



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la
Recherche Scientifique
Université Laarbi Tébessi -Tébessa-
*Faculté des Sciences Exactes et Sciences de la Nature et
de la Vie*
Département: Sciences de la Matière



N d'ordre:.....
Série:.....

Thèse

Présentée en vue de l'obtention du diplôme de
Doctorat En Sciences
Option: *Physique*

Thème

Propriétés structurales, électroniques et magnétiques des couches minces Fe/Cu

Présentée par:

Amina Djabri

Devant le jury

ABDELMALEK BOUMALI	Prof.	Président	<i>Université Laarbi-Tébessi, Tébessa</i>
FAÏÇAL CHEMAM	Prof.	Rapporteur	<i>Université Laarbi-Tébessi, Tébessa</i>
ABDELHAMID LAYADI	Prof.	Examineur	<i>Université Ferhat Abbas, Sétif 1</i>
SALAH BLIZAK	MCA	Examineur	<i>Université M'hamed Bougara, Boumerdes</i>
NOUARI ROUAG	MCA	Examineur	<i>Université Laarbi-Tébessi, Tébessa</i>

Mémoire effectué

Au

Laboratoire de Physique Appliquée et Théorique LPAT



DEDICACE

Je dédie la présente thèse :

A Mon père, qui m'a toujours poussé et motivé dans mes études, et qui m'a appris d'être patiente, qu'il trouve ici mes gratitudes et mes reconnaissances.

A celle qui m'a enfanté avec beaucoup de souffrance, certes, à ma mère qui ma toujours veillé à mon bien être, pour son affectuosité, à mon confort et qui représente le tout mon être.

A mon mari Yacine pour leur aide, et son assistance morale, je lui dois beaucoup d'avoir obtenir ce grade.

A mon king mon petit Taha el amine et je lui souhaite une longue vie pleine de joies, d'honneur et prospérité.

A tous mes frères et sœurs et leurs enfants (adel, Houria, Kamel, Ismahen, Zouheir, ratiba, et le bon cœur walid) pour m'avoir donnés le courage de veiller et de persister à finir ce travail. Je les remercie de tout mon cœur.

A Toute ma famille,

A toutes mes amies,

A tous ceux et celles que j'aime de près et de loin.

Remerciements

A l'issue de ce travail, je remercie en premier lieu le bon Dieu de m'avoir donné la force et le courage de le mener à terme.

Ce travail a été achevé grâce au soutien du laboratoire du physique appliquée et théorique (LPAT) Je tiens à remercier vivement tous ses membres.

*Je tiens, également, à exprimer ma sincère reconnaissance et ma profonde gratitude à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de cette thèse, notamment à monsieur : **Faiçal Chemam**, Professeur à l'Université laarbi-tebessi, Tébessa de m'avoir confié ce travail, je le remercie pour son entière disponibilité, ses précieux conseils et ses encouragements tout au long de nos travaux.*

*Ma gratitude revient aussi à monsieur **Abdelmalek Boumali**, Professeur à l'Université laarbi tebessi, Tébessa pour l'honneur qu'il m'a fait, en acceptant de présider le jury de thèse.*

*Mes sincères remerciements à **Abdelhamid Layadi**, Professeur à l'Université Ferhat Abbas, Sétif, **Salah Blizak** maître de conférences classe A à l'Université M'hamed Bougara, Boumerdes et **Nouari Rouag**, maître de conférence classe A au département des sciences de la matière à l'Université laarbi tebessi. Tébessa, pour leurs acceptations d'examiner cette thèse.*

Ma reconnaissance pour mes amies Dr B.Radia, Dr D.Hakima, El.Amira, D.Imen, R.Tebr, M.Nadjet, B.Hakima, M.Chafia.

Enfin, j'exprime ma reconnaissance à toute personne qui a contribué au bon déroulement de mon projet.

الملخص

في هذه المذكرة تم دراسة بعض الخصائص البنيوية، المغناطيسية والمغناطيسية الضوئية المتعددة المتكونة من شبكة الحديد و النحاس المكعبة متمركزة الأوجه (Fcc)-Fe/nCu(001) ثم مقارنتها مع شبكة الحديد الصلبة. ويتم ذلك باستخدام طرق المبادئ الأولية المعتمدة على نظرية DFT التي تستعمل طريقة الموجة المستوية المترابطة FP-LAPW المتوفرة في برنامج المحاكات wien2k ، و قد استعمل التقريب LSDA في الحساب. فيما يتعلق بالخصائص المغناطيسية، لوحظت زيادة كبيرة في العزم المغناطيسي لذرات الحديد، و كذلك طاقة التباين المغناطيسي للنظام (MAE) مع زيادة عدد طبقات النحاس. حدوث استقطاب طفيف مع ظهور عزم مغناطيسي ذو قيمة صغيرة لذرات النحاس وذلك بسبب التهجين بين مدارات الحديد و النحاس، ووجود حالة النظام الضد فيرومغناطيسية و الناجمة عن الحالة d. ظاهرة كير المغناطيسية البصرية يمكن دراستها من قبل الناقلية الضوئية. وعلى الرغم من ارتفاع قيمة العزم المغناطيسي الا ان اطيف كير يمكن تفسيرها من حيث التحولات البصرية ، وأنظمة التباين المغناطيسي البلورية MAE للنظام حسبت أيضا.

الكلمات المفتاحية : نظرية الكثافة الوظيفية، المغناطيسية الضوئية ، متعددة الشبكات، التباين المغناطيسي، الشبكة المكعبة متمركزة الأوجه (الحديد)، النحاس.

Abstract:

The magnetic and magneto optical properties of FCC-Fe/nCu (001) superlattices are studied and compared with the FCC-Fe bulk structure. This is done using the method of all electron linearized augmented waves planes (FP L APW) in the local spin density functional approximation (DFT), implemented in the WIEN2k code, with the LSDA approximation for the exchange and correlation.

As far as the magnetic properties are concerned, a significant increase of the magnetic moment of the iron atoms and the magnetic anisotropy energy (MAE) of the system is observed with increasing the copper layers.

A slight polarization occurs, with emergence of a small magnetic moment of copper atoms, due to the hybridization between the iron and copper orbital. An antiferromagnetic phase of the system is observed, caused by the **d** states.

The magneto optical Kerr effect response could be investigated through the optical conductivity. In spite of their great magnetic moment, the Kerr's spectra are explained in terms of optical transitions and the MAE of the systems is calculated.

Keywords : DFT, Superlattices, Magneto-optics, Magnetic anisotropy, Fe(fcc), Cu

Résumé :

Les propriétés magnétiques et magnéto-optiques des super-réseaux FCC-Fe / nCu (001) sont étudiées et comparées avec la structure massif de FCC-Fe. Cela se fait en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéairement (FP L APW) dans l'approximation de la densité fonctionnelle (DFT), implémentée dans le code WIEN2k, avec l'approximation LSDA pour l'échange et la corrélation.

En ce qui concerne les propriétés magnétiques, une augmentation significative du moment magnétique des atomes de fer et de l'énergie anisotropie magnétique (MAE) du système est observée avec l'augmentation des couches de cuivre.

Une légère polarisation se produit, avec l'émergence d'un petit moment magnétique des atomes de cuivre, en raison de l'hybridation entre les orbitales de fer et de cuivre. Une phase antiferromagnétique du système est observée, causée par les états d.

Magnéto-optique à effet de Kerr peut être étudiée par la conductivité optique. Malgré une grande valeur du moment magnétique, le spectre de Kerr s'explique en termes de transitions optiques et la magnéto-cristalline anisotropie des systèmes est calculée.

Mots clés : DFT, super réseaux, magnéto-optique, anisotropie magnétique, Fe (fcc), Cu.

Sommaire

Remerciements

Résumés

Sommaire

Liste des Figures

Liste des Tableaux

Introduction générale. 01

Chapitre I : Généralités sur les multicouches magnétiques à base des métaux de transitions

I. Introduction. 04

II. Notions sur les multicouches magnétiques. 05

II.1. Les Couches minces. 05

II.2. Les multicouches magnétiques. 05

II.3. Les métaux de transitions magnétiques. 06

II.3.1. Les métaux de transitions. 06

II.3.2. L'importance des métaux de transitions. 06

II.3.3. Les types des métaux de transitions magnétiques. 06

III. Les propriétés des multicouches magnétiques. 07

III.1. Propriétés magnétiques. 07

III.1.1. Le moment magnétique. 07

III.1.2. L'énergie d'échange. 08

III.1.3. L'énergie d'anisotropie magnétique. 10

III.2. Les propriétés magnéto-optiques. 16

III.2.1. Les géométries de l'effet Kerr. 17

III.2.2. Spectre Magnéto-optique pour les métaux de transition Fe, Co et Ni. 19

IV. Les applications des multicouches magnétiques. 22

IV.1. L'enregistrement magnétique longitudinal. 22

IV.2. L'enregistrement perpendiculaire. 23

IV.3. L'enregistrement magnéto-optique. 24

V Conclusion. 25

Chapitre II : Aperçu sur le cadre théorique.

I. Introduction. 26

II. Les approximations fondamentales. 27

II.1. Approximation de Born-Oppenheimer. 27

II.2.	Approximation de Hartree-Fock.	32
III.	Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).	37
III.1.	Théorèmes de Hohenberg et Kohen.	37
III.2.	L'équation de Kohn-sham.	37
IV.	les fonctionnelles de la DFT.	42
IV.1.	L'approche locale de la densité.	42
IV.2.	Introduction du spin dans l'approche locale de la densité.	42
IV.3.	Améliorations sur l'approximation locale.	44
IV.3.1.	L'introduction du gradient : approximation généralisée de gradient AGG.	44
IV.3.2.	Échange exact et les fonctionnels hybrides pour les électrons corrélés.	45
IV.3.3.	Couplage spin orbite.	46
V.	La méthode APW.	47
V.1.	La méthode de LAPW.	49
VI.	Le code WIEN2k.	50

Chapitre III : Résultats et discussions.

I.	Introduction.	53
II.	La méthode de calcul.	53
III.	La géométrie de super réseaux Fe /nCu.	54
IV.	Résultats et discussions.	56
IV.1.	Propriétés magnétiques de super réseaux Fe /nCu.	56
	*Le moment d'énergie.	56
	*La densité d'état.	57
	*L'énergie d'échange.	59
	*L'énergie de l'anisotropie magnétique (MAE).	60
IV.2.	Propriétés magnéto optiques de super réseaux Fe /nCu.	61
	*La conductivité optique d'absorption σ_{xx}^1 et dispersive σ_{xx}^2 :	63
	*Les composantes réelles et imaginaire non diagonales σ_{xy}^1 et σ_{xy}^2	65
	*Les rotations Kerr θ_k et l'ellipticité ϵ_k	66
	*Les parties réelles et imaginaires de la conductivité optique non diagonale $\omega\sigma_{xy}^1$ et $\omega\sigma_{xy}^2$	67
V.	Conclusion	68
	Conclusion générale	69
	Références bibliographiques	71

Listes des figures:

Figure I.01: Multicouche magnétique constituée en alternance, un métal magnétique X (Fe, Co, \dots) et un métal non magnétique.

Figure I.02: Schéma des bandes de valences près du niveau de Fermi pour les métaux de transition $3d$.

Figure I.03: Courbe d'aimantation du fer, du cobalt et du nickel massif dans différentes directions cristallographiques.

Figure I.04: Variations de la contrainte (a) et de l'anisotropie magnétique (b) en fonction de l'épaisseur dans le régime cohérent et incohérent dans le cas d'un film sur un substrat.

Figure I.05: Les différentes configurations (polaire, longitudinale et transverse) de l'effet Kerr.

Figure I.06: Transformation d'une onde linéaire en une onde elliptique après réflexion sur un milieu aimanté.

Figure I.07: Spectre théorique et expérimentale du Magnéto-optique (rotation et ellipticité de Kerr) pour le Fe (cc): Théorique et expérimentaux (triangles, carrés)

Figure I.08 : Spectre de rotation polaire et ellipticité de Kerr, Théorique et expérimentale du Co en structure hexagonale.

Figure I.09 : Comparaison entre les calculs théoriques et expérimental (triangles, carrés) spectres de rotation polaire de Kerr et de ellipticité de fcc Co.

Figure I.10 : Spectre MOKE pour le Ni (cfc). Spectre théorique et expérimentaux (triangles, carrés), spectres de rotation et de ellipticité polaire Kerr de fcc Ni.

Figure I.11 : Évolution de la densité d'informations des disques durs depuis leur invention en 1956 par *IBM*.

Figure I.12 : Orientation des domaines magnétiques en enregistrement longitudinal (a) et perpendiculaire (b).

Figure I.13 : Principe d'enregistrement magnéto-optique.

Figure II.01: Schéma décrivant le processus itératif pour la résolution des équations de Kohn- Sham.

Figure II.02: Organigramme de la DFT.

Figure II.03: Potentiel Muffin-Tin.

Figure II.04: Organisation des programmes dans Wien2k

Figure III.01: a. La structure Fe- α .

b. La structure Fe- γ .

Figure III.02: les super réseaux de **Fe/1Cu, Fe/5Cu.**

Figure III.03: La densité d'état totale TDOS et partielle PDOS de :

a. Fe/Cu.

b. Fe/3Cu.

C. Fe/5Cu.

Figure III.04: a. La courbe de conductivité optique d'absorption σ_{xx}^1 et

b. dispersive σ_{xx}^2 .

Figure III.05: a. Les calculs de composant réels no diagonal de σ_{xy}^1

b. les calculs imaginaires du composant no diagonal σ_{xy}^2 .

Figure III.06: a. Angles de rotation de Kerr θ_k ;

b. Ellipticité ϵ_k Pour les trois systèmes.

Figure III.07: a. $\omega\sigma_{xy}^1$

b. Partie absorbante calculée de la conductivité optique no diagonale $\omega\sigma_{xy}^2$

Liste des tableaux :

Tableau I.01: Les Coefficients d'anisotropie magnéto cristalline du fer, du cobalt et du nickel massif.

Tableau III.01: Le paramètre de réseaux de chaque structure de super réseaux.

Tableau III.02: Les valeurs moyennes des moments magnétiques pour différentes structures Fe /nCu (avec n allant de 1 à 9).

Tableau III.03: Les valeurs de l'énergie de couplage d'échange J pour différentes structures Fe /nCu (avec n allant de 1 à 9).

Tableau III.04: Les valeurs de l'énergie d'anisotropie magnétique MAE dans les différents super réseaux.

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Introduction générale

Les interactions électroniques dans les solides sont à l'origine de nombreuses propriétés physiques intéressantes telles que la supraconductivité ou le magnétisme. Aujourd'hui, environ 70% des supports de stockage d'information sont des matériaux magnétiques (disques durs, bandes magnétiques...).

Pour la recherche fondamentale, les films traitant l'épaisseur d'une seule couche atomique sont des systèmes modèles pour l'étude de la physique en deux dimensions. Les propriétés magnétiques telles que la température, le moment magnétique, l'anisotropie magnétique, etc., peuvent être différentes de celles des systèmes tridimensionnels ou en d'autres termes celle du massif qui sont profondément liée avec les propriétés structurales et morphologiques du film ainsi que son interaction avec le substrat. L'un des principaux objectifs de la recherche sur les films épitaxiaux ultrafins est donc de trouver une corrélation directe entre la structure et les propriétés magnétiques à l'échelle atomique.

Les super réseaux magnétiques sont des structures périodiques qui se compose de deux types de matériaux A et B où l'épaisseur de la couche de certains nanomètres et la dimension latérale sont microscopique. La même structure donne aux super réseaux des propriétés magnétiques particulières en raison de la présence de l'interface et de la faible épaisseur. Cette propriété est très importante dans différents domaines et il s'agit de ces applications dans le stockage de données magnétiques. Les supports de stockage magnétiques nécessitent un matériau avec des moments magnétiques augmenté et une grande énergie d'anisotropie magnétique qui peut supporter le stockage pour une longue durée [01].

Cependant, compte tenue des progrès considérables et des résultats innombrables sur le film ultra mince et les nanostructures au cours des dernières décennies, une compréhension complète et générale de la corrélation entre la structure, la morphologie et les propriétés magnétiques n'a pas encore été atteinte. L'un des meilleurs exemples de la complexité de cette corrélation est représenté par le système Fe / Cu (100) [02-05]; en raison de ces propriétés physiques fondamentales et de ses applications pratiques possibles en raison de son stockage de données magnétiques élevé, de la résistance des supports de stockage magnétique [06].

Les films de fer sont caractérisés par une structure magnétique riche, car le matériau possède deux phases magnétiques (ferromagnétique et antiferromagnétique). Le volume atomique affecte sensiblement la stabilité des phases. [07-13]

Le système Fe-Cu a été étudié par différents groupes [04,05]; il est intéressant en raison de ses propriétés physiques fondamentales et de ses applications avancées en magnétorésistance géante (GMR) et dispositifs spintroniques [14-16]. De nombreuses recherches expérimentales et théoriques sur les propriétés magnétiques de la structure à face centrée (fcc) -Fe / Cu ont été réalisées. Mitani et al [17] a établi des corrélations entre le moment magnétique et la distance interréticulaire, en préparant des couches épitaxiales fcc-Fe/Cu (100). L'effet Kerr expérimental (MOKE) du fcc-Fe sur Cu (1 0 0) est traité dans [18]. Les propriétés magnétiques des systèmes Fe/Cu (100) et du sandwich Cu/Fe(n)/Cu ont été largement étudiées par la densité fonctionnelle [19, 20]. Zhou et al ont calculé la constante de couplage d'échange J en utilisant le modèle Ising et la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) pour les super-réseaux fcc-Fe / 1Cu (001) ($n = 1-9$ ML) [21-23]. Kuch et al [24] a constaté que Fe dans l'alliage FeCu présente un moment magnétique comparable à celui des films minces Fe / Cu ainsi que le rapport entre la contribution orbitale et spin aux moments Fe \mathbf{d} est considérablement élevé dans l'alliage FeCu.

Du point de vue théorique, plusieurs méthodes de calcul ont été développées parallèlement aux expériences pour tenter d'expliquer les valeurs des moments magnétiques ainsi que les spectres de la réponse magnéto-optique (effet Kerr, effet Faraday, spectres optiques...) dans les nanostructures. Parmi ces méthodes la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) basées sur la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT), implémentée dans le code WIEN2k.

Nous avons organisé cette thèse en trois chapitres :

Le premier chapitre regroupe des généralités sur les métaux de transition qui font l'objet du travail de cette thèse. Nous rappelons les principales caractéristiques telles que la configuration électronique, le magnétisme, l'importance de ces métaux dans le domaine médicale et industriel.

Nous avons consacré le deuxième chapitre au formalisme théorique et les méthodes de calcul. Nous résumerons le principe de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et le principe de la méthode (FP LAPW).

Enfin, le troisième chapitre est composé de deux objectifs principaux :

Le premier est de réaliser des calculs en utilisant le code wien2k sur les propriétés magnétiques et les structures électroniques des super réseaux Fe/nCu ($n = 1, 3, 5, 7, 9$), puis déterminer la corrélation entre la structure et les propriétés magnétiques de ce système ; ce qui nous aide à comprendre la structure électronique et la phase magnétique des couches Fe, le couplage d'échange dans le système Fe/nCu a été aussi réalisé et enfin on met l'accent sur les calculs de la théorie fonctionnelle de densité de spin avec le couplage de spin-orbite, afin d'obtenir l'énergie d'anisotropie magnétique (MAE).

Le deuxième vise à étudier les propriétés magnéto-optiques par la détermination des spectres de rotations Kerr (θ_k) et l'ellipticité (ϵ_k) et la conductivité optique.

CHAPITRE I:

GÉNÉRALITÉS SUR LES

MULTICOUCHES MAGNÉTIQUES À

BASE DE MÉTAUX DE TRANSITIONS

I. Introduction :

Le magnétisme en général est très sensible à l'environnement atomique local. Or, dans les structures en couches minces et multicouches magnétiques il est possible de faire varier cet environnement d'une façon contrôlée convenablement. Ceci permet l'observation des phénomènes uniques qui n'existent pas dans les matériaux massifs. Citons par exemple la possibilité de stabiliser de nouvelles phases cristallographiques inexistantes ou très instables à l'état massif, l'apparition d'anisotropies magnétiques et le couplage entre les couches induites par les contraintes d'interfaces [25], des phénomènes inattendus de couplage magnétique entre les couches adjacentes. Les interfaces ont en effet une influence importante sur les caractéristiques magnétiques des multicouches, et le comportement des spins en surface est différent de leur comportement en volume [26,27].

Les couches minces et multicouches magnétiques sont en plein essor actuellement, vu leur intérêt à la fois du point de vue de la physique fondamentale ainsi que des applications technologiques dans les domaines de l'enregistrement magnétique ou magnéto-optique. Celles-ci concernent les supports d'information pour l'enregistrement magnétique planaire ou perpendiculaire, les médias pour l'enregistrement magnéto-optique, les couches minces magnétiques douces pour le transport du flux magnétique (transformateurs ...), les matériaux magnéto-résistifs pour les capteurs de champ magnétique. Le développement de cet axe de recherche n'aurait pu arriver à maturité sans des travaux intenses dans les domaines des sciences des matériaux.

Dans le premier chapitre, on a abordé la notion des couches minces et multicouches magnétiques, les super réseaux, ensuite le moment magnétique dans le magnétisme a été décrite, ce qui permet d'une part de définir les notations, les effets de surface et l'interface sur cette grandeur (moment magnétique), d'autre part, une caractérisation des effets de couplages directs (énergie d'échange) et d'anisotropie magnétique (énergie d'anisotropie magnétique). Les propriétés magnéto-optiques (l'effet de Kerr magnéto-optique) et leur application, ainsi que quelques applications des multicouches magnétiques.

II. Notions sur les multicouches magnétiques.

II.1. Les couches minces :

Est une fine pellicule d'un matériau déposée sur un autre matériau, appelé « substrat ». Le but de film mince est de donner des propriétés distinctes à la surface que du massif tout en bénéficiant des propriétés massives du substrat. Les couches minces ferromagnétiques et ferrimagnétiques sont largement utilisées comme support et têtes d'enregistrement, dans des transformateurs et des inductances, dans des dispositifs à magnéto impédance géante et aussi on les trouve fréquemment dans les dispositifs d'hyperfréquences. C'est pourquoi la caractérisation des propriétés magnétiques (perméabilité de haute fréquence, gyromagnétisme, cycle d'hystérésis) des couches minces est indispensable pour le développement et l'optimisation de ces différentes applications. La diversité des applications signifie que la nature des matériaux mis en jeu est très variée (matériaux doux ou matériaux durs, conducteurs ou isolants) ainsi que leur géométrie (couches minces ou massif). Ceci implique des moyens de caractérisations adaptés à chaque configuration [28].

II.2. Les multicouches magnétique :

L'étude des multicouches magnétiques a connu un essor considérable. Ces structures artificielles, qui sont utilisées principalement pour le stockage magnétique de l'information, sont obtenues en déposant alternativement des couches magnétiques et non magnétiques sur un substrat. L'élaboration de cette nouvelle classe de matériaux repose à priori sur le choix des deux métaux X et Y entrant dans leur fabrication (ferromagnétique, antiferromagnétique, ferrimagnétique ou non magnétique), de leurs épaisseurs relatives et de la période XY.

Dans ces structures, l'épaisseur de la couche est de l'ordre de l'Angström. L'étude de cette structure réduite est très prometteuse [29]. Les propriétés magnétiques de XY sont différentes de celles du matériau massif.

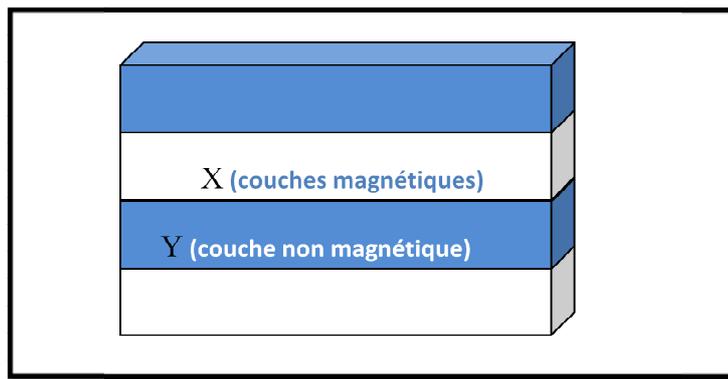


Figure I.01: Multicouche magnétique constituée en alternance, un métal magnétique X (Fe, Co,...) et un métal non magnétique.

II.3. Les métaux de transitions magnétiques.

II.3.1. Les métaux de transitions :

Sont les éléments de la classification périodique qui possèdent des orbitales partiellement occupées par des électrons. Ils ont des propriétés mécaniques, électriques et magnétiques remarquables utilisées dans la vie de tous les jours comme par exemple (fer, cuivre, zinc ...). Le fer est le plus abondant et le plus utilisé parmi ces métaux. Il est situé entre les groupes 2 et 13 de la classification périodique, il y a 3 types des éléments de transitions (éléments 3d, 4d, 5d), Le Fe est un métal de transitions 3d.

II.3.2. L'importance des métaux de transitions :

Certains éléments de transitions sont des aimants (fer, cobalt, nickel), mais il existe aussi des métaux « nobles » comme (Cu, Ag, Au). Ils forment de nombreux alliages entre eux et avec d'autres métaux. On trouve les éléments de transition partout, de l'industrie mécanique comme éléments structuraux (fer, aciers, fonte) aux industries électrotechniques (conductivité magnétisme), en plus de leur utilisation industrielle et économique les métaux de transitions deviennent très importants dans la composition des plusieurs molécules biologiques comme portant il devient quelque fois toxique quand ils sont en excès, le fer en excès contribue à créer des radicaux à base d'oxygène qui font des dégâts irréversibles dans les tissus (stress oxydant).

II.3.3. Les types des métaux de transitions magnétiques

Les ions des éléments de transition possèdent des propriétés magnétiques tout à fait remarquables qui tiennent à leur structure électronique. Parmi les métaux de transition 3d, le fer, le cobalt et le nickel possèdent la propriété remarquable d'une

aimantation spontanée en l'absence de champ magnétique en dessous de la température de Curie T_C .

Dans le magnétisme, l'alignement des moments magnétique donne une interaction d'échange qui est d'origine électrostatique qui dépend de la distance qui leur sépare. En peut distinguer plusieurs type d'interaction d'échange E_{ex} est :

- L'ordre **ferromagnétique** pour $E_{ex} > 0$ (les moments μ_β ont parallèles entre eux).
- L'ordre **antiferromagnétique** pour $E_{ex} < 0$ (les moments μ_β sont antiparallèles et se compensent exactement).
- L'ordre **ferrimagnétique** pour $E_{ex} < 0$ (dans cette configuration on a deux sous-réseaux qui entre jeux, ou l'interaction des deux sous-réseaux antiferromagnétique par contre une interaction ferromagnétique dans le même sous-réseau, le moment magnétique résultant a une interaction d'échange $E_{ex} < 0$).

III. Les propriétés des multicouches:

III.1. les propriétés magnétiques :

III.1.1. Le moment magnétique :

Dans l'atome isolé qui possède une sous-couche électronique incomplète (la sous-couche 3d des métaux de transition et la sous-couche 4f des métaux de terres rares), le magnétisme est principalement dû aux électrons, car le moment magnétique atomique du noyau est inférieur au moment magnétique électronique [30], si on considère que les électrons tournent autour du noyau, on a un moment magnétique provient de la contribution orbitale \vec{m}_L de moment magnétique et de la contribution de spin \vec{m}_S (moment magnétique de spin), qui est un moment cinétique intrinsèque de l'électron et il peut prendre la valeur $S = \pm 1/2$. Le moment magnétique total est la somme de moment orbitale et de spin :

$$\vec{m} = \vec{m}_L + \vec{m}_S \quad \text{I.01}$$

Les moments peuvent interagir l'un sur l'autre ce couplage est dénommé le couplage spin-orbite. Dans le fer pour les électrons de valence de la bande 3d, le champ électrique formé par les ions du cristal (champ cristallin) est fort, c'est pour cela qu'on parle d'un blocage du moment orbital.

Dans les films minces magnétiques qui constituent les métaux de transition 3d le magnétisme vient principalement du décalage des bandes entre les spins up et down. Ce partage des bandes dépend fortement de la structure de bandes qui est modifiée aux

surfaces de ces films. En réalité, pour un atome situé à la surface, le nombre de coordinations (de même nature) diminue donc l'hybridation des électrons de la bande d'est moins forte, et la structure de bande est plus étroite, ce qui augmente la densité d'état, donc l'énergie d'échange, et la norme du moment magnétique [31].

Tout comme les effets de surface, les modifications structurales de l'environnement et les contraintes imposées par une interface vont donner lieu à une modulation locale des propriétés magnétiques. L'un des effets induits par les interfaces sur le magnétisme des films ultraminces est la modification du paramètre de maille (une contraction de la maille conduit à un élargissement des bandes d et donc à une diminution du moment magnétique. Au contraire, une dilatation de la maille tend à accroître les moments magnétiques dans la couche déposée.

Aussi un autre effet induit par l'interface est la brisure de symétrie dans les couches ultraminces en contact avec des couches adjacentes d'un autre métal engendre une variation du moment magnétique des atomes d'interface est il est difficile à prédire; il convient de prendre en compte les effets d'hybridation entre les deux matériaux.

Comme exemple en site le Fer (cc) lorsque on peut épitaxie sur le Cu(001) , on prend la structure cfc , la modification de paramètre de maille du Fe cfc suffit à transformer l'état ferromagnétique en un état antiferromagnétique. Cela signifié la possibilité de la stabilisation de phases cristallographiques avec de nouvelles phases magnétiques [32].

III.1.2. Énergie d'échange :

Cette énergie tient compte des interactions directes entre spin d'électrons voisins, donnons une brève explication de l'origine théorique et physique de cette interaction. Considérons le système d'hydrogène H₂ composé de deux électrons et deux protons, l'Hamiltonien d'un tel système peut s'écrire :

$$H = -\sum_{i,j} J_{i,j} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad \text{I.02}$$

$J_{i,j}$: est la constante de couplage d'échange.

\vec{S}_i, \vec{S}_j : sont les spins des sites i et j.

L'interaction d'échange de Heisenberg explique ce comportement. Si deux spins forment un angle φ faible entre eux, on peut écrire :

$$U_{éch} = -J\vec{S}_i\vec{S}_j = -2JS^2\cos\varphi \cong -JS^2\left(1 - \frac{1}{2}\varphi^2\right) \quad \text{I-03}$$

Ainsi, la variation d'énergie d'échange vaut $\frac{1}{2}JS^2\varphi^2$ Par couple de spins. Si un changement d'orientation de π a lieu sur N spins, l'énergie d'échange totale d'une ligne de (N + 1) atomes est :

$$\Delta U_{éch} = \frac{1}{2}JS^2\frac{\pi^2}{N} \quad \text{I-04}$$

Parmi les interactions d'échange les plus rencontrées on cite :

- Les interactions entre ions de terre- rare ou entre ions de terre- rare qui sont à plus courte portée du fait du caractère plus localisé du magnétisme des terres rares (des états f des terres rares).
- Les interactions de type RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) oscillantes et à longue portée, elles sont transmises par les électrons de conduction des métaux nobles (comme le Cu, Ag, Au) [33, 34],
- De même que l'interaction (RKKY) entre les impuretés magnétiques dans une couche non magnétique [35-37].
- Le couplage d'échange intercalaire (IEC) peut être décrit comme un effet d'interférence quantique découlant de multiples réflexions dépendantes de spin des électrons aux interfaces entre les couches FM et la couche non magnétique [38]. Le couplage magnétique entre ces couches ferromagnétiques (FM) séparées par un espaceur non ferromagnétique a été largement étudié dans le passé [38-44].
- Les interactions indirectes dites de super échange peuvent également jouer un rôle dans des multicouches faisant intervenir des oxydes ou généralement des isolants.

