HAL
open science

# Influence des phases magnétiques désordonnées sur les propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots F/AF : Etude par simulations Monte Carlo et comparaison à l'expérience.

Haydar Kanso

**To cite this version:**

Haydar Kanso. Influence des phases magnétiques désordonnées sur les propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots F/AF : Etude par simulations Monte Carlo et comparaison à l'expérience.. Autre [cond-mat.other]. Normandie Université, 2019. Français. NNT : 2019NORMR071 . tel-02421185

**HAL Id: tel-02421185**

**https://theses.hal.science/tel-02421185**

Submitted on 20 Dec 2019

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Normandie Université

# THÈSE

**Pour obtenir le diplôme de doctorat**

**Spécialité PHYSIQUE**

**Préparée au sein de l'Université de Rouen Normandie**

# Influence des phases magnétiques désordonnées sur les propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots F/AF : Etude par simulations Monte Carlo et comparaison à l'expérience

**Présentée et soutenue par**

**Haydar KANSO**

| Thèse soutenue publiquement le 18/10/2019 devant le jury composé de | | |
|---|---|---|
| M. Jorge Linares | Professeur, Université de Versailles - St Quentin en Yvelines | Rapporteur |
| M. Florent Tournus | Chargé de Recherches CNRS HDR, Université de Lyon 1 | Rapporteur |
| M. Vincent Baltz | Chargé de Recherches CNRS HDR, IRIG-SPINTEC, Grenoble | Examinateur |
| M. Ivan Labaye | Maître de Conférences, Université du Maine | Examinateur |
| Mme Helena Zapolsky | Professeur, Université de Rouen - Normandie | Examinatrice |
| M. Denis Ledue | Professeur, Université de Rouen - Normandie | Directeur de thèse |

**Thèse dirigée par Denis Ledue, laboratoire GPM (UMR 6634 CNRS**

UNIVERSITÉ DE ROUEN NORMANDIE

ED PSIME

GPM Groupe de Physique des Matériaux

# *Remerciements*

Cette thèse a été réalisé dans le Groupe de Physique des Matériaux (GPM) de l'Université de Rouen au sein de l'Equipe de Aspects Fondamentaux des Transformations de Phases à l'Echelle Nanométrique (ERAFEN).

Je présente mes vifs remerciements à Denis Ledue pour le temps qu'il m'a consacré pour diriger et encadrer ce travail et pour d'avoir partagé ses connaissances avec moi. Sa passion et sa rigueur scientifique ont largement contribué à l'accomplissement de ce travail. Je souhaiterais également de le remercier pour ses qualités humaines et pour avoir me motiver quand il le fallait.

J'exprime mes plus sincères remerciements à Renaud Patte pour son aide et surtout au début de ma thèse dans la partie de la programmation. Son aide, ses conseils et les discussions que nous avons menés m'ont permis de réaliser mes travaux dans les bonnes conditions. Grace à son expérience, j'ai appris beaucoup dans le domaine de simulation numérique.

Je tiens naturellement à remercier les membres du Jury. Mes rapporteurs, Jorge Linares et Florent Tournus. Mes examinateurs, Vincent Baltz, Ivan Labaye et Helena Zapolsky qui a également accepté la présidence de ce jury. Je tiens à vous remercier pour votre lecture attentive et vos remarques constructives.

Je ne pourrai pas oublier de remercier Philippe Pareige de m'avoir accueillie au sein du GPM ainsi que le Centre de Ressource Informatique et d'Applications Numériques de Normandie. Je remercie également la région Normandie et l'union européenne pour le financement.

Je tiens encore à remercier Helena Zapolsky et Vincent Baltz pour la collaboration qu'on a fait ensemble durant ma thèse.

Enfin, je tiens à remercier au plus profond de mon cœur mes parents **Nemer Kanso** et **Najah Kanso**, **mes frères et sœurs**, mes amis qui sont un roc inaltérable et qui me soutiennent dès le début de mes études, grâce à vous je dépasse toutes mes difficultés.

# *Résumé*

Notre objectif est d'améliorer la compréhension du phénomène d'anisotropie d'échange dans les nanoplots en comparaison aux films continus et d'étudier les effets du désordre magnétique à l'interface dans la couche AF sur les propriétés d'anisotropie d'échange.

Dans un premier temps, nous avons utilisé un modèle granulaire qui prend en compte les phases magnétiques désordonnées à l'interface F/AF et nous modélisé ces phases par la présence de grains moins stables à l'interface dans la couche AF. De plus, dans le cas des nanoplots, nous avons pris en compte des grains moins stables localisés sur les bords de la couche AF pour reproduire les effets dus à la méthode de fabrication. Nous avons trouvé qu'il existe deux mécanismes de retournement de la couche F en dépendant de la valeur du couplage ferromagnétique. Si le couplage ferromagnétique faible, le retournement de la couche F s'amorce sur plusieurs centres de nucléation et s'effectue sans propagation. Alors que si le couplage ferromagnétique fort, le retournement de la couche F s'amorce en un seul centre de nucléation situé à un coin du nanoplot puis se propage à partir de ce coin. Ensuite notre modèle a permis d'expliquer les principales caractéristiques des comportements observés expérimentalement dans les bicouches Co/IrMn et NiFe/IrMn (pour différentes tailles latérales), à différentes températures de mesure et pour différentes épaisseurs de la couche AF. Plus précisément, les valeurs du champ d'échange simulé dans les films continus, à température ambiante, sont plus grandes que dans les nanoplots pour les faibles épaisseurs de la couche IrMn alors que c'est le contraire lorsque cette épaisseur augmente.

Dans un deuxième temps, Nous avons utilisé un modèle atomique qui prend en compte la frustration magnétique dans la couche AF et la présence de défauts structuraux tels que les joints de grains et l'interdiffusion. Nous avons trouvé que l'effet combiné de la frustration, des joints de grains et de la surface induit des configurations magnétiques non colinéaires complexes (présence de domaines magnétiques) dans la couche AF à l'interface. Nos résultats montrent que la non-colinéarité des moments AF à l'interface diminue le couplage effectif à l'interface F/AF et diminue la constante d'anisotropie effective de la couche AF. Nos résultats montrent également que la présence de joints de grains lorsqu'il y a de la frustration renforce la stabilité de la couche AF à 0K alors qu'elle la diminue à température non nulle. Enfin, nous avons trouvé que l'interdiffusion diminue fortement le champ d'échange et rend la couche AF plus stable, ce qui correspond à une diminution du couplage effectif à l'interface. Il est important de noter que les valeurs du champ d'échange simulé sont dans ce cas réalistes, ce qui met en évidence que l'interdiffusion est probablement un des facteurs essentiels pour lesquels les champs d'échange mesurés expérimentalement sont nettement plus faibles que ceux prévus par les modèles simples.

***Mots clés*** *: Anisotropie d'échange, Nanoplots, Films continues, Effets de bords, Joints grains, Frustration, Approche granulaire, Approche atomique, Simulation Monte Carlo.*

# *Abstract*

Our goal is to improve the comprehension of the exchange bias (EB) in nanodots in comparison with the continuous films and to study the effects of the interfacial magnetic disorder on the EB properties.

Firstly, we use a granular model which considers disordered interfacial phases by considering less stable magnetic grains at the interface in the antiferromagnetic (AF) layer. We further model the effect of the nanofabrication process by considering less stable magnetic grains at the edges, due to grain cutting. Our results evidence two different mechanisms of the ferromagnetic (F) layer reversal depending on the magnitude of the coupling between F grains. In the weak coupling regime relative to the anisotropy, the exchange field is independent of the coupling. By contrast, in the strong coupling regime, the exchange field depends on the coupling. Our model also well explain some experimental features observed in NiFe/IrMn and Co/IrMn nanodots (for various lateral sizes) and continuous films, at various measurement temperatures and various AF thicknesses. More precisely, the simulated values of the exchange field in the continuous films, at room temperature, are larger than in the nanodots for small values of the AF thicknesses. However, it is the opposite when this thickness increases.

Secondly, we use an atomic model which considers the magnetic frustration inside the AF layer and the presence of structural defects such as grain boundaries and interdiffusion. We found that the combination effect of grain boundaries, frustration and surface can result in complex magnetic configurations in the AF layer at the interface (magnetic domains). Our results show that the non-collinearity of the AF moments at the interface decreases the effective coupling at the interface and decreases the effective anisotropy constant of the AF layer. Our findings indicate that combination effect of grain boundaries and frustration make the AF layer more stable at 0 Kelvin and less stable at non-zero temperature. Our results show that the interdiffusion decrease the simulated values of the exchange field and make the AF more stable which corresponds to a decrease of the effective coupling at the interface.
It is important to note that the simulated values of the exchange field are realistic values, which highlights that the interdiffusion is probably one of the essential factors which can give simulated values close to the experimental values.



***Keywords:*** *Exchange bias, Nanodots, Continuous films, Edges effects, Grain boundaries, Frustration, Granular approach, Atomic approach, Monte Carlo simulation.*

# Table des matières

**Introduction** ..... **11**

**Chapitre I Généralités sur le magnétisme et l'anisotropie d'échange** ..... **13**

I.1 Introduction ..... 13

I.2 Notions de base en magnétisme ..... 13

I.2.1 Energie d'échange ..... 14

I.2.1.1. L'échange direct ..... 14

I.2.1.2 L'échange indirect ..... 14

I.2.2 Energie d'anisotropie ..... 15

I.2.2.1 L'anisotropie magnétocristalline ..... 15

I.2.2.2 L'anisotropie magnétoélastique ..... 16

I.2.2.3 L'anisotropie de forme ..... 16

I.2.3 Interaction dipolaire ..... 17

I.2.4 Energie Zeeman ..... 17

I.3 Domaines magnétiques ..... 18

I.4 Superparamagnétisme ..... 19

I.5 Anisotropie d'échange ..... 20

I.6 Modèles d'anisotropie d'échange ..... 22

I.6.1 Modèle de Meiklejohn et Bean ..... 22

I.6.2 Modèle de Néel et Mauri ..... 25

I.6.3 Modèle de Malozemoff ..... 26

I.6.4 Modèle de Nowak ..... 26

I.7 Applications de l'anisotropie d'échange ..... 27

I.7.1 Magnétorésistance géante (MRG) et vanne de spin ..... 28

1.7.2 Mécanismes d'écriture et de lecture dans le disque dur ..... 29

I.7.3 Magnétorésistance tunnel (MRT) et jonction tunnel ..... 29

1.7.4 Mécanisme de fonctionnement d'une MRAM ..... 30

**Chapitre II Simulation numérique ..... 32**

II.1 Généralités sur la simulation numérique ..... 32

II.2 Les principales méthodes de simulation numérique ..... 32

II.2.1 Les méthodes *ab initio* ..... 32

II.2.2 La dynamique moléculaire ..... 33

II.2.3 La simulation micromagnétique ..... 33

II.2.4 La méthode Monte Carlo ..... 33

II.3 Généralités sur la méthode Monte Carlo ..... 34

II.3.1 Méthode Monte Carlo standard basée sur l'algorithme de Metropolis ..... 35

II.3.2 Méthode Monte Carlo quantifiée en temps ..... 36

II.3.3 Méthode Monte Carlo cinétique ..... 37

**Chapitre III Propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots et des films continus (NiFe/IrMn et Co/IrMn) en comparaison avec les résultats expérimentaux : Approche granulaire ..... 39**

III.1 Introduction ..... 39

III.2 Modèle ..... 41

III.2.1 Modélisation structurale ..... 41

III.2.2 Modélisation magnétique ..... 43

III.2.2.1 Caractéristiques des films continus et des nanoplots ..... 43

III.2.2.2 Hamiltonien ..... 44

III.2.2.3 Températures de blocage ..... 46

III.3 Résultats sur les bicouches NiFe/IrMn ..... 47

III.3.1 Procédures expérimentales ..... 47

III.3.2 Paramètres numériques ..... 49

III.3.2.1 Paramètres magnétiques de la couche F ..... 49

III.3.2.2 Paramètres magnétiques de la couche AF ..... 49

III.3.2.3 Paramètres magnétiques des PG et $PG_B$ ..... 49

III.3.2.4 Interactions d'échange effectives interfaciales ..... 50

III.3.2.5 Bilan des paramètres numériques ..... 50

III.3.3 Effet du couplage effectif entre les grains F ..... 50

III.3.3.1 Température de mesure $T_M$ = 4 K ..... 51

III.3.3.2 Température de mesure $T_M$ = 298 K ..... 54

III.3.4 Comparaison avec les résultats expérimentaux ..... 55

III.3.4.1 Effet de l'épaisseur de la couche AF sur $H_E$ ($T_M$ = 298 K) ..... 55

III.3.4.2 Effets de taille sur les propriétés d'anisotropie d'échange à $T_M$ variable ..... 58

III.4 Résultats sur les bicouches Co/IrMn ..... 61

III.4.1 Paramètres numériques ..... 61

III.4.1.1 Paramètres magnétiques de la couche F ..... 61

III.4.1.2 Interactions d'échange effectives interfaciales ..... 61

III.4.1.3 Bilan des paramètres numériques ..... 62

III.4.2 Effet de l'épaisseur de la couche AF sur les propriétés d'anisotropie d'échange ($T_M$ = 298 K) ..... 62

III.4.3 Effet de la température et de l'épaisseur de la couche AF sur les propriétés d'anisotropie d'échange ..... 65

**Chapitre IV Effets de l'interdiffusion et des joints de grains sur les propriétés d'anisotropie d'échange de nanoplots F/AF : Approche atomique ..... 69**

IV.1 Introduction ..... 69

IV.2 Modèle ..... 70

IV.2.1 Modélisation structurale ..... 70

IV.2.2 Modélisation magnétique ..... 71

IV.2.2.1 Energie d'échange ..... 71

IV.2.2.2 Energie d'anisotropie ..... 73

IV.2.2.3 Energie Zeeman ..... 73

IV.2.2.4 Champs de retournements selon le Modèle de Meiklejohn et Bean ..... 73

IV.3 Paramètres numériques ..... 76

IV.3.1 Paramètres de la couche F ..... 76

IV.3.2 Paramètres de la couche AF ..... 76

IV.3.3 Bilan des paramètres numériques ..... 76

IV.4 Résultats préliminaires (couche F uniquement : $e_F$ = 2 plans) ..... 76

IV.4.1 Influence du nombre de pas MC sur le champ coercitif ($T_M$ = 0,1 K) ..... 77

IV.4.2 Impact de R sur le champ coercitif ($n_{MCS} = 6\times10^4$) ..... 78

IV.4.3 Influence de $D_F$ (R = 0,02 - $n_{MCS} = 6\times10^4$) ..... 81

IV.4.4 Effet de la température sur le champ coercitif ..... 82

IV.5 Résultats sur les nanoplots F/AF avec joints de grains ..... 83

IV.5.1 Interactions limitées aux 1$^{ers}$ voisins dans la couche AF ($J_2^{AF} = 0$ K) ..... 83

IV.5.1.1 Effet de $J_{int}$ à $T_M = 0,1$ K ..... 84

IV.5.1.2 Effet de la température ..... 87

IV.5.2 Prise en compte des interactions aux 2$^{èmes}$ voisins dans la couche AF ($J_2^{AF} \neq 0$ K) ..... 89

IV.5.2.1 Effet de $J_2^{AF}$ sur les configurations magnétiques à $T_M = 0,1$ K ..... 89

IV.5.2.2 Effet de $J_{int}$ sur $H_E$ et $H_C$ pour différentes valeurs de $J_2^{AF}$ ($T_M = 0,1$ K) ..... 93

IV.5.2.3 Effet de la température sur $H_E$ et $H_C$ pour différentes valeurs de $J_2^{AF}$ et $J_{int}$ ... 96

IV.6 Résultats sur les nanoplots F/AF sans joint de grains ..... 99

IV.6.1 Configurations magnétiques à $T_M = 0,1$ K pour différentes valeurs de $J_2^{AF}$ ..... 100

IV.6.2 Effet de $J_{int}$ sur $H_E$ et $H_C$ pour différentes valeurs de $J_2^{AF}$ ($T_M = 0,1$ K) en comparaison avec le nanoplot contenant des joints de grains ..... 103

IV.6.3 *Effet de la température sur $H_E$ et $H_C$ pour différentes valeurs de* $J_2^{AF}$ et $J_{int}$ en comparaison avec le nanoplot avec joints de grains ..... 103

IV.7 Influence de l'épaisseur de la couche AF (nanoplots avec joints de grains) ..... 105

IV.7.1 Effet de $J_{int}$ pour différentes valeurs de $J_2^{AF}$ et de $e_{AF}$ à $T_M = 0,1$ K ..... 105

IV.7.2 Effet de la température pour plusieurs valeurs de $J_2^{AF}$, de $J_{int}$ et de $e_{AF}$ ..... 108

IV.8 Influence de l'interdiffusion à l'interface F/AF (nanoplots avec joints de grains) .... 109

IV.8.1 Effet de $x_F$ sur les configurations magnétiques à basse température ..... 110

IV.8.2 Effet de $J_{int}$ sur $H_E$ et $H_C$ pour différentes valeurs de $x_F$ et de $J_2^{AF}$ à $T_M = 0{,}1$ K . 113

IV.8.3 Effet de la température sur $H_E$ et $H_C$ pour différentes valeurs de $x_F$ et de $J_2^{AF}$ ... 115

**Conclusion..... 117**

**Bibliographie ……... 118**

# Introduction

Le domaine de l'enregistrement magnétique a connu une évolution spectaculaire depuis la découverte de l'anisotropie d'échange et de la magnétorésistance géante en 1988. En effet, la densité de stockage d'information a été approximativement multipliée par 100 entre 1990 et 2000 ans passant de ~$10^2$ Mbits/in² à ~$10^4$ Mbits/in². L'anisotropie d'échange joue un rôle important dans la réalisation de composants dans le domaine de la spintronique tels que les têtes de lecture de disques durs et les mémoires magnétiques à accès aléatoire (MRAM). Le challenge est d'augmenter de plus en plus la densité de stockage tout en réduisant la taille des appareils (capteurs magnétiques). Pour cela, il est nécessaire de réaliser les bits d'information (MRAM) et les têtes de lecture au moyen de multicouches ayant des dimensions latérales de quelques dizaines de nanomètre appelées nanoplots. Il est donc important d'étudier l'anisotropie d'échange dans les nanoplots dans lesquels interviennent les effets de bords et les effets de taille en raison de leurs petites dimensions.

Le phénomène d'anisotropie d'échange qui a été découvert par Meiklejohn et Bean en 1956 se produit lorsqu'il y a un couplage interfacial entre les moments magnétiques de deux phases magnétiques différentes (par exemple ferromagnétique (F)/ antiferromagnétique (AF)). Ce phénomène se manifeste par un décalage du cycle d'hystérésis en champ magnétique, appelé champ d'échange. Dans le cas des bicouches F/AF, l'anisotropie d'échange dépend fortement de la nature de l'interface entre les couches F et AF. En particulier, des « entités » à faible température de blocage dans la couche AF au niveau de l'interface qui altèrent les propriétés d'anisotropie d'échange ont été mises en évidence expérimentalement. Ces « entités » sont considérées être des phases magnétiques désordonnées qui résultent de la frustration magnétique et des défauts à l'interface F/AF (interdiffusion, défauts d'empilement, joints de grains...). De plus, lorsqu'on réduit la taille des bicouches (pour avoir des nanoplots), il a été montré que la fraction de ces « entités » augmente, ce qui a été attribué à la méthode de fabrication. Dans cette thèse notre objectif est de modéliser des nanoplots à l'échelle granulaire afin de simuler leurs propriétés d'anisotropie d'échange et de les comparer à celles des films continus. Nos résultats seront comparés à des résultats expérimentaux. Nous souhaitons, en particulier, préciser les conditions dans lesquelles le champ d'échange est plus grand dans les nanoplots que dans les films continus. D'autre part, dans le cadre d'un modèle à l'échelle atomique, nous souhaitons étudier les effets du désordre magnétique dans la couche AF au niveau de l'interface. Comme nous le verrons, ce désordre résulte de la frustration magnétique à la présence de joints de grains, aux effets de surface et à l'interdiffusion.

Ce manuscrit est divisé en quatre chapitres.

Dans le premier chapitre, nous rappelons les notions de magnétisme utiles ainsi que l'effet de la réduction de taille sur les propriétés magnétiques à température non nulle (superparamagnétisme). Ensuite nous présentons une description simple de l'anisotropie

d'échange et les modèles les plus connus expliquant ce phénomène. A la fin de ce chapitre nous présentons certaines applications technologiques de l'anisotropie d'échange.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons brièvement les principales méthodes de simulations numériques utilisées en sciences des matériaux. Ensuite, nous donnons une description détaillée de la méthode de simulation utilisée dans ce travail : la méthode Monte Carlo.

Le troisième chapitre est consacré à l'étude des propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots F/AF en utilisant l'approche granulaire. Notre travail a été réalisé à l'aide de simulations Monte Carlo cinétiques. Dans un premier temps, nous décrivons notre modèle dans lequel les phases magnétiques désordonnées sont modélisées par la présence de petits grains répartis aléatoirement à l'interface F/AF au sein de la couche AF. Ces petits grains ont une anisotropie effective plus faible que celle des grains AF de volume, en raison de la non-colinéarité des moments dans ces phases désordonnées. De plus, nous avons fait l'hypothèse que les grains des bords de la couche AF ont des surfaces réduites et possèdent les mêmes propriétés magnétiques que les petits grains à l'interface F/AF. Ensuite, nous étudions l'effet du couplage F sur le mécanisme de retournement de la couche F et sur la variabilité du champ d'échange d'un nanoplot à l'autre. Puis, nous examinons les propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots par rapport à celles des films continus pour différentes épaisseurs de la couche AF (IrMn) et différentes dimensions latérales. Enfin, nous comparons nos résultats de simulations à des résultats expérimentaux sur des bicouches NiFe/IrMn et Co/IrMn.

Dans le quatrième chapitre, nous avons considéré un modèle à l'échelle atomique réaliste contenant des joints de grains et de l'interdiffusion pour étudier le phénomène d'anisotropie d'échange. Nous avons eu recours à la méthode Monte Carlo quantifiée en temps. La particularité de notre modèle est la possibilité d'avoir un plan d'interdiffusion à l'interface. De plus, la couche AF est frustrée en raison de la compétition entre les interactions aux 1$^{ers}$ voisins et aux 2$^{èmes}$ voisins. Ensuite, nous nous sommes intéressés aux effets combinés de la frustration magnétique, des joints de grains et de l'interdiffusion sur les configurations magnétiques dans la couche AF et sur les propriétés d'anisotropie d'échange. Nous avons également examiné l'effet de la température.

# Chapitre I

# Généralités sur le magnétisme et l'anisotropie d'échange

## I.1 Introduction

Les matériaux peuvent présenter des propriétés magnétiques variées telles que le diamagnétisme, le paramagnétisme, le ferromagnétisme, l'antiferromagnétisme et le ferrimagnétisme. Dans les matériaux diamagnétiques, les atomes ne présentent pas de moment magnétique en champ nul. Lorsqu'on applique un champ magnétique, il apparait sur chaque atome un faible moment magnétique opposé au champ magnétique induisant une faible aimantation dans le sens opposé au champ extérieur. Concernant les matériaux paramagnétiques, les moments magnétiques des atomes sont orientés dans toutes les directions en champ nul. Ils se compensent de telle sorte que l'aimantation totale est nulle. Sous l'action d'un champ magnétique, ces moments magnétiques s'orientent en moyenne dans le même sens que le champ appliqué conduisant à une aimantation dans le sens du champ extérieur. Les moments magnétiques des matériaux ferromagnétiques, antiferromagnétiques et ferrimagnétiques sont corrélés entre eux et présentent un ordre magnétique en dessous d'une certaine température critique. Au-dessus de cette dernière, l'ordre magnétique de ces matériaux disparait et les matériaux deviennent paramagnétiques. Dans le cas du ferromagnétisme, les moments magnétiques sont parallèles entre eux et l'aimantation spontanée est non nulle au-dessous de la température critique appelée température de Curie $T_C$. Par contre, dans un matériau antiferromagnétique ou ferrimagnétique, les moments magnétiques sont antiparallèles entre eux en-dessous de la température critique appelée température de Néel $T_N$ dans un matériau antiferromagnétique et température de Curie $T_C$ dans un matériau ferrimagnétique. L'aimantation en-dessous de la température critique est nulle dans un matériau antiferromagnétique alors qu'elle ne l'est pas dans un matériau ferrimagnétique.

Dans cette thèse, nous nous intéressons à l'anisotropie d'échange des nanoplots ferromagnétiques (Co ou NiFe) / antiferromagnétiques (IrMn). Pour cela, dans ce chapitre nous présentons les notions de base nécessaires à la compréhension de l'anisotropie d'échange. Dans la première partie, de ce chapitre nous rappelons des généralités sur le magnétisme. La deuxième partie est consacrée au mécanisme d'anisotropie d'échange. Enfin, dans la dernière partie, nous présentons les applications de l'anisotropie d'échange.

## I.2 Notions de base en magnétisme

L'énergie totale ($E_{tot}$) d'un matériau magnétique est la somme de différents termes d'énergie : l'énergie d'échange ($E_{éch}$), l'énergie d'anisotropie ($E_{ani}$), l'énergie dipolaire ($E_{dip}$) et

l'énergie Zeeman ($E_{Zee}$) qui est associée à l'application d'un champ magnétique sur le système magnétique.

## I.2.1 Energie d'échange

L'énergie d'échange est une énergie d'origine électrostatique qui a été introduite en 1929 par Heisenberg dans le cadre de la mécanique quantique. Cette énergie tend à rendre parallèles ou antiparallèles les moments magnétiques portés par les atomes « voisins » d'un matériau magnétique. Soient $\boldsymbol{S}_i$ et $\boldsymbol{S}_j$ les spins de deux atomes voisins $i$ et $j$, l'énergie d'échange est exprimée comme suit :

$$E_{\text{éch}} = -\sum_{<i,j>} J_{ij} \boldsymbol{S}_i \boldsymbol{S}_j \quad (1.1)$$

où $J_{ij}$ est appelée intégrale d'échange (en Joule) et la sommation est effectuée sur les paires $<i,j>$. Une valeur positive de $J_{ij}$ favorise un alignement parallèle des moments magnétiques, établissant ainsi un ordre ferromagnétique à basse température, tandis qu'une valeur négative de $J_{ij}$ favorise un alignement antiparallèle, c'est-à-dire un ordre ferrimagnétique ou antiferromagnétique à basse température. Plusieurs types d'interactions d'échange sont possibles comme nous allons le voir ci-dessous.

### *I.2.1.1. L'échange direct*

L'échange direct se produit lorsque les atomes sont suffisamment proches pour qu'il puisse y avoir recouvrement des orbitales.

### *I.2.1.2 L'échange indirect*

L'échange indirect se produit lorsqu'il n'y a pas de recouvrement des orbitales qui portent le moment magnétique. Dans la suite nous présentons les interactions d'échange indirectes les plus connues telles que les interactions RKKY, le super-échange et le double échange.

- **RKKY**

L'interaction RKKY nommé ainsi d'après Ruderman, Kittel, Kasuya et Yoshida [1–3] est une interaction entre les éléments de terres rares via les électrons de conduction (électrons itinérants).

- **Le super-échange**

L'interaction de super-échange [4] est une interaction indirecte présente dans les isolants (notamment les oxydes d'élément de transition 3*d*). Elle se produit entre les moments magnétiques de deux cations de même charge (figure I.1) par l'intermédiaire d'un ion non magnétique (en général l'anion $O_2^-$).

• **Le double échange** [5]

Il est très similaire à l'interaction de super-échange, mais dans ce cas l'échange se produit entre des cations de même nature chimique mais d'état de valence mixte, c'est à dire entre deux atomes qui n'ont pas le même nombre d'électrons de valence (figure I.1).

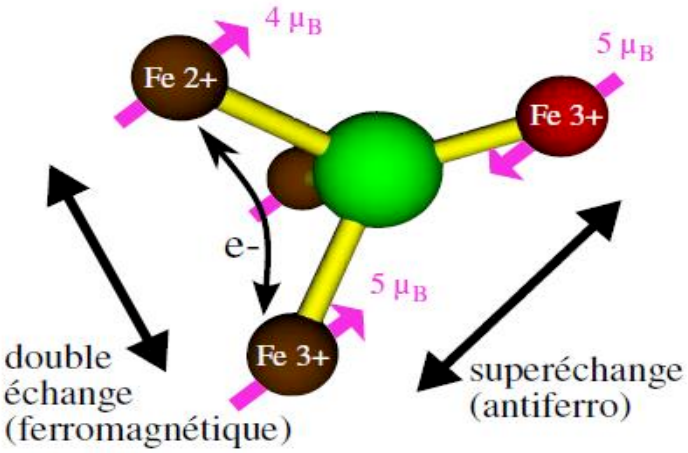


**Figure I.1 :** *Schéma représentant les interactions de double échange et de superéchange dans la magnétite.*

## I.2.2 Energie d'anisotropie

Dans un matériau magnétique, la direction de l'aimantation est déterminée par l'énergie d'anisotropie magnétique qui traduit la dépendance de l'énergie par rapport à la direction de l'aimantation. L'énergie d'anisotropie tend à aligner les moments dans une ou plusieurs directions particulières du matériau. Ces directions, qui sont les directions pour lesquelles l'énergie d'anisotropie est minimale, sont appelées axes de facile aimantation. Par contre, les directions les moins favorables énergétiquement sont appelées axes de difficile aimantation. L'anisotropie magnétique résulte de différentes contributions telles que l'anisotropie magnétocristalline, l'anisotropie magnétoélastique et l'anisotropie de forme. Dans ce qui suit, nous allons expliciter brièvement l'origine de chacune de ces anisotropies.

### *I.2.2.1 L'anisotropie magnétocristalline*

L'anisotropie magnétocristalline est liée à la structure cristallographique des matériaux et provient de l'interaction spin-orbite [6] et de l'interaction avec le champ cristallin. Dans certains cristaux, cette anisotropie est uniaxiale c'est-à-dire qu'il existe une direction préférentielle suivant laquelle l'aimantation spontanée s'alignera. Pour une symétrie uniaxiale l'expression de cette énergie par unité de volume s'écrit :

$$E_{mc} = K\, sin^2\theta \quad (1.2)$$

où $K$ est la constante d'anisotropie uniaxiale (en J $m^{-3}$) et $\theta$ l'angle entre l'axe d'anisotropie et l'aimantation.

### *I.2.2.2 L'anisotropie magnétoélastique*

L'anisotropie magnétoélastique est due à la déformation du matériau [7] qui résulte des contraintes extérieures (contrainte mécanique, champ magnétique). Le moment magnétique est fortement lié aux orbitales atomiques et toute déformation du réseau cristallin sous l'action d'une contrainte extérieure induit une modification des propriétés magnétiques. Cette déformation fait apparaitre une énergie de type élastique qui peut altérer la direction d'aimantation du matériau. C'est l'énergie magnétoélastique. Elle se produit souvent dans le cas des couches minces et des nanoparticules où il existe souvent une différence entre le paramètre de maille de différentes phases, ce qui peut induire des contraintes élastiques à l'interface. L'énergie par unité de volume associée à cet effet s'exprime par :

$$E_\sigma = -\frac{3}{2}\lambda\,\sigma\,sin^2\theta \quad (1.3)$$

où λ correspond au désaccord de maille (en m) par rapport à la valeur du massif et σ est la constante de magnétostriction (en N).

### *I.2.2.3 L'anisotropie de forme*

L'anisotropie de forme est due aux interactions dipolaires (Sec.I.2.3). Lorsqu'un matériau magnétique de forme ellipsoïdale porte une aimantation uniforme $\boldsymbol{M}$, le champ magnétique à l'intérieur du matériau $\boldsymbol{H}_D$ est uniforme et s'écrit sous la forme :

$$\boldsymbol{H}_D = -\,[N]\,\boldsymbol{M} \quad (1.4)$$

où $[N]$ est le tenseur de champ démagnétisant qui dépend de la forme du matériau (figure I.2).

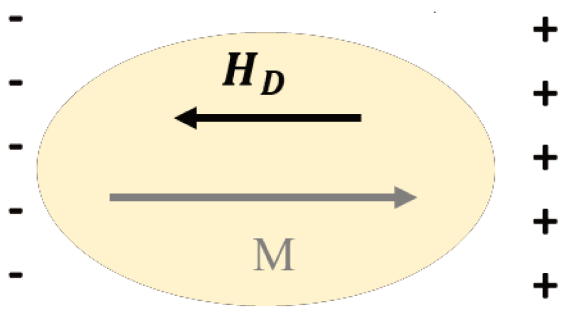


**Figure I.2 :** *Schéma représentant le champ démagnétisant qui s'oppose à l'aimantation. Les signes (+) et (−) représentent les pseudo charges magnétiques.*

Pour une sphère $N_{xx} = N_{yy} = N_{zz} = 1/3$ et pour une couche mince perpendiculaire à $Oz$, $N_{xx} = N_{yy} = 0$ et $N_{zz} = 1$. La densité d'énergie de champ démagnétisant donnée par $-\frac{1}{2}\mu_0 \boldsymbol{H}_D.\boldsymbol{M} = \frac{\mu_0}{2}[N]\,M^2$ est donc minimale lorsque l'aimantation est dans le plan de la couche.

### I.2.3 Interaction dipolaire

Cette interaction est d'origine classique. Chaque dipôle magnétique porte un moment magnétique $\boldsymbol{m}_i$ (figure I.3) et crée une induction magnétique à une distance $r$ :

$$\boldsymbol{B}_i = \frac{\mu_0}{4\pi}\left(3\,\frac{(\boldsymbol{m}_i.\boldsymbol{r}).\boldsymbol{r}}{r^5} - \frac{\boldsymbol{m}_i}{r^3}\right) \quad (1.5)$$

L'énergie d'interaction entre deux moments magnétiques $m_i$ et $m_j$ séparés par une distance $r$ est appelée énergie dipolaire et s'écrit comme suit :

$$E_{dip} = -\boldsymbol{B}_i\,.\boldsymbol{m}_j \quad (1.6)$$

C'est une interaction à longue portée, contrairement aux interactions d'échange. Elle tend à aligner les moments magnétiques $\boldsymbol{m}_i$ et $\boldsymbol{m}_j$ dans le même sens suivant le vecteur $\boldsymbol{r}$.

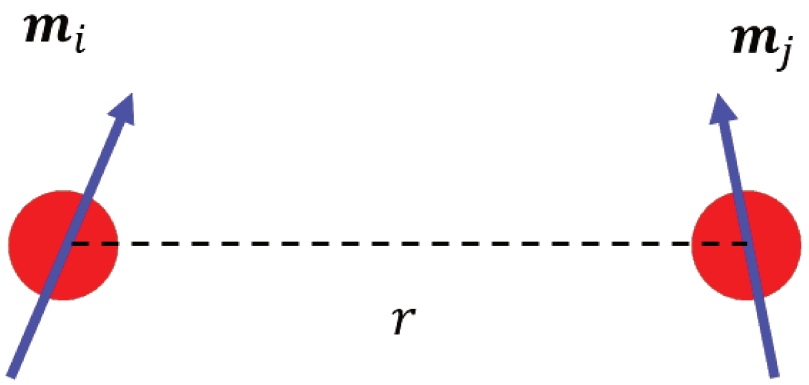


**Figure I.3 :** *Schéma représentant deux moments magnétiques distants de r.*

### I.2.4 Energie Zeeman

L'énergie Zeeman décrit l'interaction entre un moment magnétique $\boldsymbol{m}$ et le champ magnétique externe $\boldsymbol{H}$ :

$$E_{Zeeman} = -\,\mu_0\,\boldsymbol{m}.\boldsymbol{H} \qquad (1.7)$$

Cette interaction tend à aligner le moment dans la direction et le sens du champ magnétique externe.

## I.3 Domaines magnétiques

Dans un système magnétique, les configurations magnétiques stables sont déterminées par la minimisation de l'énergie magnétique totale ($E_{tot}$). Pour minimiser cette énergie, au-dessus d'une taille critique, le système se divise en plusieurs domaines [8], appelées domaines de Weiss (figure I.4). Dans chaque domaine de Weiss, les moments magnétiques sont parallèles à l'un des axes de facile aimantation et de même sens, de telle sorte que chaque domaine possède une aimantation spontanée. L'orientation de cette aimantation diffère d'un domaine à l'autre et l'aimantation totale du matériau est nulle.

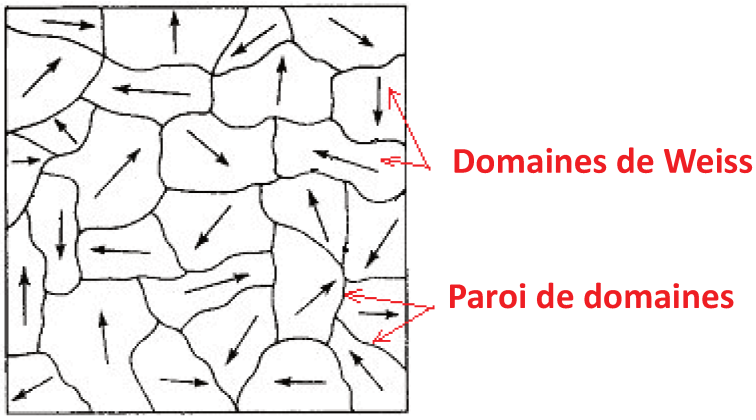


**Figure I.4 :** *Structure en domaines d'un matériau ferromagnétique.*

Ces domaines sont séparés par des régions appelées parois de domaines dans lesquelles les moments magnétiques passent progressivement d'une direction à l'autre (figure I.5). Pour une paroi à 180°, la largeur de la paroi δ est proportionnelle à $\sqrt{\frac{J}{K.a}}$ où $J$ est l'intégrale d'échange, $K$ la constante d'anisotropie par unité de volume et $a$ le paramètre de maille (δ est de l'ordre de 10 à 100 nm).

Suivant l'épaisseur de l'échantillon, il existe deux types de parois de domaines [9]: les parois de Bloch et les parois de Néel (figure I.5). Dans les parois de Néel, les moments magnétiques tournent dans le plan de la couche alors qu'ils tournent perpendiculairement au plan dans les parois de Bloch. Les parois de Bloch sont présentes surtout dans les matériaux massifs alors que les parois de Néel sont surtout dans les couches minces.

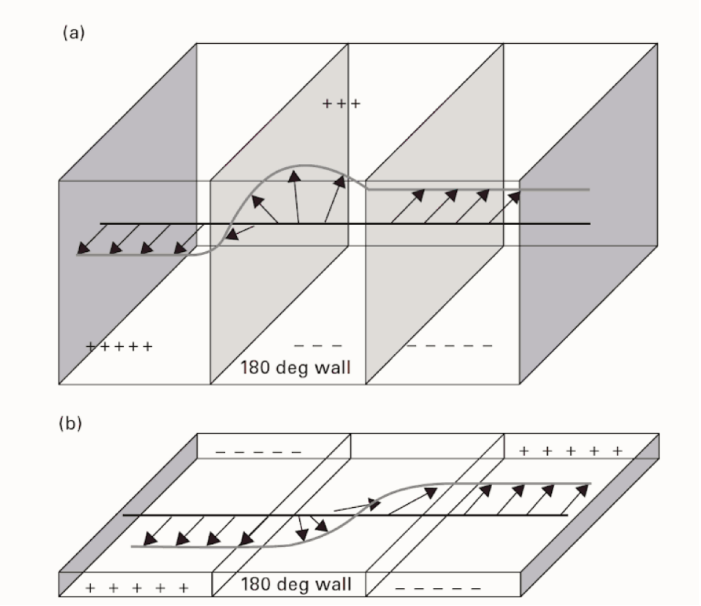


**Figure I.5 :** *Configuration de parois de domaines magnétiques (a) paroi de Bloch et (b) paroi de Néel.*

## I.4 Superparamagnétisme

En dessous d'une taille critique, la subdivision en domaines devient défavorable et l'état monodomaine devient l'état le plus stable [10]. Le système possède alors une aimantation spontanée non nulle à basse température qui peut être modélisée par un macrospin. En 1949, L. Néel montrait que l'aimantation de particules de petites tailles pouvait se retourner spontanément à température non nulle. Ce phénomène a été appelé plus tard superparamagnétisme [11,12].

En absence de champ magnétique extérieur, l'énergie du système magnétique de volume $V$ est de la forme $E=KVsin^2\theta$ où $K$ est la constante d'anisotropie par unité de volume et $\theta$ est l'angle entre la direction de l'aimantation et l'axe facile de l'aimantation (on suppose l'énergie d'échange constante). Dans ce cas, il existe deux minima d'énergie équivalents correspondant à $\theta = 0$ ou $\pi$ pour lesquels l'aimantation du système est colinéaire à l'axe de facile aimantation vers le haut ou vers le bas (figure I.6). La barrière d'énergie $\Delta E$ à franchir pour passer d'un état stable à l'autre est égale à $KV$. Plus on diminue les dimensions du système, plus la barrière d'énergie diminue et même sans l'application d'un champ extérieur l'aimantation peut se retourner spontanément en raison de l'agitation thermique. La durée moyenne durant laquelle l'aimantation conserve son orientation, appelée temps de relaxation, est donnée par :

$$\tau(T) = \tau_0 \, e^{\frac{\Delta E}{k_B T}} \qquad (1.8) \quad \text{avec } \Delta E = K\,V$$

où $\tau_0$ ($10^{-9}$ ~ $10^{-11}$ s) est un préfacteur qui dépend faiblement de la température. Par conséquent, lors d'une mesure qui s'effectue pendant un temps de mesure $t_{mes}$, on distingue deux cas :
- pour $\tau >> t_{mes}$, l'aimantation ne se retourne pas pendant la mesure. Dans ce cas, l'aimantation est dite bloquée ;
- pour $\tau << \tau_{mes}$, l'aimantation se retourne de nombreuses fois pendant la mesure et sa valeur moyenne est nulle. On parle d'état superparamagnétique.
La transition entre l'état bloqué et l'état superparamagnétique se produit lorsque $\tau = t_{mes}$, c'est-à-dire pour une température $T_B$, appelée température de blocage qui vérifie :

$$T_B = \frac{KV}{k_B \ln(\frac{t_{mes}}{\tau_0})} \qquad (1.9)$$

Dans ce cas, La température de blocage dépend de la constante d'anisotropie, du volume et du temps de mesure.

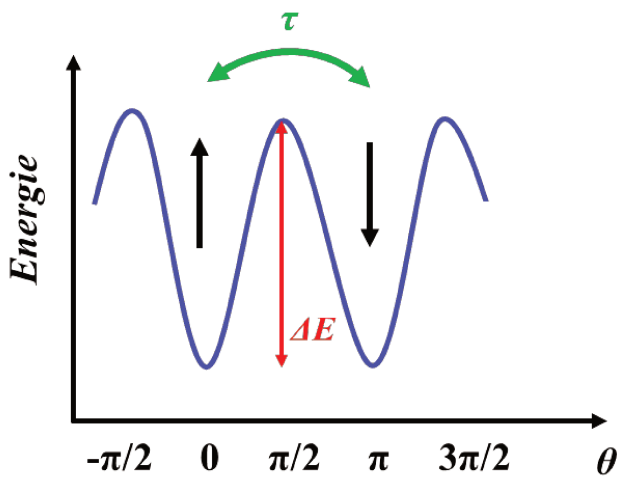


**Figure I.6 :** *Variation de l'énergie du macrospin à anisotropie uniaxiale en fonction de sa direction.*

## I.5 Anisotropie d'échange

Le phénomène d'anisotropie d'échange (EB) [13,14] se produit lorsqu'il y a un couplage interfacial entre les moments magnétiques de deux phases magnétiques différentes (ferromagnétique F ou ferrimagnétique Ferri / antiferromagnétique AF, …). L'anisotropie d'échange a été observée pour la première fois par Meiklejohn et Bean [15] en 1956 lors de mesures sur des nanoparticules de monoxyde de cobalt CoO ayant une structure cœur-coquille où le cœur est du cobalt (F) et la coquille est le monoxyde de cobalt CoO (AF). Ce phénomène a ensuite été observé dans de nombreux autres systèmes de type cœur-coquille (Ni/NiO, Fe/FeO, Fe/$Fe_2N$, Fe/FeS ...) puis dans des couches minces (F/AF). L'anisotropie d'échange se manifeste par un décalage du cycle d'hystérésis en champ magnétique, appelé champ d'échange $H_E$.

Nous allons décrire le mécanisme d'anisotropie d'échange dans le cas du modèle simple d'un système F/AF avec un couplage ferromagnétique à l'interface :

1- Le système doit être refroidi sous champ à partir d'une température $T_0$ supérieure à la température de Néel ($T_N$) de la couche antiferromagnétique et à la température de Curie ($T_C$) de la couche ferromagnétique telles que $T_N < T_C$. Dans ce cas, les moments magnétiques de la couche F se mettent en ordre dans la direction du champ appliqué au cours du refroidissement et ceux de la couche AF près de l'interface s'orientent suivant la même direction en raison du couplage interfacial supposé ici ferromagnétique. Les autres moments magnétiques de la couche AF se mettent ensuite alternativement parallèlement et antiparallèlement afin de respecter l'ordre antiferromagnétique (partie 1, figure I.7). Cette configuration est celle du début du cycle d'hystérésis.

2- La décroissance et ensuite l'inversion du champ appliqué provoque un retournement des moments de la couche F (parties 2&3, figure I.7). Dans le cas où l'anisotropie de la couche AF est suffisamment importante, les moments de la couche AF conservent leur orientation initiale et le couplage interfacial (qui tend à orienter les moments F parallèlement aux moments AF à l'interface) retarde le retournement de la couche F (le champ induit par les moments AF sur les moments F est opposé au champ appliqué) donc la valeur absolue du premier champ de retournement de la couche F est plus importante en raison du couplage interfacial.

3- Lors du second retournement de la couche F en champ positif, le champ induit par les moments AF sur les moments F est dans le même sens que le champ appliqué, ce qui favorise le retournement des moments F. En conséquence, la valeur du deuxième champ de retournement de la couche F sera plus faible en raison du couplage interfacial (figure I.7).

Il s'ensuit alors un décalage du cycle d'hystérésis en champ magnétique, appelé champ d'échange $H_E$, qui s'exprime par :

$$H_E = \frac{H_C^- + H_C^+}{2} \qquad (1.10)$$

où $H_C^-$ et $H_C^+$ représentent les champs lors du premier et du deuxième retournement respectivement ($H_C^- < 0$). Le champ d'échange est ici négatif. La demi-largeur du cycle d'hystérésis s'appelle le champ coercitif et il s'exprime par :

$$H_C = \frac{H_C^+ - H_C^-}{2} \qquad (1.11)$$

Le champ coercitif est positif.

Le champ d'échange dépend de plusieurs paramètres tels que la température initiale de refroidissement $T_0$, la température de mesure du cycle d'hystérésis, l'anisotropie de la couche AF (qui joue un rôle important sur la température de blocage), les phases désordonnées à l'interface F/AF (qui sont dues, entre autres, à la rugosité, la diffusion…), l'épaisseur de la couche AF… Nous verrons l'impact de certains de ces paramètres sur l'anisotropie d'échange dans la suite de ce manuscrit.

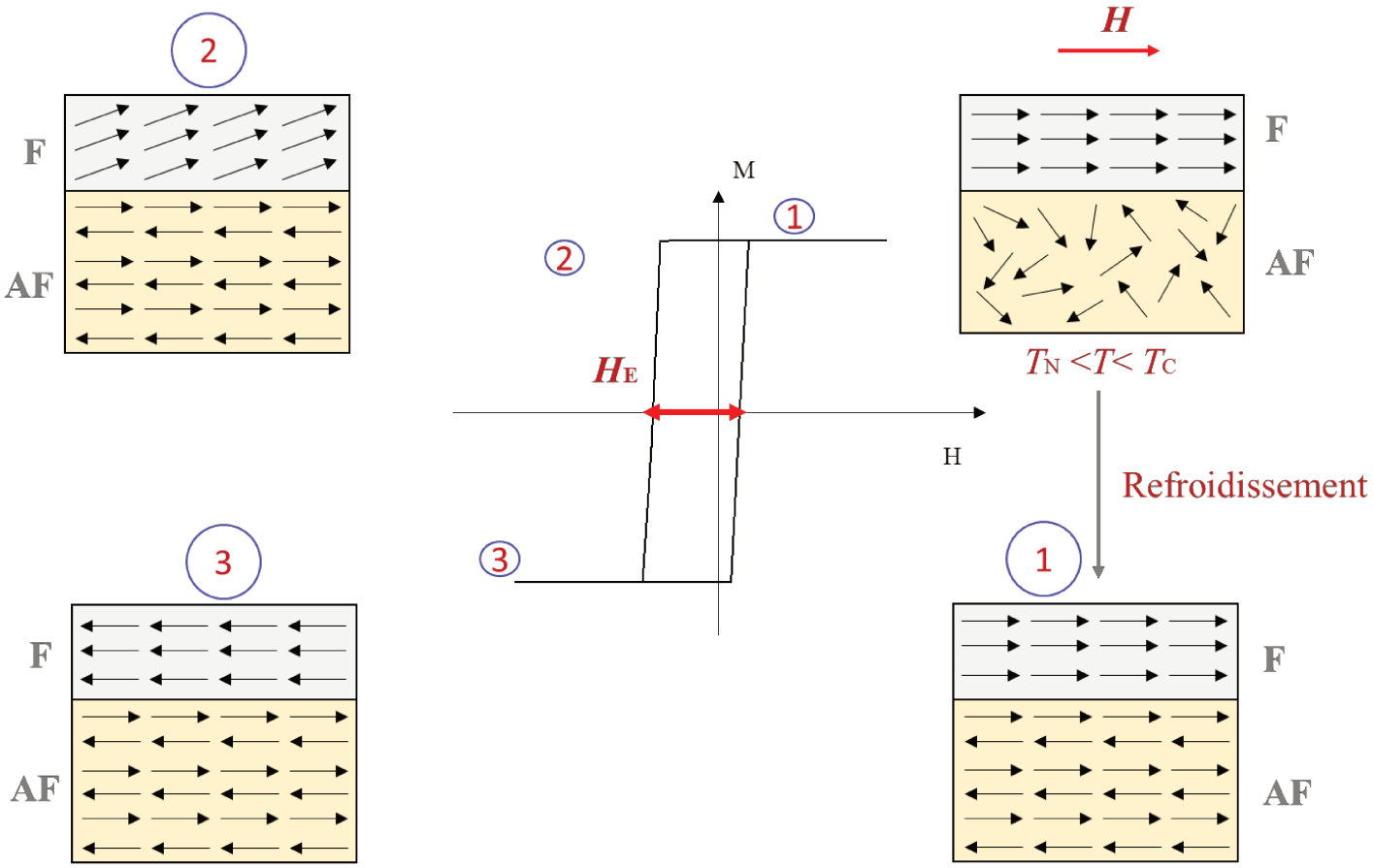


**Figure I.7 :** *Représentation schématique des configurations magnétiques d'une bicouche F/AF à différentes étapes du cycle d'hystérésis.*

Plusieurs modèles théoriques sur le phénomène d'anisotropie d'échange ont été développés. Dans la suite nous présentons les modèles les plus connus.

# I.6 Modèles d'anisotropie d'échange

## I.6.1 Modèle de Meiklejohn et Bean

Meiklejohn et Bean [15] ont proposé un modèle théorique simple valable à température nulle qui permet d'expliquer l'anisotropie d'échange. Ce modèle est basé sur plusieurs hypothèses :

- une interface F/AF idéale c'est-à-dire parfaitement plane (sans rugosité et sans diffusion) ;

- une interface F/AF non compensée, c'est-à-dire que l'aimantation du plan AF d'interface est non nulle (figure I.8) ;

- l'axe facile de la couche F est colinéaire à celui de la couche AF. Cet axe est dans le plan des couches ;

- les couches F et AF sont monodomaines ;

- le retournement des moments magnétiques F s'effectue par rotation uniforme ;

- les moments de la couche AF sont bloqués lors du retournement de la couche F (forte anisotropie de la couche AF).

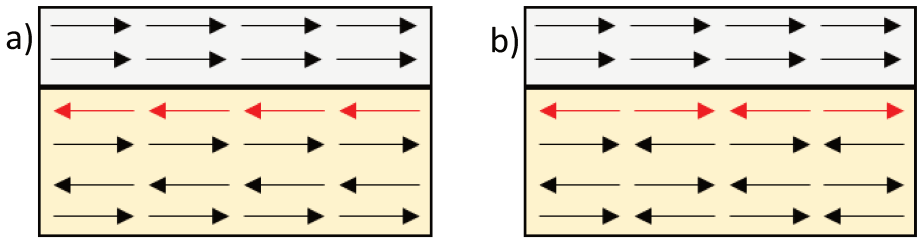


**Figure I.8 :** *Représentation schématique de deux bicouches F/AF présentant une interface idéale et une surface AF (a) non compensée et (b) compensée.*

Soit α l'angle entre l'aimantation du plan interfacial de la couche AF et l'axe facile *Oy*, $\beta$ l'angle entre l'aimantation de la couche F et l'axe facile *Oy* et θ l'angle entre le champ extérieur et l'axe facile *Oy* (figure I.9), l'énergie magnétique totale par unité de surface s'écrit :

$$E = K_F e_F sin^2\beta + K_{AF} e_{AF} sin^2\alpha - J_{int}\cos(\beta - \alpha) - \mu_0 H M_F e_F \cos(\theta - \beta) \qquad (1.12)$$

où :

- $K_F, e_F$ et $M_F$ sont respectivement la constante d'anisotropie par unité de volume, l'épaisseur et l'aimantation de la couche F ;

- $K_{AF}$ et $e_{AF}$ sont respectivement la constante d'anisotropie par unité de volume et l'épaisseur de la couche AF ;

- $J_{int}$ est l'intégrale d'échange à l'interface par unité de surface ;

- $H$ est le champ appliqué ;

Le premier et le deuxième terme représentent respectivement l'énergie d'anisotropie des couches F et AF, le troisième terme est l'énergie d'échange à l'interface entre les deux couches F et AF et le dernier terme est l'énergie Zeeman de la couche F.

