

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

**FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE**



THESE DE DOCTORAT

**SPECIALITE : PHYSIQUE
OPTION : PHYSIQUE DES MATERIAUX**

Présentée par

Madame Rebiha CHALLALI, épouse OUALI

Sujet

**Spectres magnoniques associés aux surfaces et aux interfaces entre structures cubiques
ferromagnétiques**

Devant la commission d'examen composée de

M ^{me} Ouahiba Nafa	MC/A	U.M.M. Tizi-Ouzou	Présidente
M ^r Boualem Bourahla	Professeur	U.M.M. Tizi-Ouzou	Rapporteur
M ^r Rachid Tigrine	Professeur	U. A. D. Adrar	Examineur
M ^r Adel Belayadi	MC/A	E.S.S.A.I. El-Harrach	Examineur
M ^{me} Malika Boucherrab	MC/A	U.M.M. Tizi-Ouzou	Invitée

Soutenue, le08... /...07...../2024

Remerciements

Cette thèse de doctorat a été réalisée au sein du Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ) de l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou (UMMTO), sous la direction scientifique de Monsieur le professeur Boualem Bourahla.

J'exprime ma gratitude à l'égard de mon directeur de thèse pour la bienveillance avec laquelle il a suivi la progression et l'avancement de mes travaux. Ses conseils et ses orientations m'ont permis de mener à bien ma feuille de route dans de bonnes conditions.

Je tiens à remercier vivement les membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à ma thèse.

- Dr Ouahiba Nafa, Maître de conférences à l'UMMTO pour m'avoir fait l'honneur d'accepter la présidence du jury de thèse.

- Les examinateurs : Pr Rachid Tigrine (de l'Université d'Adrar), Dr Adel Belayadi (de l'ESSAI – El Harrach) et le Dr Malika Boucherrab (de l'UMMTO) pour avoir accepté d'examiner mon travail de thèse.

Mes remerciements vont aux chercheurs du LPCQ et certains collègues de la faculté des sciences, en général, et quelques membres de notre équipe de recherche numéro 4 du LPCQ, qui s'intitule : « Excitations magnétiques et vibrationnelles des systèmes de basse dimensionnalité », pour différentes raisons, citons : les discussions enrichissantes, encouragements, suggestions, conseils et surtout pour l'ambiance amicale.

Le mot merci ou *thanmirth* en kabyle ne suffira pas pour exprimer ma gratitude envers ma mère, mon père, mes frères *mohammed Said* et *Samir*, mon mari *Brahim*, mes belles sœurs *Lola* et *Amel* ainsi que mes sœurs *Fatiha* et *Ouahiba*, mes enfants *Tiziri*, *Younes*, *Elias* et *Sedda*, je vous remercie au plus profond de mon cœur pour le soutien que vous m'avez apporté.

R. Challali

TABLE DES MATIERES

Introduction générale.....	3
Chapitre 1	
Théorie des ondes de spin	10
Introduction	10
1. Formalisme traitant des ondes de spin	12
1.1. Spin de l'électron	12
1.2. Température de Curie.....	13
1.3. Energie d'échange	13
1.4. Interaction de Zeeman.....	14
1.5. Energie d'anisotropie magnétique.....	15
1.5.1. L'énergie dipolaire	17
1.5.2. L'anisotropie magnéto-cristalline de volume.....	17
1.5.3. L'anisotropie magnéto-élastique de volume	18
2. Approximation à tenir en compte.....	19
3. Limites du modèle de Heisenberg.....	20
4. Approche semi-classique.....	21
5. Approche quantique	24
Références du chapitre 1	27
Chapitre 2	
Mouvement de précession des spins dans les structures cubiques parfaites à couplage ferromagnétique	28
Introduction	28
1. Dynamique des spins dans les structures cubiques ferromagnétiques parfaites	28
1.1. Cas d'un cristal à structure cubique simple (cs).....	33
1.2. Cas d'un cristal à structure cubique centrée (cc).....	34
1.3. Cas d'un cristal à structure cubique à faces centrées (cfc).....	35
2. Discussion des résultats.....	39
3. Vitesses de groupe associées à chaque structure.....	40
3.1. Pour un réseau cs.....	41
3.2. Pour un réseau cc.....	41
3.3. Pour un réseau cfc	41
4. Discussion des courbes.....	43
Références du chapitre 2	44
Chapitre 3	
Ondes de spin en surface des systèmes cubiques à couplage ferromagnétique	45
Introduction	45
1. Anisotropie de surface.....	47
1.1. Contribution de surface et d'interface à l'anisotropie.....	48
1.2. Relaxation et reconstruction.....	49
1.3. Rugosité des surfaces	49
2. Méthodes analytiques pour l'étude des ondes de spin dans les systèmes semi-infinis	50

2.1. Méthode de Green	50
2.2. Méthode de diagonalisation directe.....	50
2.3. Méthode de raccordement	51
3. Considérations générales du modèle étudié	52
4. Modèle théorique et formalisme utilisé.....	52
5. Fluctuations et étude dynamique des spins en surface	54
5.1. Réponse des magnons de surface	54
5.2. Etats localisés de spin en surface	58
5.3. Simulations et applications numériques	59
5.4. Discussion des résultats obtenus	63
6. Conclusion.....	66
Références du chapitre 3	67

Chapitre 4

Spectres de magnons générés par les interfaces reliant deux sous-structures ferromagnétiques à maillage cubique.....69

Introduction	69
1. Description du modèle	70
1.1. Dynamique des spins à l'interface cubique ferromagnétique	72
1.1.1. Maillages identiques.....	72
1.1.1. Maillages croisés	73
2. Diffusion des ondes de spin via l'interface	75
2.1. Etude du phénomène de diffusion via une interface	75
2.1.1. Matrice dynamique du système avec interface	75
2.1.2. Matrice de raccordement.....	76
2.2. Calcul des grandeurs physiques	78
2.2.1. Coefficients de transmission et de reflexion	78
2.2.2. La transmittance	79
3. Résultats obtenus.....	79
3.1. Interfaces de cristallisation similaire.....	79
3.1.1. Cas de l'interface cs-cs.....	79
3.1.2. Cas de l'interface cc-cc	80
3.1.3. Cas de l'interface cfc-cfc.....	81
3.2. Interfaces de cristallisation différente	82
3.2.1. Cas de l'interface cs-cc	82
3.2.2. Cas de l'interface cc-cs	83
3.2.3. Cas de l'interface cc-cfc	84
3.2.4. Cas de l'interface cfc-cc	85
3.2.5. Cas de l'interface cs-cfc	86
3.2.6. Cas de l'interface cfc-cs	87
4. Discussion des résultats.....	88
5. Conclusion.....	91
Références du chapitre 4	92

Conclusion générale 93

Résumé 95

INTRODUCTION GENERALE

Depuis longtemps, l'intérêt porté aux études des propriétés des matériaux magnétiques n'a cessé de grandir tant sur le plan expérimental que théorique. En effet, les propriétés magnétiques sont extrêmement dépendantes de la taille et de la structure cristalline. Lorsque la dimensionnalité de ces objets est réduite cela entraîne des changements dans le moment magnétique conduisant ainsi à des propriétés différentes de celles de l'état massif. Autrement dit, les propriétés physiques et chimiques des matériaux sont intimement liées à leurs propriétés structurales [1-2]. C'est pourquoi la modification de l'environnement atomique (présence de surface ou interface) conduit à de nouvelles propriétés magnétiques et à l'apparition de l'anisotropie pouvant être supérieure à celle des matériaux massifs [3].

A l'échelle nanométrique, la conception des dispositifs à base de matériaux magnétiques a pris un grand élan de prospérité grâce aux techniques de dépôt des couches minces [4-10] (tel que la pulvérisation cathodique et l'évaporation thermique) et les techniques de caractérisation (utilisant le magnétomètre à échantillon vibrant (VSM) [11-12] ou microscope de force magnétique (MFM), ...).

Retrouver la structure magnétique et étudier les excitations magnétiques est le plus souvent réalisé par les expériences de diffusion des neutrons en modes élastique et inélastique [13]. Ces expériences de diffusion permettent dans le mode de diffusion élastique de donner l'information sur la structure magnétique (ferromagnétique, antiferromagnétique ou non colinéaire) de l'état fondamental [14]. Quant aux mesures de diffusion inélastique des neutrons, celles-ci permettent directement de tracer les spectres d'excitation magnétique [13] uniquement pour les matériaux en volume. Désormais, les magnons de surface ou d'interfaces dans les films minces échappaient à toute investigation expérimentale. Ce qui a été ensuite devenu possible par la technique (SPEELS), rendue publique par les travaux de M. Plihal et al. [15]. Mais la percée expérimentale pour les mesures des amplitudes de dispersion des magnons de surface s'est produite en 2007 lorsque les premiers spectromètres (HREEL) ont été appliqués à des films ultra-minces plutôt que sur des surfaces solides des matériaux magnétiques [16].

La modélisation théorique des nano-objets se joint à l'étude des phénomènes physiques au niveau des surfaces ou interfaces car elles sont le centre de toute modification géométrique d'une part et d'autre part, elles sont au centre de toute modification des propriétés magnétiques, surtout en ce qui concerne l'anisotropie magnétique de surface ou d'interface

dont la technologie de l'informatique peut tirer un grand profit. Plusieurs disciplines ont alors immergées, en reposant sur le spin de l'électron (la spintronique et la magnonique).

La spintronique est une branche de l'électronique qui exploite simultanément la charge et le spin de l'électron. Le spin, assimilable à un petit aimant élémentaire, est utilisé comme un support additionnel pour le traitement, la transmission et le stockage de l'information [17]. Toutefois, l'électronique du spin ou la spintronique ne se limite pas à l'utilisation des matériaux ferromagnétiques. Elle met à profit les propriétés remarquables données par certains matériaux non magnétiques comme le couplage spin-orbite, les effets d'interfaces [18-20]. Aussi, l'intégration des oxydes de métaux de transition (TMO), tel que SrTiO_3 , LaAlO_3 , BiFeO_3 , connus pour leurs propriétés de supraconductivité à haute température, et la magnétorésistance colossale (CMR) [21] dans les dispositifs spintroniques est très prometteuse. Car ils permettent la manipulation des états non volatiles de spin et modulables sous contrôle d'un champ électrique [22] via les courants de spin polarisés et courants de charges, pour les matériaux ferromagnétiques, et grâce aux courants de charges pour les matériaux paramagnétiques.

Aujourd'hui, la plupart des composants fonctionnels se basent sur les spins des électrons dans le transport de l'information. Ces derniers sont soumis à la fois aux processus de diffusions classiques, dû aux collisions entre électrons, impuretés et défauts etc. aussi bien à ceux causés par des renversements de l'état de polarisation du spin. En fait, les multiples collisions auxquelles sont soumis les électrons, dans les métaux, font que : les spins des électrons transfèrent leur moment angulaire conduisant ainsi au renversement de l'état de polarisation des spins. Contrairement à l'électron, le spin n'est donc pas systématiquement conservé. A cet effet, le transport de l'information est facile dans le matériau lorsque la longueur de diffusion de spin (distance moyenne sur laquelle l'électron conserve son spin) est importante. Les chercheurs ont exploré de nombreuses classes de matériaux à la recherche de longues diffusions de spin. Citons les travaux de Lebrun et al. [23] ; où ils ont montré que l'oxyde antiferromagnétique à base de fer peut acheminer une information de spin sur des distances de l'ordre du micromètre. Pour les éléments lourds comme le Pt et Ta, Rojas-Sánchez et al. [24] ont montré que la longueur de diffusion de spin est de l'ordre du nanomètre.

Malgré ces succès, le développement de l'électronique fondée sur la spintronique se heurte à des obstacles. A l'heure actuelle, la miniaturisation des composants marque le pas en atteignant des tailles d'environ 22 nanomètre. A cet effet, des courants de fuite, dû à des phénomènes quantiques, apparaissent. Quant aux dispositifs spintroniques, la miniaturisation

ne peut pas franchir les tailles qui sont au-dessous de quelques 200 nanomètres car le champ magnétique nécessaire pour basculer l'ensemble des spins d'un bit, doit être assez intense ; le support matériel est divisé en minuscules zones correspondants à autant de bits d'informations et un champ magnétique est appliqué bit par bit pour orienter les spins des électrons, ce qui est couteux en terme d'énergie. Dans l'industrie de l'information et de la communication, les mémoires *MRAM* (*Magnetic Random Access Memory*) dont sont dotés les ordinateurs, les tablettes tactiles et les téléphones portables relèvent de la spintronique. Mais, si le concept de courant de spin permet de s'affranchir des mécanismes de transport de charges électriques pour ne prendre en considération que le transport des spins magnétiques. Il s'agit de la magnonique, une discipline ingénieuse, qui se présente comme une alternative à ces technologies, ouvrant ainsi un grand champ d'investigation prometteur à la recherche et au développement des technologies computationnelles. Elle est fondée non seulement sur les spins des électrons pris isolément mais sur les ondes formées par des ensembles de spins, elle peut conduire à une miniaturisation plus poussée. Des guides d'ondes magnoniques, d'une taille en dessous des 100 nm [25] semblent être de bons concurrents aux technologies *CMOS* (*complementary metal oxide semiconductor*) [26] pour les dispositifs logiques.

Le magnon représente le quantum de l'onde de spin correspondant à l'excitation collective de spin d'un corps ordonné magnétiquement. Nous signalons que les ondes de spin peuvent se propager sur des distances importantes (elles ne sont pas limitées par la diffusion de spin), et avec une faible dissipation de chaleur (elles ne nécessitent pas le transport d'électrons) [27-29]. Par ailleurs, la manipulation d'ondes de spin permet des opérations utilisant des variables vectorielles plutôt que scalaires, ouvrant par-là la voie à des logiques de calculs non-booléennes. Elles permettent des opérations dans la région des fréquences, dans la gamme des GHz (celle du domaine des communications actuelles) et atteignant le domaine prometteur des régions THz [30], tout en s'intégrant à des dispositifs nanométriques compatibles avec des structures électroniques traditionnelles.

La description théorique de la dispersion de magnons dans un matériau magnétique, à l'image du ferromagnétisme, repose sur deux modèles différents :

- i*) le modèle classique de Heisenberg basé sur les concepts du *magnétisme des électrons localisés*, observé souvent dans les terres rares et les composés ioniques. Les sites sont couplés magnétiquement à travers les orbitales atomiques par des constantes d'échange.
- ii*) Le modèle électronique itinérant basé sur le magnétisme de bandes, observé dans les métaux de transition (Fe, Co et Ni). Le critère de Stoner $J.D(E_F) > 1$, définit la condition

d'apparition d'un état ferromagnétique avec J le couplage d'échange magnétique et $D(E_F)$ est la densité d'états électroniques au niveau de Fermi.

La problématique posée dans ce travail de thèse sera formulée suivant le premier modèle. Par ailleurs, le problème quantique de détermination du spectre de propagation des ondes de spin pour le ferromagnétique de Heisenberg a été résolu rigoureusement par Holstein et Primakoff [31]. Leur formalisme sera adopté et posé tout au long de ce travail.

Il est bien connu, depuis longtemps, que les systèmes perturbés ou de dimensions finies présentent des propriétés extraordinaires, différentes de celles retrouvées à l'état massif grâce aux effets induits par les brisures de symétrie (surface, interface, effet de taille). Au niveau des surfaces, en raison du nombre réduit de voisins, des modifications apparaissent comme le rétrécissement des bandes de conduction et l'augmentation de la densité d'état au niveau de Fermi favorable au critère de Stoner, ceci a pour conséquence l'augmentation du moment magnétique en surface, comparé au moment magnétique du volume pour les métaux de transition. Il y a aussi l'apparition de nouveaux spectres magnoniques qui ne sont pas présents pour une structure infinie et parfaite d'où l'intérêt croissant pour ce type de systèmes. A l'heure actuelle, les scientifiques s'efforcent à réaliser un bon guidage des ondes de spin dans des structures nano-sophistiquées [32-40].

Il est fondamental d'étudier les magnons en volume. Cela, donne l'accès à la dispersion des ondes de spin dans la structure étudiée. Dans tout type de couplage magnétique de spins, il est important de souligner que les courbes de dispersion sont des fonctions dépendantes des intégrales d'échange et/ou super-échange entre différents sites de spin, à la fois dans la même couche atomique et entre les couches voisines de la structure magnétique. Au niveau des interfaces entre deux matériaux magnétiques, les liaisons sont différentes, le spectre de magnons diffusé à l'interface se distingue du spectre d'ondes transmises.

Le présent travail de thèse s'inscrit dans le contexte de la magnonique. L'objectif vise à relever les spectres magnoniques associés aux surfaces et aux interfaces entre structures cubiques à couplages ferromagnétiques. Il sera organisé autour de quatre chapitres :

- Dans le premier chapitre, nous introduisons les concepts de bases des ondes de spin dans les deux approches, théorique et quantique. Nous présentons également les méthodes et les outils mathématiques traitants les ondes de spin.
- Dans le deuxième chapitre, nous examinons, en se limitant aux interactions d'échanges entre premier et second voisins, l'évolution des spectres magnoniques des matériaux ferromagnétiques, suivant l'environnement immédiat des atomes, en traçant les courbes de

dispersion des magnons dans chaque structure cubique parfaite ; à savoir la structure cubique simple (cs), la structure cubique centrée (cc) et la structure cubique faces centrées (cfc).

- Dans le troisième chapitre, les résultats obtenus dans le deuxième chapitre nous serviront de support de comparaison et de visualisation de l'influence que peut induire la présence d'une surface ferromagnétique sur les modes de propagations des ondes de spin dans les systèmes étudiés. La présence de la surface dans tout système correspond à des propriétés structurales différentes aux structures de volume. Nous nous attendons, en toute logique, à l'apparition des états localisés de magnons en surface. Ces états se distinguent nettement des modes de propagation des magnons en volume loin de toute surface. Alors, nous présentons d'abord un modèle théorique pour l'étude des modes de spin localisés, générés par une surface de spin planaire, à l'extrémité d'un réseau ferromagnétique cubique. Il est connu que l'ordre magnétique des structures cubiques ferromagnétiques est imposé par les interactions d'échanges entre moments de spin atomiques voisins, ces interactions qui tendent à aligner tous les moments magnétiques de spin dans la même direction et la même orientation sont régies par des couplages d'échanges de courtes portées : des échanges entre premiers et second voisins. Le but est de comprendre la relation entre la symétrie de translation brisée et les états de spin localisés des couches superficielles en traçant les courbes de dispersion des magnons dans les directions de haute symétrie de la première zone de Brillouin. Les différents impacts des paramètres d'échanges des couches superficielles sur la dynamique de spin et les spectres magnoniques sont rapportés par application de la méthode de raccordement. Les résultats seront déduits et discutés en fonction de trois possibilités que peut avoir le rapport d'échange entre couches surfaciques à savoir le rapport d'adoucissement, d'homogénéité et de durcissement.

- Dans le quatrième chapitre, nous analysons les spectres de diffusion et de transmission de magnons à travers une surface ferromagnétique. Il faut signaler que nous n'examinons que les magnons dont la propagation se fait dans la direction normale à la surface ou à l'interface. Cela correspond à faire ressortir les spectres de diffusion de magnons à travers une surface ferromagnétique joignant deux systèmes ferromagnétiques cubiques semi-infinis. Les coefficients de transmission et de réflexion magnonique sont calculés pour une jonction de deux systèmes ferromagnétiques de même structure cubique aussi bien pour les jonctions des systèmes croisés ou de structures cubiques différentes.

Nous terminons notre travail par une conclusion générale et les perspectives offertes.

Références de l'introduction générale

- [1] F. Calle-Vallejo, J. I. Martínez, J. M. García-Lastra, J. Rossmeisl and M. T. M. Koper, Phys. Rev. Lett. 108, 116103 (2012).
- [2] P. Ayala, R. Arenal, A. Loiseau, A. Rubio and T. Pichler, Rev. Mod. Phys. 82, 1843 (2010).
- [3] H. Terada, S. Ohya, L. D. Anh, Y. Iwasa and M. Tanaka, Sci. Rep. 7, 5618 (2017).
- [4] T. A. Savas, M. Farhoud, H. I. Smith, M. Hwang and C. A. Rossa, J. Appl. Phys. 85, 6160 (1999).
- [5] T. Devolder, C. Chappert, Y. Chen, E. Cambril, H. Bernas, J. P. Jamet and J. Ferre, Appl. Phys. Lett. 74, 3383 (1999).
- [6] J. Moritz, B. Dieny, J. P. Nozieres, S. Landis, A. Lebib and Y. Chen, J. Appl. Phys. 91, 7314 (2002).
- [7] K. Matsuyama, S. Komatsu and Y. Nozaki, J. Appl. Phys. 87, 4724 (2000).
- [8] W. Wu, B. Cui, X.Y. Sun, W. Zhang, L. Zhuang, L. S. Kong and S. Y. Chou, J. Vac. Sci. Tech. B 16, 3825 (1998).
- [9] J.E. Mahan, *Physical Vapor Deposition of Thin Films*, Wiley Blackwell Editions, USA, (2000).
- [10] R.W. Schwartz, T. Schneller and R. Waser, C. R. Chimie 7, 433 (2004).
- [11] Y. Henry, Thèse de Doctorat, Université Louis Pasteur Strasbourg - France (1995).
- [12] W.S. Goree and M. Fuller, Rev. Geophys. Space Phys. 14, 591 (1976).
- [13] G.L. Squires, *Introduction to the theory of thermal neutron scattering*, 3rd Edition, Cambridge University Press
- [14] J. Kübler, *Theory of Itinerant Electron Magnetism*, Vol 106, Oxford University Press (2017).
- [15] M. Plihal, D.L. Mills and J. Kirschner. Phys. Rev. Lett., 82, 2579 (1999).
- [16] W. Tang, X. Zhang, Y. Tudosa, I. Prokop, J. Etzkorn and M. Kirshner, J. Phys. Rev. Lett. 99, 087202 (2007).
- [17] C. Chappert, A. Fert and F.N. Van Dau, Nat. Mater. 6, 813 (2007).
- [18] A. Soumyanarayanan, N. Reyren, A. Fert and C. Panagopoulos, Nature 539, 509 (2016).
- [19] W. Han, Y. Otani and S. Maekawa, npj Quantum Materials 3, 27 (2018).
- [20] H.Y. Hwang, Y. Iwasa, M. Kawasaki, B. Keimer, N. Nagaosa and Y. Tokura, Nat. Mater. 11, 103 (2012).
- [21] A.P. Ramirez, J. Phys. Condens Matter 8171, 8171(1997).
- [22] V.D. Castro, B. Agnès and B. Manuel, Jpn. J. Appl. Phys. 57, 0902A4 (2018).
- [23] R. Lebrun, A. Ross, S.A. Bender, A. Qaiumzadeh, L. Baldrati, J. Cramer and M. Kläui, Nat. 561, 222 (2018).
- [24] J.C. Rojas-Sánchez and A. Fert, Phys. Rev. Appl. 11, 054049 (2019).
- [25] A. Khitun and K.L. Wang, J. Appl. Phys. 110, 034306 (2011).
- [26] K.Y. Camsari, P. Debashis, V. Ostwal, A.Z. Pervaiz, T. Shen, Z. Chen, S. Datta and J. Appenzeller, Proc. IEEE 108, 1322 (2020).

-
- [27] A.A. Serga, A.V. Chumak and B. Hillebrands, *J. Phys. D. Appl. Phys.* 43, 264002 (2010).
- [28] B. Lenk, H. Ulrichs, F. Garbs and M. Münzenberg, *Phys. Reports* 507, 107 (2011).
- [29] V.V. Kruglyak, S.O. Demokritov and D. Grundler, *J. Phys. D. Appl. Phys.* 43, 264001(2010).
- [30] T. Balashov, P. Buczek, L. Sandratskii, A. Ernst and W. Wulfhekel, *J. Phys. Condens. Matter* 26, 394007 (2014).
- [31] T. Holstein and H.P. Primakoff, *Phys. Rev.* 58, 1098 (1940).
- [32] P. Pirro, T. Brächer, A.V. Chumak, B. Lägél, C. Dubs, O. Surzhenko and B. Hillebrands, *Appl. Phys. Lett.* 104, 012402 (2014).
- [33] Agence nationale de la recherche, *Ligne à retard pour magnons dans un YIG micro-structuré contrôlé électroniquement*, <https://anr.fr/Projet-ANR-12-ASTR-0023>.
- [34] F. Garcia-Sanchez, P. Borys, R. Soucaille, J.P. Adam, R.L. Stamps and J.V. Kim, *Phys. Rev. Lett.* 114, 247206 (2015).
- [35] A. Hubert and R. Schäfer, *Magnetic domains: the analysis of magnetic microstructures*. Springer, Science & Business Media (2008).
- [36] A. Hirohata, K. Yamada, Y. Nakatani, I.L. Prejbeanu, B. Diény, P. Pirro and B. Hillebrands, *J. Magn. Magn. Mat.* 509, 166711 (2020).
- [37] K. Wagner, A. Kákay, K. Schultheiss, A. Henschke, T. Sebastian and H. Schultheiss, *Nat. Nanotechnol.* 11, 432 (2016).
- [38] E. Albisetti, D. Petti, G. Sala, R. Silvani, S. Tacchi, S. Finizio, and R. Bertacco, *Comm. Phys.* 1, 1, (2018).
- [39] V. Sluka, T. Schneider, R.A. Gallardo, A. Kakay, M. Weigand, T. Warnatz and S. Wintz, *Nat. Nanotechnol.* 14, 328 (2019).
- [40] C. Liu, S. Wu, J. Zhang, J. Chen, J. Ding, J. Ma and H. Yu, *Nat. Nanotechnol.* 14, 691(2019).

Chapitre 1

THEORIE DES ONDES DE SPIN

Introduction

Les substances magnétiquement ordonnées (diélectriques, métaux de transition, semi-conducteurs, terres rares, etc.) ont fait l'objet de plusieurs études et recherches scientifiques, du fait de leurs propriétés exceptionnelles et de la diversité d'applications qu'elles offrent. D'une part, elles donnent lieu à une variété d'excitations magnétiques (plasmons, magnons, spinarons). Parmi ces excitations, on cite les ondes de spin, qui sont les types les plus simples qui traitent de la plus faible énergie d'interactions entre les vecteurs de spin. Une simple excitation magnétique et complète d'un système ferromagnétique ordonné est la réduction de la projection du moment de spin de l'atome sur l'axe de quantification. Du fait de l'interaction d'échange entre spins voisins, cette excitation ne reste pas localisée à un site donné, mais se propage sous forme d'onde et qui peut être exprimée sous la forme

$$M(r, t) = M_0 + m. \exp(i(\omega t - \vec{q} \cdot \vec{r})) \quad (\text{I-1})$$

Où $M(r, t)$ est le moment magnétique d'un point spécifique de la substance dépendant de la coordonnée r et du temps t , M_0 est la constante uniforme de la magnétisation, m est le vecteur (généralement complexe) donnant l'amplitude de l'onde de spin (**Fig. (I.1)**). C'est une forme d'onde progressive, illustrée sur la **Fig. (I.2)**.

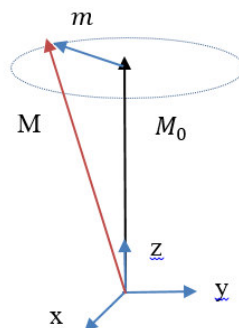


Fig. (I.1) : Représentation schématique du vecteur $M(r, t)$ avec une partie statique $M_0 \parallel Oz$ et dynamique m dans le plan (xOy) .

Dans le cas simple d'un ferromagnétique isotrope (modèle d'Heisenberg) ou uni-axial (connu sous l'appellation de cas limite d'Ising), on a : $m_z = 0$, $m_x = -i m_y$. Le vecteur $M(r, t)$ décrit un cône d'une direction établie M_0 .

Dans la théorie microscopique, pour des instants définis, l'aimantation locale $M(r)$ définie dans l'équation (I-1) doit être remplacée par le moment de spin $S(r_i)$, r_i étant la position de l'ion magnétique. Mais en général, ce n'est pas tout à fait le cas, des situations plus particulières sont rencontrées dans les multi-sous réseaux antiferromagnétiques.

La création d'un magnon peut être associée à la précession d'un spin électronique. En termes quantique, l'onde de spin est une quasi-particule, ayant une énergie $\mathcal{E} = \hbar\omega$ et un quasi-moment égal à $p = \hbar q$. Un flux de magnons peut donc transporter un courant de spins.

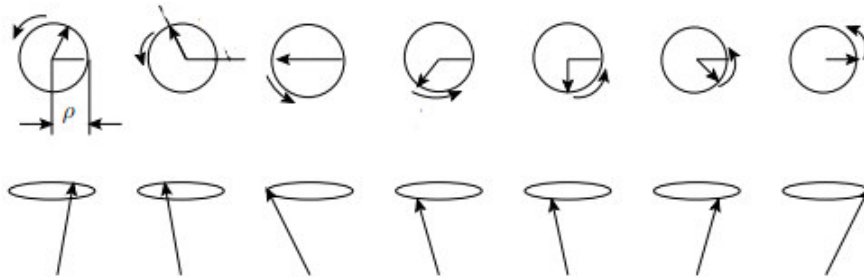


Fig. (I.2) : *Précession du vecteur de spin autour de l'axe d'aimantation à la fréquence $\omega(q)$.*

L'étude des ondes de spin réside, principalement, dans la détermination de leur spectre de propagation, c'est-à-dire, établir la loi de dispersion $\omega(q)$ et la durée de vie dictée par leur interaction entre elles et avec d'autres excitations dans l'aimant. Le spectre de magnons présente généralement un gap, ce qui signifie que son énergie ε_0 est finie au centre de la zone de Brillouin $q = 0$, et dépend à la fois des paramètres intrinsèques tels que le champ d'échange effective, l'anisotropie, les interactions dipôle-dipôle, le champ magnétique extérieur (appliqué), etc.

Les excitations magnétiques ou ondes de spin dans les substances ferromagnétiques, présentant des brisures de symétrie, sont d'une tout autre nature ; leur théorie est présentée au chapitre 1 pour les ferromagnétiques à cristallisation cubique dans l'état massif.

Il est également intéressant de considérer les excitations spécifiques résultant des interactions des magnons avec d'autres excitations dans les cristaux, à savoir les oscillations élastiques du réseau, les oscillations magnétiques des impuretés.

Dans le cadre de ce travail de thèse, nous nous intéressons, plus particulièrement, aux excitations magnétiques au niveau des surfaces ferromagnétiques dans les trois cristallisations possibles pour le système cubique. Dans une seconde étape, nous étudions les excitations des spins au niveau des interfaces ferromagnétiques obtenues par la juxtaposition de deux cristaux ferromagnétiques à maillage cubique similaire (cs-cs, cc-cc, cfc-cfc), puis, la juxtaposition des cristaux ayant des maillages différents (croisement des structures : cs-cc, cs-cfc, cc-cfc).

1. Le formalisme traitant des ondes de spin

La physique quantique permet de calculer les caractéristiques thermodynamiques et cinétiques du solide, à basse température, avec une grande précision, grâce à l'introduction et l'application du concept de quasi-particules. Ces quasi-particules sont soit des fermions, soit des bosons. Leur nombre n'est pas conservé à $T = 0$. Il n'y est pas du tout lorsque la température augmente. Les magnons sont des bosons de spin entier et obéissent à la statistique de Bose- Einstein. En supposant que chaque atome du réseau cristallin a une valeur définie de spin S , et compte tenu du couplage relativement faible entre spins et les autres degrés de libertés du cristal (Herring [1] en 1966, Mattis [2] en 1965), on peut écrire l'Hamiltonien de spin (H_S) décrivant les interactions magnétiques entre atomes comme suit

$$H_S = H_{ex} + H_{Zee} + H_{an} \quad (\text{I-2})$$

Où H_{ex} représente l'interaction d'échange (partie isotropie), H_{Zee} est l'énergie de Zeeman. Le dernier terme H_{an} , contient l'énergie d'anisotropie et l'énergie d'interaction dipôle-dipôle entre spins voisins. A noter que toutes ces contributions à l'Hamiltonien de spin seront définies, dans ce qui suit, pour les matériaux ferromagnétiques, mais on commence d'abord par l'explication de la notion du spin de l'électron.

1.1. Spin de l'électron

La découverte du concept de spin de l'électron par Samuel Goudsmith et George Uhlenbeck [3] en 1925 est révolutionnaire. Elle a permis à la physique quantique d'expliquer les phénomènes collectifs, incompris auparavant par la théorie de Bohr et Sommerfeld, à l'image du magnétisme dans la matière. Dans leur théorie, le spin est assimilé au moment cinétique intrinsèque de l'électron. Ce dernier ne peut prendre que deux valeurs discrètes et quantifiées par le nombre quantique dit de spin $m_s = \pm 1/2$. Les projections du moment cinétique de l'électron suivant l'axe, conventionnellement choisi, Oz valent :

$S_z = \pm \hbar/2$. On rappelle que \hbar est la constante de Planck.

On note, souvent les deux états propres correspondants, par $|+\rangle$ pour le spin up et $|-\rangle$ pour le spin down.

Généralement, les projections du moment cinétique suivant un axe quelconque s'obtiennent par l'application de l'observable vectorielle \hat{S} sur les vecteurs d'états, retrouvant les valeurs discrètes : $\pm \hbar/2$.

$$\hat{S}_i = \hbar/2 \cdot \sigma_i \quad (\text{I-3})$$

Où σ_i sont les matrices de Pauli, $i = x, y, z$.

Le moment magnétique de spin, correspondant au moment cinétique de spin, est défini par

$$\vec{\mu}_s = \gamma \cdot \vec{S} \quad \text{et} \quad \gamma = -\frac{g \cdot e}{2m_e} \quad (\text{I-4})$$

g est un nombre sans dimension, sa valeur est fixé, en 2021, à 2.00283 [4], appelé facteur de Landé. γ est le rapport gyromagnétique. Tout au long de cette thèse, le moment cinétique intrinsèque de spin et le moment magnétique intrinsèque de spin seront confondus au terme de spin.

1.2. Température de Curie

Dans les matériaux ferromagnétiques, il n'est pas nécessaire d'appliquer un champ magnétique extérieur pour aimanter le système. Ces derniers possèdent une aimantation naturelle grâce à l'alignement des moments magnétiques d'où l'apparition du ferromagnétisme. Ce phénomène d'alignement est sensible à la température. L'agitation thermique peut altérer l'état des moments magnétiques dès que les températures dépassent la température seuil, appelée température de Curie T_c , l'ordre ferromagnétique disparaît.

