

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE MOULOU D MAMMERI DE TIZI-OUZOU  
FACULTE : DES SCIENCES  
DEPARTEMENT : DE PHYSIQUE



# ***THESE DE DOCTORAT ES SCIENCES***

*SPECIALITE : PHYSIQUE*  
*OPTION : SCIENCES DE LA MATIERE*

Présentée par :

**SAIM LAMIA**

Sujet :

***Etude d'ondes de spin dans les interfaces et surfaces  
alliages du type  $A_xB_{1-x}$***

Soutenue, le 30/ 12 /2021

Devant la commission d'examen composée de :

<b>Mme Lalam Fadila</b>	<b>Professeure</b>	<b>UMMTO</b>	<b>Présidente</b>
<b>Mr Tigrine Rachid</b>	<b>Professeur</b>	<b>U. Adrar</b>	<b>Rapporteur</b>
<b>Mr Halit Mohamed</b>	<b>Professeur</b>	<b>U. Laghouat</b>	<b>Examineur</b>
<b>Mme Alili Baya</b>	<b>Professeure</b>	<b>USTHB Alger</b>	<b>Examinatrice</b>
<b>Mr Aouchiche Hocine</b>	<b>Professeur</b>	<b>UMMTO</b>	<b>Examineur</b>
<b>Mr Bourahla Boualem</b>	<b>Professeur</b>	<b>UMMTO</b>	<b>Examineur</b>
<b>Mr Chadli Rabah</b>	<b>Professeur</b>	<b>UMMTO</b>	<b>Invité</b>

« Je sais que je ne sais rien »

Socrate

« On ne fait jamais d'erreur sans se tromper »

Jacques Prévert

## *Remerciements*

Ce travail est le fruit d'un long processus que nous avons réalisé au sein du laboratoire de physique et chimie quantique de l'université mouloud Mammeri. Pour cela, je tiens à exprimer ma profonde gratitude au responsable du laboratoire, Professeur Hamid Bouzar, pour m'avoir permis de travailler dans de bonnes conditions. Je tiens, aussi, à remercier le Pr Rabah Chadli, responsable de l'équipe « excitations magnétiques et vibrationnelles des systèmes de basse dimensionnalités », pour m'avoir permis d'intégrer le groupe.

J'aimerais tout d'abord remercier mon directeur de thèse, Pr Rachid Tigrine, qui a mis toute sa confiance en moi, et m'a permis de persévérer jusqu'à la fin de ce travail. Sa disponibilité, son dévouement remarquable tout au long de ces années m'ont aidé à avancer, ajouter à cela sa sympathie et sa bonhomie m'ont assuré une sérénité malgré les difficultés. En fin sa relecture finale méticuleuse de chacun des chapitres m'a, sans aucun doute, permis de mener à bien mon travail.

Je tiens aussi à remercier le professeur des universités Antoine Khater chercheur retraité à le Mans Université, en France, que j'ai eu l'honneur de connaître et avec qui j'ai eu le privilège de travailler j'ai apprécié surtout son savoir, sa maîtrise, sa gentillesse, et sa courtoisie, sa disponibilité malgré ses énormes tâches, nous avons partagé ensemble, une enrichissante expérience, ainsi que Elie Albert Moujaes de Université de Fédéral de Rondônia au Brésil de sa précieuse contribution.

Je suis très reconnaissante aux membres du jury d'avoir accepté d'examiner cette thèse, plus particulièrement le professeure Lalam Fadila de l'UMMTO de m'avoir fait l'honneur d'en accepter la présidence ainsi que Mr Halit Mohamed professeur à l'université de Laghouat, Mr Aouchiche Hocine professeur à l'UMMTO, M<sup>me</sup> Alili Baya professeure à l'USTHB et Mr Bourahla Boualem professeur à l'UMMTO d'avoir acceptés la qualité d'examineurs, et en fin je remercie Mr Rabah Chadli d'avoir accepté notre invitation.

Mes remerciements vont aux membres de notre équipe de recherche, notamment, Mr Rabah Chadli, Mr Bourahla Boualem et Mme Boucherrab Malika pour leurs conseils et encouragements, et en particulier Mme Nafa Ouahiba qui m'a éclairée par ses conseils.

Un merci spécifique à mes parents, notamment à mon père qui m'a impulsé l'amour des études et ma mère qui m'a soutenue et aidée le long des années. Un immense merci à mon mari et mes filles pour leurs amours et leurs patiences.

Je remercie aussi mes amis et collègues : Sid Ali, Amina, Abdelghani et Monsieur Tarmoul, pour leurs soutiens, leurs aides ainsi que leurs encouragements.

## Table des matières

<b>Introduction générale</b>	4
<b>Chapitre I : Introduction à l'étude des ondes de spin</b>	10
I.1 Matériaux magnétiques	11
I.1.1 Classification des matériaux d'un point de vue magnétique	11
1) Diamagnétique	11
2) Paramagnétique	12
3) Ferromagnétique	12
4) Antiferromagnétique	13
5) Ferrimagnétique	13
I.1.2 Les différents termes d'énergies magnétiques	13
1) Energie d'échange	13
2) Energie Zeeman	14
3) Energie d'anisotropie	14
4) Energie dipolaire	15
I.2 Domaines d'application des matériaux ferromagnétiques	15
I.3 Interprétation physique de l'origine du ferromagnétisme	16
I.3.1 Théorie du champ moléculaire de Weiss	16
I.3.2 Interprétation d'Heisenberg	16
I.4 Ondes de spin dans les matériaux ferromagnétiques	17
I.4.1 Principe de création d'une onde de spin	17
I.4.2 Approche semi-classique de traitement des ondes de spin	18
Références	23

## **Chapitre II : Ondes de spin dans les systèmes ferromagnétiques de basse dimension**

	25
Introduction	26
II.1 Ondes de spin dans les systèmes parfaits	26
II.2 Ondes de spin dans les systèmes perturbés	28
II.2.1 Méthodes analytiques pour l'étude des ondes de spin dans les systèmes désordonnés	28
1) Méthode de diagonalisation directe	28
2) Méthode des fonctions de Green	29
3) Méthode de raccordement	29

II.2.2 Méthode de raccordement appliquées aux systèmes de basses dimensions perturbés	30
II.2.3 Modélisation de la dynamique précessionnelle d'un système désordonné	31
1) Matrice dynamique du système perturbé	31
2) Matrice de raccordement	32
II.2.4. Calcul des grandeurs physiques	34
1) Coefficients de transmission et de réflexion	35
2) Conductance magnonique	36
3) Calcul des états de magnons localisés	37
4) Calcul des densités d'états magnoniques	37
Références	39

### **Chapitre III : Transport balistique des magnons à travers une nanojonction Fe/Ni(n)/Fe**

<b>Chapitre III : Transport balistique des magnons à travers une nanojonction Fe/Ni(n)/Fe</b>	<b>41</b>
Introduction	42
III.1 Etude dynamique du guide d'onde parfait Fe(bcc)	43
III.1.1 Equation de mouvement et courbe de dispersion	43
III.1.2 Vitesses de groupe	46
III. 2 Méthodes d'élaboration des couches minces magnétiques	48
III.2.1 Pulvérisation cathodique	50
III.2.2 Epitaxie par jets moléculaires	51
III.2.3 L'ablation laser	52
III.3 Etude du transport magnonique par une couche mince du Nickel insérée en sandwich entre deux guides d'ondes parfaits Fe(bcc)	53
III.3.1 Description du système nanojonction Fe/Ni(n)/Fe	53
III.3.2 Nanojonction de type Fe/Ni <sub>bcc</sub> (n)/Fe	54
III.3.2.1 Matrice dynamique	56
III.3.2.2 Matrice de raccordement	57
III.3.2.3 Résultats obtenus	59
III.3.3 Nanojonction de type Fe/Fe <sub>1-x</sub> Ni <sub>x</sub> /Ni <sub>bcc</sub> (n)/ Fe <sub>1-x</sub> Ni <sub>x</sub> /Fe	63
III.3.3.1 Description du système	63
III.3.3.2 Résultats obtenus	65
III.3.4 Nanojonction de type Fe/Ni <sub>fcc</sub> (n)/Fe	72
III.3.4.1 Description du modèle	72
III.3.4.2 Résultats obtenus	75
III.3.5 Interprétation des résultats obtenus	83
III.3.5.1 Coefficients de transmission et de réflexion	83
III.3.5.2 Etat localisés de spin	85
III.3.5.3 Les densités d'états magnoniques	85
Conclusion	86
Références	88

<b>Chapitre IV : Etude théorique et modélisation de la dynamique de spins d'une monocouche d'alliage Fe-Ni sur Ni (fcc)</b>	<b>91</b>
Introduction	92
IV.1 Introduction aux surfaces alliages	93
IV.1.1 Surface alliage	93
IV.1.2 Energie de surface	94
IV.1.3 Techniques de caractérisation des surfaces alliages	94
IV.1.3.1 Microscopie à effet tunnel	94
IV.1.3.2 Microscopie électronique à balayage	95
IV.1.3.3 Microscopie électronique en transmission	95
IV.1.3.4 Microscope à force électronique	95
IV.2 Dynamique précessionnelle d'une surface alliage Fe/Ni(100)	95
IV.2.1 Description des surfaces alliages étudiées	95
IV.2.2 Dynamique précessionnelle en volume loin de la surface alliage	97
IV.2.3 Dynamique de la surface	100
IV.2.3.1 Système de surface alliage ordonné Fe <sub>0.5</sub> Ni <sub>0.5</sub> /Ni(100)	100
1) Matrice dynamique	101
2) Matrice de raccordement	102
3) Résultats obtenus	103
IV.2.3.2 Système de surface alliage désordonnée Fe/Ni(100)	105
1) Description du système	105
2) Résultats obtenus	106
IV.3 Discussion des résultats	107
Conclusion	108
Références	109
<b>Conclusion générale</b>	<b>111</b>

## Introduction générale

Les nanomatériaux suscitent un grand intérêt pour la communauté scientifique. En effet, ils présentent des propriétés spécifiques, différentes de celles du matériau massif. S'ils font l'objet d'études théoriques et expérimentales depuis près d'un demi-siècle, ils sont incontournables depuis une vingtaine d'années [1]. Cela revient à leurs propriétés physico-chimiques originales. Aujourd'hui, les nanomatériaux sont les briques des nanotechnologies modernes [2], ce qui rend leurs études intéressantes non seulement du point de vue fondamental mais aussi du point de vue applicatif. Avec le développement de la technologie, il est devenu indispensable d'augmenter la densité des dispositifs, au sein d'un même appareil et d'améliorer leurs performances. Dans ce but, plusieurs nanomatériaux ont été synthétisés avec l'objectif de les intégrer dans ces dispositifs [3].

Le dépôt de certains matériaux nécessite pour leur croissance des températures très élevées, cela peut endommager quelques dispositifs lors de son implémentation dans des circuits intégrés, ce qui limite l'efficacité, la capacité ainsi que la durée de vie des appareils [4-5]. L'une des solutions pour contourner ce problème est d'utiliser des nanomatériaux magnétiques en particulier les métaux de transition(TM), tel que le Fe, le Ni, le Co et leurs alliages dans ces dispositifs. La réalisation et l'étude de ces nanomatériaux magnétiques soulèvent des questions nouvelles propres à cette échelle. Par ailleurs, un effort considérable a été déployé pour l'étude du magnétisme des petits objets. Expérimentalement, les premières recherches en magnétisme ont été commencées avec les ferrites [6], du millimètre au micromètre [7-8]. Ce développement a été stimulé par l'amélioration, conjointe des procédés de micro fabrication, des techniques de caractérisation locale ainsi que des moyens de calcul performants. Il est maintenant possible de fabriquer, de mesurer et de modéliser des objets ferromagnétiques de taille submicrométrique [9].

En effet, les nanostructures magnétiques sont présentées de nos jours comme une alternative crédible aux effets de taille. Cependant, il y a plus de 20 ans les disques durs magnétiques et magnéto- optiques étaient en compétition, le disque magnétique l'a emporté car il a permis des dimensions plus petites : les bits.

Toujours dans le but de la miniaturisation des dispositifs électroniques, plusieurs groupes scientifiques s'intéressent à remplacer les systèmes logiques à base de silicium par des

dispositifs logiques à base des matériaux magnétiques et par des dispositifs à ondes de spin [10].

La notion de l'onde de spin a été introduite pour la première fois par Bloch [11-13]. La théorie a été développée aux années 50, et devenue actuellement l'une des bases essentielles du magnétisme [14-18]. Le domaine d'étude traitant des phénomènes magnétiques reliés aux ondes de spin est la magnonique, nommée ainsi à partir du quanta d'excitation des ondes de spins : les magnons. Cette thématique vise à étudier la création, la propagation, la manipulation ainsi que la détection des ondes de spin. La magnonique se propose d'utiliser les ondes de spins pour transporter et traiter l'information, par analogie aux ondes élastiques (vibrationnelles) et aux ondes électromagnétiques. Si ces dernières années il y a une recrudescence des efforts autour de la magnonique, c'est en grande partie dû au fait qu'elle est vue comme une des voies les plus prometteuses pour réaliser les technologies ICT (Integrated Circuit Technologies).

Dans ces nouveaux matériaux nano et micro, les surfaces / interfaces sont omniprésentes, qui sont le siège de contact avec le milieu qui l'entourent (un vide, un autre matériau). L'existence de ces surfaces/ interfaces dans ces dispositifs les rendent intéressants et leurs donnent des propriétés optiques, électroniques, magnétiques particulières, qui sont en grande partie déterminées par la qualité des surfaces et interfaces. Ces dernières jouent un rôle prépondérant sur leurs propriétés physiques dont la plupart ne sont pas accessibles directement par l'expérience, d'où la nécessité de recourir à des simulations numériques qui permettent de prévoir certaines propriétés physiques des matériaux présentant des surfaces / interfaces.

Durant la dernière décennie, un grand nombre de découvertes ont été réalisées en étudiant les propriétés des systèmes composés d'au moins de deux matériaux mis en contact comme par exemple les systèmes supraconducteur/ isolant (jonctions Josephson), semi-conducteur/ ferromagnétique (l'injection de spin) et ferromagnétique/ non magnétique (magnétorésistance géante) [19-22]. De notre part, nous proposons d'étudier des systèmes composés de métaux de transitions TM (Fe, Ni) mis en contactes (nanojonction Fe/Ni/Fe).

Comme on vient de dire que la réduction de la dimensionnalité modifie les propriétés magnétiques par rapport à leur forme massive. De même, la modification de l'environnement chimique d'un élément modifie ses caractéristiques. Telle que les nanoalliages, la taille et la composition chimique modifient leurs propriétés magnétiques. Les surfaces alliages

métalliques jouent un rôle important dans le développement de nouveaux nanomatériaux, on peut distinguer deux catégories de surfaces : ordonnées et désordonnées.

Une question de première importance concerne la capacité de tels nano-objets ayant des surfaces/interfaces à transférer une information. De façon générale cette information est véhiculée par les excitations collectives des spins. L'existence des surfaces / interfaces, constituent une brisure de symétrie, qui peut fortement influencer la propagation des ondes de spin dans ces dispositifs artificiels.

Dans ce travail nous intéressons d'une manière particulière aux propriétés magnétiques d'une interface métallique (100), entre deux métaux de transitions (MT) le Fer (Fe) et le Nickel (Ni) et d'autre part à une surface alliage Fe-Ni/ Ni<sub>fcc</sub>(100).

Le défi consiste à aller au-delà de l'expérience pour prévoir et déterminer les effets qui se produisent dans ces systèmes. Nous proposons une étude théorique et de simulations numériques basées sur le formalisme de Landauer-Buttiker appliqué initialement pour le transport électronique [23]. Notre étude est menée à l'aide de la méthode de raccordement [24-26], cela nous a permis de prendre en considération le problème de brisure de symétrie causé par les surfaces/interfaces. Pour la détermination des propriétés magnétiques de nos systèmes nous avons utilisé un Hamiltonien du type Heisenberg [27]. Ce qui a permis d'élaborer des algorithmes appropriés à chaque système.

Ce manuscrit de thèse est organisé autour de quatre chapitres.

Dans le premier chapitre nous avons exposé brièvement quelques généralités et concepts de base sur les ondes de spins ferromagnétiques. Ainsi, nous avons rappelé les différentes formes du magnétisme.

Dans le second chapitre, nous procédons à la description de la méthode théorique utilisée dans notre travail, pour l'étude de la dynamique des excitations magnétiques (magnons), qui s'appuie principalement sur l'approche théorique dite de raccordement [28-30]. D'autres méthodes théoriques existent dans la littérature scientifique conçues pour ce genre d'études, nous faisons un rappel de certaines d'entre elles.

Dans le troisième chapitre, nous avons appliqué la méthode de raccordement pour le calcul des propriétés précessionnelles d'un système constitué d'une couche mince de Nickel

insérée en sandwich entre deux guides d'ondes parfaits de Fer. Le système examiné est de type Fe/Ni(n)/Fe, tel que (n) le nombre de plans de Ni, qui varie de 1 à 16. En particulier nous avons étudié l'influence de l'épaisseur du film mince (Ni) sur les propriétés précessionnelles. Les coefficients de transmission et de réflexion, les états localisés et les densités d'états locales (LDOS) sont également déterminés.

Le dernier chapitre présente une étude d'un autre système, il s'agit d'une surface alliage de type Fe-Ni/Ni<sub>fcc</sub>(100) formée par le dépôt d'atomes de Fer sur la surface (100) du substrat de Nickel. Dans notre travail, on a considéré deux types de surfaces : ordonnée et désordonnée. Pour chaque surface nous avons calculé les états localisés et les densités d'états locales (LDOS).

Enfin, nous terminerons notre travail par une conclusion générale qui illustre les principaux résultats obtenus et certaines perspectives offertes dans le domaine d'étude.

## Références

- [1] A. Biancarelli-Lopes, Thèse de Doctorat, Université Aix- Marseille (2015).
- [2] F. Baletto and R. Ferrando. *Rev. Mod. Phys.*, 77, 371 (2005).
- [3] B. Bourahla, Thèse de Doctorat, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2007).
- [4] B. Lenk, H. Ulrichs, F. Garbs, M. Münzenberg, *Phys. Rev.* 507, 107 (2011).
- [5] S. Nikitov, T. Tailhades, *J. Magn. Magn. Mater.* 236, 320 (2001).
- [6] A.V. Chumak, A.A. Serga, S. Wolff, B. Hillebrands and M.P. Kostylev, *J. Appl. Phys.* 105, 083906, (2009).
- [7] M. Tsoi, A.G.M. Jansen, J. Bass, W.C. Chiang, V. Tsoi and P. Wyder, *Nature* 406, 46 (2000).
- [8] M. Krawczyk and D. Grundler, *J. Phys.: Condens. Matter* 26 ,123202 (2014).
- [9] A. Thiaville and J. Miltat, *Magnetism: small is beautiful*, *Science*, 284 (1999).
- [10] M. P. Kostylev, A. A. Serga, T. Schneider, B. Leven and B. Hillebrands, *Appl. Phys. Lett.* 87, 153501 (2005).
- [11] Bloch *Z. Phys*61, 206 (1930).
- [12] K. Matsushita, M. Sasaki, J. Sato and H. Imamura, *J. Phys. Soc. Jpn.* 82, 033801(2013).
- [13] W. Kipferl, M. Dumm, P. Kotissek, F. Steinbauer and G. Bayrether, *J. OF App. Phys*, 15, 7417 (2004).
- [14] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* 83, 1260 (1951).
- [15] R. Kubo, *Phys. Rev.* 87, 568 (1952).
- [16] C. Tsallis, *J. Math. Phys.* 19, 277 (1978).
- [17] D. C. Mattis, *Theory of Magnetism I*, Springer Verlag (1988).
- [18] A. Auerbach, *Interacting electrons and Quantum Magnetism*, Springer Velag (1994).
- [19] B. Josephson, *Lett.* 1, 251 (1962).
- [20] S. Datta and B. Das, *Appl. Phys. Lett.* 56, 665 (1990).
- [21] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Friederich and J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* 61, 2472 (1988).
- [22] T. Hauet, Thèse Doctorat, Université Henri Poincaré, Nancy I (2006).
- [23] M. Di Ventra, “*Electrical Transport in Nanoscale Systems*” Cambridge University Press, (2008), S. Datta, “*Quantum Transport: Atom to Transistor*”, Cambridge University Press, (2005).
- [24] B. Bourahla, A. Khater, M. Abou Ghantous, *Eur. Phys. J. Web Conf.*29, 00011(2012).
- [25] R. Tigrine, L. Saim, and A. Khater, *J. Nanoeng. Nanomanuf.* 6, 332 (2016).

- [26] F. Chelli, B. Bourahla and A. Khater, *Int. J. Mod.Phys. B* 34, 2050080 (2020).
- [27] E. R. Speer, *Lett. Math. Phys.* 10, 41 (1985).
- [28] B. Bourahla, O. Nafa, and A. Khater, *Can. J. Phys.* 91: 343 (2013).
- [29] E.A. Moujaes, A. Khater and M. Abou Ghantous, *J. Magn. Magn. Mater* 391, 49 (2015).
- [30] D. Ghader, A. Virlovet, M Abou Ghantous and A. Khater, *Eur. Phys J.B* 86, 180 (2013).

## Chapitre I

### Introduction à l'étude des ondes de spin

#### Sommaire

##### **I.1 Matériaux magnétiques**

###### I.1.1 Classification des matériaux d'un point de vue magnétique

- 1) Diamagnétique
- 2) Paramagnétique
- 3) Ferromagnétique
- 4) Antiferromagnétique
- 5) Ferrimagnétique

###### I.1.2 Les différents termes d'énergies magnétiques

- 1) Energie d'échange
- 2) Energie Zeeman
- 3) Energie d'anisotropie
- 4) Energie dipolaire

##### **I.2 Domaines d'application des matériaux ferromagnétiques**

##### **I.3 Interprétation physique de l'origine du ferromagnétisme**

###### I.3.1 Théorie du champ moléculaire de Weiss

###### I.3.2 Interprétation d'Heisenberg

##### **I.4 Ondes de spin dans les matériaux ferromagnétiques**

###### I.4.1 Principe de création d'une onde de spin

###### I.4.2 Approche semi-classique de traitement des ondes de spin

##### **Références**

## I.1 Matériaux magnétiques

L'étude des propriétés et comportements des matériaux magnétiques sont toujours d'actualité, à travers le monde, offrant toujours de nouvelles perspectives.

Au début de XX<sup>e</sup> siècle, les progrès réalisés dans l'étude de la matière à l'échelle atomique permettent d'explorer plus en détail le phénomène du magnétisme et d'en donner une interprétation quantique. Le magnétisme trouve essentiellement son origine dans les propriétés des électrons données par la physique quantique.

Le mouvement des électrons à l'intérieur des atomes donne lieu à deux moments cinétiques : un moment cinétique orbital associé au mouvement de l'électron autour du noyau et un moment cinétique dit de spin associé à la rotation de l'électron sur lui-même. A ces deux moments cinétiques sont associés deux moments magnétiques : le moment magnétique orbital et le moment magnétique de spin.

Les mouvements des électrons des couches incomplètes se combinent pour donner un moment magnétique atomique. Le nombre de moments magnétiques par unité de volume définit une aimantation, c'est une grandeur caractéristique des propriétés magnétiques. Elle dépend, en général, de deux paramètres principaux : le champ magnétique et la température.

Certains corps magnétiques, n'ont une aimantation qu'en présence d'un champ magnétique appliqué, sont appelés matériaux magnétiques à aimantation induite. Par ailleurs, d'autres matériaux, possédant une aimantation même en absence de champ magnétique, sont appelés matériaux magnétiques à aimantation spontanée [1].

### I.1.1 Classification des matériaux d'un point de vue magnétique

Les matériaux sont classés selon leur comportement en présence d'un champ magnétique.

A présent, les différentes catégories des matériaux magnétiques sont présentées, ci-dessous :

#### 1) Diamagnétique

Ces substances ont un moment magnétique nul par atome. Elles ne s'aimantent qu'en présence d'un champ magnétique extérieur, dans ce cas, elles induisent un moment magnétique opposé à la direction du champ appliqué. L'origine de ce magnétisme induit, provient d'une déformation des orbitales atomiques sous l'effet du champ appliqué.

Le bismuth et l'argent sont des exemples de ces matériaux.

## 2) Paramagnétique

Les matériaux paramagnétiques sont des matériaux qui ne possèdent pas d'aimantation en l'absence de champ magnétique extérieur, car l'agitation thermique entraîne un arrangement désordonné des moments magnétiques [2]. Ces derniers se compensent mutuellement de telle façon que le moment magnétique résultant est nul.

Si un champ magnétique est appliqué, les moments magnétiques s'alignent avec la direction du champ. Ainsi les matériaux acquièrent une aimantation qu'est proportionnelle au champ et dans la même direction de ce dernier. Parmi les matériaux paramagnétiques citons : le manganèse et le tungstène.

## 3) Ferromagnétique

Les matériaux ferromagnétiques présentent une aimantation permanente même en l'absence de champ magnétique appliqué, car les moments magnétiques de leurs atomes interagissent entre eux et tendent à s'aligner parallèlement les uns par rapport aux autres [3]. Cette interaction entre les moments s'oppose au désordre que tend à produire l'agitation thermique.

Sous l'action d'un champ magnétique externe, les moments magnétiques s'alignent progressivement dans la même direction et dans le même sens que le champ extérieur, dans ce cas le moment magnétique total est maximal, ainsi que l'aimantation augmente jusqu'à une valeur élevée dite aimantation à saturation. [4]

Par ailleurs, la température joue un rôle déterminant sur les propriétés magnétiques des matériaux. Lorsque les substances ferromagnétiques sont chauffées, elles perdent leurs propriétés magnétiques et se transforment peu à peu en matériaux paramagnétiques. La perte complète des propriétés ferromagnétiques s'effectue au-dessus d'une certaine température caractéristique de la substance considérée, cette température s'appelle « température de Curie » [1,5], en hommage à Pierre Curie qui a découvert cette propriété en 1895.

Les matériaux ferromagnétiques les plus courants sont le fer, le nickel et le cobalt et certains de ses alliages comme le *NiFe* ou *CoFe*. Il existe aussi des alliages plus ou moins complexes ayant cette propriété : le vicalloy (fer-cobalt-vanadium) et le silmanal (argent-manganèse-aluminium), ne sont que quelques exemples parmi la multitude des matériaux ferromagnétiques naturels ou synthétisés par l'homme.

#### 4) Antiferromagnétique

Dans les matériaux antiferromagnétiques les moments magnétiques interagissent entre eux, mais ces substances sont constituées de deux réseaux cristallins dont les directions des moments magnétiques sont couplées antiparallèlement [6]. De manière similaire aux matériaux ferromagnétiques, pour des températures supérieures à une température critique, appelée température de Néel, ces matériaux deviennent paramagnétiques [1], exemple de ces matériaux le chrome, l'oxyde  $NiO$ .

#### 5) Ferrimagnétique

Dans les matériaux ferrimagnétiques les moments magnétiques qui interagissent entre eux, sont parallèles et de sens inverse et d'intensité différente.

Les corps ferrimagnétiques sont également composés deux sous-réseaux, mais à la différence des antiferromagnétiques chaque sous-réseau est caractérisé par un moment magnétique, tel que la somme de ces deux étant non nulle.

Ces substances, ont des propriétés similaires aux ferromagnétiques : ils possèdent une aimantation non nulle en l'absence de champ magnétique extérieur et au-dessus d'une température critique (température de Curie), l'ordre ferrimagnétique est perdu et les matériaux se comportent comme des paramagnétiques [7]. Des exemples courants des matériaux ferrimagnétiques : les ferrites comme la magnétite  $Fe_3O_4$  et les grenats magnétiques comme *YIG* (Grenat d'Yttrium et de Fer).

### I.1.2 Les différents termes d'énergies magnétiques

#### 1) Energie d'échange

L'interaction d'échange est à l'origine de l'alignement spontané des moments portés par les atomes. Elle décrit l'existence des forces de couplages entre les moments magnétiques. L'énergie d'échange est une énergie purement électrostatique, mais l'origine quant à elle est quantique, en conséquence du principe d'exclusion de Pauli, qui stipule que deux électrons ne peuvent pas occuper le même état quantique.

Cette interaction a été introduite par Heisenberg en 1928, dans le cadre de la mécanique quantique [8-9]. Il a proposé de modéliser les interactions d'échange entre les spins de deux atomes voisins par une énergie d'échange proportionnelle au produit scalaire des spins  $\vec{S}_i$  et  $\vec{S}_j$  [10-11].

$$E_{\text{échange}} = -\sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.1)$$

Où  $J_{ij}$  est la constante de couplage d'échange quantifiant la force du couplage entre les spins  $\vec{S}_i$  et  $\vec{S}_j$  et caractérise le degré de recouvrement des orbitales des deux atomes.

Si sa valeur est positive les moments magnétiques tendent à s'aligner parallèlement entre eux, et en résulte un ordre ferromagnétique. Si sa valeur est négative, cela favorise une orientation antiparallèle entre les moments, c'est l'ordre antiferromagnétique ou ferrimagnétique [12-13].

## 2) Energie Zeeman

Cette énergie apparait lors de l'application d'un champ magnétique extérieur  $\vec{H}$  sur un corps magnétique. Elle constitue l'interaction de l'aimantation  $\vec{M}$  avec le champ [14].

L'énergie Zeeman favorise l'alignement de l'aimantation avec le champ extérieur.

$$E_z = -\int_V \vec{M} \cdot \vec{H} \cdot dV \quad (1.2)$$

## 3) Energie d'anisotropie

Cette énergie peut provenir de plusieurs contributions : l'énergie d'anisotropie magnéto-cristalline, l'énergie d'anisotropie magnéto-cristalline de surface et l'énergie d'anisotropie magnéto-élastique.

L'énergie d'anisotropie magnéto cristalline provient de la structure cristalline du matériau. Cette énergie fait en sorte qu'un matériau sera plus facile à aimanter dans certaines directions cristallographiques. En effet l'aimantation peut avoir tendance à s'aligner selon les axes de haute symétrie (axes de facile aimantation). Ce phénomène, résulte de l'interaction électrostatique entre les orbitales électroniques d'un atome et du champ électrique lié à la distribution de charges de l'environnement dénommé champ cristallin, ou en d'autres mots couplage spin-orbite [15].

Son expression générale pour un matériau cubique est [16] :

$$E_{\text{anisc}} = \int_V [K_1(\cos^2 \alpha_1 \cos^2 \alpha_2 + \cos^2 \alpha_2 \cos^2 \alpha_3 + \cos^2 \alpha_1 \cos^2 \alpha_3) + K_2 \cos^2 \alpha_1 \cos^2 \alpha_2 \cos^2 \alpha_3 + \dots] dV \quad (1.3)$$

Les  $K_i$  sont les constantes d'anisotropie et  $\alpha_i$  les angles que fait l'aimantation avec les axes cristallographiques.

Dans le cas des éléments 3d l'anisotropie magnéto-cristalline est faible.

A la surface ou à l'interface d'un matériau, il y a brisure de symétrie dans la structure atomique nécessitant l'ajout d'un terme d'énergie d'anisotropie supplémentaire dit de surface. Ce terme d'énergie d'anisotropie magnéto-cristalline de surface a été évoqué pour la première fois par Louis Néel en 1954 [17]. La brisure de symétrie entraîne une rupture de la continuité du champ cristallin.

Elle peut s'exprimer comme :

$$E_{anis} = K_s \cdot S \quad (1.4)$$

Où  $K_s$  et  $S$  sont, respectivement la constante, d'anisotropie de surface et la surface du système. L'énergie d'anisotropie magnéto-élastique résulte des contraintes dues à la déformation des mailles (de la structure du cristal).

#### 4) Energie dipolaire

Chaque moment magnétique d'un matériau magnétique subit de la part des autres moments une interaction dipolaire magnétique. L'énergie d'interaction entre ces moments est appelée énergie dipolaire [18] et elle est donnée par l'expression :

$$E_{dip} = \int_V -\frac{1}{2} \mu_0 \vec{M} \cdot \vec{H}_d \cdot dV \quad (1.5)$$

$\vec{H}_d$  : le champ dipolaire décrivant le champ créé par l'ensemble des moments magnétiques présents dans le matériau.

$V$  : le volume du matériau (l'échantillon).

Si l'on considère cette interaction entre deux moments portés par deux atomes voisins, elle est extrêmement faible devant l'énergie d'échange, mais elle agit à plus longue portée.

## I.2 Domaine d'application des matériaux ferromagnétiques

Les applications des matériaux ferromagnétiques se répartissent pour l'essentiel dans trois grands domaines : l'énergie, l'information et les télécommunications. On distingue les matériaux ferromagnétiques mous, à cycle d'hystérésis étroit et à faible aimantation rémanente, utilisés dans les transformateurs, moteurs ou alternateurs afin de limiter les pertes d'énergie, et les matériaux ferromagnétiques durs, à large cycle d'hystérésis et à forte aimantation rémanente

utilisés pour fabriquer des aimants permanents ou pour le stockage d'informations sous forme magnétique (bandes magnétiques, disques durs et disquettes informatiques...).

### I.3 Interprétation physique de l'origine du ferromagnétisme

#### I.3.1 Théorie du champ moléculaire de Weiss

Un matériau ferromagnétique est un matériau qui possède un moment magnétique et qui présente une aimantation spontanée, et cela même en absence de champ magnétique appliqué, au-dessous de point de transition. Cette aimantation, connue depuis l'antiquité, est appelée le ferromagnétisme et les corps qui la possèdent les ferromagnétiques. On note que le ferromagnétisme est une propriété magnétique forte due à l'interaction entre atomes.

La nature de l'interaction fut longtemps ignorée. En 1907, le physicien Français Pierre Weiss [19] accomplit un premier pas vers sa connaissance. Il admit l'existence d'un champ magnétique interne, à qui il a donné le nom de champ moléculaire, qui est proportionnel à l'aimantation [1].

Cependant, bien que la théorie du champ moléculaire arrive à expliquer assez bien l'ensemble des caractéristiques essentielles des matériaux ferromagnétiques, qu'il s'agisse de leur aimantation spontanée ou de leur transition de phase vers un état paramagnétique, elle est incapable de décrire d'autres, comme la variation expérimentale à basse température selon la loi :  $\Delta M(T) \approx T^{3/2}$ . (1.6)

#### I.3.2 Interprétation d'Heisenberg

Aux basses températures et au voisinage de la température de Curie, l'accord entre la théorie de Weiss et l'expérience n'est pas excellent. Les valeurs de la température critique déduite de la théorie du champ moléculaire sont toutefois plus faibles que les valeurs mesurées expérimentalement.

L'interprétation de ce champ moléculaire ne peut être donnée d'une manière classique. La véritable origine physique du champ de Weiss, n'a en fait pu être fournie que grâce à l'apport de la mécanique quantique.

En 1928, le physicien Allemand Werner K. Heisenberg a montré que ce champ provenait d'une interaction entre électrons dite d'échange résultant de la combinaison du principe d'exclusion de Pauli et de la répulsion coulombienne [20].

L'énergie correspondante à cette interaction d'échange est donnée par un Hamiltonien dit d'Heisenberg [11], donné par la relation suivante :

$$H = -\sum_{i,j} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.7)$$

Où

$J_{i,j}$  l'intégral d'échange, donnée par l'expression suivante [1] :

$$J = \iint \varphi_a(\vec{r}_i) \cdot \varphi_b(\vec{r}_j) \cdot \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \cdot \varphi_a(\vec{r}_j) \cdot \varphi_b(\vec{r}_i) d^3r \quad (1.8)$$

$\varphi_a$  et  $\varphi_b$  sont les fonctions d'ondes électroniques des deux atomes voisins  $i$  et  $j$ .

$J$  dépend des fonctions d'ondes électroniques des deux atomes et surtout de leurs recouvrements. Notons bien que cette intégrale d'échange est très sensible à la distance entre ces atomes, elle diminue très vite lorsque celle-ci augmente. En général, elle est négligeable pour la paire d'atome  $(i, j)$  plus éloignée que les premiers voisins.

$\vec{S}_i$  et  $\vec{S}_j$  sont deux vecteurs de spins situés sur les sites  $i$  et  $j$ .

## I.4 Ondes de spin dans les matériaux ferromagnétiques

### I.4.1 Principe de création d'une onde de spin

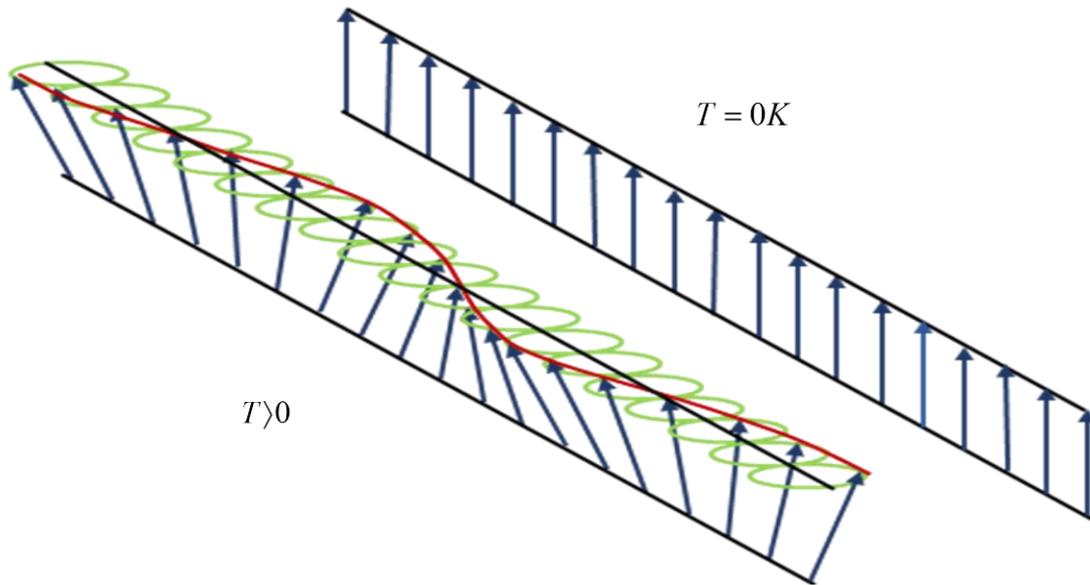
Considérons un système ferromagnétique sur lequel un axe de quantification est établi (axe  $z$  par exemple).