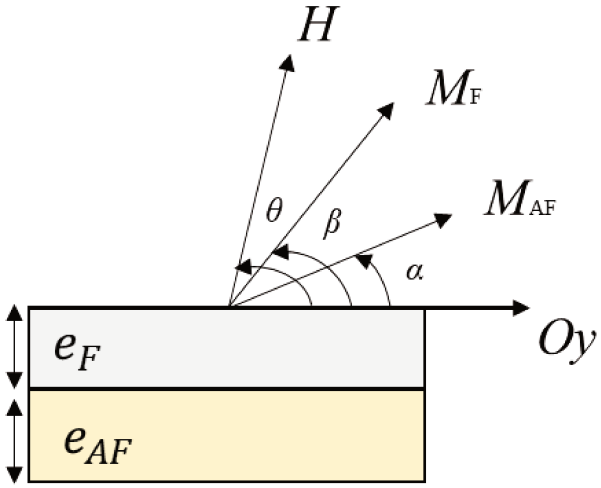


**Figure I.9 :** *Schéma représentant les paramètres utilisés dans le modèle de Meiklejohn et Bean.*

On suppose que le champ magnétique est appliqué suivant l'axe facile *Oy* ($\theta = 0$) et que la couche AF est bloquée suivant *Oy* dans la direction de l'axe d'anisotropie donc $\alpha = 0$ ou π. Les orientations stables de l'aimantation de la couche F s'obtiennent par minimisation de l'énergie totale du système par rapport à $\beta$ :

$$\frac{dE}{d\beta} = 0$$

$$\frac{d^2E(\beta)}{d\beta^2} > 0$$

Compte tenu de ces conditions, l'expression du champ d'échange s'écrit :

$$\mu_0 H_E = -\frac{|j_{int}|}{M_F e_F} \qquad (1.13)$$

Il est important de noter qu'il existe une condition nécessaire pour que l'anisotropie d'échange soit observée : $K_{AF}e_{AF} > |j_{int}|$. En effet, si cette relation n'est pas satisfaite, les moments magnétiques de la couche AF se retournent avec les moments de la couche F lors du retournement et le champ d'échange est nul, tandis que le champ coercitif augmente.

Ce modèle permet de donner une explication qualitative du décalage du cycle d'hystérésis. Cependant les valeurs des champs d'échange obtenues à partir de ce modèle sont beaucoup plus grandes que les valeurs expérimentales. Ceci est dû au fait que ce modèle ne prend pas en compte plusieurs paramètres tels que la rugosité, la diffusion à l'interface, la présence de parois de domaine… Pour cela plusieurs modèles plus réalistes ont été développés par la suite.

## I.6.2 Modèle de Néel et Mauri

Afin d'expliquer la différence entre les valeurs de champ d'échange prévues par le modèle de Meiklejohn et Bean et les résultats expérimentaux, Néel [16], puis Mauri *et al.* [17] ont proposé un modèle qui autorise la formation d'une paroi de domaine dans la couche AF (parallèle à l'interface) lors du retournement de la couche F. Ce modèle est basé sur plusieurs hypothèses :

- l'épaisseur de la couche AF est suffisamment grande de telle sorte que la paroi de domaine se développe en son intérieur (figure I.10) ;

- l'épaisseur de la couche F est petite devant celle de la couche AF ;

- l'interface F/AF est idéale c'est-à-dire parfaitement plane (sans rugosité et sans diffusion) ;

- les axes faciles des couches F et AF sont colinéaires.

Le terme relatif à la formation de domaines magnétiques est pris en compte dans l'énergie totale du système. Ce terme a pour effet de diminuer le couplage effectif à l'interface à cause de la désorientation des moments magnétiques dans la couche AF. En présence d'un fort couplage à l'interface, l'expression du champ d'échange est alors :

$$\mu_0 H_E = \frac{2\sqrt{A_{AF} K_{AF}}}{M_F e_F} \qquad (1.14)$$

où $A_{AF}$ est la constante d'échange de la couche AF (en J m$^{-1}$).

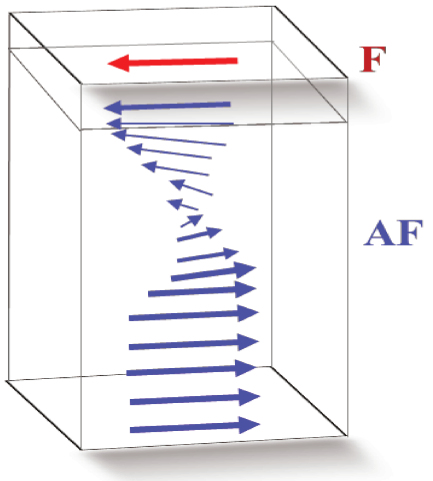


**Figure I.10 :** *Représentation schématique d'une paroi de domaine créée dans la couche AF dans le modèle de Néel et Mauri. Pour la clarté du schéma, un seul sous-réseau AF est représenté.*

Ce modèle permet de trouver des valeurs de champ d'échange du même ordre de grandeur que celles mesurées expérimentalement. Cependant, ce modèle n'est valable que dans les systèmes ayant un fort couplage interfacial, une couche AF épaisse et une interface plane et non compensée.

## I.6.3 Modèle de Malozemoff

Dans les modèles précédents, les interfaces F/AF sont parfaitement planes et non compensées. Néanmoins dans la réalité les interfaces sont rugueuses et peuvent être compensées. En 1987, Malozemoff [18] a montré qu'une surface compensée et rugueuse (existence d'inhomogénéités chimiques et de défauts répartis aléatoirement) peut conduire à un champ d'échange non nul. Dans ce modèle, la présence de défauts et de rugosité à l'interface favorise la frustration dans la couche AF (figure I.11). Cette frustration induit un champ aléatoire qui entraine la formation de domaines magnétiques dans la couche AF dont les parois sont perpendiculaires à l'interface (figure I.11). Ces domaines apparaissent lorsque la couche AF est refroidie en dessous de sa température de Néel $T_N$. En minimisant l'énergie totale du système en présence du champ aléatoire, on trouve que l'expression du champ d'échange est :

$$\mu_0 H_E = 2z\frac{\sqrt{A_{AF}K_{AF}}}{\pi^2 M_F\, e_F} \qquad (1.15)$$

où $z$ est le nombre de coordination des atomes de la couche AF à l'interface, et qui caractérise la rugosité de la couche AF à l'interface.

Les valeurs du champ d'échange dans ce modèle sont du même ordre de grandeur que les valeurs expérimentales. Cette dernière relation est proche de celle obtenue par le modèle de Néel et Mauri en cas du couplage fort alors que dans ce dernier, les parois de domaine dans la couche AF sont parallèles à l'interface lors du retournement de la couche F, alors que dans le modèle de Malozemoff les parois de domaines sont perpendiculaires à l'interface et indépendantes du retournement de la couche FM.

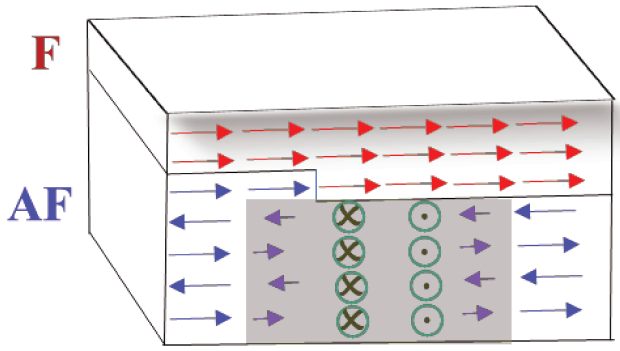


**Figure I.11 :** *Représentation schématique d'une paroi de domaine perpendiculaire à la surface de la couche AF dans le modèle de Malozemoff. Pour la clarté du schéma, un seul sous-réseau AF est représenté.*

## I.6.4 Modèle de Nowak

En 2000, Nowak et collaborateurs [19] ont montré expérimentalement et par simulations Monte Carlo que le phénomène d'anisotropie d'échange n'est pas purement un phénomène d'interface. Ils ont introduit un modèle appelé « Domain state model ». Ce modèle consiste à remplacer

aléatoirement certains atomes magnétiques de la couche AF (pas uniquement à l'interface) par des atomes non magnétiques (défauts). Ces derniers favorisent l'existence de domaines magnétiques à l'intérieur de la couche AF (figure I.12). Compte tenu de la minimisation de l'énergie magnétique, les parois de ces domaines passent par les atomes non magnétiques car cela réduit considérablement l'énergie de ces parois.

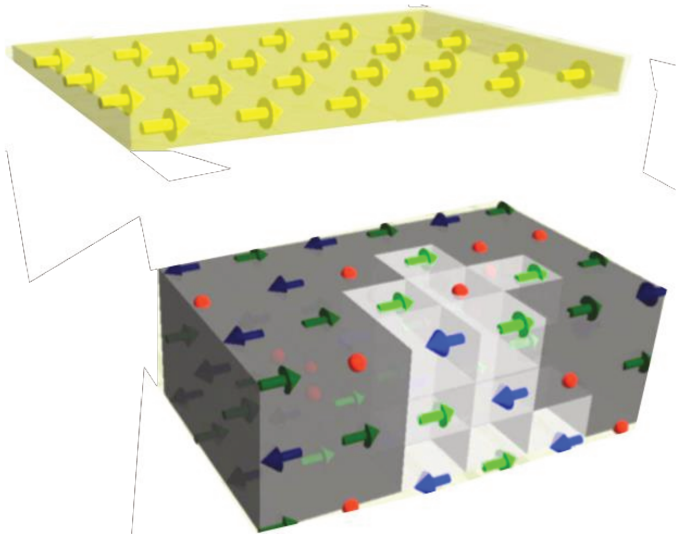

**Figure I.12 :** *Représentation schématique d'un plan F (jaune) en contact avec une couche AF qui contient des atomes non magnétiques (sphères rouges).*

Les résultats de ce modèle montrent que le champ d'échange augmente avec l'augmentation de pourcentage d'atomes non magnétiques dans la couche AF et passe par un maximum, puis il s'annule en raison de la perte des propriétés magnétiques du système. L'hypothèse de Nowak a été validée par plusieurs études expérimentales et numériques [20,21].

# I.7 Applications de l'anisotropie d'échange

Le phénomène d'anisotropie d'échange connait depuis une vingtaine d'années un très grand intérêt dans le domaine de la recherche, en raison de son énorme potentiel d'applications dans le développement de dispositifs de l'électronique de spin et du stockage magnétique. Par exemple, l'anisotropie d'échange est utilisée dans les vannes de spin pour les têtes de lecture de disques durs, et plus récemment dans les mémoires magnétiques à accès aléatoires (MRAM : *Magnetic Random Access Memory*). Notons que le principe de lecture des disques durs est basé sur la magnétorésistance géante (MRG) alors que le fonctionnement des MRAM est basé sur la magnétorésistance tunnel (MRT).

## I.7.1 Magnétorésistance géante (MRG) et vanne de spin

La magnétorésistance géante est un phénomène découvert par A. Fert [22] et P. Grünberg [23] en 1988 dans des multicouches magnétiques de fer séparées par une couche conductrice non magnétique de chrome. Cette découverte leur a valu le prix Nobel de physique en 2007. Dans ces multicouches, les aimantations des couches de fer sont alignées antiparallèlement l'une par rapport à l'autre en champ nul. Lorsqu'on applique un champ magnétique, les aimantations des couches de fer s'alignent toutes parallèlement dans la direction du champ appliqué. Ce changement d'orientation des aimantations dans les couches magnétiques s'accompagne d'une variation de résistance électrique des multicouches à cause de la diffusion des électrons dépendante du spin. Il a été observé que si les orientations des aimantations des couches de fer sont parallèles, les électrons qui ont un spin parallèle à l'aimantation peuvent traverser le dispositif plus facilement, conduisant à une faible résistance (figure I.13). Par contre, dans le cas où les orientations des aimantations des couches sont antiparallèles, tous les électrons sont diffusés, il en résulte une forte résistance (figure I.13). La différence des résistances étant importante, cet effet a été nommé magnétorésistance géante.

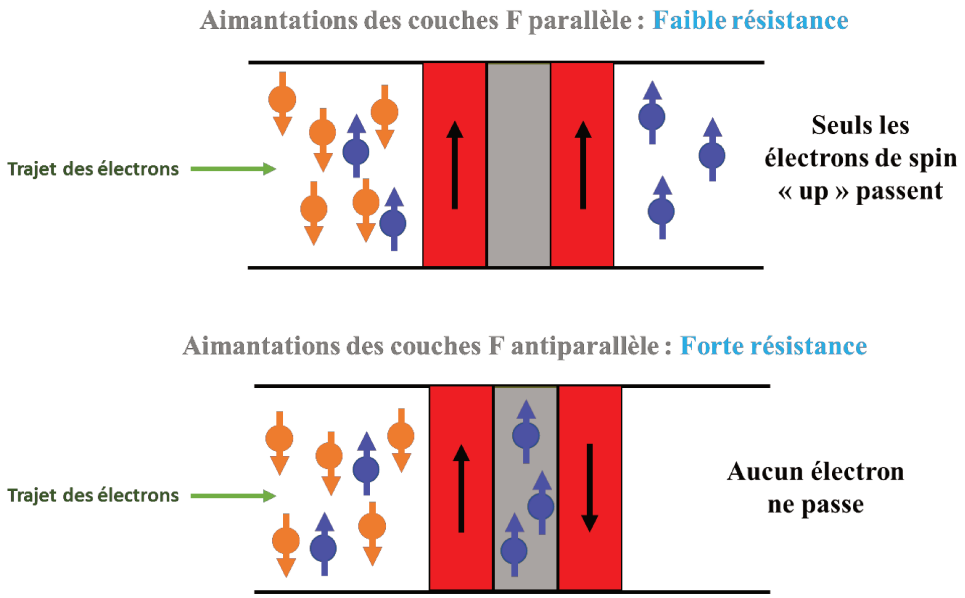


**Figure I.13 :** *Illustration de la magnétorésistance géante.*

Cette propriété a permis la réalisation de capteurs magnétiques très sensible appelés vanne de spin [24,25]. Une vanne de spin est constituée de deux couches F séparées par une couche conductrice non magnétique. L'une des couches F est dite libre car son aimantation peut se retourner facilement sous l'effet du champ magnétique extérieur. Par contre la deuxième couche est dite piégée car son aimantation ne se retourne pas lors de l'application d'un champ extérieur. Le piégeage de cette couche est obtenu par sa mise en contact avec une couche AF ce qui fait intervenir le phénomène d'anisotropie d'échange. Les aimantations des deux couches F peuvent être parallèles ou antiparallèles suivant l'aimantation de la couche F libre qui varie avec le champ extérieur. Ce changement d'orientation d'aimantation conduit au changement de

résistance qui se traduit par 0 ou 1 au niveau du codage binaire. Ce genre de capteurs de haute sensibilité est utilisé dans la tête de lecture des disques durs de nos ordinateurs [26,27].

## 1.7.2 Mécanismes d'écriture et de lecture dans le disque dur

L'écriture [28] des données dans le disque dur est basée sur l'induction magnétique. Une tête de lecture est constituée d'un circuit magnétique coupé d'un entrefer très fin avec un bobinage (figure I.14). Le bobinage est alimenté par un courant $I$ (de l'ordre de quelque mA), ce qui engendre, par induction, un flux magnétique qui s'échappe vers le media via l'entrefer et modifie localement l'aimantation du media. Le courant prend deux valeurs $\pm I$, alors on peut avoir deux états magnétiques stables qui permettent de coder deux valeurs pour chaque bit d'information 0 ou 1. Un bit sur un disque dur correspond à une région composée d'une centaine de grains du matériau F. En ce qui concerne la lecture des données, la variation de l'aimantation du média crée un champ magnétique de fuite. La sensibilité de capteurs MRG permet de détecter ces champs de fuite et transforme ces variations des aimantations en variation de tension aux bornes du bobinage (figure I.14).

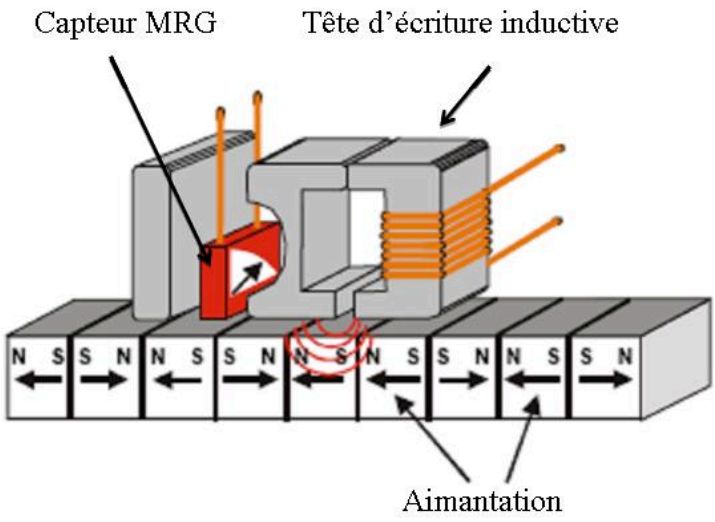


**Figure I.14 :** *Principe d'écriture et de lecture de données dans un disque dur.*

## I.7.3 Magnétorésistance tunnel (MRT) et jonction tunnel

Un effet de magnétorésistance similaire à la magnétorésistance géante est observé dans les jonctions tunnel et est appelé magnétorésistance tunnel [29]. La structure des jonctions tunnel est similaire à celle des vannes de spins, mais la couche conductrice qui sépare les couches F (libre et piégée) est remplacée par une couche isolante. Dans ces systèmes aussi, la résistance dépend de l'orientation de l'aimantation des deux couches F. La jonction tunnel est utilisée aujourd'hui comme cellule de stockage dans les mémoires magnétiques à accès aléatoires MRAM[30–32].

## 1.7.4 Mécanisme de fonctionnement d'une MRAM

Une MRAM se compose d'un réseau de cellules mémoires de dimensions de l'ordre 200 nm (figure I.15). Chaque cellule mémoire est constitué d'une jonction tunnel et d'un transistor. La jonction est comprise entre deux lignes conductrices (une « bit line » et une « digit line »). Ces lignes sont responsables d'un champ magnétique dans la jonction pour la fonction d'écriture. La jonction est connectée avec le transistor par l'électrode du bas où l'ouverture et la fermeture de transistor sont pilotées par une ligne de commande nommée « word-line » (figure I.15).

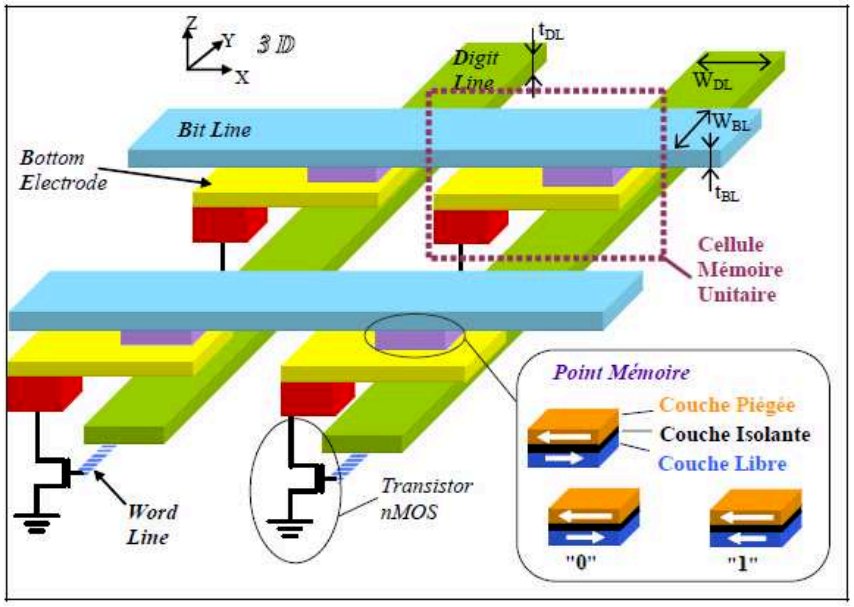


**Figure I.15 :** *Structure matricielle d'une MRAM.*

Afin d'écrire dans un cellule mémoire, des impulsions de courant sont envoyées dans les lignes conductrices (« bit line » et « digit line »). Le transistor dans ce cas est fermé pour que le courant circulant dans le « bit line » ne traverse pas la jonction. Ces impulsions génèrent un champ magnétique qui permet d'orienter l'aimantation de la couche libre (couche de stockage) dans une direction déterminée. Les impulsions de courant sont choisies d'une manière bien précise pour que le champ induit au niveau d'un point mémoire ne perturbe pas les aimantations des autres points mémoires (figure I.16).

La lecture est réalisée par la mesure de résistance de la jonction tunnel d'un point mémoire. Donc le transistor doit être ouvert pour que le courant circulant dans la « bit line » traverse la jonction et mesure sa résistance (figure I.16).

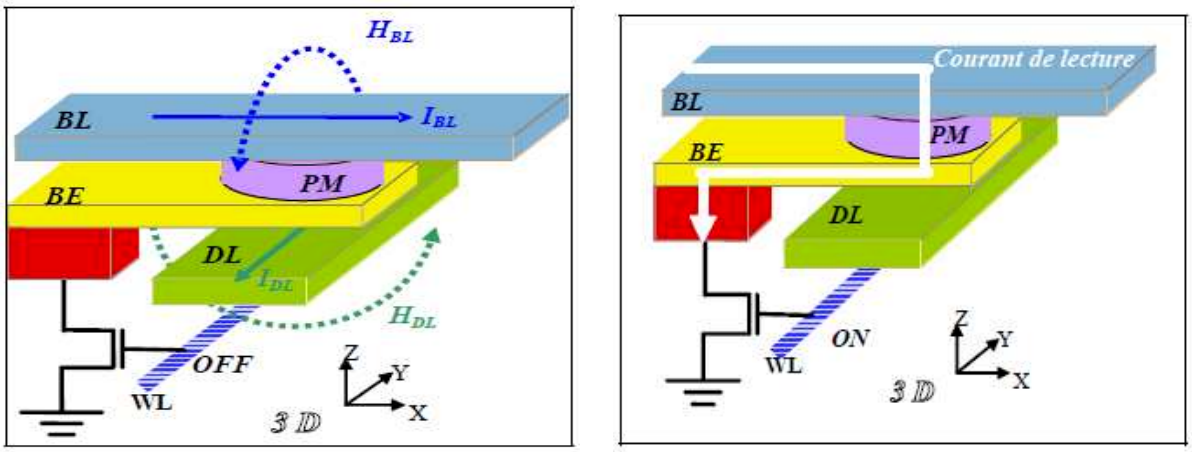


**Figure I.16 :** *Principe d'écriture et de lecture des données dans un cellule mémoire.*

# Chapitre II

# Simulation numérique

Dans ce travail de thèse nous avons eu recours aux simulations numériques pour étudier les propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots. Dans ce chapitre nous présentons quelques méthodes de simulation et nous détaillons les méthodes utilisées dans notre étude.

## II.1 Généralités sur la simulation numérique

Au cours de ces dernières années, la simulation numérique a suscité une attention particulière et a connu un développement considérable dans de nombreux secteurs d'activités (nucléaire, aéronautique, magnétisme...). La simulation numérique peut être considérée comme une technique complémentaire aux approches théoriques et expérimentales. Elle permet d'étudier les propriétés physiques de systèmes pour lesquels il n'existe pas de solution analytique, elle remplace alors une étude théorique. Dans d'autres cas, elle peut éviter de faire des expériences trop couteuses et/ou trop dangereuses si le modèle est jugé comme fiable. De plus, avec la simulation numérique, il est facile d'étudier l'effet de chacun des paramètres du modèle sur les propriétés physiques du système, ce qui est impossible expérimentalement. Les méthodes de simulation numérique sont nombreuses et le choix d'une méthode par rapport à une autre dépend de plusieurs critères tels que le problème étudié (grandeurs physiques à calculer) mais aussi les dimensions caractéristiques du phénomène physique étudié. Dans ce qui suit, nous présentons brièvement quelques méthodes en mettant en lumière les avantages et les inconvénients de chacune d'elles.

## II.2 Les principales méthodes de simulation numérique

### II.2.1 Les méthodes *ab initio*

Les méthodes *ab initio* permettent de déterminer la structure électronique d'une assemblée des quelques dizaines d'atomes. Ces méthodes sont basées sur la mécanique quantique. La plus connue est la théorie de la fonctionnelle de la densité (TFD) [33,34] et la résolution des équations de Hartree-Fock [35,36]. Elles permettent de calculer l'énergie totale et la structure électronique du système à l'état fondamental. Dans ces méthodes l'énergie du système est calculée à partir d'une densité électronique. Plus précisément, chaque électron ressent l'effet des autres électrons de façon moyenne (comme si les autres électrons formaient un nuage homogène d'électrons). Compte tenu des temps de calculs nécessaires, elles ne s'appliquent qu'à un petit nombre d'atomes.

## II.2.2 La dynamique moléculaire

La dynamique moléculaire [37–39] est une méthode de simulation permettant de décrire l'évolution temporelle d'un ensemble de particules (atomes, molécules …) en interactions. Elle utilise les lois de la mécanique classique, notamment les équations de Newton où la vitesse de d'une particule résulte des forces appliquées sur cette particule par les autres particules :

$$\begin{cases} \boldsymbol{F}_i(t) = m_i \frac{d^2\boldsymbol{r}_i(t)}{dt^2} \\ \boldsymbol{F}_i(t) = -\frac{dV(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)}{d\boldsymbol{r}_i} \end{cases} \quad (2.1)$$

où $\boldsymbol{r}_i(t)$ est le vecteur position de la particule $i$ à l'instant $t$, $\boldsymbol{F}_i$ est la résultante des forces exercées sur la particule $i$ par les autres particules, $m_i$ est la masse de la particule $i$ et $V(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)$ est l'énergie potentielle d'interaction totale. La dynamique moléculaire permet de calculer l'entropie, l'énergie libre, la chaleur spécifique … et permet de simuler des processus hors équilibre, tels que l'évolution microstructurale, le transport thermique ...

## II.2.3 La simulation micromagnétique

La simulation micromagnétique [40] est une méthode basée sur l'équation de Landau-Lifshitz qui permet d'étudier des systèmes à l'échelle de quelques micromètres. Elle consiste à modéliser un matériau ferromagnétiques au moyen d'une densité d'aimantation $\mathbf{M}(\mathbf{r},t)$ dont le comportement est donnée par l'équation :

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \frac{\gamma}{1+\lambda^2}\mathbf{M} \times \mathbf{B}_{eff} - \frac{\gamma\,\lambda}{(1+\lambda^2)\mathrm{M}}\mathbf{M} \times (\mathbf{M} \times \mathbf{B}_{eff}) \quad (2.2)$$

où $\gamma$ est le rapport gyromagnétique, $\mathbf{B}_{\mathbf{eff}}$ l'induction effective et $\lambda$ le coefficient d'amortissement.

Le premier terme représente la précession du vecteur $\mathbf{M}$ autour de $\mathbf{B}_{\mathrm{eff}}$, le deuxième terme traduit l'amortissement du mouvement de $\mathbf{M}$. Cette méthode reproduit bien les propriétés dynamiques à l'échelle des domaines et des parois de domaines magnétiques. Il est important de noter que cette méthode est valable à 0 K. Il est toutefois possible de prendre en compte les effets de la température en ajoutant un champ magnétique aléatoire fluctuant (dynamique de Langevin).

## II.2.4 La méthode Monte Carlo

La méthode Monte Carlo (MC) [41] est une méthode d'approche statistique largement utilisée dans plusieurs domaines tels que : la radioactivité, les phénomènes de transport, les transitions de phase, la croissance de films minces, la détermination des états fondamentaux … Cette

méthode peut être appliquée à un nombre d'atomes assez grand (de l'ordre de $10^6$) et permet d'obtenir les propriétés physiques d'un système à l'équilibre à une température $T$ non nulle. Dans le cas du magnétisme, elle permet de générer un grand nombre de configurations magnétiques (de l'ordre de $10^6$) à chaque température à partir desquelles on peut estimer les grandeurs magnétiques à l'équilibre (énergie interne, aimantation, chaleur spécifique, susceptibilité …) à cette température. Elle permet également de déterminer les configurations magnétiques stables à très basse température. Compte tenu de l'importance de l'effet de la température sur les propriétés d'anisotropie d'échange que nous souhaitons étudier, la méthode MC est un bon choix pour réaliser nos travaux. Dans ce qui suit, nous présentons la méthode MC appliquée à des systèmes de spins.

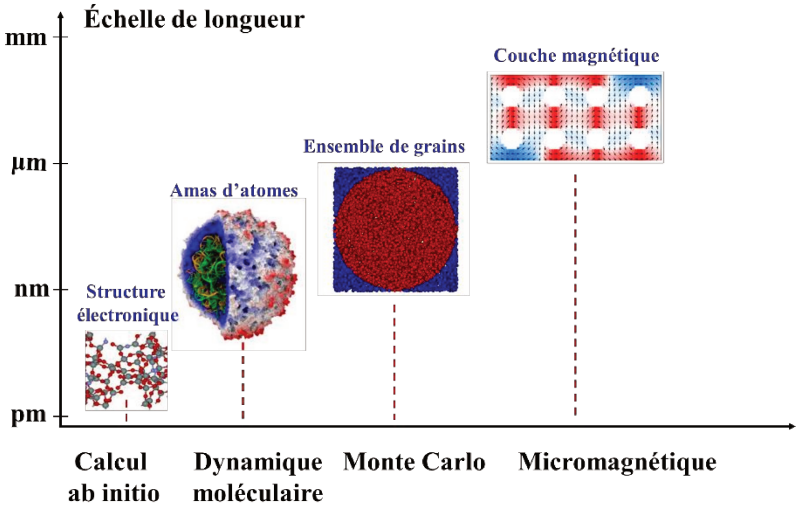


**Figure II.1 :** *Les différentes échelles des principales méthodes de simulation.*

## II.3 Généralités sur la méthode Monte Carlo

La méthode MC est une méthode stochastique qui est basé sur le principe de chaines de Markov. Une chaine de Markov est une suite ($X_1$, …, $X_n$) pour laquelle il existe une densité (distribution) de probabilité d'équilibre $P(X)$ vers laquelle le processus Markovien converge. Dans notre étude X correspond à une configuration magnétique, c'est-à-dire un ensemble de $N$ spins : $X = \{\mathbf{S}_1, \ldots, \mathbf{S}_N\}$. Le passage d'une configuration X à la configuration suivante s'effectue au moyen d'une probabilité de transition par unité du temps $W(X \rightarrow X')$. Pour qu'il y ait convergence vers $P(X)$, $W(X \rightarrow X')$ doit vérifier certaines conditions :

- les probabilités de transition d'une configuration X à une configuration X′ doivent satisfaire la relation suivante pour que l'équilibre lorsqu'il est atteint persiste :

$$P(X) = \sum_{X'} W(X' \rightarrow X) P(X') \quad (2.3)$$

Il est important à noter que cette condition est une condition nécessaire et suffisante. En fait, on utilise la condition de réversibilité microscopique :

$$W(X \rightarrow X')P(X) = W(X' \rightarrow X)P(X') \quad (2.4)$$

qui est une condition suffisante mais non nécessaire au maintien de l'équilibre. Dans ce qui suit, on présente la méthode MC standard, quantifiée en temps et cinétique.

## II.3.1 Méthode Monte Carlo standard basée sur l'algorithme de Metropolis

L'algorithme de Metropolis [42] est un algorithme dans l'ensemble canonique qui consiste en la réactualisation d'un seul spin à la fois ($\boldsymbol{S_i} \rightarrow \boldsymbol{S_i'}$). Cet algorithme permet de simuler l'état d'équilibre du système à la température $T$ et de calculer ses grandeurs thermodynamiques à cette température. Dans l'ensemble canonique, la densité de probabilité s'écrit :

$$P(X) = \frac{e^{-\frac{E(X)}{k_B T}}}{Z(T)} \quad (2.5)$$

où $E$(X) est l'énergie de la configuration X, $k_B$ est la constante de Boltzmann et $Z(T) = \sum_X e^{-\frac{E(X)}{k_B T}}$ représente la fonction de partition. Donc la condition de réversibilité microscopique (2.4) s'écrit :

$$\frac{P(X\prime)}{P(X)} = \frac{W(X \rightarrow X')}{W(X' \rightarrow X)} = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} \quad (2.6)$$

où $\Delta E = E(X') - E(X)$ est la variation d'énergie lors de la transition de la configuration X à la configuration X′. La probabilité de transition choisie par Metropolis *et al.* est :

$$W(X \rightarrow X') = \min\left\{1, e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}\right\} \quad (2.7)$$

Par conséquent, toute transition dont la variation d'énergie $\Delta E$ est négative (l'énergie du système diminue) est toujours acceptée quelle que soit la température car $W(X \rightarrow X') = 1$. Par contre si $\Delta E$ est positive, la transition peut être acceptée ou non puisque $W(X \rightarrow X') < 1$ (Figure II.2).

La description de l'algorithme de Metropolis est :

1- Choix aléatoire d'un site $i$ et tirage aléatoire de la nouvelle orientation $\boldsymbol{S_i'}$ de son spin.

2- Calcul de la variation d'énergie $\Delta E$ associé au changement d'orientation du spin : $\boldsymbol{S_i} \rightarrow \boldsymbol{S_i'}$.

3- Calcul de la probabilité de transition : $W(X \rightarrow X') = \min\left\{1, e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}\right\}$.

4- Si $\Delta E < 0$, alors le changement d'orientation est accepté.

   Si $\Delta E > 0$, on tire un nombre aléatoire $r$ tel que $0 < r < 1$ :

   - Si $r \leq e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$, alors on accepte la nouvelle orientation du spin.

- Si $r > e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$, alors on refuse la nouvelle orientation du spin.

5 - Retour à l'étape 1.

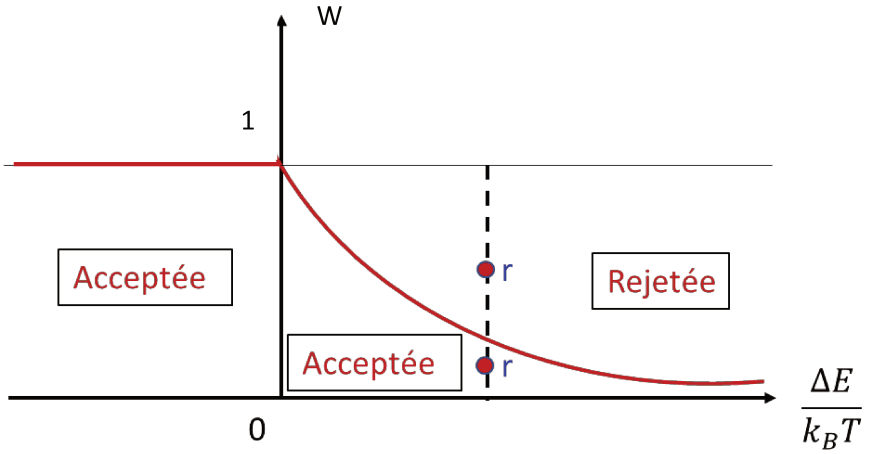


**Figure II.2 :** *Variation de la probabilité de transition de Metropolis en fonction de $\Delta E/k_B T$.*

Les étapes 1 à 4 constituent un pas MC. On réalise un grand nombre de pas MC ($n_{MCS}$) typiquement de l'ordre de $10^5$.
Cet algorithme est bien adapté pour simuler l'équilibre thermodynamique à la température $T$ car il minimise l'énergie libre du système à chaque température sans prendre en compte les barrières d'énergie à franchir lors de la transition d'une configuration à l'autre. Cependant l'un des problèmes de cet algorithme est la correspondance entre un pas MC et temps physique en secondes. Par conséquent, cet algorithme n'est pas adapté pour étudier les aspects dynamiques tels que la dynamique de retournement de l'aimantation où les barrières d'énergie à franchir jouent un rôle important. Pour pallier à ce problème, d'autres méthodes ont été proposées comme la méthode MC quantifiée en temps et la méthode MC cinétique.

## II.3.2 Méthode Monte Carlo quantifiée en temps

La méthode MC quantifiée en temps a été introduite par Nowak *et al.* [43] dans le but de résoudre le problème de la correspondance entre un pas MC et le temps physique. Cette méthode diffère de la méthode standard dans la façon de choisir la nouvelle orientation du spin. Dans cette méthode, la nouvelle orientation du spin est choisie dans un cône d'axe $\boldsymbol{S_i}$ et de rayon $R < 1$ (figure II.3) de la façon suivante :

1- On choisit aléatoirement un vecteur **u** à l'intérieur du cône de rayon $R$ avec une densité de probabilité uniforme.
2- On additionne **u** au vecteur unitaire $\boldsymbol{S_i}$ pour avoir la nouvelle orientation du spin.
3- La nouvelle valeur du spin est donnée par : $\boldsymbol{S'}_i = \frac{\boldsymbol{S_i} + \boldsymbol{u}}{||\boldsymbol{S_i} + \boldsymbol{u}||}$.

Il est à noter que les résultats de simulation sont fortement dépendants de la valeur de $R$. Selon cet algorithme, le temps physique $\delta t$ associé à un pas MC est égal à :

$$\delta t = \frac{(1+\alpha^2)m}{20\alpha\gamma k_B T} R^2 \qquad (2.8)$$

où α est le coefficient d'amortissement, γ le rapport gyromagnétique et $m$ le moment magnétique associé au spin. Cette méthode permet de prendre indirectement en compte les barrières d'énergie. Elle reste toutefois inefficace dans certains cas. Par exemple les simulations de cycles d'hystérésis à basse température dans les systèmes F pour lesquels le renversement d'aimantation s'effectue par rotation uniforme conduisent à des valeurs de champ coercitif trop élevées. Ceci est dû au fait que cette méthode utilise un algorithme de réactualisation d'un seul spin à la fois, ce qui coûte beaucoup d'énergie lorsque le couplage est fort.

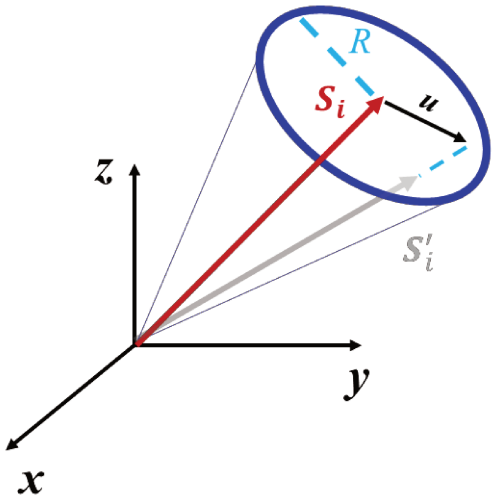


**Figure II.3 :** *Principe de la méthode Monte Carlo quantifiée en temps.*

Il est à noter que cette méthode est beaucoup moins couteuse en temps de calcul que la méthode basée sur l'équation LLG. En fait, la méthode MC quantifiée en temps est équivalente à la méthode LLG lorsque l'amortissement est grand. Nous avons choisi cette méthode dans l'approche atomique (chapitre IV) pour étudier les effets des joints de grains et de la diffusion atomique à l'interface (F/AF) sur les propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots.

## II.3.3 Méthode Monte Carlo cinétique

Contrairement à la méthode MC standard et à la méthode MC quantifiée en temps, la méthode MC cinétique [44] prend explicitement en compte les barrières d'énergie pour réactualiser un spin (par exemple pour retourner un spin). Pour mieux comprendre cette méthode, nous la présentons dans le cas de l'approche granulaire [45,46] dans laquelle le spin représentera la direction de l'aimantation d'un grain magnétique et sera noté $\boldsymbol{\sigma}_i$. Les détails du modèle granulaire seront donnés dans le chapitre III. Dans ce modèle, $\boldsymbol{\sigma}_i$ sera toujours

colinéaire à l'axe facile *Oy* et ne pourra donc prendre que deux orientations (figure II.4). Pour se retourner, chaque spin doit franchir une barrière d'énergie $\Delta E$ qui dépend de l'anisotropie, de l'énergie d'échange avec les grains voisins et du champ appliqué.

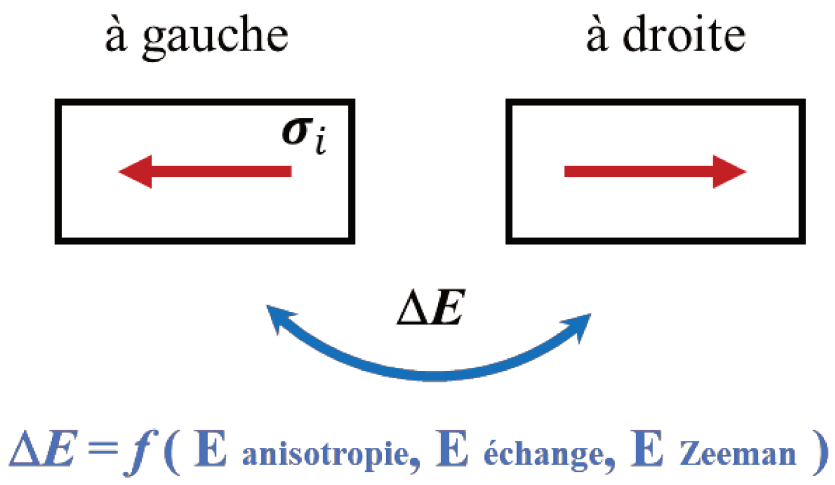


**Figure II.4** *Orientations possibles du spin dans le modèle granulaire.*

La probabilité de transition (retournement) du spin est donnée par :

$$W(\boldsymbol{\sigma}_i \rightarrow -\boldsymbol{\sigma}_i) = exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right) \text{ si } \Delta E > 0, \text{ 1 sinon.}$$

Il est à noter que cette probabilité de transition vérifie bien la condition de réversibilité microscopique (Eq. 2.4). Pour une température donnée, l'algorithme est donc :

1. Choix aléatoire d'un grain magnétique *i*.
2. Calcul de la barrière d'énergie $\Delta E$ correspondant au retournement du spin ($\boldsymbol{\sigma}_i \rightarrow -\boldsymbol{\sigma}_i$).
3. Calcul de la probabilité de retournement $W(\boldsymbol{\sigma}_i \rightarrow -\boldsymbol{\sigma}_i)$.
4. Si $W(\boldsymbol{\sigma}_i \rightarrow -\boldsymbol{\sigma}_i) = 1$, alors le spin se retourne.

   Si $W(\boldsymbol{\sigma}_i \rightarrow -\boldsymbol{\sigma}_i) = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$ , on tire un nombre aléatoire *r* tel que $0 < r < 1$ :

   - Si $r \leq e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$, alors on accepte le retournement.
   - Si $r \geq e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$, alors le spin ne se retourne pas.

5. Retour à l'étape 1.

# Chapitre III

# Propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots et des films continus (NiFe/IrMn et Co/IrMn) en comparaison avec les résultats expérimentaux : Approche granulaire

## III.1 Introduction

Pendant les dernières décennies, de nombreuses études sur l'anisotropie d'échange (EB) ont été réalisées en raison des applications dans le domaine de l'enregistrement magnétique que ce soit l'écriture ou la lecture [47,48]. Plus récemment, le challenge est d'augmenter la densité de stockage tout en réduisant la taille des appareils (capteurs magnétiques ) [49]. Pour cela, il est particulièrement important d'étudier l'anisotropie d'échange dans les nanoplots [50] dans lesquels interviennent les effets de bords et les effets de taille en raison de leurs petites dimensions (quelques dizaines de nm). Plusieurs études ont montré que les valeurs du champ d'échange $H_E$ dans les nanoplots sont plus grands que ceux des films continus alors que d'autres ont indiqué le contraire.

Par exemple, dans une étude sur des bicouches NiFe/IrMn, V. Baltz *et al.* ont montré que $H_E$ à température ambiante est plus petit dans les nanoplots que dans les films continus lorsque $e_{IrMn} < 11$ nm. Par contre, il est plus grand au-dessus de cette épaisseur [51,52]. Dans une étude plus récente sur des bicouches NiFe/IrMn, F. Spizzo *et al.* ont constaté que $H_E$ diminue lorsque les dimensions latérales diminuent à la température ambiante, alors qu'il augmente à basse température (10 K) [53]. Dans une autre étude sur des bicouches NiFe/FeMn, L. Sasaki *et al*. ont également montré que $H_E$ à température ambiante diminue lorsque la taille diminue [54], ce qui est en accord avec les Réfs. [51,53]. En revanche, il a été observé que $H_E$ à température ambiante est plus petit dans les nanoplots NiFe/IrMn pour $e_{IrMn} = 15$ nm [55], ce qui est en contradiction avec la Réf. [50]. Dans une autre étude récente sur des nanoplots Co/IrMn [56], G. Vinai *et al.* n'ont trouvé aucun effet de la taille latérale sur $H_E$ à température ambiante pour différentes épaisseurs de IrMn (3 nm < $e_{IrMn}$ < 15 nm). Dans les nanoplots Co/CoO, pour $e_{Co} = 8$ nm (petite épaisseur),

une forte augmentation de $H_E$ à 4K a été détectée lorsque la taille latérale diminue. Cependant que pour $e_{Co} = 25$ nm (grande épaisseur), l'augmentation de $H_E$ est moins prononcée [57]. La majorité des résultats expérimentaux indiquent donc que $H_E$ à température ambiante diminue lorsque la taille latérale diminue. Bien que peu de résultats existent, cela semble être l'inverse à basse température. Ces changements de comportement de $H_E$ entre les nanoplots et les films continus sont dus aux effets de bords. En effet, V. Baltz *et al.* ont montré que l'un des effets de bords est de favoriser la présence de phases magnétiques désordonnées (régions de type « verre de spin ») dans la couche AF [58].

Concernant l'influence de l'épaisseur de la couche AF, Il a été montré que la variation de $H_E$ à température ambiante en fonction de $e_{IrMn}$ présente un maximum pour $e_{IrMn} = 6{,}5$ nm pour toutes les tailles des nanoplots[56]. D'autres études sur des bicouches NiFe/IrMn et CoFe/IrMn [59,60] indiquent un maximum pour $e_{IrMn} = 8$ nm. De même, dans une autre étude sur les bicouches Co/IrMn, il a été observé que $H_E$, à température ambiante, augmente lorsque $e_{IrMn}$ passe de 2,6 nm à 3,9 nm en accord avec les Refs[56,59]. Par contre, c'est le contraire à 10 K [61].

Parallèlement, il n'existe que quelques études numériques sur les propriétés d'anisotropie d'échange dans les nanoplots F/AF. Ces études peuvent être divisées en deux catégories : la première basée sur un modèle atomique et la deuxième basée sur un modèle granulaire. Concernant l'approche atomique, G. Garcia *et al.* [62] ont montré, en utilisant les simulations Monte Carlo, une augmentation de $H_E$ à 10 K dans les nanoplots par rapport aux films continus. Concernant l'approche granulaire, G. Vallejo-Fernandez *et al.* [63] ont trouvé que $H_E$ est plus petit dans les nanoplots par rapport aux films continus à température ambiante. Il est important de noter que ce modèle granulaire ne prend pas en compte les phases magnétiques désordonnées à l'interface (régions de type « verre de spin ») qui ont été prises en compte dans d'autres études [18,45,46,53,64]. Ces phases interfaciales peuvent altérer significativement les propriétés d'anisotropie d'échange.

Ce chapitre est consacré à l'étude des propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots F/AF en utilisant l'approche granulaire. Notre travail a été réalisé à l'aide de simulations Monte Carlo cinétiques. Dans un premier temps, nous allons décrire notre modèle structurale et magnétique pour les films continus et les nanoplots. Ensuite, nous présentons nos résultats sur l'effet du couplage F sur le mécanisme de retournement de la couche F et l'effet de l'épaisseur de la couche AF sur les propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots et des films continus NiFe/IrMn. Après cela, nous étudions l'effet de la température de mesure sur le champ coercitif et le champ d'échange pour différentes tailles des nanoplots NiFe/IrMn et d'un film continu. Enfin, nous examinons l'effet de l'épaisseur de la couche AF, dans les nanoplots et les films continus Co/IrMn, sur le champ coercitif et le champ d'échange à température de mesure constante et ensuite à température de mesure variable. Pour chaque étude nous comparerons nos résultats à des résultats expérimentaux.

# III.2 Modèle

## III.2.1 Modélisation structurale

Nous nous intéressons à l'étude des bicouches F/AF en utilisant l'approche granulaire. Afin de construire la nanostructure granulaire qui est caractérisée par une distribution volumique de grains, nous avons eu recours aux tesselations de Voronoi [65] avec l'hypothèse de la croissance colonnaire. Cette méthode s'applique à un ensemble $E$ de $n$ points dans l'espace de dimension $D$. Plus précisément, elle consiste à décomposer l'ensemble $E$ en cellules qui remplissent l'ensemble sans chevauchement. Ces cellules sont connues par les germes (ou sites), chaque germe $i$ de $E$ est l'ensemble de points de l'espace qui sont plus proche de $i$ que de tous les autres germes de $E$ (figure III.1). En revenant à notre cas, l'ensemble $E$ représente une couche et les germes sont l'ensemble de grains qui constituent la couche. La distribution de tailles des germes est de type log- normale.

**Figure III.1 :** *Cellules de Voronoi 2D pour un ensemble de 20 germes.*

Afin de générer les grains de la tesselation de Voronoi et d'obtenir toutes les informations géométriques associées à chaque grain et à son voisinage, nous avons utilisé le logiciel Neper. Ce logiciel offre la possibilité de contrôler la distribution de volume des grains obtenus.

Dans le but d'étudier les propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots et de les comparer à celles des films continus, nous avons généré des bicouches modélisant les films continus et d'autres bicouches modélisant les nanoplots. Chaque couche du film continu contient $10^4$ grains alors que celle du nanoplot n'en contient que 289 ($L \approx 130$ nm). Pour être plus réaliste dans la modélisation des nanoplots, nous avons introduit des grains de surface réduites en bordures des couches qui résultent de la méthode d'élaboration expérimentale. Sur la figure III.2, nous

présentons une vue de dessus de la nanostructure d'une couche du film continu et d'une couche du nanoplot illustrant la présence de petits grains aux bords du nanoplot.

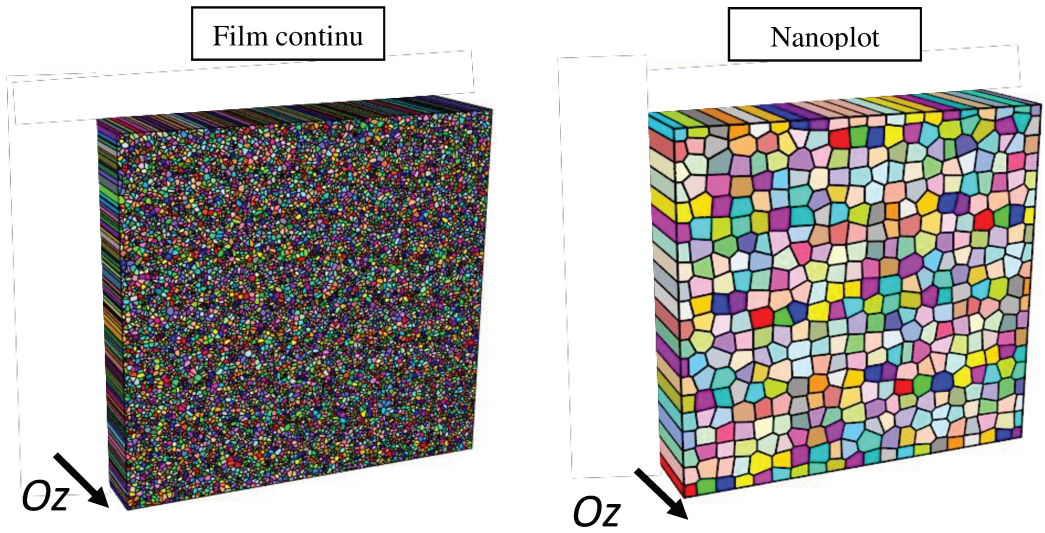


**Figure III.2 :** *Vue de dessus de la nanostructure d'une couche du film continu contenant $10^4$ grains et d'une couche du nanoplot contenant 289 grains générées par tesselation de Voronoi.*

Sur la figure III.3 nous présentons les distributions volumiques des grains intérieurs et en bordures pour une couche du film continu et une couche du nanoplot. Sur la figure de droite, on voit que le volume moyen des grains en bordures du nanoplot (≈ 150 $nm^3$) est presque deux fois plus petit que celui des grains intérieurs (≈ 270 $nm^3$) ce qui n'est pas le cas dans le film continu (figure de gauche) où le volume moyen des grains est le même en bordures et à l'intérieur (≈ 270 $nm^3$).

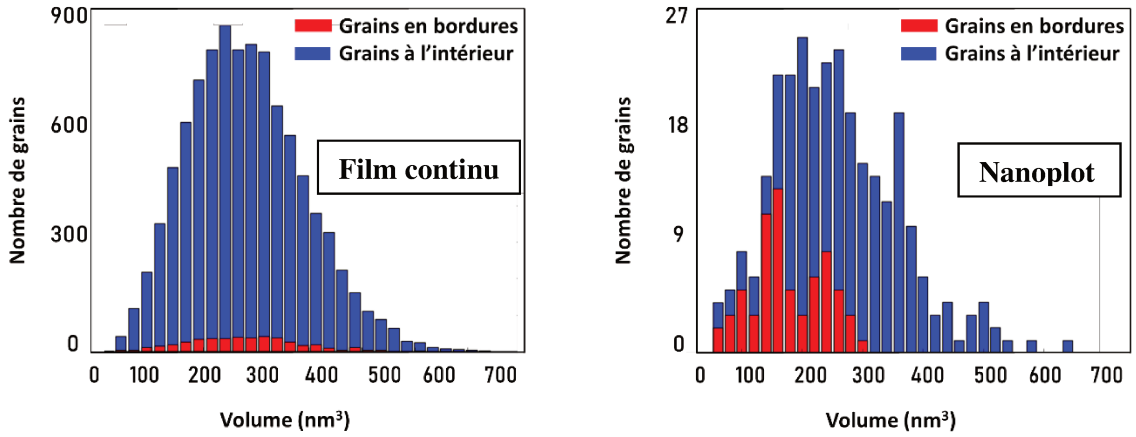


**Figure III.3 :** *Distribution log normale des volumes des grains obtenue par tesselation de Voronoi dans le cas du film continu (à gauche) et du nanoplot (à droite).*

## III.2.2 Modélisation magnétique

Après avoir modélisé la nanostructure des deux couches (F et AF), il est nécessaire de déterminer les différents paramètres magnétiques de chaque grain.

### *III.2.2.1 Caractéristiques des films continus et des nanoplots*

Plusieurs études expérimentales sur les bicouches F/AF ont montré qu'il existe des « régions » moins stables à l'interface F/AF dans la couche AF qui ont été assimilées à des phases magnétiques désordonnées [18,45,46,53,64]. Ces phases interfaciales désordonnées qui sont dues à de la frustration magnétique induite par les défauts à l'interface F/AF (interdiffusion, défauts d'empilement...) peuvent affecter significativement les propriétés d'anisotropie d'échange. Nous modélisons ces phases interfaciales désordonnées par la présence de petits grains (PG), d'épaisseur $e_{PG}$ inférieure à celle de la couche AF ($e_{AF}$), répartis aléatoirement à l'interface F/AF au sein de la couche AF [45,46] (figure III.4).

