
Simulation Micromagnétique de Plots de fer épitaxiés

J. C. Toussaint (Pr INPG)

H. Szabolics (thèse)

L. Buda-Prejbeanu (MC INPG)

I. Firastrau (Post-Doc Univ. Transilvania, Rom.)

I. Hypothèses du Micromagnétisme

II. Applications à des systèmes réels

- Propriétés magnétiques statiques de plots de Fe sur Mo



Hypothèses du Micromagnétisme



HYPOTHESES DU MICROMAGNÉTISME

1963 - W. F. Brown Jr. $\left\{ \begin{array}{l} 1907 \text{ P. Weiss / domaine magnétique} \\ 1935 \text{ Landau-Lifshitz / paroi} \end{array} \right.$

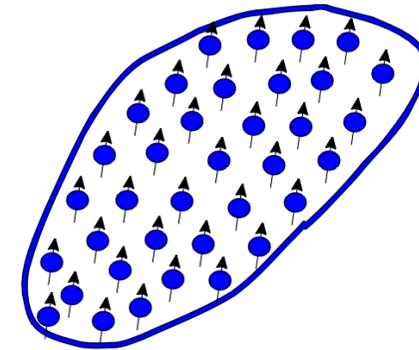
■ Modélisation d'un matériau ferromagnétique à l'échelle mésoscopique 10 nm -100 nm

■ Approximation des milieux continus \Rightarrow
Faibles variations spatiales du vecteur aimantation $\mathbf{M}(\mathbf{r})$

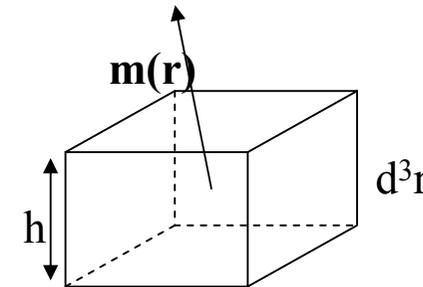
■ Contrainte sur la norme de l'aimantation

$$|\mathbf{m}(\mathbf{r})|=1$$

■ Fluctuations thermiques négligées.
Introduction de la température seulement dans une approche champ moyen

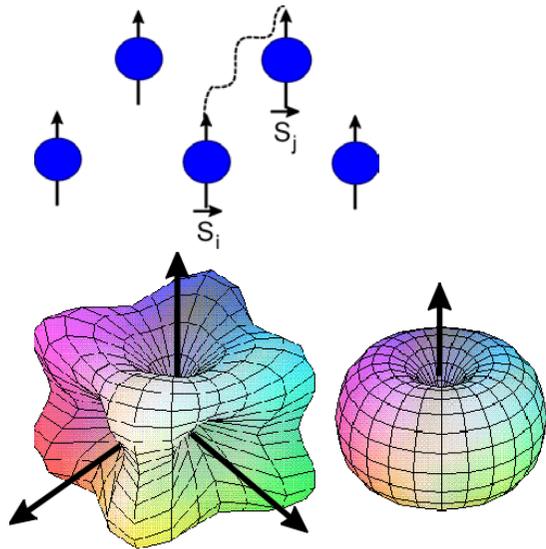


Spins individuels



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

ENERGIE LIBRE



Interaction d'échange dans un ferromagnétique

- ordre magnétique ($T < T_c$)
- spins parallèles

Interactions entre proches voisins

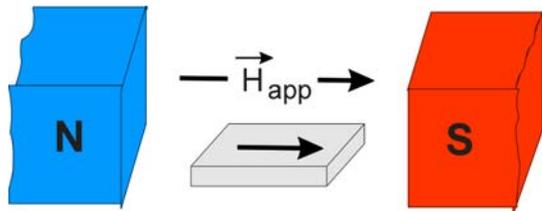
$$F_{ex} = \int_V A_{ex} (\text{grad } \mathbf{m})^2 d^3 r$$

Anisotropie Magnéto-cristalline

- symétrie du cristal
- direction(s) privilégiée(s) pour \mathbf{m}

$$F_{ani} = \int_V K_1 (1 - (\mathbf{u}_K \cdot \mathbf{m})^2) d^3 r$$

Interaction locale

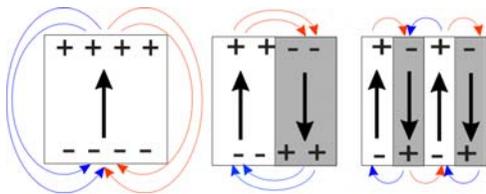


Couplage Zeeman

- Champ extérieur
- alignement des moments //ment à \mathbf{H}_{app}

$$F_z = -\mu_0 M_s \int_V \mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_{app} d^3 r$$

Interaction locale



Interaction Magnétostatique

- Equations de Maxwell
- distribution des charges magnétiques
- création des domaines mag.

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

Interaction à longue portée



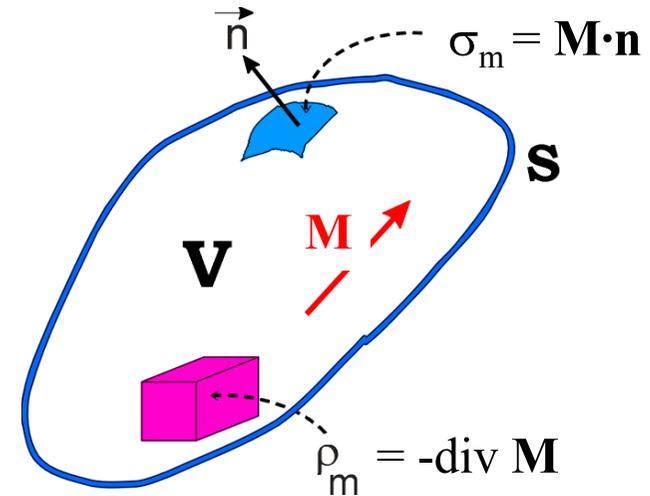
Magnétostatique : approche pseudo-potentielle

Maxwell : en absence de courant

$$\begin{cases} \text{div } \mathbf{H}_D = -\text{div } \mathbf{M} \\ \text{rot } \mathbf{H}_D = \mathbf{0} \end{cases} \longrightarrow \mathbf{H}_D = -\text{grad } \phi$$

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_V \rho_m(\mathbf{r}') G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3r' + \iint_S \sigma_m(\mathbf{r}') G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dS'$$

$$\phi(\mathbf{r}) \rightarrow 0, |\mathbf{r}| \rightarrow \infty$$



Formulation de Green :

en 3D $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi \|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\|}$

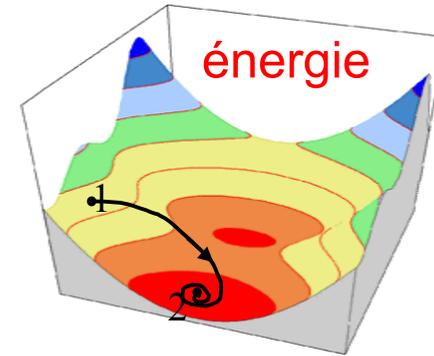
en 2D $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{2\pi} \ln \|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\|$

$$\mathbf{H}_D(\mathbf{r}) = -\int_V \text{grad}_r G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho_m(\mathbf{r}') d^3r' - \iint_S \text{grad}_r G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sigma_m(\mathbf{r}') dS'$$



 J. D. Jackson : *Classical electrodynamics*, New York (1962)

CHAMP EFFECTIF



But : trouver l'état d'équilibre à partir d'une configuration magnétique donnée

Champ effectif obtenu à partir de la variation de l'énergie $F_t = F_{ex} + F_{ani} + F_Z + F_D$

$$\delta F_t = -\int_V \mu_0 M_s \delta \mathbf{m} \cdot \mathbf{H} d^3r + 2A_{ex} \iint_S \delta \mathbf{m} \cdot \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} dS \quad \text{avec} \quad |\mathbf{m}(\mathbf{r})|^2=1$$

$$\mathbf{H} = \underbrace{\frac{2A_{ex}}{\mu_0 M_s} \Delta \mathbf{m}}_{\text{Echange}} + \underbrace{\frac{2K_1}{\mu_0 M_s} (\mathbf{u}_K \cdot \mathbf{m}) \mathbf{u}_K}_{\text{Anisotropie}} + \underbrace{\mathbf{H}_{app}}_{\text{Appliqué}} + \underbrace{\mathbf{H}_D}_{\text{démagnétisant}} + \underbrace{\lambda \mathbf{m}}_{|\mathbf{m}(\mathbf{r})|=1}$$

équilibre $\delta F_t = 0 \iff \mathbf{m}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{r} \in \text{système}$

Conditions de Brown

$$\left. \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial n} \right|_S = \mathbf{0}$$

Conditions de Brown aux interfaces

$$A_{ex}^1 \left. \frac{\partial \mathbf{m}_1}{\partial n} \right|_S = A_{ex}^2 \left. \frac{\partial \mathbf{m}_2}{\partial n} \right|_S$$



NOTRE APPROCHE NUMÉRIQUE (code GL_FFT3D) :

- Système physique discrétisé avec un maillage régulier \Rightarrow volumes finies
- Détermination du champ démagnétisant :

$$\mathbf{H}_D(\mathbf{r}) = -\int_V \nabla G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho_m(\mathbf{r}') d^3 r' = -[\nabla G * \rho_m](\mathbf{r}) + \text{expression similaire pour } \sigma_m(\mathbf{r})$$

- Hyp : N points d'échantillonnage \Rightarrow nombre d'opérations
 - En Calcul direct $\approx N^2$
 - Sur un réseau régulier avec FFT \approx

$$N \log_2 N < N^2 \text{ for large } N$$

i FFT - T.W.Cooley et al, (1965); FFTW - M. Frigo et al, MIT, (1997)

• Algorithme :

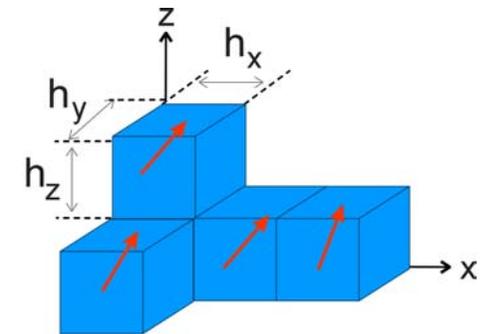
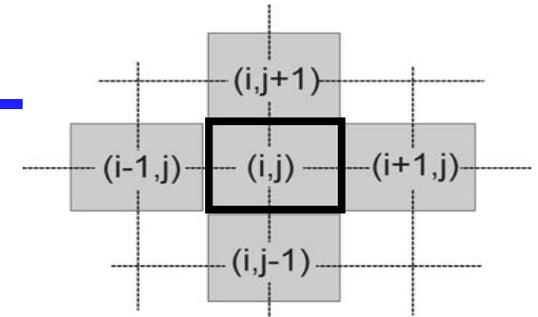
- Calcul de la $TF(\nabla G)$ Fait une seule fois pour toute la simulation !
- A chaque pas, sur la distribution courante de l'aimantation :

– estimation de $\rho_m(\mathbf{r}) \longrightarrow FT(\rho_m(\mathbf{r}))$

+ expressions similaires pour $\sigma_m(\mathbf{r})$

– estimation de

$$\mathbf{H}_D(\mathbf{r}) = -[\nabla G * \rho_m](\mathbf{r}) = -FT^{-1}[FT(\nabla G) \cdot FT(\rho_m)](\mathbf{r})$$



Intégration des équations de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) avec $|\mathbf{m}(\mathbf{r})|=1$

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\gamma\mu_0 \mathbf{m} \times \mathbf{H} + \alpha \mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} \iff (1 + \alpha^2) \frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\gamma\mu_0 \mathbf{m} \times (\mathbf{H} + \alpha \mathbf{m} \times \mathbf{H})$$

- $\alpha \ll 1$ pour la dynamique, $\alpha=1$ pour les calculs des configurations d'équilibre,

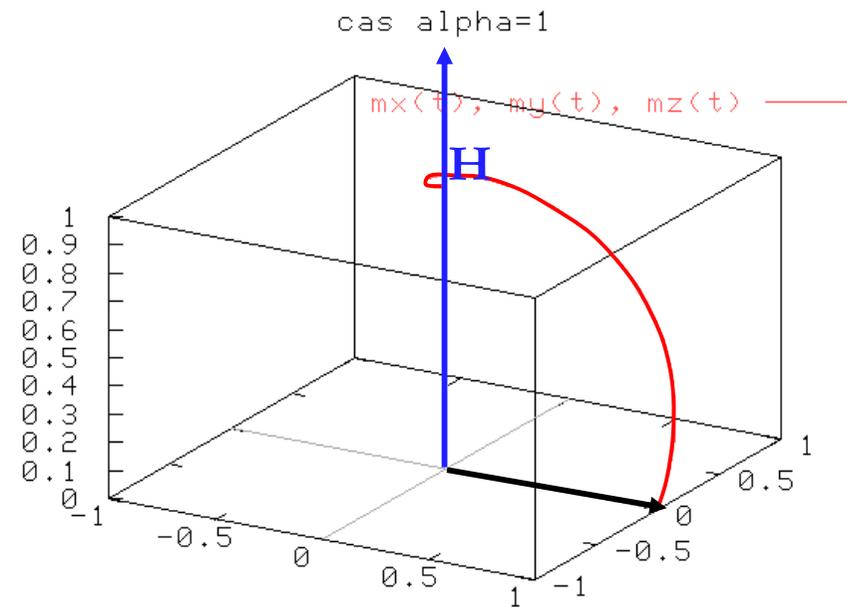
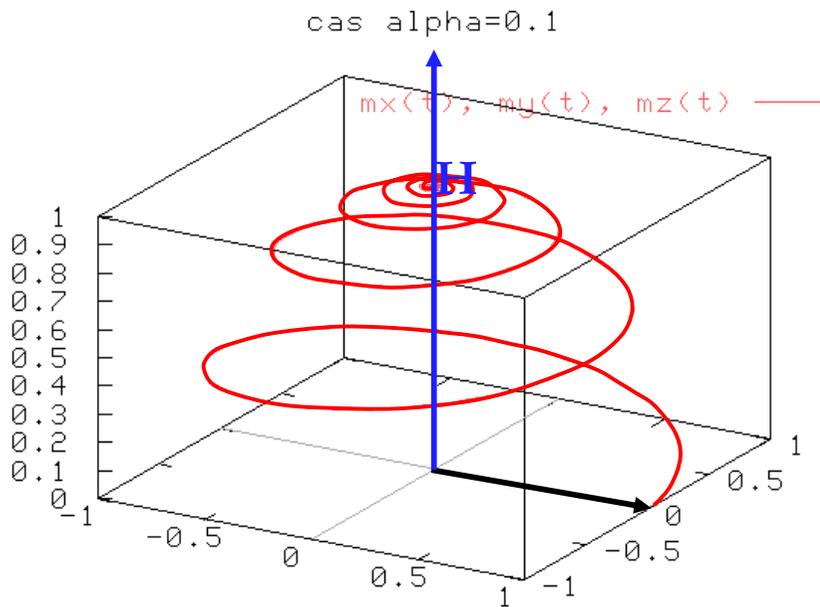
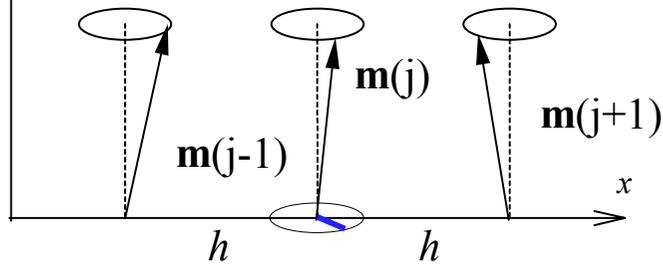


