

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOULOUD MAMMERI DE TIZI-OUZOU

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

THESE DE DOCTORAT
SPECIALITE : PHYSIQUE
OPTION : PHYSIQUE DU SOLIDE

Présentée par
BOUMEDDINE Fatiha

**Contribution à l'étude de la dynamique de spins
dans des systèmes de basses dimensions
(Implantation de défauts. Géométrie de surface.
Influence de l'échange biquadratique et de
l'anisotropie uniaxiale)**

Devant le jury d'examen composé de :

ZEMIRLI	Mourad	Professeur	U.M.M.Tizi-Ouzou	Président
TAMINE	Mokrane	Professeur	U.M.M.Tizi-Ouzou	Rapporteur
LABAYE	Ivan	Maitre de Conférences	U.du Maine-France	Co-rapporteur
AMAROUCHE	Mhend	Professeur	U.Bouira	Examineur
OTMANI	Amara	Professeur	U.Skikda	Examineur
ZIANE	Abdelhamid	Professeur	U.M.M.Tizi-Ouzou	Examineur

soutenue le /09/05/2012

A mes parents ...

Remerciements

Le travail présenté dans ce mémoire a été effectué au Laboratoire de Physique et Chimie Quantique de l'université de Mouloud Mammeri.

Je remercie M.Tamine pour avoir accepté de diriger cette thèse, je tiens à lui exprimer ma gratitude qui m'a apporté tout le long de ce travail.

Je remercie vivement M.ZEMERLI d'avoir accepté d'être président de mon jury de thèse. Mes remerciements vont aussi à M.AMAROUCHE, M.ZIANE et M.OTMANI qui ont accepté de lire et d'examiner mon travail.

Je remercie particulièrement M.LABAYE d'une part d'avoir accepté d'être membre de mon jury de thèse d'autre part de m'avoir accueilli au sein du Laboratoire de Physique de L'État Condensé de L'université du Maine Le Mans. J'exprime, également, toute ma reconnaissance envers M.GRENECHE pour les facilités dont j'ai pu bénéficier lors de ma formation à université du Maine Le Mans.

Je voudrais exprimer ma profonde amitié à Francis Chavanon pour sa disponibilité et son aide précieuse pour les subtilités de l'informatique. J'en profite également pour remercier Mr et Mme Mary pour leur aide qui m'a apporté pendant mon séjour en France.

Pour terminer, je souhaite remercier au plus profond de mon cœur mes parents et mes très chères sœurs auxquels je dédie ce travail.

Je dédie aussi ce travail à la mémoire de mon cousin Da Chavane et ma pensée va également à Karim LOUALICHE qui nous a quitté.

Table des matières

Remerciements	3
Table des matières	4
Introduction Générale	9
1 Approche théorique	13
1.1 Magnétisme de surface	13
1.1.1 Aperçu qualitatif du magnétisme de la matière	13
1.1.2 Influence de la surface	14
1.1.2.1 Caractéristiques qualitatives des ondes de spin	14
1.2 Les ondes de spin	18
1.3 Théorie des ondes de spin	19
1.3.1 Cas ferromagnétique	19
1.3.1.1 Cas semi classique	19
1.3.1.2 Cas quantique	21
1.3.2 Cas antiferromagnétique	24
1.3.2.1 Cas semi classique	24
1.3.2.2 Cas quantique	24
2 Les méthodes analytiques pour l'étude les ondes de spin de surface	31
2.1 Introduction	31
2.2 La méthode des fonctions de Green	32
2.2.1 Fonction de Green retardée et avancée	33
2.2.2 Équation du mouvement	33
2.2.3 Application des fonctions de Green pour le calcul des énergies des ondes de spin	35
2.2.4 Fonction de Green pour un système cubique semi infini	38

2.3	La méthode de diagonalisation directe	42
2.4	La méthode de raccordement	43
2.4.1	Continuité des champs de précession de volume et de surface .	43
2.4.2	Propriétés de symétrie et matrice dynamique	44
2.4.3	Équation séculaire et propriétés évanescentes des ondes de spin de volume	45
2.4.4	Densité d'états de volume et modes de surface	47
2.4.5	Expression de l'équation séculaire pour les ondes de spin de volume	49
2.4.5.1	Modèle de Heisenberg-Considérations générales . . .	49
2.4.5.2	Description des équations générales du mouvement de spin	50
	Cas antiferromagnétique	50
	Cas ferromagnétique	53
2.4.6	Équations des ondes de spin de surface en fonction de l'amplitude Cas Antiferromagnétique	55
	Cas Ferromagnétique	60
2.4.7	les énergies des ondes de spin de surface	63
	Cas Antiferromagnétique	63
	Cas ferromagnétique	67
3	Étude des excitations magnétiques d'un système ferromagnétique	69
3.1	Introduction	69
3.2	Étude d'une surface ferromagnétique dans le plan (110)	72
3.2.1	Discussion des résultats	77
3.3	Étude d'une surface ferromagnétique en présence d'un plan de défauts	82
3.3.1	Discussion et analyse des résultats	88
3.4	Conclusion du chapitre	97
4	Étude des excitations magnétiques d'un système antiferromagnétique	99
4.1	Introduction	99
4.2	Étude d'une surface antiferromagnétique dans les plans (100) et (110)	102
4.2.1	Énergies des ondes de spin de surface (100)	102
4.2.1.1	Analyse et discussion des résultats	107
4.2.2	Énergies des ondes de spin de surface (110)	109

TABLE DES MATIÈRES

4.2.2.1	Analyse et discussion des résultats	112
4.3	Influence du couplage biquadratique et d'anisotropie uniaxiale sur les excitations magnétiques de surface	116
4.3.1	Analyse et discussion des résultats	124
4.3.2	Conclusion du chapitre	136
Conclusion générale et perspectives		139
A Annexe		143
A.1	Éléments de la matrice dynamique M_{ml}^{Ns}	143
B Annexe		147
B.1	Éléments de la matrice dynamique $M_s(6 \times 6)$	147
C Annexe		149
C.1	Éléments de la matrice dynamique $M_s(6 \times 6)$	149
D Annexe		151
D.1	Éléments de la matrice dynamique $M_s(6 \times 6)$	151
Bibliographie		162
Table des figures		163

TABLE DES MATIÈRES

Introduction Générale

Par bien des aspects, la physique du solide et des surfaces vise essentiellement à mesurer, prédire, expliquer les propriétés physico-chimiques des solides. Les physiciens et les chimistes s'attachent de plus en plus à élaborer de nouveaux matériaux possédant de nouvelles propriétés. Parmi eux, les films magnétiques ultra-minces (super-réseaux, multicouches, \dots) qui ont une grande capacité à être préparés par des techniques de dépôt (épitaxie par jets moléculaires et pulvérisation cathodique \dots). Ces dernières produisent des films minces par la procédure dite de *Bottom-up*. La réduction de l'épaisseur de ces films à quelques plans fait subir des changements au niveau de leurs propriétés magnétiques, et ce, par la présence d'une surface ou d'interfaces. Ce qui conduit à des modifications du moment magnétique et à l'apparition d'anisotropie magnétique pouvant être supérieure à celle des matériaux massifs. Cette anisotropie est utile pour des applications technologiques dans le domaine de l'enregistrement magnétique. L'apparition du stockage magnétique depuis plusieurs années, a suscité un intérêt d'étude et de recherche croissant concernant les films magnétiques ultra minces. Les mémoires magnétiques et les disques durs représentent le plus grand secteur d'application de cette technologie.

Aujourd'hui, tant au niveau expérimental qu'au niveau théorique, la physique des surfaces solides est devenue un domaine de recherche extrêmement actif. Les travaux dédiés à cette étude peuvent être divisés de manière générale en trois catégories : (i) La chimie des surfaces comprenant la physisorption, la chimisorption et la catalyse. (ii) La structure cristallographique et la reconstruction des surfaces. (iii) La dynamique des surfaces comprenant les excitations collectives de surface (phonon, magnon, plasmon) et les propriétés thermodynamiques des systèmes magnétiques pour des réseaux de basses dimensions.

La surface d'un solide présentant un arrangement d'ions, d'atomes ou de molécules est sérieusement perturbée par rapport à l'agencement périodique situé à l'intérieur du solide. Par conséquent, les propriétés physiques de la surface

(mécaniques, électriques ou magnétiques) subissent des discontinuités par rapport aux propriétés volumiques. Par ailleurs, les ondes qui se propagent sur une surface solide sont en général très sensibles à ces discontinuités.

Au cours de ce travail, nous nous intéresserons en particulier à la dispersion des ondes de spin de surface. Ces excitations sont associées à des mouvements de précession des spins autour de leur direction moyenne, et qui ont physiquement le sens de fluctuations transverses par rapport à la direction de l'aimantation. Les ondes de spin de surface sont caractérisées par leur vecteur d'onde qui est parallèle à la surface et par un facteur d'atténuation. Théoriquement, ces ondes peuvent être décrites d'un point de vue microscopique ou macroscopique. A l'échelle microscopique, les excitations magnétiques de surface, dans la représentation de Heisenberg, sont dues au changement abrupt des interactions d'échange au niveau de la surface. A l'échelle macroscopique, les ondes de spin de surface sont associées à la forme du champ démagnétisant. En somme, l'interaction magnétique dipolaire, l'interaction d'échange, l'orientation du cristal et l'orientation du champ magnétique appliqué influent sur la dispersion les ondes de spin de surface.

Par ailleurs, différentes appellations ont été attribuées aux ondes de surface. Dans le cas où la contribution d'échange est prépondérante par rapport aux autres interactions, les ondes de spin sont appelées *magnon de surface* ou *onde de spin de surface*. Pour les grandes longueurs d'ondes où l'interaction dipôle-dipôle est prédominante, nous parlerons dans ce cas *d'onde de surface magnétostatique*. Pour des longueurs d'ondes suffisamment petites où l'interaction d'échange est prise en compte, nous parlerons alors dans ce cas du régime *dipôle-échange*. Il est important de souligner que les ondes magnétiques de surface englobent toutes les ondes de surface existantes dans des systèmes magnétiques.

L'objectif de ce présent travail est l'étude théorique des excitations magnétiques en volume et au voisinage de la surface pour des réseaux ferromagnétiques et antiferromagnétiques à dimensionnalité réduite. La réduction de dimensionnalité est modélisée par raison de commodité comme un modèle de réseaux semi infini. A cet effet, le modèle semi infini pour les réseaux ferro et antiferromagnétiques repose sur le fait que la perturbation appliquée sur une face ne soit pas ressentie par l'autre face. Cette configuration est l'inverse de l'étude du magnétisme et des excitations correspondantes dans les films minces.

Au cours de ce travail, différentes configurations d'analyse sont alors investiguées : (i) Influence de l'orientation de surface. (ii) Influence d'implantation de défauts dans la structure. (iii) Influence de l'échange biquadratique et de l'anisotropie uniaxiale.

Le calcul des spectres d'excitation magnétique de volume et de surface s'effectue par la description de la continuité des champs de précession de spin volumique et surfacique. Ces équations de continuité sont lors décrites dans la région *volume-surface*. Partant de l'hypothèse fondamentale que la symétrie de translation est sauvegardée dans les directions parallèles à la surface. La modélisation des calculs s'effectuera alors en considérant un modèle de couches atomiques. La première couche et la couche adjacente sont perturbées par des paramètres d'échange différents de ceux de volume.

Le formalisme utilisé dans cette thèse, pour le calcul des courbes de dispersion des magnons de volume et de surface, est la méthode de raccordement. Cette dernière a été également utilisée pour l'étude théorique de la dynamique vibrationnelle des surfaces ordonnées et désordonnées. L'objectif principal de cette méthode consiste à mettre l'accent, en particulier sur l'avantage de caractériser chaque champ de déplacement des ondes de spin en fonction de sa symétrie. Des expressions analytiques pour les équations du mouvement de volume et de surface sont également obtenues dans l'approximation des basses températures en appliquant la "random phase approximation" (RPA). Cette approximation nous permet d'analyser qualitativement la nature des modes, en observant la réponse des branches d'énergie à la variation des facteurs de structure et des paramètres d'échange se produisant à la surface.

C'est sur la perturbation au niveau de la surface que se focalise notre travail de thèse. A cet effet, nous présentons les grands axes de notre problématique.

1. Comment le spectre des ondes de spin se modifie en présence d'une brisure de symétrie due à la surface et d'une réduction de symétrie due au plan d'impureté.
2. Quel est l'effet de la variation des intégrales d'échange et des facteurs de structure sur le spectre des ondes de spin.
3. Quel est l'effet de l'anisotropie uniaxiale et l'interaction biquadratique sur le

spectre des ondes de spin.

Dans *le premier chapitre*, nous présenterons le cadre théorique des ondes de spin de volume. Nous rappellerons brièvement la théorie des ondes de spin du point de vue semi-classique. Puis, nous décrirons les excitations de basses énergies du système de spin en utilisant le formalisme quantique de Holstein-Primakoff.

Dans *le deuxième chapitre*, nous exposerons les éléments théoriques de la méthode de raccordement. Cette méthode sera utilisée au cours de ce chapitre pour déterminer les modes évanescents de surface pour des structures cubiques ferromagnétiques et antiferromagnétiques.

Le troisième chapitre sera consacré à l'application de ce formalisme afin de décrire les courbes de dispersion pour les systèmes semi-infinis ferromagnétiques. Le contexte des modèles présentés dans ce chapitre considère uniquement les interactions des plus proches voisins. De plus les interactions dans la première couche de surface sont différentes de celles de volume. Nous étudierons, en premier lieu, les modes localisés de surface pour une surface orientée (110). En second lieu, nous examinons les modifications induites sur les excitations magnétiques dues à la brisure de symétrie de translation provenant de la surface et de la présence d'un plan de défaut (100) inclu dans un cristal cubique simple ferromagnétique.

Cette étude se terminera par la présentation dans *le quatrième chapitre* du comportement des ondes de spin de surface dans un antiferromagnétique à deux sous réseaux. Nous étudierons d'abord la condition d'existence des magnons localisés pour différentes orientations cristallographiques de surface ((100), (110)). Nous déterminerons aussi l'effet des interactions d'échange sur l'évolution de modes de surface. Ensuite, nous tenterons de comprendre l'influence de l'interaction biquadratique (interaction magnon-phonon) et l'anisotropie uniaxiale sur les excitations magnétiques de surface dans un réseau cubique semi infini de spin 1.

Chapitre 1

Approche théorique

1.1 Magnétisme de surface

1.1.1 Aperçu qualitatif du magnétisme de la matière

Dans la matière condensée, le moment magnétique d'un atome est intrinsèquement lié au moment cinétique électronique qui est la somme d'un moment cinétique orbital associé au mouvement de l'électron autour du noyau et d'un moment cinétique dit de spin associé à la "rotation de l'électron sur lui même". La combinaison des moments individuels orbitaux et de spin des électrons d'un atome obéit aux règles de Hund et au principe de Pauli qui permettent de calculer des moments résultants cinétique et magnétique de l'atome. Le principe de Pauli montre ainsi que seuls les niveaux électroniques non totalement remplis contribuent au magnétisme. Ce sont les couches externes qui sont concernées. Ceci implique que les atomes voisins auront une grande influence sur le magnétisme de l'atome considéré, c'est le cas des matériaux denses. Par exemple, le magnétisme des métaux de transition et des terres rares provient des niveaux f, d et s incomplets.

Par ailleurs, nous savons qu'il existe au sein de la matière, deux types de comportement magnétique : le magnétisme localisé et le magnétisme itinérant [1]. Nous qualifions un magnétisme localisé lorsqu'il provient d'électrons portés par des orbitales de très faible extension spatiale, ce qui est généralement le cas des électrons des couches d ou f . De tels systèmes sont soumis à une forte interaction coulombienne, à laquelle s'ajoutent les effets spin-orbite, les effets du champ cristallin et des interaction d'échange.

En somme, dans le magnétisme localisé, les niveaux électroniques sont parfaitement bien définis, contrairement au magnétisme itinérant qui est un magnétisme de bande pour lequel les niveaux électroniques sont fortement élargis et seuls les électrons des couches externes sont pris en considération.

1.1.2 Influence de la surface

Compte tenu de l'aperçu général du magnétisme décrit dans le paragraphe précédent, la présence d'une surface aura une influence beaucoup plus grande dans le magnétisme itinérant que dans le cas le magnétisme localisé. Selon le critère de Stoner, en raison du nombre réduit de voisins en surface, nous observons une augmentation de la densité d'état vu que la bande d devient très étroite, ce qui favorise la magnétisme. D'autre part, la présence de la surface peut même induire un moment magnétique pour des éléments qui ne sont pas magnétiques en volume, par exemple Vanadium ($3d$), Ruthenium et Palladium ($4d$), Iridium et Platine ($5d$).

Notons par ailleurs que la surface a également une influence sur le comportement collectif des moments de spin. En conséquence, la surface offre un terrain idéal pour étudier les transitions de phases magnétiques en fonction de la taille du système magnétique. D'autre part, pour un matériau ferromagnétique, la température de transition ferro-paramagnétique n'est pas forcément la même en surface et en volume. De plus, les variations de l'aimantation autour de la température de transition se sont pas régies par les mêmes lois d'échelle (exposants critiques différents en surface et en volume).

Le magnétisme est généralement lié à l'existence d'une brisure de symétrie. En effet, dans la plupart des cas, il a été démontré expérimentalement que les spins s'orientent, les uns par rapport au autres, selon des directions bien précises. Ainsi, les travaux décrits dans la suite de ce manuscrit concernent la description et l'étude des ondes de spin issues par la brisure de symétrie de translation induite par la présence d'une surface.

1.1.2.1 Caractéristiques qualitatives des ondes de spin

Dans un cristal, par suite du couplage d'échange entre spins, ces mouvements de précession ne restent pas localisés, mais se propagent sous forme d'une onde à travers le réseau. De plus, ces mouvements sont associés à des excitations transverses, car le spin tourne dans le plan perpendiculaire à la direction de l'aimantation moyenne.

1.1. MAGNÉTISME DE SURFACE

La précession de spin dans ce plan correspond à une fréquence $\omega(k)$ et à une phase $\psi = \mathbf{K} \cdot \mathbf{R}$, où \mathbf{K} représente le vecteur d'onde et \mathbf{R} est le vecteur de position de l'ion (FIG.1.1).

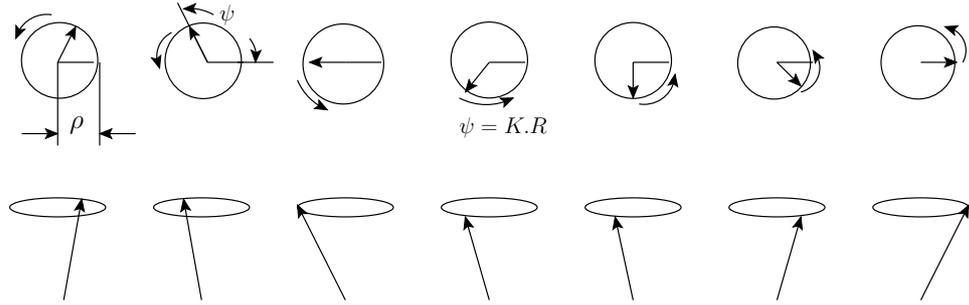


FIG. 1.1 – Image classique de l'onde de spin : précession autour de l'aimantation à la fréquence $\omega(k)$.

Par ailleurs, dans la représentation semi classique, les ondes de spin de volume ont la particularité de précesser avec une amplitude constante et avec une phase variable dans l'espace (FIG.1.1). Cependant, pour les ondes acoustiques, l'amplitude de l'onde oscillante ρ dans le plan de surface est exponentiellement amortie vers l'intérieur du cristal, d'autre part les spins vibrent en phase (FIG.1.2a). Concernant, les ondes optiques, l'amplitude évolue de la même manière que les ondes acoustiques sauf que les spins, dans ce cas, vibrent en opposition de phase (FIG.1.2b) [2] [3].

Il est important de souligner que le mouvement de l'onde de spin de surface se fait parallèlement sur le plan de surface [(y-z)] et cette onde est caractérisée par le vecteur d'onde bidimensionnel k_{\parallel} et par un ou plusieurs facteurs d'atténuations. En somme, la particularité de l'onde de spin de surface est son effet d'amortissement en s'éloignant de la surface.

Comme nous venons de faire remarquer, nous avons distingué deux types d'onde de surface : acoustique et optique. Les branches acoustiques sont moins énergétiques que celles du volume. Contrairement aux branches optiques, elles sont situées au dessous du continuum du volume (FIG.1.3). De plus, ces branches peuvent ne pas exister pour toutes les valeurs de k_{\parallel} . Il arrive que dans certains cas, ces branches apparaissent pour une certaine valeur critique k_{\parallel} et ont toutes un point d'intersection avec le bulk dit "Cut Off", ceci engendre une dégénérescence d'énergie ($E_b(k_{\parallel}) = E_s(k_{\parallel})$).

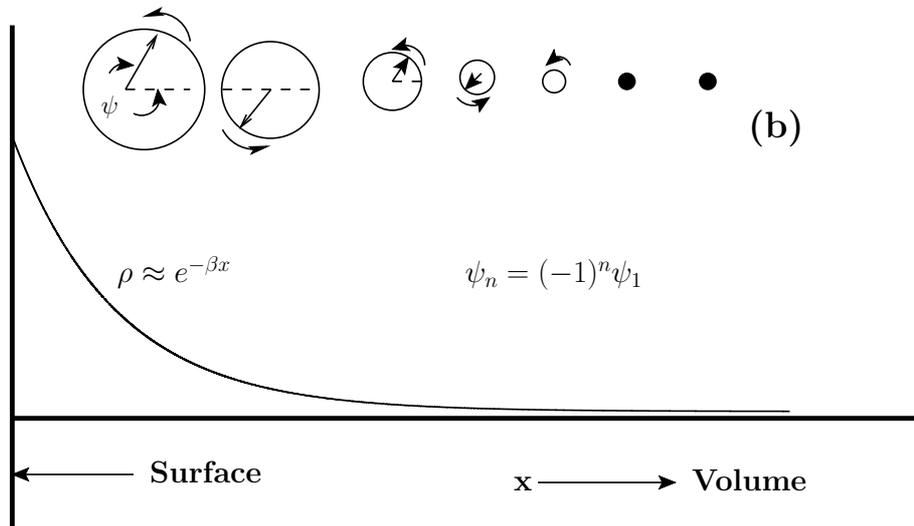
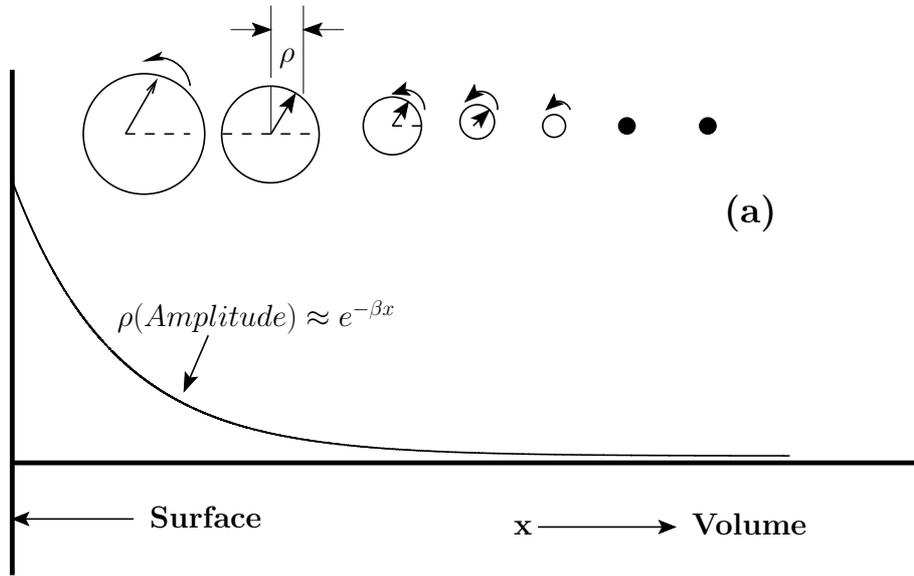


FIG. 1.2 – Représentation semi classique des ondes de spin de surface : (a) acoustique, (b) optique. La phase de l'onde optique d'un plan atomique n est $(-1)^n \psi_1$, où ψ_1 est la phase de l'onde de surface. Le rayon de précession diminue en pénétrant dans la région de volume.

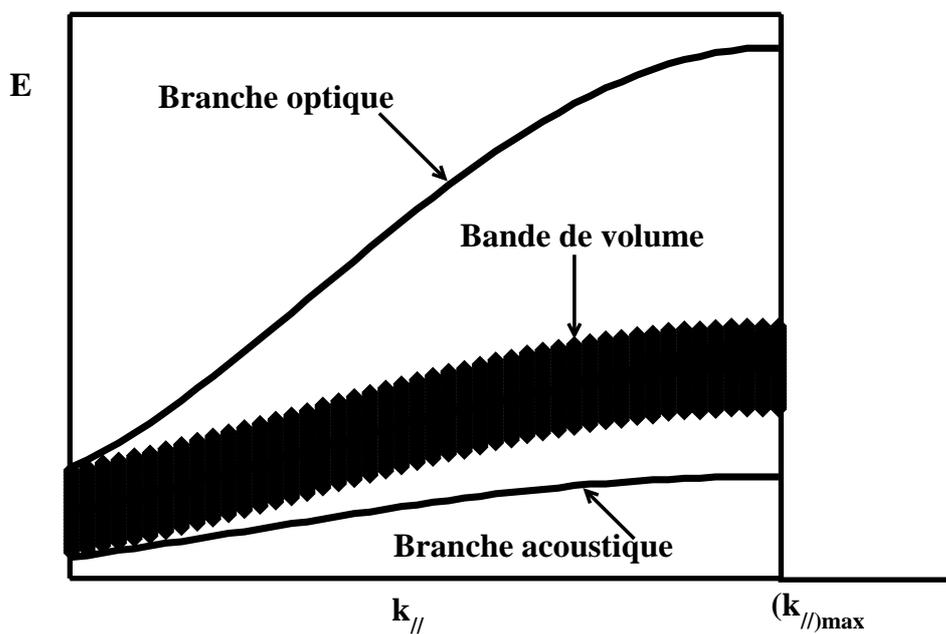


FIG. 1.3 – Ondes de spin de volume (bande pleine). Branches optiques et acoustique (trait plein). L'énergie (E) est représentée en fonction du paramètre $k_{||} = (0, k_y, k_z)$

1.2 Les ondes de spin

Dans les systèmes magnétiques (ferromagnétiques, antiferromagnétiques, ferrimagnétiques), la symétrie de rotation des moments magnétiques et l'invariance par renversement du temps sont brisées spontanément. Lorsque la symétrie brisée est une symétrie continue, il existe un théorème dû à J. Goldstone [4] selon lequel il doit apparaître des modes d'excitations de basse énergie à basse température. Ces excitations magnétiques sont appelés magnons ou ondes de spin.

Dans le cas d'un système ferromagnétique, ces magnons peuvent être visualiser comme une rotation périodique des moments magnétiques autour de la direction moyenne de l'aimantation. Ils se comportent à basse température comme des bosons de spin 1.

La théorie du champ moléculaire ne permet pas de rendre compte de l'évolution de l'aimantation d'un corps ferromagnétique en fonction de la température, en particulier pour les basses températures. Ceci est dû à l'existence d'excitation collective des spins dite communément ondes de spin.

Dans le cas ferromagnétique, la correction à la chaleur spécifique provenant des magnons selon la loi de Bloch [5] est :

$$C_v = \frac{\partial}{\partial T} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar\omega(k)}{e^{\frac{\hbar\omega(k)}{k_b T}}} \sim T^{\frac{3}{2}} \quad (1.1)$$

et l'aimantation par spin varie à basse température comme :

$$M(T) = S \left[1 - \vartheta \left(\frac{k_b T}{2SJ} \right) \right] \quad (1.2)$$

où S est le spin des ions ferromagnétiques, J est la constante d'échange, et ϑ est un nombre sans dimension. Notons qu'à $T \approx 0$ K, l'aimantation tend vers S . Ceci implique que l'état ferromagnétique est l'état fondamental exact du modèle de Heisenberg ferromagnétique.

Dans le cas antiferromagnétique, la correction à la chaleur spécifique est donnée par :

$$C_v = \frac{\partial}{\partial T} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar\omega(k)}{e^{\frac{\hbar\omega(k)}{k_b T}}} \sim T^3 \quad (1.3)$$

A partir de l'expression ci-dessus, l'évolution de la chaleur spécifique en fonction de

1.3. THÉORIE DES ONDES DE SPIN

la température est tout à fait différente de celle d'un système ferromagnétique. Cette différence vient du fait que les magnons antiferromagnétiques ont une relation de dispersion linéaire, pour $k \rightarrow 0$ $\omega(k) \propto |k|$.

Par ailleurs, les systèmes antiferromagnétiques ont la particularité de présenter une aimantation non nulle au zéro absolu :

$$M(T = 0) = S - \frac{1}{N} \sum_q \left[\frac{1}{\sqrt{3 - \cos(q_x a) - \cos(q_y a) - \cos(q_z a)}} - 1 \right] \quad (1.4)$$

où N est le nombre total d'ions.

Ceci justifie que l'état de Néel n'est pas un état propre exact de l'Hamiltonien de Heisenberg, ceci entraîne donc l'existence de fluctuation de point zéro.

1.3 Théorie des ondes de spin

Nous commençons par rappeler, d'un point de vue semi classique, la description des excitations magnétiques des systèmes infinis. Nous décrirons ensuite le formalisme quantique qui nous permet de déterminer les énergies des ondes de spin.

1.3.1 Cas ferromagnétique

1.3.1.1 Cas semi classique

Il est souvent utile de commencer par étudier la limite dite semi classique où les spins sont assimilés à des vecteurs classiques à composantes de longueur unité. Considérons, par exemple, un arrangement régulier de spin à une dimension couplés par des interactions d'échange ferromagnétiques [6].

L'énergie d'interaction d'échange d'un atome n avec l'ensemble des atomes environnants est donnée par la forme suivante :

$$E = -2J\vec{S}_n(\vec{S}_{n-1} + \vec{S}_{n+1}) \quad (1.5)$$

Partant de l'expression du moment magnétique de spin de l'atome n , $\vec{\mu}_n = -g\mu_B\vec{S}_n$, l'équation (1.5) devient alors :

$$E = \frac{2J}{g\mu_B}\vec{\mu}_n(\vec{S}_{n-1} + \vec{S}_{n+1}), \quad (1.6)$$

où J ($J > 0$) désigne la constante d'échange, μ_B est le magnéton de Bohr et g le facteur de Landé.

Selon le postulat de P.Weiss, l'ensemble des moments environnants agit sur $\vec{\mu}_n$ à la manière d'un champ magnétique \vec{B}_n ¹, ceci nous permet d'exprimer ce champ par la relation suivante :

$$\vec{B}_n = \frac{2J}{g\mu_B}(S_{n-1}^{\vec{}} + S_{n+1}^{\vec{}}). \quad (1.7)$$

L'équation du mouvement d'un spin dans un champ moyen \vec{B}_n est :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\vec{S}_n}{dt} &= g\mu_B(\vec{S}_n \wedge \vec{B}_n), \\ i\hbar \frac{d\vec{S}_n}{dt} &= 2J\vec{S}_n \wedge (S_{n-1}^{\vec{}} + S_{n+1}^{\vec{}}). \end{aligned} \quad (1.8)$$

En coordonnées cartésiennes, nous obtenons un système d'équations non linéaires :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dS_n^x}{dt} &= 2J[S_n^y(S_{n-1}^z + S_{n+1}^z) - S_n^z(S_{n-1}^y + S_{n+1}^y)], \\ i\hbar \frac{dS_n^y}{dt} &= 2J[S_n^z(S_{n-1}^x + S_{n+1}^x) - S_n^x(S_{n-1}^z + S_{n+1}^z)], \\ i\hbar \frac{dS_n^z}{dt} &= 2J[S_n^x(S_{n-1}^y + S_{n+1}^y) - S_n^y(S_{n-1}^x + S_{n+1}^x)]. \end{aligned}$$

Nous faisons l'approximation que l'amplitude de l'oscillation est petite, autrement dit $S_n^y, S_n^x \ll S$ et que les termes du second ordre ($S^x S^y$) sont négligeables, ceci nous permet d'aboutir à un système d'équations linéaires en considérant $S_n^z = S$.

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dS_n^x}{dt} &= 2JS[+2S_n^y - S_{n-1}^y - S_{n+1}^y], \\ i\hbar \frac{dS_n^y}{dt} &= 2JS[-2S_n^x + S_{n-1}^x + S_{n+1}^x], \\ i\hbar \frac{dS_n^z}{dt} &= 0. \end{aligned} \quad (1.9)$$

¹Le champ moléculaire de Weiss a la dimension d'un champ magnétique et trouve son origine dans l'interaction coulombienne entre deux électrons. Toutefois, il n'est pas un champ magnétique car il ne génère pas de courant associé à \vec{j} par la relation $\mu_0 \vec{j} = \vec{\nabla} \wedge \vec{B}$.

1.3. THÉORIE DES ONDES DE SPIN

Les solutions des équations (1.9) passe par le choix d'ondes planes progressives :

$$\begin{aligned} S_n^x &= S_0^x \exp [i(nka - \omega t)], \\ S_n^y &= S_0^y \exp [i(nka - \omega t)], \end{aligned} \quad (1.10)$$

où a est le paramètre de maille de la chaîne, $S_0^{x(y)}$ et k représentent, respectivement, le vecteur de polarisation de l'onde selon x et y et le vecteur d'onde.

L'injection des solutions type fonctions de Bloch conduisent à un système d'équations qui nonobstant les solutions triviales S_0^x et S_0^y conduisent alors à postuler que le déterminant doit-être nul. Ainsi, nous parvenons à la relation de dispersion des ondes de spin d'une chaîne linéaire ferromagnétique FIG(1.4) :

$$E = \hbar\omega = 4JS \left[1 - \cos(ka) \right]. \quad (1.11)$$

1.3.1.2 Cas quantique

Dans un système ferromagnétique, une onde de spin est un état propre de l'Hamiltonien d'Heisenberg, commençons donc à introduire l'Hamiltonien d'interaction entre les spins \mathbf{S}_i et \mathbf{S}_j . Nous reviendrons plus en détail sur les termes de l'Hamiltonien d'Heisenberg dans le chapitre suivant.

$$H = -J \sum_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.12)$$

où J est la constante d'échange et \sum_{ij} désigne la somme sur les paires de premiers voisins d'un réseau de Bravais magnétique.

L'objectif recherché dans ce cas est l'obtention de l'énergie du fondamental de H . Pour ce faire, il suffit de réécrire ce dernier au moyen des opérateurs de spin $S^\pm = S^x \pm iS^y$:

$$H = -J \sum_{ij} (S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)) \quad (1.13)$$

Nous appliquons le formalisme de la seconde quantification en introduisant les opérateurs de création et d'annihilation a_i et a_i^\dagger . Puis nous procédons aux transformations correspondantes sur les opérateurs de spin, dites transformation de *Holstein-Primakoff* [7].

La représentation exacte des composantes du moment cinétique en fonction des opérateurs de création et d'annihilation est :

$$\begin{aligned} S_i^z &= S - a_i^\dagger a_i & (1.14) \\ S_i^+ &= \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}} a_i \\ S_i^- &= \sqrt{2S} a_i^\dagger \sqrt{1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}} \end{aligned}$$

La présence des racines carrées conduit à une expression complexe de H . Pour contourner ce problème, nous faisons l'approximation que le spin S est suffisamment grand, ce qui nous permet de développer ces racines carrées en série

$$\sqrt{1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}} = \left\{ 1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{4S} - \frac{(a_i^\dagger a_i)^2}{32S^2} - \dots \right\} \quad (1.15)$$

A partir de ce développement, nous obtiendrons une décomposition $H = H_o + H_1$ où H_o est purement quadratique dans les a_i tandis que H_1 contient des termes de degré supérieur à 2 représentant des interactions magnons-magnons.

Dans l'approximation des ondes de spin à basse température, nous gardons seulement les termes quadratiques et nous déduisons la transformation de *Holstein-Primakoff* linéarisée.

$$\begin{aligned} S_i^z &= S - a_i^\dagger a_i & (1.16) \\ S_i^+ &= \sqrt{2S} a_i \\ S_i^- &= \sqrt{2S} a_i^\dagger \end{aligned}$$

Dans la base $(|a_i^\dagger\rangle, |a_i\rangle)$, l'Hamiltonien s'exprimera alors :

$$\begin{aligned} H &= -J \frac{N\tilde{z}}{2} S^2 - JS \sum_{ij} (-a_i^\dagger a_i - a_j^\dagger a_j + a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) & (1.17) \\ &= -J \frac{N\tilde{z}}{2} S^2 - \frac{JS}{2} \sum_{i,\vec{\tau}} (-a_i^\dagger a_i - a_{i+\vec{\tau}}^\dagger a_{i+\vec{\tau}} + a_i^\dagger a_{i+\vec{\tau}} + a_{i+\vec{\tau}}^\dagger a_i) \end{aligned}$$

Où N est le nombre de sites et chaque site possède \tilde{z} proches voisins qui sont repérés par le vecteur $\vec{\tau}$.

1.3. THÉORIE DES ONDES DE SPIN

Puisque l'interaction de couplage possède une symétrie de translation, nous pouvons développer l'Hamiltonien H sur la base de ces composantes de Fourier :

$$\begin{aligned} a_{\vec{k}}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} a_i^\dagger & , & & a_{\vec{k}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} a_i \\ a_i^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} a_{\vec{k}}^\dagger & , & & a_i &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} a_{\vec{k}} \end{aligned} \quad (1.18)$$

Dans cette représentation, H se réécrit après réarrangement :

$$\begin{aligned} H &= -J \frac{N\tilde{z}}{2} S^2 - \frac{JS}{2} \sum_{i,\vec{\tau}} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}_2} \\ &\quad \left(e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{r}_i + i\vec{k}_2\cdot\vec{r}_i} - e^{-i\vec{k}_1\cdot(\vec{r}_i+\vec{\tau}) + i\vec{k}_2\cdot(\vec{r}_i+\vec{\tau})} + e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{r}_i + i\vec{k}_2\cdot(\vec{r}_i+\vec{\tau})} + e^{-i\vec{k}_1\cdot(\vec{r}_i+\vec{\tau}) + i\vec{k}_2\cdot\vec{r}_i} \right) \\ &\quad \times a_{\vec{k}_1}^\dagger a_{\vec{k}_2} \\ &= -J \frac{N\tilde{z}}{2} S^2 - \frac{JS\tilde{z}}{2} \sum_{\vec{\tau}} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \left(-1 - e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{\tau} + i\vec{k}_2\cdot\vec{\tau}} + e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{\tau}} + e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{\tau}} \right) \delta_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}^\dagger a_{\vec{k}_2} \\ &= -J \frac{N\tilde{z}}{2} S^2 - \frac{JS\tilde{z}}{2} \sum_{\vec{\tau}} \sum_{\vec{k}} (-1 - 1 + e^{i\vec{k}\cdot\vec{\tau}} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\tau}}) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \end{aligned}$$

Finalement

$$H = E_o + JS\tilde{z} \sum_{\vec{k}} (1 - \gamma(\vec{k})) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \quad \text{avec} \quad \gamma(\vec{k}) = \frac{1}{\tilde{z}} \sum_{\vec{\tau}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\tau}} \quad (1.19)$$

La relation de dispersion des ondes de spin, modulo une constante, est donc :

$$E(k) = SJ\tilde{z}(1 - \gamma(k)) \quad (1.20)$$

Il est important de souligner que le formalisme d'Holstein-Primakoff qui nous permet de traiter le cas d'un nombre thermodynamique de magnons est valide dans la limite $S \gg 1$. Les termes négligés contenus dans H_1 décrivent des interactions entre magnons, dont l'énergie est inférieure à la somme des énergies des ondes de spin. Les états correspondants à H_1 existent pour les valeurs de S petit (interactions fortes) [8] mais disparaissent quand S est grand.

1.3.2 Cas antiferromagnétique

1.3.2.1 Cas semi classique

Le fondamental est l'état de Néel avec tous les spins \uparrow sur le sous-réseau A et tous les spins \downarrow sur le sous réseau B. Dans le cas d'une chaîne linéaire antiferromagnétique, la description des ondes de spin est analogue à celle décrite pour une chaîne linéaire ferromagnétique. L'énergie de dispersion prend la forme suivante FIG(1.4) :

$$E(\mathbf{k}) = 4JS|\sin ka| \quad (1.21)$$

1.3.2.2 Cas quantique

Dans le cas antiferromagnétique, l'état fondamental de l'Hamiltonien de Heisenberg est inconnu sauf dans le cas de la chaîne de spin $\frac{1}{2}$ [9]. Bien que l'état de Néel ne soit pas l'état fondamental exact de H , nous estimons qu'il s'en approche suffisamment pour servir de point de départ à une approximation de *Holstein-Primakoff*. L'état de Néel consiste en un partage du réseau cristallin en deux sous réseaux identiques et intercalés. Notons que cette décomposition de réseau est valable pour un réseau bipartite mais pas pour un réseau triangulaire ou hexagonal.

1. Transformation de Holstein-Primakoff

$\mathbf{i} \in \mathbf{A}$

$$\begin{aligned} S_i^z &= S - a_i^\dagger a_i \\ S_i^+ &= \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}} a_i \cong \sqrt{2S} a_i \\ S_i^- &= \sqrt{2S} a_i^\dagger \sqrt{1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}} \cong \sqrt{2S} a_i^\dagger \end{aligned}$$

$\mathbf{j} \in \mathbf{B}$

$$\begin{aligned} S_j^z &= -S + a_j^\dagger a_j \\ S_j^+ &= \sqrt{2S} a_j^\dagger \sqrt{1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}} \cong \sqrt{2S} a_j^\dagger \\ S_j^- &= \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}} a_j \cong \sqrt{2S} a_j \end{aligned}$$

1.3. THÉORIE DES ONDES DE SPIN

Nous calculons préalablement le produit $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ tel que $i \in A$ et $j \in B$

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$$

Notre Hamiltonien devient alors

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} -S^2 + S(a_j^\dagger a_j + a_i^\dagger a_i + a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger) \quad (1.22)$$

Le réseau étudié est bipartite, ie un site i du sous réseau A a tous ses plus proches voisins (notés symboliquement $i+\vec{\tau}$) sur le sous réseau B. Nous pouvons donc réécrire l' Hamiltonien :

$$H = \frac{-JS^2 N \tilde{z}}{2} + SJ \sum_i \sum_{\vec{\tau}} (a_i^\dagger a_i + a_{i+\vec{\tau}}^\dagger a_{i+\vec{\tau}} + a_i a_{i+\vec{\tau}} + a_i^\dagger a_{i+\vec{\tau}}^\dagger) \quad (1.23)$$

2. Transformée de Fourier des opérateurs a et a^\dagger

$$\begin{aligned} a_k^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i a_i^\dagger e^{i\vec{k}\vec{R}_i} \Rightarrow a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k a_k^\dagger e^{-i\vec{k}\vec{R}_i} \\ a_{\vec{k}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i a_i e^{-i\vec{k}\vec{R}_i} \Rightarrow a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k a_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}_i} \end{aligned} \quad (1.24)$$

Ainsi, l'Hamiltonien se réécrit sous la forme

$$H = \frac{-JS^2 N \tilde{z}}{2} + \frac{SJ}{2} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{\tau}} 2a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{\tau}} + a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger e^{i\vec{k}\vec{\tau}} \quad (1.25)$$

Les sommes sur les exponentielles complexes se traduisent par des cosinus comme calculés ci-dessous

$$\vec{\tau} \in \left\{ \begin{pmatrix} +1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ +1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ +1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \right\}$$

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{\tau}} e^{\pm i\vec{k}\vec{\tau}} &= e^{ikx} + e^{-ikx} + e^{iky} + e^{-iky} + e^{ikz} + e^{-ikz} \\ &= 2 \cos(kx) + 2 \cos(ky) + 2 \cos(kz) = \gamma(\vec{k}) \end{aligned}$$

Et l'Hamiltonien s'écrit sous la forme suivante

$$H = \frac{-JS^2N\tilde{z}}{2} + JS\tilde{z} \sum_{\vec{k}} (a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \gamma(\vec{k})(a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger)) \quad (1.26)$$

3. Transformation de Bogoliubov

L'Hamiltonien n'est pas encore diagonal puisqu'il contient des termes du type $a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}$ et $a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger$, ce qui induit à une précession elliptique des spin. Et comme nous sommes dans la limite des ondes de spin, le système doit posséder une polarisation circulaire. Par conséquent, nous effectuons une transformation de Bogoliubov en imposant que le nouvel Hamiltonien soit de la forme

$$H = \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{\vec{k}} + cst \quad (1.27)$$

où les opérateurs (α^\dagger et α) sont des combinaisons linéaires des opérateurs a et a^\dagger

$$\begin{cases} \alpha_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}^\dagger \\ \alpha_{\vec{k}}^\dagger = u_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger + v_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} \end{cases} \quad (1.28)$$

Nous imposons aussi les relations de commutation suivantes

$$\begin{cases} [\alpha_{\vec{k}}, \alpha_{\vec{k}'}] = [\alpha_{\vec{k}}^\dagger, \alpha_{\vec{k}'}^\dagger] = 0 \\ [\alpha_{\vec{k}}, \alpha_{\vec{k}'}^\dagger] = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \end{cases}$$

Nous devons donc avoir

$$[H, \alpha_{\vec{k}}] = -\omega_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} \quad (1.29)$$

si nous exprimons cette relation en terme de a et a^\dagger nous obtenons

$$a_{\vec{k}} \left[-JS\tilde{z}u_{\vec{k}} + JS\tilde{z}\gamma(\vec{k})v_{\vec{k}} \right] + \left[-JS\tilde{z}\gamma(\vec{k})u_{\vec{k}} + JS\tilde{z}v_{\vec{k}} \right] a_{-\vec{k}}^\dagger = -\omega_{\vec{k}} u_{\vec{k}} a_{\vec{k}} - \omega_{\vec{k}} v_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}^\dagger \quad (1.30)$$

1.3. THÉORIE DES ONDES DE SPIN

Nous pouvons déduire les relations suivantes

$$\begin{cases} -JS\tilde{z}u_{\vec{k}} + -JS\tilde{z}\gamma(\vec{k})v_{\vec{k}} = -\omega_{\vec{k}}u_{\vec{k}} \\ -JS\tilde{z}\gamma(\vec{k})u_{\vec{k}} + JS\tilde{z}v_{\vec{k}} = -\omega_{\vec{k}}v_{\vec{k}} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \underbrace{\begin{pmatrix} -JS\tilde{z} & JS\tilde{z}\gamma(\vec{k}) \\ JS\tilde{z}\gamma(\vec{k}) & -JS\tilde{z} \end{pmatrix}}_A \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} \end{pmatrix} = -\omega_{\vec{k}} \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} \end{pmatrix}$$

La solution existe seulement si

$$\det(A + \omega_{\vec{k}}) = 0$$

Nous obtenons

$$\omega_{\vec{k}} = JS\tilde{z}\sqrt{1 - \gamma_{\vec{k}}^2} \quad (1.31)$$

Les équations aux valeurs propres impliquent :

$$\frac{v_{\vec{k}}}{u_{\vec{k}}} = \text{sign}(\tilde{z}\gamma_{\vec{k}}) \sqrt{\frac{JS\tilde{z} - \omega_{\vec{k}}}{JS\tilde{z} + \omega_{\vec{k}}}} \quad (1.32)$$

Par ailleurs, les opérateurs $\alpha_{\vec{k}}^\dagger$ et $\alpha_{\vec{k}}$ doivent être bosoniques et assurent la condition de normalisation.

$$\begin{aligned} u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 &= 1 \\ u_{\vec{k}} &= \sqrt{\frac{JS\tilde{z} + \omega_{\vec{k}}}{2\omega_{\vec{k}}}} \\ v_{\vec{k}} &= \text{sign}(\tilde{z}\gamma_{\vec{k}}) \sqrt{\frac{JS\tilde{z} - \omega_{\vec{k}}}{2\omega_{\vec{k}}}} \end{aligned}$$

Ainsi, l'expression finale de l'Hamiltonien est :

$$H = \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{\vec{k}} + cst \quad (1.33)$$

Pour déterminer la constante, il faut exprimer les opérateurs $a_{\vec{k}}^\dagger$ et $a_{\vec{k}}$ en fonction de $\alpha_{\vec{k}}^\dagger$ et $\alpha_{\vec{k}}$. Puis les reporter dans l'Hamiltonien sans oublier de tenir compte de la condition de normalisation des opérateurs $u_{\vec{k}}$ et $v_{\vec{k}}$. Nous évaluons ensuite les expressions les différents produits $a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger$, $a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}$ et $a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$ présents dans l'Hamiltonien.

