis

Le point de départ pour les méthodes variationnelles est l'expression de l'énergie libre. L'état d'équilibre est obtenu en minimisant cette expression par rapport au champ de vecteurs $\mathbf{M}$. Pour minimiser l'énergie, une forme discrétisée doit être trouvée, soit pour un maillage régulier, soit pour un maillage type éléments finis. A l'exception du terme démagnétisant, tous les autres termes sont locaux. Le champ démagnétisant dans un noeud du maillage dépend de l'aimantation du système global, puisque les contributions de $\mathbf{M}$ au champ $\mathbf{H}_D$ sont à longue distance. Par conséquent, la matrice d'interaction $\mathbf{K}_{ij}$, qui intervient dans l'expression discrète de l'énergie libre $\sum_{i,j} \mathbf{M}_i \mathbf{K}_{ij} \mathbf{M}_j$, est une matrice pleine et l'évaluation directe de l'énergie nécessite une place mémoire de taille importante et est très gourmande en temps de calcul.

En se fondant sur les inégalités de Brown (61), il est possible d'éliminer les termes non-locaux de l'expression de l'énergie démagnétisante. Comme décrit dans le paragraphe 2.4.5, Brown propose deux fonctions, une pour sous-estimer (60) et l'autre pour surestimer (58) l'énergie du champ démagnétisant. Si les deux estimations calculées sont suffisamment proches l'une de l'autre, elles tendent vers la valeur exacte de l'énergie démagnétisante [Schrefl 93], [Schrefl 94a].

Si nous cherchons le maximum de la fonctionnelle $U(\mathbf{m}, \mathbf{H})$ par rapport à $\mathbf{H}$, celui-ci est obtenu pour $\mathbf{H} = \mathbf{H}_D$ et la fonctionnelle se réduit à l'énergie démagnétisante. Comme $\mathbf{H}$ est un champ irrotationnel, la contrainte $\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{0}$ donne $\mathbf{H} = -\nabla \varphi$ et $U(\mathbf{m}, \mathbf{H}) = U(\mathbf{m}, -\nabla \varphi)$.

En remplaçant l'énergie démagnétisante par U dans l'expression de l'énergie libre, on obtient une fonction auxiliaire $F(\mathbf{m}, -\nabla\varphi)$ dont les points stationnaires sont en même temps les points stationnaires de l'énergie libre :

$$F(\mathbf{m}, -\nabla\varphi) = \int_V (-\mu_0 M_s \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}} - P_K [\mathbf{u}_K \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r})] + A(\nabla \mathbf{m}(\mathbf{r}))^2) d^3r + \mu_0 \int_V M_s \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \varphi(\mathbf{r}) d^3r - \frac{\mu_0}{2} \int_V (\nabla \varphi(\mathbf{r}))^2 d^3r \quad (142)$$

De la même manière, le minimum de $U(\mathbf{m}, \mathbf{B})$ est obtenu pour $\mathbf{B} = \mathbf{B}_D$ et U devient égal à l'énergie démagnétisante. Avec la contrainte $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ pour un champ solénoïdal, on introduit le potentiel vecteur tel que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{a}$ et $U(\mathbf{m}, \mathbf{B}) = U(\mathbf{m}, \nabla \times \mathbf{a})$. La fonction auxiliaire associée $F(\mathbf{m}, \nabla \times \mathbf{a})$ a la forme :

$$F(\mathbf{m}, \nabla \times \mathbf{a}) = \int_V (-\mu_0 M_s \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}} - P_K [\mathbf{u}_K \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r})] + A(\nabla \mathbf{m}(\mathbf{r}))^2) d^3r + \frac{1}{2\mu_0} \int_V (\nabla \times \mathbf{a}(\mathbf{r}) - \mu_0 M_s \mathbf{m}(\mathbf{r}))^2 d^3r \quad (143)$$

et ses minima locaux sont en correspondance un à un avec ceux de l'énergie libre totale. La fonction $F(\mathbf{m}, \nabla \times \mathbf{a})$ dépend uniquement des variables locales et de leurs dérivées premières.

Examinons maintenant les avantages et les inconvénients de chaque formulation. En appliquant le potentiel scalaire pour calculer le champ démagnétisant, nous introduisons une seule variable supplémentaire dans chaque noeud, tandis que l'utilisation du potentiel vecteur nécessite l'introduction de trois variables par noeud. La formulation potentiel scalaire semble ainsi plus efficace, cependant la fonction $F(\mathbf{m}, -\nabla\varphi)$ associée à l'énergie libre n'a dans ce cas de limite, ni inférieure ni supérieure. Tous les points stationnaires de la fonction sont des points selles, ce qui complique la recherche des états d'équilibre. Toute solution trouvée sous-estime l'énergie démagnétisante et surestime les autres termes de l'énergie libre. Cette formulation, bien que valide, est mal adaptée aux techniques numériques classiques comme les méthodes du gradient.

Cette difficulté est surmontée si l'on utilise la formulation potentiel vecteur puisque la fonction auxiliaire $F(\mathbf{m}, \nabla \times \mathbf{a})$ a une limite inférieure et ses minima correspondent à ceux de l'énergie libre. Dans le cadre d'un calcul micromagnétique, où l'on cherche à décrire le renversement d'aimantation d'un système magnétique, la minimisation de F par rapport à deux champs indépendants $\mathbf{m}$ et $\mathbf{a}$, comme le suggère Asselin [Asselin 86], peut mener à des

solutions erronées car $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ sont reliés entre eux par les équations de Maxwell à chaque itération.

A partir d'une distribution d'aimantation à l'équilibre, examinons l'effet d'une perturbation $\delta\mathbf{m}$ sur l'énergie libre. La variation du second ordre de la fonction associée à l'énergie libre s'écrit comme une forme quadratique positive :

$$\begin{aligned} \delta^2 F(\mathbf{m}, \nabla \times \mathbf{a}) = & \int_V \left(-(\partial^2 P_K / \partial \mathbf{m}^2) [\mathbf{u}_K \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r})] (\mathbf{u}_K \cdot \delta\mathbf{m}(\mathbf{r}))^2 + 2A(\nabla \delta\mathbf{m}(\mathbf{r}))^2 \right) d^3r \\ & + \frac{1}{\mu_0} \int_V (\nabla \times \delta\mathbf{a}(\mathbf{r}) - \mu_0 M_s \delta\mathbf{m}(\mathbf{r}))^2 d^3r \end{aligned} \quad (144)$$

avec la contrainte :

$$-\Delta \delta\mathbf{a}(\mathbf{r}) = \mu_0 M_s \nabla \times \delta\mathbf{m}(\mathbf{r}) \quad (145)$$

L'expression de la variation de l'énergie totale montre que toute solution de minimisation locale de la formulation potentiel vecteur décrit des configurations d'équilibre stable.

3.3.1 Application à la méthode des éléments finis

L'approximation des éléments finis peut être facilement mise en oeuvre en micromagnétisme car la distribution d'aimantation à l'équilibre est gouvernée par un principe variationnel (143). La méthode de Ritz, bien qu'étant maintenant supplantée par des méthodes plus générales, comme Galerkin, est tout à fait bien adaptée au micromagnétisme.

Il convient au préalable de discrétiser le domaine de calcul D en un ensemble d'éléments jointifs sans intersection. Ces éléments sont petits par rapport à D mais de taille finie, d'où leur nom. Cette opération s'appelle le maillage du domaine et nécessite souvent des logiciels spécifiques. Un certain nombre de règles doit être respecté pour optimiser les temps de calcul et la précision de résultats.

Ainsi pour mailler un domaine 2D, chaque triangle doit ressembler le plus possible à un triangle équilatéral. La triangulation doit de plus être conforme, c'est-à-dire que deux triangles contigus ont un coté en commun.

A chaque élément est associé un certain nombre de points n , appelés points nodaux, comportant au moins les sommets de l'élément. Le champ inconnu $\phi(\mathbf{r}) = \{\mathbf{m}(\mathbf{r}), \mathbf{a}(\mathbf{r})\}$ est ensuite interpolé par les valeurs $\phi_i = \{\mathbf{m}_i, \mathbf{a}_i\}$ calculées en ces points :

$$\phi_e(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^n \phi_i^e \alpha_i(\mathbf{r}) \quad (146)$$

La fonction d'interpolation $\alpha_i(\mathbf{r})$ ne dépend pas de la géométrie de l'élément et s'annule en tout point nodal différent du noeud i ($\alpha_i(\mathbf{r}_j) = \delta_{ij}$). Lorsque les polynômes d'interpolation sont de degré 1, la fonction $\alpha_i(\mathbf{r})$ a la forme d'un chapeau (Figure 7).

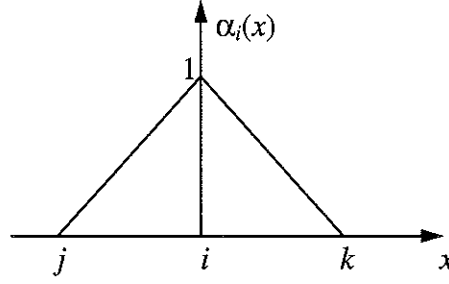


Figure 7 : Polynôme d'interpolation $\alpha_i(x)$ dans le cas 1D avec $n = 2$

La résolution du champ micromagnétique consiste alors à trouver les champs ϕ_i rendant minimale la forme discrète de la fonctionnelle $F\{\mathbf{m}, \mathbf{a}\}$, que nous pouvons l'écrire symboliquement comme une somme sur tous les éléments du domaine :

$$\begin{aligned} F\{\phi\} &= \sum_e \int_{V_e} f(\phi_e(\mathbf{r}), \nabla \phi_e(\mathbf{r})) d^3r \\ &= \sum_e \int_{V_e} f\left(\sum_{i=1}^n \phi_i^e \alpha_i(\mathbf{r}), \sum_{i=1}^n \phi_i^e \nabla \alpha_i(\mathbf{r})\right) d^3r \end{aligned} \quad (147)$$

La minimisation de $F\{\phi\}$ ne peut pas se faire que par une méthode itérative, à partir d'une distribution initiale du champ $\phi(\mathbf{r})$, à cause de la non-linéarité du terme d'anisotropie et du fort couplage entre $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{a}(\mathbf{r})$.

Les principaux avantages de cette méthode en micromagnétisme sont :

- (i) la possibilité de modéliser des systèmes à géométrie complexe,
- (ii) la facilité pour écrire les relations de continuité entre deux milieux différents.

Mais elle comporte quelques sérieux inconvénients :

- (i) les polynômes de Lagrange comme fonction d'interpolation ne respectent pas rigoureusement les relations de continuité du flux d'échange ($A(\bar{\partial}\mathbf{m}/\bar{\partial}n)$) et du flux magnétique ($\bar{\partial}\mathbf{A}/\bar{\partial}n$) à l'interface de deux éléments contigus. Ce problème est très connu

par les numériciens en électromagnétisme et génère des fluctuations de champs importantes. Il a été résolu récemment par l'introduction d'éléments d'arêtes [Bossavit 93].

- (ii) l'utilisation de maillages adaptatifs génère un déplacement aberrant des parois vers les zones où le maillage est le plus grossier. Ce phénomène qui n'a aucune origine physique est dû aux erreurs numériques dans l'évaluation du terme d'échange.

En conclusion, notre orientation scientifique a été de développer un outil mathématique s'appuyant sur une méthode des différences finies afin de mieux apprendre à maîtriser les artefacts numériques rencontrés en micromagnétisme. Le manque de flexibilité géométrique nous a semblé peu important dans les systèmes étudiés dans cette thèse, comparé au gain en précision, en stabilité et finalement en vitesse de calcul.

Chapitre III

Présentation du modèle

1. Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons l'approche micromagnétique que nous avons développée au cours de cette thèse.

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, la minimisation de l'énergie libre d'un système magnétique fait intervenir un couplage fort entre la distribution d'aimantation et les champs magnétostatiques (Figure 1).

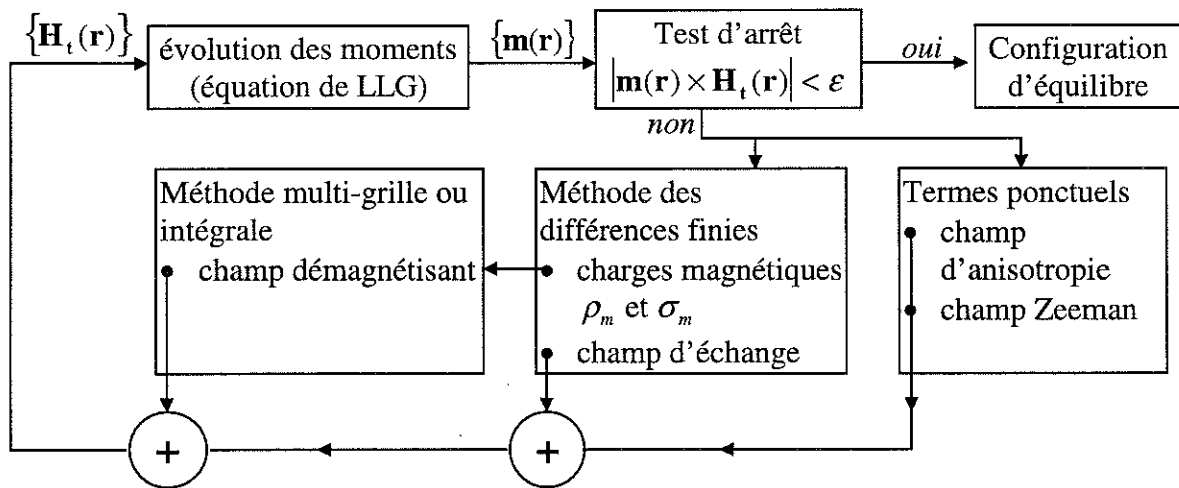


Figure 1 : Schéma du processus itératif de minimisation

Il nous a semblé judicieux d'examiner la précision et la rapidité de deux techniques de calcul de l'énergie démagnétisante (section 2), reposant sur une méthode "multi-grille" du type différences finies (paragraphe 2.1) ou sur une méthode intégrale (paragraphe 2.2) respectivement. Le terme d'échange a quant à lui été estimé dans l'approximation des différences finies (section 3). Le calcul de l'anisotropie et de l'énergie Zeeman, termes de caractère purement local, ne posent pas de problèmes particuliers (section 4).

La mise à l'équilibre d'une configuration micromagnétique est réalisée par l'intégration numérique des équations LLG (section 5). Plusieurs schémas explicites d'intégration sont proposés dans les paragraphes 5.1 et 5.2 et une étude de leur stabilité est présentée dans le paragraphe 5.4. Un schéma mixte d'intégration, obtenu à partir d'un schéma explicite modifié, est décrit dans le paragraphe 5.5.

2. Evaluation du champ démagnétisant

L'évaluation du champ démagnétisant dans une approche numérique domine habituellement le temps de calcul.

Lorsque le maillage est composé d'éléments parallélépipédiques, les points d'évaluation du vecteur aimantation et surtout son interpolation à l'intérieur de chaque cellule peuvent être obtenus par un large éventail de méthodes : en partant d'une aimantation constante à l'intérieur de l'élément et en continuant avec des interpolations linéaires et quadratiques pour l'aimantation ou des différentes variations pour les charges de volume et celles de surface [Ramstöck 94].

En fonction du schéma d'interpolation de l'aimantation, il existe plusieurs méthodes de calcul du champ démagnétisant pour des systèmes bi- et tridimensionnels. Les premiers travaux [Trouilloud 87], [Schabes 88a] reposent sur les calculs effectués par Schabes et Aharoni [Schabes 87] qui donnent une formule analytique pour calculer l'énergie d'interaction magnétostatique entre deux cubes ferromagnétiques uniformément orientés. Pour un système discrétisé en N cellules, une sommation directe paire par paire nécessite des temps de calcul en $O(N^2)$.

Différentes approches ont été utilisées pour augmenter la vitesse de calcul des champs magnétostatiques. Pour un système formé d'un maillage hexagonal de colonnes hexagonales, Zhu et Bertram [Zhu 88] proposent une méthode qui intègre les pôles magnétiques de surface ; ils peuvent ainsi calculer le champ d'une particule et moyenner le résultat sur le volume des autres particules. L'approximation du champ moyen pour les particules à longue distance [Bertram 71] et le schéma hiérarchique d'évaluation des interactions dipolaires [Miles 91] posent des problèmes de précision de calcul tandis que le gain en temps n'est pas significatif.

Une autre possibilité pour accélérer les calculs est d'utiliser l'algorithme de transformée de Fourier rapide (FFT- "Fast Fourier Transform" en anglais). La forme matricielle de l'énergie démagnétisante de laquelle dérive le champ :

$$F_D = \sum_{i,j} \mathbf{M}_i \mathbf{K}_{ij} \mathbf{M}_j \quad (1)$$

où $\mathbf{K}_{ij}$ est la matrice d'interaction entre les éléments i et j , dépend uniquement de la distance relative $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ entre les centres des deux cellules. Le champ démagnétisant s'écrit sous la forme (42), chapitre II, qui est la forme discrétisée du produit de convolution entre une fonction d'interaction et un terme source. Normalement, cette technique est utilisée pour des systèmes avec des structures périodiques bidimensionnelles [Berkov 93], [Labrune 94] et elle donne des temps de calcul proportionnels à $N \log_2 N$. La méthode du "zero-padding" [Press 92] permet d'appliquer cette technique à des systèmes de dimensions finies, ou périodiques selon une ou deux dimensions seulement [Hayashi 96]. D'autres méthodes intégrales ont été proposées comme celle développée par Yuan et Bertram [Yuan 92], qui utilise un algorithme adaptatif rapide, fondé sur un développement multipolaire [Blue 91].

Dans nos simulations, nous avons employé deux méthodes d'évaluation du champ démagnétisant, une fondée sur la résolution de l'équation de Laplace pour le potentiel scalaire ϕ par une méthode des différences finies (MD- ϕ) et une deuxième qui utilise la technique des FFT couplée à la méthode du "zero-padding". Cette deuxième méthode est une méthode du type intégrale qui présente deux variantes : un calcul direct du champ démagnétisant (MI-H) et une évaluation indirecte en passant par le potentiel scalaire (MI- ϕ).

2.1 Méthode des différences finies (MD- ϕ)

Ce sont les accroissements limités et leur passage à la limite qui ont conduit à la notion de dérivée partielle. Il n'est donc pas étonnant que la démarche inverse ait été utilisée comme la toute première méthode pour résoudre les équations aux dérivées partielles. Dans ce paragraphe, nous présentons la méthode des différences finies pour calculer le champ démagnétisant. Nous allons utiliser la formulation potentiel scalaire en résolvant l'équation laplacienne (32) du chapitre II, qui est le prototype des équations aux dérivées partielles d'ordre 2 de type elliptique.

La forme détaillée de l'équation est :

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \rho(x, y, z) = 0 \quad (2)$$

L'unicité de la solution est assurée par une condition de Dirichlet d'annulation du potentiel à l'infini. Afin d'obtenir une évaluation correcte du potentiel, il est nécessaire d'imposer cette

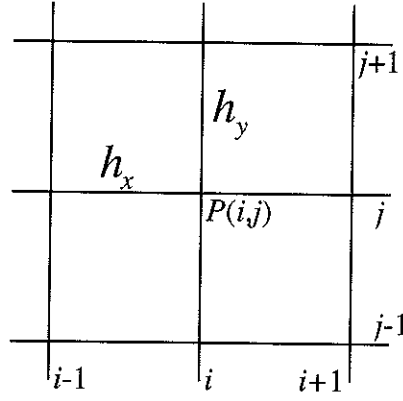


Figure 2 : exemple d'un maillage régulier 2D

condition le plus loin possible du système et, par conséquent, d'étendre le maillage sur une grande distance à l'extérieur du système physique.

Le principe de la méthode consiste, en tout point P d'un maillage régulier, à développer l'inconnue ϕ en série de Taylor et à exprimer les valeurs des dérivées successives de ϕ en P en fonction des valeurs de ϕ en P et aux points voisins de P .

Afin de générer le maillage, nous traçons un réseau de droites parallèles à l'axe Ox équidistantes de pas h_x , un autre réseau de droites parallèles à Oy équidistantes de pas h_y , enfin un dernier réseau de droites parallèles à Oz équidistantes de pas h_z . Les intersections des droites sont les points $P(i, j, k)$ de coordonnées (x_i, y_j, z_k) :

$$\begin{aligned} x_i &= ih_x, & i &= 1 \dots N_x \\ y_j &= jh_y, & j &= 1 \dots N_y \\ z_k &= kh_z, & k &= 1 \dots N_z \end{aligned} \tag{3}$$

où N_x, N_y, N_z sont les nombres de points de discrétisation selon chaque direction. Un exemple de maillage 2D est montré dans Figure 2. On note par $\phi(i, j, k)$ et $\rho_m(i, j, k)$ les valeurs de ϕ et de ρ_m en (x_i, y_j, z_k) .

Les pas de maillage étant supposés petits par rapport aux dimensions du domaine, c'est-à-dire par rapport à l'échelle de variation du potentiel, on peut considérer que ϕ varie peu quand on passe du point P aux points voisins et, par conséquent, on peut calculer ses dérivées partielles grâce au théorème des accroissements finis.

En discrétisant une dérivée seconde à l'ordre 2 à partir des différences centrées et en supposant que les pas de maillage sont du même ordre de grandeur, l'expression du laplacien devient :

$$\begin{aligned}\Delta\phi(i, j, k) = & \frac{\phi(i+1, j, k) - 2\phi(i, j, k) + \phi(i-1, j, k)}{h_x^2} \\ & + \frac{\phi(i, j+1, k) - 2\phi(i, j, k) + \phi(i, j-1, k)}{h_y^2} \\ & + \frac{\phi(i, j, k+1) - 2\phi(i, j, k) + \phi(i, j, k-1)}{h_z^2} + \mathcal{O}(h_x^2, h_y^2, h_z^2)\end{aligned}\quad (4)$$

Avec cette forme discrétisée pour le laplacien, l'équation (2) est une équation aux différences finies précise au second ordre. Sa résolution consiste à trouver les valeurs de l'inconnue ϕ uniquement sur les points du maillage :

$$\begin{aligned}& \frac{\phi(i+1, j, k) - 2\phi(i, j, k) + \phi(i-1, j, k)}{h_x^2} + \\ & \frac{\phi(i, j+1, k) - 2\phi(i, j, k) + \phi(i, j-1, k)}{h_y^2} + \\ & \frac{\phi(i, j, k+1) - 2\phi(i, j, k) + \phi(i, j, k-1)}{h_z^2} = -\rho_m(i, j, k)\end{aligned}\quad (5)$$

La relation (5) génère autant d'équations algébriques linéaires, que le nombre de points du maillage. Afin de pouvoir écrire le système d'équations sous forme matricielle, chaque point de maillage est identifié par un numéro unique. Cela revient à transformer les tableaux tridimensionnels du potentiel $\phi(i, j, k)$ et des charges $\rho_m(i, j, k)$ en des vecteurs $\phi(l)$ et $\rho_m(l)$ respectivement, tel que :

$$l(i, j, k) = (i-1) \cdot N_y \cdot N_z + (j-1) \cdot N_z + k \quad (6)$$

Dans notre modèle, le terme source $\rho_m(i, j, k) = -\text{div}\mathbf{M}(i, j, k)$, est estimé par un développement précis jusqu'à l'ordre 2 inclus. En plaçant les points du maillage aux centres des cellules parallélépipédiques jointives, les difficultés liées aux conditions de passage sur les arêtes et sur les coins du système physique sont éliminées. La forme discrétisée de la charge volumique s'écrit :

$$\begin{aligned}
-\rho_m(i, j, k) &= \text{div} \mathbf{M}|_{i,j,k} = M_s \left(\frac{\partial m_x}{\partial x} \Big|_{i,j,k} + \frac{\partial m_y}{\partial y} \Big|_{i,j,k} + \frac{\partial m_z}{\partial z} \Big|_{i,j,k} \right) = \\
&= M_s \left(\frac{1}{2h_x} (m_x(i+1, j, k) - m_x(i-1, j, k)) + \right. \\
&\quad \frac{1}{2h_y} (m_y(i, j+1, k) - m_y(i, j-1, k)) + \\
&\quad \left. \frac{1}{2h_z} (m_z(i, j, k+1) - m_z(i, j, k-1)) \right)
\end{aligned} \tag{7}$$

Les équations (5) et (7) sont valables en tout point du maillage situé à l'intérieur du système magnétique à l'exception des cellules qui sont situées sur les bords du domaine ou voisines de surfaces de passage entre deux milieux magnétiques différents ou entre un milieu magnétique et le vide.

Lorsque la cellule repérée par le triplet (i, j, k) touche une interface séparant deux milieux magnétiques différents, les relations de continuité des dérivées du potentiel (équation (35, chapitre II) et de l'aimantation (condition de Brown, équation (24), chapitre II) modifient fortement la forme discrétisée (5). Dans un but pédagogique, nous expliquons les

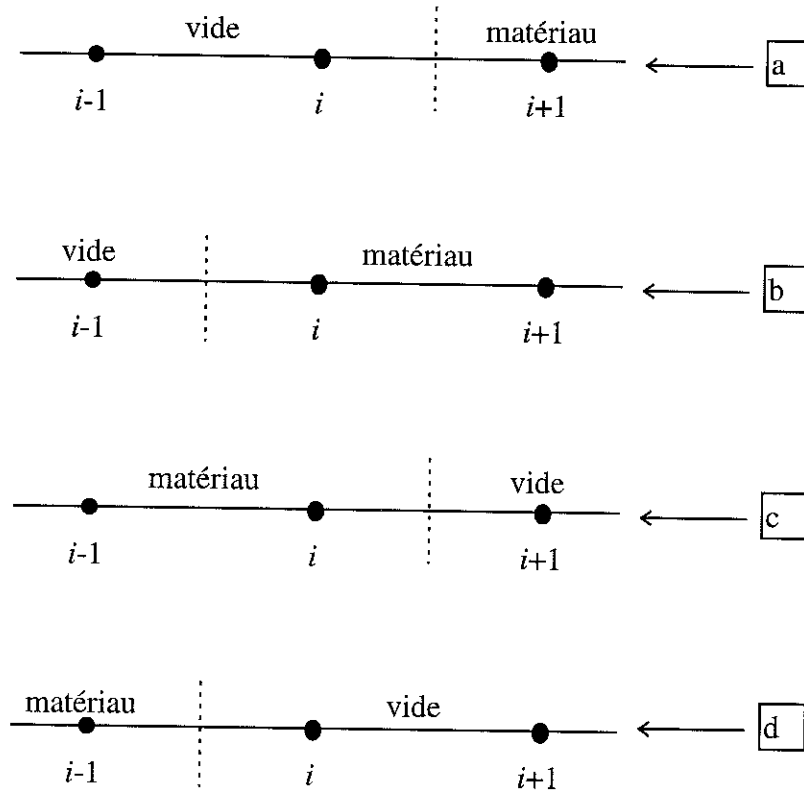


Figure 3 : schéma pour expliquer les conditions de passage

transformations à apporter à l'équation de Laplace lorsque le point de calcul repéré par (i,j,k) se trouve au voisinage d'une surface libre plane. Quatre situations sont rencontrées, comme l'indique la Figure 3. En tenant compte des conditions de passage pour ϕ et sa dérivée première, les expressions de la dérivée seconde pour les quatre cas s'écrivent :

$$(a) \quad \phi_x''(i, j, k) = \frac{4}{3h_x^2} (\phi(i+1, j, k) + \phi(i-1, j, k) - 2\phi(i, j, k) + \frac{h_x}{2} \sigma_m(i + \frac{1}{2}, j, k)),$$

$$\text{avec } \sigma_m(i + \frac{1}{2}, j, k) = -M_s m_x(i + \frac{1}{2}, j, k)$$

$$(b) \quad \phi_x''(i, j, k) = \frac{4}{3h_x^2} (\phi(i+1, j, k) + \phi(i-1, j, k) - 2\phi(i, j, k) + \frac{h_x}{2} \sigma_m(i - \frac{1}{2}, j, k)),$$

$$\text{avec } \sigma_m(i - \frac{1}{2}, j, k) = -M_s m_x(i - \frac{1}{2}, j, k)$$

$$(c) \quad \phi_x''(i, j, k) = \frac{4}{3h_x^2} (\phi(i+1, j, k) + \phi(i-1, j, k) - 2\phi(i, j, k) + \frac{h_x}{2} \sigma_m(i + \frac{1}{2}, j, k)),$$

$$\text{avec } \sigma_m(i + \frac{1}{2}, j, k) = M_s m_x(i + \frac{1}{2}, j, k)$$

$$(d) \quad \phi_x''(i, j, k) = \frac{4}{3h_x^2} (\phi(i+1, j, k) + \phi(i-1, j, k) - 2\phi(i, j, k) + \frac{h_x}{2} \sigma_m(i - \frac{1}{2}, j, k)),$$

$$\text{avec } \sigma_m(i - \frac{1}{2}, j, k) = M_s m_x(i - \frac{1}{2}, j, k) \quad (8)$$

et respectivement :

$$\phi_y''(i, j, k) = \frac{1}{h_y^2} (\phi(i, j+1, k) + \phi(i, j-1, k) - 2\phi(i, j, k)) \quad (9)$$

$$\phi_z''(i, j, k) = \frac{1}{h_z^2} (\phi(i, j, k+1) + \phi(i, j, k-1) - 2\phi(i, j, k)) \quad (10)$$

$\sigma_m(i \pm \frac{1}{2}, j, k)$ et $M_s m_x(i \pm \frac{1}{2}, j, k)$ sont la charge de surface et la composante selon x de l'aimantation estimée sur la frontière. Afin de calculer les charges de surface, l'aimantation est interpolée avec un polynôme de degré 2 et tient compte de la condition de Brown :

$$(a) \quad \sigma_m(i - \frac{1}{2}, j, k) = M_s \left(\frac{9}{8} n \cdot m_x(i+1, j, k) - \frac{1}{8} n \cdot m_x(i+2, j, k) \right), n = -1$$

$$\begin{aligned}
\text{(b) } \sigma_m(i-\frac{1}{2}, j, k) &= M_s \left(\frac{9}{8} n \cdot m_x(i, j, k) - \frac{1}{8} n \cdot m_x(i+1, j, k) \right), n = -1 \\
\text{(c) } \sigma_m(i-\frac{1}{2}, j, k) &= M_s \left(\frac{9}{8} n \cdot m_x(i, j, k) - \frac{1}{8} n \cdot m_x(i-1, j, k) \right), n = +1 \\
\text{(d) } \sigma_m(i-\frac{1}{2}, j, k) &= M_s \left(\frac{9}{8} n \cdot m_x(i-1, j, k) - \frac{1}{8} n \cdot m_x(i-2, j, k) \right), n = +1
\end{aligned} \tag{11}$$

où n est la normale à la surface, dirigée vers l'extérieur.

Il est tout à fait possible de généraliser les formules précédentes lorsque le point de calcul se trouve au voisinage de l'interface entre deux milieux magnétiques différents en appliquant le théorème de superposition.

En définitif, on observe que l'équation (5) associée à chaque point de maillage contient des termes en ϕ et des termes en $\mathbf{m}$. Ces derniers proviennent des charges de volume, des charges de surface et des conditions aux limites et génèrent le "terme source" $\mathbf{b}$ du système d'équations linéaires à résoudre :

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{12}$$

où $\mathbf{x}$ est le vecteur-colonne des $N_x N_y N_z$ inconnues (les valeurs du potentiel ϕ), $\mathbf{A}$ est la matrice des coefficients de ϕ de dimensions $N_x N_y N_z \times N_x N_y N_z$ qui ne dépend que de h_x, h_y, h_z . Comme seuls les points géométriquement voisins sont reliés par les équations du système (5), la matrice $\mathbf{A}$ contient un nombre important de zéros et est donc très "creuse" d'après l'indexation (6), seules sept lignes diagonales situées à l'intérieur d'une bande de largeur $2N_y N_z + 1$ sont non-nulles. De plus, la matrice $\mathbf{A}$ est symétrique et positive définie, car la condition suffisante $|a_{ii}| \geq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$ est vérifiée.

Après résolution du système (12) une estimation du potentiel ϕ est connue aux points de calcul et le démagnétisant peut être calculé. Pour pouvoir écrire une expression générale tenant compte des conditions particulières aux interfaces, une valeur booléenne $c(i, j, k)$ est introduite en chaque point du maillage, valant 1 si le point se trouve à l'intérieur du système physique, et zéro si le point se trouve à l'extérieur.

$$\mathbf{H}_d = -\nabla \phi \tag{13}$$

$$\begin{aligned}
H_{d_x} &= -\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{1}{2h_x}(\phi(i+1, j, k) - \phi(i-1, j, k) + \\
&\quad + (\phi(i+1, j, k) - 2\phi(i, j, k) + \phi(i-1, j, k)) \cdot \\
&\quad \cdot 2(c(i+1, j, k) - c(i-1, j, k))(2c(i, j, k) - 1)) \\
H_{d_y} &= -\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{1}{2h_y}(\phi(i, j+1, k) - \phi(i, j-1, k) + \\
&\quad + (\phi(i, j+1, k) - 2\phi(i, j, k) + \phi(i, j-1, k)) \cdot \\
&\quad \cdot 2(c(i, j+1, k) - c(i, j-1, k))(2c(i, j, k) - 1)) \\
H_{d_z} &= -\frac{\partial \phi}{\partial z} = \frac{1}{2h_z}(\phi(i, j, k+1) - \phi(i, j, k-1) + \\
&\quad + (\phi(i, j, k+1) - 2\phi(i, j, k) + \phi(i, j, k-1)) \cdot \\
&\quad \cdot 2(c(i, j, k+1) - c(i, j, k-1))(2c(i, j, k) - 1))
\end{aligned} \tag{14}$$

Pour la résolution des systèmes linéaires, il existe deux grandes catégories de méthodes : directes (élimination de Gauss, factorisation LU ou des méthodes particulières pour des matrices diagonales par blocs, bande-diagonales ou symétriques) et itératives (Jacobi, Gauss-Seidel, relaxation, méthodes de gradient conjugué, méthodes multigrilles) [Press 92], [Lascaux 94].

Dans nos simulations, nous avons testé deux techniques itératives : une méthode de sur-relaxation et une méthode de gradient conjugué.

2.1.1 Méthode de sur-relaxation

Une méthode itérative fait intervenir une suite de vecteurs qui tend asymptotiquement vers la solution exacte de l'équation. Dans les méthodes de Jacobi et de Gauss-Seidel, le passage d'un vecteur $\mathbf{x}^{(n)}$ au suivant se fait en mettant à jour simultanément ou successivement les composantes de ce vecteur.

La matrice $\mathbf{A}$ peut toujours être décomposée comme une somme de trois matrices : une diagonale $\mathbf{L}$, une strictement triangulaire inférieure $\mathbf{D}$ et une strictement triangulaire supérieure $\mathbf{U}$, telle que :

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} + \mathbf{D} + \mathbf{U} \tag{15}$$

La méthode de Jacobi consiste à calculer les composantes du vecteur $\mathbf{x}$ au pas n en fonction de celles au pas $n-1$:

$$\mathbf{D} \cdot \mathbf{x}^{(n)} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U}) \cdot \mathbf{x}^{(n-1)} + \mathbf{b} \quad (16)$$

La vitesse de convergence est exprimée par le nombre r d'itérations nécessaires pour réduire l'erreur d'un facteur 10^{-p} , elle est estimée par [Press 92] :

$$r \approx \frac{p \ln 10}{-\ln \rho_s} \quad (17)$$

où ρ_s est le rayon spectral de l'opérateur de relaxation, c'est-à-dire la plus grande valeur propre en module de la matrice d'itération $-\mathbf{D}^{-1} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{U})$.

Pour un maillage $N \times N \times N$, N suffisamment grand, le rayon spectral vaut :

$$\rho_s \cong 1 - \frac{\pi^2}{2N^2} \quad (18)$$

et la vitesse de convergence prend la forme :

$$r \cong \frac{2pN^2 \ln 10}{\pi^2} \cong \frac{1}{2} pN^2 \quad (19)$$

Pour un N de l'ordre de 100, cette méthode est en pratique peu utilisable.

Une variante de cette méthode est celle de Gauss-Seidel. Elle consiste à mettre à jour les composantes du vecteur $\mathbf{x}$ au fur et à mesure de leur calcul sans attendre la fin d'une itération :

$$(\mathbf{L} + \mathbf{D}) \cdot \mathbf{x}^{(n)} = -\mathbf{U} \cdot \mathbf{x}^{(n-1)} + \mathbf{b} \quad (20)$$

Le rayon spectral dans ce cas est la racine carrée du rayon spectral de la méthode de Jacobi :

$$\rho_s \cong 1 - \frac{\pi^2}{N^2} \quad (21)$$

et la vitesse de convergence est donnée par :

$$r \cong \frac{pN^2 \ln 10}{\pi^2} \cong \frac{1}{4} pN^2 \quad (22)$$

Le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence est deux fois plus faible par rapport à la méthode de Jacobi, mais ce n'est pas suffisant pour pouvoir considérer cette méthode comme efficace.

Un meilleur algorithme peut être obtenu en généralisant les méthodes précédentes. Soit $\mathbf{x}^{(n-1)}$ le vecteur calculé à l'itération antérieure et $\tilde{\mathbf{x}}^{(n)}$ le vecteur obtenu à partir de $\mathbf{x}^{(n-1)}$ par l'une des deux méthodes. On définit le vecteur à l'itération n comme une combinaison linéaire :

$$\mathbf{x}^{(n)} = \omega \tilde{\mathbf{x}}^{(n)} + (1 - \omega) \mathbf{x}^{(n-1)} \quad (23)$$

La généralisation par relaxation de la méthode de Jacobi n'apporte pas un gain significatif, par contre celle de Gauss-Seidel améliore la convergence. Le facteur ω s'appelle le facteur de sur-relaxation et la méthode s'appelle la méthode de sur-relaxation successive ou SOR ("successive overrelaxation"). La relation récursive prend la forme :

$$\mathbf{x}^{(n)} = \mathbf{x}^{(n-1)} - \omega (\mathbf{L} + \mathbf{D})^{-1} \boldsymbol{\xi}^{(n-1)} \quad (24)$$

où $\boldsymbol{\xi}^{(n-1)} = \mathbf{A} \mathbf{x}^{(n-1)} - \mathbf{b}$ est le résidu à l'itération $n-1$. En pratique, pour chaque composante $x(l)$ du vecteur, la relation récursive s'écrit :

$$x^{(n)}(l) = x^{(n-1)}(l) - \omega \frac{\xi^{(n-1)}(l)}{a(l,l)} \quad (25)$$

$a(l,l)$ étant l'élément diagonal de la matrice $\mathbf{A}$ qui correspond à l'équation l .

Les études [Lascaux 94] ont montré que la méthode est convergente pour $0 < \omega < 2$ si et seulement si la matrice $\mathbf{A}$ est hermitienne et définie positive. Le cas $0 < \omega < 1$ (sous-relaxation) permet souvent de faire converger un processus divergent sans garantie sur la validité physique du calcul. Le cas $1 < \omega < 2$, que nous utilisons, accélère la convergence d'un processus déjà convergent.

Si ρ_{Jacobi} est le rayon spectral de la méthode itérative de Jacobi (tel que sa racine carrée est le rayon spectral de l'itération de Gauss-Seidel), alors le choix optimal pour ω est donné par :

$$\omega = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho_{Jacobi}^2}} \quad (26)$$

et le rayon spectral correspondant est :

$$\rho_{SOR} = \left(\frac{\rho_{Jacobi}}{1 + \sqrt{1 - \rho_{Jacobi}^2}} \right)^2 \quad (27)$$

Pour N suffisamment grand, nous avons :

$$\omega \cong \frac{1}{1 + \pi/N} \quad (28)$$

$$\rho_{SOR} \cong 1 - \frac{2\pi}{N} \quad (29)$$

et la vitesse de convergence :

$$r \cong \frac{pN \ln 10}{2\pi} \cong \frac{1}{3} pN \quad (30)$$

est proportionnelle à N au lieu de N^2 . Pour N grand, le gain est très important.

La difficulté dans cette méthode est de choisir ω pour un problème dont on ne connaît pas la solution analytique. Une possibilité est de se ramener à un problème connu avec la même dimension du maillage et le même type de conditions sur les bords. Pour un maillage $N_x \times N_y \times N_z$ et des conditions de type Dirichlet ou Neumann, on estime le rayon spectral de Jacobi par :

$$\rho_{Jacobi} = \frac{N_x^2 \cos \frac{\pi}{N_x} + N_y^2 \cos \frac{\pi}{N_y} + N_z^2 \cos \frac{\pi}{N_z}}{N_x^2 + N_y^2 + N_z^2} \quad (31)$$

Une autre possibilité est de déterminer empiriquement la valeur optimale de ω pour la première équation et de l'utiliser pour les autres.

Pour améliorer l'algorithme, on peut diviser la grille en une grille "paire" et une grille "impaire" comme un échiquier 3D. Comme l'équation pour un point pair dépend uniquement des points impairs voisins et inversement, on peut par exemple mettre à jour la moitié paire puis celle impaire mais en utilisant les nouveaux points pairs.

Il faut aussi mentionner que l'erreur peut beaucoup augmenter avant que la convergence ne soit atteinte. Une petite modification dans l'algorithme permet de résoudre cet inconvénient puisque si ω est le paramètre asymptotique optimal, il n'est pas nécessairement un bon choix de départ. La méthode SOR avec accélération de Chebyshev utilise la division paire-impair de la grille et consiste à adapter à chaque demi-pas la valeur de ω selon le schéma récurrent suivant :

$$\begin{aligned}
\omega^{(0)} &= 1 \\
\omega^{(1/2)} &= 1/(1 - \rho_{Jacobi}^2/2) \\
\omega^{(n+1/2)} &= 1/(1 - \rho_{Jacobi}^2 \omega^{(n)}/2), \quad n = 1/2, 1, \dots, \infty \\
\omega^{(\infty)} &\rightarrow \omega_{optimal}
\end{aligned} \tag{32}$$

2.1.2 Méthode du gradient conjugué

La méthode du gradient conjugué fait partie de la catégorie des méthodes de descente. Comme dans notre cas la matrice $\mathbf{A}$ comporte un grand nombre de zéros, il est essentiel d'optimiser la technique de stockage (méthode de Morse) en ne gardant que les termes non-nuls. En pratique, on obtient un gain de place mémoire considérable par rapport au stockage de toute la matrice (approximativement $14N_x N_y N_z$ au lieu de $(N_x N_y N_z)^2$).

