
THÈSE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ JOSEPH FOURIER

(Discipline : Physique)

Présentée et soutenue publiquement par

Adeline CRÉPIEUX

Le 29 Mai 1998

PROPRIÉTÉS DES FILMS MINCES MAGNÉTIQUES
ÉTUDE THÉORIQUE DE QUELQUES PROBLÈMES

Directrice de thèse :

C. LACROIX

Composition du jury :

Président :

M. VALLADE

Rapporteurs :

P. BRUNO

B. COQBLIN

Examineurs :

P.M. LEVY

C. LACROIX

*"Jeunes, nous avons quelque temps
fréquenté un maître,
Quelque temps nous fûmes heureux
de nos progrès;
Vois le fond de tout cela : que nous arriva-t-il ?
Nous étions venus comme de l'eau,
nous sommes partis comme le vent."*

Omar Khayyam

(mathématicien et poète persan, XI^{ème} siècle)

REMERCIEMENTS

Je souhaite avant tout remercier Claudine Lacroix qui a dirigé ce travail avec patience. Elle a toujours su proposer des pistes nouvelles lorsque je pensais me trouver dans une impasse. J'apprécie particulièrement l'attention constante qu'elle porte aux études expérimentales et qu'elle a su me faire partager. Notamment en encourageant les discussions avec les expérimentateurs du laboratoire Louis Néel. Je tiens à remercier à ce propos Dominique Givord et Johann Rothmann.

Je remercie Messieurs P.M. Levy et M. Vallade qui ont accepté de faire partie du jury ainsi que P. Bruno et B. Coqblin pour leur attention en tant que rapporteurs.

L'un des sujets abordé dans cette thèse est le fruit d'une collaboration avec deux chercheurs russes : Anatole Vedyayev et Natalia Ryzhanova qui étaient en séjour à Grenoble durant plusieurs mois. Sans eux (et leur formalisme), je n'aurai pas eu l'occasion d'aborder un tel sujet. Je tiens à leur exprimer ma profonde reconnaissance et leur sais gré de leur extrême gentillesse.

Cette thèse a été préparé au laboratoire de magnétisme Louis Néel, je tiens à remercier l'ensemble des “permanents” et “non permanents” en sursis et ceux déjà évanouis (Chantal, Amalia, Berta, Ricardo, Pascal, Jean-Eric, Jochen, Olivier).

Une pensée particulière pour François Duhem et nos discussions à n'en plus finir, que ce soit à propos d'une question de physique ou de tout autre sujet insolite.

Merci à Jean-Christophe Toussaint et Brinducha Kerkvorkian qui m'ont fait une petite place dans leur bureau pendant les mois de rénovation du bâtiment K.

Enfin, je remercie les malheureux correcteurs : Etienne du Tremolet de Lacheisserie et Jacques Pierre qui ont accepté de faire une critique scientifique du manuscrit, Eve-Marie Verhasselt et Benoît Campion pour la critique littéraire et esthétique.

SOMMAIRE

INTRODUCTION GÉNÉRALE

p.13

1. EFFETS DE SURFACE	p.16
1.1. Augmentation du moment de spin et du moment orbital	p.16
1.2. Modification des interactions magnétiques au voisinage d'une surface	p.17
2. PROPRIÉTÉS DES FILMS MINCES MAGNÉTIQUES	p.19
2.1. Effets de taille classique et quantique	p.19
2.2. Distribution des grandeurs physiques	p.20
2.3. Non compensation dans les antiferromagnétiques	p.22
3. PROPRIÉTÉS DES MULTICOUCHES MAGNÉTIQUES	p.23
3.1. Oscillation du couplage intercouche	p.23
3.2. Magnétorésistance géante	p.24
RÉFÉRENCES	p.26

CHAPITRE 1 : INTERACTION ANTISYMMÉTRIQUE DANS LES FILMS MINCES MAGNÉTIQUES

p.31

INTRODUCTION	p.33
1. DÉTERMINATION DU VECTEUR \mathbf{D}	p.37
1.1. Règles de symétrie	p.37
1.2. Moments magnétiques localisés : formalisme de Moriya	p.40
1.3. Matériau magnétique métallique : mécanisme à trois sites	p.46
1.4. Conclusion	p.49
2. MODIFICATION DE L'ORDRE MAGNÉTIQUE	p.51
2.1. Modification de l'ordre magnétique due à des interactions antisymétriques entre sites de surface et sites de volume	p.52
2.2. Modification de l'ordre magnétique due à des interactions antisymétriques entre sites de surface	p.59
2.3. Conclusion	p.60

CONCLUSION	p.61
ANNEXE A : Matrices de couplage spin-orbite et de transfert	p.62
ANNEXE B : Autre schéma de champ cristallin - Surface (001)	p.64
RÉFÉRENCES	p.67

CHAPITRE 2 : EFFET KONDO ET INTERACTION RKKY DANS LES FILMS MINCES MAGNÉTIQUES **p.71**

INTRODUCTION	p.75
1. IMPURETÉ KONDO DANS UN FILM	p.79
1.1. Hamiltonien de Anderson	p.79
1.2. Transformation de Schrieffer-Wolff	p.80
1.3. Distribution des températures de Kondo	p.84
1.4. Résistivité Kondo en fonction de l'épaisseur	p.90
2. RÉSEAU KONDO	p.97
2.1. Interaction RKKY dans un film	p.98
2.2. Compétition entre l'effet Kondo et l'interaction RKKY	p.101
CONCLUSION	p.111
ANNEXE A : Densités d'états locales	p.112
A.1. Approximation des liaisons fortes	p.112
A.2. Approximation des électrons libres	p.117
ANNEXE B : Méthode variationnelle	p.120
ANNEXE C : Calcul des fonctions de Green	p.122
RÉFÉRENCES	p.124

CHAPITRE 3 : EFFET HALL EXTRAORDINAIRE DANS LES FILMS MINCES MAGNÉTIQUES **p.129**

INTRODUCTION	p.131
1. EFFET HALL	p.133
1.1. Effet Hall normal	p.133
1.2. Effet Hall extraordinaire	p.134
2. MODÈLE ET HYPOTHÈSES	p.137

2.1. Régime de faible diffusion	p.137
2.2. Formule de Kubo	p.139
2.3. Couplage spin-orbite	p.140
2.4. Expressions des conductivités d'un film	p.141
2.5. Détermination des fonctions de Green \tilde{G}	p.143
3. ÉTUDE D'UNE MONOCOUCHE D'ÉPAISSEUR D	p.147
4. ÉTUDE D'UNE BICOUCHE MAGNÉTIQUE	p.151
4.1. Géométrie CIP	p.151
4.2. Géométrie CPP	p.155
4.3. Remarques et comparaisons	p.156
4.4. Variation angulaire	p.156
CONCLUSION	p.161
ANNEXE A : Fonctions de Green dans la bicouche	p.162
ANNEXE B : Expression de ρ_H en géométrie CIP	p.163
ANNEXE C : Expression de ρ_H en géométrie CPP	p.165
RÉFÉRENCES	p.166

CONCLUSION GÉNÉRALE

p.171

INTRODUCTION GÉNÉRALE

TABLE DES MATIÈRES

1. EFFETS DE SURFACE	p.16
1.1. Augmentation du moment de spin et du moment orbital	p.16
1.2. Modification des interactions magnétiques au voisinage d'une surface	p.17
 2. PROPRIÉTÉS DES FILMS MINCES MAGNÉTIQUES	 p.19
2.1. Effets de taille classique et quantique	p.19
2.2. Distribution des grandeurs physiques	p.20
2.3. Non compensation dans les antiferromagnétiques	p.22
 3. PROPRIÉTÉS DES MULTICOUCHES MAGNÉTIQUES	 p.23
3.1. Oscillation du couplage intercouche	p.23
3.2. Magnétorésistance géante	p.24
 RÉFÉRENCES	 p.26

Les films minces et multicouches magnétiques sont des systèmes largement étudiés actuellement, aussi bien au niveau expérimental que théorique. Ils possèdent un certain nombre de propriétés particulières qui se distinguent de celles des matériaux massifs. L'étude théorique de certaines de ces propriétés constitue l'objet de cette thèse. Nous avons abordé trois sujets différents :

- **L'interaction antisymétrique de Dzyaloshinsky-Moriya**

Au voisinage d'une surface, la brisure de symétrie permet l'existence d'une interaction antisymétrique entre les spins. Dans le premier chapitre de cette thèse, nous présentons le calcul de cette interaction ainsi que la modification de l'ordre magnétique qu'elle peut induire au voisinage des surfaces d'un film.

- **La compétition entre l'effet Kondo et l'interaction RKKY**

Dans un deuxième chapitre, nous exposons le calcul de la température de Kondo associée à une impureté dans un film et montrons qu'elle dépend de la position de l'impureté dans le film. De même, les valeurs du couplage Kondo et des interactions RKKY sont distribuées en énergie. Finalement, nous montrons que la distribution de ces constantes permet de prévoir un magnétisme hétérogène à travers un film de type réseau Kondo.

- **L'effet Hall extraordinaire**

Dans un troisième chapitre, nous présentons le calcul de la résistivité de Hall extraordinaire pour deux systèmes différents : une monocouche avec un effet de taille quantique et une bicouche avec un effet de taille classique.

Afin de situer ce travail, nous exposons, dans cette introduction générale, certaines propriétés particulières des films minces et multicouches magnétiques, ainsi qu'un aperçu des travaux expérimentaux et théoriques sur ce sujet. Cette introduction est divisée en trois parties. Dans la première partie, nous rappelons comment sont modifiées les propriétés magnétiques au voisinage d'une surface. La seconde partie est consacrée aux propriétés des films minces. Pour les films minces, se pose, en plus des effets de surface, la question de la dimensionalité. Après avoir fait un rappel des phénomènes d'effets de taille classique et quantique, nous rapportons des travaux qui établissent qu'un certain nombre de grandeurs physiques sont distribuées à travers le film. Enfin, dans une troisième partie, nous rappelons certaines propriétés des multicouches magnétiques, en particulier les phénomènes de couplage intercouche et de magnétorésistance géante.

1. EFFETS DE SURFACE

L'environnement et la symétrie d'un site de surface sont différents de ceux d'un site de volume. On prévoit donc des propriétés électroniques et magnétiques particulières au voisinage d'une surface. Nous nous limitons ici à la description des propriétés magnétiques suivantes : augmentation du moment magnétique par atome et modification des interactions magnétiques.

1.1. Augmentation du moment de spin et du moment orbital

A la surface d'un métal de transition, le moment de spin est renforcé. Différents travaux expérimentaux et théoriques ont mis en évidence cet effet dans les composés de Fe, Co et Ni (pour une revue se référer à [1,2]). L'explication intuitive est la suivante : un atome de surface possède moins de voisins qu'un atome de volume (diminution de la coordinence). La largeur de bande associée aux électrons d est donc réduite, ce qui conduit à une augmentation de la densité d'états au niveau de Fermi ainsi qu'à une déshybridation des bandes d et p [3], et par conséquent à une augmentation du moment de spin des électrons d.

L'augmentation du moment orbital à la surface a été mise en évidence plus récemment [4,5]. Dans les métaux de transition, le moment orbital est beaucoup plus faible que le moment de spin, il avait donc été moins étudié jusque là. L'utilisation de la technique du dichroïsme circulaire magnétique permet d'extraire à la fois le moment de spin et le moment orbital pour des films de différentes épaisseurs [6,7,8]. Les valeurs du moment de spin et du moment orbital, obtenues par le calcul, convergent très rapidement vers les valeurs du massif, sur à peine 2 ou 3 plans atomiques en dessous de la surface [4,5]. Cela signifie que l'extension spatiale de la perturbation due à la surface est faible.

L'augmentation du moment de spin et du moment orbital est obtenue dans le cas d'une surface libre. A l'interface entre deux matériaux, le moment de spin et le moment orbital peuvent soit augmenter, soit diminuer selon le type de matériau qui recouvre l'interface. Nous verrons une illustration de cela plus loin.

1.2. Modification des interactions magnétiques au voisinage d'une surface

Interaction d'échange

L'interaction d'échange $JS_i \cdot S_j$ est une interaction locale, la constante J dépend des sites i et j considérés. Ainsi, la valeur de la constante J_s , associée à des sites situés à la proximité d'une surface, est différente de celle associée à un matériau massif. Les conséquences de cette différence peuvent être importantes. En effet, un ordre antiferromagnétique peut exister à la surface d'un ferromagnétique. Ou encore, une surface peut exhiber un ordre magnétique à des températures supérieures à la température de Curie du matériau massif [9]. Un tel comportement a été observé pour des monocristaux de Ni_3Fe [10] : $T_c^{Surf.} > T_c^{Massif}$. Schneider *et al.* [11] observent un comportement opposé : pour des films de $Co/Cu(100)$ contenant moins de trois plans atomiques de Co , la température de Curie du film est plus faible que la température de Curie du Co massif.

Anisotropie magnétique de surface

Dans un cristal cubique, l'énergie d'anisotropie magnétocristalline ne contient que des termes d'ordre supérieur ou égal à 4 :

$$E_a^{Cub.} = K_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_3^2\alpha_1^2) + K_2\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2 + \dots \quad (1)$$

où α_1 , α_2 et α_3 sont les cosinus directeurs de l'aimantation par rapport aux axes cristallins. Du fait de l'abaissement de symétrie à la surface d'un cristal, un terme supplémentaire d'ordre 2 peut apparaître dans l'énergie d'anisotropie magnétocristalline :

$$E_a^S = K_S \sin^2 \theta \quad (2)$$

où θ est l'angle entre l'aimantation et l'axe perpendiculaire à la surface et K_S est la constante d'anisotropie de surface, elle peut être positive ou négative. Néel fut le premier à proposer une telle anisotropie de surface [12]. L'influence de celle-ci est d'autant plus importante que le rapport S / V est grand (S étant la surface et V le volume du cristal).

Dans les films minces, deux cas de figure peuvent se présenter selon le signe de K_S :

- Si $K_S < 0$, alors l'aimantation est dans le plan du film.
- Si $K_S > 0$, il y a compétition entre l'énergie dipolaire (favorisant une aimantation dans le plan) et l'énergie d'anisotropie (favorisant une aimantation perpendiculaire au plan). La configuration magnétique stabilisée est soit une configuration avec une aimantation dans le plan, soit une configuration avec une aimantation perpendiculaire au plan.

Dans les films plus épais, il y a une compétition entre l'énergie d'anisotropie de surface et l'énergie d'anisotropie de volume. Une réorientation de la direction d'anisotropie peut se produire pour une certaine épaisseur du film. Ces épaisseurs critiques sont faibles, de l'ordre de quelques plans atomiques [13,14].

Interaction antisymétrique de Dzyaloshinsky-Moriya

Une autre conséquence de la réduction de la symétrie à la surface est qu'elle permet une interaction antisymétrique [15,16] entre un site de surface i et un site de volume j ou entre deux sites de surface i et j :

$$H_{AS} = \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) \quad (3)$$

L'idée a été proposée par Fert [17], mais n'a jamais été développée jusque là. La compétition entre l'interaction antisymétrique (favorisant une configuration orthogonale des spins) et l'interaction d'échange (favorisant une configuration colinéaire des spins) peut stabiliser une configuration magnétique “cantée” au voisinage de la surface.

Le calcul de l'interaction antisymétrique pour différentes symétries de surface ainsi que la détermination de l'état magnétique stabilisé constituent l'objet du premier chapitre de cette thèse.

2. PROPRIÉTÉS DES FILMS MINCES MAGNÉTIQUES

Dans un film mince, des effets liés à la dimensionalité s'ajoutent aux effets de surface. De plus, pour de très faibles épaisseurs, se pose la question de la stabilisation d'un ordre ferromagnétique à longue portée. La théorie des ondes de spin usuelle implique qu'un ordre ferromagnétique ne peut exister dans un système bidimensionnel, car il apparaît une divergence logarithmique des excitations thermiques des ondes de spin lorsque la relation de dispersion est du type $E \propto k^2$. Cet argument a été proposé par Bloch [18], puis confirmé par Mermin et Wagner [19]. Ces derniers ont montré qu'aucun ordre à longue portée ne peut être stabilisé à température finie dans le cas où les interactions entre spins sont isotropes et à courte portée. Des évidences expérimentales ont pu être apportées [20,21]. Elles nécessitent la fabrication de monocouches très pures, sans défauts structuraux. Dans la plupart des films minces, la présence d'interactions anisotropes et dipolaires assurent l'existence d'un ordre ferromagnétique à longue portée. Lorsque l'anisotropie est uniaxiale (axe facile perpendiculaire), un ordre ferromagnétique est stabilisé, car il apparaît un gap dans le spectre d'excitation des ondes de spin, ce qui supprime la divergence 2D. Dans le cas d'une anisotropie dans le plan, il n'y a pas de gap. L'ordre ferromagnétique ne peut être stabilisé qu'en présence d'interactions dipolaires [22,23].

Dans cette partie, nous avons choisi de présenter deux types de propriétés caractéristiques des films minces. Tout d'abord, nous présentons les effets de taille classique et quantique, puis nous rapportons des calculs qui montrent qu'un certain nombre de grandeurs physiques sont distribuées à travers un film mince.

2.1. Effets de taille classique et quantique

Lorsque l'une des dimensions de l'échantillon est de l'ordre de grandeur du libre parcours moyen des électrons de conduction, les propriétés de transport (telle que la résistivité) présentent une dépendance en taille : c'est l'effet de taille classique. Dans le cas d'un film mince, cette dépendance en taille résulte de la réflexion des électrons de conduction sur les surfaces. L'effet de taille classique a été largement étudié, à la fois au niveau théorique (théorie de Fuchs-Sondheimer [24,25]) et au niveau expérimental (mesure de résistivité [26], mesure d'effet Hall [27]). Il est favorisé lorsque le libre parcours moyen est grand, c'est-à-dire à basse température et pour une faible concentration en impuretés (pour une revue se référer à [28]).

Pour des épaisseurs du film comparables à la longueur d'onde de De Broglie des électrons de conduction (λ_B), un effet de taille quantique se produit. La dimension dans la direction (Oz) perpendiculaire au plan du film étant réduite (confinement des électrons de conduction dans le film), il y a une quantification du vecteur d'onde k_z . Dans l'hypothèse d'électrons libres, l'énergie est donc :

$$\epsilon_\alpha = \frac{\hbar^2(k_x + k_y)^2}{2m_0} + A\left(\frac{\alpha}{t}\right)^2 \quad (4)$$

où A est une constante, t est l'épaisseur du film et α un entier égal à 1, 2, 3, ..., n-1, n. Il y a ainsi n bandes d'énergie ϵ_α , n étant le nombre de plans atomiques constituant le film. La densité d'états au niveau de Fermi est [29] :

$$\rho(\epsilon_F) = \frac{m_0}{\pi\hbar^2 t} \left[\frac{2t}{\lambda_B} \right] \quad (5)$$

où $[2t/\lambda_B]$ représente la partie entière de $2t/\lambda_B$. Nous voyons, d'après cette expression, que la densité d'états diminue lorsque t augmente, tant que le nombre de bandes remplies $[2t/\lambda_B]$ est inchangé. A partir d'une certaine valeur de t, la bande suivante ($\alpha+1$) commence à se remplir. La valeur de $[2t/\lambda_B]$ augmente de 1. Il y a donc une augmentation brutale de la densité d'états. Puis, les étapes diminution - augmentation de $\rho(\epsilon_F)$ en fonction de t se répètent. Cela conduit à une oscillation de la densité d'états en fonction de l'épaisseur du film t, et par conséquent à l'oscillation d'un certain nombre de propriétés physiques [30,31]. La période d'oscillation dépend de la topologie de la surface de Fermi. Pour les électrons libres, elle est égale à $\lambda_B/2 = \pi/k_F$. De telles oscillations sont difficiles à observer, car leurs périodes sont de l'ordre de grandeur du paramètre de maille de réseau. Elles ont néanmoins été mises en évidence par divers auteurs (oscillation de la résistivité [32], oscillation de l'effet Hall normal [33]).

Dans le troisième chapitre de cette thèse, nous présentons le calcul de la résistivité de Hall extraordinaire d'un film mince en prenant en compte un effet de taille quantique.

2.2. Distribution des grandeurs physiques

La structure électronique au voisinage des surfaces du film peut être très différente de celle du matériau massif. En revanche, la structure électronique au centre du film est pratiquement celle du massif lorsque l'épaisseur du film n'est pas trop faible (supérieure à 10 plans atomiques). Ainsi, un certain nombre de travaux théoriques prévoient une distribution des grandeurs physiques telles que le moment magnétique, l'énergie d'anisotropie ou la constante d'interaction RKKY, à travers le film. Au niveau expérimental, il n'est pas possible de réaliser des mesures

plan par plan. Cependant, la mise en évidence d'oscillations en fonction de l'épaisseur du film est un indicateur de la distribution d'une grandeur physique à travers le film.

Szunyogh *et al.* [34] ont étudié des sandwichs du type $\text{Cu}(100)/\text{Co}_n$, $\text{Cu}(100)/\text{Co}_n/\text{Cu}(100)$ et $\text{Cu}(100)/\text{AuCo}_n\text{Au}/\text{Cu}(100)$. Pour une épaisseur n fixée de la couche de Co, le moment magnétique par atome et l'énergie d'anisotropie ont été calculés plan par plan. De larges variations du moment magnétique par atome et de l'énergie d'anisotropie par rapport aux valeurs obtenues au centre de la couche sont observées au voisinage des interfaces :

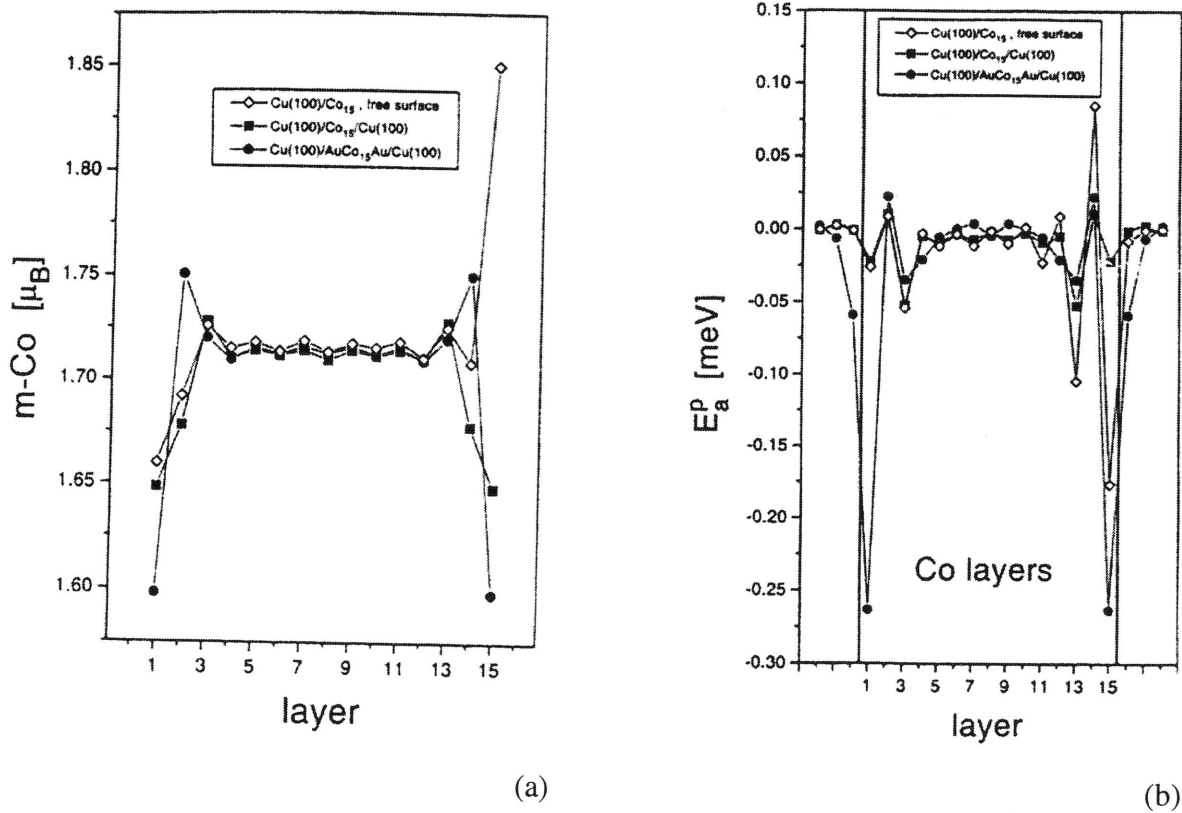


FIGURE 1 - Distribution (a) du moment magnétique par atome de Co et (b) de l'énergie d'anisotropie à travers une couche contenant 15 plans atomiques de Co [35].

Le moment magnétique par atome de Co augmente au voisinage d'une surface libre, mais diminue aux interfaces Cu/Co et Cu/AuCo. La distribution de l'énergie d'anisotropie à travers la couche de Co conduit à une oscillation de l'énergie d'anisotropie totale E_a en fonction de n , c'est-à-dire en fonction de l'épaisseur de la couche de Co. De même, les calculs prévoient une oscillation de E_a en fonction du nombre m de plans atomiques de Cu dans les sandwichs de $\text{Cu}/\text{Co}_6\text{Cu}_m\text{Co}_6/\text{Cu}$. Des oscillations de ce type de l'énergie d'anisotropie ont été mises en évidence expérimentalement dans des sandwichs de $\text{Cu}/\text{Co}/\text{Cu}_m$ en fonction de l'épaisseur de la surcouche de Cu [35].

Le second exemple de distribution concerne la constante d'interaction RKKY. Che *et al.* [36,37] ont calculé, dans le cadre d'un modèle de liaisons fortes, les constantes d'interactions

RKKY interplan et intraplan. Les valeurs en surface peuvent différer d'un facteur 1,5 par rapport à la valeur du massif. L'influence d'un potentiel de surface est aussi étudiée.

Dans le second chapitre de cette thèse, nous calculons la température de Kondo et les constantes de couplage Kondo et d'interaction RKKY à travers un film et mettons en évidence de telles distributions.

2.3. Non compensation dans les antiferromagnétiques

Dans un film antiferromagnétique, il peut se produire un phénomène de non compensation de l'aimantation au voisinage des surfaces, notamment lorsque le film est constitué d'une alternance antiferromagnétique de plans ferromagnétiques. Une aimantation résultante non nulle peut être ainsi mesurée. Cet effet est d'autant plus important que le rapport S / V est grand. Pour l'illustrer, considérons un film cubique simple constitué d'une alternance de plans ferromagnétiques alternés antiferromagnétiquement dans la direction (001). Lorsque le nombre de plans est pair, il y a une compensation exacte de l'aimantation. Par contre, lorsque le nombre de plans est impair, il y a non compensation. Cela conduit à une aimantation résultante non nulle égale à l'aimantation d'un plan ferromagnétique. Ainsi, l'aimantation résultante de ce film devrait osciller en fonction de l'épaisseur du film avec une période égale au double du paramètre de maille. La mise en évidence expérimentale d'une telle oscillation a été effectuée par Ambrose et Chien pour des multicouches de CoO/SiO_2 [38].

3. PROPRIÉTÉS DES MULTICOUCHES MAGNÉTIQUES

3.1. Oscillation du couplage intercouche

Dans les systèmes constitués d'une alternance de couches magnétiques et de couches métalliques non magnétiques, un couplage d'échange indirect, de type RKKY, s'exerce entre les couches magnétiques par l'intermédiaire des électrons de conduction de la couche métallique séparatrice. Ce couplage d'échange indirect est appelé couplage d'échange bilinéaire. L'oscillation de ce couplage en fonction de l'épaisseur t de la couche métallique a été mise en évidence expérimentalement [39]. Ainsi, selon la valeur de t , les aimantations de deux couches magnétiques peuvent être soit parallèles, soit antiparallèles. La période d'oscillation observée (de l'ordre de 5\AA) est souvent supérieure à la période habituelle de l'interaction RKKY (égale à $\pi / k_F \approx 2\text{\AA}$), car les mesures ne peuvent être effectuées que pour des valeurs discrètes de t [40]. Dans des trisouches de Fe/Cr/Fe, Rürig *et al.* [41] ont observé un comportement particulier dans les courbes d'aimantation : dans le domaine où le couplage d'échange bilinéaire s'annule, l'aimantation mesurée est égale à $M_s / \sqrt{2}$. Cette particularité est la conséquence d'aimantations perpendiculaires des deux couches. Ainsi, un couplage d'échange biquadratique, d'amplitude plus faible que le couplage d'échange bilinéaire, s'exerce entre les moments des deux couches magnétiques. L'origine de ce couplage est plutôt considérée comme extrinsèque, liée à la rugosité des interfaces ou à la présence d'impuretés magnétiques dans la couche métallique [42].

Des expériences récentes [43,44] montrent que le couplage d'échange bilinéaire est aussi une fonction oscillante des épaisseurs des couches magnétiques. Barnas avait prévu ce type de comportement [45,46] dans le cadre d'un modèle d'électrons libres où les couches magnétiques sont modélisées par des potentiels dépendant du spin. Bruno [47,48] a développé une théorie générale du couplage d'échange intercouche basée sur des phénomènes d'interférences quantiques dus au confinement des électrons de conduction. Il montre ainsi que le couplage d'échange indirect oscille en fonction de l'épaisseur de la couche métallique et des épaisseurs des couches magnétiques. De plus, il traite le problème du couplage magnétique à travers un isolant et retrouve la décroissance exponentielle en fonction de l'épaisseur de l'isolant obtenue précédemment par Slonczewski [49].

3.2. Magnétorésistance géante

En 1988, Baibich *et al.* [50] ont observé une diminution de l'ordre de 50% de la résistivité d'une multicouche de $[\text{Fe}(30\text{\AA})/\text{Cr}(t)]_n$ sous champ magnétique par rapport à la valeur de la résistivité en l'absence de champ appliqué. Pour les épaisseurs t de Cr étudiées, la constante de couplage d'échange bilinéaire entre les couches de Fe est négative. En l'absence de champ appliqué, deux couches successives de Fe sont donc antiferromagnétiques. Lorsqu'un champ magnétique suffisamment élevé est appliqué, les aimantations des couches de Fe s'alignent dans la direction du champ et sont ainsi toutes parallèles entre elles. Le fait qu'un changement de résistivité accompagne cette réorientation des aimantations des couches signifie que les processus de diffusion dépendent du spin des électrons de conduction. L'amplitude de magnétorésistance est définie par $\Delta R / R = (R_{\text{AF}} - R_{\text{F}}) / R_{\text{F}}$ où R_{AF} est la résistance de la configuration antiferromagnétique et R_{F} est la résistance de la configuration ferromagnétique. Elle peut être faible ($\approx \text{qq. \%}$) ou géante ($\approx 100 \%$). Elle augmente lorsque la température diminue. Le phénomène de magnétorésistance géante a suscité un large intérêt et inspiré un grand nombre de travaux expérimentaux et théoriques (pour une revue historique se référer à [51] et pour une revue théorique se référer à [52]). Les applications de la GMR sont nombreuses : capteurs de champ (détecteur de proximité, boussole, capteur de courant), têtes de lecture intégrées pour disques durs ou bandes magnétiques, billetterie magnétique, etc...

L'étude plus systématique des propriétés des multicouche est assez récente. Des mesures de l'aimantation, de la résistivité, de la résistivité de Hall extraordinaire et, dans certains cas, du pouvoir thermomagnétique, ont été réalisées en parallèle sur des multicouche de Fe/Cr [53], de Co/Cu [54], Co(Fe)/Cu [55] et de Pd/Co [56]. Nous présentons sur la figure ci-dessous les résultats obtenus pour des multicouche de Co(Fe)/Cu [55].

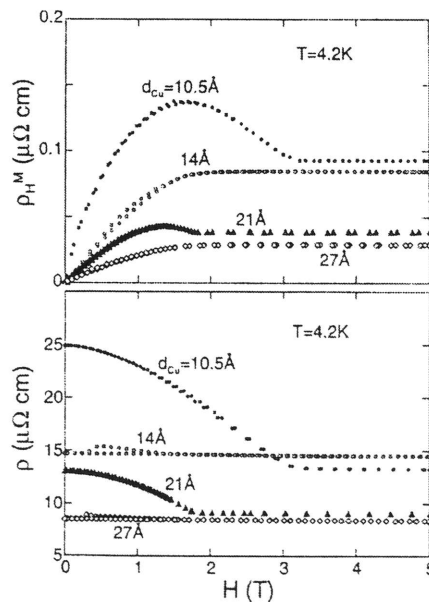


FIGURE 2 - Variations de la résistivité électrique ρ et de la résistivité de Hall extraordinaire ρ_H^M en fonction du champ magnétique appliqué.

La résistivité de Hall extraordinaire présente un maximum pour une certaine valeur du champ magnétique. Un tel maximum est obtenu pour la plupart des systèmes multicouches cités ci-dessus.

Dans le troisième chapitre de cette thèse, nous montrons que la variation de la résistivité de Hall extraordinaire en fonction du champ magnétique peut être reliée à la variation angulaire des aimantations de deux couches magnétiques successives.

RÉFÉRENCES

- [1] “Anisotropie magnétique et hystérésis du cobalt à l'échelle du plan atomique : théorie et expérience ” par P. Bruno, Thèse de l'Université de Paris-Sud (1989).
- [2] A.J. Freeman et R. Wu, *Prog. of Theo. Phys. Sup.* **106** (1991) 397.
- [3] E. Wimmer, *Phys. F : Met. Phys.* **14** (1984) 2613.
- [4] O. Eriksson, A.M. Boring, R.C. Albers, G.W. Fernando et B.R. Cooper, *Phys. Rev. B* **45**, N°6 (1992) 2868.
- [5] O. Hjortstam, J. Trygg, J.M. Wills, B. Johansson et O. Eriksson, *Phys. Rev. B* **53**, N°14 (1996) 9204.
- [6] G. Van der Laan, M.A. Hoyland, M. Surman, C.F.J. Flipse et B.T. Thole, *Phys. Rev. Lett.* **69**, N°26 (1992) 3827.
- [7] M.G. Samant, J. Stöhr, S.S.P. Parkin, G.A. Held, B.D. Hermsmeier, F. Herman, M. van Schilfgaarde, L.C. Duda, D.C. Mancini, N. Wassdahl et R. Nakajima, *Phys. Rev. Lett.* **72**, N°7 (1994) 1112.
- [8] M. Tischer, O. Hjortstam, D. Arvanitis, J. Hunter Dunn, F. May, K. Baberschke, J. Trygg, J.M. Wills, B. Johansson et O. Eriksson, *Phys. Rev. Lett.* **75**, N°8 (1995) 1602.
- [9] H.C. Siegmann, *J. Phys. : Condens. Matter* **4** (1992) 8395.
- [10] Y.A. Mamaev, V.N. Petrov et S.A. Starovoitov, *Sov. Tech. Phys. Lett.* **13** (1987) 642.
- [11] C.M. Schneider, P. Bressler, P. Schuster, J. Krischner, J.J. de Miguel et P. Miranda, *Phys. Rev. Lett.* **64**, N°9 (1990) 1059.
- [12] L. Néel, *J. de Phys. Rad.* **15**, N°4 (1954) 225.
- [13] D. Pescia, M. Starnpanoni, G.L. Bona, A. Vaterlaus, R.F. Willis et F. Meier, *Phys. Rev. Lett.* **58**, N°20 (1987) 2126.
- [14] C. Liu et S.D. Bader, *J. App. Phys.* **67**, N°9 (1990) 5758.
- [15] I. Dzyaloshinsky, *J. Phys. Chem. Solids* **4** (1958) 241.
- [16] T. Moriya, *Phys. Rev.* **120**, N°1 (1960) 91.
- [17] “Metallic multilayers ” par A. Fert, Ed. par A. Chamberod et J. Hillairet, Material Science Forum, Transtech Publications, **Vol. 59/60** (1990) 444.
- [18] F. Bloch, *Z. Physik* **61** (1930) 206.
- [19] N.D. Mermin et H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, N°22 (1966) 1133.
- [20] N.K. Flevaris, J.B. Ketterson et J.E. Hilliard, *J. Appl. Phys.* **53**, N°11 (1982) 8046.

- [21] H.K. Wong, H.Q. Yang, J.E. Hilliard et J.B. Ketterson, *J. Appl. Phys.* **57**, N°1 (1985) 3660.
- [22] Y. Yafet, J. Kwo et E.M. Gyorgy, *Phys. Rev. B* **33**, N°9 (1986) 6519.
- [23] Y. Yafet et E.M. Gyorgy, *Phys. Rev. B* **38**, N°13 (1988) 9145.
- [24] K. Fuchs, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **34** (1938) 100.
- [25] E.H. Sondheimer, *Adv. Phys.* **1** (1952) 1.
- [26] E.R. Andrew, *Proc. Phys. Soc. (London)* **A62** (1949) 77.
- [27] K.L. Chopra et S.K. Bahl, *J. of Appl. Phys.* **38**, N°9 (1967) 3607.
- [28] "Size effects in thin films" par C.R. Tellier et A.J. Tosser, Ed. Elsevier, New-York (1982).
- [29] B.G. Orr, H.M. Jaeger et A.M. Goldman, *Phys. Rev. Lett.* **53**, N°21 (1984) 2046.
- [30] N. Trivedi et N.W. Ashcroft, *Phys. Rev. B* **38**, N°17 (1988) 12298.
- [31] V.B. Sandomirskii, *Sov. Phys. JETP* **25**, N°1 (1967) 101.
- [32] G. Fischer et H. Hoffman, *Solid State Comm.* **35** (1980) 793.
- [33] M. Jalochoowski, M. Hoffman et E. Bauer, *Phys. Rev. Lett.* **76**, N°22 (1996) 4227.
- [34] L. Szunyogh, B. Ujfalussy, C. Blaas, U. Pustogowa, C. Sommers et P. Weinberger, *Phys. Rev. B* **56**, N°21 (1997) 14036.
- [35] W. Weber, A. Bischof, R. Allenspach, Ch. Würsch, C.H. Back et D. Pescia, *Phys. Rev. Lett.* **76**, N°18 (1996) 3424.
- [36] H. Che, D.L. Lin, Y. Xia, H. Zheng et H.X. Li, *Phys. Rev. B* **46**, N°20 (1992) 13501.
- [37] H. Zheng et D.L. Lin, *Phys. Rev. B* **36**, N°4 (1987) 2204.
- [38] T. Ambrose et C.L. Chien, *Phys. Rev. Lett.* **76**, N°10 (1996) 1743.
- [39] S.S.P. Parkin, N. More et K.P. Roche, *Phys. Rev. Lett.* **64**, N°19 (1990) 2304.
- [40] P. Bruno et C. Chappert, *Phys. Rev. B* **46**, N°1 (1992) 261.
- [41] M. Rürig, R. Schäfer, A. Hubert, R. Mosler, J.A. Wolf, S. Demokritov et P. Grünberg, *Phys. Stat. Sol. A* **125** (1991) 635.
- [42] J.C. Slonczewski, *JMMM* **150** (1995) 13.
- [43] P.J.H. Bloemen, M.T. Johnson, M.T.H. van de Vorst, R. Coehoorn, J.J. de Vries, R. Jungblut, J. aan de Stegge, A. Reinders et W.J.M. de Jonge, *Phys. Rev. Lett.* **72**, N°5 (1994) 764.
- [44] S.N. Okuno et K. Inomata, *Phys. Rev. Lett.* **72**, N°10 (1994) 1553.
- [45] J. Barnas, *JMMM* **111** (1992) L215-L219.
- [46] J. Barnas, *JMMM* **123** (1993) L21-L24.
- [47] P. Bruno, *Phys. Rev. B* **52**, N°1 (1995) 411.
- [48] P. Bruno, *JMMM* **164** (1996) 27.
- [49] J.C. Slonczewski, *Phys. Rev. B* **39**, N°10 (1989) 6995.

- [50] M.N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich et J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 2472.
- [51] G.A. Prinz, *Phys. Today*, April (1995) 58.
- [52] “ *Giant magnetoresistance in magnetic layered and granular materials* ” par P.M. Levy, *Solid State Physics*, Ed. par H. Ehrenreich et D. Turnbull, Academic Press, NY, **Vol.47** (1994) 367.
- [53] H. Sato, T. Kumano, Y. Aoki, T. Kaneko et R. Yamamoto, *J. of Phys. Soc. Jpn.* **62**, N°2 (1993) 416.
- [54] F. Tsui, B. Chen, D. Barlett, R. Clarke et C. Uher, *Phys. Rev. Lett.* **72**, N°5 (1994) 740.
- [55] H. Sato, Y. Kobayashi, Y. Aoki, Y. Saito et K. Inomata, *JMMM* **156** (1996) 247.
- [56] Y. Aoki, K. Honda, H. Sato, Y. Kobayashi, S. Hashimoto, T. Yokoyama et T. Hanyu, *JMMM* **162** (1996) 1.

Chapitre 1

INTERACTION ANTISYMMÉTRIQUE DANS LES FILMS MINCES MAGNÉTIQUES

TABLE DES MATIÈRES

INTRODUCTION	p.33
1. DÉTERMINATION DU VECTEUR \mathbf{D}	p.37
1.1. Règles de symétrie	p.37
1.1.1. Direction du vecteur \mathbf{D} agissant entre un site de surface et un site de volume	p.38
1.1.2. Direction du vecteur \mathbf{D} agissant entre deux sites de surface	p.39
1.2. Moments magnétiques localisés : formalisme de Moriya	p.40
1.2.1. Formalisme de Moriya	p.40
1.2.2. Application à la surface (001) des réseaux cs, cc et cfc	p.41
1.2.3. Conclusion	p.46
1.3. Matériau magnétique métallique : mécanisme à trois sites	p.46
1.3.1. Principe du calcul	p.47
1.3.2. Application aux surfaces (001), (101) et (111)	p.48
1.4. Conclusion	p.49
2. MODIFICATION DE L'ORDRE MAGNÉTIQUE	p.51
2.1. Modification de l'ordre magnétique due à des interactions antisymétriques entre sites de surface et sites de volume	p.52
2.1.1. Cas d'un film avec un échange antiferromagnétique - Surface (001) d'un réseau cfc	p.52
2.1.2. Cas d'un film avec un échange ferromagnétique - Réseau monoclinique	p.56
2.2. Modification de l'ordre magnétique due à des interactions antisymétriques entre sites de surface	p.59
2.3. Conclusion	p.60
CONCLUSION	p.61
ANNEXE A : Matrice de couplage spin-orbite et matrices de transfert	p.62
ANNEXE B : Autre schéma de champ cristallin - Surface (001)	p.64
RÉFÉRENCES	p.67

INTRODUCTION

L'interaction antisymétrique est une interaction anisotrope de la forme :

$$\mathbf{H} = \mathbf{D} \cdot (\mathbf{S}_A \times \mathbf{S}_B) \quad (1)$$

Elle favorise les configurations magnétiques telles que les spins \mathbf{S}_A et \mathbf{S}_B et le vecteur \mathbf{D} forment un trièdre orthogonal. Le vecteur \mathbf{D} dépend de façon étroite de la symétrie locale des sites A et B. L'existence d'une telle interaction est soumise aux deux conditions suivantes :

- Matériau de faible symétrie : le vecteur \mathbf{D} est nul s'il existe un centre de symétrie entre les sites A et B.
- Présence d'un couplage spin-orbite

La première évocation de l'interaction antisymétrique est théorique. Stevens [1] a montré, qu'en plus de l'interaction d'échange classique, deux interactions anisotropes peuvent s'exercer entre deux ions magnétiques lorsque un couplage spin-orbite est présent. L'une de ces interactions anisotropes est précisément l'interaction antisymétrique (1). Son amplitude est proportionnelle à $J\lambda_{SO} / \Delta$ où J est la constante d'échange isotrope, λ_{SO} la constante de couplage spin-orbite et Δ la séparation de champ cristallin. La seconde interaction anisotrope est l'interaction d'échange anisotrope $\mathbf{S}_A \cdot \vec{\Gamma} \cdot \mathbf{S}_B$, son amplitude est proportionnelle à $J (\lambda_{SO} / \Delta)^2$.

De façon apparemment indépendante, Dzyaloshinsky [2,3] a prévu, à l'aide d'arguments de symétrie, l'existence d'une interaction antisymétrique dans les faibles ferromagnétiques du type $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, MnCO_3 ou CoCO_3 . La mesure d'une aimantation résultante faible mais non nulle dans ces composés n'était pas expliquée. Néel [4] l'attribuait à la présence d'impuretés magnétiques et Li [5] invoquait des interactions ferromagnétiques dans les parois séparant les domaines magnétiques. Cependant, les échantillons les plus purs présentaient toujours cette aimantation résultante, ce qui donnait à penser que l'origine de ce phénomène était intrinsèque. Dzyaloshinsky a montré, dans le cas du composé $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, que la configuration magnétique avec des spins légèrement inclinés possède la même symétrie que la configuration antiferromagnétique. Or, cette configuration de spins inclinés présente un moment magnétique résultant non nul. Ainsi, il devait exister une interaction favorisant des configurations non colinéaires des spins.

Le calcul explicite de l'interaction antisymétrique a été effectué par Moriya [6,7]. C'est un calcul de perturbation à l'ordre 3 à partir de l'Hamiltonien de superéchange de Anderson où le couplage spin-orbite et les intégrales de transfert sont considérés comme des perturbations. Il s'applique dans le cas où les moments magnétiques sont localisés. Moriya a aussi dressé la liste

des règles de symétrie permettant de déterminer la direction du vecteur **D**. Par ailleurs, un calcul de l'interaction antisymétrique dans les matériaux magnétiques métalliques contenant des impuretés a été proposé par Fert et Levy [8,9]. Cette interaction antisymétrique résulte d'un mécanisme à trois sites : la diffusion spin-orbite des électrons de conduction par un site non magnétique induit une interaction antisymétrique entre deux sites magnétiques. Le calcul proposé est un développement perturbatif à l'ordre 3. Il permet d'exprimer le vecteur **D** en fonction des positions des trois sites.

La prise en compte de l'interaction antisymétrique a permis d'expliquer un certain nombre de comportements magnétiques particuliers tels que la forte anisotropie dans les verres de spins, le faible ferromagnétisme dans certains composés de la famille des supraconducteurs à hautes T_c , etc... Apportons quelques précisions. Prejean et Joliclerc [10] ont mesuré une anisotropie importante dans les composés $\text{CuMn}_{1-x}\text{Au}_x$ et $\text{CuMn}_{1-x}\text{Pt}_x$, dans l'état verre de spin. Ils ont remarqué que l'anisotropie augmentait avec la concentration x en atomes d'Au ou de Pt. Ils en ont déduit que la présence d'atomes d'Au ou de Pt (porteurs d'un couplage spin-orbite) était à l'origine de cet effet. Fert et Levy [8,9] ont pu retrouver, par le calcul, l'énergie d'anisotropie obtenue pour de tels composés en considérant une interaction antisymétrique résultant d'un mécanisme à trois sites, faisant intervenir les atomes d'Au ou de Pt. Par ailleurs, dans certains matériaux de la famille des supraconducteurs à hautes T_c (tels que La_2CuO_4 et La_2NiO_4), une transition structurale, accompagnée d'une transition magnétique, est observée lorsque la température diminue [11,12,13,14,15,16]. A basse température, ces composés sont des faibles ferromagnétiques. Au niveau structural, des études spectroscopiques ont montré que les plans de CuO_2 (ou NiO_2) étaient déformés. L'abaissement de la symétrie résultant de ces déformations permet l'existence d'une interaction antisymétrique entre les atomes de Cu (ou Ni). Divers auteurs [17,18] ont calculé, dans le cadre du formalisme de Moriya, l'interaction antisymétrique lorsque les plans sont déformés et ont pu rendre compte du faible ferromagnétisme. Ces deux exemples montrent la nécessité de prendre en compte l'interaction antisymétrique lorsque l'on souhaite comprendre le magnétisme de certains composés ayant une faible symétrie due à la présence de désordre (verre de spin), distorsion (plan de CuO_2 ou NiO_2), défaut, etc...

Dans les systèmes de dimension réduite, l'interaction antisymétrique devrait aussi jouer un rôle important. Dans les couches minces et multicouches magnétiques, la brisure de symétrie au niveau des surfaces et interfaces permet son existence. Certains auteurs ont pris en compte l'interaction antisymétrique dans leurs calculs des propriétés des multicouches magnétiques. Nous présentons rapidement ces études.

Lorsque deux couches magnétiques sont séparées par une couche métallique non magnétique, une interaction indirecte s'exerce entre les couches magnétiques par l'intermédiaire des électrons de conduction de la couche séparatrice. Expérimentalement, cette interaction indirecte est la somme de deux contributions : interaction bilinéaire + interaction biquadratique. L'interaction

bilinéaire favorise une configuration colinéaire des aimantations de deux couches magnétiques successives. Le mécanisme à l'origine de cette interaction est de type RKKY [19,20,21]. L'interaction biquadratique favorise une configuration orthogonale des aimantations. Son origine est souvent vue comme extrinsèque, liée à la rugosité ou à la présence d'impuretés magnétiques dans la couche métallique [22]. Xia *et al.* [23,24] ont montré théoriquement l'existence d'une interaction indirecte supplémentaire, de type antisymétrique : $\mathbf{D} \cdot (\mathbf{M}_1 \times \mathbf{M}_2)$, en considérant des interactions antisymétriques au niveau des interfaces entre les spins localisés des couches magnétiques et les spins des électrons de conduction de la couche métallique. Cette interaction antisymétrique favorise, comme l'interaction biquadratique, une configuration orthogonale des aimantations de deux couches magnétiques successives. Dans les multicouches, d'autres propriétés telles que l'effet magnétoélectrique [25] seraient modifiées en présence de l'interaction antisymétrique.

L'effet de l'interaction antisymétrique sur l'ordre magnétique dans les films minces n'a pas été étudié jusqu'ici, il constitue l'objet de ce chapitre.

