

# Approche micromagnétique de la modélisation des Alliages à Mémoire de Forme Magnétiques

O. Sevestre , O. Hubert

LMT (ENS Paris-Saclay/ CNRS/ Université Paris-Saclay), 61 avenue du Président Wilson,  
94230 Cachan, sevestre@lmt.ens-cachan.fr, hubert@lmt.ens-cachan.fr

## Résumé :

*L'emploi de matériaux intelligents tels que les Alliages à Mémoire de Forme (AMF) dans les micro-actionneurs peut permettre d'accroître leur efficacité. Parmi les AMF, les Alliages à Mémoire de Forme Magnétiques (AMFM) présentent la capacité de se déformer sous l'action non seulement d'une contrainte mécanique ou d'une variation de température, mais également d'un champ magnétique. La modélisation du comportement de ces alliages complexes reste difficile mais essentielle si l'on souhaite déterminer leurs comportement sous chargements complexes et ainsi étendre leur domaine d'application.*

*Dans ce papier, un modèle couplant éléments finis, micromagnétisme et champ de phases dans un cadre multiphysique fort est proposé afin de modéliser le comportement des AMFM et de prendre en compte l'évolution de leur microstructure.*

## Abstract :

*The development of efficient micro-actuators using smart materials like Shape Memory Alloys (SMAs) is relevant. Among the SMAs, Magnetic Shape Memory Alloys (MSMAs) can deform under the action of a magnetic field, stress and temperature. Modeling the behavior of these complex alloys remains difficult but essential in order to determine and predict their response under complex loadings (multiaxial, heterogeneous) and extend their application range.*

*In this work, a coupled micromagnetic / phase field finite element modeling of MSMAs in a multiphysics framework with strong couplings (chemo-thermo-magneto-mechanical) is proposed in order to take the evolving nature of the microstructure into account.*

**Mots clefs :** AMFM, Micromagnétisme, aimantation, minimisation énergie, transformation de phase, réorientation, martensite, austénite

## 1 Introduction

Les Alliages à Mémoire de Forme (AMF) sont des matériaux dont le comportement se caractérise par une transformation de phases solide-solide appelée transformation martensitique. Cette transformation est réversible, isochore et peut être activée par un apport de chaleur (chauffage ou refroidissement) et/ou une sollicitation mécanique.

Parmi les AMF, les Alliages à Mémoire de Forme Magnétiques (AMFM) forment une catégorie particulière : ils sont également ferromagnétiques. L'existence d'un couplage magnétostatique différent entre martensite et austénite ainsi que d'un couplage "magnéto-mécanique" conduit à ce que la transformation de phase austénite-martensite puisse se faire également sous l'action d'un champ magnétique.

Si la modélisation des AMF connaît des progrès significatifs, la modélisation des AMFM n'en est qu'à ses prémices. Le comportement de ces alliages, dépendant de la contrainte, de la température et/ou du champ magnétique appliqués en fait des alliages complexes, dont la modélisation reste difficile et dont il est essentiel de déterminer la réponse sous chargement complexe (multiaxial, hétérogène) pour rendre leur utilisation plus robuste et étendre leurs champs d'application.

Dans cette communication, nous proposons les bases d'une modélisation micromagnétique 2D de ces matériaux. L'objectif de ce modèle est de restituer la microstructure magnéto-mécanique, grâce à une minimisation de l'énergie totale ainsi qu'une résolution des équations de conservation.

## 2 Les Alliages à Mémoire de Forme Magnétiques (AMFM)

Le comportement des AMF est le résultat d'une transformation de phase dite "transformation martensitique" ou bien d'une réorientation de martensite. Cette transformation peut être le fait d'une évolution de la température (transformation martensitique seulement) ou de l'application d'une contrainte. Ce changement de phase provoque à l'échelle cristalline des déformations de réseaux de l'ordre de 5% à 10% selon les alliages. On distingue les deux phases :

- Une phase stable à haute température appelée austénite, présentant une structure cristalline de grande symétrie ;
- Une phase stable à basse température appelée martensite, qui peut se présenter sous la forme de variantes et qui possède un degré de symétrie inférieur à celui de l'austénite.

Les AMFM appartiennent à la famille des AMF. Ils sont de plus ferromagnétiques. A ce titre, la structure martensitique d'un AMFM peut être subdivisée en plusieurs domaines de Weiss. Chaque variante de martensite possède un axe de facile aimantation qui lui est propre. En l'absence de champ magnétique extérieur, une variante de martensite présentera une aimantation suivant son axe de facile aimantation. Pour un matériau anisotrope, l'axe de facile aimantation représente l'axe pour lequel l'aimantation spontanée est la plus énergétiquement favorable.

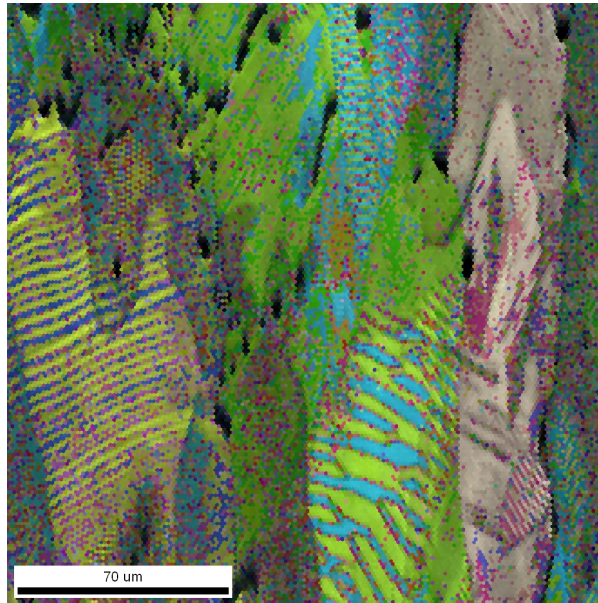


FIGURE 1 – Figure de pôles inverse (obtenue par diffraction des électrons - EBSD) d'un échantillon polycristallin de NiMnGa avec insertion de Bore. Les couleurs alternées dans certains grains trahissent l'existence d'un système à deux variantes (au minimum) séparées par des mâcles.