La méthode du gradient est applicable à n'importe quel système linéaire $N \times N$ du type (12), même faiblement non-linéaire. L'intérêt dans le cas de grands systèmes d'équations est de pouvoir résoudre de manière itérative en calcul matriciel et vectoriel. Les opérations associées sont très efficaces si la matrice creuse est stockée proprement.

La méthode classique du gradient permet uniquement de résoudre des systèmes pour lesquels la matrice $\mathbf{A}$ est symétrique et définie positive. L'idée est de minimiser la fonction :

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{x} \tag{33}$$

Cette fonction est extrémale si son gradient :

$$\nabla f = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b} = \mathbf{g}(\mathbf{x}) \tag{34}$$

s'annule. $\mathbf{x}$ est alors solution du système d'équations linéaires (12).

La méthode consiste à localiser le minimum de la fonction $f(x)$ à partir d'une suite de points $\mathbf{x}_k$ et de directions de minimisation $\mathbf{p}_k$ vérifiant $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$, où α_k est le scalaire qui minimise $f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k)$ en fixant $\mathbf{x}_k$ et $\mathbf{p}_k$.

Décrivons brièvement l'algorithme de minimisation :

- On considère d'abord un point initial $\mathbf{x}_0$ quelconque, la direction de descente $\mathbf{p}_0$ est choisie arbitrairement égale à $\mathbf{p}_0 = \mathbf{g}_0 = \nabla f(\mathbf{x}_0)$;
- A chaque itération k , on détermine $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$, tel que $f(\mathbf{x}_{k+1})$ soit minimale ;

- On détermine ensuite le paramètre :

$$\beta_{k+1} = \frac{\mathbf{g}_{k+1}^t \cdot \mathbf{g}_{k+1}}{\mathbf{g}_k^t \cdot \mathbf{g}_k} \quad (35)$$

avec $\mathbf{g}_k = \nabla f(\mathbf{x}_k)$, qui nous permet de changer la direction de minimisation :

$$\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{g}_{k+1} + \beta_{k+1} \mathbf{p}_k \quad (36)$$

- Le processus est réitéré tant que $\mathbf{g}_{k+1}$ n'est pas suffisamment petit.

Pour accélérer la convergence, une forme préconditionnée de l'équation (12) est plus adaptée :

$$(\tilde{\mathbf{A}}^{-1} \mathbf{A}) \cdot \mathbf{x} = \tilde{\mathbf{A}}^{-1} \cdot \mathbf{b} \quad (37)$$

où $\tilde{\mathbf{A}}$ est une matrice proche de $\mathbf{A}$ ($\tilde{\mathbf{A}}^{-1} \mathbf{A} \equiv 1$), appelée le préconditionneur.

Il y a plusieurs possibilités pour définir la convergence. L'algorithme peut s'arrêter si les quantités $\frac{|\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b}|}{|\mathbf{b}|}$ ou $\frac{|\tilde{\mathbf{A}}^{-1} \cdot (\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b})|}{|\tilde{\mathbf{A}}^{-1} \cdot \mathbf{b}|}$ sont plus petites qu'une tolérance choisie. Un

autre critère est de calculer l'erreur en $\mathbf{x}$ et d'imposer que sa norme, divisée par la norme de $\mathbf{x}$, soit plus petite que la tolérance, ou encore que le rapport entre la plus grande composante (en valeur absolue) de l'erreur et la plus grande composante de $\mathbf{x}$ soit inférieur à la tolérance.

La comparaison des deux méthodes de résolution de systèmes linéaires que nous venons de présenter montre que la technique du gradient est la plus rapide et c'est cette dernière que nous avons utilisée par la suite dans nos simulations.

2.1.3 Approche multi-grille

Pour calculer le potentiel avec une bonne précision, il est nécessaire de placer le système physique dans une boîte vide suffisamment grande sur laquelle une condition d'annulation du potentiel est imposée, remplaçant la condition $\phi|_{\infty} = 0$ à l'infini. Les estimations du potentiel sont dans tous les cas perturbées par des effets de taille finie de la boîte.

Notre approche consiste à décrire le système physique et la boîte vide qui l'entoure avec différentes échelles de longueur.

Pour expliquer notre algorithme, considérons un domaine carré D , dans lequel est enfermé le système physique. Le domaine est placé sur un maillage carré de pas h . On note Γ_h le contour joignant les noeuds en bord du domaine. En grisé se trouve le système physique (Figure 4a).

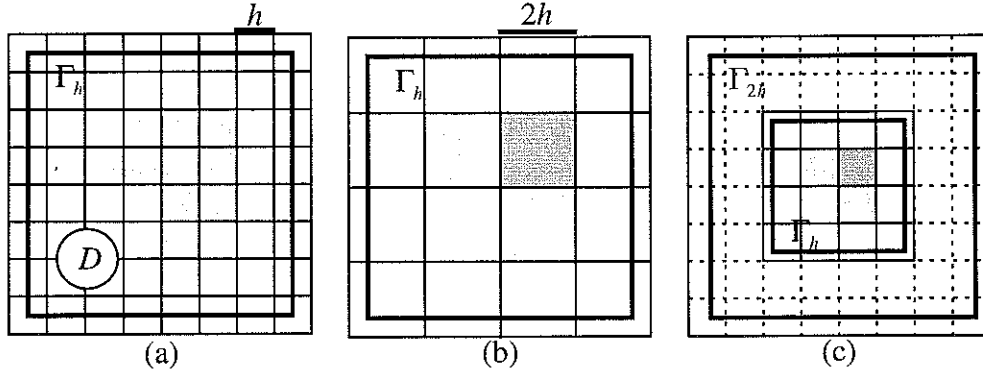


Figure 4 : Transformation d'échelle avec un facteur $b=2$

Si on impose $\phi_h = 0$ sur Γ_h , on obtient une approximation très grossière du potentiel à l'intérieur du système physique.

Renormalisons le système avec un facteur d'échelle $b=2$. La dilatation de la maille donne un pas de maillage $2h$ (Figure 4b). Dans chaque nouvelle cellule, le vecteur aimantation est calculé comme une moyenne vectorielle des vecteurs d'aimantation.

Effectuons ensuite une contraction d'espace avec le même facteur et replaçons le système sur le maillage initial (Figure 4c). Le contour Γ_h se trouve maintenant à l'intérieur du maillage. En posant $\phi_{2h} = 0$ sur Γ_{2h} et en résolvant l'équation de Laplace, une estimation de la solution $\{\phi_{2h}\}$ dans chaque cellule est obtenue et $\{\phi_h\}$ sur Γ_h est calculé par interpolation linéaire de $\{\phi_{2h}\}$. Le système est alors dilaté à sa taille initiale en gardant sur Γ_h les valeurs $\{\phi_h\}$ estimées. La solution obtenue est meilleure que dans le cas $\phi_h = 0$ sur Γ_h .

L'avantage de cette méthode est de nécessiter la même place de mémoire pour la matrice associée à l'opérateur laplacien après chaque transformation. Néanmoins cette matrice et le terme source de l'équation (12) doivent être calculés après chaque transformation d'échelle. La méthode illustrée ici pour un système 2D est généralisable facilement pour des systèmes 3D. Afin d'améliorer la précision des calculs, une série de transformations peut être appliquée. Cependant, le nombre de points de maillage doit être suffisamment grand pour permettre d'effectuer les renormalisations nécessaires. Dans ce cas, le procédé est répété plusieurs fois en partant d'un maillage très large et en effectuant des renormalisations successives.

Pour montrer l'influence du nombre de renormalisation, nous avons calculé le champ démagnétisant pour un cube uniformément aimanté selon une des directions principales et

nous l'avons comparé avec le calcul analytique en évaluant l'erreur relative du résultat numérique par la formule :

$$\frac{\delta H}{H} = \frac{\sum_{\text{points syst.}} (H_{\text{simul}} - H_{\text{anal}})^2}{\sum_{\text{points syst.}} H_{\text{anal}}^2} \quad (38)$$

Le Tableau 1 synthétise les résultats obtenus pour différentes tailles du système physique et de la boîte externe (en nombre de points de maillage selon chaque côté des cubes) en fonction du nombre n de renormalisations effectuées avec un facteur d'échelle 2.

Pour un rapport de tailles donné, on observe l'existence d'un nombre optimal de renormalisations pour obtenir la plus grande précision. En effet, une perte de précision est observée lorsque le nombre n est trop élevé à cause du faible nombre de points de maillage pour calculer $\{\phi_{n,h}\}$. Si la boîte externe est suffisamment grande par rapport au système (par exemple le cas 16/48), le calcul du potentiel, même sans renormalisation, s'avère très précis. La technique de renormalisation est au contraire particulièrement efficace lorsque la boîte externe est proche du système physique (cas 28/32 ou 32/40). En gardant constante la taille du système physique pour deux tailles de la boîte externe (cas 16/24 et 16/48), on remarque qu'un gain de précision considérable peut être atteint avec une seule renormalisation pour le système 16/24. L'erreur devient alors tout à fait comparable à celle du système 16/48 sans renormalisation.

Système physique/ Boîte externe	16/24	16/32	16/48	28/32	32/40	32/48
place mémoire	4.9Mo	9.7Mo	29.4Mo	10.7Mo	19.2Mo	31.0Mo
$n=0$	0.348	0.136	0.0509	0.731	0.556	0.325
$n=1$	0.0491	0.0538	0.0594	0.0729	0.0529	0.0298
$n=2$	0.0663	0.0641	0.0627	0.0344	0.0380	0.0374
$n=3$	0.0706	0.0657	0.0631	0.0429	0.0444	0.0417
$n=4$	-	0.0659	0.0632	0.0442	-	0.0422

Tableau 1 : Influence du nombre de renormalisations sur la précision du calcul numérique pour le champ démagnétisant

Cette technique est bien adaptée aux ordinateurs à faible capacité mémoire (64 Mo RAM) mais nécessite des temps de calcul non négligeables pour décrire le système après chaque renormalisation. En fonction de la taille du système à étudier, il faut trouver un compromis entre précision du calcul, mémoire disponible et temps de calcul.

2.2 Calcul du champ démagnétisant par une méthode intégrale

Dans ce paragraphe, nous rappelons quelques notions essentielles sur les transformées de Fourier continues et discrètes, puis nous regardons plus en détail deux algorithmes de transformées de Fourier discrètes afin de les appliquer au calcul du champ démagnétisant.

2.2.1 Transformée de Fourier continue

Un processus physique peut être décrit, soit dans le domaine temporel, par les valeurs d'une certaine quantité h en fonction du temps t ($h(t)$), soit dans le domaine fréquentiel, par une amplitude H (généralement une fonction complexe indiquant aussi le déphasage) en fonction de la fréquence f ($H(f)$), avec $-\infty < f < \infty$. De la même manière, un processus propagatif peut être représenté, soit dans l'espace des vecteurs d'onde par une fonction $h(x)$, soit dans l'espace réel par une fonction $H(k)$. Il est souvent utile de considérer $h(x)$ et $H(k)$ comme étant 2 représentations différentes de la même fonction. Les 2 représentations sont liées par les équations de la transformée de Fourier :

$$H(k) = \int_{-\infty}^{\infty} h(x) e^{2\pi i k x} dx \quad (39)$$

$$h(x) = \int_{-\infty}^{\infty} H(k) e^{-2\pi i k x} dk \quad (40)$$

On dénote une paire de transformées par $h \Leftrightarrow H$.

Avec deux fonctions $h(x)$ et $g(x)$ et leurs transformées de Fourier respectives $H(k)$ et $G(k)$, on démontre un théorème important. La convolution des deux fonctions, notée par $g * h$, est définie par :

$$(g * h)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} g(\xi) h(x - \xi) d\xi \quad (41)$$

Le théorème de la convolution stipule que la transformée de Fourier de la convolution de deux fonctions est égale au produit des transformées de Fourier des fonctions individuelles :

$$g * h \Leftrightarrow G \cdot H \quad (42)$$

2.2.2 Transformée de Fourier discrète

Dans la plupart des méthodes numériques qui nécessitent l'utilisation de fonctions, celles-ci ne peuvent être stockées que pour un nombre fini des points. L'échantillonnage est fait d'habitude en certains points également espacés. Soit h l'intervalle spatial entre deux points successifs d'évaluation et $f_n \equiv f(x_n)$, où $x_n = nh$, avec $n = 0, 1, 2, \dots, N-1$ une fonction discrète évaluée. On peut également définir la transformée de Fourier discrète de f en approximant l'expression intégrale par une somme discrète :

$$F_k = \sum_{n=0}^{N-1} f_n e^{2\pi i k n / N}, \text{ avec } k = 0, \dots, N-1 \quad (43)$$

La transformée de Fourier inverse est donnée par :

$$f_n = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} F_k e^{-2\pi i k n / N}, \text{ avec } n = 0, \dots, N-1 \quad (44)$$

2.2.3 Transformée de Fourier en dimension L

La généralisation de la transformée de Fourier en L dimensions d'une fonction discrète L -dimensionnelle $f(n_1, \dots, n_L)$ conduit à :

$$F(k_1, \dots, k_L) = \sum_{n_L=0}^{N_L-1} \dots \sum_{n_1=0}^{N_1-1} \exp\left(\frac{2\pi i k_L n_L}{N_L}\right) \dots \exp\left(\frac{2\pi i k_1 n_1}{N_1}\right) f(n_1, \dots, n_L) \quad (45)$$

où $k_1 = 0, \dots, N_1-1$; ... ; $k_L = 0, \dots, N_L-1$.

La transformée inverse est donnée par :

$$f(n_1, \dots, n_L) = \frac{1}{N_1 \dots N_L} \sum_{k_L=0}^{N_L-1} \dots \sum_{k_1=0}^{N_1-1} \exp\left(-\frac{2\pi i k_L n_L}{N_L}\right) \dots \exp\left(-\frac{2\pi i k_1 n_1}{N_1}\right) F(k_1, \dots, k_L) \quad (46)$$

2.2.4 Transformée de Fourier rapide unidimensionnelle

La transformée de Fourier discrète d'une fonction unidimensionnelle échantillonnée en N points est définie par :

$$F_k = \sum_{n=0}^{N-1} W^{nk} f_n \quad (47)$$

en notant $W = e^{2\pi i/N}$, avec $i^2 = -1$. En introduisant la matrice $W(n,k)$ composée des puissances successives de $e^{2\pi i/N}$, le nombre d'opérations nécessaires pour effectuer le calcul d'une transformée de Fourier est de l'ordre de N^2 . Le coût pour construire la matrice W est quant à lui négligeable lorsque N est suffisamment grand. La transformée de Fourier par cette méthode directe se fait alors dans $O(N^2)$.

Du fait que le nombre d'opérations est en N^2 , le calcul direct d'une transformée de Fourier devient rapidement inexploitable pour des systèmes de trop grande taille. Il est alors nécessaire de mettre en oeuvre des algorithmes plus sophistiqués comme la méthode des FFT ("Fast Fourier Transform"), développée par T. W. Cooley et J.W. Tukey [Cooley 65].

Une variante simplifiée de cet algorithme a été donné par Danielson et Lanczos. Ils ont montré que la transformée de Fourier de taille N peut s'écrire comme la somme des deux transformées de Fourier de taille $N/2$: l'une formée à partir des points d'indice pair de la fonction originale et l'autre à partir des points d'indice impair :

$$\begin{aligned}
 F_k &= \sum_{j=0}^{N-1} e^{2\pi ijk/N} f_j \\
 &= \sum_{j=0}^{N/2-1} e^{2\pi ik(2j)/N} f_{2j} + \sum_{j=0}^{N/2-1} e^{2\pi ik(2j+1)/N} f_{2j+1} \\
 &= \sum_{j=0}^{N/2-1} e^{2\pi ikj/(N/2)} f_{2j} + W^k \sum_{j=0}^{N/2-1} e^{2\pi ikj/(N/2)} f_{2j+1} \\
 &= F_k^e + W^k F_k^o
 \end{aligned} \tag{48}$$

où F_k^e dénote la composante k de la transformée de Fourier de dimension $N/2$ formée des composantes paires de la fonction originale f_j , tandis que F_k^o représente la composante k de la transformée de Fourier de dimension $N/2$ formée des composantes impaires de f_j . Il faut noter que l'indice k varie de 0 à N et non pas de 0 à $N/2$. Toutefois, les transformées F_k^e et F_k^o sont périodiques en k avec la période $N/2$ et on a donc $F_k^e = F_{k+N/2}^e$ et respectivement $F_k^o = F_{k+N/2}^o$ pour $k = 0, \dots, N/2 - 1$.

La propriété mise en évidence par Danielson et Lanczos peut être appliquée récursivement jusqu'à l'obtention de transformées de taille 1. Il est toutefois nécessaire que N soit une puissance entière de 2, ce que nous supposons dans la suite.

La transformée de Fourier de taille 1 est évidemment la fonction identité. Pour tout enchaînement de e et de o de longueur $\log_2 N$, on a donc :

$$F_k^{eoeoeoe...oe} = f_n \text{ pour un } n \text{ donné} \quad (49)$$

Cette transformée ne dépend pas de k puisqu'elle est périodique en k avec la période 1. On constate de plus que la chaîne de e et de o de la relation (49) correspond au codage binaire de l'entier n en remplaçant (e,o) par $(0,1)$ et après renversement de bits (voir exemple de la Figure 5)

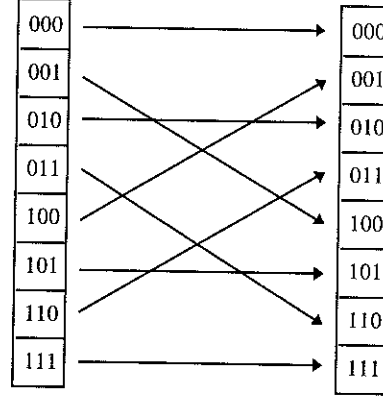


Figure 5 : Exemple de réarrangement d'un vecteur de dimension 8

L'exemple de la Figure 6 donne un aperçu du calcul de transformées de Fourier rapide dans le cas où $N=4$ sous la forme de canaux. Les composantes du vecteur f_j ont été classées par ordre d'indice croissant après renversement des bits.

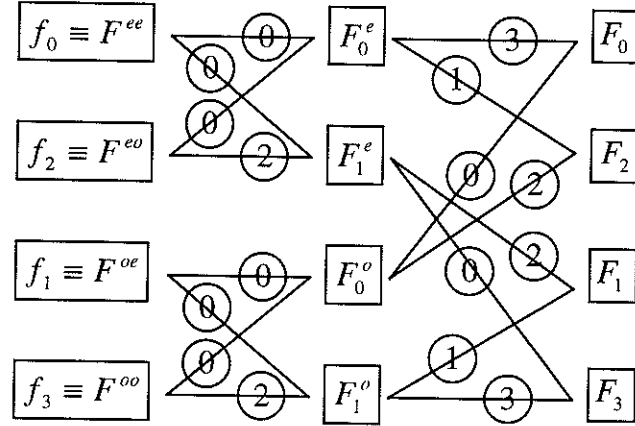


Figure 6 : Exemple de calcul de FFT

La transformée F_k est la somme des contributions de chaque canal pondérée par une puissance de W dont l'exposant est entouré dans la Figure 6. Ainsi :

$$F_3 = W^0 F_1^e + W^3 F_1^o = W^0 (W^0 f_0 + W^2 f_2) + W^3 (W^0 f_1 + W^2 f_3) \quad (50)$$

A partir de $N=16$, l'algorithme des FFT devient plus efficace que le calcul explicite de la transformée de Fourier et sa complexité est proportionnelle à $N \log_2 N$

2.2.5 Transformée de Fourier rapide en dimension L

La transformée de Fourier rapide présentée dans le paragraphe précédent peut être généralisée pour le cas multidimensionnel. On observe tout d'abord que l'équation (45) de la transformée multidimensionnelle peut s'écrire aussi de la façon suivante :

$$F(k_1, \dots, k_L) = \sum_{n_L=0}^{N_L-1} \exp\left(\frac{2\pi i k_L n_L}{N_L}\right) \sum_{n_{L-1}=0}^{N_{L-1}-1} \exp\left(\frac{2\pi i k_{L-1} n_{L-1}}{N_{L-1}}\right) \dots \sum_{n_1=0}^{N_1-1} \exp\left(\frac{2\pi i k_1 n_1}{N_1}\right) f(n_1, \dots, n_L) \quad (51)$$

La transformée de Fourier d'une fonction multidimensionnelle peut donc être calculée par une suite de transformées rapides unidimensionnelles. Pour chaque valeur de $n_1, n_2, \dots, n_{L-1}$, on applique l'algorithme FFT selon l'indice L . Puis, pour chaque valeur de $n_1, n_2, \dots, n_{L-2}, k_L$, on applique l'algorithme FFT selon l'indice $L-1$ et on continue de la même façon jusqu'à l'obtention de la transformée finale.

Pour le cas particulier où $N_1 = N_2 = \dots = N_L = N$, le nombre d'opérations nécessaires pour calculer la transformée de dimension L est proportionnel à $N^L \log_2 N$.

2.2.6 Transformée de Fourier par l'algorithme FFTW

Frigo et Johnston ont proposé en 1997 un des algorithmes les plus performants de transformation de Fourier dénommé FFTW [Frigo 97].

Cet algorithme est fondé sur trois idées essentielles : le calcul de la transformée est effectué par un *exécuteur*, qui est composé de blocs optimisés de code en langage C dénommés *codelets*. Lors de l'exécution, un *planificateur* est responsable de trouver la façon la plus efficace (un *plan*) pour composer les *codelets*.

L'*exécuteur* utilise l'algorithme de transformation de Fourier de Cooley-Tukey [Cooley 65], qui fonctionne par factorisation de la transformée de dimension N en $N = N_1 N_2$. L'algorithme calcule de façon récursive N_1 transformées de taille N_2 et N_2 transformées de taille N_1 . Les transformées initiales de la récursivité sont calculées par les *codelets*, qui sont des transformations codées pour de petites tailles diverses.

L'algorithme Cooley-Tukey permet un choix arbitraire des facteurs N_1 et N_2 . Le meilleur choix dépend des caractéristiques diverses du matériel de l'ordinateur comme le nombre de registres, la taille des caches ou la structure du processeur. L'algorithme FFTW est capable de se perfectionner en optimisant ces choix en termes de facteurs à l'aide du *planificateur*.

Enfin, les *codelets* eux-mêmes sont générés automatiquement par un générateur de *codelets*.

2.2.7 Application des transformées de Fourier au calcul du champ démagnétisant

La deuxième méthode de calcul du champ démagnétisant que nous avons utilisée repose sur la technique de transformée de Fourier rapide. Elle est fondée sur le fait que le champ démagnétisant peut s'écrire sous la forme d'un produit de convolution (équation (42), chapitre II).

Pour discrétiser le système physique, on utilise le même procédé que pour la méthode de différences finies, sans être obligé de mailler à l'extérieur du système physique.

Il existe plusieurs concepts d'échantillonnage de l'aimantation à l'intérieur de chaque cellule. Plusieurs choix, accompagnés d'une discussion sur la précision du calcul et la place de mémoire nécessaire ont été présentés par Ramstöck [Ramstöck 94]. Dans notre approche, l'aimantation est interpolée de manière quadratique à l'intérieur de chaque cellule, permettant aux charges de volume de varier linéairement. Pour limiter la place mémoire, les charges magnétiques ont été moyennées dans chaque élément de volume et sur chaque élément de surface. Cette technique s'apparente à celle proposée par Ramstöck dans son modèle B.

Dans ce paragraphe, nous allons présenter deux techniques intégrales de calcul du champ démagnétisant, une qui calcule directement le champ (MI-H) et une autre en passant par le potentiel scalaire (MI- ϕ)

2.2.7.1 Méthode MI-H

L'expression du champ démagnétisant s'écrit comme un produit de convolution :

$$\mathbf{H}_D(\mathbf{r}) = -\int_V \rho_m(\mathbf{r}') \nabla_{r'} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3 r' - \oint_S \sigma_m(\mathbf{r}') \nabla_{r'} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dS' \quad (52)$$

et sa forme discrétisée :

$$\begin{aligned}
\mathbf{H}_D(\mathbf{r}_i) = & - \sum_j \rho_m(\mathbf{r}_j) \int_{V_j} \nabla_{\mathbf{r}'} G(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}') d^3 r' \\
& - \sum_k \sigma_m(\mathbf{r}_k) \iint_{S_j} \nabla_{\mathbf{r}'} G(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}') dS'
\end{aligned} \tag{53}$$

où $\rho_m(\mathbf{r}_j)$ est la charge de volume de l'élément centré en $\mathbf{r}_j$ et $\sigma_m(\mathbf{r}_k)$ est la charge de surface centrée en $\mathbf{r}_k$ (Figure 7).

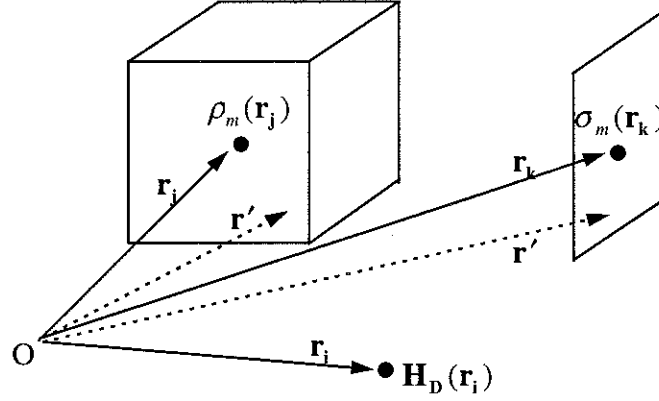


Figure 7 : Schéma de calcul du champ démagnétisant

Nous utiliserons dans la suite de notre présentation les notations suivantes :

$$\begin{aligned}
\mathbf{K}_{\text{vol}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) &= - \int_{V_j} \nabla_{\mathbf{r}'} G(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}') d^3 r' \\
\mathbf{K}_{\text{surf}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) &= - \iint_{S_j} \nabla_{\mathbf{r}'} G(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}') dS'
\end{aligned} \tag{54}$$

où $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'|$ est la distance entre le point $\mathbf{r}_i$ (le centre de l'élément i) où on désire calculer le champ démagnétisant et le point courant $\mathbf{r}'$ d'intégration.

Les expressions des vecteurs $\mathbf{K}_{\text{vol}}$ et $\mathbf{K}_{\text{surf}}$ conduisent respectivement à une intégrale triple et double, qui, pour un maillage rectangulaire, peuvent être résolues analytiquement.

Soit $h_x = 2a$, $h_y = 2b$, $h_z = 2c$ les pas de maillage selon les trois directions. Le vecteur d'interaction $\mathbf{K}_{\text{vol}}$ correspondant à la contribution de l'élément volumique centré en (l,m,n) au champ démagnétisant calculé en (i,j,k) a la forme :

$$\begin{aligned}
K_{vol}^x(i-l, j-m, k-n) &= \frac{1}{4\pi} \int_{-c-b-a}^c \int_{-a}^b \int_{-a}^a \frac{x-x_0}{((x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2)^{3/2}} dx dy dz \\
&= \frac{1}{4\pi} (F(c, z_0, b-y_0, \sqrt{(a-x_0)^2 + (b-y_0)^2}) \\
&\quad - F(c, z_0, b-y_0, \sqrt{(a+x_0)^2 + (b-y_0)^2}) \\
&\quad - F(c, z_0, -b-y_0, \sqrt{(a-x_0)^2 + (b+y_0)^2}) \\
&\quad + F(c, z_0, -b-y_0, \sqrt{(a+x_0)^2 + (b+y_0)^2}))
\end{aligned} \tag{55}$$

où $x_0 = (i-l)h_x$, $y_0 = (j-m)h_y$, $z_0 = (k-n)h_z$ et

$$\begin{aligned}
F(c, z_0, p, q) &= \int_{-c}^c \ln(p + \sqrt{(z-z_0)^2 + q^2}) dz \\
&= (z-z_0)(\ln(p + \sqrt{(z-z_0)^2 + q^2}) - 1) \\
&\quad - p \ln((z-z_0) + \sqrt{(z-z_0)^2 + q^2}) \\
&\quad - 2\sqrt{p^2 - q^2} \operatorname{atan}\left(\frac{\sqrt{q-p} \sqrt{(z-z_0)^2 + q^2} - q}{\sqrt{p+q} (z-z_0)}\right)
\end{aligned} \tag{56}$$

Par permutations circulaires on retrouve les deux autres composantes du vecteur $\mathbf{K}_{vol}$.

Pour les interactions de surface on considère l'exemple d'une surface perpendiculaire à Oz. Les autres expressions sont obtenues par permutations circulaires. Les composantes du vecteur $\mathbf{K}_{surf}$ s'écrivent :

$$\begin{aligned}
K_{surf-z}^x(i-l, j-m, k-l) &= \frac{1}{4\pi} \ln \left(\frac{b-y_0 + \sqrt{(a-x_0)^2 + (b-y_0)^2 + (z_0+c)^2}}{-b-y_0 + \sqrt{(a-x_0)^2 + (b+y_0)^2 + (z_0+c)^2}} \right. \\
&\quad \left. \cdot \frac{-b-y_0 + \sqrt{(a+x_0)^2 + (b+y_0)^2 + (z_0+c)^2}}{b-y_0 + \sqrt{(a+x_0)^2 + (b-y_0)^2 + (z_0+c)^2}} \right) \\
K_{surf-z}^y(i-l, j-m, k-l) &= \frac{1}{4\pi} \ln \left(\frac{a-x_0 + \sqrt{(a-x_0)^2 + (b-y_0)^2 + (z_0+c)^2}}{-a-x_0 + \sqrt{(a+x_0)^2 + (b-y_0)^2 + (z_0+c)^2}} \right. \\
&\quad \left. \cdot \frac{-a-x_0 + \sqrt{(a+x_0)^2 + (b+y_0)^2 + (z_0+c)^2}}{a-x_0 + \sqrt{(a-x_0)^2 + (b+y_0)^2 + (z_0+c)^2}} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K_{surf_z}^z(i-l, j-m, k-l) = & \frac{1}{4\pi} \left(\text{atan} \frac{(a-x_0)(b-y_0)}{(z_0+c)\sqrt{(a-x_0)^2+(b-y_0)^2+(z_0+c)^2}} \right. \\
& + \text{atan} \frac{(a-x_0)(b+y_0)}{(z_0+c)\sqrt{(a-x_0)^2+(b+y_0)^2+(z_0+c)^2}} \\
& + \text{atan} \frac{(a+x_0)(b-y_0)}{(z_0+c)\sqrt{(a+x_0)^2+(b-y_0)^2+(z_0+c)^2}} \\
& \left. + \text{atan} \frac{(a+x_0)(b+y_0)}{(z_0+c)\sqrt{(a+x_0)^2+(b+y_0)^2+(z_0+c)^2}} \right)
\end{aligned} \tag{57}$$

où dans ce cas les indices (l, m, n) désignent la cellule qui contient la surface. Comme une surface appartient normalement aux deux cellules adjacentes, elle est repérée par les indices de l'une des deux cellules. Nous avons choisi d'attacher à chaque cellule les surfaces situées à gauche et au-dessous.

Dans le cas des éléments parallélépipédiques, l'expression du champ démagnétisant au centre de la cellule placée en (i, j, k) , s'écrit :

$$\begin{aligned}
\mathbf{H}_D(i, j, k) = & \sum_{l, m, n=1}^{N_x, N_y, N_z} \mathbf{K}_{vol}(i-l, j-m, k-n) \rho_m(l, m, n) \\
& + \sum_{l, m, n=1}^{N_x+1, N_y+1, N_z+1} \mathbf{K}_{surf}(i-l, j-m, k-n) \sigma_m(l, m, n)
\end{aligned} \tag{58}$$

en remarquant que $N+1$ estimations sont nécessaires pour calculer les termes de surfaces lorsque le système physique comporte N mailles selon une direction.

L'expression précédente peut s'écrire sous une forme compacte comme un produit de convolution entre une fonction d'interaction $\mathbf{K}$ et une charge magnétique b :

$$\mathbf{H}_D(i, j, k) = \sum_{l, m, n=1}^{N_x, N_y, N_z} \mathbf{K}(i-l, j-m, k-n) b(l, m, n) = [\mathbf{K} * b](i, j, k) \tag{59}$$

La méthode des FFT a été développée initialement pour des systèmes périodiques, car le théorème de convolution discrète sur lequel elle est fondée, suppose que le signal est périodique.

Si on applique le théorème (41) discrétisé à l'expression ci-dessus sans précaution, le calcul du champ démagnétisant est fortement pollué car des interactions fictives entre éléments situés à grande distance sont introduites.

La technique du “zero-padding” (pavage de zéros) permet de surmonter ce problème. Elle consiste à doubler la taille du système physique et à remplir de zéros le vecteur charge magnétique b , tel que $b(i)$ coïncide avec la densité réelle de charges pour $i \in [1, N]$ et $b(i)=0$ pour $i \in [N+1, 2N]$.

Pour illustrer cette méthode, considérons le cas du calcul du produit de convolution de deux fonctions créneaux (Figure 8) non périodiques.

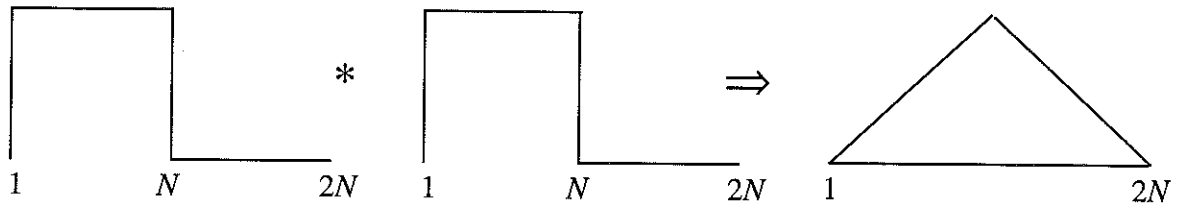


Figure 8 : Produit de convolution de deux fonctions créneaux

Nous obtenons bien, entre 1 et N , le résultat escompté après pavage de zéros du vecteur signal d'entrée pour $[N+1, 2N]$

Nous allons maintenant expliquer les modifications à apporter au calcul du champ démagnétisant dans le cadre d'un modèle 1D. L'expression du champ s'écrit :

$$\mathbf{H}_D(i) = \sum_{l=1}^N \mathbf{K}(i-l)b(l) = \sum_{l=-N+1}^{N-1} \mathbf{K}(l)b(i-l), \quad i = 1, \dots, N \quad (60)$$

telle que $b(i)=0$ pour $i \in [N+1, 2N]$. L'évaluation de l'expression précédente pour la transformée de Fourier nécessite que $\mathbf{K}$ et b soient de même dimension. Il est donc nécessaire d'ajouter un terme supplémentaire $\mathbf{K}(-N)=0$ et d'étendre la somme sur l jusqu'à l'indice $l = -N$. En conclusion, l'algorithme de résolution se résume à :

- calculer les transformées de Fourier discrètes de $\text{TF}(\mathbf{K})$ et $\text{TF}(b)$ en utilisant la méthode des FFT ;
- appliquer le théorème de convolution, en calculant le produit direct $\text{TF}(\mathbf{K}) \cdot \text{TF}(b)$, qui est la transformée de Fourier discrète de $\mathbf{H}_D$:

$$\text{TF}(\mathbf{H}_D)(\kappa) = (\text{TF}(\mathbf{K}) \cdot \text{TF}(b))(\kappa), \quad \kappa = 1, \dots, 2N \quad (61)$$

- définir le champ démagnétisant par la transformée de Fourier discrète inverse en utilisant la méthode des FFT, en ne prenant en compte que les N premières valeurs du tableau.

L'algorithme que nous venons de présenter se généralise facilement pour un système 3D en appliquant la technique du zero-padding selon les trois dimensions. L'inconvénient majeur de la technique intégrale est qu'elle nécessite une occupation mémoire importante, 7/8 des tableaux utilisés ne comportant que des zéros. Par contre, cette technique qui couple fonctions de Green et FFT permet d'évaluer les champs avec une haute précision et avec des temps de calculs bien inférieurs aux méthodes du type différences finies.

2.2.7.2 Méthode $MI-\phi$

Pour diminuer la place mémoire nécessaire, une autre possibilité est d'utiliser un algorithme qui calcule le potentiel scalaire ϕ et d'appliquer ensuite la relation trouvée pour la méthode des différences finies pour calculer le champ. Pour le potentiel, on obtient une expression analogue à celle du champ :

$$\begin{aligned} \phi(i, j, k) = & \sum_{l, m, n=1}^{N_x, N_y, N_z} \tilde{G}_{vol}(i-l, j-m, k-n) \rho_m(l, m, n) \\ & + \sum_{l, m, n=1}^{N_x+1, N_y+1, N_z+1} \tilde{G}_{surf}(i-l, j-m, k-n) \sigma_m(l, m, n) \end{aligned} \quad (62)$$

où les interactions proviennent des intégrales suivantes :

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{vol}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) &= \int_{V_j} G(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}') d^3 r' \\ \tilde{G}_{surf}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) &= \oint_{S_j} G(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}') dS' \end{aligned} \quad (63)$$

avec les mêmes définitions pour les distances que pour le calcul direct du champ.

L'évaluation de la fonction d'interaction volumique est réalisée par une intégration exacte selon l'une des dimensions et une méthode d'intégration numérique (de Gauss-Legendre) pour les deux autres ; l'expression du terme surfacique s'écrit par contre sous forme analytique.

L'inconvénient de cette technique est la perte de précision de calcul, qui nécessite l'évaluation d'un gradient à partir du potentiel scalaire. L'avantage est que l'on manipule une grandeur

Nb. de tableaux de taille $[1 \dots 2N_x][1 \dots 2N_y][1 \dots 2N_z]$	MI-H	MI- ϕ
interactions volumiques	3	1
interactions surfaciques	9	3
charges de volume	1	1
charges de surface	3	3
produit de convolution	3	1
nombre total de tableaux	19	9

Tableau 2 : Comparaison de la place mémoire nécessaire pour les deux variantes de calcul du champ démagnétisant

scalaire et un gain important en place mémoire par rapport à la technique de calcul direct du champ est observé (Tableau 2).

Pour comparer les méthodes utilisées, nous avons considéré un cube de matière uniformément aimanté comportant N points de maillage selon chaque dimension. Nous avons estimé l'erreur avec la même formule (38) que dans le cas des différences finies. Les résultats obtenus sont présentés dans le Tableau 3. L'erreur est relativement constante et très faible pour le calcul direct du champ (MI-H). Elle dépend fortement du nombre de points de discrétisation N pour la méthode MI- ϕ et suit approximativement une loi en $1/N$.

La méthode MI-H est la plus précise mais reste la plus gourmande en place mémoire. Pour des systèmes de très grande taille (64x64x64 noeuds), la capacité mémoire des nos machines (256

N	Méthode MI-H		Méthode MI- ϕ	
	place mémoire	erreur	place mémoire	erreur
4	2.0Mo	$2.40 \cdot 10^{-8}$	1.3Mo	0.195
8	2.5Mo	$2.60 \cdot 10^{-8}$	1.7Mo	0.110
16	11.1Mo	$2.52 \cdot 10^{-8}$	4.6Mo	0.0566
32	78.4Mo	$2.50 \cdot 10^{-8}$	27.6Mo	0.0283

Tableau 3 : Comparaison des méthodes utilisées

Mo RAM) ne permet plus d'employer la méthode MI-H. Il est alors nécessaire de mettre en oeuvre une méthode de calcul par le potentiel. Bien que les erreurs introduites par les deux méthodes de calcul du potentiel (MD- ϕ et MI- ϕ) soient comparables, cette dernière est préférée car elle est la plus rapide.

3. Evaluation du champ d'échange

La contribution d'échange volumique au champ total peut être évaluée en utilisant deux approches : celle microscopique, à partir du produit scalaire entre les moments voisins [Zhu 88,89], [Mansuripur 88], [Schabes 91], et celle macroscopique, qui implique le calcul des dérivées secondes des composantes de l'aimantation [Trouilloud 87], [Nakatani 89], [Berkov 91,93].

La deuxième méthode présente plusieurs variantes, en fonction de la précision de calcul des dérivées, de l'interpolation du vecteur aimantation et du type de maillage choisi. Pour un maillage rectangulaire, les dérivées peuvent être calculées en utilisant des schémas à trois points [Shir 78], [Nakatani 89] ou à cinq points [Trouilloud 87], [Berkov 93], [Labrune 95].

Pour le calcul des dérivées secondes, nous avons utilisé un schéma à trois points accompagné d'une interpolation à l'ordre deux pour l'aimantation. Nous avons appliqué un traitement particulier pour les points voisins aux surfaces afin de tenir compte des conditions de passage.

En se référant à l'équation (27), chapitre II, les composantes du champ d'échange sont calculées par la méthode des différences finies tenant compte de la condition de Brown lorsque le point de calcul est proche d'une surface libre. Une relation générale pour les dérivées secondes de l'aimantation peut être établie à l'aide du paramètre c , défini au paragraphe 2.1 :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 m_\alpha}{\partial x^2} &= \frac{1}{h_x^2} (c(i-1, j, k)(m_\alpha(i-1, j, k) - m_\alpha(i, j, k)) + \\
 &\quad + c(i+1, j, k)(m_\alpha(i+1, j, k) - m_\alpha(i, j, k))) \\
 \frac{\partial^2 m_\alpha}{\partial y^2} &= \frac{1}{h_y^2} (c(i, j-1, k)(m_\alpha(i, j-1, k) - m_\alpha(i, j, k)) + \\
 &\quad + c(i, j+1, k)(m_\alpha(i, j+1, k) - m_\alpha(i, j, k))) \\
 \frac{\partial^2 m_\alpha}{\partial z^2} &= \frac{1}{h_z^2} (c(i, j, k-1)(m_\alpha(i, j, k-1) - m_\alpha(i, j, k)) + \\
 &\quad + c(i, j, k+1)(m_\alpha(i, j, k+1) - m_\alpha(i, j, k)))
 \end{aligned} \tag{64}$$

où $\alpha = x, y, z$.