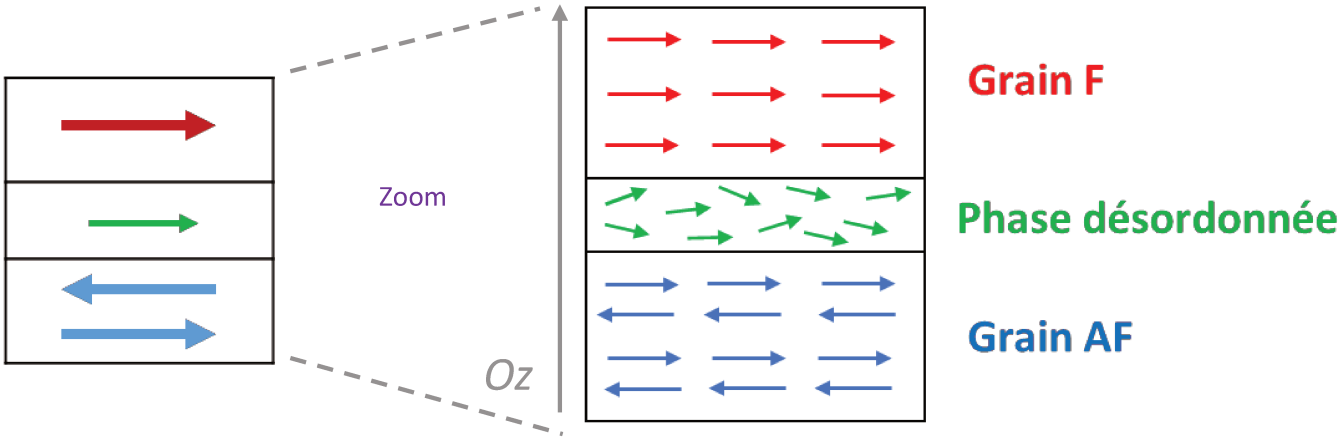


**Figure III.4 :** *Schéma représentant des moments magnétiques atomiques désordonnés à l'interface d'un grain F et d'un grain AF (à droite) et le macro-moment correspondant suivant l'axe Oy (à gauche).*

En se basant sur des données expérimentales [66,67], les phases interfaciales désordonnées peuvent s'étendre sur 3-4 plans atomiques, pour cela nous avons pris $e_{PG}$= 2 nm. De plus, il a été démontré expérimentalement [68] que la fraction de phases désordonnées à l'interface ($x_{PG}$) dépend des méthodes d'élaboration des bicouches et peut varier entre 20 et 80%. Dans nos simulations nous avons fixé la fraction de PG à l'interface à une valeur moyenne de 50% aussi bien dans les nanoplots que dans le film continu ($x_{PG}$ = 50%). En outre, une étude récente [58] sur les nanoplots a montré que les propriétés magnétiques des grains en bordures dans la couche AF sont altérées par le processus de fabrication. Cette étude a montré que les bords de la couche AF constituent des emplacements supplémentaires pour la formation de phases magnétiques désordonnées similaires à celles qui existent à l'interface F/AF. Pour modéliser ces phases magnétiques désordonnées en bordures du nanoplot dans la couche AF, **nous considérons que**

**<u>les grains des bords de la couche AF qui ont des surfaces réduites appelés $PG_B$ ont les mêmes propriétés magnétiques que les PG de l'interface F/AF.</u>** Il est à noter que ces $PG_B$ sont supposés avoir la même épaisseur que la couche AF ($e_{PGB} = e_{AF}$) et avoir des propriétés magnétiques altérées par rapport à celles des grains AF que nous préciserons ci-dessous. En conséquence, la fraction de grains ayant des propriétés magnétiques altérées dans le cas des nanoplots est plus grande que celle du film continu en raison de la présence des $PG_B$.

### *III.2.2.2 <u>Hamiltonien</u>*

Dans notre modèle les dimensions des grains sont à l'échelle nanométrique, donc nous considérons que chaque grain est monodomaine et que le retournement des moments magnétiques s'effectue par rotation uniforme. Ainsi, nous avons pu modéliser chaque grain F, PG ou $PG_B$ par un vecteur unitaire $\boldsymbol{\sigma}_i$ qui représente la direction et le sens de l'aimantation du grain. Pour les grains AF, $\boldsymbol{\sigma}_i$ représente la direction et le sens de l'aimantation interfaciale non compensée. Dans notre modèle, les grains F sont couplés entre eux ($J_F$) et il existe deux types de couplage à l'interface : un couplage $J_{F\text{-}AF}$ entre les grains F et les grains AF et un couplage $J_{F\text{-}PG}$ entre les grains F et les PG (ou les $PG_B$ dans le cas des nanoplots). De plus, les PG sont couplés aux grains AF du dessous ($J_{AF\text{-}PG}$). Nous considérons une anisotropie uniaxiale suivant l'axe *Oy* pour tous les grains. Nous considérons que la barrière d'énergie est grande devant l'agitation thermique, donc les vecteurs $\boldsymbol{\sigma}_i$ sont toujours colinéaires à l'axe facile (*Oy*) (vers la gauche ou la droite).

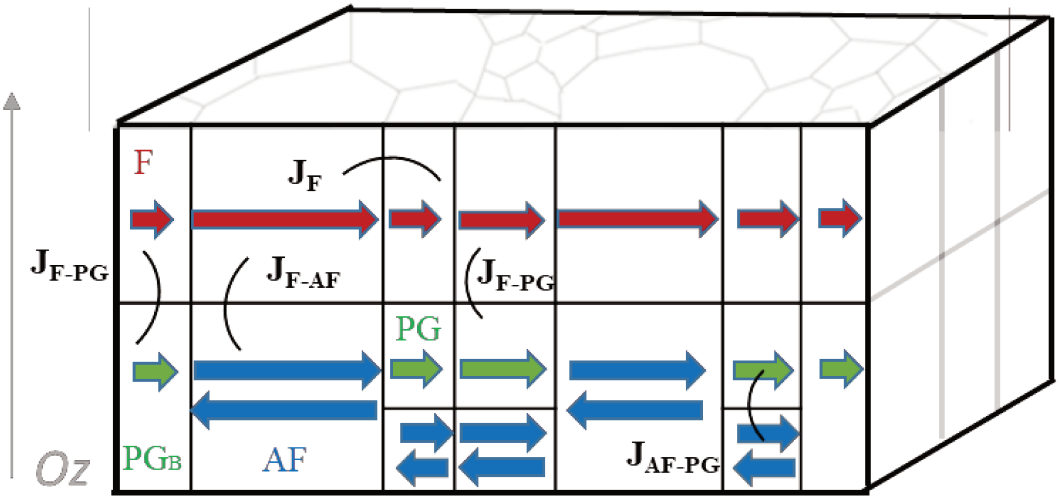


**Figure III.5 :** *Schéma représentant un nanoplot F/AF avec la présence des PG dans la couche AF à l'interface et des $PG_B$ dans la couche AF en bordures.*

L'énergie magnétique totale de la bicouche est la somme de plusieurs contributions :

$$E = -\sum_{<i,j>} J_{ij}\, \boldsymbol{\sigma_i}.\boldsymbol{\sigma_j} - \sum_{\boldsymbol{i}} K_i V_i \left(\boldsymbol{\sigma_i}.\boldsymbol{e_y}\right)^2 - \mu_0 \boldsymbol{H} \sum_{i \in F, PG, PG_B} \boldsymbol{m_i} \quad (3.1)$$

où $J_{ij} = J_F$, $J_{F\text{-}AF}$, $J_{F\text{-}PG}$ ou $J_{AF\text{-}PG}$ sont les intégrales d'échange effectives entre les grains, $V_i$ est le volume du grain, **H** est le champ appliqué suivant l'axe *Oy*, $\mathbf{m_i}$ est le moment magnétique du grain F, ou du PG ou du $PG_B$ (dans le cas des nanoplots) et $K_i$ est la constante d'anisotropie effective par unité de volume incluant les différents types d'anisotropie (anisotropie magnéto-cristalline, anisotropie de forme …). $K_i$ dépend de la température. L'intégrale d'échange effective entre le grain *i* et le grain *j* est proportionnelle à la surface « de contact » entre deux grains voisins ($S_{ij}$ ) : $J_{ij} = j_{ij} \times S_{ij}$ où $j_{ij}$ est le couplage effectif par unité de surface (voir III.3.2.4). La dépendance des constantes d'anisotropie des grains F, AF, PG et $PG_B$ en fonction de la température s'écrit sous la forme[69]:

$$K_F(T) = K_0^F \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \quad (3.2)$$

$$K_{AF}(T) = K_0^{AF} \left(1 - \frac{T}{T_N}\right) \quad (3.3)$$

$$K_{PG}(T) = K_0^{PG} \left(1 - \frac{T}{T_g}\right) \quad (3.4)$$

où $K_0^F$, $K_0^{AF}$ et $K_0^{PG}$ sont les constantes d'anisotropie effective par unité de volume à 0 K des grains F, AF, PG (et $PG_B$) respectivement, et $T_C$, $T_N$ et $T_g$ sont respectivement la température de Curie, la température de Néel et la température de gel des phases magnétiques désordonnées

Dans notre modèle, le retournement du macro-moment $\boldsymbol{\sigma}_i$ de la direction + *Oy* vers – *Oy* (ou de – *Oy* vers + *Oy*) nécessite de franchir une barrière d'énergie (figure III.6). Pour un grain F la barrière d'énergie à franchir lors du retournement s'écrit sous la forme :

$$\Delta E_{i,F}^{\pm} = K_F(T)\, V_i \left(1 \pm \frac{|H + H_i|}{H_a^F}\right)^2 \quad (3.5)$$

où $H_i$ est la valeur algébrique du champ local perçu par le grain F :

$$\boldsymbol{H_i} = \frac{1}{\mu_0 M_F V_i} \left[ J_F \sum_{Voisins\ F} \boldsymbol{\sigma_F} + J_{F-X}.\boldsymbol{\sigma_X} \right]_{X=AF\ ou\ PG} \quad (3.6)$$

où $M_F$ est l'aimantation d'un grain F et $H_a^F = \frac{2K_F(T)}{\mu_0 M_F}$ est le champ d'anisotropie des grains F. Le signe + dans la formule (3.5) correspond au cas où $\boldsymbol{\sigma}_i$ est dans le même sens que $\boldsymbol{H} + \boldsymbol{H_i}$ et le signe – au cas où $\boldsymbol{\sigma}_i$ est dans le sens opposé à $\boldsymbol{H} + \boldsymbol{H_i}$.

De même, pour les PG et les $PG_B$ la barrière d'énergie à franchir est :

$$\Delta E_{i,PG}^{\pm} = K_{PG}(T)\, V_i \left(1 \pm \frac{|H + H_i|}{H_a^{PG}}\right)^2 \quad (3.7)$$

où $H_i$ est la valeur algébrique du champ local perçu par le PG ou le $PG_B$ :

$$\boldsymbol{H_i} = \frac{1}{\mu_0 M_{PG} V_i} \left[ J_{F-PG}\, \boldsymbol{\sigma_F} + J_{AF-PG}\, \boldsymbol{\sigma_{AF}} \right] \quad (3.8)$$

où $M_{PG}$ est l'aimantation d'un PG (et $PG_B$) et $H_a^{PG} = \frac{2K_{PG}(T)}{\mu_0 M_{PG}}$ est le champ d'anisotropie des PG (et $PG_B$).

Pour un grain AF la barrière d'énergie à franchir lors du retournement du macromoment s'écrit sous la forme :

$$\Delta E_{i,AF}^{\pm} = K_{AF}(T)\, V_i\, (1 \pm \frac{|H_i|}{H_a^{AF}})^2 \qquad (3.9)$$

où $H_i$ est la valeur algébrique du champ local perçu par le grain AF :

$$\boldsymbol{H_i} = \frac{J_{AF-Y}}{\mu_0 \mu_{AF}} \boldsymbol{\sigma_Y} \quad avec\ Y = F\ ou\ PG \qquad (3.10)$$

avec $H_a^{AF} = \frac{2K_{AF}(T)V_i}{\mu_0 \mu_{AF}}$ ($\mu_{AF}$ est la norme du moment magnétique interfacial des grains AF qui est proportionnelle à la surface « de contact » F/AF ).

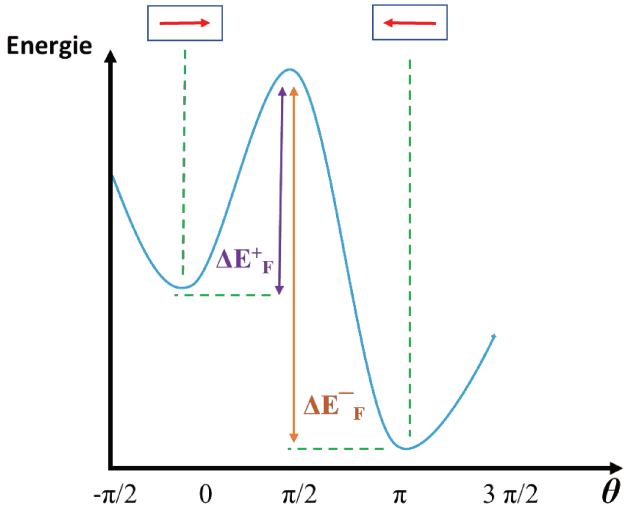


**Figure III.6 :** *Courbe de variation de l'énergie en fonction de l'angle θ entre le macromoment F et l'axe facile Oy.*

### *III.2.2.3 Températures de blocage*

Comme on l'a vu dans le chapitre I, la température de blocage intrinsèque ($T_B^{int}$) est la température pour laquelle le temps de relaxation τ en absence de champ appliqué et d'interaction est égal au temps de mesure $t_{mes}$, c'est-à-dire $T_B = \frac{KV}{k_B \ln(\frac{t_{mes}}{\tau_0})}$. Le temps de mesure dans nos simulations s'écrit sous la forme $t_{mes} = n_{MCS}\, \delta t$ (3.11) où $\delta t$ est le temps physique associé à un pas MC. Des études antérieures [70] ayant montré que $\delta t \approx 2\tau_0$ (3.12), la température de blocage intrinsèque $T_B^{int}$ devient donc :

$$T_B^{int} = \frac{K\,V}{k_B \ln(2n_{MCS})} \qquad (3.13)$$

Comme les constantes d'anisotropie effective $K$ dépendent de la température (Eqs (3.2) à (3.4)), alors $T_B^{int}$ s'écrit :

$$T_B^{int,F} = \frac{K_0^F V_F T_C}{k_B T_C \ln(2n_{MCS}) + K_0^F V_F} \quad (3.14)$$

$$T_B^{int,AF} = \frac{K_0^{AF} V_{AF} T_N}{k_B T_N \ln(2n_{MCS}) + K_0^{AF} V_{AF}} \quad (3.15)$$

$$T_B^{int,PG} = \frac{K_0^{PG} V_{PG} T_g}{k_B T_g \ln(2n_{MCS}) + K_0^{PG} V_{PG}} \quad (3.16)$$

Par conséquent, la distribution volumique des grains entraîne une distribution des températures de blocage intrinsèques $T_B^{int}$. Donc la distribution de $T_B^{int}$ du nanoplot est différente de celle du film continu à cause de la présence des $PG_B$ en bordures.

Dans la suite de ce mémoire nous étudierons les propriétés d'anisotropie d'échange des bicouches F/AF les plus étudiées d'un point de vue expérimental : les bicouches NiFe/IrMn et Co/IrMn.

# III.3 Résultats sur les bicouches NiFe/IrMn [71]

Dans cette partie nous étudions l'effet du couplage F sur le mécanisme de retournement de la couche F et sur la variabilité de $H_E$ d'un nanoplot à l'autre. Ensuite, nous examinons les propriétés d'anisotropie d'échange à température ambiante des nanoplots par rapport à celles des films continus pour différentes épaisseurs de la couche AF (IrMn). Puis, nous présentons les effets de la taille latérale des nanoplots sur $H_E$ et $H_C$ pour différentes températures de mesure.

## III.3.1 Procédures expérimentales

Nos simulations sont effectuées de manière à reproduire deux procédures expérimentales :

1- la procédure de Soeya [72] afin d'étudier la variabilité de $H_E$ entre les nanoplots et de comparer les propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots avec celles de films continus. Cette procédure consiste à faire un premier refroidissement de l'échantillon sous champ positif (« field cooling ») noté $H_{FC}$ d'une température $T_0$ (d'environ 500 K) jusqu'à $T_M = 4$ K (ou 298 K). Tous les grains en contact avec la couche F (des grains AF, les PG et $PG_B$) qui ont une température de blocage inférieure à $T_0$ sont alors « polarisés » dans le sens du champ appliqué (car $J_{F\text{-}AF}$ et $J_{F\text{-}PG} > 0$), c'est-à-dire vers la droite. Puis on fait des recuits successifs à des températures intermédiaires croissantes ($T_a$) comprises entre $T_M$ et $T_0$ sous un champ négatif. Chaque recuit permet de « repolariser » vers la gauche les grains en contact avec la couche F qui vérifient $T_B < T_a$. Les recuits successifs permettent donc de « repolariser » progressivement

vers la gauche les grains en contact avec la couche F (des grains AF, les PG et $PG_B$). Après chaque recuit à $T_a$, un cycle d'hystérésis est mesuré à $T_M$. La variation de $H_E$ en fonction de $T_a$ est représentée figure III.7. $H_E$ varie entre $-H_{max}$ lorsque tous les grains en contact avec la couche F sont initialement « polarisés » vers la droite et $+H_{max}$ lorsque tous les grains en contact avec la couche F ont été « repolarisés » vers la gauche par les recuits successifs.

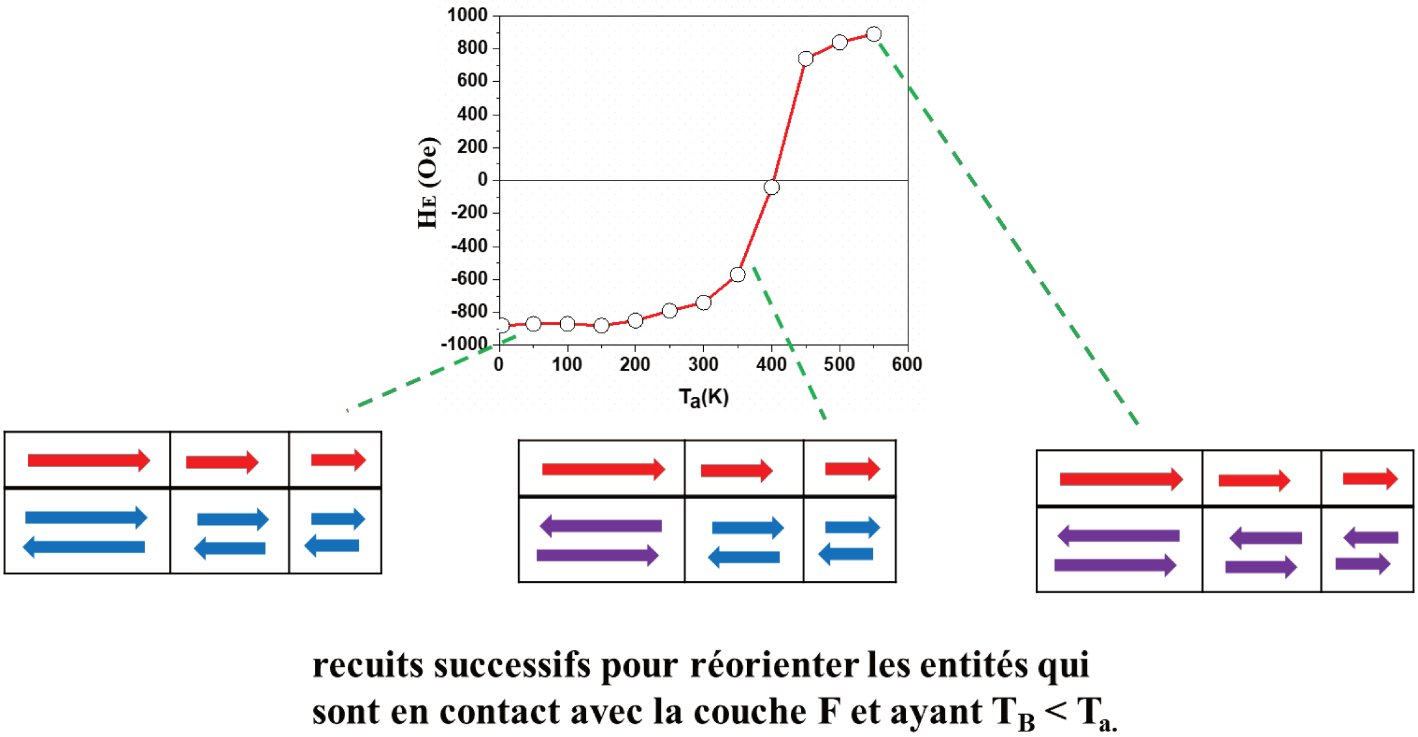


**Figure III.7 :** *Courbe de variation de $H_E$ en fonction de $T_a$ dans la procédure de Soeya.*

2- une autre procédure qui consiste à faire un seul refroidissement sous champ positif $H_{FC}$ de $T_0$ jusqu'à 5 K afin d'étudier l'effet de taille dans les nanoplots. Puis des cycles d'hystérésis successifs sont mesurées à des températures croissantes $T_M$ ($T_M \geq 5$K).

Il est important de noter qu'il existe trois catégories de grains dans la couche AF qui peuvent contribuer ou pas sur $H_E$ suivant la valeur de leur $T_B$ (figure III.8) :

1- la première catégorie correspond aux grains qui vérifient $T_B > T_0$. Ces grains ne sont pas « polarisés » par la procédure de refroidissement et ils restent orienter aléatoirement. Ils ont un moment interfacial résultant nul. Par conséquent, ils ne contribuent pas à $H_E$ en moyenne.

2- la deuxième catégorie correspond aux grains qui vérifient $T_B < T_M$. Ces grains sont polarisés par la procédure de refroidissement, mais comme $T_B < T_M$ alors ils sont superparamagnétiques à $T_M$ et ne contribue pas non plus à $H_E$.

3- la troisième catégorie correspond aux grains pour lesquels $T_M < T_B < T_0$. Ces grains sont polarisés par la procédure de refroidissement et contribuent sur $H_E$ car ils sont bloqués à $T_M$.

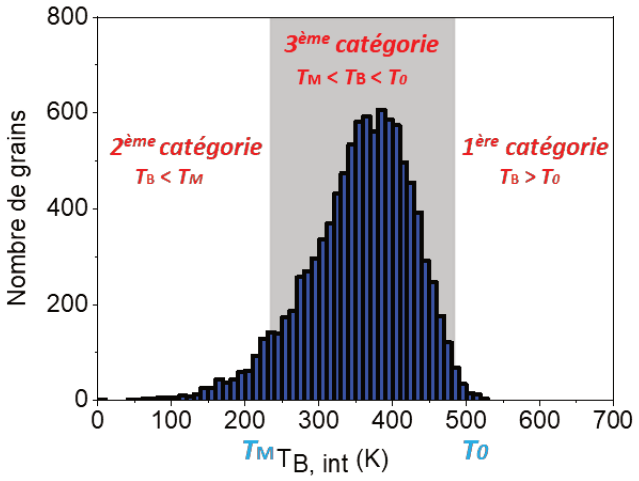


**Figure III.8 :** *Schéma représentant les différentes catégories de grains contribuant ou non à $H_E$ en fonction de leur température de blocage.*

## III.3.2 Paramètres numériques

La plupart des paramètres de notre modèle peuvent être trouvés dans la littérature ou raisonnablement estimés à partir de données expérimentales.

### *III.3.2.1 Paramètres magnétiques de la couche F*

Dans notre cas le matériau F est l'alliage NiFe qui a une température de Curie de 850 K [10]. L'aimantation à saturation de NiFe est $M_F = 8{,}3\times10^5$ A/m [10]. Afin d'avoir une valeur réaliste de $H_C$ [53] à 0 K, de l'ordre de 500 Oe, la constante d'anisotropie effective à 0 K a été prise égale à $1{,}66\times10^4$ J/m$^3$.

### *III.3.2.2 Paramètres magnétiques de la couche AF*

Dans cette thèse, le matériau AF est l'alliage IrMn qui a une température de Néel de 690 K [14]. La constante d'anisotropie effective à 0 K est égale à $4\times10^5$ J/m$^3$. Cette valeur a été choisie de façon à reproduire la distribution de $T_B$ trouvée expérimentalement par V. Baltz *et al.* [51] pour $e_{AF} = 9$ nm. L'aimantation interfacial des grains AF est $M_{AF} = 1{,}31\times10^6$ A/m.

### *III.3.2.3 Paramètres magnétiques des PG et PG$_B$*

Les paramètres des PG et des PG$_B$ sont inconnus. Nous supposons que la constante d'anisotropie des PG ou PG$_B$ est la même et est plus faible que celle des grains AF. Cela peut se justifier par l'étude expérimentale [58] qui a montré que les températures de blocage $T_B$ des phases magnétiques désordonnées à l'interface ou en bordures des grains AF sont plus faibles que celles des grains AF de volume. D'un point de vue théorique, cela peut se justifier par la non colinéarité des moments magnétiques dans ces phases qui entraine une diminution de la constante d'anisotropie effective. Nous avons arbitrairement pris $K_0^{PG} = K_0^{PGB} = 0{,}75\ K_0^{AF}$. De

même, nous avons pris une valeur identique pour l'aimantation à saturation des PG et $PG_B$ : $M_{PG} = M_{PGB} = 1{,}64\times10^5$ A/m.

### *III.3.2.4 Interactions d'échange effectives interfaciales*

Les valeurs des interactions d'échange effectives à l'interface ne sont pas connues. Dans nos simulations, le couplage effectif à l'interface par unité de surface entre les grains F et les grains AF ($j_{F\text{-}AF}$) a été choisi de façon à ce que le modèle permette de retrouver la valeur maximale de $|H_E|$ pour $e_{IrMn} = 9$ nm mesurée dans la référence [51]. Nous avons constaté que $j_{F\text{-}AF} = 1{,}5\times10^{-4}$ J/m$^2$ est une valeur raisonnable pour les bicouches NiFe/IrMn. Les couplages effectifs à l'interface par unité de surface entre les grains F et les PG ($j_{F\text{-}PG}$) et celui entre les grains F et les $PG_B$ ($j_{F\text{-}PGB}$) ont été pris identiques : $j_{F\text{-}PG} = j_{F\text{-}PGB}$. Ce couplage est un paramètre ajustable. En raison de la non-colinéarité des moments magnétiques dans les phases magnétiques désordonnées, nous supposons que $j_{F\text{-}PG} \leq j_{F\text{-}AF}$.

### *III.3.2.5 Bilan des paramètres numériques*

Les paramètres utilisés dans nos simulations sur les bicouches NiFe/IrMn sont regroupés dans le tableau III.1.

| | | | |
|---|---|---|---|
| $K_0^F = 1{,}6\times10^4$ J/m$^3$ | $M_F = 0{,}83\times10^6$ A/m | $T_C = 850$ K | $x_{PG} = 50\%$ |
| $K_0^{AF} = 4\times10^5$ J/m$^3$ | $M_{AF} = 1{,}31\times10^6$ A/m | $T_N = 690$ K | $e_{PG} = 2$ nm |
| $K_0^{PG} = 3\times10^5$ J/m$^3$ | $M_{PG} = 1{,}64\times10^5$ A/m | $T_g = 690$ K | $e_{PGB} = e_{AF}$ |
| $K_0^{PGB} = K_0^{PG}$ | $M_{PGB} = M_{PG}$ | $j_{F\text{-}AF} = 1{,}5\times10^{-4}$ J/m$^2$ | $j_{F\text{-}PGB} = j_{F\text{-}PG}$ |

**Tableau III.1 :** *Valeurs numériques des paramètres fixés dans nos simulations sur les bicouches NiFe/IrMn.*

## III.3.3 Effet du couplage effectif entre les grains F

Dans cette partie nous étudions l'effet du couplage entre grains F par unité de surface $j_F$ sur la variabilité de $H_E$ d'un nanoplot à l'autre et sur le mécanisme de retournement de la couche F. Nous appliquons la procédure de Soeya à des nanoplots NiFe (12 nm) / IrMn (5 nm) avec un refroidissement initial ($H_{FC} = 0{,}24$ T) de $T_0 = 550$ K à $T_M = 4$ K (ou 298 K). Dans nos simulations, chaque nanoplot contient 289 grains et a une taille latérale $L$ égale à 130 nm. Nous considérons que $j_{F\text{-}PG} = 8{,}5\times10^{-5}$ J/m$^2$. Les paramètres utilisés dans cette partie sont résumés dans le tableau III.2.

| | | |
|---|---|---|
| $e_F = 12$ nm | $T_M = 4$ K (ou 298 K) | $j_{F\text{-}PG\ (ou\ PGB)} = 8{,}5\times10^{-5}$ J/m$^2$ |
| $e_{AF} = 5$ nm | $T_0 = 550$ K | $4\times10^{-5} \leq j_F$ (J/m$^2$) $\leq 4\times10^{-4}$ |

**Tableau III.2 :** *Valeurs numériques des paramètres de simulation.*

Puisque les valeurs de $H_E$ sont liées directement aux valeurs de $T_B$ des grains qui sont en contact avec la couche F (grains AF, PG ou $PG_B$ dans le cas des nanoplots), nous présentons les distributions de $T_B$ intrinsèque des grains qui sont en contact avec la couche F d'un nanoplot et d'un film continu dans la figure III.9. Il est important de noter que les températures de blocages effectives ne sont pas tout à fait égales aux températures de blocages intrinsèques, compte tenu des interactions entre grains et, dans le cas des PG et $PG_B$, du champ appliqué. Cependant, des études antérieures ont montré que le couplage entre grains ne modifie pas beaucoup la distribution de $T_B$ [73]. Cette figure montre que la $T_B$ maximale de ces grains est inférieure à $T_0$ (550 K) dans les deux cas (film continu et nanoplot), ce qui signifie que tous ces grains sont polarisés lors du premier refroidissement et peuvent donc contribuer à $H_E$ suivant la valeur de $T_M$.

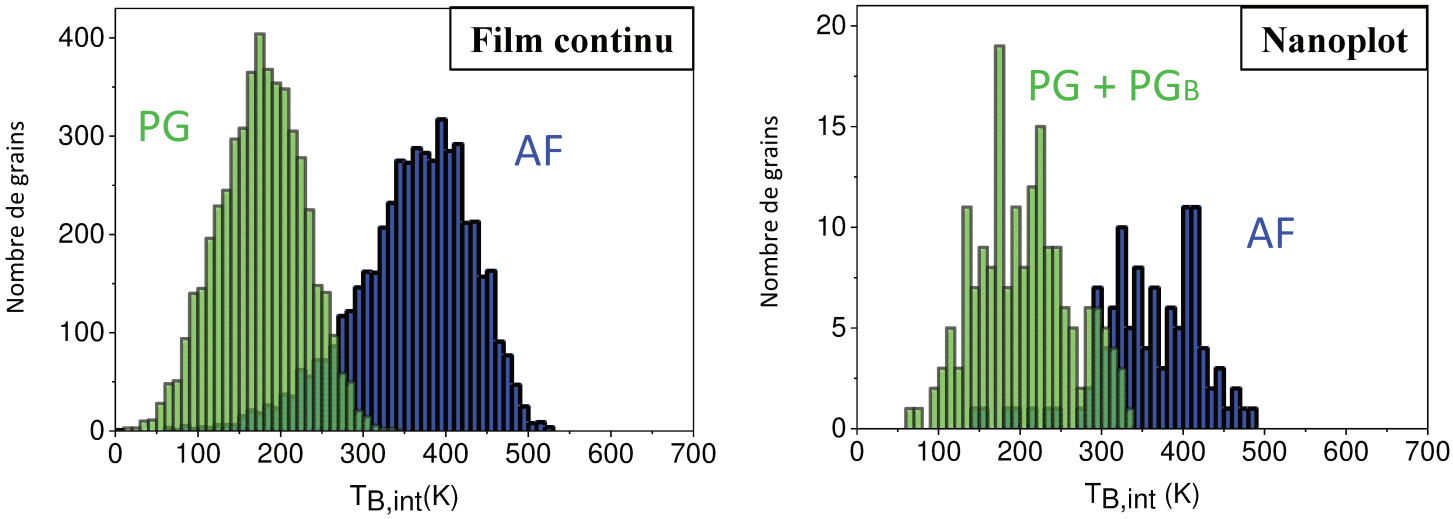


**Figure III.9 :** *Distributions de $T_B$ intrinsèque des grains en contact avec la couche F pour un film continu (à gauche) et pour un nanoplot de taille L =130 nm (à droite).*

### *III.3.3.1 Température de mesure $T_M$ = 4 K*

Selon la figure III.9, tous les grains qui sont en contact avec la couche F sont bloqués à $T_M$ = 4 K et vont donc contribuer à $H_E$ à $T_M$ = 4 K. Tout d'abord, nous étudions l'effet de $j_F$ sur la variabilité de $H_E$ d'un nanoplot à l'autre. La variation de $H_E$ (simulé à $T_M$ = 4 K) en fonction de $T_a$ pour plusieurs nanoplots est tracée figure III.10 pour $j_F = 4\times10^{-5}$ J/m$^2$ (couplage faible par rapport au terme d'anisotropie) et pour $j_F = 4\times10^{-4}$ J/m$^2$ (couplage fort par rapport au terme d'anisotropie). On voit que la variabilité de $H_E$ entre les nanoplots est importante lorsque $j_F$ est grand ($4\times10^{-4}$ J/m$^2$), elle diminue lorsque $j_F$ diminue (pas montré ici) et disparaît pour $j_F$ faible ($4\times10^{-5}$ J/m$^2$). Ensuite nous présentons figure III.11 la variation de $H_E$ (moyennée sur 60

nanoplots) en fonction de $T_a$, pour $4\times10^{-5}$ J/m$^2$ $\leq j_F \leq 4\times10^{-4}$ J/m$^2$. Nous avons vérifié que la moyenne sur un nombre de nanoplots supérieur à 60 ne modifie pas les résultats.

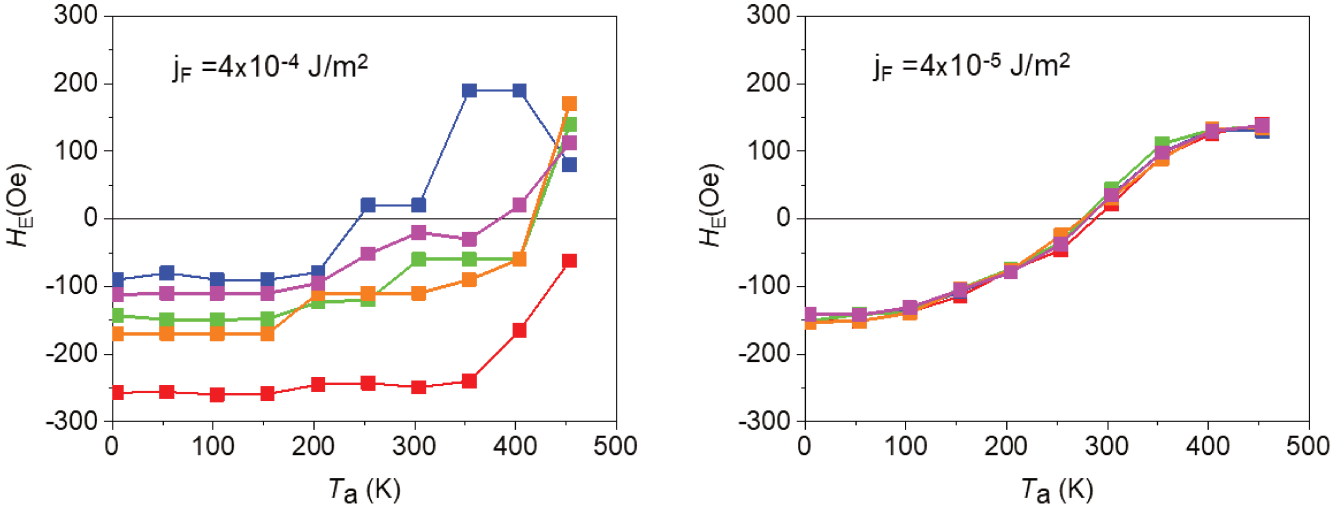


**Figure III.10 :** *Variation de $H_E$ ($T_M$ = 4 K) en fonction de $T_a$ pour plusieurs nanoplots NiFe (12 nm) /IrMn (5 nm) pour $j_F = 4\times10^{-4}$ J/m$^2$ (fort) et pour $j_F = 4\times10^{-5}$ J/m$^2$ (faible).*

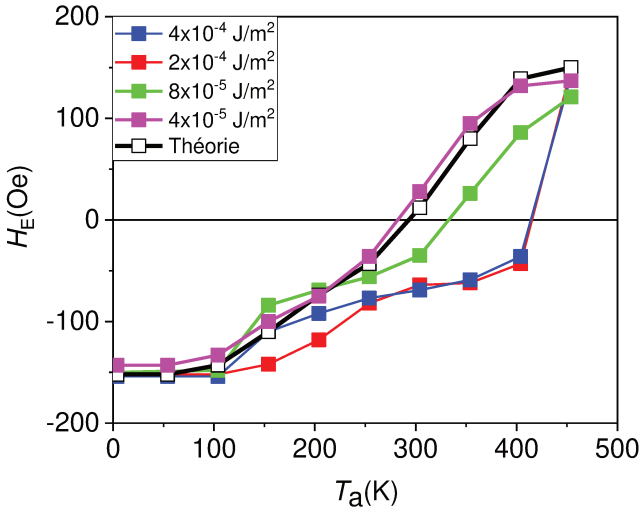


**Figure III.11 :** *Variation de $H_E$ ($T_M$ = 4 K) (moyenné sur 60 nanoplots NiFe (12 nm) /IrMn (5 nm)) en fonction de $T_a$ pour $4\times10^{-5}$ J/m$^2$ $\leq j_F \leq 4\times10^{-4}$ J/m$^2$.*

Nous avons comparé nos résultats avec l'expression théorique de $H_E$ lorsque la couche F se comporte comme un macro-moment qui est couplé avec la couche AF avec un couplage interfacial moyen $\langle j_{int} \rangle$ :

$$H_E = \frac{\langle j_{int} \rangle}{\mu_0 M_F e_F} \qquad (3.17)$$

$$\text{avec } \langle j_{int} \rangle = \frac{1}{2}\left[(1-2r)j_{F-AF} + (1-2r')j_{F-PG}\right] \qquad (3.18)$$

où $r$ est la fraction de grains AF en contact avec la couche F « repolarisés » vers la gauche et $r'$ désigne la fraction de PG et $PG_B$ « repolarisés » vers la gauche [46]. Ces fractions augmentent

lorsque $T_a$ augmente. Il est important à noter que les valeurs théoriques de $H_E$ (3.17) ne dépendent pas de $j_F$ car on suppose que la couche F se retourne par rotation uniforme. On voit sur la figure III.11 que les valeurs simulées de $H_E$ coïncident avec la courbe théorique de $H_E$ (comportement de couplage moyen), donnée par (3.17), uniquement si $j_F$ est suffisamment faible ($j_F = 4\times10^{-5}$ J/m$^2$). Nos simulations mettent clairement en évidence l'existence de deux régimes différents :

- un comportement de couplage moyen sans variabilité de $H_E$ d'un nanoplot à l'autre lorsque $j_F$ est suffisamment faible ;

- un comportement dépendant de $j_F$ où il y a une forte variabilité de $H_E$ d'un nanoplot à l'autre lorsque $j_F$ est grand. Cette dépendance de $H_E$ vis-à-vis de $j_F$ est plus marquée pour $T_a$ comprise entre 150 K et 400 K.

Pour mieux comprendre ces deux régimes, nous présentons figure III.12 le mécanisme de retournement de la couche F en fonction de $j_F$.

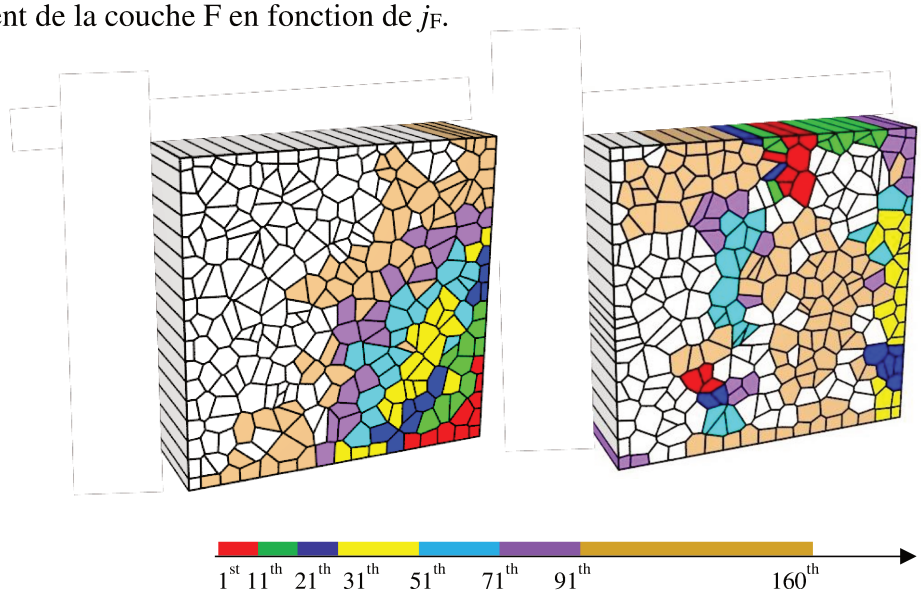


**Figure III.12 :** *Séquence de retournement des grains F à $T_M$ = 4K dans le nanoplot NiFe (12 nm)/IrMn (5 nm) pour $j_F = 4\times10^{-4}$ J/m$^2$ ($j_F$ fort, à gauche) et pour $j_F = 4\times10^{-5}$ J/m$^2$ ($j_F$ faible, à droite). Les premiers grains qui se retournent sont en rouge. Le code des couleurs correspondant à l'ordre de retournement est indiqué.*

Nous pouvons voir que dans le cas où $j_F$ est grand ($4\times10^{-4}$ J/m$^2$) le retournement de la couche F débute à l'un des coins du nanoplot (Figure III.12 à gauche). Ce grain agit comme un centre de nucléation car il présente une barrière énergétique faible en raison du manque de voisins F et de son faible volume. Puis, à cause de la forte valeur de $j_F$, le retournement de l'aimantation de la couche F se propage à partir de ce coin. Ainsi, les champs de retournement négatif ($H_C^-$) et positif ($H_C^+$) dépendent de type de voisins du centre de nucléation (AF, PG ou $PG_B$ en dessous) et du nombre de voisins F ainsi que des surfaces de contact F-F. Comme cet environnement diffère d'un nanoplot à l'autre, cela entraine la variabilité de $H_E$ observée figure III.10 à gauche.

Cette variabilité de $H_E$ entre les nanoplots est en accord avec des résultats expérimentaux antérieurs [74].

D'autre part, nous pouvons voir que pour $j_F$ faible ($4\times10^{-5}$ J/m$^2$) le retournement de la couche F commence à différents endroits sans propagation (plusieurs centres de nucléation illustrés par les grains rouges de la figure III.12 de droite). Dans ce cas, le couplage interfacial effectif est une valeur moyennée sur ces différents centres de nucléation égale à $\langle j_{int} \rangle$. Par conséquent, puisque $H_E$ est proportionnel à ce couplage moyen (éq 3. 17) alors il n'y a pas de variabilité d'un nanoplot à l'autre. Ces résultats sont intéressants d'un point de vue technologique car la variabilité entre les nanoplots n'est pas souhaitable lors de l'utilisation de capteurs magnétiques de petite taille. Enfin, nous pouvons conclure que le comportement du couplage moyen ($j_F$ faible) est associé à un retournement initié par plusieurs centres de nucléation sans propagation, tandis que le comportement dépendant de $j_F$ ($j_F$ grand) correspond à un retournement à partir d'un seul centre de nucléation situé à l'un des coins du nanoplot suivi d'une propagation.

### *III.3.3.2 Température de mesure $T_M$ = 298 K*

Pour $T_M$ = 298 K, les grains qui peuvent contribuer à $H_E$ sont les grains qui sont en contact avec la couche F à l'interface et vérifient 298 K < $T_B$ < 550 K. Selon la figure III.9 nous pouvons voir qu'une grande partie des grains AF peut contribuer à $H_E$, alors que les PG et les $PG_B$ ne contribuent pas à $H_E$ car ils sont superparamagnétiques. La variation de $H_E$ (mesuré à $T_M$ = 298 K) en fonction de $T_a$ pour plusieurs nanoplots est tracée figure III.13 pour $j_F = 4\times10^{-5}$ J/m$^2$ (couplage faible par rapport au terme d'anisotropie) et pour $j_F = 4\times10^{-4}$ J/m$^2$ (couplage fort par rapport au terme d'anisotropie). Comme pour $T_M$ = 4 K, nous observons que la variabilité de $H_E$ d'un nanoplot à l'autre est importante pour $j_F$ grand et s'annule pour $j_F$ faible.

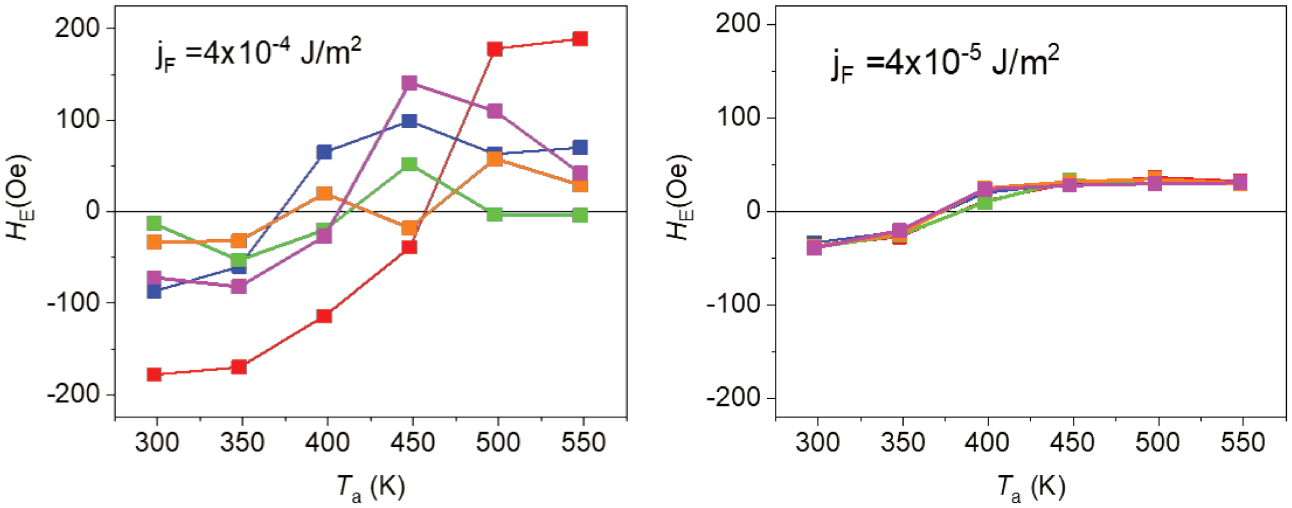


**Figure III.13 :** *Variation de $H_E$ ($T_M$ = 298 K) en fonction de $T_a$ pour plusieurs nanoplots NiFe (12 nm) /IrMn (5 nm) pour $j_F = 4\times10^{-4}$ J/m$^2$ (fort) et pour $j_F = 4\times10^{-5}$ J/m$^2$ (faible). L'incertitude sur les valeurs de $H_E$ est de l'ordre de 20 Oe.*

Ensuite nous présentons figure III.14 la variation de $H_E$ (moyenné sur 60 nanoplots) en fonction de $T_a$, pour $4\times10^{-5}$ J/m$^2$ $\leq j_F \leq 4\times10^{-4}$ J/m$^2$. Nous avons vérifié que la moyenne sur un plus grand nombre de nanoplots ne modifie pas les résultats. Nous comparons nos valeurs simulées avec les valeurs théoriques du comportement de couplage moyen (3.17) :

$$< j_{int} > = \frac{(1-2r)}{2} j_{F-AF} \qquad (3.19)$$

car tous les grains AF en contact avec la couche F contribuent à $H_E$ alors qu'aucun PG ou $PG_B$ ne contribue. De même que pour $T_M = 4$ K, nous trouvons que le comportement du couplage moyen est satisfait si $j_F$ est suffisamment faible. Il est important de noter que pour le cas $j_F$ fort, le retournement des grains ne s'amorce pas nécessairement sur un grain situé à un coin du nanoplot, contrairement au cas $T_M = 4$ K, en raison de l'agitation thermique.

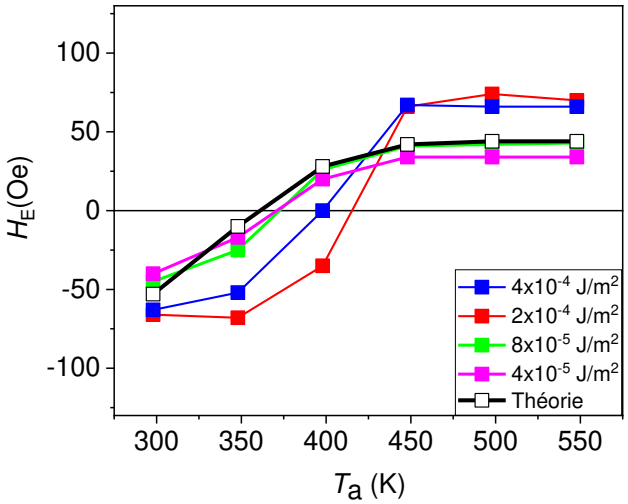


**Figure III.14 :** *Variation de $H_E$ ($T_M$ = 298 K) (moyenné sur 60 nanoplots NiFe (12 nm) /IrMn (5 nm)) en fonction de $T_a$ pour $4\times10^{-5}$ J/m$^2$ $\leq j_F \leq 4\times10^{-4}$ J/m$^2$.*

## III.3.4 Comparaison avec les résultats expérimentaux

Afin de comprendre la différence des propriétés d'anisotropie d'échange entre les nanoplots et les films continus, nous étudions des bicouches NiFe/IrMn et nous comparons nos résultats aux résultats expérimentaux [51,53]. Les résultats expérimentaux correspondent à une moyenne sur un grand nombre de nanoplots, nous avons donc fait la moyenne de nos résultats sur plusieurs nanoplots. Nous avons constaté qu'une moyenne sur 60 nanoplots était suffisante pour la convergence. Nous avons pris $j_F = 4\times10^{-5}$ J/m$^2$ et $j_{F\text{-}PG} = 1{,}5\times10^{-4}$ J/m$^2$.

### *III.3.4.1 Effet de l'épaisseur de la couche AF sur $H_E$ ($T_M$ = 298 K)*

Dans le but d'étudier l'effet de l'épaisseur de la couche AF (IrMn) sur les propriétés d'anisotropie d'échange des bicouches NiFe (12 nm)/IrMn ($e_{IrMn}$), nous appliquons la

procédure de Soeya à des nanoplots et au film continu avec $T_0 = 550$ K et $T_M = 298$ K. Les paramètres utilisés dans cette partie sont résumés dans le tableau III.3.

| | | |
|---|---|---|
| $e_F = 12$ nm | $T_M = 298$ K | $j_{F\text{-}PG} = 1{,}5\times10^{-4}$ J/m$^2$ |
| $e_{AF} = 5$, 9 et 16 nm | $T_0 = 550$ K | $j_F = 4\times10^{-5}$ J/m$^2$ |

**Tableau III.3 :** *Valeurs numériques des paramètres de simulation.*

Sur la figureIII.15 nous présentons la variation de $H_E$ en fonction de $T_a$ pour différentes épaisseurs de la couche AF (5, 9 et 16 nm) en comparaison avec les résultats expérimentaux[51].

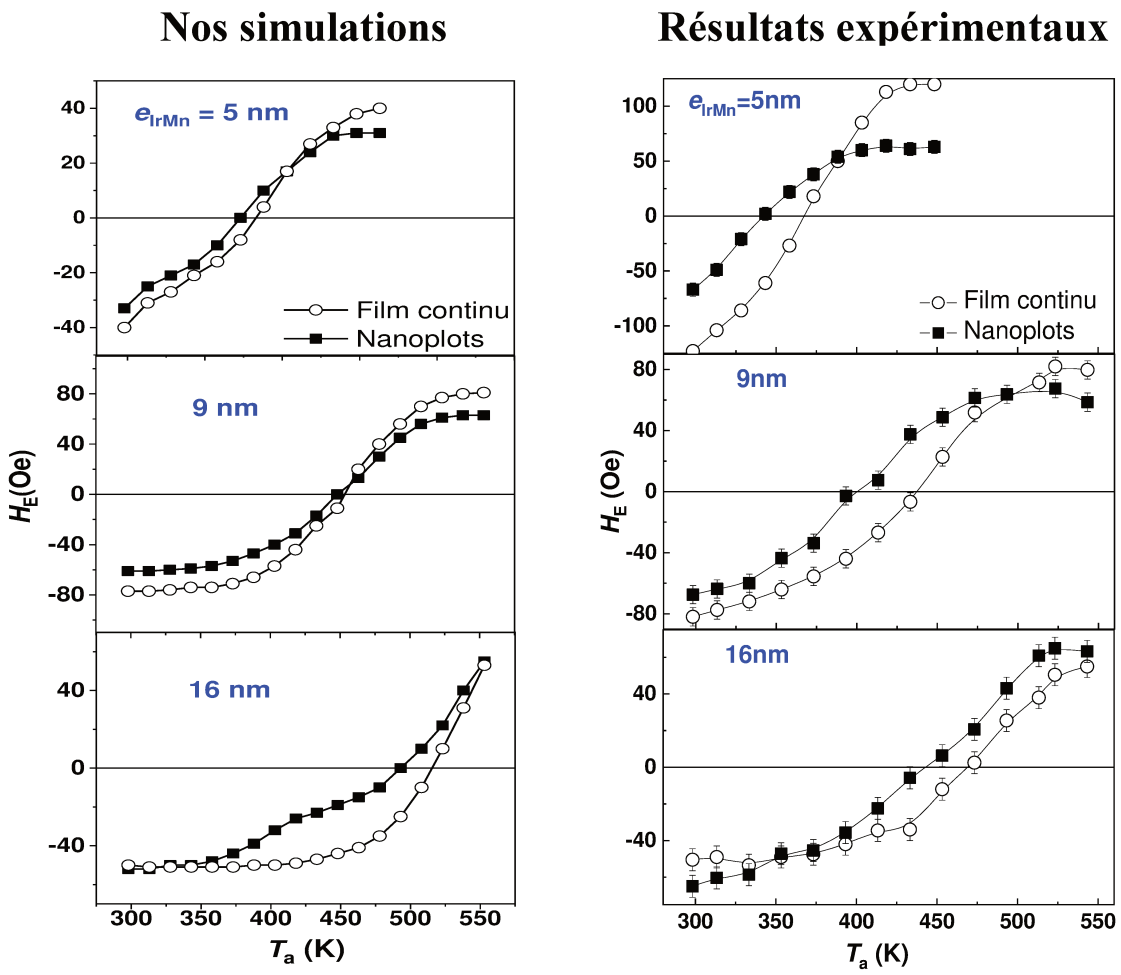


**Figure III.15 :** *Variation de $H_E(T_M = 298$ K) simulé en fonction de $T_a$ pour des bicouches NiFe (12 nm)/IrMn ($e_{IrMn}$ = 5, 9 et 16 nm) (à gauche), comparés aux données expérimentales (à droite).*

Pour le film continu et les nanoplots, on observe que la courbe $H_E$ se décale vers les hautes températures lorsque $e_{IrMn}$ augmente, ce qui est en bon accord qualitatif avec les résultats expérimentaux. Afin de comprendre ce décalage, nous présentons sur la figure III.16 les

distributions de $T_B$ intrinsèque des grains qui sont en contact avec la couche F dans le cas du film continu pour $e_{IrMn}$ = 5 nm et 16 nm avec la fenêtre de température comprise entre $T_0$ et $T_M$. En fait, seuls les grains qui sont inclus dans la fenêtre ($T_0 < T_B < T_M$) contribuent à $H_E$ alors que les autres grains sont soit superparamagnétiques ($T_B < T_M$) ou n'ont pas été « repolarisés » lors du refroidissement initial ($T_B > T_0$).