En les regroupant, nous aboutissons à l'expression finale de l'Hamiltonien d'un système antiferromagnétique.

$$H = -JS(S+1)\frac{\tilde{z}N}{2} + \sum_{\vec{k}} (\alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{\vec{k}} + \frac{1}{2}) \omega_{\vec{k}} \quad (1.34)$$

Par déduction, le terme constant de l'Hamiltonien est :

$$cst = -JS(S+1)\frac{\tilde{z}N}{2} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}}$$

Ainsi, la subtilité de la transformation de Bogoliubov a consisté en la séparation de l'Hamiltonien de l'état fondamental sous la forme de deux contributions. La première est constituée d'un terme correspondant à l'énergie du fondamental classique et le second décrit les excitations magnétiques harmoniques de type magnons.

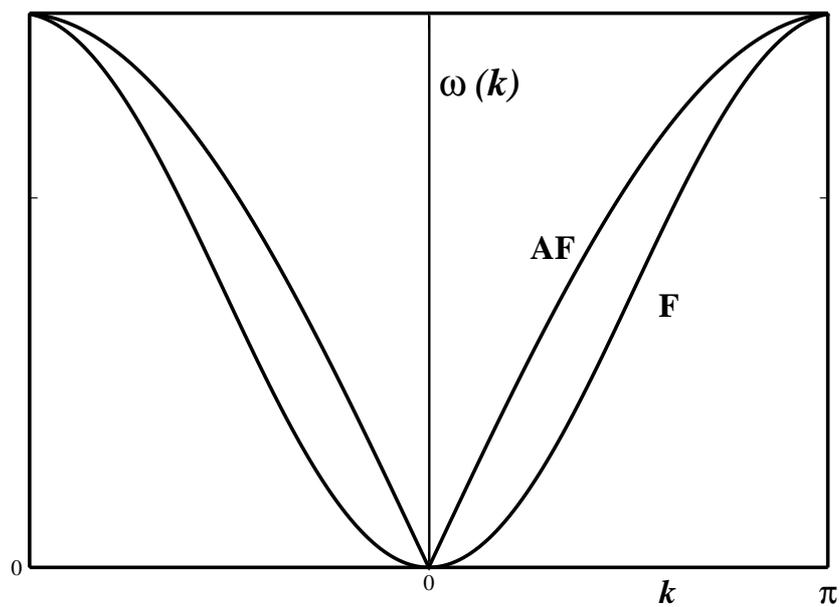


FIG. 1.4 – Courbes de dispersion des ondes de spin dans le cas d'une chaîne linéaire ferromagnétique (F)(antiferromagnétique (AF)).

Chapitre 2

Les méthodes analytiques pour l'étude les ondes de spin de surface

2.1 Introduction

Il est bien connu qu'un réseau cristallin, caractérisé par la répétition périodique d'un groupement d'atomes, présente des propriétés de symétrie intéressantes dans l'espace. Ces propriétés de symétrie permettent une bonne compréhension des phénomènes collectifs dans le milieu cristallin et aussi une modélisation plus aisée de ses propriétés physiques.

Cependant, tout solide est terminé par une surface qui délimite son volume. Le rôle de cette surface est primordial puisqu'elle modifie la nature des interactions par rapport à celles du volume. Cette modification résulte de la brisure de symétrie autrement dit le nombre de liaisons des atomes de surface est moindre que celui des atomes de volume et cette rupture de symétrie entraîne des conséquences sur les propriétés physiques de ces liaisons (magnétiques, électroniques et chimiques).

Différentes techniques expérimentales ont été utilisées dans le but d'étudier la structure et la symétrie de la surface. Nous pouvons citer la diffraction d'électrons (LEED :Low Energy Electron diffraction et RHEED : Réflexion High Energy Electron Diffraction). Sachant que cette dernière repose sur la nature ondulatoire

des électrons et sur la forte interaction de ceux-ci avec la matière. De plus, d'autres techniques expérimentales ont été développées pour étudier les effets de dispersion des ondes de spin de surface dans des films minces telles que la diffusion inélastique de la lumière et la résonance des ondes de spin. L'étude des excitations magnétiques de surface a fait l'objet d'un grand intérêt dans la perspective de corréler les propriétés magnétiques présentes dans le bulk avec celles induites par la présence d'une réduction de symétrie (surfaces, interfaces).

Par ailleurs, la mise en application du théorème de Bloch pour l'étude théorique des excitations magnétiques en surface s'avère impossible par le fait qu'il y a brisure de symétrie de translation. Ceci rend difficile la résolution des systèmes d'équations du mouvement de spin d'un solide semi infini. D'où la nécessité d'élaborer des méthodes analytiques appropriées pour résoudre ce type de problème. Parmi celles ci, nous pouvons citer le formalisme des fonctions de Green, la méthode de diagonalisation directe et la méthode de raccordement. Toutes ces méthodes sont élaborées en tenant compte principalement des propriétés de symétrie de la configuration magnétique considérée. Dans la suite, nous allons brièvement exposer les principales méthodes pour calculer les énergies des modes localisés en surface.

2.2 La méthode des fonctions de Green

Le but de la théorie quantique des systèmes à plusieurs particules est de comprendre les différentes propriétés physiques (connues de façon expérimentale). En plus de mesurer certaines grandeurs physiques des systèmes à l'équilibre, les expérimentateurs étudient certaines propriétés de ceux-ci en mesurant leur réponse à diverses excitations extérieures. Les résultats de telles mesures sont convenablement exprimés en termes des fonctions de réponse (théorie de la réponse Linéaire), ou en termes des fonctions de Green.

Cette partie sera consacré à l'élaboration de la théorie des fonctions de Green selon la méthode de Zubarev [10]. Par la suite nous utiliserons les fonctions de Green, pour déduire les fréquences des modes localisés. Avant de développer un formalisme pour les fonctions de Green, nous donnons quelques définitions générales.

2.2.1 Fonction de Green retardée et avancée

La fonction de Green à deux temps, causale et retardée, pour un système à température nulle et en équilibre, est définie par [11] :

$$\begin{aligned} G_{AB}^c(t, t') &\equiv \ll A(t); B(t') \gg^c \\ &:= -i < 0 | T_c A(t) B(t') | 0 > \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} G_{AB}^{ret}(t, t') &\equiv \ll A(t); B(t') \gg^{ret} \\ &:= -i \Theta(t - t') < 0 | [A(t), B(t')]_\epsilon | 0 > \end{aligned}$$

où $|0\rangle$ est le fondamental exact du système et $\epsilon = \pm 1$. T_c est l'opérateur chronologique de Wick,

$$T_c A(t) B(t') = \Theta(t - t') A(t) B(t') + \epsilon \Theta(t - t') B(t') A(t) \quad (2.2)$$

et $\Theta(t - t')$ est la fonction de Heavyside définie par :

$$\Theta(t - t') = \begin{cases} 1 & \text{si } t > t' \\ 0 & \text{si } t < t' \end{cases} \quad (2.3)$$

$A(t)$ et $B(t')$ sont des opérateurs complètement généraux, et obéissent à l'équation du mouvement de Heisenberg.

$$A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt}, \quad \dot{A}(t) = -i[A(t), H]_{-\epsilon}. \quad (2.4)$$

2.2.2 Équation du mouvement

Dans le cadre de la seconde quantification, $A(t)$ et $B(t')$ sont composés d'opérateurs fermioniques ou bosoniques. La valeur de ϵ dépend du type d'opérateurs utilisé ($\epsilon = -1$ pour l'anticommutateur des opérateurs de fermions et $\epsilon = 1$ pour le commutateur des opérateurs de bosons).

Nous établissons l'équation du mouvement de la fonction de Green $\ll A(t); B(t') \gg$ en dérivant par rapport à t :

$$\frac{\partial}{\partial t} \ll A(t); B(t') \gg = \delta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{-\epsilon} \rangle + \ll [A, H](t); B(t') \gg \quad (2.5)$$

Cette relation est valable pour les fonctions de Green retardées et causales. La fonction δ provient de la dérivée de la fonction Heaviside ou de celle de l'opérateur de Wick, tandis que le commutateur apparaît suite à l'équation du mouvement pour les opérateurs de Heisenberg. Dans cette dernière, nous considérons que la dérivée partielle $\partial A(t)/\partial t$ est nulle, du fait que l'opérateur A ne dépend pas explicitement du temps. La différence entre la fonction retardée et la fonction causale réside principalement dans la définition des différentes conditions aux limites. Pour un système invariant par translation dans le temps, nous sommes libres de choisir le moment auquel nous commençons nos observations. Ainsi, les fonctions de Green à deux temps ne dépendent que de la différence entre t et t' . Leurs transformées de Fourier sont alors décrites en utilisant une seule fréquence,

$$\ll A(t); B(t') \gg_{\omega} = \int_{-\infty}^{\infty} d(t - t') \ll A(t); B(t') \gg e^{i\omega(t-t')} \quad (2.6)$$

Ceci nous permet d'écrire la transformée de Fourier de l'équation du mouvement sous la forme :

$$\omega \ll A(t); B(t') \gg_{\omega} = \langle [A, B]_{-\epsilon} \rangle + \ll [A, H](t); B(t') \gg_{\omega} \quad (2.7)$$

La notation en $\ll \gg$ est celle de la fonction de Green $G_{AB}(t, t')$ qui est aussi considérée comme la *fonction de Green d'ordre supérieur*. Le simple *bracket* désigne la fonction de corrélation ($\langle [A, B]_{-\epsilon} \rangle$). Par définition, la fonction de corrélation de deux spins S_i et S_j est la valeur moyenne du produit $\langle S_i S_j \rangle$, elle permet de mesurer l'influence de l'orientation d'un spin particulier S_i . Comme l'interaction tend à aligner les spins, un spin S_j voisin de S_i aura tendance à prendre la même orientation que S_i ; mais cette tendance est combattue par l'agitation thermique qui a pour effet de décorrélérer les spins.

2.2.3 Application des fonctions de Green pour le calcul des énergies des ondes de spin

Considérons un système cubique ferromagnétique décrit par l'Hamiltonien de Heisenberg.

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mu H_o \sum_i S_i^z$$

La transformation de Holstein-Primakoff linéarisée [7] permet de mettre l'Hamiltonien sous la forme :

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \left(S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right) - \mu H_o \sum_i S_i^z \quad (2.8)$$

où H_o est le champ appliqué sur l'axe de quantification (OZ), i, j repèrent les sites du réseau. Et μ est le produit du facteur gyromagnétique g et du magnéton de Bohr μ_B . S_i est le moment de spin au site i et J_{ij} l'interaction d'échange entre le spin situé en i et celui en j . Le second terme de l'équation (2.8) est obtenu en utilisant la relation usuelle des opérateurs de spin $S_k^\pm = S_k^x \pm iS_k^y$.

Pour un spin S , l'aimantation moyenne est donnée par la relation

$$\langle S_i^z \rangle = S - \langle S_i^- S_i^+ \rangle \quad (2.9)$$

Et la fonction de corrélation, $\langle S_i^- S_i^+ \rangle$, est déterminée par le *théorème spectral des (anti-)commutateurs de la fonction de Green* [12].

Considérons la fonction de Green retardée au premier ordre

$$G_{kl}(t - t') = -i\theta(t - t') \ll S_k^+(t); S_l^-(t') \gg \quad (2.10)$$

L'équation du mouvement sera donc ;

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{kl}(t - t') = \delta(t - t') \langle [S_k^+(t), S_l^-(t')] \rangle + \ll [S_k^+, H]; S_l^-(t') \gg \quad (2.11)$$

En utilisant les relations de commutations, nous obtenons

$$[S_k^+, H] = \mu H_o S_k^+ - \sum_k J_{kj} (S_k^z S_j^+ - S_j^z S_k^+) \quad (2.12)$$

L'équation du mouvement devient

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} G_{kl}(t-t') &= \delta(t-t') 2 \langle S_k^z \rangle - \sum_k J_{kj} (\ll S_k^z S_j^+; S_l^- \gg - \ll S_j^z S_k^+; S_l^- \gg) \\ &+ \mu H_o \ll S_k^+; S_l^- \gg \end{aligned} \quad (2.13)$$

A basse température ($T \ll T_c$), nous adoptons l'approximation de découplage introduite par Tyablikov [13, 14]. Ce découplage, connu sous le nom *d'Approximation de Phase Aléatoire* \equiv *Random Phase Approximation (RPA)*, consiste à factoriser la fonction de Green supérieure et correspond aussi à l'approximation des ondes de spin.

$$\begin{aligned} \ll S_k^z S_j^+; S_l^- \gg &\simeq \langle S_k^z \rangle \ll S_j^+; S_l^- \gg = \langle S_k^z \rangle G_{jl} \\ \ll S_j^z S_k^+; S_l^- \gg &\simeq \langle S_k^z \rangle \ll S_k^+; S_l^- \gg = \langle S_j^z \rangle G_{kl} \end{aligned} \quad (2.14)$$

Ceci nous permet de réécrire l'équation du mouvement (2.13) sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} G_{kl}(t-t') &= 2 \langle S_k^z \rangle \delta(t-t') - \sum_k J_{kj} \langle S_k^z \rangle G_{jl}(t-t') \\ &+ \sum_k J_{kj} \langle S_j^z \rangle G_{kl}(t-t') + \mu H_o G_{kl}(t-t') \end{aligned} \quad (2.15)$$

Il est plus aisé d'utiliser avec les fonctions de Green en terme de fréquences que celles correspondantes en temps réel. Ceci a pour avantage d'expliciter de manière plus simple les énergies associées. La transformée de Fourier qui permet de réaliser la conversion de la représentation temporelle en une représentation fréquentielle. s'exprime via la transformée de Fourier

$$G_{kl}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} G_{kl}(E) \exp -iE(t-t') dE \quad (2.16)$$

2.2. LA MÉTHODE DES FONCTIONS DE GREEN

L'équation du mouvement (2.15) se réécrit alors comme

$$\begin{aligned} G_{kl}(E)\Gamma_k &= 2 \langle S_k^z \rangle - \langle S_k^z \rangle \sum_k J_{kj} G_{jl}(E) \quad \text{avec} \quad (2.17) \\ \Gamma_k &= E - \mu H_o - \sum_k J_{kj} \langle S_j^z \rangle \end{aligned}$$

Effectuons maintenant la transformée de Fourier de l'équation (2.16) dans l'espace avec :

$$G_{gf}(E) = \frac{1}{N} \sum_q G_q(E) \exp i(\vec{r}_g - \vec{r}_f)\vec{q} \quad (2.18)$$

En tenant compte de la symétrie de translation du cristal selon les trois directions de l'espace, tous les sites sont alors équivalents. Pour

$$J_q = \sum_l J_l \exp i(\vec{r}_l \vec{q})$$

Nous obtenons

$$G_q(E) = \frac{2 \langle S_k^z \rangle}{(E - E_q)} \quad \text{avec} \quad (2.19)$$

$$E_q = \mu H_o + \langle S^z \rangle (J(0) - J_q) \quad (2.20)$$

Dans la configuration cubique simple :

$$\begin{aligned} J(0) &= \frac{1}{N} \sum_{kl} J_{kl} \exp i(\vec{q} = 0)(\vec{r}_k - \vec{r}_l) = zJ = 6J \\ J_q &= \frac{1}{N} \sum_q \exp i(\vec{r}_k - \vec{r}_l)\vec{q} = 2J(\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a) \end{aligned}$$

$$E_q = \mu H_o + 2J \langle S^z \rangle (3 - \cos q_x a - \cos q_y a - \cos q_z a) \quad (2.21)$$

où a est la distance entre deux sites voisins. E_q est l'énergie d'une excitation élémentaire qui est définie comme le pôle de la fonction de Green $G_q(E)$.

2.2.4 Fonction de Green pour un système cubique semi infini

Reprenons maintenant le même calcul pour un cristal cubique ferromagnétique semi infini. La surface est le plan (100). Pour ce faire, nous considérons que les équations précédentes ne sont plus invariantes pour toute translation mais pour celles qui laissent la surface inchangée, c'est à dire par toute translation parallèle à la surface.

A partir de la surface, nous numérotions les couches atomiques par les indices $n_\alpha, n_\beta, n_\gamma, \dots$. Les paramètres (α, β, γ) décomptent les sites atomiques localisés respectivement sur les couches n_α, n_β et n_γ .

Soit la nouvelle fonction

$$G_q(E, n_\alpha, n_\beta) = \sum_{\substack{k \in n_\alpha \\ \text{fixé}}} G_{kl} \exp i(\vec{r}_l - \vec{r}_k)_{//} \vec{q}$$

où $(\vec{r}_l - \vec{r}_k)_{//}$ est la projection du vecteur $(\vec{r}_l - \vec{r}_k)$ sur le plan parallèle à la surface, la sommation porte sur tous les k appartenant à la même couche n_α et l étant fixé. La nouvelle fonction de Green G_q ne dépend pas uniquement de l'énergie mais aussi des indices des deux couches n_α, n_β . Si de la même façon, nous définissons :

$$J_q(n_\alpha, n_\beta) = \sum_{\substack{k \in n_\alpha \\ \text{fixé}}} J_{kl} \exp i(\vec{r}_l - \vec{r}_k)_{//} \vec{q}$$

Nous obtenons

$$G_q(E, n_\alpha, n_\beta) \Gamma_i(E) = 2 \langle S^z \rangle - \langle S^z \rangle \sum_{n_\alpha} G_q(E, n_\alpha, n_\beta) J_q(n_\alpha, n_\gamma) \quad (2.22)$$

tel que :

$$\Gamma_i(E) = E - \mu H_o - A_j \quad \text{avec} \quad A_j = \sum_{\alpha} S_\alpha J_{\alpha j}$$

Le produit de convolution dans le membre de droite couple les deux couches n_β, n_γ par l'intermédiaire de l'ensemble des couches n_α . Cette équation représente un système d'équations couplées reliant les différentes fonctions de Green entre elles. Chaque couple (n_β, n_γ) présente une équation du type (2.22).

Dans la suite du calcul, nous nous limitons seulement à la perturbation apportée par la présence d'une surface idéale (en absence de relaxation et/ou de reconstruc-

2.2. LA MÉTHODE DES FONCTIONS DE GREEN

tion). L'influence de cette perturbation de surface décroît quand nous pénétrons plus avant dans la volume. Ce qui conduit à :

$$\begin{aligned}
 A_1 &= 4SJ(1,1) + SJ(1,2) \\
 A_2 &= 4SJ(2,2) + SJ(1,2) + SJ(2,3) \\
 &\vdots \\
 A_n &= 6SJ
 \end{aligned}$$

En notation matricielle, ces équations peuvent se mettre sous la forme :

$$[M][G] = [N] \tag{2.23}$$

où

$$[G] = \begin{bmatrix} G_q(E, 1, 1) \\ G_q(E, 1, 2) \\ \dots\dots\dots \\ G_q(E, 1, n) \\ \dots\dots\dots \end{bmatrix}$$

$$[M] = \begin{bmatrix} F_1(E) & 2SJ(1,2) & 0 & 0 \\ 2SJ(1,2) & F_2(E) & 2SJ & 0 \\ 0 & 2SJ & F_3(E) & 2SJ \\ 0 & 0 & 2SJ & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

CHAPITRE 2. LES MÉTHODES ANALYTIQUES POUR L'ÉTUDE LES
ONDES DE SPIN DE SURFACE

avec

$$\begin{aligned}
 \gamma_{//}(\vec{q}) &= \cos q_x a + \cos q_y a \\
 F_1(E) &= \Gamma_1(E) + 4J(1, 1)\gamma_{//}(\vec{q})S \\
 F_2(E) &= \Gamma_2(E) + 4J(2, 2)\gamma_{//}(\vec{q})S \\
 &\dots = \dots\dots\dots \\
 F_n(E) &= \Gamma_n(E) + 4\gamma_{//}(\vec{q})S
 \end{aligned}$$

et

$$[N] = \begin{bmatrix} S \\ S \\ \vdots \\ S \\ \vdots \end{bmatrix}$$

Les énergies des ondes de spin sont obtenues par le calcul des pôles des fonctions de Green $\ll G_q \gg$ et donc par :

$$\det(M) = 0 \tag{2.24}$$

Pour déterminer les états localisés à la surface, nous adoptons une méthode de résolution analogue à celle de Wames et Wolfram [2]. Divisons M par $(-2JS)$ et posons

$$\left. \begin{aligned}
 2 \cos \theta &= -\frac{F_n(E)}{2SJ} \\
 x &= \exp(-i\theta)
 \end{aligned} \right\} \text{ pour } n \geq 2$$

En incorporant les équations ci-dessus dans l'équation (2.21), nous obtenons la relation suivante :

$$E_q = \mu H_o + 2J \langle S^z \rangle (3 - \gamma_{//}(\vec{q})) - JS(x + \frac{1}{x}) \tag{2.25}$$

La matrice $[M]$ peut être exprimée en fonction de la somme de deux matrices.

$$[M] = [M_N] + [\Delta M] \tag{2.26}$$

2.2. LA MÉTHODE DES FONCTIONS DE GREEN

où M_N est une matrice carrée ($N \times N$).

$$M_N = \begin{bmatrix} 2 \cos \theta & -1 & 0 & 0 & \cdots \\ -1 & 2 \cos \theta & -1 & 0 & \cdots \\ 0 & -1 & 2 \cos \theta & \cdot & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdots \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

et la matrice ΔM n'a d'éléments différents de zéro que dans le premier bloc (2×2).

$$\Delta M = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & 0 & 0 \\ m_{21} & m_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix} \quad (2.28)$$

avec($\Lambda_q = 2 - \gamma_{//}(q)$) :

$$\begin{aligned} m_{11} &= \frac{J(1,1)}{J} \Lambda_q + \frac{J(1,2)}{J} - (1 + \Lambda_q) \\ m_{22} &= \frac{J(1,2)}{J} - \Lambda_q - 1 \\ m_{12} &= 1 - \frac{J(1,2)}{J} \\ m_{21} &= 1 - \frac{J(1,2)}{J} \end{aligned} \quad (2.29)$$

Les solutions de $|M| = |M_N + \Delta M| = 0$ sont identiques à celles de :

$$|I_N + G_N \Delta M| = 0 \quad (2.30)$$

où $G_N = M_N^{-1}$ et où les éléments de G_N sont donnés par :

$$G_{n,m} = \frac{1}{2i \sin \theta} \exp[i(n+m)\theta] - \exp[i(n-m)\theta] \quad (2.31)$$

L'équation (2.30) se ramène facilement à une équation du troisième degré en x qui s'écrit alors :

$$\begin{aligned} x^3 + (d_{11} + d_{22})x^2 + (d_{12} + d_{21} + d_{11}d_{22} - d_{12}d_{21})x + d_{22} &= 0 \\ C_4 x^3 + C_3 x^2 + C_2 x + C_1 &= 0 \end{aligned} \quad (2.32)$$

La résolution de cette équation passe par le calcul des coefficients ($C_{i=1...4}$) à partir

des équations (2.29). Les racines x solutions de (2.32) qui satisfont à

$$|x| \geq 1 \quad \text{puisque} \quad \text{Im}\theta \geq 0 \quad (2.33)$$

sont reportées dans l'équation (2.25) ceci permet l'obtention de la relation de dispersion $E(q)$.

2.3 La méthode de diagonalisation directe

Dans la méthode de diagonalisation directe, les systèmes étudiés ont un nombre fini de plans atomiques dans la directions z , avec une extension infinie dans les deux autres directions x et y . De plus, il faut que le nombre de plans utilisés soit suffisamment grand afin d'assurer l'existence d'une région dite de volume.

Puis, il reste à déduire la matrice dynamique en écrivant les équations du mouvement des spins appartenants à la cellule unitaire. La résolution de cette matrice dynamique détermine les vecteurs propres et valeurs propres permettant de décrire les propriétés magnétiques de surface et de déterminer les courbes de dispersion des ondes de spin de surface.

La grande valeur du nombre de plans exigée dans cette méthode pose à un certain moment un problème de taille de la configuration physique considérée. En effet, la dimension des espaces de Hilbert mis en jeu croît exponentiellement avec le nombre de sites considérés. Par conséquent, un problème d'espace mémoire ainsi que de temps de calcul limitent l'application de cette méthode.

2.4 La méthode de raccordement

2.4.1 Continuité des champs de précession de volume et de surface

Dans un modèle de cristal semi-infini à l'état fondamental, l'étude de la dynamique des spin en surface et en volume montrent que les conditions aux limites imposées peuvent être définies par un réseau plan de vecteurs de base \vec{a}_1 et \vec{a}_2 pris parallèlement à la surface dans le réseau direct. Elle classe les champs de précession de spin pour des réseaux semi-infinis en deux catégories.

1. Les champs de précession de spin de volume "*bulk modes*" ne sont que la sommation des modes d'ondes planes d'un réseau infini avec des conditions aux limites périodiques.
2. Les champs de précession de spin de surface "*surface modes*" ne sont que la résultante des ondes planes se propageant parallèlement à la surface ainsi que les modes évanescents se propagent dans la direction normale à la surface, et sont par conséquent caractérisés par une diminution de leur amplitude en pénétrant dans la région du volume. Dans les directions parallèle à la surface, la description de l'amplitude de précession évolue comme une fonction du vecteur d'onde à deux dimensions $\vec{k}_{//}$.

Écrire les équations de continuité régissant les champs de précession de spin de volume et ceux associés à la surface nécessite une subdivision du cristal en trois régions. Cet agencement est réalisé pour sauvegarder la symétrie et la périodicité bidimensionnelle ($2D$) analogue à celle de la surface. A cet effet, nous pouvons définir :

- Une région de volume où des modes évanescents, normaux à la surface, sont caractérisés sur un réseau infini.
- Une région de surface, caractérisée par une périodicité $2D$ et d'une symétrie de translation planaire, définie par la portée des interactions et aussi par la nature des interactions parfois modifiées en surface.
- Une région intermédiaire "*bulk-surface*", dont le nombre de couches parallèles à la surface à considérer, augmente avec l'importance des interactions

d'échange et de l'existence ou non de relaxation et/ou de reconstruction. Par ailleurs nous établissons le raccordement des magnons évanescents de volume avec ceux de surface.

2.4.2 Propriétés de symétrie et matrice dynamique

Pour un réseau tridimensionnel (3D), la position d'un site est repéré par un vecteur position $\vec{\mathbf{r}}$ tel que :

$$\vec{\mathbf{r}} = m_1\vec{\mathbf{e}}_1 + m_2\vec{\mathbf{e}}_2 + m_3\vec{\mathbf{e}}_3 \quad (2.34)$$

Les vecteurs $\vec{\mathbf{e}}_1, \vec{\mathbf{e}}_2, \vec{\mathbf{e}}_3$ désignent la maille magnétique primitive. L'espace réciproque est engendré par les vecteurs $e_{i(x,y,z)}^*$. La projection du réseau réciproque tridimensionnel sur les vecteurs de base (e_x^*, e_y^*) décrit un réseau réciproque (2D) lié à la surface de vecteurs (\vec{e}_x, \vec{e}_y) . Ceci implique que les couches atomiques du cristal semi-infini peuvent être décrites par $n \geq 0$. En conséquence, la région de surface s'étendra de $n = 0$ à $n = \eta$, tel que η est déterminé par la portée des interactions d'échanges et par la particularité des interactions en surface.

Désignant par $\mathbf{R}(\mathcal{E}, m)$ un vecteur définissant la position d'un atome m dans un sous réseau \mathcal{E} de la maille magnétique, et notons $U_{n(R)}^{(\mathcal{E})}$, l'amplitude de l'onde de spin de cet atome appartenant au sous réseau magnétique \mathcal{E} , situé à la position R dans le plan n .

Compte tenu de la périodicité bidimensionnelle du cristal semi-infini, les amplitudes d'ondes de spin peuvent-être décrites par :

$$\begin{aligned} U_{n(R)}^{(\mathcal{E})} &= \sum_{\vec{k}_{//}} \exp(i\vec{k}_{//} \cdot \vec{\mathbf{r}}) V(E, \vec{k}_{//}, n, \mathcal{E}) \Psi^\lambda(E, \vec{k}_{//}) \\ \Psi^\lambda(E, \vec{k}_{//}) &= \alpha(E, \vec{k}_{//}) (\beta(E, \vec{k}_{//})) \quad si \quad \lambda = \mathcal{E}' \end{aligned} \quad (2.35)$$

où $\Psi(E, \vec{k}_{//})$ est l'opérateur de déviation de spin du sous réseau magnétique \mathcal{E}' associée au magnon de vecteur d'onde bidimensionnel $\vec{k}_{//}$ et d'énergie E . $V(E, \vec{k}_{//}, n, \mathcal{E})$ sont les composantes du vecteur $\vec{v}(E, \vec{k}_{//})$ qui représente les vecteurs propres de la matrice dynamique $\mathcal{D}(\vec{k}_{//})$ tel que :

$$[E - \mathcal{D}(\vec{k}_{//})] \vec{v}(E, \vec{k}_{//}) = 0 \quad (2.36)$$

L'équation (2.36) traduit alors l'écriture des amplitudes de précession de spin liée

au plan atomique n correspondant. Elle représente l'intérêt de traduire en termes d'équation du mouvement la transformation $(3D) \rightarrow (2D)$. Les équations peuvent alors se traduire par :

$$E.V(n, \mathcal{E}) = \sum_{n' > n, \mathcal{E}'} \mathcal{D}(\vec{k}_{//}, n, \mathcal{E}, n', \mathcal{E}') V(n, \mathcal{E}) \quad (2.37)$$

où la sommation porte sur chaque atome d'un sous-réseau \mathcal{E} avec ses premiers voisins du sous-réseau différent \mathcal{E}' .

2.4.3 Équation séculaire et propriétés évanescentes des ondes de spin de volume

Comme nous l'avons décrit précédemment, un cristal périodique tridimensionnel subissant une brisure de symétrie nécessite la redéfinition du concept de couches de surface et de volume. Ces régions possèdent toutes une symétrie de translation analogue à la surface. De même la base des vecteurs de représentation des champs de précession de spin dans ces régions nécessite aussi une autre formulation. De ce fait, les équations (2.36) et (2.37) sont écrites dans la base de représentation du groupe des translations (Γ) et non dans la base cartésienne.

Un opérateur de translation du vecteur $(-\vec{e}_z)$ défini par $T(-\vec{e}_z)$ agissant sur le vecteur \vec{v} s'écrit :

$$T(-\vec{e}_z)v(E, k_\Gamma) = \rho(-\vec{e}_z)v(E, k_\Gamma) \quad (2.38)$$

où $\rho(e_z)$ est le caractère d'une représentation unidimensionnelle du magnon. Par ailleurs, la théorie des groupes permet de simplifier la recherche et la classification des vecteurs propres (ou bien des valeurs propres) d'une matrice ou d'un opérateur. En utilisant les propriétés des vecteurs propres et celles des représentations irréductibles d'un groupe, les vecteurs propres ont donc pour expression :

$$v(E, k_\Gamma, n) = C(E, k_\Gamma)\rho^n(-\vec{e}_z) \quad (2.39)$$

En injectant la relation ci-dessus dans l'ensemble d'équations (2.37), nous obtenons un système d'équations de dimension $n^2(k_\Gamma)$ qui s'exprime en fonction des valeurs de $C(E, k_\Gamma)$. Le problème de la résolution de ce système est donc réduit à déterminer les solutions non triviales qui annulent son déterminant. Cette condition a pour but

de caractériser les propriétés dynamiques des spins en volume.

$$|\mathcal{D}(E, k_\Gamma, \rho)| = \mathcal{D}_b(E, k_\Gamma, \rho) = 0 \quad (2.40)$$

Ceci nous permet de déduire l'équation séculaire, dite polynôme caractéristique, à partir l'équation (2.40). Ce polynôme est de degré $2n(k_\Gamma)$ et exprimé en fonction de ρ .

Pour chaque racine (ρ) associée à l'équation (2.40), les valeurs des cofacteurs de la matrice dynamique du volume \mathcal{D}_b ($C(E, k_\Gamma)$) sont déterminées par la résolution d'un système linéaire homogène avec la condition de normalisation

$$\sum_1^{n(k_\Gamma)} |C(E, k_\Gamma)|^2 = 1 \quad (2.41)$$

En disposant ces cofacteurs suivant un ordre bien déterminé, nous faisons apparaître l'énergie E uniquement dans les éléments diagonaux de \mathcal{D}_b .

L'équation caractéristique sera alors une expression polynomiale de degré $n(k_\Gamma)$ en E .

Par ailleurs, l'équation (2.38) peut être écrite, de manière analogue, dans la direction $+e_z$ en faisant agir l'opérateur $T(+e_z)$ sur v .

$$T(e_z)v(E, k_\Gamma) = \rho(e_z)v(E, k_\Gamma) \quad (2.42)$$

où $\rho(e_z)$ représente aussi une racine de l'équation séculaire (2.40); notant que le caractère lié au produit des groupes de translation est égal à l'identité $T(e_z)T(-e_z) = 1$, il s'ensuit que :

$$\rho(e_z)\rho(-e_z) = 1 \quad (2.43)$$

L'expression de l'équation séculaire reste inchangée si nous substituons ρ par ρ^{-1} , autrement dit si ρ est une racine, ρ^{-1} l'est aussi. En conséquence, elle peut être écrite en équation de degré $n(k_\Gamma)$ et en fonction de $\delta = (\rho + \rho^{-1})$. Si $\mathcal{D}(E, k_\Gamma, \rho)$ est réelle, les racines complexes du déterminant de la matrice de volume \mathcal{D}_b sont couplées, chacune étant complexe conjuguée de l'autre.

2.4. LA MÉTHODE DE RACCORDEMENT

Dans la bande passante en volume, les ondes de spin de symétrie Γ et de vecteur d'onde k sont caractérisées par la paire $[\rho(E, k_\Gamma), \rho^{-1}(E, k_\Gamma)]$ des racines de l'équation (2.40). Ce qui implique :

$$|\rho| = |\rho^{-1}| = 1 \quad \text{si seulement si} \quad \rho^{\pm 1}(E, k_\Gamma) = \exp(\pm i k_z e_z) \quad (2.44)$$

Cette expression est caractéristique d'une onde plane où les signes + et - correspondent respectivement à une onde incidente à la surface et une onde réfléchie de celle-ci. L'équation (2.44) permet alors d'écrire

$$\delta(E, k_\Gamma) = \rho(E, k_\Gamma) + \rho^{-1}(E, k_\Gamma) = 2 \cos(\vec{k}_z \vec{e}_z) \quad (2.45)$$

qui représente la relation de dispersion des magnons de volume avec la symétrie Γ le long de la direction \vec{e}_z^* de l'espace réciproque, lorsque $\vec{k}_z \vec{e}_z$ varie de 0 à π . Il existe donc $n(k_\Gamma)$ branches distinctes de magnons de volume de symétrie Γ .

2.4.4 Densité d'états de volume et modes de surface

Par définition, la densité d'états des ondes de spin de volume projetée sur la surface est :

$$D_a(E, k_\Gamma) = \sum_j \left| \frac{\partial k_j}{\partial E} \right| \quad (2.46)$$

où la sommation est portée sur toutes les branches $n(k_\Gamma)$ de magnons caractérisés par les différentes valeurs des vecteurs k_j satisfaisant l'équation (2.40). La présence d'une surface pour un cristal périodique entraîne l'apparition de conditions aux limites différentes de celles Born-Von-Karman, ceci est dû à une brisure de symétrie de translation dans la direction perpendiculaire à la surface. Cette condition aux limites particulière conduit à l'existence des modes magnétiques dont l'énergie propre se situe dans une bande d'énergie interdite des états de volume. La densité d'états de volume est alors donnée si :

$$D_a(E, k_\Gamma) = 0 \quad (2.47)$$

En somme, lorsque des modes magnétiques localisés existent en dehors de la bande de volume, la zone qui délimite ces modes correspond alors aux ondes de spin de surface.

Par ailleurs, pour déterminer les zones de surface, nous commençons à définir d'abord les composantes du champ de l'amplitude de l'onde de spin, ils résultent de l'équation (2.40) :

$$v(n, \alpha) = \sum_{i=1}^{n_e} R_i C(\alpha, i) \rho^n(E, k_\Gamma, i) \quad (2.48)$$

La sommation sur l'indice i s'effectue sur les $n(k_\Gamma)$ racines $\rho(i)$ de l'équation caractéristique (2.40). La zone des états localisés de surface est définie par la région d'énergie E où le module de chaque racine est inférieur à l'unité (les racines dont le module est supérieur à 1, sont écartées vu qu'elles donnent lieu à des solutions divergentes). En insérant les équations (2.40) dans les équations du mouvement (2.37), nous obtenons un système linéaire homogène et n'a de solutions que si son déterminant est nul.

$$D_s(E, k_\Gamma) = 0 \quad (2.49)$$

Les solutions vérifiant cette équation donnent lieu à un ensemble de points $S(E, k_\Gamma)$ dans l'espace réciproque bidimensionnel. Chaque point caractérise un état de surface et l'ensemble de ces points constitue la courbe de dispersion $E(k_{//})$. Par définition, cette courbe de dispersion doit se situer à l'intérieur de la bande interdite des modes de spin de volume.

2.4.5 Expression de l'équation séculaire pour les ondes de spin de volume

2.4.5.1 Modèle de Heisenberg-Considérations générales

Comme nous l'avons noté au chapitre 1, les excitations de basse énergie peuvent être décrites par l'Hamiltonien Heisenberg :

$$H^{spin} = \sum_{(i,j)} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.50)$$

Le symbole (i, j) indique que nous sommes sur les paires. Les paramètres qui déterminent les propriétés de ce modèle sont :

1. Signe de couplage et interaction d'échange. Dans le cas d'un ferromagnétique, la constante de couplage J est négative et l'alignement des spins est parallèle pour un moment magnétique macroscopique. Dans le cas d'un antiferromagnétique, la constante de couplage J est positive et les spins s'alignent dans des directions opposés pour former deux sous réseaux ferromagnétiques. Ce qui correspond à l'état de Néel où le moment magnétique total est nul.
2. L'anisotropie des couplages. Si les couplages d'échange J^x , J^y et J^z sont égaux, le couplage est isotrope. Dans le cas contraire, nous parlons de couplage anisotrope. Comme ce serait par exemple dans le modèle $d'Ising$ ($J^x = J^y = 0$) et le modèle XY ($J^z = 0$).
3. La portée des couplages. Dans le cadre de notre étude, nous admettons que le couplage est limité seulement aux premiers voisins. En revanche, le couplage à plus longue portée induit des conséquences parfois très importantes dans certaines situations physiques. C'est pourquoi qu'il est nécessaire de prendre en compte l'interaction d'échange au delà des premiers voisins dans ces situations.
4. La valeur du spin. Il bien connu que le spin peut a priori prendre toutes les valeurs 1/2 entières. Certaines propriétés dépendent de la valeur de spin et du modèle d'interaction considéré (Hubbard, Heisenberg, Ising, XY). Par exemple, dans la limite classique, il est préférable de considérer que les spins sont des vecteurs de longueurs 1 et non des opérateurs.
5. La dimensionnalité de l'espace. La plupart des propriétés physiques varient radicalement suivant qu'on étudie un système de dimension $D1$, $D2$ ou $D3$.

2.4.5.2 Description des équations générales du mouvement de spin

Cas antiferromagnétique

Dans un système sur un réseau bipartite formé de deux sous-réseaux A et B, l'Hamiltonien H décrivant les interactions magnétiques entre premiers voisins est :

$$H = \sum_{(ij)} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad (2.51)$$

$$H = \sum_{(ij)} J_{ij} \left(S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right)$$

L'équation du mouvement de spin est régie par l'équation de d'Heisenberg

$$i\hbar \frac{dS_k^+}{dt} = [S_k^+, H] \quad (2.52)$$

$$i\hbar \frac{dS_k^+}{dt} = [S_k^+, \sum_{(ij)} J_{ij} S_i^z S_j^z] + [S_k^+, \frac{1}{2} \sum_{(ij)} J_{ij} S_i^+ S_j^-] + [S_k^+, \frac{1}{2} \sum_{(ij)} J_{ij} S_i^- S_j^+]$$

En tenant compte des règles de commutation des opérateurs de spin

$$[S_j^+, S_{j'}^z] = -S_{j'}^+ \delta_{jj'} \quad (2.53)$$

$$[S_j^-, S_{j'}^z] = +S_{j'}^- \delta_{jj'}$$

$$[S_j^+, S_{j'}^-] = 2S_{j'}^z \delta_{jj'}$$

L'équation générale du mouvement d'un spin pour un atome k quelconque est de la forme suivante :

$$i\hbar \frac{dS_k^+}{dt} = J_{ij} \sum_{(ij)} S_i^+ S_j^z \delta_{kj} + J_{ij} \sum_{(ij)} S_i^z S_j^+ \delta_{ki} \quad (2.54)$$

$$- J_{ij} \sum_{(ij)} S_i^+ S_j^- \delta_{ki} - J_{ij} \sum_{(ij)} S_j^+ S_i^- \delta_{kj}$$

Pour un atome i du sous-réseau A ($\delta_{ki} = 1$; $\delta_{kj} = 0$)

$$i\hbar \frac{dS_i^+}{dt} = J_{ij} \sum_{(ij)} S_i^z S_j^+ - J_{ij} \sum_{(ij)} S_i^+ S_j^- \quad (2.55)$$

2.4. LA MÉTHODE DE RACCORDEMENT

Pour un atome j du sous-réseau B ($\delta_{kj} = 1$; $\delta_{ki} = 0$)

$$i\hbar \frac{dS_j^+}{dt} = J_{ij} \sum_{(ij)} S_j^z S_i^+ - J_{ij} \sum_{(ij)} S_j^+ S_i^z \quad (2.56)$$

A très basse température, nous considérons que l'opérateur de spin est indépendant du site du réseau. En conséquence, il est remplacé dans une première approximation par sa valeur quantique de spin :

$$S_i^z = S_A = S \quad \text{et} \quad S_i^z = S_B = -S \quad (2.57)$$

Et les équations de spin pour chaque sous-réseau s'écrivent comme suit :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dS_i^+}{dt} &= J_{ij} S_A \sum_{(ij)} S_j^+ - J_{ij} S_B \sum_{(ij)} S_i^+ \\ i\hbar \frac{dS_j^+}{dt} &= J_{ij} S_B \sum_{(ij)} S_i^+ - J_{ij} S_A \sum_{(ij)} S_j^+ \end{aligned} \quad (2.58)$$

Considérons maintenant un réseau cubique tridimensionnel dont laquelle l'interaction d'échange possède une symétrie de translation.