Les relations (64) sont valables en tout point du système physique en supposant que l'aimantation spontanée M_s et la constante d'échange A sont constantes.

Pour les systèmes physiques multiphasiques une généralisation s'impose. Soit S une surface de passage entre deux milieux de natures différentes 1 et 2 (Figure 9).

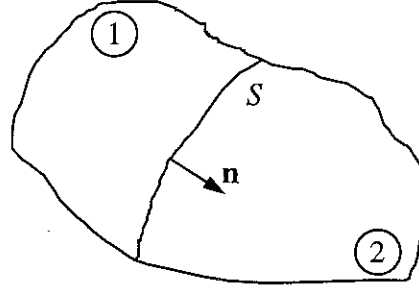


Figure 9 : Passage entre deux milieux de natures différentes

La distribution d'aimantation vérifie au voisinage de l'interface la continuité de son orientation :

$$\mathbf{m}^1(\mathbf{r})|_S = \mathbf{m}^2(\mathbf{r})|_S \quad (65)$$

et une condition de conservation du flux d'échange :

$$A_1 \frac{\partial \mathbf{m}^1}{\partial n} \Big|_S = A_2 \frac{\partial \mathbf{m}^2}{\partial n} \Big|_S \quad (66)$$

A l'équilibre, les variations des termes surfaciques de l'énergie libre s'annulent eux aussi comme pour les fluctuations volumiques (relation (18), chapitre II) :

$$\delta F_{ex surf} = 2 \iint_S A_1 \sum_i \delta m_i^1 (\nabla m_i^1 \cdot \mathbf{ds}_1) + 2 \iint_S A_2 \sum_i \delta m_i^2 (\nabla m_i^2 \cdot \mathbf{ds}_2) \quad (67)$$

Si les autres termes surfaciques, comme l'anisotropie de surface, sont négligeables, en tenant compte de la condition de continuité de l'aimantation et en notant $ds = ds_1 = ds_2$ et $n = n_2 = -n_1$, la relation précédente se transforme en :

$$\delta F_{surf} = 2 \iint_S \delta \mathbf{m} \left(A_1 \frac{\partial \mathbf{m}^1}{\partial n} - A_2 \frac{\partial \mathbf{m}^2}{\partial n} \right) ds \quad (68)$$

Son annulation pour toute fluctuation $\delta \mathbf{m}$ mène à la relation (66).

Il nous reste maintenant à établir les relations discrètes pour évaluer la direction de l'aimantation à l'interface et ses dérivées première et seconde. Pour une surface perpendiculaire à la direction Ox , deux cas existent et sont schématisés dans la Figure 10.

Pour un système multiphasique, il est nécessaire d'introduire deux tableaux supplémentaires $A(i, j, k)$ et $M_s(i, j, k)$ pour définir les valeurs locales de la constante d'échange A et de l'aimantation spontanée M_s .

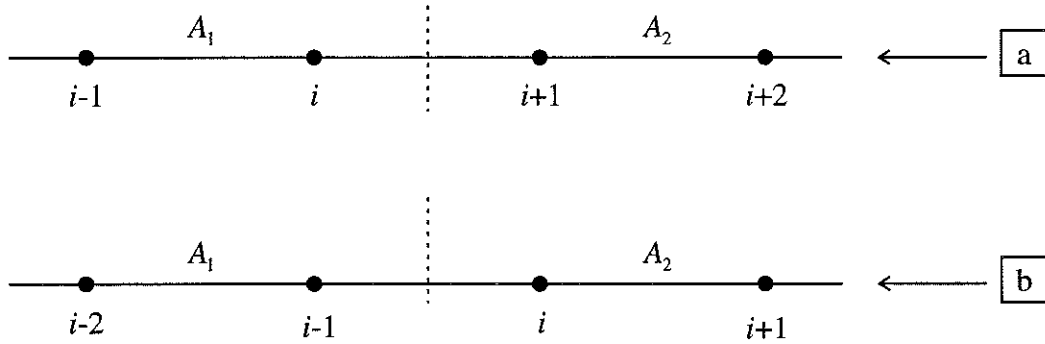


Figure 10 : Schéma pour expliquer le passage entre deux milieux de natures différentes

En utilisant un développement en série de Taylor et en tenant compte de la condition de passage (66), l'orientation du vecteur d'aimantation est donnée par les relations suivantes, exactes à l'ordre deux :

$$(a) \quad \mathbf{m}_{\text{interf}} = \mathbf{m}(i + 1/2, j, k) \\ = \frac{A(i, j, k)(9\mathbf{m}(i, j, k) - \mathbf{m}(i - 1, j, k)) + A(i + 1, j, k)(9\mathbf{m}(i + 1, j, k) - \mathbf{m}(i + 2, j, k))}{8(A(i, j, k) + A(i + 1, j, k))}$$

$$\text{avec } A(i, j, k) = A_1 \text{ et } A(i + 1, j, k) = A_2$$

$$(b) \quad \mathbf{m}_{\text{interf}} = \mathbf{m}(i - 1/2, j, k) \\ = \frac{A(i - 1, j, k)(9\mathbf{m}(i - 1, j, k) - \mathbf{m}(i - 2, j, k)) + A(i, j, k)(9\mathbf{m}(i, j, k) - \mathbf{m}(i + 1, j, k))}{8(A(i - 1, j, k) + A(i, j, k))}$$

$$\text{avec } A(i - 1, j, k) = A_1 \text{ et } A(i, j, k) = A_2 \quad (69)$$

La charge surfacique pour une surface située à gauche du point i est calculée comme :

$$\sigma_m = m_x(i - 1/2, j, k)(M_s(i - 1, j, k) - M_s(i, j, k)) \quad (70)$$

Les dérivées première et seconde sont également évaluées par un développement de Taylor en utilisant l'expression de l'orientation de l'aimantation à l'interface trouvée précédemment :

$$(a) \partial_x \mathbf{m}(i, j, k) = \frac{1}{3h_x} (4\mathbf{m}(i+1/2, j, k) - \mathbf{m}(i-1, j, k) - 3\mathbf{m}(i, j, k))$$

$$(b) \partial_x \mathbf{m}(i, j, k) = \frac{1}{3h_x} (-4\mathbf{m}(i-1/2, j, k) + \mathbf{m}(i+1, j, k) + 3\mathbf{m}(i, j, k)) \quad (71)$$

et respectivement :

$$(a) \partial_x^2 \mathbf{m}(i, j, k) = \frac{4}{3h_x^2} (2\mathbf{m}(i+1/2, j, k) + \mathbf{m}(i-1, j, k) - 3\mathbf{m}(i, j, k))$$

$$(b) \partial_x^2 \mathbf{m}(i, j, k) = \frac{4}{3h_x^2} (2\mathbf{m}(i-1/2, j, k) + \mathbf{m}(i+1, j, k) - 3\mathbf{m}(i, j, k)) \quad (72)$$

Nous avons à présent à notre disposition les outils pour évaluer le champ d'échange en toutes circonstances et la possibilité de calculer les charges volumiques et surfaciques au voisinage de l'interface entre deux milieux de natures différentes.

Les champs d'anisotropie et Zeeman intervenant dans l'expression du champ total ne posent pas de problèmes particuliers, du fait de leur caractère local. Le champ d'anisotropie dépend uniquement de la forme de l'énergie d'anisotropie, tandis que le champ extérieur appliqué est un vecteur constant.

4. Evaluation de l'énergie totale

L'énergie totale du système physique est évaluée en sommant les contributions des quatre termes sur toutes les cellules élémentaires qui le composent. Pour un maillage régulier, les contributions à l'énergie totale s'écrivent :

$$F_H = -\mu_0 v \sum_{(i,j,k)} M_s(i, j, k) \mathbf{m}(i, j, k) \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}} \quad (73)$$

$$F_D = -\frac{1}{2} \mu_0 v \sum_{(i,j,k)} M_s(i, j, k) \mathbf{m}(i, j, k) \cdot \mathbf{H}_D(i, j, k) \quad (74)$$

$$F_K = -v \sum_{(i,j,k)} P_K(i, j, k) [\mathbf{m}(i, j, k) \cdot \mathbf{u}_K(i, j, k)] \quad (75)$$

$$F_{ex} = v \sum_{(i,j,k)} A(i, j, k) \left((\nabla m_x(i, j, k))^2 + (\nabla m_y(i, j, k))^2 + (\nabla m_z(i, j, k))^2 \right) \quad (76)$$

où $v = h_x h_y h_z$ est le volume élémentaire d'une maille.

L'ensemble des termes, à l'exception de celui d'échange, est évalué facilement. Pour un système monophasique, on a pu établir une expression unique de l'énergie d'échange qui tient compte de condition de Brown :

$$\begin{aligned}
F_{ex} = \frac{Av}{4} \sum_{(i,j,k)} \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{1}{h_\alpha^2} & ((c(i-1,j,k)(m_\alpha(i,j,k) - m_\alpha(i-1,j,k)) \\
& + c(i+1,j,k)(m_\alpha(i+1,j,k) - m_\alpha(i,j,k)))^2 \\
& + \frac{1}{h_y^2} (c(i,j-1,k)(m_\alpha(i,j,k) - m_\alpha(i,j-1,k)) \\
& + c(i,j+1,k)(m_\alpha(i,j+1,k) - m_\alpha(i,j,k)))^2 \\
& + \frac{1}{h_z^2} (c(i,j,k-1)(m_\alpha(i,j,k) - m_\alpha(i,j,k-1)) \\
& + c(i,j,k+1)(m_\alpha(i,j,k+1) - m_\alpha(i,j,k)))^2
\end{aligned} \quad (77)$$

Dans le cas d'un système multiphasique, une expression générale ne peut pas être établie. Des expressions particulières doivent être développées pour les mailles du système physique en contact avec une interface entre deux milieux magnétiques différents. Pour les points intérieurs, les dérivées des composantes de l'aimantation sont calculées à l'aide des différences centrées, tandis que pour les points voisins aux surfaces, elles sont calculées par les relations du paragraphe 3.

5. Minimisation de l'énergie libre du système physique

La méthode de minimisation que nous avons utilisée pour minimiser l'énergie libre du système est l'intégration temporelle des équations du mouvement de Landau-Lifshitz-Gilbert, plus exactement la formulation de Landau-Lifshitz avec amortissement (équation (98), chapitre II). Deux techniques de résolution, fondées sur un schéma explicite, ont été testées :

- méthode du vecteur tournant autour d'un champ effectif (équation (107), chapitre II) ;
- méthode de changement de base fondée sur l'intégration exacte de l'équation de LLG (équations (110), (113), chapitre II).

Les deux techniques ont l'avantage qu'elles gardent par leur nature la norme constante de l'aimantation. Aucune normation artificielle n'est nécessaire pendant le processus itératif.

5.1 Méthode du vecteur tournant autour d'un champ effectif

Nous avons vu dans le chapitre précédent que l'introduction d'un champ effectif (équation (128), chapitre II) permet d'écrire l'équation de Landau-Lifshitz avec amortissement sous la forme d'une équation sans amortissement (relation (129), chapitre II). Cette équation a la forme de l'équation (101), chapitre II, avec $\mathbf{H}_{\text{eff}}(t)$ au lieu de $\mathbf{H}$ (constant). Dans l'hypothèse où le pas de temps est suffisamment petit pour que le champ effectif puisse être considéré constant, la forme de la solution (107), chapitre II reste valable et la solution de l'équation (98), chapitre II est :

$$\begin{aligned} \mathbf{m}(t + \delta t) = & \mathbf{m}(t) \cos(H_{\text{eff}}(t)\delta t) + \frac{\sin(H_{\text{eff}}(t)\delta t)}{H_{\text{eff}}(t)} (\mathbf{H}_{\text{eff}}(t) \times \mathbf{m}(t)) \\ & + (1 - \cos(H_{\text{eff}}(t)\delta t)) \frac{\mathbf{m}(t) \cdot \mathbf{H}_{\text{eff}}(t)}{H_{\text{eff}}^2(t)} \mathbf{H}_{\text{eff}}(t) \end{aligned} \quad (78)$$

A partir d'une configuration d'aimantation donnée, le champ total agissant sur chaque moment $\mathbf{m}$ est estimé. Le changement d'orientation des moments dans un intervalle de temps δt est alors calculé en appliquant la relation précédente. La configuration trouvée est prise en compte pour effectuer l'itération suivante.

5.2 Méthode de changement de base fondée sur l'intégration exacte de l'équation de LLG

Les relations établies dans le chapitre II, paragraphe 3.2 pour l'équation de Landau-Lifshitz avec amortissement sont valables pour un champ constant orienté selon l'axe Oz.

Il est nécessaire de généraliser les calculs pour un champ d'orientation quelconque dans un système de coordonnées cartésiennes Oxyz. La résolution suppose le passage dans un système de coordonnées OXYZ dans lequel $\mathbf{H} \parallel \text{OZ}$, de trouver les solutions (113) et (110) et finalement de revenir dans Oxyz. On note $\mathfrak{R}$ la matrice de rotation, telle que :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ \mathbf{J} \\ \mathbf{K} \end{pmatrix} = \mathfrak{R} \begin{pmatrix} \mathbf{i} \\ \mathbf{j} \\ \mathbf{k} \end{pmatrix} \quad (79)$$

où $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ et $\mathbf{I}, \mathbf{J}, \mathbf{K}$ sont les vecteurs unitaires du système de coordonnées Oxyz et OXYZ respectivement. Les vecteurs $\mathbf{I}, \mathbf{J}, \mathbf{K}$ sont choisis de manière que $\mathbf{K}$ soit parallèle au champ, et

que le couple $\mathbf{I}$ et $\mathbf{m}$ appartienne au plan XOZ . La base est finalement complétée en calculant le produit vectoriel $\mathbf{J} = \mathbf{K} \times \mathbf{I}$. L'expression de la matrice de rotation s'écrit :

$$\mathfrak{R} = \begin{pmatrix} \frac{H}{\sqrt{H^2 - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{H})^2}} \left(m_x - \frac{(\mathbf{m} \cdot \mathbf{H})H_x}{H^2} \right) & \frac{1}{\sqrt{H^2 - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{H})^2}} (H_y m_z - H_z m_y) & \frac{H_x}{H} \\ \frac{H}{\sqrt{H^2 - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{H})^2}} \left(m_y - \frac{(\mathbf{m} \cdot \mathbf{H})H_y}{H^2} \right) & \frac{1}{\sqrt{H^2 - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{H})^2}} (H_z m_x - H_x m_z) & \frac{H_y}{H} \\ \frac{H}{\sqrt{H^2 - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{H})^2}} \left(m_z - \frac{(\mathbf{m} \cdot \mathbf{H})H_z}{H^2} \right) & \frac{1}{\sqrt{H^2 - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{H})^2}} (H_x m_y - H_y m_x) & \frac{H_z}{H} \end{pmatrix}^T \quad (80)$$

A partir de l'orientation de l'aimantation à l'instant t $\mathbf{m}(t) = (m_x(t) \ m_y(t) \ m_z(t))$ dans $Oxyz$, on recherche son orientation à l'instant $t + \delta t$ $\mathbf{m}(t + \delta t) = (m_x(t + \delta t) \ m_y(t + \delta t) \ m_z(t + \delta t))$. Les composantes de l'aimantation dans le repère $OXYZ$ à l'instant t sont notées :

$$\begin{cases} \overline{m}_x(t) = \frac{\sqrt{H^2 - (\mathbf{m}(t) \cdot \mathbf{H})^2}}{H} \\ \overline{m}_y(t) = 0 \\ \overline{m}_z(t) = \frac{\mathbf{m}(t) \cdot \mathbf{H}}{H} \end{cases} \quad (81)$$

L'application des relations (110) et (113) du chapitre II mène au schéma d'intégration suivant :

$$\begin{cases} \overline{m}_x(t + \delta t) = \frac{1}{\sqrt{1 - \overline{m}_z^2(t)}} \frac{\overline{m}_x(t) \cos(H\delta t)}{\cosh(\alpha_L H \delta t + \operatorname{atanh}(\overline{m}_z(t)))} \\ \overline{m}_y(t + \delta t) = \frac{1}{\sqrt{1 - \overline{m}_z^2(t)}} \frac{\overline{m}_x(t) \sin(H\delta t)}{\cosh(\alpha_L H \delta t + \operatorname{atanh}(\overline{m}_z(t)))} \\ \overline{m}_z(t + \delta t) = \tanh(\alpha_L H \delta t + \operatorname{atanh}(\overline{m}_z(t))) \end{cases} \quad (82)$$

A partir des relations ci-dessus, l'évolution du moment magnétique $\mathbf{m}$, exprimée dans la base de départ $Oxyz$ s'exprime selon :

$$(m_x(t + \delta t) \ m_y(t + \delta t) \ m_z(t + \delta t)) = (\overline{m}_x(t + \delta t) \ \overline{m}_y(t + \delta t) \ \overline{m}_z(t + \delta t)) \mathfrak{R} \quad (83)$$

ou sous une forme plus compacte :

$$\begin{aligned} \mathbf{m}(t + \delta t) = & \bar{m}_x(t + \delta t) \frac{H}{\sqrt{H^2 - (\mathbf{m}(t) \cdot \mathbf{H})^2}} \left(\mathbf{m}(t) - \frac{(\mathbf{m}(t) \cdot \mathbf{H})\mathbf{H}}{H^2} \right) \\ & + \bar{m}_y(t + \delta t) \frac{\mathbf{H} \times \mathbf{m}(t)}{\sqrt{H^2 - (\mathbf{m}(t) \cdot \mathbf{H})^2}} + \bar{m}_z(t + \delta t) \frac{\mathbf{H}}{H} \end{aligned} \quad (84)$$

Les relations (82) ont été établies pour un champ $\mathbf{H}$ constant. Toutefois, elles peuvent être utilisées dans le cas d'un champ faiblement variable $\mathbf{H}_t(t)$ dans l'intervalle de temps δt .

5.3 Test de convergence

Du point de vue physique, l'état d'équilibre du système est obtenu lorsque le moment est orienté parallèlement au champ total local, ce qui revient à annuler le couple $\mathbf{m} \times \mathbf{H}_t$.

Dans une approche numérique, l'annulation rigoureuse du couple n'est pas possible et une condition d'arrêt du processus itératif doit être imposée. Il est nécessaire de définir une valeur critique sur l'angle entre le moment et le champ total, à atteindre en tout noeud du calcul. Dans nos simulations 3D, il nous a semblé qu'une valeur de 10^{-4} rad était satisfaisante. Une valeur bien plus faible, 10^{-6} rad a été utilisée dans les simulations 1D pour estimer très précisément les champs de nucléation.

Les tests effectués pour comparer les deux techniques décrites respectivement en 5.1 et 5.2 ont montré que le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence est approximativement le même et que leur précision est semblable. La méthode du vecteur tournant présente l'avantage de ne mettre en jeu que des calculs simples et rapides. Elle a été retenue lors de l'implantation du code de calcul.

5.4 Etude de la stabilité du schéma explicite d'intégration des équations LLG

En micromagnétisme, deux longueurs caractéristiques peuvent être formées :

- pour un matériau doux : $l_{ex} = \sqrt{\frac{A}{\mu_0 M_s^2}}$ ou $\delta_{ex} = \pi l_{ex}$ est la longueur d'échange qui est une mesure de la longueur de cohérence de l'aimantation lorsque les énergies d'échange et démagnétisante sont prépondérantes.
- pour un matériau dur : $l_K = \sqrt{\frac{A}{K_1}}$ ou $\delta_B = \pi l_K$ est la largeur de la paroi de Bloch qui est une mesure de la distance sur laquelle la direction de l'aimantation n'est plus corrélée.

Afin de décrire correctement les processus de renversement d'aimantation, les pas de maillage doivent être plus petits que ces deux longueurs caractéristiques. Si ces conditions sont respectées, le champ d'échange est la contribution dominante qui gouverne le comportement du système magnétique.

Le schéma explicite (78) décrit dans le paragraphe précédent permet de calculer une solution correcte de l'équation LLG dans la limite d'une faible dépendance temporelle du champ effectif. Cependant, son intégration sans précaution sur le choix du pas de temps peut engendrer des instabilités numériques et conduire à une solution erronée.

Nous avons réussi à définir un critère de stabilité dans le cas de systèmes ferromagnétiques, dominés par les interactions d'échange.

Dans un but pédagogique, considérons d'abord une chaîne unidimensionnelle de moments localisés sur l'axe Ox, couplés par échange. Les moments sont dirigés selon l'axe Oz et espacés d'un pas h (voir Figure 11). Lorsque le système subit une faible perturbation, le vecteur aimantation reste principalement aligné selon Oz ; ses composantes (u,v) dans le plan (x,y) étant beaucoup plus petites que 1. Dans ces conditions, un développement en série de Taylor, au second ordre, donne les approximations suivantes pour le moment local et pour le champ total :

$$\mathbf{m} = \begin{pmatrix} u \\ v + \vartheta(u^2, v^2) \\ 1 \end{pmatrix} \text{ et } \mathbf{H}_t = \mathbf{H}_{ex} \equiv \frac{2A}{\mu_0 M_s} \begin{pmatrix} \Delta u \\ \Delta v \\ 0 \end{pmatrix} \quad (85)$$

Dans la limite des faibles perturbations, l'expression du couple $\mathbf{m} \times \mathbf{H}_t$ se linéarise en :

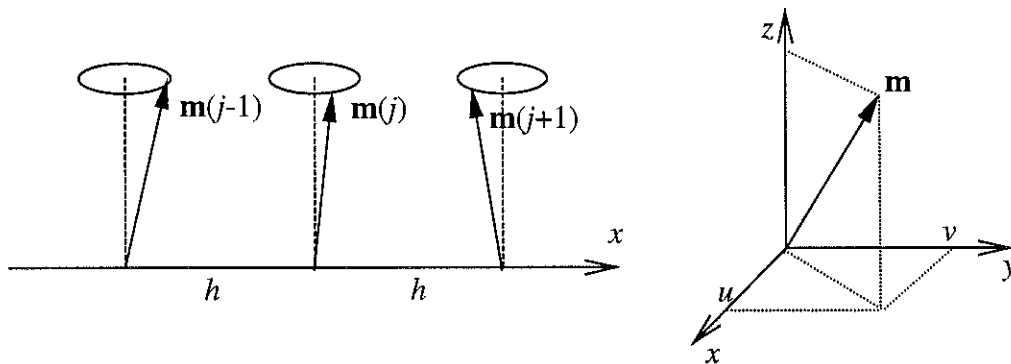


Figure 11 : Système modèle pour l'étude de la stabilité

$$\mathbf{m} \times \mathbf{H}_t = \frac{2A}{\mu_0 M_s} \begin{vmatrix} u & \Delta u \\ v & \Delta v \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = \frac{2A}{\mu_0 M_s} \begin{vmatrix} -\Delta v \\ \Delta u \\ u\Delta v - v\Delta u = \vartheta(u^2, v^2) \end{vmatrix} \quad (86)$$

et celle du terme d'amortissement devient :

$$\mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{H}_t) = (\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_t) \cdot \mathbf{m} - m^2 \mathbf{H}_t \equiv -\mathbf{H}_t + \vartheta(u^2, v^2) \quad (87)$$

L'équation LLG avec dissipation devient après linéarisation :

$$\frac{dz}{dt} = -iD\Delta z + \alpha_L D\Delta z = D(\alpha_L - i)\Delta z \quad (88)$$

avec $D = 2A / \mu_0 M_s$ et en introduisant la variable complexe $z = u + iv$.

L'équation précédente a la forme d'une l'équation de diffusion, dont le coefficient est complexe. La forme discrétisée de cette équation s'écrit dans le cadre d'un schéma explicite d'intégration :

$$\frac{z_j^{n+1} - z_j^n}{\delta t} = (\alpha_L - i)D \frac{z_{j+1}^n - 2z_j^n + z_{j-1}^n}{h^2} \quad (89)$$

où δt est le pas de temps. On obtient la relation de récurrence permettant de calculer la distribution de l'orientation des moments à l'instant $n+1$ en fonction de celle à l'instant n :

$$z_j^{n+1} = z_j^n + \frac{(\alpha_L - i)D\delta t}{h^2} (z_{j+1}^n - 2z_j^n + z_{j-1}^n) \quad (90)$$

Pour étudier la stabilité de l'équation, on utilise une analyse locale au sens de von Neumann,. Les fluctuations de z sont décrites sous la forme d'une série de Fourier :

$$\delta z_j^n = \sum_k \varepsilon_k^n e^{i(k \cdot jh)} \quad (91)$$

où k est le vecteur d'onde du mode d'amplitude complexe ε_k^n à l'instant n . Le schéma d'intégration est stable si, pour tout mode k , le facteur d'amplification G des erreurs numériques, défini par :

$$\varepsilon_k^{n+1} = \varepsilon_k^n \cdot G \quad (92)$$

reste faible en module par rapport à l'unité à chaque itération.

Le facteur d'amplification s'écrit dans le cas présent :

$$G = 1 - \frac{4D(\alpha_L - i)\delta t}{h^2} \sin^2 \frac{kh}{2} \quad (93)$$

et la condition de stabilité, $|G| \leq 1$, devient :

$$\left(1 - \frac{4D\alpha_L\delta t}{h^2}\right)^2 + \left(\frac{4D\delta t}{h^2}\right)^2 \leq 1 \quad (94)$$

En tenant compte de l'expression du facteur D , la condition de stabilité impose un pas de temps limite :

$$\delta t_{limite1D} = \frac{h^2}{8A} \mu_0 M_s \frac{2\alpha_L}{\alpha_L^2 + 1} \quad (95)$$

Cette condition est illustrée graphiquement en examinant la dépendance du facteur $|G|^2(\theta)$ avec l'angle polaire $\theta = \frac{kh}{2}$. L'équation LLG reste stable tant que $|G|^2$ reste à l'intérieur du cercle de rayon unité (Figure 12). La valeur du facteur d'amortissement a été fixée à $\alpha_L = 1$ dans cet exemple précis. L'instabilité est maximale lorsque l'orientation des moments entre deux sites voisins est alternée c'est à dire pour des modes de vecteurs d'ondes vérifiant $kh = \pi[2\pi]$.

Etudions maintenant l'influence des autres termes d'énergie sur le critère de stabilité en supposant que l'action des autres contributions est introduite par un champ supplémentaire

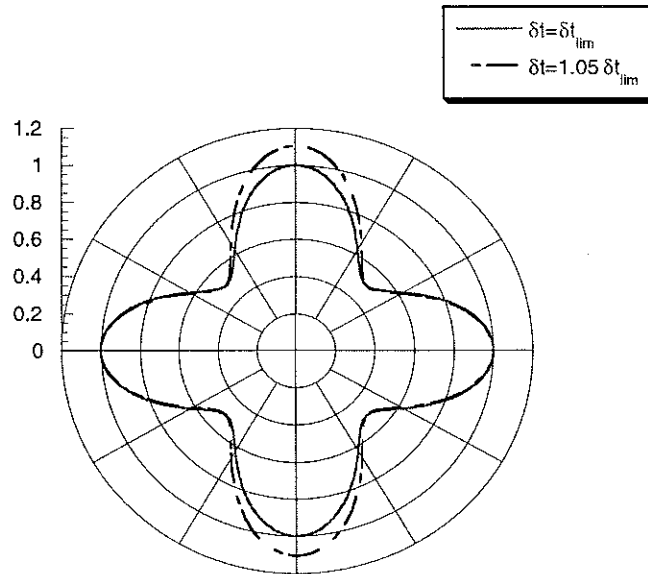


Figure 12 : Illustration de la condition de stabilité sur le pas de temps limite

dirigé selon Oz, ayant une valeur H_z . Les calculs conduisent à une expression du facteur d'amplification de la forme :

$$G = 1 - \frac{4D(\alpha_L - i)\delta t}{h^2} \sin^2 \frac{hk}{2} - (\alpha_L - i)H_z \delta t \quad (96)$$

La condition sur le module du G impose un pas de temps limite donné par :

$$\delta t_{\text{limite1D}} = \frac{1}{|H_0 + H_z|} \frac{2\alpha_L}{1 + \alpha_L^2} \quad \text{où} \quad H_0 = \frac{8A}{\mu_0 M_s h^2} \quad (97)$$

D'un point de vue physique, cette relation montre que le pas de temps doit être choisi plus petit que tous les temps caractéristiques intervenant dans la mise à l'équilibre du système magnétique. La condition de stabilité est équivalente à $|H_0 + H_z| \delta t \leq 1$ lorsque $\alpha_L = 1$, comme le montre la Figure 13.

L'expression du gain G est facilement généralisable dans une approche 3D pour un maillage parallélépipédique de pas h_x, h_y et h_z :

$$G = 1 - \frac{4D(\alpha_L - i)\delta t}{h^2} \left(\sin^2 \frac{k_x h_x}{2} + \sin^2 \frac{k_y h_y}{2} + \sin^2 \frac{k_z h_z}{2} \right) \quad (98)$$

et permet de déduire une valeur du pas de temps limite :

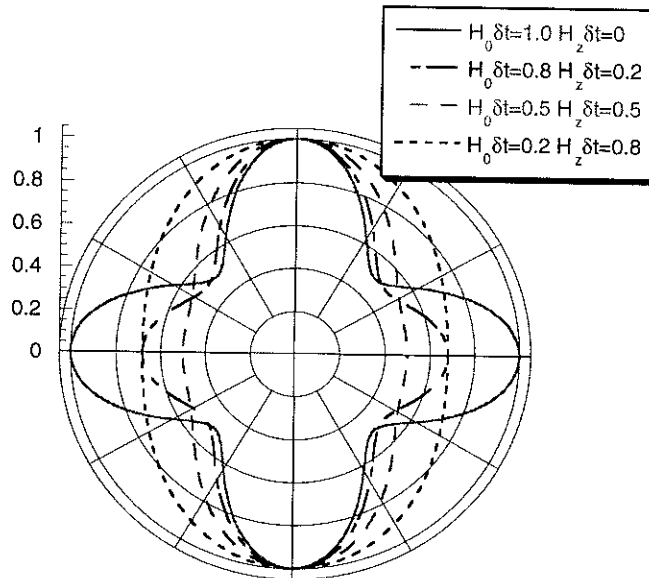


Figure 13 : Limite de la stabilité pour des différentes valeurs du champ H_z et pour $\alpha_L = 1$

$$\delta t_{limite} = \frac{\mu_0 M_s}{8A} \left(\frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2} + \frac{1}{h_z^2} \right)^{-1} \frac{2\alpha_L}{\alpha_L^2 + 1} \quad (99)$$

Pour valider notre approche de la stabilité des équations LLG, nous avons étudié la mise en équilibre d'un petit cube ferromagnétique de côté 120Å. Sa moitié supérieure est formée d'un matériau magnétique doux (Fe₃B) tandis que sa moitié inférieure est constituée d'un matériau dur (Nd₂Fe₁₄B). Les paramètres physiques utilisés sont résumés dans le tableau suivant :

Phase	$A(\text{J/m})$	$K_1(\text{J/m}^3)$	$\mu_0 M_s (\text{T})$
Fe ₃ B	$8.9 \cdot 10^{-12}$	0.	1.6
Nd ₂ Fe ₁₄ B	$8.9 \cdot 10^{-12}$	$4.3 \cdot 10^6$	1.6

Tableau 4 : Paramètres physiques utilisés pour valider l'approche de la stabilité

Le système physique a été saturé dans le sens positif selon l'axe Oz et soumis à un champ appliqué vertical, dirigé vers le bas, supérieur au champ coercitif. L'intégration temporelle a été réalisée avec différents pas de temps $\delta t = f \delta t_{limite}$, où δt_{limite} est donné par la relation (99). La dépendance temporelle de la composante verticale de l'aimantation, pour plusieurs pas de temps, est présentée sur la Figure 14.

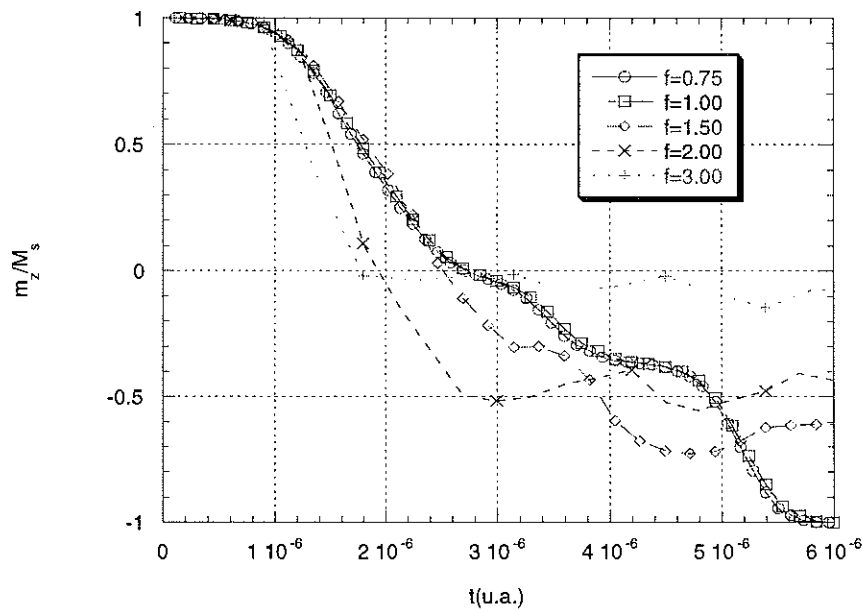


Figure 14 : Vérification du critère de stabilité sur le pas de temps

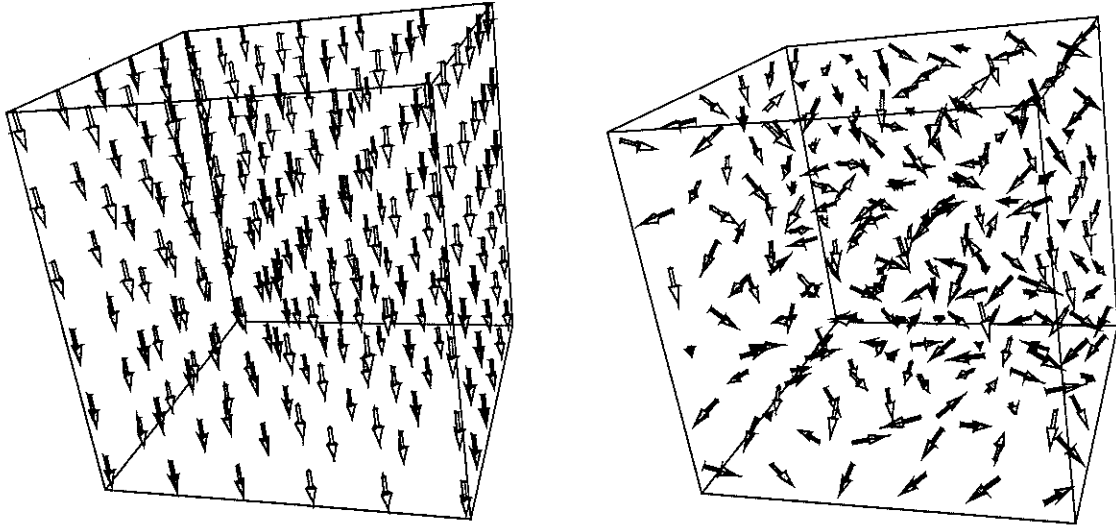


Figure 15 : Illustration de la condition de stabilité sur la valeur du pas de temps limite pour
(a) $f = 1$ et (b) $f = 2$

On observe que pour $f \leq 1$, l'état final correspond au renversement complet de l'aimantation, et la solution est effectivement stable ; à l'inverse pour $f > 1$, le comportement devient oscillatoire et la solution devient instable. Ce résultat est illustré de façon plus spectaculaire par la Figure 15 qui montre les configurations finales obtenues à la suite des intégrations correspondant à $f = 1$ et $f = 2$ respectivement. Alors que pour $f = 1$ les moments sont bien orientés verticalement vers le bas, la configuration obtenue pour $f = 2$ n'est pas physique.

5.5 Schéma mixte d'intégration

Afin d'améliorer la vitesse de convergence de l'équation de mouvement vers la solution d'équilibre, un schéma mixte d'intégration a été mis en oeuvre. L'idée est d'utiliser, pour une itération donnée, une méthode explicite pour les sites d'indice pair et une méthode implicite pour les sites d'indice impair et puis d'échanger les deux méthodes d'intégration à l'itération suivante.

L'évolution des moments situés sur des sites pairs, à l'itération n , est donnée par :

$$\frac{\mathbf{m}_{2p}^{n+1} - \mathbf{m}_{2p}^n}{\delta t} = -\mathbf{m}_{2p}^n \times (\mathbf{H}_{t,2p}^n + \alpha_L \mathbf{m}_{2p}^n \times \mathbf{H}_{t,2p}^n) \quad (100)$$

Si le système physique est gouverné principalement par l'échange, le champ s'écrit sous la forme :

$$\mathbf{H}_{t,2p}^n = \frac{D}{h^2} (\mathbf{m}_{2p+1}^n + \mathbf{m}_{2p-1}^n - 2\mathbf{m}_{2p}^n) \quad \text{avec} \quad D = \frac{2A}{\mu_0 M_s} \quad (101)$$

L'équation du mouvement à l'itération n et pour un site impair est :

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{m}_{2p+1}^{n+1} - \mathbf{m}_{2p+1}^n}{\delta t} &= -\mathbf{m}_{2p+1}^n \times (\mathbf{H}_{t,2p+1}^{n+1} + \alpha_L \mathbf{m}_{2p+1}^n \times \mathbf{H}_{t,2p+1}^{n+1}) \\ &= -\mathbf{m}_{2p+1}^n \times \mathbf{H}_{t,2p+1}^{n+1} + \alpha_L \mathbf{m}_{2p+1}^n \times \frac{\mathbf{m}_{2p+1}^{n+1} - \mathbf{m}_{2p+1}^n}{\delta t} \end{aligned} \quad (102)$$

où le champ s'écrit comme :

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{t,2p+1}^{n+1} &= \frac{D}{h^2} (\mathbf{m}_{2p+2}^{n+1} + \mathbf{m}_{2p}^{n+1} - 2\mathbf{m}_{2p+1}^{n+1}) \\ &= \frac{D}{h^2} (\mathbf{m}_{2p+2}^{n+1} + \mathbf{m}_{2p}^{n+1} - 2\mathbf{m}_{2p+1}^n) - \frac{2D}{h^2} (\mathbf{m}_{2p+1}^{n+1} - \mathbf{m}_{2p+1}^n) \\ &= \mathbf{H}_{t,2p+1}^{*n+1} - \frac{2D}{h^2} (\mathbf{m}_{2p+1}^{n+1} - \mathbf{m}_{2p+1}^n) \end{aligned} \quad (103)$$

L'équation (102) devient :

$$\frac{\mathbf{m}_{2p+1}^{n+1} - \mathbf{m}_{2p+1}^n}{\delta t} = -\mathbf{m}_{2p+1}^n \times \mathbf{H}_{t,2p+1}^{*n+1} + (\alpha_L + 2 \frac{D\delta t}{h^2}) \mathbf{m}_{2p+1}^n \times \frac{\mathbf{m}_{2p+1}^{n+1} - \mathbf{m}_{2p+1}^n}{\delta t} \quad (104)$$

En utilisant la méthode d'analyse de stabilité décrite dans le paragraphe 5.4, l'équation d'évolution pour les sites pairs et impairs respectivement devient :

$$\begin{cases} z_{2p}^{n+1} = z_{2p}^n + \frac{D(\alpha_L - i)\delta t}{h^2} (z_{2p+1}^n + z_{2p-1}^n - 2z_{2p}^n) \\ z_{2p+1}^{n+1} = z_{2p+1}^n + \frac{D(\alpha_L - i)\delta t}{h^2} (z_{2p+2}^{n+1} + z_{2p}^{n+1} - 2z_{2p+1}^n) \end{cases} \quad (105)$$

Si on écrit les fluctuations de z sous la forme :

$$\begin{cases} \delta z_{2p}^n = \sum_k \varepsilon_k^n e^{i(k \cdot 2ph)} \\ \delta z_{2p+1}^n = \sum_k \xi_k^n e^{i(k \cdot (2p+1)h)} \end{cases} \quad (106)$$

on obtient :

$$\begin{aligned}
& \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{2D(\alpha_L - i)\delta t}{h^2} \cos kh & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_k^{n+1} \\ \xi_k^{n+1} \end{pmatrix} \\
& = \begin{pmatrix} 1 - \frac{2D(\alpha_L - i)\delta t}{h^2} & \frac{2D(\alpha_L - i)\delta t}{h^2} \cos kh \\ 0 & 1 - \frac{2D(\alpha_L - i)\delta t}{h^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_k^n \\ \xi_k^n \end{pmatrix} \quad (107)
\end{aligned}$$

Comme la plus grande valeur propre en module de la matrice de droite est $1 - \frac{2D(\alpha_L - i)\delta t}{h^2}$ et la plus petite de la matrice de gauche est 1, le facteur d'amplification de l'erreur G est indépendant de k et est donné par :

$$G = 1 - \frac{2D(\alpha_L - i)\delta t}{h^2} \quad (108)$$

En tenant compte de l'expression de D , la condition de stabilité conduit à un pas de temps limite :

$$\delta t_{\text{limite}} = \frac{h^2}{4A} \mu_0 M_s \frac{2\alpha_L}{\alpha_L^2 + 1} \quad (109)$$

qui est deux fois plus grand que le pas trouvé par la méthode explicite (équation (95)) et permet de réduire le nombre d'itérations pour décrire la mise à l'équilibre. La relation (109) s'apparente à la condition de Courant-Friedrichs-Lewy obtenue dans une approche de type différences finies de la propagation d'une onde [Euvrard 94].