Le processus d'aimantation est le résultat de trois mécanismes concurrents [2] : le mouvement des parois de domaines magnétiques à  $180^\circ$ , la rotation locale des vecteurs aimantation et la réorientation des variantes de martensite induites par le champ magnétique. Ce point est illustré dans la Figure 2 dans le cas d'une austénite cubique et de trois variantes possibles de martensite tétraogonales [3]. Les deux premiers mécanismes existent dans les matériaux ferromagnétiques communs. Le premier mécanisme ne conduit pas à une déformation, le second ne génère pas une grande déformation puisque seul le couplage spin-orbite est impliqué, conduisant au phénomène de magnétostriction. Seul le dernier mécanisme qui s'apparente à un mouvement de parois à  $90^\circ$  (existant dans les matériaux ferromagnétiques classiques et conduisant également à une magnétostriction) peut provoquer une grande déformation qui peut atteindre jusqu'à 12% dans des monocristaux [4] et, par conséquent, à un fort couplage magnéto-élastique. L'intérêt principal de ce mécanisme est qu'il correspond à une transformation thermodynamique de second ordre qui s'effectue sans échange de chaleur. Cette raison explique pourquoi les AMFM peuvent être utilisés à des fréquences plus élevées que des alliages à mémoire de forme classique (jusqu'à 1kHz) [2]. L'effet piézomagnétique dans ces matériaux peut également être très élevé permettant la conception de systèmes de récupération d'énergie. Etant donné que ces comportements sont fortement associés aux transformations à l'échelle du monocristal, le développement d'approches mêlant micromagnétisme et changement de phase est pertinent pour leur modélisation.

Les AMFM peuvent subir une réorientation de leurs variantes de martensite selon le champ magnétique extérieur appliqué. De plus, l'application d'une sollicitation mécanique extérieure peut modifier les propriétés magnétiques d'un AMFM du fait du développement de certaines variantes par rapport à d'autres. Cette deuxième propriété peut être utilisée dans le cas de

capteurs.

C'est ce phénomène de réorientation qui crée cette forte déformation. Cette déformation de réorientation reste constante lors de la diminution et de la suppression de ce champ magnétique extérieur. L'AMFM sur lequel le travail s'est porté est ici un alliage de  $Ni_{50}Mn_{28,5}Ga_{21,5}$  dont la structure cristalline est représentée figure 2.

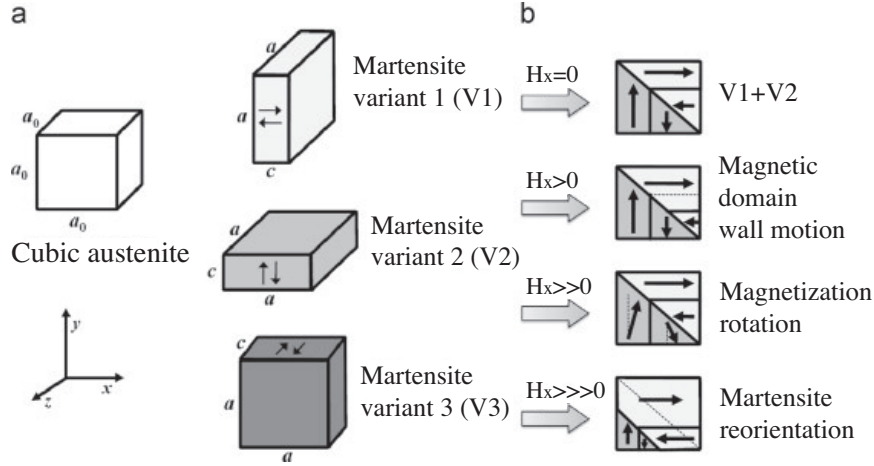


FIGURE 2 – a) Représentation de la maille cubique en phase austénitique du  $Ni_2MnGa$  qui peut se transformer en 3 variantes quadratiques de martensite. b) Phénomènes magnétiques possibles sous l'action d'un champ magnétique extérieur sur une structure initialement composée de deux variantes de martensite [3].

### 3 Comportement magnétique

Les matériaux magnétiques sont classés en trois familles distinctes : les diamagnétiques, les paramagnétiques et les ferromagnétiques. C'est sur cette dernière catégorie que s'appliquent les modèles micromagnétiques.

La théorie des domaines magnétiques a été développée par Weiss. Celui-ci émit en 1906 l'hypothèse de l'existence de domaines magnétiques dans les matériaux ferromagnétiques. Ces domaines, séparés par des parois (parois de Bloch) organisent une microstructure intragranulaire au sein du matériau. Chaque domaine possède une aimantation orientée.

$$\vec{m}_\alpha = M_s \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} \quad (1)$$

Les matériaux ferromagnétiques, sous l'action d'un champ magnétique extérieur, vont s'aimanter. De plus, ils présentent une déformation appelée magnétostriction. Cette déformation va engendrer une réorganisation des domaines de Weiss, induite par des mouvements de parois. Elle est intrinsèque au matériau. Aimantation et magnétostriction sont liés par une relation non linéaire où  $\lambda$  est le tenseur d'ordre 4 des constantes de magnétostriction.

$$\varepsilon^\mu = \lambda : (\vec{m} \otimes \vec{m}) \quad (2)$$

La mise en ordre de ces moments élémentaires sous l'effet de champs internes ou externes

provoque alors des phénomènes macroscopiques comme l'aimantation ou la déformation de magnétostriction.