Dans le cas des métaux de transition, le moment magnétique est du à la différence d'occupation des bandes de spin "up" et "down". En effet, si les spins de deux électrons voisins sont parallèles, les électrons occupent alors deux orbitales différentes et sont spatialement plus éloignés que si leurs spins étaient antiparallèles. Si on parle en terme de remplissage de bande, la bande 3d se retrouve partagée en deux bandes distinguant les spins des électrons $3d_{+1/2}$ et $3d_{-1/2}$ ayant un décalage en énergie égal à l'énergie d'échange (figure I.02). Il y a donc plus d'électrons dans une bande que dans l'autre, et donc dans notre cas une majorité de spin "up" et une minorité de spin "down" ce qui crée une aimantation spontanée [45-47].

L'interaction entre ces moments magnétiques est due au recouvrement des orbitales $3d$, et est modélisée par la constante de couplage d'échange J . Le signe de cette interaction dépend du remplissage de la bande $3d$, et est positif lorsque la bande est peu remplie, ce qui est le cas du Fe. Ce raisonnement est vrai pour une température nulle. Cependant au-delà d'une certaine température critique, appelée température de Curie, l'aimantation spontanée disparaît.

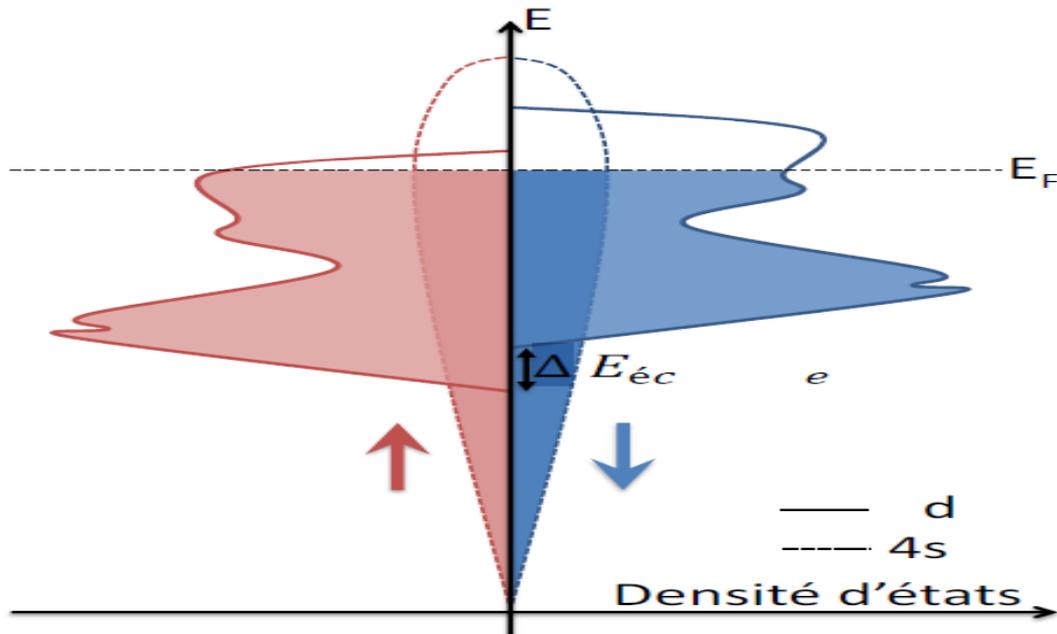


Figure I.02: Schéma des bandes de valences près du niveau de Fermi pour les métaux de transition $3d$ [48].

III.1.2. Énergie d'anisotropie magnétique.

Après avoir parlé sur le comportement de la norme du moment magnétique au sein d'une couche mince, nous allons parler comment l'anisotropie magnétique et plus précisément la direction des moments magnétiques est variée par la réduction de l'épaisseur des couches minces et l'importance des interfaces dans de tels systèmes. Ces directions préférées sont appelées axes de facile aimantation et sont déterminées par les minimums dans l'énergie d'anisotropie magnétique (MAE). Le MAE est considérée comme l'énergie nécessaire pour dévier l'aimantation en un seul cristal de la direction facile à la direction difficile (donnée par les maxima dans le MAE).

Dans les structures massives ainsi que dans les films minces, l'ordre magnétique est fourni par l'interaction d'échange entre les moments voisins. Cependant, la

stabilisation de L'aimantation totale par rapport à certaines directions spatiales est due à l'anisotropie magnétique.

La contribution à l'anisotropie magnétique provient des interactions spin-orbite et dipolaire. Dans ce qui suit, deux contributions majeures pertinentes pour les films minces seront considéré: l'énergie anisotropie magnétocristalline, E_{MC} et la magnéto-statique, énergie anisotropie de surface ou interface, anisotropie de forme.

*** Énergie magnéto cristalline :**

Dans le métal massif, il est connu depuis longtemps qu'il est plus facile d'aimanter un échantillon monocristallin suivant certaines de ces directions cristallographiques que dans l'autre. Ce phénomène dit d'anisotropie magnéto cristalline (de volume) traduit l'existence d'un terme d'énergie libre dépendant de l'orientation de l'aimantation par rapport aux axes cristallins [49].

Dans un cristal cubique (par exemple le fer et nickel) les cosinus directeurs de l'aimantation par rapport aux axes cristallins sont $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$. Phénoménologiquement l'énergie libre a été développée suivant les puissances de cosinus directeurs. Les propriétés de symétrie $E(M)=E(-M)$ imposent que le développement soit pair par rapport à la direction de l'aimantation (les α_i apparaissent en puissances paires) :

$$E_{MC} = K_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_3^2\alpha_1^2) + K_2\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2 \quad \text{I.05}$$

N.B. : les termes d'ordre 2 disparaissent, car : $\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2 = 1$

Dans le cas de Cobalt (des cristaux hexagonaux ou quadratiques), l'énergie a été développée en fonction de l'angle θ de l'aimantation par rapport à l'axe **c** suivant les harmoniques sphériques :

$$E_{MC} = K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta \quad \text{I.06}$$

Les coefficients K_1 et K_2 sont appelés **constantes d'anisotropie magnéto cristalline** du premier ordre et du deuxième ordre respectivement. La pratique montre que ces développements rendent très bien compte du comportement magnétique des matériaux avec un nombre de termes limité à seulement deux voire un terme. Les valeurs numériques de quelques-unes de ces constantes sont données dans le tableau I.01 à la température ambiante.

Tableau I.01 : Les Coefficients d'anisotropie magnéto cristalline du fer, du cobalt et du nickel massif [50-54].

	Fe (cc)		Co (hcp)		Ni (cfc)	
	4,2K	RT	4,2K	RT	4,2K	RT
K_1 (kJ/m ³)	54,8	42	766	440	-126,3	-5,7
K_2 (kJ/m ³)	19,6	15	105	130	57,8	-2,3

Les valeurs numériques du Tableau I.01 appellent des commentaires. L'axe de facile aimantation de fer est suivant les axes [100] et leur première Constante d'anisotropie est positive. Contrairement, l'axe de facile aimantation du nickel est suivant les directions [111], et la première constante d'anisotropie du nickel est négative.

Les constantes d'anisotropie de fer et du nickel sont plus petites par rapport à celles du cobalt. Donc en remarquant que les axes des cristaux hexagonaux ou quadratiques définissent des anisotropies magnétiques très marquées. Ces remarques sont illustrées (Figure I.03).

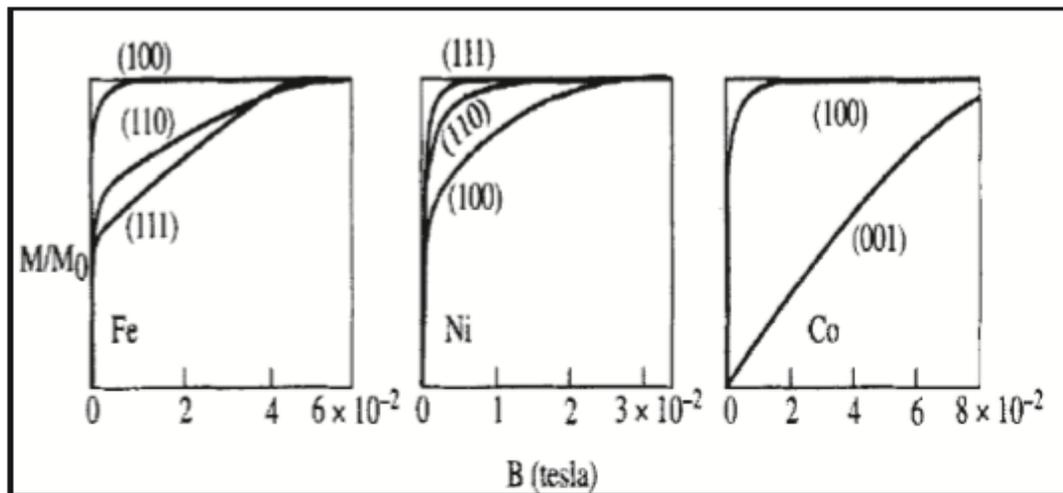


Figure I.03 : Courbe d'aimantation du fer, du cobalt et du nickel massif dans différentes directions cristallographiques [49].

***L'anisotropie de surface :**

Néel décrire ces énergies dans le cas de grains très fins [55] et qui est tout à fait actuelle aujourd'hui du fait de son influence primordiale dans les films ultraminces (moins d'une dizaine de couches atomiques) et les super réseaux magnétiques [56]. L'environnement d'un atome à la surface des films minces est beaucoup moins symétrique que dans le matériau massif. Cette brisure de symétrie peut favoriser une orientation du moment magnétique perpendiculaire à la surface. Dans de tels films très minces existe alors une compétition entre l'anisotropie due aux atomes de surface (ou d'interface avec un film non magnétique) et l'anisotropie de forme qui tend à orienter l'aimantation dans le plan du film, assez nombreux pour orienter l'aimantation dans la direction perpendiculaire aux couches (constante d'anisotropie K). Cette compétition est caractérisée par le facteur de qualité est $Q = K / 2\pi M_s^2$ qui est supérieure à 1 si l'effet de l'anisotropie de surface domine et inférieur à 1 dans le cas contraire.

Des couches minces avec $Q > 1$ sont utilisées pour l'enregistrement magnétique haut densité et pourront certainement être utilisées dans un proche avenir en tant qu'aimants permanents destinés à des dispositifs très miniaturisés.

***L'anisotropie magnéto élastique :**

Du fait que l'anisotropie magnéto cristalline est la description macroscopique de l'interaction entre le spin d'électron et le réseau, il est évident que la variation de la valeur des constantes de réseau influe sur les propriétés magnétiques.

Dans un corps magnétique, le terme d'énergie dépend des contraintes et de la direction d'aimantation ; cette énergie appelée « énergie d'anisotropie magnéto élastique », par exemple : pour le Fer (Fe), l'effet de la tension sur un cristal singulier (monocristal) crée une direction parallèle préférée de l'aimantation par rapport à la direction de la contrainte (σ).

L'énergie magnéto élastique donnée par la relation [57] :

$$E_{me} = \frac{3}{2} \lambda_m \sigma \cos^2 \theta \quad \text{I.07}$$

σ : la contrainte.

λ_m : est la constante de la magnéto striction qui peut – être positive ou négative.

Si la contrainte n'est pas nulle, le couplage magnéto élastique contribue principalement à l'anisotropie effective. Quand σ est constant et ne dépend pas de

l'épaisseur de la couche magnétique t_M alors sa contribution est identifiée comme étant une contribution dans K_v .

Les contraintes dans les couches minces sont des contraintes d'origine thermique associées aux différences de dilatation thermique, des contraintes intrinsèques qui sont liées à la nature de dépôts, des contraintes dues à l'écart type entre les paramètres de mailles.

Si l'écart type entre les deux paramètres de maille de deux matériaux A et B $\eta = (a_A - a_B) / a_A$ n'est pas assez grand, alors l'énergie est minimum, en dessous d'une certaine épaisseur critique t_c (régime cohérent), et le désaccord paramétrique est accommodé par l'apparition d'une contrainte de tension d'une seule couche et d'une contrainte compressive dans les autres telles que la structure adopte le même paramètre de maille dans le plan. Ainsi, dans les couches minces les contraintes et le couplage magnéto élastique sont indépendants de l'épaisseur (figure I.04).

Au dessus, de l'épaisseur critique t_c , le couplage devient énergétiquement favorable pour créer des dislocations qui accommodent partiellement le désaccord paramétrique et qui permettent une réduction des contraintes (régime incohérent). Dans le régime incohérent, la contribution de l'énergie magnéto élastique dépend de $1/t_M$ [58].

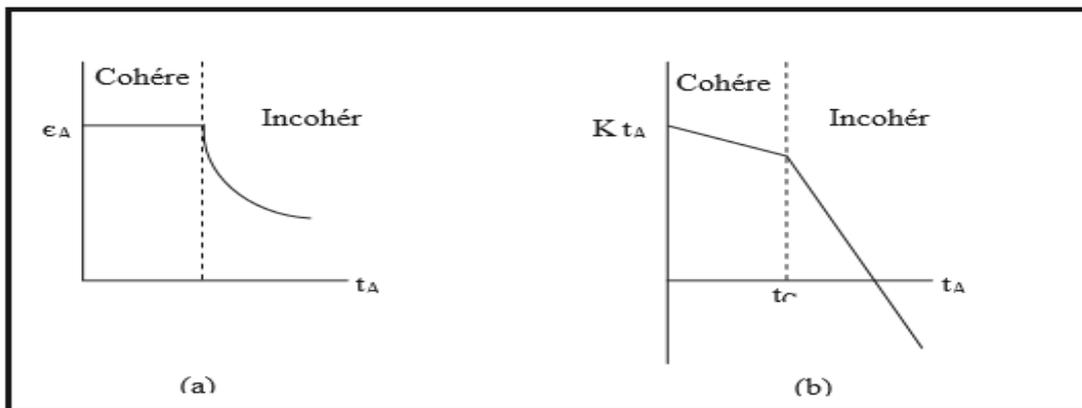


Figure I.04 : Variations de la contrainte (a) et de l'anisotropie magnétique (b) en fonction de l'épaisseur dans le régime cohérent et incohérent dans le cas d'un film sur un substrat [58].

***Anisotropie de forme :**

L'anisotropie de forme résulte des interactions dipolaires. Par exemple, si on place un film mince dans un champ magnétique perpendiculaire, il va se créer une accumulation de pôles ou charges magnétiques en surface. Le champ à l'intérieur du matériau n'est donc pas réellement le champ appliqué. Il faut ajouter à ce champ, le champ démagnétisant créé par les pôles de surface. Ce champ agit en direction opposée à celle de l'aimantation.

$$\vec{H} = \vec{H}_{\text{appliqué}} + \vec{H}_{\text{démagnétisant}} \quad \text{I.08}$$

En fait, ce champ démagnétisant dépend non seulement de la densité de charge en surface, mais aussi des charges de volume qui apparaissent si l'aimantation n'est pas uniforme à l'intérieur du matériau.

$$\vec{H}_D = \int \frac{\sigma_m \cdot \vec{R}}{R^3} dS + \int \frac{\rho_m \cdot \vec{R}}{R^3} dR \quad \text{I.09}$$

$$\sigma_m = \vec{M} \cdot \vec{n}$$

$$\rho_m = -\text{Div} \vec{M}$$

Pour un certain nombre de formes simples (ellipsoïde de révolution, plaque, cylindre.....) Son expression se simplifie pour donner :

$$\vec{H}_D = -\vec{N}_D \cdot \vec{M} \quad \text{I.10}$$

Le calcul de N_D pour un ellipsoïde de révolution a été mené par Stoner et Osborn [59] on obtient dans ce cas :

$$N_a = \frac{4\pi R^2}{R^2 - 1} \left[1 - \sqrt{\frac{1}{R^2 - 1}} \sin^{-1} \left(\sqrt{\frac{R^2 - 1}{R}} \right) \right]$$

$$N_b = N_c = \frac{4\pi - N_a}{2} \quad \text{I.11}$$

avec : $R = c / a$

Application au cas des films minces :

On peut considérer, en première approximation, qu'un film mince est un ellipsoïde de révolution avec $c \gg a$.

Dans la limite ou $R \rightarrow \infty$ on obtient :

$$N_I = N_a = 4\pi \quad \text{I.12}$$

$$N_{II} = N_b = N_c = 0$$

Le champ démagnétisant, vau donc :

$\vec{H}_D = 4\pi\vec{M}$. Lorsque l'aimantation est perpendiculaire

$\vec{H}_D = 0$ Lorsque l'aimantation est parallèle à la plaque.

-Énergie de champ démagnétisant :

L'énergie magnétostatique associée au champ démagnétisant vaut dans ce cas :

$$E_{ms} = -\frac{1}{2}\mu_0 \int \vec{H}_D \cdot \vec{M} dV = -\frac{1}{2}\mu_0 N \int M^2 dV = -\frac{1}{2}\mu_0 M^2 \sin^2 \theta \quad \text{I.13}$$

Où θ est l'angle entre l'aimantation et la normale au plan du film.

L'énergie magnétostatique par unité de volume dans le cas d'un film mince est donc :

$$E_{ms} = -\frac{1}{2}\mu_0 M^2 \sin^2 \theta \quad \text{I.14}$$

*Énergie de Zeeman

Elle représente l'interaction entre le champ extérieur applique H_{ext} et l'aimantation du matériau. Son expression volumique est :

$$E_z = -\mu_0 \cdot M \cdot H_{ext} \quad \text{I.15}$$

Il s'agit donc de l'interaction qui tend à aligner l'aimantation avec le champ extérieur. Pour un champ appliqué dans la direction de facile aimantation considérée :

$$E_z = -M \cdot H_{ext} \cos\theta \approx M \cdot H_{ext} \left(1 - \frac{\theta^2}{2}\right) \quad \text{I.16}$$

III.2. Les propriétés magnéto-optiques :

L'ensemble des phénomènes résultant de l'interaction d'une onde électromagnétique avec la matière en présence d'un champ magnétique constitue la magnéto-optique [60]. Ces effets magnéto-optiques représentent le seul moyen physique pour obtenir une propagation non réciproque de la lumière [61].

L'effet Faraday, ainsi que l'effet Kerr magnéto-optique (MOKE) remonte au 1800 quand on a remarqué que les phénomènes optiques pouvaient être influencés par un champ magnétique. Bien que distincts, les deux effets sont généralement traités ensemble.

Le MOKE décrit les changements de polarisation de la lumière qui se reflètent à partir d'un matériau magnétisé, et prend son nom de John Kerr qui l'a signalé en 1875 [62].

Il existe en fait différents effets **magnéto-optiques** qui dépendent de l'orientation du champ magnétique par rapport au vecteur de propagation de la lumière, ainsi que de la méthode de mesure employée, à savoir, par transmission ou par réflexion. On distingue les effets magnéto-optiques du premier ordre, proportionnels à des termes impairs du champ magnétique, et ceux du second ordre, proportionnels à des termes pairs du champ magnétique. Dans le domaine visible et du point de vue microscopique, les effets magnéto optiques obtiennent de l'excitation des électrons de la bande de conduction (transitions des électrons des niveaux de cœur vers des niveaux de valence. Les effets magnéto optiques ont pour origine, la brisure de symétrie suite à la présence de l'ordre magnétique [63], ils deviennent d'un couplage spin-orbite. L'utilité de l'effet de Kerr comme sonde des propriétés magnétiques des couches minces [64,65].

III.2.1. Les géométries de l'effet Kerr :

L'interaction magnéto-optique qui résulte de la réflexion d'une onde électromagnétique polarisée linéairement sur un matériau aimanté constitue l'effet Kerr magnéto-optique (en anglais MOKE, Magneto Optical Kerr Effect). Plan de réflexion (figure I.05).

- **l'effet Kerr polaire:** l'aimantation est perpendiculaire à l'échantillon et dans le plan d'incidence.
- **l'effet Kerr longitudinal:** l'aimantation est dans le plan de l'échantillon et dans le plan incidence.
- **l'effet Kerr transverse:** l'aimantation est dans le plan de l'échantillon et perpendiculaire au plan d'incidence.

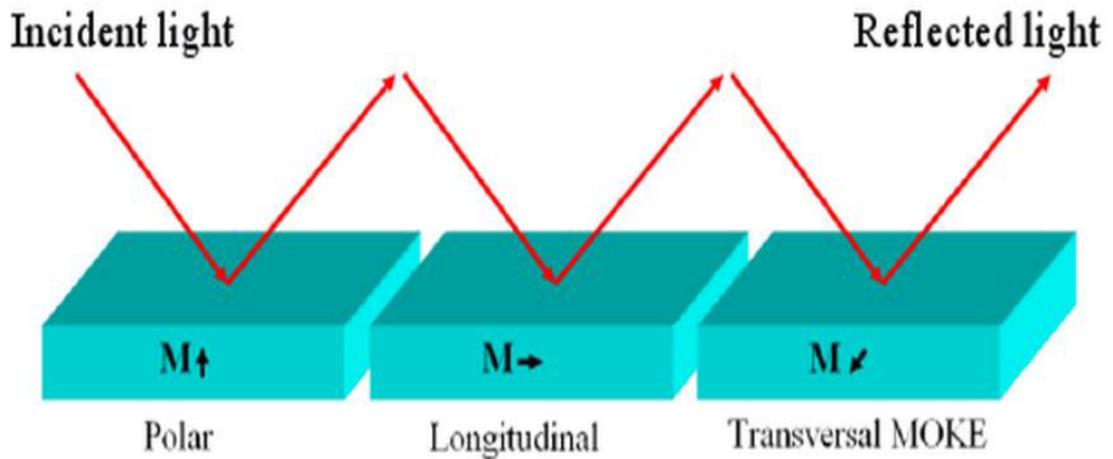


Figure I.05: *Les différentes configurations (polaire, longitudinale et transverse) de l'effet Kerr.*

Dans le cas des configurations polaire et longitudinale, l'onde électromagnétique polarisée linéaire se transforme en une onde elliptique après réflexion sur le milieu aimanté. On décrit cette onde réfléchie elliptique par la rotation complexe $\Phi_K = \theta_K + i\varepsilon_K$ où θ_K est l'angle de rotation de l'axe principal de l'ellipse par rapport à la direction initiale de polarisation et ε_K est l'angle d'ellipticité de cette ellipse (figure I.06). L'effet Kerr transverse entraîne non pas une modification de la polarisation de l'onde incidente, mais un changement de sa réflectivité.

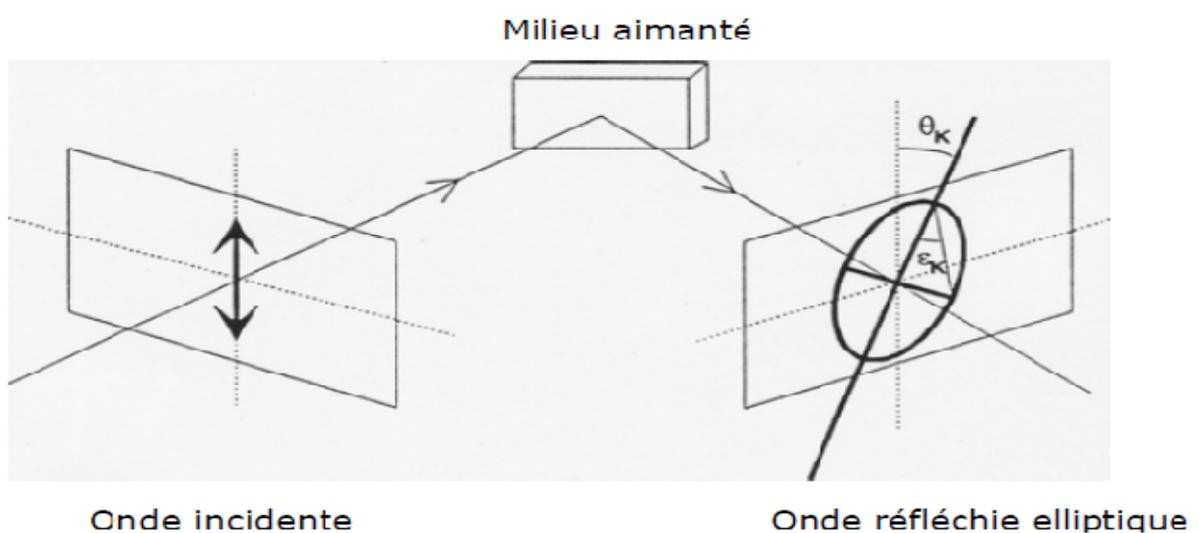


Figure I.06: *Transformation d'une onde linéaire en une onde elliptique après réflexion sur un milieu aimanté.*

III.2.2. Spectre Magnéto-optique pour les métaux de transition Fe, Co et Ni :

Dans cette partie on commence par discuter des systèmes simples comme Fe, Co et Ni. Les spectres magnéto-optiques des métaux de transition 3d ont été les premiers mesurés [66-73] et calculés [74,75]. Erskine et Stern [66] ont étudié la conductivité optique des trois métaux de transition en utilisant des techniques d'ellipsométrie et l'effet Kerr longitudinal. La caractéristique commune de ces mesures expérimentales est l'existence du pic négatif de la rotation de Kerr θ_k autour de [1.2, 1.6] eV pour tous les métaux de transition 3d. Les spectres calculés de l'effet Kerr de Fe, Co et Ni ont été publiés par plusieurs auteurs. Oppeneer et al. [76, 77] a calculé le MOKE des structures cubiques de Fe, Co et Ni en utilisant la méthode LMTO et le formalisme de Kubo. Guo et Ebert [78,79] ont calculé la dépendance d'orientation du MOKE dans fcc Co, en utilisant la méthode LMTO relativiste.

La méthode du full potentiel LAPW a été utilisée pour calculer le MOKE dans Fe, Co et Ni [80,81]. Les auteurs étudient l'influence de la contribution de spin orbite [80] et aussi l'influence de la distorsion tétragonale [81] sur les spectres MO des métaux ferromagnétiques 3d.

Le fer : Il se cristallise à la fois dans la structure bcc (α -Fe) et dans la structure fcc (γ -Fe). À basse température, γ -Fe est instable, la plupart des recherches expérimentales des propriétés optiques et magnéto-optiques du fer sont faites pour la phase cc(α).

La figure I.07 présente les spectres MOKE calculés expérimentalement [82] et théoriquement calculés pour le Fer en phase α . À 1eV, la rotation Kerr mesurée expérimentalement a son minimum d'environ -0.6° , un minimum inférieur d'environ -0.3° se produit à 4.5 eV. Katayama et al. [72] a mesurée, dans une large gamme d'énergie (jusqu'à 10 eV), le spectre Kerr dans la configuration polaire d'une couche mince de Fe, recouvert d'une couche d'or de 20 Å d'épaisseur. Ils ont découvert le pic positif de la rotation Kerr entre 6 et 8 eV. Une troisième caractéristique est une petite rotation Kerr négative de -0.1° à 9 eV. Le spectre théorique est déplacé vers une énergie plus élevée dans la gamme d'énergie 7 à 10 eV. En outre, la théorie donne une valeur plus petite de la rotation de Kerr dans l'intervalle de 6 à 8 eV et un pic négatif sensiblement plus grand à 9 eV (grandeur d'environ $-0,45^\circ$) par rapport au spectre expérimental (figure I. 07).

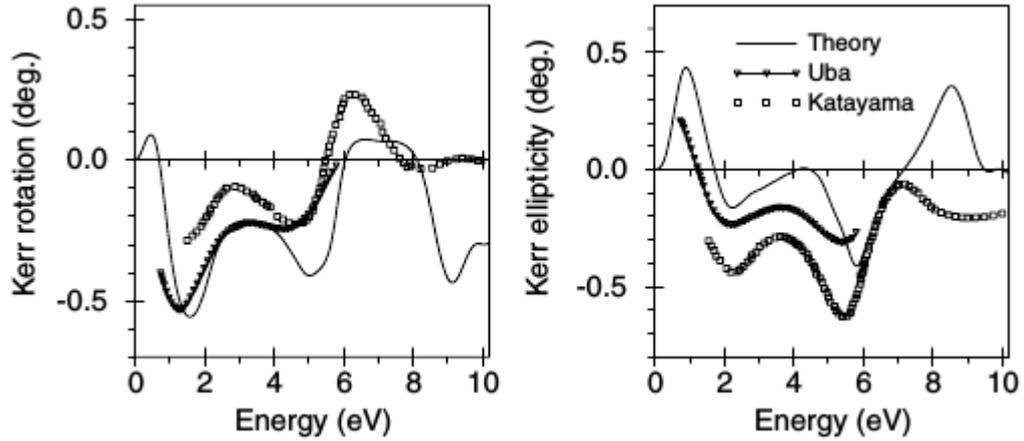


Figure I.07 : Spectre Magnéto-optique théorique et expérimentale (rotation et ellipticité Kerr) pour le Fe(cc) : Théorique [82] et expérimentaux (triangles [83], Carrés [72]).

Le cobalt : Le cobalt se cristallise dans la structure cristalline à haute température, ce qui, à environ 700 K, subit une transition martensitique à fcc Co. Cependant, il a été constaté que les films minces de fcc Co sont extrêmement stables sur divers substrats tels que Cu (110) [84].

Les spectres magnéto-optiques à effet de Kerr en structure hexagonale du Co ont été obtenus par plusieurs auteurs, [68, 69,71]. Étant donné que la structure hexagonale du Co est uniaxe, le spectre MO dépend de l'orientation de l'aimantation par rapport à l'axe cristallographique. Les spectres de Kerr expérimentaux pour deux orientations d'aimantation, $M \parallel (0001)$ et $M \parallel (1120)$, est obtenus par Weller et al [85] sont représentés sur la Figure I.08.