Schéma explicite respectant $|\mathbf{m}(\mathbf{r})|=1$: $\mathbf{H}_{\text{eff}} = \mathbf{H} + \alpha \mathbf{m} \times \mathbf{H}$ unités réduites $\gamma\mu_0=1$

$$\mathbf{m}(t + \delta t) = \mathbf{m}(t) \cos(H_{\text{eff}} \cdot \delta t) + \frac{\sin(H_{\text{eff}} \cdot \delta t)}{H_{\text{eff}}} (\mathbf{H}_{\text{eff}} \times \mathbf{m}(t)) + (1 - \cos(H_{\text{eff}} \cdot \delta t)) \frac{\mathbf{H}_{\text{eff}} \cdot \mathbf{m}(t)}{H_{\text{eff}}^2} \cdot \mathbf{H}_{\text{eff}}$$

STABILITÉ NUMÉRIQUE DU SCHEMA

Hyp : $\{\mathbf{m}\}$ alignés, faibles fluctuations Linéarisation des équations LLG \Rightarrow éq. de diffusion-propagation



$$(1 + \alpha^2) \frac{dz}{dt} = D(\alpha - i) \Delta z$$

$$z = u + iv \quad D = \frac{2A}{\mu_0 M_s}$$

unités réduites $\gamma\mu_0 = 1$

- $\alpha \rightarrow 0$: éq. de Schrödinger
- $|\alpha| \gg 1$: éq. de la chaleur

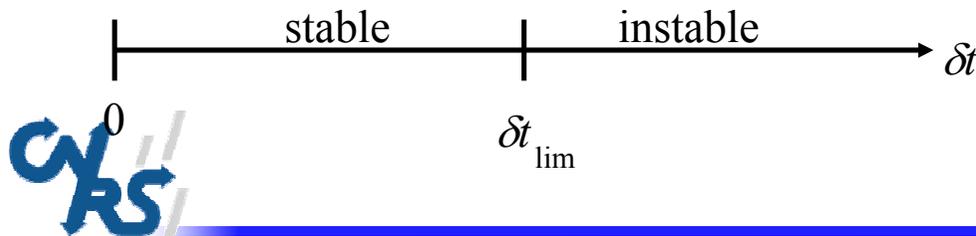
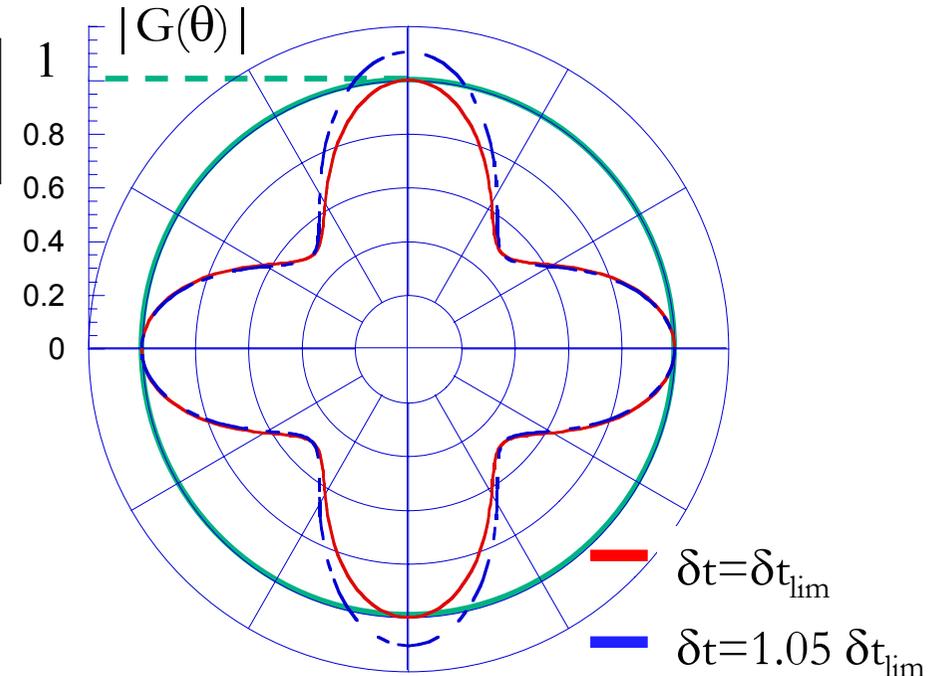
Analyse de von Neumann

Gain :

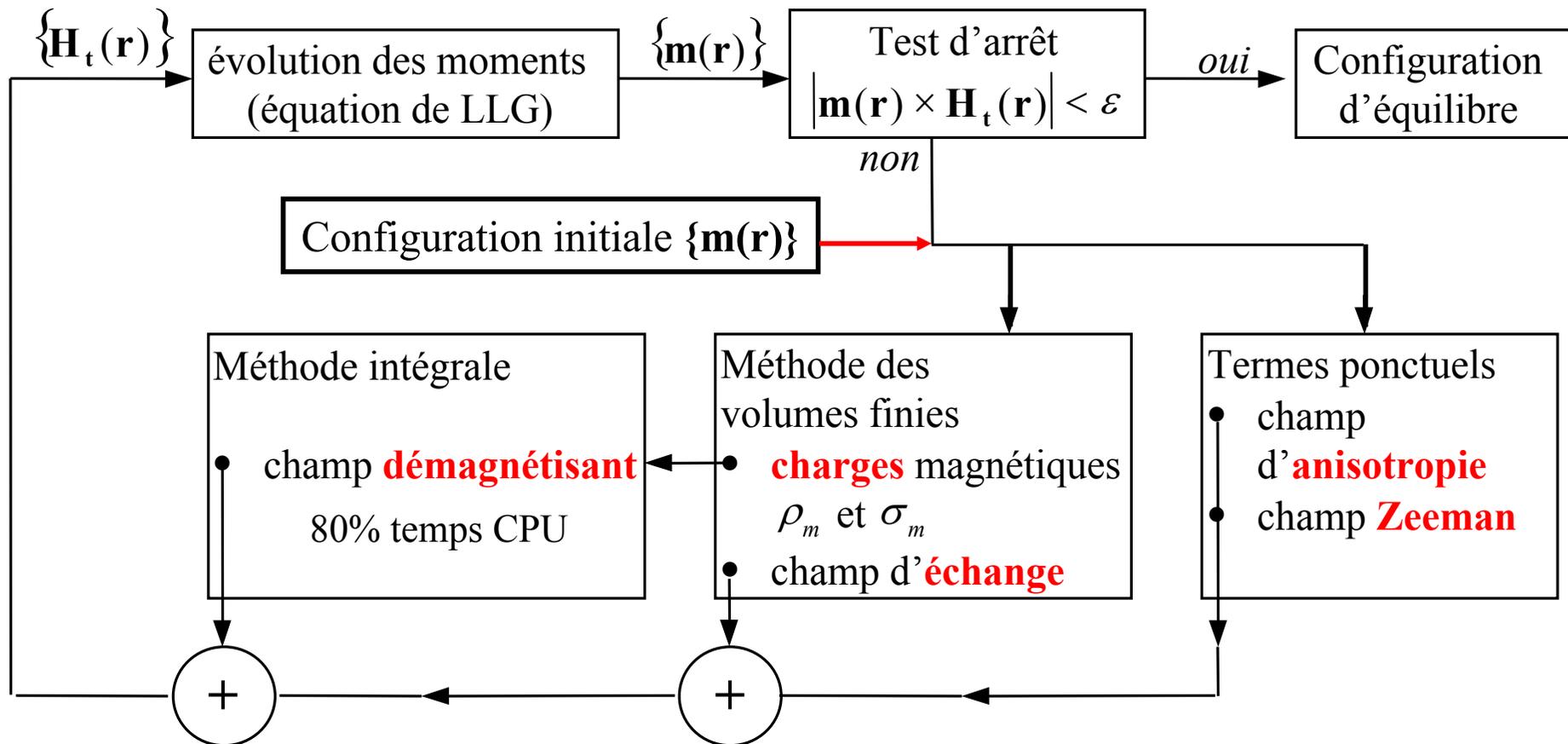
$$G(\theta) = 1 - \frac{4D}{h^2} \frac{\delta t}{\alpha + i} \sin^2 \theta, \quad \theta = \frac{kh}{2}$$

Pas de temps critique

$$\delta t_{\text{lim}} = h^2 \frac{\mu_0 M_s \alpha}{4A}$$



MÉTHODE DE MINIMISATION DE L'ÉNERGIE (CODE GL_FFT3D)



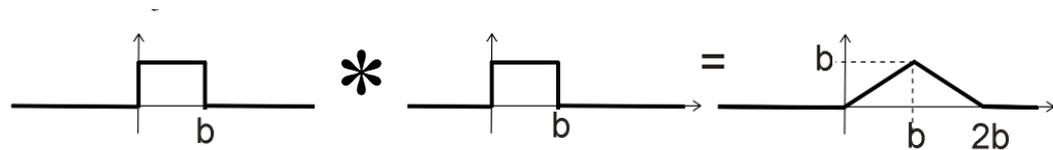
Avantages :

- stabilité de l'intégration numérique bien maîtrisée
- calcul du champ démagnétisant à base de fonctions de Green et FFT extrêmement rapide

Inconvénients :

- introduction d'une rugosité de maillage pour décrire des surfaces complexes
- Adaptation locale de maillage envisageable mais brisure de l'invariance par translation
⇒ FFT inutilisables pour le calcul du champ démagnétisant
- Taille mémoire pour le calcul de FFT sur un système de taille finie ⇒ Zero Padding

$$\mathbf{H}_D(\mathbf{r}) = -[\nabla G * \rho_m](\mathbf{r}) \\ = -\text{FT}^{-1}[\text{FT}(\nabla G) \cdot \text{FT}(\rho_m)](\mathbf{r})$$

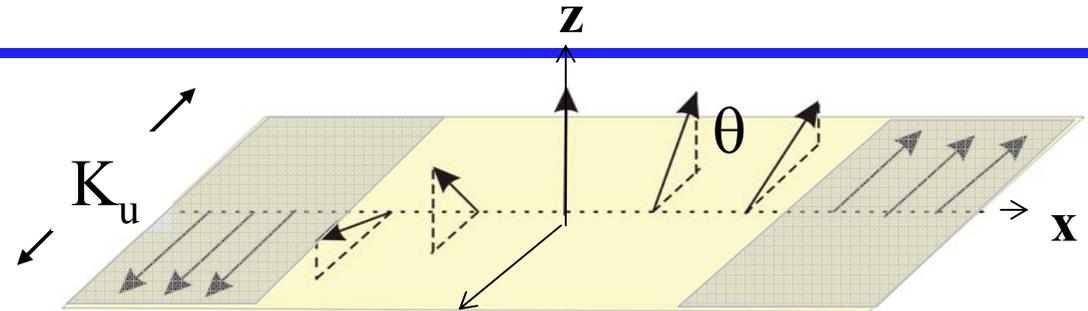


Taille du domaine de calcul = 8 x taille du système physique

LONGUEURS CARACTERISTIQUES

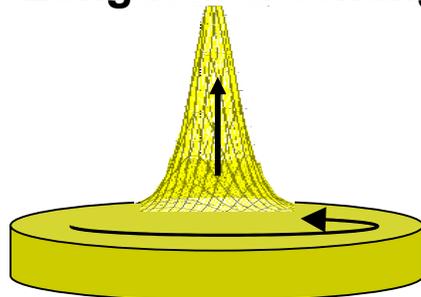
Largeur d'une paroi de Bloch

Hyp: étendue infinie

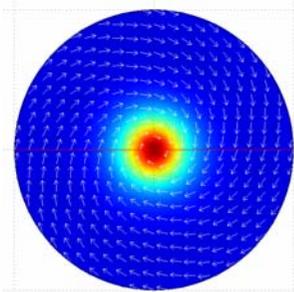


$$\varepsilon(\theta) = K_u (\sin \theta)^2 + A_{ex} \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 \implies \theta(x) = \pm 2 \arctg \left[\exp \left(\frac{x}{l_B} \right) \right] \quad \delta_B = \pi l_B = \sqrt{\frac{A_{ex}}{K_u}}$$

Longueur d'échange



'vortex'



$$\varepsilon(\theta(r)) = \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 (\cos \theta)^2 + A_{ex} \left(\frac{\partial \theta}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} A_{ex} (\sin \theta)^2$$

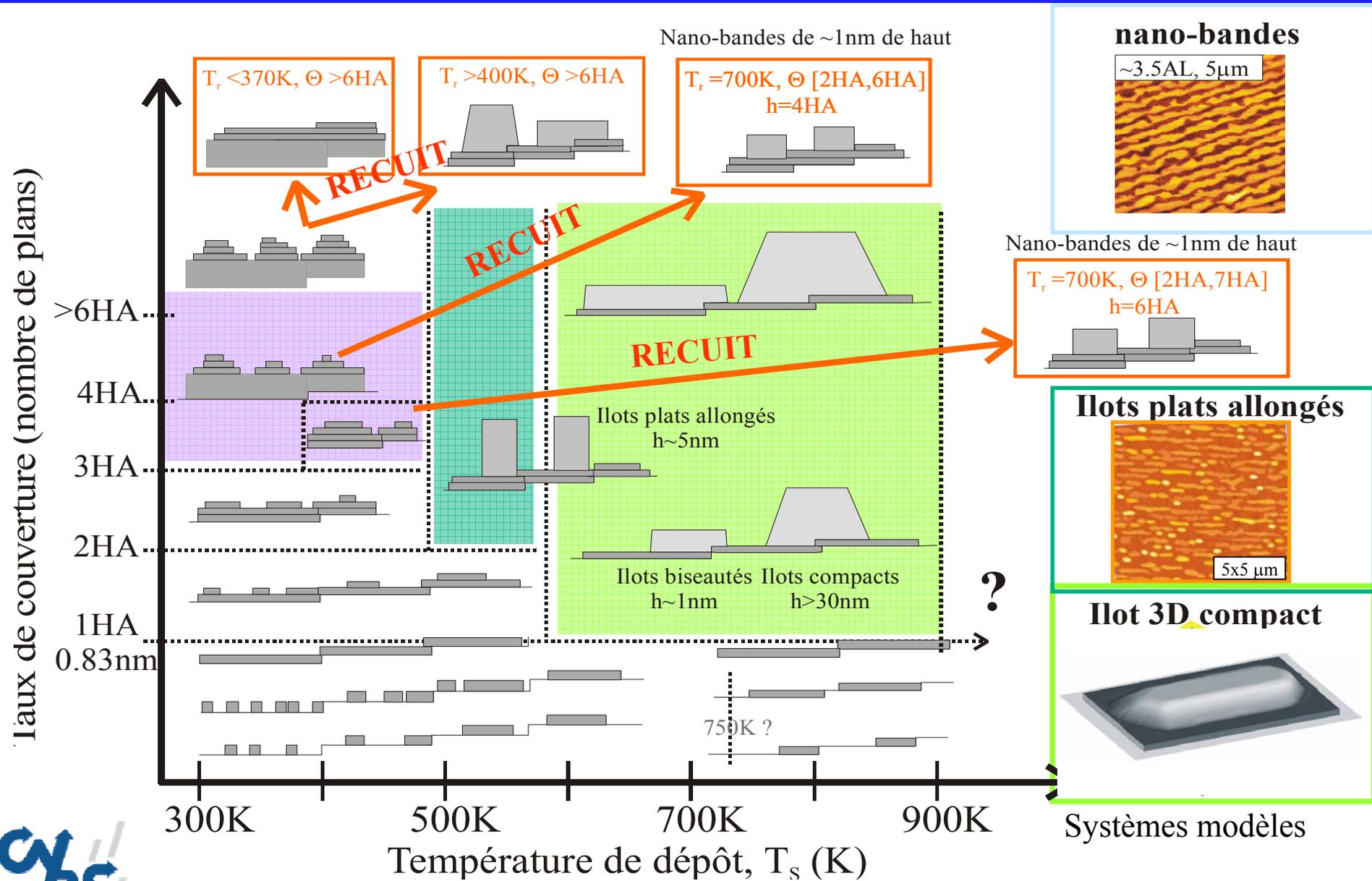
$$\theta(r) \cong \arccos \left[\exp \left(-\frac{r}{l_{ex}} \right) \right] \quad \delta_{ex} = \pi l_{ex} = \sqrt{\frac{2 A_{ex}}{\mu_0 M_s^2}}$$