Ceci nous permet de développer les opérateurs de spin dans la base des composantes de Fourier :

$$\begin{cases} S_i^+ = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}_i} \alpha_{\vec{k}}^+(\vec{k}, \omega) \\ S_j^+ = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}_j} \beta_{\vec{k}}^+(\vec{k}, \omega) \end{cases} \quad \begin{cases} \alpha_{\vec{k}}^+(\vec{k}, \omega) = \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r}_i} S_i^+ \\ \beta_{\vec{k}}^+(\vec{k}, \omega) = \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r}_j} S_j^+ \end{cases} \quad (2.59)$$

où les $\alpha_{\vec{k}}^+(\vec{k}, \omega)$ et $\beta_{\vec{k}}^+(\vec{k}, \omega)$ décrivent aussi les déviations de spin dans l'espace réciproque. Alors les équations (2.58) deviennent

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\alpha_{\vec{k}}^+}{dt} &= J_{ij} S_A z_{ij} \gamma_{ij}(\vec{k}) \beta_{\vec{k}}^+ - J_{ij} S_B z_{ij} \alpha_{\vec{k}}^+ \\ i\hbar \frac{d\beta_{\vec{k}}^+}{dt} &= J_{ij} S_B z_{ij} \gamma_{ij}(\vec{k}) \alpha_{\vec{k}}^+ - J_{ij} S_A z_{ij} \beta_{\vec{k}}^+ \end{aligned} \quad (2.60)$$

où z_{ij} représente le nombre des premiers voisins et $\gamma_{ij}(\vec{k})$ est le facteur géométrique d'expression suivante :

$$\gamma_{ij}(\vec{k}) = \frac{1}{z_{ij}} \sum_{(ij)} e^{-i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}$$

CHAPITRE 2. LES MÉTHODES ANALYTIQUES POUR L'ÉTUDE LES
ONDES DE SPIN DE SURFACE

L'une des solutions permettant de résoudre le système d'équations (2.60) est de considérer que les opérateurs sont des ondes planes dépendantes du temps :

$$\alpha_{\vec{k}}^+ = \alpha_{\vec{k}_o}^+ e^{i\omega t} \quad \text{et} \quad \beta_{\vec{k}}^+ = \beta_{\vec{k}_o}^+ e^{i\omega t} \quad (2.61)$$

En substituant les équations (2.61) dans l'expression de (2.60), les équations du mouvement peuvent se condenser sous la forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \hbar\omega - J_{ij}S_B z_{ij} & J_{ij}S_A z_{ij} \gamma_{ij}(\vec{k}) \\ J_{ij}S_B z_{ij} \gamma_{ij}(\vec{k}) & \hbar\omega - J_{ij}S_A z_{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{k}}^+ \\ \beta_{\vec{k}}^+ \end{pmatrix} = 0 \quad (2.62)$$

$$D_b(\hbar\omega, J, \gamma(k)) \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{k}}^+ \\ \beta_{\vec{k}}^+ \end{pmatrix} = 0$$

Et pour obtenir les états de magnon de volume, il faut que :

$$\det[D_b(\hbar\omega, J, \vec{k})] = 0 \quad (2.63)$$

Ainsi, l'expression (2.63) décrivant les courbes de dispersion des ondes spin en volume est une équation quadratique selon :

$$(\hbar\omega)^2 + (J_{ij}(S_A + S_B)z_{ij})\hbar\omega + J_{ij}^2 S_A S_B z_{ij}^2 (1 - \gamma_{ij}^2(\vec{k})) = 0 \quad (2.64)$$

Pour obtenir les états de magnon de volume projetés en surface, il suffit d'effectuer la transformation suivante :

$$D_b(\hbar\omega, \vec{k}) \longrightarrow D_b(\hbar\omega, \rho, k_{//}) \quad \text{avec} \quad \rho = e^{ik_z a}, \quad \rho^{-1} = e^{-ik_z a} \quad (2.65)$$

Le réseau réciproque du réseau direct ramené à une périodicité bidimensionnelle est un réseau carré dont le vecteur d'onde a pour composantes :

$\vec{k}_{//} = (k_x, k_y)$. Et nous pouvons donc réécrire l'expression du facteur de phase :

$$\begin{aligned} \gamma_{ij}(\vec{k}) &= \frac{1}{z_{ij}} (2 \cos(k_x a) + 2 \cos(k_y a) + 2 \cos(k_z a)) \\ \gamma_{ij}(\vec{k}) &= \frac{1}{z_{ij}} (2 \cos(k_x a) + 2 \cos(k_y a) + \rho + \rho^{-1}) \\ \gamma_{ij}(\vec{k}) &= \frac{1}{z_{ij}} (\gamma_{//}(\vec{k}) + \rho + \rho^{-1}) \end{aligned} \quad (2.66)$$

2.4. LA MÉTHODE DE RACCORDEMENT

La substitution de l'expression de $\gamma_{ij}(\vec{k})$ dans l'équation (2.63) donne :

$$(\hbar\omega)^2 + (J_{ij}(S_A + S_B)z_{ij})\hbar\omega + J_{ij}^2 S_A S_B z_{ij}^2 \left(1 - \frac{1}{z_{ij}^2} (\gamma_{//}(\vec{k}) + \rho + \rho^{-1})^2\right) = 0 \quad (2.67)$$

En multipliant l'équation ci-dessus par ρ^2 , il en résulte un polynôme caractéristique de degré 4 en ρ dans lequel les coefficients $A_i (i = 0, \dots, 4)$ ont la particularité d'être symétriques.

$$A_4 \rho^4 + A_3 \rho^3 + A_2 \rho^2 + A_1 \rho + A_0 = 0 \quad (2.68)$$

avec

$$\begin{aligned} A_4 &= A_0 = -J_{ij}^2 S_A S_B \\ A_2 &= (\hbar\omega)^2 + J_{ij}(S_A + S_B)\hbar\omega + J_{ij}^2 S_A S_B z_{ij}^2 - J_{ij}^2 S_A S_B \gamma_{//}^2(\vec{k}) - 2J_{ij}^2 S_A S_B \\ A_3 &= A_1 = -2J_{ij} S_A S_B \gamma_{//}(\vec{k}) \end{aligned}$$

Et l'ensemble des points $(\hbar\omega, k_{//})$ donnant $|\rho| = 1$ représente la zone des magnons de volume.

Cas ferromagnétique

Le procédé de calcul du polynôme caractéristique de l'équation séculaire des ondes de spin en volume d'un système ferromagnétique est formellement identique à celui d'un système antiferromagnétique. Sauf que dans ce cas, nous ramenons le problème à un seul réseau au lieu de deux sous-réseaux.

En représentation d'Heisenberg, l'équation du mouvement de l'opérateur S_k^+ est :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dS_k^+}{dt} &= [S_k^+, \sum_{(ij)} J_{ij} S_i^z S_j^z] + [S_k^+, \frac{1}{2} \sum_{(ij)} J_{ij} S_i^+ S_j^-] + [S_k^+, \frac{1}{2} \sum_{(ij)} J_{ij} S_i^- S_j^+] \quad (2.69) \\ i\hbar \frac{dS_k^+}{dt} &= J_{ij} \sum_{(ij)} S_i^+ S_j^z \delta_{kj} + J_{ij} \sum_{(ij)} S_i^z S_j^+ \delta_{ki} - J_{ij} \sum_{(ij)} S_i^+ S_j^z \delta_{ki} - J_{ij} \sum_{(ij)} S_j^+ S_i^z \delta_{kj} \end{aligned}$$

A très basse température $T \sim 0K$, nous considérons que les fluctuations quantiques sont négligeables d'où nous procédons à la approximation suivante $S_i^z = S$. Et pour un atome i du réseau ($\delta_{ki} = 1; \delta_{kj} = 0$), l'équation du mouvement du spin devient

alors :

$$i\hbar \frac{dS_i^+}{dt} = J_{ij}S \sum_{(ij)} S_j^+ - J_{ij}S \sum_{(ij)} S_i^+ \quad (2.70)$$

nous écrivons la transformée de Fourier :

$$S_i^+ = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}_i} \alpha_{\vec{k}}^+(\vec{k}, \omega) \quad \alpha_{\vec{k}}^+(\vec{k}, \omega) = \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r}_i} S_i^+ \quad (2.71)$$

Ainsi, l'équation (2.70) se réécrit sous la forme :

$$i\hbar \frac{d\alpha_{\vec{k}}^+}{dt} = J_{ij}S z_{ij} \gamma_{ij}(\vec{k}) \alpha_{\vec{k}}^+ - J_{ij}S z_{ij} \alpha_{\vec{k}}^+ \quad (2.72)$$

En considérant l'opérateur $\alpha_{\vec{k}}^+$ est une onde plane dépendante du temps :

$$\alpha_{\vec{k}}^+ = \alpha_{\vec{k}_0}^+ e^{i\omega t}$$

Et nous obtenons aisément.

$$[\hbar\omega + J_{ij}S z_{ij} (\gamma_{ij}(\vec{k}) - 1)] \alpha_{\vec{k}_0}^+ = 0 \quad (2.73)$$

Par analogie au cas antiferromagnétique, nous effectuons la même transformation pour obtenir les états de magnons projetés en surface :

$$D_b(\hbar\omega, \vec{k}) \longrightarrow D_b(\hbar\omega, \rho, \vec{k}_{//}) \quad \text{avec} \quad \rho = e^{ik_z a}, \quad \rho^{-1} = e^{-ik_z a} \quad (2.74)$$

Le facteur de phase est toujours défini comme

$$\gamma_{ij}(\vec{k}) = \frac{1}{z_{ij}} (2 \cos(k_x a) + 2 \cos(k_y a) + \rho + \rho^{-1}) \quad (2.75)$$

Nous avons alors :

$$\begin{aligned} \left[\hbar\omega + J_{ij}S z_{ij} \left(\frac{1}{z_{ij}} \{ 2 \cos(k_x a) + 2 \cos(k_y a) + \rho + \rho^{-1} \} - 1 \right) \right] \alpha_{\vec{k}_0}^+ &= 0 \\ D_b(\hbar\omega, \rho, \vec{k}_{//}) \alpha_{\vec{k}_0}^+ &= 0 \end{aligned} \quad (2.76)$$

En multipliant l'équation ci-dessus par ρ , nous obtenons ainsi un polynôme carac-

2.4. LA MÉTHODE DE RACCORDEMENT

téristique de degré 2 en ρ de la forme

$$D_b(\hbar\omega, \rho, \vec{k}_{//}) = A_1\rho^2 + A_0\rho^1 + A_0\rho^0 = 0 \quad (2.77)$$

avec

$$\begin{aligned} A_2 &= A_0 = JS \\ A_1 &= \hbar\omega + 2JS(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - z_{ij}JS \end{aligned}$$

Dans la région de l'espace $(\hbar\omega, k_{//})$, la zone des états localisés de volume est valide pour les valeurs de $|\rho| = 1$.

2.4.6 Équations des ondes de spin de surface en fonction de l'amplitude

Afin de déterminer les équations des amplitudes de précession des ondes de spin, nous développons une étude théorique qui pourra être appliquée d'une manière générale à tout matériau modélisable par des réseaux cubiques simples. De ce fait, nous considérons un cristal cubique simple ayant la même distance inter-atomique, la même valeur de spin et la même orientation de spin dans l'état fondamental sur chaque atome.

Nous effectuons la transformée de Fourier dans l'espace réciproque, définie par :

$$\mathcal{F}^\lambda(l, \omega) = (2\pi a)^{-2} \int dk_{//} \cdot \exp(i\vec{k}_{//}\vec{r}) U^\lambda_{n(l)}(k_{//}, \omega) \quad (2.78)$$

$n=1, 2, 3, \dots, \infty$

$$\mathcal{F}^\lambda = \alpha_{\vec{k}}^+(\beta_{\vec{k}}^+) \text{ si } \lambda = A(B).$$

Avec $\vec{k}_{//}$ et \vec{r} sont respectivement le vecteur d'onde et le vecteur position parallèles à la surface. $U^\lambda_{n(l)}(k_{//}, \omega)$ représente l'amplitude de spin de l'atome l de la couche n du sous-réseau A(B). Ceci nous permet de réécrire les équations du mouvement de précession de spin pour chaque plan atomique n .

Cas Antiferromagnétique

En s'appuyant sur le fait que les solutions du système d'équations (2.60) sont des ondes planes

$$\begin{aligned}\alpha_{\vec{k}}^+(\omega, t) &= U_{n(l)}^A(k_{//}, \omega)e^{-i\omega t} \\ \beta_{\vec{k}}^+(\omega, t) &= U_{n(l+\tau)}^B(k_{//}, \omega)e^{-i\omega t}\end{aligned}\quad (2.79)$$

où $U_{n(l)}^A$ est l'amplitude de précession de l'onde spin de l'atome du sous-réseau A situé au site (l) sur le plan n .

$U_{n(l)}^B$ est l'amplitude de précession de l'onde spin de l'atome du sous-réseau B situé au site $(l + \tau)$ sur le plan adjacent au plan n .

En injectant les équations (2.79) dans celle de (2.60) et en utilisant la notation suivante

$$i = l \quad \text{et} \quad j = l + \tau$$

Nous en déduisons la réécriture des équations du mouvement des spins des atomes pour chaque plan :

$$\begin{aligned}\hbar\omega U_{n(l)}^A(k_{//}, \omega) &= \sum_{l, l+\tau} J(l, l + \tau) z_{ij} \left(S_{A(l)}^z \gamma_{ij} U_{n(l+\tau_{ij})}^B - S_{B(l+\tau_{ij})}^z U_{n(l)}^A \right) \\ \hbar\omega U_{n(l+\tau)}^B(k_{//}, \omega) &= \sum_{l, l+\tau} J(l, l + \tau) z_{ij} \left(S_{B(l)}^z \gamma_{ij} U_{n(l+\tau_{ij})}^A - S_{A(l+\tau_{ij})}^z U_{n(l)}^B \right)\end{aligned}\quad (2.80)$$

Pour déterminer les équations du mouvement des spins pour chaque sous-réseau, nous nous limiterons à un cristal cubique (001) antiferromagnétique semi infini. Nous supposons que l'interaction d'échange J peut différer à la surface de sa valeur dans le bulk. Deux paramètres sont introduits :

$$\varepsilon_{ij}^{\parallel} = \frac{J_s}{J} \quad \varepsilon_{ij}^{\perp} = \frac{J_{\perp}}{J}\quad (2.81)$$

où J_s relie deux voisins situés sur la première couche atomique et J_{\perp} deux voisins situés l'un sur la première, l'autre sur la deuxième.

2.4. LA MÉTHODE DE RACCORDEMENT

Toutes les autres couches atomiques sont supposées non perturbées (FIG.2.1).

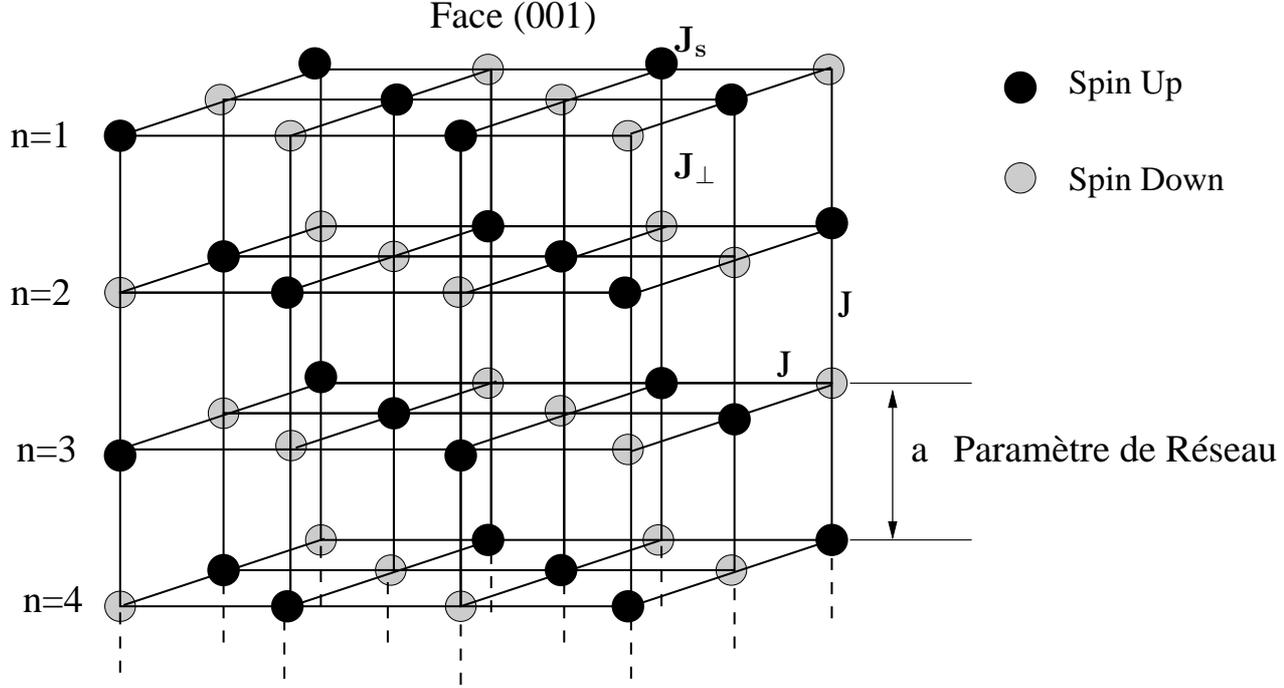


FIG. 2.1 – Représentation des différentes interactions d'échange en surface pour un réseau cubique antiferromagnétique ($J_s =$ intégrale d'échange en surface et $J_{\perp} =$ intégrale d'échange surface-volume).

A partir des équations(2.80), nous pouvons déduire les équations donnant les énergies des ondes de spin pour chaque plan atomique n des deux sous-réseaux.

Pour $n=1$

$$\begin{aligned}
 \hbar\omega U_1^A &= 4J_s \left[\langle S_A^z \rangle \gamma_{ij}^{\parallel} U_1^B - \langle S_B^z \rangle U_1^A \right] + J_{\perp} \left[\langle S_A^z \rangle \gamma_{ij}^{\perp} U_2^B \right] \\
 &\quad - J_{\perp} \left[\langle S_B^z \rangle U_1^A \right] \\
 \hbar\omega U_1^B &= 4J_s \left[\langle S_B^z \rangle \gamma_{ij}^{\parallel} U_1^A - \langle S_A^z \rangle U_1^B \right] + J_{\perp} \left[\langle S_B^z \rangle \gamma_{ij}^{\perp} U_2^A \right] \\
 &\quad - J_{\perp} \left[\langle S_A^z \rangle U_1^A \right]
 \end{aligned} \tag{2.82}$$

Pour n=2

$$\begin{aligned} \hbar\omega U_2^A &= 4J \left[\langle S_A^z \rangle \gamma_{ij}^{\parallel} U_2^B - \langle S_B^z \rangle U_2^A \right] + J_{\perp} \left[\langle S_A^z \rangle \gamma_{ij}^{\perp} U_1^B - \langle S_B^z \rangle U_2^A \right] \\ &\quad + J \left[\langle S_A^z \rangle \gamma_{ij}^{\perp} U_3^B - \langle S_B^z \rangle U_2^A \right] \end{aligned} \quad (2.83)$$

$$\begin{aligned} \hbar\omega U_2^B &= 4J \left[\langle S_B^z \rangle \gamma_{ij}^{\parallel} U_2^A - \langle S_A^z \rangle U_2^B \right] + J_{\perp} \left[\langle S_B^z \rangle \gamma_{ij}^{\perp} U_1^A - \langle S_A^z \rangle U_2^B \right] \\ &\quad + J \left[\langle S_B^z \rangle \gamma_{ij}^{\perp} U_3^A - \langle S_A^z \rangle U_2^B \right] \end{aligned}$$

Pour n=3

$$\begin{aligned} \hbar\omega U_3^A &= 4J \left[\langle S_A^z \rangle \gamma_{ij}^{\parallel} U_3^B - \langle S_B^z \rangle U_3^A \right] + J \left[\langle S_A^z \rangle \gamma_{ij}^{\perp} U_2^B - \langle S_B^z \rangle U_3^A \right] \\ &\quad + J \left[\langle S_A^z \rangle \gamma_{ij}^{\perp} U_4^B - \langle S_B^z \rangle U_3^A \right] \end{aligned} \quad (2.84)$$

$$\begin{aligned} \hbar\omega U_3^B &= 4J \left[\langle S_B^z \rangle \gamma_{ij}^{\parallel} U_3^A - \langle S_A^z \rangle U_3^B \right] + J \left[\langle S_B^z \rangle \gamma_{ij}^{\perp} U_2^A - \langle S_A^z \rangle U_3^B \right] \\ &\quad + J \left[\langle S_B^z \rangle \gamma_{ij}^{\perp} U_4^A - \langle S_A^z \rangle U_3^B \right] \end{aligned}$$

⋮

Pour n > 3

$$\begin{aligned} \hbar\omega U_n^{B(A)} &= 4J \left[\langle S_B^z \rangle \gamma_{ij}^{\parallel} U_n^{A(B)} - \langle S_{A(B)}^z \rangle U_n^{B(A)} \right] \\ &\quad + J \left[\langle S_{B(A)}^z \rangle \gamma_{ij}^{\perp} U_{n-1}^A - \langle S_{A(B)}^z \rangle U_n^{B(A)} \right] \\ &\quad + J \left[\langle S_{B(A)}^z \rangle \gamma_{ij}^{\perp} U_{n+1}^{A(B)} - \langle S_{A(B)}^z \rangle U_n^{B(A)} \right] \end{aligned} \quad (2.85)$$

Pour le système considéré, les facteurs de phase sont alors donnés par

$$\gamma_{ij}^{\parallel} = \frac{1}{z_{ij}} \sum_{\Delta_{ij}} \exp(i\vec{k}_{\parallel} \vec{\Delta}_{ij}) = \frac{1}{2} \left(\cos(k_y a) + \cos(k_x a) \right) \quad (2.86)$$

$$\gamma_{ij}^{\perp} = 1$$

2.4. LA MÉTHODE DE RACCORDEMENT

En utilisant les notations :

$$E = \frac{\hbar\omega}{JS} \quad \varepsilon_{ij}^{\parallel} = \frac{J_s}{J} \quad \varepsilon_{ij}^{\perp} = \frac{J_{\perp}}{J} \quad (2.87)$$

D'après la condition faite aux équations (2.57), les équations (2.82, 2.83, 2.84) s'écrivent alors :

Pour n=1

$$\begin{aligned} \left[E - 4\varepsilon_{ij}^{\parallel} - \varepsilon_{ij}^{\perp} \right] U_1^A + \left[-4\varepsilon_{ij}^{\parallel}\gamma_{ij}^{\parallel} \right] U_1^B + \left[-\varepsilon_{ij}^{\perp}\gamma_{ij}^{\perp} \right] U_2^B &= 0 \\ \left[E + 4\varepsilon_{ij}^{\parallel} + \varepsilon_{ij}^{\perp} \right] U_1^B + \left[+4\varepsilon_{ij}^{\parallel}\gamma_{ij}^{\parallel} \right] U_1^A + \left[+\varepsilon_{ij}^{\perp}\gamma_{ij}^{\perp} \right] U_2^A &= 0 \end{aligned} \quad (2.88)$$

Pour n=2

$$\begin{aligned} \left[E - 5 - \varepsilon_{ij}^{\perp} \right] U_2^A + \left[-4\varepsilon_{ij}^{\parallel} \right] U_2^B + \left[-\varepsilon_{ij}^{\perp}\gamma_{ij}^{\perp} \right] U_1^B + \left[-\varepsilon_{ij}^{\perp} \right] U_3^B &= 0 \\ \left[E + 5 + \varepsilon_{ij}^{\perp} \right] U_2^B + \left[+4\varepsilon_{ij}^{\parallel} \right] U_2^A + \left[+\varepsilon_{ij}^{\perp}\gamma_{ij}^{\perp} \right] U_1^A + \left[+\varepsilon_{ij}^{\perp} \right] U_3^A &= 0 \end{aligned} \quad (2.89)$$

Pour n=3

$$\begin{aligned} \left[E - 6 \right] U_3^A + \left[-4\varepsilon_{ij}^{\parallel} \right] U_3^B + \left[-\varepsilon_{ij}^{\perp}\gamma_{ij}^{\perp} \right] U_2^B + \left[-\varepsilon_{ij}^{\perp} \right] U_4^B &= 0 \\ \left[E + 6 \right] U_3^B + \left[+4\varepsilon_{ij}^{\parallel} \right] U_3^A + \left[+\varepsilon_{ij}^{\perp}\gamma_{ij}^{\perp} \right] U_2^A + \left[+\varepsilon_{ij}^{\perp} \right] U_4^A &= 0 \end{aligned} \quad (2.90)$$

En notation matricielle, ces équations peuvent se mettre sous la forme suivante :

$$[M_v(E, k_{//})][U_n^{A(B)}] = 0 \quad (2.91)$$

Où M_v est la matrice de volume

$$M_v = \begin{pmatrix} E - 4\varepsilon_{ij}'' - \varepsilon_{ij}^\perp & -4\varepsilon_{ij}''\gamma_{ij}'' & 0 & -\varepsilon_{ij}^\perp\gamma_{ij}^\perp & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4\varepsilon_{ij}''\gamma_{ij}'' & E + 4\varepsilon_{ij}'' + \varepsilon_{ij}^\perp & +\varepsilon_{ij}^\perp\gamma_{ij}^\perp & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\varepsilon_{ij}^\perp\gamma_{ij}^\perp & E - 5 - \varepsilon_{ij}^\perp & -4\varepsilon_{ij}'' & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \varepsilon_{ij}^\perp\gamma_{ij}^\perp & 0 & 4\varepsilon_{ij}'' & E + 5 + \varepsilon_{ij}^\perp & 4\varepsilon_{ij}'' & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{ij}^\perp\gamma_{ij}^\perp & E - 6 & -4\varepsilon_{ij}'' & 0 & -\varepsilon_{ij}^\perp \\ 0 & 0 & \varepsilon_{ij}^\perp\gamma_{ij}^\perp & 0 & 4\varepsilon_{ij}'' & E + 6 & \varepsilon_{ij}^\perp & 0 \end{pmatrix}$$

Et

$$[U_n^{A(B)}] = \begin{pmatrix} U_1^A \\ U_1^B \\ U_2^A \\ U_2^B \\ U_3^A \\ U_3^B \\ U_4^A \\ U_4^B \end{pmatrix}$$

Cas Ferromagnétique

Les équations des ondes de spin de surface en fonction de l'amplitude, dans le cas d'un réseau ferromagnétique, se déduisent des celles (2.88), (2.89) et (2.90) et s'écrivent de façon analogue. Dans le cas du réseau ferromagnétique, un seul sous-

2.4. LA MÉTHODE DE RACCORDEMENT

réseau est à considérer contrairement au cas antiferromagnétique. Comme l'illustre la Figure 2.2.

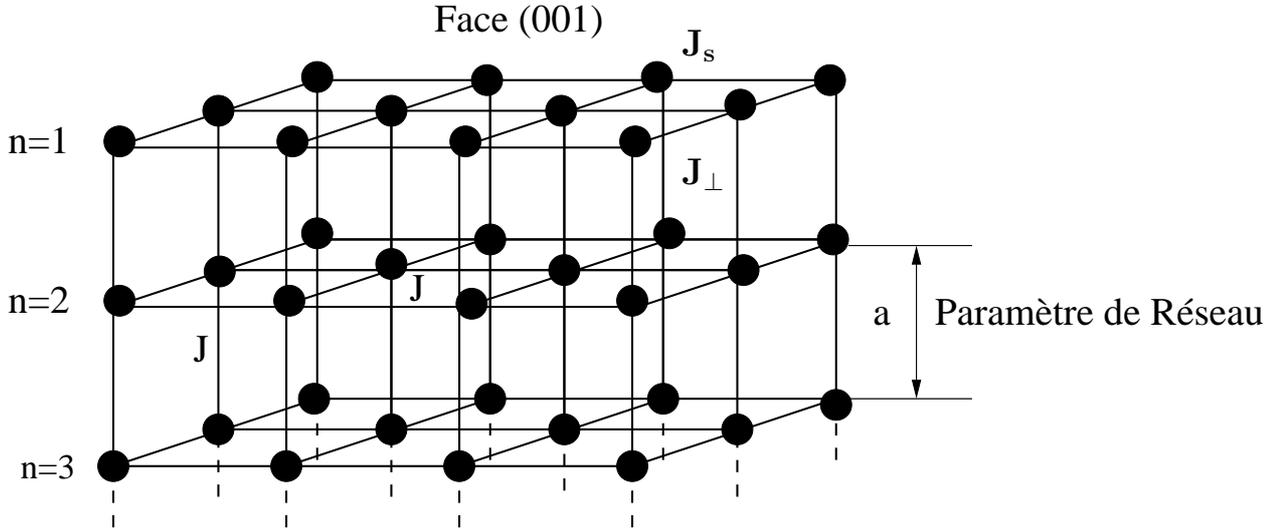


FIG. 2.2 – *Modèle cubique semi-infini en couches parallèles d'un couplage ferromagnétique. La première couche est perturbée.*

L'expression des équations de précession de spin pour chaque couche atomique n est :

Pour $n=1$

$$\hbar\omega U_1 = -4J_s S_A \left[\gamma_{ij}^{\parallel} U_1 - U_1 \right] - J_{\perp} S_A \left[\gamma_{ij}^{\perp} U_2 - U_1 \right] \quad (2.92)$$

Pour $n=2$

$$\hbar\omega U_2 = -4J S_A \left[\gamma_{ij}^{\parallel} U_2 - U_2 \right] - J_{\perp} S_A \left[\gamma_{ij}^{\perp} U_1 - U_2 \right] - J_{\perp} S_A \left[\gamma_{ij}^{\perp} U_3 - U_2 \right] \quad (2.93)$$

Pour $n=3$

$$\hbar\omega U_3 = -4J S_A \left[\gamma_{ij}^{\parallel} U_3 - U_3 \right] - J_{\perp} S_A \left[\gamma_{ij}^{\perp} U_2 - U_3 \right] - J_{\perp} S_A \left[\gamma_{ij}^{\perp} U_4 - U_3 \right] \quad (2.94)$$

⋮

Pour > 3

$$\hbar\omega U_n = -4JS_A(\gamma_{ij}^{\parallel} U_n - U_n) - J_{\perp}S_A(\gamma_{ij}^{\perp} U_{n-1} - U_n) - J_{\perp}S_A(\gamma_{ij}^{\perp} U_{n+1} - U_n)$$

En utilisant les mêmes notations que celles de (2.87), il vient :

Pour $= 1$

$$[E + 4\varepsilon_{ij}^{\parallel}(\gamma_{ij}^{\parallel} - 1) - \varepsilon_{ij}^{\perp}]U_1 + [\varepsilon_{ij}^{\perp}\gamma_{ij}^{\perp}]U_2 = 0 \quad (2.95)$$

Pour $= 2$

$$[E + 4(\gamma_{ij}^{\parallel} - 1) - \varepsilon_{ij}^{\perp} - 1]U_2 + [\varepsilon_{ij}^{\perp}\gamma_{ij}^{\perp}]U_1 + [\gamma_{ij}^{\perp}]U_3 = 0 \quad (2.96)$$

Pour $= 3$

$$[E + 4(\gamma_{ij}^{\parallel} - 1) - 2]U_3 + [\gamma_{ij}^{\perp}]U_2 + [\gamma_{ij}^{\perp}]U_4 = 0 \quad (2.97)$$

Ces équations peuvent être exprimées sous la forme matricielle :

$$[M_v(E, k_{\parallel})][U_n] = [0] \quad \text{avec} \quad n = 1, \dots, 4. \quad (2.98)$$

avec

$$M_v = \begin{pmatrix} E + 4\varepsilon_{ij}^{\parallel}(\gamma_{ij}^{\parallel} - 1) - \varepsilon_{ij}^{\perp} & \varepsilon_{ij}^{\perp}\gamma_{ij}^{\perp} & 0 & 0 \\ \varepsilon_{ij}^{\perp}\gamma_{ij}^{\perp} & E + 4(\gamma_{ij}^{\parallel} - 1) - \varepsilon_{ij}^{\perp} - 1 & \gamma_{ij}^{\perp} & 0 \\ 0 & \gamma_{ij}^{\perp} & E + 4(\gamma_{ij}^{\parallel} - 1) - 2 & \gamma_{ij}^{\perp} \end{pmatrix}$$

où M_v décrit la matrice dynamique des états localisés de volume pour un système ferromagnétique et U_n représentent les amplitudes des ondes de spin d'expression :

$$U_n = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{pmatrix} \quad (2.99)$$

2.4.7 les énergies des ondes de spin de surface

Cas Antiferromagnétique

Dans ce paragraphe, nous étudions l'existence des modes de surface d'un réseau cubique antiferromagnétique semi-infini. Pour ce faire, nous tenons compte seulement des interactions d'échange entre la première et la seconde couche. Et la région de volume est décrite à partir du plan $n = 3$.

D'après l'équation (2.48), l'amplitude des ondes de spin est

$$U(n, \lambda) = \sum_{i=1}^{n_e} R_i C(\lambda, \rho_i) \rho^{n-n_v} \quad (2.100)$$

où λ est le symbole d'un des sous-réseaux de la structure magnétique ; n_e et $C(\lambda, \rho_i)$ sont respectivement le nombre de racines du polynôme caractéristique et les cofacteurs de la matrice dynamique du volume $D_b(\hbar\omega, J, \vec{k})$, n_v indique le numéro du plan atomique pour lequel la région du volume est considérée.

En se basant sur la méthode de raccordement, les amplitudes de volume ($U(3, A)$, $U(3, B)$) et ($U(4, A)$, $U(4, B)$) peuvent être exprimés en fonction de celles de la couche de surface ($U(1, A)$, $U(1, B)$) et ($U(2, A)$, $U(2, B)$) à partir des grandeurs de raccordement R_1 et R_2

$$U(n, A(B)) = \sum_{i=1}^2 R_i C(A(B), \rho_i) \rho^{n-3} \quad (2.101)$$

Amplitude de l'onde de spin du plan n=3

$$\begin{aligned} U(3, A) &= R_1 C(A, \rho_1) + R_2 C(A, \rho_2) \\ U(3, B) &= R_1 C(B, \rho_1) + R_2 C(B, \rho_2) \end{aligned} \quad (2.102)$$

Amplitude de l'onde de spin du plan n=4

$$\begin{aligned} U(4, A) &= R_1 \rho_1 C(A, \rho_1) + R_2 \rho_2 C(A, \rho_2) \\ U(4, B) &= R_1 \rho_1 C(B, \rho_1) + R_2 \rho_2 C(B, \rho_2) \end{aligned} \quad (2.103)$$

Et d'après l'expression donnée plus haut pour $U(3, A(B))$ et $U(4, A(B))$, il s'en suit que la matrice de raccordement est

$$\begin{pmatrix} U_1^A \\ U_1^B \\ U_2^A \\ U_2^B \\ U_3^A \\ U_3^B \\ U_4^A \\ U_4^B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C(A, \rho_1) & C(A, \rho_2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C(B, \rho_1) & C(B, \rho_2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C(A, \rho_1)\rho_1 & C(A, \rho_2)\rho_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C(B, \rho_1)\rho_1 & C(B, \rho_2)\rho_2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1^A \\ U_1^B \\ U_2^A \\ U_2^B \\ R_1 \\ R_2 \end{pmatrix} \quad (2.104)$$

L'équation ci-dessus peut donc s'écrire plus simplement :

$$\begin{bmatrix} U_n^{A(B)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_R(C(A(B), \rho) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{1(2)}^{A(B)} \\ R \end{bmatrix} \quad (2.105)$$

Pour calculer la matrice dynamique décrivant les états localisés de surface, nous effectuons le produit de la matrice de volume $M_v(6 \times 8)$ (2.91) et de la matrice de raccordement $M_R(8 \times 6)$ (2.104). Nous obtenons donc une matrice carrée

$$M_s(6 \times 6) = M_v(6 \times 8) \times M_R(8 \times 6) \quad (2.106)$$

2.4. LA MÉTHODE DE RACCORDEMENT

Par suite nous déduisons un système d'équations homogène de la forme

$$[M_s(E, k_{//})] \begin{bmatrix} U^{A(B)} \\ R_1 \\ R_2 \end{bmatrix} = 0 \quad (2.107)$$

La condition que le facteur d'évanescence soit inférieur à 1 ($|\rho_i| < 1$) permet de déterminer les états localisés de surface. Si nous ajoutons la condition que le déterminant soit nul ($\det[M_s(E, k_{//})] = 0$), nous obtenons les courbes de dispersion des magnons de surface de la première zone de Brillouin.

$$M_s = \begin{pmatrix} E - 4\varepsilon_{ij}^{\prime\prime} - \varepsilon_{ij}^{\perp} & -4\varepsilon_{ij}^{\prime\prime} \gamma_{ij}^{\prime\prime} & 0 & -\varepsilon_{ij}^{\perp} \gamma_{ij}^{\perp} & 0 & 0 \\ 4\varepsilon_{ij}^{\prime\prime} \gamma_{ij}^{\prime\prime} & E + 4\varepsilon_{ij}^{\prime\prime} + \varepsilon_{ij}^{\perp} & +\varepsilon_{ij}^{\perp} \gamma_{ij}^{\perp} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\varepsilon_{ij}^{\perp} \gamma_{ij}^{\perp} & E - 5 - \varepsilon_{ij}^{\perp} & -4\varepsilon_{ij}^{\prime\prime} & -\gamma_{ij}^{\perp} C(B, \rho_1) & -\gamma_{ij}^{\perp} C(B, \rho_2) \\ \varepsilon_{ij}^{\perp} \gamma_{ij}^{\perp} & 0 & 4\varepsilon_{ij}^{\prime\prime} & E + 5 + \varepsilon_{ij}^{\perp} & \varepsilon_{ij}^{\perp} C(A, \rho_1) & \varepsilon_{ij}^{\perp} C(A, \rho_2) \\ 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{ij}^{\perp} \gamma_{ij}^{\perp} & (E - 6)C(A, \rho_1) - \\ & & & & 4\varepsilon_{ij}^{\prime\prime} C(B, \rho_1) - \varepsilon_{ij}^{\perp} C(B, \rho_1) \rho_2 & 4\varepsilon_{ij}^{\prime\prime} C(B, \rho_2) - \varepsilon_{ij}^{\perp} C(B, \rho_1) \rho_2 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{ij}^{\perp} \gamma_{ij}^{\perp} & 0 & (E + 6)C(B, \rho_1) + \\ & & & & 4\varepsilon_{ij}^{\prime\prime} C(A, \rho_1) + \varepsilon_{ij}^{\perp} C(A, \rho_1) \rho_1 & 4\varepsilon_{ij}^{\prime\prime} C(A, \rho_2) + \varepsilon_{ij}^{\perp} C(A, \rho_2) \rho_2 \end{pmatrix}$$

Cas ferromagnétique

La méthode de calcul des énergies des ondes de spin de surface pour un système ferromagnétique est tout à fait analogue à celle employée dans le cas antiferromagnétique. Ainsi, les amplitudes de l'onde de spin pour les plans $n = 3$ et $n = 4$ en fonction du facteur de raccordement R_1 sont respectivement :

$$U_3 = R_1 C(\rho_1) \tag{2.108}$$

$$U_4 = R_1 C(\rho_1) \rho_1$$

En utilisant les propriétés de la matrice de raccordement, nous pouvons exprimer les amplitudes des ondes de spin volume U_3 et U_4 en fonction de celles de la couche de surface U_1 et U_2 par l'intermédiaire du facteur de raccordement R_1 .

$$\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & C(\rho_1) \\ 0 & 0 & C(\rho_1)\rho_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ R_1 \end{pmatrix} \tag{2.109}$$

Cette dernière relation peut aussi s'écrire

$$\begin{bmatrix} U_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_R(C(\rho), \rho) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{1(2)} \\ R \end{bmatrix} \tag{2.110}$$

En encore une fois, la matrice dynamique décrivant les états localisés de surface n'est que le produit de la matrice de volume $M_v(3 \times 4)$ (2.98) et de la matrice de raccordement $M_R(4 \times 3)$ (2.109). Ce qui donne donc un système homogène de la forme

$$M_s(E, k_{//}) \begin{bmatrix} U_{1(2)} \\ R \end{bmatrix} = 0 \tag{2.111}$$

CHAPITRE 2. LES MÉTHODES ANALYTIQUES POUR L'ÉTUDE LES
ONDES DE SPIN DE SURFACE

A partir de cette expression, la matrice dynamique $M_s(E, k_{//})$ peut s'écrire ainsi :

$$\begin{pmatrix} E + 4\varepsilon_{ij}^{\prime\prime}(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - \varepsilon_{ij}^{\perp} & \varepsilon_{ij}^{\perp}\gamma_{ij}^{\perp} & 0 \\ \varepsilon_{ij}^{\perp}\gamma_{ij}^{\perp} & E + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - \varepsilon_{ij}^{\perp} - 1 & \gamma_{ij}^{\perp}C(\rho_1) \\ 0 & \gamma_{ij}^{\perp} & [E + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - 2]C(\rho_1)\rho_1 + \gamma_{ij}^{\perp}C(\rho_1)\rho_1 \end{pmatrix}$$

Comme dans le cas antiferromagnétique, la condition nécessaire et suffisante pour trouver les états localisés de surface est : d'une part $|\rho| < 1$ et d'autre part $\det(M_s(E, k_{//})) = 0$.

Chapitre 3

Étude des excitations magnétiques d'un système ferromagnétique

3.1 Introduction

De très nombreux travaux expérimentaux et théoriques ont été publiés concernant l'étude des surfaces magnétiques. En pratique, diverses techniques sont développées à l'effet d'étudier les propriétés des ondes de spin de surface. Parmi ces techniques, nous pouvons citer la diffusion de Brillouin, la diffusion de la lumière, la méthode de résonance des ondes de spin [15, 16] et la diffusion magnétique des neutrons. Par exemple, la diffusion de Brillouin ([17, 18]) a permis de mesurer les constantes d'anisotropie grâce à l'étude des ondes de spin de surface et de sonder les excitations magnétiques de basse énergie [19, 20] ainsi celles des plots magnétiques présents dans les couches de Permalloy(81% *Ni*, 19% *Fe*) [21].

D'un point de vue théorique, plusieurs auteurs ont développé des formalismes analytiques et des techniques numériques afin d'analyser et d'interpréter les différents phénomènes relatifs à la nature des excitations magnétiques de surface. En effet, la présence de cette dernière dans un cristal représente un environnement très asymétrique où les atomes ont une coordination modifiée par rapport aux atomes du volume. Ceci implique que la structure de la surface peut être radicalement différente d'une simple terminaison du cristal. La modification de structure au niveau de la surface peut se manifester soit sous la forme d'une relaxation qui peut être une dilatation ou une compression de la distance entre les premières couches atomiques soit sous la forme de reconstruction où les atomes se déplacent parallèlement à la surface.

La brisure de symétrie au niveau de la surface a motivé plusieurs auteurs à formuler des outils mathématiques pour mettre en évidence l'existence des ondes de spin en surface. Les premiers travaux reviennent à Wallis et Maradudin [22]. Puis Wolfram et Callaway [23] ont montré qu'il existe des ondes de spin localisés autour des impuretés. L'analogie avec la surface a été entreprise par les travaux de Filloпов [24] qui attribuait l'existence des ondes de spin en surface à une variation de l'interaction d'échange à la surface. Ce travail a été repris par DeWames et Wolfram [25].

En effet, diverses techniques de calcul ont été formulées pour déterminer des états localisés de magnons de surface pour des systèmes semi infini telles que : la méthode de diagonalisation directe [26] [27], la méthode de Monte-Carlo [28], la méthode des fonctions de Green [3, 29–32] et la méthode de raccordement [33]. Et c'est dans cette dernière que s'inscrit ce travail de thèse.

Wallis et *al* [34] ont montré que lorsqu'un cristal ferromagnétique de type Heisenberg se termine par une surface libre, il peut exister des états localisés sur celle-ci. L'existence de ces modes dépend de la nature du cristal (autrement dit de sa structure cristalline et des valeurs des intégrales d'échange) ainsi que l'orientation de la surface. Par exemple pour un cristal cubique simple et avec des interactions d'échange entre premiers (J_1) et seconds voisins (J_2) il n'existe des modes localisés sur une surface que lorsque ($J_1 > 0$) et ($J_2 > 0$) tandis qu'il en existe toujours sur une surface (110). Et ceci est vérifié, en supposant que les intégrales d'échange sont identiques à la surface et en volume. D'ailleurs le problème a été repris par R.E.Dewames et T.Wolfram [35], en stipulant que l'intégrale d'échange peut différer à la surface (110) de sa valeur dans le bulk et en se limitant seulement à l'interaction des premiers voisins. R.E.Dewames et T.Wolfram montrèrent la présence de modes localisés de magnons à la surface pour différentes valeurs du paramètre de couplage (variation relative de l'échange de deux spins sur la première, la deuxième et sur chacune des deux couches par rapport au volume).

3.1. INTRODUCTION

Par ailleurs, le problème d'une surface libre peut être traité comme un cas particulier de celui d'un plan de défauts. Ainsi, plusieurs auteurs se sont penchés sur l'étude des excitations magnétiques en présence d'impuretés et des défauts de plan. Il a été démontré que pour un cristal infini (3D) de type ferro/antiferromagnétique dopé d'impuretés, qu'il existe des modes localisés autour de celles-ci [23] [36, 37] et de même pour une chaîne de spin [38, 39]. Concernant les systèmes semi infinis, des études ont été effectuées dans le cadre de cette thématique en implantant soit une(des) impureté(es) [40–43] ou un défaut de plan au voisinage de la surface [44–46].

Ce chapitre est consacré à l'étude des excitations magnétiques en volume et au voisinage de la surface d'un ferromagnétique semi infini. Dans ce contexte, nous avons tout d'abord utilisé le formalisme d'Heisenberg permettant d'introduire les mécanismes élémentaires de couplage du système de spin. Ensuite, nous avons adopté la méthode de raccordement afin de décrire les propriétés des états localisés résultant de la brisure de symétrie (surface, défaut de plan).

Dans la première partie, nous aborderons l'effet des interactions d'échange sur les modes localisés dans le cas où la surface est orientée selon la direction cristallographique (110) [47]. Dans la deuxième partie, nous nous sommes plus intéressés à l'étude des excitations magnétiques d'un système cubique ferromagnétique présentant un plan de défauts homogène [48]. De plus, il est important de noter que le problème traité ici comporte d'abord une brisure de symétrie (présence de surface) et une réduction de symétrie (présence d'un plan de défauts).

3.2 Étude d'une surface ferromagnétique dans le plan (110)

Nous étudions dans cette partie la localisation des excitations magnétiques pour un réseau ferromagnétique de Heisenberg. Cette étude est effectuée sur un modèle simplifié qui permet d'obtenir quelques résultats qualitatifs.

Le cristal est supposé cubique simple avec la même distance inter-atomique a ainsi que la même valeur absolue de spin S et la même orientation de spin dans l'état fondamental sur chaque atome. Nous créons un réseau semi infini terminé par une surface dont l'orientation cristallographie est (110). Ce modèle est représenté schématiquement pour une surface (110) sur la figure 3.1.