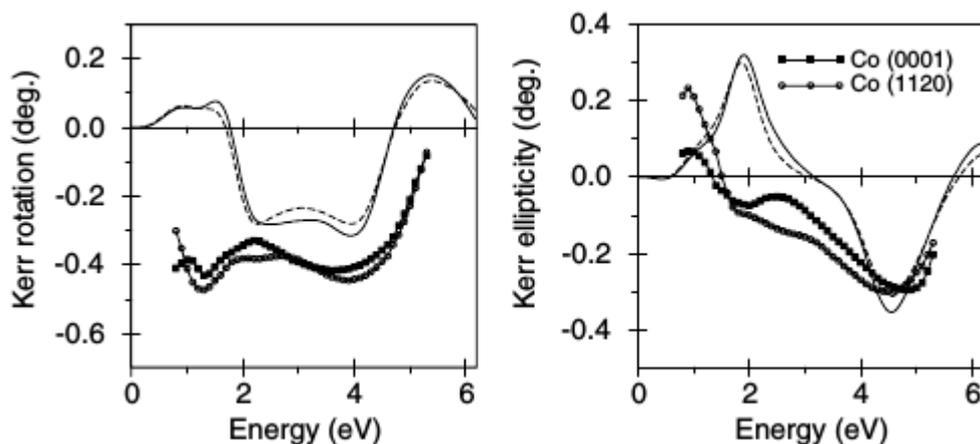


Figure I.08 : Spectre de rotation de Kerr et ellipticité, Théorique et expérimentale du Co en structure hexagonale.[86]

Dans la Figure I.08, donc, seulement les résultats ab initio d'Antonov et al sont présentés [83]. L'anisotropie de Kerr observée est plus grande dans les spectres de

rotation et l'ellipticité de Kerr dans la gamme d'énergie de 2 à 3 eV (figure I.09). Les deux minima du spectre de rotation de Kerr sont déplacés vers une énergie plus élevée dans le spectre théorique. Cela peut être confirmé par la largeur de la bande **d**, qui est prédite trop large par le LSDA approche [87]. Les spectres MO de fcc Co ont été étudiés dans le Réf. [85]. Il a été constaté que l'effet Kerr pour fcc Co est supérieur à celui de hcp Co. Figure I.09 présente les spectres MOKE [83] mesurés expérimentalement [85] et théoriquement calculés de fcc Co. La théorie reproduit assez bien les spectres MOKE mesurés expérimentalement.

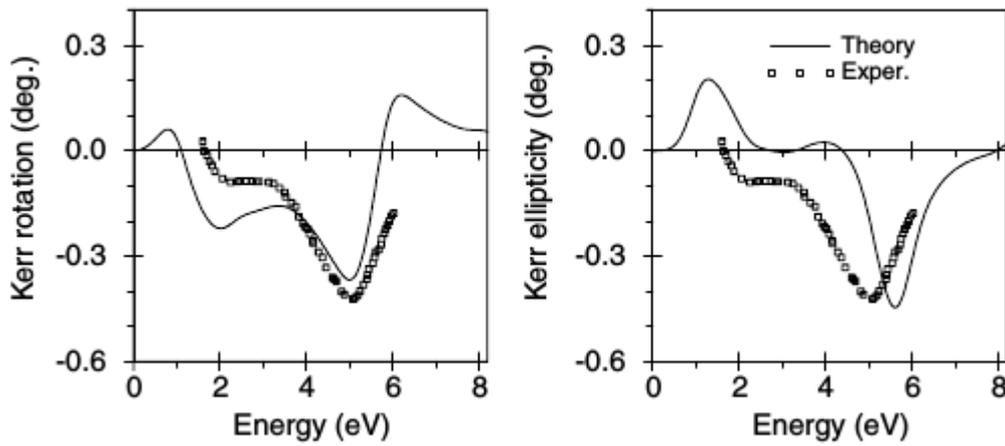


Figure I.09 : Comparaison entre les calculs théoriquement [83] et expérimentaux (triangles de Ref. [88], carrés de Ref. [89]) des spectres Kerr pour le Co(cfc) [86]

Le Nickel : La figure I.10 présente les spectres MOKE mesurés expérimentalement [83] et calculés [71,90] pour la structure en cubique à face centrée de nickel Ni.

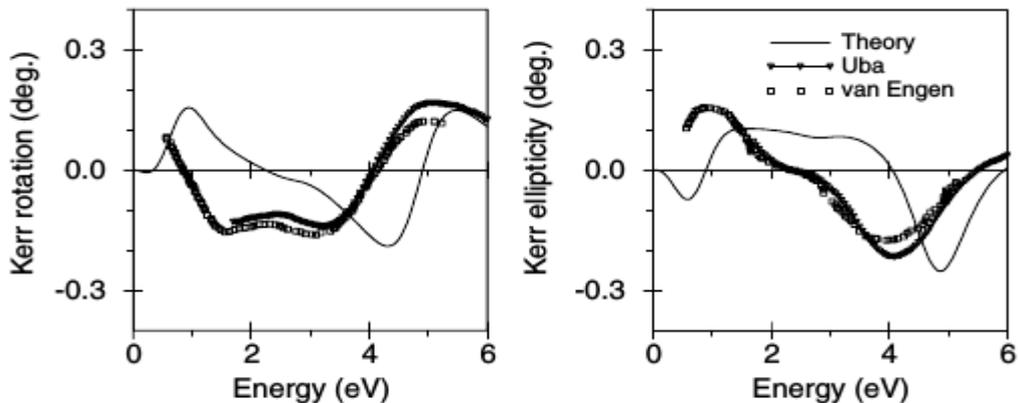


Figure I.10 : Spectre MOKE pour le Ni (cfc). Spectre théorique [83] et expérimentaux (triangles de Réf. [90], carrés de la référence [71]).

La différence la plus importante entre la théorie et l'expérience et la position du second minimum du spectre de rotation de Kerr qui, dans l'expérience, est d'environ 3.3 eV mais dans le spectre calculé est de 4.3 eV [83]. Cela indique que les bandes d'énergie LSDA 3d pour Ni sont quelque peu plus larges par rapport aux valeurs normaux. Cette déficience de la structure de bande en LSDA approche est bien connue pour le Ni [91].

IV. Les applications des multicouches magnétiques :

Les couches minces magnétiques font aujourd'hui l'objet de nombreuses recherches et ce, depuis l'apparition du stockage magnétique. Les mémoires magnétiques solides (MRAMS) et les disques durs représentent le plus grand secteur d'application de cette technologie. Du point de vue des media d'enregistrement, les deux principaux enjeux sont l'augmentation de la densité de stockage et la diminution du temps de lecture/écriture d'une information sur le support. Ces défis sont la source des nombreux travaux portant sur les couches minces. Parmi les applications les plus répandues des couches minces, on cite principalement l'enregistrement magnétique.

IV.1. L'enregistrement magnétique longitudinal :

L'enregistrement magnétique nécessite des matériaux caractérisés par une forte rémanente et un champ coercitif élevé. La première caractéristique fixe la distance à laquelle peut être placée la tête de la lecture, tandis que la deuxième reflète la façon dont laquelle les matériaux vont résister à la désaimantation lors de l'exposition à des champs magnétiques. Parmi les applications les plus répandues des multicouches, on cite principalement l'enregistrement magnétique perpendiculaire et les têtes de lecture à "sensors" magnétorésistifs. Les moyens de stockage utilisant le magnétisme sont largement majoritaires et ont une place privilégiée dans l'audio, la vidéo et les disques durs des ordinateurs. Le premier disque dur a vu le jour en 1956 chez *IBM* avec une capacité de 5Mo pour une densité de $2Kb/in^2$. Depuis l'utilisation de ces supports magnétiques, la quantité d'informations à stocker n'a cessé de croître poussant les constructeurs à augmenter sans cesse la densité de leur support. C'est ainsi que la densité d'informations des disques durs actuels double chaque année et affiche environ $100Gb/in^2$ (figure I.12)

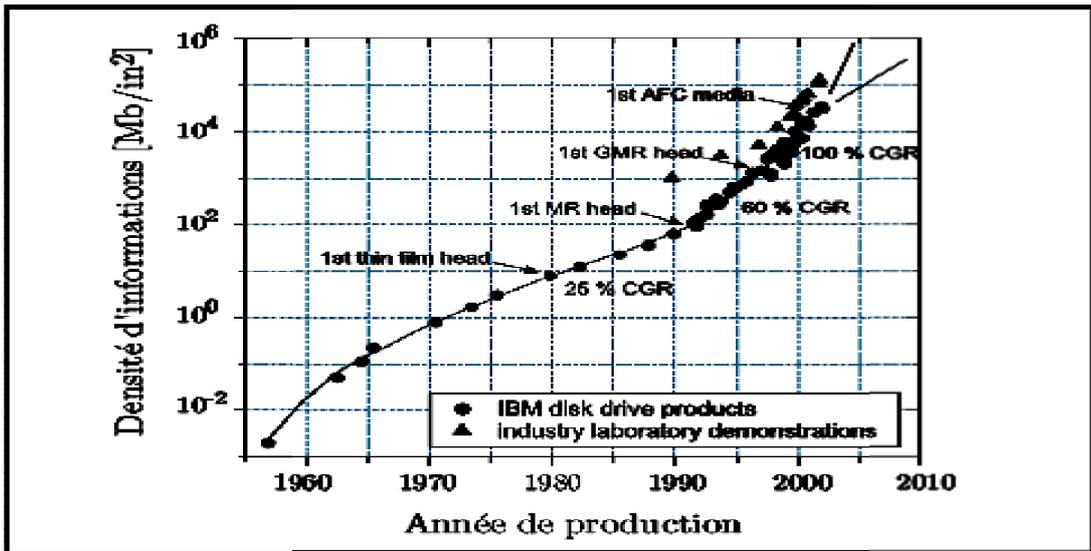


Figure I.11 : Évolution de la densité d'informations des disques durs depuis leur invention en 1956 par IBM [92].

IV.2. Enregistrement perpendiculaire.

Il est connu que les milieux à aimantation perpendiculaire possèdent une capacité d'enregistrement et de stockage plus grand que les milieux à orientation parallèle. La taille minimum des domaines dans les enregistrements parallèles est limitée par l'énergie magnétostatique. Lorsque l'aimantation est perpendiculaire au plan du film, l'énergie est toujours abaissée par la création des domaines à aimantation inverses (Figure I.13). Ceci favorise donc une création de petits domaines dans le cas des milieux à aimantation perpendiculaire que dans le cas des enregistrements longitudinaux. Les matériaux utilisés pour l'enregistrement perpendiculaire doivent posséder une anisotropie intrinsèque suffisante pour vaincre le champ démagnétisant, ce qui correspond aux matériaux ou multicouches à anisotropie perpendiculaire.

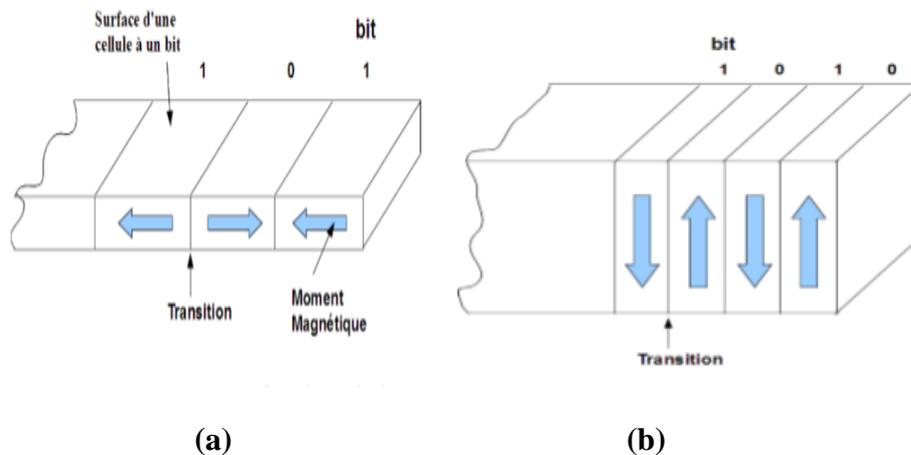


Figure I.12 : Orientation des domaines magnétiques en enregistrement longitudinal (a) et perpendiculaire (b).

IV.3. L'enregistrement magnéto-optique :

L'effet Kerr magnéto-optique a suscité un intérêt considérable ces dernières années en raison de sa large application dans les appareils d'enregistrement MO. Grâce à sa haute précision, sa résolution temporelle et spatiale élevée et sa réponse très rapide, la sonde MO est devenue une méthode puissante pour étudier les propriétés magnétiques des films minces et multicouches. Détermination de la structure électronique, l'observation de l'imagerie des domaines magnétiques, l'étude des oscillations dans le couplage entre les couches ferromagnétiques via des couches métalliques non magnétiques sont quelques exemples.

Dans ces mémoires, on met en œuvre le mode d'enregistrement perpendiculaire que l'on vient juste de décrire, mais l'inscription et la lecture se font par voie optique [93,94]. L'un des grands avantages de cette technique est le fait que la tête de lecture ou d'écriture n'a aucun besoin de voler à distance infime de la surface du disque, à la différence des systèmes purement magnétiques. Outre une forte anisotropie uniaxiale d'axe facile perpendiculaire au plan de la couche, les matériaux utilisés encore une fois sous forme de couches minces doivent posséder une coercivité de paroi importante, on comprendra plus loin pourquoi. Le procédé d'écriture, dit thermomagnétique, repose sur une diminution rapide du champ coercitif avec la température.

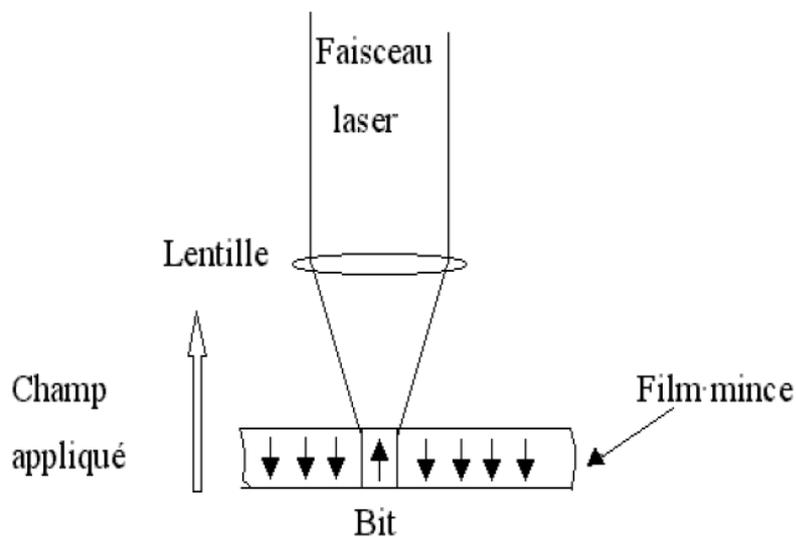


Figure I.13 : *Principe d'enregistrement magnéto-optique.*

V. Conclusion :

L'idée principale à l'origine de ce travail est l'étude des propriétés structurale, magnétique, magnéto optique des super réseaux Fe/nCu par la technique théorique DFT.

Dans ce chapitre, on a d'abord rappelé certaine notions, indispensable pour la compréhension de la suite du travail.

Une connaissance du magnétisme des couches minces, multicouches et super réseau magnétique facilitera par la suite la compréhension de leurs propriétés magnétiques et leurs applications.

CHAPITRE II :

APERÇUS SUR LE CADRE

THÉORIQUE

I. Introduction :

Le calcul des propriétés physiques d'un système à plusieurs électrons est de nos jours une tâche rarement accomplie avec exactitude. En tenant compte de la complexité de la plupart des systèmes à étudier, avoir recours aux approximations, est donc inévitable, car c'est la seule manière de résoudre les problèmes étudiés aux moyens disponibles.

Un solide est une collection de particules lourde, chargée positivement (noyaux) et plus léger chargé, négativement (électrons). Si on a N noyaux nous traitons un problème de N+NZ particules en interaction électromagnétique.

L'Hamiltonien exact s'écrit [95] :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{\vec{R}_i}^2}{M_i} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{\vec{r}_i}^2}{m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad \text{II.01}$$

Les diverses méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques des matériaux à l'état solide mises au point au cours des dernières décennies reposent sur un certain nombre des approximations.

II. Les approximations fondamentales

II.1. Approximation de Born-Oppenheimer:

Les noyaux sont (fixes); les électrons sont en mouvement, avec NZ particules en échange dans un potentiel (externe) des noyaux [95,96] :

$$\hat{H}_{B.O} = \hat{T} + \hat{V} + \hat{V}_{ext} \quad \text{II.02}$$

On a seulement l'énergie cinétique du gaz d'électrons avec un potentiel d'interaction électron-électron et le potentiel interne des noyaux ; il est intéressant pour noter ici que les limites cinétiques et d'électron-électron de (II .02) dépendent seulement du fait que nous traitons un système de beaucoup-électron la présente partie est universel. L'information spécifique du système (quels noyaux et quelles positions) est fournie entièrement par V_{ext} .

L'approximation de Born-Oppenheimer appelée aussi approximation adiabatique tient compte de ce que le caractère du mouvement des particules légères (électrons) et lourdes (noyaux des atomes) est fort différent.

Pour des particules aussi rapides qu'ils sont les électrons c'est la position instantanée est des noyaux qui importe ; quant aux noyaux, leurs mouvements ne pouvant être affectés par la position instantanée de l'ensemble des électrons, ce n'est que la moyenne des mouvements est de l'ensemble des électrons qui peut avoir de

l'importance. La situation est en effet analogue à celle qui prévaut dans les atomes à un grand nombre d'électrons ; du fait de son inertie, le noyau ne peut évidemment pas réagir au mouvement de chacun des électrons et se meut dans le champ résultant produit par tous les électrons. Simultanément les mouvements relativement lents du noyau entraînent dans leur sillage l'ensemble de tous les électrons, ce qui assure l'unité de l'atome.

Un comportement semblable des noyaux et des électrons doit se manifester dans un corps solide cristallin.

En adoptant cette hypothèse, on simplifie notablement l'équation de Schrödinger, puisque l'énergie d'interaction des noyaux devient constante, mais que l'on peut par un choix convenable de l'origine tout aussi bien rendre nulle.

Compte tenu de ce que $\hat{T}_Z = 0$ et $\hat{U}_Z = 0$ nous pouvons définir un nouvel Hamiltonien, l'Hamiltonien des électrons \hat{H}_e

$$\hat{H}_e = \hat{T}_e + \hat{U}_e + \hat{U}_{eZ} \quad \text{II.03}$$

Désignons par ψ_e la fonction d'onde des électrons ; cette fonction doit dépendre des coordonnées des électrons \vec{r}_i et de celles des noyaux immuables (\vec{R}_α^0) ; la fonction $\psi_e(\vec{r}_i, \vec{R}_\alpha^0)$ doit être normée de telle sorte qu'elle se réduise à l'unité pour toute valeur des coordonnées des noyaux lors d'une intégration étendue à toutes les coordonnées des électrons :

$$\int \psi_e^*(\vec{r}_1, \dots; \vec{R}_1^0, \dots) \psi_e(\vec{r}_i; \vec{R}_\alpha^0) d\tau_e \quad \text{II.04}$$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\hat{H}_e \psi_e = E_e \psi_e \quad \text{II.05}$$

$$\left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i \right) + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,\alpha} \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha^0|} \right] \psi_e = E_e \psi_e \quad \text{II.06}$$

Dans cette équation les coordonnées (\vec{R}_α^0) figurent non plus comme une variable de l'équation différentielle, mais comme un paramètre dont la valeur exerce en fin de compte une influence sur la fonction d'onde et l'énergie du cristal E_e :

$$E_e = \int \psi_e^* \hat{H}_e \psi_e d\tau_e = E_e(\vec{R}_1^0; \vec{R}_2^0; \dots) \quad \text{II.07}$$

E_e représentant l'énergie des électrons qui se meuvent dans le champ créé par des noyaux fixes. Poser que les noyaux sont parfaitement immobiles est cependant une approximation trop grossière. Il est préférable de tenir compte des mouvements des noyaux en faisant intervenir une nouvelle fonction d'onde concernant les noyaux $\varphi_z(\vec{R}_1, \dots)$. Nous procéderons alors de la manière suivante, désignons par \hat{H}_z l'opérateur:

$$\hat{H}_z = \sum_{\alpha} \left(-\frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \Delta_{\alpha} \right) + \hat{U}_z + \hat{E}_e(\dots; \vec{R}_{\alpha}; \dots) \quad \text{II.08}$$

Que nous appellerons la partie nucléaire de l'Hamiltonien du cristal. Nous pouvons maintenant représenter l'Hamiltonien du cristal à l'aide de deux opérateurs \hat{H}_e et \hat{H}_z tenant compte des équations II.02, II.08 est :

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_z + \hat{U}_e + \hat{U}_z + \hat{U}_{eZ} + \hat{V} \quad \text{II.09}$$

Notre système n'est soumis à aucun champ appliqué :

$$V(\vec{r}_i, \dots, \vec{R}_1, \dots) = 0 \quad \text{II.10}$$

Donc nous écrivons :

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_z - \hat{E}_e \quad \text{II.11}$$

La fonction d'onde du cristal ψ peut se mettre sous forme d'un produit :

$$\psi(\dots, \vec{r}_i, \dots; \dots, \vec{R}_{\alpha}, \dots) = \psi_e(\dots, \vec{r}_i, \dots; \dots, \vec{R}_{\alpha}, \dots) \varphi_z(\dots, \vec{R}_{\alpha}, \dots) \quad \text{II.12}$$

$\varphi_z(\dots, \vec{R}_{\alpha}, \dots)$; que nous pouvons reporter dans l'équation de Schrödinger du cristal et en déduire :

$$\hat{H}\psi = (\hat{H}_e + \hat{H}_z - \hat{E}_e) \psi_e \varphi_z = \varphi_z \hat{H}_e \psi_e + \hat{H}_z \psi_e \varphi_z - \hat{E}_e \psi_e \varphi_z = E \psi_e \varphi_z \quad \text{II.13}$$

Tenant compte II.05 il vient :

$$\hat{H}\psi = \hat{H}_z \psi_e \varphi_z = E \psi_e \varphi_z = E \psi \quad \text{II.14}$$

Puisque ψ_e dépend des coordonnées des noyaux, l'opérateur \hat{H}_z doit agir sur ψ_e ; déterminons, par exemple $\Delta_{\alpha} \psi_e \varphi_z$

$$\begin{aligned} \Delta_{\alpha} \psi_e \varphi_z &= \nabla_{\alpha} (\psi_e \nabla_{\alpha} \varphi_z + \varphi_z \nabla_{\alpha} \psi_e) = \\ &= \psi_e \Delta_{\alpha} \varphi_z + \varphi_z \Delta_{\alpha} \psi_e + 2(\nabla_{\alpha} \varphi_z \cdot \nabla_{\alpha} \psi_e). \end{aligned} \quad \text{II.15}$$

Utilisons ce développement pour récrire l'équation II.14 :

$$\begin{aligned}\hat{H}_Z \psi_e \varphi_Z &= \sum_{\alpha} \left(-\frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \right) \left[\psi_e \Delta_{\alpha} \varphi_Z + \varphi_Z \Delta_{\alpha} \psi_e + 2(\nabla_{\alpha} \varphi_Z \cdot \nabla_{\alpha} \psi_e) \right] + \hat{U}_Z \psi_e \varphi_Z \\ &+ E_e \psi_e \varphi_Z = E \psi_e \varphi_Z\end{aligned}\quad \text{II.16}$$

Multiplions le premier membre de l'équation II.16 par ψ_e^* et intégrons par rapport aux coordonnées des électrons ; nous tiendrons compte de ce que :

$$\int \psi_e^* \psi_e d\tau_e = 1 \quad \text{II.17}$$

Et nous trouverons alors :

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha} \left(-\frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \right) \left[\Delta_{\alpha} \varphi_Z + \varphi_Z \int \psi_e^* \Delta_{\alpha} \psi_e d\tau_e + 2(\nabla_{\alpha} \varphi_Z \cdot \int \psi_e^* \nabla_{\alpha} \psi_e d\tau_e) \right] + \hat{U}_Z \varphi_Z \\ + E_e \varphi_Z = E \varphi_Z\end{aligned}\quad \text{II.18}$$

Portons dans cette dernière expression la valeur de \hat{H}_Z donnée par II.08 :

$$\hat{H}_Z \varphi_Z = E \varphi_Z + \sum_{\alpha} \frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \left[\varphi_Z \int \psi_e^* \Delta_{\alpha} \psi_e d\tau_e + 2(\nabla_{\alpha} \varphi_Z \cdot \int \psi_e^* \nabla_{\alpha} \psi_e d\tau_e) \right] \quad \text{II.19}$$

Multiplions le premier membre de l'équation II.18 par φ_Z^* et intégrons par rapport aux coordonnées des noyaux ; nous obtenons une équation définissant l'énergie du cristal :

$$\int \varphi_Z^* \hat{H}_Z \varphi_Z d\tau_Z = E + \delta E \quad \text{II.20}$$

la valeur de δE .

$$\delta E = \sum_{\alpha} \frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \int \psi_e^* \Delta_{\alpha} \psi_e d\tau_e + \sum_{\alpha} \frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \left(2 \int \varphi_Z^* \nabla_{\alpha} \varphi_Z d\tau_Z \cdot \int \psi_e^* \nabla_{\alpha} \psi_e d\tau_e \right) \quad \text{II.21}$$

Ne peut être estimée qu'en précisant la relation fonctionnelle existante entre ψ_e et les coordonnées \vec{r}_i et \vec{R}_{α}

Si on néglige dans l'expression \hat{H}_e le terme se rapportant aux interactions entre électrons, \hat{H}_e ce réduit à l'Hamiltonien d'un système de particules indépendantes dont la fonction d'onde peut être représentée alors comme une combinaison des fonctions d'onde atomique dépendant de la différence $|\vec{r}_i - \vec{R}_{\alpha}|$, on pourra écrire alors :

$$\nabla_{\alpha}^n \psi_e = (-1)^n \nabla_i^n \psi_e \quad \text{II.22}$$

Et réécrire le premier terme de l'équation II.20

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha} \frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \int \psi_e^* \Delta_{\alpha} \psi_e d\tau_e &= \sum_{i,\alpha} \frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \int \psi_e^* \Delta_i \psi_e d\tau_e = -\sum_{i,\alpha} \frac{m}{M_{\alpha}} \int \psi_e^* \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right) \psi_e d\tau_e \\ &= -\sum_{i,\alpha} \frac{m}{M_{\alpha}} \langle T_i \rangle\end{aligned}\quad \text{II.23}$$

Où $\langle T_i \rangle$ est la valeur moyenne de l'énergie cinétique d'un électron. Finalement, le premier terme de l'équation II.17 s'écrit :

$$\sum_{\alpha} \frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \int \psi_e^* \Delta_{\alpha} \psi_e d\tau_e = -ZN \cdot \frac{m}{M_{\alpha}} \langle T_i \rangle \quad \text{II.24}$$

Ce terme est petit vis-à-vis de E. et peut donc être omis ; l'erreur que l'on commet alors, on est infime, de l'ordre du rapport de la masse de l'électron à celle de noyau ; dans le cas du germanium, par exemple, ce rapport est voisin de 10^{-5} .

Ceci montre que le deuxième terme de l'équation II.20 a une valeur qui représente là $\sqrt{\frac{m}{M_{\alpha}}}$ -ième de l'énergie totale du cristal. En effectuant tous ces calculs, nous sommes placés dans le cas le plus défavorable, celui où la fonction des électrons est donnée sous la forme d'une combinaison de fonctions d'onde atomiques (approximation dite de liaisons fortes).

Au cas où la fonction d'onde des électrons serait indépendante des coordonnées des noyaux (Approximation dite des électrons libres), les deux termes de correction figurant dans II.20 seraient nuls. Nous voyons donc qu'en négligeant ces termes de correction, l'erreur commise sur la valeur de l'énergie E est inférieure à $\sqrt{\frac{m}{M_{\alpha}}} E$ (pour le germanium ceci représente 0.3 % environ).

Nous pouvons donc déterminer l'énergie d'un cristal avec une bonne approximation par la solution de l'équation :

$$\hat{H}_Z \varphi_Z - E_Z \varphi_Z = E \varphi_Z \quad \text{II.25}$$

L'énergie totale d'un cristal se confond donc, à un haut degré de précision, avec la valeur propre de la partie nucléaire de l'Hamiltonien.

L'approximation de Born-Oppenheimer appliquée à un cristal décrit par l'Hamiltonien II.01 permet de déterminer l'énergie du cristal avec une précision suffisante en posant que sa fonction d'onde puisse être mise sous la forme II.11 ; ψ_e et φ_Z étant déterminés par les équations :

$$H_e \psi_e = E_e \psi_e \quad \text{II.26}$$

$$H_Z \varphi_Z = E_Z \varphi_Z = E \varphi_Z \quad \text{II.27}$$

Donc ; la fonction d'onde des noyaux φ_Z est déterminée par la valeur moyenne

des mouvements des électrons (terme E_e dans l'expression de \hat{H}_Z), tandis que ψ_e dépendent de la position instantanée des noyaux (terme U_{eZ} dans l'expression de \hat{H}_e).

En négligeant le terme de correction δE , on admet implicitement que l'action de Δ_α sur ψ se réduit à une action sur φ_Z ce qui traduit le fait que les noyaux se meuvent lentement par rapport aux électrons.

L'approximation de Born-Oppenheimer est qualifiée d'adiabatique, car elle consiste à séparer le problème électronique de celui des vibrations du réseau. On pourra toujours introduire ultérieurement T_n et V_{n-n} pour aborder le problème des vibrations du réseau (phonons) mais en supposant qu'il n'y a pas d'échange d'énergie entre le système électronique d'une part et les modes de vibration d'autre part.

II.2. Approximation de Hartree-Fock:

Les simplifications résultant de l'approximation de Born-Oppenheimer montrent que la fonction d'onde des électrons doit satisfaire aux équations :

$$\hat{H}_e \psi_e = E_e \psi_e \quad \text{II.28}$$

Ou encore :

$$\left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} + \sum_{i,\alpha} U_{i\alpha} \right] \psi_e = E_e \psi_e. \quad \text{II.29}$$

Cette équation ne peut, elle no plus, être résolue, à moins de la réduire à l'équation concernant une seule particule.

Si on suppose que les électrons n'interagissent pas entre eux ($U_{ij} = 0$), l'équation II.29 se laisse décomposer en un système d'équations.

Il faut donc trouver un moyen qui permettrait de tenir compte des interactions entre les électrons tout en substituant à un système d'électrons en interaction un système d'électrons indépendants.

Ce résultat peut être atteint en faisant appel à la notion du champ self-consistent ; considérons un électron i quelconque, cet électron se trouve soumis à l'action du champ de tous les noyaux et de tous les autres électrons. Supposons qu'à l'aide d'un champ appliqué nous réussissons à créer à tout instant à l'emplacement de l'électron i un champ identique à celui produit par tous les autres électrons.

Désignons par Ω_i l'énergie potentielle de l'électron i dans ce champ, il est évident que cette énergie ne dépend que des coordonnées de l'électron i considéré:

$$\Omega_i = \Omega_i(\vec{r}_i).$$

En admettant que nous soyons en mesure de créer un champ pareil pour chacun des électrons, l'énergie d'interaction de toutes les paires d'électrons du cristal pourrait être mise sous la forme d'une somme des termes $\Omega_i(\vec{r}_i)$:

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|} \longrightarrow \sum_i \Omega_i(\vec{r}_i) \quad \text{II.30}$$

L'énergie potentielle $\Omega_i(\vec{r}_i)$ d'un électron i dépend non seulement du mouvement de tous les autres électrons, mais indirectement de son propre mouvement, puisque celui-ci influe sur les mouvements des autres électrons.

On peut en déduire que le champ $\Omega_i(\vec{r}_i)$ non seulement détermine le mouvement de l'électron i , mais en est à son tour fonction, ce qui conduit à l'appeler champ auto cohérent (self consistent).