	$\mu_0 M_s$ (T)	A_{ex} (J/m)	K_u (J/m ³)	δ_B (nm)	δ_{ex} (nm)
Co	1.4	$1.5 \cdot 10^{-11}$	$500 \cdot 10^3$	17	11
NiFe	1.0	$1.0 \cdot 10^{-11}$	10^3	315	15

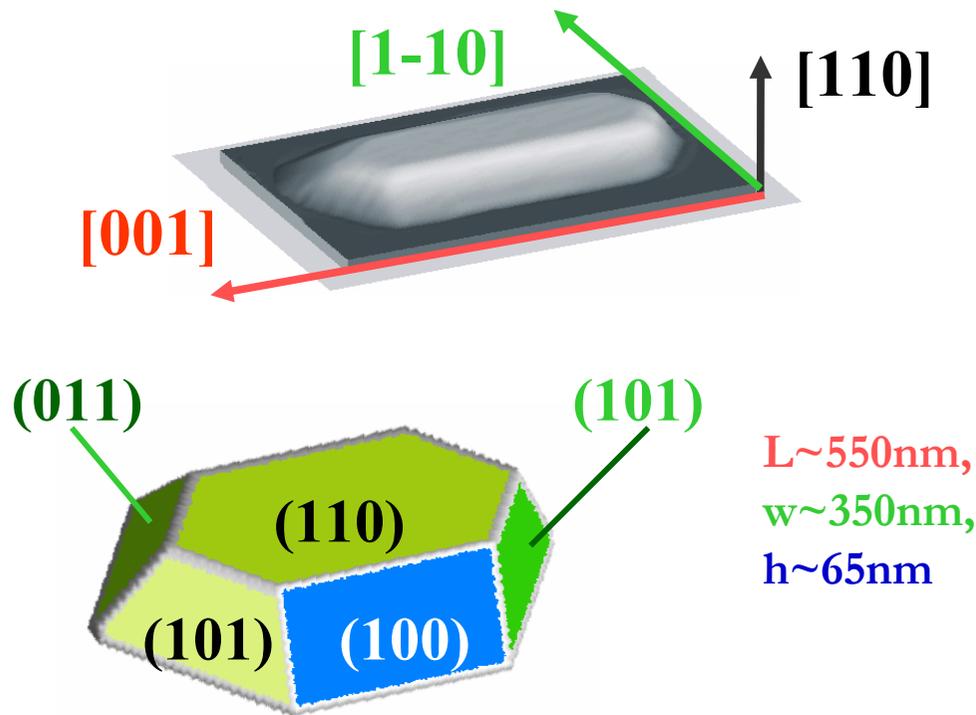
Propriétés magnétiques de plots de Fe sur Mo

F. Cheynis, P.O. Jubert, O. Fruchart, W. Wernsdorfer





PROPRIETES MAGNETIQUES D'ILOTS 3D COMPACTS DE Fe(110)

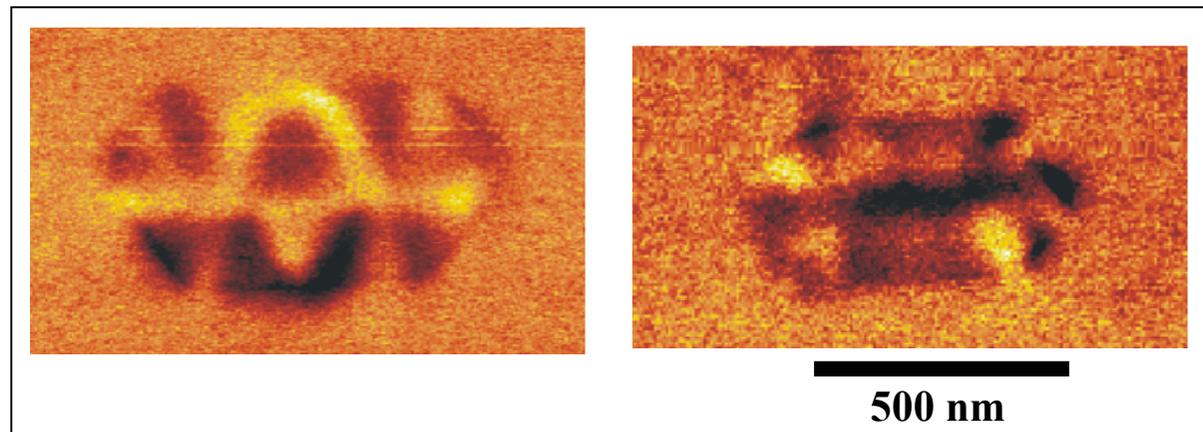
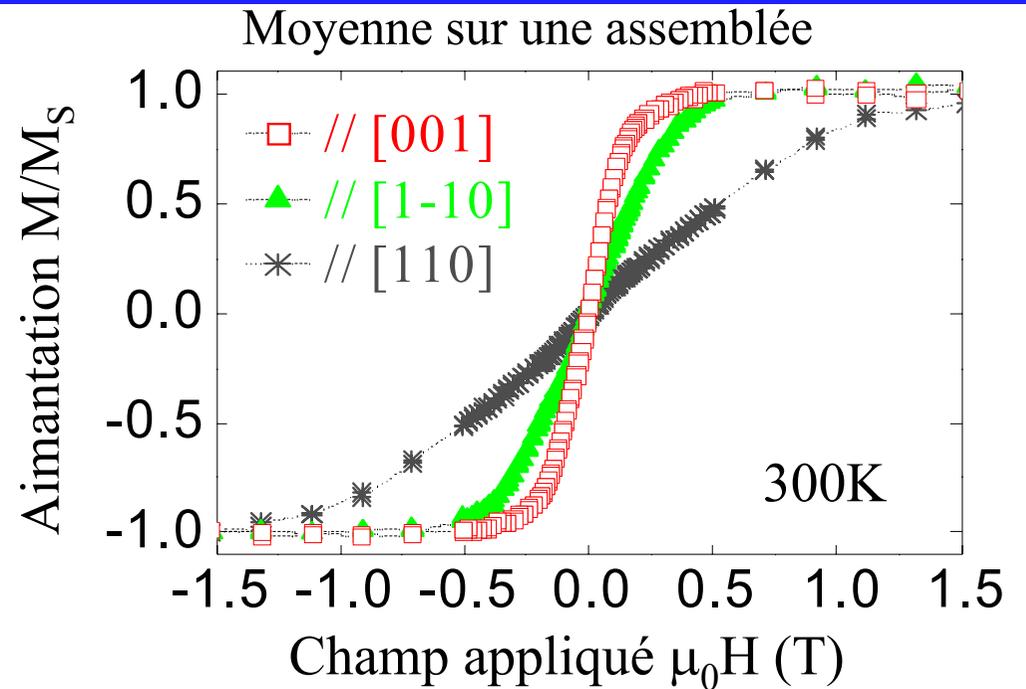


$H_{sat} // [001]$

MFM: Y. Samson, DRFMC

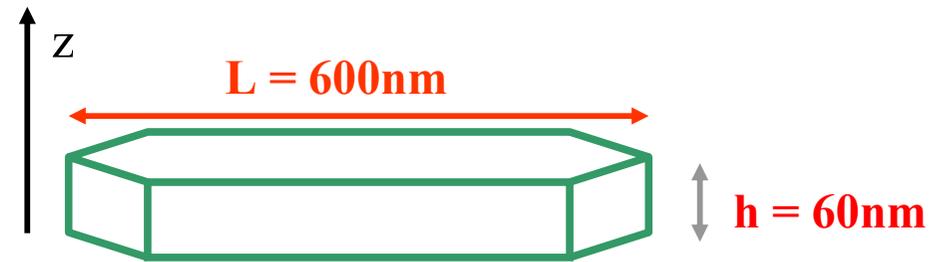


Laboratoire Louis Néel, Grenoble.



SIMULATIONS MICROMAGNETIQUES

- Forme simplifiée : « hexaplot »
 $L=600\text{nm}$, $w=300\text{nm}$, $h=60\text{nm}$

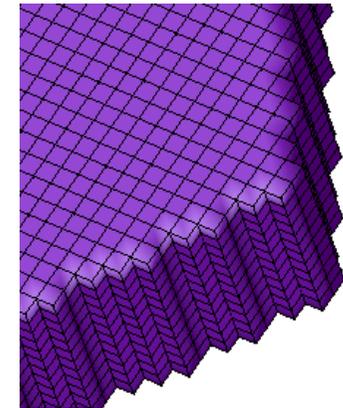
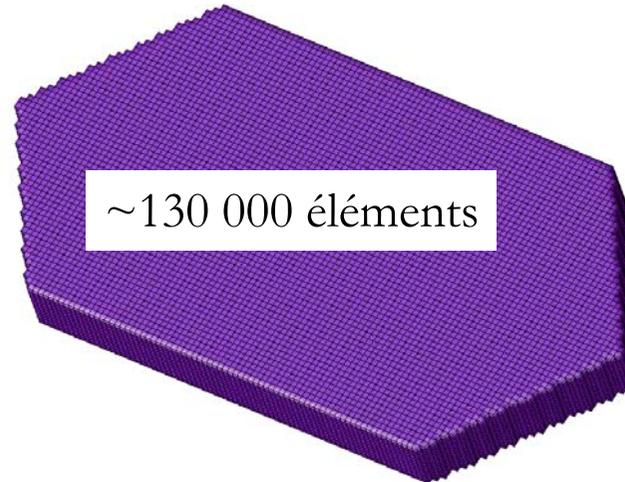


- Pas de maillage : $h < \delta_{ex}$, δ_B

$$\delta_{ex} = \pi \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}} \sim 10\text{nm}$$

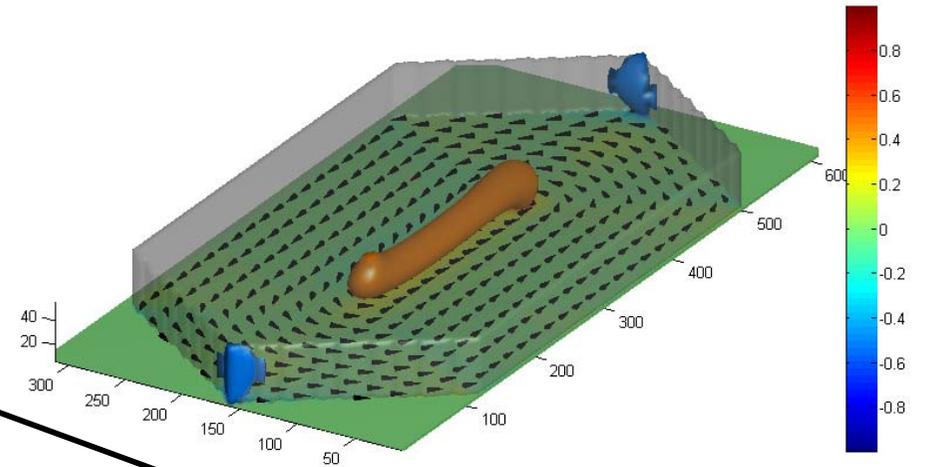
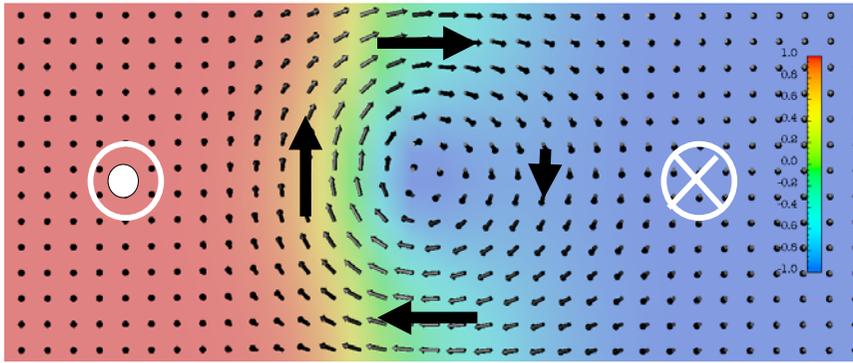
$$\delta_B = \pi \sqrt{\frac{A}{K_1}} \sim 70\text{nm}$$

$$\Rightarrow h=5\text{nm} \sim \delta_{ex}/2$$

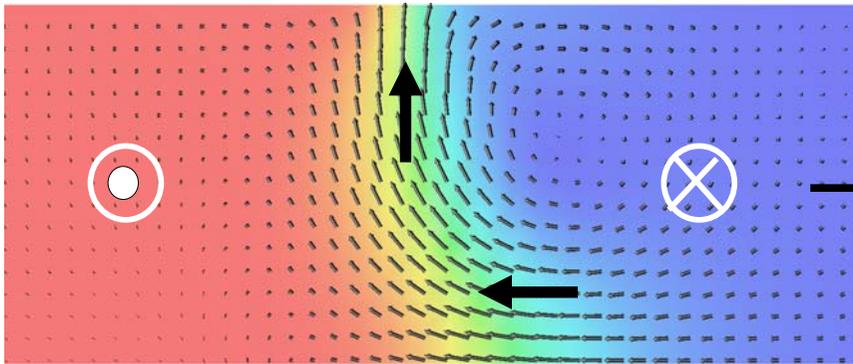


- Paramètres magnétiques du Fer massif : M_s , K_1 , A_{ech}
- Calcul micromagnétique avec amortissement $\alpha=1$

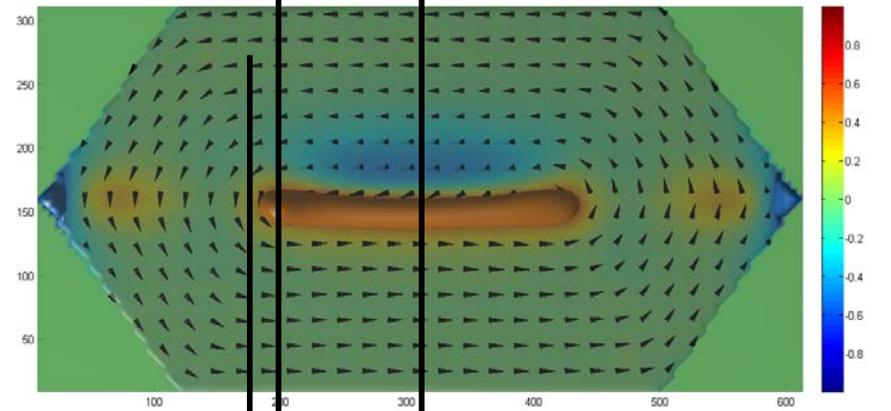
Paroi de Bloch asymétrique



+x
⊙



⊗
-x



~ Paroi de Néel asymétrique



CONFIGURATIONS A LA REMANENCE : CONSTRUCTIONS DE VAN DEN BERG :

ou comment construire un champ vectoriel 2D tel que $\text{div } \mathbf{m} = 0$ avec $|\mathbf{m}| = 1$?

