

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique  
UNIVERSITE MOULOUD MAMMERRI, TIZI-OUZOU

Faculté des Sciences  
Département de Physique



Mémoire de Magister

Spécialité : Physique  
Option : Physique des Matériaux

Présenté par

DJERROUDI Leila

Thème

Anisotropie uniaxiale et échange biquadratique dans la dynamique de spin ferromagnétique

Devant le jury d'examen composé de :

Mr : Omar LAMROUS	Professeur	UMMTO	Président
Mr : Mokrane TAMINE	Professeur	UMMTO	Rapporteur
Mr : Mourad ZEMIRLI	Professeur	UMMTO	Examineur

Soutenu le /09/ 2012

A mes Parents, à mes sœurs,  
à mes frères et beau frères...

## Remerciements

Les travaux présentés dans ce mémoire de Magister ont été réalisés au Laboratoire de Physique et Chimie Quantique de la Faculté des Sciences, sous la direction Scientifique de M<sup>r</sup> Tamine Mokrane Professeur à la Faculté des Sciences de Tizi-Ouzou.

Je suis honoré d'avoir travaillé avec Monsieur Mokrane TAMINE, Professeur à la faculté des Sciences de Tizi-Ouzou. Je me dois de lui exprimer mes remerciements et mon respect les plus sincères pour toute l'aide, la compréhension ainsi que ses compétences dans le domaine des excitations magnétiques. Je m'en suis volontiers servi et profité de ses conseils avisés.

Je tiens à adresser mes remerciements à Monsieur le Professeur Omar LAMROUS, pour avoir accepté de présider le jury de soutenance.

Je tiens à exprimer ma gratitude à Monsieur Mourad ZEMIRLI, Professeur à la Faculté des Sciences de Tizi-Ouzou et responsable du département de Physique, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant d'examiner ce mémoire.

Sommaire	
Remerciements	3
Introduction générale	8
Référence	11
Chapitre I: Généralités sur les excitations magnétiques de volume et de surface	13
1. Introduction	13
2. Origine du magnétisme	13
2.1 Ordre magnétique spontané	15
2.2 Origine du ferromagnétisme	15
2.2.1 Champ moléculaire de Weiss	15
2.3 Interprétation semi-classique du ferromagnétique	15
3. Onde de spin	15
3.1 Théorie de l'onde de spin	16
3.1.1 Interprétation semi-classique du ferromagnétisme	16
Relation de dispersion	16
3.2 Principale conséquence de l'existence des magnons	19
3.2.1 Quantification de l'onde de spin	19
a. L'aimantation	20
b. La chaleur spécifique $C_v$	21
3.3 Théorie quantique du ferromagnétisme	21
3.3.1 L'interaction d'échange de Heisenberg	21
a. L'écart d'énergie entre les états triplet et Singulet	22
b. Interaction d'échange de Heisenberg	25
4. Interprétation quantique du ferromagnétisme	25
a. Introduction	25
b. Conséquences physiques des brisures de symétries	27
Référence	29

## Chapitre II : Méthodes analytiques de calculs d'excitations

1. Introduction	31
2. Méthodes d'études des excitations magnétiques de surface	32
a. Méthode de diagonalisation	32
b. Méthode de Fonction de Green	32
c. Méthode de raccordement	32
3. Eléments théoriques de la méthode de raccordement	33
4.1 Propriétés de symétrie et matrice dynamique	34
4.2 Equation séculaire et propriétés des excitations magnétiques Propageant de volume	35
4.3 Excitations magnétiques de surface	37
4.4 Illustrations des équations de continuité volume-surface	38
Référence	41

## Chapitre III: Excitation magnétique d'un modèle ferromagnétique semi-infini 43

1. Introduction	44
2. Aspect théorique	44
2.1 Description générale du mouvement	44
2.1.1 Excitations magnétique d'un ferromagnétique pur	44
a. La limite classique	45
b. La limite quantique	46
2.2 Equation générale de mouvement	47
3. Modèles d'interactions d'échange en surface	48
4. Expression de l'équation séculaire des excitations magnétiques de volume	50
4.1 Théorie de l'onde de spin de surface pour le système semi-infini	51
4.2 Equations des ondes de spin de surface en fonction de l'amplitude	
Modèle.1	52
Modèle.2	57

5 Résultats et discussion	61
Référence	68
Chapitre IV : Influence de l'anisotropie uniaxiale et de l'échange Biquadratique	69
1. Introduction	70
2. Différentes interactions d'échange	71
2.1 Intégrales d'échange	71
3. Excitations magnétiques de surface avec anisotropie uniaxiale et champ d'anisotropie de surface (Configuration.1)	73
4. Excitation magnétiques de surface avec anisotropie uniaxiale et absence de champ d'anisotropie de surface (Configuration.2)	88
5. Excitation magnétiques de surface en absence d'anisotropie uniaxiale et champ d'anisotropie de surface (Configuration.3)	95
6. Résultats et discussion	102
Légendes des figures	103
Conclusion du chapitre	105
Référence	106
Conclusion générale et perspectives	109

## Introduction générale

## Introduction générale

L'âge d'or du magnétisme entre la déflexion d'atomes ionisés dans un gradient de champ magnétique (W. Gerlach et O. Stern) qui postule l'existence du spin de l'électron et Dirac qui montre que, par la nouvelle mécanique quantique, le spin est une quantité non-classique. Il y a à ce niveau une transition entre le magnétisme "phénoménologique" de Curie-Weiss et le magnétisme du début du 21<sup>ème</sup> siècle. Le magnétisme actuel résulte des travaux de Hund, Pauli, de Broglie, Schrödinger et Bloch-Heisenberg. La plupart des concepts actuellement utilisés sont basés sur des théories précises et pertinentes qui permettent de s'affranchir de plusieurs difficultés.

La notion de spin, introduite de manière mathématique par Dirac, a permis d'expliquer les différentes raies de diffraction de Gerlach et Stern. Malheureusement si un atome peut être décrit de manière satisfaisante par des déterminants dits de Slater, un solide ne peut être décrit de manière aisée. Les moyens de calculs actuels sont pour l'instant incapables de décrire de manière auto cohérente un très grand nombre formidable d'électrons. Deux "approximations" ont été proposées : l'Hamiltonien de Heisenberg qui approxime le magnétisme d'un atome par un vecteur  $S_i$  en interaction avec d'autres atomes représentés par des vecteurs  $S_j$ . L'Hamiltonien du système est du type  $JS_i \cdot S_j$  où  $J$  est le paramètre d'échange. Cette approche est strictement valable pour des systèmes non-métalliques. Dans les métaux on utilisera plutôt l'approche du magnétisme itinérant de Bloch pouvant amener au ferromagnétisme. De plus, F. Bloch a introduit la notion d'onde de densité de spin dont le Cr est un des prototypes.

Les ondes de spin en surface ont suscité un intérêt théorique depuis des décennies. Il provient, pour une plus grande proportion, des questions fondamentales telles que la nature de la transition de phase de l'aimantation en surface par rapport à celle du volume ainsi que de la chaleur spécifique. Les ondes magnétiques de surface sont différentes des ondes vibrationnelle de surface d'un réseau en raison de deux choses importantes. Premièrement, nous notons que l'effet de la température est plus important pour la surface des magnons que la surface des phonons et deuxièmement, la vitesse de l'onde de surface magnétostatique dépend directement de l'épaisseur de l'échantillon, tandis que dans le domaine acoustique la vitesse des phonons de surface est approximativement indépendante de l'épaisseur de l'échantillon [1].

Le travail présenté dans ce mémoire consiste en une étude théorique du comportement des excitations ferromagnétiques, lorsque la présence simultanée du couplage biquadratique et de l'anisotropie uniaxiale est considérée. On abordera aussi, l'étude théorique des ondes de spin. D'autre-part l'étude du comportement des excitations antiferromagnétiques à été étudié par [2].

Le formalisme utilisé dans ce travail est la méthode de raccordement, adapté aux calculs des courbes de dispersion des excitations magnétiques de surface et des courbes de dispersion des excitations magnétiques en volume, méthode qui a été utilisée aussi pour l'étude théorique de la dynamique vibrationnelle des surfaces ordonnées et désordonnées.

Ce mémoire est divisé en quatre chapitres présentés comme suit :

Dans le premier chapitre, on présente certains concepts fondamentaux nécessaires à l'étude théorique semi-classique et quantique du ferromagnétisme. De plus, des rappels sur le ferromagnétisme dans le modèle du champ moléculaire de Weiss sont décrits. Ce modèle a permis de comprendre le ferromagnétisme comme une mise en ordre parallèle des moments et de rendre compte de la variation de l'aimantation spontanée en fonction de la température. Le modèle de Heisenberg par contre, a permis de révéler la nature du ferromagnétisme, celle-ci traduit l'existence de quasi-particules de type boson, appelées ondes de spin.

Le deuxième chapitre est consacré à l'étude théorique des ondes de spin en surface et en volume d'un matériau ferromagnétique semi-infini. On valorise les différentes méthodes de calcul des excitations de surfaces ordonnées. Nous rappelons les théories fondamentaux de ces méthodes, telle que la méthode SLAB, la méthode de raccordement et la méthode des fonctions de GREEN. La méthode de raccordement est utilisée dans ce travail, et nous en détaillerons les étapes de calcul. On utilise un modèle d'Hamiltonien de Heisenberg traitant une interaction aux premiers voisins en présence d'un champ extérieur et même d'un champ d'anisotropie<sup>o</sup>; on applique ainsi ce formalisme pour l'étude théorique des excitations magnétiques de surface qu'on analysera en fonction des paramètres d'échange, de l'anisotropie uniaxiale et de l'échange biquadratique.

Dans le troisième chapitre, on décrira l'influence de l'échange isotrope sur l'excitation magnétique de surface et de volume. Nous comparerons alors les résultats obtenus dans ce travail à ceux décrits dans la littérature [1,3].

Dans le quatrième chapitre, on décrira l'influence de l'échange biquadratique et d'anisotropie uniaxiale sur l'onde de spin de surface et de volume. De même, nous comparerons nos résultats à ceux obtenus en utilisant le ferromagnétisme des fonctions de Green décrit dans la littérature [4, 5, 6].

## Références

- [1] T. Wolfram and R.E. De Wames, Phys. Rev. *Surface Dynamics of Magnetic Materials*, 234 (1969).
- [2] F.Boumeddine, M.Tamine, Surface Science 603 2120-2131 (2009).
- [3] E. Ilisca et E. Gallais, J.Phys. *Le spectre des ondes de spin*, N° 10 Tome 33 811 (1972).
- [4] D. Kapor, M. Skrinjar, S. Stojanovic, Phys. Lett. A 192 413-420 (1994).
- [5] M. Pavkov, M. Skrinjar, D. Kapor, S. Stojanovic, Phys. Lett. A 280 465-483 (2000).
- [6] W. Z. Shen, Z. Y. Li, Phys. Lett. A 168, 151-156 (1992).

Chapitre I : Quelques aspects magnétiques du ferromagnétisme-  
introduction aux excitations magnétiques

## 1. Introduction

Une charge électrique en mouvement engendre un champ électrique, qui est une grandeur physique capable d'exercer une force sur d'autres charges électriques. Celle-ci a une trajectoire décrivant une boucle fermée, son moment magnétique proportionnel au moment cinétique de la charge par un facteur gyromagnétique  $\gamma_0$  près, est donné par la relation suivante :

$\vec{\mu} = \gamma_0 \vec{L}$  tel que  $\gamma_0 = q/2m$ , où  $\vec{\mu}$  est le moment magnétique,  $q$  la charge en mouvement,  $m$  la masse et  $\vec{L}$  le moment cinétique de la charge. La relation de proportionnalité reste vraie en mécanique quantique.

Dans la matière, le noyau et les électrons sont des charges électriques possédant un spin. Mais, comme le proton est environ 2000 fois plus lourd que l'électron, il en résulte que le moment magnétique nucléaire est inférieur au moment magnétique porté par les électrons. A un facteur gyromagnétique près, les moments magnétiques présents dans un matériau sont donc essentiellement dus aux électrons.

Dans le cas d'électrons localisés, on a alors les moments magnétiques portés par un atome. On appelle aimantation  $\vec{M}$  la résultante de tous les moments magnétiques  $\vec{\mu}$  par unité de volume  $V$ , présents dans le matériau est donné par la relation :

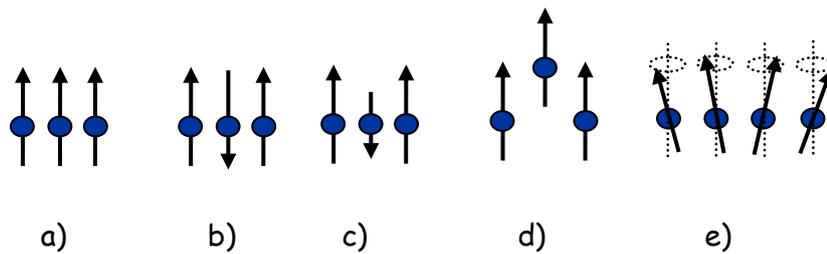
$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum_i \vec{\mu}_i.$$

Connaitre les propriétés magnétiques d'un matériau revient en théorie à prendre en compte l'Hamiltonien du système et à en déduire les niveaux d'énergie du système ainsi que leur densité électronique.

## 2. Origine du magnétisme

### 2.1 Ordre magnétique spontané

Par ordre magnétique spontané, les moments magnétiques microscopiques ont tendance à s'orienter dans un certain sens sans l'intervention d'un champ magnétique extérieur. On distingue alors plusieurs types d'ordre :



**Figure.1** Les différents arrangements des moments magnétiques dans la matière

- a) Le ferromagnétisme où les moments magnétiques sont tous orientés dans le même sens ;
- b) L'antiferromagnétisme où les moments magnétiques voisins sont orientés dans des sens opposés ;
- c) Le ferrimagnétisme qui est un cas particulier de l'antiferromagnétisme où les moments magnétiques opposés n'ont pas la même norme ;
- d) Les systèmes frustrés ou verres de spin où les moments magnétiques ne peuvent pas tous être dans une orientation d'énergie minimale ;
- e) L'Hélimagnétisme où les moments magnétiques sont désorientés d'un certain angle.

## 2.2 Origine du ferromagnétisme

### 2.2.1 Champ moléculaire de Weiss

Lorsqu'on parle d'ordre magnétique, on l'assimile à l'orientation de petits aimants les uns par rapport aux autres. Cependant, l'énergie dipolaire mise en jeu entre deux moments magnétiques de l'ordre de  $10^{-4} eV$  est trop faible pour expliquer l'ordre ferromagnétique à une température  $T$  ambiante sachant que l'énergie thermique atteint environ  $2.6 \cdot 10^2 eV$ . En effet, il faut introduire une autre interaction pour expliquer le fait que les spins s'orientent les uns par rapport aux autres.

### 2.3 Interprétation classique du ferromagnétisme

Afin d'expliquer la tendance de certains métaux de transition (Fe, Co, Ni) à présenter une aimantation spontanée en l'absence de champ magnétique en dessous d'une température critique appelée température de Curie ( $T_c$ ), Weiss a fait l'hypothèse de l'existence d'une interaction favorisant l'alignement des moments magnétique des différents atomes à laquelle

il a donné le nom de *champ moléculaire* [1]. L'hypothèse du champ moléculaire a ainsi permis à Weiss de retrouver l'ensemble des propriétés essentielles des ferromagnétiques (aimantation spontanée, transition de phase vers un état paramagnétique).

La théorie du champ moléculaire permet d'expliquer une grande partie des propriétés magnétiques des solides, la variation de l'aimantation spontanée en fonction de la température et en particulier sa disparition au-dessus de cette température critique. C'est également la première théorie qui a permis d'expliquer le comportement des ferromagnétiques et des ferrimagnétiques introduisant la notion d'ordre magnétique. A une température proche de  $T_c$ , la susceptibilité  $\chi$  est infinie et pour un champ  $H \rightarrow 0$  l'aimantation reste finie. Donc, le système s'aimante spontanément sous l'effet d'un champ moléculaire même en l'absence d'un champ extérieur. Cependant, le comportement détaillé donné par la théorie de champ moyen n'est pas en accord avec l'expérience en particulier l'évolution de l'aimantation  $M$  et la susceptibilité  $\chi$  proche de  $T_c$  est mal reproduite à basse température, ceci est dû à l'excitation collective des spins dite couramment onde de spin. La faiblesse de cette théorie est qu'elle ne prend pas en considération la nature quantique des spins, l'anisotropie locale et la dimensionnalité du système.

### 3. L'onde de spin

L'énergie nécessaire pour inverser le spin d'un électron est donnée par l'interaction d'échange. Ceci est vrai dans le cas du ferromagnétisme de moments localisés. Il existe d'autres excitations d'énergie inférieure à celle associée au renversement d'un spin, ce sont les ondes de spin [2]. Ainsi les magnons sont des modes d'excitation ou ondes de spin. Ces excitations sont en outre associées à des mouvements de spins autour d'excitations transverses car le spin tourne dans le plan perpendiculaire à cette direction privilégiée. Pour s'assurer de la stabilité de la structure magnétique, nous avons vu qu'il fallait calculer l'aimantation moyenne du système sur chaque site.

Dans un milieu ferromagnétique isotrope, en dessous de la température de Curie, ou dans un milieu antiferromagnétique en dessous de la température de Néel, les moments magnétiques des atomes sont alignés parallèlement ou antiparallèlement. On dit qu'il y a brisure spontanée de la symétrie de rotation. Le théorème de Goldstone implique la présence de modes d'excitation de basse énergie [3]. Les magnons dans le cas ferromagnétique peuvent être visualisés comme une rotation périodique des moments magnétiques autour de la

direction moyenne de l'aimantation. A basse température, ces magnons se comportent comme des bosons possédant des propriétés de symétrie identiques par rapport à l'échange de particules. Considérées en physique statistique comme des particules de spin entier et obéissent à la statistique de Bose-Einstein, cette statistique implique une transition de phase à basse température.

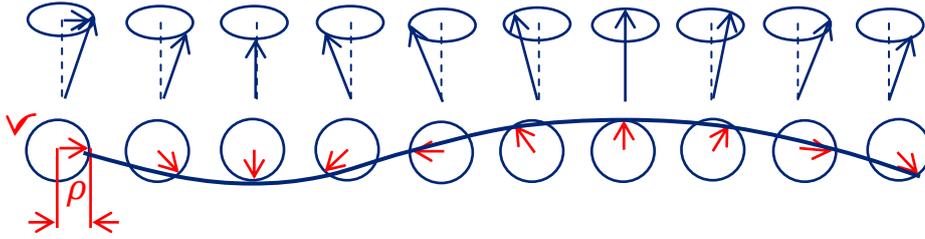


Figure 2 La création d'une onde de spin

### 3.1 Théorie de l'onde de spin

Rappelant d'un point de vue semi-classique, la description des excitations magnétique des systèmes infinis. Ainsi par la suite décrivant le formalisme quantique pour déterminer les énergies des ondes de spin.

#### 3.1.1 Interprétation semi-classique du ferromagnétisme

- Relation de dispersion

Une démonstration classique de la relation de dispersion des magnons est une approche unidimensionnelle des ondes de spin sur une chaîne linéaire de spins arrangés de façon ordonnée et uniforme [4].

Chaque site est lié à son voisin par l'énergie  $E = -2J \sum_{n=1}^N \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1}$ , ce qui se traduit par la relation :

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

On rappelle pour l'équation du moment cinétique  $(d\vec{L}/dt) = \vec{M} \wedge \vec{B}$

$$\vec{M} = -g\mu_B \vec{S}_n, \quad (2)$$

$$\vec{B} = \left(-\frac{2J}{g\mu_B}\right) (\vec{S}_{n-1} + \vec{S}_{n+1}), \quad (3)$$

Où  $g$  facteur de Landé,  $J$  la constante d'échange ( $J > 0$ ) pour le cas ferromagnétique et  $\mu_B$  le magnéton de Bohr.  $\vec{M}$  est le moment magnétique au site  $n$  et le couplage d'un spin à ses voisins peut se décrire comme l'action d'un champ magnétique  $\vec{B}$  agissant sur le spin du site  $n$ . Ainsi l'équation différentielle liant le mouvement du spin  $S_n$  à celui de ses voisins s'écrit :

$$\hbar \left( \frac{d\vec{S}_n}{dt} \right) = 2J\vec{S}_n \wedge (\vec{S}_{n+1} + \vec{S}_{n-1}). \quad (4)$$

Les composantes du vecteur spin  $\vec{S}$  sont respectivement  $(S^x, S^y, S^z)$  ainsi en coordonnées cartésiennes on obtient :

$$\hbar \left( \frac{dS_n^x}{dt} \right) = 2J[S_n^y(S_{n-1}^z + S_{n+1}^z) - S_n^z(S_{n-1}^y + S_{n+1}^y)],$$

$$\hbar \left( \frac{dS_n^y}{dt} \right) = 2J[S_n^z(S_{n-1}^x + S_{n+1}^x) - S_n^x(S_{n-1}^z + S_{n+1}^z)],$$

$$\hbar \left( \frac{dS_n^z}{dt} \right) = 2J[S_n^x(S_{n-1}^y + S_{n+1}^y) - S_n^y(S_{n-1}^x + S_{n+1}^x)],$$

ces équations n'étant pas linéaires, pour cela on fait l'approximation des petites oscillations,  $S_n^x, S_n^y \ll S$  permet de lineariser le système d'équation en considérant  $S_n^z = S$ . Ainsi en négligeant les termes faisant intervenir le produit de  $S_n^x$  et  $S_n^y$ , on obtient les équations suivantes :

$$\begin{cases} \frac{dS_n^x}{dt} = \frac{2J}{\hbar} S [2S_n^y - S_{n-1}^y - S_{n+1}^y] \\ \frac{dS_n^y}{dt} = -\frac{2J}{\hbar} S [2S_n^x - S_{n-1}^x - S_{n+1}^x] \\ \frac{dS_n^z}{dt} = 0 \end{cases} \quad (5)$$

On cherche les solutions des équations (5) en faisant le choix d'ondes planes progressives de la forme :

$$\begin{cases} S_n^x = u e^{i(pka_0 - \omega t)} \\ S_n^y = v e^{i(pka_0 - \omega t)} \end{cases} \quad (6)$$

avec  $u$  et  $v$  des constantes,  $a_0$  le paramètre du réseau,  $\omega$  la pulsation de l'onde,  $k$  le vecteur d'onde et on injecte les solutions choisies dans les équations (6) dans (5), on obtient alors :

$$\begin{cases} -i\omega u = + \left(\frac{4JS}{\hbar}\right) [1 - \cos(ka)]v. \\ -i\omega v = - \left(\frac{4JS}{\hbar}\right) [1 - \cos(ka)]u. \end{cases} \quad (7)$$

Les fonctions (6) admettent des solutions non triviales à la condition que le déterminant soit nul.

$$\begin{vmatrix} i\omega & (4JS/\hbar)(1 - \cos(ka)) \\ -(4JS/\hbar)(1 - \cos(ka)) & i\omega \end{vmatrix} = 0 \quad (8)$$

Ce qui permet d'obtenir la relation de dispersion des ondes de spin progressive dans le cas de cette chaîne linéaire ferromagnétique. Elle est de type:

$$E = \omega\hbar = 4JS(1 - \cos(ka)) \quad (9)$$

Aux grandes longueurs d'onde  $\lambda = 2\pi/k$ , si  $ka \ll 1$  alors  $E(k) = 2JSa^2k^2$ . Ainsi, la fréquence est proportionnelle à  $k^2$ , ce qui se traduit par la relation :

$$\hbar\omega_k = 2JSa^2k^2 \quad (10)$$

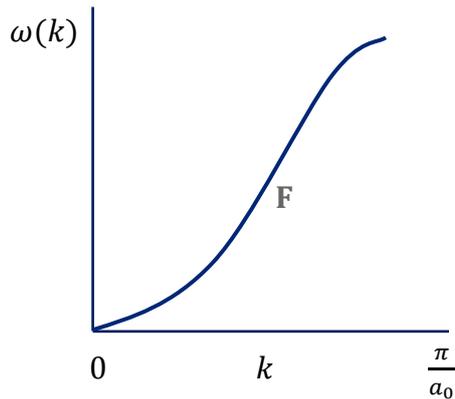


Figure 3. La courbe de dispersion de l'onde de spin d'une chaîne linéaire ferromagnétique

La notion d'onde de spins a été introduite par Bloch [5], qui a montré que les excitations de basse énergie de l'Hamiltonien de Heisenberg sont des états dans lesquels le renversement d'un spin est délocalisé sur tout le réseau ; l'onde de spin est caractérisée par

son vecteur d'onde  $\vec{k}$  et son énergie  $E(\vec{k}) = \hbar\omega(\vec{k})$ . La relation de dispersion des ondes de spins est  $E(\vec{k}) \sim k^2$ .

## 3.2 Principale conséquence de l'existence des excitations magnétiques

### 3.2.1 Quantification de l'onde de spin

Les ondes de spin étant des bosons, la probabilité d'occupation d'un état excité est donnée par la distribution de Bose-Einstein. L'énergie associée à ces oscillations dépend du vecteur d'onde  $k$  et de l'onde de spin. La quantification des ondes de spin s'effectue de la même manière que les phonons, l'énergie associée à un mode de fréquence  $\omega_k$  est transportée par soit disant des quasi-particules appelées magnons dont l'énergie à (1D) est donnée par la

relation  $\varepsilon_k = \left(n_k + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_k$  ou encore

$$\varepsilon_k = 4JS(1 - \cos(ka)) = \left(n_k + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_k. \quad (11)$$

A l'équilibre thermique, la population moyenne  $n_k$ , régis par la dispersion de Planck est donnée par la relation :

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_k}{k_B T}\right) - 1}, \quad (12)$$

qui permet alors de calculer la variation de l'aimantation par rapport à l'aimantation à saturation ainsi que la chaleur spécifique.

Le nombre total des magnons excités à la température T est ainsi défini par:

$$\sum_k \langle n_k \rangle = \int_0^\infty d\omega D(\omega) \langle n(\omega) \rangle. \quad (13)$$

$D(\omega)$  est la densité de nombre de magnons associés à une fréquence comprise entre  $\omega$  et  $(\omega + d\omega)$  l'intégration doit être faite sur toutes les valeurs de  $k$  prises dans la 1er zone de Brillouin. Le nombre de modes à trois dimensions (3D) est le nombre de modes par unité de volume :

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi k^3, \quad (14)$$

par conséquent, le nombre de magnons  $D(\omega)d\omega$  ayant une fréquence comprise entre  $\omega$  et  $d\omega$  est exprimé par la relation :

$$D(\omega)d\omega = \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 \frac{dk}{d\omega} d\omega, \quad (15)$$

de l'équation (2), on déduit que  $k = \left(\frac{\hbar}{2JSa^2}\right)^{\frac{1}{2}}\omega^{\frac{1}{2}}$ , or  $\hbar\omega_k = 2JSa^2k^2$  ceci conduit à :

$$D(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \left(\frac{\hbar}{2JSa^2}\right)^{\frac{3}{2}}\omega^{\frac{1}{2}}, \quad (16)$$

$$\sum_k \langle n_k \rangle = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{\hbar}{2JSa^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\omega}}{e^{\frac{\hbar\omega_k}{k_B T}} - 1} d\omega, \quad (17)$$

$$\text{Avec } \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1} dx = 0.0587(4\pi^2),$$

$$\sum_k \langle n_k \rangle = 0.0587 \left(\frac{k_B T}{2JS}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{a^3}.$$

### 3.2.2 L'aimantation

La variation d'aimantation due à l'excitation thermique des ondes de spins est donnée par :

$$\Delta M(T) \sim \int_0^{+\infty} N(E) \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{E}{k_B T}\right) - 1} dE \sim (k_B T)^{\frac{3}{2}} \int_0^{+\infty} N(E) \cdot \frac{\sqrt{x}}{\exp(x) - 1} dx \sim T^{\frac{3}{2}}, \quad (18)$$

en introduisant les équations (10) et (17) dans l'équation (18) on obtient alors la relation suivante:

$$M(0) - M(T) = g\mu_B \sum_k \langle n_k \rangle = \frac{g\mu_B}{8\pi^3} \left(\frac{\hbar}{2JSa^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\omega}}{e^{\frac{\hbar\omega_k}{k_B T}} - 1} d\omega, \quad (18')$$

$$M(T) = M(0) - \frac{N g\mu_B}{8\pi^3} \left(\frac{T k_B}{2JS}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1} dx,$$

$$M(T) = M(0) \left[1 - \gamma \left(\frac{T k_B}{2JS}\right)^{\frac{3}{2}}\right] \sim T^{\frac{3}{2}}.$$

### 3.2.3 La chaleur spécifique $C_v$

La chaleur spécifique provenant des magnons est :

$$C_v = \frac{\partial}{\partial T} \int_0^\infty \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar\omega(k)}{e^{\frac{\hbar\omega_k}{k_B T}} - 1},$$

$$\int_0^\infty \frac{u^4}{e^{u^2} - 1} du = 3\sqrt{\pi}\zeta\left(\frac{5}{2}\right),$$

$$C_v = \frac{k_B N}{\pi^2} \frac{15}{8} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \left(\frac{k_B T}{2JS}\right)^{\frac{3}{2}} = 0.113 k_B N \left(\frac{k_B T}{2JS}\right)^{\frac{3}{2}}.$$

Sachant que  $\frac{15}{8\pi^2} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) = 0.113$  pour une structure cubique simple (cs).

## 3.3 Théorie quantique du ferromagnétisme

### 3.3.1 L'interaction d'échange de Heisenberg

La véritable nature du ferromagnétisme a été révélée par Heisenberg. L'énergie d'interaction entre deux atomes contient en plus du terme classique, un terme non classique appelé " énergie d'échange ". Cette interaction est due à la répulsion coulombienne entre deux électrons combinée au principe d'exclusion de Pauli et présenté par la relation :

$$\mathcal{H}\psi = E\psi \tag{19}$$

Où  $\mathcal{H}$  l'Hamiltonien a deux électrons et le terme d'interaction de coulomb s'écrit :

$$\mathcal{H} = h_0(r_1) + h_0(r_2) + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \tag{20}$$

Où le problème à un électron peut être résolu :

$$h_0(r)\phi_a(r) = \epsilon_a\phi_a(r),$$

$$\langle\phi_a(r)|\phi_b(r)\rangle = \delta_{ab} \tag{21}$$

Or, la fonction d'onde s'écrit comme le produit tensoriel d'une fonction orbital  $f(r) = \phi_a(r)\phi_b(r)$  dépendant des positions et d'une fonction d'onde de spin  $\chi_{\uparrow(\downarrow)}$  up ou down.

