

Stage M1

*par*

ISENBART ROMAIN, ROLLIN GUILLAUME

**Directions de facile aimantation dans quelques composés  
 $TRFe_2$  (massif, films et lignes microstructurées)**

*Tuteur :*

C. DUFOUR

2009/2010

NANCY

FACULTÉ DES SCIENCES ET TECHNIQUES  
UNIVERSITÉ HENRI POINCARÉ



# Remerciements

Ce stage dans le milieu de la recherche nous aura été très enrichissant et le bilan qui ressort de ces deux mois est très positif. Il nous aura tout d'abord permis de découvrir la dynamique du monde de la recherche, mais il nous aura surtout appris à mettre en place un projet, à fixer des étapes pour parvenir à son bon déroulement. Ce que nous avons particulièrement apprécié c'est le détachement avec les cours, le fait d'utiliser la théorie comme un outil, de parvenir à surmonter les difficultés, de trouver les bons résultats. C'est dans cette ambiance que nous avons pu mener à bien ce stage. Nous remercions pour cela toutes les personnes qui ont contribué au bon déroulement de celui-ci. Tout d'abord notre tuteur, Mme Dufour, présente pour répondre à nos nombreuses questions et qui aura su nous guider tout au long de ces deux mois. Ensuite nous remercions toutes les personnes qui nous ont aidé pour les recherches bibliographiques, les calculs, la compréhension théorique, à savoir Mr Lacour, Mr Piecuch, Mme Dumesnil. Nous remercions aussi Mr Piecuch et Mr Mangin d'avoir accepté être nos rapporteurs.



# Table des matières

<b>1</b>	<b>Formulation de l'énergie magnétique et du couple magnétique dans les composés <math>TRFe_2</math></b>	<b>8</b>
1.1	Les composés $TRFe_2$	8
1.2	Formulation générale des contributions à l'énergie magnétique et du couple magnétique dans les $TRFe_2$	9
1.2.1	Énergie d'anisotropie magnétocristalline	9
1.2.2	Énergie magnétoélastique	9
1.2.3	Anisotropie de forme	10
1.2.4	Énergie Zeeman	11
1.2.5	Valeurs des différentes constantes utilisées dans le massif	11
1.2.6	Énergie et couple magnétique	11
<b>2</b>	<b>Calculs des énergies et du couple magnétique dans <math>DyFe_2</math>, <math>TbFe_2</math>, <i>Terfenol</i> – <math>D</math></b>	<b>14</b>
2.1	Calcul du couple et de l'énergie magnétique dans les composés massifs	14
2.2	Calculs dans les films et lignes microstructurées	18
2.2.1	Dans les films	18
2.2.2	Dans des lignes microstructurées	22
<b>3</b>	<b>Ajustement de données expérimentales par la méthode des moindres carrés</b>	<b>26</b>
3.1	Reproduction de l'ajustement de C. Fuente[3]	26
3.2	Ajustement sur des données expérimentales	27
3.3	Calcul de couple dans les lignes microstructurées avec $K_i$ et $b_i$ des films (différentes du massif)	29



# Introduction

Le magnétisme des couches minces et objets nanoscopiques est depuis peu de temps l'objet de nombreuses études. Les enjeux de ces études sont bien évidemment les découvertes théoriques possibles mais aussi les retombées industrielles qu'elles engendreraient. La magnétostriction est le lien qui existe entre l'aimantation d'un corps magnétique et ses déformations mécaniques, un peu comme l'effet piézoélectrique d'un corps avec un courant électrique. La magnétostriction agit selon différents effets :

- Tout d'abord la magnétostriction spontanée en volume, il est commun de la représenter par la variation en volume d'un corps magnétique entre son volume normal et son volume s'il était non magnétique. Elle a lieu même sans champs extérieur.
- Un autre effet est la magnétostriction de Joule, découverte par ce dernier au 19<sup>ème</sup> siècle. Il s'agit de la déformation d'un corps magnétique placé dans un champ magnétique. Contrairement à la magnétostriction spontanée qui est isotrope, celle-ci est anisotrope.
- Le dernier effet est en fait l'inverse du précédent, c'est-à-dire que la déformation mécanique du corps va entraîner une modification de ses propriétés magnétiques (notamment les directions d'aimantation).

Comme nous l'avons vu ces propriétés magnétostrictives n'ont lieu que dans les matériaux magnétiques, à savoir qu'il n'existe que deux familles de ce genre, les métaux de transition et les terres rares. La magnétostriction des métaux de transition est assez faible (par rapport aux terres rares) même si certains alliages ont des propriétés magnétostrictive intéressantes comme par exemple le Permalloy, alliage de fer et de nickel. Il en est tout autre pour les terres rares. En effet au début des années 1960 la découverte théorique de la magnétostriction géante a créé un intérêt sur ces matériaux. Par la suite des mesures ont été faites et il s'avère que l'effet créé des déformations dans le plan de base de 100 à 10 000 fois plus importantes que celles créées dans les métaux de transition, ces déformations "record" peuvent être de l'ordre de 1%. Cependant à cause de certaines propriétés des terres rares (faibles températures d'ordre), les effets magnétostrictifs ne peuvent être développés à température ambiante dans ces matériaux.

C'est la Naval Ordnance Laboratory, section recherche de la Navy, qui a la première cherché des matériaux magnétostrictifs à température ambiante, c'était dans les années 1970. Un des chercheurs dont les travaux font toujours office de référence est A. E. Clark. La première idée fut d'allier une terre rare et un métal de transition pour allier les avantages de chacun.

C'est ainsi que le  $TbFe_2$  possède une température de Curie élevée grâce au fer et une forte magnétostriction grâce au Terbium. Il s'agit du Terfenol (TERbium, FEr, Naval Ordnance Laboratory). Cependant la magnétostriction s'observe sous champ magnétique intense (2T) à cause de la forte anisotropie magnéto-cristalline du composé. L'idée a donc été d'allier deux terres rares aux effets antagonistes, c'est-à-dire avec des constantes d'anisotropie de signe opposé afin d'annuler l'anisotropie globale avec un métal de transition, ce composé ternaire est le Terfenol-D, Terfenol auquel on ajoute la terre rare dysprosium. Les proportions afin d'annuler l'anisotropie globale sont 70% de dysprosium et 30% de terbium, environ.

Bien que cela ne fasse que quelques dizaines d'années que ces matériaux ont été découverts, les applications de ces derniers sont nombreuses.

Par exemple une application exploitant l'effet direct : on déforme le matériau via une bobine placée autour ou à proximité de l'échantillon. Il va ainsi se déformer et peut donc entraîner d'autres pièces grâce à cette déformation, il s'agit ici d'un actionneur. De la même manière si la bobine est alimentée par un courant alternatif, la contraction puis dilatation de l'échantillon va créer des ondes dont la fréquence sera fonction de la fréquence du champ magnétique.

Cette fois-ci en utilisant l'effet inverse, en mesurant les propriétés magnétique de l'échantillon on est renseigné sur les contraintes mécaniques qu'il subit, l'échantillon joue ici le rôle de capteur.

Le net avantage des magnétostrictifs par rapport aux piézoélectriques, leur principaux concurrents, est qu'aucun contact n'est nécessaire avec la bobine, alors que pour les piézo ils doivent être par définition en contact avec un circuit électrique. Les sonars sous-marins ont beaucoup utilisé la magnétostriction afin d'émettre et de capter des ondes sonores, d'où la recherche de la Navy dans ce domaine.

Enfin quelques autres applications industrielles :

- Les électrovannes.
- Les micro-pompes pour les têtes d'imprimantes.
- Positionnement automatique des outils avec compensation d'usure.
- Sonars, capteurs.
- Embrayages, moteurs linéaires et rotatifs...

De nombreux travaux ont été consacrés à l'étude de l'anisotropie magnétocristalline dans les composés intermétalliques de terre rare ainsi qu'à la détermination de leur direction de facile aimantation, par mesures d'aimantation macroscopiques via spectrométrie Mössbauer ou RMN. Ci-dessous un résumé de composés  $TRFe_2$  (TR = Terre Rare), informations recueillies dans la thèse de A. Mougin :

Composé $TRFe_2$	Direction de facile aimantation	
	4.2K	300K
$TbFe_2$	$\langle 111 \rangle$	$\langle 111 \rangle$
$DyFe_2$	$\langle 100 \rangle$	$\langle 100 \rangle$
$YFe_2$	$\langle 111 \rangle$	$\langle 111 \rangle$
$ErFe_2$	$\langle 111 \rangle$	$\langle 111 \rangle$
<i>Terfenol - D</i>	$\langle 100 \rangle$	$\langle 111 \rangle$
$SmFe_2$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$

TABLE 1 – Directions de facile aimantation dans  $TRFe_2$  massifs

On remarque immédiatement deux types de comportements : il y a des composés dont les direction d'aimantation ne changent pas avec la température, alors que d'autres subissent une réorientation.

L'élaboration de couches minces est faite par épitaxie. L'épitaxie est une technique de croissance orientée, l'un par rapport à l'autre, de deux cristaux possédant un certain nombre d'éléments de symétrie communs dans leurs réseaux cristallins. Elle est utilisée pour faire croître des couches minces (quelques nanomètres d'épaisseur). On utilise pour cela une surface parfaitement polie d'un monocristal, le substrat, sur lequel seront déposés d'autres atomes. Le substrat est choisi de façon à avoir des paramètres de maille proches de ceux du cristal que l'on veut obtenir.

L'épitaxie induit des contraintes dans les couches de  $TRFe_2$ . Ces contraintes engendrent une contraction dans la direction de croissance et un étirement dans le plan d'épitaxie. Ces déformations entraînent des modifications dans les termes d'énergie anisotropes qui modifient les directions d'aimantation.

Le but de notre stage aura été dans un premier temps de reproduire les résultats, déjà bien connus, des directions de facile aimantation dans des composés  $TRFe_2$ , ainsi que dans les films pour ensuite, une fois la méthode bien maîtrisée et le sujet bien compris, étendre ces méthodes de calcul à des lignes microstructurées sur nos composés. Ces lignes sont fabriquées depuis peu à l'Institut Jean Lamour par lithographie ou gravure. Cette méthode calculatoire consiste à additionner toutes les énergies mises en jeu et à considérer les points de minimisation de l'énergie totale comme des points particuliers de l'aimantation.

Nous avons vu précédemment dans cette introduction les avantages du composé ternaire Terfenol-D, composé de dysprosium, de terbium et de fer. L'étude du  $TbFe_2$ , du  $DyFe_2$  et enfin de l'alliage des deux,  $Dy_{0.7}Tb_{0.3}Fe_2$  était donc le cheminement logique que nous avons suivi.

