

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

THESE DE DOCTORAT

SPECIALITE : PHYSIQUE DES MATERIAUX

Présentée par :

Ouahiba NAFA

Sujet :

***Excitations collectives de spins dans
les couches minces ferromagnétiques***

Devant le jury d'examen composé de :

Mme Nassima Benbrahim	Professeur	U.M.M.Tizi Ouzou	Présidente
Mr Boualem Bourahla	M C/A	U.M.M.Tizi Ouzou	Rapporteur
Mme Fawzia Chafa Mekideche	Professeur	U.S.T.H.B. Alger	Examinatrice
Mr Yan Pennec	M C/HDR	U. Lille 1- France	Examineur
Mr Rachid Tigrine	Professeur	U.M.M.Tizi Ouzou	Invité

Soutenue le : **31/05 /2014**

“Mesure ce qui est mesurable
et
rend mesurable ce qui ne peut
être mesuré”

Galilée



Remerciements



Le travail présenté dans cette thèse a été accompli au sein de l'équipe 'Excitations magnétiques et vibrationnelles des systèmes de basse dimensionnalité' du laboratoire de Physique et Chimie Quantique. Je tiens à remercier le Pr Tigrine, responsable de l'équipe de m'avoir reçu et aidé à m'intégrer dans le groupe.

Je tiens à exprimer ma sincère gratitude au Docteur Boualem Bourahla que j'ai eu la chance d'avoir pour directeur de thèse. J'ai beaucoup apprécié la confiance qu'il m'a témoignée et l'indépendance qu'il m'a octroyée. Il a été ma référence de sagesse scientifique et il m'a fait comprendre qu'avec la persévérance rien n'est impossible.

Je remercie le Professeur des universités Antoine Khater pour son accueil à l'IMMM du Mans, mais également de tout le temps qu'il m'a consacré, lors des deux stages que j'ai eu la chance et le plaisir de passer dans son équipe, malgré ses grandes responsabilités. Par ses qualités humaines et ses compétences scientifiques a su rendre chaque journée aussi agréable qu'instructive. Sa patience, son écoute, sa disponibilité et ses nombreux conseils m'ont beaucoup fait progresser et consolider mes connaissances. Merci de m'avoir offert l'opportunité de réaliser un travail de recherche de qualité.

Je suis très reconnaissante aux membres de jury de m'avoir fait l'honneur d'évaluer mon travail de thèse. Je remercie tout particulièrement le Professeur Nassima Benbrahim, de l'université M. Mammeri, d'avoir accepté de présider le jury. Mes remerciements vont aussi aux examinateurs, Professeur Fawzia Chafa de l'USTHB, et Dr Yann Pennec de l'université de Lille 1, ainsi que le Professeur Rachid Tigrine de l'UMMTO d'avoir accepté mon invitation et Dr Nader Yaacoub de l'université du Maine de ces remarques précieuses, contribuées à l'amélioration de la qualité de cette thèse.

Un merci spécifique à mes parents, d'avoir fait de moi ce que je suis aujourd'hui, pour les valeurs qu'ils ont si bien su m'inculquer. Un grand remerciement à mon mari et mes filles pour avoir supporté mon mauvais caractère, quand mes ondes de spins ne faisaient pas toujours ce que je leurs demande. Merci pour votre soutien inconditionnel.

Je voudrais exprimer ma reconnaissance envers mes amis et les doctorants qui m'ont apporté leurs soutiens tout au long de ma formation. Un immense merci à mes deux meilleures amies, Leila, une amie très spéciale, qui m'a énormément fait rire et Malika qui m'a beaucoup aidée dans les périodes de doute.

Un grand merci aux deux Algériens, Zohra et Aziz, installés en France, qui ont su rendre mon séjour au Mans très agréable. Merci également pour votre sympathie : Doreid, Dominik et Vinod de l'IMMM du Mans.

Pour finir, je tiens à adresser mes salutations et amitiés à tous ceux qui, par leurs conseils, par leur compétence ou tout simplement par leur chaleur humaine, ont contribué au bon déroulement de cette thèse.

TABLE DES MATIERES

Table de figures 3

Liste des tableaux 6

Introduction générale..... 7

Chapitre I : Introduction aux couches ultra-minces..... 12

1. Méthodes d’élaboration et de caractérisation des couches minces 12

1.1. Méthodes d’élaboration des couches minces 13

1.1.1. Approche Top-Dow..... 13

1.1.2. Approche Bottom-Up..... 13

1.3. Les techniques les plus usitées de fabrication des couches minces 13

1.2. Les différents modes de croissance 14

1.2.1. La croissance bidimensionnelle (de Frank et Van der Merwe)..... 14

1.2.2. La croissance tridimensionnelle (de Volmer-Weber) 14

1.2.3. La croissance de Stranski-Krastanov 15

1.3. Techniques de caractérisation des couches minces 15

1.3.1. Techniques d’évaluation de l’épaisseur 15

1.3.2. Caractérisation structurale et morphologique 16

1.3.3. Caractérisation des propriétés magnétiques 16

2. Propriétés magnétiques des couches minces 17

2.1. Les énergies magnétiques et température de curie des couches minces 18

2.1.1. Energie d’échange 18

2.1.2. L’énergie Zeeman (Effet Zeeman) 19

2.1.3. Température de curie des couches minces 19

2.2. L’anisotropie magnétique des couches minces..... 20

2.2.1. Anisotropie dipolaire ou anisotropie de forme..... 20

2.2.2. Anisotropie magnétocristalline de surface 21

2.2.3. Anisotropie magnétoélastique 22

2.3. Les différentes méthodes analytiques d’étude des ondes de spins dans les couches minces..... 24

2.3.1. La méthode de diagonalisation directe..... 24

2.3.2. La méthode des fonctions de Green 25

2.3.3. La méthode de raccordement 25

Références du chapitre I..... 27

Chapitre II : Ondes de spins dans les couches minces ferromagnétiques ordonnées 30

1. Approche théorique de traitement des ondes de spins 30

1.1. Approche semi-classique..... 31

1.2. Approche quantique 34

2. Dynamique des spins dans les couches minces ferromagnétiques parfaites..... 37

2.1. Cas des films ferromagnétiques ultra-minces à maillage cubique 39

2.1.1. Courbes de dispersion 40

2.1.2. Courbes des vitesses de groupe 41

2.2. Cas des films ferromagnétiques ultra-minces à maillage hexagonal 42

2.2.1. Courbes de dispersion 43

2.2.2. Courbes des vitesses de groupe	44
Conclusion.....	45
Références du chapitre II.....	47
Chapitre III : Méthode théorique pour le calcul des spectres magnétiques des films ferromagnétiques ultraminces en présence d'inhomogénéités	48
1. Les différents défauts de structure dans un film mince.....	48
1.1. Défauts ponctuels	49
1.2. Défauts linéaires	50
1.3. Défauts surfaciques	51
1.4. Défauts volumiques.....	52
2. Méthode et formalisme utilisés	53
2.1. Principe de la méthode utilisée.....	53
2.2. Formalisme théorique.....	54
3. Définition de la matrice dynamique du système perturbé.....	55
3.1. Définition de la matrice défaut.....	55
3.2. Définition de la matrice de raccordement	55
4. Définition des grandeurs physiques	57
4.1. Calcul des états localisés du système	57
4.2. Détermination des coefficients de transmission et de réflexion.....	57
4.3. Conductance magnonique	58
4.4. Calcul des densités d'états magnoniques	59
Références du chapitre III	60
Chapitre VI : Excitations de spins dans les films magnétiques à cinq plans en présence des inhomogénéités.....	61
Partie I : Excitations des spins dans un film mince inhomogène à maillage cubique.....	62
1.1. Résultats obtenus.....	62
1.1.1. Cas d'un nanowell dans un film à maillage cubique.....	62
1.1.2. Cas d'un nanocontact dans un film à maillage cubique	67
1.1.3. Cas d'un dépôt atomique sur un film à maillage cubique	71
1.2. Discussion et analyse des résultats obtenus	74
Partie II : Excitations des spins dans un film inhomogène à maillage hexagonal	80
2.1. Résultats obtenus.....	80
2.1.1. Cas d'un nanowell.....	80
2.1.2. Cas d'un nanocontact	84
2.1.3. Cas d'un dépôt atomique.....	88
2.2. Discussion et analyse des résultats obtenus	92
Partie III : Juxtaposition de deux films minces à maillage différent	96
3.1. Résultats obtenus.....	96
3.1.1. Interface A/B	96
3.1.2. Interface B/A.....	98
3.2. Résultats et discussions	99
Conclusion.....	100
Références du chapitre VI.....	101
Conclusion générale	102

Table des figures

Fig.2.1	Diagramme schématique d'une onde de spins dans un matériau ferromagnétique.....	31
Fig.2.2a	Décomposition d'un spin autour de Oz	33
Fig.2.2b	Représentation des composantes d'un spin	33
Fig.2.3	Représentation schématique d'un film ultramince fini à maillage cubique constitué de cinq plans atomiques	39
Fig.2.4	Courbes de dispersion d'un film ultramince à maillage cubique constitué de cinq plans atomiques, dans le cas d'une anisotropie nulle : - (a) $\Omega = f(\varphi_x)$, - (b) $\Omega = f(Z)$	40
Fig.2.5	Courbes de dispersion d'un film ultramince à maillage cubique constitué de cinq plans atomiques pour une anisotropie non nulle : - (a) $\Omega = f(\varphi_x)$, - (b) $\Omega = f(Z)$	40
Fig.2.6	Courbes des vitesses de groupe d'un film mince à maillage cubique constitué de cinq plans atomiques pour deux cas d'anisotropie : - (a) anisotropie nulle, - (b) anisotropie non nulle.....	41
Fig.2.7	Représentation schématique d'un film ultramince fini à maillage hexagonal constitué de cinq plans atomiques	43
Fig.2.8	Courbes de dispersion d'un film ultramince à maillage hexagonal constitué de cinq plans atomiques, dans le cas d'une anisotropie nulle :- (a) $\Omega = f(\varphi_x)$, - (b) $\Omega = f(Z)$	43
Fig.2.9	Courbes de dispersion d'un film ultramines à maillage hexagonal constitué de cinq plans atomiques pour une anisotropie $D_l = 10\%$ de $J_{ll'}$: - (a) $\Omega = f(\varphi_x)$, - (b) $\Omega = f(Z)$..	43
Fig.2.10	Courbes des vitesses de groupe d'un film mince à maillage hexagonal constitué de cinq plans atomique pour deux cas d'anisotropie : - (a) anisotropie nulle, - (b) anisotropie non nulle.....	44
Fig.3.1	Représentation schématique des défauts ponctuels	49
Fig.3.2	Représentation schématique d'une dislocation (a) coin (b) vis	50
Fig.3.3	Représentation schématique des défauts surfaciques	51
Fig.3.4	Représentation schématique d'un défaut magnétique couplant deux films minces ferromagnétiques selon le concept de la méthode de raccordement	54
Fig.3.5	Représentation schématique du principe de Landauer	55
Fig.4.1.1a	Représentation schématique d'un film mince à maillage cubique constitué de cinq plans atomiques ferromagnétiques contenant un nanowell atomique asymétrique. - (i) Représentation à 3D. - (ii) Projection à 2D	63

Fig.4.1.1b Coefficients de transmission et de réflexion magnoniques via un nanowell dans un film mince à maillage cubique	64
Fig.4.1.1c Conductances magnoniques d'un nanowell asymétrique présent dans un film mince à maillage cubique	64
Fig.4.1.1d Etats localisés d'un nanowell asymétrique présent dans un film mince à maillage cubique	65
Fig.4.1.1e DOS de magnons d'un nanowell asymétrique présent dans un film mince à maillage cubique	65
Fig.4.1.1.2a Représentation schématique d'un film mince à maillage cubique constitué de cinq plans atomiques ferromagnétiques contenant un nanocontact - (<i>i</i>) Représentation à 3D. - (<i>ii</i>) Représentation à 2D	66
Fig.4.1.2b Coefficients de transmission et de réflexion via un nanocontact dans un film mince à maillage cubique	67
Fig.4.1.2c Conductances magnoniques d'un nanocontact dans un film mince à maillage cubique	67
Fig.4.1.2d Etats localisés d'un nanocontact dans un film mince à maillage cubique.....	68
Fig.4.1.2e DOS de magnons d'un nanocontact dans un film mince à maillage cubique.....	68
Fig.4.1.3a Représentation schématique d'un dépôt atomique sur un film mince à maillage cubique constitué de cinq plans atomiques - (<i>i</i>) Représentation à 3D - (<i>ii</i>) Représentation à 2D	69
Fig.4.1.3b Coefficients de transmission et de réflexion via un dépôt atomique sur un film ferromagnétique mince à maillage cubique.....	70
Fig.4.1.3c Conductances magnoniques via un dépôt atomique dans un film mince à maillage cubique	70
Fig.4.1.3d Etats localisés d'un dépôt atomique sur un film mince à maillage cubique.....	71
Fig.4.1.3e DOS de magnons d'un dépôt atomique sur un film mince à maillage cubique.....	71
Fig.4.2.1a Représentation schématique d'un nanowell magnétique asymétrique dans un film mince à maillage hexagonal constitué de cinq plans atomiques - (<i>i</i>) Représentation à 3D - (<i>ii</i>) Représentation à 2D	77
Fig.4.2.1b Coefficients de transmission et de réflexion via un nanowell magnétique asymétrique dans un film mince à maillage hexagonal.....	78
Fig.4.2.1c Conductances magnoniques d'un nanowell magnétique asymétrique présent dans un film mince à maillage hexagonal	78

Fig.4.2.1d Etats localisés d'un film mince à maillage hexagonal contenant un nanowell asymétrique.....	79
Fig.4.2.1e DOS de magnons d'un nanowell asymétrique dans un film mince à maillage hexagonal.....	79
Fig.4.2.2a Représentation schématique d'un nanocontact dans un film mince à maillage hexagonal constitué de cinq plans atomiques - (i) Représentation à 3D - (ii) Représentation à 2D	80
Fig.4.2.2b Transmission et réflexion de magnons via un nanocontact dans un film mince à maillage hexagonal	80
Fig.4.2.2c Conductances magnoniques d'un nanocontact atomique présent dans un film mince à maillage hexagonal	81
Fig.4.2.2d Etats localisés d'un film mince à maillage hexagonal contenant un nanocontact.....	81
Fig.4.2.2e DOS de magnons d'un film mince à maillage hexagonal avec nanocontact.....	82
Fig.4.2.3a Représentation schématique d'un dépôt atomique sur un film mince à maillage hexagonal constitué de cinq plans atomiques - (i) Représentation à 3D - (ii) Représentation à 2D	82
Fig.4.2.3b Coefficients de transmission et de réflexion en présence d'un dépôt atomique dans un film mince à maillage hexagonal	83
Fig.4.2.3c Conductances magnoniques d'un film mince à maillage hexagonal en présence d'un dépôt atomique.....	83
Fig.4.2.3d Etats localisés de magnons d'un film mince à maillage hexagonal contenant un dépôt atomique	84
Fig.4.2.3e DOS de magnons d'un film mince à maillage hexagonal avec un dépôt atomique.....	84
Fig.4.3 Représentation schématique d'un film mince engendrant une nanojonction reliant un film mince à maillage cubique A et un autre à maillage hexagonal B.....	89
Fig.4.3.1a Coefficients de transmission et de réflexion du film mince A/B dans trois possibilités de l'environnement magnétique	90
Fig.4.3.1b Conductance magnonique du film mince A/B	90
Fig.4.3.2a Coefficients de transmission et de réflexion via l'interface B/A pour trois possibilités de l'environnement magnétique	91
Fig.4.3.2b Conductance magnonique du film mince B/A	91

Liste des tableaux

Tableau 2.1 Les plages de propagation des modes de précession d'un film ultramince à maillage cubique dans deux cas d'anisotropie	42
Tableau 2.2 Les plages de propagation des modes de précession d'un film ultramince à maillage hexagonal dans deux cas d'anisotropie	45
Tableau 4.1.1 Nombre de modes propageants dans l'intervalle de propagation de magnons des films minces à maillage cubique	74
Tableau 4.1.2 Nombre de modes localisés pour les trois types de défauts dans un film mince à maillage cubique en fonction de l'environnement magnétique de la zone de défaut	75
Tableau 4.2.1 Nombre de modes propageants dans l'intervalle de propagation de magnons des films minces à maillage hexagonal	86
Tableau 4.2.2 Nombre de modes localisés pour les trois types de défauts dans un film mince à maillage hexagonal en fonction de l'environnement magnétique de la zone de défaut	87

Introduction générale

Depuis la découverte de l'aimant, les sciences des matériaux magnétiques ne cessent d'évoluer et de se diversifier. Au début, ces matériaux sont étudiés dans leur état massif ; mais avec le développement technologique, on s'intéresse beaucoup plus à l'infiniment petit. Ainsi, plusieurs nouveaux matériaux ont-ils été mis au point [1-7]. Parmi ces derniers, citons les matériaux magnétiques artificiels sous forme de films ultraminces, dont l'étude a pris un essor considérable, vu qu'ils présentent des comportements différents et des fonctionnalités nouvelles par rapport aux matériaux massifs correspondants.

Lorsque l'épaisseur des matériaux magnétiques est réduite à quelques plans atomiques, les propriétés des structures sont totalement modifiées et l'influence des phénomènes de surface sur les propriétés magnétiques du film sont nettement privilégiées et s'écartent notablement des caractéristiques connues [8-10]. Par exemple, on a enregistré la modification du moment magnétique, l'apparition des domaines et des parois spécifiques et l'effet magnéto-transport, le changement de l'axe de facile aimantation et surtout l'apparition d'une anisotropie de surface extrêmement grande, pouvant être très supérieure à celle des massifs et pouvant aussi favoriser l'orientation perpendiculaire des moments magnétiques à la surface.

De tels phénomènes ont été prédits théoriquement par plusieurs auteurs [11-16] et constituent, actuellement, une bonne matière première pour la recherche scientifique, aussi bien sur le plan théorique que pratique.

Depuis quelques années, la mise au point de techniques modernes de préparation des films minces a permis de façonner et de concrétiser des structures d'une précision extraordinaire, allant de quelques couches magnétiques jusqu'aux nanofils. Mais la maîtrise de la croissance de ces derniers paraît, à moyen terme, indispensable pour pouvoir obtenir des dispositifs plus parfaitement caractérisés et permet de mieux comprendre plusieurs mécanismes physiques comme le transport électronique dépendant du spin [12-13].

Les films minces peuvent être obtenus par deux approches différentes, l'une dite descendante ou « Top-down », elle consiste à réduire la taille du matériau jusqu'à quelques plans atomiques ; l'autre approche est ascendante ou « Bottom-up », elle permet de réaliser des films minces en faisant un dépôt atome par atome. En parallèle, des techniques spectroscopiques de caractérisation extrêmement sensibles se sont développées [14]. Elles ont permis l'observation voir la manipulation de ces objets magnétiques à l'échelle nanométrique ; sans oublier, le développement rapide des moyens informatiques accédant à

l'utilisation de la simulation numérique qui permet de prévoir certaines propriétés physiques des matériaux présentant un certain nombre d'inhomogénéités, de défauts de structure ou de désordre atomique et/ou structural [15].

Initialement, les applications des matériaux ferromagnétiques se répartissent pour l'essentiel en trois grands domaines : l'énergie, l'information et les télécommunications. On distingue :

- les matériaux ferromagnétiques doux, à cycle d'hystérésis étroit et à faible aimantation rémanente, utilisés dans les transformateurs, les moteurs ou les alternateurs afin de limiter les pertes d'énergie.

- les matériaux ferromagnétiques durs, à large cycle d'hystérésis et à forte aimantation rémanente, utilisés pour fabriquer des aimants permanents.

Aujourd'hui, l'étude du magnétisme des films et des couches minces a beaucoup contribué à la compréhension de la physique fondamentale du magnétisme [16]. Ce qui a ouvert la voie à leur intégration technologique dans le domaine de l'électronique, de la médecine, et les télécommunications, comme disques durs, capteurs de champ, traceurs,...

Une autre thématique fortement développée autour de ces structures magnétiques confinées (à épaisseur finie) est l'étude du mouvement de précession de leurs spins.

Historiquement, les spins sont utilisés comme moyen de codage, de transport et de traitement de l'information. Au début des années 90, Vaterlaus et *al.* ont mis en œuvre des techniques de mesure « pompe sonde » pour étudier la dynamique des spins dans des films de gadolinium [17-18] ; où ils ont aperçu qu'une petite impulsion optique porte le système d'étude hors d'équilibre.

En 2007, un nouveau champ de recherche fondé sur l'électronique de spin (spintronique) a vu le jour. Il est basé totalement sur l'exploitation des propriétés quantiques du spin de l'électron, dont la naissance est due à la magnétorésistance géante (GMR), découverte suite aux travaux réalisés par Albert Fert et Peter Grünberg [19-20]. L'électronique de spin est utilisée aussi pour assurer l'interface entre l'information magnétique et son traitement. D'autres applications sont également envisagées, telles que les transistors à spins et les éléments d'électronique logique. Cette technologie présente plusieurs avantages, citons la non-volatilité du signal, la rapidité du traitement de l'information et la faible consommation de l'énergie électrique [21-22].

De plus, l'étude de l'onde de spin dans les films ultraminces présentant des défauts de structure ouvre des perspectives innovantes dans le domaine magnétique, car même s'ils sont

bien préparés, ils présentent inévitablement des défauts ponctuels et structuraux, à l'échelle nanoscopique [23]. Ces défauts se présentent sous plusieurs formes [24-25] : distribution de marches de différentes hauteurs et de terrasses, puits atomiques, adatoms, adlacunes, marches dont les bords présentent des irrégularités appelées crans, etc.

Notons aussi que ces défauts constituent une brisure de symétrie, pouvant jouer un rôle prépondérant sur les propriétés magnétiques des films ultraminces, notamment sur la propagation d'ondes de spins et la diffusion magnonique.

Dans ce contexte, notre contribution consiste à mettre en évidence, à basse température l'impact des défauts de structure sur les propriétés magnétiques des films ferromagnétiques ultraminces qu'ils soient à structure cubique ou hexagonale, ayant une épaisseur finie, et en tenant compte de l'anisotropie de surface.

Pour cela, nous proposons une étude théorique et des simulations numériques comparables à l'approche de Landauer-Büttiker pour le transport électronique [26]. L'étude sera menée à l'aide de la méthode dite de raccordement [27-30] qui permettra de prendre en considération le problème de la brisure de symétrie causé par les inhomogénéités et les défauts. Pour la détermination des propriétés magnétiques, nous avons fait appel au model d'Heisenberg [31].

La thèse est structurée en quatre chapitres :

Le premier chapitre est une vue générale sur les structures à épaisseur finie, à travers lequel nous avons exposé brièvement quelques notions sur les films minces ; les techniques de leur fabrication jusqu'aux modes de leur croissance les plus connus. Une attention particulière est accordée aux propriétés magnétiques et nous avons rappelé aussi les méthodes les plus courantes permettant d'étudier ces films en présence de défauts magnétiques.

Le deuxième chapitre est consacré à la théorie d'ondes de spins dans les films ultraminces avec une morphologie de surface parfaite. Dans la première partie, nous avons exposé la théorie d'ondes de spins dans les matériaux ferromagnétiques en utilisant deux approches : l'approche semi-classique et l'approche quantique. Quant à la deuxième partie du chapitre, nous l'avons consacrée à une application directe sur deux films ultraminces ferromagnétiques à maillage différent, l'un est cubique et l'autre est hexagonal. Ce qui a permis de tracer leurs courbes de dispersion et leurs vitesses de groupe pour deux possibilités de l'anisotropie de surface.

Dans le troisième chapitre, nous avons présenté la théorie appliquée dans cette thèse, à savoir la méthode de raccordement pour le traitement des ondes de spins dans des films minces en présence d'inhomogénéités magnétiques. Nous avons rappelé les étapes de sa mise en œuvre pour déterminer les spectres magnétiques (les états localisés de spins, les coefficients de transmission et de réflexion, la conductance magnonique ainsi que les densités d'états magnoniques), après avoir cité les différents défauts qu'on peut rencontrer dans un matériau quelconque.

Dans le dernier chapitre, nous avons présenté les résultats relatifs aux calculs des spectres magnétiques, obtenus de l'étude de la dynamique des spins et de la propagation d'ondes dans des films ultraminces composés de cinq couches atomiques parallèles, que nous avons mené en appliquant la méthode de raccordement. Ce chapitre est aussi subdivisé en trois parties. Dans la première, nous nous intéressons à la détermination des propriétés magnétiques d'un film mince à maillage cubique et présentant trois inhomogénéités (nanocontact, puits magnétique et dépôt atomique). Afin de connaître l'influence du maillage sur le mouvement de précession des spins, nous avons repris le même travail de la partie précédente, mais en y introduisant un maillage hexagonal. Ce qui constitue l'objet de la deuxième partie. Quant à la troisième partie, elle fait l'objet de la juxtaposition des deux films à maillage différent. Nous avons rapporté comment les spectres magnétiques dépendent du maillage du film diffusant l'onde de spin.

Nous avons terminé notre travail par la présentation d'une conclusion générale et les perspectives offertes dans le domaine étudié.

Nos résultats numériques sont obtenus à l'aide des programmes élaborés par nous-mêmes sous MATLAB.

Références bibliographiques

- [1] M. Rivallin, M. Benmami, A. Gaunand, A. Kanaev, *Chemical Engineering Research & Design*, 83, A1 (2005).
- [2] X. Feng, D. C. Sayle, Z. L. Wang, S. Paras, B. Santora, T. Sutorik, T. X. T. Sayle, Y. Yang, Y. Ding, X. Wang, and Y.S. Her, *Science*. 312, 1504 (2006).
- [3] X. D. Wang, J. H. Song, J. Liu, and Z. L. Wang, *Science*. 316, 102 (2007).
- [4] V. S. Shrivastava, *Appl. Sci. Research*, 2 (6): 82 (2010).
- [5] B. N. Khlebtsov, V. A. Khanadeev, E. V. Panfilova, T. E. Pylaev, O. A. Bibikova, S.A. Staroverov, V. A. Bogatyrev, L. A. Dykman, N. G. Khlebtsov, *Nanotechnologies in Russia*, 8, 209 (2013).
- [6] Q. Zhang, E. Uchaker, S. L. Candelaria and G. Cao, *Chem. Soc. Rev.* 42, 3127 (2013).
- [7] D. Jariwala, V. K. Sangwan, L. J. Lauhon, T. J. Marks and M. C. Hersam, *Chem. Soc. Rev.* 42, 2824 (2013).
- [8] X. M. Chenga and C. L. Chien, *J. Appl. Phys.* 93, 10 (2003).
- [9] J. Y. Bigot and M. Vomir, *Annal. Phys.* 525, 2 (2013).
- [10] E. Salmani, O. Mounkachi, H. Ez-Zahraouy, A. Benyoussef, M. Hamedoun, E. K. Hlil, *J. Alloys and Compounds*, 578, 77 (2013).
- [11] C. A. F. Vaz, J. A. C. Bland and G. Lauhoff, *Rep. Prog. Phys.* 71, 056501 (2008); M. Müller, R. Montbrun, M. Marz, V. Fritsch, Ch. Sürgers, H. V. Löhneysen, *Nano Letters* 11, 574 (2011).
- [12] O. Peña, W. Peng, M. Guilloux-Viry, Y. Ma, Z. Gao and C. Moure, *Thin Solid Films* 518, 4718 (2010).
- [13] B. Y. Yoo, S.C. Hernandez, D.-Y. Park, N.V. Myung, *Electrochimica Acta* 51, 6346 (2006); R. Brandt, R. Rückriem, D. Gilbert, F. Ganss, T. Senn, K. Liu, M. Albrecht, and H. Schmidt, *J. Appl. Phys.* 113, 203910 (2013).
- [14] S. El-Abed, S. K. Ibsouda, H. Latrache and F. Hamadi, “*Scanning Electron Microscopy*”, Edited by Viacheslav Kazmiruk, ISBN 978-953-51-0092-8, InTech, (2012)
- [15] S. S. Mahajan, M. D. Bambole, S. P. Gokhale, and A. B. Gaikwad, *Prama J. Phys.* 74, 447 (2010).
- [16] I. Baek, H. G. Lee, H. J. Kim and E. Vescovo, *Phys. Rev. B* 67, 75401 (2003).
- [17] A. Vaterlaus, T. Beutler and F. Meier, *Phys. Rev. Lett.* 67, 3314 (1991).
- [18] A. Vaterlaus, T. Beutler, D. Guarisco, M. Lutz and F. Meier, *Phys. Rev. B* 46, 5280 (1992).
- [19] 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).
- [20] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M. B. Brodsky, and H. Sowers, *Phys. Rev. Lett.* 57, 2442 (1986).
- [21] D. D. Awschalom et. al., *Nat. Phys.* 3, 153 (2007).
- [22] Y. G. Semenov, J. M. Zavada, and K. W. Kim, *Appl. Phys. Lett.* 97, 013106 (2010); S. Datta, *Appl. Phys. Lett.* 87, 013115 (2005); S. Datta, S. Salahuddin and B. Behin-Aein, *Appl. Phys. Lett.* 101, 252411 (2012).
- [23] A. Bouali, R. Guinerbretiere and A. Daurer, *J. Phy.* IV 118, 183 (2004).
- [24] L. E. Koutsokeras, G. Abadias, P. Patsalas, *J. Appl. Phys.* 110, 043535 (2011); C. Jeong, S. Datta, and M. Lundstrom, *J. Appl. Phys.* 111, 093708 (2012).
- [25] A. Boulle, O. Masson, R. Guinebretiere, A. Daurer, *Thin Solid Films* 450, 66 (2004).
- [26] M. Di Ventra, “*Electrical Transport in Nanoscale Systems*”, Cambridge University Press, (2008); S. Datta, “*Quantum Transport: Atom to Transistor*”, Cambridge University Press (2005).
- [27] B. Bourahla, A. Khater, R. Tigrine, O. Rafil, M. Abou Ghantous, *J. Phys. Condens. Matter* 19, 266208 (2007).
- [28] B. Bourahla, A. Khater, R. Tigrine, *Thin Solid Films* 517, 6857 (2009).
- [29] B. Bourahla, A. Khater, M. Abou Ghantous, *Eur. Phys. J. Web Conf.* 29, 00011 (2012).
- [30] A. Khater, B. Bourahla, M. Abou Ghantous, R. Tigrine, and R. Chadli, *Eur. Phys. J. B* 82, 53 (2011).
- [31] E. R. Speer, *Lett. Math. Phys.* 10, 41 (1985).

Introduction aux couches ultra-minces

Sommaire

1. Méthodes d'élaboration et de caractérisation des couches minces
 - 1.1. Méthodes d'élaboration des couches minces
 - 1.2. Les différents modes de croissance
 - 1.3. Techniques de caractérisation des couches minces
2. Propriétés magnétique des couches minces
 - 2.1. Les énergies magnétiques et température de curie des couches minces
 - 2.2. L'anisotropie magnétique des couches minces
 - 2.3. Les méthodes analytiques d'étude des ondes de spins dans les couches minces

Une couche mince ou film ultramince est une fine pellicule de la matière déposée sur un support que l'on appelle substrat, ainsi l'une de ses dimensions est vigoureusement réduite, et elle peut atteindre quelques nanomètres. Cette réduction entraîne une perturbation de la majorité des propriétés physiques et chimiques du matériau par rapport à son état massif [1-5]. La différence essentielle entre les deux états du matériau est liée au fait que dans l'état massif on néglige usuellement le rôle des surfaces dans l'étude de ses propriétés, tandis que dans une couche mince ce sont, au contraire, ces effets qui deviennent prépondérants. Ainsi, plus l'épaisseur est faible, plus l'effet 2D est exacerbé. Inversement, au-delà d'un certain seuil, l'effet d'épaisseur devient négligeable et le matériau retrouve les propriétés de son état massif [6-8].

Ce chapitre a pour objectif de présenter au lecteur les notions ainsi que les bases bibliographiques nécessaires à la compréhension et à l'étude des films ultraminces. La première partie, est un aperçu général des différentes techniques de fabrication et des méthodes de caractérisation de ce type de structures. La deuxième est consacrée à leurs propriétés magnétiques. Le but de celle-ci est d'introduire quelques concepts de base qui seront utilisés dans la suite de ce corpus. Dans la troisième et dernière, les méthodes théoriques les plus connues pour leurs études ont été citées.

1. Méthodes d'élaboration et de caractérisation des couches minces

Aujourd'hui, le contrôle des procédés d'élaboration des couches minces permet de structurer et de réaliser, avec une grande précision, des structures ordonnées à l'échelle atomique et à longue distance [9-10]. Parallèlement, beaucoup de techniques de caractérisation se sont développées, cela a permis maintenant aux scientifiques de mieux

comprendre ces matériaux et d'ouvrir une grande gamme de leur application et d'utilisation industrielle.

1.1. Méthodes d'élaboration des couches minces

Diverses techniques permettent de réaliser des couches minces avec différents degrés de qualité, d'ordre, de coût et de rapidité. On peut regrouper ces techniques en deux approches distinctes, dites « Top-Down » et « Bottom-Up » [11-12].

Les résolutions en taille respectives obtenues avec l'une ou l'autre de ces démarches se rejoignent actuellement en combinant ces deux approches [11, 13-14]. L'assemblage d'atomes, de molécules ou d'agrégats passe par des procédés physiques, chimiques ou mécaniques dont on citera les plus utilisés.

1.1.1. Approche Top-Down

C'est une approche descendante et beaucoup utilisée en microélectronique. Elle consiste à fabriquer des nanomatériaux par réduction de la taille du matériau jusqu'à l'échelle nanométrique. L'enjeu étant de réaliser des circuits toujours plus petits, c'est le cas de la lithographie, de la nano-lithographie [15] et des procédés faisant appel à des faisceaux de rayons X, des ions ou même d'électrons. On peut aussi créer des motifs nanométriques à la surface d'un matériau, qui permet d'obtenir ce qu'on appelle un substrat nanostructuré.

1.1.2. Approche Bottom-Up

C'est une approche ascendante, le physicien Richard Feynman a introduit dans son discours général ce terme pour la première fois en 1959. Pour lui, la structuration pouvait se faire non plus par enlèvement de matière mais par apport de matière sur une surface, atome par atome. Vingt-trois années plus tard, en 1982, le premier microscope à effet tunnel voit le jour. En 1986, Binnig et *al.* [16] ont mis au point le premier microscope à force atomique [17], qui ne mesure plus un courant tunnel, mais qui est sensible à l'interaction entre une pointe et une surface qui permet de déposer atome par atome sur une surface.

1.1.3. Les techniques les plus utilisées dans la fabrication des couches minces

Les procédés d'élaboration des films minces sont extrêmement actifs et diversifiés. On distingue deux grandes catégories qui sont les méthodes physiques [18], et les méthodes chimiques [19]. Les premières sont essentiellement utilisées par les laboratoires de recherche, car elles permettent d'élaborer des films minces de quelques nanomètres d'épaisseur avec

moins de défaut de structure. Les trois techniques les plus utilisées actuellement dans le domaine sont : la pulvérisation cathodique, l'épitaxie par jets moléculaires et l'ablation laser. Par contre, la deuxième catégorie regroupe les méthodes qui sont beaucoup utilisées dans l'industrie, étant donné que les vitesses de dépôt sont plus grandes. On peut citer, parmi ces techniques, les dépôts en phase vapeur CVD (Chemical Vapor Deposition) et les dépôts en phase liquide LPD (Liquid Phase Deposition), ou CSD (Chemical Solution Deposition). Le lecteur trouvera plus de détails dans la référence [20].

1.2. Les différents modes de croissance

Lorsqu'on dépose un matériau B sur un support A, le matériau B ne s'étale pas nécessairement pour recouvrir la surface de A, le processus ne dépend pas uniquement des énergies de surface E_A et E_B des deux matériaux A et B, mais il dépend également de l'énergie E_{AB} d'interface de A/B et de l'énergie d'adhésion définie selon la formule de Dupré :

$$U = E_A + E_B - E_{AB} \quad (1.1)$$

Nous résumons, ci-dessus, les trois principaux modes de croissance observés. En tenant compte d'autres effets, tels que l'inter-diffusion entre les éléments. Il est possible de décliner une grande quantité de modes de croissance intermédiaires. Une description complète du sujet est donnée dans les références [21-22].

1.2.1. La croissance bidimensionnelle (dite de Frank et Van der Merwe)

Frank et Van der Merwe [23] ont proposé un modèle simple inspiré du travail de Frenkel et Kontorova [24], qui tient compte des différentes positions adoptées par le matériau B sur le réseau de A. Dans ce mode de croissance, les couches atomiques se forment les unes après les autres et l'apparition d'une nouvelle couche ne se forme que lorsque la couche précédente est complète ; c'est le mode de croissance en couche par couche. En terme d'énergie superficielle, le système gagne de l'énergie en s'étalant sur le substrat, donc ce mode est obtenu pour $U \geq 2E_B$, (exemple : Co/Cu(100)₂, Cu/Pt(111)₃, Pt/W(100)₄).

1.2.2. La croissance tridimensionnelle (dite de Volmer-Weber)

Dans ce mode de croissance, de nouvelles couches se forment avant l'accomplissement des couches précédentes. Cette fois-ci, il y a formation d'îlots de plusieurs couches atomiques.

Autrement dit, le système perd de l'énergie en s'étalant sur le substrat. Ce mode de croissance est obtenu si : $U < 2 E_B$ (exemple : Pb/Graphite).

1.2.3. La croissance de Stranski-Krastanov

Le troisième mode est une combinaison des deux modes précédents, la croissance commence par le mode bidimensionnel, et, après quelques couches atomiques, on observe un changement de mode de croissance qui devient tridimensionnel. L'adsorbat gagne de l'énergie en s'étalant sur le substrat mais pas sur l'adsorbat (exemples : Cu/Ni(100)₆ et Pt/Au(100)₇).

1.3. Techniques de caractérisation des couches minces

La géométrie des films ultraminces et la présence d'un substrat lorsqu'ils sont supportés, impliquent que de nombreuses techniques de caractérisation usuelles sont peu sensibles, voir inefficaces. Pour cela, de nouvelles méthodes d'analyses et l'adaptation des techniques existantes à ces nouvelles géométries et aux faibles quantités de matières offertes, ne cesse de se développer.

1.3.1. Techniques d'évaluation de l'épaisseur

La caractéristique essentielle d'un film ultramine étant sa faible épaisseur, il est donc essentiel de la connaître avec précision. Pour cela, les études lui donnent beaucoup d'importance [25]. Il existe deux méthodes de mesure, celles qui permettent de la mesurer au moment de la fabrication (son avantage est de permettre de déposer des couches d'épaisseur souhaitée) ; et celles qui font appel à des procédés qui permettent de définir l'épaisseur après leur fabrication. On peut la déterminer par : diffractométrie de rayons X. On peut aussi utiliser la réflectométrie, qui est une méthode similaire aux interférences des ondes lumineuses ; on voit des oscillations du signal, lorsque l'on déplace le détecteur ; ou par incidence rasante qui consiste à balayer le détecteur autour d'un pic caractéristique du substrat, pour une incidence des rayons X donnée, puis on augmente l'incidence, et, lorsque l'on voit apparaître le pic, la loi de Beer-Lambert permet d'estimer l'épaisseur de la couche. Ou bien, on peut utiliser la spectrométrie de fluorescence X, qui consiste à mesurer l'absorption d'une raie émise par le substrat, ou de mesurer l'intensité d'une raie émise par la couche mince ; cette méthode peut aussi permettre de déterminer la composition chimique de la couche.