Sous l'influence d'un champ magnétique externe, la microstructure évolue par déplacement des parois et par rotation des moments magnétiques. Le déplacement de ces parois peut se retrouver interrompu lors de la rencontre de défauts structuraux (phases, inclusions, dislocations, joints de grains ...). Afin de débloquent ce déplacement, il faut appliquer un champ magnétique légèrement supérieur au champ nécessaire en l'absence de défaut pour déplacer la paroi. Les parois évoluent alors par sauts brusques et irréversibles. Ces sauts sont à l'origine de l'hystérésis du comportement magnétique.

L'énergie qui résulte de l'application d'un champ magnétique externe peut être subdivisée en quatre contributions énergétiques élémentaires : l'énergie d'échange, l'énergie d'anisotropie, l'énergie démagnétisante et l'énergie de Zeemann.

L'énergie d'échange caractérise la tendance des moments magnétiques voisins à s'aligner suivant une direction commune. C'est une interaction purement locale qui décroît rapidement avec la distance et ne dépend que des propriétés microscopiques du matériau.

$$E_{ech} = \mu_0 \mathbf{A} \cdot \|\vec{\nabla} \vec{m}\|^2 \quad (3)$$

L'anisotropie représente l'interaction des moments magnétiques avec le potentiel créé par la symétrie du cristal. Ainsi, cette interaction conduit les moments magnétiques à s'orienter selon des directions énergétiquement favorables (direction de symétrie du cristal / direction de facile aimantation). Cette énergie s'annule suivant les différents axes d'anisotropie du cristal considéré. Ainsi dans le cas d'une symétrie cubique, l'énergie d'anisotropie prend la forme :

$$E_a = K_0 + K_1(\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_1^2 \alpha_3^2) + K_2(\alpha_1^2 \alpha_2^2 \alpha_3^2) \quad (4)$$

L'énergie démagnétisante dépend de l'interaction mutuelle des moments magnétiques et de la géométrie du milieu. En effet, l'aimantation créée dans un milieu sous l'action d'un champ magnétique externe génère en retour un champ magnétique. Ce champ magnétique réponse est appelé champ démagnétisant  $\vec{H}_d(\vec{m})$ . Cette énergie se présente sous la forme :

$$E_d = -\frac{\mu_0}{2} \vec{H}_d(\vec{m}) \cdot \vec{m} \quad (5)$$

La quatrième interaction représente l'influence du champ extérieur appliqué sur les moments magnétiques du matériau. Il s'agit de l'énergie de Zeemann.

$$E_z = -\mu_0 \vec{H}_{ext} \cdot \vec{m} \quad (6)$$

## 4 Modèle micromagnétique couplé

Le modèle présenté dans cette communication est le résultat d'une transformation d'un code existant (SIVIMM2D-magnetomeca) réalisé par He et Mballa [5][7][10]. Le comportement magnéto-

mécanique est déterminé par le biais d'une modélisation statique de particules ferromagnétiques basée sur la minimisation d'une fonction d'énergie. Cette modélisation emprunte la méthode du gradient conjugué couplée à des Méthodes aux Eléments Finis (MEF) qui permettent la résolution du problème mécanique. Le micromagnétisme est une approche théorique permettant de décrire le processus d'aimantation à une échelle suffisamment large pour remplacer les moments magnétiques atomiques par des fonctions continues, et suffisamment fine pour rendre compte des zones de transition entre domaines magnétiques [1][6].

Cette approche continue de la théorie du ferromagnétisme fait le lien entre la description quantique de la structure des spins et la théorie de l'électromagnétisme de Maxwell où les propriétés magnétiques du matériau sont décrites par des constantes volumiques homogènes (susceptibilité  $\chi$  et perméabilité  $\mu$ ). L'approche micromagnétique consiste à proposer une approximation basée sur la minimisation d'une fonctionnelle énergétique. Cette minimisation par rapport à l'aimantation donne lieu à un état d'équilibre métastable associé à une configuration particulière de la structure magnétique. La contribution apportée par Brown [1] fut de définir une expression de l'énergie libre  $E_{total}$  comme somme des contributions internes et externes énoncées précédemment. Dans ses travaux, Mballa [7][10] a ajouté l'énergie mécanique à cette somme. Nous adoptons pour l'énergie mécanique l'expression 7 fonction du champ de déformation totale  $\varepsilon$  et de la déformation de magnétostriction considérée comme une déformation libre du milieu.  $\vec{u}$  désigne le champ de déplacement. Le terme écrit en rouge représente ainsi l'unique terme de couplage magnéto-mécanique du problème.

$$E_{\sigma}(\vec{u}) = \frac{1}{2} \varepsilon(\vec{u}) : \mathbb{C} : \varepsilon(\vec{u}) - \varepsilon(\vec{u}) : \mathbb{C} : \varepsilon^{\mu} \quad (7)$$

Ainsi, dans le cadre d'une approche couplée, l'énergie libre via laquelle l'équilibre énergétique va se traduire prend la forme :

$$E_{tot}(\vec{m}, \vec{u}) = E_z + E_{ech} + E_a + E_d + E_{\sigma} \quad (8)$$

La condition de stabilité de l'énergie est alors obtenue si et seulement si les champs d'aimantation et de déplacement minimisent simultanément l'énergie libre totale. Cette condition s'écrit :

$$\delta E_{tot} = \frac{\partial E_{tot}}{\partial \vec{m}} \delta \vec{m} + \frac{\partial E_{tot}}{\partial \vec{u}} \delta \vec{u} = 0 \quad (9)$$

Ce qui revient à écrire :

$$\frac{\partial E_{tot}}{\partial \vec{m}} = \vec{0} \quad \frac{\partial E_{tot}}{\partial \vec{u}} = \vec{0} \quad \forall \vec{x} \in \Omega \quad (10)$$

