

# Anisotropie Magnétocristalline

Jean-Christophe Toussaint

24 février 2025

## 1 Observations expérimentales

On constate expérimentalement qu'un monocristal de forme sphérique peut avoir des courbes d'aimantation très différentes suivant l'orientation du champ appliqué par rapport aux axes du cristal (Fig. 1). Dans le cas du cobalt, de structure hexagonale, l'aimantation atteint plus rapidement la saturation dans la direction parallèle à l'axe sénnaire que dans une direction perpendiculaire.

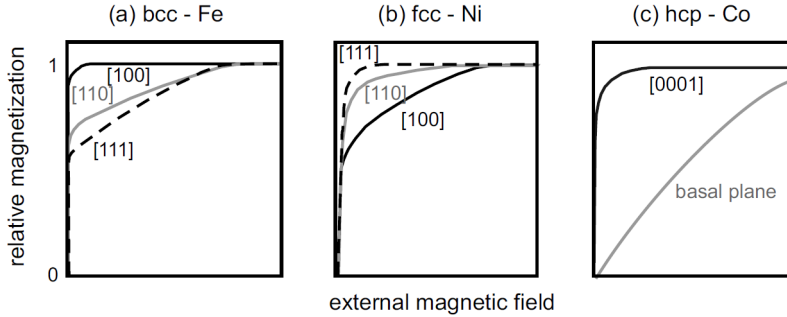


FIGURE 1 – Courbes d'aimantation de (a) Fe cubique centré, (b) Ni face cubique centré, et (c) Co hexagonal compact. Les axes de facile aimantation sont les directions  $[100]$  pour Fe,  $[111]$  pour Ni, et  $[0001]$  pour Co. Selon ces directions, le champ magnétique externe nécessaire pour atteindre la saturation est le plus faible.

L'aimantation est donc dirigée préférentiellement suivant certaines directions cristallographiques appelées direction de facile aimantation.

Plusieurs mécanismes ont été proposés tous reliés à l'interaction spin-orbite qui couple les moments aux orbitales atomiques. Les orbitales étant elles-mêmes couplées au réseau sous l'influence du champ cristallin (Bloch) ou interagissant différemment suivant leur direction par rapport au réseau (Van Vleck), il en résulte un couplage entre moments et réseau à la source de l'anisotropie magnétique.

## 2 Approche phénoménologique

On s'intéresse à un moment magnétique unique  $\boldsymbol{\mu} = \mu \mathbf{u}$  placé dans un cristal. Les cosinus directeurs sont définis par :

$$\alpha_i = \mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_i \quad \text{avec} \quad \sum_{i=1}^3 \alpha_i^2 = 1 \quad (1)$$

où  $\mathbf{e}_i$  sont les vecteurs unitaires suivant les axes du cube.

Le modèle suppose que l'énergie d'anisotropie magnétocristalline par unité de volume peut être décrite par un développement en série des cosinus directeurs :

$$e_a(\mathbf{u}) = e_0 + \sum_i b_i \alpha_i + \sum_{ij} b_{ij} \alpha_i \alpha_j + \sum_{ijk} b_{ijk} \alpha_i \alpha_j \alpha_k + \sum_{ijkl} b_{ijkl} \alpha_i \alpha_j \alpha_k \alpha_l + \vartheta(\alpha^5) \quad (2)$$

L'énergie est invariante par renversement de l'aimantation :  $e_a(-\mathbf{u}) = e_a(\mathbf{u})$ . Ceci impose que les coefficients correspondant aux termes de degrés impairs sont nuls. L'expression (2) se réduit à :

$$e_a(\mathbf{u}) = e_0 + \sum_{ij} b_{ij} \alpha_i \alpha_j + \sum_{ijkl} b_{ijkl} \alpha_i \alpha_j \alpha_k \alpha_l + \vartheta(\alpha^6) \quad (3)$$

Examinons cette expression générale pour différents systèmes cristallographiques. L'énergie d'anisotropie est une fonction des  $\alpha_i$  qui doit être invariante dans les opérations de symétrie de cristal.

### 2.1 Système orthorhombique

L'énergie d'anisotropie est invariante en appliquant de manière indépendante les opérations de symétrie miroir  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  et  $\sigma_z$ . Elle vérifie donc l'identité :  $e_a(\pm\alpha_1, \pm\alpha_2, \pm\alpha_3) = e_a(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  pour toute orientation  $\mathbf{u}$ , tous les termes croisés  $\alpha_i \alpha_j$  disparaissent, c'est-à-dire que  $b_{ij} = 0$  pour  $i \neq j$ .