A  $0K$ , le système est dans un état fondamental qui correspond à un état d'ordre, dans lequel tous les spins sont parallèles et orientés dans un même sens (suivant l'axe de quantification). Cet alignement des spins correspond au minimum d'énergie.

Supposons que la température soit légèrement supérieure à  $0K$ , l'ordre des spins est détruit, ces derniers effectuent un mouvement de précession, en décrivant un cône autour de l'axe  $z$ , représenté schématiquement sur la figure 1.1. Dans ce cas, le système est dans un état excité.

Les spins s'influencent mutuellement, cela suggère que le spin dévié ne reste pas localisé, cette perturbation se propage de proche en proche par l'effet d'interaction d'échange, ce qui donne lieu à une précession cohérente et collective de spins. Le système ferromagnétique est alors parcouru par une onde de déviation de spins. Ces ondes engendrées, on les appelle « ondes de spin ». L'existence de ces ondes a été établie en 1930 par F. Bloch [21-24].

Les ondes de spin sont des oscillations de l'orientation relative des spins du réseau cristallin, comme indiqué sur la figure 1.1, elles sont semblables aux ondes vibrationnelles qui sont des oscillations des positions relatives des atomes dans le réseau.



**Figure 1.1** : Principe de création d'une onde de spin dans un matériau ferromagnétique.

D'après les lois de la physique quantique, les ondes de spin transportent de l'énergie par quantités bien définies. Ces quanta d'énergie sont nommés « magnons », par analogie aux photons qui sont les quanta des ondes électromagnétiques. Les magnons sont des pseudoparticules des bosons, qui à l'équilibre thermodynamique, se répartissent sur des états accessibles suivant la loi de Bose-Einstein. Si l'on connaît les propriétés statistiques des magnons, on peut établir la dépendance entre le nombre de magnons excités et la température. Il s'est avéré que le nombre de magnons croît avec la température en raison directe de  $T^{\frac{3}{2}}$ .

#### I.4.2 Approche semi-classique de traitement des ondes de spin

Plusieurs auteurs développèrent la théorie des ondes de spins, en utilisant différentes méthodes. Nous rappellerons brièvement, l'approche semi-classique et sur cette dernière que s'appuiera notre travail.

Dans le traitement semi-classique, les spins sont considérés comme des vecteurs [1,25]. Considérons un arrangement régulier de spin, couplés par des interactions d'échanges ferromagnétique.

L'énergie d'interaction d'échange d'un spin  $p$  avec l'ensemble des spins voisins est donnée sous la forme suivante [26-27] :

$$H = -2J \sum_{p'} \vec{S}_p \cdot \vec{S}_{p'} \quad (1.9)$$

La somme s'effectue sur tous les voisins.

On peut réécrire (1.9) par [28] :

$$H = -\vec{M}_p \cdot \vec{H}_{ex} \quad (1.10)$$

Avec

$$\vec{M}_p = g\mu_B \cdot \vec{S}_p \quad (1.11)$$

$$\vec{H}_{ex} = \frac{2J}{g\mu_B} \sum_{p'} \vec{S}_{p'} \quad (1.12)$$

Où

$g$  : le facteur de Landé.

$\mu_B$  : le magnéton de Bohr.

$\vec{M}_p$  : le moment magnétique du  $\vec{S}_p$ .

$\vec{H}_{ex}$  : le champ crée par les voisins agissant sur les spin  $\vec{S}_p$

La vitesse de variation du moment cinétique  $\hbar\vec{S}_p$  est égale au couple  $\vec{M}_p \wedge \vec{H}_{ex}$  qui agit sur le spin  $\vec{S}_p$  :

$$\hbar \frac{d\vec{S}_p}{dt} = -[\vec{M}_p \wedge \vec{H}_{ex}] \quad (1.13)$$

$$\hbar \frac{d\vec{S}_p}{dt} = - \left[ g\mu_B \vec{S}_p \wedge \frac{2J}{g\mu_B} \sum_{p'} \vec{S}_{p'} \right] \quad (1.14)$$

L'équation (1.14), peut se réécrire comme suit :

$$\frac{d\vec{S}_p}{dt} = - \frac{g\mu_B}{\hbar} \vec{S} \wedge \vec{H}_{ex} = -\gamma \vec{S} \wedge \vec{H}_{ex} \quad (1.15)$$

$\gamma = \frac{g\mu_B}{\hbar}$  est un rapport dit gyromagnétique.

L'équation (1.15), s'appelle équation de Landau-Lifshitz [29-31].

$$\hbar \frac{d\vec{S}_p}{dt} = -2J \left[ \vec{S}_p \wedge \sum_{p'} \vec{S}_{p'} \right] \quad (1.16)$$

Si  $\vec{S}_p$  est parallèle à ses spins voisins (pas d'onde de spin excitée).

On aura :  $\hbar \frac{d\vec{S}_p}{dt} = 0$  ( $\vec{S}_p$  un vecteur constant).

Si les spins effectuent de rotation autour de l'axe z (états excité), alors on peut décomposer  $\vec{S}_p$  comme suit :  $\vec{S}_p = \vec{S}_0 + \delta\vec{S}_0$

$\delta\vec{S}_p$  représente la déviation et  $\vec{S}_0$  la composante de  $\vec{S}_p$  suivant l'axe z (figure 1.2). Pour un système homogène, on suppose  $\vec{S}_0$  indépendante du temps.

L'équation (1.16) devient :

$$\hbar \frac{d(\delta\vec{S}_p)}{dt} = -2J \sum_{p'} \left[ (\vec{S}_0 + \delta\vec{S}_p) \wedge (\vec{S}_0 + \vec{S}_{p'}) \right] \approx -2J \sum_{p'} \left[ (\delta\vec{S}_p - \delta\vec{S}_{p'}) \wedge \vec{S}_0 \right] \quad (1.17)$$

A basse température,  $\delta\vec{S}_p$  et  $\delta\vec{S}_{p'}$  sont supposés très petits.

Soient  $\vec{S}_p^x$  et  $\vec{S}_p^y$  les composantes de  $\vec{S}_p$  le long des axes x et y, respectivement, (voir figure 1.3).

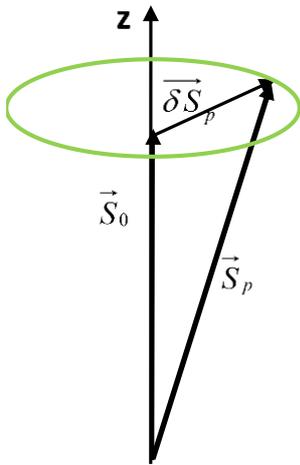
$$\delta\vec{S}_p^x = \vec{S}_p^x, \quad \delta\vec{S}_p^y = \vec{S}_p^y.$$

L'équation (1.17) s'écrit

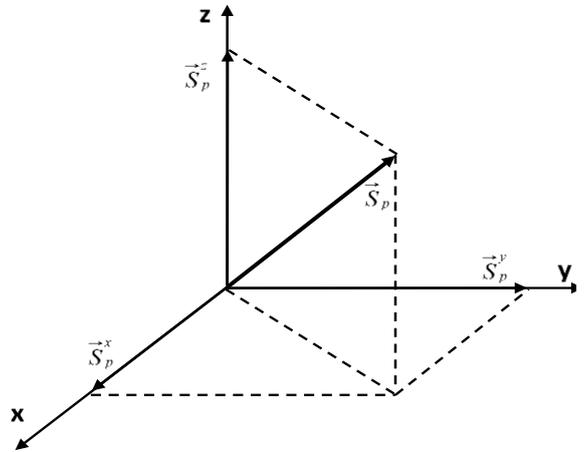
$$\hbar \frac{dS_p^x}{dt} = -2J_{pp'} \sum_{p'} (S_p^y - S_{p'}^y) \quad (1.18)$$

$$\hbar \frac{dS_p^y}{dt} = -2J_{pp'} \sum_{p'} (S_p^x - S_{p'}^x) \quad (1.19)$$

$$\hbar \frac{dS_p^z}{dt} = 0 \quad (1.20)$$



**Figure1.2** : Décomposition d'un vecteur de spin autour de l'axe z



**Figure1.3** : Représentation des composantes cartésiennes d'un vecteur de spin.

On cherche des solutions pour  $S_p^x$  et  $S_p^y$  de la forme d'ondes progressives (non stationnaires)

[28,32] :

$$S_p^x = U e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (1.21)$$

$$S_p^y = V e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (1.22)$$

( $S_p^z$  est une constante).

Où  $U$  et  $V$  sont des constantes,  $\vec{k}$  et  $\vec{r}$  sont le vecteur d'onde et vecteur position de  $\vec{S}_p$  respectivement.

On remplace ces solutions dans les équations (1.18 et 1.19), on obtient :

$$-i\hbar\omega U = 2J_{pp'}S_p\eta \left[ 1 - \frac{1}{\eta} \sum_{\vec{r}} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r})} \right] V \quad (1.23)$$

$$-i\hbar\omega V = 2J_{pp'}S_p\eta \left[ 1 - \frac{1}{\eta} \sum_{\vec{r}} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r})} \right] U \quad (1.24)$$

Avec  $\eta$  est le nombre de proches voisins (nombre de coordination).

Ce système d'équation en  $U$  et  $V$  admet une solution si le déterminant des coefficients est nul :

$$\begin{vmatrix} i\hbar\omega & 2J_{pp'}S_p\eta(1-\gamma) \\ -2J_{pp'}S_p\eta(1-\gamma) & i\hbar\omega \end{vmatrix} = 0 \quad (1.25)$$

$$\text{Où } \gamma = \frac{1}{\eta} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

Les solutions non-triviales de  $U$  et de  $V$  correspondent à

$$\hbar\omega = 2J_{pp'}S_p\eta[1-\gamma] \quad (1.26)$$

L'équation (1.26), est appelée relation de dispersion d'onde de spin, elle permet de tracer les courbes de dispersion des magnons.

**Références**

- [1] C. Kittel, Physique de l'état solide, 7<sup>ème</sup> édition, Dunod, Paris (1998).
- [2] F. Issaoui, Thèse de Doctorat, Université de Grenoble (2006).
- [3] Bleaney B.I. and Bleaney B., Electricity and magnetism, Third edition, Oxford University Press (1976).
- [4] M. Cyrot et J. P. Yonnet, Magnétisme I-Fondements, édition EDP Science (2000).
- [5] P. Georgs, Introduction à l'étude du magnétisme, Université de Paris (1966).
- [6] S. Lamrani, Thèse de Doctorat, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2016).
- [7] J. Degauque, Magnétisme et matériaux magnétiques : introduction J. Phys. IV France 02 C3-1-C3-13 (1992).
- [8] W. Heisenberg, Z. Phys, 49, 619 (1928)
- [9] R. Serra, Thèse de Doctorat, Toulouse III-Paul Sabatier (2009).
- [10] P. A. M. Dirac. Proc. Roy. Soc. A123, 714 (1929).
- [11] J. C. Slater, Phys.Rev.35, 509 (1930).
- [12] A. Bollero, Thèse de Doctorat, Université de Technologie de Dresden (2003).
- [13] P. Bruno, Thèse de Doctorat, Université de Paris-Sud (1989).
- [14] K. Garelo, Thèse de Doctorat, Université de Limoges (2009).
- [15] B. D. Cullity, Edition, Addison-Wesly, New York (1972).
- [16] L. Néel, J. Phys. Radium, 15, 225 (1954).
- [17] M. Arnaud Hillion, Thèse de Doctorat, Université de Lyon (2012).
- [18] G.O. Hernandez, Thèse de Doctorat, Université Toulouse 3 Paul Sabatier (2013).
- [19] P. Weiss, J. Phys. 6, 667 (1907).
- [20] L. P. Lévy, Magnétisme et supraconductivité, Inter Edition/ CNRS Editions, 1997.
- [21] F. Block, Z. Phys. 61, 206 (1930).
- [22] K. Matsushita, M. Sasaki, J. Soto and H. Imamura, J. Phys. Sos. Jpn.82, 033801 (2013).
- [23] W. Kipferl, M. Dumm, P. Kotissek, F. Steinbauer and G. Bayreuther, J. App. Phys.15, 7417 (2004).
- [24] L. A. Prozorova and A. I. Smirnov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 74, 1554(1978).
- [25] F. Boumeddine, Thèse de Doctorat, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2012).
- [26] S. Petit, Collection SFN10, EDP Scieces, 449(2010).
- [27] H. Puzskarski, Phys. Stat. Solid, 171,205 (1992).
- [28] H. T. Diep, Physique de la matière condensée, Donud (2003).
- [29] R. L. Stamps and R. E. Camley, R. J. Hicken. Phys. Rev. B54, 6 (1996).
- [30] Shan-Ho Tsai and D. P. Landau, Cond-Mat/0302397v1 (2003).

[31] S. Flach and Y. Zolotaryuk. *Solid Stat. Phys.* 41, 315 (2001).

[32] O. Nafa, Thèse de Doctorat, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2014).

## Chapitre II

# Ondes de spin dans les systèmes ferromagnétiques de basse dimension

### Sommaire

#### Introduction

#### II.1 Ondes de spin dans les systèmes parfaits

#### II.2 Ondes de spin dans les systèmes perturbés

##### II.2.1 Méthodes analytiques pour l'étude des ondes de spin dans les systèmes désordonnés

- 1) Méthode de diagonalisation directe
- 2) Méthode des fonctions de Green
- 3) Méthode de raccordement

##### II.2.2 Méthode de raccordement pour les systèmes de basses dimensions perturbés

##### II.2.3 Modélisation de la dynamique précessionnelle d'un système désordonné

- 1) Matrice dynamique du système perturbé
- 2) Matrice de raccordement

##### II.2.4 Calcul des grandeurs physiques

- 1) Coefficients de transmission et de réflexion
- 2) Conductance magnonique
- 3) Calcul des états de magnons localisés
- 4) Calcul des densités d'états magnoniques

#### Références

### Introduction

Certains corps magnétiques présentent la propriété remarquable de posséder une aimantation spontanée en l'absence de champs magnétiques appliqués. Cette aimantation connue depuis l'antiquité, est appelée le ferromagnétisme et les corps qui la possèdent les matériaux ferromagnétiques.

Dans les matériaux ferromagnétiques, les spins des atomes sont très fortement couplés. A très basses températures, les spins sont parallèles entre eux et orientés dans un même sens.

Lorsqu'on les excite, soit par une agitation thermique ou par une excitation magnétique les spins effectuent un mouvement de précession cohérent. Ces excitations collectives des spins sont de nature ondulatoire, elle porte le nom d'onde de spin.

La dynamique des spins dans les matériaux ferromagnétiques reste un des sujets d'études les plus actuels du magnétisme. Il est abordé autant pour ses aspects fondamentaux autant que pour son intérêt applicatif. En effet, d'un point de vue théorique, la dynamique des milieux ferromagnétiques offre une grande richesse due à la diversité et à la nature multi-échelle des interactions mises en jeu. D'un point de vue technologique, l'intérêt des ondes de spin réside dans leurs applications comme support pour transporter et traiter l'information [1-2].

Dans ce chapitre, nous exposons quelques notions de base sur la dynamique des spins dans les solides ferromagnétiques ordonnés. Puis, nous présentons, les différentes méthodes théoriques qui sont développées, pour l'étude des systèmes ferromagnétiques désordonnés. En outre, le dernier paragraphe de ce chapitre, est consacré pour décrire le principe de la méthode de raccordement, que nous allons utiliser dans notre étude pour la détermination des états de magnons localisés au voisinage d'un défaut, ainsi que l'étude de la diffusion d'ondes de spin et les densités d'états dans les systèmes ferromagnétiques de basse dimension.

### II.1 Ondes de spin dans les systèmes parfaits

Le cristal parfait ou idéal est un modèle utilisé pour décrire la structure d'un système (matériau). Dans ce modèle, on considère le système comme un arrangement ordonné et parfait des atomes de façon périodique, qui s'étend pratiquement à l'infini. Un cristal peut être décrit à l'aide d'une entité mathématique qu'on appelle le réseau et d'un contenu matériel dit le motif.

Le réseau cristallin parfait possède les propriétés de symétrie, donc il peut être reconstruit à partir d'une unité de base (maille élémentaire), la translation périodique de cette maille dans les trois directions nous permet de reconstruire l'ensemble du cristal.

Considérons un système ferromagnétique infini, constitué de  $N$  spins identiques de nombres quantiques  $S$ , localisés sur les nœuds d'un réseau cristallin ordonné. Le système peut alors être considéré comme une succession infinie de mailles élémentaires de spins. Soient  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  et  $\vec{c}$  trois vecteurs fondamentaux d'une cellule unitaire (élémentaire) du système considéré. La position d'un spin dans le réseau est déterminée par le vecteur position suivant :

$$\vec{r}(n_x, n_y, n_z) = n_x \vec{a} + n_y \vec{b} + n_z \vec{c} \quad (2.1)$$

Avec  $n_x$ ,  $n_y$  et  $n_z$  des nombres entiers.

Les spins dans le système sont couplés très fortement par une interaction d'échange entre les paires de premiers voisins. Cette interaction est décrite par l'Hamiltonien de Heisenberg suivant [3-4] :

$$H = - \sum_{p,p'} J_{p,p'} \vec{S}_p \cdot \vec{S}_{p'} \quad (2.2)$$

$\vec{S}_p$  est le vecteur de spin situé sur le site atomique  $p$  et  $\vec{S}_{p'}$  est le vecteur de spin occupant le site  $p'$ , voisin du site  $p$ .

$J_{p,p'}$  représente l'intégrale d'échange entre les spins  $\vec{S}_p$  et  $\vec{S}_{p'}$ . Sa valeur dépend des fonctions d'ondes électroniques des deux atomes et surtout de leur recouvrement.

Du fait de la périodicité spatiale du réseau cristallin, deux spins occupant deux sites équivalents du réseau magnétique effectuent, à une phase près, les mêmes mouvements de précession. Par conséquent, leurs amplitudes vérifient à chaque instant  $t$  la relation suivante :

$$\vec{u}(p', \omega) = \vec{u}(p, \omega) \cdot \exp[i\vec{q} \cdot \vec{r}(p, p')] \quad (2.3)$$

Où  $\vec{q}$  est un vecteur d'onde du réseau réciproque et  $\vec{r}(p, p')$  vecteur joignant la position d'équilibre du spin  $p$  à celle du spin  $p'$ .

On obtient un système d'équation, qu'on peut mettre sous la forme matricielle suivante :

$$[\omega I - M_D(\vec{q}, J_{pp'}, S)] \cdot |u\rangle = 0 \quad (2.4)$$

Où  $M_D$  est la matrice dynamique, dont les éléments dépendent des constantes d'échanges ainsi que de la valeur du quantum de spin.

$I$  est une matrice identité de même rang que la matrice  $M_D$  et  $|u\rangle$  le vecteur propre contenant les amplitudes de précession.

La condition pour que le système homogène (2.4) possède des solutions non triviales en  $\omega$  il faut que:

$$\det[\omega I - M_D(\vec{q}, J_{pp'}, S)] = 0 \quad (2.5)$$

## II.2 Ondes de spin dans les systèmes perturbés

Il est bien connu qu'un cristal parfait est obtenu par répétition périodique et régulière d'une maille élémentaire, mais la répétition à l'infini de cette maille n'existe pas et tout cristal présente des inhomogénéités de dimensions différentes. La première étant la surface extérieure de ce cristal.

Par ailleurs, la mise en application du théorème de Bloch pour l'étude des excitations magnétiques au voisinage d'une inhomogénéité s'avère impossible par le fait qu'il y a brisure de symétrie de translation. Ce qui rend impossible la résolution des systèmes d'équations du mouvement précessionnel d'un système ferromagnétique semi-infini. D'où la nécessité d'utiliser de nouvelles méthodes analytiques pour résoudre ce type de problème.

### II.2.1 Méthodes analytiques pour l'étude des ondes de spin dans les systèmes désordonnés

Pour étudier les propriétés physiques liées à la dynamique précessionnelle dans les systèmes ferromagnétiques désordonnés, plusieurs méthodes analytiques ont été développées et adaptées. Parmi celles-ci, on peut citer : la méthode de diagonalisation directe, le formalisme des fonctions de Green et la méthode de raccordement.

#### 1) Méthode de diagonalisation directe (Slab method)

Cette méthode a été introduite par Clark en 1965 [5]. Elle a été appliquée à un système physique par Allen et Alldredge en 1971, qui se sont plus particulièrement intéressés aux modes de phonons de surfaces d'un réseau cubique à faces centrées et aux effets induits par une couche adsorbée [6]. Depuis, cette méthode est apparue comme pratique et puissante pour étudier la dynamique vibrationnelle et magnétique aussi bien pour des surfaces planes que pour des surfaces vicinales [7-9].

Le principe de la méthode consiste à limiter les systèmes étudiés à un nombre fini de plans atomiques dans une direction donnée ( $z$  par exemple), avec une extension infinie dans les deux autres directions cartésiennes  $x$  et  $y$ . Afin de garantir l'existence d'une région dite de volume au centre du système. Il reste alors à écrire les équations du mouvement des spins appartenant à la cellule unitaire pour déduire la matrice dynamique.

La résolution numérique de la matrice dynamique détermine les valeurs propres ainsi que les vecteurs propres correspondants, ce qui permet ensuite de remonter aux propriétés des surfaces en donnant accès par exemple aux courbes de dispersion, aux densités spectrales, et aux vecteurs de déplacements et autres. Ce qui permet ainsi de développer les connaissances concernant les propriétés dynamiques des surfaces et interfaces.

La grande valeur du nombre de plans exigée dans cette méthode engendre des difficultés de calcul lors des simulations numériques dues à la taille de la matrice dynamique.

## 2) Méthode des fonctions de Green

Cette méthode a été développée par Lifshitz et Rosenzweig en 1948 [10], dans le but d'étudier les modes de vibration localisés de surface. Elle est devenue plus tard une technique de référence souvent utilisée dans la détermination des états de magnons localisés en surface [11-13].

Le principe de la méthode consiste à créer un réseau semi infini à partir d'un réseau illimité, en annulant les interactions entre les atomes situés de part et d'autre du plan bissecteur de deux plans atomiques consécutifs. L'effet de cette modification sur la dynamique du système est considéré comme une perturbation qui transforme la matrice dynamique  $M$  du système illimité (ou infini) en une matrice  $M_s$ , qui s'écrit sous la forme  $M_s = M + W$

Où  $W$  représente la matrice de perturbation composée d'une sous matrice non nulle dont l'ordre fini dépend du nombre de plans affectés par la perturbation.

## 3) Méthode de raccordement

Cette méthode a été initiée pour la première fois par Feuchtwang en 1967 [14], lors d'une étude de l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin semi infini à trois dimensions.

Puis, reprise et développée par Szeftel et Khater en 1987 [15-16].

La méthode de raccordement a été adaptée dans l'étude des ondes de spin au voisinage des surfaces magnétiques [17-18]. Elle s'est imposée par la suite, comme un outil incontournable

dans l'étude de la dynamique vibrationnelle et précessionnelle de plusieurs systèmes physiques perturbés [19-22].

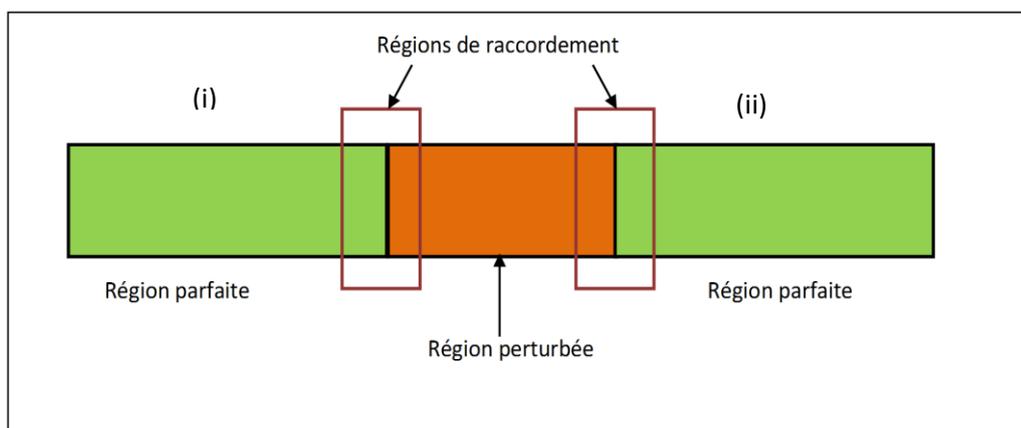
En utilisant cette méthode, A. Khater et *al.* ont effectué de nombreux travaux tels que les phonons et les magnons des surfaces, surfaces alliages, interfaces, le transport cohérent par des nanojonctions. [23-25]

C'est sur la méthode de raccordement que s'appuiera notre travail. Les bases théoriques de cette méthode sont développées au paragraphe suivant.

### II.2.2 Méthode de raccordement appliquée aux systèmes de basses dimensions perturbés

La méthode de raccordement consiste à décrire le mouvement de précession des vecteurs de spin par un nombre fini d'équations [26]. L'exécution de cette méthode requiert la subdivision du système en trois régions distinctes.

- **Région parfaite** : c'est une partie du système cristallographique, qui se trouve loin du défaut, c'est-à-dire hors des effets de la perturbation. Elle est caractérisée par sa périodicité tridimensionnelle, et elle permet de tracer les courbes de dispersions.
- **Région de défaut** : c'est la région qui renferme tous types de défauts ou inhomogénéités, elle a, en général, des propriétés différentes de celles du système parfait, ce qui signifie que la périodicité est perturbée dans cette zone.
- **Région de raccordement** : c'est la région intermédiaire entre les deux zones, parfaite et perturbée. Elle sert à relier analytiquement les précessions de spin de cette région et la région perturbée avec ceux de la zone parfaite à l'aide des vecteurs propre et valeur propre calculés à partir de la matrice de volume.



**Figure 2.1** : Représentation schématique, d'un système désordonné, subdivisé selon la méthode de raccordement.

### II.2.3 Modélisation de la dynamique précessionnelle d'un système désordonné

Tout d'abord nous attribuons à chaque atome du système étudié un vecteur de spin  $S_p(n_x, n_y, n_z)$ , tels que les indices  $(n_x, n_y, n_z)$  sont des nombres entiers donnant la position du vecteur spin le long des trois directions cartésiennes  $(ox)$ ,  $(oy)$  et  $(oz)$ . Nous considérons des ondes incidentes venant de la gauche du défaut, se dirigeant vers la droite, et nous fixons l'origine du repère sur la position  $n_x = 0$ , de la première colonne perturbée. Le mode incident pourrait être une superposition des modes propres du guide d'onde parfait.

Nous écrivons l'amplitude de l'onde incidente pour  $n_x \langle 0$ , de la manière suivante [27-28] :

$$\vec{u}_{inc}^{n_x} = (Z_{\bar{v}})^{n_x} \vec{u}_{\bar{v}} \quad (2.6)$$

L'indice  $\bar{v}$  désignera toujours le mode incident, et  $\vec{u}_{\bar{v}}$  le vecteur propre correspondant au mode  $\bar{v}$ . L'indice  $n_x$  désigne le site occupé par un vecteur de spin suivant la direction de propagation  $(ox)$ .

$(Z_{\bar{v}})$  les facteurs de phase associés au mode propre  $\bar{v}$ .

$$\text{avec } Z_{\bar{v}} = \exp(i\phi_{\alpha}) = \exp(iq_{\alpha}a) \quad (2.7)$$

$q$  est le vecteur d'onde dans la première zone de Brillouin,  $a$  le paramètre du réseau et  $\alpha$  représente l'une des trois directions cartésiennes.

#### 1) Matrice dynamique du système perturbé

Cette matrice est obtenue en écrivant les équations du mouvement de précession des spins appartenant à la région du défaut (RP) et aux deux régions de raccordement (RRG+RRD) représenté sur la Fig. (1.1). Cette zone d'étude est choisie de telle sorte qu'elle comprenne les spins de la région de défaut ainsi que ceux des deux régions de raccordement gauche et droite possédant un environnement des guides d'ondes parfaits.

En utilisant les expressions (2.6) et (2.7), l'ensemble de ces équations qui régit la dynamique précessionnelle de ce système perturbé peut s'écrire comme suit :

$$[\Omega I - M_D(Z_1, Z_2, Z_3)]\vec{u} = |0\rangle \quad (2.8)$$

$\Omega = \frac{\omega}{\omega_0}$  est la fréquence normalisée, avec  $\omega_0$  est la fréquence caractéristique du réseau parfait

et  $\omega$  la fréquence d'excitation.

$I$  est la matrice identité,  $J_i$  représente les différentes constantes d'échange du système.

$Z_2 = \exp(i\phi_y)$  et  $Z_3 = \exp(i\phi_z)$  sont les facteurs de phases suivant les deux directions  $y$  et  $z$  respectivement.

Le vecteur  $|u\rangle$  représente les amplitudes de précession de tous les spins appartenant à la zone perturbée considérée.

$M_D$  est une matrice rectangulaire, appelée matrice dynamique du système perturbé. On peut l'écrire comme  $M_D(m, n)$ .

Avec

$\dim[M_D] = (m \otimes n)$ , tel que :

$m$  : le nombre de spins dans les régions défaut et raccordements et  $n = m + l$ , avec  $l$  est le nombre de spins qui sont reliés directement aux sites de raccordement.

La condition de compatibilité du système parfait donne accès, pour chaque donnée  $(q, \Omega)$  à une équation polynomial en  $Z_1$  ( $Z_1 = \exp(i\phi_x)$ , le facteur de phase suivant la direction  $x$ ), dont les solutions physiques caractérisent les différents modes précessionnels en volume suivant la direction normale au défaut. Les solutions pour lesquelles  $|Z_1| = 1$ , sont des modes itinérants, tandis que celles qui vérifient la condition  $|Z_1| < 1$  correspondent à des modes évanescents depuis le défaut vers le volume.

## 2) Matrice de raccordement

La dynamique des spins dans la zone perturbée donne une matrice rectangulaire  $M_D$ , donc elle est non diagonalisable ce qui ne nous permet pas de déterminer ses valeurs et vecteurs propres. Pour résoudre ce problème, on applique le formalisme de raccordement qui consiste à exprimer la déviation des sites de la zone de défaut et ceux des zones de raccordements en fonction des champs précessionnels des modes évanescents et propagent en volume.

Pour cela nous devons définir deux espaces vectoriels avec deux bases distinctes  $\{R^-\}$  et  $\{R^+\}$  ; la première sera utilisée pour l'étude de la précession des spins se trouvant à droite du défaut

par contre la deuxième sera utilisée pour l'étude de la précession de ceux se trouvant à gauche du défaut. Les dimensions des matrices correspondantes au  $\{R^-\}$  et  $\{R^+\}$  sont liés au nombre de modes propres obtenus lors de l'étude préliminaire en volume des guides d'ondes parfaits.

Compte tenu des relations de raccordement, les amplitudes de précession des vecteurs de spin appartenant à la région de raccordement côté gauche du défaut, peuvent être alors décrites de la manière suivante [29-30] :

$$u'_\alpha(n_x, n_y, n_z) = A'(j)Z_j^{-n_x} + \sum_{j=1}^N Z_j^{-n_x} A'(\alpha, j)R_j^- \quad (2.9)$$

De même, pour les amplitudes de précessions des vecteurs de spin du côté droit :

$$u_\alpha(n_x, n_y, n_z) = \sum_{i=1}^{N'} Z_i^{n_x} A(\alpha, i)R_i^+ \quad (2.10)$$

Dans laquelle :

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

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

$\alpha$  : représente l'une des trois directions cartésiennes.

$A'(\alpha, j)$  et  $A(\alpha, i)$  sont les poids pondérés associés aux différents modes évanescents déterminés à partir de la dynamique en volume.

Le vecteur de précession des spins de la zone perturbée  $|u\rangle$ , peut se décomposer en deux parties :

- La première est notée par  $|irr\rangle$ , est constituée par les amplitudes de précessions des sites irréductibles formant la région de défaut.
- La seconde est  $|rac\rangle$ , est formée par les amplitudes de précessions des sites des deux zones de raccordements (gauche et droite).

Ainsi on écrit :

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

On peut alors décrire le raccordement des sites à l'aide des expressions suivantes :

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} = [M_R] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |R^-\rangle \\ |R^+\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & R_1^- & 0 \\ 0 & 0 & R_2^+ \\ 0 & R_3^- & 0 \\ 0 & 0 & R_4^+ \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |R^-\rangle \\ |R^+\rangle \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

$$[M_R] = \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & R_1^- & 0 \\ 0 & 0 & R_2^+ \\ 0 & R_3^- & 0 \\ 0 & 0 & R_4^+ \end{bmatrix}$$

$[M_R]$  est la matrice de raccordement, qui est rectangulaire de dimension inverse de celle de la matrice dynamique  $M_D$ , c'est-à-dire,  $\dim[M_R] = (n \otimes m)$ .

$I$  est une matrice identité, ses dimensions dépendent du nombre des sites irréductibles.

$R_1^-$ ,  $R_2^+$ ,  $R_3^-$  et  $R_4^+$  sont des matrices carrées, leurs dimensions dépendent du nombre de modes propageants.

### II.2.4 Calcul des grandeurs physiques

La méthode de raccordement a été introduite afin d'avoir une approche analytique pour déterminer les différentes grandeurs physiques

$$[M_D(m \otimes n)] \cdot [M_R(n \otimes m)] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |R^-\rangle \\ |R^+\rangle \end{bmatrix} = |0\rangle \quad (2.13)$$

Le produit de la matrice  $M_D$  par la matrice  $M_R$  donne la matrice dynamique carrée du système perturbé  $M_S(m \otimes m)$ , le système (2.13) devient

$$[M_s(m \otimes m)] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |R^-\rangle \\ |R^+\rangle \end{bmatrix} = |0\rangle \quad (2.14)$$

La matrice  $M_s$  permet de calculer les grandeurs physiques

### 1) Coefficients de transmission et de réflexion

Une onde incidente, venant de la gauche vers la droite, en arrivant à la zone de défaut, se divise en deux parties : l'une est réfléchiée et l'autre est transmise. Cela donne naissance à un champ précessionnel dans les régions (i) et (ii) (voir la figure 2.1), qui peuvent être exprimés comme une superposition de l'onde incidente avec les modes propres du guide d'onde parfait à la même fréquence.

L'amplitude de précession d'une onde réfléchiée, qui se propage dans la partie gauche s'écrit comme suit :

$$\vec{u}_r = \sum_{\nu} R_{\nu\bar{\nu}} \left( \frac{1}{Z} \right) \vec{u} \quad (2.15)$$

Pour l'amplitude de précession d'une onde transmise qui se propage dans la partie droite, s'écrit comme suit :

$$\vec{u}_t = \sum_{\nu} T_{\nu\bar{\nu}}(Z) \vec{u} \quad (2.16)$$

Avec  $\nu$  est un mode propageant du guide d'ondes et  $\bar{\nu}$  le mode incident. Les quantités  $R_{\nu\bar{\nu}}$  et  $T_{\nu\bar{\nu}}$ , sont des facteurs complexes, qui nous permettent de calculer les coefficients de réflexion  $r_{\nu\bar{\nu}}$  et de transmission  $t_{\nu\bar{\nu}}$ , en prenant soin de les normaliser par les vitesses de groupe.

Les coefficients de réflexion et de transmission sont donnés par les relations [31-34] :

$$r_{\nu\bar{\nu}} = |\tau_{\nu\bar{\nu}}|^2 = \left( \frac{V_{g\nu}}{V_{g\bar{\nu}}} \right) \cdot |R_{\nu\bar{\nu}}|^2 \quad (2.17)$$

$$t_{\nu\bar{\nu}} = |\rho_{\nu\bar{\nu}}|^2 = \left( \frac{V_{g\nu}}{V_{g\bar{\nu}}} \right) \cdot |T_{\nu\bar{\nu}}|^2 \quad (2.18)$$

Les grandeurs  $\tau$  et  $\rho$  sont les éléments de la matrice de raccordement.

Notons que  $V_{g\nu}$ , qui désigne la vitesse de groupe correspondante au mode propre  $\nu$  est nulle pour les modes évanescents des guides d'ondes parfaits. En effet, les modes évanescents sont nécessaires pour une description totale de la dynamique précessionnelle et pour la diffusion d'ondes de spin, mais ils ne contribuent pas au transport d'énergie.

Comme dans tous processus de diffusion, la conservation de l'énergie transportée par l'onde de spin incidente sur le défaut se traduit par l'unitarité de la matrice de diffusion. Dans ces conditions, en supposant que l'onde de spin incidente a une amplitude normalisée, la somme des coefficients  $r$  et  $t$  est égale à l'unité, et on écrit [35] :

$$\sum_{\nu} (t_{\nu\bar{\nu}} + r_{\nu\bar{\nu}}) = 1 \quad (2.19)$$

## 2) Conductance magnonique

Afin de décrire la transmission globale des ondes de spin dans les systèmes perturbés, il est utile de définir, par analogie avec la conductance électronique qui est liée aux phénomènes de diffusion, la conductance magnonique d'un défaut pour une fréquence  $\Omega$  donnée [36]. Cette conductance notée  $\sigma(\Omega, \phi_y, \phi_z)$ , est définie par [28, 37].

$$\sigma(\Omega, \phi_y, \phi_z) = \sum_{\nu, \bar{\nu}} t_{\nu\bar{\nu}} \quad (2.20)$$

Où la sommation étant effectuée sur tous les modes propageant à une fréquence  $\Omega$ .

Pour un guide d'onde parfait, sans défaut (non perturbé)  $\sigma$  est un entier qui donne le nombre de modes propageant à la fréquence  $\Omega$  considérée.

Par contre, en présence d'un défaut,  $\sigma$  n'est plus entier et l'écart entre la valeur de  $\sigma$  idéale et sa valeur provenant des processus de diffusion donne une mesure de la réflexion.