La première minimisation fournit alors :

$$\vec{H}_{eff} = \vec{H}_{ext} + \vec{H}_d - \mathbf{A} \Delta \vec{m} - \frac{1}{2} \frac{\partial E_a}{\partial \vec{m}} - \vec{H}_{\sigma} = -\frac{1}{\mu_o} \frac{\partial E_{tot}(\vec{m})}{\partial \vec{m}} \quad (11)$$

Avec

$$\vec{H}_{\sigma} = -\frac{1}{\mu_o} \frac{\partial E_{\sigma}}{\partial \vec{m}} = -\frac{1}{\mu_o} \frac{\partial (-\sigma : \varepsilon^{\mu})}{\partial \vec{m}} \quad (12)$$

$\sigma$  désigne le tenseur des contraintes locales. La seconde minimisation fournit toujours le système

linéaire donné par l'équation :

$$\mathbb{K}.U = F \quad (13)$$

Avec  $\mathbb{K}$  la matrice de rigidité du système,  $U$  le vecteur déplacement généralisé et  $F$  le vecteur force généralisé.

Dans le cas d'un matériau à symétrie cubique (telle l'austénite) le tenseur de magnétostriction est tel que :

$$\varepsilon^\mu = \frac{3}{2} \begin{bmatrix} \lambda_{100} (\alpha_1^2 - \frac{1}{3}) & \lambda_{111} \alpha_1 \alpha_2 & \lambda_{111} \alpha_1 \alpha_3 \\ SYM & \lambda_{100} (\alpha_2^2 - \frac{1}{3}) & \lambda_{111} \alpha_1 \alpha_2 \\ SYM & SYM & \lambda_{100} (\alpha_3^2 - \frac{1}{3}) \end{bmatrix} \quad (14)$$

L'algorithme utilisé est donc le suivant :

Supposé :  $\vec{m}_0$ ,  $\delta E_{tot}(\vec{m}_0) = \vec{g}_0$ ,  $\vec{w}_0 = \vec{g}_0$ ,  $\mathbb{K}_h.U_{h_0} = F_{h_0}$ ;

**while**  $n \geq 1$ , **do**

    Trouver  $\rho_n \in \mathbb{R}$  Tel que  $\forall \rho \in \mathbb{R}$ ;

$E_{tot} \left( \frac{\vec{m}_n - \rho_n \vec{w}_n}{\|\vec{m}_n - \rho_n \vec{w}_n\|}, \sigma_n \right) < E_{tot} \left( \frac{\vec{m}_n - \rho \vec{w}_n}{\|\vec{m}_n - \rho \vec{w}_n\|}, \sigma_n \right)$ ;

$\vec{m}_{n+1} = \frac{\vec{m}_n - \rho_n \vec{w}_n}{\|\vec{m}_n - \rho_n \vec{w}_n\|}$ ;

$\mathbb{K}_h.U_{h_{n+1}} = F_{h_{n+1}}$ ;

$\vec{g}_{n+1} = \vec{H}_{eff}(\vec{m}_{n+1}, \sigma_{n+1})$ ;

$\vec{w}_{n+1} = \vec{g}_{n+1} + r_n \vec{w}_n$ ;

    Où l'on choisit  $r_n = \frac{\vec{g}_{n+1} \cdot (\vec{g}_{n+1} - \vec{g}_n)}{\|\vec{g}_n\|_{\mathbb{R}^n}^2}$ ;

**end**

**Algorithm 1:** Gradient conjugué Magnéto-Mécanique.

Les simulations montrent qu'en l'absence de couplage magnéto-mécanique, la microstructure magnétique est dominée par les effets démagnétisants d'anisotropie qui tendent à aligner les moments magnétiques suivant les axes de facile aimantation. La contrainte et son énergie associée agissent comme une source supplémentaire d'anisotropie. La structure est donc stabilisée par cet apport énergétique.

## 5 Extension aux AMFM

Partant de ce modèle magnéto-mécanique d'une structure figée, une grande partie du travail a été de repenser le code de manière à introduire la possibilité de choix de présence de différentes phases et/ou variantes localement.

Ainsi, toutes les équations existantes ont dû être repensées et réécrites de manière à ce que leurs paramètres puissent varier selon la phase ou variante en présence. Dans un premier temps, il a été considéré la mise en place d'un modèle pour lequel la distribution de la phase ou variante sur l'ensemble de la surface du monocristal est fixe et imposée par l'utilisateur ; cela revient à considérer que la méthode de résolution reste identique, seule change l'ensemble des équations définissant les différentes énergies mises en jeu ainsi que les champs magnétiques découlant de ces énergies.

$$\begin{array}{llll}
M_s = 0.67 \text{ T} & A = 1.10^{-11} \text{ J.m}^{-1} & K_{1aus} = 3.10^2 \text{ J.m}^{-3} & K_2 = 0 \\
\lambda_{100} = 120.10^{-6} & \lambda_{111} = 13.10^{-6} & 2 \text{ axes d'anisotropie } [100] = \vec{x} \text{ et } [010] = \vec{y} & \\
C_{11} = 140 \text{ GPa} & C_{12} = 122 \text{ GPa} & C_{44} = 104 \text{ GPa} & 
\end{array}$$

TABLE 1 – Constantes physiques de la phase austénitique (monocristalline) utilisées pour les simulations, Heczko [?] et Sozinov [11]

Pour des raisons de simplifications et aussi par manque d'information sur les paramètres matériau de la phase martensitique, certains paramètres seront pris égaux aux paramètres de la phase austénitique. Les paramètres sont regroupés dans les tables 1 et 2.

$$\begin{array}{llll}
M_s = 0.67 \text{ T} & A = 1.10^{-11} \text{ J.m}^{-1} & K_{1mar} = 1.65 .10^5 \text{ J.m}^{-3} & K_2 = 0 \\
\lambda_{100} = 120.10^{-6} & \lambda_{111} = 13.10^{-6} & 1 \text{ axe d'anisotropie suivant l'axe de facile aimantation} & \\
C_{11} = 140 \text{ GPa} & C_{12} = 122 \text{ GPa} & C_{44} = 104 \text{ GPa} & 
\end{array}$$