Il est primordial de bien comprendre les phénomènes liant aimantation et structure, voilà pourquoi dans un premier temps nous allons énoncer les différentes énergies mises en jeu, les expliquer, introduire les différences qu'apportent dans les calculs le fait de considérer un composé massif, un film ou des lignes microstructurées. Dans cette même partie nous introduirons le couple qui est mesuré expérimentalement. C'est grâce à ce couple mesuré que nous avons pu "calibrer" notre méthode de détermination de direction d'aimantation.

Une fois ces bases mises en place nous développerons la partie pratique de notre stage, les calculs de directions de facile aimantation. Des mesures ont déjà été faite pour le massif et les films, elles nous serviront de point de comparaison pour évaluer notre méthode, nous pourrons ensuite calculer ces directions d'aimantation dans les lignes afin de voir s'il y a une influence de la réduction des dimensions sur les directions de facile aimantation.

# Chapitre 1

## Formulation de l'énergie magnétique et du couple magnétique dans les composés $TRFe_2$

Dans ce premier chapitre nous allons aborder des aspects théoriques afin d'expliquer l'anisotropie des cristaux  $TRFe_2$ . Diverses énergies plus ou moins importantes sont mises en jeu, nous allons ici les détailler. Nous arriverons ensuite en fin de ce chapitre à la formulation du couple magnétique. Il est important d'expliquer cette notion de couple car il s'agit de la grandeur physique mesurée que nous exploitons.

### 1.1 Les composés $TRFe_2$

La série des métaux de terres rares s'étend dans le tableau de Mendeleïev du lanthane au lutétium et leur classement correspond au remplissage de la couche électronique  $4f$ . Leur configuration électronique est donc du type  $[Xe]4f^n5d^16s^1$ , pour le lanthane  $n = 0$  et pour le lutétium  $n = 14$ . L'extension spatiale des orbitales  $4f$  est très faible, conséquence : les électrons interagissent très fortement entre eux.

La plupart des composés  $TRFe_2$  cristallisent dans la structure dite "phase de Laves" qui est représentée ci-dessous, en rouge les atomes de Terre Rare, jaune le fer :

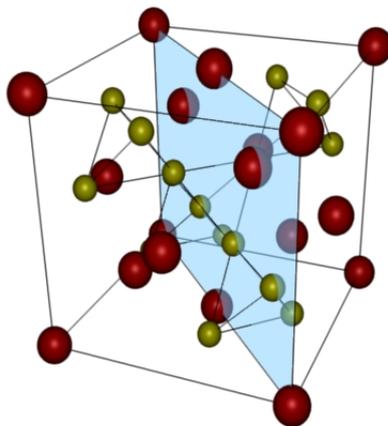


FIGURE 1.1 – Phase de Laves

## 1.2 Formulation générale des contributions à l'énergie magnétique et du couple magnétique dans les TRFe<sub>2</sub>

### 1.2.1 Énergie d'anisotropie magnétocristalline

Dans un cristal ferromagnétique, il existe une énergie qui oriente l'aimantation le long de certains axes cristallographiques définis, appelés directions de facile aimantation, il s'agit de l'énergie d'anisotropie magnétocristalline. L'anisotropie respectant les symétries du cristal sa formule phénoménologique peut s'exprimer en fonction des cosinus directeurs,  $\alpha_j$  avec  $j = x, y, z$  et des constantes d'anisotropie,  $K_j$  avec  $j = 1, 2, 3$ . On doit cette formulation à Akulov [1].

$$F_k = K_1(\alpha_x^2\alpha_y^2 + \alpha_x^2\alpha_z^2 + \alpha_y^2\alpha_z^2) + K_2(\alpha_x^2\alpha_y^2\alpha_z^2) + K_3(\alpha_x^4\alpha_y^4 + \alpha_x^4\alpha_z^4 + \alpha_y^4\alpha_z^4) \quad (1.1)$$

Où les  $K_i$  sont les constantes d'anisotropie en  $erg/cm^3$ .

Les cosinus directeurs sont de la forme :

$$\begin{cases} \alpha_x = \sin \theta \cos \beta \\ \alpha_y = \sin \theta \sin \beta \\ \alpha_z = \cos \theta \end{cases}$$

$\theta$  est l'angle avec l'axe [001] du cristal et  $\beta$  est l'angle avec l'axe [100].

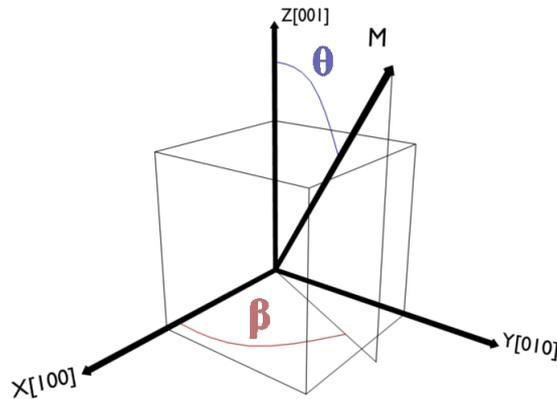


FIGURE 1.2 – Schéma des angles des cosinus directeurs

On peut déduire via la littérature et d'après les constantes d'anisotropie les directions particulières d'aimantation grâce à un tableau édité par Cullity [4] pour ensuite comparer nos résultats d'ajustement avec ces résultats théoriques :

$K_1$	+	+	+	-	-	-
$K_2$	$+\infty$ à $-9K_1/4$	$-9K_1/4$ à $-9K_1$	$-9K_1$ à $\infty$	$-\infty$ à $-9   K_1   /4$	$9   K_1   /4$ à $9   K_1  $	$9   K_1  $ à $+\infty$
Facile	$\langle 100 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$
Moyenne	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\langle 100 \rangle$
Difficile	$\langle 111 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	$\langle 111 \rangle$

TABLE 1.1 – Directions d'aimantations dans un cristal cubique en fonction des  $K_i$

### 1.2.2 Énergie magnétoélastique

Il existe dans les matériaux un effet appelé effet magnétostrictif qui couple l'aimantation du matériau et ses déformations. Il existe principalement deux types de magnétostrictions :

- Magnétostriction spontanée.
- Magnétostriction forcée ou de Joule.

La spontanée se produit dans les matériaux magnétiques, même à champ magnétique nul, lorsqu'ils sont portés en dessous de leur température dite de Curie. Des déformations se produisent dues au fait que l'aimantation choisie une direction privilégiée. La symétrie passe de cubique à quadratique.

La magnétostriction forcée apparait lorsque le matériau est placé sous un champ magnétique. En effet le matériau, qui possédait plusieurs domaines magnétiques selon des directions qui se compensent, devient monodomaine, les déformations se produisent alors dans le même sens et l'effet devient observable.

Le modèle de magnétostriction développé par Clark et Cullen en 1976 [2] nous donne une variation relative dans une direction :

$$\frac{\Delta l}{l} = \lambda_\alpha + \frac{3}{2}\lambda_{100}(\alpha_x^2\beta_x^2 + \alpha_y^2\beta_y^2 + \alpha_z^2\beta_z^2 - \frac{1}{3}) + 3\lambda_{111}(\alpha_x\beta_y\alpha_y\beta_x + \alpha_x\beta_x\alpha_z\beta_z + \alpha_z\beta_z\alpha_y\beta_y) \quad (1.2)$$

Où  $\alpha_i$  sont les coefficients directeurs de l'aimantation,

$\beta_i$  sont les coefficients directeurs de la direction de variation,

$\lambda_\alpha$  est la constante de magnétostriction associée à la variation de volume

qui est isotrope et ne diminue pas la symétrie.

$\lambda_{100}$  est la constante de magnétostriction associée à la déformation relative dans la direction [100] lorsque  $\vec{M}$  est dans cette direction.

$\lambda_{111}$  est la constante de magnétostriction associée à la déformation relative dans la direction [111] lorsque  $\vec{M}$  est dans cette direction.

Dans une approche phénoménologique, l'énergie magnétoélastique est une fonction des cosinus directeurs de la direction d'aimantation et des déformations. Dans une structure cubique, on a :

$$F_{m.e.} = b_0(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) + b_1(\alpha_x^2\epsilon_{xx} + \alpha_y^2\epsilon_{yy} + \alpha_z^2\epsilon_{zz}) + b_2(\alpha_x\alpha_y\epsilon_{xy} + \alpha_x\alpha_z\epsilon_{xz} + \alpha_y\alpha_z\epsilon_{yz}) \quad (1.3)$$

Où les  $b_i$  sont les coefficients magnétoélastiques et les  $\epsilon_{ij}$  les composantes du tenseur des déformations dans un système d'axes cartésiens.

L'énergie élastique est :

$$F_{elast.} = \frac{1}{2}C_{11}(\epsilon_{xx}^2 + \epsilon_{yy}^2 + \epsilon_{zz}^2) + C_{12}(\epsilon_{xx}^2\epsilon_{yy}^2 + \epsilon_{xx}^2\epsilon_{zz}^2 + \epsilon_{yy}^2\epsilon_{zz}^2) + \frac{1}{2}C_{44}(\epsilon_{xy}^2 + \epsilon_{xz}^2 + \epsilon_{yz}^2) \quad (1.4)$$

Où les  $C_{ij}$  sont les constantes élastiques.

La direction de facile aimantation étant fixée, les déformations à l'équilibre sont celles pour laquelle la dérivée, par rapport aux déformations  $\epsilon_{ij}$ , de la somme de ces deux énergies est nulle. Ainsi pour une structure cubique on obtient :

$$\begin{aligned} \epsilon_{ii}^{eq} &= \frac{-b_1\alpha_i^2}{C_{11}-C_{12}} + \frac{-b_0}{C_{11}+2C_{12}} + \frac{C_{12}b_0}{(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})} \\ \epsilon_{ij}^{eq} &= \frac{-b_2\alpha_i\alpha_j}{C_{44}} \end{aligned} \quad (1.5)$$

En substituant les valeurs des déformations à l'équilibre dans l'équation de la magnétostriction, les constantes de magnétostriction se déduisent alors des constantes magnétoélastiques et des constantes élastiques et s'expriment ainsi :

$$\begin{aligned} \lambda_\alpha &= \frac{-3b_0}{C_{11}+C_{12}} + \frac{-3C_{12}b_0}{(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})} \\ \lambda_{100} &= \frac{-2b_1}{3(C_{11}-C_{12})} \\ \lambda_{111} &= \frac{-b_2}{3C_{44}} \end{aligned} \quad (1.6)$$

### 1.2.3 Anisotropie de forme

Dans les systèmes de basse dimension il existe une nouvelle énergie appelée anisotropie de forme. Elle est liée à l'existence d'un champ démagnétisant  $\vec{H}_d$  dans la matière.

