

Simulation numérique du comportement magnétostrictif de nanostructures ferromagnétiques sur substrat souple

N. Challab ^a, A. D. Aboumassound ^b, F. Zighem ^c, D. Faurie ^d, M. Haboussi ^{e*}

a. LSPM-CNRS UPR3407, Université Paris 13, Sorbonne Paris Cité, 93430 Villetaneuse, France nabil.challab@univ-paris13.fr

b. LSPM-CNRS UPR3407, Université Paris 13, Sorbonne Paris Cité, 93430 Villetaneuse, France + aboumassound88@gmail.com

c. LSPM-CNRS UPR3407, Université Paris 13, Sorbonne Paris Cité, 93430 Villetaneuse, France + zighem@univ-paris13.fr

d. LSPM-CNRS UPR3407, Université Paris 13, Sorbonne Paris Cité, 93430 Villetaneuse, France + faurie@univ-paris13.fr

e. LSPM-CNRS UPR3407, Université Paris 13, Sorbonne Paris Cité, 93430 Villetaneuse, France + haboussi@univ-paris13.fr

Résumé :

Dans ce travail, un outil de simulation numérique par éléments finis du comportement magnéto-mécanique de nanostructures déposées sur substrats (souples) est présenté. Développé dans COMSOL multiphysics® après implantation de l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) couplée aux équations de la magnétostatique et de l'équilibre mécanique, l'outil numérique proposé permet de décrire les effets des déformations mécaniques transmises du substrat vers les nanostructures, sur la réponse magnétique de ces dernières.

Abstract:

In this work, a finite element based numerical tool for simulating the magnetomechanical behavior of nanostructures deposited on (flexible) substrates is presented. Developed in COMSOL multiphysics® after implementation of the Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) equation coupled with magnetostatic and mechanical equations, the proposed numerical tool enables to describe the effects of mechanical deformations transmitted from the substrate to nanostructures on the latter's magnetic response.

Mots clefs : Comportement magnétostrictif; nanostructures ferromagnétiques; substrat souple; simulation numérique; éléments finis

1 Introduction

La magnétostriction et la magnétostriction inverse (effet magnéto-mécanique) désignent les propriétés que possèdent les matériaux ferromagnétiques de se déformer en fonction de l'orientation de leur aimantation, par exemple sous l'influence d'un champ magnétique extérieur, ou de voir leur susceptibilité magnétique, ou leur aimantation, évoluer en présence de contraintes mécaniques.

La magnétostriction est déjà mise à profit pour développer des dispositifs innovants comme des capteurs ou des actionneurs magnétiques. Elle peut aussi être "indésirable" comme dans la magnéto-électronique souple où les déformations mécaniques peuvent altérer les propriétés magnétiques des nanostructures telles que les nanoplots, les nanofils ou les films minces, déposées dans ce cas sur des substrats souples. Il était donc important de pouvoir quantifier les effets de ces déformations, transmises du substrat sous chargement aux nanostructures, sur les propriétés magnétiques de ces dernières, pour bien concevoir ces systèmes et optimiser leur fonctionnement, [1, 2, 3].

L'objectif de ce travail est de développer un outil de simulation numérique par éléments finis du comportement magnéto-mécanique de nanostructures déposées sur substrats (souples), capable de bien décrire les effets des déformations mécaniques transmises du substrat vers les nanostructures, sur la réponse magnétique de ces dernières.

Pour développer cet outil de simulation, nous avons implanté dans COMSOL multiphysics® [4], l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG), en couplage fort avec les équations de la magnétostatique et de la mécanique (déjà disponibles pour les dernières en standard dans COMSOL multiphysics®). Dans la LLG, nous avons pris en compte en plus de l'énergie magnéto-élastique, trois autres contributions énergétiques, de Zeeman, d'échange, et magnétostatique.

L'outil de simulation ainsi obtenu a été progressivement validé en traitant différents exemples bien choisis. Ces exemples concernent le calcul de la précession de Larmor dans une sphère ferromagnétique soumise à un champ magnétique extérieur sans amortissement, le calcul du champ démagnétisant dans successivement, un disque et une sphère magnétiques, une comparaison avec un logiciel dédié au micromagnétisme (NMAG), portant sur la description de la relaxation (retournement) de l'aimantation, sous l'effet du seul champ magnétostatique, et ensuite sous l'effet d'une déformation homogène croissante.