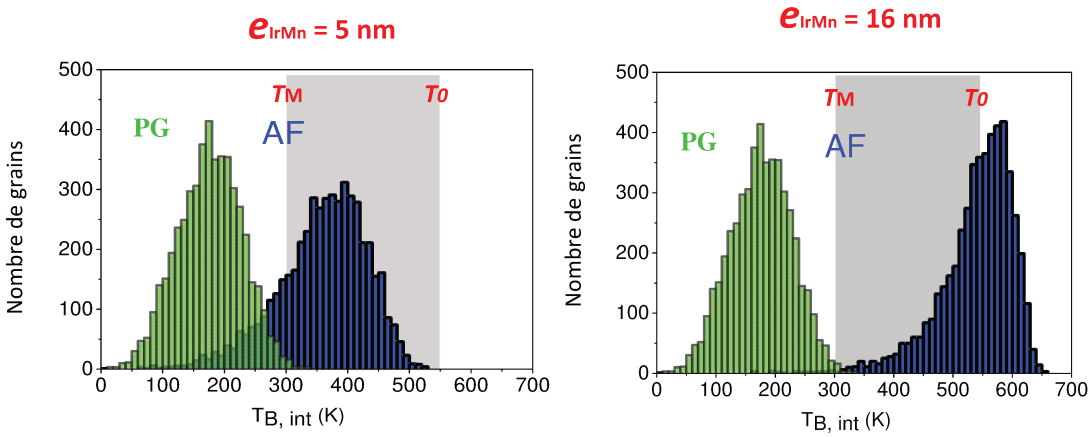


**Figure III.16 :** *Distributions de $T_B$ intrinsèque des grains en contact avec la couche F pour un film continu avec $e_{IrMn}$ = 5 nm (à gauche) et $e_{IrMn}$ = 16 nm (à droite).*

Selon la figure III.16 nous constatons que :

- la distribution des grains AF se décale vers les hautes températures lorsque $e_{IrMn}$ augmente ;
- tous les PG sont superparamagnétiques et ne contribuent pas à $H_E$ alors qu'une grande partie des grains AF contribue à $H_E$.

Ensuite nous présentons figure III.17 les distributions de $T_B$ intrinsèque des grains qui sont en contact avec la couche F dans le cas des nanoplots pour $e_{IrMn}$ = 5 nm et 16 nm.

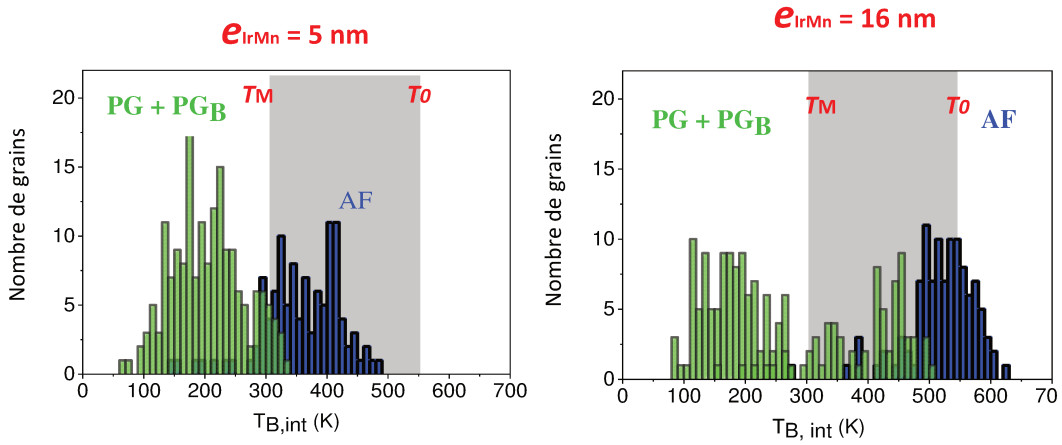


**Figure III.17 :** *Distributions de $T_B$ intrinsèque des grains en contact avec la couche F pour un nanoplot avec $e_{IrMn}$ = 5 nm (à gauche) et $e_{IrMn}$ = 16 nm (à droite).*

Nous constatons que :

- la distribution des grains AF et des $PG_B$ se décale vers les hautes températures lorsque $e_{IrMn}$ augmente ;
- pour $e_{IrMn} = 5$ nm, la plupart des PG et $PG_B$ sont superparamagnétiques et ne contribuent pas à $H_E$, par contre il y a une contribution des $PG_B$ à $H_E$ pour $e_{IrMn} = 16$ nm.

De ce qui précède, nous pouvons expliquer le décalage de la courbe $H_E$ vers les hautes températures (figure III.15) comme suit :

i) la principale contribution à $H_E$ est due aux grains AF (298 K $< T_B <$ 550 K). Par contre les PG ne contribuent pas à $H_E$ et les $PG_B$ ne donne qu'une petite contribution pour les nanoplots à $e_{IrMn} = 16$nm.

ii) la distribution de $T_B$ des grains AF qui contribuent à $H_E$ est proportionnelle à la dérivée $dH_E/dT_a$ de $H_E$ par rapport à $T_a$ [45,46]. Par conséquent, puisque la distribution des grains AF se décale vers les hautes températures lorsque $e_{IrMn}$ augmente alors la courbe de $dH_E/dT_a$ se décale vers les hautes températures et la courbe $H_E$ également.

De plus, conformément aux résultats expérimentaux, la valeur maximale de $|H_E|$ simulée (c'est-à-dire pour $T_a = 298$ K ou 550 K) pour $e_{IrMn} = 5$ nm et 9 nm est plus petite dans les nanoplots. Ce qui s'explique par la présence de $PG_B$ dans les nanoplots qui ne contribuent pas à $H_E$ pour ces épaisseurs. Par contre, la valeur maximale de $|H_E|$ simulée pour $e_{IrMn} = 16$ nm est légèrement plus grande dans les nanoplots. Ce résultat provient de la contribution des $PG_B$ pour cette épaisseur car leur $T_B$ ($T_B \propto e_{IrMn}$) peut être comprise entre 550 K et 298 K (figure III.17 de droite). Nous insistons sur le fait que tous les paramètres (sauf $e_{IrMn}$) ont été conservés pour les six courbes simulées de la figure III.15 ce qui atteste de la validité de notre modèle pour rendre compte des résultats expérimentaux.

### *III.3.4.2 <u>Effets de taille sur les propriétés d'anisotropie d'échange à $T_M$ variable</u>*

Dans cette partie, notre objectif est d'étudier l'effet de la taille latérale ($L$ = 130 nm, 300 nm, 500 nm et le film continu) sur $H_C$ et $H_E$ dans les bicouches NiFe/IrMn avec $e_{NiFe} = e_{IrMn} = 8$ nm en comparaison avec les résultats expérimentaux de la Ref [53]. Nous appliquons une procédure qui consiste en un seul refroidissement sous un champ positif $H_{FC} = 500$ Oe de $T_0 = 300$ K jusqu'à 5 K. Ensuite, des cycles d'hystérésis successifs sont mesurées à des températures croissantes $T_M \geq 5$ K. Les valeurs des paramètres sont résumées dans le tableau III.4.

| | | |
|---|---|---|
| $e_F = 8$ nm | 5 K $\geq T_M \geq$ 300 K | $j_{F\text{-}PG} = 1{,}5\times10^{-4}$ J/m$^2$ |
| $e_{AF} = 8$ nm | $T_0 = 300$ K | $j_F = 4\times10^{-5}$ J/m$^2$ |

**Tableau III.4 :** *Valeurs numériques des paramètres de simulation.*

La variation de $H_E$ en fonction de $T_M$ pour différentes tailles latérales est présentée figure III.18 en comparaison avec les résultats expérimentaux. Nous trouvons un bon accord qualitatif avec les données expérimentales :

- $H_E$ à $T_M = 5$ K augmente lorsque la taille latérale diminue, alors que c'est l'inverse lorsque $T_M$ augmente (pour $T_M \approx 150$ - 200 K). Ceci est dû au fait qu'à $T_M = 5$ K, il y a une contribution supplémentaire dans les nanoplots à cause des $PG_B$ alors que la contribution due aux grains AF (ceux avec 5 K < $T_B$ < 300 K) et PG (tous les PG contribuent sur $H_E$, figure III.19) est la même dans les nanoplots et dans le film continu.

Par ailleurs, la fraction des $PG_B$ diminue avec l'augmentation de la taille des nanoplots, donc $H_E$ diminue lorsque la taille latérale des nanoplots augmente (figure III.19).

- lorsque $T_M$ augmente, la fraction de PG et de $PG_B$ contribuant sur $H_E$ diminue, ce qui explique la diminution de $H_E$.

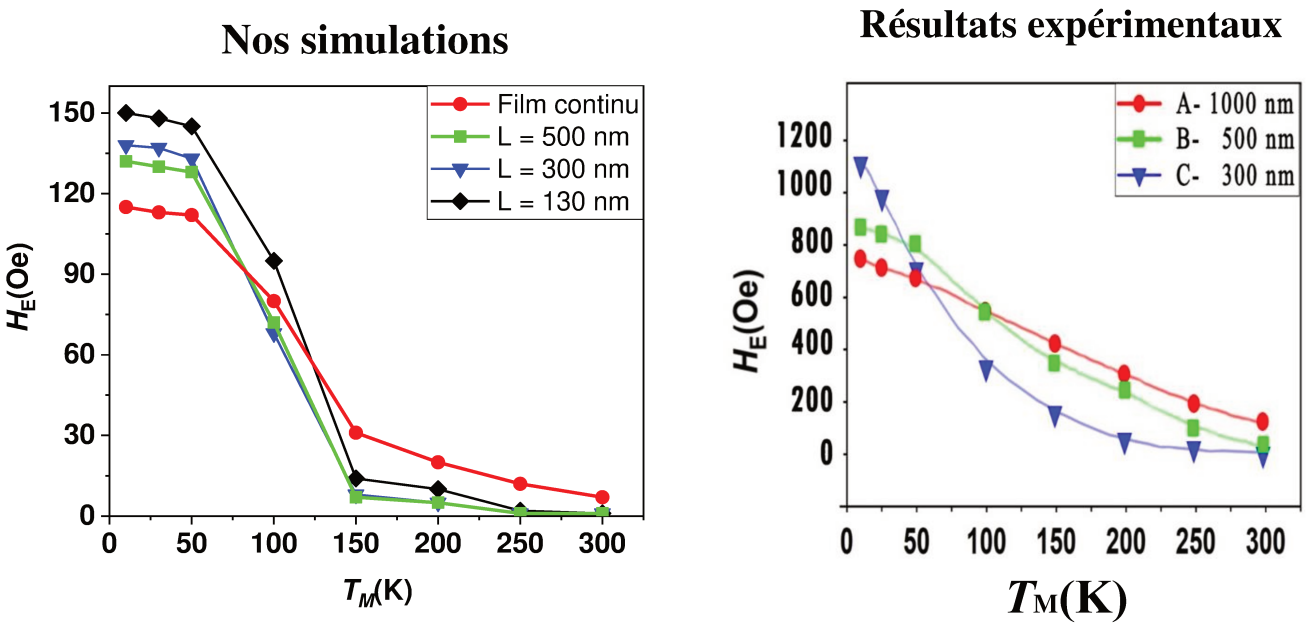


**Figure III.18 :** *Variation de $H_E$ simulé en fonction de $T_M$ pour des bicouches NiFe (8 nm) / IrMn (8 nm) pour différentes tailles latérales (à gauche), comparées aux résultats expérimentaux (à droite). L'incertitude sur les valeurs de $H_E$ est de l'ordre de 10 Oe.*

Il est important de noter que la différence entre nos valeurs simulées de $H_E$ et les valeurs expérimentales est due au choix de la valeur de $j_{F\text{-}AF}$. En effet, nous avons choisi la valeur de $j_{F\text{-}AF}$, dans les bicouches NiFe/IrMn, pour ajuster la valeur maximale de $H_E$ pour $e_{IrMn} = 9$ nm de la Ref [51]. Cependant les résultats expérimentaux de la fig. III.18 [53] et de la fig. III.15 [51] ont été obtenus dans deux laboratoires différents sur des échantillons distincts. Donc, la qualité de l'interface F/AF n'est probablement pas la même en raison des différences dans le processus de fabrication et le couplage interfacial F-AF effectif dans les échantillons de la Ref. [53] est plus grand que dans ceux de la Ref.[51].

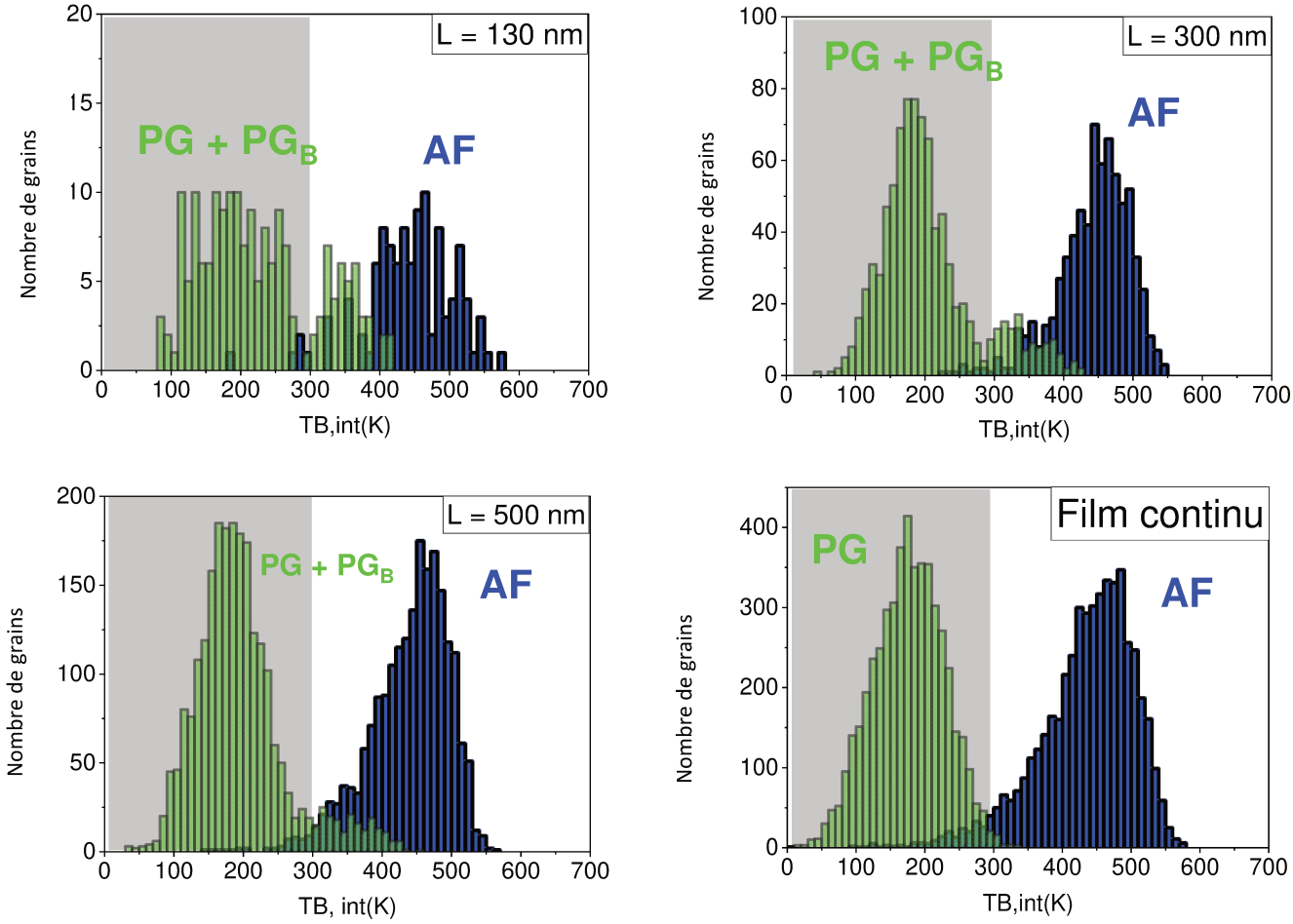


**Figure III.19** *Distributions de $T_B$ intrinsèque de grains en contact avec la couche F pour des nanoplots NiFe (8 nm)/IrMn (8 nm) de différentes tailles et le film continu.*

Nous présentons figure III.20 la variation de $H_C$ en fonction de $T_M$ pour les différentes tailles latérales. Nous trouvons que les valeurs de $H_C$ diminuent lorsque $T_M$ augmente et présentent un maximum vers $T_M = 150$ K. Ce maximum est dû à la contribution des grains en contact avec la couche F qui se retourne avec un léger retard par rapport à la couche F, c'est-à-dire des grains qui ont une $T_B$ légèrement supérieure à $T_M$. En d'autres termes, le maximum de $H_C$ apparait à une température $T_M$ légèrement inférieure à la température correspondant au maximum de la distribution de température de blocage ($T_B \approx 180$ K d'après la figure III.19). De plus nous voyons que le maximum de $H_C$ dans les nanoplots est plus prononcé que celui du film continu, ceci est dû au fait que la fraction de grains contribuant sur $H_C$ dans les nanoplots est plus grande que dans le film continu à cause de la contribution des $PG_B$.

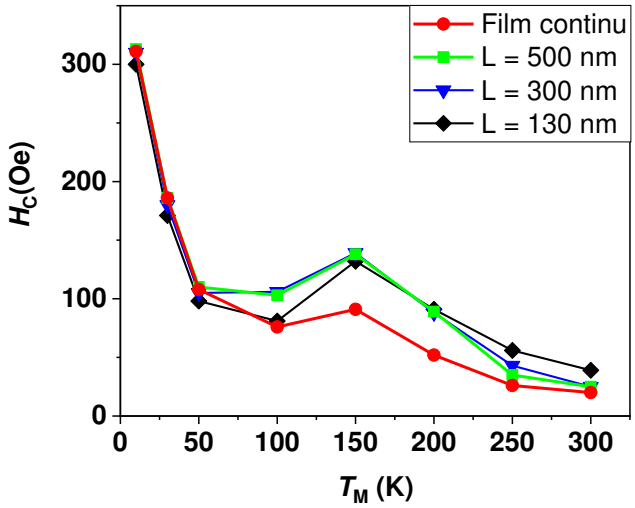


**Figure III.20 :** *Variation de $H_C$ simulée en fonction de $T_M$ pour des nanoplots NiFe (8 nm) / IrMn (8 nm) de différentes tailles latérales.*

# III.4 Résultats sur les bicouches Co/IrMn[75]

Dans cette partie nous étudions l'effet de l'épaisseur de la couche AF et de la température sur les propriétés d'anisotropie d'échange des bicouches Co/IrMn en comparaison à des résultats expérimentaux. Pour cela, nous avons simulé la procédure expérimentale qui consiste à faire un seul refroidissement, sous un champ positif $H_{FC}$, de $T_0$ jusqu'à $T_f$. Ensuite des cycles d'hystérésis sont mesurés à $T_M = 298$ K (§ III.4.2) ou à $T_M$ croissante ($T_f \leq T_M < T_0$) (§ III.4.3). Comme précédemment, les résultats présentés correspondent à une moyenne sur 60 nanoplots. Nous rappelons que, comme nous l'avons expliqué dans la partie III.3.1, seuls les grains qui ont $T_B$ compris entre $T_0$ et $T_M$ peuvent contribuer à $H_E$.

## III.4.1 Paramètres numériques

Les paramètres magnétiques de la couche AF et des PG (ou $PG_B$) sont les mêmes que ceux utilisés dans les parties III.2.2.3 et III.3.2.3 car nous utilisons toujours l'alliage IrMn comme matériau AF.

### *III.4.1.1 Paramètres magnétiques de la couche F*

Le matériau F dans cette partie est le cobalt (Co) qui est plus anisotrope que le NiFe. La constante d'anisotropie à 0 K du Co est $7{,}2 \times 10^4$ J/m$^3$ [45] avec une température de Curie qui vaut 1360 K [14]. L'aimantation à saturation $M_F$ du cobalt est $1{,}44 \times 10^6$ A/m [14].

### *III.4.1.2 Interactions d'échange effectives interfaciales*

Comme nous avons dit dans la partie III.4.2.3, les valeurs des interactions d'échange à l'interface ne sont pas connues. Donc dans nos simulations, le couplage effectif à l'interface

par unité de surface entre les grains F et les grains AF ($j_{F\text{-}AF}$) a été choisi de façon à reproduire la valeur expérimentale de $H_E$ à 0 K (de l'ordre de 600 Oe) pour un film continu d'épaisseur 9 nm [61]. Nous avons constaté que $j_{F\text{-}AF} = 4{,}5\times10^{-4}$ J/m$^2$ est une valeur raisonnable pour les bicouches Co/IrMn. Comme précédemment, le couplage effectif à l'interface par unité de surface entre les grains F et les grains PG (ou $PG_B$) ($j_{F\text{-}PG} = j_{F\text{-}PGB}$) est un paramètre ajustable. En raison de la non colinéarité des moments magnétiques dans les phases magnétiques désordonnées, nous supposons que $j_{F\text{-}PG} < j_{F\text{-}AF}$, nous avons pris $j_{F\text{-}PG} = 3\times10^{-4}$ J/m$^2$.

### *III.4.1.3 Bilan des paramètres numériques*

Les paramètres utilisés dans nos simulations sur la bicouche Co/IrMn sont résumés dans le tableau III.5.

| | | | |
|---|---|---|---|
| $K_0^F = 7{,}2\times10^4$ J/m$^3$ | $M_{FM} = 1{,}44\times10^6$ A/m | $T_C = 1360$ K | $x_{PG} = 50\%$ |
| $K_0^{AF} = 4\times10^5$ J/m$^3$ | $M_{AF} = 1{,}31\times10^6$ A/m | $T_N = 690$ K | $e_{PG} = 2$ nm |
| $K_0^{PG} = 3\times10^5$ J/m$^3$ | $M_{PG} = 1{,}64\times10^5$ A/m | $T_g = 690$ K | $e_{PGB} = e_{AF}$ |
| $K_0^{PGB} = K_0^{PG}$ | $M_{PGB} = M_{PG}$ | $j_{F\text{-}PG} = 3\times10^{-4}$ J/m$^2$ | $j_{F\text{-}AF} = 4{,}5\times10^{-4}$ J/m$^2$ |

**Tableau III.5 :** *Valeurs numériques des paramètres fixés dans nos simulations sur les bicouches Co/IrMn.*

## III.4.2 Effet de l'épaisseur de la couche AF sur les propriétés d'anisotropie d'échange ($T_M = 298$ K)

Dans cette partie, nous étudions l'influence de l'épaisseur de la couche AF (3 nm < $e_{IrMn}$ <14 nm) sur les propriétés d'anisotropie d'échange dans les bicouches Co(5nm)/IrMn($e_{IrMn}$), puis nous comparons nos résultats aux données expérimentales de la Ref. [56]. Pour chaque valeur de $e_{IrMn}$, les cycles d'hystérésis sont simulés à $T_M = 298$ K après un refroidissement sous $H_{FC} = 2$ kOe de $T_0 = 473$ K jusqu'à $T_f = 298$ K. Sur la figure III.21 nous présentons les cycles d'hystérésis pour différentes valeurs de $e_{IrMn}$ (4, 8 et 14 nm) dans le cas des films continus et le cas des nanoplots.

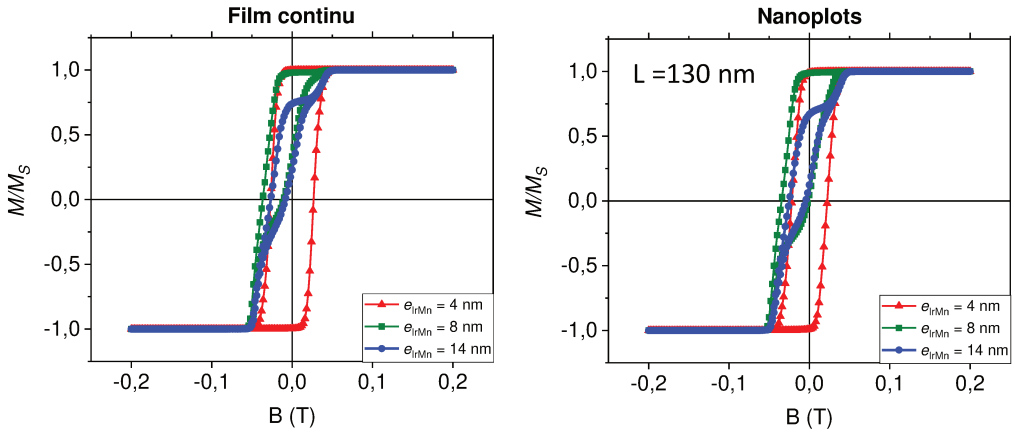


**Figure III.21 :** *Cycles d'hystérésis simulés à $T_M$ = 298 K pour des films continus (à gauche) et des nanoplots (à droite) pour différentes valeurs de $e_{IrMn}$.*

La variation de $H_E$ en fonction de $e_{IrMn}$, dans le cas du film continu et des nanoplots, en comparaison avec les résultats expérimentaux [56] est présentée figure III.22. En accord avec les données expérimentales, nos résultats montrent que la courbe de $H_E$ présente un maximum dans les deux cas.

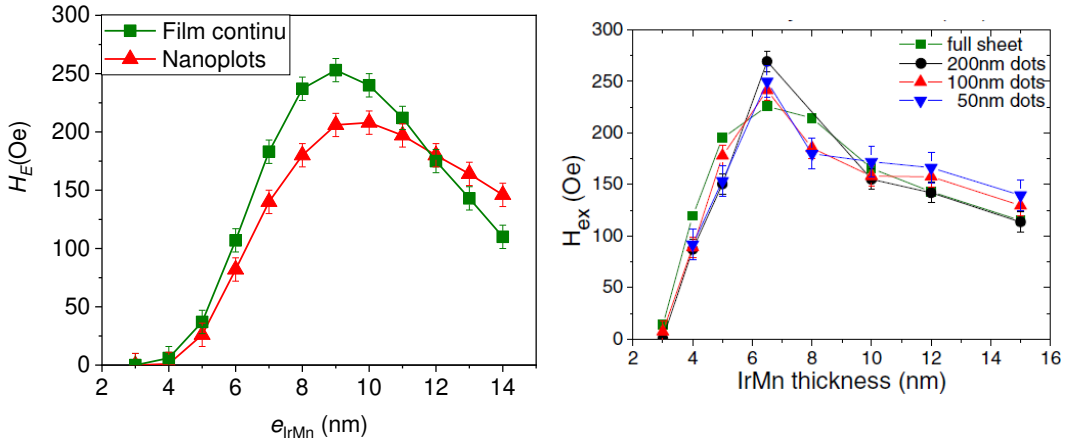


**Figure III.22 :** *Variation de $H_E$ simulé à $T_M$ = 298 K en fonction de $e_{IrMn}$ dans les bicouches Co/IrMn (à gauche) en comparaison aux résultats expérimentaux [56] (à droite).*

Pour mieux comprendre ces résultats, nous présentons figure III.23 les distributions de $T_B$ intrinsèque des grains qui sont en contact avec la couche F pour différentes valeurs de $e_{IrMn}$ dans le cas du film continu. Nous rappelons que seuls les grains dont la $T_B$ vérifie $T_0 = 473$ K > $T_B$ > $T_M = 298$ K (rectangle gris) contribuent à $H_E$. Par contre, les autres grains sont des grains superparamagnétiques ($T_B < T_M$) ou de gros grains qui n'ont pas été « repolarisés » lors du refroidissement initial ($T_B > T_0$). Plus précisément, les PG ne contribuent pas à $H_E$ (car $T_B < 298$ K) alors qu'une fraction des grains AF, qui dépend du $e_{IrMn}$, contribue sur $H_E$. On voit que pour les petites épaisseurs (figure III.23), la fraction des grains AF qui contribue à $H_E$ est faible et donc la valeur de $H_E$ est faible. Lorsque $e_{IrMn}$ augmente, cette fraction augmente et atteint un maximum pour $e_{IrMn} = 9$ nm (figure III.23) conduisant à un maximum pour $H_E$. Pour $e_{IrMn} > 9$ nm, la fraction des grains AF qui contribuent diminue (figure III.23) et donc $H_E$ diminue. On remarque que le maximum des courbes de $H_E$ simulés se trouve à une épaisseur légèrement supérieure à la valeur expérimentale. Ceci peut s'expliquer par un faible décalage de la distribution des $T_B$ des grains AF dans notre modèle par rapport à celle de l'expérience[56]. Il est à noter que les résultats expérimentaux ne permettent pas de mettre en évidence une différence entre les valeurs de $H_E$ des nanoplots et des films continus à cause des incertitudes de mesure. Par contre, nos résultats indiquent que $H_E$ dans les nanoplots est plus petit que dans les films continus pour $e_{IrMn} < 12$ nm, et indiquent le contraire pour $e_{IrMn} > 12$ nm. Cela s'explique par la présence des $PG_B$ dans les nanoplots qui sont superparamagnétiques pour $e_{IrMn} < 12$ nm, et ne contribuent pas à $H_E$. Par contre, pour $e_{IrMn} > 12$ nm, les $PG_B$ contribuent à $H_E$, et donc les valeurs simulées de $H_E$ dans les nanoplots sont légèrement plus grandes que celles des films continus.

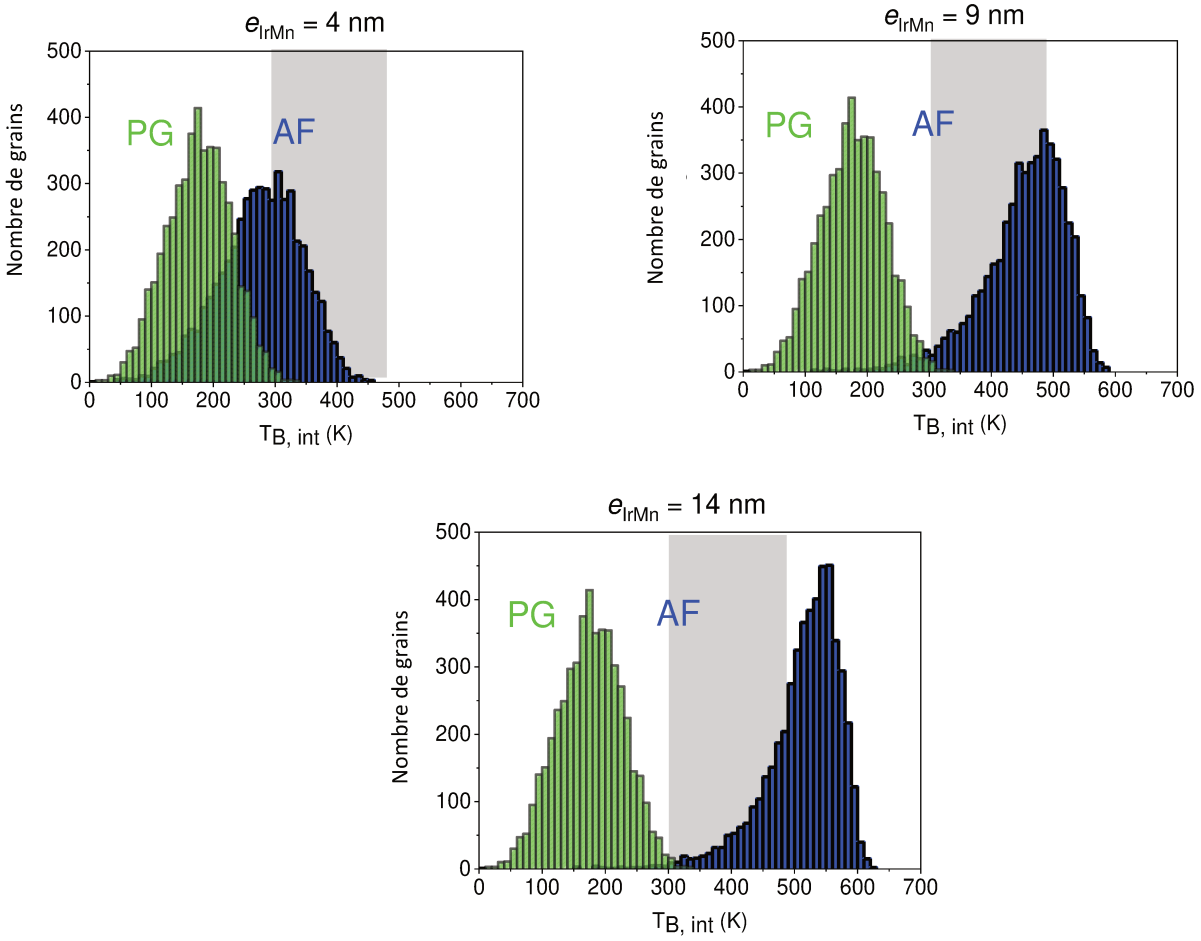


**Figure III.23 :** *Distribution de $T_B$ intrinsèques des grains en contact avec la couche F dans un film continu Co/IrMn pour $e_{IrMn}$ = 4 nm, 9 nm et 14 nm. Les rectangles gris représentent les grains qui contribuent à $H_E$.*

Nous présentons figure III.24 la variation de $H_C$ simulé à $T_M$ = 298 K en fonction de $e_{IrMn}$ en comparaison avec les résultats expérimentaux. Nos résultats reproduisent qualitativement les données expérimentales [56] dans le cas du film continu avec la présence d'un maximum pour $H_C$ vers $e_{IrMn}$ = 3-4 nm. En effet, la contribution sur $H_C$ provient des grains qui sont en contact avec la couche F dont la température de blocage vérifie $T_B$ légèrement supérieure à $T_M$. Plus précisément, dans le cas du film continu, les PG ne contribuent pas à $H_C$ car $T_B < T_M$ (voir figure III.23). Par contre il y a une partie des grains AF qui contribue à $H_C$ (ceux qui ont $T_B$ légèrement supérieure à $T_M$). Selon la figure III.23, on peut voir que la fraction de ces grains est maximale pour $e_{IrMn}$ = 4 nm et au-delà de 4 nm cette fraction diminue, ce qui explique le comportement de $H_C$.

Ensuite, nous comparons les valeurs de $H_C$ simulé du film continu à celles des nanoplots. Nos résultats montrent que $H_C$ est plus petit dans les nanoplots pour $e_{IrMn}$ < 7 nm, alors qu'il est plus grand pour $e_{IrMn}$ > 7 nm. Cela dû au fait que pour $e_{IrMn}$ < 7 nm, la fraction de grains contribuant à $H_C$ dans les nanoplots est plus petite que celle du film continu à cause de la présence des $PG_B$

dans les nanoplots qui sont tous superparamagnétiques à $T_M = 298$ K. Alors que pour $e_{IrMn} > 7$ nm, les $T_B$ des $PG_B$ augmentent et deviennent proches de $T_M$ et donc les $PG_B$ contribuent à $H_C$.

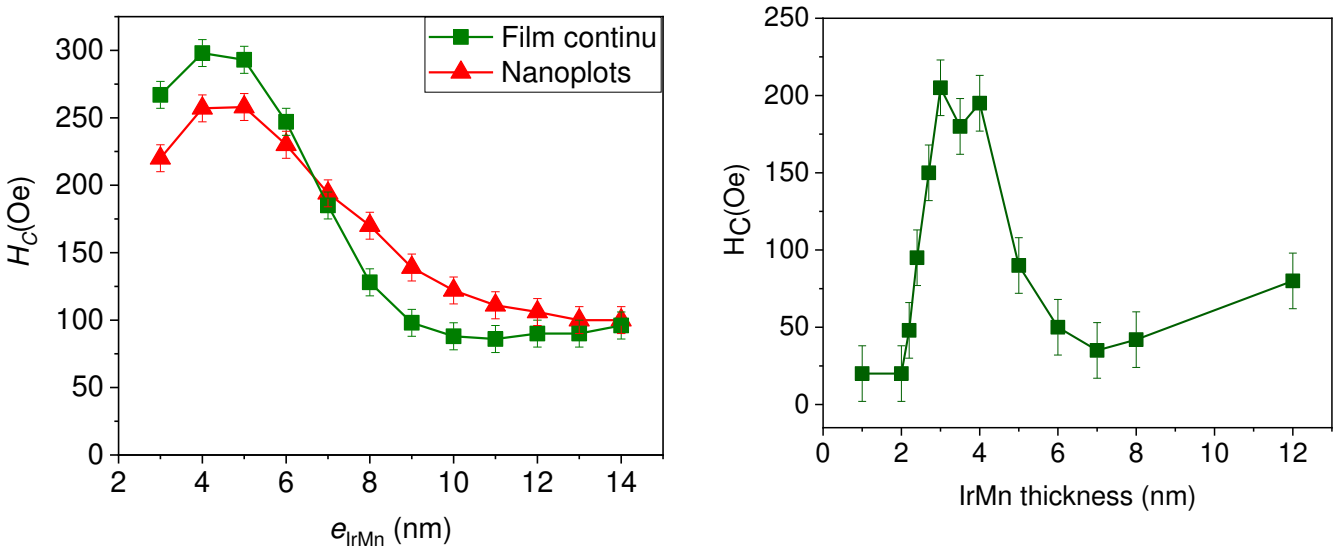


**Figure III.24 :** *Variation de $H_C$ simulé à $T_M$ = 298 K en fonction de $e_{IrMn}$ dans les bicouches Co/IrMn (à gauche) en comparaison avec les résultats expérimentaux*[56] *(à droite).*

## III.4.3 Effet de la température et de l'épaisseur de la couche AF sur les propriétés d'anisotropie d'échange

Dans cette section, nous étudions l'effet de la température sur les propriétés d'anisotropie d'échange dans les bicouches Co (4nm) / IrMn ($e_{IrMn}$) pour différentes valeurs de $e_{IrMn}$ (3, 9 et 15 nm) et nous comparons nos résultats avec les données expérimentales de la Ref. [61]. La procédure simulée consiste en un refroidissement sous $H_{FC} = 4$ kOe de $T_0 = 550$ K jusqu'à $T_f = 2$ K. Ensuite, des cycles d'hystérésis sont mesurés à des températures croissantes $T_M \geq 2$ K. Sur la figure III.25 nous montrons la variation de $H_C$ et de $H_E$ simulés en fonction de $T_M$ dans le cas du film continu pour différentes valeurs de $e_{IrMn}$ en comparaison aux résultats expérimentaux [61].

Concernant $H_E$, nous avons trouvé un bon accord qualitatif avec les données expérimentales au-dessus de 100 K, à savoir une diminution puis l'annulation de $H_E$ lorsque la température de mesure augmente. La température d'annulation de $H_E$ augmente avec $e_{IrMn}$, ce qui est également en accord avec l'expérience. La diminution de $H_E$ s'explique par l'augmentation de la fraction de grains superparamagnétiques (grains AF et PG) qui sont en contact avec la couche F lorsque $T_M$ augmente. La température d'annulation de $H_E$ correspond donc à la température de blocage maximale des grains AF donnée par (à condition que les interactions soient négligeables) :

$$T_B^{AF,max} = \frac{K_0^{AF} V_{AF}^{max} T_N}{k_B T_N \ln(2nMCS) + K_0^{AF} V_{AF}^{max}} \quad (3.20)$$

Cette température augmente avec l'augmentation de $e_{IrMn}$ car $V_{AF}^{max}$ α $e_{IrMn}$.

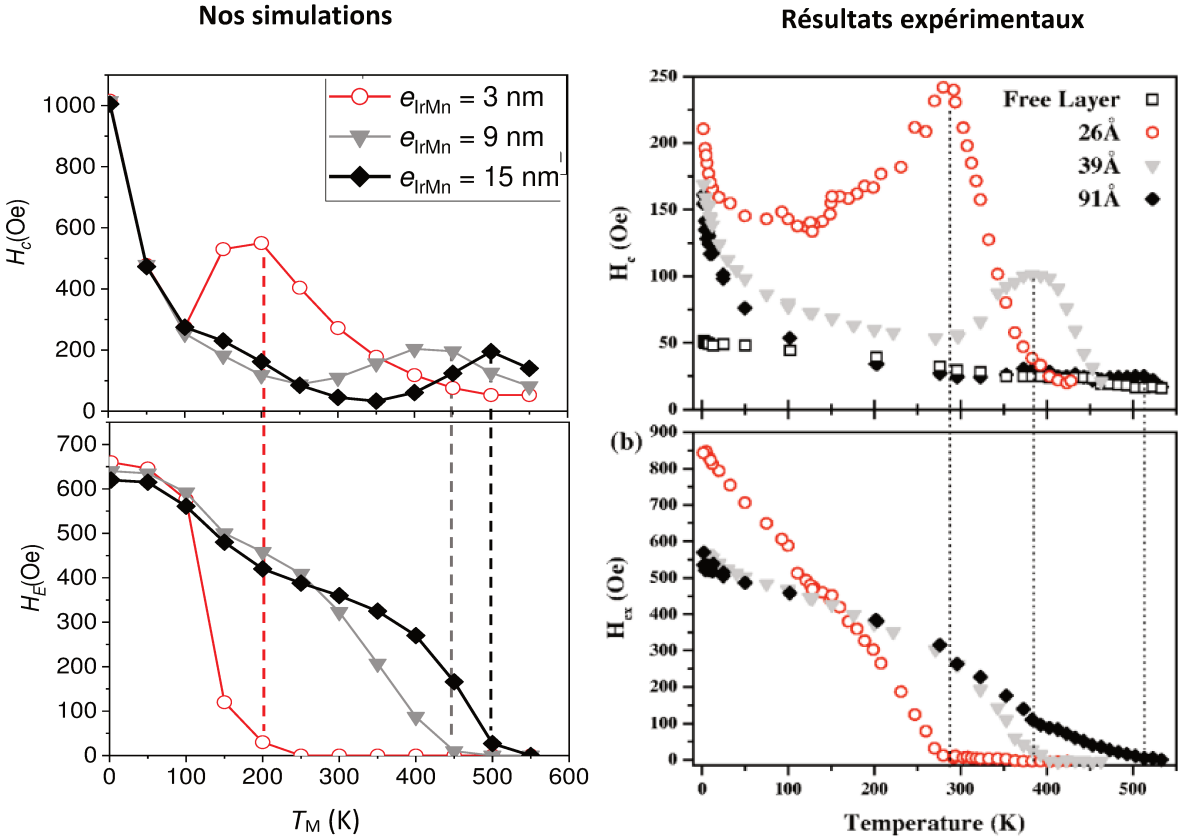


**Figure III.25 :** *Variation de $H_C$ et $H_E$ simulés en fonction de $T_M$ dans les bicouches Co/IrMn pour $e_{IrMn}$ = 3 nm, 9 nm et 15 nm (à gauche) en comparaison avec les résultats expérimentaux* [61] *(à droite).*

En dessous de 100 K, nos résultats sont en bon accord avec les résultats expérimentaux sauf pour $e_{IrMn}$ = 2,6 nm [61]. En particulier, la valeur simulée de $H_E$ à $T_M$ = 2 K, diminue légèrement avec l'augmentation de $e_{IrMn}$. Cela est dû au fait que la fraction de grains qui contribue à $H_E$ diminue lorsque $e_{IrMn}$ augmente comme le montre la figure III.26.

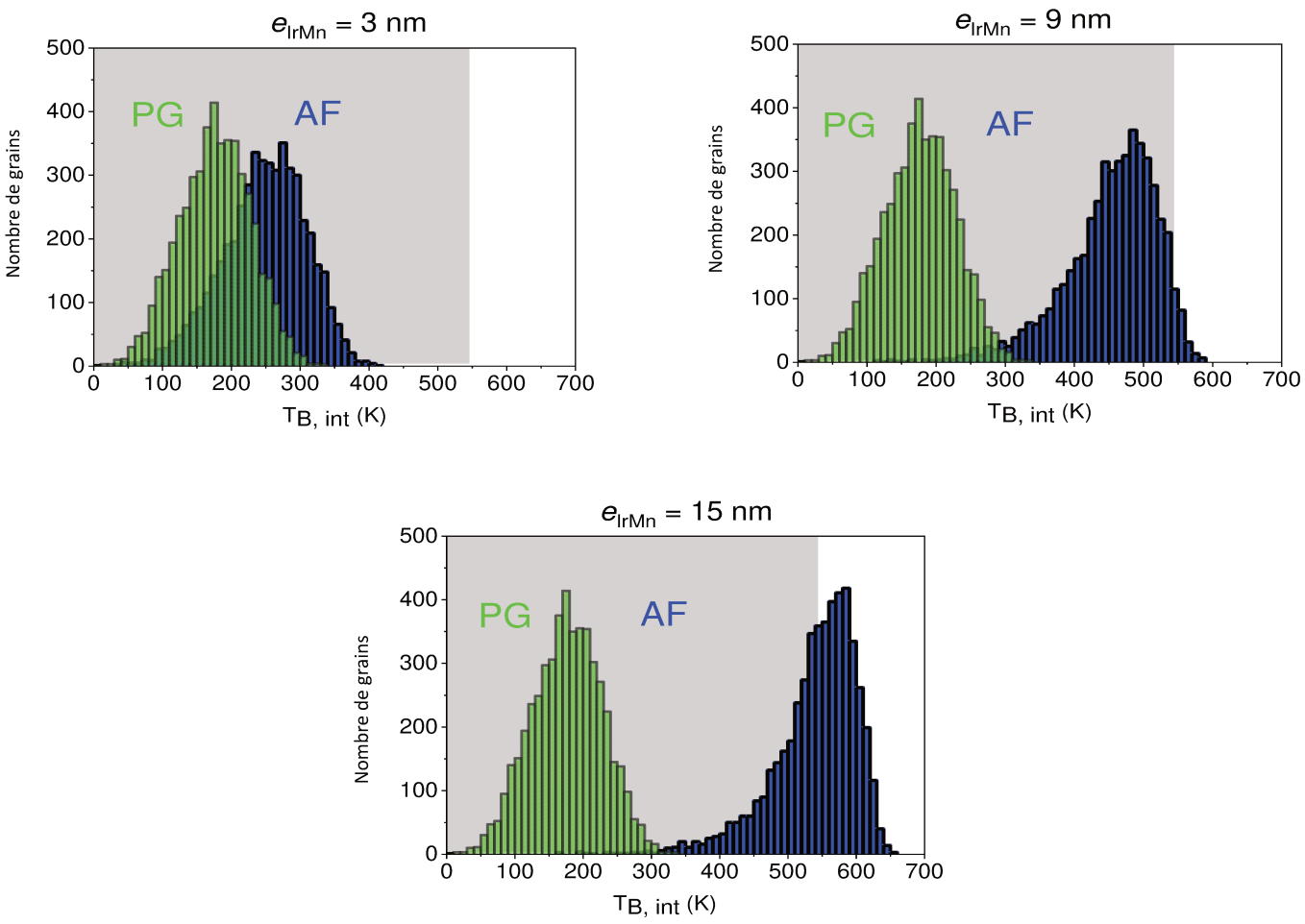


**Figure III.26 :** *Distributions de $T_B$ intrinsèque des grains en contact avec la couche F dans un film continu Co/IrMn pour $e_{IrMn}$ = 3, 9 et 15 nm. Les rectangles gris représentent les grains qui contribuent à $H_E$ pour $T_M$ = 2 K.*

En ce qui concerne $H_C$, nous avons encore trouvé un bon accord qualitatif avec l'expérience [61]. En particulier, nos résultats reproduisent la présence d'un maximum de $H_C$ à la température d'annulation de $H_E$. Ce maximum se décale vers les hautes températures et son amplitude diminue lorsque $e_{IrMn}$ augmente. En fait, comme nous l'avons déjà expliqué, ce maximum se produit à la température correspondant au maximum de la distribution des températures de blocage qui se déplace vers les hautes températures lorsque $e_{IrMn}$ augmente (figure III.26).

Afin de voir l'effet de la diminution de la taille latérale, nous avons effectué des simulations sur des nanoplots ($e_{IrMn}$ = 9 nm). La variation de $H_C$ et de $H_E$ en fonction de $T_M$ est tracée figure III.27 en comparaison avec le film continu.

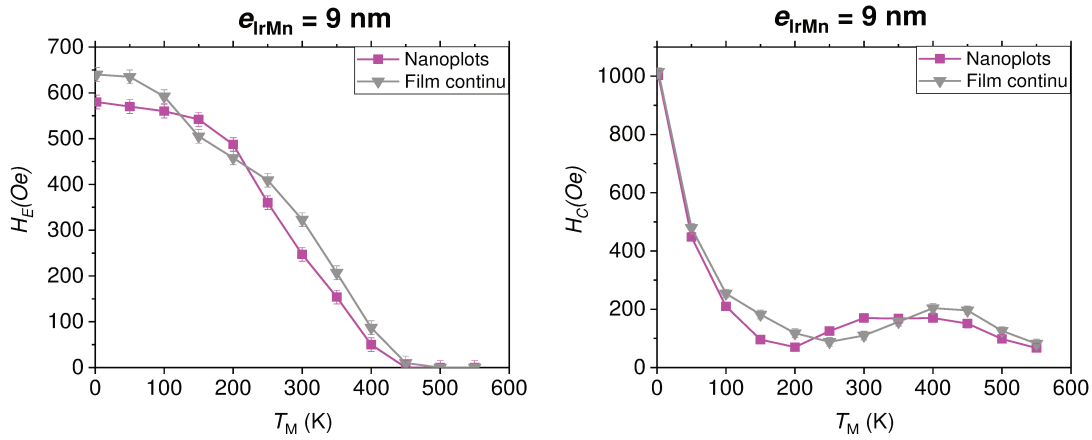


**Figure III.27 :** *Variation de $H_E$ (à gauche) et $H_C$ (à droite) simulés en fonction $T_M$ dans les nanoplots Co(4nm)/IrMn (9nm) en comparaison avec le film continu.*

Nous observons que le comportement des nanoplots est similaire à celui du film continu. La valeur de $H_E$ dans les nanoplots est plus petite que celle du film continu à $T_M = 2$ K en raison de la présence des $PG_B$ en bordures des nanoplots qui sont plus faiblement couplés avec les grains F que les grains AF présents dans le film ($j_{F\text{-}PGB} < j_{F\text{-}AF}$). La position du minimum et du maximum de $H_C$ dans les nanoplots est décalée vers les basses températures car la fraction de grains contribuant sur $H_C$ à basses températures augmente dans les nanoplots à cause de la présence des $PG_B$ (figure III.28).

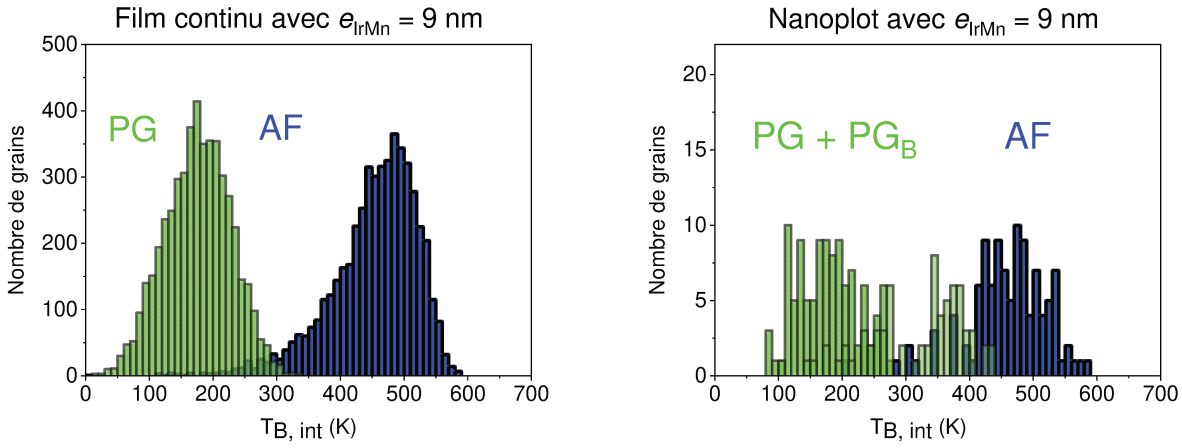


**Figure III.28 :** *Distributions de $T_B$ intrinsèque des grains en contact avec la couche F dans un film continu Co/IrMn (à gauche) et dans un nanoplot (à droite) pour $e_{IrMn}$ = 9 nm.*

# Chapitre IV

# Effets de l'interdiffusion et des joints de grains sur les propriétés d'anisotropie d'échange de nanoplots F/AF : Approche atomique

## IV.1 Introduction

L'anisotropie d'échange a fait l'objet de nombreuses études expérimentales et théoriques. Certains résultats expérimentaux, en particulier la dépendance en température du champ d'échange et du champ coercitif, sont bien compris et expliqués par des modèles à l'échelle granulaire en termes de distribution de températures de blocage des entités magnétiques dans la couche AF. Notamment, l'existence de phases magnétiques désordonnées à l'interface F/AF [53,58,64] qui sont modélisées comme des petits grains à faible température de blocage [45,46,71,75], a été proposée pour interpréter ces résultats expérimentaux. Cependant, ces phases magnétiques désordonnées sont très difficiles à observer et à caractériser expérimentalement. Il est donc nécessaire d'étudier ces phases désordonnées à l'interface à l'aide de simulations numériques sur des modèles appropriés, tels que les modèles à l'échelle atomique. En effet, ces modèles doivent permettent de mettre en évidence des régions où les moments magnétiques sont non colinéaires et désordonnés en raison de la frustration magnétique et des défauts (rugosité, interdiffusion, joints de grains, fautes d'empilement …). Il n'existe pas à notre connaissance d'études numériques sur des modèles à l'échelle atomique prenant en compte les joints de grains. La présence de joints de grains dans la couche AF favorise la présence de désordre magnétique lorsqu'il y a de frustration dans la couche AF [76]. Plusieurs études ont également mis en évidence que l'interdiffusion favorise la présence de moments non colinéaires à l'interface et diminue les valeurs du champ d'échange [77–79]. La présence de moments magnétiques désordonnés à l'interface pose également la question du réarrangement de ces moments magnétiques lors des cycles d'hystérésis. De plus, la modélisation à l'échelle atomique des nanoplots est envisageable compte tenu du nombre raisonnable d'atomes dans ces systèmes (une simulation de durée raisonnable est limitée à des nombres d'atomes de l'ordre de $10^6$). C'est pourquoi nous proposons ici la modélisation à l'échelle atomique de nanoplots F/AF présentant des joints de grains et de l'interdiffusion.