La première partie de ce chapitre est consacrée à la détermination du vecteur \mathbf{D} . Nous avons tout d'abord déterminé les directions des vecteurs \mathbf{D} agissant entre un site de surface et ses premiers voisins à l'aide des règles de symétrie. Différentes symétries de surface ont été considérées. Puis, nous avons utilisé le formalisme de Moriya, d'une part, et le mécanisme à trois sites, d'autre part, afin de calculer explicitement le vecteur \mathbf{D} pour quelques symétries de surface particulières. La seconde partie de ce chapitre présente la modification de l'ordre magnétique d'un film engendrée par l'interaction antisymétrique.

1. DÉTERMINATION DU VECTEUR \mathbf{D}

La direction du vecteur \mathbf{D} , agissant entre deux sites donnés, peut être déterminée par des considérations de symétrie. Nous donnons, dans une première partie, les directions des vecteurs \mathbf{D} obtenues de cette manière pour un certain nombre de surfaces. Cependant, ces simples considérations n'assurent pas l'existence d'une interaction antisymétrique, car elles ne donnent pas d'information sur la norme du vecteur \mathbf{D} qui peut être éventuellement nulle. Moriya [6,7] a proposé un développement perturbatif qui permet de calculer explicitement le vecteur \mathbf{D} . Dans une deuxième partie, nous exposons le principe de ce calcul et son application au cas de la surface (001) des réseaux cubique simple (cs), cubique centré (cc) et cubique faces centrées (cfc). Dans une troisième partie, nous présentons le mécanisme à trois sites proposé par Levy et Fert [8,9] et utilisons l'expression du vecteur \mathbf{D} obtenu pour calculer les vecteurs \mathbf{D} associés à quelques surfaces particulières.

1.1. Règles de symétrie

L'interaction antisymétrique entre deux sites A et B doit être invariante vis-à-vis de toutes les transformations du groupe de symétrie du cristal considéré. Cette condition impose des restrictions sur la direction du vecteur \mathbf{D} . Moriya [6] a énoncé les règles de symétrie de la façon suivante :

- | | |
|---|---|
| 1 - S'il y a un centre d'inversion transformant A en B : | $\mathbf{D} = 0$ |
| 2 - Si le plan médiateur de la liaison (AB) est un plan de symétrie : | $\mathbf{D} // \text{plan}$
ou $\mathbf{D} \perp (AB)$ |
| 3 - Si un plan de symétrie contient A et B : | $\mathbf{D} \perp \text{plan}$ |
| 4 - Si une médiatrice de la liaison (AB) est un axe de rotation d'ordre 2 : | $\mathbf{D} \perp \text{axe}$ |
| 5 - S'il y a un axe de rotation d'ordre ≥ 2 le long de la liaison (AB) : | $\mathbf{D} // (AB)$ |

Nous avons utilisé ces règles de symétrie afin de déterminer la direction du vecteur \mathbf{D} agissant :

- Entre un site de surface et ses premiers voisins de volume (partie 1.1.1)
- Entre un site de surface et ses premiers voisins de surface (partie 1.1.2)

Différentes symétries de surface ont été considérées.

1.1.1. Direction du vecteur D agissant entre un site de surface et un site de volume

La direction du vecteur D agissant entre un site de surface et chacun de ses premiers voisins de volume a été déterminée pour les surfaces (001), (101) et (111) des réseaux cs, cc et cfc. Certains de ces voisins de volume sont situés dans le premier plan en dessous de la surface, d'autres sont situés dans le second plan voire le troisième plan en dessous de la surface. Le tableau ci-dessous présente les résultats obtenus.

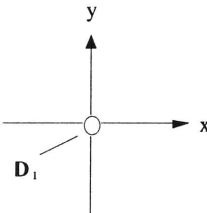
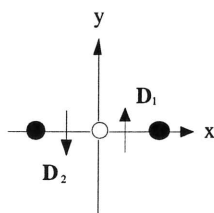
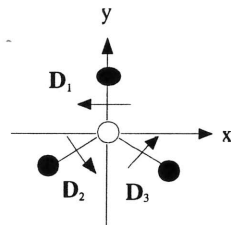
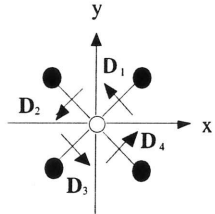
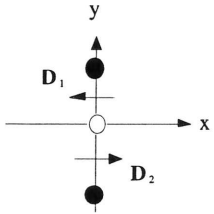
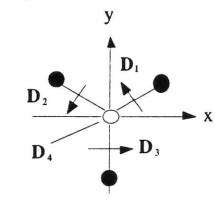
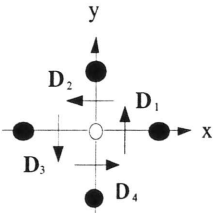
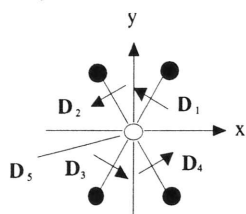
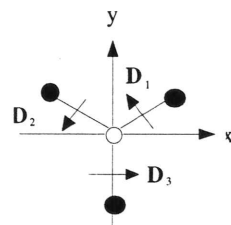
	Surface (001)	Surface (101)	Surface (111)
cs	(a) 1 voisin dans le 1 ^{er} plan : $D_1 = 0$ 	(d) 2 voisins dans le 1 ^{er} plan : $D_1 = Dy$ $D_2 = -Dy$ 	(g) 3 voisins dans le 1 ^{er} plan : $D_1 = -Dx$ $D_2 = D(\frac{1}{2}x - \frac{1}{2}\sqrt{3}y)$ $D_3 = D(\frac{1}{2}x + \frac{1}{2}\sqrt{3}y)$ 
cc	(b) 4 voisins dans le 1 ^{er} plan : $D_1 = D(-x + y)$ $D_2 = D(-x - y)$ $D_3 = D(x - y)$ $D_4 = D(x + y)$ 	(e) 2 voisins dans le 1 ^{er} plan : $D_1 = -Dx$ $D_2 = Dx$ 	(h) 3 voisins dans le 1 ^{er} plan et 1 voisin dans le 3 ^{ème} plan : $D_1 = D(-\frac{1}{2}x + \frac{1}{2}\sqrt{3}y)$ $D_2 = D(-\frac{1}{2}x - \frac{1}{2}\sqrt{3}y)$ $D_3 = Dx$; $D_4 = 0$ 
cfc	(c) 4 voisins dans le 1 ^{er} plan : $D_1 = Dy$ $D_2 = -Dx$ $D_3 = -Dy$ $D_4 = Dx$ 	(f) 4 voisins dans le 1 ^{er} plan et 1 voisin dans le 2 ^{ème} plan : $D_1 = D\frac{1}{\sqrt{3}}(-\sqrt{2}x + y)$ $D_2 = D\frac{1}{\sqrt{3}}(-\sqrt{2}x - y)$ $D_3 = D\frac{1}{\sqrt{3}}(\sqrt{2}x - y)$ $D_4 = D\frac{1}{\sqrt{3}}(\sqrt{2}x + y)$ $D_5 = 0$ 	(i) 3 voisins dans le 1 ^{er} plan : $D_1 = D(-\frac{1}{2}x + \frac{1}{2}\sqrt{3}y)$ $D_2 = D(-\frac{1}{2}x - \frac{1}{2}\sqrt{3}y)$ $D_3 = Dx$ 

TABLEAU 1 - Direction des vecteurs D agissant entre un site de surface et ses premiers voisins de volume.

Les axes x et y sont définis dans le plan de la surface, alors que l'axe z est perpendiculaire à la surface. Sur chacune des figures, le rond blanc représente l'atome de surface et les ronds noirs ses premiers voisins de volume. Pour les surfaces (a), (f) et (h), un premier voisin de volume est situé exactement à la verticale en dessous de l'atome de surface, il n'est donc pas représenté mais le vecteur \mathbf{D} associé est indiqué par un trait. Dans tous les cas, le vecteur \mathbf{D} associé à ce voisin est nul à cause de la règle de symétrie n°3 qui prévoit des directions contradictoires de \mathbf{D} selon le plan de symétrie considéré.

1.1.2. Direction du vecteur \mathbf{D} agissant entre deux sites de surface

Nous avons déterminé la direction du vecteur \mathbf{D} agissant entre deux sites des surfaces (001), (101) et (111) des réseaux cs, cc et cfc. Le réseau formé par les atomes de surface est indiqué dans chaque cas.

	Surface (001)	Surface (101)	Surface (111)
cs	(a) Réseau carré : $\mathbf{D}_{12} = \mathbf{Dy}$ $\mathbf{D}_{23} = -\mathbf{Dx}$ $\mathbf{D}_{34} = -\mathbf{Dy}$ $\mathbf{D}_{41} = \mathbf{Dx}$	(b) Réseau rectangulaire : $\mathbf{D}_{12} = \mathbf{D' y}$ $\mathbf{D}_{23} = -\mathbf{Dx}$ $\mathbf{D}_{34} = -\mathbf{D' y}$ $\mathbf{D}_{41} = \mathbf{Dx}$	(d) Réseau triangulaire : les vecteurs \mathbf{D}_{ij} sont dans les plans médiateurs Δ_{ij} , leurs directions ne sont pas complètement déterminées.
cc	Identique au cas (a)	(c) Réseau losange : les vecteurs \mathbf{D}_{ij} sont dans le plan de la surface, leurs directions ne sont pas déterminées.	Identique au cas (d)
cfc	Identique au cas (a)	Identique au cas (b)	Identique au cas (d)

TABLEAU 2 - Direction des vecteurs \mathbf{D} agissant entre deux sites de surface.

Les surfaces étudiées peuvent se regrouper en quatre géométries différentes :

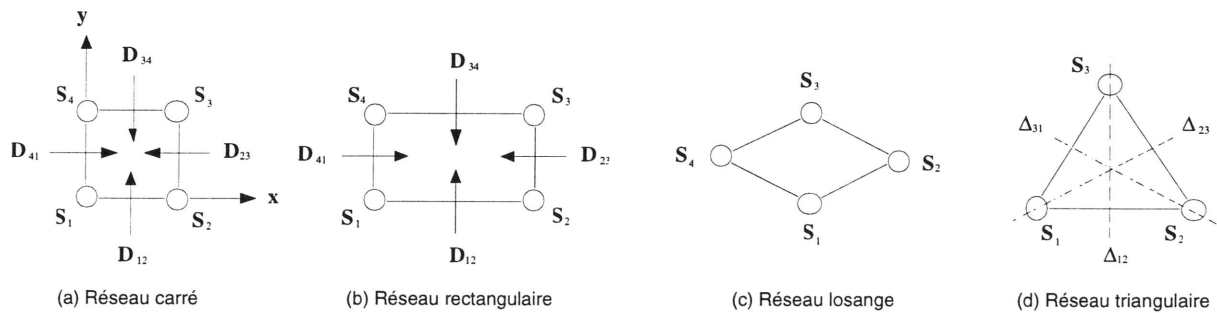


FIGURE 1 - Projection dans le plan de la surface des vecteurs \mathbf{D} agissant entre deux sites de surface.

Dans le cas du réseau rectangulaire, nous distinguons deux normes différentes \mathbf{D} et \mathbf{D}' pour les vecteurs \mathbf{D} , car les sites de surface ne sont pas séparés par les mêmes distances dans les directions x et y . Nous remarquons que les règles de symétrie ne suffisent pas toujours à déterminer complètement les vecteurs \mathbf{D} agissant entre deux sites de surface. Pour les surfaces de type (a) et (b), les directions des vecteurs \mathbf{D} sont complètement déterminées alors que ce n'est pas le cas pour les surfaces de type (c) et (d), car les éléments de symétrie ne sont pas en nombre suffisant pour contraindre \mathbf{D} .

Les tableaux 1 et 2 sont valables pour des réseaux de Bravais. Dans le cas d'un composé avec plusieurs atomes par maille, la symétrie peut être abaissée, ce qui signifie que les vecteurs \mathbf{D} seront différents.

1.2. Moments magnétiques localisés : formalisme de Moriya

Nous présentons dans cette partie le principe du calcul de l'interaction antisymétrique proposé par Moriya. Puis nous effectuons ce calcul dans le cas d'une surface (001). Nous appliquons ensuite le résultat obtenu à la surface (001) des réseaux cs, cc et cfc.

1.2.1. Formalisme de Moriya

Moriya a repris le formalisme développé par Anderson [25] pour la théorie du superéchange, puis il a introduit un couplage spin-orbite ainsi que des termes de transfert. L'Hamiltonien considéré est $H = H_0 + H_T + H_{SO}$ avec :

$$\begin{cases} H_0 = \sum_{i,n,\sigma} \epsilon_{in} d_{in\sigma}^+ d_{in\sigma} + \sum_{\substack{i,n \neq m \\ \text{ou } \sigma_1 \neq \sigma_2}} \frac{U}{2} n_{in\sigma_1} n_{im\sigma_2} \\ H_T = \sum_{\substack{i \neq j \\ n,m,\sigma}} T_{in,jm} (d_{in\sigma}^+ d_{jm\sigma} + d_{jm\sigma}^+ d_{in\sigma}) \\ H_{SO} = \lambda_{SO} \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{L}_i \end{cases} \quad (2)$$

Les indices i et j se réfèrent au site, les indices n et m à l'orbitale et les indices σ , σ_1 et σ_2 au spin. Dans notre étude, nous considérons des électrons 3d, ainsi les orbitales sont : $\{xy, yz, zx, x^2 - y^2, 3z^2 - r^2\}$. ϵ_{in} est le niveau d'énergie associé à l'orbitale n de l'atome situé sur le site i . Les opérateurs $d_{in\sigma}^+$ et $d_{in\sigma}$ sont les opérateurs de création et d'annihilation associés aux électrons 3d. U est la constante d'interaction Coulombienne. Nous supposons qu'elle est indépendante de l'orbitale et du site. $T_{in,jm}$ est l'intégrale de transfert permettant le transfert d'un électron 3d de l'orbitale n du site i vers l'orbitale m du site j . Enfin, λ_{SO} est la constante de couplage spin-orbite. Une limitation importante du calcul de l'interaction antisymétrique

proposé par Moriya est l'hypothèse d'électrons 3d localisés. En traitant le terme de transfert et le couplage spin-orbite comme des perturbations (valable si λ_{so} et $T_{in,jm} \ll U$), Moriya a montré, dans le cas d'un seul électron par atome, que l'Hamiltonien (2) conduit, à l'ordre 4 du calcul de perturbation, à un Hamiltonien effectif de la forme :

$$H = H_0 - \sum_{i,j} J_{ij} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) + \sum_{i,j} \mathbf{D}_{ij} (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) + \sum_{i,j} (\mathbf{S}_i \cdot \vec{\Gamma}_{ij} \cdot \mathbf{S}_j) \quad (3)$$

où :

- A l'ordre 2 : on obtient l'interaction d'échange classique. La constante J_{ij} est proportionnelle à des termes du type : T^2 / U .
- A l'ordre 3 : on obtient l'interaction antisymétrique recherchée. Dans le cas où $\Delta \ll U$, la norme du vecteur \mathbf{D}_{ij} est proportionnelle à des termes du type : $\lambda_{so} T^2 / \Delta U$. Elle est de l'ordre de grandeur de $J\Delta g / g$ qui est en général inférieur à 0,1 dans les métaux de transition (g est le rapport gyromagnétique et Δg la variation de g par rapport à sa valeur dans le cas d'électrons libres).
- A l'ordre 4 : on obtient l'interaction d'échange anisotrope. $\vec{\Gamma}_{ij}$ est un tenseur antisymétrique de trace nulle. Dans le cas où $\Delta \ll U$, les éléments du tenseur $\vec{\Gamma}_{ij}$ sont proportionnels à des termes du type : $\lambda_{so}^2 T^2 / U\Delta^2$. Ils sont de l'ordre de grandeur de $J(\Delta g / g)^2$. Dans ce travail, nous nous sommes limités à l'ordre 3, nous n'avons donc pas étudié cette interaction.

Δ est la séparation de champ cristallin, par exemple : $\Delta_{in,im} = \epsilon_{in} - \epsilon_{im}$ représente la différence entre les énergies associées aux niveaux orbitaux n et m des électrons 3d de l'atome situé sur le site i . Précisons que si la séparation de champ cristallin au niveau des sites i et j est la même, le vecteur \mathbf{D}_{ij} est nul, car dans l'expression de sa norme obtenue par Moriya figure en facteur la différence $(1/\Delta_{in,im} - 1/\Delta_{jn,jm})$. Nous retrouvons ainsi la condition qui impose que les deux sites i et j doivent avoir un environnement différent (pas de centre d'inversion entre les sites i et j) pour que le vecteur \mathbf{D}_{ij} soit non nul.

1.2.2. Application à la surface (001) des réseaux cs, cc et cfc

Nous nous sommes limités au cas d'un seul électron de type 3d par atome. En géométrie sphérique, les cinq orbitales 3d : $\{xy, yz, zx, x^2 - y^2, 3z^2 - r^2\}$ sont dégénérées. En géométrie cubique, il y a une levée partielle de la dégénérescence, les cinq orbitales se séparent en deux sous-groupes : $t_{2g} = \{xy, yz, zx\}$ et $e_g = \{x^2 - y^2, 3z^2 - r^2\}$. Au voisinage de la surface (001), une levée de dégénérescence supplémentaire se produit entre les orbitales dans le plan de la surface et les orbitales hors du plan de la surface. Pour la surface (001), l'axe perpendiculaire à la surface est directement l'axe cristallin (Oz). Ainsi, les orbitales t_{2g} sont séparées en deux sous-groupes : orbitale dans le plan de la surface = $\{xy\}$ et orbitales hors du plan = $\{yz, zx\}$.

De même, une levée de dégénérescence se produit pour les orbitales e_g : séparation entre l'orbitale dans le plan = $\{x^2 - y^2\}$ et l'orbitale hors du plan = $\{3z^2 - r^2\}$. Le calcul de perturbation à l'ordre 3 dans le cas général, avec une prise en compte des cinq orbitales 3d, n'est pas réalisable analytiquement. Nous nous sommes donc limités à l'étude d'un cas particulier. Dans le calcul qui suit, nous ne tenons pas compte des orbitales e_g que nous supposons situées à des énergies supérieures. La figure 2 présente la configuration des orbitales atomiques que nous avons choisi d'étudier.

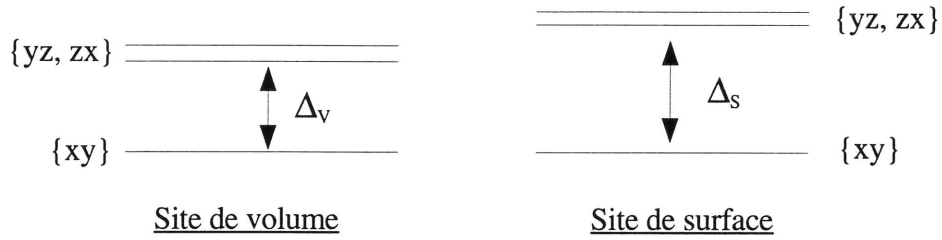


FIGURE 2 - Configuration des niveaux orbitaux considérés.

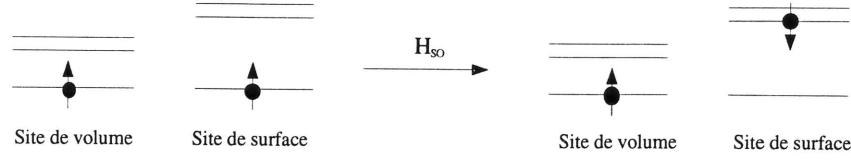
Nous avons précisé plus haut que l'interaction antisymétrique issue du calcul de Moriya n'agissait qu'entre des sites dont la séparation de champ cristallin est différente. C'est pourquoi ce formalisme ne nous permet pas de prévoir d'interaction antisymétrique entre deux sites de surface, car ils ont le même environnement électronique. Ainsi, nous ne considérons dans cette partie que l'interaction antisymétrique entre un site de surface et un site de volume premier voisin. La séparation de champ cristallin entre le niveau $\{xy\}$ et les niveaux $\{yz, zx\}$ sur le site de surface est notée Δ_s . L'environnement du site de volume étant cubique au niveau des premiers voisins, la séparation de champ cristallin Δ_v , entre le niveau $\{xy\}$ et les niveaux $\{yz, zx\}$ sur le site de volume, est plus faible que Δ_s . Nous avons choisi comme fondamental le niveau $\{xy\}$ plutôt que le niveau dégénéré $\{yz, zx\}$ afin de simplifier les calculs. Ces précisions sur la configuration des niveaux orbitaux étant faites, nous avons à calculer le terme d'ordre 3 dans le développement perturbatif :

$$E^{(3)} = \sum_{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle} \frac{\langle \psi_0 | V | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | V | \psi_2 \rangle \langle \psi_2 | V | \psi_0 \rangle}{(\epsilon_0 - \epsilon_1)(\epsilon_0 - \epsilon_2)} \quad (4)$$

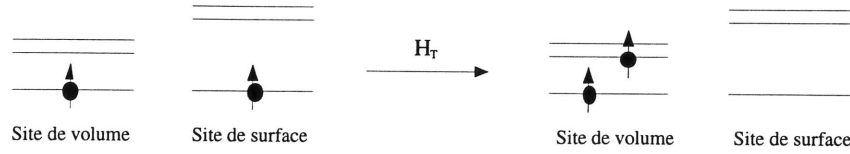
où :

- $|\psi_0\rangle$ est l'état fondamental d'énergie ϵ_0 . Il correspond à l'occupation par un seul électron de l'orbitale $\{xy\}$ sur chacun des deux sites.
- $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont les états excités d'énergies ϵ_1 et ϵ_2 . Ils peuvent être de deux sortes. Ils correspondent soit à la présence de deux électrons sur un même site, soit à présence d'un seul électron sur chacun des deux sites. Dans ce dernier cas, l'un des électrons est situé sur le niveau fondamental du premier site alors que le second électron est situé sur l'un des niveaux excités du deuxième site.

- V est la perturbation : $V = H_{SO} + H_T$. Le couplage spin-orbite H_{SO} permet à un électron de sauter d'un niveau orbital à un autre sur le même site, ce saut est accompagné, ou pas, d'un retournement de spin, par exemple :



Le terme de transfert H_T permet à un électron de sauter d'un site à un autre, par exemple :



Nous avons reporté l'expression de V dans (4). Huit termes apparaissent lorsqu'on fait le développement. Parmi ces huit termes, seuls quatre donnent une contribution non nul dans (4). L'un de ces termes fait intervenir trois fois le couplage spin-orbite, c'est un mécanisme à un site qui ne peut conduire à une interaction à deux sites, ainsi il ne contribue pas à l'interaction antisymétrique. Les trois autres termes font intervenir une fois le couplage spin-orbite et deux fois le terme de transfert. Deux de ces trois termes donnent des contributions en $\lambda_{SO}T^2 / U\Delta$ alors que le troisième donne une contribution en $\lambda_{SO}T^2 / U^2$. Comme $U \gg \Delta$, nous négligeons ce dernier terme. Ainsi, il ne reste que deux contributions dans (4) :

$$E^{(3)} = \sum_{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle} \frac{\langle \psi_0 | H_{SO} | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | H_T | \psi_2 \rangle \langle \psi_2 | H_T | \psi_0 \rangle}{(\epsilon_0 - \epsilon_1)(\epsilon_0 - \epsilon_2)} + \sum_{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle} \frac{\langle \psi_0 | H_T | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | H_T | \psi_2 \rangle \langle \psi_2 | H_{SO} | \psi_0 \rangle}{(\epsilon_0 - \epsilon_1)(\epsilon_0 - \epsilon_2)} \quad (5)$$

Nous avons calculé les matrices associées à l'Hamiltonien de transfert et à l'Hamiltonien de couplage spin-orbite dans la base des orbitales 3d couplée à la base de spin. La matrice associée au terme de transfert dépend fortement de la symétrie du système étudié. Pour la calculer, nous avons utilisé les tables établies par Slater et Koster [27] dans l'approximation des liaisons fortes. Cette approximation, valable lorsque les électrons restent localisés, revient à supposer que les orbitales moléculaires sont des combinaisons linéaires d'un nombre restreint d'orbitales atomiques. Ces matrices sont présentées dans l'annexe A.

Revenons à l'expression de l'interaction antisymétrique :

$$H^{(3)} = D_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) \quad (6)$$

Développons explicitement le produit vectoriel :

$$H^{(3)} = D_{ij}^x (S_i^y S_j^z - S_i^z S_j^y) + D_{ij}^y (S_i^z S_j^x - S_i^x S_j^z) + D_{ij}^z (S_i^x S_j^y - S_i^y S_j^x) \quad (7)$$

Ceci nous permet d'exprimer les trois composantes du vecteur \mathbf{D}_{ij} :

$$\begin{cases} D_{ij}^x = 4 \left(\langle xy, \uparrow_y | \otimes \langle xy, \uparrow_z | \right) H^{(3)} \left(|xy, \uparrow_y\rangle_i \otimes |xy, \uparrow_z\rangle_j \right) \\ D_{ij}^y = 4 \left(\langle xy, \uparrow_z | \otimes \langle xy, \uparrow_x | \right) H^{(3)} \left(|xy, \uparrow_z\rangle_i \otimes |xy, \uparrow_x\rangle_j \right) \\ D_{ij}^z = 4 \left(\langle xy, \uparrow_x | \otimes \langle xy, \uparrow_y | \right) H^{(3)} \left(|xy, \uparrow_x\rangle_i \otimes |xy, \uparrow_y\rangle_j \right) \end{cases} \quad (8)$$

$|xy, \uparrow_x\rangle_i$ est l'état correspondant à un électron, de spin 1/2 dans la direction $+\mathbf{x}$, dans l'orbitale $\{xy\}$ du site i (même chose pour $|xy, \uparrow_y\rangle_i$ et $|xy, \uparrow_z\rangle_i$). Ainsi, selon le choix de l'état fondamental $|\psi_0\rangle$, $\langle \psi_0 | H^{(3)} | \psi_0 \rangle$ permet de calculer chacune des composantes du vecteur \mathbf{D}_{ij} :

$$\begin{cases} \text{pour } D_{ij}^x \Rightarrow |\psi_0\rangle = |xy, \uparrow_y\rangle_i \otimes |xy, \uparrow_z\rangle_j \\ \text{pour } D_{ij}^y \Rightarrow |\psi_0\rangle = |xy, \uparrow_z\rangle_i \otimes |xy, \uparrow_x\rangle_j \\ \text{pour } D_{ij}^z \Rightarrow |\psi_0\rangle = |xy, \uparrow_x\rangle_i \otimes |xy, \uparrow_y\rangle_j \end{cases} \quad (9)$$

A l'issue de ces calculs, nous obtenons :

$$\begin{cases} D_{ij}^x = \frac{4\lambda_{so}}{U} T_{i,xy;j,xy} T_{i,xy;j,zx} \left(\frac{1}{\Delta_i} - \frac{1}{\Delta_j} \right) \\ D_{ij}^y = -\frac{4\lambda_{so}}{U} T_{i,xy;j,xy} T_{i,xy;j,yz} \left(\frac{1}{\Delta_i} - \frac{1}{\Delta_j} \right) \\ D_{ij}^z = 0 \end{cases} \quad (10)$$

Remarques :

- Nous avons supposé que les séparations de champ cristallin Δ_i et Δ_j sont négligeables devant U .
- Nous obtenons, comme Moriya, le terme $(1/\Delta_i - 1/\Delta_j)$ en facteur. Ainsi, lorsque la séparation de champ cristallin est identique pour les atomes situés sur les sites i et j , aucune interaction antisymétrique n'est attendue. C'est pourquoi nous cherchons à calculer dans cette partie uniquement l'interaction antisymétrique entre un site de surface et un site de volume.
- Le calcul présenté ci-dessus est valable dans le cas où les séparations de champ cristallin Δ_s et Δ_v sont grandes devant la constante de couplage spin-orbite λ_{so} et les intégrales de transfert T . Ces conditions ne sont pas forcément vérifiées par Δ_v , car un atome situé

dans le premier plan en dessous de la surface possède un environnement cubique au niveau de ses premiers voisins. Ainsi, Δ_v peut être faible, voire nulle. Lorsque Δ_v est de l'ordre de grandeur de λ_{so} et T , le vecteur \mathbf{D} ne peut être calculé à partir du calcul perturbatif développé par Moriya. En revanche, lorsque $\Delta_v = 0$, on peut effectuer un calcul perturbatif en considérant un niveau fondamental triplement dégénéré sur le site de volume (on néglige alors l'action du couplage spin-orbite sur ce site). Le calcul est présenté dans l'annexe B.

Nous donnons ci-dessous les expressions explicites des vecteurs \mathbf{D}_{ij} agissant entre un site de la surface (001) et ses premiers voisins de volume dans les réseaux cs, cc et cfc.

Surface (001) du réseau cs : un atome de surface possède un premier voisin de volume. La matrice de transfert associée, donnée dans l'annexe A, est diagonale. Ainsi, à partir de (10), nous obtenons $\mathbf{D} = 0$. Ce résultat est en accord avec les règles de symétrie (voir tableau 1, cas a).

Surface (001) du réseau cc : un atome de surface (pris comme origine) possède quatre premiers voisins de volume situés en $(11\bar{1})$, $(\bar{1}1\bar{1})$, $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ et $(1\bar{1}\bar{1})$. A partir des matrices de transfert associées à chacun de ces voisins (voir annexe A) et des expressions (10), nous obtenons :

$$\begin{cases} \mathbf{D}_{(000),(11\bar{1})} = D(-\mathbf{x} + \mathbf{y}) \\ \mathbf{D}_{(000),(\bar{1}1\bar{1})} = D(-\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\ \mathbf{D}_{(000),(\bar{1}\bar{1}\bar{1})} = D(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\ \mathbf{D}_{(000),(1\bar{1}\bar{1})} = D(\mathbf{x} + \mathbf{y}) \end{cases} \quad (11)$$

avec :

$$D = \frac{4\lambda_{so}}{81U} (3(dd\sigma) + 2(dd\pi) + 4(dd\delta))(3(dd\sigma) - (dd\pi) - 2(dd\delta)) \left(\frac{1}{\Delta_s} - \frac{1}{\Delta_v} \right) \quad (12)$$

où $(dd\sigma)$, $(dd\pi)$ et $(dd\delta)$ sont définis dans l'annexe A. Les directions des vecteurs \mathbf{D}_{ij} obtenus à l'issue de ces calculs correspondent aux directions imposées par les règles de symétrie (voir tableau 1, cas b).

Surface (001) du réseau cfc : un atome de surface possède quatre premiers voisins de volume situés en $(10\bar{1})$, $(01\bar{1})$, $(\bar{1}0\bar{1})$ et $(0\bar{1}\bar{1})$. A partir des matrices de transfert associées à chacun de ces voisins (voir annexe A) et des expressions (10), nous obtenons :

$$\begin{cases} \mathbf{D}_{(000),(10\bar{1})} = D\mathbf{y} \\ \mathbf{D}_{(000),(01\bar{1})} = -D\mathbf{x} \\ \mathbf{D}_{(000),(\bar{1}0\bar{1})} = -D\mathbf{y} \\ \mathbf{D}_{(000),(0\bar{1}\bar{1})} = D\mathbf{x} \end{cases} \quad (13)$$

avec :

$$D = \frac{\lambda_{so}}{U} ((dd\pi)^2 - (dd\delta)^2) \left(\frac{1}{\Delta_s} - \frac{1}{\Delta_v} \right) \quad (14)$$

Les directions des vecteurs \mathbf{D}_{ij} obtenus par le calcul correspondent aux directions imposées par les règles de symétrie (voir tableau 1, cas c).

1.2.3. Conclusion

Nous avons utilisé le formalisme proposé par Moriya pour calculer explicitement le vecteur \mathbf{D} de l'interaction antisymétrique agissant entre un site de la surface (001) et ses premiers voisins de volume. Les résultats obtenus pour les réseaux cs, cc et cfc sont en accord avec les règles de symétrie. L'intérêt du calcul explicite est qu'il permet d'obtenir l'expression de la norme de \mathbf{D} .

Ce type de calcul peut être effectué pour d'autres orientations de surface et pour d'autres schémas de champ cristallin ainsi que pour un nombre différent d'électrons par atome. Il est nécessaire de faire le calcul au cas par cas, car le vecteur \mathbf{D} dépend de façon étroite de la symétrie de la surface.

1.3. Matériau magnétique métallique : mécanisme à trois sites

Dans les matériaux magnétiques métalliques, une interaction d'échange indirecte (RKKY) s'exerce entre les spins localisés par l'intermédiaire des électrons de conduction. Si des impuretés non magnétiques (avec un couplage spin-orbite important) sont présentes, une interaction antisymétrique indirecte s'exerce entre les spins localisés par l'intermédiaire des électrons de conduction qui subissent une diffusion spin-orbite au niveau des impuretés non magnétiques. Ce mécanisme a été proposé par Smith [28]. Il fait intervenir trois sites : deux sites magnétiques et un site non magnétique sur lequel un couplage spin-orbite est présent. Levy et Fert [8,9] ont calculé ce terme à l'aide d'un développement perturbatif dans le cas d'un alliage verre de spin CuMn contenant des impuretés d'Au ou de Pt. Nous allons présenter le principe du calcul puis nous utiliserons l'expression du vecteur \mathbf{D} issue de ce calcul pour déterminer les vecteurs \mathbf{D} associés à quelques surfaces particulières.

1.3.1. Principe du calcul

Le système considéré est un métal contenant des atomes magnétiques (Mn) et des impuretés non magnétiques, porteurs d'un couplage spin-orbite (Pt ou Au). L'Hamiltonien associé est :

$$H = H_0 - J\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A)\mathbf{S}_A \cdot \mathbf{s} - J\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B)\mathbf{S}_B \cdot \mathbf{s} + \lambda_{SO}(\mathbf{r})\mathbf{s} \cdot \mathbf{l} \quad (15)$$

où H_0 correspond à l'énergie cinétique des électrons de conduction, le deuxième (troisième) terme est l'interaction d'échange entre le spin \mathbf{S}_A (\mathbf{S}_B) localisé en \mathbf{R}_A (\mathbf{R}_B) et le spin \mathbf{s} d'un électron de conduction. Le quatrième terme est le couplage spin-orbite sur le site C de l'impureté non magnétique pris comme origine $\mathbf{R}_C = 0$. Les trois derniers termes dans (15) sont considérés comme des perturbations. Il apparaît 27 termes dans la correction d'énergie à l'ordre 3, seuls les termes proportionnels à $\lambda_{SO}J^2$ sont conservés. Finalement, il est possible d'écrire la correction d'énergie à l'ordre 3 sous la forme d'un Hamiltonien effectif antisymétrique [8,9] :

$$H_{AS} = -V \sin\left(k_F(R_A + R_B + R_{AB}) + \frac{\pi Z_d}{10}\right) \frac{\mathbf{R}_A \cdot \mathbf{R}_B (\mathbf{R}_A \times \mathbf{R}_B) \cdot (\mathbf{S}_A \times \mathbf{S}_B)}{R_{AB} (R_A R_B)^3} \quad (16)$$

avec :

$$V = \frac{135\pi\lambda_{SO}J^2}{32\varepsilon_F^2 k_F^3} \sin\left(\frac{\pi Z_d}{10}\right) \quad (17)$$

où ε_F et k_F sont l'énergie de Fermi et le vecteur d'onde au niveau de Fermi des électrons de conduction, Z_d est le nombre d'électrons d. Le vecteur \mathbf{D} peut donc s'écrire sous la forme :

$$\mathbf{D} = D_0 \frac{\mathbf{R}_A \cdot \mathbf{R}_B (\mathbf{R}_A \times \mathbf{R}_B)}{R_{AB} (R_A R_B)^3} \quad (18)$$

où le facteur D_0 , proportionnel à $\lambda_{SO}J^2$, est une fonction oscillante des distances R_A , R_B et R_{AB} entre les trois sites. Ce calcul a été effectué dans le cas d'un matériau massif. Dans le cas d'un film mince, le calcul conduirait à une expression semblable à (18) avec un facteur D_0 différent. D'après (18), le vecteur \mathbf{D} est perpendiculaire au plan contenant les trois sites :

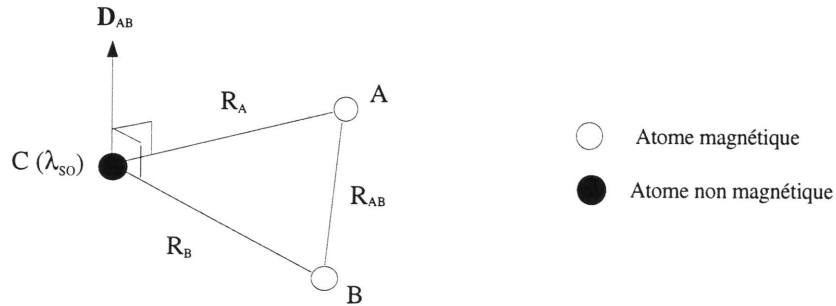


FIGURE 3 - Direction du vecteur \mathbf{D} résultant du mécanisme à trois sites.

Le vecteur \mathbf{D} total agissant entre deux sites magnétiques A et B est obtenu en sommant sur tous les sites C non magnétiques :

$$\mathbf{D}_{AB} = \sum_C D_0 \frac{\mathbf{R}_{AC} \cdot \mathbf{R}_{BC} (\mathbf{R}_{AC} \times \mathbf{R}_{BC})}{R_{AB} (R_{AC} R_{BC})^3} \quad (19)$$

D_0 dépend du site C par l'intermédiaire des distances R_{AC} et R_{BC} . Si la disposition des sites C est trop symétrique, ou si la concentration en sites C est importante, il peut y avoir une compensation des différentes contributions, le vecteur \mathbf{D}_{AB} total sera alors nul.

1.3.2. Application aux surfaces (001), (101) et (111)

Nous avons utilisé l'expression (19) pour déterminer les vecteurs \mathbf{D} agissant entre un site de surface et ses premiers voisins. Nous supposons que les atomes magnétiques, d'une part, et les atomes non magnétiques, d'autre part, forment deux réseaux cs entrecroisés du type CsCl :

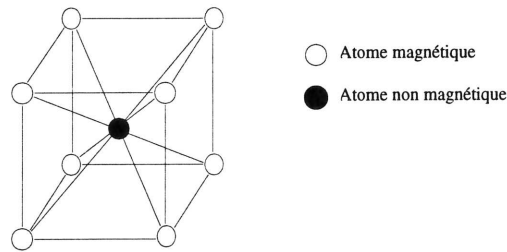


FIGURE 4 - Configuration du réseau considéré.

Nous avons fait le calcul pour les trois orientations de surface : (001), (101) et (111). Les résultats sont présentés dans le tableau ci-dessous.

Surface (001)	Surface (101)	Surface (111)	
<p>Voisins de surface</p> <p>$\mathbf{D}_{12} = D\mathbf{y}$ $\mathbf{D}_{23} = -D\mathbf{x}$ $\mathbf{D}_{34} = -D\mathbf{y}$ $\mathbf{D}_{41} = D\mathbf{x}$</p> <p>Réseau carré :</p>	<p>Voisins de surface</p> <p>$\mathbf{D}_{12} = D'\mathbf{y}$ $\mathbf{D}_{23} = -D\mathbf{x}$ $\mathbf{D}_{34} = -D'\mathbf{y}$ $\mathbf{D}_{41} = D\mathbf{x}$</p> <p>Réseau rectangulaire :</p>	<p>Voisins de surface</p> <p>$\mathbf{D}_{12} = D\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{y} + \sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{z}\right)$ $\mathbf{D}_{23} = D\left(-\frac{1}{2}\mathbf{x} - \frac{1}{2\sqrt{3}}\mathbf{y} + \sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{z}\right)$ $\mathbf{D}_{31} = D\left(\frac{1}{2}\mathbf{x} - \frac{1}{2\sqrt{3}}\mathbf{y} + \sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{z}\right)$</p> <p>Réseau triangulaire :</p>	<p>Voisins de volume</p> <p>$\mathbf{D}_1 = D\mathbf{y}$ $\mathbf{D}_2 = D\left(-\sqrt{\frac{3}{2}}\mathbf{x} - \frac{1}{2}\mathbf{y}\right)$ $\mathbf{D}_3 = D\left(\sqrt{\frac{3}{2}}\mathbf{x} - \frac{1}{2}\mathbf{y}\right)$</p> <p>Réseau triangulaire :</p>

TABLEAU 3 - Directions des vecteurs \mathbf{D} résultants du mécanisme à trois sites.

Les ronds blancs représentent les atomes de surface et les ronds noirs les atomes de volume. Dans le cas des surfaces (001) et (101), il n'y a pas d'interaction antisymétrique entre un site de surface et un site de volume, car les diverses contributions se compensent. Par contre, pour la surface (111), le mécanisme à trois sites conduit à une interaction antisymétrique entre deux sites de surface (partie gauche de la troisième colonne du tableau 3) mais aussi entre un site de surface et ses premiers voisins de volume (partie droite de la troisième colonne du tableau 3).

Remarques

- Surface (001) : les directions des vecteurs **D** obtenues sont en accord avec les règles de symétrie (voir tableau 2, cas a).
- Surface (101) : si on se limite aux premiers voisins non magnétiques, alors $D' = 0$, une interaction antisymétrique ne s'exercera qu'entre les sites 2 et 3, d'une part, et 4 et 1, d'autre part. En tenant compte des seconds voisins non magnétiques, on obtient une interaction antisymétrique entre tous les sites magnétiques premiers voisins de surface. Les directions des vecteurs **D** obtenues sont en accord avec les règles de symétrie (voir tableau 2, cas b).
- Surface (111), colonne de gauche : rappelons que pour cette surface, les règles de symétrie indiquent que le vecteur **D** doit appartenir au plan médiateur sans plus de précision sur sa direction (voir tableau 2, cas d). Les vecteurs **D** obtenus à partir de la formule (19) sont bien contenus dans les plans médiateurs. Il y a donc accord avec les règles de symétrie.
- Surface (111), colonne de droite : les directions des vecteurs **D** obtenues sont en accord avec les règles de symétrie (voir tableau 1, cas g).

1.4. Conclusion

Dans cette partie, nous avons montré que la brisure de symétrie, apparaissant au niveau des surfaces d'un film, permet l'existence d'une interaction antisymétrique entre un atome de surface et ses premiers voisins de volume (formalisme de Moriya), et entre un atome de surface et ses premiers voisins de surface et dans certains cas de volume (mécanisme à trois sites). Dans le cas des deux mécanismes, le calcul donne des vecteurs **D** dont les directions vérifient les règles de symétrie.

La partie suivante présente la modification de l'ordre magnétique d'un film induite par l'interaction antisymétrique.

2. MODIFICATION DE L'ORDRE MAGNÉTIQUE

Considérons la surface (001) du réseau cfc. Un atome de cette surface (désigné par S) possède quatre premiers voisins (numérotés de 1 à 4) situés dans le premier plan en dessous de la surface. Les vecteurs \mathbf{D} associés à ces premiers voisins ont été calculés dans le cadre du formalisme de Moriya. Nous avons obtenu :

$$\begin{cases} \mathbf{D}_{S1} = D\mathbf{y} \\ \mathbf{D}_{S2} = -D\mathbf{x} \\ \mathbf{D}_{S3} = -D\mathbf{y} \\ \mathbf{D}_{S4} = D\mathbf{x} \end{cases} \quad (20)$$

Nous remarquons que :

$$\sum_{i=1}^4 \mathbf{D}_{Si} = 0 \quad (21)$$

Ainsi, dans un film pour lequel on suppose que les spins, appartenant au même plan atomique, restent parallèles (interaction d'échange ferromagnétique), il y a une compensation exacte des quatre termes d'interaction antisymétrique agissant entre le spin du site de surface \mathbf{S}_S et les spins $\mathbf{S}_{1^{er} \text{ plan}}$ de ses quatre voisins de volume situés dans le premier plan en dessous de la surface :

$$H^{(3)} = \sum_{i=1}^4 \mathbf{D}_{Si} \cdot (\mathbf{S}_S \times \mathbf{S}_{1^{er} \text{ plan}}) = (\mathbf{S}_S \times \mathbf{S}_{1^{er} \text{ plan}}) \cdot \sum_{i=1}^4 \mathbf{D}_{Si} = 0 \quad (22)$$

Cela signifie que pour un film cfc avec des surfaces (001), l'interaction antisymétrique n'aura d'effet que si l'interaction d'échange est antiferromagnétique. Cette remarque s'applique à toutes les surfaces considérées dans le tableau 1, car pour chacune d'elle, la somme des vecteurs \mathbf{D} associés aux premiers voisins situés dans un même plan en dessous de la surface est nulle.

Dans une premier temps, nous présentons la modification de l'ordre antiferromagnétique induite par l'interaction antisymétrique dans un film cfc d'orientation de surface (001). Dans un second temps, nous montrons que la modification d'un ordre ferromagnétique par l'interaction antisymétrique est possible dans un film avec des surfaces de plus faibles symétries.

2.1 Modification de l'ordre magnétique due à des interactions antisymétriques entre sites de surface et sites de volume

2.1.1 Cas d'un film avec un échange antiferromagnétique Surface (001) d'un réseau cfc

Nous nous sommes limités, par souci de simplification, à l'étude d'un film composé de trois plans atomiques (c'est-à-dire deux plans de surface et un plan central). Si on considère une constante d'interaction d'échange J_1 négative entre premiers voisins, deux configurations antiferromagnétiques dégénérées (sans compter la dégénérescence due à la rotation continue de tous les spins) peuvent être stabilisées en l'absence d'interaction antisymétrique ($D = 0$) :

- Une configuration de première espèce constituée d'une alternance antiferromagnétique de plans ferromagnétiques perpendiculaires à un axe quaternaire.
- Une configuration de troisième espèce constituée d'un empilement de plans antiferromagnétiques perpendiculaires à un axe quaternaire.

Cette dégénérescence est levée lorsqu'on tient compte de l'interaction d'échange entre seconds voisins. En l'absence d'interaction antisymétrique ($D = 0$), différentes configurations antiferromagnétiques peuvent être stabilisées selon les valeurs des constantes d'échange entre premiers voisins (J_1) et seconds voisins (J_2). Nous avons choisi d'étudier la configuration, appelée de seconde espèce, qui est constituée d'une alternance antiferromagnétique de plans ferromagnétiques perpendiculaires à l'axe tertiaire (111) :

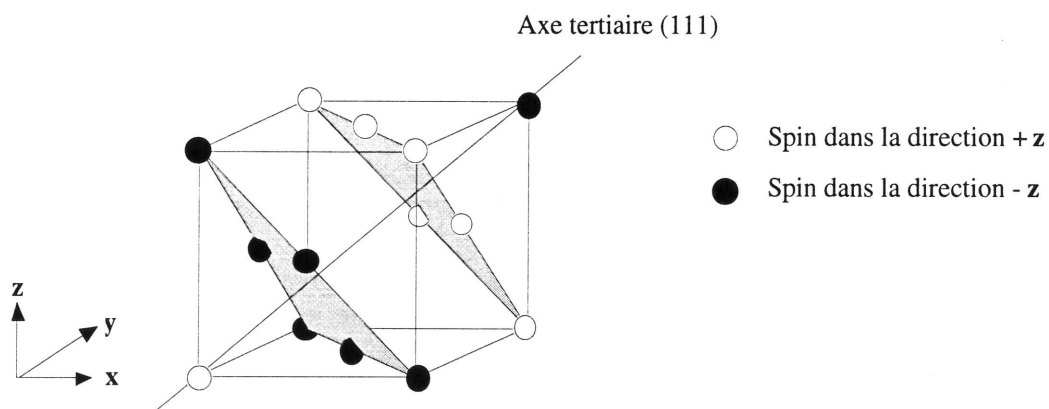


FIGURE 5 - Configuration antiferromagnétique de seconde espèce.

En l'absence d'interactions antisymétriques ($D = 0$), cette configuration est stable pour $J_2 < 0$ et pour :

$$\begin{cases} \frac{J_2}{J_1} < -1 \text{ si } J_1 > 0 \\ \frac{J_2}{J_1} > \frac{1}{2} \text{ si } J_1 < 0 \end{cases} \quad (23)$$

L'énergie totale du film est alors égale à : $E_0 = 7NJ_2S^2$ où N est le nombre d'atomes par plan atomique.

La question qui se pose est la suivante : en présence d'interactions antisymétriques, existe-t-il une configuration stable d'énergie inférieure à E_0 ? Nous n'avons pas cherché à étudier le cas général mais seulement tenté de montrer l'existence d'une telle configuration. Aussi nous avons fait un certain nombre d'hypothèses restrictives sur les orientations des spins dans les trois plans :

- Les deux plans de surface sont symétriques.
- Nous supposons que les spins le long d'une direction $(\bar{1}10)$ d'un même plan restent identiques. Ainsi, dans le plan de surface, nous définissons deux lignes ferromagnétiques α et β , de direction $(\bar{1}10)$, qui s'alternent, portant deux spins différents S_α et S_β . De même, dans le plan central, nous définissons deux lignes ferromagnétiques i et j , de direction $(\bar{1}10)$, qui s'alternent, portant deux spins différents S_i et S_j . Dans le plan de surface inférieur, les lignes ferromagnétiques α et β sont décalées. Cette structure est donc composée de quatre sous-réseaux que nous représentons ci-dessous.

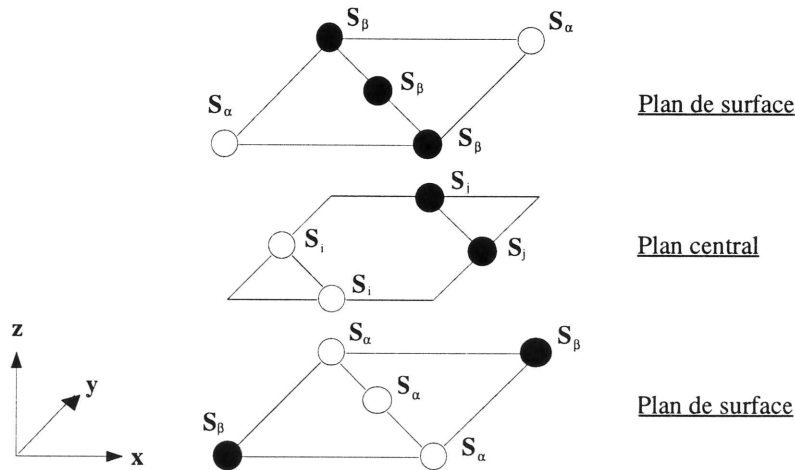


FIGURE 6 - Hypothèses faites sur les orientations des spins dans les trois plans atomiques.