On signale que la température seuil de l'ordre antiferromagnétique s'appelle température de Néel, on la note T_N .

1.3. Energie d'échange

Bien qu'elle soit un effet quantique, responsable de l'ordre magnétique dans le matériau, l'interaction d'échange se produit entre particules exclusivement identiques. Pour les fermions, les électrons de spin demi-entier ne peuvent pas occuper le même état quantique ;

l'interaction d'échange est générée par la répulsion de Pauli, appelée souvent principe d'exclusion de Pauli. Quant aux bosons, qui ont des spins entiers, l'interaction se révèle de nature "attraction efficace" [5], obéissant ainsi à la statistique de Bose- Einstein.

Les magnons, qui sont des bosons, occupent un même et unique état quantique à basse température. Ceci donne lieu à un regroupement de ces particules. Autrement dit, l'interaction d'échange résulte de l'interaction entre moments de spin voisins. L'expression de l'énergie d'échange entre deux spins premiers voisins est donnée par

$$E_{ex} = -J_{pp} \cdot \vec{S}_p \cdot \vec{S}_p \quad (\text{I-5})$$

Où J_{pp} est l'intégrale d'échange d'Heisenberg [6] correspondant à l'amplitude d'interaction entre les vecteurs de spin \vec{S}_p et \vec{S}_p localisés aux sites p et p , respectivement.

Lorsque le couplage J_{pp} est positif, l'interaction favorisera l'ordre ferromagnétique dans le réseau cristallin et lorsqu'il est négatif, l'interaction favorisera l'ordre antiferromagnétique.

On doit noter que le couplage J_{pp} est une fonction de la distance entre spins voisins. Il devient alors négligeable au-delà du second voisin.

Toutefois, l'interaction d'échange ne se résume pas seulement aux couplages directe des moments de spin mais provient aussi de la capacité des électrons de conduction à être confinés autour de leurs atomes, du recouvrement plus ou moins des orbitales atomiques et de la portée à courte ou à longue distance des interactions d'échanges, tous ces mécanismes microscopiques imposent un alignement spécifique des moments magnétiques de spin dans le matériau. Parmi les travaux qui ont fait découvrir les effets de cette interaction, on cite les travaux de Werner Heisenberg [6] et de Paul Dirac [7], en 1926. Tous deux ont découvert les effets de cette interaction sur le ferromagnétisme de la matière à l'état massif.

1.4. Interaction de Zeeman

Elle correspond directement à l'action d'un champ magnétique extérieur \vec{h}_{ext} sur l'aimantation spontanée du matériau. Avant de donner le détail de la formule de l'énergie de Zeeman, on procédera à la définition de quelques quantités utiles pour la suite.

On définit le vecteur moment magnétique $\vec{M}(\vec{r})$ comme le moment magnétique par unité de volume dV comme suit

$$\vec{M}(\vec{r}) = \frac{d\vec{\mu}_{mag}(\vec{r})}{dV} \quad (\text{I-6})$$

Où $\overrightarrow{\mu_{mag}}(\vec{r})$ est le moment magnétique local de l'élément de volume dV situé à la position \vec{r} . On définit aussi le scalaire M_s par l'aimantation à saturation. Elle vaut la norme du vecteur $\overrightarrow{M}(\vec{r})$.

L'énergie de Zeeman favorise l'alignement de l'aimantation du système avec la direction du champ appliqué. Si on considère un élément de volume dV , ayant une aimantation $\overrightarrow{M}(\vec{r})$ soumise à l'action d'un champ magnétique extérieur, l'énergie de Zeeman s'écrit

$$E_{Zee} = -\mu_0 \int_V \overrightarrow{M} \cdot \overrightarrow{h_{ext}} \cdot dV \quad (\text{I-7})$$

Si l'aimantation du système est uniforme, l'équation (I-7) prendra la forme suivante

$$E_{Zee} = -\mu_0 \cdot M_s \cdot h_{ext} \cdot V \cdot \cos(\varphi) \quad (\text{I-8})$$

φ est l'angle entre le vecteur $\overrightarrow{M}(\vec{r})$ et le champ extérieur appliqué ($\overrightarrow{h_{ext}}$). La constante μ_0 est la perméabilité du vide, elle vaut $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} SI$.

De l'équation (I-8), on peut constater que l'énergie de Zeeman est minimale lorsque l'aimantation du système est dirigée dans le même sens et la même direction que le champ magnétique extérieur. Pour stabiliser une configuration magnétique en domaine, par exemple une configuration en domaine de Weiss, vers une configuration en mono domaine, on doit appliquer un champ magnétique de forte amplitude ; là encore, l'énergie de Zeeman est minimale. Dans ce travail, la contribution de ce terme sera, donc, ignorée.

1.5. Energie d'anisotropie magnétique

L'anisotropie reflète l'observation bien connue que les monocristaux magnétiques peuvent être magnétisés le long de certaines directions cristallographiques plus facilement que d'autres. Elle offre la possibilité de stocker des informations sur l'orientation des moments magnétiques dans les petites structures magnétiques et maintient la magnétisation parallèle ou antiparallèle à une orientation particulière, permettant ainsi la réalisation physique d'informations numériques binaires. Dans le cas des cristaux ferromagnétiques, l'aimantation suit des directions privilégiées, appelées axes de facile aimantation : c'est l'orientation de la plus faible énergie du système. En effet, les énergies associées à l'anisotropie magnétique sont relativement faibles. Néanmoins, sans l'anisotropie magnétique, même la manifestation

macroscopique la plus simple de l'aimant permanent n'existerait pas. Pour un cristal ferromagnétique en équilibre thermique, l'aimantation est orientée suivant l'axe de facile aimantation. A titre d'exemple, pour le Cobalt (de structure hcp), le moment magnétique est orienté suivant l'axe C hexagonal. Dans tous les matériaux, l'anisotropie magnétique varie avec la température. En augmentant la température du cristal, l'anisotropie magnétique s'affaiblit plus rapidement que l'aimantation spontanée [8].

Il existe deux sources microscopiques de l'anisotropie magnétique à savoir l'interaction dipôle-dipôle et le couplage spin-orbite.

i) *L'interaction dipôle-dipôle*

Elle est à l'origine de l'anisotropie dipolaire de forme, de surface ou d'interface, sa portée est nettement plus grande. Dans le cas des cristaux cubiques, l'interaction dipôle-dipôle donne une contribution nulle à l'anisotropie magnéto-cristalline.

ii) *Le couplage spin-orbite*

Le couplage spin-orbite résulte de l'interaction entre le moment cinétique intrinsèque ou spin de l'électron \vec{S} avec le moment cinétique orbital \vec{L} , associé au mouvement orbital du même électron. Dans le model du champ central, où l'on suppose que chaque électron se déplace indépendamment des autres électrons dans le champ électrostatique, l'interaction spin-orbite est proportionnelle au produit scalaire $\vec{L} \cdot \vec{S}$ selon l'expression

$$\Delta H_{S.O} = \frac{\mu_B}{\hbar m_e e c^2} \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial U(r)}{\partial r} \cdot (\vec{L} \cdot \vec{S}) \quad (\text{I-9})$$

μ_B est le magnéton de Bohr, \hbar est la constante de Planck, m_e et e sont, respectivement, la masse et la charge de l'électron. $U(r)$ est l'énergie potentielle de l'électron dans le champ central.

Le couplage spin-orbite [9] est à l'origine de l'anisotropie magnéto-cristalline et magnéto-élastique. Il contribue à ce que l'énergie d'anisotropie soit dépendante de l'orientation du spin par rapport aux axes cristallographiques.

L'énergie d'anisotropie associée à l'anisotropie magnétique peut être alors écrite comme la somme de trois termes

$$H_a = E_d + E_{mc} + E_{me} \quad (\text{I-10})$$

1.5.1. L'énergie dipolaire (E_d)

Dans le matériau, chaque moment magnétique local $\overrightarrow{\mu_{mag}}(\vec{r})$ est soumis à l'action d'un champ dipolaire $\overrightarrow{H_{Dip}}(\vec{r})$, rayonné par tous les autres moments magnétiques locaux. Ce champ dipolaire qui se crée au sein du matériau est opposé à la direction de l'aimantation locale, d'où son appellation par le champ démagnétisant $\overrightarrow{H_{Démag}}(\vec{r})$. Cette interaction donne lieu à un terme d'énergie appelé énergie dipolaire (E_d) proportionnelle au volume de la matière et favorise toujours une aimantation colinéaire à la direction de sa plus grande dimension. Ainsi, et par analogie à l'équation (I-7), l'expression de l'énergie associée à l'anisotropie dipolaire s'écrit, tout simplement, en remplaçant $\overrightarrow{h_{ext}}$ par $\overrightarrow{H_{Démag}}(\vec{r})$ [10] et l'ensemble doit être multiplié par un facteur de $\frac{1}{2}$ pour comptabiliser cette énergie une fois au lieu de deux fois, il vient alors

$$E_d = -\frac{\mu_0}{2} \int_V \vec{M}(\vec{r}) \cdot \overrightarrow{H_{Démag}}(\vec{r}) \cdot dV \quad (\text{I-11})$$

En couches minces, le champ démagnétisant est calculé à partir des densités de courant d'aimantation de surface et de volume. Cette description en termes de charges magnétiques est utilisée pour comprendre facilement l'évolution de l'énergie dipolaire en fonction des configurations magnétiques $\vec{M} \cdot \vec{n}$ (\vec{n} est la normale à la surface, orientée vers l'extérieur du matériau magnétique).

Dans le cas des couches minces l'énergie dipolaire prend la forme

$$E_d = -\frac{\mu_0 M_s^2}{2} \cdot V \cdot (\sin\theta)^2 \quad (\text{I-12})$$

Ici, θ est l'angle entre l'aimantation et l'axe Oz . On peut constater tout de suite, à partir de l'équation (I-12), que l'énergie dipolaire dépend directement de la forme de l'échantillon plutôt que de sa structure cristalline et que son minimum est obtenu lorsque l'aimantation est dans le plan.

1.5.2. L'anisotropie magnéto-cristalline de volume

Elle est spécifique à la structure cristalline car dans les matériaux cristallins, il existe des axes cristallographiques selon lesquels il est facile d'aimanter le cristal [11] (axe facile) et des

axes de difficile aimantation. A titre d'exemple, pour les cristaux ferromagnétiques à symétrie cubique, l'aimantation préfère s'orienter suivant les arrêtes du cube à savoir les axes [001], [010] et [100] plutôt que suivant la diagonale [111] qui est un axe de difficile aimantation. C'est dans la direction de facile aimantation [001] que seront réalisés les spectres de propagations des guides d'ondes parfaits que nous déterminons dans cette thèse.

Pour un cristal cubique, l'énergie d'anisotropie magnéto-cristalline est, formellement, donnée en fonction des cosinus directeurs α_i , avec $i = x, y, z$ par la formule suivante

$$u_{cub} = K_1(\alpha_x^2\alpha_y^2 + \alpha_y^2\alpha_z^2 + \alpha_x^2\alpha_z^2) + K_2\alpha_x^2\alpha_y^2\alpha_z^2 \quad (\text{I-13})$$

K_1 et K_2 sont les constantes d'anisotropie [12]. Par exemple, pour le cas du fer, les valeurs de ces constantes sont $K_1 = 4.2 \times 10^4 \text{ J.m}^{-3}$ et $K_2 = 1.5 \times 10^4 \text{ J.m}^{-3}$.

L'anisotropie magnéto-cristalline est une grandeur très faible mais extrêmement importante et avec des conséquences imposantes sur le comportement des matériaux magnétiques. Sa détermination expérimentale est assez directe. Sur le plan théorique, l'anisotropie magnéto-cristalline est difficile à calculer précisément et plusieurs outils mathématiques ont été développés pour donner des résultats quantitatifs.

1.5.3. L'anisotropie magnéto-élastique de volume

Les effets magnéto-élastique apparaissent lorsque l'aimantation du système est modifiée suite à une déformation mécanique et spontanée du réseau sous l'effet d'un champ magnétique extérieur. Elle peut être aussi prise en considération comme l'anisotropie de surface lorsque le cristal est délimité par des surfaces donc subi la déformation de la maille élémentaire [13-15]. Pour les matériaux à cristallisation cubique, ce terme est donné sous la forme ci-dessous

$$u_{me,cub} = B_1(\varepsilon_{xx}\alpha_x^2 + \varepsilon_{yy}\alpha_y^2 + \varepsilon_{zz}\alpha_z^2) + 2B_2(\varepsilon_{xy}\alpha_x\alpha_y + \varepsilon_{yz}\alpha_y\alpha_z + \varepsilon_{xz}\alpha_x\alpha_z) \quad (\text{I-14})$$

Où α_i sont les cosinus directeurs, B_1 et B_2 sont les constantes d'anisotropie magnéto-élastique. Les facteurs ε_{ij} représentent les tenseurs de déformation du système cubique.

Remarque

Bien que sa valeur soit faible, de l'ordre du μeV à l'énergie totale qui est de l'ordre du eV/atome , l'énergie d'anisotropie magnétique est responsable d'effets importants comme les

directions d'aimantation facile/dure, les mécanismes d'inversion d'aimantation et parois de domaines. Dans le cas des films minces et couches minces, l'anisotropie magnétique est différente du matériau constitutif en raison de la présence d'éléments briseurs de symétrie comme la surface ou interface. En effet, la distorsion du réseau dû au décalage film/substrat et la présence d'atomes de faible coordination en surface relève de la morphologie de la surface. Ainsi, une contribution de la surface ou de l'interface à l'anisotropie magnétique est pesante. Des termes de plus seront ajoutés aux différentes composantes de l'anisotropie magnétique. Ils sont d'une grande importance dans l'apparition d'une forte anisotropie dans les films et couches minces. Nous verrons au chapitre 3, l'anisotropie de surface ou d'interface et nous donnerons le détail de ce que devient la formule de l'énergie anisotrope relative à l'anisotropie magnétique en présence de surface ou d'interface.

2. Approximations à tenir en compte

Il est bien connu que la partie d'échange de l'Hamiltonien de spin (I-2) du système ferromagnétique ne favorise aucune direction spécifique. L'axe O_z est alors choisi comme une direction le long de laquelle le moment magnétique total (spin) est orienté. Dans le cas où la partie de l'énergie d'anisotropie de l'Hamiltonien de spin est énergétiquement favorable pour que le moment magnétique total soit orienté selon l'axe sélectionné (O_z), l'anisotropie est de type "easy-axis" (EA) ou axe facile). Dans cette situation, aucun problème ne se pose dans la détermination de l'état fondamental. Ce dernier coïncide avec le cas classique correspondant à la température $T = 0$, où les spins ont leurs projections maximales le long de l'axe O_z , mais si le terme d'anisotropie favorise plus d'une direction privilégiée ou le moment magnétique total est orienté dans la direction perpendiculaire à l'axe de quantification (anisotropie de type "easy-plane" (EP)). Alors, l'Hamiltonien de spin ne commute pas avec la projection du spin total sur l'axe de quantification, et donc l'aimantation n'atteint pas la valeur maximale même à $T = 0$. Les systèmes magnétiques de ce genre ont un magnétisme non colinéaire. Une situation strictement colinéaire ne s'établit que dans un champ magnétique infiniment grand (Holstein et Primakoff 1940) [16] où les interactions dipôle-dipôle sont ignorées.

Notre travail justement s'inscrit dans la perspective des systèmes ferromagnétiques pour lesquels l'interaction d'échange domine tous les termes de l'Hamiltonien de spin ; par conséquent l'Hamiltonien de spin H_s se résume en Hamiltonien du modèle de Heisenberg-Dirac- Van Vleck [17], souvent appelé, brièvement, le modèle de Heisenberg. C'est le modèle le plus pratique qui traite les ondes de spin avec la seule contribution des interactions d'échanges H_{ex} , il s'écrit comme suit

$$H = -\sum_{p,\tilde{p}} J_{p\tilde{p}} \vec{S}_p \cdot \vec{S}_{\tilde{p}} \quad (\text{I-15})$$

Ainsi l'Hamiltonien d'Heisenberg est la sommation sur toutes les interactions d'échanges entre proches voisins où $J_{p\tilde{p}}$ est l'intégrale d'échange d'Heisenberg correspondant à l'amplitude d'interaction entre les vecteurs de spins \vec{S}_p et $\vec{S}_{\tilde{p}}$ localisés aux sites p et \tilde{p} , respectivement.

Lorsque le couplage $J_{p\tilde{p}}$ est positif, l'interaction favorisera l'ordre ferromagnétique dans le réseau cristallin.

Dans le contexte de Heitler-London [18], l'Hamiltonien de Heisenberg suppose que les électrons impliqués dans le couplage d'échange sont localisés. C'est une approche plus réaliste pour les diélectriques (isolants). Mais, il n'est pas de même pour les métaux de transition ferromagnétiques (Fe, Co et Ni) où les électrons responsables du ferromagnétisme sont libres. Une description d'électrons délocalisés, de type Hund-Mulliken-Bloch [19-20] pour les fonctions d'ondes des électrons (orbitales moléculaires et structures de bandes), permet de comprendre les phénomènes liés au ferromagnétisme. Par conséquent, le modèle de Stoner qui repose sur la différence entre les populations de spins up et spins down, semble être en parfaite adéquation. Néanmoins, on pourra juxtaposer le modèle de l'Hamiltonien d'Heisenberg aux métaux de transition, où les électrons responsables du ferromagnétisme sont les électrons de la sous-couche 3d. Ces électrons libres, donnant lieu au magnétisme itinérant, peuvent être considérés plus au moins figés et les électrons des sous-couches de valence s, et f seront considérés libres. Ainsi, les électrons des couches d se voient figés autour de leurs atomes et se voient dans un champ de potentiel moyen. De plus, on a choisi : que toute perturbation externe tels que l'agitation thermique, application de champ externe comme inclus dans le choix des paramètres d'échanges $J_{p\tilde{p}}$. D'autres approximations concernant l'étude du phénomène collectif au niveau des surfaces et interfaces seront abordées plus loin aux chapitres 3 et 4.

3. Limites du modèle de Heisenberg

Deux hypothèses importantes sont faites dans le modèle de Heisenberg :

- i) Les spins sont supposés être complètement localisés.
- ii) Les moments magnétiques orbitaux sont ignorés.

La première hypothèse est satisfaite pour les diélectriques et semi-conducteurs. Elle est mal-satisfaite pour les métaux (une zone modèle, par exemple, doit être utilisée dans ce cas). La deuxième hypothèse est parfaitement satisfaite pour les ferromagnétiques avec des ions en état S et plus l'extinction des moments orbitaux (s'ils sont présents) est forte, plus c'est mieux. Néanmoins, il faut noter que lorsque le recouvrement est suffisamment fort, la faible (mais toujours importante) influence des moments orbitaux est peut être prise en compte dans le cadre du modèle de Heisenberg généralisé. Deux hypothèses supplémentaires doivent être posées :

- la première dans le terme de Zeeman, la valeur de spin doit être prise différemment.
- Deuxièmement, un terme décrivant l'anisotropie magnéto-cristalline (dont la cause principale est l'interaction spin-orbitale) est ajoutée dans la formule de l'Hamiltonien.

4. Approche semi-classique

Il est très important de noter que l'aspect semi-classique de l'étude des excitations magnétiques correspond à une description dans des systèmes parfaits, périodiques et infinis. Les spins ressemblent à des vecteurs classiques, arrangés périodiquement dans le réseau cristallin, et dont l'amplitude est égale à l'unité. En considérant le cas des systèmes ferromagnétiques, les spins sont couplés par des interactions d'échanges positives. Ainsi, les spins sont assimilés à des petits aimants qui s'influencent mutuellement ; un spin au site quelconque p détermine la position des spins de son voisinage immédiat, qui déterminent à leurs tours les positions des spins plus proches voisins. Ils sont en mouvements de précessions cohérentes autour de l'axe de l'aimantation macroscopique. Une perturbation sur l'un des spins se répercute progressivement sur la précession des autres, donnant lieu à une onde dite *onde de spin*. Pour décrire l'onde de spin (équation de dispersion de l'onde de spin), nous adoptons l'Hamiltonien de Heisenberg H . Nous commençons par un rappel de quelques équations qui permettent d'aboutir à l'équation de dispersion des ondes de spin.

Un spin atomique \vec{S}_p au site p , agit avec les spins proches voisins suivant l'équation

$$E = -2 \cdot \sum_{p,p'} J_{pp'} \vec{S}_p \cdot \vec{S}_{p'} \quad (\text{I-16})$$

Suivant cette relation, le spin \vec{S}_p se trouve sous l'action d'un champ moléculaire ou bien champ moyen des moments de spin environnants. Ce champ s'écrit

$$\vec{B} = \frac{2J_{p\dot{p}}}{g\mu_B} \sum_{\dot{p}} \vec{S}_{\dot{p}} \quad (\text{I-17})$$

g et μ_B sont, respectivement, le facteur de Landé et le magnéton de Bohr.

Au spin \vec{S}_p correspond le moment magnétique de spin \vec{B}_p qui s'écrit par la relation suivante :

$$\vec{B}_p = g\mu_B \vec{S}_p \quad (\text{I-18})$$

L'Hamiltonien de Heisenberg est une théorie de champ moyen qu'on formule comme suit

$$H = -\vec{B}_p \cdot \vec{B} \quad (\text{I-19})$$

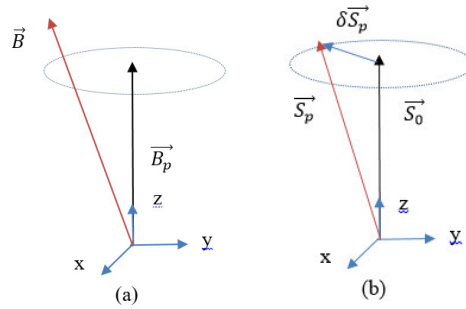


Fig. 1.4 : (a) *Representation du vecteur moment de spin avec le champ moyen des moments de spin environnants.* (b) *Rotation du moment de spin autour de l'axe Oz.*

L'équation de mouvement du moment magnétique de spin a été proposée initialement par Landau et Lifshitz, en 1935 [21] et ce en considérant le cas des oscillations uniformes du moment magnétique de spin dans un matériau ferromagnétique isotrope. La loi mathématique qui régit le mouvement du moment de spin quelconque \vec{S}_p est donnée par l'équation

$$\hbar \frac{d\vec{S}_p}{dt} = -\vec{B}_p \wedge \vec{B} \quad (\text{I-20})$$

Ou bien par

$$\hbar \frac{d\vec{S}_p}{dt} = -2J\vec{S}_p \wedge \sum_{\dot{p}} \vec{S}_{\dot{p}} \quad (\text{I-21})$$

La rotation du spin autour de l'axe Oz décrit un cône, (voir la **Fig. 1.4(a)**), tel que

$$\vec{S}_p = \vec{S}_0 + \delta\vec{S}_p \quad (\text{I-22})$$

\vec{S}_0 est la composante de \vec{S}_p suivant l'axe Oz , elle est indépendante du temps.

$$\hbar \frac{d(\vec{S}_0 + \delta\vec{S}_p)}{dt} = -2J(\vec{S}_0 + \delta\vec{S}_p) \wedge \sum_{\dot{p}} (\vec{S}_0 + \delta\vec{S}_{\dot{p}}) \quad (\text{I-23})$$

En l'absence d'excitation extérieure,

$$\frac{d\vec{S}_p}{dt} = 0 \quad (\text{I-24})$$

Les écarts $\delta\vec{S}_p$ et $\delta\vec{S}_{\dot{p}}$ sont indépendants du temps ; à basse température, ils sont très petits.

A partir de l'équation (I-23), on peut aboutir à

$$\hbar \frac{d(\delta\vec{S}_p)}{dt} = -2J \sum_{\dot{p}} [(\delta\vec{S}_p - \delta\vec{S}_{\dot{p}}) \wedge \vec{S}_0] \quad (\text{I-25})$$

Comme on peut le voir sur la **Fig. 1.4(b)**,

$$(\delta\vec{S}_p)_x = (\vec{S}_p)_x, (\delta\vec{S}_p)_y = (\vec{S}_p)_y \text{ et } (\vec{S}_p)_z = \vec{S}_0 \quad (\text{I-26})$$

On introduit ces projections dans l'équation (I-25), on obtient

$$\hbar \frac{d(\vec{S}_p)_x}{dt} = -2J \sum_{\dot{p}} [(\vec{S}_p)_x - (\vec{S}_{\dot{p}})_x] \wedge \vec{S}_0 \quad (\text{I-27})$$

$$\hbar \frac{d(\vec{S}_p)_y}{dt} = -2J \sum_{\dot{p}} [(\vec{S}_p)_y - (\vec{S}_{\dot{p}})_y] \wedge \vec{S}_0 \quad (\text{I-28})$$

$$\hbar \frac{d(\vec{S}_p)_z}{dt} = 0 \quad (\text{I-29})$$

Comme nous l'avons déjà mentionné dans l'introduction, l'excitation se propage sous forme d'ondes planes progressives. Par analogie à l'équation (I-1), nous posons les solutions suivantes

$$S_{p_x}(r, t) = S_0 + U. \exp(i(\vec{q}\vec{r} - \omega t)) \quad (\text{I-30})$$

$$S_{p_y}(r, t) = S_0 + V. \exp(i(\vec{q}\vec{r} - \omega t)) \quad (\text{I-31})$$

On remplace ces solutions dans les équations (I-27) et (I-28), on obtient l'équation de dispersion de l'onde de spin qui s'écrit comme suit

$$\hbar\omega = 2JS_p\eta_p \left[1 - \frac{1}{z_p} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{q}\vec{r}} \right] \quad (\text{I-32})$$

5. Approche quantique

Afin d'obtenir l'état fondamental de l'Hamiltonien de Heisenberg par les concepts de la seconde quantification, il suffit de le réécrire au moyen des opérateurs de spin suivants

$$S^\pm = S^x \pm iS^y \quad (\text{I-33})$$

Ces opérateurs, quant à eux, seront exprimés en termes d'opérateurs de création et d'annihilation de Bose : a_p^+ et a_p . Les expressions liants les opérateurs de spin aux opérateurs a_p^+ et a_p sont dérivés dans le cadre des transformations de Holstein et Primakoff [16].

En introduisant les opérateurs de spin dans l'équation de l'Hamiltonien de spin de l'équation (I-15), on obtient la forme suivante

$$H = -\sum_{p,p'} J_{pp'} \left[S_p^z S_{p'}^z + \frac{1}{2} (S_p^+ S_{p'}^- + S_p^- S_{p'}^+) \right] \quad (\text{I-34})$$

Le symbole S représente l'amplitude de spin.

S^x , S^y et S^z représentent, respectivement, les composantes de spin suivant les directions Ox , Oy et Oz .

Il existe dans la littérature une variété de transformations, permettant de construire l'équivalent en opérateurs de Bose de l'Hamiltonien de spin. Parmi celle-ci, on cite les transformations de Dyson [22-23], Maleev [24] et les transformations de Goldhirsch [25-28]. Dans la présente thèse, nous procédons avec les transformations de Holstein-Primakoff exprimées ci-dessous par

$$S_p^z = S - a_p^+ a_p \quad (\text{I-35})$$

$$S_p^+ = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_p^+ a_p}{2S}\right)^{1/2} a_p \quad (\text{I-36})$$

$$S_p^- = \sqrt{2S} a_p^+ \left(1 - \frac{a_p^+ a_p}{2S}\right)^{1/2} \quad (\text{I-37})$$

On note que les valeurs propres de l'opérateur $a_p^+ a_p$ sont le nombre \mathcal{N} d'ondes de spin excités. Ces expressions sont néanmoins imprécises lorsque les valeurs propres de l'opérateur $a_p^+ a_p$ sont supérieures à $2S$ ou encore, pour les mêmes valeurs. Une difficulté supplémentaire est introduite par la présence de radicaux dans les équations (I-36) et (I-37). Ceci conduit à l'apparition d'une série de termes anharmoniques dans l'Hamiltonien. Pour contourner ce problème, une autre approximation s'avère nécessaire : il s'agit de considérer que le spin S est supérieur à 1 ($S > 1$). Ce qui nous permet de développer ces racines carrées en série, comme cela

$$\left(1 - \frac{a_p^+ a_p}{2S}\right)^{1/2} = 1 - \frac{a_p^+ a_p}{4S} - \frac{(a_p^+ a_p)^2}{32S^2} - \dots \quad (\text{I-38})$$

Alors, il ressort un Hamiltonien composé de deux contributions H_0 et H_1 tel que

$$H = H_0 + H_1 \quad (\text{I-39})$$

H_0 : contient les termes multiples de a_p et représente la somme des énergies des ondes de spin.

H_1 : contient des termes de degrés supérieurs à 2 et représente les interactions magnon-magnon.

Il est généralement possible de se servir uniquement de la contribution H_0 . Ce choix est justifié par la condition fixée tout au début ($S > 1$) qui correspond à l'approximation des ondes de spin, à basse température. Nous devons rappeler que dans ce cas, plus l'amplitude des spins est grande, plus ils ressemblent à des vecteurs classiques. Il est à noter aussi que les interactions entre magnons sont négligeables dans ce cas. Nous pouvons alors travailler avec la transformation de Holstein-Primakoff linéarisée [29]

$$S_p^z = S - a_p^+ a_p \quad (\text{I-40})$$

$$S_p^+ = \sqrt{2S} a_p \quad (\text{I-41})$$

$$S_p^- = \sqrt{2S} a_p^+ \quad (\text{I-42})$$

Ces transformations peuvent être appliquées sur plusieurs modèles. Prenons le cas d'un modèle ferromagnétique ordonné. En se limitant aux interactions d'échanges entre premiers voisins, avec un couplage isotrope, possédant la symétrie de translation, $J_x = J_y = J_z = J$, il ressort l'Hamiltonien suivant

$$H = -J \frac{NZ}{2} S^2 - JS \sum_{p,\tilde{p}} (-a_p^+ a_p - a_{\tilde{p}}^+ a_{\tilde{p}} + a_p^+ a_{\tilde{p}} + a_{\tilde{p}}^+ a_p) \quad (\text{I-43})$$

Avec N le nombre total de spin et chaque spin possède Z spins premiers proches voisins. Un spin à la position \vec{r}_p repère son voisin à la position $\vec{r}_{\tilde{p}}$ tel que

$$\vec{r}_{\tilde{p}} = \vec{r}_p + \vec{r} \quad (\text{I-44})$$

On introduit les transformations de Fourier suivantes

$$a_p^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\vec{r}_p} \cdot a_{\vec{q}}^+ \quad (\text{I-45})$$

$$a_p = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\vec{r}_p} \cdot a_{\vec{q}} \quad (\text{I-46})$$

On obtient l'Hamiltonien suivant

$$H = -J \frac{NZ}{2} S^2 + JSZ \sum_{\vec{q}} (1 - \gamma(\vec{q})) a_{\vec{q}}^+ a_{\vec{q}} \quad (\text{I-47})$$

$$\gamma(\vec{q}) = \frac{1}{Z} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{q}\vec{r}} \quad (\text{I-48})$$

La partie $E(\vec{q}) = JSZ(1 - \gamma(\vec{q}))$ de l'équation (I-47) est l'énergie de l'onde de spin.

En résumé

Dans la limite où ($S > 1$), l'Hamiltonien H_1 est négligeable car il représente les interactions magnon-magnon dont l'énergie est faible, comparée à la somme des énergies des ondes de spin. Dans la limite où S est très petit ou avec l'agitation thermique, il devient non négligeable.

Bibliographie et webographie du chapitre 1

- [1] C. Herring, *Direct exchange between well-separated atoms in: Magnetism*, eds G.T. Rado and H. Suhl, Academic Press, New York (1966).
- [2] D.C. Mattis, *The Theory of Magnetism*, Harper and Row, New York (1965).
- [3] G.E. Uhlenbeck and S. Goudsmit, *Nat. Sci.* 13, 953 (1925).
- [4] Victor HASPOT, Thèse de Doctorat de l'université Paris- Saclay (2020).
- [5] W. Heisenberg, *Z. Phys.*, 49, 619 (1928).
- [6] W. Heisenberg, *J. Phys* 38, 411 (1926).
- [7] P.A.M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. Lond. Series A* 112, 661 (1926).
- [8] <http://perso.neel.cnrs.fr/olivier.fruchart/slides/magn/magn-fruchart-lecturenotes2006.pdf> [archive]
- [9] B.D. Cullity. *Introduction to Magnetic Material*, Addison-Wesley, New York (1972).
- [10] De Lacheisserie, Etienne du Trémolet. *Magnétisme*, Vol. 2. EDP sciences (2012).
- [11] S. Blundell, *Magnetism in condensed matter*, Londres, Oxford University Press (2001).
- [12] K. Ait Oukaci, Thèse de Doctorat, Lorraine, France (2021).
- [13] P. Bruno, Thèse de Doctorat, Université Paris XI, Orsay, France (1989).
- [14] A. Bounouh, Thèse de Doctorat, Université Paris Sud Orsay, France (1997).
- [15] C. Chappert and P. Bruno, *J. Appl. Phys.* 64, 5736 (1988).
- [16] F. Boumeddine, Thèse de Doctorat, Université de Tizi-Ouzou (2012).
- [17] J.H. Van Vleck, *Quelques aspects de la théorie du magnétisme*, Annales de l'I.H.P., tome 10, 57 (1947).
- [18] W. Heitler and F. London, *J. Phys.* 44, 455 (1927).
- [19] R.S. Mulliken, *Phys. Rev.* 41, 49 (1932).
- [20] F. Bloch, *Z. Phys.* 52, 555 (1929).
- [21] B. Bourahla, Thèse de Doctorat, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, (2007).
- [22] F. Dyson, *Phys. Rev.* 102, 1217 (1956a).
- [23] F. Dyson, *Phys. Rev.* 102, 1231 (1956b).
- [24] C.V. Maleev, *Zh. Eksp. & Teor. Fiz.* 33, 1010 (1957).
- [25] I. Goldhirsch, *J. Phys. A* 13, 453 (1980a).
- [26] I. Goldhirsch, *J. Phys. A* 13, 3479 (1980b).
- [27] I. Goldhirsch and E. Levich, *Phys. Rev. B* 21, 2833 (1980).
- [28] Goldhirsch, I., E. Levich and V. Yachot, 1979, *Phys. Rev. B* 19, 4780.
- [29] O. Nafaa, Thèse de Doctorat, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou (2014).