Chapitre IV

Application à des systèmes réels

1. Introduction

Dans ce chapitre, nous appliquons les techniques d'analyse numérique en micromagnétisme exposées dans le chapitre III à des systèmes réels :

- tri-couches magnétiques à base d'alliages amorphes terres rares-cobalt (section 2) ;
- plots de fer épitaxiés de dimensions submicroniques (section 3) ;
- matériaux nanostructurés dur-doux (section 4),

et nous confrontons nos résultats avec l'expérience.

Une analyse précise du comportement magnétique des deux premiers systèmes peut être réalisée, car :

- leurs caractéristiques magnétiques intrinsèques et géométriques sont relativement bien définies ;
- leur dimensionnalité est réduite, permettant de diminuer considérablement le nombre de degrés de liberté pour la distribution d'aimantation ;
- le renversement d'aimantation est peu dépendant des phénomènes de nucléation sur des défauts.

Toutes ces propriétés font que ces systèmes peuvent être considérés comme des systèmes modèles.

L'étude réalisée sur les matériaux nanostructurés est plus délicate pour les raisons suivantes :

- la taille des systèmes considérés est macroscopique ;
- la distribution en taille des grains est dispersée ;
- plusieurs phases métallurgiques interviennent dans leur composition.

Ces propriétés caractéristiques font que ces systèmes ne sont pas accessibles à une simulation réaliste avec les moyens numériques actuels et l'étude numérique que nous présentons n'a pas cette prétention. Notre analyse tend par contre à mettre en évidence plusieurs mécanismes de renversement d'aimantation en fonction de la taille des grains et à indiquer des orientations de recherche du point de vue métallurgique pour augmenter la rémanence sans trop perdre en coercitivité.

2. Tri-couches magnétiques à base d'alliages amorphes de terres rares et de cobalt

Dans cette section, on applique les méthodes numériques développées à la simulation du comportement de systèmes tri-couches associant de matériaux doux et durs, par un modèle 1D. Les résultats présentés par la suite montrent que dans certains cas, les simulations permettent de particulièrement bien décrire les systèmes expérimentaux. Un certain nombre de cas limites peut être décrit par une approche analytique.

2.1 Présentation des systèmes physiques étudiés

Les progrès faits ces dernières années dans les techniques de dépôt offrent la possibilité de fabrication de matériaux en couches minces aux propriétés magnétiques différentes de celles trouvées dans les matériaux massifs.

Des systèmes de tri-couches R-Co/R'-Co/R-Co (R, R' = Y, Nd, Gd, Er, Sm, Zr) qui associent des matériaux dur et doux, fabriqués par pulvérisation cathodique, ont été étudiés au laboratoire dès 1990 [Dieny 90], [Dieny 91], [Alameda 92]. Le modèle analytique développé par Dieny et al. a permis de décrire le comportement de l'aimantation dans les systèmes Y-Co/Gd-Co/Y-Co, observé expérimentalement au voisinage de la saturation.

Nous nous sommes plus particulièrement intéressés à des systèmes sandwichs formés de trois couches minces où la couche centrale en matériau magnétiquement doux est comprise entre deux couches magnétiquement dures de coercitivités différentes [Wüchner 97]. Les épaisseurs des couches individuelles sont de l'ordre de la largeur de la paroi ou de la longueur d'échange (de quelques dizaines à quelques centaines de nanomètres). Par conséquent, chaque couche présente une configuration qui correspond soit à un mono-domaine, soit à une paroi séparant deux domaines.

Les systèmes étudiés sont du type Sm-Co/X/Sm-Co' (X = Zr-Co, Gd-Co). Leur préparation, leurs caractérisations structurale et magnétique sont décrites dans la thèse de Sibylle Wüchner [Wüchner 95]. Une caractéristique importante de ces systèmes est la présence de cobalt dans chaque couche, qui conduit à de fortes interactions d'échange dans tout l'échantillon, tandis que les moments des terres-rares sont couplés soit parallèlement (terres-rares légères), soit antiparallèlement (terres-rares lourdes) aux moments du cobalt. En conséquence, ces systèmes

peuvent présenter un comportement ferro- ou ferrimagnétique, en fonction de la nature des couches qui les composent.

2.2 Résultats expérimentaux pour le système ferrimagnétique à base de Sm-Co/Gd-Co/Sm-Co'

Le système Sm-Co/Gd-Co/Sm-Co' est composé d'une couche centrale douce de Gd-Co entourée de deux couches dures de Sm-Co de compositions différentes. Comme le samarium est une terre-rare légère et le gadolinium une terre-rare lourde, le couplage entre les moments de samarium et de cobalt est du type ferromagnétique, tandis que celui entre les moments de gadolinium et de cobalt est de nature antiferromagnétique, le moment du gadolinium étant dominant par rapport au cobalt, pour les compositions choisies (Figure 1).

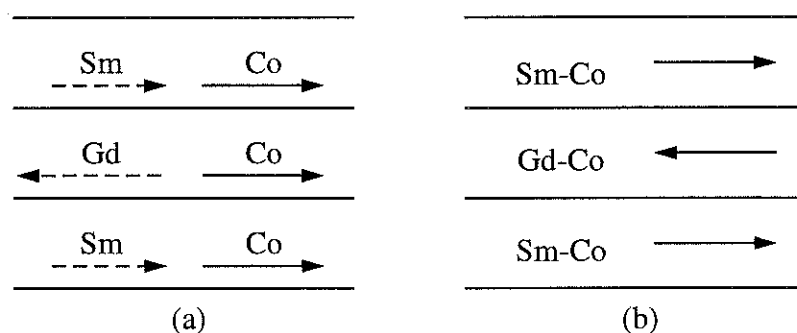


Figure 1 : (a) Schéma de l'orientation des moments magnétiques de Co, Sm et Gd dans des couches individuelles en absence d'un champ appliqué ; (b) Schéma de l'orientation des aimantations résultantes dans chaque couche du système Sm-Co/Gd-Co/Sm-Co'

Les échantillons ont été préparés par pulvérisation cathodique magnétron à partir des cibles de Sm-Co et Gd-Co. Un axe de facile aimantation est induit dans le plan des couches par application d'un champ magnétique pendant le dépôt. La série $\text{SmCo}_{3,3}/\text{GdCo}_{1,62}/\text{SmCo}_{6,3}$ (45nm/e/50nm) réalisée comporte plusieurs échantillons avec des épaisseurs différentes de la couche douce variant entre 43 et 530nm.

La Figure 2 présente une courbe d'hystérésis à $T=10\text{K}$ obtenue pour un échantillon qui comporte une couche douce de 43nm d'épaisseur. Dans l'état saturé (région 1), les moments de la couche de Sm-Co et celui de gadolinium sont orientés dans la direction du champ appliqué ; il en résulte que les moments du cobalt de la couche de Gd-Co sont orientés dans la direction opposée. Ceci implique l'existence d'une paroi de Bloch au voisinage de chaque interface. Quand le champ appliqué diminue, la variation de l'aimantation observée en

champs faibles et la transition H_t en champ positif sont des signatures de la présence des parois de Bloch.

A la transition, l'aimantation de la couche douce centrale se retourne, ce qui permet la suppression des parois (région 2). En champ nul, les moments de cobalt sont alignés parallèlement à travers tout l'échantillon, le moment magnétique global étant positif pour les faibles épaisseurs de la couche centrale est négatif pour les plus épaisses, lorsque son moment est supérieur à celui des deux couches Sm-Co. Cet état correspond à la minimisation de l'énergie d'échange en absence d'énergie Zeeman. L'application d'un faible champ inverse ne change pas la valeur du moment magnétique total, ce qui confirme l'existence d'une configuration mono-domaine à l'intérieur de chaque couche.

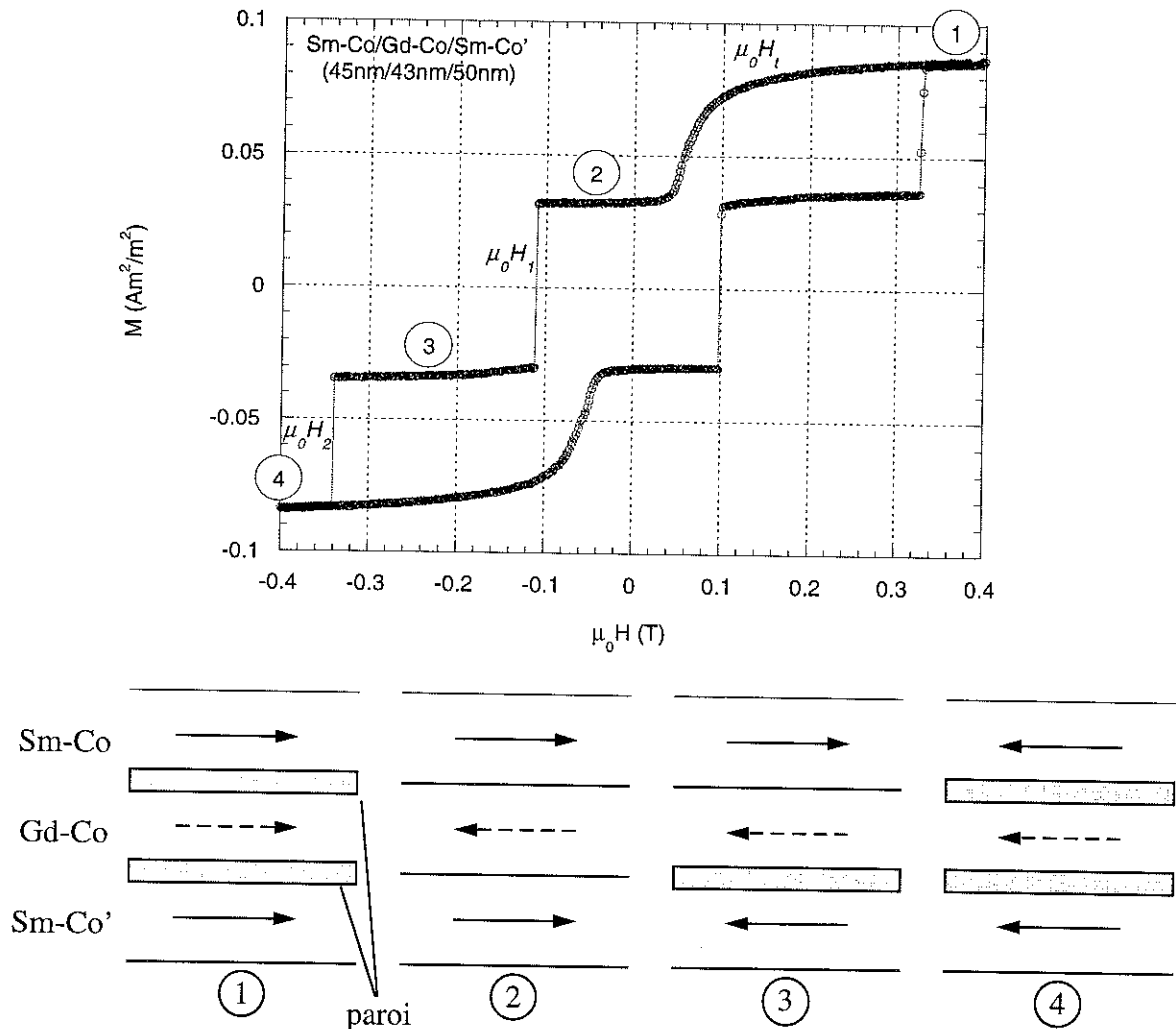


Figure 2 : Courbe d'hystérésis expérimentale à $T=10\text{K}$ et schéma de configurations des trois couches pour un système à base de $\text{Sm-Co/Gd-Co/Sm-Co'}$ (45nm/43nm/50nm)

L'augmentation de la valeur du champ inverse produit une deuxième transition H_1 , qui correspond au renversement d'aimantation dans la couche dure la moins coercitive et à la formation d'une paroi dans la couche de Gd-Co afin de minimiser les interactions d'échange entre les moments de cobalt dans l'échantillon (région 3). La dernière transition apparaît pour un champ H_2 et indique le renversement de la couche de Sm-Co la plus coercitive, accompagnée de la création d'une deuxième paroi de Bloch à la seconde interface (région 4).

2.3 Résultats expérimentaux pour le système ferromagnétique à base de Sm-Co/Zr-Co/Sm-Co'

Le système Sm-Co/Zr-Co/Sm-Co' est constitué d'une couche centrale en matériau doux (Zr-Co), comprise entre deux couches de matériaux durs de Sm-Co de coercitivités différentes. En champ nul, les moments magnétiques sont tous orientés parallèlement (Figure 3).

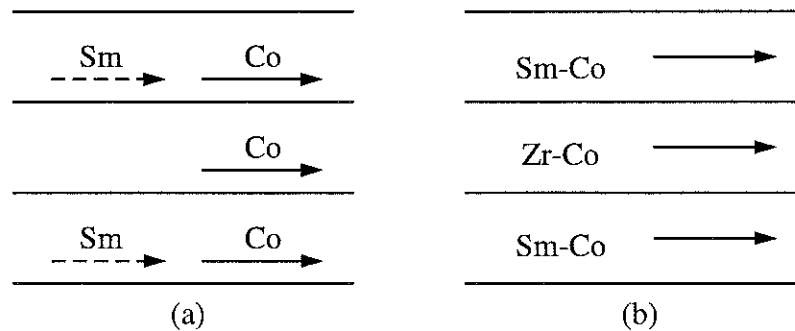


Figure 3 : (a) Schéma de l'orientation des moments magnétiques de Co et de Sm dans des couches individuelles en absence d'un champ appliqué ; (b) Schéma de l'orientation des aimantations résultantes dans chaque couche du système Sm-Co/Zr-Co/Sm-Co'

Une série d'échantillons $\text{SmCo}_{3.5}/\text{Co}_{0.95}\text{Zr}_{0.05}/\text{SmCo}_{6.3}$ (44nm/e/43nm) avec différentes épaisseurs e (de 46nm à 467nm) de la couche douce ont été préparés par pulvérisation cathodique, en suivant la même procédure expérimentale que celle décrite précédemment.

Les courbes d'hystérésis présentent plusieurs transitions lorsque le champ appliqué parallèlement à l'axe de facile aimantation varie. Ces transitions correspondent aux renversements successifs de l'aimantation dans chaque couche et les valeurs du champ extérieur pour lesquelles elles ont lieu dépendent de la coercitivité de chaque couche et du couplage magnétique entre les couches.

La Figure 4 montre un exemple de courbe d'hystérésis expérimentale à $T=10\text{K}$ pour une tri-couche de $\text{SmCo}_{3.5}/\text{Co}_{0.95}\text{Zr}_{0.05}/\text{SmCo}_{6.3}$ (44nm/467nm/43nm). Dans l'état saturé (région 1) les moments de cobalt sont alignés parallèlement au champ appliqué. Le système garde sa structure mono-domaine lorsque le champ diminue jusqu'à zéro. Au passage en champ négatif, le moment magnétique global commence à diminuer et on observe une première transition à H_i (nucléation dans la couche douce), qui est due à la création d'une paroi à chaque interface (région 2). Les transitions suivantes à H_1 et H_2 correspondent au renversement des deux couches dures, d'abord la couche moins coercitive (SmCo') (région 3) puis la plus coercitive (région 4, état saturé), avec suppression d'une paroi à chaque fois.

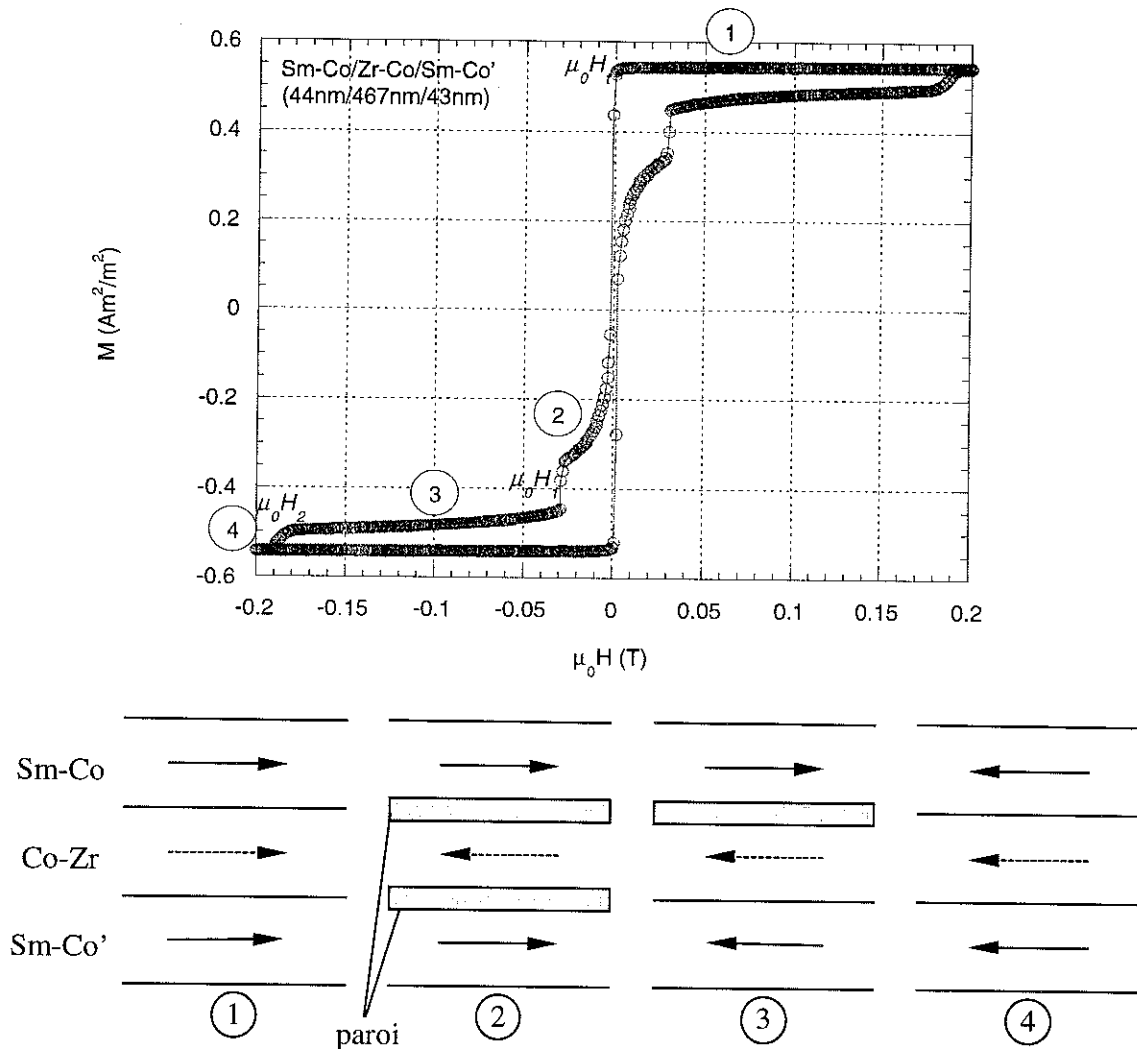


Figure 4 : Courbe expérimentale d'hystérésis à $T=10\text{K}$ et schéma de retournement pour un système à base de $\text{Sm-Co/Zr-Co/Sm-Co}'$ (44nm/467nm/43nm)

2.4 Comparaison des comportements des deux systèmes

La nature du couplage entre les couches est le principal facteur qui détermine le comportement de ces systèmes pendant le renversement d'aimantation.

Dans le cas des systèmes ferrimagnétiques à base de Sm-Co/Gd-Co/Sm-Co', les champs de retournement H_1 et H_2 des couches de Sm-Co sont supérieurs aux champs de retournement des couches simples de Sm-Co de la même composition et restent relativement constants quand l'épaisseur de la couche centrale varie (Figure 5 et Figure 6). Cette augmentation des champs coercitifs par rapport aux couches simples, peut s'expliquer par la création d'une paroi de Bloch dans la couche centrale pour chaque retournement, création qui coûte en énergie de paroi (énergie d'échange plus énergie d'anisotropie), et doit être compensée par un gain en énergie Zeeman.

Pour les systèmes ferromagnétiques à base de Sm-Co/Zr-Co/Sm-Co', les champs H_1 et H_2 sont inférieurs aux champs coercitifs des couches simples de même composition. Cette réduction des champs coercitifs peut être attribuée à la suppression d'une paroi pour chaque retournement d'une couche dure, processus suivi d'une diminution de l'énergie de la paroi. On observe aussi que les champs coercitifs H_1 et H_2 augmentent lorsque l'épaisseur de la couche centrale diminue (Figure 5 et Figure 6). Les arguments qualitatifs présentés jusqu'ici ne permettent pas de rendre compte de ce phénomène ou prévoir plutôt une diminution puisque l'énergie de paroi est plus grande pour les faibles épaisseurs.

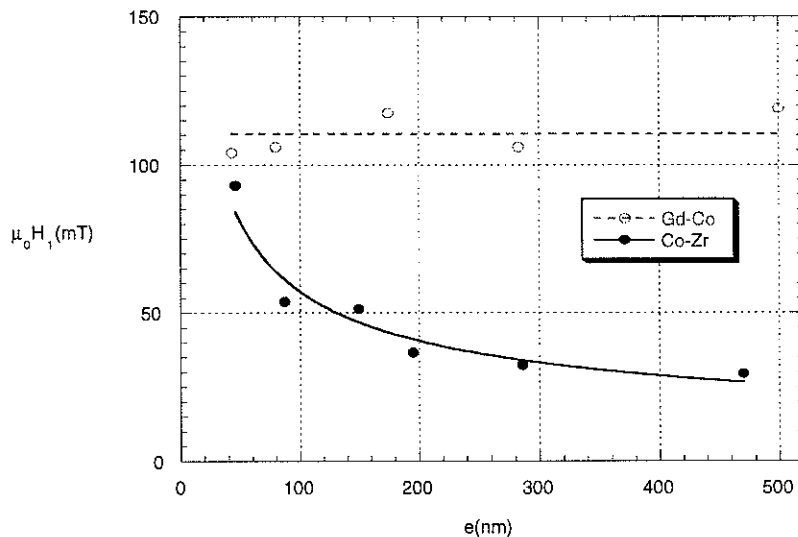


Figure 5 : Champ H_1 de retournement de l'aimantation de la couche de SmCo la moins coercitive en fonction de l'épaisseur de la couche centrale

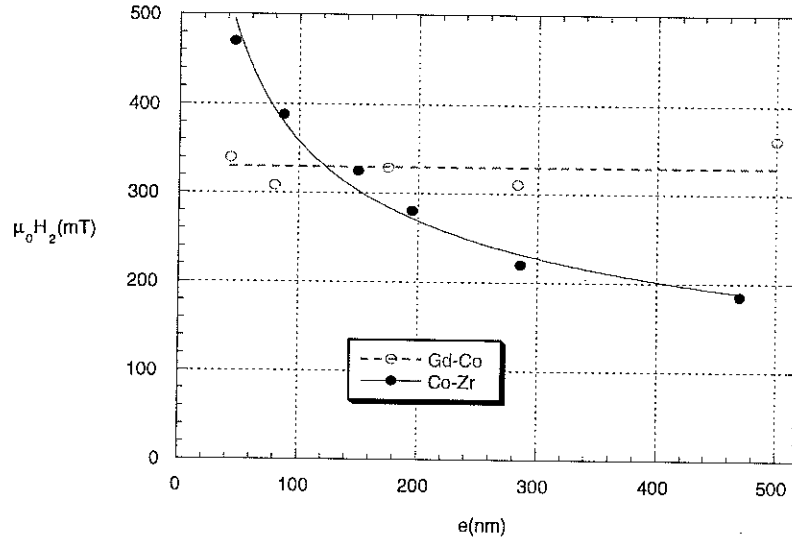


Figure 6 : Champ H_2 de retournement de l'aimantation de la couche de SmCo la plus coercitive en fonction de l'épaisseur de la couche centrale

2.5 Résultats numériques

Grâce au caractère amorphe des matériaux qui forment les tri-couches, on peut considérer que les propriétés magnétiques de chaque couche sont invariantes dans des plans parallèles aux surfaces et interfaces.

On utilise un modèle 1D simplifié par rapport au modèle 3D présenté dans le chapitre précédent. Le système est décomposé en N cellules d'épaisseur h , repérées par l'indice i , ($i = 1 \dots N$). Pour tenir compte de la condition de Brown sur les bords, on ajoute un site fictif de chaque côté, de manière que $\mathbf{m}(0) = \mathbf{m}(1)$ et $\mathbf{m}(N+1) = \mathbf{m}(N)$. Le terme démagnétisant est calculé en utilisant l'analogie avec l'expression du champ électrique à l'intérieur d'un condensateur. Comme le système est infini selon Oy et Oz, le champ démagnétisant est orienté selon Ox et est donné par la composante m_x du vecteur aimantation. La forme du champ total utilisée est :

$$\mathbf{H}_t(i) = \frac{2A(i)}{\mu_0 M_s(i)} \frac{d^2 \mathbf{m}(i)}{dx^2} + \frac{2K_1(i)}{\mu_0 M_s(i)} [\mathbf{m}(i) \cdot \mathbf{u}_K] \mathbf{u}_K + \mathbf{H}_{\text{ext}} - M_s(i) m_x(i) \mathbf{u}_x \quad (1)$$

où la dérivée seconde qui apparaît dans l'expression du terme d'échange est calculée en tenant compte des considérations faites dans le chapitre précédent.

Le système est maillé finement en épaisseur, selon l'axe Ox, à l'intérieur de chaque couche, et le champ extérieur est appliqué incliné de 10^{-5} rad par rapport à la direction Oz.

Les simulations ont été réalisées sur la série Sm-Co/Zr-Co/Sm-Co'. Les paramètres physiques utilisés ont été obtenus par expérience et sont indiqués dans le Tableau 1 :

couche	épaisseur (nm)	$\mu_0 M_s$ (T)	A (J/m)	K (J/m ³)
SmCo _{3.5}	44	0.616	$3.8 \cdot 10^{-12}$	$9.1 \cdot 10^5$
Co _{0.95} Zr _{0.05}	46...467	1.39	$20 \cdot 10^{-12}$	0
SmCo _{6.3}	43	0.916	$6.0 \cdot 10^{-12}$	$1.24 \cdot 10^5$

Tableau 1 : Paramètres physiques utilisés dans les simulations

Les épaisseurs des échantillons simulés sont : 46nm, 87nm, 150nm, 195nm, 290nm et 467nm et le pas de maillage utilisé est de 1nm. La Figure 7 montre quelques courbes d'aimantation obtenues par simulation. On observe le même comportement que dans le cas des courbes expérimentales : nucléation en champ négatif, retournement de la couche dure la moins coercitive suivi du retournement de la deuxième couche dure.

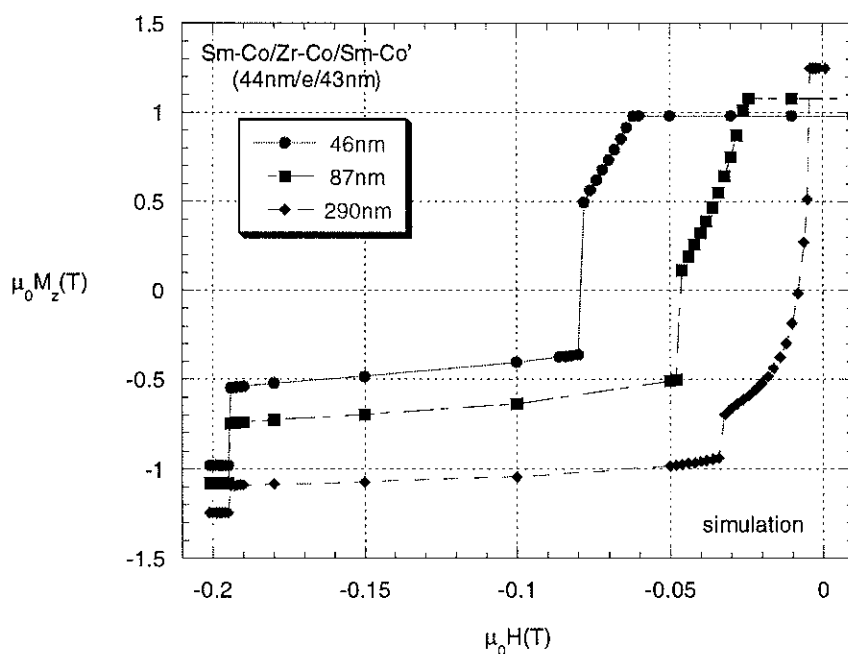


Figure 7 : Courbes d'aimantation simulées pour des différentes épaisseurs de la couche centrale

2.5.1 Retournement d'aimantation dans une couche douce couplée par échange - simulation versus modèle analytique

Le retournement d'aimantation dans la couche centrale douce correspond à la première transition H_t observée lorsque le champ est progressivement diminué après l'application d'un champ saturant. Dans les systèmes ferromagnétiques, cette nucléation se traduit par la création d'une paroi à chaque interface avec la couche dure externe. Le champ de transition est déterminé par la compétition entre l'énergie de paroi de Bloch et l'énergie Zeeman.

Les valeurs expérimentales et simulées obtenues sont en bon accord et montrent que H_t dépend de l'épaisseur de la couche douce centrale (Figure 8).

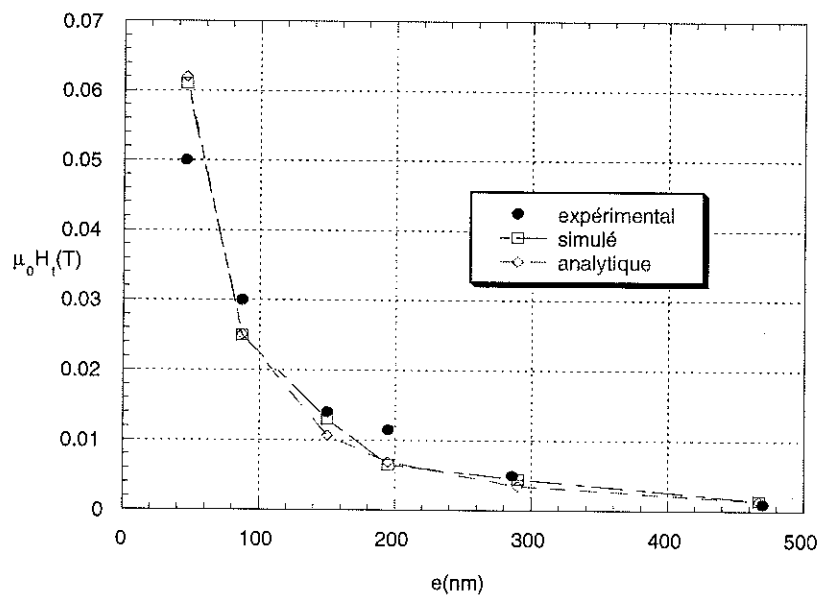


Figure 8 : Dépendance du champ de nucléation avec l'épaisseur de la couche douce de Zr-Co

Le champ de transition peut être déterminé analytiquement par un calcul qui généralise le calcul d'Aharoni du champ de nucléation dans le cas d'un profil d'anisotropie en marche d'escalier (chapitre I, paragraphe 3.1.1). Le calcul suppose un profil d'anisotropie sous forme d'un puits non-symétrique de largeur $e=2a$, centré en zéro et il tient compte des conditions de passage entre deux milieux de natures différentes. Les couches dures sont considérées infiniment épaisses.

L'aimantation reste dans le plan yOz pour minimiser l'énergie dipolaire. En notant $\omega(x)$ l'inclinaison du vecteur aimantation par rapport à Oz , l'énergie libre du système s'écrit :

$$F_t(\omega, \frac{\partial \omega}{\partial x}) = \int \left(A(x) \left(\frac{\partial \omega}{\partial x} \right)^2 - K_1(x) \cos^2 \omega(x) - \mu_0 M_s(x) H \cos \omega \right) dx \quad (2)$$

où H est le champ extérieur dirigé le long de l'axe Oz et où l'on a supposé $\omega(-\infty) = \omega(\infty) = 0$.

Au voisinage du champ de nucléation, ω est petit et l'expression de F_t peut être linéarisée. La configuration d'équilibre est obtenue en résolvant l'équation de Euler associée à $\delta F_t = 0$:

$$2\bar{\sigma}_x(A(x)\bar{\sigma}_x\omega) - (2K_1(x) + \mu_0 M_s(x)H)\omega(x) = 0 \quad (3)$$

en tenant compte de la condition de passage entre deux milieux d'échange différent, pour deux surfaces placées en $x=-a$ et $x=a$ (Figure 9) :

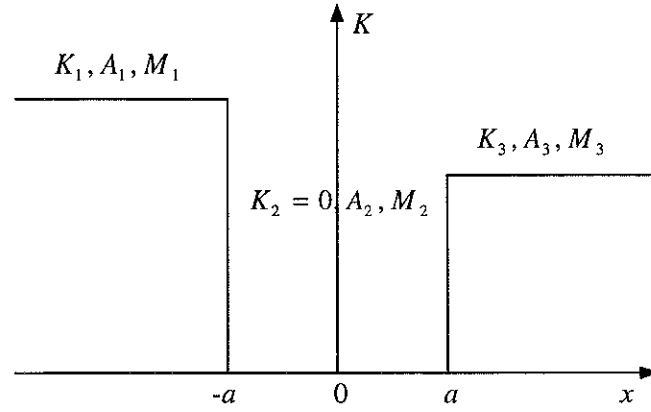


Figure 9 : Profil d'anisotropie pour le modèle de calcul du champ de nucléation dans le système de tri-couches

$$\omega|_{-a^-} = \omega|_{-a^+}, \quad \omega|_{a^-} = \omega|_{a^+} \quad (4)$$

$$A_1 \partial_x \omega|_{-a^-} = A_2 \partial_x \omega|_{-a^+}, \quad A_2 \partial_x \omega|_{a^-} = A_3 \partial_x \omega|_{a^+} \quad (5)$$

Les solutions de l'équation (3) pour les trois zones s'écrivent :

$$\begin{aligned} \omega^{(1)} &= \alpha_1 e^{k_1 x} & k_1^2 &= \frac{K_1}{A_1} + \frac{\mu_0 M_1 H}{2A_1} > 0 \\ \omega^{(2)} &= \alpha_2 e^{-k_2 x} + \beta_2 e^{k_2 x} & k_2 &= i \sqrt{-\frac{\mu_0 M_2 H}{2A_2}} = ik \\ \omega^{(3)} &= \alpha_3 e^{-k_3 x} & k_3^2 &= \frac{K_3}{A_3} + \frac{\mu_0 M_3 H}{2A_3} > 0 \end{aligned} \quad (6)$$

En tenant compte des conditions de passage on obtient un système d'équations linéaires en $\alpha_1, \alpha_2, \beta_2, \alpha_3$. L'annulation du déterminant caractéristique conduit à la "relation de dispersion" suivante :

$$\operatorname{tg}(2ka) = \frac{\lambda_1 + \lambda_3}{1 - \lambda_1 \lambda_3}, \quad \text{avec } \lambda_1 = \frac{k_1 A_1}{k A_2}, \lambda_3 = \frac{k_3 A_3}{k A_2} \quad (7)$$

La résolution numérique de cette équation en H donne les valeurs du champ de nucléation en fonction de l'épaisseur de la couche douce. Les résultats obtenus sont portés sur le graphe de la Figure 8 ; l'accord est parfait avec les valeurs obtenues par simulation et montre que la relation de continuité du flux d'échange (relation (66), chapitre III) est bien respectée dans le modèle numérique.

2.5.2 Retournement d'aimantation des couches coercitives couplées par échange

Les simulations offrent la possibilité de visualiser les configurations d'aimantation. La Figure 10 montre l'évolution de la composante m_z de l'aimantation en fonction de l'épaisseur pour différentes valeurs du champ appliqué. Les remarques faites sur les courbes expérimentales pour interpréter les transitions observées sont confirmées par les résultats des simulations. On peut noter que si la couche douce centrale est suffisamment épaisse ($e=290\text{nm}$), deux parois sans interaction peuvent s'y former avant le retournement de la couche dure la moins coercitive, tandis que, si la couche centrale est mince ($e=46\text{nm}$), les parois ne peuvent plus se développer complètement.

Juste après le retournement de la couche dure la moins coercitive, la paroi restante est localisée près de l'interface entre la couche douce et la couche dure la plus coercitive pour les couches douces épaisses, par contre, elle s'étale sur toute l'épaisseur si la couche centrale est mince.

La Figure 11 montre la variation des champs coercitifs simulés pour les deux couches dures en fonction de l'épaisseur de la couche centrale. Le champ H_1 diminue quand l'épaisseur e augmente et tend vers une valeur constante pour les grandes épaisseurs. Cela s'explique par le fait qu'aux faibles épaisseurs, les parois n'ont pas la place nécessaire pour se développer et elles exercent une pression sur les couches dures, en augmentant l'énergie d'échange. Cette énergie est autant plus grande que l'épaisseur e est plus petite.

Pour les grandes épaisseurs, les deux parois qui se forment ont toute la place pour s'étendre et elles ne sont plus couplées. Par conséquent l'épaisseur de la couche n'est plus un facteur qui agit sur le comportement des systèmes et le champ de retournement devient indépendant de l'épaisseur.

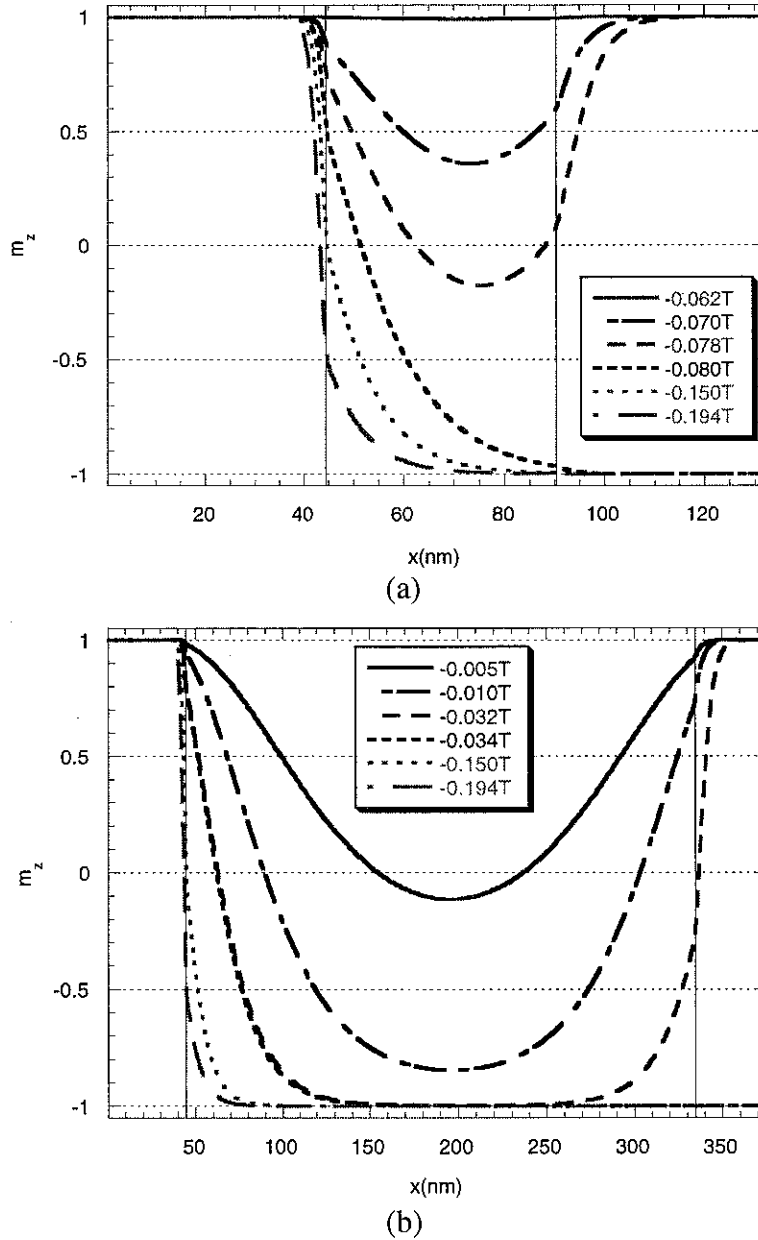


Figure 10 : Configurations d'aimantation pour des systèmes avec d'épaisseurs de la couche douce de (a) 46nm et (b) 290nm

L'état à une paroi, qui correspond au retournement de la couche dure la moins coercitive, conduit à des configurations d'aimantation où la paroi restante a tout l'espace disponible pour se développer sans contrainte. Le champ de retournement H_2 de la couche dure la plus dure, dont la valeur prédite par le modèle analytique (paragraphe 2.5.3, équation (14)) est 19.9mT, devient indépendant de l'épaisseur (Figure 11), contrairement à ce qui est observé expérimentalement (Figure 6). Par conséquent, notre modèle n'arrive pas à décrire globalement l'évolution de H_2 avec e due à une méconnaissance des interactions de la couche dure avec le substrat.