1.3.2. Caractérisation structurale et morphologique

Les propriétés de la surface d'un film ultramince qui peuvent en découler sont très importantes. Pour avoir des informations sur la texture de la couche mince en surface, on peut utiliser :

- la *Microscopie Electronique à Balayage* (MEB) [26] (en anglais : *Scanning Electron Microscopy* (SEM)) qui est un outil permettant l'observation de la morphologie, l'état de surface, la composition chimique ainsi que l'épaisseur de l'échantillon. Il permet d'avoir la cartographie de la surface avec une résolution de quelques nanomètres ;

- la *Microscopie Électronique en Transmission* (MET) (en anglais : *Transmission Electron Microscope* (TEM)), elle consiste à soumettre un échantillon à un faisceau d'électrons primaires de haute énergie. L'interaction des électrons avec la matière génère plusieurs types de rayonnements, comme les électrons diffractés, les électrons transmis et les rayons X. Selon le type de détecteur et le mode d'imagerie, il est notamment possible d'obtenir la cristallinité, la composition chimique et l'épaisseur des films ultraminces.

- La *microscopie électronique à très haute résolution* est devenue un outil extraordinaire qui rend possible l'analyse et la mesure des propriétés des films ultraminces. La barre du dixième de nanomètre a été franchie, ce qui permet d'observer et de comprendre les structures des films et mêmes des défauts.

- La *Microscopie à effet tunnel* (STM), son invention a permis d'observer, de manipuler et d'organiser les atomes d'une surface à l'aide d'une simple pointe métallique. Il permet d'élaborer les nano-objets atome par atome. Grâce à son évolution, on peut évaluer leurs nouvelles propriétés électroniques, qui relèvent bien souvent des concepts quantiques.

- Le *microscope à force électrostatique*, est un outil dérivé du microscope à force atomique, à l'aide d'une pointe oscillante qui balaye la surface à observer, il permet de mesurer les propriétés électrostatiques locales avec l'ordre d'une dizaine de nanomètre. Comme on peut injecter des charges pour observer et manipuler les états électroniques de la nanostructure, ainsi on aura accès à ses propriétés électroniques.

1.3.3. Caractérisation des propriétés magnétiques

Les propriétés magnétiques d'un film mince peuvent être déterminées en utilisant des mesures différentes : son aimantation, par exemple, est déterminée par la magnétométrie en observant la modification de l'oscillation d'un film mince au sein d'un aimant (VSM - Vibrating Sample Magnetometer) ou le courant qu'il produit, quand il est situé entre deux supraconducteurs (jonction Josephson dans un SQUID – Superconducting Quantum

Interference Device) [27-28]. Cela permet de mesurer son cycle d'hystérésis, ainsi que sa température de Curie et l'anisotropie magnétique du matériau ou son champ coercitif, qui peut être mesuré par effet Kerr polaire [29-30] ou par effet Hall. L'analyse de la diffraction des électrons et la spectroscopie Mössbauer donne accès aux paramètres cristallins du matériau, tandis que la mesure dichroïque de rayons X polarisés relie l'aimantation à la nature chimique du matériau. Toutes ces méthodes apportent des données magnétiques quantitatives. Mais l'information est globale, qui intègre généralement plusieurs contributions différentes pour obtenir un signal.

L'imagerie magnétique est une approche bidimensionnelle de l'information. Une information magnétique, comme l'une de celles présentées ci-dessus est ainsi sondée en plusieurs points d'un objet, pour reconstituer une image. Chaque pixel (point de l'image) représente alors l'information magnétique issue d'un endroit précis de l'échantillon. Dans le cas de l'imagerie par effet Kerr, la mesure de la direction de l'aimantation peut être obtenue en différents points de la surface pour remonter à une cartographie de l'intensité du champ magnétique d'une direction donnée. L'Imagerie par Résonance Magnétique (IRM) utilise la précession des moments magnétiques des noyaux atomiques soumis à l'action couplée de deux champs magnétiques (statique et hyperfréquence).

2. Propriétés magnétique des couches minces

Les systèmes de dimensions réduites ou de taille nanométrique, présentent un comportement magnétique différent de celui des matériaux macroscopiques [31-36]. En effet, la brisure de symétrie et la présence des liaisons pendantes, la bande de valence se rétrécit et entraîne une importante modification de la densité d'états au niveau de Fermi, ce qui permet aux films minces de présenter une aimantation plus importante en surface et d'induire l'apparition de nouvelles propriétés magnétiques. Ainsi, existe-t-ils certains matériaux qui ne sont pas magnétiques à l'état massif mais peuvent le devenir, lorsqu'ils sont déposés en couches très minces sur des substrats [37].

Dans la suite de cette partie, nous présentons les bases élémentaires pour comprendre le magnétisme des films ultraminces ferromagnétiques et nous introduisons, par la suite, les concepts essentiels à l'étude de la propagation d'ondes de spins dans les films magnétiques minces. Nous soulignons qu'actuellement beaucoup de chercheurs travaillent activement dans le domaine de la magnonique.

Pour rappel, la magnonique est une approche originale de l'électronique de spin qui se propose d'utiliser les ondes de spins (magnons) pour transporter et traiter l'information [38],

en remplacement des transistors conventionnels. Cependant, son développement technologique passe par la découverte de nouveaux matériaux.

2.1. Les énergies magnétiques et température de curie des couches minces

Un matériau ferromagnétique est un matériau qui acquiert à l'échelle macroscopique une forte aimantation sous l'action d'un champ faible (effet Zeeman) et qui possède à l'échelle mésoscopique un moment magnétique spontané, et cela même en absence de champ magnétique appliqué. Cette organisation des moments magnétiques implique l'existence d'interactions d'échange entre ces moments, capables de s'opposer au désordre que tend à produire l'agitation thermique. Expérimentalement, on montre qu'au-delà d'une certaine température appelée *température de Curie* (T_c), l'aimantation spontanée de ces corps disparaît brutalement. Au-dessus de cette température, l'agitation thermique l'emporte sur les interactions d'échange [39].

2.1.1. Energie d'échange

L'énergie d'échange est d'origine microscopique et de nature coulombienne [40]. Elle est responsable de l'ordre magnétique et explique l'aimantation spontanée des matériaux ferromagnétiques. Les premiers travaux rapportant une explication satisfaisante de ce comportement furent menés par Weiss en 1907 [41]. Il part de l'hypothèse selon laquelle il existe au sein de la matière une interaction provoquant un alignement des différents moments magnétiques qu'il représente par un champ dit moléculaire. Ce modèle lui permet de retrouver les propriétés essentielles des structures ferromagnétiques. En 1928, Heisenberg montre que cette interaction a une origine quantique ; qui s'explique par le principe d'exclusion de Pauli, qui stipule que deux électrons ne peuvent pas occuper le même état quantique. L'énergie du système formé par ces deux électrons, souvent construite sous forme d'un Hamiltonien de spin appelé Hamiltonien de Heisenberg, s'écrit alors sous la forme suivante [42] :

$$H = -\sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad (1.2)$$

Où J_{ij} est la constante de couplage d'échange quantifiant la force du couplage entre spins. Il est important de rappeler que cette interaction est de très courte portée et négligeable au-delà de deux distances interatomiques ; par conséquent, le volume atomique intervient d'une façon décisive dans la détermination de la valeur de l'échange magnétique dans les matériaux.

Plusieurs études ont montré que les modifications structurales entraînent aussi des modifications au niveau de l'énergie d'échange. Dans les couches ultraminces l'intensité du paramètre d'échange J entre spins électroniques est également modifiée.

Le décalage des bandes d'énergie des électrons pour les deux directions de spin résulte d'une compétition entre l'augmentation d'énergie cinétique due au transfert d'électrons d'une sous-bande à l'autre et le gain d'énergie d'échange. Le critère de Stoner prévoit l'apparition de l'ordre ferromagnétique lorsque le produit $J_{\text{ex}} \times n(E_F)$ est supérieur à 1, avec $n(E_F)$ la densité d'état électronique au niveau de Fermi dans l'état paramagnétique et J_{ex} l'intensité de l'interaction d'échange [43]. C'est le cas du platine ou du palladium au contact du Cobalt [44], à cause de la possibilité d'une polarisation de surface d'un métal paramagnétique engendrée par l'interface.

2.1.2. L'énergie Zeeman (Effet Zeeman)

L'application d'un champ magnétique extérieur \vec{H} sur un moment magnétique \vec{m} fait apparaître un couple qui s'écrit comme suit :

$$\vec{\tau} = \vec{H} \wedge \vec{m} \quad (1.3)$$

l'énergie résultante est appelée énergie Zeeman. Si l'on considère un film mince de volume V et d'aimantation uniforme, cette énergie s'écrira :

$$E_{\text{Zeem}} = - \int_V \vec{H} \cdot \vec{m} dV \quad (1.4)$$

2.1.3. Température de Curie des couches minces

Dans la théorie de champ moyen, qu'on appelle aussi le *champ moléculaire*, la température de Curie (notée T_c) est proportionnelle au nombre P_v d'atomes plus proches voisins [45].

$$T_c = K P_v \quad (1.5)$$

K est le coefficient de la proportionnalité.

Or, dans une couche mince le nombre *moyen* d'atomes plus proches voisins $P(n)$ est inférieur à P_v et cela est dû aux atomes des deux surfaces :

$$P(n) = P_v - 2(P_v - P_s)/n \quad (1.6)$$

où n est le nombre de plans atomiques et P_s le nombre de plus proches voisins magnétiques d'un atome de surface.

De cela, on peut constater que T_c diminue, quand le nombre de couches atomiques diminue. La diminution du nombre de voisins à la surface entraîne un affaiblissement de l'énergie d'interaction d'échange avec tous les voisins et pour les couches ultra-minces. On observe une réduction de la température d'ordre magnétique en fonction de l'épaisseur des couches [46].

2.2. L'anisotropie magnétique des couches minces

L'énergie d'anisotropie magnétique des films minces est une propriété physique très importante dans les applications technologiques, comme l'enregistrement magnétique où l'aimantation doit être fixée dans une direction donnée de l'espace.

Dans le cas d'une couche mince mono-domaine [47], l'anisotropie magnétique est donnée par :

$$H_a = E_d + E_{mc} + E_{me} \quad (1.7)$$

où E_d est l'énergie d'anisotropie dipolaire (ou de forme), E_{mc} est l'énergie d'anisotropie magnéto-cristalline et E_{me} est l'énergie d'anisotropie magnéto-élastique. La compétition entre ces trois termes détermine la direction de l'aimantation dans un film.

2.2.1. Anisotropie dipolaire ou anisotropie de forme

Le terme d'anisotropie dipolaire noté E_d est dû à l'interaction dipolaire. Il est l'énergie magnétostatique qu'on peut décrire par une répartition de charges magnétiques. Elle s'écrit en fonction de l'aimantation M , du volume V et de son inclinaison par rapport à la normale θ :

$$E_d = -\frac{\mu_0 M^2}{2} V (\sin \theta)^2 \quad (1.8)$$

avec μ_0 la perméabilité du vide.

Comme la surface du film présente des rugosités, alors les pseudo-charges magnétiques se répartissent sur les bords des terrasses et produisant un champ démagnétisant parallèle au plan

du film. L'effet d'une telle rugosité a alors comme conséquence de diminuer l'anisotropie dipolaire, puisque l'énergie magnétostatique est non nulle, lorsque l'aimantation est dans le plan. Le chercheur Patrick Bruno [48] a montré également que comme le champ démagnétisant parallèle à la surface existe essentiellement aux bords des rugosités, l'énergie magnétostatique associée est proportionnelle à l'amplitude de rugosité et non à l'épaisseur du film. S'il n'y avait que l'anisotropie de forme l'aimantation préférerait être dans le plan du film.

2.2.2. Anisotropie magnéto-cristalline de surface

L'anisotropie magnéto-cristalline provient, quant à elle, du couplage spin-orbite qui lie les moments magnétiques au champ cristallin [49]. Ce dernier respecte la symétrie du cristal. Ce qui entraîne la correspondance entre les directions d'anisotropie et les directions cristallographiques. L'énergie d'anisotropie magnéto-cristalline peut être évaluée en introduisant le couplage spin-orbite comme perturbation dans un calcul de structure de bandes électroniques [50]. Plus récemment, il a été observé que l'anisotropie magnéto-cristalline était accompagnée d'une anisotropie du moment magnétique orbital [48]. Or, du fait de la brisure de symétrie que constitue la surface, la valeur du moment orbital y est beaucoup plus importante que dans le volume. Ce qui explique la forte anisotropie de surface des films minces ou de particules magnétiques.

La surface et l'interface représentent une rupture de symétrie dans un cristal. Ce qui crée un couplage spin-orbite localement différent et génère un terme d'anisotropie magnéto-cristalline propre à la surface et à l'interface. En 1954, Néel [51] fut l'un des premiers à souligner que cette rupture de symétrie à la surface (et aussi au niveau de l'interface) pouvait créer une anisotropie magnétique non négligeable face à celle du volume, en raison de la plus faible symétrie des atomes de surface (d'interface). Ainsi leur anisotropie magnétique pourrait-elle être de plusieurs ordres de grandeur supérieure à celle des atomes de volume. Cette anisotropie de surface peut devenir très importante, notamment pour les films minces pour lesquels le rapport entre le nombre d'atomes de surface et d'atomes de volume est grand [52].

D'une manière générale, on exprime la densité d'énergie d'anisotropie magnéto-cristalline en fonction des angles $\theta_x, \theta_y, \theta_z$ entre l'aimantation \vec{M} et les directions cristallographiques \vec{x}, \vec{y} ,

\bar{z} . Par exemple, pour un cristal cubique, Akulov [53] a proposé l'expression (1.9) faisant intervenir les cosinus directeurs $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$.

$$E_{mc} = K_0 + K_1(\alpha_x^2\alpha_y^2 + \alpha_y^2\alpha_z^2 + \alpha_x^2\alpha_z^2) + K_2\alpha_x^2\alpha_y^2\alpha_z^2 + K_3(\alpha_x^2\alpha_y^2 + \alpha_y^2\alpha_z^2 + \alpha_x^2\alpha_z^2)^2 + K_4\alpha_x^2\alpha_y^2\alpha_z^2(\alpha_x^2\alpha_y^2 + \alpha_y^2\alpha_z^2 + \alpha_x^2\alpha_z^2) \quad (1.9)$$

L'énergie magnéto-cristalline d'un cristal à symétrie hexagonale peut s'écrire, quant à elle, sous la forme suivante :

$$E_{mc} = K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta + K_3 \sin^6 \theta + K_4 \sin^6 \theta \cos \varphi$$

Avec θ l'angle entre l'aimantation et l'axe facile aimantation et φ l'angle dans le plan de base.

Dans le cas des métaux de transition $3d$, le champ cristallin est plus fort que le couplage spin-orbite. Et comme l'anisotropie dépend de la symétrie locale du champ cristallin, elle est d'autant plus faible que la symétrie est haute. En symétrie cubique, pour le Ni (*fcc*) ou le Fe (*cc*) (plusieurs axes de facile aimantation sont possibles), ou bien en symétrie hexagonale, pour le Co (*hc*) (un seul axe de facile aimantation), l'énergie de l'anisotropie magnéto-cristalline s'exprime respectivement sous la forme d'équations (1.10) et (1.11) :

$$E_{mc}^{cub} = K_1 (\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_3^2\alpha_1^2) + K_2\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2 \quad (1.10)$$

$$E_{mc}^{hex} = K_1 \sin^2(\theta) + K_2 \sin^4(\theta) \quad (1.11)$$

K_i sont les constantes d'anisotropie qui dépendent de la température, et $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ (les cosinus des angles entre la direction de l'aimantation et les axes x, y, z) et l'angle θ obtenu entre la direction de l'aimantation et l'axe de plus haute symétrie (l'axe c dans la structure *hc*).

Dans les couches minces, P. Bruno, en 1989 [54], a montré que l'augmentation de l'anisotropie est liée à l'abaissement local de symétrie des atomes de surface, comme cela a été expliqué pour le moment orbital, même si l'anisotropie magnétique d'un atome de surface est forte, l'anisotropie totale de surface doit s'annuler pour des raisons de symétrie.

2.2.3. Anisotropie magnéto-élastique

Ce type d'anisotropie est également lié au couplage spin-orbite. Comme les interactions d'échange sont sensibles à la distance interatomique, elle apparaît dès qu'il existe des contraintes structurales que l'on peut rencontrer dans les films hétéro-épitaxiaux comme, par exemple, les films de Cobalt sur le Cuivre. En effet, le Cobalt présente un désaccord de maille 2% avec le cuivre ce qui engendre des contraintes dans le film de Cobalt. Selon l'épaisseur de la couche ferromagnétique, il existe deux régimes de déformation : l'anisotropie magnéto-élastique se comporte soit comme un terme de volume, soit comme un terme de surface [48, 55-56]. La contribution de l'anisotropie magnéto-élastique est souvent incorporée dans les constantes d'anisotropie magnéto-cristalline. Dans le premier cas, la contribution de l'anisotropie magnéto-élastique est prise en compte dans le terme volumique de l'anisotropie magnéto-cristalline. Dans le second cas, elle est prise en considération dans le terme de surface. La déformation de la maille de l'adsorbat, pour s'adapter au substrat, peut générer un terme d'anisotropie magnétique E_{me} qui s'écrit en fonction du tenseur ε de déformation et des cosinus directeurs α_i de l'aimantation. Dans le cas cubique, ce terme est donné sous la forme suivante :

$$E_{me} = B_1(\varepsilon_{11}\alpha_1^2 + \varepsilon_{22}\alpha_2^2 + \varepsilon_{33}\alpha_3^2) + 2B_2(\varepsilon_{12}\alpha_1\alpha_2 + \varepsilon_{13}\alpha_1\alpha_3 + \varepsilon_{23}\alpha_2\alpha_3) + \dots \quad (1.12)$$

Dans le cas d'un réseau hexagonal, au premier ordre, ce terme s'écrit :

$$E_{me} = B_1(\varepsilon_{11}\alpha_1^2 + 2\varepsilon_{12}\alpha_1\alpha_2 + \varepsilon_{22}\alpha_2^2) + B_2\varepsilon_{33}(1 - \alpha_3^2) + B_3(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22})(1 - \alpha_3^2) + B_4(\varepsilon_{23}\alpha_1\alpha_3 + \varepsilon_{13}\alpha_1\alpha_3) + \dots \quad (1.13)$$

où B_i sont les constantes d'anisotropie magnéto-élastique, α_i sont les cosinus directeurs de l'aimantation et ε_{ij} sont les tenseurs de déformation exprimés pour le système hexagonal.

Remarque

Une anisotropie de surface est attendue pour des matériaux très minces. Elle est liée au fait qu'en surface, les atomes n'ont pas un environnement identique à ceux dans le cœur du matériau. Les spins n'y subissent donc pas les mêmes interactions (moins d'atomes avec lesquels ils rentrent en interaction) d'où une anisotropie selon l'orientation du champ extérieur

par rapport à la surface, qui est essentiellement uni-axiale d'origine spin-orbite qui peut s'écrire comme suit [57-60] :

$$E_s = \frac{K_s}{t} (\sin(\theta))^2 \quad (1.14)$$

t est l'épaisseur du film mince, K_s est une constante d'anisotropie de surface et θ est l'angle entre la normale à la surface et la magnétisation.

Au-dessous d'une épaisseur critique l'aimantation passe du plan à la perpendiculaire au plan.

2.3. Les différentes méthodes analytiques d'étude des ondes de spins dans les couches minces

Pour l'étude des différentes propriétés de la matière condensée dans l'état massif, on prend compte de l'invariance par translation des solides cristallins, et ce pour utiliser des transformations basées sur la périodicité du système. Telles que les transformations de Fourier, les conditions aux limites périodiques de Born von Karman et les règles de somme, etc. Mais dans un film ultramine l'invariance par translation est brisée par la présence de surfaces, de défauts et d'impuretés. Pour cela, il faut modifier ces techniques et chercher d'autres qui sont adéquates à leurs études. Sur le plan expérimental, on trouve déjà beaucoup de nouvelles techniques [61-62]. Nous avons cité quelques unes dans la première partie de ce chapitre. Sur le plan théorique, beaucoup d'efforts sont consacrés à la recherche de nouvelles méthodes, afin d'expliquer les données expérimentales et surtout prédire les nouveaux phénomènes. D'où l'émergence de plusieurs méthodes pour leurs études. On citera entre autres, la méthode de diagonalisation directe, la méthode des fonctions de Green et la méthode de raccordement. Toutes ces méthodes sont élaborées en tenant compte principalement des propriétés de symétries de la configuration magnétique à étudier et en permettant de limiter le nombre d'équations et d'inconnues du système.

2.3.1. La méthode de Diagonalisation Directe

Cette méthode a été énoncée par Clark en 1965 [63], et a été appliquée pour la première fois en 1971, par Allen dans l'étude des modes de surface d'un réseau cubique à faces centrées et aux effets induits par une couche absorbée [64]. Et depuis elle a été utilisée pour l'étude de la dynamique vibrationnelle et magnétique des surfaces planes et vicinales [65-67]. Elle prend en considération un nombre fini de plans atomiques dans une direction donnée, par

exemple la direction z , avec une extension infinie dans les deux autres directions cartésiennes x et y . Cette méthode met en jeu un grand nombre de plans afin de garantir de retrouver la région dite de volume dans le centre du système. Il suffit alors d'écrire les équations du mouvement des spins appartenant à la cellule unitaire, puis on déduit la matrice dynamique.

La résolution numérique d'une telle matrice détermine les vecteurs et les valeurs propres. Ce qui permet ensuite de remonter aux propriétés des surfaces en donnant accès par exemple aux courbes de dispersion, amplitudes de précession des spins, états localisés, densités spectrales, et aux vecteurs déplacements et autres.

2.3.2. La méthode des fonctions de Green

La fonction de Green a été introduite par George Green [68] en 1850. Elle a permis à la physique de s'élaner dans l'étude de la dynamique des systèmes perturbés. Elle a été appliquée pour la première fois à la physique de l'état solide par Slater [69].

Depuis, cette méthode est devenue un outil essentiel pour l'étude de la dynamique vibrationnelle des systèmes réels avec quelques variantes dans le formalisme mathématique [70-73].

Dans le cas des films minces, cette méthode est un atout considérable pour leur étude [74-78]. Il suffit de définir une fonction de Green pour chaque couche atomique, comptant la surface comme la première couche. Ensuite, on écrit les équations de mouvement pour chaque fonction, on obtient alors un système d'équations qu'on linéarise à l'aide de couplage de Tyablikov et puis on effectue la transformation de Fourier dans le plan (xOy) qu'on considère périodique et on obtient un système d'équations, dont les solutions nous donne accès aux courbes de dispersion.

D'une part l'avantage des fonctions de Green appliquées dans l'étude de la dynamique des spins dans les films minces ferromagnétiques réside dans la simplicité à les utiliser, et de l'autre elle permet de suivre le spectre des magnons en fonction de la température d'une manière implicite jusqu'à la température de transition T_c .

2.3.3. La méthode de raccordement

Cette méthode a été introduite initialement par Feuchtwang pour l'étude de l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin semi-infini [79]. Puis développé en 1987 par A. Khater et J. Szeftel [80] et appliquée aux surfaces Ni(100) et Ni(100)+c(2×2) [81]. Depuis, la méthode de raccordement a contribué à l'étude de la dynamique vibrationnelle et précessionnelle de plusieurs systèmes physiques perturbés [82-86].

Le premier principe de la méthode consiste à décrire le mouvement de vibration des atomes ou de précession de spins par un nombre fini d'équations. Le deuxième principe est de définir dans le système une zone intermédiaire appelé zone de raccordement qui relie analytiquement les équations de mouvement des atomes ou de spin de la partie où se trouve le défaut et celles où on retrouve le système parfait sans aucune influence de défaut. Cette méthode permet d'aboutir à la détermination des modes localisés au voisinage du défaut. En conséquence, il est possible de calculer les courbes de dispersion, les densités d'états et les états localisés des systèmes étudiés.

Références du chapitre I

- [1] R. Lamni, Thèse de Doctorat, Université Poincaré, Nancy I, France (2005).
- [2] A. Karipera, E. Güneria, F. Gödeb and C. Gümüşç, Chal. Lett. 9, 27 (2012).
- [3] Y. A. Salazar, R. Patiño, J. L. Peña, W. Cauich and A. I. Oliva, Braz. J. Phys. 36,1058 (2006).
- [4] A. Helmaoui, A. Belghachi and A. V. Simachkevitch, Rev. Energ. Ren. 89-93 (1998).
- [5] C. Sanz, C. Guillén, M. T. Gutiérrez, and J. Herrero, Phys. Status Solidi (a) 210, 320 (2013).
- [6] C. Chappert et al., Appl. Phys. 64, 5736 (1988).
- [7] B. Su and K. L. Choy, Thin Solid Films 359, 160 (2000).
- [8] R. H. Kodame, J. Magn. Mater. 200, 359 (1999).
- [9] K. V. P. M. Shafi, Y. Kolytyn, A. Gedanken, R. Prozorov, J. Balogh, J. Lendvai and I. Felner, J. Phys. Chem. B 101, 6409 (1997).
- [10] D. Vollath, D. V. Szabo, R. D. Taylor and J. O. Willis, J. Mater. Res.12, 2175 (1997).
- [11] T. A. Savas, M. Farhoud, H. I. Smith, M. Hwang and C. A. Rossa, J. Appl. Phys.85, 6160 (1999).
- [12] T. Devolder, C. Chappert, Y. Chen, E. Cambriil, H. Bernas, J. P. Jamet and J. Ferre, Appl. Phys. Lett. 74, 3383 (1999).
- [13] J. Moritz, B. Dieny, J. P. Nozieres, S. Landis, A. Lebib, and Y. Chen, J. Appl. Phys. 91, 7314 (2002).
- [14] K. Matsuyama, S. Komatsu, and Y. Nozaki, J. Appl. Phys. 87, 4724 (2000).
- [15] W. Wu, B. Cui, X.Y. Sun, W. Zhang, L. Zhuang, L. S. Kong, and S. Y. Chou, J. Vac. Sci. Tech. B 16, 3825 (1998).
- [16] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber and E. Weibel, Appl. Phys. Lett. 40, 178 (1982).
- [17] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber and E. Weibel, Physica 109/110b, 2075 (1982).
- [18] J. E. Mahan, “*Physical Vapor Deposition of Thin Films*”, Wiley Blackwell Editions, USA, (2000).
- [19] R. W. Schwartz, T. Schneller, R. Waser, C. R. Chimie 7, 433 (2004).
- [20] D. M. Mattox, “*Physical Vapor Deposition (PVD) Processing*”, William Andrew Editions, United Kingdom, 2nd Edition, (2010).
- [21] N. Marsot, Thèse de doctorat, Université Paris XI Orsay (1999).
- [22] C. Argile et G. E. Rhead, Surf. Sci. Rep. 10, 256 (1989).
- [23] F. Van der Merwe, Proc. Roy. Soc. Lond. 198, 205 (1949).
- [24] F. Kontorova, Phys. Z. Sovjetunion, 13, 1 (1938).
- [25] J. Son, P. Moetakef, J. M. Le Beau, D. Ouellette, L. Balents, S. J. Allen, and S. Stemmer, Appl. Phys. Lett. 96, 062114 (2010).
- [26] N. Chaban, Thèse de doctorat, Université de Grenoble, France (2012).
- [27] Y. Henry, Thèse de Doctorat, Université Louis Pasteur Strasbourg France (1995).
- [28] W. S. Goree and M. Fuller, Rev. Geophys. Space Phys. 14, 591 (1976).
- [29] R. Cowburn, D. K. Koltsov, A. O. Adeyeye and M. E. Welland, Appl. Phys. Lett. 73, 3947(1998).
- [30] A. Lebib, S. P. Li, M. Natali and Y. Chen, J. Appl. Phys. 89, 3892 (2001).
- [31] F. Vidal, Y. Zheng, J. Milano, D. Demaille, P. Schio, E. Fonda, B. Vodungbo, Appl. Phys. Lett. 95, 152510 (2009).
- [32] C. Helman, J. Milano, S. Tacchi, M. Madami, G. Carlotti, G. Gubbiotti, G. Alejandro, M. Marangolo, D. Demaille, V. H. Etgens, and M. G. Pini, Phys. Rev. B 82, 094423 (2010).
- [33] M. Sacchi, M. Marangolo, C. Spezzani, R. Breitwieser, H. Popescu, R. Dealounay, B. Rache Salles, M. Eddrief and V. H. Etgens, Phys. Rev. B 81, 220401 (2010).
- [34] S. Tacchi, M. Madami, G. Carlotti, G. Gubbiotti, M. Marangolo, J. Milano, R. Breitwieser, V. H. Etgens, R. L. Stamps, and M. G. Pini, Phys. Rev. B 80,155427 (2009).
- [35] R. Breitwieser, M. Marangolo, J. Lüning, N. Jaouen, L. Joly, M. Eddrief, V. H. Etgens and M. Sacchi, Appl. Phys. Lett. 93, 122508 (2008).
- [36] M. Sacchi, M. Marangolo, C. Spezzani, L. Coelho, R. Breitwieser, J. Milano, and V. H. Etgens, Phys. Rev. B 77, 165317 (2008).
- [37] A. J. Freeman and R. Q. Wu, J. Magn. Mater. 100, 497 (1991).
- [38] P. Rovillain, R. de Sousa, Y. Gallais, A. Sacuto, M. A. Méasson, D. Colson, A. Forget, M. Bibes, A. Barthélémy and M. Cazayous, Nat. Mat. 9, 975 (2010).

- [39] L. M. Lacroix, Thèse de Doctorat, Université de Toulouse - France (2008).
- [40] W. Heisenberg, Z. Phys., 49, 619 (1928).
- [41] P. Weiss, J. Phys. Rad., 4, 469 (1907).
- [42] P. A. M. Dirac. Proc. Roy. Soc. A123, 714 (1929).
- [43] M. Héritier. « *DEA de Physique des Solides, Magnétisme-Supraconductivité* ». Université Orsay Paris XI, (2002).
- [44] S. Ferrer, J. Alvarez, E. Lundgren, X. Torrelles, P. Fajardo, and F. Boscherini, Phys. Rev. B 56, 9848 (1997).
- [45] S. Petit, Thèse de Doctorat, Université de Lille 1 (2007).
- [46] Yi-Li, K. Baberschke, Phys. Rev. Lett. 68, 1208 (1992).
- [47] E. C. Stoner and E. P. Wohlfarth, Phil. Trans. Roy. Soc. 240, 599 (1948).
- [48] P. Bruno, Thèse de Doctorat, Université Paris XI, Orsay (1989).
- [49] B. D. Cullity, Editions Addison-Wesley, New-York (1972).
- [50] H. Brooks, Phys. Rev. 58, 909 (1940).
- [51] L. Néel, J. Phys. Rad. 15, 225 (1954).
- [52] P. Bruno, Thèse de Doctorat, Université Paris XI, Orsay (1989).
- [53] N. S. Akulov, Z. Phys. 67, 794 (1931).
- [54] P. Bruno, Phys. Rev. B 39, 865 (1989).
- [55] A. Bounouh, Thèse de Doctorat, Université Paris Sud Orsay, (1997).
- [56] C. Chappert and P. Bruno, J. Appl. Phys. 64, 5736 (1988).
- [57] U. Gradmann: J. Mag. Mat. 54-57, 733 (1986).
- [58] C. Chappert, K. Le Dang, P. Beauvillain, H. Hurdequint, D. Renard: Phys. Rev. B 34, 3192 (1986).
- [59] C. Chappert and P. Bruno: J. Appl. Phys. 64, 5736 (1988).
- [60] P. Bruno and J. P. Renard, Appl. Phys. A 49, 499 (1989).
- [61] D. N. Zubarev, Usp. Fiz. Nauk 187, 71 (1960).
- [62] N. N. Bogolyubov and S.V.Tyablikov, Soviet. Phys. Doklady 4, 604 (1959).
- [63] W. Clarke, PhD Thesis, University of California, Los Angeles (1965).
- [64] R. E. Allen, G. P. Alidrege and F. De Wette, Phys. Rev. 4, 1648 (1971).
- [65] R. A. Allen, Surf. Sci. 76, 91 (1978).
- [66] J. E. Black and P. Bopp, Surf. Sci. 140, 275 (1984).
- [67] P. Knipp, Phys. Rev. B 43, 6908 (1991).
- [68] G. Green ; *An essay on the application of mathematical analysis to the theory of electricity & magnetism*, Journal für die reine und angewandte Mathematik (connu aussi sous le nom de « Journal de Crelle ») n° 39, 73-79 (1850); n°44, 356-374 (1852); n° 47, 161-221 (1854).
- [69] J. C. Slater : *Quantum Theory of Molecules and Solids*, Vol (M. C. Graw-Hill, New York, London, 1965).
- [70] L. Dobrzynski, Surf. Sci. Reports 6, 119 (1986).
- [71] A. A. Maradudin and J. Mellagalis, Phys. Rev. A 133, 1118 (1967).
- [72] A. A. Maradudin, I. P. Ipatova, E. W. Montroll and G. H. Weiss, *Theory of lattice dynamics harmonic approximation*, Academic press, New York and London (1971).
- [73] E. J. Mele and M. V. Pykhtin, Phys. Rev. Lett. 75, 3878 (1995).
Dean G. Duffy ; *Green's Functions With Applications*, CRC Press (2001).
- [74] A. A. Maradudin, R. F. Wallis and L. Dobrzynski, *Handbook of surfaces and surfaces*, Vol 3, Garland, New York (1980).
- [75] G. Benedek and L. Miglio, *The Green's Function Method in the Surface Lattice Dynamics of Ionic Crystals, in Surface Phonons*, ed. by W. Kress and F.W. de Wette (Springer Verlag Berlin, Heidelberg, p. 37, 1991).
- [76] T. Dauzhenka, Thèse de doctorat, Université Toulouse III - Paul Sabatier (2001).
- [77] W. Hanke and A. Muramatsu ; *Theory of electron-phonon interaction and broken symmetries of semiconductor interfaces*; J. Phys. 45, C5 (1984).
- [78] L. Dobrzynski and B. Djafari-Rouhani, Phys. Rev. B 33, 3251 (1986).
- [79] T. E. Feuchtwang, Phys. Rev. 155, 731 (1967).
- [80] J. Szeftel and A. Khater, J. Phys. C: Solid State Phys. 20, 4725 (1987).

- [81] J. Szeftel, A. Khater, F. Mila, S. Datato and N. Auby, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 21, 2113 (1988).
- [82] A. Virlovet, H. Grimech, A. Khater, Y. Pennec and K. Maschke, *J. Phys. : Condens. Matter*, 8, 7589 (1996).
- [83] A. Khater, B. Bourahla and R. Tigrine, *J. Phys. Conference Series* 92, 012032 (2007).
- [84] Y. Pennec and A. Khater, *Surf. Sc.* 348, 82 (1996).
- [85] B. Bourahla, A. Khater, R. Tigrine, *Thin Solid Films* 517, 6857 (2009).
- [86] B. Bourahla, Thèse de Doctorat, Université M. Mammeri (2007).

Ondes de spins dans les couches minces ferromagnétiques ordonnés

Sommaire

1. Approche théorique de traitement d'ondes de spins
 - 1.1. Approche semi-classique
 - 1.2. Approche quantique
2. Dynamique de spins dans les couches minces ferromagnétiques parfaites
 - 2.1. Cas des films ferromagnétiques ultra-minces à maillage cubique
 - 2.1.1. Courbes de dispersion
 - 2.1.2. Courbes de vitesses de groupe
 - 2.2. Cas des films ferromagnétiques ultra-minces à maillage hexagonal
 - 2.2.1. Courbes de dispersion
 - 2.2.2. Courbes de vitesses de groupe
- Conclusion

La notion de l'onde de spin a été introduite pour la première fois par Bloch [1-4]. Il a montré que les excitations de basse énergie de l'hamiltonien de l'Heisenberg sont des états dans lesquels le renversement d'un spin est délocalisé sur tout le réseau. La théorie de ces ondes a été développée aux années 50, et devenue actuellement l'une des bases essentielles du magnétisme [5-12]. Elle a pour objet l'étude des phénomènes collectifs qui apparaissent, lorsque des entités portant un moment magnétique interagissent entre elles ou avec un champ magnétique extérieur.

Dans la première partie de ce chapitre, nous présentons en détail le formalisme mathématique, pour la modélisation du mouvement de précession des vecteurs de spins dans les matériaux ferromagnétiques, à basse température, que nous retiendrons pour le reste de l'étude. La seconde partie est une application de la théorie à deux types de films ultraminces ferromagnétiques constitués de cinq plans atomiques parallèles. L'un est à maillage cubique et l'autre à maillage hexagonal. Cette théorie permet de définir la dispersion d'ondes de spins, ainsi que leurs vitesses de groupe dans ces films. Nous avons aussi présenté l'influence de l'anisotropie de surface sur les propriétés magnétiques des films étudiés.

1. Approche théorique de traitement d'ondes de spins

Les spins dans un matériau sont reliés par une constante d'échange J , elle dépend de recouvrement entre fonctions d'ondes électroniques de deux atomes. Ces fonctions décroissent exponentiellement avec la distance, et par conséquent l'échange J décroît aussi très rapidement quand la distance entre atomes grandit. Dans la vaste majorité des cas, il est alors suffisant de tenir compte uniquement des interactions d'échange entre premiers voisins.

On obtient alors le modèle de Heisenberg [13] le plus simple pour le traitement des ondes de spins, décrit par l'Hamiltonien suivant :

$$H = -2 \sum_{\langle l,l' \rangle} J(l,l') \vec{S}_l \vec{S}_{l'} \quad (2.1)$$

Ici : les l sont les sites atomiques contenant les vecteurs de spins (les nœuds d'un réseau de Bravais), les S_l est le spin occupant le site l et $S_{l'}$ est l'un de ses site voisins.

Le symbole $\langle l,l' \rangle$ indique qu'une sommation sur tous les sites de spins voisins et sur tous les plans atomiques.

La première hypothèse fondamentale de ce modèle est de supposer que le champ moléculaire induit une transition vers une phase magnétique ordonnée.

La deuxième hypothèse consiste à ne considérer que de petites déviations autour de cet état de champ moyen. La théorie des ondes de spins est une théorie du champ, dont les quasi-particules sont appelées ondes de spins ou magnons.

Ces excitations correspondent physiquement à des modes de précession des spins autour de la direction locale du moment ordonné, et caractérisées par un déphasage de site en site comme indiqué sur la Fig.2.1.