$\vec{H}_d$  s'exprime en fonction de  $\vec{N}$  qui est un tenseur des coefficients de champ démagnétisant et  $\vec{M}$  l'aimantation :

$$\vec{H}_d = -\vec{N}\vec{M} \quad (1.7)$$

Le tenseur  $\vec{N}$  a des propriétés spécifiques en fonction de la géométrie de l'échantillon, la plus utilisée est l'ellipsoïde pour laquelle la matrice de  $\vec{N}$  est diagonal et somme des éléments diagonaux égale à  $4\pi$  en unités CGS et 1 en S.I. :

$$\begin{aligned} N_{xx} + N_{yy} + N_{zz} &= 4\pi(CGS) \\ N_{xx} + N_{yy} + N_{zz} &= 1(S.I.) \end{aligned} \quad (1.8)$$

Ces éléments sont rapportés aux axes a,b,c de symétrie de l'ellipsoïde.

L'énergie quant à elle est de la forme :

$$F_d = -\frac{1}{2}\vec{M} \cdot \vec{H}_d \quad (1.9)$$

### 1.2.4 Energie Zeeman

Si une couche magnétique est placée dans une magnétique extérieur  $\vec{H}$ , s'ajoute une énergie. Elle tend à orienter les moments dans la direction et le sens du champ. Sa formule est donnée par :

$$F_z = -\mu_0^2 \vec{H}_{ap} \cdot \vec{M}_s \quad (1.10)$$

### 1.2.5 Valeurs des différentes constantes utilisées dans le massif

Pour faciliter la suite voici un tableau récapitulatif des différentes données utilisées ainsi que leur provenance :

	$K_1$ $\times 10^{-7}$	$K_2$ $\times 10^{-7}$	$b_1$ $\times 10^{-9}$	$b_2$ $\times 10^{-9}$	$\lambda_{100}$ $\times 10^6$	$\lambda_{111}$ $\times 10^6$	$C_{11}$ $\times 10^{-11}$	$C_{12}$ $\times 10^{-11}$	$C_{44}$ $\times 10^{-11}$
$TbFe_2$	$-6.3^a$	0.6	$-0.12^a$ 0, 12	$-3, 69^{**}$	100 -100	2460 <sup>a</sup>	14 <sup>**</sup>	6 <sup>**</sup>	5 <sup>**</sup>
$DyFe_2$	$2.45^a$ $4.2^b$	$-0.5^a$ $-0.4^b$	$-0.085^*$	$-1.8^b$	$-70^c$	1260 <sup>a</sup>	14, 58 <sup>**</sup>	6, 80 <sup>**</sup>	4.70 <sup>**</sup>
$T - D$	$-0.3^a$ $-0.66^b$	$-0.17^a$ $0.34^b$	$-0.103^*$	$-2.3^b$	90 <sup>d</sup>	1620 <sup>a</sup>	14, 1 <sup>**</sup>	6, 48 <sup>**</sup>	4.82 <sup>**</sup>

TABLE 1.2 – Tableau des constantes d'anisotropie utilisées

NB : Les unités des constantes sont respectivement, pour les  $K_i, b_i$  des  $erg/cm^3$  et pour les  $C_{ii}$  des  $dyn/cm^2$ , unités CGS.

Provenance des constantes :

<sup>a</sup> V.Oderno Thèse (1996)

<sup>b</sup> A. Mougín Thèse (1999)

<sup>c</sup> Clark (1977)

<sup>d</sup> J. Degauque [6]

\* Calculé par nos soins grâce à la formule :

$$\lambda_{100} = \frac{-2b_1}{3(C_{11} - C_{12})}$$

\*\* D'après l'article de M.Huth et C.P.Flynn (*Magnetism and microstructure in epitaxial TRFe<sub>2</sub> (111) thin films, Phys. Rev. B*) les constantes élastiques sont difficiles à trouver, on utilise les ordres de grandeur des deux autres matériaux TRFe<sub>2</sub> ainsi que l'ordre de grandeur donné par V. Oderno dans sa thèse concernant les  $\lambda_{100}$  dans les composés TRFe<sub>2</sub>.

### 1.2.6 Energie et couple magnétique

Pour déterminer les directions de facile aimantation on introduit le couple, il est égal à moins la dérivée par rapport à  $\theta$  de la somme des énergies précédentes. Lorsque le couple s'annule on a une direction particulière de l'aimantation. Cette notion de couple est très importante car il s'agit de la grandeur physique mesurée expérimentalement.

En effet, lorsqu'on applique un champ magnétique selon une direction qui n'est pas la direction facile sur des échantillons magnétiques, ce champ exerce un couple (force) pour tenter d'aligner l'aimantation avec le champ. C'est-à-dire que l'aimantation est tirée dans une direction autre que l'axe facile par le champ, l'anisotropie tente de la ramener dans l'axe de direction de facile aimantation.

Au cours des mesures de couple, l'échantillon est placé sur un support tournant. Un champ fixe est appliqué, l'échantillon effectue des rotations de 30° et pour chaque pas d'angle les composantes parallèles et perpendiculaires

au champ de l'aimantation sont mesurées.

NB : Les formules suivantes sont valable dans les systèmes cristallins cubiques.

$$\tau = -\frac{\partial F_{tot.}}{\partial \theta} \quad (1.11)$$

### Energie et couple dans le massif

Dans le cas du composé massif, dans l'énergie magnétoélastique nous n'introduisons pas le terme en  $b_0$  qui est isotrope et ne fait qu'ajouter une énergie constante qu'elle que soit l'orientation du champ magnétique et nous négligeons  $b_1$  celui-ci étant beaucoup plus petit que  $b_2$ . L'énergie se réduit donc à :

$$F_k = K_1(\alpha_x^2\alpha_y^2 + \alpha_x^2\alpha_z^2 + \alpha_y^2\alpha_z^2) + K_2(\alpha_x^2\alpha_y^2\alpha_z^2) + b_2(\alpha_x\alpha_y\epsilon_{xy} + \alpha_x\alpha_z\epsilon_{xz} + \alpha_y\alpha_z\epsilon_{yz}) \quad (1.12)$$

Pour des raisons ultérieures nous fixons l'aimantation dans le plan (110) du cube, ainsi l'aimantation ne dépend plus que de  $\theta$ . Les cosinus directeurs deviennent :

$$\begin{cases} \alpha_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ \alpha_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ \alpha_z = \cos \theta \end{cases}$$

Nous remplaçons les déformations par celles à l'équilibre. Voici l'expression finale du couple dans les composés massifs :

$$\tau = \frac{1}{32}((16b_2\epsilon_{xy}^{eq} - 8K_1 + K_2 + 3K_2 \cos(4\theta) \sin(2\theta) - 4 \cos(2\theta)(4\sqrt{2}b_2(\epsilon_{xz}^{eq} - \epsilon_{yz}^{eq}) + (6K_1 + K_2) \sin(2\theta))) \quad (1.13)$$

### Energie et couple dans les films

Dans notre cas, il s'agit de film (et plus tard de lignes) epitaxiés (lithographiées) selon le plan (110), le couple sera calculé dans ce plan, pour cela nous devons définir la base  $x'$ ,  $y'$ ,  $z'$  telle que :

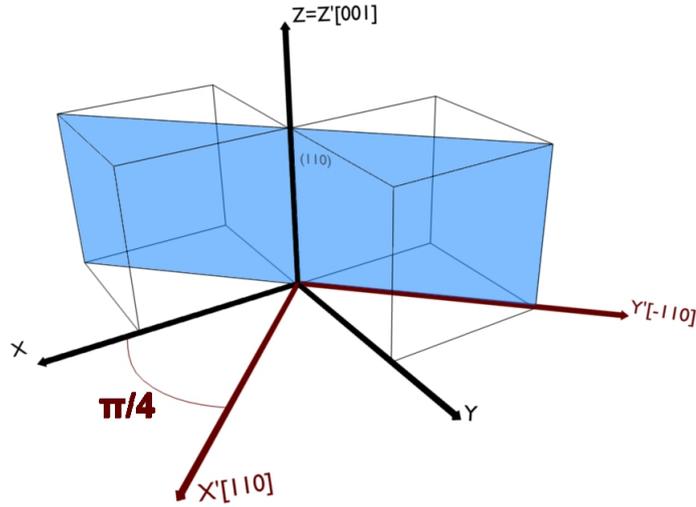


FIGURE 1.3 – Changement de base.

Les énergies deviennent :

$$\begin{aligned} F_k &= K_1\left(\frac{1}{4} \sin^4(\theta) + \sin^2(\theta) \cos^2(\theta)\right) + \frac{K_2}{4}(\sin^4 \theta \cos^2 \theta) \\ F_{m.e.} &= b_1\left(\frac{1}{2} \sin^2 \theta(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) + \cos^2 \theta \epsilon_{zz}\right) + b_2\left(\frac{-1}{2} \sin^2 \theta(\epsilon_{xy} + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta(\epsilon_{xz} - \epsilon_{yz}))\right) \\ F_d &= \pi M^2(\alpha_x + \alpha_y)^2 \end{aligned} \quad (1.14)$$

M est en  $emu/cm^3$ ,  $F_d$  est en  $erg/cm^3$ .

$F_d$  s'annule car  $\vec{M}$  fixé dans le plan, le terme  $(\alpha_x + \alpha_y)^2$  s'annule.

Il faut également exprimer les termes du tenseur de déformation dans la nouvelle base, ayant fait une rotation de  $\pi/4$  par rapport à la précédente. Dans cette ancienne base le tenseur est :

$$T_\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix}$$

La matrice de rotation de l'angle  $\pi/4$  est

$$R = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

De cette manière on trouve comme tenseur dans la nouvelle base :

$$T'_\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} + \epsilon_{xy} & 0 & \frac{\epsilon_{xz} + \epsilon_{yz}}{\sqrt{2}} \\ 0 & \epsilon_{xx} - \epsilon_{xy} & \frac{-\epsilon_{xz} + \epsilon_{yz}}{\sqrt{2}} \\ \frac{\epsilon_{zx} + \epsilon_{zy}}{\sqrt{2}} & \frac{-\epsilon_{zx} + \epsilon_{zy}}{\sqrt{2}} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix}$$

On exprime les déformations en fonction de celles de la nouvelle base :

$$\begin{aligned} \epsilon_{xx} &= \epsilon_{yy} = \frac{\epsilon_{xx'} + \epsilon_{yy'}}{2} \\ \epsilon_{zz} &= \epsilon_{zz'} \\ \epsilon_{xz} &= \frac{\epsilon_{xz'} - \epsilon_{yz'}}{\sqrt{2}} \\ \epsilon_{zx} &= \frac{\epsilon_{zx'} - \epsilon_{zy'}}{\sqrt{2}} \\ \epsilon_{yz} &= \frac{\epsilon_{xz'} + \epsilon_{yz'}}{\sqrt{2}} \\ \epsilon_{zy} &= \frac{\epsilon_{zx'} + \epsilon_{zy'}}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (1.15)$$

Nous trouvons au final la dérivée par rapport à l'angle  $\theta$  :

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{tot.}}{\partial \theta} &= -b_2 \epsilon_{yz'} \cos(2\theta) + \frac{K_1}{4} + \frac{K_2}{64} + \frac{b_1}{2} (\epsilon_{xx'} + \epsilon_{yy'} - 2\epsilon_{zz'}) \\ &+ \frac{b_2}{4} (\epsilon_{yy'} - \epsilon_{xx'}) \sin(2\theta) + \left( \frac{3K_1}{8} + \frac{K_2}{16} \right) \sin(4\theta) - \frac{3K_2}{64} \sin(6\theta) \end{aligned} \quad (1.16)$$

On remémore :  $\tau = -\frac{\partial E_{tot.}}{\partial \theta}$ .