De plus, parmi les résultats expérimentaux qui sont encore mal compris figure l'influence de l'épaisseur de la couche AF sur l'anisotropie d'échange. Dans certaines études sur des films

minces [52,63], le champ d'échange ($H_E$) diminue lorsque l'épaisseur de la couche AF augmente tandis que d'autres études [56,60,61] montrent que $H_E$ passe par un maximum puis diminue. Une des explications pourrait être la présence de domaines magnétiques dans la couche AF comme le propose le modèle de Malozemoff [18] et le « Domain State Model » [19,80–83]. Le modèle de Malozemoff [18] montre qu'une interface compensée « rugueuse » peut entrainer une anisotropie d'échange. Cette rugosité interfaciale engendre la création de domaines dans la couche AF qui sont responsables de la dépendance de $H_E$ vis-à-vis de l'épaisseur de la couche AF. Il est à noter que ce modèle conduit à des valeurs de champ d'échange réalistes contrairement au modèle de Meiklejohn et Bean qui prévoit des valeurs trop grandes. Plus récemment, Nowak *et al.* [19,80–83] ont montré que l'existence de domaines dans la couche AF est liée directement à la présence de défauts non magnétiques dans cette couche. Cette hypothèse a été validée par plusieurs études expérimentales et numériques[20,21].

Dans ce chapitre, nous allons d'abord décrire notre modèle structurale et magnétique. Ensuite, nous nous sommes intéressés aux effets combinés des joints de grains, de l'interdiffusion et la frustration magnétique sur les propriétés d'anisotropie d'échange. Plus précisément, nous montrons l'effet des configurations magnétiques interfaciales non colinéaires complexes dans la couche AF, qui résultent de la frustration magnétique, des joints de grains et de l'effet de surface sur l'anisotropie d'échange. Puis, nous étudions l'effet de l'interdiffusion sur ces configurations magnétiques complexes AF et sur l'anisotropie d'échange. Nous avons également examiné l'effet de la température. Pour cela, nous avons eu recours à la méthode MC quantifiée en temps dont le principe a été expliqué dans le chapitre II.

# IV.2 Modèle

Dans cette partie, nous présentons notre modèle structural puis magnétique.

## IV.2.1 Modélisation structurale

Le système considéré dans ce chapitre est une bicouche (nanoplot) F/AF. La structure atomique du nanoplot est obtenue par simulations basées sur la méthode du champ de phases dans laquelle les positions des atomes sont définies par des probabilités de présence [84]. Cette méthode permet de simuler des structures à l'échelle atomique réalistes contenant des joints de grains (JG). Pour des raisons de simplicité, nous avons considéré une structure cubique centrée (CC), il existe donc deux types de plans atomiques. Compte tenu de l'hypothèse de croissance colonnaire, chaque couche a la même structure et est formée de trois grains (figure IV.1). Contrairement aux atomes à l'intérieur de chaque grain, il existe un désordre topologique au niveau des joints grains. Dans cette thèse, l'épaisseur de la couche F est constante ($e_F = 2$ plans soit $N_F = 2922$), l'épaisseur de la couche AF ($e_{AF}$) pouvant varier. Au niveau de l'interface F/AF, nous avons considéré deux cas :

- il n'y a pas d'interdiffusion (interface abrupte) et tous les plans atomiques sont constitués d'un seul type d'atome (F ou AF) (cas idéal) ;

- il y a de l'interdiffusion et le 1er plan de la couche AF (en « contact » avec la couche F) contient une fraction $x_F$ d'atomes F et une fraction $(1-x_F)$ d'atomes AF.

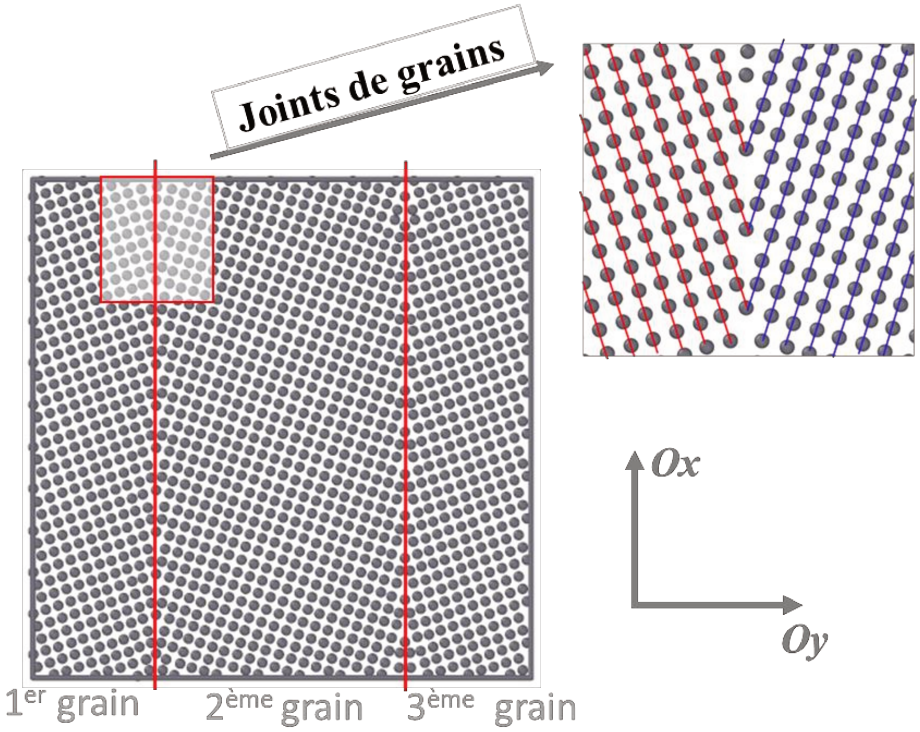


**Figure IV.1** : *Représentation d'un plan atomique contenant des joints de grains (chaque plan contient 1461 atomes).*

## IV.2.2 Modélisation magnétique

Dans ce chapitre, nous avons utilisé le modèle de Heisenberg classique qui est un modèle réaliste pour décrire un système de spins en interactions. Dans ce modèle, chaque atome est représenté par un spin $\boldsymbol{S} = (S_x, S_y, S_z)$ qui peut prendre toutes les directions de l'espace. Le Hamiltonien de notre système est composé de trois termes : un terme d'échange, un terme d'anisotropie et un terme Zeeman. Dans ce qui suit nous allons présenter chaque terme.

### *IV.2.2.1 Energie d'échange*

Ce terme contient les différents types de couplage entre les spins et s'écrit sous la forme suivante :

$$E_{ech} = -J_F \sum_{<i,j> \in F} \boldsymbol{S}_i . \boldsymbol{S}_j - J_1^{AF} \sum_{<i,j> \in AF} \boldsymbol{S}_i . \boldsymbol{S}_j - J_2^{AF} \sum_{<i,j> \in AF} \boldsymbol{S}_i . \boldsymbol{S}_j - J_{int} \sum_{i \in F,\ j \in AF} \boldsymbol{S}_i . \boldsymbol{S}_j \quad (4.1)$$

où :

- $J_F$ est l'intégrale d'échange entre deux atomes F 1$^{ers}$ voisins. Dans un grain, $J_F$ correspond aux « liaisons » de longueur $\frac{a\sqrt{3}}{2}$ (entre deux plans consécutifs) où $a$ est le paramètre de maille (figure IV.2). Au niveau des joints de grains, deux atomes distants de $l \leq \frac{a\sqrt{3}}{2}$ et qui appartiennent à deux plans consécutifs sont considérés comme 1$^{ers}$ voisins ;

- $J_{int}$ est l'intégrale d'échange entre un atome F et un atome AF 1$^{ers}$ voisins à l'interface F/AF. Les liaisons entre 1$^{ers}$ voisins à l'interface sont déterminées de la même manière que pour les atomes F ;

- $J_1^{AF}$ et $J_2^{AF}$ représentent les intégrales d'échange entre atomes AF « premiers » et « deuxièmes voisins », respectivement. On détermine les liaisons entre 1$^{ers}$ voisins dans la couche AF $\left(J_1^{AF}\right)$ de la même manière que les liaisons entre 1$^{ers}$ voisins dans la couche F. Les liaisons entre 2$^{èmes}$ voisins ($J_2^{AF}$), dans un grain, correspondent aux « liaisons » de longueur $a$ (figure IV.2). Au niveau des joints de grains, il existe des distances entre atomes différentes de $\frac{a\sqrt{3}}{2}$ et $a$. Pour ces liaisons, nous avons fait le choix suivant :

- deux atomes distants de $l$ telle que $\frac{a\sqrt{3}}{2} \leq l \leq a$ et qui appartiennent à deux plans consécutifs sont considérés comme 2$^{èmes}$ voisins ;

- deux atomes distants de $l \leq a$ et qui appartiennent au même plan sont considérés comme 2$^{èmes}$ voisins.

$J_F$ et $J_{int}$ sont positifs et favorisent donc un alignement parallèle des moments. Par contre, $J_1^{AF}$ est négatif ce qui conduit à une configuration magnétique dans laquelle les moments AF d'un plan atomique sont parallèles. Deux plans de la couche AF consécutifs ont des aimantations antiparallèles (figure IV.3). De même $J_2^{AF}$ est négatif ce qui engendre de la frustration magnétique et peut éventuellement conduire à des configurations magnétiques non colinéaires.

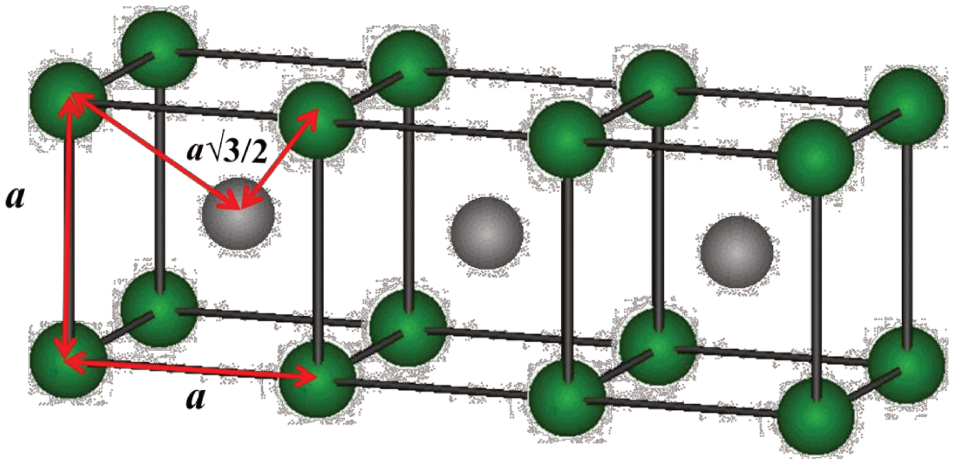


**Figure IV.2** : *Distances entre 1$^{ers}$ et 2$^{èmes}$ voisins dans la structure cubique centrée.*

### *IV.2.2.2 Energie d'anisotropie*

Le terme d'anisotropie s'écrit :

$$E_a = -D_{\mathrm{F}} \sum_{i \in F} \left(S_i^y\right)^2 - D_{\mathrm{AF}} \sum_{i \in AF} \left(S_i^y\right)^2 \qquad (4.2)$$

où $D_{\mathrm{F}} > 0$ et $D_{\mathrm{AF}} > 0$ représentent respectivement les constantes d'anisotropie par atome dans la couche F et la couche AF. Les moments F et AF possèdent donc un axe facile suivant $Oy$.

### *IV.2.2.3 Energie Zeeman*

Le terme Zeeman qui correspond à l'interaction avec un champ extérieur est de la forme :

$$E_Z = \mu_0 \mu_B \boldsymbol{H}. \sum_i g_i \boldsymbol{S}_i \qquad (4.3)$$

où $\boldsymbol{H}$ est le champ extérieur appliqué suivant l'axe facile et $g_i$ est le facteur de Landé.

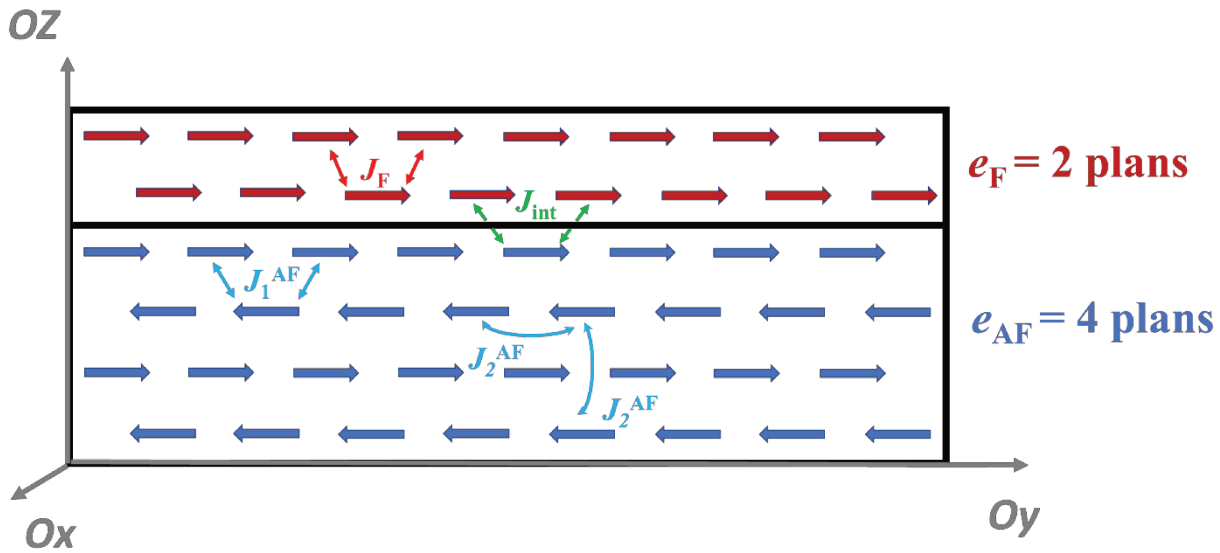


**Figure IV.3** : *Configuration magnétique stable d'un nanoplot F/AF avec interface abrupte dans le cas* $J_2^{\mathrm{AF}} = 0$. *Les flèches rouges représentent les moments F et les flèches bleus représentent les moments AF. Pour des raisons de simplicité, les joints de grains ne sont pas représentés.*

### *IV.2.2.4 Champs de retournement selon le modèle de Meiklejohn et Bean* [15]

Le modèle de Meiklejohn et Bean est le premier modèle théorique qui permet d'expliquer l'anisotropie d'échange. Ce modèle valable à température nulle est basé sur plusieurs hypothèses :

- une interface F/AF idéale c'est-à-dire parfaitement plane (sans rugosité et sans diffusion) ;

- une interface F/AF non compensée, c'est-à-dire que l'aimantation du plan AF d'interface est non nulle ;

- l'axe facile de la couche F est colinéaire à celui de la couche AF. Cet axe est dans le plan des couches ;

- les couches F et AF sont monodomaines ;

- le retournement des moments magnétiques F s'effectue par rotation uniforme ;

- les moments de la couche AF sont bloqués lors du retournement de la couche F (forte anisotropie de la couche AF).

En nous basant sur ce modèle, nous souhaitons déterminer les expressions du champ d'échange et du champ coercitif à 0 K d'une bicouche F/AF dont l'aimantation de la couche F fait un angle $\beta$ avec l'axe facile $Oy$ et l'aimantation du plan interfacial de la couche AF fait un angle $\alpha$ avec l'axe facile (figure IV.4). La direction du champ appliqué fait un angle $\theta$ avec l'axe facile. L'énergie totale du système s'écrit :

$$E = -J_{\mathrm{F}}\, S_{\mathrm{F}}^2\, \mathrm{Z}_{\mathrm{F-F}} - J_1^{\mathrm{AF}}\, S_{AF}^2\, \mathrm{Z}_{1,\mathrm{AF-AF}} - J_2^{\mathrm{AF}}\, S_{\mathrm{AF}}^2\, \mathrm{Z}_{2,\mathrm{AF-AF}} - J_{\mathrm{int}}\, S_{\mathrm{F}}\, S_{\mathrm{AF}}\, \mathrm{Z}_{\mathrm{F-AF}} \cos(\alpha - \beta) - D_{\mathrm{F}}\, N_{\mathrm{F}}\, S_{\mathrm{F}}^2\, (\sin\beta)^2 - D_{\mathrm{AF}}\, N_{\mathrm{AF}}\, S_{\mathrm{AF}}^2\, (\sin\alpha)^2 + \mu_0 \mu_B H\, N_{\mathrm{F}}\, g_{\mathrm{F}}\, S_{\mathrm{F}} \cos(\theta - \beta) \quad (4.4)$$

où :

- $Z_{F\text{-}F}$ et $Z_{F\text{-}AF}$ sont les nombres de liaisons des atomes F et le nombre de liaisons F-AF à l'interface ;

- $Z_{1,AF\text{-}AF}$ et $Z_{2,AF\text{-}AF}$ sont respectivement le nombre de liaisons 1$^{ers}$ et 2$^{èmes}$ voisins dans la couche AF ;

- $S_F$ et $S_{AF}$ sont les normes des spins F et AF respectivement ;

- $N_F$ et $N_{AF}$ sont les nombres de spins F et AF ;

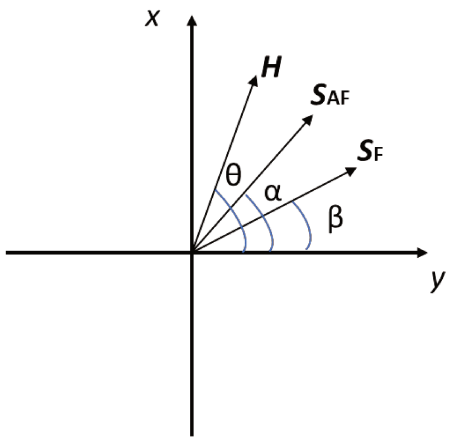


**Figure IV.4** : *Schéma représentant les orientations des moments magnétiques de la couche F, du plan interfacial de la couche AF et du champ appliqué par rapport à l'axe facile Oy.*

On suppose que le champ magnétique est appliqué suivant l'axe facile $Oy$ ($\theta = 0$) et que la couche AF est bloquée suivant $Oy$ dans la direction de l'axe d'anisotropie donc $\alpha = 0$ ou π. Les orientations stables de l'aimantation de la couche F s'obtiennent par minimisation de l'énergie totale du système par rapport à $\beta$ :

$$\frac{dE}{d\beta} = 0$$

$$\frac{d^2E(\beta)}{d\beta^2} > 0$$

Il est à noter que la dérivée seconde de l'énergie totale est liée à sa courbure locale. Une courbure positive indique un état stable. Par contre, une courbure négative indique un état instable, c'est le retournement de l'aimantation. La dérivée seconde s'écrit :

$$\frac{d^2E(\beta)}{d\beta^2} = J_{\text{int}}\, S_{\text{AF}}\, S_{\text{F}}\, \text{Z}_{\text{F-AF}} \cos(\alpha - \beta) + 2\, D_{\text{F}}\, N_{\text{F}}\, S_{\text{F}}^2\, (1 - 2(\cos\beta)^2) + \mu_0 \mu_B H\, N_{\text{F}}\, g_{\text{F}}\, S_{\text{F}}\, \cos(\beta) \qquad (4.5)$$

Les états stables sont obtenus pour $\beta = 0\ ou\ \pi$. En remplaçant $\beta = 0\ ou\ \pi$ dans l'équation (4.5) on trouve les expressions des champs de retournement :

$$\mu_0 \mu_B H_{\text{C}}^- = -\frac{2D_{\text{F}}\, S_{\text{F}}}{g_{\text{F}}} - \frac{\text{Z}_{\text{F-AF}}\, S_{\text{AF}}\, J_{\text{int}}}{N_{\text{F}}\, g_{\text{F}}} \qquad (4.6)$$

$$\mu_0 \mu_B H_{\text{C}}^+ = +\frac{2D_{\text{F}}\, S_{\text{F}}}{g_{\text{F}}} - \frac{\text{Z}_{\text{F-AF}}\, S_{\text{AF}}\, J_{\text{int}}}{N_{\text{F}}\, g_{\text{F}}} \qquad (4.7)$$

Il est important de rappeler que le phénomène d'anisotropie d'échange n'est observé que si la couche AF ne se retourne pas lors du retournement de la couche F. Cette condition de non retournement s'écrit :

$$N_{\text{AF}}\, D_{\text{AF}}\, S_{\text{AF}} > \text{Z}_{\text{F-AF}}\, J_{\text{int}}\, S_{\text{F}} \qquad (4.8)$$

Dans le cas où le critère de non retournement de la couche AF est satisfaite, les champs d'échange et coercitif s'écrivent sous la forme suivante :

$$\mu_0 \mu_B H_{\text{C}} = \frac{2D_{\text{F}}\, S_{\text{F}}}{g_{\text{F}}} \qquad (4.9)$$

$$\mu_0 \mu_B H_{\text{E}} = -\frac{\text{Z}_{\text{F-AF}}\, S_{\text{AF}}\, J_{\text{int}}}{N_{\text{F}}\, g_{\text{F}}} \qquad (4.10)$$

# IV.3 Paramètres numériques

## IV.3.1 Paramètres de la couche F

Nous avons choisi un matériau F dont la température de Curie $T_C$ est proche de 1360 K (celle du cobalt) [10]. Le moment atomique du Co valant 1,7 $\mu_B$ [10], nous avons choisi une valeur du spin $S_F = 0{,}85$ ($g = 2$). Afin de trouver la valeur du couplage ferromagnétique ($J_F$), nous avons utilisé la formule qui établit une relation entre $T_C$ et $J_F$ dans le cas d'un réseau cubique centré de spins d'Heisenberg [85] : $\frac{k_B T_C}{J_F S_F^2} \approx 2{,}054$ (4.11). Nous avons choisi $J_F = 1{,}256 \times 10^{-20}$ J. L'anisotropie du matériau F a été choisie uniaxiale suivant l'axe $Oy$. La valeur de la constante d'anisotropie par atome ($D_F$) retenue est $1{,}1 \times 10^{-23}$ J/atome [86].

## IV.3.2 Paramètres de la couche AF

Pour le matériau AF, nous avons choisi une température de Néel $T_N$ égale à 690 K (celle de l'alliage IrMn) [10] et une valeur du spin $S_{AF} = 1$ [87]. De même que pour $J_F$, nous avons choisi la valeur du couplage antiferromagnétique aux 1ers voisins à partir de la formule [85] $\frac{k_B T_N}{|J_1^{AF}| S_{AF}^2} \approx 2{,}054$ (4.12) et nous avons donc pris $J_1^{AF} = -4{,}63 \times 10^{-21}$ J. La valeur du couplage antiferromagnétique aux 2èmes voisins $J_2^{AF} < 0$ est un paramètre variable dans notre étude ($0 \leq |J_2^{AF}| \leq 0{,}6\ |J_1^{AF}|$). Il est important de noter que ce couplage entraine de la frustration magnétique. L'axe facile de la couche AF a été également choisi suivant l'axe ($Oy$) et nous avons pris arbitrairement $D_{AF} = 10\ D_F$.

## IV.3.3 Bilan des paramètres numériques

Pour des raisons pratiques dans notre code, nous avons utilisé les paramètres magnétiques divisés par $k_B$ ($J_{ij}/k_B$ et $D/k_B$), ce qui donne des constantes en Kelvin (K) dont les valeurs sont résumées dans le tableau IV.1.

| | | | |
|---|---|---|---|
| $S_F = 0{,}85$ | $D_F = 1$ K | $J_F = 910$ K | $T_C = 1360$ K |
| $S_{AF} = 1$ | $D_{AF} = 10$ K | $J_1^{AF} = -335$ K | $T_N = 690$ K |

**Tableau IV.1** : *Valeurs numériques fixées dans nos simulations.*

# IV.4 Résultats préliminaires (couche F uniquement : $e_F = 2$ plans)

Tous les cycles d'hystérésis sont simulés après un recuit sous un champ positif en partant de $T_0$ qui est largement supérieur à la température de transition de la couche F jusqu'à $T_f = 0{,}1$ K. Il est à noter que compte tenu du faible nombre d'atomes dans la couche F, la température à laquelle s'annule l'aimantation, qui correspond à $T_C$, est de l'ordre de 550 K (figure IV.5), nous avons donc choisi $T_0 = 800$ K. Dans cette partie, chaque cycle représenté est la moyenne de

plusieurs cycles. Après différents tests, nous avons trouvé qu'il suffisait de moyenner sur 28 cycles. Dans cette partie nous avons eu recours à la simulation MC quantifiée en temps. Nous présentons les résultats préliminaires obtenus sur une couche F contenant deux plans atomiques que nous comparons aux résultats théoriques afin de vérifier la fiabilité de notre méthode de simulation.

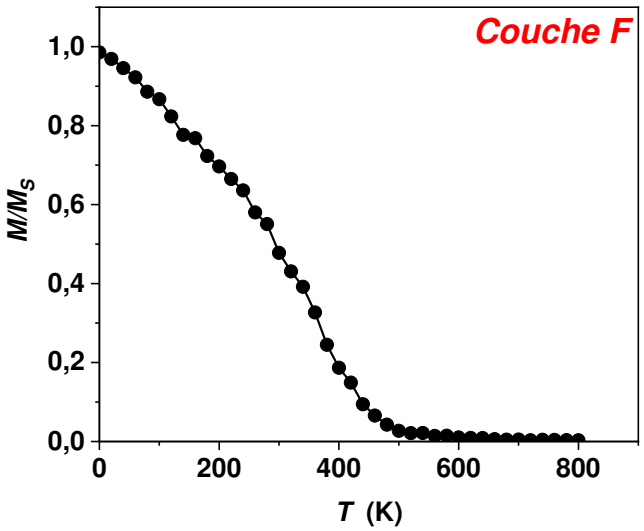


**Figure IV.5** : *Variation de l'aimantation de la couche F en fonction de la température.*

## IV.4.1 Influence du nombre de pas MC sur le champ coercitif ($T_M$ = 0,1 K)

Nous avons simulé plusieurs cycles d'hystérésis pour différentes valeurs du nombre de pas MC à chaque valeur du champ et $R = 0{,}01$. La variation de $H_C$ avec le nombre de pas MC est reportée sur la figure IV.6 :

- $H_C$ diminue avec l'augmentation de $n_{MCS}$, ce qui est logique car, à température non nulle, la probabilité de retournement à chaque valeur du champ augmente avec le nombre de pas MC.

- Pour $n_{MCS} > 6\times10^4$, $H_C$ est presque constant et $\frac{\mu_B\,\mu_0 H_C}{k_B} \approx 1$ K qui est légèrement supérieur à la valeur théorique à 0 K :

$$\frac{\mu_B \mu_0 H_C}{k_B} = \frac{2D_F \times S_F}{g_F} = 0{,}85 \text{ K}.$$

Cette légère surestimation de $H_C$ dans les simulations par rapport à la valeur théorique est due à la nature de l'algorithme (rotation individuelle des moments) [88]. En effet, comme l'algorithme réactualise un seul spin à la fois, l'interaction $J_F$ intervient dans le calcul de la variation d'énergie et elle empêche les rotations individuelles des moments, ce qui retarde le retournement de l'aimantation. Il est à noter que cette surestimation augmente lorsque le rapport $J_F/(k_B T)$ augmente.

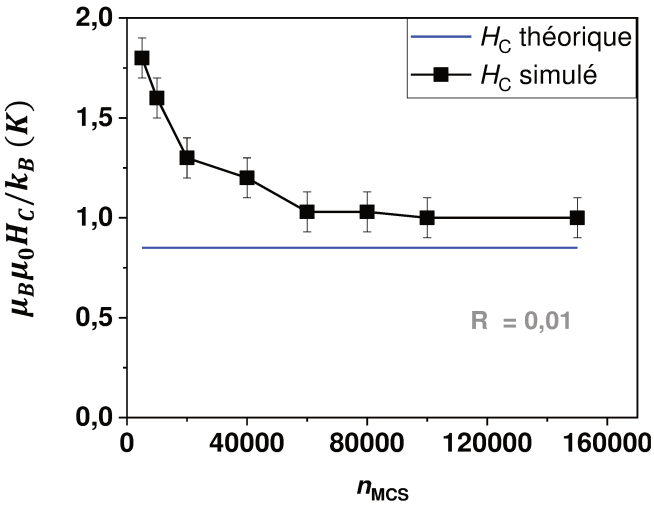


**Figure IV.6** : *Variation du champ coercitif en fonction du nombre de pas de MC à $T_M$ = 0,1 K (R = 0,01).*

Donc à partir de ces tests, on trouve que $n_{MCS} = 6\times10^4$ est une valeur convenable lorsque $R = 0{,}01$ pour avoir des résultats acceptables pour deux plans atomiques. Dans la suite, nous travaillerons donc avec $n_{MCS} = 6\times10^4$.

## IV.4.2 Impact de R sur le champ coercitif ($n_{MCS} = 6\times10^4$)

Dans la méthode MC quantifiée en temps, les résultats sont fortement liés à la valeur du rayon du cône *R*. Il est donc nécessaire d'étudier la variation de $H_C$ avec *R* (figure IV.7) pour trouver la valeur de *R* pour laquelle la simulation donne la valeur la plus proche de la valeur théorique. D'après la figure IV.7, nous constatons que $H_C$ diminue lorsque *R* augmente jusqu'à atteindre un minimum pour $R = 0{,}02$. Au-delà de cette valeur, $H_C$ augmente avec *R*. La valeur de $H_C$ simulé la plus proche de la valeur théorique est obtenue pour $R = 0{,}02$.

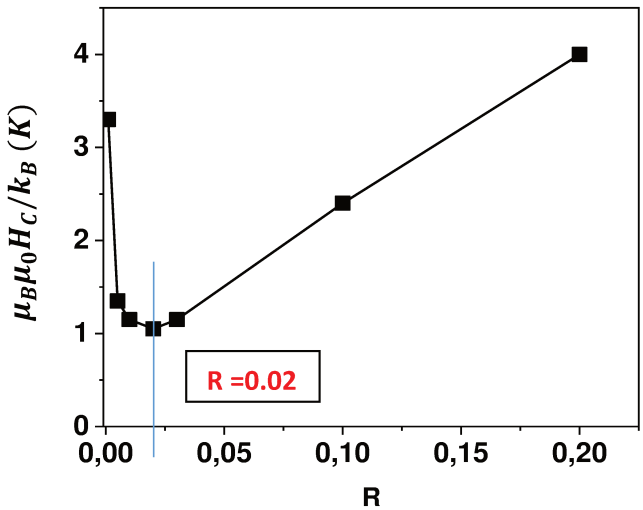


**Figure IV.7** : *Variation du champ coercitif à $T_M$ = 0,1 K en fonction du rayon du cône R ($n_{MCS} = 6\times10^4$).*

Afin de comprendre cette variation, rappelons qu'à l'équilibre thermodynamique, la densité de probabilité $P(\theta)$ de trouver un moment magnétique faisant un angle $\theta$ avec l'axe facile $Oy$ est donnée par :

$$\mathrm{P}(\theta) = 2\pi\, e^{-\frac{E(\theta)}{k_B T}} \sin\theta \qquad (4.13)$$

où $E(\theta)$ est la somme de l'énergie d'anisotropie, de l'énergie Zeeman et de l'énergie d'échange. Cela revient à dire que les moments magnétiques sont contenus dans un cône de demi-angle $\theta_{\text{thermique}}$ que nous appellerons « cône d'agitation thermique ». Il est à noter que le maximum de la densité probabilité a lieu pour un angle $\theta_0$ qui est différent de 0 et augmente avec la température (figure IV.8). Par exemple, dans notre cas à $T = T_M = 0{,}1$ K, on trouve $\theta_0 \approx 0{,}35°$ et $\theta_{\text{thermique}} \approx 1{,}25°$. Ce qui signifie qu'à cette température, les moments magnétiques fluctuent approximativement dans un cône d'axe $Oy$ et de demi-angle ≈ 1,25°.

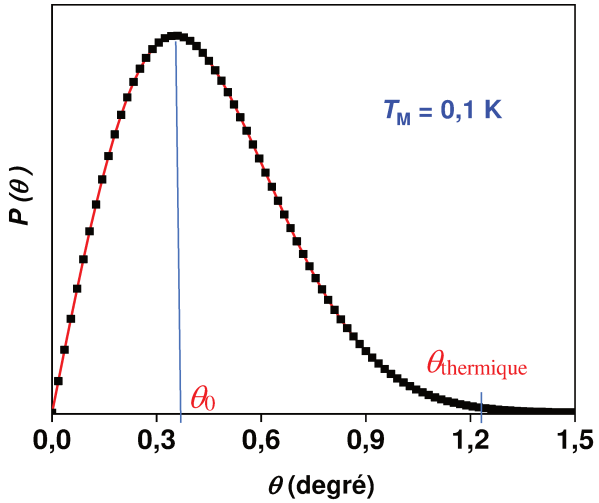


**Figure IV.8** : *Densité de probabilité en fonction de l'angle $\theta$ à $T$ = 0,1 K.*

Comparons maintenant à $\theta_{\text{thermique}}$ l'angle de rotation maximum $\theta_{\text{sim}}$ proposé dans l'algorithme qui vérifie $\tan(\theta_{\text{sim}}) \approx R$ et augmente donc avec $R$ (tableau IV.2). On constate alors que le minimum de $H_C$, obtenu pour $R = 0{,}02$ donc pour $\theta_{\text{sim}} \approx 1{,}14°$, est atteint précisément lorsque $\theta_{\text{sim}}$ est proche du demi-angle du cône d'agitation thermique ($\theta_{\text{thermique}} \approx 1{,}25°$). Ainsi, lorsque $R$ est faible ($R < 0{,}02$), les moments magnétiques fluctuent à l'intérieur du cône d'agitation thermique ($\theta_{\text{sim}} < \theta_{\text{thermique}}$). Ceci semble expliquer pourquoi l'algorithme est « peu efficace » pour modéliser le retournement d'aimantation et la valeur de $H_C$ est surestimée. Lorsque $R > 0{,}03$, $\theta_{\text{sim}} > \theta_{\text{thermique}}$ alors les rotations proposées seront souvent en dehors du cône d'agitation thermique et donc refusées, ce qui explique que l'inefficacité de l'algorithme augmente au-delà de $R = 0{,}03$ et que $H_C$ simulé augmente.

| R | 0,001 | 0,005 | 0,01 | 0,02 | 0,03 | 0,05 | 0,1 | 0,2 | 0,3 | 0,5 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $\theta_{\text{sim}}$(°) | 0,06 | 0,29 | 0,57 | 1,14 | 1,72 | 2,86 | 5,7 | 11,3 | 16,7 | 26,6 |

**Tableau IV.2** : *Valeurs de $\theta_{sim}$ pour chaque valeur de R.*

Afin de préciser ces points, nous présentons sur la figure IV.9 la variation du nombre de transitions acceptées et refusées par l'algorithme en fonction de $R$. Il est important de rappeler que dans la méthode MC, les transitions acceptées proviennent de deux cas :
- soit elles correspondent à une variation d'énergie négative ($\Delta E < 0$) ;
- soit elles correspondent à une variation d'énergie positive ($\Delta E > 0$) et un nombre aléatoire tiré $r \leq W(\Delta E)$ (probabilité de transition).

Les transitions refusées correspondent à une variation d'énergie positive ($\Delta E > 0$) et un nombre aléatoire tiré $r > W(\Delta E)$ (probabilité de transition).

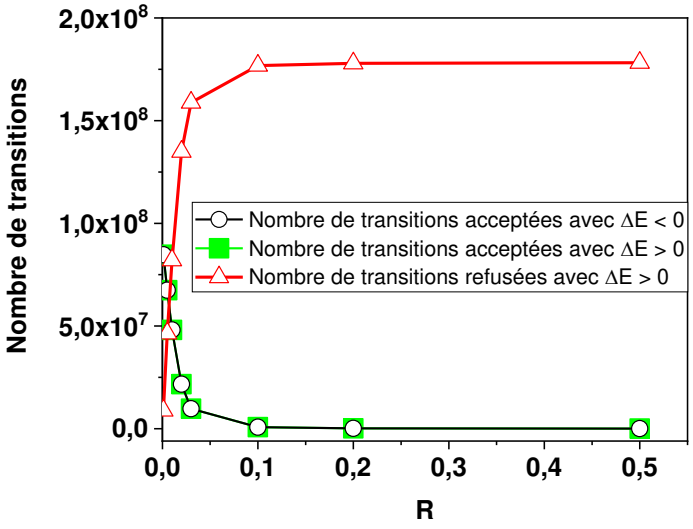


**Figure IV.9** : *Variation du nombre de transitions acceptées et refusées en fonction de R à $T_M = 0,1$ K.*

On peut expliquer ces résultats à partir des faits suivants :
- les rotations correspondant à $\Delta E < 0$ consistent à ramener le moment magnétique sur son champ local et sont donc des rotations d'angle faible (rotation à l'intérieur du cône d'agitation thermique) ;
- les rotations correspondant à $\Delta E > 0$ qui sont acceptées sont également des rotations d'angle faible contenues dans le cône d'agitation thermique. Ces rotations consistent à éloigner le moment magnétique de son champ local. Donc ces transitions sont responsables du retournement de moment ;
- les rotations correspondant à $\Delta E > 0$ qui sont refusées sont des rotations d'angle plus grand qui « sortent » le moment magnétique du cône d'agitation thermique (figure IV.10) ;

Ainsi lorsque $R$ augmente :
- la proportion de rotations qui « sortent » le moment magnétique du cône d'agitation thermique augmente et donc le nombre de rotations refusées augmente car ce type de rotations coûtent beaucoup d'énergie ;

- en conséquence, la proportion de transitions qui « maintiennent » le moment magnétique (transitions acceptées) dans le cône d'agitation thermique diminue. Parmi ces transitions, il y en a, à priori, autant qui augmentent ou diminuent l'énergie. C'est pourquoi, le nombre de transitions acceptées avec $\Delta E > 0$ ou $\Delta E < 0$ diminue lorsque $R$ augmente et suit la même évolution.

<u>On constate que pour $R$ = 0,02, valeur pour laquelle $H_C$ est minimum, le nombre de transitions acceptées est encore assez grand et le nombre de transitions refusées n'est pas trop grand.</u>

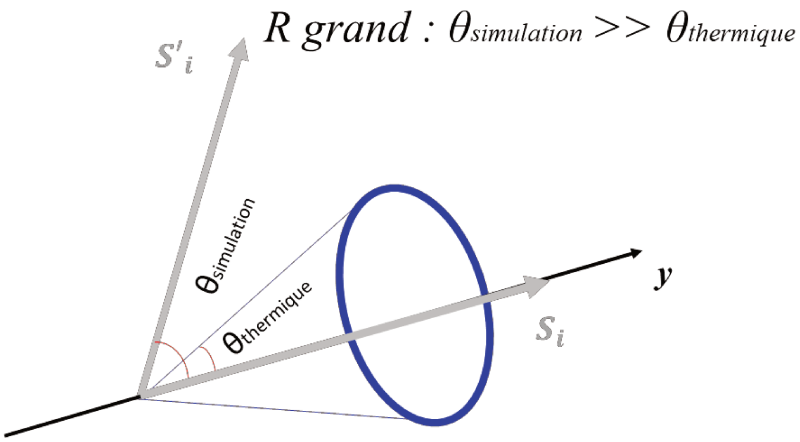


**Figure IV.10** : *Schéma représentant une rotation* $\boldsymbol{S_i \rightarrow S'_i}$ *« sortant » le moment magnétique du cône d'agitation thermique qui sera refusée.*

Il est important de noter que dans la suite de ce travail, nous avons choisi la valeur de $R$ de façon à avoir le même temps de mesure quelle que soit la température. Compte tenu de l'expression de $\delta t$ (éq. 2.8), cela signifie que $\frac{R^2}{T}$ doit être constant. En se basant sur les résultats de la figure IV.7, nous avons choisi $\frac{R^2}{T} = 0{,}004$, c'est-à-dire $\delta t \approx 2{,}5 \times 10^{-15}\ s$.

## IV.4.3 <u>Influence de $D_F$ (R = 0,02 - $n_{MCS}$ = 6×10⁴)</u>

Nous examinons ici l'effet de la constante d'anisotropie ferromagnétique $D_F$ sur le champ coercitif simulé sachant que la valeur théorique du champ coercitif à 0 K est proportionnelle à $D_F$. Les cycles d'hystérésis simulés à $T_M = 0{,}1$ K pour différentes valeurs de $D_F$ et la variation de $H_C$ en fonction de $D_F$ sont présentés sur la figure IV.11. On constate que les cycles d'hystérésis obtenus sont carrés et symétriques, ce qui est logique car $J_{int} = 0$ K. Plus on augmente $D_F$ et plus le cycle d'hystérésis s'élargit. De plus, on trouve que $H_C$ augmente linéairement avec $D_F$ (équation de la régression linéaire : $H_C = 0{,}86\ D_F + 0{,}2$) ce qui est en bon accord avec la théorie ($H_C = 0{,}85\ D_F$). Cependant, la courbe des valeurs simulées est légèrement au-dessus de la courbe théorique (environ 0,2 K) en raison du processus de rotation individuelle utilisé dans l'algorithme.

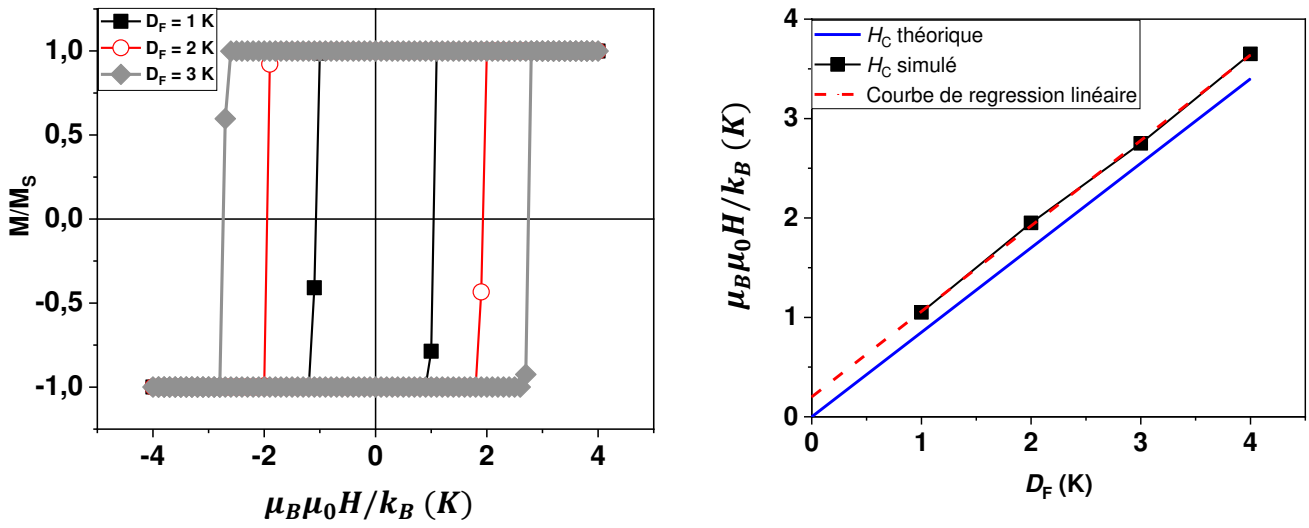


**Figure IV.11** : *Cycles d'hystérésis pour différentes valeurs de la constante d'anisotropie $D_F$ (à gauche) et variation du champ coercitif simulé en fonction de $D_F$ (à droite) à $T_M$ = 0,1 K* ($R$ = 0,02 et $n_{MCS}$ = 6×10$^4$).

Dans la suite, nous fixerons les paramètres $R$ = 0,02, $n_{MCS}$ = 6×10$^4$ et $D_F$ = 1 K.

## IV.4.4 Effet de la température sur le champ coercitif

La figure IV.12 montre la variation de $H_C$ simulé en fonction de la température $T_M$ en comparaison avec les valeurs théoriques de $H_C$. Théoriquement, pour une température non nulle, la barrière d'énergie à franchir lors du retournement par rotation uniforme (norme de l'aimantation constante au cours du retournement) de la couche F s'écrit :

$$\Delta E = N_F\, D_F(T)\, S_F^2 \left(1 - \frac{H}{H_a(T)}\right)^2$$

où :

- $D_F(T) = D_F\left(1 - \frac{T}{T_C}\right)$ est la constante d'anisotropie effective qui dépend de la température. En effet, les fluctuations thermiques diminuent l'anisotropie effective du système ;

- $H_a(T) = \frac{2\, D_F(T)\, S_F^2}{\mu_0\, m(T)}$ est le champ d'anisotropie où $m(T)$ est le moment magnétique moyen par atome F à chaque température.

Par hypothèse, la couche F se retourne lorsque le temps de relaxation $\tau = \tau_0\, e^{\frac{\Delta E}{k_B T}}$ est égal au temps de mesure ($t_{mes}$). On en déduit alors que le champ de retournement $H_C^-$, qui est égal au champ coercitif $H_C$, vérifie la relation :

$$\ln\left(\frac{t_{mes}}{\tau_0}\right) = \frac{N_F D_F(T)\, S_F^2}{k_B T}\left(1 - \frac{H_C(T)}{H_a(T)}\right)^2$$

soit finalement :

$$H_C(T) = \frac{2\, D_F(T)\, S_F^2}{\mu 0\, m(T)}\left[1 - \sqrt{\frac{k_B\, T}{N_F\, D_F(T)\, S_F^2}\, ln\left(\frac{t_{mes}}{\tau_0}\right)}\right]^{89} \quad (4.14).$$

En fait, $\frac{t_{mes}}{\tau_0}$ est inconnu, c'est pourquoi nous présentons les courbes de $H_C$ théorique pour différentes valeurs de $\frac{t_{mes}}{\tau_0}$ et $T_C$ = 550 K (voir figure IV.5).

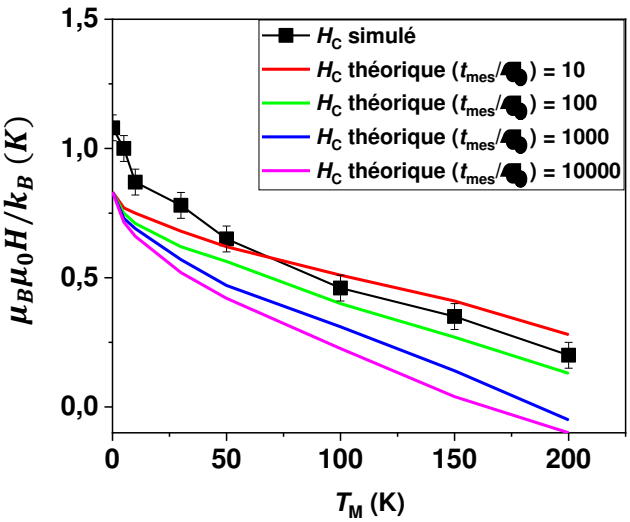


**Figure IV.12** : *Variation de $H_C$ simulé en fonction de la température en comparaison avec les valeurs théoriques pour différentes valeurs de $t_m/\tau_0$.*

On constate que :

- $H_C$ simulé diminue lorsque la température augmente comme prévu ;
- la courbe simulée est proche de la courbe théorique avec $\frac{t_{mes}}{\tau_0}$ = 10 lorsque la température augmente ;
- la surestimation de $H_C$ dans les simulations à basse température, c'est-à-dire lorsque $k_B T/J_F$ est petit, est due à la nature de l'algorithme qui effectue des rotations individuelles des moments.

# IV.5 Résultats sur les nanoplots F/AF avec joints de grains

## IV.5.1 Interactions limitées aux 1ers voisins dans la couche AF ($J_2^{AF}$ = 0 K)

Dans cette partie, les interactions dans la couche AF sont limitées aux 1ers voisins uniquement. Dans ce cas, la configuration magnétique stable de la couche AF est constituée de plans atomiques dans lesquelles les moments magnétiques sont parallèles entre eux et deux plans atomiques adjacents ont des aimantations antiparallèles (figure IV.3). Nous présentons

l'effet du couplage interfacial $J_{int}$ sur $H_C$ et $H_E$ à $T_M = 0{,}1$ K après avoir refroidi sous champ $\frac{\mu_B \mu_0 H_{ref}}{k_B} = 1$ K ($\mu_0 H_{ref} = 1{,}49$ T) à partir de $T_0 = 800$ K. Ensuite, nous étudions l'effet de la température pour différentes valeurs de $J_{int}$.

### *IV.5.1.1 Effet de $J_{int}$ à $T_M = 0{,}1$ K*

Les cycles d'hystérésis simulés à $T_M = 0{,}1$ K pour différentes valeurs de $J_{int}$ sont présentés (figure IV.13). La variation de $H_E$ et $H_C$ en fonction de $J_{int}$ est représentée figure IV.14.

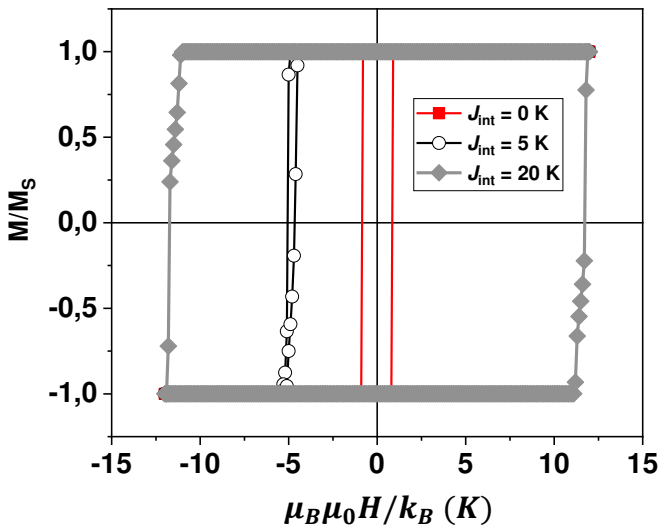


**Figure IV.13** : *Cycles d'hystérésis simulés à $T_M = 0{,}1$ K pour différentes valeurs du couplage interfacial $J_{int}$. ($J_2^{AF} = 0$ K).*

En absence de couplage interfacial, les cycles d'hystérésis sont symétriques comme attendu. Sur la figure IV.14, nous avons tracé les courbes de $H_E$ et $H_C$ prédites par le modèle de Meiklejohn et Bean (voir partie IV.2.2.4) :

$$\frac{\mu_B \mu_0 H_C^-}{k_B} = -0{,}85 - 0{,}96\,\frac{J_{int}}{k_B} \qquad (4.15)$$

$$\frac{\mu_B \mu_0 H_C^+}{k_B} = 0{,}85 - 0{,}96\,\frac{J_{int}}{k_B} \qquad (4.16)$$

$$\begin{cases} \dfrac{\mu_B \mu_0 H_E}{k_B} = -0{,}96\,\dfrac{J_{int}}{k_B} & (4.17) \\[2ex] \dfrac{\mu_B \mu_0 H_C}{k_B} = 0{,}85 & (4.18) \end{cases}$$

Le critère de non retournement de la couche AF (Eq. 4.8) s'écrit $\frac{J_{int}}{k_B} < 12{,}225$ K.

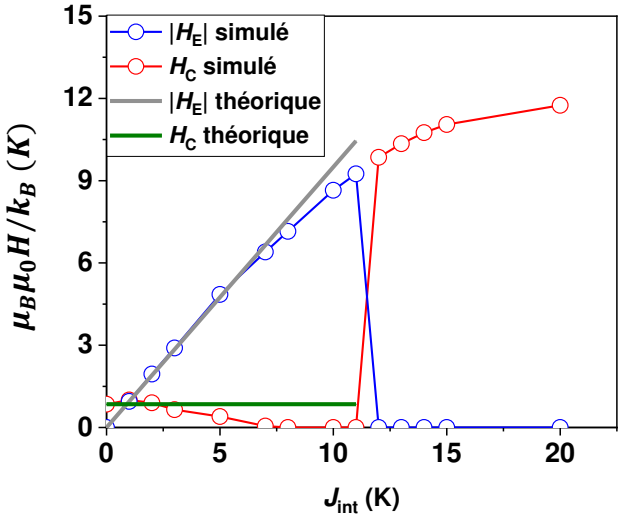


**Figure IV.14** : *Variation de $H_E$ et $H_C$ pour différentes valeurs de $J_{int}$ ($J_2^{AF}$ = 0 K) en comparaison avec les valeurs prédites par le modèle de Meiklejohn et Bean [Eqs 4.17 et 4.18].*

En augmentant la valeur du couplage à l'interface, nous trouvons :

**<u>Pour $J_{int}$ < 7.5 K :</u>**

- le décalage (champ d'échange) augmente linéairement lorsque $J_{int}$ augmente car la couche AF est bloquée, ceci est en très bon accord avec la variation donnée par le modèle théorique de Meiklejohn et Bean.

- la largeur du cycle (champ coercitif) diminue lorsque $J_{int}$ augmente et s'éloigne de la valeur théorique. Ces résultats sont expliqués page suivante.

**<u>Pour 7.5 K< $J_{int}$ <11 K :</u>**

- La couche AF est toujours bloquée et on trouve que $|H_E|$ augmente avec $J_{int}$ mais cette fois moins rapidement que le comportement prévu par le modèle Meiklejohn et Bean.
- $H_C$ est nul.

**<u>Pour $J_{int}$ ≥ 12 K :</u>**

- L'annulation de $H_E$ s'explique par le retournement de la couche AF lors du retournement de la couche F, ce qui est en excellent accord avec le critère de non retournement de la couche AF $\frac{J_{int}}{k_B} < 12{,}225$ K.
- $H_C$ augmente avec $J_{int}$, ce qui est logique car la couche AF se retourne avec la couche F.

Pour mieux comprendre le comportement de $H_C$ nous présentons sur la figure IV.15 la variation des champs de retournement positif $H_C^+$ et négatif $H_C^-$ simulés en comparaison avec les valeurs du modèle Meiklejohn et Bean (Eqs 4.15 et 4.16).

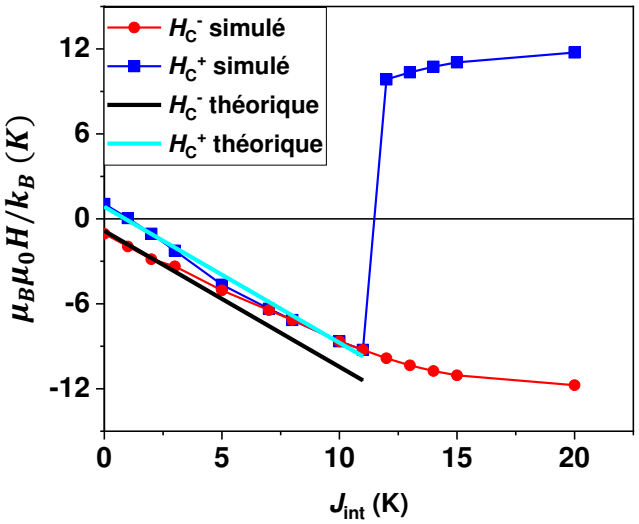


**Figure IV.15** : *Variation des champs de retournement positif et négatif pour différentes valeurs de $J_{int}$ ($J_2^{AF}$ = 0 K) en comparaison avec les valeurs prédites par le modèle de Meiklejohn et Bean [*Eqs 4.15 et 4.16*].*

**<u>Pour $J_{int}$ < 3 K :</u>**

- Les valeurs des champs de retournement sont en bon accord avec les valeurs théoriques car le retournement de la couche F s'effectue par rotation uniforme.