Chapitre 2

MOUVEMENT DE PRECESSION DES SPINS DANS LES STRUCTURES CUBIQUES PARFAITES A COUPLAGE FERROMAGNETIQUE

Introduction

A basse température, si un matériau solide à cristallisation cubique, doté de spins aux couplages ferromagnétiques, est soumis à l'action d'un champ magnétique extérieur H_{ext} , suivant un axe de facile aimantation (l'axe Oz par exemple), tous les spins peuvent précesser en phase (précession harmonieuse). Par contre, dès que l'on s'écarte de ces conditions idéales, soit en augmentant la température, soit en délimitant le solide par des surfaces/interfaces ferromagnétiques, on peut s'attendre à ce que la précession des spins ne se fasse plus en phase.

Une décomposition des amplitudes magnétiques des spins, en série de Fourier, sous forme d'ondes planes, fait apparaître des harmoniques spatiales que l'on nomme "Ondes de Spin". Pour déterminer les caractéristiques de ces ondes, comme leurs énergies, vitesses de propagations et spectres de dispersion, des méthodes analytiques sont élaborées. La méthode de raccordement est l'une de ces méthodes. Elle permet d'une part, d'expliquer les phénomènes collectifs [1-5], déjà observés expérimentalement et d'autre part de prédire le comportement de ces phénomènes, en fonction de plusieurs paramètres physiques tels que : l'environnement atomique, structure cristallines, interaction d'échange, etc.

Sur le plan théorique, l'étude des excitations collectives de spin dans les systèmes ferromagnétiques avec brisures de symétrie, afin de comprendre leurs propriétés (spectres et modes de précession, vitesse de propagation, la localisation et la transmission/réflexion des ondes, etc.), nécessite inévitablement la maîtrise de la thématique dans les systèmes parfaitement ordonnés ou dans les régions qui sont loin de toutes perturbations structurales. Ces régions dites "de volume" présentent des caractéristiques différentes des structures perturbées par la présence de surfaces ou interfaces [6-7].

1. Dynamique des spins dans les structures cubiques ferromagnétiques parfaites

Pour les excitations de basse énergie, en dessous de la température de Curie (T_c), l'effet de Zeeman lié à l'application d'un champ magnétique peut être négligé ainsi que les termes

d'anisotropie, alors l'énergie du système peut être décrite par l'interaction d'échange entre spins voisins, avec un Hamiltonien de type Heisenberg [8]

$$H = - \sum_{p,p'} J_{pp'} \vec{S}_p \cdot \vec{S}_{p'} \quad (\text{II-1})$$

A chaque site atomique p du réseau cristallin, correspond un vecteur de spin noté $\vec{S}_p(l, m, n)$. Les indices $(l, m, n) \equiv p$, sont les entiers décrivant les coordonnées du spin p dans le réseau de Bravais, avec

$$\vec{S}_p = l\vec{i} + m\vec{j} + n\vec{k} \quad (\text{II-2})$$

Il a été démontré que le ferromagnétisme des systèmes à structures cubiques est lié aux interactions d'échanges, qui font que tous les moments de spin des sites atomiques ont la même orientation. Dans ce chapitre, nous considérons des systèmes cubiques parfaitement ordonnés avec le même paramètre de réseau a ainsi la même valeur absolue de l'intensité du spin, qu'on note S , sur chaque site atomique.

Si nous choisissons soigneusement les constantes de couplage entre les différents spins voisins, connues sous l'appellation « intégrales d'échange, et notées par $J_{pp'}$ », ceci nous permettra de relever les conséquences et l'impact des interactions sur le mouvement de précession et la dynamique des spins dans le réseau.

Dans le cas des matériaux ferromagnétiques, les interactions d'échanges sont de courte portée. Le couplage $J_{pp'}$ est positif et décroît rapidement avec la distance interatomique [9].

On pose J_1 et J_2 comme couplages d'échange entre spins premiers voisins et seconds voisins, respectivement.

Dans ce travail de thèse, on introduit la valeur normalisée dans les équations du traitement théorique. On la note par r . Elle est définie comme étant le rapport des intégrales d'échange, J_1 et J_2 , comme suit

$$r = \frac{J_2}{J_1} < 1 \quad (\text{II-3})$$

La **Fig. (II.1)** illustre ces couplages dans les trois structures cubiques ferromagnétiques

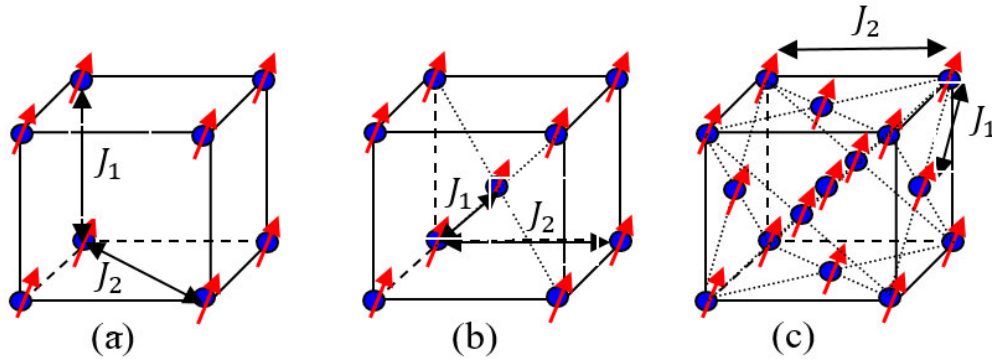


Fig. (II.1) : Schéma représentatif des réseaux cubiques existants. J_1 et J_2 sont les couplages d'échanges entre premiers voisins et second voisins, respectivement.

(a) Structure cubique simple (cs), (b) Structure cubique centrée (cc),
(c) Structure cubique faces centrées (cfc).

Le mouvement de précession des vecteurs de spins est décrit par le formalisme de Landauer- Buttiker [10]. La symétrie de translation, étant conservée. Elle permet d'écrire l'équation de mouvement de précession de chaque vecteur de spin du réseau cristallin dans la cellule primitive qui génère le guide d'onde parfait. L'amplitude de chaque moment de spin vérifie à chaque instant t , la relation suivante

$$u(\vec{l}, \vec{m}, \vec{n}) = e^{\pm i\vec{q}\vec{r}} \cdot u(l, m, n) \quad (\text{II-3})$$

Où \vec{q} est le vecteur d'onde du réseau réciproque, \vec{r} est le vecteur qui joigne le spin du site de coordonnées $(\vec{l}, \vec{m}, \vec{n})$ au spin situé sur le site de coordonnées (l, m, n) , avec

$$\vec{q} = q_x \vec{i}^* + q_y \vec{j}^* + q_z \vec{k}^* \quad (\text{II-4})$$

\vec{i}^* , \vec{j}^* et \vec{k}^* sont les vecteurs de base du réseau réciproque.

Le produit des composantes du vecteur d'onde (q_x, q_y, q_z) avec le paramètre de réseau (a) définit les grandeurs suivantes

$$\varphi_x = q_x a, \quad \varphi_y = q_y a, \quad \varphi_z = q_z a \quad (\text{II-5})$$

Les termes générés : φ_x , φ_y et φ_z sont dits facteurs de phase de la structure.

L'équation (II-1) sera appliquée systématiquement pour décrire la dynamique et le mouvement des spins dans les structures cubiques parfaites et structures perturbées.

Nous signalons qu'il est bien connu que dans n'importe quelle structure cubique (soit cubique simple, cubique centré ou cubique faces centrées) le voisinage immédiat du spin atomique (nombre de spins voisins, distances entre spins voisins) varie d'une direction cristallographique à une autre. Notons aussi, que pour une même direction cristallographique, l'environnement atomique diffère d'une structure cubique à une autre. C'est dans ce contexte, que nous formulons le travail consacré à ce chapitre.

Nous portons le choix sur la direction [001], perpendiculaire au plan de surface magnétique du cristal (001). Or, ce choix, soutenu même aux chapitres 3 et 4, n'est pas arbitraire. Les propriétés magnétiques, en surfaces et aux interfaces, montrent une tendance à aligner les moments magnétiques de spin dans la direction perpendiculaire à la surface (effet d'anisotropie magnéto-cristalline). Bien que ce terme sera négligé dans l'équation (II-1) mais son effet sera bien retenu. Il est important de noter que le choix d'unifier la direction de propagation [001], nous permettra de voir l'impact direct de la surface sur la propagation des ondes de spin ; nous revenons dessus en détail dans les deux prochains chapitres.

Considérons maintenant que le guide d'onde parfait, de chaque structure cubique, est construit à partir d'une succession de plans infinis (disposés les uns sur les autres) suivant une direction bien définie, dans ce travail le long de l'axe (Oz).

Les équations de mouvement de précession des spins pour un cristal ferromagnétique peuvent se condenser sous la forme matricielle

$$[\omega I - D_v(\varphi_x, \varphi_y, \xi)] |C(q, \omega) \rangle = 0 \quad (\text{II-6})$$

ω est la fréquence de dispersion de l'onde de spin le long de la direction [001] (suivant l'axe Oz), I est la matrice identité et $|C(q, \omega) \rangle$ sont les vecteurs propres de spins.

Les fluctuations des amplitudes de spin sont décrites par le théorème de Bloch comme suit

$$U(R_{p+1}, q) = \xi U(R_p, q) \quad (\text{II-7})$$

ξ est le facteur de phase de Bloch à l'intérieur de la structure cubique parfaite, il est défini le long de l'axe (Oz) perpendiculairement aux couches superficielles ferromagnétiques comme cela

$$\xi = e^{\pm i q_z a}. \quad (\text{II-8})$$

Les autres facteurs de phases définis dans le plan (Ox, Oy) sont donnés, respectivement, par

$$\begin{cases} u(l \pm 1, m, n) = e^{\pm iq_x a} u(l, m, n) \\ u(l, m \pm 1, n) = e^{\pm iq_y a} u(l, m, n) \end{cases} \quad (\text{II-9})$$

L'utilisation des procédures numériques standards, conçues pour résoudre les problèmes matricielles, nous permet facilement d'accéder aux solutions du système d'équations (II-6). Cependant, nous notons que toutes les valeurs propres trouvées par ces procédures devront être testées pour la convergence.

De plus, les solutions de l'équation (II-6), obéissent à la condition de Bloch ($|\xi| = 1$). L'équation (II-6) donne à la fois les fréquences propres et les vecteurs propres. En fait, l'équation peut être résolue pour tout ξ .

Notons que ξ et son inverse ξ^{-1} sont tous deux des solutions, lorsque l'onde passe d'un spin d'un site au spin situé sur un autre site plus proche voisin, le long de l'axe Oz et constituent les branches du spectre de propagation des magnons.

Les solutions physiquement acceptables correspondent à la condition

$$|\xi| \leq 1 \quad (\text{II-10})$$

La condition $|\xi| < 1$, caractérise les modes évanescents, tandis que $|\xi| = 1$, donne les modes propageant des magnons. Les solutions $|\xi| > 1$ correspondent aux modes divergents.

Pour chaque réseau cubique, nous retenons, uniquement, les solutions physiquement acceptables. Ces dernières correspondent soit au mode évanescent soit au mode propageant. Nous rapportons que les modes évanescents sont inactifs et ne transportent pas d'énergie mais nous devons les introduire dans nos calculs pour une description complète de la diffusion de magnons via les différentes inhomogénéités présentes dans un matériau ferromagnétique, et la description des phénomènes de localisation au voisinage des zones perturbées, que nous verrons plus loin dans le chapitre 3 et 4.

Pour obtenir une solution mathématique au problème posé, dans l'équation (II-6), nous imposons la condition suivante

$$\det[\omega I - D_v(\varphi_x, \varphi_y, \xi)] = 0 \quad (\text{II-11})$$

L'équation (II-11) est appelée équation séculaire de l'onde de spin. Elle donne accès à l'équation de dispersion de l'onde de spin, et peut être exprimée sous la forme d'un polynôme caractéristique [11-12] de degré n en fonction de ξ , suivant cette expression

$$\sum_0^n C_n \xi^n = 0 \quad (\text{II-12})$$

Les coefficients C_n sont les cofacteurs du polynôme caractéristique. Ils sont en fonction de $\varphi_x, \varphi_y, J_{pp}$ et ω . Ils ont la particularité d'être symétriques.

Toutefois, pour tous les matériaux ferromagnétiques, les modes de propagation sont définis par le facteur de phase ξ . Quand à ξ^{-1} , il définit les modes évanescents se propageant dans la direction opposée.

Une description mathématique de la précession de spin peut être obtenue en résolvant l'équation de mouvement de spin suivante

$$\hbar \frac{d\vec{S}_p}{dt} = -\vec{S}_p \cdot \sum_{p'} J_{pp'} \vec{S}_{p'} \quad (\text{II-13})$$

La direction Oz est définie comme la direction du spin à l'état fondamental. En supposant que les déviations des spins dans l'état excité sont très faibles comparées à la valeur de \vec{S}_p : les projections S_p^z et $S_{p'}^z$ sont alors approximativement égales à S (la valeur du moment de spin \vec{S}_p).

1.1. Cas d'un cristal à structure cubique simple (cs)

Le nombre de premiers voisins est de 6, ils sont distants de a (a est l'arrête du cube) quant au nombre de second voisins, il est de 8, tous distants de $a\sqrt{2}$.

L'équation de dispersion de l'onde de spin s'écrit comme suit

$$\Omega - 6 - 12r + 4r \cos \varphi_x \cos \varphi_y + 2 (\cos \varphi_x + \cos \varphi_y) + \left(1 + 2r(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y)\right) (\xi + \xi^{-1}) = 0 \quad (\text{II-14})$$

La notation $\Omega = \frac{\hbar\omega}{J_1 S}$ représente la fréquence normalisée.

Nous soulignons qu'à très basse température ($T \sim 0K$), les fluctuations des amplitudes de spins sont très faibles ; par conséquent, l'approximation $S_p^z \approx S$ est justifiée.

Nous remarquons pour q_x et q_y fixés, la bande de volume (guide d'onde parfait du cs) peut être décrite, respectivement, par les deux paramètres de l'équation suivante

$$\begin{cases} \alpha = 6 + 12r - 4r \cos \varphi_x \cos \varphi_y - 2 (\cos \varphi_x + \cos \varphi_y) \\ \beta = 1 + 2r(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y) \end{cases} \quad (\text{II-15})$$

En multipliant l'équation (II-15) par ξ , nous obtenons le polynôme caractéristique de degrés 2 en ξ comme suit

$$\begin{aligned} & [1 + 2r(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y)]\xi^0 + [\Omega - 6 - 12r + 4r \cos \varphi_x \cos \varphi_y + 2(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y)]\xi^1 \\ & + [1 + 2r(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y)]\xi^2 = 0 \end{aligned} \quad (\text{II-16})$$

Les formules donnant les cofacteurs C_0 , C_1 et C_2 sont rassemblées dans l'équation (II-17), ci-dessous

$$\begin{cases} C_0 = C_2 = 1 + 2r(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y) \\ C_1 = \Omega - 6 - 12r + 4r \cos \varphi_x \cos \varphi_y + 2(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y) \end{cases} \quad (\text{II-17})$$

Le procédé de calcul du polynôme caractéristique de l'équation séculaire des ondes de spin en volume des systèmes ferromagnétiques est formellement identique pour toutes les structures cubiques.

1.2. Cas d'un cristal à structure cubique centré (cc)

Le nombre de premiers voisins est de 8, ils sont distants de $a\sqrt{3}/2$, quant au nombre de second voisins, il est de 6, tous distants de a . L'équation de dispersion de l'onde de spin pour un cristal à structure cubique centré s'écrit comme suit

$$\Omega - 8 - 6r + 2r(\cos \varphi_{2x} + \cos \varphi_{2y}) + 4(\cos \varphi_x \cos \varphi_y)(\xi + \xi^{-1}) + r(\xi^{-2} + \xi^2) = 0 \quad (\text{II-18})$$

En multipliant cette équation par ξ^2 , nous obtenons le polynôme caractéristique de degré 4 comme suit

$$r\xi^0 + 4(\cos \varphi_x \cos \varphi_y)\xi^1 + [\Omega - 8 - 6r + 2r(\cos \varphi_{2x} + \cos \varphi_{2y})]\xi^2 + 4(\cos \varphi_x \cos \varphi_y)\xi^3 + r\xi^4 = 0 \quad (\text{II-19})$$

Les coefficients du polynôme caractéristique sont symétriques, il vient que

$$\begin{cases} C_0 = C_4 = r \\ C_2 = \Omega - 8 - 6r + 2r(\cos \varphi_{2x} + \cos \varphi_{2y}) \\ C_1 = C_3 = 4\cos \varphi_x \cos \varphi_y \end{cases} \quad (\text{II-20})$$

1.3. Cas d'un cristal à structure cubique à faces centrées (cfc)

Le nombre de premiers voisins est de 12, ils sont distants de $a\sqrt{2}/2$, quant au nombre de second voisins, il est de 6, tous distants de a . L'équation de dispersion de l'onde de spin pour un cristal à structure cubique faces centrées s'écrit comme suit

$$\Omega - 12 - 6r + 4 \cos \varphi_x \cos \varphi_y + 2r(\cos \varphi_{2x} + \cos \varphi_{2y}) + 2(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y)(\xi + \xi^{-1}) + r(\xi^{-2} + \xi^2) = 0 \quad (\text{II-21})$$

En multipliant cette équation par ξ^2 , comme dans le cas précédent, nous obtenons le polynôme caractéristique de degré 4, écrit comme suit

$$r\xi^0 + 2(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y)\xi^1 + [\Omega - 12 - 6r + 4 \cos \varphi_x \cos \varphi_y + 2r(\cos \varphi_{2x} + \cos \varphi_{2y})]\xi^2 + 2(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y)\xi^3 + r\xi^4 \quad (\text{II-22})$$

On fait ressortir les cofacteurs C_0 , C_1 , C_3 et C_4 , suivant les équations ci-dessous

$$\begin{cases} C_0 = C_4 = r \\ C_2 = \Omega - 12 - 6r + 4 \cos \varphi_x \cos \varphi_y + 2r(\cos \varphi_{2x} + \cos \varphi_{2y}) \\ C_1 = C_3 = 2(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y) \end{cases} \quad (\text{II-23})$$

En fixant q_x et q_y , les équations (II-16), (II-19) et (II-22) nous permettent de tracer les courbes de dispersion de magnons en volume, se propageant suivant l'axe Oz .

Depuis longtemps, de nombreux chercheurs ont étudié et analysé la nature et l'intensité des intégrales d'échange qui ont conditionné les excitations de spin dans les systèmes

ferromagnétiques [13-14]. Les auteurs, de ces études, ont constaté que les constantes de couplage entre spin et ses seconds voisins sont plus petites que celles dû aux couplages entre premiers voisins. En considérant cette observation dans notre travail de simulation, nous avons calculé numériquement les fréquences avec lesquelles se dispersent les magnons pour une valeur normalisée de $r = 0.2$. Notre choix, n'est pas basé sur des valeurs exactes ou spécifiques des couplages d'échanges ferromagnétiques J_1 et J_2 , mais nous estimons que la valeur utilisée est raisonnable. Nous notons aussi que le plus grand avantage à tirer de nos modèles de calculs numériques et de nos programmes, est qu'ils offrent la possibilité d'illustrer la dynamique de spin dans n'importe quel matériau ferromagnétique.

Sur les figures **Fig. (II.3)**, nous avons tracé les courbes de dispersion des magnons (ou énergie des ondes de spin) des guides d'ondes parfaits, le long des chemins de haute symétrie (HSP) de la première zone de Brillouin, pour les trois réseaux cubiques (cs, cc et cfc).

Nous précisons, d'abord sur les tableaux **Tab.(1)**, **Tab.(2)** et **Tab.(3)**, les coordonnées des points de haute symétrie ($q - point$) de la première zone de Brillouin de la cellule de Wigner Seitz du réseau réciproque [15], respectivement, pour les réseaux cubique simple, cubique centré et cubique faces centrées.

Nous présentons sur les figures **Fig. (II.2a)**, **Fig. (II.2b)** et **Fig. (II.2c)** les chemins de haute symétrie (HSP) adoptés dans le tracé des spectres de dispersion des ondes de spin.

On note a_1 , a_2 et a_3 , les vecteurs de la cellule primitive du réseau direct de Bravais ; b_1 , b_2 et b_3 sont les vecteurs de la cellule primitive du réseau réciproque.

Les coordonnées des points de haute symétrie, de la première zone de Brillouin sont données en fraction de b_1 , b_2 et b_3 pour chaque structure cubique comme le montre les tableaux ci-dessous

(a) Pour un réseau cubique simple (cs)

Tab.(1) : Les coordonnées des points de haute symétrie du réseau réciproque de la structure cubique simple. $a_1(a, 0, 0)$, $a_2(0, a, 0)$ et $a_3(0, 0, a)$ sont les vecteurs de la cellule primitive du réseau direct.

$xb_1xb_2xb_3$		$xb_1xb_2xb_3$	
(0, 0, 0)	Γ	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	R
$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	M	$(0, \frac{1}{2}, 0)$	X

La représentation de la zone réduite est donnée sur la figure suivante

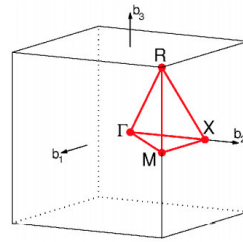


Fig. (II.2a) : Zone de Brillouin du réseau cubique simple, tirée de la référence [15]. Le chemin : $R - \Gamma - X - M - \Gamma$.

Le spectre de propagation des ondes de spin suivant ce chemin est donné sur la figure **Fig. (II.3a)**.

(b) Pour un réseau cubique centré (cc)

Tab.(2) : Les coordonnées des points de haute symétrie du réseau réciproque de la structure cubique centrée. $a_1(\frac{-a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2})$, $a_2(\frac{a}{2}, \frac{-a}{2}, \frac{a}{2})$ et $a_3(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{-a}{2})$ sont les vecteurs de la cellule primitive du réseau directe.

$xb_1xb_2xb_3$		$xb_1xb_2xb_3$	
(0, 0, 0)	Γ	$(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$	P
$(\frac{1}{2}, \frac{-1}{2}, \frac{1}{2})$	H	$(0, 0, \frac{1}{2})$	N

La représentation de la zone réduite est donnée sur la figure suivante

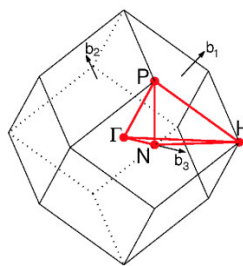


Fig. (II.2b) : Zone de Brillouin du réseau cubique centrée, tirée de la référence [15]. Le chemin : $N - \Gamma - H - P - \Gamma$.

Le spectre de propagation des ondes de spin suivant ce chemin est donné sur la figure **Fig. (II.3b)**.

(c) Pour un réseau cubique faces centrées (cfc)

Tab.(3) : Les coordonnées des points de haute symétrie du réseau réciproque de la structure cubique faces centrées. $a_1(0, \frac{a}{2}, \frac{a}{2})$, $a_2(\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2})$ et $a_3(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0)$ sont les vecteurs de la cellule primitive du réseau directe.

$xb_1xb_2xb_3$		$xb_1xb_2xb_3$	
(0,0,0)	Γ	$(\frac{5}{8}, \frac{1}{4}, \frac{5}{8})$	U
$(\frac{3}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{4})$	K	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$	W
$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	L	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$	X

La représentation de la zone réduite est donnée sur la figure suivante

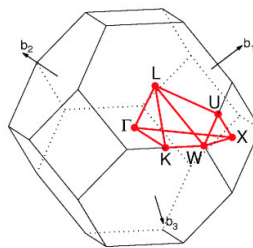
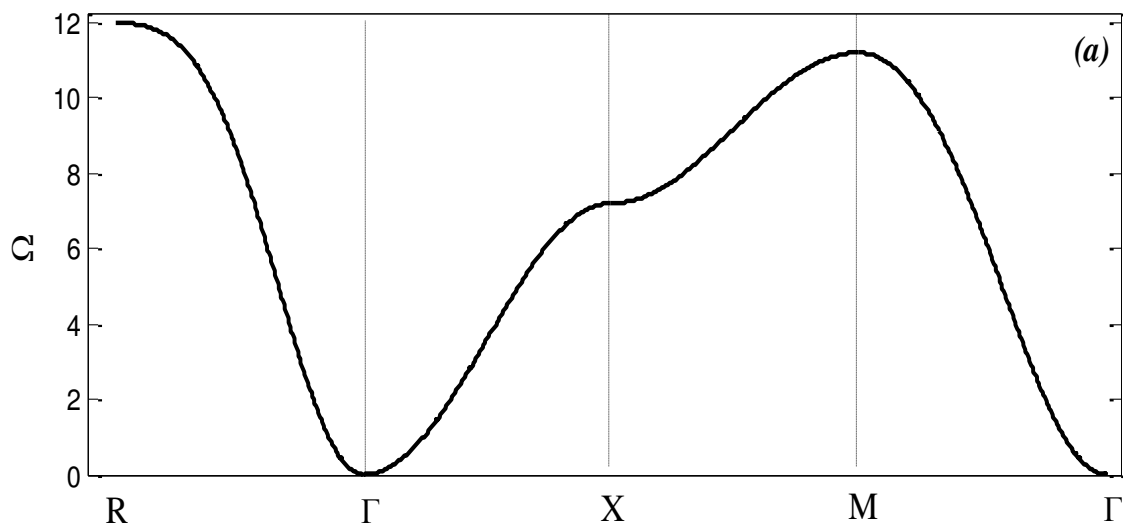


Fig. (II.2c) : Zone de Brillouin du réseau cubique faces centrées, tirée de la référence [15].
Le chemin : $\Gamma - X - W - K - \Gamma - L - U - W - L - K/U - X$.

Le spectre de propagation des ondes de spin suivant ce chemin est donné sur la figure

Fig. (II.3c).



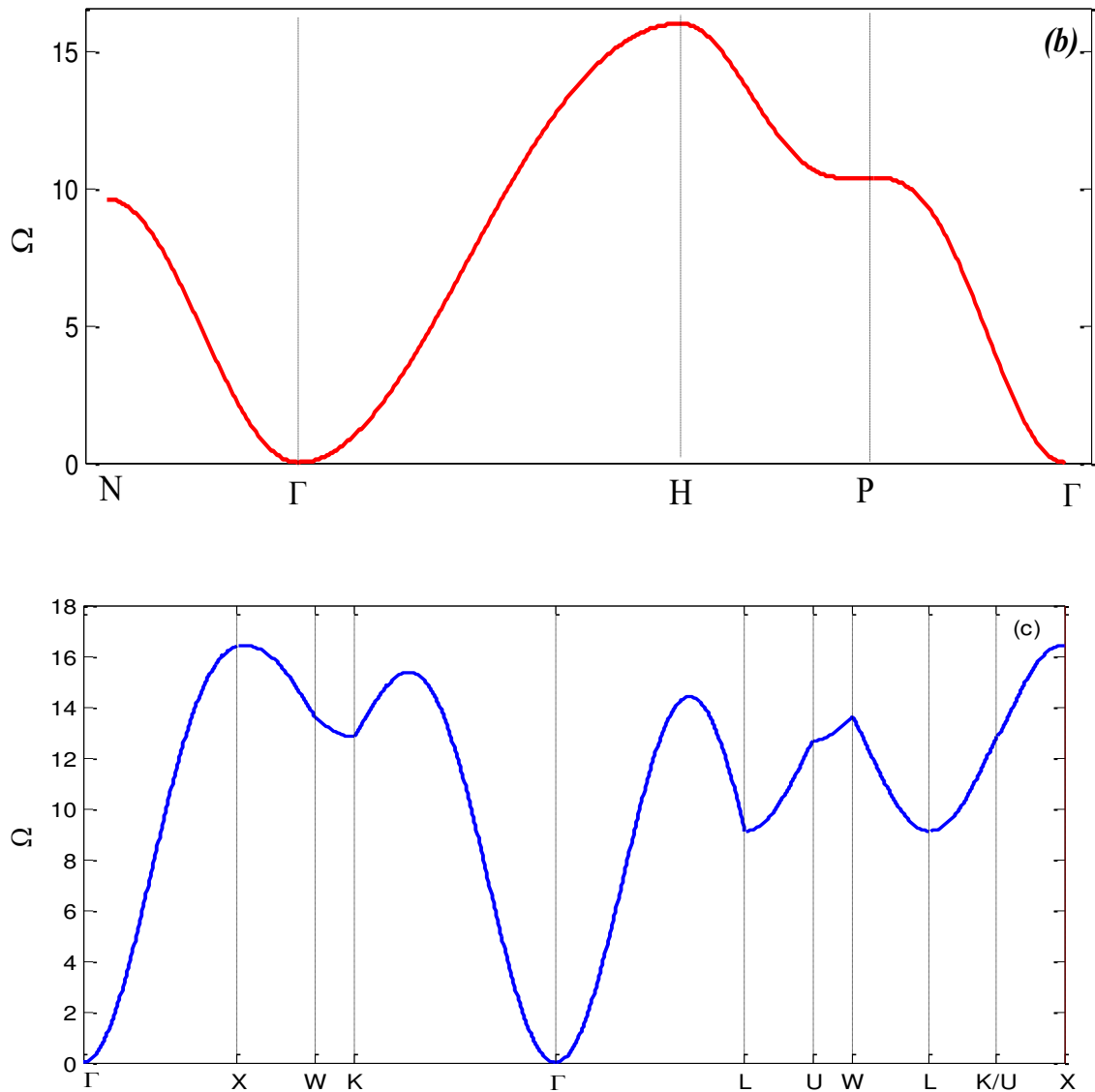


Fig. (II.3): Courbes de dispersion des magnons dans les trois réseaux cubiques ferromagnétiques. (a) réseau cubique simple (cs), (b) réseau cubique centré (cc), (c) réseau cubique faces centrées (cfc).

2. Discussion des résultats

Sur les courbes de la figure **Fig. (II.3)**, nous avons représenté, pour chaque type de cristallisation cubique, les modes de dispersion magnonique comme des fonctions de la fréquence normalisée en fonction du vecteur d'onde, qui décrit les chemins de haute symétrie de la première zone de Brillouin.

Nous remarquons que chaque branche se situe dans son intervalle spécifique. Aussi, le mode de dispersion des magnons de volume est acoustique dans les trois structures cubiques ferromagnétiques, il tend vers zéro lorsque le vecteur d'onde tend vers le centre de la zone de Brillouin ($\Omega \rightarrow 0$, pour $q_z \rightarrow \Gamma$).

Quand nous changeons le chemin de propagation, le mode de propagation des ondes de spin devient optique, l'énergie normalisée est différente de zéro ($\Omega \neq 0$). Ceci est observé le long du chemin XM pour le réseau cubique simple, le long du chemin HP pour le réseau cubique centré et le long des chemins XK, LW et LX pour le réseau cubique faces centrées.

Le long de tous les chemins délimitant la zone de Brillouin de chaque structure cubique parfaite, l'onde de spin se propage dans une fréquence d'intervalle précise :

[$\Omega_{min} = 0, \Omega_{max} = 12$], pour le réseau cubique simple.

[$\Omega_{min} = 0, \Omega_{max} = 16$], la plage de fréquence des ondes dans le réseau cubique centré.

[$\Omega_{min} = 0, \Omega_{max} = 16.35$], pour le réseau cubique faces centrées.

Nous concluons que l'énergie transportée par l'onde de spin diffère d'une structure cristallographique à une autre. Cela est attendu car l'énergie d'échange qui gouverne un système cubique ferromagnétique est une fonction directe du nombre de coordination entre spin voisins et de la portée des couplages d'échanges.

3. Vitesses de groupe associées à chaque structure

A différencier de la vitesse de phase d'une onde qui est égale au rapport entre sa pulsation ω et la norme de son vecteur d'onde. La vitesse de groupe est définie toujours dans un milieu dispersif, comme la variation de la pulsation de l'onde en fonction de son vecteur d'onde suivant cette expression

$$\vec{V}_g = \overrightarrow{grad}\Omega(\vec{q}) \quad (\text{II-24})$$

Comme cité au début du chapitre, nous consacrons l'étude à la dispersion de l'onde de spin suivant la direction Oz . Nous nous intéressons alors à la composante de la vitesse suivant cette direction. Elle est définie comme suit

$$V_g = \frac{\partial\Omega}{\partial q_z} \quad (\text{II-25})$$

Physiquement, la vitesse de groupe est la vitesse de transport de l'énergie ou de l'information. Elle est indépendante du temps. Nous donnons, dans ce qui suit, la matrice de la vitesse pour chaque structure cubique du guide d'onde parfait.

3.1. Pour un réseau cs

Les éléments de la matrice dérivée sont donnés ci-dessous

$$V_g = -ia(\xi - \xi^{-1})[1 + r(e^{i\varphi_x} + e^{-i\varphi_x} + e^{i\varphi_y} + e^{-i\varphi_y})] \quad (\text{II-26})$$

Après simplification, on obtient

$$V_g = 2a[1 + 2r(\cos(q_x a) + \cos(q_y a))] \sin(q_z a) \quad (\text{II-27})$$

3.2. Pour un réseau cc

Les éléments de la matrice dérivée sont donnés ci-dessous

$$V_g = -ia(e^{i\varphi_x} + e^{-i\varphi_x})(e^{i\varphi_y} + e^{-i\varphi_y})(\xi - \xi^{-1}) - 2ria(\xi^2 - \xi^{-2}) \quad (\text{II-28})$$

Après simplification

$$V_g = 8a \cdot \cos(q_x a) \cdot \cos(q_y a) \cdot \sin(q_z a) + 8ra \cdot \cos(q_z a) \cdot \sin(q_z a) \quad (\text{II-29})$$

3.3. Pour un réseau cfc

Les éléments de la matrice dérivée sont donnés ci-dessous

$$V_g = -ia(e^{i\varphi_x} + e^{-i\varphi_x} + e^{i\varphi_y} + e^{-i\varphi_y})(\xi - \xi^{-1}) - 2ria(\xi^2 - \xi^{-2}) \quad (\text{II-30})$$

Après simplification

$$V_g = 4a(\cos(q_x a) + \cos(q_y a)) \cdot \sin(q_z a) + 8ra \cdot \cos(q_z a) \cdot \sin(q_z a) \quad (\text{II-31})$$

Les courbes associées aux vitesses de groupe des ondes de spin dans les trois structures cubiques à couplage ferromagnétiques, que nous avons étudié dans ce travail de thèse, sont représentées sur la figure **Fig. (II.4)**.