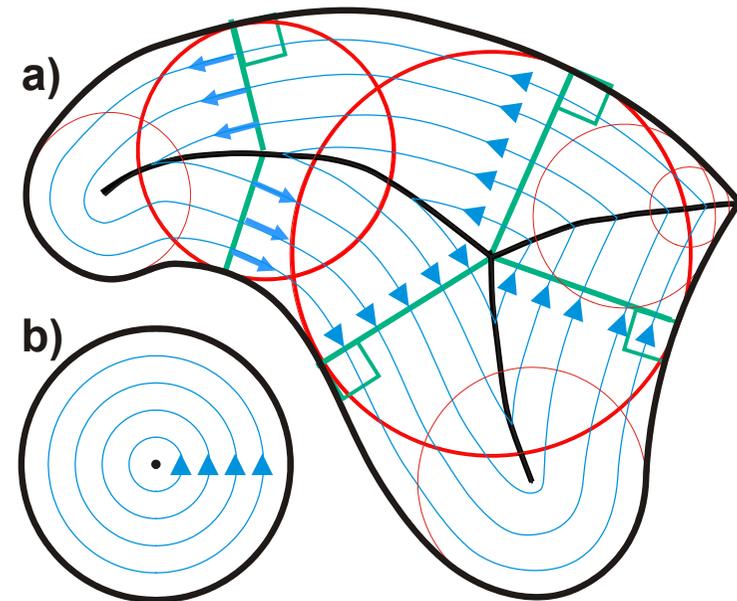
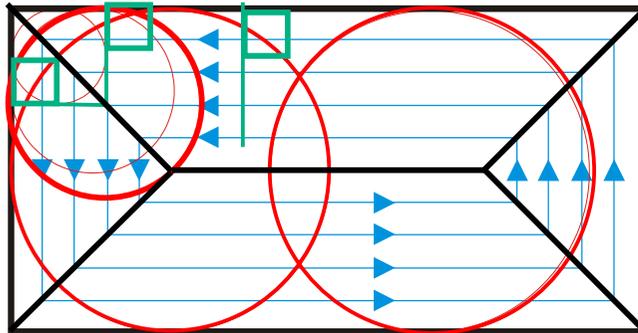
Méthode des caractéristiques

Van den Berg J. Appl. Phys. **60**, 1104 (1986)

J. Militat « Applied Magnetism », ed. R. Gerber et al (1994) 221.

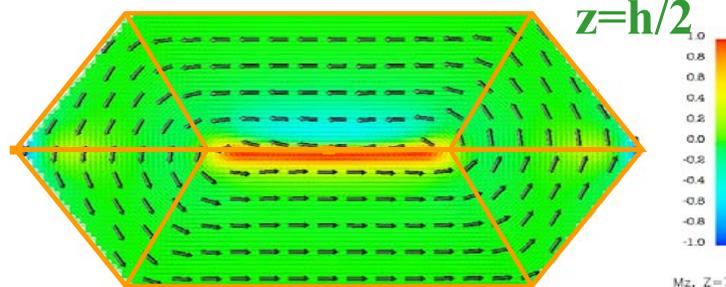
- Hyp :**
- anisotropie négligeable,
 - structure 2D,
 - dimensions du système $\gg \lambda_{\text{ech}}$ et λ_{paroi}

$$\mathbf{m} \begin{cases} \cos(\theta) \\ \sin(\theta) \end{cases}$$

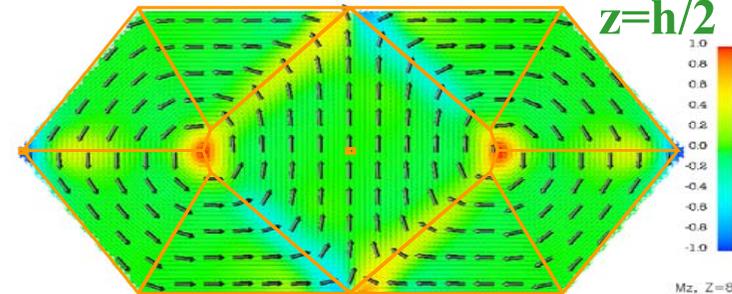


à $H_{\text{app}} = 0$.

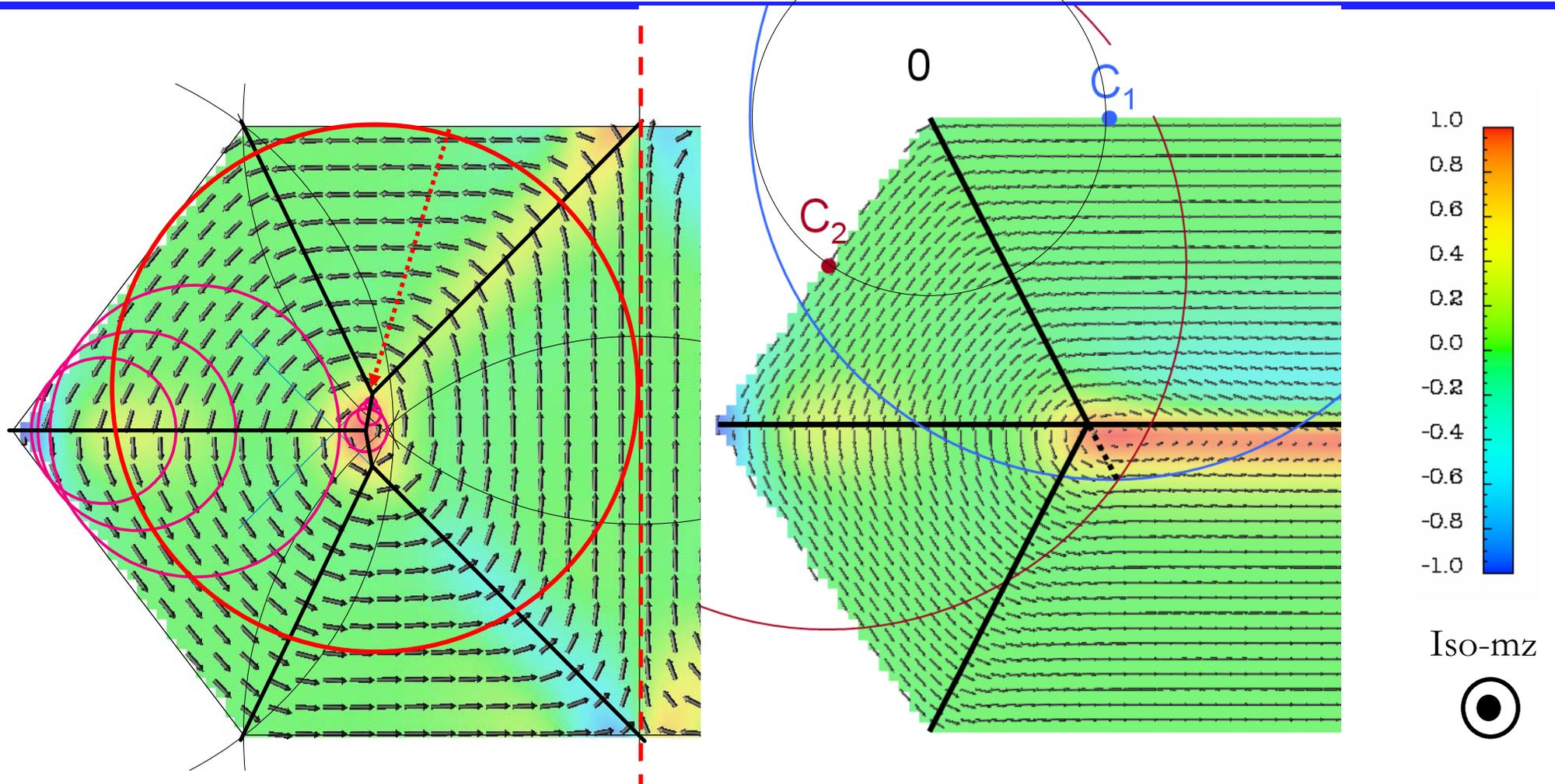
LANDAU



LOSANGE



COMPARAISON AVEC CONSTRUCTIONS DE VAN DEN BERG



Bon accord avec la construction de Van Den Berg

Signature de la paroi de Bloch asymétrique

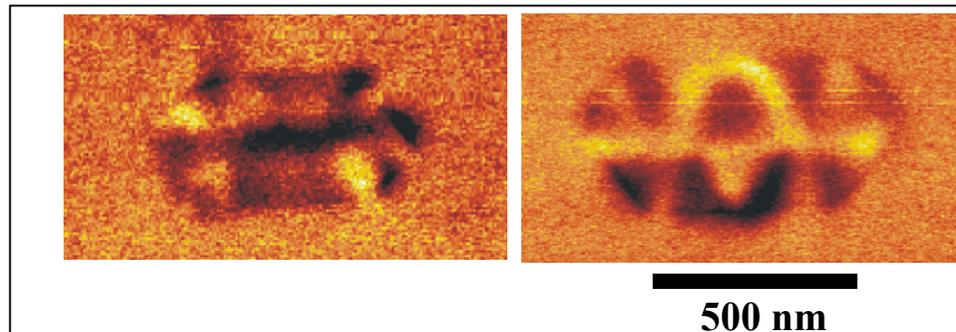


ANALYSE DES IMAGES MFM

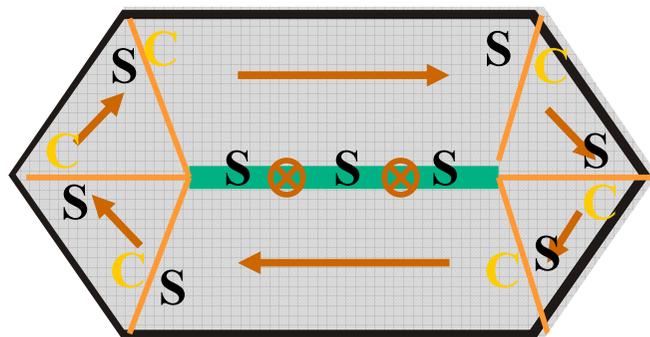
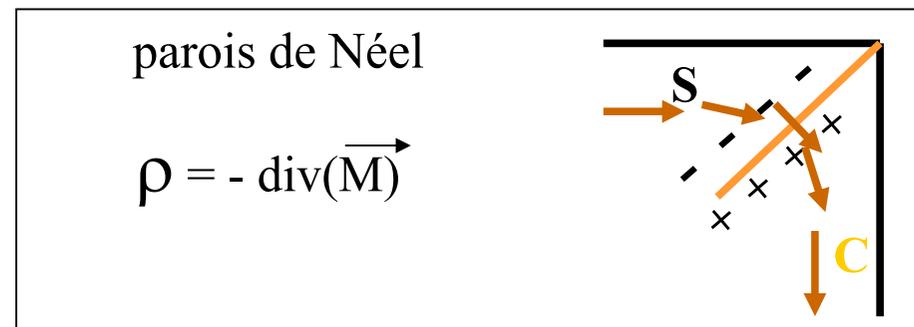
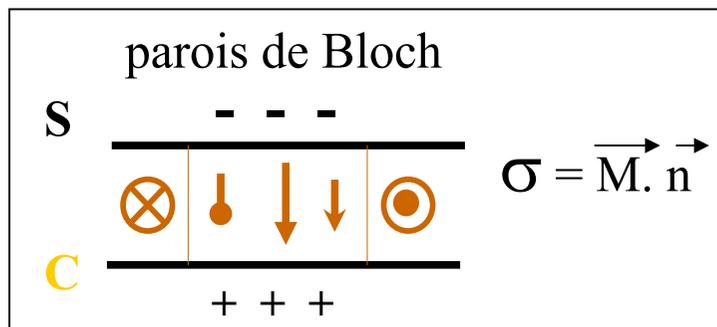
saturation
 $H // [001]$



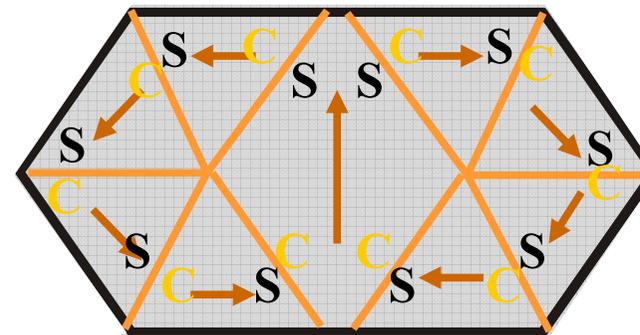
MFM: Y. Samson, DRFMC



Interprétation des images MFM :



LANDAU



LOSANGE



Modèle de réponse MFM : approche monopole

Aimantation dans la couche // Oz

$$M_z = M_s \sin(kx) \quad \text{avec} \quad k = \frac{2\pi}{T}$$

En dehors

$$\mathbf{H} = M_s \sinh\left(\frac{kt}{2}\right) e^{-kz} \begin{cases} \cos(kx) \\ 0 \\ \sin(kx) \end{cases}$$