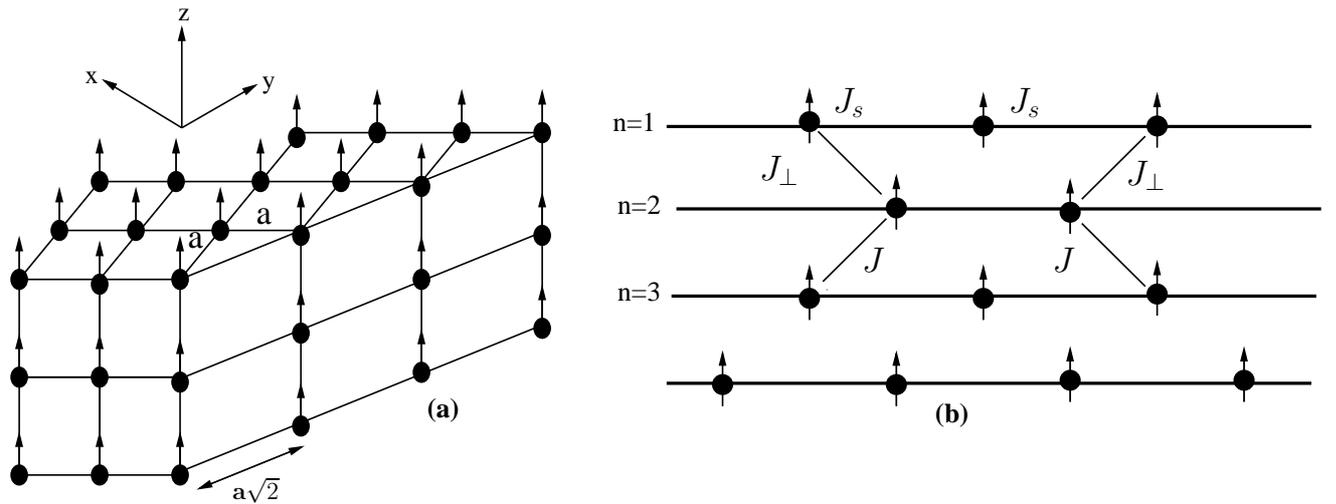


FIG. 3.1 – (a) Représentation schématique du modèle d'un réseau cubique ferromagnétique(110).(b) Modèle d'interaction d'échange

L'Hamiltonien d'un tel système, comportant un terme d'échange isotrope de Heisenberg, un terme de Zeeman et un terme d'anisotropie [49], est défini par la relation :

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \mu_B g (H_o + H_{AN}) \sum_i S_i^z \quad (3.1)$$

où nous retenons uniquement les interactions d'échange aux premiers voisins.

3.2. ÉTUDE D'UNE SURFACE FERROMAGNÉTIQUE DANS LE PLAN (110)

Nous recherchons ici les équations de dispersion des magnons de volume et de surface de H que nous commençons par réécrire au moyen des opérateurs de spin $S^\pm = S^x \pm iS^y$:

$$H = \sum_{ij} J_{ij} \left(S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right) - \mu_B g (H_o + H_{AN}) \sum_i S_i^z \quad (3.2)$$

L'équation du mouvement de l'opérateur S_i^+ pour un site i s'écrit :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dS_i^+}{dt} &= [S_i^+, H] \\ i\hbar \frac{dS_i^+}{dt} &= \langle S^z \rangle \sum_{(ij)} J_{ij} S_j^+ - \langle S^z \rangle \sum_{(ij)} J_{ij} S_j^+ + \mu_B g (H_o + H_{AN}) \sum_i S_i^+ \end{aligned} \quad (3.3)$$

A très basse température, en comparaison avec la transition de phase ordre-désordre en fonction de la température, nous effectuons alors l'approximation que $\langle S^z \rangle = S$. De plus, comme la symétrie de l'ordre magnétique autour de la surface est invariante par rotation de spin dans les directions OZ et OY , nous pouvons ainsi utiliser le théorème de Bloch et par conséquent l'écriture de l'opérateur $S^+(r, t)$ dans cette direction est exprimée par :

$$S_{y(z)}^+(r, t) = S_{y(z)}(r, 0) + S_{y(z)}^+(r) \exp(\pm i k_{y(z)} a \sqrt{2}) \exp(-i\omega t) \quad (3.4)$$

où $S_{y(z)}(r, 0)$ représente la déviation de spin indépendante du temps selon l'axe de facile aimantation OZ , et le terme $\exp(\pm i k_{y(z)} a \sqrt{2})$ décrit la partie spatiale du facteur de phase pour les modes se propageant selon la direction parallèle à la surface. Notons que $a\sqrt{2}$ caractérise la distance inter-atomique entre premiers voisins dont l'orientation cristallographique est (110).

Il est important de noter que la présence d'une surface brise la symétrie de translation selon la direction OX , ainsi les modes évanescents sont décrits par la solution de type :

$$S_x^+(r, t) = S_x(r, 0) + S_x^+(r) \rho_x \exp(-i\omega t) \quad (3.5)$$

$\rho_x = \exp(\pm i k_x a)$ exprime le facteur de phase dans la direction normale à la surface et l'évanescence des modes de fluctuation de spin sont décrits par le doublet (ρ_x, ρ_x^{-1}) .

CHAPITRE 3. ÉTUDE DES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES D'UN
SYSTÈME FERROMAGNÉTIQUE

En substituant les équations (3.4) et (3.5) dans l'équation du mouvement (3.3), nous obtenons l'équation séculaire des magnons en volume d'expression suivante :

$$A_0\rho^0 + A_1\rho^1 + A_2\rho^2 = 0 \quad (3.6)$$

Et les coefficients du polynôme caractéristique (3.6) s'écrivent tout simplement sous la forme :

$$A_0 = 2JS\gamma_{\perp} = 2JS \cos(k_y\sqrt{2}a)$$

$$A_1 = \hbar\omega + 2JS(\gamma_{\parallel} - 6JS - g\mu_B(H_o + H_{AN})) = \hbar\omega + 2JS(\cos(k_z a) - 6JS - g\mu_B(H_o + H_{AN}))$$

$$A_2 = 2JS\gamma_{\perp} = 2JS \cos k_y\sqrt{2}a$$

Ainsi, les états de magnons de volume correspondent aux solutions de l'équation (3.6) avec la condition $|\rho| = 1$.

Nous rappelons que la méthode de résolution de l'équation du mouvement (3.3) en partant de l'Hamiltonien d'Heisenberg est détaillée au *chapitre 2*. Pour déterminer les états d'excitations magnétiques de surface, la subtilité de calcul consistera alors à réaliser la transformation dans l'espace des vecteurs d'onde. Le passage d'un espace des vecteurs d'ondes à trois dimensions (3D) vers un espace des vecteurs à deux dimensions s'effectue en utilisant la transformée de Fourier bidimensionnelle (2D). Ceci présente l'avantage d'exprimer l'amplitude de précession des spins en fonction de l'opérateur de spin S^+ (cf Section 2.4.6) :

$$\mathcal{S}^+(r, \omega) = (2\pi a)^{-2} \int dk_{//} \exp(i\vec{k}_{//}\vec{r}_{//}) U_{n(l)}(k_{//}, \omega) \quad (3.7)$$

Pour simplifier la notation des équations des plans atomiques définies par l'indice n , nous adoptons les notations suivantes :

$$E = \frac{\hbar\omega - g\mu_B H_o}{JS}, \quad \varepsilon_{\parallel} = \frac{J_{\parallel}}{J}, \quad \varepsilon_{\perp} = \frac{J_{\perp}}{J}, \quad \Lambda_y = 1 - \gamma_{\perp}, \quad \Lambda_z = 1 - \gamma_{\parallel} \quad (3.8)$$

3.2. ÉTUDE D'UNE SURFACE FERROMAGNÉTIQUE DANS LE PLAN (110)

Les équations décrivant les précessions pour chaque plan sont décrites comme suit :

Pour $n=1$

$$[E - (2\epsilon_{\parallel}\Lambda_z) - 2\epsilon_{\perp} - \frac{g\mu_B H_1^A}{JS}]U_1 + [2\epsilon_{\perp}(1 - \Lambda_y)]U_2 = 0 \quad (3.9)$$

Pour $n=2$

$$[2\epsilon_{\perp}(1 - \Lambda_y)]U_1 + [E - 2\Lambda_z - 2\epsilon_{\perp} - 2 - \frac{g\mu_B H^A}{JS}]U_2 + [2(1 - \Lambda_y)]U_3 = 0 \quad (3.10)$$

Pour $n \geq 3$

$$[2\epsilon_{\perp}(1 - \Lambda_y)]U_{n-1} + [E - 2\Lambda_z - 4 - \frac{g\mu_B H^A}{JS}]U_n + [2(1 - \Lambda_y)]U_{n+1} = 0 \quad (3.11)$$

En notation matricielle, ces équations s'écrivent simplement $[M^n][U_n] = [0]$, où $[U_n]$ est le vecteur colonne représenté par ses composantes : $[U_n] = [U_1, \dots, U_n, U_{n+1}, \dots]^T$. Et $[M^n]$ est la matrice dynamique décrivant la propagation et l'évanescence des modes de fluctuation de spin.

$$M_v = \begin{pmatrix} E - (2\epsilon_{\parallel}\Lambda_z) - 2\epsilon_{\perp} - \frac{g\mu_B H_1^A}{JS} & 2\epsilon_{\perp}(1 - \Lambda_y) & 0 & 0 \\ 2\epsilon_{\perp}(1 - \Lambda_y) & E - 2\Lambda_z - 2\epsilon_{\perp} - 2 - \frac{g\mu_B H^A}{JS} & 2(1 - \Lambda_y) & 0 \\ 0 & 2(1 - \Lambda_y) & E - 2\Lambda_z - 4 - \frac{g\mu_B H^A}{JS} & 2(1 - \Lambda_y) \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

Pour déterminer les états localisés de surface, nous utilisons la méthode de raccordement en faisant le produit de la matrice de raccordement $M_R(2.109)$ par celle de la matrice ci-dessus $M_v(3.12)$.

3.2.1 Discussion des résultats

La représentation la mieux adaptée à la description des spins quantiques en interaction d'échange sur un réseau cubique ferromagnétique (110) est celle de Heisenberg. En effet, en partant de cette représentation, nous avons abouti à la relation de dispersion afin d'examiner les effets induits par les différentes valeurs des interactions d'échange.

Par ailleurs, la zone de fluctuation de spin dans le volume correspond à l'ensemble de points d'énergies E pour chaque valeur de $(1 - \gamma_{\perp})$. L'ensemble de ces points caractérise les solutions numériques de l'équation caractéristique (3.6). Comme nous l'avons précédemment remarqué, chaque solution doit satisfaire la condition $|\rho_1| = 1$. Ainsi, les courbes de dispersion des ondes de volume sont représentées en fonction des facteurs de phases $\Lambda_y = 1 - \cos(k_y a \sqrt{2})$ et de $\Lambda_z = 1 - \cos(k_z a)$.

Concernant la zone de dispersion des ondes de spin de surface, elle est définie par les racines du déterminant de l'équation (3.13) $\det(M_s) = 0$ avec la condition que $|\rho_1| < 1$. Ces racines caractérisent d'une part les amplitudes de spin de surface ayant la particularité de s'amortir exponentiellement vers l'intérieur du volume et d'autre part, elles décrivent les branches de dispersion des ondes de spin de surface. Il est à noter que l'existence de ces branches est liée intrinsèquement aux valeurs de ε_{\parallel} , ε_{\perp} et de Λ_z .

A partir de nos résultats numériques, les énergies de dispersion des ondes de spin de surface et de volume ont été calculées pour un ensemble de paramètres d'échange en supposant que le champ magnétique externe et celui d'anisotropie soient négligés. Et nous nous sommes intéressés à l'influence du facteur de phase Λ_z sur le spectre des ondes de spin. Ainsi, nous avons tenu compte de différentes configurations de géométries distinctes.

Dans un premier temps, nous avons considéré que la perturbation créée par la surface est quasiment négligeable pour les constantes de couplage (autrement dit les valeurs J_s et J sont identiques ($\varepsilon_{\parallel} = 1$)), cette configuration est dite "*surface libre*". De plus, le vecteur d'onde de l'onde de spin se propage parallèlement avec l'axe (Oz) qui correspond à $\Lambda_z = 0$ ($\cos(k_z a) = 1$). Dans cette configuration, les modes localisés de surface se produisent au dessous et au dessus du continuum de volume et ceci en fonction du paramètre ε_{\perp} .

CHAPITRE 3. ÉTUDE DES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES D'UN SYSTÈME FERROMAGNÉTIQUE

Pour $\varepsilon_{\perp} = \frac{1}{2}$, nous observons deux branches acoustiques dont l'une d'elles présente un point d'intersection avec le volume ("*Cut-off*") pour $\Lambda_y^{c2} \approx 0.56$ et pour $\varepsilon_{\perp} = 1$ une seule branche acoustique apparaît. Par ailleurs, dans l'intervalle $\varepsilon_{\perp} \in]1, 1.30[$, nous constatons l'inexistence d'onde de spin de surface quand nous tenons compte seulement des interactions d'échange aux premiers voisins. Toutefois, pour les valeurs $\varepsilon_{\perp} \geq 1.30$, nous distinguons deux séries de branches de types optique et acoustique. Nous remarquons aussi à la limite $\varepsilon_{\perp} = 1.30$, l'apparition d'un "*Cut-off*" optique à $\Lambda_y^{c1} \approx 0.38$. Lorsque $\varepsilon_{\perp} = 2$, nous observons un mode optique complet et un mode localisé à la limite de zone de Brillouin ; notons que ce dernier n'a pas de sens physique, il représente seulement une solution du déterminant de $\det(M_s) = 0$.

Dans un second temps, nous considérons que la perturbation apportée par la surface est non négligeable. En effet, les valeurs associées à ε_{\parallel} et ε_{\perp} jouent un rôle essentiel en ce qui concerne la localisation des modes optiques et acoustiques. Observons maintenant lorsque le vecteur d'onde k_z fait un angle de $(\frac{\pi}{3})$ puis de $(-\pi)$ suivant l'axe (OZ) qui correspond respectivement à $\Lambda_z = \frac{1}{2}$ et $\Lambda_z = 2$ (FIG.3.3 et FIG.3.4). Sur la Figure (3.3), nous obtenons simultanément une branche acoustique et une branche optique pour le couple de valeurs ($\varepsilon_{\parallel} = 0.5$, $\varepsilon_{\perp} = 1.5$). Pour les valeurs de couplage ($\varepsilon_{\parallel} = 0.5$, $\varepsilon_{\perp} = 1$) et ($\varepsilon_{\parallel} = 2$, $\varepsilon_{\perp} = 1.5$), il apparaît seulement des branches acoustiques dont l'une présente un "*Cut-off*" à $\Lambda_y^c = 0.56$. Concernant la Figure (3.4), nous obtenons le même résultat que dans les cas précédents sauf pour les valeurs $\varepsilon_{\parallel} = 2$ et $\varepsilon_{\perp} = 1$ où une branche optique est obtenue avec un "*Cut-off*" à $\Lambda_y^c = 0$ et un mode localisé au bord de zone de Brillouin.

3.2. ÉTUDE D'UNE SURFACE FERROMAGNÉTIQUE DANS LE PLAN (110)

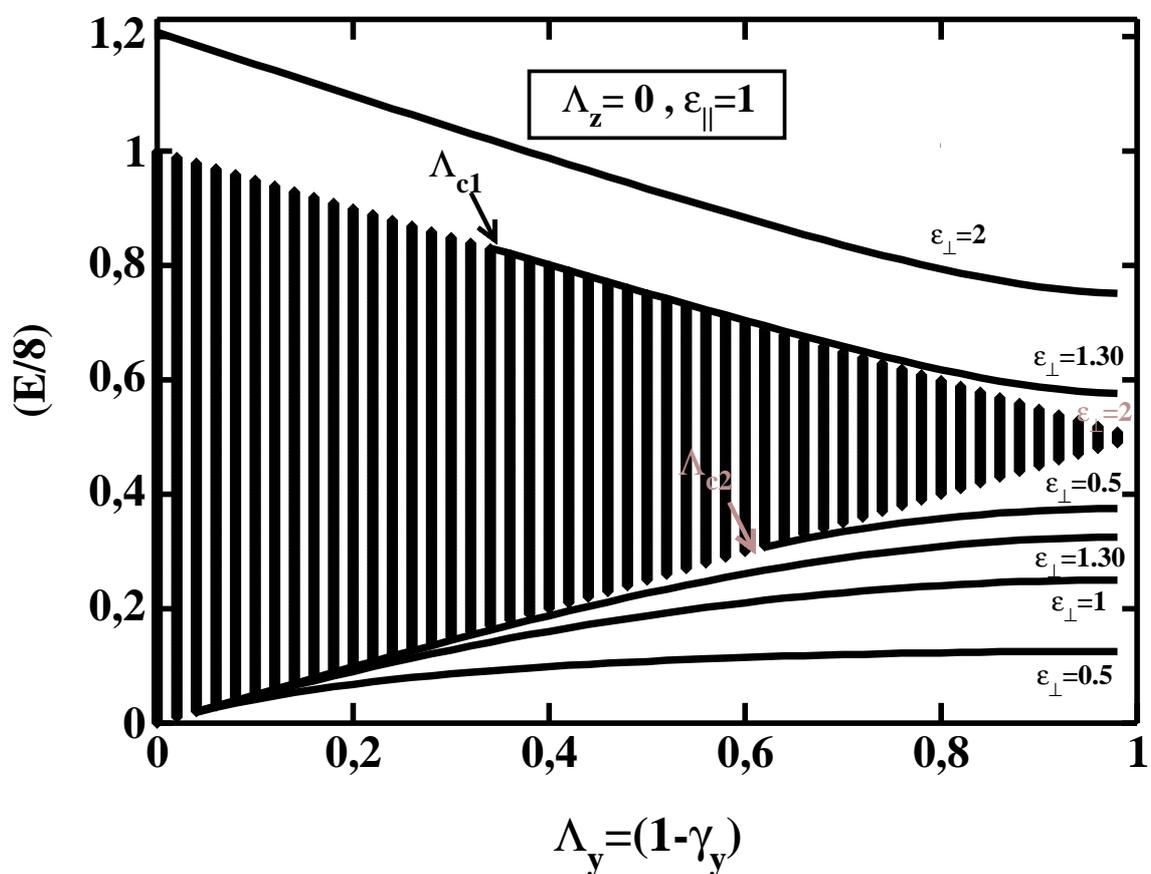


FIG. 3.2 – Évolution des modes localisés de volume et de surface pour un réseau ferromagnétique(110). L'énergie est représentée en fonction du paramètre $\Lambda_y = 1 - \gamma_{\perp} = 1 - \cos k_y \sqrt{2}a$ pour différentes valeurs de ϵ_{\perp} . Les paramètres utilisés sont $\Lambda_z = 1 - \cos k_z a = 0, \epsilon_{\parallel} = 1$.

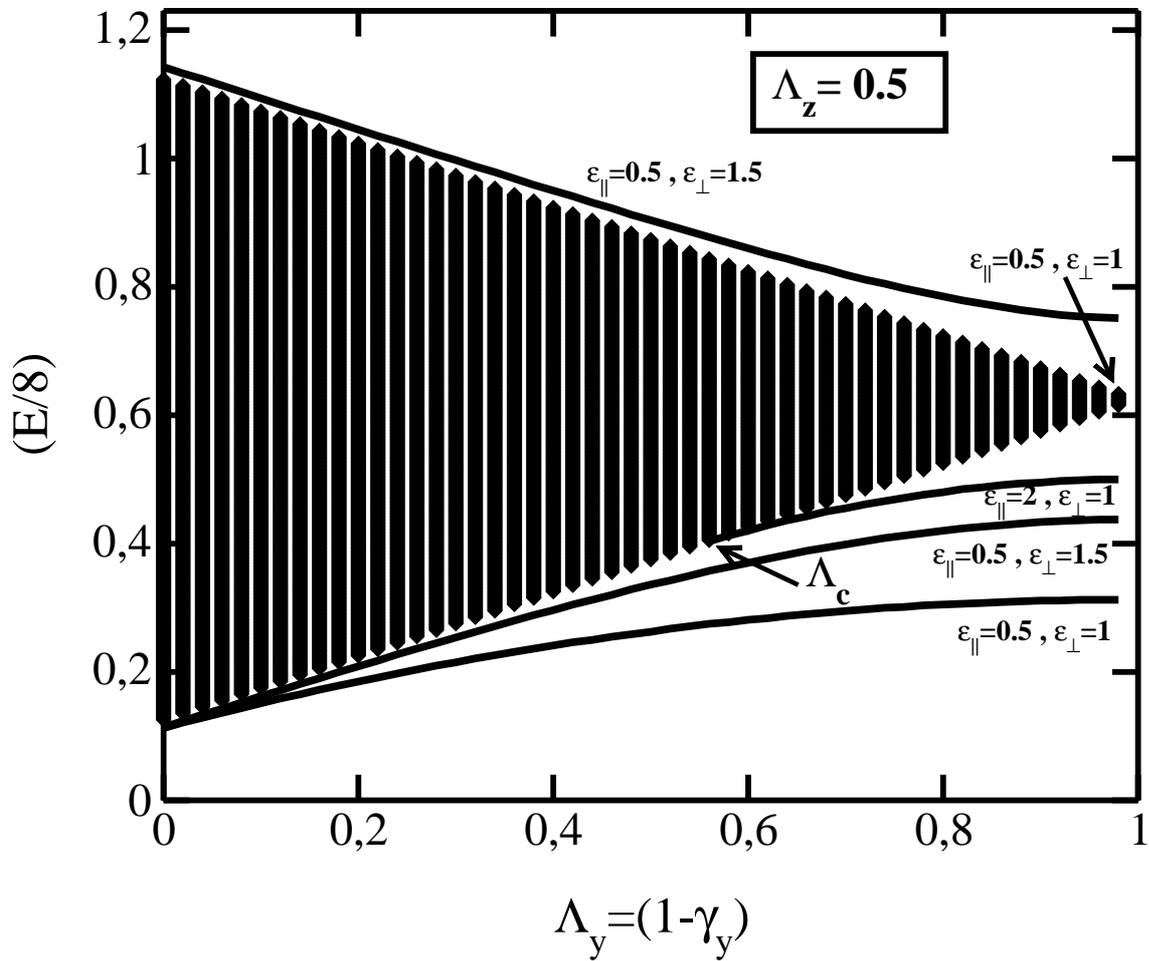


FIG. 3.3 – Évolution des modes localisés de volume et de surface pour un réseau ferromagnétique(110) selon l'axe $k_z = \frac{\pi}{3a} (\Lambda_z = \frac{1}{2})$, pour différentes valeurs de ϵ_{\perp} et $\epsilon_{||}$.

3.2. ÉTUDE D'UNE SURFACE FERROMAGNÉTIQUE DANS LE PLAN (110)

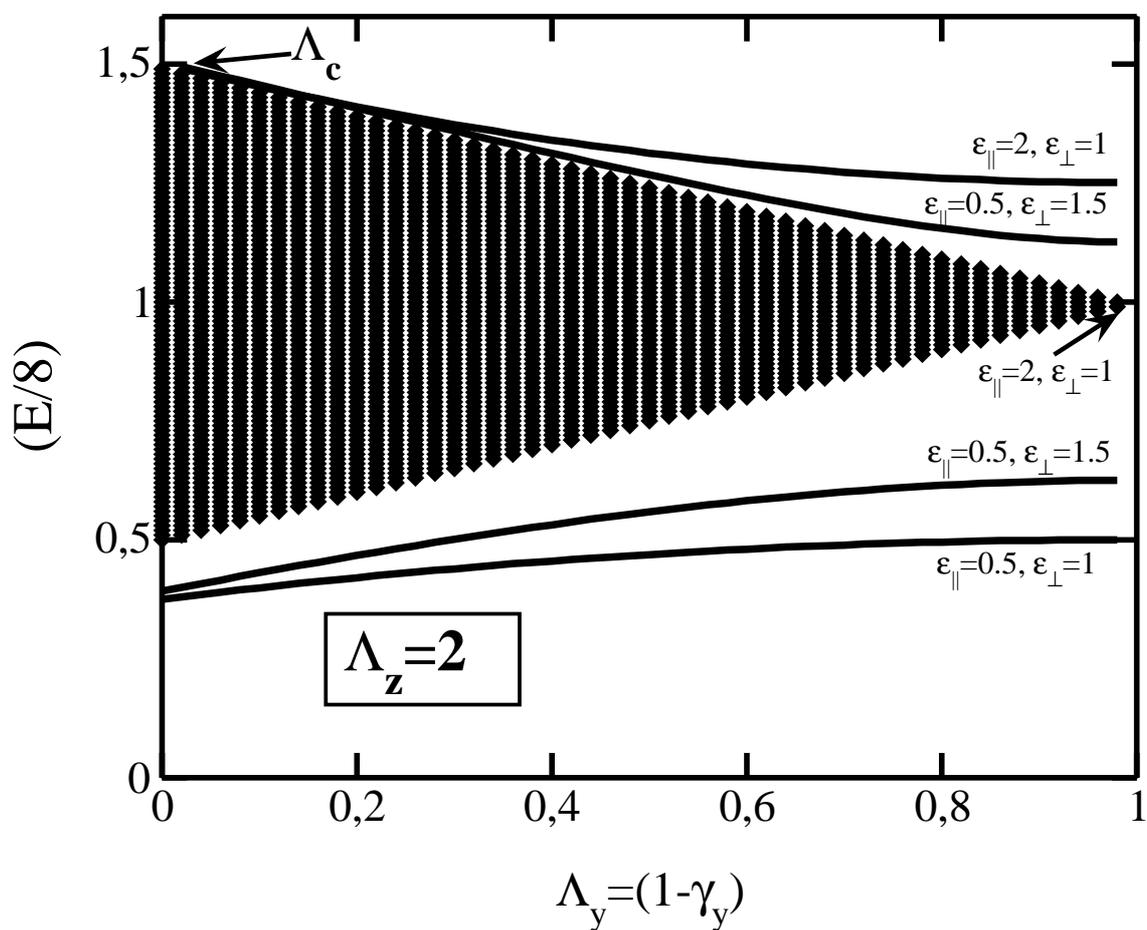


FIG. 3.4 – Évolution des modes localisés de volume et de surface pour un réseau ferromagnétique(110) selon l'axe $k_z = \frac{-\pi}{a} (\Lambda_z = 2)$, pour différentes valeurs de ϵ_{\perp} et $\epsilon_{||}$.

3.3 Étude d'une surface ferromagnétique en présence d'un plan de défauts

Dans cette section nous nous intéressons aux modes localisés de surface dans le cas d'un réseau cubique semi infini ferromagnétique présentant un plan de défaut. Ce dernier est obtenu en implantant successivement un plan de défauts à la troisième couche, à la cinquième couche puis à la dixième couche par rapport à la couche de surface. Ainsi, le comportement des excitations magnétiques est étudié par rapport à plusieurs paramètres : (i) couplage d'échange en surface et en volume, (ii) position du plan d'impuretés dans le volume, (iii) nature du défaut.

Nous étudions ce système à l'aide du modèle de Heisenberg en limitant les interactions d'échange aux premiers voisins et en tenant compte de la contribution de Zeeman à l'Hamiltonien. Nous utilisons un cristal cubique simple semi infini avec une surface (001) et ayant le même paramètre du réseau a . Dans le cristal, chaque spin S_i est couplé avec ses six premiers voisins par les interactions d'échange J_{ij} . Comme l'illustre la Figure (3.5).

Dans ce cas, L'Hamiltonien d'un tel système s'écrit :

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \mu_B g H_o \sum_i S_i^z \quad (3.14)$$

En fonction des opérateurs de spin $S_\alpha^\pm = S_\alpha^x \pm i S_\alpha^y$, il s'écrit sous la forme :

$$H = \sum_{(ij)} J_{ij} \left(S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right) - \mu_B g (H_o + H_{AN}) \sum_i S_i^z \quad (3.15)$$

En représentation d'Heisenberg, l'équation du mouvement de l'opérateur S_i^+ est donnée par :

$$i\hbar \frac{dS_i^+}{dt} = \langle S_i^z \rangle \sum_{(ij)} J_{ij} S_j^+ - \langle S_i^z \rangle \sum_{(ij)} J_{ij} S_j^+ + \mu_B g H_o \sum_i S_i^+ \quad (3.16)$$

3.3. ÉTUDE D'UNE SURFACE FERROMAGNÉTIQUE EN PRÉSENCE D'UN PLAN DE DÉFAUTS

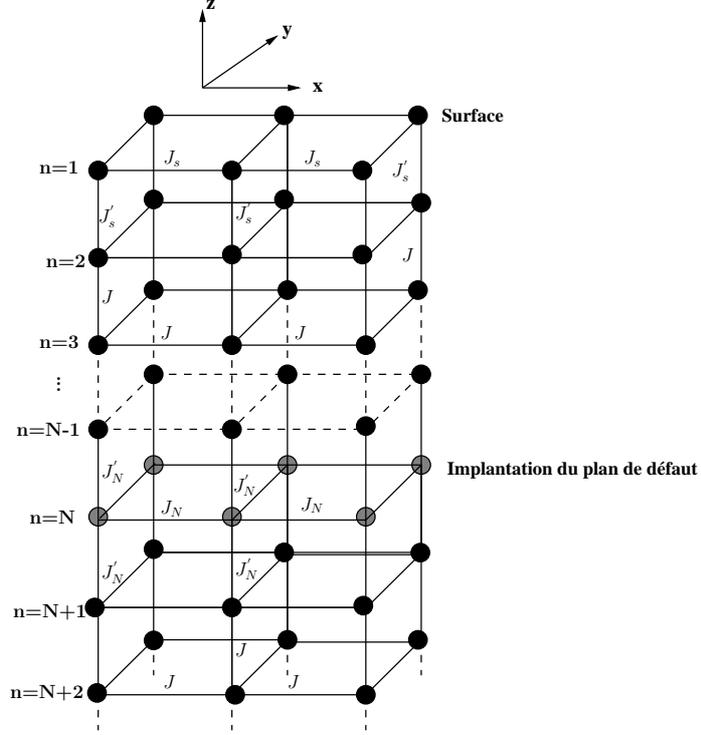


FIG. 3.5 – Représentation schématique d'un réseau cubique semi infini ferromagnétique présentant un plan de défaut.

Pour calculer l'expression de l'équation caractéristique des magnons de volume, nous devons d'abord utiliser la propriété d'invariance par translation dans le plan (OX, OY) ensuite nous introduisons l'opérateur de déviation de l'onde de spin α_k^+ qui est donné par son expression en fonction du vecteur d'onde $k_{//} = (k_x, k_y)$:

$$\alpha_{k_{//}}^+ = \sum_i S_i^+ \exp -ik_{//} \vec{r}_i \quad \text{et} \quad S_i^+ = \sum_{k_{//}} \alpha_{k_{//}}^+ \exp -ik_{//} \vec{r}_i \quad (3.17)$$

En introduisant l'expression (3.17) dans celle de (3.16), nous obtenons l'équation du mouvement :

$$i\hbar \frac{d\alpha_k^+}{dt} = z_{ij} J_{ij} \left[\langle S_i^z \rangle \gamma_k^{ij}(k) \alpha_{k_{//}}^+ (k_{//}) - \langle S_i^z \rangle \alpha_{k_{//}}^+ (k_{//}) \right] + \mu_B g H_o \alpha_{k_{//}}^+ \quad (3.18)$$

où $\gamma_k^{ij}(k) = \frac{1}{z_{\sigma\kappa}} \sum_{\sigma\kappa} \exp [i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r}_i)]$ représente le facteur de phase avec \vec{k} le vecteur d'onde de l'onde de spin et \vec{r}_i est le vecteur du site i dans l'espace usuel à trois dimensions.

A très basse température, l'équation du mouvement (3.18) peut être linéarisée en utilisant l'approximation de phase aléatoire RPA qui consiste à remplacer la valeur

moyenne des fluctuations du spin par sa valeur quantique $\langle S^z \rangle = S$. Sous forme matricielle, l'équation (3.18) prend donc la forme suivante :

$$\left[\hbar\omega - M_b(J_{ij}, S, \gamma_k^{ij}, H_o) \right] |\alpha_{k//}^+\rangle = |0\rangle \quad (3.19)$$

Compte tenu de la perte de symétrie de translation suivant la direction perpendiculaire à la surface (OZ), les modes évanescents sont décrits en introduisant les facteurs de phase temporel et spatial. Nous insistons sur le fait que l'introduction de ces facteurs n'est valable que si l'onde de spin propageante se déplace suivant la direction de brisure de symétrie (OZ). A cet effet, l'opérateur $\alpha_{i(j)}^+$ est défini par la relation :

$$\alpha_{i(j)}^+(r, t) = \alpha_{i(j)}^+(r, 0) + \alpha_{i(j)}^+(r) \rho_{i(j)} \exp(-i\omega t) \quad (3.20)$$

$\alpha_{i(j)}^+(r, 0)$ désigne la partie indépendante du temps selon l'axe de facile aimantation OZ . Et $\rho_{i(j)}$ est le facteur de phase spatial d'expression $\rho_{i(j)} = e^{ik_z a}$, où k_z est le vecteur d'onde de l'onde de spin dirigé selon la direction normale du plan surface et du plan d'impureté. Il caractérise les modes propageants lorsque sa valeur absolue est égale 1 ($|\rho| = 1$). Cette condition impose de prendre

$$\rho^{\pm 1}(E, k) = \exp(\pm ik_z a) \quad (3.21)$$

Les signes (+) et (-) représentent, respectivement, les ondes incidente et réfléchie. La relation (3.21) peut aussi s'écrire

$$\rho^{\pm 1}(E, k) = \rho(E, k) + \rho^{-1}(E, k) = 2 \cos(k_z a) \quad (3.22)$$

Cette équation (3.22) décrit la relation de dispersion des ondes de spin de volume selon la direction (a_z^*) du réseau réciproque, quand $k_z a$ varie dans l'intervalle $[0, \pi]$. En effet, en combinant l'expression (3.22) avec celle de γ_k^{ij} et en injectant la nouvelle formule γ_k^{ij} dans la matrice dynamique M_b , nous retrouvons le polynôme caractéristique des états de magnons de volume de degré 2 :

$$A_1 + A_1 \rho + A_3 \rho^2 = 0 \quad (3.23)$$

3.3. ÉTUDE D'UNE SURFACE FERROMAGNÉTIQUE EN PRÉSENCE D'UN PLAN DE DÉFAUTS

où les coefficients du polynôme sont donnés par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} A_1 &= A_3 = JS \\ A_2 &= \hbar\omega + 2JS(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - 6JS - \mu_B g H_o \end{aligned}$$

Le problème de la résolution de l'équation caractéristique (3.23) est donc réduit à trouver les solutions (ρ) en imposant la condition $|\rho| = 1$. Ces solutions correspondent aux états localisés de volume.

Pour calculer les modes localisés associés aussi bien à la surface qu'à l'impureté, nous devons alors définir une région intermédiaire communément appelée "*bulk-surface*". La largeur de cette dernière, dont le nombre de couches parallèles à la surface et au plan de défaut à considérer dépend essentiellement de la nature de l'interaction entre les spins du "*bulk*" et de l'impureté. Ainsi, elle est limitée dans le domaine ($N < n \leq N + 2$), comme l'illustre la Figure (3.5). De plus, le choix de ces plans ($n = N$ et $n = N + 2$) est adopté dans le but de sauvegarder les propriétés de translation décrites précédemment pour la surface. Contrairement à l'implantation d'une impureté isolé dans n'importe quelle position (x, y, z) du système infini. Dans ce cas, la réduction de symétrie s'effectue dans les trois directions de l'espace. Dans ce cas, un traitement mathématique différent est à envisager.

Par ailleurs, la région de volume, vu son caractère périodique, possède une symétrie de translation. Ceci nous permet d'introduire la transformation de Fourier bidimensionnelle de l'opérateur $\alpha_{i(j)}^+$ (3.20) en l'écrivant en fonction de l'amplitude de précession des ondes de spin

$$\begin{aligned} \alpha^+(r, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \exp(i\omega t) \alpha^+(r, \omega) \\ \alpha^+(r, \omega) &= \frac{1}{(2\pi)^2 v} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_{//} \exp(ik_{//} r_{//}) U_{n(r)}(k_{//}, \omega) \end{aligned} \quad (3.24)$$

Le procédé d'obtention de l'ensemble des modes évanescents dans la région de volume consiste à exprimer $U_{n(r)}$ dans l'ensemble des opérateurs de déviation de spin $\alpha_{\vec{k}}^+(\hbar\omega, k_{//})$ tel que :

$$U_{n(r)} = \sum_{k_{//}} \frac{\exp(ik_{//} r_{//})}{\hbar\omega} V(\hbar\omega, k_{//}, n) \alpha_{\vec{k}}^+(\hbar\omega, k_{//}) \quad (3.25)$$

où $\alpha_{\vec{k}}^+(\hbar\omega, k_{//})$ est l'opérateur de déviation de spin correspondant au mode localisé

CHAPITRE 3. ÉTUDE DES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES D'UN
SYSTÈME FERROMAGNÉTIQUE

de vecteur d'onde bidimensionnel $k_{//}$ et d'énergie $\hbar\omega$. $V(\hbar\omega, k_{//}, n)$ sont les composantes du vecteur propre de la matrice dynamique $M_b(\hbar\omega, J, S, \Lambda_k^{\sigma\tau}, H_o)$ (3.19). Rappelons que l'expression de $U_{n(r)}$ (3.25) est valable lorsque la précession du champ d'amplitude de spin $U_{n(r)}(k_{//}, \omega)$ s'effectue dans la région intermédiaire et suivant la direction normale à la surface.

Pour obtenir les équations régissant les amplitudes de précession des ondes de spin, il suffit d'insérer l'expression (3.25) dans (3.24) et en réinjectant le résultat dans l'équation du mouvement (3.18). Ces équations sont classées en trois catégories selon les différentes régions :

1. Domaine de plan de surface, $n = 1$ et $n = 2$.

$$\begin{aligned} \frac{E}{JS}U_1 &= -4\varepsilon_s(\gamma_{ij}^{\prime\prime}U_1 - U_1) - \varepsilon'_s(\gamma_{ij}^\perp U_2 - U_1) + \left(\frac{g\mu_B H_o}{JS}\right)U_1 \\ \frac{E}{JS}U_2 &= -4(\gamma_{ij}^{\prime\prime}U_2 - U_2) - \varepsilon'_s(\gamma_{ij}^\perp U_1 - U_2) - (\gamma_{ij}^\perp U_3 - U_2) + \left(\frac{g\mu_B H_o}{JS}\right)U_2 \end{aligned} \quad (3.26)$$

2. Domaine de plan de volume. Vu que la périodicité en volume est préservée, l'expression générale de ces équations est décrite par la relation récurrente :

$$\begin{aligned} \frac{E}{JS}U_n &= -4(\gamma_{ij}^{\prime\prime}U_n - U_n) - (\gamma_{ij}^\perp U_{n-1} - U_n) - (\gamma_{ij}^\perp U_{n+1} - U_n) \\ &\quad + \left(\frac{g\mu_B H_o}{JS}\right)U_n \end{aligned} \quad (3.27)$$

3. Domaine de plan de défauts, $n = N$.

$$\begin{aligned} \frac{E}{JS}U_N &= -4\theta\varepsilon_N(\gamma_{ij}^{\prime\prime}U_N - U_N) - \theta\varepsilon'_N(\gamma_{ij}^\perp U_{N-1} - U_N) - \theta\varepsilon_N(\gamma_{ij}^\perp U_{N+1} - U_N) \\ &\quad + \left(\frac{g\mu_B H_o}{JS}\right)U_N \end{aligned} \quad (3.28)$$

Il est plus approprié d'écrire ces équations (3.26-3.28) en utilisant la forme matricielle.

$$[M_n(E, \varepsilon_s, \varepsilon'_s, \varepsilon_N, \varepsilon'_N, \theta, \gamma_{ij}^{\prime\prime}, \gamma_{ij}^\perp, H_o)]|U_n\rangle = |0\rangle \quad (3.29)$$

avec

$$\begin{aligned} \varepsilon_s &= \frac{J_s}{J}; & \varepsilon'_s &= \frac{J'_s}{J}; & \varepsilon_N &= \frac{J_N}{J}; & \varepsilon'_N &= \frac{J'_N}{J}; \\ \theta &= \frac{S'}{S}; & \gamma_{ij}^\perp(k_{//}) &= 1; & \gamma_{ij}^{\prime\prime}(k_{//}) &= \frac{1}{2}(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \end{aligned}$$

3.3. ÉTUDE D'UNE SURFACE FERROMAGNÉTIQUE EN PRÉSENCE D'UN PLAN DE DÉFAUTS

où $|U_n\rangle$ est le vecteur colonne défini par ses composantes $|U_n\rangle = [U_1, \dots, U_N, \dots]^T$ et $M_{ml}^n(E, \varepsilon_s, \varepsilon'_s, \varepsilon_N, \varepsilon_s^N, \theta, H_o)$ représentent les éléments de matrice M^n de dimension infinie décrivant les fluctuations des amplitudes de ondes de spin pour chaque plan n .

Afin de décrire les solutions donnant les modes localisés associés à la surface et à l'impureté, il est nécessaire d'analyser l'évolution de l'amplitude du champ d'évanescence des fluctuations de spin dans la région intermédiaire (volume-surface). Ceci consistera alors à coupler les amplitudes du champ de fluctuation de spin de volume à celles des plans de surface et de l'impureté. En utilisant cette procédure, l'expression de l'amplitude U_n , pour un ensemble complet des modes propagateurs et évanescent ($n_e + n_p$), peut donc se mettre sous la forme :

$$U_n(\rho_\eta, \eta, i) = \sum_{\eta}^{n_e+n_p} R_\eta C(\rho_\eta, \eta, i) \rho^{n-N}(E, k_{//}, \eta) \quad (3.30)$$

R_η sont les coefficients de pondération qui caractérisent la contribution des différents modes au champ de précession des moments magnétiques de spin présent dans le volume. $C(\rho_\eta, \eta, i)$ représente la polarisation des vecteurs d'onde de spin, appelé cofacteur de la matrice dynamique (3.19), et vérifie la condition de normalisation.

$$\sum_{i=1}^{i=3} |C_i(\rho_\eta, \eta, i)|^2 = 1 \quad (1 \leq i \leq (n_e + n_p)) \quad (3.31)$$

Dans le cas d'un réseau ferromagnétique, l'application de l'équation (3.30) dans la région intermédiaire ($n \geq N$) permet d'obtenir la matrice de raccordement de dimension $(N + 4, N + 3)$.

$$\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ U_N \\ U_{N+1} \\ U_{N+2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & \dots & \vdots \\ 0 & \dots & \ddots & 0 & \vdots \\ 0 & \ddots & 0 & 1 & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & C(\rho) \\ 0 & \dots & 0 & \dots & C(\rho)\rho \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ U_N \\ R_1 \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

Pour décrire les modes localisés de surface et de l'impureté, nous réalisons le produit de la matrice dynamique $M_n(N+3, N+4)$ (3.29) et de la matrice de raccordement $M_r(N+4, N+3)$ (3.32), il en résulte une matrice carrée $M_s(N+3, N+3)$ ¹.

$$[M_s]|V\rangle = |0\rangle \quad \text{avec } |V\rangle^T = (U_1, U_2, \dots, U_{N-1}, R_1) \quad (3.33)$$

La zone des états localisés associés à la surface et aux impuretés, définie dans la région de l'espace $(E, k_{//})$, est déterminée par les racines ρ qui annulent le déterminant de la matrice M_s mais avec la condition $|\rho| < 1$.

3.3.1 Discussion et analyse des résultats

Les modes localisés de volume et ceux de surface se déduisent, respectivement, de la résolution numérique des équations non linéaires de (3.23) et (3.33). Les solutions de ces équations donnent lieu d'une part à des modes localisés d'énergie E pour différentes valeurs de $k_{//}$, et d'autre part à des courbes de dispersion des ondes de volume et de surface en présence d'un plan de défauts.

Les solutions existantes dépendent des valeurs du spin dans le site, de la position du plan d'impureté par rapport à la surface et des valeurs des paramètres $\varepsilon_s, \varepsilon'_s, \varepsilon_N$ et ε'_N . Ces derniers paramètres se présentant par couple $(\varepsilon_s, \varepsilon'_s)$ et $(\varepsilon_N, \varepsilon'_N)$ correspondent par rapport au volume, respectivement, à la variation relative d'échange de spin de surface et à l'impureté. C'est à partir de ces paramètres là que s'écrivent les éléments de matrice (3.33). D'où la dépendance des solutions de l'équation (3.33) vis à vis des paramètres de surface et d'impureté. Ceci implique l'interférence entre les modes localisés de surface et ceux de l'impureté. C'est pourquoi, il est nécessaire d'analyser l'évolution des spectres de surface, de l'impureté et de volume.

Notons que les branches d'onde de surface et d'impureté, dont la disposition peut être au dessus et au dessous du spectre de volume, découlent de l'équation (3.33) qui donne les racines ρ en fonction de E et $k_{//}$. Précisons que dans certains cas, ces branches n'apparaissent pas du tout dans toute la zone de Brillouin ($0 \leq k_{//} \leq \frac{\pi}{2}$), alors qu'elles peuvent apparaître pour une valeur supérieure à une valeur critique k_c . Cela revient à dire que les branches des ondes de spin de surface et d'impureté se présentant séparément ou conjointement ont toutes un point d'intersection avec le volume ("Cut-off").

¹Nous décrivons dans l'Annexe A les éléments de matrices $M_s(N+3, N+3)$ lorsque le défaut de plan est situé la N ième couche à partir de la surface ($N=3, N=5$ et $N=10$).

3.3. ÉTUDE D'UNE SURFACE FERROMAGNÉTIQUE EN PRÉSENCE D'UN PLAN DE DÉFAUTS

Autrement dit, elles se trouvent dans un état dégénéré $\frac{E_B}{J_S}(k_{//}^c) = \frac{E_{s(N)}}{J_S}(k_{//}^c)$.

Pour bien distinguer les propriétés magnétiques des ondes de spin de surface en présence d'un plan d'impureté, il convient de traiter d'abord le cas d'un système ferromagnétique pur, ensuite celui présentant un plan de défauts.

Par exemple, les Figures (3.6) et (3.7) montrent l'évolution des états localisés sur l'axe $k_y = 0$ de la zone de Brillouin ($0 \leq k_x \leq \frac{\pi}{2}$) pour différentes valeurs ε_s et ε'_s . Les courbes de dispersion des ondes de spin de surface montrent l'existence de plus d'une branche d'onde de surface pour des valeurs données de ε_s et ε'_s . De plus, deux "Cut-off" optiques ont été observés à $k_{//}^{c1} \approx 1.7$ et à $k_{//}^{c2} \approx 2.3$ correspondant, respectivement, aux énergies $\frac{E_B}{J_S}(k_{//}^{c1}) = 8.53$ et $\frac{E_B}{J_S}(k_{//}^{c2}) = 10.53$ (Figure 3.6).