Nous pouvons choisir une combinaison linéaire de telle sorte à avoir une valeur définie de spin total  $S$  et de  $S^z$  [6]. On peut construire 4 états  $|S, M_s\rangle$  suivants :

L'état de spin  $S = 0$  (noté état singulet) change de signe lorsqu'on permute le spin des 2 électrons. Par contre les 3 états de spin  $S = 1$  (noté état triplet) restent inchangés. Le principe de Pauli suppose que la fonction d'onde  $\psi = \phi(r_1, r_2)|S, M_s\rangle$ .

L'état singulet est l'état de spin  $S = 0$ , antisymétrique dans l'échange des deux électrons est s'écrit :

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_2 - \psi_3]. \quad (22)$$

Les trois états triplets sont décrits par l'état de spin  $S = 1$ . Ils sont symétriques dans l'échange des deux électrons. Leur configuration est présentée sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} |1,1\rangle &= \psi_1 \\ |1,-1\rangle &= \psi_4 \\ |1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_2 + \psi_3] \end{aligned} \quad (23)$$

Compte tenu du principe de Pauli, les électrons étant des fermions. La fonction d'onde  $\psi$ , donnée comme suit :

$$\psi = \phi(r_1, r_2)|S, M_s\rangle, \quad (24)$$

change de signe lorsqu'on permute les électrons. Cela signifie que la fonction d'onde spatiale, associée à l'état singulet  $\phi_{sg}$ , doit être symétrique et que la fonction d'onde associée à l'état triplet  $\phi_{tp}$  doit être antisymétrique.

Les valeurs propres  $\epsilon_{sg}$  et  $\epsilon_{tp}$  de  $\psi_{sg}$  et  $\psi_{tp}$  seront différentes des états fondamentaux, soit pour  $S = 0$  ou  $S = 1$ .

### 3.3.2 L'écart d'énergie entre les états triplet ( $\epsilon_{tp}$ ) et singulet ( $\epsilon_{sg}$ )

L'écart d'énergie  $\epsilon_{sg} - \epsilon_{tp}$  permet de connaître dans quelle mesure l'alignement antiparallèle des spins électronique ( $S = 0$ ) est plus favorable à l'alignement parallèle

( $S = 1$ ). Cette différence d'énergie, dépendant que des termes électrostatiques dont l'ordre est de ( $\sim 1\text{eV}$ ) est la source de l'interaction magnétique entre les ions [7].

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_{\uparrow}(s_1) \chi_{\uparrow}(s_2) [\phi_a(r_1) \phi_b(r_2) + \phi_a(r_2) \phi_b(r_1)]; \\
\psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{\downarrow}(s_1) \chi_{\uparrow}(s_2) \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) - \chi_{\uparrow}(s_1) \chi_{\downarrow}(s_2) \phi_b(r_1) \phi_a(r_2)]; \\
\psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{\uparrow}(s_1) \chi_{\downarrow}(s_2) \phi_a(r_1) \phi_b(r_2) - \chi_{\downarrow}(s_1) \chi_{\uparrow}(s_2) \phi_b(r_1) \phi_a(r_2)], \\
\psi_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_{\downarrow}(s_1) \chi_{\downarrow}(s_2) [\phi_a(r_1) \phi_b(r_2) - \phi_a(r_2) \phi_b(r_1)],
\end{aligned} \tag{25}$$

On définit l'intégrale de coulomb comme suit :

$$C_{ab} = \int dr_1 \int dr_2 [|\phi_a(r_1)|^2 \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} |\phi_b(r_2)|^2] \tag{26}$$

On définit l'intégrale d'échange comme suit :

$$J_{ab} = \int dr_1 \int dr_2 [\phi_a^*(r_1) \phi_b(r_1) \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \phi_b^*(r_2) \phi_a(r_2)], \tag{27}$$

Les expressions des éléments de la matrice de l'interaction de coulomb s'écrivent :

$$\begin{aligned}
\langle \psi_1 | \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} | \psi_1 \rangle &= C_{ab} - J_{ab}, \\
\langle \psi_2 | \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} | \psi_2 \rangle &= C_{ab}, \\
\langle \psi_2 | \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} | \psi_3 \rangle &= -J_{ab},
\end{aligned} \tag{28}$$

On retrouve alors la matrice de l'Hamiltonien

$$(\epsilon_a + \epsilon_b) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} (C_{ab} - J_{ab}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_{ab} & -J_{ab} & 0 \\ 0 & -J_{ab} & C_{ab} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (C_{ab} - J_{ab}) \end{pmatrix} \tag{29}$$

L'état triplet à trois solutions dégénérées :

$$\epsilon_{sg} = \epsilon_a + \epsilon_b + C_{ab} - J_{ab} \tag{30}$$

L'état singulet à une seule solution :

$$\epsilon_{tp} = \epsilon_a + \epsilon_b + C_{ab} + J_{ab} \quad (31)$$

Se qui fait que la variation de  $\epsilon_{sg}$  et de  $\epsilon_{tp}$  s'écrit :

$$-2J_{ab} = \epsilon_{sg} - \epsilon_{tp} \quad (32)$$

Comme  $(\epsilon_{sg} - \epsilon_{tp})$  est un élément de la matrice de l'Hamiltonien  $\mathcal{H}$  entre deux états qui ne diffèrent que par l'échange des coordonnées des deux électrons, on dit que la différence d'énergie singulet-triplet est due à un terme d'échange et du point de vue d'interaction magnétique on parle d'interaction d'échange [7].

#### 4 Interaction d'échange de Heisenberg

On considère généralement le cas de deux électrons d'une configuration  $(3d^2)$ , le calcul quantique traduit de façon satisfaisante l'interaction de coulomb, mais également, comme conséquence du principe d'exclusion de Pauli et du caractère antisymétrique que doit présenter la fonction d'onde, un terme supplémentaire dit d'énergie d'échange. Cette énergie n'a pas la même valeur suivant que les spins  $S_1$  et  $S_2$  des deux électrons soient orientés dans la même direction ou dans des directions opposées. Il apparaît un très fort couplage spin-spin, nommé couplage d'échange de Heisenberg [8].

Dans le cas des interactions magnétiques, on exprime la dépendance du spin des états singulet et triplet en introduisant un Hamiltonien dit Hamiltonien de spin, dépendant des spins  $S_1$  et  $S_2$  des électrons 1 et 2 de l'élément  $(3d^2)$  [6]. Afin de définir cet Hamiltonien, on pose :

$$S^2 = (S_1 + S_2)^2 - 1 = \frac{1}{2} + 2S_1 \cdot S_2$$

Sachant que le spin total de configuration  $(3d^2)$  s'écrit :

$$S = S_1 + S_2$$

$$S^2 = S(S + 1) = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) = \frac{3}{4}$$

le cas état singulet ( $S^2 = 0$ ), implique que  $S_1 \cdot S_2 = -\frac{3}{4}$ .

dans le cas état triplet ( $S^2 = 2$ ), cela implique que  $S_1 \cdot S_2 = \frac{1}{4}$ .

$$\begin{aligned} \text{Ainsi l'Hamiltonien } \mathcal{H} = H^{spin} &= \frac{1}{4}(\epsilon_{sg} + 3\epsilon_{tp}) - (\epsilon_{sg} - \epsilon_{tp})S_1 \cdot S_2 \\ \mathcal{H} &= \frac{1}{2}(\epsilon_{sg} + \epsilon_{tp}) - \frac{1}{2}(\epsilon_{sg} - \epsilon_{tp})(2S_1 \cdot S_2 + \frac{1}{2}) \end{aligned}$$

$$\mathcal{H} = \text{const} - 2J_{ab}S_1 \cdot S_2$$

On généralise l'interaction d'échange pour le réseau et on peut l'écrire comme suit :

$$H^{spin} = -\sum_{ij} J_{ij} S_i \cdot S_j.$$

Cet Hamiltonien possède la valeur propre  $\epsilon_{sg}$  pour l'état singulet et  $\epsilon_{tp}$  pour l'état triplet.

$$H^{spin}\psi_{sg} = H^{spin}\phi_{sg}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|0, 0\rangle$$

$$H^{spin}\psi_{tp} = H^{spin}\phi_{tp}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|1, M_s\rangle$$

On peut écrire  $H^{spin} = -JS_1 \cdot S_2$  sachant que  $J = \epsilon_{sg} - \epsilon_{tp}$ , avec  $J > 0$  pour les spins parallèles et  $J < 0$  pour les spins antiparallèle.

Dans le cas d'un système formé d'un ensemble d'ions magnétiques, on généralise en sommant sur les paires d'ions.

$$H^{spin} = -\sum_{ij} J_{ij} S_i \cdot S_j \tag{33}$$

$H^{spin}$  est dit Hamiltonien de Heisenberg et les  $J_{ij}$  sont les constantes d'interaction d'échange et  $i, j$  étant les indices des sites du réseau ferromagnétique.

## 4. Interprétation quantique de l'excitation magnétique

### 4.1 Introduction

Dans le cas ferromagnétique, F. Bloch a montré qu'un magnon unique est un état propre exact du Hamiltonien de Heisenberg. Pour pouvoir traiter le cas d'un nombre

thermodynamique de magnons, il est nécessaire d'avoir recours à des approximations basées sur la seconde quantification.

La procédure de seconde quantification consiste à remplacer *les coefficients complexes* des modes de Fourier du développement du champ scalaire par des opérateurs abstraits :

- $\hat{a}_{\vec{k}}^+$ , appelé opérateur de création d'un quantum d'impulsion  $\hbar\vec{k}$ .
- $\hat{a}_{\vec{k}}$ , appelé opérateur d'annihilation d'un quantum d'impulsion  $\hbar\vec{k}$ .

Ces opérateurs obéissent, par définition, à la règle de commutation canonique :

$$[\hat{a}_{\vec{k}'}, \hat{a}_{\vec{k}}^+] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \hat{1}$$

le spin est un opérateur vectoriel, s'écris  $S = (S^x, S^y, S^z)$ .

On définit les opérateurs  $S^+$  et  $S^-$  par les relations suivantes :

$$\begin{cases} S^+ = S^x + iS^y \\ S^- = S^x - iS^y \end{cases}$$

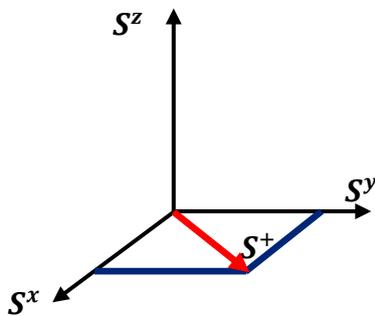


Figure4. La décomposition d'opérateur  $S^+$  en fonction de  $S^x$  et  $S^y$ .

Holstein et Primakoff [9] ont introduit une représentation des opérateurs de spin de la forme :

$$S^z = S - a^+ a$$

$$S^+ = S^x + iS^y = (2S - a^+ a)^{\frac{1}{2}} a = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a^+ a}{2S}\right)^{\frac{1}{2}} a$$

$$S^- = S^x - iS^y = a^+ (2S - a^+ a)^{\frac{1}{2}}$$

où  $a^+$  est l'opérateur de création de bosons, et  $a$  l'opérateur d'annihilation. En introduisant cette représentation, en développant les racines carrées en puissances de  $\frac{a^+a}{2S}$ , et en ne retenant que les termes quadratiques en  $a^+a$ , on obtient une approximation de l'Hamiltonien de Heisenberg, qui présente alors une solution formelle exacte. Celle-ci traduit l'existence de quasi-particules de type boson, appelées magnons ou ondes de spin, et qui ont physiquement le sens de fluctuations 'transverses' par rapport à la direction de l'aimantation. Holstein et Primakoff ont pu obtenir la relation de dispersion des magnons ferromagnétiques. Les termes négligés (d'ordre supérieur à  $\frac{1}{2S}$ ) décrivent des interactions magnons-magnons. Le développement de Holstein et Primakoff est valide dans une limite  $2S \gg 1$ .

$$\sqrt{2S} \left(1 - \frac{a^+a}{2S}\right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a^+a}{4S} - \dots\right)$$

Les interactions magnons-magnons ont été étudiées par F. J. Dyson [10]. Dyson a utilisé une autre représentation des ondes de spin différente de celle faite par Holstein et Primakoff. Il a séparé les interactions des ondes de spin en 2 catégories : les interactions cinématiques qui proviennent du fait que le spin d'un ion donné ne peut varier que entre  $-S$  et  $+S$ , et une interaction dynamique. Dyson a pu montrer que seule l'interaction dynamique est importante à basse température.

Dans ce travail, nous nous limiterons dans le cadre des basses températures à négliger l'interaction magnon-magnon. A cet effet, les approximations suivantes demeureront toujours valables dans le développement de ce mémoire.

$$S^z = S - a^+a$$

$$S^+ = \sqrt{2S}a$$

$$S^- = a^+\sqrt{2S}$$

## 4.2 Conséquences physiques des brisures de symétries

La présence d'une surface provoque une brisure de symétrie. En physique, la brisure spontanée de symétrie renvoie au fait que, sous certaines conditions, certaines propriétés de la matière ne semblent pas respecter les équations décrivant le mouvement des particules. On dit qu'elles n'ont pas les mêmes symétries. Cette incohérence n'est qu'apparente et ne signifie pas

que les équations soient fausses. Dans le cas du magnétisme, la brisure de symétrie de rotation entraîne l'apparition de magnons à basse température.

Lorsqu'une symétrie est brisée spontanément dans un système physique, il existe un nouveau paramètre, appelé paramètre d'ordre qui mesure l'importance de celle-ci. L'existence d'un paramètre d'ordre est à la base de la théorie de Landau des transitions de phase. Dans un état à symétrie brisée, il existe des forces qui tendent à imposer une valeur uniforme de ce paramètre dans tout le système.

## Références

- [1] W. Ashcroft, D. Mermin, *Solid-State Physics* (1976).
- [1] L. Landau, E Lifshitz, Phys. Z Sowjetunion 8, 153 (1935).
- [3] T.Holstein, H.P.Primakoff, Phys. Rev. 58, 1098 (1940).
- [4] C.Kittel, *Physique de l'état solide*, 5<sup>ime</sup> éd. 468-471(1969)
- [6] F.Mila, *Cours de physique des solides*, Ecole polytechnique fédérale de Lausanne (2003-2004).
- [5] F. Bloch, Z.Phys 61, 206 (1930).
- [6] C.Cohen-Tannoudji, B.Diu, F.Laloe, *Mécanique quantique*, (1986).
- [7] P. frobrich, P. J. Kuntz, *Many-body Green's function theory of Heisenberg films*, Physics Reports 432 223-304 (2006).
- [8] R. Pauthnet, *Théorie du Magnétisme*, traité genie électrique D175 (1983).
- [9] T. Holstein, H. P. Primakoff. Field Dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet . Phys. Rev. 58, 1098 (1940).
- [10] F. J. Dyson, Phys. Rev. 102, 1217 (1956)

Chapitre II : Méthodes analytiques de calculs d'excitations  
magnétiques de volume et de surface

## 1. Introduction

Un solide cristallin provient de la répétition périodique de la maille élémentaire et la configuration réelle de ces atomes est approximée par un modèle dit rigide. Or, dans le cas réel, les atomes ne sont pas fixes, mais vibrent autour de leurs positions d'équilibre.

Ces conditions sont connues sous le nom de condition périodique de Born-vonKarman [1]. Le développement de cette théorie, ainsi que ses nombreuses applications sont discutés avec détails dans les références standards : Born et Huang [2], Leibfried [3], Ludwig et Leibfried [4], Maradudin, Montroll et Weiss [5]. La théorie suscite un grand intérêt, elle permet de résoudre la relation de dispersion en volume, dans un solide cristallin et limite donc la difficulté numérique de résolution [6-10]. L'étude des magnons et leurs méthodes de calculs utilisés, sont basées sur les conditions de Born-vonKarman, semblables aux méthodes de calculs des phonons.

Jusqu'ici nous avons considéré un cristal semi-infini ; cependant il est nécessaire d'imposer des conditions aux limites périodiques pour la résolution de l'équation de mouvement. Néanmoins, le choix particulier de ses conditions ne se fera sentir que dans la zone de surface. Si le cristal est suffisamment grand et qu'on ne s'intéresse pas aux phénomènes de surface, alors ce choix aura un impact négligeable. L'arrangement géométrique des atomes à la surface d'un solide cristallin est en général différent de ce qu'il est en volume. Cela peut être expliqué qualitativement par la nécessité de minimiser l'excès d'énergie superficielle, produit par la coupure de liaisons lors de la création de la surface. Ce réarrangement peut être peu important et se manifeste par un léger déplacement des atomes perpendiculairement à la surface. Cette relaxation de surface est soit positive (augmentation de la distance), soit négative (diminution de la distance) selon le matériau et le type de face du cristal ainsi, dans le cas des métaux, les faces les plus rugueuses [cfc(110), cc(100) et cc(111)] présentent des relaxations négatives. On rencontre aussi de nombreux cas où le réarrangement est très important. Il produit non seulement un déplacement des atomes perpendiculairement à la surface, mais aussi dans la direction parallèle à celle-ci. On dit alors que la surface est reconstruite. Cette reconstruction produit une structure totalement différente de celle d'un plan du volume.

Pour les excitations magnétiques de surface l'absence de symétrie de translation dans la direction normale à la surface rend l'application de ces conditions impossibles. La brisure de symétrie suivant cette direction, sous certaines conditions et pour certaines propriétés de la

matière ne respecte pas les équations décrivant le mouvement des particules, ce qui nous conduit à reformuler une nouvelle approche théorique et donc à exploiter de nouvelles méthodes de calcul, donc une nouvelle physique permettant de raccorder les équations de précession de spin d'une couche atomique à une autre du système magnétique semi-infini. Ces méthodes permettent soit de résoudre des systèmes infinis d'équations, soit de limiter le nombre d'équations en surface avec une approximation valable [11]. Le calcul des états de magnons de surface est développé soit par la méthode de fonction de *Green*, soit par la méthode *SLAB* « matrice réduite », ou par la méthode de *Raccordement*.

## 2. les méthodes d'études des excitations magnétiques de surface

Les méthodes utilisées dans l'étude de l'onde de spin en surface sont la méthode *SLAB*, la méthode de fonction de *GREEN* et la méthode de raccordement utilisée dans ce travail.

### a. Méthode de diagonalisation.

- La méthode *SLAB* ou méthode de diagonalisation directe de matrices réduites introduite par Allen et al [12], consiste à limiter les plans du cristal semi-infini à un nombre fini de plans atomiques périodiques, donnant lieu à deux surfaces limites.

### b. Méthode de Fonction de *Green*.

- La méthode de fonctions de *GREEN* est introduite par Lifshitz et Rosenzweig [13] pour étudier les modes localisés souvent utilisés comme une technique de référence pour déterminer les états localisés d'excitations magnétiques de surface [14-21]. Cette méthode consiste à créer un réseau semi-infini à partir d'un réseau infini, en annulant les interactions entre les atomes situés de part et d'autre du plan bissecteur de deux plans atomiques successifs. Cette modification a un effet sur la dynamique des spins, interprété comme une perturbation transformant la matrice dynamique  $D_s$  du système magnétique en somme de deux matrices  $D_s = D_v + D_p$  où  $D_v$  est la matrice de volume et  $D_p$  la matrice de perturbation.

### c. la méthode de raccordement

Il existe deux sortes de mode d'excitations magnétiques pour un réseau semi-infini [22] :

- Bulk modes ou les modes de volume décrits comme la sommation de tous les modes d'ondes planes d'un réseau considéré comme étant infini et soumis aux conditions de Born-vonKarman.
- Surface modes ou les modes de surface présentent des amplitudes qui décroissent au fur et à mesure que l'on s'enfonce dans le volume. Elles sont décrites comme la sommation d'ondes planes parallèles à la surface et représentent les modes évanescents et dans une direction normale à celle-ci. Le vecteur d'onde normal au plan limitant la surface présente une composante complexe. La description de l'amplitude de précession des spins parallèle à la surface évolue comme une fonction de vecteur d'onde à deux dimensions  $\vec{k}_{\parallel}$  dans le réseau réciproque du plan de surface.
- Le raccordement des états localisés de surface aux modes propageant de volume est obtenu en divisant le cristal semi-infini en trois régions :

1. La région de volume où les modes évanescents sont normaux à la surface, représentant tous les plans atomiques de  $n > 2$  ( $n$  est le rang du plan atomique), loin de portée d'interaction d'échange induits par la surface est caractérisée par la périodicité tridimensionnelle. Dans cette zone, les modes quantiques de volume sont comptabilisés.

2. La région de surface représentant les premiers plans atomiques du système semi-infini définissant ainsi la région de surface. Elle est caractérisée par une périodicité bidimensionnelle et une symétrie de translation planaire aussi par la portée des interactions et également par la spécificité des interactions modifiées parfois en surface.

3. La région de raccordement qui relie la région de volume à celle de la surface, permettant de raccorder analytiquement les ondes de spin évanescent de la région de volume avec les modes de surface.

### 3. Eléments théoriques de la méthode de raccordement

Les propriétés essentielles de la matrice dynamique engendrent la partie se rapportant au volume permettant de développer l'équation séculaire. Les racines de cette équation décrivent les courbes de dispersion des magnons de volume ainsi que la densité d'état projetée

en surface. Traitant ainsi la méthode de calcul des courbes de dispersion des magnons de surface.

### 3.1 Propriétés de symétrie et matrice dynamique

Pour un réseau tridimensionnel le vecteur de position peut-être décrit par la formulation suivante :

$$\vec{r} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad (1)$$

où les vecteurs  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  définissent la maille magnétique primitive et  $\vec{a}_1, \vec{a}_2$  les vecteurs décrivant la surface. Le réseau réciproque est généré par les vecteurs de base  $\vec{a}_x, \vec{a}_y, \vec{a}_z$ . La projection du réseau réciproque tridimensionnel sur les vecteurs de base  $(\vec{a}_x, \vec{a}_y)$  décrit un réseau réciproque (2D), lié à la surface. les couches atomiques du cristal semi-infini peuvent être alors décrites par  $n \geq 3$ . La région de surface s'étend donc de  $n = 0$  à  $n = s$  où  $s$  est déterminé par la portée des interactions d'échange et par la spécificité des interactions en surface.

Le vecteur définissant la position d'un atome  $q$  du réseau de la maille magnétique primitive est notée  $r(q)$  où  $U_{n(R)}$  est l'amplitude de l'onde de spin d'un atome appartenant au réseau magnétique situé à la position  $R$  dans le plan  $n$ .

En raison du caractère de périodicité bidimensionnelle (2D) du cristal semi-infini, les amplitudes des ondes de spin seront décrites par :

$$U_{n(R)} = \sum_{\vec{k}_{\parallel}} \exp(i \vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}). V(E, \vec{k}_{\parallel}, n). Q(E, \vec{k}_{\parallel}), \quad (2)$$

où  $Q(E, \vec{k}_{\parallel})$  est la représentation des opérateurs de création et d'annihilation de spin, associée aux magnons de vecteur de l'onde bidimensionnel  $\vec{k}_{\parallel}$  et d'énergie  $E$ . Les composantes  $V(E, \vec{k}_{\parallel}, n)$  déterminent le vecteur  $\vec{v}(E, \vec{k}_{\parallel})$  représentant le vecteur propre de la matrice dynamique  $D(\vec{k}_{\parallel})$  tel que :

$$[E - D(\vec{k}_{\parallel})]. \vec{v}(E, \vec{k}_{\parallel}) = 0, \quad (3)$$

cette équation traduit alors l'écriture des amplitudes de précession de spin liée au plan atomique  $n$  correspondant. Elle représente l'intérêt de traduire en termes d'équation du mouvement la transformation (3D)  $\rightarrow$  (2D).

Cette expression donne les équations de mouvement de spins.

$$E.v(n) = \sum_n D(\vec{k}_{\parallel}, n).v(n), \quad (4)$$

où la sommation portée sur chaque atome avec ses premiers et ses seconds voisins du même réseau. Pour  $n > s$ ,  $D(\vec{k}_{\parallel}, n)$  diminue pour des valeurs de  $n$  et représente le nombre maximal de couches atomiques liées aux interactions et à la surface et au volume.

Une étude par la théorie des groupes des propriétés de symétrie d'un cristal semi-infini développée par Tamine [23] montre que pour le cas des magnons, le champ d'amplitude des magnons  $(E, k_{\Gamma})$ , où  $\Gamma$  décrit sa représentation possède  $n(l, k_{\Gamma})$  composantes indépendantes. Les équations de mouvement (3) peuvent se réécrire alors en dehors d'une base cartésienne.

$$[E - D(k_{\Gamma})].v(E, k_{\Gamma}) = 0, \quad (5)$$

où  $D(k_{\Gamma})$  est hermitienne, elle possède les mêmes valeurs propres que  $D(k)$ .

### 3.2 Equation séculaire et propriétés des excitations magnétiques propageantes de volume

La région de surface qui définit les couches de  $n \geq 1$ , est remplacée par les couches de volume afin de construire un cristal périodique tridimensionnel.

De par cette considération, les équations (5) et (6) sont écrites en fonction de  $D(\vec{k}_{\Gamma})$  et  $v(E, \vec{k}_{\Gamma})$  au lieu de  $D(\vec{k})$  et  $v(E, \vec{k})$ .

Tinkham [31] montra qu'un opérateur translation du vecteur  $(-\vec{a}_z)$ , défini par  $T(-\vec{a}_z)$  et agissant sur le vecteur  $\vec{v}$ , permette d'écrire en volume la relation suivante :

$$T(-a_z).v(E, k_{\Gamma}) = \rho(-a_z).v(E, k_{\Gamma}) \quad (6)$$

où  $\rho(-\vec{a}_z)$  est le caractère d'une représentation unidimensionnelle de magnon. Cette analyse peut être alors étendue aux magnons. Aussi les composantes  $(n, \alpha)$  de  $T(-\vec{a}_z).\vec{v}$  sont égales à celles de  $\vec{v}(n-1, \alpha)$ , où  $\alpha$  représente alors l'indice de sommation sur les composantes  $n_{\Gamma}(\vec{k})$  du champ de l'amplitude de magnons dans les couches du volume.

On déduit alors de l'équation (6) que

$$\begin{aligned}
v(E, k_\Gamma, n, \alpha) &= C(E, k_\Gamma, \alpha) \cdot \rho^n(-\vec{a}_z) \quad \text{si} \\
v(E, k_\Gamma, n = 0, \alpha) &= C(E, k_\Gamma, \alpha)
\end{aligned} \tag{7}$$

Cette équation est insérée dans l'ensemble des  $n(k_\Gamma)$  équations (4) obtenues pour tout  $n > p$ . On obtient ainsi un système linéaire homogène de dimension  $n^2(k_\Gamma)$  en fonction des valeurs de  $C(\alpha)$ . Une solution non triviale (non commune) exige que le déterminant du système soit nul pour respecter la dynamique du système en volume

$$D_b(E, k_\Gamma, \rho) = 0. \tag{8}$$

La relation (8) définit une équation algébrique séculaire de degré  $2 \cdot n_e(k_\Gamma)$  en  $\rho$ . Pour une racine  $\rho$  de l'équation (8), les valeurs  $C(\alpha)$  correspondantes sont déterminées par la résolution d'un système avec la condition de normalisation,

$$\sum_{\alpha=1}^{n(k_\Gamma)} |C(\alpha)|^2 = 1. \tag{9}$$

Chacune des  $n(k_\Gamma)$  équations constituant le système linéaire homogène est une expression polynomiale de degré  $2 \cdot n_b$  en fonction de  $\rho$ .

En ordonnant correctement les valeurs de  $C(\alpha)$ , représentant les cofacteurs de la matrice dynamique du volume, on fait apparaître l'énergie  $E$ , seulement dans les éléments diagonaux de  $D_b$ . L'équation séculaire sera alors une expression polynomiale de degré  $n(k_R)$  en fonction de  $E$ .

L'équation (7) peut être réécrite dans la direction  $+a_z$ , de matrice similaire, en faisant agir l'opérateur translation  $T(a_z)$  sur  $v$ .

$$T(a_z) \cdot v(E, k_\Gamma) = \rho(a_z) \cdot v(E, k_\Gamma), \tag{10}$$

avec  $\rho(a_z)$  est une racine de l'équation séculaire (8) ; sachant que le caractère rattaché au produit des groupes de translation est égal à l'identité  $T(a_z)T(-a_z) = 1$ , alors on déduit que :

$$\rho(a_z)\rho(-a_z) = 1. \tag{11}$$

L'équation séculaire est alors identique si on remplace  $\rho$  par  $\rho^{-1}$ , autrement dit si  $\rho$  est une racine,  $\rho^{-1}$  l'est aussi. Elle peut être alors exprimée en une équation de degré  $n_e(k_\Gamma)$

en termes de  $\delta = (\rho + \rho^{-1})$ . Si  $D(k_\Gamma)$  est réelle, les racines complexes du déterminant de la matrice de volume  $D_b$  sont couplées ; chacune étant complexe conjuguée de l'autre.

Dans la bande passante en volume ; les magnons de symétrie  $\Gamma$  et de vecteur d'onde  $k$  sont caractérisés par la plus petite paire  $[\rho(E, k_\Gamma), \rho^{-1}(E, k_\Gamma)]$  des racines de l'équation (8), ce qui se traduit par  $|\rho| = |\rho^{-1}| = 1$ .

Cette condition impose alors de prendre

$$\rho^{\pm 1}(E, k_\Gamma) = \exp(\pm i k_z \cdot a_z). \quad (12)$$

Cette expression est caractéristique d'une onde plane où les signes  $\pm$  correspondent respectivement à une onde arrivant à la surface et repartant de celle-ci. L'équation (12) permet alors d'écrire la relation suivante :

$$\delta(E, k_\Gamma) = \rho(E, k_\Gamma) + \rho^{-1}(E, k_\Gamma) = 2 \cdot \cos(\vec{k}_z \cdot \vec{a}_z), \quad (13)$$

qui est aussi la relation de dispersion des magnons de volume avec la symétrie  $\Gamma$  le long de la direction  $\vec{b}_z$  de l'espace réciproque, quand  $\vec{k}_z \cdot \vec{a}_z$  varie de 0 à  $\pi$ . Par conséquent, il existe  $n(k_\Gamma)$  branches distinctes de magnons de volume de symétrie  $\Gamma$ .

### 3.3 Excitations magnétiques de surface

Les zones de surface sont définies par les régions d'énergie  $E$  où la densité d'état  $n_d(E, k_\Gamma)$  est nulle, c'est-à-dire  $n_d(E, k_\Gamma) = 0$ .