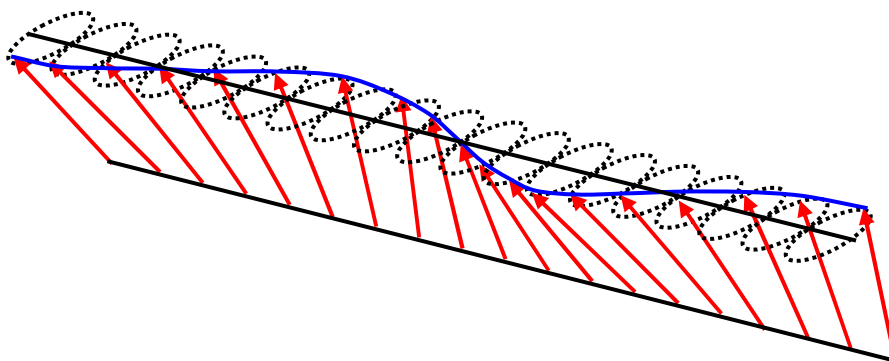


Fig.2.1 Diagramme schématisé d'une onde de spin dans un matériau ferromagnétique.

1.1. Approche semi-classique

Dans cette approche, les spins sont assimilés à des vecteurs classiques [14]. Si on considère un arrangement régulier de spins, couplés par des interactions d'échange

ferromagnétique, alors l'énergie d'échange de l'un des spins de la couche l , avec l'ensemble des sites voisins est gouvernée par l'équation (2.1). Qu'on peut réécrire comme suit [15] :

$$H = -\vec{M}_l \cdot \vec{h}_{ex} \quad (2.2)$$

$$\vec{M}_l = g\mu_B \vec{S}_l \quad (2.3)$$

$$\vec{h}_{ex} = \frac{2J}{g\mu_B} \sum_{l'} \vec{S}_{l'} \quad (2.4)$$

g est le facteur de Landé, μ_B est le magnéton de Bohr, \vec{M}_l est le moment magnétique de spin \vec{S}_l , et \vec{h}_{ex} est le champ créé par les spins voisins au site \vec{S}_l .

L'équation du mouvement du moment cinétique $\hbar \vec{S}_l$ du spin \vec{S}_l est donnée par :

$$\hbar \frac{d\vec{S}_l}{dt} = -\left[\vec{M} \wedge \vec{h}_{ex} \right] = -2J \left[\vec{S}_l \wedge \sum_{l'} \vec{S}_{l'} \right] \quad (2.5)$$

Dans un état stationnaire (pas d'onde de spin excitée) on aura :

$$\hbar \frac{d\vec{S}_l}{dt} = 0 \quad (2.6)$$

Mais dans l'état excité, on a la rotation des spins suivant l'axe (Oz), alors on décompose \vec{S}_l comme suit (voir Fig. 2.2a) :

$$\vec{S}_l = \vec{S}_0 + \delta \vec{S}_l \quad (2.7)$$

Avec $\delta \vec{S}_l$ représente la déviation et \vec{S}_0 est la composante de \vec{S}_l suivant l'axe (Oz) qu'on suppose indépendant du temps t , ainsi l'équation (2.5) prendra la forme :

$$\hbar \frac{d(\delta \vec{S}_l)}{dt} = -2J \sum_{l'} \left[(\vec{S}_0 + \delta \vec{S}_l) \wedge (\vec{S}_0 + \delta \vec{S}_{l'}) \right] \approx -2J \sum_{l'} \left[(\delta \vec{S}_l - \delta \vec{S}_{l'}) \wedge \vec{S}_0 \right] \quad (2.8)$$

A basse température, $\delta \vec{S}_l$ et $\delta \vec{S}_{l'}$ sont très petits. $\vec{S}_0 \approx S \cdot \vec{k}$, \vec{k} est le vecteur unitaire suivant l'axe (Oz), comme indiqué sur la Fig.2.2b.

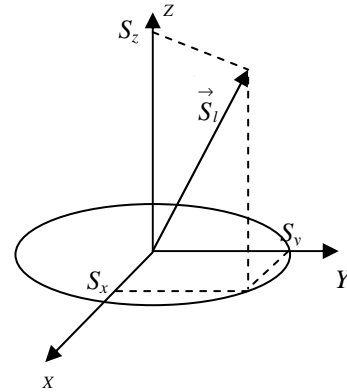
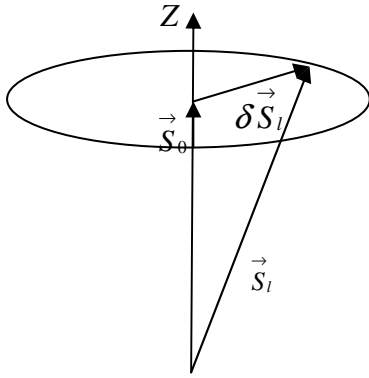


Fig.2.2a Décomposition d'un vecteur de spin. **Fig.2.2b** Représentation des composantes d'un spin. autour de Oz

Soient $(\vec{S}_l)_x$, $(\vec{S}_l)_y$ les composantes de \vec{S}_l suivant les plans (ox) et (oy) , $(\delta \vec{S}_l)_x = (\vec{S}_l)_x$ et

$$(\delta \vec{S}_l)_y = (\vec{S}_l)_y$$

L'équation (2.8) peut se réécrire comme suit :

$$\hbar \frac{d(S_l)_x}{dt} = 2J \sum (S_l)_y - (S_l)_y \quad (2.9)$$

$$\hbar \frac{d(S_l)_y}{dt} = 2J \sum (S_l)_x - (S_l)_x \quad (2.10)$$

$$\hbar \frac{d(S_l)_z}{dt} = 0 \quad (2.11)$$

On cherche des solutions de la forme d'ondes progressives. Alors on pose :

$$(S_l)_x = U e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad \text{et} \quad (S_l)_y = V e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (2.12)$$

Avec \vec{k} et \vec{r} sont respectivement, le vecteur d'onde et le vecteur position de \vec{S}_l .

On remplace ces solutions dans les équations (2.9) et (2.10), on obtient :

$$-i\hbar\omega U = 2JS_l\eta_l \left[1 - \frac{1}{Z_l} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r})}\right] V \quad (2.13)$$

$$-i\hbar\omega V = 2JS_l\eta_l \left[1 - \frac{1}{Z_l} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r})}\right] U \quad (2.14)$$

Avec Z_l est le nombre de proches voisins (nombre de coordination).

Avec η_l est le nombre de plus proches voisins qu'on appelle aussi le nombre de coordination. Les solutions non-triviales de U et de V correspondent à :

$$\hbar\omega = 2JS_l\eta_l \left[1 - \frac{1}{Z_l} \sum_{\vec{r}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r})} \right] \quad (2.15)$$

Cette dernière équation est appelée relation de dispersion d'onde de spins, elle permet de tracer les courbes de dispersion des magnons.

1.2. Approche quantique

Si, on cherche à construire l'équivalent quantique de l'approche précédente, il est nécessaire d'avoir recours à des approximations basées sur le formalisme de la seconde quantification et les transformations de Holstein et Primakoff [16]. Ces derniers ont été les premiers auteurs à travailler sur la théorie d'ondes de spins en 1940, en incluant les interactions de types dipolaires et pseudo-dipolaires, cela a donné naissance à un nouveau et puissant formalisme qui est devenu la base de plusieurs études théoriques sur les ondes de spins dans les matériaux ferromagnétiques [17-21].

Soit ψ_S^z la fonction d'onde de spin. L'indice S indique l'amplitude de spin et z la composante du spin suivant l'axe (Oz). La théorie quantique de moment angulaire donne les relations suivantes :

$$S^+ \psi_S^z = \sqrt{(S-z)(S+z+1)} \psi_S^{z+1} \quad (2.16)$$

$$S^- \psi_S^z = \sqrt{(S+z)(S-z+1)} \psi_S^{z-1} \quad (2.17)$$

$$S^z \psi_S^z = z \psi_S^z \quad (2.18)$$

Quand l'opérateur $S^+ = S^x + iS^y$ augmente la composante z , l'opérateur $S^- = S^x - iS^y$ la diminue, par une unité. Comme z varie de $-S$ à $+S$, il y a $(2S+1)$ valeurs de z . En général, on écrit $S^z = S - n$ où n est le nombre d'ondes de spins excitées.

On utilise les fonctions correspondantes en n et en remplace :

$$\psi_S^z \text{ par } \varphi_S(n), \psi_S^{z+1} \text{ par } \varphi_S(n-1), \text{ et } \psi_S^{z-1} \text{ par } \varphi_S(n+1)$$

La diminution de z correspond à l'augmentation de n et vice versa. Les équations (2.16), (2.17), (2.18) deviennent :

$$S^+ \varphi_S(n) = \sqrt{n(2S-n+1)} \varphi_S(n-1) = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{n-1}{2S}} \sqrt{n} \varphi_S(n-1) \quad (2.19)$$

$$S^- \varphi_S(n) = \sqrt{(2S-n)(n+1)} \varphi_S(n+1) = \sqrt{2S} \sqrt{n+1} \sqrt{1 - \frac{n}{2S}} \varphi_S(n+1) \quad (2.20)$$

$$S^z \varphi_S(n) = (S-n) \varphi_S(n) \quad (2.21)$$

On introduit les opérateurs de création et d'annihilation a et a^+ définis par :

$$a \varphi_S(n) = \sqrt{n} \varphi_S(n-1) \quad (2.22)$$

$$a^+ \varphi_S(n) = \sqrt{n+1} \varphi_S(n+1) \quad (2.23)$$

$$a^+ a \varphi_S(n) = n \varphi_S(n) \quad (2.24)$$

Les n sont les valeurs propres de l'opérateur $a^+ a$ qui correspond au nombre d'ondes de spin excitées.

Les équations (2.22) et (2.24) donnent alors :

$$S^z = S - a^+ a \quad (2.25)$$

$$S^+ = \sqrt{2S} f(S) a \quad (2.26)$$

$$S^- = \sqrt{2S} a^+ f(S) \quad (2.27)$$

Où

$$f(S) = \sqrt{1 - \frac{a^+ a}{2S}} \quad (2.28)$$

Les transformations (2.25) et (2.28) sont dites transformations de Holstein-Primakoff.

Si, on considère l'Hamiltonien de Heisenberg suivant :

$$H = -2J \sum_{(l,l')} \vec{S}_l \vec{S}_{l'} - g\mu_B B \sum_l S_l^z \quad (2.29)$$

où les interactions sont limitées aux premiers voisins. B est l'amplitude de champ magnétique appliqué dans la direction z , g et μ_B sont le facteur de Landé et le magnéton de Bohr, respectivement.

En utilisant la transformation suivante :

$$S^\pm = S^x \pm iS^y \quad \text{pour} \quad \vec{S}_l \text{ et } \vec{S}_{l'}$$

On réécrit l'Hamiltonien H comme :

$$H = -2J \sum_{(l,l')} [S_l^z S_{l'}^z + \frac{1}{2}(S_l^+ S_{l'}^- + S_l^- S_{l'}^+)] - g\mu_B B \sum_l S_l^z \quad (2.30)$$

Si, on remplace S^\pm et S^z par (2.25) et (2.27), on obtient :

$$H = -2J \sum_{(l,l')} [S^2 + S a_l^+ \phi_l(S) \phi_{l'}(S) a_{l'} + S \phi_l(S) a_l a_{l'}^+(S) - S a_l^+ a_l - S a_{l'}^+ a_{l'} - a_l^+ a_l a_{l'}^+ a_{l'}] - g\mu_B B \sum_l (S - a_l^+ a_l) \quad (2.31)$$

Il est impossible de trouver les valeurs propres de cet Hamiltonien à cause de la présence des termes non linéaires, tels que $a_l^+ a_l a_{l'}^+ a_{l'}$, $f_l(S)$ et $f_{l'}(S)$. Dans la première approximation, on peut supposer que le nombre d'ondes de spins excitées n est petit, et on fait un développement limité pour $\phi_l(S)$ et $\phi_{l'}(S)$ comme suit :

$$\phi_l(S) \approx 1 - \frac{a_l^+ a_l}{4S} + \dots \quad (2.32)$$

$$\phi_{l'}(S) \approx 1 - \frac{a_{l'}^+ a_{l'}}{4S} + \dots \quad (2.33)$$

L'équation (2.31) devient à l'ordre quadratique en a^+ et a

$$H = -ZJNS^2 - g\mu_B BNS + 4JS \sum_{(l,l')} (a_l^+ a_l - a_l^+ a_l) + g\mu_B B \sum_l a_l^+ a_l \quad (2.34)$$

On introduit les transformations de Fourier suivante :

$$a_l^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ik \cdot \vec{l}} a_k^+ \quad (2.35)$$

$$a_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ik \cdot \vec{l}} a_k \quad (2.36)$$

Avec Z le nombre de proches voisins et N est le nombre total de spin du système.

On obtient :

$$H = \sum_{\vec{k}} [2ZJS(1 - \gamma_{\vec{k}}) + g\mu_B B] a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \quad (2.37)$$

Où

$$\varepsilon_{\vec{k}} = 2ZJS(1 - \gamma_{\vec{k}}) + g\mu_B B \quad (2.38)$$

Avec :

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \hbar \omega_{\vec{k}} \quad \text{et} \quad \gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{Z} \sum_{\vec{l}'} e^{i\vec{k}\vec{l}'}$$

Dans le cas où $B = 0$, on retrouve la relation de dispersion obtenue par la méthode classique. L'avantage de cette méthode permet de tenir compte des termes supérieurs des opérateurs $a^+ a$ dans (2.32), qui représentent les interactions magnon-magnon qui deviennent de plus en plus importants avec l'augmentation de la température.

2. Dynamique des spins dans les couches minces ferromagnétiques parfaites

Le film magnétique mince est considéré comme un système de n plans monoatomiques, parallèles aux faces de la couche, orientés dans une direction cristallographique quelconque, sans défauts. Les sites situés sur les faces de la couche n'ont pas de voisins d'un côté du plan monoatomique qui les contient.

A cause de l'existence de surfaces, nous avons tenu compte de l'anisotropie surfacique introduite pour la première fois par Néel [22-23], qui observa souvent une direction préférentielle des spins suivant l'axe de facile aimantation dirigée, en général, suivant l'axe z . Cette anisotropie joue un rôle essentiel dans les considérations des propriétés des couches minces : elle explique beaucoup d'effets dans ces couches. Par conséquent, nous avons ajouté, dans l'expression de l'Hamiltonien, un terme d'anisotropie.

Dans cette partie, nous avons considéré deux types de films ferromagnétiques ultraminces, chaque type est constitué de cinq plans monoatomiques, le premier est à maillage cubique et le deuxième est à maillage hexagonal, Fig.2.3 et Fig.2.7. A très basses températures, tous les spins du solide peuvent précéder en phase pour une pulsation donnée. La forme générale de l'Hamiltonien pour chaque une des couches atomiques est donné par :

$$H = - \sum_{\vec{l}, \vec{l}'} J_{\vec{l}, \vec{l}'} S_{\vec{l}} S_{\vec{l}'} - \sum_{\vec{l}} D_{\vec{l}} (S_{\vec{l}}^z)^2 - Bg\mu_B \sum_{\vec{l}} S_{\vec{l}}^z \quad (2.39)$$

Le premier terme correspond à l'énergie d'échange défini dans la partie précédente, le deuxième est le terme d'anisotropie, avec D_l est le champ d'anisotropie et le dernier terme correspond à l'effet Zeeman, où μ_B est le magnéton de Bohr et g est le facteur de Landé. Ce dernier terme nous l'avons négligé dans ce travail, car nous avons considéré que les systèmes étudiés loin de tout champ magnétique extérieur.

Grâce à la périodicité spatiale du réseau de spins, deux spins l et l' occupant deux sites équivalents du réseau effectuent à une phase près les mêmes mouvements de précession magnétique. C'est pourquoi, leurs amplitudes vérifient à chaque instant t , la relation suivante :

$$\bar{u}(l', \omega) = \bar{u}(l, \omega) \cdot \exp[\bar{q} \cdot \bar{r}(l, l')] \quad (2.40)$$

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

On obtient pour chaque type de film mince cinq équations, qui correspondent au mouvement des spins des cinq plans monoatomiques, qu'on peut regroupées sous la forme matricielle suivante :

$$[\Omega I - D_v(\bar{q})]u = 0 \quad (2.41)$$

Où : $[D_v(\bar{q})]$ est la matrice dynamique de taille (5x5), pour chaque donnée de \bar{q} , dont les éléments dépendent généralement des intégrales d'échange et $\Omega = \frac{\omega \hbar}{JS}$ est la fréquence normalisée.

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

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

$$\det(\Omega I - D_v(\bar{q})) = 0 \quad (2.42)$$

C'est cette équation qui permet de tracer les courbes de dispersion.

Les vitesses de transport de l'énergie ou de l'information dans le milieu sont appelées vitesses de groupe. Pour les déterminer, deux méthodes différentes peuvent être utilisées : la méthode des différences finies ou la méthode perturbative [24-25].

Les deux méthodes exigent la résolution du problème du guide d'ondes parfait :

$$D(\vec{q})\vec{u}_v = -\Omega(\vec{q})\cdot\vec{u}_v \quad (2.43)$$

Dans ce travail, nous avons choisi la méthode perturbative qui consiste à utiliser la similitude formelle entre l'équation (2.16) et l'équation de Schrödinger stationnaire $H\psi = E\psi$ portant sur les perturbations indépendante du temps en mécanique quantique. Elles sont définies pour des valeurs d'ondes \vec{q} réelles par l'équation :

$$\overrightarrow{grad}[\Omega(\vec{q})] = \frac{\partial\Omega}{\partial q} = V_g \quad (2.44)$$

Dans le cas où q est différent d'un réel, on pose $V_g = 0$.

2.1. Cas des films ferromagnétiques ultra-minces à maillage cubique

Dans ce premier cas, nous avons considéré un film ultramince constitué de cinq plans monoatomiques à cristallisation cubique, représenté sur la Fig.2.3. Nous avons représenté les courbes de dispersion et les vitesses de groupe pour deux cas d'anisotropies.

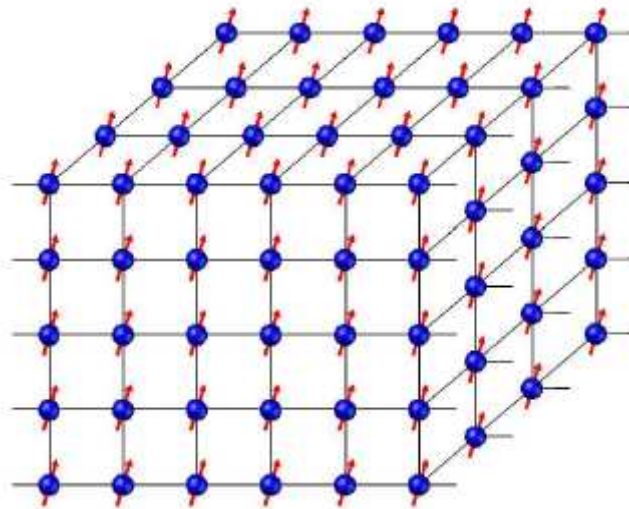


Fig.2.3 Représentation schématique d'un film ultramince fini à maillage cubique constitué de cinq plans atomiques.

2.1.1. Courbes de dispersions

Cas où $D_I = 0$

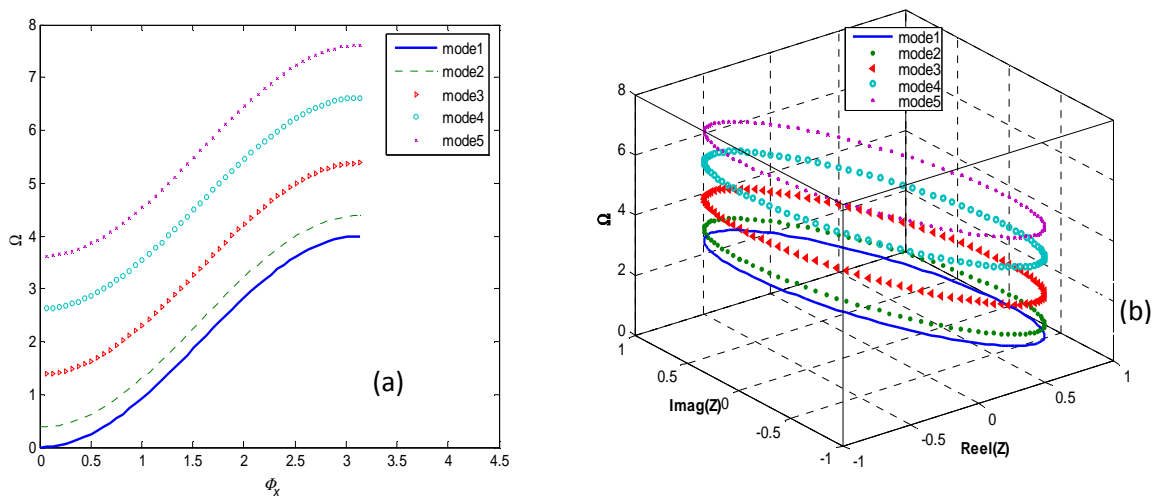


Fig.2.4 Courbes de dispersion d'un film ultramince à maillage cubique constitué de cinq plans atomiques, dans le cas d'une anisotropie nulle :- (a) $\Omega = f(\phi_x)$, - (b) $\Omega = f(Z)$.

Cas où $D_I = 10\%$ de J_{II}

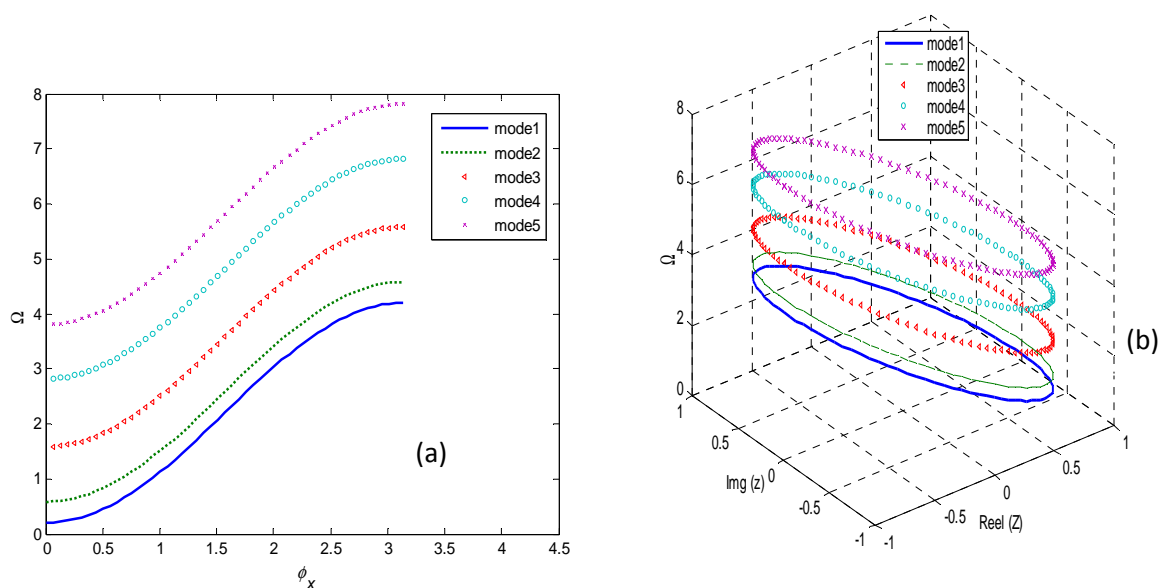


Fig.2.5 Courbes de dispersion d'un film ultramines à maillage cubique constitué de cinq plans atomiques pour une anisotropie non nulle :- (a) $\Omega = f(\phi_x)$, - (b) $\Omega = f(Z)$.

2.1.2. Courbes des vitesses de groupe

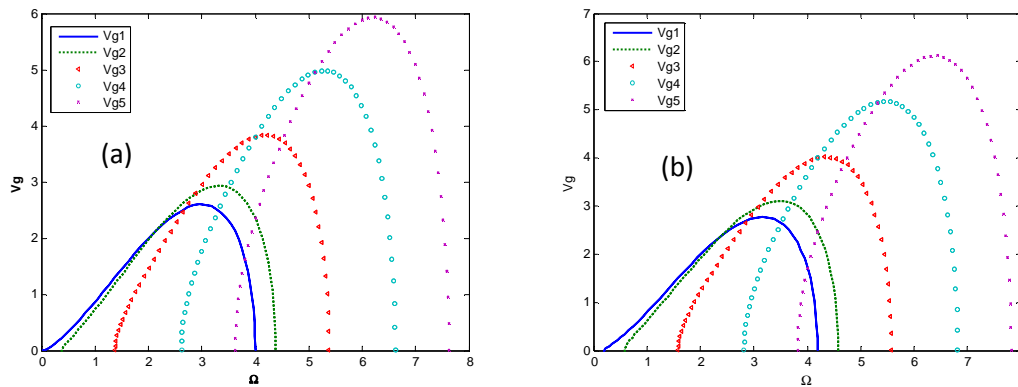


Fig.2.6 Courbes des vitesses de groupe d'un film mince à maillage cubique constitué de cinq plans atomique pour deux cas d'anisotropie :
 -(a) anisotropie nulle, -(b) anisotropie non nulle.

- Interprétation des résultats

La résolution de l'équation (2.42) pour une valeur de Z fixe, donne accès aux cinq modes propres Ω_v de magnons du film ultramince. Ceci a permis de représenter les courbes de dispersion des modes de magnons, en fonction de $\phi_x = q_x a$, lorsque q_x parcourt la première zone de Brillouin. Elles correspondent aux solutions $|Z| = 1$. Nous avons considéré deux cas d'anisotropie magnétique ; le premier pour une anisotropie D_l nulle et le deuxième pour une D_l de l'ordre de 10% de l'énergie d'échange J_{II} .

Sur la figure (2.4), correspondant à une anisotropie nulle, parmi les cinq modes de précession on note un mode acoustique ($\Omega \rightarrow 0$ quand $\phi_x \rightarrow 0$) et quatre modes optiques.

La figure (2.5), correspond aux courbes de dispersion pour le cas d'une anisotropie non nulle qui est de $D_l = 10\%J$. On remarque que les cinq modes sont optiques et se décalent vers les hautes énergies.

Les plages de propagation des modes (la numérotation des modes se fait de bas en haut) pour les deux cas d'anisotropies sont résumées sur le tableau (2.1) suivant :

D_l Le mode	$D_l = 0$	$D_l = 10\%$ de J_{II}
Mode 1	$[\Omega_{1\min} = 0.00, \Omega_{1\max} = 4.00]$	$[\Omega_{1\min} = 0.20, \Omega_{1\max} = 4.20]$
Mode 2	$[\Omega_{2\min} = 0.38, \Omega_{2\max} = 4.38]$	$[\Omega_{2\min} = 0.58, \Omega_{2\max} = 4.58]$
Mode 3	$[\Omega_{3\min} = 1.38, \Omega_{3\max} = 5.38]$	$[\Omega_{3\min} = 1.58, \Omega_{3\max} = 5.58]$
Mode 4	$[\Omega_{4\min} = 2.60, \Omega_{4\max} = 6.60]$	$[\Omega_{4\min} = 2.80, \Omega_{4\max} = 6.80]$
Mode 5	$[\Omega_{5\min} = 3.60, \Omega_{5\max} = 7.60]$	$[\Omega_{5\min} = 3.80, \Omega_{5\max} = 7.80]$

Tableau 2.1 Les plages de propagation des modes de précession d'un film ultramince à maillage cubique pour les deux cas d'anisotropie.

Ce tableau montre que les modes de précession pour une anisotropie $D_l = 10\% J_{II}$ se décalent par rapport à ceux d'une anisotropie nulle de $\Delta\Omega = 0.20$ dans l'ensemble des modes de précession du film mince.

Sur les Figures (2.6a) et (2.6b), nous avons représenté respectivement, les vitesses de groupe pour le cas d'une anisotropie nulle et d'une anisotropie non nulle. Nous constatons sur ces deux figures que les cinq courbes évoluent globalement avec la même allure. Elles montrent des zones où les vitesses des différents modes se recouvrent. Cela signifie que les modes peuvent être excités simultanément dans l'intervalle de fréquences $\Omega \in [3.60, 4.00]$ dans le premier cas ($D_l = 0$) et $\Omega \in [3.82, 4.20]$ dans le second cas ($D_l = 10\% J_{II}$). Si nous comparons les deux figures nous retrouvons les caractéristiques citées précédemment dans les courbes de dispersion ; les vitesses de groupe pour le cas d'une anisotropie $D_l = 10\%$ de J_{II} se décalent vers les hautes énergies par rapport à celles du cas d'anisotropie nulle.

2.2. Cas des films ferromagnétiques ultra-minces à maillage hexagonal

Dans ce deuxième cas, nous avons considéré un autre film ultramince de même épaisseur que le précédent, toutefois celui-ci est à maillage hexagonal. Sur la Fig.2.8, 2.9 et 2.10 nous avons représenté ses courbes de dispersion et ses vitesses de groupe toujours pour deux cas d'anisotropies.

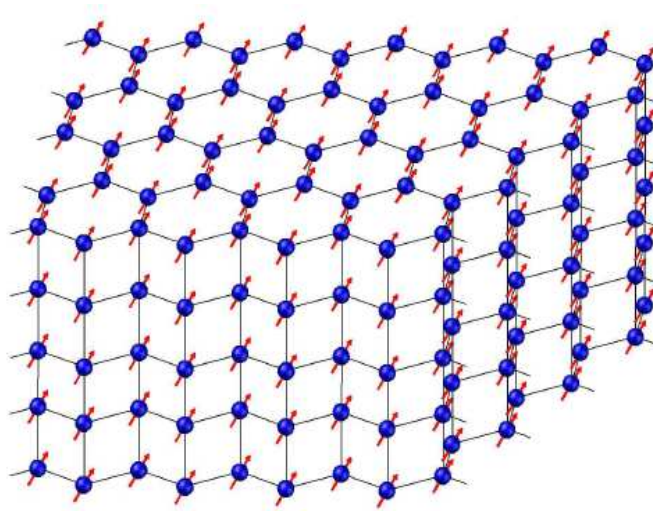


Fig.2.7 Représentation schématique d'un film ultramince fini à maillage hexagonal constitué de cinq plans atomiques.

2.2.1. Courbes de dispersion

Cas où $D_I = 0$

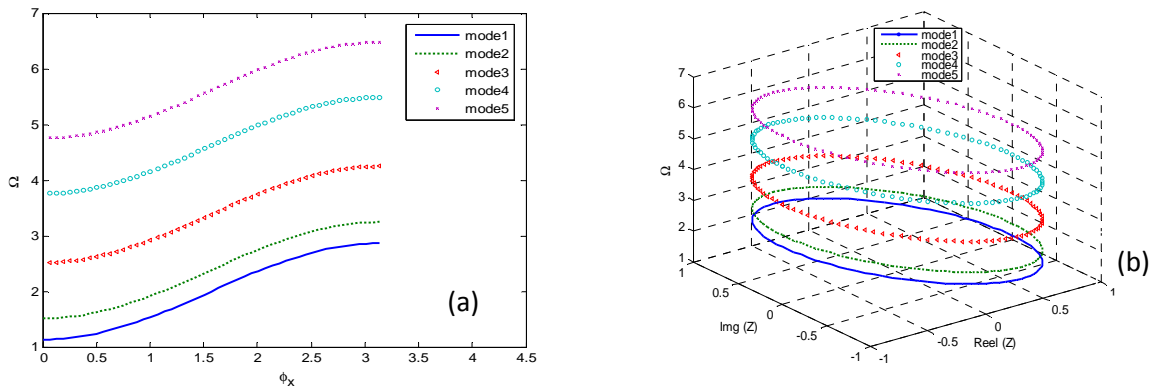


Fig.2.8 Courbes de dispersion d'un film ultramince à maillage hexagonal constitué de cinq plans atomiques, dans le cas d'une anisotropie nulle :- (a) $\Omega = f(\phi_x)$, - (b) $\Omega = f(Z)$.

Cas où $D_I = 10\%$ de J_{II}

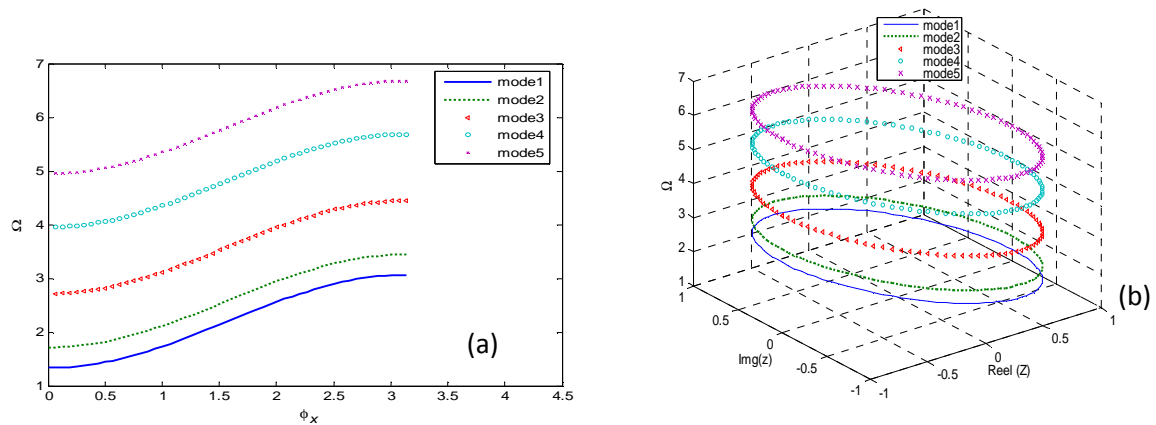


Fig.2.9 Courbes de dispersion d'un film ultramince à maillage hexagonal constitué de cinq plans atomiques pour une anisotropie $D_I = 10\%$ de J_{II} :- (a) $\Omega = f(\phi_x)$, - (b) $\Omega = f(Z)$.

2.2.2. Courbes des vitesses de groupe

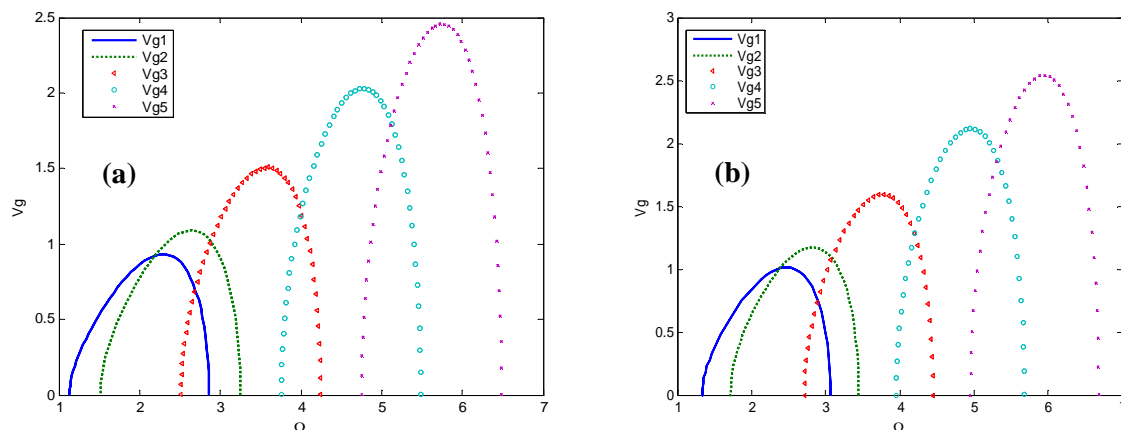


Fig.2.10 Courbes des vitesses de groupe d'un film mince à maillage hexagonal constitué de cinq plans atomique pour deux cas d'anisotropie :
- (a) anisotropie nulle, - (b) anisotropie non nulle.

- Interprétations des résultats

Nous avons refait les mêmes calculs pour déterminer la dispersion des magnons dans les films minces à maillage hexagonal, en utilisant toujours l'équation (2.42), qui nous a permis de tracer les cinq modes de magnons, pour les deux cas d'anisotropie examinés précédemment ; le premier pour D_l nulle et le second pour $D_l = 10 \%$ de l'énergie d'échange J_H .

Sur la Fig.2.8 correspondant aux modes de magnons dans le cas d'une anisotropie de surface D_l nulle, nous remarquons que tous les modes obtenus sont totalement optiques et aucun mode acoustique.

Sur la Fig.2.9, qui représente les courbes de précession de magnons dans le cas d'une anisotropie non nulle ($D_l = 10 \%$ de J_H), on remarque que les cinq modes restent toujours optiques mais se décalent vers les hautes énergies.

Les plages de propagation des modes (la numérotation de bas en haut) pour les deux cas d'anisotropies pour ce type de film sont résumées sur le tableau (2.2) ci-dessous :

D_l	$D_l = 0$	$D_l = 10\% \text{ de } J_{II}$
N° de mode		
Mode 1	$[\Omega_{1\min} = 1.13, \Omega_{1\max} = 2.86]$	$[\Omega_{1\min} = 1.33, \Omega_{1\max} = 3.06]$
Mode 2	$[\Omega_{2\min} = 1.51, \Omega_{2\max} = 3.24]$	$[\Omega_{2\min} = 1.71, \Omega_{2\max} = 3.54]$
Mode 3	$[\Omega_{3\min} = 2.51, \Omega_{3\max} = 4.24]$	$[\Omega_{3\min} = 2.72, \Omega_{3\max} = 4.45]$
Mode 4	$[\Omega_{4\min} = 3.75, \Omega_{4\max} = 5.48]$	$[\Omega_{4\min} = 3.95, \Omega_{4\max} = 5.68]$
Mode 5	$[\Omega_{5\min} = 4.75, \Omega_{5\max} = 6.48]$	$[\Omega_{5\min} = 4.95, \Omega_{5\max} = 6.68]$

Tableau.2.2 Les plages de propagation des modes de précession pour les deux cas d'anisotropies dans le cas d'un film ultramince à maillage hexagonal.

Ce tableau montre que les modes de précession, dans le cas d'un film mince à maillage hexagonal constitué de cinq plans atomiques, pour une anisotropie $D_l = 10\% J_{II}$ se décalent par rapport à ceux d'une anisotropie nulle de $\Delta\Omega = 0.20$ pour tout les modes.

Sur les Fig.2.10a et Fig.2.10b, nous avons représenté les vitesses de groupe pour les deux cas d'anisotropie. Nous constatons que les courbes évoluent globalement avec la même allure pour les deux cas d'anisotropies. Elles montrent des zones où les vitesses de groupe de quelques modes se recouvrent, cela signifie que ces modes peuvent être excités simultanément.

On a pour le cas d'anisotropie nulle, les trois premiers modes se recouvrent dans l'intervalle $\Omega \in [2.51, 2.86]$, les modes 3 et 4 dans l'intervalle $\Omega \in [3.75, 4.24]$ et les modes 4 et 5 se recouvrent dans l'intervalle de fréquence $\Omega \in [4.75, 5.48]$.

Dans le deuxième cas d'anisotropie, le mode 1, 2 et 3 se recouvrent pour $\Omega \in [2.72, 3.06]$, les modes 3 et 4 pour $\Omega \in [3.92, 4.45]$ et les modes 4 et 5 pour $\Omega \in [4.95, 5.68]$.