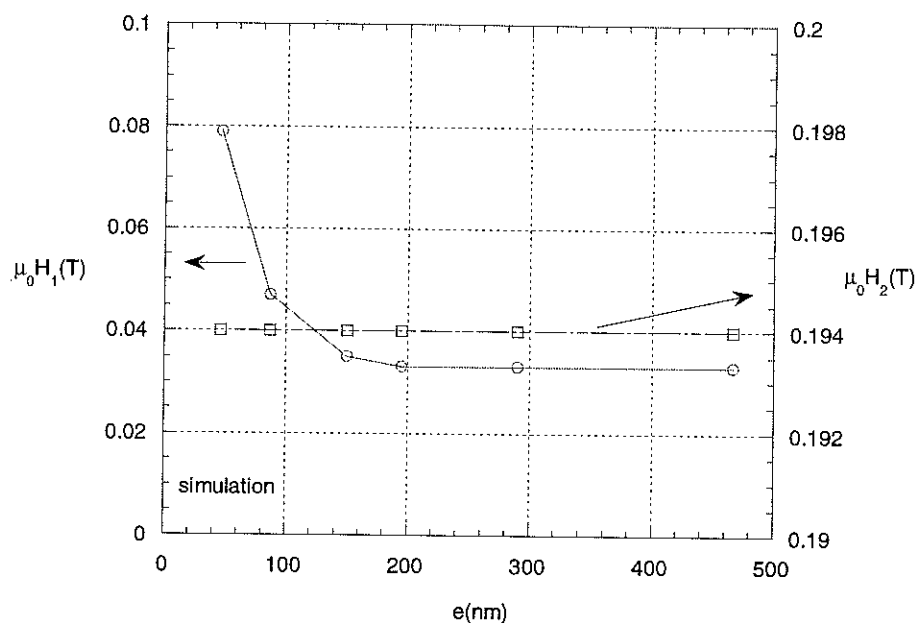


Figure 11 : Variations de champs simulés de retournement des couches dures en fonction de l'épaisseur de la couche centrale

2.5.3 Processus d'aimantation dans l'état à une paroi - Calcul numérique et analytique

Ce type de systèmes avec des couches coercitives permet de décrire des cycles mineurs d'aimantation (voir Figure 12). A partir d'un état saturé, on applique un champ inverse jusqu'au renversement de la couche de Sm-Co la moins coercitive pour un champ $-H_1$.

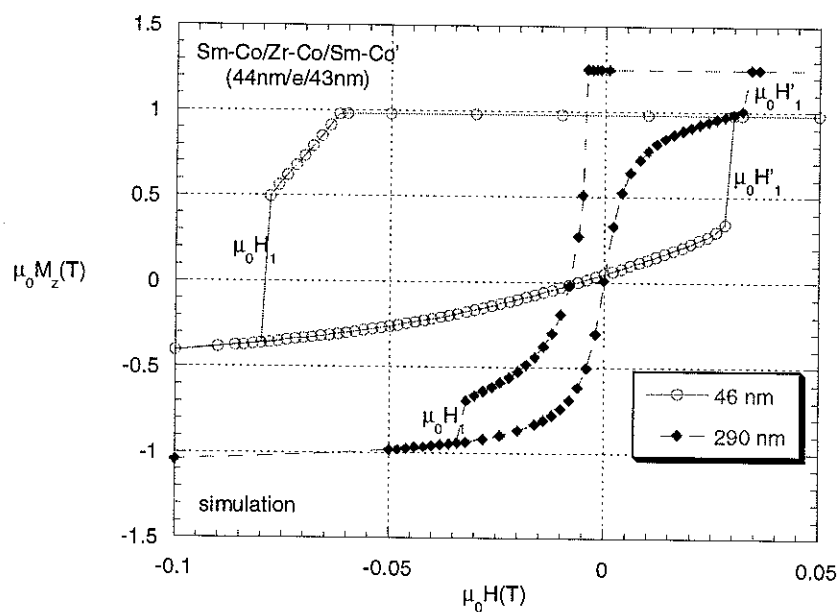


Figure 12 : Influence de l'épaisseur de la couche douce sur la forme du cycle d'aimantation mineur simulé

Après un changement de sens de variation du champ, on décrit un cycle mineur jusqu'à une valeur H'_1 pour laquelle la même couche de Sm-Co bascule de nouveau et le système se retrouve dans l'état saturé de départ.

La Figure 12 présente les cycles mineurs obtenus par simulation pour deux épaisseurs de la couche centrale : 46nm et 290nm. On remarque que pour les faibles épaisseurs, le champ de

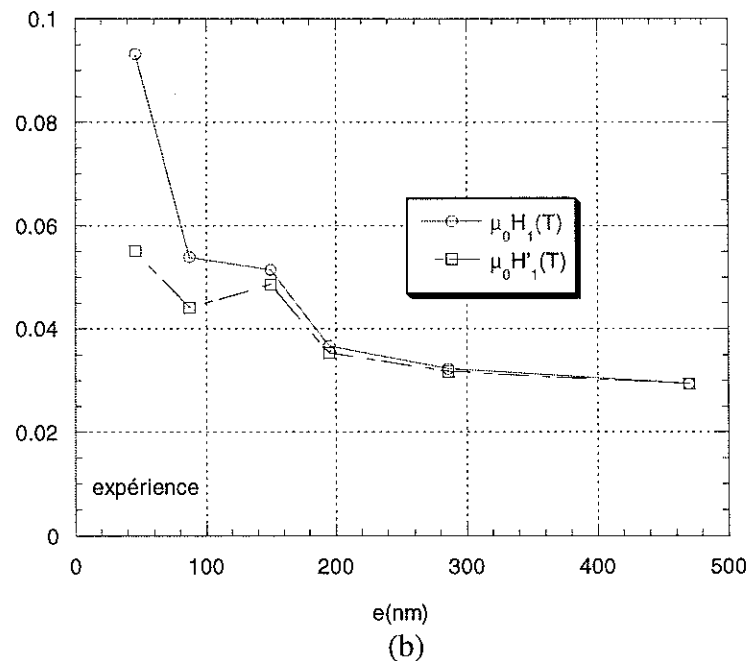
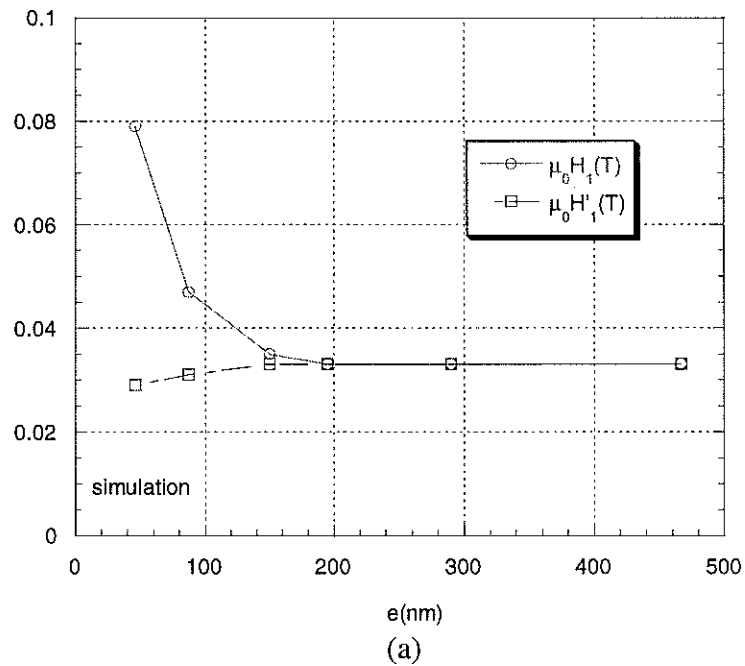


Figure 13 : Variation des champs de retournement (a) simulés et (b) expérimentaux pour le retournement de la couche de Sm-Co la moins coercitive dans un cycle mineur en fonction de l'épaisseur de la couche douce

retournement $|H'_1|$ est inférieur à $|H_1|$, tandis que ces champs en valeur absolue deviennent identiques pour les grandes épaisseurs (Figure 13a). Ce résultat est en concordance avec les observations expérimentales (Figure 13b).

L'étude des configurations d'équilibre des cycles mineurs montre qu'en augmentant le champ appliqué jusqu'à la valeur H'_1 , la paroi s'éloigne progressivement de l'interface entre la couche dure la plus dure et la couche douce. Pour les grandes épaisseurs de la couche centrale, les couches dures ne sont plus couplées. Au voisinage du champ H'_1 , l'allure de la paroi

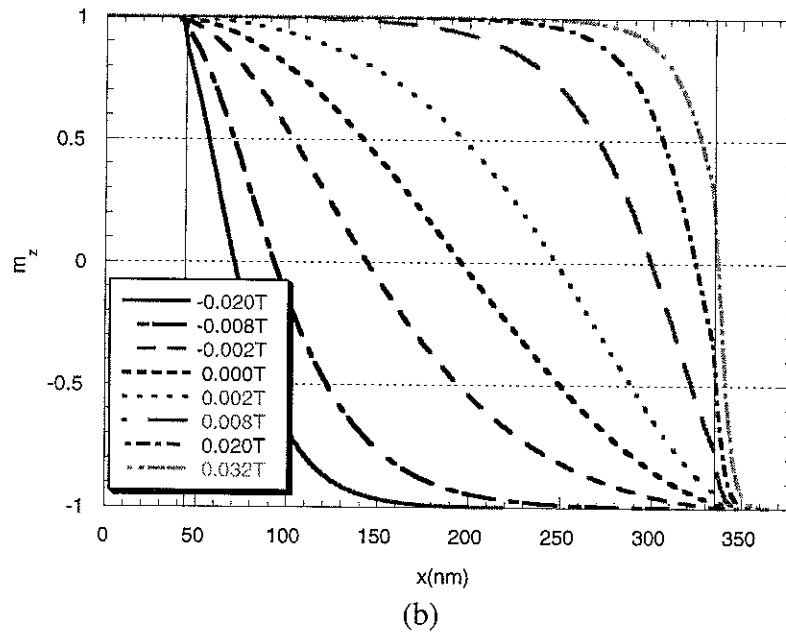
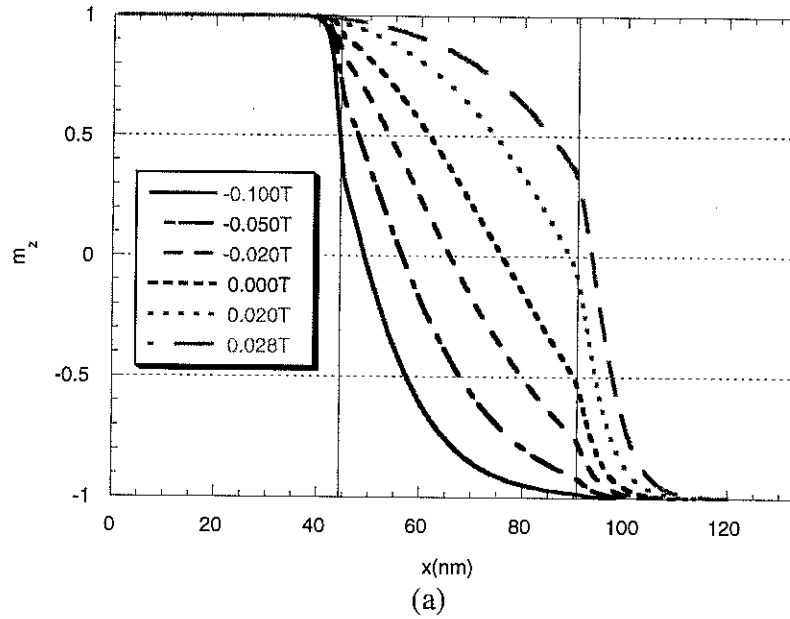


Figure 14 : Configurations d'aimantation sur les cycles mineurs pour d'épaisseurs de la couche douce de (a) 46nm et (b) 290nm

devient indépendante de l'épaisseur, car elle a toute la place nécessaire, sans contrainte de la couche dure la plus dure (Figure 14a).

Pour des faibles épaisseurs de la couche douce, la paroi est comprimée (Figure 14b) et l'énergie stockée est importante. Par conséquent, un champ appliqué dans la direction positive fait basculer la couche dure la moins dure en champ beaucoup plus faible que pour les couches douces plus épaisses.

Pour le domaine des grandes épaisseurs de la couche douce où le champ H'_1 est constant, un modèle analytique 1D, incluant une couche douce et une couche dure, permet de décrire avec une bonne précision la forme de la paroi et la valeur de son champ de propagation à l'intérieur de la couche dure.

Le système 1D doux-dur considéré est dans la limite des épaisseurs infinies et invariant dans le plan yOz . Les paramètres physiques qui caractérisent les deux phases sont A_1 , M_1 et A_2 , M_2 , K pour les phases douce et dure respectivement. L'interface entre les deux milieux est située en $x=0$. On suppose que l'aimantation reste dans le plan yOz , afin de minimiser l'énergie du champ démagnétisant, et on note par $\theta(x)$ la déviation de la direction de l'aimantation par rapport à Oz .

Pour la phase douce, l'énergie libre a la forme :

$$F_t = \int \left(A_1 \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 - \mu_0 M_1 H \cos \theta \right) dx \quad (8)$$

En utilisant l'équation d'Euler et les conditions à l'infini ($\theta = 0$, $\partial \theta / \partial x = 0$ pour $x \rightarrow -\infty$), on obtient la solution :

$$\ln \left| \frac{\theta}{4} \right| = \pm \sqrt{\frac{\mu_0 M_1 H}{2 A_1}} x + C_1 \quad (9)$$

où la constante C_1 sera déterminée à partir des conditions de passage entre les deux milieux.

L'énergie libre de la phase dure s'écrit :

$$F_t = \int \left(A_2 \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 - \mu_0 M_2 H \cos \theta - K \cos^2 \theta \right) dx \quad (10)$$

L'équation d'Euler et les conditions à l'infini ($\theta = \pi$, $\partial \theta / \partial x = 0$ pour $x \rightarrow \infty$) conduisent à :

$$\ln \left| \operatorname{tg} \left(\frac{\theta}{2} \right) + \sqrt{\operatorname{tg}^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) + 1 - k} \right| = \pm \sqrt{\frac{K_{\text{eff}}}{A_2}} x + C_2 \quad (11)$$

où C_2 est calculée à partir des conditions de passage et $k = K / K_{\text{eff}} > 1$ avec $K_{\text{eff}} = K - \mu_0 M_2 H / 2$ pour $H > 0$. Cette solution est valable à condition que $\operatorname{tg} \left(\frac{\theta}{2} \right) \geq k - 1$.

En tenant compte des conditions de passage en $x=0$:

$$\begin{cases} \theta(x \rightarrow 0^-) = \theta(x \rightarrow 0^+) \\ A_1 \frac{\partial \theta}{\partial x}(x \rightarrow 0^-) = A_2 \frac{\partial \theta}{\partial x}(x \rightarrow 0^+) \end{cases} \quad (12)$$

et en utilisant le changement de variable $u = \cos(\theta/2)$ on obtient les constantes C_1 et C_2 et la valeur de θ à l'interface. Théoriquement, il existe deux solutions possibles :

$$u^2 = \frac{C+1}{2Ck} \pm \frac{1}{2Ck} \sqrt{(C+1)^2 - 4Ck}, \quad C = \frac{2K_{\text{eff}}}{\mu_0 M_1 H} \frac{A_2}{A_1} \quad (13)$$

menant à deux solutions, u , coïncidant avec le résultat numérique, tant que le champ appliqué est inférieur au champ de propagation, et une solution u_+ instable. Les deux solutions se rejoignent lors du champ de transition, donné par :

$$\frac{H_c}{H_K^{(2)}} = \frac{\lambda}{(1 + \sqrt{\lambda})^2}, \quad \lambda = \frac{M_2}{M_1} \frac{A_2}{A_1} \quad (14)$$

où $H_K^{(2)} = 2K / \mu_0 M_2$ est le champ d'anisotropie du matériau dur. Les deux solutions u ont la même valeur $u_+ = u_- = 2 / (C + 1)$.

On peut remarquer que, lorsque $\lambda = 1$ on retrouve le modèle de Aharoni ($H_c = 1/4 H_K^{(2)}$) et que lorsque $\lambda \rightarrow \infty$, $H_c \rightarrow H_K^{(2)}$.

Pour les paramètres physiques des simulations, le champ critique déduit du modèle a une valeur de 0.0322T, tandis que celui obtenu par simulation est de 0.0323T. Les valeurs de l'aimantation à l'interface sont aussi assez proches ($\cos \theta(x=0) = 0.38$ par le calcul et $\cos \theta(x=0) = 0.35$ par la simulation).

2.6 Conclusion

En résumé, dans les systèmes ferromagnétiques Sm-Co/Zr-Co/Sm-Co', nous avons montré que le retournement d'aimantation débute par un processus de nucléation à partir de la couche douce. Le champ de nucléation H_i calculé par notre modèle micromagnétique a pu être validé par une approche analytique, simple généralisation du modèle d'Aharoni. Ses valeurs sont en bon accord avec celles obtenues expérimentalement pour toutes épaisseurs e de la couche centrale.

En même temps, le modèle nous a permis d'expliquer le renversement d'une des couches dures de Sm-Co par propagation d'une paroi à partir de la couche douce. Les valeurs du champ de propagation calculé pour ce processus en fonction de l'épaisseur e tendent vers celles de l'expérience avec une assez bonne précision.

Notre étude a finalement montré que la décroissance du champ de retournement de la couche de Sm-Co la plus dure ne peut s'expliquer par un mécanisme de propagation de paroi. Elle a mis en défaut le modèle que nous venons de présenter.

3. Plots submicroniques épitaxiés ultraminces

3.1 Présentation du système physique

Notre objectif a été de décrire la distribution d'aimantation dans des particules de fer de dimensions submicroniques et de calculer les champs de renversement de l'aimantation. De tels systèmes peuvent être considérés comme des modèles pour étudier le processus de renversement d'aimantation. A long terme, ils présentent aussi un intérêt potentiel pour les applications dans le domaine de l'enregistrement magnétique de haute densité.

Dans les couches continues, le renversement d'aimantation est gouverné par des phénomènes extrinsèques comme la nucléation sur des défauts locaux. La courbe d'hystérésis ne reflète pas alors les propriétés intrinsèques du matériau. Afin d'augmenter la coercitivité, les couches sont subdivisées en de nombreuses particules isolées de taille micronique, ce qui permet de réduire l'influence des défauts.

Les plots ont été réalisés par épitaxie d'un film de fer sur un substrat de tungstène (Fe(110)/W(110)) ou molybdène par Dépôt Laser Pulsé (DLP), suivie d'une lithogravure par rayons X [Fruchart 98a], permettant de découper le film en un très grand nombre (10^7 à 10^8) de particules, à base carrée ou ronde, pratiquement sans interaction. La mesure macroscopique de l'aimantation d'un tel échantillon revient à moyenner, avec une très bonne précision, l'aimantation individuelle de chaque plot et de réduire l'effet des fluctuations de taille.

Plusieurs échantillons ont été fabriqués par O. Fruchart [Fruchart 98b]. Ils sont formés d'un ensemble de plots disposés sur un réseau carré dont le pas est le double de la taille des particules :

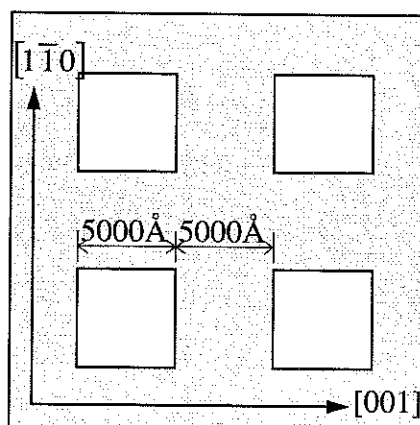


Figure 15 : Schéma du réseau de particules

- particules carrées de côté 5000Å et d'épaisseur 58Å. Les cotés des particules sont orientés parallèlement aux axes magnétiques du fer ([001] et $[1\bar{1}0]$) (Figure 15).
- particules rondes de diamètre 2000Å et 10Å d'épaisseur.

Les courbes d'aimantation expérimentales obtenues reflètent des différences par rapport aux mesures sur les couches continues, principalement une forte augmentation du champ coercitif [Fruchart 97].

Afin d'interpréter ces résultats et d'obtenir des informations sur le retournement d'une particule unique, Olivier Fruchart a développé un modèle statistique simple du renversement

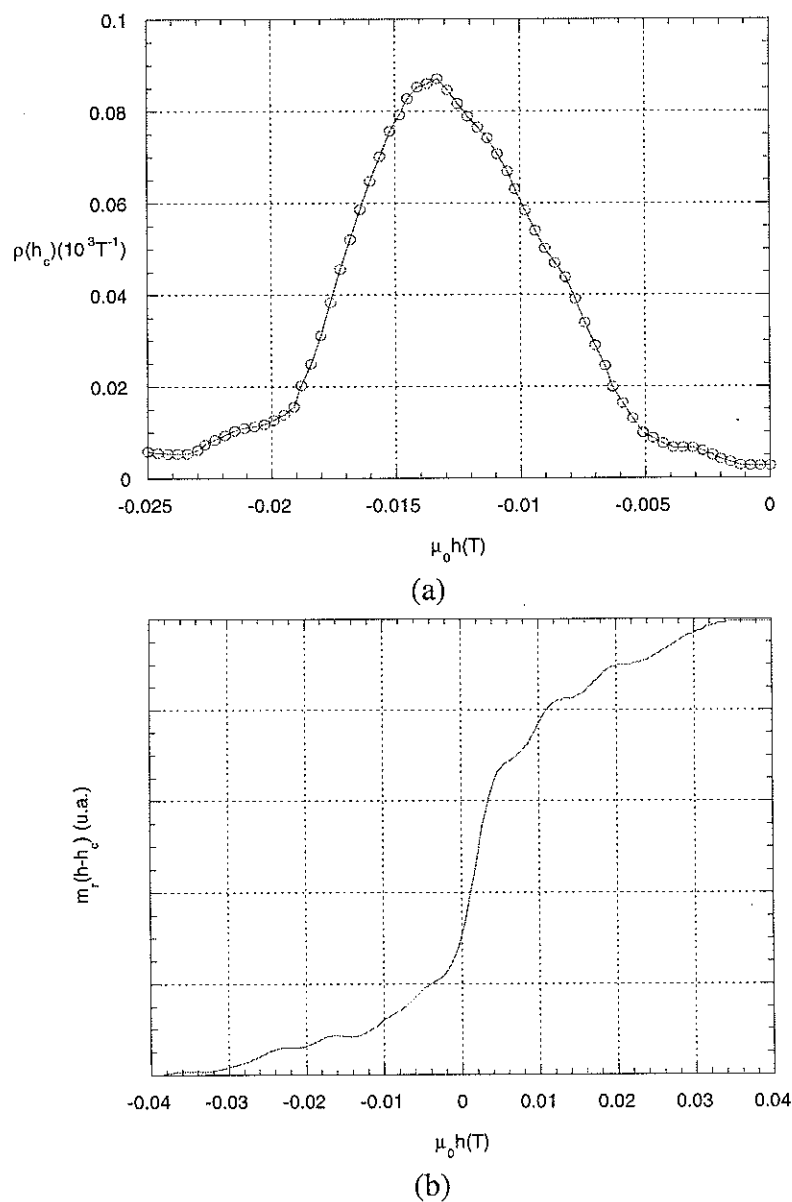


Figure 16 : Résultats du modèle de déconvolution : (a) distribution des champs coercitifs, (b) contribution réversible à l'aimantation

d'aimantation dans les particules [Fruchart 98a]. Ce modèle est fondé sur trois hypothèses :

- i) les interactions interparticules sont négligeables (les champs dipolaires interparticules sont négligeables par rapport au champ coercitif) ;
- ii) chaque particule est monodomaine et le processus de retournement d'aimantation peut être décrit en supposant l'existence de trois régimes : écartement réversible de la saturation suivi par un renversement irréversible pour un champ appliqué égal au champ coercitif et saturation réversible en fin ;
- iii) les contributions réversibles au cycle sont supposées identiques pour toutes les particules.

Le comportement de l'assemblée des particules est décrit par deux fonctions : la distribution des champs coercitifs individuels $\rho(h_c)$ et la contribution réversible au retournement $m_r(\tilde{h}) = m_r(h - h_c)$ présentées sur la Figure 16 pour le cas de la particule carrée. Les deux fonctions expérimentales macroscopiques utilisées pour résoudre ce système fonctionnel sont la variation totale de l'aimantation par rapport au champ et la susceptibilité statique réversible.

La Figure 17 présente la courbe pour une seule particule, obtenue par le calcul ci-dessus, en supposant que la valeur du champ coercitif correspond au maximum de la courbe de distributions des champs coercitifs. Comme $m_r(\tilde{h})$ a été supposé le même pour toutes les particules, les courbes d'aimantation pour des particules avec un champ coercitif différent

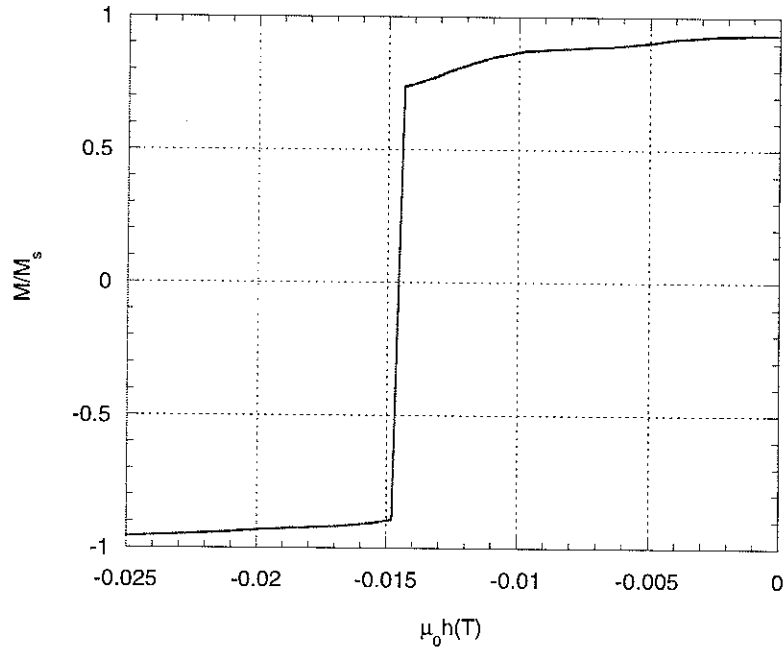


Figure 17 : Courbe de renversement d'aimantation pour une particule carrée de 5000Å à 300K obtenue avec le modèle de déconvolution

sont obtenues par une simple translation.

Pour la particule ronde, le signal mesuré est insuffisant pour permettre la procédure de déconvolution. La Figure 18 montre le cycle macroscopique obtenu expérimentalement.

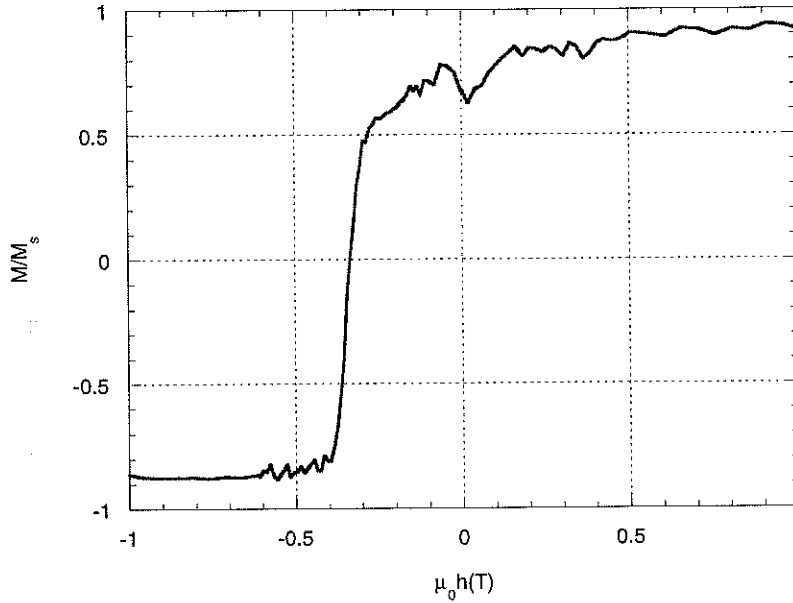


Figure 18 : Courbe de renversement d'aimantation pour une particule ronde de 2000Å à 10K

3.2 Système modèle pour les simulations

Le système modèle utilisé pour réaliser les premières simulations sur une particule carrée est un parallélépipède de section carrée de coté 5000Å et d'épaisseur 58Å. Les paramètres physiques utilisés sont ceux du fer à 300K : une constante d'échange $A = 2 \cdot 10^{-11} \text{ J/m}$ et une aimantation à la saturation $\mu_0 M_s = 2.2 \text{ T}$.

Pour des couches ultraminces, où l'aimantation reste dans le plan de la couche, une forme phénoménologique d'une énergie d'anisotropie planaire peut être déduite. Comme les couches continues et les particules montrent le même type de variation de l'anisotropie en fonction de la température, on suppose une forme analogue pour l'anisotropie des particules et les constantes phénoménologiques sont déterminées à partir des constantes trouvées pour les couches continues [Fruchart 98a]. L'expression de l'énergie d'anisotropie dans nos simulations est de la forme :

$$F_K = \int_V (A_p \sin^2 \varphi + B_p \sin^4 \varphi) d^3 r \quad (15)$$

où φ est l'angle entre le vecteur aimantation et l'axe $[001]$ (Figure 19), tandis que $A_p = 2.08 \cdot 10^4 J/m^3$ et $B_p = -4 \cdot 10^4 J/m^3$. Dans ce cas, l'axe de facile aimantation $\mathbf{u}_K$ est dirigé selon $[1\bar{1}0]$. Le système de coordonnées est orienté avec $Ox \parallel [001]$, $Oy \parallel [1\bar{1}0]$ et $Oz \parallel [110]$.

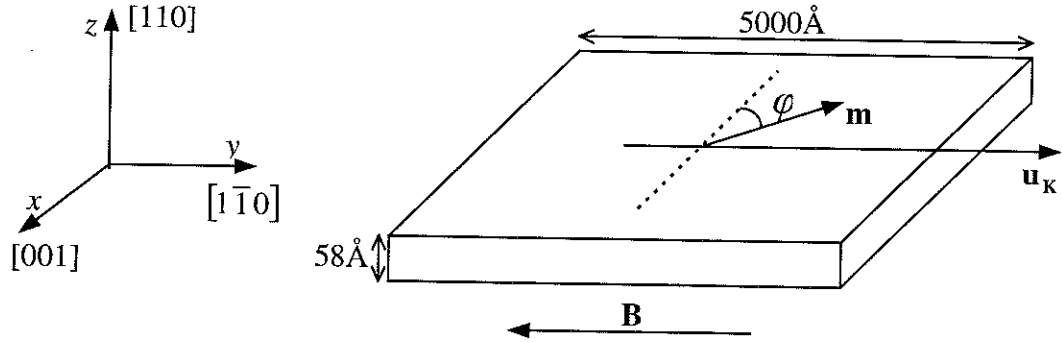


Figure 19 : Système modèle

Les simulations faites sur les plots de fer ont fait appel à la méthode MI-H pour calculer le champ démagnétisant à l'exception de celles présentées dans les paragraphes 3.3.1 et 3.5.1 où la technique MD- ϕ moins précise a été utilisée.

3.3 Définition de paramètres numériques adaptés

3.3.1 Influence du pas de maillage

Un choix correct du pas de maillage impose qu'il soit inférieur aux longueurs caractéristiques : longueur d'échange δ_{ex} et largeur de paroi δ_N qui est de type Néel. L'évaluation de δ_N nécessite une approche numérique car toutes les énergies entrent en compétition. Pour les couches ultraminces où l'aimantation reste dans le plan de la couche, l'influence magnétostatique agit à très courte distance uniquement et la forme de la paroi est donnée par la minimisation de l'énergie d'échange et d'anisotropie, ce qui conduit à la même expression que pour une paroi de Bloch. La seule différence est le fait que l'aimantation tourne parallèlement au plan de la paroi pour une paroi de Bloch et perpendiculairement à la paroi pour celle de Néel. On obtient $\delta_N \approx \delta_B \equiv 1000 \text{ Å}$.

La longueur d'échange δ_{ex} est le résultat de la compétition entre l'énergie magnétostatique et celle d'échange. Sa valeur est $\delta_{ex} \equiv 80 \text{ Å}$. Dans le cas de nos particules, où les pôles magnétiques sont localisés sur les bords, la longueur δ_{ex} est pertinente dans une zone près des

contours. Comme à l'intérieur de la particule la longueur caractéristique pour les variations de l'aimantation est la largeur de paroi de Néel δ_N , les volumes de nucléation qui apparaissent grandissent jusqu'à des dimensions comparables à δ_N , pour s'élargir ensuite et provoquer le renversement d'aimantation.

Nous allons examiner l'influence du pas de maillage supérieur à δ_{ex} mais inférieur à δ_N sur la courbe d'aimantation et sur la distribution d'équilibre. En fixant le même pas de maillage selon Oz ($h_z=29\text{\AA}$), deux simulations avec des pas différents selon Ox et Oy ont été menées avec $h_x=h_y=125\text{\AA}$ et $50\text{\AA}$ respectivement. La Figure 20 montre que les valeurs du champ coercitif obtenues par les deux calculs sont semblables et qu'un écart maximum de 1.8% est observé pour les courbes d'aimantations. Par contre, un écart angulaire important entre les deux distributions d'équilibre juste avant le retournement est observé, il atteint une valeur maximale de 14° (Figure 22). Mais cet écart est heureusement localisé loin du bord de la particule, la valeur du champ de retournement n'est pas perturbée car le renversement s'initie toujours à partir d'un bord. Il demeure que pour décrire correctement des configurations d'aimantation, il est recommandé de choisir un pas de maillage plus petit que les longueurs caractéristiques définies ci-dessus.

La valeur calculée du champ coercitif $\mu_0 H_c = -21.8\text{mT}$ est plus proche de la valeur expérimentale $\mu_0 h_c = -14\text{mT}$ mesurée sur les plots que celle de la couche continue

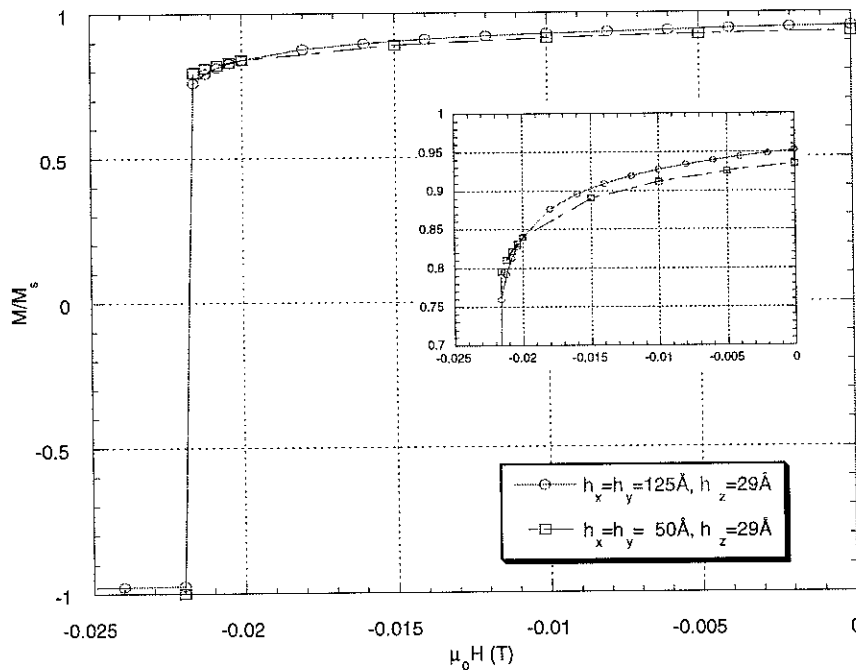


Figure 20 : Influence du pas de maillage (h_x, h_y) sur la courbe d'hystérésis simulée

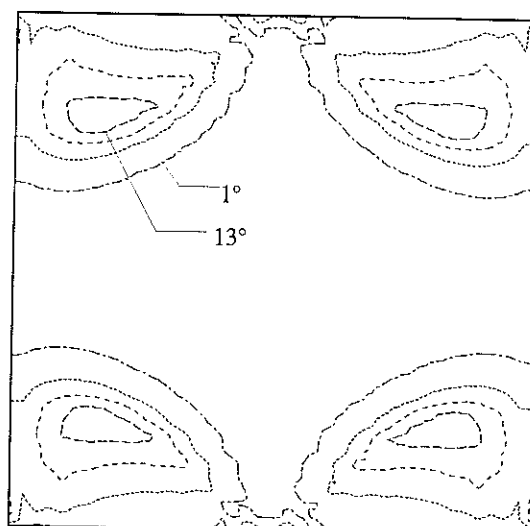


Figure 22 : Influence du pas de maillage sur la configuration d'équilibre juste avant le retournement : isovaleurs de l'écart angulaire entre deux distributions d'aimantation calculées pour $h_x=h_y=125\text{\AA}$ et $h_x=h_y=50\text{\AA}$ respectivement

$\mu_0 h_{cf} = -4\text{mT}$. Cette différence se réduit en appliquant un champ légèrement incliné par rapport à l'axe de facile aimantation, brisant la symétrie des configurations (voir paragraphe 3.3.2).

La Figure 21 représente deux configurations d'aimantation d'équilibre en champ nul et juste avant le retournement. En champ nul, il existe quatre régions symétriques situées au voisinage des bords où l'aimantation s'écarte de façon significative de la direction de l'axe de plus facile

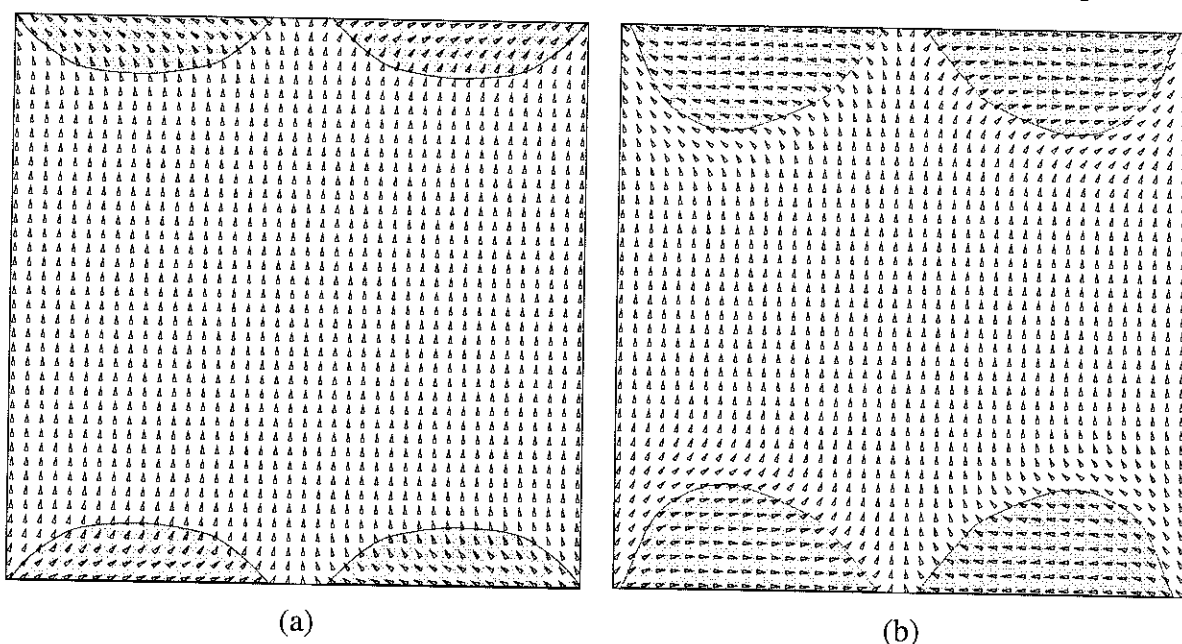


Figure 21 : Configurations d'équilibre d'aimantation obtenues par simulation (a) en champ nul et (b) avant le champ coercitif

aimantation. Ces volumes de nucléation augmentent en champ négatif et, pour un champ juste avant le champ coercitif, la taille des domaines avec une aimantation perpendiculaire à la direction du champ atteint une dimension proche de δ_N . En se plaçant parallèlement à la surface, ces moments minimisent leur énergie démagnétisante et se trouvent dans le second puits de l'énergie d'anisotropie.

Le champ coercitif déduit des simulations est réduit d'une manière importante par rapport au champ du modèle de Stoner-Wohlfarth ($\mu_0 H_{SW} = -55\text{mT}$). Un tel résultat est concordant avec le fait que l'aimantation quitte l'état de complète saturation dans un champ d'amplitude bien inférieure au champ coercitif et le mécanisme de renversement se développe à partir des volumes de nucléation. Ce modèle ne peut pas tenir compte de certaines sources de réduction du champ coercitif comme la présence d'une rugosité de surface.

3.3.2 Brisures de symétrie et influence de l'orientation du champ appliqué

Dans les simulations que nous venons de présenter, le champ externe a été appliqué rigoureusement selon l'axe de facile aimantation de la particule. En réalité, dans le cas de mesures expérimentales, le champ ne peut jamais être orienté aussi précisément.

3.3.2.1 Cas du plot carré

Nous avons donc entrepris d'examiner l'influence de l'inclinaison du champ, d'un petit angle

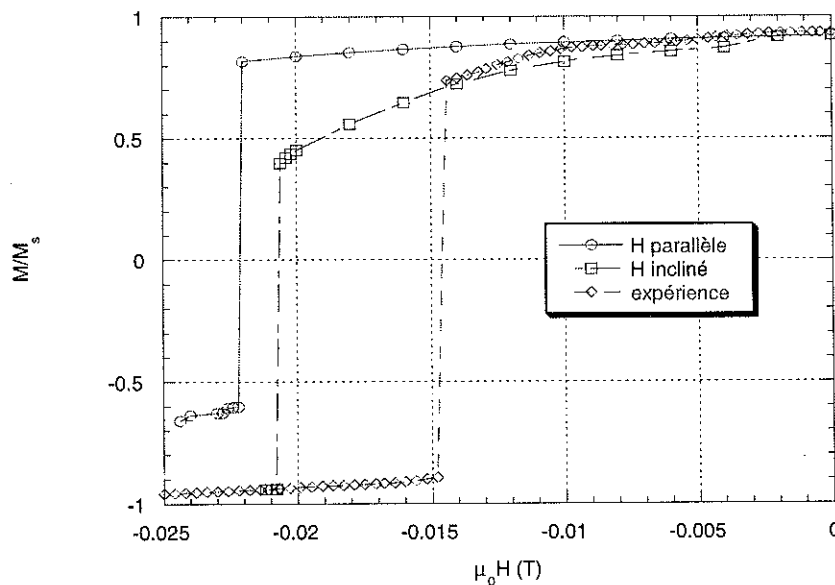


Figure 23 : Influence de l'orientation du champ appliqué sur la courbe d'hystérésis d'une particule carré ($h_x=h_y=78\text{\AA}$, $h_z=29\text{\AA}$)

(0.1°) par rapport à l'axe de facile aimantation, sur la courbe d'hystérésis. La Figure 23 révèle qu'une désorientation du champ appliqué induit une diminution du champ coercitif, approximativement de 6% (-20.7mT pour le champ incliné par rapport à -22mT pour le champ vertical) et un écart à la saturation beaucoup plus important, surtout près du champ coercitif.