Avec ces hypothèses, l'énergie totale du film comprenant les interactions d'échanges et les interactions antisymétriques est :

$$\begin{aligned} E = & -DN(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \cdot [(\mathbf{S}_\alpha - \mathbf{S}_\beta) \times (\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_j)] - 2J_1N(\mathbf{S}_\alpha + \mathbf{S}_\beta) \cdot (\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_j) \\ & - (2J_1 + 5J_2)NS_\alpha \cdot \mathbf{S}_\beta - (J_1 + 2J_2)NS_i \cdot \mathbf{S}_j - 3J_1NS^2 \end{aligned} \quad (24)$$

A cause des hypothèses faites sur les spins des sites de surface, les termes d'interactions antisymétriques entre sites de surface se compensent exactement (voir tableau 2, cas a). Il ne demeure que les termes d'interactions antisymétriques entre les sites de surface et leurs premiers voisins de volume. On remarque d'après l'expression (24) que si les spins appartenant à un même plan sont identiques (c'est-à-dire si $\mathbf{S}_\alpha = \mathbf{S}_\beta$ et $\mathbf{S}_i = \mathbf{S}_j$) alors le terme d'interaction antisymétrique est nul. Ceci illustre la remarque faite dans l'introduction de cette partie, à savoir que l'interaction antisymétrique n'a d'effet (dans ces hypothèses) que si l'interaction d'échange est antiferromagnétique.

Les spins sont considérés comme classiques, leurs directions peuvent varier de façon continue. Nous les repérons à l'aide de leurs coordonnées sphériques : $\{S, \theta, \varphi\}$.

Nous avons supposé qu'en l'absence d'interactions antisymétriques, l'état fondamental correspond à des spins alignés le long de l'axe z (perpendiculaire aux plans du film). Lorsque des interactions antisymétriques sont présentes, on s'attend à ce que l'état fondamental soit obtenu pour des spins légèrement déviés par rapport à l'axe z , car les rapports D / J_1 et D / J_2 sont faibles pour les métaux de transition (de l'ordre de 0,1). Ainsi, nous avons fait des développements limités, à l'ordre 2 en D , des termes contenant les angles $\varphi_\alpha, \varphi_\beta, \varphi_i$ et φ_j autour de leurs valeurs en l'absence d'interactions antisymétriques, c'est à dire : autour de 0 pour φ_α et φ_i et autour de π pour φ_β et φ_j . Nous définissons les angles $\delta\varphi_\alpha, \delta\varphi_\beta, \delta\varphi_i$ et $\delta\varphi_j$ de la façon suivante : $\varphi_\alpha = \delta\varphi_\alpha, \varphi_\beta = \pi + \delta\varphi_\beta, \varphi_i = \delta\varphi_i$ et $\varphi_j = \pi + \delta\varphi_j$. Par ailleurs, nous nous sommes placés dans le cas particulier :

$$\begin{cases} \theta_\alpha = \theta_i = \theta \\ \theta_\beta = \theta_j = -\theta \end{cases} \quad (25)$$

Afin de mieux saisir ces divers angles ainsi que les hypothèses que nous avons faites, nous avons représenté sur la figure ci-dessous les spins \mathbf{S}_α et \mathbf{S}_β des lignes ferromagnétiques des plans de surface et les spins \mathbf{S}_i et \mathbf{S}_j des lignes ferromagnétiques du plan central.

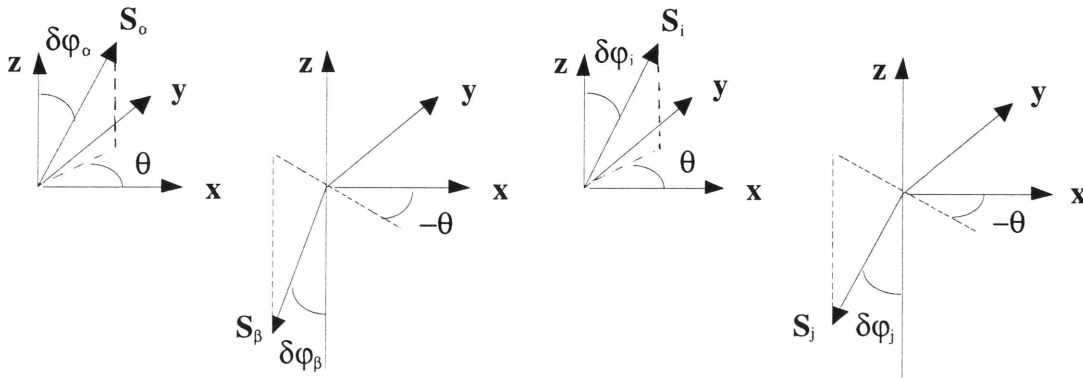


FIGURE 7 - Définitions des angles associés aux quatre spins $\mathbf{S}_\alpha, \mathbf{S}_\beta, \mathbf{S}_i$ et \mathbf{S}_j .

Après le développement limité, l'énergie totale (24) se réduit à :

$$\begin{aligned}
 E = E_0 - 2NDS^2 & \left[(\delta\varphi_\alpha - \delta\varphi_i)(\cos\theta + \sin\theta) + (\delta\varphi_\beta - \delta\varphi_j)(\cos\theta - \sin\theta) \right] \\
 - 2NJ_1S^2 & \left[(\delta\varphi_\alpha - \delta\varphi_\beta)(\delta\varphi_i - \delta\varphi_j)(\cos\theta)^2 + (\delta\varphi_\alpha + \delta\varphi_\beta)(\delta\varphi_i + \delta\varphi_j)(\sin\theta)^2 \right] \\
 + N(2J_1 + 5J_2)S^2 & \left[\delta\varphi_\alpha\delta\varphi_\beta\cos 2\theta - \frac{1}{2}(\delta\varphi_\alpha^2 + \delta\varphi_\beta^2) \right] \\
 + N(J_1 + 2J_2)S^2 & \left[\delta\varphi_i\delta\varphi_j\cos 2\theta - \frac{1}{2}(\delta\varphi_i^2 + \delta\varphi_j^2) \right] + O(D^3)
 \end{aligned} \quad (26)$$

Nous obtenons, à l'ordre 0 en D , l'énergie $E_0 = 7NJ_2S^2$. Ainsi, un état différent de l'état associé à E_0 peut être stabilisé si les termes supplémentaires dans (26) donnent une contribution négative. La minimisation de E par rapport à θ conduit aux quatre angles ci-dessous :

$$\theta \in \left\{ \frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}, \frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4} \right\} \quad (27)$$

Pour $\theta = \pi/4$ et $\theta = 5\pi/4$, la minimisation par rapport aux angles $\delta\varphi$ conduit à :

$$\begin{cases} \delta\varphi_\alpha = \pm \frac{4D(3J_1 + 2J_2)}{\sqrt{2}(4J_1^2 - (J_1 + 2J_2)(2J_1 + 5J_2))} \\ \delta\varphi_\beta = 0 \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} \delta\varphi_i = \mp \frac{4D(4J_1 + 5J_2)}{\sqrt{2}(4J_1^2 - (J_1 + 2J_2)(2J_1 + 5J_2))} \\ \delta\varphi_j = 0 \end{cases} \quad (28)$$

Pour $\theta = 3\pi/4$ et $\theta = 7\pi/4$, la minimisation par rapport aux angles $\delta\varphi$ conduit à :

$$\begin{cases} \delta\varphi_\alpha = 0 \\ \delta\varphi_\beta = \mp \frac{4D(3J_1 + 2J_2)}{\sqrt{2}(4J_1^2 - (J_1 + 2J_2)(2J_1 + 5J_2))} \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} \delta\varphi_i = 0 \\ \delta\varphi_j = \pm \frac{4D(4J_1 + 5J_2)}{\sqrt{2}(4J_1^2 - (J_1 + 2J_2)(2J_1 + 5J_2))} \end{cases} \quad (29)$$

L'énergie minimale correspondant à ces angles est :

$$E_{\min} = E_0 - \frac{28N(J_1 + J_2)D^2S^2}{4J_1^2 - (J_1 + 2J_2)(2J_1 + 5J_2)} \quad (30)$$

Le second terme est négatif lorsque $J_2/J_1 < -1,084$ pour $J_1 > 0$ et $J_2/J_1 > 0,84$ pour $J_1 < 0$. En tenant compte des conditions (23), qui déterminent le domaine de stabilité de l'état antiferromagnétique de seconde espèce, on trouve que la stabilisation d'un état d'énergie inférieure à E_0 n'est possible que si les constantes d'échange sont dans les domaines :

$$\begin{cases} \frac{J_2}{J_1} < -1,084 \quad \text{si } J_1 > 0 \\ \frac{J_2}{J_1} > \frac{1}{2} \quad \text{si } J_1 < 0 \end{cases} \quad (31)$$

L'aimantation résultante, associée à l'état stabilisé, est obtenue en additionnant les spins des trois plans. Sa direction est parallèle aux plans du film :

$$\mathbf{M} \propto \pm \frac{D(J_1 + 3J_2)N}{4J_1^2 - (J_1 + 2J_2)(2J_1 + 5J_2)} (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (32)$$

Nous avons donc montré qu'en présence d'interactions antisymétriques, l'état magnétique stabilisé est différent de celui obtenu en l'absence d'interactions antisymétriques. En effet, pour $D = 0$, l'état magnétique stable est antiferromagnétique, son aimantation résultante est donc nulle. En revanche, lorsque $D \neq 0$, l'état magnétique stable est un état de spins inclinés, son aimantation résultante est faible (car proportionnelle à D) mais non nulle. Ce film cfc, de surfaces orientées (001), se comporte comme un ferromagnétique faible dans le sens évoqué par Dzyaloshinsky pour les composés antiferromagnétiques.

Remarques

- Nous avons obtenu une aimantation résultante dans la direction $\mathbf{x} - \mathbf{y}$, ceci résulte du choix de l'orientation des lignes ferromagnétiques dans les plans du film. Un choix de lignes ferromagnétiques le long de $\mathbf{x} + \mathbf{y}$ aurait conduit à une aimantation résultante dans cette direction.
- Il peut paraître surprenant que le minimum d'énergie soit obtenu lorsque deux des quatre angles $\delta\varphi$ sont nuls. Ceci résulte des hypothèses restrictives que nous avons faites sur les angles φ et θ . L'état de spins inclinés d'énergie inférieure à E_0 que nous avons obtenu n'est peut-être pas l'état fondamental. L'important est que nous ayons montré qu'un état de spins inclinés est plus stable que l'état antiferromagnétique.
- Nous avons présenté dans cette partie l'effet de la perturbation apportée par l'interaction antisymétrique sur une configuration antiferromagnétique de spins dans la direction z perpendiculaire aux plans du film. Dans le cas d'une configuration antiferromagnétique avec des spins parallèles aux plans du film, l'interaction antisymétrique ne modifie pas l'ordre magnétique tant que les rapports D / J_1 et D / J_2 sont faibles, car le vecteur \mathbf{D} est dans le plan du film. Au dessus d'une valeur critique de D , dépendante à la fois de J_1 et J_2 , une configuration "cantée" pourrait être stabilisée. Cependant cette valeur critique n'est pas réaliste (par exemple, pour $J_2 = 0.6J_1$, $D_c \approx 11.5J_1$), aussi aucun effet n'est attendu. Ceci est lié au fait que les vecteurs \mathbf{D} associés à la surface (001) du réseau cfc sont tous parallèles aux plans du film.

2.1.2 Cas d'un film avec un échange ferromagnétique - Réseau monoclinique

L'interaction antisymétrique ne peut modifier l'ordre ferromagnétique d'un film mince que dans certaines conditions. Par exemple, si l'on suppose que les plans ont une aimantation uniforme,

c'est-à-dire que les spins d'un même plan restent parallèles, l'interaction antisymétrique ne peut modifier l'ordre magnétique que dans le cas où :

$$\sum_{i_\alpha} \mathbf{D}_{Si_\alpha} \neq 0 \quad (33)$$

où S fait référence à un site de surface et i_α fait référence à un site i (du plan α) voisin du site S. Cette condition n'est vérifiée pour aucun des surfaces des réseaux de Bravais présentées dans les tableaux 1 et 2, aussi aucune modification de l'ordre ferromagnétique due à l'interaction antisymétrique n'est attendue pour ces surfaces. En revanche, la condition (33) peut être vérifiée dans les cas suivants :

- Réseau non cubique
- Présence de déformations de surface ou d'interface
- Composé avec plusieurs atomes par maille

Nous allons présenter l'effet de la modification de l'ordre ferromagnétique par l'interaction antisymétrique dans le cas d'un réseau non cubique. Le réseau choisi est un réseau monoclinique simple :

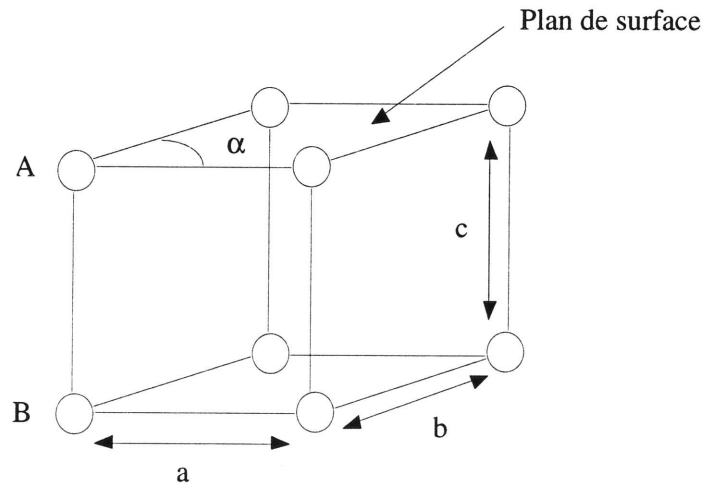


FIGURE 8 - Réseau monoclinique simple ($\alpha \neq 90^\circ$ et $a \neq b$).

Le seul élément de symétrie est un axe de rotation d'ordre 2 perpendiculaire au plan de surface. Ainsi, une interaction antisymétrique s'exerce entre un site A de surface et un site B situé dans le premier plan en dessous de la surface. Le vecteur \mathbf{D} associé est, d'après les règles de symétrie, perpendiculaire à la surface :

$$\mathbf{D}_{AB} = D\mathbf{z} \quad (34)$$

On considère un film monoclinique formé de n plans atomiques. La constante d'échange J est prise positive, ainsi, les spins appartenant à un même plan atomique i sont supposés identiques, égaux à \mathbf{S}_i . Chaque plan est donc caractérisé par la valeur de son aimantation (égale à $N\mathbf{S}_i$). L'énergie totale de ce film est :

$$E = -JNnS^2 - JN \sum_{i=1}^{n-1} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + NDz \cdot (\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_n \times \mathbf{S}_{n-1}) \quad (35)$$

Nous utilisons les coordonnées sphériques (S, θ_i, φ_i) pour repérer les directions des spins \mathbf{S}_i .

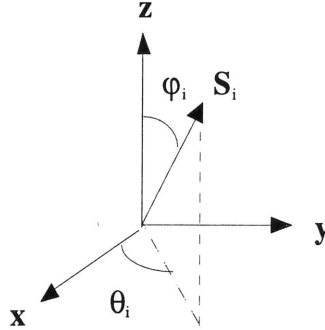


FIGURE 9 - Définition des angles θ_i et φ_i associés au spin \mathbf{S}_i .

Le vecteur \mathbf{D} étant perpendiculaire à la surface, l'interaction antisymétrique n'aura d'effet que sur une configuration ferromagnétique avec des spins parallèles aux plans du film (que nous supposons le long de la direction $+\mathbf{x}$). Elle aura pour effet de faire dévier les spins dans le plan sans les faire sortir du plan. Ainsi, seuls les angles θ_i demeurent dans l'expression de l'énergie. On effectue un développement limité autour de la valeur 0 des angles θ_i (D/J étant faible, les spins \mathbf{S}_i seront faiblement déviés par rapport à la direction $+\mathbf{x}$). L'énergie du film est alors :

$$E = E_0 + \frac{JNS^2}{2} \sum_{i=1}^{n-1} (\theta_i - \theta_{i+1})^2 - NDS^2(\theta_1 - \theta_2 + \theta_n - \theta_{n-1}) \quad (36)$$

où $E_0 = -JNS^2(2n-1)$ est l'énergie de la configuration ferromagnétique. La minimisation de l'énergie par rapport aux angles θ_i conduit à :

$$\begin{cases} \theta_1 = D/J \\ \theta_2 = 0 \\ \vdots \\ \theta_{n-1} = 0 \\ \theta_n = D/J \end{cases} \quad (37)$$

L'énergie correspondante est :

$$E = E_0 - \frac{NS^2D^2}{2J} \quad (38)$$

Ainsi, la présence d'interactions antisymétriques permet la stabilisation d'un état magnétique différent de l'état ferromagnétique. L'état stabilisé est un état "canté" caractérisé par une déviation des spins des plans de surface par rapport aux spins des autres plans du film. L'angle de déviation est de l'ordre de grandeur de D/J , c'est-à-dire de l'ordre de quelques degrés

(lorsque $D/J \approx 0,1$). En conséquence de la déviation des spins dans le plan (xOy), il apparaît une aimantation résultante transverse $M_{\perp} = M_y$ reliée à l'aimantation $M_{//} = M_x$ par la relation simple :

$$\frac{M_{\perp}}{M_{//}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \theta_i = \frac{2D}{nJ} \quad (39)$$

L'aimantation transverse est d'autant plus grande que le nombre de plans atomiques n dans le film est faible.

La situation décrite dans cette partie peut aussi se rencontrer dans un réseau cubique avec des déformations de surface liées aux contraintes de substrat.

2.2. Modification de l'ordre magnétique due à des interactions antisymétriques entre sites de surface

Dans le cas des films étudiés dans la partie 2.1, les interactions antisymétriques entre sites de surface n'interviennent pas. Elles se compensent à cause des hypothèses que nous avons faites sur les directions des spins. La modification de l'ordre magnétique induite par les interactions antisymétriques entre sites de surface est sans doute très semblable à celle qui se produit dans les systèmes bidimensionnel et unidimensionnel. Nous n'avons pas étudié ce problème, mais quelques précisions peuvent tout de même être données.

Un certain nombre de travaux traitent de la modification de l'ordre antiferromagnétique due à l'interaction antisymétrique dans les plans distordus de CuO_2 . Coffey *et al.* [13,14] ont calculé l'interaction antisymétrique agissant entre les spins des atomes de Cu dans les plans de CuO_2 des composés La_2CuO_4 et $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$. Ils obtiennent des vecteurs \mathbf{D} dans le plan qui changent de signe d'une liaison à l'autre à cause des distorsions des plans de CuO_2 . En conséquence, l'ordre antiferromagnétique peut être modifié : les spins sont déviés dans le plan par rapport aux directions de la configuration antiferromagnétique. Des calculs numériques ont par la suite été développés [29] afin de déterminer l'état fondamental ainsi que l'aimantation totale en fonction des paramètres D , J_1 et J_2 . Ces calculs confirment la possibilité d'un faible ferromagnétisme. De même, des calculs d'ondes de spin, effectué par Manuel *et al.* [30], montrent la possibilité d'une aimantation résultante non nulle dans la phase orthorhombique du composé La_2CuO_4 .

L'interaction antisymétrique entre les sites de surface d'un ferromagnétique peut modifier l'ordre magnétique dans le cas où la symétrie de la surface est abaissée pour diverses raisons (distorsion, réseau à plusieurs atomes par maille, etc...). Un ordre héliomagnétique à longue portée, induit par l'interaction antisymétrique, peut aussi être stabilisé dans les

ferromagnétiques. Donnons comme exemple la surface (101) du réseau cs ou cfc pour laquelle les sites de surfaces forment un réseau rectangulaire (voir tableau 2, cas b).

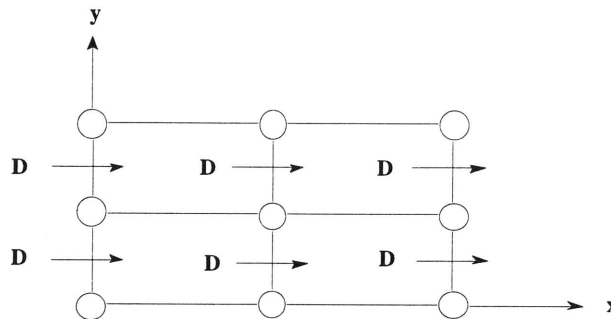


FIGURE 10 - Surface (101) des réseaux cs et cfc. Les axes x et y sont définis dans le plan de la surface.

Si on considère uniquement les interactions antisymétriques entre sites de surface premiers voisins, on se ramène alors à un problème unidimensionnel. L'ordre magnétique stabilisé est formé de lignes de spins en hélice dans la direction y [31].

Dans un film mince, il faudrait bien sûr tenir compte de l'interaction d'échange interplan qui sans doute empêcherait un véritable ordre hélicoïdale à longue portée.

2.3. Conclusion

Dans cette partie, nous avons montré que l'interaction antisymétrique peut stabiliser un état magnétique différent de celui obtenu en l'absence d'interaction antisymétrique. La modification de l'ordre magnétique est localisée à la proximité des surfaces du film. Le calcul effectué dans le cas d'un film cfc de surface (001), avec des interactions d'échange antiferromagnétiques, montre un comportement de ferromagnétique faible. Ce calcul peut être effectué pour des films avec d'autres orientations de surface. On s'attend à un comportement semblable, c'est-à-dire un comportement de faible ferromagnétique lorsque l'échange est antiferromagnétique. Le second exemple traité est un film monoclinique avec un échange ferromagnétique. L'interaction antisymétrique a pour effet de faire apparaître une aimantation transverse. Par ailleurs, dans tous les cas, l'interaction antisymétrique est source d'anisotropie de surface, car elle favorise une configuration magnétique dans laquelle les spins sont proches d'une direction perpendiculaire au vecteur \mathbf{D} . L'effet étudié étant un effet de surface, les déviations des directions de spins obtenues au voisinage des surfaces doivent aussi se produire à la surface d'un matériau magnétique massif.

CONCLUSION

Ce chapitre, consacré à l'étude de l'interaction antisymétrique dans les films minces, a permis de montrer l'existence et de comprendre le rôle de cette interaction dans de tels systèmes.

Dans une première partie, nous avons démontré l'existence d'une interaction antisymétrique entre un atome de surface et ses premiers voisins de volume (formalisme de Moriya) d'une part, et entre atomes premiers voisins de surface et éventuellement de volume (mécanisme à trois sites) d'autre part. Les vecteurs \mathbf{D} obtenus par le calcul dépendent de façon étroite de la symétrie de la surface considérée, ils sont en accord avec les règles de symétrie.

Dans une seconde partie, nous avons déterminé la configuration magnétique de l'état fondamental associée à deux films différents en étudiant la compétition entre les interactions d'échanges et les interactions antisymétriques. Dans les deux cas, l'état magnétique stabilisé est différent de celui obtenu en l'absence d'interactions antisymétriques : faible ferromagnétisme pour les films ayant un échange antiferromagnétique et apparition d'une aimantation transverse pour les films ayant un échange ferromagnétique. Dans un ferromagnétique, l'effet principal de l'interaction antisymétrique est de contribuer à l'anisotropie de surface. La rugosité au niveau des surfaces ainsi que les déformations locales (aux interfaces notamment) doivent encore augmenter l'effet de l'interaction antisymétrique, car elles abaissent la symétrie locale.

ANNEXE A : Matrice de couplage spin-orbite et matrices de transfert

A.1. Matrice de couplage spin-orbite

Les éléments de matrice du couplage spin-orbite $\lambda_{so} \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{L}_i$ ont été calculés dans la base des harmoniques sphériques Y_2^m ($m = 0, \pm 1, \pm 2$). On effectue ensuite un changement de base afin d'exprimer les éléments de matrice dans la base associée aux orbitales 3d : $\left\{ |xy, \uparrow_z\rangle_i, |xy, \downarrow_z\rangle_i, |yz, \uparrow_z\rangle_i, |yz, \downarrow_z\rangle_i, |zx, \uparrow_z\rangle_i, |zx, \downarrow_z\rangle_i, |x^2 - y^2, \uparrow_z\rangle_i, |x^2 - y^2, \downarrow_z\rangle_i, |3z^2 - r^2, \uparrow_z\rangle_i, |3z^2 - r^2, \downarrow_z\rangle_i \right\}$.

$$M_{so} = \frac{\lambda_{so}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & i & -2i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & i & 0 & 0 & 2i & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 & i & 0 & i\sqrt{3} \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & i & i & 0 & i\sqrt{3} & 0 \\ 0 & -i & i & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & \sqrt{3} \\ -i & 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 1 & 0 & -\sqrt{3} & 0 \\ 2i & 0 & 0 & -i & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2i & -i & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\sqrt{3} & 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\sqrt{3} & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (A1)$$

A.2. Matrice de transfert pour la surface (001) du réseau cs

Un atome de surface possède cinq premiers voisins. Quatre d'entre eux sont situés en surface, leur environnement possède donc la même symétrie que l'atome de surface considéré, aucune interaction antisymétrique n'est attendue dans le cadre du formalisme de Moriya. Ainsi, seul le cinquième voisin, situé à la verticale en dessous du site de surface, doit être considéré. La matrice de transfert entre le site de surface (000) et le site de volume (00 $\bar{1}$) est :

$$T = \begin{pmatrix} (dd\sigma) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (dd\pi) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (dd\pi) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (dd\delta) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (dd\delta) \end{pmatrix} \quad (A2)$$

dans la base $\{|xy\rangle, |yz\rangle, |zx\rangle, |x^2 - y^2\rangle, |3z^2 - r^2\rangle\}$. $(dd\sigma)$, $(dd\pi)$ et $(dd\delta)$ représentent les intégrales de transfert dans les notations définies par Slater et Koster [27].

A.3. Matrice de transfert pour la surface (001) du réseau cc

Un atome de surface possède quatre premiers voisins situés en volume. Nous ne donnons que la matrice de transfert entre le site de surface (000) et son premier voisin situé en $(11\bar{1})$. Les autres matrices associées aux voisins $(1\bar{1}\bar{1})$, $(\bar{1}1\bar{1})$ et $(\bar{1}\bar{1}1)$ se déduisent par permutation de signes.

$$T = \frac{1}{9} \begin{pmatrix} 3A + 2B + 4C & -3A + B + 2C & -3A + B + 2C & 0 & \sqrt{3}(A - 2B + 2C) \\ -3A + B + 2C & 3A + 2B + 4C & 3A - B - 2C & 3(B - C) & \sqrt{3}(C - B) \\ -3A + B + 2C & 3A - B - 2C & 3A + 2B + 4C & 3(C - B) & \sqrt{3}(C - B) \\ 0 & 3(B - C) & 3(C - B) & 3(2B + C) & 0 \\ \sqrt{3}(A - 2B + 2C) & \sqrt{3}(C - B) & \sqrt{3}(C - B) & 0 & 3(2B + C) \end{pmatrix} \quad (A3)$$

où l'on a posé : $A = (dd\sigma)$, $B = (dd\pi)$ et $C = (dd\delta)$.

A.4. Matrice de transfert pour la surface (001) du réseau cfc

Un atome de surface possède huit premiers voisins dont quatre situés en surface. Pour des raisons identiques à celles évoquées dans le cas du réseau cs, nous ne considérons que les premiers voisins situés en volume. Nous donnons la matrice de transfert entre le site de surface (000) et son premier voisin situé en $(10\bar{1})$. Les matrices associées aux trois autres voisins : $(01\bar{1})$, $(\bar{1}0\bar{1})$ et $(0\bar{1}1)$ s'en déduisent par permutation de signes.

$$T = \frac{1}{16} \begin{pmatrix} 8(B + C) & 8(C - B) & 0 & 0 & 0 \\ 8(C - B) & 8(B + C) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4(3A + C) & 6(C - A) & 2\sqrt{3}(C - A) \\ 0 & 0 & 6(C - A) & 3A + 4B + 9C & \sqrt{3}(A - 4B + 3C) \\ 0 & 0 & 2\sqrt{3}(C - A) & \sqrt{3}(A - 4B + 3C) & A + 12B + 3C \end{pmatrix} \quad (A4)$$

ANNEXE B : Autre schéma de champ cristallin - Surface (001)

Nous supposons une séparation de champ cristallin nulle entre l'orbitale dans le plan $\{xy\}$ et les orbitales hors du plan $\{yz, zx\}$ sur le site de volume.

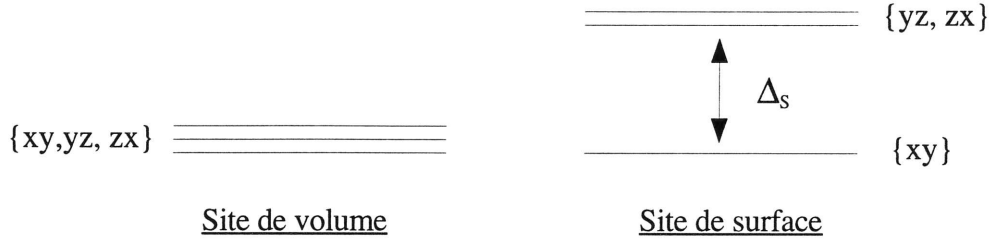


FIGURE 1 - Configuration des niveaux orbitaux considérés.

L'état orbital de l'électron situé sur le site j de volume est décrit par le vecteur :

$$|\phi\rangle_j = \alpha|xy\rangle_j + \beta|yz\rangle_j + \gamma|zx\rangle_j \quad (\text{B1})$$

où les coefficients α , β et γ vérifient la relation :

$$\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1 \quad (\text{B2})$$

Les composantes du vecteur \mathbf{D}_{ij} sont :

$$\begin{cases} D_{ij}^x = 4 \left(\langle xy, \uparrow_y |_i \otimes \langle \phi, \uparrow_z |_j \right) H^{(3)} \left(|xy, \uparrow_y \rangle_i \otimes |\phi, \uparrow_z \rangle_j \right) \\ D_{ij}^y = 4 \left(\langle xy, \uparrow_z |_i \otimes \langle \phi, \uparrow_x |_j \right) H^{(3)} \left(|xy, \uparrow_z \rangle_i \otimes |\phi, \uparrow_x \rangle_j \right) \\ D_{ij}^z = 4 \left(\langle xy, \uparrow_x |_i \otimes \langle \phi, \uparrow_y |_j \right) H^{(3)} \left(|xy, \uparrow_x \rangle_i \otimes |\phi, \uparrow_y \rangle_j \right) \end{cases} \quad (\text{B3})$$

L'indice j fait référence au site de volume et l'indice i au site de surface.

Nous exprimons les états de spin $|\uparrow_x\rangle$ et $|\uparrow_y\rangle$ en fonction des états de spin $|\uparrow_z\rangle$ et $|\downarrow_z\rangle$ par l'intermédiaire des relations :

$$\begin{cases} |\uparrow_x\rangle = \frac{|\uparrow_z\rangle + |\downarrow_z\rangle}{\sqrt{2}} \\ |\uparrow_y\rangle = \frac{|\uparrow_z\rangle + i|\downarrow_z\rangle}{\sqrt{2}} \end{cases} \quad (\text{B4})$$

En développant les états de spin $|\uparrow_x\rangle$ et $|\uparrow_y\rangle$, ainsi que l'état orbital $|\phi\rangle_j$, il apparaît 36 termes dans D_{ij}^x et D_{ij}^y et 144 termes dans D_{ij}^z . Nous nous sommes limités au calcul de D_{ij}^x et D_{ij}^y dans la mesure où la symétrie impose $D_{ij}^z = 0$ pour les réseaux cs, cc et cfc.

A l'issue de la sommation sur les états excités dans l'expression (5) de la correction de l'énergie à l'ordre 3, nous obtenons :

$$\begin{cases} D_{ij}^x = \frac{4\lambda_{so}}{U\Delta_s} (\alpha T_{i,1;j,1} + \beta T_{i,1;j,2} + \gamma T_{i,1;j,3}) (\alpha T_{i,1;j,3} + \beta T_{i,2;j,3} + \gamma T_{i,3;j,3}) \\ D_{ij}^y = -\frac{4\lambda_{so}}{U\Delta_s} (\alpha T_{i,1;j,1} + \beta T_{i,1;j,2} + \gamma T_{i,1;j,3}) (\alpha T_{i,1;j,2} + \beta T_{i,2;j,2} + \gamma T_{i,3;j,2}) \end{cases} \quad (B5)$$

où l'on a utilisé les notations $|1\rangle = |xy\rangle$, $|2\rangle = |yz\rangle$ et $|3\rangle = |zx\rangle$ pour simplifier l'écriture.

Pour obtenir une expression de D , il est nécessaire de moyenner sur les différents états orbitaux possibles (fonction d'onde (B1)). Si les états sont équiprobables, on a :

$$\begin{cases} \langle\alpha\beta\rangle = \langle\beta\gamma\rangle = \langle\gamma\alpha\rangle = 0 \\ \langle\alpha^2\rangle = \langle\beta^2\rangle = \langle\gamma^2\rangle = \frac{1}{3} \end{cases} \quad (B6)$$

D'où :

$$\begin{cases} D_{ij}^x = \frac{4\lambda_{so}}{3U\Delta_s} (T_{i,1;j,1} T_{i,1;j,3} + T_{i,1;j,2} T_{i,2;j,3} + T_{i,1;j,3} T_{i,3;j,3}) \\ D_{ij}^y = -\frac{4\lambda_{so}}{3U\Delta_s} (T_{i,1;j,1} T_{i,1;j,2} + T_{i,1;j,2} T_{i,2;j,2} + T_{i,1;j,3} T_{i,3;j,2}) \end{cases} \quad (B7)$$

En utilisant les tableaux de l'annexe A, on trouve :

Réseau cs

Un site de la surface (001) du réseau cs possède un premier voisin de volume. La matrice de transfert associée est diagonale. On obtient alors $D = 0$.

Réseau cc

Un site de la surface (001) du réseau cc possède quatre premiers voisins de volume. Nous avons calculé les composantes selon x et y des vecteurs \mathbf{D} associés à ces voisins à partir des expressions (B5) et des matrices de transfert (voir annexe A). Afin de simplifier les calculs, nous avons négligé les intégrales de transfert ($dd\pi$) et ($dd\delta$) devant ($dd\sigma$). Cette approximation est justifiée pour ($dd\delta$), car ($dd\sigma$) \approx 10 ($dd\delta$). En revanche, concernant ($dd\pi$), ce n'est pas très correct, car ($dd\sigma$) \approx - 2 ($dd\pi$). C'est tout de même une manière d'avoir une première idée du résultat. Nous obtenons :

$$\begin{cases} \mathbf{D}_{(000),(11\bar{1})} = D(-\mathbf{x} + \mathbf{y}) \\ \mathbf{D}_{(000),(\bar{1}1\bar{1})} = D(-\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\ \mathbf{D}_{(000),(\bar{1}\bar{1}\bar{1})} = D(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\ \mathbf{D}_{(000),(1\bar{1}\bar{1})} = D(\mathbf{x} + \mathbf{y}) \end{cases} \quad (\text{B8})$$

avec :

$$D = \frac{4\lambda_{so}(dd\sigma)^2}{9U\Delta_s} \quad (\text{B9})$$

Les directions des vecteurs \mathbf{D} obtenus sont en accords avec les règles de symétrie. L'expression de la norme de \mathbf{D} est semblable à celle obtenue dans le cas $\Delta_v \neq 0$ (formule (12) dans le texte), mis à part les termes en $1/\Delta_v$, $(dd\pi)$ et $(dd\delta)$ qui sont ici absents.

Réseau cfc

Un site de la surface (001) du réseau cfc possède quatre premiers voisins de volume. Nous avons calculé les composantes selon x et y des vecteurs \mathbf{D} associés à ces voisins à partir des expressions (B5) et des matrices de transfert (voir annexe A). Nous obtenons :

$$\begin{cases} \mathbf{D}_{(000),(10\bar{1})} = D\mathbf{y} \\ \mathbf{D}_{(000),(01\bar{1})} = -D\mathbf{x} \\ \mathbf{D}_{(000),(\bar{1}0\bar{1})} = -D\mathbf{y} \\ \mathbf{D}_{(000),(0\bar{1}\bar{1})} = D\mathbf{x} \end{cases} \quad (\text{B10})$$

avec :

$$D = \frac{2\lambda_{so}}{3U\Delta_s} ((dd\pi)^2 - (dd\delta)^2) \quad (\text{B11})$$

Les directions des vecteurs \mathbf{D} obtenus sont en accords avec les règles de symétrie.

RÉFÉRENCES

- [1] K.W.H Stevens, *Rev. of Mod. Phys.* **25**, N°1 (1953) 166.
- [2] I. Dzyaloshinsky, *Sov. Phys. JEPT* **5** (1957) 1259.
- [3] I. Dzyaloshinsky, *J. Phys. Chem. Solids* **4** (1958) 241.
- [4] L. Néel, *Ann. Phys.* **4** (1949) 249.
- [5] Y.Y. Li, *Phys. Rev.* **101** (1956) 1450.
- [6] T. Moriya, *Phys. Rev.* **120**, N°1 (1960) 91.
- [7] T. Moriya, *Phys. Rev. Lett.* **4**, N°5 (1960) 228.
- [8] A. Fert et P.M. Levy, *Phys. Rev. Lett.* **44**, N°23 (1980) 1538.
- [9] P.M. Levy et A. Fert, *Phys. Rev. B* **23**, N°9 (1981) 4667.
- [10] J.J. Prejean et M.J. Joliclerc, *J. Phys.* **41** (1980) 427.
- [11] G. Burns, F.H. Dacol, D.E. Rice, D.J. Buttrey et M.K. Crawford, *Phys. Rev. B* **42**, N°16 (1990) 10777.
- [12] K. Yamada, T. Omata, K. Nakajima, S. Hosoya, T. Sumida et Y. Endoh, *Physica C* **191** (1992) 15.
- [13] D. Coffey, K.S. Bedell et S.A. Trugman, *Phys. Rev. B* **42**, N°10 (1990) 6509.
- [14] D. Coffey, T.M. Rice et F.C. Zhang, *Phys. Rev. B* **44**, N°18 (1991) 10112.
- [15] J. Rodriguez-Carvajal, M.T. Fernandez-Diaz et J.L. Martinez, *J. Phys. : Condens. Matter* **3** (1991) 3215.
- [16] T. Thio, T.R. Thurston, N.W. Preyer, P.J. Picone, M.A. Kastner, H.P. Jenssen, D.R. Gabbe, C.Y. Chen, R.J. Birgeneau et A. Aharony, *Phys. Rev. B* **38**, N°1 (1988) 905.
- [17] L. Shekhtman, A. Aharony et O. Entin-Wohlman, *Phys. Rev. B* **47**, N°1 (1993) 174.
- [18] W. Koshibae, Y. Ohta et S. Maekawa, *Phys. Rev. B* **50**, N°6 (1994) 3767.
- [19] P. Bruno et C. Chappert, *Phys. Rev. Lett.* **67**, N°12 (1991) 1602.
- [20] P. Bruno et C. Chappert, *Phys. Rev. B* **46**, N°1 (1992) 261.
- [21] P. Bruno, *JMMM* **121** (1993) 248.
- [22] J.C. Slonczewski, *JMMM* **150** (1995) 13.
- [23] K. Xia, W. Zhang, M. Lu et H. Zhai, *Phys. Lett. A* **230** (1997) 223.
- [24] K. Xia, W. Zhang, M. Lu et H. Zhai, *Phys. Rev. B* **55**, N°18 (1997) 12561.
- [25] E.A. Turov, *Europhys. Lett.* **34**, N°4 (1996) 305.
- [26] P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **115**, N°1 (1959) 2.
- [27] J.C. Slater et G.F. Koster, *Phys. Rev.* **94**, N°6 (1954) 1498.

- [28] D.A. Smith, *JMMM* **1** (1976) 214.
- [29] A. Voigt et J. Richter, *J. Phys. : Condens. Matter* **8** (1996) 5059.
- [30] L.O. Manuel, C.J. Gazza, A.E. Trumper et H.A. Ceccatto, *Phys. Rev. B* **54**, N°18 (1996) 12946.
- [31] F.C. Alcaraz et W.F. Wreszinski, *J. of Stat. Phys.* **58**, N°1/2 (1990) 45.

Chapitre 2

EFFET KONDO ET INTERACTION RKKY DANS LES FILMS MINCES MAGNÉTIQUES

TABLE DES MATIÈRES

INTRODUCTION	p.75
1. IMPURETÉ KONDO DANS UN FILM	p.79
1.1. Hamiltonien de Anderson	p.79
1.2. Transformation de Schrieffer-Wolff	p.80
1.2.1. Constante de couplage effectif dans l'approximation des liaisons fortes	p.81
1.2.2. Constante de couplage effectif dans l'approximation des électrons libres	p.83
1.2.3. Conclusion	p.83
1.3. Distribution des températures de Kondo	p.84
1.3.1. Distribution des températures de Kondo dans l'approximation des liaisons fortes	p.85
1.3.2. Distribution des températures de Kondo dans l'approximation des électrons libres	p.88
1.3.3. Conclusion	p.90
1.4. Résistivité Kondo en fonction de l'épaisseur	p.90
1.4.1. Variation du coefficient C dans l'approximation des liaisons fortes	p.93
1.4.2. Variation du coefficient C dans l'approximation des électrons libres	p.94
1.4.3. Remarques et conclusion	p.94
2. RÉSEAU KONDO	p.97
2.1. Interaction RKKY dans un film	p.98
2.2. Compétition entre l'effet Kondo et l'interaction RKKY	p.101
2.2.1. Approximation du champ moyen	p.101
2.2.2. Cas non magnétique	p.103
2.2.3. Cas ferromagnétique	p.106
CONCLUSION	p.111
ANNEXE A : Densités d'états locales	p.112
A.1. Approximation des liaisons fortes	p.112
A.1.1. Densités d'états totales à 2D et 3D	p.115
A.1.2. Densités d'états locales à travers un film contenant 50 plans atomiques	p.116
A.1.3. Densités d'états totales de films de différentes épaisseurs	p.117
A.2. Approximation des électrons libres	p.117

A.2.1. Densités d'états locales à travers un film contenant 50 plans atomiques	p.118
A.2.2. Densités d'états totales de films de différentes épaisseurs	p.119
ANNEXE B : Méthode variationnelle	p.120
ANNEXE C : Calcul des fonctions de Green	p.122
RÉFÉRENCES	p.124

INTRODUCTION

Dans les années 60, une anomalie dans la courbe de la résistivité en fonction de la température a été observée dans différents alliages métalliques. L'explication de cette anomalie a été apportée par Kondo [1] : dans les métaux contenant des impuretés magnétiques, les électrons de conduction peuvent écranter, à basse température, le moment magnétique des impuretés. Ce phénomène, appelé effet Kondo, induit une décroissance logarithmique de la résistivité avec la température pour des températures supérieures à la température de Kondo T_K , où $k_B T_K$ représente l'énergie caractéristique associée à cet écrantage. L'image classique de l'état fondamental Kondo est celle d'un moment magnétique localisé entouré par un nuage d'écrantage formé par les électrons de conduction. Cet écrantage résulte d'une interaction d'échange antiferromagnétique entre le moment de l'impureté et le spin des électrons de conduction. Cette interaction est renforcée lorsque la température diminue. En dessous de T_K , le moment de l'impureté est complètement écranté. L'extension spatiale du nuage d'écrantage est appelée rayon Kondo, elle est égale à [2] :

$$R_K = \frac{\hbar v_F}{k_B T_K} \quad (1)$$

où v_F est la vitesse au niveau de Fermi des électrons de conduction. La valeur de R_K dépend du composé, elle est en général grande. Donnons deux exemples :

- Alliage de Cu(Fe) : $T_K \approx 20\text{K}$, ce qui correspond à $R_K \approx 1000\text{\AA}$.
- Alliage de Au(Fe) : $T_K \approx 0.3\text{K}$, ce qui correspond à $R_K \approx 30000\text{\AA}$.

Le fait que la longueur caractéristique de l'effet Kondo soit si grande est assez problématique. Pour une concentration n d'impuretés magnétiques supérieure à $(a_0/R_K)^3 \approx 10^{-7}$ (a_0 est le paramètre de maille), la distance moyenne entre les impuretés est inférieure à R_K , l'effet Kondo devrait être affecté, or ce n'est pas le cas, les expériences montrent un comportement dit "à une seule impureté" jusqu'à des concentrations beaucoup plus élevées ($\approx 10^{-1}$) [3]. Une autre façon de tester la pertinence de cette longueur caractéristique est de considérer des échantillons de dimensions inférieures à R_K et de voir si l'effet Kondo est modifié. Un certain nombre de travaux expérimentaux et théoriques se sont intéressés à ce problème. Nous allons les passer rapidement en revue.

Au niveau expérimental, les systèmes étudiés sont à la fois des films minces et des fils. Concernant les films d'Au(Fe) [4] et les films de Cu(Cr) [5], des résultats similaires ont été obtenus, à savoir une dépendance en taille du coefficient B , qui figure devant le terme logarithmique en température dans la résistivité Kondo : $\Delta\rho_{\text{él}} = -B \ln T$. Cela signifie que l'effet Kondo serait supprimé lorsque l'épaisseur du film diminue. Dans les films de Cu(Fe) [6], une

étude dans le domaine $T < T_K$ montre que la contribution Kondo à la résistivité est supprimée lorsque diminue alors que la température de Kondo T_K reste inchangée [6]. Une étude portant sur des fils d'Au(Fe) de diamètres supérieurs à 380Å [7] ne présente pour sa part aucune dépendance en taille lorsque les corrections concernant les interactions électron - électron sont prises en compte. Citons pour finir des mesures de températures de Kondo d'alliages de Cu(Mn) par une méthode de spectroscopie par contact de pointe [8]. Celles-ci montrent que lorsque le diamètre d de la pointe de contact diminue (c'est-à-dire lorsque le volume de l'échantillon, proportionnel à d^3 , diminue), la température de Kondo associée augmente de façon relativement importante. Ce rapide aperçu des travaux expérimentaux ne permet pas de conclure sur un éventuel effet de taille, que ce soit sur le coefficient B ou sur T_K , lorsque l'une des dimension de l'échantillon est inférieure à R_K .

Au niveau théorique, la situation n'est pas plus claire. Bergmann [9] a tout d'abord remis en cause la définition (1) de la longueur caractéristique de l'effet Kondo. Il affirme que le choix, lors du calcul, d'une symétrie sphérique du nuage d'écrantage conduit à un R_K beaucoup trop élevé. Il en conclut que les échantillons de dimensions plus petites que le R_K donné par (1) ne doivent pas forcément présenter d'effet de taille. Par ailleurs, dans les métaux désordonnés bidimensionnels, l'effet Kondo n'est pas la seule interaction qui conduit à une dépendance logarithmique en température dans la résistivité. Les interactions électron - électron [10] et la localisation faible [11] induisent aussi une dépendance logarithmique. Ainsi, le coefficient B , issu des mesures expérimentales citées ci-dessus, ne mesure sans doute pas le seul effet Kondo. Martin *et al.* [12] ont pu retrouver la variation de B en fonction de l'épaisseur observée par Blachly *et al.* [6] dans des films de Cu(Fe) en prenant uniquement en compte l'effet de la localisation faible, c'est-à-dire en excluant un éventuel effet de taille de l'effet Kondo et en négligeant les interactions électron-électron. Ujsaghy *et al.* [13] pour leur part obtiennent un effet de taille sur l'effet Kondo en prenant en compte l'anisotropie de surface.

Nous n'avons passé en revue jusqu'ici que les résultats concernant les alliages Kondo pour lesquels les interactions entre les moments localisés des impuretés sont faibles ou négligeables. L'étude du problème du réseau Kondo, dans les systèmes de dimension intermédiaire entre 2 et 3, constitue, elle aussi, l'objet de travaux récents. Dans de tels systèmes se pose, en plus des effets de dimensionnalité, la question de la compétition entre l'effet Kondo (qui s'oppose au magnétisme) et l'interaction RKKY (qui favorise l'ordre magnétique). Au niveau expérimental, citons une étude, réalisée actuellement par Rothman [14], concernant les propriétés structurales, magnétiques et de transport de films épitaxiés de Ce(111). Pour des épaisseurs de Ce comprises entre 60Å et 300Å, la phase γ est stabilisée. Pour des épaisseurs plus petites, une nouvelle phase du Ce est observée. Nous avons suivi de près l'évolution de cette étude qui, durant ces trois années, a été l'une des motivations de notre travail sur ce thème. Le parallèle que nous souhaitons établir entre cette étude expérimentale et nos travaux théoriques n'a pas pu être mis clairement en évidence pour le moment. D'autres études expérimentales portent sur des multicouches de Ce/Ta [15]. Les résultats obtenus sont les suivants : pour des épaisseurs des

couches de Ce inférieures à 15Å, le Ce est amorphe et son comportement magnétique est similaire à celui de Ce 3D dans la phase γ alors qu'aux plus grandes épaisseurs (100Å par exemple), le Ce est proche du Ce 3D dans la phase α du point de vue cristallographique et magnétique.

En résumé, la compréhension de l'effet Kondo dans les systèmes de dimension intermédiaire entre 2 et 3 n'est pas simple. D'autant plus que de multiples effets sont présents dans de tels systèmes (et difficilement séparables de l'effet Kondo pour certains) : effets liés à la dimension, localisation faible, interaction électron-électron, couplage spin-orbite, interaction RKKY, transition structurale, etc...

Nous étudions dans ce chapitre l'effet de la modification de la densité d'états, au voisinage des surfaces d'un film, sur l'effet Kondo et l'interaction RKKY. La première partie est consacrée à l'étude du problème Kondo dilué. Nous montrons tout d'abord comment sont modifiées la constante de couplage Kondo et la température Kondo d'un film. Puis, nous présentons le calcul de la résistivité électrique d'un film contenant des impuretés Kondo sans interactions entre elles. La deuxième partie est consacrée à l'étude d'un film du type réseau Kondo. Nous exposons tout d'abord le calcul des constantes d'interaction RKKY d'un film. Puis, nous donnons une première étude de la compétition entre l'effet Kondo et l'interaction RKKY. Tous les calculs présentés ont été effectués dans le cas d'un spin 1/2 et à température nulle (sauf concernant la résistivité électrique : calcul dans le domaine $T > T_K$).