Les composantes du champ de l'amplitude de l'onde de spin sont déduites de l'équation (8)

pour  $n > h = p - B$  :

$$v(n, \alpha) = \sum_{i=1}^{n_l} R_i^l C(\alpha, i) \rho^n(E, k_\Gamma, i). \quad (16)$$

La sommation sur l'indice  $i$  s'effectue sur les  $n_l(k_\Gamma)$  racines  $\rho(i)$  de l'équation séculaire (8) pour lesquelles le module est inférieur à l'unité. Les racines dont le module est supérieur à 1, sont écartées car elles donnent lieu à des déplacements divergents. En insérant les équations (16) dans les équations du mouvement (4) avec  $n \leq p$ , on obtient un système linéaire homogène qui aura alors comme inconnues  $(\sum_{n=0}^h m(n, k_R))$ , les composantes du champ de précession des spins à la surface et  $n_l(k_\Gamma)$  coefficients de pondération  $R_i^l$ .

La dimension du système linéaire est alors égale à :

$$\sum_{n=0}^h m(n, k_{\Gamma}) + B.m(k_{\Gamma}) = \sum_{n=0}^p m(n, k_{\Gamma}) \quad (17)$$

Ce système n'a de solutions que si son déterminant est nul.

$$D_s(E, k_{\Gamma}) = 0, \quad (18)$$

les solutions vérifiant cette équation donneront lieu à un ensemble de point  $S(E, k_{\parallel})$ , dans l'espace réciproque bidimensionnel. Chaque point sera caractéristique d'un état d'excitation magnétique de surface et l'ensemble de ces points décriront la courbe de dispersion  $E_s(k_{\parallel})$ .

### 3.4 Illustrations des équations de continuité volume-surface

Pour un cristal ferromagnétique semi-infini avec un réseau de structure cubique simple dont l'axe de facile aimantation est (Oz) représenté dans le schéma.1.

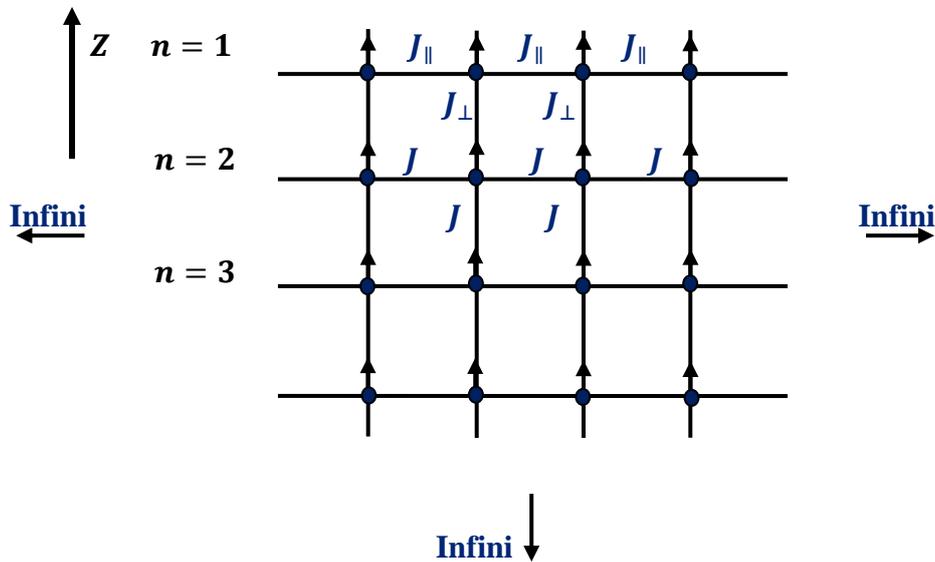


Figure.5 Schématisation d'une structure cubique simple semi-infinie.  
Configuration des paramètres d'échange et de la région de continuité.

- La première étape consiste à calculer la matrice dynamique de l'amplitude de l'onde de spin de volume par un formalisme mathématique mis en évidence. On obtient une matrice qui englobe les équations de mouvement de spin d'un système considéré

comme étant infini  $D_b(E, \vec{k})$ . Pour résoudre cette matrice, on doit satisfaire la condition :  $\det(D_b(E, \vec{k})) = 0$  avec  $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ .

- La deuxième étape consiste à retrouver les expressions des équations séculaires donnant les états évanescents de volume. Alors on réalise le changement suivant :

$$D_b(E, \vec{k}) \rightarrow D_b(E, \vec{k}_{\parallel}, \rho),$$

où  $\rho$  Représente la phase de l'onde de spin dans la direction  $z$  pour un modèle cubique semi-infini, sachant que  $\vec{k}_{\parallel}(k_x, k_y)$ ,  $\rho = e^{(ik_z a)}$  et  $\rho^{-1} = e^{-(ik_z a)}$  la condition de compatibilité  $\det(D_b(E, \vec{k}_{\parallel}, \rho)) = 0$  qui donne pour chaque donnée de  $(E, \vec{k}_{\parallel})$  une équation séculaire en  $\rho$  dont les solutions sont soit  $|\rho| = 1$  ou  $|\rho| < 1$ , caractérisent les différents modes de précession de spins en volume, suivant la direction normale à la surface. Les solutions de valeur  $|\rho| = 1$  correspondent à des modes itinérants des excitations magnétiques et celles vérifiant  $|\rho| < 1$  correspondent à des modes évanescents d'excitations magnétiques.

- La troisième étape consiste à déterminer les modes localisés associés au volume et à la surface en écrivant les équations de continuité volume-surface.  $J_{\parallel}$  est l'intégrale d'échange entre premiers voisins de la surface,  $J_{\perp}$  est l'intégrale d'échange entre premiers voisins, l'un situé sur le premier plan, l'autre situé sur le deuxième plan du réseau considéré et  $J$  l'intégrale d'échange limité aux premiers voisins de tous les plans de la région de volume décrite à partir du deuxième plan.
- 1) La détermination des états localisés de la surface de notre réseau semi-infini consiste à calculer d'abord les modes évanescents pour chaque valeur de  $(E, \vec{k}_{\parallel})$ . A l'aide d'un formalisme mathématique, on écrit l'équation de mouvement des spins pour chaque plan en fonction de l'amplitude de précession de l'onde de spin autour de la position d'équilibre. La matrice obtenue  $M_V(3 \times 4)$  est rectangulaire, appelée matrice en volume où le nombre d'inconnues est plus grand que le nombre d'équations.
  - 2) La méthode de raccordement permet de réduire le nombre d'inconnues en faisant créer une relation entre tous les atomes selon la direction normale à la surface. L'amplitude

de précession des spins autour de la position d'équilibre des atomes situés sur le plan  $n$  est décrite selon l'équation d'approximation suivante :

$$U(n) = \sum_{i=1}^{n_e} R_i \cdot C(\rho_i) \rho_i^{n-p} \quad (19)$$

$\rho_i$  : Les racines de l'équation séculaire satisfaisant la condition  $|\rho| < 1$  ;

$n_e$  : Le nombre de racine  $\rho_i$  ;

$R_i$  : Facteur de raccordement ;

$C(\rho_i)$  : Cofacteurs de la matrice dynamique en volume  $D_b(E, \vec{k})$ .

En connaissant les facteurs de phases  $\rho_i$  qui caractérisent les modes évanescents et les cofacteurs  $C(\rho_i)$ , issus de l'étude en volume, et l'application de l'équation précédente (19) nous permet de définir la matrice  $M_R(4 \times 3)$  rectangulaire appelée matrice de raccordement où le nombre d'équations est plus grand que le nombre d'inconnues.

- 3) On aboutit ainsi à une matrice carrée  $M_S(4 \times 4)$ , appelée matrice dynamique en faisant le produit des deux matrices rectangulaires  $M_V(3 \times 4)$  par  $M_R(4 \times 3)$ . Cette matrice caractérise le système d'équations homogène pour lequel la résolution de la relation de compatibilité  $\det(M_S(E, \vec{k}_{\parallel})) = 0$  aboutit à la détermination des états localisés de surface et donc des courbes de dispersions des états localisés de surface.

## Références

- [1] M. Born, T.vonKarman, Z.Physik 13 297 (1912).
- [2] M. Born, K.Hung, *Dynamical Theory of cristal Lattices*, (1954).
- [3] G. Leibfried, Handbuck der Physik, Spinger-Verlag, Vol.VII, Part I, 104 (1955).
- [4] G. Leibfried, W.Ludwig, *Solid State Physics*, Academic Press Inc., N. Y, Vol. 12, 275 (1961).
- [5] A. A. Maradudin, E. W. Montroll, G. H. Weiss, *Solid State Physics*, Academic Press Inc., N. Y (1963),
- [6] M. Born, J Oppenheimer, Ann. Phys. 84 457 (1927).
- [7] J .M. Ziman, *Principales of the Theory of solids*, University Press Cambridge 161 (1964).
- [8] C. Demangeat, D. L. Mills, Physical review B Vol. 16 N°1, 522-532 (1976).
- [9] E. Wigner, F. Seitz : Phys. Rev. 43, 804 (1933).
- [10] J. C. Slater: *Quantum Theory of molecules and Solids*, Vol. 2 (1965).
- [11] G. I. Stegemann, F. Nizolli, *Surface Excitations*, ed. V. M. Agranovich, R. Loudon (1984).
- [12] R. E. Allen, G. P. Alldredge and F. W. De Wette , Phys. Rev. B4, 1648 (1971).
- [13] I. M. Lifshitz, L. N. Rosenzweig, Zh. Ekperim. Fiz. 18, 1012 (1948).
- [14] J. N. B. De Moraes and W. Figueiredo, Phys. Rev. B, Vol 47. N° 14, 8695-8699 (1993)
- [15] D. L. Mills, A. A. Maradudin, J. Phys. Chem. Solids 28, 2245 (1967).
- [16] W. Z. Shen, Z. Y. Li, Phys. Letters A 168, 151-156 (1992).
- [17] W. Z. Shen, Z. Y. Li, Commun. Theor. Phys. Vol. 20, N°4, 433-438 (1993).
- [18] R. F. Wallis, A. A. Maradudin, Solid State Comm. 5, 89 (1967).
- [19] M. G. Cottam, J. Phys. Rev. B Vol. 45, 12898, (1992).
- [20] M. Sparks, Phys. Rev. B, Vol1. N°11, 4439-4443 (1970).
- [21] M. G. Cottam, D. J. Lockwood, *Light Scattering in Magnetic Solids* (1986).
- [22] M. Tamine, Thèse de doctorat, Université de Maine, (1994).
- [23] M. Tamine, Jour. Magn. *Magnetic Materials*. 153, 366 (1996).

### Chapitre III: Description de la dynamique de spin de volume et de surface en fonction des paramètres d'échange

## 1. Introduction

L'étude des propriétés des surfaces solides est un vaste domaine, qui a fait l'objet de recherches approfondies ces dernières années. Ce sujet peut être divisé, grosso modo, en trois domaines de recherche, (i) la chimie des réactions de surface, y compris la physisorption, chimisorption et catalyse, (ii) la structure et la reconstruction des surfaces et des couches de surface adsorbé [1,2], et (iii) la dynamique des surfaces, y compris les excitations et la diffusion de surface. Le dernier thème abordé comprend des phonons, les magnons, les électrons et les plasmons en états de surface, la diffusion d'électrons de basse énergie, et les propriétés thermodynamiques du réseau fini ainsi que les systèmes magnétiques.

Les ondes magnétiques de surface sont des excitations de la composante transversale de l'aimantation [3-6] dont l'amplitude est localisée près de la surface d'un système magnétiquement ordonné. Ces ondes sont caractérisées par un vecteur d'onde parallèle à la surface et aussi caractérisées par des constantes d'atténuation qui décrivent l'amplitude d'excitation en fonction de la distance de pénétration dans le cristal avec une direction parallèle à la surface.

Les ondes magnétiques de surface sont prédites par les deux théories microscopiques. Dans la théorie microscopique de Heisenberg, ces ondes de surface se produisent par ce que des changements abrupts dans les interactions d'échange et à proximité de la surface sont réalisés.

Wallis et al [7] ont montré que lorsqu'un cristal de type Heisenberg se termine par une surface libre, il peut exister des états localisés sur celle-ci. L'existence de ces modes dépend de la structure cristalline du réseau, des valeurs des intégrales d'échanges et de l'orientation de la surface. Fillopov [8] attribue l'existence des ondes de spin de surface à une variation de l'interaction d'échange de celle-ci. Ce travail repris par la suite par Wolfram et De Wames [9].

Le but de ce travail est de donner une étude préliminaire de certains des travaux sur la dynamique de surface des systèmes magnétiques. L'accent est essentiellement mis sur la nature des ondes de surface magnétiques. Nous avons fait un effort pour garder les développements mathématiques aussi simple que possible.

## 2. Aspect théorique

Le magnétisme résulte des corrélations coulombiennes entre électrons du cristal, c'est un effet de nature quantique, lié à l'antisymétrie des fonctions d'ondes et dans un système où les électrons sont localisés ; on le décrit par un hamiltonien de Heisenberg.

Une brisure de symétrie engendre nécessairement de nouvelles propriétés magnétiques. En effet dans la plupart des cas, les spins s'orientent, les uns par rapport aux autres, selon des directions bien précises. Ce choix est dicté par l'apparition, au dessous d'une température critique d'un champ moléculaire, produit par l'ensemble des spins présents dans le réseau.

Du point de vue dynamique l'existence du champ moléculaire se traduit par une précession des spins autour de la direction du champ avec une fréquence proportionnelle à son intensité. Dans le cristal, par suite du couplage entre spins, ces mouvements de précession ne restent pas localisés, mais se propagent sous forme d'une onde à travers le réseau. On dit souvent qu'il s'agit d'excitations transverses, car le spin tourne dans le plan perpendiculaire à la direction de l'aimantation moyenne.

### 2.1 Description générale du mouvement

- Excitation magnétique d'un ferromagnétique pur

Dans le contexte de l'Hamiltonien d'Heisenberg, les excitations magnétiques sont décrites en tenant compte de l'interaction aux premiers voisins et en négligeant l'interaction magnon-magnon. Dans cette configuration, l'Hamiltonien du système s'écrit comme suit:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - g\mu_b H \sum_i S_i^z.$$

On note  $g\mu_b H$  avec  $H$  étant la somme de deux champs  $H = H_I + H_{AN}$ ,  $H_I$  est le champ appliqué normal à l'axe de quantification ( $Oz$ ), et  $H_{AN}$  le champ d'anisotropie, introduit en général pour stabiliser le réseau de spin autour de l'axe préférentiel ( $Oz$ ).  $g\mu_b(H_I + H_{AN}) \sum_i \hat{S}_i^z$  est l'effet Zeeman,  $g$  étant le facteur de Lande,  $\mu_b$  le magnéton de Bohr.  $\sum_{ij}$  désigne la somme sur les paires des premiers voisins d'un réseau de Bravais.  $J_{ij}$  est l'intégrale d'échange isotrope.

On définit l'effet Zeeman comme étant l'interaction des moments magnétiques avec le champ magnétique extérieur, de cet effet l'aimantation tend à s'aligner suivant ce champ.

- Signe de l'interaction d'échange :

$J_{ij}$  est l'interaction d'échange isotrope. Son signe, peut être positive ou négative et pour les ferromagnétiques le couplage favorise le parallélisme des spins dans la même direction alors  $J_{ij} > 0$ .

- L'anisotropie des couplages :

Si les couplages  $J^x, J^y$  et  $J^z$  sont égaux, on parle de couplage isotrope sinon on parle de couplage anisotrope comme le modèle d'Ising ( $J^x = J^y = 0$ ) et le modèle XY ( $J^z = 0$ ).

- La portée des couplages :

On se limite souvent à des couplages entre premiers voisins, mais pour être plus performant dans les calculs on tient en compte l'interaction d'échange à plus long portée et il est parfois préférable de considérer que les spins sont des vecteurs de longueurs 1 non des opérateurs. C'est ce qu'on appelle la limite classique qui correspond à la limite  $S \rightarrow \infty$  du cas quantique.

- La valeur du spin :

Le spin d'un système magnétique peut prendre toutes les valeurs  $1/2$  entières. Certaines propriétés dépendent de façons décisives de la valeur de  $S$  et du modèle d'interaction considéré (Heisenberg, Ising, XY...).

- La dimensionnalité de l'espace :

La plupart des propriétés physiques sont absolument différentes suivant qu'on étudie le système de dimension 1, 2 ou 3.

### a. La limite classique

Les spins sont assimilés à des vecteurs classiques à 3 composantes ( $S^x, S^y, S^z$ ). Dans le cas ferromagnétique, l'énergie est minimale pour les configurations où tous les spins pointent dans la même direction puisqu'une telle configuration minimise indépendamment l'énergie totale.

## b. La limite quantique

Par analogie avec le cas classique, il faut construire l'équivalent quantique des états où les spins sont alignés. Le spin  $S$  est décrit par la théorie de l'onde de spin comme étant un opérateur à trois composantes cartésiennes dépendant du temps

$$\vec{S}_i \vec{S}_j = S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z.$$

Comme cela a été souligné précédemment, un modèle ferromagnétique de Heisenberg, déterminé par un réseau, est supposé semi-infini.

Afin d'obtenir les modes associés à l'onde de spin, nous définirons les opérateurs  $S_n^\pm$  par les expressions suivantes :

$$\begin{cases} S_n^+ = S_n^x + iS_n^y \\ S_n^- = S_n^x - iS_n^y \end{cases} \quad (15)$$

Alors :  $\vec{S}_i \vec{S}_j = \frac{1}{2} [S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+] + S_i^z S_j^z$  et l'Hamiltonien s'écrit:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \left[ \frac{1}{2} [S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+] + S_i^z S_j^z \right] - g\mu_b H \sum_i S_i^z.$$

Ensuite, nous calculons la fonction de commutation  $[S_n^+, \mathcal{H}]$  telle que :

$$\begin{aligned} [S_n^+, S_{n'}^z] &= -S_n^+ \delta_{nn'} \\ [S_n^-, S_{n'}^z] &= +S_n^- \delta_{nn'} \\ [S_n^+, S_{n'}^-] &= 2S_n^z \delta_{nn'} \end{aligned} \quad (16)$$

( $\delta_{nn'}$  désigne le symbole de Kronecker delta).

L'équation du mouvement  $i\hbar \frac{\partial S_k^+}{\partial t} = [S_k^+, \mathcal{H}]$  permettra de décrire le champ de précession de spin pour n'importe quel site  $n$  dans la région de volume. Son développement peut-être alors décrit selon:

$$[S_k^+, \mathcal{H}] = S_i^z S_j^+ \delta_{ki} + S_i^+ S_j^z \delta_{kj} - S_i^z S_j^+ \delta_{kj} - S_i^+ S_j^z \delta_{ki} - g\mu_b H S_i^+ \delta_{ki}$$

Or pour un atome du site (i), on a :  $\delta_{ki} = 1$  et  $\delta_{kj} = 0$

$$[S_k^+, \mathcal{H}] = (S_i^+ S_j^z - S_i^z S_j^+) - g\mu_b H S_i^+$$

## 2.2 Equation générale du mouvement de spin

L'équation générale du mouvement de spin devient :

$$i\hbar \frac{\partial S_i^+}{\partial t} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} (S_i^+ S_j^z - S_i^z S_j^+) + g\mu_b H \sum_i S_i^+,$$

a très basse température et on utilisant la Random Phase Approximation (RPA) [10] dite aussi l'approximation de phase aléatoire qui constitue à remplacer la valeur moyenne des fluctuations du spin par sa valeur quantique, l'opérateur de spin suivant l'axe (Oz) est remplacé alors par sa valeur  $S_i^z = S_j^z = \langle S^z \rangle = S$ . Cette approximation rejoint celle du champ moyen (MFA).

En multipliant l'équation du mouvement  $\sum_i e^{-\vec{k} \cdot \vec{r}_i}$ , l'équation du spin s'écrit alors :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_i e^{-\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \cdot S_i^+ = -\langle S^z \rangle \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \left( \sum_i e^{-\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \cdot S_j^+ - \sum_j e^{-\vec{k} \cdot \vec{r}_j} \cdot S_i^+ \right) + g\mu_b H \sum_i e^{-\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \cdot S_i^+, (1)$$

et en introduisant la transformée de Fourier et son inverse dans l'espace réel et l'espace réciproque écrite sous la forme suivante :

$$\begin{cases} S_i^+ = \sum_{\vec{k}} e^{-\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \cdot \alpha^+(\vec{k}, \omega) \\ \alpha_{\vec{k}}^+(\vec{k}, \omega) = \sum_i e^{-\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \cdot S_i^+ \end{cases} \quad (2)$$

Cette procédure permet de traduire les équations dans la base des  $\alpha^+(\vec{k}, \omega)$  qui caractérisent les déviations de spin dans l'espace des vecteurs d'onde  $\vec{k}$ , sachant que :

$$\sum_{ij} J_{ij} = J_{ij} z_{ij} \quad (z_{ij} \text{ représente le nombre de premier voisins } j \text{ du site } i).$$

A partir de ces considérations, l'équation de l'onde de spin s'écrit alors:

$$i\hbar \frac{\partial \alpha_{\vec{k}}^+}{\partial t} = -\frac{J_{ij} z_{ij}}{2} \langle S^z \rangle (\alpha_{\vec{k}}^+ \gamma_{ij} - \alpha_{\vec{k}}^+) + g\mu_b H \alpha_{\vec{k}}^+, \quad (3)$$

avec  $\gamma_{ij}(\vec{k}) = \frac{1}{z_{ij}} \sum_{ij} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i)}$  le facteur de phase.

Choisissons les solutions progressives de l'onde de spin en fonction du temps :

$$\alpha_k^+ = U_{n(R)}(k_{\parallel}, \omega). e^{-i\omega.t} \quad (3)$$

où  $U_{n(R)}(k_{\parallel}, \omega)$  est la représentation de l'amplitude de l'onde de spin de l'atome  $R$  dans le plans  $n$  en fonction vecteur d'onde  $k_{\parallel}$  parallèle à la surface.

En introduisant cette solution dans l'équation écrite ci-dessus (3), nous obtiendrons la nouvelle équation :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_{n(R)}(k_{\parallel}, \omega). e^{-i\omega.t} = - \left( \langle S^z \rangle \frac{1}{2} J_{ij} z_{ij} (\gamma_{ij} - 1) - \mu H \right) U_{n(R)}(k_{\parallel}, \omega). e^{-i\omega.t} \quad (4)$$

Ce qui nous donne :

$$\hbar\omega U_{n(R)}(k_{\parallel}, \omega) = - \left( \langle S^z \rangle \frac{1}{2} J_{ij} z_{ij} (\gamma_{ij} - 1) - \mu H \right) U_{n(R)}(k_{\parallel}, \omega). \quad (5)$$

Cette nouvelle équation décrit le mouvement des spins pour chaque plan en fonction de l'amplitude de précession autour de la position d'équilibre.

### 3. Modèles d'interactions d'échange en surface

On schématise les modèles proposés dans la figure.1 en indiquant les différentes couches proches de la surface relaxée pour le modèle.1 et la surface à relaxation étendue pour le modèle.2 ainsi que la zone de raccordement.

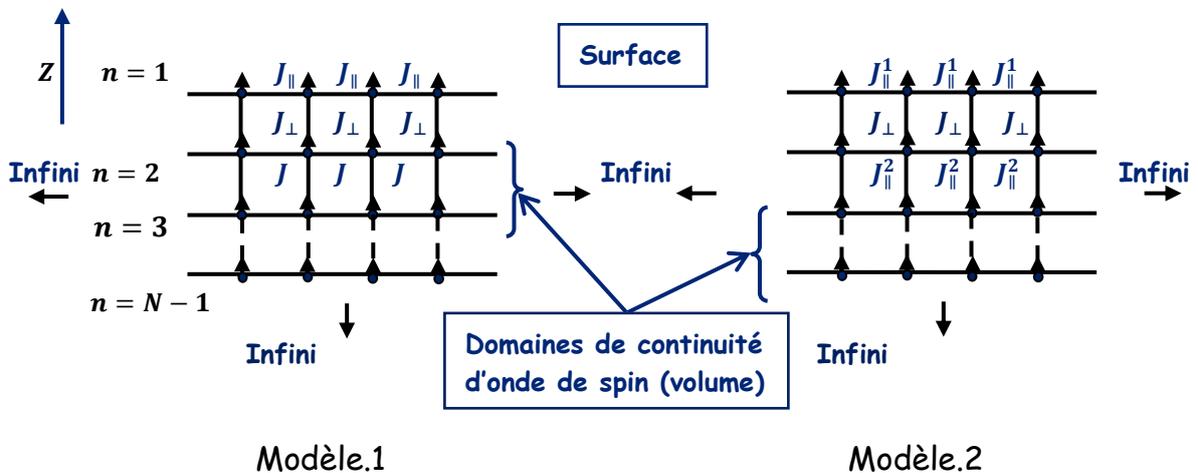


Figure.6 Schématisation de deux modèles de configuration des paramètres d'échange et de la région de continuité.

- **Dans le modèle 1**, le modèle de surface relaxée, proposé dans la figure.6 où on pose  $\varepsilon_{\parallel} = \frac{J_{\parallel}}{J}$  le paramètre d'échange de surface et  $\varepsilon_{\perp} = \frac{J_{\perp}}{J}$ , le paramètre d'échange entre le premier plan et le deuxième. Avec  $J$  l'intégrale d'échange en volume décrit à partir du troisième plan.
- **Dans le modèle 2**, le modèle à relaxation étendue, proposé dans la figure.6 où les paramètres sont décrits comme dans le modèle 1 mais nous conservons un paramètre de plus :  $\varepsilon_{\parallel}^2 = J_{\parallel}^2/J$  qui est représenté l'énergie d'échange de la deuxième surface,  $J_{\parallel}^2$  l'intégrale d'échange de la deuxième couche de la structure considéré et  $\Lambda_q = 2 - \gamma_{\parallel}$  est le double de celui correspondant au modèle 1. Cette configuration correspond en fait à la présence d'une deuxième surface (l'onde de surface présente une profondeur de pénétration supérieure à celle considérée dans le modèle 1). Nous nous proposons de montrer que  $\varepsilon_{\parallel}^2$  est un paramètre important au même titre que  $\varepsilon_{\parallel}^1$  et peut-être même plus que  $\varepsilon_{\perp}$  (à cause de la symétrie près de la surface).

Si  $\varepsilon_{\parallel}^1 = \varepsilon_{\parallel}^2 = 1$  alors  $\rho$  est indépendant de  $\Lambda_q$  ce qui se traduit par des courbes de dispersion des ondes de spin de surface parallèle à celles du volume.  $\varepsilon_{\perp}$  ne fait que décaler d'une constante les courbes. Par contre  $\varepsilon_{\parallel}^1$  et  $\varepsilon_{\parallel}^2$  sont essentiels en ce qui concerne la position et la forme des courbes. On pose  $z_{\parallel}^1 = 4$  le nombre des premiers voisins en plan de surface,  $z_{\parallel}^2 = 4$  le nombre des premier voisins du deuxième plan près de la surface et  $z_{\perp}$  le nombre de premier voisins perpendiculaire au plans  $z_{\perp}$ .

- **Facteur de phase de la structure magnétique**

$$\gamma_{ij}(\vec{k}) = \frac{1}{z_{ij}} \sum_{ij} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i)} = \gamma_{\parallel ij} + \gamma_{\perp ij}, \quad (6)$$

$$\gamma_{ij}(\vec{k}) = \frac{1}{3} (\cos(k_x a_x) + \cos(k_y a_y) + \cos(k_z a_z)). \quad (6')$$

On remplace le facteur de phase par sa valeur et on pose  $\hbar\omega = E_b$ , l'équation (3) devient :

$$E_b(\vec{k}) = -\langle S^z \rangle J_6 \left( \frac{1}{6} (2 \cos(k_x a_x) + 2 \cos(k_y a_y) + 2 \cos(k_z a_z)) - 1 \right) + g\mu_b H, \quad (7)$$

cette équation décrit la relation de dispersion des excitations magnétiques de volume dans le cas d'un système cubique ferromagnétique infini.

#### 4. Expression de l'équation séculaire des excitations magnétiques de volume

Obtenant les états d'excitations magnétiques de volume projetés en surface en effectuant la transformation suivante :

$D_b(E, \vec{k}) \rightarrow D_b(E, \rho, \vec{k}_{\parallel})$  et en posant,

$$\begin{cases} \rho = e^{ik_z a} \\ \rho^{-1} = e^{-ik_z a} \end{cases} \quad (8)$$

$\rho$  représente la phase de l'onde de spin dans la direction ( $Oz$ ).

Le réseau réciproque du réseau direct ramené à une périodicité bidimensionnelle est un réseau carré dont le vecteur d'onde a pour composantes  $\vec{k}_{\parallel} = (k_x, k_y)$ .

le facteur de phase s'écrit en fonction de  $\rho$  comme suit :

$$\gamma_{ij} = \frac{1}{z_{ij}} (2 \cos(k_x a_x) + 2 \cos(k_y a_y) + \rho + \rho^{-1})$$

L'équation (4) devient :

$$E_b(\vec{k}) = -\frac{SJ_{ij}z_{ij}^1}{2} \left( \frac{1}{z_{ij}} (2 \cos(k_x a_x) + 2 \cos(k_y a_y) + \rho + \rho^{-1}) - 1 \right) + g\mu_b H \quad (9)$$

On pose  $J_{ij}z_{ij} = Jz$  et en multipliant par  $\rho$  l'équation (4') devient :

$$[2E_b + SJ(2 \cos(k_x a_x) + 2 \cos(k_y a_y)) - JSz - 2\mu H]\rho + SJ\rho^2 + SJ\rho^0 = 0, \quad (10)$$

le polynome est de degré 2 en  $\rho$  ; toute racine a son inverse qui aussi solution, d'où une seul racine acceptable, ce polynome est de la forme suivante :

$$D_b(E, k_{\parallel}, \rho) = A_2 \rho^2 + A_1 \rho + A_0 \rho^0 \quad (11)$$

$$\text{Avec } \begin{cases} A_0 = SJ \\ A_1 = 2E_b + SJ(2 \cos(k_x a_x) + 2 \cos(k_y a_y)) - JSz - \mu H. \\ A_2 = A_0 = SJ \end{cases}$$

La zone des excitations magnétiques en volume est donnée par l'ensemble des points  $(E, k_{\parallel})$  pour lesquels  $|\rho_i| = 1$ .

#### 4.1 Théorie de l'onde de spin de surface pour le système semi-infini

Les relations de dispersion  $E(\vec{k})$  des états localisés de surface sont obtenues en considérant plusieurs modèles d'interaction, on citera quelques uns :

- Seule la première couche atomique en surface est perturbée, ce qui se traduit par l'intégrale d'échange en surface  $J_{\parallel}$  différente de l'intégrale d'échange du volume  $J = J_{\perp}$ , et des interactions limités aux premiers voisins seulement [9-13].
- Les deux premières couches atomiques sont perturbées, ce qui se traduit par l'intégrale d'échange de la couche de surface  $J_{\parallel}^1$  différente de l'intégrale d'échange de la deuxième couche  $J_{\parallel}^2$  qui est différente de l'intégrale d'échange du volume  $J$  et de l'intégrale d'échange perpendiculaire à la surface  $J_{\perp}$  avec des interactions limitées aux premiers voisins seulement [14].