TABLE 2 – Constantes physiques de la phase martensitique (monocristalline) utilisées pour les simulations, Straka [12]

## 5.1 insertion d'une fonction de phase

Les AMFM, en plus de posséder une déformation élastique (sous chargement mécanique) et une déformation de magnétostriction (sous champ magnétique externe), présentent également une déformation de transformation. Cette déformation doit être prise en compte dans l'écriture de l'énergie via l'énergie élastique. En se basant sur les travaux de Li [13], l'écriture de cette déformation est alors :

$$\varepsilon^{tr} = \omega_1 \cdot \varepsilon_1^{tr} + \omega_2 \cdot \varepsilon_2^{tr} + \omega_3 \cdot \varepsilon_3^{tr} \quad (15)$$

$\omega_i$  et  $\varepsilon_i^{tr}$  représentent les fractions et déformations de transformation de la variante  $i$  (les 3 variantes du système quadratique sont considérées). Pour un point donné, une seule variante peut être présente, ainsi,  $\omega_i$  ne pourra être égal qu'à 1 (présence de la variante  $i$ ) ou 0. Les  $\omega_i$  peuvent être liés entre eux par l'équation suivante :  $\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 = 1$  Pour des questions d'optimisation les fractions  $\omega_i$  ont été réécrites en utilisant deux paramètres  $\mu_1$  et  $\mu_2$ .

$$\omega_1 = \mu_1 \cdot (1 - \mu_2), \quad \omega_2 = \mu_2 \cdot (1 - \mu_1), \quad \omega_3 = (1 - \mu_2) \cdot (1 - \mu_1), \quad \omega_4 = \mu_1 \cdot \mu_2 \quad (16)$$

L'indice  $i=4$  fait alors référence à l'austénite monovariante. En considérant la déformation de transformation de l'austénite nulle  $\varepsilon_4^{tr} = \varepsilon_{aus}^{tr} = \mathbb{0}$ , la déformation de transformation pour les variantes de martensite s'écrit alors :

$$\varepsilon_1^{tr} = \begin{bmatrix} \beta & & \\ & \xi & \\ & & \xi \end{bmatrix}; \quad \varepsilon_2^{tr} = \begin{bmatrix} \xi & & \\ & \beta & \\ & & \xi \end{bmatrix}; \quad \varepsilon_3^{tr} = \begin{bmatrix} \xi & & \\ & \xi & \\ & & \beta \end{bmatrix}; \quad (17)$$



Dans cet article, les valeurs suivantes ont été utilisées :

Paramètres	E [GPa]	$\nu$	$\beta$	$\xi$
Valeurs	154	0.3	-0.034	0.021

TABLE 3 – Constantes physiques du NiMnGa (monocristallin) utilisées pour les simulations, Li [13]

Les valeurs de  $\mu_1$  et  $\mu_2$  permettent de définir les 4 phases possibles d'un alliage de Ni<sub>2</sub>MnGa :

	Martensite 1	Martensite 2	Martensite 3	Austénite
Valeur de $\mu_1$	1	0	0	1
Valeur de $\mu_2$	0	1	0	1

TABLE 4 – Détermination de la phase et/ou variante en présence selon la combinaison ( $\mu_1, \mu_2$ ) à implémenter dans le code existant.

Les énergies du problème peuvent ainsi être réécrites en une seule équation généralisée, faisant intervenir une formulation spécifique selon la variante ou phase en présence localement.

## 5.2 réécriture des énergies

Les écritures des différentes énergies et paramètres intervenant dans le modèle font intervenir les paramètres et équations de chaque variante ou phase en fonction de la combinaison ( $\mu_1, \mu_2$ ). Ainsi, la déformation de transformation vaut, par définition, la moyenne des déformations de transformation, en prenant en compte la phase austénitique.

$$\varepsilon^{tr} = \omega_1 \cdot \varepsilon_{m1}^{tr} + \omega_2 \cdot \varepsilon_{m2}^{tr} + \omega_3 \cdot \varepsilon_{m3}^{tr} + \omega_4 \cdot \varepsilon_{aust}^{tr} \quad (18)$$

De même, l'énergie d'anisotropie est donnée par l'équation :

$$E_a = K_{1_{mart}} \cdot [1 - (1 - \mu_1)(1 - \mu_2) - (\alpha_1 \cdot \mu_1 \cdot (1 - \mu_2) + \alpha_2 \cdot \mu_2 \cdot (1 - \mu_1))^2] + K_{1_{aust}} \cdot [(\alpha_1 \cdot \mu_1)^2 \cdot (\alpha_2 \cdot \mu_2)^2] \quad (19)$$

L'énergie d'échange est aussi réécrite de telle sorte que :

$$E_{ech} = \mu_0 (\mathbf{A}_1 \cdot \|\vec{\nabla} \vec{m}\|^2 + \mathbf{A}_2 \cdot \|\vec{\nabla} \vec{\mu}\|^2) \quad (20)$$

Afin de pouvoir prendre en compte l'influence de la réorientation des éléments voisins entre eux. L'hypothèse posée est que  $\mathbf{A}_1 = \mathbf{A}_2$ .

L'énergie démagnétisante dépend du champ démagnétisant et est définie par l'équation 5. De même, l'énergie de Zeemann conserve son écriture d'origine et est définie par l'équation 6.