Dem : en notant  $\epsilon_i = \pm 1$  pour tout  $i$ , pour les termes d'ordre 2, on a :

$$\sum_{ij} b_{ij} \alpha_i \alpha_j = \sum_{ij} b_{ij} \epsilon_i \epsilon_j \alpha_i \alpha_j. \quad (4)$$

D'où  $\epsilon_i \epsilon_j = \delta_{ij}$ , la somme sur ces termes se réduit à :

$$\sum_{ij} b_{ij} \alpha_i \alpha_j = \sum_i b_{ii} \alpha_i^2 \quad (5)$$

Pour les termes d'ordre 4, l'invariance par symétrie miroir impose :

$$\sum_{ijkl} b_{ijkl} \alpha_i \alpha_j \alpha_k \alpha_l = \sum_{ijkl} b_{ijkl} \epsilon_i \epsilon_j \epsilon_k \epsilon_l \alpha_i \alpha_j \alpha_k \alpha_l. \quad (6)$$

Donc soit tous les indices sont identiques :  $\epsilon_i \epsilon_j \epsilon_k \epsilon_l = \delta_{ij} \delta_{jk} \delta_{kl}$ , soit ils sont identiques deux à deux :  $\delta_{ij} \delta_{kl}$  avec  $j \neq k$  ou  $\delta_{ik} \delta_{jl}$  avec  $i \neq j$  ou  $\delta_{il} \delta_{jk}$  avec  $k \neq l$ .

L'expression de l'énergie d'anisotropie (3) se réduit à :

$$e_a(\mathbf{u}) = e_0 + \sum_{i=1}^3 b_{ii} \alpha_i^2 + \sum_{i=1}^3 b_{iiii} \alpha_i^4 + \sum_{i=1, j \neq i}^{3,3} (b_{iijj} + b_{ijji} + b_{jjii}) \alpha_i^2 \alpha_j^2 \quad (7)$$

## 2.2 Système cubique

Contrairement au système orthorhombique, les indices  $i = 1, 2, 3$  sont indiscernables dans les systèmes à symétrie cubique, on a  $b_{11} = b_{22} = b_{33}$ . Le terme du deuxième ordre devient :

$$\sum_{ij} b_{ij} \alpha_i \alpha_j = b_{11} (\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2) = b_{11} \quad (8)$$

Les termes d'ordre 4 s'écrivent :

$$\sum_{ijkl} b_{ijkl} \alpha_i \alpha_j \alpha_k \alpha_l = b_{1111} (\alpha_1^4 + \alpha_2^4 + \alpha_3^4) + 6b_{1122} (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) \quad (9)$$

Comme  $1 = (\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2)^2$ , on obtient l'identité suivante :

$$\alpha_1^4 + \alpha_2^4 + \alpha_3^4 = 1 - 2(\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) \quad (10)$$

L'énergie d'anisotropie magnétocristalline dans un système cubique s'écrit :

$$e_a(\mathbf{u}) = K_0 + K_1 (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) \quad (11)$$

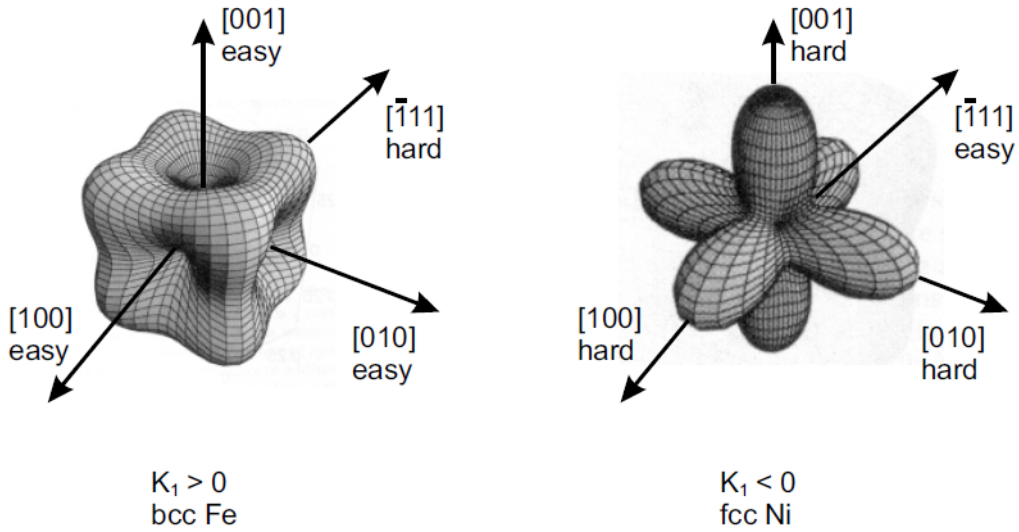


FIGURE 2 – Surface d'énergie d'anisotropie magnétocristalline pour Fe cubique centré ( $K_1 > 0$ ) et pour Ni face cubique centré ( $K_1 < 0$ ).