**<u>Pour $J_{int}$ > 3 K :</u>**

- $H_C^-$ s'éloigne du comportement linéaire du modèle Meiklejohn et Bean et devient quasiment indépendant de $J_{int}$ pour les grandes valeurs de $J_{int}$. Ceci s'explique par le fait que le retournement de la couche F se déclenche sur la surface supérieure libre de la couche F en raison du manque de voisins lorsque $J_{int}$ augmente. En effet, $H_C^-$ ne dépend quasiment pas de l'interface F/AF et c'est pourquoi il n'y a pas de variation brutale de $H_C^-$ lorsque la couche AF se retourne et $H_C^-$ ne dépend quasiment pas de $J_{int}$ lorsque celui-ci augmente.
- Concernant $H_C^+$ il suit quasiment le comportement linéaire du modèle Meiklejohn et Bean jusqu'à ce que la couche AF se retourne. Ceci est logique car le retournement à $H_C^+$ s'amorce à l'interface F/AF (tant que la couche AF est bloquée) car $J_{int}$ favorise le retournement des moments d'interface par rapport à ceux de la surface supérieure libre. Ceci est confirmé par l'augmentation brutale de $H_C^+$ lorsque la couche AF se retourne.

Ces résultats sur $H_C^-$ et $H_C^+$ permettent d'expliquer la variation de $H_C$ simulé de la figure IV.15. En particulier, la dépendance de $H_C$ avec $J_{int}$ (décroissance puis annulation pour $J_{int} \leq 11$ K) qui n'est pas prédite dans le modèle Meiklejohn et Bean s'explique par l'effet de la surface supérieure libre qui peut se produire dans les échantillons réels pour les faibles épaisseurs de la couche F.

### *IV.5.1.2 Effet de la température*

Nous souhaitons étudier ici l'effet des fluctuations thermiques des moments dans la couche AF sur le champ d'échange et le champ coercitif pour différentes valeurs de $J_{int}$. La dépendance en température de $H_C$ et $H_E$ pour différentes valeurs de $J_{int}$ est présentée sur la figure IV.16.

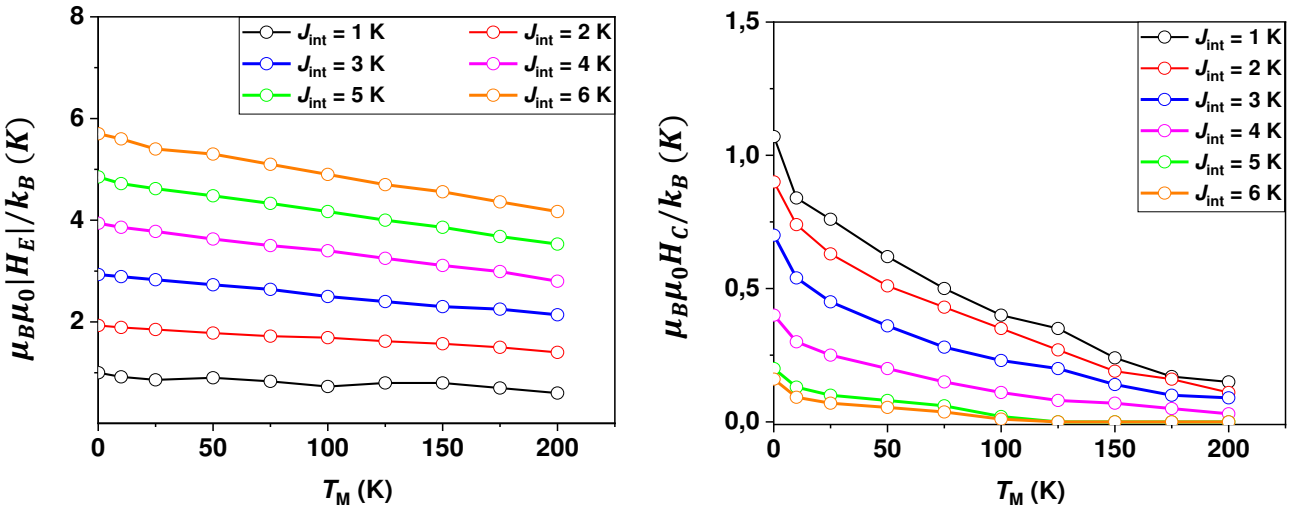


**Figure IV.16** : *Variation de $H_E$ et $H_C$ en fonction de $T_M$ pour différentes valeurs de $J_{int}$ ($J_2^{AF}$ = 0 K).*

- ***Champ coercitif***

- $H_C$ décroit lorsque $T_M$ augmente comme attendu ;
- $H_C$ diminue lorsque $J_{int}$ augmente car le 1er retournement ($H_C^-$) s'amorce à la surface supérieure libre et le deuxième retournement ($H_C^+$) s'amorce à l'interface F/AF comme expliqué précédemment (§ IV.5.1.1).

- ***Champ d'échange***

- $|H_E|$ augmente avec $J_{int}$ quelle que soit $T_M$ comme attendu (couche AF bloquée) ;
- $|H_E|$ diminue avec l'augmentation de $T_M$, quel que soit $J_{int}$ (contrairement au modèle granulaire où $H_E$ est constant tant que les grains AF sont bloqués). Cela peut s'expliquer par l'augmentation des fluctuations thermiques des moments AF à l'interface avec la température. Dans une approche granulaire, cela revient à dire que le couplage d'interface effectif $J_{int}^{eff}$ défini par $E_{ech} = J_{int}^{eff}\ \boldsymbol{\sigma}_F.\boldsymbol{\sigma}_{AF}$ diminue, ce qui tend à diminuer $|H_E|$.

Afin de voir si l'on peut généraliser la formule de Meiklejohn et Bean $\mu_B\mu_0 H_E = -\frac{Z_{F-AF}\, J_{int}\, S_{AF}}{N_F\, g_F}$ valable uniquement à 0 K de la façon suivante :

$$\mu_B\mu_0 H_E(T) = -\frac{Z_{F-AF}\, J_{int}\ < S_{AF} >_T}{N_F\, g_F} \qquad (4.19)$$

nous présentons figure IV.17 la variation du spin moyen $<S_{AF}>_T$ des atomes du 1er plan de la couche AF (plan interfacial). On voit comme attendu que $<S_{AF}>_T$ diminue avec l'augmentation de $T_M$, de plus la décroissance est linéaire.

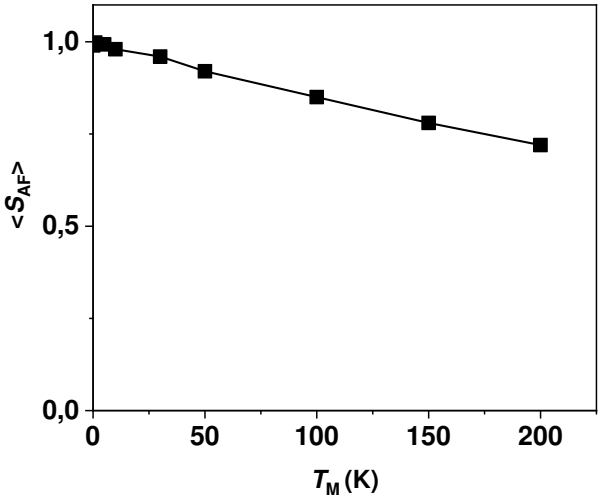


**Figure IV.17** : *Variation du spin moyen des atomes du 1er plan de la couche AF (plan interfacial) en fonction de la température $T_M$.*

Nous avons alors tracé figure IV.18, la formule généralisée du champ d'échange (Eq. 4.19) en fonction de la température en comparaison avec nos résultats de simulations. On peut voir que l'accord est excellent montrant ainsi que la formule de Meiklejohn et Bean peut être généralisée à température non nulle en remplaçant simplement $S_{AF}$ par $<S_{AF}>_T$.

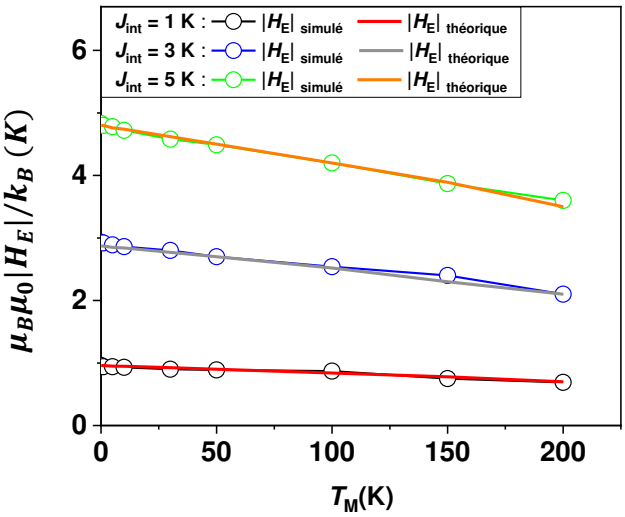


**Figure IV.18** : *Variation de $H_E$ simulé en fonction de $T_M$ pour différentes valeurs de $J_{int}$ en comparaison avec les valeurs théoriques données par la relation (4.19).*

## IV.5.2 Prise en compte des interactions aux 2èmes voisins dans la couche AF ($J_2^{AF} \neq 0$ K)

Pour être plus réaliste, nous prenons en compte les interactions aux seconds voisins en plus de celles aux premiers voisins. Comme $J_2^{AF} < 0$, la prise en compte de ces interactions entraine l'apparition de frustration magnétique dans la couche AF qui peut engendrer des configurations magnétiques non colinéaires. Dans cette partie, nous présentons l'effet de $J_2^{AF}$ sur les configurations magnétiques à $T_M = 0{,}1$ K, ensuite nous examinerons l'effet de $J_{int}$ et de la température sur les propriétés d'anisotropie d'échange pour différentes valeurs de $J_2^{AF}$.

### *IV.5.2.1 Effet de $J_2^{AF}$ sur les configurations magnétiques à $T_M = 0{,}1$ K*

Dans cette partie, nous faisons un refroidissement sous champ positif $\frac{\mu_B \mu_0 H_{ref}}{k_B} = 1$ K ($\mu_0 H_{ref} = 1{,}49$ T) en partant de $T_0 = 800$ K jusqu'à $T_f = 0{,}1$ K avec un pas de refroidissement $\Delta T = 5$ K.

- **$J_{int} = 0$ K**

Les configurations magnétiques du 1er plan (plan interfacial) de la couche AF obtenues à la fin du refroidissement ($T_M = 0{,}1$ K) pour $J_{int} = 0$ K et différentes valeurs de $J_2^{AF}$ sont représentées sur la figure IV.19. Le code couleur représente la composante des spins (le spin est opposé au moment magnétique car $\boldsymbol{m} = -g\mu_B \boldsymbol{S}$) suivant l'axe perpendiculaire au plan (axe *Oz*).

- Pour $J_2^{AF} = 0$ K, les moments sont orientés dans le même sens en formant un seul domaine, ce qui est logique car il n'y a pas de frustration.

- Pour $J_2^{AF} = 0{,}5\, J_1^{AF}$, à cause de la compétition entre $J_2^{AF}$ et $J_1^{AF}$, les moments ne sont plus colinéaires. Dans la partie centrale, l'angle entre les moments est ~ 60°. On peut voir qu'au niveau des joints de grains et des bords, certains moments sont hors du plan *Oxy*.

- Pour $0{,}5\, J_1^{AF} < J_2^{AF} \leq 0{,}6\, J_1^{AF}$, la proportion de moments hors du plan augmente. De plus, on voit la formation de plusieurs domaines magnétiques dans le plan interfacial de la couche AF. On remarque qu'il y a plusieurs domaines dans chaque grain. De plus, il semble qu'un domaine ne puisse pas traverser un joint de grains.

Afin de vérifier que ces résultats sont reproductibles, nous avons fait les mêmes simulations mais avec différentes configurations magnétiques initiales et aussi avec plusieurs vitesses de refroidissement, nous avons toujours trouvés des domaines magnétiques dans le plan interfacial pour $0{,}5\, J_1^{AF} < J_2^{AF} \leq 0{,}6\, J_1^{AF}$. Il est à noter que pour $J_2^{AF} = 0{,}6\, J_1^{AF}$, les moments du second plan de la couche AF sont légèrement désalignés mais reste globalement dans le plan *Oxy* (figure IV.20). Par contre, le dernier plan de la couche AF présente sensiblement la même configuration que le plan interfacial ce qui montre que l'effet de surface et la présence de joints de grains sont les causes des configurations en domaines observées.

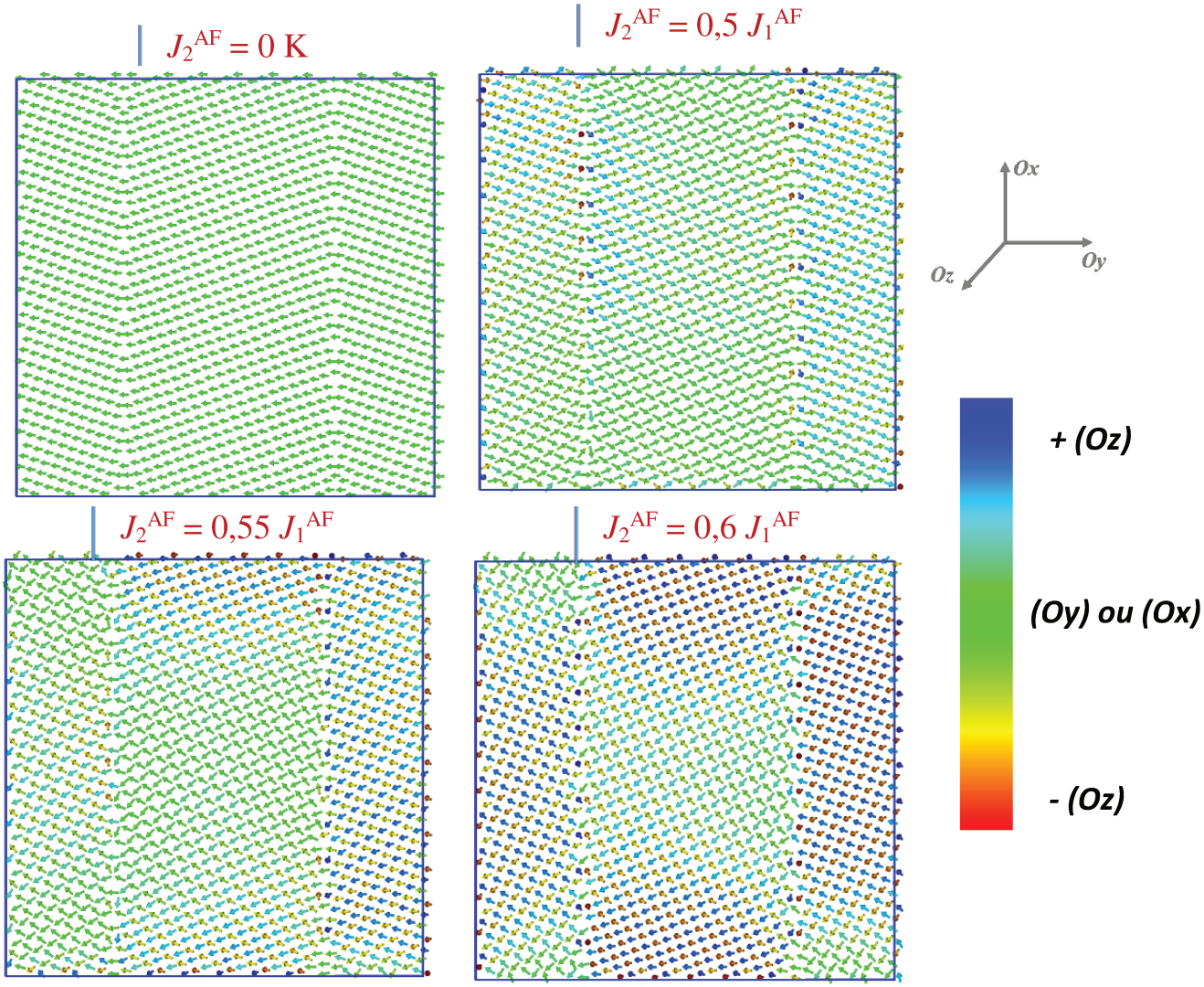


**Figure IV.19** : *Configurations des spins (les spins sont opposés aux moments magnétiques) du premier plan de la couche AF (plan interfacial) à $T_M = 0{,}1$ K pour $J_{int} = 0$ K et différentes valeurs de $J_2^{AF}$.*

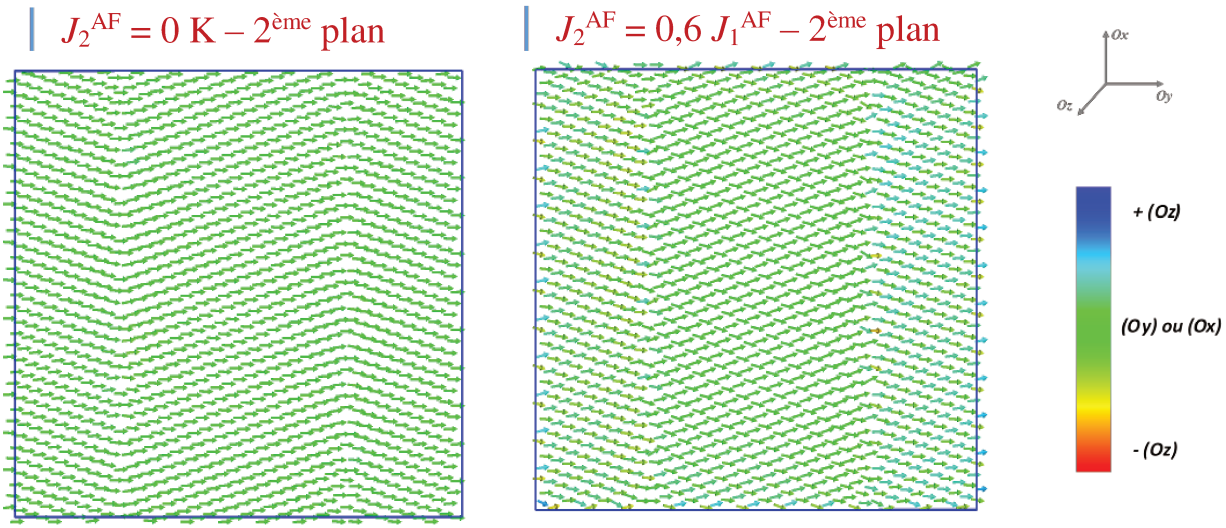


**Figure IV.20** : *Configurations des spins (les spins sont opposés aux moments magnétiques) du second plan de la couche AF à $T_M = 0{,}1$ K pour $J_{int} = 0$ K et différentes valeurs de $J_2^{AF}$.*

Pour calculer la frustration dans la couche AF résultant de la compétition entre $J_2^{\mathrm{AF}}$ et $J_1^{\mathrm{AF}}$, nous avons utilisé la formule suivante :

$$F = 1 - \frac{E_{\min}^{\text{simulation}}}{E_{\min}^{\text{théorique}}} \qquad (4.20)$$

où $E_{\min}^{\text{simulation}}$ est l'énergie de l'état fondamental obtenue dans nos simulations, c'est-à-dire à la fin du refroidissement et $E_{\min}^{\text{théorique}}$ est l'énergie correspondant au cas où toutes les interactions sont pleinement satisfaites (qui correspond à l'énergie de l'état fondamental dans le cas d'un système non frustré) :

$$E_{\min}^{\text{théorique}} = -\mathrm{Z_F}\, J_{\mathrm{F}}\, S_{\mathrm{F}}^2 - Z_{1,\mathrm{AF-AF}}\, J_1^{\mathrm{AF}}\, S_{\mathrm{AF}}^2 - \mathrm{Z}_{2,\mathrm{AF-AF}}\, J_2^{\mathrm{AF}}\, S_{\mathrm{AF}}^2 - \mathrm{Z_{F-AF}}\, J_{\mathrm{int}}\, S_{\mathrm{F}}\, S_{\mathrm{AF}} - N_{\mathrm{F}}\, D_{\mathrm{F}}\, S_{\mathrm{F}}^2 - N_{\mathrm{AF}}\, D_{\mathrm{AF}}\, S_{\mathrm{AF}}^2 + \mu_B\, B\, N_{\mathrm{F}}\, g_{\mathrm{F}}\, S_{\mathrm{F}} \qquad (4.21)$$

Dans le cas des systèmes non frustrés, $E_{\min}^{\text{simulation}} = E_{\min}^{\text{théorique}}$, donc $F = 0$. Cependant que dans les systèmes frustrés $E_{\min}^{\text{simulation}} > E_{\min}^{\text{théorique}}$, ce qui nous donne $F > 0$. Dans la figure IV.21, nous présentons la variation de la frustration dans la couche AF en fonction de $J_2^{\mathrm{AF}}$. On voit clairement que $F$ augmente avec $J_2^{\mathrm{AF}}$, ce qui est logique.

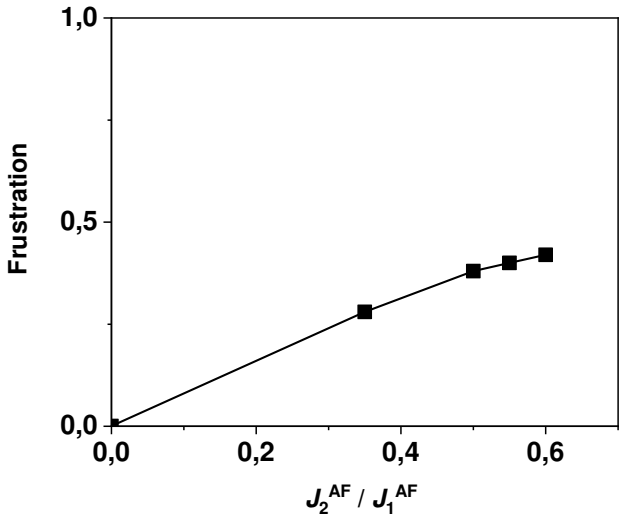


**Figure IV.21** : *Variation de la frustration dans la couche AF en fonction de* $J_2^{\mathrm{AF}}/J_1^{\mathrm{AF}}$.

D'après la figure IV.22, on voit que la température de transition ($T_{\mathrm{N}}$) de la couche AF, qui correspond à la position du maximum de la courbe de chaleur spécifique, se décale vers les basses températures lorsque $J_2^{\mathrm{AF}}$ augmente. Ceci montre la diminution de stabilité de la couche AF par rapport à l'agitation thermique lors l'augmentation de $J_2^{\mathrm{AF}}$.

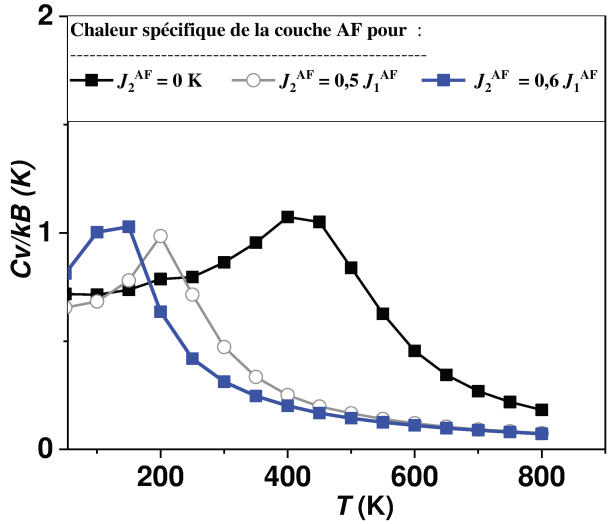


**Figure IV.22** : *Dépendance en température de la chaleur spécifique de la couche AF pour plusieurs valeurs de* $J_2^{AF}$ .

• $J_{int} \neq 0$ K

Sur la figure IV.23 nous présentons les configurations magnétiques du 1er plan (plan interfacial) de la couche AF obtenues à la fin du refroidissement ($T_M = 0{,}1$ K) pour $J_{int} = 20$ K et différentes valeurs de $J_2^{AF}$. Le code couleur représente la composante des spins suivant l'axe perpendiculaire au plan (axe *Oz*).

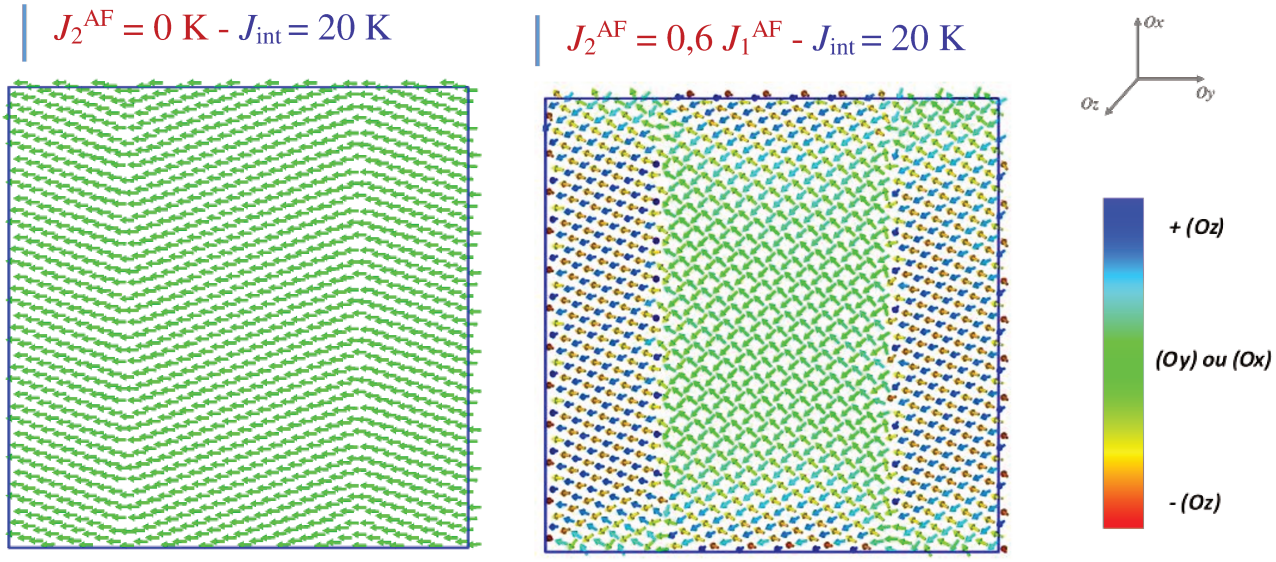


**Figure IV.23** : *Configurations des spins (les spins sont opposés aux moments magnétiques) du premier plan de la couche AF (plan interfacial) à* $T_M = 0{,}1$ *K pour* $J_{int} = 20$ *K et différentes valeurs de* $J_2^{AF}$ .

On remarque que les configurations magnétiques sont similaires à celles observées lorsque $J_{int} = 0$ K (pour les valeurs de $J_{int}$ étudiées, c'est-à-dire $J_{int} \leq 25$ K) ce qui est logique car on travaille avec des valeurs de $J_{int}$ faibles par rapport aux valeurs de $J_2^{AF}$ :

- pour $J_2^{AF} = 0{,}6\ J_1^{AF}$, les moments du second plan de la couche AF sont légèrement désalignés mais reste globalement dans le plan *Oxy* (figure IV.24) ;

- le dernier plan de la couche AF a sensiblement la même configuration que le plan interfacial.

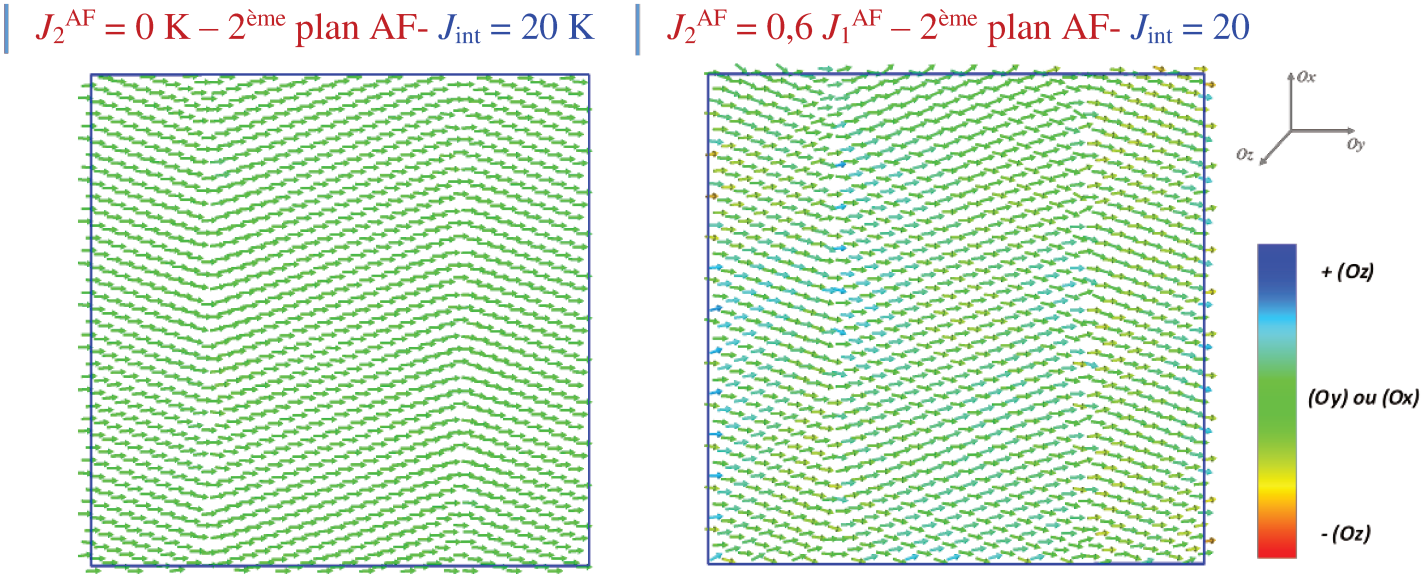


**Figure IV.24** : *Configurations des spins (les spins sont opposés aux moments magnétiques) du second plan de la couche AF à $T_M$ = 0,1 K pour $J_{int}$ = 20 K et différentes valeurs de $J_2^{AF}$.*

### *IV.5.2.2 Effet de $J_{int}$ sur $H_E$ et $H_C$ pour différentes valeurs de $J_2^{AF}$ ($T_M$ = 0,1 K)*

Dans cette partie, nous étudions l'effet de $J_{int}$ sur $H_E$ et $H_C$ à $T_M$ = 0,1 K pour différentes valeurs de $J_2^{AF}$. Les résultats de cette étude sont présentés sur la figure IV.25.

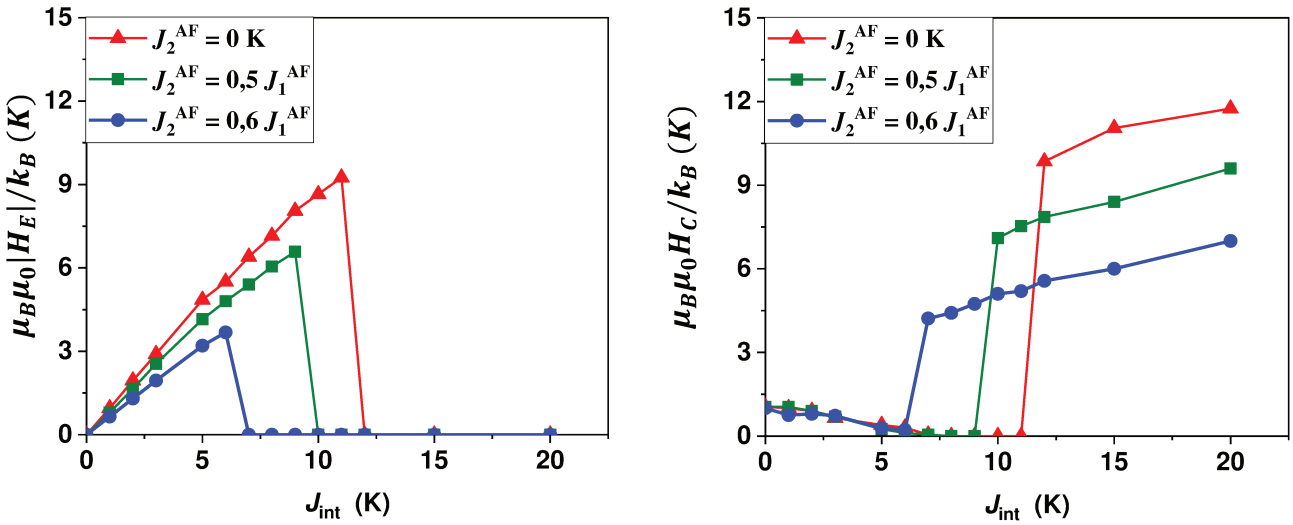


**Figure IV.25** : *Variation de $H_E$ et $H_C$ en fonction de $J_{int}$ pour différentes valeurs de $J_2^{AF}$ ($T_M$ = 0,1 K).*

• ***Champ d'échange***

On trouve un comportement similaire de $H_E$ quelle que soit la valeur de $J_2^{AF}$ avec une augmentation (quasiment linéaire) pour les faibles valeurs de $J_{int}$ puis l'annulation de $H_E$ lorsque la couche AF se retourne avec la couche F. Cependant, on remarque deux effets dus à l'augmentation de $J_2^{AF}$ :

- pour les faibles valeurs de $J_{int}$, $|H_E|$ diminue en raison de la non-colinéarité des moments AF de l'interface. Tout se passe donc comme si le couplage effectif entre les deux couches diminue lorsque les moments AF sont non colinéaires. Afin de voir si l'on peut généraliser la formule théorique de Meiklejohn et Bean (Eq. 4.10), qui a été établie dans le cadre d'un plan interfacial contenant des moments AF colinéaires, de la façon suivante :

$$\mu_B \mu_0 H_E(T) = -\frac{Z_{F-AF}\, J_{int} < S_{AF}^y >}{N_F\, g_F} \qquad (4.22)$$

où $< S_{AF}^y >$ désigne ici la valeur moyenne de la composante suivant *Oy* des spins AF du 1er plan de la couche AF (plan interfacial) dont la variation en fonction de $J_2^{AF}$ est présentée sur la figure IV.26. On voit comme attendu que $< S_{AF}^y >$ diminue lorsque $J_2^{AF}$ augmente conformément aux observations des figures IV.19 et IV.23.

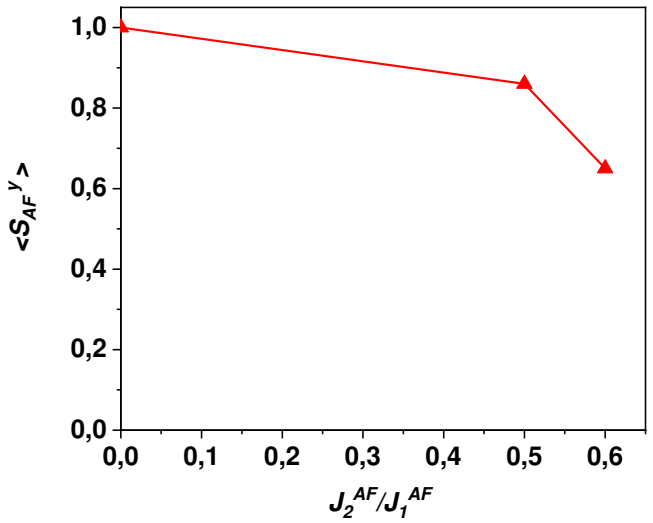


**Figure IV.26** : *Variation de la valeur moyenne de la composante suivant Oy des spins du 1er plan de la couche AF (plan interfacial) en fonction de* $J_2^{AF}$ .

Nous avons alors tracé sur la figure IV.27, la variation de $H_E$ donnée par la formule théorique (Eq. 4.22) en fonction de $J_{int}$ en comparaison avec la partie linéaire de nos résultats de simulations. On peut voir que l'accord est excellent montrant ainsi que la formule de Meiklejohn et Bean peut être généralisée dans le cas de moments AF non colinéaires à l'interface en remplaçant $S_{AF}$ par la valeur moyenne de la composante du spin AF, suivant la direction des moments F.

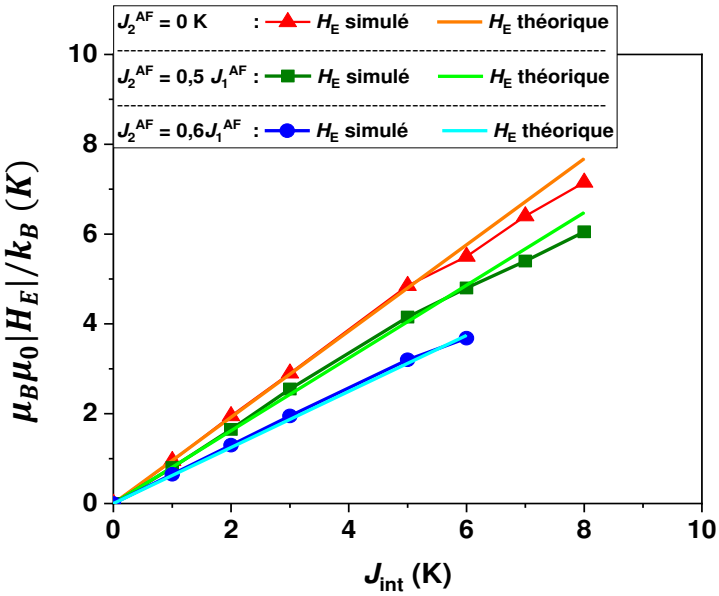


**Figure IV.27** : *Variation de $H_E$ simulé en fonction de $J_{int}$ en comparaison avec les valeurs théoriques données par la relation (Eq 4.22).*

- la couche AF devient moins stable, c'est-à-dire qu'elle se retourne pour une valeur de $J_{int}$ plus faible que lorsque $J_2^{AF} = 0$. Par exemple pour $J_2^{AF} = 0{,}6\, J_1^{AF}$, l'annulation de $H_E$ a lieu vers $J_{int} = 7$ K alors qu'il s'annule pour $J_{int} = 12$ K dans le cas $J_2^{AF} = 0$. En fait, en raison de la non-colinéarité des moments AF, la barrière à franchir lors du retournement est plus faible ce qui rend la couche AF moins stable. Tout se passe donc comme si la constante d'anisotropie effective $K_{AF}^{eff}$ définie par $\Delta E = K_{AF}^{eff}\ V_{AF}$ est plus faible en présence de $J_2^{AF}$.

- ***Champ coercitif***

On trouve un comportement similaire de $H_C$ quelle que soit la valeur de $J_2^{AF}$ avec une diminution puis annulation de $H_C$ pour les faibles valeurs de $J_{int}$ et une augmentation brutale de $H_C$ lorsque la couche AF se retourne avec la couche F. Plus précisément, on remarque encore deux effets dus à l'augmentation de $J_2^{AF}$ :

- tant que la couche AF ne se retourne pas (c'est-à-dire pour les faibles valeurs de $J_{int}$), $H_C$ ne dépend pas de $J_2^{AF}$ ;

- lorsque la couche AF se retourne, on trouve que $H_C$ diminue lorsque $J_2^{AF}$ augmente. Ceci est dû au fait que le couplage effectif, qui est responsable de l'augmentation de $H_C$ lorsque la couche AF se retourne, diminue avec l'augmentation de $J_2^{AF}$.

• ***Configuration magnétique du 1er plan de la couche AF avant et après retournement de la couche F***

Pour les valeurs de $J_{int}$ légèrement inférieures à celle qui correspond à l'annulation de $H_E$, c'est-à-dire pour laquelle la couche AF se retourne avec la couche F, les moments magnétiques AF du 1er plan (plan interfacial) subissent des réarrangements au cours du cycle d'hystérésis. Sur la figure IV.28 nous présentons la configuration des spins AF de ce plan au début et à la fin du cycle pour $J_2^{AF} = 0{,}5\ J_1^{AF}$ et $J_{int} = 9$ K (la couche AF se retourne pour $J_{int} \geq 10$ K).

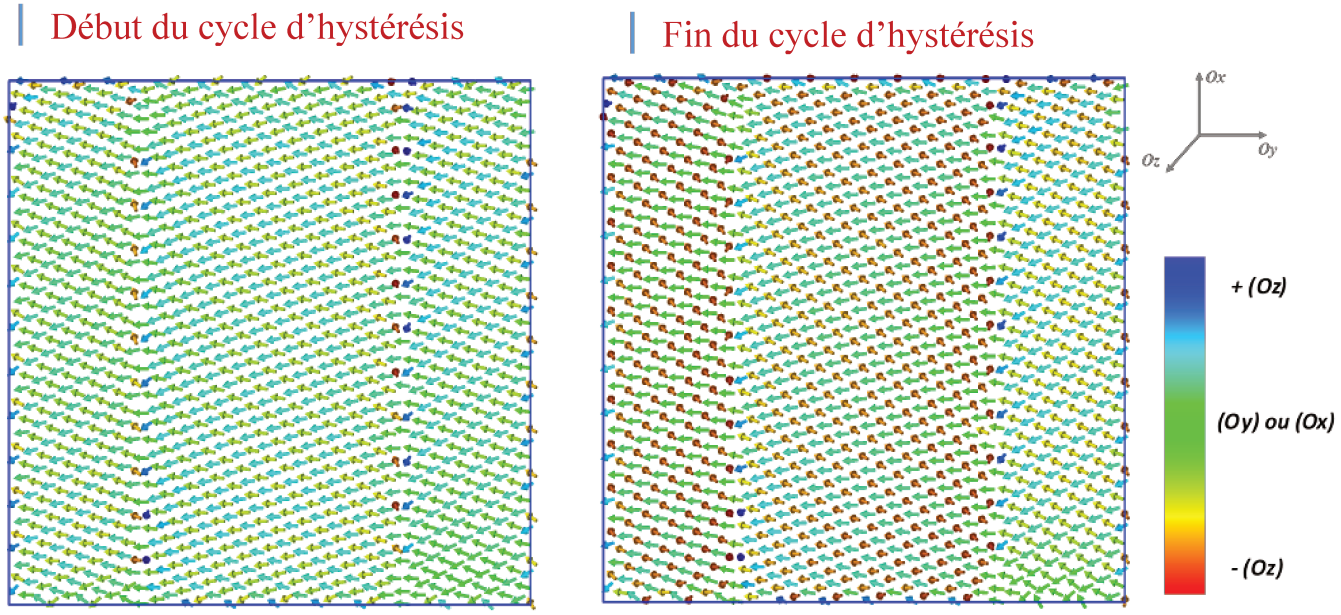


**Figure IV.28** : *Configuration des spins (les spins sont opposés aux moments magnétiques) du premier plan de la couche AF (plan interfacial) avant et après le retournement de la couche F pour* $J_2^{AF} = 0{,}5\ J_1^{AF}$ *et* $J_{int} = 9$ K.

Nous voyons que l'orientation de la plupart des moments magnétiques AF de l'interface au début du cycle n'est pas la même qu'à la fin du cycle. En particulier, on remarque que le nombre de moments magnétiques hors du plan augmente à la fin du cycle.

### *IV.5.2.3 Effet de la température sur $H_E$ et $H_C$ pour différentes valeurs de $J_2^{AF}$ et $J_{int}$*

Dans cette partie nous étudions l'effet de la température sur $H_E$ et $H_C$ pour différentes valeurs de $J_{int}$ lorsque $J_2^{AF} = 0{,}5\ J_1^{AF}$ et $J_2^{AF} = 0{,}6\ J_1^{AF}$. Nous rappelons que la configuration des moments du premier plan de la couche AF (plan interfacial) à basse température est non colinéaire dans les deux cas mais qu'il y a beaucoup plus de moments hors du plan lorsque $J_2^{AF} = 0{,}6\ J_1^{AF}$ (figures IV.19 et IV.23).

**IV.5.2.3.a $J_2^{AF} = 0{,}5\ J_1^{AF}$**

Sur la figure IV.29 nous présentons l'évolution de $H_C$ et $H_E$ en fonction de $T_M$ pour $J_2^{AF} = 0{,}5\ J_1^{AF}$. On observe un comportement différent du cas $J_2^{AF} = 0$ K (figure IV.16). En effet, on observe ici l'annulation du champ d'échange à une température $T_{pic}$ comprise entre 85 et 170 K suivant les valeurs de $J_{int}$ pour laquelle le champ coercitif présente un maximum. Ces deux faits sont dus au retournement de la couche AF.

**$T_M < T_{pic}$ ($T_{pic}$ est la température où $H_C$ présente un maximum)**

- la couche AF ne se retourne pas et on retrouve des résultats similaires au cas $J_2^{AF} = 0$ K, à savoir une légère diminution de $H_E$ lorsque $T_M$ augmente, quel que soit $J_{int}$, qui est due aux fluctuations thermiques des moments AF à l'interface ;
- on observe une légère diminution de $H_E$ par rapport au cas $J_2^{AF} = 0$ qui s'explique par la présence de domaines dans le premier plan de la couche AF (plan interfacial) ;
- on observe aucune influence de $J_2^{AF}$ sur $H_C$.

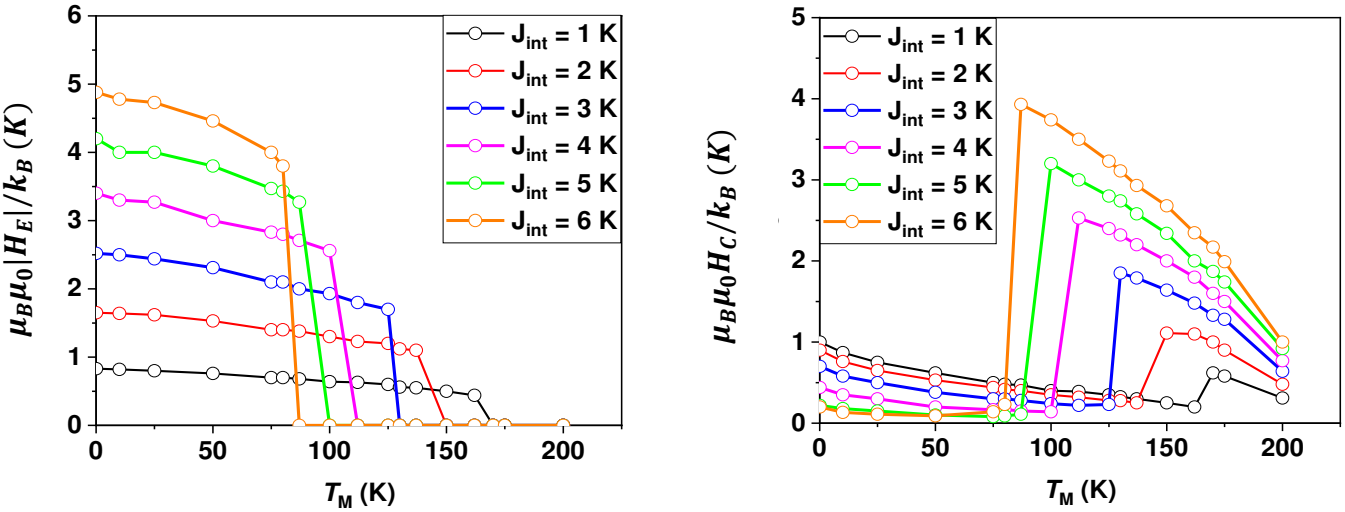


**Figure IV.29** : *Variation de $H_E$ et $H_C$ en fonction de $T_M$ pour différentes valeurs de $J_{int}$ ($J_2^{AF} = 0{,}5\ J_1^{AF}$).*

**$T_M = T_{pic}$**

- le champ d'échange s'annule en même temps que le champ coercitif présente un maximum à $T_M = T_{pic}$ ;
- l'annulation de $H_E$ est due au retournement complet de la couche AF avec un léger retard par rapport à la couche F (figure IV.30). Puisque la couche AF se retourne légèrement en retard par rapport à la couche F, elle retient celle-ci de la même façon lors des deux retournements et l'annulation de $H_E$ s'accompagne d'une augmentation de $H_C$ (figure IV.29). La valeur maximale de $H_C$ augmente avec $J_{int}$ car la couche AF retient plus la couche F lorsque $J_{int}$ est grand ;
- le retournement de la couche AF en présence de $J_2^{AF}$ confirme le fait que la couche AF est moins stable en présence de $J_2^{AF}$. Cela s'explique par le fait que les moments AF du plan interfacial avant le retournement ne sont pas orientés suivant l'axe facile *Oy*, donc la barrière

d'énergie $\Delta E$ à franchir lors de leur « retournement » est plus faible que dans le cas où les moments AF sont colinéaires. Cela confirme que dans un modèle à l'échelle granulaire, la constante d'anisotropie effective est plus faible.
- on observe que la température d'annulation du champ d'échange $T_{pic}$ se décale vers les basses températures lorsque $J_{int}$ augmente. Ceci indique que la couche AF est moins stable lorsque $J_{int}$ augmente.

**$T_M > T_{pic}$**

- lorsque la température continue d'augmenter, la couche AF se retourne en même temps que la couche F (la couche AF devient superparamagnétique) (figure IV.30). Donc tout se passe comme si la couche F était libre. Il est à noter que le retournement de la couche AF s'amorce sur les bords du nanoplot.

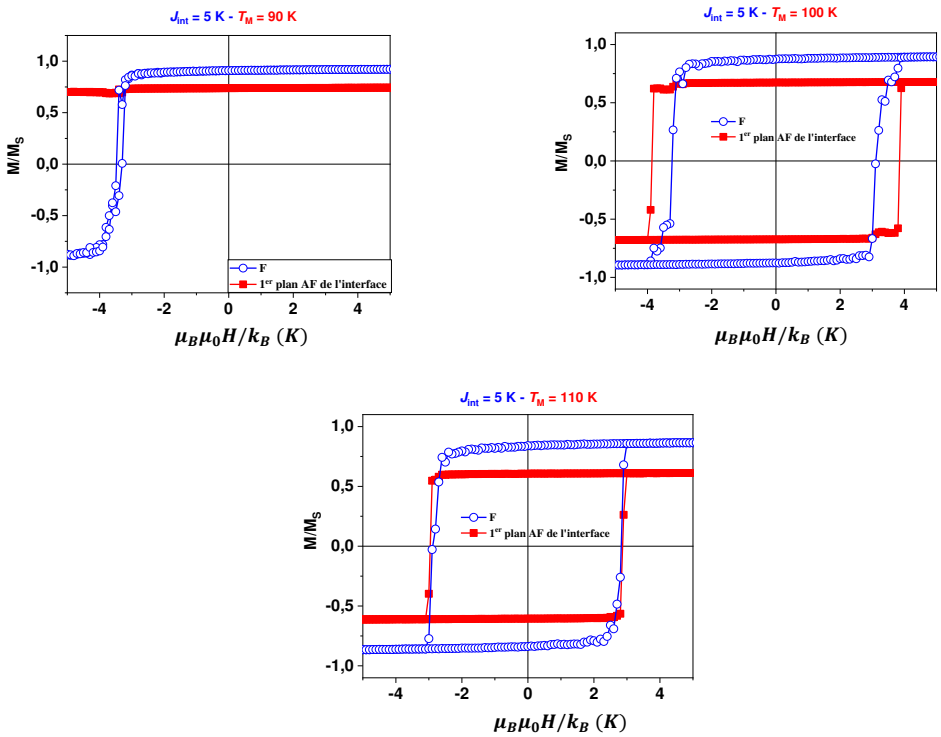


**Figure IV.30** : *Cycles d'hystérésis de la couche F et du 1er plan de la couche AF au voisinage de $T_{pic}$ = 100 K pour $J_{int}$= 5 K ($J_2^{AF}$ = 0,5 $J_1^{AF}$ ).*

### IV.5.2.3.b $J_2^{AF}$ = 0,6 $J_1^{AF}$

Sur la figure IV.31 nous présentons l'évolution de $H_C$ et $H_E$ en fonction de $T_M$ pour $J_2^{AF}$ = 0,6 $J_1^{AF}$. On retrouve les mêmes comportements que pour $J_2^{AF}$ = 0,5 $J_1^{AF}$, mais avec des valeurs de $H_E$ plus faibles, quel que soit la valeur de $J_{int}$, car les moments du premier plan AF (plan interfacial) sont plus hors du plan *Oxy* (figure IV.19). Ceci explique également pourquoi la couche AF est moins stable ($T_{pic}$ ($J_2^{AF}$ = 0,6 $J_1^{AF}$ ) < $T_{pic}$ ($J_2^{AF}$ = 0,5 $J_1^{AF}$ )).

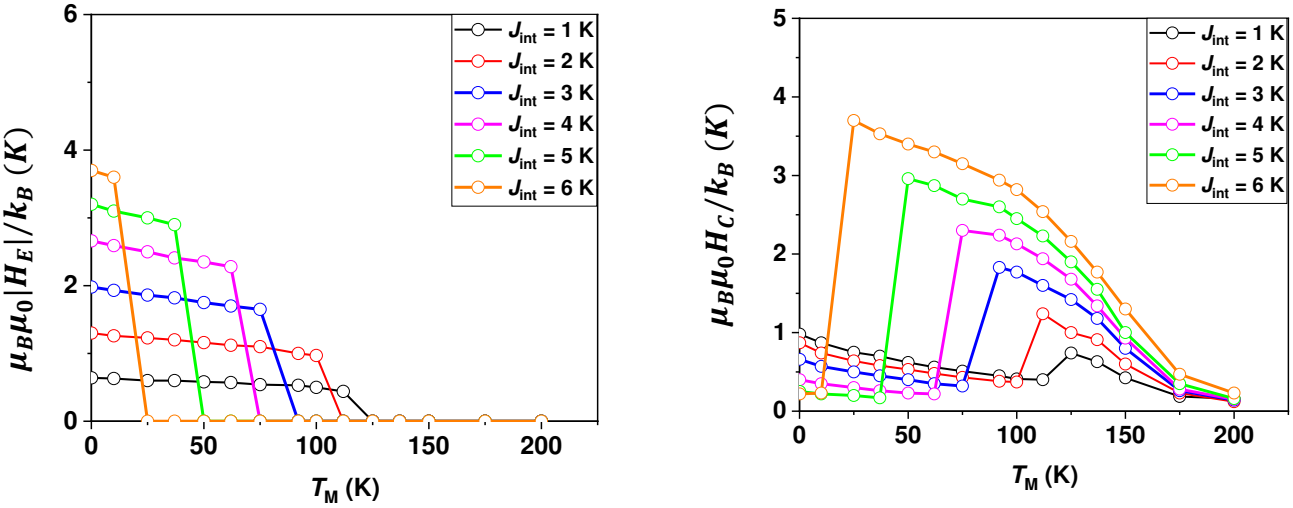


**Figure IV.31** : *Variation de $H_E$ et $H_C$ en fonction de $T_M$ pour différentes valeurs de $J_{int}$ ($J_2^{AF} = 0{,}6\, J_1^{AF}$).*

# IV.6 Résultats sur les nanoplots F/AF sans joint de grains

Afin de mieux comprendre l'effet des joints de grains sur les propriétés d'anisotropie d'échange et sur les configurations magnétiques à basse température, nous avons généré un nanoplot de structure cubique centrée sans joint de grains (monocristal CC). Le nanoplot est toujours constitué de deux plans F et quatre plans AF. La figure IV.32 montre un plan atomique. Les cycles d'hystérésis sont simulés à $T_M = 0{,}1$ K après un refroidissement sous champ positif $\frac{\mu_B\mu_0 H_{\mathrm{ref}}}{k_B} = 1$ K ($\mu_0 H_{\mathrm{ref}} = 1{,}49$ T) en partant de $T_0 = 800$ K (largement supérieur à $T_C$). Tout d'abord nous présentons l'effet de $J_2^{AF}$ sur les configurations à $T_f = 0{,}1$ K, c'est-à-dire au début du cycle d'hystérésis. Ensuite, nous examinons l'effet de $J_{int}$ et de la température sur le champ d'échange $H_E$ et le champ coercitif $H_C$. Nos résultats sont comparés à ceux obtenus pour le nanoplot contenant des joints de grains.