L'énergie élastique va intégrer un terme supplémentaire avec l'apparition de la déformation de

transformation. Les termes de couplage sont contenus dans l'énergie élastique.

$$\begin{aligned}
 E_\sigma(\vec{v}, \vec{m}, \vec{\mu}) &= \frac{1}{2} (\varepsilon - \varepsilon^\mu(\vec{m}) - \varepsilon^{tr}(\vec{\mu})) : \mathbb{C} : (\varepsilon - \varepsilon^\mu(\vec{m}) - \varepsilon^{tr}(\vec{\mu})) \\
 &= \frac{1}{2} \varepsilon : \mathbb{C} : \varepsilon - \varepsilon : \mathbb{C} : \varepsilon^\mu(\vec{m}) - \varepsilon : \mathbb{C} : \varepsilon^{tr}(\vec{\mu}) \\
 &\quad + \frac{1}{2} \varepsilon^\mu(\vec{m}) : \mathbb{C} : \varepsilon^\mu(\vec{m}) + \frac{1}{2} \varepsilon^{tr}(\vec{\mu}) : \mathbb{C} : \varepsilon^{tr}(\vec{\mu})
 \end{aligned} \tag{21}$$

De par l'ajout de fonctions de phase rendant la microstructure évolutive, l'énergie chimique (Gibbs) est à prendre en compte dans la résolution du modèle par minimisation d'énergie.

Cette énergie dépend de la température, de l'enthalpie et de l'entropie. L'enthalpie et l'entropie auront des valeurs différentes selon la phase en présence.

Elle prend la forme :

$$E_T = h_{mart}(1 - \mu_1 \cdot \mu_2) + h_{aust}(\mu_1 \cdot \mu_2) - T(s_{mart} \cdot (1 - \mu_1 \cdot \mu_2) + s_{aust} \cdot (\mu_1 \cdot \mu_2)) \tag{22}$$

$h_\mu$  et  $s_\mu$  désignent respectivement l'enthalpie et l'entropie du système.  $\mu$  représente la phase en présence (austénite ou martensite) à travers une combinaison utilisant les variables  $\mu_1$  et  $\mu_2$ .

## 6 Applications numériques

L'évolution d'un monocristal de  $\text{Ni}_2\text{MnGa}$  est étudiée. Ses constantes magnétiques, mécaniques et cristallographiques sont résumées dans les tableaux 1 pour l'austénite, 2 pour la martensite et 4 pour la détermination de la phase en présence. Pour les exemples traités, la phase est fixée : phase martensitique (pas de transformation austénite / martensite lors de la résolution). Du fait d'une modélisation 2D, la variante 3 de martensite possède un axe de facile aimantation hors plan, alors la combinaison :  $\mu_1 = 0$  et  $\mu_2 = 0$  ne sera pas utilisée ici car elle représente, dans le plan, une énergie d'anisotropie nulle quelque soit la direction de l'aimantation.

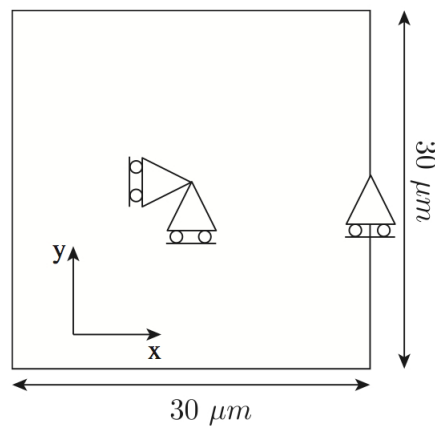


FIGURE 3 – Domaine d'étude et conditions aux limites mécaniques : bords libres. Monocristal de  $30\mu\text{m} \times 30\mu\text{m}$  maillage de 3996 éléments triangulaires.

On présente les résultats obtenus pour deux structures martensitiques différentes soumises à un même chargement magnétique.

Le champ magnétique externe appliqué est suivant l'axe  $\vec{x}$  du repère tracé figure 2 et la variante 1 est la variante de martensite dont l'axe de facile aimantation (axe court) est suivant l'axe  $\vec{x}$  et la variante 2 est la variante de martensite dont l'axe de facile aimantation est suivant l'axe  $\vec{y}$ .

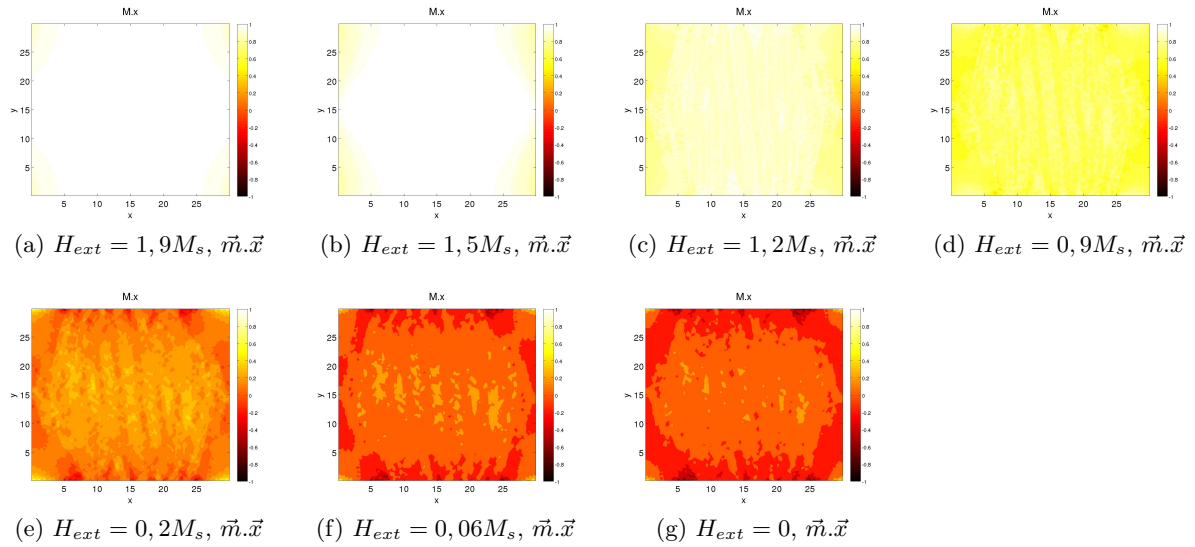


FIGURE 4 – Evolution de la microstructure sous chargement magnétique pour la variante de martensite 2. Les figures représentent l'évolution de l'aimantation suivant  $\vec{x}$ .