### Energie et couple dans les lignes microstructurées

Ici pour seule l'énergie de forme change. Nous assimilons nos lignes à des ellipsoïdes allongées et dans ce cas le tenseur de facteurs démagnétisant  $\bar{N}$  est diagonal. Nos lignes se trouvant dans le plan (110) le tenseur  $\bar{N}$  est diagonal dans la base  $x', y', z'$ . Nous effectuons donc une rotation  $\frac{-\pi}{4}$  et trouvons ce même tenseur dans la base  $x, y, z$  :

$$N = \begin{pmatrix} \frac{N'_{xx} + N'_{yy}}{2} & \frac{N'_{xx} - N'_{yy}}{2} & 0 \\ \frac{N'_{xx} - N'_{yy}}{2} & \frac{N'_{xx} + N'_{yy}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & N'_{zz} \end{pmatrix}$$

Nous obtenons finalement l'énergie démagnétisante pour des lignes microstructurées avec les cosinus directeurs pour un angle de  $\pi/4$  :

$$F_D = \frac{1}{2} \mu_0 M^2 (\sin^2(\theta) N'_{yy} + \cos^2(\theta) N'_{zz}) \quad (1.17)$$

On dérive cette expression et on l'inclut dans le couple :

$$\begin{aligned} \tau &= -b_2 \epsilon_{yz'} \cos(2\theta) + \frac{K_1}{4} + \frac{K_2}{64} + \frac{b_1}{2} (\epsilon_{xx'} + \epsilon_{yy'} - 2\epsilon_{zz'}) + \frac{b_2}{4} (\epsilon_{yy'} - \epsilon_{xx'}) \sin(2\theta) \\ &+ \left( \frac{3K_1}{8} + \frac{K_2}{16} \right) \sin(4\theta) - \frac{3K_2}{64} \sin(6\theta) - \frac{1}{2} \mu_0 M^2 (\sin(2\theta) (N'_{yy} - N'_{zz})) \end{aligned} \quad (1.18)$$

## Chapitre 2

# Calculs des énergies et du couple magnétique dans $DyFe_2$ , $TbFe_2$ , *Terfenol – D*

### 2.1 Calcul du couple et de l'énergie magnétique dans les composés massifs

#### Détermination des directions de facile aimantation à partir des variations angulaires du couple magnétique

Premièrement nous calculons les déformations pour les composés massifs grâce aux formules vues précédemment :

$$\begin{aligned} \epsilon_{xy}^{eq} &= \frac{-b_2 \alpha_x \alpha_y}{C_{44}} \\ \epsilon_{xz}^{eq} &= \frac{-b_2 \alpha_x \alpha_z}{C_{44}} \\ \epsilon_{yz}^{eq} &= \frac{-b_2 \alpha_y \alpha_z}{C_{44}} \end{aligned} \quad (2.1)$$

Les pointillés représente le couple calculé en tenant compte seulement de l'énergie magnétocristalline ; le trait noir représente le couple en tenant compte de la somme des énergies magnétocristalline et magnétoélastique .

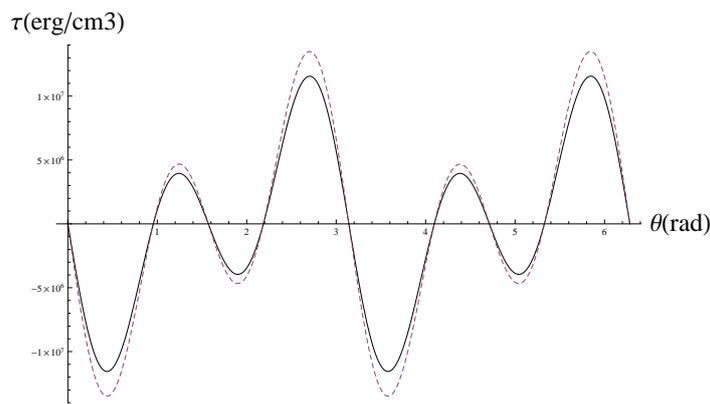


FIGURE 2.1 –  $DyFe_2$  massif à 300K en trait noir plein.

On trouve pour les zéros d'énergie des angles  $\theta$  tels que, en degrés :

/	$\theta$
1er zéro	0
2ème zéro	54.74
3ème zéro	90

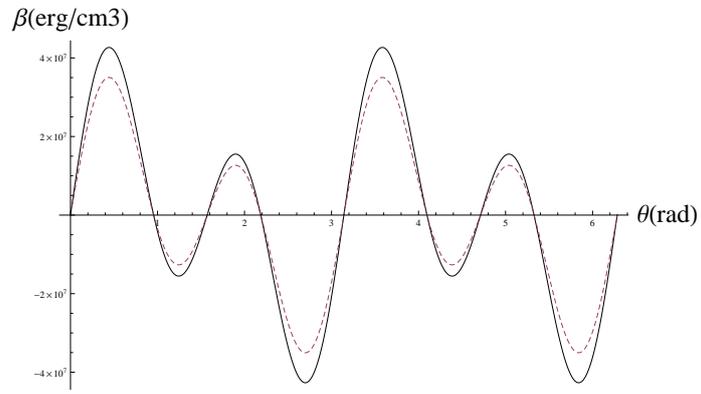


FIGURE 2.2 –  $TbFe_2$  massif à 300K en trait noir plein.

/	$\theta$
1er zéro	0
2ème zéro	54.74
3ème zéro	90

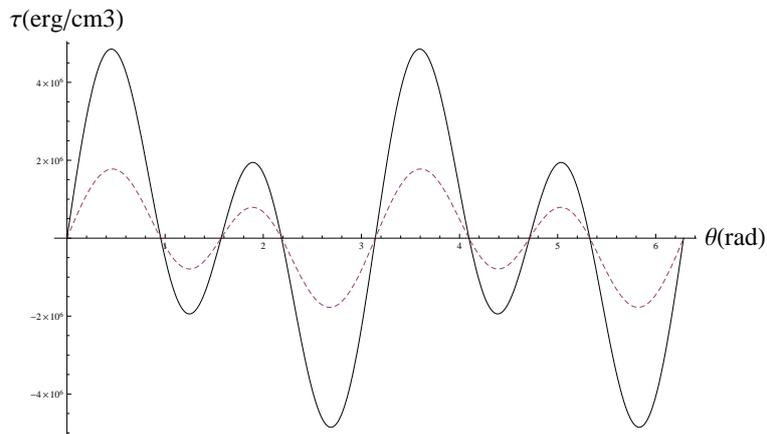


FIGURE 2.3 – *Terfenol* –  $D$  massif à 300K en trait noir plein.

/	$\theta$
1er zéro	0
2ème zéro	54.74
3ème zéro	90

### Exploitation des courbes de couple

$DyFe_2$  : Axes faciles :  $\langle 100 \rangle$ ,  
 Axes moyens :  $\langle 110 \rangle$ ,  
 Axes difficiles :  $\langle 111 \rangle$

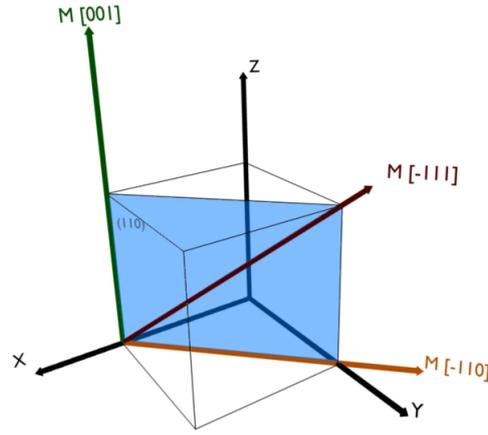


FIGURE 2.4 – Directions d'aimantation dans le  $DyFe_2$  massif à 300K

$TbFe_2$  : Axes faciles :  $\langle 111 \rangle$ ,  
 Axes moyens :  $\langle 110 \rangle$ ,  
 Axes difficiles :  $\langle 100 \rangle$

$Terfenol - D$  : Axes faciles :  $\langle 111 \rangle$ ,  
 Axes moyens :  $\langle 110 \rangle$ ,  
 Axes difficiles :  $\langle 100 \rangle$

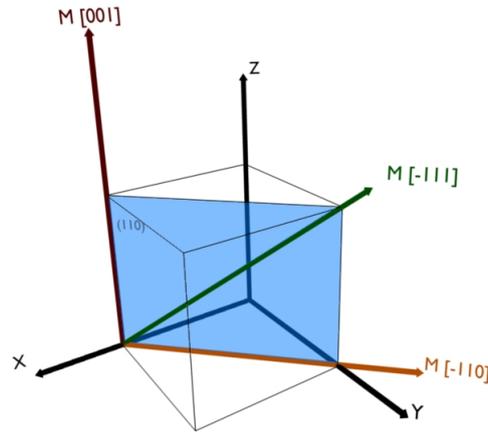


FIGURE 2.5 – Directions d'aimantation dans le  $TbFe_2$  et  $Terf - D$  massif à 300K

Nous voyons pour les 3 que l'ajout de l'énergie magnétoélastique ne change pas les directions de faciles aimantations cela agit uniquement sur l'amplitude du couple.

Ces résultats de directions d'aimantation ont été obtenu graphiquement. En effet, en regardant la courbe du couple on relève les points où il est nul.

- Si le couple s'annule dans une partie où il est décroissant alors il s'agit d'une direction de facile aimantation.
- Si le couple s'annule dans une partie où il est croissant alors il s'agit d'une direction de difficile aimantation.
- A deux parties décroissantes (ou croissantes) différentes on attribuera à la pente avec le moins d'amplitude la direction de moyenne aimantation.

Nous avons ensuite comparés ces résultats avec la théorie, obtenue grâce au tableau des constantes d'anisotropie 9, nous avons bien sûr trouvé les mêmes résultats :

$DyFe_2$  :  $K_1 = 2.45 \times 10^7$   
 $K_2 = -0.5 \times 10^7$   
 > On est alors dans la 1ère colonne du tableau.

$TbFe_2$  et  $Terf - D$  :  $K_1^{Tb} = -6.3 \times 10^7$ ,  $K_1^{Terf} = -0.3 \times 10^7$   
 $K_1^{Tb} = 0.6 \times 10^7$ ,  $K_1^{Terf} = -0.17 \times 10^7$   
 > On est alors dans la 4ème colonne du tableau.