Pour ce film mince qui est de structure hexagonale, on retrouve aussi, sur les deux figures des vitesses le déplacement des vitesses de groupe vers les hautes fréquences dans le cas d'une anisotropie $D_l = 10\% \text{ de } J_{II}$ par apport à celles du cas d'anisotropie nulle.

Conclusion

La première partie de ce chapitre est un rappel sur les différentes méthodes théoriques, qui permettent d'analyser le comportement des magnons dans les films minces parfaits à basse température. Dans la deuxième partie, nous avons appliqué ces méthodes à deux types de

films minces l'un à maillage cubique et l'autre à maillage hexagonal, et nous avons analysé l'influence de l'anisotropie sur la dynamique de ces deux films ultraminces. Le modèle, d'ondes de spins présenté dans ce chapitre, suppose l'existence d'une structure ordonnée, et qu'il n'est valable que dans la limite des basses températures. Le modèle prévoit l'existence de cinq branches d'excitations (de type boson) où cinq correspond au nombre de plans atomiques du film ultramine. Ces excitations sont en outre associées à des mouvements de précession des spins autour de leur direction moyenne, et qui se propagent dans le film. On suppose que ces excitations sont transverses, car le spin tourne dans le plan perpendiculaire à cette direction privilégiée.

Les propriétés des couches minces peuvent être considérées de deux points de vue : le comportement des grandeurs physiques en fonction du maillage de la couche et en fonction de l'anisotropie. On peut constater que la présence de l'anisotropie ne change pas l'allure des courbes de dispersion, mais elle les décale vers les hautes énergies. Par contre, le maillage influence les intervalles de propagations de ces films minces.

Références du chapitre II

- [1] F. Bloch Z. Phys 61, 206 (1930).
- [2] K. Matsushita, M. Sasaki, J. Sato, and H. Imamura, J. Phys. Soc. Jpn. 82, 033801(2013).
- [3] W. Kipferl, M. Dumm, P. Kotissek, F. Steinbauer, and G. Bayreuther, J. OF App. Phys, 15, 7417, (2004).
- [4] L. A. Prozorova and A. I. Smirnov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 74, 1554 (1978).
- [5] P. W. Anderson, Phys. Rev. 83, 1260 (1951).
- [6] R. Kubo, Phys. Rev. 87, 568 (1952).
- [7] T. Oguchi, Phys. Rev 117, 117 (1960).
- [8] C. Tsallis, *Diagonalization method for the general Hamiltonian of an assembly of bosons*, J. Math. Phys, 19, 277 (1978).
- [9] D. C. Mattis, *Theory of Magnetism I*, Springer Verlag, (1988).
- [10] R. M. White, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer Verlag, (1987).
- [11] A. Auerbach, *Interacting electrons and Quantum Magnetism*, Springer Verlag, (1994).
- [12] D. C. Wallace, PR, 128, 1614 (1962).
- [13] S. Petit, Collection SFN 10, 449 (2010), published by EDP Sciences.
- [14] C. Kittel. *Physique de l'état solide*. Dunod (2007).
- [15] H. T. Diep, *Physique de la matière condensée*, Dunod (2003).
- [16] T. Holstein et H. P. Primakoff Phys. Rev. 58, 1098 (1940).
- [17] J. G. Hirsch, O. Castanos, R. Lopez-Pena and E. Nahmad-Achar, Phys. Scr. 87, 038106 (2013).
- [18] A. Klein, C. T. Li and M. Vallieres, Lect. Not. Phys. 142, 76 (1981).
- [19] Z. Chang, Phys. A. 204, 405 (1995).
- [20] A. V. Makhankov, V. G. Makhankov, Physica Status Solidi (b), 145, 669 (1988).
- [21] A. Kreisel, F. Sauli, L. Bartosch, and P. Kopietz, Eur. Phys. J. B71, 59 (2009).
- [22] L. Néel, C. R. Acad. Sci. Paris, 237, 1468 (1953).
- [23] D. Navas, C. Nam, D. Velazquez and C. A. Ross, Phys. Rev B 81, 224439 (2010).
- [24] S. Nicaise, *Analyse numérique et équations aux dérivées partielles*, Dunod, (2000).
- [25] J. Rappaz, M. Picasso, *Introduction à l'analyse numérique*, Presses Polytechniques et Universitaires Romandes (1998).

Méthode théorique pour le calcul des spectres magnétiques des films ferromagnétiques ultraminces en présence d'inhomogénéités

Sommaire

1. Les différents défauts de structure dans un film mince
2. Méthode et formalisme utilisés
 - 2.1. Principe de la méthode utilisée
 - 2.2. Le formalisme utilisé
3. Définition de la matrice dynamique d'un système perturbé
 - 3.1. Définition de la matrice de défaut
 - 3.2. Définition de la matrice de raccordement
4. Définition des grandeurs physiques
 - 4.1. Calcul des états localisés de spins dans un système
 - 4.2. Détermination des coefficients de transmission et de réflexion
 - 4.3. Conductance magnonique
 - 4.4. Calcul des densités d'états magnoniques

Malgré la maîtrise des moyens de fabrication des films ultraminces, ces derniers ne sont jamais parfaits. Les défauts créés par la surface et par le désordre atomique au voisinage de la surface qui s'y trouvent gouvernent une grande partie de leurs propriétés, dont on peut tirer avantage dans plusieurs applications. Hélas! Ces défauts étaient autrefois souvent négligés par les modèles théoriques. Car leur étude pose des problèmes théoriques compliqués à résoudre, qui sont liés essentiellement à la brisure de symétrie. Ainsi fallait-il trouver des méthodes appropriées pour leurs études. Actuellement, plusieurs études sont menées pour comprendre leurs influences sur les propriétés magnétiques dans les systèmes à basse dimension [1-5]. Notre approche, dans ce domaine, est basée sur celle proposée par R. Landauer et largement développée par M. Büttiker initialement pour la description du transport électrique dans les systèmes mésoscopiques [6-10]. Nous l'avons transposée pour le transfert d'ondes de spins à travers les défauts de structure. Un des avantages de ce formalisme est qu'il permet de calculer de nombreux phénomènes, et cela en utilisant la méthode dite de raccordement que nous allons expliquer dans ce chapitre, après avoir donné les différents défauts qu'un matériau peut inclure.

1. Les différents défauts de structure dans un film mince

Certaines propriétés des matériaux dépendent essentiellement de la structure et très peu des défauts. D'autres, en revanche, sont fortement influencées par la nature et la concentration des défauts qu'ils contiennent. Ces derniers peuvent être classés en quatre catégories : ponctuels, linéaires, surfaciques et volumiques [11-13].

1.1. Défauts ponctuels

Ce sont des perturbations du réseau à l'échelle atomique (à zéro dimension). Parmi ces défauts citons :

- ✓ Les lacunes : sont l'absence des atomes en nœuds du réseau cristallin. Elles jouent un rôle fondamental dans la diffusion à l'état solide qui engendre des déplacements d'atomes sur de longues distances et est à la base des traitements thermique.
- ✓ Les interstitiels : sont des atomes qui s'insèrent dans les espaces vides du réseau cristallin. Si l'atome en insertion est lui-même un atome du réseau cristallin, on parle d'auto-interstitiel. Si l'atome est de nature différente, on parle d'hétéro-interstitiel. Ces défauts jouent un grand rôle dans la constitution des alliages.
- ✓ Les défauts extrinsèques : sont dus à la présence d'atomes étrangers, appelés impuretés, dans le réseau, qui peut être une substitution d'un atome du réseau dite solution solide de substitution, soit en interstitiel dite solution solide interstitielle. Ce type de défauts joue également un rôle important dans la constitution des alliages.
- ✓ Lorsque plus de deux défauts s'associent, on parle d'amas de défauts (on utilise fréquemment le terme anglais *cluster*). Les amas apparaissent en général pour des concentrations de défauts supérieures à 10^{-2} défauts par maille.

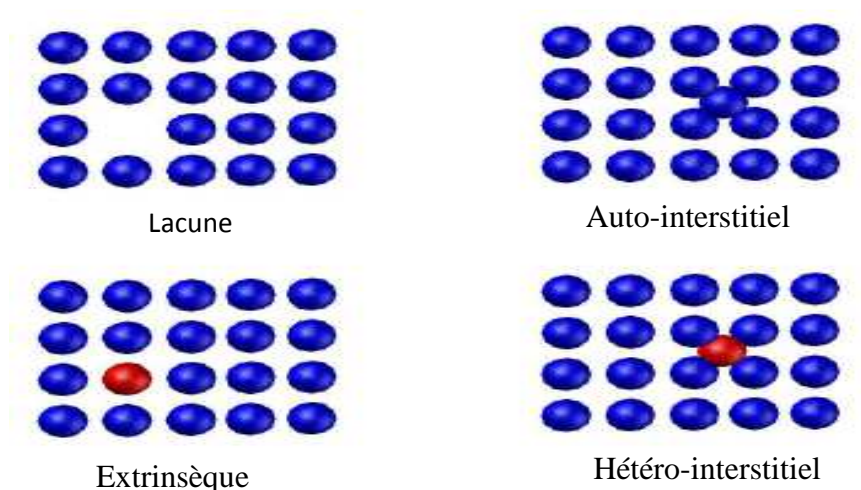


Fig.3.1 Représentation schématique des défauts ponctuels.

Les défauts ponctuels influencent le comportement mécanique à chaud, la diffusion de la matière et de la chaleur, ainsi que la conductivité électrique. Dans les cristaux transparents, les défauts ponctuels ou leurs associations peuvent former des centres colorés en modifiant les niveaux d'énergie et les longueurs d'ondes absorbées et donc la couleur visible.

Enfin, les défauts ponctuels peuvent créer les distorsions élastiques du cristal : un atome interstitiel ou un gros atome de substitution vont « écarter » les atomes voisins et donc dilater la maille, créant ainsi des « micro-contraintes » de compression. À l'inverse, une lacune ou un petit atome de substitution vont créer une contraction de la maille. Ces effets sont visibles par la diffraction de rayons X ou la diffraction d'électrons dans un microscope électronique en transmission [14-17].

1.2. Défauts linéaires

Ce sont les défauts atomiques à une dimension. Ils correspondent à une discontinuité dans l'organisation de la structure cristalline. On les appelle souvent les dislocations et on distingue :

- ✓ Dislocation coin : géométriquement, une dislocation coin peut être comprise comme résultant de l'introduction d'un demi plan atomique à l'intérieur d'un cristal parfait. Les atomes du demi-cristal supérieur sont dilatés, les autres sont comprimés.
- ✓ Dislocation vis : on peut représenter une dislocation vis en imaginant que l'on fait une entaille dans le cristal et que l'on fait glisser l'un des bords de cette entaille par rapport à l'autre d'une distance interatomique. Une dislocation vis transforme les plans atomiques successifs en une surface hélicoïdale d'où son nom.
- ✓ Dislocation mixte : dans le cas général la ligne de dislocation n'est pas forcément droite. Une dislocation courbée a des parties vis, des parties coin, et des parties intermédiaires. Une telle dislocation est appelée dislocation mixte.

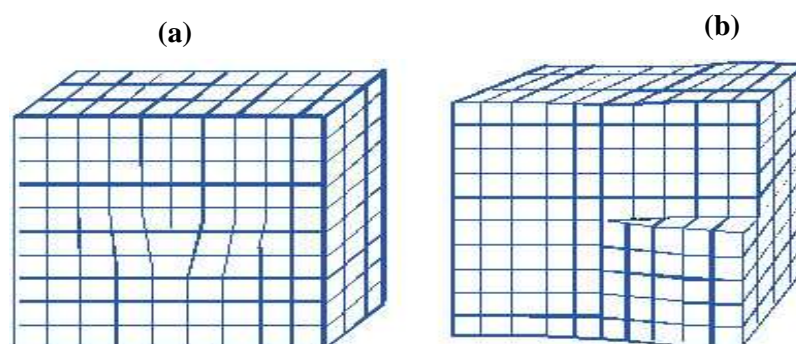


Fig.3.2 Représentation schématique d'une dislocation (a) coin (b) vis.

Les dislocations définissent plusieurs propriétés physiques des matériaux, comme la propagation de la déformation plastique. Elles sont responsables de leur ductilité et permettent la mise en forme des pièces métalliques. Les déformations du réseau cristallin qu'elles induisent facilitent la diffusion d'atomes, elles permettent ainsi l'installation de défauts à ses

alentours ce qu'on appelle nuage de Cottrell. Comme elles influencent aussi les propriétés électroniques des semi conducteurs [18-19].

1.3. Défauts surfaciques

Ce sont des défauts à deux dimensions, on peut trouver :

- ✓ Les joints de grains : généralement les matériaux cristallins utilisés ne sont pas des monocristaux mais formés d'un ensemble de grains de taille plus ou moins grande environ 1 μm à plusieurs centimètres, selon le mode d'élaboration et les traitements subis par le matériau. Ces grains sont juxtaposés et les régions où les différents grains sont en contact sont appelés les joints de grains. Ces derniers sont des zones de transition caractérisés par des structures plus ou moins perturbées qui permettent l'accommodation géométrique et cristallographique des grains constitutifs du polycristal. Dans un matériau homogène, deux cristaux voisins ont le même réseau cristallin, mais orienté différemment. Le joint de grain est donc une frontière de désorientation qui est une interface dont l'épaisseur est très petite devant les dimensions du cristal où les atomes restent organisés, mais de sorte à adapter la désorientation.
- ✓ Les défauts d'empilement et les macles : on appelle défaut d'empilement une modification de la séquence d'empilement. Ces défauts peuvent être intrinsèques, ceci correspond au retrait d'un plan. Il peut arriver également que la séquence se transforme localement en une structure symétrique au cours de la solidification ou de la recristallisation. Le défaut d'empilement occasionné par cette altération de la séquence est appelé macle.

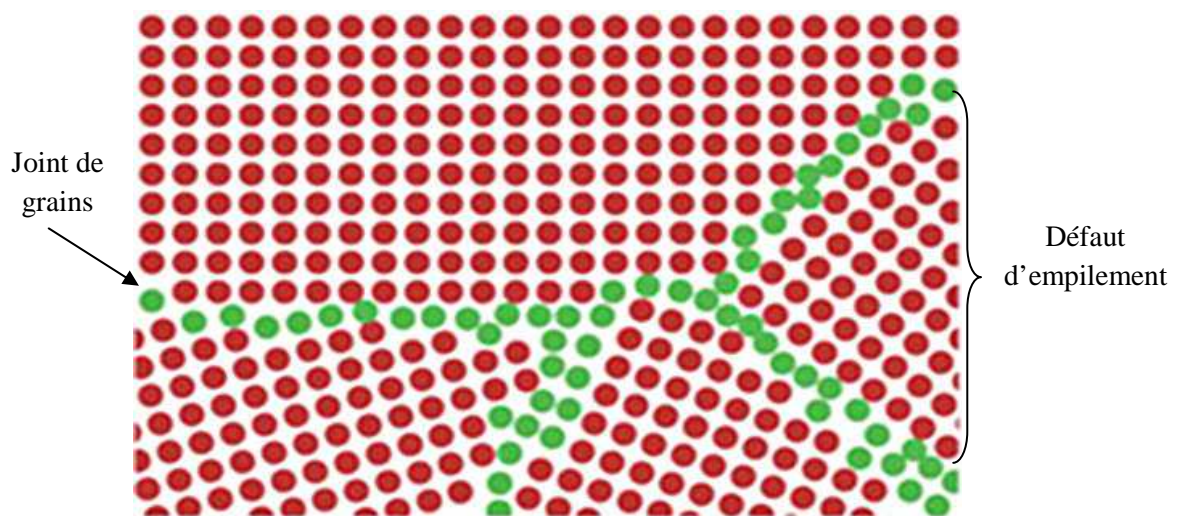


Fig.3.3 Représentation schématique des défauts surfaciques.

D'une manière générale, les joints de grains sont à la fois des sources et des pièges pour les défauts ponctuels et les dislocations. Au cours d'une trempe, les lacunes excédentaires s'éliminent plus rapidement aux joints de grains. Ils jouent également un rôle important dans la déformation plastique puisqu'ils peuvent induire des dislocations sous l'effet d'une contrainte et constituer des obstacles au mouvement des dislocations. Les joints de grain peuvent être une zone de fragilité (rupture dite « inter-granulaire »). En particulier, la ségrégation de certains atomes peut fragiliser les joints de grain. Par ailleurs, de même que les joints de grain sont attaqués préférentiellement par les acides, ils peuvent subir une corrosion plus importante que le reste du cristal (corrosion inter-granulaire). Les joints de grain bloquent les dislocations ; en effet, si une dislocation veut « franchir » le joint de grain, elle doit changer de direction de glissement et de plan de glissement. Enfin, à haute température, les joints de grain peuvent glisser, ce qui provoque du fluage. Les défauts d'empilement influent les propriétés mécaniques.

1.4. Défauts volumiques

Les défauts volumiques sont des défauts à trois dimension est le remplacement d'une partie du cristal par un volume d'un composé étranger. Ce dernier peut différer du cristal par sa nature chimique et/ou cristallographique et peut être un précipité ou une inclusion.

- ✓ Les précipités : sont des particules de seconde phase qui sont formés par combinaison entre les atomes du métal et les atomes des éléments d'alliage. On trouve des précipités cohérents, c'est ceux qui présentent une continuité cristallographique avec la matrice, c.à.d. les réseaux cristallins de la matrice et du précipité sont semblables mais leur paramètres de maille peuvent être différents, ce qui entraîne une distorsion élastique de la matrice. Ou bien des précipités incohérents qui n'ont aucune relation cristallographique avec la matrice.
- ✓ Les inclusions : correspondent à des impuretés qui proviennent généralement de son élaboration depuis l'état liquide. Ce sont généralement des sulfures, des oxydes ou des silicates. Ces derniers sont toujours incohérents.

Les défauts volumiques n'ont pas les mêmes propriétés mécaniques, en particulier le même module de Young que le reste du matériau. Il s'ensuit des concentrations de contrainte et donc un amorçage de rupture possible. Ils n'ont pas non plus les mêmes propriétés chimiques. Il peut donc se produire des corrosions localisées. Enfin, ce sont des

obstacles aux dislocations. Dans les matériaux ductiles, la présence de précipités entraîne donc une élévation de la limite élastique appelée durcissement structural.

2. Méthode et formalisme utilisés

2.1. Principe de la méthode utilisée

Pour traiter le problème de la dispersion des magnons en présence de défauts de structure dans des films ultraminces ferromagnétiques, nous avons eu recours à la méthode analytique dite de raccordement, qui consiste à décrire le mouvement de précession des spins par un nombre fini d'équations [20-23] ; elle est basée sur le raccordement des états localisés créés par les défauts et les modes évanescents de volume. Son application exige que le film mince soit divisé en trois zones distinctes (Voir Fig.3.4) :

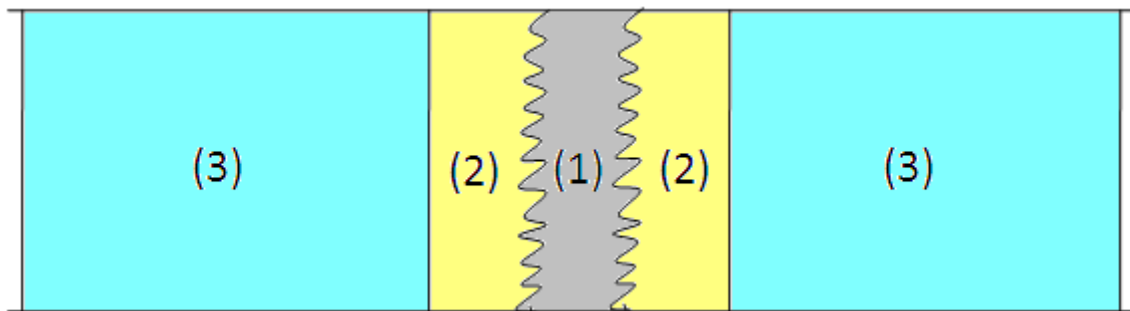


Fig.3.4 Représentation schématique d'un défaut magnétique couplant deux films minces ferromagnétiques selon le concept de la méthode raccordement.

i) Zones parfaites (3) : c'est la région où on retrouve la partie du film mince sans défauts; les spins ne sont pas influencés par la présence du défaut, elle est caractérisée par une périodicité tridimensionnelle. Elle permet de tracer les courbes de dispersion en volume et de définir les modes propageants et les modes évanescents du système, dont nous aurons besoin, car on cherchera toutes les solutions du système sauf celles qui donnent lieu à des modes divergents. Ces solutions sont obtenues par la méthode de Gagel [24-25] qui consiste à linéariser le système en augmentant la base des vecteurs propres du système parfait.

ii) Zone de défaut (1) : c'est la région qui renferme tout types de nanostructures, de défauts. Elle est généralement affectée par la relaxation et la reconstruction, d'où la perte de la périodicité du réseau. Elle permet d'obtenir la matrice dynamique du système perturbé, en écrivant les équations de mouvement de précession des spins de la zone (1) et celles des atomes de la zone (2) dite de raccordement, on obtient une matrice rectangulaire $D(m,n)$ de dimension $(m \otimes n)$. Avec m est le nombre de spins dans la zone (1) et (2) et n est le nombre de spins dans les zones (1) et (2) plus le nombre de spins qui joint la zone (2) à la zone (3).

iii) Zone de raccordement (2) : c'est la région intermédiaire entre la région parfaite et la région de défaut. Elle permet dans la modélisation théorique de raccorder analytiquement les modes induits par le défaut aux états de précession évanescents de la zone parfaite. On obtient une matrice $R(n,m)$ dite de raccordement qui relie analytiquement les déplacements précessionnels de spins appartenant à la zone de défaut et ceux des modes évanescents des deux guides d'ondes parfaits situés de part et d'autre de la zone nanostructurée.

2.2. Le formalisme théorique utilisé

Dans cette partie, nous présentons brièvement le formalisme utilisé pour l'étude des ondes de spins dans des films minces en présence de défauts. Celui-ci est comparable à celui développé par Landauer, Imry et Büttiker [6-10, 26-28] dans la description du transport électronique dans les systèmes mésoscopiques ; qui est basé sur la théorie quantique développée pour décrire l'injection de courant dans une jonction tunnel [29]. Cependant, l'idée fondamentale nouvelle [30] introduite par Landauer consiste à décrire la conductance d'un système comme un coefficient de transmission. Le système à étudier est un objet quantique relié par des fils de mesure parfaits à des réservoirs, comme le montre schématiquement la Fig.3.5. On définit le réservoir, appelé aussi contact ou terminal de la façon suivante :

- Il n'existe pas de relation de phase entre ce qui entre et ce qui sort d'un réservoir.
- Le réservoir absorbe les électrons et les renvoie dans le conducteur à un potentiel chimique et une température donnés.
- La résistance du réservoir est nulle, ou très faible devant celle de l'objet à étudier.

Le but est de décrire la transmission d'un réservoir à l'autre à travers l'objet quantique.

Le schéma physique est le suivant : un électron venant du contact gauche entrera ainsi dans le dispositif. Une fois à l'intérieur de celui-ci, il pourra être à tout moment rétrodiffusé et revenir dans le contact gauche, entrer en collision avec un centre diffuseur, comme poursuivre son chemin et atteindre le contact droit. Il pourra donc être potentiellement collecté par les deux contacts. La transmission du dispositif s'exprimera à partir du flux arrivant au contact opposé, et déterminera la conductance du système. La méthode de Landauer consiste à représenter l'échantillon étudié par une série de diffuseur, ou défauts, incorporés dans un guide d'onde parfait, il permet en effet de mieux comprendre ce qui se passe dans des matériaux de très basses dimensions tels que, les films minces.

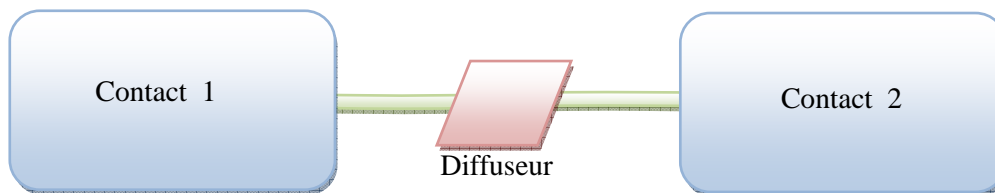


Fig.3.5 Représentation schématique du principe de Landauer.

Le but de ce travail est d'adapter cette approche à l'étude du transfert d'ondes de spins dans des films minces ferromagnétiques en présence de défauts. Elle est basée sur le principe de relier la conductivité d'un système à la probabilité qu'une onde de spins traverse un défaut donné dans un système, appelé communément le coefficient de transmission/réflexion.

3. Définition de la matrice dynamique du système perturbé

3.1. Définition de la matrice défaut

Cette matrice trouve son origine dans l'écriture des équations de mouvement de précession des spins des sites de la zone de défaut et des deux zones de raccordement (Fig.3.4), en utilisant l'équation (2.39) défini au chapitre II. Cette dernière permet d'obtenir une matrice rectangulaire $D(m \otimes n)$.

3.2. Définition de la matrice de raccordement

Pour calculer la matrice de raccordement nous devons définir deux espaces avec deux bases distinctes $\{R^-\}$ et $\{R^+\}$; la première sera utilisée pour l'étude de la précession des spins

se trouvant à droite, et la deuxième sera utilisée pour l'étude de la précession de ceux se trouvant à gauche du défaut.

Pour les vecteurs de spins appartenant à la région de droite, on peut écrire leurs amplitudes de précession comme suit :

$$u'_\alpha(n_x, n_y, n_z) = \sum_{j=1}^5 Z_j^{nx} A'(\alpha, j) R_j^+ \quad (3.1)$$

Pour un spin de la région gauche, les amplitudes de précession sont données par la relation :

$$u_\alpha(n_x, n_y, n_z) = A(i) Z_i^{-nx} + \sum_{i'=1}^5 Z_{i'}^{-nx} A(\alpha, i') R_{i'}^- \quad (3.2)$$

Avec R_i^- est le vecteur unitaire qui caractérise les modes évanescents i dans la base $\{R^-\}$ de l'espace des phases, R_j^+ est le vecteur unitaire qui caractérise les modes évanescents j dans la base $\{R^+\}$, α est l'une des trois directions (Ox) , (Oy) ou (Oz) , A et A' sont les poids pondérés associés aux différents modes évanescents déterminés à l'aide des vecteurs propres issus de l'étude de la matrice de la zone parfaite.

On note par $|u\rangle$ le vecteur de précession des spins de la zone perturbée. On peut le décomposer en deux parties :

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

La partie $|irr\rangle$ est constituée des amplitudes de précession des sites irréductibles formants la zone (1). La partie $|rac\rangle$ est composée des amplitudes de précession des deux zones (2) de raccordements de gauche et de droite de la (Fig.3.4).

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} = [R] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |R^-\rangle \\ |R^+\rangle \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

$[R]$ est appelée matrice de raccordement, ses dimension sont $(n \otimes m)$.

Le produit de la matrice D par la matrice R donne la matrice dynamique carrée du système perturbé $S(m \otimes m)$.

$$[D(m \otimes n)].[R(n \otimes m)]. \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |R^-\rangle \\ |R^+\rangle \end{bmatrix} = [S(m \otimes m)]. \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |R^-\rangle \\ |R^+\rangle \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

4. Définition des grandeurs physiques

Compte tenu de la brisure de symétrie suivant la direction (Ox), l'onde de spin peut être atténuée en rencontrant le défaut. De ce fait, il serait commode de relier les vecteurs de précession de deux spins adjacents par un facteur d'atténuation Z , tel que :

$$u_\alpha(n_x \pm 1, n_y, n_z) = Z^{\pm 1} u_\alpha(n_x, n_y, n_z)$$

Cette relation est une caractéristique essentielle de la méthode de raccordement [31-32].

Avec Z et $1/Z$ sont appelés facteurs de phases.

Pour décrire la diffusion en présence des défauts, nous avons besoin des modes propagants et des modes évanescents. On peut les déterminer par la méthode du déterminant ou la méthode de l'augmentation de la base [33-34].

4.1. Calcul des états localisés de spins dans un système

Les états localisés induits par l'existence d'un défaut dans le film mince seront déterminés par les solutions de l'équation suivante

$$\det([S(m \otimes m)]) = 0 \quad (3.6)$$

4.2. Détermination des coefficients de transmission et de réflexion

A partir des équations du mouvement, on peut tirer les probabilités de réflexion et de transmission [35-36].

Pour des ondes incidentes se propageant de gauche à droite suivant la direction (Ox), elles sont diffusées en rencontrant une inhomogénéité en deux parties l'une est réfléchiée et l'autre transmise.

Pour l'onde réfléchiée dans la partie gauche du film mince, l'amplitude de précession s'exprime par :

$$\vec{u}_r = \sum \xi_{v\bar{v}} \frac{1}{Z_v} \cdot \vec{u} \left(\frac{1}{Z_v} \right)$$

Pour l'onde transmise dans la partie droite du film mince :

$$\vec{u}_t = \sum \eta_{v\bar{v}} Z_v \vec{u}(Z_v)$$

Avec V est un mode propageant du guide d'onde, et \bar{V} est le mode incident.

Après normalisation de $\xi_{v\bar{v}}$ et de $\eta_{v\bar{v}}$ par les vitesses de groupe on obtient les coefficients de transmission et de réflexion $t_{v\bar{v}}$ et $r_{v\bar{v}}$ donnés par les équations suivantes :

$$\begin{aligned} t_{v\bar{v}} &= |\tau_{v\bar{v}}|^2 = \frac{Vg_v}{Vg_{\bar{v}}} |\eta_{v\bar{v}}|^2 \\ r_{v\bar{v}} &= |\rho_{v\bar{v}}|^2 = \frac{Vg_v}{Vg_{\bar{v}}} |\xi_{v\bar{v}}|^2 \end{aligned} \quad (3.7)$$

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

L'onde incidente a une amplitude normalisée, la somme des coefficients r et t est égale à un :

$$\sum_v (t_{v\bar{v}} + r_{v\bar{v}}) = 1 \quad (3.8)$$

4.3. Conductance magnonique

Par analogie avec la conductance électronique, qui est liée aux phénomènes de diffusion électroniques [37], il est utile de définir la conductance d'un défaut pour une fréquence Ω donnée [38]. Cette conductance, notée $\sigma(\Omega)$, est définie par :

$$\sigma(\Omega) = \sum_{v,\bar{v}} t_{v\bar{v}} \quad (3.9)$$

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

Pour un guide d'onde parfait, sans défaut, σ est un entier qui donne le nombre de modes propageant à la fréquence Ω considérée. La présence du défaut crée un écart entre le σ idéal et sa valeur provenant des processus de diffusion. Cet écart donne une mesure de la réflexion causée par la diffusion sur les défauts.

L'approche mésoscopique de Landauer exprime la conductance d'un système, à partir de la probabilité qu'un électron puisse le traverser. Cette probabilité est appelée transmittance de l'échantillon.

4.4. Calcul des densités d'états magnoniques

La densité d'états électroniques, en anglais *Density of States* ou DOS, quantifie le nombre d'états électroniques possédant une énergie donnée dans le matériau considéré. Plus précisément, est le nombre d'états magnoniques, par maille élémentaire du matériau étudié. Cette quantité est d'une grande utilité en physique expérimentale, puisque il est directement mesurable.

Pour les calculer, nous faisons appel aux fonctions de Green. Ces dernières sont exprimées d'une façon très dense, en les associant à la méthode de raccordement [39].

$$G(\Omega + i\varepsilon) = [(\Omega + i\varepsilon)I - D(Z, \phi_y, J)]^{-1} \quad (3.10)$$

Cette opérateur est obtenu à partir de la matrice S défini dans l'équation (3.5).

Les densités spectrales, pour un vecteur d'onde parallèle à la direction (Ox) est alors donné par la relation suivante :

$$\rho_{(\alpha,\beta)}^{(l,l')}(\Omega) = 2\Omega \sum_m C_{\alpha m}^l \cdot C_{\beta m}^{l'} \cdot \delta(\Omega - \Omega_m) \quad (3.11)$$

Où l et l' représentent deux spins différents, α et β deux directions cartésiennes, et $C_{\alpha m}^l$ la composante α du vecteur amplitude de précession de spin l , pour la branche d'énergie Ω_m .

La densité d'état magnonique correspond à la somme de la trace des matrices des densités spectrales. Elle peut alors s'écrire sous la forme suivante :

$$E(\Omega) = \sum_{l\alpha} \rho_{(\alpha,\alpha)}^l(\Omega) = (-2\Omega/\pi) \sum_{l\alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \text{Im}[G_{\alpha\beta}^{ll'}(\Omega + j\varepsilon)] \quad (3.12)$$

Références du chapitre III

- [1] V. Russier, K. Younsi and L. Bessais, *J. Magn. Magn. Mat.* 324, 1122 (2012).
- [2] F. Fang, M. Boero, P. Rabu and C. Massobrio, *C. R. Acad. Sci. Chimie* 15, 202 (2012).
- [3] R. Soulairol, Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI (2011).
- [4] M. Costes, Thèse de doctorat, Université de Toulouse 3 (2005).
- [5] W. P. Zhou, G. H. Yun, and X. X. Liang, *Phys. Rev. B* 77, 104403 (2008).
- [6] J. E. Avron, A. Elgart, G. M. Graf, L. Sadun and K. Schnee, *Comm. Pure. Appl. Math.* 57, 528 (2004).
- [7] J. E. Avron, A. Elgart, G. M. Graf and L. Sadun, *J. Stat. Phys.* 116, 425 (2004).
- [8] M. Büttiker, *Phys. Rev. B* 38, 9375 (1988).
- [9] M. Büttiker, A. Prêtre and H. Thomas, *Phys. Rev. Lett.* 70, 4114 (1993).
- [10] X. Waintal, E. B. Myers, P. W. Brouwer and D. C. Ralph, *Phys. Rev. B*, 62, 8249 (2000).
- [11] H. Guérault, Thèse de doctorat, Université du Maine, France (2000).
- [12] R. W. Siegel, *Encycl. Appl. Phys.* 11, Trigg G.L. (ed.), 173 (1994).
- [13] R. W. Siegel, *Nanostruct. Mater.*, 3, 1 (1993).
- [14] M. S. Pierce, J. E. Davies, J. J. Turner, K. Chesnel, E. E. Fullerton, J. Nam, R. Hailstone, S. D. Kevan, J. B. Kortright, Kai Liu, L. B. Sorensen, B. R. York, and O. Hellwig, *Phys. Rev. B* 87, 184428 (2013).
- [15] I. R. Shein, M. A. Gorbunova, V. S. Kiiko and A. L. Ivanovskii, *Rev. Adv. Mater. Sci.* 26, 48 (2010).
- [16] R. Van de Krol, J. Ségalini and C. S. Enache, *J. Phot. Energy* 1, 016001 (2011).
- [17] R. Korobko, S. K. Kim, S. R. Cohen, E. Wachtel, I. Lubomirsky; *Adv. Funct. Mater.* 23, 6076(2013).
- [18] C. Visan, T.L. Mitran, A. Nicolaev, G.A. Nemnes, L. Ion and S. Antohe, *J. Digest, J. Nanomat. Biostruct.* 6, 1173 (2011).
- [19] K. Xiao-Yan, Y. Lei-Lei, C. Yu, and L. Ying-Kai, *Chin. Phys. B* 21, 096101 (2012)
- [20] M. Belhadi, R. Chadli, A. Khater and M. Abou Ghantous, *Eur. Phys. J. Phys* 37, 25 (2007).
- [21] L. Dobrzynski, *Surf. Sci. Reports* 6, 119 (1986).
- [22] B. Bourahla, Thèse de doctorat, Université de Tizi Ouzou (2007).
- [23] F Boumeddine, Thèse de doctorat, Université de Tizi Ouzou (2010).
- [24] F. Gagel, K. Maschke, *Physica Status Solidi (b)* 205, 363 (1998).
- [25] C. Berthod, F. Gagel, K. Maschke, *Phys. Rev. B* 50, 18299 (1994).
- [26] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas, *Phys. Rev. B* 31, 6207 (1985).
- [27] G. Nenciu, *J. Math. Phys.* 48, 033302 (2007).
- [28] D. K. Ferry and S.M. Goodnick. *Transport in Nanostructures*, Cambridge University Press(2001).
- [29] J. Frenkel, *Phys. Rev.* 36, 1604 (1930).
- [30] R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* 1, 223 (1957).
- [31] J. Szeftel and A. Khater, *Phys. Rev. C: Solid state Phys.* 20, 4725 (1987).
- [32] T. E. Feuchtwang, *Phys. Rev.* 155, 731 (1967).
- [33] M. Marcus, *The College Mathematics Journal* 21, 130 (1990).
- [34] D. G. Luenberger, *Linear and nonlinear programming*, 2nd edition, Kluwer, 2003).
- [35] D. Zerirgui, R. Tigrine, and B. Bourahla, *J. Appl. Phys.* 111, 044907 (2012).
- [36] A. Khater, B. Bourahla, M. Abou Ghantous, R. Tigrine, R. Chadli, *Eur. Phys. J. B* 82, 53 (2011).
- [37] R. Landauer, *J. Phys.: Condensed Matter* 1, 8099 (1989).
- [38] A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlouvet, A. Khater, *Phys. Rev. B* 55, 1707 (1997).
- [39] D. Ghader, V. Ashokan, M. Abou Ghantous, A. Khater, *Eur. Phys J. B* 86, 180 (2013).

Excitations de spins dans les films magnétiques à cinq plans en présence des inhomogénéités

Sommaire

- Partie I** : Excitations de spins dans un film mince inhomogène à maillage cubique
1. Résultats obtenus pour les défauts : nanowell, nanocontact et dépôt atomique
 2. Discussion et analyse des résultats obtenus
- Partie II** : Excitations de spins dans un film magnétique inhomogène à maillage hexagonal
1. Résultats obtenus pour les défauts : nanowell, nanocontact et dépôt atomique
 2. Discussion et analyse des résultats obtenus
- Partie III** : Juxtaposition de deux films minces à maillage différent
1. Résultats obtenus pour les interface : A/B et B/A
 2. Discussion et analyse des résultats obtenus
- Conclusion

L'étude des ondes de spins au voisinage d'une inhomogénéité est complexe et diffère amplement de celle d'un guide d'ondes parfait [1-10]. Car l'inhomogénéité modifie considérablement les propriétés magnétiques d'un film mince. Wallis et *al.*, [11], ont montré que l'existence d'une surface dans un matériau ferromagnétique présentant une surface libre peut engendrer des états localisés. L'existence de ces modes dépend de sa structure cristalline, de son intégrale d'échange et des inhomogénéités. Afin de relever l'impact de ces défauts sur la dynamique des spins en présence des inhomogénéités magnétiques dans les films ultraminces, nous avons appliqué, dans ce chapitre, la méthode théorique développée au chapitre précédent.

Nous calculons évidemment plusieurs grandeurs physiques, à basse température, à savoir la transmission et la réflexion, la conductance magnonique, les états localisés et les densités d'états des différents systèmes étudiés. Dans la première partie, nous avons examiné des films ultramine à maillage cubique renfermant trois cas de défaut ; un nanocontact ; un puits magnétique et un dépôt atomique. Dans la seconde, nous avons réexaminé ces défauts dans un film mince à maillage hexagonal. Dans la troisième et dernière partie, nous nous sommes intéressés à l'étude de la propagation de l'onde de spin à travers un autre type de défaut qui est une interface créée par la juxtaposition de deux films parfaits à maillages différents, que nous avons étudié dans le deuxième chapitre. Dans l'ensemble des modèles examinés, nous considérerons que les interactions entre les spins plus proches voisins et nous négligeons les interactions dipôle-dipôle et nous ne tenons pas compte du champ magnétique extérieur.