### 3) Calcul des états de magnons localisés

Les états précessionnels localisés dans la zone de défaut sont déterminés à partir de la relation de compatibilité suivante :

$$\det([M_S(m \otimes m)]) = 0 \quad (2.21)$$

### 4) Calcul des densités d'états magnoniques

La densité d'états (DOS : *Densité of States*) est une des grandeurs physiques de base, sa détermination est capitale pour déterminer certaines propriétés physiques d'un système comme par exemple la capacité calorifique [38]. Il est directement mesurable en physique expérimentale par différentes techniques selon le système (électronique, phononique, magnonique,) ; pour des systèmes magnétiques avec des excitations de spin (magnons), la technique de la diffusion inélastique des neutrons donne accès à la DOS (ou LDOS) de ces excitations.

Il est possible de définir une densité d'états des excitations de spin (magnons)  $D(\Omega)$ , définie par le fait que la quantité  $D(\Omega)d\Omega$  soit le nombre d'états (modes) dans le domaine de fréquence  $[\Omega, \Omega + d\Omega]$  par maille élémentaire en volume du système étudié.

Nous pouvons calculer les densités d'état locales (LDOS) par couche atomique au voisinage de la surface ou interface, en utilisant un formalisme basé essentiellement sur les fonctions de Green associées à la méthode de raccordement. [39-40].

L'opérateur de Green, est obtenu à partir de la matrice carrée du système  $M_S$  (qui résulte du produit de la matrice dynamique du système  $M_D$  et de la matrice de raccordement  $M_R$ ).

L'opérateur de Green s'exprime sous la forme suivante :

$$G(\phi_y, \phi_z, \Omega + i\varepsilon) = [(\Omega + i\varepsilon)I - M_S(\phi_y, \phi_z, [J_i])]^{-1} \quad (2.22)$$

Où

$\Omega$  : La fréquence normalisée.

$\varepsilon$  : Une infime partie imaginaire qu'on ajoute à  $\Omega$  pour éviter toute divergence dans les calculs.

$\phi_y$  et  $\phi_z$  : Les facteurs de phase suivant les directions  $oy$  et  $oz$ , respectivement.

$J_i$  : représente l'ensemble des constantes d'échange, du système.

La matrice des densités spectrales, pour un vecteur d'onde parallèle à la surface ou à l'interface, est donnée par la relation suivante :

$$\rho_{(\alpha, \beta)}^{(l, l')}(\phi_y, \phi_z, \Omega, [J_i]) = \sum_m C_{\alpha m}^l \cdot C_{\beta m}^{l'} \cdot \delta(\Omega - \Omega_m) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left[ \text{Im} G_{\alpha\beta}^{ll'}(\phi_y, \phi_z, [J_i], \Omega + i\varepsilon) \right] \quad (2.23)$$

$l$  et  $l'$  représentent deux spins différents sur les couches atomiques au voisinage de la surface ou l'interface,  $\alpha$  et  $\beta$ , représentent, deux directions cartésiennes, et  $C_{\alpha m}^l$  la composante  $\alpha$  du vecteur de précession du spin  $l$  pour la branche d'énergie  $\Omega_m$ .

$\delta$  : Distribution de Dirac

La densité d'état correspond à la somme sur tous les vecteurs d'ondes  $\phi_y$  et  $\phi_z$  à l'énergie  $E = \hbar\Omega$ ; elle peut alors s'écrire, pour l'ensemble donné des constantes d'échange du système  $\{J_i\}$ , comme suit:

$$D(\Omega) = \sum_{l\alpha} \sum_{\phi_y, \phi_z} \rho_{(\alpha, \alpha)}^{(l, l')}[\Omega, \phi_y, \phi_z] = -\frac{1}{\pi} \sum_{l, \alpha} \sum_{\phi_y, \phi_z} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left[ \text{Im} G_{\alpha\alpha}^{ll}(\phi_y, \phi_z, \Omega + i\varepsilon) \right] \quad (2.24)$$

La densité d'état localisée sur le site  $l$  pour une couche atomique au voisinage de la surface ou l'interface, qu'on note par  $D_l(\Omega)$ , est donnée par :

$$D_l(\Omega) = \sum_{\alpha} \sum_{\phi_y, \phi_z} \rho_{(\alpha, \alpha)}^{(l, l')}[\Omega, \phi_y, \phi_z] = -\frac{1}{\pi} \sum_{\alpha} \sum_{\phi_y, \phi_z} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left[ \text{Im} G_{\alpha\alpha}^{ll}(\phi_y, \phi_z, \Omega + i\varepsilon) \right] \quad (2.25)$$

**Références**

- [1] A. A. Serga, A. V. Chumak and B. Hillebrands, *J. Phys. D. Appl. Phys.* 43, 264002 (2010).
- [2] A. V. Chumak, V. I. Vasyuchka, A. A. Serga and B. Hillebrands, *Nat. Phys.* 11, 453 (2015).
- [3] M. Abou Ghantous, E. A. Moujaes, J. L. Dunn and A. Khater, *Eur. Phys. J. B* 85, 178 (2012).
- [4] R. B. Stinchcombe, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 6, 2459 (1973).
- [5] W. Clarke, PhD Thesis, University of California, Los Angeles (1965).
- [6] R. E. Allen, G. P. Alldrege and F. W. De Wette, *Phys. Rev. B* 4, 1648 (1971).
- [7] J. E. Black and P. Bopp, *Surf. Sci.* 140, 275 (1984).
- [8] A. Lock, J. P. Toennies, G. Witte, *J. Elec. Spec. & Related Phenomena*, 54/55, 309 (1990).
- [9] P. Knipp, *Phys. Rev. B* 43, 6908 (1991).
- [10] I. M. Lifshitz and L. N. Rosenzweig, *Zh. Ekperim. I Teor. Fiz.* 18, 1012 (1948).
- [11] D. L. Mills and A. A. Maradudin, *J. Phys. Chem. Solids* 28, 1855 (1967).
- [12] M. G. Cottam, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 11, 165 (1978).
- [13] I. D. Paczek and al, *Phys. Rev. B* 45, 12898, (1992).
- [14] T. E. Feuchtwang, *Phys. Rev.* 155, 731 (1967).
- [15] J. Szeftel and A. Khater, *J. Phys. C: Solide State Phys.* 20, 4725 (1987).
- [16] J. Szeftel, A. Khater, F. Mila, S. d'Addato and N. Auby, *J. Phys. C: Solide State Phys.* 21, 2113 (1988).
- [17] M. Tamine, *J. Magn. and Magn. Mat.*, 153, 366 (1996).
- [18] M. Abou Ghantous and A. Khater, *Eur. Phys. J. B* 12, 335 (1999).
- [19] R. Tigrine, A. Khater, M. Belhadi and O. Rafil, *Surf. Sci.* 580 (2005).
- [20] B. Bourahla, A. Khater and R. Tigrine, *Thin Solid Films* 517, 6857 (2009).
- [21] R. Tigrine, A. Khater, B. Bourahla, M. Abou Ghantous and O. Rafil, *Eur. Phys. J. B* 62, 59 (2008).
- [22] V. Ashokan, M. Abou Ghantous, D. Ghader and A. Khater, *Thin Solid Films* 616, 6 (2016).
- [23] R. Tigrine, L. Saim, and A. Khater, *J. Nanoeng. Nanomanuf.* 6, 332 (2016).
- [24] O. Nafa, B. Bourahla and A. Khater, *Thin Solid Films*, 540, 282 (2013).
- [25] B. Bourahla, A. Khater, R. Tigrine, O. Rafil and M. Abou Ghantous, *J. Phys.: Condens. Matter* 19, 266208 (2007).

- [26] A. Khater, N. Auby and R. F. Wallis, *Physica. B* 168, 273 (1998).
- [27] A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlovvet and A. Khater, *Phys. Rev. B* 55, 1707 (1997).
- [28] A. Fellay, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (1996).
- [29] R. Tigrine, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2004).
- [30] R. Xu, H. Hong, P. Zschack and T. C. Chiang, *Phys. Rev. Lett.* 101 (085504/1-4) (2008).
- [31] R. Landauer, *Philos. Mag.* 21 863, (1970).
- [32] M. Büttiker, *Phys. Rev. Lett* 57, 1761, (1986).
- [33] O. Nafa, B. Bourahla and A. Khater, *J. Phys. Chem. Solids* 74, 395 (2013).
- [34] B. Bourahla, O. Nafa, A. Khater and R. Tigrine, *Physic E* 43, 1213 (2011).
- [35] M. Boucherrab, Thèse de doctorat, université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2015).
- [36] R. Landauer, *J. Phys: Condens.Matter*1, 8099(1989).
- [37] O. Nafa, B. Bourahla and A. Khater. *Physica. B* 407, 1027 (2012).
- [38] E. J. Garboczi and M. F. Thorpe, *Phys. Rev. B* 32, 4513 (1985).
- [39] D. Ghader, A. Virlovvet, M. Abou Ghantous and A. Khater, *Eur. Phys. J.B* 86, 180 (2013).
- [40] H. Grimech and A. Khater, *Surf. Sci.* 323, 198 (1995).

## Chapitre III

# Transport balistique des magnons à travers une nanojonction Fe/Ni(n)/Fe

## Sommaire

### Introduction

#### III.1 Etude dynamique du guide d'onde parfait Fe (bcc)

III.1.1 Equation de mouvement et courbe de dispersion

III.1.2 Vitesses de groupe

#### III. 2 Méthodes d'élaboration des couches minces magnétiques

III.2.1 Pulvérisation cathodique

III.2.2 Epitaxie par jets moléculaires

III.2.3 L'ablation laser

#### III.3 Etude du transport magnonique par une couche mince du Nickel insérée en sandwich entre deux guides d'ondes parfaits Fe (bcc)

III.3.1 Description des systèmes nanojonctions Fe/Ni(n)/Fe

III.3.2 Nanojonction de type Fe/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe

III.3.3 Nanojonction de type Fe/Fe<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub>/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub> /Fe

III.3.4 Nanojonction de type Fe/Ni<sub>fcc</sub>(n)/Fe

III.3.5 Interprétation des résultats obtenus

### Conclusion

### Références

## Introduction

Les besoins croissants de stockage de l'information et la nécessité d'un accès rapide aux données sont à l'origine d'une course à la miniaturisation qui a stimulé la recherche de nouveaux dispositifs et composants artificiels [1-2]. Les originaux de ces composants contiennent et utilisent des objets de dimension nanométrique tels que les couches minces.

Lors de la dernière décennie des phénomènes nouveaux et inattendus ont été découverts dans le domaine du magnétisme des couches minces. Dans les années 80, des progrès importants ont été faits dans le domaine des couches minces magnétiques liés au besoin des moyens d'enregistrements de données performants pour les secteurs de l'électronique [3]. Au milieu des années 80, il est apparu que les progrès de la fabrication des couches minces par dépôt sous ultravide ouvraient de nouvelles perspectives. En effet, les procédés de fabrication de certaines couches minces magnétiques nécessitent des températures de dépôt élevées et cela peut endommager d'autres composants lors d'une intégration. Des matériaux ferromagnétiques tels que les métaux de transition (Fe, Ni et Co) sous forme de couches minces se présentent comme solution.

A la fin des années 80, des structures magnétiques artificielles à l'échelle atomique ont vu le jour, telles que les multicouches  $[Fe/Cr]_n$  et les sandwichs  $Fe/MgO/Fe$  et  $Y/Dy/Y$ . Un grand nombre de découvertes ont été réalisées en étudiant les propriétés de ces systèmes [4-6].

Dans ce chapitre, on s'intéresse à l'étude des systèmes à base de métaux de transition de type Fe/Ni(n)/Fe. Ces derniers sont constitués de  $n$  plans atomiques de Nickel (Ni) insérés entre deux structures semi infinies de Fer (Fe) ce qui donne naissance à une structure sandwich, qu'on considère thermodynamiquement stable.

L'objectif ambitieux de ce chapitre est de relever l'impact et l'influence de l'épaisseur de la nanostructure constituée des plans atomiques Ni insérés entre les deux guides d'ondes parfaits de Fe, suivant la direction [100], sur les propriétés dynamiques et la diffusion de magnons.

Pour cela nous avons adapté la méthode de raccordement [7-10], rappelée au chapitre précédent.

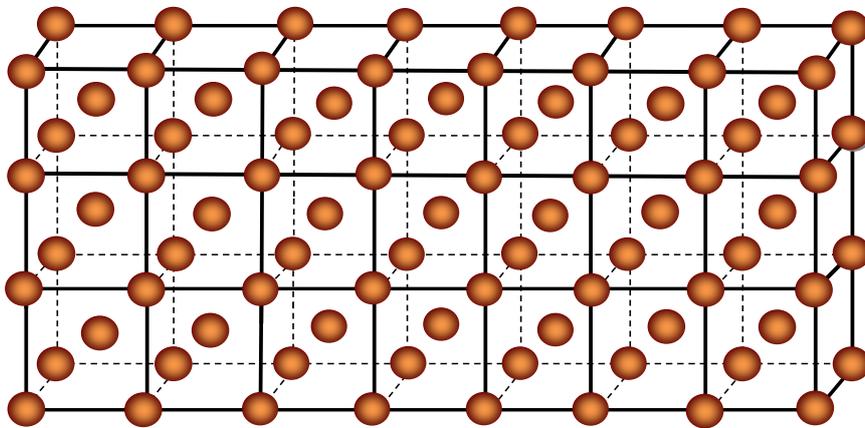
### III.1 Etude dynamique du guide d'onde parfait Fe (bcc)

Le fer (Fe) appartient à la première série des éléments de transition. Il existe à l'état massif dans plusieurs types d'empilement : une structure cubique centrée (bcc) ferromagnétique (Fe  $\alpha$ ) et une structure cubique à face centrées (Fe  $\gamma$ ). Nous ne considérons ici que la structure (bcc).

#### III.1.1 Equation de mouvement et courbes de dispersion

Le système modèle est un réseau cubique centré (bcc) ferromagnétique, infini dans les trois directions cartésiennes (ox), (oy) et (oz) et de paramètre de maille  $a$ .

Un atome de fer donné  $A$  appartenant à la région parfaite (volume), se retrouve entouré par 8 premiers proches voisins à une distance  $\frac{\sqrt{3}}{2}a$ .



**Figure 3.1 :** Représentation schématique du guide d'onde parfait Fe(bcc).

Le mouvement de précession d'un vecteur de spin  $\vec{S}$ , situé sur un site donné est décrit par un Hamiltonien d'Heisenberg, décrivant toutes les interactions entre les spins. Il est donné par [11-14] :

$$H = -\sum_{ll'} J_{ll'} S_l S_{l'} \quad (3.1)$$

Où :

$S_l$  et  $S_{l'}$  : les vecteurs de spins situés sur les sites  $l$  et  $l'$ .

$J_{ll'}$  : la constante d'échange couple les sites adjacentes  $l$  ( $l'$ ) du système.

Nous tenons compte uniquement des interactions d'échanges entre premiers proches voisins.

L'équation du mouvement de précession d'un vecteur de spin de site  $(i,j,k)$  du réseau tridimensionnel, est donnée sous la forme suivante :

$$\hbar\omega u_A(i,j;k) = J_{AA} S_A \begin{bmatrix} 8u_A(i,j,k) - u_A\left(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}\right) - u_A\left(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2}\right) \\ -u_A\left(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}\right) - u_A\left(i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}\right) \\ -u_A\left(i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}\right) - u_A\left(i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2}\right) \\ -u_A\left(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2}\right) - u_A\left(i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2}\right) \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

$u_A(i,j,k)$ , représente l'amplitude de précession d'un vecteur de spin appartenant au système parfait et  $\omega$  est la fréquence propre du système.

$J_{AA} = J_{Fe-Fe} = 18.50 \text{ meV}$ , c'est la constante d'échange [11] et  $S_A = S_{Fe}$ .

Pour simplifier les calculs, nous avons introduit la notion de la fréquence normalisée. Elle est sans dimension. Elle est définie par :

$$\Omega = \frac{\omega}{\omega_0} = \frac{\hbar\omega}{J_{AA} S_A} \quad (3.3)$$

En divisant l'équation (3.2) sur  $J_{AA} S_A$ , on obtient

$$\Omega u_A(i,j;k) = \begin{bmatrix} 8u_A(i,j,k) - u_A\frac{1}{2}(i+1, j+1, k+1) - u_A\frac{1}{2}(i+1, j+1, k-1) \\ -u_A\frac{1}{2}(i+1, j-1, k+1) - u_A\frac{1}{2}(i-1, j+1, k+1) \\ -u_A\frac{1}{2}(i-1, j-1, k+1) - u_A\frac{1}{2}(i-1, j+1, k-1) \\ -u_A\frac{1}{2}(i+1, j-1, k-1) - u_A\frac{1}{2}(i-1, j-1, k-1) \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

La relation de Bloch [15] nous permet d'écrire :

$$u_A\left(i \pm \frac{1}{2}, j, k\right) = \exp(\pm iq_x \frac{a}{2}) u_A(i, j, k)$$

$$u_A\left(i, j \pm \frac{1}{2}, k\right) = \exp(\pm i q_y \frac{a}{2}) u_A(i, j, k) \quad (3.5)$$

$$u_A\left(1, j, k \pm \frac{1}{2}\right) = \exp(\pm i q_z \frac{a}{2}) u_A(i, j, k)$$

Où  $q_x, q_y$  et  $q_z$  sont les composantes du vecteur d'onde du réseau réciproque, et  $a$  le paramètre de maille.

On pose

$$\exp\left(\pm i q_x \frac{a}{2}\right) = \exp(\pm i \phi_x) = Z^{\pm 1}$$

$$\exp\left(\pm i q_y \frac{a}{2}\right) = \exp(\pm i \phi_y) \quad (3.6)$$

$$\exp\left(\pm i q_z \frac{a}{2}\right) = \exp(\pm i \phi_z)$$

Avec  $Z$  est le facteur de phase satisfaisant la condition d'évanescence ou de propagation suivant l'axe des  $x$ .  $\phi_y$  et  $\phi_z$  les facteurs de phases suivant les axes ( $oy$ ) et ( $oz$ ), respectivement.

En tenant compte des notations (3.6), l'équation (3.4) devient

$$\Omega u_A(i, j, k) = \left[8 - 4 \cos \phi_y \cos \phi_z (Z + Z^{-1})\right] u_A(i, j, k) \quad (3.7)$$

Cette équation peut être réécrite sous la forme matricielle suivante :

$$\left[\Omega I - M_V(Z, \phi_y, \phi_z)\right] \cdot |u_A\rangle = |0\rangle \quad (3.8)$$

Où  $I$  est une matrice identité et  $M_V(Z, \phi_y, \phi_z)$  la matrice dynamique du système bcc parfait de dimension  $(1 \times 1)$ .

Avec

$$M_V = \left[\Omega - 8 + 4 \cos \phi_y \cos \phi_z (Z + Z^{-1})\right]$$

La condition pour que l'équation (3.8) ait des solutions non triviales est pour :

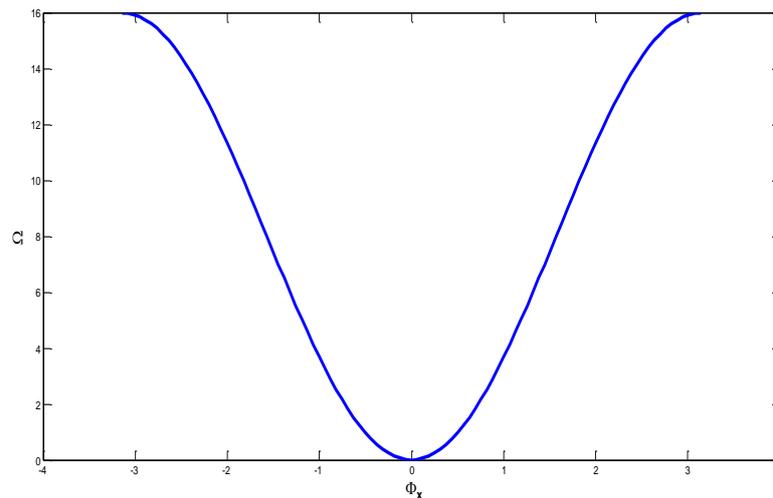
$$\det[\Omega I - M_V(Z, \phi_y, \phi_z)] = 0 \quad (3.9)$$

La résolution de cette dernière équation pour  $\phi_y$  et  $\phi_z$  fixés, donne la fréquence propre de précession  $\Omega_v$  ainsi que le vecteur propre  $\vec{u}_v$  du système.

Lorsque le facteur de phase  $Z$  parcourt le cercle unité dans le plan complexe, en d'autres termes lorsque  $q_x$  parcourt la première zone de Brillouin, soit ici l'intervalle  $[-\pi, \pi]$ , on obtient la courbe de dispersion en fonction de  $\phi_x$ .

### Discussion des résultats obtenus

La figure (3.2) ci-dessous montre la courbe de dispersion obtenue pour le système Fe(bcc).



**Figure 3.2** : Courbe de dispersion dans le guide d'ondes parfait Fe(bcc) ferromagnétique.

On note qu'il y a un mode propre acoustique, puisque  $\Omega \rightarrow 0$ , quand  $\phi_x \rightarrow 0$ , qui se propage dans l'intervalle de fréquence  $[0, 16]$ .

On constate que cette branche est symétrique par rapport à l'origine et sa dépendance en fonction de  $\phi_x$  n'est pas linéaire ce qui signifie que le système est dispersif.

#### III.1.2 Vitesses de groupe

La notion de vitesse de groupe a été introduite par Lord Rayleigh à propos de la propagation d'un signal dans un milieu dispersif.

La vitesse de groupe représente la vitesse de propagation du paquet d'ondes. Elle est la vitesse à laquelle l'énergie ou l'information est transportée dans un milieu. Elle est définie pour des vecteurs d'ondes  $\vec{q}$  réels par l'expression suivante :

$$v_g = \frac{\partial \Omega}{\partial \vec{q}} \quad \text{soit} \quad \vec{v}_g = \overrightarrow{\text{grad}}[\Omega(\vec{q})] \quad (3.10)$$

Dans le cas où  $q$  est complexe (non réel), nous imposons  $v_g = 0$ .

Pour déterminer cette vitesse deux méthodes différentes peuvent être utilisées : la méthode des différences finies ou la méthode des perturbations [16-18] ; toutes deux exigent la résolution du problème du guide d'onde parfait :

$$M_v(\vec{q}) \cdot \vec{u}_v = -\Omega(\vec{q}) \cdot \vec{u}_v \quad (3.11)$$

Dans ce travail, on a utilisé la deuxième méthode qui est basée sur la théorie standard des perturbations utilisée également en mécanique quantique.

Cette méthode consiste à résoudre l'équation (3.10), pour un accroissement infinitésimal  $\Delta \vec{q}$  tel que :

$$\vec{q} = \vec{q}_0 + \Delta \vec{q} \quad (3.12)$$

Si l'on se limite au premier ordre, nous pouvons considérer que le vecteur propre est constant et on écrit ainsi :

$$\vec{u}(\vec{q}) = \vec{u}(\vec{q}_0) \quad (3.13)$$

Et

$$M_v(\vec{q}) = M_v(\vec{q}_0) + \Delta \vec{q} \frac{\partial M_v}{\partial q} \quad (3.14)$$

$$\Omega(\vec{q}) = \Omega(\vec{q}_0) + \Delta \vec{q} \frac{\partial \Omega}{\partial q} \quad (3.15)$$

En tenant compte de ces approximations, l'équation (3.10) permet de trouver la relation entre la dérivé de  $M_v$  et celle de  $\Omega$  :

$$\frac{\partial M_V}{\partial q} \vec{u} = -\frac{\partial \Omega}{\partial q} \vec{u} \quad (3.16)$$

Qui peut s'écrire sous la forme :

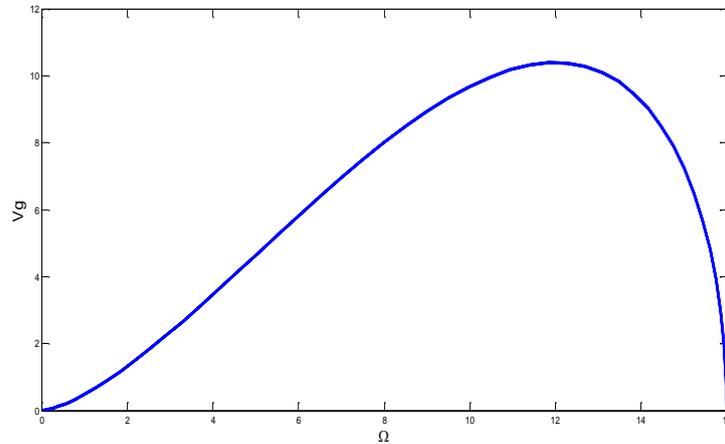
$$\vec{u}' \frac{\partial M_V}{\partial q} \vec{u} = -\frac{\partial \Omega}{\partial q} \vec{u}' \vec{u} \quad (3.17)$$

Où  $\vec{u}'$  est la transposée de  $\vec{u}$ .

La vitesse de groupe est ainsi exprimée par :

$$v_g = \frac{\partial \Omega}{\partial q} = -\vec{u}' \frac{\partial M_V}{\partial q} \vec{u} \quad (3.18)$$

La figure (3.3), donne l'allure de la vitesse de groupe, pour le mode propageant en fonction de la fréquence normalisée  $\Omega$ .



**Figure 3.3:** Courbe de vitesse de groupe du système parfait Fe(bcc) ferromagnétique.

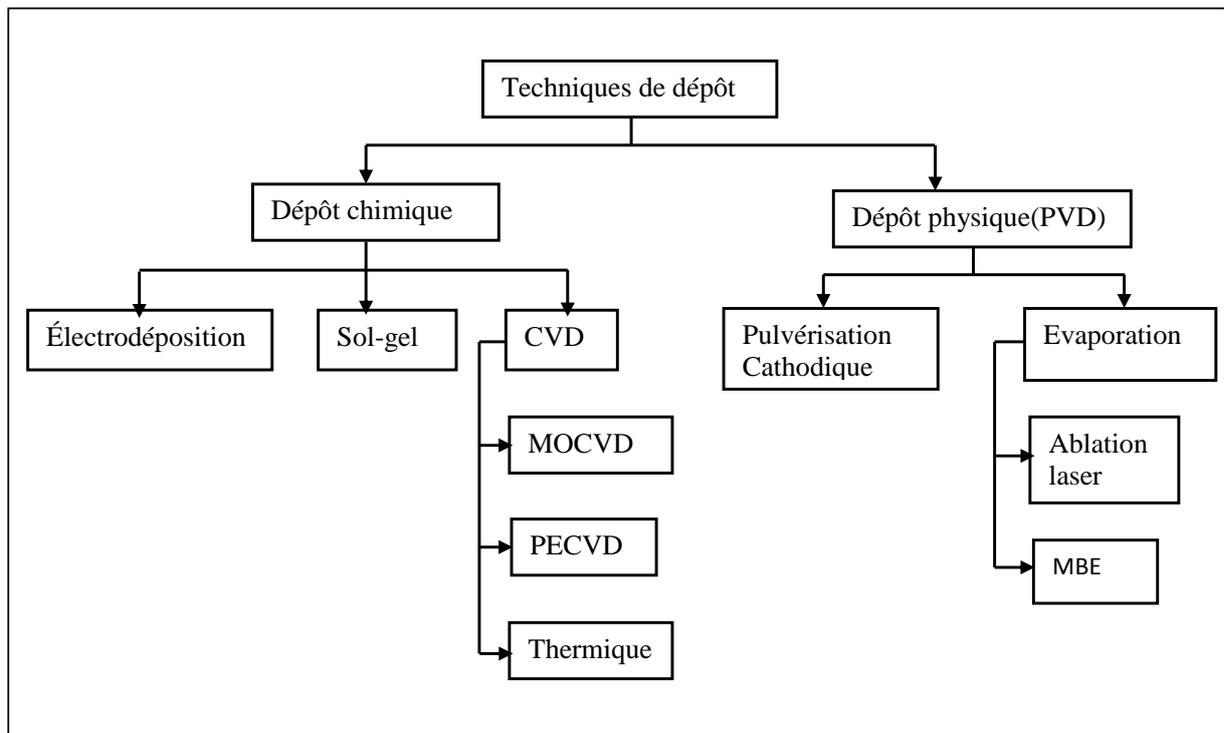
Nous constatons que la plage où la vitesse  $v_g \neq 0$  se rapporte bien à celle du mode propageant.

### III. 2 Méthodes d'élaboration des couches minces magnétiques

L'élaboration d'une couche mince signifie le dépôt d'un matériau de quelques nanomètres d'épaisseur sur un substrat ou sur une couche mince antérieurement déposée. Ces dernières années ont vu le développement d'un grand nombre de techniques originales pour le dépôt des films minces.

Les couts de productions, la facilité d'utilisation et la qualité des couches visées déterminent leurs choix. L'utilisation d'une technique dépend des propriétés des couches déposées pour une application donnée. Ces techniques de dépôts sont généralement réparties en deux grandes familles : les méthodes physiques et les méthodes chimiques. Il existe d'autres techniques dérivées ou complémentaires.

Les méthodes générales de dépôt de couches minces sont regroupées dans le diagramme suivant :



**Figure 3.4** : Méthodes générales pour déposer une couche mince.

Dans les méthodes chimiques, le dépôt se fait par réaction chimique à la surface du substrat, ainsi que le matériau à déposer est utilisé sous forme de solution gazeuse (CVD, ALD) ou liquide (sol-gel). En revanche, dans les méthodes physiques, le matériau à déposer est sublimé afin d'obtenir un gaz qui va être condensé sur une surface froide (substrat) qui récupère l'énergie des particules qui arrivent, ce qui permet la formation d'une couche mince solide.

Les techniques de dépôts en phase vapeur la PVD (Physical Vapor Deposition) [19] et la CVD (Chemical Vapor Deposition) [20] sont actuellement en développement compte tenu des meilleurs résultats d'adhérences et de contrôle d'épaisseur de la couche, en comparaison aux autres méthodes.

D'une façon générale, ces techniques font appel à trois composantes : une source, un substrat et un milieu.

Les différentes techniques de dépôt PVD sont distinguées en fonction de la façon dont le matériau est vaporisé. Cela peut être effectué de différentes manières, comme par exemple, par échauffement du matériau ou par bombardement ionique.

Cependant, les films obtenus par PVD sont denses et leur processus de dépôt est facile à contrôler et ne provoquent pas de pollution

Dans le domaine des films minces magnétiques, il faut maîtriser des dépôts généralement ayant des épaisseurs de quelques angströms, et ceci est beaucoup plus facile à réaliser avec les méthodes physiques (PVD). C'est pour cette raison que nous présenterons par la suite, les trois méthodes de synthèses les plus utilisées dans le domaine, à savoir la pulvérisation cathodique, l'épithaxie par jets moléculaires et l'ablation laser.

### III.2.1 Pulvérisation cathodique

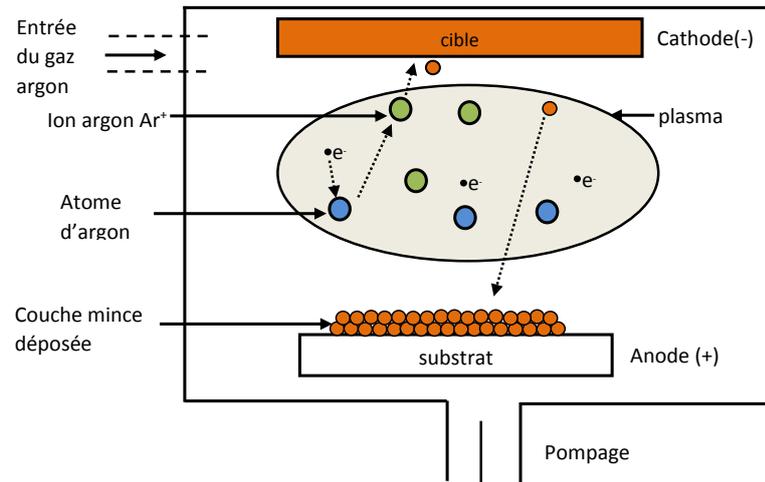
La pulvérisation cathodique est un phénomène d'éjection des atomes superficiels d'un matériau (appelé cible), lorsque celui-ci est bombardé par un flux de particules énergétiques. L'éjection des atomes est un effet purement mécanique, c'est-à-dire que les particules incidentes transfèrent leurs énergies cinétiques aux atomes de la cible.

Dans cette technique, le matériau à déposer (cible) est fixé à la cathode, et le substrat est placé sur l'anode (à proximité de la cathode). Une tension électrique est appliquée entre les deux électrodes, donnant lieu à l'ionisation d'un gaz résiduel (exemple l'Argon Ar) et la création d'un plasma qui apparaît sous forme d'un nuage luminescent constitué d'atomes d'argon, d'ions  $\text{Ar}^+$  et d'électrons. Le principe de la pulvérisation cathodique est présenté sur la figure (3.5).

Le gaz à ioniser est généralement Ar, qui est un gaz neutre (inerte). Cela en raison de sa masse atomique élevée et de son inertie chimique (pas de réaction chimique avec le matériau à déposer).

Les ions  $\text{Ar}^+$  sont accélérés vers la cible et entre en collision avec elle. Ce bombardement provoque la pulvérisation d'atomes de la cible qui vont se condenser finalement sur le substrat [21].

La technique de pulvérisation cathodique permet le dépôt de n'importe quel matériau solide à des températures ordinaires (plasma froid). De plus, elle permet de synthétiser rapidement un grand nombre d'échantillons de caractéristiques variables.

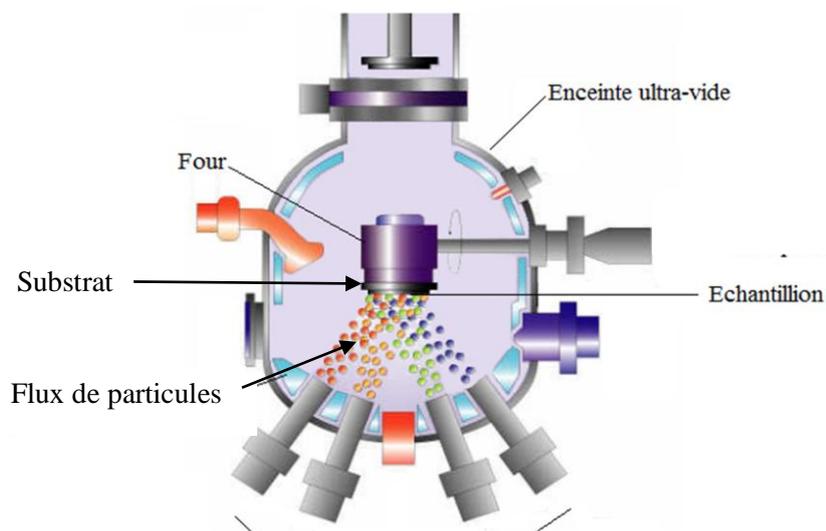


**Figure 3.5:** Pulvérisation cathodique.

### III.2.2 Epitaxie par jets moléculaires

L'épitaxie par jets moléculaire (ou BME pour Molecular Beam Epitaxy), a été inventée à la fin des années 1960 [22], c'est une technique qui consiste à évaporer soit par effet joule, par rayonnement ou par bombardement électronique un matériau.

L'épitaxie par jets moléculaires se caractérise par des rythmes de croissance très lents (de l'ordre d'une monocouche atomique par seconde ou moins), ce qui permet la croissance des couches de très grande qualité cristalline.



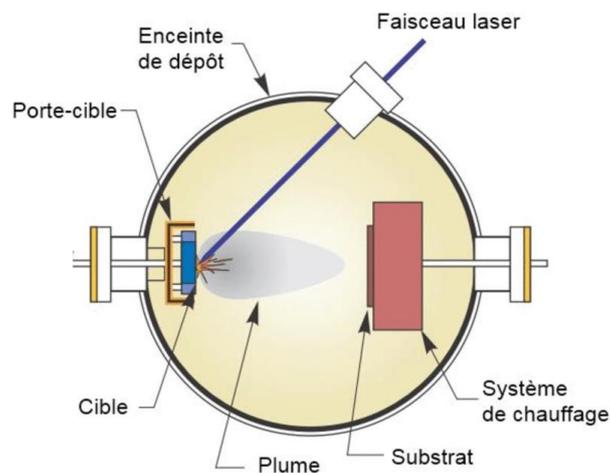
**Figure 3.6:** Epitaxie par jets moléculaire.

### III.2.3 L'ablation laser

Cette technique a été proposée par l'équipe de Bell Core [23] et rapidement appliquée par d'autres groupes. Elle est basée sur l'idée d'utiliser l'énergie d'un faisceau laser pour évaporer une cible (un matériau solide) afin de déposer une couche mince.

Le principe de dépôt par ablation laser (PLD pour Pulsed Laser Deposition) est conceptuellement simple. Un faisceau laser de forte densité énergétique est dirigé sur une cible constituée du matériau, que l'on souhaite déposer sur le substrat [24]. Généralement, les radiations du laser sont dans le domaine de l'ultraviolet (UV).

Une éjection de matière de la cible est engendrée à l'impact du faisceau, il se forme alors une plume plasma constituée d'espèces partiellement ionisées dirigée perpendiculairement à la surface de la cible. Ces espèces se condensent ensuite sur la surface du substrat placée en vis-à-vis de la cible pour former la couche mince. La nature et la qualité du dépôt dépendent de nombreux paramètres notamment l'énergie du laser, la température du substrat, ...