En principe on peut trouver ce champ par approximation successive, admettons que la valeur de ce champ soit déjà déterminée ; nous pourrions alors mettre l'Hamiltonien \hat{H}_e sous la forme :

$$\begin{aligned} \hat{H}_e &= \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} + \sum_{i,\alpha} U_{i\alpha} = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i \right) + \sum_i \Omega_i(\vec{r}_i) \\ &+ \sum_i \left(\sum_{\alpha} U_{i\alpha} \right) = \sum_i \hat{H}_i \end{aligned} \quad \text{II.31}$$

Où l'Hamiltonien correspondant à l'électron i vaut :

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i + \Omega_i(\vec{r}_i) + U_i(\vec{r}_i) \quad \text{II.32}$$

$\Omega_i(\vec{r}_i)$ Représente l'énergie potentielle de l'électron i soumis à l'action du champ produit par tous les autres électrons, et $U_i(\vec{r}_i)$ son énergie potentielle dans le champ produit par tous les noyaux du cristal [95].

Puisque l'Hamiltonien ne renferme plus de termes représentant les énergies d'interaction des électrons, la fonction d'onde du système électronique a la forme d'un produit de fonctions d'onde de chacun des électrons, et l'énergie de ce système est, par conséquent, égale à la somme des énergies de tous les électrons :

$$\psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_1, \dots) = \prod_i \psi_i(\vec{r}_i) \quad \text{II.33}$$

$$E_e = \sum E_i \quad \text{II.34}$$

Avec :

$$\hat{H}_i \psi_i = E \psi_i \quad \text{II.35}$$

Ceci montre que la mise en œuvre du champ auto-cohérente (self-consistent) permet de réduire le problème pour les électrons multiples à celui pour l'électron unique.

Pour trouver la forme sous laquelle se présente, $\Omega_i(\vec{r}_i)$ écrivons l'équation de Schrödinger de la partie électronique de l' Hamiltonien, du cristal sous les deux formes équivalentes :

$$\hat{H}_e \psi_e = \left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} + \sum_i U_i(\vec{r}_i) \right] \Psi_e = E_e \psi_e \quad \text{II.36}$$

$$\hat{H}_e \psi_e = \left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i \right) + \sum_i \Omega_i(\vec{r}_i) + \sum_i U_i(\vec{r}_i) \right] \Psi_e = E_e \psi_e \quad \text{II.37}$$

Donc :

$$\Omega_i(\vec{r}_i) = \frac{1}{2} \sum_{j(j \neq i)} U_{ij} \quad \text{II.38}$$

Multiplions les équations II.36 et II.37 par ψ_e^* et intégrons par rapport aux coordonnées de tous les électrons :

$$\sum_i \int \psi_e^* \Omega_i(\vec{r}_i) \psi_e d\tau_e = \sum_i \psi_e^* \frac{1}{2} \sum_{j(j \neq i)} U_{ij} \psi_e d\tau_e \quad \text{II.39}$$

L'introduction de la quantité $\Omega_i(\vec{r}_i)$ réduit le problème concernant les électrons à celui d'un Système de particules indépendantes, ce qui nous permet de représenter ψ_e sous la forme d'un produit des fonctions d'onde de toutes les particules prises séparément (équation II.33)

Tenant compte de ce $d\tau_e = d\tau_1 d\tau_2 \dots$, que nous pouvons transcrire l'équation II.2.40 de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \sum_i \int \psi_1^*(\vec{r}_1) \dots \Omega_i(\vec{r}_i) \psi_1(\vec{r}_1) \dots d\tau_1 d\tau_2 \dots &= \sum_i \int \psi_i^*(\vec{r}_i) \Omega_i(\vec{r}_i) \psi_i^*(\vec{r}_i) d\tau_i \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j(j \neq i)} \int \psi_1^*(\vec{r}_1) \dots U_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \psi_1(\vec{r}_1) \dots d\tau_1 d\tau_2 \dots \\ &= \sum_i \int \psi_i^*(\vec{r}_i) \left[\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int \psi_j^*(\vec{r}_j) U_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \psi_j(\vec{r}_j) d\tau_j \right] \psi_i(\vec{r}_i) d\tau_i \end{aligned} \quad \text{II.40}$$

En égalant les deuxième et quatrième termes de cette série d'expressions, nous

trouvons :

$$\Omega_i(\vec{r}_i) = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \int |\psi_j(\vec{r}_j)|^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} d\tau_j \quad \text{II.41}$$

Le sens physique de cette dernière équation est le suivant : $e |\psi_j(\vec{r}_j)|^2$ représente la densité de charge du nuage électronique de l'électron j situé en un point de coordonnées \vec{r}_j le produit $e |\psi_j(\vec{r}_j)|^2 d\tau_j$ est l'élément de la charge électrique qui détermine le potentiel au point \vec{r}_i

En intégrant par rapport à toutes les coordonnées de l'électron j, nous obtenons l'énergie d'interaction de l'électron i avec l'électron j " diffus dans l'espace".

L'équation II.37 dévie :

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi(\vec{r}) + \left[\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \int |\Psi_j(\vec{r}_j)|^2 \frac{e^2 d\tau_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right] \Psi_i(\vec{r}_i) + U_i(\vec{r}_i, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots) \Psi_i(\vec{r}_i) \\ & = E_i \Psi_i(\vec{r}_i) \end{aligned} \quad \text{II.42}$$

Pour pouvoir calculer $\Omega_i(\vec{r}_i)$ nous devons connaître les valeurs de tous les, $\Psi_j(\vec{r}_j)$ ce qui -exige que le connaisse les valeurs de tous les $\Omega_i(\vec{r}_i)$!

Cette équation est l'équation de Hartree [03], c'est une équation intégral-différentielle dont la solution ne peut être trouvée que par approximations successives.

En adoptant pour approximation d'ordre zéro certaines fonctions $\Psi_j^{(0)}(\vec{r}_j)$, on les utilise pour calculer les $\Omega_i^{(0)}(\vec{r}_i)$. en reportant la valeur $\Omega_i^{(0)}(\vec{r}_i)$ ainsi trouvée dans l'équation II.42 on déterminera de nouvelles fonctions $\Psi_j^{(1)}(\vec{r}_j)$ à l'aide desquelles on calculera les $\Omega_i^{(1)}(\vec{r}_i)$ et ainsi de suite. Ce processus devra être poursuivi jusqu'à ce que la (n + 1) approximation ne se confonde avec la (n) approximation avec un degré de précision fixe à l'avance. Le principal défaut de l'équation de Hartree est qu'on ne tient pas compte du principe de Pauli, si on fait intervenir le principe de Pauli, on aboutit à l'équation de Hartree-Fock. Selon le principe de Pauli, la fonction d'onde des électrons doit être antisymétrique par rapport à toute permutation de deux électrons, compte tenu de leurs coordonnées et des projections de leurs spins. Or le produit $\prod_i \Psi_i(\vec{r}_i)$ ne peut satisfaire à cette condition.

Une combinaison convenable des fonctions d'onde d'électrons pris à part est

décrite par le déterminant de Slater :

$$\Psi_e(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \dots) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{bmatrix} \Psi_1(\vec{q}_1) & \Psi_1(\vec{q}_1) & \dots \\ \Psi_2(\vec{q}_2) & \Psi_2(\vec{q}_2) & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad \text{II.43}$$

où N est le nombre d'électrons et \vec{q}_i être présente une combinaison de quatre variables x_i, y_i, z_i, S_{zi} la fonction d'onde doit satisfaire aux conditions :

$$\Psi_e(\dots, \vec{q}_l, \vec{q}_k, \dots) = -\Psi_e(\dots, \vec{q}_k, \vec{q}_l, \dots) \quad \text{II.44}$$

$$\int \Psi_e^* \Psi_e dq_e = 1 \quad \text{II.45}$$

Utilisant pour exprimer ψ_e le déterminant de Slater, nous trouvons l'expression définissant l'énergie E_i :

$$E_i = \int \Psi_e^*(\vec{q}_1, \dots) \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i + U_i(r_i, \dots, R_1, R_2, \dots) \right] \Psi_e(\vec{q}_1, \dots) dq_e + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \Psi_e^*(\vec{q}_1, \dots) \frac{e^2}{r_{ij}} \Psi_e(\vec{q}_1, \dots) dq_e \quad \text{II.46}$$

dq_e Représente un élément de volume dans l'espace de configuration du système d'électrons comprenant la variable spin électronique ; une intégration par rapport à dq_e représente donc une intégration par rapport aux coordonnées et une sommation par rapport aux spins variables de tous les électrons.

Notons que la première intégrale de l'équation II.45 est identique au terme correspondant de l'équation de Hartree, le deuxième terme contient des intégrales d'échange n'y apparaissant pas. Ceci provient de ce que lors d'une intégration par rapport à dq_e nous devons maintenant retenir tous les termes comportant les coordonnées des électrons i et j, qui peuvent se trouver dans un état quelconque $\Psi_k, \Psi_l, \Psi'_k, \Psi'_l$:

$$\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \Psi_e^*(\vec{q}_1, \dots) \frac{e^2}{r_{ij}} \Psi_e(\vec{q}_1, \dots) dq_e = \frac{1}{8\pi\epsilon_0 N!} \sum_i \sum_{k,l} (-1)^{k+l} \int \Psi_k^*(\vec{q}_i) \Psi_l^*(\vec{q}_j) \times \frac{e^2}{r_{ij}} \Psi_k(\vec{q}_j) \Psi_l(\vec{q}_i) dq_i dq_j \quad \text{II.47}$$

Lorsque $k = l$, nous retrouvons l'énergie d'interaction électrostatique moyenne, donc la valeur usuelle de cette énergie, et lorsque $k \neq l$, nous obtenons l'énergie

d'échange.

On doit cependant remarquer que la méthode de Hartree-Fock ne permet pratiquement pas de résoudre l'équation de Schrödinger pour un cristal.

III. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT):

L'approximation II.02.02 révèle encore difficile à résoudre, l'autre approximation (celle de Hartree-Fock : (HF) [97].

On chimie ainsi d'autre discipline HF montre des résultats pour le moins attractifs, mais moins pour le domaine du physique des solides pour cette raison une méthode très forte se présente (La DFT) ; qui a été formellement établie par deux théorèmes vers les années 1964 [98].

III.1 .Théorèmes de Hohenberg et Kohen :

Théorème 1 : Il y a une correspondance un à un entre l'état fondamental de la densité $[\rho(\vec{r})]$ d'un système multi électrons :(atome, molécule, solide) et le potentiel externe V_{ext} par conséquent la valeur attendue d'observable \hat{O} pour l'état fondamental est la valeur exacte de l'état fondamental de la densité :

$$\langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle = D[\rho] \quad \text{II.48}$$

Théorème 2 : Soit \hat{O} l'Hamiltonien \hat{H} ; le fonctionnel de l'énergie totale de l'état fondamental $H[\rho] = E_{V_{ext}}[\rho]$ est de la forme :

$$E_{V_{ext}}[\rho] = \langle \Psi | \hat{T} + \hat{V} | \Psi \rangle + \langle \Psi | V_{ext} | \Psi \rangle \quad \text{II.49}$$

$$E_{V_{ext}}[\rho] = F_{HK}[\rho] + \int \rho(\vec{r}) V_{ext}(\vec{r}) d\vec{r}$$

Ou $F_{HK}[\rho]$ est un fonctionnel universel pour n'importe quel système multi -électrons $E_{V_{ext}}[\rho]$ atteindre sa valeur (égal à l'énergie totale de l'état fondamental) pour la densité de l'état fondamental correspondant à V_{ext} .

III.2. L'équation de Kohn-sham :

Publier en 1965 [99] : a permis au DFT de devenir un outil pratique, pour déterminer la densité de l'état fondamental ; l'énergie de corrélation définie comme une partie de l'énergie totale $E_c[\rho]$ et $E_{HF}[\rho]$.

$$E_c[\rho] = T + V \quad \text{II.50}$$

$$E_{HF}[\rho] = T_O + V_H + V_X \quad \text{II.51}$$

T : fonctionnel d'énergie cinétique (exacte)

V : fonctionnel des potentiels électrons (exacte)

T₀ : fonctionne d'énergie cinétique du gaz d'électrons sans interaction

V_H : pour la contribution de Hartree

V_X : pour la contribution d'échange

De (II.50) et (II.51) on a :

$$V_c = T - T_0 \quad \text{II.52}$$

C'est la contribution de corrélation.

La contribution d'échange à toute l'énergie est définie comme, la pièce qui est présente dans la solution de Hartree-Fock, mais absente dans la solution de Hartree. évidemment, avec le fonctionnel Hartree, donnée par :

$$E_H = T_0 + V_H \quad \text{II.53}$$

$$V_x = V - V_H \quad \text{II.54}$$

On peut maintenant réécrire le fonctionnel de Hohenberg – Kohen [97,98] :

$$\begin{aligned} F_{HK} &= T + V + T_0 - T_0 \\ &= T_0 + V + V_c \\ &= T_0 + V_H + V_{XC} \end{aligned} \quad \text{II.55}$$

Avec V_{XC} est le fonctionnel de l'énergie d'échange, corrélation ; on suppose que V_{XC} est connue donc : le fonctionnel d'énergie peut être écrire explicitement comme suite :

$$E_{V_{ext}}[\rho] = T_0[\rho] + V_H[\rho] + V_{XC}[\rho] + V_{ext}[\rho] \quad \text{II.56}$$

C'est le fonctionnel d'énergie du gaz d'électrons sans interactions sous le potentiel externe due aux noyaux et à l'effet d'échange-corrélation

L'Hamiltonien de Kohen-scham est :

$$\hat{H} = \hat{T}_O + \hat{V}_H + \hat{V}_{Xc} + \hat{V}_{ext} \quad \text{II.57}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(r')}{|r - r'|} dr' + V_{ext} + V_{XC} \quad \text{II.58}$$

Où le potentiel d'échange-corrélation est donné par le dérivé fonctionnel.

$$\hat{V}_{XC} = \frac{\delta V_{XC}}{\delta \rho} \quad \text{II.59}$$

La densité $\rho(\vec{r})$ exacte de l'état fondamental de système de N électrons est [04 ,06] :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \varphi_i(\vec{r})^* \varphi_i(\vec{r}) \quad \text{II.60}$$

Où les fonctions d'onde de la particule isolée $\varphi_i(\vec{r})$ ont les solutions du N basse-énergie l'équation de Kohn-Sham est :

$$\hat{H}_{KS} \varphi_i = \varepsilon_i \varphi_i \quad \text{II.61}$$

- À noter que φ_i décrit des quasi - particules mathématiques sans un sens physique direct, seulement la densité d'état global de ces quasi -particules est égal à la densité d'électrons ; de même ε_i n'est pas l'énergie d'électrons.

- Dans cette équation : V_H et V_{XC} , dépend de $\rho(\vec{r})$ et $\rho(\vec{r})$ dépend du φ_i recharger ; donc c'est un problème auto cohérente (self –consistent).

L'opérateur \hat{V}_H de Hartree et l'opérateur d'échanger-corrélation V_{XC} dépendent de la densité $\rho(\vec{r})$, qui dépend alternativement du φ_i déterminent l'équation originale (V_H et V_{XC} dans \hat{H}_{KS}), et l'équation ne peuvent pas être notées et résolues avant que sa solution soit connue un procédé itératif est nécessaire pour s' échapper de ce paradoxe . Certains ρ_0 sont devinés, et un \hat{H}_{KS1} Hamiltonien est construit avec lui. Le problème de la valeur propre est résolu, et a comme conséquence un ensemble φ_1 duquel un ρ_1 de densité peut être dérivé. Pour la plupart ρ_0 différera du ρ_1 maintenant le ρ_1 est employé pour construire \hat{H}_{KS2} , qui rapportera un ρ_2 . (voir Figure II.01), etc.

Le procédé peut être installé de telle manière que cette série converge à un ρ_f de densité qui produit d'un \hat{H}_{KSf} qui rapporte. ρ_f Comme solution encore : cette densité de final à l'est alors conformé avec l' Hamiltonien.

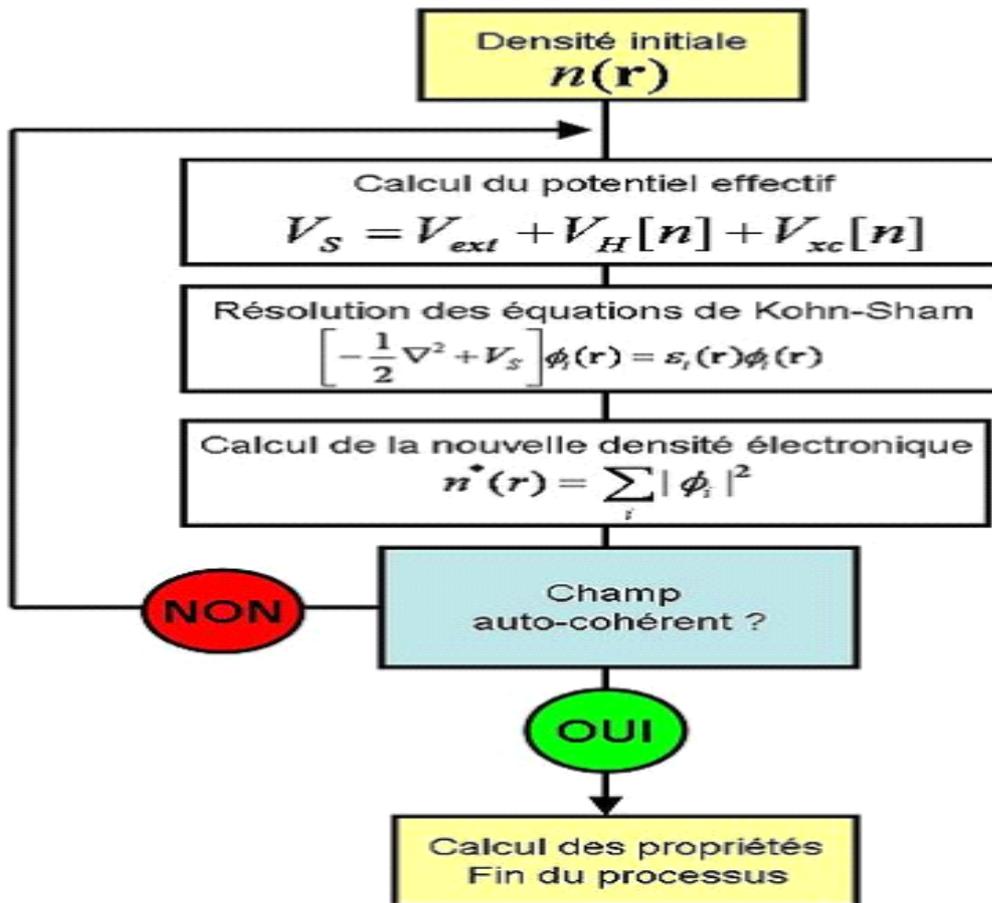


Figure. II.01: Schéma décrivant le processus itératif pour la résolution des équations de Kohn- Sham.

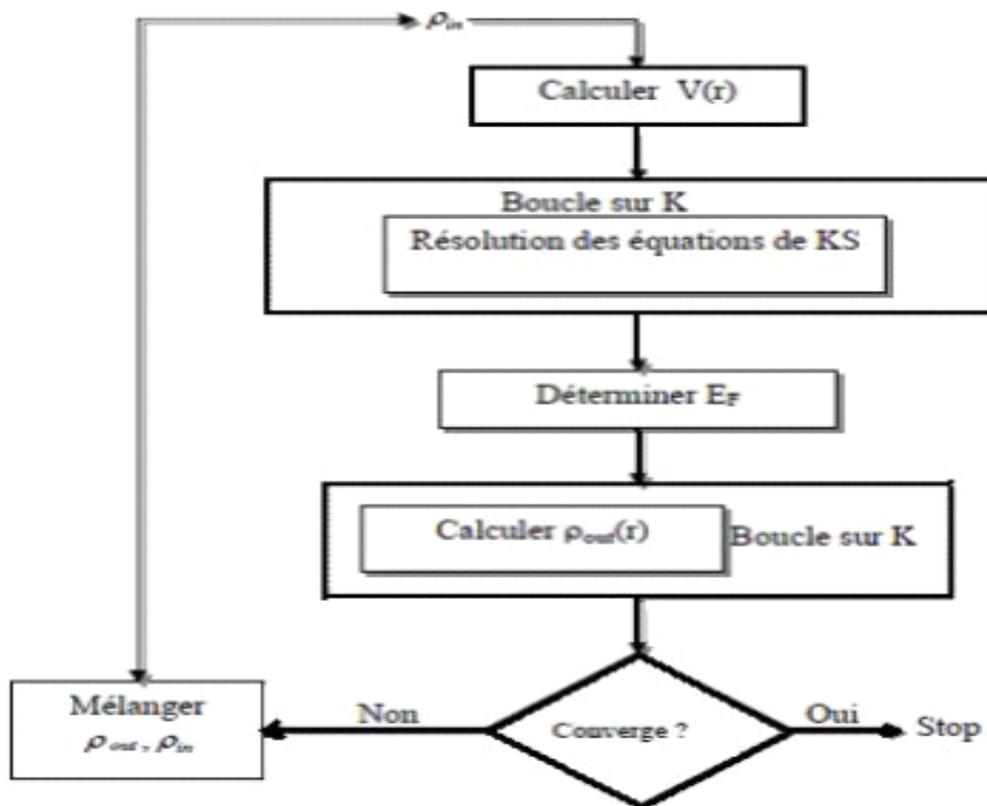


Figure II.02: Organigramme de la DFT

IV. les fonctionnelles de la DFT :

La première fonctionnelle propre DFT ayant permis la résolution du problème est l'approximation locale (LSDA : local spin density approximation). Elle est en fait basé sur des idées de Félix Bloch [14] considérant une statistique de Fermi d'un gaz d'électrons uniforme pour exprimer l'échange. Ces développements ont été ensuite étendus à la prise en compte de la corrélation.

IV.01. L'approche locale de la densité :

Dans une densité électronique variant lentement, Kohn et Sham ont proposé un développement de l'énergie d'échange-corrélation :

$$E_{xc}[\rho(\vec{r})] = \int \rho \varepsilon_{xc}(\vec{r}) d^3\vec{r} + \int \frac{1}{2} \frac{|\nabla \rho|^2}{\rho} \varepsilon_{xc}(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad \text{II.62}$$

Où $\varepsilon_{xc}(\vec{r})$ est la contribution à l'énergie d'échange-corrélation par électron dans un gaz homogène. Notons qu'est fonction de \vec{r} d'où la localité (contrairement à l'échange non local dans HF). La LDA consiste à considérer $E_{xc}[\rho(\vec{r})]$ comme une fonctionnelle locale de la densité électronique $\rho(\vec{r})$, c'est-à-dire que dépend de la densité en \vec{r} :

$$\varepsilon_{xc}(\vec{r}) = \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})] \quad \text{II.63}$$

La LDA est souvent une approximation efficace, même quand la densité varie de manière non négligeable. Cependant, elle a certains désavantages, comme une sous-estimation systématique de l'énergie de cohésion des solides et des paramètres de maille [101,102]. L'erreur sur les paramètres structuraux est souvent faible (de l'ordre de 1 à 2%).

IV.02. Introduction du spin dans l'approche locale de la densité :

La généralisation de la LDA au cas où une polarisation des spins serait prise en compte conduit à la LSDA où S désigne le spin électronique. L'introduction de ce dernier consiste à considérer deux populations $\rho(\uparrow)$ et $\rho(\downarrow)$ dans la matrice de densité et à formuler le potentiel dépendant du spin (α) pour l'échange et la corrélation :

($V_{xc}^\alpha(\vec{r})$ où α désigne l'orientation \uparrow ou \downarrow). Le système est décrit par deux fonctions dans un espace à 3 dimensions. Le terme ε_{xc} est maintenant fonction des deux spins :

$$\varepsilon_{xc}[\rho^\uparrow(\vec{r}), \rho^\downarrow(\vec{r})]$$

Il existe pour cette énergie différents schémas de para-métrisation comme on le verra plus loin. Ainsi définit-on l'approximation de la LSDA à l'énergie d'échange-corrélation de la manière suivante :

$$E_{xc}^{LSDA}[\rho^\uparrow, \rho^\downarrow] = \int d^3r \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}^{\text{hom}}[\rho^\uparrow, \rho^\downarrow] \quad \text{II.64}$$

ici $\varepsilon_{xc}^{\text{hom}}(\rho^\uparrow, \rho^\downarrow)$ est l'énergie d'échange-corrélation par particule d'un gaz d'électrons homogène. L'équation d'onde est réécrite pour les deux spins :

$$[-\nabla^2 + V_{\text{eff}}^\uparrow(\vec{r}) - \varepsilon_i^\uparrow] \psi_i(\vec{r}) = 0 \quad \text{II.65}$$

$$[-\nabla^2 + V_{\text{eff}}^\downarrow(\vec{r}) - \varepsilon_i^\downarrow] \psi_i(\vec{r}) = 0 \quad \text{II.66}$$

Dans les équations II.65 et II.66 le potentiel effectif ne montre pas une dépendance en spin pour ses composantes de potentiel extérieur et d'interaction électrostatique, mais uniquement pour la contribution échange-corrélation. On écrit alors $V_{\text{eff}}^{(\uparrow, \downarrow)}(\vec{r})$:

$$V_{\text{eff}}^\uparrow(\vec{r}) = V_{\text{ext}}^\uparrow(\vec{r}) + \frac{\delta E_{xc}(\uparrow, \downarrow)}{\delta \rho^\uparrow(\vec{r})} \quad \text{II.67}$$

$$V_{\text{eff}}^\downarrow(\vec{r}) = V_{\text{ext}}^\downarrow(\vec{r}) + \frac{\delta E_{xc}(\uparrow, \downarrow)}{\delta \rho^\downarrow(\vec{r})} \quad \text{II.68}$$

Enfin, le nombre d'électrons de valence Z_g et le moment magnétique m sont donnés par :

$$Z_g = n(\uparrow) + n(\downarrow) \quad \text{II.69}$$

$$m = n(\uparrow) - n(\downarrow) \quad \text{II.70}$$

Importance de LSDA :

Elles sont importantes pour la description des systèmes dans un champ magnétique externe; on ajoutant le terme $\sum_i B(r_i) \sigma_i$ à l'hamiltonien. Ceci permet par exemple d'accéder la susceptibilité magnétique. Même en l'absence de champ magnétique, la description du système dans la LSDA est plus complète, car les électrons de spins différents ont un degré de liberté de plus dans la distribution spatiale comme dans les méthodes type unrestricted Hartree-Fock, si une différence $n(\uparrow) - n(\downarrow)$ non nulle en résulte qu'on peut décrire les phénomènes liés l'apparition spontanée de moment magnétique comme le moment spin-only, le champ hyperfin du au terme contact de Fermi a noter que malgré le manque de preuve théorique, des systèmes magnétiques sont généralement traités avec cette théorie fonctionnelle de densité de spin (SDFT) (le premier théorème est non avéré vrais [103,104]).

La LSDA est une approximation ab-initio. Elle est exacte pour les systèmes à distribution électronique homogène; mais représente une bonne approximation pour ceux où la variation de la densité électronique est suffisamment lente (systèmes

électroniques itinérants). Néanmoins, il a été montré sur plusieurs exemples d'application depuis sa mise en place dans différentes méthodes de calculs que la LSDA donne des résultats suffisamment fiables pour des systèmes où la densité électronique ne varie pas lentement d'où son énorme succès.

Par ailleurs, la LSDA surévalue les énergies de liaison à plus de 20% [105] et donne des gaps trop faibles pour les semi-conducteurs et les composés isolants, mais surtout elle viole quelque conditions de physique quantique dont la plus importante est celle appelée self-interaction (SIC). La LDA représente une approximation grossière de la DFT; elle conduit parfois à une description médiocre des propriétés de certains systèmes, surtout pour les actinides et les lanthanides.

Heureusement, le but poursuivi est la modélisation des résultats obtenus des expériences. Pour cela, la théorie reste un outil tant qualitatif (propriétés de liaison chimiques) que quantitatif (moment magnétique, champs hyperfins, ordres magnétiques, etc.) assez performant, dont l'amélioration des faiblesses reste un champ de recherche ouvert.

IV.3. Améliorations sur l'approximation locale :

IV.3.1. L'introduction du gradient : approximation généralisée de gradient AGG:

Une façon d'améliorer la LSDA est d'introduire des termes en gradient dans l'expression de l'énergie d'échange-corrélation ($E_{exact} = E_{Hartree} + E_{xc}$); ceci introduisant une correction non locale. Ce type d'expansion donnant ce que l'on appelle la GEA (gradient expansion approximation) ne permet pas d'apporter d'amélioration, au contraire : les résultats sont encore moins bons. Une des raisons évoquées est que le trou d'échange-corrélation associé à cette expansion ne correspond pas à une situation physique quelconque.

En revanche la GGA (generalized gradient approximation) [106] qui introduit une combinaison entre les termes locaux et en gradient dans l'équation précédent, donne de meilleurs résultats pour les gaps énergétiques et les éclatements de bande dans les oxydes ou les fluorures des métaux de transition. Par ailleurs la description correcte de l'état fondamental magnétique du fer. L'équation suivante permet d'introduire une combinaison entre les termes locaux et des termes dépendant du gradient. Dans cette approche, l'énergie d'échange et de corrélation est donnée par [107,108] :

$$V_{xc}^{GGA} = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho(r), |\nabla \rho(r)|) d\vec{r} \quad \text{II.71}$$

GGA s'exécute habituellement mieux que LDA, mais dans le cas de LDA un $\varepsilon_{xc}(\rho(r))$

unique est disponible. Pour GGA cependant, parce que le gradient de densité peut être mis en application dans diverses manières, plusieurs versions existent.

D'ailleurs, beaucoup de versions de GGA contiennent les paramètres libres qui doivent être adaptés aux données expérimentales. Ces versions de GGA ne sont plus *ab initio*.

IV.3.2. Échange exact et les fonctionnels hybrides pour les électrons corrélés

Il est également possible d'aller au-delà de LDA standard (GGA) et inclure sur place l'échange exact (Hartree-Fock), qui est très utile pour les systèmes fortement corrélés ; par les fonctions hybrides.

L'échange exact dans les méthodes hybrides est appliqué seulement à l'intérieur des sphères atomiques, donc on lui recommande de les employer seulement pour les électrons localisés (voir le Tran et al 2006 pour des détails [109] ; ils n'amélioreront pas les gaps en semi-conducteurs. Des exemples pour des fonctions (implémentées dans le code WIEN2k) :

LDA-Hartree-Fock :

$$E_{xc}^{LDA-HF}[\rho] = E_{xc}^{LDA}[\rho] + E_x^{HF}[\Psi_{corr}] - E_x^{LDA}[\rho_{corr}] \quad \text{II.72}$$

LDA-Fock :

$$E_{xc}^{LDA-Fock-\alpha}[\rho] = E_{xc}^{LDA}[\rho] + \alpha(E_x^{HF}[\Psi_{corr}] - E_x^{LDA}[\rho_{corr}]) \quad \text{II.73}$$

PBE-Fock:

$$E_{xc}^{PBE-Fock-\alpha}[\rho] = E_{xc}^{PBE}[\rho] + \alpha(E_x^{HF}[\Psi_{corr}] - E_x^{PBE}[\rho_{corr}]) \quad \text{II.74}$$

PBEsol-Fock:

$$E_{xc}^{PBEsol-Fock-\alpha}[\rho] = E_{xc}^{PBEsol}[\rho] + \alpha(E_x^{HF}[\Psi_{corr}] - E_x^{PBEsol}[\rho_{corr}]) \quad \text{II.75}$$

WC-Fock :

$$E_{xc}^{WC-Fock-\alpha}[\rho] = E_{xc}^{WC}[\rho] + \alpha(E_x^{HF}[\Psi_{corr}] - E_x^{WC}[\rho_{corr}]) \quad \text{II.76}$$

TPSS-H-Fock :

$$E_{xc}^{TPSS-H-Fock-\alpha}[\rho] = E_{xc}^{TPSS}[\rho] + \alpha(E_x^{HF}[\Psi_{corr}] - E_x^{TPSS}[\rho_{corr}]) \quad \text{II.77}$$

B3PW91 : ($\alpha = 0,2$)

$$\begin{aligned} & E_{xc}^{TPSS-H-Fock-\alpha}[\rho] \\ &= E_{xc}^{TPSS}[\rho] + 0.2(E_x^{HF}[\Psi_{corr}] - E_x^{LDA}[\rho_{corr}]) \\ &+ 0.72(E_x^{B88}[\Psi_{corr}] - E_x^{LDA}[\rho_{corr}]) \\ &+ 0.81(E_x^{PW91}[\Psi_{corr}] - E_x^{LDA}[\rho_{corr}]) \end{aligned} \quad \text{II.78}$$

À noter que le paramètre α est la fraction d'hybridation introduite dans le fichier

case.ineece.