Partie I :

Excitations des spins dans un film mince inhomogène à maillage cubique

Cette partie est consacrée à l'étude de la propagation d'ondes de spins à travers trois types de défauts : un nanocontact, un nanowell et un dépôt atomique, incrustés dans des films ferromagnétiques ultraminces à maillage cubique. Ces films sont constitués de cinq plans atomiques, déposés sur des substrats non magnétiques et sans interactions magnétiques avec leur environnement. Nous avons calculé et présenté pour chaque film les coefficients de transmission/réflexion d'ondes traversant le défaut de gauche à droite, les conductances magnoniques, les états localisés et les densités d'état de spins des sites irréductibles, et cela pour les trois possibilités de l'environnement magnétique, à savoir : l'adoucissement ($\gamma < 1$), l'homogénéité ($\gamma = 1$) et le durcissement ($\gamma > 1$) de l'échange magnétique au niveau du domaine inhomogène. Avec γ décrivant le rapport J_d/J , où J_d est l'intégrale d'échange entre spins plus proches voisins dans la zone défaut et J dans la zone parfaite.

1.1. Résultats obtenus

1.1.1. Cas d'un nanowell dans un film à maillage cubique

Le premier défaut que nous avons étudié est un nanowell asymétriques engendré par élimination de deux chaînes atomiques sur la surface suivant l'axe (Oy) en créant ainsi une marche et une contre marche; puis suivi de l'élimination de deux autres chaînes atomiques suivant (Oz) juste à coté, en créant ainsi une deuxième marche et deux autres contre marches, l'une à droite et l'autre à gauche de hauteurs différentes, nous les avons représentées sur la Fig.4.1.1a.

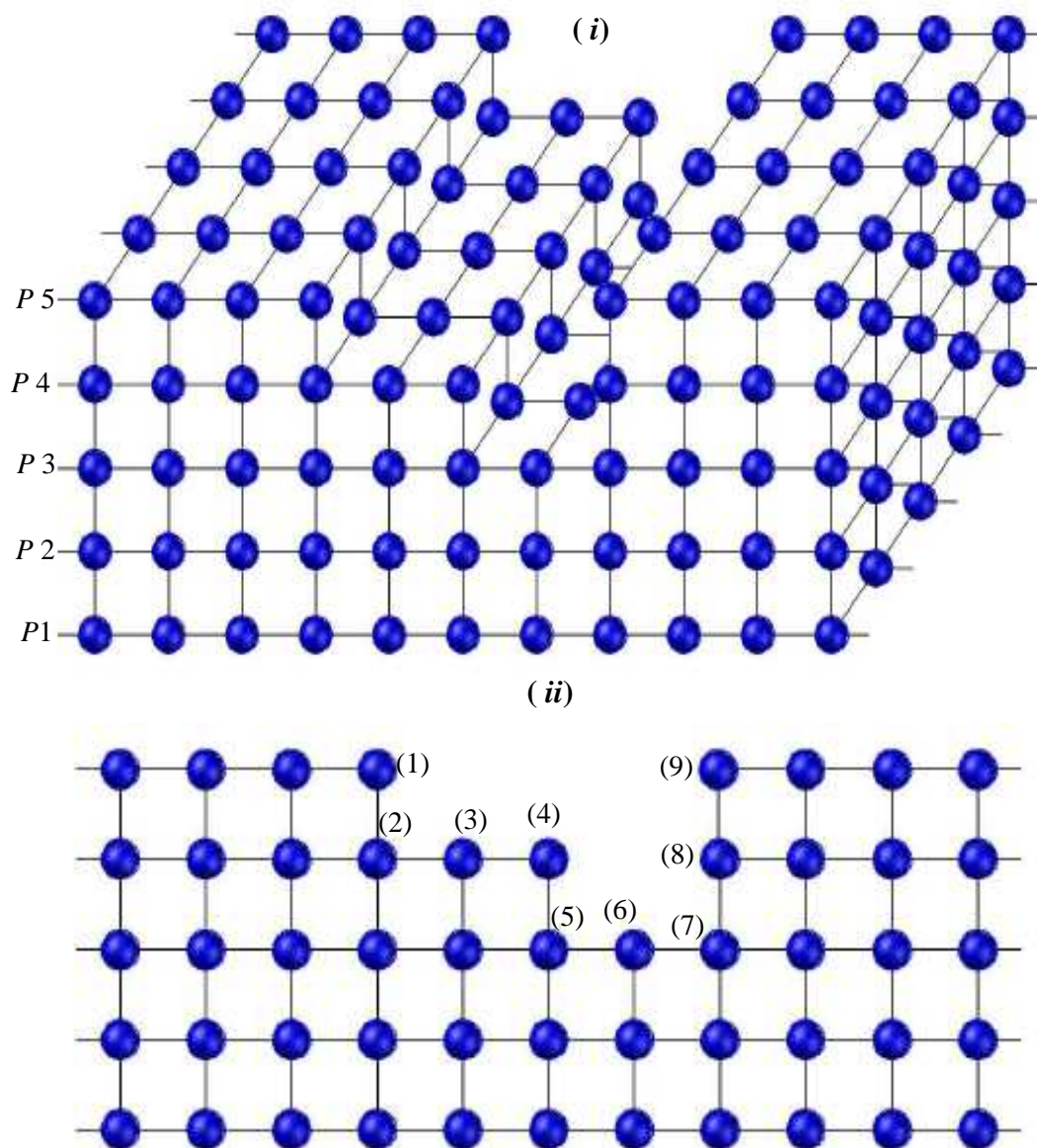


Fig.4.1.1a Représentation schématique d'un film mince à maillage cubique constitué de cinq plans atomiques ferromagnétiques contenant un nanowell atomique asymétrique.
 - (*i*) Représentation à 3D. - (*ii*) Projection à 2D.

Coefficients de transmission et de réflexion

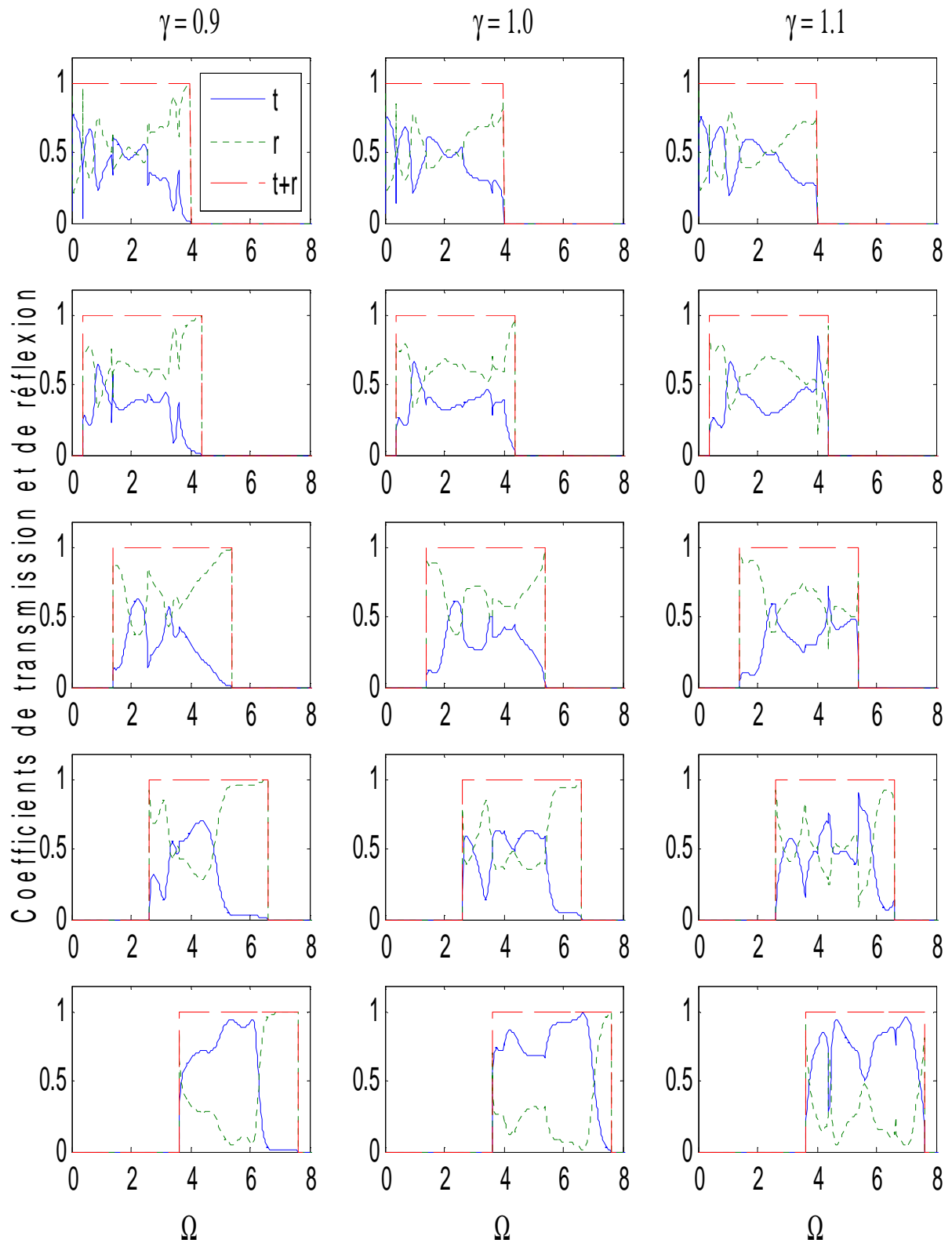


Fig.4.1.1b Coefficients de transmission et de réflexion magnoniques via un nanowell dans un film mince à maillage cubique.

Conductance magnonique

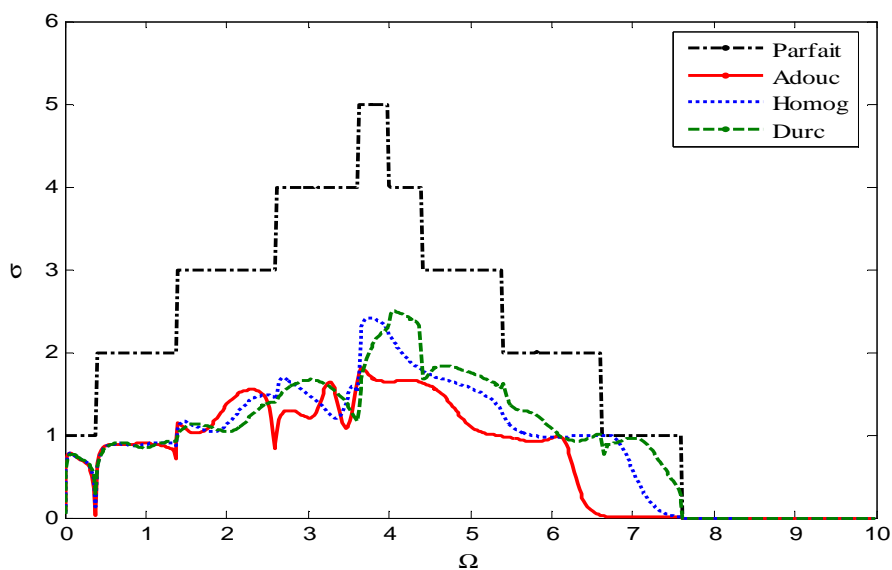


Fig.4.1.1c Conductances magnoniques d'un nanowell asymétrique présent dans un film mince à maillage cubique.

Les états localisés de spins

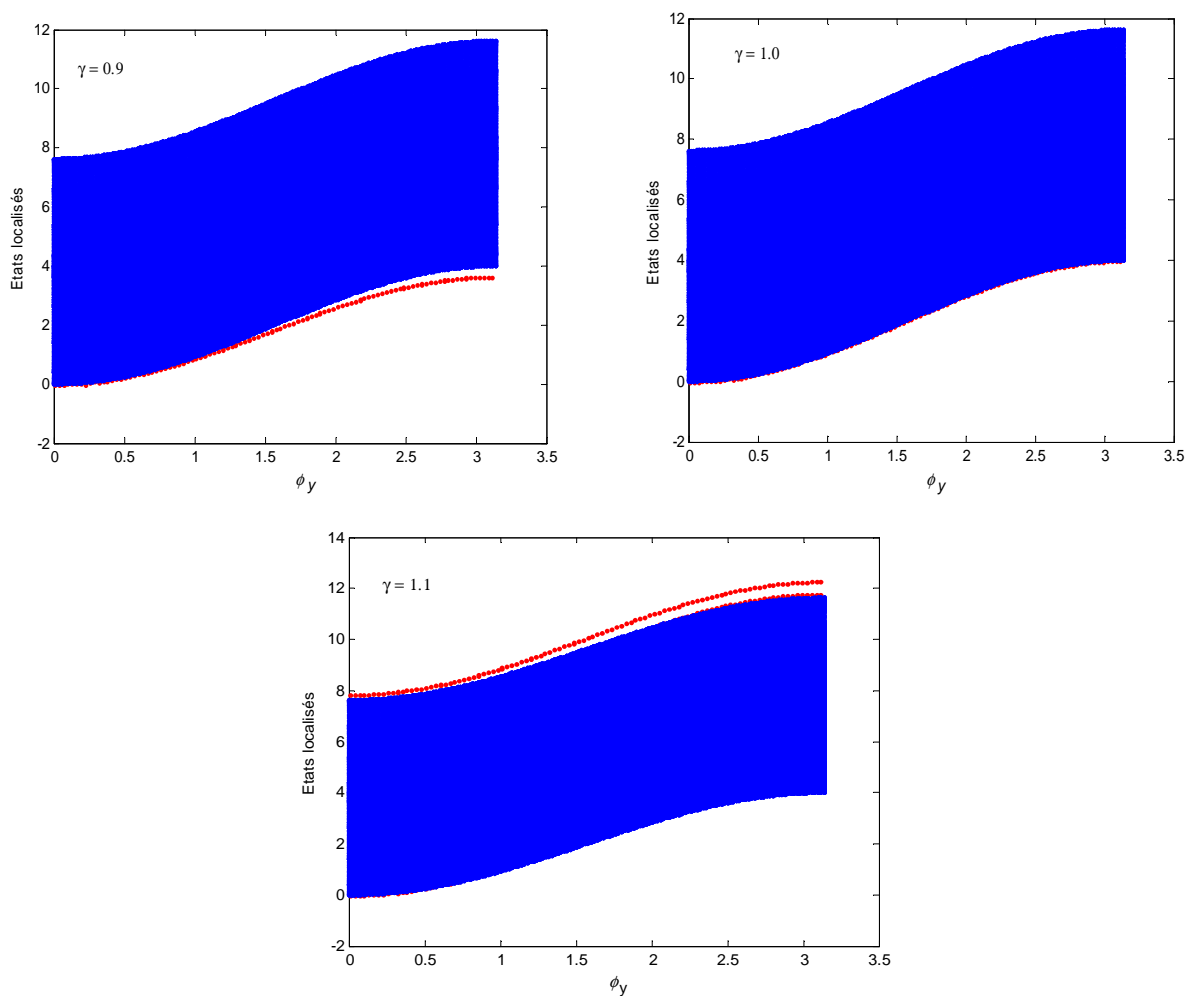


Fig.4.1.1d Etats localisés d'un nanowell asymétrique présent dans un film mince à maillage cubique.

Densités d'états magnoniques

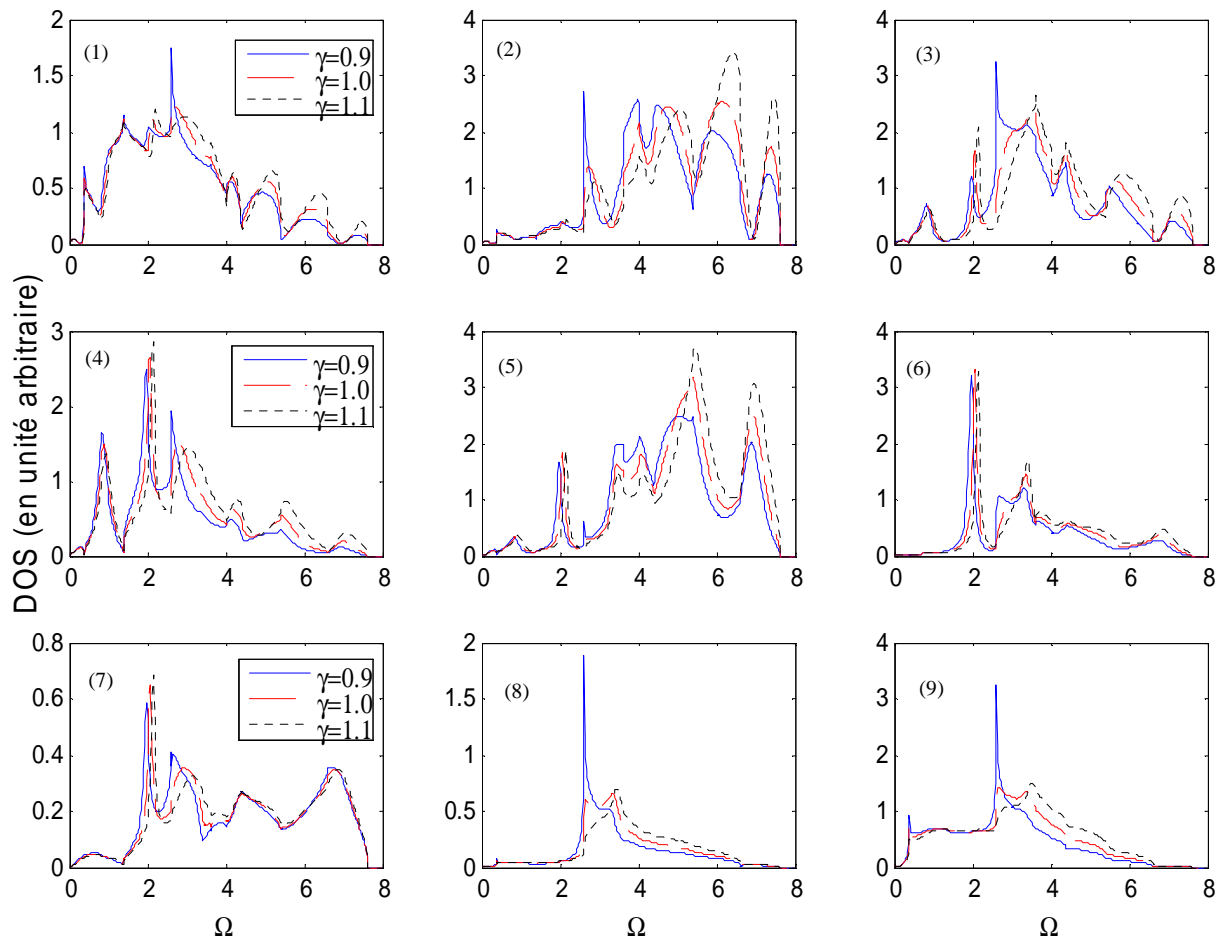


Fig.4.1.1e DOS de magnons d'un nanowell asymétrique présent dans un film mince à maillage cubique.

1.1.2. Cas d'un nanocontact dans un film à maillage cubique

Le deuxième défaut que nous avons examiné est un nanocontact. Il est créé par l'élimination de trois chaînes atomiques suivant (Oy) dans les plans P1, P2, P4 et P5, comme indiqué sur la Fig.4.1.2a.

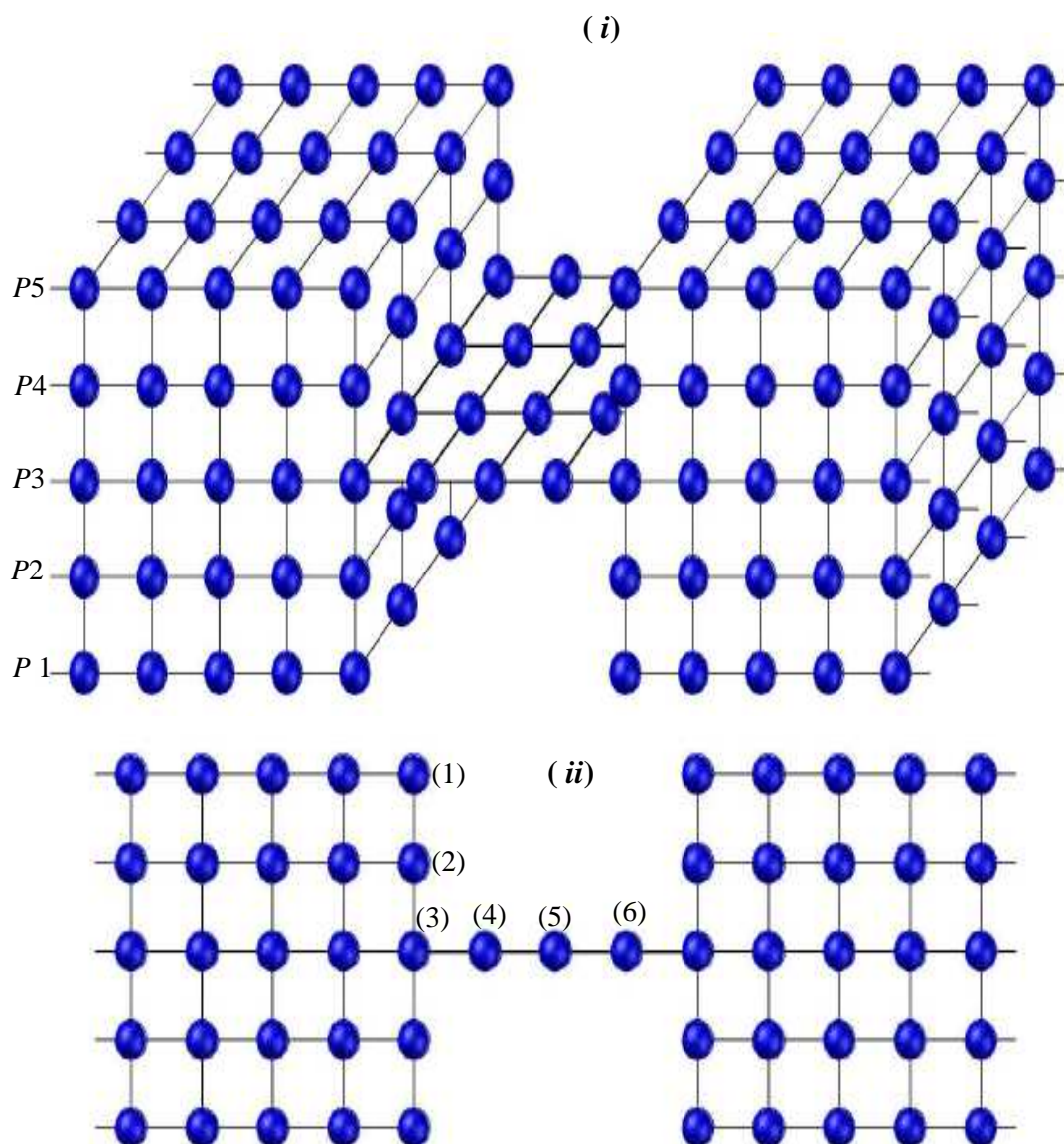


Fig.4.1.2a Représentation schématique d'un film mince à maillage cubique constitué de cinq plans atomiques ferromagnétiques contenant un nanocontact.

- (i) Représentation à trois dimension. - (ii) Représentation à deux dimension.

Coefficients de transmission et de réflexion

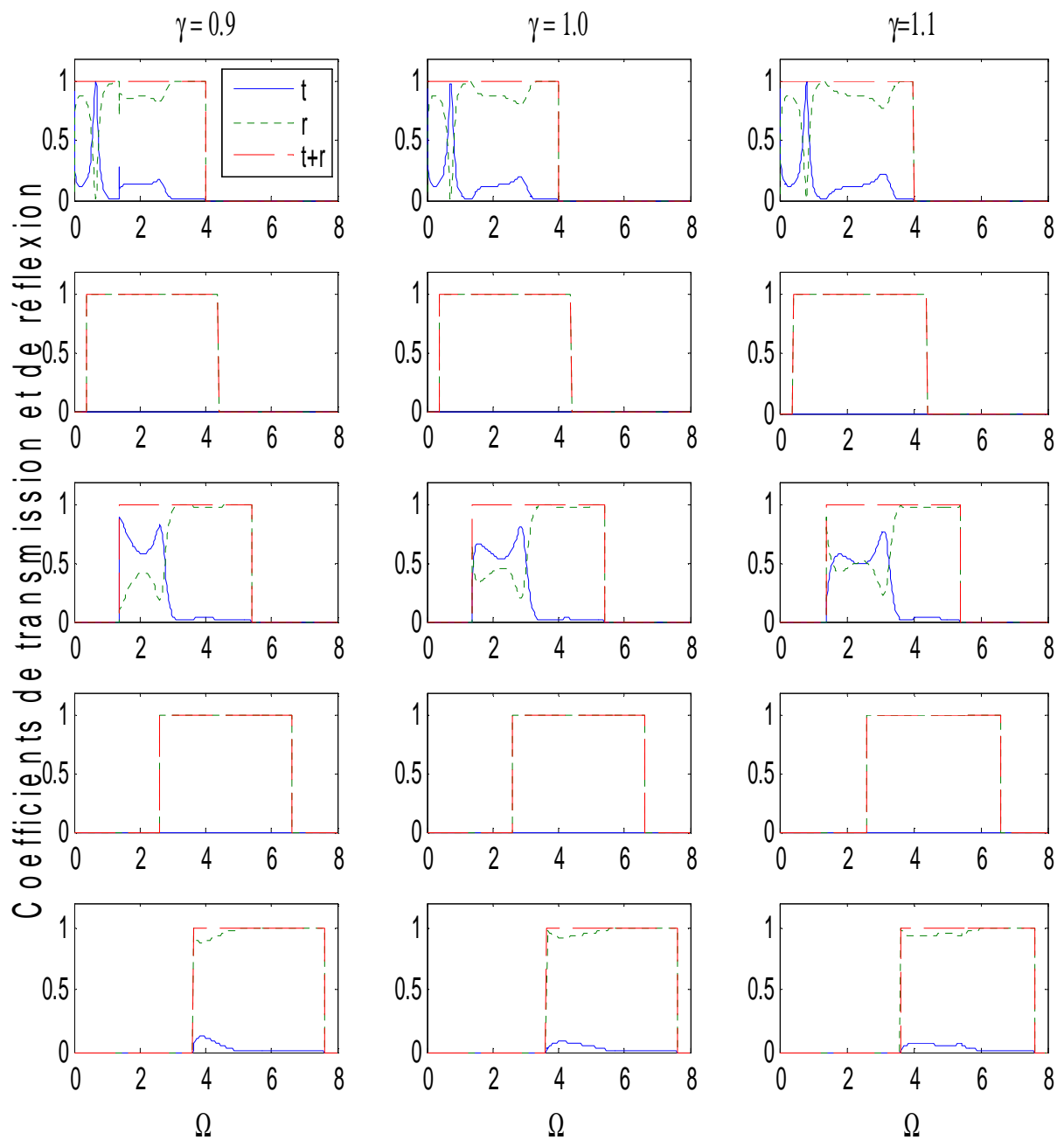


Fig.4.1.2b Coefficients de transmission et de réflexion via un nanocontact dans un film mince à maillage cubique.

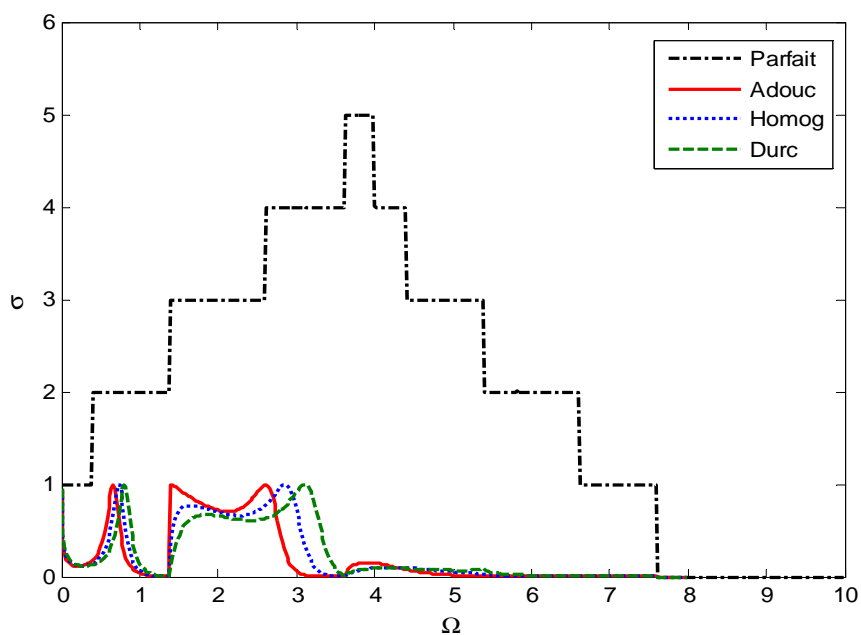
Conductance magnonique

Fig.4.1.2c Conductances magnoniques d'un nanocontact dans un film mince à maillage cubique.

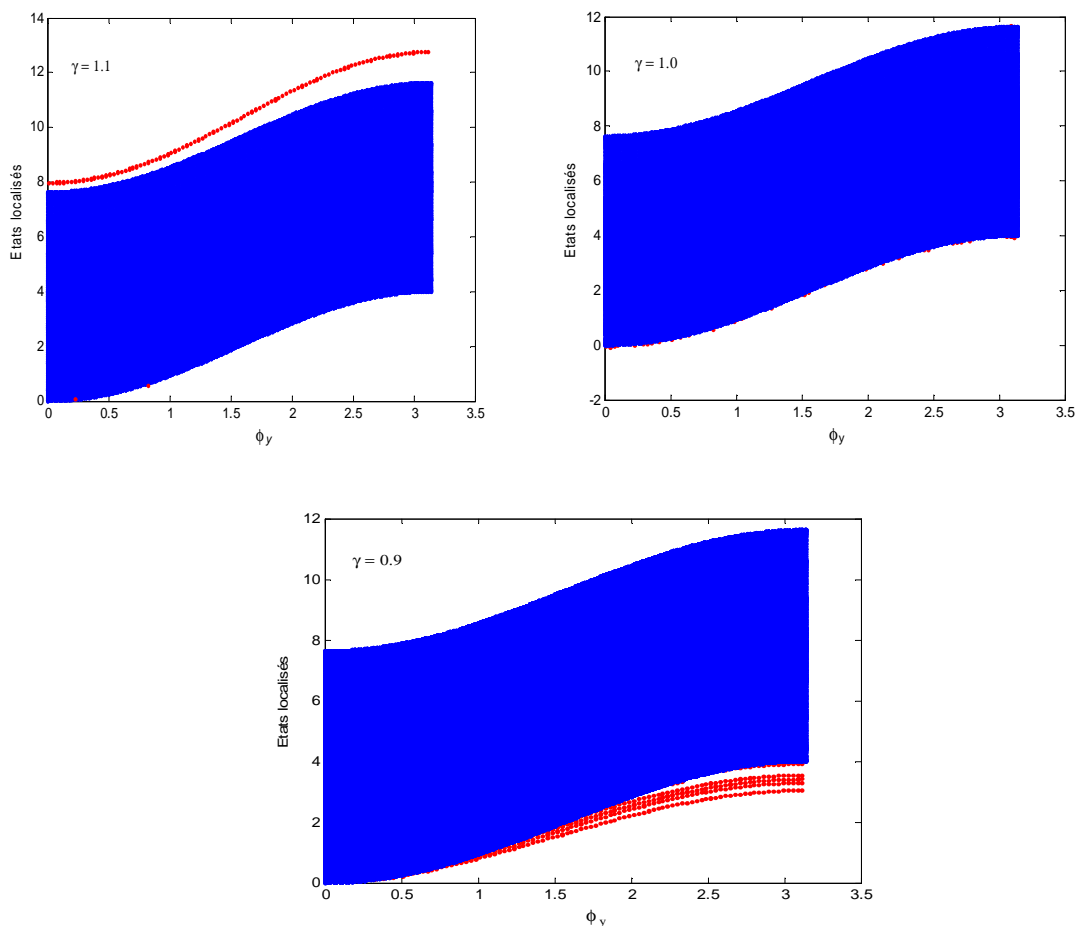
Etats localisés de spins

Fig.4.1.2d Etats localisés d'un nanocontact dans un film mince à maillage cubique.

Densités d'états magnoniques

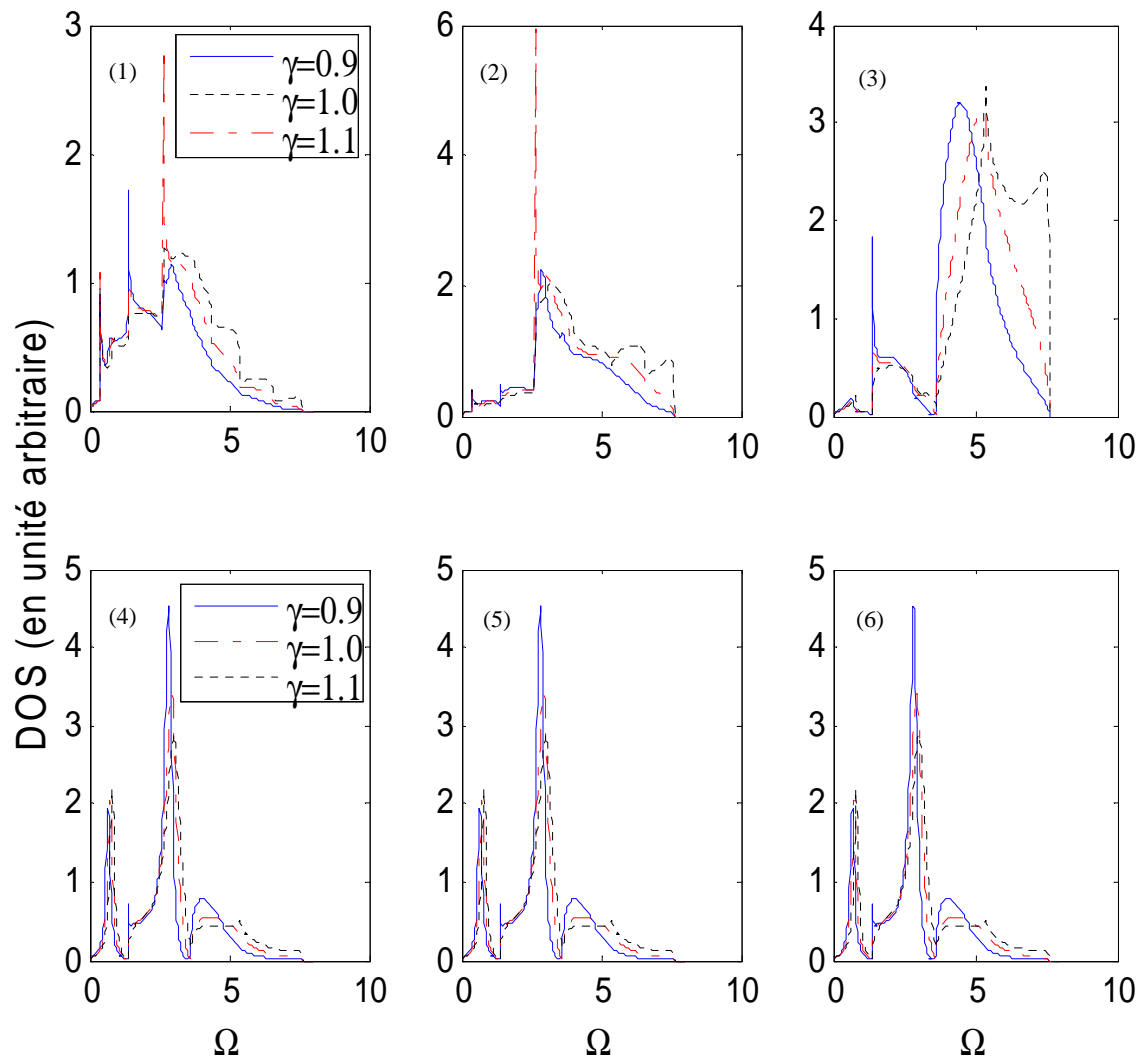


Fig.4.1.2e DOS de magnons d'un nanocontact dans un film mince à maillage cubique.

1.1.3. Cas d'un dépôt atomique sur un film à maillage cubique

Le troisième défaut considéré est un dépôt atomique, obtenu par le dépôt de quelques chaînes atomiques sur la surface du film mince, représenté sur la Fig.4.1.3a.

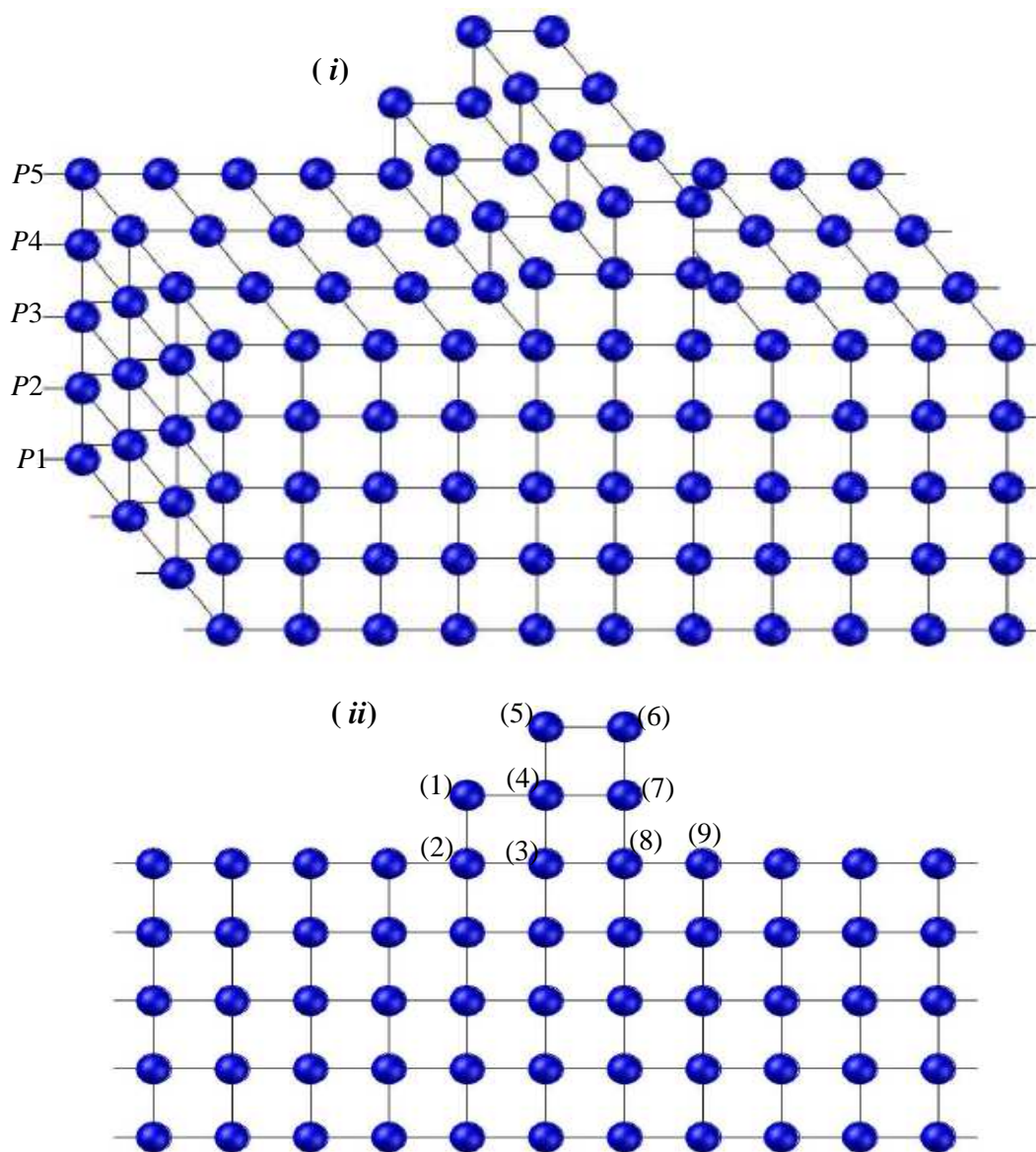


Fig.4.1.3a Représentation schématique d'un dépôt atomique sur un film mince à maillage cubique constitué de cinq plans atomiques.
- (i) Représentation à trois dimensions - (ii) Représentation à deux dimensions.