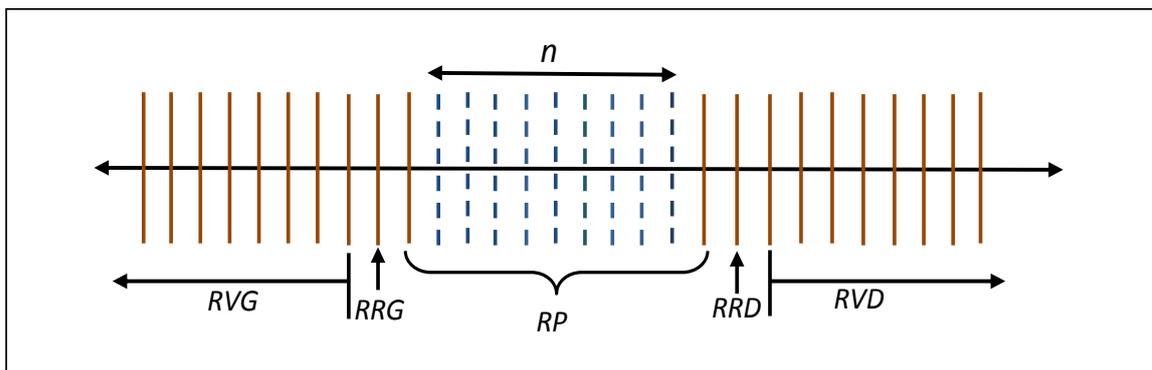
**Figure 3.7** : Ablation laser [25] .

Cette technique se caractérise par un très bon transfert stœchiométrique entre la cible et la couche mince, ce qui permet le dépôt d'un matériau complexe. En effet, elle permet facilement la réalisation d'alliages binaires.

### III. 3 Etude du transport magnonique par une couche mince du Nickel insérée en sandwich entre deux guides d'ondes parfaits Fe(bcc).

#### III.3.1 Description du système nanojonction Fe/Ni(n)/Fe

Notre système est divisé en trois régions : *RVG* et *RVD*, représentant le système parfait étudié dans la partie (III.1), et la région *RP* correspondant à la nanostructure intégrée qui joint les deux demi-systèmes qui sont constitués de Fer à maillage bcc. Dans le système, il y a deux régions de raccordements (*RRG* et *RRD*) qui sont définies par les sites de spin séparant la région *RP* des régions *RVG* et *RVD*. (Voir la figure 3.8).



**Figure 3.8** : Représentation schématique de la nanojonction Fe/Ni(n)/Fe.

Les nanostructures intégrées contiennent un nombre  $n$  de monocouches ultraminces de Nickel (Ni). Nous supposons que ces couches de Ni sont sans défauts ainsi que la morphologie structurale des deux interfaces Fe/Ni son idéalement plates. On suppose également, que la monocouche de Ni intégrée approximativement à la même constante de réseau que Fe(bcc).

Le Nickel de structure bcc n'existe pas à l'état massif, mais peut être stabilisé dans cette phase lorsqu'il est déposé en couche mince sur un substrat adapté tel que le Fer. Les études théoriques et expérimentales, menées sur le système Ni(bcc)/Fe(001) ont montré que pour obtenir une couche de Nickel de structure bcc il est nécessaire de déposer une épaisseur inférieur à 6 plans atomiques( moins de 3 cellules unitaires) c'est-à-dire que  $n < 6$ , au-delà de cette épaisseur une transition de phase bcc vers la phase fcc se produit, appelée « phase Ni(bcc) modifiée » [26].

Le film mince de Nickel intercalé entre les deux structures semi infinies de Fe(bcc), peut notamment être stabilisé dans différentes structure (bcc, fcc) selon la valeur de  $n$ . La structure cristallographique de la nanostructure dépend du nombre de plans  $n$  incéré en sandwich.

Dans le cas où  $1 \leq n \leq 6$  la nanostructure de Ni cristallise dans un système bcc, donc on obtient une nanojonction de type Fe/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe. Dans ce cas, il peut avoir eu lieu une formation d'un alliage Fe<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub>(bcc) aux deux interfaces d'où, on aura une nanojonction de type Fe/Fe<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub>/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub>/Fe avec  $0 < x \leq 0.2$ . Les couches de Nickel dont l'épaisseur est comprise entre 6 et 10 plans atomiques sont constituées d'un mélange des deux phases cubiques centrées et cubiques à faces centrées. Par contre, pour  $n \geq 10$ , la nanostructure de Ni est de structure fcc. Il s'agit, dans ce cas-ci, d'une nano jonction Fe/Ni<sub>fcc</sub>(n)/Fe.

Ces nanojonctions introduisent une brisure de symétrie de translation suivant la direction [100], la résolution d'un tel problème nécessite l'emploi de la méthode de raccordement afin d'aboutir à la détermination de quelques propriétés physiques.

Dans l'ensemble des nanojonctions examinées nous considérons uniquement les interactions entre les spins plus proches voisins. L'interaction d'échange entre les spins appartenant aux deux régions parfaites (RVG et RVD) est noté  $J_{Fe-Fe}$ , tel que  $J_{Fe-Fe} = 18.50 meV$  [27]. En revanche, l'interaction d'échange dans la région correspondante aux nanostructures est notée  $J_{Ni-Ni}$ , est différente de celles des zones parfaites ainsi que sa valeur dépend de la structure cristallographique des nanostructures.

Nous calculons pour chaque système plusieurs grandeurs physiques, à savoir la transmission et la réflexion d'ondes de spin traversant la nanojonction de gauche vers la droite, les états localisés et les densités d'états magnoniques.

Notre étude a porté sur la compréhension du comportement d'ondes de spin à travers ces systèmes.

### III.3.2 Nanojonction de type Fe/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe

La phase cubique centrée du Nickel n'existe pas dans la nature. C'est resté un défi expérimental pour synthétiser et étudier la phase Ni(bcc). L'idée de cette phase remonte aux travaux théoriques de Moruzzi et al. [28] qui ont prédit que la phase Ni(bcc) est ferromagnétique pour une constante du réseau de 0.2815 nm. Cependant, il est prouvé par Guo et al. que la phase Ni(bcc) à 0.280 nm est déjà ferromagnétique avec un moment magnétique de  $0.53 \mu_B / \text{atome}$  [29].

Parallèlement aux travaux théoriques, des recherches expérimentales ont été effectuées par Heinrich et al. [30] et Wang et al. [31], dans lesquelles ils ont réussi à élaborer des couches ultraminces de  $Ni(bcc)$  déposées sur un substrat semi- infini de  $Fe(001)$  par épitaxie par jets moléculaires. Ces deux équipes ont démontré que la phase ferromagnétique de  $Ni(bcc)$  n'existe que pour une épaisseur, limitée de 3 à 4 couches monoatomiques. De plus, Heinrich et al. [32] ont conclu que les couches monoatomiques  $Ni(bcc)$  n'ont aucun effet sur les propriétés magnétiques des couches Fe. Cependant, dans une étude employant la technique de réflectivité de neutrons polarisés (PNR), Bland et al. [33] ont montré que le couplage entre les couches  $Fe(001)$  et  $Ni(bcc)$  est ferromagnétique, et que le moment magnétique par atome de  $Ni$  est  $0.55\mu_B$ . Brooks et al. [34] ont étudié les propriétés structurales et magnétiques des films minces de  $Ni(bcc)$  épitaxiés sur  $Fe(001)$ . Ces films ont été étudiés par photoémission résolue en angle et en spin. Leurs résultats montrent en revanche que le moment magnétique par atome de  $Ni$  environ égal  $0.40\mu_B$  est en accord avec les prédictions théoriques. Ensuite, Celinski et al. [35], à partir de leurs travaux expérimentaux, ont réussi à mesurer le moment magnétique des atomes de fer à l'interface avec la couche de  $Ni(bcc)$ .

Hashibon et al. [36] ont effectué des calculs ab initio en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) dans l'approximation de la densité locale (LDA), ils ont confirmé la stabilité de la phase  $Ni(bcc)$  pour 3 à 4 couches monoatomiques sur  $Fe(001)$ .

Par ailleurs, il est montré théoriquement [37], et expérimentalement [32-33, 38] qu'il existe une forte hybridation pour le couplage magnétique à l'interface Fe-Ni.

En général, les mesures expérimentales sont en accord avec les résultats théoriques sur les propriétés structurales et magnétiques de la couche ultraminces de  $Ni(bcc)$  déposée sur  $Fe(100)$ .

Le lecteur trouvera plus de détails dans l'article cité à la référence [11].

Vu ces résultats, nous proposons un système d'ordre magnétique, dont nous avons jugé intéressant de calculer les propriétés dynamiques. Le système modèle examiné est constitué d'un film ultramine ferromagnétique, composé de  $n$  monocouche d'un matériau de transition le Nickel, tel que  $n \leq 6$ , reliant deux sous-systèmes semi infinis d'un même matériau de transition le Fer comme le montre la figure (3.9) dans le cas où  $n=2$ .

Le maximum de couches monoatomiques,  $n=6$ , est conservé. Cela ce n'est pas un choix aléatoire mais dans le but d'assurer la stabilité de la nanostructure de  $Ni(bcc)$  entre les deux surfaces de  $Fe(100)$  ; cela découle de la stabilité de 3 à 4 couches monoatomiques de  $Ni(bcc)$  sur une seule surface de  $Fe(001)$ .

A chaque site atomique du système nous avons attribué un vecteur de spin noté  $S_p(i, j, k)$ . Les indices  $(i, j, k)$ , sont des nombres donnant la position d'un vecteur de spin le long des trois directions cartésiennes  $x$ ,  $y$  et  $z$ .

Les constantes d'échanges entre spins des régions parfaites sont notées  $J_{Fe-Fe}$ , celle de nanostructure de Ni sont notées  $J_{Ni-Ni}$  et celle au niveau des deux interfaces Fe(100)-Ni(100) sont notées par  $J_{Fe-Ni}$ .

Pour les valeurs de ces constantes d'échanges, Khater et al. [27,39-41], ont développé un modèle théorique pour extraire les valeurs des constantes d'échanges pour un matériau ordonné de la valeur expérimentale de la température de Curie ordre-désordre. Par ailleurs, ils ont pu ainsi déterminer des relations analytiques générales pour extraire la valeur de  $J$  pour un matériau donné, Fe, Ni, Co, Gd, etc., en connaissant la température critique de Curie (transition ordre – désordre magnétique). Où ils ont utilisé la théorie du champ effectif d'Ising (EFT) pour calculer ces constantes d'échange. Par conséquence,  $J_{Ni-Ni} = 8.08 \text{ meV}$ ,  $J_{Ni-Fe} = 10.72 \text{ meV}$  et  $J_{Fe-Fe} = 18.50 \text{ meV}$ .

### III.3.2.1 Matrice dynamique

L'écriture des équations du mouvement de précession des spins situés dans la région de la nanojonction et ceux des régions de raccordements gauche et droite, permettent d'avoir un système d'équation qu'on peut mettre sous la forme suivante :

$$[M_D] \cdot |u\rangle = |0\rangle \quad (3.19)$$

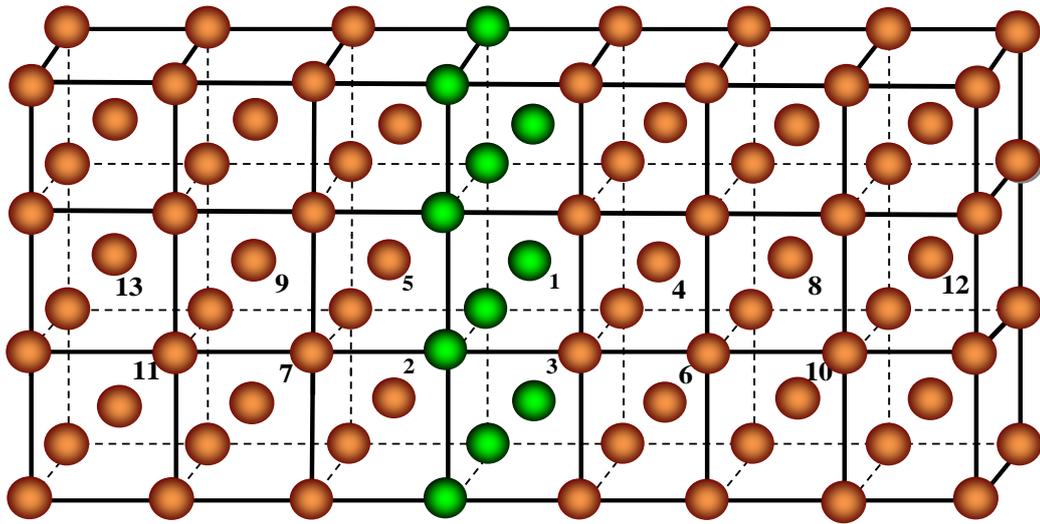
Où  $|u\rangle$  est un vecteur décrivant les amplitudes de précession de tous les vecteurs de spins appartenant à la région d'étude choisie précédemment.

$$\text{Tel que, } |u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

$|irr\rangle$  est constituée par les déplacements des sites irréductibles formants la zone de la nanostructure.

$|rac\rangle$  est formée par les déplacements associés aux zones de raccordements.

$M_D$  est la matrice dynamique du système de taille  $(P \times Q)$ , cette dernière dépend du nombre de plan  $n$  de la nanostructure.



**Figure 3.9:** Représentation schématique d'une nanojonction Fe/Ni<sub>bcc</sub>(2)/Fe

### Matrice dynamique

**Pour n=1**  $\dim[M_D] = 5 \times 7$ .

**Pour n=2**  $\dim[M_D] = 6 \times 8$ .

**Pour n=3**  $\dim[M_D] = 7 \times 9$ .

**Pour n=4**  $\dim[M_D] = 8 \times 10$ .

**Pour n=5**  $\dim[M_D] = 9 \times 11$ .

**Pour n=6**  $\dim[M_D] = 10 \times 12$ .

#### III.3.2.2 Matrice de raccordement

Cette matrice relie analytiquement les déplacements précessionnels de spins appartenant aux nanostructures et ceux des modes évanescents des deux guides d'ondes parfaits situés de parts d'autres des nanostructures.

Tels que

$$[M_R] = \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & R_1^- & 0 \\ 0 & 0 & R_2^+ \\ 0 & R_3^- & 0 \\ 0 & 0 & R_4^+ \end{bmatrix}$$

$I$  est une matrice identité ces dimension dépendent du nombres de plan  $n$ .

$R_1^-$ ,  $R_2^+$ ,  $R_3^-$  et  $R_4^+$  sont des matrices carrées, leurs dimension  $(1 \times 1)$  puisque il y a un seul mode propagent.

**Pour  $n = 1$**   $\Rightarrow \dim[M_R] = 7 \times 5$ .

**Pour  $n = 2$**   $\Rightarrow \dim[M_R] = 8 \times 6$ .

**Pour  $n = 3$**   $\Rightarrow \dim[M_R] = 9 \times 7$ .

**Pour  $n = 4$**   $\Rightarrow \dim[M_R] = 10 \times 8$ .

**Pour  $n = 5$**   $\Rightarrow \dim[M_R] = 11 \times 9$ .

**Pour  $n = 6$**   $\Rightarrow \dim[M_R] = 12 \times 10$ .

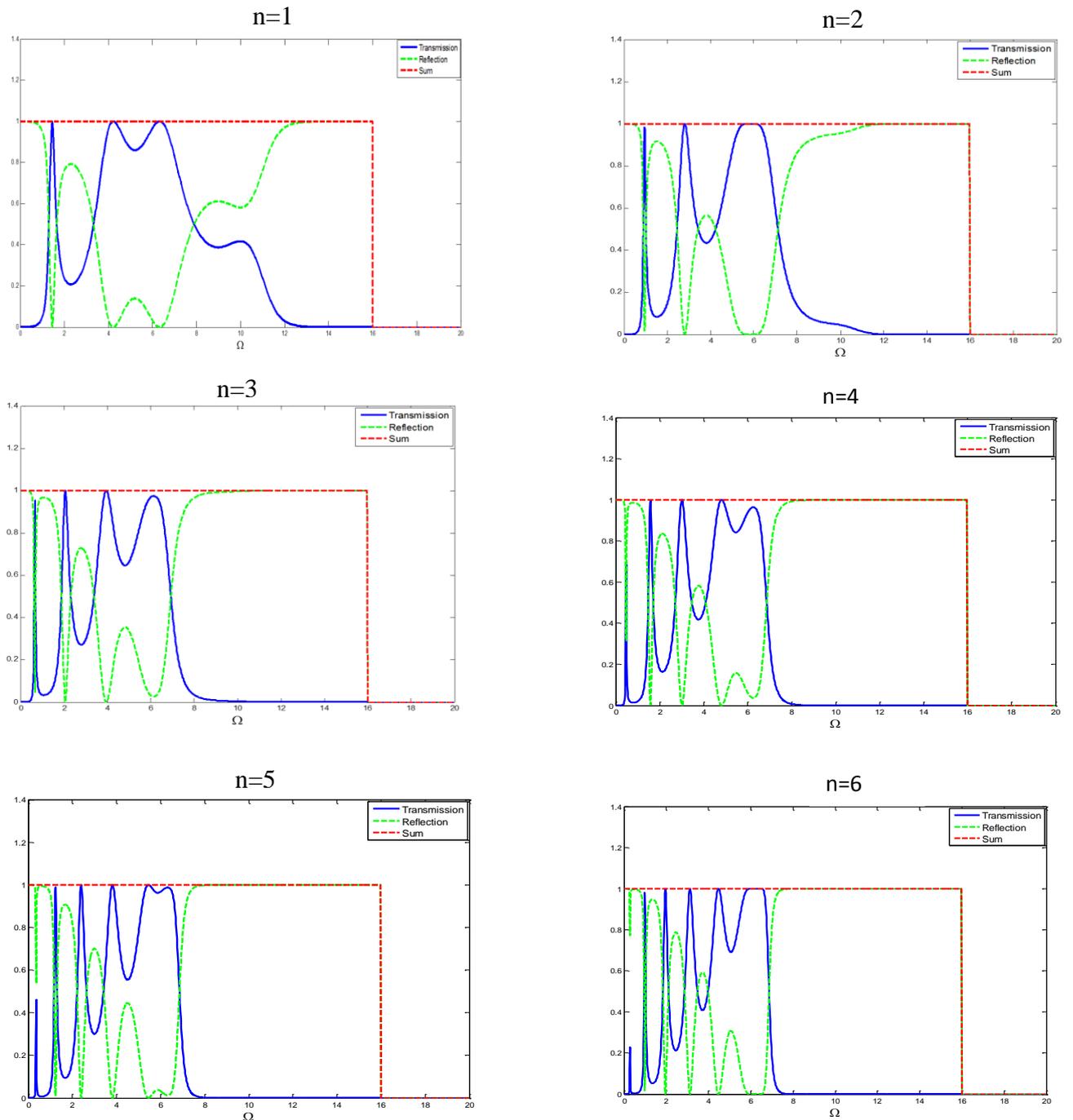
**Exemple :  $n = 2$**   $\Rightarrow \dim[I] = (4 \times 4)$ .

$$[M_R] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & R_1^- & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & R_2^+ \\ 0 & 0 & 0 & 0 & R_3^- & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & R_4^+ \end{bmatrix}$$

## III.3.2.3 Résultats obtenus

Coefficients de transmission et de réflexion

Le produit de la matrice dynamique et de raccordement nous donne une matrice carrée associée au formalisme de Landauer–Bütiker aboutit aux calculs des coefficients de transmission et de réflexion qui sont présentés dans les figures ci-dessous ;

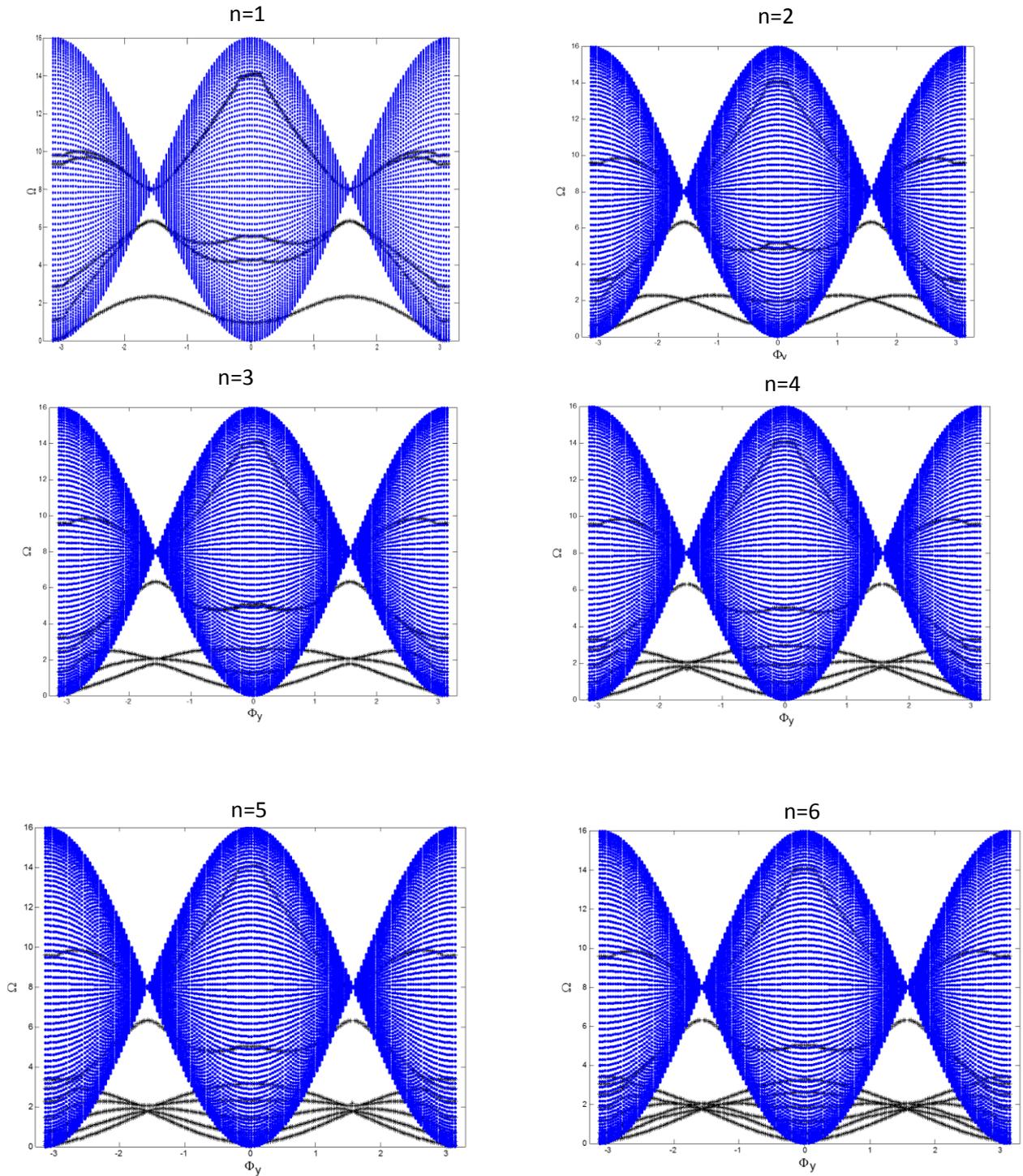


**Figure 3.10.1** : Coefficients de transmission et de réflexion de la structure Fe/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe,

$$\phi_y = \phi_z = 0.$$

***Etats localisés***

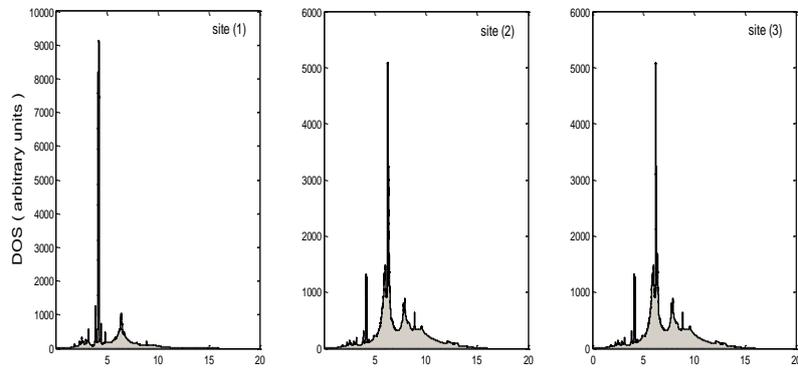
En plus des coefficients de transmission et de réflexion nous avons aussi déterminé les états localisés induit par les nanojonctions. Ces états s'évanouissent de part et d'autre du défaut et se propagent suivant la direction de haute symétrie ( $oy$ ).



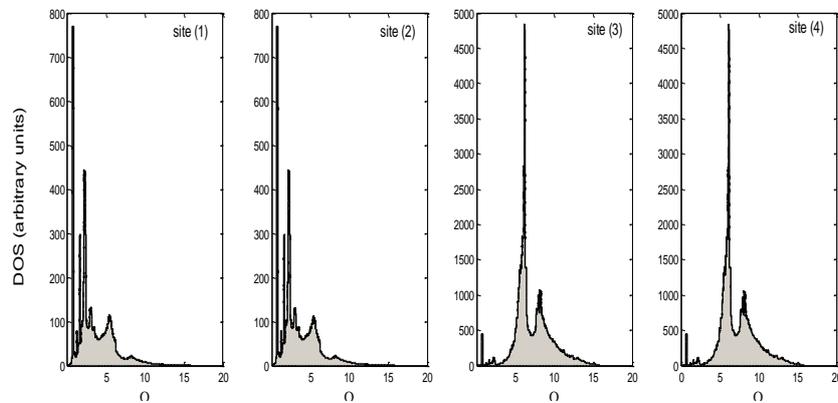
**Figure 3.10.2 :** Etats localisés de la structure Fe/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe.

**Densités d'états localisés**

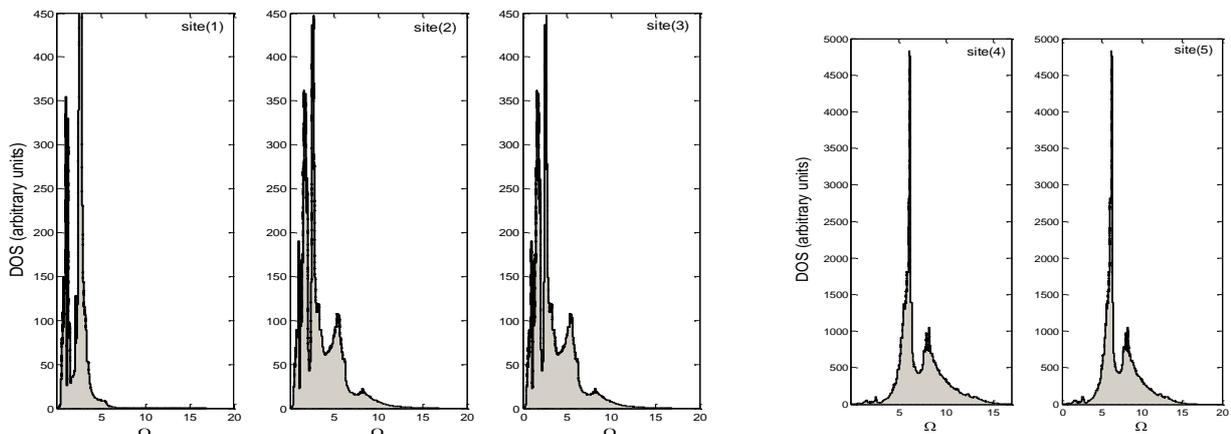
Nous avons aussi calculé les densités d'états associées aux états localisés en utilisant le formalisme de Green. Ces densités présentent des oscillations de Fano dues aux interactions des états de volumes et les états localisés.



**Figure 3.10.3a** : LDOS des magnons du système Fe/Ni<sub>bcc</sub>(1)/Fe.



**Figure 3.10.3b** : LDOS des magnons du système Fe/Ni<sub>bcc</sub>(2)/Fe.



**Figure 3.10.3c** : LDOS des magnons du système Fe/Ni<sub>bcc</sub>(3)/Fe.

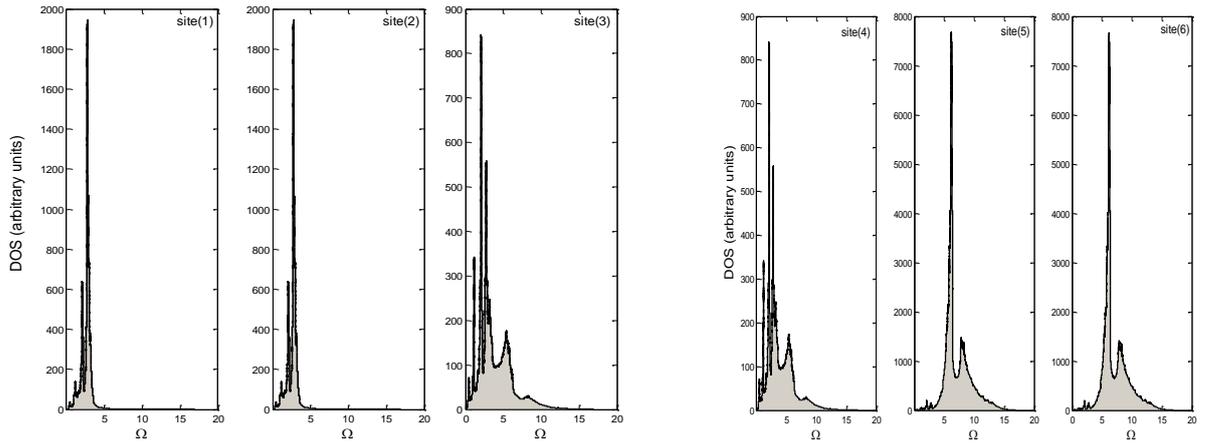


Figure 3.10.3d : LDOS des magnons du système Fe/Ni<sub>bcc</sub>(4)/Fe.

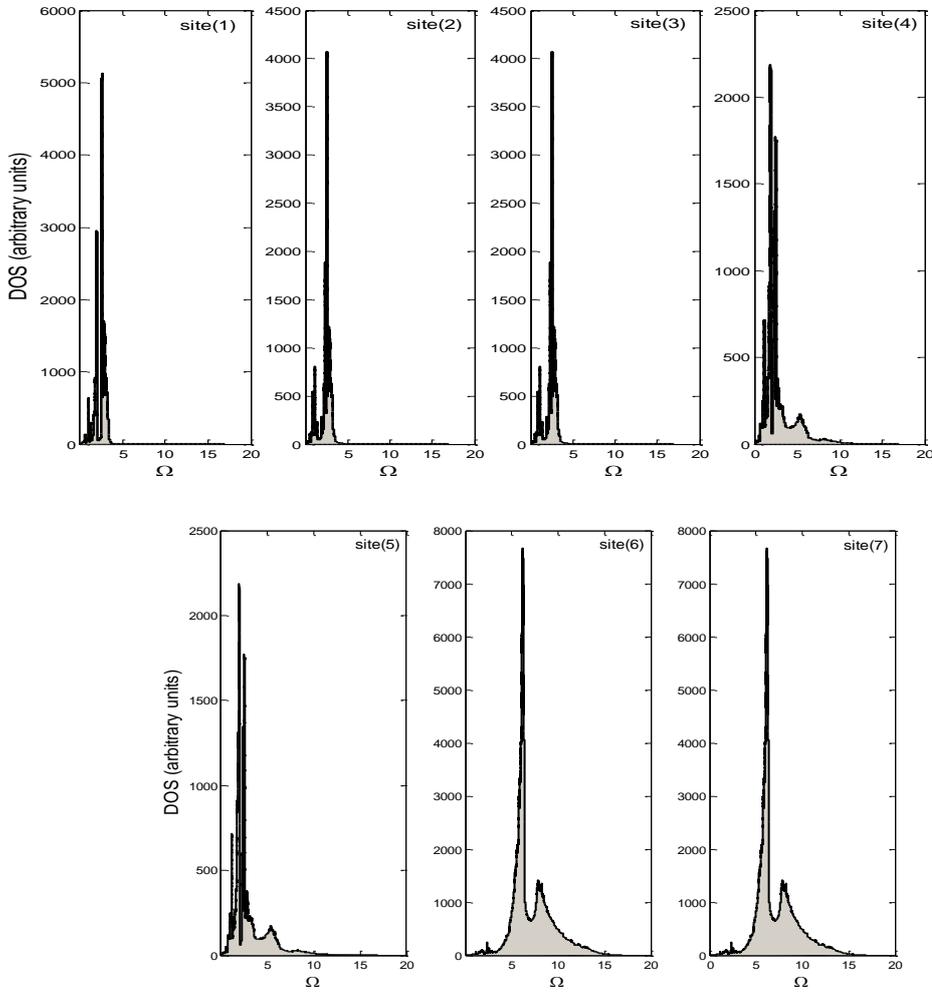
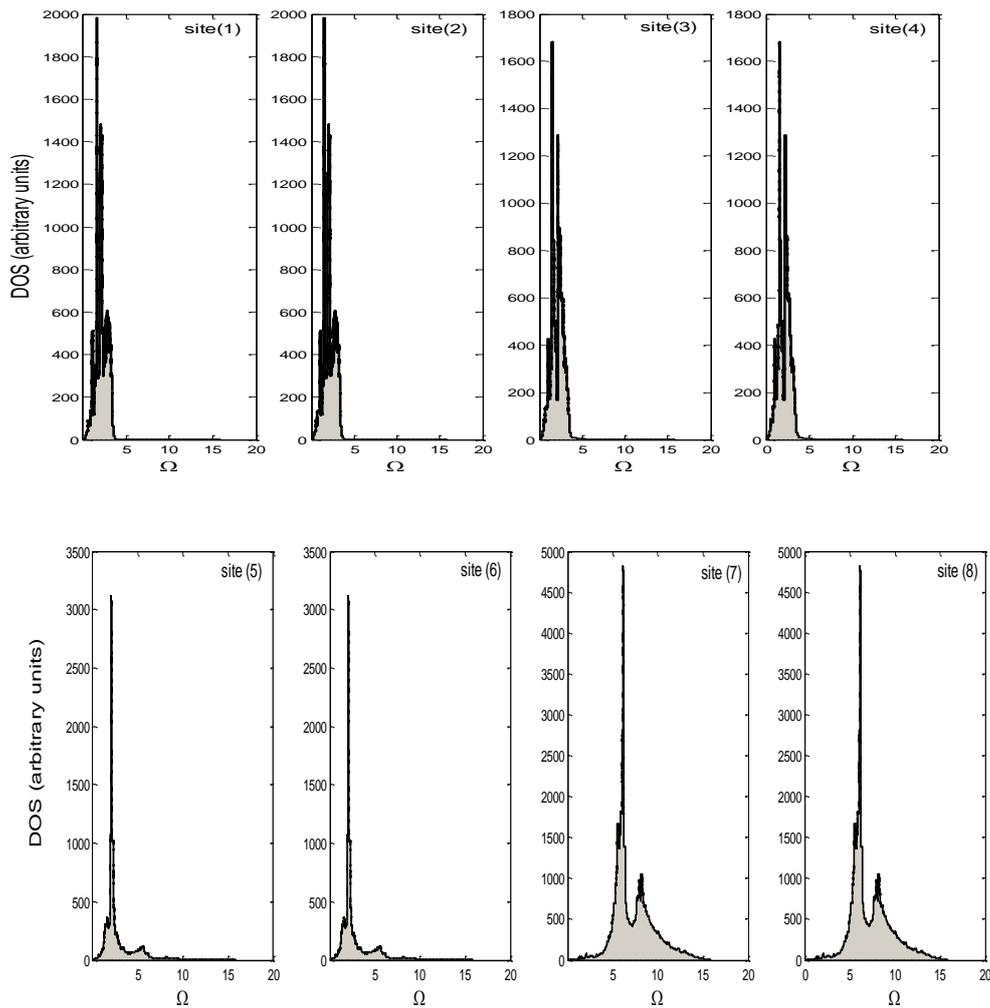


Figure 3.10.3e : LDOS des magnons du système Fe/Ni<sub>bcc</sub>(5)/Fe.



**Figure 3.10.3f** : LDOS des magnons du système Fe/Ni<sub>bcc</sub>(6)/Fe.

### III.3.3 Nanojonction de type Fe/Fe<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub>/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub>/Fe

#### III.3.3.1 Description du système

Cette nanojonction est différente de celle qu'on avait traitée dans la partie précédente. En effet, celle-ci contient, en plus de la nanostructure Ni(bcc), une monocouche atomique d'un alliage Fe<sub>(1-x)</sub>Ni<sub>x</sub>(bcc), au niveau des deux interfaces de la nanojonction, avec la concentration de Ni étant  $0 < x \leq 0.2$  [42,43].

Pour étudier la dynamique des spins, la diffusion d'ondes de spin et le transport balistique, cette nanojonction est modélisée dans l'approximation du cristal virtuel (VCA) [44-46].

L'approximation des cristaux virtuels (VCA) suppose un cristal hypothétique idéal pour modéliser les propriétés d'un alliage aléatoire. Dans notre cas l'alliage est binaire, contient deux types d'atomes Fe et Ni, tels que ces derniers sont remplacés par un seul type d'atome dont les propriétés sont supposées être une moyenne linéaire des deux atomes (Fe et Ni). En fait, l'alliage virtuel est constitué de pseudo-atomes notés ici par exemple FN. La VCA considère que l'alliage est approximativement représenté par un réseau périodique monoatomique (virtuel). Dans ce cas-ci la structure cristalline de l'alliage est bcc, la même que celles de Ni(bcc) et Fe(bcc). Cette hypothèse réduit fortement la complexité des calculs.

Dans cette approche VCA, le spin effectif par site  $S^*$  et l'échange effectif entre sites les plus proches voisins  $J^*$  sont définis comme [42,43] :

$$S^* = xS_{Ni} + (1-x)S_{Fe} .$$

$$J^* = x^2 J_{Ni-Ni} + 2x(1-x)J_{Fe-Ni} + (1-x)^2 J_{Fe-Fe} .$$

Pour la constante d'échange entre la monocouche alliage et le Fe du guide d'ondes est définis comme suit :

$$J_{\text{alliage-Fe}} = (1-x) J_{FeFe} + x J_{FeNi}$$

Pour la constante d'échange entre la monocouche alliage et le Ni de la nanostructure :

$$J_{\text{alliage-Ni}} = x J_{NiNi} + (1-x) J_{FeNi}$$

$$\text{Avec : } S(Ni) = 1$$

Pour un atome isolé  $S(Fe) = 2$  par contre, pour un atome dans un solide  $S(Fe) = 1$ .