La Figure 3.7 illustre les modes localisés de surface et ceux de volume lorsque la valeur de l'interaction d'échange surface-volume (J_{\perp}) est supérieure à celle du volume (J). Par exemple, il se produit deux branches optique et acoustique pour le couple de valeur ($\varepsilon_s = 0.5, \varepsilon'_s = 2.5$). Tout en soulignant que la plupart des branches optiques sont dans un état dégénéré à $k_{//} \rightarrow 0$ d'énergie $\frac{E_s}{J_S}(k_{//} \rightarrow 0) \approx 6$ et ne présentent pas de "Cut-off" Figure (3.7).

Quant à l'étude d'un système ferromagnétique présentant un plan de défauts, nous suggérons d'examiner l'influence des interactions d'échanges dus au défaut de plan sur l'existence de modes localisés. A cet effet, nous représentons les résultats sur les Figures 3.9, 3.11 et 3.12 où nous distinguons trois cas suivants :

Plan d'impureté situé sur la troisième couche à partir de la surface ($N = 3$).

Pour différencier les modes localisés de surface ainsi que les modes de défaut plan, nous supposons que les valeurs des interactions dues à l'impureté, comme pour les valeurs de spin $\theta = \frac{S_N}{S} = 1$, sont égales à celles du volume ($\frac{J_N}{J} = \frac{J'_N}{J} = 1$). Sur l'exemple la Figure 3.8, nous avons représenté le spectre des modes localisés pour $\varepsilon_s = 4, \varepsilon'_s = 1.25, \varepsilon_N = 1, \varepsilon'_N = 1$ et $\theta = 1$. Nous obtenons seulement les états de volume et une branche optique due à la surface (O_3). Or, en tenant compte de l'influence du plan d'impureté, les résultats seront différents du cas précédant (FIG 3.9). En effet, pour un jeu donné de paramètres ($\varepsilon_s = 4, \varepsilon'_s = 1.25, \varepsilon_N = 4, \varepsilon'_N = 6, \theta = 3$), nous observons : d'une part un décalage de la branche optique (O_3) due à la surface, et d'autre part, deux branches optiques (O_1, O_2) dues à l'impureté dont l'une d'elle présente un "Cut-off" à $k_{//} = k_{//}^c = 1.11$. En outre, pour les valeurs de longueurs d'onde $k_{//} \geq 2.22$, nous constatons un effet de répulsion entre les modes de surface et ceux de l'impureté, appelé "effet Crossover".

CHAPITRE 3. ÉTUDE DES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES D'UN SYSTÈME FERROMAGNÉTIQUE

Plan d'impureté situé sur la cinquième couche à partir de la surface ($N = 5$).

Comme dans le cas précédent ($N=3$), pour distinguer les modes de surface et les modes d'impureté, nous supposons en premier lieu que le système est dépourvu du plan d'impureté. Le spectre des modes localisés représente les paramètres $\varepsilon_s = 4$, $\varepsilon'_s = 2$, $\varepsilon_N = 1$, $\varepsilon'_N = 1$, $\theta = 1$ (FIG 3.10) où il apparaît seulement une branche optique (O_3). En deuxième lieu, nous examinons la perturbation apportée aux excitations magnétiques par la présence d'un plan de défauts. Les résultats obtenus sont représentés sur la Figure 3.11. Pour $\varepsilon_s = 4$, $\varepsilon'_s = 2$, $\varepsilon_N = 7$, $\varepsilon'_N = 4$, $\theta = 3$, il résulte quatre branches optiques (O_1, O_2, O_3, O_4), trois d'entre elles (O_2, O_3, O_4) apparaissent dans la majeure partie de la zone de Brillouin tandis que la branche optique (O_1) présente un "Cut-off" à $k_{//}a = 1.6$ d'énergie $\frac{E_s}{J_S} = 11.28$. Comme nous l'avons précédemment remarqué, la présence du plan de défauts provoque la translation de la branche optique (O_3) due à la surface et induit *l'effet Crossover* du à la répulsion des modes de surface et des modes de l'impureté. Cet effet se produit approximativement à $k_{//}a = 0.8$, et il est très prononcé dans l'intervalle de longueur d'onde ($0.46 \leq k_{//}a \leq 1.13$).

Plan d'impureté situé sur la dixième couche à partir de la surface ($N = 10$).

Nous présentons ici le spectre des modes localisés obtenu pour des paramètres suivants : $\varepsilon_s = 0.5$, $\varepsilon'_s = 1$, $\varepsilon_N = 5$, $\varepsilon'_N = 1$, $\theta = 1$ (FIG 3.12). A partir de ces paramètres, nous avons aussi considéré que les interactions d'échange entre la couche de surface et la couche adjacente sont réduites de manière analogue au plan de défauts par rapport à leurs valeurs en volume c'est à dire : $\frac{J'_s}{J} = \frac{J'_N}{J} = 1$, la valeur du spin du plan de défaut est égale à celle du volume $\theta = \frac{S_N}{S} = 1$ et le plan d'impureté est implanté suffisamment loin de la couche de surface.

Sur la Figure 3.12, nous montrons un mode optique dû au plan de défaut et un mode acoustique dû au plan de surface. Ces modes entrent en résonance avec les états de la bande de volume. Autrement dit, les branches optique et acoustique présentent, respectivement, deux "Cut-off" à $k_{c1} = 0.43$ et à $k_{c2} = 0.91$ d'énergies $\frac{E_s}{J_S} = 9.25$ et $\frac{E_s}{J_S} = 5.62$. Nous remarquons aussi qu'aucune branche d'onde de surface n'apparaît à l'origine de la zone de Brillouin.

Au regard de ces résultats, les modes d'impureté dépendent de manière intrinsèque des valeurs des interactions d'échange, des valeurs de spin (S et S') et de la distance du plan de défaut par rapport à celui de la surface. La prise en compte de ces paramètres induit une apparition de *l'effet Crossover* quand le plan d'impureté est proche de celui de la surface.

3.3. ÉTUDE D'UNE SURFACE FERROMAGNÉTIQUE EN PRÉSENCE D'UN PLAN DE DÉFAUTS

Par ailleurs, l'application du champ magnétique extérieur H_o entraîne une simple translation du spectre des ondes de spin ie les excitations magnétiques du spin sont séparés du fondamental par un gap d'énergie ΔE [50]. Par exemple, sur les Figures (3.8 - 3.12), ce gap d'énergie vaut $\Delta E = 5JS$.

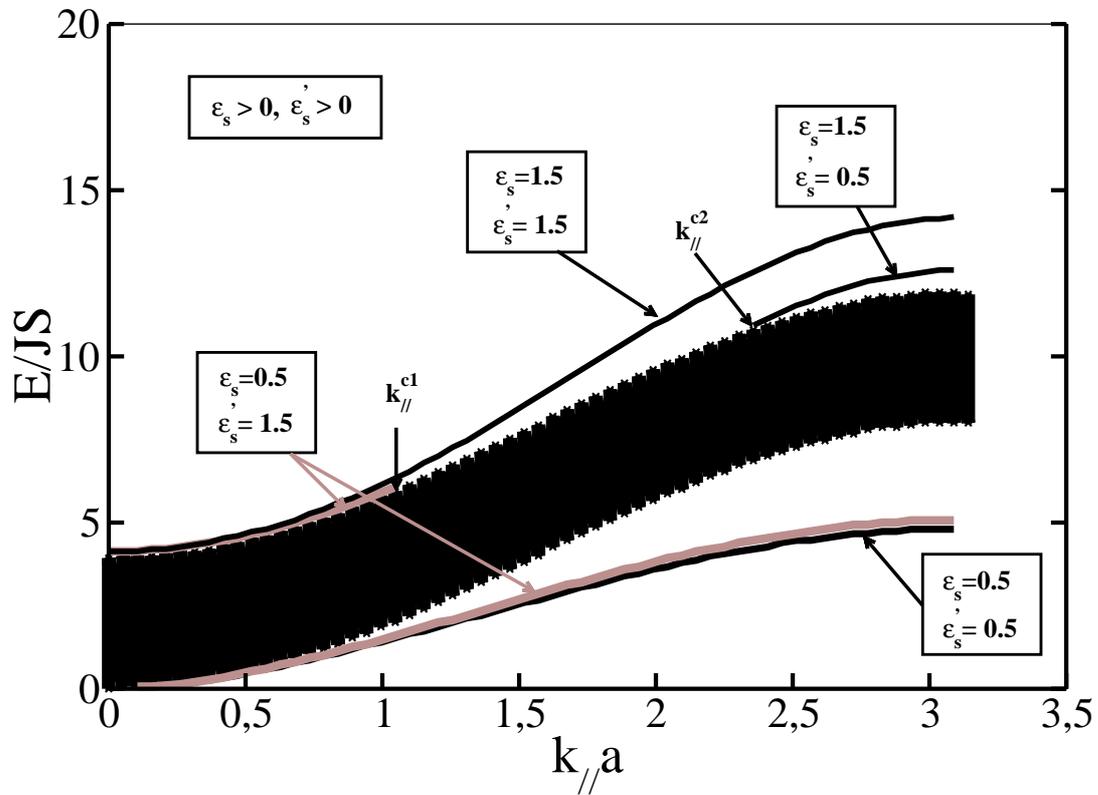


FIG. 3.6 – Ondes de spin optiques et acoustique pour un réseau cubique ferromagnétique pur, en fonction de ϵ_s et ϵ'_s . L'énergie est représentée en fonction du vecteur d'onde $k_{//} = (k_x, 0)$. Les lignes continues correspondent aux courbes de dispersion des magnons de surface et la bande pleine représente les états de volume.

3.3. ÉTUDE D'UNE SURFACE FERROMAGNÉTIQUE EN PRÉSENCE D'UN PLAN DE DÉFAUTS

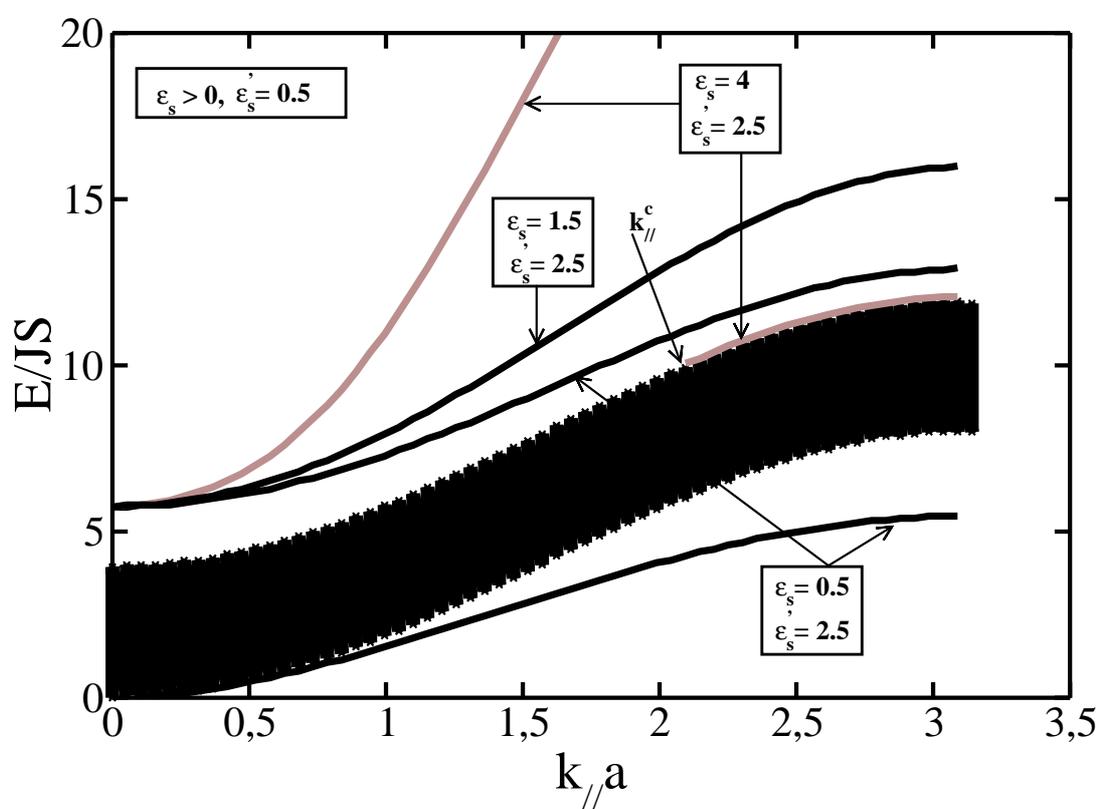


FIG. 3.7 – Spectre des ondes de spin de surface et de volume pour différentes valeurs de ϵ_s et ϵ'_s .

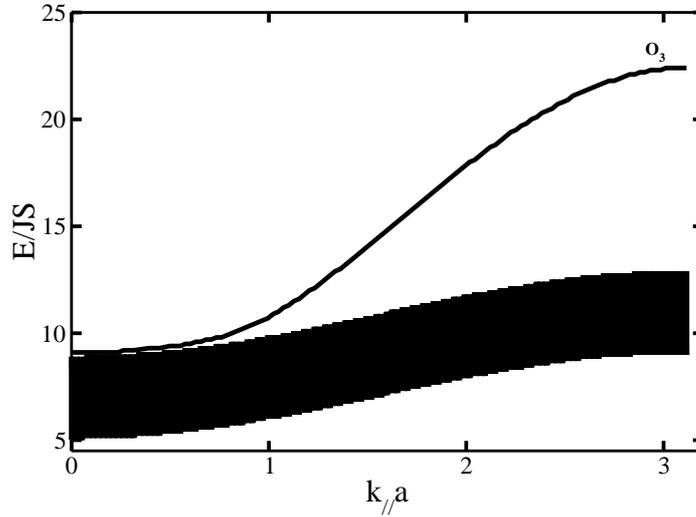


FIG. 3.8 – Magnons de volume (bande pleine) et de surface (ligne continue) pour un réseau ferromagnétique pur. Les paramètres utilisés sont : $\varepsilon_s = 4$, $\varepsilon'_s = 1.25$, $\varepsilon_N = 1$, $\varepsilon'_N = 1$, $\theta = 1$, $\frac{g\mu_B H_0}{JS} = 5$.

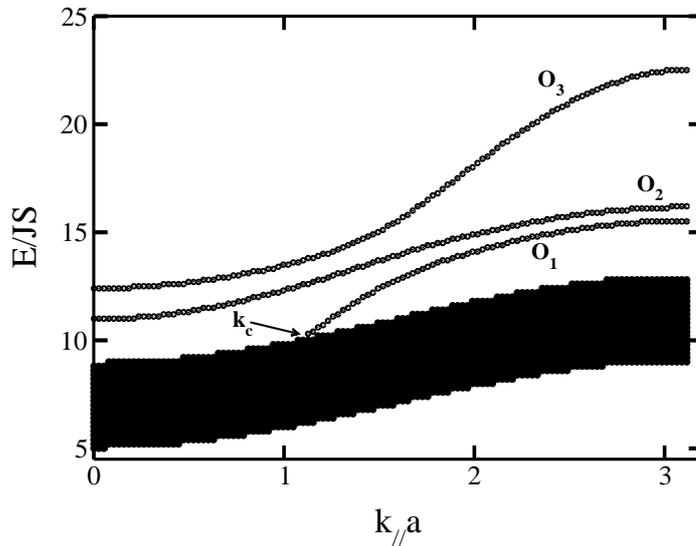


FIG. 3.9 – Modes de dispersion de volume et de surface pour un réseau ferromagnétique présentant un plan de défaut selon l'axe $k_{//} = (k_x, 0)$ de la zone de Brillouin, le plan défaut localisé à $N=3$. Les paramètres utilisés sont : $\varepsilon_s = 4$, $\varepsilon'_s = 1.25$, $\varepsilon_N = 4$, $\varepsilon'_N = 6$, $\theta = 3$, $\frac{g\mu_B H_0}{JS} = 5$.

3.3. ÉTUDE D'UNE SURFACE FERROMAGNÉTIQUE EN PRÉSENCE D'UN PLAN DE DÉFAUTS

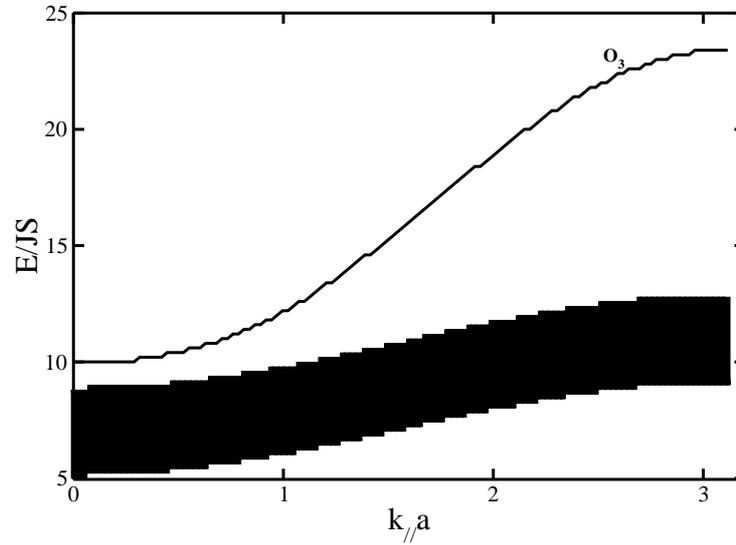


FIG. 3.10 – États localisés de volume et de surface pour un réseau ferromagnétique pur. Les paramètres utilisés sont : $\varepsilon_s = 4$, $\varepsilon'_s = 2$, $\varepsilon_N = 1$, $\varepsilon'_N = 1$, $\theta = 1$, $\frac{g\mu_B H_0}{JS} = 5$.

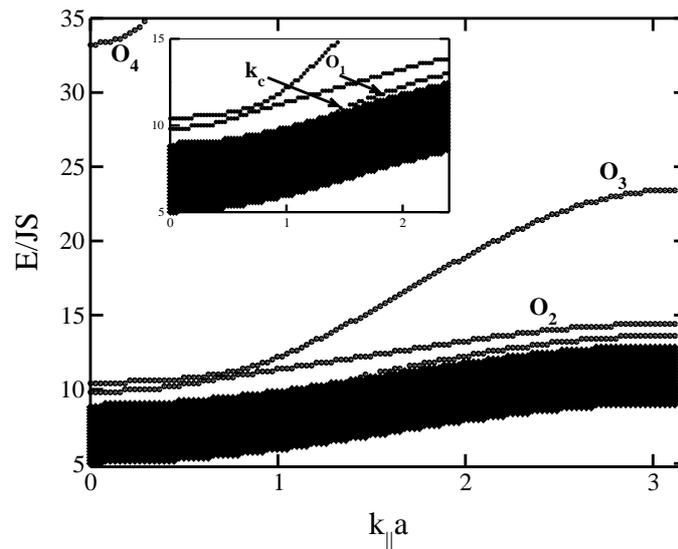


FIG. 3.11 – Modes de dispersion de volume et de surface pour un réseau ferromagnétique présentant un plan de défaut selon l'axe $k_{\parallel} = (k_x, 0)$ de la zone de Brillouin, le plan défaut localisé à $N=5$. Les paramètres utilisés sont : $\varepsilon_s = 4$, $\varepsilon'_s = 2$, $\varepsilon_N = 7$, $\varepsilon'_N = 4$, $\theta = 3$, $\frac{g\mu_B H_0}{JS} = 5$.

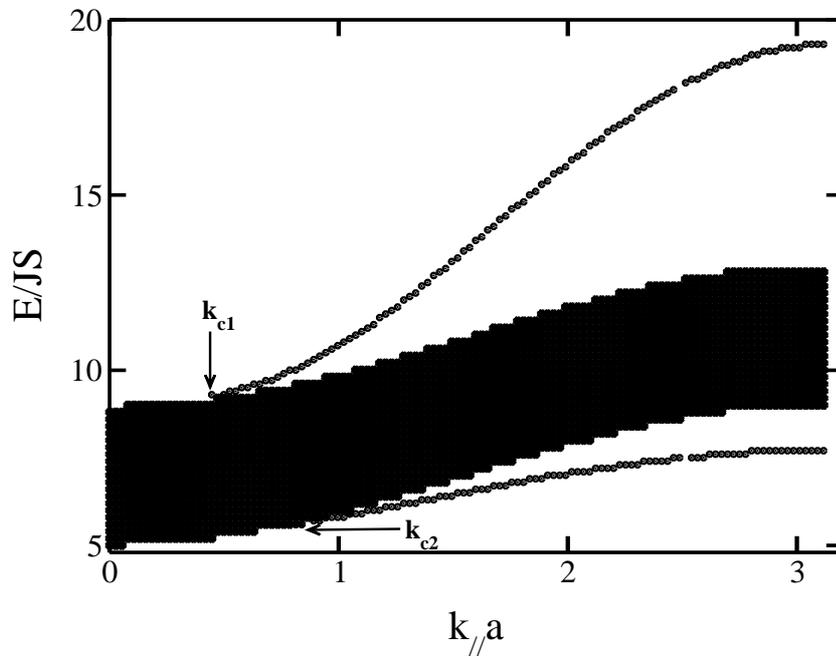


FIG. 3.12 – Modes de dispersion de volume et de surface pour un réseau ferromagnétique présentant un plan de défaut selon l'axe $k_{//} = (k_x, 0)$ de la zone de Brillouin, le plan défaut localisé à $N=10$. Les paramètres utilisés sont : $\varepsilon_s = 0.5$, $\varepsilon'_s = 1$, $\varepsilon_N = 3$, $\varepsilon'_N = 1$, $\theta = 1$, $\frac{g\mu_B H_0}{JS} = 5$.

3.4 Conclusion du chapitre

En conclusion, la présence d'une surface et des impuretés créent une perturbation en provoquant une brisure de symétrie. Cette réduction de symétrie altère peu les effets de volume, par contre elle affecte énormément les phénomènes de surface (plan d'impureté). Pour mettre en évidence les effets de cette brisure de symétrie dus à la surface et au plan de défauts, nous avons scindé l'étude des ondes de spin d'un système ferromagnétique semi infini dans deux directions. Dans la première, nous nous sommes focalisés sur l'étude des modes localisés d'un système cubique semi infini ferromagnétique dont la surface est orientée selon la direction (110). La seconde partie a pour but d'analyser simultanément les modes localisés associés à la surface et au plan de défauts.

En utilisant l'approximation de phase aléatoire (*RPA*) et en partant de l'équation du mouvement de spin découlant de la relation de commutation de Heisenberg [51, 52], nous avons obtenu l'expression de l'équation séculaire des magnons de volume à partir de laquelle nous avons représenté le spectre des ondes de spin de volume. En outre, l'application de notre formalisme mathématique nous a permis d'aboutir à l'équation matricielle M_s (3.33) et sa résolution numérique conduit à la détermination des fréquences des états localisés au voisinage du plan de défaut, et également en surface.

Les résultats ont montré, en général, que le spectre des ondes de spin subit des modifications avec l'apparition des modes de surface et des modes d'impureté (optique et acoustique). En fait, en partant d'une surface d'orientation (110) nous avons montré qu'il est possible d'avoir simultanément un mode optique et un mode acoustique. Aussi, nous avons démontré le rôle des interactions d'échange ($\varepsilon_{//}, \varepsilon_{\perp}$) à la surface. Nous signalons que nos résultats [47] sont en bon accord avec ceux rapportés dans la littérature [35].

Par ailleurs, dans le cas d'implantation de plan défaut, les résultats indiquent que les modes localisés sont sensibles à l'effet du couplage d'échange et à la position du plan d'impureté par rapport à celui de la surface. De plus, nous avons constaté que la présence d'un plan de défaut influe énormément sur le spectre des modes localisés. En effet, nous avons remarqué, dans les situations physiques que nous avons abordées, un effet de répulsion entre les ondes de spin de surface et celles de l'impureté. D'autre part, l'application du champ magnétique extérieur entraîne une simple translation des courbes de dispersion sans induire de modification sur la nature des modes localisés.

Le développement croissant de techniques d'élaboration de couches magnétiques minces rend possible la réalisation d'échantillon avec l'incorporation de couches d'impureté. Sachant aussi que plusieurs procédés expérimentaux ont été adaptés pour l'étude des propriétés magnétiques des films minces ; à savoir : la diffusion de Brillouin [53], la méthode magnéto-optique [54], Diffraction d'électrons de faible énergie polarisés en spin (SPLEED) [55]. Par exemple, diverses techniques expérimentales utilisées pour élaborer des structures magnétique composées de deux couches de fer (*Fe*) séparées par une fine couche de chrome (*Cr*) [56–60].

Avec les techniques modernes de réalisation des couches magnétiques minces, il est possible de créer des structures magnétiques multicouches présentant des plans d'impuretés, comme cela est présenté dans notre analyse théorique. Toutefois, pour une bonne comparaison avec les résultats obtenus il est plus approprié de réaliser des films minces de type ferromagnétique-Heisenberg (EuO, EuS). Compte tenu de l'accord obtenu avec la méthode des fonctions de Green [44], nous pouvons considérer que notre formalisme mathématique est une méthode qui a démontré son efficacité dans l'étude des ondes de spin d'un système ferromagnétique présentant un plan de défauts [48].

Chapitre 4

Étude des excitations magnétiques d'un système antiferromagnétique

4.1 Introduction

Depuis plusieurs décennies, de nombreux travaux expérimentaux et théoriques ont été dévolus à l'étude des propriétés magnétiques dans des systèmes de basse dimension [61–64]. En effet, les propriétés magnétiques d'un atome localisé en surface ou à l'interface sont évidemment différentes de celles d'un atome localisé en volume d'où l'apparition de phénomènes physiques intéressants [65, 66]. La compréhension et la maîtrise des propriétés magnétiques de surface sont essentielles pour le développement du stockage magnétique à ultra haute densité et des capteurs magnétiques basés sur la technologie des couches minces.

De nombreuses techniques expérimentales ont été utilisées durant plusieurs années à l'effet d'étudier les propriétés des ondes de spin de grandes longueurs d'ondes près de la surface [67, 68]. Parmi celles-ci nous pouvons citer la diffusion inélastique de la lumière et la résonance des ondes de spin. Il a été récemment montré que l'utilisation de la spectroscopie de perte d'énergie d'électrons à spin polarisé (SPEELS) permet de mesurer la dispersion des ondes de spin de surface à la limite de la zone de Brillouin dans le cas des films minces ferromagnétiques [69–71].

Du point de vue théorique, plusieurs auteurs ont pu parvenir à mettre en œuvre des formalismes mathématiques permettant de décrire d'une manière très efficace la théorie des ondes de spin de surface dans des systèmes ferromagnétique et antiferromagnétique semi infini [35] [72–74]. De plus, pour étudier les excitations magnétiques

de surface, les méthodes de calcul qui sont utilisées sont basées sur les conditions aux limites périodiques semblables aux méthodes de calculs décrites sur les phonons [75–77].

Ainsi, l'absence de symétrie de translation dans la direction normale à la surface rend impossible l'application de ces conditions. Par conséquent, la brisure de symétrie suivant cette direction nous oblige à formaliser une autre approche d'étude théorique.

A cet effet, les calculs des excitations localisées associées aux surface sont aujourd'hui développés par plusieurs méthodes, telles que la méthode des fonctions de Green [78], la méthode de Monte-Carlo [79], la diagonalisation exacte [80] et la méthode de raccordement [81].

Ainsi, la méthode de raccordement citée dans le chapitre 3 est l'approche utilisée à l'étude théorique des excitations magnétiques en surface pour des systèmes tridimensionnels antiferromagnétiques. L'avantage de ce formalisme réside dans la possibilité d'analyser séparément la propagation et l'évanescence des champs de fluctuation de spin [82]. De plus, ces champs ont la particularité d'être indépendants de la structure de la surface. Néanmoins, ils montrent une forte dépendance de l'orientation cristallographique de la surface et des interactions de couplage entre les sites des sous réseaux.

Par ailleurs, pour décrire les interactions magnétiques, nous avons exprimé le couplage de spin par un Hamiltonien de Heisenberg en limitant les interactions d'échange entre premiers voisins, en négligeant les contributions électroniques ainsi que les phénomènes de relaxation et/ou de reconstruction de surface. De plus, l'Hamiltonien de Heisenberg exprimé en fonction des opérateurs de spin localisés présente l'avantage de procéder à la détermination de l'ensemble des modes de fluctuations de spin. D'autre part, la propagation et l'évanescence de ces derniers sont décrites en fonction des champs de déplacement d'ondes de spin dans des directions normales à la surface.

Il est important de souligner que les modes de fluctuations de spin sont obtenus à partir des équations du mouvement de volume et de surface en appliquant la "random phase approximation" (RPA). Cette approximation nous permet d'analyser qualitativement la nature des modes et d'observer la réponse des branches d'énergie à la variation des facteurs de structure et des paramètres d'échange se produisant à la surface. Les résultats sont ensuite utilisés pour calculer les modes localisés des fluctuations de spin liées à la surface.

4.1. INTRODUCTION

Des exemples numériques des modes localisés sont illustrés pour montrer les divers effets d'interaction entre les modes de volume et ceux localisés en surface.

Le propos de ce chapitre sera donc dans un premier temps d'étudier l'influence de l'orientation cristallographique de la surface sur les modes localisés. En effet, le calcul des magnons localisés ont été effectués pour les surfaces d'orientation (100) et (110).

Toutefois, les effets des interactions d'échange sur l'existence et l'évolution des ondes de spin peuvent se montrer décisives dans le choix des plans de surface (100) et (110) [83] [84]. D'autre part, le calcul des énergies des ondes de spin de surface est limité jusqu'à présent à un Hamiltonien présentant seulement des interactions d'échange de type Heisenberg. Une autre étape de calcul consistera à introduire un autre formalisme de Heisenberg qui permet d'introduire d'autres contributions en plus de celles de l'échange ; à savoir : l'échange biquadratique et l'anisotropie uniaxiale. Nous décrirons les effets produits par ces contributions sur la dispersion des modes localisés.

4.2 Étude d'une surface antiferromagnétique dans les plans (100) et (110)

4.2.1 Énergies des ondes de spin de surface (100)

L'objectif de cette étude est de montrer l'influence des interactions d'échange et de l'orientation cristallographique de la surface sur les excitations magnétiques. Pour cela, le modèle adopté pour décrire le cristal antiferromagnétique est un cristal cubique semi infini dans laquelle tous les plus proches voisins ont des spins antiparallèles. De plus, il est supposé que ce cristal a la particularité d'avoir une structure mono-domaine et mono-cristallin. En outre, nous considérons que ce cristal est infini selon les directions (y, z) et sa surface est orthogonale à la direction (x) .

Par ailleurs, nous admettons que chaque spin est localisé par son vecteur de position $\vec{r}(u, v, w) = u\vec{a}_x + v\vec{a}_y + w\vec{a}_z$, où les vecteurs $(\vec{a}_x, \vec{a}_y, \vec{a}_z)$ définissent la maille magnétique primitive et leurs modules représentent la constante du réseau $a_x = a_y = a_z = a$. D'autre part, les vecteurs (\vec{a}_y, \vec{a}_z) caractérisent le réseau de surface. Les plans atomiques parallèles à la surface sont numérotés par ordre croissant autrement dit la surface correspond au premier plan $n = 1$. Comme l'illustre la figure (FIG.4.1).

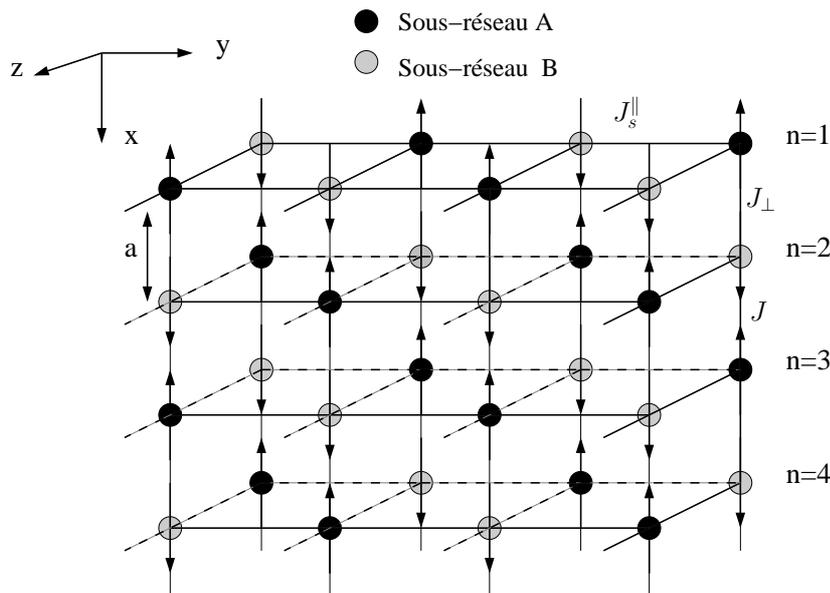


FIG. 4.1 – Représentation schématique du modèle d'un réseau cubique antiferromagnétique(100).

4.2. ÉTUDE D'UNE SURFACE ANTIFERROMAGNÉTIQUE DANS LES PLANS (100) ET (110)

En somme, l'Hamiltonien d'un tel système comportant un terme Zeeman et un terme d'échange isotrope d'Heisenberg s'écrit :

$$H = \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - g\mu_B (H_o + H_{an}^A) \sum_i S_i^z - g\mu_B (H_o + H_{an}^B) \sum_j S_j^z \quad (4.1)$$

i et j sont respectivement les indices relatifs à chacun des sous réseaux A et B . J_{ij} est l'interaction d'échange entre premiers voisins en positions antiferromagnétiques, g représente le facteur de décomposition spectroscopique de l'état fondamental et μ_B le magnéton de Bohr. H_o est le champ magnétique extérieur appliqué parallèlement à OZ et $H_{an}^{A(B)}$ le champ d'anisotropie agissant sur le spin i (respectivement sur le spin j).

Pour trouver l'expression de l'équation de séculaire et celle des équations régissant les amplitudes des ondes de spin pour un système antiferromagnétique, nous procédons de manière analogue à la procédure établie au chapitre précédent.

L'équation générale du mouvement, $i\hbar dS_k^+ / dt = [S_k^+, H]$, d'un spin pour un atome k est :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dS_k^+}{dt} = & J_{ij} \sum_{(ij)} S_i^+ S_j^z \delta_{kj} + J_{ij} \sum_{(ij)} S_i^z S_j^+ \delta_{ki} - J_{ij} \sum_{(ij)} S_i^+ S_j^z \delta_{ki} \\ & - J_{ij} \sum_{(ij)} S_j^+ S_i^z \delta_{kj} + g\mu_B (H_o + H_{an}^A) \sum_i S_k^+ \delta_{ki} + g\mu_B (H_o + H_{an}^B) \sum_j S_k^+ \delta_{kj} \end{aligned} \quad (4.2)$$

En effectuant de manière analogue le calcul analytique décrit précédemment d'après les équations (2.57, 2.58, 2.59) et compte tenu des règles de commutation des opérateurs de spin (2.53), les équations du mouvement exprimées dans le contexte de l'Hamiltonien d'Heisenberg (4.2) sont formulées :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\alpha_k^+(r, t)}{dt} &= J_{ij} z_{ij} \{ S_A \gamma_{ij}(\vec{k}) \beta_k^+(r, t) - S_B \alpha_k^+(r, t) \} + g\mu_B (H_o + H_{an}^A) \alpha_k^+(r, t) \\ i\hbar \frac{d\beta_k^+(r, t)}{dt} &= J_{ij} z_{ij} \{ S_B \gamma_{ij}(\vec{k}) \alpha_k^+(r, t) - S_A \beta_k^+(r, t) \} + g\mu_B (H_o + H_{an}^B) \beta_k^+(r, t) \end{aligned} \quad (4.3)$$

Les solutions du type

$$\begin{aligned} \alpha_{y(z)}^+(r, t) &= \alpha_{y(z)}^+(r, 0) + \alpha_{y(z)}^+(r) \exp(\pm i k_{y(z)} a) \exp(i\omega t) \\ \beta_{y(z)}^+(r, t) &= \beta_{y(z)}^+(r, 0) + \beta_{y(z)}^+(r) \exp(\pm i k_{y(z)} a) \exp(i\omega t) \\ \alpha_x^+(r, t) &= \alpha_x^+(r, 0) + \alpha_x^+(r) \rho_x \exp(i\omega t) \\ \beta_x^+(r, t) &= \beta_x^+(r, 0) + \beta_x^+(r) \rho_x \exp(i\omega t) \end{aligned} \quad (4.4)$$

CHAPITRE 4. ÉTUDE DES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES D'UN
SYSTÈME ANTIFERROMAGNÉTIQUE

permettent de déduire la loi de dispersion des magnons de volume (2.63)

$$A_4\rho_x^4 + A_3\rho_x^3 + A_2\rho_x^2 + A_1\rho_x + A_0\rho_x^0 = 0 \quad (4.5)$$

Si nous appliquons les notations présentées ci dessous :

$$E = \frac{\hbar\omega - g\mu_B H_o}{JS}, \quad \omega_o = \frac{6JS + \omega_a}{JS}, \quad \gamma_{ij}(\vec{k}) = \frac{1}{6}\{4\gamma_{ij}^{\parallel} + \rho_x + \rho_x^{-1}\}, \quad \Gamma_{ij}^{\parallel} = 4(1 - \gamma_{ij}^{\parallel})$$

avec

$$H_{an}^A = -H_{an}^B, \quad \omega_a = g\mu_B H_{an}^A, \quad S_A = -S_B = S, \quad z_{ij} = 6,$$

L'expression du facteur de structure, selon l'orientation cristallographie de surface (100), est :

$$\begin{aligned} \gamma_{ij}(\vec{k}) &= \frac{1}{z_{ij}}(2 \cos(k_y a) + 2 \cos(k_z a) + \rho_x + \rho_x^{-1}) \\ &= \frac{1}{6}\{4\gamma_{ij}^{\parallel} + \rho_x + \rho_x^{-1}\} \\ &= \frac{1}{6}\{4 - \Gamma_{ij}^{\parallel} + \rho_x + \rho_x^{-1}\}. \end{aligned}$$

Les coefficients de l'équation séculaire se mettent donc sous la forme :

$$\begin{aligned} A_4 &= A_0 = 1 \\ A_2 &= E^2 - \omega_o^2 + (\Gamma_{ij}^{\parallel})^2 + 2 \\ A_3 &= A_1 = 2(4 - \Gamma_{ij}^{\parallel}) \end{aligned}$$

Par conséquent, les modes propageants correspondent à l'ensemble de racines ρ_x tel que $|\rho_x(\Gamma_{ij}^{\parallel})| = 1$.

Concernant la détermination des modes évanescents d'un système antiferromagnétique, nous sommes amenés à revoir le formalisme mathématique établi au chapitre précédent et ceci conduit à un ensemble d'équations analogues à celles utilisées pour un système ferromagnétique (3.24, 3.25, 3.30). Pour établir donc les équations régissant le mouvement des spins pour chaque plan en fonction de l'amplitude de précession des ondes de spin, nous nous placerons dans le cas d'un système à deux sous-réseaux A et B .

4.2. ÉTUDE D'UNE SURFACE ANTIFERROMAGNÉTIQUE DANS LES PLANS (100) ET (110)

Les transformées de Fourier bidimensionnelles en fonction de l'amplitude de précession des ondes de spin sont :

$$\alpha^+(r, \omega) = (2\pi a)^{-2} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_{\parallel} \exp(ik_{\parallel} r_{\parallel}) U_{n(r)}^{(A)}(k_{\parallel}, \omega) \quad (4.6)$$

$$\beta^+(r, \omega) = (2\pi a)^{-2} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_{\parallel} \exp(ik_{\parallel} r_{\parallel}) U_{n(r)}^{(B)}(k_{\parallel}, \omega) \quad (4.7)$$

En reportant ces formules dans les équations du mouvement des ondes de spin (4.3), nous aboutissons aux expressions donnant les énergies des modes localisés de surface pour chaque plan atomique n :

Pour $n=1$

$$\begin{aligned} \left[E - 4\varepsilon_{ij}^{\parallel} - \varepsilon_{ij}^{\perp} - \frac{\omega_{as}}{JS} \right] U_1^A + \left[-4\varepsilon_{ij}^{\parallel} \gamma_{ij}^{\parallel} \right] U_1^B + \left[-\varepsilon_{ij}^{\perp} \gamma_{ij}^{\perp} \right] U_2^B &= 0 \quad (4.8) \\ \left[E + 4\varepsilon_{ij}^{\parallel} + \varepsilon_{ij}^{\perp} + \frac{\omega_{as}}{JS} \right] U_1^B + \left[+4\varepsilon_{ij}^{\parallel} \gamma_{ij}^{\parallel} \right] U_1^A + \left[+\varepsilon_{ij}^{\perp} \gamma_{ij}^{\perp} \right] U_2^A &= 0 \end{aligned}$$

Pour $n=2$

$$\begin{aligned} \left[E - 5 - \varepsilon_{ij}^{\perp} - \frac{\omega_a}{JS} \right] U_2^A + \left[-4\gamma_{ij}^{\parallel} \right] U_2^B + \left[-\varepsilon_{ij}^{\perp} \gamma_{ij}^{\perp} \right] U_1^B + \left[-\gamma_{ij}^{\perp} \right] U_3^B &= 0 \quad (4.9) \\ \left[E + 5 + \varepsilon_{ij}^{\perp} + \frac{\omega_a}{JS} \right] U_2^B + \left[+4\gamma_{ij}^{\parallel} \right] U_2^A + \left[+\varepsilon_{ij}^{\perp} \gamma_{ij}^{\perp} \right] U_1^A + \left[+\gamma_{ij}^{\perp} \right] U_3^A &= 0 \end{aligned}$$

Pour $n=3$

$$\begin{aligned} \left[E - 6 - \frac{\omega_a}{JS} \right] U_3^A + \left[-4\gamma_{ij}^{\parallel} \right] U_3^B + \left[-\gamma_{ij}^{\perp} \right] U_2^B + \left[-\gamma_{ij}^{\perp} \right] U_4^B &= 0 \quad (4.10) \\ \left[E + 6 + \frac{\omega_a}{JS} \right] U_3^B + \left[+4\gamma_{ij}^{\parallel} \right] U_3^A + \left[+\gamma_{ij}^{\perp} \right] U_2^A + \left[+\gamma_{ij}^{\perp} \right] U_4^A &= 0 \end{aligned}$$

⋮

Pour $n > 3$

$$\begin{aligned} \left[E - 6 - \frac{\omega_a}{JS} \right] U_n^A + \left[-4\gamma_{ij}^{\parallel} \right] U_n^B + \left[-\gamma_{ij}^{\perp} \right] U_{n-1}^B + \left[-\gamma_{ij}^{\perp} \right] U_{n+1}^B &= 0 \quad (4.11) \\ \left[E + 6 + \frac{\omega_a}{JS} \right] U_n^B + \left[+4\gamma_{ij}^{\parallel} \right] U_n^A + \left[+\gamma_{ij}^{\perp} \right] U_{n-1}^A + \left[+\gamma_{ij}^{\perp} \right] U_{n+1}^A &= 0 \end{aligned}$$

CHAPITRE 4. ÉTUDE DES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES D'UN
SYSTÈME ANTIFERROMAGNÉTIQUE

avec $\gamma_{ij}^{\perp} = 1$, $\gamma_{ij}^{\parallel} = \frac{1}{2}[\cos(k_y a) + \cos(k_z a)]$, $\varepsilon_{ij}^{\parallel} = \frac{J_s}{J}$ et $\varepsilon_{ij}^{\perp} = \frac{J^{\perp}}{J}$.

En vue de déterminer les états localisés de surface, nous devons connaître d'une part, la matrice de volume $M_v(6 \times 8)$ qui traduit les équations ci-dessus écrites sous forme matricielle et d'autre part la matrice de raccordement $M_R(8 \times 6)$ (2.104) qui lie les amplitudes des ondes de spin volume en fonction de celles des ondes de spin des plans de surface (2.102, 2.103). Par conséquent, le produit de ces deux matrices permet de déduire la matrice dynamique $M_s(6 \times 6)$ ¹ nécessaire à la description des états localisés de surface.

¹nous décrivons dans l'Annexe B les éléments de matrices $M_s(6 \times 6)$ de la matrice dynamique des états localisés de surface(100)

4.2. ÉTUDE D'UNE SURFACE ANTIFERROMAGNÉTIQUE DANS LES PLANS (100) ET (110)

4.2.1.1 Analyse et discussion des résultats

Le modèle adopté pour décrire un cristal antiferromagnétique est celui d'un cristal à deux sous-réseaux (100)(FIG.4.1). Dans cette configuration, les états localisés ont été déterminés en utilisant l'équation de Heisenberg. A partir de cette dernière, nous avons abouti aux expressions décrivant les modes localisés de volume (4.5) et les modes localisés de surface $\det|M_s(\rho_x)| = 0$. Sur la Figure (FIG.4.2), nous avons représenté ces modes en fonction de $4(1 - \gamma_{\parallel})$ pour différentes valeurs du paramètre de couplage $\varepsilon_{ij}^{\parallel} = \frac{J_s^{\parallel}}{J}$.

Les Figures (FIG.4.2 a) et (FIG.4.2 b) illustrent, respectivement, les branches acoustiques et les branches optiques pour différentes valeurs de $\varepsilon_{ij}^{\parallel}$. Les branches acoustiques sont obtenues dans le domaine de valeurs $0.5 \leq \varepsilon^{\parallel} \leq 1.1$, comme l'illustre la figure (FIG.4.2 a). Pour des valeurs $1.207 \leq \varepsilon^{\parallel} \leq 1.25$, les modes de surface sont inexistantes. Dans cette configuration, les solutions obtenues (modes de surface) présentent des énergies comprises dans le continuum du volume d'où elles sont rejetées dans le cas présent, par contre dans les films minces elles doivent surtout ne pas être négligées [83].

Dans le cas $\varepsilon^{\parallel} \geq 1.25$, nous observons seulement des modes optiques. Cet effet est illustré par la figure (FIG.4.2 b) où nous avons représenté la dispersion de ces modes. D'autre part, nous remarquons l'apparition des "Cut-off" optiques d'énergies $\Gamma_{\parallel}^{c1} \approx 1.92$, $\Gamma_{\parallel}^{c1} \approx 0.66$ et $\Gamma_{\parallel}^{c1} \approx 0.24$ correspondant, respectivement, aux valeurs $\varepsilon^{\parallel} = 1.3$, $\varepsilon^{\parallel} = 1.5$ et $\varepsilon^{\parallel} = 1.75$. Par ailleurs, pour $\varepsilon^{\parallel} \geq 1.854$, les branches des modes de surface (optiques) apparaissent dans la majeure partie de la zone de Brillouin. Par exemple, pour $\varepsilon^{\parallel} = 2$, nous avons un mode optique complet (cf. FIG 4.2 b).