Une fois validé, l'outil de simulation numérique a été déployé pour étudier la réponse d'un objet magnétique déposé sur un substrat soumis à un chargement mécanique de traction. En particulier, le rôle de l'épaisseur dans le transfert de charge substrat/nanostructure et par conséquent, dans l'évolution des propriétés magnétiques de la nanostructure, a été mis en exergue.

2 Cadre théorique

Le problème mathématique résolu dans ce travail fait intervenir trois champs inconnus (ϕ, \vec{m}, \vec{U}) correspondant respectivement, au potentiel démagnétisant, à l'aimantation réduite, et au déplacement. L'aimantation est solution de l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) posée sur la nanostructure magnétique (domaine noté (Ω_1)) :

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = -\mu_0 \gamma \vec{m} \times \vec{H}_{eff} + \alpha \vec{m} \times \frac{\partial \vec{m}}{\partial t} \quad \text{dans } (\Omega_1) \quad (1)$$

complétée par la condition initiale $\vec{m}(\vec{r} \in (\Omega_1), t = 0) = \vec{m}^{imposé}$ vérifiant $\|\vec{m}^{imposé}\| = 1$.

Dans Eq. (1), γ représente le ratio gyromagnétique, α , le coefficient adimensionnel de Gilbert, et \vec{H}_{eff} , le champ magnétique effectif, défini comme :

$$\vec{H}_{eff} = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\partial F}{\partial \vec{m}} \quad (2)$$

où F représente la densité d'énergie totale regroupant plusieurs contributions énergétiques, de Zeeman $F_{Zee} = -\mu_0 M_s \vec{m} \cdot \vec{H}$, d'échange $F_{ex} = A(\vec{\nabla} \cdot \vec{m})^2$, magnétostatique $F_{ms} = -\frac{1}{2} \mu_0 M_s \vec{m} \cdot \vec{H}_{dem}$ et magnéto-élastique $F_{el} = \frac{1}{2} (\bar{\bar{\bar{C}}} : (\bar{\bar{\bar{e}}} - \bar{\bar{\bar{e}}}) : \bar{\bar{\bar{C}}} : (\bar{\bar{\bar{e}}} - \bar{\bar{\bar{e}}})$ avec $\bar{\bar{\bar{e}}} = \frac{\vec{\nabla} \otimes \vec{U} + (\vec{\nabla} \otimes \vec{U})^t}{2}$, $(\bar{\bar{\bar{e}}})_{ij} = \frac{3}{2} \lambda m_i m_j$ si $i \neq j$ et $(\bar{\bar{\bar{e}}})_{ij} = \frac{3}{2} \lambda (m_i m_j - \frac{1}{3})$ si $i = j$:

$$F = F_{Zee} + F_{ex} + F_{ms} + F_{el} \quad (3)$$

Les contributions énergétiques de Zeeman, d'échange dépendent d'une seule inconnue, à savoir l'aimantation, alors que les contributions magnétostatique et magnétoélastique dépendent en plus de l'aimantation, des deux autres inconnues que sont, le champ démagnétisant \vec{H}_{dem} et le vecteur déplacement \vec{U} . Ces derniers sont solutions des problèmes différentiels suivants, posés sur les trois domaines $\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3$, correspondant respectivement, à l'objet ferromagnétique, le substrat et le milieu environnant extérieur :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H}_{dem} = -\Delta \phi = \begin{cases} -\vec{\nabla} \cdot (M_s \vec{m}) & \text{sur } \Omega_1 \\ 0 & \text{sur } \Omega_2, \\ 0 & \text{sur } \Omega_3 \end{cases} \quad (4)$$

et

$$\vec{\nabla} \cdot (\bar{\bar{\bar{C}}} : (\bar{\bar{\bar{e}}} - \bar{\bar{\bar{e}}})) + \vec{f} = 0 \text{ sur } \Omega_1 \cup \Omega_2, \quad (5)$$