Cette différence de comportement peut être illustrée par l'analyse des configurations d'aimantation qui révèlent des différences significatives selon que le champ est orienté selon Oy ou incliné de 0.1° (Figure 24 pour un champ appliqué de -20mT).

On note en particulier :

- (i) la création de deux volumes de nucléation en (b) au lieu de quatre en (a),
- (ii) lorsque le champ est parfaitement aligné avec Oy, les moments magnétiques dans les coins de la particule pointent selon les diagonales du carré, tandis que pour le cas du champ légèrement incliné, l'ancrage des moments n'apparaît que dans deux des quatre coins les plus éloignés,
- (iii) la pénétration plus grande des volumes de nucléation à l'intérieur de la particule en (b).

La brisure de symétrie de la configuration en champ incliné apparaît pour une valeur du champ appliqué de l'ordre de -3mT pour une inclinaison de 0.1° et correspond, sur la courbe d'aimantation, à une diminution brutale de l'aimantation (voir Figure 23).

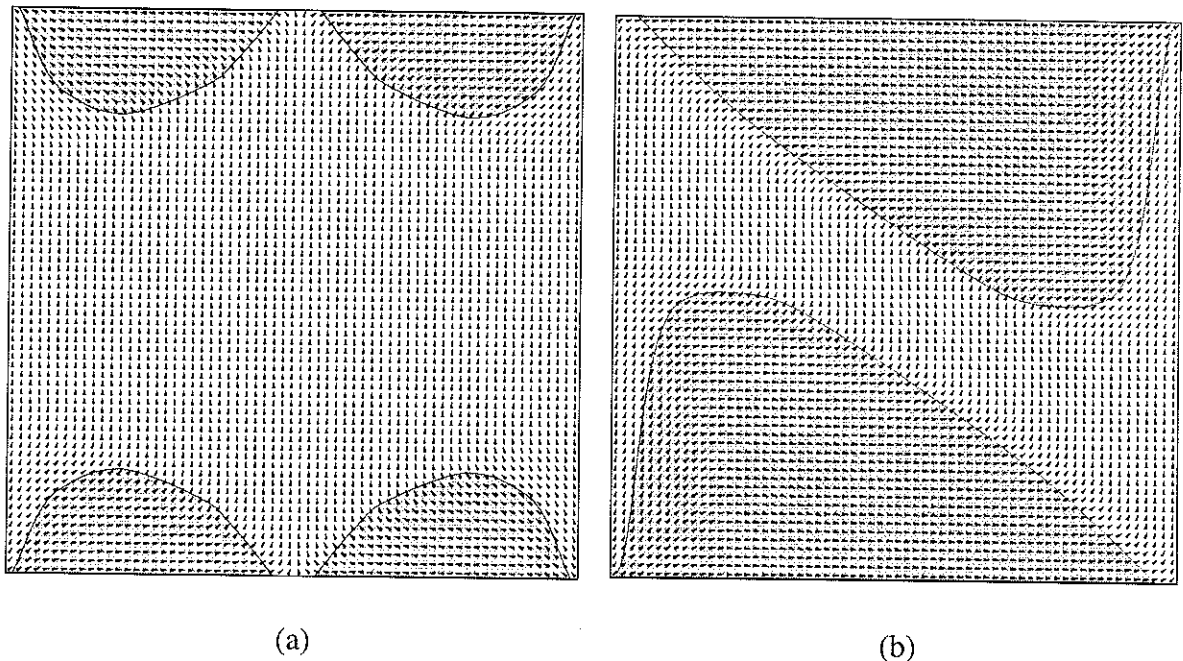


Figure 24 : Configurations d'équilibre pour un champ de -20mT orienté : (a) parallèlement à l'axe Oy (b) incliné de 0.1° par rapport à Oy ($h_x=h_y=78\text{\AA}$, $h_z=29\text{\AA}$)

3.3.2.2 Cas d'une particule ronde

Examinons maintenant l'influence de l'inclinaison du champ dans le cas d'une particule de forme circulaire de $2000\text{\AA}$ de diamètre et de $20\text{\AA}$ d'épaisseur. L'aimantation à la saturation et la constante d'échange sont celles utilisées pour le plot carré. Les résultats expérimentaux conduisent à un champ coercitif de -0.19T et à une anisotropie différente ($A_p = 2.63 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$, $B_p \equiv 0$) à cause du changement d'épaisseur.

Trois situations ont été simulées : (a) champ et axe d'anisotropie parallèles à Oy , (b) champ et axe d'anisotropie inclinés à 1° par rapport à Oy , (c) champ incliné à 1° par rapport à Oy et axe d'anisotropie parallèle à Oy . Les cycles d'aimantation sont relativement carrés, l'écart à la saturation avant le champ coercitif étant très faible. La Figure 25 offre un détail sur la partie réversible de la courbe d'aimantation pour les trois cas pris en compte. Les situations (a) et (b) sont théoriquement identiques, à une rotation du référentiel près, comme indique la superposition des parties réversibles des courbes d'aimantation pour les deux cas mentionnés.

Le faible décalage observé pour la valeur du champ coercitif peut être dû à des ancrages de nature numérique causés par la discrétisation du système. Cet artefact numérique disparaît en tournant légèrement le système physique par rapport au maillage. La situation (c) correspond à une orientation du champ légèrement inclinée par rapport à l'axe de facile aimantation. Bien que les configurations restent relativement saturées avant le retournement irréversible et

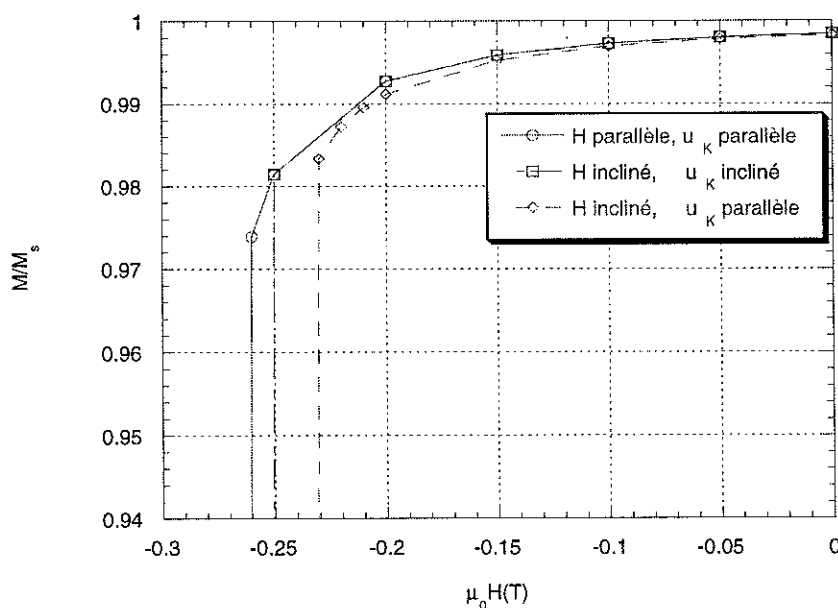


Figure 25 : Détail sur la partie réversible des courbes d'aimantation pour une particule de forme circulaire ($h_x=h_y=31\text{\AA}$, $h_z=10\text{\AA}$)

visuellement semblables pour les trois cas, la faible brisure de symétrie qui apparaît (Figure 26) diminue la valeur du champ coercitif comme dans le cas des plots carrés, mais de façon moins nette cependant.

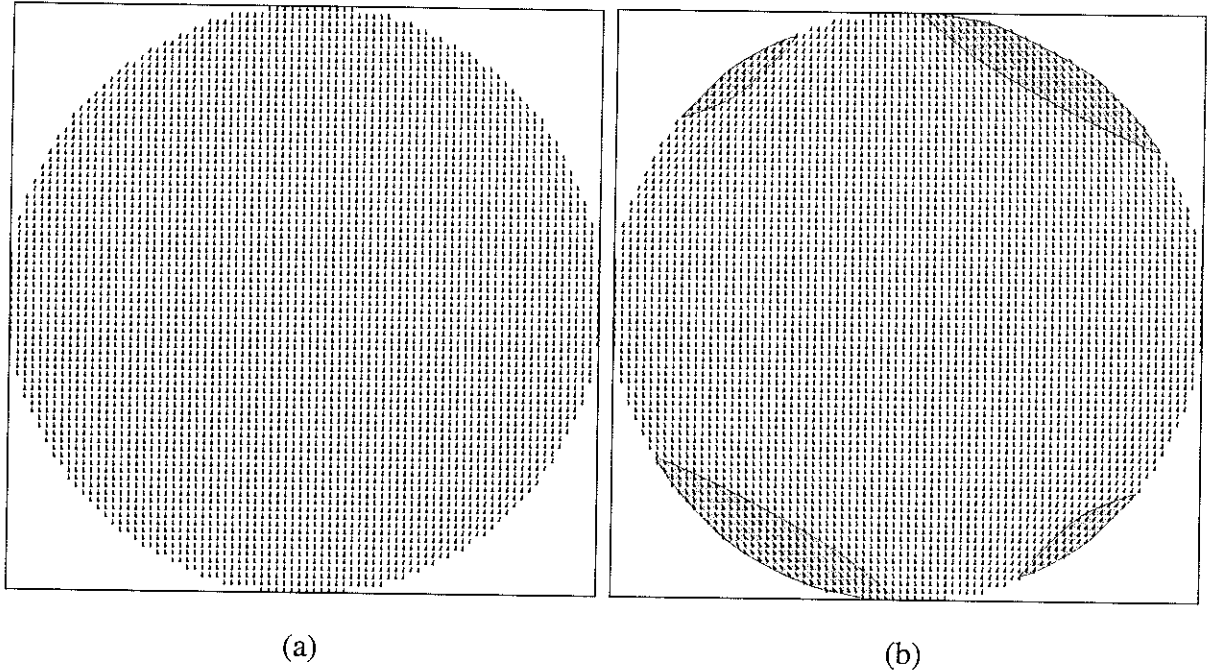


Figure 26 : Configurations d'équilibre pour la particule ronde (a) en champ nul et (b) pour un champ de -23mT incliné de 1° par rapport à l'axe d'anisotropie ($h_x=h_y=31\text{\AA}$, $h_z=10\text{\AA}$)

3.4 Facteur effectif de qualité Q

Dans les couches minces à anisotropie perpendiculaire, la direction de l'aimantation dépend du rapport entre énergie d'anisotropie et énergie démagnétisante. Ce rapport $Q = 2K / \mu_0 M_s^2$ est appelé facteur de qualité. Lorsque $Q < 1$, l'aimantation reste dans le plan des couches, c'est-à-dire sans composante le long de l'axe de facile aimantation, car le champ d'anisotropie est trop faible pour compenser le champ démagnétisant ; l'aimantation peut par contre sortir du plan lorsque $Q > 1$ [Miltat 89].

L'application de ce critère dans le cas de plots de faible épaisseur à anisotropie planaire mène à la situation apparemment contradictoire où l'aimantation reste dans le plan bien que $Q < 1$. Il est donc nécessaire de modifier la définition du facteur Q pour nos systèmes.

Considérons un plot d'épaisseur $e = 2b$, faible par rapport à la longueur d'échange $\delta_{ex} = \pi \sqrt{A / \mu_0 M_s^2} \cong 80 \text{\AA}$, de largeur $L = 2a \gg e$ et infiniment long (Figure 27).

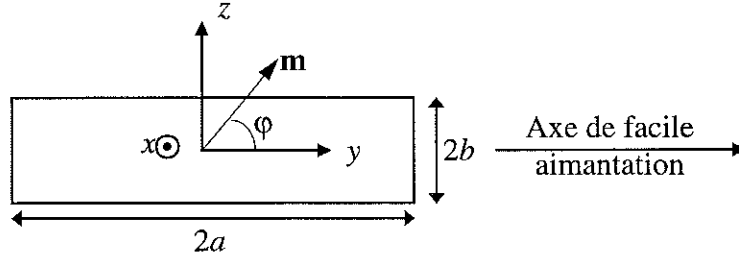


Figure 27 : Modèle pour le calcul du facteur de qualité

Les hypothèses dans le présent calcul sont :

- i) L'angle φ repère la direction de l'aimantation par rapport à Oy, axe de facile aimantation ;
- ii) comme $e < \delta_{ex}$, l'aimantation est fortement corrélée dans toute épaisseur ;
- iii) l'aimantation est uniforme et reste confinée dans le plan yOz.

L'effet du champ démagnétisant est le plus prononcé en un point proche de la surface, comme $y = a$. Comme les moments sont corrélés sur toute l'épaisseur, la valeur effective du champ démagnétisant ressenti par un moment placé en $y = a$ correspond à sa valeur moyenne sur toute épaisseur.

Les valeurs moyennes du champ généré par les faces horizontales situées en $z = \pm b$ sont :

$$\begin{aligned} \langle H_y \rangle &= 0 \\ \langle H_z \rangle &= \frac{M_z}{\pi} \left(\frac{a}{2b} \ln \frac{a^2}{a^2 + b^2} - \arctg \frac{a}{b} \right) = M_z f(u) \end{aligned} \quad (16)$$

où $f(u) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{u}{2} \ln \frac{u^2}{u^2 + 1} - \arctg u \right)$ avec $u = a/b$. De même, les valeurs du champ généré par

les surfaces verticales situées en $y = \pm a$ sont :

$$\begin{aligned} \langle H_y \rangle &= -M_y (1 + f(u)) \\ \langle H_z \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (17)$$

En se limitant à l'anisotropie d'ordre 2, la densité d'énergie du système pour une tranche infinitésimale en $y = a$ s'écrit :

$$E = -K \cos^2 \varphi + \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 \left((1 + f(u) \cos^2 \varphi - f(u) \sin^2 \varphi) \right) \quad (18)$$

où φ est l'angle d'inclinaison de l'aimantation par rapport à Oy.

Cette relation permet de définir une constante effective d'anisotropie :

$$E = E_0 - K_{eff} \cos^2 \varphi = E_0 - K \left(1 - \frac{1}{Q} \right) \cos^2 \varphi \quad (19)$$

avec

$$K_{eff} = K - \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 (1 + 2f(u)) \quad (20)$$

et d'en déduire une expression du facteur de qualité :

$$Q = \frac{K}{K - K_{eff}} = \frac{2K}{\mu_0 M_s^2 (1 + 2f(u))} \text{ avec } u = a/b \quad (21)$$

Dans les systèmes étudiés, le rapport u des dimensions est de l'ordre de 100, le facteur de qualité est donc grand par rapport à l'unité. Il nous indique que l'aimantation doit rester dans le plan xOy, ce qui est vérifié dans nos simulations. Dans le cas limite d'une couche mince à anisotropie perpendiculaire ($a/b \ll 1$), le facteur de qualité tend vers la valeur escomptée $Q = 2K / \mu_0 M_s^2$.

3.5 Influence de divers paramètres physiques sur le mécanisme de retournement

3.5.1 Influence de la forme de l'énergie d'anisotropie

L'anisotropie des couches minces présente une contribution volumique et une contribution surfacique. Le terme volumique est pris en compte dans la forme de l'énergie totale définie dans le chapitre II. Le terme surfacique est normalement pris en compte en modifiant la condition de Brown.

Dans le cas des nos simulations, l'épaisseur de la particule ($58\text{\AA}$) est beaucoup plus faible que la largeur de la paroi de Néel ($\delta_N \cong 1000\text{\AA}$), donc l'aimantation est pratiquement homogène dans toute l'épaisseur et par conséquent l'anisotropie d'interface peut être renormalisée dans le volume et être prise comme un terme volumique. En même temps l'anisotropie d'interface provenant des bords latéraux de la particule est supposée négligeable [Fruchart 98a]. Il ressort des arguments ci-dessus que l'aimantation doit rester dans le plan et l'énergie d'anisotropie peut être simplement décrite par l'équation (15).

Néanmoins, afin de vérifier l'exactitude des approximations faites, nous avons effectué une simulation qui utilise la forme complète de l'énergie d'anisotropie avec toutes les contributions et un vecteur aimantation qui peut sortir du plan de la couche. Les contributions magnétoélastique, magnétocristalline volumique et de l'anisotropie de surface s'expriment alors par :

$$\begin{aligned}
 E_{mel} &= [(b^{\gamma,2} - b^{\epsilon,2}) \sin^2 \theta \cos^2 \theta - 2b^{\epsilon,2} \cos^2 \theta] \frac{\epsilon_{//} - \epsilon_{\perp}}{2} \\
 E_{mc} &= K_{cub} \left(\frac{1}{4} \cos^4 \theta + \frac{1}{4} \sin^4 \theta \sin^4 \varphi + \sin^4 \theta \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{2} \cos^2 \theta \sin^2 \theta \sin^2 \varphi + \cos^2 \theta \sin^2 \theta \cos^2 \varphi \right) \\
 E_s &= \frac{A_s}{e} \sin^2 \theta + \frac{A_{s,p}}{e} \sin^2 \theta \sin^2 \varphi
 \end{aligned} \tag{22}$$

où e est l'épaisseur de la couche, K_{cub} la constante d'anisotropie magnétocristalline d'ordre 1, A_s et $A_{s,p}$ les constantes d'anisotropie de surface d'ordre 1, $b^{\gamma,2}$, $b^{\epsilon,2}$ les constantes magnétoélastiques et $\epsilon_{//}$, $\epsilon_{\perp}$ les déformations correspondantes. Les angles θ et φ sont définis conformément à la Figure 28.

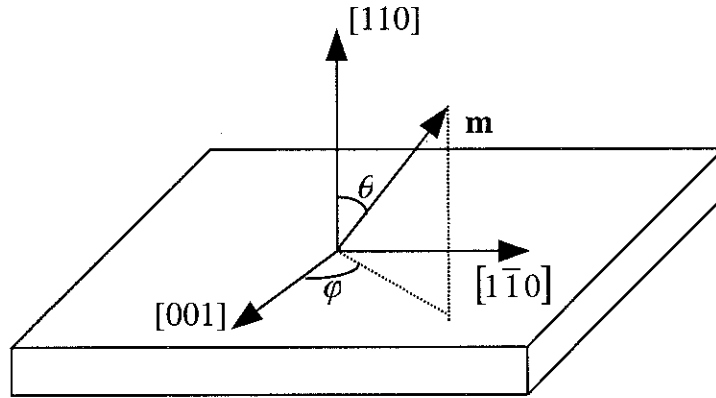


Figure 28 : Schéma pour la définition de la forme 3D de l'anisotropie

Les simulations réalisées pour les deux formes de l'énergie d'anisotropie montrent qu'il n'existe pas de déviations significatives (Figure 29). Nous retiendrons la forme simplifiée 2D dans la suite de notre étude car elle est plus économe en temps de calcul.

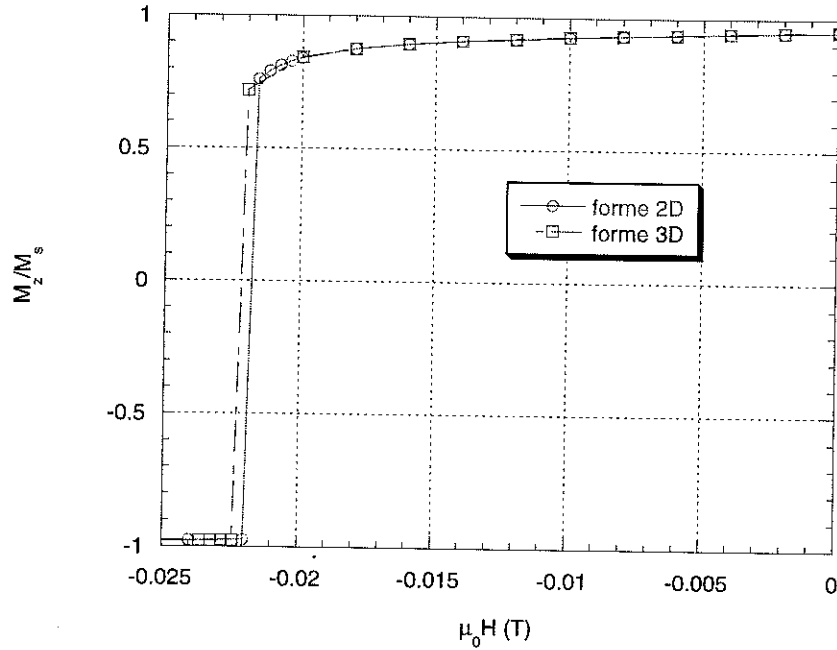


Figure 29 : Influence de la forme de l'énergie d'anisotropie sur la courbe d'hystérésis simulée ($h_x=h_y=125\text{\AA}$, $h_z=29\text{\AA}$)

3.5.2 Influence de la forme de la particule

Dans ce paragraphe, nous examinons l'influence de la forme de la particule sur le renversement d'aimantation. Pour une épaisseur donnée, nous comparons le comportement de deux particules de même taille, l'une carrée de côté L et l'autre ronde. Selon l'épaisseur, les constantes d'anisotropie utilisées dans notre modèle varient en accord avec les mesures expérimentales :

	$A_p (\text{J} / \text{m}^3)$	$B_p (\text{J} / \text{m}^3)$
(a) $L=5000\text{\AA}$, $e=58\text{\AA}$	$2.08 \cdot 10^4$	$-4 \cdot 10^4$
(b) $L=2000\text{\AA}$, $e=10\text{\AA}$	$4.81 \cdot 10^5$	0

Tableau 2 : Paramètres physiques utilisés

Nos calculs montrent que la forme des particules a une forte influence sur les courbes d'aimantation sont affectés par la forme. Les différences observées sont autant plus marquées que l'épaisseur est grande (Figure 30 et Figure 32). Examinons d'abord le cas de particules de forte épaisseur ($e=58\text{\AA}$). En champ nul, le champ démagnétisant des particules contraint les moments magnétiques à s'orienter parallèlement aux bords de la particule (Figure 21a et Figure 31). Cela conduit à la création de quatre volumes de nucléation, dont l'étendue est plus

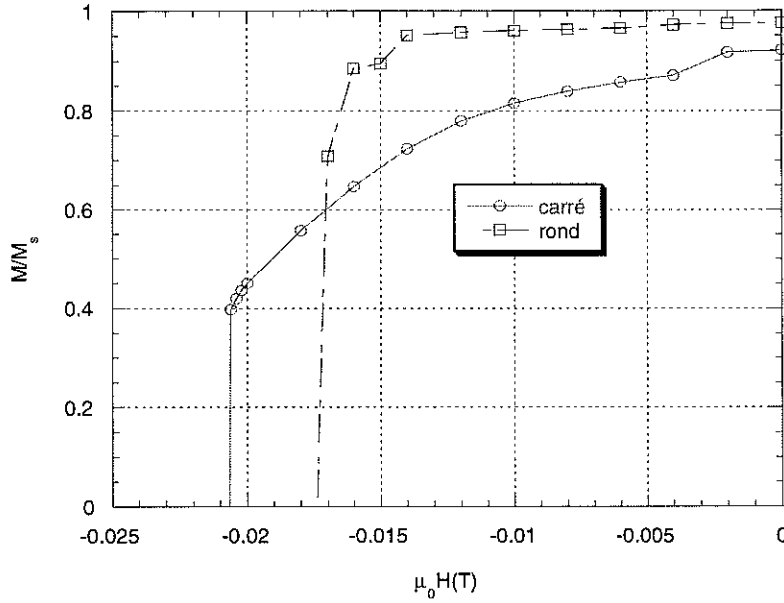


Figure 30 : Influence de la forme de la particule sur la courbe d'aimantation
pour des particules de $L=5000\text{\AA}$ et $e=58\text{\AA}$ ($h_x=h_y=78\text{\AA}$, $h_z=29\text{\AA}$)

importante dans le cas de la particule carrée. Dans cette géométrie particulière, les moments magnétiques dans ces volumes tentent de se placer perpendiculaires à l'axe de facile aimantation pour se trouver dans le second puits en énergie d'anisotropie.

Les moments situés sur le contour minimisent de plus leur énergie démagnétisante. Par contre, pour les plots ronds, les moments des volumes de nucléation n'arrivent pas à minimiser aussi efficacement ces deux termes d'énergie. En champ négatif, pour les deux classes de plots, la

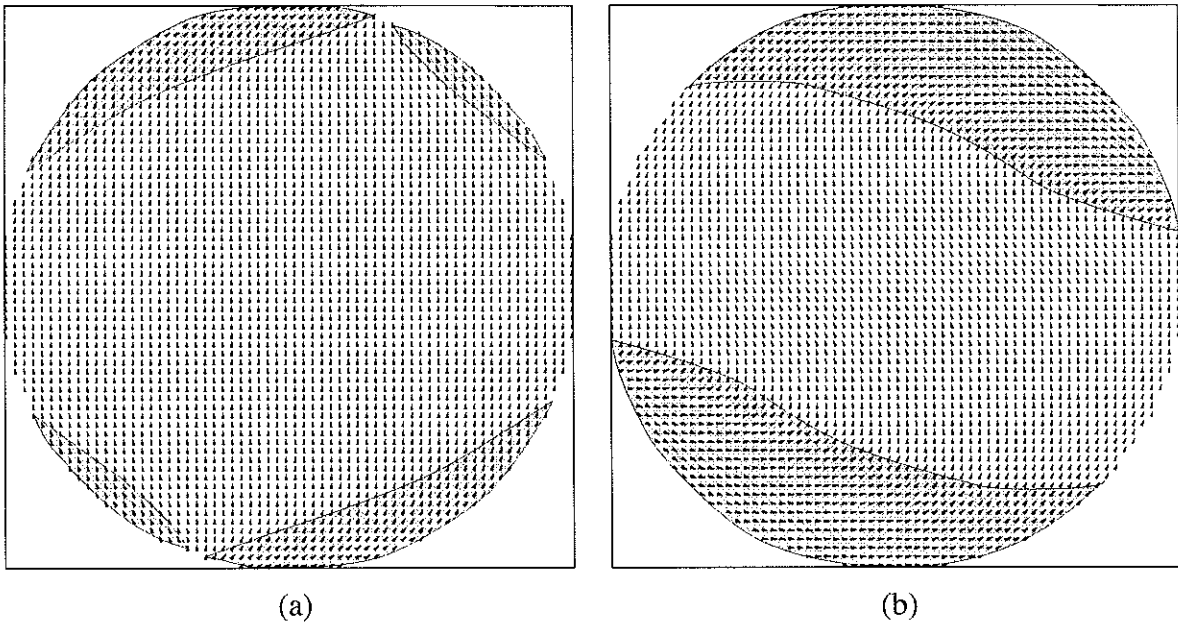


Figure 31 : Configurations d'équilibre d'aimantation obtenues par simulation (a) en champ nul et (b) avant le champ coercitif ($h_x=h_y=78\text{\AA}$, $h_z=29\text{\AA}$)

symétrie est brisée et seuls subsistent deux volumes de nucléation dont la taille augmente au cours du renversement. L'absence de coins d'ancrage dans une particule ronde est à l'origine d'une diminution assez importante du champ coercitif.

La deuxième situation que nous présentons concerne des particules de taille plus petite ($L=2000\text{\AA}$ et $e=10\text{\AA}$) pour lesquelles la forme de l'énergie d'anisotropie est uniquement d'ordre 2 et plus forte que dans le cas $e=58\text{\AA}$. On observe un écart à la saturation très faible même pour un champ proche du champ coercitif. Les processus calculés sont alors très similaires quelque soit la forme de la particule (Figure 32). En effet, dans la limite des faibles épaisseurs, l'énergie démagnétisante joue un rôle tout à fait mineur par rapport à l'énergie d'anisotropie. Par conséquent, les particules présentent peu de rotation réversible de l'aimantation et leur champ coercitif s'approche de celui calculé par le modèle de Stoner-Wohlfarth (-0.55T à 10K).

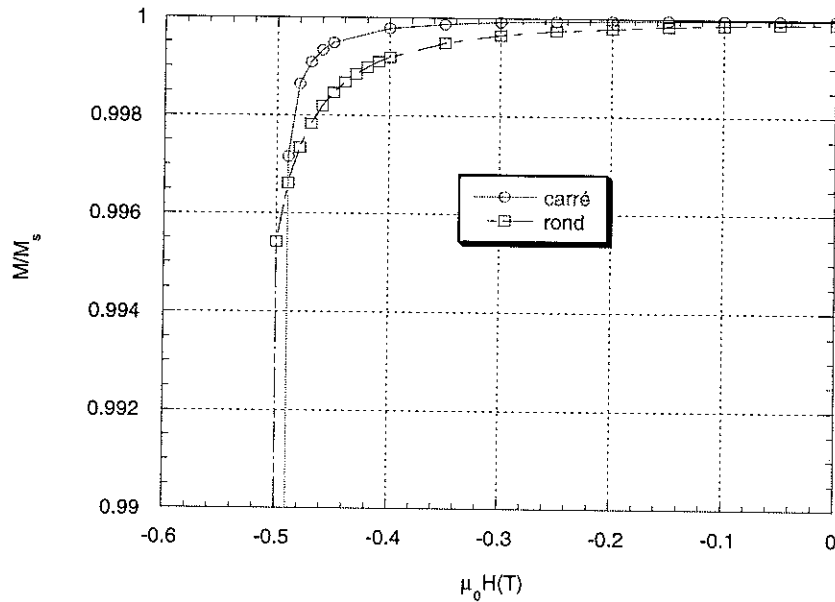


Figure 32 : Influence de la forme de la particule sur la courbe d'aimantation pour des particules de $L=2000\text{\AA}$ et $e=10\text{\AA}$ ($h_x=h_y=31\text{\AA}$, $h_z=10\text{\AA}$)

3.5.3 Influence de la taille latérale (L) de la particule

Dans cette section nous examinons l'influence de la taille L sur le comportement magnétique de particules à base carrée d'épaisseur $e=10\text{\AA}$.

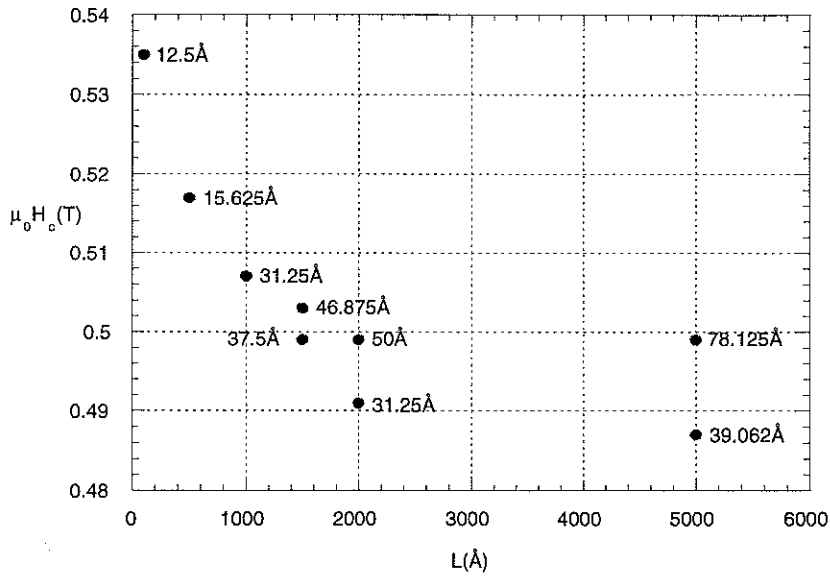


Figure 33 : Dépendance du champ coercitif des particules carrées d'épaisseur $e=10\text{\AA}$ en fonction de la taille latérale L . Les valeurs reportées sur la figure correspondent au pas de maillage utilisé dans le plan de la particule.

La Figure 33 présente les résultats de nos simulations. On remarque que la valeur du champ coercitif est sensible aux effets de taille finie du pas de maillage dans le plan de la particule. Cependant, la correction maximale n'est que de 2% pour $L=5000\text{\AA}$ avec des pas de maillage de $39.062\text{\AA}$ et $78.125\text{\AA}$ respectivement. On observe une diminution monotone du champ coercitif en fonction de la taille des particules (Figure 33). Dans la limite des petites tailles

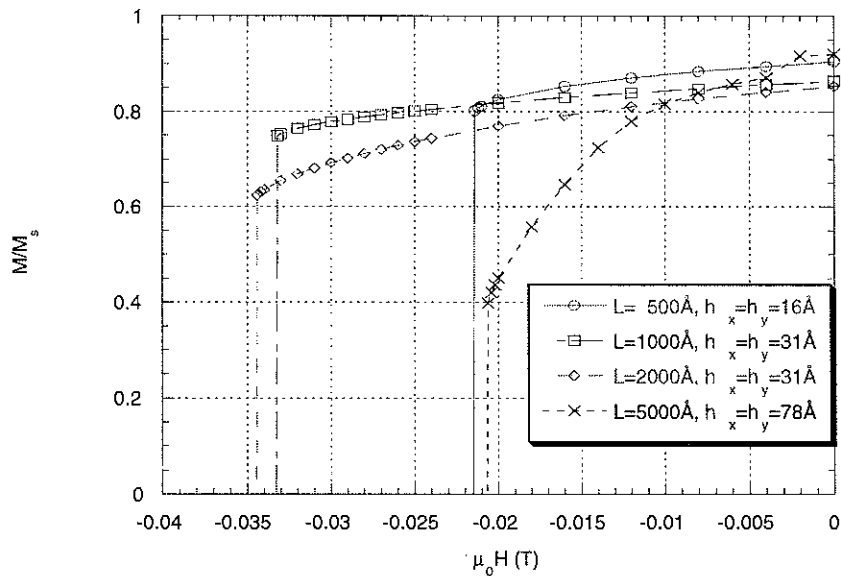


Figure 34 : Courbes d'hystérésis des particules carrées de la série (b) en fonction de la taille latérale ($h_z=29\text{\AA}$)

$L < \delta_N$, les volumes de nucléation ne peuvent plus se développer et le retournement s'approche de plus en plus de la rotation cohérente. Le champ coercitif tend vers le champ d'anisotropie, comme nous l'avons déjà signalé.

Remarquons enfin que la physique devient plus complexe dans le cas de plots à forte épaisseur $e=58\text{\AA}$ du fait de la présence d'un second minimum de l'énergie d'anisotropie pour un moment orienté à 90° par rapport à l'axe de facile aimantation (ou $\varphi = 0$) (voir Figure 34).

3.5.4 Influence de l'épaisseur (e) de la particule

L'analyse de l'influence de l'épaisseur des plots a été réalisée sur des particules carrées de taille $L=2000\text{\AA}$ et pour des épaisseurs de $10\text{\AA}$, $20\text{\AA}$, $40\text{\AA}$ et $60\text{\AA}$. Nous avons simplifié notre approche en oubliant la dépendance de l'anisotropie avec l'épaisseur, observée expérimentalement. La forme de l'anisotropie et son amplitude ont été supposées identiques à celles observées expérimentalement dans des plots de $e=10\text{\AA}$

Bien que les courbes d'aimantation calculées soient pratiquement rectangulaires (Figure 35), un écart à la saturation assez prononcé est observé proche du champ coercitif pour des fortes épaisseurs dû à la présence de plus en plus grands volumes de nucléation. A cette source de réduction du champ coercitif vient s'ajouter l'effet du champ démagnétisant, dont l'amplitude grandit avec l'épaisseur.

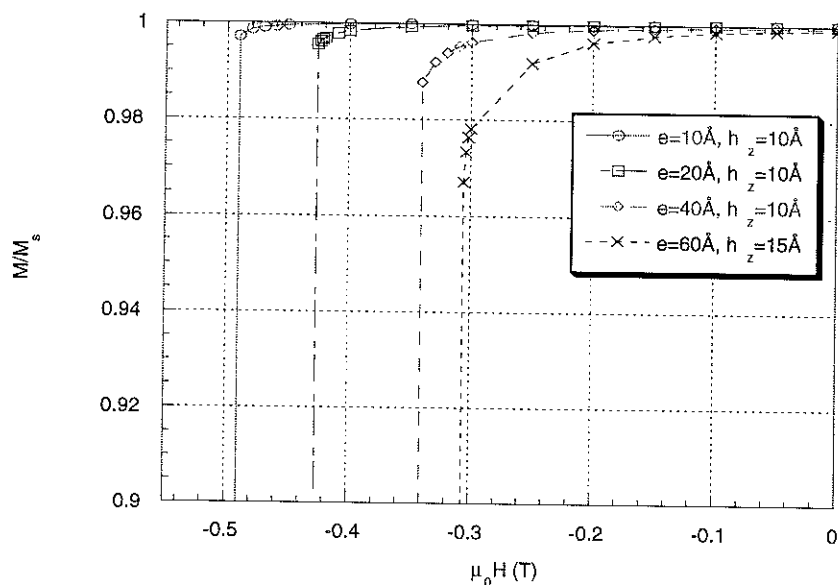


Figure 35 : Influence de l'épaisseur des particules sur les courbes d'aimantation ($h_x=h_y=31\text{\AA}$)

3.6 Dépendance angulaire du champ coercitif - calcul versus expérience

Dans ce paragraphe on examine la dépendance du champ coercitif en fonction de l'orientation du champ appliqué par rapport à l'axe de facile aimantation, indiquée par l'angle θ_H . Deux systèmes ont été étudiés : des particules rondes de diamètre 2000Å et d'épaisseur 10Å ($A_p = 4.81 \cdot 10^5 J/m^3$, $B_p = 0$) et 20Å ($A_p = 2.63 \cdot 10^5 J/m^3$, $B_p = 0$) respectivement.

Pour les particules les plus minces ($e=10\text{\AA}$) le champ coercitif (-0.51T), dans le cas où le champ est orienté selon l'axe de facile aimantation, est proche du champ d'anisotropie (-0.55T). Comme attendu dans ce cas, la dépendance angulaire calculée du champ coercitif (Figure 36) s'approche d'une loi de Stoner-Wohlfarth. Ces résultats ont été confirmés du point de vue expérimental par deux types de mesures : mesures magnétiques sur le VSM et sur le microsquid. Comme le réseau de particules présente une certaine distribution de champs de retournement due à la présence de défauts, on a supposé que les valeurs maximales des champs coercitifs expérimentaux reflètent le retournement de particules les plus parfaites (voir Figure 36).

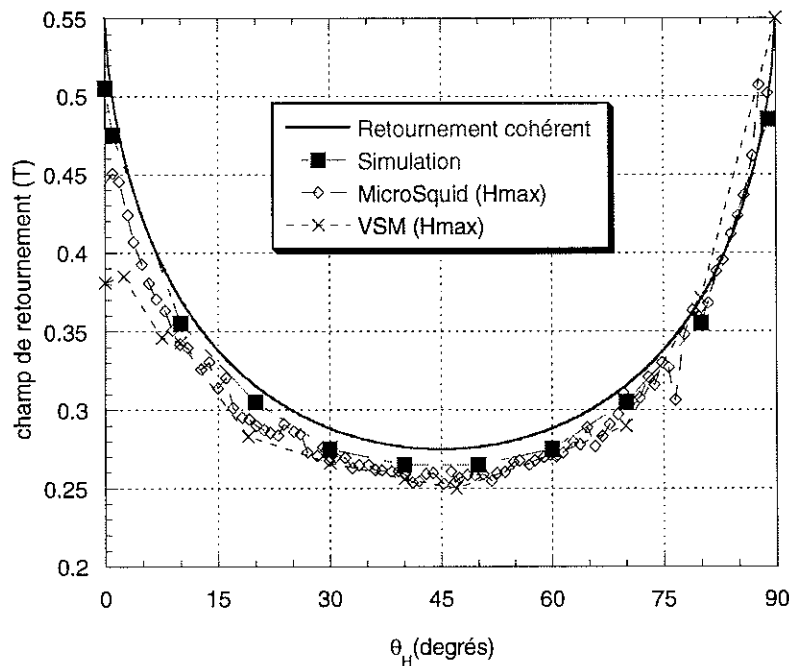


Figure 36 : Dépendance angulaire du champ coercitif pour une particule ronde avec un diamètre de 2000Å et d'épaisseur 10Å

Pour la particule d'épaisseur $20\text{\AA}$ le rapport entre le champ coercitif (-0.25T) et celui d'anisotropie (-0.30T) est plus faible que dans le premier cas et la dépendance angulaire calculée s'écarte plus nettement de la courbe de Stoner-Wohlfarth (Figure 37).