IV.3.3. Couplage spin orbite :

Jusqu'ici une approche non relativiste a été employée. Quand la vitesse d'électron est du même ordre de la vitesse de la lumière, cependant, des corrections relativistes sont nécessaires. Bien que les interactions dipolaires puissent contribuer, la contribution la plus importante vient de l'interaction entre le spin et les moments orbitaux \vec{S} et \vec{L} . Et le moment magnétique total est la somme de ces deux moments selon l'équation (I-01).

Dans une description non relativiste, usine l'équation de Schrödinger, le couplage spin-orbite n'est pas tenu compte. Mais les interactions apparaissent dans la description entièrement relativiste du système, donnée par l'équation de Dirac qui peut être trouvée en plusieurs manuels [110]. En général cette description exige une fonction d'onde relativiste à quatre composés, mais pour les atomes suffisamment légers (qui correspond à la limite à énergie réduite) la fonction d'onde peut presque totalement être décrite avec deux composants. Ceci tient compte d'une approximation de l'équation de Dirac :

$$E\psi = H^{sr}\psi + \frac{1}{2}\xi(\vec{\sigma}\cdot\vec{L})\psi \quad \text{II .79}$$

Le H^{sr} est l'hamiltonien relativiste scalaire qui contient l'équation non relativiste de Schrödinger, la correction de la masse relativiste et le décalage de Darwin.

Le dernier terme dans l'équation (II .79) décrit le couplage spin-orbite pour un Potentiel sphériquement symétrique avec \vec{L} Le moment angulaire orbital et ξ le paramètre spin-orbite. Le couplage spin-orbite est particulièrement important pour des électrons de noyau des atomes lourds. Un calcul relativiste est nécessaire donc pour ces électrons de noyau. Pour des électrons de valence, le couplage spin-orbite est moins crucial et il est souvent suffisant pour commencer par un calcul relativiste scalaire. Le couplage spin-orbite est ajouté après dans une deuxième étape variationnelle [111].

V. La méthode APW :

Un premier, historiquement important, l'exemple d'une base efficace et impartiale est la base augmentée d'onde plane (APW), proposée par Slater en 1937 [104].

Ceci l'ensemble de bases n'est plus utile aucun pratique, mais vaut de mentionner parce que c'est le prédécesseur des autres ensembles de bases à discuter. La

première vue, l'on a pourrait penser à employer un ensemble de bases d'onde plane, puisque, selon le théorème de Bloch, des fonctions propres d'un Hamiltonien périodique peuvent être développées dans une base d'onde plane.

D'ailleurs, nous pouvons écrire Ψ avec les nombres quantiques du théorème de Bloch: $\psi_m = \psi_{\vec{k}}^n$

Cependant ; trop de fonctions de base d'onde plane sont nécessaires pour décrire le comportement rapidement d'oscillation des fonctions propres près du noyau, qui lui fait une méthode très longue et dans la pratique inutilisable. Pour cette raison une autre approche est nécessaire pour la région autour des noyaux atomiques.

La méthode d' APW est basée sur la connaissance que le potentiel et les fonctions d' onde fortement variables et presque sphériques près d'un noyau atomique sont très semblables à ceux d'un atome isoler, dans la région entre les atomes le potentiel est presque constant et par conséquent les fonctions d' onde sont mieux décrites par les ondes planes qui sont la solution de l' équation de Schrödinger pour un constant potentiel. Basé sur cette observation, l'espace est divisé dans deux régions où différents développements de base sont employés.

Des sphères non recouvertes (MT) ; de muffin-tin ($S_{MT,\alpha}$) concentré sur les noyaux atomiques du rayon R_{MT} ; sont construits. La région entre les sphères s'appelle la région interstitielle (I). Nous pouvons maintenant définir une fonction de base d' APW comme suit :

$$\varphi_{\vec{k}}^{\vec{k}}(r, E) = \begin{cases} V^{-\frac{1}{2}} e^{i(\vec{k}+\vec{K})\vec{r}}, \vec{r} \in I \\ \sum_{l,m} A_{lm}^{\alpha,\vec{k}+\vec{K}} u_l^{\alpha}(r_i, E) Y_m^l(\hat{r}_l), \vec{r} \in S_{MT,\alpha} \end{cases} \quad \text{II.80}$$

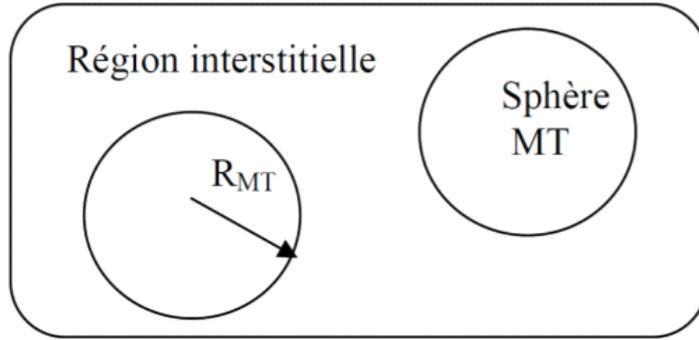


Figure. II.03.: potentiel Muffin-Tin .

Avec le \vec{k} un vecteur dans la première zone de Brillouin, \vec{K} un vecteur du réseau réciproque et V est le volume de la cellule, Y_m^l les harmoniques sphériques, $\vec{r}_i = \vec{r} - \vec{r}_\alpha$ ou \vec{r}_α est la position atomique dans la cellule élémentaire de l'atome.

$A_{lm}^{\alpha, \vec{k} + \vec{K}}$ Sont les coefficients du développement et $u_l^\alpha(r_i, E)$ est une solution de l'équation radiale de Schrödinger avec le potentiel cristallin moyen sphérique $V(r)$ centré sur l'atome, à l'énergie donnée E :

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) + E \right] r u_l^\alpha(r, E) = 0 \quad \text{II.81}$$

Continuité imposante sur $u_l^\alpha(r_i, E)$ et l'onde plane correspondante sur la sphère de muffin-tin détermine les coefficients $A_{lm}^{\alpha, \vec{k} + \vec{K}}$

Malheureusement, la méthode d'APW a un inconvénient important ; la dépendance l'énergie $u_l^\alpha(r_i, E)$, afin de décrire une fonction propre ψ_m du l'équation de Kohn-Sham correctement, la valeur propre correspondante ε_m doit être employé pour E .

Puisque ε_m n'est pas connu ; une conjecture doit être faite pour la valeur d' E , pour cette valeur la base d' APW peut être construite et l'équation de Kohin-Sham peut être résolue. E devrait être une racine de cette équation, sinon, une nouvelle valeur pour E doit être essayée jusqu'à ce que la valeur choisie s'avère être une valeur propre de l'équation. Ce procédé doit être répété pour chaque valeur propre et est donc très long. Une solution générale à ce problème consiste en un certain genre de perfectionnement de la base dans les sphères de muffin-tin a fin d'enlever la dépendance d'énergie.

V.1. La méthode de LAPW :

Comme peut-être prévus, les premiers calculs de LAPW [112] étaient dans l'approximation de la MT et ont employé un potentiel modèle. Cependant, sous peu suivant ceci, les codes auto cohérents pour les feuilles et les massifs [113-116] ont été développés, et le potentiel général (aucune MT ou toute autre approximation à la densité de charge ou le potentiel, également appelé les calculs du potentiel total) a commencé à apparaître [116-122]. Il avait lieu pendant ce temps que la puissance et l'exactitude de la méthode ont été démontrées, en grande partie par une série de calculs des structures électroniques de surface et d'adsorbant. Celles-ci et d'autres démonstrations ont établi la méthode de LAPW comme méthode de choix pour des calculs précis de structure électronique pour des matériaux contenant des atomes en métal de transition.

La méthode standard:

Dans la méthode d'APW on a dû construire les fonctions $u_l^\alpha(r_i, E)$ par l'utilisation la valeur propre inconnue $\varepsilon_{\vec{k}}^n$ de l'état propre recherché $\psi_{\vec{k}}^n$ pour E.

Ces fonctions de base manquent de la liberté variationnelle pour traiter même de petites déviations de l'énergie de bande $\varepsilon_{\vec{k}}^n$ de la valeur d'essai pour E.

Une solution à ce problème consiste à faire l'énergie de l'APW dans une certaine région d'énergie ; indépendante, comme est fait dans la méthode d'onde plane linéarité augmentée (LAPW) [123, 124].

Là où linéarité désigne le fait que l'équation séculaire en résultant sera linéaire dans E.

Une fonction de base LAPW a la même forme qu'une fonction de base d'APW, mais dans la partie de la fonction de base à la région de muffin-tin, l'augmentation, a été adapté :

$$\varphi_{\vec{k}}^{\vec{r}}(r, E) = \begin{cases} V^{-\frac{1}{2}} e^{i(\vec{k}+\vec{K})\vec{r}} & \vec{r} \in I \\ \sum_{l,m} \left(A_{lm}^{\alpha, \vec{k}+\vec{K}} u_l^\alpha(r_i, E_0) + B_{lm}^{\alpha, \vec{k}+\vec{K}} u_l^\alpha(r_i, E_0) \right) Y_m^l(\hat{r}_i) & \vec{r} \in S_{MT,\alpha} \end{cases} \quad \text{II.82}$$

L'augmentation d'APW a été remplacée par une combinaison linéaire de la fonction originale et u_l^α son dérivé d'énergie $\dot{u}_l^\alpha = \left. \frac{\partial u_l^\alpha(r_i, E)}{\partial E} \right|_{E=E_0}$; évalué à une énergie fixe E_0 de linéarisation.

On peut interpréter la nouvelle limite entre crochets comme un développement de Taylor de premier ordre autour d'une énergie fixe E_0 .

$$u_l^\alpha(r_i, E) = u_l^\alpha(r_i, E_0) + (\mathbf{E} - \mathbf{E}_0) \dot{u}_l^\alpha(r_i, E_0) + \mathbf{O}(\mathbf{E} - \mathbf{E}_0) \quad \text{II.83}$$

Si l'énergie E_0 diffère légèrement de la véritable énergie de bande E , une combinaison si linéaire reproduira la fonction radiale d'APW à l'énergie de bande. Ceci rapporte une base réglée qui est assez flexible pour représenter tous les états propres dans une région autour de E_0 .

Dans la méthode de LAPW, les fonctions de base à l'intérieur des sphères de MT sont des combinaisons linéaires des fonctions radiales $u_l Y_m^l(\hat{r})$ et leurs dérivés en ce qui concerne les paramètres de linéarisation E_l , les u_l sont définis exactement comme dans la méthode d'APW, avec un E_l fixe.

$u_l Y_m^l(\hat{r})$ Satisfait :

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) + E_l \right] r \dot{u}_l(r) = r u_l(r) \quad \text{II.84}$$

Dans le cas non relativiste.

VI. Le code WIEN2k :

Le code Wien est une implémentation de la méthode LAPW (FP-LAPW) ; ce programme a été conçu par Blaha et ses collaborateurs [122] , il est utilisé dans de nombreuses applications , telles que le gradient du champ électrique[123,126], les systèmes supraconducteurs à haute température [127], les minéraux [128], les surfaces des métaux de transition [129] , les oxydes non ferromagnétiques [130] et les molécules [131].

Des versions du code WIEN original ont été développées sous UNIX, qui se sont appelées WIEN93, WIEN95 et le WIEN97. Maintenant une nouvelle version, WIEN2k, est disponible, qui est basée sur un ensemble alternatif de bases.

Ceci permet une amélioration significative, particulièrement en termes de vitesse, universalité, facilité d'emploi et nouveaux dispositifs. WIEN2k est écrit en Fortran 90 et exige le système d'exploitation UNIX ; puisque les programmes sont liés ensemble par l'intermédiaire des scripts de C-shell. Dans les codes WIEN2k le calcul se fait en trois étapes :

***L'initialisation :**

Pour déterminer les propriétés d'un matériau donné, il faut générer les données de départ qui se trouvent dans le fichier case .struct ; ce dernier contient le paramètre du réseau, la structure cristalline, les rayons muffin tin, les opérateurs de symétrie ...

Cette étape est faite pour la préparation du cycle SCF ; au cours de cette étape on exécute une série des programmes :

nn: (les distances voisines les plus proches) : donne les distances entre plus proches voisins et aide à déterminer le rayon de la sphère muffin tin.

LSTART: (programme atomique LSDA) : le lstart est un code atomique relativiste de LSDA à l'origine écrite par des clos [132, 133] et modifié pour le but actuel.

SYMMETRY : Génère les opérations de symétrie du groupe spatial, détermine le groupe ponctuel des sites atomiques individuels, génère l'expansion LM pour les harmoniques du réseau et détermine les matrices de rotation locale.

KGEN : Ce programme produit du k-maillage dans la cellule irréductible de la zone de Brillouin (IBZ) sur une grille de point spéciale, qui peut être employée dans un arrangement modifié d'intégration tétraédral [134].

DSTART : Ce programme produit d'une première densité de charge cristalline (case.clmsum) par une superposition des densités atomiques (case.rsp) produites avec le lstart.

***Calcul SCF**

LAPW0 : lapw0 calcule le potentiel V_{tot} comme somme du potentiel coulombien V_c et le potentiel V_{xc} d'échangeur-corrélation ; en utilisant toute la densité électronique (de spin) comme entrée.

LAPW1 : produit des valeurs propres et des vecteurs propres, il installe la matrice hamiltonienne et la matrice de chevauchement [135], et trouve les valeurs propres et les vecteurs propres de diagonalisation qui sont écrits au case.vector, sans compter que l'ensemble standard de bases de LAPW, aussi la méthode d'APW+lo [136,137] est soutenue et les ensembles de bases peuvent être mélangés pour l'efficacité maximale.

LAPW2 : calcule les densités de valence à partir des vecteurs propres, il utilise case.energy et case.vector et calcule E_F .

LCORE : calcule les états de coeur et les densités.

MIXER : mélange les densités de valence et du coeur pour produire une nouvelle densité.

***Utilisation des tâches pour le calcul des propriétés :**

SPAGHETTI : calcule la structure de bandes en utilisant les valeurs propres générées par LAPW1.

TETRA : calcule la densité d'état DOS et LDOS (densité d'états locale).

OPTIMISE : détermine l'énergie totale en fonction du volume, utilisée dans le calculer des paramètres du réseau, en utilisant l'équation d'état.

OPTIC : calcule les propriétés optiques.

XSPEC : calcule et dessine les spectres d'absorption et émission des rayons X.

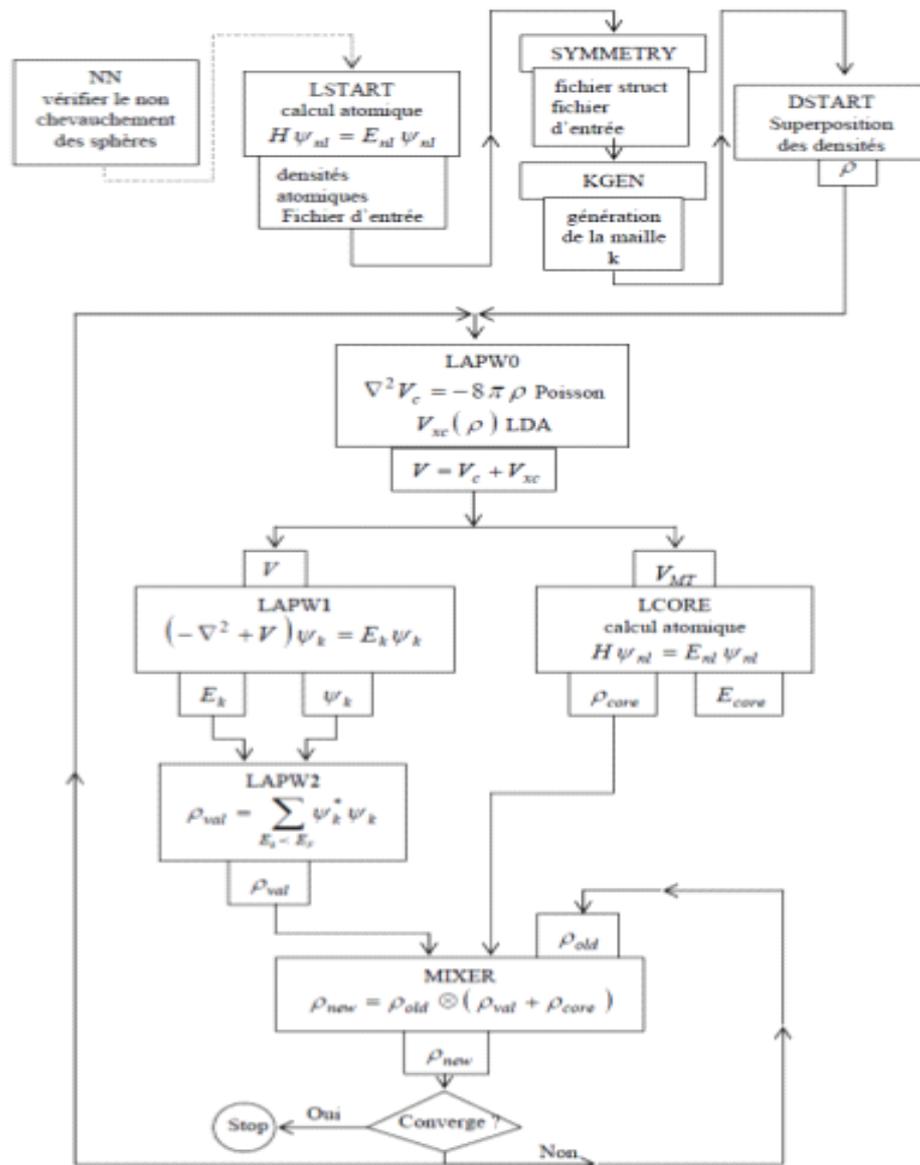


Figure II.04: Organisation des programmes dans Wien2k.

CHAPITRE III :

RÉSULTATS ET DISCUSSIONS

I. Introduction

Les nouvelles structures cristallines à base des métaux de transition comme le Fer (Fe/Co, Fe/Mn, Fe/Ni et Fe/Au) [138-141] sont caractérisés par des moments magnétiques augmentés et une grande énergie d'anisotropie magnétique, différente de celle des matériaux massifs. Le système Fe/Cu est plus intéressant en raison de ses propriétés physiques fondamentales (magnétiques, magnéto-optique ...) différentes de celles observées dans les états cristallins usuels.

Grâce à leur comportement magnéto-optique, le système Fe/Cu a fait l'objet de plusieurs travaux tant théoriques qu'expérimentaux notamment dans le domaine de stockage d'enregistrement magnétique.

L'objectif principal de cette étude est de réaliser de la simulation des propriétés magnétiques et des structures électroniques des super réseaux Fe/nCu(001) [n=1, 3, 5, 7,9], ainsi que la détermination du couplage d'échange J dans ces systèmes.

La deuxième partie de ce travail mettra l'accent sur les calculs de la théorie fonctionnelle de densité de spin avec le couplage spin-orbite a fin d'obtenir l'énergie d'anisotropie magnétique (MAE) et la détermination des constantes magnéto-optiques rotation et ellipticité de Kerr des systèmes étudié.

II. La méthode de calcul :

Nous avons utilisé la méthode self-consistent, connue en anglais sous le nom de «Full-potential Linearized Augmented Plane-Wave» (**FLAPW**) dans la théorie fonctionnelle de densité et les résultats sont obtenus par le code Wien2k avec approximation de la densité locale (Locale Spin Densité Approximation) **LSDA** [142, 143]. Le rayon muffin-tin (**R_{MT}**) est égal à 2 pour tous les super réseaux **Fe/nCu**, **n** est le nombre de couches de cuivre. Les paramètres de coupure (The cutoff parameters) sont **R_{MT} K_{max} = 7** pour l'onde plane et **R_{MT} G_{max} = 12** pour la densité de charge; Où **K_{max}** représente le nombre maximal d'ondes dans la région interstitielle et **G_{max}** est le vecteur maximal de réseau réciproque. L'énergie de convergence est de 0,0001 Ry, la valeur par défaut de la séparation d'énergie entre core / valence est -6,0 Ry, un maillage (kpoint mesh) est de 20 × 20 × 10 est utilisé pour toutes les super réseaux dans la structure électronique, magnétique et magnéto-optique; le nombre de k point introduit dans le code de calcul a été choisi parfaitement pour avoir la meilleure convergence en un temps minimal.

III. La géométrie de super réseaux Fe/nCu :

Dans ce travail de recherche, la structure fcc pour les deux éléments constitutifs Fe et Cu a été utilisée. Leurs constantes de réseau optimisées sont respectivement de 3,613Å et 3,615 Å pour le Fe- γ et le Cuivre Cu, respectivement. Le diagramme schématique pour Fe/Cu, Fe/5Cu sont illustrés (Figure III.02). Le nombre de couches de Cu (ML) varie de 1 à 9ML pour chaque structure de super réseau, les constantes de réseau calculées sont données dans le tableau III.01. où les constantes de réseau pourraient être calculées par:

$$a_{Fe/Cu} = \frac{a_{Fe} + na_{Cu}}{n+1} \tag{III.01}$$

$$c_{Fe/Cu} = (n + 1)a_{Fe/Cu} \tag{III.02}$$

Où n est le nombre de plans atomiques (n = 1, 3, 5, 7, 9) avec une pas de c / a
 c / a = 2 est le rapport de la tétragonalité.

Tableau III.01: Le paramètre de réseaux de chaque structure de super réseaux.

Super réseaux	a (Å)	c (Å)	c/a
Fe/Cu	3.614	7.228	2
Fe/3Cu	3.6145	14.458	4
Fe/5Cu	3.61466	21.688	6
Fe/7Cu	3.61475	28.918	8
Fe/9Cu	3.6148	36.148	10

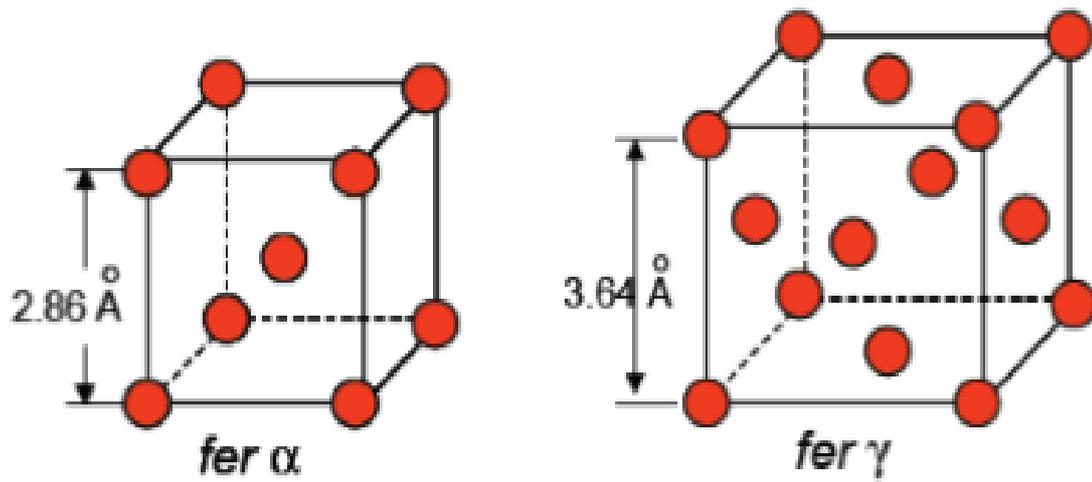


Figure III.01 :: a- La structure Fe- α , b- La structure Fe- γ

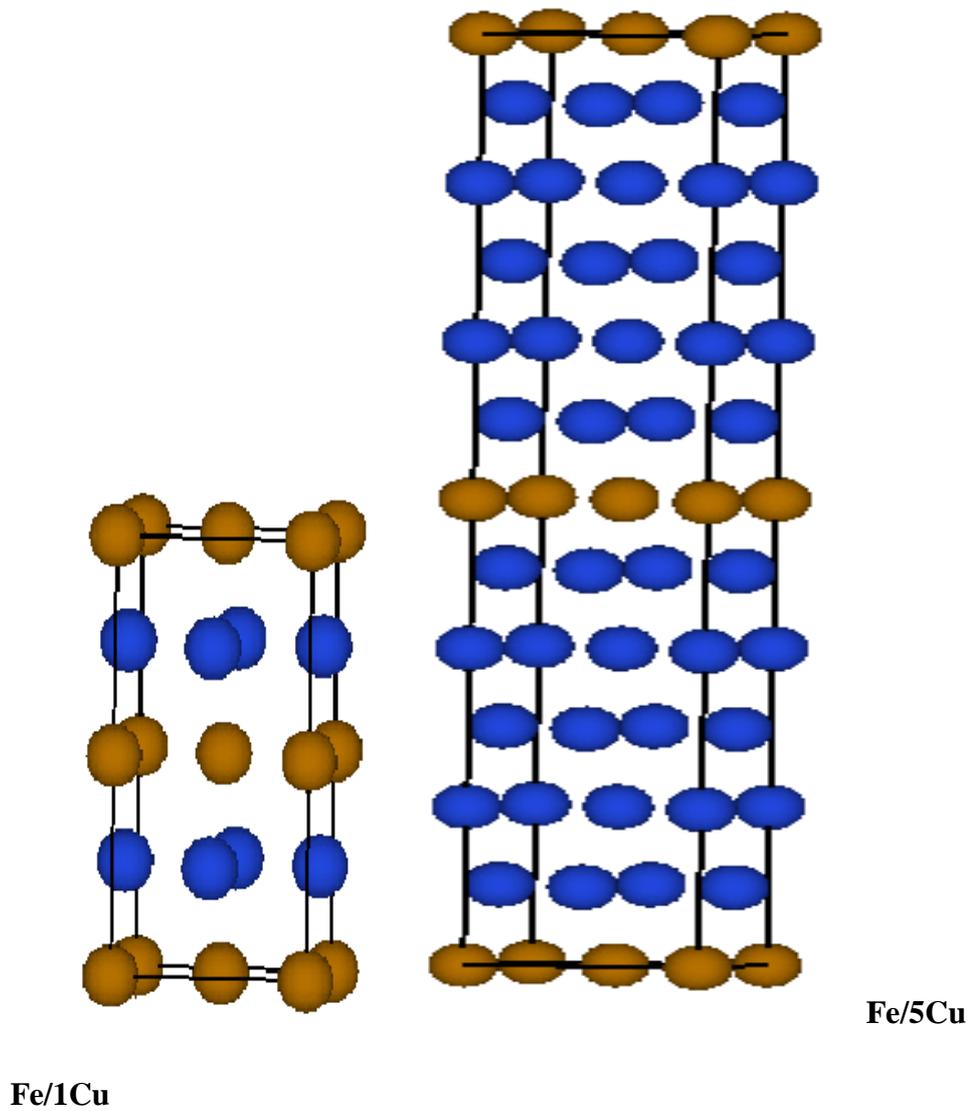


Figure III.02 : les super réseaux de Fe/1Cu, Fe/5Cu.

IV. Résultats et discussions :**IV .1. Propriétés magnétiques:***** Le moment magnétique :**

Le but de cette section est de calculer le moment magnétique par atome et de déterminer la phase magnétique des super réseaux de Fe.

Nous avons calculé le moment magnétique de chaque atome dans le plan atomique du super réseau. Les valeurs sont présentées dans le tableau III.02, les valeurs du moment magnétique de Fe sont différent de celle du moment magnétique fer- γ qui est égal à $1,89 \mu_B$ [30]; Il varie entre 2,4 et $2,5 \mu_B$, ce qui explique une augmentation du moment magnétique [144]. Sur la base de l'analyse de la densité d'état partielle (PDOS) (figure III.02), on a trouvé une hybridation entre les orbitales de fer et de cuivre. Cela veut dire que les électrons **d** sur les atomes de Fe dans les super réseaux étudiées sont plus localisés a comparées avec ceux de [30] qui entraînent une augmentation des moments magnétiques observés. En raison de cette hybridation, les atomes de cuivre possèdent un moment magnétique induit qui se caractérise par sa faible valeur [24]. Le moment magnétique de Cu diminue avec l'augmentation du nombre des monocouches du Cuivre [145].

Le moment magnétique induit par le Cu a été causé par les hybridations entre les orbitales de fer et de cuivre et se caractérise par sa faible valeur [24].

Tableau III. 02: Les valeurs moyennes des moments magnétiques pour différentes structures Fe / nCu (avec n allant de 1 à 9).

	Modèles	Fe	Cu1	Cu2	Cu3	Cu4	Cu5	Cu6	Cu7	Cu8	Cu9
Moment magnétique m[μ B/Atom] (LSDA)	Fe	1.90									
	Fe/Cu	2.40	0.103								
	Fe/3Cu	2.43	0.064	-0.012	0.064						
	Fe/5Cu	2.45	0.049	-0.006	-0.004	0.009	0.074				
	Fe/7Cu	2.47	0.074	-0.005	0.019	0.0004	0.001	-0.006	0.089		
	Fe/9Cu	2.50	0.072	-0.006	0.0006	0.0002	0.0008	0.0003	0.0009	-0.0056	0.076

*** La densité totale et partielle des états (TDOS, PDOS) :**

TDOS et PDOS des super réseaux Fe / n Cu est présentée dans la Figure III.03. Pour les trois structures Fe / 1Cu, Fe / 3Cu et Fe / 5Cu, le TDOS est principalement dominé par la contribution des atomes de Fe et de Cu qui sont proches du niveau de Fermi; les deux spin up et spin down sur la figure TDOS sont asymétriques par rapport aux axes d'énergie qui conduisent à la formation de moments magnétiques d'atomes de Fe et de Cu dans des super réseaux. Le PDOS des couches de Fe et Cu a un caractère d, et il a été constaté que le couplage magnétique dans les couches de fer est antiferromagnétique.