complétées par les conditions aux limites et de transmissions aux interfaces suivantes :

$$\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \phi = \begin{cases} M_s \vec{m} \cdot \vec{n} & \text{sur } \partial \Omega_1 \\ 0 & \text{sur } \partial \Omega_2 \\ 0 & \text{sur } \partial \Omega_3^{\text{int}} \\ -2 \frac{\phi}{\|\vec{r}\|} & \text{sur } \partial \Omega_3^{\text{ext}} \end{cases} \quad (6)$$

$$\vec{U} = \vec{U}^{\text{imposé}} \text{ sur } \partial \Omega_2^u \quad (7)$$

$$(\bar{\bar{\bar{C}}} : (\bar{\bar{\bar{e}}} - \bar{\bar{\bar{e}}})) \cdot \vec{n} = \vec{0} \text{ sur } \partial \Omega_2^g \quad (8)$$

$$[\phi] = 0 \quad \text{sur les différentes interfaces} \quad (9)$$

$$[\vec{U}] = [\bar{\bar{\bar{C}}} : (\bar{\bar{\bar{e}}} - \bar{\bar{\bar{e}}})] = \vec{0} \quad \text{sur l'interface entre } \Omega_1 \text{ et } \Omega_2 \quad (10)$$

3 Applications numériques

Le problème mathématique décrit précédemment a été implémenté dans COMSOL multiphysics®. L'outil numérique obtenu a été déployé pour résoudre différents problèmes présentés ci-après.

3.1 Précession de Larmor

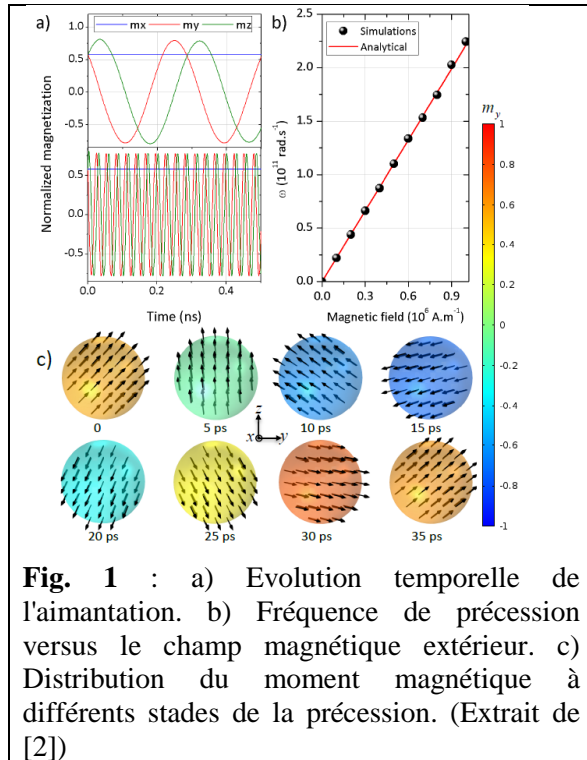


Fig. 1 : a) Evolution temporelle de l'aimantation. b) Fréquence de précession versus le champ magnétique extérieur. c) Distribution du moment magnétique à différents stades de la précession. (Extrait de [2])