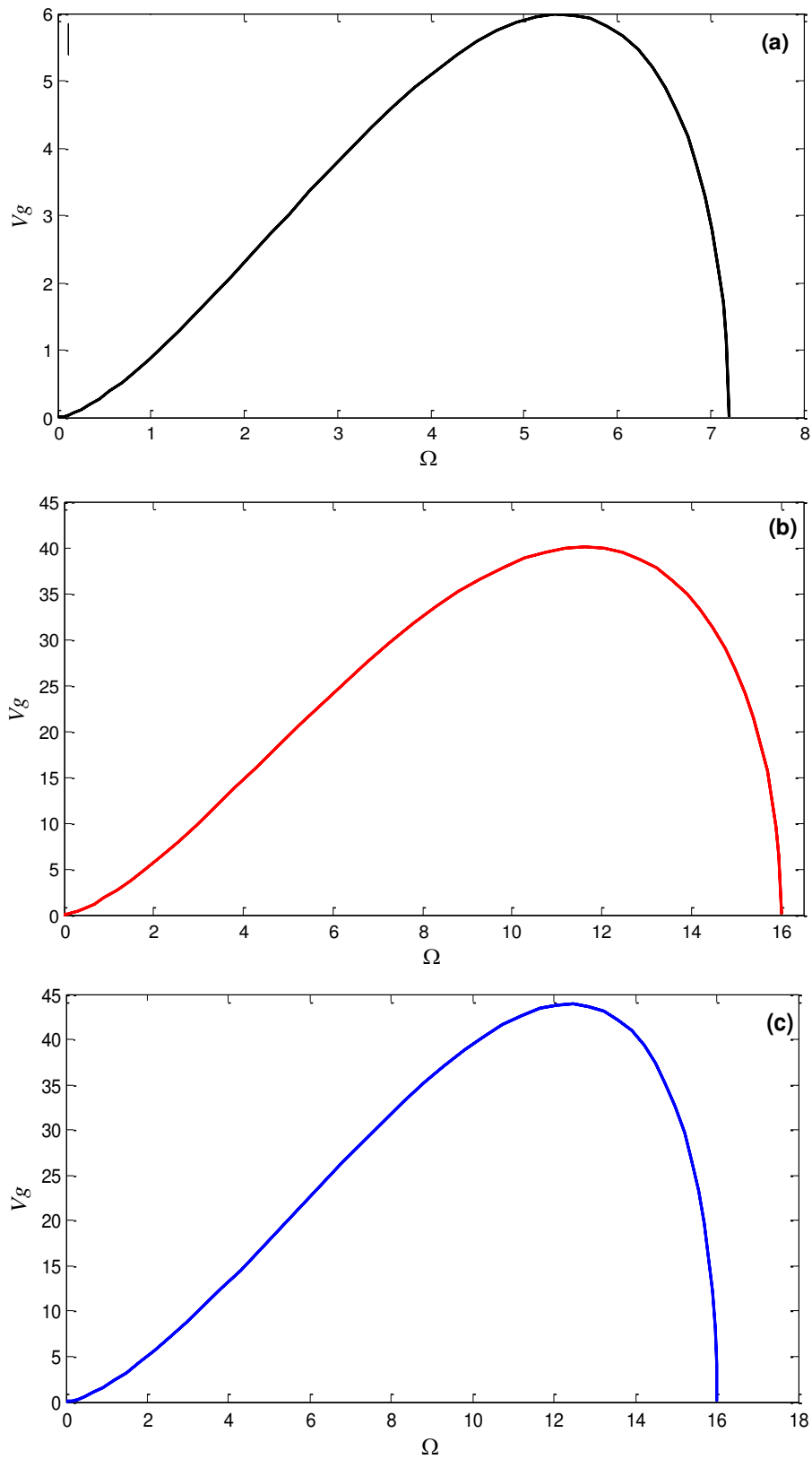


Fig. (II.4) : Courbes des vitesses de groupe dans les trois réseaux cubiques ferromagnétiques.
 (a) réseau cubique simple le long du chemin IX ,
 (b) réseau cubique centré IH ,
 (c) réseau cubique faces centrées IX .

4. Discussion des courbes

Comme nous pouvons le constater d'après les courbes de la **Fig. (II.4)**, l'évolution des vitesses de groupe en fonction de la fréquence normalisée Ω se fait de la même manière pour les trois réseaux cubiques ferromagnétiques, c'est-à-dire les courbes ont globalement la même allure. Elles sont calculées pour une propagation de l'onde de spin suivant un seul chemin.

*Le long du chemin ΓX pour le réseau cubique simple **Fig. (II.4a)**,*

La vitesse de groupe varie dans la plage $[V_g(\min) = 0, V_g(\max) = 6]$ et atteint sa valeur maximale lorsque la fréquence atteint la valeur de $\Omega = 5.334$.

*Le long du chemin ΓH pour un réseau cubique centré **Fig. (II.4b)**,*

La vitesse de groupe varie dans la plage $[V_g(\min) = 0, V_g(\max) = 40.09]$ et la valeur maximale est située à la pulsation $\Omega = 11.64$.

*Le long du chemin ΓX pour le réseau cubique faces centrées **Fig. (II.4c)**,*

La vitesse de groupe varie dans la plage $[V_g(\min) = 0, V_g(\max) = 43.91]$ et atteint sa valeur maximale lorsque $\Omega = 12.47$.

Conformément aux courbes de dispersion de la figure **Fig. (II.3)**, les vitesses de groupe maximales ne correspondent pas au transport d'énergie qui s'effectue à la fréquence Ω_{max} mais elles correspondent en fait au transport de l'information à la fréquence Ω , spécifique à chaque guide d'onde parfait, où la pente de la courbe de dispersion est maximale.

Par contre, les vitesses s'annulent lorsque les courbes de dispersion deviennent parallèles à l'axe représentatif des points de haute symétrie de la zone de Brillouin ou bien aux limites des chemins choisis. Notons que l'étendue de chacune des plages où la vitesse de groupe $V_g \neq 0$ se rapporte bien à celles des modes propageant. Nous précisons que les vitesses de groupe n'ont de sens que lorsque $|\xi| = 1$ et nulles pour les autres valeurs du module du facteur de phase.

Il est utile de signaler que, mathématiquement, les vitesses de groupe représentent les pentes des tangentes aux courbes de dispersion.

Remarque

Les vitesses de groupe peuvent être déterminées en calculant directement les pentes des courbes de dispersion des ondes de spin. On note que lorsque les pentes sont négatives, cela indique que les ondes de spin modifient le sens de leur propagation. Elles sont importantes à calculer lorsque nous étudions la diffusion des ondes de spin. Le problème, dans l'approche quantique, visant à déterminer le spectre des ondes de spin pour un ferromagnétique de

Heisenberg a été résolu par Holstein et Primakoff (1940). Les auteurs ont montré que compte tenu des interactions dipôle- dipôle, l'énergie de l'onde de spin est régie non seulement par la grandeur $q(q_x, q_y, q_z)$ mais aussi par sa direction par rapport au vecteur de magnétisation M_0 . En conséquence, et comme nous allons le voir, le spectre des ondes de spin est une bande plutôt qu'une ligne.

Bibliographie du chapitre 2

- [1] J. Szeftel and A. Khater, J. Phys. C: Solid State Phys. 20, 4725 (1987); M. Tamine, Surf. Sci. 469, 45 (2000).
- [2] B. Bourahla, A. Khater, R. Tigrine, O. Rafil and M. Abou Ghantous, J. Phys. Condens. Matter 19, 266208 (2007).
- [3] M. Abou Ghantous and A. Khater, Eur. Phys. J. B 12, 335 (1999).
- [4] O. Nafa and B. Bourahla, Comput. Condens. Matter 16, e00301 (2018).
- [5] L. Ferrah, B. Bourahla and S. Blizak, Spin 11, 2150028 (2021).
- [6] E. Meloche, C. M. Pinciuc and M.L. Plumer, Phys. Rev. B 74, 094424 (2006).
- [7] L. Bergqvist, A. Taroni, A. Bergman, C. Etz and O. Eriksson, Phys. Rev. B 87, 144401 (2013).
- [8] D. Ghader and A. Khater, J. Phys. Condens. Matter 31, 315801 (2019).
- [9] M. Boucherrab, O. Nafa, B. Bourahla and F. Chelli, J. Theo. Appl. Phys. 16, 162211 (2022).
- [10] R. Landauer, Philos. Mag. 2, 863 (1970); M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. 57, 1761 (1986).
- [11] A. Khater and M. Abou Ghantous, Surf. Sci. 498, L97 (2002).
- [12] M. Belhadi and R. Chadli, Surf. Rev. Lett. 11, 321 (2004).
- [13] R.E. De Wames and T. Wolfram, Phys. Rev. 185, 752 (1969).
- [14] J.C. Levy, E. Ilisca and J.L. Motchane, Phys. Rev. B 5, 1099 (1972).
- [15] W. Setyawan¹ and S. Curtarolo, arXiv:1004.2974v1 (cond-matt.mtrl-sci), 17 April 2010.

Chapitre 3

ONDES DE SPIN EN SURFACE DES SYSTEMES CUBIQUES A COUPLAGE FERROMAGNETIQUE

Introduction

Les propriétés physiques et chimiques des matériaux sont profondément liées à leurs propriétés structurales. C'est pourquoi la modification de l'environnement atomique conduit à de nouvelles propriétés différentes de celles observées dans les structures de l'état massif. Indépendamment de la température et en absence de champ magnétique extérieur, tout écart aux propriétés de l'état massif est généré par la présence de briseurs de symétrie de translation comme les surfaces et interfaces.

Jusqu'à présent, il est prouvé que les excitations de spin et propriétés magnoniques des spins situés à l'intérieur des couches superficielles sont considérablement différentes de celles situées dans la majeure partie du matériau ferromagnétique [1-2]. Les couches superficielles sont le lieu où émergent des phénomènes physiques intéressants. En effet, les systèmes semi-infinis et/ou les structures avec dimensionnalités réduites ressortent des propriétés extraordinaires, par exemple, l'augmentation des moments magnétiques en surface, comparés aux moments magnétiques enregistrés dans la région dite de *volume*, ou bien la modification de la densité d'état au niveau de Fermi. Le plus spectaculaire est l'apparition de l'anisotropie de surface [3-6].

Cette particularité (l'anisotropie de surface) a fait l'objet d'un grand intérêt de la part des physiciens qui ont mené divers recherches théoriques et expérimentales afin de tirer profit pour l'industrie du stockage de l'information. Le principe du procédé repose sur les propriétés ferromagnétiques, des systèmes composés de quelques plans atomiques (films minces et ultra-minces) permettant de garder en mémoire l'orientation d'un champ magnétique externe appliqué. Ce type de stockage d'informations ne nécessite pas un courant électrique et donc permet de minimiser l'énergie nécessaire au stockage. A l'heure actuelle, la technologie permet de stocker des quantités d'informations de plus en plus grandissantes sur un espace réduit grâce à la miniaturisation.

Au cours de ces dernières décennies, la science des surfaces a pris de l'élan grâce au développement des techniques expérimentales qui s'inscrivent dans les progrès instrumentaux

et logiciels [7-8]. Citons, par exemple, l'ARPES (*Angle resolution photoelectron spectroscopy*) une technique qui fournit une visualisation immédiate des relations de dispersion [9,10] de l'énergie $E(\vec{q}_{\parallel})$, avec \vec{q}_{\parallel} le vecteur d'onde de la zone de Brillouin surfacique. Un nouvel instrument reposant sur la technique RHEED (*Resolution high energy electron diffraction*) à haute résolution et à filtrage d'énergie a été développé et utilisé pour déterminer la morphologie des surfaces [11]. De plus, la spectroscopie électronique dépendante de spin (SPLEED) permet d'étudier les propriétés magnétiques et électroniques en surface et fournit des détails des liaisons atomiques et moléculaires en surface. On cite aussi, l'étude des spectres d'anisotropie effectuée par la RA (*Reflectance Anisotropy*) [12], l'étude de la topographie de surface par la STS (*spectroscopie à effet tunnel*) [13] et la résolution latérale du STM (*microscopie à effet tunnel*) qui peut atteindre des dimensions subatomiques [14], une échelle où l'on observe plus exactement le profil de la surface.

Sur le plan théorique, l'application du théorème de Bloch [15] pour l'étude des excitations magnétiques en surface est quasi impossible du fait que la périodicité rompue rend impossible la résolution du système d'équations de mouvement de précession des spins.

Afin de soulever les problèmes de discontinuités induites par la présence d'une surface, nous proposons, dans ce chapitre, des modèles théoriques adaptés au problème des magnons de surface des systèmes cubiques semi-infinis, en s'appuyant sur la méthode analytique dite méthode de raccordement. Principalement, nous examinons l'impact de la surface sur la précession des spins dans les structures cubiques ferromagnétiques semi-infinies.

Dans ce type de brisure de symétrie, des états localisés de magnons de surface apparaissent en son voisinage avec d'autres modes évanescents qui pénètrent plus loin dans le volume ; le spectre des ondes de spin en surface se distingue nettement des modes de propagations des ondes de spin dans les structures parfaites. Nous allons expliciter sur la surface (001), la condition d'existence des magnons de surface ainsi que les lois de dispersion des modes localisés et résonnants dans les directions de haute symétrie de la première zone de Brillouin. Nous décrirons aussi bien et avec plus de détail la réponse de tels modes aux différentes valeurs des couplages magnétiques. Mais avant de rentrer dans le détail des formules rencontrées dans ce chapitre nous procéderons à la définition de quelques phénomènes liés à la surface et on passera ensuite à donner un aperçu sur quelques méthodes analytiques utilisées par les théoriciens afin de résoudre les problèmes physiques liés à la brisure de symétrie.

1. Anisotropie de surface

Il est mentionné dans le premier chapitre que la contribution de la surface du film ou du matériau à l'énergie d'anisotropie est soutenue par la présence d'atomes de coordination réduite et que le comportement magnétique du matériau à la surface présente un aspect compétitif entre l'interaction dipolaire à longue portée (anisotropie de forme) et les autres contributions à l'anisotropie à savoir l'anisotropie magnéto-cristalline et magnéto-élastique [16-23]. Les intensités relatives des différentes contributions et leurs signes par rapport à l'anisotropie de forme déterminent, en fait, le passage de l'aimantation dans le plan à l'aimantation hors du plan, ce qui est appelé *Spin Reorientation Transition (SRT)*.

Dans la littérature, on trouve une documentation très riche sur l'anisotropie magnétique et la *SRT*. Ici, une approche phénoménologique sera adaptée, appropriée principalement aux échantillons magnétisés de manière homogène.

Nous rappelons que l'énergie d'anisotropie traduit le fait que l'aimantation s'oriente, en champ appliqué nul, selon certaines directions préférentielles appelées directions de facile aimantation. Considérons un film magnétique d'épaisseur d , la normale au plan de surface du film est orientée dans la direction Oz . L'expression générale de l'énergie d'anisotropie peut être écrite sous la forme

$$E_{Ani} = K_{per} V \sin^2 \theta \quad (\text{III-1})$$

On définit θ l'angle que fait l'aimantation de l'échantillon avec l'axe Oz et V le volume de l'échantillon considéré. D'autre part, on note K_{per} la constante d'anisotropie qui traduit significativement la compétition entre les contributions de volume et de surface à l'anisotropie magnétique. Elle peut être écrite comme la somme de deux termes

$$K_{per} = K_V + \frac{K_S}{d} \quad (\text{III-2})$$

K_V rassemble toutes les contributions à l'anisotropie de volume comme l'anisotropie magnéto-élastique et magnéto-cristalline. Elle s'exprime en (J/m^3).

K_S rassemble toutes les contributions à l'anisotropie de surface comme l'anisotropie magnéto-élastique de surface et l'anisotropie de surface ou d'interface, exprimée en (J/m^2), ces contributions ne pèsent que lorsque l'épaisseur de la couche magnétique est petite (fine).

1.1. Contribution de surface et d'interface à l'anisotropie

On définit l'*anisotropie magnéto-élastique de surface* comme une conséquence directe des dislocations qui peuvent se créer à l'interface entre deux couches de paramètres de maille différents après relaxation. Elle s'écrit comme suit

$$E_S^{Me} = \frac{K_S^{Me,1} + K_S^{Me,2}}{t} V \sin^2 \theta \quad (\text{III-3})$$

$K_S^{Me,1}$ et $K_S^{Me,2}$ sont les constantes d'anisotropie magnéto-élastiques aux deux interfaces (1 et 2) de la couche magnétique, exprimées en (J/m^2), θ l'angle entre la direction de l'aimantation et la direction de la contrainte.

L'*anisotropie de surface ou d'interface* provient de la brisure de symétrie à l'interface entre deux matériaux. Elle prend la forme de

$$E_S^{Int} = \frac{K_S^{Int,1} + K_S^{Int,2}}{t} V \sin^2 \theta \quad (\text{III-4})$$

$K_S^{Int,1}$ et $K_S^{Int,2}$ sont les constantes d'anisotropie magnéto-élastiques de surfaces ou d'interfaces (1 et 2) de la couche magnétique, exprimées en (J/m^2), θ l'angle entre la direction de l'aimantation et la normale aux interfaces.

Ces deux derniers termes sont d'une grande importance dans l'apparition d'une forte anisotropie perpendiculaire dans les multicouches de cobalt et de nickel $[\text{Co/Ni}]_n$ [24-26].

On peut regrouper les constantes d'anisotropie d'interface et de surface sous l'expression

$$K_S = K_S^{Me,1} + K_S^{Me,2} + K_S^{Int,1} + K_S^{Int,2} \quad (\text{III-5})$$

Et réécrire l'énergie d'anisotropie d'un matériau comme sous la somme suivante

$$E_{Ani} = \left(K_V + \frac{K_S^{Me,1} + K_S^{Me,2} + K_S^{Int,1} + K_S^{Int,2}}{t} \right) V \sin^2 \theta \quad (\text{III-6})$$

De cette formule, nous constatons bien que l'énergie d'anisotropie se définit grâce aux contributions majoritaires de volume ou de surface ou d'interface, selon le système étudié.

1.2. Relaxation et reconstruction

Lorsqu'on coupe un solide suivant un plan cristallin quelconque, la surface obtenue n'est jamais parfaite. Elle est d'une structure cristalline différente de la structure du matériau dans le volume. Si la structure cristalline au voisinage de la surface subit une variation du paramètre de maille dans la direction normale à la surface et que les autres paramètres de maille ne sont pas modifiés dans les autres directions, on dit que les plans de surfaces subissent la relaxation. Dans les semi-conducteurs et dans certains métaux, le solide se réorganise complètement, la modification du paramètre de maille est subie dans toutes directions formant un nouveau réseau bidimensionnel différent du réseau volumique, c'est la reconstruction de surface.

1.3. Rugosité des surfaces

Les surfaces usinées ne sont jamais parfaites, elles présentent des irrégularités (creux et pics) ou des défauts dues aux procédés de fabrication, aux outils, à la matière, etc. Elle constitue l'une des caractéristiques de la texture de la surface. Il existe de nombreux paramètres pour mesurer la rugosité d'un profil surfacique, parmi lesquels la valeur Ra est plus courante. Elle est définie comme l'écart moyen entre les pics et les creux se trouvant à la surface. Ra mesure dans une certaine longueur d'échantillon la moyenne des pics et des creux de la surface. La mesure des états de surface peut être réalisée avec un profilomètre à contact ou optique ou bien avec un microscope capable de mesurer la hauteur de la surface.

Aujourd'hui, les états de surface sont évalués numériquement, à partir de profils ou de surfaces numérisés. Avec tous les progrès, actuels, des techniques de nano-fabrication, l'obtention d'une surface lisse et pure reste difficile mais possible, car plus l'indice de rugosité Ra est faible, plus il est difficile de l'obtenir, ce qui augmente le coût de fabrication.

Remarque

Les effets liés à la présence de la surface comme l'anisotropie, la relaxation ou reconstructions ne sont pas considérés terme par terme dans l'Hamiltonien mais nous n'avons pas omis leurs effets car ils sont tout simplement pris en considération dans les intégrales d'échanges magnétiques.

2. Méthodes analytiques pour étude des ondes de spin dans les systèmes semi-infinis

Dans le modèle semi-infini, la surface est considérée comme un défaut de volume cristallin ou bien une perturbation qui s'étale sur un nombre réduit de plans atomiques. La symétrie de translation tridimensionnelle est alors brisée et fait place à la symétrie de translation planaire. De ce fait, la mise en application du théorème de Bloch s'avère impossible pour toute étude théorique ce qui rend difficile la résolution du système d'équations de mouvement de précession des spins 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 la méthode des fonctions de Green, la méthode de diagonalisation directe, que nous allons brièvement exposer, et la méthode de raccordement. Nous avons opté pour cette dernière afin de calculer les énergies des modes localisés en surface.

2.1. Méthode des fonctions de Green

La méthode a été initialement formulée par George Green [27], en 1850, et appliquée pour la première fois à la physique de l'état solide par Slater [28].

Pour étudier les propriétés physiques des systèmes à l'équilibre, les physiciens procèdent en mesurant leurs réponses aux diverses excitations extérieures. De telles réponses sont exprimées en termes des Fonctions de Green. En fait, la méthode est basée sur la résolution d'une équation aux dérivées partielles à coefficients constants. Cette équation est obtenue en écrivant la fonction de Green pour chaque plan atomique d'un système perturbé. Ensuite, nous établissons l'équation de mouvement pour chaque fonction de Green en formulant sa dérivée par rapport au temps. Les équations obtenues sont dépendantes du temps et nous devons par la suite effectuer la transformée de Fourier afin de réaliser la conversion de la représentation temporelle en une représentation fréquentielle. Ces équations peuvent être regroupées sous une forme matricielle. La matrice ainsi obtenue sera composée de deux matrices, une est la matrice du système parfait ou de volume et l'autre représente la matrice de perturbation.

La dimension de la dernière matrice dépend du nombre de plan affectés par la perturbation. L'inconvénient majeur de cette méthode est qu'elle procède avec des matrices de tailles importantes ce qui est coûteux en termes de temps de calculs lors des simulations numériques.

2.2. Méthode de diagonalisation directe

Cette méthode a été formulée par Clark [29], en 1965, et initiée par Allen [30-32] dans l'étude des modes de surface d'un réseau cubique à faces centrées et utilisée dans l'étude des

effets liés à la présence d'une couche absorbée. Pour étudier un système semi-infini, la méthode de diagonalisation directe, appelée *slab method*, procède en considérant un nombre fini de plans atomiques, dans une direction donnée, ayants une extension infinie dans les deux autres directions.

Afin de garantir l'existence d'une zone de volume dans la modélisation, le nombre de plans à considérer doit être suffisamment grand. Par conséquent, les calculs numériques ab-initio menés avec cette méthode nécessitent des temps de calculs pharaoniques avant de converger vers une situation physique favorable à un état d'énergie d'équilibre. Ces calculs peuvent parfois prendre plusieurs jours dans les centres de calculs pour un certain nombre d'itérations. Ceci représente l'inconvénient majeur de cette méthode. Malgré ça, la méthode de diagonalisation directe continue d'être l'outil préféré des théoriciens pour décrire, ensemble, les états localisés de magnons de surface et les ondes de propagation des magnons de l'état massif. Dans notre équipe de recherche, nous utiliserons une autre méthode plus exigeante, elle s'agit de la méthode de raccordement [33-39].

2.3. Méthode de raccordement

Elle a été introduite, pour la première fois, par Feuchtwang [40], en 1967, pour l'étude de l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin semi-infini. Ensuite, développée par A. Khater et J. Szeftel [41], en 1987, pour l'appliquer aux surfaces de Nickel. La méthode procède en divisant le système semi-infini en trois zones distinctes (une illustration est donnée sur la **Fig. (III.1)**).

- (i) *Zone de défaut* : c'est la région qui renferme tout type de défauts. En fait, dans le modèle du cristal semi-infini, la surface est considérée comme un défaut de volume cristallin ou bien une perturbation qui s'étale sur un nombre réduit de plans atomiques tout en conservant la symétrie de translation planaire dans la direction normale à celle-ci. Elle permet d'obtenir la matrice dynamique du système perturbé $D_V(m, n)$.
- (ii) *Zone Parfaite* : c'est la région de l'état massif, les atomes sont loin de toute perturbation. Elle est caractérisée par une symétrie de translation tridimensionnelle et permet de tracer les bandes et les courbes de dispersion des ondes de spin en volume.
- (iii) *Zone de raccordement* : c'est la région qui sépare la région de défaut de la région parfaite. Elle permet d'obtenir la matrice de raccordement $D_R(n, m)$ qui lie analytiquement les modes évanescents de volume et les modes itinérants de la zone de défaut. Si on note par

m le nombre de spins de la zone (i) et (iii) et on note par n le nombre de spins de la zone (i) et (iii) plus le nombre de spins qui joint la zone (iii) à la zone (ii).

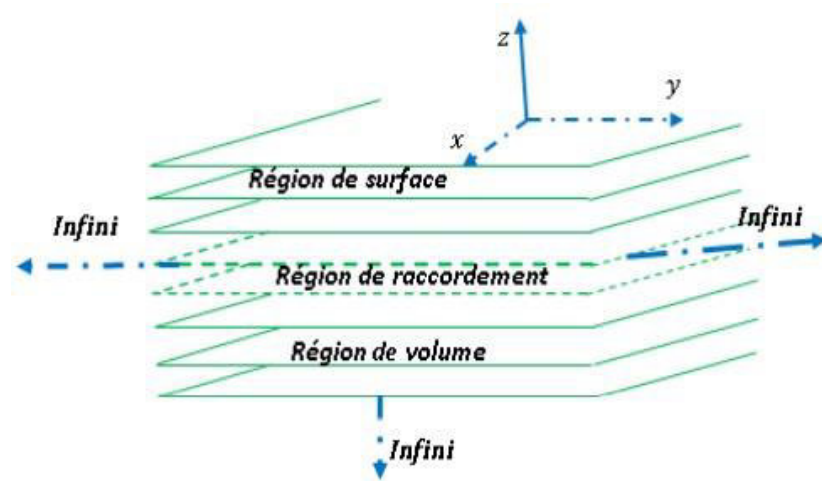


Fig. (III.1) : Représentation schématique d'un cristal semi-infini, illustrant les trois régions : de défaut, de raccordement et de volume.

3. Considérations générales du modèle étudié

Nous modélisons la surface par une cellule unité se déplaçant, suivant le plan (Oxy), dans la direction normale à celui-ci, tout en conservant la symétrie de translation planaire. Or, toute surface subit les effets reliés à la reconstruction et la relaxation des plans atomiques qui lui sont parallèles ; nous rappelons que ces effets ne seront pas négligés et seront intégrés dans les couplages d'échanges en faisant différencier les couplages d'échanges entre spins du volume et les couplages d'échanges entre spins positionnés en surface.

Nous nous limiterons aussi à la seule perturbation apportée par la présence d'une surface propre. L'influence de cette perturbation décroît quand nous pénétrons plus profondément dans la zone de volume (en s'éloignant des plans de surface).

4. Modèle théorique et formalisme utilisé

Afin d'étudier les excitations de spins en surface, nous proposons un modèle théorique qui pourra être appliqué d'une manière générale à tout matériau modélisable par des réseaux cubiques ferromagnétiques semi- infinis. En considérant l'empilement de plusieurs plans atomiques, où chaque nœud est doté d'un vecteur de spin.

Les deux premiers plans (à partir de la surface) sont dits irréductibles, le plan suivant est un plan de raccordement qui lie ces deux plans de surfaces au plan représentant le volume.

(En d'autres termes, la zone parfaite est séparée de la zone de défaut par le plan de raccordement, appelé aussi plan adjacent). Au-delà de ce dernier, on retrouve les caractéristiques des structures parfaites de volume.

Dans le système modèle adopté pour trois réseaux cubiques, nous menons notre étude à basse température, et nous supposons que les spins ont la même amplitude et même orientation dans l'état fondamental sur chaque atome (couplage ferromagnétique).

De plus, nous considérons que dans chaque système cubique semi- infini, les distances interatomiques entre spins voisins sont identiques partout.

En tenant compte des effets liés à la présence de la surface, les interactions magnétiques entre sites adjacents sur la majeure partie de chaque type de réseau cubique considéré ne sont pas les mêmes aux plans de surface. Une illustration de ces interactions à la première couche atomique de surface est donnée pour chaque réseau cubique sur la **Fig. (III.2)**.

Nous utilisons les notations J_{1s} et J_{2s} pour décrire les constantes d'échanges magnétiques au niveau des plans de la surface, respectivement, entre les spins premiers voisins et seconds voisins. Au-delà de la deuxième couche atomique, on pose les notations suivantes J_1 et J_2 pour décrire les couplages d'échanges dans la structure parfaite, faisant référence au plan de volume.

Afin de travailler avec les énergies normalisées, il est utile de définir pour les réseaux cubiques parfaits le rapport suivant : $k = \frac{J_2}{J_1}$,

et pour les guides d'ondes semi-infinis, les rapports suivants : $k_1 = \frac{J_{1s}}{J_1}$, $k_2 = \frac{J_{2s}}{J_1}$.

Il est utile de signaler que les calculs sont menés pour une valeur de $k = 0.2$. Le choix est justifié par le fait que les interactions entre seconds voisins sont négligeables devant les interactions entre premiers voisins dans le cas des systèmes ferromagnétiques.

Les paramètres introduits k , k_1 et k_2 permettent de décrire la modification homogène de la répartition des intégrales d'échanges dans la région de surface et illustrent l'effet de rupture de symétrie dans les simulations numériques menées dans nos calculs.

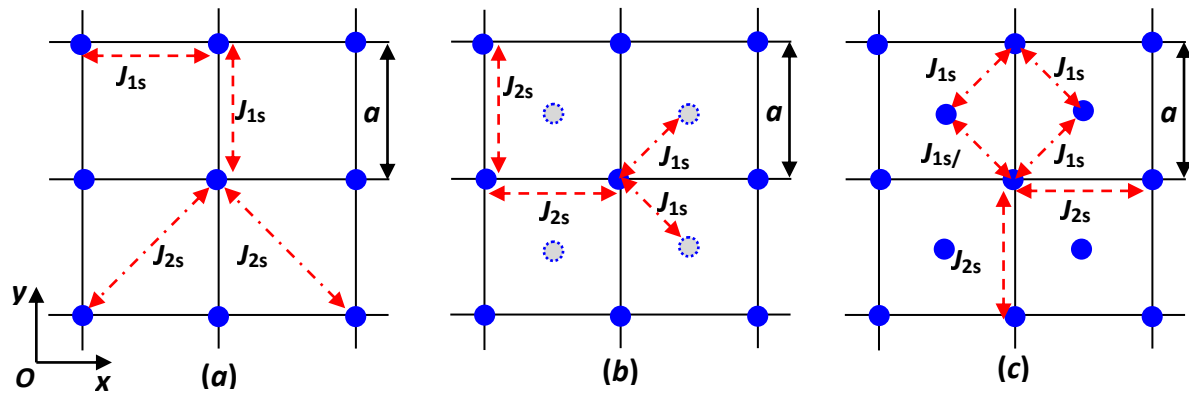


Fig. (III.2) : Description schématique des plans de surface (001), dans les trois réseaux cubiques à couplage ferromagnétique.

5. Fluctuations et étude dynamique des spins en surface

5.1. Réponse des magnons de surface

Afin d'étudier et de caractériser les excitations de spin dans les réseaux cubiques ferromagnétiques semi-infinis, il est impératif de construire la matrice dynamique de la structure cubique. Or, toute surface est considérée comme un écart à la structure parfaite, qui nous renseigne sur l'absence de translation de symétrie (dans le cas de la direction perpendiculaire aux plans de surface), par conséquent, la matrice dynamique est construite en écrivant les équations du mouvement de précession pour chaque spin des couches atomiques considérées (de la cellule unitaire). Cela nous ramène à écrire les équations de mouvement de spin pour les spins des couches superficielles elles-mêmes et les équations de mouvement des spins adjacents sous la zone de surface, appelée zone de raccordement.

Par la suite, nous regroupons les équations dans une matrice dite matrice dynamique ayant une forme rectangulaire.