Coefficients de transmission et de réflexion

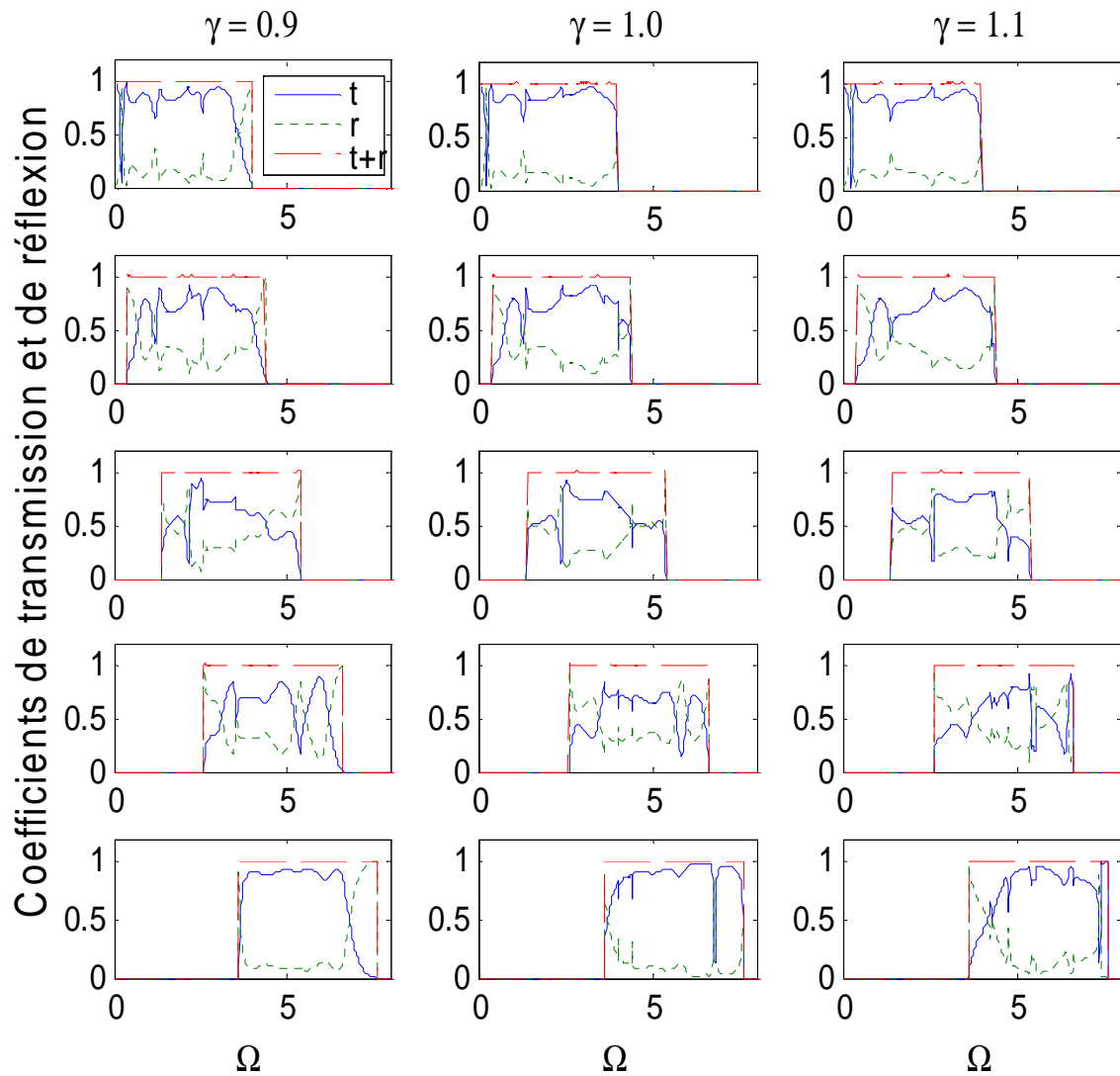


Fig.4.1.3b Coefficients de transmission et de réflexion via un dépôt atomique sur un film ferromagnétique mince.

Conductance magnonique

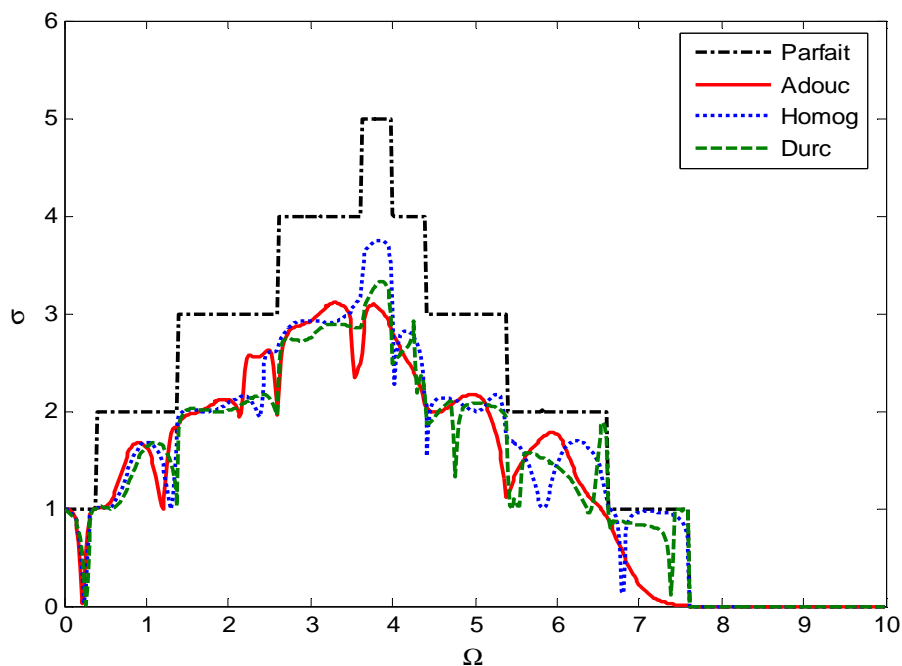


Fig.4.1.3c Conductances magnoniques via un dépôt atomique dans un film mince à maillage cubique.

Etats localisés de spins

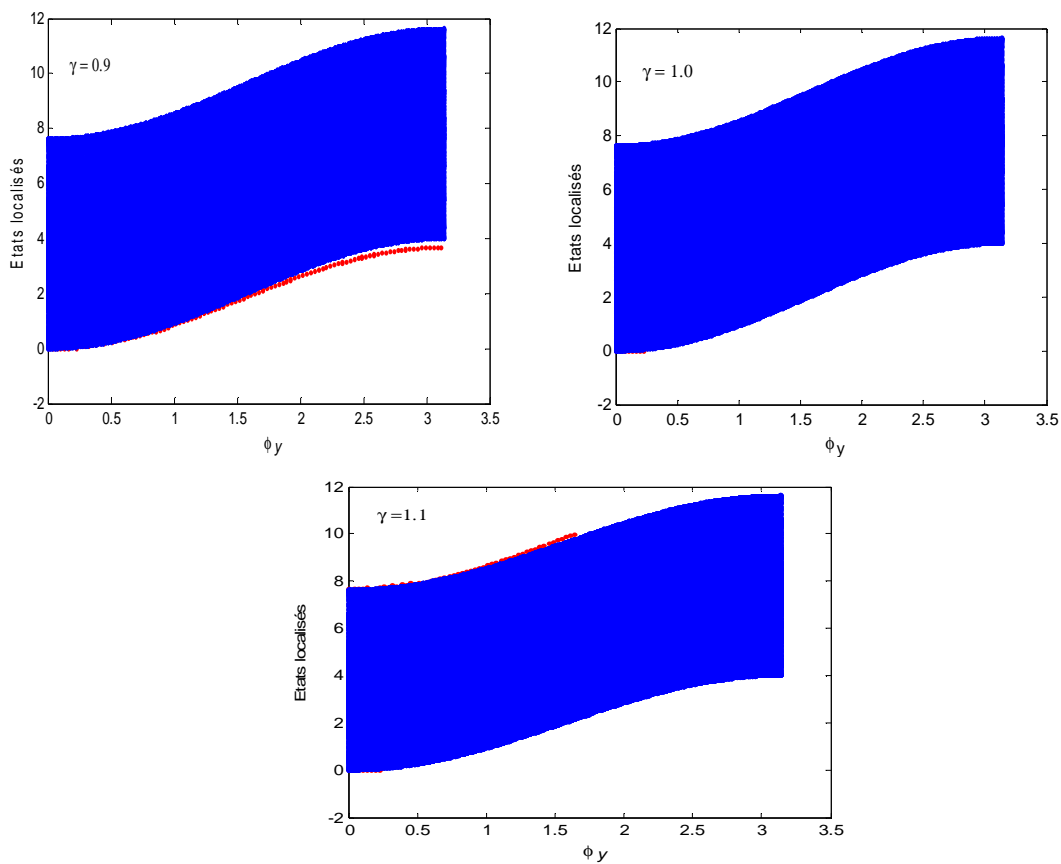


Fig.4.1.3d Etats localisés d'un dépôt atomique sur un film mince à maillage cubique.

Densités d'états magnoniques

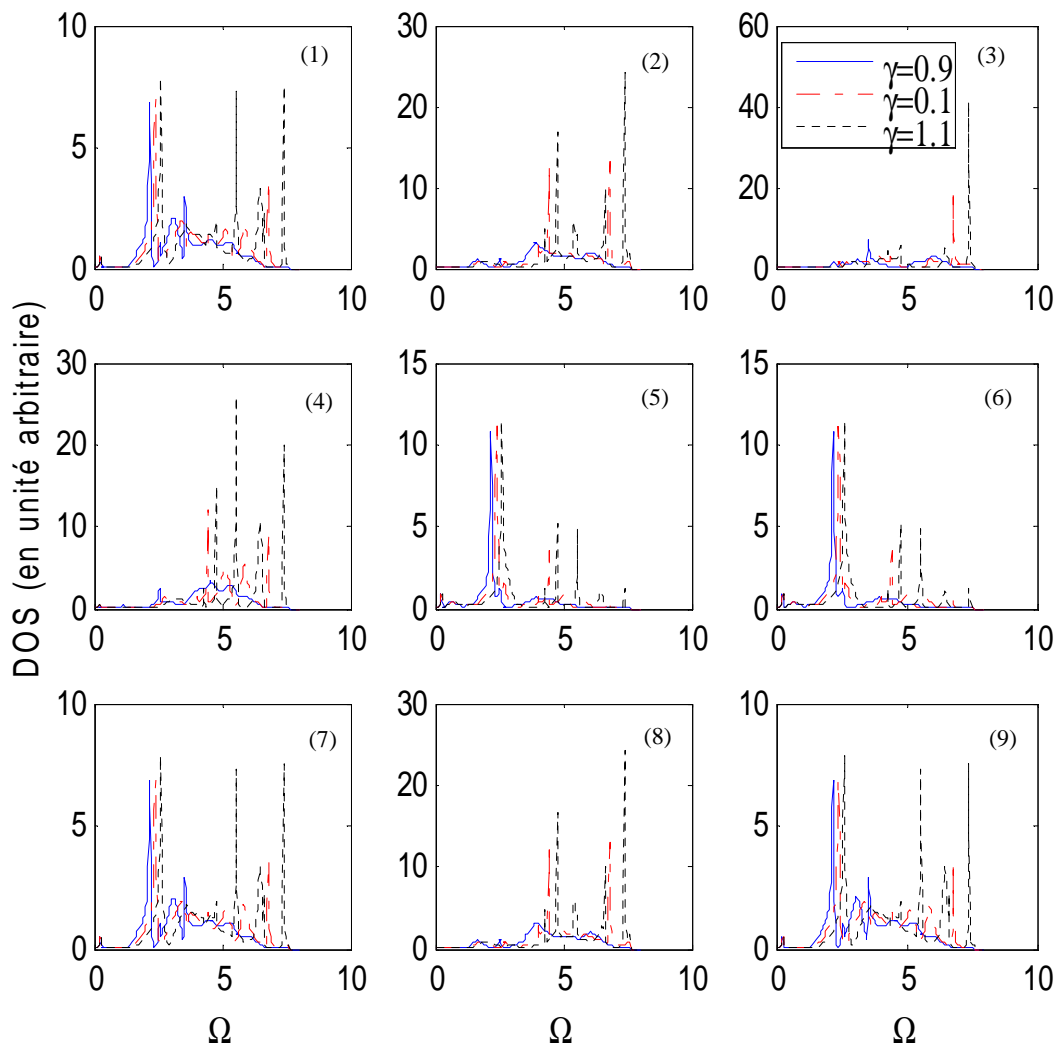


Fig.4.1.3e DOS de magnons d'un dépôt atomique sur un film mince à maillage cubique.

1.2. Discussion et analyse des résultats obtenus

La diffusion de magnons dans les films minces à maillage cubique en présence des trois types de défauts considérés est analysée pour des ondes de spins incidentes se propageant de gauche à droite, c'est-à-dire se propageant parallèlement à l'axe (Ox) dans le sens positif avec un angle d'incidence donné. Pour appliquer notre prototype de simulation, l'exécution des programmes de calcul peut être obtenue pour une large variété de γ et ϕ_y . Nous avons réalisé des simulations pour $\phi_y = 0$ et un choix de $\gamma = 0.9$ pour l'adoucissement, $\gamma = 1.0$ pour l'homogénéité et $\gamma = 1.1$ pour le durcissement.

Coefficients de transmission et de réflexion

Les résultats relatifs aux coefficients de transmission et de réflexion en fonction des fréquences normalisées Ω sont tracés sur les figures Fig.4.1.1b, Fig.4.1.2b et Fig.4.1.3b, pour les trois défauts examinés, à savoir : le nanowell, le nanocontact et le dépôt atomiques, qui sont représentés respectivement sur les Fig.4.1.1a, Fig.4.1.2a et Fig.4.1.3a. Rappelons que nous avons montré au chapitre II, qu'il existe cinq modes de précession de magnons dans le cas des films ultra-mince à cinq plans parallèles. Ces modes sont classés en lignes sur les figures et notés de 1 à 5, et la numérotation se fait de haut en bas. D'autre part, nous avons classé en colonnes les trois cas de l'intégral d'échange dans la zone nanostructurée par rapport à celui des zones parfaites, allant de l'adoucissement au durcissement en passant par l'homogénéité ($\gamma = 0.9, 1.0$ et 1.1), de gauche à droite. La relation théorique bien connue entre les coefficients de transmission et de réflexion $t+r = 1$ est vérifiée. Cette condition a été utilisée comme un moyen de contrôle de nos résultats numériques.

Pour le nanowell, on constate, sur la quasi-totalité des courbes, que les coefficients de transmission sont très faibles quand Ω tend vers les grandes énergies, voir nul dans le cas de l'adoucissement; mais ils augmentent légèrement au fur et à mesure qu'ils passent de l'adoucissement au durcissement. Par contre, à très basse énergie, les coefficients de transmission sont plus importants dans les modes 1 et 5 et deviennent faibles pour les trois autres modes. Le spectre du mode 1, acoustique à basse fréquence, est différent par rapport aux quatre autres modes optiques, et cela pour les trois possibilités de γ . Cet effet probablement est dû à l'absence d'interférences entre modes dans cet intervalle de fréquence. Ce mode présente, aussi, une particularité dans cette gamme de fréquence, qui est la présence de la résonance de type Fano[12–15] aux alentours de $\Omega = 0.38$. Un tel phénomène s'explique par l'interaction d'un état localisé discret créé par le défaut avec le guide d'onde parfait. Au delà de cette fréquence, la transmission diminue de manière significative pour des fréquences plus élevées. Notant également, que les spectres de transmission et de réflexion pour le mode acoustique sont très sensibles aux changements d'échange magnétique sur le domaine asymétrique du nanowell. Le mode 5 présente aussi un comportement particulier : il est en grande partie transmis dans sa gamme de propagation et ne montre aucune résonance de Fano, ceci s'explique par le fait qu'il est fortement énergétique, comparé aux autres modes. Par conséquent, il joue un rôle important dans la conductance magnétique.

Dans le cas du nanocontact, la première observation incontestable est le comportement particulier des modes optiques 2 et 4, où on trouve une réflexion totale des magnons dans

leurs intervalles de propagation. Nous concluons que ces deux modes sont asymétriques, à cause de la nature symétrique du nanocontact. Le deuxième détail significatif concerne le mode acoustique 1, à basse fréquence, dans les trois cas d'échange considérés. En outre, on remarque que le mode acoustique présente un pic de transmission; qui correspond à une résonance de Fano, qui se déplace vers les fréquences plus élevées avec l'augmentation de l'échange magnétique dans la zone de défaut. On observe cette résonance autour de $\Omega = 0.65$ pour $\gamma = 0.9$, de $\Omega = 0.70$ pour $\gamma = 1.0$, et de $\Omega = 0.75$ pour $\gamma = 1.1$. Au delà de cette fréquence, la réflexion est très importante, voir total à très grandes énergies. Pour ce qui concerne le mode 3, la transmission est plus importante dans la première partie de son intervalle de propagation et diminue quant l'intégrale d'échange magnétique augmente. Elle devient quasiment nulle dans la deuxième partie de l'intervalle. Pour le mode optique 5, qui est très énergétique, nous notons que la transmission du spectre de magnons est très faible et devient totalement nulle, quand on se déplace vers les hautes fréquences. Ce comportement est attendu, du fait que, à hautes énergies, les magnons sont très excités pour être transmis.

Concernant le troisième défaut qui est le dépôt atomique, la transmission est très importante dans les cinq modes de magnons, et ce pour les trois possibilités de l'intégrale d'échange γ . Cela est dû, probablement, à la présence d'atomes en plus sur le film ultraminesces. Dans ce cas, aussi, on retrouve la particularité du mode 1, qui présente une résonance de Fano, à basse énergie, à $\Omega = 0.34$, dans les trois cas d'échange magnétique. Sur le reste de l'intervalle de fréquence, on aura une transmission très importante pour ce mode.

Conductance magnonique

Nous rappelons que la conductance analytiquement est définie comme étant la contribution de l'ensemble des modes à la transmission d'ondes de spins. Autrement dit, c'est la somme des coefficients de transmission individuel du système se propageant à une fréquence Ω donnée. Physiquement, elle permet de connaître l'aptitude du système à laisser passer les magnons. Elle est appelée aussi la transmittance du système. La conductance présente l'inconvénient de perdre l'information sur l'apport de chaque mode de magnon. Néanmoins, elle est accessible expérimentalement, du moment qu'on peut exciter et détecter les précessions des spins à une fréquence donnée.

Sur les Fig.4.1.1c, Fig.4.1.2c et Fig.4.1.3c, nous avons tracé pour les trois défauts étudiés, l'allure des conductances magnétiques $\sigma(\Omega)$, dans les trois possibilités de l'environnement magnétique, en fonction de l'énergie de précession Ω . Nous avons représenté aussi celle du guide d'ondes parfait sur la même courbe, pour faire une comparaison et noter les diverses

modifications induites par l'existence des inhomogénéités dans le film mince. La courbe du guide d'ondes parfait, $\sigma(\Omega)$, est sous forme d'escalier, où chaque palier correspond au nombre de modes propageants dans l'intervalle de fréquence considéré. Des informations sont regroupées sur le tableau 4.1.1.

Energie de diffusion normalisée Ω	Nombre de Mode	Numéro de mode
$\Omega \in [0.00 - 0.38]$	Un mode	Mode 1
$\Omega \in [0.38 - 1.38]$	Deux modes	Modes 1 et 2
$\Omega \in [1.38 - 2.60]$	Trois modes	Modes 1, 2 et 3
$\Omega \in [2.60 - 3.60]$	Quatre modes	Modes 1, 2, 3 et 4
$\Omega \in [3.60 - 4.00]$	Cinq modes	Modes 1, 2, 3, 4, 5
$\Omega \in [4.00 - 4.38]$	Quatre modes	Modes 2, 3, 4 et 5
$\Omega \in [4.38 - 5.38]$	Trois modes	Modes 3, 4 et 5
$\Omega \in [5.38 - 6.60]$	Deux modes	Modes 4 et 5
$\Omega \in [6.60 - 7.60]$	Un seul mode	Mode 5

Tableau.4.1.1 Nombre de modes propageants dans l'intervalle de propagation de magnons des films minces à maillage cubique.

L'écart entre $\sigma(\Omega)$ et sa valeur effective donne une mesure de la réflexion causée par la diffusion magnétique via le défaut.

On remarque sur les courbes de conductances des oscillations complexes. Elles sont dues aux multiples réflexions sur les bords des défauts. Plusieurs pics, dont la plupart correspondent aux bornes des intervalles Ω et des paliers de la conductance du film parfait. Les conductances du dépôt atomique sont plus importantes par rapport à celles des deux autres défauts examinés. Ces résultats prouvent que la conductance est une fonction dépendante de la nature du défaut, et dans notre cas, les dépôts atomiques la favorisent.

On remarque dans le premier film, la conductance est peu sensible à la variation de l'intégrale d'échange γ pour $\Omega \in [0-1.80]$, on constate deux résonances dans cet intervalle ; la première est très importante à $\Omega = 0.38$ et une autre à $\Omega = 1.36$. En revanche cette conductance devienne de plus en plus sensible au changement de l'environnement magnétique en passant vers les hautes énergies, où elle est dominante dans le cas de durcissement et s'annule dans le cas d'adoucissement pour $\Omega > 6.68$.

Dans le deuxième défaut (nanocontact), la conductance est égale ou inférieure à un seul mode de propagation. Sa deuxième caractéristique est le déplacement systématique de son pic spectral vers des fréquences plus élevées avec le durcissement de l'échange magnétique du domaine de nanocontact. La constatation infaillible de ces résultats et l'annulation de la

Excitations de spins dans les films magnétiques à cinq plans en présence des inhomogénéités

conductance quand Ω tend vers les hautes fréquences. On peut dire que le nanocontact filtre les magnons, et ne laisse passer qu'un seul mode au maximum.

Le troisième film présente des amplitudes de conductances très importantes, dire proches de celle du film mince parfait. Elles présentent plusieurs fluctuations est des chutes aux bornes des limites d'interférences des modes propageants.

Les états localisés de spins

Sur les Fig.4.1.1d, Fig.4.1.2d et Fig.4.1.3d, nous avons représenté les bandes passantes des magnons de volume (en bleu) et les modes localisés (en rouge) pour les trois films minces inhomogènes à structure cristallographique cubique et pour les différents cas de l'intégrale d'échange. On distingue deux types de modes localisés ; les modes de très basses énergies qui apparaissent au dessous de la bande passante de magnons de volume appelés modes acoustiques, et les modes localisé à hautes énergies qui se trouvent au dessus des modes de volume qui sont des modes optiques. Nous avons récapitulé les résultats des trois types de défauts dans le tableau 4.1.2 suivant :

Défauts	γ	N ^{bre} de modes Localisés acoustiques	N ^{bre} de modes Localisés optiques
Nanowell	0.9	Un seul mode	Aucun mode
	1.0	Aucun mode	Aucun mode
	1.1	Aucun mode	Deux modes
Nanocontact	0.9	Cinq modes	Aucun mode
	1.0	Aucun mode	Aucun mode
	1.1	Aucun mode	Un seul mode
Dépôt atomique	0.9	Un seul mode	Aucun mode
	1.0	Aucun mode	Aucun mode
	1.1	Aucun mode	Un seul mode

Tableau.4.1.2 Nombre de modes localisés pour les trois types de films minces à maillage cubique en fonction de l'environnement magnétique de la zone de défaut.

Les densités d'états magnoniques

Les DOS sont calculées en fonction de la fréquence normalisée Ω et pour un angle d'incidence $\phi_y = 0$, dans les trois possibilités d'échange magnétique et pour les trois films minces inhomogènes à structure cubique et pour les différents sites irréductibles, que nous avons numérotés sur les figures Fig.4.1.1a.(ii), Fig.4.1.2a.(ii) et Fig.4.1.3a. (ii).

On remarque, pour les trois cas, que les DOS sont données en unités arbitraires et sont définies sur l'intervalle de fréquence $\Omega \in [0.00, 7.60]$ qui correspond à celui de dispersion de magnons dans le film mince parfait à maillage cubique. Pour chaque site, nous avons analysé

les trois possibilités de l'échange magnétique, de l'adoucissement au durcissement de l'intégrale d'échange γ . Dans chaque figure, nous observons plusieurs pics de résonance de différentes tailles et largeurs. Ces derniers se déplacent légèrement vers les hautes fréquences en fonction de durcissement de γ . Ces résonances sont sensibles à la variation des paramètres magnétiques au voisinage du domaine défaut. Notons que leur présence dans différentes courbes de la densité d'état est induite par l'interaction entre les modes propageants du film et les modes localisés. Sur la Fig.4.1.1e, nous avons représenté les densités d'états des sites irréductibles (1), (2), (3), (4), (5), (6), (7), (8), (9) du film mince contenant le nanowell de la Fig.4.1.1a.(ii).

On constate que, pour la majorité des sites, les densités d'états, à basse fréquence, sont insensibles à la variation de γ . Leurs hauteurs diminuent en passant aux hautes énergies. Sauf pour le site (5) où la hauteur est proportionnelle à la fréquence. Les sites (1), (2), (3), (8) et (9) présentent une importante résonance pour l'adoucissement à $\Omega = 2.68$.

La Fig.4.1.2e, donne les densités d'états des sites irréductibles (1), (2), (3), (4), (5), (6) du nanocontact (Fig.4.1.2a. (ii)). On constate que les densités des sites (4), (5), (6) sont identiques cela s'explique par le même nombre de voisins. Elle présente à $\Omega = 0.79$ un pic de résonance et un autre de hauteur plus importante en fonction de l'adoucissement à $\Omega = 2.83$. Le site (3) présente un comportement très différent des autres et cela peut être expliqué par le nombre de voisins complet par rapport aux autres sites.

Sur la Fig.4.1.3e, nous avons représenté les densités d'états des sites irréductibles (1), (2), (3), (4), (5), (6), (7), (8), (9) du film mince qui contient le dépôt atomique, numérotés sur la Fig.4.1.3a.(ii). Ce cas est différent des deux premiers par les hauteurs importantes des pics de résonances. La densité d'états des sites (1), (5), (6), (7) et (9) présentent un pic à $\Omega = 2.17$. Les sites (2), (3), (4) et (8) présentent des résonances importantes à hautes énergies dans le cas de durcissement de γ .

Partie II :

Excitations des spins dans un film magnétique inhomogène à maillage hexagonal

Dans cette partie, nous reprenons les étapes suivies dans la partie précédente et nous analysons la dynamique des films ultraminces avec un autre type de maillage qui est hexagonal. Notre but est de relever l'effet de la cristallisation sur le mouvement de précession des ondes de spins, en considérant des films hexagonaux, contenant les mêmes défauts examinés précédemment.

2.1. Résultats obtenus

2.1.1. Cas d'un défaut nanowell dans un film à maillage hexagonal

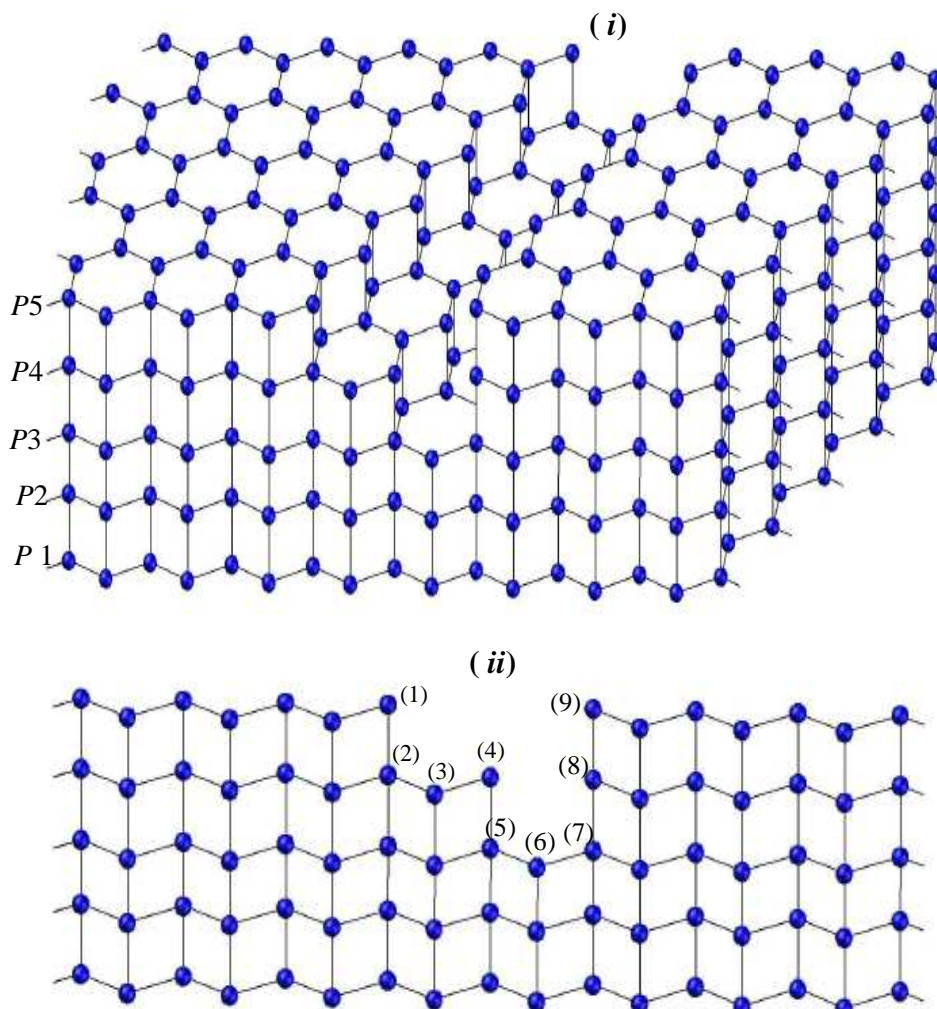


Fig.4.2.1a Représentation schématique d'un nanowell magnétique asymétrique dans un film mince à maillage hexagonal constitué de cinq plans atomiques.
- (i) Représentation à 3D - (ii) Représentation à 2D.

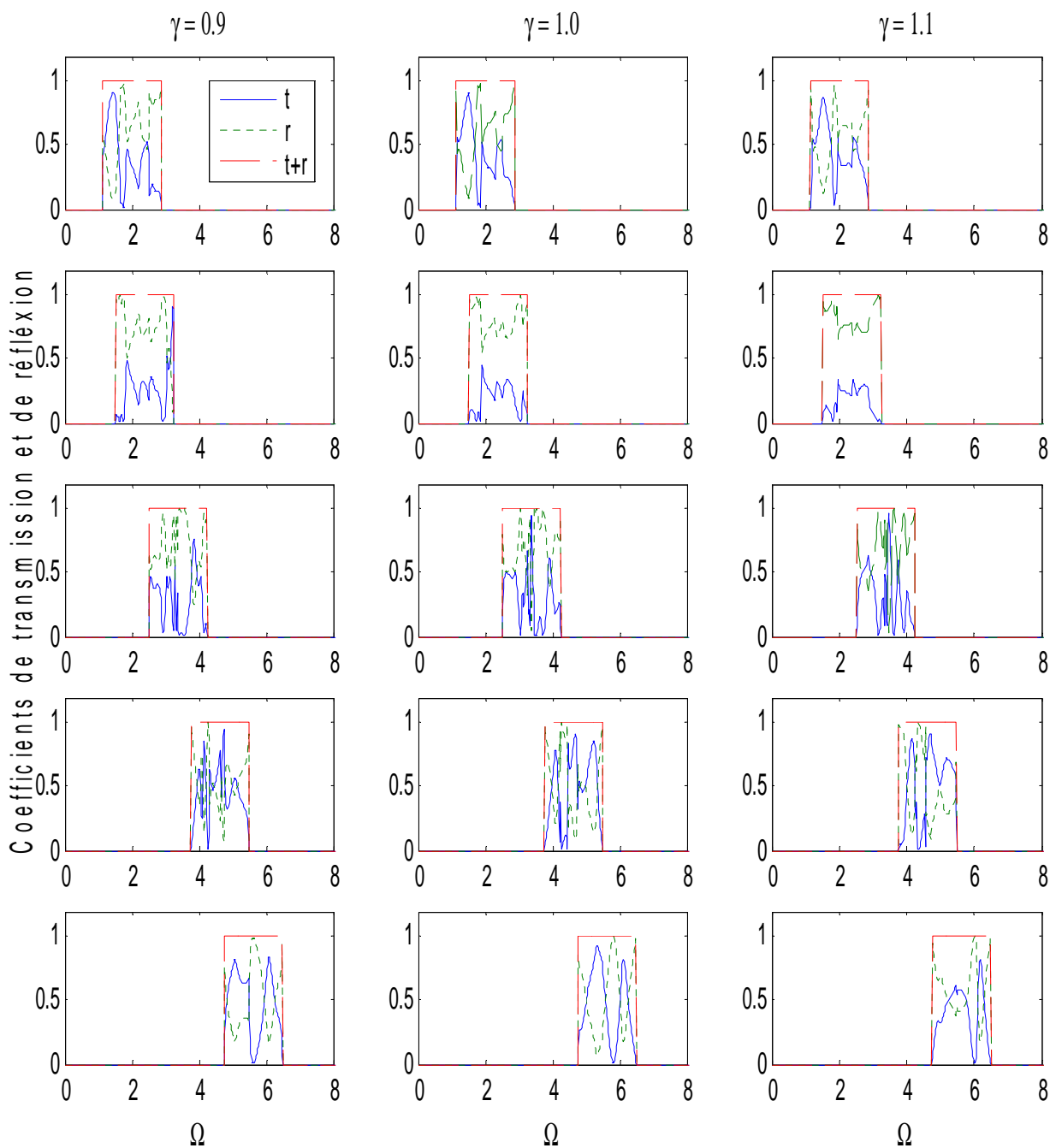
Coefficients de transmission et de réflexion

Fig.4.2.1b Coefficients de transmission et de réflexion via un nanowell magnétique Asymétrique dans un film mince à maillage hexagonal.

Conductance magnonique

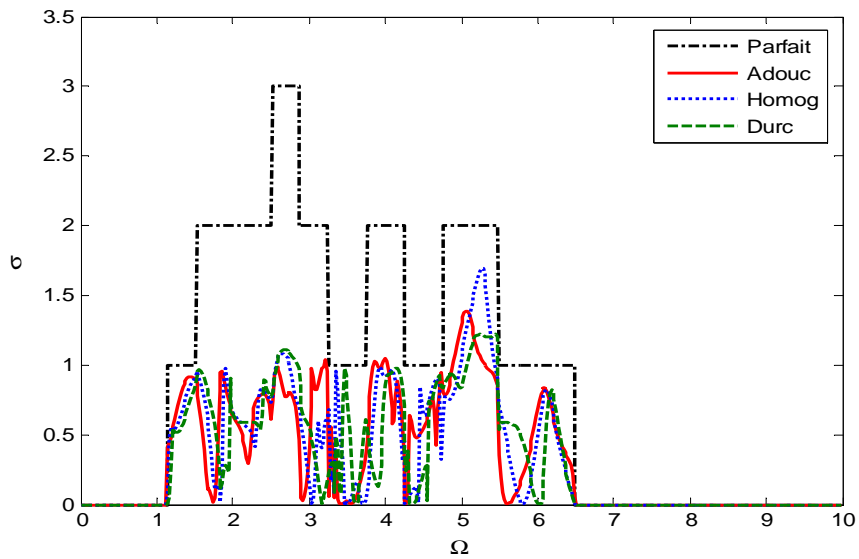


Fig.4.2.1c Conductances magnoniques d'un nanowell magnétique asymétrique présent dans un film mince à maillage hexagonal.

Etats localisés de spins

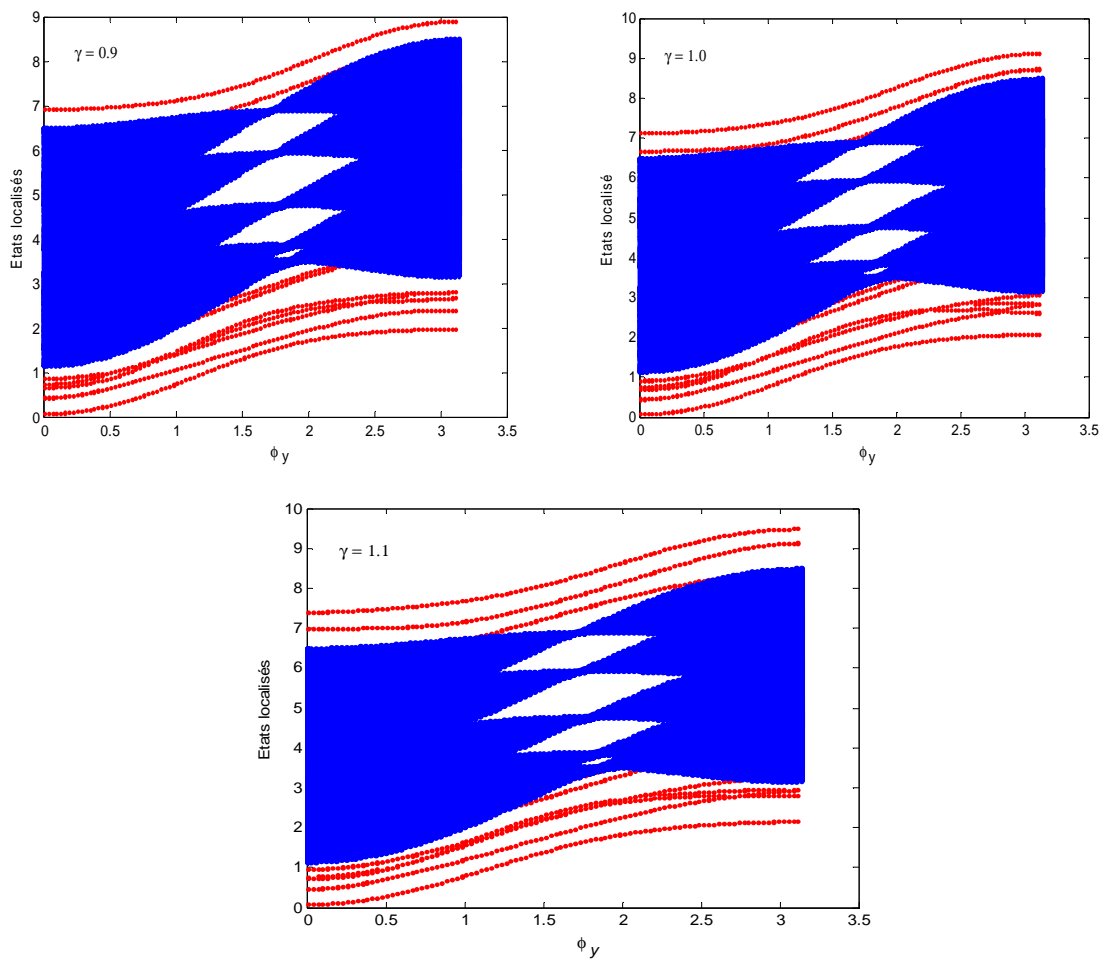


Fig.4.2.1d Etats localisés d'un film mince à maillage hexagonal Contenant un nanowell asymétrique.