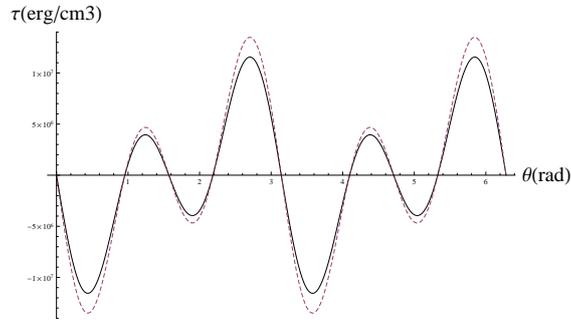


FIGURE 2.6 – Cartes d'énergie du  $DyFe_2$  massif à 300K

### Détermination des directions de facile aimantation à partir des cartographies d'énergie magnétique

$\theta$	$\beta$	Direction
180	/	$[00\bar{1}]$
90	180	$[\bar{1}00]$
90	90	$[010]$

TABLE 2.1 – Direction facile d'aimantation pour le  $DyFe_2$ , massif.

Résultats en accord avec ceux trouvés dans le couple, une direction de facile aimantation du type  $\langle 100 \rangle$ .

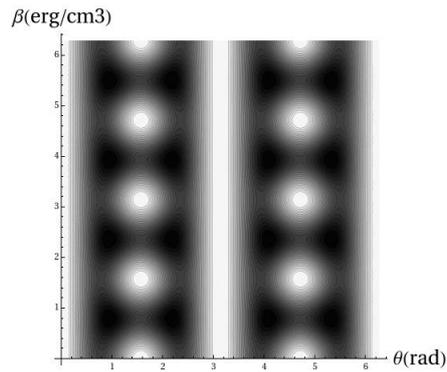


FIGURE 2.7 – Carte d'énergie du  $TbFe_2$  massif à 300K

$\theta$	$\beta$	Direction
54.7	45	$[111]$
125.3	45	$[111]$
54.7	135	$[111]$

TABLE 2.2 – Directions faciles d'aimantation pour le  $TbFe_2$ , massif.

Résultats en accord avec ceux trouvés dans le couple, une direction de facile aimantation du type  $\langle 111 \rangle$ .

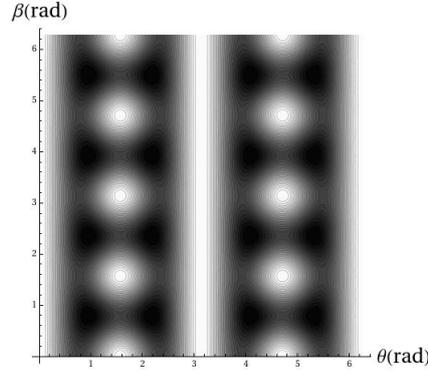


FIGURE 2.8 – Carte d'énergie du *Terfenol – D* massif à 300K

$\theta$	$\beta$	Direction
54.7	45	[111]
125.3	45	[111]
54.7	135	[111]

TABLE 2.3 – Directions faciles d'aimantation pour le Terfenol-D, massif.

Résultats en accord avec ceux trouvés dans le couple, une direction de facile aimantation du type  $\langle 111 \rangle$ .

Nous retrouvons donc les mêmes résultats, preuve que ces deux visualisations différentes à partir des énergies sont bonnes et peuvent être complémentaire dans des cas où l'aimantation peut se déduire d'un seul angle ou si il en faut deux.

## 2.2 Calculs dans les films et lignes microstructurées

Les films sont déformés par l'épitaxie, leurs déformations sont donc différentes de celles des composés massif ; dans les calculs suivants, nous utiliserons les valeurs des déformations mesurées par diffraction de rayons X. Dans les films les constantes  $K_i$  et  $b_i$  peuvent être différentes du massif. Dans ce paragraphe, nous allons cependant utiliser les constantes de massif. Car dans un premier temps, notre but est de voir l'influence sur la courbe de couple des déformations dues à l'épitaxie.

Tout au long du stage nous avons utilisé pour nos calculs le logiciel Mathématique. Assez simple d'utilisation et relativement intuitif il nous a permis d'ajuster mathématiquement les points expérimentaux de mesure de couple avec notre formule théorique pour ce dernier. C'est ainsi que nous avons pu déduire des grandeurs physiques telles que les constantes d'anisotropie par exemple.

### 2.2.1 Dans les films

Il à été mesuré des redirections d'aimantation dans le cas des films minces de type  $TRFe_2$ , nous allons donc tenter à partir d'une simulation de voir ces modifications de direction de facile aimantation, pour ce faire nous utiliserons les constantes du massif, et les déformations du film mesurées sur une couche mince d'épaisseur 100nm.

Voici les résultats obtenus avec les déformations suivantes :

$$\begin{aligned} \epsilon_{xx'} &= -0.55\% \\ \epsilon_{yy'} &= 0.63\% \\ \epsilon_{zz'} &= 0.31\% \end{aligned}$$

On néglige  $\epsilon_{zz'}$  et  $\epsilon_{xz'}$

Ces valeurs ont été obtenues par mesure de diffraction aux rayons X.

#### Composé $DyFe_2$

En rouge, le couple pour le composé massif, en noir celui pour le film.

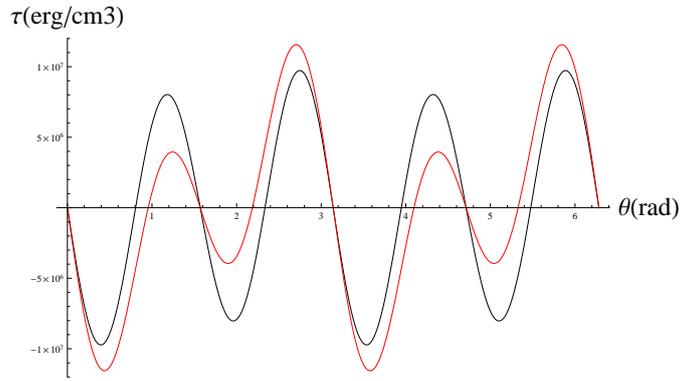


FIGURE 2.9 – Simulation du couple dans un film de 100nm de  $DyFe_2$ , en noir. En rouge le massif.

/	Film	Massif
Direction facile	0	0
Direction difficile	46.18	54.75
Direction moyenne	90	90

TABLE 2.4 – Comparaison film/massif pour  $DyFe_2$

On voit que les directions faciles et moyennes ne changent pas par rapport au massif, en revanche les axes difficiles changent d'environ  $8,6^\circ$  vers la direction  $[001]$ .

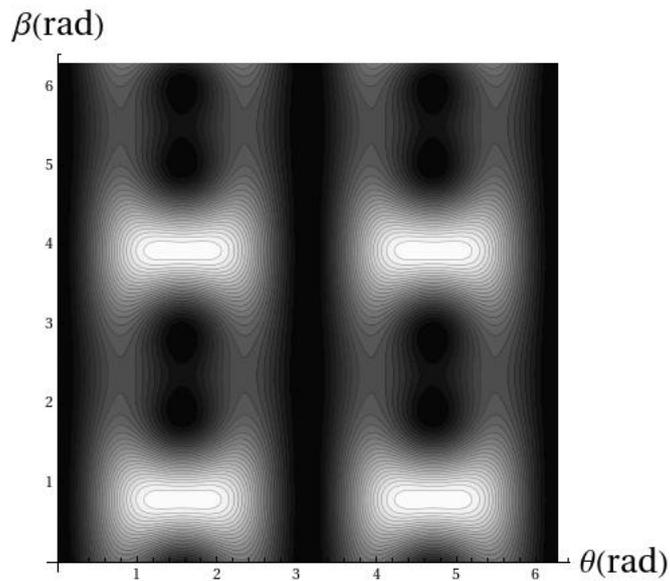


FIGURE 2.10 – Simulation de l'énergie dans un film de 100nm de  $DyFe_2$

Film		Massif	
$\theta$	$\beta$	$\theta$	$\beta$
90	108.42	90	90

TABLE 2.5 – Direction facile d'aimantation pour le  $DyFe_2$ , film/massif.

On voit la même chose que pour le couple en  $\theta$ , pas de changement de direction pour les directions faciles, en revanche elles tournent en  $\beta$  de  $18^\circ$  vers la direction  $[\bar{1}10]$ . Ce qui est proche des résultats obtenus par les simulations de A. Mougin dans sa thèse, par contre nous sommes confrontés au même problème qu'elle a à savoir que ses expériences par spectrométrie Mossbauer donne une rotation de  $30^\circ$  en  $\beta$  et de  $10^\circ$  en  $\theta$  par rapport au massif, faits que ne prédisent pas nos calculs.

## Composé $TbFe_2$

N'ayant pas trouvé les valeurs des  $b_i$  dans la littérature, nous utilisons des valeurs du bon ordre de grandeur ( $10^9 \text{ erg/cm}^3$ ). De plus, nos calculs ayant montré que l'influence du signe de  $b_1 > 0$  était négligeable, nous avons choisis  $b_1 > 0$ .

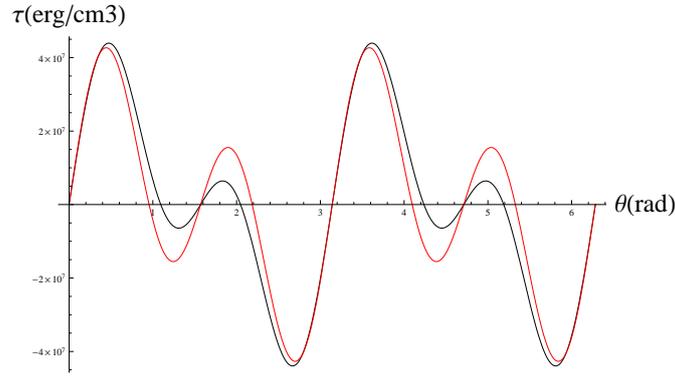


FIGURE 2.11 – Simulation du couple dans un film de 100nm de  $TbFe_2$ , en noir. En rouge le massif.

/	Film	Massif
Direction facile	62.72	54.74
Direction difficile	0	0
Direction moyenne	90	90

TABLE 2.6 – Comparaison film/massif pour  $TbFe_2$

On voit que les directions difficiles et moyennes ne changent pas par rapport au massif, en revanche les axes faciles changent d'environ  $8^\circ$  vers la direction  $[110]$ .