Pour chaque réseau cubique ferromagnétique, les expressions des équations de précession de spin pour chaque couche atomique s'écrivent comme suit

❖ Pour le réseau semi-infini de type cubique simple (cs)

Le premier site irréductible occupé est le spin (0,0,0)

$$[\Omega - 5k_1 + 2k_1(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y) - 8k_2 + 4k_2(\cos \varphi_x \cos \varphi_y)]u(0,0,0) + [k_1 + 2k_2(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y)]u(0,0,1) = 0.$$

Le deuxième site irréductible est le spin (0,0,1)

$$[k_1 + 2k_2(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y)]u(0,0,0) + [\Omega + 2k_1(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y) - 6k_1 + 4k_2(\cos \varphi_x \cos \varphi_y) - 12k_2]u(0,0,1) + [k_1 + 2k_2(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y)]u(0,0,2) = 0.$$

Pour le site appartenant au plan de raccordement, spin (0,0,2)

$$[k_1 + 2k_2(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y)]u(0,0,1) + [\Omega - 5k_1 + 2k_1(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y) - 1 + 4k_2(\cos \varphi_x \cos \varphi_y) - 8k_2 - 4k]u(0,0,2) + [1 + 2k(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y)]u(0,0,3) = 0.$$

(III-7)

Comme on peut le constater, l'écriture des équations de mouvement des spins des sites irréductibles et adjacents, donne lieu à un système linéaire de trois équations avec quatre inconnus, la matrice dynamique correspondante est de dimension $D_v(3 \times 4)$, les composantes du vecteur de base sont une fonction des coordonnées des sites

$$[u(0,0,0), u(0,0,1), u(0,0,2), u(0,0,3)].$$

La matrice dynamique se déduit aisément comme suit

$$\begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & 0 & 0 \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & 0 \\ 0 & d_{32} & d_{33} & d_{34} \end{bmatrix}.$$

Les expressions de ses éléments sont les suivants

$$\begin{aligned} d_{11} &= \Omega - 5k_1 + 2k_1(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y) - 8k_2 + 4k_2(\cos \varphi_x \cos \varphi_y), \\ d_{12} &= d_{21} = d_{23} = d_{32} = k_1 + 2k_2(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y), \\ d_{22} &= \Omega + 2k_1(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y) - 6k_1 + 4k_2(\cos \varphi_x \cos \varphi_y) - 12k_2, \\ d_{33} &= \Omega - 5k_1 + 2k_1(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y) - 1 + 4k_2(\cos \varphi_x \cos \varphi_y) - 8k_2 - 4k, \\ d_{34} &= 1 + 2k(\cos \varphi_x + \cos \varphi_y). \end{aligned}$$

❖ **Pour le réseau semi-infini de type cubique centré (cc)**

Pour le spin de coordonnées (0,0,0) situé sur le premier plan irréductible

$$\begin{aligned} &[\Omega - 4k_1 + 2k_2(\cos 2\varphi_x + \cos 2\varphi_y) - 5k_2]u(0,0,0) \\ &+ k_1[1 + e^{-2i\varphi_x} + e^{-2i\varphi_y} + e^{-2i(\varphi_y + \varphi_x)}]u\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) + k_2u(0,0,1) = 0. \end{aligned}$$

Pour le spin de coordonnées $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ situé sur le deuxième plan irréductible

$$k_1[1 + e^{2i\varphi_x} + e^{2i\varphi_y} + e^{2i(\varphi_x + \varphi_y)}]u(0,0,0) + [\Omega - 8k_1 + 4k_1 \cos \varphi_x \cos \varphi_y + 2k_2(\cos 2\varphi_x + \cos 2\varphi_y) - 4k_2 - k]u(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) + k_1[1 + e^{2i\varphi_x} + e^{2i\varphi_y} + e^{2i(\varphi_x + \varphi_y)}]u(0,0,1) + ku(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}) = 0.$$

Pour le spin de coordonnées $(0,0,1)$ situé sur le plan de raccordement

$$k_2u(0,0,0) + [1 + e^{-2i\varphi_x} + e^{-2i\varphi_y} + e^{-2i(\varphi_x + \varphi_y)}]u(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) + [\Omega - 4k_1 + 2k_2(\cos 2\varphi_x + \cos 2\varphi_y) - 5k_2 - k - 4]u(0,0,1) + [1 + e^{-2i\varphi_x} + e^{-2i\varphi_y} + e^{-2i(\varphi_x + \varphi_y)}]u(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}) + ku(0,0,2) = 0. \quad (\text{III-8})$$

Comme on peut le voir, l'écriture des équations de mouvement des spins des sites irréductibles et adjacents, donne lieu à un système linéaire de trois équations avec cinq inconnus, la matrice dynamique correspondante est alors de dimension $D_v(3 \times 5)$, dont les éléments se déduisent identiquement de la même manière que pour le réseau cubique simple. Les composantes du vecteur de base sont une fonction de différentes coordonnées des sites :

$$[u(0,0,0), u(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), u(0,0,1), u(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}), u(0,0,2)].$$

❖ **Pour le réseau semi-infini de type cubique à faces centrées (cfc)**

Pour le premier plan irréductible représenté par le spin de site $(0,0,0)$

$$[\Omega - 8k_1 + 4k_1 \cos \varphi_x \cos \varphi_y + 2k_2(\cos 2\varphi_x + \cos 2\varphi_y) - 5k_2]u(0,0,0) + k_1[1 + e^{-2i\varphi_x} + e^{i(\varphi_y - \varphi_x)} + e^{i(\varphi_y + \varphi_x)}]u(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) + k_2u(0,0,1) = 0.$$

Pour le deuxième plan irréductible représenté par le spin de site $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

$$k_1[1 + e^{i(\varphi_x + \varphi_y)} + e^{i(\varphi_x - \varphi_y)} + e^{2i\varphi_x}]u(0,0,0) + [\Omega - 12k_1 + 4k_1 \cos \varphi_x \cos \varphi_y + 2k_2(\cos 2\varphi_x + \cos 2\varphi_y) - 4k_2 - k]u(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) + k_1[1 + e^{i(\varphi_x + \varphi_y)} + e^{i(\varphi_x - \varphi_y)} + e^{2i\varphi_x}]u(0,0,1) + k_2u(0, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}) = 0.$$

Pour le spin de coordonnées (0,0,1) situé sur le plan de raccordement

$$k_2 u(0,0,0) + k_1 [1 + e^{-2i\varphi_x} + e^{i(\varphi_y - \varphi_x)} + e^{-i(\varphi_y + \varphi_x)}] u(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) + [\Omega - 8k_1 + 4k_1 \cos \varphi_x \cos \varphi_y + 2k_2 (\cos 2\varphi_x + \cos 2\varphi_y) - 5k_2 - k - 4] u(0,0,1) + [1 + e^{-2i\varphi_x} + e^{i(\varphi_y - \varphi_x)} + e^{-i(\varphi_y + \varphi_x)}] u(0, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}) + ku(0,0,2) = 0. \quad (\text{III-9})$$

Comme on peut le voir aussi, l'écriture des équations de mouvement des spins des sites irréductibles et adjacents, donne lieu à un système linéaire de trois équations avec cinq inconnus, la matrice dynamique correspondante est de dimension $D_v(3 \times 5)$ dont les éléments se déduisent de la même manière que pour le réseau cubique simple.

Les composantes du vecteur de base sont aussi une fonction des différentes coordonnées des sites de la cellule unitaire : $[u(0,0,0), u(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), u(0,0,1), u(0, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}), u(0,0,2)]$.

D'une façon générale, les équations de mouvement sont exprimées par des vecteurs ayant les composantes $[|U\rangle, |R\rangle]$. La première partie (le vecteur $|U\rangle$) décrit les vecteurs de base des sites de spins de la zone de surface. Le second vecteur $|R\rangle$ décrit les vecteurs de base des sites de spins reliés à ceux des autres couches, c'est-à-dire, constitués par les sites des spins du plan de raccordement et du plan représentant le volume.

La dimension de l'espace de Hilbert, définie par les vecteurs $|R\rangle$ dépend du nombre de modes de magnon dans chaque réseau cubique parfait.

Afin de résoudre le système d'équations linéaires (III-7), (III-8) et (III-9) dans chaque réseau cubique ferromagnétique, il faut impérativement transformer chaque système d'équations en un système dont le nombre d'équations est égale au nombre d'inconnus via la méthode de raccordement. Autrement dit, nous devons établir les relations de raccordement entre les états de spin localisés, en surface, et les modes évanescents, en volume, loin de la zone de surface à l'aide de la matrice de raccordement D_R définie par

$$[|U\rangle, |R\rangle] = [D_R] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix}$$

$|irr\rangle$ regroupe les amplitudes de précession des spins des deux plans de surface.

$|rac\rangle$ est l'amplitude de précession du spin du plan de raccordement.

Où la dimension de D_R est de $(n \times m)$.

Chaque système d'équations peut alors être regroupé selon l'expression suivante

$$[D_v](|U\rangle, |R\rangle) = [D_v] \times [D_R] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = |0\rangle \quad (\text{III-10})$$

$$\text{Avec } [D_v] \times [D_R] = [D_p]$$

Les transformations qui relient les amplitudes de précession de spin, sont nécessaires pour rendre tout simplement la matrice dynamique rectangulaire $D_v(m, n)$ une matrice carrée de dimension $D_p(m \times m)$.

$$[\Omega I - D_p(\varphi_x, \varphi_y, k, k_1, k_2)] [|U\rangle, |R\rangle] = -|X\rangle \quad (\text{III-11})$$

La notation D_p désigne la matrice dynamique du réseau cubique semi-infini (perturbé).

Le vecteur $-|X\rangle$ dont les composantes sont adaptées aux vecteurs de base, contient les termes inhomogènes liés aux ondes de spin incidentes.

En résolvant l'équation (III-11), nous accédons aux composantes du vecteur de base $|U\rangle$ des sites irréductibles appartenant au domaine de surface ainsi qu'aux modes évanescents, générés par la surface dans le volume des systèmes semi-infinis.

Remarque

Afin d'analyser, l'ensemble, des spectres de magnons, les états de spin localisés et les ondes de spin diffusées par les couches de surface, il est nécessaire de connaître les modes propageant et les modes évanescents du système étudié. Pour cela, nous devons considérer, pour toutes fréquence normalisée Ω , toutes les solutions obéissantes à la condition $|\xi| \leq 1$.

Nous rappelons que la fréquence normalisée Ω est donnée par la relation suivante : $\Omega = \frac{\omega}{\omega_0}$,

où ω est la fréquence de précession de spin et ω_0 est la fréquence caractéristique, telle que :

$$\omega_0 = \frac{2 \cdot J_{AA} \cdot S_A}{\hbar}.$$

5.2. Etats localisés de spin en surface

Dans cette étude, l'équation (III-11) est très importante [42-48] puisqu'elle permet de décrire la dynamique de spin, en surface des trois types de réseaux semi-infinis. Pour remonter aux modes de magnons et les énergies des branches de spin localisées, générées par la présence des couches superficielles, nous devons imposer la condition

$$\det[D_p] = 0 \quad (\text{III-12})$$

L'équation (III-12), donne accès aux énergies des branches localisées en surface et les ondes diffusées par la surface en fonction des couplages magnétiques entre spins de la région de surface et couplages magnétiques entre spins de la zone parfaite des structures cubiques ferromagnétiques.

Nous avons tracé le long de la zone de Brillouin à la surface (001), les états localisés décrivant effectivement les modes de spins qui se propagent dans chaque réseau semi-infini et qui sont géométriquement localisés car les amplitudes de précession de spin diminuent le long de l'axe normal, en passant de la surface à la majeure partie du système cubique semi-infini. Les résultats des simulations numériques sont donnés sur les figures **Fig. (III.3)**, **Fig. (III.4)** et **Fig. (III.5)**.

5.3. Simulations et applications numériques

Les résultats du premier modèle de calcul, qui se réfère à la structure cubique simple semi-infinie, sont donnés sur la **Fig. (III.3)** ; tandis que ceux du deuxième modèle, qui fait référence à la surface du système cubique centré, sont représentés sur la **Fig. (III.4)** ; en dernier, les résultats issus des simulations numériques qui se rapportent au réseau cubique semi-infini de type faces centrées sont tracés sur la **Fig. (III.5)**.

Nous avons simulé et analysé le problème des excitations de spin, en présence d'une surface, dans les trois cristallisations, du réseau cubique semi-infini, et cela dans les trois possibilités des constantes d'échanges magnétiques entre les différents sites voisins.

Les possibilités analysées sont, respectivement, pour les valeurs des rapports suivants

- (a) $k_1 = 0.9$ et $k_2 = 0.18$, (pour décrire l'adoucissement des forces d'interactions).
- (b) $k_1 = 1.0$ et $k_2 = 0.20$, (pour décrire l'homogénéité des forces de couplages).
- (c) $k_1 = 1.1$ et $k_2 = 0.22$, (pour décrire le durcissement des forces d'interactions).

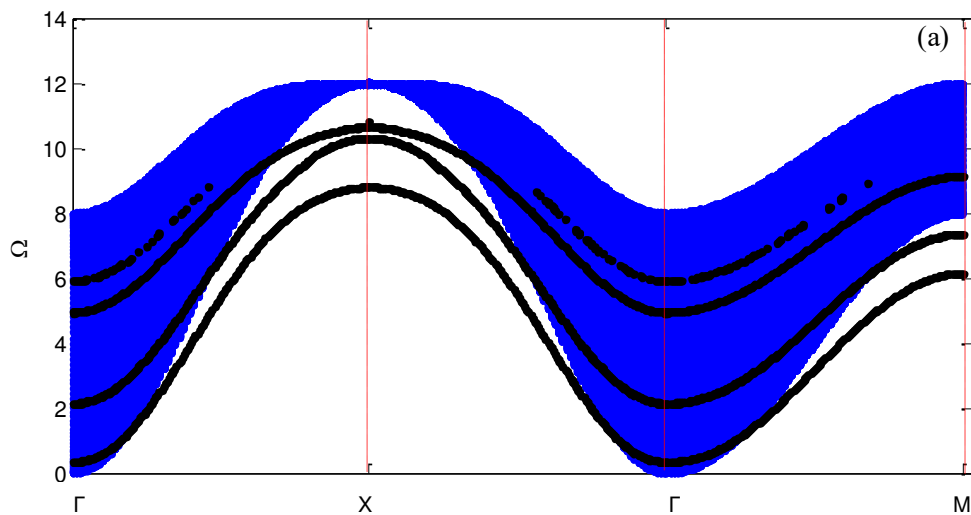
Nous rappelons que les valeurs des constantes k_1 et k_2 ne correspondent pas aux valeurs exactes des matériaux réels, qui peuvent être différentes dans certains réseaux ferromagnétiques, mais ce choix des valeurs de simulations numériques soutient le fait que les interactions entre spins second voisins sont plus faibles par rapport aux interactions entre spins premiers voisins.

Les cas (a) et (c) correspondent, respectivement, à l'adoucissement et le durcissement des interactions d'échanges magnétiques. Nous supposons dans ces cas-là que les rapports d'échanges magnétiques pèsent entre les couches superficielles de surface et de volume. Par

ailleurs, nous considérons que l'échange magnétique est homogène entre les différents spins situés en région de surface. Tandis que, dans le cas (b), les interactions d'échanges sont considérées comparables (valeurs très proches) dans tout le système.

Sur les figures relatives à la dynamique des spins en surface, dans le réseau cubique (**Fig. (III.3)**, **Fig. (III.4)** et **Fig. (III.5)**), nous avons tracé les énergies de volume et de surface sur la même courbe. Comme il a été déjà mentionné dans le chapitre précédent, le spectre des magnons de volume est une bande plutôt qu'une ligne. A titre de comparaison, il sera raisonnable de mettre ensemble, pour chaque système cubique ferromagnétique, la bande de volume avec les branches de surface. Cela nous permet de relever l'effet et l'impact de la surface sur les ondes de spin, et aussi d'étudier le comportement des excitations de spin et les variations des amplitudes de précession de spins et leurs réponses aux changements locaux des propriétés magnoniques en surface (réseau semi-infini), lorsque le nombre de plus proches voisins change. Nous signalons que les énergies de surface sont dites aussi états localisés de spin en surface.

Sur l'ensemble des figures présentées, les spectres relatifs aux couches de la zone de surface sont donnés sous forme de branches noires, par contre, les états de volume sont des bandes de propagation (continuum) en bleu.



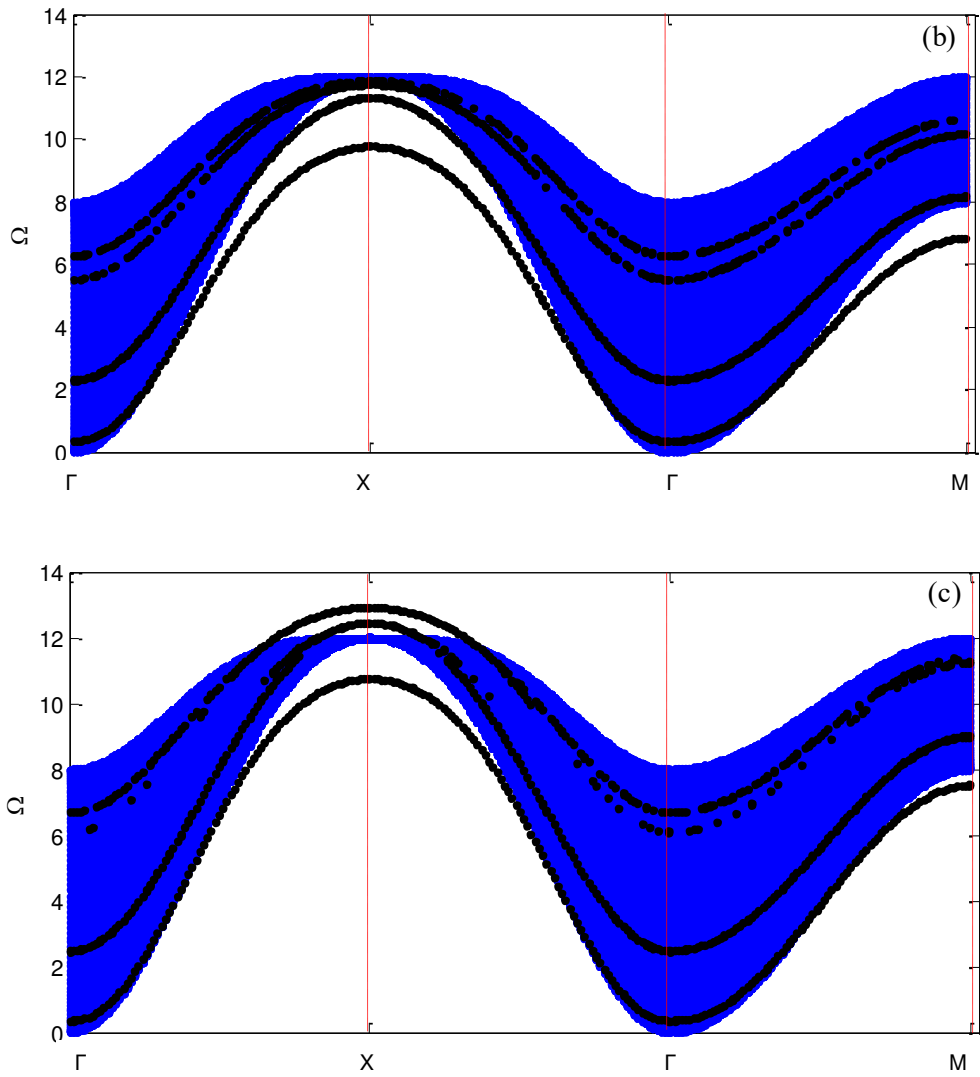
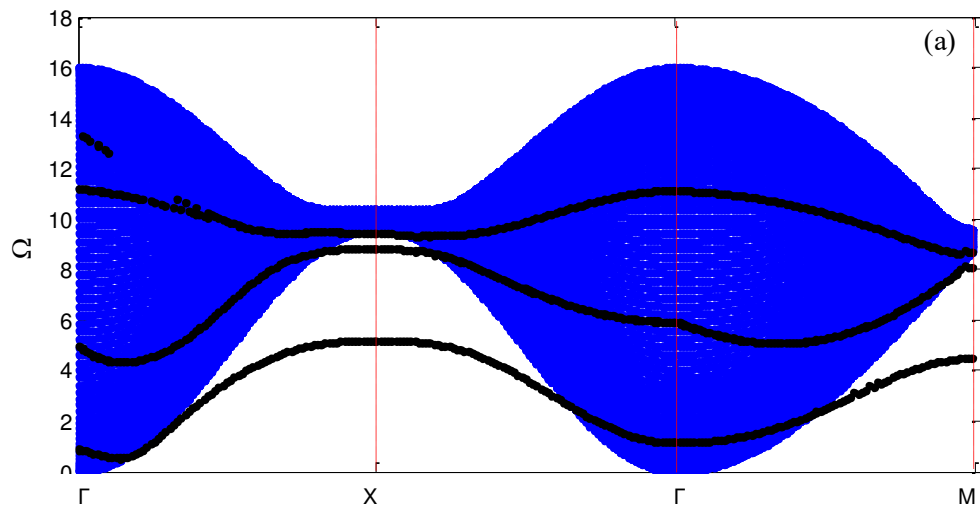


Fig. (III.3) : Energies normalisées des ondes de spin de surface (001) et la bande de volume du guide d'onde parfait du réseau cubique simple.



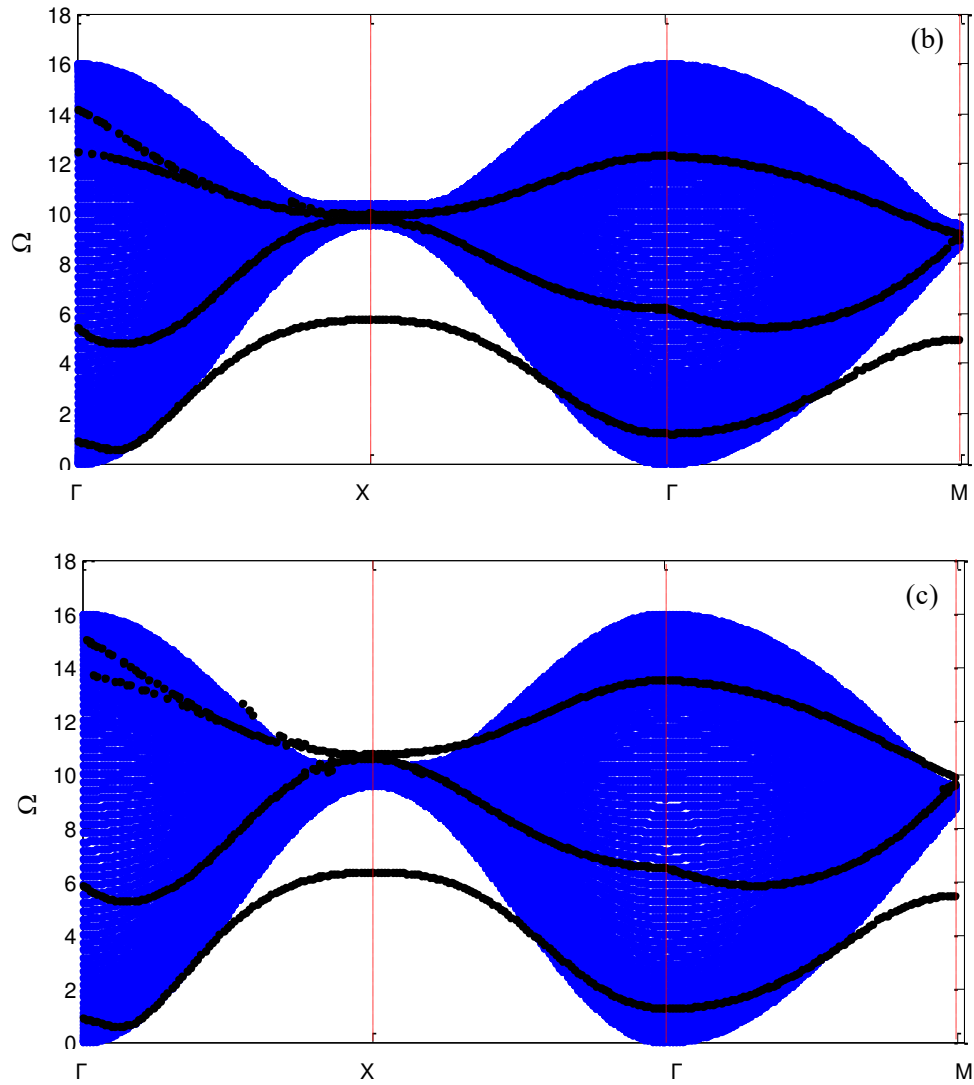
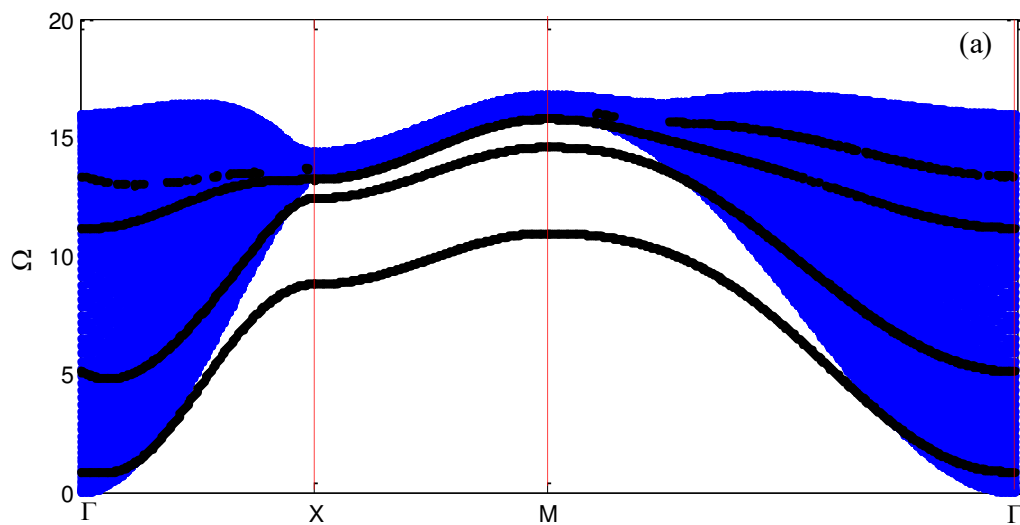


Fig. (III.4) : Energies normalisées des ondes de spin de surface (001) et la bande de volume du guide d'onde parfait du réseau cubique centré.



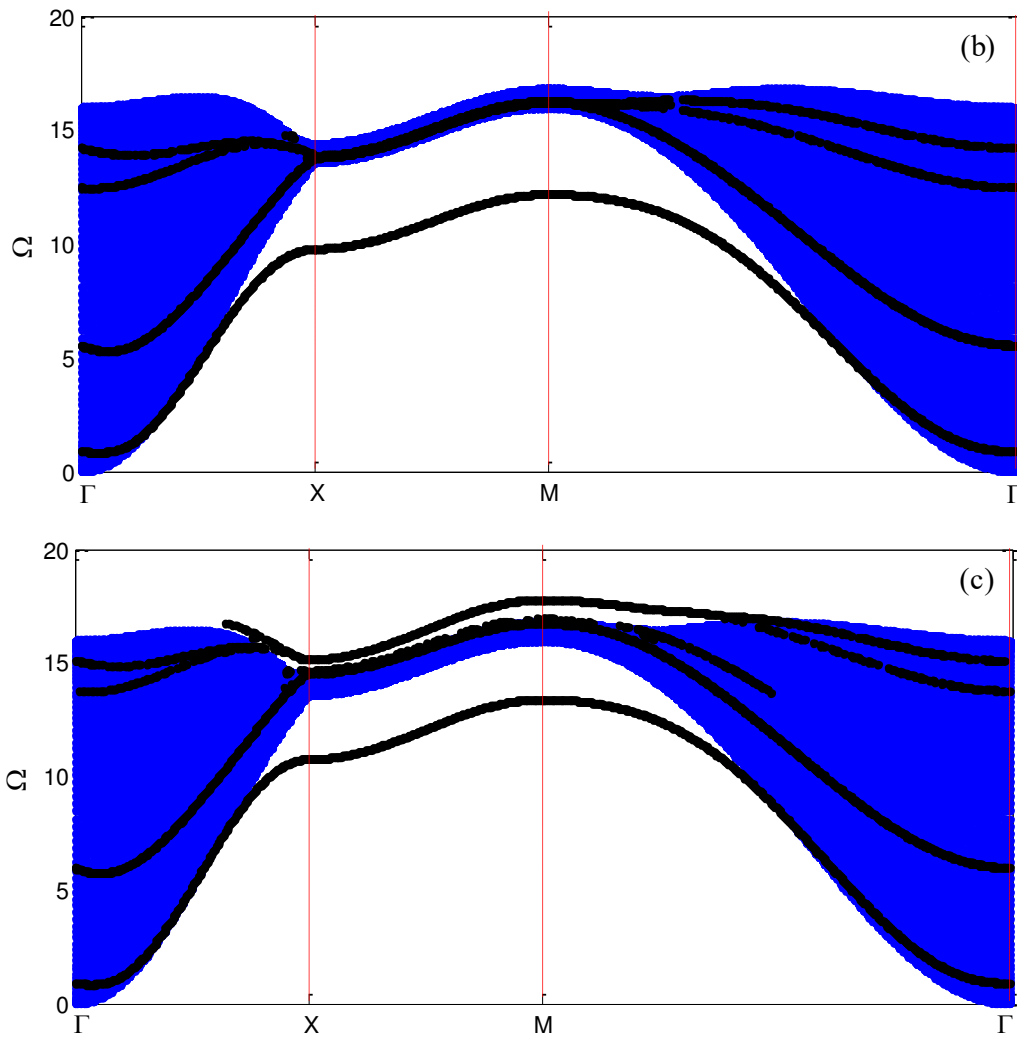


Fig. (III.5) : Energies normalisées des ondes de spin de surface (001) et la bande de volume du guide d'onde parfait du réseau cubique faces centrées.

5.4. Discussion des résultats obtenus

Sur la **Fig. (III.3)**, nous avons tracé la bande de volume et les états localisés en surface du réseau semi-infini ferromagnétique à structure cubique simple sur le même chemin de symétrie (HSP). Les résultats sont donnés sous les trois possibilités de l'échange magnétique décrites précédemment. La **Fig. (III.3-a)** correspond au cas où un couplage d'adoucissement est décrit. Pour ce cas, les interactions d'échanges magnétiques dans les couches superficielles sont inférieures aux interactions magnétiques existantes dans le réseau cubique simple parfait d'environ 20%. Sur la **Fig. (III.3-b)**, nous avons posé les résultats des calculs, menés sur un environnement où les couplages magnétiques sont homogènes et similaires partout.

Sur la **Fig. (III.3-c)**, nous avons examiné la situation de durcissement où l'échange magnétique de spin dans les couches superficielles est plus élevé, d'environ 20%, par rapport

au couplage de spin dans le réseau parfait. Nous avons représenté sur ces figures les états localisés diffusés par la surface en lignes pointillées (branches noirs) et la bande de volume du réseau cubique simple parfait en couleur bleu à titre comparatif. De même pour les figures **Fig. (III.4)** et **Fig. (III.5)**.

Par comparaison entre les figures **Fig. (III.3)**, **Fig. (III.4)** et **Fig. (III.5)**, nous constatons que la forme de la bande de volume est très différente pour les trois types de structures cubiques cristallines. Pour chaque type de réseau cubique, les limites des intervalles de fréquences magnoniques sont conformes aux limites des courbes de dispersion obtenues dans le chapitre précédent. D'un côté, les états de spin localisés représentent les caractéristiques générales et spécifiques aux trois diverses possibilités des valeurs de l'échange magnétique que nous avons considéré. Par ailleurs, nous constatons que dans tous les cas considérés, les branches localisées présentent des oscillations qui dépendent des paramètres d'échange du domaine de surface. Certains des états localisés interfèrent avec les états de volume. Dans ce cas, les états interférés sont nommés états résonnants. Cependant, les branches de surface sont les états, qui apparaissent suite à la brisure de symétrie. En plus de cela, l'analyse des branches conduit à identifier trois catégories des modes des spectres de surface :

- Des branches dont les fréquences se situent dans les limites de la bande de volume.
- Des branches dont les fréquences sont inférieures aux modes de magnons des systèmes cubiques parfaits.
- Les branches dont les modes interfèrent avec les modes de propagation des ondes de spin.

Les changements dans la position et la forme des branches de spin sont la signature d'un effet de confinement dû à la variation de la coordonnée dans chaque structure cubique semi-infinie, le long de l'axe normale à la surface plane.

Pour les trois possibilités étudiées, dans les trois réseaux cubiques, les spectres magnoniques de surface deviennent plus énergiques et leurs états localisés sont décalés vers des fréquences plus élevées, avec un échange magnétique croissant dans les couches adjacentes aux sites irréductibles.

Par analogie avec les études des phénomènes localisés, nous notons principalement trois types d'états magnoniques de surface dans les structures cubiques ferromagnétiques :

- (i) Mode de spin de type Rayleigh [49],
- (ii) Branches de spin de type Fuchs-Kliewer [50],
- (iii) Branches de spin de type surface microscopique [51].

Les modes (i) et (ii) sont caractérisés par une longue pénétration dans le réseau cubique simple ferromagnétique parfait. De plus, les modes de Rayleigh sont souvent positionnés sous les branches acoustiques comme nous le constatons dans le cas de l'adoucissement, représenté sur la **Fig. (III.3-a)**.

Selon la définition, les modes de Fuchs-Kliwer sont positionnés sur les branches optiques. Nous ne pouvons pas les observer car les réseaux cubiques simples ne présentent pas de modes optiques. Les modes (iii) sont situés dans l'espace continu du spectre magnonique du réseau cubique simple, comme il est observé sur les **Fig. (III.3-b)** et **Fig. (III.3-c)**. Mêmes remarques sont valables pour les autres figures **Fig. (III.4)** et **Fig. (III.5)**.

De plus, la comparaison entre les spectres magnoniques de surface, obtenus pour les trois cas d'interactions d'échanges, permet de tirer les remarques suivantes :

- Le long des chemins ΓX et $X\Gamma$, la fréquence maximale des branches localisées (lignes pointillées) est observée au point X de la zone de Brillouin dans les trois cas d'échanges magnétique considérés. Par contre, le long du troisième trajet ΓM , le maximum est observé à la limite du point M, sa valeur est de $\Omega = 11.0$ pour le cas de l'adoucissement, il est de $\Omega = 12.0$ pour le cas de l'homogénéité et $\Omega = 13.0$ pour le cas de durcissement.

Nous observons aussi que les branches évoluent vers les énergies plus élevées avec le durcissement des constantes de couplages. Le même comportement est noté dans les deux autres chemins $X\Gamma$ et ΓM .

De plus, dans la situation correspondant au couplage homogène, les branches des états localisés dégènèrent près du point X dans le système cubique simple. Cela peut s'expliquer par le fait que les polarisations des modes magnoniques d'un spin donné sont telles que l'amplitude de précession sur quelques sites dans la même couche ou dans les couches adjacentes sont symétriques. La disparition (la levée) de la dégénérescence indique la fin des effets d'interférences dues à la surface. Par conséquent, les polarisations des modes de spin sont telles que les amplitudes de précession sur une paire équivalente de spin des sites sont antisymétriques. Le phénomène peut s'expliquer par les faibles longueurs d'ondes des modes magnoniques par rapport au paramètre de réseau.

Les remarques faites dans le cas du réseau cubique simple sont également valables sur les deux autres structures cubiques, centré (cc) et à faces centrées (cfc).

Nous devons prendre chaque structure cubique et remplacer les valeurs des fréquences maximales et leurs positions par leurs valeurs dans le réseau cc semi-infini et le réseau cfc semi-infini. Ainsi, dans le cas du système cubique centré, le long du chemin ΓX , la fréquence

maximale des branches localisées (lignes pointillées) est observée au point Γ de la zone de Brillouin dans les trois cas d'échanges magnétique considérés. Le maximum est observé à la limite du point Γ , sa valeur est de $\Omega = 13.2$ pour le cas de l'adoucissement, il est de $\Omega = 14.18$ pour le cas de l'homogénéité et $\Omega = 14.94$ pour le durcissement.

Dans le cas du système cubique faces centrées, le long du chemin $\Gamma X - XM - M\Gamma$, la fréquence maximale est enregistrée au point M de la zone de Brillouin dans un seul cas d'échange magnétique, il s'agit du cas du durcissement où il est observé pour une valeur de $\Omega = 17.8$. Pour le cas de l'adoucissement et l'homogénéité, le maximum est observé en un point du chemin $M\Gamma$ qui se situe dans la bande de volume. Il est de $\Omega = 15.96$ dans le cas de l'adoucissement et de $\Omega = 16.32$ pour le cas de l'homogénéité.