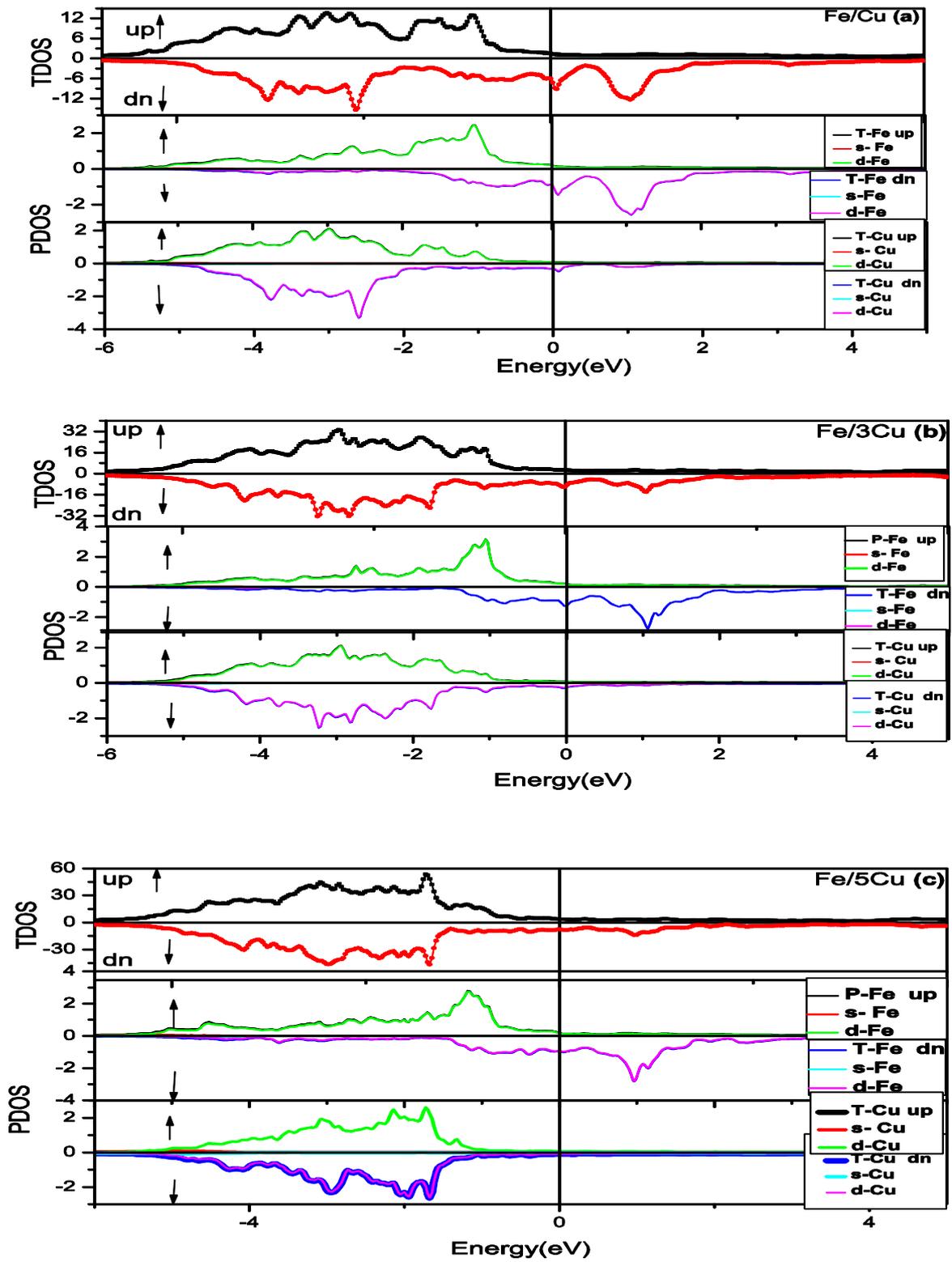


Figure III.03: La densité d'état totale TDOS et partielle PDOS de : a. Fe/Cu. b. Fe/3Cu.

c. Fe/5Cu.

***Le couplage d'échange J :**

Afin d'étudier le couplage d'échange entre les couches, l'énergie totale pour la configuration ferromagnétique (F) et antiferromagnétique (AF) du Fe pour chaque couche de Cu est calculé en utilisant l'approximation LSDA. Les différentes énergies sont présentées dans le tableau III.03 pour les super réseaux de Fe / nCu. La valeur J est calculée avec cette relation:

$$J(d) = E_{tot}^{\uparrow\downarrow}(d) - E_{tot}^{\uparrow\uparrow}(d) \tag{III.03}$$

Où **d** est l'épaisseur de la couche d'espacement.

$E_{tot}^{\uparrow\downarrow}(d)$: Énergie totale du système en ordre AF.

$E_{tot}^{\uparrow\uparrow}(d)$: Énergie totale du système en ordre F.

L'énergie totale de différentes configurations magnétiques dans ces super réseaux se caractérise par une forte interaction d'échange antiferromagnétique (AFM) entre les couches voisines les plus proches ($J < 0$) pour l'interface. Le couplage AFM est plus fort pour la couche d'interface puis pour l'intérieur [21].

Tableau III.03: Les valeurs de l'énergie de couplage d'échange J pour différentes structures Fe / nCu (avec n allant de 1 à 9).

Super réseau	$E_{tot}^{\uparrow\downarrow}$ (Ry)	$E_{tot}^{\uparrow\uparrow}$ (Ry)	$J = E_{tot}^{\uparrow\downarrow} - E_{tot}^{\uparrow\uparrow}$ (mRy)	Couplage
Fe/Cu	-23384.18150077	-23384.16843803	-16	AF
Fe/3Cu	-49823.63708675	-49823.63607656	-1	AF
Fe/5Cu	-76263.37912943	-76263.37856584	-0,56359	AF
Fe/7Cu	-102701.27902668	-102701.21480329	-64,22	AF
Fe/9Cu	-129140.51903837	-129140.46593827	-53.100094	AF

*** L'énergie d'anisotropie magnétique MAE :**

Les phénomènes d'anisotropie magnétique jouent un rôle très important dans la structure multicouche, il est produit par l'interaction du spin-orbite. Les valeurs de l'énergie de l'anisotropie magnétique (MAE) dans les métaux de transition magnétiques cubiques ont des valeurs très faibles. Mais dans les multicouches en métal de transition, cette valeur augmente, cette augmentation peut être obtenue en raison de la rupture de la symétrie cubique aux interfaces [146, 147].

L'énergie d'anisotropie magnétique MAE est donnée par la différence entre les énergies totales des systèmes avec des moments magnétiques qui sont alignés selon les directions [001] et [100] respectivement [148].

$$MAE = E_{001} - E_{100} \tag{III.04}$$

Cette différence est très sensible dans les systèmes en nanostructure, résultant des influences quantitatives de la structure électronique [149].

L'analyse du MAE a montré que sa valeur ne dépend pas de la structure des super réseaux (tableau III.04). Le minimum de valeur absolue de MAE a été observé pour Fe /3Cu alors que son maximum appartient à Fe / 5Cu.

Table III.04: Les valeurs de l'énergie d'anisotropie magnétique MAE dans les différents super réseaux.

Super réseaux	E_{001}	E_{100}	MAE, meV
Fe/1Cu	-157,6849	-157,6848	-2.1
Fe/3Cu	-350,8397	-350,8396	-1.2
Fe/5Cu	-574,3663	-574,3660	-4.38
Fe/7Cu	-690,5775	-690,5773	-3.07
Fe/9Cu	-869,8808	-869,8806	-1.5

IV.2. Les propriétés magnéto-optiques :

Les effets magnéto-optiques résultent de l'interaction des rayonnements avec des matériaux magnétisés spontanément ou soumis à un champ magnétique externe. L'origine de ces effets est la rupture de la symétrie suivant la présence de l'ordre magnétique [64].

Cependant, il ne peut être traité que si le couplage Spin-Orbite est pris en compte. L'effet magnéto-optique de Kerr a été découvert par le physicien écossais John Kerr en 1888. Il a constaté que lorsque la lumière réfléchie sur la surface d'une substance magnétique après une incidence normale devient polarisée elliptiquement, de sorte que l'axe principal de l'ellipse subit une rotation du plan de polarisation du faisceau incident [150].

L'effet Kerr existe dans plusieurs géométries, les géométries les plus intéressantes sont l'effet Kerr polaire, il est utilisé dans la technologie de stockage de données à haute densité [151], et pour cette raison, nous étudions la théorie pour celle-ci. Sa géométrie est conçue de manière à orienter le vecteur de l'aimantation.

Étant donné que toutes les propriétés magnéto-optiques sont directement liées à la conductivité optique, dans un système tétragonal dans lequel l'aimantation est orientée le long de l'axe z, comme mentionné [152, 153], le tenseur de conductivité est donné par l'expression suivante:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad \text{III.05}$$

La dispersion du tenseur de conductivité optique $\sigma_{\alpha\beta(\omega)}$ étant donné qu'en fonction de la fréquence ω du rayonnement électromagnétique entrant a été calculée à partir de la structure de la bande d'énergie par Kubo-Greenwood [154,155] et réponse linéaire [156].

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{-ie^2}{m^2\hbar V_{uc}} \sum_k \sum_{nn'} \frac{f(\epsilon_{nk}) - f(\epsilon_{n'k})}{\omega_{nn'}(k)} \frac{\Pi_{nn'}^\alpha(k) \Pi_{nn'}^\beta(k)}{\omega - \omega_{nn'}(k) + i\gamma} \quad \text{III.06}$$

Pour un solide ayant au moins trois symétries de rotation, les éléments du tenseur de conductivité optique satisfont $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$ et $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$. Dans un tel cas, les parties absorbantes du tenseur de conductivité optique (diagonale réelle et imaginaire, non diagonale) en raison des transitions inter bandes peuvent être obtenues en utilisant la formule Kubo dans la théorie de la réponse linéaire [154, 156,157].

$$\sigma_{xx}^1(\omega) = \frac{\lambda}{\omega} \sum_{k,jj'} [|\Pi_{jj'}^+|^2 + |\Pi_{jj'}^-|^2] \delta(\omega - \omega_{jj'}) \quad \text{III.07}$$

$$\sigma_{xy}^2(\omega) = \frac{\lambda}{\omega} \sum_{k,jj'} [|\Pi_{jj'}^+|^2 - |\Pi_{jj'}^-|^2] \delta(\omega - \omega_{jj'}) \quad \text{III.08}$$

Ou : $\lambda = \frac{\pi e^2}{2\hbar m^2 V}$ est une constante spécifique du matériau.

$\hbar\omega$ est l'énergie de photons.

$\hbar\omega_{jj'}$ est la différence d'énergie entre les bandes occupées et inoccupées au même k point.

Et : $\Pi_{jj'}^\pm = \langle kj | \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{p}_x \pm i\hat{p}_y) | kj' \rangle$ Sont les éléments de matrice dipolaire pour la lumière polarisée circulaire.

La lumière plane réfléchiée sur une surface métallique d'une couche mince devient polarisée elliptiquement et son axe principal subit une légère rotation et la partie imaginaire des éléments non diagonaux du tenseur de conductivité qui décrit l'absorption magnéto-optique. Cette partie d'absorption est directement proportionnelle à la différence entre l'absorption gauche (-) et droite (+) de la lumière à polarisation circulaire (LCP et RCP) et son signe est directement lié à la polarisation des spins des états responsables des transitions inter bande. C'est la méthode la plus expérimentalement étudié de cette géométrie, et est également celle qui est connue pour donner le plus grand signal de Kerr.

Dans ces conditions, l'angle complexe de Kerr est donné par la relation [158]:

$$\frac{1 + \tan \varepsilon_k}{1 - \tan \varepsilon_k} e^{i2\theta_k} = \frac{(1+n_+)(1-n_-)}{(1-n_+)(1+n_-)} \quad \text{III.09}$$

Avec : θ_k : La rotation de Kerr

ε_k : L'ellipticité de Kerr

n_\pm^2 : Les valeurs propres du tenseur $\sigma(\omega)$ (n_\pm est l'indice de réfraction pour les ondes polarisées circulairement et directement connectées à un tenseur diélectrique ou au tenseur de conductivité). Elles sont données par l'équation:

$$n_\pm^2 = 1 + \frac{4\pi i}{\omega} (\sigma_{xx} \pm \sigma_{xy}) \quad \text{III.10}$$

$$\varphi_k = \theta_k + i\varepsilon_k \quad \text{III.11}$$

Comme θ_k et ε_k , pour la plupart des matériaux, sont inférieurs à un degré, la relation précédente est donnée par [159, 160] comme suit:

$$\theta_k + i\varepsilon_k = \frac{-\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}\sqrt{1+\left(\frac{4\pi i}{\omega}\right)\sigma_{xx}}} \quad \text{III.12}$$

Afin d'étudier le comportement magnéto-optique de nos systèmes, nous avons adopté le calcul spectral de l'effet Kerr dans sa géométrie polaire (P-MOKE) et nous avons seulement considéré les contributions inter-bandes dans les résultats présentés. La gamme d'énergies du rayonnement incident que nous avons utilisées a été élargie jusqu'à 14 eV.

***La conductivité optique d'absorption σ_{xx}^1 et dispersive σ_{xx}^2 :**

La figure III.04 présente la courbe de conductivité optique d'absorption σ_{xx}^1 et dispersive σ_{xx}^2 (qui peut être obtenue à partir des pièces absorbantes correspondantes en utilisant la transformation Kramers-Kronig [159] pour les trois systèmes). Dans l'intervalle d'énergie 1-6 eV, le pic principal est bien reproduit par les calculs. Ce résultat est valable pour les deux parties réelles et imaginaires de la conductivité de la partie diagonale, cela est en accord avec la relation Kramers-Kronig (KK) des pièces réelles et imaginaires.

Nous trouvons également que la caractéristique de tous les spectres est la présence de trois pics, en raison des transitions inter bande, à ~ 1.7 eV, pour tous les systèmes; les deux autres valeurs de pics dépendent du système, on les trouve: dans Fe/Cu à $\sim 3,5$ eV, 6 eV; en Fe/3Cu à ~ 3 eV, 5,2 eV; et dans Fe/5Cu à $\sim 3,5$ eV, 5 eV.

Comme le montre le panneau inférieur de la figure III.04.b, la forme de σ_{xx}^2 des spectres à des énergies inférieures (< 2 eV) change avec l'augmentation des atomes de Cu dans les systèmes alors que pour plus d'énergie (> 6 eV), les caractéristiques sont presque les mêmes pour trois systèmes. Des tendances similaires sont également observées pour les spectres σ_{xx}^1 dans la présente de gamme d'énergie supérieure de tous les systèmes. Ainsi, la réponse optique dans l'ultraviolet lointain (région de l'énergie > 6 eV) est identique pour les trois systèmes.

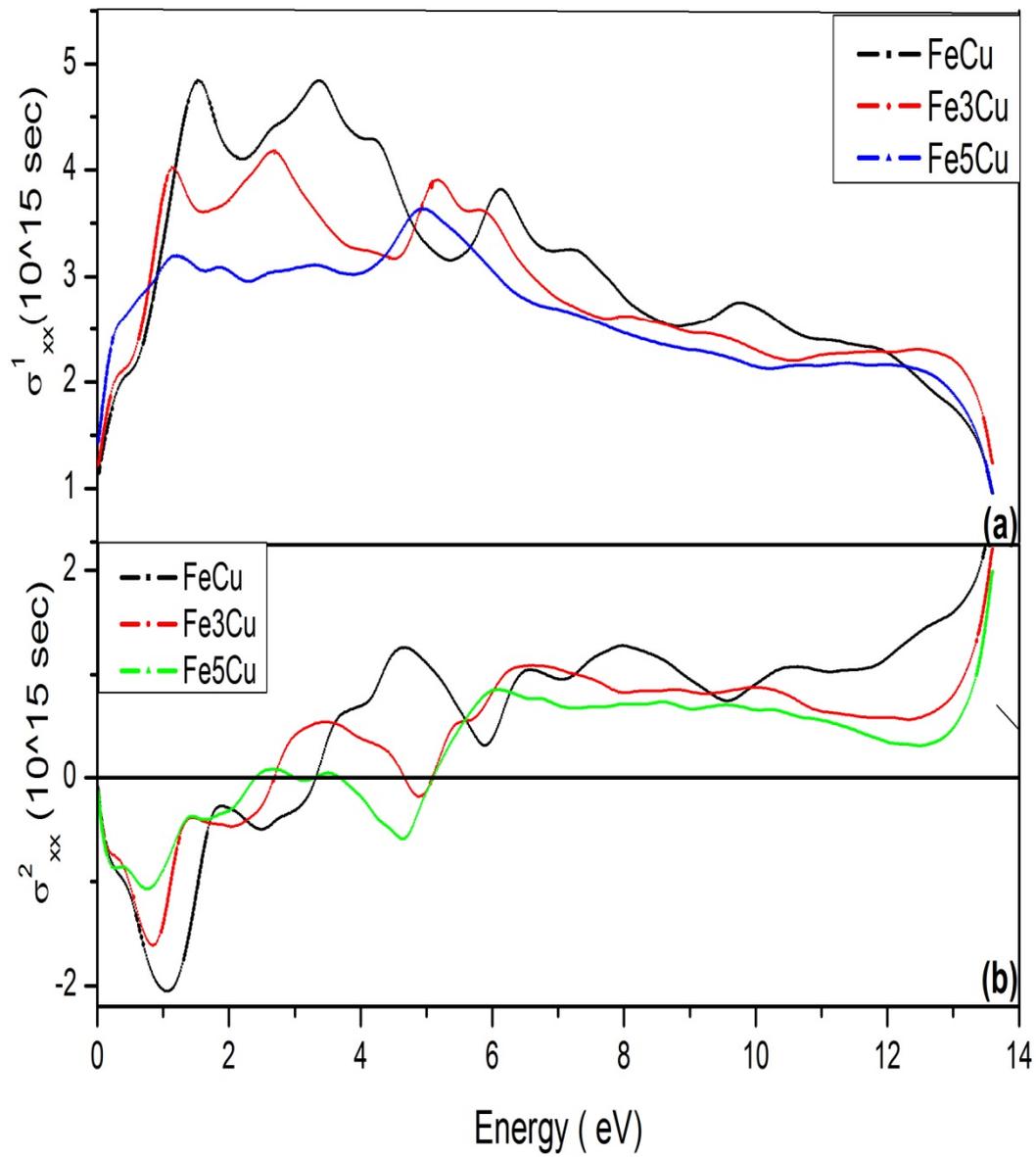


Figure III.04: a- La courbe de conductivité optique d'absorption σ_{xx}^1 et b- dispersive σ_{xx}^2

*Les composants de conductivité optique réels et imaginaire no diagonal σ_{xy}^1 et σ_{xy}^2 :

Le spectre de σ_{xy}^1 et σ_{xy}^2 des trois systèmes étudiés a des pics oscillants indiqués dans la zone à faible énergie et leur amplitude diminue à une faible valeur pour une énergie supérieure à 6 eV (figure III .04 a et b) et ils sont également identiques en ligne et en grandeur. Les pics positif (ou négatif) suggère que les transitions interbandes sont dominées par des excitations dues à la lumière polarisée gauche (droite) [79].

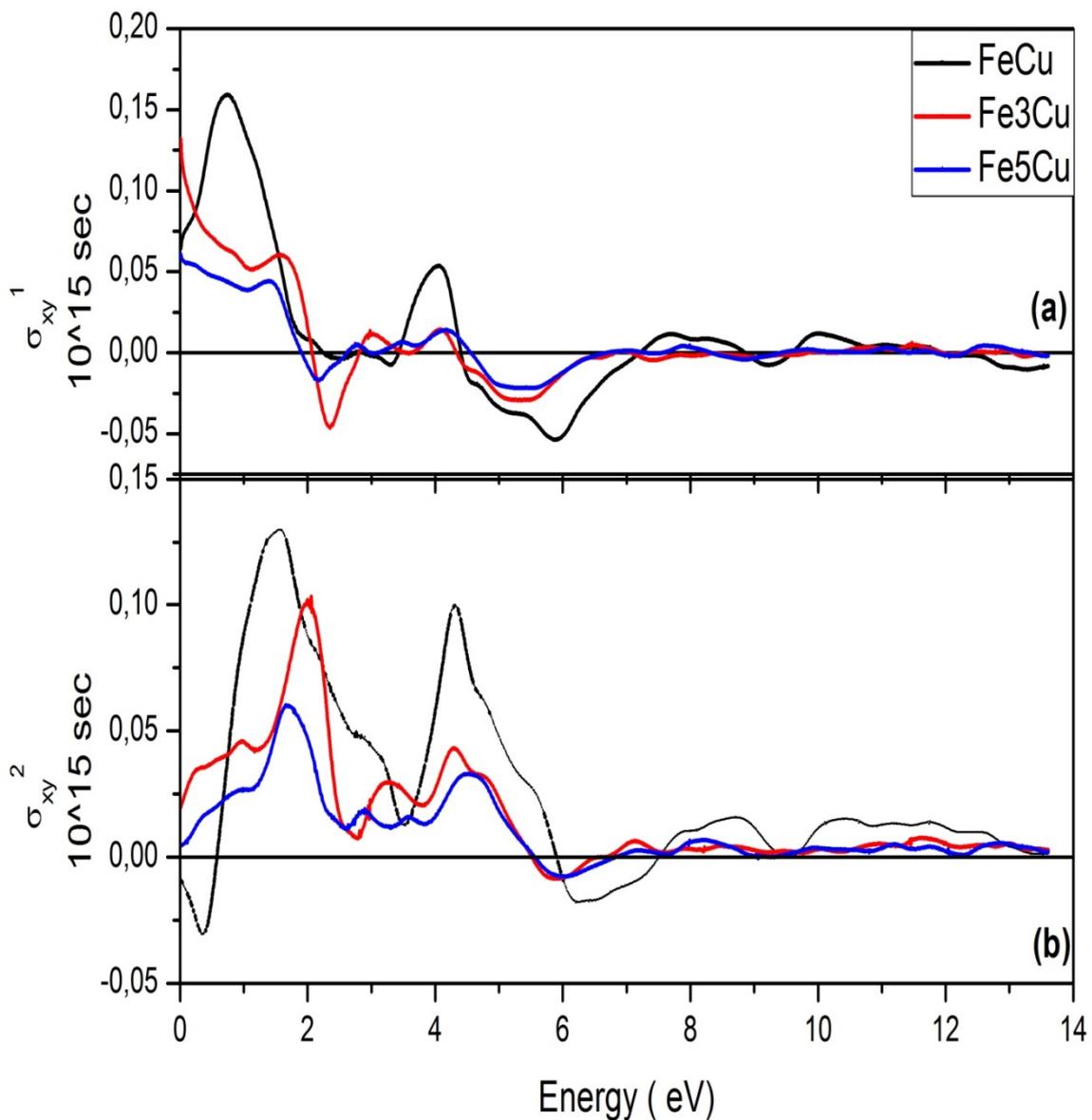


Figure III.05: a. Les calculs de composant réels no diagonal de σ_{xy}^1 b. les calculs imaginaires du composant no diagonal σ_{xy}^2 .

***Le rotation de Kerr θ_k et l'ellipticité ε_k :**

Les rotations Kerr correspondantes et l'ellipticité sont illustrées à la Figure III.05.a et b). Ce spectre a révélé que tous les systèmes étudiés ont des caractéristiques similaires dans la gamme de l'énergie sélectionnée. Pour θ_k , il existe trois pics négatifs autour de 1,8, 4 et 11 eV, ce qui indique la dominance de **LCP** de la lumière polarisée. Après environ 6 eV, il existe une prédominance de la caractéristique de **RCP** avec un pic positif de 0,2°, 0,1° et 0,05° dans la rotation Kerr de tous les systèmes. Le plus grand angle de rotation de Kerr qui apparaît dans Fe/Cu est de $\sim 0,4^\circ$ à l'énergie photonique incidente de 4,2 eV. Cet angle issu de l'antiferromagnétique est remarquablement comparable à celui des métaux de transition, tels que le Fe et Co massif et les multicouches de Fe et Co étudiés plus tôt [160,161].

Dans la gamme d'énergie, on voit que les inversions du signe de θ_k et ε_k sont répétées quand ε_k traverse la ligne zéro, et un pic apparaît dans le spectre θ_k et vice versa, ce qui est probablement attribué à la relation Kramers-Kronig [162].

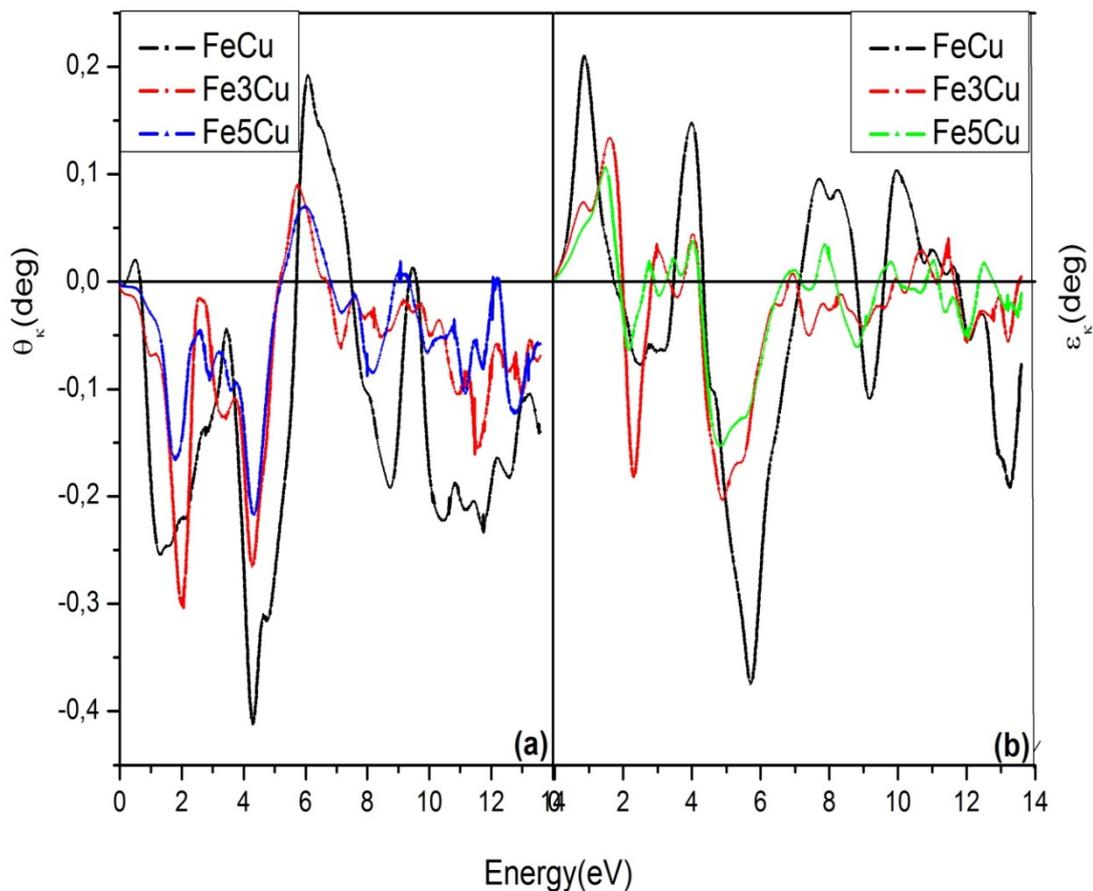


Figure III.06 : a- Angles de rotation de Kerr θ_k ; b- Ellipticité ε_k Pour les trois systèmes.

*Les parts réels et imaginaires de la conductivité optique d'absorption no diagonale $\omega\sigma_{xy}^1$ et $\omega\sigma_{xy}^2$:

La conductivité d'absorption no diagonale $\omega\sigma_{xy}^2$ est proportionnelle à la différence de taux d'absorption de la lumière polarisée circulairement gauche et droite, et son signe est directement lié à la polarisation de spin des états responsables des transitions inter bandes produisant les structures dans le spectres $\omega\sigma_{xy}^2$ [61]. La rotation Kerr peut être améliorée par des conductivités no diagonales plus large. Nous avons aussi également constaté de la figure III.07.b, que les pics négatifs et positifs dans les spectres de rotation de Kerr correspondent aux maxima et minima de $\omega\sigma_{xy}^2$. Ceci montre la contribution dominante de la conductivité no diagonale des propriétés magnéto-optiques. Les spectres de $\omega\sigma_{xy}^1$ est aussi présentés dans la figure III .07.a.

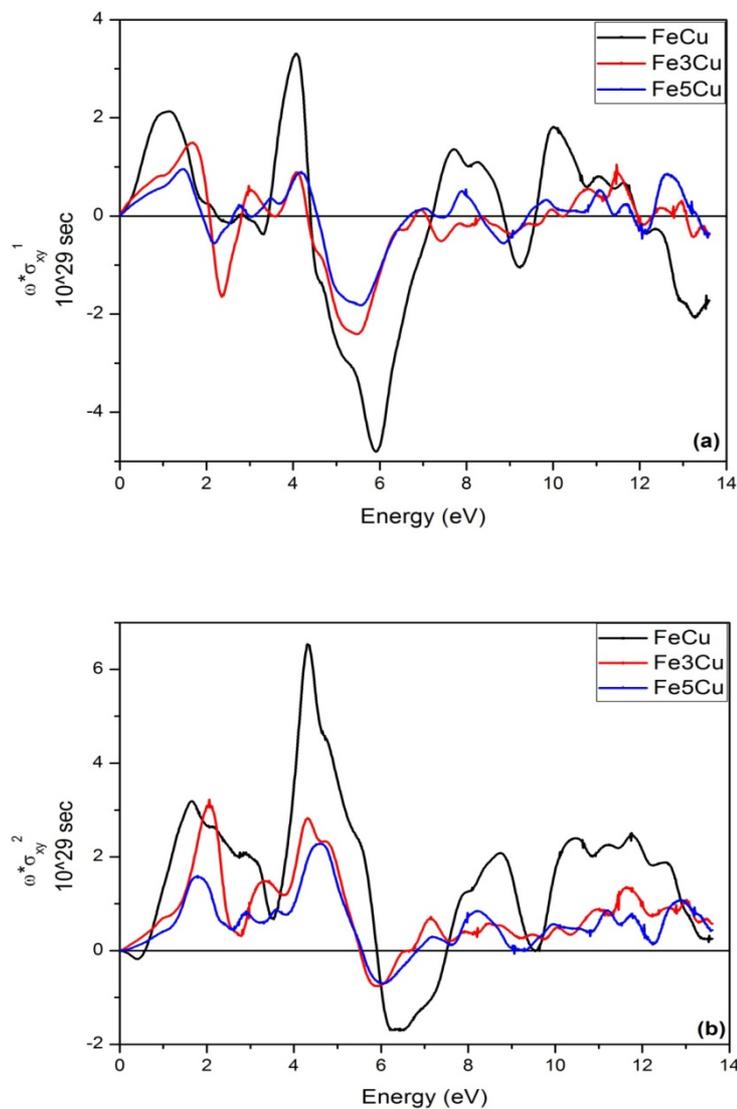


Figure III.07 : a. $\omega\sigma_{xy}^1$, b. Partie absorbante calculée de la conductivité optique no diagonale $\omega\sigma_{xy}^2$

V. Conclusion :

Les structures électroniques et les propriétés magnétiques des super réseaux Fe /nCu ($n = 1,3,5,7,9$) ont été étudiées par la méthode DFT implémentée dans le code Wien2k en utilisant l'approximation LSDA. On a constaté une augmentation du moment magnétique des atomes de fer dans les super réseaux étudiés par rapport à Fcc Fe parce que la petite hybridation entre les orbitales de fer et de cuivre. En raison de cette hybridation, les atomes de cuivre possèdent de petits moments magnétiques induits. Le fort couplage antiferromagnétique dans les couches voisines contenant le fer le plus proche a été trouvé pour l'interface et l'intérieur. Le MAE calculé ne dépend pas de la structure des super réseaux. Ses valeurs absolues minimales et maximales ont été observées pour Fe / 3Cu et Fe / 5Cu respectivement. Le comportement magnéto-optique des super réseaux a été étudié par le calcul spectral de l'effet Kerr dans sa géométrie polaire (P-MOKE), compte tenu uniquement des contributions inter-bandes. Le plus grand angle de rotation de Kerr a été trouvé pour Fe/1Cu qui est égal à $\sim 0,4^\circ$ à l'énergie photonique incidente de 4,2 eV. Cet angle résultant d'un couplage antiferromagnétique qui est comparable à celui des métaux de transition, tels que le volume et les multicouches de Fe et Co.