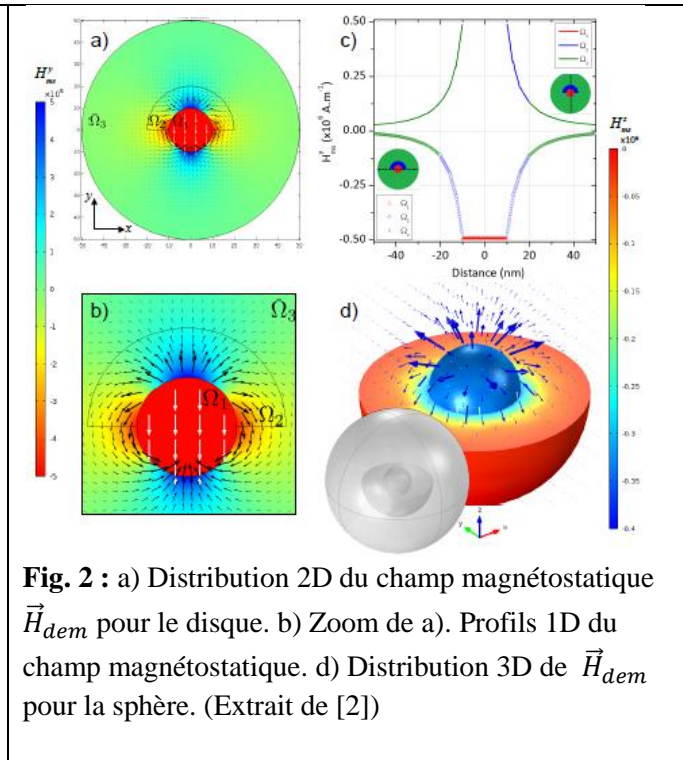


Fig. 2 : a) Distribution 2D du champ magnétostatique \vec{H}_{dem} pour le disque. b) Zoom de a). Profils 1D du champ magnétostatique. d) Distribution 3D de \vec{H}_{dem} pour la sphère. (Extrait de [2])

L'équation LLG est résolue seule ici, c'est à dire sans prise en compte ni de l'interaction dipolaire ($\vec{H}_{dem} = \vec{0}$), ni des déformations mécaniques, pour une sphère magnétique subissant un champ magnétique externe dirigé selon \vec{x} . Les simulations numériques réalisées sans amortissement, montrent que l'aimantation initialement dirigée selon (1,1,1) dans le repère de travail indiqué sur la figure 1, "précède" autour de la direction \vec{x} du champ magnétique extérieur imposé \vec{H} , avec une fréquence ω proportionnelle à H conformément à $\omega = \gamma\mu_0 H$.