Concernant la dégénérescence des branches des états localisés, celles-ci dégènèrent près du point X pour le système cubique centré et près des points X et M pour le système cubique à faces centrées.

6. Conclusion

Il est rapporté qu'au niveau des couches superficielles, les excitations de spin génèrent des ondes de spin se propageant le long des directions de haute symétrie de la surface étudiée, qui sont localisées, puisque leurs amplitudes de précession diminuent car les ondes sont évanescentes dans les couches perpendiculaires aux plans de surface. Cela signifie que les couches superficielles, d'un matériau ferromagnétique semi-infini, brisent la périodicité et par cela donne lieu à des états de surface appropriés. Ces derniers sont caractéristiques de la forme et du type de délimitation des cristaux magnétiques. Les branches de spin localisées peuvent être expliquées comme une conséquence de la réduction du nombre de liaison au niveau des couches superficielles. En effet, il diminue l'espace disponible pour la délocalisation des électrons sur l'épaisseur de la surface, conduisant aux changements de la forme de la bande, avec l'apparition des énergies liées aux spins des sites irréductibles dans le spectre magnonique. Il est utile de rappeler qu'un magnon de surface est caractérisé par sa fréquence propre, son vecteur d'onde et la manière dont il diminue pendant sa pénétration dans la zone parfaite. Les états de spin localisés dans le domaine magnonique constituent un outil important qui fournit des informations sur les caractéristiques du couplage des couches de surface et l'impact des interactions d'échanges de spin de la région de raccordement sur les énergies des spins des sites de surface.

Les états localisés de spin à la surface sont localisés dans des états discrets et intégrés dans le volume du guide d'onde parfait. Certaines oscillations observées caractérisent les résonances de type Fano.

Références du chapitre 3

- [1] E. Meloche, C.M. Pinciuc and M.L. Plumer, Phys. Rev. B 74, 094424 (2006).
- [2] L. Bergqvist, A. Taroni, A. Bergman, C. Etz and O. Eriksson, Phys. Rev. B 87, 144401 (2013).
- [3] A.J. Freeman and C.L. Fu, J. Appl. Phys. 61, 3356 (1987).
- [4] H. Zabel, J. Phys.: Condens. Matter 11, 9303 (1999).
- [5] F. Hellman *et al.*, Rev. Mod. Phys. 89, 025006 (2017).
- [6] T. Fu, Y. Zhong, L. Zhou, S. Meng, Z. Tian, Y. Chen, T. Li, X. Zou, Z. Li and T. Yang, J. Vac. Sci. Technol. A 41, 043212 (2023).
- [7] D.J. Choi, N. Lorente, J. Wiebe, K. von Bergmann, A.F. Otte and A.J. Heinrich, Rev. Mod. Phys. 91, 041001 (2019); C. Weiss, M. Grassi, Y. Roussigné, A. Stashkevich,
- [8] T. Schefer, J. Robert, M. Bailleul and M. Kostylev, J. Magn. Magn. Mat. 565, 170002 (2023).
- [9] Cardona, M., Ley, L. (eds.): *Photoemission in Solids I*, Berlin, Heidelberg: Springer Verlag (1978).
- [10] Kevan, S.D. (ed.): *Angle-resolved Photoemission – Theory and Current Applications, Studies in Surface and Catalysis*, Vol. 74, Amsterdam, Elsevier (1992).
- [11] B. Müller, and M. Henzler, Surf. Sci. 389 (1997) 338.
- [12] P. Weightmann, D.S. Martin, R.J. Cole and T. Farrel, Rep. Progr. Phys. 78 (2005) 1251.
- [13] R.M. Feenstra, Surf. Sci. 299–300, 965 (1994).
- [14] B. Binning, H. Rohrer, Ch. Gerber and E. Weibel, Phys. Rev. Lett. 50, 120 (1983).
- [15] R.S. Fishman, T. Berlijn, J. Villanova and L. Lindsay, Phys. Rev. B 108, 214402 (2023).
- [16] S. Blundell, *Magnetism in Condensed Matter*, Londres, Oxford University Press, (2001),
- [17] <http://perso.neel.cnrs.fr/olivier.fruchart/slides/magn/magn-fruchart-lecturenotes2006.pdf> [archive]
- [18] C. Kittel, *Physique de l'état solide*, 7ème édition, Paris (1998).
- [19] B.D. Cullity. *Introduction to Magnetic Material*. Addison-Wesley, New York (1972).
- [20] P. Bruno, Thèse de Doctorat, Université Paris XI, Orsay (1989).
- [21] A. Bounouh, Thèse de Doctorat, Université Paris Sud Orsay (1997).
- [22] C. Chappert and P. Bruno, J. Appl. Phys. 64, 5736 (1988).
- [23] De Lacheisserie, Etienne du Trémolet. *Magnétisme*. Vol. 2. EDP sciences (2012).
- [24] F.J.A. den Broeder, E. Janssen, W. Hoving, and W.B. Zeper, IEEE Transactions on Magnetism 28, 2760 (1992).
- [25] C. Vautrin, PhD thesis, Université de Lorraine, France (2017).
- [26] M. Arora, N.R. Lee-Hone, T. Mckinnon, C. Coutts, R. Hübner, B. Heinrich, D.M. Broun and E. Girt, J. Phys. D: Appl. Phys. 50, 505003 (2017).
- [27] G. Green, J. Reine Und Angewandte Maths 39, 73 (1850).
- [28] C. Shen. A. Kahn and J. Schwartz, J. Appl. Phys. 89, 449 (2001).
- [29] W. Clark, PhD Thesis, University of California, Los Angeles (1965).

- [30] R. Fuchs and K.L. Kliewer, Phys. Rev. 140, A 2076 (1965).
- [31] R.E. Allen, G.P. Alldredge and F.W. de Wette, Phys. Rev. B 4, 1661 (1971).
- [32] G.P. Alldredge, R.E. Allen and F.W. de Wette, Phys. Rev. B 4, 1682 (1971).
- [33] M. Tamine, J. Magn. Magn. Mat. 153, 366 (1996).
- [34] A. Belayadi, B. Bourahla and F. Mekideche-Chafa, Surf. Rev.Lett. 25, 1850101 (2018).
- [35] L. Ferrah, B. Bourahla and S. Blizak, Spin 11, 2150028 (2021).
- [36] B. Bourahla, A. Khater and R. Tigrine, Thin Solid Films 517, 6857 (2009).
- [37] B. Bourahla, A. Khater and M. Abou Ghantous, Eur. Phys. J. Web Conf. Series 29, 00011 (2012).
- [38] A. Khater, B. Bourahla, M. Abou Ghantous, R. Tigrine and R. Chadli, Eur. Phys. J. B 82, 53 (2011).
- [39] R. Challali, S. Sait, B. Bourahla and L. Ferrah. Spin 12, 2350001 (2023).
- [40] T. E. Feuchtwang, Phys. Rev. 155, 731 (1967).
- [41] J. Szeftel and A. Khater, Phys. Rev. C: Solid State Phys. 20, 4725 (1987).
- [42] J. Szeftel and A. Khater, J. Phys. C: Solid State Phys. 20, 4725 (1987);
M. Tamine, Surf. Sci. 469, 45 (2000).
- [43] B. Bourahla, A. Khater, R. Tigrine, O. Rafil and M. Abou Ghantous, J. Phys. Condens. Matter 19, 266208 (2007).
- [44] M. Abou Ghantous and A. Khater, Eur. Phys. J. B 12, 335 (1999). 2. L. Bergqvist, A. Taroni, A. Bergman, C. Etz and O. Eriksson, Phys. Rev. B 87, 144401 (2013).
- [45] O. Nafa and B. Bourahla, Comput. Condens. Matter 16, e00301 (2018).
- [46] L. Ferrah, B. Bourahla and S. Blizak, Spin 11, 2150028 (2021).
- [47] L. Djebala and B. Bourahla, Spin 11, 2150066 (2021).
- [48] M. Boucherrab, O. Nafa, B. Bourahla and F. Chelli, J. Theo. Appl. Phys. 16, 162211 (2022).
- [49] V.L. Zhang, F.S. Ma, H.H. Pan, C.S. Lin, H.S. Lim, S.C. Ng, M.H. Kuok, S. Jain and A.O. Adeyeye, Appl. Phys. Lett. 100, 163118 (2012).
- [50] F. Li and G.A. Sawatzky, Phys. Rev. Lett. 120, 237001 (2018).
- [51] A. Kreisel, F. Sauli, L. Bartosch and P. Kopietz, Eur. Phys. J. B 71, 59 (2009).

Chapitre 4

SPECTRES DE MAGNONS GENERES PAR LES INTERFACES RELIANT DEUX SOUS-STRUCTURES FERROMAGNETIQUES A MAILLAGE CUBIQUE

Introduction

La technologie électronique d'aujourd'hui repose sur l'utilisation des nanostructures artificielles telle que les multicouches, fabriquées par les techniques modernes de dépôts sous ultravide. Ces matériaux se caractérisent par une périodicité nanométrique à une ou deux dimensions [1]. Ils peuvent être définis comme étant un empilement d'un ensemble fini de couches atomiques. Et chaque couche atomique a une épaisseur de quelques plans atomiques. Les travaux sur la synthèse et les applications technologiques des films minces et multicouches ont connu un grand élan ces dernières décennies. Ceci provient de l'écart que représentent leurs propriétés physiques, chimiques, électriques et magnétiques [2-4] par rapport à celles des matériaux de tailles conventionnelles. A l'origine de cet écart, les couches superficielles et les interfaces sont devenues le lieu où émergent des phénomènes physiques intéressants. Ces phénomènes peuvent être maîtrisés et dirigés selon les besoins en contrôlant la façon dont les nanostructures sont assemblées [5-6]. Cependant, les matériaux de basses dimensions ont percé dans le domaine de la supraconductivité à haute température en 1985. Citant comme exemple, les super-réseaux semi-conducteurs obtenus par un empilement de couches de deux semi-conducteurs dans une direction de croissance privilégiée. L'étude théorique de tels objets définit l'Hamiltonien du super-réseau à partir des Hamiltoniens des matériaux massifs. Nous citons aussi, l'étude des structures ZnTe, CoTe qui a permis de définir les effets combinés de la contrainte et du confinement sur les états électroniques. De plus, il a été montré qu'il apparaît aux interfaces des états localisés capables de modifier le transport de ces structures. A ce sujet, Albert Fert a réalisé [7-8], en 1988, des multicouches avec des matériaux ferromagnétiques (Fer-Chrome), épitaxies dans la direction (001) qui ont la propriété d'avoir une résistance géante. Ses travaux lui ont valu le prix Nobel, en 2007. IBM a su profiter de ces résultats pour réaliser des disques durs miniaturisés (gigabits).

En l'électronique, l'intérêt de l'étude de la surface/interface, se fait donc sentir au niveau des jonctions des composants électroniques. En effet, l'étude de la diffusion d'onde de spin à travers une surface ou interface met en évidence les lois régissant la matière à l'échelle locale

[9-11]. Cette connaissance permet de savoir comment de nouveaux systèmes peuvent être construits et organisés pour obtenir les propriétés recherchées où découvrir de nouvelles possibilités d'applications industrielles. Sur le plan analytique, la périodicité rompue, induite par la présence d'une surface ou interface dans les systèmes conduit à l'apparition de solutions mathématiques additionnelles. Ces solutions présentent un vecteur d'onde complexe ξ dans la direction normale à la surface. Par conséquent, les fonctions d'ondes sont évanescentes et les électrons seront localisés aux premiers plans atomiques du système faisant apparaître des états appelés états de surface. C'est dans ce contexte, que nous allons étudier, dans le présent chapitre, la diffusion d'onde de spin via une interface ferromagnétique, séparant deux réseaux semi-infinis ferromagnétiques. Le modèle théorique, proposé, à cette étude écarte toute diffusion d'atomes au niveau de l'interface et considère un empilement périodique parfait dans chacun des deux cristaux ferromagnétiques semi-infinis. La méthode de calcul utilisée, dans les simulations numériques est la méthode de raccordement, déjà présentée et détaillée au chapitre 3.

Afin de remonter aux propriétés induites par une interface dans les systèmes de spins, nous avons présenté un modèle qui permet l'étude de la diffusion des magnons à travers la nano-jonction magnétique qui relie deux sous-systèmes magnétiques. Dans une première étape, la nano-jonction représente une interface entre deux structures de même cristallisation cubique (cs-cs, cc-cc et cfc-cfc) ; et dans une seconde étape, le nano-contact regroupe deux structures cubiques à cristallisation différentes à savoir cs-cc, cs-cfc et cc-cfc (et leurs inverses).

Lorsqu'une onde de spin se diffuse via une interface, elle se scinde en deux ondes, une onde transmise et une autre réfléchie. A ces ondes, nous attribuons le coefficient de transmission et de réflexion des magnons. Nous calculons aussi la transmittance totale via l'interface. Les résultats numériques seront analysés et discutés dans la perspective de la mise en avant du rôle que peut jouer la cristallisation et l'incidence des ondes de spin sur la dynamique des spins en présence des nano-jonctions.

1. Description du modèle

Pour modéliser une interface, nous considérons la juxtaposition de deux sous-systèmes semi- infinis A et B , de cristallisation cubique et d'ordre ferromagnétique. Les paramètres de mailles des deux cristaux sont supposés très proches ($a_A = a_B = a$) et tous les moments de spins, à l'état fondamental, ont la même orientation et la même valeur absolue S sur chaque atome des deux sous-réseaux. Ils diffèrent uniquement par les valeurs de leurs intégrales d'échanges entre premiers voisins : J_{Ad} pour le sous- réseau A , J_{Bd} pour le sous réseau B .

Nous créons l'interface en couplant les deux cristaux semi-infinis terminés par une même surface cristallographique (001) à l'aide d'interactions d'échanges, uniquement, entre premiers voisins. Comme nous l'avons déjà évoqué dans le chapitre précédent. Toute brisure de symétrie dans le modèle semi-infini est considérée comme une perturbation de périodicité de la structure, dès lors, les intégrales d'échanges au voisinage de l'interface, si nous tenons compte uniquement des interactions d'échanges aux premiers voisins, sont décrites de la manière suivante

J_{AB} : est le couplage d'échanges de part et d'autres des atomes des deux sous réseaux ($J_{AB} = J_{BA}$). Nous considérons dans tout ce qui suit uniquement une seule écriture (J_{AB}).

J_{Bd} : Intégrale d'échange reliant les spins du plan de surface du côté B ,

J_{Ad} : Intégrale d'échange reliant les spins du plan de surface du côté A ,

J_A et J_B sont les intégrales d'échanges définissant les interactions entre spins de l'état massif des cristaux cubiques A et B .

Un schéma clarifiera cette description sur les figures **Fig. (IV.1)** et **(IV.2)**.

Afin de travailler avec les énergies normalisées, il est utile de définir pour les guides d'ondes perturbés, le rapport suivant

$$J_d = \frac{J_A + J_B}{2} \quad (\text{IV-1})$$

Nous avons simulé et analysé le phénomène de diffusion des ondes de spin via une interface, dans deux types de maillage : maillage identique et maillage croisé, et cela dans les trois possibilités des constantes d'échanges magnétiques entre les différents sites voisins. Nous devons noter que l'onde de spin incidente est suivant la direction [100]. Il est important, de considérer la direction de l'onde incidente lorsque le maillage est croisé, car comme nous allons le voir l'angle et la direction d'incidence joue un grand rôle dans les phénomènes de diffusion et de localisation.

Les possibilités analysées sont, respectivement, pour les valeurs des rapports suivants

- (a) $J_d = 0.9$ (pour décrire l'adoucissement des forces d'interaction).
- (b) $J_d = 1.0$ (pour décrire l'homogénéité des forces d'interaction).
- (c) $J_d = 1.1$ (pour décrire le durcissement des forces d'interaction).

Nous rappelons que ces valeurs ne correspondent pas aux valeurs exactes des matériaux réels, qui peuvent être différentes dans certains réseaux ferromagnétiques, mais ce choix des valeurs de simulations soutient le fait que les interactions entre spins second voisins sont plus

faibles par rapport aux interactions entre spins premiers voisins, avec un taux de l'ordre de 10% des valeurs des constantes d'échange en volume.

Les cas (a) et (c) correspondent, respectivement, à l'adoucissement et le durcissement des interactions d'échange magnétiques. Nous supposons dans ces cas-là que les rapports d'échanges magnétiques pèsent entre les couches superficielles de la zone de raccordement et de la zone de l'interface. Par ailleurs, nous considérons que l'échange magnétique est homogène entre les différents spins situés en région de l'interface. Tandis que, dans le cas (b), les interactions d'échanges sont considérées comparables (valeurs très proches) dans tout le système.

Sur la **Fig. (IV.1)**, le modèle est pris de même cristallisation (pour les deux sous réseaux) : à savoir : cs-cs, cc-cc et cfc-cfc. Tandis que sur la **Fig. (IV.2)**, nous réalisons des croisements entre les deux sous réseaux en contact, pour former : cs-cc, cs-cfc et cc-cfc (et leurs inverses). Dans tous les cas, nous devons signaler que les informations obtenues dépendent de la direction d'incidence de l'onde de spin dans les systèmes étudiés.

1.1. Dynamique des spins à l'interface cubique ferromagnétique

1.1.1. Maillages identiques

Le système modèle est composé de deux sous-systèmes semi-infinis de spins A et B , reliés par une seule nano-jonction magnétique. Les couplages (intégrales d'échange) entre les spins dans A et B sont notés par J_A et J_B , respectivement. Chaque structure se subdivise en trois zones

- i)* les zones à gauche de A et à droite de B : systèmes parfaits (étudiés au chapitre 2).
- ii)* la zone du milieu : correspond à la zone interface proprement. Elle relie le centre du système aux zones A et B par l'intermédiaire de zones dites de raccordement. Les intégrales d'échange dans cette zone sont notées J_{AB} entre premiers voisins.
- iii)* les frontières entre les zones citées en *i)* et *ii)*.
- iv)* Le maillage de la structure cubique est identique pour les deux systèmes semi-infinis (voir les schémas de la **Fig. (IV.1)**).

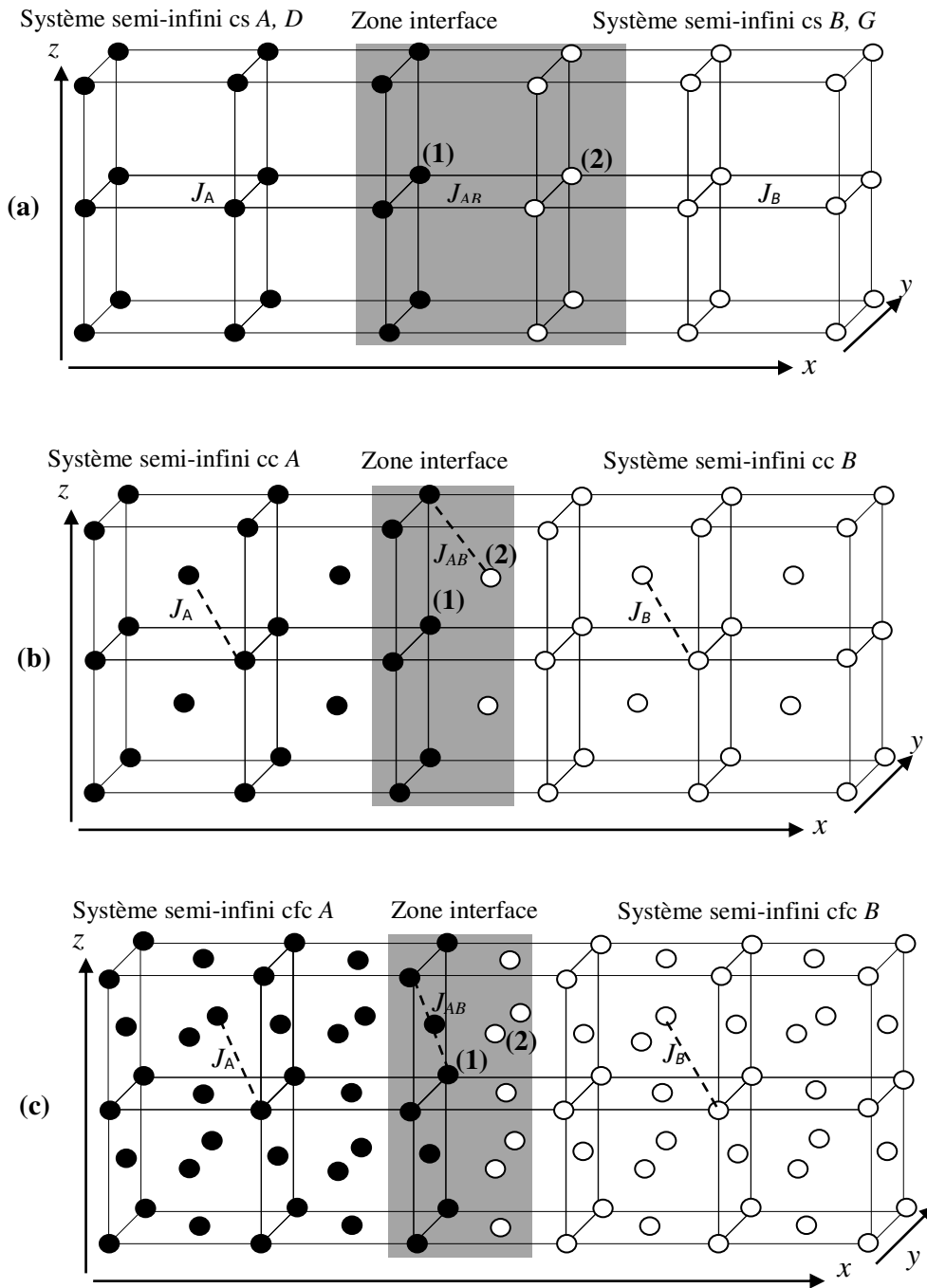
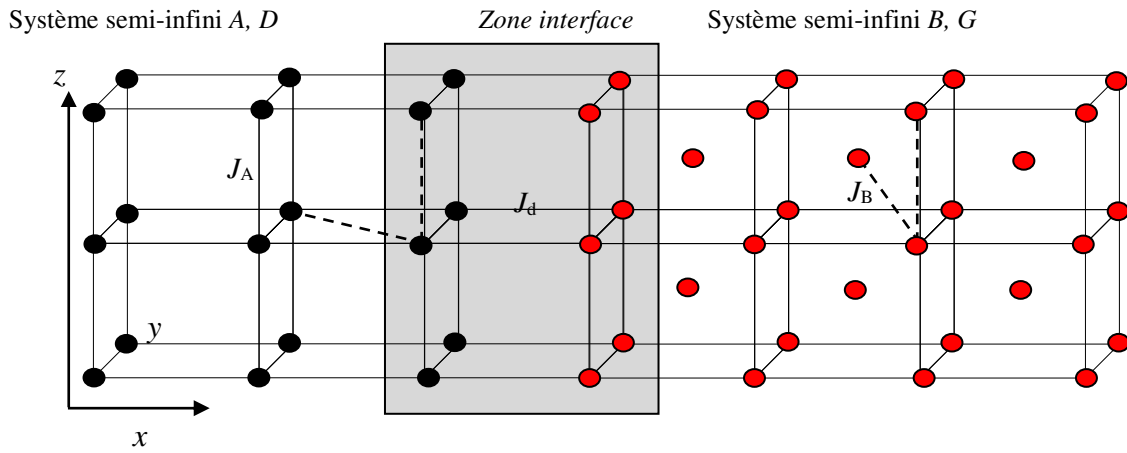


Fig. (IV.1) : Représentation schématique d'une interface séparant deux structures identiques (interface de type A/B). (a) réseau cs, (b) réseau cc et (c) réseau cfc.

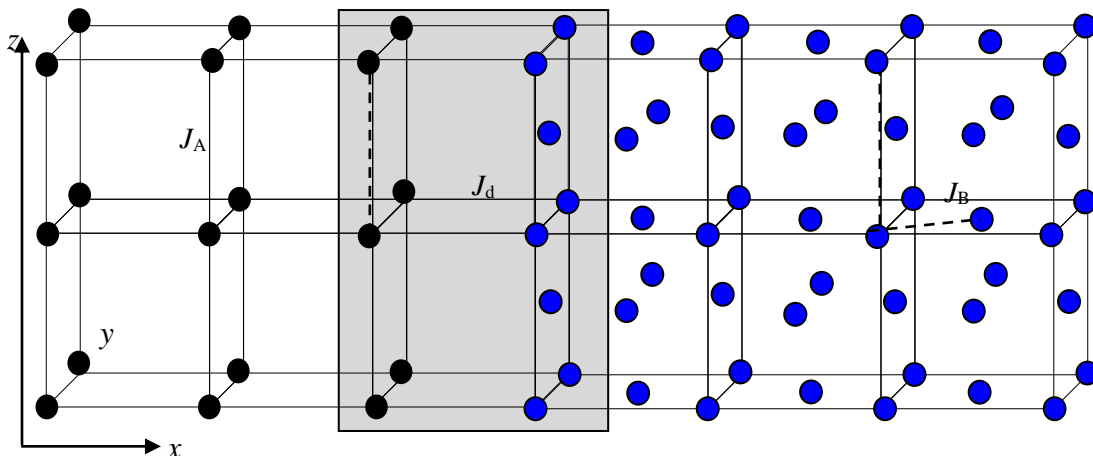
1.1.2. Maillages croisés

La description du modèle est identique à la précédente sauf pour ce cas, le maillage de chaque sous-système semi-infini est pris différemment, comme illustré sur la **Fig. (IV.2)**.

a) interface cs-cc et son inverse cc-cs



b) interface cs-cfc et son inverse cfc-cs



c) interface cc-cfc et son inverse cfc-cc

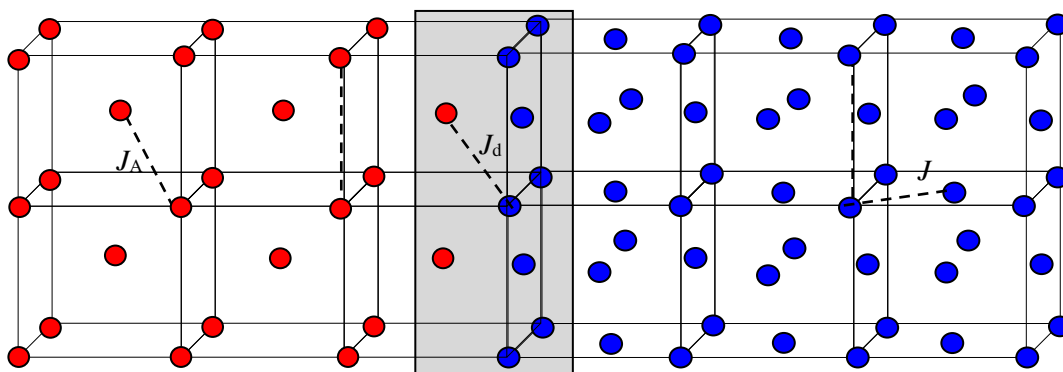


Fig. (IV.2) : Représentation schématique d'une interface séparant deux structures différentes (interface de type A/B). (a) cs-cc, (b) cs-cfc et (c) cc-cfc.

2. Diffusion des ondes de spin via l'interface

Nous considérons le cas d'un mode propageant $|\xi| = 1$, qui se propage de gauche à droite, l'onde résultante diffusée par l'interface se décompose en deux parties, l'une transmise (se propage dans la partie D) et l'autre réfléchie (se propage dans le côté gauche G).

Cela donne naissance à un champ de précession des spins dans les deux semi-systèmes. Les amplitudes de spins dans une direction donnée à gauche de l'interface peuvent s'exprimer comme la superposition de l'onde incidente avec les modes de précession des spins du guide d'ondes parfait à la même fréquence comme suit

$$u_\alpha(n_x, n_y, n_z) = A(\alpha, i) \cdot \xi(i)^{n_x} + \sum_{i=1} \xi(i)^{-n_x} \cdot R_{ii} \cdot A(\alpha, i) \quad (\text{IV-2})$$

Avec $n_x < 0$.

De la même façon, les amplitudes de spins à droite s'expriment par

$$\acute{u}_\alpha(n_x, n_y, n_z) = \sum_{j=1} \xi(j)^{n_x} \cdot T_{ij} \cdot \acute{A}(\alpha, j) \quad (\text{IV-3})$$

Avec $n_x > 0$.

Pour décrire la diffusion des magnons à travers une nano-jonction, nous avons besoin d'utiliser toutes les solutions du système d'équations de précession des spins, obéissant à la condition $|\xi| \leq 1$. Ces solutions sont obtenues par la méthode de Gagel [12] qui consiste à linéariser le système d'équations en augmentant la base des vecteurs propres du système original.

2.1. Etude du phénomène de diffusion via une interface

2.1.1. Matrice dynamique du système avec interface

La matrice est obtenue en écrivant les équations de précession des spins des atomes de la zone de contact (zone colorée) + celles des atomes de raccordement se trouvant aux frontières séparant les zones (interface et D) et (interface et G), nous obtenons une matrice rectangulaire M appelée matrice dynamique du système perturbé ou matrice défaut.

La taille de la matrice dépend du nombre d'atomes dans la zone interface. Alors il y a plus d'inconnus que d'équations. Nous l'écrivons d'une façon générale comme $M_p(l, s)$, sa dimension est

$$\text{Dim}(M_p) = (l \times s) \quad (\text{IV-4})$$

Où : l = le nombre de spins dans la zone de perturbée (dans la zone interface + ceux des deux zones de raccordement).

$s = l +$ (le nombre de spins qui sont reliés directement aux spins de raccordement).

2.1.2 Matrice de raccordement

Le rôle de cette matrice est d'établir les relations qui permettent de raccorder les amplitudes de précession des spins appartenant au domaine de l'interface et les champs précessionnels des modes évanescents des deux guides d'ondes parfaits. Pour cela, nous allons représenter les vecteurs de spin par une combinaison linéaire des vecteurs $\{R, T\}$ définissant un espace fini.

Dans le cas présent, il y a deux parties de raccordements (gauche et droite) par rapport à la zone interface. Nous devons définir deux bases distinctes $\{R\}$ et $\{T\}$; la première sera utilisée pour l'étude du mouvement de précession des spins se trouvant à gauche de l'interface, et la deuxième base est utilisée pour l'étude de la dynamique des spins se trouvant à droite de la zone interface.

Les dimensions des vecteurs de bases définis sont liées au nombre de modes évanescents obtenus lors de l'étude de la dynamique de la zone parfaite, ainsi $\{R\}$ et $\{T\}$ sont de dimension un).

Pour un spin de la région de raccordement à droite, on peut écrire leurs amplitudes de précession de la manière suivante [12-13]

$$u_\alpha(n_x, n_y, n_z) = \sum_{j=1} \xi(j)^{n_x} \cdot T_j \cdot \hat{A}(\alpha, j) \quad (\text{IV-5})$$

$$u_\alpha(n_x, n_y, n_z) = \sum_{i=1} \xi(i)^{n_x} \cdot R_i \cdot A(\alpha, j) \quad (\text{IV-6})$$

R_i : est le vecteur unitaire qui caractérise les modes évanescents i dans la base $\{R\}$ de l'espace des phases.

T_j : est le vecteur unitaire qui caractérise les modes évanescents j dans la base $\{T\}$ de l'espace des phases.

α : est l'une des directions (Ox) , (Oy) ou (Oz) .

A et \hat{A} : sont les poids pondérés associés aux différents modes évanescents déterminés à l'aide des vecteurs propres issus de l'étude de la matrice de la zone parfaite.

Le vecteur de précession des spins de la zone interface est noté $|u\rangle$. Nous pouvons le décomposer en deux parties

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} \quad (IV-7)$$

* la partie $|irr\rangle$ est constituée des amplitudes de précession des sites irréductibles formants la zone interface (le domaine interface est coloré sur les schémas).

$\text{Dim}(|irr\rangle) =$ nombre de spins de la zone interface.

* la partie $|rac\rangle$ est composée des amplitudes de précession des deux zones de raccordement (gauche et droite).

$\text{Dim}(|rac\rangle) =$ nombre de spins de raccordement. Il faut compter les spins à gauche et à droite de la zone de contact.

Nous pouvons alors écrire le raccordement des spins à l'aide de l'expression suivante

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [M_R] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} \quad (IV-8)$$

Où : I_d est une matrice identité. Sa taille dépend du nombre d'atomes dans le site irréductible.

R_1, R_2, R_3 et R_4 : sont des sous-matrices carrées, elles dépendent du nombre de modes propageant du système parfait. Leurs dimensions (1×1) . Ces dernières sont exprimées en fonctions des $\xi(i)$, ($i = 1$) et des poids pondérés associés aux modes (cofacteurs).

M_R : est appelé matrice de raccordement, sa dimension est : $\text{Dim}(M_R) = (s \times l)$

Le produit de la matrice M_p obtenue par la matrice M_R donne une matrice diffusion, carrée $M(l \times l)$ suivant l'équation (IV-9)

$$[M_p(l \times s)] \cdot [M_R(s \times l)] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [M(l \times l)] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = 0 \quad (IV-9)$$

Les états localisés induits par l'existence d'une interface seront déterminés par la relation de compatibilité

$$\det[M(l \times l)] = 0 \quad (\text{IV-10})$$

Nous obtenons, dans chaque cas, des matrices dynamiques de dimensions (4×6) et des matrices raccordement de dimensions (6×4). Chaque matrice diffusion est alors de dimension (4×4).

2.2. Calcul des grandeurs physiques

Comme nous l'avons dit, les facteurs complexes R et T permettent de calculer toutes les grandeurs physiques intéressantes telles que les coefficients de transmission, de réflexion et la transmittance magnonique.

2.2.1. Coefficients de transmission et de réflexion

Notre objectif est de tirer, à partir des équations du mouvement, des informations facilement telles que les coefficients de réflexion et de transmission [14].