## 4.2 Equations des ondes de spin de surface en fonction de l'amplitude

### o Surface relaxée (Modèle 1) :

Considérant un système ferromagnétique semi-infini avec le plans (100) tel que l'axe ( $Oz$ ) est l'axe de facile aimantation et normal à la surface.

L'Hamiltonien, est caractérisé par des integrales d'échange tel que  $J_{\parallel}$  relie deux voisins de la première couche considéré comme étant la surface et  $J_{\perp}$  relie deux voisins l'un sur la première couche l'autre sur la deuxième couche. Toutes les autres couches sont considérées non perturbées avec  $J$  comme paramètre d'échange.

De l'équation (3) on obtient une équation regissant le mouvement des spins pour chaque plan en fonction de l'amplitude de précession des ondes de spin  $U_{n(R)}$  autour de position d'équilibre.

pour  $n = 1$

$$(\hbar\omega - g\mu_b H) 2U_1 = \langle S^z \rangle [z_{\parallel} J_{\parallel}(1 - \gamma_{\parallel}) + z_{\perp} J_{\perp}]U_1 + z_{\perp} J_{\perp} \gamma_{\perp ij} \langle S^z \rangle U_2. \quad (12)$$

pour  $n = 2$

$$(\hbar\omega - g\mu_b H) 2U_2 = -z_{\perp} J_{\perp} \gamma_{\perp} \langle S^z \rangle U_1 + \langle S^z \rangle [z_{\parallel} J(1 - \gamma_{\parallel}) + z_{\perp}(J_{\perp} + J)]U_2 - z_{\perp} \gamma_{\perp ij} U_3. \quad (13)$$

pour  $n = 3$

$$(\hbar\omega - g\mu_b H) 2U_3 = \langle S^z \rangle [z_{\parallel} J(1 - \gamma_{\parallel}) + 2z_{\perp} J]U_3 - z_{\perp} J \gamma_{\perp} \langle S^z \rangle (U_2 + U_4). \quad (14)$$

En divisant ces équations par  $SJ$ , et en faisant le changement de variables on obtient:

$$\langle S^z \rangle \equiv S \quad \text{et} \quad .$$

$$\text{On pose : } \varepsilon_{\perp} = \frac{J_{\perp}}{J}, \quad \varepsilon_{\parallel} = \frac{J_{\parallel}}{J}, \quad \Omega_o = \frac{8(\hbar\omega - g\mu_b H)}{JS} = \frac{E}{J} - \omega_o, \quad \frac{E}{J} = \frac{8\hbar\omega}{JS},$$

$$\omega_o = \frac{g\mu_b H_I}{JS}, \quad \omega_s = \frac{g\mu_b H_{AN}}{JS}, \quad z_{\parallel} = 4 \quad \text{et} \quad z_{\perp} = 1.$$

Pour  $g\mu_b H = 0$  ce qui est traduit par l'absence du champ appliqué  $H_A$  et champ d'anisotropie  $H_{AN}$ , on pose  $\Lambda_q = 1 - \gamma_{\parallel}$  avec  $\gamma_{\parallel} = \frac{1}{2}(\cos(k_x a_x) + \cos(k_y a_y))$  et  $\gamma_{\perp} = 1$ , on obtient les équations suivantes :

pour  $n = 1$ .

$$\frac{E}{JS} U_1 = [4\varepsilon_{\parallel}(1 - \gamma_{\parallel}) + \varepsilon_{\perp}]U_1 + \varepsilon_{\perp} \gamma_{\perp} U_2. \quad (12')$$

pour  $n = 2$ .

$$\frac{E}{JS} U_2 = [4(1 - \gamma_{\parallel}) + \varepsilon_{\perp} + 1]U_2 - \varepsilon_{\perp} U_1 - \gamma_{\perp} U_3. \quad (13')$$

pour  $n = 3$

$$\frac{E}{JS} U_3 = [4(1 - \gamma_{\parallel}) + 2]U_3 - \gamma_{\perp}(U_2 + U_4). \quad (14')$$

La matrice de volume décrite pour tous les plans  $M_V(3 \times 4)$  est :

$$\begin{bmatrix} \left[ \frac{E}{JS} - 4\varepsilon_{\parallel}(1 - \gamma_{\parallel}) - \varepsilon_{\perp} - \omega_s \right] & \varepsilon_{\perp} \gamma_{\perp} & 0 & 0 \\ \varepsilon_{\perp} \gamma_{\perp} & \left[ \frac{E}{JS} - 4(1 - \gamma_{\parallel}) - 1 - \varepsilon_{\perp} - \omega_o \right] & \gamma_{\perp} & 0 \\ 0 & \gamma_{\perp} & \left[ \frac{E}{JS} - 6 + 4\gamma_{\parallel} - \omega_o \right] & \gamma_{\perp} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{bmatrix} = 0.$$

- **Les modes localisés de surface**

Le système semi-infini considéré est modélisé par un système en couches, la première couche  $n = 1$  représente la surface, la deuxième couche  $n = 2$  représente l'intermédiaire entre la surface et le volume et la troisième couche  $n = 3$  représente donc le volume. On a supposé que l'intégrale d'échange de la première couche de surface est différent de l'intégrale d'échange adjacent, ainsi différent de l'intégrale d'échange du volume.

La région de volume commence donc à partir du plan  $n = 3$  et les amplitudes de précessions des spins autour de la position d'équilibre des atomes situés sur le plan  $n$  est décrite par relation de raccordement suivante :

$$U_{(n)} = \sum_{i=1}^{n_e} R_i C(\rho_i) \cdot \rho_i^{n-3} \quad (15)$$

La formule décrite par la méthode de raccordement, permet de raccorder des états de surface aux ceux de volumes. Avec  $n_e$  étant le nombre de racines  $\rho_i$  de l'équation séculaire (4) satisfaisant la condition  $|\rho_i| < 1$ .

$R_i$  est le facteur de raccordement.

$C(\rho_i)$  est le cofacteur de la matrice en volume (3).

$n$  est le nombre de plans.

$$C(\rho_i) = \hbar\omega - S_A J_{ij} Z_{ij} \left(1 - \gamma_{ij}(\vec{k}, \rho_i)\right) + g\mu_b H. \quad (16)$$

Les amplitudes de l'onde de spin pour les plans  $n = 3$  et  $n = 4$  sont respectivement :

$$\begin{cases} U_3 = R_1 C(\rho_1) \\ U_4 = R_1 C(\rho_1) \cdot \rho_1 \end{cases} \quad (17)$$

La matrice de raccordement est une matrice  $M_R(4 \times 3)$  ; elle exprime les amplitudes de volume  $U_3$  et  $U_4$  en fonction de ceux en surface  $U_1$  et  $U_2$  ainsi que par le facteur de raccordement  $R_1$ .

La matrice de raccordement décrite pour tous les plans  $M_R(4 \times 3)$  est :

$$\begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & C(\rho_1) \\ 0 & 0 & C(\rho_1) \cdot \rho_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ R_1 \end{bmatrix}.$$

On a une matrice en volume pour les plans  $n \leq 3$ , notée  $M_V(3 \times 4)$ , une matrice de trois plans et quatre amplitudes ou quatre inconnues, et la matrice de raccordement

$M_R(4 \times 3)$  qui exprime les amplitudes de volume avec ceux de surfaces, ainsi que le facteur de raccordement, et pour décrire la matrice dynamique du système il suffit de multiplier les deux matrices, celle en volume et celle de raccordement, on obtient alors une matrice carrée  $M_S(3 \times 3)$  telle que :

$$M_S(3 \times 3) = M_V(3 \times 4) \times M_R(4 \times 3)$$

$$M_S(3 \times 3) = \begin{bmatrix} \left[ \frac{E}{JS} - 4\varepsilon_{\parallel}(1 - \gamma_{\parallel}) - \varepsilon_{\perp} - \omega_s \right] & \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} & 0 & 0 \\ \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} & \left[ \frac{E}{JS} - 4(1 - \gamma_{\parallel}) - 1 - \varepsilon_{\perp} - \omega_o \right] & \gamma_{\perp} & 0 \\ 0 & \gamma_{\perp} & \left[ \frac{E}{JS} - 6 + 4\gamma_{\parallel} - \omega_o \right] & \gamma_{\perp} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & C(\rho_1) \\ 0 & 0 & C(\rho_1) \cdot \rho_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ R_1 \end{bmatrix} = 0.$$

On obtient un système de la forme  $M_S(E, \vec{k}_{\parallel}) \begin{bmatrix} U \\ R \end{bmatrix} = 0$  où  $U$  représentent les vecteurs des amplitudes des ondes de spin sur les plans de zone de surface et  $R$  représente la composante du facteur de raccordement. La matrice dynamique  $M_S$  des états localisés du système ferromagnétique semi-infini s'écrit alors :

$$M_S(3 \times 3) = \begin{bmatrix} \left[ \frac{E}{JS} - 4\varepsilon_{\parallel}(1 - \gamma_{\parallel}) - \varepsilon_{\perp} \right] & \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} & 0 \\ \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} & \left[ \frac{E}{JS} - 4(1 - \gamma_{\parallel}) - 1 - \varepsilon_{\perp} \right] & \gamma_{\perp} C(\rho_1) \\ 0 & \gamma_{\perp} & \left\{ \left[ \frac{E}{JS} - 6 + 4\gamma_{\parallel} \right] C(\rho_1) + \gamma_{\perp} C(\rho_1) \cdot \rho_1 \right\} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ R_1 \end{bmatrix} = 0.$$

La région de l'espace  $(E, \vec{k}_{\parallel})$  des états localisés de surface où les facteurs d'évanescence  $\rho_i$  de l'onde de spin sont que pour les valeurs  $\rho_i < 1$ .

On calcule les courbes de dispersion des magnons de surface du plan (100) de la zone de Brillouin en utilisant la relation de compatibilité  $\det(M_S(E, \vec{k}_{\parallel})) = 0$ .

On pose :

Décrire ensuite les composantes du champ de précession de spin résultant des modes de spin localisés et les champs de processionne de spin évanescence qui se produisent dans le volume et agit sur un vecteur de colonne  $V$ . Cela conduit au système linéaire homogène suivant :

$$[M_S(E, \varepsilon_{\parallel}, \alpha(a), D, D_s, \omega_0, \omega_s, \gamma_{\parallel}, h_A, \rho_{z(i)})] |V\rangle = |0\rangle \quad (18)$$

$\{\rho_{z(i)}\}$  est un ensemble de  $i = 1, 2, \dots, (n_e + n_p)$  racines complexes de l'équation séculaire (10) des espaces  $(E, \omega_q)$ . Dans le cadre de ces racines, il est important de souligner qu'une racine a une valeur absolue supérieure à l'unité, tandis que l'autre à une valeur absolue plus petite que l'unité. Ainsi, le problème est posé avec l'onde de spin de surface dont l'amplitude des modes localisés est donnée par l'ensemble des doublets de facteur  $(\rho_{z(i)}, \rho_{z(i)}^{-1})$ , répondant à la condition  $|\rho_{z(i)}| < 1$ . Les expressions non-nulles pour  $M_s(l, l')$  sont données sous les formes suivantes:

$$M_s(1,1) = \frac{E}{JS} + 4\varepsilon_{\parallel}(1 - \gamma_{\parallel}) - \varepsilon_{\perp},$$

$$M_s(1,2) = \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} = 1,$$

$$M_s(2,1) = \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} = 1,$$

$$M_s(2,2) = \frac{E}{JS} + 4(1 - \gamma_{\parallel}) - 1 - \varepsilon_{\perp},$$

$$M_s(2,3) = \gamma_{\perp}C(\rho_{z(i)}),$$

$$M_s(3,2) = C(\rho_{z(i)}),$$

$$M_s(3,3) = \left(\frac{E}{JS} + 4\gamma_{\parallel} - 6\right)C(\rho_{z(i)}) + C(\rho_{z(i)}) \cdot \rho_{z(i)}.$$

En calculant les courbes de dispersion des magnons de surface du plan (100) de la zone de Brillouin en fonction de la relation de compatibilité  $\det(M_s(E, \vec{k}_{\parallel})) = 0$ .

○ Surface à relaxation étendue (Modèle.2) :

L'Hamiltonien est caractérisé par des intégrales d'échanges, tel que  $J_{\parallel}^1$  relie deux voisins de la première couche, considéré comme étant la surface,  $J_{\parallel}^2$  relie deux voisins de la deuxième couche, considéré comme étant la deuxième surface et  $J_{\perp}$  relie deux voisins l'un sur la première couche l'autre sur la deuxième couche. Toutes les autres couches sont considérées non perturbées avec  $J$  comme paramètre d'échange.

De l'équation (3) on obtient une équation regissant le mouvement des spins pour chaque plan en fonction de l'amplitude de précession des ondes de spin  $U_{n(R)}$  autour de position d'équilibre.

pour  $n = 1$

$$(\hbar\omega - \mu H) 2U_1 = \langle S^z \rangle [z_{\parallel} J_{\parallel}^1 (1 - \gamma_{\parallel}) + z_{\perp} J_{\perp}] U_1 + z_{\perp} J_{\perp} \gamma_{\perp} \langle S^z \rangle U_2 \quad (1)$$

pour  $n = 2$

$$(\hbar\omega - \mu H) 2U_2 = -z_{\perp} J_{\perp} \gamma_{\perp} \langle S^z \rangle U_1 + \langle S^z \rangle [z_{\parallel} J_{\parallel}^2 (1 - \gamma_{\parallel}) + z_{\perp} (J_{\perp} + J)] U_2 - J z_{\perp} \gamma_{\perp} U_3 \quad (2)$$

pour  $n = 3$

$$(\hbar\omega - \mu H) 2U_3 = \langle S^z \rangle [z_{\parallel} J (1 - \gamma_{\parallel}) + 2z_{\perp} J] U_3 - z_{\perp} J \gamma_{\perp} \langle S^z \rangle (U_2 + U_4). \quad (4)$$

En divisant ces équations par  $SJ$ , et en faisant les changements de variables suivantes :

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{J_{\perp}}{J}, \varepsilon_{\parallel} = \frac{J_{\parallel}}{J}, \Omega_o = \frac{2(\hbar\omega - \mu H)}{JS} = \frac{E}{J} - \omega_o, \frac{E}{J} = \frac{2\hbar\omega}{JS}, \omega_s = \omega_o = \frac{\mu H}{JS}, z_{\parallel} = 4 \text{ et } z_{\perp} = 1. \text{ et}$$

pour  $\mu H = 0$  ce qui est traduit par l'absence du champ appliqué, et on pose  $\Lambda_q = 2 - \gamma_{\parallel}$

avec  $\gamma_{\parallel} = \cos(k_x a_x) + \cos(k_y a_y)$  et  $\gamma_{\perp} = 1$ , on obtient les équations suivantes :

pour  $n = 1$ .

$$\frac{E}{JS} U_1 = [2\varepsilon_{\parallel}^1 (2 - \gamma_{\parallel}) + \varepsilon_{\perp}] U_1 + \varepsilon_{\perp} \gamma_{\perp} U_2 \quad (1)'$$

pour  $n = 2$ .

$$\frac{E}{JS} U_2 = [2\varepsilon_{\parallel}^2 (2 - \gamma_{\parallel}) + \varepsilon_{\perp} + 1] U_2 - \varepsilon_{\perp} U_1 - \gamma_{\perp} U_3 \quad (2)'$$

pour  $n = 3$

$$\frac{E}{JS} U_3 = [2(2 - \gamma_{\parallel}) + 2]U_3 - \gamma_{\perp}(U_2 + U_4) \quad (3)'$$

La matrice de volume décrite pour tous les plans  $M_V(3 \times 4)$  est :

$$\begin{bmatrix} \left[ \frac{E}{JS} - 2\varepsilon_{\parallel}^1(2 - \gamma_{\parallel}) - \varepsilon_{\perp} - \omega_s \right] & \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} & \left[ \frac{E}{JS} - 2\varepsilon_{\parallel}^2(2 - \gamma_{\parallel}) - 1 - \varepsilon_{\perp} - \omega_o \right] & \gamma_{\perp} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \gamma_{\perp} & \left[ \frac{E}{JS} - 6 + 2\gamma_{\parallel} - \omega_o \right] & \gamma_{\perp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1 \\ \mathbf{U}_2 \\ \mathbf{U}_3 \\ \mathbf{U}_4 \end{bmatrix} = \mathbf{0}$$

- Les modes localisés de surface

En passant par les mêmes étapes que dans le modèle.1, Le système semi-infini considéré est modélisé par un système en couches, la première couche  $n = 1$  représente la surface, la couche intermédiaire  $n = 2$  et le volume pour  $n \geq 3$ . On suppose que  $J_{\parallel}^1$  est l'intégrale d'échange de la première couche de surface,  $J_{\parallel}^2$  est l'intégrale d'échange de la deuxième couche de surface et  $J_{\perp}$  est l'intégrale d'échange reliant deux voisins l'un sur la première couche l'autre sur la deuxième couche.

Les amplitudes de précessions des spins autour de la position d'équilibre des atomes situés sur le plan  $n$  est décrit par relation de raccordement suivante :

$$U_{(n)} = \sum_{i=1}^{n_e} R_i C(\rho_i) \cdot \rho_i^{n-3}, \quad (4)$$

la formule décrite par la méthode de raccordement [4,5], nous permet de raccorder des états de surface aux ceux de volumes.

$n_e$  étant le nombre de racines  $\rho_i$  de l'équation séculaire (4) satisfaisant la condition  $|\rho_i| < 1$   
 $R_i$  est le facteur de raccordement.

$C(\rho_i)$  est le cofacteur de la matrice en volume (3).

$n$  est le nombre de plans.

$$C(\rho_i) = \hbar\omega - S_{AJij} Z_{ij} \left(1 - \gamma_{ij}(\vec{k}, \rho_i)\right) + \mu H \quad (5)$$

Les amplitudes de l'onde de spin pour les plans  $n = 3$  et  $n = 4$  sont respectivement :

$$U_3 = C(\rho_1) \quad \text{et} \quad U_4 = C(\rho_1) \cdot \rho_1,$$

La matrice de raccordement est une matrice  $M_R(4 \times 3)$  ; elle exprime les amplitudes de volume  $U_3$  et  $U_4$  en fonction de ceux en surface  $U_1$  et  $U_2$  ainsi que par le facteur de raccordement  $R_1$ .

La matrice de raccordement  $M_R(4 \times 3)$  qui exprime les amplitudes de volume avec ceux de surfaces est décrite comme dans le modèle.1, la matrice en volume  $M_V(3 \times 4)$  des plans  $n \leq 3$  est décrite aussi comme précédemment et pour décrire la matrice dynamique du système il suffit de multiplier les deux matrices, donc celle de volume et celle de raccordement, on obtient alors une matrice carrée  $M_S(3 \times 3)$ .

$$M_S(3 \times 3) = M_V(3 \times 4) \times M_R(4 \times 3)$$

$$M_S(3 \times 3) =$$

$$\begin{bmatrix} \left[ \frac{E}{JS} - 2\varepsilon_{\parallel}^1(2 - \gamma_{\parallel}) - \varepsilon_{\perp} \right] & \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} & 0 \\ \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} & \left[ \frac{E}{JS} - 2\varepsilon_{\parallel}^2(2 - \gamma_{\parallel}) - 1 - \varepsilon_{\perp} \right] & \gamma_{\perp} C(\rho_1) \\ 0 & \gamma_{\perp} & \left\{ \left[ \frac{E}{JS} - 6 + 2\gamma_{\parallel} \right] C(\rho_1) + \gamma_{\perp} C(\rho_1) \cdot \rho_1 \right\} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ R_1 \end{bmatrix} = 0$$

Avec  $(E, \vec{k}_{\parallel})$  l'espace des états localisés de surface et  $\rho_1$  le facteur d'évanescence de l'onde de spin qui n'existe que pour les valeurs  $\rho_1 < 1$ . On calcule ainsi les courbes de dispersion des magnons de surface du plan (100) en utilisant la relation de compatibilité  $\det(M_S(E, \vec{k}_{\parallel})) = 0$ .

Les expressions non-nulles pour  $M_s(l, l')$  sont données sous les formes suivantes:

$$M_s(1,1) = \frac{E}{JS} - 2\varepsilon_{\parallel}^1(2 - \gamma_{\parallel}) - \varepsilon_{\perp},$$

$$M_s(1,2) = \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} = 1,$$

$$M_s(2,1) = \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} = 1,$$

$$M_s(2,2) = \frac{E}{JS} - 2\varepsilon_{\parallel}^1(2 - \gamma_{\parallel}) - 1 - \varepsilon_{\perp},$$

$$M_s(2,3) = \gamma_{\perp}C(\rho_{z(i)}),$$

$$M_s(3,2) = C(\rho_{z(i)}),$$

$$M_s(3,3) = \left(\frac{E}{JS} - 2(2 - \gamma_{\parallel}) - 2\right)C(\rho_{z(i)}) + C(\rho_{z(i)}) \cdot \rho_{z(i)},$$

## 5. Résultats et discussions

### a) Modèle.1

On retrouve les courbes de dispersion avec une surface perturbée seulement, représentés dans la figure.7, 8 et 9 les modes localisés de surface et de volume.

- Dans la figure.7 on retrouve des courbes de dispersions optiques et acoustiques pour (a)  $\varepsilon_{\parallel} = \frac{J_{\parallel}}{J} = 2$ , (b)  $\varepsilon_{\parallel} = 0.5$ , (c),  $\varepsilon_{\perp} = J_{\perp}/J = 1$  et  $S = 1$ . L'énergie est représentée en fonction du paramètre  $\Lambda_q = (1 - \gamma_{\parallel})$ , avec une valeur maximale de 2.

La présentation des ondes de spin de surface pour différentes valeurs de  $\varepsilon_{\parallel}$  et pour  $\varepsilon_{\perp} = 1$ . La branche optique ainsi présenté pour  $\varepsilon_{\parallel} = 2$  est tronquée à  $\Lambda_c = 0,5$  où elle devient dégénérée avec les ondes de spin en volume. Comme  $\varepsilon_{\parallel}$  diminue à 1,25, la branche optique est tronqué à des valeurs plus grandes de  $\Lambda_q$ , et enfin, se rétrécit jusqu'à un point à  $\Lambda_q = 2.0$  et  $\left(\frac{\Omega}{8}\right) = \frac{E}{SJ} = 1,5$ . Les branches acoustiques apparaissent pour  $\varepsilon_{\parallel} < 1$ .

1. Les ondes de spin de surface acoustique ( $\varepsilon_{\parallel} < 1$ ) sont moins énergétiques que celles du volume. Pour  $(1 - \gamma_{\parallel}) = 0$ ,  $E = 0$ . Les spins précèdent tous en phases. Dans la figure.4 où (b) représente l'onde de surface acoustique pour une valeur  $\varepsilon_{\parallel} = 0.5$ .

2. Les ondes de spin de surface optiques ( $\varepsilon_{\parallel} > 5/4$ ) sont situées au-dessus du volume. Les spins de deux couches adjacentes sont en opposition de phase. Elles ont toutes un point d'interaction avec le volume. Dans la figure.7 où représente l'onde de surface optique pour une valeur  $\varepsilon_{\parallel} = 2$ .

- Dans la figure.8 on retrouve des courbes de dispersions optiques et acoustiques pour (1)( $\varepsilon_{\parallel} = 1.5, \varepsilon_{\perp} = 1.5$ ), (2)( $\varepsilon_{\parallel} = 1.5, \varepsilon_{\perp} = 0.5$ ), (3)( $\varepsilon_{\parallel} = 0.5, \varepsilon_{\perp} = 1.5$ ), (4)( $\varepsilon_{\parallel} = 0.5, \varepsilon_{\perp} = 0.5$ ), et  $S = 1$ . L'énergie est représentée en fonction du paramètre  $(1 - \omega_q)$ , avec une valeur maximale de 2.

1. Courbes de dispersion d'ondes de spin pour différentes valeurs de  $\varepsilon_{\parallel}$  et  $\varepsilon_{\perp}$ . Plus d'une courbe de surface apparaît pour différentes valeurs de  $\varepsilon_{\parallel}$  et  $\varepsilon_{\perp}$ , une branche optique

tronquée et une autre branche d'onde de spin de surface acoustique complète sont indiquées, pour  $\varepsilon_{\parallel} = 0.5$  et  $\varepsilon_{\perp} = 1.5$ .

- Dans la figure.9 on retrouve des courbes de dispersions optiques et acoustiques pour (1)( $\varepsilon_{\parallel} = 4, \varepsilon_{\perp} = 2.5$ ), (2)( $\varepsilon_{\parallel} = 1.5, \varepsilon_{\perp} = 2.5$ ), (3)( $\varepsilon_{\parallel} = 0.5, \varepsilon_{\perp} = 2.5$ ), et  $S = 1$ . L'énergie est représentée en fonction du paramètre  $(1 - \gamma_{\parallel})$ , avec une valeur maximale de 2.

1. La figure.9 présente des courbes de dispersions de surface pour différentes valeurs de  $\varepsilon_{\parallel}$  et  $\varepsilon_{\perp} = 2.5$ , et représente plusieurs courbes de dispersion de surface pour différentes valeurs de  $\varepsilon_{\parallel}$  et la même valeur de  $\varepsilon_{\perp}$ .

Deux branches l'une optique et l'autre acoustique complètes sont indiquées, pour  $\varepsilon_{\parallel} = 0.5$  et  $\varepsilon_{\perp} = 2.5$ .

Deux branches optiques l'une tronquée en  $\Lambda_c$ , dégénéré avec le top du bulk l'autre complète pour  $\varepsilon_{\parallel} = 4$  et  $\varepsilon_{\perp} = 2.5$ , et une branche optique pour  $\varepsilon_{\parallel} = 1.5$  et  $\varepsilon_{\perp} = 2.5$ .

## b) Modèle.2

On conserve un paramètre de plus :  $\varepsilon_{\parallel}^2$  qui est aussi important que  $\varepsilon_{\parallel}^1$  et même  $\varepsilon_{\perp}$  à cause de la symétrie près de la surface. On retrouve les courbes de dispersions, représentés dans les figures.10, 11 et 12 les modes localisés de surface et de volume.

- On retrouve dans la figure.10 la forme des courbes de dispersions optiques et acoustiques pour différentes valeurs de  $\varepsilon_{\parallel}^1$ : (1) ( $\varepsilon_{\parallel}^1 = 2, \varepsilon_{\parallel}^2 = \varepsilon_{\perp} = 1$ ), (2) ( $\varepsilon_{\parallel}^1 = 1.25, \varepsilon_{\parallel}^2 = \varepsilon_{\perp} = 1$ ), (3) ( $\varepsilon_{\parallel}^1 = 0.5, \varepsilon_{\parallel}^2 = \varepsilon_{\perp} = 1$ ), et  $S = 1$ .

L'énergie est représentée en fonction du paramètre  $\Lambda_q = (2 - \gamma_{\parallel})$  avec une valeur maximale de 4.

Pour  $\varepsilon_{\parallel}^1 = 1$  on retrouve une solution du volume  $\frac{E}{J} = 2\varepsilon_{\parallel}^1(2 - \gamma_{\parallel}) - 2$ . Deux solutions à la surface sont obtenues.

- **Cas.1**  $\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{\parallel}^2 = \frac{J_{\parallel}^2}{J} = 1$

1. Les ondes de spin de surface acoustique ( $\varepsilon_{\parallel}^1 < 1$ ) sont moins énergétiques que celles du volume. Pour  $(2 - \gamma_{\parallel}) = 0$ ,  $E = 0$ . Les spins précessent tous en phases. Dans la figure.4 où (c) représente l'onde de surface acoustique pour une valeur  $\varepsilon_{\parallel}^1 = 0.5$  et  $\varepsilon_{\perp} = 1$ .

2. Les ondes de spin de surface optiques ( $\varepsilon_{\parallel}^1 > \frac{5}{4}$ ) sont situées au-dessus du volume. Les spins de deux couches adjacentes sont en opposition de phase. Elles ont toutes un point d'interaction avec le volume. Dans la figure.10 où (a) représente l'onde de surface optique pour une valeur  $\varepsilon_{\parallel}^1 = 2$  et  $\varepsilon_{\perp} = 1$ .

Elles ont toutes un point d'interaction avec le volume appelé « cut-off ».

○ On retrouve dans la figure.11 la forme des courbes de dispersions optiques et acoustiques quand (1) ( $\varepsilon_{\parallel}^1 = \varepsilon_{\parallel}^2 = 1, \varepsilon_{\perp} = 3$ ), (2) ( $\varepsilon_{\parallel}^1 = \varepsilon_{\parallel}^2 = 1, \varepsilon_{\perp} = \frac{4}{3}$ ), (3) ( $\varepsilon_{\parallel}^1 = \varepsilon_{\parallel}^2 = 1, \varepsilon_{\perp} = -1$ ), et  $S = 1$ . L'énergie est représentée en fonction du paramètre  $(2 - \omega_q)$ , avec une valeur maximale de 4.

- **Cas.2**  $\varepsilon_{\parallel}^1 = \varepsilon_{\parallel}^2 = 1$  et  $\varepsilon_{\parallel}^1 = \varepsilon_{\parallel}^2 = -2$

Comme nous l'avons précédemment remarqué, les courbes de dispersion des ondes de surface sont parallèles à celle du volume figure.11 et en faisant une simple variation de l'intégrale d'échange perpendiculaire  $\varepsilon_{\perp}$ .

1. Les ondes de spin de surface acoustique présentés pour ( $\varepsilon_{\perp} < 0$ ) sont des solutions instables situées au-dessous du volume. Dans la figure.11 la branche acoustique représenté pour la valeur de  $\varepsilon_{\parallel}^1 = \varepsilon_{\parallel}^2 = 1$  et  $\varepsilon_{\perp} = -1$  est un mode de surface dans le domaine d'énergie négative qui est une solution rejeté.

2. Les ondes de spin de surface optiques ( $\varepsilon_{\perp} > \frac{4}{3}$ ) sont situées au-dessus du continuum de volume. Ainsi dans la figure.11 la branche optique est représenté pour une valeur  $\varepsilon_{\parallel}^1 = 1$  et  $\varepsilon_{\perp} = 2$ .

La variation de  $\varepsilon_{\perp}$  entraîne une simple translation des courbes de dispersion qui restent parallèles à la courbe de dispersion du volume et change rarement de nature.

Pour des valeurs de  $\varepsilon_{\parallel}^1 = \varepsilon_{\parallel}^2 = -2$  on retrouve des ondes de spin de surface optique une complète pour  $\varepsilon_{\perp} = 2$  parallèle avec l'autre incomplète pour  $\varepsilon_{\perp} = 1$ .