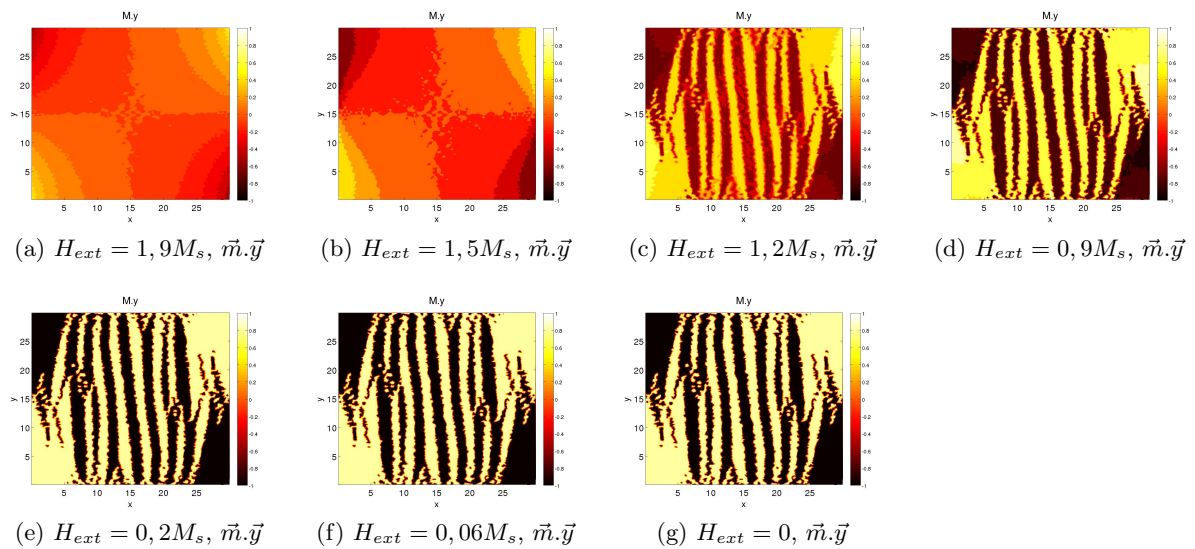


FIGURE 5 – Evolution de la microstructure sous chargement magnétique pour la variante de martensite 2. Les figures représentent l'évolution de l'aimantation suivant  $\vec{y}$ .

Sous un champ insuffisant pour réorienter l'aimantation de la microstructure, celle-ci sera naturellement orientée suivant l'axe de facile aimantation, ici  $\vec{y}$ .

En changeant de variante de martensite on obtient, pour un chargement identique, le résultat suivant :

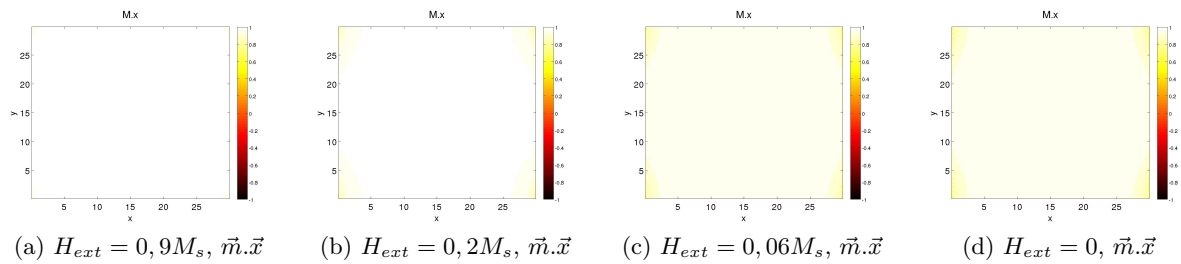


FIGURE 6 – Evolution de la microstructure sous chargement magnétique pour la variante de martensite 1. Les figures représentent l'évolution de l'aimantation suivant  $\vec{x}$ .

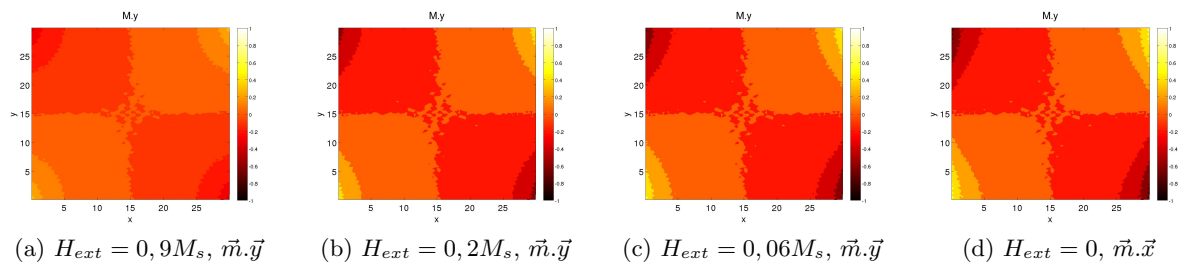


FIGURE 7 – Evolution de la microstructure sous chargement magnétique pour la variante de martensite 1. Les figures représentent l'évolution de l'aimantation suivant  $\vec{y}$ .

La variante de martensite 1 possède un axe de facile aimantation suivant la direction du champ magnétique externe, son aimantation est donc naturellement orientée dans la direction  $\vec{x}$ .

L'austénite ayant une maille cubique, l'évolution de sa microstructure sera différente de la martensite.