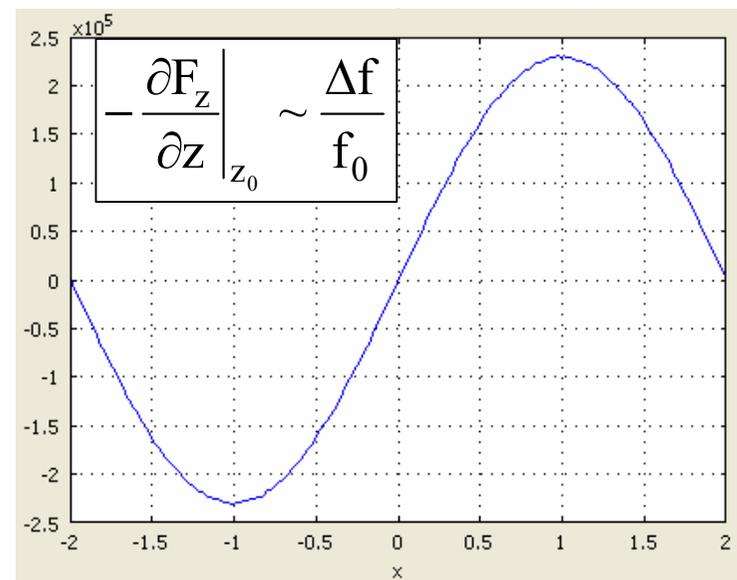
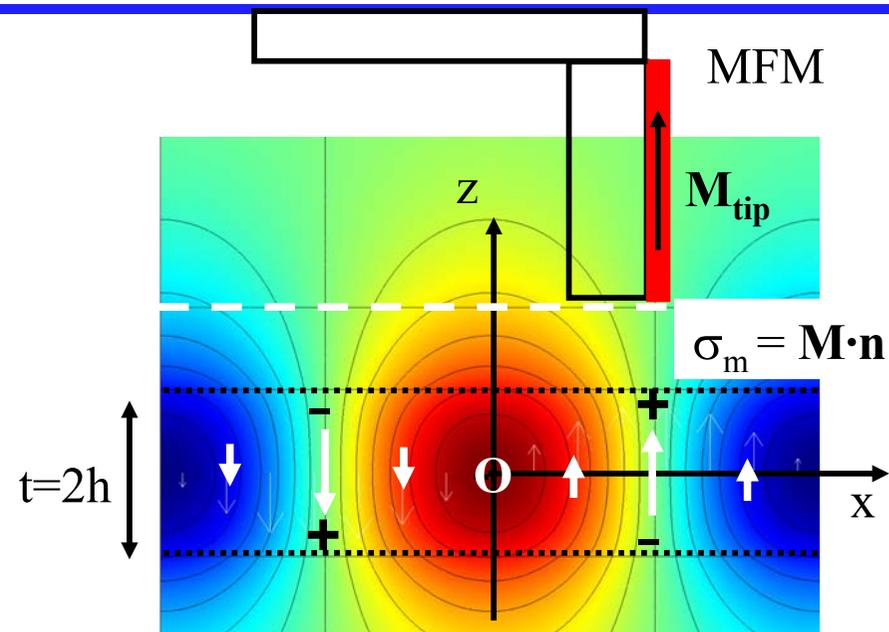
Force magnétique :

$$\mathbf{F} = +\mu_0 \int_{\text{tip}} d^3 r' \text{grad}_{r'} (\mathbf{M}_{\text{tip}}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}'))$$

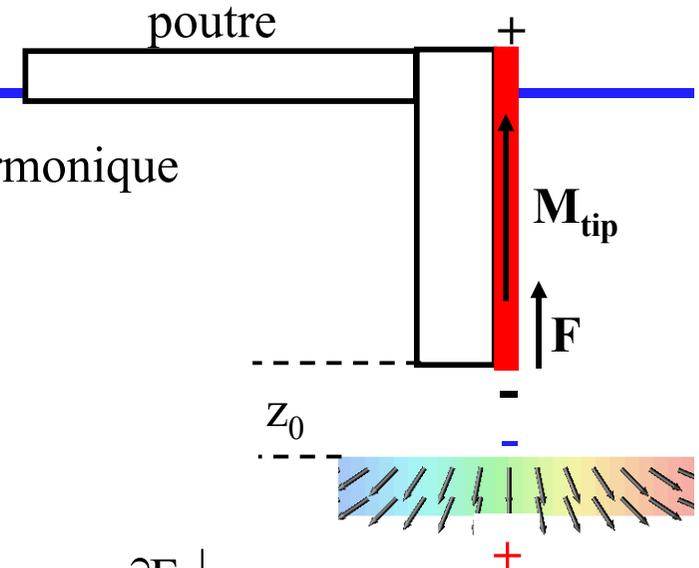
Hypothèse forte : $\mathbf{M}_{\text{tip}} = \mathbf{C}^{\text{ste}}$

$$F_z = -\mu_0 M_{\text{tip}}^z \int_{\text{tip}} d^3 r' \frac{\partial H_z}{\partial z'} \cong -\mu_0 M_{\text{tip}}^z S \int_{z_0}^{L \rightarrow \infty} dz' \frac{\partial H_z}{\partial z'}$$

$$F_z(z_0) \cong +\mu_0 M_{\text{tip}}^z S H_z(z_0)$$



Réponse MFM : mode de détection



- **mode dynamique** : la poutre oscille comme un oscillateur harmonique

autour d'une position z_0 : $m\ddot{z} \cong -c(z - z_0) + F_z^{\text{ext}}(t)$

Fréquence de résonance de l'oscillateur : $f_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{c}{m}}$

+ La force due à la présence du gradient de champ

Pour des petites amplitudes du mouvement, $F_z(z) \cong F_z(z_0) + (z - z_0) \frac{\partial F_z}{\partial z} \Big|_{z_0} + \mathcal{O}(z - z_0)^2$

$$m\ddot{z} \cong -c \left(1 - \frac{1}{c} \frac{\partial F_z}{\partial z} \Big|_{z_0} \right) (z - z_0) + F_z(z_0) + F_z^{\text{ext}}(t)$$

⇒ Changement de fréquence de résonance : $f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{c}{m} \left(1 - \frac{1}{c} \frac{\partial F_z}{\partial z} \Big|_{z_0} \right)} = f_0 \sqrt{1 - \frac{1}{c} \frac{\partial F_z}{\partial z} \Big|_{z_0}}$

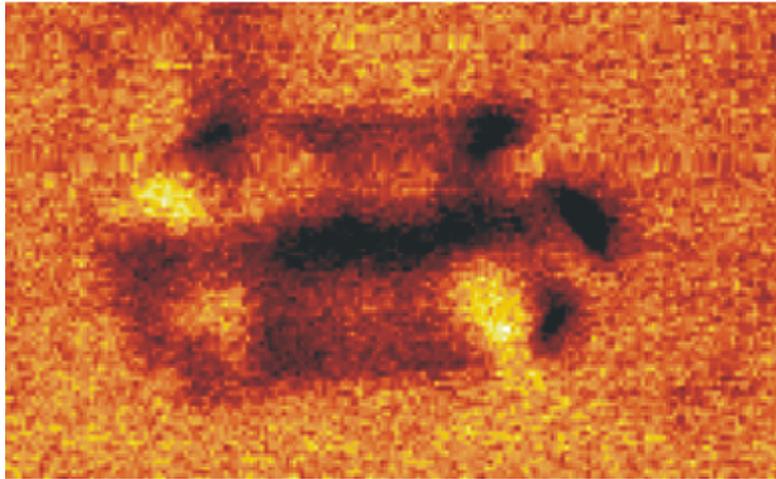
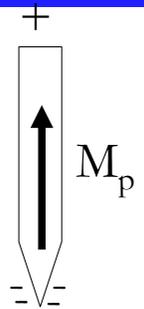
Pour des petites amplitudes du mouvement,

$$\frac{\Delta f}{f_0} \approx -\frac{1}{2c} \frac{\partial F_z}{\partial z} \Big|_{z_0} = -\mu_0 M_{\text{tip}}^z S \frac{1}{2c} \frac{\partial H_z}{\partial z} \Big|_{z_0}$$

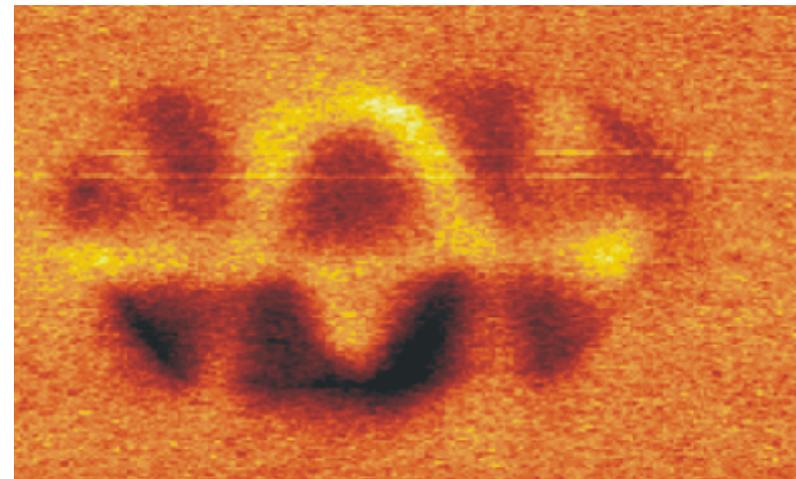
REMANENCE : MFM SIMULE

Pour $\mu_0 H_{\text{app}} = 0$. T Hyp. si pointe \sim monopole \Rightarrow réponse MFM $\sim \partial_z H_z$

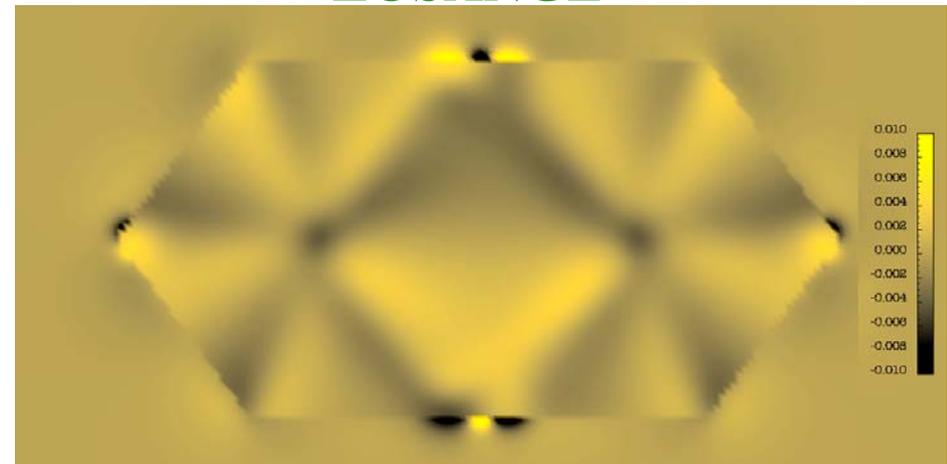
Résolution 50nm \sim hauteur de vol



LANDAU

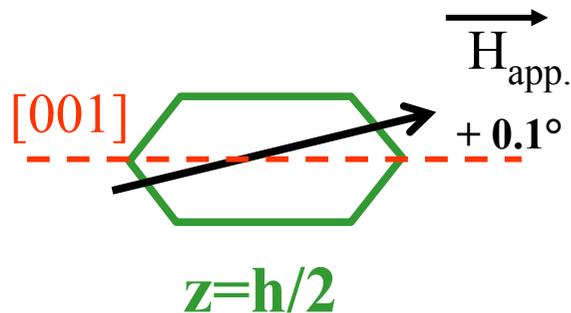
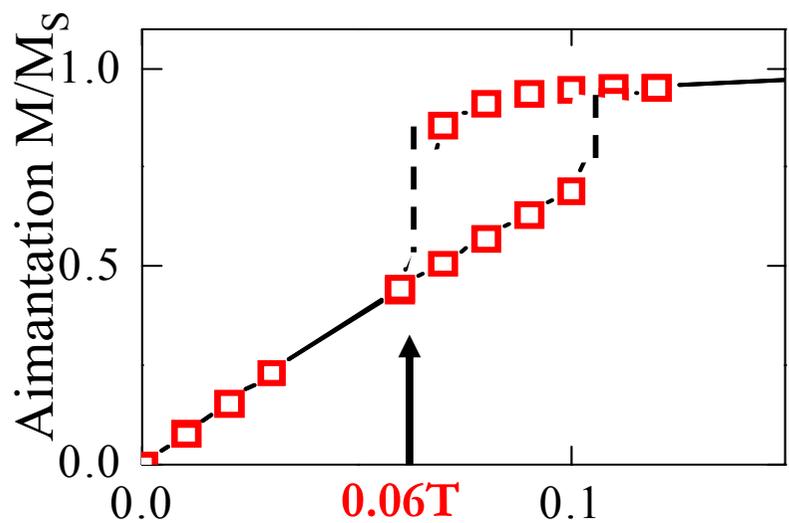


LOSANGE

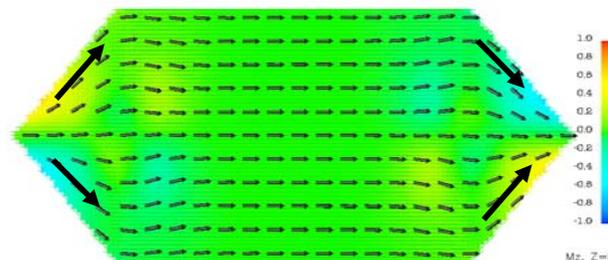


hauteur de vol = 30nm

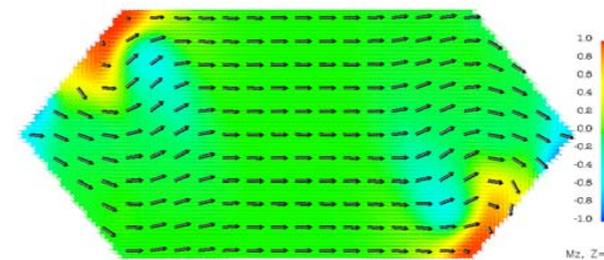
But : comprendre les mécanismes pour atteindre la rémanence



