

UNIVERSITE LOUIS PASTEUR STRASBOURG

RESUME DE LA THESE DE DOCTORAT

Discipline : Physique

Spécialité : Physique de la matière condensée et des matériaux

Présentée par : Liliana-Daniela Buda
Boursier EGIDE

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

Laboratoire: UMR N° 7054
Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg (IPCMS)
Groupe d'Etude des Matériaux Métalliques (GEMM)

Directeur de thèse : Dr. Kamel Ounadjela
Directeur de Recherches au C.N.R.S.
IPCMS / GEMM

L'étude du comportement de systèmes magnétiques de dimensions submicroniques suscite depuis plusieurs années un vif intérêt, motivé par les progrès enregistrés dans les techniques de nano-fabrication. Lorsque les dimensions latérales du système sont réduites à l'ordre de grandeur des longueurs caractéristiques du matériau magnétique, des nouveaux phénomènes physiques apparaissent intéressants à la fois d'un point de vue fondamental, mais qui laissent également entrevoir de riches applications potentielles, en particulier pour l'enregistrement magnétique. Ainsi, un nombre important d'études expérimentales et théoriques ont été menées afin de comprendre la stabilité des configurations micromagnétiques de ces systèmes et leur dynamique de retournement de l'aimantation.

Les techniques expérimentales d'analyse de la distribution interne de l'aimantation dans des objets à dimensionalité réduite permettent d'obtenir soit des informations globales (la magnétométrie optique à effet Kerr par exemple), soit des informations locales, mais limitées en résolution (la microscopie à force magnétique). C'est pourquoi, pour accéder à la structure fine des configurations magnétiques et reproduire à l'échelle nanométrique les processus de renversement de l'aimantation, des simulations micromagnétiques sont indispensables.

L'objectif de ce travail de thèse réside dans le développement d'outils numériques appropriés à l'étude du magnétisme des structures de dimensions submicroniques en utilisant la modélisation micromagnétique. Pour l'évaluation des énergies et des champs internes qui décrivent l'état du système, un algorithme numérique, basé sur la méthode des différences finies, a été conçu. La minimisation de l'énergie libre du système, qui mène aux états stables, est fondée sur l'intégration temporelle de l'équation phénoménologique de Landau-Lifshitz-Gilbert ^[1]. Afin d'améliorer la précision du calcul numérique, plusieurs méthodes d'évaluation des énergies et des champs ont été proposées et analysées en détail. Différents schémas d'intégration ont été développés et comparés afin d'assurer la stabilité numérique des solutions obtenues et permettre d'augmenter l'efficacité du calcul. L'application de cette approche numérique à l'étude du comportement magnétique de systèmes réels demande un traitement adéquat par rapport aux caractéristiques individuelles de chaque système. La dimension du système (*finie* ou *infinie*) et sa périodicité selon certaines directions de l'espace, nous ont contraint d'adapter l'algorithme à chaque cas précis.

^[1] J. F. Brown, Jr. : *Micromagnetics*, Interscience Publishers, J. Wiley and Sons, New York (1963)

Approche bidimensionnelle pour les couches minces

Dans une première étape, un code micromagnétique applicable à l'étude des systèmes infinis à deux dimensions (2D), tels que les couches minces, a été mis au point. Cette approche numérique a permis d'étudier les propriétés internes des films à l'échelle nanométrique pour des films de cobalt à forte anisotropie magnétocristalline. Nous nous sommes intéressés à deux systèmes dont la différence réside dans la direction du champ d'anisotropie.

Films de cobalt à anisotropie uniaxiale planaire: Ce type de films dans lesquels l'aimantation est parallèle au plan du film, forment des domaines antiparallèles séparés par des parois à 180°. Lorsque l'épaisseur de la couche augmente la structure interne des parois change et une transition d'une paroi de type "Néel" asymétrique vers une paroi de type "Bloch" asymétrique est identifiée autour de 20 nm. Le signal MFM, déduit à partir de la configuration micromagnétique simulée de la paroi, confirme de manière qualitative les profils MFM mesurés expérimentalement ^[2].

Films de cobalt à anisotropie uniaxiale perpendiculaire au plan des couches: Leur caractéristique principale est l'existence des domaines magnétiques en bandes parallèles. Le traitement d'une telle structure périodique a nécessité l'extension du calcul 2D non périodique au calcul 2D périodique. La dépendance de la largeur des domaines en bandes en fonction de l'épaisseur de la couche déduite par simulation s'avère très proche des résultats expérimentaux. L'évaluation du champ interne inhomogène à partir de la distribution de l'aimantation simulée pour plusieurs champs externes appliqués dans le plan de la couche a permis une meilleure compréhension de la richesse des spectres de résonance ferromagnétique mesurés expérimentalement ^[3].

Approche tridimensionnelle pour les éléments nanostructurés

L'extension à un calcul tridimensionnel (3D) a représenté le but essentiel de la deuxième partie de ce travail de thèse. Ce type d'approche s'est révélé idéal pour étudier des

^[2] I. L. Prejbeanu, L. D. Buda, U. Ebels, K. Ounadjela, Appl. Phys. Lett. **77**, 3066 (2000). *Observation of asymmetric Bloch walls in epitaxial Co films with strong in-plane uniaxial anisotropy*

^[3] U. Ebels, L. D. Buda, K. Ounadjela, P. E. Wigen, Phys. Rev. B **63**, 174437/1-11 (2001). *Ferromagnetic resonance excitation of two-dimensional wall structures in magnetic stripes domains*

systèmes ferromagnétiques de dimensions submicroniques, tels que des plots circulaires, des anneaux, des fils ou des plaquettes rectangulaires. A l'aide de ce code micromagnétique, nous avons identifié les états magnétiques stables dont l'existence dépend des dimensions de l'objet étudié. Les cycles d'aimantation ainsi que le signal MFM attendu ont été simulés et comparés aux résultats expérimentaux.