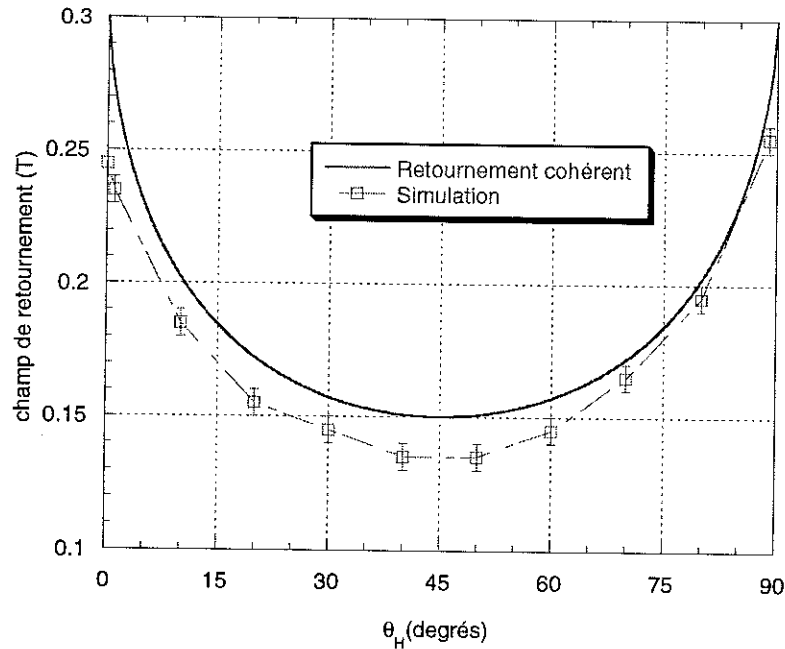


Figure 37 : Dépendance angulaire du champ coercitif pour une particule ronde avec un diamètre de $2000\text{\AA}$ et d'épaisseur $20\text{\AA}$

3.7 Conclusion

Cette étude a montré que pour mener à bien un calcul micromagnétique, il est nécessaire de choisir un pas de maillage inférieur à toutes les longueurs caractéristiques du système magnétique. Nous avons montré qu'il est nécessaire d'incliner le champ extérieur par rapport à l'axe d'anisotropie pour éliminer un artefact de calcul dû au maillage.

Pour les plots d'épaisseur $e = 58\text{\AA}$, le champ coercitif H_c est considérablement réduit par rapport au champ d'anisotropie H_a dû à un mécanisme de nucléation depuis les bords du système ; tandis que pour les plots de faibles épaisseurs, $e = 10\text{\AA}$, le retournement d'aimantation tend à être cohérent.

Notre modèle micromagnétique reproduit avec une bonne précision la dépendance angulaire du champ coercitif pour des plots d'épaisseur $e = 10\text{\AA}$.

4. Matériaux magnétiques nanostructurés

L'un des critères les plus importants qui caractérise les performances d'un aimant permanent est le maximum de l'énergie magnétostatique $(BH)_{\max}$.

Le produit $(BH)_{\max}$ augmente avec le champ coercitif H_c et l'aimantation rémanente M_r , mais, il ne peut pas dépasser $(1/4)\mu_0 M_r^2$ (qui correspond à un cycle idéal de forme rectangulaire) lorsque le champ coercitif est supérieur à la moitié de l'aimantation rémanente et $(1/2)\mu_0(M_r - H_c)H_c < (1/4)\mu_0 M_r^2$ lorsque $H_c < M_r/2$. Pour un aimant hypothétique idéal, à base de α -Fe, le produit $(BH)_{\max}$ devraient atteindre 920 kJ/m³. En dépit de la valeur élevée de l'aimantation spontanée ($\mu_0 M_s = 2.15\text{T}$), la coercitivité du fer est si faible que l'énergie produite ne dépasse pas 1 kJ/m³. En fait, le développement d'aimants à fort $(BH)_{\max}$ nécessite l'utilisation de composés à forte aimantation rémanente présentant également une anisotropie suffisamment forte, source d'un champ coercitif tel que $H_c > M_r/2$.

La recherche d'aimants à forte anisotropie a fait un formidable bond en avant en 1967 lors de la découverte des composés intermétalliques SmCo_5 avec une constante d'anisotropie de 17 MJ/m³, 10³ fois plus forte que celle du α -Fe. D'autres composés comme $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ à rémanence plus forte ($\mu_0 M_s = 1.61\text{T}$), découverts en 1984, permettent de produire une densité d'énergie $(BH)_{\max}$ de l'ordre de 400 kJ/m³ à température ambiante.

Dans le cas des aimants isotropes, la basse rémanence $M_r \equiv M_s/2$ réduit la valeur théorique du produit $(BH)_{\max}$ par un facteur 4. L'élaboration des matériaux nanocristallins structurés, associant deux phases différentes, comme $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\text{Fe}_3\text{B}$ ou $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_3/\text{Fe}$, par trempe sur roue (en anglais "melt spinning") [Coehoorn 90] ou mécanosynthèse (en anglais "mechanical alloying") [Ding 93] permet d'améliorer les propriétés des aimants. Dans ces systèmes, dits "spring-magnets", les avantages caractéristiques des deux phases en présence sont associées : forte rémanence de la phase douce, anisotropie importante et coercitivité de la phase dure.

Forte rémanence et une coercitivité moyenne sont obtenues grâce aux dimensions nanoscopiques des grains et au couplage par échange entre eux. Les recherches actuelles auxquelles le laboratoire participe dans le cadre du projet européen EMERGE (Brite-Euram III), se portent sur l'amélioration des propriétés par l'optimisation des méthodes de préparation et des compositions.

Parallèlement aux études expérimentales, la simulation numérique est devenue un outil indispensable pour explorer les mécanismes pilotant le comportement magnétique de tels systèmes.

Dans l'approche 3D proposée par Fukunaga et Inoue [Fukunaga 92] pour simuler des matériaux nanostructurés monophasiques, la structure magnétique de chaque grain est simplifiée à l'extrême et est représentée par un seul élément du maillage. L'aimantation a une amplitude constante dans chaque bloc, seule son orientation peut changer. Pour estimer l'effet des interactions magnétostatiques et d'échange entre les grains dans des aimants de NdFeB, les auteurs appliquent une technique de calcul du champ démagnétisant qui évalue exactement les interactions entre les plus proches voisins et utilise une approximation dipolaire pour les interactions à longue distance. Leur modèle comporte plusieurs limitations : (i) Toutes les parois de domaine sont confinées sur la surface des grains et il n'est donc pas possible d'observer des mécanismes non-cohérents de renversement d'aimantation à l'intérieur d'un grain. Or, ces mécanismes ne peuvent pas être négligés lorsque la taille des grains dépasse la largeur de paroi δ_B . Par conséquent, les valeurs du champ coercitif ont tendance à être surestimées. (ii) L'expression simplifiée de l'énergie d'échange entre grains voisins, $-J\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2$, ne permet pas de décrire les parois pouvant apparaître à l'interface entre grains voisins de même orientation. Par contre, leur modèle permet de traiter un nombre important de grains et d'obtenir une bonne statistique sur les grandeurs calculées. Les résultats obtenus sont qualitativement en bon accord avec l'expérience. Ils mettent en évidence une augmentation de la rémanence et une diminution du champ coercitif lorsque la taille des grains décroît. Des approches similaires ont été développées par Otani [Otani 90] et El-Hilo [El-Hilo 94].

Rave et Ramstöck [Rave 97] ont étudié la dépendance du champ coercitif avec la taille des grains d'aimants permanents nanocristallins dans une approche 2D. Celle-ci repose sur un calcul précis du champ démagnétisant du type intégral. Leurs travaux ont mis en évidence de fortes différences avec les résultats de Fukunaga. Un maximum de coercitivité est calculé pour des tailles de grains de NdFeB de l'ordre de 5nm.

Une approche différente, utilisant les éléments finis, est proposée par Schrefl [Schrefl 94b] qui modélise des systèmes nanostructurés avec des distributions de tailles de grains et de compositions variables. Plusieurs critiques peuvent être faites [Griffiths 98] : (i) les grains simulés sont mal calibrés, rendant la comparaison des résultats obtenus avec d'autres

approches difficile voire impossible ; (ii) pour les grandes tailles de grains, le pas de maillage utilisé n'est pas suffisamment faible par rapport aux longueurs caractéristiques pour décrire correctement les termes de l'énergie libre.

Shindo [Shindo 97] a tenté d'expliquer les courbes d'aimantation observées dans les couches minces α -Fe/NdFeB dans le cadre d'un modèle 3D ne tenant pas compte du champ démagnétisant. La simulation est en accord qualitatif avec l'expérience seulement dans la limite des couches de faible épaisseur.

4.1 Modèle 1D de Skomski et Coey

4.1.1 Calcul analytique

Ce modèle [Skomski 93] permet d'illustrer le fait qu'une augmentation de l'énergie magnétique est observée dans un matériau magnétique biphasique où les phases douces et dures sont fortement couplées par échange. On se place dans le cadre idéal d'une multicouche où la structure magnétique peut être décrite par un modèle 1D (Figure 38), le système est invariant par translations selon Oy et Oz et présente une anisotropie uniaxiale d'ordre 2. Comme les axes d'anisotropie sont tous dirigés selon l'axe Oz, il est possible de calculer un champ de nucléation défini comme le champ minimal à appliquer pour observer un écart à la saturation. Les paramètres du problème sont les suivants :

phase dure :

$$K_1 = 12 \cdot 10^6 \text{ J / m}^3$$

$$\mu_0 M_{s,h} = 1.55 \text{ T}$$

$$A_h = 1.33 \cdot 10^{-11} \text{ J / m}$$

phase douce :

$$K_1 = 0$$

$$\mu_0 M_{s,s} = 2.15 \text{ T}$$

$$A_s = 2 \cdot 10^{-11} \text{ J / m}$$

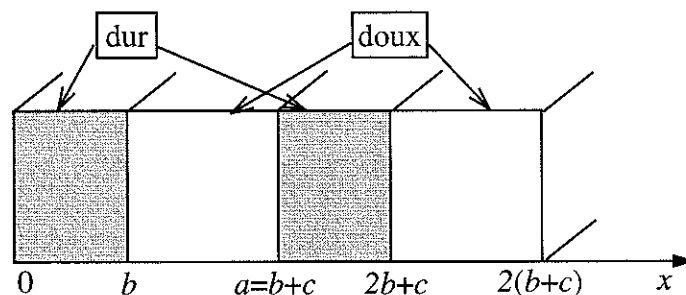


Figure 38 : Système modèle

L'aimantation réside dans le plan yOz pour annuler l'énergie dipolaire. En notant $\omega(x)$ l'inclinaison du vecteur aimantation par rapport à Oz , l'énergie libre du système a la forme de l'expression (2), au début de ce chapitre, et la configuration d'équilibre est la solution de l'équation différentielle (3).

En tenant compte de la condition de passage entre deux milieux d'échange différent, pour une surface placée en $x=0$:

$$\omega|_{0^-} = \omega|_{0^+} \quad (23)$$

$$A(0^-)\partial_x \omega|_{0^-} = A(0^+)\partial_x \omega|_{0^+} \quad (24)$$

La relation (3) devient dans le matériau doux :

$$\partial_x^2 \omega + \alpha^2 \omega = 0 \text{ avec } \alpha^2 = -\frac{\mu_0 M_{s,s} H}{2A_s} \text{ et } H < 0 \quad (25)$$

et dans le matériau dur :

$$\partial_x^2 \omega - q^2 \omega = 0 \text{ avec } q^2 = \frac{K_1}{A_h} + \frac{\mu_0 M_{s,h} H}{2A_h} \quad (26)$$

A part une généralisation liée aux conditions de passage, l'équation (3) correspond à l'équation de Schrödinger pour une particule dans un potentiel $2K_1(\mathbf{r})/\mu_0 M_s(\mathbf{r})$. A la différence du modèle de Kronig-Penney en physique du solide, la solution ne s'exprime pas sous la forme d'une onde de Bloch de vecteur d'onde k , car aucune propriété de conservation n'existe pour le module de ω . La solution n'est qu'une fonction périodique de période $a = b + c$. Le champ de nucléation est défini par la relation implicite :

$$1 = \cos(\alpha c) \operatorname{ch}(qb) + \frac{q^2 - \gamma^2 \alpha^2}{2\gamma\alpha q} \sin(\alpha c) \operatorname{sh}(qb) \text{ avec } \gamma = \frac{A_s}{A_h} \quad (27)$$

En passant aux angles moitiés, les deux conditions suivantes en sont déduites :

$$\gamma\alpha \operatorname{th}\left(\frac{qb}{2}\right) = -q \operatorname{tg}\left(\frac{\alpha c}{2}\right) \text{ et } \gamma\alpha \operatorname{tg}\left(\frac{\alpha c}{2}\right) = q \operatorname{th}\left(\frac{qb}{2}\right) \quad (28)$$

seule la dernière étant physique.

4.1.2 Calcul numérique

Le modèle numérique utilisé pour déterminer les champs de nucléation est celui décrit dans le paragraphe sur les tri-couches. A la différence du modèle analytique, le système magnétique est schématisé par sept couches alternées de matériaux doux et dur. Le pas de maillage choisi varie entre 1 Å et 5 Å, en fonction de l'épaisseur des couches.

Les valeurs du champ de nucléation calculées numériquement sont comparées aux valeurs analytiques du modèle de Skomski et Coey dans le Tableau 3 :

$c(\text{Å})$ épaisseur de la couche douce	$b(\text{Å})$ épaisseur de la couche dure	$h(\text{Å})$ pas de maillage	$\mu_0 H_n(\text{T})$ (analytique)	$\mu_0 H_n(\text{T})$ (numérique)
10	10	1.0	19.4	8.8
10	200	2.5	19.4	14.3
50	50	5.0	3.5	3.4
100	10	2.5	0.85	0.92
100	20	5.0	1.15	1.18
100	40	5.0	1.31	1.31
100	100	5.0	1.34	1.41
100	200	5.0	1.34	1.40
200	10	2.5	0.32	0.34
200	100	5.0	0.43	0.42
200	200	5.0	0.43	0.44

Tableau 3 : Valeurs du champ de nucléation (analytique et numérique) pour différentes épaisseurs des couches douces et dures respectivement

Un bon accord entre les deux approches n'est observé que pour des épaisseurs de matériaux doux de l'ordre de 100 Å voire plus. Pour $b=200\text{Å}$ et $c=200\text{Å}$, après nucléation, une double paroi se forme dans la phase douce, tandis que pour des largeurs c plus faibles ($b=200\text{Å}$ et $c=100\text{Å}$), la double paroi a tendance à pénétrer dans la phase dure. L'origine du désaccord est due à des effets de taille finie de l'épaisseur du système simulé, car dans la limite où $b \rightarrow 0$ et $c \rightarrow 0$, toutes couches deviennent fortement couplées.

Une structure périodique de NdFeB/ α Fe avec des épaisseurs respectives de 20 Å et 100 Å permettrait d'atteindre une densité d'énergie $(BH)_{\max}$ de l'ordre du mégajoule par m³ (rémanence de 2T en principe et un champ coercitif supérieur à 1.15T).

4.2 Modèle de renforcement de l'aimantation rémanente

Le modèle précédent permet de décrire les champs de nucléation dans un matériau nanostructuré biphasique. Par contre, il est impossible de l'utiliser pour illustrer une propriété fondamentale de ce type de matériaux qui est le renforcement de l'aimantation rémanente.

Pour cela, considérons maintenant le cas d'un modèle 1D d'un système doux-dur à anisotropie aléatoire. Le système est constitué d'une alternance selon Ox de couches douce et dures, d'épaisseur $2a$, invariantes dans le plan yOz et qui présentent une anisotropie uniaxiale. Les axes de facile aimantation sont situés dans le plan des couches et dirigés aléatoirement. L'aimantation est supposée rester dans le plan yOz, afin de minimiser les interactions dipolaires et sa direction est repérée par l'angle θ formé avec l'axe Oz.

Deux configurations tests sont proposées (Figure 39), l'une, notée 1, dans laquelle la paroi pénètre dans la phase dure et l'autre (notée 2) dans laquelle la paroi est localisée uniquement dans la phase douce. Pour simplifier, on considère que l'axe de facile aimantation dans la première couche dure est parallèle à l'axe Oz et dans la deuxième, il est incliné d'un angle θ_0 . L'analyse du bilan énergétique sans champ appliqué indique quelle est la configuration favorisée en fonction de l'épaisseur des couches.

Pour la configuration 1, les contributions à l'énergie totale dans le cas la première configuration, pour la zone délimitée par les deux traits verticaux en pointillé, sont :

$$\begin{cases} E_{ex} = A \int (\partial_x \theta)^2 dx \\ E_K = -K \int \cos^2 \theta dx = -K \left(\frac{d\theta}{dx} \right)^{-1} \int_0^{\theta_0/4} 2 \cos^2 \theta d\theta \end{cases} \quad (29)$$

d'où est déduite l'énergie totale :

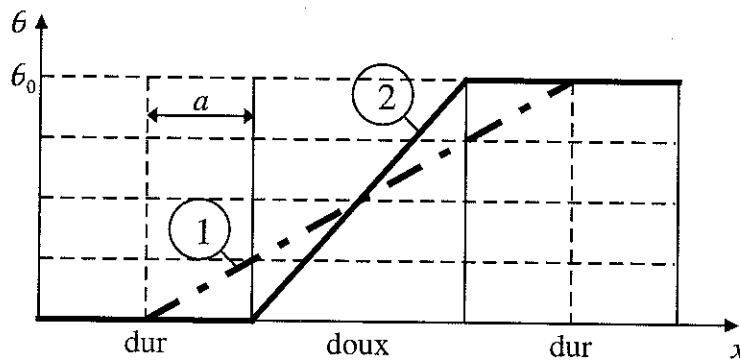


Figure 39 : Configurations de parois tests 1 et 2 (voir texte)

$$E_1 = A \left(\frac{\theta_0}{4a} \right)^2 4a - 2Ka\eta(\theta_0) \quad (30)$$

$$\text{avec } \eta(\theta_0) = \frac{4}{\theta_0} \int_0^{\theta_0/4} \cos^2 \theta d\theta = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sin(\theta_0/2)}{\theta_0/2} \right)$$

Pour la configuration 2, l'énergie totale est donnée par :

$$E_2 = A \left(\frac{\theta_0}{2a} \right)^2 2a - 2Ka \quad (31)$$

Pour les faibles épaisseurs, la configuration 1 est la plus favorable énergétiquement. La transition vers la configuration 2 s'effectue pour une épaisseur critique $2a$ telle que $E_1 = E_2$:

$$2a_c = \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \delta_B \frac{\theta_0}{\sqrt{1-\eta(\theta_0)}} \text{ avec } \theta_0 \in [0, \pi] \quad (32)$$

Comme $\frac{\theta_0}{\sqrt{1-\eta(\theta_0)}} \cong 2$, on a $2a_c \cong 2\delta_B$. En conclusion, si $2a < 2\delta_B$, la paroi préfère pénétrer dans la phase dure, tandis qu'elle y est exclue quand l'épaisseur des couches est grande par rapport à $2\delta_B$.

Pour estimer la valeur de l'aimantation rémanente, on suppose que : (i) la direction φ de facile aimantation d'un grain varie dans $[0, \pi]$ et (ii) qu'aucune corrélation sur l'axe facile n'existe entre les grains voisins. L'aimantation rémanente est obtenue en moyennant la composante de l'aimantation selon Oz sur toutes les orientations possibles de deux grains voisins.

Pour les petits grains, $2a < 2\delta_B$:

$$\frac{M_r}{M_s} = \left\langle \frac{1}{\varphi_2 - \varphi_1} \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} \cos \theta d\theta \right\rangle_{(\varphi_1, \varphi_2) \in [0, \pi]^2} = \beta \cong 0.75 \quad (33)$$

Pour les grains plus gros, $2a \gg 2\delta_B$, l'aimantation rémanente présente deux contributions, celle de la phase douce dont le calcul est analogue au cas précédent et celle de la phase dure où la distribution angulaire de l'aimantation est aléatoire et coïncide avec celle des axes d'anisotropie :

$$\frac{M_r}{M_s} = \frac{\langle \cos \theta \rangle_\theta + \beta}{2} = \frac{1}{\pi} + \frac{\beta}{2} \quad (34)$$

où on a supposé que l'aimantation spontanée des deux phases est la même. La valeur $M_r/M_s = 0.69$ obtenue montre qu'une taille des grains proche de $2\delta_B$ conduit déjà à un renforcement de la rémanence de l'ordre de 10% (sinon $M_r/M_s = 0.5$).

4.3 Matériaux magnétiques durs nanostructurés à base de NdFeB de type "exchange spring magnets"

4.3.1 Résultats expérimentaux

Les échantillons à base de NdFeB, de différentes compositions stoechiométriques, ont été élaborés et étudiés expérimentalement au laboratoire par Stéphane David, dans le cadre de sa thèse, par une technique de trempe par percussion (splat-cooling) [David 98b]. Leur analyse par rayon X et TEM (Figure 40) a montré l'existence de trois phases en proportions différentes : une phase dure de $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ et deux douces de Fe_3B et $\alpha\text{-Fe}$ avec des grains de dimensions de 10 à 30nm.

Les contributions réversibles et irréversibles à la susceptibilité (Figure 49), ainsi que les courbes d'aimantation expérimentales (Figure 41), indiquent la présence d'un mécanisme de renversement en deux étapes : renversement principalement réversible de la phase douce, pour de faibles champs, suivi par le renversement de la phase dure, essentiellement irréversible, à des valeurs de champs plus élevés. La séparation entre ces deux phénomènes s'accroît lorsque la température diminue et affecte l'allure des courbes d'aimantation (Figure 41). Ces variations thermiques ont été modélisées et analysées par S. David et D. Givord [David 98b].

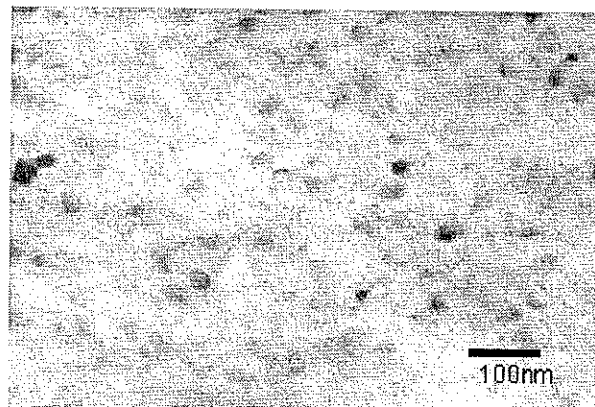


Figure 40 : Image d'une microstructure obtenue par TEM

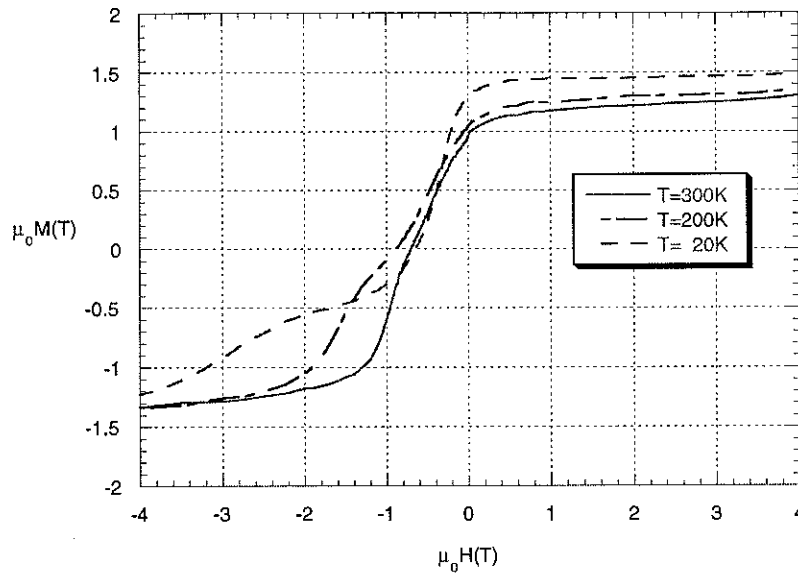


Figure 41 : Dépendance thermique des courbes d'hystérésis mesurées expérimentalement

4.3.2 Système modèle

Les observations ci-dessus sur des systèmes expérimentaux, nous ont servi à concevoir un système modèle utilisé dans nos simulations. Afin d'identifier les paramètres physiques pertinents et les mécanismes impliqués dans le renversement d'aimantation, les résultats des simulations ont ensuite été comparés aux résultats expérimentaux.

Le système modèle que nous avons étudié se présente sous la forme d'un cube constitué d'un empilement de 64 grains cubiques de taille identique, avec des proportions de chaque phase respectant celles observées dans les matériaux réels [David 98a]. L'avantage principal de notre approche, par rapport à une approche de type éléments finis [Fischer 96], est un meilleur contrôle local des erreurs numériques par l'utilisation d'un maillage régulier. Les paramètres physiques utilisés dans les simulations sont ceux déterminés par l'expérience à 300K et résumés dans le Tableau 4.

	K_1 (MJ/m ³)	K_2 (MJ/m ³)	$\mu_0 M_s$ (T)	A (pJ/m)
Nd ₂ Fe ₁₄ B hexagonal	4.5	0.66	1.61	12.5
Fe ₃ B tétragonal	-0.322	0	1.61	12.5
α -Fe cubique	0.046	0.015	2.15	25

Tableau 4 : Paramètres physiques utilisés dans les simulations

Pour les deux premiers composés l'anisotropie magnétocristalline est du type uniaxiale (voir chapitre II), tandis que pour le fer, le cristal présente une symétrie cubique et l'anisotropie s'écrit sous la forme :

$$F_K = \int_V (K_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_3^2\alpha_1^2) + K_2\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2) d^3r \quad (35)$$

où $\alpha_i (i=1,2,3)$ sont les cosinus directeurs du vecteur aimantation par rapport aux axes cristallographiques du cube.

Pour les phases d'anisotropie uniaxiale, les orientations des axes de facile aimantation sont choisies aléatoirement, avec la condition restrictive $\langle \cos(\mathbf{u}_K, 0z) \rangle = 0.5$, caractéristique d'une distribution isotrope par rapport à l'axe Oz.

Le modèle forme un arrangement 3D alterné de 32 grains durs et 32 grains doux (Figure 42). Il respecte approximativement la proportion entre phase dure et phase douce des systèmes réels.

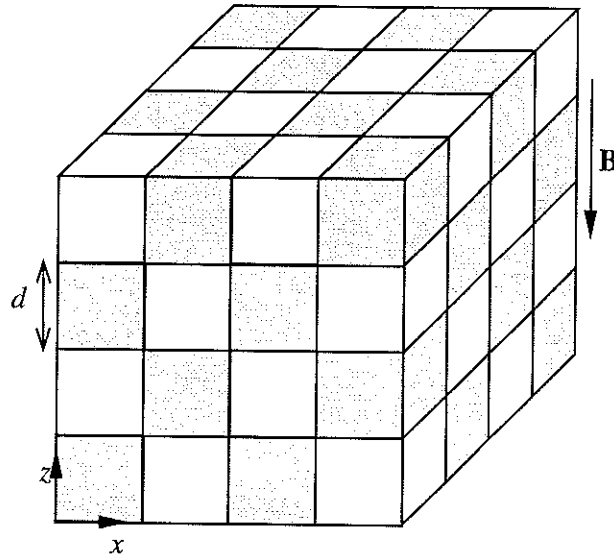


Figure 42 : Système modèle

Dans toutes les simulations que nous allons présenter, la technique très précise MI-H a été utilisée pour les tailles de grains $d < 20\text{nm}$, tandis que pour $d = 20\text{nm}$, seule la technique MI- ϕ a été employée afin de limiter la place mémoire.

4.3.3 Choix du maillage et précision du calcul

Comme précédemment, pour décrire correctement le comportement magnétique du système modélisé, il est nécessaire de choisir un pas de maillage h petit par rapport aux longueurs

caractéristiques $\delta_B \cong 4.6 \text{ nm}$ et respectivement $\delta_{ex} \cong 7.7 \text{ nm}$. Pour observer l'influence du pas de maillage sur la précision du résultat, des simulations ont été effectuées avec différentes valeurs de h dans le cas d'un système avec des grains de 15 nm . On observe (Figure 43) que dans le domaine réversible $[-0.8, 0] \text{ T}$, à l'exception du cas $h=3.75 \text{ nm}$, les courbes d'aimantation restent assez semblables. Par contre, le domaine où intervient le renversement irréversible des grains est très sensible au pas de discrétisation. Nos simulations montrent que les effets de taille du pas de maillage deviennent négligeables lorsque $h \leq 1.875 \text{ nm}$.

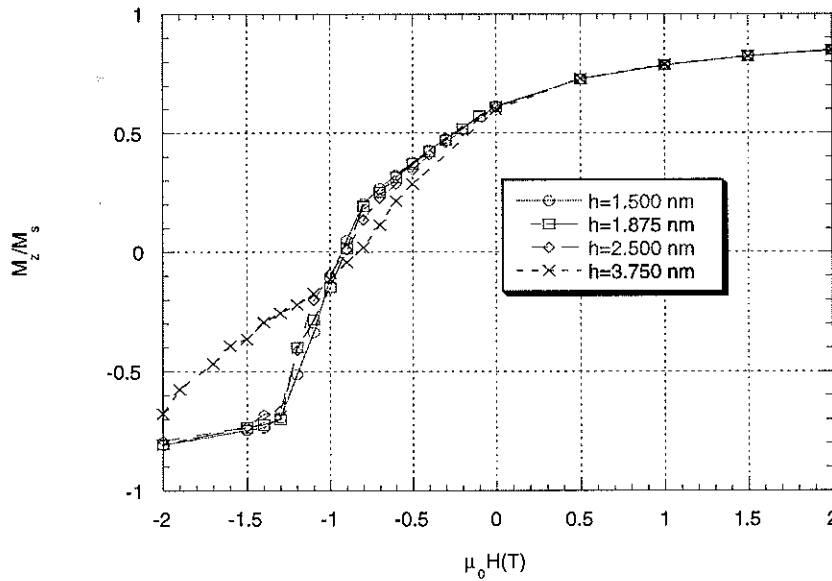


Figure 43 : Influence du pas de maillage sur la précision des résultats

4.3.4 Influence de la taille des grains

Dans ce paragraphe, nous examinons le comportement magnétique de systèmes dont la taille d des grains varie de 5 nm à 20 nm . Les pas de maillage utilisés sont résumés dans le Tableau 5 :

$d(\text{nm})$	5	10	15	20
$h(\text{nm})$	1.25	1.25	1.5	1.25

Tableau 5 : Pas de maillage utilisés dans les simulations

Initialement, le système est porté à la saturation le long de la direction Oz du champ appliqué. Les configurations d'équilibre dont est issue la courbe d'aimantation pour chaque taille de grains (Figure 44) ont été calculées successivement en diminuant le champ de 2 T à -2 T . Sur la Figure 44 est aussi reportée la courbe d'hystérésis obtenue expérimentalement (à 300 K) à titre de comparaison.

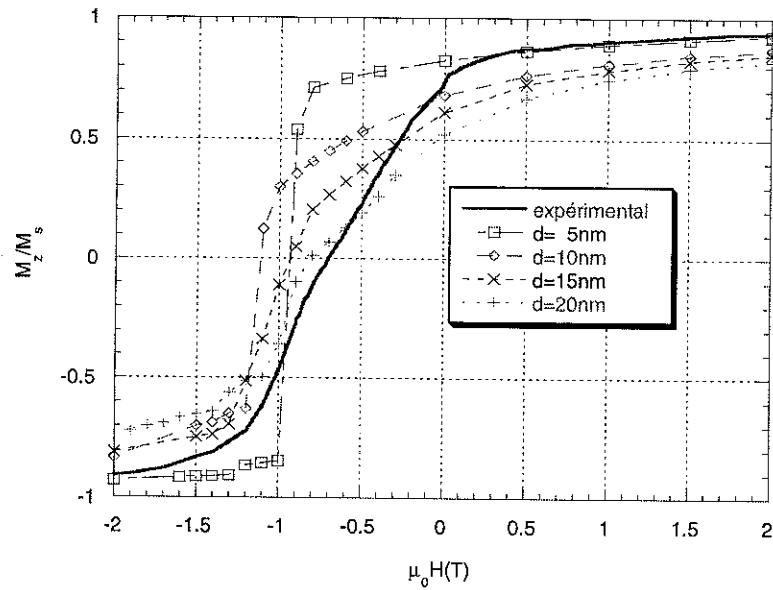


Figure 44 : Influence de la taille des grains sur la forme de la courbe d'hystérésis

On remarque des différences de comportement du renversement d'aimantation en fonction de la taille des grains. Pour des petits grains ($d=5\text{nm}$), les longueurs caractéristiques sont plus grandes ou de l'ordre de la taille des grains, le renversement a alors lieu en une seule étape. Comme les grains sont couplés par échange sur toute leur largeur, le renversement de la phase douce entraîne celui de la phase dure. Lorsque la taille des grains devient plus grande que les

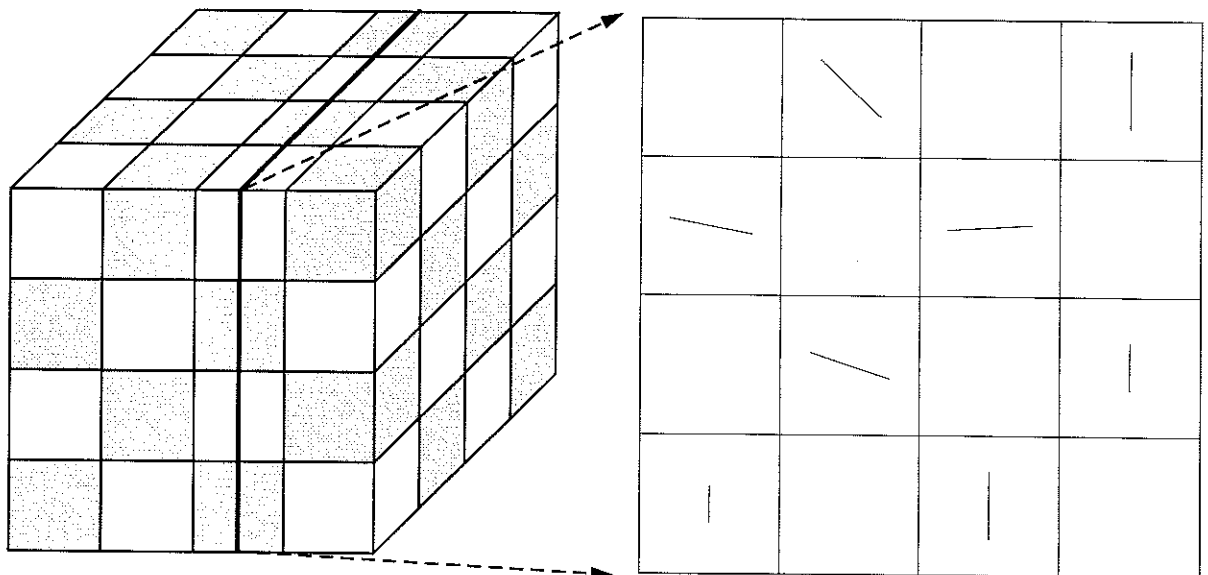


Figure 45 : Projections des directions des axes d'anisotropie des grains durs sur le plan de coupe des configurations présentées

longueurs caractéristiques, les renversements d'aimantation de deux phases tendent à se découpler. Cela nous conduit à observer deux régimes sur les courbes d'hystérésis, surtout pour $d=15$ et 20nm .

Pour confirmer ces comportements, nous avons observé les configurations d'aimantation calculées pour les tailles de grains $d=5$ et $d=15\text{nm}$ dans un plan de coupe. La Figure 45 indique la position de la coupe et les projections des directions des axes d'anisotropie des grains durs dans le plan considéré.

En comparant les états rémanents des deux systèmes (Figure 46a et Figure 47a), on observe une déviation plus importante des moments magnétiques par rapport à la direction verticale du champ appliqué dans le cas de grains de 15nm . Elle induit, par conséquent, une diminution de l'aimantation rémanente. Pour les petites tailles, les grains sont fortement couplés par échange, sur des distances beaucoup plus importantes par rapport à leur taille. L'aimantation reste, par conséquent, fortement corrélée sur l'ensemble du système car l'orientation des moments selon les axes d'anisotropie coûte plus cher en énergie que dans le cas de gros grains.

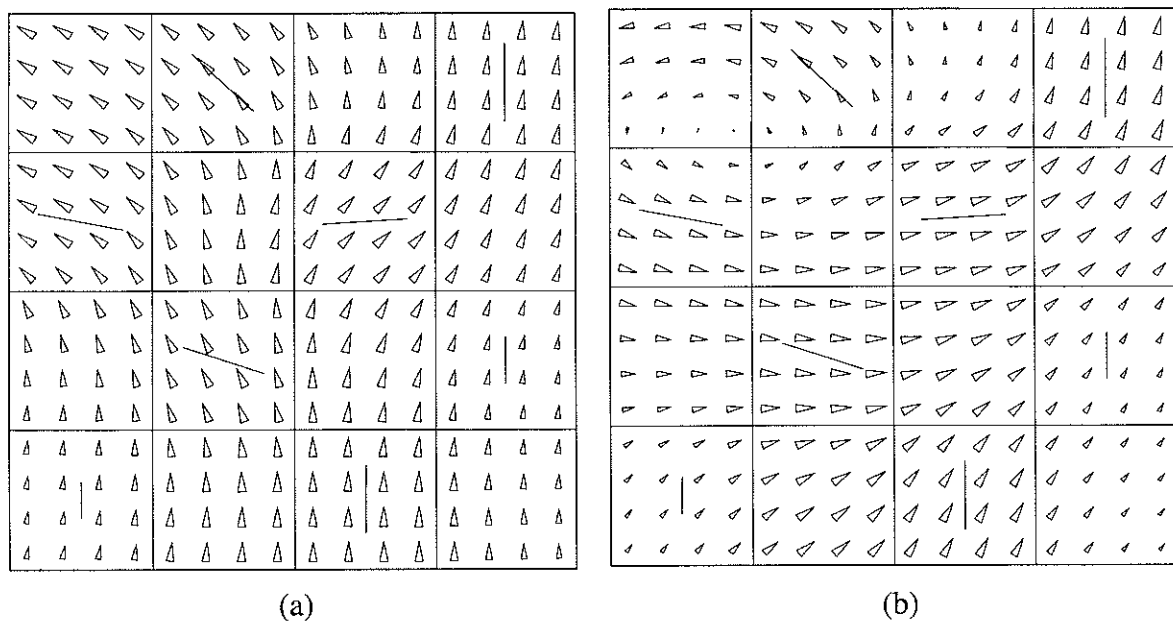


Figure 46 : Configurations d'équilibre dans le cas des grains de 5nm pour un champ appliqué de (a) 0T et (b) -0.9T juste avant le retournement

Pour le système avec $d=5\text{nm}$, l'application d'un faible champ négatif induit une rotation réversible de l'ensemble des grains (Figure 46b) et par la suite un renversement irréversible de la phase dure en même temps que la phase douce.

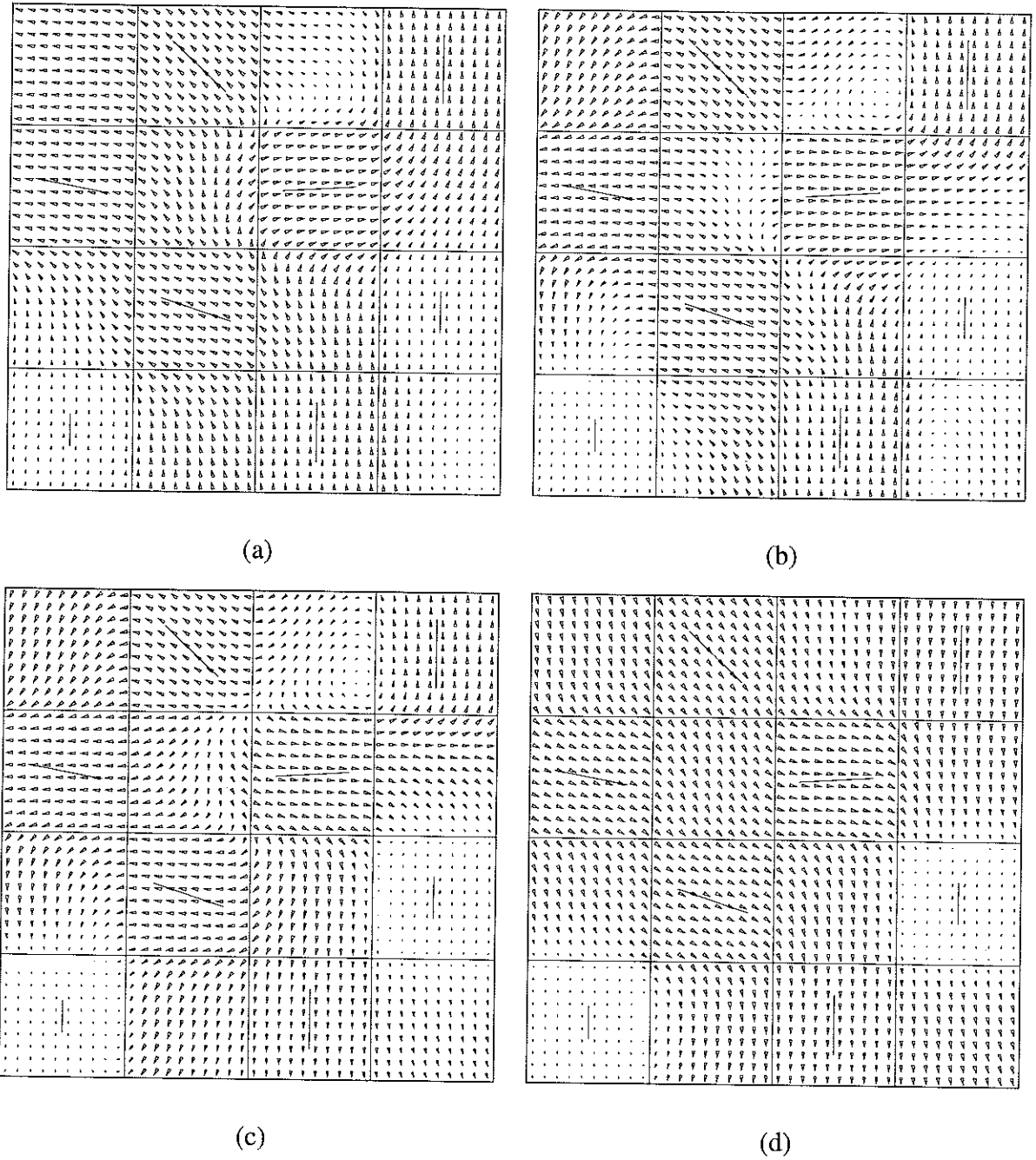


Figure 47 : Configurations d'équilibre dans le cas des grains de 15nm pour un champ appliqué de (a) 0T, (b) -0.8T, (c) -1T et (d) -1.3T

Pour des tailles de grains de 15nm, le champ inverse fait tourner l'aimantation de la phase douce et crée des parois mais n'entraîne qu'une faible proportion de l'aimantation de phase dure (Figure 47b). En augmentant la valeur du champ appliqué, les parois pénètrent de plus en plus dans les grains durs et gouvernent le retournement de l'aimantation des grains durs (Figure 47c,d).