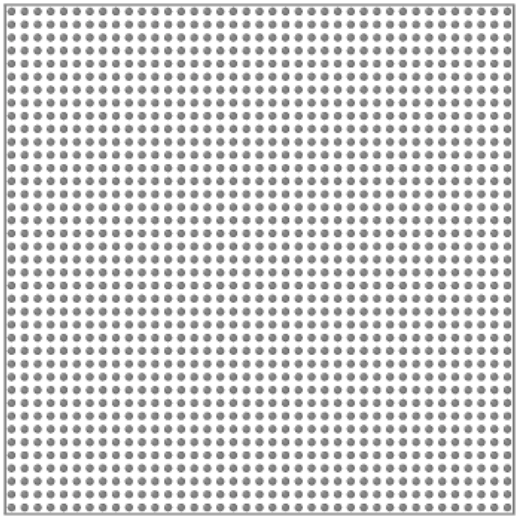

**Figure IV.32** : *Plan atomique dans les couches de structure cubique centrée sans joint de grains.*

## IV.6.1 Configurations magnétiques à $T_M$ = 0,1 K pour différentes valeurs de $J_2^{AF}$

• $J_{int}$ = 0 K

Sur la figure IV.33 nous montrons l'effet de $J_2^{AF}$ sur les configurations magnétiques du premier plan de la couche AF (plan interfacial) pour $J_{int}$ = 0 K.

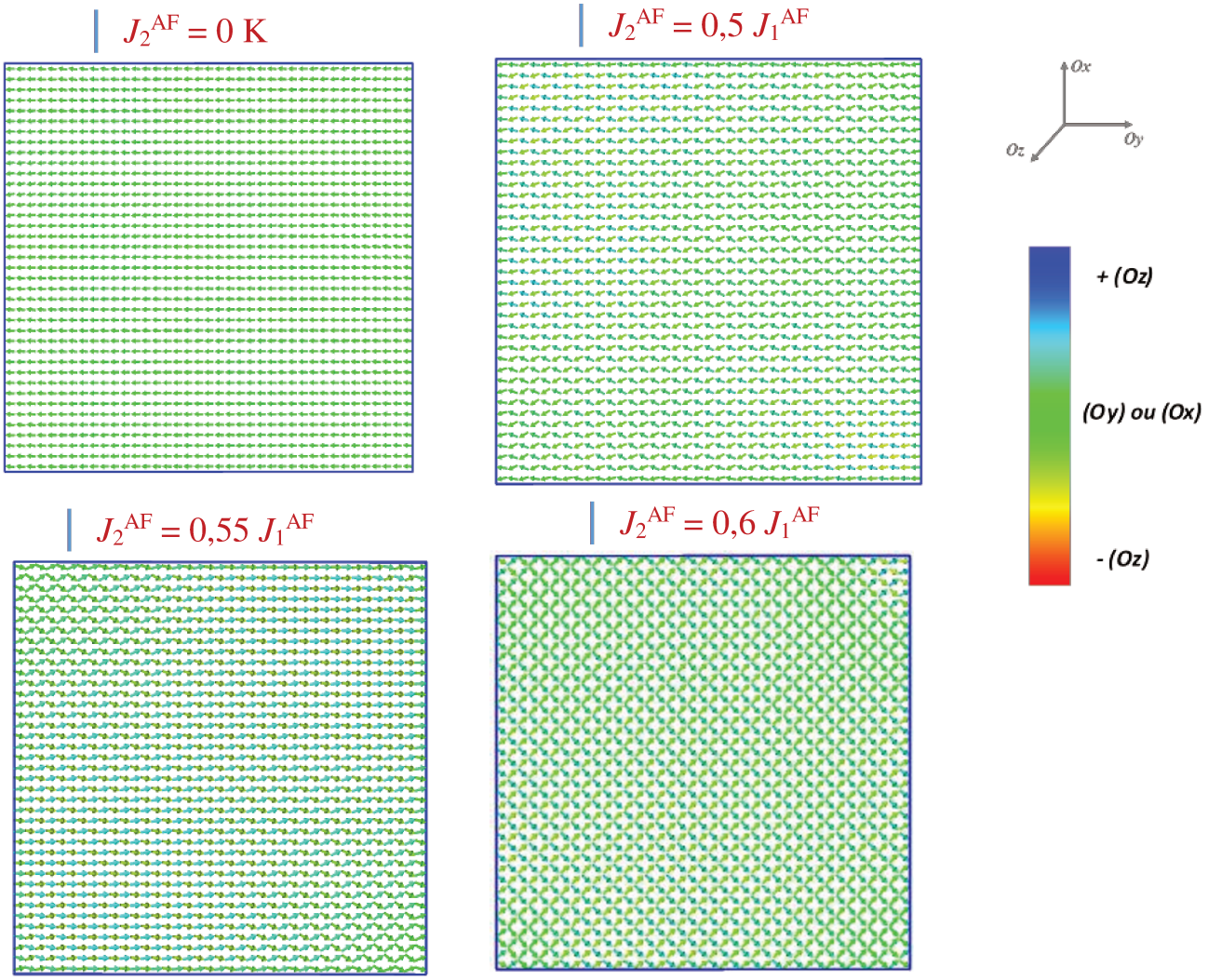


**Figure IV.33** : *Configurations des spins (les spins sont opposés aux moments magnétiques) du premier plan de la couche AF (plan interfacial) à $T_M$ = 0,1 K pour $J_{int}$ = 0 K et différentes valeurs de $J_2^{AF}$.*

- Pour $J_2^{AF}$ = 0 K, la configuration magnétique est la même qu'avec les joints de grains comme attendu puisqu'il n'y a pas de frustration.

- pour $0{,}5\ J_1^{AF} \leq J_2^{AF} \leq 0{,}6\ J_1^{AF}$, les moments magnétiques ne sont plus colinéaires et ne sont pas contenus dans le plan atomique en raison de la compétition entre $J_2^{AF}$ et $J_1^{AF}$. Par contre,

contrairement au cas avec joints de grains, la configuration magnétique est régulière (avec quelques perturbations dues aux effets de bords) et ne contient qu'un seul domaine. Il est à noter que la configuration stable du modèle d'Heisenberg frustré dans le réseau CC infini est toujours colinéaire[10]. La non colinéarité des moments magnétiques est ici due aux effets de surface.

Il est à noter que pour $J_2^{AF} = 0{,}6\, J_1^{AF}$, les moments du second plan de la couche AF (figure IV.34) sont beaucoup moins perturbés qu'en présence de joints de grains (figure IV.20). Par contre, comme avec les joints de grains, le dernier plan de la couche AF présente la même configuration que le plan interfacial.

<u>Nous pouvons donc dire que les joints de grains sont responsables de l'apparition de domaines magnétiques dans le 1er plan de la couche AF lorsqu'il y a de la frustration.</u>

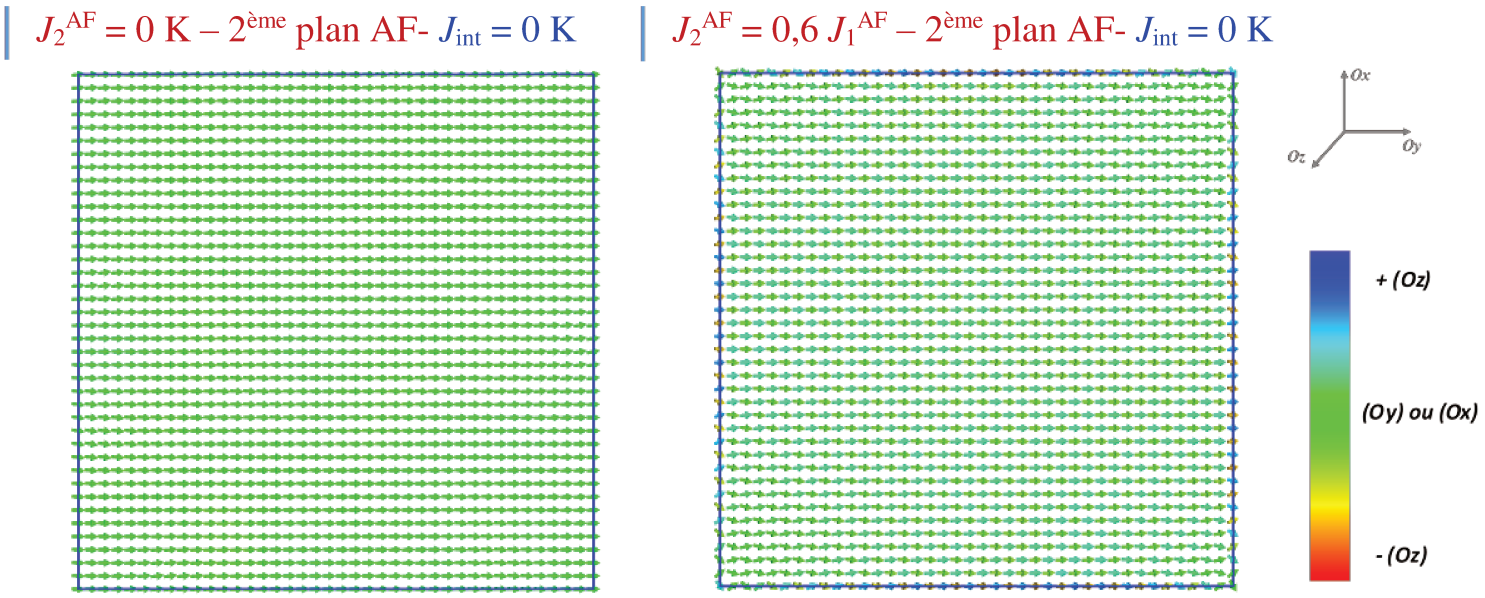


**Figure IV.34** : *Configurations des spins (les spins sont opposés aux moments magnétiques) du second plan de la couche AF à $T_M$ = 0,1 K pour $J_{int}$ = 0 K et différentes valeurs de $J_2^{AF}$.*

- **$J_{int} \neq 0$ K**

Nous montrons l'effet de $J_2^{AF}$ sur les configurations magnétiques du premier plan (plan interfacial) de la couche AF (figure IV.35) et du deuxième plan AF (figure IV.36) pour $J_{int}$ = 20 K. Le code couleur représente la composante des spins suivant l'axe perpendiculaire au plan (axe *Oz*). On remarque que les configurations magnétiques sont similaires à celles observées lorsque $J_{int}$ = 0 K.

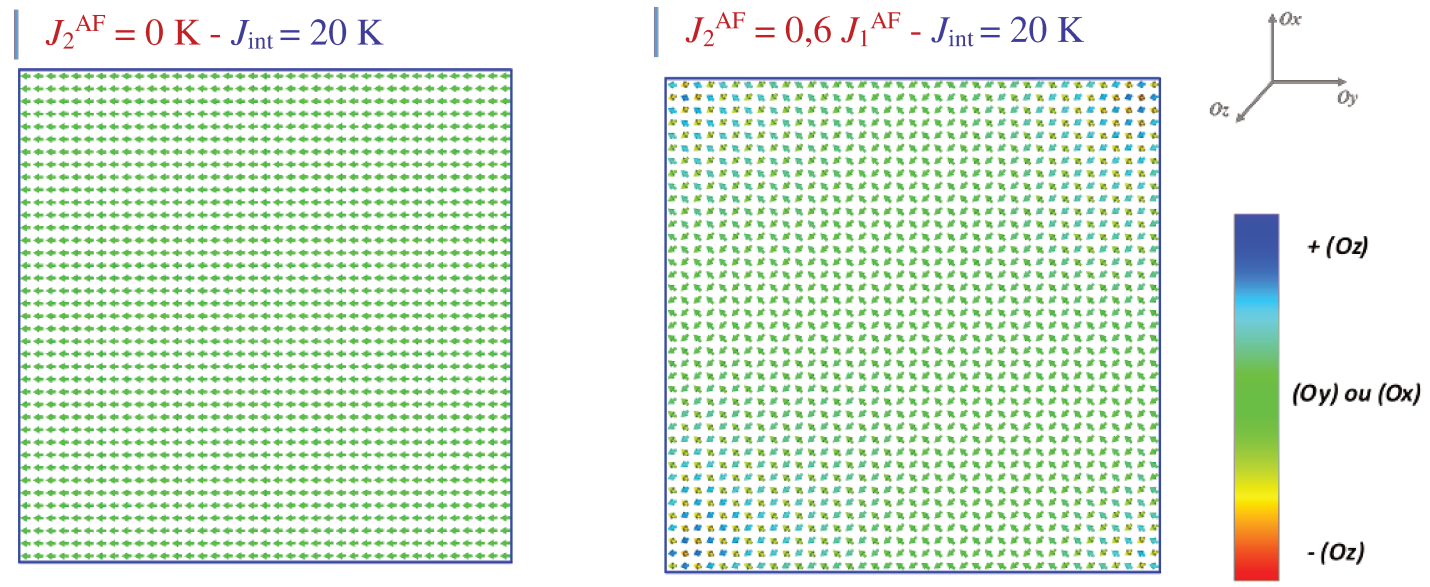


**Figure IV.35** : *Configurations des spins (les spins sont opposés aux moments magnétiques) du premier plan de la couche AF (plan interfacial) à $T_M$ = 0,1 K pour $J_{int}$ = 20 K et différentes valeurs de $J_2^{AF}$.*

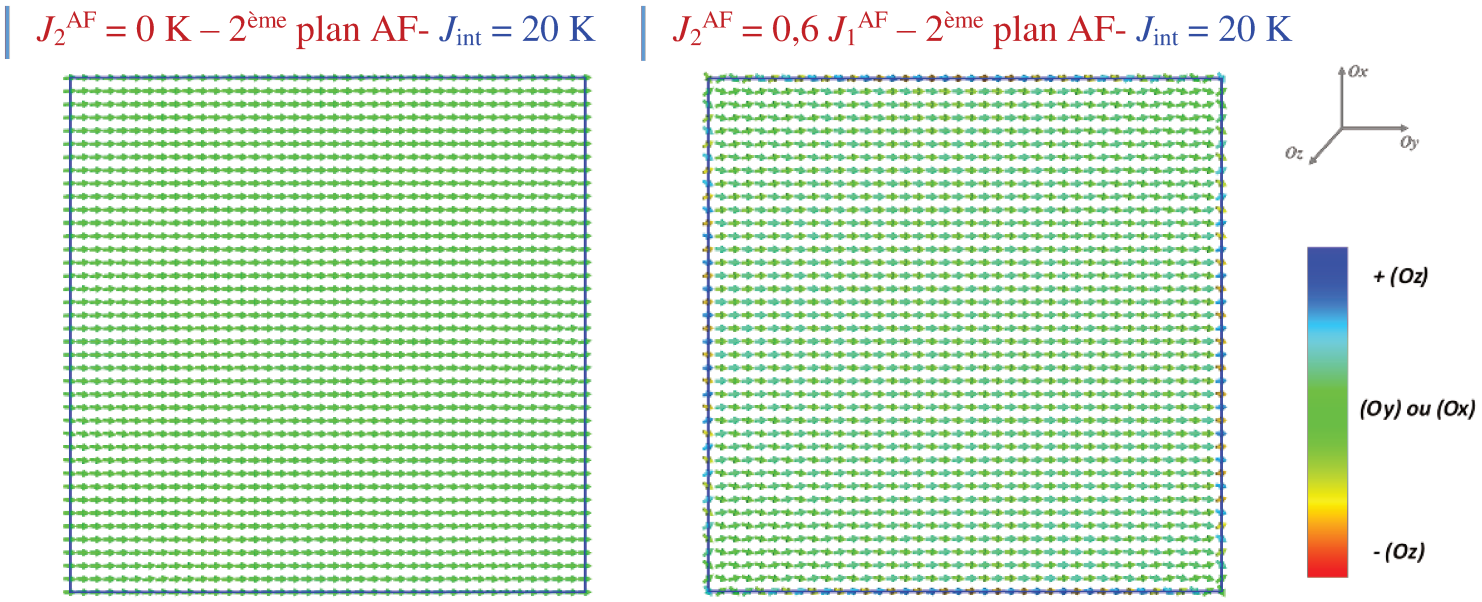


**Figure IV.36** : *Configurations des spins (les spins sont opposés aux moments magnétiques) du second plan de la couche AF à $T_M$ = 0,1 K pour $J_{int}$ = 20 K et différentes valeurs de $J_2^{AF}$.*

## IV.6.2 Effet de $J_{int}$ sur $H_E$ et $H_C$ pour différentes valeurs de $J_2^{AF}$ ($T_M$= 0,1 K) en comparaison avec le nanoplot contenant des joints de grains

Dans cette partie, nous présentons l'effet de $J_{int}$ sur $H_E$ et $H_C$ à $T_M = 0{,}1$ K pour différentes valeurs de $J_2^{AF}$ en comparaison avec le nanoplot contenant des joints de grains. Les résultats de cette étude sont présentés sur la figure IV.37.

- $J_2^{AF}$ =0 K

On trouve les mêmes résultats que ceux du nanoplot avec joints de grains. C'est logique car la configuration magnétique du premier plan de la couche AF au début du cycle d'hystérésis est la même (moments colinéaires).

- $J_2^{AF} = 0{,}6\ J_1^{AF}$

On trouve quasiment les mêmes valeurs de $H_C$ et $|H_E|$ (tant que la couche AF ne se retourne pas) que dans le cas du nanoplot avec joints de grains. La couche AF se retourne pour $J_{int} \approx 6$ K dans le cas du nanoplot sans joint de grains alors qu'elle se retourne pour $J_{int} \approx 7$ K lorsqu'il y a des joints de grains. On peut donc en conclure que les joints de grains rendent la couche AF légèrement plus stable lorsqu'il y a de la frustration.

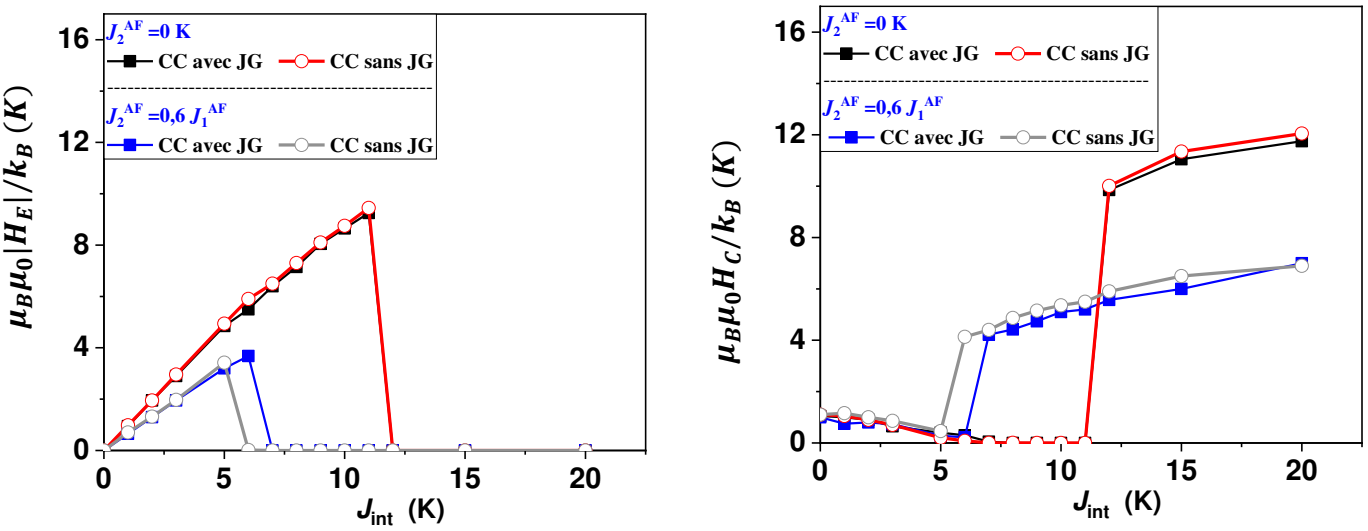


**Figure IV.37** : *Variation de $H_E$ et $H_C$ en fonction de $J_{int}$ pour deux valeurs de $J_2^{AF}$ en comparaison avec les valeurs du nanoplot avec joints de grains ($T_M$ = 0,1 K).*

## IV.6.3 *Effet de la température sur $H_E$ et $H_C$ pour différentes valeurs de $J_2^{AF}$ et $J_{int}$ en comparaison avec le nanoplot avec joints de grains*

On a vu ci-dessus comment sont modifiées les configurations magnétiques à l'interface et les propriétés d'anisotropie d'échange à basse température lorsqu'il n'y a pas de joint de grains.

Il est également intéressant d'étudier cet effet lorsqu'on augmente la température pour différentes valeurs de $J_{\text{int}}$ et de $J_2^{\text{AF}}$. Ensuite nous comparons les résultats à ceux du nanoplot avec joints de grains.

- **$J_2^{\text{AF}}$ =0**

On trouve quasiment les mêmes résultats que ceux du nanoplot avec joints de grains (les résultats ne sont présentés pas ici). C'est logique car il n'y a pas de frustration dans les deux cas pour cette valeur de $J_2^{\text{AF}}$ (figures IV.16 et IV.19).

- **$J_2^{\text{AF}}$ = 0,5 $J_1^{\text{AF}}$**

Pour cette valeur de $J_2^{\text{AF}}$ les configurations magnétiques du premier plan de la couche AF ne sont pas les mêmes avec ou sans joints de grains (figures IV.19, IV.23, IV.33 et IV.35). Les résultats de cette étude sont présentés (figure IV.38) pour $J_{\text{int}}$ = 2 et 4 K. On constate que :

- tant que la couche AF ne se retourne pas les valeurs de $H_C$ et $|H_E|$ sont légèrement inférieures dans le cas du nanoplot avec joints de grains. Ceci est attribué à la présence de domaines magnétiques dans le plan interfacial de la couche AF ;
- pour $J_{\text{int}}$ = 2 K : avec JG, $H_E$ s'annule vers 150 K alors que sans JG, $H_E$ s'annule vers 162 K ;
- pour $J_{\text{int}}$ = 4 K : avec JG, $H_E$ s'annule vers 112 K alors que sans JG, $H_E$ s'annule vers 125 K.

Les joints de grains semblent donc rendre la couche AF légèrement moins stable à température non nulle contrairement à 0 K.

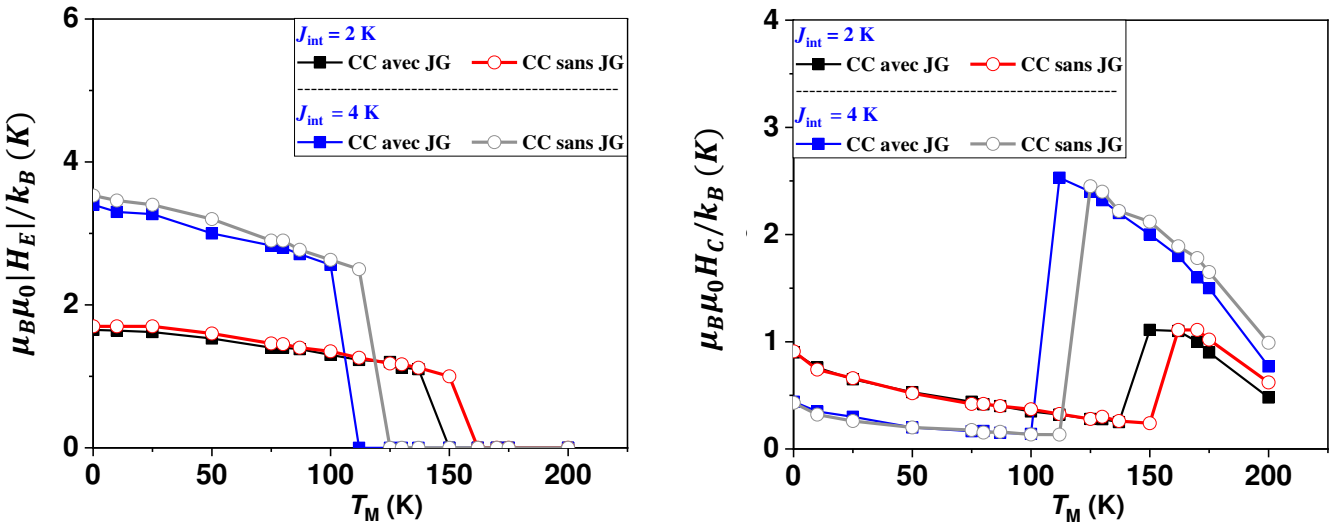


**Figure IV.38** : *Variation de $H_E$ et $H_C$ en fonction de $T_M$ pour $J_2^{\text{AF}}$ = 0,5 $J_1^{\text{AF}}$ et deux valeurs de $J_{int}$ en comparaison avec les valeurs du nanoplot avec joints de grains.*

• $J_2^{AF} = 0{,}6\, J_1^{AF}$

Les résultats sont similaires à ceux obtenus pour $J_2^{AF} = 0{,}5\, J_1^{AF}$ (figure IV.39). On remarque tout de même que la température à laquelle se retourne la couche AF (température de blocage) diminue par rapport au cas précédent.

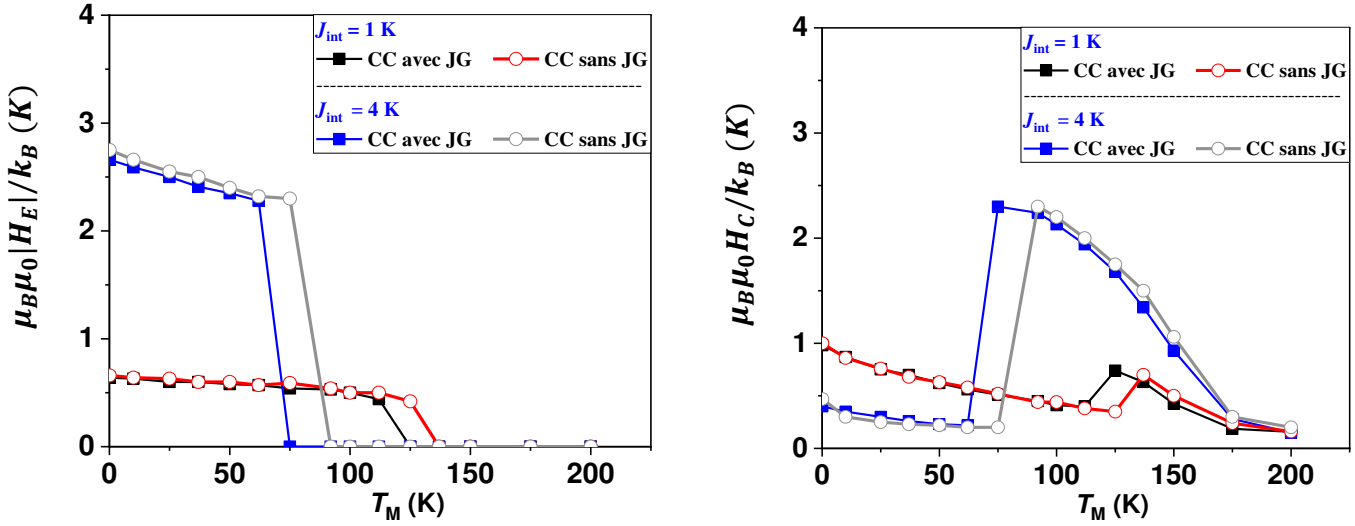


**Figure IV.39** : *Variation de $H_E$ et $H_C$ en fonction de $T_M$ pour $J_2^{AF} = 0{,}6\, J_1^{AF}$ et deux valeurs de $J_{int}$ en comparaison avec les valeurs du nanoplot avec joints de grains.*

# IV.7 Influence de l'épaisseur de la couche AF (nanoplots avec joints de grains)

Dans cette partie, nous étudions l'effet de $J_{int}$ et de la température pour différentes valeurs de $J_2^{AF}$ et différentes épaisseurs de la couche AF. L'intérêt d'augmenter $e_{AF}$ est de pouvoir augmenter le couplage $J_{int}$, ce qui est plus réaliste, peut modifier la configuration magnétique du premier plan de la couche AF et entrainer des réarrangements des moments magnétiques de ce plan lors du retournement de la couche F.

## IV.7.1 Effet de $J_{int}$ pour différentes valeurs de $J_2^{AF}$ et de $e_{AF}$ à $T_M$ = 0,1 K

Nous étudions l'effet de $J_{int}$ sur les courbes $H_C$ et $H_E$ pour trois épaisseurs de la couche AF (4, 14, 32 plans) et pour $J_2^{AF}$ = 0 K et 0,6 $J_1^{AF}$ .

• $J_2^{AF}$ =0

Les résultats obtenus pour $J_2^{AF}$ = 0 K sont présentés sur la figure IV.40.

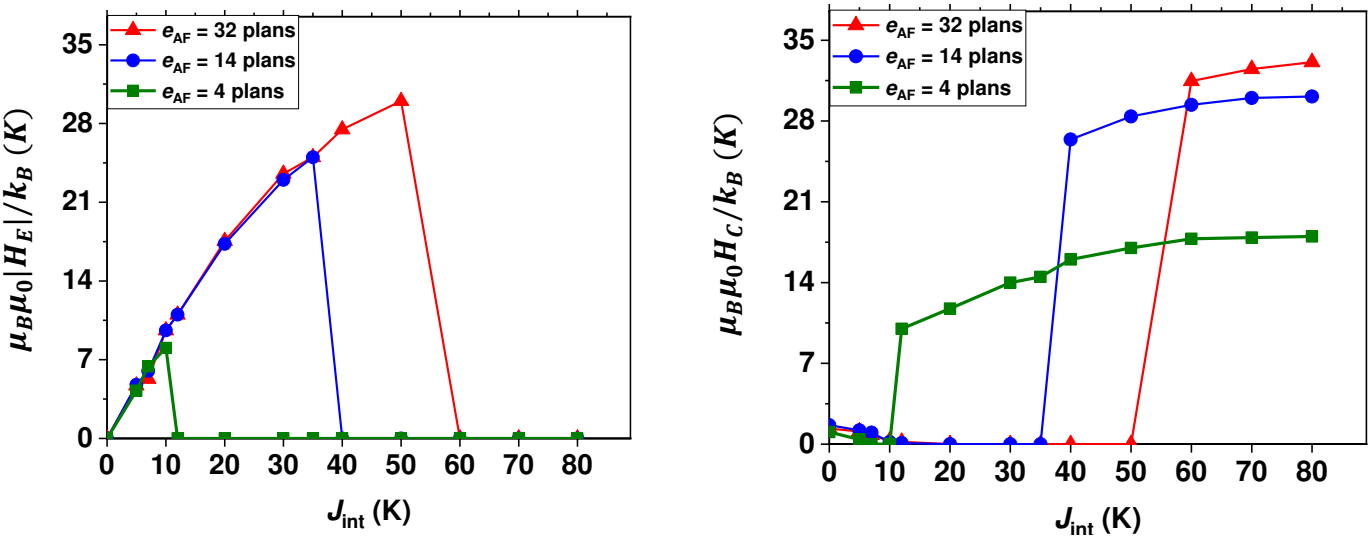


**Figure IV.40** : *Variation de $H_E$ et $H_C$ en fonction de $J_{int}$ pour différentes valeurs de $e_{AF}$ pour $J_2^{AF}$ =0 K et $T_M$ = 0,1 K.*

- pour les faibles valeurs de $J_{int}$ (c'est-à-dire tant que la couche AF ne se retourne pas), $H_E$ augmente et sa valeur est indépendante de $e_{AF}$. Il est important de noter que nous n'observons pas ici de dépendance vis-à-vis de $e_{AF}$ comme c'est le cas dans certaines études expérimentales [52,56,61] ou numériques [80]. Ceci s'explique par le fait que les domaines AF sont ici confinés au niveau de l'interface et ne s'étendent pas dans toute la couche AF.

- lorsque $J_{int}$ atteint une valeur critique qui augmente avec $e_{AF}$ (12, 40 et 60 K pour $e_{AF}$ = 4, 14 et 32 plans, respectivement) $H_E$ s'annule en raison du retournement de la couche AF. Cette valeur critique de $J_{int}$ est en bon accord avec celle du modèle Meiklejohn et Bean ($J_{int}^c = \frac{N_{AF}D_{AF}S_{AF}}{Z_{F-AF}S_F}$) pour $e_{AF}$ = 4 et 14 plans. Par contre, pour $e_{AF}$ = 32 plans, la valeur obtenue par simulation est nettement plus petite que la valeur du modèle Meiklejohn et Bean (60 K par rapport à 98 K). En fait, pour $J_{int} \geq 60$ K, la couche AF se retourne totalement d'une manière non uniforme (Figure IV.41). Le retournement s'amorce au niveau du plan interfacial puis se propage dans toute la couche AF. Il est important de noter que le modèle théorique est basé sur l'hypothèse d'une rotation uniforme de chacune des couches. Pour 40K $\leq J_{int} <$ 60 K, on observe un réarrangement des premiers plans proches de l'interface de la couche AF (rotation d'environ 90° des moments des 9 premiers plans) sans qu'il y ait retournement total (figure IV.42). Le code couleur sur la figure IV.42 représente la composante des spins suivant l'axe (*Oy*).

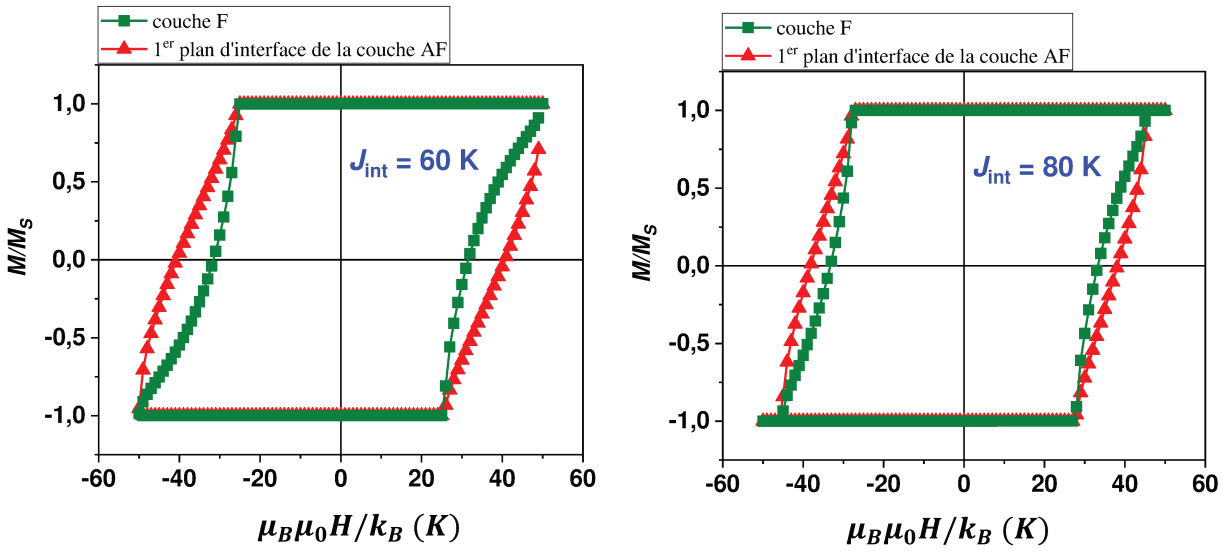


**Figure IV.41** : *Cycles d'hystérésis de la couche F et du 1er plan de la couche AF (plan interfacial) pour $J_{int}$ = 60 et 80 K et $e_{AF}$ = 32 plans ($T_M$ = 0,1 K).*

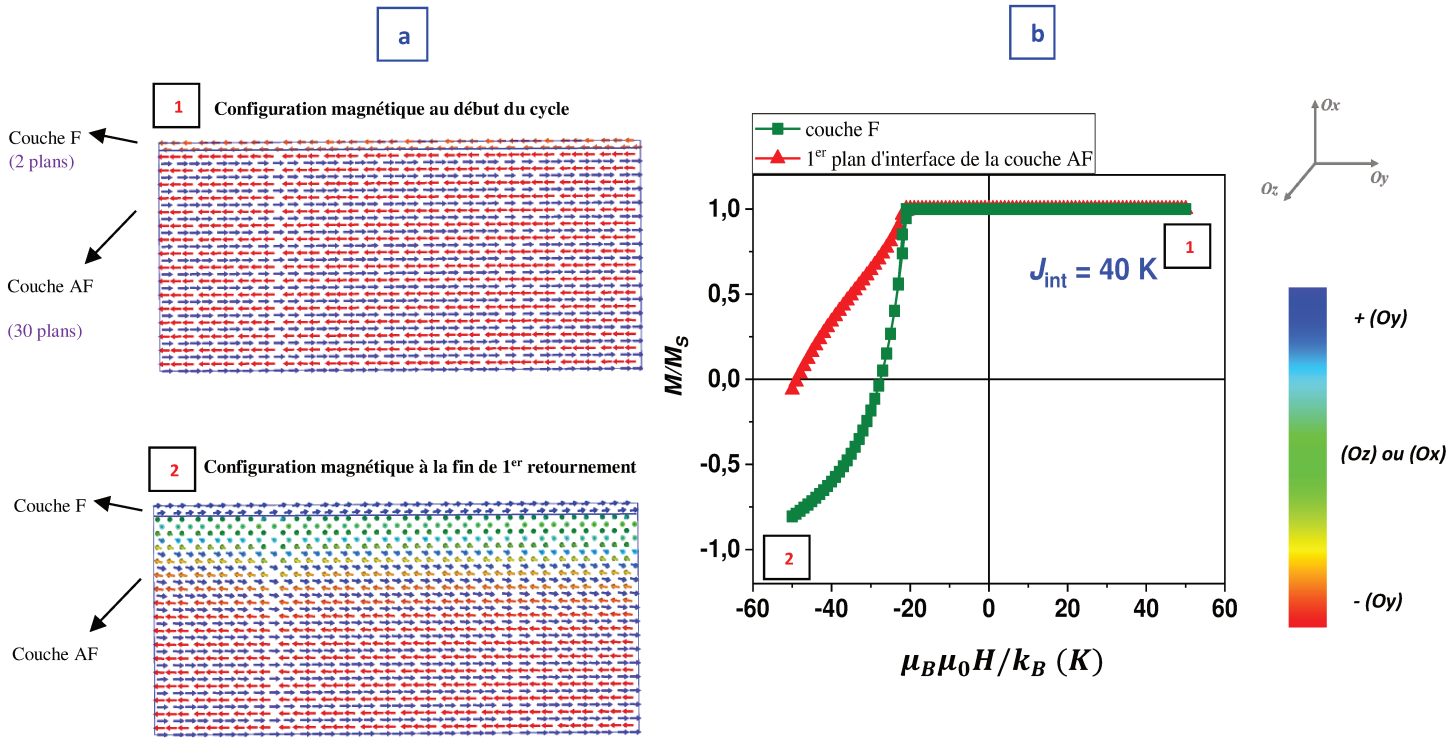


**Figure IV.42** : *(a) Configurations des spins du nanoplot au début et à la fin du cycle d'hystérésis (les spins sont opposés aux moments magnétiques) et (b) cycles d'hystérésis de la couche F et du 1er plan de la couche AF (plan interfacial) pour $e_{AF}$ = 32 plans et $J_{int}$ = 40 K ($J_2^{AF}$ =0 K).*

- comme dans les études précédentes, l'annulation de $H_E$ s'accompagne d'une augmentation de $H_C$.

• $J_2^{AF} = 0{,}6\, J_1^{AF}$

Ensuite nous avons étudié le cas $J_2^{AF} = 0{,}6\, J_1^{AF}$, les résultats obtenus sont présentés figure IV.43.

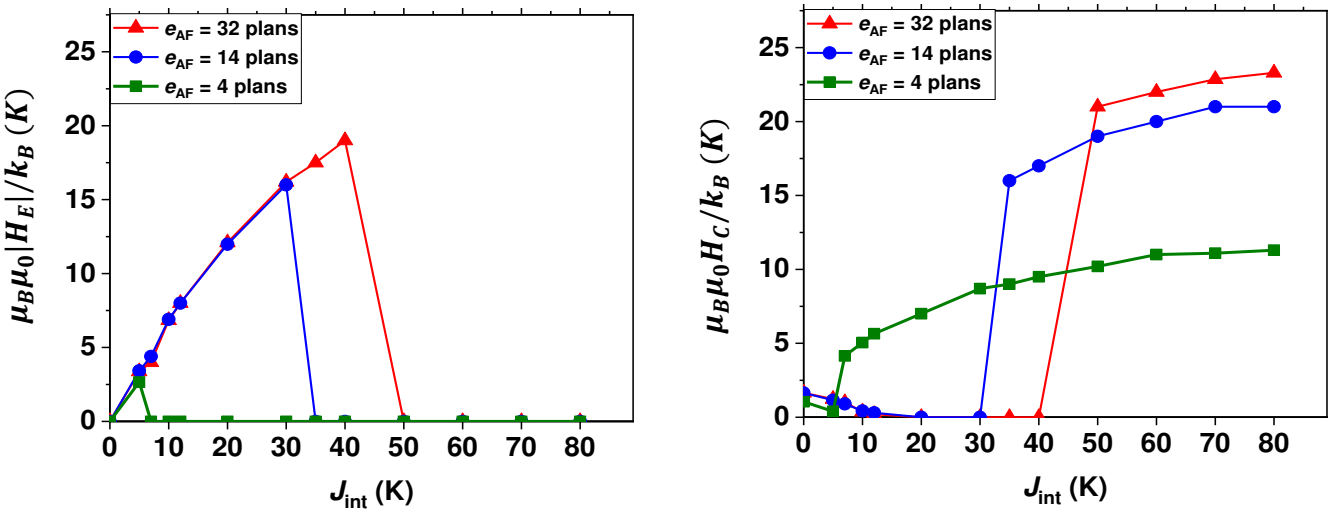


**Figure IV.43** : *Variation de $H_E$ et $H_C$ en fonction de $J_{int}$ pour $J_2^{AF} = 0{,}6\, J_1^{AF}$ et différentes valeurs de $e_{AF}$ ($T_M$ = 0,1 K).*

On trouve des résultats similaires à ceux obtenus avec $J_2^{AF} = 0$ K, mais avec des valeurs de $H_E$ plus faibles. Quelle que soit l'épaisseur $e_{AF}$, la couche AF est moins stable en présence de $J_2^{AF} < 0$.

## IV.7.2 Effet de la température pour plusieurs valeurs de $J_2^{AF}$, de $J_{int}$ et de $e_{AF}$

Dans cette partie, nous examinons l'effet de la température sur $H_E$ pour $e_{AF}$ = 4 et 14 plans, $J_2^{AF} = 0$ K et $0{,}6\, J_1^{AF}$, et plusieurs valeurs de $J_{int}$. Les résultats sont reportés sur la figure IV.44.

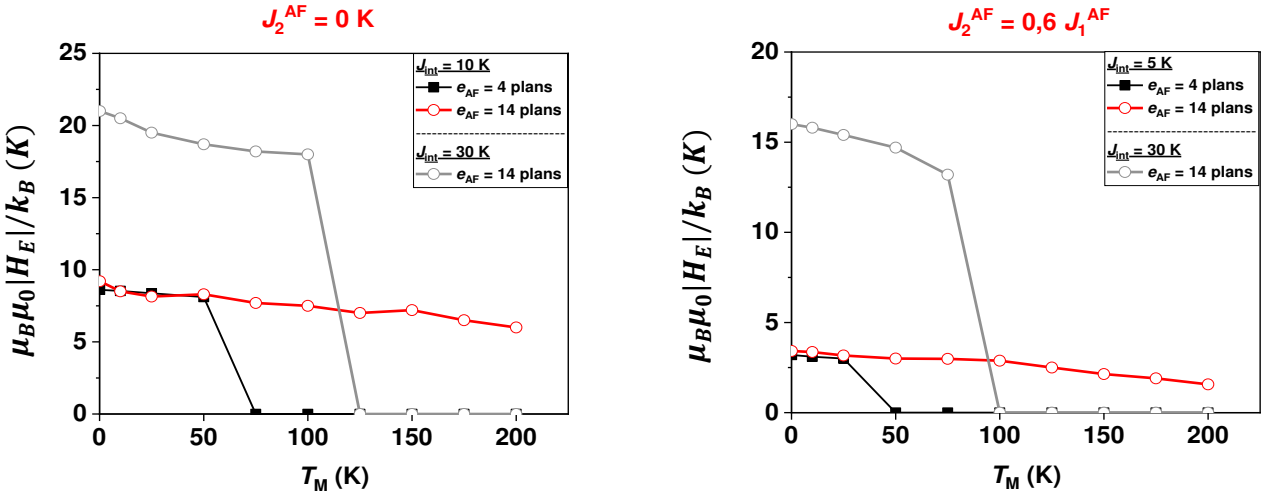


**Figure IV.44** : *Variation de $H_E$ en fonction de la température $T_M$ lorsque $J_2^{AF} = 0$ (à gauche) et $J_2^{AF} = 0{,}6\, J_1^{AF}$ (à droite) pour $e_{AF}$ = 4 et 14 plans et différentes valeurs de $J_{int}$.*

**Pour $J_2^{AF}$ =0 :**

- $J_{int}$ = 10 K

- on remarque que contrairement au cas $e_{AF}$ = 4 plans, la couche AF contenant 14 plans ne se retourne pas dans la gamme de température étudiée. C'est logique si l'on considère que la température de blocage est proportionnelle à $e_{AF}$.

- $J_{int}$ = 30 K

- la couche AF avec 14 plans se retourne vers 125 K ce qui montre clairement que l'augmentation de $J_{int}$ diminue la barrière d'énergie à franchir et donc la température de blocage de la couche AF. Il est à noter que ce résultat avait déjà été observé dans le cadre du modèle granulaire.

**Pour $J_2^{AF}$ = 0,6 $J_1^{AF}$ :**

Les effets de $J_2^{AF}$ sont qualitativement les mêmes que pour $e_{AF}$ = 4 plans à savoir une diminution de $H_E$ à basse température et une diminution de la stabilité de la couche AF lorsque $|J_2^{AF}|$ augmente. Pour $J_{int}$ = 30 K, on notera tout de même un changement de courbure dans la décroissance de $H_E$ à basse température par rapport à $J_2^{AF}$ = 0.

## IV.8 Influence de l'interdiffusion à l'interface F/AF (nanoplots avec joints de grains)

Dans cette partie nous étudions l'effet de l'interdiffusion à l'interface F/AF sur les propriétés d'anisotropie d'échange. Pour cela, nous supposons que le premier plan de la couche AF est un plan mixte qui contient des atomes F et AF (figure IV.45). Dans la suite nous étudions l'effet du pourcentage d'atomes F dans le plan mixte $x_F$ sur les configurations magnétiques à l'interface et sur les courbes $H_C$ et $H_E$.

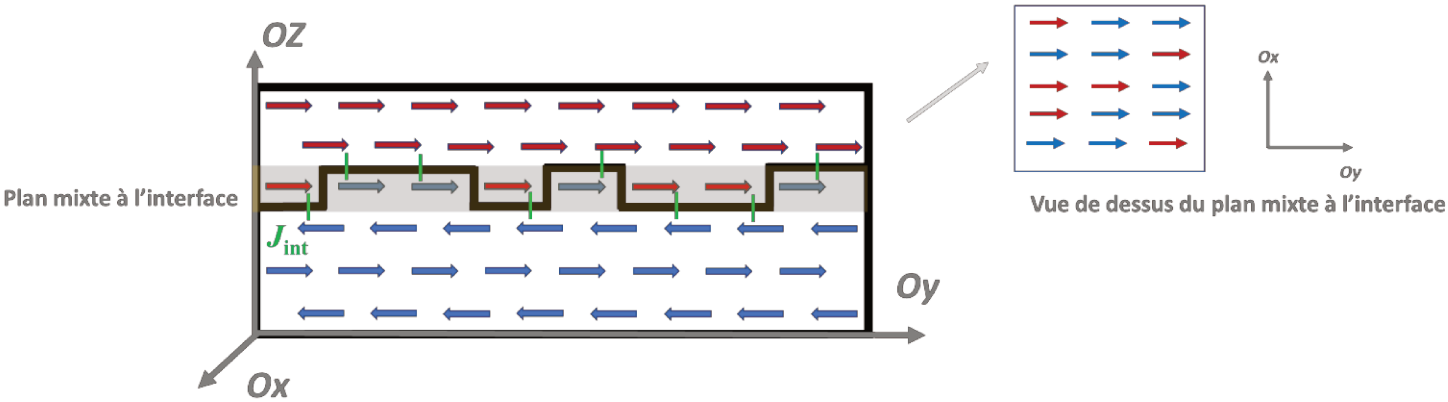


**Figure IV.45** : *Schéma représentant un nanoplot F/AF à l'échelle atomique en présence d'un plan mixte, les flèches rouges représentent les moments F et les flèches bleues représentent les moments AF (l'orientation des moments ne correspond pas nécessairement aux orientations des moments magnétiques dans l'état fondamental).*

## IV.8.1 Effet de $x_F$ sur les configurations magnétiques à basse température

Tout d'abord, il est important de préciser, qu'en présence d'un champ magnétique appliqué lors du refroidissement, le sens des moments AF du plan mixte et du second plan de la couche AF dépend de $x_F$ comme nous l'expliquons ci-dessous. Puisque ces moments AF sont directement couplés aux moments F d'interface, cela aura un effet important sur le champ d'échange.

Sur la figure IV.46, nous présentons les configurations magnétiques du plan mixte et du 1$^{er}$ plan F simulées à $T_f$ = 0,1 K après un recuit sous champ positif ($H_{ref}$) pour $J_2^{AF}$ = 0 K, différentes valeurs de $x_F$ (0%, 20% et 50%) et $J_{int}$ = 20 K.

- **$x_F$ = 0% (figure IV.46.a)**

Dans ce cas, le premier plan de la couche AF ne contient que des moments AF et le moment magnétique résultant de la couche AF est nul. Par conséquent, $H_{ref}$ n'a pas d'effet sur la couche AF et c'est le couplage interfacial $J_{int} > 0$ qui est responsable de l'orientation des moments AF de ce plan, c'est-à-dire la même direction que les moments F.

- **$x_F$ = 20% (figure IV.46.b)**

Dans ce cas, le moment magnétique résultant de la couche AF est faible (0,2 $n_{AF}\, m_{AF}$ où $n_{AF}$ = 1461 est le nombre d'atomes par plan et $m_{AF}$ le moment magnétique atomique AF). L'effet de $H_{ref}$ sur la couche AF est alors dominé par l'effet de $J_{int}$ qui tend à orienter les moments AF du plan mixte parallèlement aux moments F.

- **$x_F$ = 50% (figure IV.46.c)**

Dans ce cas, le moment magnétique résultant de la couche AF est égal à 0,5 $n_{AF}\, m_{AF}$ et l'effet de $H_{ref}$ qui tend à orienter le moment résultant de la couche AF suivant sa direction n'est plus négligeable. Il existe alors une compétition entre $H_{ref}$ et $J_{int}$ (qui tend à orienter les moments AF du plan mixte dans le sens contraire de $H_{ref}$). Nos résultats de simulation montrent que $H_{ref}$ l'emporte. Toutefois, suite à cette compétition, certains moments de la couche F ou du plan mixte sont légèrement désalignés.

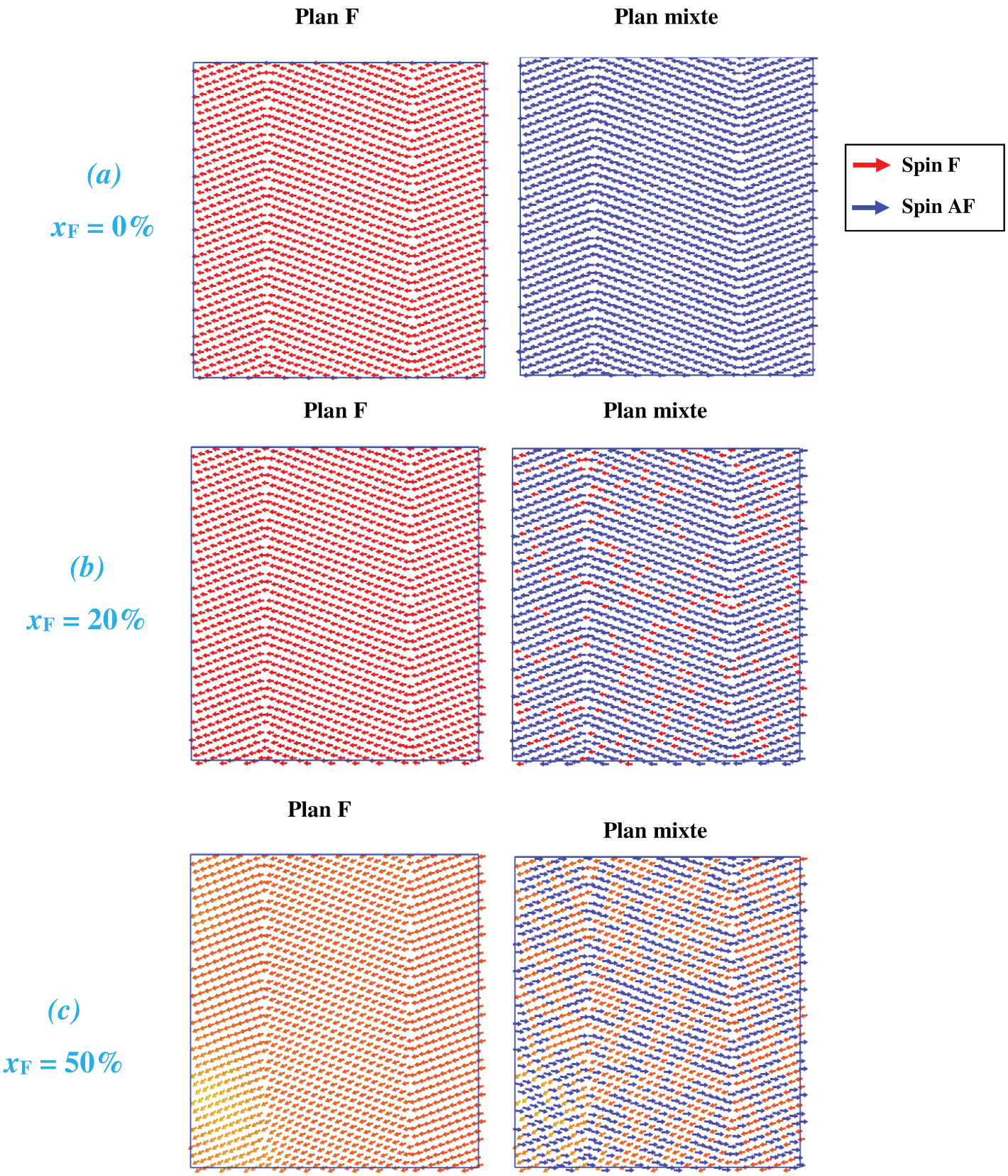


**Figure IV.46** : *Configurations des spins (les spins sont opposés aux moments magnétiques) du plan interfacial de la couche F et du plan mixte (1^er^ plan de la couche AF) à $T_M$ = 0,1 K pour $J_2^{AF}$ =0 K et (a) $x_F$ = 0%, (b) $x_F$ = 20% et (c) $x_F$ = 50% ($J_{int}$ = 20 K).*

Sur la figure IV.47, nous présentons, les configurations magnétiques du plan mixte simulées à $T_f = 0{,}1$ K après un recuit sous champ positif ($H_{ref}$) pour $J_2^{AF} = 0{,}5\ J_1^{AF}$, pour différentes valeurs de $x_F$ (0%, 20% et 50%) et $J_{int} = 20$ K. Nous trouvons qualitativement les mêmes comportements que pour $J_2^{AF} = 0$ K. Plus précisément pour $x_F = 20\%$, l'effet de $H_{ref}$ sur la couche AF est dominé par l'effet de $J_{int}$, pour cela on trouve que les moments AF du plan mixte sont parallèles aux moments F. Par contre pour $x_F = 50\%$, l'effet de $H_{ref}$ l'emporte et donc les moments AF du plan mixte sont presque antiparallèles aux moments F.