Plots et anneaux: Un aspect important de ce travail de thèse a consisté à étudier le renversement de l'aimantation dans des éléments submicroniques et de prédire les configurations magnétiques en fonction de la forme et la taille de l'objet. En particulier, les configurations circulaires de l'aimantation, qui constituent de futurs candidats pour des mémoires magnétiques à accès aléatoire (MRAM) ^[4], ont été étudiées. Dans ce type de composants, le point mémoire a en général une forme rectangulaire qui induit une aimantation linéaire et planaire. Cette géométrie rectangulaire rend le processus de renversement de l'aimantation non répétitif à cause de la présence de domaines magnétiques aux bords de l'élément. Ceci constitue un frein à son utilisation. Cette contrainte est levée dans le cas d'éléments circulaires comme des plots ou encore des anneaux. Des simulations systématiques en fonction du diamètre et de l'épaisseur d'un plot circulaire, corrélées avec des données expérimentales de MFM ont permis d'élaborer un diagramme de phase des états fondamentaux. L'état fondamental d'un plot est contrôlé par ses dimensions et par les paramètres du matériau, comme l'anisotropie magnétocristalline ou l'aimantation à saturation. Ainsi, en dessous d'un diamètre et d'une épaisseur de plot critiques, l'état fondamental est l'état monodomaine planaire. Lorsqu'on augmente le diamètre et/ou l'épaisseur du plot, une structure de type "vortex" qui assure la fermeture du flux magnétique, est favorisée. Une attention spéciale a été accordée à l'étude de l'état "vortex" et à sa stabilité en présence d'un champ magnétique appliqué perpendiculairement au plan du plot ^[5]. La présence de l'anisotropie cristalline induit un élargissement du cœur de vortex et augmente de manière significative sa stabilité en champ inverse. Pour mettre en évidence l'influence de la forme de l'élément sur ses propriétés magnétiques, des anneaux circulaires ont été analysés en parallèle. Lorsque la partie centrale d'un plot circulaire est absente, le cœur du vortex est

^[4] J. -G. Zhu, Y. Zheng, G. A. Prinz, J. Appl. Phys. **87**, 6668 (2000). *Ultrahigh density vertical magnetoresistive random access memory*

^[5] L. D. Buda, I. L. Prejbeanu, M. Demand, U. Ebels, K. Ounadjela, en cours de publication dans IEEE Trans. Magn., *Vortex states stability in circular Co (0001) dots*

éliminé et la stabilité d'un état de "fermeture de flux" augmente par rapport à celle d'un état monodomaine planaire ^[6].

Fils nanométriques: Les fils nanométriques à section rectangulaire ou circulaire constituent des systèmes modèles pour l'étude de la contribution magnétoresistive d'une paroi de domaine^[7]. Afin d'isoler la contribution d'une paroi individuelle, il nous a fallu tout d'abord déterminer la configuration interne de la paroi en fonction de l'orientation de l'axe d'anisotropie magnétocristalline par rapport à l'axe du fil. Lorsque l'axe d'anisotropie est perpendiculaire à l'axe du fil, la structure de la paroi déterminée est plutôt complexe, avec des parties "Néel" en surface où l'aimantation s'oriente parallèlement à la surface du fil et une partie "Bloch" au cœur de la paroi. La structure en domaines en bandes parallèles périodiques, caractéristique pour cette géométrie, requiert la généralisation des calculs 3D non périodiques à des calculs 3D périodiques. Lorsque l'axe d'anisotropie magnétocristalline est parallèle à l'axe du fil, la structure interne de la paroi change. Dans les fils qui ont la taille latérale suffisamment petite (< 30 nm), la structure de la paroi s'approche de la structure d'une paroi de "Bloch" idéale. L'effet des constriction géométriques sur le mouvement d'une telle paroi en champ appliqué le long du fil a été analysé. Les valeurs du champ de déblocage des parois s'avèrent fortement liées à la nature de la constriction. Les résultats obtenus corroborent les observations expérimentales.

Ce travail montre que la simulation micromagnétique est un outil indispensable pour l'interprétation des données expérimentales et pour la compréhension fine des phénomènes internes mis en jeu dans le processus de renversement de l'aimantation. La flexibilité de l'approche micromagnétique nous a permis d'étudier des systèmes à deux et à trois dimensions, périodiques et non-périodiques.

^[6] S. P. Li, D. Peyrade, M. Natali, Y. Chen, U. Ebels, L. D. Buda, K. Ounadjela, Phys. Rev. Lett. **86**, 1102 (2001), *Flux closure structures in cobalt rings*

^[7] U. Ebels, A. Radulescu, Y. Henry, L. Piraux, K. Ounadjela, Phys. Rev. Lett. **84**, 983 (2000). *Spin accumulation and domain wall magnetoresistance in 35 nm Co wires*