- On retrouve dans la figure.12 la forme des courbes de dispersions optiques et acoustiques pour (1)( $\varepsilon_{\parallel}^1 = \varepsilon_{\perp} = 1, \varepsilon_{\parallel}^2 = 2$ ), (2)( $\varepsilon_{\parallel}^1 = \varepsilon_{\perp} = 1, \varepsilon_{\parallel}^2 = 0.5$ ), et  $S = 1$ . Avec le paramètre  $\varepsilon_{\parallel}^1$  concernant le premier plan de la surface et le paramètre  $\varepsilon_{\parallel}^2$  concernant le deuxième plan de la structure considéré comme étant une deuxième surface. L'énergie est représentée en fonction du paramètre  $(2 - \gamma_{\parallel})$ , avec une valeur maximale de 4.

- **Cas.3**  $\varepsilon_{\parallel}^1 = \varepsilon_{\perp} = 1$

On remarque que le gap en  $\varepsilon_{\parallel}^2$  est beaucoup plus étroit que pour  $\varepsilon_{\parallel}^1$  et  $\varepsilon_{\perp}$ . On passe donc presque continuellement d'une branche acoustique à une branche optique par exemple  $\varepsilon_{\parallel}^2 = 0.9$  à  $1.1$  passant par le bord du continuum de bulk à  $\varepsilon_{\parallel}^2 = 1$ . Notons que pour  $(2 - \gamma_{\parallel}) = 0$  les solutions ne dépendent plus de  $\varepsilon_{\parallel}^2$ .  $\varepsilon_{\parallel}^1$  et  $\varepsilon_{\parallel}^2$  ont un rôle analogue, particulièrement de situer les solutions parmi les branches optiques ou acoustiques. L'influence de  $\varepsilon_{\parallel}^2$  est mise en évidence dans la figure.6.

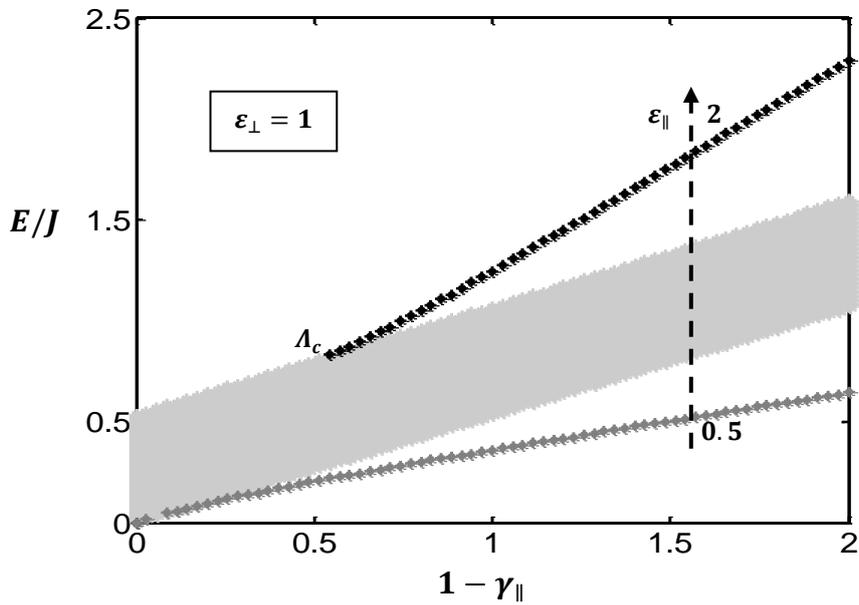


Figure.7 Ondes de spin optique et acoustique pour la surface libre.

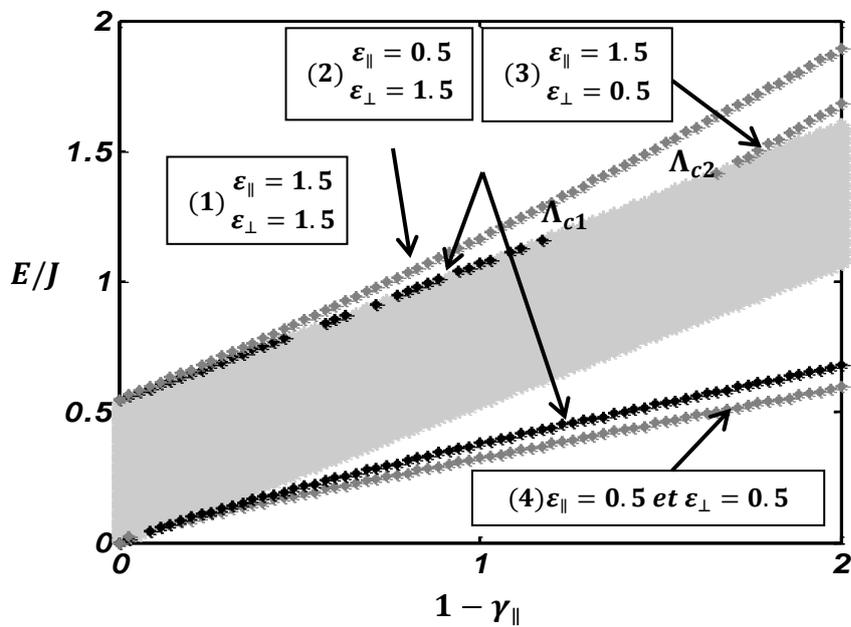


Figure.8 Ondes de spin de surface de toutes les branches optiques et acoustiques pour différentes valeurs de  $\epsilon_{\parallel}$ .

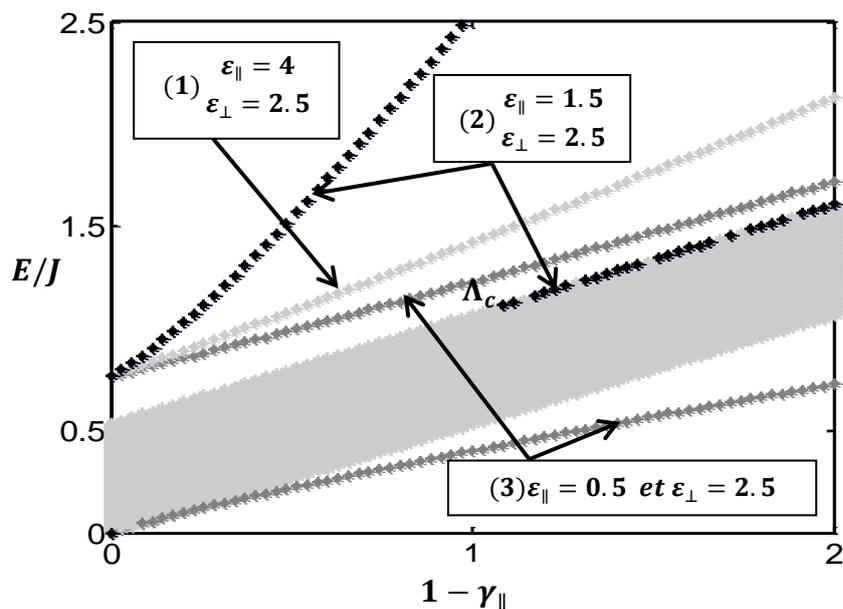


Figure.9 Ondes de spin de surface de toutes les branches optiques et acoustiques pour différentes valeurs de  $\epsilon_{\parallel}$ .

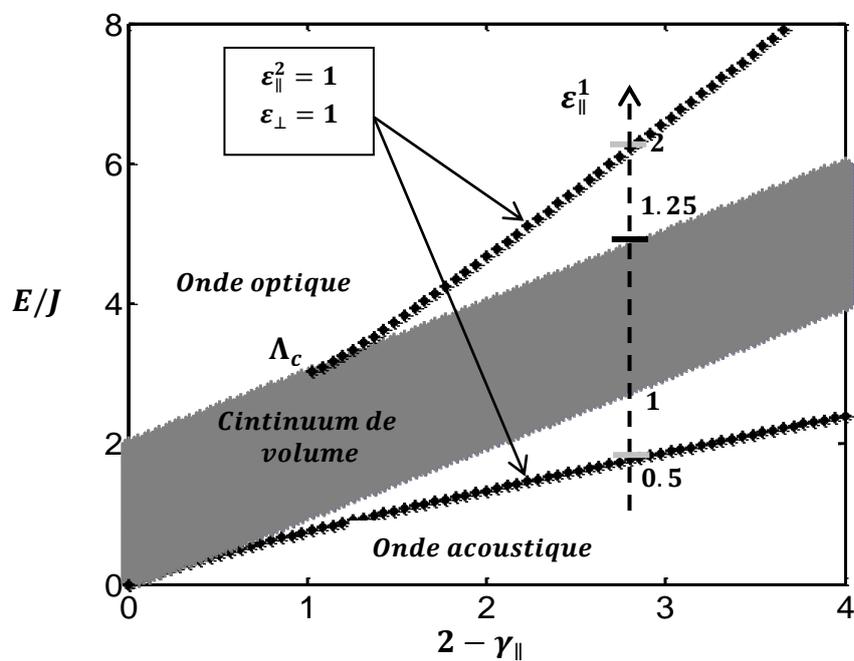


Figure.10 Ondes de spin optique et acoustique pour différentes valeurs de  $\epsilon_{\parallel}^1$ .

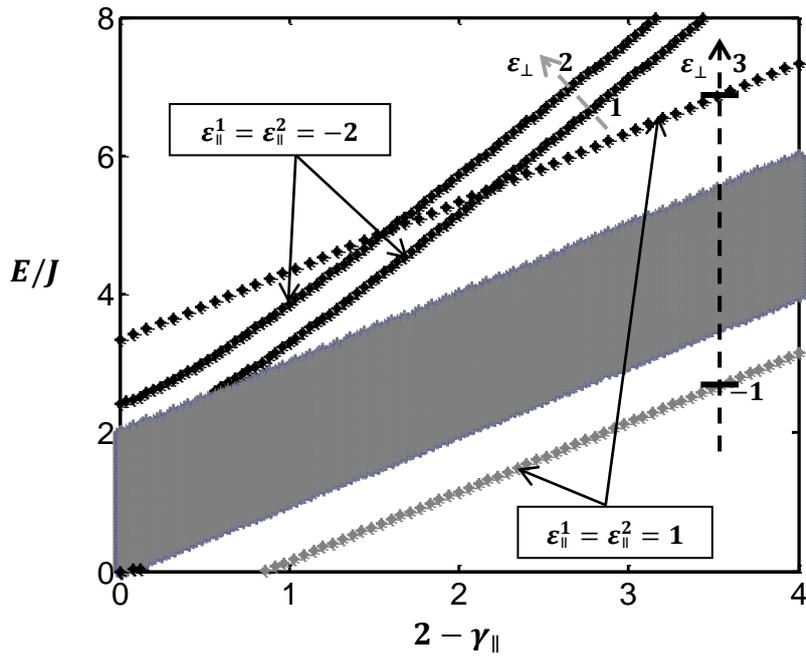


Figure.11 Ondes de spin optique et acoustique pour différentes valeurs de  $\epsilon_{\perp}$ .

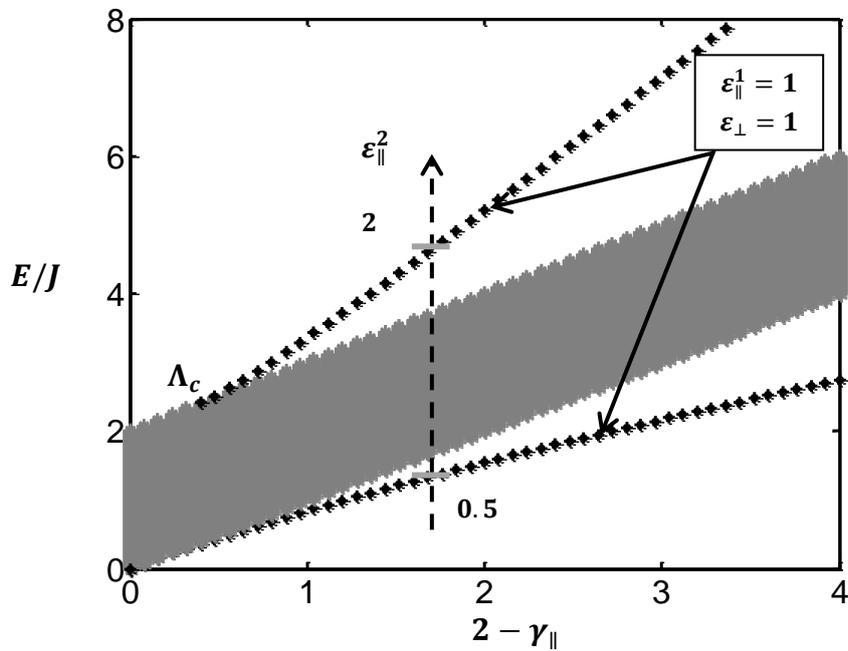


Figure.12 Ondes de spin optique et acoustique pour différentes valeurs de  $\epsilon_{\parallel}^2$ .

## Références

- [1] M. Prutton, Surface Physics, Clarendon Press, (1975).
- [2] L. Little, Infrared Spectra of Adsorbed Species, Academic Press, (1966).
- [3] A. Herpin, Théorie du magnétisme, Presses Universitaire de France, (1968).
- [4] L.P.Lévy, Magnetism and Superconductivity, Texts and Monographs in Physics, (2000).
- [5] D. C. Mattis , The Theory of magnetism I : Thermodynamics, Statistical Mechanics, (1988) ; The Theory of Magnetism II : Statics and Dynamics, (1985).
- [6] K. Yosida, Theory of Magnetism, Solid-State Sciences, Vol.122 (1996).
- [7] Wallis, R. F. Maradudin, A. A. Ipatova and I. P. Klochitkin. Surface Spin Waves. Solid State Co. 5, 89 (1967).
- [8] B. N. Filloпов Theory of Surface Spin Wave. Sov. Physics Solid State 9, 1048 (1967).
- [9] T. Wolfram and R.E. De Wames, Phys. Rev. Surface Dynamics of Magnetic Materials, 234 (1969).
- [10] G. Cottam, D. Tiley, Introduction and superlattice excitations (1989).
- [11] M. Tamine, Thèse de Doctorat. Université de Maine (1994).
- [12] M. Tamine, F. Boumeddine, Journal of Physics and chemistry of Solids 69, 865-875 (2008).
- [13] D. L. Mills and A. A. Maradudin, J. Phys. Chem. Solids 28, 2245 (1967).
- [14] E. Ilisca et E. Gallais, J.Phys. Le spectre des ondes de spin, N° 10 Tome 33, 811 (1972).

## Chapitre IV : Influence de l'anisotropie uniaxiale et de l'échange biquadratique sur la dynamique de spin de surface

## 1. Introduction

L'existence d'échange biquadratique a été bien établie par Anderson [1], Huang et Orbach [2] et Allen et al. [3]. Anderson [1] a souligné que pour un système de haut spin ( $S > 1$ ) l'interaction d'échange biquadratique devrait être envisagée. Les effets de l'échange biquadratique sont notamment mis en relief dans les systèmes tels que Fe, EuO (ferromagnétique). Le terme d'échange biquadratique dans l'Hamiltonien de spin présente un effet significatif dans certains isolants magnétiques (Harris et Owen [4], Joseph [5], Rodbell et al. [6]). De nombreux articles ont été publiés en se concentrant sur l'effet de l'interaction d'échange biquadratique [7,8], permettant d'illustrer certaines observations expérimentales que le modèle standard de Heisenberg est incapable d'expliquer. Herring [9] a indiqué que, en principe, dans l'Hamiltonien d'interaction d'échange bilinéaire, la hausse des termes de l'échange peut se produire, mais dans la plupart des cas, leur effet devrait être faible. L'effet de l'interaction d'échange biquadratique a été largement étudié par Brown [7], Chen et Levy [10] et Iwashita et al. [11] en utilisant respectivement la constante de couplage, la théorie du champ moléculaire et l'approximation du modèle de paire. Récemment, Adler et al. [12], Tiwari et al. [13] ont étudiés les effets de l'interaction d'échange biquadratique sur l'aimantation, la température de Curie et la susceptibilité par l'utilisation de la technique des fonctions de Green.

Jusqu'à ce jour, un intérêt grandissant a été porté à des propriétés magnétiques, telles que la température de Curie, l'aimantation et la susceptibilité magnétique, en utilisant la technique de fonction de Green avec différents types de couplages et différents approximations [4-6]. Cependant, moins d'importance a été accordée à l'effet des excitations magnétiques sur les propriétés magnétiques résultantes. Toutefois, R. DeWames, T. Wolfram et E. Ilisca, E. Galais et al. [14,15] se sont penchés sur cet aspect en présentant une étude détaillée mais demeurant limitée car le modèle choisi, bien que se situant dans le contexte du modèle de Heisenberg, se limite uniquement à l'échange isotrope et l'existence de l'effet Zeeman. Notre apport consistera alors, à partir de ces modèles d'analyser les spectres d'excitations lorsque la coexistence de l'échange biquadratique et de l'anisotropie uniaxiale est considérée. Par conséquent, nous allons considérer l'effet de l'échange biquadratique sur les excitations magnétiques de surface ainsi que de volume dans un ferromagnétique de Heisenberg semi-infini et on s'intéresse plus aux excitations magnétiques on faisant plusieurs approximations justifiées.

En outre, les expériences ont montré qu'il existe un champ d'anisotropie très fort dans les matériaux magnétiques, jouant un rôle important dans les propriétés magnétiques. De nombreux articles ont été publiés traitant des systèmes magnétiques avec un seul ion uniaxiale anisotropie [7-10]. Nous avons donc ici aussi introduit les termes seule-ion d'anisotropie uniaxiale.

Dans le chapitre précédent, on s'est intéressé à un Heisenberg isotrope ferromagnétique. Dans ce travail, nous explorons l'effet de l'interaction d'échange biquadratique sur le comportement des excitations magnétiques de surface et à la présence de l'anisotropie uniaxiale en se basant sur l'approximation Randon Phase (RPA).

## 2. Différentes interactions d'échange

Il est possible de distinguer quatre échanges selon Herring [9] : l'interaction d'échange des électrons itinérants, l'échange indirect, l'échange direct et le super échange.

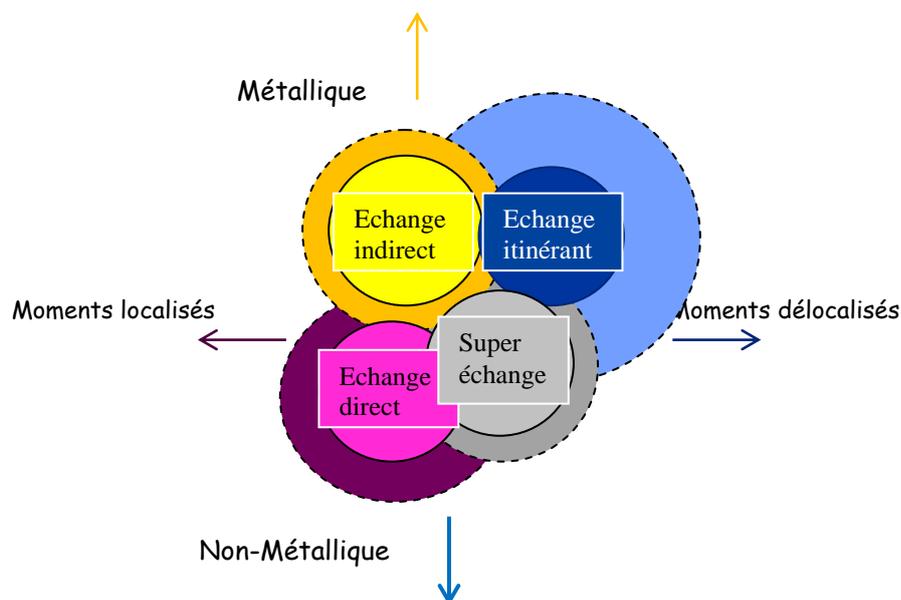


Figure.13 Les différents types d'échange

- 1) L'échange direct apparaît si les atomes interagissent entre eux faiblement, noté aussi interaction d'échange isotrope qui est l'échange associé à l'interaction directe spin-spin, il provient de l'interaction coulombienne entre les électrons de deux atomes,

dans ce travail on note  $J$  comme l'intégrale d'échange limitée aux premiers voisins, supposé perturbée par la surface, on introduit deux paramètres:  $\varepsilon_{\parallel} = J_{\parallel}/J$   $\varepsilon_{\perp} = J_{\perp}/J$  où  $J_{\parallel}$  relie deux voisins situés sur la première couche et  $J_{\perp}$  relie deux voisins situés l'un sur la première couche, l'autre sur la seconde couche, les autres couches sont supposées non perturbées. Les calculs sont effectués pour les plans de surface (001).

- 2) Le super-échange apparaît si l'échange se fait par biais d'un anion sur lequel se produit le couplage d'échange. Noté interaction d'échange biquadratique et c'est le couplage associé à l'interaction électron-élastique ou spin-phonon Kaplan [16], dans ce travail on note  $a$  comme paramètre d'échange biquadratique.
- 3) L'échange indirect se produit lorsque les couches internes atomiques des atomes ne sont pas complètement remplies comme le cas des éléments de transition.
- 4) L'échange des électrons itinérants se produit pour le gaz de Fermi.

Il est utile de souligner que le chapitre que nous présentons ici est structuré dans sa présentation par l'étude de trois configurations physiques différentes. Elles sont alors définies par l'existence ou non de l'anisotropie uniaxiale (L'échange biquadratique est considérée toujours présent). Ceci a pour effet de procéder à une analyse assez fine de ces paramètres sur le spectre d'excitations de volume et de surface. À cet effet nous exposons ces différentes configurations d'étude.

- Configuration magnétique 1.

Echange isotrope, échange biquadratique, anisotropie uniaxiale et champ d'anisotropie.

- Configuration magnétique 2.

Echange isotrope, échange biquadratique et anisotropie uniaxiale.

- Configuration magnétique 3.

Echange isotrope, échange biquadratique en absence d'anisotropie uniaxiale et champ d'anisotropie.

### 3. Excitations magnétiques de surface avec anisotropie uniaxiale et champ d'anisotropie de surface (Configuration 1)

L'objectif de cette étude est d'examiner les excitations magnétiques de surface pour des structures ferromagnétiques en tenant compte de l'échange bilinéaire, de l'échange biquadratique et de l'anisotropie uniaxiale ainsi que du champ d'anisotropie de surface.

On définit l'anisotropie uniaxiale comme étant l'anisotropie magnéto-cristalline qui provient du couplage spin-orbite avec le champ cristallin et favorise l'alignement de l'aimantation selon des directions privilégiées du réseau. Selon la symétrie du réseau l'anisotropie magnéto-cristalline peut être uniaxiale ou l'aimantation tend à s'aligner selon un axe privilégié. A la surface celle-ci a une grande influence à cause de la brisure de symétrie.

Le terme d'anisotropie uniaxiale peut se retrouver dans la définition de  $J_{ij}$  (analyse dimensionnelle). En effet alors que l'échange « classique » est associé aux termes  $i \neq j$ , le terme d'anisotropie va correspondre aux termes du type  $i = j$  avec  $D_i = J_{ii}^z \geq 0$  [20].

#### Configuration 1

L'opérateur Hamiltonien du système dans le contexte du modèle de Heisenberg en forme ultérieure s'écrit:

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j - a \sum_{ij} J_{ij} (\hat{S}_i \hat{S}_j)^2 - \sum_{\langle i \rangle} D_i (\hat{S}_i^z)^2 - h_A \sum_{i, n_z=0} \hat{S}_i^z. \quad (1)$$

(a)
(b)
(c)
(d)

Où  $S_i$  et  $S_j$  représentent respectivement l'opérateur de spin local situé sur les sites  $i$  et  $j$ .  $J_{ij}$  est l'intégrale d'échange des premiers proches voisins. L'Hamiltonien est décomposé en quatre parties : le premier terme (a) désigne l'énergie d'échange de Heisenberg, où les termes sont négatifs, représenté par l'alignement des spins ferromagnétiques dans un réseau. Le deuxième terme (b) désigne l'interaction d'échange biquadratique, qui devrait être considéré pour un système à haut spin  $S \geq 1$  [18-20] de même pour l'antiferromagnétique [21,22]. Le paramètre  $a$  mesure la force de l'échange biquadratique dans l'approximation classique. Le troisième terme (c) désigne l'énergie du seul-ion d'anisotropie uniaxiale due au champ cristallin.  $D_i$  est le paramètre d'anisotropie uniaxiale du champ cristallin mesurant la force de l'anisotropie sur le site  $i$ . L'interaction d'échange et l'anisotropie du seul-ion où les deux sites sont situés sur la

surface sont prises respectivement par  $J_S$  et  $D_S$ . Le dernier terme (d) indique que la surface peut être aussi placée dans un champ d'anisotropie  $h_A$ .

Une discussion sur le couplage d'échange biquadratique découlée d'une recherche approfondi des études expérimentales montrent l'intérêt et l'importance de ces termes donnés par Adler et al. [6]. La nécessité d'inclure ce terme remonte à Schrödinger et l'interprétation en termes d'un mécanisme de super-échange a été donnée par Anderson [23]. Pour un état fondamental ferromagnétique, le paramètre  $a$  doit prendre les valeurs  $0 \leq a < 1$ ,  $S \geq 1$ .

Nous allons d'abord effectuer une transformation algébrique et même des approximations utiles de l'Hamiltonien afin de le mettre sous une forme plus appropriée pour les calculs. D'après Kapor [16], utilisé aussi par I. L. Buchbinder, B. Westwanski [24], et par A. Lauchli, F. Mila, K. Penk [25], l'Hamiltonien du système s'écrit comme suit :

$$\hat{H} = \tilde{H}_E + \tilde{H}_B + \tilde{H}_A + \tilde{H}_{SA} \text{ avec}$$

$$\tilde{H}_{SA} = -h_A \sum_{i,n_z=0} S_i^z$$

$$\tilde{H}_E = -\sum_{ij} J_{ij} [S_i^+ S_j^- + S_i^z S_j^z (1 - 1/2a)]$$

$$\tilde{H}_B = -a \sum_{ij} J_{ij} \left[ \frac{3}{2} (S_i^z)^2 (S_j^z)^2 + \frac{1}{2} (S_i^+)^2 (S_j^-)^2 + S_i^+ S_i^z S_j^z S_j^- + S_i^z S_i^+ S_j^z S_j^- \right]$$

$$\tilde{H}_A = -\sum_i (D_i - aS(S+1) \sum_j J_{ij}) (S_i^z)^2$$

Où alors :

$$H =$$

$$-h_A \sum_{i,n_z=0} S_i^z - \sum_{ij} J_{ij} [S_i^+ S_j^- + S_i^z S_j^z (1 - \frac{a}{2}) - a \sum_{ij} J_{ij} \left[ \frac{3}{2} (S_i^z)^2 (S_j^z)^2 + \frac{1}{2} (S_i^+)^2 (S_j^-)^2 + S_i^+ S_i^z S_j^z S_j^- + S_i^z S_i^+ S_j^z S_j^- \right] - \sum_i (D_i - aS(S+1) \sum_j J_{ij}) (S_i^z)^2. \quad (2)$$

Comme cela a été souligné précédemment, un modèle ferromagnétique de Heisenberg, déterminé par un réseau, est supposé semi-infini. Afin d'obtenir les modes de l'onde de spin normal à la surface du volume nous utilisons les normes RPA et nous employons les opérateurs  $S_\sigma^\pm = S_\sigma^x \pm iS_\sigma^y$  dans l'équation de mouvement de Heisenberg. Ensuite, nous calculons la fonction de commutation  $[S_\sigma^+, \mathcal{H}]$  en vue d'obtenir l'équation du mouvement  $i\hbar \frac{\partial S_\sigma^\pm}{\partial t} = [S_\sigma^\pm, \hat{\mathcal{H}}]$  qui décrit le champ de précession de spin pour n'importe quel site  $\sigma$  dans le

domaine du volume suffisamment éloigné de la surface, à condition qu'ils remplissent les règles de commutations suivantes :

$$[S_{\sigma}^+, S_{\sigma'}^z] = -S_{\sigma}^+ \delta_{\sigma\sigma'};$$

$$[S_{\sigma}^-, S_{\sigma'}^z] = +S_{\sigma}^+ \delta_{\sigma\sigma'};$$

$$[S_{\sigma}^+, S_{\sigma'}^-] = 2S_{\sigma}^z \delta_{\sigma\sigma'}.$$

( $\delta_{\sigma\sigma'}$  Désigne le symbole de Kronecker delta).

Ainsi nous obtenons, l'équation de mouvement suivante:

$$[S_i^+, \mathcal{H}] = i\hbar \frac{\partial S_i^+}{\partial t}.$$

$$i\hbar \frac{\partial S_i^+}{\partial t} = \left(1 - \frac{a}{2}\right) \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (S_i^z S_j^+ - S_j^z S_i^+) + \frac{a}{2} \sum_{\langle i \rangle} J_{ij} \{ Q_j (S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+) + Q_i (S_j^+ S_j^z + S_j^z S_j^+) \} + D_i (S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+) + h_A S_i^+, \quad (3)$$

où  $Q_i = 3(S_i^z)^2 - S(S+1)$  et  $Q_j$  des moments quadrupolaires. On donne  $\hat{S} = \hbar S$  et  $\hbar = 1$ .

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

$Q_i = 3(S_i^z)^2 - S(S+1) \approx 3(S)^2 - S(S+1) = 2(S)^2 - S = S(2S-1)$  et ces équations sont linearisées par Randon Phase Approximation (RPA) [26,27].