1. IMPURETÉ KONDO DANS UN FILM

Le système étudié est un film contenant n plans atomiques. Le calcul complet des densités d'états locales à travers le film est exposé dans l'annexe A. Deux approximations concernant les électrons de conduction ont été considérées : approximation des liaisons fortes et approximation des électrons libres.

1.1. Hamiltonien de Anderson

Dans un premier temps, nous avons étudié le problème d'une seule impureté magnétique diluée dans un film métallique constitué de n plans atomiques. L'hybridation entre l'électron localisé de type f (ou d), introduit par l'impureté magnétique positionnée dans le plan γ , et les électrons de conduction de type s du film métallique peut être décrite par l'Hamiltonien d'interaction locale suivant :

$$H_I^\gamma = \sum_{\sigma} V(\mathbf{R}_{i_0}^\gamma) (c_{i_0\sigma}^{+\gamma} f_{\sigma} + f_{\sigma}^+ c_{i_0\sigma}^{\gamma}) \quad (2)$$

où :

- $\mathbf{R}_{i_0}^\gamma$ est un vecteur à deux dimensions précisant la position de l'impureté (site i_0 dans le plan γ) que l'on prend comme origine : $\mathbf{R}_{i_0}^\gamma = 0$.
 - $V(\mathbf{R}_{i_0}^\gamma)$ est le potentiel d'hybridation s - f , localisé en $\mathbf{R}_{i_0}^\gamma$. Une seule impureté située à l'origine est considérée, le potentiel est donc simplement noté V .
 - $c_{i_0\sigma}^{+\gamma}$ et $c_{i_0\sigma}^{\gamma}$ sont les opérateurs de création et d'annihilation associés à l'électron s .
 - f_{σ}^+ et f_{σ} sont les opérateurs de création et d'annihilation associés à l'électron de type f .
- Nous avons considéré un seul niveau orbital f et avons négligé toute dégénérescence éventuelle de ce niveau.

L'Hamiltonien total de ce type de système, comprenant le terme d'interaction (2), l'énergie cinétique totale et l'interaction Coulombienne, est l'Hamiltonien de Anderson [16]. Il s'écrit :

$$H^\gamma = \sum_{m,k,\sigma} \epsilon_k^m c_{k\sigma}^{+\alpha} c_{k\sigma}^{\beta} + \epsilon_f \sum_{\sigma} f_{\sigma}^+ f_{\sigma} + U n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{m,k,\sigma} \Omega_{\gamma}^m (c_{k\sigma}^{+m} f_{\sigma} + f_{\sigma}^+ c_{k\sigma}^m) \quad (3)$$

où k est le vecteur d'onde 2D associé aux électrons de conduction et m l'indice de bande (ces notations sont définies plus précisément dans l'annexe A). Le premier terme dans (3) représente l'énergie cinétique des électrons de conduction s . L'expression de ϵ_k^m dépend de

l'approximation choisie (liaisons fortes ou électrons libres). ϵ_f est le niveau d'énergie associé aux électrons f. La répulsion Coulombienne U entre deux électrons de spins opposés sur le niveau f est supposée infinie. Deux électrons ne peuvent être présents sur le niveau f en même temps, ainsi : $n_{f\uparrow}n_{f\downarrow} = 0$. N est le nombre de sites par plan. Les coefficients Ω_γ^m sont les éléments de la matrice permettant de passer de la base associée aux plans à la base associée aux bandes. Leur calcul est présenté dans l'annexe A. Ils dépendent de l'approximation choisie concernant les électrons de conduction.

Dans la suite nous utiliserons l'Hamiltonien de Anderson sous la forme suivante :

$$H^\gamma = H_0 + H_1^\gamma \quad (4)$$

où,

$$\begin{cases} H_0 = \sum_{m,k,\sigma} \epsilon_k^m c_{k\sigma}^{+m} c_{k\sigma}^m + \epsilon_f \sum_{\sigma} f_{\sigma}^+ f_{\sigma} \\ H_1^\gamma = \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{m,k,\sigma} \Omega_\gamma^m (c_{k\sigma}^{+m} f_{\sigma} + f_{\sigma}^+ c_{k\sigma}^m) \end{cases} \quad (5)$$

avec la contrainte :

$$n_{f\uparrow}n_{f\downarrow} = 0 \quad (6)$$

1.2. Transformation de Schrieffer-Wolff

Si l'hybridation entre les électrons f et s est faible, alors les fluctuations du nombre d'électrons f sont faibles. En effectuant une transformation canonique de l'Hamiltonien de Anderson on peut remplacer ces fluctuations de charge f par une interaction effective entre le spin localisé de l'électron f et les spins des électrons itinérants s. A l'issue de cette transformation, on obtient un Hamiltonien du type Kondo. Dans le cas où le niveau orbital f est non dégénéré, cette transformation est appelée transformation de Schrieffer-Wolff [17]. La généralisation de cette transformation au cas d'un niveau orbital f dégénéré est la transformation de Coqblin-Schrieffer [18]. Dans l'hypothèse d'un niveau f non dégénéré, nous avons donc effectué la transformation de Schrieffer-Wolff à partir de H^γ . Nous rappelons rapidement le principe de ce calcul et présentons le résultat obtenu pour notre système.

L'Hamiltonien effectif \tilde{H}^γ est défini par :

$$\tilde{H}^\gamma = e^{iA^\gamma} H^\gamma e^{-iA^\gamma} \quad (7)$$

où l'opérateur A^γ est d'ordre 1 en V . En faisant un développement limité des exponentielles, on obtient :

$$\tilde{H}^\gamma = \underbrace{H_0}_{\text{ordre 0 en } V} + \underbrace{H_1^\gamma + i[A^\gamma, H_0]}_{\text{ordre 1 en } V} + \underbrace{i[A^\gamma, H_1^\gamma] - \frac{1}{2}[A^\gamma, [A^\gamma, H_0]]}_{\text{ordre 2 en } V} + \dots \quad (8)$$

Les termes d'ordres supérieurs sont négligeables dans la mesure où $|\epsilon_F - \epsilon_f| \gg \Gamma$ et $U - \epsilon_F + \epsilon_f \gg \Gamma$. Γ étant l'élargissement du niveau ϵ_f dû à l'hybridation : $\Gamma = \pi V^2 \rho(\epsilon_F)$. Si $|\epsilon_F - \epsilon_f| \gg \Gamma$, le nombre d'électrons sur le niveau ϵ_f : $n_f = n_{f\uparrow} + n_{f\downarrow}$ est pratiquement égal à 1. Les deux conditions ci-dessus sont vérifiées si le niveau d'énergie ϵ_f est loin du niveau de Fermi ϵ_F et si la répulsion Coulombienne U est suffisamment grande. L'annulation du terme d'ordre 1 en V permet de déterminer l'opérateur A^γ par la résolution de l'équation :

$$H_1^\gamma = -i[A^\gamma, H_0] \quad (9)$$

Nous obtenons pour un film :

$$A^\gamma = \frac{iV}{\sqrt{N}} \sum_{m,k,\sigma} \frac{\Omega_\gamma^m}{\epsilon_k^m - \epsilon_f} (f_\sigma^+ c_{k\sigma}^m - c_{k\sigma}^{+m} f_\sigma) (1 - n_{f-\sigma}) \quad (10)$$

A partir de l'expression de A^γ , on calcule le terme à l'ordre 2 en V dans \tilde{H}^γ . Nous obtenons une interaction effective locale entre le spin $S_{i_0}^\gamma$ de l'électron localisé et le spin $s_{i_0}^\gamma$ de l'électron itinérant :

$$\tilde{H}^{\gamma(2)} = -J_{\text{eff}}^\gamma S_{i_0}^\gamma \cdot s_{i_0}^\gamma \quad (11)$$

où la constante de couplage effectif J_{eff}^γ est donnée par :

$$J_{\text{eff}}^\gamma = -\frac{2V^2}{\epsilon_F - \epsilon_f} \left(\sum_m \omega_\gamma^m \Omega_\gamma^m \right) \quad (12)$$

La sommation sur m se fait uniquement sur les bandes traversées par le niveau de Fermi ϵ_F . Les coefficients ω_γ^m sont les éléments de la matrice permettant de passer de la base des bandes à la base des plans (voir annexe A). De ce calcul, il apparaît que la constante de couplage effectif dépend de la position γ de l'impureté dans le film. Afin de mieux cerner cette dépendance, nous avons calculé cette constante pour différentes positions γ de l'impureté dans le film et différents remplissages dans le cadre des deux approximations concernant les électrons de conduction : approximation des liaisons fortes et approximation des électrons libres.

1.2.1. Constante de couplage effectif dans l'approximation des liaisons fortes

Nous avons calculé la somme :

$$\frac{J_{\text{eff}}^\gamma}{J_0} = \sum_m \omega_\gamma^m \Omega_\gamma^m \quad (13)$$

où J_0 est la constante de couplage effectif obtenue dans le cas 3D, elle est égale à [16] :

$$J_0 = -\frac{2V^2}{\epsilon_F - \epsilon_f} \quad (14)$$

La figure 1 présente les variations de la somme (13) à travers un film contenant 50 plans atomiques pour les valeurs de l'énergie de Fermi indiquées à droite du graphique.

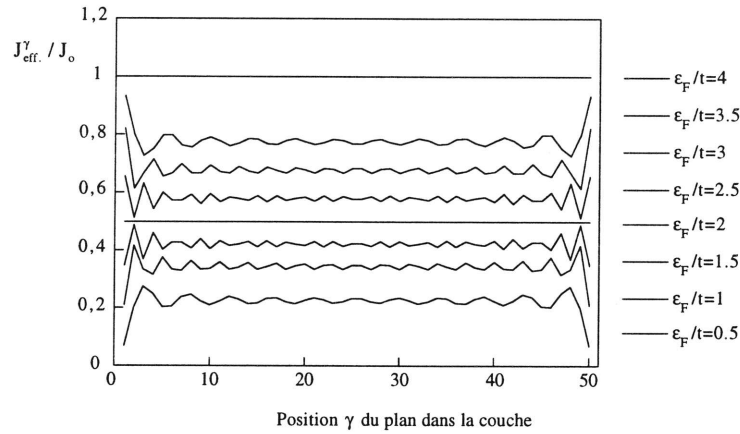


FIGURE 1 - Variation de la constante de couplage effectif à travers un film contenant 50 plans atomiques.

où t est définie dans l'annexe A. Lorsque l'énergie de Fermi ϵ_F est comprise entre $4t$ et $8t$, c'est-à-dire pour un remplissage partiel de toutes les bandes (voir figure 2), la somme sur m est égale à 1, ce qui signifie que J_{eff}^γ est simplement égale à J_0 .

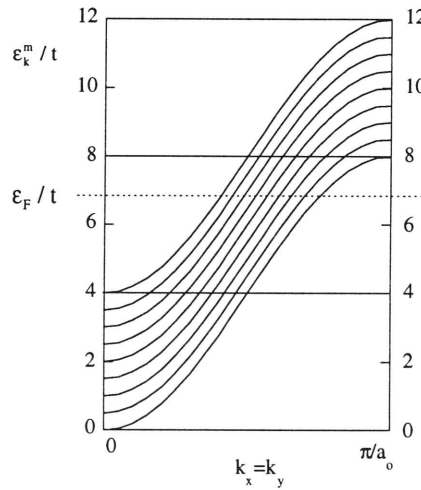


FIGURE 2 - Pour ϵ_F / t compris entre 4 et 6, le niveau de Fermi coupe les n bandes.

Pour une énergie de Fermi ϵ_F supérieure à $8t$, la variation de $J_{\text{eff}}^\gamma / J_0$ en fonction de γ est identique à celle correspondant à une énergie de Fermi égale à $12t - \epsilon_F$ du fait de la symétrie électron - trou.

1.2.2. Constante de couplage effectif dans l'approximation des électrons libres

La figure 3 présente les variations de la somme (13) à travers un film contenant 50 plans atomiques pour les remplissages indiqués à droite du graphique.

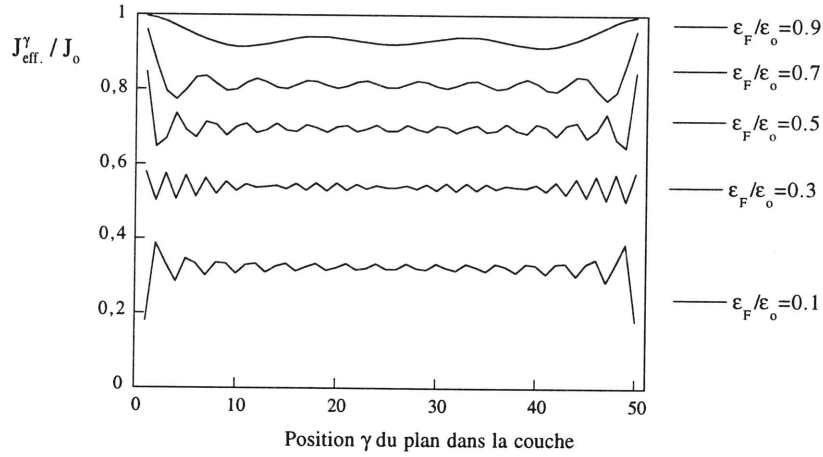


FIGURE 3 - Variation du couplage effectif à travers un film contenant 50 plans atomiques.

où est définie dans l'annexe A. J_{eff}^{γ} n'est égale à J_0 que lorsque $\epsilon_F / \epsilon_0 = 1$, ce qui correspond à une occupation partielle de toutes les bandes (voir figure 6 de l'annexe A).

1.2.3. Conclusion

- On obtient une constante de couplage effectif J_{eff}^{γ} négative, car la somme sur m est positive (voir figures 1 et 3) et J_0 est négative (car $\epsilon_F > \epsilon_f$).
- Nous observons une oscillation de J_{eff}^{γ} à travers le film. La période d'oscillation dépend du niveau de Fermi.
- $J_{\text{eff}}^{\gamma=1}$ peut être inférieure ou supérieure à J_0 selon le remplissage de la bande.
- Pour les deux approximations, nous remarquons que dès que toutes les bandes sont partiellement remplies, la somme sur m est égale à 1. Dans ce cas, J_{eff}^{γ} ne dépend plus de γ et est simplement égale à J_0 . Nous reviendrons sur ce point dans la partie suivante.

1.3. Distribution des températures de Kondo

Nous avons calculé la température de Kondo, associée à une impureté localisée dans un plan γ du film, à l'aide d'une méthode variationnelle développée par Varma et Yafet [19]. Le point de départ est l'Hamiltonien de Anderson (4). On recherche une expression approchée de l'état fondamental $|\psi\rangle$ de H^γ sous la forme d'une combinaison linéaire de l'état fondamental $|\psi_0\rangle$ de H_0 (correspondant à $n_f = 0$), et des états pour lesquels un électron de la bande de conduction, de spin \uparrow ou \downarrow , a été transféré vers le niveau localisé f (correspondants à $n_f = 1$) :

$$|\psi\rangle = b_0 |\psi_0\rangle + \sum_{m,k,\sigma} b_k^m f_\sigma^+ c_{k\sigma}^m |\psi_0\rangle \quad (15)$$

avec :

$$|\psi_0\rangle = \prod_{m,k,\sigma} c_{k\sigma}^{+m} |0\rangle \quad (16)$$

Les coefficients b_0 et b_k^m doivent minimiser la valeur moyenne de l'Hamiltonien H^γ dans l'état $|\psi\rangle$:

$$\frac{\langle \psi | H^\gamma | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \epsilon_f + \sum_{m,k,\sigma} \epsilon_k^m - \epsilon_F + \epsilon_\gamma \quad (17)$$

Le calcul de cette valeur moyenne permet de déterminer la quantité ϵ_γ , qui représente le gain d'énergie lors du transfert d'un électron de la bande de conduction vers le niveau localisé (ϵ_γ est négative). Le détail des calculs est exposé dans l'annexe B. La température de Kondo est simplement reliée à l'énergie ϵ_γ , ainsi on obtient la température de Kondo associée à une impureté localisée dans un plan γ du film :

$$T_K^\gamma \propto -\frac{\epsilon_\gamma}{\epsilon_F} = \exp\left(\frac{1}{J_0 \rho_\gamma(\epsilon_F)}\right) \quad (18)$$

où $\rho_\gamma(\epsilon_F)$ est la densité d'états locale, dans le plan γ , au niveau de Fermi (son calcul est présenté dans l'annexe A) et J_0 est la constante de couplage Kondo définie dans l'annexe B par :

$$J_0 = -\frac{2V^2}{\epsilon_F - \epsilon_f} \quad (19)$$

A l'issu de la transformation de Schrieffer-Wolff (partie 1.2), nous avons obtenu une constante de couplage effectif (ou Kondo) plus complexe :

$$J_{\text{eff.}}^\gamma = -\frac{2V^2}{\epsilon_F - \epsilon_f} \left(\sum_m \omega_\gamma^m \Omega_\gamma^m \right) \quad (20)$$

où la sommation sur m se fait sur les bandes traversées par le niveau de Fermi. Les deux méthodes de calcul ne conduisent donc pas tout à fait au même résultat. Rappelons cependant

que pour des remplissages partiels de toutes les bandes m , nous avons montré que la somme (20) est simplement égale à J_0 . Ainsi, pour de tels remplissages, les deux méthodes donnent la même valeur de la constante de couplage Kondo.

Il est intéressant de comparer la valeur de T_K^γ à la température de Kondo associée au matériau volumique, définie par :

$$T_K^{\text{Vol.}} \propto \exp\left(\frac{1}{J_0 \rho_{3D}(\epsilon_F)}\right) \quad (21)$$

où la densité d'état 3D, $\rho_{3D}(\epsilon)$, est issue, soit de l'approximation des liaisons fortes, soit de l'approximation des électrons libres. A partir des expressions (18) et (21) nous avons représenté les distributions des rapports $T_K^\gamma / T_K^{\text{Vol.}}$ à travers un film constitué d'un nombre n donné de plans atomiques. Ces distributions résultent directement des variations des densités d'états locales à travers le film que nous avons mises en évidence dans l'annexe A. Nous présentons ces distributions dans le cadre des deux approximations choisies concernant les électrons de conduction. La dépendance par rapport à la densité d'états locale étant exponentielle, de grandes variations de T_K^γ par rapport à la valeur du massif peuvent être obtenues.

1.3.1. Distribution des températures de Kondo dans l'approximation des liaisons fortes

Les figures 4 et 5 représentent les distributions du rapport $T_K^\gamma / T_K^{\text{Vol.}}$ dans l'approximation des liaisons fortes, à travers des films contenant 20 et 100 plans atomiques. Les valeurs de ϵ_F et J_0 sont fixées à : $\epsilon_F / t = 6$ et $J_0 / t = -0,5$.

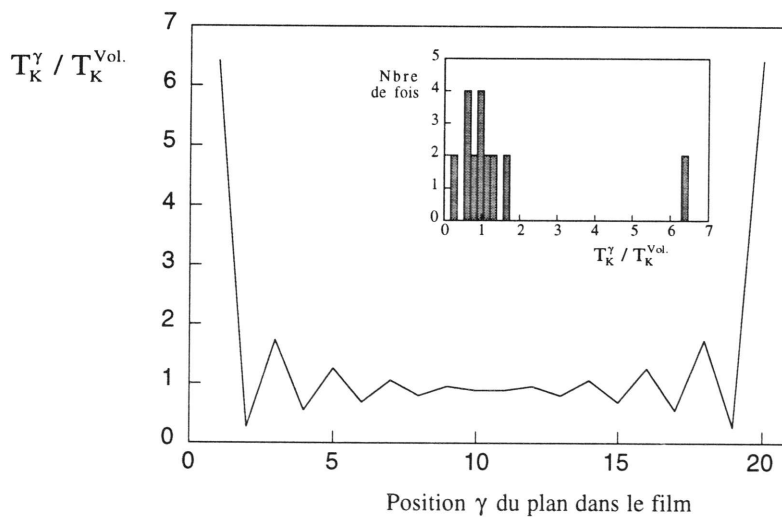


FIGURE 4 - Distribution des températures de Kondo à travers un film contenant 20 plans atomiques. En encart figure le diagramme de la distribution du rapport $T_K^\gamma / T_K^{\text{Vol.}}$.

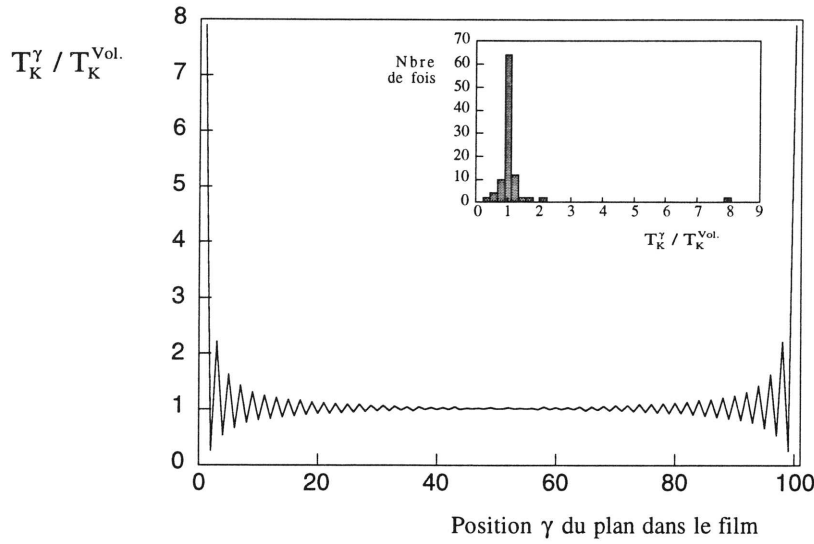


FIGURE 5 - Distribution des températures de Kondo à travers un film contenant 100 plans atomiques. En encart figure le diagramme de la distribution du rapport $T_K^\gamma / T_K^{\text{Vol.}}$.

A partir de ces deux figures, nous pouvons faire les remarques suivantes :

- La déviation de la valeur de T_K^γ par rapport à la valeur de $T_K^{\text{Vol.}}$ est importante au voisinage des surfaces. L'atténuation est assez rapide, elle se fait sur environ dix plans atomiques.
- Les diagrammes des distributions, figurant en encart, sont centrés autour de la valeur 1. Plus le nombre de plans atomiques n augmente, plus la largeur du pic centré en 1 diminue. Cependant, on remarque que quelle que soit la valeur de n , il demeure un pic excentré correspondant aux valeurs des températures de Kondo aux surfaces.
- Le rapport $T_K^l / T_K^{\text{Vol.}}$ obtenu est assez grand, il dépend de la valeur de l'énergie de Fermi et de la constante de couplage J_0 . Les figures 6 et 7 mettent en évidence ces dépendances.

La figure 6 montre la variation des températures de Kondo en surface, dans le second plan et au centre d'un film, contenant 100 plans atomiques, en fonction du niveau de Fermi, pour $J_0 / t = -0,4$.

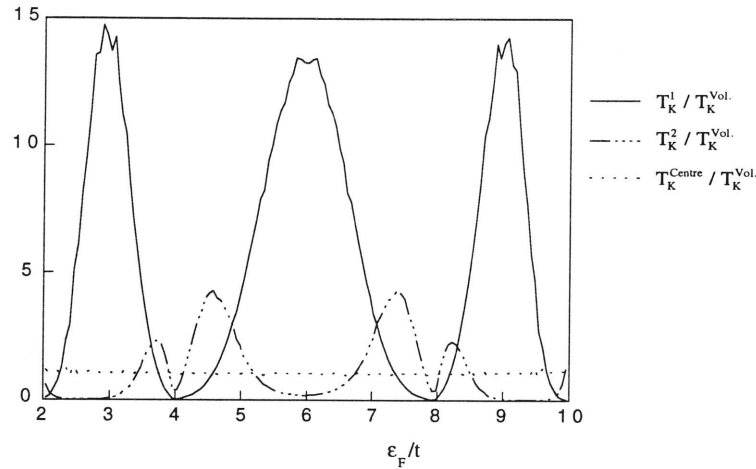


FIGURE 6 - Variation du rapport $T_K^\gamma / T_K^{\text{Vol.}}$ en surface, dans le second plan et au centre en fonction de l'énergie de Fermi.

On remarque que selon la valeur de ϵ_F / t , la température de Kondo dans le second plan peut être plus grande que celle en surface. Ce n'est pas le cas pour les distributions représentées sur les figures 4 et 5, car nous avons fixé $\epsilon_F / t = 6$. La température de Kondo au centre du film reste toujours très proche de la température de Kondo d'un matériau volumique quelle que soit ϵ_F .

La figure 7 montre la variation des températures de Kondo en surface, dans le second plan et au centre d'un film, contenant 100 plans atomiques, en fonction de la valeur de la constante J_0 , pour $\epsilon_F / t = 5$.

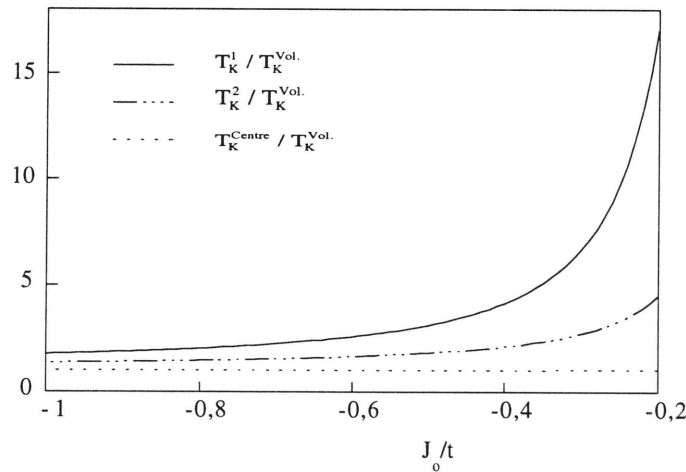


FIGURE 7 - Variation du rapport $T_K^\gamma / T_K^{\text{Vol.}}$ en surface, dans le second plan et au centre en fonction de l'énergie de Fermi. $\epsilon_F / t = 5$.

Lorsque $|J_0|$ diminue, les rapports $T_K^1 / T_K^{\text{Vol.}}$ et $T_K^2 / T_K^{\text{Vol.}}$ augmentent. Cela vient de la dépendance exponentielle de T_K^γ par rapport à J_0 . En effet, nous avons : $T_K^\gamma / T_K^{\text{Vol.}} = \exp((1/\rho_\gamma(\epsilon_F) - 1/\rho_{3D}(\epsilon_F)) / J_0)$. Dans le cas où $\epsilon_F / t = 5$, la figure 3 de l'annexe A montre que pour $\gamma = 1$ et 2, $\rho_\gamma(\epsilon_F) > \rho_{3D}(\epsilon_F)$, donc $1/\rho_\gamma(\epsilon_F) - 1/\rho_{3D}(\epsilon_F) < 0$. Ce qui se traduit sur la courbe ci-dessus par une augmentation des rapports $T_K^1 / T_K^{\text{Vol.}}$ et $T_K^2 / T_K^{\text{Vol.}}$ lorsque $|J_0|$ diminue.

La température de Kondo au centre du film est très proche de la température de Kondo d'un matériau volumique quelle que soit J_0 .

1.3.2. Distribution des températures de Kondo dans l'approximation des électrons libres

Les figures 8 et 9 représentent les distributions des rapports $T_K^\gamma / T_K^{\text{Vol.}}$, dans l'approximation des électrons libres, à travers des films contenant 20 et 100 plans atomiques, pour des valeurs fixées de ϵ_F et J_0 : $\epsilon_F / \epsilon_0 = 0,5$ et $J_0 / \epsilon_0 = -0,2$.

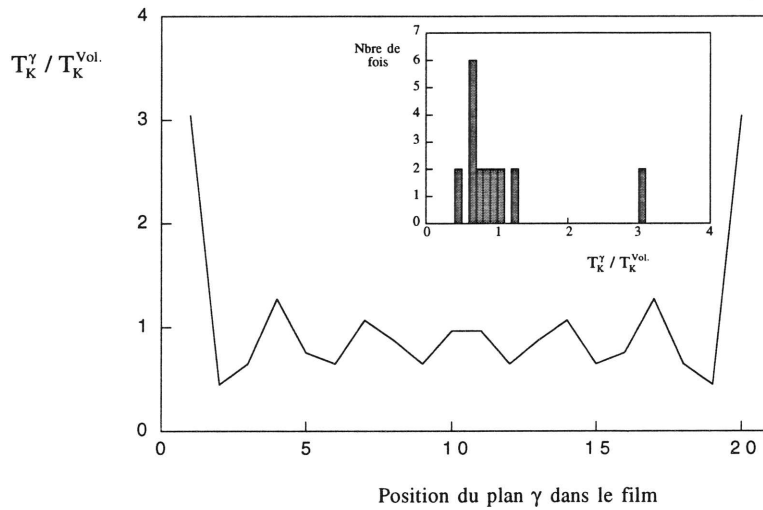


FIGURE 8 - Distribution des températures de Kondo à travers un film contenant 20 plans atomiques. En encart figure le diagramme de la distribution du rapport $T_K^\gamma / T_K^{\text{Vol.}}$.

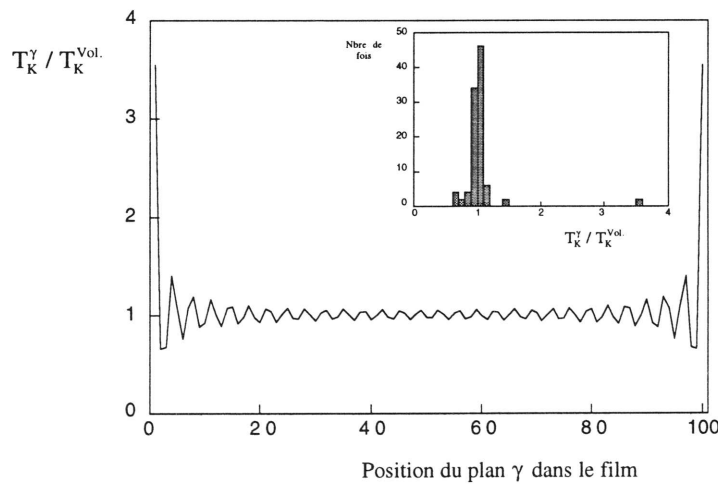


FIGURE 9 - Distribution des températures de Kondo à travers un film contenant 100 plans atomiques. En encart figure le diagramme de la distribution du rapport $T_K^\gamma / T_K^{\text{Vol.}}$.

Les remarques faites à propos des distributions des températures de Kondo obtenues dans l'approximation des liaisons fortes peuvent s'appliquer aux distributions obtenues dans l'approximation des électrons libres mise à part celle concernant l'atténuation des déviations de

T_K^γ par rapport à $T_K^{\text{Vol.}}$. Les figures 8 et 9 montrent en effet que même au centre de la couche, une déviation demeure, ce qui n'était pas le cas dans l'approximation des liaisons fortes. L'origine de cette différence provient des densités d'états locales au centre du film qui oscillent en général autour de la densité d'état 3D avec une amplitude plus grande dans l'approximation des électrons libres que dans l'approximation des liaisons fortes (voir figures 3 et 5 de l'annexe A).

Afin de comprendre l'influence de la valeur du niveau de Fermi sur les températures de Kondo au voisinage des surfaces, nous avons représenté les rapports $T_K^1 / T_K^{\text{Vol.}}$, $T_K^2 / T_K^{\text{Vol.}}$ et $T_K^{\text{Centre}} / T_K^{\text{Vol.}}$, d'un film comprenant 180 plans atomiques, en fonction du niveau de Fermi pour différentes valeurs de J_0 .

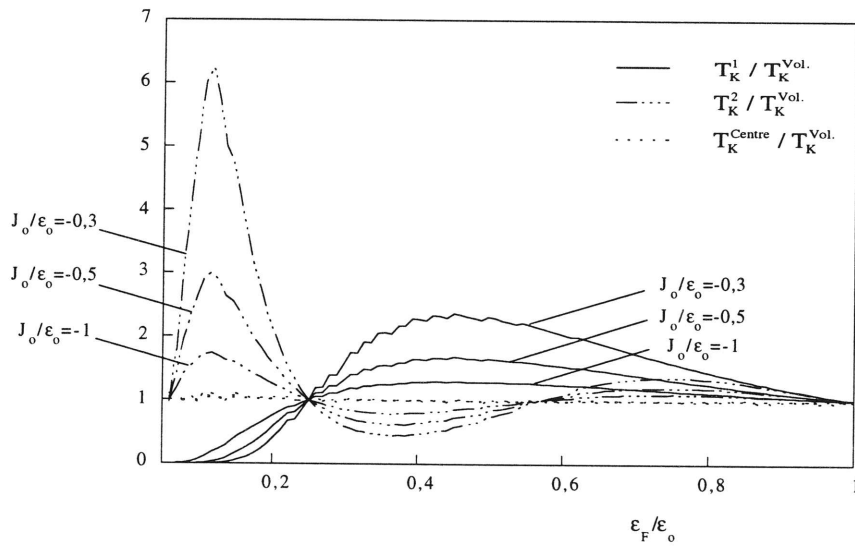


FIGURE 10 - Variation du rapport $T_K^\gamma / T_K^{\text{Vol.}}$ en surface, dans le second plan et au centre en fonction de l'énergie de Fermi, pour différentes valeurs de J_0 / ϵ_0 .

On remarque que pour $\epsilon_F / \epsilon_0 = 0.25$, les températures de Kondo en surface et dans le second plan sont égales à la température de Kondo 3D et ceci indépendamment de la valeur de la constante J_0 . Cette particularité résulte du comportement singulier de la densité d'états locale lorsque $\epsilon_F / \epsilon_0 = 0.25$. La figure 5 de l'annexe A montre que pour cette valeur de l'énergie de Fermi la densité d'états locale est constante à travers le film. De plus, elle est égale à 0.5, qui est précisément la valeur de la densité d'états 3D pour ce niveau de Fermi. Ainsi, nous avons $\rho_\gamma(0.25) = \rho_{3D}(0.25) = 0.5$ quel que soit le plan γ . Ceci conduit, d'après les formules (18) et (21), à l'égalité : $T_K^\gamma = T_K^{\text{Vol.}}$ quel que soit le plan γ . Par ailleurs, la figure 5 de l'annexe A montre que, pour $\epsilon_F / \epsilon_0 < 0.25$, $\rho_{\gamma=1}(\epsilon_F / \epsilon_0)$ est inférieure à $\rho_{\gamma=2}(\epsilon_F / \epsilon_0)$ alors que pour $\epsilon_F / \epsilon_0 > 0.25$, c'est l'inverse. Cela se traduit dans la figure ci-dessus par $T_K^1 / T_K^{\text{Vol.}} < T_K^2 / T_K^{\text{Vol.}}$ pour $\epsilon_F / \epsilon_0 < 0.25$ et par $T_K^1 / T_K^{\text{Vol.}} > T_K^2 / T_K^{\text{Vol.}}$ pour $\epsilon_F / \epsilon_0 > 0.25$. Ainsi, les variations des rapports $T_K^1 / T_K^{\text{Vol.}}$ et $T_K^2 / T_K^{\text{Vol.}}$ en fonction de l'énergie de Fermi peuvent simplement s'expliquer à partir des variations de la densité d'états locale.

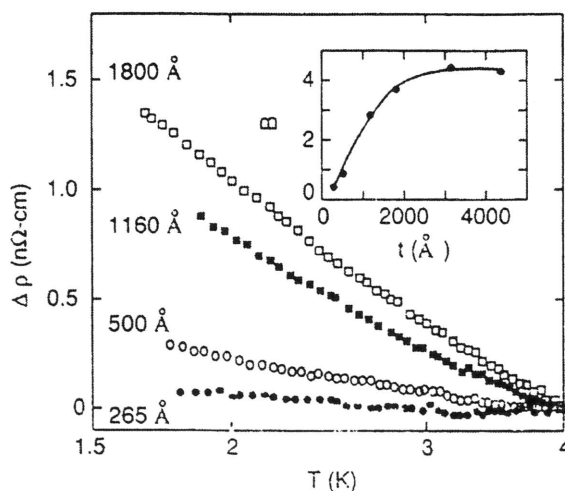
La variation du rapport $T_K^1 / T_K^{\text{Vol.}}$ en fonction de $|J_o|$ est différente selon la valeur du rapport $T_K^1 / T_K^{\text{Vol.}}$. Lorsque $T_K^1 / T_K^{\text{Vol.}} > 1$ alors $T_K^1 / T_K^{\text{Vol.}}$ augmente lorsque $|J_o|$ diminue. En revanche, lorsque $T_K^1 / T_K^{\text{Vol.}} < 1$ alors $T_K^1 / T_K^{\text{Vol.}}$ diminue lorsque $|J_o|$ diminue. Ceci résulte de la dépendance exponentielle de T_K^1 en fonction de J_o . Un commentaire similaire peut être donné en ce qui concerne $T_K^2 / T_K^{\text{Vol.}}$.

1.3.3. Conclusion

Dans le cadre des deux approximations considérées (liaisons fortes et électrons libres), nous avons mis en évidence une distribution des températures de Kondo à travers un film. Les déviations par rapport à la température de Kondo d'un matériau volumique sont importantes au voisinage des surfaces : rapports $T_K^1 / T_K^{\text{Vol.}}$ et $T_K^2 / T_K^{\text{Vol.}} \gg 1$ ou $\ll 1$.

1.4. Résistivité Kondo en fonction de l'épaisseur

Les grandeurs, dont nous avons présenté le calcul dans les parties précédentes (constante de couplage Kondo, température de Kondo), ne sont pas accessibles expérimentalement de façon directe. C'est pourquoi il nous a paru nécessaire de nous intéresser à la résistivité Kondo dans les films minces. Un certain nombre d'études expérimentales sur l'effet Kondo dans de tels systèmes mettent en évidence un effet de taille sur le coefficient B qui figure devant le terme logarithmique en température dans la résistivité : $\Delta \rho_{\text{él.}} = \rho_{\text{él.}} - (\rho_{\text{él.}})_0 = -B \ln T$ où $(\rho_{\text{él.}})_0$ est la résistivité du matériau sans effet Kondo. Citons par exemple les travaux de Chen *et al.* [4] qui ont étudié des films d'Au(Fe), et ont montré que le coefficient B dépend de l'épaisseur : nul dans la limite d'une épaisseur nulle, il augmente puis sature pour des épaisseurs de l'ordre de quelques milliers d'angströms :



FIGURES 11 - Résultats expérimentaux de Chen *et al.* pour des films de Au(Fe). En encart est présentée la variation du coefficient B en fonction de l'épaisseur du film.

Nous avons calculé la résistivité électrique $\rho_{\text{él.}}$ pour un film d'épaisseur variable en appliquant à notre système la méthode développée par Nagaoka [20] dans le cas d'une seule impureté magnétique diluée dans un métal tridimensionnel. Nous présentons dans cette partie les grandes étapes de ce calcul, ainsi que les courbes montrant la variation du rapport $\Delta\rho_{\text{él.}} / (\rho_{\text{él.}})_0$ en fonction du nombre n de plans atomiques dans le film.

Dans la partie 1.2, nous avons vu que l'Hamiltonien de Anderson décrivant le film était équivalent, sous certaines conditions, à un Hamiltonien Kondo effectif que nous avons déterminé. Nous partons donc de l'Hamiltonien Kondo pour une impureté magnétique localisée sur le site i_0 du plan γ :

$$H^\gamma = H_0 - J \mathbf{s}_{i_0}^\gamma \cdot \mathbf{S}_{i_0}^\gamma \quad (22)$$

que l'on exprime dans la base associée aux bandes :

$$H^\gamma = \sum_{m,k,\sigma} \epsilon_k^m c_{k\sigma}^{+m} c_{k\sigma}^m - \frac{J}{2N} \sum_{\substack{m,m' \\ k,k'}} \Omega_\gamma^m \Omega_{\gamma'}^{m'} \left((c_{k\uparrow}^{+m} c_{k'\uparrow}^{m'} - c_{k\downarrow}^{+m} c_{k'\downarrow}^{m'}) S_z^\gamma + c_{k\uparrow}^{+m} c_{k'\downarrow}^{m'} S_-^\gamma + c_{k\downarrow}^{+m} c_{k'\uparrow}^{m'} S_+^\gamma \right) \quad (23)$$

Nous avons supposé, pour simplifier, que la constante de couplage Kondo J est indépendante de γ . La conductivité diagonale est donnée par la formule de Kubo :

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \sum_{\substack{\alpha,\alpha' \\ k,k'}} v_{k_x}^\alpha G_{kk'}^{+\alpha\alpha'}(\epsilon) v_{k'_x}^{\alpha'} G_{k'k}^{-\alpha'\alpha}(\epsilon) \\ &= \sum_{\substack{\alpha,\alpha' \\ k,k'}} \sum_{\substack{m_1,m'_1 \\ m_2,m'_2}} \Omega_\alpha^{m_1} \Omega_{\alpha'}^{m'_1} \Omega_{\alpha'}^{m'_2} \Omega_\alpha^{m_2} G_{kk'}^{+m_1 m'_1}(\epsilon) G_{k'k}^{-m'_2 m_2}(\epsilon) v_{k_x}^\alpha v_{k'_x}^{\alpha'} \end{aligned} \quad (24)$$

Il apparaît dans l'expression (24) la fonction de Green $G_{kk'}^{mm'}(\epsilon) = \langle \langle c_{k'\uparrow}^{m'} | c_{k\uparrow}^{+m} \rangle \rangle$. Cette fonction de Green est la transformée de Fourier de la fonction de Green $G_{kk'}^{mm'}(t-t')$ à un électron associée à l'Hamiltonien H_0 :

$$G_{kk'}^{mm'}(t-t') = \langle \langle c_{k'\uparrow}^{m'}(t) | c_{k\uparrow}^{+m}(t') \rangle \rangle = -i \langle T [c_{k'\uparrow}^{m'}(t) c_{k\uparrow}^{+m}(t')] \rangle \quad (25)$$

où le T-produit ordonne les opérateurs $c_{k'\uparrow}^{m'}(t)$ et $c_{k\uparrow}^{+m}(t')$ dans l'ordre croissant par rapport au temps, la notation $\langle \rangle$ signifie que l'on effectue une moyenne thermodynamique sur l'ensemble grand canonique, enfin, on utilise la notation $\langle \langle | \rangle \rangle$ afin d'abréger l'écriture [21].

La fonction de Green $G_{kk'}^{mm'}(\epsilon)$ est liée par l'intermédiaire des équations du mouvement à la fonction de Green :

$$\Gamma_{kk'}^{mm'}(\epsilon) = \langle \langle c_{k'\uparrow}^{m'} S_z^\gamma + c_{k'\downarrow}^{m'} S_-^\gamma | c_{k\uparrow}^{+m} \rangle \rangle \quad (26)$$

qui correspond à la diffusion d'un électron par un site magnétique de l'état $\{k', m'\}$ vers l'état $\{k, m\}$ avec ou sans retournement du spin de l'électron de conduction. Les équations du mouvement associées à ces deux fonctions de Green sont les suivantes :

$$\begin{cases} \varepsilon G_{kk'}^{mm'}(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \langle [c_{k'\uparrow}^{m'}, c_{k\uparrow}^{+m}]_+ \rangle + \langle \langle [c_{k'\uparrow}^{m'}, H^\gamma]_- | c_{k\uparrow}^{+m} \rangle \rangle \\ \varepsilon \Gamma_{kk'}^{mm'}(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \langle [c_{k'\uparrow}^{m'} S_z^\gamma + c_{k'\downarrow}^{m'} S_-^\gamma, c_{k\uparrow}^{+m}]_+ \rangle + \langle \langle [c_{k'\uparrow}^{m'} S_z^\gamma + c_{k'\downarrow}^{m'} S_-^\gamma, H^\gamma]_- | c_{k\uparrow}^{+m} \rangle \rangle \end{cases} \quad (27)$$

où le commutateur $[A, B]$ de deux opérateurs est, par définition, égal à $(AB - BA)$. L'anticommutateur $[A, B]_+$ est égal à $(AB + BA)$. Les fonctions de Green (25) et (26) ont été déterminées à partir du système d'équation (27) après avoir effectué le découplage des fonctions de Green proposé par Nagaoka dans le cas d'un métal 3D. Ce calcul est présenté dans l'annexe C. Dans le domaine des hautes températures ($T > T_K$), nous obtenons :

$$G_{kk'}^{mm'}(\varepsilon) = \frac{\delta_{kk'} \delta_{mm'}}{2\pi(\varepsilon - \varepsilon_k^m)} - \frac{3iJ^2 \Omega_\gamma^m \Omega_\gamma^{m'} \rho_\gamma(\varepsilon)}{16(\varepsilon - \varepsilon_k^m)(\varepsilon - \varepsilon_{k'}^{m'})(1 - J\rho_\gamma(\varepsilon_F) \ln T)} \quad (29)$$

Revenons à l'expression (24) de la conductivité. Si les indices k et k' d'une part, et m_1, m'_1, m_2, m'_2 d'autre part, sont différents, le produit des fonctions de Green est d'ordre supérieur à 4 en J . Dans cette première approche, nous négligeons ces contributions par rapport aux termes d'ordre 2 et 3 en J qui apparaissent lorsque les indices sont égaux. Dans le cadre de cette approximation et après intégration sur k , nous obtenons :

$$\sigma_{xx} = \sum_{\substack{\alpha, \alpha' \\ m}} (\Omega_\alpha^m)^2 (\Omega_{\alpha'}^m)^2 v_F^\alpha v_F^{\alpha'} \frac{16\rho_m(\varepsilon_F)(1 - J\rho_\gamma(\varepsilon_F) \ln T)}{3\pi J^2 \rho_\gamma(\varepsilon_F) (\Omega_\gamma^m)^2} \quad (30)$$

La conductivité totale est obtenue à partir de (29) en sommant sur les plans α et α' . La résistivité associée à une impureté magnétique localisée dans le plan γ peut finalement se mettre sous la forme :

$$(\rho_{\text{él.}})_\gamma = AJ^2(1 + J\rho_\gamma(\varepsilon_F) \ln T) \quad (31)$$

Le facteur A dépend de façon non évidente des vitesses au niveau de Fermi et des densités d'états. Nous le laissons de côté dans cette étude et nous nous limitons à l'étude du coefficient C qui apparaît dans le rapport :

$$\frac{(\Delta\rho_{\text{él.}})_\gamma}{(\rho_{\text{él.}})_0} = J\rho_\gamma(\varepsilon_F) \ln T = -C \ln T \quad (32)$$

Pour une distribution uniforme d'impuretés magnétiques, n'interagissant pas entre elles, à travers un film contenant n plans atomiques, nous avons :

$$C = -\frac{J}{n} \sum_{\gamma=1}^n \rho_{\gamma}(\epsilon_F) \quad (33)$$

Dans le cas tridimensionnel, rappelons que Nagaoka [20] obtient une résistivité de la forme :

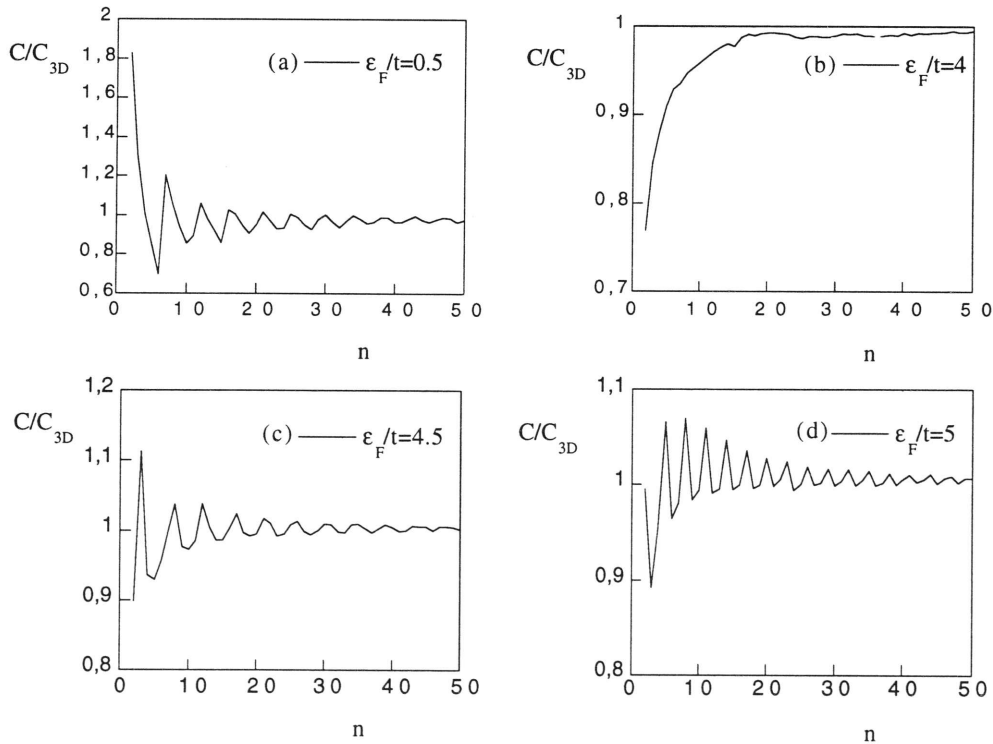
$$(\rho_{\text{él.}})_{3D} \propto J^2 (1 + J \rho_{3D}(\epsilon_F) \ln T) \quad (34)$$

Nous allons donc nous intéresser à la variation du rapport :

$$\frac{C}{C_{3D}} = \frac{1}{n} \sum_{\gamma=1}^n \frac{\rho_{\gamma}(\epsilon_F)}{\rho_{3D}(\epsilon_F)} \quad (35)$$

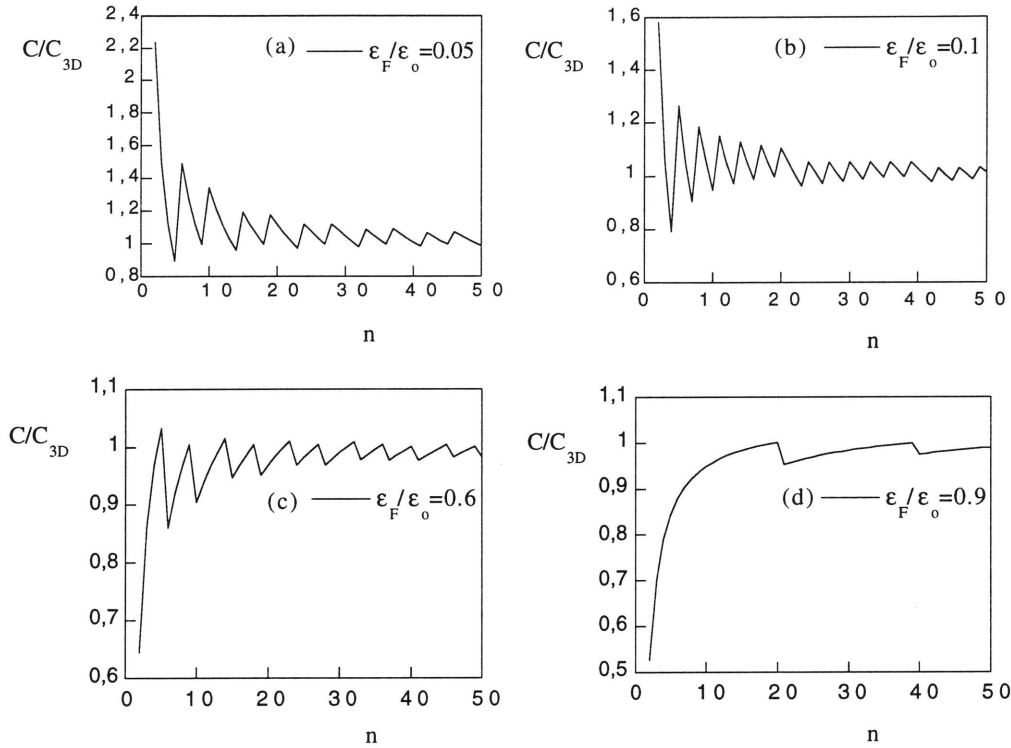
en fonction du nombre n de plans atomiques dans le film dans le cadre des deux approximations concernant les électrons de conduction. L'énergie de Fermi est supposée indépendante de n . Nous aurions pu faire une autre hypothèse, à savoir considérer un nombre d'états constant quel que soit n . L'influence du choix de l'une ou l'autre de ces deux hypothèses sur la résistivité électrique normal d'un film mince a été étudiée par Wang [22].