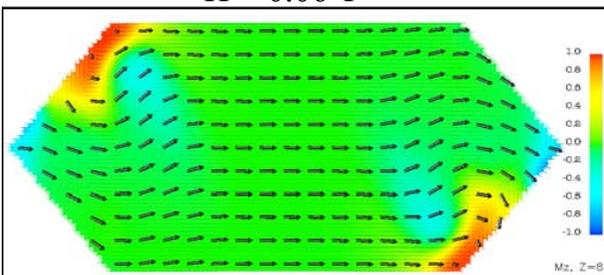
H = 0.09 T



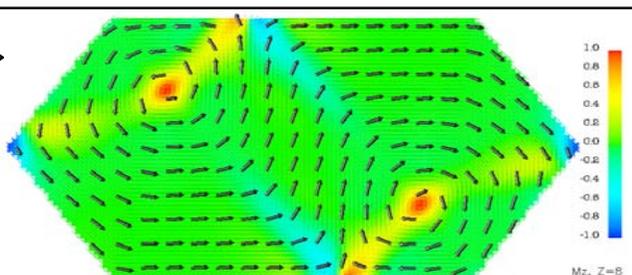
H = 0.08 T



H = 0.06 T

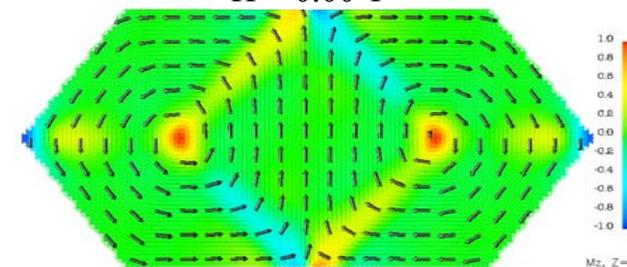


H = 0.06 T

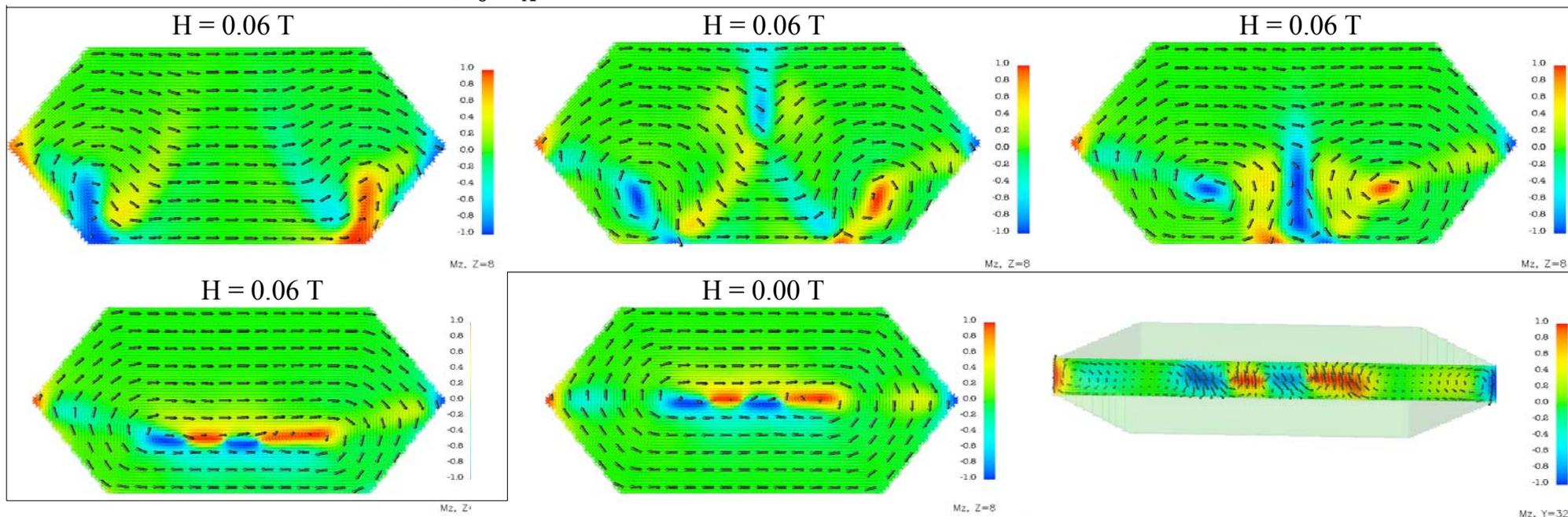
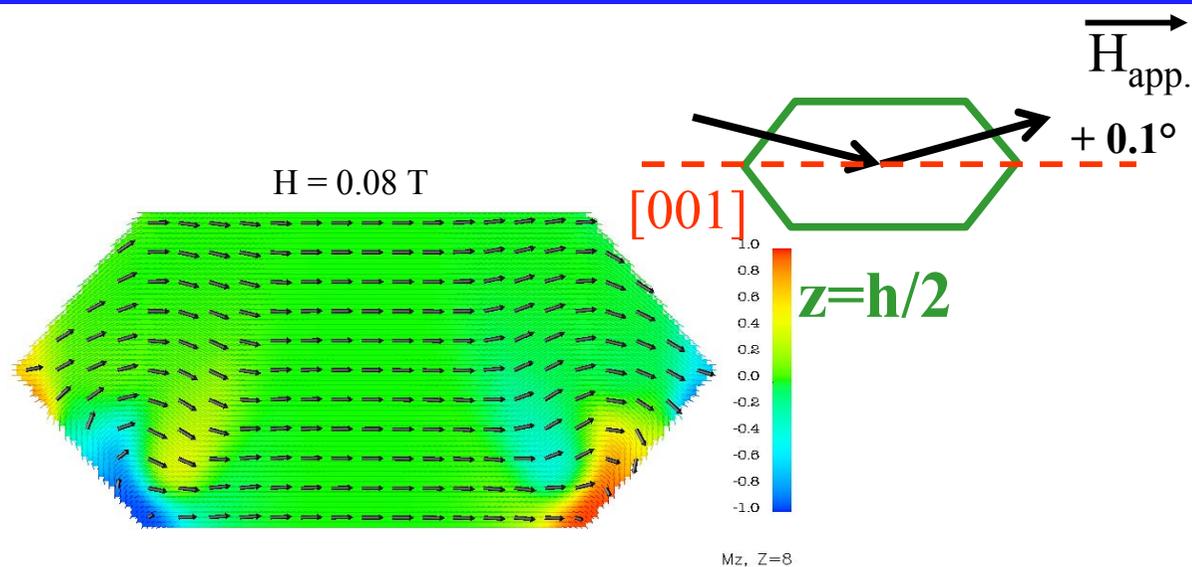
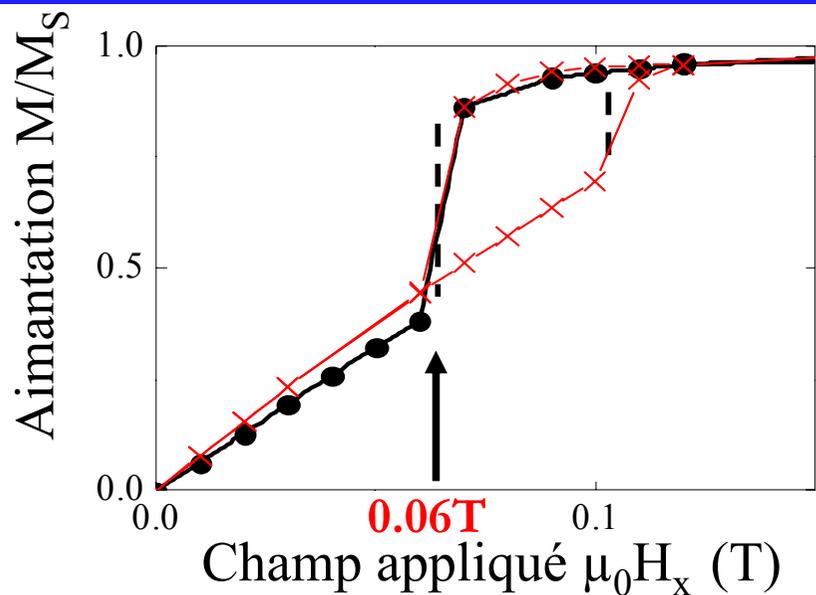


nucléation

H = 0.00 T

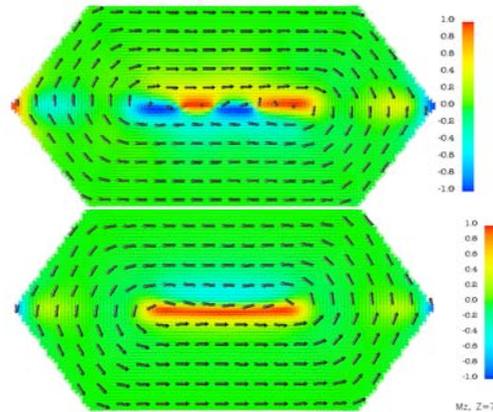


APPLICATION D'UN CHAMP DISSYMETRIQUE

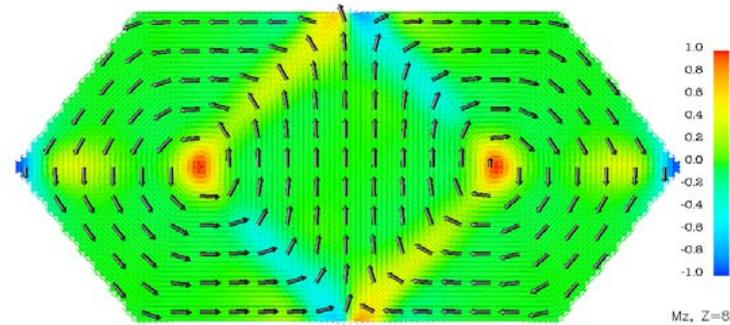


MAGNETISME D'ILOTS 3D COMPACT 3D : H//[001]

$H_{app} // [001]$

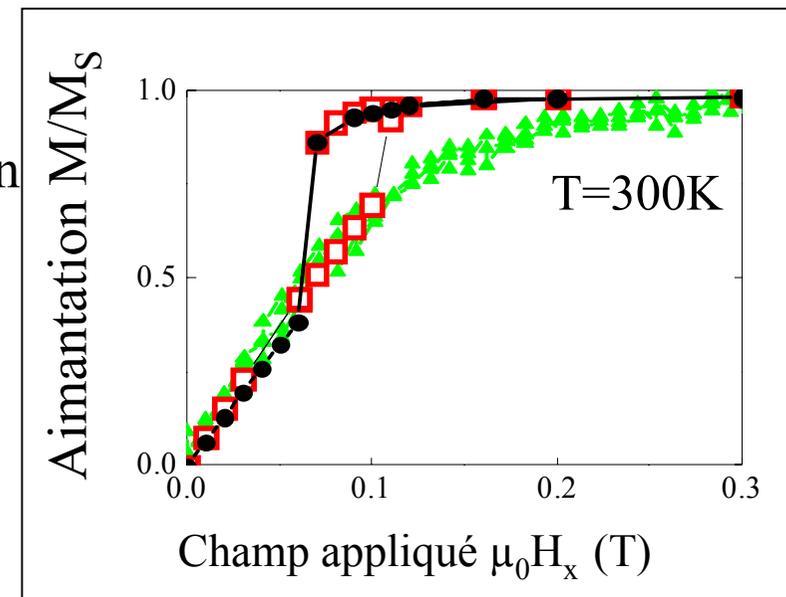


Landau



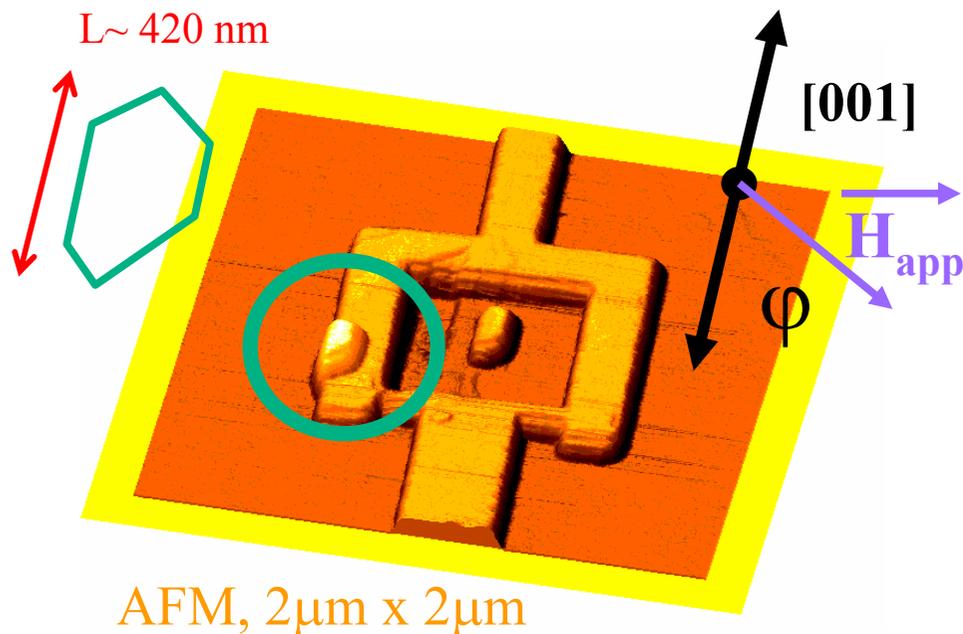
Diamant

- Simulations : évolution vers config. de type Landau ou diamant déterminé par dissymétrisation (perturbation)
- Expérimentalement, peut correspondre à dissymétrie de forme ou agitation thermique...



Mesures macros. insuffisantes pour discerner les configurations micromagnétiques
Activation thermique difficilement simulable.

MESURES MICRO-SQUID D'UN ILOT INDIVIDUEL

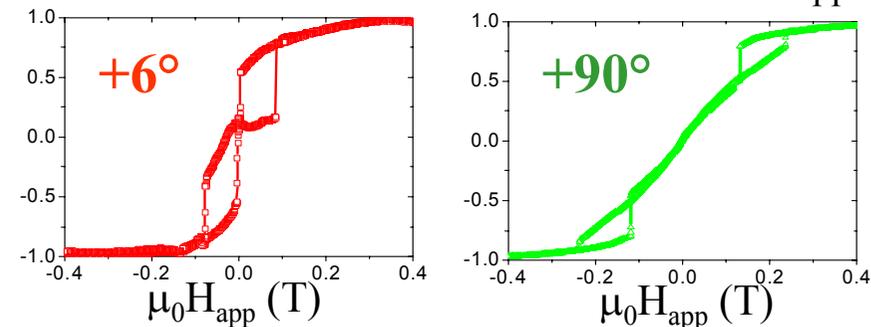


μ -SQUID fabriqué sur l'échantillon :
- dépôt de Nb sur Mo/Fe/Mo(110)
- litho. électronique (D. Mailly, L2M)

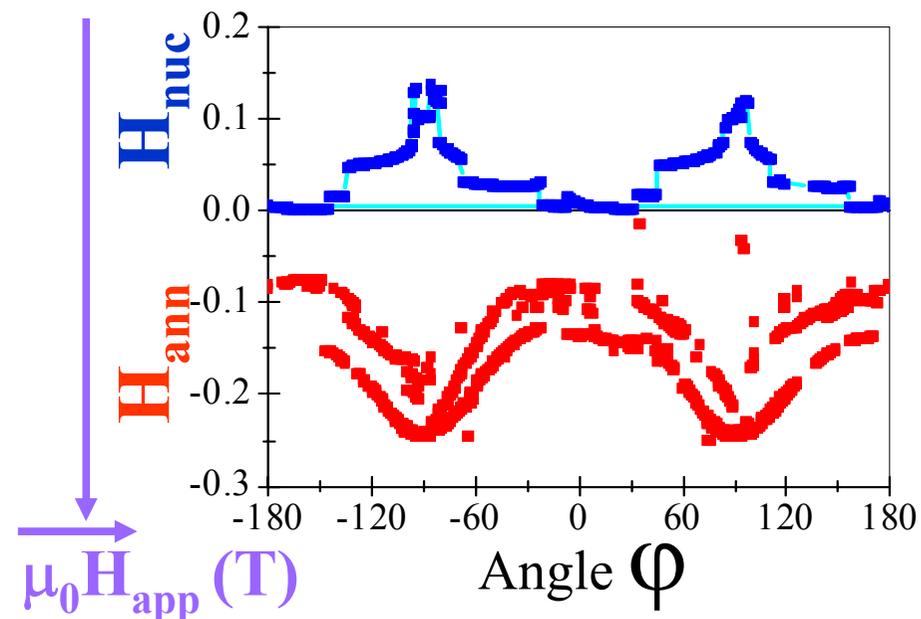
Coll. W. Wernsdorfer



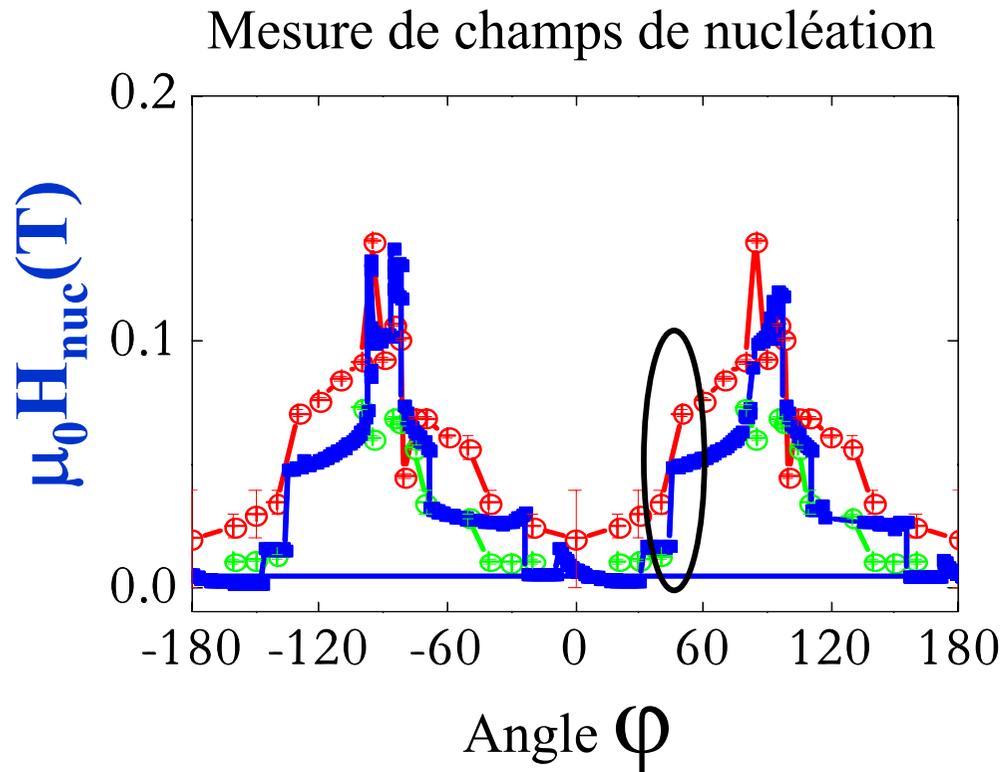
- Variations de flux vs. angle de H_{app} :