Cette forme d'écriture résultante de l'échange biquadratique n'est pas définie pour des opérateurs de même site. Nous allons utiliser la représentation boson afin d'en tirer le découplage adéquat. Pour cela l'approximation de F. Bloch [28] qui est utilisée par D. Mattis [29] valable pour les basses températures est employée:

$$S_i^+ = \sqrt{2S} a_i \quad \text{et} \quad S_i^z = S - a_i^+ a_i$$

On donne

$$(S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+) = \sqrt{2S} (a_i (S - a_i^+ a_i) + (S - a_i^+ a_i) a_i).$$

$$(S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+) \approx \sqrt{2S} (2S - 1) a_i$$

$$(S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+) \approx (2S - 1) S_i^+$$

$$i\hbar \frac{\partial S_i^+}{\partial t} = \left(1 - \frac{a}{2}\right) \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (S_i^+ S_j^z - S_i^z S_j^+) + \frac{a}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \{ [3(S_j^z)^2 - S(S+1)](S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+) + [3(S_i^z)^2 - S(S+1)](S_j^+ S_j^z + S_j^z S_j^+) \} + D_i (S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+) + h_A S_i^+, \quad (4)$$

Dans le but de lineariser l'équation (4), on utilise la procédure RPA et on pose  $S_i^z = S_A^z$ ,  $S_j^z = S_B^z$  et  $\sum_{ij} J_{ij} = z_{ij} J_{ij}$  :

$$i\hbar \frac{\partial S_i^+}{\partial t} = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \left(1 - \frac{a}{2}\right) (\langle S_B^z \rangle S_i^+ - \langle S_A^z \rangle S_j^+) - \frac{a}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \times [\langle S_B^z \rangle (2 \langle S_B^z \rangle - 1)(2 \langle S_A^z \rangle - 1) S_i^+ - \langle S_A^z \rangle (2 \langle S_A^z \rangle - 1)(1 - 2 \langle S_B^z \rangle) S_j^+] + D_i (2 \langle S_A^z \rangle - 1) S_i^+ + h_A S_i^+, \quad (5)$$

en utilisant la transformée de Fourier dans l'espace réciproque  $(\vec{r}, \vec{k}_{\parallel})$  de la première zone de brillouin de la structure magnétique avec opérateurs d'onde de spins adaptés aux vecteurs d'ondes planes s'écrivent comme suit :

$$\begin{cases} \alpha_{k_0}^+(t, k_{\parallel}) = \sum_{\langle i \rangle} S_i^+(t) e^{-ik_{\parallel} r_i} \\ S_i^+(t) = \sum_{\langle k_{\parallel} \rangle} \alpha_{k_0}^+(t, k_{\parallel}) e^{-ik_{\parallel} r_i} \end{cases} \quad (6a)$$

$$\begin{cases} \beta_{k_0}^+(t, k_{\parallel}) = \sum_{\langle j \rangle} S_j^+(t) e^{-ik_{\parallel} r_j} \\ S_j^+(t) = \sum_{\langle k_{\parallel} \rangle} \beta_{k_0}^+(t, k_{\parallel}) e^{-ik_{\parallel} r_j} \end{cases} \quad (6b).$$

L'équation de mouvement s'écrit en fonction des opérateurs  $\alpha_{k_0}^+(t, k_{\parallel})$  et  $\beta_{k_0}^+(t, k_{\parallel})$  en insérant (3a) et (3b) dans l'équation (3) on obtient alors :

$$i\hbar \frac{\partial \alpha_{k_0}^+}{\partial t} = \left(1 - \frac{a}{2}\right) J z_{ij} (\langle S_A^z \rangle \alpha_{k_0}^+ - \langle S_A^z \rangle \gamma_{ij} \beta_{k_0}^+) + \frac{a}{2} J z_{ij} [\langle S_A^z \rangle (2 \langle S_A^z \rangle - 1)(2 \langle S_A^z \rangle - 1) \alpha_{k_0}^+ + \langle S_A^z \rangle (2 \langle S_A^z \rangle - 1)(1 - 2 \langle S_A^z \rangle) \gamma_{ij} \beta_{k_0}^+] + D_i (2 \langle S_A^z \rangle - 1) \alpha_{k_0}^+ + h_A \alpha_{k_0}^+ \quad (7)$$

considérant que la présence de la surface brise la symétrie de translation dans la direction  $(Oz)$ , la détermination d'une solution unique pour le champ de précession évanescents des modes de spin dans cette direction nécessite la connaissance des facteurs de phase spatiale qui caractérise les modes progressives et évanescents. Ceci est réalisé en considérant la propagation d'ondes de spin d'un site avec ses plus proches voisins dans les deux sens, le long

de la direction de symétrie brisée dans l'axe des ( $Oz$ ) de la maille cubique et en introduisant le terme dépendant du temps. Les modes de spin  $\alpha_{k_0}^{+Z}(r, t)$  et  $\beta_{k_0}^{+Z}(r, t)$  peuvent s'exprimer, respectivement, comme suit:

$$\alpha_{k_0}^{+Z}(r, t) = \alpha_{k_0}^{+Z}(r, 0) + \alpha_{k_0}^{+Z}(r) \rho_Z \exp(-i\omega t) \quad (8a)$$

$$\beta_{k_0}^{+Z}(r, t) = \beta_{k_0}^{+Z}(r, 0) + \beta_{k_0}^{+Z}(r) \rho_Z \exp(-i\omega t) \quad (8b)$$

où  $\rho_Z$  décrit ici le facteur de phase spatiale le long de la direction ( $Oz$ ) de la propagation en mode de l'onde-spin, survenant sur les sites de spin magnétique du réseau. En insérant les équations (5) et (6) dans l'équation (4), cela conduit à obtenir la propagation sur les sites magnétique en dehors de la région de surface.

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \alpha_{k_0}^+ e^{-i\omega t}}{\partial t} = & \left(1 - \frac{a}{2}\right) J_{ij} z_{ij} (\alpha_{k_0}^+ e^{-i\omega t} S_j^z - S_i^z \beta_{k_0}^+ e^{-i\omega t} \gamma_{ij}) + a/2 J_{ij} z_{ij} [\langle S_j^z \rangle (2 \langle S_j^z \rangle \\ & - 1)(2 \langle S_i^z \rangle - 1) \alpha_{k_0}^+ e^{-i\omega t} - \langle S_i^z \rangle (2 \langle S_i^z \rangle - 1)(2 \langle S_j^z \rangle - 1) \beta_{k_0}^+ e^{-i\omega t} \gamma_{ij}] + \\ & D_i (2 \langle S_i^z \rangle - 1) \alpha_{k_0}^+ e^{-i\omega t} + h_A \alpha_{k_0}^+ e^{-i\omega t} \end{aligned} \quad (9)$$

Pour des sites donnés  $i, j$ :  $D_i = D$ ,  $S_i^z = S_A = S$  et  $S_j^z = S_B = S$  on a :

$$\begin{aligned} \hbar\omega \alpha_{k_0}^+ = & \left(1 - \frac{a}{2}\right) J_{ij} z_{ij} (\alpha_{k_0}^+ S_B - S_A \beta_{k_0}^+ \gamma_{ij}) + \frac{a}{2} J_{ij} z_{ij} S_B (2S_B - 1)(2S_A - 1) \alpha_{k_0}^+ - \\ & S_A (2S_A - 1)(2S_B - 1) \beta_{k_0}^+ \gamma_{ij}] + D(2S_A - 1) \alpha_{k_0}^+ + h_A \alpha_{k_0}^+, \end{aligned} \quad (10)$$

ce qui nous conduit vers l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \left[ \hbar\omega - \left(1 - \frac{a}{2}\right) J_{ij} z_{ij} S - \frac{a}{2} J_{ij} z_{ij} S (2S - 1)(2S - 1) - D(2S - 1) - h_A \right] \alpha_{k_0}^+ = & - \left[ \frac{a}{2} S (2S - 1)(2S - 1) + \left(1 - \frac{a}{2}\right) S \right] \beta_{k_0}^+ \gamma_{ij} J_{ij} z_{ij}. \end{aligned} \quad (11)$$

$z_{ij}$  et  $\gamma_{ij}(\vec{k})$  sont déterminés en raison de la symétrie de la structure magnétique,  $z_{ij}$  caractérise le nombre de coordination entre premiers voisins, ainsi  $J_{ij} z_{ij} = J z_{ij}$ .

On donne le facteur de phase  $\gamma_{ij}(k)$  tel que :

$$\gamma_{ij}(\vec{k}) = \frac{1}{z_{ij}} \sum_{\langle ij \rangle} e^{i\vec{k}(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}, \quad (12)$$

$$\gamma_{ij}(k) = \frac{1}{3} [\cos(k_x a_x) + \cos(k_y a_y) + \cos(k_z a_z)],$$

$$\gamma_{ij}(k) = \frac{1}{z_{ij}^{\parallel}} [2 \cos(k_x a_x) + 2 \cos(k_y a_y)] + \frac{1}{z_{ij}^{\perp}} [2 \cos(k_z a_z)],$$

$$\gamma_{ij}^{\parallel}(\vec{k}) = \frac{1}{z_{ij}^{\parallel}} \sum_{\langle ij \rangle} e^{i\vec{k}_{\parallel}(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}. \quad (13)$$

On note  $\gamma_{ij}(k) = \gamma_{ij}^{\parallel} + \gamma_{ij}^{\perp}$ , alors  $\gamma_{ij}^{\parallel} = \gamma_{\parallel}$  où  $\gamma_{\parallel} = \cos(k_x a_x) + \cos(k_y a_y)$ ,  $\frac{1}{z_{ij}^{\perp}} [2 \cos(k_z a_z)] = \rho_z + \rho_z^{-1}$  avec  $z_{ij}^{\perp} = z_{\perp} = 1$  et  $z_{ij}^{\parallel} = z_{\parallel} = 4$ .

Pour n'importe quels sites  $i, j$  donnés d'un réseau ferromagnétique,  $\alpha_{k_0}^+ = \beta_{k_0}^+$  et l'équation (11) s'écrit :

$$\left[ \hbar\omega - \left[ \left(1 - \frac{a}{2}\right) S + \frac{a}{2} S(2S - 1)(2S - 1) \right] J z_{ij} - (D(2S - 1) + h_A) \right] \alpha_{k_0}^+ + \left[ \frac{a}{2} S(2S - 1)(2S - 1) + \left(1 - \frac{a}{2}\right) S \right] \alpha_{k_0}^+ \gamma_{ij} z_{ij} = 0, \quad (14)$$

on pose  $\alpha(a) = \left(1 - \frac{a}{2}\right) S + \frac{a}{2} S(2S - 1)(2S - 1) = S \left(1 + a2S(S - 1)\right)$  et  $\Omega_0 = D(2S - 1) + h_A$ , l'équation (9) devient alors:

$$[\hbar\omega - \alpha(a)z_{ij}](1 - \gamma_{ij}) - \Omega_0 \alpha_{k_0}^+ = 0, \quad (15)$$

Ou bien  $\alpha_{k_0}^+ \cdot D_b(E, \vec{k}) = 0$ ,

pour que cette dernière équation soit vérifiée il faut que  $D_b(E, \vec{k}) = 0$ .

- **Equation séculaire de volume :**

Pour obtenir les états de magnons en volume projetés en surface, il est important d'effectuer la transformation suivante :

$$D_b(E, \vec{k}) \rightarrow D_b(E, \rho, \vec{k}_{\parallel}),$$

le réseau est uniforme, ainsi les modes en volume peuvent être quantifiés par l'équation exprimée en  $\rho_z$ .

$$(\alpha)J\rho_z^2 + [\hbar\omega - \Omega_0 - \alpha(a)J_{z\parallel}\gamma_{\parallel}]\rho_z + \alpha(a)J = 0, \quad (16)$$

en notant  $E = \hbar\omega$  et en utilisant le facteur de phase mentionné ci-dessus avec le vecteur d'onde réel  $k_z$  défini par  $\rho_z = e^{+ik_z a_z}$ , le mode de propagation, caractérisés alors par des valeurs particulières  $|\rho_z| = 1$  implique :

$$\rho_z^{\pm} = \exp(\pm ik_z a_z), \quad (17)$$

Où les signes  $\pm$  correspondent aux ondes progressives loin de la couche de surface. L'équation (11) montre que les amplitudes des ondes de spin ont des valeurs finies sur le cristal entier et permet d'écrire alors :

$$\eta(E, k) = \rho_z + \rho_z^{-1} = 2\cos k_z a_z \quad (18)$$

- **Equation d'onde de spin de surface en fonction de l'amplitude :**

Les solutions de l'équation (5) sont des ondes planes et s'écrit :

$$\alpha_{\vec{k}}^+(\omega, t) = U_{n(l)}(k_{\parallel}, \omega) e^{-i\omega t} \quad (19)$$

où  $U_{n(l)}(k_{\parallel}, \omega)$  est la valeur moyenne de l'opérateur magnons, proportionnelle à la valeur transversale de la précession de l'aimantation et représente donc l'amplitude de l'onde de spin de site ( $l$ ) sur le plan  $n$ .

L'insertion de l'équation (14) conduit aux composantes de Fourier pour les sites de spin magnétiques situées sur les couches du réseau proche de la surface. Les différents équations des couches atomiques définies par  $n$  s'écrivent alors:

pour  $n = 1$

$$\hbar\omega U_1 - \alpha(a) \left( 4J_{\parallel} (1 - \gamma_{\parallel}) + J_{\perp} + (D_s(2S - 1) + \hbar a) \right) U_1 + \alpha(a) J_{\perp} \gamma_{\perp} U_2 = 0 \quad (20)$$

pour  $n = 2$

$$\hbar\omega U_2 - \alpha(a) \left( 4J (1 - \gamma_{\parallel}) + J + J_{\perp} + D(2S - 1) \right) U_2 + \alpha(a) J_{\perp} \gamma_{\perp} U_1 + \alpha(a) J U_3 = 0 \quad (21)$$

pour  $n = 3$

$$\hbar\omega U_3 - \alpha(a) \left( 2J(3 - 2\gamma_{\parallel}) + D(2S - 1) \right) U_3 + \alpha(a)J(U_2 + U_4) = 0 \quad (22)$$

En insérant les équations (14) et (16) dans les transformées de Fourier des magnons de spin des sites localisés et en divisant ces équations par  $\alpha(a)J$  et en faisant le changement de variables on obtient:

$$\frac{E}{J} = \frac{\hbar\omega}{J\alpha(a)}; \quad \varepsilon_{\perp} = \frac{J_{\perp}}{J}; \quad \varepsilon_{\parallel} = \frac{J_{\parallel}}{J}, \quad \omega_s = \frac{(D_s(2S-1)+\hbar a)}{J\alpha(a)} \quad \text{et} \quad \omega_o = \frac{D(2S-1)}{J\alpha(a)}.$$

pour  $n = 1$

$$(E/J)U_1 - (4\varepsilon_{\parallel}(1 - \gamma_{\parallel}) + \varepsilon_{\perp} + \omega_s)U_1 + \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} U_2 = 0 \quad (20)'$$

pour  $n = 2$

$$(E/J)U_2 - (4(1 - \gamma_{\parallel}) + \varepsilon_{\perp} + 1 + \omega_o)U_2 + \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} U_1 + U_3 = 0 \quad (21)'$$

pour  $n = 3$

$$(E/J) U_3 - (2(3 - 2\gamma_{\parallel}) + \omega_o)U_3 + U_2 + U_4 = 0 \quad (22)'$$

Avec  $\gamma_{ij}^{\parallel} = \cos(k_x a_x) + \cos(k_y a_y)$ .

Les équations d'amplitude d'onde de spin correspondante à la  $n^{\text{ième}}$  couche parallèle à la surface peuvent être réécrites à partir des équations de (20)' à (22)' sous forme matricielle. Cela conduit à

$$[M_n]|U_n\rangle = |0\rangle \quad (23)$$

$$U_n = \sum_{i=1}^{(n_e+n_p)} [\eta_{z(i)}]^{n-3} R_i C(\eta_{z(i)}) \quad (24)$$

L'équation (19), appliquée aux couches du réseau semi-infini ferromagnétique des régions intermédiaires du volume ( $n \geq 3$ ) conduit à l'expression suivante:

$$U_n = [\eta_{z(1)}]^{n-3} R_1 C(\eta_{z(1)}) \quad (25)$$

Ainsi, l'amplitude d'onde de spin pour la couche  $n = 3$  est

$$U_3 = R_1 C(\rho_{z(1)}) \quad (26)$$

Et pour la couche  $n = 4$

$$U_4 = \eta_{z(1)} R_1 C(\rho_{z(1)}) \quad (27)$$

Ainsi, les équations de (20) à (22) peuvent être traduites en une équation matricielle de dimension  $M_R(4 \times 3)$  dite de raccordement qui s'écrit comme suit:

$$\begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & C(\rho_{z(1)}) \\ 0 & 0 & C(\rho_{z(1)}) \cdot \rho_{z(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ R_1 \end{bmatrix}$$

avec  $R_1$  le facteur de raccordement.

En utilisant la technique ci-dessus le long de la direction de la symétrie brisée, il est possible d'exprimer les équations dynamiques de l'amplitude du champ de précession de spin près de la région de surface, en extrayant des équations (20), (21) et (22) une sous-matrice  $M_V(3 \times 4)$  correspondant aux plans  $n \leq 3$  et qui permet de définir à la fois la surface et les couches adjacentes. Le produit matriciel  $[M_R(4 \times 3) \times M_V(3 \times 4)]$  nous permet d'obtenir une matrice dynamique carrée  $M_S$  de spin de surface.

$$M_S(3 \times 3) = M_V(3 \times 4) \times M_R(4 \times 3)$$

$$\begin{bmatrix} [E - 2\varepsilon_{\parallel}(2 - \gamma_{\parallel}) - \varepsilon_{\perp} - \omega_s] & \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} & 0 & 0 \\ \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} & [E - 2\varepsilon_{\parallel}(2 - \gamma_{\parallel}) - 1 - \varepsilon_{\perp} - \omega_o] & \gamma_{\perp} & 0 \\ 0 & \gamma_{\perp} & [E - 6 + 2\gamma_{\parallel} - \omega_o] & \gamma_{\perp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ R_1 \end{bmatrix} = 0$$

On obtient un système de la forme  $M_S(E, \vec{k}_{\parallel}) \begin{bmatrix} U \\ R \end{bmatrix} = 0$  où  $U$  représentent les vecteurs des amplitudes des ondes de spin sur les plans de zone de surface et  $R$  représente la composante du facteur de raccordement. La matrice dynamique  $M_S$  des états localisés du système ferromagnétique semi-infini s'écrit alors :

$$\begin{bmatrix} [E - 2\varepsilon_{\parallel}(2 - \gamma_{\parallel}) - \varepsilon_{\perp} - \omega_s] & \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} & \mathbf{0} \\ \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} & [E - 2\varepsilon_{\parallel}(2 - \gamma_{\parallel}) - 1 - \varepsilon_{\perp} - \omega_o] & \gamma_{\perp} \mathbf{C}(\rho_{z(1)}) \\ \mathbf{0} & \gamma_{\perp} & \{[E - 6 + 2\gamma_{\parallel} - \omega_o] \mathbf{C}(\rho_{z(1)}) + \gamma_{\perp} \cdot \mathbf{C}(\rho_{z(1)}) \cdot \rho_{z(1)}\} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ R_1 \end{bmatrix} = 0$$

La région de l'espace  $(E, \vec{k}_{\parallel})$  des états localisés de surface où les facteurs d'évanescence  $\rho_i$  de l'onde de spin sont que pour les valeurs  $\eta_{z(i)} < 1$ .

On calcule les courbes de dispersion des magnons de surface du plan (100) de la zone de Brillouin en utilisant la relation de compatibilité  $\det(M_S(E, \vec{k}_{\parallel})) = 0$ .

On pose :

$$\omega_0 = \frac{D(2S-1)}{J\alpha(a)},$$

$$\omega_s = \frac{D_s(2S-1) + h_A}{J\alpha(a)}.$$

Décrire ensuite les composantes du champ de précession de spin résultant des modes de spin localisés et les champs de processionne de spin évanescence qui se produisent dans le volume et agit sur un vecteur colonne  $V$ . Cela conduit au système linéaire homogène suivant :

$$[M_S(E, \varepsilon_{\parallel}, \alpha(a), D, D_s, \omega_0, \omega_s, \gamma_{\parallel}, h_A, \rho_{z(i)})] |V\rangle = |0\rangle \quad (28)$$

$\varepsilon_{\parallel} = J_{\parallel}/J$ ,  $\varepsilon_{\perp} = J_{\perp}/J$  désignent respectivement le couplage d'échange de surface-volume, le couplage d'échange entre l'adjacente-volume.  $\{\rho_{z(i)}\}$  est un ensemble de  $i = 1, 2, \dots, (n_e + n_p)$  racines complexes de l'équation séculaire (7) des espaces  $(E, \omega_q)$ . Dans le cadre de ces racines, il est important de souligner qu'une racine a une valeur absolue supérieure à l'unité, tandis que l'autre à une valeur absolue plus petite que l'unité. Ainsi, le problème est posé avec l'onde de spin de surface dont l'amplitude des modes localisés est donnée par l'ensemble

des doublets de facteur  $(\rho_{z(i)}, \rho_{z(i)}^{-1})$ , répondant à la condition  $|\rho_{z(i)}| < 1$ . Les expressions non-nulles pour  $M_s(l, l')$  sont données sous les formes suivantes:

$$M_s(1,1) = \frac{E}{JS} + 2\varepsilon_{\parallel}(2 - \gamma_{\parallel}) - \varepsilon_{\perp} - \omega_s,$$

$$M_s(1,2) = \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} = 1,$$

$$M_s(1,3) = M_s(3,1) = 0,$$

$$M_s(2,1) = \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} = 1,$$

$$M_s(2,2) = \frac{E}{JS} + 2\varepsilon_{\parallel}(2 - \gamma_{\parallel}) - 1 - \varepsilon_{\perp} - \omega_0,$$

$$M_s(2,3) = C(\rho_{z(i)}),$$

$$M_s(3,2) = \gamma_{\perp} = 1,$$

$$M_s(3,3) = \left(\frac{E}{JS} + 2\gamma_{\parallel} - 6 - \omega_0\right) C(\rho_{z(i)}) + C(\rho_{z(i)}) \cdot \rho_{z(i)}.$$

En calculant les courbes de dispersion des magnons de surface du plan (100) de la zone de Brillouin en fonction de la relation de compatibilité  $\det(M_S(E, \vec{k}_{\parallel})) = 0$ .

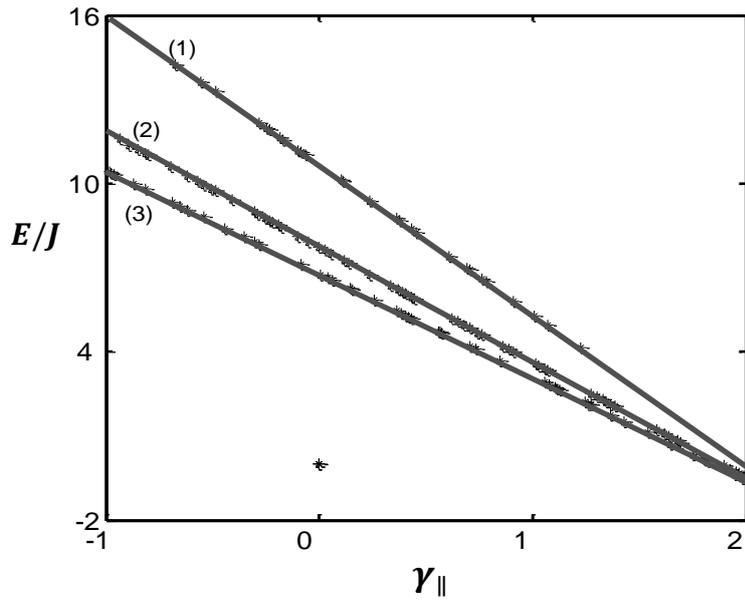


Figure.14 Energie des modes localisés de surfaces pour  $h_A = -19$ , (1) $a = 0$ , (2) $a = 0.2$ , (3) $a = 0.3$

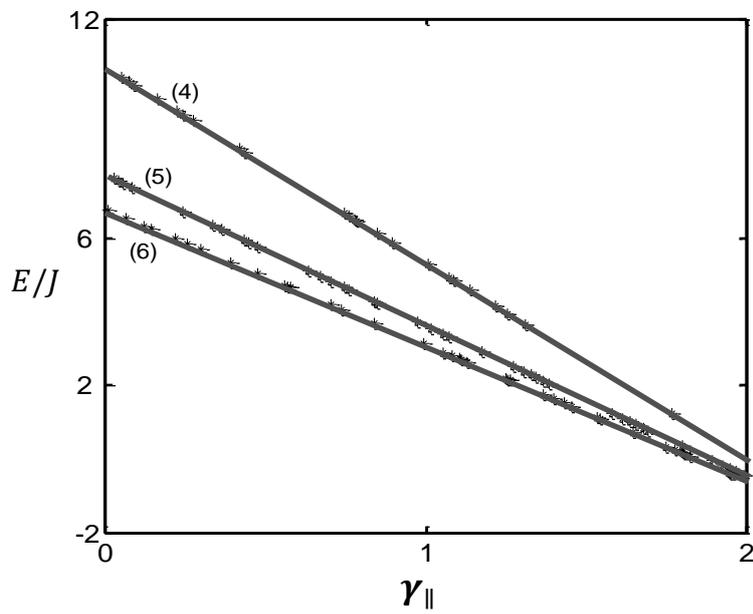


Figure.15 Energie des modes localisés de surfaces pour  $h_A = -7$  (4)  $a = 0$ , (5) $a = 0.2$ , (6) $a = 0.3$ .

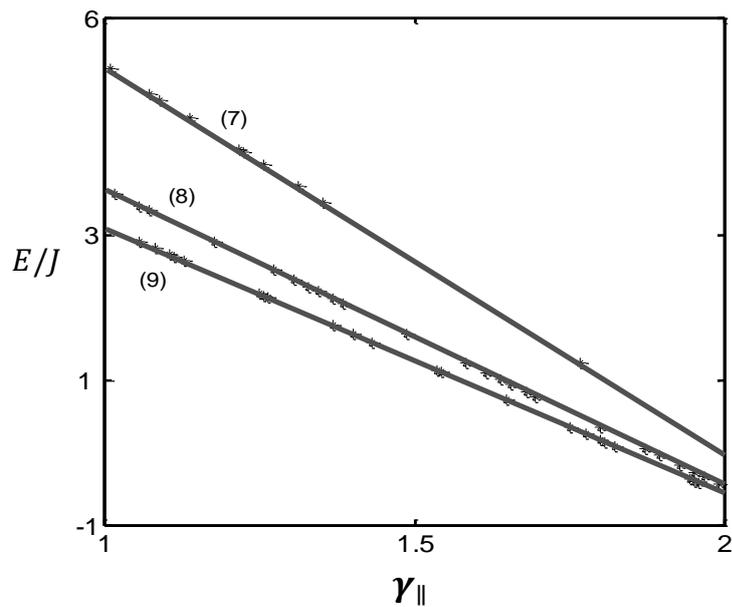


Figure.16 Energie des modes localisés de surfaces  $h_A = -3$ . (7)  $a = 0$ , (8)  $a = 0.2$ , (9)  $a = 0.3$ .

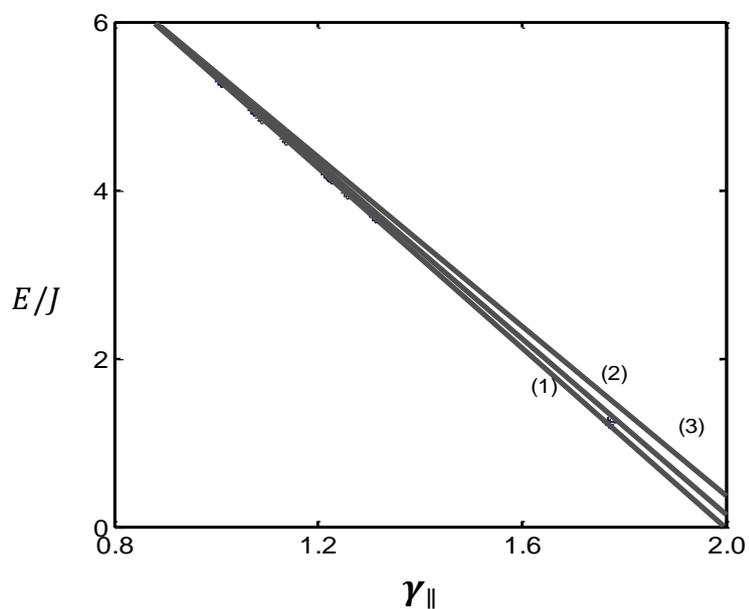


Figure.17 Energie des modes localisés de surfaces. (1)  $\varepsilon_{\perp} = \frac{7}{2}$ , (2)  $\varepsilon_{\perp} = \frac{3}{2}$ , (3)  $\varepsilon_{\perp} = 1$ . (2).étant la droite du milieu

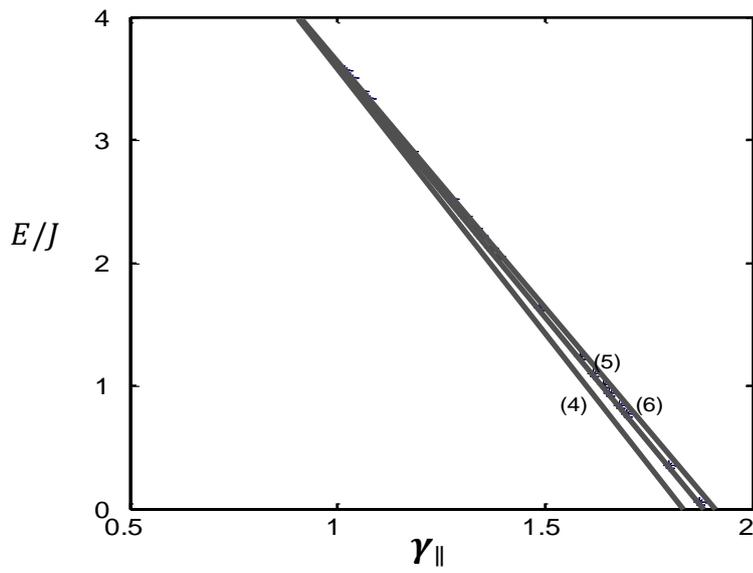


Figure.18 Energie des modes localisés de surfaces. (4)  $\varepsilon_{\perp} = \frac{7}{2}$ , (5)  $\varepsilon_{\perp} = \frac{3}{2}$ , (6)  $\varepsilon_{\perp} = 1$ .  
(5).étant la droite du milieu

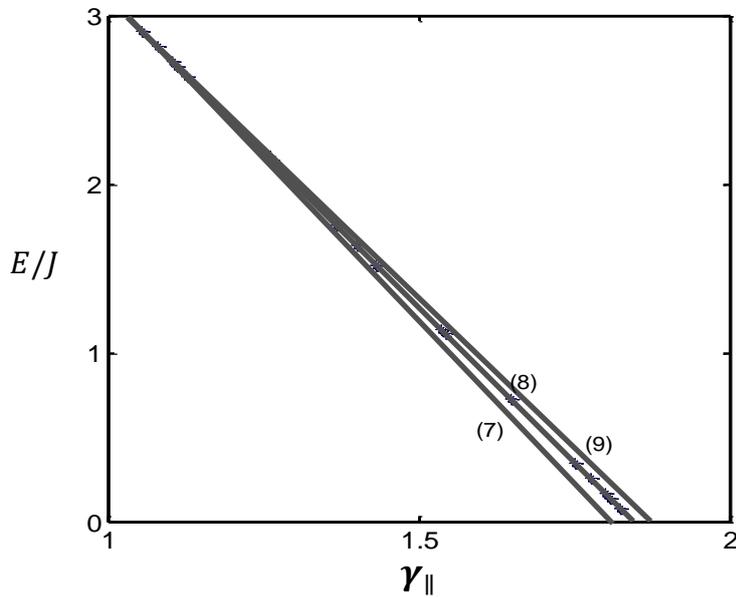


Figure.19 Evolution le l'énergie des modes localisés de surfaces. (7)  $\varepsilon_{\perp} = \frac{7}{2}$ , (8)  $\varepsilon_{\perp} = \frac{3}{2}$ ,  
(9)  $\varepsilon_{\perp} = 1$ . (8).étant la droite du milieu.