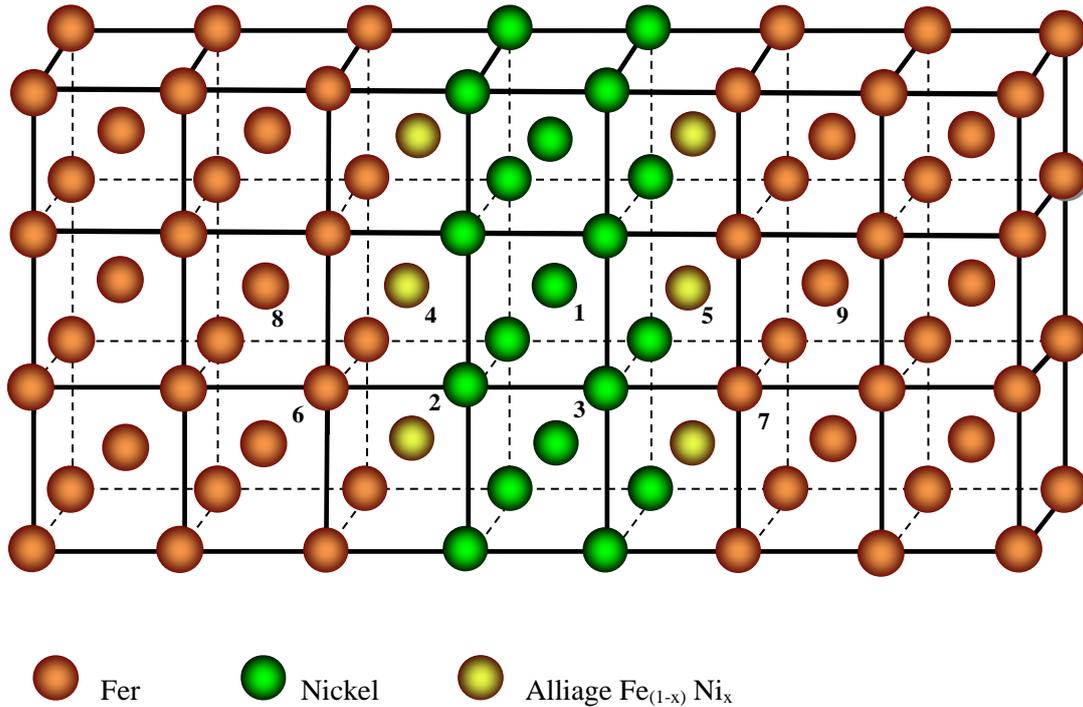
Les valeurs des différentes constantes d'échanges [11] :

$$J_{Fe-Fe} = 18.50 \text{ meV} , \quad J_{Ni-Ni} = 8.08 \text{ meV} \quad \text{et} \quad J_{Fe-Ni} = 10.72 \text{ meV} .$$

La VCA a été appliqué aux plusieurs systèmes tel que la nanojonction d'alliages cobalt-gadolinium [44] et nanojonction Co/ [Fe<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub>]<sub>4</sub>/Co [43].

Sur la figure (3.11), est illustré un schéma représentatif du système

$$\text{Fe/Fe}_{1-x}\text{Ni}_x/\text{Ni}_{\text{bcc}}(3)/\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x/\text{Fe}$$



**Figure 3.11** : Représentation schématique du système Fe/alliage /Ni<sub>bcc</sub>(3)/alliage/Fe.

### Les dimensions des matrices des nanojonction

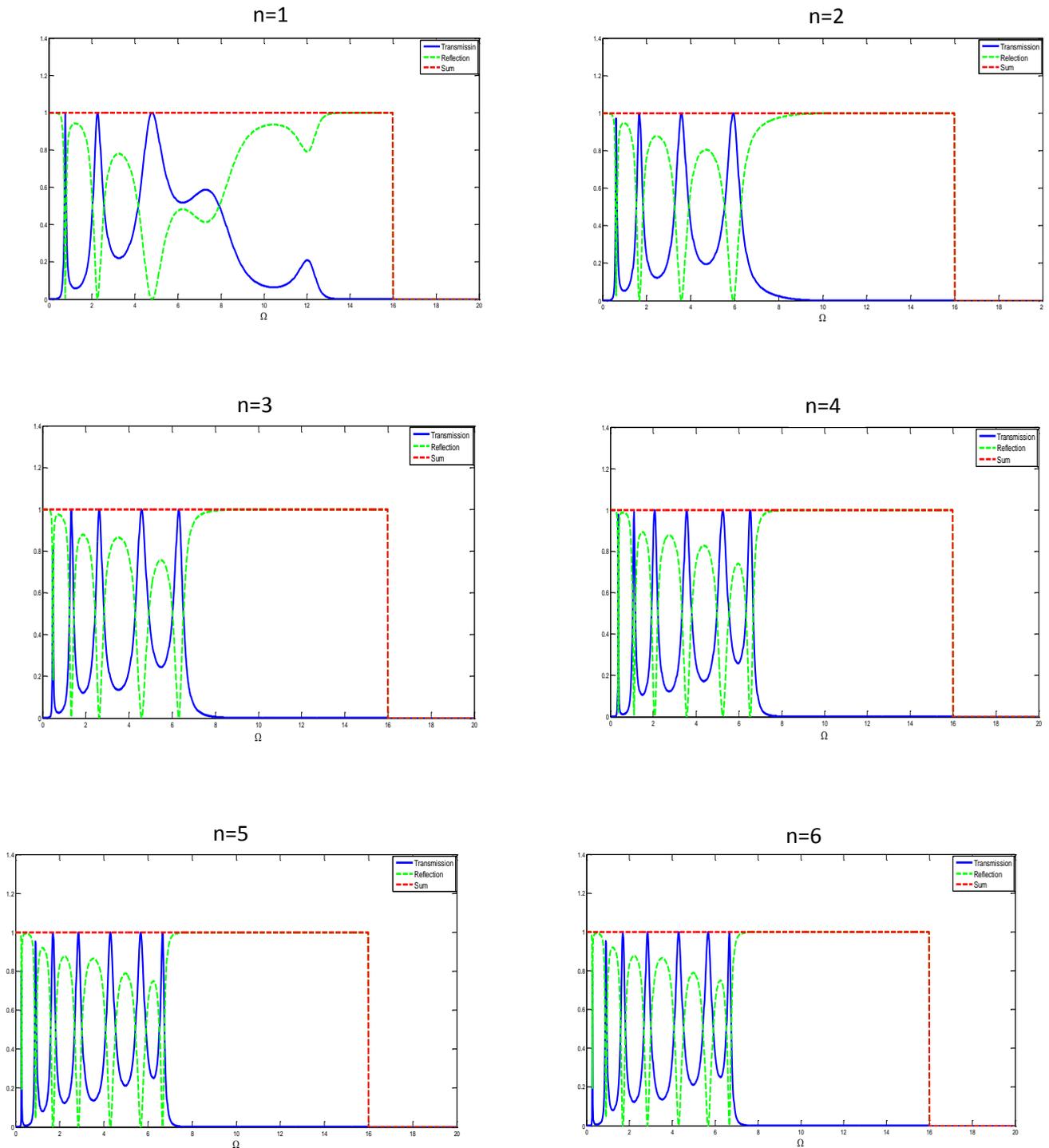
Le nombre de plans	Dim[ $M_D$ ]	Dim[ $M_R$ ]	Dim[ $M_S$ ]
n=1	(7 × 9)	(9 × 7)	(7 × 7)
n=2	(8 × 10)	(10 × 8)	(8 × 8)
n=3	(9 × 11)	(11 × 9)	(9 × 9)
n=4	(10 × 12)	(12 × 10)	(10 × 10)
n=5	(11 × 13)	(13 × 11)	(11 × 11)
n=6	(12 × 14)	(14 × 12)	(12 × 12)

### III.3.3.2 Résultats obtenus

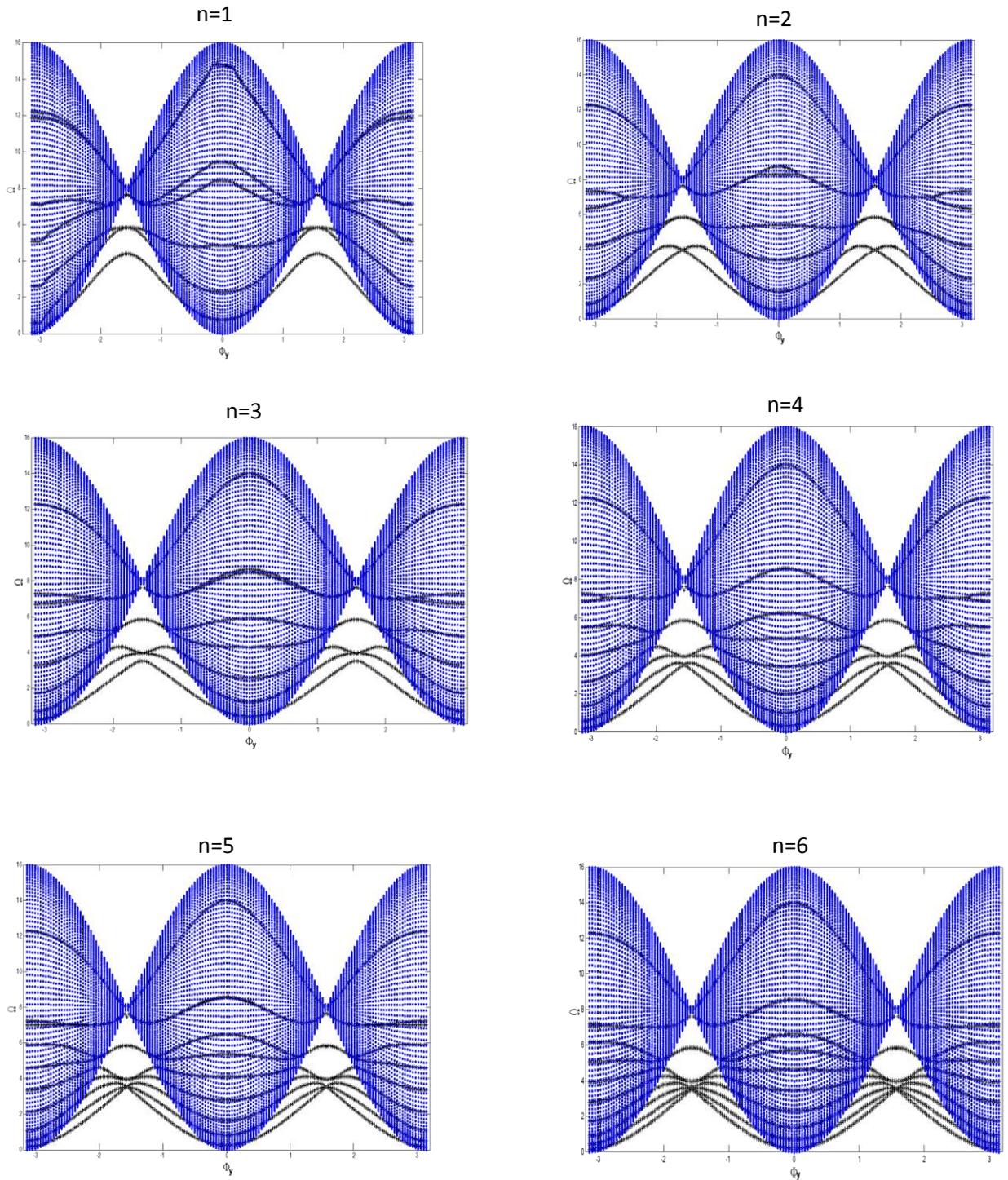
Pour la diffusion, nous supposons une onde incidente, se propageant de gauche vers la droite.

Les résultats sont présentés pour une concentration  $x = 0.2$ .

***Coefficients de transmission et de réflexion***



**Figure 3.12.1:** Coefficients de transmission et de réflexion de la structure Fe/alliage/Ni<sub>bcc</sub>(n)/alliage/Fe,  $\phi_y = \phi_z = 0$ .

Etats localisés

**Figure 3.12.2** : Etats localisés de la structure Fe/alliage/Ni<sub>bcc</sub>(n)/alliage/Fe.

Densités d'états localisés

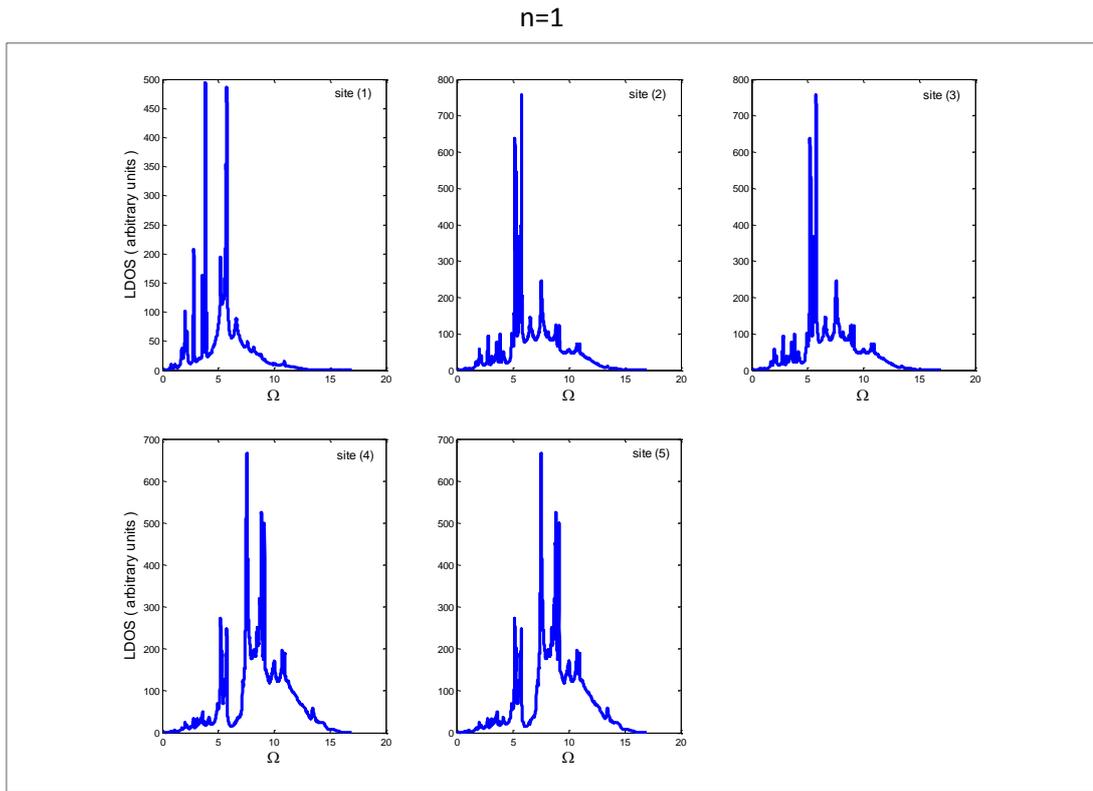


Figure 3.12.3a : LDOS des magnons du système Fe/alliage/Ni<sub>bcc</sub>(1)/alliage/Fe.

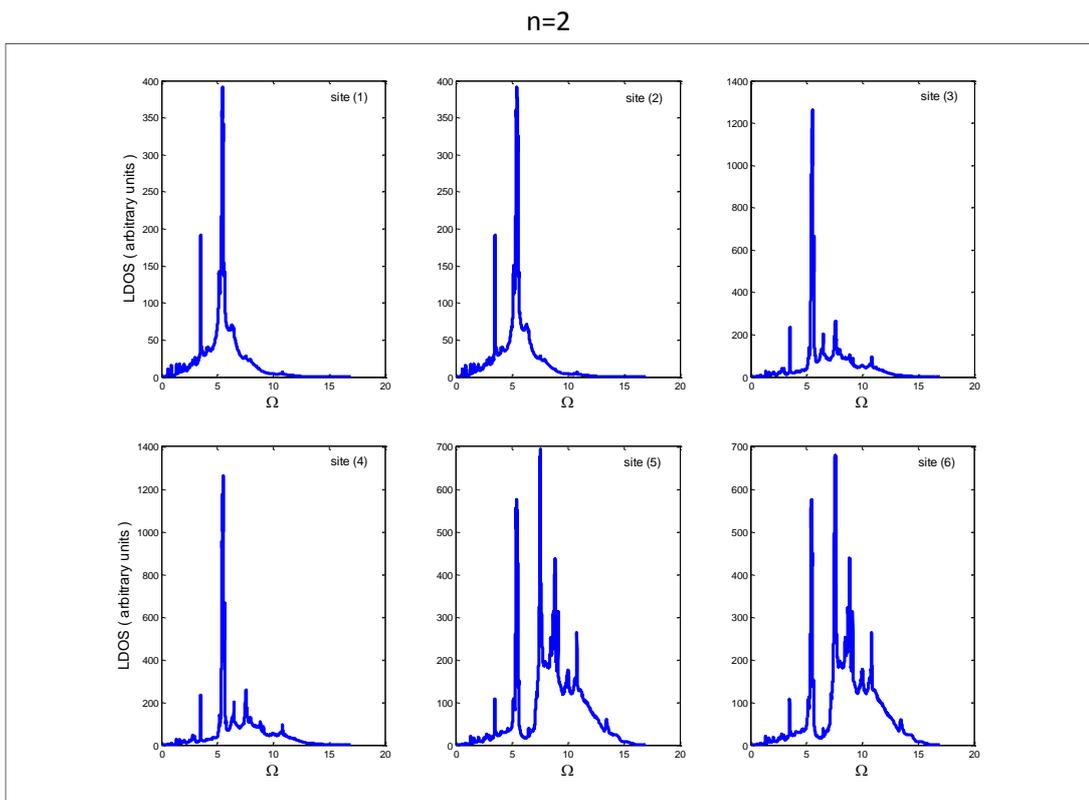


Figure 3.12.3b : LDOS des magnons du système Fe/alliage/Ni<sub>bcc</sub>(2)/alliage/Fe

n=3

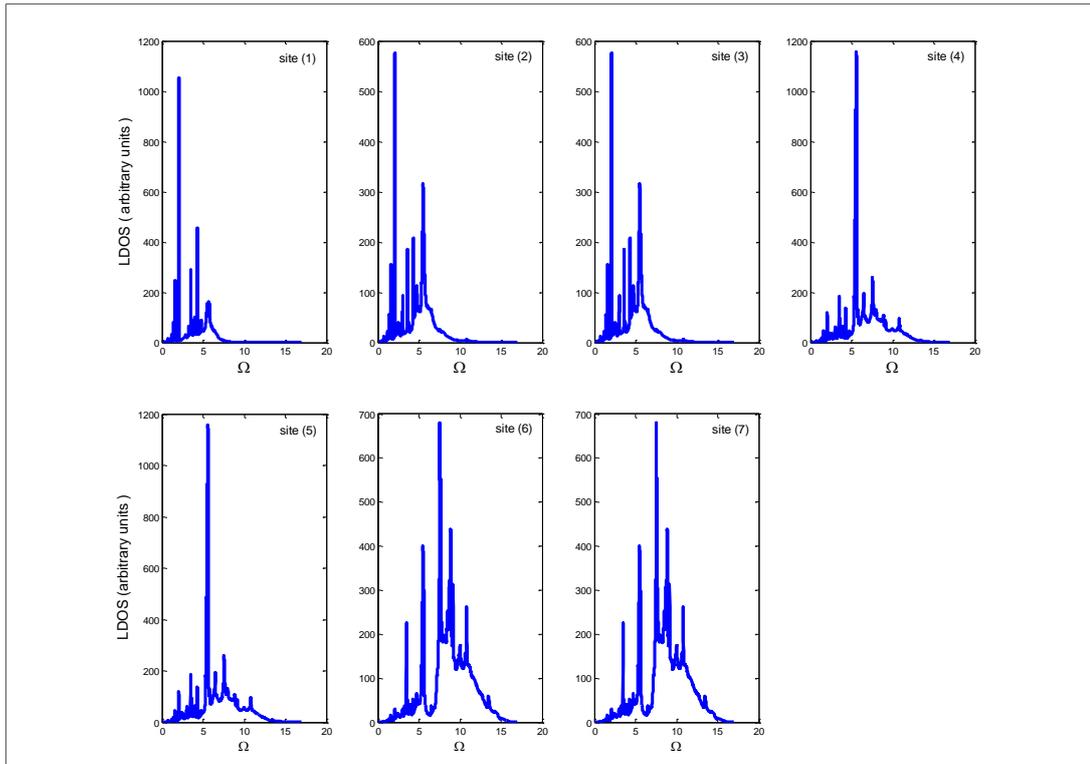


Figure 3.12.3c : LDOS des magnons du système Fe/alliage/Ni<sub>bcc</sub>(3)/alliage/Fe.

n=4

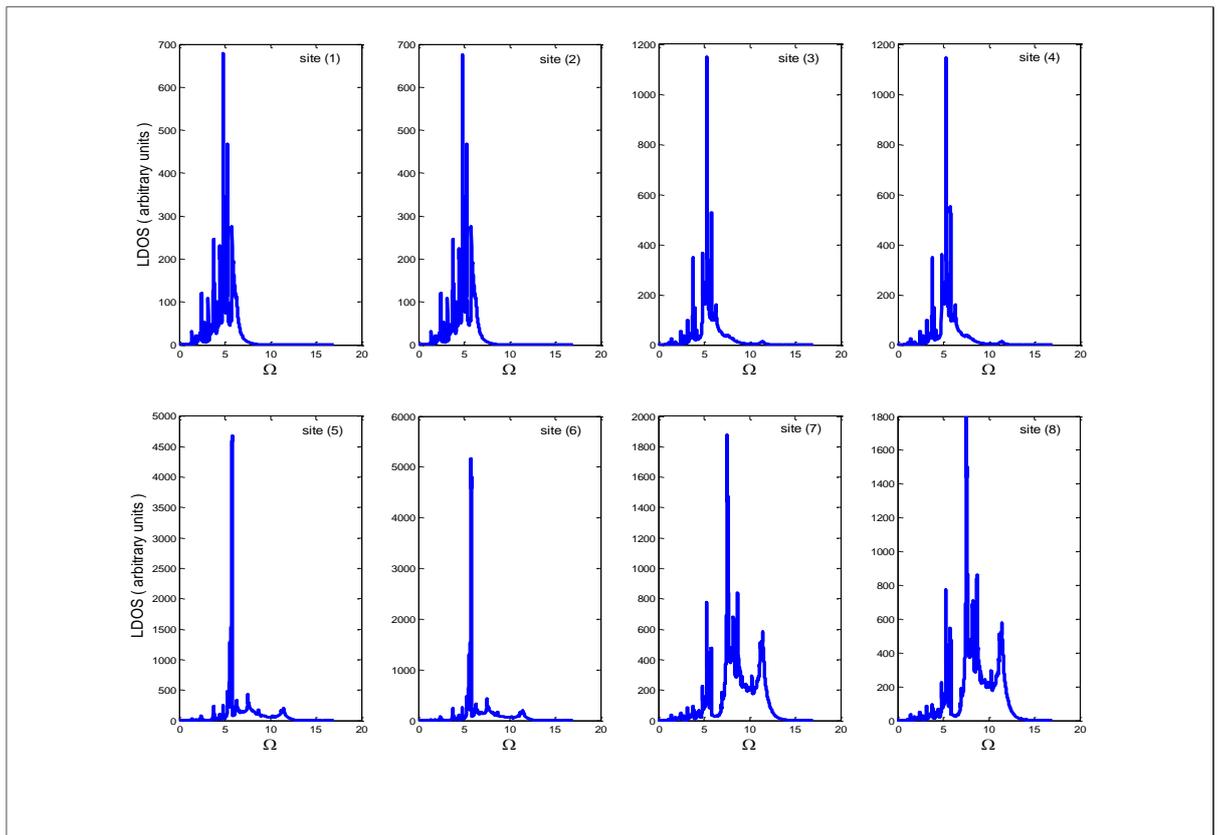


Figure 3.12.3d : LDOS des magnons du système Fe/alliage/Ni<sub>bcc</sub>(4)/alliage/Fe.

n=5

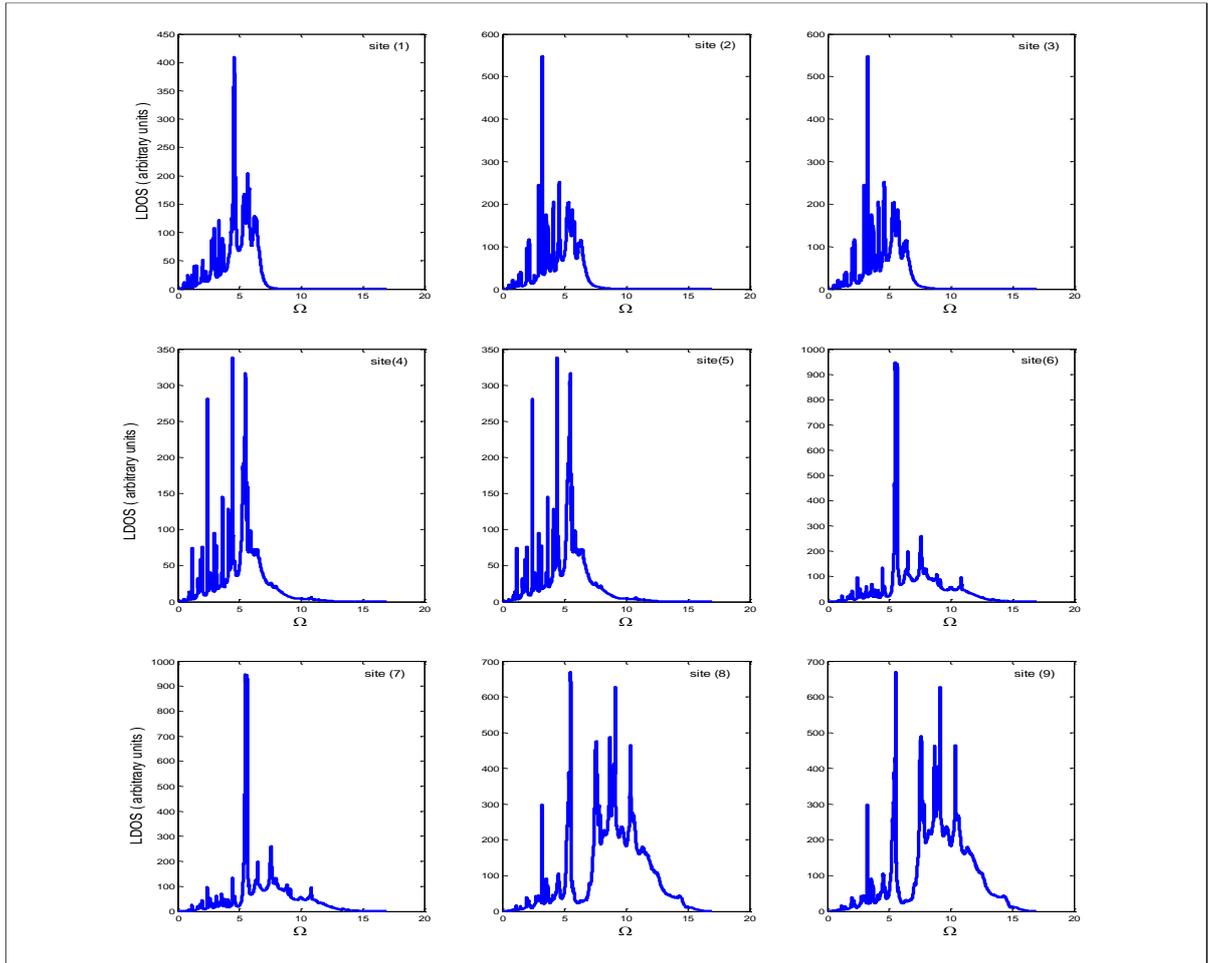
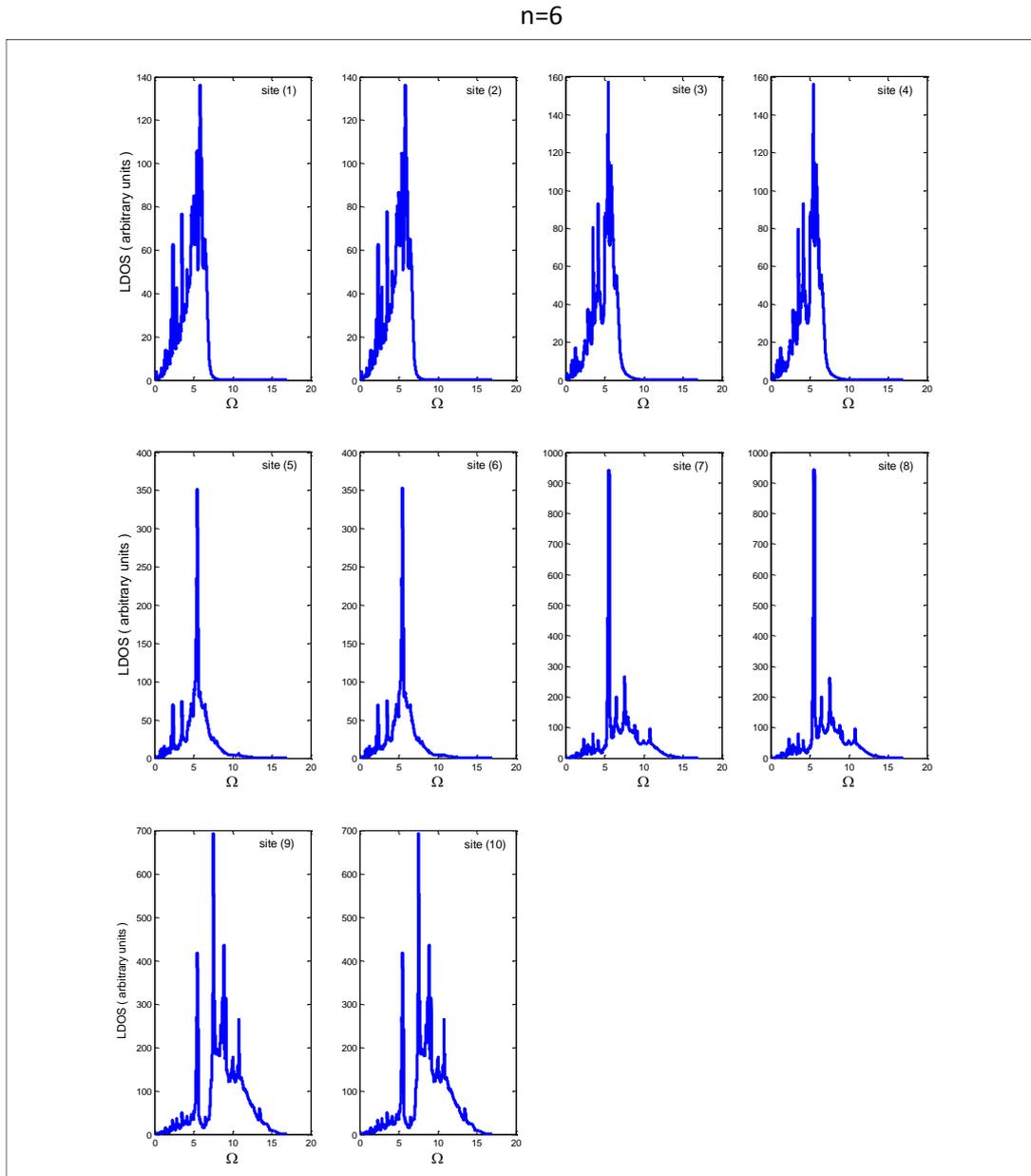


Figure 3.12.3e : LDOS des magnons du système Fe/alliage/Ni<sub>bcc</sub>(5)/alliage/Fe.



**Figure 3.12.3f** : LDOS des magnons du système Fe/alliage/Ni<sub>bcc</sub>(6)/alliage/Fe.

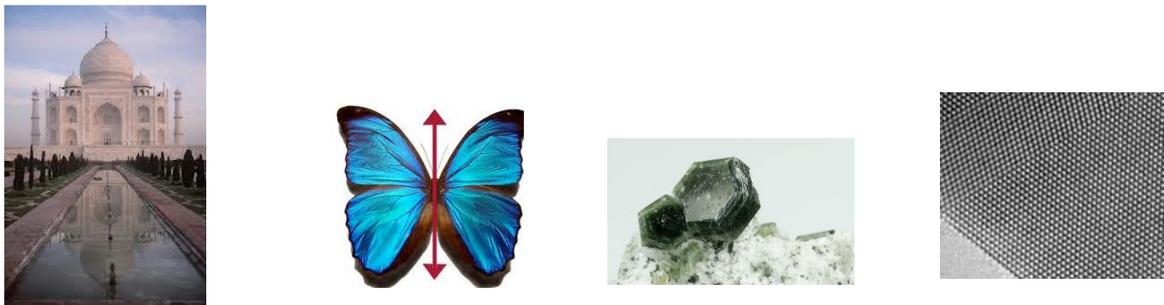
**III.3.4 Nanojonction de type Fe/Ni<sub>fcc</sub>(n)/Fe****III.3.4.1 Description du modèle**

Dans cette partie, nous augmentons le nombre de plans (n), insérés en sandwich entre les deux guides d'ondes parfaits. On suppose une transition de la phase cristallographique bcc vers fcc de la couche de Ni lorsque l'épaisseur de cette couche atteint 10 plans atomiques.

Dans cette nanojonction, l'épaisseur de la nanostructure variée de 10 à 16 monocouches atomiques. Une nanostructure intégrée de Ni(fcc) est symétrique si le nombre de plans atomiques de la nanostructure de Ni et impaire, est asymétrique si ce nombre est paire.

Lorsque on choisit un nombre impair de plans atomiques de Ni pour constituer la nanojonction, cette symétrie du système et de ses deux interfaces est assurée. Par contre, lorsqu'on choisit un nombre pair de plans atomiques de Ni pour constituer la nanojonction, cette symétrie de ses deux interfaces n'est pas assurée.

La nature aime la symétrie, elle est observée à toutes les échelles (macroscopique, microscopique), pour des raisons esthétiques, mais, aussi physiques (mécaniques, dynamiques, thermodynamiques.). La symétrie est une des propriétés cruciales de la matière.



**Figure 3.13** : Symétrie fabriquée ou induite naturellement.

Dans la nature de la nanojonction entre deux guides d'ondes identiques de Fe(bcc), il ne peut pas y avoir une asymétrie quelconque. Cependant, pour la nanojonction avec deux interfaces dans la direction [100] qui porte l'équivalent d'un nombre pair de plans atomiques de Ni, alors l'un de ces plans favorise la création de deux plans atomiques d'un alliage Fe<sub>0.5</sub> Ni<sub>0.5</sub>. Il s'avère que le phénomène d'inter-diffusion est responsable de la formation de cette monocouche atomique d'alliage Fe<sub>0.5</sub> Ni<sub>0.5</sub>.

En général :

Fe/Ni<sub>fcc</sub>(n [pair])/Fe se transforme en Fe/alliage Fe<sub>0.5</sub>Ni<sub>0.5</sub>-Ni<sub>fcc</sub>(n[impair])/alliage Fe<sub>0.5</sub>Ni<sub>0.5</sub>-Fe

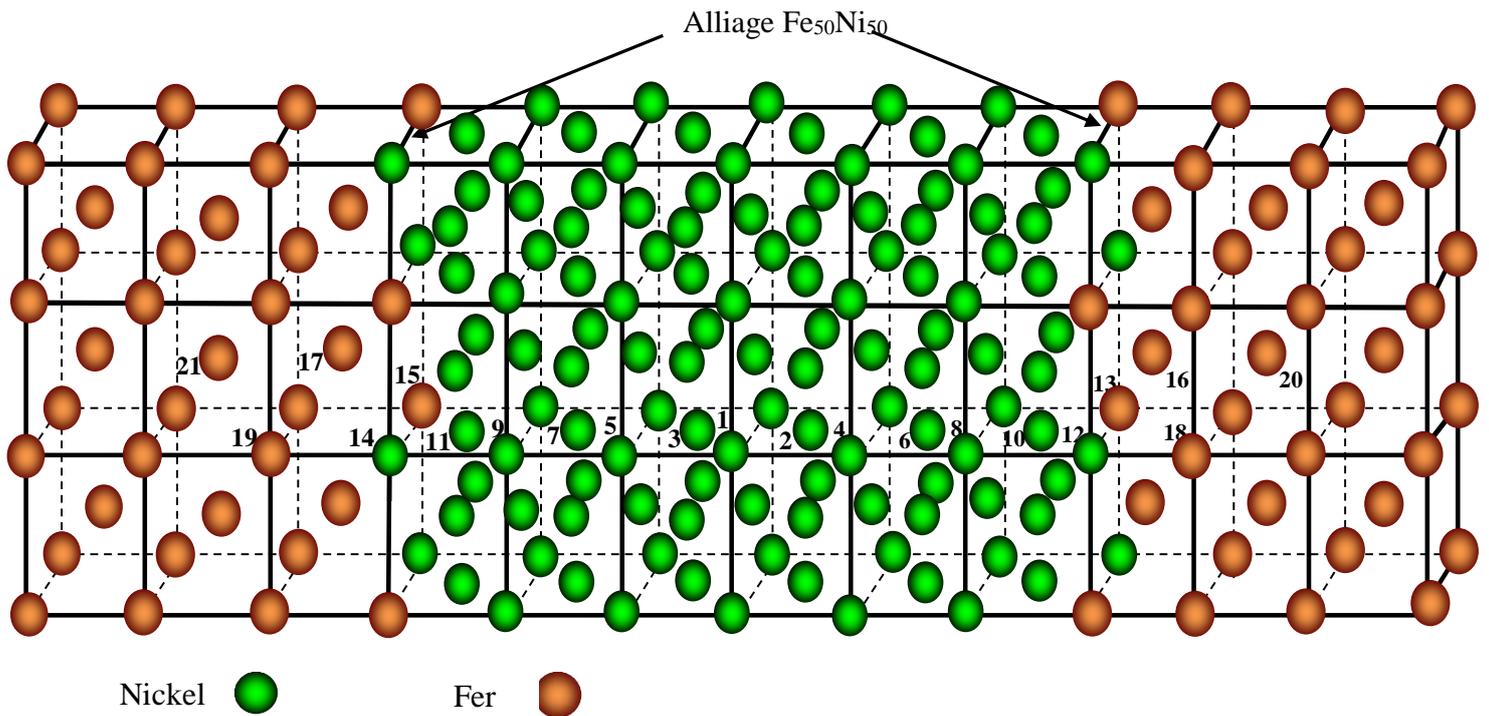
Pour :

n = 10 : Fe/alliage Fe<sub>0.5</sub>Ni<sub>0.5</sub>-Ni<sub>fcc</sub>(9)-alliage Fe<sub>0.5</sub>Ni<sub>0.5</sub>/Fe.

n = 12 : Fe/alliage Fe<sub>0.5</sub>Ni<sub>0.5</sub>-Ni<sub>fcc</sub>(11)-alliage Fe<sub>0.5</sub>Ni<sub>0.5</sub>/Fe.

n = 14 : Fe/alliage Fe<sub>0.5</sub>Ni<sub>0.5</sub>-Ni<sub>fcc</sub>(13)-alliage Fe<sub>0.5</sub>Ni<sub>0.5</sub>/Fe.

n = 16 : Fe/alliage Fe<sub>0.5</sub>Ni<sub>0.5</sub>-Ni<sub>fcc</sub>(15)-alliage Fe<sub>0.5</sub>Ni<sub>0.5</sub>/F



**Figure 3.14.1** : Représentation schématique du système Fe/Ni<sub>fcc</sub>(12)/Fe.

Les atomes de Fer et de Nickel sont reliés à leurs proches voisins par des constantes d'échanges

$J_{Fe-Fe} = 18.5 \text{ meV}$  et  $J_{Ni-Ni} = 7.21 \text{ meV}$  respectivement. Alors que dans le domaine de l'interface

$J_{Fe-Ni}$  sa valeur dépend de la distance entre les deux atomes Fe et Ni.