On voit clairement, que la non-colinéarité des moments à l'intérieur d'un grain est plus faible que lorsqu'il n'y avait pas d'interdiffusion.

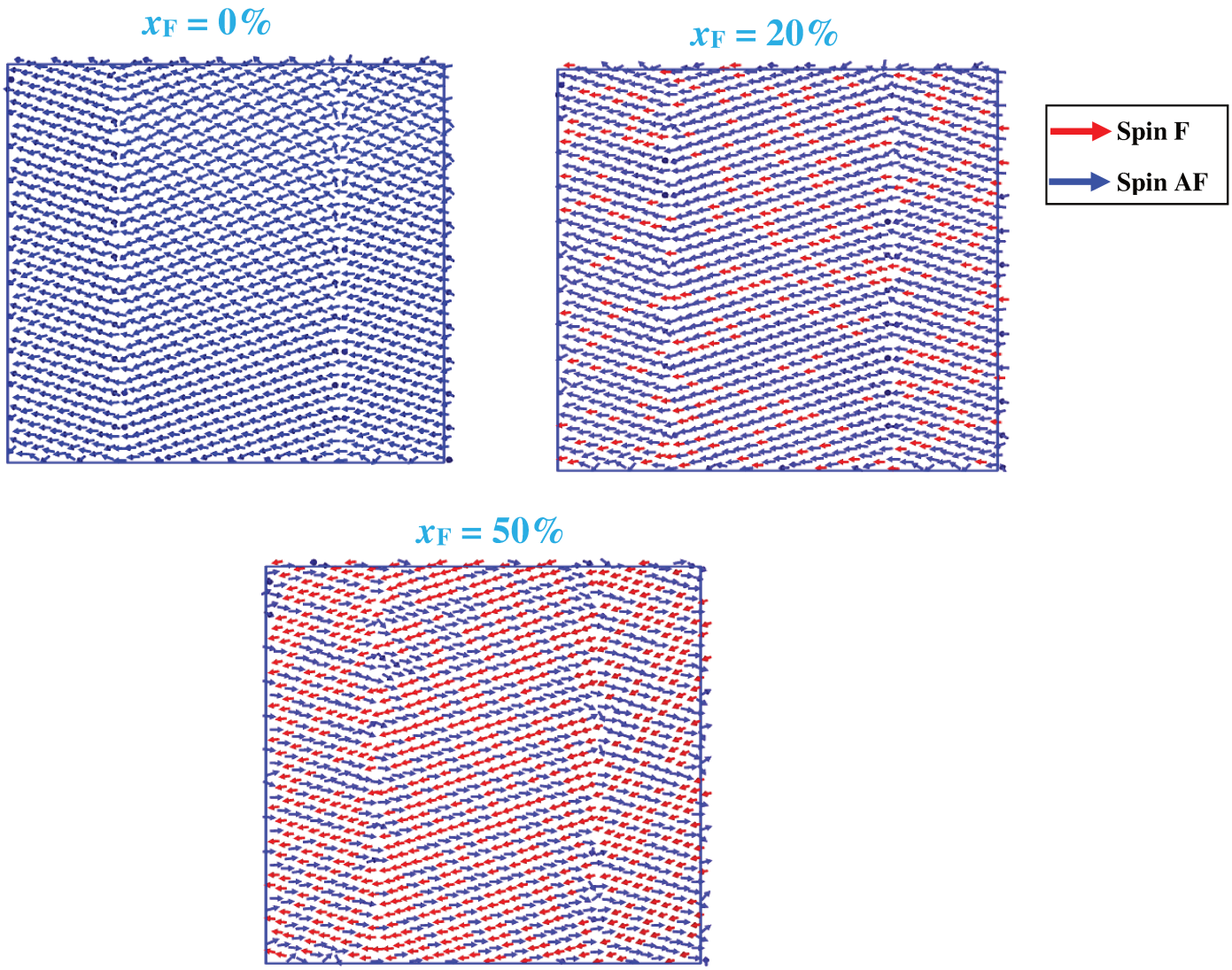


**Figure IV.47** : *Configurations des spins (les spins sont opposés aux moments magnétiques) du plan mixte (1^er^ plan de la couche AF) à $T_M = 0{,}1$ K pour $J_2^{AF} = 0{,}5\ J_1^{AF}$, $x_F = 0\%$, 20% et 50% ($J_{int} = 20$ K). Les spins de la couche F sont vers la gauche.*

## IV.8.2 Effet de $J_{int}$ sur $H_E$ et $H_C$ pour différentes valeurs de $x_F$ et de $J_2^{AF}$ à $T_M = 0{,}1$ K

Dans cette partie, nous étudions l'effet de $J_{int}$ sur $H_E$ et $H_C$ à $T_M = 0{,}1$ K pour différentes valeurs de $x_F$ lorsque $J_2^{AF} = 0$ K et $J_2^{AF} = 0{,}5\, J_1^{AF}$. Les résultats obtenus pour $J_2^{AF} = 0$ K sont présentés sur la figure IV.48. Il est important de noter que lorsqu'il y a interdiffusion, ce sont les moments AF du plan mixte et ceux du 2ème plan de la couche AF (juste en dessous du plan mixte) qui contribue à $H_E$. Comme les moments AF du plan mixte sont antiparallèles à ceux du 2ème plan de la couche AF, les deux effets s'opposent. Plus précisément, pour $x_F = 20\%$, les moments AF du plan mixte donnent une contribution négative à $H_E$ (ils retiennent la couche F lors du 1er retournement) alors que les moments AF du 2ème plan de la couche AF donne une contribution positive (ils favorisent le second retournement de la couche F). Par contre, pour $x_F = 50\%$, c'est le contraire.

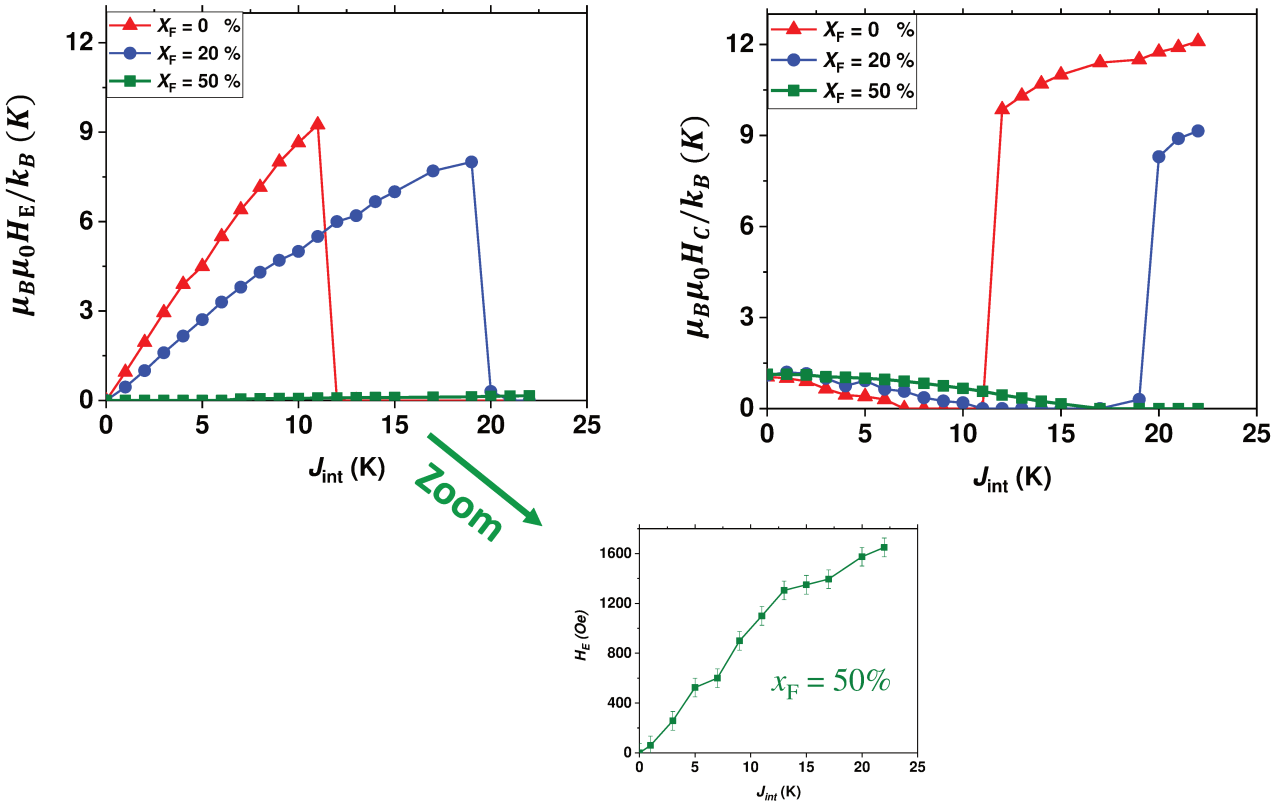


**Figure IV.48** : *Variation de $H_E$ et $H_C$ en fonction de $J_{int}$ pour $J_2^{AF} = 0$ K et différentes valeurs de $x_F$ ($T_M = 0{,}1$ K). L'incertitude sur $H_E$ est de l'ordre de 0,1 K.*

- **$x_F = 0\%$ et $x_F = 20\%$**

  - l'interdiffusion diminue la valeur de $H_E$ (tant que la couche AF ne se retourne pas) en raison de la contribution positive au champ d'échange des moments AF du 2ème plan AF ;

- la couche AF se retourne pour $J_{int} = 12$ K lorsque $x_F = 0\%$, alors qu'elle se retourne pour $J_{int} = 20$ K lorsque $x_F = 20\%$ (Figure IV.45). Donc la couche AF devient plus stable lorsque $x_F$ augmente.

Ces deux résultats peuvent s'expliquer par une diminution du couplage effectif à l'interface lorsqu'il y a de l'interdiffusion.

- **$x_F = 50\%$**

- le champ d'échange est très faible par rapport aux cas précédents car les deux effets qui s'opposent (celui des moments AF du plan mixte et celui des moments AF du 2ème plan de la couche AF) sont quasiment de même intensité. Il est important de noter que les valeurs de $H_E$ simulées sont dans ce cas réalistes. En effet, par exemple pour $J_{int} = 20$ K, $\mu_0 \mu_B H_E/k_B = 0{,}11$ K (figures IV.48 & 49), soit $\mu_0 H_E = 0{,}16$ T ($H_E = 1600$ Oe) avec $e_F \approx 0{,}5$ nm (2 plans atomiques). Comme $H_E$ est proportionnel à $1/e_F$, on obtiendrait donc $\mu_0 H_E = 0{,}016$ T ($H_E = 160$ Oe) pour $e_F \approx 5$ nm ce qui est tout à fait réaliste ;

- La couche AF ne se retourne pas.

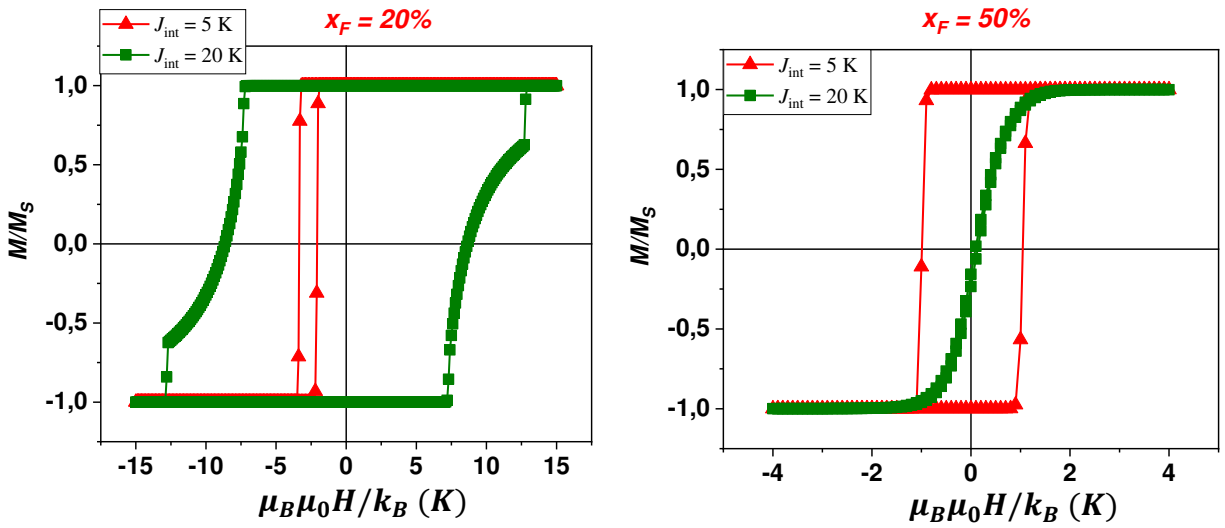


**Figure IV.49** : *Cycles d'hystérésis de la couche F lorsque $x_F$ =20% (à gauche) et 50% (à droite) pour $J_{int}$ =5 K et 20 K ($T_M$ = 0,1 K).*

Nous présentons sur la figure IV.50 la même étude avec $J_2^{AF} = 0{,}5\, J_1^{AF}$. On retrouve pratiquement les mêmes comportements que pour $J_2^{AF} = 0$ K.

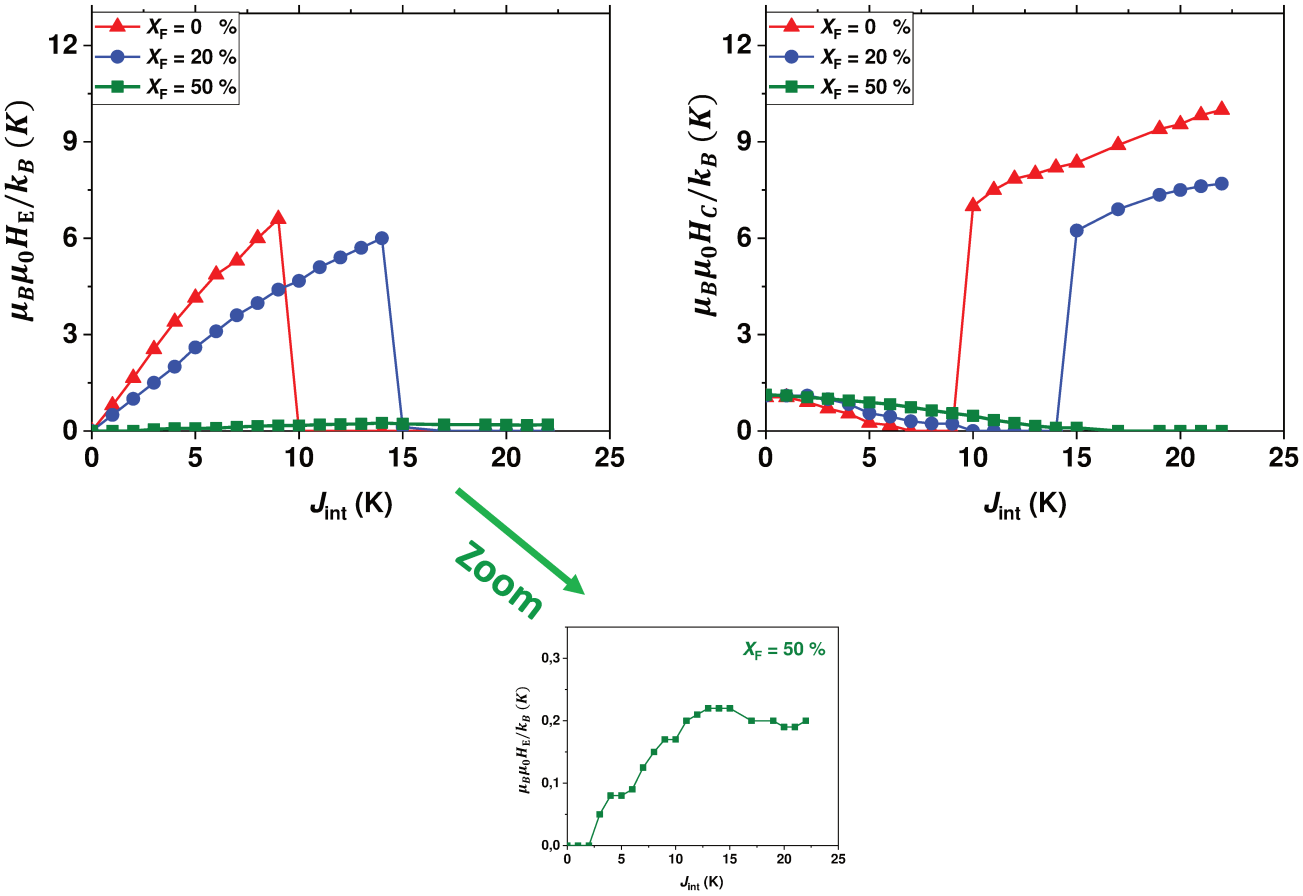


**Figure IV.50** : *Variation de $H_E$ et $H_C$ en fonction de $J_{int}$ pour $J_2^{AF}$ = 0,5 $J_2^{AF}$ et différentes valeurs de $x_F$ ($T_M$ = 0,1 K). L'incertitude sur $H_E$ est de l'ordre de 0,1 K.*

## IV.8.3 Effet de la température sur $H_E$ et $H_C$ pour différentes valeurs de $x_F$ et de $J_2^{AF}$

Dans cette partie nous examinons l'effet de la température sur les propriétés d'anisotropie d'échange pour différentes valeurs de $x_F$ et de $J_2^{AF}$ lorsque $J_{int}$ = 5 K.

- **$J_2^{AF}$ = 0 K**

Les résultats de cette étude sont présentés sur la figure IV.51 et on trouve que :

- $H_E$ diminue de la même façon lorsque $T_M$ augmente quel que soit $x_F$, ce qui s'explique par les fluctuations thermiques des moments AF à l'interface ;

- $H_C$ diminue lorsqu'on diminue $x_F$ car la diminution de $x_F$ entraine l'augmentation du couplage effectif et par conséquent diminution de $H_C$ (voir figure IV.14).

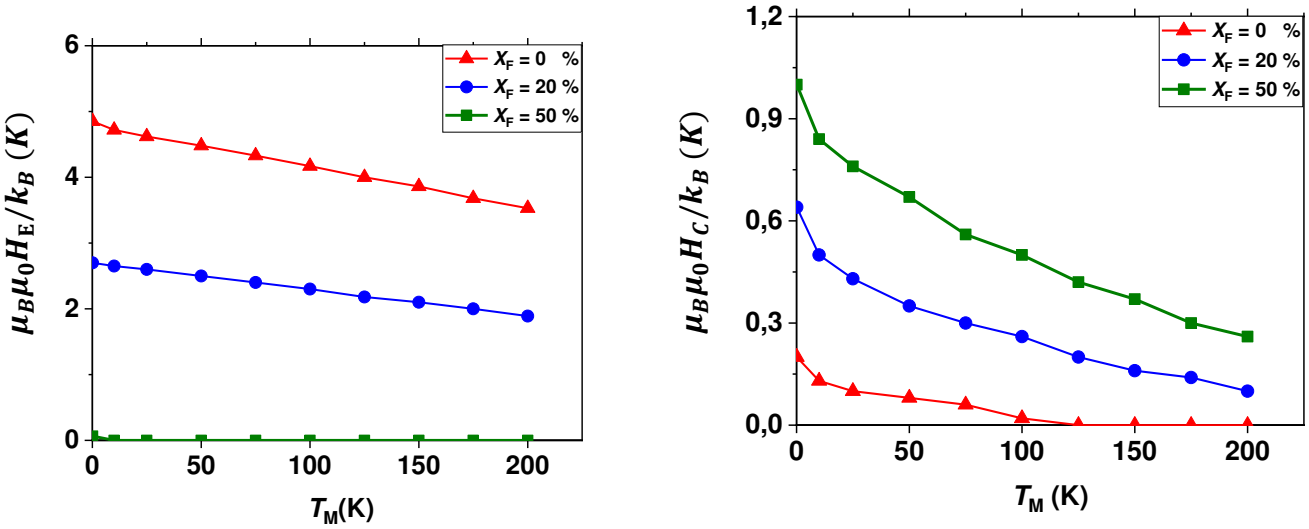


**Figure IV.51** : *Variation de $H_E$ et $H_C$ en fonction de la température pour différentes valeurs de $x_F$ et $J_2^{AF}$ = 0 K ($J_{int}$ = 5 K).*

- **$J_2^{AF}$ = 0.5 $J_1^{AF}$**

Les résultats de cette étude sont présentés dans la figure IV.52. A basse température, on trouve des résultats similaires au cas $J_2^{AF} = 0$. On remarque que l'augmentation de $x_F$ augmente la stabilité de la couche AF à température plus élevée (elle se retourne à $T_M$ = 100 K pour $x_F$ = 0%, à $T_M$ = 125 K pour $x_F$ = 20% et ne se retourne pas pour $x_F$ = 50%). Cela confirme que l'interdiffusion a pour effet de diminuer le couplage effectif interfacial.

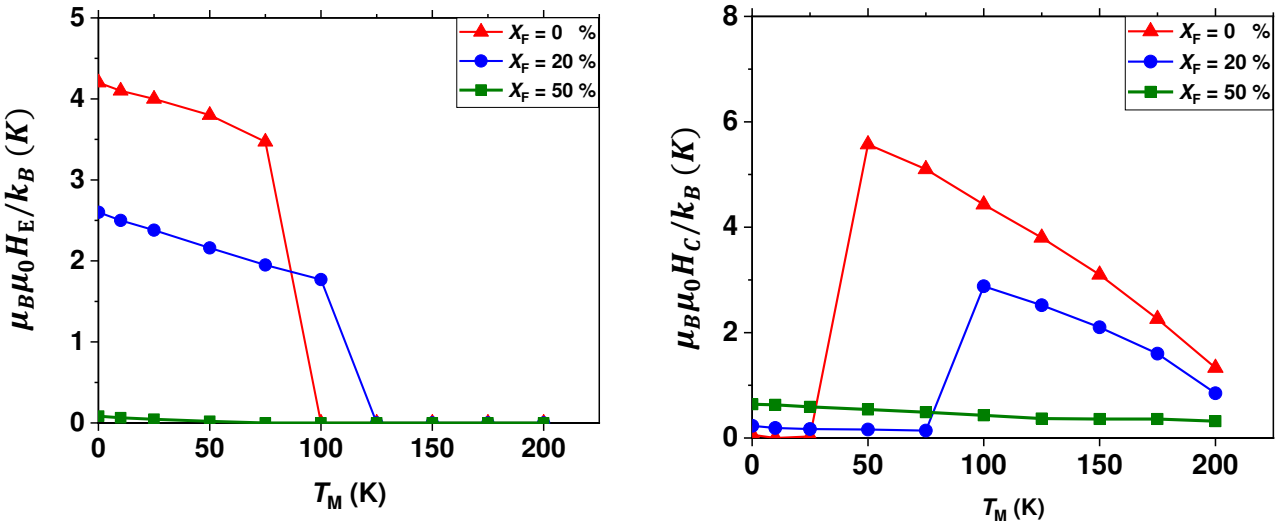


**Figure IV.52** : *Variation de $H_E$ et $H_C$ en fonction de la température pour différentes valeurs de $x_F$ et $J_2^{AF}$ = 0,5 $J_1^{AF}$ ($J_{int}$ = 5 K).*

# Conclusion

Dans ce travail notre objectif était :

- d'améliorer la compréhension du phénomène d'anisotropie d'échange dans les nanoplots en comparaison aux films continus ;

- d'étudier les effets du désordre magnétique à l'interface dans la couche AF sur les propriétés d'anisotropie d'échange.

Dans un premier temps, nous avons étudié les propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots à l'échelle granulaire en utilisant la méthode Monte Carlo cinétique. Dans notre travail, nous avons modélisé les phases magnétiques désordonnées à l'interface F/AF par la présence de grains moins stables à l'interface dans la couche AF. De plus, dans le cas des nanoplots, nous avons pris en compte des grains moins stables localisés sur les bords de la couche AF pour reproduire les effets dus à la méthode de fabrication. Tout d'abord, nous avons étudié l'effet du couplage ferromagnétique sur le mécanisme de retournement de la couche F et sur la variabilité du champ d'échange d'un nanoplot à l'autre. Nous avons trouvé qu'il existe deux mécanismes de retournement de la couche F :

- pour les faibles valeurs du couplage ferromagnétique, le retournement de la couche F s'amorce sur plusieurs centres de nucléation et s'effectue sans propagation. Dans ce cas, il n'y a pas de variabilité d'un nanoplot à l'autre ;

- pour les fortes valeurs du couplage ferromagnétique, le retournement de la couche F s'amorce en un seul centre de nucléation situé à un coin du nanoplot puis se propage à partir de ce coin. On observe alors une grande variabilité d'un nanoplot à l'autre.

Ensuite nous avons effectué des simulations reproduisant les procédures expérimentales afin de comprendre la différence de comportement du champ d'échange entre les nanoplots et les films continus. Notre modèle a permis d'expliquer les principales caractéristiques des comportements observés expérimentalement dans les bicouches Co/IrMn et NiFe/IrMn (pour différentes tailles latérales), à différentes températures de mesure et pour différentes épaisseurs de la couche AF. En particulier, nous avons montré que la présence de grains moins stables sur les bords de la couche AF dans les nanoplots peut expliquer pourquoi le champ d'échange dans les nanoplots peut être plus petit ou plus grand que dans les films continus. Il nous semble que les valeurs de $|H_E|$ simulés dans les films continus, <u>à température ambiante</u>, sont plus grandes que dans les nanoplots pour 5 nm < $e_{IrMn}$ ≤12 nm, alors que c'est le contraire pour 12 nm < $e_{IrMn}$ ≤ 16 nm.

Dans un deuxième temps, nous avons étudié les propriétés d'anisotropie d'échange des nanoplots F/AF à l'échelle atomique en utilisant la méthode Monte Carlo quantifiée en temps.

La caractéristique essentielle de notre modèle est le désordre magnétique à l'interface dans la couche AF qui résulte de la frustration magnétique, de la présence de joints de grains et des effets de surface.

Dans le cas où les interactions dans la couche AF sont limitées aux 1$^{ers}$ voisins uniquement (pas de frustration), nos résultats sur la variation de $H_E$ et $H_C$ en fonction de $J_{int}$ présentent un bon accord avec le modèle de Meiklejohn et Bean, c'est-à-dire que $|H_E|$ augmente linéairement avec $J_{int}$. Il est à noter que lorsque $J_{int}$ augmente, $H_E$ simulé est légèrement inférieur à la valeur théorique car le modèle de Meiklejohn et Bean ne prend pas en compte l'effet de la surface supérieure libre qui peut se produire dans les échantillons réels pour les faibles épaisseurs de la couche F. De plus, nos résultats montrent que $|H_E|$ diminue, lorsque la température augmente, quel que soit $J_{int}$ (contrairement au modèle granulaire où $H_E$ est constant tant que les grains AF sont bloqués). Cela s'explique par l'augmentation des fluctuations thermiques des moments AF à l'interface avec la température. Dans notre approche granulaire du chapitre III, cela revient à dire que le couplage interfacial effectif diminue.

Pour être plus réaliste, nous avons pris en compte les interactions aux seconds voisins en plus de celles aux premiers voisins. Nous avons trouvé que l'effet combiné de la frustration, des joints de grains et de la surface induit des configurations magnétiques complexes (présence de domaines magnétiques) dans la couche AF à l'interface. Il est à noter que le désordre magnétique est confiné au premier plan de la couche AF (plan interfacial). La variation de $H_E$ avec $J_{int}$ montre que la non-colinéarité des moments AF à l'interface diminue, dans le cadre d'une approche granulaire, le couplage effectif à l'interface. Comme, de plus, la couche AF est moins stable, tout se passe comme si la constante d'anisotropie effective était plus faible lorsque les moments AF sont non colinéaires. Afin de mieux comprendre l'effet des joints de grains, nous avons généré un nanoplot sans joint de grains. Dans ce cas, nous observons des configurations non-colinéaires monodomaine (avec quelques perturbations sur les bords) dans le premier plan de la couche AF mettant en évidence la corrélation entre la présence de joints de grains et de domaines magnétiques à l'interface F/AF. Nos résultats montrent également que la présence de joints de grains lorsqu'il y a de la frustration renforce la stabilité de la couche AF à 0 K alors qu'elle la diminue à température non nulle.

Puis, nous avons étudié l'effet de l'épaisseur de la couche AF sur $H_C$ et $H_E$ dans les nanoplots avec joints de grains. Nous n'avons pas observé d'effet de $e_{AF}$ sur $H_E$. Ceci s'explique par le fait que la configuration magnétique complexe en domaines est confinée au plan interfacial de la couche AF et n'est pas modifiée lorsque $e_{AF}$ augmente. Pour des épaisseurs suffisantes (32 plans) de la couche AF, nous avons observé un réarrangement des premiers plans de la couche AF proches de l'interface (rotation des moments AF d'environ 90° sans qu'il y ait retournement de la couche AF) au cours du cycle pour des valeurs de $J_{int}$ suffisamment grandes.

Enfin, nous avons étudié l'effet de l'interdiffusion et avons trouvé que l'interdiffusion diminue fortement le champ d'échange et rend la couche AF plus stable, ce qui correspond à une diminution du couplage effectif à l'interface dans le cadre d'une approche granulaire. Il est important de noter que l'interdiffusion permet d'obtenir, des valeurs simulées du champ d'échange qui sont elles aussi réalistes, ce qui n'est pas le cas des modèles atomiques en général.

Dans cette thèse les simulations basées sur l'approche atomique ont été réalisées sur des nanoplots contenant deux joints de grains. En perspective à ce travail, nous souhaitons augmenter les dimensions latérales des nanoplots afin d'étudier les effets de taille sur les propriétés d'anisotropie d'échange. L'augmentation de la taille aura deux conséquences :

- diminuer les effets de bords ;

- augmenter le nombre de grains (donc de joints de grains), ce qui permettra de mieux comprendre l'effet des joints de grains sur les configurations magnétiques à l'interface et sur les propriétés d'anisotropie d'échange.

De plus, dans notre modèle le désordre magnétique est confiné au premier plan de la couche AF (plan interfacial). Il serait donc intéressant de déterminer à partir de notre modèle les conditions d'apparition de domaines magnétiques en volume dans la couche AF (valeurs des interactions dans la couche AF, nombre de joints de grains, taille des grains, présence de défauts non magnétiques, épaisseur de la couche AF …). Dans le cas où il y des domaines AF en volume, il sera alors important d'étudier la dépendance du champ d'échange avec l'épaisseur de la couche AF qui est encore mal comprise actuellement.

# Bibliographie


(1) Ruderman, M. A.; Kittel, C. Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons. *Physical Review* **1954**, *96* (1), 99–102. https://doi.org/10.1103/PhysRev.96.99.

(2) Yosida, K. Magnetic Properties of Cu-Mn Alloys. *Physical Review* **1957**, *106* (5), 893–898. https://doi.org/10.1103/PhysRev.106.893.

(3) Kasuya, T. A Theory of Metallic Ferro- and Antiferromagnetism on Zener's Model. *Progress of Theoretical Physics* **1956**, *16* (1), 45–57. https://doi.org/10.1143/PTP.16.45.

(4) Anderson, P. W. Antiferromagnetism. Theory of Superexchange Interaction. *Physical Review* **1950**, *79* (2), 350–356. https://doi.org/10.1103/PhysRev.79.350.

(5) Anderson, P. W.; Hasegawa, H. Considerations on Double Exchange. *Physical Review* **1955**, *100* (2), 675–681. https://doi.org/10.1103/PhysRev.100.675.

(6) Bruno, P. Tight-Binding Approach to the Orbital Magnetic Moment and Magnetocrystalline Anisotropy of Transition-Metal Monolayers. *Physical Review B* **1989**, *39* (1), 865–868. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.39.865.

(7) West, F. G. Uniaxial Anisotropy Due to Magnetoelastic Energy in Constrained Polycrystalline Films. *Journal of Applied Physics* **1964**, *35* (6), 1827–1840. https://doi.org/10.1063/1.1713750.

(8) Kittel, C. Theory of the Structure of Ferromagnetic Domains in Films and Small Particles. *Physical Review* **1946**, *70* (11–12), 965–971. https://doi.org/10.1103/PhysRev.70.965.

(9) Middelhoek, S. Domain Walls in Thin Ni–Fe Films. *Journal of Applied Physics* **1963**, *34* (4), 1054–1059. https://doi.org/10.1063/1.1729367.

(10) Coey, J. M. D. Magnetism and Magnetic Materials. 633.

(11) Bean, C. P.; Livingston, J. D. Superparamagnetism. *Journal of Applied Physics* **1959**, *30* (4), S120–S129. https://doi.org/10.1063/1.2185850.

(12) Néel, L. Théorie Du Traînage Magnétique Des Ferromagnétiques En Grains Fins Avec Application Aux Terres. *Ann. Géophysique* **1949**, *5*, 99–136.

(13) Berkowitz, A. E.; Takano, K. Exchange Anisotropy * a Review. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **1999**, 19.

(14) Nogués, J.; Sculler, Ivan. K. Exchange Bias. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **1999**, *192*, 203–232.

(15) Meiklejohn, W. H.; Bean, C. P. New Magnetic Anisotropy. *Physical Review* **1956**, *102* (5), 1413–1414. https://doi.org/10.1103/PhysRev.102.1413.

(16) Néel, L. Étude théorique du couplage ferro-antiferromagnétique dans les couches minces. *Annales de Physique* **1967**, *14* (2), 61–80. https://doi.org/10.1051/anphys/19671402061.

(17) Mauri, D.; Siegmann, H. C.; Bagus, P. S.; Kay, E. Simple Model for Thin Ferromagnetic Films Exchange Coupled to an Antiferromagnetic Substrate. *Journal of Applied Physics* **1987**, *62* (7), 3047–3049. https://doi.org/10.1063/1.339367.

(18) Malozemoff, A. P. Random-Field Model of Exchange Anisotropy at Rough Ferromagnetic-Antiferromagnetic Interfaces. *Physical Review B* **1987**, *35* (7), 3679–3682. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.35.3679.

(19) Miltényi, P.; Gierlings, M.; Keller, J.; Beschoten, B.; Güntherodt, G.; Nowak, U.; Usadel, K. D. Diluted Antiferromagnets in Exchange Bias: Proof of the Domain State Model. *Physical Review Letters* **2000**, *84* (18), 4224–4227. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.4224.

(20) Fecioru-Morariu, M.; Ali, S. R.; Papusoi, C.; Sperlich, M.; Güntherodt, G. Effects of Nonmagnetic Metal Additives in Metallic Antiferromagnets on Exchange Bias. *arxiv* 13.

(21) Papusoi, C.; Hauch, J.; Fecioru-Morariu, M.; Guntherodt, G. Tuning the Exchange Bias of Soft Metallic Antiferromagnets by Inserting Nonmagnetic Defects. *Journal of Applied Physics* **2006**, *99* (12), 123902. https://doi.org/10.1063/1.2204335.

(22) Baibich, M. N.; Broto, J. M.; Fert, A.; Van Dau, F. N.; Petroff, F.; Etienne, P.; Creuzet, G.; Friederich, A.; Chazelas, J. Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices. *Physical Review Letters* **1988**, *61* (21), 2472–2475. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.2472.

(23) Binasch, G.; Grünberg, P.; Saurenbach, F.; Zinn, W. Enhanced Magnetoresistance in Layered Magnetic Structures with Antiferromagnetic Interlayer Exchange. *Physical Review B* **1989**, *39* (7), 4828–4830. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.39.4828.

(24) Dieny, B.; Speriosu, V. S.; Parkin, S. S. P.; Gurney, B. A.; Wilhoit, D. R.; Mauri, D. Giant Magnetoresistive in Soft Ferromagnetic Multilayers. *Physical Review B* **1991**, *43* (1), 1297–1300. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.1297.

(25) Dieny, B. Spin Valves. In *Magnetoelectronics*; M. Johnson, 2004; pp 68–149.

(26) Childress, J. R.; Fontana, R. E. Magnetic Recording Read Head Sensor Technology. *Comptes Rendus Physique* **2005**, *6* (9), 997–1012. https://doi.org/10.1016/j.crhy.2005.11.001.

(27) Nozières, J.-P. Têtes de lecture et mémoires magnétiques. *Reflets de la physique* **2010**, No. 18, 12–16. https://doi.org/10.1051/refdp/2010007.

(28) Karlqvist, O. *Calculation of the Magnetic Field in the Ferromagnetic Layer of a Magnetic Drum*; 1954.

(29) Schuhl, A.; Lacour, D. Spin Dependent Transport: GMR & TMR. *Comptes Rendus Physique* **2005**, *6* (9), 945–955. https://doi.org/10.1016/j.crhy.2005.10.010.

(30) Sousa, R. C.; Prejbeanu, I. L. Non-Volatile Magnetic Random Access Memories (MRAM). *Comptes Rendus Physique* **2005**, *6* (9), 1013–1021. https://doi.org/10.1016/j.crhy.2005.10.007.

(31) Parkin, S.; Xin Jiang; Kaiser, C.; Panchula, A.; Roche, K.; Samant, M. Magnetically Engineered Spintronic Sensors and Memory. *Proceedings of the IEEE* **2003**, *91* (5), 661–680. https://doi.org/10.1109/JPROC.2003.811807.

(32) Cros, V.; Boulle, O.; Grollier, J.; Hamzić, A.; Muñoz, M.; Pereira, L. G.; Petroff, F. Spin Transfer Torque: A New Method to Excite or Reverse a Magnetization. *Comptes Rendus Physique* **2005**, *6* (9), 956–965. https://doi.org/10.1016/j.crhy.2005.10.002.

(33) Dreizler, R. M.; Gross, E. K. U. *Density Functional Theory: An Approach to the Quantum Many-Body Problem*; Springer-Verlag: Berlin Heidelberg, 1990.

(34) Kohn, W. Nobel Lecture: Electronic Structure of Matter—Wave Functions and Density Functionals. *Reviews of Modern Physics* **1999**, *71* (5), 1253–1266. https://doi.org/10.1103/RevModPhys.71.1253.

(35) Hartree, D. R. The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part I. Theory and Methods. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **1928**, *24* (01), 89. https://doi.org/10.1017/S0305004100011919.

(36) Slater, J. C. A Simplification of the Hartree-Fock Method. *Physical Review* **1951**, *81* (3), 385–390. https://doi.org/10.1103/PhysRev.81.385.

(37) Allen, M. P.; Tildesley, D. J. *Computer Simulation of Liquids*; Oxford : Clarendon Press ; New York : Oxford University Press, 1987.

(38) Rapaport, D. C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, 2. ed., 3. print.; Cambridge Univ. Press: Cambridge, 2007.

(39) Frenkel, D.; Smit, B. *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*; Elsevier, 2001.

(40) Brown, W. F. *Micromagnetics*; J. Wiley: New York; London, 1963.

(41) *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, 2. ed.; Binder, K., Ed.; Topics in current physics; Springer: Berlin, 1986.

(42) Metropolis, N.; Rosenbluth, A. W.; Rosenbluth, M. N.; Teller, A. H. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. 7.

(43) Nowak, U.; Chantrell, R. W.; Kennedy, E. C. Monte Carlo Simulation with Time Step Quantification in Terms of Langevin Dynamics. *Physical Review Letters* **2000**, *84* (1), 163–166. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.163.

(44) Kanai, Y.; Charap, S. H. Simulation of Magnetic Aftereffect in Particulate Recording Media. *IEEE Transactions on Magnetics* **1991**, *27* (6), 4972–4974. https://doi.org/10.1109/20.278711.

(45) Lhoutellier, G.; Ledue, D.; Patte, R.; Barbe, F.; Dieny, B.; Baltz, V. Bimodal Distribution of Blocking Temperature for Exchange-Bias Ferromagnetic/Antiferromagnetic Bilayers: A Granular Monte Carlo Study with Less Stable Magnetic Regions Spread over the Interface. *Journal of Physics D: Applied Physics* **2015**, *48* (11), 115001. https://doi.org/10.1088/0022-3727/48/11/115001.

(46) Lhoutellier, G.; Ledue, D.; Patte, R.; Baltz, V. Monte Carlo Investigation of How Interfacial Magnetic Couplings Affect Blocking Temperature Distributions in Exchange Bias Bilayers. *Journal of Applied Physics* **2016**, *120* (19), 193902. https://doi.org/10.1063/1.4967829.

(47) Prejbeanu, I. L.; Kerekes, M.; Sousa, R. C.; Sibuet, H.; Redon, O.; Dieny, B.; Nozières, J. P. Thermally Assisted MRAM. *Journal of Physics: Condensed Matter* **2007**, *19* (16), 165218. https://doi.org/10.1088/0953-8984/19/16/165218.

(48) Baltz, V.; Manchon, A.; Tsoi, M.; Moriyama, T.; Ono, T.; Tserkovnyak, Y. Antiferromagnetic Spintronics. *Reviews of Modern Physics* **2018**, *90* (1). https://doi.org/10.1103/RevModPhys.90.015005.

(49) Chappert, C.; Fert, A.; Van Dau, F. N. The Emergence of Spin Electronics in Data Storage. *Nature materials* **2007**, *6*, 813–823.

(50) Nogués, J.; Sort, J.; Langlais, V.; Skumryev, V.; Suriñach, S.; Muñoz, J. S.; Baró, M. D. Exchange Bias in Nanostructures. *Physics Reports* **2005**, *422* (3), 65–117. https://doi.org/10.1016/j.physrep.2005.08.004.

(51) Baltz, V.; Sort, J.; Rodmacq, B.; Dieny, B.; Landis, S. Thermal Activation Effects on the Exchange Bias in Ferromagnetic-Antiferromagnetic Nanostructures. *Physical Review B* **2005**, *72* (10). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.104419.

(52) Baltz, V.; Sort, J.; Landis, S.; Rodmacq, B.; Dieny, B. Tailoring Size Effects on the Exchange Bias in Ferromagnetic-Antiferromagnetic < 100 Nm Nanostructures. *Physical Review Letters* **2005**, *94* (11). https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.117201.

(53) Spizzo, F.; Bonfiglioli, E.; Tamisari, M.; Gerardino, A.; Barucca, G.; Notargiacomo, A.; Chinni, F.; Del Bianco, L. Magnetic Exchange Coupling in IrMn / NiFe Nanostructures: From the Continuous Film to Dot Arrays. *Physical Review B* **2015**, *91* (6). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.064410.

(54) Sasaki, I.; Nakatani, R.; Ishimoto, K.; Endo, Y.; Shiratsuchi, Y.; Kawamura, Y.; Yamamoto, M. Size Effects on Exchange Bias in Polycrystalline Ni–Fe/Fe–Mn Square Dots. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **2007**, *310* (2), 2677–2679. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2006.10.984.

(55) Shen, Y.; Wu, Y.; Xie, H.; Li, K.; Qiu, J.; Guo, Z. Exchange Bias of Patterned NiFe/IrMn Film. *Journal of Applied Physics* **2002**, *91* (10), 8001. https://doi.org/10.1063/1.1453322.

(56) Vinai, G.; Moritz, J.; Gaudin, G.; Vogel, J.; Prejbeanu, I. L.; Dieny, B. IrMn Microstructural Effects on Exchange Bias Variability in Patterned Arrays of IrMn/Co Square Dots. *Journal of Physics D: Applied Physics* **2014**, *47* (19), 195302. https://doi.org/10.1088/0022-3727/47/19/195302.

(57) Laureti, S.; Suck, S. Y.; Haas, H.; Prestat, E.; Bourgeois, O.; Givord, D. Size Dependence of Exchange Bias in Co / CoO Nanostructures. *Physical Review Letters* **2012**, *108* (7). https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.077205.

(58) Baltz, V.; Gaudin, G.; Somani, P.; Dieny, B. Influence of Edges on the Exchange Bias Properties of Ferromagnetic/Antiferromagnetic Nanodots. *Applied Physics Letters* **2010**, *96* (26), 262505. https://doi.org/10.1063/1.3449123.

(59) Vallejo-Fernandez, G.; Fernandez-Outon, L. E.; O'Grady, K. Antiferromagnetic Grain Volume Effects in Metallic Polycrystalline Exchange Bias Systems. *Journal of Physics D: Applied Physics* **2008**, *41* (11), 112001. https://doi.org/10.1088/0022-3727/41/11/112001.

(60) Gritsenko, C.; Dzhun, I.; Babaytsev, G.; Chechenin, N.; Rodionova, V. Exchange Bias and Coercivity Fields as a Function of the Antiferromagnetic Layer Thickness in Bi- and Tri- Layered Thin-Films Based on IrMn and NiFe. *Physics Procedia* **2016**, *82*, 51–55. https://doi.org/10.1016/j.phpro.2016.05.010.

(61) Ali, M.; Marrows, C. H.; Al-Jawad, M.; Hickey, B. J.; Misra, A.; Nowak, U.; Usadel, K. D. Antiferromagnetic Layer Thickness Dependence of the IrMn/Co Exchange-Bias System. *Physical Review B* **2003**, *68* (21). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.214420.

(62) García, G.; Kiwi, M.; Mejía-López, J.; Ramírez, R. Exchange Bias of Patterned Systems: Model and Numerical Simulation. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **2010**, *322* (21), 3329–3332. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2010.06.018.

(63) Vallejo-Fernandez, G.; Chapmam, J. N. Size Effects in Submicron Exchange Bias Square Elements. *Applied Physics Letters* **2009**, *94* (26), 262508. https://doi.org/10.1063/1.3170233.

(64) Proenca, M. P.; Ventura, J.; Sousa, C. T.; Vazquez, M.; Araujo, J. P. Exchange Bias, Training Effect, and Bimodal Distribution of Blocking Temperatures in Electrodeposited Core-Shell Nanotubes. *Physical Review B* **2013**, *87* (13). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.134404.

(65) Quey, R.; Dawson, P. R.; Barbe, F. Large-Scale 3D Random Polycrystals for the Finite Element Method: Generation, Meshing and Remeshing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **2011**, *200* (17–20), 1729–1745. https://doi.org/10.1016/j.cma.2011.01.002.

(66) Lechevallier, L.; Zarefy, A.; Lardé, R.; Chiron, H.; Le Breton, J.-M.; Baltz, V.; Rodmacq, B.; Dieny, B. Structural Analysis and Magnetic Properties of ( Pt / Co ) 3 / Pt TPt / IrMn Multilayers. *Physical Review B* **2009**, *79* (17). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.174434.

(67) Lechevallier, L.; Zarefy, A.; Letellier, F.; Lardé, R.; Blavette, D.; Le Breton, J. M.; Baltz, V.; Rodmacq, B.; Dieny, B. Temperature Stability of $(Pt/Co)_3$ /IrMn Multilayers. *Journal of Applied Physics* **2012**, *112* (4), 043904. https://doi.org/10.1063/1.4745033.

(68) Akmaldinov, K.; Auffret, S.; Joumard, I.; Dieny, B.; Baltz, V. Benefit of Inserting a (Cu/Pt) Intermixing Dual Barrier for the Blocking Temperature Distribution of Exchange Biased Co/(Cu/Pt)/IrMn Stacks. *Applied Physics Letters* **2013**, *103* (4), 042415. https://doi.org/10.1063/1.4816816.

(69) Stiles, M. D.; McMichael, R. D. Temperature Dependence of Exchange Bias in Polycrystalline Ferromagnet-Antiferromagnet Bilayers. *Physical Review B* **1999**, *60* (18), 12950–12956. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.12950.

(70) Brinis, D.; Laggoun, A.; Ledue, D.; Patte, R. Effects of Dimensionality and Spatial Distribution on the Magnetic Relaxation of Interacting Ferromagnetic Nanoclusters: A Monte Carlo Study. *Journal of Applied Physics* **2014**, *115* (17), 173906. https://doi.org/10.1063/1.4873298.

(71) Kanso, H.; Patte, R.; Baltz, V.; Ledue, D. Influence of Finite-Size and Edge Effects on the Exchange-Bias Properties of Ferromagnetic/Antiferromagnetic Nanodots: Granular Monte Carlo Investigation. *Physical Review B* **2019**, *99* (5). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.054410.

(72) Soeya, S.; Imagawa, T.; Mitsuoka, K.; Narishige, S. Distribution of Blocking Temperature in Bilayered $Ni_{81}Fe_{19}$/NiO Films. *Journal of Applied Physics* **1994**, *76* (9), 5356–5360. https://doi.org/10.1063/1.358488.

(73) Lhoutellier, G.; Ledue, D.; Patte, R.; Baltz, V. Monte Carlo Investigation of How Interfacial Magnetic Couplings Affect Blocking Temperature Distributions in Exchange Bias Bilayers. *Journal of Applied Physics* **2016**, *120* (19), 193902. https://doi.org/10.1063/1.4967829.

(74) Akmaldinov, K.; Frangou, L.; Ducruet, C.; Portemont, C.; Pereira, J.; Joumard, I.; Dieny, B.; Alvarez-Herault, J.; Baltz, V. Correlation Between Disordered Magnetic Phases in Ferromagnetic/Antiferromagnetic Thin Films and Device-to-Device Variability of Exchange Bias in Spintronic Applications. *IEEE Magnetics Letters* **2015**, *6*, 1–4. https://doi.org/10.1109/LMAG.2015.2452891.

(75) Kanso, H.; Patte, R.; Ledue, D. Antiferromagnetic Thickness and Temperature Dependence of the Exchange Bias Properties of Co/IrMn Nanodots and Continuous Films: A Monte Carlo Study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **2019**, *491*, 165543. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.165543.

(76) Kohn, A.; Dean, J.; Kovacs, A.; Zeltser, A.; Carey, M. J.; Geiger, D.; Hrkac, G.; Schrefl, T.; Allwood, D. Exchange-Bias in Amorphous Ferromagnetic and Polycrystalline Antiferromagnetic Bilayers: Structural Study and Micromagnetic Modeling. *Journal of Applied Physics* **2011**, *109* (8), 083924. https://doi.org/10.1063/1.3559261.

(77) Agudelo-Giraldo, J. D.; Restrepo-Parra, E.; Restrepo, J. Monte Carlo Simulation of Roughness Effect on Magnetic and Magnetotransport Behavior of La2/3Ca1/3MnO3/La1/3Ca2/3MnO3 Bilayers. *Physica B: Condensed Matter* **2014**, *434*, 149–154. https://doi.org/10.1016/j.physb.2013.11.014.

(78) Nascimento, V. P.; Passamani, E. C.; Alvarenga, A. D.; Pelegrini, F.; Biondo, A.; Baggio Saitovitch, E. Influence of the Roughness on the Exchange Bias Effect of NiFe/FeMn/NiFe Trilayers. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **2008**, *320* (14), e272–e274. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2008.02.059.

(79) Moritz, J.; Bacher, P.; Dieny, B. Numerical Study of the Influence of Interfacial Roughness on the Exchange Bias Properties of Ferromagnetic/Antiferromagnetic Bilayers. *Physical Review B* **2016**, *94* (10). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.104425.

(80) Nowak, U.; Usadel, K. D.; Keller, J.; Miltényi, P.; Beschoten, B.; Güntherodt, G. Domain State Model for Exchange Bias. I. Theory. *Physical Review B* **2002**, *66* (1). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.014430.

(81) Usadel, K. D.; Nowak, U. Exchange Bias for a Ferromagnetic Film Coupled to a Spin Glass. *Physical Review B* **2009**, *80* (1). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.014418.

(82) Spray, J.; Nowak, U. Exchange Bias in Ferromagnetic/Antiferromagnetic Bilayers with Imperfect Interfaces. *Journal of Physics D: Applied Physics* **2006**, *39* (21), 4536–4539. https://doi.org/10.1088/0022-3727/39/21/003.

(83) Schuller, I. K.; Morales, R.; Batlle, X.; Nowak, U.; Güntherodt, G. Role of the Antiferromagnetic Bulk Spins in Exchange Bias. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **2016**, *416*, 2–9. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.04.065.

(84) Biner, S. B. *Programming Phase-Field Modeling*; Springer International Publishing: Cham, 2017. https://doi.org/10.1007/978-3-319-41196-5.

(85) Chen, K.; Ferrenberg, A. M.; Landau, D. P. Static Critical Behavior of Three-Dimensional Classical Heisenberg Models: A High-Resolution Monte Carlo Study. *Physical Review B* **1993**, *48* (5), 3249–3256. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.48.3249.

(86) Beaujouan, D. Simulation des matériaux magnétiques à base Cobalt par Dynamique Moléculaire Magnétique. 245.

(87) Szunyogh, L.; Lazarovits, B.; Udvardi, L.; Jackson, J.; Nowak, U. Giant Magnetic Anisotropy of the Bulk Antiferromagnets IrMn and IrMn 3 from First Principles. *Physical Review B* **2009**, *79* (2). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.020403.

(88) Nehme, Z.; Labaye, Y.; Sayed Hassan, R.; Yaacoub, N.; Greneche, J. M. Modeling of Hysteresis Loops by Monte Carlo Simulation. *AIP Advances* **2015**, *5* (12), 127124. https://doi.org/10.1063/1.4938549.

(89) Nowak, U.; Mryasov, O. N.; Wieser, R.; Guslienko, K.; Chantrell, R. W. Spin Dynamics of Magnetic Nanoparticles: Beyond Brown's Theory. *Physical Review B* **2005**, *72* (17). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.172410.