Densités d'états localisés

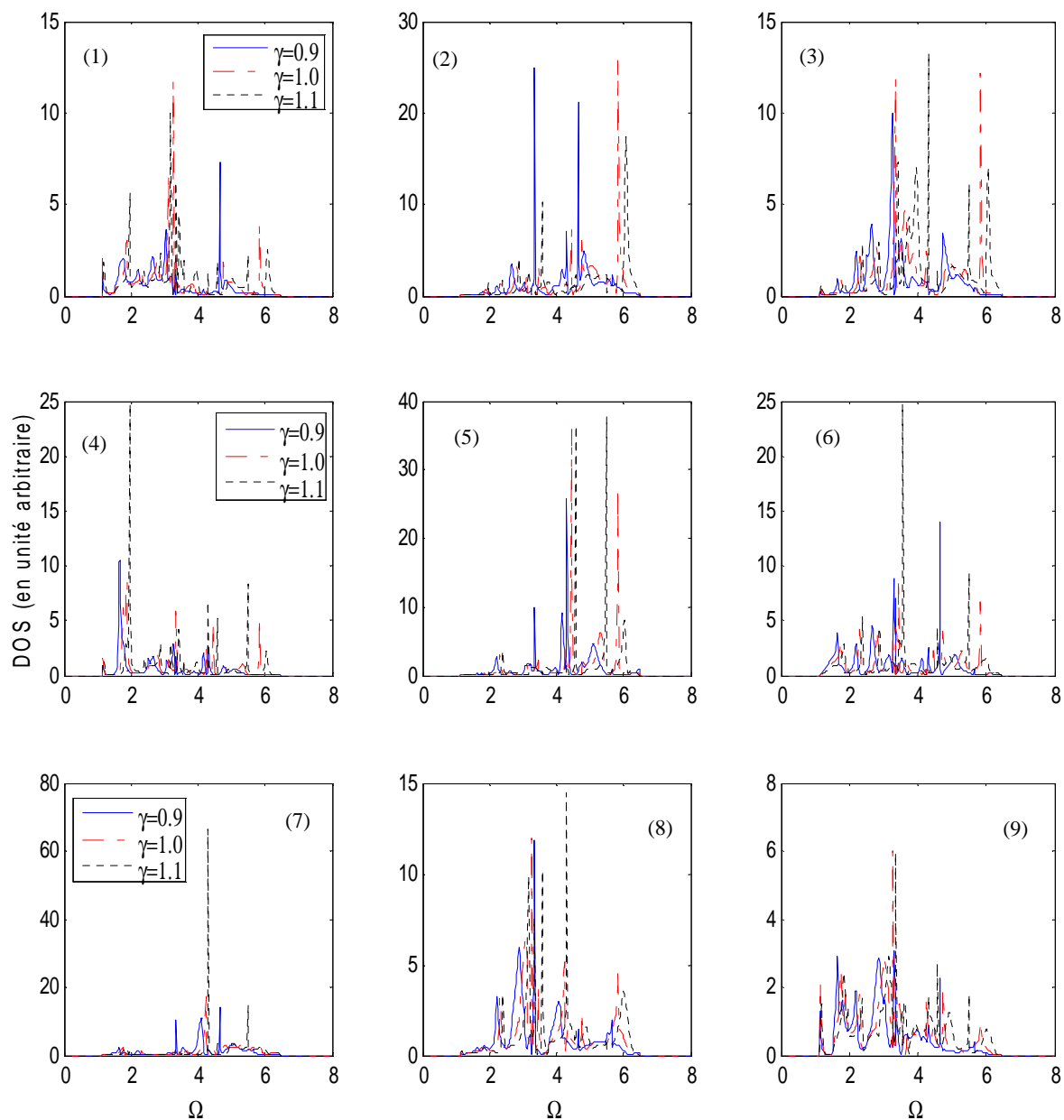


Fig.4.2.1e DOS de magnons d'un nanowell asymétrique dans un film mince à maillage hexagonal.

2.1.2. Cas d'un nanocontact dans un film mince à maillage hexagonal

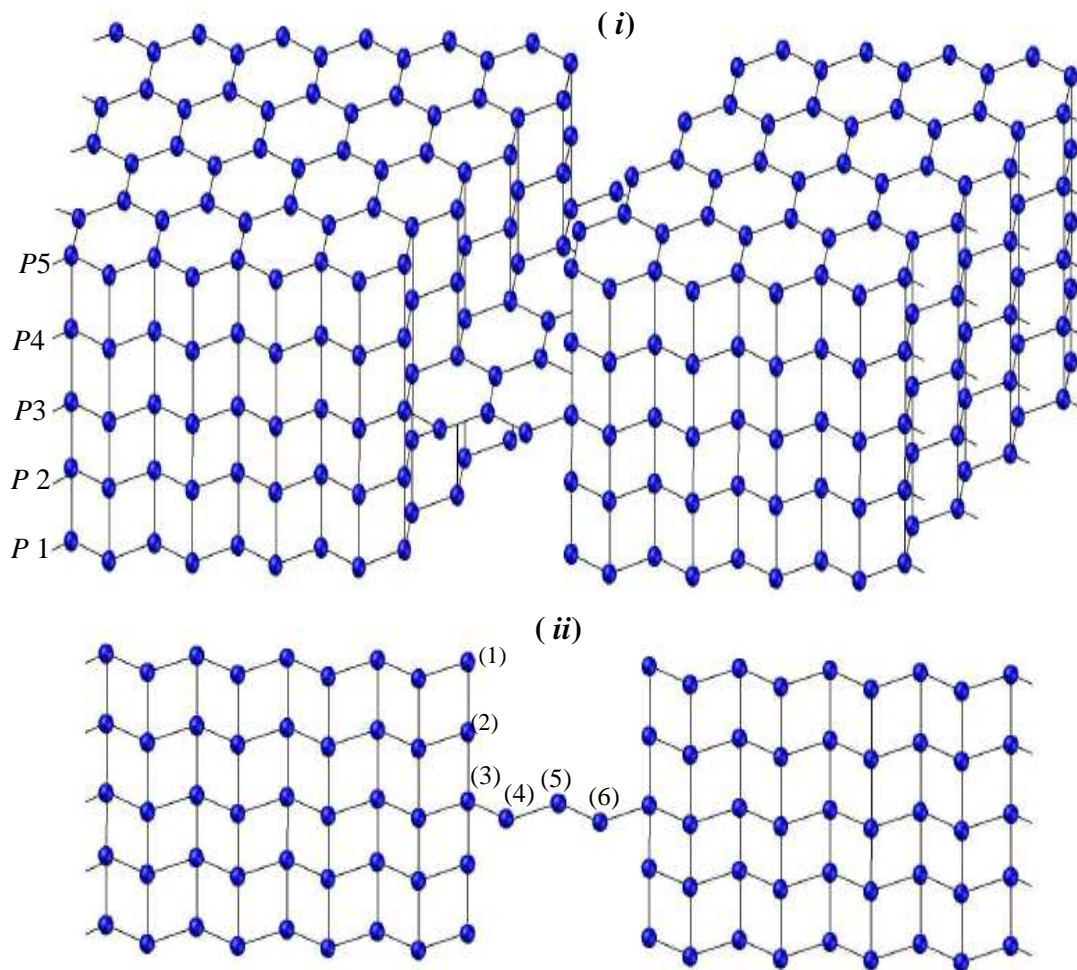


Fig.4.2.2a Représentation schématique d'un nanocontact dans un film mince à maillage hexagonal constitué de cinq plans atomiques.
- (i) Représentation à 3D - (ii) Représentation à 2D.

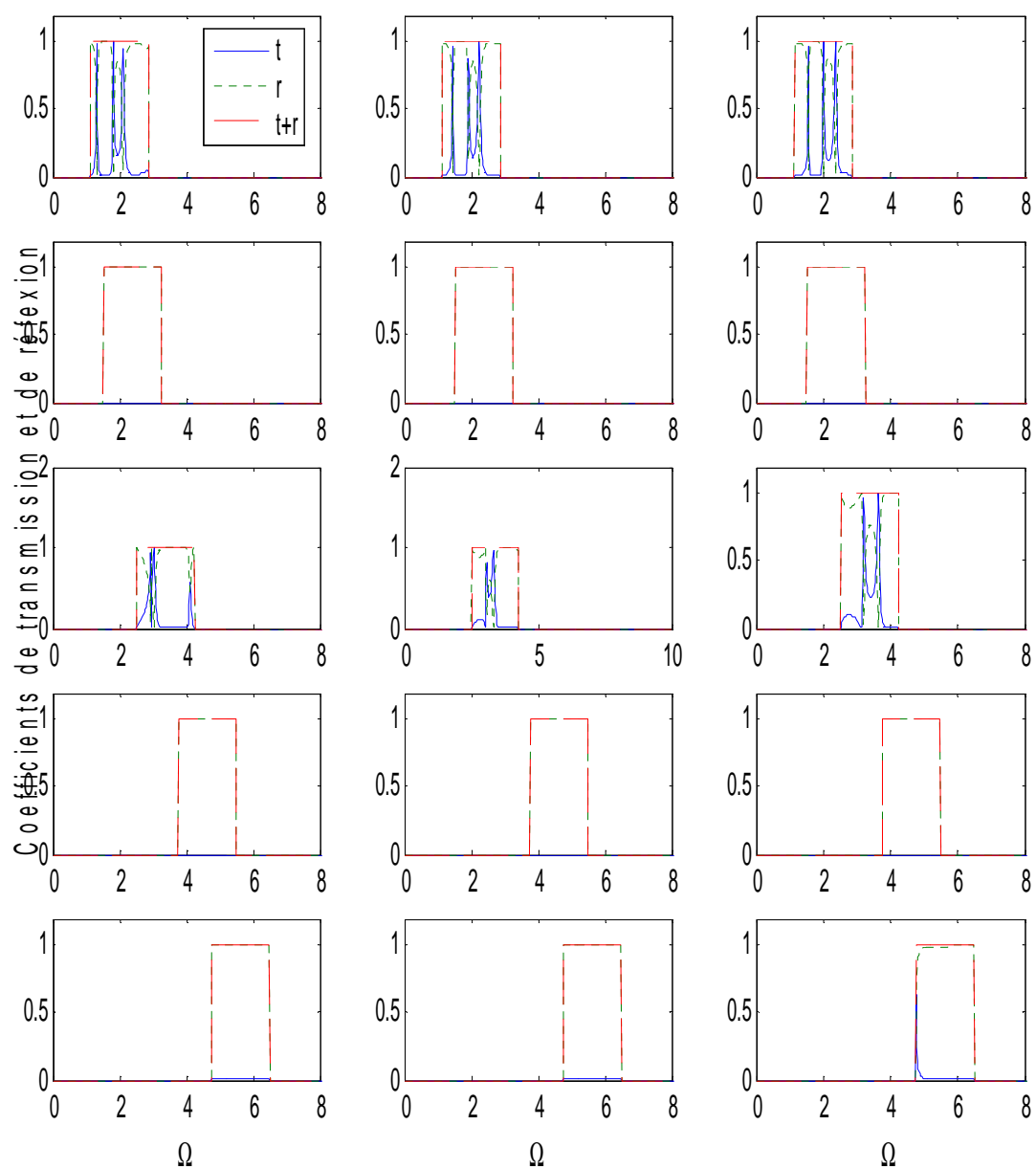
Coefficients de transmission et de réflexion

Fig.4.2.2b Transmission et réflexion de magnons via un nanocontact dans un film mince à maillage hexagonal.

Conductance magnonique

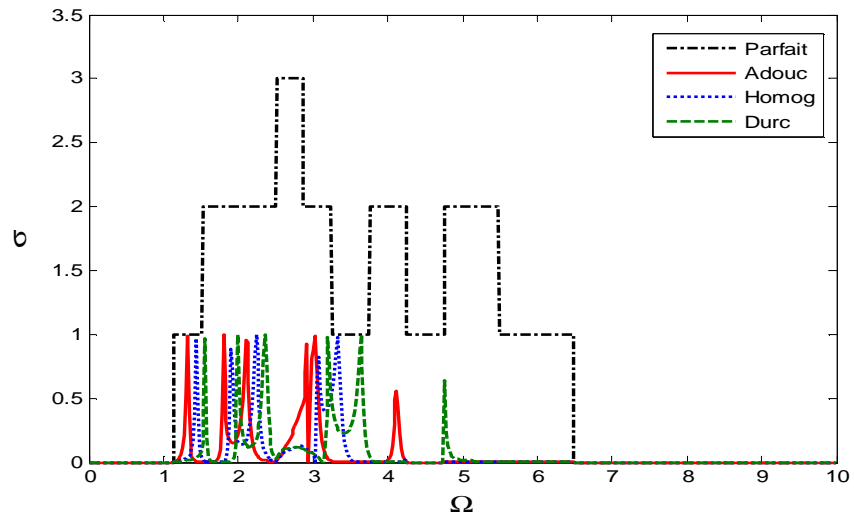


Fig.4.2.2c Conductances magnoniques d'un nanocontact atomique
Présent dans un film mince à maillage hexagonal.

Etats localisés de spins

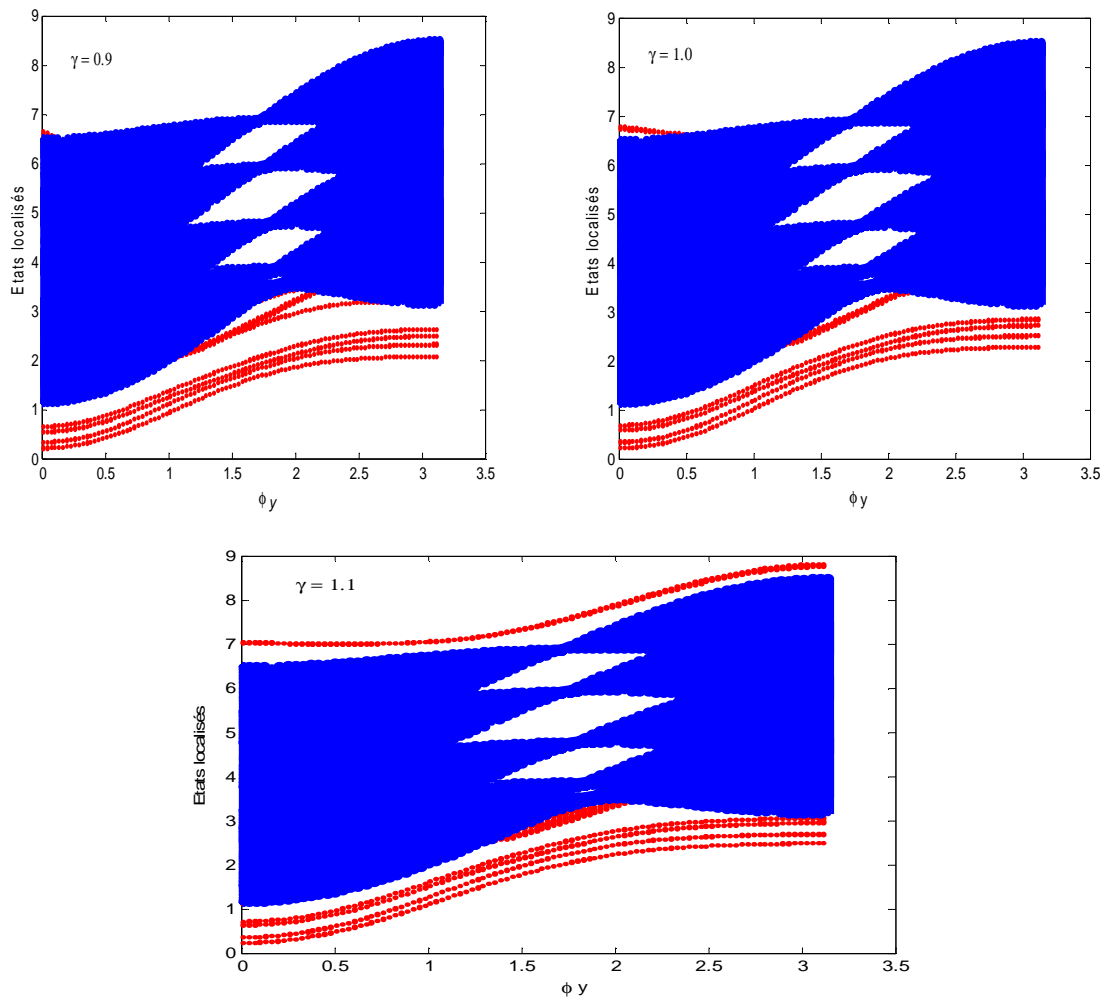


Fig.4.2.2d Etats localisés d'un film mince à maillage hexagonal contenant un nanocontact.

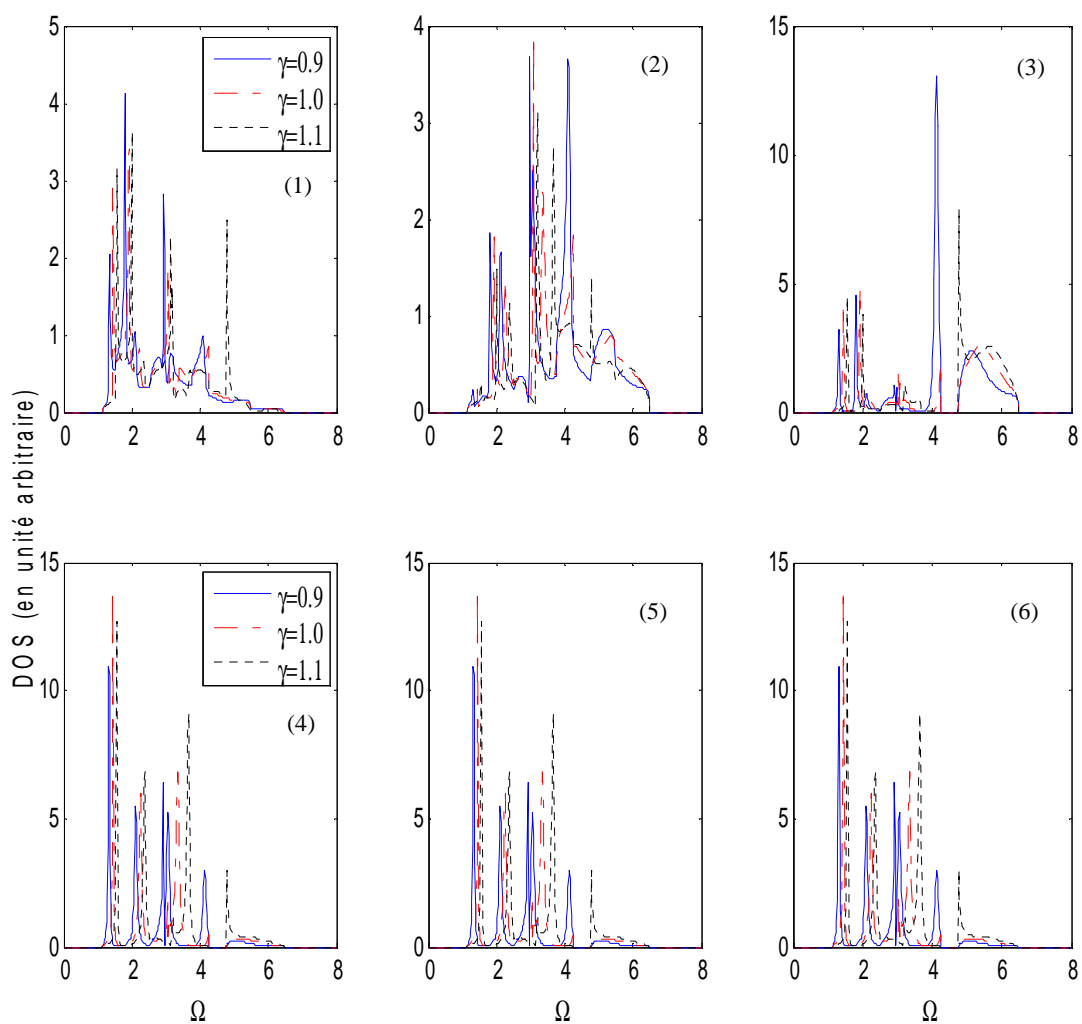
Densités d'états magnoniques

Fig.4.2.2e DOS de magnons d'un film mince à maillage hexagonal avec nanocontact.

2.1.3. Dépôt atomique sur un film à maillage hexagonal

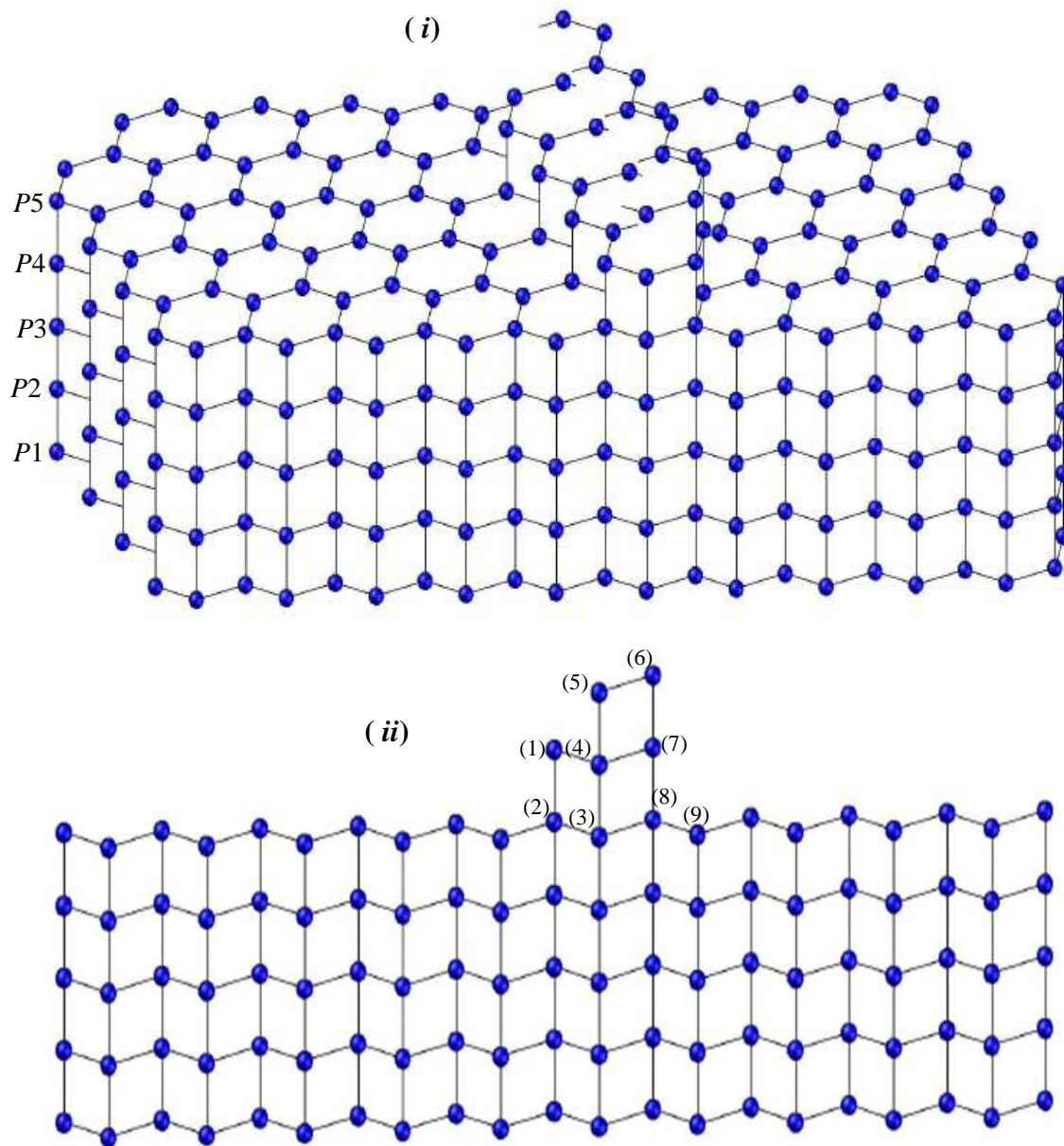


Fig.4.2.3a Représentation schématique d'un dépôt atomique sur un film mince à maillage hexagonal constitué de cinq plans atomiques.
- (i) Représentation à 3D - (ii) Représentation à 2D.

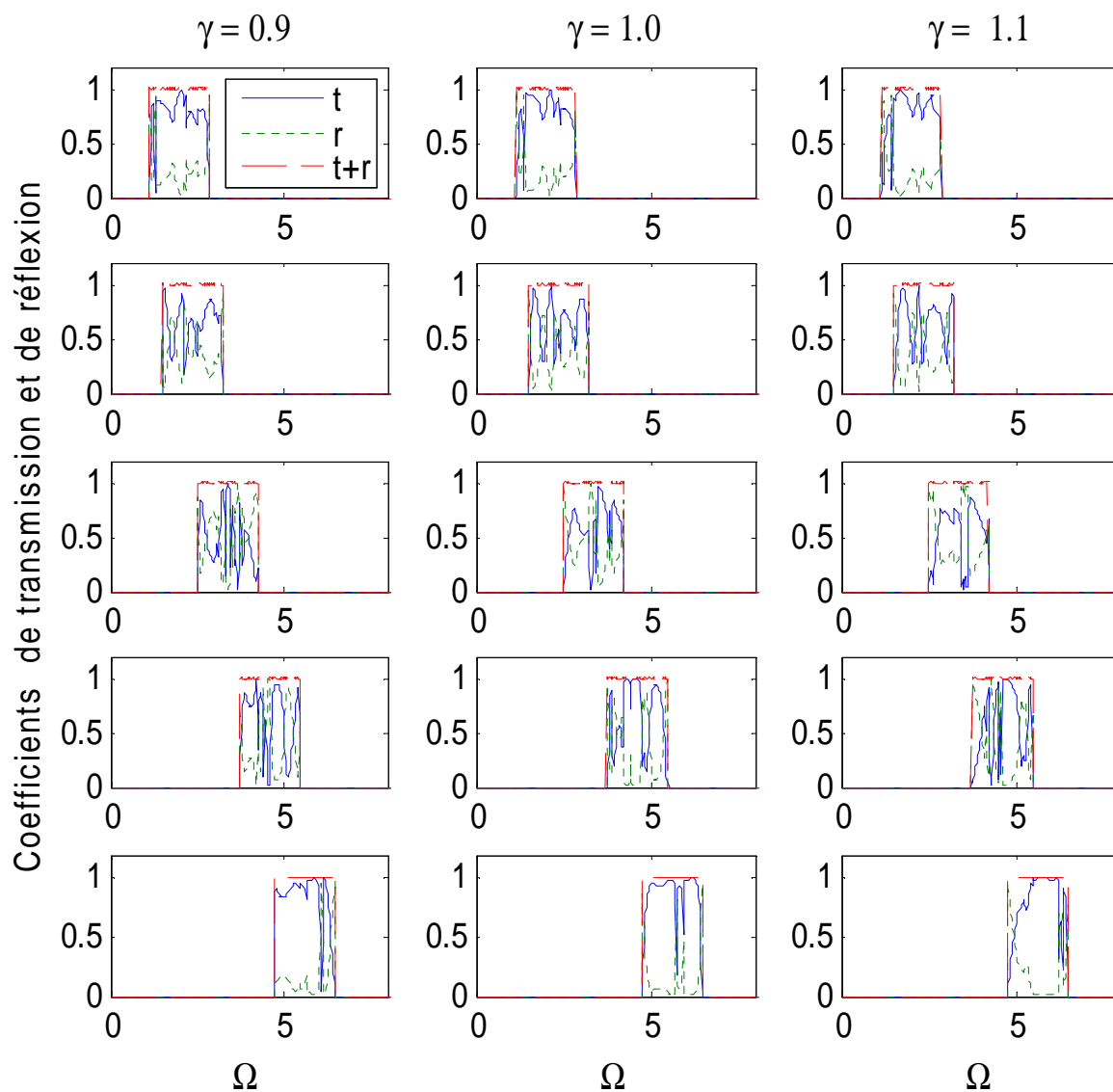
Coefficients de transmission et de réflexion

Fig.4.2.3b Coefficients de transmission et de réflexion en présence d'un dépôt atomique dans un film mince à maillage hexagonal.

Conductance magnonique

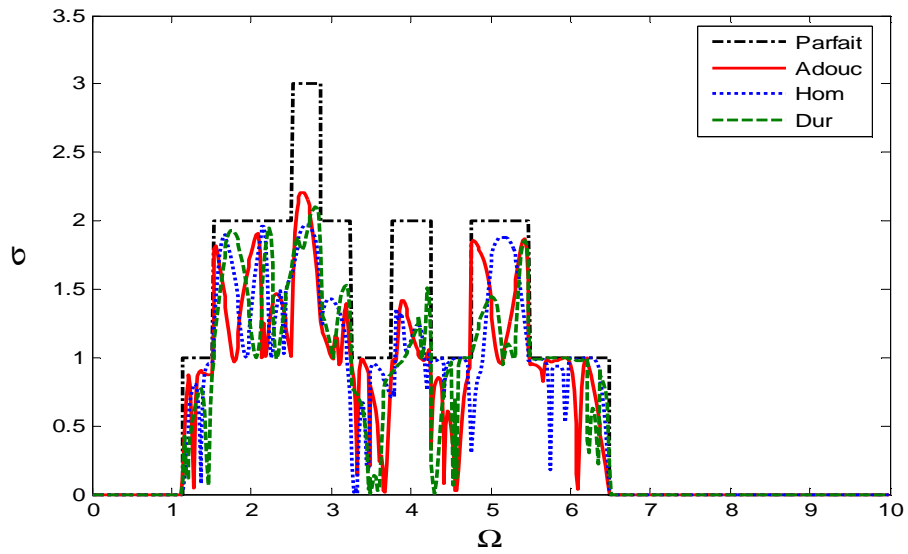


Fig.4.2.3c Conductances magnoniques d'un film mince à maillage hexagonal en présence d'un dépôt atomique.

Etats localisés de spins

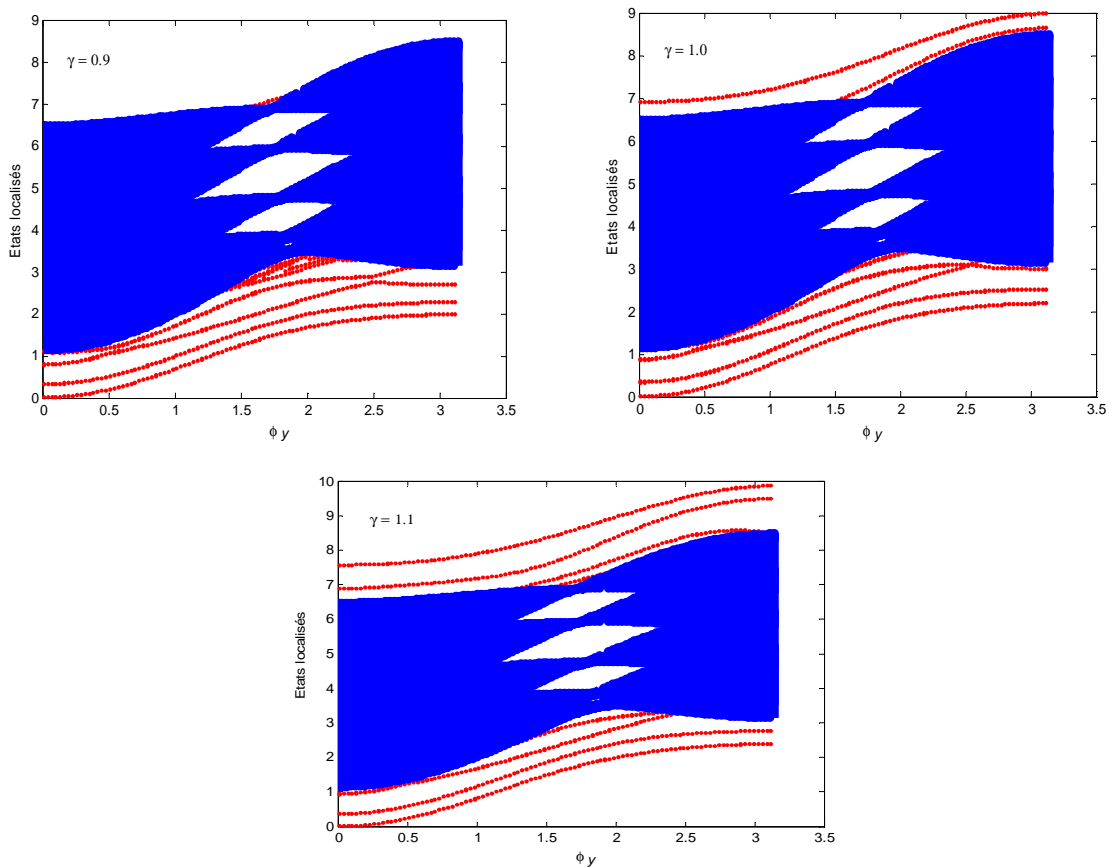


Fig.4.2.3d Etats localisés de magnons d'un film mince à maillage hexagonal contenant un dépôt atomique.

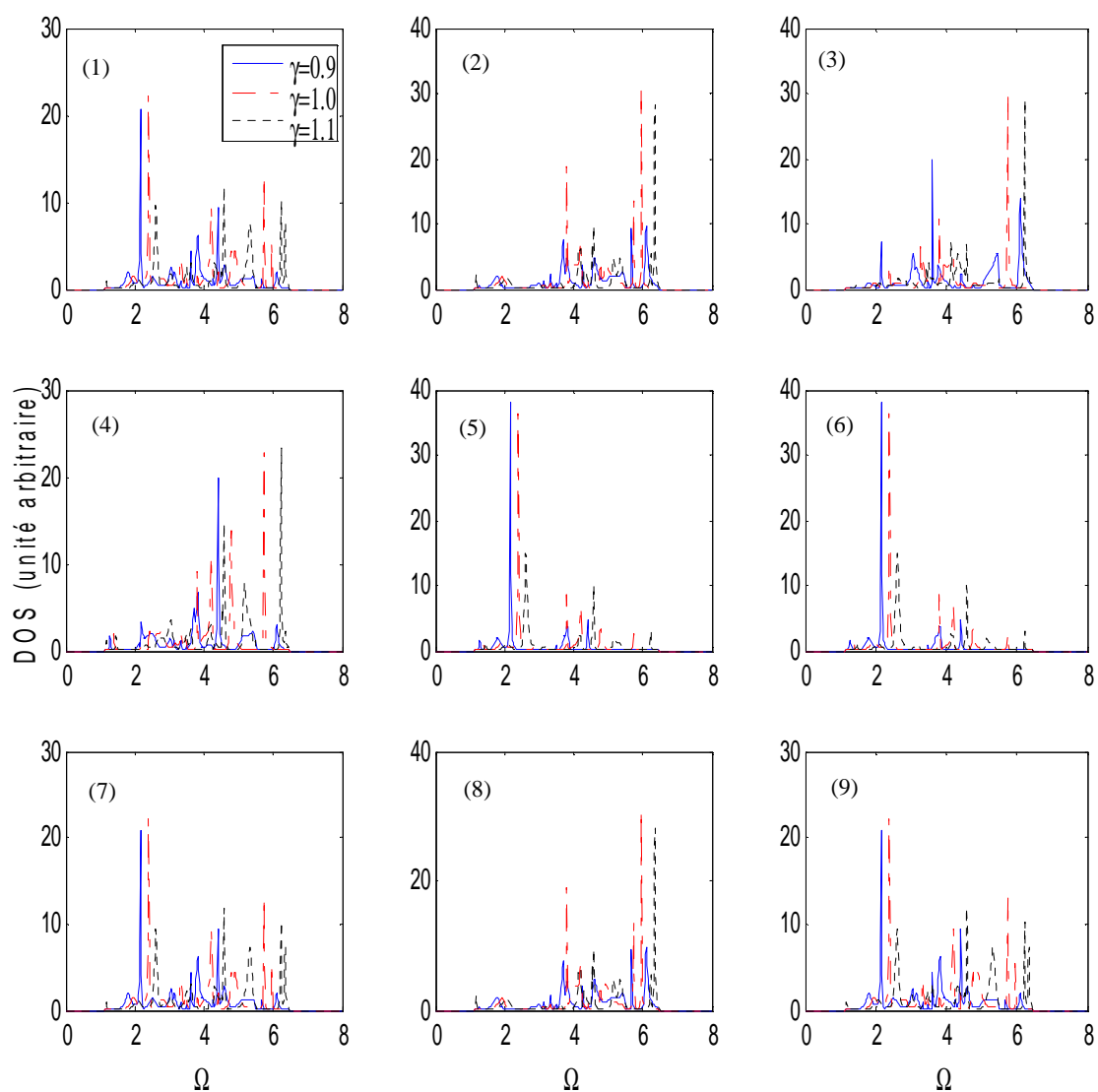
Densités d'états magnoniques

Fig.4.2.3e DOS de magnons d'un film mince à maillage hexagonal avec un dépôt atomique.

2.2. Discussion et analyse des résultats obtenus

Pour étudier le comportement des ondes de spins à travers un autre type de films minces en gardant le même nombre de plans atomiques, et les mêmes types de défauts, mais en considérant un maillage hexagonal, nous avons suivi la même démarche que la partie I.