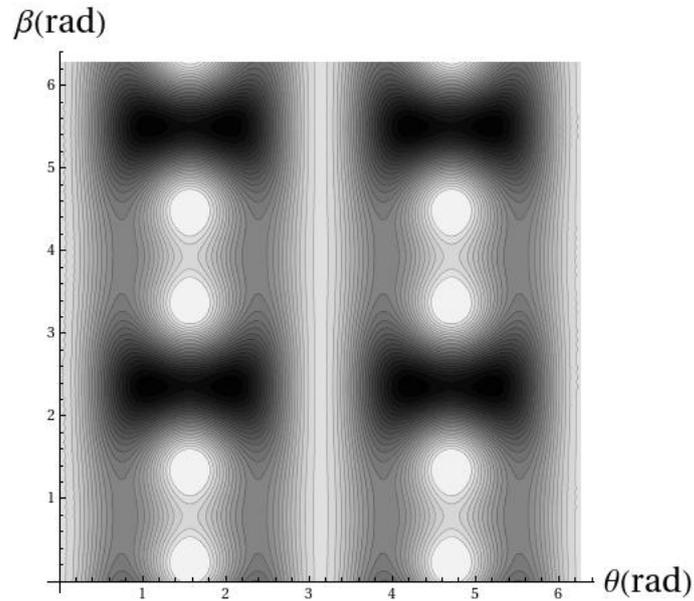


FIGURE 2.12 – Simulation de l'énergie dans un film de  $TbFe_2$

Film		Massif	
$\theta$	$\beta$	$\theta$	$\beta$
62.72	135	54.74	135

TABLE 2.7 – Direction facile d'aimantation pour le  $TbFe_2$ , film/massif.

Mêmes résultats que pour le couple, les directions faciles changent de  $8^\circ$  vers  $[\bar{1}10]$  mais ne changent pas en  $\beta$ . L'aimantation se situe donc, d'après cette situation dans le plan (110) et c'est rapproché de la direction  $[\bar{1}10]$  de  $8^\circ$ .

### Composé Terfenol-D

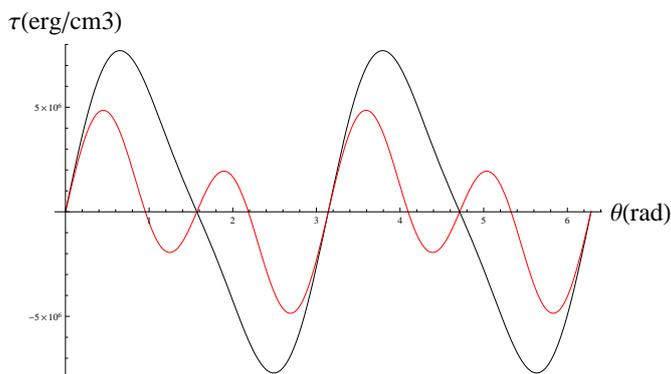


FIGURE 2.13 – Simulation du couple dans un film de 100nm de Terfenol-D, en noir. En rouge le massif.

/	Film	Massif
Direction facile	90	54.74
Direction difficile	0	0

TABLE 2.8 – Comparaison film/massif pour Terfenol-D

On voit que les directions difficiles ne changent pas par rapport au massif, en revanche les axes faciles changent d'environ  $35^\circ$  vers la direction  $[\bar{1}10]$ .

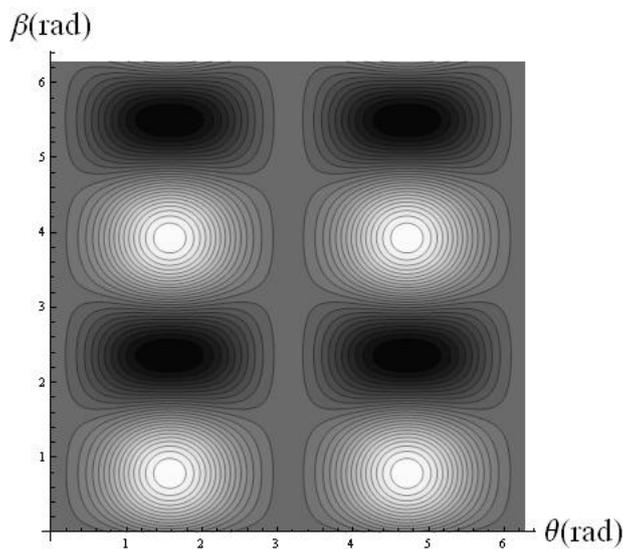


FIGURE 2.14 – Simulation de l'énergie dans un film de Terfenol-D

Film		Massif	
$\theta$	$\beta$	$\theta$	$\beta$
90	135	54.74	135

TABLE 2.9 – Direction facile d'aimantation pour le Terfenol-D, film/massif.

On voit la même chose que pour le couple, les directions faciles tournent d'environ  $35^\circ$  vers la direction  $[\bar{1}10]$

et en  $\beta$  rien ne change.

La conclusion que nous pouvons donc tirer est que les directions de facile aimantation sont modifiées par les déformations que cause l'épitaxie. Dans le cas du  $DyFe_2$  les directions de facile aimantation sont modifiées en  $\beta$  et se rapprochent du plan (110), résultats observés grâce aux cartes d'énergie. Dans le cas du  $TbFe_2$  et du  $Terfenol - D$  les directions faciles sont dans le plan ( $\beta = 135^\circ$ ) et modifiées en  $\theta$  vers la direction  $[\bar{1}10]$ .

### 2.2.2 Dans des lignes microstructurées

Comme nous l'avons vu précédemment le couple magnétique dans les lignes microstructurées est différent de celui dans le film. Il faut en effet prendre en compte l'énergie démagnétisante qui prend en compte cette géométrie de ligne. Dans notre situation les lignes se trouvent dans la direction  $[\bar{1}10]$ , donc selon  $y'$ . D'après la méthode d'Osborn [5], on a pour des lignes cylindriques elliptiques, les coefficients suivants :

Pour le système CGS :

$$\begin{aligned} L &= 0 \\ N &= 4\pi \frac{c}{b+c} \\ M &= 4\pi \frac{b}{b+c} \end{aligned}$$

Pour le système SI :

$$\begin{aligned} L &= 0 \\ N &= \frac{c}{b+c} \\ M &= 4 \frac{b}{b+c} \end{aligned}$$

Pour des cylindres elliptiques selon x. Avec L, M, N les coefficients démagnétisants liés respectivement aux demi-axes de l'ellipsoïde a, b, c, avec  $a \geq b \geq c \geq 0$ .

Donc dans notre cas, les lignes étant selon  $y'$ , on trouve dans la base  $x', y', z'$  :

$$\begin{aligned} N'_{xx} &= \frac{b}{b+c} \\ N'_{yy} &= 0 \\ N'_{zz} &= \frac{c}{b+c} \end{aligned}$$

Où b sera la largeur de notre ligne, c son épaisseur qui est égale à l'épaisseur du film vue précédemment.

Nous avons pris trois dimensions de largeur (= b) de lignes caractéristiques pour les trois composés, à savoir 0.1, 1 et 2 microns.

**Pour  $DyFe_2$**

Tout d'abord pour 0.1 microns :

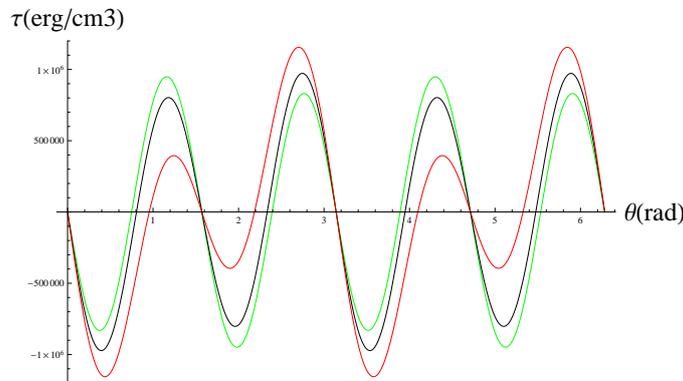


FIGURE 2.15 – Superposition des couples pour différentes formes du composé  $DyFe_2$ . En vert les lignes, en noir le film, en rouge le massif.

/	Lignes	Film	Massif
Direction moyenne	0	0	0
Direction difficile	42.91	46.18	54.75
Direction facile	90	90	90

TABLE 2.10 – Comparaison lignes/film/massif pour  $DyFe_2$

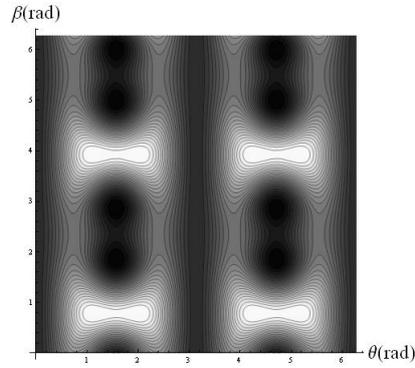


FIGURE 2.16 – Carte d'énergie pour des lignes de 0.1 microns de  $DyFe_2$

Lignes		Film		Massif	
$\theta$	$\beta$	$\theta$	$\beta$	$\theta$	$\beta$
90	105.55	90	108.42	90	90

TABLE 2.11 – Direction facile d'aimantation pour le  $DyFe_2$ , lignes/film/massif.

Ici nous voyons que l'anisotropie de forme semble orienter à nouveau en  $\beta$ , les directions de facile aimantation vers la direction [110]. En revanche pour des lignes plus larges les résultats sont les mêmes que pour le film.

### Pour $TbFe_2$

Tout d'abord pour 0.1 microns :

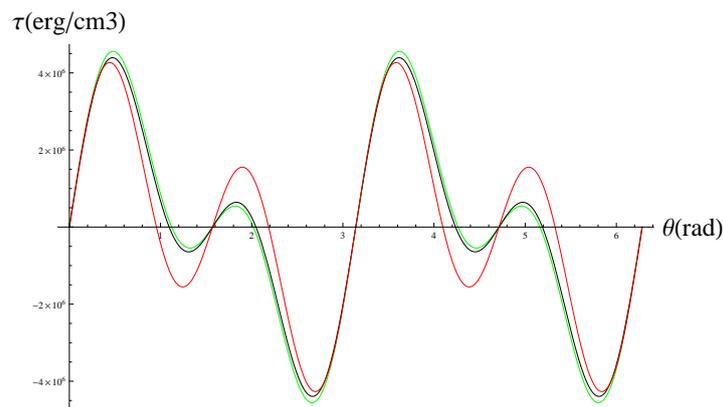


FIGURE 2.17 – Superposition des couples pour différentes formes du composé  $TbFe_2$ . En vert les lignes, en noir le film, en rouge le massif.

/	Lignes	Film	Massif
Direction facile	64.32	62.72	54.74
Direction difficile	90	90	90
Direction moyenne	0	0	0

TABLE 2.12 – Comparaison lignes/film/massif pour  $TbFe_2$

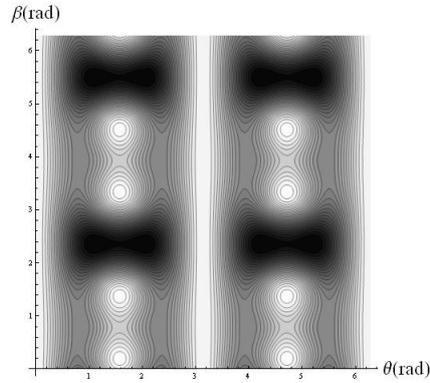


FIGURE 2.18 – Carte d'énergie pour des lignes de 0.1 microns de  $TbFe_2$

Lignes		Film		Massif	
$\theta$	$\beta$	$\theta$	$\beta$	$\theta$	$\beta$
64.32	135	62.72	135	54.74	135

TABLE 2.13 – Direction facile d'aimantation pour le  $TbFe_2$ , lignes/film/massif.