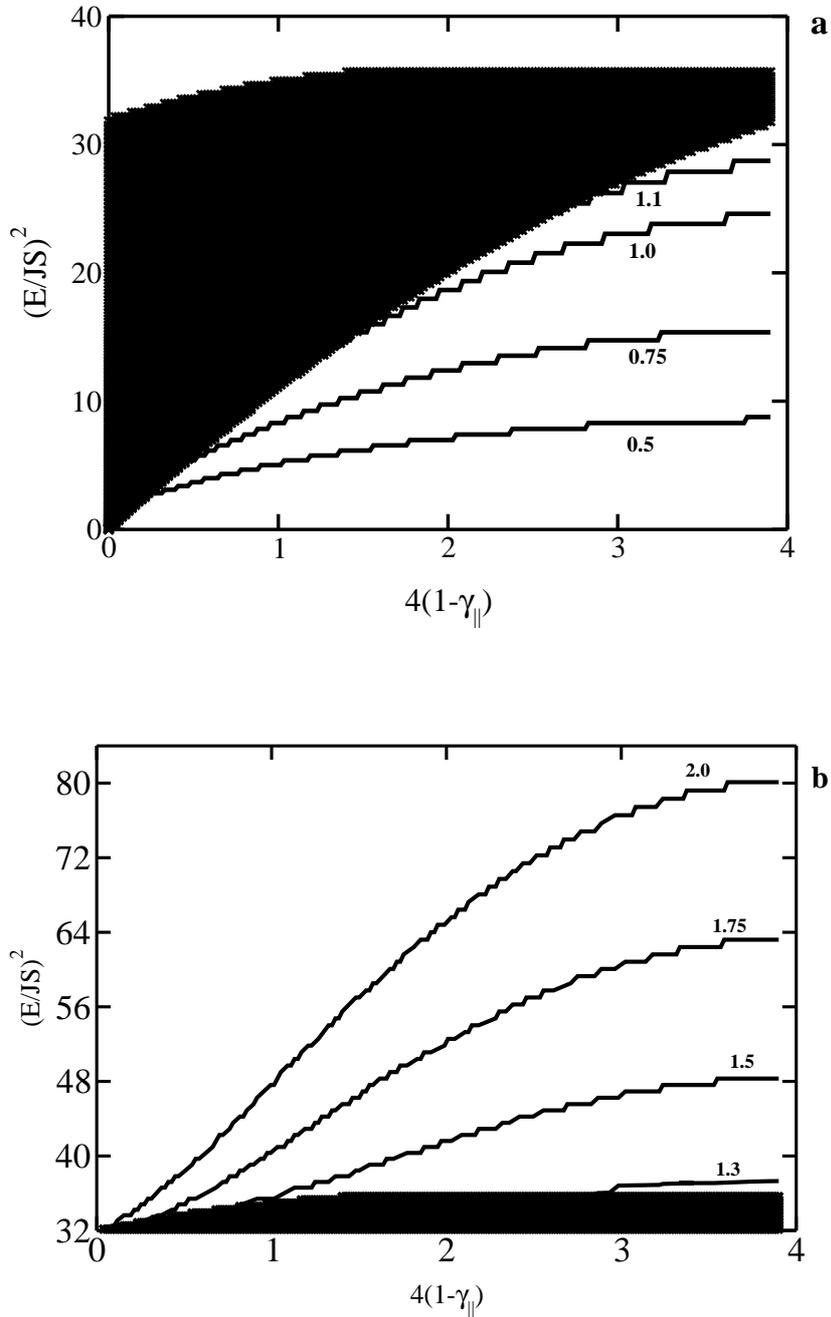


FIG. 4.2 – États localisés de volume (aire hachurée) et de surface (lignes en traits gras) pour un réseau cubique semi infini antiferromagnétique fini par une surface(100). Ondes de spin acoustiques (a) et optiques (b) en fonction des différentes valeurs de ε^{\parallel} . L'énergie est représentée en fonction du paramètre $4(1 - \gamma^{\parallel}) = 4 - 2 \cos(k_y a) + 2 \cos(k_z a)$.

4.2.2 Énergies des ondes de spin de surface (110)

Nous venons de traiter l'étude des modes localisés d'un cristal cubique simple antiferromagnétique. Le calcul des énergies de ces modes a été effectué sur un réseau cubique simple avec une surface (100) et ayant le même paramètre de réseau a . Aussi nous avons porté plus particulièrement notre attention sur l'étude des modes localisés en fonction des paramètres d'échange (volume-surface).

Nous allons maintenant appliquer le formalisme de la première partie de ce chapitre pour une surface (110). En effet, pour cette orientation cristallographique, les vecteurs (\vec{a}_y, \vec{a}_z) définissent le réseau de surface, la distance entre les plans atomiques est $a\sqrt{2}$ et les plans parallèles à la surface forment un réseau rectangulaire (2D) de largeur a . En outre, chaque spin est couplé directement avec ses plus proches voisins, à savoir l'interaction des plus proches voisins selon la direction (Oz) diffère de celles de (Ox) et (Oy) . Ce modèle est représenté schématiquement sur la figure (FIG.4.3).

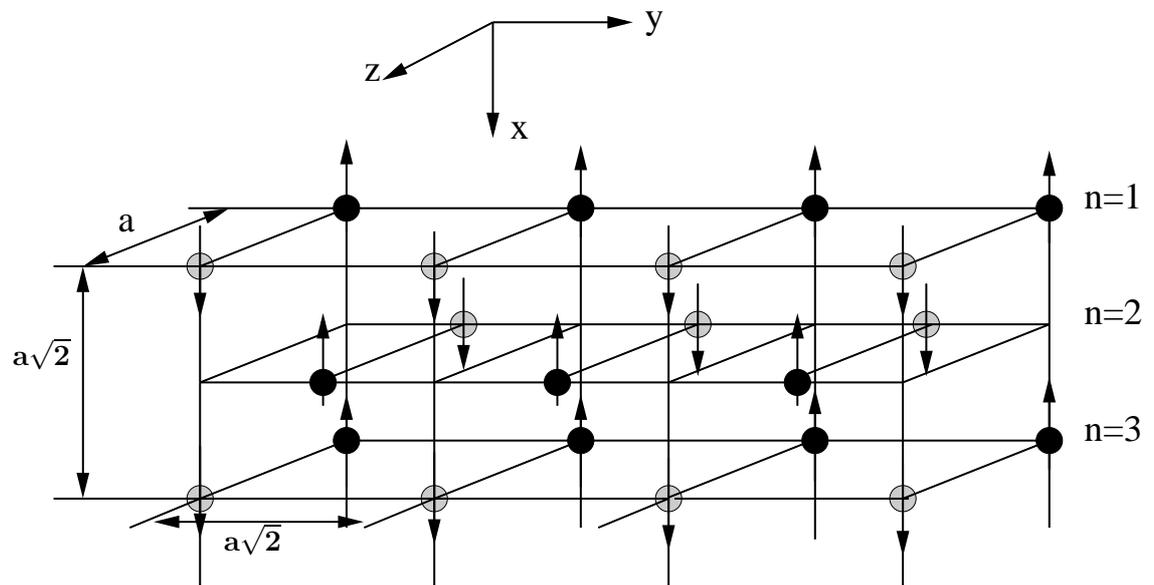


FIG. 4.3 – Représentation schématique du modèle d'un réseau cubique antiferromagnétique(110).

CHAPITRE 4. ÉTUDE DES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES D'UN
SYSTÈME ANTIFERROMAGNÉTIQUE

Dans ce cas, le facteur de phase $\gamma_{ij}(\vec{k})$ a pour expression :

$$\gamma_{ij}(\vec{k}) = \frac{1}{z_{ij}} \sum_{ij} \exp i\vec{k}r_{ij}$$

avec $\vec{k}(k_x, k_y, k_z)$, $z_{ij} = 6$ et

$$\begin{aligned} r_{ij}^{\vec{}}(x, y, z) &\equiv r_0^{\vec{}}(0, 0, 0), \\ &r_1^{\vec{}}(0, 0, +a), \quad r_2^{\vec{}}(0, 0, -a), \\ &r_3^{\vec{}}\left(+\frac{a}{\sqrt{2}}, -\frac{a}{\sqrt{2}}, 0\right), \quad r_5^{\vec{}}\left(-\frac{a}{\sqrt{2}}, +\frac{a}{\sqrt{2}}, 0\right), \\ &r_4^{\vec{}}\left(+\frac{a}{\sqrt{2}}, +\frac{a}{\sqrt{2}}, 0\right), \quad r_6^{\vec{}}\left(-\frac{a}{\sqrt{2}}, -\frac{a}{\sqrt{2}}, 0\right). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \gamma_{ij}(\vec{k}) &= \frac{1}{3} \cos k_z a + \frac{2}{3} \cos k_x \frac{a}{\sqrt{2}} \cos k_y \frac{a}{\sqrt{2}} \\ &= \frac{1}{3} \gamma_{ij}^{\parallel}(\vec{k}) + \frac{2}{3} \gamma_{ij}^{\perp}(\vec{k}) \cos k_x \frac{a}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

Avec les notations suivantes

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar\omega - g\mu_B H_o}{JS}, \quad \omega_o = \frac{6JS + \omega_A}{JS} \quad S_A = -S_B = S \\ \omega_A &= -\omega_B = g\mu_B H_{an}^A \quad \Lambda_z = 1 - \gamma_{ij}^{\parallel} \quad \Lambda_y = 1 - \gamma_{ij}^{\perp} \end{aligned}$$

la relation de dispersion des ondes de spin de volume d'un réseau cubique antiferromagnétique (110) s'écrit donc sous la forme :

$$A_4 \rho_x^4 + A_3 \rho_x^3 + A_2 \rho_x^2 + A_1 \rho_x + A_0 \rho_x^0 = 0 \quad (4.12)$$

avec

$$\begin{aligned} A_4 &= 4[1 - \Lambda_z]^2 \\ A_3 &= 8[1 - \Lambda_z][1 - \Lambda_y] \\ A_2 &= [E^2 - \omega_o^2] + 4[1 - \Lambda_z]^2 + 8[1 - \Lambda_y]^2 \\ A_1 &= A_3 \\ A_0 &= A_4 \end{aligned}$$

4.2. ÉTUDE D'UNE SURFACE ANTIFERROMAGNÉTIQUE DANS LES PLANS (100) ET (110)

Les équations, exprimées en fonction de l'amplitude de précession des ondes de spin, donnant les énergies des modes localisés de surface sont :

Pour $n=1$

$$\begin{aligned} \left[E - 2\varepsilon_{ij}^{\parallel} - 2 - \frac{\omega_{As}}{JS} \right] U_1^A + \left[-2\varepsilon_{ij}^{\parallel}(1 - \Lambda_z) \right] U_1^B + \left[-2\varepsilon_{ij}^{\perp}(1 - \Lambda_y) \right] U_2^B &= 0 \\ \left[E + 2\varepsilon_{ij}^{\parallel} + 2 + \frac{\omega_{As}}{JS} \right] U_1^B + \left[+2\varepsilon_{ij}^{\parallel}(1 - \Lambda_z) \right] U_1^A + \left[+2\varepsilon_{ij}^{\perp}(1 - \Lambda_y) \right] U_2^A &= 0 \end{aligned} \quad (4.13)$$

Pour $n=2$

$$\begin{aligned} \left[E - 6 - \frac{\omega_{As}}{JS} \right] U_2^A + \left[-2(1 - \Lambda_z) \right] U_2^B + \left[-2(1 - \Lambda_y) \right] U_1^B + \left[-2(1 - \Lambda_y) \right] U_3^B &= 0 \\ \left[E + 6 + \frac{\omega_{As}}{JS} \right] U_2^B + \left[+2(1 - \Lambda_z) \right] U_2^A + \left[+2(1 - \Lambda_y) \right] U_1^A + \left[+2(1 - \Lambda_y) \right] U_3^A &= 0 \end{aligned} \quad (4.14)$$

Pour $n=3$

$$\begin{aligned} \left[E - 6 - \frac{\omega_{As}}{JS} \right] U_3^A + \left[-2(1 - \Lambda_z) \right] U_3^B + \left[-2(1 - \Lambda_y) \right] U_2^B + \left[-2(1 - \Lambda_y) \right] U_4^B &= 0 \\ \left[E + 6 + \frac{\omega_{As}}{JS} \right] U_3^B + \left[+2(1 - \Lambda_z) \right] U_3^A + \left[+2(1 - \Lambda_y) \right] U_2^A + \left[+2(1 - \Lambda_y) \right] U_4^A &= 0 \end{aligned} \quad (4.15)$$

⋮

Pour $n > 3$

$$\begin{aligned} \left[E - 6 - \frac{\omega_{As}}{JS} \right] U_n^A + \left[-2(1 - \Lambda_z) \right] U_n^B + \left[-2(1 - \Lambda_y) \right] U_{n-1}^B + \left[-2(1 - \Lambda_y) \right] U_{n+1}^B &= 0 \\ \left[E + 6 + \frac{\omega_{As}}{JS} \right] U_n^B + \left[+2(1 - \Lambda_z) \right] U_n^A + \left[+2(1 - \Lambda_y) \right] U_{n-1}^A + \left[+2(1 - \Lambda_y) \right] U_{n+1}^A &= 0 \end{aligned} \quad (4.16)$$

Comme nous l'avons vu au début du paragraphe (4.2.1), les états localisés de surface sont obtenus en résolvant numériquement l'équation ci dessous (4.17). Pour ce faire, il est nécessaire d'exprimer les équations (4.13, 4.14, 4.15) sous forme matricielle $M_v(6 \times 8)$ puis de faire le produit avec la matrice de raccordement $M_R(8 \times 6)$ (2.104) ².

$$Det|M_s(E, \varepsilon^{\parallel(\perp)}, \rho_x, \Lambda_{y(z)}, \omega_0, \omega_A)| = Det|M_v(6 \times 8).M_R(8 \times 6)| = 0 \quad (4.17)$$

4.2.2.1 Analyse et discussion des résultats

Dans le premier paragraphe (4.2.1), nous avons étudié uniquement l'influence de l'interaction d'échange sur les modes de surface (100). Dans le second paragraphe (4.2.2), nous avons considéré, simultanément, l'effet de l'interaction d'échange (surface-volume) sur les états localisés de surface (110) et la direction de leurs propagations.

Sur les figures (FIG.4.4, FIG.4.5), nous avons représenté le spectre des modes de surface selon leur direction propagation. En effet, la figure (FIG.4.4) montre l'évolution des modes localisés de surface sur l'axe ($k_y = 0 \equiv \Lambda_y = 0$) de la zone de Brillouin ($0 \leq k_z \leq \frac{\pi}{a} \equiv 0 \leq \Lambda_z \leq 1$) pour différentes valeurs de ε^{\parallel} . En fait, nous observons des modes acoustiques et des modes optiques associés respectivement aux valeurs $\varepsilon^{\parallel} \leq 1$ (FIG.4.4a) et $\varepsilon^{\parallel} > 1$ (FIG.4.4b). D'autre part, dans la configuration où les états localisés sont représentés sur l'axe ($k_z = 0 \equiv \Lambda_z = 0$) de la zone de Brillouin ($0 \leq k_y \leq \frac{\pi\sqrt{2}}{a} \equiv 0 \leq \Lambda_y \leq 1$), il en résulte seulement des modes acoustiques pour $\varepsilon^{\parallel} \leq 4$. De plus, nous remarquons que les courbes de dispersion partent de l'origine, autrement dit les spins de surface se réorientent afin d'obtenir des états stables et du coup minimisent l'énergie libre [3]. Cependant, pour la valeur $\varepsilon^{\parallel} = 4$, nous constatons une branche acoustique qui se raccorde tangentiellement au bulk. Au delà de cette valeur ($\varepsilon^{\parallel} \geq 4$), aucun mode localisé ne peut apparaître sur la surface. Cet effet est illustré sur la figure (FIG.4.5).

Lorsque nous considérons les différentes orientations cristallographiques de surface, il est logique que le nombre de coordination des atomes de surface et les interactions d'échange soient modifiés. Ceci entraîne, par conséquent, un changement très prononcé dans le calcul des modes de surface. En fait, nous avons montré qu'il est possible d'avoir des branches acoustiques et des branches optiques pour deux orien-

²nous décrirons dans l'Annexe C les éléments de matrices $M_s(6 \times 6)$ de la matrice dynamique des états localisés de surface (110)

4.2. ÉTUDE D'UNE SURFACE ANTIFERROMAGNÉTIQUE DANS LES PLANS (100) ET (110)

tations cristallographique de surface [(100)et(110)], ou bien l'une des deux. Comme nous l'avons déjà fait remarquer, lorsque la propagation des modes localisés se fait selon la direction (Oy) les ondes de spin de surface sont quasiment acoustiques. Dans cette configuration, l'énergie des ondes de spin de surface se trouve diminuer (en absence de modes optiques). Cette diminution est parfois si importante que l'onde de surface peut disparaître dans le spectre du volume. En somme, l'apparition des états localisés est attribuée essentiellement à l'orientation de la surface et à la valeur de l'interaction d'échange (surface-volume) ε^{\parallel} .

Il est important de noter que nos résultats obtenus dans ce travail sont en bon accord avec les résultats trouvés par la méthode des fonctions de Green [35, 83] et nous avons montré la capacité de notre méthode à donner une description pertinente de l'évolution des modes de surface.

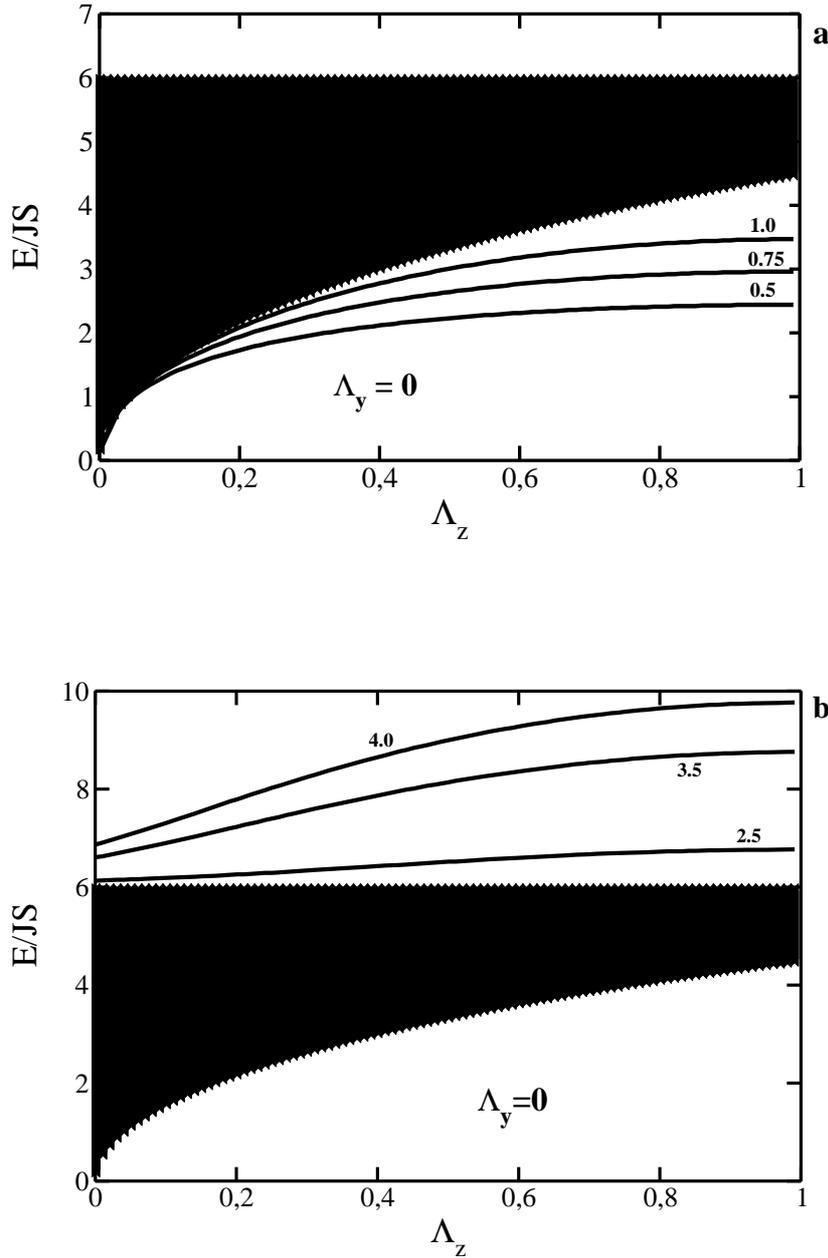


FIG. 4.4 – États localisés de volume (aire en traits gras) et de surface (lignes en traits gras) pour un réseau cubique semi infini antiferromagnétique fini par une surface (110). Ondes de spin acoustiques (a) et optiques (b) en fonction des différentes valeurs de ε^{\parallel} . L'énergie est représentée en fonction des paramètres $\Lambda_y = 0$ et $\Lambda_z = 1 - \cos(k_z a)$.

4.2. ÉTUDE D'UNE SURFACE ANTIFERROMAGNÉTIQUE DANS LES PLANS (100) ET (110)

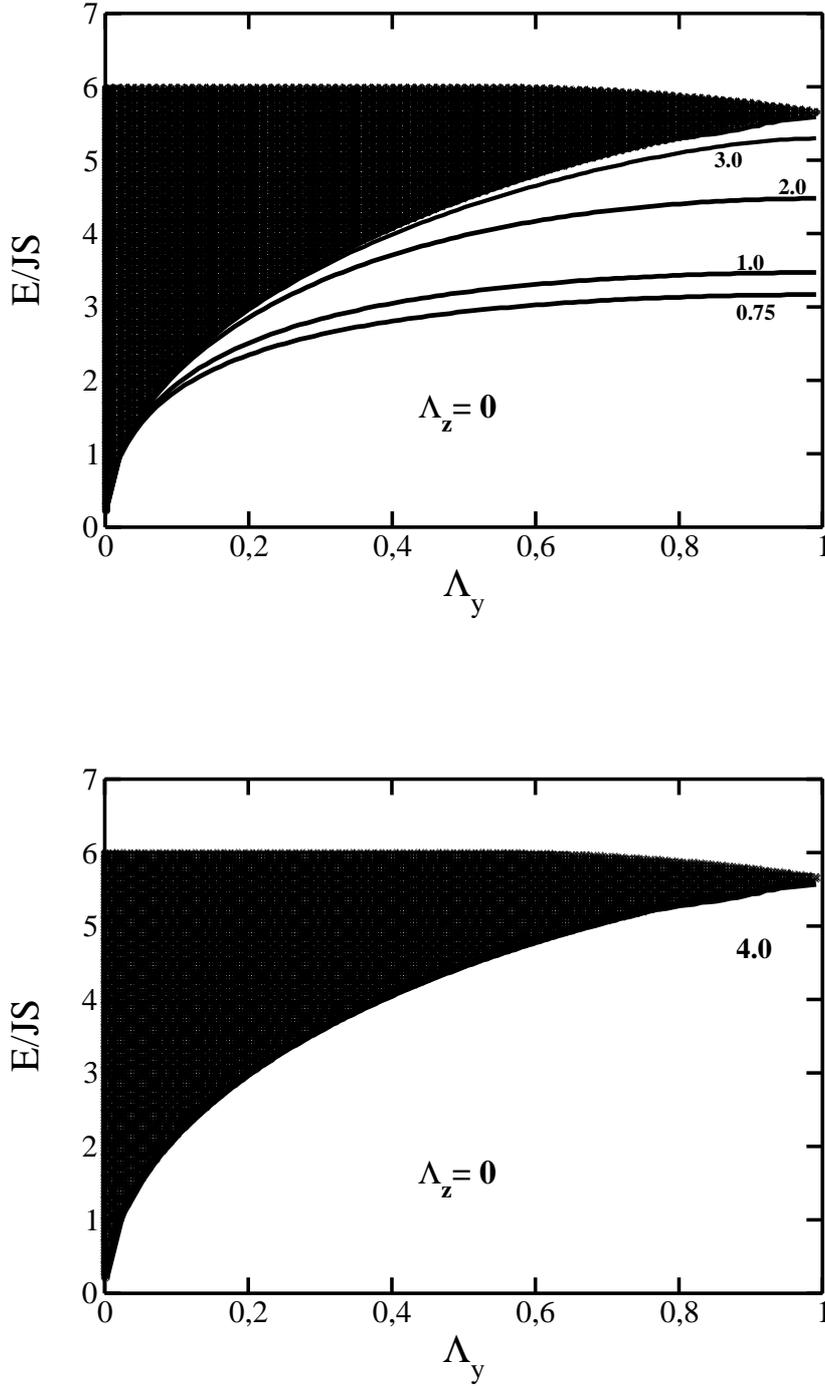


FIG. 4.5 – États localisés de volume (aire en traits gras) et de surface (lignes en traits gras) pour un réseau cubique semi infini antiferromagnétique fini par une surface (110). Ondes de spin acoustiques en fonction des différentes valeurs de ϵ^{\parallel} . L'énergie est représentée en fonction des paramètres $\Lambda_z = 0$ et $\Lambda_y = 1 - \cos(k_z a)$.

4.3 Influence du couplage biquadratique et d'anisotropie uniaxiale sur les excitations magnétiques de surface

L'objectif principal de cette étude est d'examiner les excitations magnétiques de surface pour les matériaux antiferromagnétiques en tenant compte, en plus de l'échange bilinéaire, de l'échange biquadratique et de l'anisotropie uniaxiale. Dans ce contexte, l'Hamiltonien de Heisenberg prend la forme :

$$\begin{aligned} H &= H_E + H_B + H_A + H_Z & (4.18) \\ &= \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + a \sum_{ij} J_{ij} (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j)^2 - \sum_i D_i (S_i^z)^2 - g\mu_B (H_0 + H_A) \sum_i S_i^z \end{aligned}$$

Ce modèle d'interaction est adapté à une large classe de matériaux où l'interaction biquadratique a une influence majeure et la valeur de spin doit être supérieure ou égale à 1 ($S \geq 1$) [85–89]. Les matériaux décrivant ce type de couplage sont : Les ferromagnétiques (EuO), les antiferromagnétiques (MnO, MnF_2), les ferrimagnétiques (Fe_3O_4), arséniate et phosphate de terres rares [89] et vanadate de terres rares.

Dans le cadre de notre étude, nous considérons un réseau cubique semi-infini antiferromagnétique ($J_{ij} > 0$) ayant la même distance inter-atomique a_0 . Le réseau cubique est de plus bipartite autrement dit un site du réseau des spins "up" a tous ses plus proches voisins sur le réseau des spins "down". Nous supposons aussi que l'état fondamental est l'état de Néel i.e. les spins sont ordonnés dans un arrangement antiparallèle selon la direction de l'axe (Oz). Nous admettons ensuite que la relation ($0 < a < 1$) est satisfaite [85].

Nous considérons que la surface est définie par le plan (Ox, Oy) et orientée selon la direction (100), c'est à dire que l'axe de quantification (Oz) coïncide avec l'axe cristallographique (Oc). Notons que les couplages des spins de surface et des spins de volume sont décrits, respectivement, par les interactions d'échanges J_s et J . De même, la constante de l'anisotropie uniaxiale en surface D_s est différente de celle du volume D .

Avant de passer à l'étude des excitations magnétiques décrites par l'Hamiltonien H , il est utile de définir les différentes contributions que nous avons prises en considération :

4.3. INFLUENCE DU COUPLAGE BIQUADRATIQUE ET D'ANISOTROPIE UNIAXIALE SUR LES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES DE SURFACE

- **1. Interaction d'échange** : C'est le couplage associé à l'interaction directe spin-spin, il provient de l'interaction coulombienne entre les électrons de deux atomes. De plus, il est responsable de l'apparition d'une phase ordonné pour $T < T_c$ dans le cas d'un système ferromagnétique. Par ailleurs, l'antiferromagnétisme trouve également son origine dans l'interaction d'échange qui favorise l'ordre antiparallèle des spins.

- **2. Interaction biquadratique** : C'est le couplage associé à l'interaction spin-phonon [90], ce type d'interaction favorise un alignement perpendiculaire entre les aimantations des plans magnétiques adjacents.
Dans cette étude, il est important de souligner que notre objectif principal est de discuter de manière assez qualitative l'influence de l'échange biquadratique sur les modes d'excitation de surface et préciser son rôle sur les phénomènes de stabilité de surface (nouvelles configurations, reconstructions, nouveaux états fondamentaux, ...). Sans rentrer dans les détails sur la définition et la compréhension de cet échange, nous laissons le lecteur le soin de se référer à une multitude de publications sur ce sujet (théorie, effets expérimentaux, ...) [91–101].

- **3. Anisotropie magnéto-cristalline -Anisotropie uniaxiale** : Anisotropie magnéto-cristalline provient du couplage spin-orbite avec le champ cristallin et favorise l'alignement de l'aimantation selon certaines directions du réseau cristallin. Selon la symétrie du réseau, l'anisotropie magnéto-cristalline peut être cubique, hexagonale, quadratique ou uniaxiale. Au voisinage de la surface, cette anisotropie a une influence considérable à cause de l'existence d'une brisure de symétrie. De plus, cette influence est d'autant plus grande que les dimensions du cristal diminuent.
Dans le cadre de notre étude, nous nous sommes intéressés seulement à l'anisotropie uniaxiale où l'aimantation tend à s'aligner selon un axe privilégié. Cette contribution est totalement locale et ne s'appuie que sur les propriétés microscopiques du matériau.

- **4. Contribution Zeeman** : C'est l'interaction des moments magnétiques avec le champ magnétique extérieur H_0 . Sous l'application de ce dernier, l'aimantation tend à s'aligner suivant l'orientation du champ H_0 .

CHAPITRE 4. ÉTUDE DES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES D'UN
SYSTÈME ANTIFERROMAGNÉTIQUE

En tenant compte des considérations décrites ci-dessus, l'équation du mouvement de l'opérateur S_m^+ est :

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{dS_m^+}{dt} &= [S_m^+, H] \\
 &= \sum_{ij} J_{ij} [S_m^+, \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j] + a \sum_{ij} J_{ij} [S_m^+, (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j)^2] - \sum_i D_i [S_m^+, (S_i^z)^2] \\
 &\quad - g\mu_B (H_0 + H_A) \sum_i [S_m^+, S_i^z]
 \end{aligned} \tag{4.19}$$

En utilisant les propriétés des opérateurs des moments quadrupolaires [85], l'expression du terme biquadratique est donnée par la relation suivante :

$$\frac{1}{3} Q_i^0 Q_j^0 + Q_i^2 Q_j^2 + \sum_{\kappa, \sigma=x, y, z} Q_i^{\kappa\sigma} Q_j^{\kappa\sigma} = \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + 2(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j)^2 - \frac{2}{3} S(S+1) \tag{4.20}$$

Avec

$$\begin{aligned}
 S_i^\pm &= S_i^x \pm iS_i^y, \\
 Q^0 &= 3\langle S^z \rangle^2 - S(S+1), \\
 Q^2 &= S_x^2 + S_y^2, \\
 Q^{xy} &= S^x S^y + S^y S^x, \\
 Q^{yz} &= S^y S^z + S^z S^y, \\
 Q^{zx} &= S^z S^x + S^x S^z
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

4.3. INFLUENCE DU COUPLAGE BIQUADRATIQUE ET D'ANISOTROPIE UNIAXIALE SUR LES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES DE SURFACE

Partant de l'équation (4.20) et en utilisant les règles de commutations ($[S^+, S^-] = 2S^z$, $[S^+, S^z] = -S^+$, $[S^-, S^z] = S^-$), l'équation (4.19) devient :

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{dS_m^+}{dt} = [S_m^+, H] = & - \sum_j J_{ij} \left(1 - \frac{a}{2}\right) (S_j^z S_m^+ - S_m^z S_j^+) - \frac{a}{2} \sum_j J_{ij} \left\{ Q_j^0 (S_m^+ S_m^z + S_m^z S_m^+) \right. \\
 & - Q_j^0 (S_j^+ S_j^z + S_j^z S_j^+) + (S_m^+)^2 (S_j^- S_j^z + S_j^z S_j^-) + (S_j^+)^2 (S_m^- S_m^z + S_m^z S_m^-) \left. \right\} \\
 & + D_m (S_m^+ S_m^z + S_m^z S_m^+) + g\mu_B (H_0 + H_A) \sum_i S_m^+ \quad (4.22)
 \end{aligned}$$

L'application de l'approximation de phase aléatoire (*RPA*) permet de linéariser les équations ci-dessus [13] :

$$(S_j^z S_m^+ - S_m^z S_j^+) \rightarrow \langle S_j^z \rangle S_m^+ - \langle S_m^z \rangle S_j^+$$

De plus, en effectuant la transformation de Holstein Primakoff [5, 7, 102, 103], les opérateurs de spin S_m^+ , pour chaque sous réseau, peuvent s'exprimer en gardant seulement les termes linéaires, autrement dit :

$$S_m^{+a} = \sqrt{2S} a_m, \quad S_m^{za} = S_a - a_m^+ a_m, \quad S_m^{+b} = \sqrt{2S} b_m, \quad S_m^{zb} = -S_b - b_m^+ b_m$$

Nous obtenons

$$\begin{aligned}
 (S_m^+ S_m^z + S_m^z S_m^+)^a &= \sqrt{2S_a} (a_m (S_a - a_m^+ a_m) + (S_a - a_m^+ a_m) a_m) \approx \sqrt{2S_a} (2S_a - 1) a_m \\
 &\approx (2S_a - 1) S_m^{+a} \quad (4.23)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (S_m^+ S_m^z + S_m^z S_m^+)^b &= \sqrt{2S_b} (b_m^+ (-S_b - b_m^+ b_m) + (-S_b + b_m^+ b_m) b_m) \approx \sqrt{2S_b} (-2S_b + 1) b_m^+ \\
 &\approx (-2S_b + 1) S_m^{+b}
 \end{aligned}$$

De même, nous montrons que :

$$Q_i^0 = Q_j^0 \approx 3S^2 - S(S+1) = 2S^2 - S = S(2S-1) \quad S = S_a = S_b$$

L'équation du mouvement d'un opérateur de déviation de spin $S_m^{+(\lambda)}$ ($\lambda = A, B$) prend alors la forme :

Pour un opérateur S_i^+ du sous réseau de **A** :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dS_i^+}{dt} &= - \sum_{ij} J_{ij} \left(1 - \frac{a}{2}\right) (-S_b S_i^+ - S_a S_j^+) \\ &\quad - \frac{a}{2} \sum_{ij} J_{ij} \left[S_b (2S_b - 1) (2S_a - 1) S_i^+ - S_a (2S_a - 1) (1 - 2S_b) S_j^+ \right] \\ &\quad + D_i (2S_a - 1) S_i^+ + g\mu_B (H_0 + H_A) S_i^+ \end{aligned} \quad (4.24)$$

Pour un opérateur S_j^+ du sous réseau de **B** :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dS_j^+}{dt} &= - \sum_{ij} J_{ij} \left(1 - \frac{a}{2}\right) (S_a S_j^+ + S_b S_i^+) \\ &\quad - \frac{a}{2} \sum_{ij} J_{ij} \left[S_a (2S_a - 1) (1 - 2S_b) S_j^+ - S_b (2S_b - 1) (2S_a - 1) S_i^+ \right] \\ &\quad + D_j (1 - 2S_b) S_j^+ - g\mu_B (H_0 + H_A) S_j^+ \end{aligned} \quad (4.25)$$

Par ailleurs, nous introduisons les transformées de Fourier de S_i^+ et S_j^+ par le fait que les déviations de spin sont définies en termes d'onde.

$$\begin{aligned} \alpha_k^+(t, k_{\parallel}) &= \sum_i S_i^+(t) e^{-ik_{\parallel} r_i} & \text{et} & \quad S_i^+(t) = \sum_{k_{\parallel}} \alpha_k^+(t, k_{\parallel}) e^{-ik_{\parallel} r_i} \\ \beta_k^+(t, k_{\parallel}) &= \sum_j S_j^+(t) e^{-ik_{\parallel} r_j} & \text{et} & \quad S_j^+(t) = \sum_{k_{\parallel}} \beta_k^+(t, k_{\parallel}) e^{-ik_{\parallel} r_j} \end{aligned} \quad (4.26)$$

Ainsi, les relations (4.24,4.25) permettent de déterminer par transformation de Fourier les équations du mouvement des déviations de spin dans l'espace des vecteurs d'onde \vec{k} .

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\alpha_k^+}{dt} &= - \left(1 - \frac{a}{2}\right) J_{ij} z_{ij} \left[-S_b \alpha_k^+ - S_a \gamma_{ij} \beta_k^+ \right] \\ &\quad - \frac{a}{2} J_{ij} z_{ij} \left[S_b (2S_b - 1) (2S_a - 1) \alpha_k^+ - S_a (2S_a - 1) (1 - 2S_b) \gamma_{ij} \beta_k^+ \right] \\ &\quad + D_i (2S_a - 1) \alpha_k^+ + g\mu_B (H_0 + H_A) \alpha_k^+ \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\beta_k^+}{dt} &= - \left(1 - \frac{a}{2}\right) J_{ij} z_{ij} \left[S_a \beta_k^+ + S_b \gamma_{ij} \alpha_k^+ \right] \\ &\quad - \frac{a}{2} J_{ij} z_{ij} \left[S_a (2S_a - 1) (1 - 2S_b) \beta_k^+ - S_b (2S_b - 1) (2S_a - 1) \gamma_{ij} \alpha_k^+ \right] \\ &\quad + D_j (1 - 2S_b) \beta_k^+ - g\mu_B (H_0 + H_A) \beta_k^+ \end{aligned} \quad (4.28)$$

4.3. INFLUENCE DU COUPLAGE BIQUADRATIQUE ET D'ANISOTROPIE UNIAXIALE SUR LES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES DE SURFACE

avec

$$\begin{aligned}\gamma_{ij} &= \frac{1}{3} \{ \cos(k_x a_0) + \cos(k_y a_0) + \cos(k_z a_0) \} \\ z_{ij} &= \text{coordinnence atomique.}\end{aligned}$$

En reprenant les solutions de type (4.4),

$$\begin{aligned}\alpha_{x(y)}^+(r, t) &= \alpha_{x(y)}^+(r, 0) + \alpha_{x(y)}^+(r) \exp(\pm i k_{x(y)} a) \exp(i\omega t) \\ \beta_{x(y)}^+(r, t) &= \beta_{x(y)}^+(r, 0) + \beta_{x(y)}^+(r) \exp(\pm i k_{x(y)} a) \exp(i\omega t) \\ \alpha_z^+(r, t) &= \alpha_z^+(r, 0) + \alpha_z^+(r) \rho_z \exp(i\omega t) \\ \beta_z^+(r, t) &= \beta_z^+(r, 0) + \beta_z^+(r) \rho_z \exp(i\omega t)\end{aligned}\tag{4.29}$$

la relation de dispersion des états localisés de volume est donnée par :

$$A_4 \rho_z^4 + A_3 \rho_z^3 + A_2 \rho_z^2 + A_1 \rho_z + A_0 \rho_z^0 = 0\tag{4.30}$$

avec

$$\begin{aligned}A_4 &= A_0 = 1 \\ A_3 &= A_1 = 2\omega_q \\ A_2 &= \left(\frac{E}{J\varphi(a)}\right)^2 - \omega_0^2 + \omega_q^2 + 2\end{aligned}$$

où nous avons introduit les notations suivantes :

$$\begin{aligned}\omega_q &= 4\gamma_{ij}^{\parallel} = 4\left[\frac{1}{2}(\cos(k_x a_0) + \cos(k_y a_0))\right] \\ \hbar\omega &= E, \quad \varepsilon^{\parallel} = \frac{J_s}{J} \\ \varphi(a) &= S[(1-a) - 2aS(S-1)] \\ \omega_0 &= \frac{\Omega_0 + Jz_{ij}\varphi(a)}{J\varphi(a)} \\ \omega_0^s &= \frac{\Omega_0^s + (4J_s + J)\varphi(a)}{J\varphi(a)} \\ \Omega_0 &= D(2S-1) + g\mu_B(H_0 + H_A) \\ \Omega_0^s &= D_s(2S-1) + g\mu_B(H_0 + H_A^s)\end{aligned}$$

CHAPITRE 4. ÉTUDE DES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES D'UN
SYSTÈME ANTIFERROMAGNÉTIQUE

Les solutions de l'équation (4.30) représentent les modes de volume, de plus leur résolution numérique doit se faire en accord avec la condition $|\rho_z| = 1$.

En se basant sur les relations (4.6), nous obtenons les équations donnant les énergies des modes de surface pour chaque plan atomique et ceci en fonction de l'amplitude de précession des ondes de spin.

Pour n=1

$$\begin{aligned} \left[\frac{E}{J\varphi(a)} - \omega_0^s \right] U_1^A + \left[-4\gamma_{ij}^{\parallel} \varepsilon^{\parallel} \right] U_1^B + \left[-1 \right] U_2^B &= 0 \\ \left[\frac{E}{J\varphi(a)} + \omega_0^s \right] U_1^B + \left[+4\gamma_{ij}^{\parallel} \varepsilon^{\parallel} \right] U_1^A + \left[+1 \right] U_2^A &= 0 \end{aligned} \quad (4.31)$$

Pour n=2

$$\begin{aligned} \left[\frac{E}{J\varphi(a)} - \omega_0 \right] U_2^A + \left[-4\gamma_{ij}^{\parallel} \right] U_2^B + \left[-\varepsilon^{\parallel} \right] U_1^B + \left[-1 \right] U_3^B &= 0 \\ \left[\frac{E}{J\varphi(a)} + \omega_0 \right] U_2^B + \left[+4J\gamma_{ij}^{\parallel} \right] U_2^A + \left[+1 \right] U_1^A + \left[+1 \right] U_3^A &= 0 \end{aligned} \quad (4.32)$$

Pour n=3

$$\begin{aligned} \left[\frac{E}{J\varphi(a)} - \omega_0 \right] U_3^A + \left[-4\gamma_{ij}^{\parallel} \right] U_3^B + \left[-1 \right] U_2^B + \left[-1 \right] U_4^B &= 0 \\ \left[\frac{E}{J\varphi(a)} + \omega_0 \right] U_3^B + \left[+4\gamma_{ij}^{\parallel} \right] U_3^A + \left[+1 \right] U_2^A + \left[+1 \right] U_4^A &= 0 \end{aligned} \quad (4.33)$$

⋮

4.3. INFLUENCE DU COUPLAGE BIQUADRATIQUE ET D'ANISOTROPIE UNIAXIALE SUR LES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES DE SURFACE

Pour $n > 3$

$$\begin{aligned} \left[\frac{E}{J\varphi(a)} - \omega_0 \right] U_n^A + \left[-4\gamma_{ij}^{\parallel} \right] U_n^B + \left[-1 \right] U_{n-1}^B + \left[-1 \right] U_{n+1}^B &= 0 \\ \left[\frac{E}{J\varphi(a)} + \omega_0 \right] U_n^B + \left[+4\gamma_{ij}^{\parallel} \right] U_n^A + \left[+1 \right] U_{n-1}^A + \left[+1 \right] U_{n+1}^A &= 0 \end{aligned} \quad (4.34)$$

Comme nous l'avons décrit précédemment, la matrice dynamique des états localisés de surface $M_s(E, \varepsilon^{\parallel}(a), D, D_s, a, \rho_z)$ ³ est déduite à partir de la forme matricielle des équations ci-dessus et de la matrice décrivant les équations de continuité des champs de précession volumique et surfacique (2.104). La résolution numérique de $\det|M_s| = 0$ permet d'obtenir les états localisés de surface en appliquant la condition que $|\rho_z| < 1$.

³nous décrirons dans l'Annexe D les éléments de matrices $M_s(6 \times 6)$ de la matrice dynamique des états localisés de surface (100) à couplages bilinéaire et biquadratique

4.3.1 Analyse et discussion des résultats

L'objectif que nous nous sommes fixés dans ce travail est d'analyser, dans le cadre d'un modèle simple, l'évolution des modes localisés associés au volume et à la surface en présence de l'interaction d'échange biquadratique et de l'anisotropie uniaxiale en plus de l'interaction d'échange.

Dans un premier temps, nous présentons l'influence de l'interaction biquadratique et de l'anisotropie uniaxiale sur le spectre des ondes de spin dans le cas d'une surface libre (en absence de relaxation et/ou de reconstruction). Cette configuration correspond alors à la condition où l'échange de surface est égal à celui du volume $J_s = J$ ($\varepsilon^{\parallel} = 1$). Ainsi, les calculs sont effectués pour différentes valeurs du paramètre d'échange biquadratique a . De plus, les résultats obtenus sont très satisfaisants et sont en accord avec ceux trouvés par Čelić et al [104]. Dans un second temps, nous étudions l'évolution des états localisés en fonction du paramètre d'échange ε^{\parallel} pour différentes valeurs d'anisotropie uniaxiale.

Comme nous l'avons déjà fait remarquer l'ensemble des modes propagants est obtenu à partir de l'équation (4.30) avec la condition $|\rho| = 1$. De cette condition, nous avons pu délimiter le domaine de précession des spins de volume qui correspond à un continuum d'énergie d'excitation de volume, que nous avons représenté sur les figures en zone hachurée. Rappelons que cette dernière est une projection des états volume sur la zone de Brillouin de surface.

Pour déterminer la zone de dispersion des magnons de surface, il suffit de trouver les racines (ρ_z) de l'équation numérique $\det(M_s) = 0$ avec la condition que $|\rho_z| < 1$. A savoir que, pour chaque racine obtenue, il correspond alors un mode de surface dépendant de (E^2/J^2) et de $(4-\omega_q)$. Pour ces solutions, les amplitudes de précession des ondes de spin subissent un amortissement exponentiel en se propageant dans la zone du volume. Ainsi, le profil de ces solutions représente la propagation des ondes de spin de surface suivant la direction normale à celle ci et décrit l'évolution des branches des modes localisés. Il est important de noter que ces branches peuvent apparaître ou non, sur la majeure partie de la zone de Brillouin. Dans certains cas, ces branches peuvent être observées seulement à partir d'une valeur supérieure à une valeur critique ω_q^c . Autrement dit, elles se trouvent dans un état de dégénéré $[(E_B^2)/(J^2)](\omega_q^c) = [(E_s^2)/(J^2)](\omega_q^c)$.