Coefficients de transmission et de réflexion

Les coefficients de transmission et de réflexion en fonction des fréquences normalisées Ω sont représentés sur les Fig.4.2.1b, Fig.4.2.2b et Fig.4.2.3b, pour les mêmes défauts étudiés dans la partie I, en considérant aussi trois possibilités de l'intégrale d'échange magnétique γ pour chaque inhomogénéité ($\gamma = 0.9, 1.0$ et 1.1).

Dans le cas du nanowell, on constate plusieurs oscillations dans les spectres magnétiques. En particulier, dans le troisième et le quatrième modes, on observe des résonances de type Fano. Le coefficient de transmission pour le premier mode commence par une valeur moyenne puis augmente pour atteindre son maximum aux alentours de $\Omega = 1.5$, puis diminue et devient nul aux environs de $\Omega = 1.6$. Nous observons une autre résonance de Fano à la position $\Omega = 1.8$. Dans le mode 2, nous notons un comportement remarquable; la réflexion est dominante dans sa gamme de propagation, et elle augmente en fonction du durcissement de l'échange magnétique. En parallèle, le mode de précession cinq présente un pic de réflexion au milieu de sa gamme de fréquence. Ce dernier se déplace vers les hautes énergies quand γ augmente.

Dans le cas du nanocontact hexagonal, le comportement des modes 2, 4 et 5 est similaire à celui des mêmes modes constatés dans le cas du nanocontact cubique. Pour rappel, nous obtenons une très grande réflexion de magnons dans le mode 5 et total pour les deux autres.

Aussi, nous remarquons que le premier mode présente trois résonances de Fano, aux positions $\Omega = 1.32, \Omega = 1.67$ et $\Omega = 2.12$. Ces positions de résonances se déplacent légèrement vers les hautes fréquences en fonction du durcissement de l'intégrale d'échange; d'ailleurs nous les retrouvons aux positions $\Omega = 1.50, \Omega = 1.86$ et $\Omega = 2.28$ (cas homogène) et aux positions $\Omega = 1.60, \Omega = 2.04$ et $\Omega = 2.42$ (cas durcissement). Le troisième mode de magnon possède deux résonances importantes et leurs fréquences et leurs largeurs varient en fonction de l'intégrale d'échange du nanocontact.

En ce qui concerne la troisième inhomogénéité (dépôt atomique), la transmission est très importante pour les cinq modes et pour les trois possibilités de l'intégrale d'échange γ . Cela est dû à la présence d'atomes en plus sur le film mince, et le mouvement de précession des

vecteurs de spins n'est pas gêné à l'intérieur du film. À très basses fréquences, le mode 1 présente une résonance de Fano, qui se décale vers les hautes fréquences en fonction de durcissement. En définitif, on peut dire que les spectres magnétiques montrent des résonances caractéristiques dans toute la zone de Brillouin associée pour chaque type de film. Ce qui a entraîné l'appariation de nouvelles caractéristiques dans les spectres de transmission des films à maillage hexagonal suite au changement des amplitudes de précession des spins. Ainsi, les spectres de transmission et de réflexion, causés par les défauts sont une empreinte directe des amplitudes de précession des spins d'un maillage donné.

Conductance magnétique

Sur les Fig.4.2.1c, Fig.4.2.2c et Fig.4.2.3c, nous avons tracé, pour les trois défauts considérés, l'allure des conductances magnétiques $\sigma(\Omega)$, dans les trois possibilités de l'environnement magnétique, en fonction de l'énergie de diffusion Ω . Nous avons représenté aussi celle du guide d'ondes parfait sur la même courbe afin de faire une comparaison et de noter les diverses modifications induites par l'existence des inhomogénéités dans le film mince. La courbe de guide d'ondes parfait, $\sigma(\Omega)$ est aussi sous forme d'escalier, où chaque palier correspond à l'intervalle de fréquence de propagation considéré pour un nombre de modes bien défini. Nous les avons résumés sur le tableau 4.2.1.

Fréquence normalisée Ω	N ^{bre} de Modes	Numéro de mode
[1.13– 1.51]	Un mode	Mode 1
[1.51 –2.51]	Deux modes	Mode 1 et 2
[2.51–2.86]	Trois modes	Mode 1, 2 et 3
[2.86–3.24]	Deux modes	Modes 2 et 3
[3.24–3.75]	Un mode	Mode3
[3.75–4.24]	Deux modes	Modes 3 et 4
[4.24– 4.75]	Un mode	Mode 4
[4.75– 5.48]	Deux modes	Modes4 et5
[5.48–6.48]	Un mode	Mode 5

Tableau 4.2.1 Nombre de modes propageant dans l'intervalle de propagation de magnons des films minces à maillage hexagonal.

Le maximum de modes qui peut être excité simultanément est de trois, contrairement au film cubique où les cinq modes peuvent être excités aux même temps.

Nous remarquons, aussi, sur les courbes des conductances magnoniques des oscillations complexes. Elles sont dues aux multiples réflexions sur les limites des zones défauts. En outre, plusieurs pics sont observés sur les courbes, dont la plupart correspond aux bornes des intervalles des paliers de la conductance du film parfait.

Excitations de spins dans les films magnétiques à cinq plans en présence des inhomogénéités

Pour le premier film, la conductance est inférieure à deux modes propageants. Leurs maximums est à $\Omega = 5.08$, pour l'adoucissement, $\Omega = 5.26$ pour l'homogénéité et $\Omega = 5.44$ pour le durcissement.

Dans le deuxième défaut (nanocontact), les conductances sont très faibles, et elles ne dépassent pas un seul mode propageant à basse fréquence. Ces conductances s'annulent à partir de $\Omega = 4.94$.

Dans le troisième défaut, nous constatons que les conductances sont très importantes, dire proches de celle du film mince hexagonal parfait, et présentent un nombre important de fluctuations. En conclusion, l'amplitude des conductances du dépôt atomique sont les plus importantes et celles du nanocontact sont les plus faibles dans le maillage hexagonal.

Les états localisés de spins

Sur les figures Fig.4.2.1d, Fig.4.2.2d et Fig.4.2.3d, nous avons représenté les bandes passantes de magnons de volume par une surface continue (en bleu) et les modes localisés par des lignes (en rouge) pour les trois films minces inhomogènes à structure hexagonale. Sur les spectres, nous notons la présence de deux importantes caractéristiques différentes de celles des films minces à structure cubiques. La première est la présence de quatre régions de gap en volume sous forme de losanges dont trois sont très importantes. La deuxième : est le nombre important d'états localisés. La raison de cette différence réside dans le fait qu'un spin à la surface lui manque environ 16.66% de voisins dans la structure cubique. Par contre, dans la structure hexagonale, le nombre est beaucoup plus grand, il est d'environ 33.33%.

Défauts	γ	N ^{bre} de modes à basses fréquences	N ^{bre} de modes à hautes fréquences
Nanowell	0.9	Sept modes	Deux modes
	1.0	Six modes	Deux modes
	1.1	Cinq modes	Trois modes
Nanocontact	0.9	Six modes	Aucun mode
	1.0	Cinq modes	Un seul mode
	1.1	Cinq modes	Un seul mode
Dépôt atomique	0.9	Sept modes	Aucun mode
	1.0	Cinq modes	Deux modes
	1.1	Quatre modes	Quatre modes

Tableau 4.2.2 Nombre de modes localisés pour les trois types de films minces à maillage hexagonal en fonction de l'environnement magnétique de la zone de défaut.

Les densités d'états magnoniques

Nous avons calculé les densités d'états de magnons pour les trois films minces inhomogènes à structures cristallographiques hexagonales, pour les mêmes atomes irréductibles vues dans les films à maillage cubique. Ces résultats sont rapportés sur les Fig.4.2.1e, Fig.4.2.2e et Fig.4.2.3e.

Pour chaque configuration, nous avons analysé les trois possibilités du choix de l'environnement magnétique dans le domaine propre de la région perturbée par rapport à la valeur de l'intégrale d'échange de film mince parfaite $\gamma = 0.9, 1.0, 1.1$.

L'ensemble des spectres de (DOS) montrent des pics et des oscillations qui s'étalent sur une plage de fréquence [1.13 – 6.48], pour l'ensemble des valeurs de γ considérées. Ces films présentent un nombre important de résonances par rapport aux films à maillage cubique. Ceci est justifiée, par le grand nombre d'états localisés créés par les défauts dans les films hexagonaux.

Dans le premier type de configuration de défaut (nanowell), le site (7) présente la résonance ayant la plus grande amplitude et ce dans le cas de durcissement, elle est située à $\Omega = 4.33$. Par contre, le site (9) présente les plus faibles densités. Dans le cas de l'adoucissement, le site (2) présente deux pics notables l'un à $\Omega = 3.35$ et l'autre à $\Omega = 4.65$.

Dans le deuxième type de configuration de défaut (nanocontact), les DOS des atomes (4), (5) et (6) sont identiques, c'est la même caractéristique retrouvée dans la partie I, pour ce type de défaut. Elles présentent des pics de résonances d'amplitudes variables à $\Omega = 1.31, \Omega = 2.23, \Omega = 2.91$ et $\Omega = 4.11$ qui se déplacent vers les hautes fréquences en fonction de durcissement de l'échange magnétique γ .

Les courbes, de DOS, se rapportant au troisième type de défaut magnétique (cas de dépôt atomique) montrent que les sites (1), (7) et (9) ont des densités identiques. Ce qui permet de conclure que ces trois sites ont des fréquences d'oscillations communes. Chaque site, possède une amplitude importante, à la même fréquence se trouvant à $\Omega = 2.17$. Les DOS des sites numérotés (2) et (8) sont également identiques ainsi que celles des sites (5) et (6) et cela est dû à leur nombre de voisins identique et à leurs propriétés de symétrie.

Partie III : Juxtaposition de deux films minces à maillage différent

Cette partie est réservée à l'étude de la diffusion d'ondes de spins par l'intermédiaire d'une interface reliant deux films minces de même épaisseur A et B, et de structure cristallographique différente, l'un est cubique (A) et l'autre est hexagonal (B). Nous nous sommes intéressés au comportement de l'onde de spin, quand il passe du film à maillage cubique vers l'hexagonal (A/B) et vis versa (B/A). L'intégrale d'échange du film mince A est J_{AA} et celui du film B est J_{BB} et celui de l'interface est noté J_{AB} , nous l'avons pris comme leurs moyenne arithmétique, de telle que $J_{AB} = (J_{AA} + J_{BB})/2$. Cette façon de calculer J_{AB} est similaire à celle calculée dans quelques métaux ferromagnétiques [16–19], mais, elle n'est pas toujours exacte, car elle dépend de la concentration des éléments A et B. Dans la littérature, une autre manière de la déterminer est proposée; $J_{AB} = (J_{AA} \cdot J_{BB})^{1/2}$. La valeur considérée est arbitraire. Notre but est juste d'illustrer nos calculs.

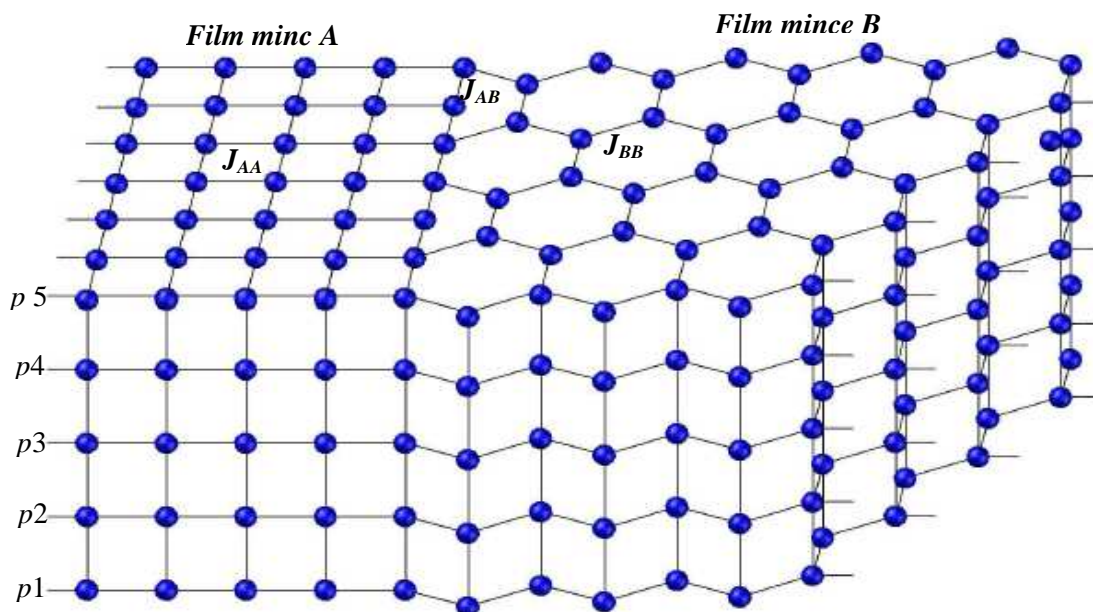


Fig.4.3 Représentation schématique d'un film mince engendrant une nanojonction reliant un film mince à maillage cubique A et un autre à maillage hexagonal B.

3.1. Résultats obtenus

3.1.1. Interface A/B

Coefficients de transmission et de réflexion

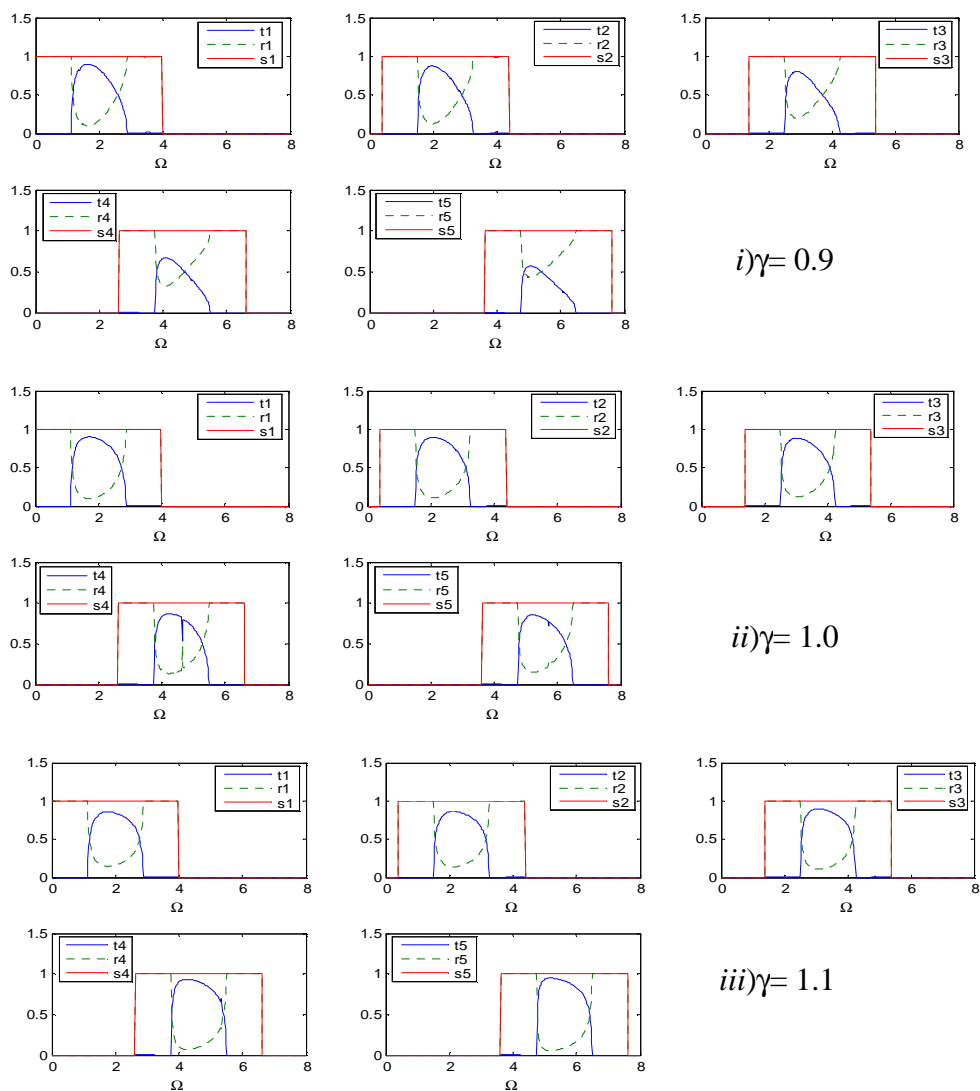
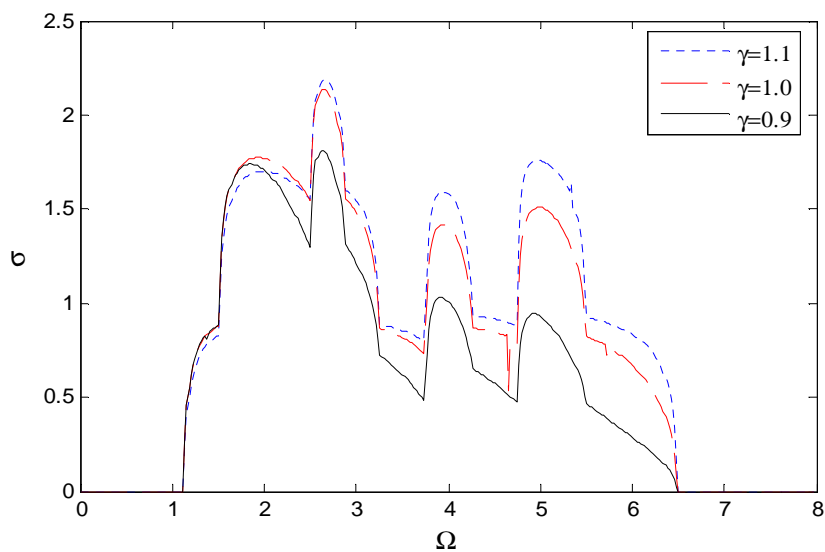


Fig.4.3.1a Coefficients de transmission et de réflexion du film mince A/B dans les trois possibilités de l'environnement magnétique γ .



3.1.2. Interface B/A **Fig.4.3.1b** Conductance magnonique du film mince A/B.

Excitations de spins dans les films magnétiques à cinq plans en présence des inhomogénéités

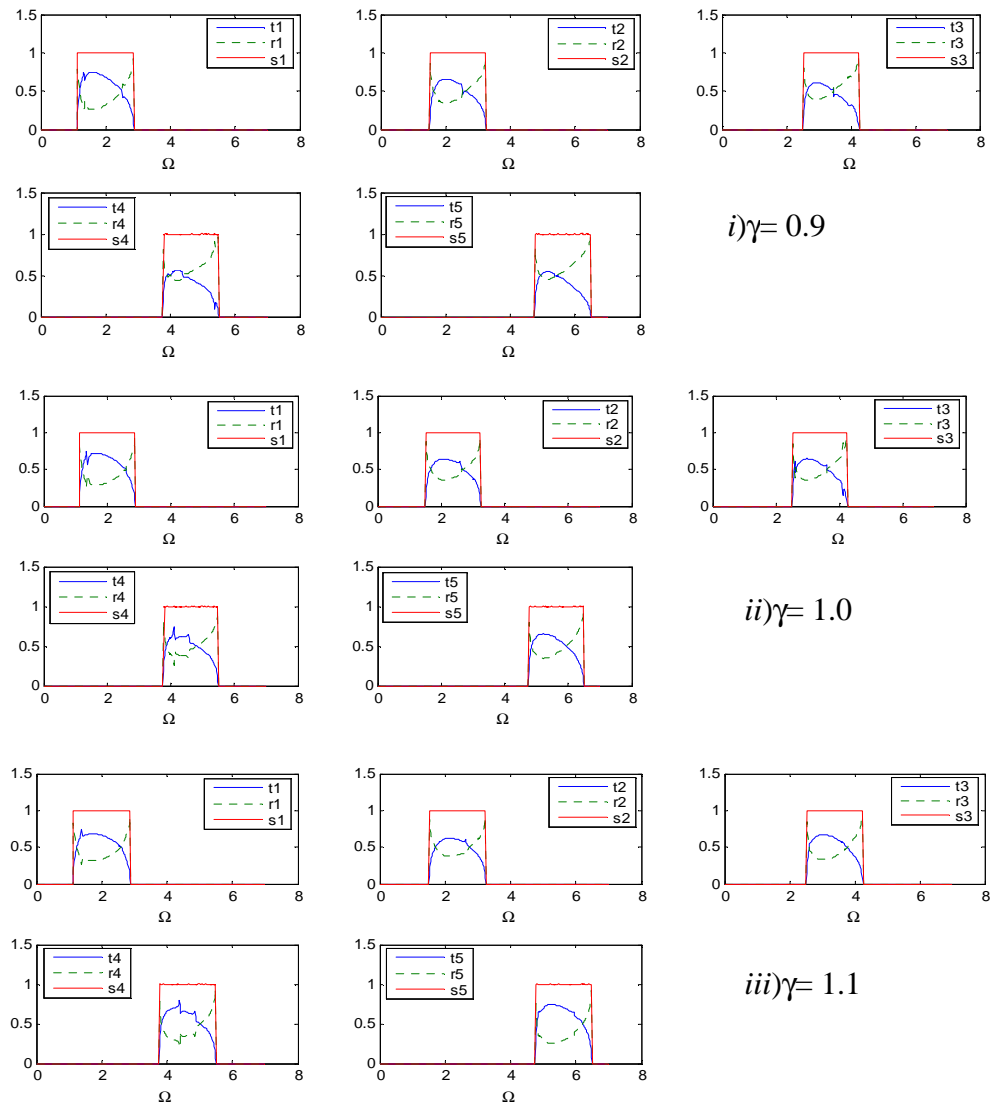


Fig.4.3.2a Coefficients de transmission et de réflexion via le film mince B/A dans les trois possibilités de l'environnement magnétique γ .

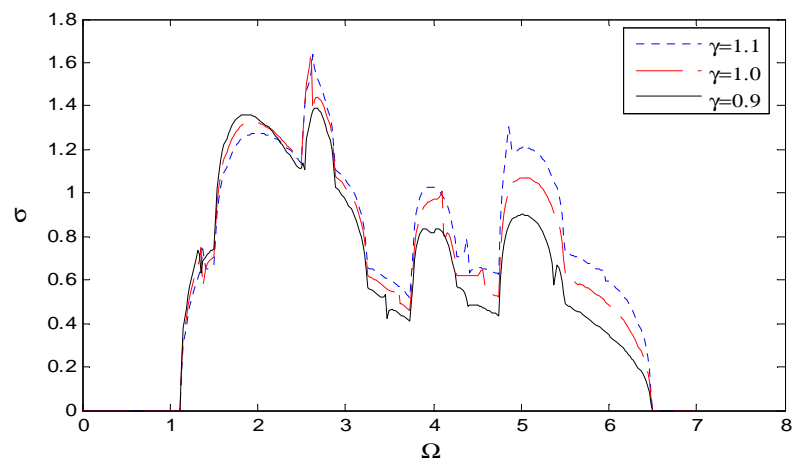


Fig.4.3.2b Conductance magnonique du film mince B/A.

3.2. Discussion et analyse des résultats obtenus

La dispersion des magnons via l'interface entre les deux films minces semi-infinies est déterminée et analysée. Le calcul numérique est effectué pour les deux types d'interfaces magnétiques entre les films cubique et hexagonal, A/B et B/A considérées dans cette partie.. Nous avons considéré, que les ondes de spins sont propageantes suivant l'axe (Ox). L'interface est traitée comme une inhomogénéité. Dans les deux films, nous avons considéré que les spins S_A du film mince à maillage cubique et S_B du film à maillage hexagonal sont comparables, et nous avons traité uniquement le cas où ($S_A=S_B$). En outre, les résultats sont obtenus pour les trois situations différentes de l'intégrale d'échange magnétique sur le domaine des deux interfaces.

3.2.1. Film mince A/B

Sur la Fig.4.3.1a, nous avons représenté les coefficients de transmission et de réflexion via l'interface A/B, en fonction de la fréquence de dispersion normalisée pour les trois probabilités de γ . La bande de dispersion des ondes de spins est $\Omega \in [0-7.60]$, ce qui correspond à celle du film à maillage cubique. La deuxième remarque importante est la transmission quasiment nulle pour la totalité des spectres à basses et haute fréquences. Ailleurs, la totalité des coefficients de transmission commence par une valeur nulle puis augmente jusqu'à son maximum, et puis diminue jusqu'à l'annulation totale. Son amplitude diminue en passant du mode 1 au mode 5 dans le cas d'adoucissement ; reste inchangé pour l'homogénéité, mais pour ce qui concerne le durcissement celle-ci augmente en passant de mode 1 au mode 5. Dans le cas d'homogénéité, le mode quatre présente une résonance de Fano à la position $\Omega = 4.64$.

Le spectre des conductances à travers l'interface A/B est donné sur la Fig.4.3.1b pour les trois cas de l'échange magnétique. Celles-ci se propagent dans l'intervalle de fréquence $\Omega=1.13$ et $\Omega = 6.50$, son amplitude ne dépasse pas trois et passe par plusieurs pics d'oscillations, et le plus important est observé à $\Omega = 2.66$. A très basse fréquence, elle est insensible à l'environnement magnétique au niveau de la zone interface, au-delà, elle devienne importante en passant de l'homogénéité au durcissement de l'échange magnétique.

3.2.2. Film mince B/A

Pour ce deuxième film, les coefficients de transmission sont donnés sur la Fig.4.3.2a. Ces coefficients montrent que la bande de propagation est rétrécie, elle est dans l'intervalle $\Omega \in [1.13-6.50]$, et l'amplitude de la transmission diminue. On remarque aussi la présence de

plusieurs résonances. Néanmoins, la majorité de ces courbes retrouve la caractéristique déjà vue dans le cas de la première interface A/B, qui concerne l'allure des coefficients de transmission, qui commence par une valeur nulle jusqu'à une valeur maximal puis diminue pour reprendre la valeur de départ.

Les conductances magnoniques du film B/A sont indiquées sur la Fig.4.3.2b. L'intervalle de propagation des magnons est toujours de $\Omega = 1.13$ à $\Omega = 6.50$, et leurs amplitudes ne dépassent pas deux. De plus, on remarque la présence d'un nombre plus grand de résonances comparativement à la première interface A/B. La plus haute amplitude de la conductance se trouve aux environs de $\Omega = 2.60$. À basse fréquence, la conductance est peu sensible à la variation de l'échange magnétique, par contre, à hautes fréquences elle devient importante en passant de l'adoucissement au durcissement de l'échange magnétique.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons tenté de mettre l'accent sur le rôle important des défauts dans quelques modèles de films minces sur quelques spectres magnétiques. Nous avons montré que leur présence dans les films ferromagnétiques ultra-minces a un effet remarquable sur le comportement des ondes de spins. La conductance et les coefficients de transmission dépendent fortement du type de défaut, de la nature de maillage et de la valeur de l'intégrale d'échange. L'analyse des spectres des conductances a montré que cette dernière est plus importante dans les structures cubiques, cela est dû au grand nombre de modes de dispersion qui se propagent au mêmes temps dans ces structures. Par contre, le nombre de résonances dues à l'interaction du continuum avec les états discrets induits par le défaut est plus grand dans les structures hexagonales, et cela en raison du grand nombre d'états localisés. Les inhomogénéités présentes dans un film peuvent engendrer des modes localisés dont la majorité des branches sont à basses fréquences dans l'ensemble des défauts étudiés dans les deux premières parties. Leurs nombres diffèrent d'un défaut à un autre. Elles se déplacent vers les hautes fréquences avec le durcissement de l'échange magnétique dans les différentes configurations. Leurs nombre est plus grand dans les structures hexagonales. Cela dépend de nombre de proches voisins.

La troisième partie a permis de mettre en évidence le rôle de l'interface et de prédire un effet nouveau : qu'une interface peut jouer un double rôle dans un système cela dépend de la direction de la propagation de l'onde de spin.

Référence du chapitre IV

-
- [1] M. Belhadi and A. Khater, *Surf. Rev. Lett.* 16, 55 (2009).
- [2] V. Russier, K. Younsi, L. Bessais, *J. Mag. Mag. Mat.* 324, 1122 (2012).
- [3] G. S. Chang, E. Z. Kurmaev, L.D. Finkelstein, A. Moewes, and A. Dinia, *J. Elec. Spectro. Related Phenom.* 181, 202 (2010).
- [4] F. Fang, M. Boero, P. Rabu and C. Massobrio, *C. R. Acad. Sci. Chimie* 15, 202 (2012).
- [5] R. Larde, E. Talbot, F. Vurpillot, P. Pareige, G. Schmerber, E. Beaurepaire, A. Dinia, and V. Pierron-Bohnes, *J. Appl. Phys.* 105, 126107 (2009).
- [6] R. Soulairol, Thèse de Doctorat, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI (2011).
- [7] E. Meloche, J. I. Mercer, J. P. Whitehead, T. M. Nguyen, and M. L. Plumer, *Phys. Rev. B* 83, 174425 (2011).
- [8] M. Costes, Thèse de doctorat, Université de Toulouse 3 (2005).
- [9] J. H. Kwon, S. S. Mukherjee, P. Deorani, M. Hayashi and H. Yang, *Appl. Phys. A Mater.Sci. Process.*, 111, 369 (2013).
- [10] W. P. Zhou, G. H. Yun, and X. X. Liang, *Phys. Rev. B* 77, 104403 (2008).
- [11] R.F. Wallis, A.A. Maradudin, I.P. Ipatova and A. A.Klochikhin, *Solid.State.Comm.* 5, 89 (1967).
- [12] Ken-ichi Hino , *J. Phys. Soc. Japn.* 69,836 (2000).
- [13] S.J. Yong, M.S. Arkady and S.K. Chang, *Phys. Scr.* 74, 259 (2006).
- [14] B. Bourahla, O. Nafa and R. Tigrine, *Physica. B* 406, 725 (2011).
- [15] A. R. P. Rau, *Physica Scr.* 69, 1 (2004).
- [16] T. Kaneyoshi, *Acta Phys. Pol. A* 83, 703 (1993).
- [17] P. Hansen, C. Clausen, G. Much, M. Rosenkranz and K. Witter, *J. Appl. Phys.* 66, 756 (1989).
- [18] S. Honda, K. Kimura and M. Nawate, *J. Mag. Mag. Mater.* 121, 116 (1993).
- [19] S. Honda and M. Nawate, *J. Mag. Mag. Matter.* 136, 163 (1994).

Conclusion générale

Les films ultraminces ferromagnétiques ouvrent de nouvelles voies intéressantes et prometteuses d'applications dans tout les domaines, encore plus compétitives et présentant de nouvelles utilités. Leur intégration dans le domaine de l'électronique de spin a emmené les travaux de recherche à explorer leurs nouvelles propriétés et à les étudier sous leurs différentes formes. A présent, l'élaboration de méthodes de calcul qui tiennent compte, de façon fiable de leurs surfaces, reste un challenge pour les théoriciens. L'intérêt scientifique porté à ce sujet, nous a motivé à développer une approche théorique et des simulations numériques permettant le traitement des phénomènes d'anisotropie, de localisation et de diffusion d'ondes de spins dans des films magnétiques à épaisseur finie. Notre étude est basée essentiellement sur un Hamiltonien d'Heinsberg et une méthode théorique dite "*méthode de raccordement*". Ceci a permis d'illustrer quelques aspects fondamentaux qui régissent leur comportement dynamique.

Ce travail de thèse est constitué de deux contributions importantes. Dans la première, nous nous sommes intéressés à l'impact de l'anisotropie de surface sur la dispersion de magnons dans deux types de films minces ferromagnétiques idéaux, de même épaisseurs mais de structures cristallographiques différentes. Nous avons étudié, ensuite, les propriétés dispersives de la propagation des ondes de spins dans ces films.

La deuxième contribution porte sur l'étude de l'influence des inhomogénéités structurales sur le comportement des ondes de spins. Car le rôle des défauts est saisissant dans les matériaux en forme de couche mince, lorsque leur épaisseur décroît. Dans une première étape, nous avons calculé, en utilisant la méthode de raccordement, les coefficients de transmission et de réflexion, les conductances, les états localisés et les densités d'états magnoniques des films minces pour un maillage cubique et hexagonal en présence de trois défauts, cela pour trois cas d'échange magnétique dans la zone nanostructurée. Pour l'évaluation des DOS décrivant l'état du système, un algorithme numérique, basé sur la méthode de raccordement et les fonctions de Green, a été conçu et ce dans le but de permettre d'augmenter l'efficacité du calcul. Dans une dernière étape, nous avons amélioré les algorithmes pour l'étude d'une interface reliant deux films minces de même épaisseur mais de structures cristallographiques différentes : l'un cubique et l'autre hexagonal. Notons que notre approche numérique demande un traitement adéquat par rapport aux caractéristiques individuelles de chaque système. Pour cela, nous avons élaboré des calculs et des algorithmes appropriés à chaque défaut et à chaque maillage.

Les premiers résultats donnés au chapitre II, montrent que l'anisotropie de surface joue un rôle important dans la dispersion de magnons, cela est bien indiqué sur les courbes de dispersion de magnons, et sur celles des vitesses de groupe. Ainsi, la négligée peut donner des résultats erronés sur les énergies permises à la propagation.

Afin de mettre en évidence la liaison entre le comportement des ondes de spins en présence des défauts et en fonction de maillage, une série de résultats est donnée au chapitre IV. Ces résultats apportent une contribution à la compréhension du magnétisme. A travers les quelques exemples étudiés dans ce travail, nous avons montré que chaque défaut laisse une empreinte particulière dans les courbes de transmission, des états localisés, ainsi que dans celles des densités d'états. Nous attestons alors qu'un défaut dans un film est une signature de son état morphologique. La maîtrise irréprochable des conséquences de la morphologie des films minces sur leurs propriétés magnétiques va contribuer à la confection de matériaux améliorés, plus légers et plus fiables. L'apparition ou l'annulation d'une résonance sur les courbes des conductances, de transmission dépendent du type de défaut ou du maillage du film. Ces résonances résultent de l'interaction entre les états propageants du système et les états localisés créés autour des défauts. Le nombre d'états localisés dépend de la structure du film mais leurs énergies dépendent de l'intégral d'échange de la zone de défaut par rapport au film mince parfait. Ceci explique que les propriétés puissent être modifiées par plusieurs ordres de grandeurs. Rappelons que les résultats obtenus, concernant les densités d'états magnétique des systèmes étudiés, sont comparables à ceux obtenus pour les données électroniques des films minces perturbés. L'existence des inhomogénéités peut faire écran aux ondes de spins dans certains intervalles d'énergie, ainsi leur éventuelle utilisation comme filtres pour régler la conductance d'un système en électronique de spin.

Les résultats donnés dans la dernière partie du chapitre IV ont pour dessein d'illustrer, le lien entre les propriétés magnétiques et les structures d'interface à l'échelle atomique entre deux films minces de maillage différent. Cette dernière a apporté une contribution à la compréhension du magnétisme d'interface. Nous avons montré que ce type de film peut avoir deux comportements différents, et cela dépend de la direction de l'onde de spin, si elle se propage du film à maillage cubique vers le film à maillage hexagonal ou l'inverse. Malgré les efforts déployés dans ce domaine, les travaux accomplis demeurent insuffisants. Beaucoup reste encore à clarifier et à comprendre, cela est en partie dû au fait que plusieurs mécanismes physiques qui contribuent à la détermination des propriétés magnétiques de ces systèmes d'une part et d'autre part de la plus grande gamme de défauts qu'on peut trouver dans les films ultraminces.

De toute évidence, ce travail offre de nombreux points à approfondir et ouvre d'intéressantes perspectives. Nous avons privilégié deux axes particuliers. Le premier est le développement plus accru de notre approche théorique et numérique et l'autre est son application à l'étude de nouveaux systèmes magnétiques. Dans le premier, le but est de faire une étude plus approfondie en introduisant les effets liés au couplage spin-orbite et surtout l'influence de la température sur le transport magnonique. Cette dernière reste un problème mal compris en dépit de l'extrapolation des modèles simples, qui arrivent actuellement à expliquer la magnonique de façon satisfaisante dans les films minces à basse température ; mais s'avère incapable d'expliquer de manière cohérente la dépendance en température. Un effort fondamental s'impose donc sur ce plan. Pour cela, nous devons ajouter certaines parties au code de calcul. Il s'agit notamment d'apporter de nouveaux sous-programmes qui permettront de calculer l'influence de la température sur les ondes de spins et le calcul de la chaleur spécifique.

Dans le deuxième axe, nous envisageons d'étudier l'influence de la combinaison de plusieurs nanostructures en même temps (défaut de masses, positions atomiques, lacunes, dislocations...), dans les films minces avec différentes épaisseurs, sur les excitations magnétiques à couplage ferromagnétique, antiferromagnétique et l'application de notre approche à des structures multicouches avec deux matériaux magnétiques ou plus, de même nature, ensuite de différente nature, pour voir la différence entre les deux études.

Résumé

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'impact de l'anisotropie de surface et des défauts atomiques sur les excitations collectives de spins dans des films ferromagnétiques ultraminces composés de cinq plans parallèles, à maillage cubique et hexagonal.

Pour chaque maillage, nous avons examiné la dynamique des spins en présence de trois inhomogénéités différentes (nanocontact joignant deux films semi-infinis, puits atomiques de hauteurs variés et dépôts de chaînes atomiques en surface engendrant des marches et des terrasses). Notre investigation est basée sur l'application de la méthode théorique de raccordement et de l'Hamiltonien d'Heisenberg décrivant toutes les interactions entre premiers voisins. Les états localisés de spins, les coefficients de transmission et de réflexion, la conductance totale et les densités d'états (DOS) magnoniques en présence des différents défauts ont été déterminés en fonction des grandeurs physiques caractérisant le milieu.

Nos résultats numériques montrent que l'anisotropie et les défauts influent sur l'énergie de dispersion des magnons dans les films, ce qui donne des branches de magnons localisés dont le nombre et la nature dépendent fortement des paramètres des zones nanostructurées. Les interactions entre les états localisés de spins et les états de diffusion font apparaître dans les spectres magnétiques calculés plusieurs oscillations et des résonances de type Fano.

Mots- clés : Films ferromagnétiques ultraminces — Dynamique des spins —
Diffusion d'ondes de spins – Etats localisés de magnons — DOS.

Abstract

In this work, we interested to the impact of surface anisotropy and atomic defects on the collective excitations of the spins in ultra-thin ferromagnetic films made from of five parallel atomic layers, with cubic and hexagonal mesh. For each mesh, we examined the dynamics of spins in the presence of three different inhomogeneities (symmetric-spin nanocontact joining two semis -infinite films, asymmetric nanowell, and atomic chains deposition on the surface film generating steps and terraces). Our investigation is based on the application of the theoretical matching method and Heisenberg Hamiltonian describing all interactions between neighbors. The localized spins states, the transmission and reflection coefficients, the total conductance and the densities of states (DOS) in the presence of different defects were determined, according to the physical quantities characterizing the medium. The numerical results show that the anisotropy and the atomic defects affect the magnon dispersion in thin films, giving a localized magnon branches whose number and nature are heavily dependent on the parameters of the nanostructured areas. Interactions between localized spin states and scattering states in the calculated magnetic spectra show several oscillations and Fano resonances.

Keywords: Ultrathin ferromagnetic films — Spin dynamics — Spin waves diffusion —
Localized spin states — DOS