CONCLUSION GÉNÉRALE

Conclusion

Le travail de la présente thèse a porté sur l'étude structurale, magnétique et magnéto optique de super réseaux (Fe- γ /Cu), dans le but de définir l'influence des métaux nobles sur les propriétés électronique des systèmes en couche ; les propriétés magnétiques de l'état fondamentale des systèmes a dimension réduite a été explorées pour voir la nature magnétique des systèmes étudiés. Notamment les super réseaux Fe /nCu où (n=1, 3, 5, 7, 9).

Les différentes propriétés magnétiques ont été calculées théoriquement par la méthode auto cohérente (self consistent) connue sous le nom de FLAPW (la méthode des ondes planes augmentées) existante dans la théorie fonctionnelle de densité DFT, les résultats obtenue par le code WIEN2k dans le cadre de l'approximation de la densité de spin locale LSDA.

Les paramètres de réseaux pour chaque structure de super réseaux ont été définis préalablement afin d'obtenir le taux de la tetragonalité.

Ensuite l'investigation des propriétés électronique et magnétique suivie dans ce travail ont montrée que :

- Le moment magnétique total de l'atome de Fe différent du moment magnétique de Fe- γ massif et il augmente par l'augmentation du nombre de plan atomique de cuivre Cu, c'est ce qu'on appelle un état magnétique élevé.
- Petite hybridation entre les orbitales de fer et de cuivre, en raison de cette hybridation, les atomes de Cu possèdent un moment magnétique de valeur faible il diminue sous l'augmentation du nombre de monocouche.
- Nous avons calculé la densité total et partielle des états TDOS et PDOS pour trouver la phase magnétique des super réseaux, ils sont asymétrique dans tous les structures pour le spin up et down et le couplage dans les couches de Fer et antiferromagnétique.
- Les calculs de valeurs de l'énergie de couplage d'échange J pour différentes structures a confirmé la forte interaction d'échange AFM (antiferromagnétique) entre les couches voisines les plus proches ($J < 0$).
- Le calcul de l'énergie d'anisotropie magnétique est fait, L'analyse du MAE a montré que sa valeur ne dépend pas de la structure des super réseaux. Le minimum de valeur absolue de MAE a été observé pour Fe / 3Cu alors que son maximum appartient à Fe / 5Cu.

Le deuxième calcul mener dans ce travail a permis l'investigation des propriétés magnéto optiques comme suit :

- La courbe de conductivité optique d'absorption σ_{xx}^1 et dispersive σ_{xx}^2 a été présentée. Dans l'intervalle d'énergie 1-6 eV, le pic principal est bien reproduit par les calculs. Ce résultat est valable pour les deux parties réelles et imaginaires de la conductivité de la partie diagonale, cela est en accord avec la relation Kramers-Kronig (KK) des pièces réelles et imaginaires. Et la forme de σ_{xx}^2 des spectres à des énergies inférieures (<2eV) change avec l'augmentation des atomes de Cu dans les systèmes alors que pour plus d'énergie (>6eV), les caractéristiques sont presque les mêmes pour trois systèmes. Des tendances similaires sont également observées pour σ_{xx}^1 spectres dans la présente gamme d'énergie supérieure de tous les systèmes.
- Le spectre de σ_{xy}^1 et σ_{xy}^2 des trois systèmes étudiés a des pics oscillants indiqués dans la zone à faible énergie et leur amplitude diminue à une faible valeur pour une énergie supérieure à 6 eV.
- Les rotations Kerr correspondantes et l'ellipticité ont révélé que tous les systèmes étudiés ont des caractéristiques similaires dans la gamme de l'énergie sélectionnée. Pour θ_k , il existe trois pics négatifs autour de 1.8, 4 et 11 eV, ce qui indique la dominance de **LCP** de la lumière polarisée. Après environ 6 eV, il existe une prédominance de la caractéristique de **RCP** avec un pic positif de 0,2°, 0,1° et 0,05° dans la rotation Kerr de tous les systèmes. Le plus grand angle de rotation de Kerr qui apparaît dans Fe/Cu est de ~ 0,4° à l'énergie photonique incidente de 4,2 eV.
- Les pics négatifs et positifs dans les spectres de rotation de Kerr correspondent aux maxima et minima de $\omega\sigma_{xy}^2$. Ceci montre la contribution dominante de la conductivité no diagonale des propriétés magnéto-optiques.

En conclusion, dans le cadre de ce travail, nous avons calculé la structure cristalline, le moment magnétique, l'énergie d'échange, l'énergie d'anisotropie magnétique, et la rotation Kerr, et le fruit de ce travail est la détermination de l'origine microscopique des pics qui apparaissent sur les spectres de l'effet Kerr et le calcul théorique de la valeur d'énergie d'anisotropie magnétique des super réseaux.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Références bibliographiques

- [01] Chikazumi S., Physics of Ferromagnetism, second ed., Clarendon, Oxford, (1997).
- [02] Drittler B., Stefanou N., Blugel S., Zeller R and Dederichs P.H., Phys. Rev. B 40. 8203. (1989).
- [03] Dederich H., Drittler B., Zeller R., Ebert H and Weinert W., Hyperfine Interaction 60 547. (1990).
- [04] Kajzar, F., Parette, G.: J. Appl. Phys. **50**, 1966 (1979).
- [05] James P., Eriksson Johansson O.B., Abrikosov I.A., Phys. Rev. B 59. 419. (1999)
- [06] Abid M., Thèse d'état, 'Ondes de spin dans les multicouches (Fe,Ni)/(Pt,V) Modélisation et application', Université Hassan II Casablanca, Casablanca (2002).
- [07] Pescia D., Stampanoni M., Bone G.L., Vateriaus A., Willis R.F., and Meier F., Phys. Rev. Lett. 58, 2126 (1987).
- [08] Stampanoni M., Vateriaus A., Aeschliman M., Meier F., and Pescia D., J. Appl. Phys. 64, 5321 (1988).
- [09] Cheng S.F., Mansour A.N., Teter J.P., Hathaway K.B., and Kabacoff L.T., Phys. Rev. B 47, 206 (1993).
- [10] Allenspach R. and Bischof A., Phys. Rev. Lett. 69, 3385 (1992).
- [11] Allenspach R., Magn Magn J.. Mater. 129, 160 (1994).
- [12] Detzel Th. Vonbank, M., Donath M., and Dose V., Magn. Magn J.. Mater. 147, L1 (1995).
- [13] Baudalet F., Lin M.T., Kuch W., Meinel K., Choi B. Schneider C. M., and Kirschner J., Phys. Rev. B 51, 12 563 (1995).
- [14] Rabbering F., Wormeester, H., Everts, F., Poelsema, B.: Phys. Rev. B 79, 075402 (2009)
- [15] Lee S.G., Chung, Y.-C.: J. Phys. D: Appl. Phys. 42, 135305 (2009)
- [16] Ohresser P., et al.: Phys. Rev. B 59, 3696 (1999)
- [17] Mitani S., Kida, A., Matsui, M.: J. Magn. Magn. Mater. 126, 76 (1993)
- [18] Qian D., Jin, X.F.: Phys. Rev. Lett. 87, 227204 (2001)
- [19] Vollmer R., van Dijken, S., Schleberger, M., Kirschner, J.: Phys. Rev. B 61, 1303 (2000)
- [20] Spisak D., Hafner, J.: Phys. Rev. B 64, 205422 (2001)
- [21] Zhou Y.M., Geng, W.T., Wang, D.S.: Phys. Rev. B 57, 5029 (1998)
- [22] Memmel N., Detzel, T.: Surf. Sci. 307–309, 490 (1994)

- [23] Zhou Y.M., Geng, W.-T., Wang, D.-S.: J. Magn. Magn. Mater. 177, 1321 (1998)
- [24] Kuch W., Salviati, M., Gao, X., Klaua, M., Barthel, J., Mohan, Ch.V., Kirschner, J.: J. Appl. Phys. 83, 7019 (1998).
- [25] Heinrich B., Blands J.A.C.; Ultrathin Magnetic Structures II. Measurement Techniques and Novel Magnetic Properties. Springer. P196. (1994).
- [26] Donggi Li., Freitag M., Pearson J., Qiu Z. Q., Bader S. D.; Magnetic phases of ultrathin Fe grown on Cu(100) as epitaxial wedges, Phys. Rev. Lett. 72(19). 3112-3115. (1994).
- [27] Brooks N. B., Chang Y., Johnson P.D., Magnetic interface states and finite-size effects , Phys. Rev. Lett. 67(3) .354-357. (1991).
- [28] ACHER O., Actes de la conférence des sixièmes Journées de Caractérisation Micro-ondes et Matériaux. JCMM', Paris La Défense. (2000)
- [29] Awschalom D. D., Divineinzo D. P. ; Complex Dynamics of Mesoscopic Magnets Physics Today. April 48(4). 43-48. (1995).
- [30] Stephen Blundell. *Magnetism in Condensed Matter*. Oxford University press, (2001).
- [31] James R. W.. *The optical principles of the diffraction of X-rays*. G. Bell and sons LTD, London, (1950).
- [32] Boukelkoul M., Thèse de doctorat 'Propriétés magnéto-optiques des couches ultraminesces et des slabs à base de métaux de transition' Université de Sétif1 (2013).
- [33] Bruno P. and Chappert C., Phys. Rev. Lett. 67, 1602 (1991).
- [34] Bruno P. and Chappert C., Phys. Rev. B 46, 261 (1992).
- [35] Ruderman M. A. and Kittel C., Phys. Rev. 96, 99 (1954).
- [36] Kasuya T., Progr. Theor. Phys. 16, 45 (1956).
- [37] Yosida K., Phys. Rev. 106, 893 (1957).
- [38] Bruno P., J. Phys.: Condens. Matter 11, 9403 (1999).
- [39] Grunberg P., Schreiber R., Pang Y., Brodsky M. B., and Sowers C. H., Phys. Rev. Lett. 57, 2442 (1986).
- [40] Heinrich B., Celinski Z., Cochran J. F., Muir W. B., Rudd J., Zhong Q. M., Arrot A. S., Myrtle K., and Kirschner J., Phys. Rev. Lett. 64, 673 (1990).
- [41] Parkin S. S. P., Phys. Rev. Lett. 67, 3598 (1991).

- [42] Johnson M. T., Purcell S. T., McGee N. W. E., Coehoorn R., van de Stegge J and Hoving W., Phys. Rev. Lett. 68, 2688 (1992).
- [43] Costa A. T., d'Albuquerque e Castro and J., R. B. Muniz, M. S. Ferreira, and J. Mathon, Phys. Rev. B 55, 3724 (1997).
- [44] Unguris J., Celotta R. J and Pierce D. T., Phys. Rev. Lett. 79, 2734 (1997).
- [45] Etienne du Trémolet de Lacheisserie et al. Magnétisme : I. Fondements. Presses Universitaires de Grenoble, (1999).
- [46] Nicola A. Spaldin. Magnetic Materials, Fundamentals and Applications. Cambridge University press, (2011).
- [47] Stephen B. Magnetism in Condensed Matter. Oxford University press, (2011).
- [48] Emmanuelle J., These de doctorat : Reflectivité magnétique résonante de rayons X mous : une sonde de la distribution d'aimantation complexe au sein de films minces, (2014).
- [49] Morrish A. H.; The physical principles of magnetism. New York. P110. (1965).
- [50] Garad H. M.; L'anisotropie magnétique perpendiculaire induite par oxydation et recuit thermique: De la structure au magnétisme, Thèse de doctorat, Université Grenoble. PP 10, 19, 20. (2012).
- [51] Ibach H.; Lüth H.; Crystalline anisotropy, Solide-State Physics ; An introduction to principles of materials science. Springer. PP 219, 222.(1985)
- [52] Bruno P.; Magnetismus von Festkörpern und Grenzflächen, édité par, P.H. Dederichs, P. Grünberg, and W. Zinn (24. IFF-Ferienkurs, Forschungszentrum Jülich, PP. 24.124.28. (1993).
- [53] Fonrose B. W, Traverse A., Calmels L., Serin V and Snoeck E.; Structural and magnetic studies of Co thin films. Micron. 37(5). 478-485. (2006).
- [54] Paige D., Szpunar B., Tanner B. K.; The magneto crystalline anisotropy of cobalt, J. Magn Magn Mater. 239-248.(1984).
- [55] Beavillain P. et al. - Images de la Physique, Le courrier du CNRS, 77, 72, (1991)
- [56] Néel L. - J. Phys. Rad., 15, 225, (1954).
- [57] Johnson M. T., Bloemen P. J. H., Den Broeder F. J. A., de Vries J. J. ; Magnetic anisotropy in metallic multilayer, Rep Progr Phys. 59 (11). 1409-1458. (1996).

- [58] Den Broeder F. J. A., Hoving W., Bloemen P.J.H.; Magnetic anisotropy of multilayers, *J. Magn Magn Mater.* 93. 562-570.(1991).
- [59] Agnès B. ; Thèse de doctorat (étude des super-réseaux magnétiques Fe(001)/Ag(001) et Fe(001)/Cr(001). (1991).
- [60] ARGYERS P.N., *PHYS.Rev.*97, , 334, (1955).
- [61] Bennett H.S.and Stern E.A., *ibid.*137,,A448.(1965)
- [62] ROYER F. « Etude et application des effets magnéto-optiques dans des couches minces sol-gel dopées à l'aide de nanoparticules magnétiques», Thèse de Doctorat de L'INPG, France, (2004).
- [63] Yariv A., *Optical Electronics*, 3rd edn. (Holt, Rinehart and Winston, New York, (1985)
- [64] Kleiner W.H., *Phys.Rev.* 142. 318. (1966).
- [65] Erskine J.L.and Stern E.A; *Phy.Rev.Lett.*30,(1973),1329,*phy.Rev.*B8,1239. ,(1973)
- [66] Bader S.D. and Moog E. R.; *J.Appl.Phys.*61,(1987),3729,E.R.Moog and S.D. Bader Superlatt, *Microstruct 1*, , 543. (1985).
- [67] Erskine J. L. and Stern E. A., *Phys. Rev. Lett.* 30, 1329 (1973).
- [68] Erskine J. L., *Physica B+C* 89B, 83 (1977).
- [69] Krinchik G. S. and Artemiev V. A., *Eksp Zh.. Teor. Fiz.* 53, 1901 (1967), [*Sov. Phys.JETP* 26, 1080 (1968)].
- [70] Krinchik G. S. and Artemiev V. A., *J. Appl. Phys.* 39, 1276 (1968).
- [71] Burkhard H. and Jaumann J., *Z. Phys.* 235, 1 (1970).
- [72] van Engen P. G., Buschow K. H. J., and Erman M., *J. Magn. Magn. Materials* 30, 374.(1983).
- [73] Katayama T., Awano H., and Nishihara Y., *J. Phys. Soc. Japan* 55, 2539 (1986).
- [74] Ebert H., *Rep. Prog. Phys.* 59, 1665 (1996).
- [75] Oppeneer P. M., Sticht J., and Herman F., *J. Magn. Soc. Japan* 15, S1, (1991).
- [76] Oppeneer P. M., Maurer T., Sticht J., and Kubler J., *Phys. Rev. B* 45, 10924 (1992).
- [77] Oppeneer P. M., Maurer T., Sticht J., and Kubler J., *Z. Phys. B* 88, 309 (1992).
- [78] Guo G. Y. and Ebert H., *Phys. Rev. B* 50, R10377 (1994).

- [79] Guo G. Y. and Ebert H., Phys. Rev. B 51, 12633 (1995).
- [80] Kunes J. and Novak P., J. Phys.: Condens. Matter 11, 6301 (1999).
- [81] Delin A., Eriksson O., Johansson B., Auluck S., and Wills J. M., Phys. Rev. B 60, 14105.(1999).
- [82] Antonov V. N., Perlov A. Y., Shpak A. P., and Yaresko A. N., J. Magn. Magn. Materials 146, 205.(1995).
- [83] Uba L., Polewko A., Uba S., Gontarz R., Yaresko A. N., and Antonov V. N., Phys. status solidi (a) 196, 145.(2003).
- [84] Harp G. R., Farrow R. F. C., Weller D., Rabedeau T. A., and Marks R. F., Phys. Rev. B 48, 17538.(1993).
- [85] Weller D., Harp G. R., Farrow R. F. C., Cebollada A., and Sticht J., Phys. Rev. Lett. 72, 2097 (1994).
- [86] Victor A., Bruce H., Alexander Y.; Electronic Structure And Magneto-Optical Properties Of Solids Kluwer Academic Publishers. (2004).
- [87] Eastman D. E., Himpsel F. J., and Knapp J. A., Phys. Rev. Lett. 44, 95 (1980).
- [88] Uba L., Uba S., Antonov V. N., Yaresko A. N., and Gontarz R., Phys. Rev. B 64, 125105 (2001).
- [89] Weller D., Harp G. R., Farrow R. F. C., Cebollada A., and Sticht J., Phys. Rev. Lett. 72, 2097 (1994).
- [90] Nakajima K., Sawada H., Katayama T., and Miyazaki T., Phys. Rev. B 54, 15950 (1996).
- [91] Oppeneer P. M., in *Ferromagnetic Materials*, edited by E. P. Wohlfarth and K. H. J. Buschow (North-Holland, Amsterdam, Vol. 13, Chap. 3, pp. 229–422.(2000),
- [92] Moser A. et al ; Magnetic recording: advancing into the future, J. Phys. D: Appl. Phys. 35.R157–R167.(2002)
- [93] Suzuki T.; Ultrahigh- Density Information-Storage Materials, Magneto-optic Recording Materials Bulletin. 21(9). 42-47. (1996).
- [94] Mansuripur M.; Recent Developments, The physical principles of magneto-optical recording Cambridge. University Press. P51. (1995)
- [95] Cottenier S.; Density Functional Theory and the Family of LAPW-methods.(2004).
- [96] Ashcroft N. W. and Mermin N.D., Solid State Physics, Ed. Holt-Saunders, Japan (1981).

- [97] Szabo A. and Ostlund N.S., Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Theory, Ed. McGraw-Hill, New York (1989).
- [98] Torrey H C. Phys. Rev. B 104 563. (1956).
- [99] Levy P M.; Solid State Phys. 47 367 . (1994).
- [100] Mott N F Proc. Phys. Soc. 47 571. (1935).
- [101] Webster. P.J, J Phys Chem Solids 32. 1221. (1971).
- [102] Schmidt G and Molenkamp L W; Electrical spin injection: spin-polarized transport from magnetic into non-magnetic semiconductors Semiconductor Spintronics and Quantum Computation ed D D Awschalom et al (Berlin: Springer). (2002).
- [103] Eschrig H. and Pickett W. E., Density functional theory of magnetic systems revisited, Solid State Commun. 118. 123. (2001).
- [104] Capelle K. and Vignale G., Nonuniqueness of the Potentials of Spin-Density-Functional Theory, Phys. Rev. Lett. 86. 5546. (2001).
- [105] Moruzzi V. L., Janak J. F. And Williams A. R., Calculated Electronic Properties of Metals, Pergamon Press, New York. (1978).
- [106] Perdew J. P., Burke K. and Ernzerhof M., Phys. Rev. Lett. 7. 3865. (1996).
- [107] Perdew J.P. and Wang Y., Accurate and simple density functional for the electronic exchange energy : Generalized gradient approximation, Phys.Rev. B 33. 8800. (1986).
- [108] Perdew J.P., Burke K., and Ernzerhof M., Generalized Gradient Approximation Made Simple, Phys. Rev. Lett. 77. 3865. (1996).
- [109] Tran F, Blaha P Schwarz K and Novak P, Phys. Rev. B 74, 155108. (2006).
- [110] Jones W. and March N. H., Theoretical Solid State Physics, N.J. Stone, H. Postmaeds., Elsevier Science Publishers B.V.(1985).
- [111] Koelling D.D. and Harmon B.N., A technique for relativistic spin-polarised calculations, J. Phys. C : Solid State Phys. 10. 3107. (1977).

- [112] Koelling D.D. and Arbman G.O., J. Phys. F 5, 2041 (1975).
- [113] Jepsen O., J. Madsen and Andersen O.K., Phys. Rev. B 18, 605 (1978).
- [114] Krakauer H., Posternak M. and Freeman A.J., Phys. Rev. B 19, 1706 (1979).
- [115] Hamann D.R., Mattheiss L.F and Greenside H.S., Phys. Rev. B 24, 6151 (1981).
- [116] Hamann D.R., Phys. Rev. Lett. 42, 662 (1979).
- [117] Wimmer E., Krakauer H., Weinert M. and Freeman A.J., Phys. Rev. B 24, 864 (1981).
- [118] Jansen H.J.F. and Freeman A.J., Phys. Rev. B 30, 561 (1984).
- [119] Wei S.-H. and Krakauer H., Phys. Rev. Lett. 55, 1200 (1985).
- [120] Wei S.-H., Krakauer H. and Weinert M., Phys. Rev. B 32, 7792 (1985).
- [121] Mattheiss L.F and Hamann D.R., Phys. Rev B 33, 823 (1986).
- [122] Blaha P, Schwarz K., Sorantin P and Trickey S.B., Comp. Phys. Commun. 59, 399, (1990).
- [123] Andersen O. K., Linear methods in band theory, Phys. Rev. B 12 3060. (1975).
- [124] Koelling D.D. and Arbman G. O., Use of energy derivative of the radial solution in an augmented plane wave method: application to copper, J. Phys. F : Met. Phys. 5. 2041. (1975).
- [125] Blaha P. and Schwarz K., Hypert. Interact. 52, 153 (1989).
- [126] Blaha P. and Schwarz K., Hypert. Interact. 52, 153 (1989).
- [127] Schwarz K., Ambrosch-Draxl C. and Blaha P., Phys.Rev. B42, 2051 (1990).
- [128] Winkler B., Blaha P. and Schwarz K.; A. Mineralogist 81, 545 (1996).
- [129] Kohler B., Ruggerone P., Wilke S. and Scheerer M., Phys.Rev.Lett. 74, 1387 (1995).
- [130] Wang X.G., Weiss W., Shaikhutdinov S. K., Ritter M., Peterson M., Wagner F., Schlgl R.and Scheerer M., Phys.Rev.Lett. 81, 1038 (1998).

- [131] Kohler B., Wilke S., Scheerer M., Kouba R. and Ambrosch-Draxl C., *Comput. Phys. Commun.* 94, 21 (1996).
- [132] Desclaux J.P. *Comp. Phys. Commun.* 1, 216. (1969).
- [133] Desclaux J.P, *Comp. Phys. Commun.* 9, 31 ; (1975).
- [134] Blöchl P.E., Jepsen O. and Andersen O.K., *Phys. Rev B* 49, 16223,(1994).
- [135] Koelling D.D. and Arbman G.O. *J.Phys. F : Met. Phys.* 5, 2041. (1975).
- [136] Sjöstedt E, Nordström L and Singh D. *J. Solid State Commun.* (2000).
- [137] Madsen G. K. H., Blaha P, Schwarz K, Sjöstedt E and Nordström L, *Phys. Rev B* 64,195134. (2001).
- [138] Bergman, A., Burkert, T., Sanyal, B., Pessôa, S.F., Nordström, L., Ruban, A.V., Simak, S.I., Eriksson, O.: *Phys. Rev. B* 74, 174409 (2006).
- [139] Sánchez-De Jesús, F, Bolarín-Miró, A. M. Cortés Escobedo, C. A. Torres-Villaseñor G. and Vera-Serna P.; *Analysis and Magnetic Properties of FeCo Alloys Obtained by Mechanical Alloying*”, *Journal of Metallurgy* Volume 2016. (2016).
- [140] Popova A. N., Zaharov Y. A., and Pugachev V. M., “Chemical synthesis, structure and magnetic properties of nanocrystalline Fe-Co alloys,” *Materials Letters*, vol. 74, pp. 173–175, (2012).
- [141] Abdel-Baset, T. A. Yue-Wen Fang, Anis B., Chun-Gang Duan, and Mahmoud Abdel-afiez *Structural and Magnetic Properties of Transition-Metal-Doped Zn_{1-x}Fe_xO*, *Nanoscale Res Lett.* (2016).
- [142] Blaha, P. Schwarz K., Luitz J., Wien2k, *A Full Potential Linearized Augmented Plane Wave Package for Calculating Crystal Properties* (Kalheinz Schwarz, Techn. Universitat Wien, Austria).
- [143] Von Barth U., Hedin L. *J. Phys. C* 5. 1629. (1972).
- [144] Kong L. T. and Liu B. X: *Appl. Phys. Lett.* Vol. 84. 3627. (2004)
- [145] Zhou, L.Zhong, Zhang Y W..and Wang D., *J. Appl. Phys.*, 81. 4472. (1997)
- [146] Wu Y., Stohr J., Hermsmeier B. D., Samant M. G., and Weller D.. *Phys. Rev. Lett.* 69. 2307. (1992).
- [147] Weller D., Wu Y., Stohr J., Samant M. G., Hermsmeier B. D., and Chappert, C. *Phys. Rev. B* 49. 12888. (1994).

- [148] Cros V., Petroff F, Vogel, ., Fontaine J. A., Menendez J. L., Cebollada A., W.Grange, J.P.Kappler, M. Finazzi, and N. Brookes, Europhys. Lett. 49(2000) 807.
- [149] Hamad and M. Richter B. A., Phys.Rev B 83. 245135. (2011).
- [150] Kerr J., Philos.Mag.3, 321 (1877).
- [151] Grundy P.J., Mater. Sci. Technol. B 3. 568. (1994).
- [152] Martin D.H, Neal K F and Dean T J . Proc. R . Soc 86 605. (1965).
- [153] Halilov S.V., R. Feder, Solid State Commun. 88. 749. (1993).
- [154] Kubo R., J. Phys. Soc. Jpn. 12. 570. (1957).
- [155] Kubo J., J. Phys. Soc. Jpn 12, 570.(1972)
- [156] Wang C.S., J. Callaway, Phys. Rev. B 9. 4897.(1974)
- [157] Callaway, J. Quantum Theory of the Solid State (Academic, New York, (1991).
- [158] Reim W.and Schoenes, J.in Ferromagnetic Materials ,edited by Wohlfarth E.P and Buschow K.H.J. (North-Holland, Amesterdam,),vol.4,p.588. (1988).
- [159] Kahn F.J., Pershan P.S., J.P. Remeika, Phys. Rev. 186 891. (1969).
- [160] Schoenes J., Z. Phys. B 20, 345 (1975).
- [161] Guo G. Y. and Ebert H., Phys. Rev. B 5010377. (1994).
- [162] Feng W., Guo G., Zhou J., Yao Y.and Niu Q., Phys.Rev.B92144426. (2015).

Structural, Magnetic, and Magneto-Optical Properties of Fe/Cu Superlattices

Amina Djabri¹ · Mohamed Mahdi¹ · Radia Boukhalfa¹ · Mustafa Erkovan² · Yurii Chumakov³ · Faïçal Chemam¹

Received: 4 April 2017 / Accepted: 11 April 2017
© Springer Science+Business Media New York 2017

Abstract The magnetic and magneto-optical properties of face-centered cubic (fcc)-Fe/*n*Cu (001) superlattices are studied and compared with the fcc-Fe bulk structure. This is done using the method of all electron linearized augmented wave planes (FP L APW) in the local spin density functional approximation (DFT), implemented in the WIEN2k code, with the local spin density approximation for the exchange and correlation. As far as the magnetic properties are concerned, a significant increase of the magnetic moment of the iron atoms and the magnetic anisotropy energy (MAE) of the system is observed with increasing copper layers. A slight polarization occurs, with emergence of a small magnetic moment of copper atoms, due to the hybridization between the iron and copper orbitals. An antiferromagnetic phase of the system is observed, caused by the *d* states. The contraction film's structure explains the continuous decay of the magnetic moment; therefore, the magneto-optical Kerr effect response could be investigated through the optical conductivity. In spite of their great magnetic moment, Kerr's spectra are explained in terms of optical transitions and the MAE of the systems is calculated.

Keywords DFT · Superlattices · Magneto-optics · Magnetic anisotropy · Fe(fcc) · Cu

1 Introduction

The magnetic nanostructure with different magnetic compounds of iron like Fe/Co, Fe/Mn, Fe/Ni, and Fe/Au [1–4] is characterized by enhanced magnetic moments and large magnetic anisotropic energy, different from those of the bulk materials. The Fe-Cu system has been studied by different groups [5–8]; the system is interesting because of its fundamental physical properties and advanced applications in giant magnetoresistance (GMR) and spintronic devices [9–11]. Many experimental and theoretical investigations of the magnetic properties of the face-centered cubic (fcc)-Fe/Cu have been carried out. Mitani et al. [12] made correlations between the magnetic moment and the interlayer distance, by preparing experimentally the epitaxial growth of fcc-Fe layers on Cu (1 0 0). The experimental magneto-optical Kerr effect (MOKE) of the fcc-Fe on Cu(1 0 0) is treated in [13]. The magnetic properties and structure of the Fe/Cu (1 0 0) surface and Cu/Fe(*n*)/Cu sandwich system have been extensively studied by first-principles calculations [14, 15]. Zhou et al. have calculated the exchange coupling constant *J* by using the Ising model and the semi-relativistic all-electron linearized augmented planewave (LAPW) method for the fcc-*n*Fe/1Cu(001) (*n* = 1–9 ML) superlattices [16–18]. Kuch et al. [19] found that Fe in FeCu alloy exhibits a magnetic moment comparable to that in Fe/Cu thin films as well as the ratio between orbital and spin contribution to the Fe *d* moments is significantly enhanced in alloy. The main objective of this study is to carry out the first-principles calculations of the magnetic properties and electronic structures of the Fe/*n*Cu (*n* = 1, 3, 5, 7, 9) superlattices,

✉ Faïçal Chemam
fchemam@gmail.com

¹ Laboratory of Applied and Theoretical Physics, Sciences of Matter Department, University Laarbi Tebessi, Tebessa, Algeria

² Nanoscience and Nanotechnology Department, Sakarya University, Adapazarı, Sakarya Turkey

³ Department of Physics, Gebze Technical University, Çayirova, Kocaeli, Turkey

and investigate the correlation between the structure and magnetic properties of this system. This one helps in understanding the electronic structure and the magnetic phase of Fe layers. Exchange coupling in the Fe/*n*Cu system is carried out as the first part of this work. The second part of this paper will focus on the spin density functional theory calculations with spin orbit coupling, in order to obtain the magnetic anisotropy energy (MAE). The third part aims to investigate the magneto-optical properties which depend on the magnetic moment and the inter-layer magnetic coupling found after the relaxation of the studied system.