4.3. INFLUENCE DU COUPLAGE BIQUADRATIQUE ET D'ANISOTROPIE UNIAXIALE SUR LES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES DE SURFACE

La figure (4.6) présente les résultats obtenus pour une surface libre en faisant varier la valeur du paramètre biquadratique a dans l'intervalle $[0, 1]$. Ainsi, pour toutes les valeurs caractéristiques à a , il résulte uniquement des branches acoustiques présentant des *Cut-off*. Un résumé des valeurs des énergies de ces *Cut-off* est présenté dans le tableau ci dessous :

a	0	0.2	0.4	0.6
ω_q^c	3.456	3.080	2.877	1.491
$\frac{E_s^2}{J^2} = \frac{E_B^2}{J^2}$	16.250	14.285	10.55	8.10

TAB. 4.1 – Énergies des "Cut-off" acoustiques pour différentes valeurs du paramètre biquadratique a .

Nous montrons sur le tableau (4.1) que pour un jeu donné de paramètres, les valeurs attribuées à a diminuent l'énergie de l'onde de surface. Dans un souci de clarté, il nous paraît important de donner quelques explications sur l'influence du paramètre biquadratique a sur les modes de surface. En s'appuyant sur la figure (FIG.4.7), nous remarquons que le nombre de modes de surface dépend particulièrement des valeurs attribuées à a . En effet, dans la limite où la valeur de a est égale à 1, le couplage bilinéaire se confond avec le couplage biquadratique. Cette situation conduit probablement à l'existence d'une compétition entre ces deux couplages. Par conséquent, aucun mode de surface ne peut apparaître. Il est important de noter que les résultats obtenus sont valables pour $a < a_c = 0.6$. Pour une valeur de a supérieure à cette valeur critique $a_c = 0.6$, il apparaît une configuration instable. Par exemple, pour $a \rightarrow 1$ ($\varphi(a) \rightarrow 0$), l'énergie des modes localisés est indépendante du vecteur d'onde k et les équations traduisant les amplitudes de spin pour chaque plan atomique sont découplées, ce qui donne lieu à l'apparition des ondes progressives dites "consistent progressive waves" [105]. Il ne faut cependant pas perdre de vue que nos calculs sont obtenus en considérant l'interaction aux premiers voisins.

Si nous élargissons la portée de l'interaction aux seconds voisins, le système d'équations est alors à nouveau couplé quelque soit la valeur de a , d'où l'absence d'ondes de spin de type "consistent progressive waves" [106].

Nous venons de traiter le cas simple d'un système antiferromagnétique semi infini présentant une surface libre. Nous allons maintenant donner quelques exemples qui illustrent l'évolution des modes localisés dans le cas où la première couche de surface est perturbée ($\varepsilon^{\parallel} \neq 1$). Nous allons de plus considérer l'influence de l'anisotropie uniaxiale sur ces modes. Nous verrons aussi qu'il est nécessaire de distinguer les modifications apportées par cette anisotropie sur le spectre des ondes de spin dans le cas où sa valeur est nulle ou non nulle. En absence de l'anisotropie uniaxiale, la figure (FIG.4.8) montre la présence des branches acoustiques (A_1, A_2, A_3) et des branches optiques (O_1, O_2, O_3) pour différentes valeurs de (ε^{\parallel}).

Toutes ces branches apparaissent dans la majeure partie de la zone de Brillouin sauf A_1 et O_3 . Ces dernières présentent, respectivement, des points d'intersection avec la bande de volume *Cut-off* à ($\omega_q^{cA1} \approx 2.04, E_s^2 = E_B^2 \approx 20.521$) et à ($\omega_q^{cO1} \approx 0.437, E_s^2 = E_B^2 \approx 33.659$).

Notons par ailleurs que les modes de surface apparaissent pour une certaine valeur de (ε^{\parallel}). En effet, dans l'intervalle de valeurs $1.207 \leq \varepsilon^{\parallel} \leq 1.25$, les modes de surface se croisent avec les modes de volume par conséquent ils sont rejetés. Les solutions de ces modes ne respectent pas la condition correspondant aux modes évanescents de surface $|\rho| < 1$.

Nous allons à présent considérer la situation pour laquelle le couplage en surface est ferromagnétique ; autrement dit les valeurs attribuées à (ε^{\parallel}) sont négatives.

En fait, pour toute valeur de $\varepsilon^{\parallel} < -0.207$, il apparaît un phénomène nouveau : (i) Les courbes de dispersion des ondes de spin de surface sont strictement des branches acoustiques. (ii) Ces modes acoustiques se présentent en deux branches de surface pour chaque valeur de ε^{\parallel} attribuée , comme l'illustre la figure (FIG.4.9). Ainsi, (A_2, A_3) sont des branches complètes et se raccordent tangentiellement avec la bande de volume, la branche A_1 présente un *Cut-off* acoustique à $\omega_q^{cA1} \approx 0.491$. De plus, les branches (A'_1, A'_2, A'_3) présentent, respectivement, pour $E^2 = 0$ une valeur $\omega_q^{A'_{i=1,2,3}} \approx 0.846, 0.560, 0.392$, d'ailleurs nous avons considéré seulement les magnons de surface à la limite d'énergie $E^2 \geq 0$. Dans le domaine d'énergie négative, il apparaît une instabilité des modes de surface. Dans ce cas, les solutions obtenues sont rejetées. En somme, pour les valeurs négatives de ε^{\parallel} , le couplage surface/bulk est, respectivement, ferromagnétique et antiferromagnétique ; ceci correspond à une

4.3. INFLUENCE DU COUPLAGE BIQUADRATIQUE ET D'ANISOTROPIE UNIAXIALE SUR LES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES DE SURFACE

reconstruction de surface.

Nous allons maintenant nous intéresser à l'influence de l'anisotropie uniaxiale sur l'évolution des modes localisés. Pour analyser cet effet, nous envisageons le cas $S = 1$, $a = 0.5$, $\omega_A = \omega_A^s = 0$ et $D, D_s > 0$. Pour interpréter les résultats de cette influence, nous considérerons trois situations classiques : $D_s = D$, $D_s > D$ et $D_s < D$.

1. *Cas $D_s = D = J$.* La figure (FIG.4.10) indique le spectre des branches acoustiques pour $\varepsilon^{\parallel} = 1.1825, 1, 0.5$ et -0.3875 . Il apparaît alors trois branches complètes (A_2, A_3, A_4) et une branche, (A_1), présentant un *Cut-off* acoustique. De plus les énergies de ces branches diminuent au fur à mesure que la valeur de (ε^{\parallel}) décroît. Il est important de noter que pour la valeur négative de (ε^{\parallel}), les excitations correspondantes à la branche (A_4) (FIG.4.11) ont une partie d'énergie négative (la courbe de dispersion ne part pas de l'origine). Cet effet se remarque bien sur la figure (FIG.4.11) où nous avons effectué un agrandissement de la branche (A_4) pour une meilleure lecture. Cette partie d'énergie négative ne définit pas d'excitations magnétiques au sens propre. Nous dirons donc qu'il y a eu reconstruction de surface. Par conséquent, l'état fondamental du système étudié devient instable et ceci correspond à une réorientation des spins de surface.

2. *Cas $D_s > D = 0$.* Étudions le cas où nous tenons compte seulement de l'anisotropie uniaxiale de surface. L'objectif de ce cas est de montrer spécifiquement les modifications que peuvent apporter les paramètres de surface ($D_s, \varepsilon^{\parallel}$) sur le spectre des ondes de spin de surface (FIG.4.12). En fait, pour les valeurs attribuées à D_s et à ε^{\parallel} , il apparaît trois branches acoustiques : les branches (A_1, A_2) ont, respectivement, toutes un point d'intersection avec le bulk à $\omega_q^{cA^1} \approx 1.877$ et $\omega_q^{cA^1} \approx 3.421$, la branche A_3 apparaît dans la majeure partie de la zone de Brillouin. Il est important de noter que le spectre des ondes de spin nous renseigne non seulement sur la nature des modes localisés associés au volume et à la surface mais montre également le rôle joué par l'anisotropie uniaxiale de surface dans l'apparition des excitations magnétiques de surface et ceci, il est utile de le souligner, même en l'absence de l'interaction d'échange. L'illustration est décrite par la courbe de dispersion (A_2) (cf.FIG.4.12). D'autre part, même si la valeur de ε^{\parallel} est négative, il en résulte une branche acoustique dans les très basses fréquences. Ceci explique la diminution de la fréquence de précession des amplitudes de spin d'où l'apparition de modes mous.

Ce qui augure d'une instabilité probablement de structure en surface, pouvant éventuellement engendrer un changement de phase magnétique.

Par ailleurs, dans la situation où $D_s > D$, l'anisotropie uniaxiale induit un décalage énergétique très prononcé entre les modes de surface (FIG.4.12).

3. *Cas* $D_s < D = J$. Dans ce cas de figure, nous observons non seulement des modes acoustiques et optiques mais nous constatons également une coexistence de ces modes. En effet, pour les valeurs $\varepsilon^{\parallel} = 1.625$ et 1.75 , les branches acoustiques (A_1, A_2) se raccordent, respectivement, au bulk à $\omega_q^{cA1} \approx 3.070$ et à $\omega_q^{cA2} \approx 3.378$ puis repartent également en se raccordant avec la bande supérieur du volume pour donner des solutions optiques (O_1, O_2) (FIG.4.13). Par ailleurs, pour la valeur de $\varepsilon^{\parallel} = 2.192$, la branche optique (O_3) apparaît dans la majorité de la zone de Brillouin pour une énergie minimale $E^2(\omega_q \rightarrow 4) \approx 60$.

Il est intéressant de constater que lorsque l'anisotropie du volume est supérieure à celle de la surface, l'écart énergétique entre les modes acoustiques est faible. L'illustration du rétrécissement des branches (A_1, A_2, A_3) (FIG.4.13) est représentée sous une forme grossissante pour une meilleure visualisation (FIG.4.14).

4.3. INFLUENCE DU COUPLAGE BIQUADRATIQUE ET D'ANISOTROPIE UNIAXIALE SUR LES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES DE SURFACE

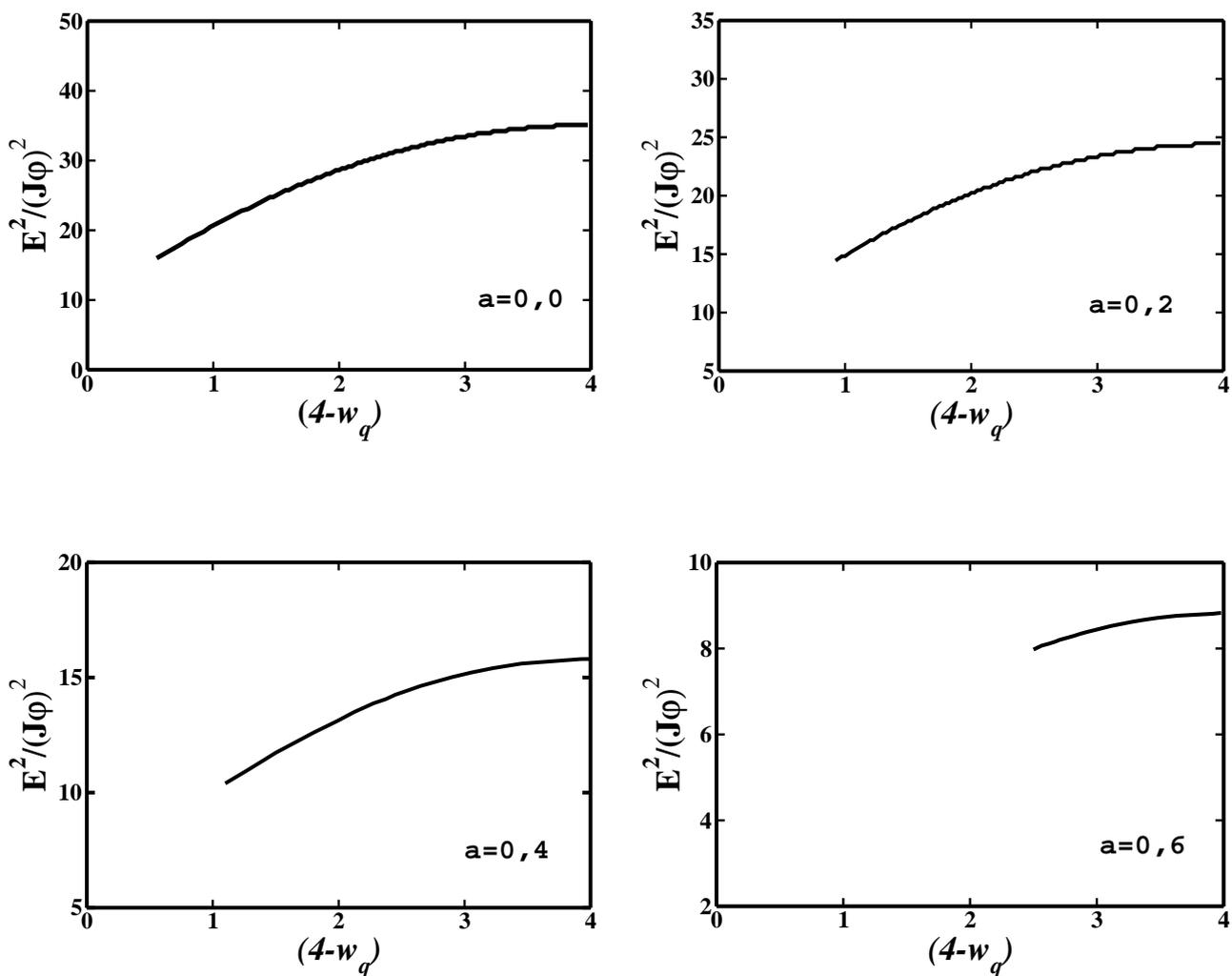


FIG. 4.6 – Excitations magnétiques de volume (aire hachurée) et de surface (100) (lignes en traits gras). L'énergie des ondes acoustiques est représentée en fonction du paramètre $4 - \omega_q = 4 - 2(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))$. Solutions obtenues en fonction de a pour différentes valeurs de $\varepsilon^{\parallel} = 1$, $\frac{D}{J} = 0.75$ et $\frac{D_s}{J} = 1$.

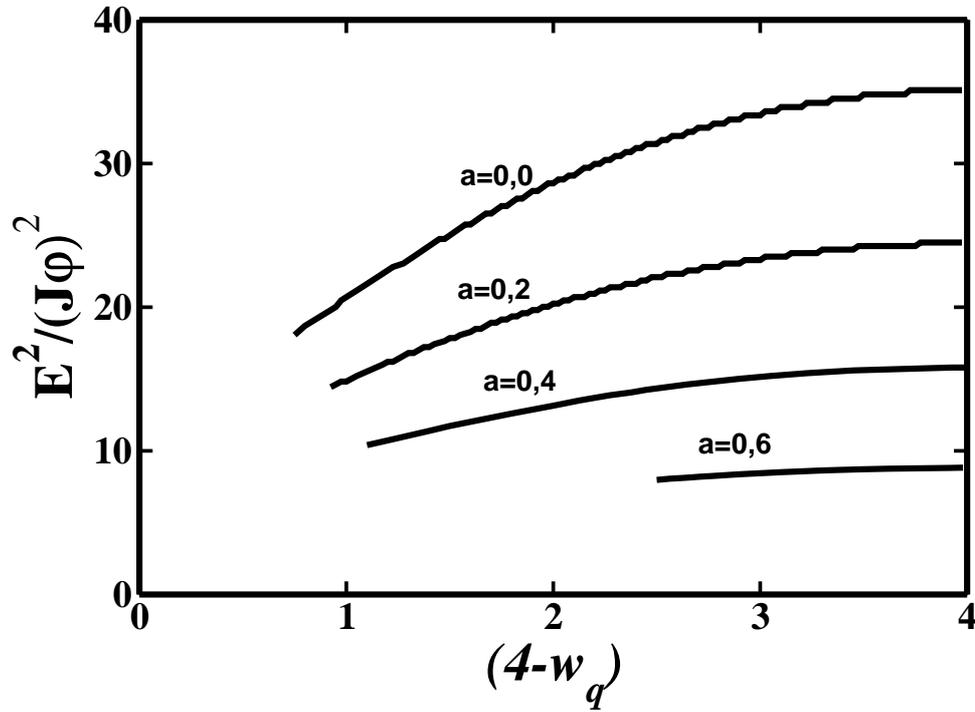


FIG. 4.7 – Évolution des états localisés de surface pour différentes valeurs de a . Le paramètre de couplage biquadratique a est fixé à (0,0, 0,2, 0,4 et 0,6).

4.3. INFLUENCE DU COUPLAGE BIQUADRATIQUE ET D'ANISOTROPIE UNIAXIALE SUR LES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES DE SURFACE

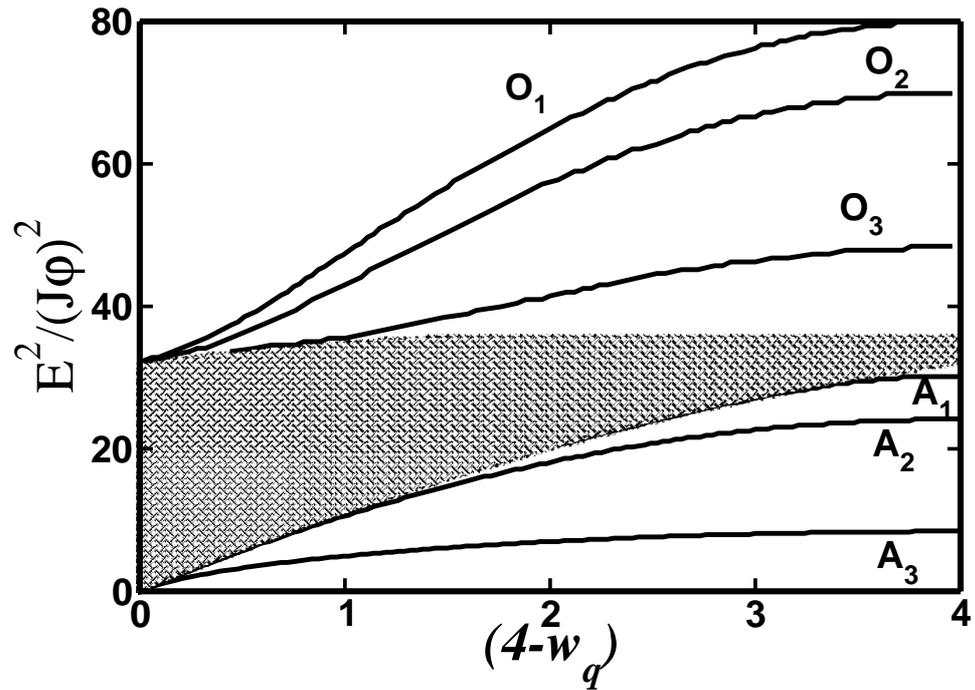


FIG. 4.8 – Spectre de dispersion des ondes de spin de surface et de volume. Les modes de surface sont obtenus pour des valeurs $a \neq 0$ et $D_s = D = 0$. A_1 , A_2 et A_3 représentent les branches acoustiques obtenues, respectivement, pour les valeurs $\varepsilon^{\parallel} = 1.15$, $\varepsilon^{\parallel} = 1$ et $\varepsilon^{\parallel} = 0.5$. O_1 , O_2 et O_3 représentent les branches optiques obtenues, respectivement, pour les valeurs $\varepsilon^{\parallel} = 2$, $\varepsilon^{\parallel} = 1.854$ et $\varepsilon^{\parallel} = 1.5$.

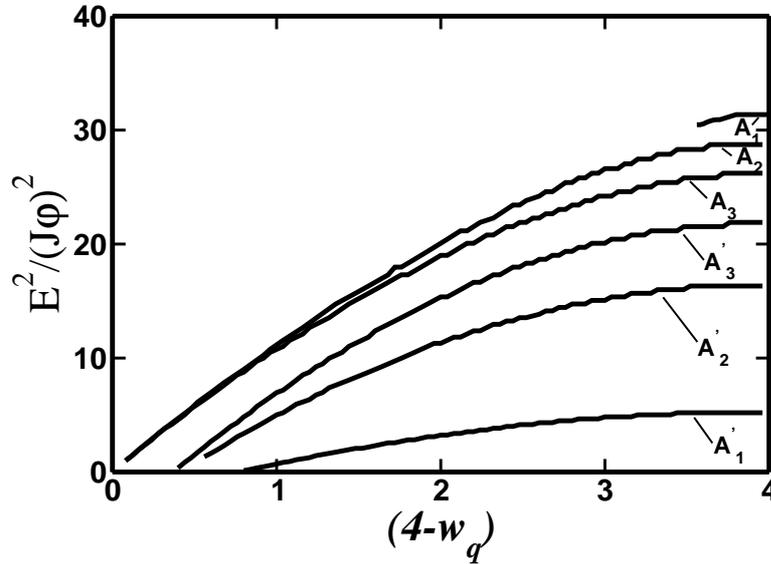


FIG. 4.9 – Spectre de dispersion des branches acoustiques dans le cas d'un couplage ferromagnétique à la surface. $A_1A_1' : \varepsilon^{\parallel} = -0.75$, $A_2A_2' : \varepsilon^{\parallel} = -1.125$, $A_3A_3' : \varepsilon^{\parallel} = -1.2125$.

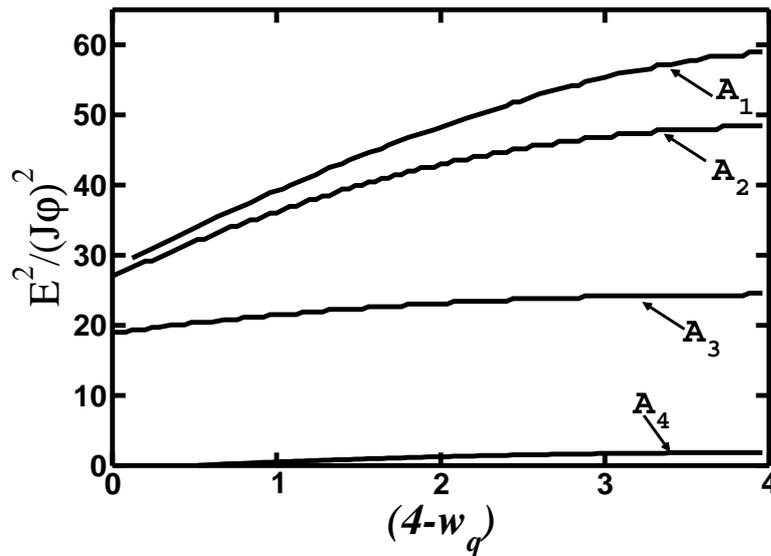


FIG. 4.10 – Spectre de dispersion des branches acoustiques en tenant compte de l'anisotropie uniaxiale ($D = D_s$). Les paramètres utilisés sont : $\omega_0 = 8$, $D = D_s = J$ et $a = 0.5$. $A_1 : \varepsilon^{\parallel} = 1.1825$, $A_2 : \varepsilon^{\parallel} = 1$, $A_3 : \varepsilon^{\parallel} = 0.5$, $A_4 : \varepsilon^{\parallel} = -0.3875$.

4.3. INFLUENCE DU COUPLAGE BIQUADRATIQUE ET D'ANISOTROPIE UNIAXIALE SUR LES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES DE SURFACE

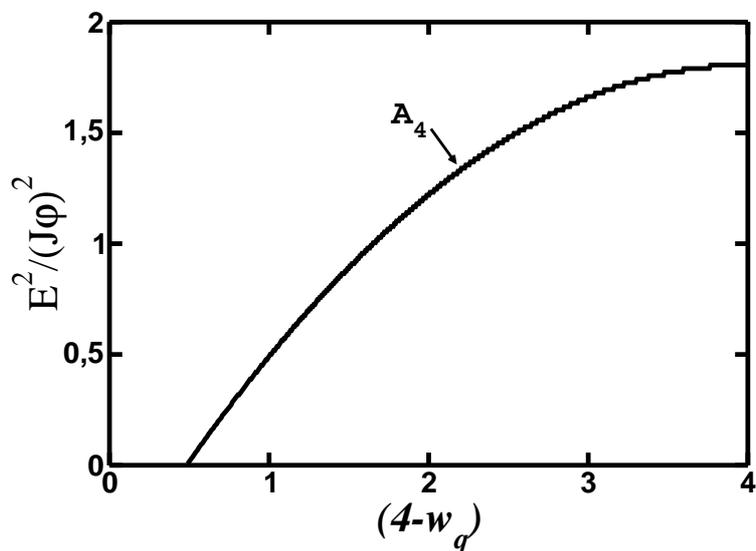


FIG. 4.11 – Illustration de la branche acoustique A_4 de la figure (FIG.4.10).

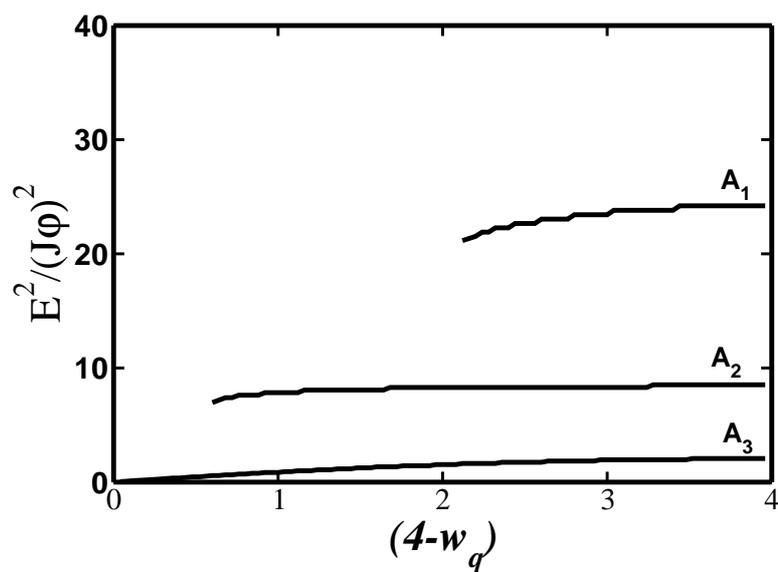


FIG. 4.12 – Spectre de dispersion des branches acoustiques en tenant compte de l'anisotropie uniaxiale ($D < D_s$). Les paramètres utilisés sont : $\omega_0 = 6$, $D = 0$, $D_s = 0.5$ et $a = 0.5$. $A_1 : \varepsilon^{\parallel} = 0.5$, $A_2 : \varepsilon^{\parallel} = 0$, $A_3 : \varepsilon^{\parallel} = -0.3625$.

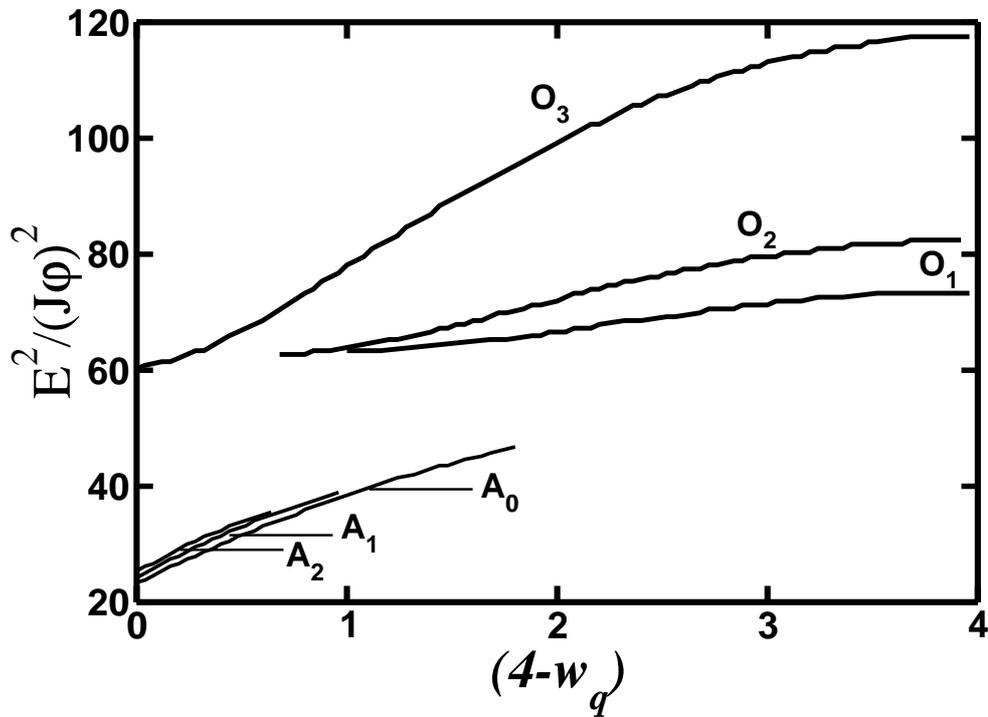


FIG. 4.13 – Spectre de dispersion des branches acoustiques et optiques en tenant compte de l'anisotropie uniaxiale ($D > D_s$). Les paramètres utilisés sont : $\omega_0 = 8$, $D = 1$, $D_s = 0.5$ et $a = 0.5$. Les modes acoustiques A_0 , A_1 et A_2 correspondent, respectivement, aux valeurs $\varepsilon^{\parallel} = 1.5$, $\varepsilon^{\parallel} = 1.625$ et $\varepsilon^{\parallel} = 1.75$. Les modes optiques O_1 , O_2 et O_3 correspondent, respectivement, aux valeurs $\varepsilon^{\parallel} = 1.625$, $\varepsilon^{\parallel} = 1.75$ et $\varepsilon^{\parallel} = 2.192$.

4.3. INFLUENCE DU COUPLAGE BIQUADRATIQUE ET D'ANISOTROPIE UNIAXIALE SUR LES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES DE SURFACE

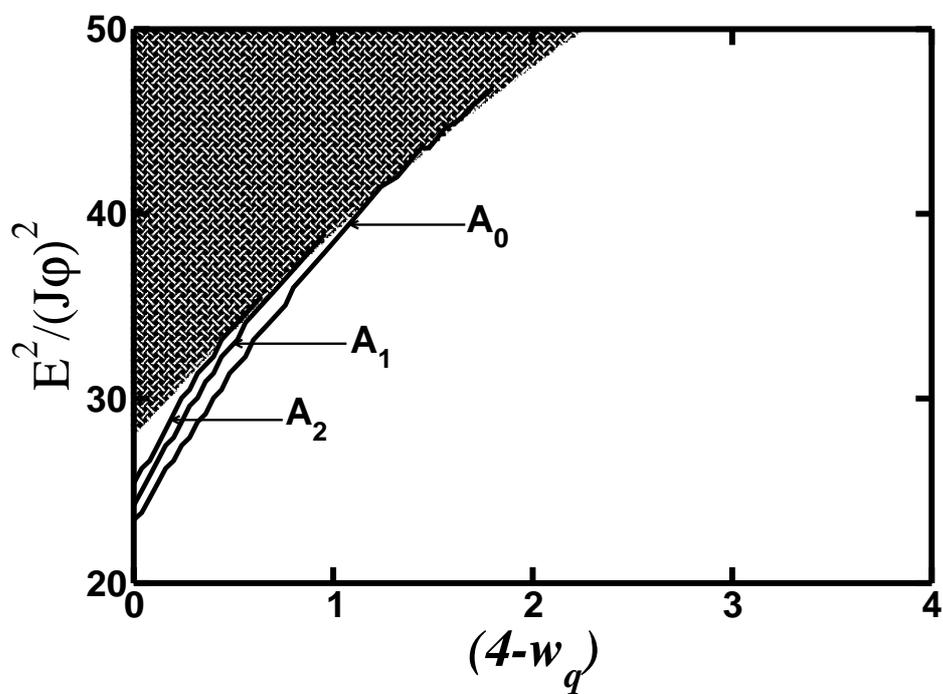


FIG. 4.14 – Illustration des branches acoustiques A_0 , A_1 et A_2 de la figure (FIG.4.13).

4.3.2 Conclusion du chapitre

Nous avons développé une étude théorique à l'effet d'analyser les excitations magnétiques associées au volume et à la surface d'un réseau semi infini antiferromagnétique à deux sous-réseaux. Le développement de cette théorie a permis, à partir d'un Hamiltonien généralisé de type Heisenberg incluant les énergies d'interaction étendues aux premiers voisins, de décrire les relations de dispersion des ondes de spin de surface. Nous avons aussi décrit une méthode de résolution pour le calcul des énergies des ondes de spin pour des modèles tridimensionnels. Ce procédé de calcul est décrit sous forme de couches atomiques antiferromagnétiques, où la première couche est perturbée en considérant que l'interaction d'échange en surface est différente de celle du volume.

La description des équations de continuité des champs de précession de spin à l'interface surface/volume est l'une des méthodes principales utilisées pour résoudre le problème des magnons de surface, lorsqu'il existe une brisure de symétrie suivant la direction normale à la surface. L'originalité de notre travail est d'utiliser cette méthode en remontant à des informations sur l'évolution des états localisés de surface dans des systèmes tridimensionnels cubiques antiferromagnétiques.

Nous avons décrit le comportement général du spectre des ondes de spin de surface en fonction du paramètre d'échange ε^{\parallel} . Le rapport d'échange ε^{\parallel} joue un rôle déterminant dans l'apparition des modes acoustiques et optiques. Il est également déterminant dans l'existence des *Cut-off*. Pour $\varepsilon^{\parallel} < 0$ et dans la domaine d'existence de modes de fréquence négative, il apparaît une instabilité conduisant à une réorientation des spins de surface.

Dans la première partie de ce travail, nous avons étudié le comportement des états localisés pour différentes orientations cristallographiques de surface. Nos résultats montrent que pour une orientation de surface, la symétrie d'interaction de cette dernière subit des changements et affecte donc l'évolution des modes localisés avec l'apparition d'ondes de surface (acoustique et optique).

Dans la seconde partie, en plus de l'échange bilinéaire, l'interaction biquadratique et l'anisotropie uniaxiale ont été introduites afin d'étudier l'influence de ces paramètres sur le comportement des modes de spin de surface. Ces investigations ont conduit à des résultats que l'on peut classer principalement en trois catégories :

4.3. INFLUENCE DU COUPLAGE BIQUADRATIQUE ET D'ANISOTROPIE UNIAXIALE SUR LES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES DE SURFACE

- a- La contribution du couplage biquadratique, en général, a pour effet de diminuer l'énergie des modes de surface. Elle influe également sur l'existence des "Cut off". De plus, les ondes de spin de surface ne doivent leur existence qu'à des valeurs bien précises du paramètre biquadratique. Ceci n'est vrai que dans le cas où l'interaction d'échange est limitée aux plus proches voisins.

- b- La présence de l'anisotropie uniaxiale engendre un élargissement ou rétrécissement entre les modes localisés particulièrement dans le domaine d'existence des modes acoustiques. De plus, le rôle de l'anisotropie uniaxiale sont illustrés de manière significative (comme décrite ci-dessus) en fonction du rapport de D/D_s . Lorsque $D_s > D$, un élargissement est obtenu. Dans le cas contraire $D_s < D$ un rétrécissement assez significatif est observé. En outre, l'existence de l'anisotropie uniaxiale implique l'apparition des ondes de spin de surface même en absence de l'interaction de d'échange.

- c- La présence simultanément du couplage biquadratique et de l'anisotropie uniaxiale, il en résulte l'existence des modes acoustiques et des modes optiques pour une même valeur de ε^{\parallel} .

Cette étude a clairement démontré qu'un modèle basé sur différentes contributions (géométries de surface, couplage bilinéaire, couplage biquadratique et anisotropie uniaxiale) est approprié pour décrire l'évolution des ondes de spin de surface. D'ailleurs, les résultats numériques [107] que nous venons de rapporter s'avèrent en accord avec ceux obtenus analytiquement par Celic [104] et Pavkov [106] en utilisant la méthode de Dewames et Wolfram [2] [35]. Hormis la méthode des fonctions de Green qui est un outil mathématique efficace pour décrire les modes localisés de surface, la méthode proposée dans ce travail pour résoudre le problème de brisure de symétrie de translation a permis aussi d'étudier les dispersions des ondes de spin de surface.

*CHAPITRE 4. ÉTUDE DES EXCITATIONS MAGNÉTIQUES D'UN
SYSTÈME ANTIFERROMAGNÉTIQUE*

Conclusion générale et perspectives

L'un des enjeux de l'étude des systèmes magnétiques semi infinis est de comprendre le rôle que joue la surface sur les propriétés des ondes de spin afin de permettre l'analyse des propriétés magnétiques des films minces, des multicouches, super réseaux, Effet, l'introduction de la perturbation créée par la surface engendre une brisure de symétrie. Ainsi, les propriétés physiques de la surface se trouvent fortement modifiées par rapport aux propriétés volumiques. La thèse présentée est consacrée à l'étude à la dynamique des spins dans des systèmes de basse dimension : (i) Implantation de défauts. (ii) Géométrie de surface. (iii) Influence de l'échange biquadratique et de l'anisotropie uniaxiale.

Dans la première partie de cette thèse, nous avons donné un aperçu assez qualitatif des excitations magnétiques en insistant sur la présentation de l'outil théorique qui régit les champs de précession de spin. Différentes approches sont alors présentées tout en notant que cette modeste introduction est dans la lignée des connaissances adaptées à des systèmes infinis où les conditions aux limites périodiques sont alors bien connues. Le souci de familiariser le lecteur à un certain ensemble de définitions et de concepts nous a paru indispensable dans la structuration de ce manuscrit. Il est évident que l'existence d'une brisure et d'une réduction de symétrie rend indispensable l'élaboration d'outils théoriques nouveaux à l'effet d'appréhender cette contrainte. Partant de l'outil théorique des fonctions de Green qui rendent substantiellement compte des excitations collectives dans un système physique, nous avons adopté une démarche théorique basée sur l'idée de décrire la continuité des champs de précession de spin au voisinage de l'interface volume-surface. Cette interface rend alors compte des excitations magnétiques localisées associées aussi bien à la surface qu'au volume. Cette dissociation tient compte de tous les ingrédients de calculs physiques susceptibles de caractériser le modèle d'interaction qui nous concerne (inter-

action d'échange, magnitude de spin, orientation de surface, couplage biquadratique, anisotropie uniaxiale).

Dans la deuxième partie de ce manuscrit, nous avons présenté, en premier lieu, une méthode basée sur une illustration d'un formalisme théorique pour calculer les modes localisés de surface pour une orientation (110) d'un système cubique ferromagnétique semi infini. De cette illustration, nous avons pu examiner l'évolution des modes localisés de surface en fonction des facteurs de structures et des paramètres d'échange. Nous avons montré la possibilité d'apparition simultanée des modes acoustiques et optiques et nous avons déterminé le rôle des interactions d'échange à la surface. En second lieu, nous nous sommes intéressés à l'étude des excitations magnétiques ferromagnétique résultant de la réduction de symétrie induite par un plan de défauts et de la brisure de symétrie de translation due à la présence de la surface (001).

Nous avons montré, que plusieurs modes localisés peuvent se produire et la modification des spectres d'énergie peut être interprétée par l'aspect énergétique des modes de surface et d'impureté.

De plus, nous avons démontré que les fluctuations de spin, issus, soit de la surface soit du volume ou bien du plan de défauts, dépendent de la nature de l'interaction d'échange entre les sites magnétiques, des valeurs quantiques de spin et de la position de la couche d'impureté par rapport à la surface.

Dans la dernière partie de cette thèse, nous avons tenté de comprendre l'évolution des modes de surface d'un cristal cubique simple antiferromagnétique. Nous avons d'abord traité la localisation des modes en tenant compte de l'influence des orientations cristallographiques de la surface (100) et (110) sur ces modes. Nous avons montré que l'apparition des modes acoustiques et optiques dépend dans le premier cas (100) uniquement de la valeur de l'interaction d'échange (surface/volume). Dans le second cas (110), les modes de surface subissent non seulement des modifications selon les valeurs des interactions d'échange mais aussi selon la direction de propagation de ces modes. En effet, lorsque l'onde de spin se propage suivant l'axe (Oz), il résulte des modes acoustiques pour $\varepsilon^{\parallel} < 1$ et des modes optiques pour $\varepsilon^{\parallel} > 1$. Dans le cas d'une propagation suivant l'axe (Oy), nous avons observé uniquement des modes acoustiques pour $\varepsilon^{\parallel} \leq 4$. Au delà de ce seuil ($\varepsilon^{\parallel} \geq 4$), nous avons constaté qu'aucun mode n'est localisé. Cela est probablement lié à la diminution de la fréquence de précession des spins de surface.

En plus de la contribution de couplage bilinéaire, nous avons ensuite tenté d'étendre l'analyse des modes localisés de surface en prenant en compte le couplage biquadratique et l'anisotropie uniaxiale. D'une part, nous avons démontré que la contribution du couplage biquadratique tend à diminuer l'énergie des modes de surface, d'autre part l'introduction de l'anisotropie uniaxiale est responsable de l'élargissement ou du rétrécissement entre ces modes. Par ailleurs, l'introduction simultanée du couplage biquadratique et de l'anisotropie uniaxiale, nous a permis de mettre en évidence la coexistence des modes acoustiques et optiques pour une même valeur de paramètre d'échange ε^{\parallel} .

En conclusion générale, nous avons utilisé dans cette étude un modèle simplifié aussi bien du point de vue géométrique que de celui des valeurs des interactions d'échange à la surface. Ces résultats sont donc qualitatifs dans l'application aux surfaces réelles. En outre, nous avons montré la capacité de la méthode de raccordement à donner une bonne description de l'évolution des modes de volume et de surface pour des systèmes magnétiques de basse dimension. La condition d'application de cette méthode est la prise en compte de la perte de symétrie due à la surface.

Par ailleurs, nous envisageons une autre extension de la méthode de raccordement à l'étude théorique des ondes de spin de surface ou d'interface dans le cas des films minces et des multicouches magnétiques pour différentes orientations de spin en englobant les effets d'anisotropie de surface.

Il serait intéressant d'étudier le comportement des modes localisés de surface et d'interface en présence de plusieurs plans de défauts dans le cas d'un réseau tridimensionnel ferromagnétique. Les simulations qui seront menées dans l'avenir pourront inclure les effets du champ magnétique extérieur et du champ anisotropie.

Signalons également que notre formalisme peut s'appliquer au cas des super-réseaux ferromagnétiques ou antiferromagnétiques, cette théorie peut aussi être complétée en tenant compte du couplage biquadratique.

Annexe A

Annexe

A.1 Eléments de la matrice dynamique M_{ml}^{Ns}

Nous présentons les éléments de matrice dynamique $M_{ml}^{Ns}(N+3, N+3)$ décrivant les états localisés de surface et d'impureté pour un réseau cubique ferromagnétique présentant un plan de défaut.