Pour une distance de  $\frac{a}{2} \Rightarrow J_{Fe-Ni} = 11.55 \text{ meV}$ .

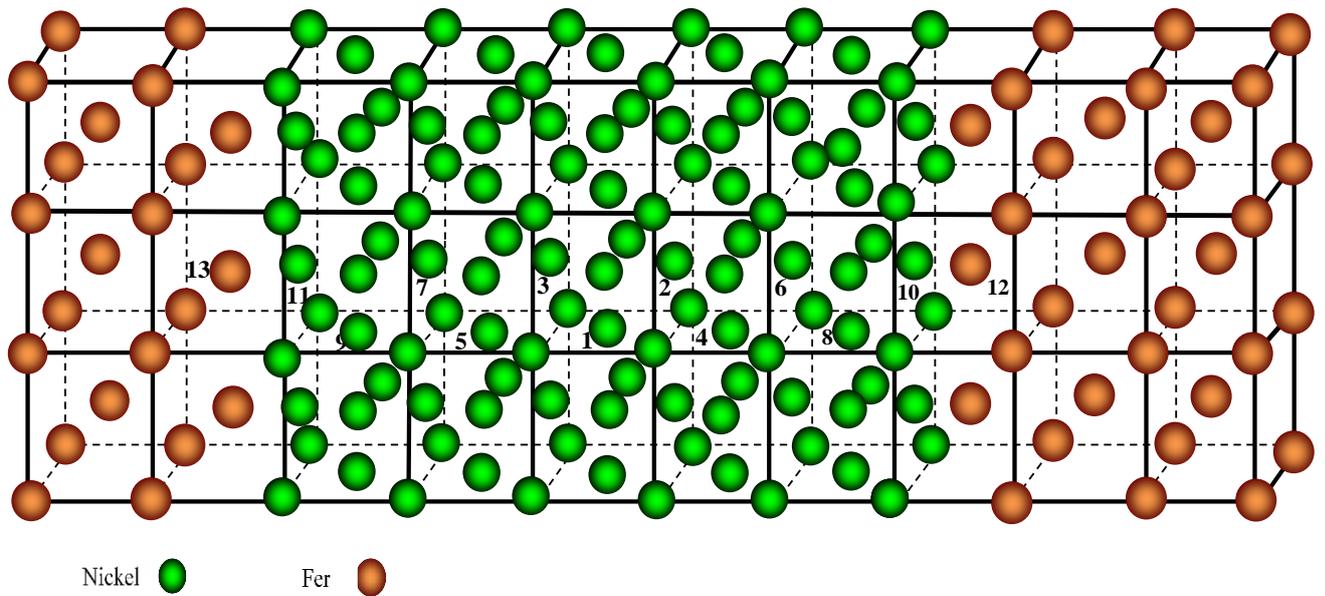
$$\text{Pour une distance de } \frac{1}{\sqrt{2}}a \Rightarrow J_{Fe-Ni} = 9.397 \text{ meV} .$$

$$\text{Pour une distance de } a \Rightarrow J_{Fe-Ni} = 6.99 \text{ meV} .$$

$$\text{Pour une distance de } \frac{\sqrt{3}}{2}a \Rightarrow J_{Fe-Ni} = 8.05 \text{ meV} .$$

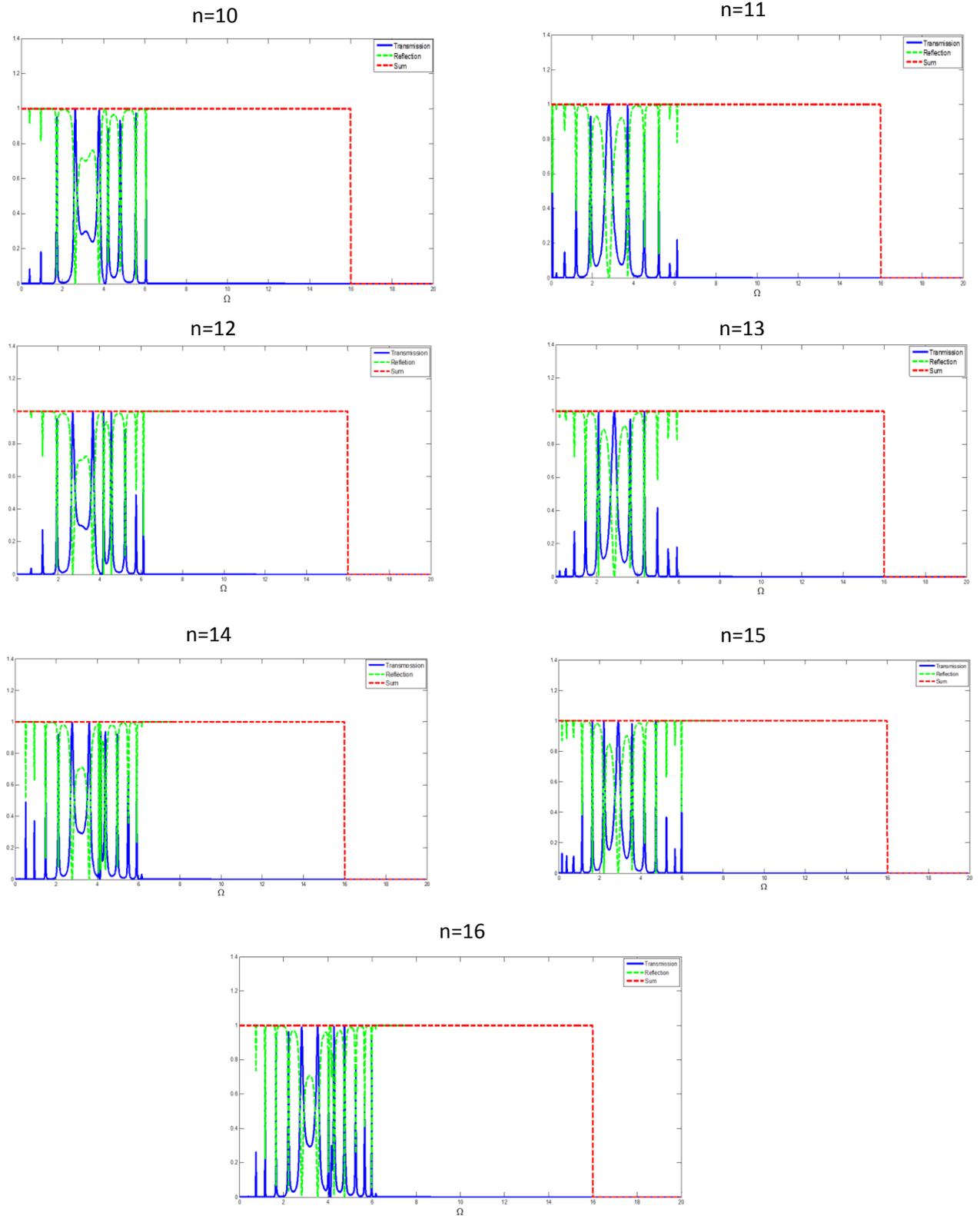
$$S(Ni) = 1$$

$S(Fe) = 1$ , pour un atome de Fe dans un solide et  $S(Fe) = 2$  pour un atome de Fe isolé.



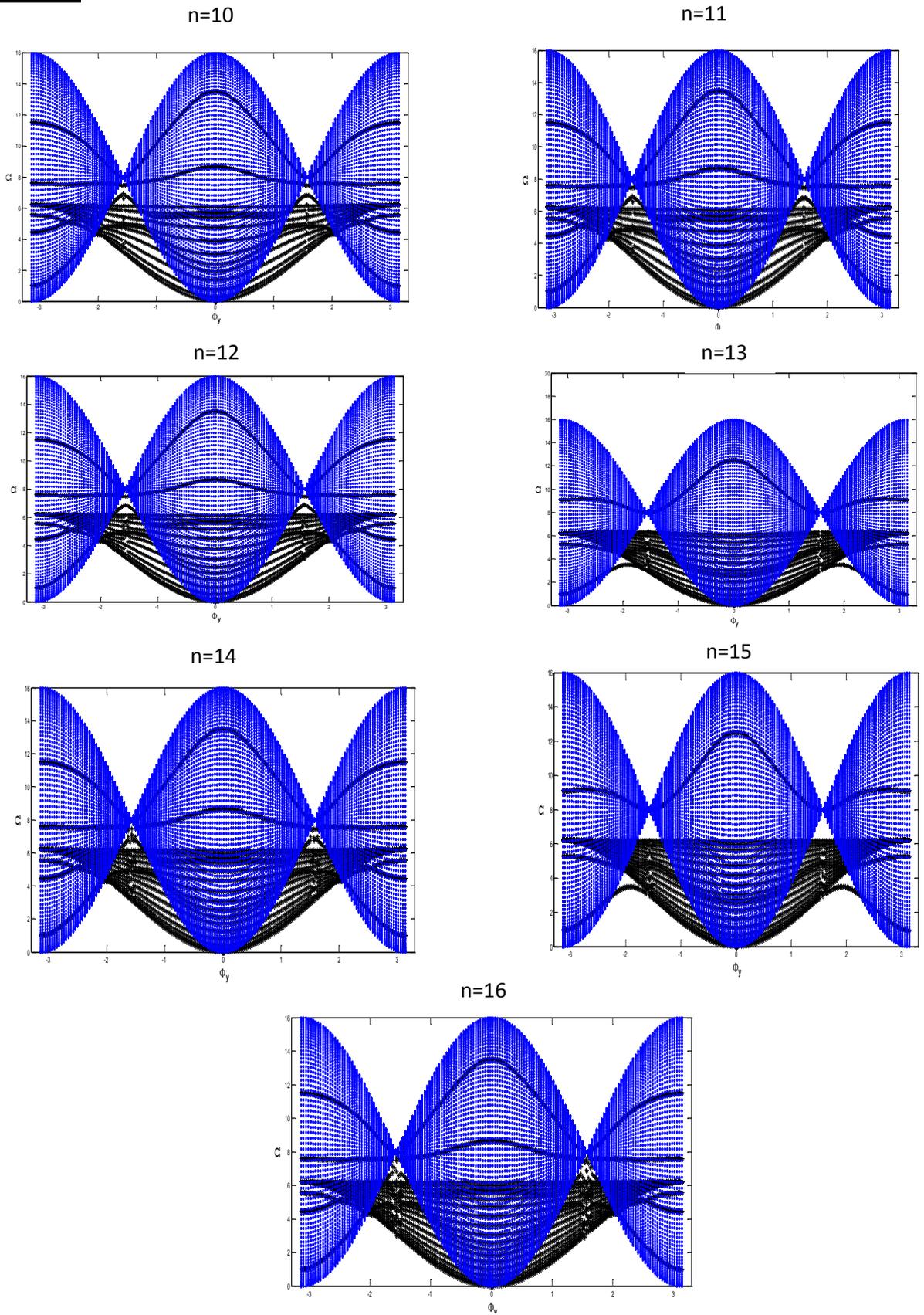
**Figure 3.14.2** : Représentation schématique du système Fe/Ni<sub>fcc</sub>(11)/Fe.

## III.3.4.2 Résultats obtenus

Coefficients de transmission et de réflexion

**Figure 3.15.1** : Coefficients de transmission et de réflexion de la structure Fe/Ni<sub>fcc</sub>(n)/Fe,  $n$  varie de 10 à 16 et  $\phi_y = \phi_z = 0$ .

Etats localisés



**Figure 3.15.2 :** Etats localisés de la structure Fe/Ni<sub>fcc</sub>(n)/Fe, n varie de 10 à 16.

Densité d'états localisés

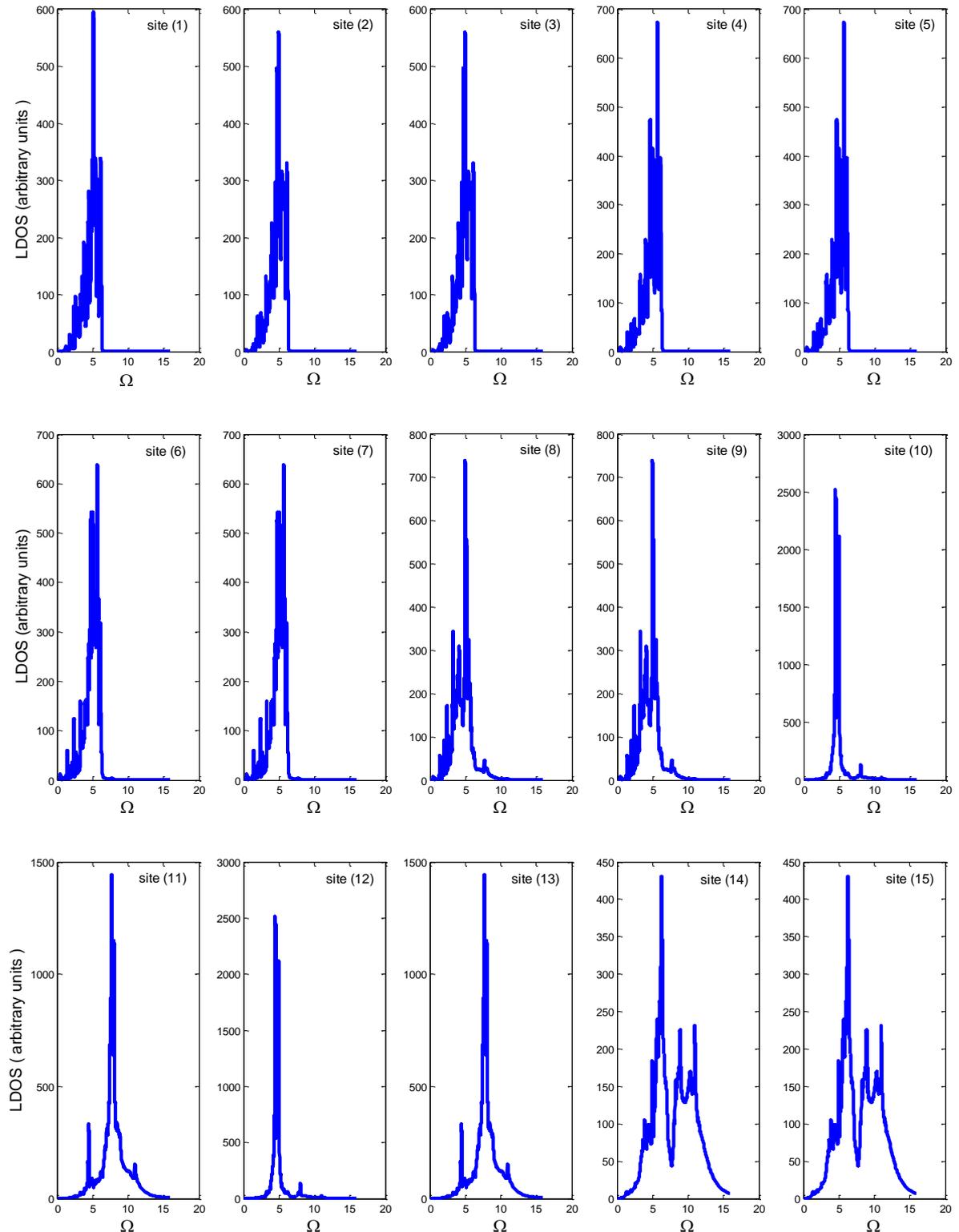


Figure 3.15.3a : LDOS des magnons du système Fe/Ni<sub>fcc</sub>(10)/Fe.

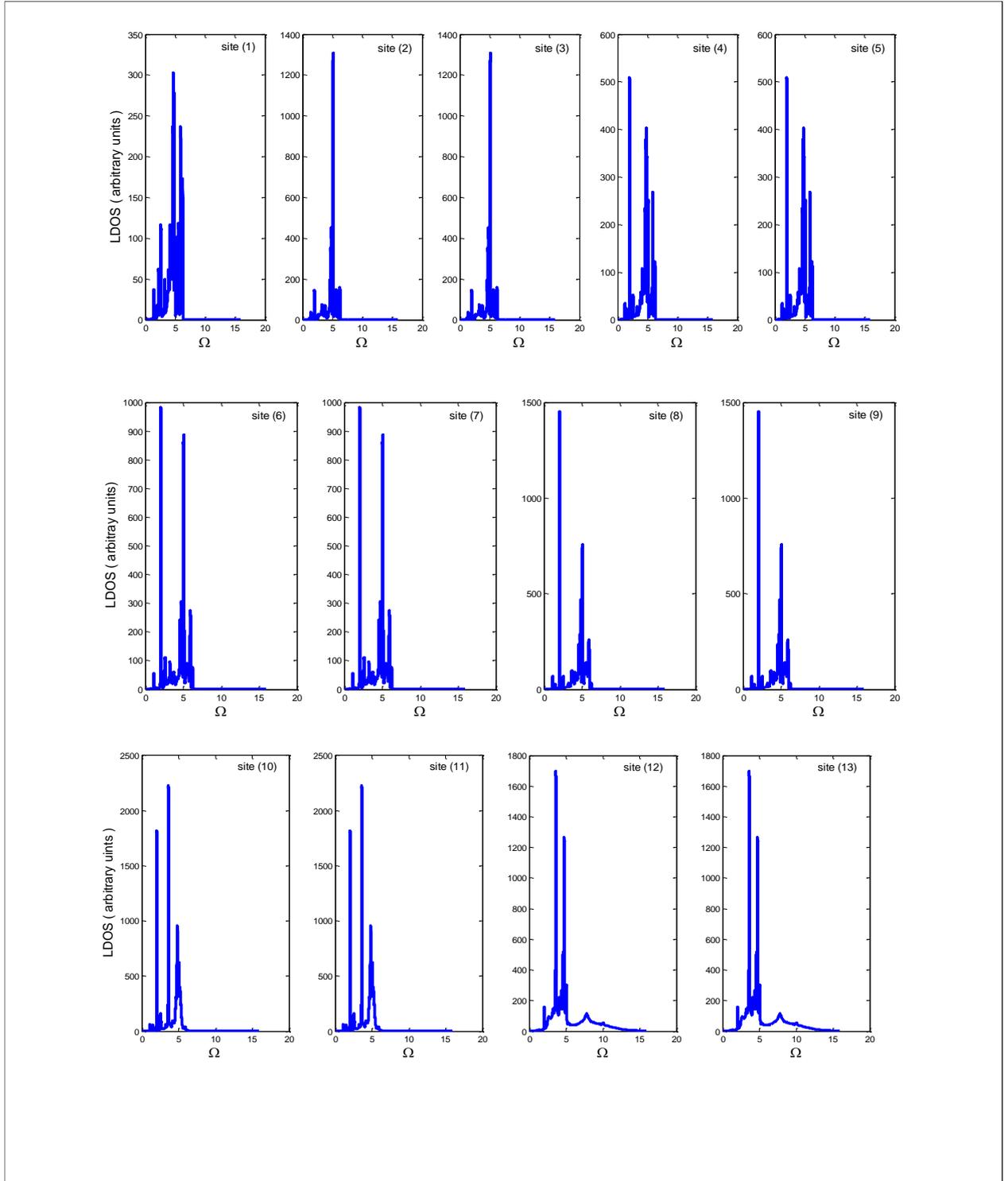


Figure 3.15.3b : LDOS des magnons du système Fe/Ni<sub>fcc</sub>(11)/Fe.

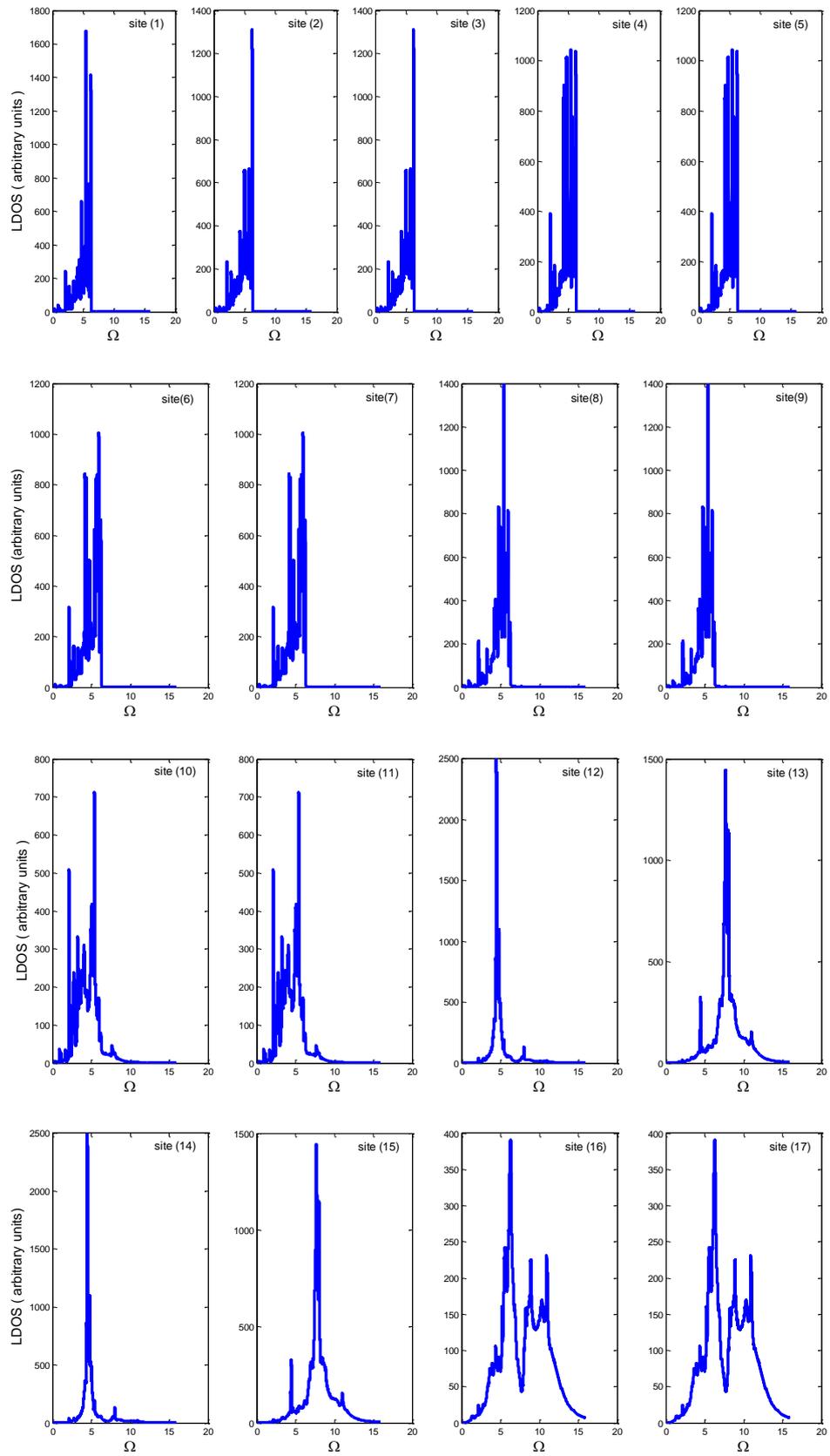
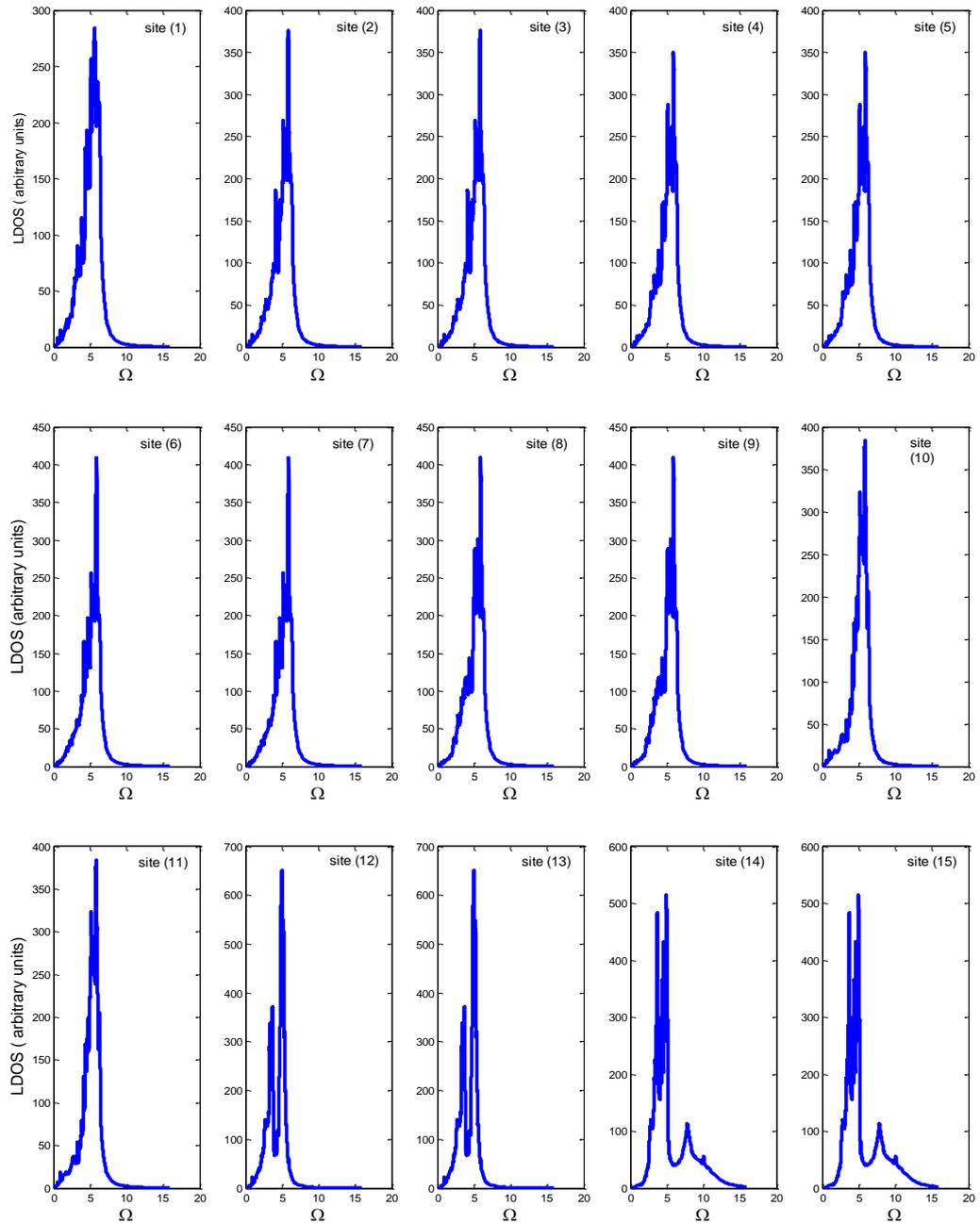


Figure 3.15.3c : LDOS des magnons du système Fe/Ni<sub>fcc</sub>(12)/Fe.



**Figure 3.15.3d** : LDOS des magnons du système Fe/Ni<sub>fcc</sub>(13)/Fe.

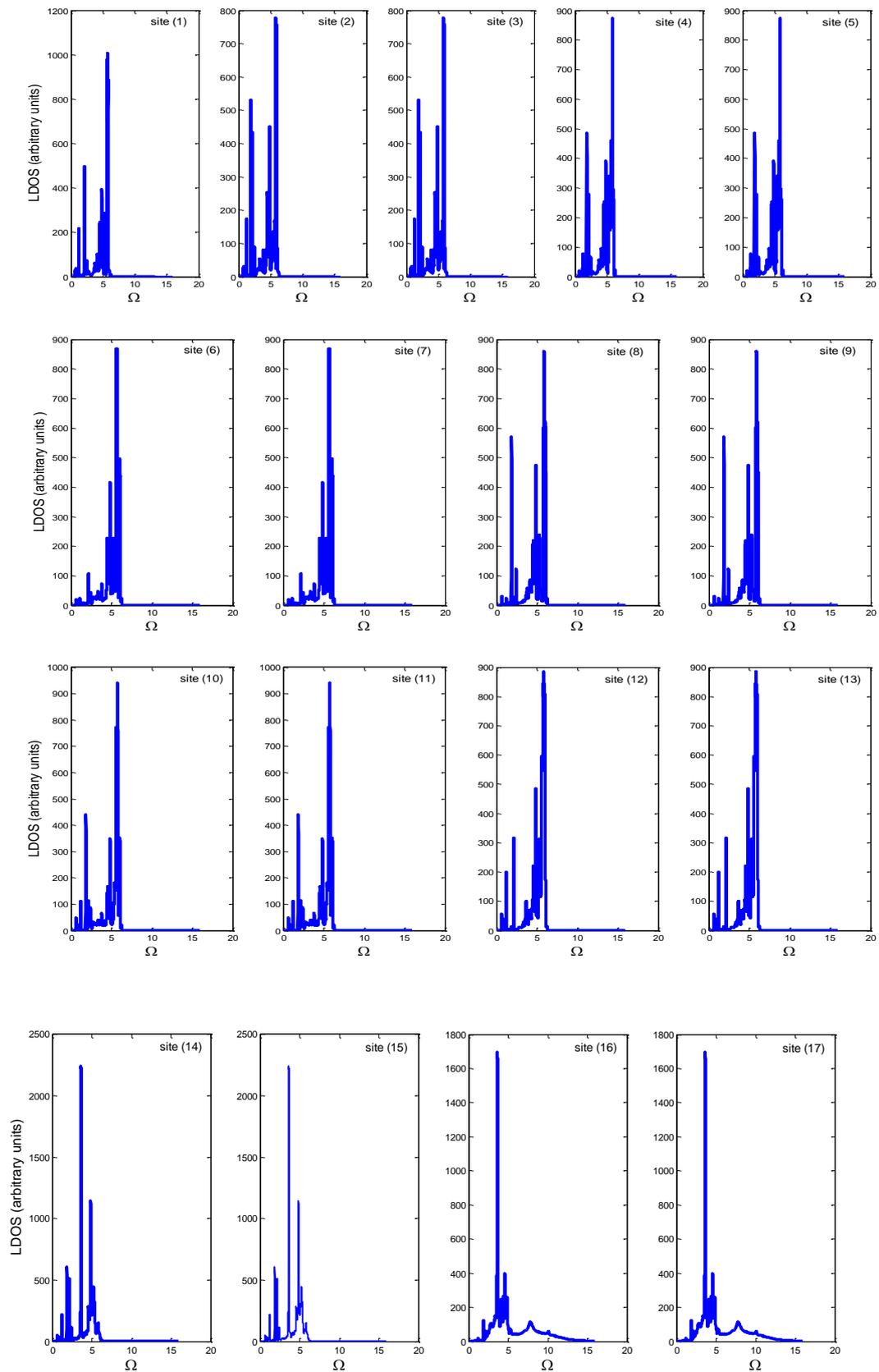


Figure 3.15.3e : LDOS des magnons du système Fe/Ni<sub>fcc</sub>(15)/Fe.

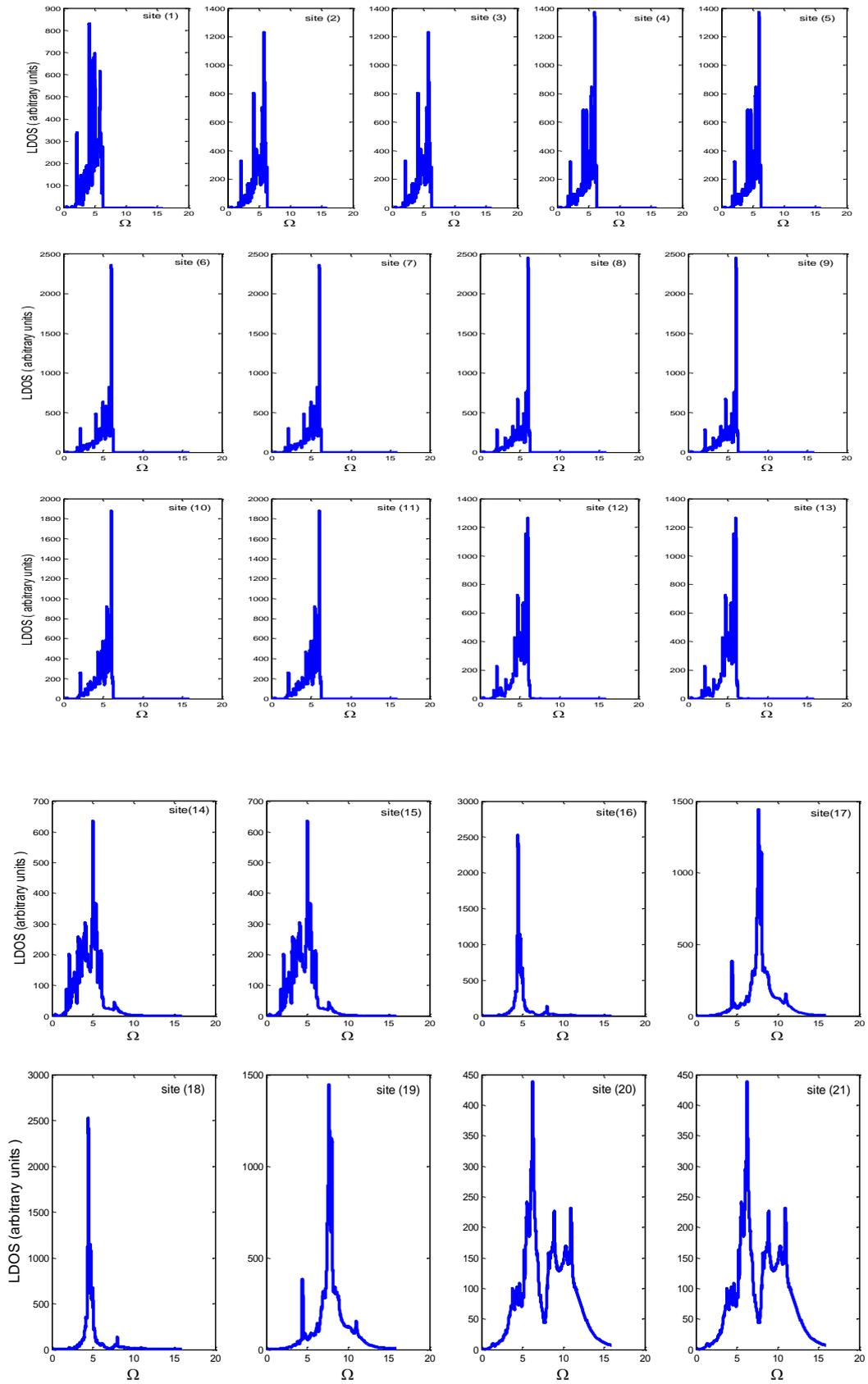


Figure 3.15.3f : LDOS des magnons du système Fe/Ni<sub>fcc</sub>(16)/Fe.

### III.3.5 Interprétation des résultats obtenus

Les résultats numériques ont été réalisés sous Matlab par des programmes calculant les différentes grandeurs physiques : coefficients de transmission et de réflexion, états localisés et densités d'états pour les différentes nanojonctions.

#### III.3.5.1 Coefficients de transmission et de réflexion

Les figures (10.1), (12.1) et (15.1) montrent l'allure des coefficients de transmission et de réflexion en fonction de la fréquence normalisée  $\Omega$ , pour les systèmes examinés :

Fe/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe, Fe/Fe<sub>x-1</sub>Ni<sub>x</sub>/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe<sub>x-1</sub>Ni<sub>x</sub>/Fe et Fe/Ni<sub>fcc</sub>(n)/Fe.

Les résultats sont obtenus pour des ondes de spin dans les systèmes ferromagnétiques incidentes se propageant de gauche vers la droite de la nanostructure intégrée entre les deux guides d'ondes parfaits Fe(100).

Nous constatons sur les différentes figures, que la condition d'unitarité,  $s = t + r = 1$ , est vérifiée. Celle-ci est utilisée comme un moyen de contrôle de nos résultats numériques.

Nous remarquons que les courbes existent sur la totalité du domaine de propagation de la structure parfaite, là où les vitesses de groupes sont non nulles  $\Omega \in [0 - 16]$ .