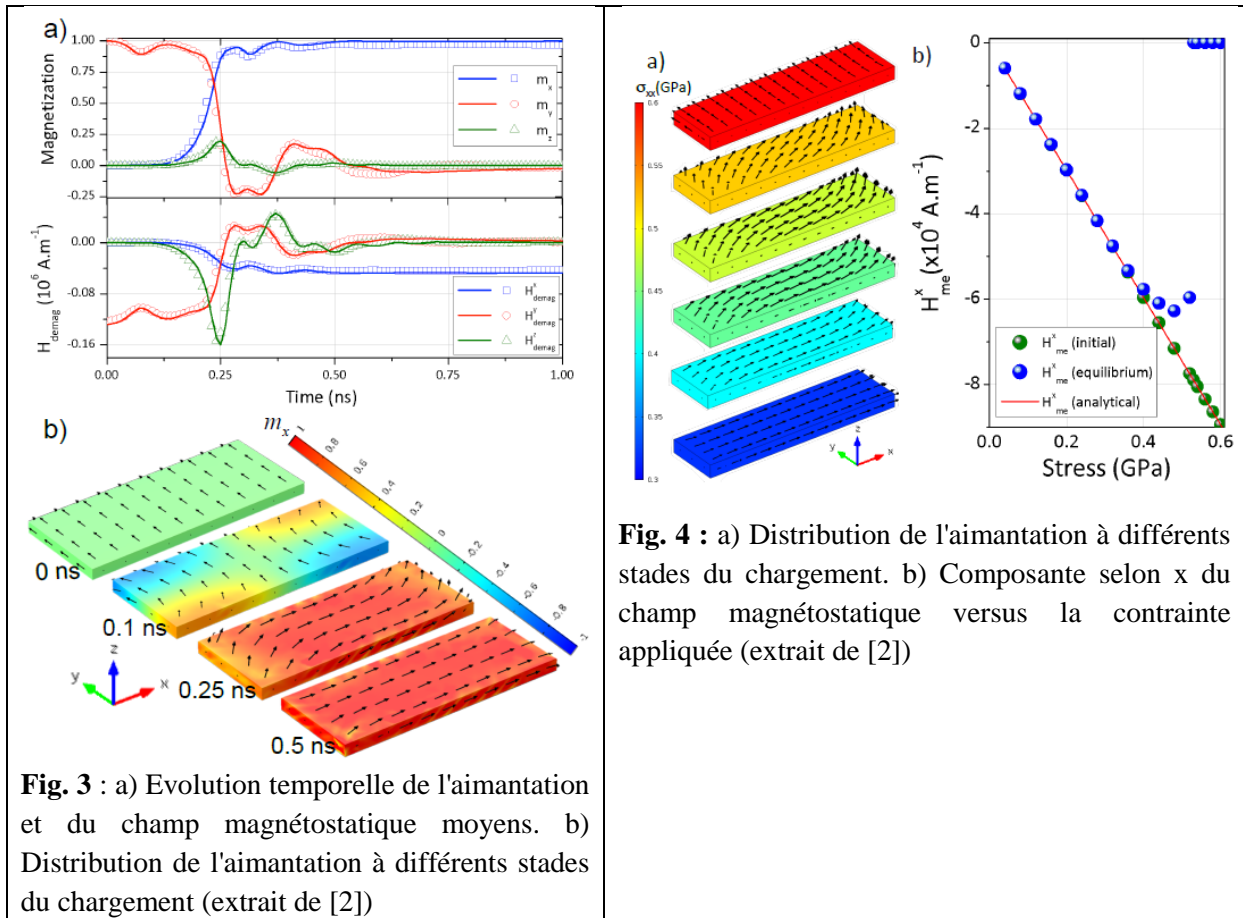
3.2 Champ magnétostatique

Les équations de la magnétostatique sont résolues seules dans ce cas pour déterminer le champ démagnétisant/magnétostatique dans les trois domaines Ω_1 , Ω_2 , Ω_3 , correspondant respectivement, à l'objet ferromagnétique, le substrat et le milieu environnant extérieur. Les résultats de la simulation numérique, reportés sur la Fig. 2, montrent entre autres choses, que le champ \vec{H}_{dem} est égal à $-\frac{1}{2}M_s \vec{y}$ pour le disque, et $-\frac{1}{3}M_s \vec{z}$ pour la sphère, conformément aux solutions analytiques connues dans ces cas. Ils montrent également une allure cohérente des lignes de champ magnétiques dans les trois domaines Ω_1 , Ω_2 , Ω_3 .

3.3 Comparaison avec Nmag/relaxation de l'aimantation

La LLG est résolue ici conjointement avec les équations de la magnétostatique pour simuler la relaxation (le retournement) de l'aimantation dans un nanofil magnétique avec le code développé dans COMSOL multiphysics®, et avec un autre code dédié au magnétisme, en l'occurrence NMAG, [5], pour les besoins de la comparaison. Les résultats obtenus avec les deux codes sont reportés sur la

figure 3. Ces résultats montrent le retournement de l'aimantation, initialement parallèle à \vec{y} , dans la direction \vec{x} , sous l'effet de l'anisotropie de forme. On observe également que les deux codes décrivent à peu de choses près, les mêmes évolutions de l'aimantation et du champ magnétostatique moyens.



3.4 Anisotropie magnétoélastique

Le problème mathématique est résolu ici dans son intégralité, c'est à dire avec la LLG couplée aux équations magnétostatiques et mécaniques, afin de simuler la relaxation de l'aimantation dans un nanofil magnétique, soumis à un chargement mécanique selon \vec{x} , l'aimantation étant également initialement orientée selon \vec{x} .

Le cas d'une déformation homogène du nano-fil a d'abord été considéré. Les simulations ont alors montré qu'au delà d'une valeur de la contrainte, aux alentours de 0,4 GPa d'après la courbe de la Fig. 4, il y a retournement de l'aimantation initialement parallèle à \vec{x} vers la direction \vec{y} , à l'équilibre. On observe en particulier, que l'aimantation est guidée par la contrainte σ_{xx} même à l'équilibre et le reste tant que $\sigma_{xx} < 0,4 \text{ GPa}$, au delà, l'énergie magnétoélastique fait retourner l'aimantation le long de la direction \vec{y} , à l'équilibre.