1.4.1. Variation du coefficient C dans l'approximation des liaisons fortes



FIGURES 12 - Variation du facteur C / C_{3D} en fonction de l'épaisseur du film, pour différentes valeurs du niveau de Fermi.

1.4.2. Variation du coefficient C dans l'approximation des électrons libres



FIGURES 13 - Variation du facteur C/C_{3D} en fonction de l'épaisseur du film, pour différentes valeurs du niveau de Fermi.

1.4.3. Remarques et conclusion

Dans les deux approximations, nous obtenons un effet de taille important (jusqu'à 100%) sur le coefficient C. La convergence du coefficient C vers la limite volumique dépend de la valeur du niveau de Fermi. Les épaisseurs du film correspondant à cette convergence restent assez faibles, environ 15 plans atomiques ($\approx 100\text{\AA}$), ce qui est très inférieur au rayon Kondo R_K ($\approx 1000\text{\AA}$). C'est donc une remise en cause du rayon Kondo R_K comme longueur caractéristique de l'effet Kondo. Ce résultat est à mettre en parallèle avec les travaux de Barzykin et Affleck [23]. Ils ont étudié le problème d'une impureté Kondo dans le cadre de la théorie du groupe de renormalisation. Ils montrent que la partie non oscillante de la susceptibilité de spin s'annule à des distances $r \gg 1/k_F$. Ainsi, la longueur caractéristique de l'effet Kondo serait plutôt liée à $1/k_F$ (\approx distance interatomique). Elle serait donc beaucoup plus faible que ce qui est en général admis.

La comparaison des courbes théoriques présentant la variation de C avec les courbes expérimentales de la variation de B n'est possible que dans le cas où le coefficient A intervenant dans l'expression (31) ne varie pas trop avec l'épaisseur du film. Dans ce cas, deux remarques peuvent être faites :

- Le coefficient C obtenu de façon théorique présente des oscillations en fonction de l'épaisseur du film alors que les courbes expérimentales montrent un comportement monotone de B . Il est possible toutefois que des oscillations soient présentes sans que les mesures expérimentales ne puissent les mettre en évidence (dans le cas par exemple où la période d'oscillation est faible, de l'ordre de grandeur de la distance atomique).
- Une limitation plus importante s'impose lorsqu'on souhaite comparer quantitativement les courbes théoriques et expérimentales. Ces dernières montrent que la convergence vers la valeur volumique du coefficient B se fait vers 2000\AA alors que les courbes théoriques de C convergent bien plus rapidement : environ 15 plans atomiques ($\approx 100\text{\AA}$). Cette différence peut avoir deux origines, soit l'hypothèse d'un coefficient A dépendant faiblement de l'épaisseur est fausse, soit d'autres effets, tels que localisation faible ou interaction électron - électron, contribuent au coefficient B .

2. RÉSEAU KONDO

Dans la première partie, nous sommes limités à l'étude d'un système Kondo dilué, c'est-à-dire un système dans lequel les impuretés magnétiques sont suffisamment éloignées et n'interagissent pas entre elles. Nous allons maintenant nous intéresser à l'autre cas limite : le réseau Kondo dans lequel chaque site est occupé par un atome magnétique. Une interaction d'échange indirecte s'exerce alors entre les spins localisés sur chaque site, par l'intermédiaire des spins des électrons de conduction, c'est l'interaction de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida [24,25,26], appelée interaction RKKY. Dans de tels systèmes, il y a une compétition entre l'effet Kondo (qui s'oppose au magnétisme) et l'interaction RKKY (qui favorise le magnétisme). Cette compétition est décrite qualitativement par le diagramme de Doniach [27] :

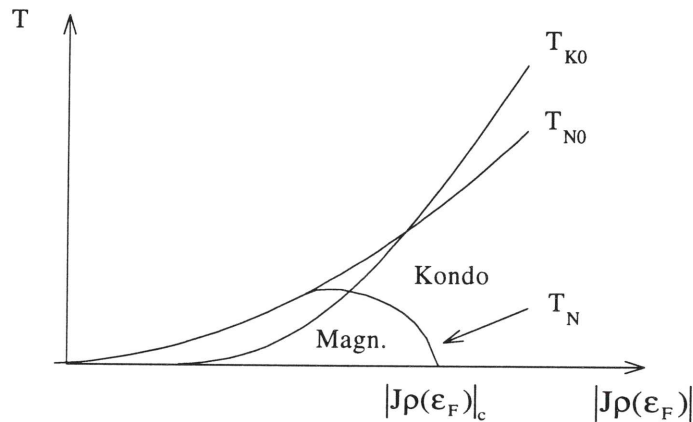


FIGURE 14 - Diagramme de phase de Doniach.

T_{K0} est la température caractéristique de l'effet Kondo, elle varie en $\exp(1 / J\rho(\epsilon_F))$ où J est la constante de couplage Kondo (J est négative) et $\rho(\epsilon_F)$ la densité d'états au niveau de Fermi. T_{N0} est la température de Néel caractéristique de l'état magnétique en l'absence d'effet Kondo, elle varie en $(J\rho(\epsilon_F))^2$. Lorsque le paramètre $|J\rho(\epsilon_F)|$ est faible, alors T_{K0} est inférieure à T_{N0} , l'état fondamental est magnétique. Par contre, lorsque $|J\rho(\epsilon_F)|$ est grand, T_{K0} est supérieure à T_{N0} , l'état fondamental est non magnétique, car un électron de conduction forme avec l'impureté un état singulet sur chaque site. Ainsi, selon la valeur du paramètre $|J\rho(\epsilon_F)|$, le système peut être soit magnétique, soit non magnétique. La température réelle d'ordre magnétique T_N présente un maximum avant de s'annuler. La valeur critique $|J\rho(\epsilon_F)|_c$ séparant la phase magnétique et la phase Kondo dépend du nombre d'électron par site [28,29]. Expérimentalement, la variation de T_N , telle qu'elle est représentée sur la figure 14, a été observée en faisant varier la pression ou la concentration dans les alliages ternaires. Par contre, la variation de T_{K0} pour des grandes valeurs de $|J\rho(\epsilon_F)|$ ne correspond pas toujours à la courbe de la figure 14 [30,31].

Dans cette partie, nous présentons l'étude de cette compétition dans un film de type réseau Kondo. Nous exposons tout d'abord le calcul des interactions RKKY à travers un film (partie 2.1), puis, dans le cadre de l'approximation du champ moyen, nous présentons l'étude de la transition état magnétique - état non magnétique (partie 2.2) et montrons la possibilité d'un magnétisme hétérogène à travers le film. Dans cette première approche, nous n'avons pas tenu compte du problème de la stabilisation d'un ordre magnétique à longue portée dans les systèmes de dimensions réduites.

2.1. Interaction RKKY dans un film

Nous avons vu dans la partie 1.2 que la valeur de la constante de couplage Kondo dépend de la position du site magnétique dans le film. De façon similaire, la valeur de la constante d'interaction RKKY doit dépendre des positions des deux sites magnétiques dans le film. Ce problème a été étudié par Che *et al.* [32,33]. Nous nous sommes directement inspirés de leur méthode pour calculer les constantes d'interaction RKKY. Dans cette partie, nous présentons le principe du calcul et les résultats que nous avons obtenus, qui sont très proches de ceux de Che *et al.* Le point de départ est l'Hamiltonien Kondo. Dans le cas d'un film mince contenant n plans atomiques, il s'écrit :

$$H = H_0 + H_{\text{Kondo}} = -t_{//} \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ \alpha, \sigma}} c_{i\sigma}^{+\alpha} c_{j\sigma}^{\alpha} - t_{\perp} \sum_{\substack{\langle \alpha, \beta \rangle \\ i, \sigma}} c_{i\sigma}^{+\alpha} c_{i\sigma}^{\beta} - J \sum_{i, \alpha} \mathbf{S}_i^{\alpha} \cdot \mathbf{s}_i^{\alpha} \quad (36)$$

La signification des indices α, β, i, j et σ est la même que dans la partie 1 : α et β sont les indices de plan, i et j les indices de site dans un plan donné et σ est l'indice de spin. Les électrons de conduction sont considérés dans l'approximation des liaisons fortes. Afin de simplifier le problème, nous supposons que la constante de couplage Kondo J est indépendante du plan α . Si elle dépend de α , la distribution des constantes d'interaction RKKY sera renforcée. \mathbf{S}_i^{α} et \mathbf{s}_i^{α} désignent respectivement le spin de l'électron localisé et le spin de l'électron itinérant sur le site i dans le plan α .

Dans le cas où le terme de couplage Kondo H_{Kondo} peut être considéré comme une perturbation (c'est-à-dire si les rapports $J/t_{//}$ et J/t_{\perp} sont petits devant 1), un calcul de perturbation à l'ordre 2 conduit à une interaction effective entre les deux spins localisés \mathbf{S}_i^{α} et \mathbf{S}_j^{β} :

$$\Delta E^{(2)} = - \sum_{\substack{i,j \\ \alpha, \beta}} I_{ij}^{\alpha\beta} \mathbf{S}_i^{\alpha} \cdot \mathbf{S}_j^{\beta} \quad (37)$$

où la constante d'interaction effective est [32,33] :

$$I_{ij}^{\alpha\beta} = - \frac{J^2}{2i\pi N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot (\mathbf{R}_i^{\alpha} - \mathbf{R}_j^{\beta})] \int_{-\infty}^{+\infty} G(\alpha, \beta, \mathbf{k}, \epsilon) G(\beta, \alpha, \mathbf{k}, \epsilon) d\epsilon \quad (38)$$

Les vecteurs d'onde \mathbf{k} et \mathbf{k}' sont des vecteurs à deux dimensions (définis dans le plan (xOy)). De même, les vecteurs \mathbf{R}_i^α et \mathbf{R}_j^β sont des vecteurs 2D qui repèrent les positions du site i dans le plan α et du site j dans le plan β . $G(\alpha, \beta, \mathbf{k}, \epsilon)$ est la transformée de Fourier de la fonction de Green associée à l'Hamiltonien d'énergie cinétique H_0 . Cette dernière est définie de la façon suivante

$$G(\alpha, i, \beta, j, t - t') = -i \langle \Psi_0 | T [c_i^\alpha(t) c_j^{\beta\dagger}(t')] | \Psi_0 \rangle \quad (39)$$

où le T-produit ordonne les opérateurs $c_i^\alpha(t)$ et $c_j^{\beta\dagger}(t')$ dans l'ordre croissant par rapport au temps. Nous ne précisons pas l'indice de spin, car les fonctions de Green associées à H_0 sont indépendantes du spin. $|\Psi_0\rangle$ est l'état fondamental des électrons de conduction. En calculant l'équation du mouvement des fonctions de Green, on obtient un système d'équations liant les transformées de Fourier des fonctions de Green. Ces équations sont du type :

$$(\epsilon + 2t_{//}(\cos(k_x a_0) + \cos(k_y a_0)))G(\alpha, \beta, \mathbf{k}, \epsilon) + t_\perp G(\alpha + 1, \beta, \mathbf{k}, \epsilon) + t_\perp G(\alpha - 1, \beta, \mathbf{k}, \epsilon) = \delta_{\alpha\beta} \quad (40)$$

où α et β prennent toutes les valeurs entières entre 1 et n . Nous supposons par la suite que les termes de transferts sont isotropes : $t_{//} = t_\perp = t$. En écrivant ce système d'équations sous forme matricielle et en utilisant des programmes numériques pour résoudre ce système (méthode de Jacobi et décomposition LU), nous avons déterminé les fonctions de Green sous la forme :

$$G(\alpha, \beta, \mathbf{k}, \epsilon) = \sum_{m=1}^n \frac{f_{\alpha\beta}(\epsilon_k^m)}{\epsilon - \epsilon_k^m} \quad (41)$$

où les ϵ_k^m sont les énergies propres de H_0 (voir annexe A.1). Les fonctions $f_{\alpha\beta}(\epsilon_k^m)$ ont été calculées numériquement, elles sont indépendantes du vecteur d'onde \mathbf{k} .

Nous nous sommes limités au calcul des constantes d'interaction RKKY entre deux sites magnétiques premiers voisins. Dans un film, il faut distinguer deux types de constantes d'interaction effectives :

- Les constantes d'interaction RKKY agissant entre deux spins premiers voisins localisés dans le même plan α : $I_{(i,j)}^{\alpha\alpha}$, ce sont des constantes d'interaction intraplan, on notera simplement I_{Intra} . Dans le cas d'un réseau carré dans le plan, deux sites premiers voisins sont distants de a_0 dans la direction \mathbf{x} par exemple. Ainsi, $(\mathbf{R}_i^\alpha - \mathbf{R}_j^\alpha)$ est égale à $a_0 \mathbf{x}$. En reportant l'expression (41) de la fonction de Green dans l'expression (38) de la constante effective, nous obtenons pour I_{Intra} :

$$I_{\text{Intra}} = \frac{J^2 a_0^4}{\pi^4} \sum_{m,m'} \frac{f_{\alpha\beta}(\epsilon_k^m) f_{\alpha\beta}(\epsilon_k^{m'})}{\epsilon_k^m - \epsilon_k^{m'}} \int dk_x dk'_x dk_y dk'_y \cos(k_x a_0) \cos(k'_x a_0) (\theta(\epsilon_k^m - \epsilon_F) \theta(\epsilon_F - \epsilon_k^{m'}) - \theta(\epsilon_k^{m'} - \epsilon_F) \theta(\epsilon_F - \epsilon_k^m)) \quad (42)$$

La fonction $\theta(\epsilon)$ est nulle pour $\epsilon < 0$ et est égale à 1 pour $\epsilon > 0$.

- Les constantes d'interaction RKKY agissant entre deux spins premiers voisins localisés dans deux plans successifs : $I_{ii}^{(\alpha,\beta)}$, ce sont des constantes d'interaction interplan, on notera simplement $I_{Inter.}$. Deux sites premiers voisins appartenant à deux plans différents sont distants de a_0 dans la direction z . Ainsi, $\mathbf{R}_i^\alpha = \mathbf{R}_i^\beta$. En reportant l'expression (41) de la fonction de Green dans l'expression (38) de la constante d'interaction effective, nous obtenons pour $I_{Inter.}$:

$$I_{Inter.} = \frac{J^2 a_0^4}{\pi^4} \sum_{m,m'} \frac{f_{\alpha\beta}(\epsilon_k^m) f_{\alpha\beta}(\epsilon_k^{m'})}{\epsilon_k^m - \epsilon_k^{m'}} \int dk_x dk'_x dk_y dk'_y (\theta(\epsilon_k^m - \epsilon_F) \theta(\epsilon_F - \epsilon_k^{m'}) - \theta(\epsilon_k^{m'} - \epsilon_F) \theta(\epsilon_F - \epsilon_k^m)) \quad (43)$$

Nous présentons, sur les figures ci-dessous, la variation des valeurs des constantes $I_{Intra.}$ et $I_{Inter.}$ à travers un film constitué de 20 plans atomiques pour deux valeurs différentes du niveau de Fermi. Ces constantes ont été normalisées par rapport à la valeur de la constante de couplage RKKY d'un matériau volumique $I_{Vol.}$, que nous avons calculé numériquement à partir de son expression classique à 3D :

$$I_{Vol.} = \frac{J^2 a_0^6}{\pi^6} \int d\kappa d\kappa' \frac{\cos(\kappa_x a_0) \cos(\kappa'_x a_0)}{\epsilon_\kappa - \epsilon_{\kappa'}} (\theta(\epsilon_\kappa - \epsilon_F) \theta(\epsilon_F - \epsilon_{\kappa'}) - \theta(\epsilon_{\kappa'} - \epsilon_F) \theta(\epsilon_F - \epsilon_\kappa)) \quad (44)$$

où κ est un vecteur à trois dimensions.

Distribution de la constante intraplan :

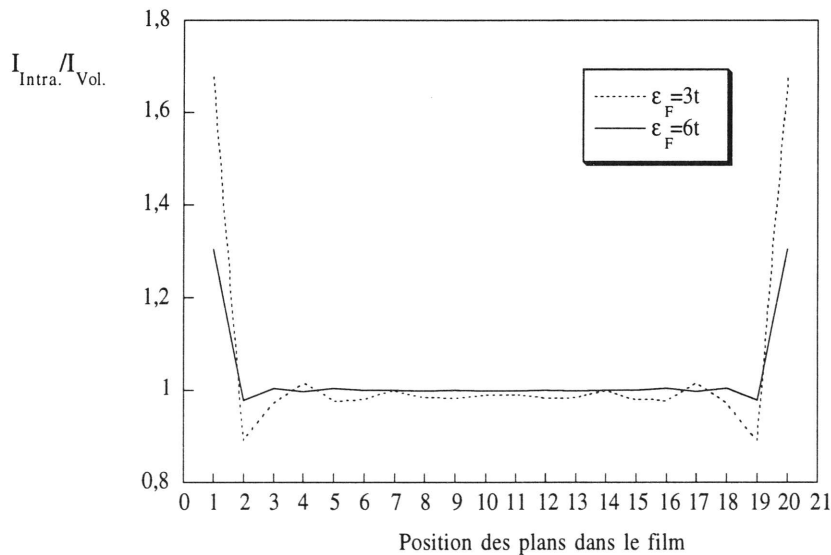


FIGURE 15 - Distribution des constantes d'interaction RKKY entre deux sites premiers voisins d'un même plan.

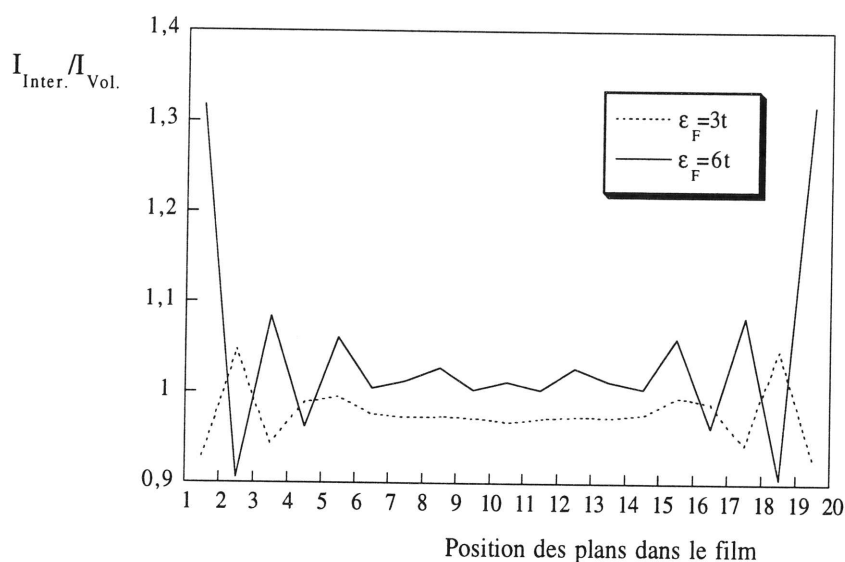
Distribution de la constante interplan :

FIGURE 16 - Distribution des constantes d'interaction RKKY entre deux sites appartenant à deux plans premiers voisins.

On obtient de larges variations des valeurs des constantes d'interaction RKKY $I_{\text{Inter.}}$ et $I_{\text{Intra.}}$ au voisinage des surfaces par rapport à la valeur de $I_{\text{Vol.}}$. Ces variations s'atténuent très vite, sur moins de cinq plans atomiques. Pour les valeurs des niveaux de Fermi considérées, nous avons obtenu des constantes d'interaction RKKY $I_{\text{Inter.}}$ et $I_{\text{Intra.}}$ ayant le même signe que la constante $I_{\text{Vol.}}$, c'est pourquoi les rapports $I_{\text{Inter.}} / I_{\text{Vol.}}$ et $I_{\text{Intra.}} / I_{\text{Vol.}}$ sont toujours positifs. Il n'est cependant pas impossible que, pour certaines valeurs du niveau de Fermi, $I_{\text{Inter.}}$ et / ou $I_{\text{Intra.}}$ soient de signe différent de $I_{\text{Vol.}}$ au voisinage des surfaces.

2.2. Compétition entre l'effet Kondo et l'interaction RKKY

Dans cette partie, nous nous intéressons à la compétition entre l'effet Kondo (qui tend à supprimer le magnétisme) et l'interaction RKKY (qui favorise le magnétisme) dans un film composé de trois plans atomiques. Nous nous sommes limités à l'étude de ce système simple pour une raison de temps de calcul numérique. Ce problème a été traité dans le cadre de l'approximation du champ moyen.

2.2.1. Approximation du champ moyen

Le système étudié est un film métallique, constitué de trois plans atomiques, dans lequel chaque site est occupé par un atome magnétique. Un tel système est un réseau Kondo de dimension intermédiaire entre 2 et 3. La résolution du problème du réseau Kondo infini dans le cadre de l'approximation du champ moyen consiste à calculer les valeurs des deux paramètres de champ

moyen μ (moment magnétique) et λ (paramètre Kondo) en fonction des constantes de couplage : J (entre le spin localisé et le spin itinérant) et I (entre deux spins localisés) [29]. Nous avons vu dans la partie 1.2 que la valeur de la constante J dépend de la position de l'impureté magnétique dans le film. Dans la partie 2.1, nous avons vu également que la constante I dépend des positions relatives des atomes magnétiques dans le film. Pour un film constitué de trois plans atomiques, il est donc nécessaire de définir 5 constantes de couplage :

- J_s : constante de couplage Kondo en surface.
- J_v : constante de couplage Kondo en volume.
- I_{ss} : constante d'interaction RKKY entre deux spins localisés en surface.
- I_{vv} : constante d'interaction RKKY entre deux spins localisés en volume.
- I_{sv} : constante d'interaction RKKY entre un spin localisé en surface et un spin localisé en volume.

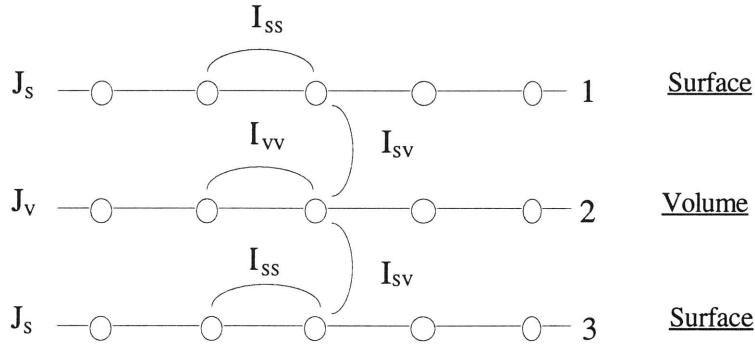


FIGURE 17 - Configuration du système étudié et définitions des constantes de couplages.

Les constantes de couplage Kondo : J_s et J_v , sont négatives alors que les constantes d'interaction RKKY : I_{ss} , I_{vv} et I_{sv} , peuvent être, selon le matériau considéré, positives (cas ferromagnétique) ou négatives (cas antiferromagnétique). Les valeurs moyennes μ et λ dépendent de I et J , il est donc nécessaire d'introduire les valeurs moyennes μ_s et λ_s , associées aux plans de surface, et les valeurs moyennes μ_v et λ_v , associées au plan de volume. Nous reviendrons sur leurs définitions plus loin.

L'Hamiltonien décrivant ce système est, dans l'approximation des liaisons fortes :

$$H = H_0 + H_{\text{Kondo}} + H_{\text{RKKY}} \quad (45)$$

avec :

$$\begin{cases} H_0 = -t_{//} \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ \sigma, \alpha}} c_{i\sigma}^{+\alpha} c_{j\sigma}^{\alpha} - t_{\perp} \sum_{\substack{\langle \alpha, \beta \rangle \\ i, \sigma}} c_{i\sigma}^{+\alpha} c_{i\sigma}^{\beta} + \epsilon_f \sum_{i, \sigma, \alpha} f_{i\sigma}^{+\alpha} f_{i\sigma}^{\alpha} \\ H_{\text{Kondo}} = - \sum_{i, \alpha} J_{\alpha} S_i^{\alpha} \cdot S_i^{\alpha} \\ H_{\text{RKKY}} = - \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} I_{\alpha\alpha} S_i^{\alpha} \cdot S_j^{\alpha} - \frac{1}{2} \sum_{i, \langle \alpha, \beta \rangle} I_{\alpha\beta} S_i^{\alpha} \cdot S_i^{\beta} \end{cases} \quad (46)$$

où,

- α et β sont les indices de plan prenant les valeurs 1, 2 ou 3.
- i et j sont les indices de sites.
- σ est le spin.
- $J_\alpha = J_s$ si $\alpha = 1$ ou 3 et $J_\alpha = J_v$ si $\alpha = 2$.
- $I_{\alpha\beta} = I_{ss}$ si $\{\alpha, \beta\} = \{1, 1\}$ ou $\{3, 3\}$, $I_{\alpha\beta} = I_{vv}$ si $\{\alpha, \beta\} = \{2, 2\}$ et $I_{\alpha\beta} = I_{sv}$ si $\{\alpha, \beta\} = \{1, 2\}$ ou $\{2, 3\}$.

Il peut paraître redondant d'inclure dans l'Hamiltonien les termes d'interaction RKKY qui dérivent en fait du couplage Kondo. Ce type d'Hamiltonien est en général utilisé pour traiter la compétition entre magnétisme et effet Kondo. En effet, l'interaction RKKY étant de l'ordre de grandeur de J^2 alors que T_K est en $\exp(1 / J\rho(\epsilon_F))$, il n'est pas possible de traiter cette compétition par des approximations simples sans introduire H_{RKKY} dans H . Les calculs "exacts" pour le problème de deux impuretés Kondo introduisent le terme H_{RKKY} de cette façon [34].

L'approximation de champ moyen consiste à développer certains produits d'opérateurs autour de leurs valeurs moyennes dans l'Hamiltonien et à ne conserver que les termes à l'ordre 1 par rapport à la différence entre le produit d'opérateur et sa valeur moyenne. Ensuite, on recherche les valeurs moyennes pour lesquelles l'énergie totale est minimale.

Nous présentons, dans la suite, l'application de cette procédure dans les deux cas suivants : cas non magnétique et cas ferromagnétique.

2.2.2. Cas non magnétique

Dans ce cas, μ_s et μ_v sont nuls. Nous cherchons à déterminer λ_s et λ_v en fonction de J_s et J_v . Les paramètres Kondo λ_s et λ_v sont les valeurs moyennes des produits d'opérateurs suivants :

$$\begin{cases} \lambda_s = \langle c_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma}^1 \rangle = \langle f_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}^1 \rangle = \langle c_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma}^3 \rangle = \langle f_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}^3 \rangle \\ \lambda_v = \langle c_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma}^2 \rangle = \langle f_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}^2 \rangle \end{cases} \quad (47)$$

Ces paramètres Kondo sont des bons indicateurs de l'état magnétique du système. Lorsque $\lambda_\alpha \neq 0$, il y a hybridation entre l'électron f et les électrons de conduction s sur chaque site du plan α , le plan α n'est pas magnétique. Cette hybridation décrit la présence d'un effet Kondo. En revanche, lorsque $\lambda_\alpha = 0$, il n'y a pas d'hybridation s - f sur les sites du plan α , le plan α reste magnétique [35].

L'Hamiltonien (45) se réduit à $H = H_0 + H_{Kondo}$. Après une transformation de Fourier des opérateurs $c_{i\sigma}^\alpha$ et $f_{i\sigma}^\alpha$, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{k,\alpha,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^{+\alpha} c_{k\sigma}^{\alpha} - t_{\perp} \sum_{\langle \alpha, \beta \rangle_{k,\sigma}} c_{k\sigma}^{+\alpha} c_{k\sigma}^{\beta} + \epsilon_f \sum_{k,\alpha,\sigma} f_{k\sigma}^{+\alpha} f_{k\sigma}^{\alpha} \\
& - \sum_{k,\alpha,\sigma} \frac{J_{\alpha}}{2} (c_{k\sigma}^{+\alpha} c_{k-\sigma}^{\alpha} f_{k-\sigma}^{+\alpha} f_{k\sigma}^{\alpha}) - \sum_{k,\alpha} \frac{J_{\alpha}}{4} (c_{k\uparrow}^{+\alpha} c_{k\uparrow}^{\alpha} - c_{k\downarrow}^{+\alpha} c_{k\downarrow}^{\alpha}) (f_{k\uparrow}^{+\alpha} f_{k\uparrow}^{\alpha} - f_{k\downarrow}^{+\alpha} f_{k\downarrow}^{\alpha})
\end{aligned} \quad (48)$$

où, $\epsilon_k = -2t_{\parallel}(\cos(k_x a_0) + \cos(k_y a_0))$ pour un réseau carré. L'introduction des valeurs moyennes λ_s et λ_v permet d'approximer le produit d'opérateur $c_{k\sigma}^{+\alpha} c_{k-\sigma}^{\alpha} f_{k-\sigma}^{+\alpha} f_{k\sigma}^{\alpha}$, apparaissant dans l'Hamiltonien Kondo, par :

$$c_{k\sigma}^{+\alpha} c_{k-\sigma}^{\alpha} f_{k-\sigma}^{+\alpha} f_{k\sigma}^{\alpha} \cong \lambda_{\alpha}^2 - \lambda_{\alpha} (c_{k\sigma}^{+\alpha} f_{k\sigma}^{\alpha} + c_{k-\sigma}^{\alpha} f_{k-\sigma}^{+\alpha}) \quad (49)$$

où,

- $\lambda_{\alpha} = \lambda_s$ si $\alpha = 1$ ou 3 .
- $\lambda_{\alpha} = \lambda_v$ si $\alpha = 2$.

Par ailleurs, le cinquième terme dans (48) est nul en valeur moyenne, car nous nous limitons dans cette partie à l'étude du cas non magnétique. Ainsi, l'Hamiltonien Kondo se réduit à :

$$\begin{aligned}
H_{\text{Kondo}} = & J_s \lambda_s \sum_{k,\sigma} (c_{k\sigma}^{+1} f_{k\sigma}^1 + f_{k\sigma}^{+1} c_{k\sigma}^1 + c_{k\sigma}^{+3} f_{k\sigma}^3 + f_{k\sigma}^{+3} c_{k\sigma}^3) \\
& + J_v \lambda_v \sum_{k,\sigma} (c_{k\sigma}^{+2} f_{k\sigma}^2 + f_{k\sigma}^{+2} c_{k\sigma}^2) - 4J_s \lambda_s^2 - 2J_v \lambda_v^2
\end{aligned} \quad (50)$$

Les énergies propres de H sont obtenues en diagonalisant la matrice :

$$\begin{pmatrix}
\epsilon_k & J_s \lambda_s & -t_{\perp} & 0 & 0 & 0 \\
J_s \lambda_s & \epsilon_f & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-t_{\perp} & 0 & \epsilon_k & J_v \lambda_v & -t_{\perp} & 0 \\
0 & 0 & J_v \lambda_v & \epsilon_f & 0 & 0 \\
0 & 0 & -t_{\perp} & 0 & \epsilon_k & J_s \lambda_s \\
0 & 0 & 0 & 0 & J_s \lambda_s & \epsilon_f
\end{pmatrix} \quad (51)$$

Nous faisons l'hypothèse d'un demi remplissage de la bande de conduction, dans ce cas les énergies ϵ_F et ϵ_f sont nulles [29].

A température nulle, l'énergie totale du système est :

$$E = 2 \sum_{k,m} \eta_k^m - 4J_s \lambda_s^2 - 2J_v \lambda_v^2 = \frac{1}{W} \int_{-W}^W \sum_m \eta_k^m \theta(-\eta_k^m) d\epsilon_k - 4J_s \lambda_s^2 - 2J_v \lambda_v^2 \quad (52)$$

où,

- Les η_k^m sont les énergies propres, m prend toutes les valeurs entières entre 1 et 6.
- Le facteur 2 devant la somme provient de la sommation sur le spin.
- La sommation sur k se fait uniquement sur les états occupés, c'est-à-dire pour $\eta_k^m < \epsilon_F = 0$. D'où la fonction $\theta(-\eta_k^m)$ dans la seconde expression.

- Nous avons fait l'hypothèse d'une densité d'états constante pour les électrons de conduction de largeur égale à $2W$ où $W = 4t_{//}$.

Le calcul de l'énergie totale et sa minimisation par rapport à λ_s et λ_v ont été effectués de façon numérique pour des valeurs de $J_s / t_{//}$, $J_v / t_{//}$ et $t_{\perp} / t_{//}$ fixées. Les figures 18 et 19 montrent les variations des paramètres Kondo λ_s et λ_v minimisant l'énergie totale en fonction des différents paramètres.

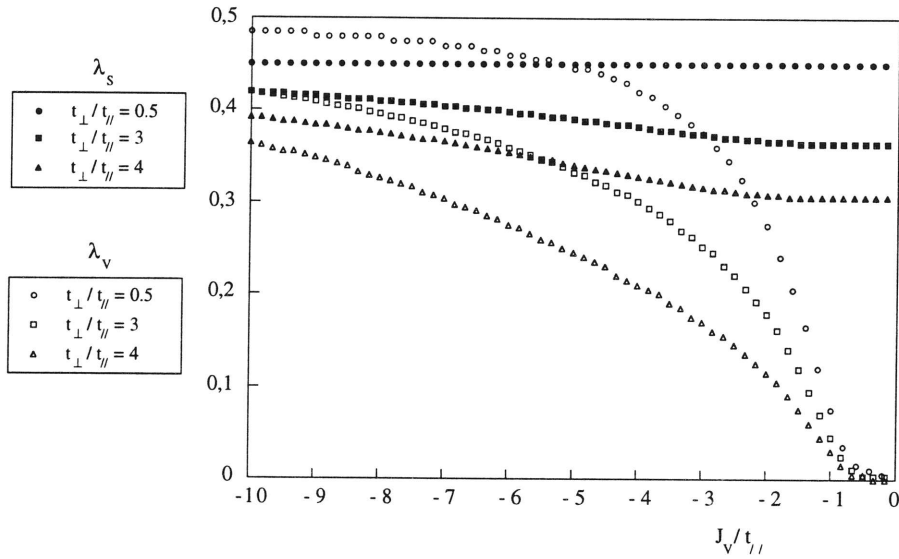


FIGURE 18 - Fonctions de corrélations en surface et en volume en fonction de $J_v / t_{//}$ pour $J_s / t_{//} = -5$ et pour les différentes valeurs de $t_{\perp} / t_{//}$ indiquées dans le cadre.

Sur cette première figure, le rapport $J_s / t_{//}$ reste constant alors que $J_v / t_{//}$ varie. Ceci explique la moindre variation de λ_s avec $J_v / t_{//}$ par rapport à la variation de λ_v avec $J_v / t_{//}$. On remarque que pour $t_{\perp} / t_{//} \leq 1$, λ_s est totalement découplée de $J_v / t_{//}$. Lorsque la valeur du rapport $t_{\perp} / t_{//}$ augmente, la dépendance de λ_s en fonction de $J_v / t_{//}$ augmente.

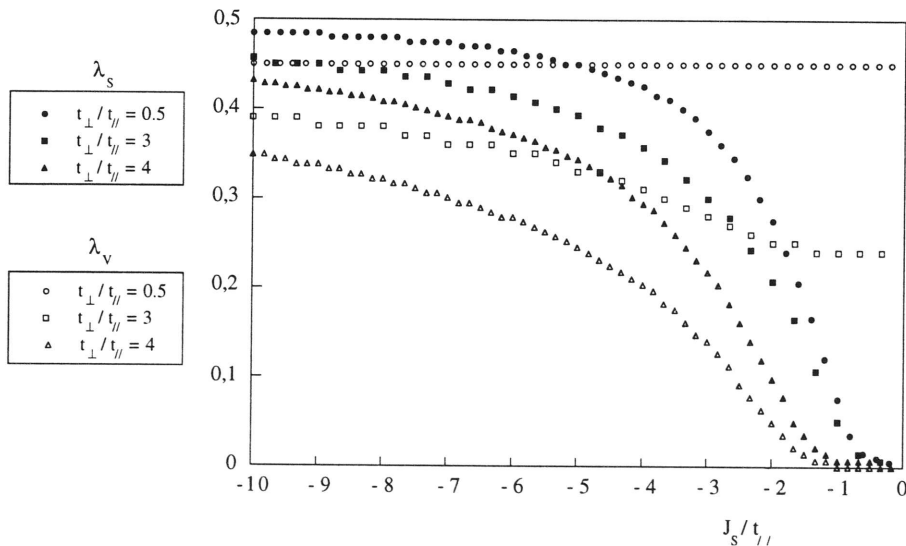


FIGURE 19 - Fonctions de corrélations en surface et en volume en fonction de $J_s / t_{//}$ pour $J_v / t_{//} = -5$ et pour les différentes valeurs de $t_{\perp} / t_{//}$ indiquées dans le cadre.

Cette figure suscite le même type de remarques que la figure 18 si l'on échange les indices S et V. Une nuance doit être tout de même précisée : la dépendance de λ_V avec $J_S / t_{//}$ est plus marquée que celle de λ_S avec $J_V / t_{//}$ pour une même valeur de $t_{\perp} / t_{//}$. Cela est lié à la configuration particulière du système étudié qui ne contient qu'un plan de volume pour deux plans de surface.

Remarques

- La distribution des constantes de couplage Kondo à travers le film a pour conséquence une distribution de la fonction de corrélation λ à travers le film. Les figures 18 et 19 montrent même la possibilité d'avoir, pour des valeurs particulières des constantes $J_S / t_{//}$ et $J_V / t_{//}$, $\lambda_S = 0$ et $\lambda_V \neq 0$, c'est-à-dire la formation d'un état Kondo uniquement sur les sites de volume. L'inverse, c'est-à-dire la stabilisation d'un état Kondo sur les seuls sites de surface, peut aussi se produire pour d'autres valeurs des constantes $J_S / t_{//}$ et $J_V / t_{//}$.
- Dans le cas où le rapport $t_{\perp} / t_{//}$ est inférieur ou égal à 1, nous avons remarqué que λ_S ne dépend que de $J_S / t_{//}$ et λ_V que de $J_V / t_{//}$. Une bonne description des résultats numériques est alors donnée par l'expression :

$$\lambda_{\alpha} = -\frac{W}{J_{\alpha}} \left(\frac{\exp\left(\frac{W}{J_{\alpha}}\right)}{1 - \exp\left(\frac{2W}{J_{\alpha}}\right)} \right) \quad (53)$$

où $2W = 8t_{//}$ est la largeur de bande 2D et $\alpha = S$ ou V . Ce résultat est intéressant, car la forme (53) est similaire à celle obtenue dans le cas d'un réseau Kondo infini [28,36]. Ainsi, pour $t_{\perp} / t_{//} \leq 1$, les trois plans peuvent être vus comme découplés dans le sens où les dépendances de λ_S en fonction de J_S et λ_V en fonction de J_V sont similaires au cas d'un réseau Kondo 2D infini (car $2W$ est ici la largeur de bande 2D).

2.2.3. Cas ferromagnétique

Nous devons prendre en compte à la fois l'Hamiltonien Kondo et l'Hamiltonien RKKY dans (45). L'application de la procédure de champ moyen au terme Kondo est identique à celle présentée dans le cas non magnétique. Ainsi, le terme Kondo est donné par l'expression (50). Le cinquième terme dans (48) ne doit pas être pris en compte, car il représente indirectement l'interaction entre les spins localisés qui est déjà comprise dans l'Hamiltonien RKKY. Explicitons le terme RKKY relatif au système étudié :

$$H_{\text{RKKY}} = -\frac{I_{\text{SS}}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{S}_i^1 \cdot \mathbf{S}_j^1 + \mathbf{S}_i^3 \cdot \mathbf{S}_j^3) - \frac{I_{\text{VV}}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i^2 \cdot \mathbf{S}_j^2 - I_{\text{SV}} \sum_i (\mathbf{S}_i^1 \cdot \mathbf{S}_i^2 + \mathbf{S}_i^2 \cdot \mathbf{S}_i^3) \quad (54)$$

Nous nous plaçons dans le cas où le moment est selon (Oz). On définit le moment magnétique en surface μ_s et le moment magnétique en volume μ_v :

$$\begin{cases} \mu_s = \langle (S_i^1)^z \rangle = \langle (S_i^3)^z \rangle \\ \mu_v = \langle (S_i^2)^z \rangle \end{cases} \quad (55)$$

Le développement des opérateurs $(S_i^\alpha)^z$ et $(S_j^\beta)^z$ autour de leurs valeurs moyennes permet d'approximer le produit d'opérateur $(S_i^\alpha)^z (S_j^\beta)^z$ par :

$$(S_i^\alpha)^z (S_j^\beta)^z \cong -\mu_\alpha \mu_\beta + \mu_\alpha (S_j^\beta)^z + \mu_\beta (S_i^\alpha)^z \quad (56)$$

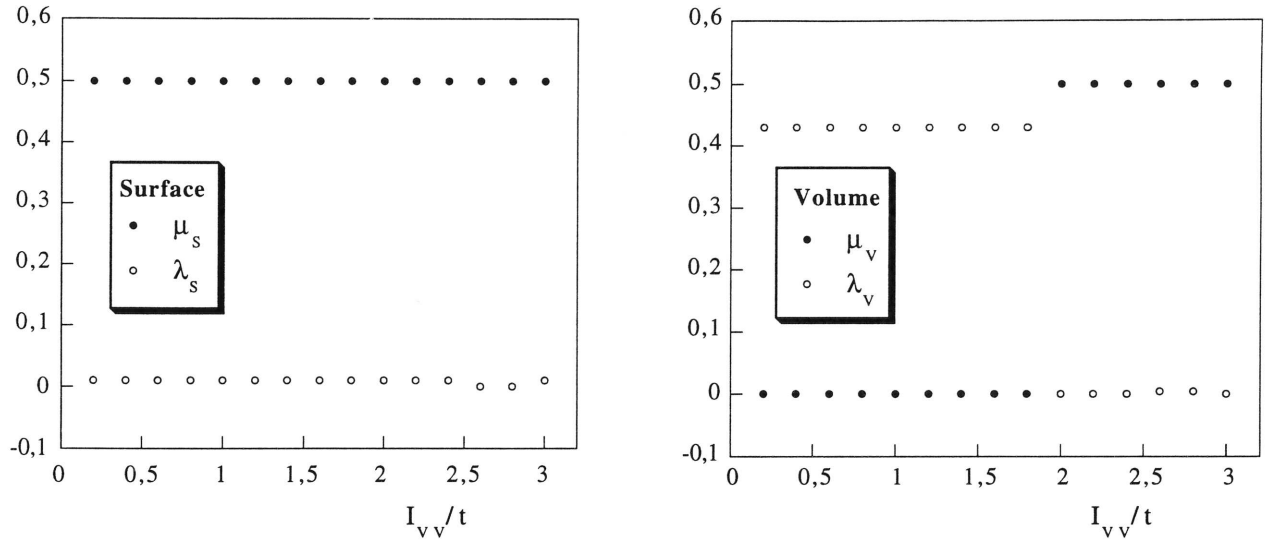
Dans le cas d'un réseau carré dans les plans du film, l'application de la procédure de champ moyen conduit à :

$$\begin{aligned} H_{\text{RKKY}} = & - \left(2I_{\text{SS}}\mu_s + \frac{I_{\text{SV}}}{2}\mu_v \right) \sum_k (f_{k\uparrow}^{+1}f_{k\uparrow}^1 - f_{k\downarrow}^{+1}f_{k\downarrow}^1 + f_{k\uparrow}^{+3}f_{k\uparrow}^3 - f_{k\downarrow}^{+3}f_{k\downarrow}^3) \\ & - (2I_{\text{VV}}\mu_v + I_{\text{SV}}\mu_s) \sum_k (f_{k\uparrow}^{+2}f_{k\uparrow}^2 - f_{k\downarrow}^{+2}f_{k\downarrow}^2) + 4I_{\text{SS}}\mu_s^2 + 2I_{\text{VV}}\mu_v^2 + 2I_{\text{SV}}\mu_s\mu_v \end{aligned} \quad (57)$$

Pour chacune des deux directions de spin, la diagonalisation de $H = H_0 + H_{\text{Kondo}} + H_{\text{RKKY}}$ permet d'obtenir les énergies propres $\eta_{k\sigma}^m$. L'énergie totale est alors donnée par :

$$E = \sum_{k,m,\sigma} \eta_{k\sigma}^m - 4J_s \lambda_s^2 - 2J_v \lambda_v^2 + 4I_{\text{SS}}\mu_s^2 + 2I_{\text{VV}}\mu_v^2 + 2I_{\text{SV}}\mu_s\mu_v \quad (58)$$

Pour des valeurs fixées de I_{SS} , I_{VV} , I_{SV} , J_s et J_v , nous avons calculé les énergies propres et le minimum de l'énergie totale de façon numérique. Les intégrales de transfert sont supposées isotropes : $t_{\parallel} = t_{\perp} = t$. Nous présentons les variations des valeurs moyennes λ_s , λ_v , μ_s et μ_v en fonction de l'un des cinq paramètres, les quatre autres étant fixés. La figure 20 montre l'effet de la variation du rapport I_{VV} / t et la figure 21 celui de la variation du rapport J_s / t .

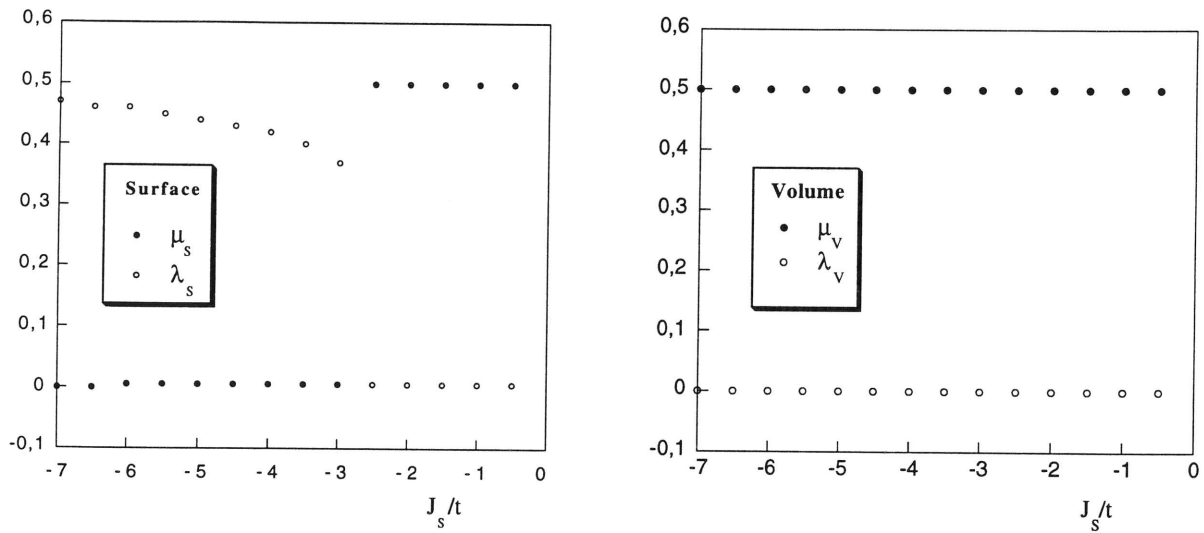


FIGURES 20 - Variation des valeurs moyennes λ_s , λ_v , μ_s et μ_v en fonction de I_{vv}/t .
Les autres paramètres sont fixés à : $I_{ss}/t = 0.4$, $I_{sv}/t = 0$, $J_s/t = -1$ et $J_v/t = -5$.