## 2.3 Système tétragonal

Un cristal de symétrie tétragonal n'est rien d'autre qu'un cristal de symétrie cubique ayant subi une compression ou une dilatation selon l'axe  $c$ . Comme dans le cas des systèmes

précédents, tous les termes croisés  $\alpha_i \alpha_j$  disparaissent également. En raison de la symétrie réduite, seuls les indices 1 et 2 sont indiscernables.

On s'intéresse d'abord aux termes d'ordre 2 :

$$\sum_{ij} b_{ij} \alpha_i \alpha_j = b_{11} (\alpha_1^2 + \alpha_2^2) + b_{33} \alpha_3^2 \quad (12)$$

Comme  $\alpha_3^2 = 1 - \alpha_1^2 - \alpha_2^2$ , l'expression précédente devient :

$$\sum_{ij} b_{ij} \alpha_i \alpha_j = a_0 + a_1 \alpha_3^2 \quad (13)$$

Les termes d'ordre 4 s'écrivent :

$$\sum_{ijkl} b_{ijkl} \alpha_i \alpha_j \alpha_k \alpha_l = b_{1111} (\alpha_1^4 + \alpha_2^4) + b_{3333} \alpha_3^4 + 6b_{1122} \alpha_1^2 \alpha_2^2 + 6b_{1133} \alpha_3^2 (\alpha_1^2 + \alpha_2^2) \quad (14)$$

Exercice : montrer que l'énergie d'anisotropie magnétocristalline dans un système tétragonal peut s'écrire :

$$e_a(\mathbf{u}) = K_0 + K_1 \alpha_3^2 + K_2 \alpha_3^4 + K_3 (\alpha_1^4 + \alpha_2^4) \quad (15)$$

*indication* : utiliser l'identité  $(1 - \alpha_3^2)^2 = (\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^2$ .

Exercice : en remplaçant les cosinus directeurs par leur expression en fonction des angles d'euler  $\theta$  et  $\phi$ , montrer que

$$e_a(\mathbf{u}) = K'_0 + K'_1 \sin^2 \theta + K'_2 \sin^4 \theta + K'_3 \sin^4 \theta \cos(4\phi) \quad (16)$$

Jusqu'aux termes d'ordre 4 inclus, l'énergie magnétocristalline est invariante par rotation autour de l'axe  $\mathbf{c}$  et ne dépend que de  $\theta$ . L'énergie magnétocristalline est uniaxiale.

## 2.4 Système hexagonal

Des considérations de symétrie analogues conduisent à une densité d'énergie pour un cristal hexagonal :

$$e_a(\mathbf{u}) = K_0 + K_1 (\alpha_1^2 + \alpha_2^2) + K_2 (\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^2 \quad (17)$$

Exercice : montrer que l'on peut obtenir une expression différente (tout aussi juste) faisant intervenir que  $\alpha_3$  en remarquant que  $\alpha_3^2 = 1 - \alpha_1^2 - \alpha_2^2$ . En déduire, les expressions des coefficients  $K'_0$ ,  $K'_1$  et  $K'_2$  des termes de puissance paire en  $\alpha_3$ .

Exercice : en remplaçant les cosinus directeurs par leur expression en fonction des angles d'euler  $\theta$  et  $\phi$ , montrer que

$$e_a(\mathbf{u}) = K_0 + K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta \quad (18)$$

Comme pour le système tétragonal, jusqu'aux termes d'ordre 4 inclus, l'énergie magnétocristalline est invariante par rotation autour de l'axe  $\mathbf{c}$  et ne dépend que de  $\theta$ . On dit que l'énergie magnétocristalline est uniaxiale.

## 2.5 Ordres de grandeur des constantes $K_1$ et $K_2$

La table suivante donne l'amplitude des constantes d'anisotropie magnétocristalline pour des cristaux de fer (bcc), de nickel (fcc) et de cobalt (hcp).

	bcc-Fe	fcc-Ni	hcp-Co
$K_1 [J/m^3]$	$5.48 \cdot 10^4$	$-12.63 \cdot 10^4$	$7.66 \cdot 10^5$
$K_2 [J/m^3]$	$1.96 \cdot 10^2$	$5.78 \cdot 10^4$	$1.05 \cdot 10^5$

TABLE 1 – Constantes d'anisotropie magnétocristalline mesurée à  $T = 4.2K$

En pratique,

- Les constantes d'anisotropie magnétocristalline dépendent du matériau et de la température.
- L'expérience prouve que les constantes  $K_1$  et  $K_2$  sont suffisantes pour un bon accord entre l'expérience et le calcul.
- Le signe et le rapport des constantes déterminent l'axe de magnétisation facile ou l'axe préférentiel, c'est-à-dire les directions cristallographiques sur lesquelles l'aimantation s'aligne sans champ magnétique externe.