Les résultats montrent certaines caractéristiques générales, ainsi que quelques comportements spécifiques des magnons, pour chaque nanojonction. Sur l'ensemble des courbes de transmission et de réflexion, pour chaque système on note, en général, une grande similitude dans leurs comportements, c'est-à-dire les courbes suivent globalement les mêmes formes. On remarque aussi que les spectres de transmission et de réflexion présentent plusieurs oscillations, leurs nombres dépendent fortement de (n). Au fur à mesure qu'on augmente le nombre de plans de Ni (n) insérés entre les deux guides d'ondes parfaits Fe, les spectres de transmission et de réflexion subissent plus de fluctuations, ce qui explique le nombre le plus élevé dans la nanojonction Fe/Ni<sub>fcc</sub>(n)/Fe par rapport aux deux autres systèmes (nanojonctions). Les résultats obtenus pour le système Fe/Ni<sub>fcc</sub>(n)/Fe qui sont représentés sur la figure (15.1), tel que (n) varie de 10 à 16, confirment nos déductions, on voit bien que le nombre de fluctuations sont plus élevées pour n=16.

Certaines de ces fluctuations sont identifiées comme étant des résonances de types Fano [47-49], elles sont dues à l'interaction entre les modes localisés induits par la nanostructure et le continuum de propagation du guide d'onde parfait et d'autre de type Fabry-Pérot, elles sont dues aux interactions entre multiples ondes diffusées dans la nanostructure.

En outre, les courbes de transmission et de réflexion du deuxième système Fe/alliage/Ni<sub>bcc</sub>(n)/alliage/Fe présentent plus d'oscillations et de fluctuations (figures 12.1) par rapport au premier système Fe/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe (figure 10.1), et cela pour les mêmes valeurs de n, avec n varie de 1 à 6. Ceci est dû certainement à l'alliage  $Fe_{x-1}Ni_x$  qui se trouve au niveau des deux interfaces

Au vu des résultats obtenus, on peut dire que la transmission dans les différentes nanojonctions est une fonction dépendante de l'énergie de diffusion. Aux plus basses fréquences la probabilité de transmission est nul ou très faible, et au fur à mesure qu'on monte en fréquence la transmission augmente et devient maximale en subissant des oscillations. En effet, au cours du déplacement des magnons, ils acquièrent une énergie supplémentaire en interagissant avec les modes localisés induits par la nanostructure. De plus les ondes de spin interfèrent entre elles dans la zone perturbée et donnent lieu à des ondes ayant des longueurs d'ondes particulières.

Tandis que, pour les hautes fréquences, on constate que la transmission est nulle, par contre la réflexion est totale. Ce comportement de transmission est dû à la perte d'énergie de l'onde incidente au cours de son déplacement, on peut dire aussi que cet effet est dû à l'absence d'interférences d'ondes de spin dans cette gamme de fréquence. Cela s'explique qu'à haute fréquence les magnons, n'ont pas assez d'énergie pour qu'ils puissent franchir et traverser toute la zone de la nanostructure.

On constate aussi sur les différentes figures que la transmission du mode acoustique est très sensible à la variation du nombre des plans (n) insérés. Quand le nombre de plans n augmente, on remarque une diminution de la transmission dans son intervalle de propagation.

Pour la nanojonction Fe/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe, la transmission du mode propageant est partielle dans son intervalle de propagation et cela pour  $4 \leq n \leq 6$ , dans la nano jonction Fe/alliage/Ni<sub>bcc</sub>(n)/alliage/Fe la transmission est partielle dans le cas où  $3 \leq n \leq 4$ , par contre, pour la nanojonction Fe/Ni<sub>fcc</sub>(n)/Fe avec n variable de 10 à 16 la transmission s'effectue seulement dans l'intervalle de fréquence  $\Omega \in [0 - \delta]$ , voir figure (15.1).

En comparant les résultats obtenus pour le premier système Fe/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe, nous observons que la transmission de la nanojonction Fe/Ni<sub>bcc</sub>(1)/Fe est plus grande par rapport aux cas où  $2 \leq n \leq 6$ , ceci s'explique que le mono plan atomique de Ni<sub>bcc</sub> qui joint les deux systèmes parfait Fe, filtre moins les ondes incidentes venant de la gauche. On note la même situation pour la nanojonction Fe/Fe<sub>x-1</sub>Ni<sub>x</sub>/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe<sub>x-1</sub>Ni<sub>x</sub>/Fe.

### III.3.5.2 Etats localisés de spin

Sur les figures (10.2), (12.2) et (15.2) nous avons représenté la bande passante des magnons du guide d'ondes parfait Fe le long de l'axe (oy) (en bleu) et les modes localisés sont tracés par des lignes noires pointillées, pour les trois nanojonctions : Fe/ Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe, Fe/Fe<sub>x-1</sub>Ni<sub>x</sub>/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe<sub>x-1</sub>Ni<sub>x</sub>/Fe et Fe/Ni<sub>fcc</sub>(n)/Fe, respectivement.

Il en découle des figures que plusieurs modes de magnons localisés appariassent au voisinage de la nanostructure. Notons que leurs nombres dépend fortement de l'épaisseur de la nanostructure, en effet, une forte présence d'état localisé a été constaté pour le système Fe/Ni<sub>fcc</sub>(n)/Fe.

Nos résultats montrent des branches de faibles énergies au-dessous de la bande passante. Ces modes sont associés à la dynamique de spin des sites Ni des couches monoatomiques de la nanostructure Ni.

Les branches ayant des énergies élevées, probablement sont associées à la dynamique des spins des sites interfaces Ni-Fe. Tandis que les branches d'énergies plus élevées, certainement sont induites par les spins de la structure parfaite Fe (100).

Par ailleurs, en comparant les résultats correspondant aux nanojonctions Fe/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe et Fe/alliage/Ni<sub>bcc</sub>(n)/alliage/Fe avec n varie entre 1 et 6 monocouches atomiques de Ni<sub>bcc</sub>. Dans le système Fe/alliage/Ni<sub>bcc</sub>(n)/alliage /Fe, les branches correspondent aux sites qui se trouvent à l'interface Fe-Ni sont plus nombreuses et plus énergétiques que ceux du système Fe/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe, cela est dû essentiellement à la présence d'une couche mélangée de Fe et Ni (alliage aléatoire). De plus, nous pouvons voir sur les figures, que les branches de très hautes énergies sont maintenues dans les deux systèmes.

### III.3.5.3 Les densités d'états magnoniques

Les spectres des densités d'état locaux (LDOS) des différents sites irréductibles sont illustrés sur les figures (10.3), (12.3) et (15.3) pour les systèmes, Fe/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe, Fe/alliage/Ni<sub>bcc</sub>(n)/alliage /Fe et Fe/Ni<sub>fcc</sub>(n)/Fe, respectivement. Ces densités sont données en unités arbitraires et en fonction de la fréquence normalisée  $\Omega$  dans la première zone de Brillouin.

Les spectres montrent des oscillations qui s'étalent sur une plage de fréquence de  $0 \leq \Omega \leq 16$ , qui correspond à celle de dispersion de magnons de la zone parfaite Fe. Ces oscillations sont dues au couplage entre les états localisés au voisinage de la nanostructure et ceux du continuum.

Dans chaque figure, on note une multitude de pics de résonance d'amplitudes différentes, leur nombre et leur hauteur dépendent fortement du type de la nanojonction, des paramètres de chaque système et du nombre de plan (n) inséré.

Comme on peut le constater sur les différentes figures, l'existence de pics de grandes amplitudes pour toutes les nanojonctions dans la première partie de la plage de propagation, cela est dû essentiellement aux états localisés qui sont plus denses dans cette gamme de fréquence.

Nous pouvons voir sur les figures, que le nombre de pics est plus important dans le système Fe/alliage/Ni<sub>bcc</sub>(n)/alliage/Fe mais moins intenses par rapport au système Fe/Ni<sub>bcc</sub>(n)/Fe.

Les différentes nanojonctions sont symétriques, alors nous attendons à ce que les courbes des LDOS correspondants aux sites symétriques soient identiques. En effet, c'est le cas, les résultats obtenus sont conformes aux effets de symétrie dans chaque système.

### Conclusion

Nous avons développé un modèle de calcul, des propriétés de transport cohérent de magnons à travers une nanostructure ferromagnétique intercalée entre deux systèmes semi infinis Fe (100). Notre objectif est de connaître l'influence de l'épaisseur de la nanostructure sur les propriétés dynamiques et de diffusion de magnons.

Nos résultats numériques ont mis en évidence, l'apparition de nouveaux états de magnons localisés aux voisinages de la nanostructure intégrée inexistants en volume. Notons bien que le nombre de modes localisés qui apparaissent, dépendent fortement de l'épaisseur de la nanostructure.

Les résultats ont montré l'apparition de plusieurs pics à des énergies bien définies. Les spectres de transmission et de réflexion, présentent des oscillations de types Fabry – Péro. Elles sont dues aux interactions entre multiples ondes diffusées dans la région de nanostructure auxquelles se superposent des résonances de type Fano, qui sont une signature d'un couplage interférentiel entre des modes propageant et des modes discrets créés par la nanostructure.

Les propriétés de transmission cohérente de la nano jonction Fe/Ni (n)/Fe peut avoir une utilité technologique, pour contrôler la transmission des fréquences bien spécifiques ou contrairement la suppression des signaux est cela dans la spintronique.

**Références**

- [1] V. S. Shrivastava, Appl. Sci. Research, 2 (6), 82 (2010).
- [2] X. D. Wang, J. H. Song, J. Liu and Z. L. Wang, Science. 316, 102 (2007).
- [3] M.N. Baïbich, J.M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friedrich and J. Chazelas, Phys. Rev. Lett. 61, 2472 (1988).
- [4] R. Matsumoto, A. Fukushima, K. Yakushiji, S. Nishioka, T. Nagahama, T. Katayama, Y. Suzuki, K. Ando and S. Yuasa. Phys. Rev. B 79, 174436 (2009).
- [5] M. Mizuguchi, Y. Suzuki, T. Nagahama and S. Yuasa. J. Appl. Phys. 99, 08A907 (2006).
- [6] G. Binach, P Grünberg, F. Saurenbach and W. Zinn, Phys. Rev. B 39, 4828(1989).
- [7] J. Szeftel and A. Khater, J. Phys. C: Solide State Phys.20, 4725 (1987).
- [8] J. Szeftel, A. Khater, F. Mila, S. d'Addato and N. Auby, J. Phys. C: Solide State Phys.21, 2113 (1988).
- [9] M. Belhadi, A. Khater, J. Hardy and K. Maschke, Eur. Phys. J. Appl.35, 185 (2006).
- [10] B. Bourahla, O. Nafa and A. Khater, Can. J. Phys. 91: 343 (2013).
- [11] A. Khater, L. Saim, R. Tigrine and D. Ghader, Surf. Sci. 672 (2018).
- [12] V. Ashokan, M. Abou Ghantous, D. Ghader and A. Khater, Thin Solide Film, 616, 6 (2016).
- [13] W. Heisenberg, Z. Physik 69, 287 (1931).
- [14] B. Bourahla, A. Khater and R. Tigrine, Eur. Phys. J.B, 69, 343 (2009).
- [15] C. Kittel, Introduction à la Physique de l'Etat Solide (Dundo, Paris, 1970).
- [16] F. Gagel and K. Maschke, Phys. Rev. B 52, 2013 (1995).
- [17] S. Nicaise, Analyse numérique et équations aux dérivées partielles, Dunod, (2000).
- [18] R. Tigrine, A. Khater, O. Rafil and M. Belhadi, Mod. Physi. Lette. B19, 625 (2005).
- [19] B. Grolleau, Le vide, les couches minces 204 (1980).
- [20] Ph. Lami et Y. Pauleau, J. Electrochem. Soc.: Solid-State Science and Technology 135, 980 (1988).
- [21] L. Maissel and R. Glang, « Handbook of thin film technology ». New York: McGraw-Hill, 1970.
- [22] A. Y. Cho and J. R. Arthur. Molecular beam epitaxy, Prog. Solid. State Chemi. 10, 157 (1975).
- [23] D. Dijkkamp, Y. H. Min-Lee and W.L. Mc, Appl. Phys. Lett. 51, 619 (1987).
- [24] D. B. Chrisey and G. K. Huubler, 1/2- Pulsed Laser Deposition of Thin Film. Ed Wiley interscience, New York 258 (1994).
- [25] N. Jaber, Thèse de Doctorat, Université Francois-Rabelais de Tours, (2015).

- [26] B. Heinrich, S. T. Purcell, J. R. Dutcher, K. B. Urquhart, J. F. Cochran, and A. S. Arrott, *Phys. Rev. B* 38, 12 879 (1988).
- [27] E.A. Moujaes, A. Khater and M. Abou Ghantous, *J. Magn. Magn. Mater* 391, 49 (2015).
- [28] V.L. Moruzzi, *Phys. Rev. Lett* 57, 2211 (1986); L. Moruzzi, P. M. Marcus, K. Schwarz, and P. Mohn., *Phys. Rev. B* 34, 1784 (1986); V. L. Moruzzi and P. M. Marcus, *Phys. Rev. B* 38, 1613 (1988).
- [29] G.Y. Guo and H.H. Wang, *Chin. J. Phys* 38, 949 (2000).
- [30] B. Heinrich, A. S. Arrott, J. F. Cochran, C. Liu, and K. Myrtle., *J. Vac. Sci. Technol. A* 4, 1376 (1986); B. Heinrich, A.S. Arrott, J.F. Cochran, S.T. Purcell, K.B. Urquhart and K. Myrtle. *J. Cryst. Growth* 81, 562 (1987).
- [31] Z. Q. Wang, Y.S. Li, F. Jona and P.M. Marcus, *Solid State Commun* 61, 623 (1987).
- [32] B. Heinrich, S. T. Purcell, J. R. Dutcher, K. B. Urquhart, J. F. Cochran, and A. S. Arrott, *Phys. Rev. B* 38, 879 (1988).
- [33] J. A. C. Bland, R. D. Bateson, A. D. Johnson, B. Heinrich, Z. Celinski and H. J. Hauser, *J. Magn. Magn. Mater.* 93, 331 (1991).
- [34] N.B. Brookes, A. Clarke and P.D. Johnson, *Phys. Rev. B* 46, 237 (1992).
- [35] Z. Celinski, K. B. Urquhart, and B. Heinrich, *J. Magn. Magn. Mater.* 166, 6 (1997).
- [36] A. Hashibon, P. Schravendijk, C. Elsaesser and P. Gumbsch, *Philos. Mag.* 89, 3413 (2009).
- [37] J.I. Lee, S.C. Hong, A.J. Freeman and C.L. Fu, *Phys. Rev. B* 47, 810 (1993).
- [38] T. Lin, et al., *Phys. Rev. B* 59 (13), 911 (1999).
- [39] A. Khater, G. Le Gal and T. Kaneyoshi, *Phys. Lett. A* 171, 237 (1992).
- [40] A. Khater and M. Abou Ghantous, *J. Mag. Mag. Mat* 323, 2717 (2011).
- [41] V. Ashokan, M. Abou Ghantous and A. Khater, *J. Mag. Mag. Mat* 396, 16 (2015).
- [42] E.A. Moujaes, L. V. Aguiar and M. Abou Ghantous, *J. Mag. Mag. Mat.* 304, 8853 (2016).
- [43] E.A. Moujaes, A. Khater, M. Abou Ghantous and V. Ashokan, *Materialia*, 4, 373 (2018).
- [44] V. Ashokan, M. Abou Ghantous, D. Ghader, A. Khater, *J. Mag. Mag. Mat* 363 (2014).
- [45] T.G. Dargam, R.B. Capaz and B. Koiller, *Braz. J. Phys.* 27/A, 299 (1997).
- [46] L. Bellaiche and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* 61, 7877 (2000).
- [47] Ken-ichi Hino *J.Phys. Soc. Japn.* 69, 836 (2000).
- [48] S. J. Yong, M. S. Arkady and S. K. Chang, *Phys. Scr.* 74, 259 (2006).

[49] B. Bourahla, O. Nafa and R. Tigrine, Phys. B 406, 725 (2011).

## Chapitre IV

# Etude théorique et modélisation de la dynamique de spins d'une monocouche d'alliage Fe-Ni sur Ni (fcc)

### Sommaire

#### Introduction

#### IV.1 Introduction aux surfaces alliages

IV.1.1 Surface alliage

IV.1.2 Energie de surface

IV.1.3 Techniques de caractérisation des surfaces alliages

#### IV.2 Dynamique précessionnelle d'une surface alliage Fe/Ni (100)

IV.2.1 Description des surfaces alliages étudiées

IV.2.2 Dynamique précessionnelle en volume loin de la surface alliage

IV.2.3 Dynamique de la surface

IV.2.3.1 Système de surface alliage ordonné  $\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}/\text{Ni}$  (100)

IV.2.3.2 Système de surface alliage désordonnée Fe/Ni(100)

#### VI.3 Discussion des résultats

#### Conclusion

#### Références

## Introduction

Les alliages métalliques sont des systèmes bien connus des physiciens et des chimistes, tant à l'échelle du volume qu'à celui de la surface. Ils présentent des caractéristiques physico-chimiques qui dépendent essentiellement de leur structure, composition ainsi que de leur taille. En effet, en diminuant la taille de ces alliages, jusqu'à l'échelle nanométrique, on augmente considérablement l'impact de leurs surfaces.

Les nanoalliages présentent une importante diversité de formes d'arrangement atomiques, de composition chimiques, qui leur confèrent des propriétés physiques et chimiques uniques (catalytiques, magnétiques, optiques,...). D'un point de vue fondamental, les effets dus à la taille réduite du système, et en particulier les effets de surface, sont à l'origine d'un très grand nombre de travaux expérimentaux ou théoriques. Bien que ceux-ci offrent de nombreuses perspectives, une grande partie de l'attention se focalise sur les propriétés magnétiques.

Dans ces nouvelles générations de nanoparticules, une place importante est occupée par les nanomatériaux magnétiques bimétalliques. En combinant deux métaux de transition 3d, comme par exemple FeCo, ou FeNi, une nouvelle classe de nanoparticules est attendue [1-4].

Aujourd'hui l'une des applications envisagée pour ces nanomatériaux est la conception d'inducteurs en microélectronique, pour le téléphone mobile par exemple. Ils sont également susceptibles d'entrer dans la composition de têtes d'écriture –lecture de dispositifs de stockage d'informations magnétiques. Ils sont également intégrés dans les circuits magnétiques complexes, et sont aussi utilisés comme systèmes de contrôle de la surface.

Les alliages Fe-Ni font l'objet de nombreuses applications, tels que les revêtements métalliques et en microélectroniques.

Récemment, des études ont été faite sur les nanoalliages à base de métaux de transition (TM), tels que les nanojonctions d'alliages Fe/Fe-Co/Fe, Co/[Gd<sub>1-x</sub>Co<sub>x</sub>]<sub>n</sub>/Co [5-8], nanoalliages Fe-Ni inséré en sandwich entre le Fe et Co [9].

Dans ce chapitre, on propose une étude théorique centrée sur les surfaces alliages

Fe<sub>x</sub>Ni<sub>1-x</sub>/Ni<sub>fcc</sub> (100), obtenus par le dépôt d'atomes de Fer sur la surface (100) de Nickel substrat. Pour cela, nous appliquons l'approximation du cristal virtuel (VCA) [10-12] et la méthode de raccordement [13-15].

Le but de la surface Fe<sub>x</sub>Ni<sub>1-x</sub> est de donner des propriétés particulières à la surface de Ni<sub>fcc</sub>(100).

Nous débutons ce chapitre par un rappel de quelques généralités et concepts pour l'étude des surfaces ainsi que quelques techniques expérimentales utilisées pour l'analyse des surfaces, puis, nous étudions les propriétés précessionnelles de la surface alliage Fe/Ni<sub>fcc</sub>(100). On focalisera notre étude sur deux systèmes : surface alliage ordonnée et désordonnée. Nous appliquons la méthode de raccordement, pour calculer les états de magnons de surface ainsi que les densités d'états locales. Nous discutons à la fin les différents résultats numériques obtenus.

## IV. 1 Introduction aux surfaces alliages

### IV.1.1 Surface alliage

Le dépôt d'un métal B sur une surface métallique A peut former un alliage de quelques couches atomiques dans les couches atomiques externes du substrat. Des études expérimentales et théoriques montrent que la formation d'un alliage de surface est possible dans de nombreux couples métal sur métal [16, 17].

Selon la miscibilité des métaux en volume, on peut distinguer deux classes d'alliages de surfaces. La première classe formée par la combinaison de deux métaux immiscibles en volume. Dans ce cas, la pénétration du dépôt métallique ne peut dépasser la première couche atomique.

La seconde classe, diffère fondamentalement de la première, en effet ces alliages entre métaux ayant une forte solubilité, forment parfois une solution solide ou un alliage stœchiométrique ordonné sur plusieurs couches atomiques. [18-20].

Un autre type de classement est possible pour les surfaces alliages, celui des surfaces alliages ordonnées et désordonnées selon la nature des métaux et les conditions de préparations (température, concentration des atomes adsorbés, ...).

Il est possible d'obtenir un arrangement régulier des atomes A et B sur le réseau de façon à obtenir une structure aussi compacte que possible. Un tel arrangement ne peut se produire que pour des concentrations bien déterminées. De façon générale, il y a possibilité d'ordre, si du point de vue énergétique, les liaisons interatomiques AB sont favorisées par rapport aux liaisons AA et BB.

### IV.1.2 Energie de surface

L'énergie de surface est la grandeur la plus importante qui est utilisée dans la thermodynamique des surfaces. Un matériau quelconque est composé d'atomes liés entre eux par des liaisons [21]. Lorsqu'on s'approche de la surface, les atomes les plus proches de cette dernière ne possèdent pas le même environnement que ceux du volume. Ces atomes de surface ont un excès d'énergie. Cette énergie est appelée énergie de surface.

Afin de créer une surface il faut fournir un travail, donné par la relation suivante [22]

$$\delta W = \gamma dA \quad (4.1)$$

Où :  $\delta W$  est le travail fourni pour créer la surface infinitésimale  $dA$ ,

$\gamma$  est la tension superficielle. Elle représente l'énergie nécessaire pour augmenter la surface d'une unité.

### IV.1.3 Techniques de caractérisation des surfaces alliages

Les propriétés des alliages de surface, sont très importantes. Pour avoir des informations sur la morphologie de ces surfaces, plusieurs techniques d'analyse sont développées [23]. On citera brièvement quelques techniques expérimentales utilisées dans les sciences des surfaces.

**IV.1.3.1 Microscopie à effet tunnel :** en anglais, Scanning Tunneling Microscop, (STM), est inventée en 1981, par des chercheurs d'IBM, G. Binnig et H. Rohrer qui reçurent le prix Nobel de physique pour cette invention en 1986 [24, 25].

Le principe de cette technique est basé sur un phénomène quantique l'effet tunnel. Il est utilisé pour déterminer la morphologie à l'aide d'une sonde (pointe) métallique qui balaie et scanne la surface de l'objet.

### **IV.1.3.2 Microscopie électronique à balayage**

La microscopie électronique à balayage (MEB) (en anglais Scanning Electron Microscopy (SEM)) a été imaginée pour la première fois, par Max Knoll et Manfred Von Ardenne dans les années 1930 [26-28].

Le principe de la technique consiste en un faisceau d'électrons balayant la surface de l'échantillon à analyser. Elle permet d'analyser la morphologie de la surface et la composition chimique de la plupart des matériaux solides. La MEB a la particularité de donner des images en haute résolution.

### **IV.1.3.3 Microscopie électronique en transmission MET : (en anglais, Transmission Electron Microscopy TEM).**

Le principe du microscope électronique a été mis au point dans les années 1930 par Max Knoll et Ernst Ruska. Ce dernier a reçu le prix Nobel de la physique en 1986 pour cette invention [29]. Cette technique consiste à soumettre un échantillon suffisamment mince à un faisceau d'électrons. L'interaction de ces derniers avec la matière génère plusieurs types de rayonnements comme les électrons diffractés, les électrons transmis et les rayons X. Selon le type de détecteur, une multitude d'informations peuvent être obtenues comme la cristallinité, la nature des défauts cristallins et la composition chimique d'une surface alliage.

### **IV.1.3.4 Microscope à force électronique EFM**

La EFM utilise comme système oscillant une lame souple portant à l'extrémité mobile une pointe métallisée qui balaye la surface à observer. Cette technique permet de mesurer de faibles grandeurs physiques caractéristiques de l'interaction entre une pointe et une surface avec une résolution latérale pouvant aller jusqu'à l'Angstrom, comme mesurer les propriétés électrostatiques locales.

## **IV.2 Dynamique précessionnelle d'une surface alliage Fe/Ni (100)**

### **IV.2.1 Description des surfaces alliages étudiées**

Le dépôt d'atomes de Fe sur une surface monocristalline de Ni cubique à face centrée, mène à la formation d'une monocouche bimétallique de Fe et Ni, à travers la substitution d'atomes de Fe à ceux du Ni.

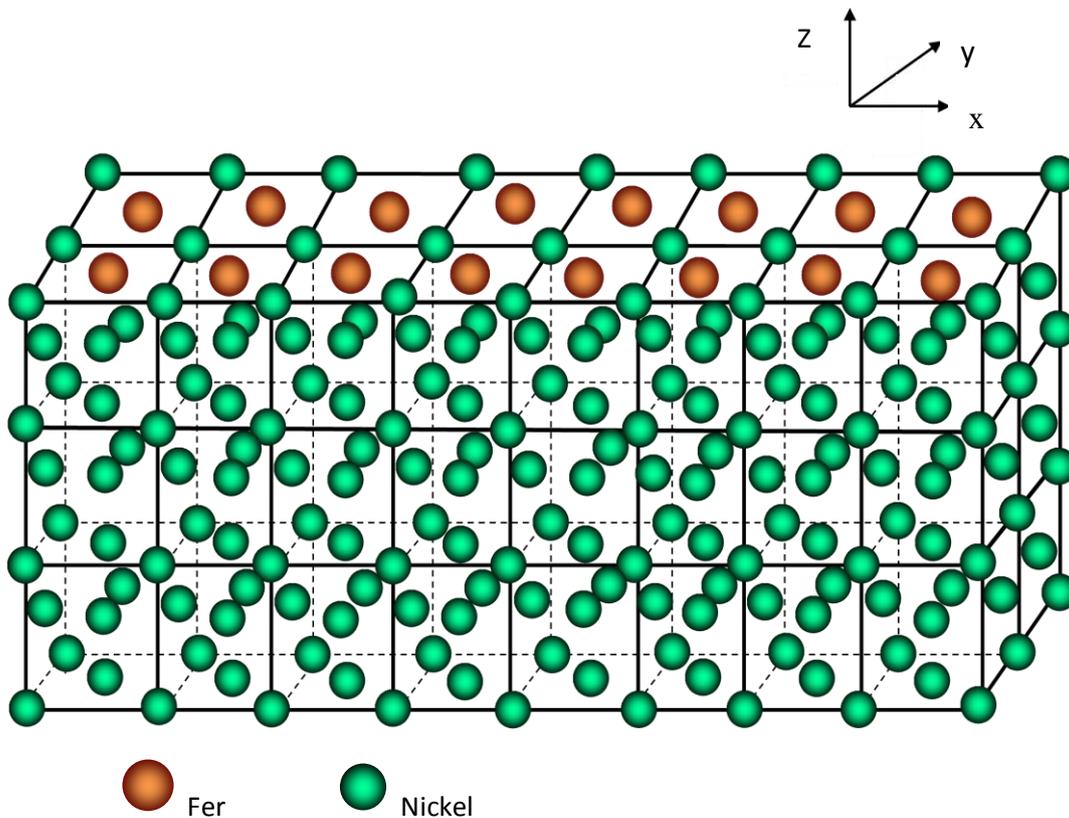
Lorsqu'on dépose les atomes de Fe sur la surface externe du Nickel(Ni), d'un point de vue pratique, nous pouvons avoir deux classes de surfaces alliages  $Fe_xNi_{1-x}$  : ordonnée ou désordonnée.

On propose dans ce travail, deux système de surfaces alliages, le premier est

$Fe_{0.5} Ni_{0.5}/Ni(100)$  ordonnée, le deuxième c'est  $Fe_xNi_{1-x}/Ni(100)$  désordonnée telle que  $x$  la concentration de Fe.

Nos structures se constituent, d'une monocouche d'alliage Ni-Fe et d'un substrat semi infini Ni(100) représenté sur les figure (4.1.a) et (4.1.b). Une brisure de symétrie de translation est introduite suivant la direction [100], pour calculer les propriétés précessionnelles de ces systèmes on applique la méthode de raccordement et l'approximation du cristal virtuel (VCA).

La modélisation s'effectuera en considérant un modèle de couches atomiques, la première couche et la deuxième couche adjacentes sont perturbées par des paramètres d'échange différents de ceux de volume.



**Figure 4.1a** : Représentation d'une surface alliage ordonnée  $Fe_{0.5} Ni_{0.5}/Ni_{fcc}(100)$ .

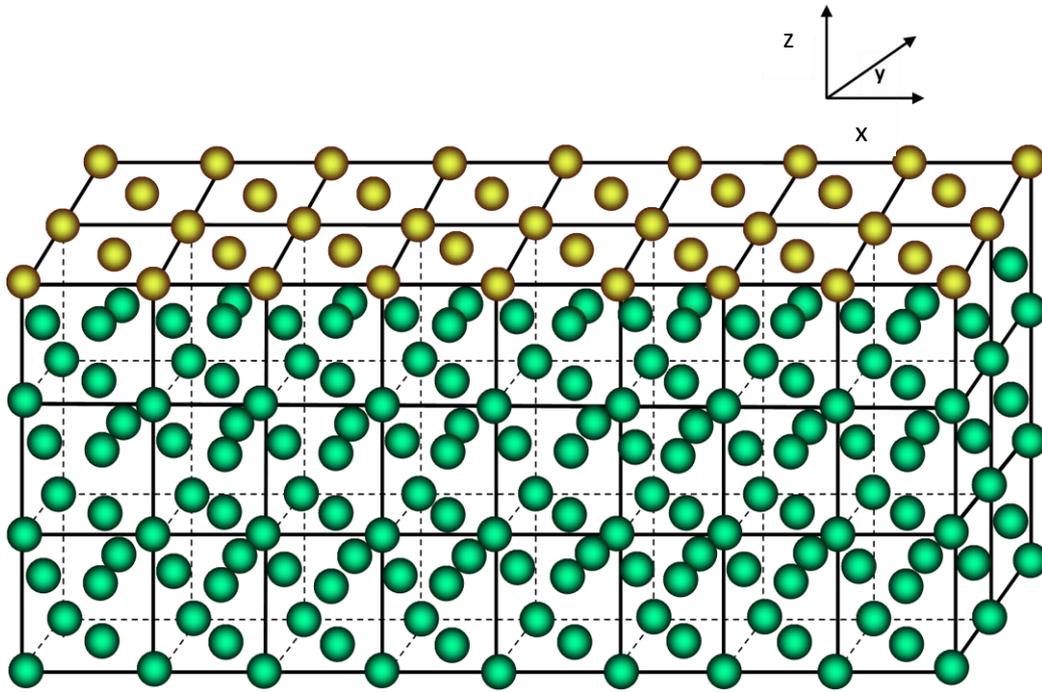


Figure 4.1b : Représentation d'une surface alliage virtuelle  $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}/\text{Ni}_{\text{fcc}}(100)$ .

#### IV.2.2 Dynamique précessionnelle en volume loin de la surface alliage

Le Nickel est un métal de transition, il se cristallise dans une structure cubique à face centrée (fcc). Un atome de Nickel appartenant à la région de volume, se retrouve entouré par 12 atomes premiers proches voisins à une distance  $a/\sqrt{2}$ , avec  $a$  le paramètre du réseau (figure 4.2).

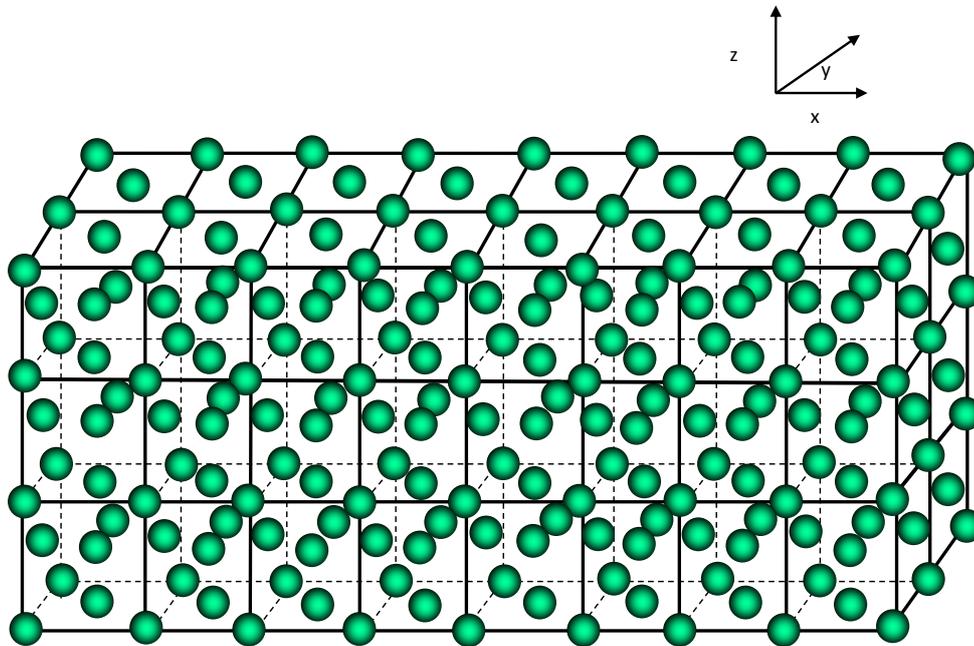


Figure 4.2 : Représentation schématique de Ni parfait.

Les excitations magnétiques, d'un système de spins, sont décrites à partir d'un Hamiltonien  $H$  dit d'Heisenberg décrivant toutes les interactions entre premiers voisins. Il est donné par [30] :

$$H = -\sum_{l,l'} J_V(l,l') \vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l'} \quad (4.2)$$

Où  $J_V$  est un scalaire positif dans le cas d'un couplage ferromagnétique. Il est appelé intégrale d'échange.  $\vec{S}_l$  et  $\vec{S}_{l'}$  sont les vecteurs de spins situés sur les sites  $l$  et  $l'$ .

L'équation générale du mouvement de précession d'un vecteur de spin sur un site  $l$  de coordonnées  $n, s$  et  $m$  est donnée sous la forme suivante :

$$\left( \Omega - \left[ 12 - 2 \left( Z_3 + \frac{1}{Z_3} \right) (\cos \phi_y + \cos \phi_x) - 4 \cos \phi_y \cos \phi_x \right] \right) |u\rangle = 0 \quad (4.3)$$

avec

$\Omega = \frac{\hbar \omega}{J_V S}$  : la fréquence normalisée,  $S = S_{Ni}$  : l'intensité du vecteur  $\vec{S}$ .

$$Z_3 = e^{i\phi_z} = e^{iq_z \frac{a}{2}}, \quad Z_2 = e^{i\phi_y} = e^{iq_y \frac{a}{2}}, \quad Z_1 = e^{i\phi_x} = e^{iq_x \frac{a}{2}} \quad (4.4)$$

Tels que

$Z_1, Z_2$  et  $Z_3$  sont les facteurs de phases le long des axes  $x, y$  et  $z$ , respectivement.

$q_x, q_y$  et  $q_z$  sont les vecteurs d'ondes dans les trois directions  $x, y$  et  $z$ , respectivement.

L'équation précédente peut se mettre sous la forme matricielle suivante :

$$[\Omega I - D_v(Z_3, \phi_x, \phi_y)] |u_{Ni}\rangle = 0 \quad (4.5)$$

Ou :  $|u\rangle = |u_{Ni}\rangle$

$D_v(Z_3, \phi_x, \phi_y)$  la matrice dynamique du système en volume de taille  $(1 \times 1)$ .

$I$  la matrice identité de même rang que la matrice  $D_v$  et  $|u\rangle$  le vecteur propre.

La condition pour que ce système homogène ait des solutions non triviales est :

$$\det(\Omega I - D_v(Z_3, \phi_x, \phi_y)) = 0 \quad (4.6)$$

La relation (4.6), nous permet de tracer la courbe de dispersion.

Sur la figure (4.3), nous avons représenté la courbe de dispersion de magnons en volume d'un cristal de Nickel ferromagnétique.

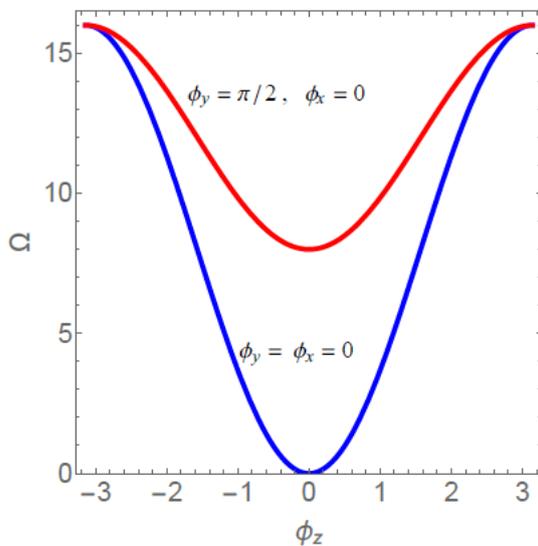
La vitesse de transport de l'énergie ou de l'information, dans le milieu est appelée vitesse de groupe.

Elle est définie pour des vecteurs ondes  $\vec{q}$  réels par l'expression :

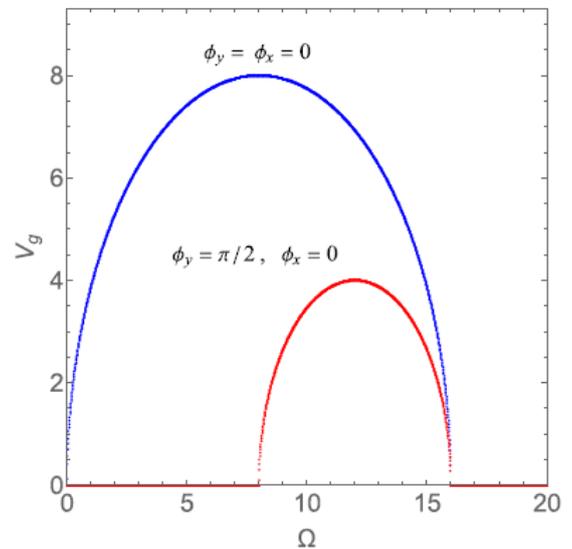
$$v_g = \frac{\partial \Omega}{\partial \vec{q}} \quad \text{soit} \quad \vec{v}_g = \overrightarrow{\text{grad}}[\Omega(\vec{q})] \quad (4.7)$$

Dans le cas où  $\vec{q}$  est différent d'un réel, on pose  $v_g = 0$ .