Le cas du nanofil déposé sur un substrat est ensuite considéré, Fig. 5. Le chargement mécanique de traction est appliqué au substrat, et la déformation hétérogène supportée par le nanofil est alors celle qui lui est transmise par l'interface nanofil/substrat. Dans ce cas, les simulations confirment d'abord le caractère hétérogène de la déformation dans le nanofil, et mettent en évidence à la fois le rôle des surfaces libres et de l'épaisseur du nanofil. Ainsi, l'aimantation de la nanostructure, initialement orientée selon \vec{x} , le reste tant que l'anisotropie de forme (énergie échange et énergie magnétostatique),

l'emporte sur l'anisotropie magnéto-élastique. Dans le cas contraire, on observe le retournement graduel de l'aimantation le long de la direction perpendiculaire \vec{y} , pour une déformation appliquée au substrat suffisamment importante.

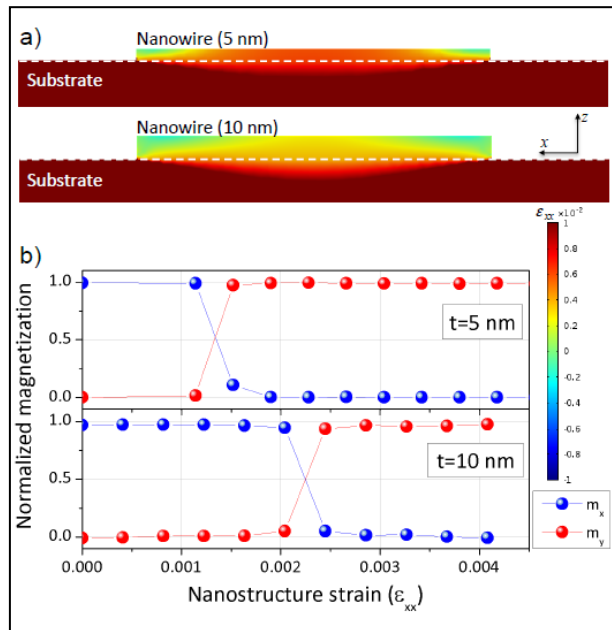


Fig. 6 : a) Distribution de la déformation dans la nanofil et le substrat. b) Evolution de l'aimantation pour différentes épaisseurs du nanofil (extrait de [2])

Conclusion

Un outil de simulation numérique par éléments finis du comportement magnéto-mécanique de nanostructures déposées sur substrats (souples) a été présenté dans ce travail. Les tests numériques réalisés montrent que cet outil décrit de manière satisfaisante l'effet de la déformation sur les propriétés magnétiques de nanostructures magnétiques étudiées. Il peut donc être utilisé comme un outil d'aide à la conception et l'optimisation de systèmes hybrides (dépôt ferromagnétique/substrat souple). Ainsi, en étudiant l'effet de l'épaisseur du dépôt magnétique avec cet outil, il en est ressorti que le retournement de l'aimantation peut être "retardé" pour les nanofils en prenant des épaisseurs relativement plus élevées quantifiables, chose qui n'est pas atteignable aux mêmes épaisseurs, pour des dépôts magnétiques continus (films minces).

Références

- [1] N. Challab, F. Zighem, D. Faurie, M. Haboussi, M. Belmeguenai, P. Lupo, and A. O. Adeyeye, Local Stiffness Effect on Ferromagnetic Response of Nanostructure Arrays in Stretchable Systems, *Physica Status Solidi (RRL) - Rapid Research Letters*, Volume 13, Issue 2, Article number 1800509, 2018.
- [2] N. Challab, D. A. Aboumassound, F. Zighem, D. Faurie, M. Haboussi, Micromagnetic modelling of nanostructures subject to heterogeneous strain fields, soumis dans *Journal of Physics D* (2019) (en révision).
- [3] C.-Y. Liang, S. M. Keller, A. E. Sepulveda, A. Bur, W.-Y. Sun, K. Wetzlar and G. P. Carman, Modeling of magnetoelastic nanostructures with a fully coupled mechanical-micromagnetic model, *Nanotech.* 25, 435701 (2014)
- [4] COMSOL Multiphysics® v. 4.4. www.comsol.com. COMSOL AB, Stockholm, Sweden.
- [5] <http://nmag.soton.ac.uk/nmag/>