On observe une redirection de  $10^\circ$  vers  $[\bar{1}10]$  des directions faciles par rapport au massif dans les lignes de 0.1 microns, les lignes plus large nous donnent les mêmes résultats que dans le film, cependant les nombreuses approximations effectuées sur le  $TbFe_2$  peuvent nuire aux résultats. Pour ce qui est des conclusions à propos des cartes d'énergie, on observe la même chose que le couple en  $\theta$  alors que l'aimantation reste dans le plan (110).

### Pour le Terfenol-D

Pour le *Terfenol - D* les résultats sont les mêmes peu importe la taille de la ligne, les voici :

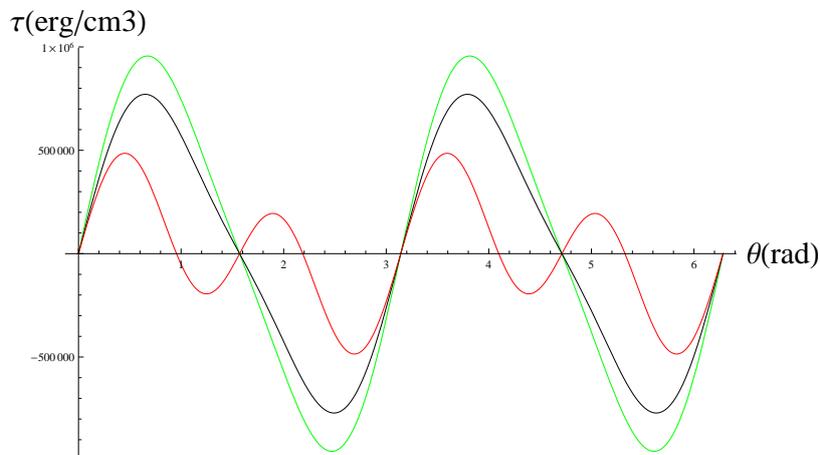


FIGURE 2.19 – Courbes de couple pour des lignes Terfenol-D (en vert). En noir le film, en rouge le massif.

/	Lignes	Film	Massif
Direction facile	63	62.72	54.74
Direction difficile	90	90	90
Direction moyenne	0	0	0

TABLE 2.14 – Comparaison lignes/film/massif pour le Terfenol-D

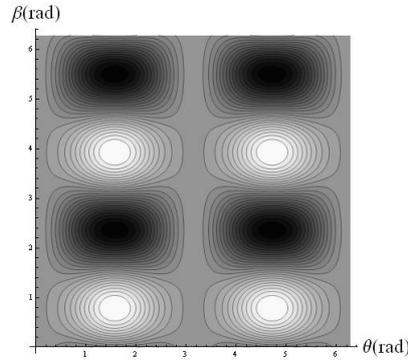


FIGURE 2.20 – Carte d'énergie pour des lignes Terfenol-D

Lignes		Film		Massif	
$\theta$	$\beta$	$\theta$	$\beta$	$\theta$	$\beta$
90	135	90	135	54.74	135

TABLE 2.15 – Direction facile d'aimantation pour le Terfenol-D, lignes/film/massif.

Aucuns changements vis à vis du film.

## Conclusion

Avec les constantes du massif on voit des redirections d'aimantation différentes du film pour le  $DyFe_2$  et le  $TbFe_2$  mais pas dans le *Terfenol - D*. Ces simulations permettent donc de prévoir des redirections d'abord à cause des déformations de l'épitaxie dans les films puis des redirections dues à l'énergie de forme dans les lignes. Mais elles ne peuvent pas prédire les redirections réelles car nous savons que les constantes  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $b_1$ ,  $b_2$ , changent du massif au film et du film aux lignes. C'est pour cette raison que nous allons par la suite tenter d'ajuster une courbe théorique à des données expérimentales pour déterminer les nouvelles constantes dans le cas du film et ainsi effectuer de nouvelles simulations pour prévoir des redirections plus précises.

## Chapitre 3

# Ajustement de données expérimentales par la méthode des moindres carrés

La méthode d'ajustement que nous avons choisit est une méthode dite de moindres carrés qui consiste à minimiser l'écart entre la courbe estimée et les points expérimentaux. Nous avons utilisé dans Mathematica la fonction "FindFit" pour cet ajustement. Pour améliorer les résultats de Mathematica nous avons procédé à un ajustement "à la main" qui consiste à faire varier les valeurs des constantes pour affiner l'ajustement.

### 3.1 Reproduction de l'ajustement de C. Fuente[3]

C. de la Fuente a effectué une mesure expérimentale de torque pour un film de *Terfenol - D* de 60nm d'épaisseur fabriqué à Nancy. Cette mesure a été effectuée sous un champ de 2T. Cet auteur a ensuite procédé à un ajustement de cette courbe expérimentale. Les paramètres libres étaient les déformations, les constantes  $K_i, b_i$ .

Nous avons obtenu un bon ajustement des données expérimentales avec des déformations proches de celles mesurées aux rayons X et des constantes  $K_i, b_i$  différentes du massif.

Courbe du couple à 300K dans le composé en film fin suivant la direction (110).

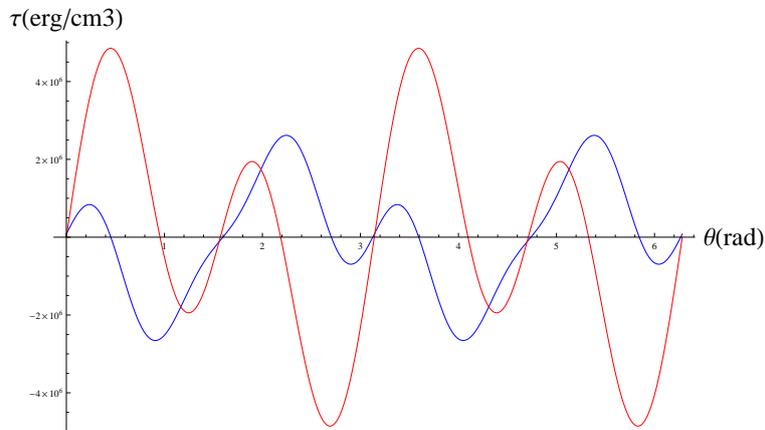


FIGURE 3.1 – Reproduction de l'article de C. de la Fuente [3]. En bleu le film, en rouge le massif.

Les constantes de la courbe du film ont été trouvées par ajustement alors que la courbe rouge est le massif, on distingue clairement un changement des directions de facile aimantations.

On trouve de nouvelles directions d'aimantations qui ne sont plus selon les axes du cube, les angles de facile aimantation par rapport à la direction [001] sont, en degrés :

	Film	Massif
Direction facile	25.98	54.74

TABLE 3.1 – Direction facile d'aimantation pour le  $DyFe_2$ , film Fuente.

On trouve des redirections des axes de facile aimantation d'environ  $28^\circ$  vers la direction [001].

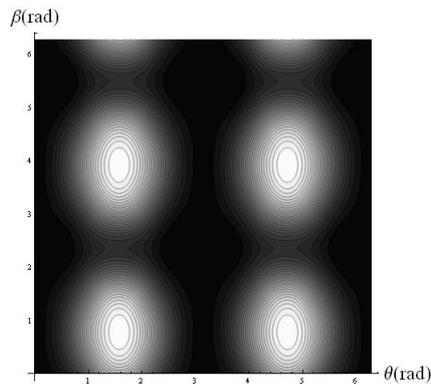


FIGURE 3.2 – Carte d'énergie avec les constantes trouvées.

Film	
$\theta$	$\beta$
24.7	135

TABLE 3.2 – Direction facile d'aimantation pour le  $DyFe_2$ , film Fuente.

Avec l'ajustement de C. de la Fuente nous trouvons les directions de facile aimantation dans le plan et à  $24.7^\circ$  de la direction [001].

### 3.2 Ajustement sur des données expérimentales

Le couple magnétique d'un film de 100nm  $Dyfe_2$  a été récemment mesuré à l'IJL à Nancy. Nous présentons ci-dessous notre ajustement de ce résultat expérimental à l'aide du logiciel Mathématique en utilisant la méthode des moindres carrés :

En noir : les points expérimentaux.

En bleu : l'ajustement.

En rouge : le massif.

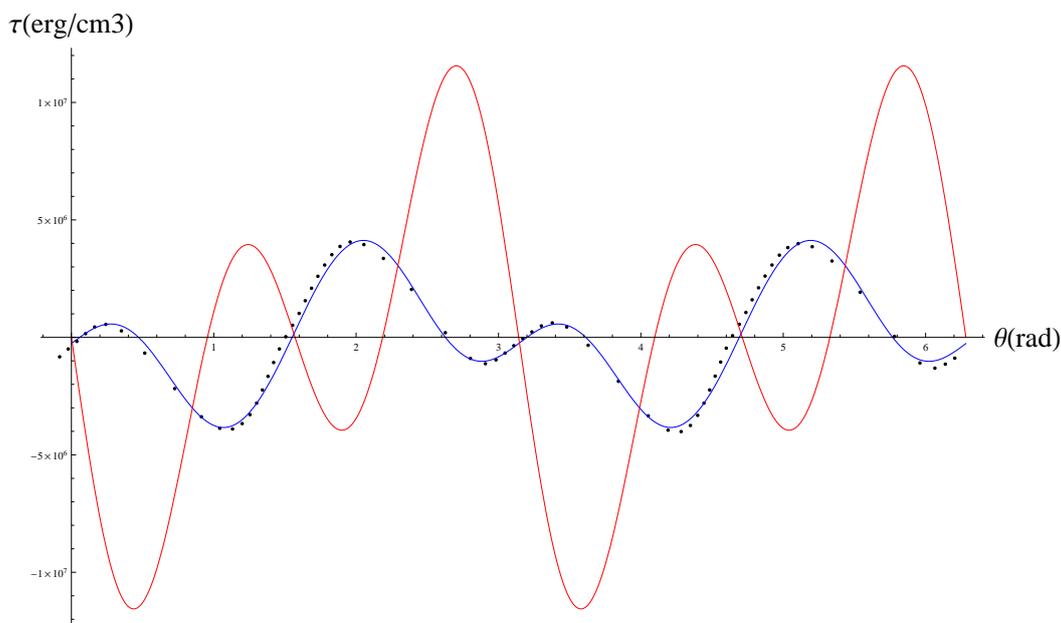


FIGURE 3.3 – Ajustement avec des données expérimentales

Pour faire ce fit nous avons pris les données mesurées expérimentalement suivantes :

$$\epsilon_{xx'} = -0,55\%$$

$$\epsilon_{yy'} = 0.63\%$$

$$\epsilon_{zz'} = 0.31\%$$

Voici les résultats numériques donnés par notre ajustement :

$$\begin{aligned}
 K_1 &= -6.19 \times 10^6 \\
 K_2 &= 2.42 \times 10^6 \\
 b_1 &= -7.24 \times 10^8 \\
 b_2 &= 6.43 \times 10^8 \\
 \epsilon_{yz'} &= -0,079\%
 \end{aligned}$$

On remarque deux choses très importantes :

- Les directions de facile aimantations sont modifiées par rapport au massif.
- Les constantes  $K_1$  et  $K_2$

Les angles de facile aimantation par rapport à la direction [001] sont, en degrés :

/	Film	Massif
Direction facile	27.02	0

TABLE 3.3 – Directions d'aimantation pour le  $DyFe_2$ , film/massif.