Pour ce jeu de paramètres, les plans de surface sont magnétiques ($\mu_s = 1/2$) quelle que soit la valeur de I_{vv}/t , car la valeur $I_{ss}/t = 0.4$ est suffisamment élevée par rapport à $J_s/t = -1$ pour que l'interaction RKKY l'emporte sur l'effet Kondo. Par contre, le plan de volume est non magnétique ($\mu_v = 0$) pour $I_{vv}/t < 2$ et magnétique ($\mu_v = 1/2$) pour $I_{vv}/t > 2$. Cette transition était prévisible, en effet :

- Pour $I_{vv}/t = 0$, il n'y a pas d'interaction RKKY entre les spins localisés dans le plan de volume, ce plan n'est donc pas magnétique.
- Lorsque le rapport I_{vv}/t augmente tout en restant inférieur à 2, l'interaction RKKY entre les spins localisés dans le plan de volume n'est pas assez forte pour s'opposer à l'effet Kondo qui est important dans le plan de volume, car $J_v/t = -5$.
- A partir d'une certaine valeur seuil de I_{vv}/t , l'interaction RKKY l'emporte sur l'effet Kondo dans le plan de volume et ainsi, ce plan devient magnétique.

Ainsi, pour $I_{vv}/t < 2$, les plans de surface sont magnétiques alors que le plan de volume est non magnétique. La transition de μ_v observée en $I_{vv}/t = 2$ est discontinue. Ceci résulte du choix du niveau de Fermi que nous avons utilisé dans notre calcul. Il a la particularité de se trouver dans un gap d'énergie (figurant au centre de la bande). Le traitement du réseau Kondo pour d'autres remplissages conduiraient, au contraire, à une variation continue du moment magnétique moyen en fonction de la constante d'interaction RKKY [37,38].



FIGURES 21 - Variation des valeurs moyennes λ_s , λ_v , μ_s et μ_v en fonction de J_s/t . Les autres paramètres sont fixés à : $I_{ss}/t = 0.2$, $I_{sv}/t = 0.1$, $I_{vv}/t = 1$ et $J_v/t = -1$.

Les paramètres choisis sont tels que le plan de volume est toujours magnétique. Par contre, les plans de surfaces, magnétiques pour des faibles valeurs de $|J_s/t|$, deviennent non magnétiques lorsque la constante de couplage Kondo en surface est inférieure à une valeur seuil : $J_s/t < -3$, suffisante pour que l'effet Kondo l'emporte sur l'interaction RKKY.

Conclusion

Selon les valeurs des constantes de couplages Kondo et RKKY, le film étudié peut être magnétique en surface et non magnétique en volume (figures 20 pour $I_{vv}/t < 2$), ou inversement, il peut être non magnétique en surface et magnétique en volume (figures 21 pour $J_s/t < -3$). Ainsi, nous avons mis en évidence la possibilité d'un magnétisme hétérogène dans un film mince.

CONCLUSION

L'étude du problème d'une impureté Kondo diluée dans un film métallique a permis de mettre en évidence une distribution des températures de Kondo à travers le film. Cette distribution a été obtenue à la fois dans l'approximation des liaisons fortes et dans l'approximation des électrons libres, elle résulte de la modification de la structure électronique au voisinage des surfaces. La valeur de la température de Kondo au voisinage des surfaces peut être très différente de celle d'un matériau volumique : $T_K^{\text{Surf.}} / T_K^{\text{Vol.}} \gg 1$ ou $\ll 1$.

L'application de la transformation de Schrieffer-Wolff a permis de transformer l'Hamiltonien de Anderson décrivant le film en un Hamiltonien effectif de type Kondo. La constante de couplage effectif issue de ce deux calcul coïncide avec celle issue du calcul variationnel de Varma et Yafet dans le cas où toutes les bandes des électrons de conduction sont partiellement remplies. Dans le cas contraire, la constante de couplage effectif, issue de la transformation de Schrieffer-Wolff, dépend de la position de l'impureté dans le film.

Par ailleurs, en appliquant au cas d'un film un calcul auto-cohérent, développé par Nagaoka, nous avons obtenu un effet de taille sur le coefficient C qui figure devant le terme logarithmique apparaissant dans le rapport $\Delta\rho_{\text{él.}} / (\rho_{\text{él.}})_0$. Cet effet de taille est assez important mais la convergence vers la valeur du massif est rapide (pour une épaisseur du film $\approx 100\text{\AA}$), ce qui remet en cause le fait que le rayon Kondo R_K soit la longueur caractéristique de l'effet Kondo. Si l'on souhaite une comparaison quantitative avec les mesures expérimentales, il serait nécessaire d'une part, d'évaluer le facteur A qui intervient dans l'expression (30) et d'autre part, de tenir compte des autres effets qui contribuent à la dépendance logarithmique en température de la résistivité.

Dans un second temps, nous nous sommes intéressés à la limite opposée au problème Kondo dilué, c'est-à-dire le cas où la concentration en impuretés magnétiques est telle que l'interaction d'échange entre spins localisés ne peut être négligée. Nous avons repris un calcul développé par Che *et al.* permettant de calculer les constantes d'interactions RKKY dans un film. Comme eux, nous obtenons une distribution des constantes d'interactions RKKY interplans et intraplans à travers le film.

Enfin, une première étude simple du problème du réseau Kondo, c'est-à-dire de la compétition entre l'effet Kondo et l'interaction RKKY, dans un film constitué de trois plans atomiques, montre la possibilité d'un magnétisme hétérogène à travers le film. Ceci résulte directement de la distribution des constantes de couplages Kondo et RKKY à travers le film.

ANNEXE A : Densités d'états locales

Les propriétés étudiées dans ce chapitre ont pour origine des processus se déroulant à un niveau local. Ainsi, ces propriétés dépendent de façon étroite de la structure électronique locale, c'est-à-dire des densités d'états locales. Deux approximations concernant le déplacement des électrons de conduction ont été étudiées : l'approximation des liaisons fortes et l'approximation des électrons libres. Dans cette annexe, nous présentons le calcul des densités d'états locales et totales d'un film mince dans le cadre de ces deux approximations.

A.1. Approximation des liaisons fortes

L'approximation des liaisons fortes permet de décrire le transfert d'un électron entre deux sites atomiques i et j d'un cristal, dont les orbitales atomiques se recouvrent suffisamment, par l'intermédiaire de l'Hamiltonien :

$$H_0 = - \sum_{i,j} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \quad (A1)$$

Les opérateurs c^{\dagger} et c sont les opérateurs de création et d'annihilation associés aux électrons de conduction. σ est l'indice de spin. t_{ij} est l'intégrale de transfert entre les sites i et j . La sommation sur les sites i et j s'effectue le plus souvent sur les premiers voisins, éventuellement sur les seconds voisins. Nous nous sommes limités à une sommation sur les premiers voisins. Dans nos systèmes, il est nécessaire de distinguer deux intégrales de transfert différentes :

- Une intégrale de transfert entre deux sites premiers voisins appartenant au même plan atomique : $t_{//}$.
- Une intégrale de transfert entre deux sites premiers voisins appartenant à des plans atomiques différents : t_{\perp} .

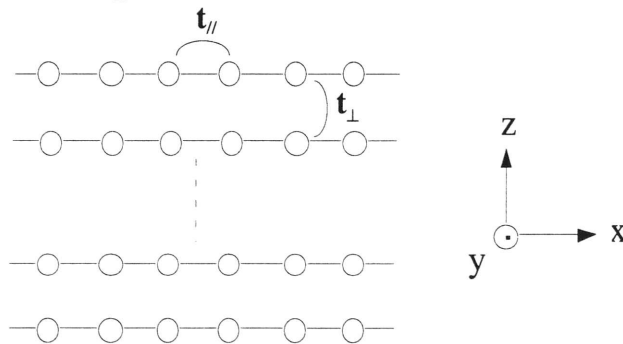


FIGURE 1 - Configuration du système étudié, film contenant n plans atomiques.

L'Hamiltonien de liaison forte pour un film s'écrit alors sous la forme suivante :

$$H_0 = -t_{//} \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i\sigma}^{+\alpha} c_{j\sigma}^{\alpha} - t_{\perp} \sum_{\langle \alpha,\beta \rangle} c_{i\sigma}^{+\alpha} c_{i\sigma}^{\beta} \quad (A2)$$

où les différents indices sont :

- i et j : indices de site dans un plan donné.
- α et β : indices de plan.

La notation $\langle i,j \rangle$ (ou $\langle \alpha,\beta \rangle$) signifie que i et j (ou α et β) sont des sites (ou plans) premiers voisins. Les indices de site i et j varient entre 1 et N où N est le nombre de site par plan. Les indices de plan α et β varient entre 1 et n où n est le nombre de plans atomiques dans le film.

Après une transformation de Fourier, nous obtenons l'Hamiltonien :

$$H_0 = -t_{//} \sum_{k,\alpha,\sigma} \chi_k c_{k\sigma}^{+\alpha} c_{k\sigma}^{\alpha} - t_{\perp} \sum_{\langle \alpha,\beta \rangle} c_{k\sigma}^{+\alpha} c_{k\sigma}^{\beta} \quad (A3)$$

où,

$$\chi_k = \sum_{\langle i,j \rangle} e^{ik \cdot R_{ij}} = 2(\cos(k_x a_0) + \cos(k_y a_0)) \quad (A4)$$

Nous nous sommes placés dans le cas d'un réseau carré de paramètre de maille a_0 . \mathbf{k} est un vecteur à deux dimensions, défini dans le plan (xOy). On peut exprimer H_0 sous forme matricielle dans la base $\{|\psi_{k\sigma}^{\alpha}\rangle = c_{k\sigma}^{+\alpha}|\psi_0\rangle\}$, où $|\psi_0\rangle$ est l'état correspondant au remplissage jusqu'au niveau de Fermi. La matrice M_n représentant H_0 est tridiagonale. Ci-dessous est présenté comme exemple le cas d'un film composé de cinq plans atomiques ($n = 5$) :

$$M_{(n=5)} = \begin{pmatrix} -t_{//}\chi_k & -t_{\perp} & 0 & 0 & 0 \\ -t_{\perp} & -t_{//}\chi_k & -t_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & -t_{\perp} & -t_{//}\chi_k & -t_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & -t_{\perp} & -t_{//}\chi_k & -t_{\perp} \\ 0 & 0 & 0 & -t_{\perp} & -t_{//}\chi_k \end{pmatrix} \quad (A5)$$

Les énergies propres sont obtenues en diagonalisant la matrice M_n . On note ε_k^m ces énergies propres où m est l'indice associé aux bandes d'énergie (m varie entre 1 et n). Le tableau ci-dessous présente les expressions des ε_k^m calculées de façon analytique, c'est-à-dire pour des valeurs de n pas trop élevées (jusqu'à $n = 5$). Pour $n > 5$, les énergies propres ont été déterminées de façon numérique (diagonalisation par la méthode de Jacobi).

n=2	n=3	n=4	n=5
$\epsilon_k^1 = -t_{//} - t_{\perp}\chi_k$ $\epsilon_k^2 = -t_{//} + t_{\perp}\chi_k$	$\epsilon_k^1 = -t_{//} - \sqrt{2}t_{\perp}\chi_k$ $\epsilon_k^2 = -t_{//}$ $\epsilon_k^3 = -t_{//} + \sqrt{2}t_{\perp}\chi_k$	$\epsilon_k^1 = -t_{//} - (1 + \sqrt{5})t_{\perp}\chi_k / 2$ $\epsilon_k^2 = -t_{//} + (1 - \sqrt{5})t_{\perp}\chi_k / 2$ $\epsilon_k^3 = -t_{//} - (1 - \sqrt{5})t_{\perp}\chi_k / 2$ $\epsilon_k^4 = -t_{//} + (1 + \sqrt{5})t_{\perp}\chi_k / 2$	$\epsilon_k^1 = -t_{//} - \sqrt{3}t_{\perp}\chi_k$ $\epsilon_k^2 = -t_{//} - t_{\perp}\chi_k$ $\epsilon_k^3 = -t_{//}$ $\epsilon_k^4 = -t_{//} + t_{\perp}\chi_k$ $\epsilon_k^5 = -t_{//} + \sqrt{3}t_{\perp}\chi_k$

TABLEAU 1 - Energies propres de H_0 pour $n = 2, 3, 4$ et 5 .

Dans la suite, nous faisons l'hypothèse simplificatrice que les intégrales de transfert perpendiculaire et parallèle aux plans du film sont égales : $t_{//} = t_{\perp} = t$. Dans la présentation des résultats numériques, toutes les énergies seront normalisées par rapport à t .

Dans la base des états propres, l'Hamiltonien H_0 s'écrit simplement :

$$H_0 = \sum_{m,k,\sigma} \epsilon_k^m c_{k\sigma}^{+m} c_{k\sigma}^m \quad (A6)$$

où les opérateurs $c_{k\sigma}^{+m}$ et $c_{k\sigma}^m$ sont les opérateurs de création et d'annihilation associés à la bande m . Ils sont reliés aux opérateurs $c_{k\sigma}^{+\alpha}$ et $c_{k\sigma}^{\alpha}$, associés au plan α , par l'intermédiaire des éléments de la matrice de changement de base issue de la diagonalisation de M_n :

$$c_{k\sigma}^{+m} = \sum_{\alpha=1}^n \omega_{\alpha}^m c_{k\sigma}^{+\alpha} \quad (A7)$$

L'inversion de la matrice de changement de base permet d'exprimer les opérateurs $c_{k\sigma}^{+\alpha}$ et $c_{k\sigma}^{\alpha}$, associés aux plans, en fonction des opérateurs $c_{k\sigma}^{+m}$ et $c_{k\sigma}^m$ associés aux bandes :

$$c_{k\sigma}^{+\alpha} = \sum_{m=1}^n \Omega_{\alpha}^m c_{k\sigma}^{+m} \quad (A8)$$

Les éléments de matrice ω_{α}^m et Ω_{α}^m sont réels, ils sont déterminés numériquement (décomposition LU).

Avant de présenter le calcul des densités d'états, il paraît nécessaire d'insister sur la différence entre les indices de plan (du type α, β) et les indices de bande (du type m, m'). L'origine de cette différence est la dimension particulière du système étudié (intermédiaire entre les dimensions deux et trois). L'Hamiltonien de liaisons fortes H_0 s'écrit de façon directe dans la base associée aux plans (voir formule (A2)). Cependant, H_0 n'est pas diagonale dans cette base (voir expression (A5)). La diagonalisation de la matrice M_n permet d'obtenir les énergies propres et d'exprimer H_0 dans la base associée aux bandes.

Nous rappelons tout d'abord les densités d'états des systèmes bidimensionnel (2D) et tridimensionnel (3D) dans l'approximation des liaisons fortes. Puis, nous présentons l'allure des densités d'états locales et totales d'un film contenant n plans atomiques.

A.1.1. Densités d'états totales à 2D et 3D

A 2D, l'énergie propre de l'Hamiltonien de liaisons fortes est égale à :

$$\epsilon_k^{2D} = 2t(2 - \cos(k_x a_0) - \cos(k_y a_0)) \quad (A9)$$

La densité d'états correspondante peut se calculer de façon analytique. On obtient :

$$\rho_{2D}(\epsilon) = \rho_0 \sum_k \delta(\epsilon - \epsilon_k^{2D}) = \rho_0 K \left(\sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon - 4t}{4t} \right)^2} \right) \quad (A10)$$

où,

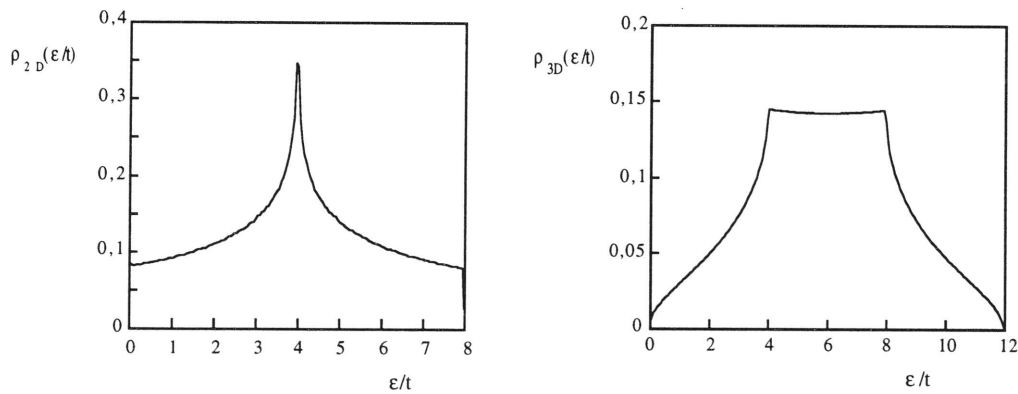
- La fonction K est l'intégrale elliptique complète.
- ρ_0 est un facteur de normalisation.

A 3D, l'énergie propre est :

$$\epsilon_k^{3D} = 2t(3 - \cos(k_x a_0) - \cos(k_y a_0) - \cos(k_z a_0)) \quad (A11)$$

Il n'y a pas d'expression analytique de la densité d'états 3D. Nous la calculons numériquement par une méthode de diagrammes.

Les allures des densités d'états normalisées, à 2D et 3D, sont représentées ci-dessous :



FIGURES 2 - Densités d'états 2D et 3D dans l'approximation des liaisons fortes.

La densité d'états à 2D présente une divergence logarithmique en centre de zone.

A.1.2. Densités d'états locales à travers un film contenant 50 plans atomiques

A partir des expressions des énergies propres ϵ_k^m , déterminées par la diagonalisation de M_n , on calcule numériquement les densités d'états associées aux bandes :

$$\rho_m(\epsilon) = \sum_k \delta(\epsilon - \epsilon_k^m) \quad (A12)$$

La densité d'états locale $\rho_\alpha(\epsilon)$, associée à un plan α , est obtenue à partir des densités d'états associées aux bandes en faisant la transformation suivante :

$$\rho_\alpha(\epsilon) = \sum_{m=1}^n (\Omega_\alpha^m)^2 \rho_m(\epsilon) \quad (A13)$$

Sur la figure 3 est représentée la densité d'états locale à travers un film, composé de 50 plans atomiques, pour différentes valeurs du niveau de Fermi. Les droites horizontales hachurées repèrent les valeurs de la densité d'état 3D, dans l'approximation des liaisons fortes, pour chaque valeur du niveau de Fermi.

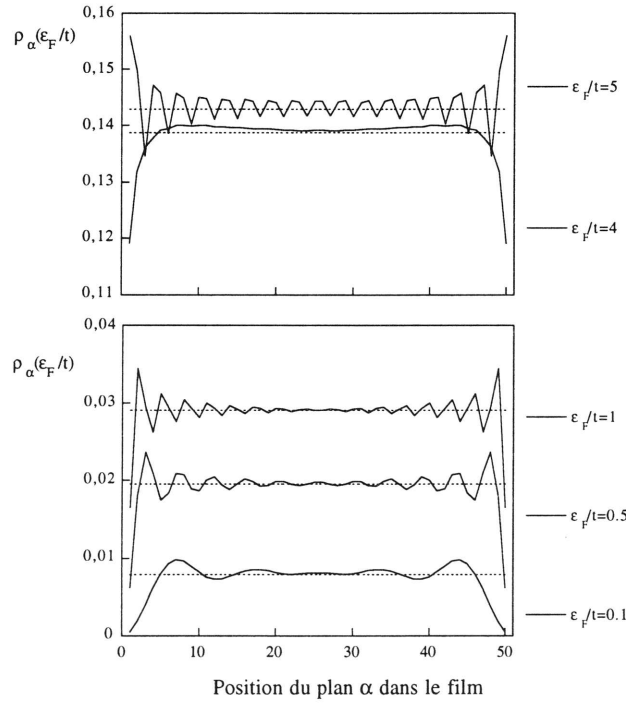


FIGURE 3 - Densités d'états locales à travers un film constitué de 50 plans atomiques.

Cette figure montre qu'au voisinage des surfaces du film, les densités d'états locales diffèrent notablement de la densité d'états 3D. Nous n'avons pas représenté les densités d'états locales pour $\epsilon_F > 6t$, car du fait de la symétrie électron - trou, la densité d'états locale pour $\epsilon_F > 6t$ est égale à celle correspondant à une énergie de Fermi égale à $12t - \epsilon_F$.

A.1.3. Densités d'états totales de films de différentes épaisseurs

La densité d'états totale d'un film est obtenue en sommant les densités d'états locales dans les n plans composant le film :

$$\rho_n^{\text{tot.}}(\epsilon) = \frac{1}{n} \sum_{\alpha=1}^n \rho_{\alpha}(\epsilon) \quad (\text{A14})$$

La figure 4 représente les densités d'états totales, normalisées, de films contenant $n = 2$, $n = 5$ et $n = 50$ plans atomiques.

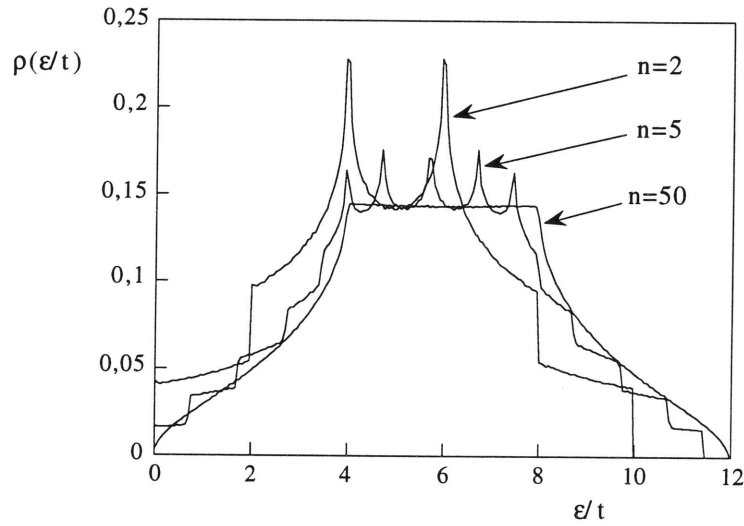


FIGURE 4 - Densités d'états totales pour des films contenant $n=2$, $n=5$ et $n=50$ plans atomiques.

Nous remarquons la présence de n divergences dont la nature est semblable à la divergence observée dans $\rho_{2D}(\epsilon / t)$. Pour $n = 50$, la densité d'états totale est égale à la densité d'états 3D.

A.2. Approximation des électrons libres

Lorsque le potentiel dû au réseau cristallin est faible, on peut utiliser l'approximation des électrons libres pour laquelle les électrons de conduction sont délocalisés sur toute l'étendue du cristal. Du fait de la configuration particulière de nos systèmes, les électrons de conduction sont considérés comme libres dans le plan du film, mais restent confinés dans la direction (Oz) perpendiculaire aux plans du film. On modélise ce confinement par la présence de barrières de potentiel infinies aux surfaces. L'Hamiltonien s'écrit comme :

$$H_0 = \sum_{m,k,\sigma} \epsilon_k^m c_{k\sigma}^{+m} c_{k\sigma}^m + U(\alpha) \quad (\text{A15})$$

Le potentiel $U(\alpha)$ est défini de la façon suivante :

$$U(\alpha) = \begin{cases} 0 & \text{pour } 1 \leq \alpha \leq n \\ \infty & \text{pour } \alpha < 1 \text{ et } \alpha > n \end{cases} \quad (\text{A16})$$

Les énergies propres de H_0 sont [39,40] :

$$\epsilon_k^m = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_o} + \epsilon_o \left(\frac{m-1}{n-1} \right)^2 \quad (\text{A17})$$

où,

- $\epsilon_o = \hbar^2 \pi^2 / 2m_o a_o^2$. Dans la présentation des résultats numériques, toutes les énergies sont normalisées par rapport à ϵ_o .
- m_o est la masse effective des électrons.
- a_o est le paramètre de maille.
- m est l'indice de bande, il prend toutes les valeurs entières entre 1 et n .
- \mathbf{k} est un vecteur d'onde à deux dimensions, défini dans le plan (xOy) du film.

Les états propres de H_0 sont [22,40] :

$$\psi_k^m(\mathbf{R}_\alpha) = \frac{1}{\sqrt{S a_o}} \Omega_\alpha^m e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\alpha} \quad (\text{A18})$$

où S est la surface des plans du film, α est l'indice de plan et Ω_α^m est défini comme :

$$\Omega_\alpha^m = \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sin\left(\frac{m\alpha\pi}{n+1}\right) \quad (\text{A19})$$

Les densités d'états locales et totales ont été précédemment définies par les formules (A12) et (A13). Les énergies propres intervenant dans ces formules sont données par (A17). Avant de présenter ces densités d'états, nous rappelons, à titre de comparaison, la densité d'état 3D dans l'approximation des électrons libres :

$$\rho_{3D}(\epsilon) = \frac{m_o}{\hbar^2 \pi^2} \sqrt{\frac{2m_o \epsilon}{\hbar^2}} \quad \text{pour } \epsilon > 0 \quad (\text{A20})$$

A.2.1. Densités d'états locales à travers un film contenant 50 plans atomiques

Sur la figure 5 est représentée la densité d'états locale à travers un film contenant 50 plans atomiques pour cinq valeurs différentes du niveau de Fermi. Les droites hachurées horizontales indiquent la valeur de la densité d'états $\rho_{3D}(\epsilon_F / \epsilon_o)$ dans l'approximation des électrons libres.

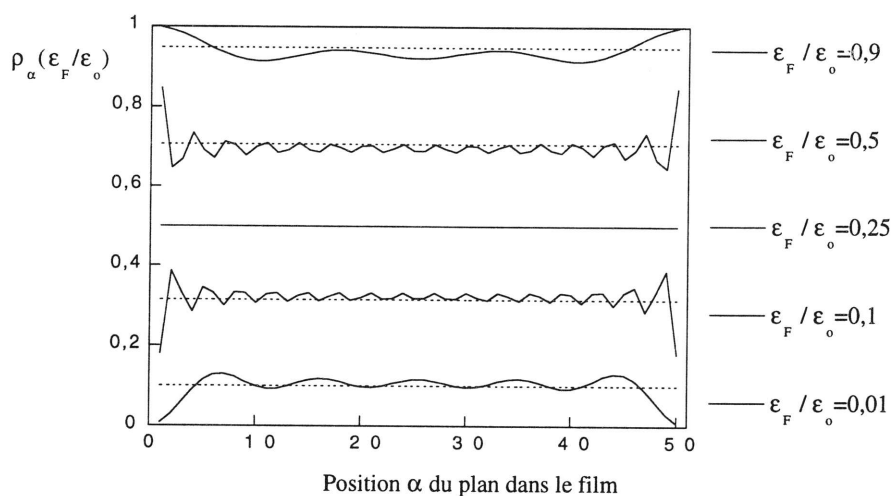


FIGURE 5 - Densités d'états locales à travers un film contenant 50 plans atomiques.

Nous voyons, comme dans le cas de l'approximation des liaisons fortes, que les densités d'états locales au voisinage des surfaces diffèrent notablement de la densité d'état 3D.

A.2.2. Densités d'états totales de films de différentes épaisseurs

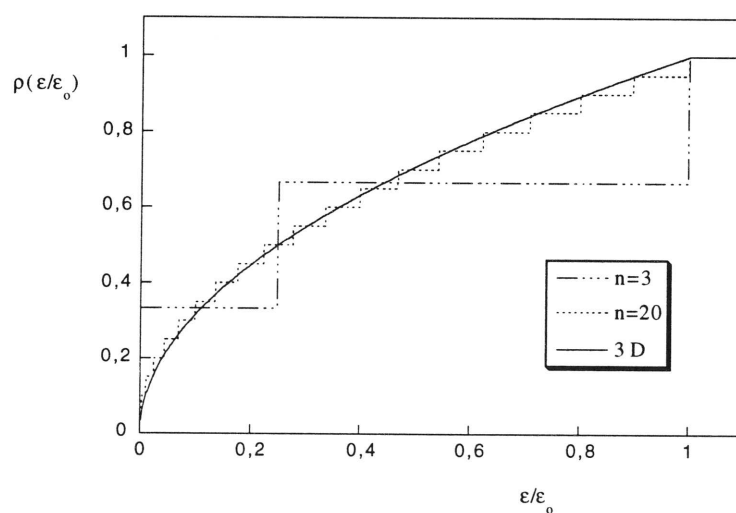


FIGURE 6 - Densités d'états totales pour des films contenant $n=3$ et $n=20$ plans atomiques. A titre de comparaison est représentée la densité d'états tridimensionnelle.

ANNEXE B : Méthode variationnelle

A partir de l'expression (15) de $|\psi\rangle$ et (4) de H^γ , on calcule la quantité :

$$\frac{\langle \psi | H^\gamma | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \varepsilon_f + \sum_{m,k,\sigma} \varepsilon_k^m + \frac{\frac{2b_0 V}{\sqrt{N}} \sum_{k,m,\sigma} b_k^m \Omega_\gamma^m - b_0^2 \varepsilon_f - \sum_{m,k,\sigma} (b_k^m)^2 \varepsilon_k^m}{b_0^2 + \sum_{m,k,\sigma} (b_k^m)^2} \quad (B1)$$

En identifiant cette égalité avec la relation (17), on obtient :

$$(\varepsilon_\gamma - \varepsilon_F) \left(b_0^2 + \sum_{m,k,\sigma} (b_k^m)^2 \right) = \frac{2b_0 V}{\sqrt{N}} \sum_{k,m,\sigma} b_k^m \Omega_\gamma^m - b_0^2 \varepsilon_f - \sum_{m,k,\sigma} (b_k^m)^2 \varepsilon_k^m \quad (B2)$$

La dérivation de (B2) par rapport aux coefficients b_0 d'une part, et b_k^m d'autre part, conduit au système d'équations suivant :

$$\begin{cases} b_0 (\varepsilon_\gamma - \varepsilon_F + \varepsilon_f) = \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{m,k,\sigma} b_k^m \Omega_\gamma^m \\ b_k^m (\varepsilon_\gamma - \varepsilon_F + \varepsilon_k^m) = \frac{V}{\sqrt{N}} b_0 \Omega_\gamma^m \end{cases} \quad (B3)$$

En reportant l'expression de b_k^m donnée par la seconde équation, dans la première équation, on obtient une équation en ε_γ :

$$\varepsilon_\gamma - \varepsilon_F + \varepsilon_f = \frac{2V}{N} \sum_{m,k} \frac{(\Omega_\gamma^m)^2}{\varepsilon_\gamma - \varepsilon_F + \varepsilon_k^m} \quad (B4)$$

On néglige $|\varepsilon_\gamma|$ devant $|\varepsilon_F - \varepsilon_f|$ dans le membre de gauche. On transforme la sommation discrète sur k en sommation continue. Par ailleurs, on suppose que la densité d'états ne varie pas trop autour du niveau de Fermi. L'intégration sur k introduit un terme logarithmique :

$$-\varepsilon_F + \varepsilon_f = \frac{2V}{N} \left(\sum_m \rho_m(\varepsilon_F) (\Omega_\gamma^m)^2 \right) \ln \left(\frac{\varepsilon_\gamma}{\varepsilon_F} \right) \quad (B5)$$

Il apparaît la densité d'états locale :

$$\rho_\gamma(\varepsilon_F) = \sum_m \rho_m(\varepsilon_F) (\Omega_\gamma^m)^2 \quad (B6)$$

Ainsi, en inversant la relation (B5), on obtient une dépendance exponentielle de l'énergie ϵ_γ :

$$\epsilon_\gamma = -\epsilon_F \exp\left(-\frac{\epsilon_F - \epsilon_f}{2V^2\rho_\gamma(\epsilon_F)}\right) = -\epsilon_F \exp\left(\frac{1}{J_o\rho_\gamma(\epsilon_F)}\right) \quad (\text{B7})$$

où la constante J_o , qui est négative, est définie par :

$$J_o = -\frac{2V^2}{\epsilon_F - \epsilon_f} \quad (\text{B8})$$

ANNEXE C : Calcul des fonctions de Green

En reportant l'Hamiltonien Kondo (23) dans le système (27), on aboutit aux deux équations :

$$(\epsilon - \epsilon_{k'}^{m'}) G_{kk'}^{mm'}(\epsilon) = \frac{\delta_{kk'} \delta_{mm'}}{2\pi} - \frac{J}{2N} \Omega_{\gamma}^{m'} \sum_{k_1 m_1} \Omega_{\gamma}^{m_1} \Gamma_{kk_1}^{mm_1}(\epsilon) \quad (C1)$$

et,

$$\begin{aligned} (\epsilon - \epsilon_{k'}^{m'}) \Gamma_{kk'}^{mm'}(\epsilon) = & -\frac{J}{2N} \Omega_{\gamma}^{m'} \sum_{k_1, m_1} \Omega_{\gamma}^{m_1} \left(\frac{3}{4} G_{kk'}^{mm'}(\epsilon) + \Gamma_{kk_1}^{mm_1}(\epsilon) \right) \\ & - \frac{J}{2N} \sum_{\substack{k_1, m_1 \\ k_2, m_2}} \Omega_{\gamma}^{m_1} \Omega_{\gamma}^{m_2} \left(-\left\langle \left\langle c_{k'\uparrow}^{m'} c_{k_1\uparrow}^{+m_1} c_{k_2\downarrow}^{m_2} S_{-}^{\gamma} \right| c_{k\uparrow}^{+m} \right\rangle \right\rangle + \left\langle \left\langle c_{k'\uparrow}^{m'} c_{k_1\downarrow}^{+m_1} c_{k_2\uparrow}^{m_2} S_{+}^{\gamma} \right| c_{k\uparrow}^{+m} \right\rangle \right\rangle \\ & - \left\langle \left\langle c_{k'\downarrow}^{m'} c_{k_1\downarrow}^{+m_1} c_{k_2\downarrow}^{m_2} S_{-}^{\gamma} \right| c_{k\uparrow}^{+m} \right\rangle \right\rangle - 2 \left\langle \left\langle c_{k'\downarrow}^{m'} c_{k_1\downarrow}^{+m_1} c_{k_2\uparrow}^{m_2} S_z^{\gamma} \right| c_{k\uparrow}^{+m} \right\rangle \right\rangle + \left\langle \left\langle c_{k'\downarrow}^{m'} c_{k_1\uparrow}^{+m_1} c_{k_2\uparrow}^{m_2} S_{-}^{\gamma} \right| c_{k\uparrow}^{+m} \right\rangle \right\rangle \end{aligned} \quad (C2)$$

Pour résoudre ce système il faut approcher les fonctions de Green qui apparaissent aux ordres supérieurs en remplaçant certains produits d'opérateurs par leurs valeurs moyennes. A ce niveau, nous effectuons les mêmes développements que ceux qui sont présentés dans l'article de Nagaoka [20]. Par exemple, la première fonction de Green à 6 opérateurs qui apparaît dans (C2) est remplacée par [41] :

$$\left\langle \left\langle c_{k'\uparrow}^{m'} c_{k_1\uparrow}^{+m_1} c_{k_2\downarrow}^{m_2} S_{-}^{\gamma} \right| c_{k\uparrow}^{+m} \right\rangle \right\rangle = \left\langle c_{k'\uparrow}^{m'} c_{k_1\uparrow}^{+m_1} \right\rangle \left\langle \left\langle c_{k_2\downarrow}^{m_2} S_{-}^{\gamma} \right| c_{k\uparrow}^{+m} \right\rangle \right\rangle + \left\langle c_{k_1\uparrow}^{+m_1} c_{k_2\downarrow}^{m_2} S_{-}^{\gamma} \right\rangle \left\langle \left\langle c_{k'\uparrow}^{m'} \right| c_{k\uparrow}^{+m} \right\rangle \right\rangle \quad (C3)$$

Il n'apparaît que les combinaisons qui conservent le spin total. En effet, celles qui ne conservent pas le spin total sont nulles en valeurs moyennes (car le processus de diffusion considéré conserve le spin total). Il est supposé par ailleurs que la valeur moyenne $\langle S_z^{\gamma} \rangle$ est nulle. Après avoir reporté les développements du type (C3) des produits d'opérateurs dans (C2), on peut résoudre de façon auto-cohérente le système d'équations en $G_{kk'}^{mm'}(\epsilon)$ et $\Gamma_{kk'}^{mm'}(\epsilon)$. Dans le domaine haute température $T > T_K$ (dans lequel la dépendance logarithmique en température de la résistivité apparaît), il est possible de simplifier ce système en effectuant un développement perturbatif en J . Les valeurs moyennes qui apparaissent dans les développement (C3) doivent être limitées à l'ordre 0 en J si l'on souhaite conserver uniquement les termes d'ordre 1 en J dans l'expression (C2) de $\Gamma_{kk'}^{mm'}(\epsilon)$. A l'ordre 0 en J , les valeurs moyennes qui apparaissent dans (C3) sont égales à :

$$\begin{cases} \left\langle c_{k_1\uparrow}^{+m_1} c_{k_2\uparrow}^{m_2} \right\rangle = \delta_{k_1 k_2} \delta_{m_1 m_2} f(\epsilon_{k_1}^{m_1}) \\ \left\langle c_{k_1\uparrow}^{+m_1} c_{k_2\downarrow}^{m_2} S_{-}^{\gamma} \right\rangle = 0 \end{cases} \quad (C4)$$

où $f(\epsilon)$ est la fonction de distribution de Fermi-Dirac :

$$f(\epsilon) = \frac{1}{1 + \exp((\epsilon - \epsilon_F) / k_B T)} \quad (C5)$$

A l'issue de ces approximations, le système d'équations se réécrit sous la forme :

$$\begin{cases} (\epsilon - \epsilon_{k'}^{m'}) G_{kk'}^{mm'}(\epsilon) = \frac{\delta_{kk'} \delta_{mm'}}{2\pi} - \frac{J}{2N} \Omega_\gamma^{m'} \sum_{k_1 m_1} \Omega_\gamma^{m_1} \Gamma_{kk_1}^{mm_1}(\epsilon) \\ (\epsilon - \epsilon_{k'}^{m'}) \Gamma_{kk'}^{mm'}(\epsilon) = -\frac{J}{2N} \Omega_\gamma^{m'} \sum_{k_1 m_1} \Omega_\gamma^{m_1} \left(\frac{3}{4} G_{kk_1}^{mm_1}(\epsilon) + (2f(\epsilon_{k'}^{m'}) - 1) \Gamma_{kk_1}^{mm_1}(\epsilon) \right) \end{cases} \quad (C6)$$

Nous avons calculé les fonctions de Green vérifiant ce système. Nous ne présentons que l'expression de $G_{kk'}^{mm'}(\epsilon_F)$ qui intervient dans le calcul de la résistivité.

$$G_{kk'}^{mm'}(\epsilon) = \frac{\delta_{kk'} \delta_{mm'}}{2\pi(\epsilon - \epsilon_k^m)} \mp \frac{3iJ^2 \Omega_\gamma^m \Omega_\gamma^{m'} \rho_\gamma(\epsilon)}{16(\epsilon - \epsilon_k^m)(\epsilon - \epsilon_{k'}^{m'})(1 - J\rho_\gamma(\epsilon_F) \ln T)} \quad (C7)$$

où,

- Les termes d'ordres supérieurs en J ont été négligés.
- $\rho_\gamma(\epsilon)$ est la densité d'états locale, dans le plan γ .
- Le terme logarithmique en température est issu de l'intégration sur le vecteur d'onde k' du facteur $(2f(\epsilon_{k'}^{m'}) - 1)$ apparaissant dans (C6).

L'inversion de la fonction de Green diagonale ($k = k'$ et $m = m'$) suivie d'un développement limité en J permet d'exprimer celle-ci sous la forme :

$$2\pi G_{kk}^{mm}(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \epsilon_k^m \pm \frac{i}{\tau_\gamma^m}} \quad (C8)$$

où τ_γ^m est défini par :

$$\frac{1}{\tau_\gamma^m} = \frac{3\pi J^2 (\Omega_\gamma^m)^2 \rho_\gamma(\epsilon)}{16(1 - J\rho_\gamma(\epsilon_F) \ln T)} \quad (C9)$$

RÉFÉRENCES

- [1] J. Kondo, *Prog. of Theo. Phys.* **32**, N°1 (1964) 37.
- [2] H. Ishii, *J. of Low Temp. Phys.* **32**, N°3/4 (1978) 457.
- [3] "The Kondo problem to heavy fermions" par A.C. Hewson, Cambridge University Press, Cambridge (1993).
- [4] G. Chen et N. Giordano, *Phys. Rev. Lett.* **66**, N°2 (1991) 209.
- [5] K.R. Lane, M. Park, M.S. Isaacson et J.M. Parpia, *Phys. Rev. B* **51**, N°2 (1995) 945.
- [6] M.A. Blachly et N. Giordano, *Phys. Rev. B* **49**, N°10 (1994) 6788.
- [7] V. Chandrasekhar, P. Santhanam, N.A. Penebre, R.A. Webb, H. Vloeberghs, C. Van Haesendonck et Y. Bruynseraede, *Phys. Rev. Lett.* **72**, N°13 (1994) 2053.
- [8] N. Van der Post, J.A. Mydosh, J.M. van Ruitenbeek et I.K. Yanson, *Phys. Rev. B* **53**, N°22 (1996) 15106.
- [9] G. Bergmann, *Phys. Rev. Lett.* **67**, N°18 (1991) 2545.
- [10] "Transport phenomena" par H. Smith et H.H. Jensen, Clarendon Press, Oxford (1989).
- [11] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello et T.V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, N°10 (1979) 673.
- [12] I. Martin, Y. Wan et P. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **78**, N°1 (1997) 114.
- [13] O. Ujsaghy, A. Zawadowski et B.L. Gyorffy, *Phys. Rev. Lett.* **76**, N°13 (1996) 2378.
- [14] J. Rothman, communication privée.
- [15] Y. Aoki, H. Sato, Y. Komaba, Y. Kobayashi, H. Sugawara, S. Hashimoto, T. Yokoyama et T. Hanyu, *Phys. Rev. B* **54**, N°17 (1996) 12172.
- [16] P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, N°1 (1961) 41.
- [17] J.R. Schrieffer et P.A. Wolff, *Phys. Rev.* **149**, N°2 (1966) 491.
- [18] B. Coqblin et J.R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **185**, N°2 (1969) 847.
- [19] C.M. Varma et Y. Yafet, *Phys. Rev. B* **13**, N°7 (1976) 2950.
- [20] Y. Nagaoka, *Phys. Rev.* **138**, N°4A (1965) A1112.
- [21] D.N. Zubarev, *Usp. Fiz. Nauk* **71** (1960) 71.
- [22] Z. Wang, S. Wang, S. Shen et S. Zhou, *Phys. Rev. B* **55**, N°16 (1997) 10863.

- [23] V. Barzykin et I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **76**, N°26 (1996) 4959.
- [24] M.A. Ruderman et C. Kittel, *Phys. Rev.* **96**, N°1 (1954) 99.
- [25] T. Kasuya, *Phys. Rev.* **81** (1954) 440.
- [26] K. Yosida, *Phys. Rev.* **106** (1957) 893.
- [27] S. Doniach, *Physica B* **91** (1977) 321.
- [28] C. Lacroix et M. Cyrot, *Phys. Rev. B* **20**, N°5 (1979) 1969.
- [29] "Contribution à l'étude de l'apparition du magnétisme" par C. Lacroix, Thèse de l'Université Scientifique et Médicale et l'Institut National Polytechnique de Grenoble (1979).
- [30] "Frontiers in Solid State Sciences" par B. Coqblin, J. Arispe, A.K. Bhattacharjee et S.M.M. Evans, **Vol.2**, Selected Topics in Magnetism, Eds. L.C. Gupta et M.S. Multani (1992) p.75.
- [31] J.G. Sereni, *Physica B* **206&207** (1995) 246.
- [32] H. Che, D.L. Lin, Y. Xia, H. Zheng et H.X. Li, *Phys. Rev. B* **46**, N°20 (1992) 13501.
- [33] H. Zheng et D.L. Lin, *Phys. Rev. B* **36**, N°4 (1987) 2204.
- [34] L.C. Andreani et H. Beck, *Phys. Rev. B* **48**, N°10 (1993) 7322.
- [35] J.R. Iglesias, C. Lacroix, J. Arispe et B. Coqblin, *Physica B* **223&224** (1996) 160.
- [36] "Compétition entre l'effet Kondo et le magnétisme dans les composés de Cerium" par J. Arispe, Thèse de l'Université Paris-Sud, Centre d'Orsay (1996).
- [37] V.Y. Irkhin et M.I. Katsnelson, *J. Phys. : Condens. Matter* **2** (1990) 8715.
- [38] V.Y. Irkhin et M.I. Katsnelson, *Z. Phys. B - Condens. Matter* **82** (1991) 77.
- [39] N. Trivedi et N.W.Ashcroft, *Phys. Rev. B* **38**, N°17 (1988) 12298.
- [40] V.B. Sandomirskii, *Sov. Phys. JETP* **25**, N°1 (1967) 101.
- [41] "Green's functions for solid state physicists" par S. Doniach et E.H. Sondheimer, Frontiers in physics, The Benjamin/Cumming Publishing Company (1974).

Chapitre 3

EFFET HALL EXTRAORDINAIRE DANS LES FILMS MINCES MAGNÉTIQUES

TABLE DES MATIÈRES

INTRODUCTION	p.131
1. EFFET HALL	p.133
1.1. Effet Hall normal	p.133
1.2. Effet Hall extraordinaire	p.134
2. MODÈLE ET HYPOTHÈSES	p.137
2.1. Régime de faible diffusion	p.137
2.2. Formule de Kubo	p.139
2.3. Couplage spin-orbite	p.140
2.4. Expressions des conductivités d'un film	p.141
2.5. Détermination des fonctions de Green \tilde{G}	p.143
3. ÉTUDE D'UNE MONOCOUCHE D'ÉPAISSEUR D	p.147
4. ÉTUDE D'UNE BICOUCHE MAGNÉTIQUE	p.151
4.1. Géométrie CIP	p.151
4.2. Géométrie CPP	p.155
4.3. Remarques et comparaisons	p.156
4.4. Variation angulaire	p.156
CONCLUSION	p.161
ANNEXE A : Fonctions de Green dans la bicouche	p.162
ANNEXE B : Expression de ρ_H en géométrie CIP	p.163
ANNEXE C : Expression de ρ_H en géométrie CPP	p.165
RÉFÉRENCES	p.166

INTRODUCTION

Le transport électronique dans les couches minces et multicouches magnétiques est un sujet de recherche en plein développement. De nombreux travaux portent sur l'effet de magnéto-résistance géante (GMR) dans de tels systèmes [1]. Cet effet se caractérise par une modification dans la résistivité lorsque l'aimantation relative de deux couches successives change sous l'action d'un champ magnétique appliqué. Les premières approches théoriques concernant la GMR sont basées sur les équations de Boltzmann et font intervenir des diffusions dépendantes du spin aux interfaces et dans la couche, ainsi que des coefficients de transmission dépendants du spin [2,3]. Ces approches quasi-classiques ne permettent pas de rendre compte de tous les résultats expérimentaux. Elles échouent notamment lorsqu'on cherche à interpréter simultanément les valeurs mesurées de la résistivité et de la GMR, car il semble qu'elles surestiment la contribution de la diffusion interfaciale. Parallèlement, des théories quantiques ont été développées à partir du formalisme de Kubo. Levy *et al.* [4] ont traité la GMR en terme de diffusion des électrons par des potentiels dépendants du spin et distribués de façon aléatoire dans les couches. Vedyayev *et al.* [5] ont tenu compte d'une structure électronique dépendante du spin.

Cette revue sommaire montre que l'interprétation théorique de la GMR n'est pas évidente du fait de la diversité des phénomènes entrant en jeu dans ce type de système : diffusion dépendante du spin, rugosité des interfaces, barrières de potentiel aux interfaces, structure électronique dépendante du spin, diversité des types d'électrons participant au courant, effets de taille classique ou quantique. Il apparaît clairement qu'une étude plus large, portant sur l'ensemble des propriétés magnétiques et de transport dans les multicouches magnétiques, est nécessaire, ne serait-ce que pour la compréhension des mécanismes responsables de la GMR. Au niveau expérimental, des mesures d'aimantation, de GMR, de pouvoir thermomagnétique et d'effet Hall extraordinaire (EHE) ont été réalisées en parallèle [6,7].

Les résultats expérimentaux concernant l'EHE dans les multicouches magnétiques révèlent des comportements particuliers. Des mesures du coefficient spontané de Hall R_S , dans des multicouches de Fe/Cr [8], conduisent à une variation de R_S en $(\rho_{\text{él.}})^n$ avec un exposant n égal à 2.6, alors que la valeur de n pour un matériau massif varie entre 1 et 2 ($\rho_{\text{él.}}$ est la résistivité électrique). La relation entre R_S et $\rho_{\text{él.}}$ est appelée loi d'échelle. Dans le cas de multicouches de Co(Fe)/Cu, la résistivité de Hall extraordinaire, mesurée en fonction du champ magnétique appliqué, présente une anomalie qui est directement liée à l'existence d'un effet de GMR [7]. De plus, le coefficient R_S oscille en fonction de l'épaisseur de la couche séparatrice de Cu avec la même période que l'oscillation du pourcentage de GMR. Ces résultats soulèvent un grand

nombre de questions, qui n'ont, jusqu'à aujourd'hui, pratiquement pas été étudiées du point de vue théorique. On peut uniquement citer un article de Zhang [9] dans lequel il calcule la résistivité de Hall extraordinaire d'une multicouche magnétique dans le cas où le mécanisme de diffusion avec saut latéral est dominant. Il montre que la loi d'échelle n'est vérifiée que dans la limite locale, c'est-à-dire dans le cas où le libre parcours moyen des électrons de conduction est plus petit que l'épaisseur de la couche.

Dans ce chapitre, nous présentons l'étude théorique de l'EHE dans les films minces magnétiques dans le cas où le mécanisme de diffusion asymétrique domine. Dans une première partie, nous faisons un rappel du phénomène de l'EHE. Nous précisons notamment les deux mécanismes responsables de l'EHE. La seconde partie est la description du modèle utilisé pour effectuer nos calculs. La troisième partie présente l'étude d'une monocouche pour laquelle nous avons calculé la résistivité de Hall extraordinaire en fonction de son épaisseur. Dans cette partie, nous insistons particulièrement sur l'effet de taille quantique. Enfin, la quatrième partie présente l'étude en géométries CIP et CPP d'une bicouche antiferromagnétique avec un effet de taille classique.