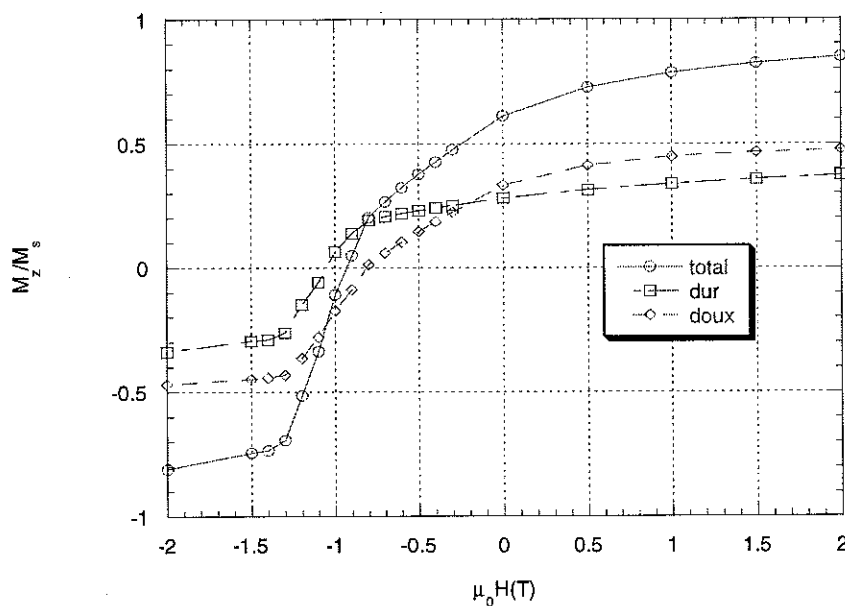


Figure 48 : Contributions des grains durs et doux à la courbe d'hystérésis pour un système avec des grains de 15nm

Le comportement du système avec $d=15\text{nm}$, décrit ci-dessus, est illustré par les contributions séparées des grains durs et doux à l'aimantation totale (Figure 48). Le renversement de la phase douce débute bien avant celui de la phase dure, tandis que la plus grande variation de l'aimantation totale correspond au champ pour lequel la phase dure se renverse brutalement.

Les évolutions des susceptibilités de la phase dure (χ_h) et de la phase douce (χ_d) en fonction du champ ont été déduites des calculs. De plus, la contribution réversible (χ_{rev}) à la susceptibilité totale a été déterminée par une méthode qui mime le procédé expérimental, en évaluant la pente de l'aimantation pour de petits retours en champ (10mT) le long du cycle majeur d'aimantation. La quantité $\chi_{tot} - \chi_{rev}$, associée principalement aux phénomènes irréversibles a été aussi calculée.

La Figure 50 présente les différentes contributions à la susceptibilité totale obtenues par simulation sur le système avec $d=15\text{nm}$. Pour calculer la susceptibilité totale, χ_{tot} , comme la dérivée de l'aimantation par rapport au champ appliqué, il a été nécessaire de lisser la courbe d'aimantation afin de réduire au minimum le bruit numérique. On peut remarquer que (i) le maximum de la susceptibilité irréversible, qui définit le champ coercitif, est situé vers -1.1T ; (ii) le maximum de la contribution de la phase dure est situé à la même valeur du champ, mais son amplitude est plus faible. La majorité des moments de la phase dure et aussi approximativement la moitié des moments de la phase douce se renversent autour de cette

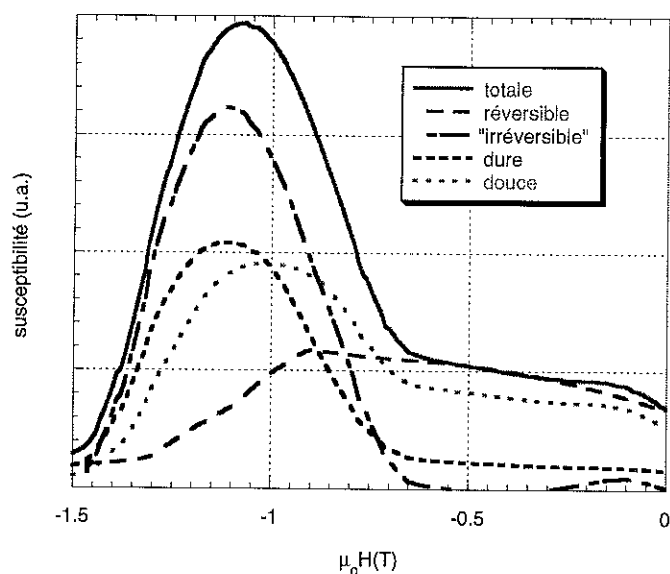


Figure 50 : Différentes contributions à la susceptibilité simulée

valeur. Cela montre que les moments de la phase douce sont fortement couplés par échange aux moments de la phase dure et suivent leur rotation.

En comparant ces résultats avec les susceptibilités mesurées expérimentalement (Figure 49), on remarque que : (i) le maximum de la susceptibilité irréversible est localisé à une valeur du champ légèrement plus faible (-1T) que pour la courbe simulée ; (ii) le rapport entre les contributions réversible et irréversible obtenues par simulation est plus petit que celui expérimental, ce qui signifie qu'une proportion plus grande des moments magnétiques se retourne de manière réversible dans les systèmes réels que dans le modèle. Par conséquent, le

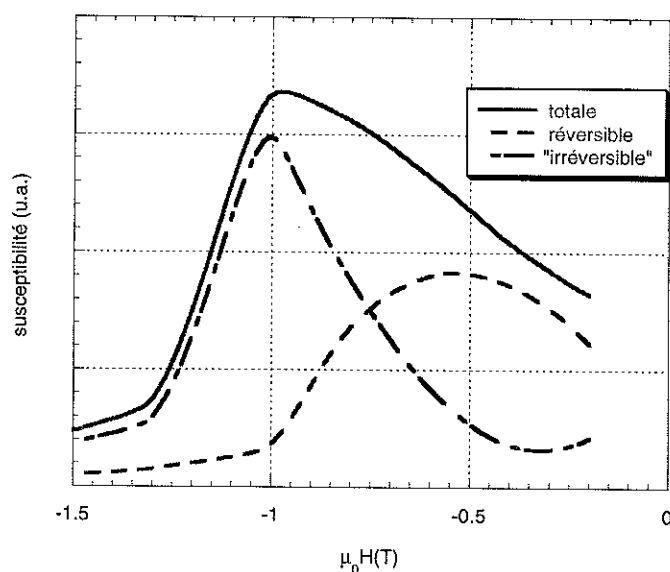


Figure 49 : Différentes contributions à la susceptibilité mesurée expérimentalement

couplage par échange est plus fort dans le système modèle que dans le matériau réel.

Toutes ces remarques conduisent à la conclusion qu'une diminution de la taille des grains dans les systèmes réels est nécessaire pour améliorer leurs propriétés, principalement la coercitivité.

4.3.5 Influence du champ démagnétisant

Les observations expérimentales sur des systèmes nanostructurés et l'analyse des variations thermiques du volume d'activation [David 98b] ont montré que, dans les aimants "spring-

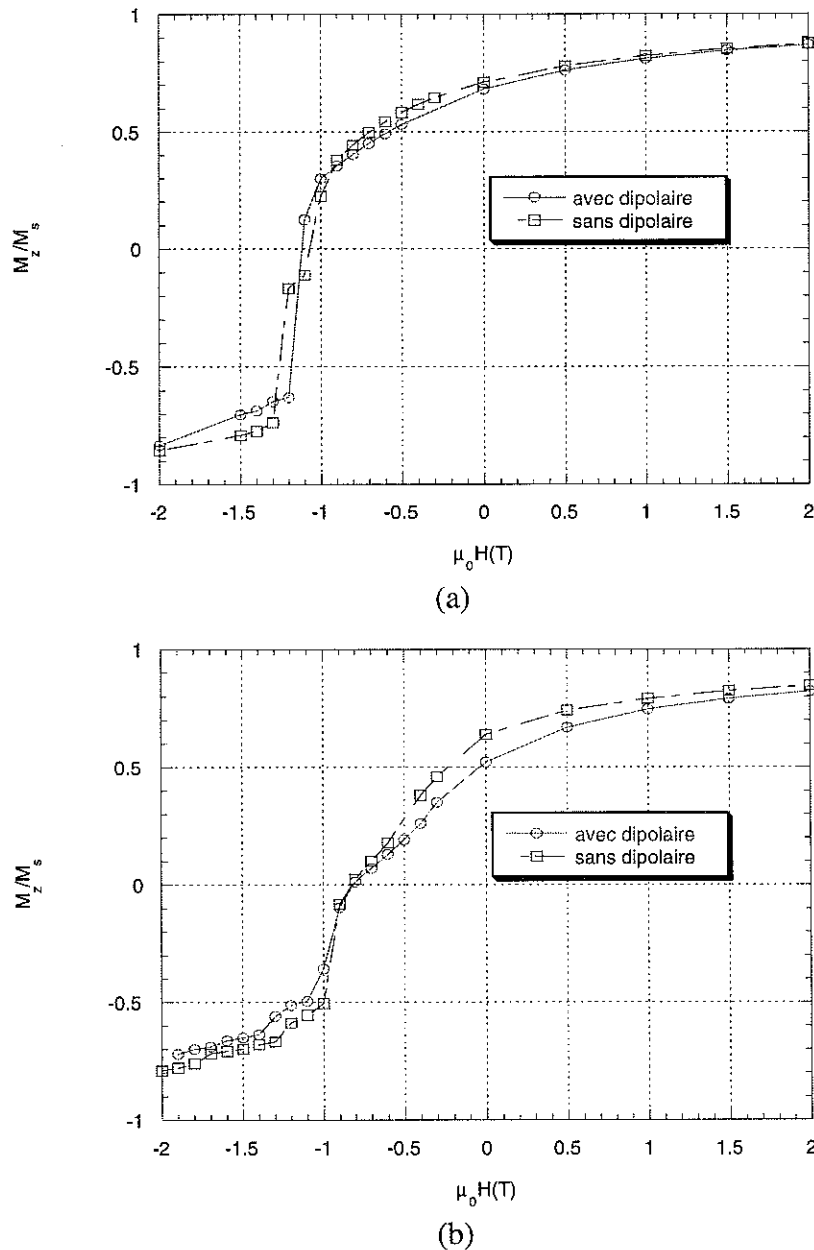


Figure 51 : Influence des interactions dipolaires sur le renversement d'aimantation pour des tailles de grains de (a) 10nm et (b) 20nm

magnets”, les interactions de nature dipolaire sont faibles et décroissent quand la taille des grains diminue.

Pour étudier l’influence des interactions dipolaires sur les configurations d’équilibre, deux séries de simulations ont été effectuées, l’une tenant compte du champ démagnétisant et l’autre en le négligeant.

La comparaison des courbes d’aimantation pour différentes tailles de grains (Figure 51) montre une faible influence du champ démagnétisant au niveau macroscopique. Une analyse quantitative indique une augmentation de la rémanence en absence du champ démagnétisant de 4.2% pour une taille de grains de 10nm, de 8.5% pour 15nm et de 20% pour 20nm.

Pour comprendre ce phénomène, on se propose d’examiner localement l’écart angulaire entre deux configurations en champ nul pour une taille de grains donnée, avec et sans champ démagnétisant. La Figure 52 présente les déviations observées pour des grains de 10nm et 20nm pour le plan de coupure indiqué dans la Figure 45. On remarque que les déviations sont localisées dans les grains doux et sont plus grandes dans le cas de grains de 20nm. La Figure 52b confirme que le renversement d’aimantation pour le système $d=20\text{nm}$ s’initie dans les grains doux situés en surface, avant de se propager dans tout le système.

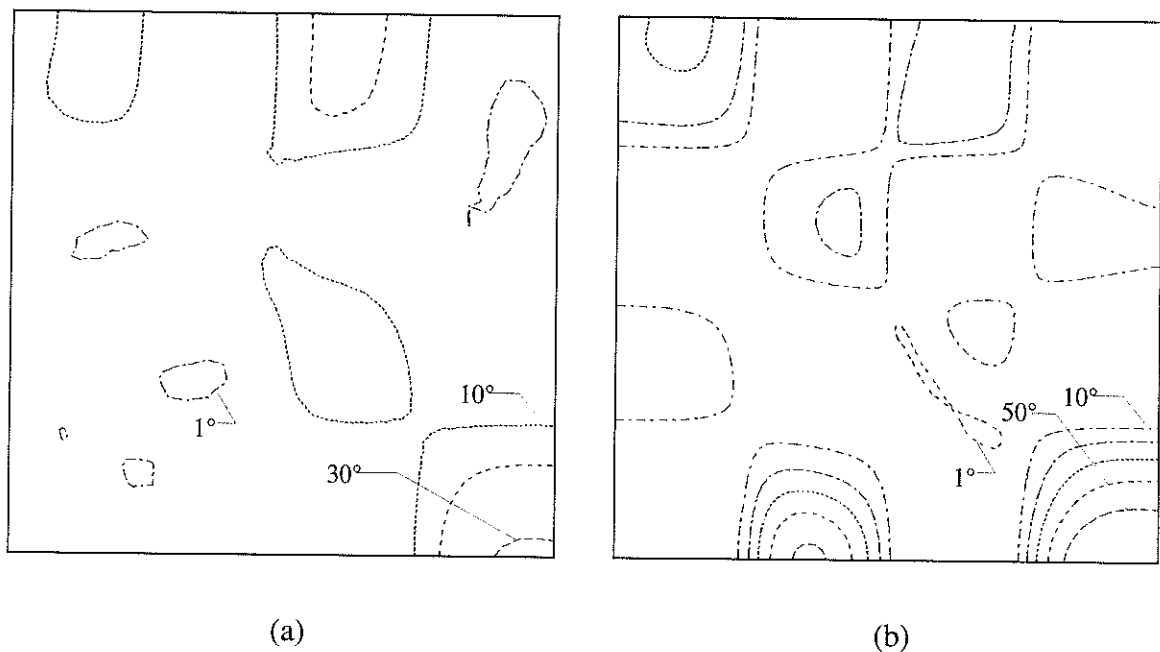


Figure 52 : Influence du champ démagnétisant sur les configurations en champ nul pour (a) $d=10\text{nm}$ et (b) $d=20\text{nm}$: isovaleurs de l’angle de déviation

4.3.6 Influence de la nature de la phase douce sur les propriétés magnétiques d'un aimant du type spring-magnet

Une méthode pour augmenter la rémanence des systèmes précédemment étudiés est de remplacer la phase douce Fe_3B par une phase $\alpha\text{-Fe}$ dont l'aimantation à saturation est plus importante. Dans cette phase, le couplage par échange entre atomes de Fe (Tableau 4) est plus fort que dans la phase Fe_3B .

Pour examiner l'influence d'une aimantation à la saturation plus importante de la phase douce et en même temps d'un couplage par échange plus fort, on a remplacé la phase douce du système précédent par du $\alpha\text{-Fe}$.

Les courbes d'aimantation obtenues pour des simulations avec des tailles de grains de $d=10\text{nm}$ (Figure 53) et 15nm (Figure 54), montrent, comme prévu, un renforcement de l'aimantation rémanente par rapport aux valeurs obtenues avec une phase douce du type Fe_3B et parallèlement une diminution de la coercitivité (Tableau 6).

	M_r/M_s		$\mu_0 M_r (\text{T})$		$\mu_0 H_c (\text{T})$		$(BH)_{\max} (\text{MJ/m}^3)$	
phase douce/ d	10nm	15nm	10nm	15nm	10nm	15nm	10nm	15nm
Fe_3B	0.682	0.613	1.10	0.99	1.15	1.1	0.15	0.11
$\alpha\text{-Fe}$	0.716	0.638	1.35	1.20	0.8	0.65	0.22	0.16

Tableau 6 : Valeurs de l'aimantation rémanente, du champ coercitif et du produit $(BH)_{\max}$ obtenues par simulation en fonction du type de la phase douce et de la taille de grains

Nos simulations prédisent finalement que les performances énergétiques des systèmes spring-magnets peuvent être améliorées en diminuant la taille des grains jusqu'à 10nm dans l'hypothèse où la phase Fe_3B tend à être remplacée par la phase $\alpha\text{-Fe}$.

4.4 Conclusion

Deux types de comportement ont été observés pour le retournement d'aimantation en fonction de la taille des grains. Pour $d = 5\text{nm}$, le renversement irréversible de la phase dure se passe en même temps que celui de la phase douce, tandis qu'un découplage des deux phases est observé pour $d = 15\text{nm}$ et $d = 20\text{nm}$.

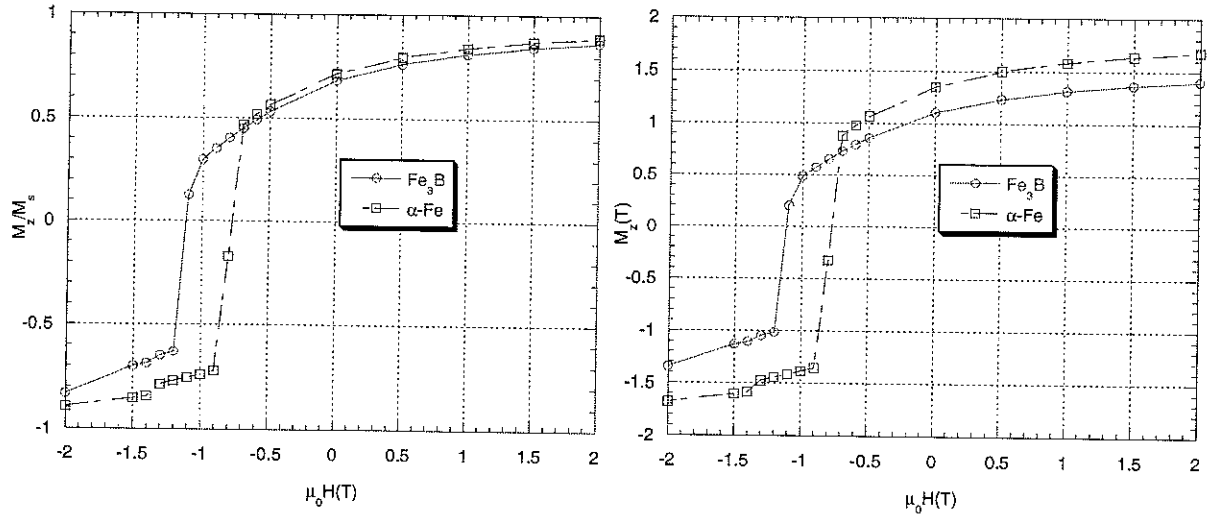


Figure 53 : Influence de la nature de la phase douce pour une taille de grains de 10nm

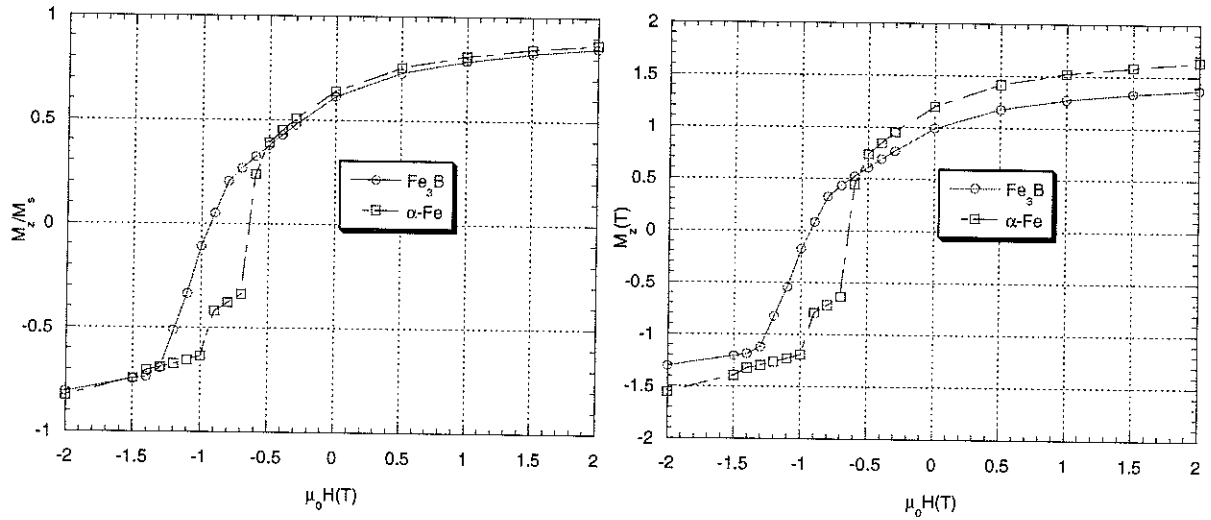


Figure 54 : Influence de la nature de la phase douce pour une taille de grains de 15nm

Les simulations faites sur le système modèle avec $d=15\text{nm}$ ont mis en évidence que le rapport des contributions réversible et irréversible est plus petit que la valeur obtenue expérimentalement, ce qui signifie qu'un plus grand nombre de moments magnétiques dans le système réel tend à se renverser de manière réversible.

Nos simulations tendent à montrer qu'une amélioration des performances des matériaux nanostructurés réels est possible en diminuant la taille des grains et en réduisant la proportion de la phase Fe_3B par rapport à $\alpha\text{-Fe}$.

Conclusion

Conclusion

Au cours de cette thèse nous avons développé notre outil de simulation micromagnétique dans l'approximation des milieux continus.

La méthode de minimisation utilisée repose sur l'intégration des équations de précession-dissipation de Landau-Lifshitz-Gilbert. Nous avons vu que le champ total ressenti localement par l'aimantation se compose de trois termes locaux, qui sont les champs d'échange, d'anisotropie et Zeeman, et d'un terme issu d'interactions à longue distance, qui est le champ démagnétisant. Le champ d'échange a été estimé dans l'approximation des différences finies. Deux techniques de calcul du champ démagnétisant, reposant sur la méthode des différences finies et une méthode intégrale ont été présentées.

Nous avons montré qu'il était essentiel en méthodes numériques de mener des études de stabilité pour éliminer toute source d'erreur grave lors de l'intégration des équations LLG.

Dans les tri-couches ferrimagnétiques $\text{SmCo}/\text{GdCo}/\text{SmCo}'$, le renversement d'aimantation débute par un mécanisme de nucléation directement dans la phase dure SmCo . Ce processus est pratiquement impossible à aborder par la simulation. Par contre, pour le système ferromagnétique $\text{SmCo}/\text{ZrCo}/\text{SmCo}'$, le mécanisme de renversement de la phase dure est dû à la propagation d'une paroi depuis la phase douce. Ce processus est très bien décrit par un modèle micromagnétique. Les valeurs du champ de nucléation et du champ de retournement de la couche dure la moins dure sont en bon accord avec les mesures expérimentales pour toutes les épaisseurs de la couche douce. Par contre, notre modèle 1D est incapable de décrire l'évolution du champ de retournement de la couche dure la plus dure avec l'épaisseur.

Du point de vue des méthodes numériques, cette étude nous a permis de valider les résultats de continuité de la section 3 du chapitre III et a montré l'intérêt d'une utilisation conjointe des calculs numériques et analytiques pour déterminer les champs critiques, dans la limite des couches de grande épaisseur.

L'étude menée sur les plots de fer épitaxié sur du tungstène $\text{Fe}(110)/\text{W}(110)$ a été de décrire leur distribution d'aimantation et d'estimer leur champ de retournement. Du point de vue numérique, nous avons montré qu'un pas de maillage de $50\text{\AA}$ inférieur à $\lambda_{ex} = 80\text{\AA}$ était nécessaire pour décrire correctement le comportement magnétique du modèle. Nous avons montré que les distributions d'aimantation calculées dans les plots carrés restent symétriques

lorsque le champ appliqué est parfaitement aligné avec l'axe d'anisotropie. Elles présentent, par contre, une brisure de symétrie dès que le champ est légèrement incliné de $0,1^\circ$. Seules ces dernières ont un domaine d'existence, car dans l'expérience, le champ ne peut jamais être orienté aussi précisément.

Du point de vue de la physique, la modélisation faite sur des plots carrés de $L = 5000\text{\AA}$ de côté et de $e = 58\text{\AA}$ d'épaisseur montre que le renversement d'aimantation est gouverné par un mécanisme de nucléation sur les bords du système. Là apparaissent quatre volumes de nucléation en champ nul, disposés symétriquement, dont les dimensions sont comparables à λ_n . En appliquant un champ inverse, on observe une brisure de symétrie de la distribution d'aimantation et le nombre de volumes de nucléation se réduit à deux. Le champ coercitif calculé est $\mu_0 H_c = 20.7\text{mT}$ proche de la valeur obtenue expérimentalement $\mu_0 h_c = 14\text{mT}$. Sa valeur est considérablement réduite par rapport au champ d'anisotropie 55mT due à la non-uniformité de la distribution d'aimantation et à l'effet du champ démagnétisant.

L'étude faite sur des plots carrés et ronds de faibles épaisseurs $e = 10\text{\AA}$ montre que leur comportement magnétique tend vers celui décrit dans le modèle de Stoner-Wohlfarth. Un bon accord entre l'expérience et la simulation a été observé dans l'étude de la dépendance angulaire du champ coercitif d'une particule ronde de diamètre $2000\text{\AA}$ et d'épaisseur $10\text{\AA}$.

L'étude réalisée sur les matériaux nanostructurés dans le cadre d'un modèle très simplifié nous a permis d'identifier les paramètres pertinents et les mécanismes impliqués dans le renversement d'aimantation. La précision de nos calculs nous a permis de déduire les contributions de chacune des phases à la susceptibilité totale. La contribution réversible à la susceptibilité totale a été déterminée par une approche qui mime le procédé expérimental. La comparaison de nos résultats avec ceux de l'expérience tend à prouver qu'une amélioration des performances des systèmes nanostructurés réels est possible en diminuant la taille des grains.

Nous avons également examiné l'influence de la nature de la phase douce sur les propriétés des aimants du type spring-magnets. Un renforcement de la rémanence de l'ordre de 30% pour des grains de 10nm a été observé dans nos simulations en remplaçant la phase Fe_3B par la phase $\alpha\text{-Fe}$. Bien que le champ coercitif ressent une réduction du même ordre de grandeur, les performances énergétiques sont améliorées.

Liste des publications issues de ce travail

J.C. Toussaint, **B. Kevorkian**, D. Givord, M.F. Rossignol, "Micromagnetic modelling of magnetization reversal in permanent magnets", Proceedings of the 9th International Symposium Magnetic Anisotropy and Coercivity in Rare-Earth Transition Metal Alloys, 2 (1996) 59-68.

B. Kevorkian, J.C. Toussaint, O. Fruchart, J.P. Nozieres, F. Rousseaux, D. Decanini, F. Carcenac, "Modélisation du renversement d'aimantation dans des plots epitaxies submicroniques", Actes du 5eme Colloque Louis Néel Couches Minces et Nanostructures Magnétiques (1997) II-P7.

O. Fruchart, J.P. Nozieres, **B. Kevorkian**, J.C. Toussaint, F. Rousseaux, D. Decanini, F. Carcenac, "Coercivité renforcée dans des plots submicroniques epitaxiés ultraminces à aimantation planaire", Actes du 5eme Colloque Louis Néel Couches Minces et Nanostructures Magnétiques (1997) II-2.

J.C. Toussaint, **B. Kevorkian**, "Simulation des systèmes nanostructurés", Actes de l'école franco-roumaine de magnétisme "Simulation des systèmes nanostructurés", Oradea, Roumanie (1997).

O. Fruchart, J.P. Nozieres, **B. Kevorkian**, J.C. Toussaint, D. Givord, F. Rousseaux, D. Decanini, F. Carcenac, "High coercivity in ultra-thin epitaxial micrometer-sized particles with in-plane magnetization: experiment and numerical simulation", Physical Review B, **57**(4) (1998) 2596.

S. David, **B. Kevorkian**, J.C. Toussaint, D. Givord, "A computational micromagnetic investigation of magnetization reversal in Nd-Fe-B nanocomposite magnets", Journal of Applied Physics **83**(11) (1998) 6506.

J.C. Toussaint, **B. Kevorkian**, O. Fruchart, J. Voiron, "Magnetization reversal in thin films and small particles", papier invité à paraître dans Proceedings of the 10th International Symposium Magnetic Anisotropy and Coercivity in Rare-Earth Transition Metal Alloys, (1998).

Références

- [Abraham 60] C. Abraham, A. Aharoni, Phys. Rev. **120**(5) (1960) 1576.
- [Aharoni 58] A. Aharoni, S. Shtrikman, Phys. Rev. **109**(5) (1958) 1522.
- [Aharoni 60] A. Aharoni, Phys. Rev. **119**(1) (1960) 127.
- [Aharoni 63] A. Aharoni, Phys. Rev. **131**(4) (1963) 1478.
- [Aharoni 86a] A. Aharoni, IEEE Trans. Magn. **22**(5) (1986) 478.
- [Aharoni 86b] A. Aharoni, J. P. Jakubovics, Phil. Mag. B **53** (1986) 133.
- [Aharoni 88] A. Aharoni, J. P. Jakubovics, IEEE Trans. Magn. **24**(2) (1988) 1892.
- [Aharoni 91a] A. Aharoni, IEEE Trans. Magn. **27**(4) (1991) 3539.
- [Aharoni 91b] A. Aharoni, IEEE Trans. Magn. **27**(6) (1991) 4793.
- [Alameda 92] J. M. Alameda, L. T. Baczewski, B. Dieny, D. Givord, J. M. B. Ndjaka, J. P. Nozières, J. J. Préjean, J. P. Rebouillat, F. H. Salas, J. Magn. Magn. Mat. **104-107** (1992) 1813.
- [Asselin 86] P. Asselin, A. A. Thiele, IEEE Trans. Magn. **22**(6) (1986) 1876.
- [Berkov 91] D. V. Berkov, J. Magn. Magn. Mat. **99** (1991) L7.
- [Berkov 93] D. V. Berkov, K. Ramstöck, A. Hubert, Phys. Stat. Sol. (a) **137** (1993) 207.
- [Bertram 71] H. N. Bertram, J. de Physique, **32** (1971) 684.
- [Blue 91] J. L. Blue, M. R. Scheinfein, IEEE Trans. Magn. **27**(6) (1991) 4778.
- [Bossavit 93] A. Bossavit, "Electromagnétisme en vue de la modélisation", Springer Verlag (1993).
- [Brown 57] W. F. Brown Jr., Phys. Rev. **105**(5) (1957) 1479.
- [Brown 62] W. F. Brown Jr., J. Phys. Soc. Japan, Suppl B-I to **17** (1962) 540.
- [Brown 63] W. F. Brown Jr., "Micromagnetics", Interscience Publishers, John Wiley & Sons, New York-London (1963).

- [Chen 93] W. Chen, D. R. Fredkin, T. R. Koehler, IEEE Trans. Magn. **29**(3) (1993) 2124.
- [Coehoorn 90] R. Coehoorn, C. de Waard, J. Magn. Magn. Mat. **83** (1990) 228.
- [Cooley 65] J.W. Cooley, J.W. Tukey, Mathematics of Computation, **19**, (1965) 297.
- [David 98a] S. David, B. Kevorkian, J.C. Toussaint, D. Givord, J. Appl. Phys., **83**(11) (1998) 6506.
- [David 98b] S. David, D. Givord, à paraître dans J. Alloys Compd., (1998).
- [Della Torre 84] E. Della Torre, IEEE Trans. Magn. **20** (1984) 1906.
- [Della Torre 86] E. Della Torre, IEEE Trans. Magn. **22**(5) (1986) 484.
- [Del Vecchio 89] R. M. Del Vecchio, R. Scott Hebbert, L. J. Schwee, IEEE Trans. Magn. **25**(5) (1989) 4322.
- [Dieny 90] B. Dieny, D. Givord, J. M. B. Ndjaka, J. Appl. Phys. **67**(9) (1990) 5677.
- [Dieny 91] B. Dieny, D. Givord, J. M. B. Ndjaka, J. Magn. Magn. Mat. **93** (1991) 503.
- [Ding 93] J. Ding, Y. Liu, P. G. McCormick, R. Street, J. Magn. Magn. Mat. **123** (1993) L239.
- [El-Hilo 94] M. El-Hilo, K. O'Grady, R. W. Chantrell, in Proc of 13th Int. Workshop on RE Magnets and their Applications (1994) 447.
- [Euvrard 94] D. Euvrard, "Résolution numérique des équations aux dérivées partielles de la physique, de la mécanique et des sciences de l'ingénieur", Masson, Paris (1994).
- [Fischer 96] R. Fischer, T. Schrefl, H. Kronmüller, J. Fidler, J. Magn. Magn. Mat. **153** (1996) 35.
- [Frei 57] E. H. Frei, S. Shtrikman, D. Treves, Phys. Rev. **106**(3) (1957) 446.
- [Friedel 63] J. Friedel, "Electron Microscopy and Strength of Crystals", Interscience, New York (1963).

- [Frigo 97] M. Frigo, S. G. Johnston, "The Fastest Fourier Transform in the West", Rapport technique de MIT Laboratory for Computer Science, Massachusetts Institute of Technology (1997).
- [Fruchart 97] O. Fruchart, J.-P. Nozières, D. Givord, J. Magn. Magn. Mat. **165** (1997) 508.
- [Fruchart 98a] O. Fruchart, J.-P. Nozières, B. Kevorkian, J.-C. Toussaint, D. Givord, F. Rousseaux, D. Decanini, F. Carcenac, Phys. Rev. B **57**(4) (1998) 2596.
- [Fruchart 98b] O. Fruchart, Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier, Grenoble (1998).
- [Fukunaga 92] H. Fukunaga, H. Inoue, Jpn. J. Appl. Phys. **31** (1992) 1347.
- [Gaunt 83] P. Gaunt, Phil. Mag. **B48** (1983) 261.
- [Griffiths 98] M. K. Griffiths, J. E. L. Bishop, J. W. Tucker, H. A. Davies, J. Magn. Magn. Mat. **183** (1998) 49.
- [Hayashi 96] N. Hayashi, K. Saito, Y. Nakatani, Jpn. J. Appl. Phys. **35** (1996) 6065.
- [Hilzinger 75] H. R. Hilzinger, H. Kronmüller, Phys. Lett. **51A** (1975) 59.
- [Jakubovics 91] J. P. Jakubovics, J. Appl. Phys. **69**(7) (1991) 4029.
- [Kronmüller 78] H. Kronmüller, J. Magn. Magn. Mat. **7** (1978) 341.
- [Kronmüller 87] H. Kronmüller, Phys. Stat. Sol. (b) **144** (1987) 385.
- [LaBonte 69] A. E. LaBonte, J. Appl. Phys. **40**(6) (1969) 2450.
- [Labrune 94] M. Labrune, J. Miltat, J. Appl. Phys. **75**(4) (1994) 2156.
- [Labrune 95] M. Labrune, J. Miltat, J. Magn. Magn. Mat. **151** (1995) 231.
- [Lascaux 94] P. Lascaux, R. Théodor, "Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur", 2^{ème} édition, vol I et II, Edition Masson, Paris (1994).
- [Mallinson 87] J. C. Mallinson, IEEE Trans. Magn. **23**(4) (1987) 2003.
- [Mansuripur 88] M. Mansuripur, J. Appl. Phys. **63**(12) (1988) 5809.
- [Miles 91] J. J. Miles, B. K. Middleton, J. Magn. Magn. Mat. **95** (1991) 99.

- [Miltat 89] J. Miltat, A. Thiaville, P. Trouilloud, J. Magn. Magn. Mat. **82** (1989) 297.
- [Otani 90] Y. Otani, H. Li, J. M. D. Coey, IEEE Trans. Magn. **26** (1990) 2658.
- [Nakatani 89] Y. Nakatani, Y. Uesaka, N. Hayashi, Jpn. J. Appl. Phys. **28**(12) (1989) 2485.
- [Nozières 84] J. P. Nozières, Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier, Grenoble (1984).
- [Press 92] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, "Numerical Recipes in C, The Art of Scientific Computing", Second Edition, Cambridge University Press, New York (1992)
- [Ramstöck 94] K. Ramstöck, T. Leibl, A. Hubert, J. Magn. Magn. Mat. **135** (1994) 97.
- [Rave 97] W. Rave, K. Ramstöck, J. Magn. Magn. Mat. **171** (1997) 69.
- [Schabes 87] M. E. Schabes, A. Aharoni, IEEE Trans. Magn. **23**(6) (1987) 3882.
- [Schabes 88a] M. E. Schabes, H. N. Bertram, J. Appl. Phys. **64**(3) (1988) 1347.
- [Schabes 88b] M. E. Schabes, H. N. Bertram, J. Appl. Phys. **64**(10) (1988) 5832.
- [Schabes 90] M. E. Schabes, H. N. Bertram, J. Appl. Phys. **67**(9) (1990) 5149.
- [Schabes 91] M. E. Schabes, J. Magn. Magn. Mat. **95** (1991) 249.
- [Schrefl 93] T. Schrefl, Thèse de doctorat, Technische Universität, Wien (1993).
- [Schrefl 94a] T. Schrefl, J. Fidler, H. Kronmüller, J. Magn. Magn. Mat. **138** (1994) 15.
- [Schrefl 94b] T. Schrefl, J. Fidler, -H. Kronmüller, J. Appl. Phys. **76**(10) (1994) 7053.
- [Stoner 48] E. C. Stoner, E. P. Wohlfarth, Phil. Trans. Roy. Soc., **240A** (1948) 599.
- [Shindo 97] M. Shindo, M. Ishizone, A. Sakuma, H. Kato, T. Miyazaki, J. Appl. Phys., **81**(8) (1997) 4444.
- [Shir 78] C. C. Shir, J. Appl. Phys. **49**(6) (1978) 3413.
- [Skomski 93] R. Skomski, J. M. D. Coey, Phys. Rev. B, **48**(21) (1993) 15812.
- [Torfeh-Isfahani 83] M. Torfeh-Isfahani, E. Della Torre, IEEE Trans. Magn. **19**(6) (1983) 2527.

- [Trouilloud 87] P. Trouilloud, J. Miltat, J. Magn. Magn. Mat. **66** (1987) 194.
- [Wüchner 95] S. Wüchner, Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier, Grenoble (1995).
- [Wuchner 97] S. Wüchner, J.C. Toussaint, J. Voiron, Phys. Rev. B **55** (1997) 11576.
- [Yuan 92] S. W. Yuan, H. N. Bertram, IEEE Trans. Magn. **28**(5) (1992) 2031.
- [Zhu 88] J. G. Zhu, H. N. Bertram, J. Appl. Phys. **63**(8) (1988) 3248.
- [Zhu 89] J. G. Zhu, H. N. Bertram, J. Appl. Phys. **66**(3) (1989) 1291.

Résumé

Nous avons développé des techniques mathématiques efficaces et un ensemble d'outils numériques spécifiques au micromagnétisme, pour calculer des configurations magnétiques à l'équilibre et hors équilibre. Le modèle utilise une méthode de minimisation qui repose sur l'intégration des équations de précession-dissipation de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG). Nous avons mis en évidence l'importance de l'étude de stabilité des équations LLG.

L'approche numérique mise au point a été appliquée pour étudier le comportement magnétique de systèmes réels fabriqués au laboratoire.

Dans les tri-couches ferromagnétiques $\text{SmCo}/\text{ZrCo}/\text{SmCo}$, dont la couche centrale douce est prise en sandwich entre deux couches dures, le mécanisme de renversement de la phase dure est dû à la propagation d'une paroi depuis la phase douce. L'essentiel des processus de renversement d'aimantation expérimentaux a été décrit correctement par la simulation, seul un désaccord porte sur le renversement d'aimantation de la couche de SmCo la plus dure.

L'étude menée sur les plots de fer épitaxiés $\text{Fe}(110)/\text{W}(110)$ a permis de décrire les distributions d'aimantation et d'estimer les champs de retournement. Le champ coercitif calculé pour un plot carré de $L = 5000\text{\AA}$ de côté et de $e = 58\text{\AA}$ d'épaisseur est proche de la valeur obtenue expérimentalement. Un bon accord entre l'expérience et la simulation a été observé pour la dépendance angulaire du champ coercitif d'une particule ronde de diamètre $2000\text{\AA}$ et d'épaisseur $10\text{\AA}$. Le comportement calculé, comme observé, tendent vers celui décrit par le modèle de Stoner-Wohlfarth.

Dans le cas des matériaux nanostructurés doux-durs, l'approche micromagnétique utilisée nous a permis d'identifier les paramètres pertinents et les mécanismes impliqués dans le renversement d'aimantation. Les contributions de chaque phase à la susceptibilité totale ont été déduites. La contribution réversible à la susceptibilité totale a été déterminée par une approche qui mime le procédé expérimental. La comparaison de nos résultats avec ceux de l'expérience tend à prouver qu'une amélioration des performances des systèmes nanostructurés réels est possible en diminuant la taille des grains.

Mots clés

Micromagnétisme

Simulation numérique

Retournement d'aimantation

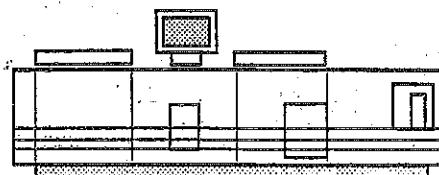
Systèmes sandwich

Plots submicroniques

Matériaux nanostructurés



Grenoble, juillet 1998



Imprimé sur "Xerox 5090",
au Service Reprographie du CNRS de Grenoble.