1. Plan de défaut implanté à la troisième couche à partir de la surface, $N=3$.

$$M_{ml}^{3s}(6, 6) \equiv$$

$$M_{1,1}^{3s} = \frac{E}{JS} + 4\varepsilon_s(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - \varepsilon'_s - \frac{H_o}{JS}$$

$$M_{1,2}^{3s} = M_{2,1}^{3s} = \varepsilon'_s \gamma_{ij}^{\perp}$$

$$M_{2,2}^{3s} = \frac{E}{JS} + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - \varepsilon'_s - \varepsilon'_N - \frac{H_o}{JS}$$

$$M_{2,3}^{3s} = M_{4,3}^{3s} = \varepsilon'_N \gamma_{ij}^{\perp}$$

$$M_{3,2}^{3s} = M_{3,4}^{3s} = \theta \varepsilon'_N \gamma_{ij}^\perp$$

$$M_{3,3}^{3s} = \frac{E}{JS} + 4\theta \varepsilon_N (\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - 2\theta \varepsilon'_N - \frac{H_o}{JS}$$

$$M_{4,4}^{3s} = \frac{E}{JS} + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - 1 - \varepsilon'_N - \frac{H_o}{JS}$$

$$M_{4,5}^{3s} = M_{5,4}^{3s} = M_{6,5}^{3s} = \gamma_{ij}^\perp$$

$$M_{5,5}^{3s} = \frac{E}{JS} + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - 2 - \frac{H_o}{JS}$$

$$M_{5,6}^{3s} = \gamma_{ij}^\perp C(\rho)$$

$$M_{6,6}^{3s} = \left[\frac{E}{JS} + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - 2 - \frac{H_o}{JS} \right] C(\rho) + \gamma_{ij}^\perp C(\rho) \rho$$

2. Plan de défaut implanté à la cinquième couche à partir de la surface, N=5.

$$\begin{aligned}
 M_{ml}^{5s}(8, 8) &\equiv \\
 M_{1,1}^{5s} &= \frac{E}{JS} + 4\varepsilon_s(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - \varepsilon'_s - \frac{H_o}{JS} \\
 M_{1,2}^{5s} &= M_{2,1}^{5s} = \varepsilon'_s \gamma_{ij}^{\perp} \\
 M_{2,2}^{5s} &= \frac{E}{JS} + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - \varepsilon'_s - 1 - \frac{H_o}{JS} \\
 M_{2,3}^{5s} &= M_{3,2}^{5s} = M_{3,4}^{5s} = M_{4,3}^{5s} = M_{6,7}^{5s} = M_{7,6}^{5s} = M_{8,7}^{5s} = \gamma_{ij}^{\perp} \\
 M_{3,3}^{5s} &= \frac{E}{JS} + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - 2 - \frac{H_o}{JS} \\
 M_{4,4}^{5s} &= \frac{E}{JS} + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - 1 - \varepsilon'_N - \frac{H_o}{JS} \\
 M_{4,5}^{5s} &= M_{6,5}^{5s} = \varepsilon'_N \gamma_{ij}^{\perp} \\
 M_{5,4}^{5s} &= M_{5,6}^{5s} = \theta \varepsilon'_N \gamma_{ij}^{\perp} \\
 M_{5,5}^{5s} &= \frac{E}{JS} + 4\theta \varepsilon_N(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - 2\theta \varepsilon'_N - \frac{H_o}{JS} \\
 M_{6,6}^{5s} &= \frac{E}{JS} + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - 1 - \varepsilon'_N - \frac{H_o}{JS} \\
 M_{7,7}^{5s} &= \frac{E}{JS} + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - 2 - \frac{H_o}{JS} \\
 M_{7,8}^{5s} &= \gamma_{ij}^{\perp} C(\rho) \\
 M_{8,8}^{5s} &= \left[\frac{E}{JS} + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - 2 - \frac{H_o}{JS} \right] C(\rho) + \gamma_{ij}^{\perp} C(\rho) \rho
 \end{aligned}$$

3. Plan de défaut implanté à la dixième couche à partir de la surface, $N=10$.

$$M_{ml}^{10s}(13, 13) \equiv$$

$$M_{1,1}^{10s} = \frac{E}{JS} + 4\varepsilon_s(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - \varepsilon'_s - \frac{H_o}{JS}$$

$$M_{1,2}^{10s} = M_{2,1}^{10s} = \varepsilon'_s \gamma_{ij}^{\perp}$$

$$M_{2,2}^{10s} = \frac{E}{JS} + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - \varepsilon'_s - 1 - \frac{H_o}{JS}$$

$$M_{2,3}^{10s} = M_{3,2}^{10s} = M_{3,4}^{10s} = M_{4,3}^{10s} = M_{4,5}^{10s} = M_{5,4}^{10s} = M_{5,6}^{10s} = M_{6,5}^{10s} = \gamma_{ij}^{\perp}$$

$$M_{6,7}^{10s} = M_{7,6}^{10s} = M_{7,8}^{10s} = M_{8,7}^{10s} = \gamma_{ij}^{\perp}$$

$$M_{8,9}^{10s} = M_{9,8}^{10s} = M_{11,12}^{10s} = M_{12,11}^{10s} = M_{13,12}^{10s} = \gamma_{ij}^{\perp}$$

$$M_{3,3}^{10s} = M_{4,4}^{10s} = M_{5,5}^{10s} = M_{6,6}^{10s} = M_{7,7}^{10s} = M_{8,8}^{10s} = \frac{E}{JS} + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - 2 - \frac{H_o}{JS}$$

$$M_{9,10}^{10s} = M_{11,10}^{10s} = \varepsilon'_N \gamma_{ij}^{\perp}$$

$$M_{9,9}^{10s} = M_{11,11}^{10s} = \frac{E}{JS} + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - 1 - \varepsilon'_N - \frac{H_o}{JS}$$

$$M_{10,9}^{10s} = M_{10,11}^{10s} = \theta \varepsilon'_N \gamma_{ij}^{\perp}$$

$$M_{10,10}^{10s} = \frac{E}{JS} + 4\theta \varepsilon_N (\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - 2\theta \varepsilon'_N - \frac{H_o}{JS}$$

$$M_{12,12}^{10s} = \frac{E}{JS} + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - 2 - \frac{H_o}{JS}$$

$$M_{12,13}^{10s} = \gamma_{ij}^{\perp} C(\rho)$$

$$M_{13,13}^{10s} = \frac{E}{JS} + 4(\gamma_{ij}^{\prime\prime} - 1) - 2 - \frac{H_o}{JS} C(\rho) + \gamma_{ij}^{\perp} C(\rho) \rho$$

Annexe B

Annexe

B.1 Eléments de la matrice dynamique $M_s(6 \times 6)$

Nous présentons les éléments de matrice dynamique $M_s(6 \times 6)$ décrivant les états localisés de surface d'un réseau cubique antiferromagnétique (100).

$$M_s^{11} = E - 4\varepsilon_{ij}^{\parallel} - \varepsilon_{ij}^{\perp} - \frac{\omega_{as}}{JS}$$

$$M_s^{12} = -4\varepsilon_{ij}^{\parallel}\gamma_{ij}^{\parallel}$$

$$M_s^{13} = 0$$

$$M_s^{14} = -\varepsilon_{ij}^{\perp}\gamma_{ij}^{\perp}$$

$$M_s^{15} = 0$$

$$M_s^{16} = 0$$

$$M_s^{21} = 4\varepsilon_{ij}^{\parallel}\gamma_{ij}^{\parallel}$$

$$M_s^{22} = E + 4\varepsilon_{ij}^{\parallel} + \varepsilon_{ij}^{\perp} + \frac{\omega_{as}}{JS}$$

$$M_s^{23} = \gamma_{ij}^{\perp}$$

$$M_s^{24} = 0$$

$$M_s^{25} = 0$$

$$M_s^{26} = 0$$

$$\begin{aligned}
 M_s^{31} &= 0 \\
 M_s^{32} &= -\gamma_{ij}^\perp \\
 M_s^{33} &= E - 6 - \frac{\omega_a}{JS} \\
 M_s^{34} &= -4\gamma_{ij}^\parallel \\
 M_s^{35} &= -\gamma_{ij}^\perp C(B, \rho_1) \\
 M_s^{36} &= -\gamma_{ij}^\perp C(B, \rho_2)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 M_s^{41} &= \gamma_{ij}^\perp \\
 M_s^{42} &= 0 \\
 M_s^{43} &= 4\gamma_{ij}^\parallel \\
 M_s^{44} &= E + 6 + \frac{\omega_a}{JS} \\
 M_s^{45} &= \gamma_{ij}^\perp C(A, \rho_1) \\
 M_s^{46} &= \gamma_{ij}^\perp C(A, \rho_2)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 M_s^{51} &= 0 \\
 M_s^{52} &= 0 \\
 M_s^{53} &= 0 \\
 M_s^{54} &= -\varepsilon_{ij}^\perp \gamma_{ij}^\perp \\
 M_s^{55} &= (E - 6 - \frac{\omega_a}{JS})C(A, \rho_1) - 4\varepsilon_{ij}^\parallel C(B, \rho_1) - \varepsilon_{ij}^\perp C(B, \rho_1)\rho_1 \\
 M_s^{56} &= (E - 6 - \frac{\omega_a}{JS})C(A, \rho_2) - 4\varepsilon_{ij}^\parallel C(B, \rho_2) - \varepsilon_{ij}^\perp C(B, \rho_2)\rho_2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 M_s^{61} &= 0 \\
 M_s^{62} &= 0 \\
 M_s^{63} &= \varepsilon_{ij}^\perp \gamma_{ij}^\perp \\
 M_s^{64} &= 0 \\
 M_s^{65} &= (E + 6 + \frac{\omega_a}{JS})C(B, \rho_1) + 4\varepsilon_{ij}^\parallel C(A, \rho_1) + \varepsilon_{ij}^\perp C(A, \rho_1)\rho_1 \\
 M_s^{66} &= (E + 6 + \frac{\omega_a}{JS})C(B, \rho_2) + 4\varepsilon_{ij}^\parallel C(A, \rho_2) + \varepsilon_{ij}^\perp C(A, \rho_2)\rho_2
 \end{aligned}$$

Annexe C

Annexe

C.1 Eléments de la matrice dynamique $M_s(6 \times 6)$

Nous présentons les éléments de matrice dynamique $M_s(6 \times 6)$ décrivant les états localisés de surface d'un réseau cubique antiferromagnétique (110).

$$M_s^{11} = E - 2\varepsilon_{ij}^{\parallel} - 2 - \frac{\omega_{As}}{JS}$$

$$M_s^{12} = -2\varepsilon_{ij}^{\parallel}(1 - \Lambda_z)$$

$$M_s^{13} = 0$$

$$M_s^{14} = -2\varepsilon_{ij}^{\perp}(1 - \Lambda_y)$$

$$M_s^{15} = 0$$

$$M_s^{16} = 0$$

$$M_s^{21} = 2\varepsilon_{ij}^{\parallel}(1 - \Lambda_z)$$

$$M_s^{22} = E + 2\varepsilon_{ij}^{\parallel} + 2 + \frac{\omega_{As}}{JS}$$

$$M_s^{23} = 2\varepsilon_{ij}^{\perp}(1 - \Lambda_y)$$

$$M_s^{24} = 0$$

$$M_s^{25} = 0$$

$$M_s^{26} = 0$$

$$\begin{aligned}
 M_s^{31} &= 0 \\
 M_s^{32} &= -2(1 - \Lambda_y) \\
 M_s^{33} &= E - 6 - \frac{\omega_A}{JS} \\
 M_s^{34} &= -2(1 - \Lambda_z) \\
 M_s^{35} &= -2(1 - \Lambda_y)C(B, \rho_1) \\
 M_s^{36} &= -2(1 - \Lambda_y)C(B, \rho_2)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 M_s^{41} &= 2(1 - \Lambda_y) \\
 M_s^{42} &= 0 \\
 M_s^{43} &= 2(1 - \Lambda_z) \\
 M_s^{44} &= E + 6 + \frac{\omega_a}{JS} \\
 M_s^{45} &= 2(1 - \Lambda_y)C(A, \rho_1) \\
 M_s^{46} &= 2(1 - \Lambda_y)C(A, \rho_2)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 M_s^{51} &= 0 \\
 M_s^{52} &= 0 \\
 M_s^{53} &= 0 \\
 M_s^{54} &= -2(1 - \Lambda_y) \\
 M_s^{55} &= (E - 6 - \frac{\omega_a}{JS})C(A, \rho_1) - 2(1 - \Lambda_z)C(B, \rho_1) - 2(1 - \Lambda_y)C(B, \rho_1)\rho_1 \\
 M_s^{56} &= (E - 6 - \frac{\omega_a}{JS})C(A, \rho_2) - 2(1 - \Lambda_z)C(B, \rho_2) - 2(1 - \Lambda_y)C(B, \rho_2)\rho_2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 M_s^{61} &= 0 \\
 M_s^{62} &= 0 \\
 M_s^{63} &= 2(1 - \Lambda_y) \\
 M_s^{64} &= 0 \\
 M_s^{65} &= (E + 6 + \frac{\omega_{as}}{JS})C(B, \rho_1) + 2(1 - \Lambda_z)C(A, \rho_1) + 2(1 - \Lambda_y)C(A, \rho_1)\rho_1 \\
 M_s^{66} &= (E + 6 + \frac{\omega_{as}}{JS})C(B, \rho_2) + 2(1 - \Lambda_z)C(A, \rho_2) + 2(1 - \Lambda_y)C(A, \rho_2)\rho_2
 \end{aligned}$$

Annexe D

Annexe

D.1 Éléments de la matrice dynamique $M_s(6 \times 6)$

Nous présentons les éléments de matrice dynamique $M_s(6 \times 6)$ décrivant les états localisés de surface d'un réseau cubique semi infini antiferromagnétique (100) en introduisant l'interaction biquadratique et l'anisotropie uniaxiale.

$$\begin{aligned}M_s^{11} &= \frac{E}{J\varphi(a)} - \omega_0^s \\M_s^{12} &= -4\gamma_{ij}^{\parallel} \varepsilon^{\parallel} \\M_s^{13} &= 0 \\M_s^{14} &= -1 \\M_s^{15} &= 0 \\M_s^{16} &= 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}M_s^{21} &= +4\gamma_{ij}^{\parallel}\varepsilon^{\parallel} \\M_s^{22} &= \frac{E}{J\varphi(a)} + \omega_0^s \\M_s^{23} &= +1 \\M_s^{24} &= 0 \\M_s^{25} &= 0 \\M_s^{26} &= 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}M_s^{31} &= 0 \\M_s^{32} &= -1 \\M_s^{33} &= \frac{E}{J\varphi(a)} - \omega_0 \\M_s^{34} &= -4\gamma_{ij}^{\parallel} \\M_s^{35} &= -C(B, \rho_1) \\M_s^{36} &= -C(B, \rho_2)\end{aligned}$$

D.1. ELÉMENTS DE LA MATRICE DYNAMIQUE $M_S(6 \times 6)$

$$M_s^{41} = +1$$

$$M_s^{42} = 0$$

$$M_s^{43} = 4\gamma_{ij}^{\parallel}$$

$$M_s^{44} = \frac{E}{J\varphi(a)} + \omega_0$$

$$M_s^{45} = C(A, \rho_1)$$

$$M_s^{46} = C(A, \rho_2)$$

$$M_s^{51} = 0$$

$$M_s^{52} = 0$$

$$M_s^{53} = 0$$

$$M_s^{54} = -1$$

$$M_s^{55} = \left(\frac{E}{J\varphi(a)} - \omega_0\right)C(A, \rho_1) - 4\gamma_{ij}^{\parallel}C(B, \rho_1) + C(B, \rho_1)\rho_1$$

$$M_s^{56} = \left(\frac{E}{J\varphi(a)} + \omega_0\right)C(A, \rho_2) - 4\gamma_{ij}^{\parallel}C(B, \rho_2) + C(B, \rho_2)\rho_2$$

$$M_s^{61} = 0$$

$$M_s^{62} = 0$$

$$M_s^{63} = +1$$

$$M_s^{64} = 0$$

$$M_s^{65} = \left(\frac{E}{J\varphi(a)} - \omega_0\right)C(B, \rho_1) + 4\gamma_{ij}^{\parallel}C(A, \rho_1) + C(A, \rho_1)\rho_1$$

$$M_s^{66} = \left(\frac{E}{J\varphi(a)} + \omega_0\right)C(B, \rho_2) + 4\gamma_{ij}^{\parallel}C(A, \rho_2) + C(A, \rho_2)\rho_2$$

Bibliographie

- [1] G.Wulff and Z.Krist. On the question of the rate of growth and dissolution of crystal surfaces. *Z. Kristallogr. Mineral*, 34 :449–530, 1901.
- [2] R.E.DeWames and T. Wolfram. Theory of the surface spin waves in the Heisenberg ferromagnet. *Phys.Rev*, 185 :720, 1969.
- [3] E.Iisca and E.Gallais. Sur le spectre des ondes de spin de surface. *J.de Phys*, 33 :811, 1972.
- [4] J. Goldstone. Field theories with superconductor solutions. *Nuovo Cimento*, 19 :154–164, 1961.
- [5] F.Bloch. Theory of ferromagnetism. *Z. Phys*, 61 :206, 1930.
- [6] C.Kittel. *Physique de l'état solide*. Dunod, 2007.
- [7] T Holstein and H.P.Primakoff. Field Dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet. *Phys.Rev*, 58 :1098, 1940.
- [8] Freeman J.Dyson. General Theory of Spin-Wave Interactions. *Phys.Rev*, 102 :1217, 1956.
- [9] H.Bethe. On the Theory of Metals, I. Eigenvalues and Eigenfunctions of a Linear Chain of Atoms. *Z.Phys*, 74 :205–226, 1931.
- [10] D.N.Zubarev. Double Time Green Functions In Statical Physics. *Soviet. Phys*, 3 :320 – 345, 1960.
- [11] P.Fröbrich and P.J.Kuntz. Many-body Green's function theory of Heisenberg films. *Physics Reports*, 432 :223 – 304, 2006.
- [12] Steffen SCHÄFER. *Approximation des phases aléatoires self-consistante dans le modèle de Hubbard*. Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier-Grenoble I, 1998.
- [13] S.V.Tyablikov. *Ukr.Mat.Zh*, 11 :289, 1959.

-
- [14] S.V.Tyablikov. *Methods in Quantum Theory of Magnetism*. New York : Plenum Press, 1967.
- [15] D.J. Mills, in : V.M. Agranovich, and A.A. Maradudin (Eds). *Surface Excitations*. Amsterdam, North Holland, 1984.
- [16] M.G. Cottam and D.R. Tilley. *Introduction to surface and superlattice Excitations*. Cambridge University Press, 1989.
- [17] S.M.Resende, J.A.S.Moura, F.M.de Aguiar, and W.H.Schreiner. Ferromagnetic resonance of fe(111) thin films and Fe(111)/Cu(111) multilayers. *Phys.Rev.B*, 49 :15105, 1994.
- [18] G. Gubbiotti, G. Carlotti, G. Socino, F. D’Orazio, F. Lucari, R. Bernardini, and M. De Crescenzi. Perpendicular and in-plane magnetic anisotropy in epitaxial Cu/Ni/Cu/Si(111) ultrathin films. *Phys.Rev.B*, 56 :11073, 1997.
- [19] P.Grünberg, In : M. Cardona, and G. Güntherodt(Eds). *Light Scattering in Solids V*. Springer, Berlin, 1989.
- [20] B. Hillebrands, G. Güntherodt In : J.A.C. Bland, and B. Heinnich (Eds). *Ultrathin Magnetic Structures II*. Springer, Berlin, 1993.
- [21] S.M.Cherif, C.Dugautier, J.F.Hennequin, and P.Moch. Brillouin light scattering by magnetic surface waves in dot-structured permalloy layers. *J. Magn. Mater*, 175 :228–236, 1997.
- [22] R.F.Wallis and A.A.Maradudin. *Solid State Co*, 5 :89, 1967.
- [23] T.Wolfram and J.Callaway. Spin Wave Impurity in Ferromagnets. *J. Phys.Rev*, 130 :2207, 1963.
- [24] B.N.Filippov. Theory of Surface Spin Wave. *Sov. Phycis Solid State*, 9 :1048, 1967.
- [25] R.E.DeWames and T.Wolfram. Optical Surface Spin Waves in the Heisenberg Ferromagnet. *Phys.Letters*, 29A :71, 1969.
- [26] D.Mercier, J.C.S. Levy, M.L. Watson, J.S.S. Whiting, and A. Chamber. Spin wave modes in layerd magnetic sandwich structures. *Phys. Rev. B*, 43 :3311, 1991.
- [27] J.Barnas. Exchange modes in ferromagnetic superlattices. *Phys. Rev. B*, 45 :10427, 1992.
- [28] P.Frobrich P.Henelius, P.J.Kuntz, C.Timm, and P.J.Jensen. Quantum Monte Carlo simulation of thin magnetic films. *Phys. Rev. B*, 66 :094407, 2002.

BIBLIOGRAPHIE

- [29] D.L. Mills and A.A.Maradudin. Some thermodynamic properties of a semi infinite Heisenberg ferromagnet. *J.Phys.Chem.Solids*, 28 :1855–1874, 1967.
- [30] D.T. Hung, J.C. Levy, and O. Nagai. Effects of Surface Spin Waves and Surface Anisotropy in Magnetic Thin Films at Finite Temperatures. *Phys. Stat. Sol*, 93 :351, 1979.
- [31] D.L. Mills. Influence of surface anisotropy on the magnetization of the Heisenberg ferromagnet. *Phys. Rev. B*, 40 :11153, 1989.
- [32] A.Slavin (Eds) M.G.Cottam. *Spin-waves and Nonlinear Excitations in Magnetic Thin Films and Superlattices*. World Scientific, Singapore, 1993.
- [33] M.Tamine. Calculations of surface magnon dispersion by means of the matching procedure. *J. Magn. Magn. Mat*, 153 :366, 1996.
- [34] Wallis, R.F.Maradudin, A.A.Ipatova, and I.P.Klochitkin. Surface spin waves. *Solid.State.Co*, 5 :89, 1967.
- [35] T. Wolfram and R.E. De Wames. Surface Dynamics of Magnetic Materials. *Prog. Surf. Sci*, 2 :233, 1972.
- [36] R.A.Cowley and W.J.L.Buyers. The proprieties of defects in magnetic insulators. *Rev.Mod.Phys*, 44 :406, 1972.
- [37] M.F.Thorpe. *Excitations in Discordered System*. Plenum,New York, 1982.
- [38] Y.Tsuchida. Localized spin wave state in a one -dimensional Heisenberg ferromagnet with a boundary and impurity spins. *Prog.Theor.Phys*, 55 :10, 1976.
- [39] G.Georgiev and I.Gochev. Localized magnons around an impurity in a spin chain with next nearest neighbour interaction. *Phys.Status Solidi(b)*, 85 :657, 1978.
- [40] J.B.Parkinson. Localized surface impurity modes in magnetic insulators. *J.Phys.C :Solid State Phys*, 9 :3807–3812, 1976.
- [41] Niu-Niu Chen and M.G.Cottam. Spin wave theory of impurity states near the surface of ferromagnets and antiferromagnets. *J.Appl.Phys*, 69(8) :6209–6211, 1991.
- [42] Niu-Niu Chen and M.G.Cottam. Green-function theory for a single magnetic impurity near the surface of an antiferromagnet. *Phys.Rev.B*, 45 :266–273, 1992.
- [43] R.N.Costa Filho, U.M.S.Costa, and M.G.Cottam. Localised magnetic impurity states in a transverse Ising ferromagnet : bulk and surface effects. *J. Magn. Magn. Mat*, 189 :234–240, 1998.

-
- [44] Niu-Niu Chen and M.G.Cottam. Green function theory for a magnetic impurity layer in a semi-infinite ferromagnet. *Solid.State.Co*, 76 :437–442., 1990.
- [45] Niu-Niu Chen and M.G.Cottam. Spin waves in a semi-infinite Heisenberg ferromagnet with an impurity layer. *J.Appl.Phys*, 67 :5483., 1990.
- [46] R.V.Leite, B.T.F.Morais, J.Milton Pereira Jr., and R.N.Costa Filho. Green's function theory for a magnetic impurity layer in a ferromagnet Ising film with transverse field. *J. Magn. Magn. Mat*, 283 :385–391., 2004.
- [47] M.Tamine and F.Boumeddine. Calculations of (110) ferromagnetic surface modes : A method of solution. *Comput.Mat.Sci*, 38 :602–608, 2007.
- [48] M.Tamine and F.Boumeddine. Spin modes and layer magnetization for surface and impurity layer embedded in a ferromagnet. *J.Phys.Chem.Solids*, 69 :865–875, 2008.
- [49] Patrick Bruno. *Anisotropie magnétique et hystérésis de cobalt à l'échelle du plan atomique : Théorie et Expérience*. Thèse de Doctorat, Université De Paris-Sud, 1989.
- [50] M.Tamine. *Contribution à l'étude théorique des magnons en volume et en surface des systèmes cubiques antiferromagnétiques frustrés*. Thèse de Doctorat, Université du Maine, 1994.
- [51] W.Heisenberg. Zur theorie des ferromagnetismus. *Zeits.f.Physik*, 49 :619–636, 1928.
- [52] P.A.M.Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford,Clarendon, 1935.
- [53] Roussigne Yves. *Diffusion de Brillouin dans des couches et multicouches minces magnétiques de colbat. Etude des anisotropies et des couplages inter-couches*. Thèse de Doctorat, Université de Paris 13, 1995.
- [54] David Hrabovsky. *Etdute des propriétés magnétiques, par méthode magnéto-optique, de systèmes de couches minces pour l'électronique de spin*. Thèse de Doctorat, Université de Toulouse, 2003.
- [55] H.J.Elmers, J.Hauschilda, and U.Gradmanna. Spleed with external magnetic fields. *J.Magn.Magn.Mat*, 140-144 :671–672, 1995.
- [56] P.Grünberg, R.Schreiber, Y.Pang, M.B.Brodsky, and H.Sowers. Layered Magnetic Structures : Evidence for Antiferromagnet Coupling of Fe Layers across Cr Interlayers. *Phys.Rev.Lett*, 57 :2442–2445, 1986.

- [57] P.Grünberg, R.Schreiber, Y.Pang, U.Walz, M.B.Brodsky, and H.Sowers. Layered Magnetic Structures : Evidence for Antiferromagnet Coupling of Fe Layers across Cr Interlayers. *J.Appl.Phys*, 61 :3750, 1987.
- [58] C.Carbone and S.F.Alvarado. Antiparallel coupling between Fe layers separated by a Cr interlayer : Dependence of the magnetization on the film thickness. *Phys.Rev.B*, 36 :2433–2435, 1987.
- [59] F.Saurenbach, U.Walz, L.Hinchey, P.Grüberg, and W.Zinn. Static and dynamic magnetic properties of Fe-Cr layered structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *J.Appl.Phys*, 63 :3473, 1988.
- [60] S.F.Alvarado and C.Carbone. Magnetism and epitaxy of Fe/Cr(001) multilayers. *Physica B+C*, 149 :43–48, 1988.
- [61] M.G.Cottam. Theory of light scattering off the surface of a Heisenberg antiferromagnet. *J.Phys.C :Solid State Phys*, 11 :151, 1978.
- [62] C.G.Windsor and R.W.H.Stevenson. Spin waves in RbMnF₃. *Proc.Phys.Soc*, 87 :501, 1966.
- [63] M.Tamine. Surface spin wave spectra in trifluorides MF₃(M = Fe, Cr, V). *Surf.Sci*, 45 :469, 2000.
- [64] V.V.Eremenko and V.M.Naumenko. *Spin Waves and Magnetic Excitations*. A.S.Borovik-romanov and S.K.Sinha(Eds), North Holland, Amsterdam, part 2 edition, 1988.
- [65] H.Ohdag, A.Scholl, F.Nolting, S.Anders, F.U.Hillebrecht, and J.Stöhr. Spin Reorientation at the Antiferromagnetic NiO(001) Surface in Response to an Adjacent Ferromagnet. *Phys.Rev.Lett*, 86 :2878, 2001.
- [66] F.U.Hillebrecht, H.Ohdag, N.B.Weber, C.Bethke, U.Mick, M.Weiss, and J.Bahrtdt. Magnetic Moments at the Surface of Antiferromagnetic NiO(100). *Phys.Rev.Lett*, 86 :3419, 2001.
- [67] D.L.Mills. *In Surface Excitations*. V.M.Agranovich and R.Loudon(Eds), North Holland, Amsterdam, 1984.
- [68] M.G. Cottam and D.R. Tilley. *Introduction to Surface and Superlattice Excitations*. 2nd ed,(IOP Publishing, Bristol, 2004).
- [69] M.Plihal, D.L.Mills, and J.Krischner. Spin Wave Signature in the Spin Polarized Electron Energy Loss Spectrum of Ultrathin Fe Films : Theory and Experiment. *Phys.Rev.Lett.*, 82 :2579, 1999.

-
- [70] R.Vollmer, M.Etzkore, P.S.Anil Kumar, H.Ibach, and J.Kirschner. Spin-Polarized Electron Energy Loss Spectroscopy of High Energy, Large Wave Vector Spin Waves in Ultrathin fcc Co Films on Cu(001). *Phys.Rev.Lett.*, 91 :147201, 2003.
- [71] J.Prokop, W.X.Tang, Y.Zhang, I.Tudosa, R.F.Peixoto, Kh.Zakeri, and J.Kirschner. Magnons in a Ferromagnetic Monolayers. *Phys.Rev.Lett.*, 102 :177206, 2009.
- [72] D.L.Mills and W.M. Saslow. Surface Effects in the Heisenberg Antiferromagnet. *Phys.Rev.*, 171 :488–506, 1968.
- [73] M.G.Cottam. The spin correlation function of a semi-infinite Heisenberg ferromagnet. *J.Phys.C*, 9 :2121, 1976.
- [74] T.Wolfram and R.E.De Wames. Surface Spin Waves for the Simple Cubic Antiferromagnet. *Phys.Rev*, 185 :762, 1969.
- [75] F.Milla and J.Szeftel. Application of the matching procedure to the calculate of surface phonons and surface resonances of Ni(100) in the (011)directions. *J.Phys.C :Solid State Phys*, 21 :177, 1988.
- [76] P.Masri. Etude des propriétés vibrationnelles des interfaces couches minces-substrat par la méthode des fonctions de Green. *Surf.Sci*, 99 :714, 1980.
- [77] SeGi Yu, K.Kim, Michael A.Stroscio, G.J.Iafrate, J.P. Sun, and G.I.Haddad. Transfer matrix method for interface optical-phonon modes in multiple-interface heterostructure systems. *J.Appl.Phys*, 82 :3363, 1997.
- [78] I.D.Paczek, N.N.Chen, and M.G.Cottam. Surface properties of perovskite antiferromagnets : spectrum waves and impurity modes. *Phys.Rev.B*, 45 :12898, 1992.
- [79] N.Voropajeva and A.Sherman. Spin correlations near the surface of a three-dimensional Heisenberg antiferromagnet. *Phys.Lett.A*, 373 :3473, 2009.
- [80] Wen-Zhong Shen and Zhen-Ya Li. Surface spin waves in semi-infinite antiferromagnetic and ferrimagnetic semiconductors in the narrow-band limit. *Phys.Status.Solidi.B*, 171 :493, 1992.
- [81] M.Tamine. Calculations of (001) surface spin waves in frustrated antiferromagnet systems with competing interactions. *Surf.Sci*, 346 :264, 1996.
- [82] M.Tamine and F.Boumeddine. Calculations modes on surface and impurity layer embedded in a semi-infinite Heisenberg ferromagnet. *Ann.Phys*, 321 :2271, 2006.

- [83] J.Milton Pereira Jr and M.G.Cottam. Exchange-dominated spin waves in simple cubic antiferromagnetic films. *Phys.Rev.B*, 63 :174431, 2001.
- [84] M.Tamine and F.Boumeddine. Spin excitations in exchange dominated regime on (100) and (110) antiferromagnetic surfaces. *Surf.Sci*, 601 :1996, 2007.
- [85] H.H.Chen and P.M.Levy. Dipole and quadrupole phase transitions in spin-1 models. *Phys.Rev.B*, 7 :4267, 1973.
- [86] C.A.Querioz and W.Figueiredo. Surface-enhanced magnetization for uniaxial ferromagnets. *Phys.Rev.B*, 40 :4967, 1989.
- [87] W.Z.Shen and Z.Y.Li. Surface magnons for a Heisenberg model with biquadratic exchange and single-ion uniaxial anisotropy. *Phys.Lett.A*, 168 :151, 1992.
- [88] D.Kapor, M.Škrinjar, and S.Stojanović. Magnetic excitations in the semi-infinite heisenberg model with biquadratic exchange. *Phys.Lett.A*, 192 :413, 1994.
- [89] J.Sivadiere. Molecular field theory of phase transitions in TbPO₄ and TmAsO₄. *Phys.Rev.B*, 8 :2004, 1973.
- [90] T.A.Kaplan. Frustrated classical heisenberg model in one dimension with nearest-neighbor biquadratic exchange : Exact solution for the ground state phase diagram. *Phys.Rev.B*, 8 :012407, 2009.
- [91] C.G.Bezerra and M.G.Cottam. Effects of the biquadratic exchange coupling on the localization and scaling laws of spin wave in Fibonacci superlattices. *Phys.Rev.B*, 65 :054412, 2002.
- [92] J.Sólyom. Competing bilinear and biquadratic exchange coupling in spin-1 Heisenberg chains. *Phys.Rev.B*, 36 :8642, 1987.
- [93] M.Pavkov, M.Škrinjar, D.Kapor, and S.Stojanović. The effect of a surface on the dynamic and thermodynamic properties of S=1 Heisenberg ferromagnet with biquadratic exchange. *Phys.A*, 280 :465, 2000.
- [94] S.Lazarev, M.Škrinjar, D.Kapor, and S.Stojanović. On the mean-field theory of magnetic multilayers with bilinear and biquadratic Heisenberg exchange. *Phys.A*, 250 :453, 1998.
- [95] D.Kapor, M.Škrinjar, and S.Stojanović. Magnetic excitations in the semi-infinite Heisenberg model with biquadratic exchange. *Phys.A*, 192 :413, 1994.
- [96] I.L.Buchbinder and B.Westwanski. Correlation functions for the Heisenberg and biquadratic pair interaction. *J. Magn. Magn. Mat*, 1 :11, 1975.

-
- [97] A.Laïchli, F.Mila, and K.Penc. Quadrupolar phase of the $S=1$ bilinear-biquadratic Heisenberg model on the triangular lattice. *Phys.Rev.Lett*, 97 :087205, 2006.
- [98] F.Mila and F.Zhang. On the origin of the biquadratic exchange in spin 1 chains. *Eur.Phys.J*, 16 :7, 2000.
- [99] Y.A.Fridman and D.V.Spirin. Influence of a biquadratic interaction on the magnetic ordering in two-dimensional ferromagnets. *Low Temp.Phys*, 26(4) :273, 2000.
- [100] J.Barnaś. Spin waves in a bilayer with biquadratic interlayer. *Phys.stat.sol(b)*, 203 :221, 1997.
- [101] H.A.Brown. A note on biquadratic exchange. *Revista Brasileira de Física*, 3(3) :453, 1973.
- [102] M.Bloch. Magnon renormalization in ferromagnets near the Curie point. *Phys.Rev.Lett*, 9 :286, 1962.
- [103] D.C.Mattis. *Theory of magnetism I*. Springer, Berlin,1988.
- [104] A.Ćelić, D.Kapor, M.Škrinjar, and S.Stojanović. New approach to surface magnon states in the semi-infinite antiferromagnetic Heisenberg model with biquadratic exchange and single-ion anisotropy. *Phys.Lett.A*, 219 :121, 1996.
- [105] Wen-Zhong Shen and Zhen-Ya Li. Surface magnons for a Heisenberg model with biquadratic exchange and single-ion uniaxial anisotropy. *Phys.Lett.A*, 168 :151, 1992.
- [106] M.Pavkov, M.Škrinjar, S.Stojanović, and D.Kapor. The influence of biquadratic coupling and uniaxial anisotropy on the surface modes in a simple cubic antiferromagnet. *Phys.Lett.A*, 236 :148, 1997.
- [107] F.Boumeddine and M.Tamine. Surface modes with biquadratic coupling and uniaxial anisotropy en semi-infinite heisenberg antiferromagnet. *Surf.Sci*, 603 :2121–2113, 2009.

Table des figures

1.1	Image classique de l'onde de spin : précession autour de l'aimantation à la fréquence $\omega(k)$	15
1.2	Représentation semi classique des ondes de spin de surface :(a) acoustique, (b) optique. La phase de l'onde optique d'un plan atomique n est $(-1)^n \psi_1$, où ψ_1 est la phase de l'onde de surface. Le rayon de précession diminue en pénétrant dans la région de volume.	16
1.3	Ondes de spin de volume (bande pleine). Branches optiques et acoustique (trait plein). L'énergie (E) est représentée en fonction du paramètre $k_{\parallel} = (0, k_y, k_z)$	17
1.4	Courbes de dispersion des ondes de spin dans le cas d'une chaîne linéaire ferromagnétique (F)(antiferromagnétique (AF)).	29
2.1	Représentation des différentes interactions d'échange en surface pour un réseau cubique antiferromagnétique(J_s = intégrale d'échange en surface et J_{\perp} = intégrale d'échange surface-volume.	57
2.2	Modèle cubique semi-infini en couches parallèles d'un couplage ferromagnétique. La première couche est perturbée.	61
3.1	Représentation schématique du modèle d'un réseau cubique ferromagnétique(110).(b) Modèle d'interaction d'échange.	72
3.2	Évolution des modes localisés de volume (aire hachurée) et de surface (lignes en traits gras) pour un réseau ferromagnétique(110). L'énergie est représentée en fonction du paramètre $\Lambda_y = 1 - \Lambda_y = 1 - \cos k_y \sqrt{2}a$ pour différentes valeurs de ε_{\perp} . Les paramètres utilisés sont $\Lambda_z = 1 - \cos k_z a = 0, \varepsilon_{\parallel} = 1$	79
3.3	Évolution des modes localisés de volume et de surface pour un réseau ferromagnétique(110) selon l'axe $k_z = \frac{\pi}{3a}(\Lambda_z = \frac{1}{2})$, pour différentes valeurs de ε_{\perp} et ε_{\parallel}	80

3.4	Évolution des modes localisés de volume et de surface pour un réseau ferromagnétique(110) selon l'axe $k_z = \frac{-\pi}{a}(\Lambda_z = 2)$, pour différentes valeurs de ε_{\perp} et ε_{\parallel}	81
3.5	Représentation schématique d'un réseau cubique semi infini ferromagnétique présentant un plan de défaut.	83
3.6	Ondes de spin optiques et acoustiques pour un réseau cubique ferromagnétique pur, en fonction de ε_s et ε'_s . L'énergie est représentée en fonction du vecteur d'onde $k_{//} = (k_x, 0)$. Les lignes continues correspondent aux courbes de dispersion des magnons de surface et la bande pleine représente les états de volume.	92
3.7	Spectre des ondes de spin de surface et de volume pour différentes valeurs de ε_s et ε'_s	93
3.8	Magnons de volume (bande pleine) et de surface (ligne continue) pour un réseau ferromagnétique pur. Les paramètres utilisés sont : $\varepsilon_s = 4$, $\varepsilon'_s = 1.25$, $\varepsilon_N = 1$, $\varepsilon'_N = 1$, $\theta = 1$, $\frac{g\mu_B H_0}{JS} = 5$	94
3.9	Modes de dispersion de volume et de surface pour un réseau ferromagnétique présentant un plan de défaut selon l'axe $k_y = 0$ de la zone de Brillouin. Les paramètres utilisés sont : $\varepsilon_s = 4$, $\varepsilon'_s = 1.25$, $\varepsilon_N = 4$, $\varepsilon'_N = 6$, $\theta = 3$, $\frac{g\mu_B H_0}{JS} = 5$	94
3.10	États localisés de volume et de surface pour un réseau ferromagnétique pur. Les paramètres utilisés sont : $\varepsilon_s = 4$, $\varepsilon'_s = 2$, $\varepsilon_N = 1$, $\varepsilon'_N = 1$, $\theta = 1$, $\frac{g\mu_B H_0}{JS} = 5$	95
3.11	Modes de dispersion de volume et de surface pour un réseau ferromagnétique présentant un plan de défaut selon l'axe $k_{//} = (k_x, 0)$ de la zone de Brillouin, le plan défaut localisé à N=5. Les paramètres utilisés sont : $\varepsilon_s = 4$, $\varepsilon'_s = 2$, $\varepsilon_N = 7$, $\varepsilon'_N = 4$, $\theta = 3$, $\frac{g\mu_B H_0}{JS} = 5$	95
3.12	Modes de dispersion de volume et de surface pour un réseau ferromagnétique présentant un plan de défaut selon l'axe $k_{//} = (k_x, 0)$ de la zone de Brillouin, le plan défaut localisé à N=10. Les paramètres utilisés sont : $\varepsilon_s = 0.5$, $\varepsilon'_s = 1$, $\varepsilon_N = 3$, $\varepsilon'_N = 1$, $\theta = 1$, $\frac{g\mu_B H_0}{JS} = 5$	96
4.1	Représentation schématique du modèle d'un réseau cubique antiferromagnétique(100).	102

TABLE DES FIGURES

4.2	États localisés de volume (aire en traits gras) et de surface (lignes en traits gras) pour un réseau cubique semi infini antiferromagnétique fini par une surface(100). Ondes de spin acoustiques (a) et optiques (b) en fonction des différentes valeurs de ε^{\parallel} . L'énergie est représentée en fonction du paramètre $4(1 - \gamma^{\parallel}) = 4 - 2 \cos(k_y a) + 2 \cos(k_z a)$. . .	108
4.3	Représentation schématique du modèle d'un réseau cubique antiferromagnétique(110).	109
4.4	États localisés de volume (aire hachurée) et de surface pour un réseau cubique semi infini antiferromagnétique fini par une surface (110). Ondes de spin acoustiques (a) et optiques (b) en fonction des différentes valeurs de ε^{\parallel} . L'énergie est représentée en fonction des paramètres $\Lambda_y = 0$ et $\Lambda_z = 1 - \cos(k_z a)$	114
4.5	États localisés de volume (aire hachurée)et de surface (lignes en traits gras) pour un réseau cubique semi infini antiferromagnétique fini par une surface (110).Ondes de spin acoustiques en fonction des différentes valeurs de ε^{\parallel} . L'énergie est représentée en fonction des paramètres $\Lambda_z = 0$ et $\Lambda_y = 1 - \cos(k_z a/\sqrt{2})$	115
4.6	Excitations magnétiques de volume (aire hachurée) et de surface (100) (lignes en traits gras). L'énergie des ondes acoustiques est représentée en fonction du paramètre $4 - \omega_q = 4 - 2(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))$. Solutions obtenues en fonction de a pour différentes valeurs de $\varepsilon^{\parallel} = 1$, $\frac{D}{J} = 0.75$ et $\frac{D_s}{J} = 1$	129
4.7	Évolution des états localisés de surface pour différentes valeurs de a . Le paramètre de couplage biquadratique a est fixé à (0,0, 0,2, 0,4 et 0,6).	130
4.8	Spectre de dispersion des ondes de spin de surface et de volume. Les modes de surface sont obtenus pour des valeurs $a \neq 0$ et $D_s = D = 0$. A_1 , A_2 et A_3 représentent les branches acoustiques obtenues, respectivement, pour les valeurs $\varepsilon^{\parallel} = 1.15$, $\varepsilon^{\parallel} = 1$ et $\varepsilon^{\parallel} = 0.5$. O_1 , O_2 et O_3 représentent les branches optiques obtenues, respectivement, pour les valeurs $\varepsilon^{\parallel} = 2$, $\varepsilon^{\parallel} = 1.854$ et $\varepsilon^{\parallel} = 1.5$	131
4.9	Spectre de dispersion des branches acoustiques dans le cas d'un couplage ferromagnétique à la surface. $A_1 A'_1 : \varepsilon^{\parallel} = -0.75$, $A_2 A'_2 : \varepsilon^{\parallel} = -1.125$, $A_3 A'_3 : \varepsilon^{\parallel} = -1.2125$	132

4.10 Spectre de dispersion des branches acoustiques en tenant compte de l'anisotropie uniaxiale ($D = D_s$). Les paramètres utilisés sont : $\omega_0 = 8$, $D = D_s = J$ et $a = 0.5$. $A_1 : \varepsilon^{\parallel} = 1.1825$, $A_2 : \varepsilon^{\parallel} = 1$, $A_3 : \varepsilon^{\parallel} = 0.5$, $A_4 : \varepsilon^{\parallel} = -0.3875$ 132

4.11 Illustration de la branche acoustique A_4 de la figure (4.10). 133

4.12 Spectre de dispersion des branches acoustiques en tenant compte de l'anisotropie uniaxiale ($D < D_s$). Les paramètres utilisés sont : $\omega_0 = 6$, $D = 0$, $D_s = 0.5$ et $a = 0.5$. $A_1 : \varepsilon^{\parallel} = 0.5$, $A_2 : \varepsilon^{\parallel} = 0$, $A_3 : \varepsilon^{\parallel} = -0.3625$ 133

4.13 Spectre de dispersion des branches acoustiques et optiques en tenant compte de l'anisotropie uniaxiale ($D > D_s$). Les paramètres utilisés sont : $\omega_0 = 8$, $D = 1$, $D_s = 0.5$ et $a = 0.5$. Les modes acoustiques A_0 , A_1 et A_2 correspondent, respectivement, aux valeurs $\varepsilon^{\parallel} = 1.5$, $\varepsilon^{\parallel} = 1.625$ et $\varepsilon^{\parallel} = 1.75$. Les modes optiques O_1 , O_2 et O_3 correspondent, respectivement, aux valeurs $\varepsilon^{\parallel} = 1.625$, $\varepsilon^{\parallel} = 1.75$ et $\varepsilon^{\parallel} = 2.192$ 134

4.14 Illustration des branches acoustiques A_0 , A_1 et A_2 de la figure (FIG.4.13).135

Résumé

Le travail principal de cette thèse a pour but d'expliquer le comportement des ondes de spin de surface dans des systèmes ferromagnétiques et antiferromagnétiques. Nous avons développé une étude théorique de calcul des courbes de dispersion des magnons de volume et de surface pour des systèmes semi infinis ferromagnétique et antiferromagnétique. Le développement de cette théorie a permis, à partir d'un hamiltonien généralisé de type Heisenberg (ayant des spins dont le module est conservé quelque soit l'environnement) incluant les énergies d'interaction étendues aux premiers voisins et d'un champ magnétique extérieur, de décrire les relations de dispersion des ondes de surface localisées au voisinage de défauts. En outre, nous avons adopté l'approximation des basses températures en appliquant la "random phase application" (RPA) qui correspond à l'approximation des ondes de spin. Ensuite, nous avons déduit le spectre des excitations magnétiques en utilisant l'approximation du champ moyen qui nous permet de déterminer les amplitudes des champs progressifs et évanescents des modes de surface. Dans ce travail, nous avons étudié le problème de simulation du comportement des ondes de spin de surface pour des systèmes cubiques semi infinis ferromagnétiques et antiferromagnétiques. En premier lieu, nous nous sommes intéressés à l'évolution de magnons de surface dans un réseau cubique tridimensionnel ferromagnétique en introduisant d'autres effets en plus ceux liés à l'échange ; à savoir : variation des facteurs de structure sur les modes localisés dans les cas où la surface est orientée selon la direction cristallographique(110), implantation d'un plan de défaut au voisinage de la surface. En second lieu, nous avons d'abord montré comment les interactions d'échange et l'orientation cristallographique de la surface peuvent engendrer des excitations magnétiques de différentes manière pour un réseau cubique semi infini antiferromagnétique. Ensuite, nous avons complété l'analyse des excitations magnétiques sur des systèmes antiferromagnétiques comportant plusieurs contributions ; celles rentrant en compte dans l'étude que nous nous effectuons sont : le couplage bilinéaire, le couplage biquadratique et l'anisotropie uniaxiale.

Enfin, la validité des résultats numériques est effectuée par comparaison avec une série des résultats obtenus par la méthode des fonctions de Green.

Mots clefs *1.Calculs d'énergie - 2.Modes localisés - 3.Magnons de surface - 4.Magnons de volume -5.Méthode de raccordement - 6.Hamiltonien de Heisenberg -7.Interaction d'échange - 8.Couplage biquadratique - 9.Anisotropie uniaxiale*

Abstract

The basic aim of this thesis was to present a simplified mathematical procedure for deriving the spectra of the surface excitations in a simple cubic lattice semi-infinite ferromagnets and antiferromagnets. The calculation is based on a Heisenberg Hamiltonian with nearest-neighbor interaction only. Using a matching procedure with the random-phase approximation (RPA) we find that, in addition to bulk spin wave modes, there may be localized spin wave modes associated with the surface. First we studied the effects of surface orientation on the spectrum of localized surface spin wave in semi-infinite ferromagnet and of a magnetic impurity layer embedded below the surface of a ferromagnet. Then, we examine the effect of the crystallographic surface orientation on the surface spin wave properties. We have considered semi-infinite antiferromagnets where the magnetic ions occupy a simple cubic (s.c) structure with (001) and (011) orientations of the surface planes. Then, we have studied the surface magnetic excitations in a semi infinite antiferromagnet described by a Hamiltonian which includes not only simple Heisenberg exchange but also biquadratic exchange and the single-ion uniaxial anisotropy term. Finally, numerical results are validated by comparison with a set of results obtained via Green's functions.

Keywords 1. *Heisenberg model* - 2. *semi-infinite ferromagnet (antiferromagnet)* - 3. *Matching method* - 4. *Bulk magnon* - 5. *Surface magnon* - 6. *Bilinear exchange* - 7. *Biquadratic interaction* - 8. *Single-ion anisotropy*