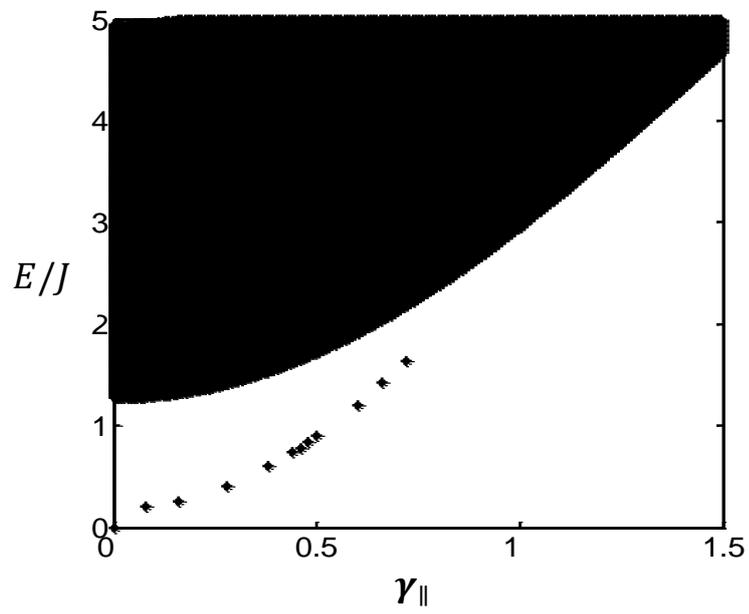


Figure.20 Le spectre d'énergie de l'onde de spin en volume et en surface pour la valeur de  $h_A = -12$  et  $a = 0.3$

#### 4. Excitations magnétiques de surface avec anisotropie uniaxiale et absence d'anisotropie de surface (Configuration 2)

##### Configuration 2

On étudie le modèle sans champ d'anisotropie, le cas ferromagnétique pour  $S = \frac{3}{2}$  l'Hamiltonien s'écrit alors :

$$\hat{\mathcal{H}} = -\sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j - a \sum_{ij} J_{ij} (\hat{S}_i \hat{S}_j)^2 - \sum_{\langle i \rangle} D_i (\hat{S}_i^z)^2.$$

Nous allons d'abord effectuer une transformation algébrique et même des approximations utiles de l'Hamiltonien afin de le mettre sous une forme plus appropriée pour les calculs,  $\hat{\mathcal{H}}$  s'écrit alors comme suit:

$$\hat{H} = \tilde{H}_E + \tilde{H}_B + \tilde{H}_A \text{ avec}$$

$$\tilde{H}_E = -\sum_{ij} J_{ij} [S_i^+ S_j^- + S_i^z S_j^z (1 - \frac{a}{2})]$$

$$\tilde{H}_B = -a \sum_{ij} J_{ij} [\frac{3}{2} (S_i^z)^2 (S_j^z)^2 + \frac{1}{2} (S_i^+)^2 (S_j^-)^2 + S_i^+ S_i^z S_j^z S_j^- + S_i^z S_i^+ S_j^z S_j^-]$$

$$\tilde{H}_A = -\sum_i (D_i - aS(S+1) \sum_j J_{ij}) (S_i^z)^2$$

Pour trouver l'expression de l'équation séculaire et l'équation d'amplitude d'onde de spin pour un système ferromagnétique, nous faisons les mêmes étapes suivit précédemment dans la configuration 1.

L'équation de mouvement de champ de spin  $i\hbar \frac{\partial S_i^+}{\partial t}$  s'écrit en calculant la fonction de commutation suivante en écrivant  $[S_i^+, \mathcal{H}]$  :

$$[S_i^+, \mathcal{H}] = i\hbar \frac{\partial S_i^+}{\partial t},$$

$$i\hbar \frac{\partial S_i^+}{\partial t} = \left(1 - \frac{a}{2}\right) \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (S_i^z S_j^+ - S_j^z S_i^+) + \frac{a}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \{ Q_j (S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+) + Q_i (S_j^+ S_j^z + S_j^z S_j^+) \} + D_i (S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+), \quad (1)$$

Où  $Q_i, Q_j$  sont les moments quadrupolaires des deux sites  $i$  et  $j$ . Ces équations sont linéarisées par l'approximation de Randon phase ou bien l'approximation de phase aléatoire (RPA),

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

mais elles ne sont pas définies pour les termes avec les opérateurs sur le même site, résultant de l'échange biquadratique.

Nous allons utiliser la représentation boson afin d'en tirer le découplage adéquat. Nous nous servons alors de l'approximation de Bloch [28] valable pour les basses températures pour décrire un réseau semi-infini.

$$S_i^+ = \sqrt{2S}a_i \quad \text{et} \quad S_i^z = S.$$

On donne

$$(S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+) = \sqrt{2S}a_i(S + S)$$

$$(S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+) \approx \sqrt{2S}a_i(2S)$$

$$(S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+) \approx (2S)S_i^+$$

$$Q_i = 3(S_i^z)^2 - S(S + 1) = S(2S - 1)$$

$$\text{On pose } Q \approx Y = 3(S)^2 - 2$$

L'équation (1) devient :

$$i\hbar \frac{\partial S_i^+}{\partial t} = \left(1 - \frac{a}{2}\right) \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (\langle S_i^z \rangle S_j^+ - \langle S_j^z \rangle S_i^+) + \frac{a}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \{ Q_j(2S) S_j^+ + Q_i(2S) S_i^+ \} + 2SD_i S_i^+, \quad (2)$$

en utilisant la transformée de Fourier dans l'espace réciproque  $(\vec{r}, \vec{k})$  de la première zone de Brillouin, en insérant les opérateurs d'onde de spins adaptés aux vecteurs d'ondes planes s'écrivent selon les équations (3a) et (3b) de la configuration. L'équation de mouvement engendrée s'écrit en fonction des opérateurs  $\alpha_{k_0}^+(t, k_{\parallel})$  et  $\beta_{k_0}^+(t, k_{\parallel})$  comme suit :

$$i\hbar \frac{\partial \alpha_{k_0}^+}{\partial t} = \left(1 - \frac{a}{2}\right) J z_{ij} (\langle S_A^z \rangle \alpha_{k_0}^+ - \langle S_A^z \rangle \gamma_{ij} \beta_{k_0}^+) + \frac{a}{2} J z_{ij} [\langle S_A^z \rangle (2 \langle S_A^z \rangle - 1) 2 \langle S_A^z \rangle \alpha_{k_0}^+ - \langle S_A^z \rangle (2 \langle S_A^z \rangle - 1) 2 \langle S_A^z \rangle \gamma_{ij} \beta_{k_0}^+] + D_i (2 \langle S_A^z \rangle) \quad (4).$$

En introduisant le terme dépendant du temps, L'équation (4) s'exprime en fonction de  $\alpha_{k_0}^{+Z}(r, t)$  et  $\beta_{k_0}^{+Z}(r, t)$  et s'écrit:

$$i\hbar \frac{\partial \alpha_{k_0}^+ e^{-i\omega t}}{\partial t} = \left(1 - \frac{a}{2}\right) J_{ij} z_{ij} (\alpha_{k_0}^+ e^{-i\omega t} S_j^z - S_i^z \beta_{k_0}^+ e^{-i\omega t} \gamma_{ij}) + \frac{a}{2} J_{ij} z_{ij} [ \langle S_j^z \rangle (2 \langle S_j^z \rangle - 1) 2 \langle S_i^z \rangle \alpha_{k_0}^+ e^{-i\omega t} - \langle S_i^z \rangle (2 \langle S_i^z \rangle - 1) 2 \langle S_j^z \rangle \beta_{k_0}^+ e^{-i\omega t} \gamma_{ij}] + D_i 2 \langle S_i^z \rangle \alpha_{k_0}^+ e^{-i\omega t} \quad (6)$$

En posant  $D_i = D$ ,  $S_i^z = S_A = S$  et  $S_j^z = S_B = S$ ,  $J_{ij} z_{ij} = Jz$ ,  $\alpha_{k_0}^+ = \beta_{k_0}^+$  celle pour des n'importe quels sites donnés  $i, j$  d'une structure ferromagnétique, l'équation de mouvement du volume s'écrit:

$$\left[ \hbar\omega - \left[ \left(1 - \frac{a}{2}\right) S + \frac{a}{2} S(2S - 1)(2S) \right] Jz - (D2S) \right] \alpha_{k_0}^+ = - \left[ \frac{a}{2} S(2S - 1)(2S) + \left(1 - \frac{a}{2}\right) S \right] \alpha_{k_0}^+ \gamma_{ij} Jz = 0. \quad (7)$$

Or  $\alpha(a) = S \left( \left(1 - \frac{a}{2}\right) + \frac{a}{2} (2S - 1) 2S \right)$  alors l'équation précédente s'écrit :

$$[\hbar\omega - \alpha(a) z_{ij}] (1 - \gamma_{ij}) - \Omega_0 \alpha_{k_0}^+ = 0. \quad (8)$$

La différence entre la configuration.1 et la configuration.3 provient de l'approximation de Bloch valable pour les basses températures, ou dans la première  $S_i^z = S - a_i^+ a_i$  et dans la dernière on à  $S_i^z = S$ , sella se traduit par une différence dans le paramètre  $\alpha(a)$  qui a donc une grand influence sur l'apparitions des modes localisés de surface.

$$\left( \begin{array}{l} \frac{a}{2} S(2S - 1)(2S - 1) \equiv \frac{a}{2} S(2S - 1) 2S \\ D(2S - 1) \equiv 2SD. \end{array} \right.$$

$$\alpha(a) = \left(1 - \frac{a}{2}\right) S + \frac{a}{2} S(2S - 1) 2S = S \left(1 - \frac{a}{2} + aS(2S - 1)\right), \text{ configuration 3}$$

$$\alpha(a) = \left(1 - \frac{a}{2}\right) S + \frac{a}{2} S(2S - 1)(2S - 1) = S \left(1 + a2S (S-1)\right), \text{ configuration 1.}$$

Le facteur de structure dans ce cas de configuration est :

$$\gamma_{ij}(\vec{k}) = \frac{1}{Z_{ij}} \sum_{\langle ij \rangle} e^{i\vec{k}(\vec{r}_j - \vec{r}_i)} = \gamma_{ij}^{\parallel} + \gamma_{ij}^{\perp},$$

$$\gamma_{ij}(k) = \frac{1}{z_{ij}^{\parallel}} [2 \cos(k_x a_x) + 2 \cos(k_y a_y)] + \frac{1}{z_{ij}^{\perp}} [2 \cos(k_z a_z)],$$

avec  $\gamma_{ij}^{\parallel} = \gamma_{\parallel}$  et  $\gamma_{\parallel} = \frac{1}{2} (\cos(k_x a_x) + \cos(k_y a_y))$  et  $z_{ij} = z = 6$  caractérise le nombre de coordination entre premiers voisins, déterminés en raison de la symétrie de la structure magnétique, valable pour le facteur de structure  $\gamma_{ij}(k)$ .

Pour que cette équation (7) soit vérifiée il faut que  $\hbar\omega - \alpha(a)z_{ij}(1 - \gamma_{ij}) - \Omega_0 = 0$  (9), le réseau est uniforme ainsi les modes en volume peuvent être quantifiés par l'équation exprimée en  $\rho_z = e^{ik_z a_z}$  qui est le facteur de phase et les modes progressives sont caractérisés alors par des valeurs particulières  $|\rho_z| = 1$ , l'équation(9) s'écrit :

$$\alpha(a)J\rho^2 + [\hbar\omega - \Omega_0 - \alpha(a)Jz_{ij}^{\parallel}\omega_q]\rho + \alpha(a)J = 0, \quad (10)$$

on pose  $\hbar = 1$ ,  $d = [\omega - 2SD - 6J\{S2(1 - \frac{a}{2}) + S2aY\} + 4J\{S2(1 - \frac{a}{2}) + S2aY\}\omega_q]/c$ ,  
 $d = \rho + \rho^{-1}$  avec  $|\rho| < 1$ ,  $c = -JS\{2(1 - \frac{a}{2}) + 2aY\}$  alors l'équation (10) devient :

$$[\omega - 2SD - 6SJ\{2(1 - \frac{a}{2}) + 2aY\} + 4SJ\{2(1 - \frac{a}{2}) + 2aY\}\omega_q] + SJ\{2(1 - \frac{a}{2}) + 2aY\}(\rho + \rho^{-1}) = 0$$

avec  $\alpha(a) = 2S\{(1 - \frac{a}{2}) + aY\}$ ,  $c = -J\alpha(a)$  et  $Y = 3S^2 - 2$ .

Les solutions de l'équation (5) sont des ondes planes

$$\alpha_{\vec{k}}^{\pm}(\omega, t) = U_{n(l)}(k_{\parallel}, \omega)e^{-i\omega t}, \quad (12)$$

où  $U_{n(l)}(k_{\parallel}, \omega)$  est l'amplitude de précession de l'onde de spin du site  $(l)$  sur le plan  $n$ . En introduisons l'équation (12) dans l'équation (8) nous conduit aux équations du mouvement pour les différentes couches atomiques  $n$ .

pour  $n = 1$ :

$$\omega U_1 - \alpha(a)(4J_{\parallel}(1 - \gamma_{\parallel}) + J + D_s 2S)U_1 + \alpha(a)J\gamma_{\perp} U_2 = 0 \quad (15)$$

pour  $n = 2$ :

$$\omega U_2 - \alpha(a)(4J(1 - \gamma_{\parallel}) + 2J + D2S)U_2 + \alpha(a)J\gamma_{\perp}(U_1 + U_3) = 0 \quad (16)$$

pour  $n = 3$ :

$$\omega U_3 - \alpha(a)(2J(3 - 2\gamma_{\parallel}) + D2S)U_3 + \alpha(a)J(U_2 + U_4) = 0 \quad (17)$$

En divisant ces équations par  $\alpha(a)J$  et en faisant le changement de variables :

$$\frac{E}{J} = \frac{\omega}{\alpha(a)}, J_{\perp} = J; J_{\parallel}/J = \varepsilon_{\parallel} \text{ et } \gamma_{\perp} = 1 \text{ on obtient :}$$

pour  $n = 1$  :

$$\frac{E}{J} U_1 - (4\varepsilon_{\parallel}(1 - \gamma_{\parallel}) + 1 + D_s 2S/J\alpha(a))U_1 + U_2 = 0 \quad (15)'$$

pour  $n = 2$  :

$$\frac{E}{J} U_2 - (4(1 - \gamma_{\parallel}) + 2 + D 2S/J\alpha(a))U_2 + (U_1 + U_3) = 0 \quad (16)'$$

pour  $n = 3$  :

$$\frac{E}{J} U_3 - (2(3 - 2\gamma_{\parallel}) + D 2S/J\alpha(a))U_3 + U_2 + U_4 = 0 \quad (17)'$$

Il est plus approprié d'écrire ces équations (15)' (16)'et (17)' en utilisant une forme matricielle dite de volume  $M_R(4 \times 3)$ .

$$\begin{bmatrix} [E - 4\varepsilon_{\parallel}(1 - \gamma_{\parallel}) - 1 - \omega_s] & \gamma_{\perp} & 0 & 0 \\ \gamma_{\perp} & [E - 4(1 - \gamma_{\parallel}) - 2 - \omega_o] & 1 & 0 \\ 0 & \gamma_{\perp} & [E - 6 + 4\gamma_{\parallel} - \omega_o] & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{bmatrix} = 0$$

$$\omega_o = D 2S/J\alpha(a) \text{ et } \omega_s = D_s 2S/J\alpha(a).$$

Dans la méthode de raccordement, les amplitudes de volume pour les couches  $n = 3$  et  $n = 4$  s'exprime en fonction de celle de la surface par le facteur de raccordement  $R_1$  présenté dans la matrice dite de raccordement  $M_V(4 \times 3)$ .

$$\begin{cases} U_3 = R_1 C(\rho_{z(1)}) \\ U_4 = R_1 C(\rho_{z(1)}) \rho_{z(1)} \end{cases}, \text{ avec } R_1 \text{ le facteur de raccordement.}$$

$$\begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & C(\rho_{z(1)}) \\ 0 & 0 & C(\rho_{z(1)}) \cdot \rho_{z(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ R_1 \end{bmatrix}$$

Le produit matriciel  $[M_R(4 \times 3) \times M_V(3 \times 4)]$  nous permet d'obtenir une matrice dynamique carrée  $M_S(3 \times 3)$  de spin de surface.

$$[M_S(E, \vec{k}_{\parallel})] \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ R_1 \end{bmatrix} = 0$$

La condition que le facteur d'évanescence  $|\rho_{z(i)}| < 1$  permet de déterminer les états localisés de surface et en utilisant la relation de compatibilité  $\det(M_S(E, \vec{k}_{\parallel})) = 0$ .

Nous obtenons les courbes de dispersion des ondes de spin de surface du plan (100) de la zone de Brillouin.

$$\begin{bmatrix} [E - 4\varepsilon_{\parallel}(1 - \gamma_{\parallel}) - 1 - \omega_s] & \gamma_{\perp} & 0 \\ \gamma_{\perp} & [E - 4(1 - \gamma_{\parallel}) - 2 - \omega_o] & R_1 C(\rho_{z(1)}) \\ 0 & \gamma_{\perp} & [E - 6 + 4\gamma_{\parallel} - \omega_o] R_1 C(\rho_{z(1)}) + R_1 C(\rho_{z(1)}) \rho_{z(1)} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ R_1 \end{bmatrix} = 0$$

Les expressions non-nulles pour  $M_S(l, l')$  sont données sous les formes suivantes:

$$M_S(1,1) = E + 4\varepsilon_{\parallel}(1 - \gamma_{\parallel}) - 1 - \omega_s$$

$$M_S(1,2) = \gamma_{\perp} = 1,$$

$$M_S(2,1) = \gamma_{\perp} = 1,$$

$$M_S(2,2) = E + 4(1 - \gamma_{\parallel}) - 2$$

$$M_S(2,3) = \gamma_{\perp} = 1,$$

$$M_S(3,2) = C(\rho_{z(1)}),$$

$$M_S(3,3) = (E + 4\gamma_{\parallel} - 6)C(\rho_{z(1)}) + C(\rho_{z(1)}) \cdot \rho_{z(1)}.$$

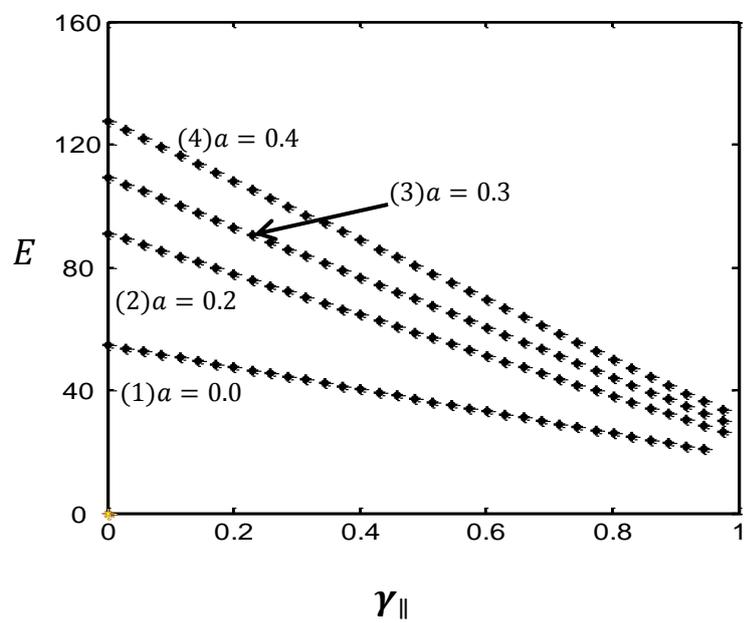


Figure.21 les spectres d'onde de spin de surface pour différentes valeurs du paramètre  $a$  (1) $a = 0$ , (2) $a = 0.2$ , (3) $a = 0.3$ , (4) $a = 0.4$  en fonction de  $\omega_q$ .

5. Excitations magnétiques de surface en l'absence d'anisotropie uniaxiale et de champ d'anisotropie de surface (Configuration 3)

Configuration 3

L'absence d'anisotropie uniaxiale se traduit par  $(D = 0, D_s = 0)$ , et l'absence de champ d'anisotropie se traduit par  $h_A = 0$ , l'Hamiltonien du système s'écrit :

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j - \frac{1}{2} \sum_{ij} K_{ij} (\hat{S}_i \hat{S}_j)^2$$

On passe par les mêmes étapes que le travail précédent, et on pose  $\alpha(a) = S(1 + a2S(S-1))$  et pour  $S = 1$  alors  $\alpha(a) = S$ .

On note que  $a = K/J$ , considéré comme étant le couplage biquadratique, variant entre  $0 \leq a < 1$ . Notre Hamiltonien s'écrit quelques applications algébriques et en absence d'anisotropie uniaxiale et champ d'anisotropie comme suit :

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} [S_i^+ S_j^- + S_i^z S_j^z] + \frac{1}{4} \sum_{ij} K_{ij} S_i^z S_j^z - \frac{1}{2} \sum_{ij} K_{ij} [\frac{3}{2} (S_i^z)^2 (S_j^z)^2 + \frac{1}{2} (S_i^+)^2 (S_j^-)^2 + S_i^+ S_i^z S_j^z S_j^- + S_i^z S_i^+ S_j^- S_j^+] + \frac{1}{2} \sum_i S(S+1) \sum_j K_{ij} (S_i^z)^2$$

L'équation du mouvement  $i\hbar \frac{\partial S_i^\pm}{\partial t} = [S_i^\pm, \hat{\mathcal{H}}]$  s'écrit en utilisant les opérateurs  $S_\sigma^\pm = S_\sigma^x \pm iS_\sigma^y$  et en calculons la fonction de commutation  $[S_\sigma^\pm, \mathcal{H}]$  comme suit :

$$\frac{i\hbar \partial S_i^+}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (S_i^z S_j^+ - S_j^z S_i^+) - \frac{1}{4} \sum_{\langle ij \rangle} K_{ij} (S_i^z S_j^+ - S_j^z S_i^+) + \frac{1}{2} \sum_{\langle i \rangle} K_{ij} \{ Q_j (S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+) + Q_i (S_j^+ S_j^z + S_j^z S_j^+) \} \quad (1)$$

On note  $K_{ij} = K$  sachant que  $a = K/J$  alors  $K_{ij} = aJ_{ij}$ , on peut écrire :

$$2i\hbar \frac{\partial S_i^+}{\partial t} = \left(1 - \frac{a}{2}\right) \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (S_i^z S_j^+ - S_j^z S_i^+) + \frac{a}{2} \sum_{\langle i \rangle} J_{ij} \{ Q_j (S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+) + Q_i (S_j^+ S_j^z + S_j^z S_j^+) \}.$$

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

$$S_i^+ = \sqrt{2S} a_i \quad \text{et} \quad S_i^z = S - a_i^+ a_i$$

On donne

$$(S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+) = \sqrt{2S}(a_i(S - a_i^+ a_i) + (S - a_i^+ a_i)a_i).$$

$$(S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+) \approx \sqrt{2S}(2S - 1)a_i$$

$$(S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+) \approx (2S - 1)S_i^+$$

$$Q_i = 3(S_i^z)^2 - S(S + 1) \approx 3(S)^2 - S(S + 1) = 2(S)^2 - S = S(2S - 1), \text{ de même pour } Q_j,$$

l'équation s'écrit alors, en utilisant la procédure RPA et en posant  $S_i^z = S_A^z$  et  $S_j^z = S_B^z$  sachant que  $\sum_{ij} J_{ij} = zJ$  comme suit :

$$\begin{aligned} 2 \frac{i\hbar \partial S_i^+}{\partial t} &= \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (\langle S_B^z \rangle S_i^+ - \langle S_A^z \rangle S_j^+) - \frac{1}{2} a \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (\langle S_B^z \rangle S_i^+ - \langle S_A^z \rangle S_j^+) - \\ &a \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \times [\langle S_B^z \rangle (2 \langle S_B^z \rangle - 1)(2 \langle S_A^z \rangle - 1) S_i^+ - \langle S_A^z \rangle (2 \langle S_A^z \rangle - 1)(1 - 2 \langle S_B^z \rangle) S_j^+] \end{aligned} \quad (2)$$

en utilisant la transformée de Fourier dans l'espace réciproque  $(\vec{r}, \vec{k})$  de la structure magnétique, décrites par les équations (3a) et (3b) dans la configuration 1, l'équation linéaire de mouvement exprimé en fonction des opérateurs  $\alpha_{k_0}^+(t, k)$  et  $\beta_{k_0}^+(t, k)$  s'écrivent comme suit :

$$\begin{aligned} 2i\hbar \frac{\partial \alpha_{k_0}^+}{\partial t} &= Jz(\langle S_A^z \rangle \alpha_{k_0}^+ - \langle S_A^z \rangle \gamma_{ij} \beta_{k_0}^+) - \frac{1}{2} aJz(\langle S_A^z \rangle \alpha_{k_0}^+ - \langle S_A^z \rangle \gamma_{ij} \beta_{k_0}^+) + \\ &zaJ[\langle S_A^z \rangle (2 \langle S_A^z \rangle - 1)(2 \langle S_A^z \rangle - 1) \alpha_{k_0}^+ + \langle S_A^z \rangle (2 \langle S_A^z \rangle - 1)(1 - 2 \langle S_A^z \rangle) \gamma_{ij} \beta_{k_0}^+] \end{aligned} \quad (3)$$

Avec  $\gamma_{ij}(\vec{k}) = \frac{1}{z_{ij}} \sum_{\langle ij \rangle} e^{i\vec{k}(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}$  le facteur de structure.

Les modes de spin s'écrivent en introduisant le terme dépendant du temps comme suit  $\alpha_{k_0}^{+Z}(r, t)$  et  $\beta_{k_0}^{+Z}(r, t)$  décrit dans la configuration 1 par les équations (8a) et (8b).  $\rho_z$  représente le facteur de phase spatiale le long de la direction (Oz), l'équation (3) devient :

$$\begin{aligned} 2i\hbar \frac{\partial \alpha_{k_0}^+ e^{-i\omega t}}{\partial t} &= Jz(\alpha_{k_0}^+ e^{-i\omega t} S_j^z - S_i^z \beta_{k_0}^+ e^{-i\omega t} \gamma_{ij}) - \frac{1}{2} Jaz(\alpha_{k_0}^+ e^{-i\omega t} S_j^z - S_i^z \beta_{k_0}^+ e^{-i\omega t} \gamma_{ij}) + \\ &Jaz[\langle S_j^z \rangle (2 \langle S_j^z \rangle - 1)(2 \langle S_i^z \rangle - 1) \alpha_{k_0}^+ e^{-i\omega t} - \langle S_i^z \rangle (2 \langle S_i^z \rangle - 1)(2 \langle S_j^z \rangle - 1) \beta_{k_0}^+ e^{-i\omega t} \gamma_{ij}] \end{aligned} \quad (4)$$

On pose  $S_i^z = S_A = S$  et  $S_j^z = S_B = S$ ,

$$2\hbar\omega\alpha_{k_0}^+ = Jz\left(1 - \frac{a}{2}\right)(\alpha_{k_0}^+ S_B - S_A\beta_{k_0}^+ \gamma_{ij}) + JazS_B(2S_B - 1)(2S_A - 1)\alpha_{k_0}^+ - S_A(2S_A - 1)(2S_B - 1)\beta_{k_0}^+ \gamma_{ij}, \quad (5)$$

ce qui nous donne :

$$\left[\hbar\omega - \left[\left(1 - \frac{a}{2}\right)S + \frac{a}{2}S(2S - 1)(2S - 1)\right]Jz_{ij} - (D(2S - 1) + h_A)\right]\alpha_{k_0}^+ + \left[\frac{a}{2}S(2S - 1)(2S - 1) + \left(1 - \frac{a}{2}\right)S\right]\alpha_{k_0}^+ \gamma_{ij}Jz_{ij} = 0,$$

$$\left[2\hbar\omega - JzS + \frac{1}{2}JazS - JazS(2S - 1)(2S - 1)\right]\alpha_{k_0}^+ = -[JaS(2S - 1)(2S - 1) + JS + \frac{1}{2}JaS]\beta_{k_0}^+ \gamma_{ij}z. \quad (6)$$

Le facteur de structure s'écrit :

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

$$\gamma_{ij}(k) = \frac{1}{3} [\cos(k_x a_x) + \cos(k_y a_y) + \cos(k_z a_z)],$$

$$\gamma_{ij}(k) = \gamma_{ij}^{\parallel} + \gamma_{ij}^{\perp}, \text{ alors } \gamma_{ij}^{\parallel} = \gamma_{\parallel}, \text{ où le paramètre } \gamma_{\parallel} = \cos(k_x a_x) + \cos(k_y a_y).$$

pour un réseau ferromagnétique  $\alpha_{k_0}^+ = \beta_{k_0}^+$  et pour n'importe quels sites  $i, j$  donnés.

$$\left[\frac{2\hbar\omega}{J} - \left[\left(1 - \frac{a}{2}\right)S + \frac{a}{2}S(2S - 1)(2S - 1)\right]z\right]\alpha_{k_0}^+ + \left[\frac{a}{2}S(2S - 1)(2S - 1) + \left(1 - \frac{a}{2}\right)S\right]\alpha_{k_0}^+ \gamma_{ij}z = 0. \quad (7)$$

En faisant le changement de variable suivant  $\alpha(a) = S(1 + a2S(S-1))$  l'équation (7) devient :

$$\left[\frac{2\hbar\omega}{J} - \alpha(a)z(1 - \gamma_{ij}) - \Omega_0\right]\alpha_{k_0}^+ = 0 \quad (8)$$

Pour que cette équation (8) soit vérifiée il faut que  $\hbar\omega - \alpha(a)zJ(1 - \gamma_{ij}) - \Omega_0 = 0$ .

Le réseau est uniforme, ainsi, les modes en volume peuvent être quantifiés par l'équation exprimée en  $\rho_z$

$$\rho_z^2 + \left[ \frac{2\hbar\omega}{\alpha(a)} - z_{\parallel}\gamma_{\parallel} \right] \rho_z + 1 = 0 \quad (9)$$

En notant  $E = 2\hbar\omega$  et en utilisant le facteur de phase mentionné ci-dessus avec le vecteur d'onde réel  $k_z$  défini par  $\rho_z = e^{+ik_z a_z}$ , avec le mode de propagation, caractérisés par  $|\rho_z| = 1$ .