1. EFFET HALL

1.1. Effet Hall normal

L'effet Hall normal se manifeste lorsque un échantillon métallique est placé simultanément sous un champ électrique \mathbf{E} (dans une certaine direction, par exemple selon \mathbf{x}) et sous un champ magnétique \mathbf{H} (dans une autre direction, par exemple selon \mathbf{z}). Sous l'action du champ électrique, les porteurs de courant se déplacent dans la direction \mathbf{x} . La force de Lorentz engendrée par le champ magnétique ($\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{H} / c$, q est la charge) a pour effet de dévier les porteurs de courant dans la direction \mathbf{y} . Ce courant transverse conduit à une accumulation de charge à l'une des extrémités de l'échantillon. Cette accumulation crée un champ électrique transverse qui s'oppose au courant transverse. A l'équilibre, le champ électrique transverse E_y (ou champ de Hall) compense exactement l'effet de la force de Lorentz. Ainsi, le courant circule uniquement dans la direction \mathbf{x} . L'amplitude du champ électrique transverse est proportionnelle à l'amplitude du champ magnétique et au courant dans la direction \mathbf{x} . Le rapport :

$$R_o = \frac{E_y}{j_x H} \quad (1)$$

est donc une constante, appelée constante de Hall, qui caractérise le matériau. Le signe de R_o dépend du signe des porteurs de charge : E_y étant négatif, R_o est négatif pour les électrons et positif pour les trous. L'effet Hall normal permet d'obtenir un certain nombre de renseignements sur les propriétés électroniques des métaux et semi-conducteurs. Sous champ magnétique élevé, l'effet Hall normal permet de déterminer le nombre effectif d'électrons participant au courant et ceci quels que soient les processus de diffusion. Sous champ magnétique faible, l'effet Hall est plus compliqué, il dépend des détails de la structure électronique et des processus de diffusion [10]. La résistivité de Hall ρ_H est égale à :

$$\rho_H^{\text{normal}} = \rho_{xy} = \frac{E_y}{j_x} = R_o H \quad (2)$$

Elle est donc proportionnelle au champ magnétique \mathbf{H} .

1.2. Effet Hall extraordinaire

Dans les matériaux magnétiques, la résistivité de Hall ρ_H n'est pas simplement proportionnelle au champ magnétique appliqué. Les mesures de ρ_H en fonction du champ font apparaître deux régimes linéaires.

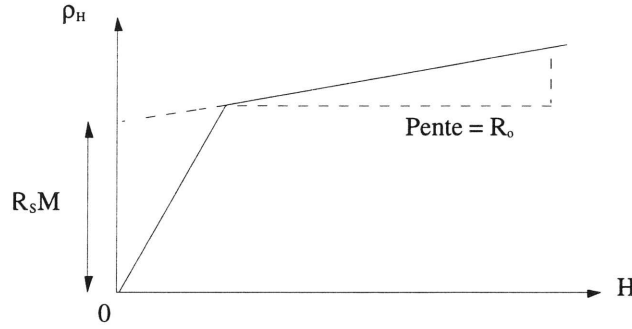


FIGURE 1 - Variation de ρ_H en fonction du champ magnétique.

Smith et Sears [11] proposèrent la relation :

$$\rho_H = R_0 H + R_s M = \rho_H^{\text{normal}} + \rho_H^{\text{extra.}} \quad (3)$$

où le coefficient de Hall spontané R_s est plus grand que R_0 dans la plupart des composés. La contribution supplémentaire à ρ_H est appelée résistivité de Hall extraordinaire, elle est proportionnelle à l'aimantation M , ce qui signifie que les spins des électrons influencent le processus de transport. L'interaction permettant un tel mécanisme est le couplage spin-orbite. Pour les matériaux massifs, une relation phénoménologique relie la résistivité de Hall extraordinaire $\rho_H^{\text{extra.}}$ à la résistivité électrique $\rho_{\text{él.}}$:

$$\rho_H^{\text{extra.}} \approx (\rho_{\text{él.}})^n \quad (4)$$

où l'exposant n dépend du composé (Ni : $n=1.5$; Fe : $n=2$; Ga : $n=2$).

Du point de vue théorique, il a été établi que le couplage spin-orbite contribue à la résistivité de Hall extraordinaire par l'intermédiaire des deux mécanismes suivants :

- **Diffusion asymétrique (skew-scattering)**

Ce mécanisme a été proposé par Kondo [12] et Giovannini [13]. Il peut être vu comme une déviation d'un petit angle, par rapport à la direction incidente, de l'électron de conduction lorsqu'il est diffusé par le centre magnétique. L'origine de ce mécanisme reste classique. Il dérive des équations de Boltzmann, à un ordre supérieur dans le développement de Born, dans lequel il apparaît un terme asymétrique relativement aux vecteurs d'onde incident κ et diffusé κ' dans la matrice diffusion :

$$H_{\kappa, \kappa'} = \langle \kappa | H_{SO} | \kappa' \rangle = i \lambda_{SO} \mathbf{M} \cdot \kappa \times \kappa' \quad (5)$$

où H_{SO} est le couplage spin-orbite :

$$H_{SO} = \lambda_{SO} \mathbf{M} \cdot (\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}) \quad (6)$$

λ_{SO} est la constante de couplage spin-orbite, \mathbf{M} est l'aimantation, ∇ est l'opérateur gradient, $V(\mathbf{r})$ est le potentiel électrostatique et \mathbf{p} l'impulsion.

La contribution de ce mécanisme à la résistivité de Hall extraordinaire est proportionnelle à la résistivité électrique.

- **Diffusion avec saut latéral (side-jump)**

Ce mécanisme a été proposé par Berger [14]. Il correspond à un saut latéral de l'électron de conduction lorsqu'il est diffusé. Son origine n'est pas classique. Ce mécanisme résulte de l'existence d'une vitesse anormale [15]. La contribution de ce mécanisme à la résistivité de Hall extraordinaire est proportionnelle au carré de la résistivité électrique.

Lorsque les deux mécanismes sont présents, la résistivité de Hall extraordinaire est la somme des deux contributions :

$$\rho_H^{\text{extra.}} = \underbrace{a \rho_{\text{él.}}}_{\text{diffusion asymétrique}} + \underbrace{b (\rho_{\text{él.}})^2}_{\text{saut latéral}} \quad (7)$$

Précisons que cette relation n'est obtenue que pour des processus de diffusion élastiques. Pour les processus de diffusion inélastiques, la relation entre $\rho_H^{\text{extra.}}$ et $\rho_{\text{él.}}$ est plus complexe. De même, lorsque différents types de porteurs de courant sont présents (électrons + trous), la relation (7) n'est plus vérifiée.

Au cours des deux processus, l'électron subit un déplacement transverse par rapport à sa direction incidente. Cela se comprend, car l'origine de ces deux termes est le couplage spin-orbite qui introduit une asymétrie droite/gauche et permet donc un effet transverse. La contribution relative de chacun des deux termes dépend du composé considéré [16]. Dans les alliages faiblement concentrés, le terme de diffusion asymétrique est prépondérant. En effet, ce terme est proportionnel à la concentration en impuretés magnétiques alors que le terme de saut latéral est proportionnel au carré de la concentration. Le terme de diffusion avec saut latéral devient comparable au terme de diffusion asymétrique à haute température ($>100\text{K}$) et pour les alliages concentrés.

2. MODÈLE ET HYPOTHÈSES

Notre étude se situe dans le cas d'une diffusion asymétrique dominante. La condition de prédominance de la diffusion asymétrique sur la diffusion avec saut latéral est $k_F \lambda \gg 1$ (λ étant le libre parcours moyen des électrons de conduction et k_F le vecteur d'onde au niveau de Fermi). Cette relation est vérifiée pour les alliages faiblement concentrés en impuretés magnétiques pour lesquels le libre parcours moyen est grand (régime de faible diffusion).

2.1. Régime de faible diffusion

Le système considéré est un alliage métallique constitué de différents types d'atomes magnétiques répartis de façon aléatoire. L'Hamiltonien associé à ce système est de la forme :

$$H = H_0 + V \quad (8)$$

où :

- H_0 est l'énergie cinétique. Deux types d'électrons participent au courant : des électrons de type s et des électrons de type d.
- V est le potentiel diffusif total égal à la somme des potentiels diffusifs locaux ϑ sur chaque site i :

$$V(\mathbf{r}) = \sum_i \vartheta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (9)$$

ϑ n'est pas périodique, car les positions \mathbf{r}_i des atomes magnétiques sont désordonnées.

Les propriétés de transport dépendent de la configuration particulière du système, c'est-à-dire de la répartition particulière des atomes magnétiques. Cependant, lorsque cette répartition est homogène, les propriétés électroniques du système sont bien décrites par des fonctions, telles que la self-énergie, qui ont été moyennées sur toutes les configurations possibles des impuretés. Nous avons déterminé la self-énergie dans la limite d'une faible diffusion (le potentiel V est considéré comme une perturbation). Nous rappelons rapidement le principe de ce calcul. Différentes fonctions de Green à un seul électron doivent être introduites :

$$\begin{cases} G_0(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - H_0} \\ G(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - H_0 - V} \\ \tilde{G}(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - H_0 - \Sigma(\epsilon)} \end{cases} \quad (10)$$

$G_0(\epsilon)$ est la fonction de Green associée à l'Hamiltonien H_0 , $G(\epsilon)$ est la fonction de Green associée à l'Hamiltonien H et $\tilde{G}(\epsilon)$ est la fonction de Green moyennée sur toutes les configurations du système. $\Sigma(\epsilon)$ est la self-énergie. Dans le régime de faible diffusion, nous pouvons développer les fonctions de Green $G(\epsilon)$ et $\tilde{G}(\epsilon)$ de la façon suivante :

$$\begin{cases} G(\epsilon) = G_0(\epsilon) + G_0(\epsilon)V G_0(\epsilon) + G_0(\epsilon)V G_0(\epsilon)V G_0(\epsilon) + \dots \\ \tilde{G}(\epsilon) = G_0(\epsilon) + G_0(\epsilon)\Sigma(\epsilon)G_0(\epsilon) + G_0(\epsilon)\Sigma(\epsilon)G_0(\epsilon)\Sigma(\epsilon)G_0(\epsilon) + \dots \end{cases} \quad (11)$$

La détermination de la self-énergie se fait à partir de la relation $\langle G(\epsilon) \rangle = \tilde{G}(\epsilon)$ où la notation $\langle \rangle$ signifie que l'on fait une moyenne sur toutes les distributions d'impuretés magnétiques. Ainsi,

$$\Sigma(\epsilon) \equiv \langle V \rangle + \langle V G_0(\epsilon) V \rangle - \langle V \rangle G_0(\epsilon) \langle V \rangle \quad (12)$$

Dans l'hypothèse où il n'y a pas d'ordre à courte distance, on a :

$$\langle V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}') \rangle G_0(\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \begin{cases} \langle V(\mathbf{r}) \rangle \langle V(\mathbf{r}') \rangle G_0(\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') & \text{si } \mathbf{r} \neq \mathbf{r}' \\ \langle V^2(\mathbf{r}) \rangle G_0(\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}) & \text{si } \mathbf{r} = \mathbf{r}' \end{cases} \quad (13)$$

La self-énergie est alors égale à [17] :

$$\Sigma(\epsilon) \equiv \langle V \rangle + (\langle V^2 \rangle - \langle V \rangle^2) F_0(\epsilon) \quad (14)$$

où $F_0(\epsilon)$ est la fonction de Green diagonale associée à H_0 .

Dans le cas d'un alliage binaire $A_c B_{1-c}$, l'expression (14) de la self-énergie devient :

$$\Sigma(\epsilon) = c\epsilon_A + (1-c)\epsilon_B + c(1-c)(\epsilon_A - \epsilon_B)^2 \langle F_0(\epsilon) \rangle \quad (15)$$

où,

- c est la concentration d'atome magnétique A par maille élémentaire.
- $(1 - c)$ est la concentration d'atome magnétique B par maille élémentaire.
- $\epsilon_{A(B)}$ = centre de la bande associée aux électrons d introduits pas les atomes magnétiques de type A(B).

Introduisons la matrice T définie par :

$$G(\epsilon) = \tilde{G}(\epsilon) + \tilde{G}(\epsilon)T(\epsilon)\tilde{G}(\epsilon) \quad (16)$$

A partir des relations (11) et (12) et de la définition donnée par (16) de la matrice T , nous obtenons :

$$T(\epsilon) = \frac{V - \Sigma(\epsilon)}{1 - (V - \Sigma(\epsilon))F_0(\epsilon)} = \underbrace{V - \langle V \rangle}_{\text{ordre 1 en } V} + \underbrace{V^2 - \langle V^2 \rangle + 2\langle V \rangle(\langle V \rangle - V)F_0(\epsilon)}_{\text{ordre 2 en } V} + \dots \quad (17)$$

2.2. Formule de Kubo

La formule de Kubo permet d'exprimer la réponse linéaire à une perturbation extérieure à partir des fonctions de corrélation [18]. Dans le cas où la perturbation est un champ électrique \mathbf{E} , le courant induit \mathbf{j} est en réponse linéaire :

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r}' \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}') \quad (18)$$

où σ est la conductivité, proportionnelle dans le formalisme de Kubo à la fonction de corrélation courant - courant :

$$\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \propto \langle [\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}')] \rangle \quad (19)$$

Le conductivité σ dépend des deux positions \mathbf{r} et \mathbf{r}' , et non de leur seule différence $(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, car le système considéré n'est pas homogène. $\hat{\mathbf{j}}$ est l'opérateur courant. Nous supposons que la contribution principale à la conductivité provient de la diffusion des électrons de conduction par les atomes magnétiques. Nous ne prenons donc pas en compte les corrections de vertex qui résultent des interactions électrons - électrons. Cette approximation est justifiée par le fait que l'on effectue une moyenne sur les distributions d'impuretés magnétiques. En effet, dans ce cas, les corrections de vertex sont de l'ordre de $1/(k_F \lambda)^2$ [19,20,21]. Elles sont donc négligeables dans le régime de faible diffusion que nous considérons. Le fait de négliger les corrections de vertex simplifie considérablement le problème, car il est alors possible d'exprimer la fonction de corrélation (19) comme le produit de deux fonctions de Green à une particule [22]. Dans la limite d'une température nulle et d'une fréquence nulle, les éléments de la matrice conductivité peuvent s'écrire sous la forme suivante [23,24] :

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \propto (G^+(\epsilon_F, \mathbf{r}, \mathbf{r}') - G^-(\epsilon_F, \mathbf{r}, \mathbf{r}')) \vec{\nabla}_\alpha \vec{\nabla}_\beta (G^+(\epsilon_F, \mathbf{r}', \mathbf{r}) - G^-(\epsilon_F, \mathbf{r}', \mathbf{r})) \quad (20)$$

où $\vec{\nabla} = (\vec{\nabla} - \vec{\nabla})/2$ est l'opérateur gradient antisymétrique, G^+ et G^- sont les fonctions de Green avancée et retardée associées à l'Hamiltonien total du système, ϵ_F est l'énergie de Fermi, enfin, les indices α et β sont : $\{x, y, z\}$. Finalement, la formule de Kubo peut se mettre sous la forme [5] :

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{\hbar e^2}{\pi N \Omega} \langle \text{Tr}[v_\alpha G^+(\epsilon_F, \mathbf{r}, \mathbf{r}') v_\beta G^-(\epsilon_F, \mathbf{r}', \mathbf{r})] \rangle \quad (21)$$

où $\langle \rangle$ signifie que l'on fait la moyenne sur toutes les configurations spatiales des atomes magnétiques.

2.3. Couplage spin-orbite

D'après l'expression (21), les conductivités non diagonales ($\alpha \neq \beta$) sont nulles en l'absence de couplage spin-orbite, car dans ce cas, la matrice dont on calcule la trace est non diagonale (impaire en v_α et v_β). Il est donc nécessaire d'introduire le couplage spin-orbite H_{SO} , l'Hamiltonien H considéré est alors :

$$H = H_0 + V + H_{SO} \quad (22)$$

La fonction de Green $G(\epsilon)$ associée à H est :

$$G(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - H_0 - V - H_{SO}} \quad (23)$$

Elle est égale, à l'ordre 1 en H_{SO} , à :

$$G(\epsilon) = \tilde{G}(\epsilon) + \tilde{G}(\epsilon)(T + H_{SO})\tilde{G}(\epsilon) \quad (24)$$

où $\tilde{G}(\epsilon)$ est la fonction de Green associée au milieu effectif définie par (10).

Donnons quelques précisions sur le couplage spin-orbite H_{SO} . Il est égal à :

$$H_{SO} = -\frac{1}{mc^2} \mathbf{M} \cdot (\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}) \quad (25)$$

où \mathbf{M} est l'aimantation, ∇ l'opérateur gradient, $V(\mathbf{r})$ est le potentiel électrostatique autour du noyau et \mathbf{p} l'impulsion. Le couplage spin-orbite est l'un des termes de structures fines qui apparaissent dans l'équation de Dirac. L'origine physique de ce terme est relativiste : l'électron se déplace dans le champ électrique $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r}) / q$ créé par le noyau et l'ensemble des autres électrons, ceci a pour conséquence de créer un champ magnétique dans le référentiel propre de l'électron. L'interaction entre le champ magnétique et le moment magnétique de l'électron est le couplage spin-orbite [25]. Dans un système tridimensionnel, les éléments de matrice du couplage spin-orbite entre deux ondes planes κ et κ' (vecteurs d'onde 3D associés aux électrons de conduction) sont :

$$\langle \kappa | H_{SO} | \kappa' \rangle = -\frac{1}{mc^2} \mathbf{M} \cdot \langle \kappa | \nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p} | \kappa' \rangle = -\frac{i\hbar}{mc^2} \mathbf{M} \cdot (\kappa \times \kappa') V_{\kappa\kappa'}(\mathbf{r}) \quad (26)$$

où nous avons utilisé les relations :

$$\begin{cases} \mathbf{p}|\kappa\rangle = \hbar\kappa|\kappa\rangle \\ \nabla V(\mathbf{r})|\kappa'\rangle = i\kappa'\nabla V(\mathbf{r})|\kappa'\rangle \end{cases} \quad (27)$$

Ainsi, les éléments de matrice de H_{SO} peuvent se mettre sous la forme :

$$\langle\kappa|H_{SO}|\kappa'\rangle = i\lambda_{SO}\mathbf{M}\cdot(\kappa\times\kappa') \quad (28)$$

Dans le cas où l'aimantation \mathbf{M} est perpendiculaire au film, l'expression (28) peut se mettre sous la forme suivante :

$$\langle\kappa|H_{SO}|\kappa'\rangle = i\lambda_{SO}M_z(\kappa\times\kappa')_z = i\lambda_{SO}\mathbf{M}(\mathbf{q}\times\mathbf{q}') \quad (29)$$

où les vecteurs d'onde \mathbf{q} et \mathbf{q}' sont définis dans le plan (xOy) du film.

Dans le cas où l'aimantation \mathbf{M} est dans le plan du film (par exemple selon y), nous avons :

$$\langle\kappa|H_{SO}|\kappa'\rangle = i\lambda_{SO}M_y(\kappa\times\kappa')_z = i\lambda_{SO}M_y(\kappa_z\kappa'_x - \kappa_x\kappa'_z) \quad (30)$$

Nous exprimons alors les éléments de matrice du couplage spin-orbite sous la forme suivante :

$$\langle\kappa|H_{SO}|\kappa'\rangle = i\lambda_{SO}M_y(-i\nabla_z q'_x + i q_x \nabla'_z) \quad (31)$$

où ∇ est l'opérateur gradient. En effet, nous avons : $\kappa_z = -i\nabla_z$.

2.4. Expressions des conductivités d'un film

Le système que nous étudions possède la particularité de ne pas être invariant par translation dans la direction (Oz) perpendiculaire aux plans des couches dont il est constitué. Par contre, il reste invariant dans le plan des couches. Cela signifie que les fonctions de Green ne dépendent pas de la seule différence $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ mais des deux positions \mathbf{r} et \mathbf{r}' . La fonction de Green G associée à H sera notée $G_{ij}^{\pm}(\epsilon, z, z')$ où le site i est situé en \mathbf{R}_i à l'altitude z et le site j est situé en \mathbf{R}_j à l'altitude z' . \mathbf{R}_i et \mathbf{R}_j indiquent les positions dans le plan. La formule (21) de la conductivité devient :

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{\hbar e^2}{\pi N \Omega} \sum_{i,j,z,z'} \left\langle \text{Tr} \left[v_{\alpha} v_{\beta} G_{ij}^{+}(\epsilon_F, z, z') G_{ji}^{-}(\epsilon_F, z', z) \right] \right\rangle \quad (32)$$

On effectue une transformation de Fourier sur les fonctions de Green uniquement par rapport aux vecteurs 2D : \mathbf{R}_i et \mathbf{R}_j . On obtient :

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{\hbar e^2}{\pi N \Omega} \sum_{q,\bar{q},z,z'} \left\langle \text{Tr} \left[v_{\alpha} v_{\beta} G_{q\bar{q}}^{+}(\epsilon_F, z, z') G_{\bar{q}q}^{-}(\epsilon_F, z', z) \right] \right\rangle \quad (33)$$

Tous les calculs qui suivent sont effectués dans la représentation mixte : $\{\mathbf{q}, z\}$ où \mathbf{q} est la composante planaire (plan xOy) du vecteur d'onde des électrons de conduction (espace réciproque) et z est la coordonnée dans la direction perpendiculaire aux couches (espace direct). Après avoir reporté l'expression (24) de la fonction de Green $G(\epsilon)$, le produit qui apparaît dans (33) devient :

$$G_{\mathbf{q}\bar{\mathbf{q}}}^+(\epsilon, z, z') G_{\bar{\mathbf{q}}\mathbf{q}}^-(\epsilon, z', z) = \left(\tilde{G}_{\mathbf{q}}^+(\epsilon, z, z') \delta_{\mathbf{q}\bar{\mathbf{q}}} + \sum_{i, z''} \tilde{G}_{\mathbf{q}}^+(\epsilon, z, z'') \left(T_i^+(\epsilon, z'') + (H_{\text{SO}}(z''))_i^+ \right) \tilde{G}_{\bar{\mathbf{q}}}^+(\epsilon, z'', z') e^{i(\mathbf{q}-\bar{\mathbf{q}})\mathbf{R}_i} \right) \cdot \left(\tilde{G}_{\bar{\mathbf{q}}}^-(\epsilon, z', z) \delta_{\bar{\mathbf{q}}\mathbf{q}} + \sum_{j, z'''} \tilde{G}_{\bar{\mathbf{q}}}^-(\epsilon, z', z''') \left(T_j^-(\epsilon, z''') + (H_{\text{SO}}(z'''))_j^- \right) \tilde{G}_{\mathbf{q}}^-(\epsilon, z''', z) e^{-i(\mathbf{q}-\bar{\mathbf{q}})\mathbf{R}_j} \right) \quad (34)$$

On rappelle que \tilde{G}^+ et \tilde{G}^- sont les fonctions de Green avancée et retardée associées au milieu effectif. Les conductivités diagonales et non diagonales s'obtiennent en reportant (34) dans (33).

- Conductivités diagonales

Le terme prépondérant est :

$$\sigma_{\alpha\alpha} = \frac{\hbar e^2}{\pi N \Omega} \sum_{\mathbf{q}, z, z'} \left((v_{\alpha})^2 \tilde{G}_{\mathbf{q}}^+(\epsilon_F, z, z') \tilde{G}_{\bar{\mathbf{q}}}^-(\epsilon_F, z', z) \right) \quad (35)$$

Si le système étudié est formé d'un empilement de couches magnétiques éventuellement différentes, les fonctions de Green, la self-énergie et autres grandeurs physiques peuvent différer d'une couche à l'autre, il est donc nécessaire d'introduire un indice de couche μ . De même, il est nécessaire d'introduire un indice $\tilde{\alpha}$ indiquant le type d'électron (s ou d) et un indice $\tilde{\sigma}$ pour le spin. Ainsi, (35) devient :

$$\sigma_{\alpha\alpha} = \frac{\hbar e^2}{\pi N \Omega} \sum_{\substack{\mathbf{q}, z, z' \\ \mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}} \left((v_{\alpha})^2 \tilde{G}_{\mathbf{q}}^{+\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}(\epsilon_F, z, z') \tilde{G}_{\bar{\mathbf{q}}}^{-\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}(\epsilon_F, z', z) \right) \quad (36)$$

Le fait d'additionner simplement les contributions des électrons \uparrow et \downarrow (somme sur $\tilde{\sigma}$) vient du choix d'un modèle à deux courants : $\mathbf{j}_{\text{tot}} = \mathbf{j}_{\uparrow} + \mathbf{j}_{\downarrow}$, qui est une bonne approximation du transport électronique dans les métaux de transition, pour lesquels on peut négliger les diffusions avec retournement de spin (au moins à basse température par rapport à T_c).

- Conductivités non diagonales

α étant différent de β , les premiers termes non nuls dans (33) sont ceux qui font intervenir le produit $T H_{\text{SO}}$ (le terme qui fait intervenir uniquement H_{SO} est nul, en effet, il apparaît la somme $H_{\text{SO}}^+ + H_{\text{SO}}^-$ qui est nulle, car H_{SO} est imaginaire pur). Ainsi,

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{\hbar e^2}{\pi N \Omega} \sum_{\substack{q \\ z, z', z'' \\ \mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}} \left(\left| \tilde{G}_q^{\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}(\epsilon_F, z, z'') \right|^2 \left| \tilde{G}_q^{\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}(\epsilon_F, z'', z') \right|^2 \text{Tr} \left[v_\alpha v_\beta \left\langle -2iH_{SO} \text{Im} \left[T^{\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}(\epsilon_F) \right] \right\rangle \right] \right) \quad (37)$$

Dans le cas d'un alliage binaire $A_c B_{1-c}$, l'aimantation et la constante de couplage spin-orbite peuvent différer selon l'occupation du site : $M_A \neq M_B$ et $\lambda_{SO}^A \neq \lambda_{SO}^B$, la valeur moyenne qui apparaît dans l'expression (37) de la conductivité non diagonale est alors égale à :

$$\left\langle -2iH_{SO} \text{Im} \left[T^{\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}(\epsilon_F) \right] \right\rangle = 2\kappa_\alpha \tilde{\kappa}_\beta c(1-c)(1-2c)(\epsilon_A - \epsilon_B)^2 (\lambda_A M_A - \lambda_B M_B) \text{Im} \left[F_0^{\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}(\epsilon_F) \right] \quad (38)$$

La contribution à l'ordre 1 en V dans l'expression (17) de la matrice T n'intervient pas, car elle est réelle.

Dans le cas d'une aimantation orientée selon z , la conductivité (37) est égale à :

$$\sigma_{xy} \propto D \sum_{\substack{q \\ z, z', z'' \\ \mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}} \left(q_x^2 q_y^2 \left| \tilde{G}_q^{\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}(\epsilon_F, z, z'') \right|^2 \left| \tilde{G}_q^{\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}(\epsilon_F, z'', z') \right|^2 \right) \quad (39)$$

où le coefficient D est défini pour un alliage binaire par :

$$D = 2c(1-c)(1-2c)(\epsilon_A - \epsilon_B)^2 (\lambda_A M_A - \lambda_B M_B) \text{Im} \left[F_0^{\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}(\epsilon_F) \right] \quad (40)$$

Dans le cas d'une aimantation dans le plan du film (selon y par exemple), la conductivité (37) est égale à :

$$\sigma_{xz} \propto D \sum_{\substack{q \\ z, z', z'' \\ \mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}} \left(q_x^2 \left| \tilde{G}_q^{\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}(\epsilon_F, z, z'') \right|^2 \tilde{V}_z^2 \left| \tilde{G}_q^{\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}(\epsilon_F, z'', z') \right|^2 \right) \quad (41)$$

avec $\tilde{\kappa}_z = i\tilde{V}_z$.

2.5. Détermination des fonctions de Green \tilde{G}

La fonction de Green $\tilde{G}_q^{\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}(\epsilon_F, z, z')$ vérifie l'équation différentielle :

$$\left(\epsilon_F - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \Sigma^{\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}(\epsilon_F) \right) \tilde{G}_q^{\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}(\epsilon_F, z, z') = a_0 \delta(z - z') \quad (42)$$

L'équation (42) peut se mettre sous la forme suivante :

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} (k^{\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}})^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \tilde{G}_q^{\mu, \tilde{\alpha}, \tilde{\sigma}}(\epsilon_F, z, z') = a_0 \delta(z - z') \quad (43)$$

où $k^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}$ est un vecteur d'onde complexe égal à :

$$k^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}} = k_F^{\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}} \sqrt{1 - \left(\frac{q}{k_F^{\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}}\right)^2 - \frac{2m\Sigma^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}(\epsilon_F)}{(\hbar k_F^{\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}})^2}} \quad (44)$$

La partie réelle de la self-énergie est liée à la position du niveau de Fermi par rapport au bas de la bande de conduction. Ainsi, $|\text{Re}[\Sigma^{\mu,\alpha,\sigma}(\epsilon_F)] - \text{Re}[\Sigma^{\nu,\alpha,\sigma}(\epsilon_F)]|$ représente la barrière de potentiel vue par les électrons de type α et de spin σ lorsqu'ils passent de la couche μ à la couche ν . La partie imaginaire de la self-énergie est pour sa part liée à l'inverse du libre parcours moyen $\lambda^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}$:

$$\frac{1}{\lambda^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}} = -\frac{m}{\hbar^2 k_F^{\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}} \text{Im}[\Sigma^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}(\epsilon_F)] \quad (45)$$

Afin de simplifier la signification physique des paramètres entrant en jeu, nous redéfinissons le vecteur d'onde au niveau de Fermi $k_F^{\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}$ de telle sorte qu'il englobe la partie réelle de la self-énergie, il devient alors $k_F^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}$. Ainsi, la barrière de potentiel, vue par les électrons de type $\tilde{\alpha}$ et de spin $\tilde{\sigma}$ à l'interface entre les couches μ et ν , est directement représentée par $|k_F^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}} - k_F^{\nu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}|$.

Dans ces conventions, $k^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}$ se réécrit comme :

$$k^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}} = c^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}} + id^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}} = k_F^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}} \sqrt{1 - \left(\frac{q}{k_F^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}}\right)^2 + \frac{2i}{k_F^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}} \lambda^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}}} \quad (46)$$

Les parties réelle et imaginaire du vecteur d'onde $k^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}$ se calculent à partir de l'équation (46). On obtient :

$$\begin{cases} c^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}} = \frac{k_F^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \left(\frac{q}{k_F^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}}\right)^2 + \sqrt{\left(1 - \left(\frac{q}{k_F^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}}\right)^2\right)^2 + \left(\frac{2}{\lambda^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}} k_F^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}}\right)^2}} \\ d^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}} = \frac{k_F^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}}{\lambda^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}} c^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}} \end{cases} \quad (47)$$

Les paramètres de notre problème se réduisent de cette manière au libre parcours moyen $\lambda^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}$ et au vecteur d'onde au niveau de Fermi $k_F^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}$.

Les fonctions de Green sont calculées à partir de la résolution du système d'équations formé par (43) et par son équation intégrale :

$$\left(\frac{\partial \tilde{G}_q^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}}{\partial z}\right)_{z \rightarrow z' + i\eta} - \left(\frac{\partial \tilde{G}_q^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}}{\partial z}\right)_{z \rightarrow z' - i\eta} = \frac{2ma_0}{\hbar^2} \quad (48)$$

Une condition de réflexion totale sur les interfaces externes des couches permet de déterminer complètement les fonctions de Green. Nous présenterons les résultats de ce calcul dans les parties 3 et 4 consacrées à l'étude de systèmes particuliers.

Dans cette partie, nous avons précisé le type de système étudié (films désordonnés) et présenté le formalisme utilisé et les approximations dans lesquelles nous nous sommes placés pour effectuer nos calculs (régime de faible diffusion et formule de Kubo). Ceci nous a permis d'extraire les expressions des conductivités diagonales (36) et non diagonales (39 ou 41). Par ailleurs, nous avons cerné les paramètres pertinents du problème, à savoir : le libre parcours moyen $\lambda^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}$ et le vecteur d'onde au niveau de Fermi $k_F^{\mu,\tilde{\alpha},\tilde{\sigma}}$ qui dépendent tous deux de la couche μ , du type d'électron $\tilde{\alpha}$ et du spin $\tilde{\sigma}$.

Dans les parties suivantes, nous exposons les résultats concernant deux systèmes différents :

- Une monocouche d'épaisseur D (partie 3). Une attention particulière est portée à l'effet de taille quantique (un rappel de l'effet de taille quantique a été fait dans l'introduction générale).
- Une bicouche antiferromagnétique (partie 4).

Pour chacun des systèmes, nous donnerons le résultat du calcul des fonctions de Green, les expressions des conductivités et de la résistivité de Hall extraordinaire. Des calculs numériques nous ont permis d'étudier les variations de la résistivité de Hall extraordinaire en fonction des épaisseurs des couches.

3. ÉTUDE D'UNE MONOCOUCHE D'ÉPAISSEUR D

Le premier système étudié est une monocouche d'épaisseur D avec le courant dans la direction x , le champ électrique de Hall dans la direction y et le champ magnétique dans la direction z perpendiculaire à la couche (voir figure ci-dessous). On considère des épaisseurs D assez petites ($< 100\text{\AA}$) pour qu'un effet de taille quantique se produise.

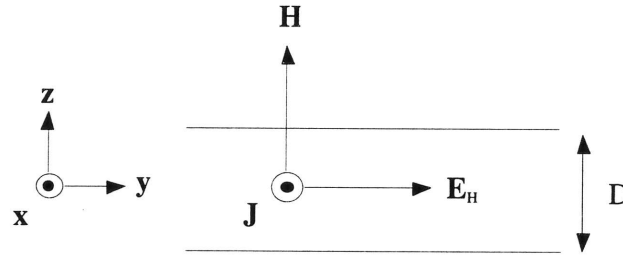


FIGURE 2 - Configuration de la monocouche.

Malgré l'égalité des vecteurs d'ondes au niveau de Fermi pour les directions de spin \uparrow et \downarrow des électrons s : $k_F^{s\uparrow} = k_F^{s\downarrow} = k_F^s$, le libre parcours moyen peut être différent selon le spin, du fait de l'interaction $s - d$. Dans cette partie, afin de simplifier le problème, nous faisons au contraire une hypothèse d'égalité des libres parcours moyens : $\lambda^{s\uparrow} = \lambda^{s\downarrow}$. Les paramètres restants sont donc : λ^s , $\lambda^{d\uparrow(\downarrow)}$, k_F^s et $k_F^{d\uparrow(\downarrow)}$. L'indice μ se référant à la couche n'est pas précisé, car nous considérons une monocouche.

Revenons à l'équation (43). Nous cherchons les fonctions de Green $\tilde{G}(z, z')$ vérifiant cette équation. Dans ce qui suit, les indices $\tilde{\alpha}$ et $\tilde{\sigma}$ et la dépendance en ϵ_F sont omis afin de simplifier l'écriture. Il faut définir la fonction de Green par morceau, car $\tilde{G}(z > z') \neq \tilde{G}(z < z')$. Soient $\tilde{G}_1(z, z')$ correspondant à $z < z'$ et $\tilde{G}_2(z, z')$ correspondant à $z > z'$. D'après l'équation différentielle (48), les solutions sont de la forme :

$$\begin{cases} \tilde{G}_1(z < z') = A_1 \cos kz + B_1 \sin kz \\ \tilde{G}_2(z > z') = A_2 \cos kz + B_2 \sin kz \end{cases} \quad (49)$$

k étant défini par (46). Par ailleurs, il y a des conditions aux limites qui, dans le cas d'une réflexion spéculaire totale sur les surfaces du film, sont :

$$\begin{cases} \tilde{G}_1(0, z') = 0 \\ \tilde{G}_2(D, z') = 0 \end{cases} \quad (50)$$

A l'aide des équations (43), (48), (50) et en prenant les formes (49), nous déterminons les expressions des coefficients A_1 , A_2 , B_1 et B_2 . Les fonctions de Green pour une monocouche d'épaisseur D s'expriment finalement sous la forme :

$$\begin{cases} \tilde{G}_1(z < z') = \left(\frac{2ma_0}{\hbar^2} \right) \frac{\sin(kz)\sin(k(z'-D))}{k\sin(kD)} \\ \tilde{G}_2(z > z') = \left(\frac{2ma_0}{\hbar^2} \right) \frac{\sin(kz')\sin(k(z-D))}{k\sin(kD)} \end{cases} \quad (51)$$

En reportant les expressions (51) des fonctions de Green dans les expressions (36) et (39) des conductivités, nous obtenons la résistivité de Hall extraordinaire :

$$\rho_{xy} = \frac{\sigma_{xy}^{d\uparrow} - \sigma_{xy}^{d\downarrow}}{(2\sigma_{xx}^s + \sigma_{xx}^{d\uparrow} + \sigma_{xx}^{d\downarrow})^2} = \frac{\sigma_{xy}^{tot.}}{(\sigma_{xx}^{tot.})^2} \quad (52)$$

où,

$$\begin{cases} \sigma_{xx}^s = \sigma_0^s I_3^s \\ \sigma_{xx}^{d\uparrow(\downarrow)} = \sigma_0^{d\uparrow(\downarrow)} I_3^{d\uparrow(\downarrow)} \\ \sigma_{xy}^{d\uparrow(\downarrow)} = \sigma_{non-diag.}^{d\uparrow(\downarrow)} I_1^{d\uparrow(\downarrow)} (I_3^{d\uparrow(\downarrow)})^2 \end{cases} \quad (53)$$

$\sigma_0^{\alpha\uparrow(\downarrow)}$ et $\sigma_{non-diag.}^{\alpha\uparrow(\downarrow)}$ représentent les conductivités diagonales et non diagonales dans la limite volumique. $I_n^{\alpha\uparrow(\downarrow)}$ est une intégrale définie de la façon suivante :

$$\begin{aligned} I_n^{\alpha\uparrow(\downarrow)} &= \int_0^{k_F^{\alpha\uparrow(\downarrow)}} \frac{c^{\alpha\uparrow(\downarrow)} q^n dq}{(k_F^{\alpha\uparrow(\downarrow)})^n ((c^{\alpha\uparrow(\downarrow)})^2 + (d^{\alpha\uparrow(\downarrow)})^2)} \\ &\times \left(\frac{\text{sh}(2d^{\alpha\uparrow(\downarrow)}D) + (d^{\alpha\uparrow(\downarrow)} / c^{\alpha\uparrow(\downarrow)}) \sin(2c^{\alpha\uparrow(\downarrow)}D)}{\text{ch}(2d^{\alpha\uparrow(\downarrow)}D) - \cos(2c^{\alpha\uparrow(\downarrow)}D)} - \frac{2d^{\alpha\uparrow(\downarrow)}}{D((c^{\alpha\uparrow(\downarrow)})^2 + (d^{\alpha\uparrow(\downarrow)})^2)} \right) \end{aligned} \quad (54)$$

où α est l'indice représentant les électrons s ou d et n est un entier égal à 1 ou 3. $c^{\alpha\uparrow(\downarrow)}$ et $d^{\alpha\uparrow(\downarrow)}$ sont définis dans la partie 2.5 par les relations (46) et (47). Il n'y a pas de contribution des électrons s à $\sigma_{xy}^{tot.}$, car ayant choisi $\lambda^{s\uparrow} = \lambda^{s\downarrow}$, les contributions des électrons $s\uparrow$ et $s\downarrow$ se compensent exactement. Du fait de la condition $k_F\lambda \gg 1$ (mécanisme de diffusion asymétrique dominant), certains termes, d'ordre supérieur en $1/k_F\lambda$, ont été négligés. Les intégrales $I_n^{\alpha\uparrow(\downarrow)}$ ont été calculées numériquement par la méthode de Simpson pour différentes valeurs des paramètres λ^s , $\lambda^{d\uparrow(\downarrow)}$, k_F^s et $k_F^{d\uparrow(\downarrow)}$.

Sur la figure 3 sont représentées la conductivité diagonale $\sigma_{xx}^{tot.}$ et les conductivités non diagonales $\sigma_{xy}^{d\uparrow}$ et $\sigma_{xy}^{d\downarrow}$, normalisées par rapport à la limite volumique, en fonction de l'épaisseur de la monocouche D .

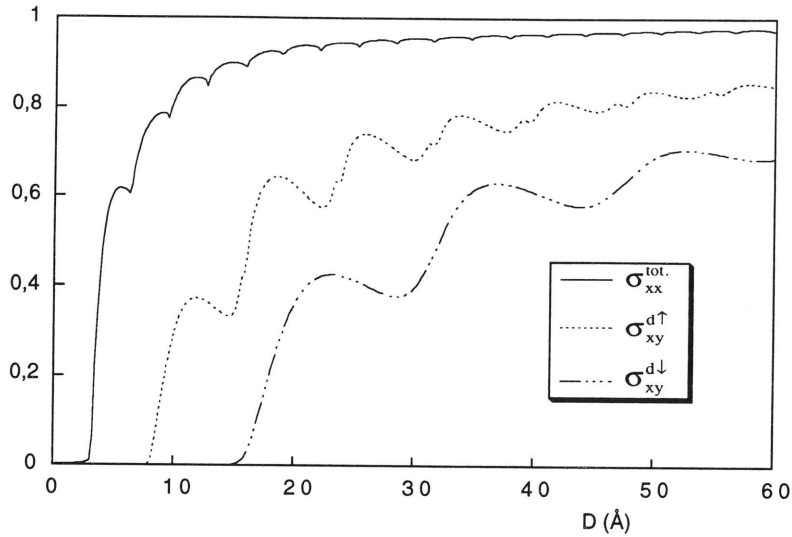


FIGURE 3 - Dépendance en taille de la conductivité diagonale $\sigma_{xx}^{tot.}$ et des conductivités non diagonales $\sigma_{xy}^{d\uparrow}$ et $\sigma_{xy}^{d\downarrow}$.

Les paramètres sont : $\lambda^s = 200\text{\AA}$, $\lambda^{d\uparrow} = 100\text{\AA}$, $\lambda^{d\downarrow} = 100\text{\AA}$, $k_F^s = 1\text{\AA}^{-1}$, $k_F^{d\uparrow} = 0,4\text{\AA}^{-1}$ et $k_F^{d\downarrow} = 0,2\text{\AA}^{-1}$.

Nous obtenons des oscillations de taille quantique dues à la dépendance oscillatoire des fonctions de Green en fonction de l'épaisseur D (voir expression (51)).

A partir de la figure 3, nous pouvons faire les remarques suivantes :

- La période d'oscillation de la conductivité diagonale $\sigma_{xx}^{tot.}$ est directement liée au k_F des électrons s : elle est égale à π / k_F^s . En effet, la contribution majeure à $\sigma_{xx}^{tot.}$ provient des électrons ayant le plus grand k_F , ce qui est le cas des électrons s . Les oscillations de $\sigma_{xx}^{tot.}$ sont difficiles à observer expérimentalement, la période d'oscillation étant de l'ordre de grandeur du paramètre de maille.
- Les périodes d'oscillation des conductivités non diagonales $\sigma_{xy}^{d\uparrow}$ et $\sigma_{xy}^{d\downarrow}$ sont liées aux k_F des électrons $d\uparrow$ et $d\downarrow$: elles sont égales à $\pi / k_F^{d\uparrow}$ et $\pi / k_F^{d\downarrow}$ respectivement.
- L'effet de taille est plus important pour les conductivités non diagonales que pour les conductivités diagonales. Ceci résulte de la nature différente des électrons contribuant majoritairement : électrons s pour les conductivités diagonales et électrons d pour les conductivités non diagonales. On remarque de plus que dans l'expression (53) des conductivités non diagonales, figure un produit de deux fonctions dépendantes de l'épaisseur, ce qui renforce l'effet de taille, alors que dans l'expression (53) des conductivités diagonales n'apparaît qu'un seul facteur dépendant de l'épaisseur.

D'après l'équation (52), l'oscillation de la résistivité de Hall extraordinaire ρ_H résulte de la superposition de trois périodes : π / k_F^s , $\pi / k_F^{d\uparrow}$ et $\pi / k_F^{d\downarrow}$. La période qui domine dans ρ_H correspond aux électrons d ayant le plus grand k_F , c'est-à-dire aux électrons $d\uparrow$ pour ce jeu de paramètres. La figure 4 montre bien cette correspondance des périodes entre $\sigma_{xy}^{d\uparrow}$ et ρ_H .

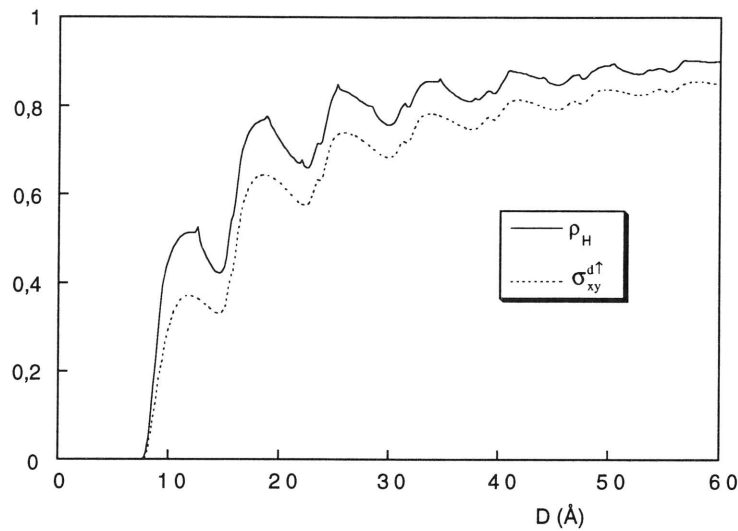


FIGURE 4 - Dépendance en taille de la résistivité de Hall extraordinaire ρ_H et comparaison avec la conductivité non diagonale $\sigma_{xy}^{d\uparrow}$.

Expérimentalement, les oscillations de ρ_H seraient a priori plus facile à observer que les oscillations de $\rho_{\text{él.}} = 1 / \sigma_{xx}^{\text{tot.}}$, car en général $k_F^d > k_F^s$, ce qui signifie que la période d'oscillation de ρ_H est plus grande que celle de $\rho_{\text{él.}}$. On prévoit une période d'oscillation de ρ_H de l'ordre de quelques monocouches.

Conclusion

- Les valeurs des vecteurs d'onde au niveau de Fermi régissent les périodes des oscillations liées à l'effet de taille quantique dans les conductivités diagonales et non diagonales et dans la résistivité de Hall extraordinaire. Une mise en évidence expérimentale de telles oscillations permettrait d'obtenir des informations sur la nature des électrons (s ou d) contribuant le plus à ces différentes grandeurs.
- Au regard des figures 3 et 4, la loi d'échelle $\rho_H = a\rho_{\text{él.}}$ (pour un mécanisme de diffusion asymétrique) ne serait vérifiée que si le coefficient a dépend de l'épaisseur D .

4. ÉTUDE D'UNE BICOUCHE MAGNÉTIQUE

On considère un sandwich constitué de deux couches ferromagnétiques, d'épaisseurs a et b , couplées antiferromagnétiquement par l'intermédiaire d'une couche métallique très fine, dont on néglige l'influence sur les propriétés de transport en considérant que son épaisseur est très faible devant le libre parcours moyen. Les deux couches ferromagnétiques sont composées du même matériau, ce qui signifie que leurs caractéristiques sont identiques. Nous pourrions alors faire un certain nombre d'hypothèses sur les valeurs des paramètres dans l'une ou l'autre des deux couches.

On néglige la quantification du vecteur d'onde dans la direction z perpendiculaire aux couches et étudions uniquement l'effet de taille classique. La partie oscillante qui apparaît dans la conductivité est donc négligée. Ainsi, nous n'obtenons plus d'oscillations de taille quantique mais uniquement un effet de taille. Cette approximation est valable si $k_F(a + b) \gg 1$. Nous avons calculé la résistivité de Hall extraordinaire d'une bicouche présentant une aimantation dans le plan des couches. Dans ce cas, deux orientations différentes du courant électrique sont possibles :

- Courant dans le plan des couches : Géométrie CIP (traité en 4.1).
- Courant perpendiculaire aux plans des couches : Géométrie CPP (traité en 4.2).

Les fonctions de Green associées à ce système ont été calculées à l'aide de la méthode décrite dans la partie 2, leurs expressions figurent dans l'annexe A.

Pour finir, dans la partie 4.4, nous proposons une interprétation de résultats expérimentaux obtenus dans une troisième configuration : géométrie CIP avec un champ magnétique perpendiculaire aux couches.

4.1. Géométrie CIP

Le courant est dans la direction x et le champ électrique de Hall est dans la direction z , son sens dans l'une ou l'autre des couches dépend du sens de l'aimantation dans la couche .

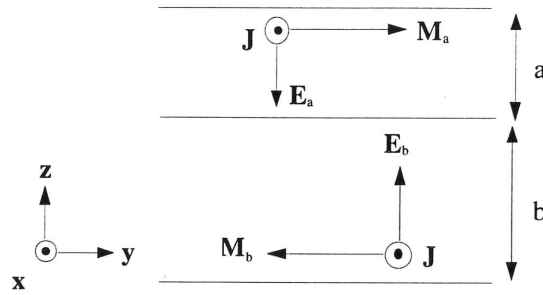


FIGURE 5 - Configuration de la bicouche en géométrie CIP.

Comme dans le cas de la monocouche, nous choisissons, pour simplifier, $\lambda^{\mu s \uparrow} = \lambda^{\mu s \downarrow}$ que ce soit pour $\mu = a$ ou $\mu = b$. Par ailleurs, nous remarquons que les spins majoritaires dans la couche a correspondent aux spins minoritaires dans la couche b (et vice versa). De plus, nous avons précisé que les deux couches a et b étaient constituées du même matériau. Ces deux remarques permettent de justifier des égalités simples entre les paramètres de la couche a et ceux de la couche b : $\lambda^{ad \uparrow} = \lambda^{bd \downarrow}$ et $\lambda^{ad \downarrow} = \lambda^{bd \uparrow}$. Des égalités identiques lient les vecteurs d'ondes au niveau de Fermi pour les électrons d. Il suffit donc de définir les paramètres dans l'une des couches, par exemple la couche a. Les paramètres associés à la couche b en seront déduits. Les paramètres pertinents du problème se réduisent alors à : λ^{as} , $\lambda^{ad \uparrow(\downarrow)}$, k_F^{as} et $k_F^{ad \uparrow(\downarrow)}$. Les expressions des conductivités et de la résistivité de Hall extraordinaire figurent dans l'annexe B.