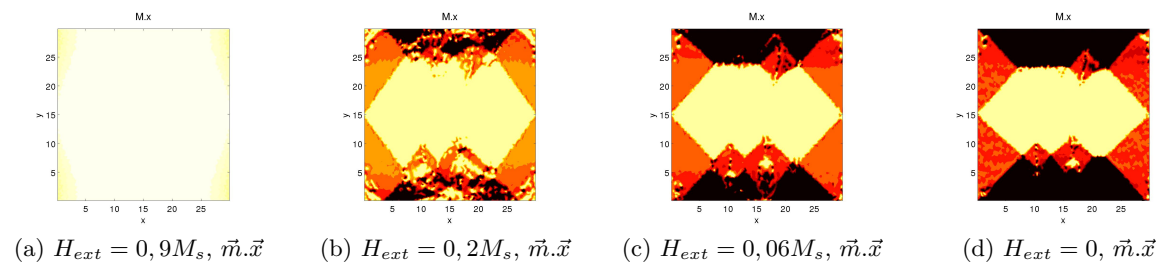


FIGURE 8 – Evolution de la microstructure sous chargement magnétique pour la phase austénitique. Les figures représentent l'évolution de l'aimantation suivant  $\vec{x}$ .

L'austénite possède deux axes de facile aimantation suivant les directions  $\vec{x}$  et  $\vec{y}$ .

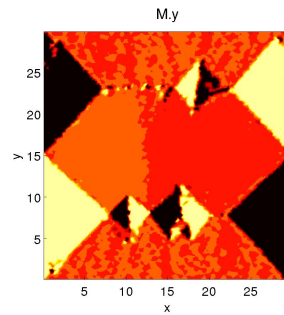


FIGURE 9 –  $H_{ext} = 0$ ,  $\vec{m} \cdot \vec{x}$ . Etat de la microstructure pour la phase austénitique. Représentation de l'aimantation suivant  $\vec{y}$ .

L'insertion d'une fonction définissant la phase ou variante en présence a permis de constater que selon la structure initiale imposée au maillage via les fonctions de phase qui ont été introduites dans le code, le résultat obtenu, pour un même chargement magnétique, diffère largement. Ceci met en évidence l'influence de l'anisotropie sur la microstructure d'un monocristal de  $\text{Ni}_2\text{MnGa}$ . En effet, la variante 1 présentant un axe de facile aimantation suivant la direction du chargement magnétique, alors, son aimantation est naturellement orientée suivant cette direction. A contrario, la variante 2 possède un axe de facile aimantation perpendiculaire à la direction du chargement magnétique, son aimantation est donc difficile à orienter suivant l'axe du chargement.

## 7 Conclusion

Dans cette communication nous avons proposé les bases d'une modélisation mêlant micro-magnétisme et champ de phases 2D des AMFM. L'objectif de ce modèle est de restituer la microstructure de ces matériaux et son évolution grâce à une minimisation de l'énergie totale ainsi qu'une résolution des équations de conservation. Seuls les mécanismes de mouvement de parois et de réorientation de variantes ont été illustrés.

## Références

- [1] Brown, W.F., Micromagnetics, John Wiley and Sons, New York, 1963.
- [2] Lagoudas, D.C., Shape Memory Alloys : Modeling and Engineering Applications, Springer Science + Business media, LLC, 2008.
- [3] Chen X., Moumni Z., He S., Zhang W., A three-dimensional model of magneto-mechanical behaviors of martensite reorientation in ferromagnetic shape memory alloys, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, volume 64, pp. 249-286, 2014.
- [4] Sozinov A., Lanska N., Soroka A., Zou W., 12% magnetic field-induced strain in Ni-Mn-Ga-based non-modulated martensite Applied Physical Letters, 102, 021902, 2013.
- [5] Bernadou M., Depeyre S., He S., Meilland P., Numerical Simulations of Ferromagnetic Microstructures : Motion of the Walls and Effect of Nonmagnetic Impurities, Journal of Intelligent Material Systems and Structures, volume 16, pp. 1015-1023, 2005.
- [6] Aharoni A. Introduction to the Theory of Ferromagnetism. Oxford University Press, New York, 1996.
- [7] Mballa-Mballa, F. S., Hubert, O., Song, H., Depeyre, S., Meilland, P., Modélisation micromagnétique du comportement magnéto-mécanique, CSMA 2013, 11e Colloque National en Calculs des Structures, 2013.
- [8] Tillier, J., Films Ni-Mn-Ga et mémoire de forme magnétique : élaboration et étude des propriétés structurales et magnétiques, thèse de doctorat, 2010.
- [9] Sozinov, A., Likhachev, A. A., Lanska, N., Ullakko, K., Giant magnetic field induced strain in NiMnGa seven layered martensitic phase, Applied physics letters volume 80, number 10, pp. 1746-1748, Helsinki, 2002.
- [10] Mballa-Mballa, F. S., Hubert, O., Song, H., Depeyre, S., Meilland, P., Micromagnetic modeling of magneto-mechanical behavior, IEEE Transactions on magnetics, volume 50, number 4, pp.1-4, 2014.
- [11] Sozinov, A., Likhachev, A. A., Ullakko, K., Magnetic and Magnetomechanical Properties of Ni-Mn-Ga Alloys with easy axis and easy plane of magnetization, Helsinki University of Technology, Proc. SPIE Vol. 4333, pp. 189-196, 2001.
- [12] Straka, L., Heczko, O., Magnetic anisotropy in Ni-Mn-Ga martensites, Journal of Applied Physics 93, 8636, 2003.
- [13] Li, L.J., Lei, C.H., Shu, Y.C., Li, J.Y., Phase field simulation of magnetoelastic couplings in ferromagnetic shape memory alloys, Acta Materialia volume 59, p. 2648-2655, Seattle, 2011.