Si ν est un mode propageant, à la vitesse $V_{g\nu}$, du guide d'ondes et $\bar{\nu}$ le mode incident, propageant à la vitesse $V_{g\bar{\nu}}$, les coefficients (appelés aussi probabilités) sont donnés, respectivement, par

$$r_{\nu\bar{\nu}} = |\rho_{\nu\bar{\nu}}|^2 = \frac{V_{g\nu}}{V_{g\bar{\nu}}} |R_{\nu\bar{\nu}}|^2 \quad (\text{IV-11})$$

$$t_{\nu\bar{\nu}} = |\tau_{\nu\bar{\nu}}|^2 = \frac{V_{g\nu}}{V_{g\bar{\nu}}} |T_{\nu\bar{\nu}}|^2 \quad (\text{IV-12})$$

Les grandeurs τ et ρ sont les éléments de la matrice de diffusion du système perturbé.

Si ν est un mode atténué, les coefficients t et r sont nuls.

Il est, en effet, toujours possible de s'éloigner de l'échantillon jusqu'à ne plus ressentir l'effet de l'onde diffusée.

Comme dans tout processus de diffusion la conservation du courant se traduit par l'unitarité de la matrice de diffusion. C'est elle qui impose la normalisation par le rapport des vitesses de groupe pour les éléments de cette matrice et pour les coefficients définis ici qui en sont

dérivés. Dans ces conditions, en supposant que l'onde incidente a une amplitude normalisée, la somme des coefficients r et t est aussi égale à l'unité (1)

$$\sum_{\nu} (t_{\nu\bar{\nu}} + r_{\nu\bar{\nu}}) = 1 \quad (\text{IV-13})$$

2.2.2. La transmittance (conductance)

Par analogie avec la conductance électronique qui est liée aux phénomènes de diffusion électroniques [15], il est utile de définir la transmittance magnonique d'une interface pour une fréquence Ω [16] donnée. Elle est notée $\sigma(\Omega)$ et définie par

$$\sigma(\Omega) = \sum_{\nu, \bar{\nu}} t_{\nu\bar{\nu}} \quad (\text{IV-14})$$

La somme est effectuée sur tous les modes se propageant à la fréquence Ω .

Pour un guide d'ondes parfait, σ est un entier qui donne le nombre de modes propageant à la fréquence Ω considérée. La présence d'un défaut ou d'une brisure de symétrie crée un écart entre le σ idéal et sa valeur provenant des processus de diffusion. Cet écart donne une mesure de la réflexion causée par la diffusion des ondes via l'interface ferromagnétique.

3. Résultats obtenus

3.1. Interfaces de cristallisation similaire

3.1.1. Cas de l'interface cs-cs

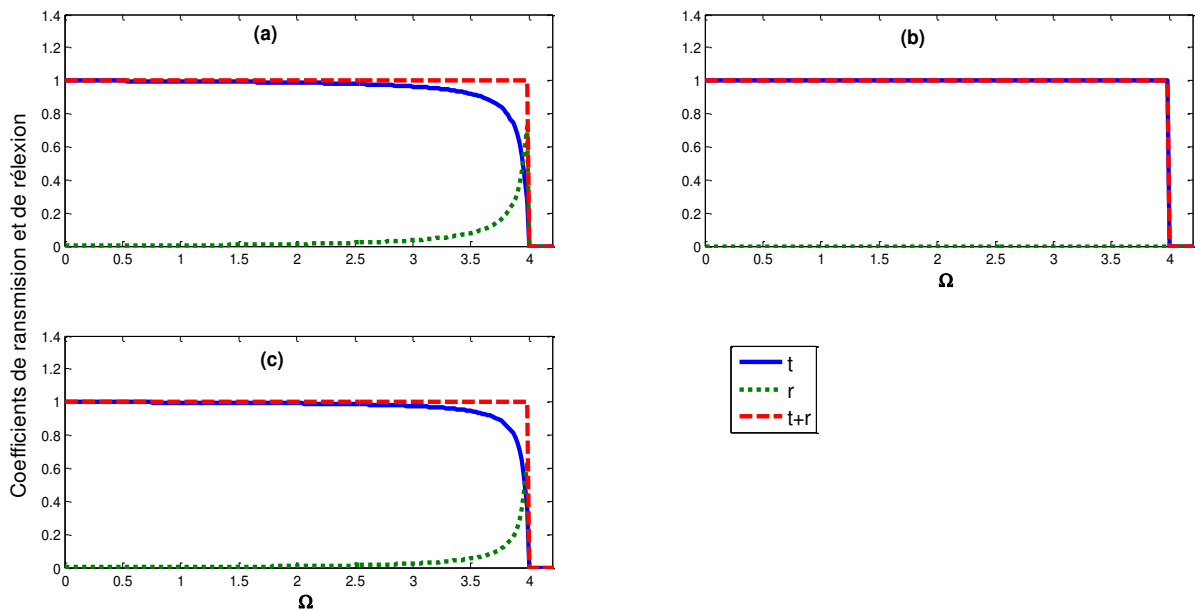


Fig. (IV.3.1-1) : Coefficients de transmission et de réflexion d'onde de spin via une interface cs-cs. (a) Adoucissement, (b) homogénéité, (c) durcissement.

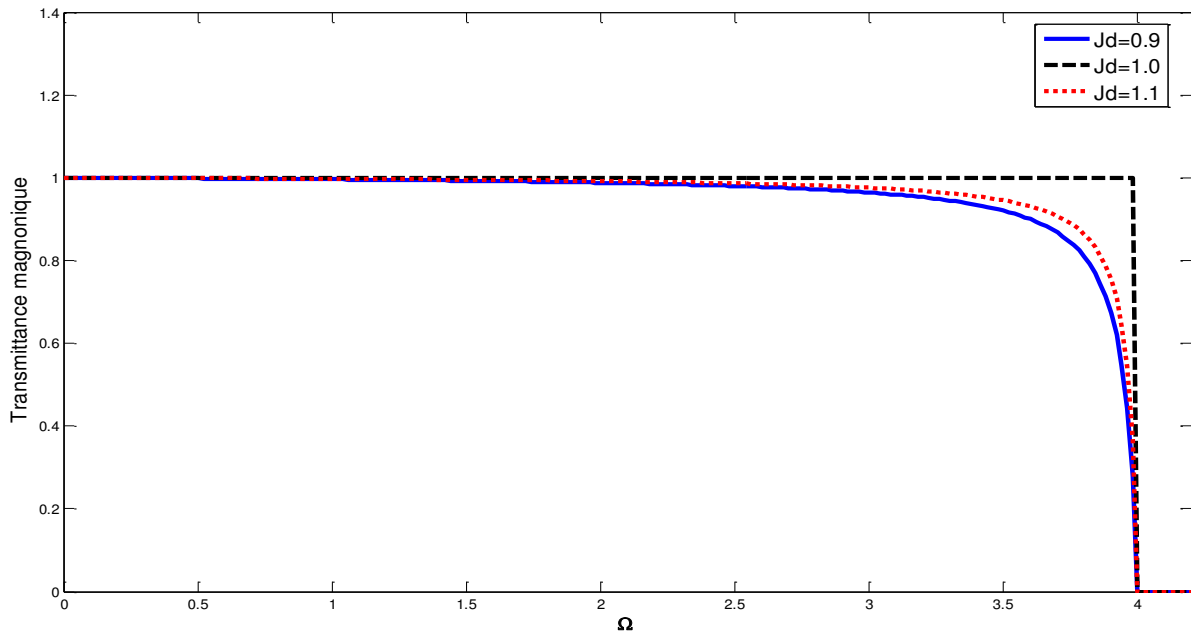


Fig. (IV.3.1-2) : Transmittance magnonique via une interface cs-cs.

3.1.2. Cas de l'interface cc-cc

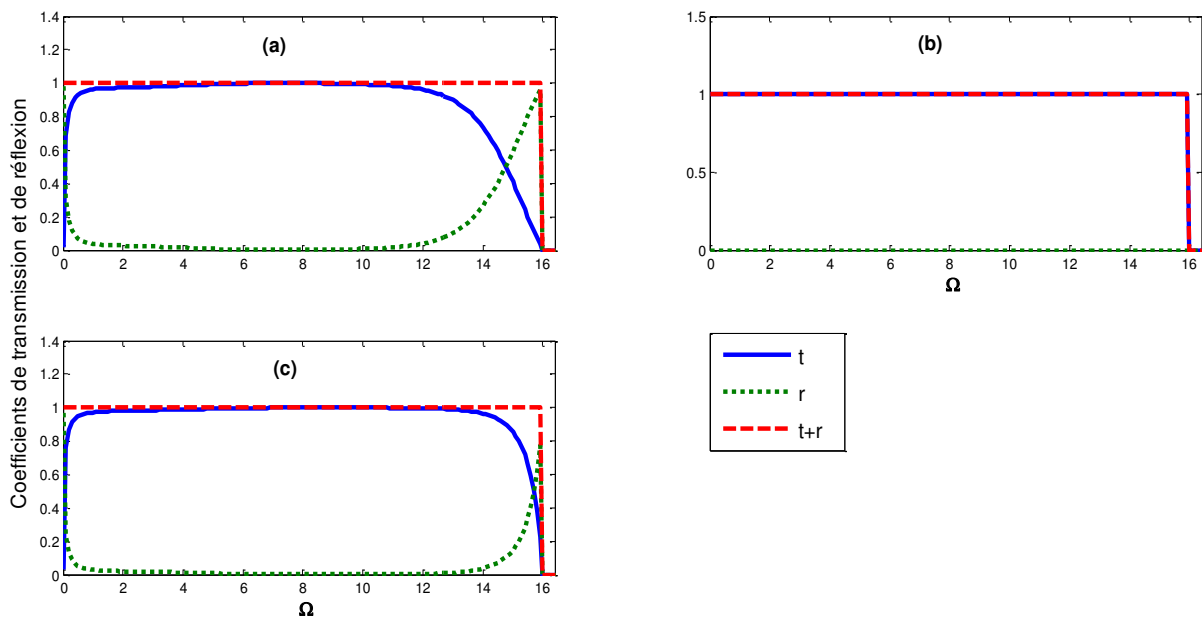


Fig. (IV.3.2-1) : Coefficients de transmission et de réflexion d'onde de spin via une interface cc-cc. (a) Adoucissement, (b) homogénéité, (c) durcissement.

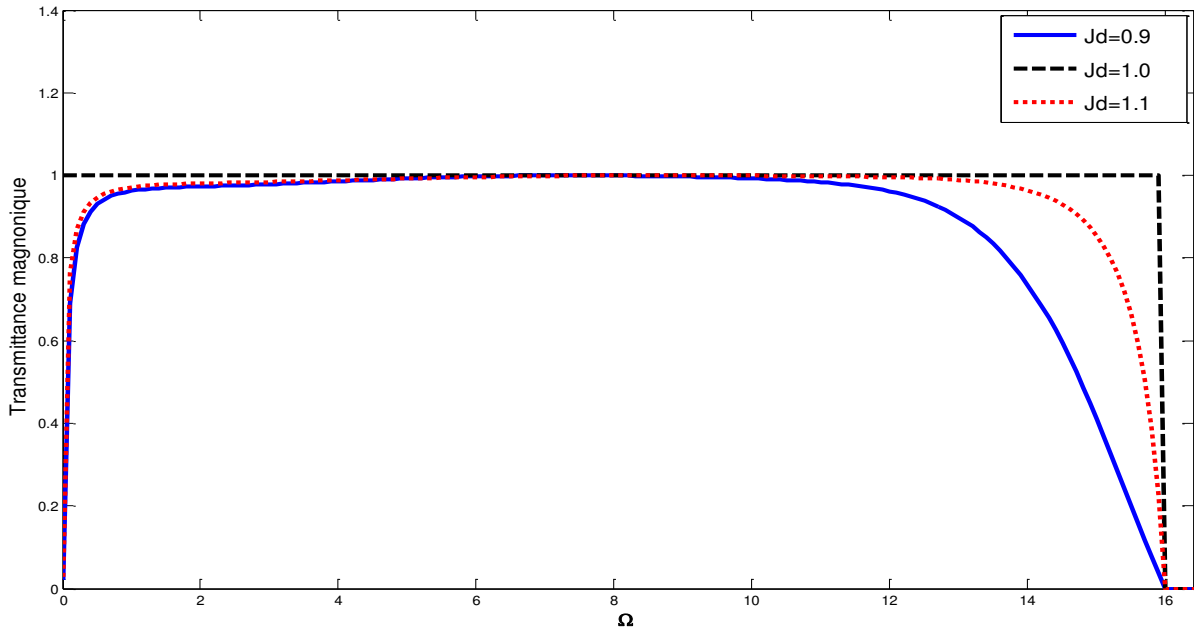


Fig. (IV.3.2-2) : Transmittance magnonique via une interface cc-cc.

3.1.3. Cas de l'interface cfc-cfc

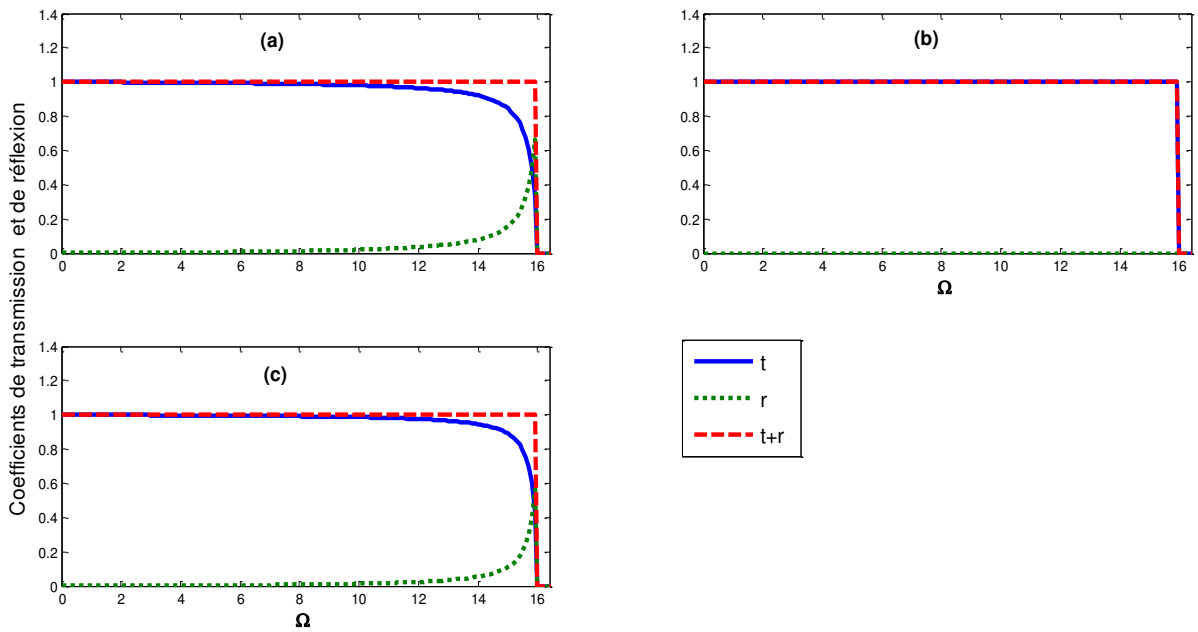


Fig. (IV.3.3-1) : Coefficients de transmission et de réflexion d'onde de spin via une interface cfc-cfc. (a) Adoucissement, (b) homogénéité, (c) durcissement.

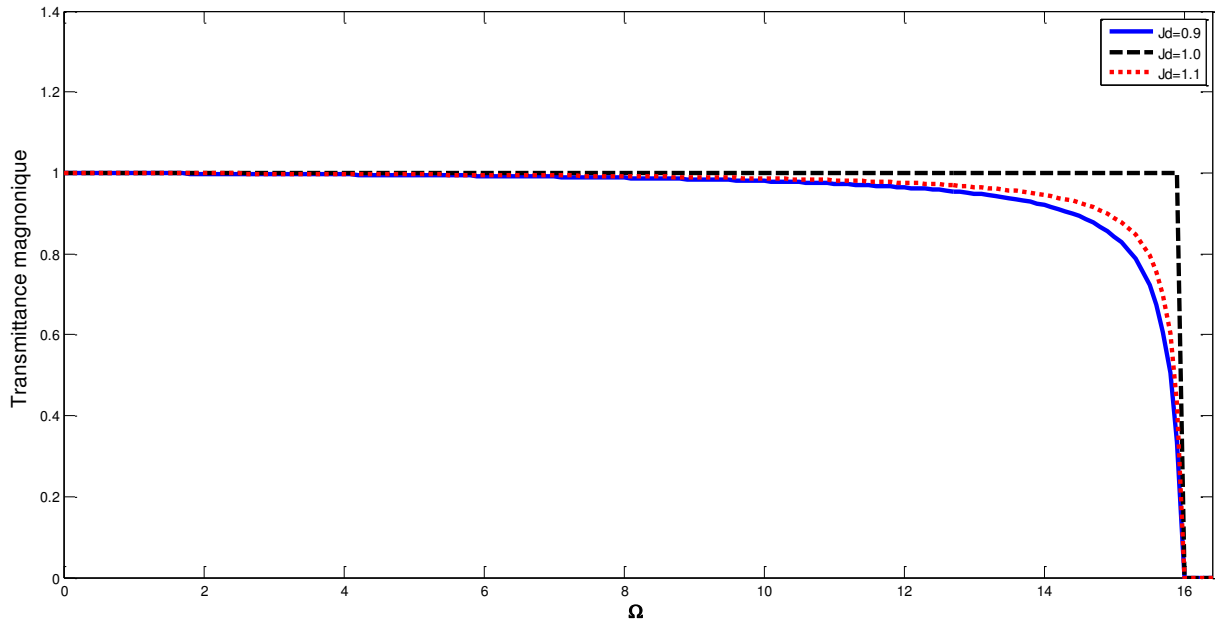


Fig. (IV.3.3-2) : Transmittance magnonique via une interface cfc-cfc.

3.2. Interfaces de cristallisation similaire

3.2.1. Cas de l'interface cs-cc

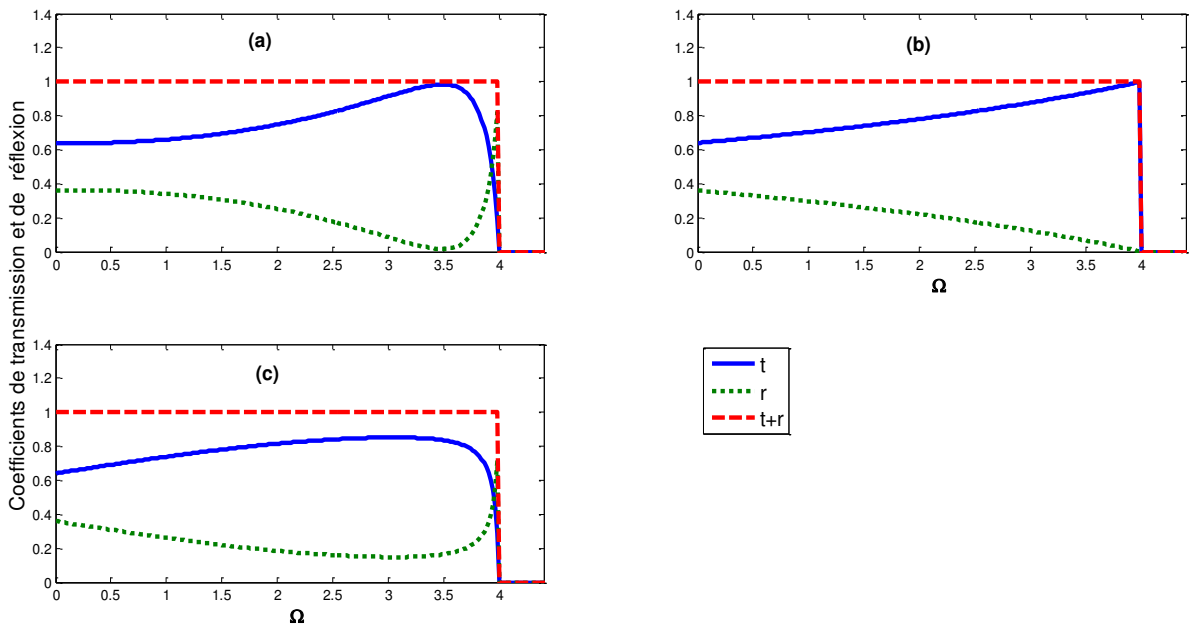


Fig. (IV.4.1-1) : Coefficients de transmission et de réflexion d'onde de spin via une interface cs-cc. (a) Adoucissement, (b) homogénéité, (c) durcissement.

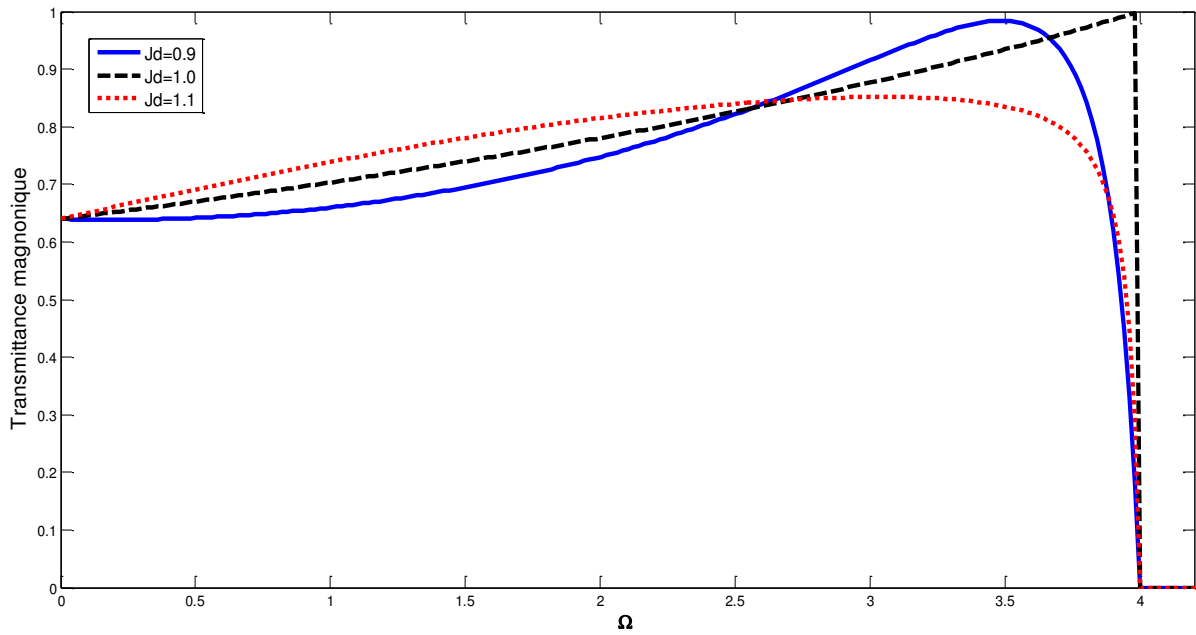


Fig. (IV.4.1-2) : Transmittance magnonique via une interface cs-cc.

3.2.2. Cas de l'interface cc-cs

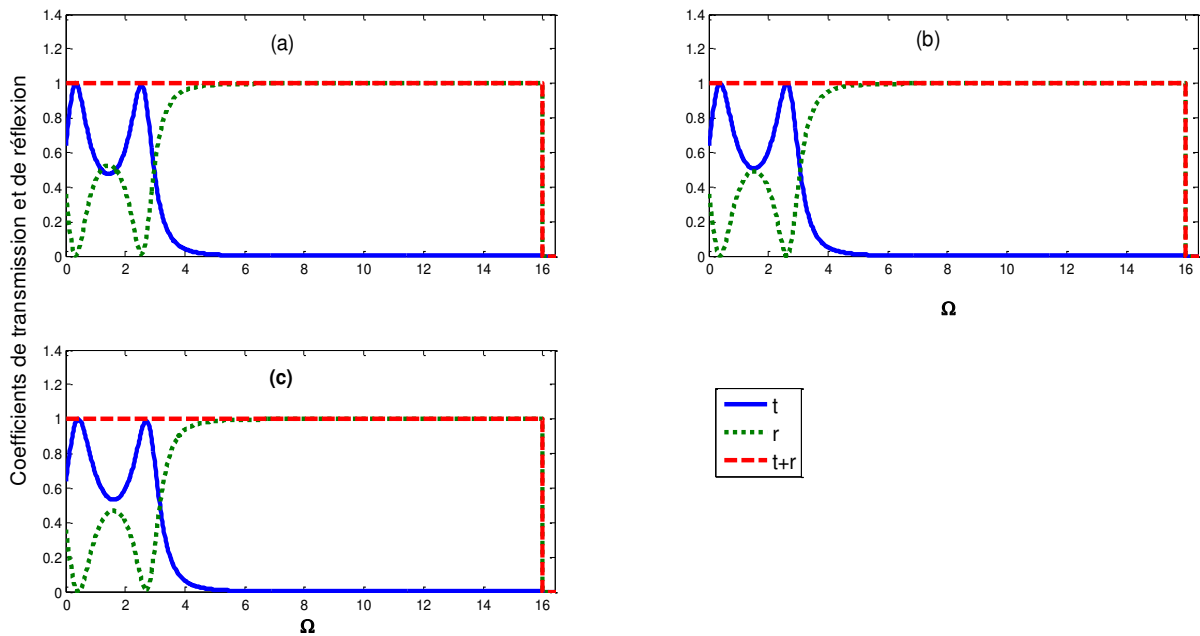


Fig. (IV.4.2-1) : Coefficients de transmission et de réflexion d'onde de spin via une interface cc-cs. (a) Adoucissement, (b) homogénéité, (c) durcissement.

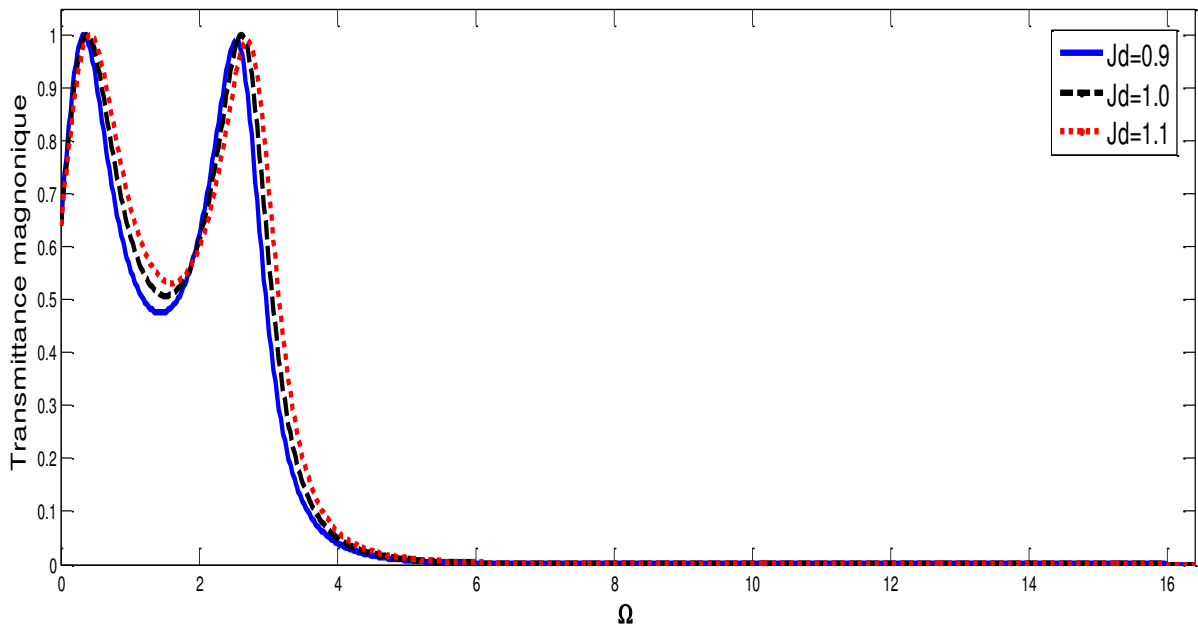


Fig. (IV.4.2-2) : Transmittance magnonique via une interface cc-cs.

3.2.3. Cas de l'interface cc-cfc

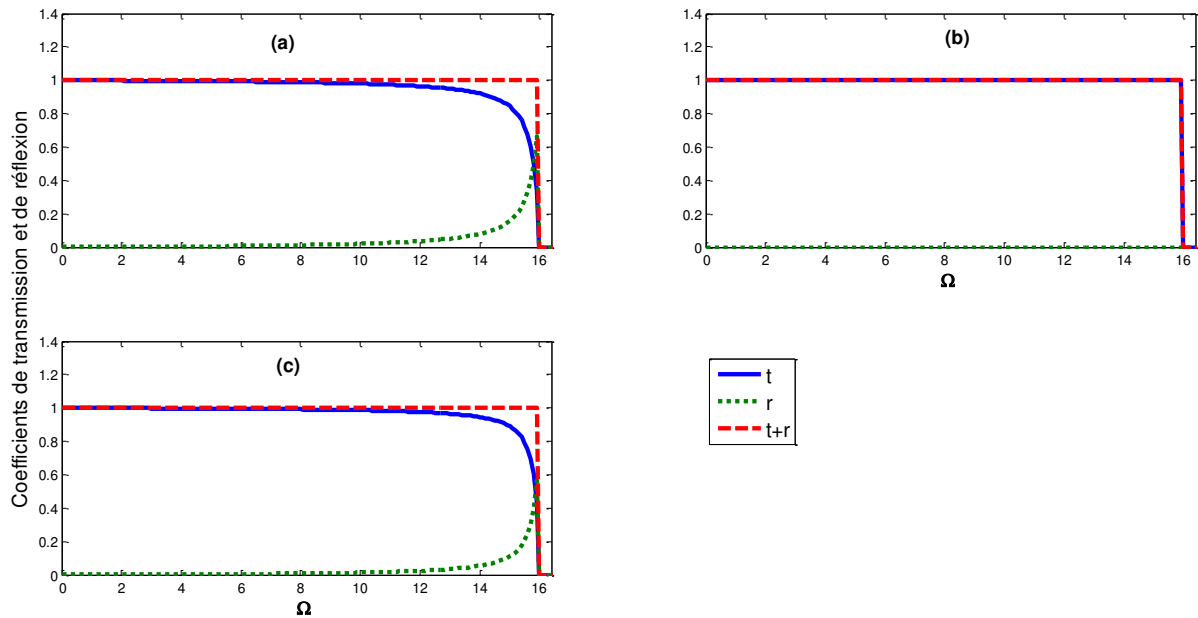


Fig. (IV.4.3-1) : Coefficients de transmission et de réflexion d'onde de spin via une interface cc-cfc. (a) Adoucissement, (b) homogénéité, (c) durcissement.

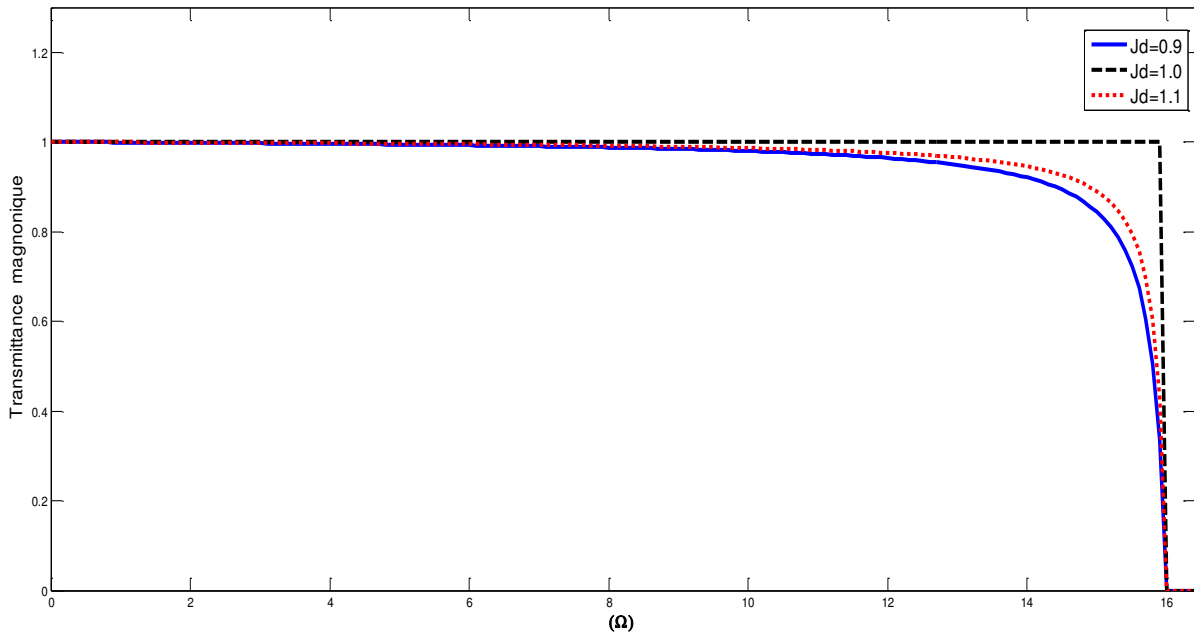


Fig. (IV.4.3-2) : Transmittance magnonique via une interface cc-cfc.

3.2.4. Cas de l'interface cfc-cc

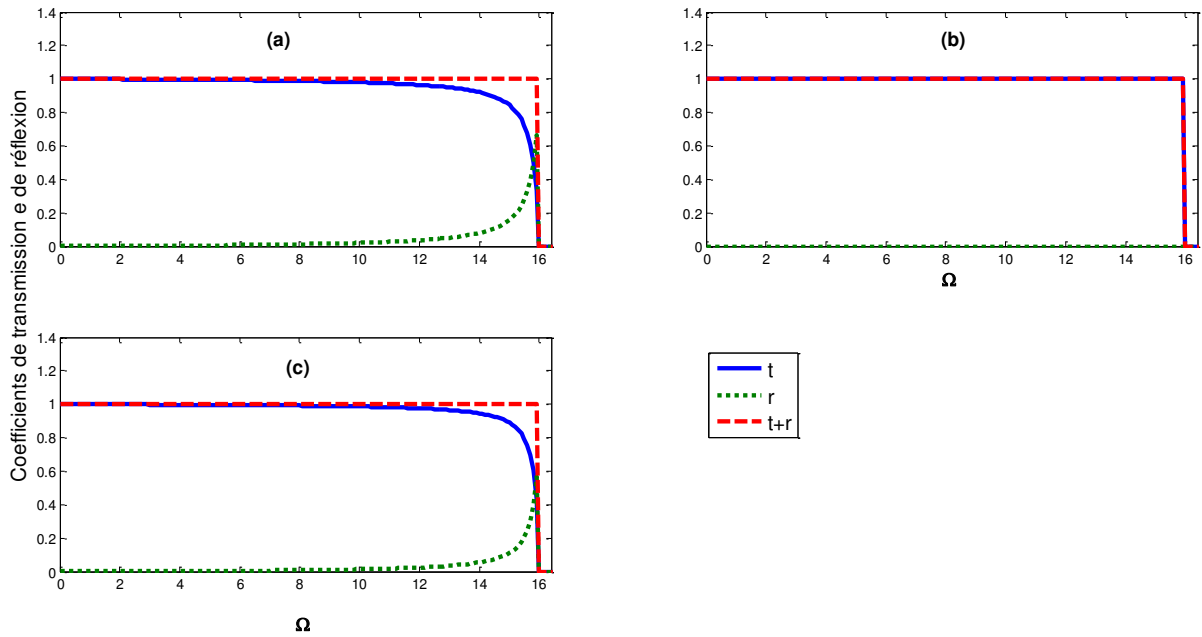


Fig. (IV.4.4-1) : Coefficients de transmission et de réflexion d'onde de spin via une interface cfc-cc. (a) Adoucissement, (b) homogénéité, (c) durcissement.