Il est intéressant de montrer l'influence des différents paramètres. Pour cela, nous représentons le coefficient de Hall extraordinaire R_H , qui est égal à la résistivité de Hall extraordinaire divisée par l'aimantation totale, en fonction de l'aimantation totale de la bicouche (proportionnelle à la différence $a - b$, car \mathbf{M}_a et \mathbf{M}_b sont antiparallèles). La figure 6 montre l'influence sur R_H de la barrière de potentiel des électrons d à l'interface.

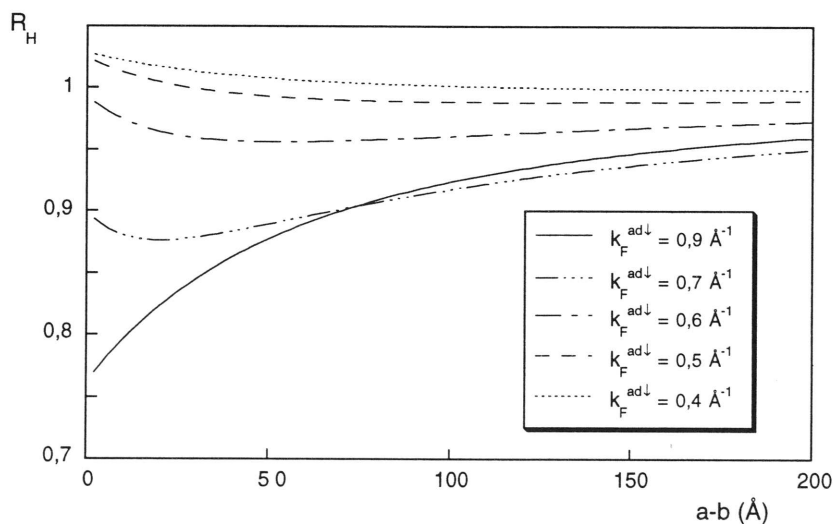


FIGURE 6 - Coefficient de Hall extraordinaire en fonction de l'aimantation pour les différentes valeurs de $k_F^{ad \downarrow}$ indiquées dans le cadre. Les autres paramètres sont : $b = 20 \text{ Å}$, $k_F^{as} = 1 \text{ Å}^{-1}$, $\lambda^{as} = 300 \text{ Å}$, $k_F^{ad \uparrow} = 0,8 \text{ Å}^{-1}$, $\lambda^{ad \uparrow} = 200 \text{ Å}$, $\lambda^{ad \downarrow} = 20 \text{ Å}$.

On remarque que l'effet de taille classique sur R_H est d'autant plus grand que la barrière de potentiel $|k_F^{ad\uparrow} - k_F^{bd\uparrow}| = |k_F^{ad\uparrow} - k_F^{ad\downarrow}|$ est faible. En effet, lorsque la barrière de potentiel est grande, la proportion d'électrons d réfléchis à l'interface est grande. Les électrons d restent alors canalisés dans une même couche. Les deux couches deviennent découplées du point de vue du transport électronique, ce qui supprime tout effet de taille classique sur R_H .

Sur la figure 7, nous avons isolé une des courbes de la figure 6 (correspondant à $k_F^{ad\downarrow} = 0,7\text{\AA}^{-1}$) et comparons le coefficient de R_H avec la conductivité diagonale σ_{xx} .

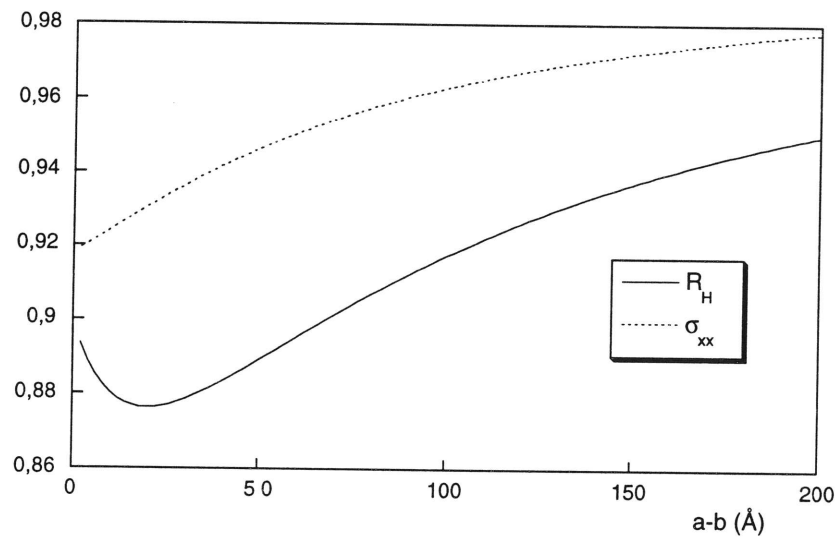


FIGURE 7 - Comparaison de la variation générale de R_H et σ_{xx} .

Alors que la variation de σ_{xx} en fonction de l'aimantation est monotone, la variation de R_H est non monotone. Ceci montre que R_H (ou ρ_H) n'est pas proportionnel à $\rho_{\text{él.}}$ ($= 1 / \sigma_{xx}$) comme le propose la loi d'échelle dans les matériaux volumiques.

La figure 8 montre l'influence de la valeur des libres parcours moyens sur R_H .

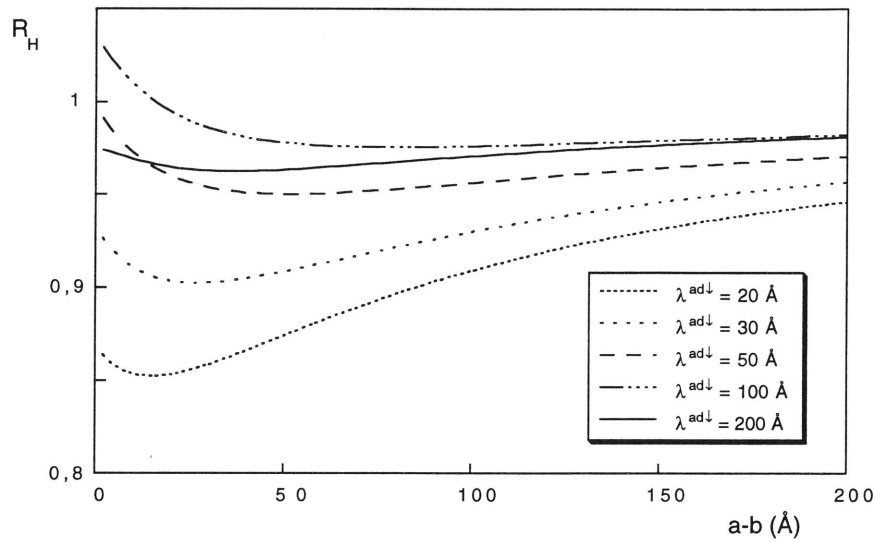


FIGURE 8 - Coefficient de Hall extraordinaire en fonction de l'aimantation pour les différentes valeurs de $\lambda^{ad\downarrow}$ indiquées dans le cadre. Les autres paramètres sont : $b = 20\text{\AA}$, $k_F^{as} = 1\text{\AA}^{-1}$, $\lambda^{as} = 300\text{\AA}$, $k_F^{ad\uparrow} = 1\text{\AA}^{-1}$, $k_F^{ad\downarrow} = 0.9\text{\AA}^{-1}$, $\lambda^{ad\uparrow} = 200\text{\AA}$.

Nous remarquons que l'effet de taille classique est maximum lorsque les libres parcours moyens sont de l'ordre de grandeur des épaisseurs a et b . Cet extremum de l'effet de taille classique peut être expliqué de la façon suivante :

- Si $\lambda \ll a, b$: les électrons subissent un grand nombre de diffusions dans les couches. Ils ne gardent pas la mémoire d'une couche lorsqu'ils passent dans l'autre. Les deux couches peuvent être vues comme indépendantes et l'effet de taille est inexistant.
- Si $\lambda \gg a, b$: les électrons ne voient pas les impuretés magnétiques. Il n'y a donc pas d'effet Hall extraordinaire, car pas de contribution aux conductivités non diagonales.

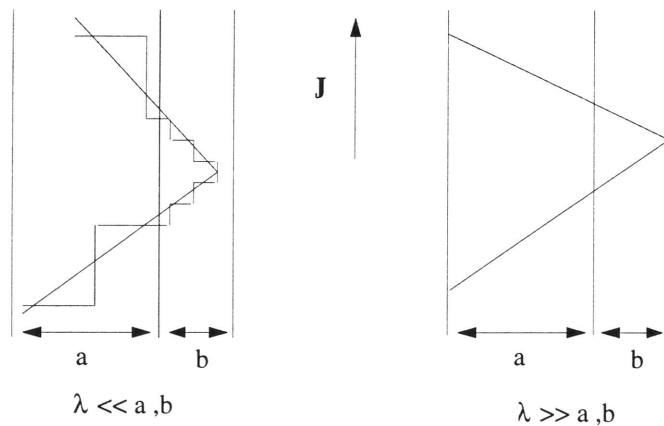


FIGURE 9 - Parcours des électrons dans la bicouche, deux cas extrêmes.

Ainsi, l'effet de taille est maximum est pour des épaisseurs de l'ordre de grandeur des libres parcours moyens.

4.2. Géométrie CPP

Le courant est dans la direction z et le champ électrique de Hall est dans la direction x , son sens dans l'une ou l'autre des couches dépend du sens de l'aimantation dans la couche .

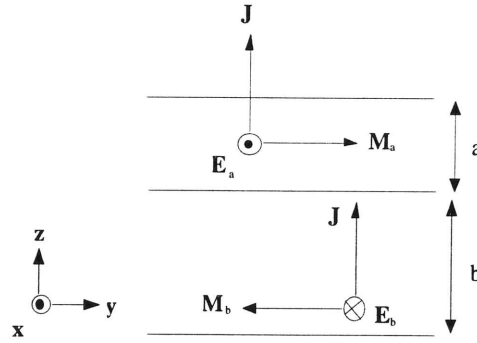


FIGURE 10 - Configuration de la bicouche en géométrie CPP.

La contribution principale au courant provient des électrons s car les électrons d sont réfléchis à l'interface entre les couches a et b à cause de la barrière de potentiel dépendante du spin. Nous négligeons donc toute contribution des électrons d . Nous avons, ici aussi, des relations liant les paramètres de la couche a avec ceux de la couche b : $\lambda^{as\uparrow(\downarrow)} = \lambda^{bs\downarrow(\uparrow)}$ et $k_F^{as} = k_F^{bs}$. Les paramètres du problème se réduisent à : $\lambda^{as\uparrow} \neq \lambda^{as\downarrow}$ et k_F^s . Les expressions des conductivités et de la résistivité de Hall extraordinaire se trouvent dans l'annexe C.

La figure 11 représente la variation de R_H en fonction de l'aimantation totale de la bicouche (proportionnelle à la différence $a - b$).

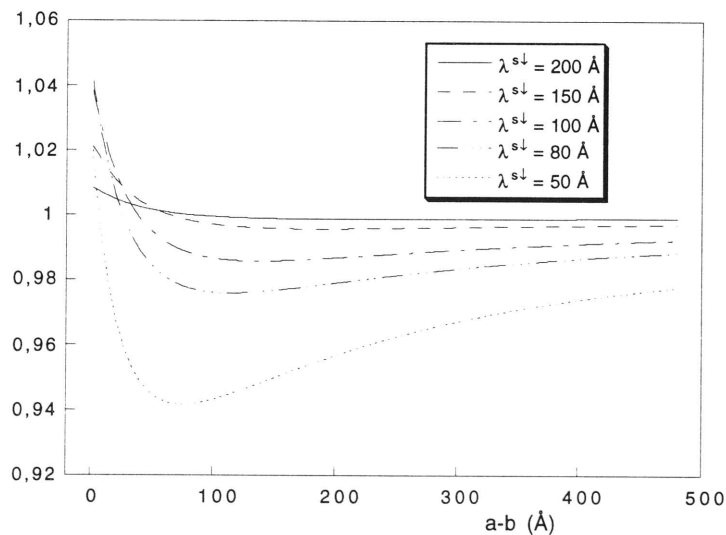


FIGURE 11 - Variation de R_H en fonction l'aimantation pour les différentes valeurs de $\lambda^{as\pm}$ indiquées dans le cadre.

Les autres paramètres sont : $b = 20\text{Å}$, $k_F^s = 1\text{Å}^{-1}$, $\lambda^{as\uparrow} = 300\text{Å}$.

L'effet de taille classique sur R_H est extremum pour des épaisseurs a et b de l'ordre de grandeur des libres parcours moyens. Nous voyons par exemple que la courbe correspondant à $\lambda^{as\downarrow} = 50\text{\AA}$ présente un extremum pour $a - b \approx 70\text{\AA}$, c'est-à-dire pour $a \approx 90\text{\AA}$, car $b = 20\text{\AA}$. Les courbes correspondant à des valeurs de $\lambda^{as\downarrow}$ plus élevées ne présentent pas d'extremums aussi marqués, car l'effet de taille classique est beaucoup plus faible aux épaisseurs correspondantes.

4.3. Remarques et comparaisons

Influence de la barrière de potentiel

L'influence est la même sur ρ_H^{CIP} (ou R_H^{CIP}) que sur $\rho_{\text{él.}}^{CIP}$, à savoir une diminution de l'effet de taille lorsque la barrière de potentiel, vue par les électrons d, augmente.

Influence du libre parcours moyen

Pour ρ_H^{CIP} et ρ_H^{CPP} , nous avons obtenu des effets de taille classique maximum lorsque les libres parcours moyens sont de l'ordre de grandeur des épaisseurs des couches.

Comparaison des géométries CIP et CPP

L'effet de taille est plus grand sur ρ_H^{CIP} (jusqu'à 25%) que sur ρ_H^{CPP} (jusqu'à 6%). Ceci vient du fait que dans l'expression (B1) de ρ_H^{CIP} , il y a une dépendance en taille du numérateur et du dénominateur, alors que dans l'expression (C1) de ρ_H^{CPP} , la dépendance en taille n'apparaît que dans le numérateur. De plus, la nature des électrons contribuant majoritairement est différente selon la géométrie. Alors que les électrons d donnent une large contribution en géométrie CIP, ils ne contribuent pas en géométrie CPP.

Comparaison de la résistivité de Hall extraordinaire et de la résistivité électrique

Pour les deux géométries, la dépendance en taille de ρ_H n'est pas monotone contrairement à ce qui est observé sur $\rho_{\text{él.}}$. Cela résulte de la combinaison des effets de taille particuliers à σ_{xx} et σ_{xz} qui composent ρ_H .

4.4. Variation angulaire

Un certain nombre d'articles récents présentent des mesures de la résistivité de Hall extraordinaire en fonction du champ magnétique dans les multicouches magnétiques. La plupart d'entre eux mettent en évidence un maximum dans la courbe $\rho_H(H)$, alors que la courbe $\rho_{\text{él.}}(H)$ reste monotone [6,7,8,26,27,28,29]. Cette différence de comportement entre $\rho_{\text{él.}}(H)$ et $\rho_H(H)$ soulève plusieurs questions, notamment à propos de la loi d'échelle (7). Dans cette partie, nous proposons une description simple de ce maximum en considérant la dépendance angulaire de $\rho_{\text{él.}}$ et ρ_H .

Dans les parties 4.1 et 4.2, nous nous sommes limités à l'étude d'une configuration anti-ferromagnétique de la bicouche. Cependant, la résistivité de Hall extraordinaire, comme la résistivité électrique, dépend de la configuration magnétique de la bicouche. Plus précisément, elles dépendent de l'angle θ entre les aimantations des couches a et b. Les dépendances angulaires de $\rho_{\text{el.}}$ et ρ_{H} peuvent être obtenues à partir de la représentation de ces deux grandeurs en fonction du carré de l'aimantation. En effet, l'aimantation totale M de la bicouche étant proportionnelle au cosinus de l'angle moitié $\theta / 2$, le carré de l'aimantation est proportionnel à $(1 + \cos\theta)$. C'est pourquoi il est nécessaire de disposer simultanément des trois courbes expérimentales $M(H)$, $\rho_{\text{el.}}(H)$ et $\rho_{\text{H}}(H)$ pour étudier cette dépendance angulaire. Ces données sont disponibles dans l'article de Sato *et al.* [26] qui ont étudié des multicouches de Fe/Cr et ont effectué des mesures de transport en géométrie CIP avec un champ magnétique perpendiculaire aux plans des couches.

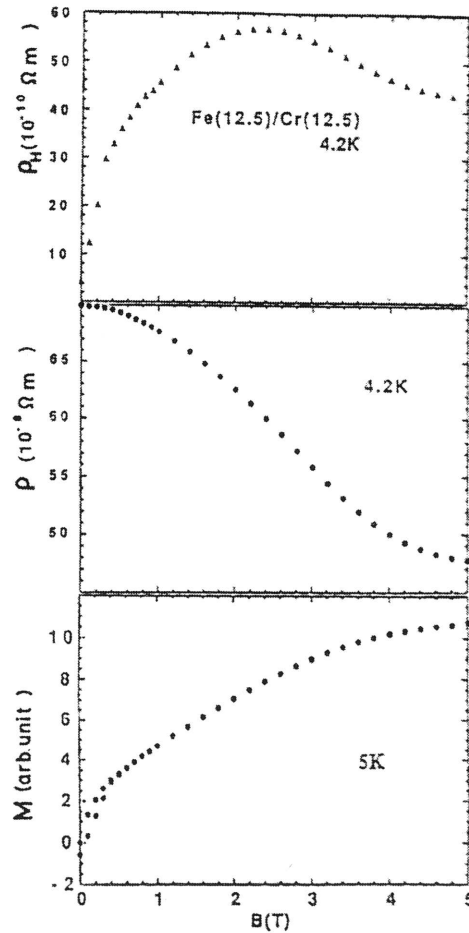


FIGURE 12 - Courbes expérimentales de la résistivité électrique, résistivité de Hall extraordinaire et aimantation mesurées dans des multicouches de Fe/Cr.

Bien que la géométrie soit différente de celle étudiée dans les parties précédentes, nous présentons une discussion qualitative de ces résultats expérimentaux. Nous avons, dans un premier temps, représenté la variation de $\rho_{\text{el.}}$ en fonction de $1 + \cos\theta$ qui est nul lorsque $\theta = \pi$ ($M = 0$) et qui est égal à 2 pour $\theta = 0$ (nous supposons que M est saturé lorsque $B = 5\text{T}$).

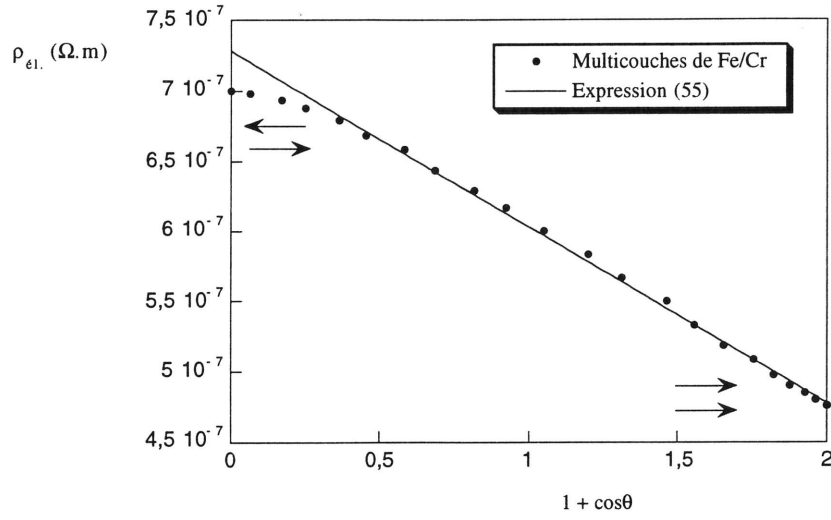


FIGURE 13 - Variation de la résistivité en fonction du cosinus de l'angle θ .

La figure 13 montre une variation linéaire de $\rho_{\text{él.}}(M^2)$ (ou $\rho_{\text{él.}}(\theta)$) en fonction du cosinus de l'angle θ , sauf pour les faibles valeurs de l'aimantation. Ce type de comportement est très souvent obtenu dans les multicouches magnétiques [30,31,32]. Au niveau théorique, il a été démontré que la dépendance angulaire de la conductivité diagonale est étroitement liée à la hauteur de la barrière de potentiel à l'interface entre les deux couches [33,34].

A partir de la figure ci-dessus, nous pouvons extraire la pente α et l'ordonnée à l'origine ρ_o de l'expression suivante :

$$\rho_{\text{él.}}(M^2) = \rho_{\text{él.}}(\theta) = \rho_o + \alpha(1 + \cos \theta) \quad (55)$$

où ρ_o est la résistivité obtenue pour la configuration antiferromagnétique (correspondant à un angle $\theta = \pi$ entre les aimantations). Nous obtenons : $\rho_o = (7,28 \pm 0,02) \cdot 10^{-7} \Omega.m$ et $\alpha = (-1,25 \pm 0,01) \cdot 10^{-7} \Omega.m$. La résistivité de Hall extraordinaire est égale à :

$$\rho_H(\theta) = \rho_{\text{él.}}^2(\theta) \sigma_{xy}(\theta) \quad (56)$$

avec en toute généralité,

$$\sigma_{xy}(\theta) \propto M(\theta)F(\theta) \quad (57)$$

En première approximation, nous supposons une variation linéaire du facteur F en fonction du cosinus de l'angle θ . Ainsi, la résistivité de Hall extraordinaire peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\rho_H(\theta) = (\rho_o + \alpha(1 + \cos \theta))^2 \sqrt{1 + \cos \theta} (\beta + \gamma(1 + \cos \theta)) \quad (58)$$

A l'aide de l'expression (58) et des coefficients ρ_o et α précédemment déterminés, il est possible de décrire précisément la courbe expérimentale $\rho_H(M^2)$.

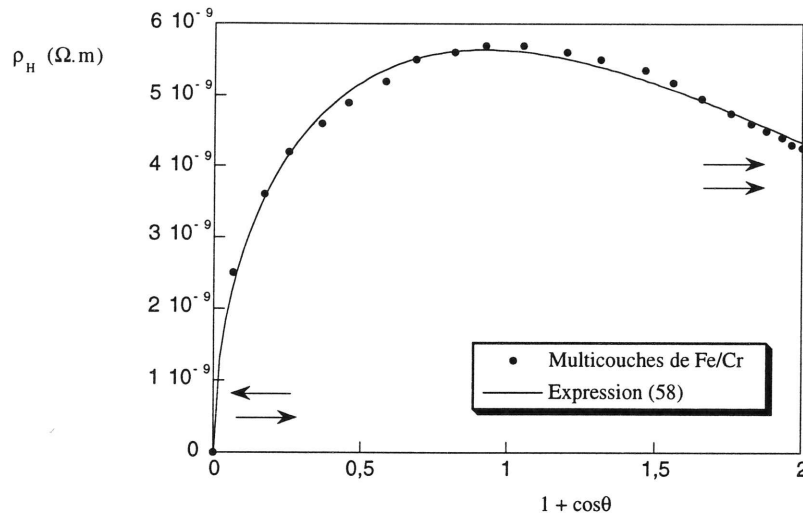


FIGURE 14 - Variation de la résistivité de Hall extraordinaire en fonction du cosinus de l'angle θ .

Les valeurs numériques des coefficients intervenant dans les formules (55) et (58) sont :

ρ_o ($10^{-7} \Omega.m$)	α ($10^{-7} \Omega.m$)	β ($10^4 \Omega^{-1}.m^{-1}$)	γ ($10^4 \Omega^{-1}.m^{-1}$)
7,28	- 1,25	1,76	-0,21
($\pm 0,02$)	($\pm 0,01$)	($\pm 0,02$)	($\pm 0,02$)

TABLEAU 1 - Coefficients permettant d'ajuster les courbes $\rho_{el}(\theta)$ et $\rho_H(\theta)$.

Les rapports α / ρ_o et γ / β sont du même ordre de grandeur ($\approx 0,1$), ce qui indique que les variations angulaires des deux quantités ρ_{el} et σ_{xy} sont à prendre en compte pour décrire correctement les résultats expérimentaux.

Cette première étude simple de la dépendance angulaire de la résistivité de Hall extraordinaire dans les multicouches de Fe/Cr permet de comprendre l'origine du maximum observé dans la courbe $\rho_H(H)$. Ce maximum résulte de la combinaison des dépendances angulaires propres des différentes grandeurs intervenant dans l'expression de ρ_H : conductivités diagonale et non diagonale.

CONCLUSION

La dépendance en taille de la résistivité de Hall extraordinaire dans les films minces magnétiques est plus complexe que pour la résistivité électrique, car ρ_H fait intervenir à la fois les conductivités diagonales et non diagonales.

L'étude de l'effet de taille quantique dans une monocouche montre que les périodes d'oscillations de ρ_H et ρ_{el} en fonction de l'épaisseur sont différentes du fait de la nature différente des électrons régissant ces oscillations. Des mesures expérimentales de ρ_H et ρ_{el} en fonction de l'épaisseur dans de tels systèmes simples permettraient d'obtenir des informations directes sur la nature des électrons impliqués.

L'étude d'une bicouche antiferromagnétique a permis de mettre en évidence des comportements non monotones de ρ_H^{CIP} et ρ_H^{CPP} en fonction de l'aimantation alors que ρ^{CIP} et ρ^{CPP} restent monotones.

Une modélisation simple de la variation angulaire de ρ_H a permis de rendre compte de l'anomalie observée dans les mesures expérimentales sur des multicouches de Fe/Cr.

Que ce soit dans le cas de la monocouche ou de la bicouche, la loi d'échelle : $\rho_H = a\rho_{el}$ (mécanisme de diffusion asymétrique) n'est vérifiée que si le coefficient a dépendant de l'épaisseur des couches.

ANNEXE A : Fonctions de Green dans la bicouche

La résolution du système, formé par les équations (43), (48), les équations de continuité des fonctions de Green à l'interface entre les couches a et b ainsi que les équations de réflexion spéculaire totale aux extrémités du film, conduit aux expressions suivantes :

$$\begin{cases} \tilde{G}(z_{\epsilon a} < z'_{\epsilon a}) = -\left(\frac{2ma_o}{\hbar^2 k_1}\right) \frac{k_1 \cos k_1(z' - a) \sin(k_2 b) - k_2 \sin k_1(z' - a) \cos(k_2 b)}{k_1 \cos(k_1 a) \sin(k_2 b) + k_2 \sin(k_1 a) \cos(k_2 b)} \sin(k_1 z) \\ \tilde{G}(z_{\epsilon a} < z'_{\epsilon b}) = \left(\frac{2ma_o}{\hbar^2 k_2}\right) \frac{\sin(k_1 z) \sin k_2(z' - a - b)}{k_1 \cos(k_1 a) \sin(k_2 b) + k_2 \sin(k_1 a) \cos(k_2 b)} \end{cases} \quad (A1)$$

L'indice 1 correspond au spin $\tilde{\sigma} = \uparrow$ dans la couche $\mu = b$ ou au spin $\tilde{\sigma} = \downarrow$ dans la couche $\mu = a$. L'indice 2 correspond au spin $\tilde{\sigma} = \downarrow$ dans la couche $\mu = b$ ou au spin $\tilde{\sigma} = \uparrow$ dans la couche $\mu = a$. En effet, les spins majoritaires dans la couche b sont les spins minoritaires dans la couche a (et réciproquement), car nous étudions une configuration antiferromagnétique. Ainsi,

$$k_{1(2)} = k_F^{b\uparrow(\downarrow)} \sqrt{1 - \left(\frac{q}{k_F^{b\uparrow(\downarrow)}}\right)^2} + \frac{2i}{k_F^{b\uparrow(\downarrow)} \lambda^{b\uparrow(\downarrow)}} = k_F^{a\downarrow(\uparrow)} \sqrt{1 - \left(\frac{q}{k_F^{a\downarrow(\uparrow)}}\right)^2} + \frac{2i}{k_F^{a\downarrow(\uparrow)} \lambda^{a\downarrow(\uparrow)}} \quad (A2)$$

Les indices se référant au type d'électrons (s ou d) ne sont pas précisés. L'expression de la fonction de Green $G(z_{\epsilon b} < z'_{\epsilon b})$ est similaire.

ANNEXE B : Expression de ρ_H en géométrie CIP

La résistivité de Hall extraordinaire moyennée sur l'ensemble du système est :

$$\rho_H^{\text{CIP}} = \frac{|a|E_z^a - b|E_z^b|}{j_x^{\text{CIP}}(a+b)} \quad (\text{B1})$$

où $|E_z^a|$ est le champ de Hall moyen dans la couche a défini par :

$$E_z^a = -\frac{j_z^a \sigma_{zz}^{bb} - j_z^b \sigma_{zz}^{ab}}{\sigma_{zz}^{aa} \sigma_{zz}^{bb} - \sigma_{zz}^{ab} \sigma_{zz}^{ba}} \quad (\text{B2})$$

L'expression de E_z^b se déduit de (B2) en échangeant les indices a et b.
Par ailleurs,

$$\begin{cases} j_x^{\text{CIP}}(a+b) = E_x (a(\sigma_{xx}^{aa} + \sigma_{xx}^{ab}) + b(\sigma_{xx}^{bb} + \sigma_{xx}^{ba})) \\ j_z^{a(b)} = E_x (\sigma_{zx}^{\uparrow a(b)} + \sigma_{zx}^{\downarrow a(b)}) \end{cases} \quad (\text{B3})$$

Le champ électrique selon x, E_x , disparaît à cause de la fraction dans ρ_H .

Les expressions des conductivités diagonales sont :

$$\begin{cases} \sigma_{xx}^{uv} = \frac{3}{2} \sigma_0^{\uparrow} \int_0^{k_{F1}} \frac{q^3 dq}{k_{F1}^3 c_1} \varphi_1^{uv} + \frac{3}{2} \sigma_0^{\downarrow} \int_0^{k_{F2}} \frac{q^3 dq}{k_{F2}^3 c_2} \varphi_2^{uv} \\ \sigma_{zz}^{uv} = 3 \sigma_0^{\uparrow} \int_0^{k_{F1}} \frac{q dq c_1}{k_{F1}^3} \varphi_1^{uv} + 3 \sigma_0^{\downarrow} \int_0^{k_{F2}} \frac{q dq c_2}{k_{F2}^3} \varphi_2^{uv} \end{cases} \quad (\text{B4})$$

où uv représente aa, bb, ab ou ba. Les facteurs devant les intégrales sont : $\sigma_0^{\uparrow(\downarrow)} = k_{F1(2)}^2 \lambda_{1(2)}$.

Les fonctions φ_1^{uv} et φ_2^{uv} sont définies par :

$$\begin{cases} \varphi_{1(2)}^{ab(ba)} = \frac{\lambda_{2(1)} c_{1(2)} c_1 c_2 (1 - F_{1(2)}^a) (1 - F_{2(1)}^b)}{a(b) k_{F2(1)} (c_1 + c_2)^2 (1 - F_{1(2)}^a F_{2(1)}^b)} \\ \varphi_{1(2)}^{aa(bb)} = 1 - \frac{\lambda_{1(2)} c_{1(2)} c_1 c_2 (1 - F_{1(2)}^a) (1 - F_{2(1)}^b)}{a(b) k_{F1(2)} (c_1 + c_2)^2 (1 - F_{1(2)}^a F_{2(1)}^b)} \end{cases} \quad (\text{B5})$$

où la fonction $F_{1(2)}^{a(b)}$ est définie par :

$$F_{1(2)}^{a(b)} = \exp\left(-\frac{4a(b) k_{F1(2)}}{\lambda_{1(2)} c_{1(2)}}\right) \quad (\text{B6})$$

L'expression de la conductivité non diagonale est donnée par :

$$\begin{aligned}
 \sigma_{zx}^{\uparrow b} = & \frac{9}{2} \sigma_{\text{non-diag.}}^{\uparrow} \int_0^{k_{F1}} \frac{q^3 dq \tilde{q} d\tilde{q} \tilde{c}_1}{k_{F1}^6 c_1} \left\{ 1 - \frac{c_1 \tilde{c}_1 \tilde{c}_2}{4(\tilde{c}_1 + \tilde{c}_2)^2 (\tilde{c}_1 - c_1) b} \left(\frac{\lambda_1 (\tilde{c}_1 - 2c_1)}{k_{F1}} + \frac{\lambda_2 \tilde{c}_1}{k_{F2}} \right) \right. \\
 & \times \frac{(1 - F_2^a)(1 - F_1^b)}{1 - F_2^a F_1^b} - \frac{\tilde{c}_1^4 \tilde{c}_2}{2(\tilde{c}_1 + \tilde{c}_2)^2 (\tilde{c}_1^2 - c_1^2) b} \left(\frac{\lambda_1}{k_{F1}} - \frac{\lambda_2}{k_{F2}} \right) \frac{(1 - \tilde{F}_2^a)(1 - \tilde{F}_1^b)}{1 - \tilde{F}_2^a \tilde{F}_1^b} \left. \right\} \quad (B7) \\
 - \frac{9}{8} \sigma_{\text{non-diag.}}^{\downarrow} \int_0^{k_{F2}} \frac{q^3 dq \tilde{q} d\tilde{q} \tilde{c}_2 c_1 \lambda_1}{k_{F2}^6 (c_1 + c_2)^2 (\tilde{c}_2 + c_2) b k_{F1}} & \left\{ \frac{4\tilde{c}_1 \tilde{c}_2^2 \lambda_1 k_{F2}}{(\tilde{c}_1 + \tilde{c}_2)^2 \lambda_2 k_{F1}} + (2\tilde{c}_2 + c_2) \right\} \frac{(1 - F_2^a)(1 - F_1^b)}{1 - F_2^a F_1^b}
 \end{aligned}$$

Les facteurs devant les intégrales sont : $\sigma_{\text{non-diag.}}^{\uparrow(\downarrow)} = k_{F1(2)}^5 \lambda_{1(2)}$.

L'expression de $\sigma_{zx}^{\downarrow b}$ est obtenue en remplaçant les indices 1 et 2, \uparrow et \downarrow dans (B7). De même, pour obtenir l'expression des conductivités non diagonales dans la couche a, il faut remplacer l'indice b par a dans (B7).

ANNEXE C : Expression de ρ_H en géométrie CPP

La résistivité de Hall extraordinaire moyennée sur l'ensemble du système est :

$$\rho_H^{CPP} = \frac{|a|E_x^a - b|E_x^b|}{j_z^{CPP}(a+b)} \quad (C1)$$

où $|E_x^a|$ est le champ de Hall moyen dans la couche a défini par :

$$E_x^a = - \frac{j_x^a \sigma_{xx}^{bb} - j_x^b \sigma_{xx}^{ab}}{\sigma_{xx}^{aa} \sigma_{xx}^{bb} - \sigma_{xx}^{ab} \sigma_{xx}^{ba}} \quad (C2)$$

L'expression de E_x^b s'obtient à partir de (C2) en échangeant les indices a et b.
Par ailleurs,

$$\begin{cases} j_z^{CPP} = \sigma_0 E_z^{\uparrow b} \frac{\lambda_1(a+b)}{a\lambda_2 + b\lambda_1} \\ j_x^{a(b)} = \sigma_{zx}^{\uparrow a(b)} E_z^{\uparrow a(b)} + \sigma_{zx}^{\downarrow a(b)} E_z^{\downarrow a(b)} \end{cases} \quad (C3)$$

L'expression du courant j_x^a est :

$$\begin{aligned} j_x^b = \sigma_{xz}^{b\uparrow} E_z^{b\uparrow} + \sigma_{xz}^{b\downarrow} E_z^{b\downarrow} = \frac{9}{2} E_z^{b\uparrow} \sigma_{\text{non-diag.}}^{\uparrow} \int_0^{k_F} \frac{q^3 dq \tilde{q} d\tilde{q} \tilde{c}}{k_F^6 c} \left\{ \frac{(a+b)(\lambda_1 + \lambda_2)}{a\lambda_2 + b\lambda_1} \right. \\ \left. - \frac{c}{4bk_F} \left\{ \lambda_1 \frac{(1-F_1^b)(1-F_2^a)}{1-F_1^b F_2^a} + \lambda_2 \left(\frac{a\lambda_1 + b\lambda_2}{a\lambda_2 + b\lambda_1} \right) \frac{(1-F_1^a)(1-F_2^b)}{1-F_1^a F_2^b} \right\} \right\} \end{aligned} \quad (C4)$$

L'expression de j_x^a se déduit de (C4) en échangeant les indices a et b et en utilisant la relation : $E_z^{\uparrow a} = \lambda_1 E_z^{\uparrow b} / \lambda_2$. Les fonctions $F_{1(2)}^{a(b)}$ ont été définies dans l'annexe B par la relation (B-7).

Enfin, la conductivité diagonale est :

$$\sigma_{xx}^{uv} = \frac{3}{2} \sigma_0^{\uparrow} \int_0^{k_F} \frac{q^3 dq}{k_F^3 c} \varphi_1^{uv} + \frac{3}{2} \sigma_0^{\downarrow} \int_0^{k_F} \frac{q^3 dq}{k_F^3 c} \varphi_2^{uv} \quad (C5)$$

Les fonctions φ_1^{uv} et φ_2^{uv} ont été définies dans l'annexe B par les relations (B5). Les indices 1 et 2 n'interviennent plus pour les quantités k_F et c , car nous ne tenons compte que de la contribution des électrons s en géométrie CPP, pour lesquels $k_{F1} = k_{F2} = k_F$ et $c1 = c2 = c$. Par contre, concernant les libres parcours moyens, on a toujours : $\lambda_1 \neq \lambda_2$.

RÉFÉRENCES

- [1] “ *Giant magnetoresistance in magnetic layered and granular materials* ” par P.M. Levy, Solid State Physics, Ed. par H. Ehrenreich et D. Turnbull, Academic Press, NY, **Vol.47** (1994) 367.
- [2] R.E. Camely et J. Barnas, *Phys. Rev. Lett.* **63**, N°6 (1989) 664.
- [3] R.Q. Hood et L.M. Falicov, *Phys. Rev. B* **46**, N°13 (1992) 8287.
- [4] P.M. Levy, S. Zhang et A. Fert, *Phys. Rev. Lett.* **65**, N°13 (1990) 1643.
- [5] A. Vedyayev, C. Cowache, N. Ryzhanova et B. Dieny, *J. Phys. : Condens. Matter* **5** (1993) 8289.
- [6] F. Tsui, B. Chen, D. Barlett, R. Clarke et C. Uher, *Phys. Rev. Lett.* **72**, N°5 (1994) 740.
- [7] H. Sato, Y. Kobayashi, Y. Aoki, Y. Saito et K. Inomata, *JMMM* **156** (1996) 247.
- [8] S.N. Song, C. Sellers et J.B. Ketterson, *Appl. Phys. Lett.* **59**, N°4 (1991) 479.
- [9] S. Zhang, *Phys. Rev. B* **51**, N°6 (1995) 3632.
- [10] “ *Transport phenomena* ” par H. Smith et H.H. Jensen, Clarendon Press, Oxford (1989).
- [11] A.W. Smith et R.W. Sears, *Phys. Rev.* **34** (1929) 1466.
- [12] J. Kondo, *Prog. Theor. Phys.* **27**, N°4 (1962) 772.
- [13] B. Giovannini, *Phys. Lett.* **36A**, N°5 (1971) 381.
- [14] L. Berger, *Phys. Rev. B* **2**, N°11 (1970) 4559.
- [15] S.K. Lyo et T. Holstein, *Phys. Rev. Lett.* **29**, N°7 (1972) 423.
- [16] A. Fert, *J. de Phys. Lett.* **35** (1974) L-107.
- [17] “ *The electronic structure of alloys* ” par H. Ehrenreich et L.M. Schwartz, Solid State Physics, Academic Press, **Vol.31** (1976) p.149.
- [18] R. Kubo, *J. of Phys. Soc. Jpn.* **12** (1957) 570.
- [19] A. Vedyayev, C. Cowache, N. Ryzhanova et B. Dieny, *Phys. Lett. A* **198** (1995) 267.
- [20] J. Inoue, H. Itoh et S. Maekawa, *JMMM* **126** (1993) 413.
- [21] J. Inoue, H. Itoh et S. Maekawa, *Phys. Rev. B* **51**, N°1 (1995) 342.
- [22] “ *Many-particle physics* ” par G.D. Mahan, Plenum Press (1990).

- [23] D.S. Fisher et P.A. Lee, *Phys. Rev. B* **23**, N°12 (1981) 6851.
- [24] C.L. Kane, R.A. Serota et P.A. Lee, *Phys. Rev. B* **37**, N°12 (1988) 6701.
- [25] “*Mécanique quantique*” par G. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, Hermann, Eds. des Sciences et des Arts (1977).
- [26] H. Sato, T. Kumano, Y. Aoki, T. Kaneko et R. Yamamoto, *J. of Phys. Soc. Jpn.* **62**, N°2 (1993) 416.
- [27] H. Sato, H. Henmi, Y. Kobayashi, Y. Aoki, H. Yamamoto, T. Shinjo et V. Sechovsky, *J. Appl. Phys.* **76**, N°10 (1994) 6919.
- [28] Y. Aoki, K. Honda, H. Sato, Y. Kobayashi, S. Hashimoto, T. Yokoyama et T. Hanyu, *JMMM* **162** (1996) 1.
- [29] W. Varva, C.H. Lee, F.J. Lamelas, H. He, R. Clarke et C. Uher, *Phys. Rev. B* **42**, N°7 (1990) 4889.
- [30] B. Dieny, C. Cowache, A. Nossov, P. Dauguet, J. Chaussy et P. Gandit, *J. Appl. Phys.* **79**, N°8 (1996) 6370.
- [31] “*Comportements magnétiques dans les systèmes multicouches et granulaires Ag/FeNi et Ag/FeCo pour le développement de capteurs magnétorésistifs*” par O. Redon, Thèse de l'Université Joseph Fourier - Grenoble I (1996).
- [32] “*Contribution à l'étude de la magnétorésistance géante planaire et perpendiculaire dans les multicouches et alliages granulaires magnétiques*” par C. Cowache, Thèse de l'Université Joseph Fourier - Grenoble I (1995).
- [33] A. Vedyayev, B. Dieny, N. Ryzhanova, J.B. Genin et C. Cowache, *Europhys. Lett.* **25**, N°6 (1994) 465.
- [34] A. Vedyayev, N. Ryzhanova, B. Dieny, P. Dauguet, P. Gandit et J. Chaussy, *Phys. Rev. B* **55**, N°6 (1997) 3728.

CONCLUSION GÉNÉRALE

Dans le premier chapitre de ce mémoire, nous avons montré que l'interaction antisymétrique de Dzyaloshinsky : $\mathbf{D} \cdot (\mathbf{S}_A \times \mathbf{S}_B)$ est présente au voisinage des surfaces. A l'aide des règles de symétrie, nous avons déterminé les directions des vecteurs \mathbf{D} pour différentes symétries de surface : surfaces (001), (101) et (111) des réseaux de Bravais cs, cc et cfc. Le calcul explicite du vecteur \mathbf{D} a été effectué à l'aide du formalisme de Moriya dans le cas d'un matériau isolant et à partir de la formule établie par Levy et Fert (mécanisme à trois sites) dans le cas d'un matériau conducteur. Dans les deux cas, les vecteurs \mathbf{D} obtenus à l'issue du calcul ont des directions qui correspondent à celles imposées par les règles de symétrie.

Ainsi, du fait de la brisure de symétrie au niveau des surfaces, une interaction antisymétrique s'exerce entre les spins situés à proximité des surfaces. Cette interaction antisymétrique favorise des configurations non colinéaires des spins. Elle est donc en compétition avec l'interaction d'échange de Heisenberg. Nous avons étudié cette compétition dans deux films différents :

- Film cfc avec un échange antiferromagnétique - Surfaces orientées (001)
Une configuration “cantée” peut être stabilisée. Elle correspond à des spins légèrement inclinés par rapport à la direction perpendiculaire au film. Ce film est un faible ferromagnétique, car il présente une aimantation résultante faible mais non nulle.
- Film monoclinique avec un échange ferromagnétique
Une configuration “cantée” peut être stabilisée. Au voisinage des surfaces, les spins sont déviés dans le plan par rapport à la direction de ceux qui sont situés au centre du film. Il apparaît une aimantation transverse.

L'interaction antisymétrique peut donc modifier l'ordre magnétique au voisinage des surfaces. Dans les deux exemples étudiés, l'interaction antisymétrique contribue à l'anisotropie, car elle stabilise des configurations de spins d'orientations proches d'une direction perpendiculaire à \mathbf{D} . L'interaction antisymétrique devrait jouer un rôle d'autant plus important que :

- l'épaisseur du film est faible
- le système est constitué d'un grand nombre d'interfaces
- le matériau présente un fort couplage spin-orbite (composé à base de Terre Rare)
- les surfaces et les interfaces sont rugueuses

Lors des calculs de minimisation de l'énergie, nous avons vite été limités du fait du grand nombre de variables par rapport auxquelles l'énergie devait être minimisée. Un certain nombre d'hypothèses ont du être faites, ce qui donne à penser que l'état “canté” obtenu n'est peut-être pas l'état fondamental. Des calculs numériques (du type Monte Carlo) permettraient de déterminer la configuration magnétique précise de l'état fondamental.

Dans le deuxième chapitre, nous avons présenté l'étude de l'effet Kondo et de l'interaction RKKY dans les films minces magnétiques.

Dans un premier temps, nous nous sommes intéressés au problème d'un film Kondo dilué. Une transformation de Schrieffer-Wolff a permis de montrer que, dans certaines conditions, la constante de couplage effectif dépend de la position de l'impureté dans le film. A l'aide d'une méthode variationnelle proposée par Varma et Yafet, nous avons calculé la température de Kondo T_K . Nous montrons qu'elle dépend aussi de la position de l'impureté dans le film, elle est donc distribuée à travers le film. Au voisinage des surfaces, T_K peut être très différente de la température de Kondo du massif (très inférieure ou très supérieure).

Par ailleurs, nous mettons en évidence un effet de taille sur le coefficient C qui figure devant le terme logarithmique en température dans le rapport $\Delta\rho_{\text{él.}} / (\rho_{\text{él.}})_0$. La convergence de C vers la valeur du massif est obtenue pour une épaisseur du film beaucoup plus faible que le rayon Kondo R_K . En effet, la convergence s'effectue vers 100\AA . Ce résultat se rapproche des considérations faites par Affleck. C'est donc une remise en cause du rayon Kondo R_K comme longueur caractéristique de l'effet Kondo.

Enfin, une première étude de la compétition entre l'effet Kondo et l'interaction RKKY dans un film est présentée. Les distributions des constantes de couplage Kondo et l'interaction RKKY à travers le film peuvent conduire à un magnétisme hétérogène dans le film. Il serait intéressant de poursuivre ces travaux : étude en fonction de l'épaisseur et de la température (les températures d'ordre magnétique en surface et en volume pourraient être différentes), étude du cas antiferromagnétique, étude de la stabilisation d'un ordre magnétique à longue portée dans les systèmes Kondo bidimensionnels.

Le troisième chapitre présente un calcul de la résistivité de Hall extraordinaire d'un film dans le cadre du formalisme de Kubo. Nous obtenons une oscillation de taille quantique de la résistivité de Hall extraordinaire en fonction de l'épaisseur du film. La période d'oscillation est liée au k_F des électrons d , alors que pour la résistivité électrique, la période est liée au k_F des électrons s . La mise en évidence expérimentale de l'oscillation de la résistivité de Hall extraordinaire serait très intéressante, elle permettrait notamment d'obtenir des informations sur les porteurs de courant. La période d'oscillation de la résistivité de Hall extraordinaire attendue est a priori plus grande que celle de la résistivité électrique, ce qui facilite l'observation des oscillations.

Ensuite, nous avons étudié un sandwich composé de deux couches ferromagnétiques avec des aimantations antiparallèles. Le calcul de la résistivité de Hall extraordinaire, dans le limite d'un effet de taille classique, a permis de mettre en évidence une dépendance non monotone en fonction de l'aimantation totale de la bicouche.

Enfin, nous avons pu décrire des mesures expérimentales de la résistivité de Hall extraordinaire en fonction du champ magnétique en supposant que les conductivités dépendent de l'angle entre les directions d'aimantations des deux couches magnétiques. Afin de vérifier cette hypothèse, il serait nécessaire de calculer explicitement la dépendance angulaire des conductivités non diagonales comme cela a été fait pour les conductivités diagonales par Vedyayev *et al.*

Les trois sujets qui ont été abordés durant cette thèse sont assez différents. Un point commun peut cependant être dégagé. En effet, ces trois études montrent que les propriétés des films minces magnétiques peuvent être très différentes de celle des matériaux magnétiques massifs :

- **Modification du magnétisme au voisinage des surfaces du film.**

Dans les films Kondo dilués, la température de Kondo au voisinage des surfaces peut être très différente de la température de Kondo associée à un matériau massif. Dans les films avec des surfaces de basses symétries, l'ordre magnétique peut être modifié au voisinage des surfaces.

- **Distribution de certaines grandeurs physiques à travers le film.**

Dans ce travail, nous avons montré que la température de Kondo et les constantes d'interactions Kondo et RKKY étaient distribuées à travers le film. Ces distributions résultent de la modification de la structure électronique au voisinage des surfaces, elles peuvent conduire à la stabilisation d'un magnétisme hétérogène dans le film.

- **Oscillation de taille quantique**

La réduction de la dimension dans la direction perpendiculaire au film conduit à une quantification du vecteur d'onde dans cette direction. Ainsi, la résistivité de Hall extraordinaire (comme la résistivité électrique) présente des oscillations en fonction de l'épaisseur.

Dans les films minces magnétiques, les visions classiques des propriétés magnétiques et des propriétés de transport doivent donc être remises en cause.