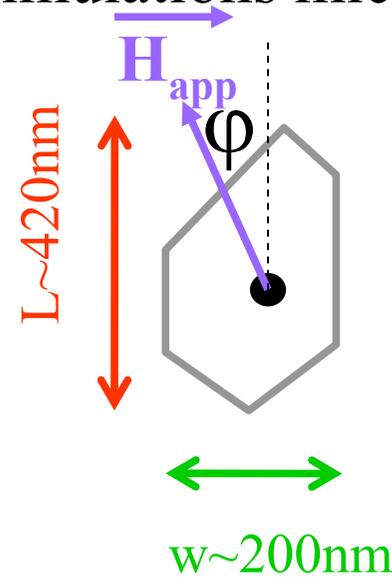
- H_{nuc} et H_{ann} vs. angle de H_{app} :



VARIATIONS DU CHAMP DE NUCLÉATION



Simulations micromagnétiques :



hexaplot
 $h=30\text{nm}$

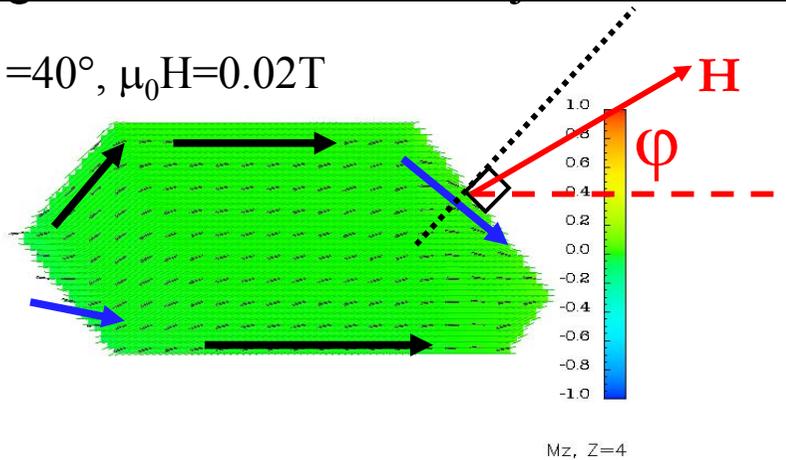
Maillage :
latéral 5nm
vertical $< 5\text{nm}$

- Accord qualitatif pour $H_{nuc}(\varphi)$
- Discontinuités pour angles particuliers

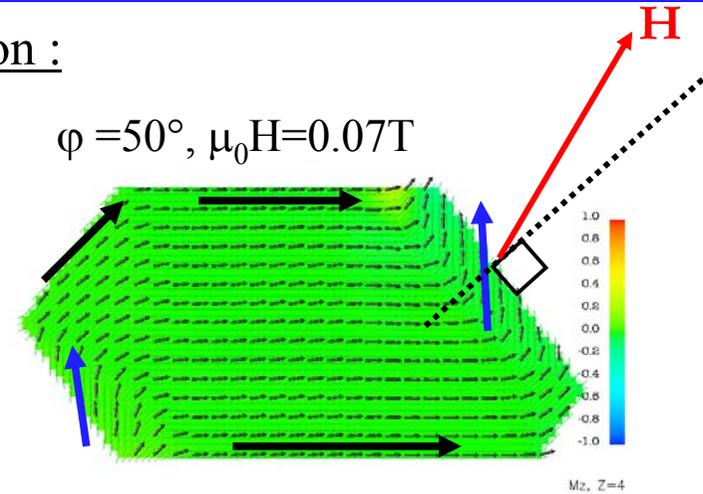
DISCONTINUITES DU CHAMP DE NUCLEATION

Configurations non uniformes juste avant nucléation :

$\varphi = 40^\circ, \mu_0 H = 0.02T$

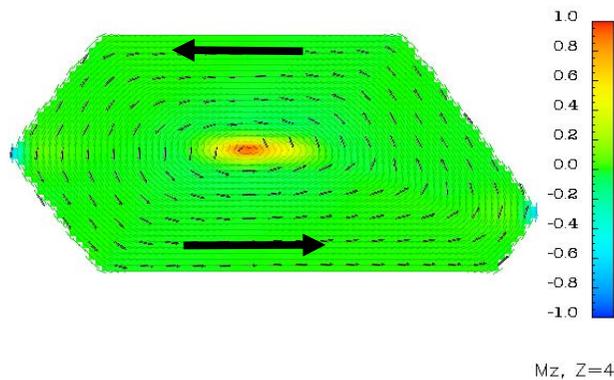


$\varphi = 50^\circ, \mu_0 H = 0.07T$

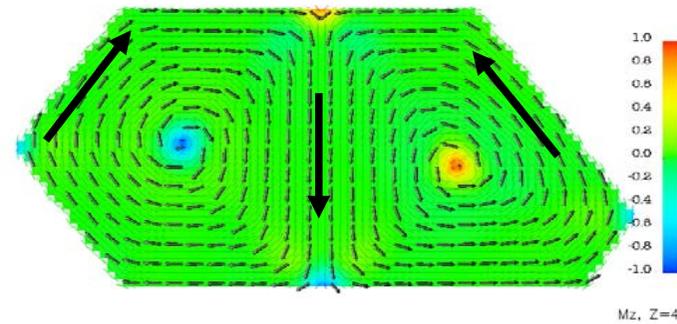


Discontinuités de $H_{nuc}(\varphi)$: propriété intrinsèque liée à la forme de la particule

Configurations à la rémanence :

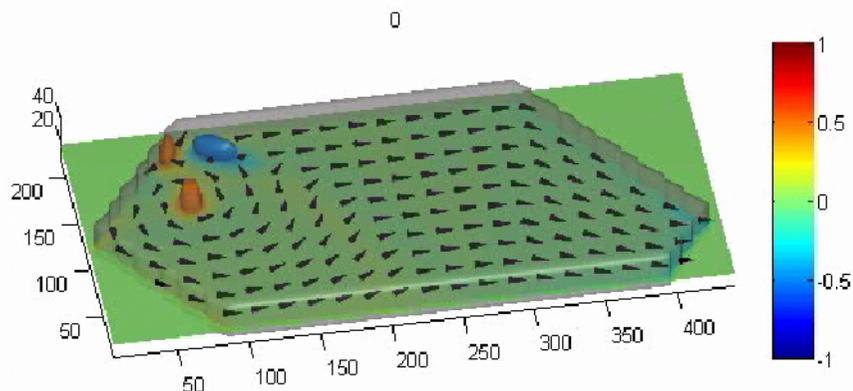


$\varphi = 50^\circ$



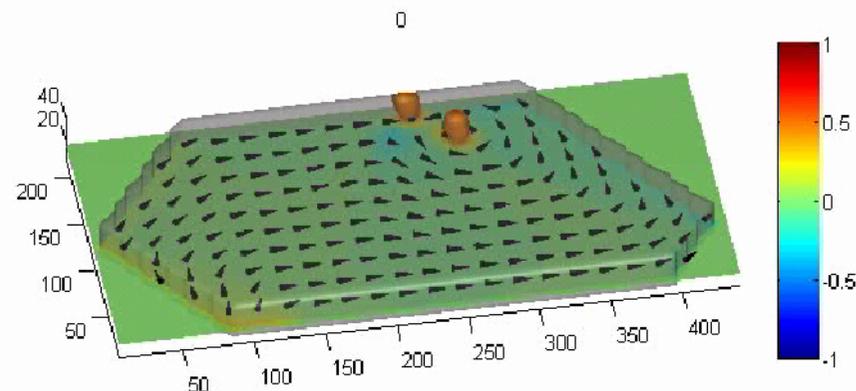
Mécanismes impliqués lors de la nucléation

$\varphi = 40^\circ$, $\mu_0 H_{\text{nuc}} = 6 \text{ mT}$



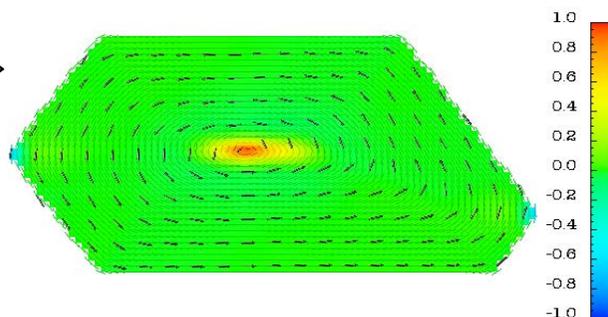
film_ilot_alpha10_006_theta40

$\varphi = 50^\circ$, $\mu_0 H_{\text{nuc}} = 0.06 \text{ T}$

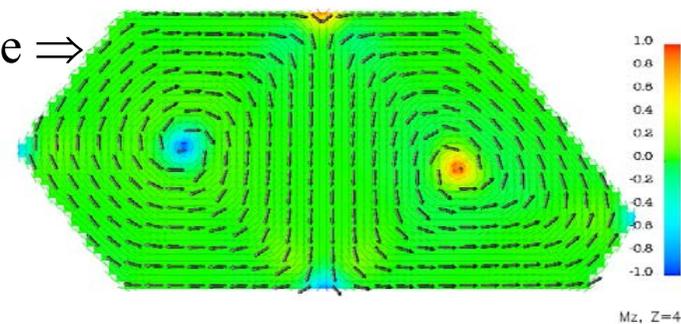


film_ilot_alpha1_0_062_theta50

Rémanence \Rightarrow



Rémanence \Rightarrow



Mz, Z=4

Imagerie XPEEM

X-ray Photoelectron Emission Microscopy (X-PEEM)

Salia Cherifi, Stefania Pizzini, Jan Vogel

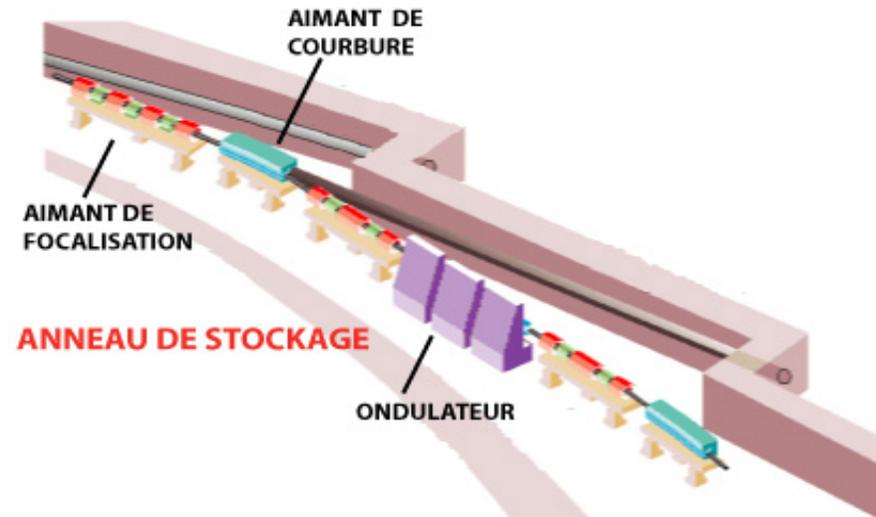
But : imager la distribution d'aimantation en surface des plots



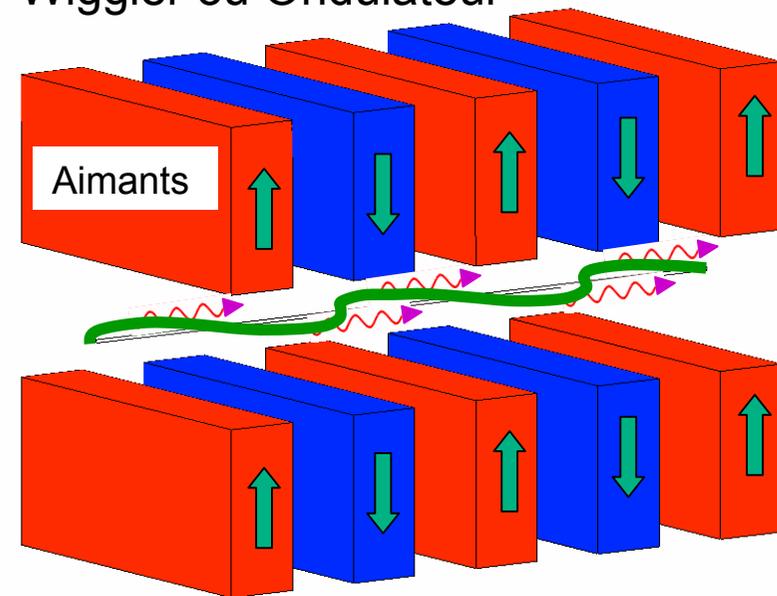
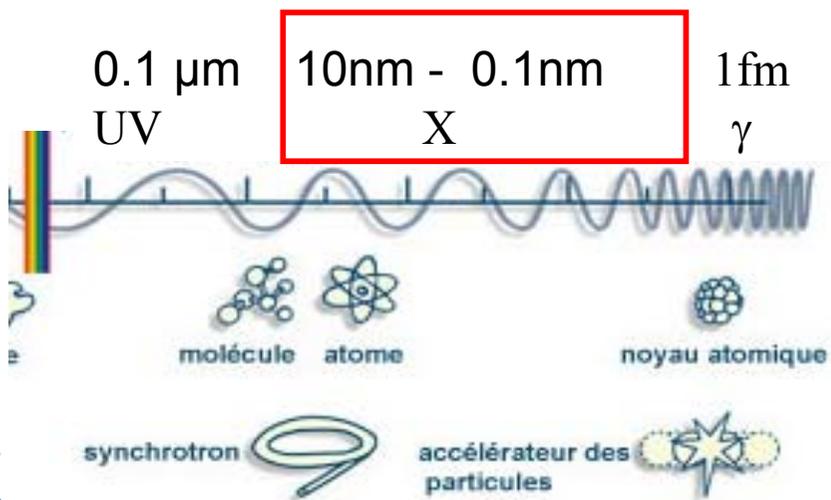
Rayonnement Synchrotron