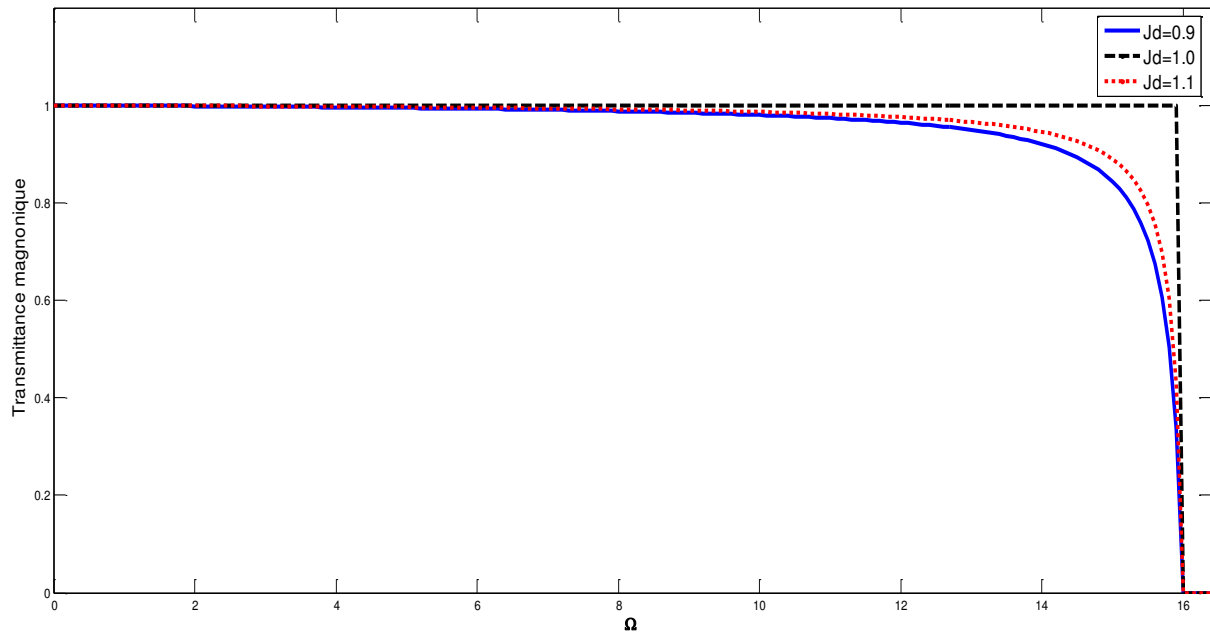


Fig. (IV.4.4-2) : Transmittance magnonique via une interface cfc-cc.

3.2.5 Cas de l'interface cs-cfc

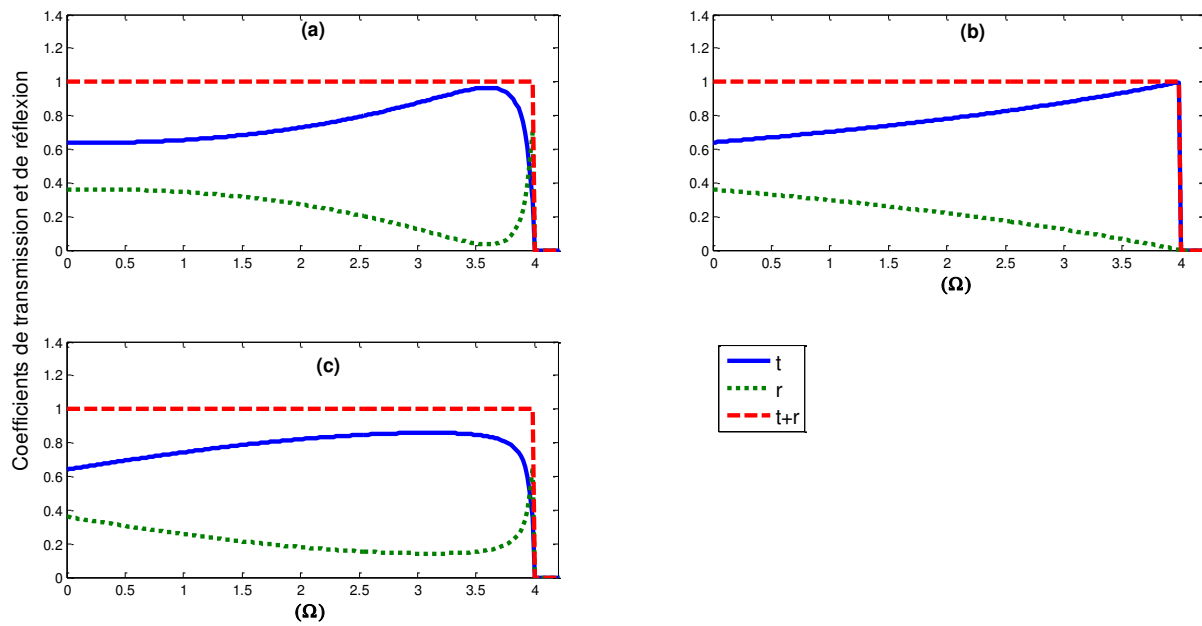


Fig. (IV.4.5-1) : Coefficients de transmission et de réflexion d'onde de spin via une interface cs-cfc. (a) Adoucissement, (b) homogénéité, (c) durcissement.

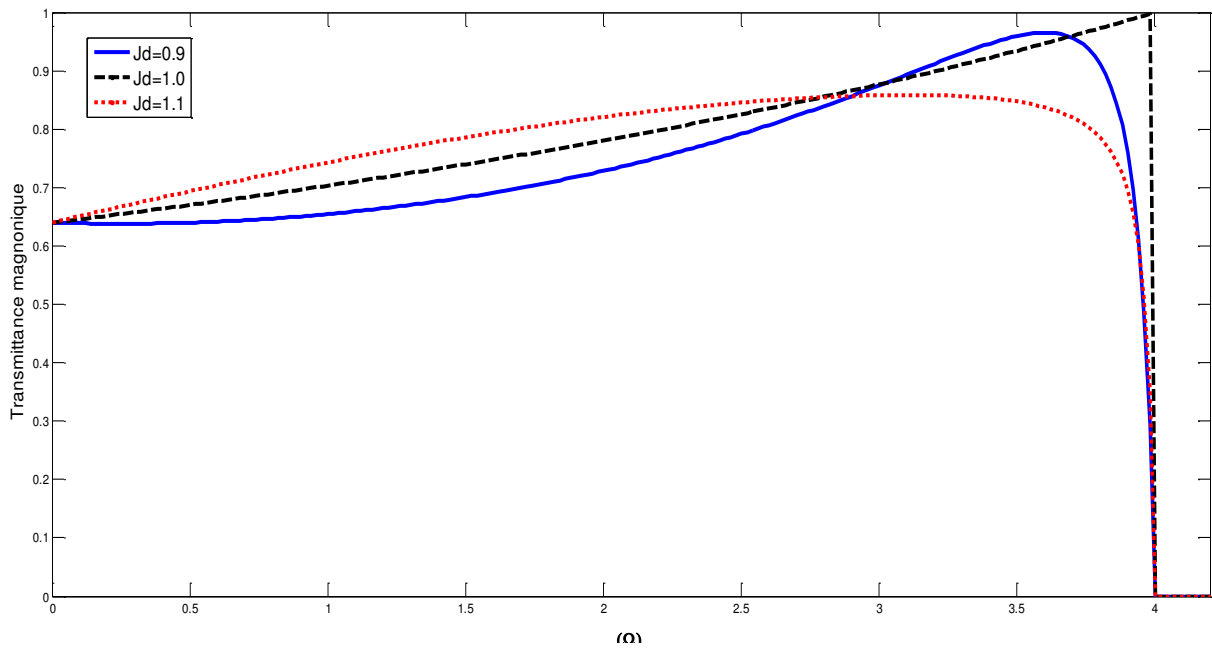


Fig. (IV.4.5-2) : Transmittance magnonique via une interface cs-cfc.

3.2.6. Cas de l'interface cfc-cs

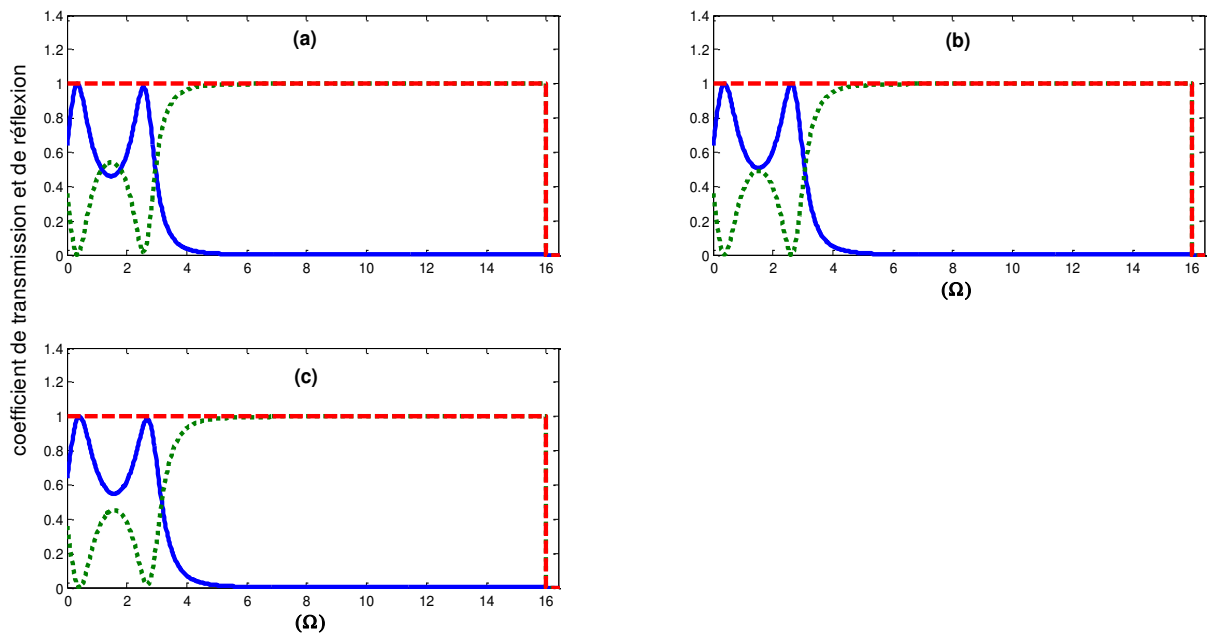


Fig. (IV.4.6-1) : Coefficients de transmission et de réflexion d'onde de spin via une interface cfc-cs. (a) Adoucissement, (b) homogénéité, (c) durcissement.

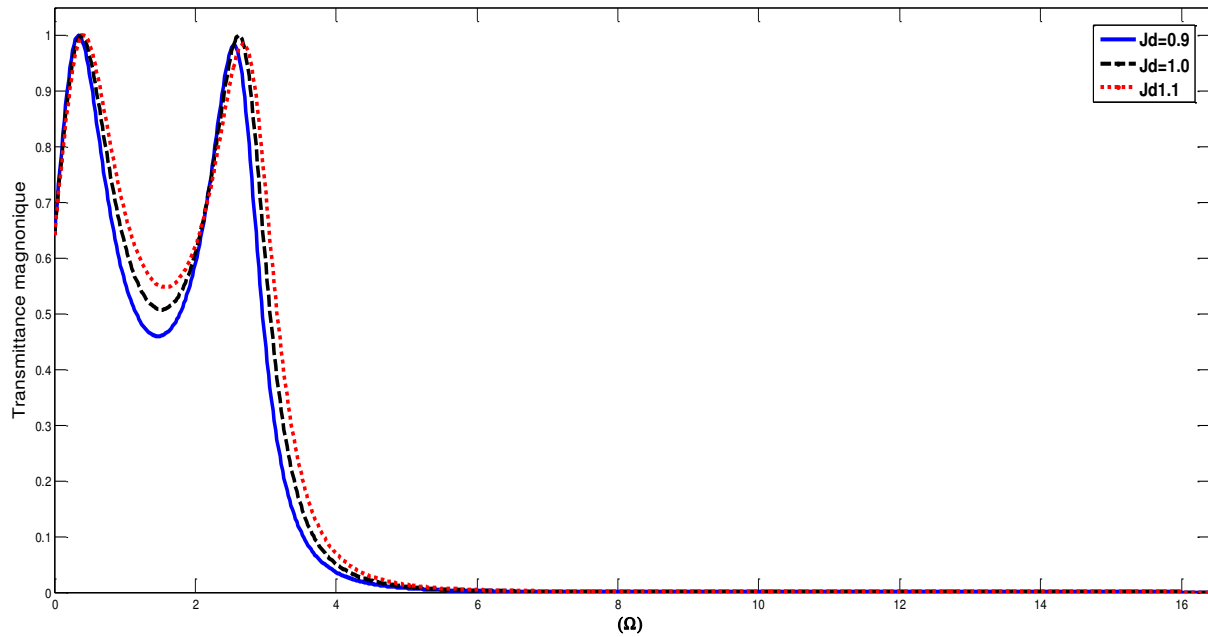


Fig. (IV.4.6-2) : *Transmittance magnonique via une interface cfc-cs.*

4. Discussion des résultats

Les résultats numériques ont été réalisés par des programmes calculant les différentes grandeurs considérées. Par raison de commodité, nous avons présenté pour chaque structure ou interface, les coefficients de transmission et de réflexion, la transmittance totale, en fonction de la fréquence de dispersion normalisée pour les trois probabilités de l'échange magnétique J_d . Notons que la condition $s = t + r$ est constamment vérifiée. Elle est utilisée pour s'assurer de la fiabilité des résultats numériques obtenus dans le cadre du calcul des coefficients de transmission et de réflexion dans tous les cas étudiés.

Nous remarquons que les courbes obtenues s'étendent sur la totalité des intervalles obtenus pour la propagation des ondes de spin dans les structures parfaites, même pour les systèmes faisant intervenir les interfaces cs-cs, cs-cc et cs-cfc, le premier système avant l'interface impose son énergie (**Fig. (IV.3.1-1)**, **Fig. (IV.4.1-1)**, **Fig. (IV.4.5-1)**). Nous rappelons que ces intervalles correspondent aussi aux domaines où les vitesses de groupe sont non nulles.

Les domaines de propagation sont repérés par les fréquences :

$[\Omega_{min} = 0, \Omega_{max} = 12]$, pour le réseau cubique simple,

$[\Omega_{min} = 0, \Omega_{max} = 16]$, pour le réseau cubique centré,

$[\Omega_{min} = 0, \Omega_{max} = 16.35]$, pour le réseau cubique faces centrées.

La deuxième remarque importante est que la transmission s'annule pour la totalité des spectres à la fréquence normalisée $\Omega = 4$, lorsque l'onde incidente passe d'une structure

cubique simple vers une autre structure soit celle du cubique simple, cubique centré ou cubique faces centrées (**Fig. (IV.3.1-1)**, **Fig. (IV.4.1-1)**, **Fig. (IV.4.5-1)**). A cet effet s'ajoute le rétrécissement de la bande de dispersion des ondes de spin. Pour l'interface cfc-cfc, la bande de propagation est légèrement rétrécie (nous enregistrons un maximum à $\Omega = 16$ au lieu de $\Omega_{max} = 16.35$) (**Fig. (IV.3.3-1)**).

Pour les interfaces joignant deux structures cubiques identiques

Au vu des figures obtenues sur la diffusion via les interfaces joignant les cristaux de même structure cubique à savoir les interfaces cs-cs et cfc-cfc (**Fig. (IV.3.1-1)**, **Fig. (IV.3.3-1)**), le cas (a) correspond à $J_d = 0.9$ et le cas (c) correspond à la constante $J_d = 1.1$, nous notons une grande similitude des courbes de coefficient de transmission et de réflexion dans le cas d'adoucissement et de durcissement des interactions d'échanges magnétiques : la transmittance de l'onde de spin est totale. Elle vaut l'unité aux basses fréquences. Puis, elle diminue progressivement sans s'annuler pour les grandes valeurs de l'énergie de diffusion comme le montrent les figures (**Fig. (IV.3.1-2)** et **Fig. (IV.3.3-2)**).

Dans le cas du rapport d'homogénéité des intégrales d'échanges, qui correspond au cas $J_d = 1.0$, l'onde est entièrement transmise et puis réfléchi brutalement, via l'interface cs-cs, lorsque $\Omega = 4$ (**Fig. (IV.3.1-1)**, **Fig. (IV.3.1-2)**). Elle sera réfléchi via l'interface cc-cc et cfc-cfc, lorsque $\Omega = 16$, comme le montrent les figures (**Fig. (IV.3.2-1)**, **Fig. (IV.3.2-2)**, **Fig. (IV.3.3-1)**, **Fig. (IV.3.3-2)**). Nous notons très bien, qu'aux basses fréquences, le coefficient de transmission vaut 1 quand Ω tend vers zéro. Ce qui peut s'expliquer qu'à basse énergie l'onde se propage entièrement et facilement comme si l'interface n'existe pas et la longueur d'onde est de l'ordre de paramètre du réseau. Concernant la diffusion magnonique via l'interface cc-cc, la bande de dispersion des ondes de spin est de $\Omega \in [0, 16]$, elle correspond au guide d'onde parfait de la structure cubique centré. Le coefficient de transmission commence par une valeur nulle lorsque $\Omega = 0$ (**Fig. (IV.3.2-1)**, **Fig. (IV.3.2-2)**) pour toutes les possibilités de l'échange magnétiques considérés. A basse fréquence, dans le cas de l'adoucissement, la transmission augmente rapidement et devient totale aux alentours de $\Omega = 7$ et puis diminue progressivement jusqu'à l'annulation totale ou la réflexion totale du signal lorsque $\Omega = 16$. Nous remarquons dans le cas du durcissement des rapports d'échanges magnétiques que lorsque la fréquence atteint son maximum, permis par la bande de dispersion, la réflexion n'est pas totale mais partielle.

Pour les interfaces joignant deux structures cubiques différentes ou croisés

Il est impératif de mentionner, que le comportement de l'onde diffusée dépend fortement de la direction d'incidence de l'onde se propageant dans le sous-système de la structure à maillage croisé. Notons que toutes diffusion de l'onde via l'interface joignant un réseau cubique simple vers un autre réseau (cs-cc et cs-cfc), se fait sentir par un grand rétrécissement de la plage de diffusion du signal ($\Omega \in [0, 4]$ au lieu de l'intervalle $[0, 12]$), observé sur les figures **Fig. (IV.4.1-1)**, **Fig. (IV.4.5-1)**). Un léger rétrécissement de la bande ($\Omega \in [0, 16]$ au lieu de l'intervalle $[0, 16.35]$) est observé lorsque l'onde incidente se diffuse via l'interface cfc-cs (**Fig. (IV.4.6-1)**, **Fig. (IV.4.6-2)**). De plus, nous verrons l'apparition de pics résonnants pour une direction d'incidence donnée et n'existant pas si l'onde de spin parcourt le système d'interface dans une direction inverse. Ceci nous renseigne sur le rôle important du sous-système où l'onde est incidente.

Sur les courbes des **Fig. (IV.4.2-1)**, **(IV.4.2-2)**, **(IV.4.6-1)** et **(IV.4.6-2)**, nous observons, dans la plage de propagation des ondes de spins via les interfaces cc-cs et cfc-cs, des structures résonnantes de type Fano. Nous rappelons que ces résonnances sont l'impact du couplage entre un continuum et les états discrets induits par la présence de l'interface. Les coefficients de transmission présentent deux structures de résonance aux basses fréquences, les deux pics atteignent le maximum qui est de 1, puis rapidement l'onde est réfléchi sur la majeure partie de la plage de propagation des ondes de spins (aux alentours de $\Omega = 5$ via l'interface cc-cs).

Sur les courbes des figures **Fig. (IV.4.6-1)** et **Fig. (IV.4.6-2)**, la diffusion via l'interface cfc-cs, le premier pic est enregistré lorsque $\Omega = 0.36$, le second est atteint à la fréquence $\Omega = 2.54$, pour une constante $J_d = 0.9$. Le coefficient de transmission dans le deuxième pic avoisine l'unité dans le cas de l'adoucissement. Au-delà de ces fréquences, la réflexion est très importante, voir totale à très grandes énergies. Ce comportement est attendu car à haute énergie, les magnons sont très excités pour être transmis. Aussi, nous devons noter, pour le cas de cette interface, que les spectres de transmission et de réflexion ne sont pas sensibles aux changements des interactions d'échanges magnétiques car les courbes ont la même allure pour les trois cas de la constante J_d . Notons également, sur les courbes des **Fig. (IV.4.5-1)** et **Fig. (IV.4.5-2)**, que l'onde incidente est entièrement transmise sur sa gamme de propagation et ne montre aucune résonance Fano lorsque celle-ci est diffusée via l'interface cs-cfc. Cela peut s'expliquer par le fait que l'onde diffusée via une interface magnétique de ce type est fortement énergétique par rapport à d'autres interfaces. Par conséquent, le type de la nano-jonction joue un rôle important dans la transmittance magnonique.

Sur les **Fig. (IV.4.3-1)**, **Fig. (IV.4.3-2)**, **Fig. (IV.4.4-1)** et **Fig. (IV.4.4-2)**, les courbes de coefficients de transmission et de réflexion ainsi que la transmittance magnonique, et contre toute attente, ne semble pas être sensibles à la direction d'incidence puisque les résultats obtenus sont presque similaires. De plus, ils sont comparables à ceux obtenus pour l'interface cfc-cfc. Ce qui conduit à conclure que les phénomènes de localisation et de diffusion via une nano-jonction formée par la juxtaposition de deux réseaux cubiques à faces centrées se comportent de la même manière que si nous changeons le type de cristallisation ou le maillage de l'un de ces systèmes par un réseau de structure cubique centrée.

5. Conclusion

Nous notons que le problème d'une surface libre (A/Air) peut être traité comme un cas particulier de celui de l'interface (A/B) ; il suffit d'annuler les interactions couplant les deux cristaux à savoir $J_{AB} = 0$ et logiquement annuler les couplages du côté B à savoir $J_{Bd} = 0$ et $J_B = 0$.

Nous avons mené une investigation sur les phénomènes de diffusion des ondes de spin, à travers différentes interfaces ferromagnétiques, construites à partir d'un assemblage, supposé parfait, de deux sous-systèmes semi-infinis de cristallisation cubique avec même maillages d'une part et d'autre part avec des maillages différents. Les résultats numériques de l'étude théorique menée dans ce chapitre ont été obtenus par la méthode de raccordement. Cette méthode s'avère être un outil théorique de base et si efficace qu'il peut être transposé sur n'importe quel système de spins. L'aspect le plus remarquable dans nos résultats est l'apparition de résonances Fano, suite à l'interaction qui survient entre les états localisés à l'interface et le spectre de dispersion du continuum pour les interfaces cc-cs et cfc-cs. Aussi, la direction d'incidence de l'excitation joue un grand rôle surtout lorsque celle-ci est transmise vers un système ferromagnétique de structure cubique simple : la plage de dispersion des ondes transmises est fortement rétrécie. Le signal ainsi transmis est brutalement réfléchi. Néanmoins, la transmittance via le type d'interfaces cs-cs, cfc-cfc, cfc-cc et cc-cfc est maximale : l'onde de spin est totalement transmise. Ceci nous conduit à conclure pour ce genre d'interface que l'onde ne semble pas être altérée fortement par la présence d'une jonction parfaitement agencée. Ces résultats sont fructueux et peuvent être d'une importance primordial et constructive dans la compréhension des phénomènes physiques à l'échelle nanométrique et servent d'outils de base dans la conception des jonctions destinées à des utilisations particulières et bien spécifiques.

Références du chapitre 4

- [1] F. Leroy, Thèse de Doctorat, Grenoble, France (2004).
- [2] H. Lüth, Surfaces and interfaces of Solids. Éd. Springer-Verlag (1993).
- [3] Structure and dynamics of surfaces II. Éd. W. Schommers et P. von Blanckenhagen, Topics in current physics. Springer-Verlag (1987).
- [4] P. A. Dowben and A. Miller, Surface segregation, related phenomena. Éd. CRC Press (1990).
- [5] G.C. Hadjipanayis, R. W. Siegel eds. « Nanophase Materials: synthesis, Properties and Applications», Kluwer, USA(1994).
- [6] A.S. Edelstein and R.C. Camarata, « Nanomaterials: synthesis, Properties and Applications», Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia (1996).
- [7] M.N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Friederich and J. Chazelas, Phys. Rev. Lett. 61, 2472 (1988).
- [8] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M.B. Brodsky and H. Sowers, Phys. Rev. Lett. 57, 2442 (1986).
- [9] B. Bourahla, A. Khater, R. Tigrine, O. Rafil, M. Abou Ghantous, J. Phys. Condens. Matter 19, 266208 (2007).
- [10] B. Bourahla, A. Khater, R. Tigrine, Thin Solid Films 517, 6857 (2009); B. Bourahla, A. Khater, M. Abou Ghantous, Eur. Phys. J. Web Conf. 29, 00011 (2012).
- [11] A. Khater, B. Bourahla, M. Abou Ghantous, R. Tigrine and R. Chadli, Eur. Phys. J. B 82, 53 (2011).
- [12] F. Gagel and K. Maschke, Phys. Rev. B 52, 2013 (1995).
- [13] A. Fellay, Travail d'ingénieur Physicien, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (1996).
- [14] L. Ferrah, Thèse de Doctorat, Université M. Bougarra de Boumerdes (2023).
- [15] R. Landauer, J. Phys.: Condensed Matter 1, 8099 (1989).
- [16] A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlovet, and A. Khater, Phys. Rev. B 55, 1707 (1997).

CONCLUSION GENERALE

Dans cette thèse, une approche théorique, traitant des états localisés de spin en surface et de la diffusion d'ondes de spin via des interfaces magnétiques dans les matériaux ferromagnétiques à cristallisation cubiques, est développée. Le formalisme employé est capable de décrire les excitations et le mouvement de précession des spins dans les trois modèles de la structure cubique ; à savoir la structure cubique simple (cs), la structure cubique centrée (cc) et la structure cubique à faces centrées (cfc). Il est indépendant de la taille, de la nature des surfaces en contact et des orientations des spins.

L'objectif principal de notre travail est de relever les différents spectres magnoniques associés aux surfaces et aux interfaces, dans les structures cubiques citées. L'investigation du phénomène de localisation des spins au voisinage de la zone de surface et la diffusion d'ondes de spin via les interfaces s'est effectuée en résolvant directement les équations de mouvement de précession des spins, avec des conditions spécifiques. La méthode appliquée trouve son origine dans les travaux menés sur les guides d'ondes ferromagnétiques ; le cas des ondes de précession est beaucoup plus difficile. La difficulté vient du fait que les fonctions d'ondes dans l'équation de Schrödinger sont des scalaires complexes, alors que les fonctions d'ondes précessionnelles sont décrites, quant à elles par des vecteurs complexes.

La brisure de symétrie dans les structures cubiques (présence d'une surface ou d'une interface) donne lieu à des matrices dynamiques rectangulaires d'où la nécessité d'introduire une méthode appropriée capable de résoudre le problème. Dans cette thèse, nous avons employé la technique dite de raccordement. Cette dernière constitue un excellent outil qui permet de déterminer les propriétés magnoniques dans les structures perturbées. Les propriétés en question (les phénomènes de localisation et de transport de magnons) sont relevées et ce en fonction des différents paramètres qui caractérisent la zone nano-structurée de chaque domaine perturbé (intégrale d'échange et angle d'incidence) par rapport aux zones parfaites.

La présence d'une surface dans tout système de spins à couplage ferromagnétique induit des propriétés magnétiques différentes par rapport aux structures parfaites ou en volume. Il y a apparition des états localisés de magnons en surface. Ces états se distinguent nettement des modes de propagation des magnons en volume loin de toute surface. Ceci s'explique principalement par la réduction de la coordinence et la modification des interactions d'échange. Les effets des paramètres d'échange des couches superficielles sur la dynamique

des spins et les spectres magnoniques sont rapportés. Les résultats sont discutés en fonction de trois possibilités que peut avoir les rapports d'échange entre couches surfaciques à savoir le rapport d'adoucissement, homogénéité et de durcissement.

Dans une seconde étape, nous avons analysé les spectres de diffusion de magnons à travers des interfaces dans les trois structures cubiques. Nous avons examiné des interfaces dans les systèmes de même cristallisations et des interfaces dans les systèmes ayant des cristallisations croisées ou différentes. Il faut signaler que nous n'examinons que les magnons dont la propagation se fait dans la direction normale à la surface ou à l'interface.

Les résultats obtenus ont mis en évidence un certain nombre de phénomènes intéressants tels que l'interaction des états localisés de spin créés par les brisures de symétrie et les modes propageant du continuum. Ceci est repérable sur les spectres par des oscillations de type Fano. Nos résultats ont montré aussi l'existence des empreintes caractéristiques de chaque brisure de symétrie sur les spectres magnoniques. Autrement dit, les spectres magnétiques par des expériences de diffusion à travers un échantillon cubique contiennent une information sur la structure détaillée du système (présence de surface ou d'interface). De plus, la connaissance des propriétés magnoniques des matériaux contribuera sans aucun doute à l'usinage et la fabrication de disques durs de grande capacité de stockage de l'information.

Parmi les perspectives offertes dans la thématique de cette thèse, nous pouvons citer :

- Etudier le transport thermique et déterminer la chaleur spécifique des composés ferromagnétiques réels à cristallisation cubique qui se présentent sous forme de multicouches.
- Examiner la dynamique des structures magnétiques, ayant au moins un motif par cellule unitaire, en tenant compte de l'environnement réel (interactions avec le substrat) et en incluant la contribution des phonons et des électrons à l'excitation des structures dans la formule de l'Hamiltonien.
- Appliquer la méthode analytique de raccordement aux inhomogénéités étendues, dans les systèmes à cristallisation hexagonales et tétraogonales. De plus, relever l'impact de la température et de la direction d'excitation. Ce qui permettra de mieux cerner les propriétés des alliages largement utilisés dans le domaine de l'industrie électronique et de stockage de l'information.
- Reprendre l'intégralité du travail réalisé suivant d'autres directions telles que [110] et [111] et introduire des couplages de types antiferromagnétiques et ferrimagnétiques.

Résumé

Les propriétés magnétiques des matériaux sont fortement dépendantes de la géométrie de la structure cristalline et des arrangements des sites. Au sein du même matériau, les propriétés sont aussi sensibles à la variation de la concentration et de l'environnement atomique.

À la surface et à l'interface, le changement de symétrie et la réduction de coordinence entraînent un grand changement dans les propriétés physiques des matériaux. Des états énergétiques supplémentaires sont observés sur les spectres dynamiques des différents assemblages de spins. Car, la modification du voisinage atomique est à l'origine des nouvelles propriétés électroniques, vibrationnelles et magnétiques dans toutes les structures atomiques.

Dans cette thèse, nous avons réalisé une étude théorique portant sur le comportement, les excitations des spins et leur mouvement de précession dans les structures cubiques à couplage ferromagnétique. Particulièrement, nous avons relevé l'impact de la brisure de symétrie sur la précession des spins dans les trois structures cubiques à couplage ferromagnétiques.

Aujourd'hui, il est établi que dans toutes les structures semi-infinies, les échanges d'informations et toute corrélation se réalisent par l'intermédiaire des zones de contacts, air/solide (surfaces) et solide/solide (interfaces). La dynamique des spins aux surfaces et aux interfaces des structures cubiques sont examinées en employant la technique dite de raccordement. Les spectres magnoniques et les énergies des états localisés de spins (à la surface et à l'interface) sont déterminés et discutés en fonction des différents paramètres caractérisant les cristaux cubiques semi-infinis. Les interactions entre les états localisés de spins et les modes de magnons des structures parfaites font apparaître dans les spectres magnétiques plusieurs pics et oscillations. Certains pics sont identifiés comme étant des résonances de type Fano.

Mots-clés : Surfaces et interfaces, Ondes de spin ; Spectres magnétiques ; Etats localisés

Abstract

The magnetic properties of materials are strongly dependent on the geometry of the crystal structure and the arrangements of the atomic sites. Within the same material, the properties are also sensitive to variation in concentration and atomic environment.

At the surface and interface, the change in symmetry and the reduction in coordination lead to a large change in the physical properties of materials. Additional energy states are observed on the dynamic spectra of the different spin assemblies. Because, the modification of the atomic neighborhood is at the origin of new electronic, vibrational and magnetic properties in all atomic structures.

In this thesis, we carried out a theoretical study on the behavior of spin excitations and their precession movement in cubic structures with ferromagnetic coupling. In particular, we noted the impact of symmetry breaking on the precession of spins in the three crystallographic cubic structures with ferromagnetic coupling.

Today, it is established that in all semi-infinite structures, information exchanges and any correlation are carried out via contact zones, air/solid (surfaces) and solid/solid (interfaces). The dynamics of spins at surfaces and interfaces of cubic structures are examined using the matching technique. The magnonic spectra and the energies of the localized spin states (at the surface at the interface zones) are determined and discussed according to the different parameters characterizing semi-infinite cubic lattices. The interactions between localized spin states and the magnon modes of perfect structures reveal several peaks and oscillations in the magnetic spectra. Some peaks are identified as Fano-type resonances.

Keywords: Surfaces and interfaces, Spin waves; Magnetic spectra; Localized spin states