Sur la figure (4.4), nous avons représenté l'allure de la vitesse de groupe en fonction de la fréquence de diffusion  $\Omega$ .



**Figure 4.3.** : Courbe de dispersion des magnons en volume du Nickel.



**Figure 4.4.** : Courbe vitesse de group en volume du Nickel.

### Discussion des résultats obtenus

Nous remarquons l'existence d'un seul mode, qui se propage dans un intervalle de fréquence  $\Omega \in [0 - 16]$ . Pour des angles d'incidences  $\phi_y = \phi_x = 0$ , le mode est acoustique, tandis que pour

des angles  $\phi_x = 0$  et  $\phi_y = \frac{\pi}{2}$  le mode est optique (figure 4.3).

Les courbes de dispersion sont symétriques par rapport à l'axe de  $\Omega$ , et que leurs dépendance en fonction de  $\phi_z$  n'est pas linéaire.

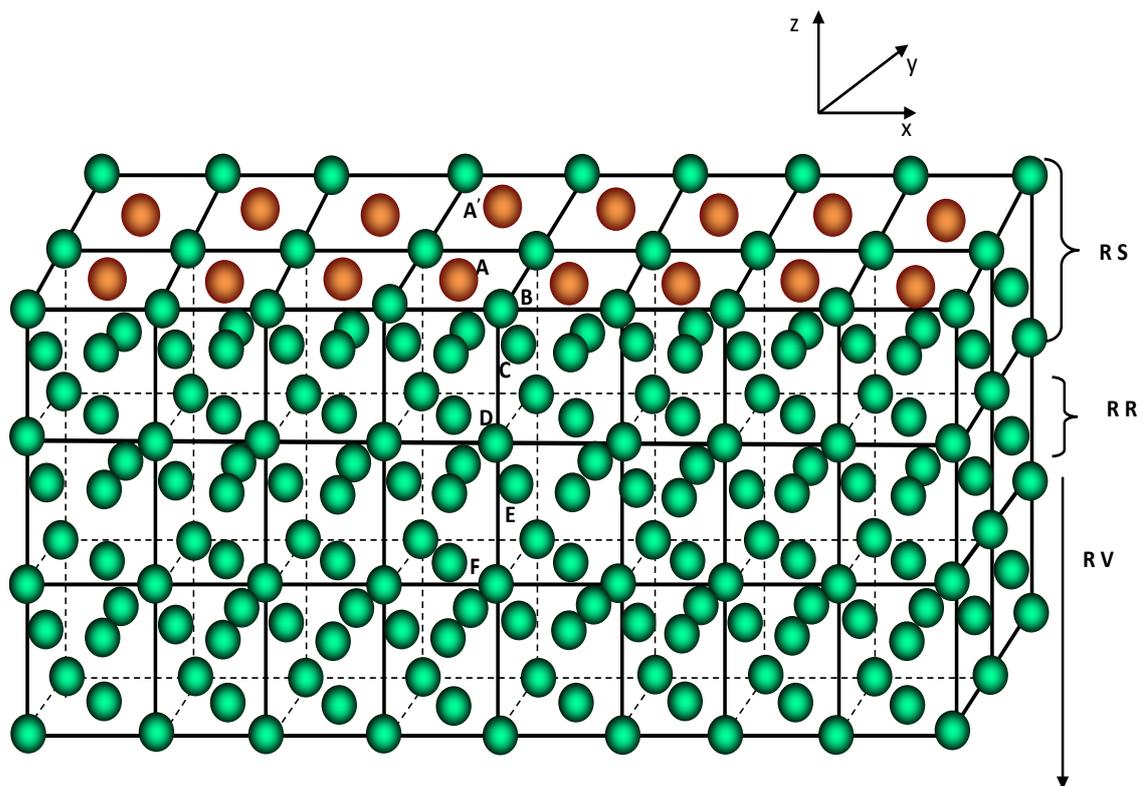
Nous constatons sur la figure (4.4), que la plage où la vitesse  $v_g \neq 0$  se rapporte bien à celle du mode propageant dans les deux cas.

### IV.2.3 Dynamique de la surface

Afin d'appliquer le formalisme de la méthode de raccordement plusieurs régions doivent être définies, à savoir, une région perturbée que constitue les trois plans atomiques de la surface, une région de raccordement constituée par le quatrième plan atomique, et enfin une région de volume définie à partir du cinquième plan atomique.

#### IV.2.3.1 Système de surface alliage ordonné $\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}/\text{Ni}$ (100)

Pour ce système, on fera deux études, dans la première, on se limitera aux interactions entre premiers proches voisins, par contre dans la deuxième on va prendre en considération les seconds voisins pour les atomes de Fe situés au niveau de la surface.



**Figure 4.5 :** Surface alliage ordonnée, le schéma montre les atomes (A), (B), (C), (D) et (E) pour lesquels les équations de mouvements sont écrites.

### 1) Matrice dynamique

La matrice dynamique du système trouve son origine dans l'écriture des équations du mouvement de précessions des vecteurs de spins situés sur les sites : **A**, **B**, **C**, **D** et **E**, tel que : **A** et **B** appartiennent à la surface alliage,

- L'atome **A (Fer)** a 12 proches voisins : 8 premier proches voisins à une distance  $a/\sqrt{2}$  et 4 seconds voisins à une distance  $a$ . exemple **A'** et le second voisin de A. interaction d'échange entre **A** et **A'**  $J_{AA'} = 6.813 meV$  [31], vu que cette valeur est importante on a pris en considération cette constante dans l'écriture de l'équation de mouvement du site **A**.
- L'atome **B (Nickel)** : 8 premiers proches voisins à une distance  $a/\sqrt{2}$ .
- l'atome **C (Nickel)** appartient au plan adjacent (premier plan du Nickel) : 12 premiers proches voisins à une distance  $a/\sqrt{2}$ .
- l'atome **D** appartient au deuxième plan du Nickel : 12 premiers proches voisins à une distance  $a/\sqrt{2}$ .
- l'atome **E** appartient au troisième plan du Nickel (raccordement) : 12 premiers proches voisins à une distance  $a/\sqrt{2}$ .
- L'atome **F** appartient au quatrième plan du Nickel (région de volume) : 12 premiers proches voisins à une distance  $a/\sqrt{2}$ .

La matrice correspondante à l'écriture des équations du mouvement de précession des vecteurs de spin, est une matrice rectangulaire  $M_D$ . Telle que  $\dim[M_D] = (5 \times 6)$ .

Les différentes constantes d'échanges ont été calculées par la méthode DFT [31]. Les valeurs des différents paramètres du système sont :

$J_{Fe-Ni} = 8.73 meV$ , interaction d'échange entre les spins de Ni et Fe appartenant à la région de la surface.

$J_{Ni-Ni} = 1.74 meV$ , interaction d'échange entre les spins de Ni appartenant à la région de la surface.

$J_{Fe-Fe} = 6.813 meV$ , interaction d'échange entre les spins de Fe appartenant à la région de la surface.

$J_V = 7.21 meV$ , interaction d'échange entre les spins de Ni appartenant à la région de volume (parfaite).

$$S_{Ni} = 1$$

$S(Fe) = 2$ , pour un atome isolé par contre,  $S(Fe) = 1$ , pour un atome dans un solide.

## 2) Matrice de raccordement

Le rôle de cette matrice est d'établir les relations qui permettent de raccorder les déplacements précessionnelles des spins appartenant à la zone de la surface (RS) et ceux des modes du guide d'onde parfait (RV).

Pour construire la matrice de raccordement, nous devons définir un espace avec une base  $\{R\}$ , qui servira à étudier le mouvement de précession des spins appartenant à la région de raccordement.

Pour un site appartenant à la région de raccordement, du système de surface alliage Fe<sub>50</sub>Ni<sub>50</sub>/Ni(100), pour lequel on peut écrire leurs amplitudes de précession comme suit :

$$u_{\alpha}(n_x, n_y, n_z) = \sum_v^1 Z_v^{nz} A(\alpha, v) R_v \quad (4.8)$$

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

$\alpha$  : est l'une des trois directions cartésiennes (ox), (oy) ou (oz).

$A(\alpha, v)$  : Poids pondérés associés aux différents modes évanescents déterminés par les vecteurs propres issus de l'étude de la matrice de la région de volume (parfaite).

On note par  $|u\rangle$  le vecteur de précession des spins dans la zone de surface (RS), celui-ci peut se décomposer en deux parties :

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

$|irr\rangle$  est constituée par les déplacements des sites irréductibles (A), (B), (C) et (D) formants la zone de la surface (RS). La partie  $|rac\rangle$  est formée par les déplacements associés au site (E)

Avec :  $\dim|irr\rangle = (4 \times 1)$ .

$$\dim|rac\rangle = (2 \times 1)$$

Le raccordement des sites se met sous la forme matricielle suivante :

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 \\ 0 & R_1 \\ 0 & R_2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [M_R] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

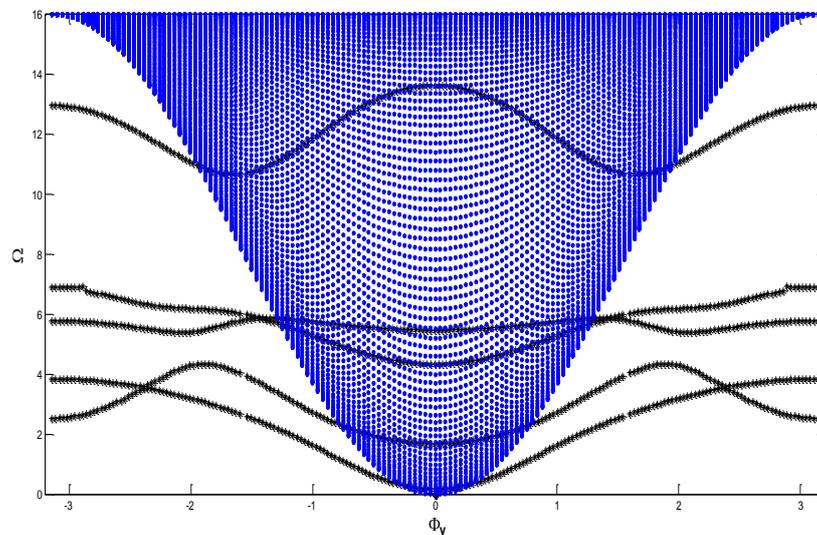
Où  $I_d$  est une matrice identité de dimension  $(4 \times 4)$ , les blocs  $R_1$  et  $R_2$  définissent des sous matrices carrées. Elles dépendent du nombre de modes propageant dans le système parfait, leurs dimensions  $(1 \times 1)$  (du fait qu'il y a un seul mode), ces dernières sont exprimées en fonction de  $Z$  et du poids pondéré, associé au mode propageant.

$M_R$  : est la matrice de raccordement de forme rectangulaire de dimension  $(6 \times 5)$ .

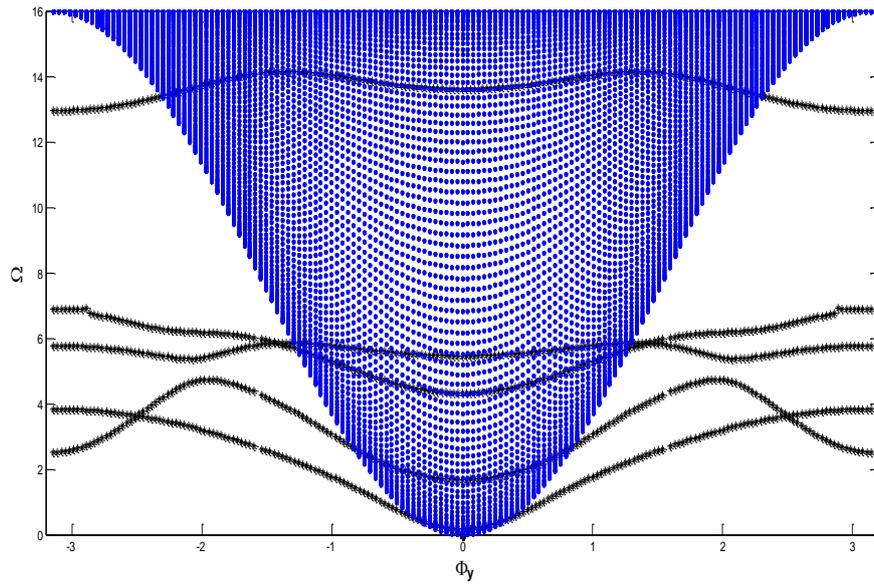
$$M_R = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & R_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & R_2 \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

### 3) Résultats obtenus

- *Etats de magnons localisés*

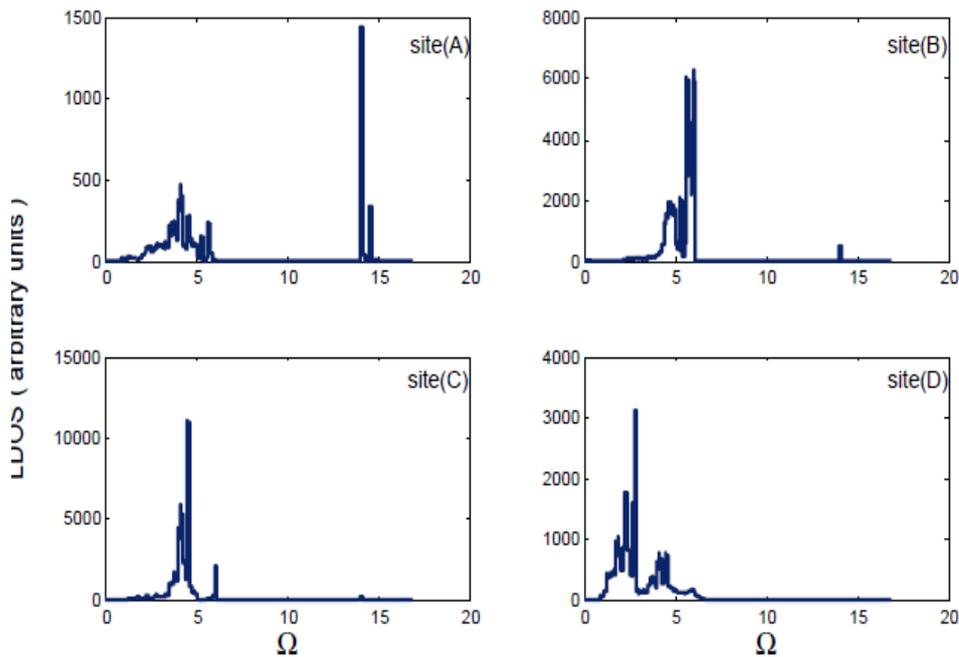


**Figure 4.6a.** : Etats de magnons de surface, calculés pour le système surface alliage  $\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}/\text{Ni}_{\text{fcc}}(100)$ . En tenant compte des interactions des premiers proches voisins à la surface alliage,  $\phi_x = 0$ .



**Figure 4.6b.** : Etats de magnons de surface, calculés pour le système surface alliage  $\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}/\text{Ni}_{\text{fcc}}(100)$ , en tenant compte des interactions entre premiers et seconds voisins à la surface alliage,  $\phi_x = 0$ .

▪ Densités d'états localisés

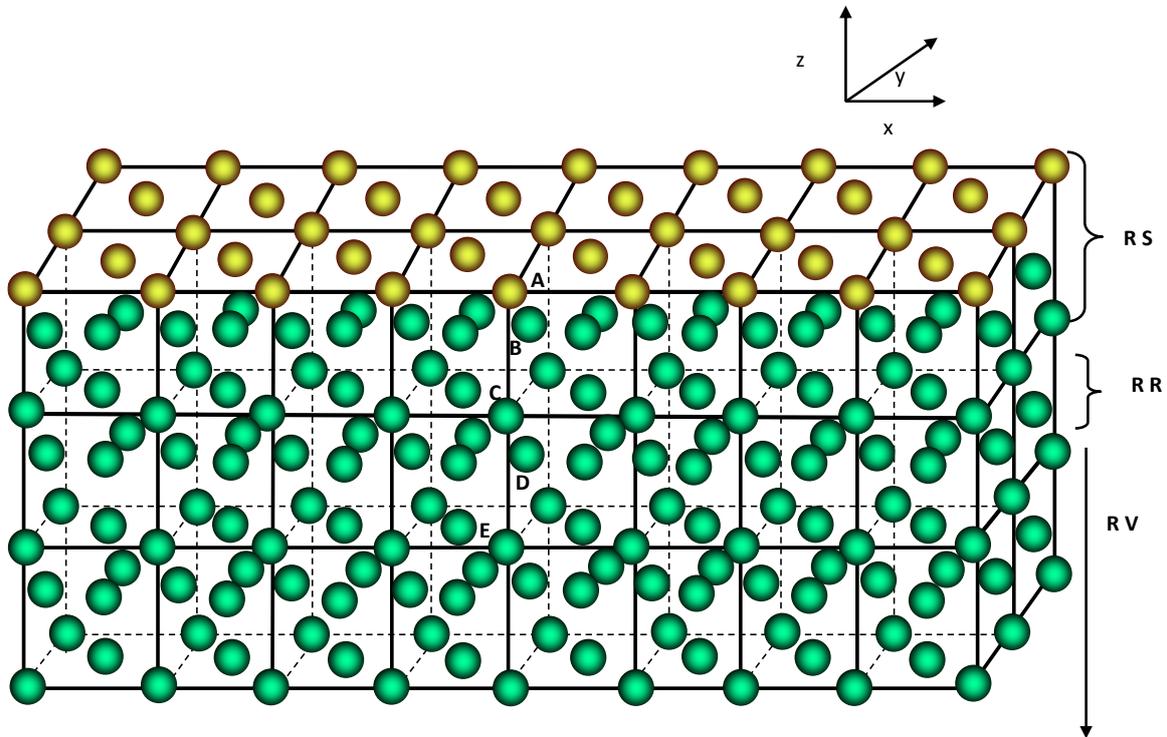


**Figure 4.7** : Densité d'états locales des magnons de la surface  $\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}$  en considérant les interactions entre premiers et seconds voisins à la surface alliage.

### IV.2.3.2 Système de surface alliage désordonnée Fe/Ni(100)

#### 1) Description du système

Le dépôt du Fer sur la surface de (100) du Nickel, mène à la formation d'un alliage  $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$  désordonné tel que  $x \geq 0.6$  [32].



**Figure 4.8:** Surface alliage désordonnée, le schéma montre les atomes (A), (B), (C) et (D) pour lesquels les équations de mouvements sont écrites.

Pour déterminer les propriétés précessionnelles de la surface alliage  $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}/\text{Ni}(100)$ , on utilise la méthode de raccordement et l'approximation VCA (virtuel crystal approximation) pour calculer les différentes constantes concernant la monocouche d'alliage (alliage virtuel).

La constante d'échange entre les spins appartenant à la surface alliage est équivalente à une constante d'échange effective notée  $J^*$  et pour le spin alliage est équivalent à un spin  $S^*$ .

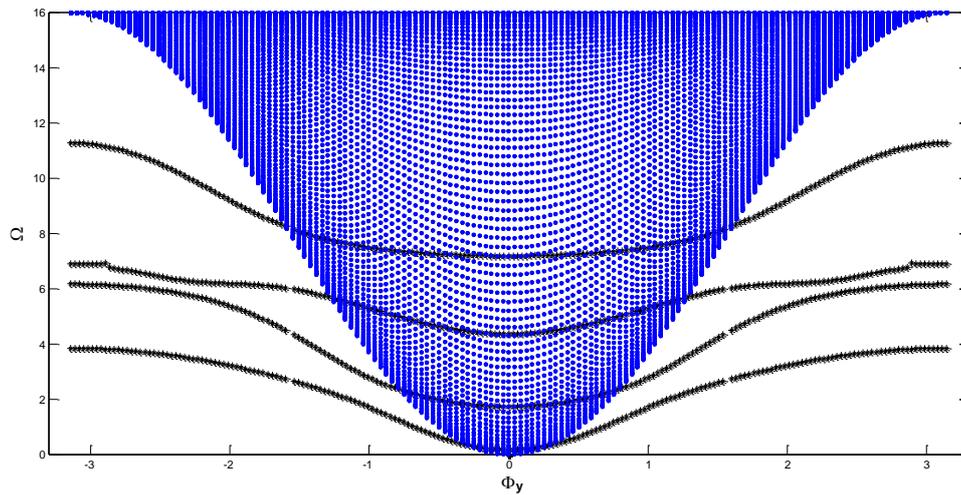
La constante d'échange entre la monocouche d'alliage et le Nickel (guide d'onde parfait) est

$$J_{\text{alliage-Ni}}.$$

A partir des équations du mouvement de précession des sites A, B, C et D indiqués sur la figure (4.8) ci-dessus, on obtient une matrice rectangulaire  $M_D$  appelée matrice dynamique du système perturbé de dimension  $(4 \times 5)$ .

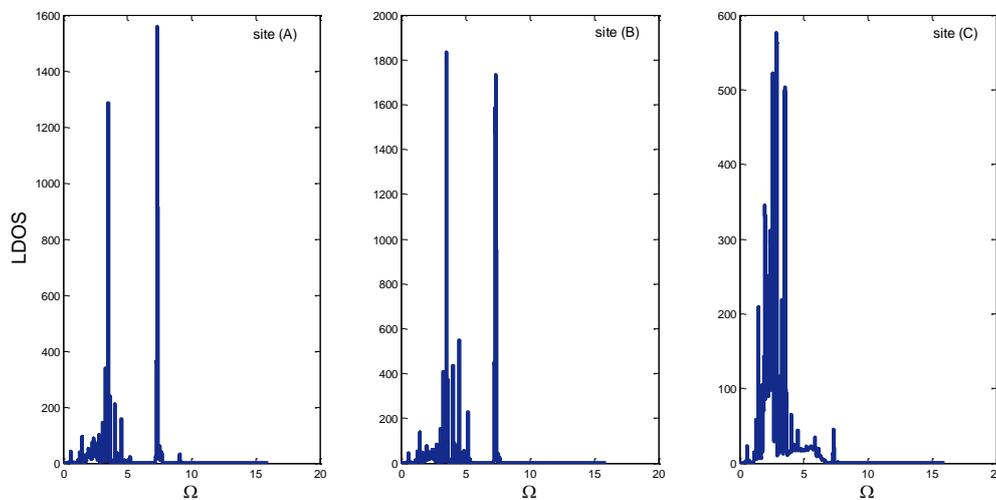
## 2) Résultats obtenus

### ▪ Etats localisés



**Figure 4.9** : Etats de magnons de surface, calculés pour le système surface alliage virtuel,  $\phi_x = 0$ .

### ▪ Densités d'états localisés



**Figure 4.10** : LDOS, calculées pour le système surface alliage virtuel.

### IV.3 Discussion des résultats

- Etats localisés

Les courbes de dispersion des magnons de surfaces dans les deux systèmes de surfaces alliage :  $\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}/\text{Ni}$  (100) et  $\text{Ni}_{(1-x)}\text{Fe}_x/\text{Ni}$ (100), sont représentées sur les figures (4.6) et (4.9), respectivement. La bande passante des magnons de volume (en bleu), les états de magnons localisés sont notés par des trait noir pointillés.

Nos résultats montrent quatre branches de magnons de surfaces pour le système  $\text{Ni}_{(1-x)}\text{Fe}_x/\text{Ni}$ (100) et cinq branches pour le système  $\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}/\text{Ni}$  (100).

On note l'apparition d'une nouvelle branche de magnons localisées au voisinage de la surface alliage ordonnée, en comparaison avec le système surface alliage désordonnée. Ce résultat est justifié, du fait que la surface alliage  $\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}$  est constitué de deux types d'atomes le fer et le nickel, tandis que la surface alliage virtuel (désordonnée) est constitué d'un pseudo-atome.

Par ailleurs, en comparant les courbes de dispersion des modes de surface, calculés pour le système de surface alliage ordonnée  $\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}/\text{Ni}$  (100), nous pouvons noter dans les deux cas, l'existence de deux branches de magnons de surface de faibles énergies. Les résultats montrent également deux autres branches de magnons situées dans les intervalles de fréquences  $\Omega \in [4.74 - 5.82]$  et  $[5.32 - 6.90]$ . De plus, on observe un cinquième mode plus énergétique. Le seul changement se produit au niveau de ce mode, tel que dans le premier cas (sans second voisins) ce mode existe dans un intervalle de fréquence  $\Omega \in [10.29 - 12.96]$ , par contre, dans le deuxième cas où on a pris en considération les seconds voisins du Fe qui appartiennent à la surface alliage, le mode existe dans une plage de fréquence plus énergétique  $\Omega \in [12.93 - 14.18]$  Nous pouvons noter que les modes localisés se décalent légèrement vers les hautes fréquences dans le deuxième cas où on a pris en considérations les seconds voisins pour les atomes Fe de la surface.

- Densités d'états localisés

Les densités d'états des magnons locales (LDOS) sont calculées numériquement pour les sites atomiques irréductibles notés (A), (B), (C) et (D) pour la surface alliage ordonnée et par (A), (B) et (C) pour la surface alliage désordonnée, en utilisant le formalisme des fonctions de Green. Les LDOS sont exprimées en unités arbitraires en fonction de la fréquence normalisée  $\Omega$  dans

la première zone de Brillouin. Les résultats des différents sites sont représentés sur les figures (4.7) et (4.10).

Les spectres se rapportant au premier système (surface alliage ordonnée) représentés sur la figure (4.5), montrent des pics et des oscillations qui s'étalent sur une plage de fréquence  $\Omega \in [0 - 6]$ . La différence dans les caractéristiques des allures est liée au comportement du site (A), qui présente un pic spécifique à haute fréquence aux environs de  $\Omega = 14.01$ .

Par ailleurs, les spectres LDOS de la surface alliage désordonnée (figure 4.10), présentent un ensemble de pics de différentes amplitudes, tel que pour le site (A) ces pics s'étalent sur un domaine de fréquence  $0 \leq \Omega \leq 9$ . En revanche, pour les deux autres sites (B) et (C) s'étalent sur une plage de fréquence  $0 \leq \Omega \leq 7$ .

Sur la figure (4.10), on constate, pour les trois sites (A), (B) et (C), la présence de pics de hauteurs très importantes, leurs répartitions sur les spectres des fréquences sont :  $\Omega = 7.3$ ,  $\Omega = 3.5$  et  $\Omega = 2.8$ , respectivement.

### Conclusion

En conclusion, nos résultats numériques ont montré l'apparition de nouvelles modes de magnons de surfaces pour les deux surfaces alliages étudiées, qui sont dues essentiellement aux mouvements de précession des sites Fe et Ni appartenant à la surface alliage.

Cependant, le calcul des (LDOS) a montré la présence d'oscillations et des pics qui sont dus aux interactions entre les états de volume et ceux induits par la surface. A noter que, le nombre de branches apparaissant, ainsi que la densité locale des magnons dépendent fortement de la nature et de l'environnement des atomes de la surface alliage.

## Références

- [1] W. S. Seo, J. H. Lee, X. Sun, Y. Suzuki, D. Mann, Z. Liu, M. Terashima, P. C. Yang, M. V. McConnell, D. G. Nishimura and H. Dai, *Nature materials* 5, 971 (2006).
- [2] E. Flahaut, A. Govindaraj, A. Peigney, C. Laurent, A. Rousset and C. N. R. Rao, *Chem. Phys. Lett.*, 300, 236 (1999).
- [3] O. Margeat, D. Ciuculescu, P. Lecante, M. Respaud, C. Amiens and B. Chaudret, 3, 451 (2007).
- [4] G. S. Chaubey, C. Barcena, N. Poudyal, C. Rong, J. Gao, S. Sun and J. P. Liu, *J. Amer. Chem. Soc.* 129, 7214 (2007).
- [5] V. Ashokan, M. Abou Ghantous and A. Khater, *J. Mag. Mag. Mat.* 396, 16 (2015).
- [6] M. Abou Ghantous, A. Khater, D. Ghader and V. Ashokan, *J. Appl. Phys.* 113, 094303 (2013).
- [7] V. Ashokan, M. Abou Ghantous, D. Ghader and A. Khater, *Thin Solid Films* 616, 6 (2016).
- [8] V. Ashokan, M. Abou Ghantous, D. Ghader and A. Khater, *J. Mag. Mag. Mat.* 363, 66 (2014).
- [9] E. A. Moujaes, A. Khater, M. Abou Ghantous and V. Ashokan, *Materialia* 4, 373 (2018).
- [10] T.G. Dargam, R. B. Capaz and B. Koiller, *Braz. J. Phys.* 27/A, 299 (1997).
- [11] L. Bellaiche and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* 61, 7877 (2000).
- [12] A. Khater, B. Bourahla, M. Abou Ghantous, R. Tigrine, R. Chadli, *J. Eur. Phys. B* 82, 53 (2011).
- [13] B. Bourahla, A. Khater, R. Tigrine and M. Abou Ghantous, *J. Phys. : Cond. Matter* 19, 266208 (2007)
- [14] R. Chadli, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2012).
- [15] A. Khater, L. Saim, R. Tigrine and D. Ghader, *Surf. Sci.* 672–673, 47 (2018).
- [16] C. T. Campbell, *Annu. Rev. Chem.* 41, 775 (1990).
- [17] D. P. Woodruff editor, *The Chemical Physics of Solid Surfaces Vol. 10, Surface Alloys and Alloy Surface*, Elsevier (2002).
- [18] A. de Siervo, E. A. Soares, R. Landers, T. A. Fazan, J. Morais and G. G. Kleiman, *Surf. Sci.* 504, 215 (2002).
- [19] A. Grob, *J. Phys. : Condens. Matter.* 21, 084205 (2009).
- [20] D. P. Woodruff, *J. Robinson, App. Surf. Sci.* 219, 1 (2003).
- [21] J. N. Israelachvili, *Intermolecular and surfaces force*; Academic Press (1995).

- [22] P. G. De Gennes F. Brochard-Wyart, D. Quéré, Goutte, bulles, perles et ondes ; Belin : Paris, (2002).
- [23] B. C. Duke: the first Thirty years, Surf. Sci. 299/ 300 (1994).
- [24] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber and E. Weibel, Phys. Rev. Lett. 49, 57 (1982).
- [25] Scanning Tunneling Microscopy II, ed. R. Wiesendanger et H.J. Guntherodt, Springer, Series in Surf. Sci. 28 (1992).
- [26] Knoll M, Z. tech. Phys. 16, 467 (1935).
- [27] Von Ardenne M, Z. Phys, 109, 553 (1938).
- [28] Von Ardenne M, Z. Tech. Phys. 19, 407 (1938).
- [29] Ruska E, Z. Phys. 83,492 (1933).
- [30] F. Chelli, B. Bourahla and A. Khater, Inter. J. Mod.Phys. B 34,2050080 (2020).
- [31] L. Saim, E. A. Moujaes, A. Khater and R. Tigrine, J. Magn. Magn. Mater. 511,166958 (2020).
- [32] E.A. Moujaes, A. Khater, M. Abou Ghantous and V. Ashokan, Materialia, 4, 373 (2018).

### Conclusion générale

Les interfaces et les surfaces métallique jouent un rôle important dans le développement de nouveaux nanomatériaux, en effet un intérêt considérable a été stimulé ces dernières années pour ces systèmes dans plusieurs domaines comme la microélectronique, le magnétisme, les catalyses hétérogènes, et dans la recherches fondamentale ou appliquée.

L'intérêt scientifique porté à la connaissance des propriétés des surfaces et interfaces nous a motivé à développer une approche théorique et de simulation numérique permettant de déterminer les différentes propriétés physiques des matériaux magnétiques en présence de surfaces et d'interfaces.

La thèse présentée est consacrée à l'étude de la dynamique des spins via des interfaces et surfaces alliages dans les systèmes de basse dimensions en présence de nanojonctions de type Fe/Ni(n)/Fe et des surfaces alliages de type  $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ . Notre étude théorique est basée essentiellement sur un Hamiltonien d'Heinsberg décrivant toutes les interactions entre les plus proches voisins et une méthode connue sous le nom « méthode de raccordement », adaptée pour la première fois par Feuchtwang en 1967, lors d'une étude de l'équilibre d'un réseau cristallin semi infini à 3D, puis développée par Khater et Szeftel en 1987. Elle s'est imposée par la suite comme un outil incontournable dans la résolution des problèmes liés à la propagation des ondes de spins dans les systèmes désordonnés.

Nos résultats numériques pour les systèmes nanojonctions Fe/Ni(n)/Fe, ont mis en évidence l'apparition de nouveaux états de magnons localisés au voisinage de la nanostructure intégrée inexistantes en volume. Notons que le nombre de modes qui apparaissent dépendent fortement de l'épaisseur de la nanostructure. Cette nanojonction conduit également à l'apparition de pics sur les courbes de transmission et de réflexion qui peuvent être décrits en termes d'oscillations de type Fabry-Pérot, qui sont dues aux interférences entre multiples ondes diffusées dans la zone perturbée (nanostructure), et d'autres de type Fano, ces dernières proviennent des interférences entre les modes propageants incidents et les modes localisés créés autour du défaut. Quant aux résultats des densités d'états locales (LDOS), ils ont montré plusieurs pics de résonance de différentes hauteurs et largeurs cela est due à la position de l'atome par rapport à la nanojonction.

La comparaison entre ces différentes nanojonctions montre que le rôle joué par les interfaces dépend entre autres de leurs compositions chimiques ainsi que de leurs organisations.

Les propriétés de transmission cohérente balistique de la nano jonction Fe/Ni (n)/Fe, peut avoir une utilité technologique, pour contrôler la transmission des fréquences bien spécifiques ou contrairement la suppression des signaux est cela dans la spintronique. L'étude de la dynamique des zones interfaciales engendrées par différents types de nanojonctions, ouvre des perspectives dans le domaine des nanotechnologies.

Quant aux systèmes des surfaces alliages, nos résultats, ont montré l'apparition de nouveaux modes de magnons de surfaces pour les deux surfaces alliages étudiées, qui sont due essentiellement aux mouvements de précession des sites Fe à Ni de la surface alliage.

Les surfaces alliages Fe-Ni, sont très importantes dans la magnonique d'un point de vue technologique, elles sont utilisées comme modulateur magnétique et systèmes de contrôle des nanojonctions.

Parmi nos perspectives dans ces domaines

- L'études d'autre nanojonction : ferromagnétique / antiferromagnétique/ferromagnétique  
Exemple : Fe/ Cr/ Fe
- L'étude des systèmes de surfaces alliages plus compliquées.
- L'étudier des multicouches magnétiques pour différentes orientations.

## Résumé

Dans cette thèse, nous étudions les propriétés précessionnelles des interfaces et surfaces alliages de types  $A_xB_{1-x}$  dans les systèmes ferromagnétiques de basses dimensions. Le but principal est d'expliquer le comportement des ondes de spins d'interfaces et de surfaces alliages. Le premier systèmes modèles sous étude est une nano jonction de type Fe/Ni(n)/Fe. Nous examinons l'influence de l'épaisseur de cette dernière. Quant au deuxième modèle, c'est une surface alliage Fe/Ni<sub>fcc</sub>(100), où on a considéré deux catégories de surfaces : ordonnée et désordonnée. Notre étude est basée sur l'application de la méthode de raccordement décrivant toutes les interactions entre les plus proches voisins et l'Hamiltonien d'Heisenberg. Les coefficients de transmission et de réflexion, les états localisés ainsi que les densités d'états locale de magnons (LDOS) ont été déterminés en fonction des grandeurs physiques de nos systèmes considérés. Nos résultats numériques, pour le système Fe/Ni(n)/Fe ont mis en évidence l'apparition de nouvelles branches de magnons d'interface et des pics dans les courbes des densités d'états de magnons (LDOS), notons que le nombre des branches et des pics dépend fortement de l'épaisseur de la nanostructure intégrée et de la nature des interfaces. Les courbes des coefficients de transmission et de réflexion montrent que la nanojonction Fe/Ni(n)/Fe forme un résonateur de Fabry-Pérot. Quant aux résultats des surfaces alliages montrent que le nombre de branches induites par la surface ainsi que les spectres des densités d'états locales dépend fortement de l'ordre structurel des surfaces alliages et de la concentration de l'adsorbat.

**Mots clés :** Dynamique des spins, Surfaces alliages, Méthode de raccordement, Magnons de surface

## Abstract

In this thesis, we study the precessional properties of the interfaces and surfaces of  $A_xB_{1-x}$  type alloys in low-dimensional ferromagnetic systems. The main is to explain the behavior of spin waves at interfaces and alloy surfaces. The first model systems under study is an Fe / Ni (n) / Fe nanojunction. We examine the influence of the thickness of the latter. As for the second model, it is an Fe / Ni<sub>fcc</sub> (100) alloy surface, where we considered two categories of surfaces: ordered and disordered. Our study is based on the matching method describing all the interactions between nearest neighbors and the Hamiltonian of Heisenberg. The transmission and reflection coefficients, the localized states as well as the local magnon densities of states (LDOS) were determined according to the physical quantities of our systems considered. Our numerical results, for the Fe/Ni(n)/Fe system highlighted the appearance of new branches of interface magnons and peaks in the curves of the magnon densities of states (LDOS), note that the number of branches and peaks strongly depends on the thickness of the integrated nanostructure and the nature of the interfaces. The curves of the transmission and reflection coefficients show that the Fe/Ni(n)/Fe nanojunction forms a Fabry-Perot resonator. As for the results of the alloy surfaces show that the number of branches induced by the surface as well as the spectra of the local state densities, strongly, depends on the structural order of the alloy surfaces and on the adsorbate concentration.

**Key word:** Spin dynamics, Alloys surfaces, Matching method, Surface magnons.