2 Computational Details

We used the self-consistent method, known as the full-potential linearized augmented plane wave (FLAPW) within the density functional theory, and the results are obtained by the Wien2k code with local spin density approximation (LSDA) [20, 21]. The muffin-tin radius (RMT) is equal to 2 for all supercell Fe/*n*Cu; *n* is the number of copper layers. The cutoff parameters are RMT Kmax = 7 for the plane wave and RMT Gmax = 12 for the charge density, where Kmax represents the maximum wave number of the plane wave in the interstitial region and Gmax is the maximum reciprocal lattice vector. The total energy is converged to better than 0.0001 Ry; the default value of the energy separation between core/valence is −6.0 Ry, a kpoint mesh of 20 × 20 × 10 is used for all supercells in the electronic structure, magnetic, and magneto-optic calculations.

The fcc structures of Fe and Cu were optimized, and the found cell parameters are equal to 3.613 and 3.615 Å, respectively. The diagrams for Fe/1Cu and Fe/5Cu are shown in Fig. 1. The values of the lattice parameters are

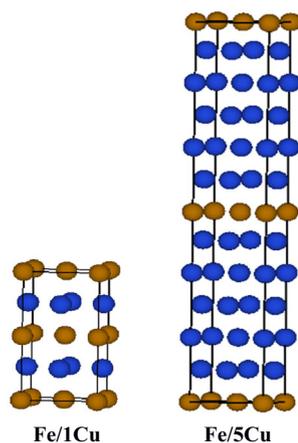


Fig. 1 The supercell structures *Fe/1Cu* and *Fe/5Cu*

Table 1 Lattice constants of each superlattice structure

Superlattice	<i>a</i> (Å°)	<i>c</i> (Å°)	<i>c/a</i>
Fe/Cu	3.614	7.228	2
Fe/3Cu	3.6145	14.458	4
Fe/5Cu	3.61466	21.688	6
Fe/7Cu	3.61475	28.918	8
Fe/9Cu	3.6148	36.148	10

given by equations of (01) and (02) where the lattice constants could be calculated by

$$a_{\text{Fe}/n\text{Cu}} = \frac{a_{\text{Fe}} + na_{\text{Cu}}}{n + 1} \quad (1)$$

$$c_{\text{Fe}/n\text{Cu}} = (n + 1) a_{\text{Fe}-\text{Cu}} \quad (2)$$

where *n* is the number of atomic planes (*n* = 1, 3, 5, 7, 9) with a step of *c/a* = 2 is the ratio of tetragonality. The *a*, *c*, and *c/a* values are shown in Table 1 for Fe/*n*Cu with a different *n*.

3 Results and Discussions

3.1 Magnetic Properties

We have calculated the magnetic moment of each atom in the atomic plane of the superlattice. The values are presented in Table 2; the Fe magnetic moment values differ from the iron γ magnetic moment which is equal to 1.89 μ_B as mentioned in [22]; it ranges between 2.4 and 2.5 μ_B , this is called a high magnetic state [23]. Based on analysis of PDOS (Fig. 2), it was found the small hybridization between the iron and copper orbitals. It means that *d*-electrons on Fe atoms in studied superlattices are more localized in comparison with those in [22] that leads to increasing of observed magnetic moments. Due to this hybridization, the copper atoms possess an induced magnetic moment which is characterized by its small value [19]. The magnetic moment of Cu is decreasing with the increasing of the number of monolayers [24]. The Cu-induced magnetic moment was caused by the hybridizations between the iron and copper orbitals, and it is characterized by its small value [19].

The total and partial density of states (TDOS, PDOS) of Fe/Cu superlattices are presented in Fig. 2. For the three structures Fe/1Cu, Fe/3Cu, and Fe/5Cu, the TDOS is mostly dominated by the contribution of Fe and Cu atoms which are close to the Fermi level; both spin-up and spin-down DOS are asymmetrical with respect to the energy axes that leads to formation of magnetic moments of Fe and Cu atoms in

superlattices. The PDOS of Fe and Cu layers have a *d* character, and it was found that the magnetic coupling in the iron layers is antiferromagnetic.

In order to study the interlayer exchange coupling, the total energy for ferromagnetic (F) and antiferromagnetic (AF) ordering of Fe for each Cu layer is calculated using the LSDA approach. The different energies are shown in Table 3 for the superlattices of Fe/*n*Cu. The *J* value is computed with this relation:

$$J(d) = E_{\text{tot}}^{\uparrow\downarrow}(d) - E_{\text{tot}}^{\uparrow\uparrow}(d) \tag{3}$$

where *d* is the thickness of the spacer layer, $E_{\text{tot}}^{\uparrow\downarrow}(d)$ is the total energy of the system in AF arrangement, and $E_{\text{tot}}^{\uparrow\uparrow}(d)$ is the total energy of the system in F arrangement.

The total energy of different magnetic configurations in these superlattices is characterized by a strong AFM exchange interaction between nearest-neighbor layers (*J* < 0) for both interface and interior ones. The AFM coupling is stronger for the interface layer than for the interior one [25].

The magnetic anisotropy phenomenon is found to play a very important role in the multilayer structure; it is produced as a result of spin-orbit coupling. The values of the energy of the magnetic anisotropy (MAE) in the cubic magnetic transition metals are very low. But in transition metal multilayers, this intrinsic value increases; this increase can be achieved due to the rupture of the cubic symmetry at the interfaces [26, 27].

The intrinsic MAE is given by the difference between the total energies of the systems with magnetic moments which are aligned along the [001] and [100] directions respectively [28].

$$\text{MAE} = E_{001} - E_{100} \tag{4}$$

Analysis of MAE showed that its value does not depend on structure of superlattices (Table 4). The minimum of the MAE absolute value was observed for Fe/3Cu while its maximum belongs to Fe/5Cu.

3.2 Magneto-Optical Properties

The dispersion of the optical conductivity tensor $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ as a function of the frequency ω of the incoming electromagnetic radiation was calculated from the energy band structure by means of the Kubo-Greenwood [29, 30] linear response [31]

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{-ie^2}{m^2 h V_{uc}} \sum_k \sum_{nn'} \frac{f(\epsilon_{nk}) - f(\epsilon_{n'k})}{\omega_{nn'}(k)} \frac{\prod_{nn}^{\prime\alpha}(k) \prod_{nn}^{\prime\beta}(k)}{\omega - \omega_{nn'}(k) + i\gamma} \tag{5}$$

The plane light reflected on a metallic surface of a thin layer becomes elliptically polarized, and its major axis undergoes a slight rotation. The imaginary part of the non-diagonal elements of the conductivity tensor describes the magneto-optical absorption. This absorption part is directly proportional to the difference between the left (−) and right (+) absorption of circularly polarized light (LCP and RCP), and its sign is directly related to the experimentally investigated geometry method, known to give the largest Kerr signal.

For most materials, the two parameters θ_k and ϵ_k are less than 1°; they are given by the following relations [32, 33]:

$$\varphi_k = \theta_k + i\epsilon_k \tag{6}$$

$$\theta_k + i\epsilon_k = \frac{-\sigma_{xy}}{\sigma_{xx} \sqrt{1 + \left(\frac{4\pi i}{\omega}\right) \sigma_{xx}}} \tag{7}$$

where θ_k is the Kerr rotation and ϵ_k the Kerr ellipticity.

In order to study the magneto-optical behavior of our systems, we have adopted the spectral calculation of the Kerr effect in its polar geometry (P-MOKE), and only considered inter-band contributions in the presented results. The range of energies of the incident radiation we have used has been widened up to 14 eV.

Figure 3 presents the absorption optical conductivity curve σ_{xx}^1 and dispersive σ_{xx}^2 (that can be obtained from the corresponding absorptive parts by use of the Kramers-Kronig transformation [34] for the three systems). In the energy interval 1–6 eV, the main peak is well reproduced

Table 2 Values of the magnetic moment for different Fe/*n*Cu structures (with *n* ranging from 1 to 9)

	Models	Fe	Cu1	Cu2	Cu3	Cu4	Cu5	Cu6	Cu7	Cu8	Cu9
Magnetic moment <i>m</i>	Fe	1.90									
LSDA (μ _B /atom)	Fe/Cu	2.40	0.103								
	Fe/3Cu	2.43	0.064	−0.012	0.064						
	Fe/5Cu	2.45	0.049	−0.006	−0.004	0.009	0.074				
	Fe/7Cu	2.47	0.074	−0.005	0.019	0.0004	0.001	−0.006	0.089		
	Fe/9Cu	2.50	0.072	−0.006	0.0006	0.0002	0.0008	0.0003	0.0009	−0.0056	0.076

Fig. 2 TDOS and PDOS of Fe/1Cu (a), Fe/3Cu (b), and Fe/5Cu (c)

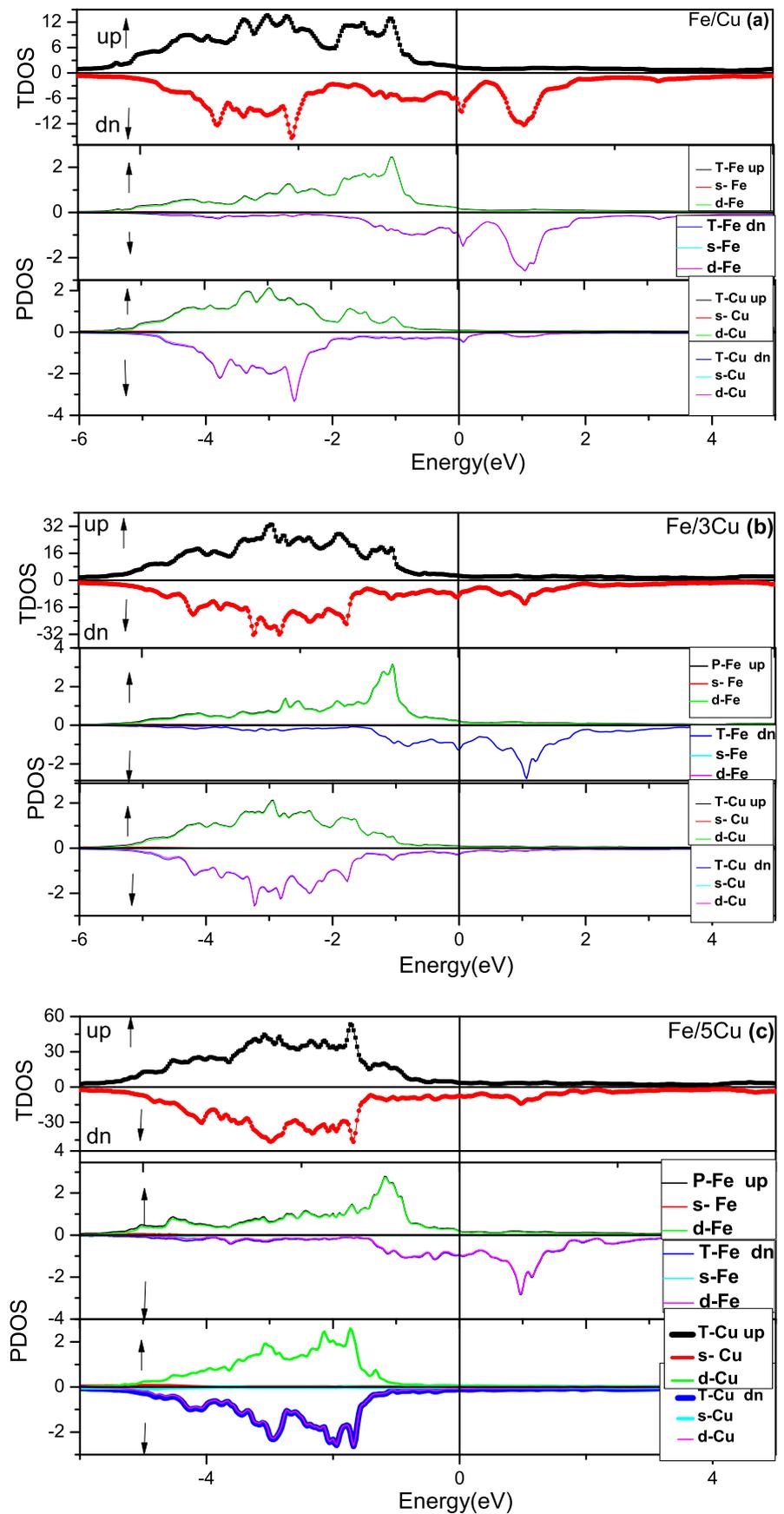


Table 3 Values of the exchange coupling energy J for different Fe/ n Cu structures (with n ranging from 1 to 9)

Superlattice	$E_{\text{tot}}^{\downarrow\downarrow}$ (Ry)	$E_{\text{tot}}^{\uparrow\uparrow}$ (Ry)	$J = E_{\text{tot}}^{\downarrow\downarrow} - E_{\text{tot}}^{\uparrow\uparrow}$ (mRy)	Coupling
Fe/1Cu	-23,384.1815	-23,384.1684	-16	AF
Fe/3Cu	-49,823.6370	-49,823.6360	-1	AF
Fe/5Cu	-76,263.3791	-76,263.3785	-0.56	AF
Fe/7Cu	-102,701.2790	-102,701.2148	-64.22	AF
Fe/9Cu	-129,140.5190	-129,140.4659	-53.10	AF

Table 4 Values of MAE in different supercells

Superlattice	E_{001}	E_{100}	MAE = $E_{001} - E_{100}$ (meV)
Fe/1Cu	-157.6849	-157.6848	-2.1
Fe/3Cu	-350.8397	-350.8396	-1.2
Fe/5Cu	-574.3663	-574.3660	-4.38
Fe/7Cu	-690.5775	-690.5773	-3.07
Fe/9Cu	-869.8808	-869.8806	-1.5

Fig. 3 The absorption optical conductivity curve σ_{xx}^1 (a) and dispersive σ_{xx}^2 (b)

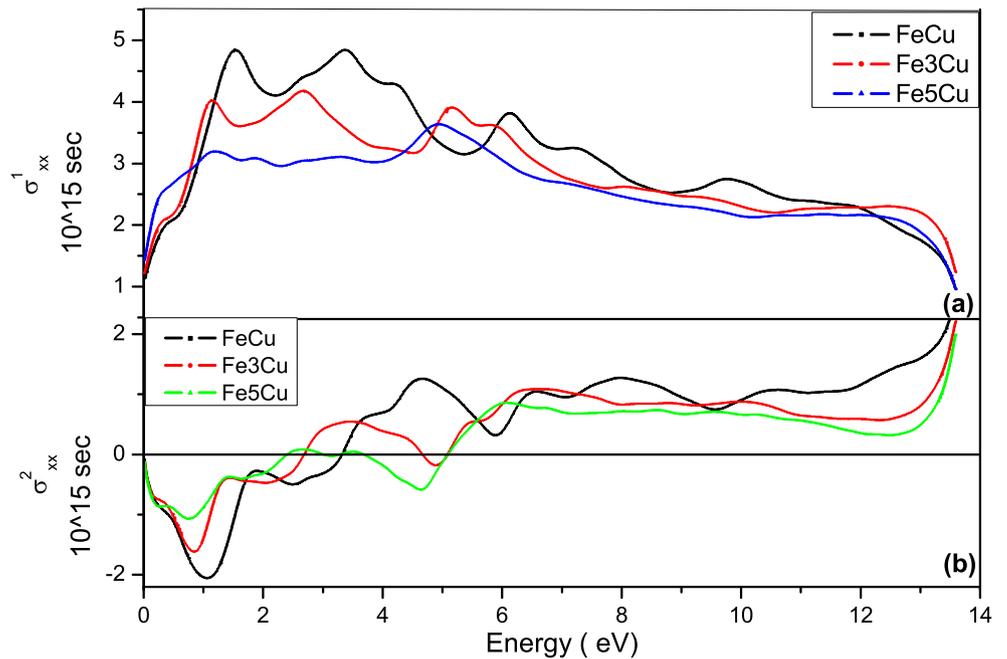
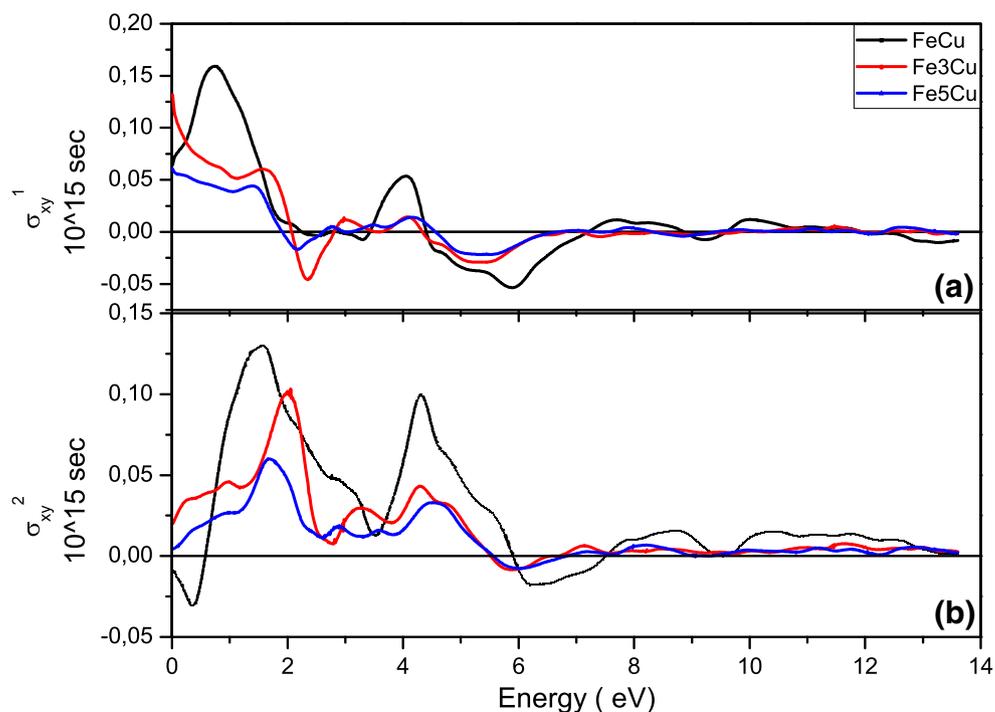


Fig. 4 The calculated real off-diagonal σ_{xy}^1 (a) and imaginary off-diagonal σ_{xy}^2 (b)



by the calculations. This result is valid for the two real and imaginary parts of the conductivity of the diagonal part; this is in agreement with the Kramers-Kronig (KK) relation of both real and imaginary parts.

We find also that the characteristic of all spectra is the presence of three peaks, due to interband transitions, at ~ 1.7 eV, for all systems. The two other values of peaks depend

on the system; they are found in FeCu at ~ 3.5 and 6 eV, in Fe3Cu at ~ 3 and 5.2 eV, and in Fe5Cu at ~ 3.5 and 5 eV.

As shown in the lower panel of Fig. 3b, the shape of σ_{xx}^2 of spectra at lower energies (< 2 eV) changes with the increase of Cu atoms in the systems whereas for more energies high (> 6 eV), the characteristics are almost the same for three systems. Similar trends are also observed for σ_{xx}^1

Fig. 5 Kerr rotation angles θ_k (a); ellipticity ε_k (b) for the three systems

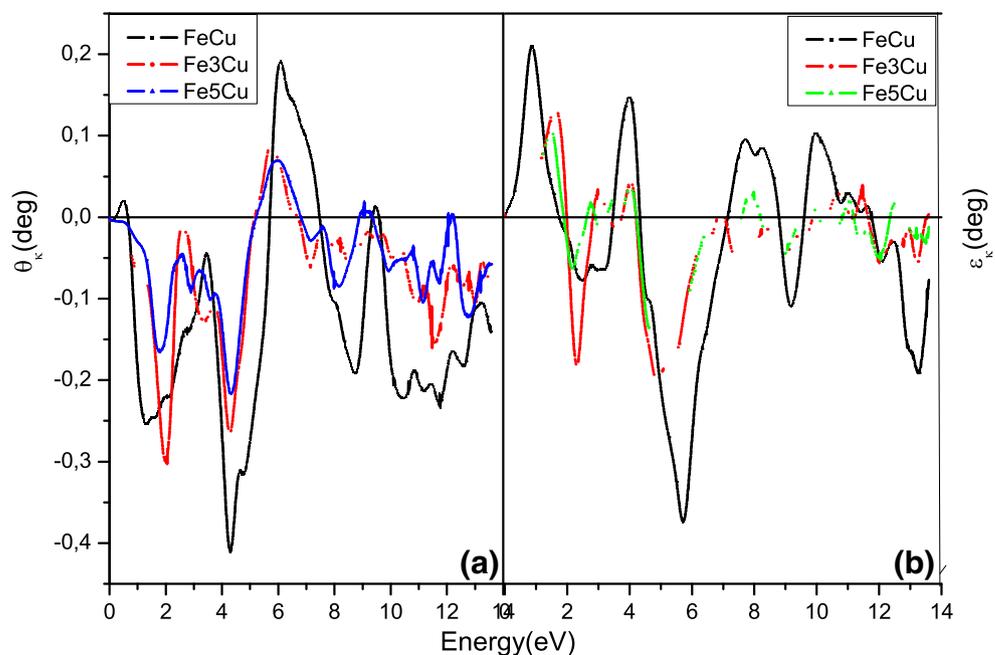
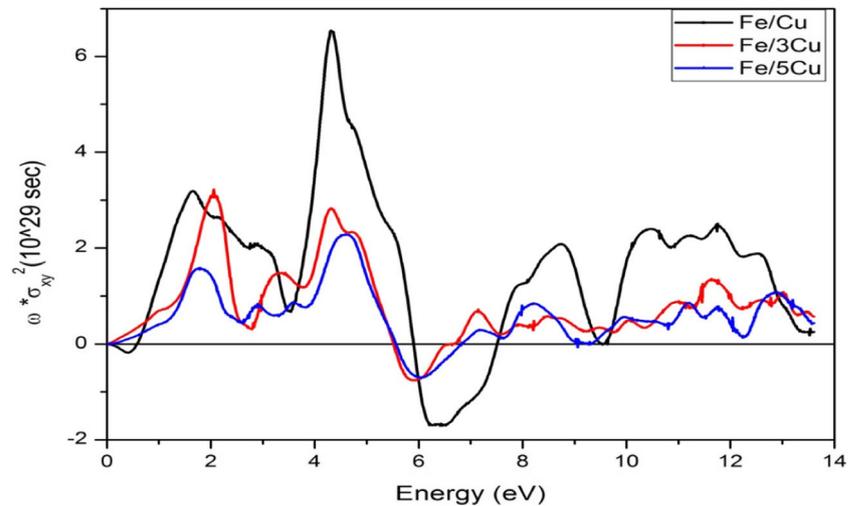


Fig. 6 Calculated absorptive part of the off-diagonal optical conductivity $\omega\sigma_{xy}^2$



spectra in the present higher energy range of all systems. Thus, the optical response in the far ultraviolet (region of energy >6 eV) is identical for the three systems.

The spectra of σ_{xy}^1 and σ_{xy}^2 of the three studied systems have oscillatory peaks indicated in the low-energy zone, their amplitude decreased to a small value for energy greater than 6 eV (Fig. 4a, b), and they are also identical in line and in magnitude. The positive (or negative) suggests that the interband transitions are dominated by excitations due to left (right) polarized light [35].

The corresponding Kerr rotations and ellipticity are illustrated in Fig. 5a, b. These spectra revealed that all the studied systems have similar characteristics in the range of the selected energy. For θ_k , there are three negative peaks around 1.8, 4, and 11 eV, which indicates the dominance of LCP of polarized light. After around 6 eV, there is a predominance of the CPR characteristic with a positive peak of 0.2° , 0.1° , and 0.05° in the Kerr rotation of all systems. The largest Kerr rotation angle that appears in Fe/Cu is $\sim 0.4^\circ$ at an incident photon energy of 4.2 eV. This angle arising from antiferromagnetic is remarkably comparable to those of transition metals, such as the bulk and multilayers of Fe and Co studied earlier [36, 37].

In the energy range, we see that the inversions of sign of θ_k and ε_k are repeated when ε_k traverses the zero line, and a peak turns up in the θ_k spectrum, and vice versa, which is possibly attributed to the Kramers-Kronig relation [38].

The absorbing off-diagonal optical conductivity $\omega\sigma_{xy}^2$ is proportional to the difference in absorption rate of circularly left-polarized and right-polarized light, and its sign is directly related to the spin polarization of the states responsible for the interband transitions producing the structures in the $\omega\sigma_{xy}^2$ spectra [39]. The Kerr rotation can be improved by larger off-diagonal conductivities. From Fig. 6, we also found that the negative and positive peaks in the Kerr rotation spectra correspond to the maxima and minima

of σ_{xy}^2 . This shows the dominant contribution of the off-diagonal conductivity to the magneto-optical properties.

4 Conclusion

The electronic structures and magnetic properties of the Fe/ n Cu ($n = 1, 3, 5, 7, 9$) superlattices have been studied by the DFT method implemented in the Wien2k code using LSDA. An increase was found in the magnetic moment of iron atoms in studied superlattices in comparison with fcc Fe because of the small hybridization between the iron and copper orbitals. Due to this hybridization, the copper atoms possess small induced magnetic moments. The strong antiferromagnetic coupling in the nearest iron-containing neighbor layers was found for both interface and interior ones. The calculated MAE does not depend on the structure of the superlattices; its minimum and maximum absolute values were observed for Fe/3Cu and Fe/5Cu respectively. The magneto-optical behavior of superlattices has been studied by the spectral calculation of the Kerr effect in its polar geometry (P-MOKE), considering the inter-band contributions only. The largest Kerr rotation angle was found for Fe/1Cu which is equal to $\sim 0.4^\circ$ at an incident photon energy of 4.2 eV. This angle arose from antiferromagnetic coupling which is comparable to those of transition metals, such as the bulk and multilayers of Fe and Co.

Acknowledgments We are grateful to Prof. Layadi Abdelahamid from Setif University (Algeria) for his suggestions and discussions.

References

1. Bergman, A., Burkert, T., Sanyal, B., Pessôa, S.F., Nordström, L., Ruban, A.V., Simak, S.I., Eriksson, O.: Phys. Rev. B **74**, 174409 (2006)

2. Ekholm, M., Abrikosov, I.A.: *Phys. Rev. B* **84**, 104423 (2011)
3. Iaiá, D., Kubetzka, A., Bergmann, K., Wiesendanger, R.: *Phys. Rev. B* **93**, 134409 (2016)
4. Uba, L., Uba, S., Antonov, V.N., Yaresko, A.N., Ślęzak, T., Korecki, J.: *Phys. Rev. B* **62**, 13731 (2000)
5. Drittler, B., Stefanou, N., Blugel, S., Zeller, R., Dederichs, P.H.: *Phys. Rev. B* **40**, 8203 (1989)
6. Dederich, H., Dritler, B., Zeller, R., Ebert, H., Weinert, W.: *Hyperfine Inter.* **60**, 547 (1990)
7. Kajzar, F., Parette, G.: *J. Appl. Phys.* **50**, 1966 (1979)
8. James, P., Eriksson, O., Johansson, B., Abrikosov, I.A.: *Phys. Rev. B* **59**, 419 (1999)
9. Rabbering, F., Wormeester, H., Everts, F., Poelsema, B.: *Phys. Rev. B* **79**, 075402 (2009)
10. Lee, S.-G., Chung, Y.-C.: *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42**, 135305 (2009)
11. Ohresser, P., et al.: *Phys. Rev. B* **59**, 3696 (1999)
12. Mitani, S., Kida, A., Matsui, M.: *J. Magn. Magn. Mater.* **126**, 76 (1993)
13. Qian, D., Jin, X.F.: *Phys. Rev. Lett.* **87**, 227204 (2001)
14. Vollmer, R., van Dijken, S., Schleberger, M., Kirschner, J.: *Phys. Rev. B* **61**, 1303 (2000)
15. Spisak, D., Hafner, J.: *Phys. Rev. B* **64**, 205422 (2001)
16. Zhou, Y.M., Geng, W.T., Wang, D.S.: *Phys. Rev. B* **57**, 5029 (1998)
17. Memmel, N., Detzel, T.: *Surf. Sci.* **307–309**, 490 (1994)
18. Zhou, Y.-M., Geng, W.-T., Wang, D.-S.: *J. Magn. Magn. Mater.* **177**, 1321 (1998)
19. Kuch, W., Salviatti, M., Gao, X., Klaua, M., Barthel, J., Mohan, Ch.V., Kirschner, J.: *J. Appl. Phys.* **83**, 7019 (1998)
20. Blaha, P., Schwarz, K., Luitz, J.: Wien2k, A full potential linearized augmented plane wave package for calculating crystal properties. Kalheinz Schwarz, Technology Universitat Wien, Austria (2004)
21. Von Barth, U., Hedin, L.: *J. Phys. C* **5**, 1629 (1972)
22. Wohlfarth: *Ferromagnetic Materials*, vol. 1 North-Holland Publishing Company (1980)
23. Kong, L.T., Liu, B.: *Appl. Phys. Lett.* **84**, 3627 (2004)
24. Zhou, Y., Zhong, L., Zhang, W., Wang, D.: *J. Appl. Phys.* **81**, 4472 (1997)
25. Zhou, Y., Geng, W., Wang, D.: *Phys. Rev. B* **57**, 5029 (1998)
26. Wu, Y., Stohr, J., Hermsmeier, B.D., Samant, M.G., Weller, D.: *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2307 (1992)
27. Weller, D., Wu, Y., Stohr, J., Samant, M.G., Hermsmeier, B.D., Chappert, C.: *Phys. Rev. B* **49**, 12888 (1994)
28. Cros, V., Petroff, F., Vogel, J., Fontaine, A., Menendez, J.L., Cebollada, A., Grange, W., Kappler, J.P., Finazzi, M., Brookes, N.: *Europhys. Lett.* **49**, 807 (2000)
29. Zhang, H., Richter, M., Koepernik, K., Opahle, I., Tasnadi, F., Eschrig, H.: *New J. Phys.* **11**, 043007 (2009)
30. Grundy, P.J.: *Mater. Sci. Technol.* **B 3**, 568 (1994)
31. Kubo, R.: *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**, 570 (1957)
32. Kubo, J.: *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**, 570 (1972)
33. Wang, C.S., Callaway, J.: *Phys. Rev. B* **9**, 4897 (1974)
34. Kahn, F.J., Pershan, P.S., Remeika, J.P.: *Phys. Rev.* **186**, 891 (1969)
35. Guo, G.Y., Ebert, H.: *Phys. Rev. B* **51**, 12633 (1995)
36. Schoenes, J.: *Z. Phys. B* **20**, 345 (1975)
37. Guo, G.Y., Ebert, H.: *Phys. Rev. B* **50**, 10377 (1994)
38. Feng, W., Guo, G., Zhou, J., Yao, Y., Niu, Q.: *Phys. Rev. B* **92**, 144426 (2015)
39. Bennett, H.S., Stern, E.: *Phys. Rev.* **137**, A448 (1965)