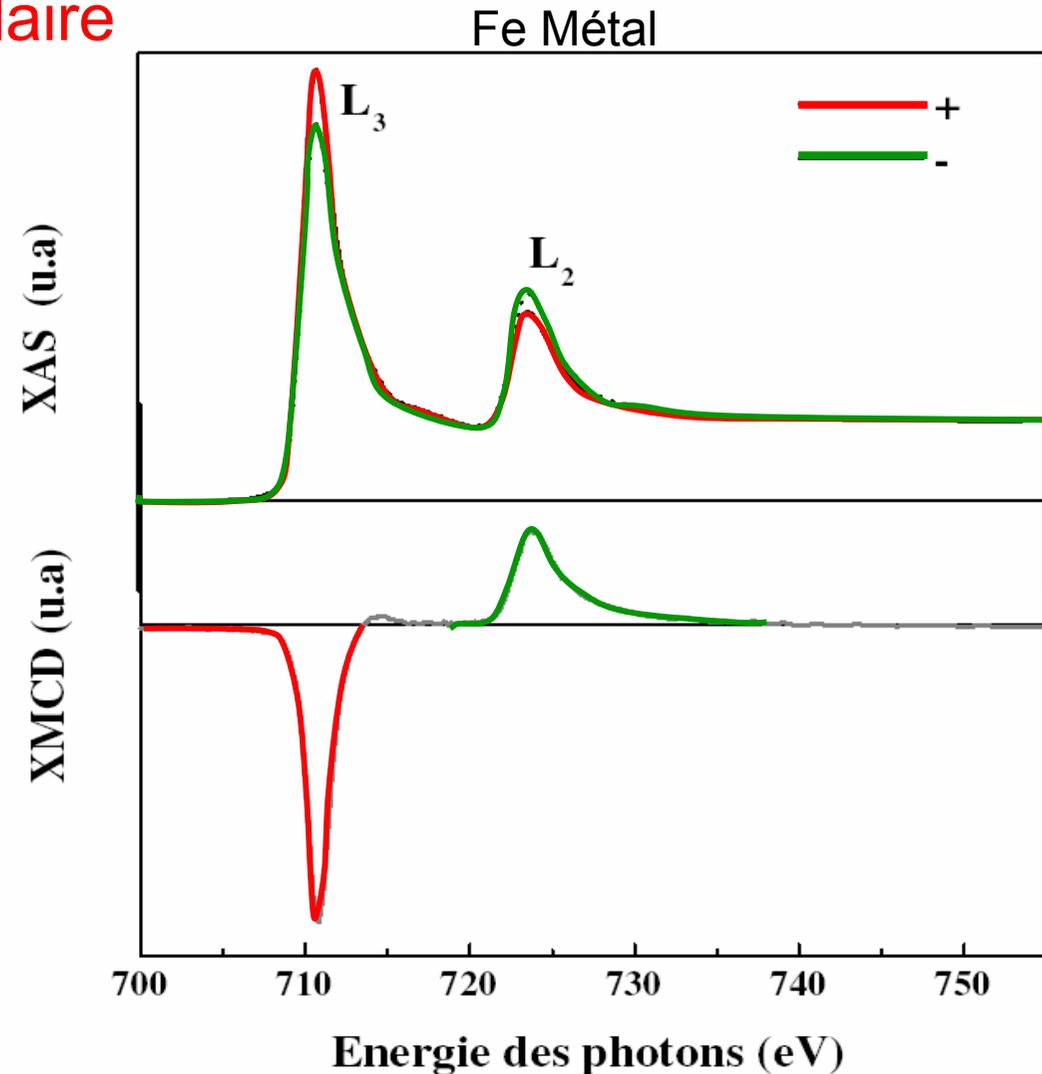
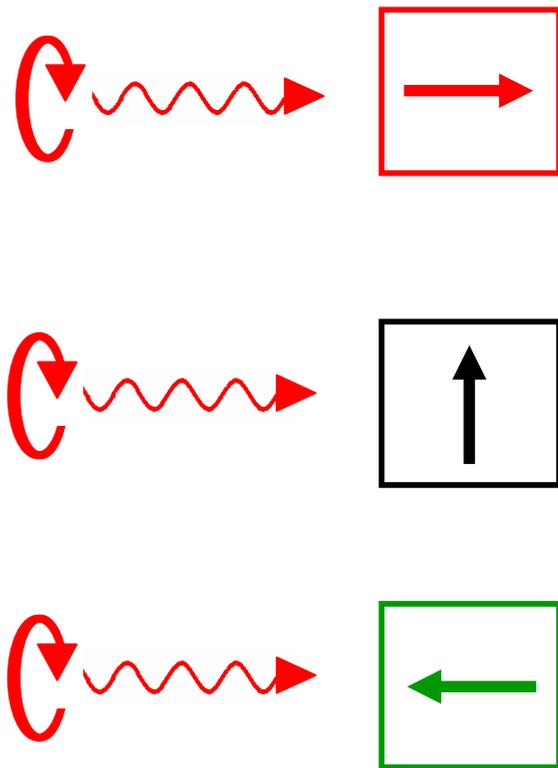
ESRF - Grenoble



Wiggler ou Ondulateur

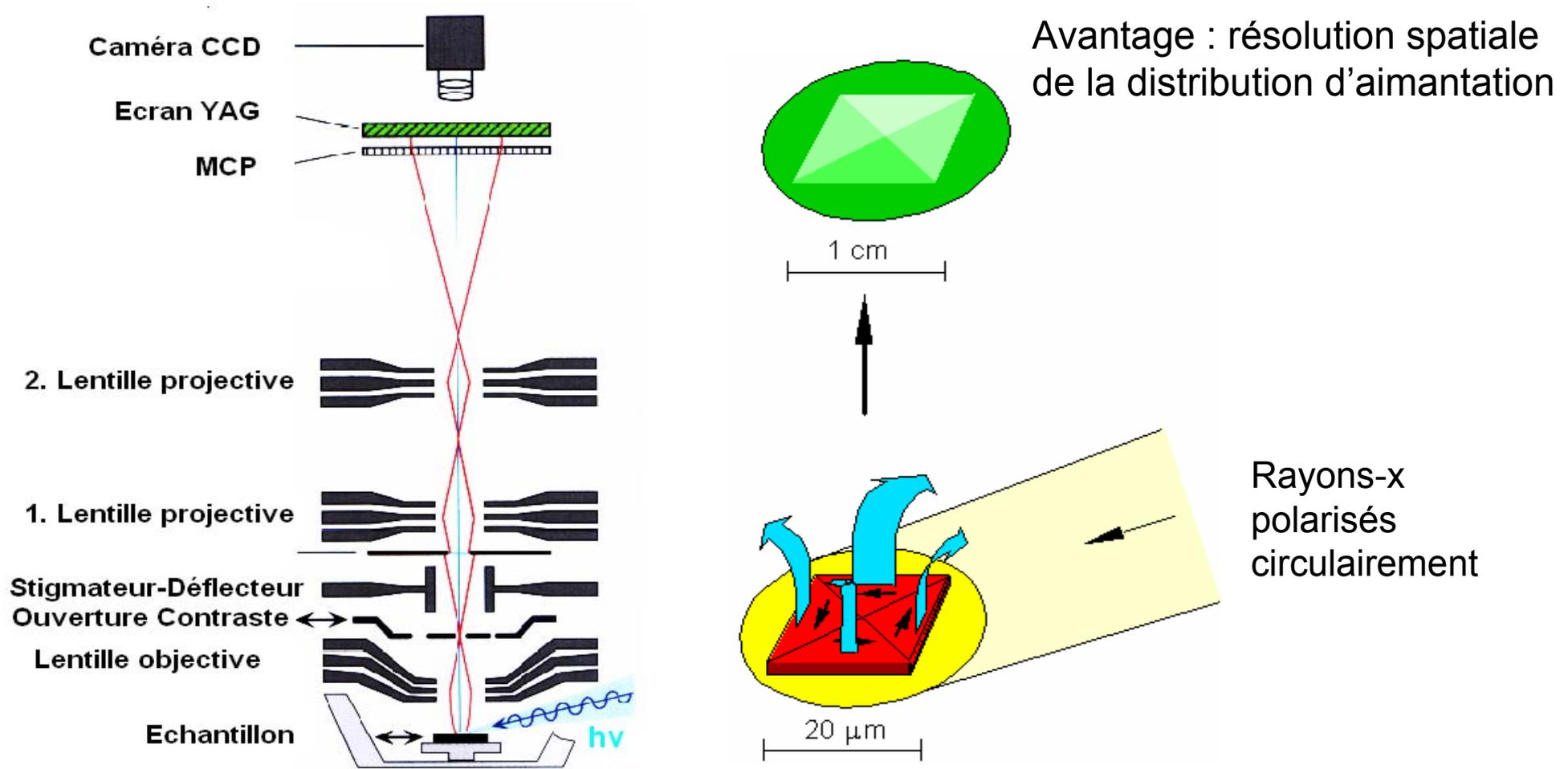


X-ray Magnetic Circular Dichroism (XMCD) : Dichroïsme magnétique circulaire



Énergie des rayons x polarisés accordée à un seuil d'absorption d'un élément magnétique: absorption dépend de la direction d'aimantation locale

X-ray Photoelectron Emission Microscopy (X-PEEM)



Détection de l'absorption locale par détection du nombre d'électrons secondaires en utilisant un microscope électronique

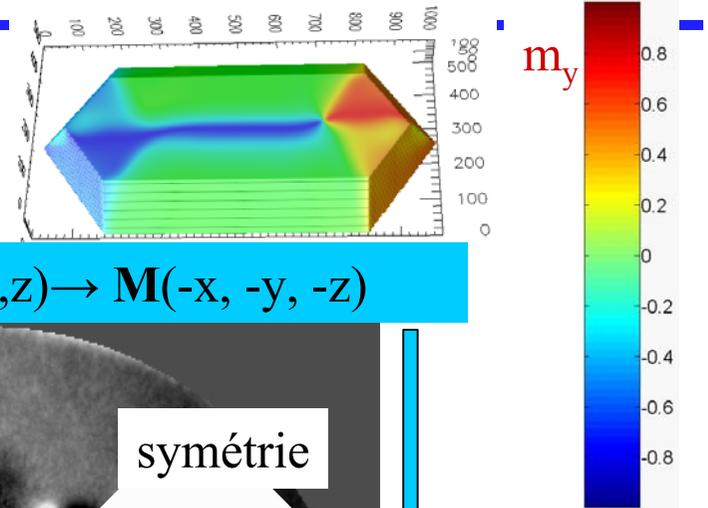
Interprétation des images X-PEEM (Elettra-2003)

Taille : 1000 x 500 x 100 nm - Pas de maillage < 3.9nm

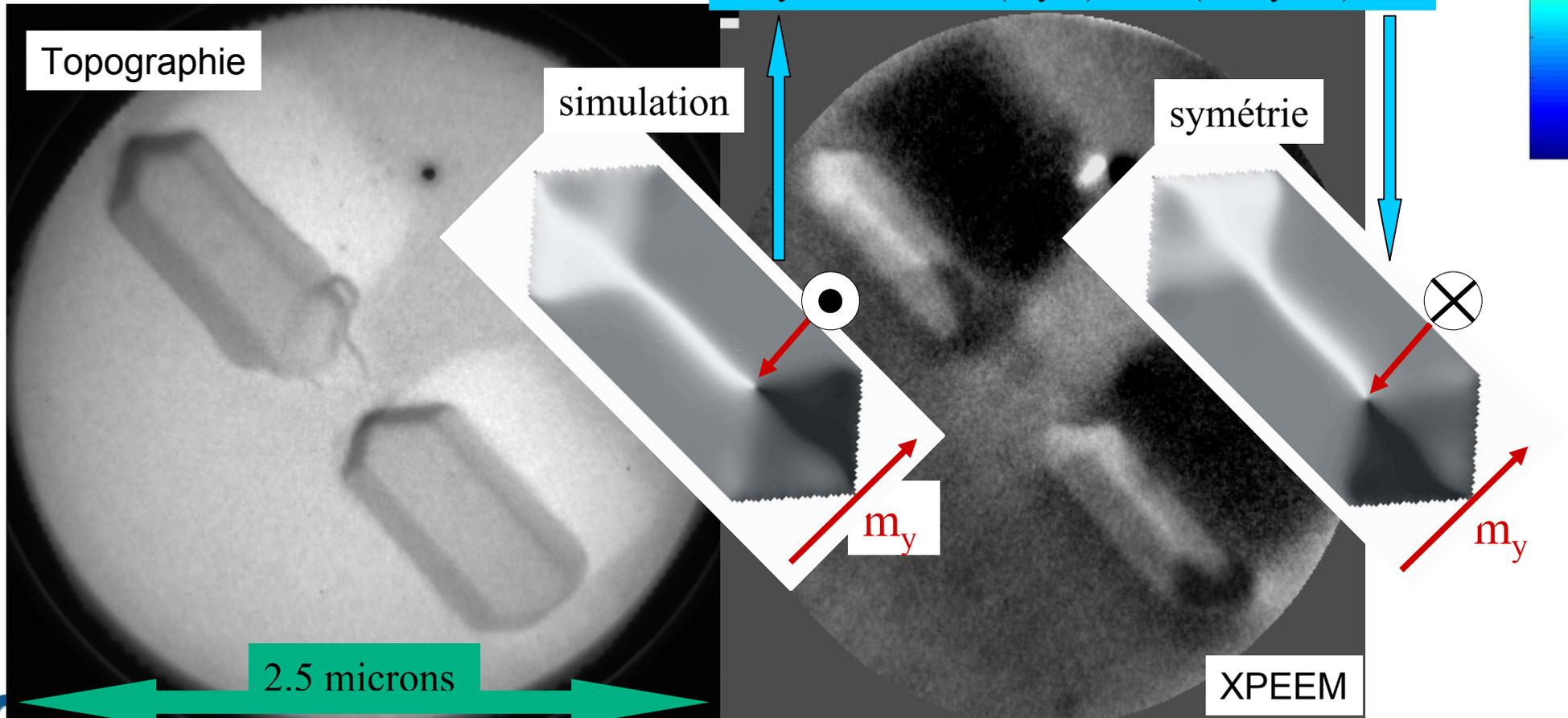
Discrétisation : 256 x 128 x 32 ≈ 1M

A {Base [1030x440]; Top [940x200]; Height [120nm]}

B {Base [980x480]; Top [870x255]; Height [110nm]}



Symétrie : $M(x,y,z) \rightarrow M(-x, -y, -z)$



Configuration à la rémanence de Plots de taille micronique

Taille : 1000 x 500 x 100 nm

Discretisation : 256 x 128 x 32 ~ 1M

Pas de maillage < 3.9nm

Volumes $|m_z| > 0.5$