En utilisant une solution de l'équation (5a) décrit dans la configuration 1 comme une onde plane donnée par :

$$\alpha_{\vec{k}}^{\pm}(\omega, t) = U_{n(l)}(k_{\parallel}, \omega) e^{-i\omega t} \quad (10)$$

où  $U_{n(l)}(k_{\parallel}, \omega)$  est l'amplitude de l'onde de spin du site ( $l$ ) sur le plan  $n$ .

Les différentes équations définies en fonction des composantes de Fourier des sites ( $l$ ) de spin magnétiques situées sur les couches de plans  $n$  proche de la surface comme suit :

pour  $n = 1$

$$\frac{2\hbar\omega}{J} U_{1-} - \alpha(a) \left( 4 \frac{J_{\parallel}}{J} (1 - \gamma_{\parallel}) + 1 \right) U_{1+} + \alpha(a) \gamma_{\perp} U_2 = 0 \quad (11)$$

pour  $n = 2$

$$\frac{2\hbar\omega}{J} U_{2-} - \alpha(a) (4 (1 - \gamma_{\parallel}) + 2) U_2 + \alpha(a) \gamma_{\perp} U_1 + \alpha(a) U_3 = 0 \quad (12)$$

pour  $n = 3$

$$\frac{2\hbar\omega}{J} U_3 - \alpha(a) 2 (3 - \gamma_{\parallel}) U_3 + \alpha(a) (U_2 + U_4) = 0 \quad (13)$$

On pose  $\frac{E}{J} = \frac{2\hbar\omega}{J}$ ,  $\varepsilon_{\parallel} = \frac{J_{\parallel}}{J}$  et  $\gamma_{\perp} = 1$ , les équations précédentes s'écrivent :

pour  $n = 1$

$$\left( \frac{E}{J} \right) U_{1-} - (2\varepsilon_{\parallel} (2 - \gamma_{\parallel}) + 1) U_{1+} + U_2 = 0 \quad (11)'$$

pour  $n = 2$

$$\left( \frac{E}{J} \right) U_{2-} - (2 (2 - \gamma_{\parallel}) + 2) U_2 + U_1 + U_3 = 0 \quad (12)'$$

pour  $n = 3$

$$\left(\frac{E}{JS}\right) U_3 - 2(3 - \gamma_{\parallel})U_3 + U_2 + U_4 = 0 \quad (13)'$$

Les amplitudes d'ondes de spin des couches  $n = 3$  et  $n = 4$  sont:

$$\begin{cases} U_3 = R_1 C(\rho_{z(1)}) \\ U_4 = R_1 C(\rho_{z(1)}) \rho_{z(1)} \end{cases}, \text{ avec } R_1 \text{ le facteur de raccordement.}$$

Ces dernières équations peuvent être traduites en une équation matricielle de dimension  $M_R(4 \times 3)$  dite de raccordement comme celle décrit par la configuration1, il est possible d'exprimé les équations dynamiques de l'amplitude du champ de précession de spin près de la région de surface, en extrayant des équations (11)',(12)' et (13)' une matrice  $M_V(3 \times 4)$  dite de volume correspondant aux plans  $n \leq 3$  et qui permet de définir à la fois la surface et les coches adjacentes. Le produit matriciel  $[M_R(4 \times 3) \times M_V(3 \times 4)]$  nous permet d'obtenir une matrice dynamique carrée  $M_S(3 \times 3)$  de spin de surface.

$$M_S(3 \times 3) = M_V(3 \times 4) \times M_R(4 \times 3)$$

$$\begin{bmatrix} [E - 2\varepsilon_{\parallel}(2 - \gamma_{\parallel}) - 1 - \omega_s] & \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} & 0 & 0 \\ \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} & [E - 2(2 - \gamma_{\parallel}) - 2 - \omega_o] & \gamma_{\perp} & 0 \\ 0 & \gamma_{\perp} & [E - 6 + 2\gamma_{\parallel} - \omega_o] & \gamma_{\perp} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & C(\rho_{z(1)}) \\ 0 & 0 & C(\rho_{z(1)}) \cdot \rho_{z(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ R_1 \end{bmatrix} = 0,$$

Et s'exprime aussi comme suit:

$$M_S(3 \times 3) =$$

$$\begin{bmatrix} [E - 2\varepsilon_{\parallel}(2 - \gamma_{\parallel}) - 1] & \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} & 0 \\ \varepsilon_{\perp}\gamma_{\perp} & [E - 2(2 - \gamma_{\parallel}) - 2] & \gamma_{\perp} C(\rho_{z(1)}) \\ 0 & \gamma_{\perp} & \{[E - 6 + 2\gamma_{\parallel}] C(\rho_{z(1)}) + \gamma_{\perp} C(\rho_{z(1)}) \cdot \rho_{z(1)}\} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ R_1 \end{bmatrix} = 0.$$

La région de l'espace  $(E, \vec{k}_{\parallel})$  des états localisés de surface où les facteurs d'évanescence  $\rho_{z(i)}$  de l'onde de spin sont que pour les valeurs  $\rho_{z(i)} < 1$ .

$\varepsilon_{\parallel} = \frac{J_{\parallel}}{J}$ , désigne le couplage d'échange de surface-volume.  $\eta_{z(i)}$  sont des racines complexes de l'équation séculaire (10) des espaces  $(E, 2 - \gamma_{\parallel})$ . Dans le cadre de ces racines, il est important de souligner qu'une racine a une valeur absolue supérieure à l'unité, tandis que l'autre à une valeur absolue plus petite que l'unité. Ainsi, le problème est posé avec l'onde de spin de surface dont l'amplitude des modes localisés est donnée par l'ensemble des doublets de facteur  $(\eta_{z(i)}, \eta_{z(i)}^{-1})$ , répondant à la condition  $|\eta_{z(i)}| < 1$ . Les expressions non-nulles pour  $M_s(l, l')$  sont données sous les formes suivantes:

$$M_s(1,1) = E - 2\varepsilon_{\parallel}(2 - \gamma_{\parallel}) - 1$$

$$M_s(1,2) = \gamma_{\perp} = 1,$$

$$M_s(2,1) = \gamma_{\perp} = 1,$$

$$M_s(2,2) = E - 2(2 - \gamma_{\parallel}) - 2,$$

$$M_s(2,3) = \gamma_{\perp} = 1,$$

$$M_s(3,2) = C(\rho_{z(1)}),$$

$$M_s(3,3) = (E - 2(2 - \gamma_{\parallel}) - 2)C(\rho_{z(1)}) + C(\rho_{z(1)}) \cdot \rho_{z(1)}.$$

Calculant ainsi les courbes de dispersion des magnons de surface du plan (100) de la zone de Brillouin en fonction de la relation de compatibilité  $\det(M_s(E, \vec{k}_{\parallel})) = 0$ .

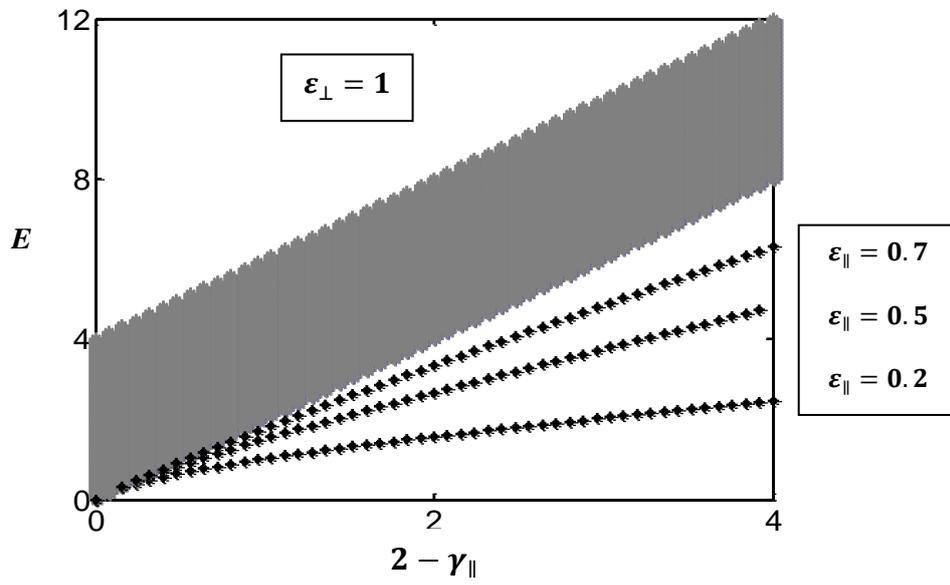


Figure.22 Modes de surface acoustiques représentées pour différentes valeurs  $\epsilon_{\parallel}$ .

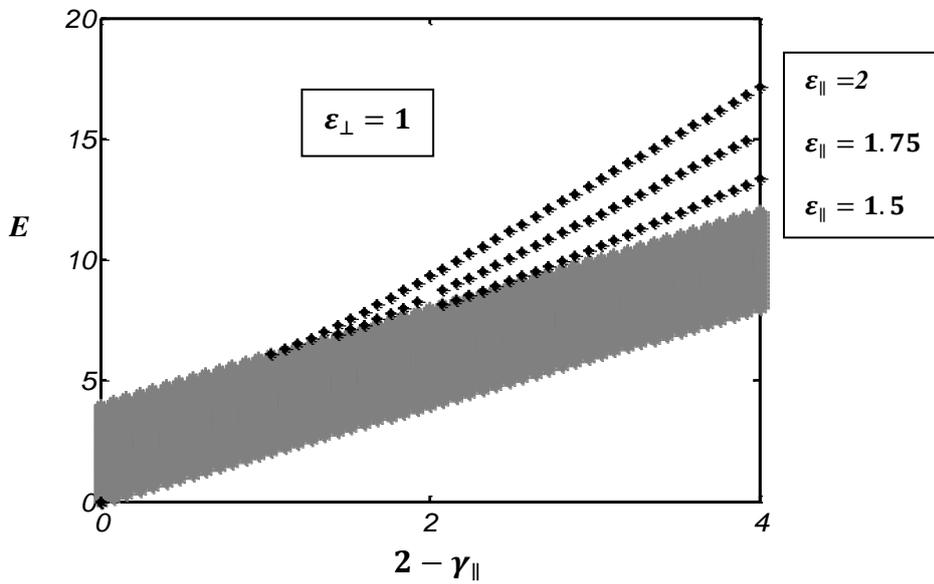


Figure.23 Modes de surface optiques représentés pour différentes valeurs de  $\epsilon_{\parallel}$ .

## Résultats et discussions

### Configuration 1

Dans chacune des trois figures. 14,15, 16 on à une représentation de trois droites, pour la même valeur du champ d'anisotropie  $h_A$  et différentes valeurs du paramètre  $a = 0.0, 0.2, 0.3$ . Par conséquent, on remarque que l'augmentation de ce paramètre conduit à la diminution de la pente de celle-ci. Donc cette diminution conduit à la diminution en énergie et l'augmentation du champ d'anisotropie  $h_A = -19, -7, -3$  conduit à la diminution sévère en énergie  $E/J$  avec  $-1 < \gamma_{\parallel} \leq 2$ .

Dans chacune des trois figures. 17, 18, 19 on à une représentation de trois droites pour la même valeur du champ d'anisotropie  $h_A = -7$  et différentes valeurs du paramètre  $a$  ainsi que pour différentes valeurs de l'intégrale d'échange perpendiculaire  $J_{\perp} = 7, 3, 2$ . Par conséquent, on remarque qu'au fur et à mesure que  $J_{\perp}$  diminue pour la même valeur de  $a$ , on a une augmentation en  $\gamma_{\parallel}$ , et une augmentation de la valeur de la pente de chaque allures, qui converge par la suite vers la même énergie. Au fur et à mesure que le paramètre  $a$  augmente la pente de chaque figure augmente.

### Configuration 2

Pour une valeur de  $S = 1.5$ , l'énergie des modes localisés de surface dépend du paramètre  $a$  ainsi qu'au fur et à mesure que  $a$  augmente, l'énergie d'excitation d'onde de spin magnétique de surface augmente, figure.21.

### Configuration 3

Le modèle de surface libre où  $J_{\perp} = J = 1$  représentés dans la figure.22 et la figure.23. Nous remarquons que dans le cas particulier  $S = 1$  les énergies d'excitations et les paramètres d'atténuation ne dépendent pas du paramètre  $a$ . Les excitations magnétiques de surfaces dépendent du paramètre  $\varepsilon_{\parallel}$  et leurs énergies augmentent au fur et à mesure que  $\varepsilon_{\parallel}$  augmente. Ainsi pour différentes valeurs de  $\varepsilon_{\parallel} \leq 0.7$  nous avons des branches acoustiques figure.22 et pour des différentes valeurs  $1.4 < \varepsilon_{\parallel} \leq 2$  nous avons des branches optiques figure.23.

- Pour  $J > J_{\parallel}$  seule la surface de l'onde de spin acoustique existe.
- Pour  $J < J_{\parallel} < \frac{5}{4}J$  pas d'existence d'excitations de surface.
- Pour  $J_{\parallel} > \frac{5}{4}J$  seule la surface de l'onde de spin optique existe.

## Légende des figures

**Figure.1** Les différents arrangements des moments magnétiques dans la matière.

**Figure.2** La création d'une onde de spin.

**Figure.3** La courbe de dispersion de l'onde de spin d'une chaîne linéaire ferromagnétique.

**Figure.4** La décomposition d'opérateur  $S^+$  en fonction de  $S^x$  et  $S^y$ .

**Figure.5** Schématisation d'une structure cubique simple semi-infinie. Configuration des paramètres d'échange et de la région de continuité.

**Figure.6** Schématisation de deux modèles de configuration des paramètres d'échange et de la région de continuité.

**Figure.7** Les énergies des modes localisés de volume et de surface acoustique et optique en fonction de  $\varepsilon_{\parallel}$ : (1) $\varepsilon_{\parallel} = 0.5$ , (2)  $\varepsilon_{\parallel} = 1.25$ , (3) $\varepsilon_{\parallel} = 2$  avec  $1 - \omega_q = 2$  comme valeur maximale.  $S = 1$ ,  $\varepsilon_{\perp} = 1$ .

**Figure.8** Les énergies des modes localisés de volume et de surface acoustique et optique en fonction de  $\varepsilon_{\parallel}$  et  $\varepsilon_{\perp}$ : (1)( $\varepsilon_{\parallel} = 0.5$ ,  $\varepsilon_{\perp} = 0.5$ ), (2)( $\varepsilon_{\parallel} = 0.5$ ,  $\varepsilon_{\perp} = 1.5$ ), (3)( $\varepsilon_{\parallel} = 1.5$ ,  $\varepsilon_{\perp} = 0.5$ ), (4)( $\varepsilon_{\parallel} = 1.5$ ,  $\varepsilon_{\perp} = 1.5$ ) avec  $1 - \omega_q = 2$  comme valeur maximale,  $S = 1$ . Tronqué en  $\Lambda = 1.2$  pour  $\varepsilon_{\parallel} = 0.5$ , et  $\varepsilon_{\perp} = 1.5$  en une branche optique et une branche acoustique incomplète.

**Figure.9** Les énergies des modes localisés de volume et de surface acoustique et optique en fonction de  $\varepsilon_{\parallel}$  et  $\varepsilon_{\perp}$ : (1)( $\varepsilon_{\parallel} = 4$ ,  $\varepsilon_{\perp} = 2.5$ ), (2)( $\varepsilon_{\parallel} = 1.5$ ,  $\varepsilon_{\perp} = 2.5$ ), (3)( $\varepsilon_{\parallel} = 0.5$ ,  $\varepsilon_{\perp} = 2.5$ ) avec  $1 - \omega_q = 2$  comme valeur maximale,  $S = 1$ . Apparence de branches acoustiques tronquées en  $\Lambda_c = 1.5$  pour ( $\varepsilon_{\parallel} = 4$ ,  $\varepsilon_{\perp} = 2.5$ ) ainsi deux autres branches complètes apparaissent une optique et une acoustique pour ( $\varepsilon_{\parallel} = 0.5$ ,  $\varepsilon_{\perp} = 2.5$ ).

**Figure.10** Les énergies des modes localisés de volume et de surface optique et acoustique en fonction de  $\varepsilon_{\parallel}^1$ : (1) $\varepsilon_{\parallel}^1 = 0.5$ , (2)  $\varepsilon_{\parallel}^1 = \frac{5}{4}$ , (3)  $\varepsilon_{\parallel}^1 = 2$  avec  $2 - \omega_q = 4$  comme valeur maximale.  $S = 1$ ,  $\varepsilon_{\perp} = 1$ ,  $\varepsilon_{\parallel}^2 = 1$ .

**Figure.11** Les énergies des modes localisés de volume et de surface en fonction de  $\varepsilon_{\perp}$ : (1)  $\varepsilon_{\perp} = -1$ , (2)  $\varepsilon_{\perp} = \frac{4}{3}$ , (3)  $\varepsilon_{\perp} = 3$  avec  $2 - \omega_q = 4$  comme valeur maximale.  $S = 1$ ,  $\varepsilon_{\parallel}^1 = \varepsilon_{\parallel}^2 = 1$ .

**Figure.12** Les énergies des modes localisés de volume et de surface optique et acoustique en fonction de  $\varepsilon_{\parallel}^1$  : (1)  $\varepsilon_{\parallel}^2 = 0.5$ , (2)  $\varepsilon_{\parallel}^2 = 1$ , (3)  $\varepsilon_{\parallel}^2 = 2$  avec  $2 - \omega_q = 4$  comme valeur maximale.  $S = 1$ ,  $\varepsilon_{\perp} = 1$ ,  $\varepsilon_{\parallel}^1 = 1$ .

**Figure.13** Les différents types d'échange.

**Figure.14** l'énergie des modes localisés de surfaces pour différentes valeurs du paramètre de couplage biquadratique  $a$  (1) $a = 0$ , (2) $a = 0.2$ , (3) $a = 0.3$  et du champ d'anisotropie  $h_A$ , tel que  $h_A = -19$  avec  $\omega_q = 2$  comme valeur maximal.  $S = \frac{3}{2}$ ,  $J_{\perp} = 7$ ,  $J_{\parallel} = 3.0$ ,  $J = 2.0$ ,  $D = 1.5$ ,  $Ds = 2.0$ .

**Figure.15** l'énergie des modes localisés de surface pour différentes valeurs du paramètre (4) $a = 0$ , (5) $a = 0.2$ , (6) $a = 0.3$ ,  $h_A = -J_{\perp}$ ,  $\omega_q = 2$ ,  $S = \frac{3}{2}$ ,  $J_{\perp} = 7$ ,  $J_{\parallel} = 3.0$ ,  $J = 2.0$ ,  $D = 1.5$ ,  $Ds = 2.0$ .

**Figure.16** l'énergie des modes localisés de surface pour différentes valeurs du paramètre (7) $a = 0$ , (8) $a = 0.2$ , (9) $a = 0.3$ ,  $h_A = -J_{\parallel}$ ,  $\omega_q = 2$ ,  $S = \frac{3}{2}$ ,  $J_{\perp} = 7$ ,  $J_{\parallel} = 3.0$ ,  $J = 2.0$ ,  $D = 1.5$ ,  $Ds = 2.0$ .

**Figure.17** L'évolution de l'énergie des modes localisés de surfaces pour différentes valeurs de  $\varepsilon_{\perp}$  (4)  $\varepsilon_{\perp} = \frac{7}{2}$ , (5)  $\varepsilon_{\perp} = \frac{3}{2}$ , (6)  $\varepsilon_{\perp} = 1$  et une valeur du paramètre  $a = 0$  ainsi que le champ d'anisotropie  $h_A = -7$ .

**Figure.18** L'évolution de l'énergie des modes localisés de surfaces pour différentes valeurs de  $\varepsilon_{\perp}$  (4)  $\varepsilon_{\perp} = \frac{7}{2}$ , (5)  $\varepsilon_{\perp} = \frac{3}{2}$ , (6)  $\varepsilon_{\perp} = 1$  et une valeur du paramètre  $a = 0.2$  ainsi que le champ d'anisotropie  $h_A = -7$ .

**Figure.19** L'évolution de l'énergie des modes localisés de surfaces pour différentes valeurs de  $\varepsilon_{\perp}$  (4)  $\varepsilon_{\perp} = \frac{7}{2}$ , (5)  $\varepsilon_{\perp} = \frac{3}{2}$ , (6)  $\varepsilon_{\perp} = 1$  et une valeur du paramètre  $a = 0.3$  ainsi que le champ d'anisotropie  $h_A = -7$ .

**Figure.20** l'énergie des modes localisés de surface et de volume pour  $a = 0.3$ ,  $S = \frac{3}{2}$ ,  $h_A = -12$ ,  $D = 1.5$ ,  $Ds = 2.0$  et  $J < J_{\perp} < J_{\parallel}$  tel que  $J_{\perp} = 2.5$ ,  $J_{\parallel} = 3.0$ ,  $J = 2.0$ .

**Figure.21** Les énergies des modes localisés de surface pour  $a = 0.0, 0.2, 0.3, 0.4$ ,  $S = 3/2$ ,  $D = 1.5$ ,  $Ds = 2.0$  et  $J < J_{\parallel}$  tel que  $J_{\parallel} = 3.0$ ,  $J = 2.0$ .

**Figure.22** Les énergies des modes localisés de volume et de surface acoustique en fonction de  $\varepsilon_{\parallel}$ : (1) $\varepsilon_{\parallel} = 0.2$ , (2)  $\varepsilon_{\parallel} = 0.5$ , (3) $\varepsilon_{\parallel} = 0.7$  avec  $2-\omega_q = 4$  comme valeur maximale,  $S = 1$  et  $0 \leq a < 1$ .

**Figure.23** Les énergies des modes localisés de volume et de surface optique en fonction de  $\varepsilon_{\parallel}$ : (4) $\varepsilon_{\parallel} = 1.5$ , (5)  $\varepsilon_{\parallel} = 1.75$ , (6) $\varepsilon_{\parallel} = 2$  avec  $2-\omega_q = 4$  comme valeur maximale,  $S = 1$  et  $0 \leq a < 1$ .

## Conclusion du chapitre

On a décrit le comportement général des spectres d'onde de spin de surface en fonction du paramètre d'échange  $\varepsilon_{\parallel}$ . Celui-ci joue un rôle important dans l'apparition des modes acoustiques et optiques, ainsi que dans l'existence des énergies de coupures « Cut off ».

Dans ce travail on a étudié le comportement des états localisés de surface en présence d'échange biquadratique et d'anisotropie uniaxiale en plus d'échange bilinéaire. Ces investigations ont conduit à des résultats qu'on peut classer principalement en trois catégories :

- La présence du couplage biquadratique, a pour effet de diminuer l'énergie des modes de surfaces, les ondes de spin de surface existent que pour des valeurs bien précises du paramètre de couplage biquadratique  $a$  avec l'intégrale d'échange qui est limité aux premiers voisins seulement, ainsi il a une influence sur l'existence des énergies de coupures appelé « Cut off ». aussi l'augmentation de la valeur du paramètre  $a$  engendre une diminution en énergie appelé « gap ».
- La présence de l'anisotropie uniaxiale, donne soit un rétrécissement soit un élargissement des modes de surface, ainsi pour une valeur du paramètre d'anisotropie de surface  $D$  supérieur a celui du volume  $D_S$ , un élargissement apparait dans le mode de spin de volume et dans le cas contraire un rétrécissement apparait.
- la présence de champ d'anisotropie influence sur le gap d'énergie, car aux fur et à mesure que  $h_A$  augmente, l'énergie augmente.
- La présence de l'échange biquadratique et de l'anisotropie uniaxiale engendre des modes de surfaces, acoustique et optique. Ceci est démontré qu'un modèle basé sur plusieurs contributions est attribuer a décrire l'évolution des modes de spin de surface. Par conséquent les résultats obtenus par [17,18] et [19] en utilisant la méthode des fonctions de Green sont en accord avec ceux obtenue dans ce travail.

## Références

- [1] Anderson, P.W.: Phys. Rev. 115, 2 (1959).
- [2] Huang, N.L., Orbach, R. : Phys. Rev. Lett. 12, 275 (1964).
- [3] Allen, G.A.T., Betts, D.d. : Proc. Phys. Soc. 91, 341 (1967).
- [4] Harris, E.A., Owen, J. : Phys. Rev. Lett. 11, 9 (1963).
- [5] Joseph, R.I. : Phys. Rev. 138, A1441 (1965).
- [6] Rodbel, D.S., Jacobs, I.S., Owen, J., Herring, E.A. : Phys. Rev. Lett. 11, 10 (1963).
- [7] Brown, H.A. : Phys. Rev. 4, 115 (1971).
- [8] R. Ferrer, R. Pintanel, Physica B+C 119 (1983) 321.
- [9] Herring, C., In : Magnetism, Rado, G.T. Suhl, H. (eds), VolIIB. New York, London : Academic Press (1966).
- [10] H.Chen, M. Levy, Phys. Rev. B7 4267 (1973).
- [11] T. Iwashita, N. Uryu : J. Phys. C12, 4007 (1979).
- [12] J. Adler, J. Oitma, A. M. Stewart/ J. Phys. C. Vol.9, 2911-2915 (1976).
- [13] Tiwari, M., Srivastava, R.N. : IL Nuovo Cimento B58, 323 (1980).
- [14] R. DeWames, T. Wolfram. Theory of the surface spin waves . Phys. Rev. 185 720 (1969).
- [15] E. Ilisca, E. Gallais. Spectre des ondes de spin de surface. J. de Phys. 33 811 (1972).
- [16] A. Kaplan. Frustrated classical heisenberg model in one dimention with nearest-neighbor biquadratic exchange : Phys. Rev. B (2009).
- [17] D. Kapor, M. Skrinjar, S. Stojanovic, Phys. Lett. A 192 413-420 (1994).
- [18] M. Pavkov, M. Skrinjar, D. Kapor, S. Stojanovic/ Phys. Lett. A 280 465-483 (2000).
- [19] W. Z. Shen, Z. Y. Li, Phys. Letts. A168, 151-156 (1992) .
- [20] S. Petit. Onde de Spin, Institut Rayonnement de Saclay, EDP Sciences, 10 449-463 (2010).
- [21] A. Celic, D. Kapor, M. Skrinjar, S. Stojanovic, Phys. Lett. A 219-221 (1996).
- [22] F. Boumeddine, M. Tamine, Surface Science 603 2120-2130 (2009).
- [23] Anderson, F.B., Callen, H.B. : Phys. Rev. 13. A, 1068 (1964).
- [24] I. L. Buchbinder, B. Westwanski, J. Mangnetism and Magnetic Materials 1, 11-18 (1975).
- [25] A. Lauchli, F. Mila, K. Penk, Phy. Rev. Lett. 087205-1 (2006).
- [26] S. V. Tyablikov. Ukr. Mat. Zh. 11289 (1959).
- [27] M. G. Cottam, D. R. Tiley, *Introduction to surface and superlattice excitations* (1989).

[28] F. Bloch, *Theory of ferromagnetism*, Z. Phys. 61, 206 (1930).

[29] D. Mattis, *Theory of magnetism I* (1988).

## Conclusion Générale et Perspectives

## Conclusion générale

Nous avons développé une étude théorique afin de procéder à une investigation de l'influence de l'échange isotrope, de l'anisotropie uniaxiale et du couplage biquadratique sur le spectre d'excitations magnétiques de surface.

La théorie des excitations magnétiques de surface, a été développée grâce à l'adaptation de la méthode de raccordement, utilisée pour la dynamique vibrationnelle de surface. Le développement de cette théorie a permis, à partir d'un Hamiltonien  $\mathcal{H}$  qui décrit les interactions entre les premiers voisins seulement et en présence d'un champ extérieur  $H_0$  et d'un champ d'anisotropie  $H_a$ , de décrire les relations de dispersion des magnons et les états d'excitations magnétique de surface pour les systèmes semi-infinis.

L'Hamiltonien est choisi suivant le modèle de Heisenberg, dans lequel on suppose que pour chaque site  $i$  du réseau, on a un spin  $S_i$ . dans la première étape on a choisie un Hamiltonien isotrope, avec un champ d'anisotropie, ensuite on adjoint une anisotropie uniaxiale et un échange biquadratique. On a traité le cas d'un réseau cubique simple ferromagnétique semi-infini. La présence de la surface entraîne une perte de la symétrie, ce qui entraîne des changements dans les propriétés magnétiques.

Le configuration de l'état fondamental est définie comme état de Néel et, par conséquent, conformément à la théorie de champ moyen du système infinie H. Chen P. Levy, nous considérons la condition  $0 < a < 1$ , comme satisfait. Par ailleurs, soulignons que, pour une application numériques traitées dans le présent travail, nous considérons  $S = 1$  et nous rappelons que  $D = D_s = 0$ . Il est important de noter que dans le formalisme théorique présenté ici, les résultats numériques obtenus par la mise en œuvre de  $D = D_s = 0$  et  $a = 0$  en accord avec les modes de surface localisés obtenus dans le cas de la modèle de Heisenberg pure ferromagnétique T. Wolfram et De Wames et plus récemment par M. Tamine et F.Boumeddine. Ainsi, cela nous permet de distinguer deux types de modes de surface (propageants et évanescents) en fonction principalement de la présence ou non d'anisotropie uniaxiale pour  $S > 1$ . Dans les deux cas, l'existence et la nature des modes localisés de volume et de surface sont également discutés en termes de la force de la contribution de l'échange biquadratique, de la valeur d'anisotropie uniaxiale et des paramètres combinés de couplage biquadratique et d'anisotropie uniaxiale.

La méthode de raccordement, utilisée dans un premier temps, retrace impeccablement les courbes de dispersion des magnons de surfaces. Cependant, dans le cas des métaux, les modes optique et acoustique des excitations magnétiques sont misent en évidence selon les

valeurs des interactions d'échanges, soient  $(J, J_{\parallel}, J_{\perp})$ . Le spectre des ondes de spin subissent un changement profond.

La seconde étape consiste à retracer les courbes de dispersion des excitations magnétiques de surfaces, dans le cas d'un Heisenberg simple, en lui ajoutant un biquadratique, un champ d'anisotropie de surface et une anisotropie seule-ion uniaxiale. En faisant varier soit le paramètre ajustable au biquadratique  $a$ , soit le champ d'anisotropie de surface  $h_A$ , les modes acoustique et optique des excitations magnétiques de surface sont mis en évidence selon des valeurs données de  $a$  et de  $h_A$ .

Cette méthode reproduit de manière très encourageante et même satisfaisante les résultats obtenus par la méthode de Green, considérée comme étant une très bonne méthode de calcul.

A la lumière des différents résultats obtenus lors de ces études d'influence de l'échange biquadratique et de l'anisotropie uniaxiale sur la dynamique de spin de surface, plusieurs pistes de réflexion et d'étude sont à envisager :

1. Etudier le cas antiferromagnétique et ferrimagnétique pour comparer avec la littérature.
2. Etudier le cas de l'interface.
3. Etudier le cas du super réseau.