La direction d'aimantation passe de  $0^\circ$  par rapport à [001] dans le massif à  $27.02^\circ$ .

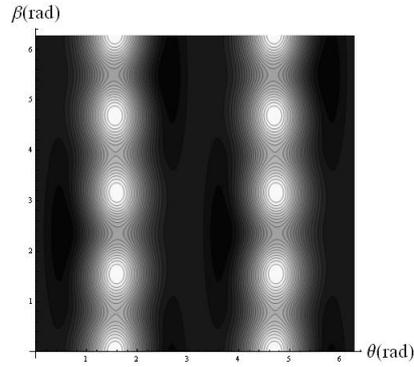


FIGURE 3.4 – Carte d'énergie avec les constantes trouvées.

Film	
$\theta$	$\beta$
30.72	135

TABLE 3.4 – Direction facile d'aimantation pour le  $DyFe_2$ , film.

On prévoit donc avec nos nouvelles constantes obtenues grâce à l'ajustement une redirection dans les films de  $DyFe_2$ . La direction de facile aimantation se trouve donc dans le plan ( $\beta = 135^\circ$ ) et à  $30^\circ$  de la direction [001].

### 3.3 Calcul de couple dans les lignes microstructurées avec $K_i$ et $b_i$ des films (différentes du massif)

Lignes dans  $DyFe_2$

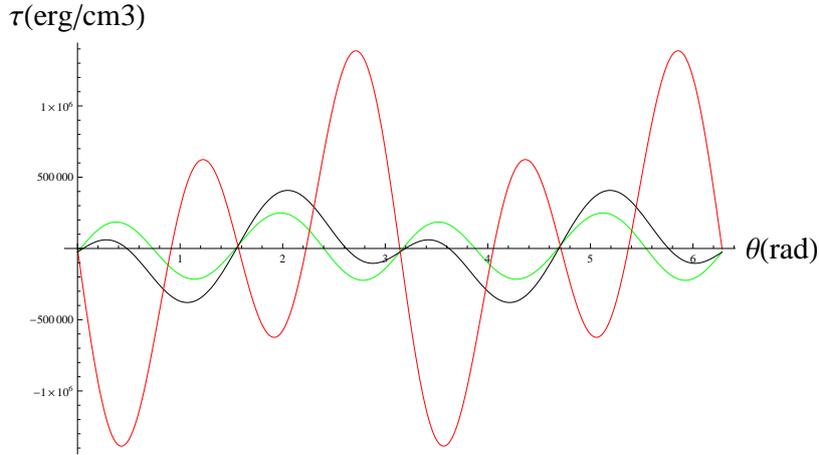


FIGURE 3.5 – Courbe de couple pour des lignes dans  $DyFe_2$ , en vert. En noir le film, rouge le massif.

Lignes de 0.1 microns	
Direction moyenne	1.67
Direction facile	42.07
Direction difficile	88.31

TABLE 3.5 – Directions d'aimantation pour le  $DyFe_2$ , lignes 0.1 microns

Ce résultat prédit une descente de  $15^\circ$  en  $\theta$  par rapport au film des directions de facile aimantation.

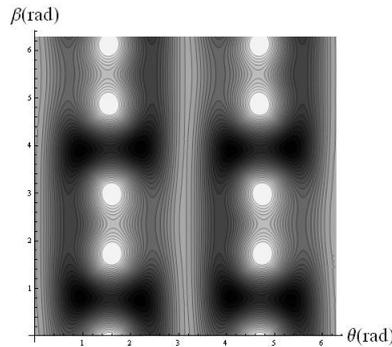


FIGURE 3.6 – Carte d'énergie pour des lignes de 0.1 microns dans  $DyFe_2$

Lignes de 0.1 microns	
$\theta$	$\beta$
54,17	46.99

TABLE 3.6 – Direction facile d'aimantation pour le  $DyFe_2$ , lignes de 0.1 microns.

Ce résultat est intéressant puisqu'il confirme nos prédictions de simulations faites avec les constantes du massif, à savoir que les lignes tendent à amener l'aimantation vers la direction [110] en diminuant l'angle  $\beta$ . Autrement dit vers des directions quasiment perpendiculaires au plan (110). Pour des lignes plus larges on note une légère différence par rapport au film ( $2^\circ$ ) mais pas de différence en  $\beta$ .

## Lignes dans le Terfenol-D

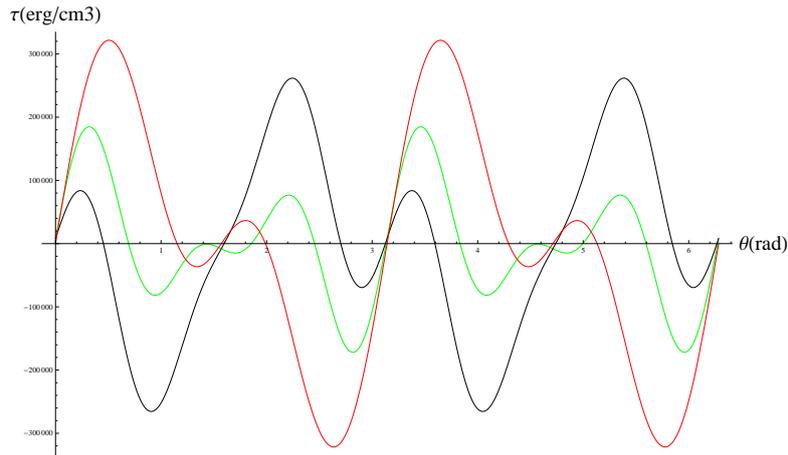


FIGURE 3.7 – Courbes de couple pour des lignes (en vert) Terfenol-D. En noir film, en rouge massif.

Lignes de 0.1	
Direction facile	39.65
Direction difficile	0

TABLE 3.7 – Directions d'aimantation pour le Terfenol-D, lignes de 0.1 microns.

Le couple révèle une différence de  $13.67^\circ$  en  $\theta$  par rapport au film, pour des lignes plus larges encore une fois les différences sont faibles, de l'ordre de 1 ou  $2^\circ$ .

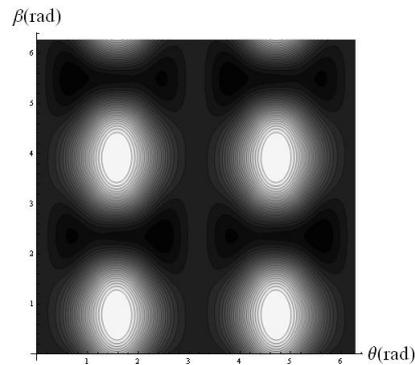


FIGURE 3.8 – Carte d'énergie pour des lignes Terfenol-D

Lignes de 0.1 microns	
$\theta$	$\beta$
39.20	135
Lignes de 1 micron	
$\theta$	$\beta$
27.07	135
Lignes de 2 microns	
$\theta$	$\beta$
25.93	135

TABLE 3.8 – Direction faciles d'aimantation dans des lignes de Terfenol-D.

Cette fois pour le *Terfenol - D* quelle que soit la largeur de la ligne la simulation ne nous montre aucune redirection en  $\beta$  par rapport au film. Mais il y a une redirection, pour les lignes de 0.1 microns, d'environ  $14.5^\circ$

en  $\theta$  vis à vis du film. Pour les lignes plus larges la redirection est bien plus faible, on retombe la encore dans la situation du film.

# Conclusion

A travers ce rapport nous avons pu étudier le problème de l'anisotropie des composés  $TRFe_2$ . Nous avons constaté que cette anisotropie dépendait de nombreux paramètres, à savoir les déformations, le changement de la valeur des constantes entre film et massif, mais aussi la forme de l'échantillon.

Nous aurions pu, avec une étude plus approfondie, voir qu'elle dépend également de la température, travail effectué par A. Mougin dans sa thèse.

Nos simulations ont mis en évidence une taille critique pour les lignes nanométriques au delà de laquelle la situation du film se retrouve. En effet nous avons pu constater que pour avoir des effets significatifs la taille des lignes devait être de l'ordre de la centaine de nanomètre au plus. Cette constatation nous a parue intéressante notamment dans le cas du  $DyFe_2$  où la direction de facile aimantation se retrouvait à environ  $45^\circ$  en  $\beta$  de l'axe  $[100]$ , soit une direction perpendiculaire au plan considéré. Il faudrait pour confirmer cette tendance avoir plus de données expérimentales pour pouvoir tirer un comportement type sur ces lignes.

Notre travail peut être poursuivi pour cette fois traiter des "nano-plots". Nous avons déjà commencé les recherches à ce sujet, le problème s'avère relativement complexe en raison de la forme des coefficients démagnétisants. En effet l'approximation que nous avons fait pour ceux-ci, à savoir les traiter tels des ellipsoïdes n'est plus réalisable.

# Bibliographie

- [1] Akulov, *Z. Phys.*, 1931.
  - [2] Clark & al. *Phys. Rev. B15*, 1976.
  - [3] C de la Fuente, *Magnetocrystalline anisotropy in a (110) Terfenol-D thin film*, *J. Phys.*, 2004.
  - [4] Cullity, *Introduction to magnetic materials*, p.212, 1972.
  - [5] J.A. Osborn, *Demagnetizing Factors of the General Ellipsoid*, *Phys. Rev.*, 1945.
  - [6] , J. Degauque, *Journal de Physique 4*, volume 2, 1992
- R. Morel, *Habilitation à diriger des recherches*, 2009.
- V. Odero, thèse, *Croissance de couches minces épitaxiées de phases de Laves TRFe<sub>2</sub>*, 1996.
- A. Mougin, thèse, *Nanosystèmes magnétostrictifs de TRFe<sub>2</sub>*, 1999.
- O. Fruchart, site <http://perso.neel.cnrs.fr/olivier.fruchart/>.
- M.C. Remacha, thèse, *Magnetoelasticidad de superredes de tierras raras con lutecio e itrio*, 1997.
- E. du Trémolet de Lacheisserie, livre, *Magnétisme, fondements*, 2000.