

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE ABDELHAMID IBN BADIS-MOSTAGANEM
FACULTE DES SCIENCES EXACTES ET INFORMATIQUE

Département de PHYSIQUE

Domaine : Sciences de la Matière

MEMOIRE

Présenté par

BATACHE Asma

Pour l'obtention

DU DIPLOME DE MASTER

Spécialité : **PHYSIQUE**

Option : Modélisation et caractérisation des matériaux

Intitulé :

Energie d'anisotropie des superréseaux Fe/Co (001) : Calculs ab-initio

Soutenu le : 03/06/2015

Devant le jury composé de :

M ^{me} Y. BENCHERIF	M. C	Université de Mostaganem	Encadreur
M ^r A. BOUKRA	M. C	Université de Mostaganem	Président
M ^r H. YAHLA	M. C	Université de Mostaganem	Examineur

Table des matières

I	MATÉRIAUX MAGNÉTIQUES	3
1.1	Généralités	3
1.2	Moment Magnétique	4
1.2.1	Moment magnétique orbital	4
1.2.2	Moment magnétique de spin	6
1.3	Magnétisation et anisotropie magnétique	7
1.3.1	Magnétisation	7
1.3.2	Anisotropie magnétique	7
1.3.3	La MAE selon le model de Néel	10
II	ENERGIE D'ANISOTROPIE MAGNÉTIQUE DES SUPERÉ-	
	SEAUX Fe/Co(001)	15
2.1	Détails de calcul et code utilisé	15
2.2	Fer et Cobalt massifs	18
2.2.1	Propriétés structurales, électroniques et magnétiques	18
2.3	Superéseaux Fe/Co (001)	27
2.3.1	Introduction	27
2.3.2	Structures cristallines des supéréseaux Fe/Co	27
2.3.3	Paramètres d'équilibre	28
2.3.4	Densité d'états	33

2.3.5	Moments magnétiques	36
2.4	Energie d'Anisotropie Magnétique (MAE)	39
2.4.1	Fer et Cobalt massifs	40
2.4.2	Superéseaux Fe_n/Co_1 et Fe_1Co_m	40
CONCLUSION GÉNÉRALE		44

Table des figures

1.1.1 Illustration de l'ordre magnétique dans une maille cubique centrée. de gauche à droite : Ferromagnétique, anti-ferromagnétique et ferri- magnétique [4].	4
1.2.1 Atome de Bohr, l'électron décrit une orbite circulaire où le moment angulaire \vec{l} et le moment magnétique orbital \vec{m} ont des directions opposées [6].	5
1.3.1 Interaction spin-orbite [6].	8
1.3.2 Représentation schématique des différents axes d'aimantation.	9
1.3.3 Aimantation en fonction du champ appliqué pour le Fer (bcc), le Nickel (fcc) et le Cobalt (hcp) d'après [6].	9
1.3.4 Illustration schématique de l'orientation des moments magnétiques dans des couches magnétiques. Dans un superréseau (à gauche) et dans une couche magnétique épaisse (à droite) [7].	10
1.3.5 Schéma du modèle de Néel.	11
1.3.6 Représentation polaire de l'énergie d'anisotropie . $K_1 > 0$ (à gauche), $K_1 < 0$ (à droite) [9].	14
2.1.1 Procédure d'autocohérence du calcul de la densité de charge de l'état fondamental du système.	17
2.2.1 Structure atomique cubique centrée.	19
2.2.2 Energie totale du Fer et du cobalt (cc) en fonction du paramètre de maille.	20

2.2.3 Structure de bandes des spins majoritaires et minoritaires du Fer et du Cobalt.	22
2.2.4 DOS total du Fer et du Cobalt	24
2.2.5 Evolution du moment magnétique de spin du Fer et du Cobalt en fonction du paramètre de maille.	26
2.3.1 Représentation schématique d'un superréseau (A_3/B_2).	27
2.3.2 Supercellule représentant 3 plans de Cobalt sur 3 plans de Fer.	28
2.3.3 Optimisation du paramètre de maille des superréseaux Fe_nCo_1	29
2.3.4 Optimisation du paramètre de maille des superréseaux Fe_1Co_m	30
2.3.5 Variation du paramètre de maille en fonction du nombre n de couches atomiques de Fer et de Cobalt.	32
2.3.6 DOS totale et partielles des superréseaux Fe_nCo_1	34
2.3.7 DOS totale et partielles des superréseaux Fe_1Co_m	35
2.3.8 Moments magnétiques des atomes de Fer et de Cobalt des superé- seaux Fe_nCo_1 et Fe_1Co_m	37
2.3.9 Variation du moment magnétique totale en fonction de nombre de plans atomiques de Fer et de Cobalt.	38
2.4.1 Energie d'anisotropie magnétique en fonction du nombre de valeurs d'onde de Bloch dans la première zone de Brillouin, cas du superé- seau Co_1Fe_1	39
2.4.2 Variation de la MAE du superréseau Fe_nCo_1 et Fe_1Co_m	42
2.4.3 Variation de la MAE en fonction du moment magnétique total des superréseaux Fe_nCo_1 et Fe_1Co_m	43

Liste des tableaux

2.2.1 Paramètres de maille de Fer et de Cobalt comparés aux résultats théoriques et expérimentaux.	21
2.2.2 Moments magnétiques du Fer et du Cobalt.	25
2.3.1 Paramètres de maille et module de rigidité des superréseaux Fe/Co.	31
2.3.2 Moments magnétiques par atome de Fe et de Co des différents su- perréseaux.	36
2.4.1 Calculs GGA de la MAE du Fer et du Cobalt massifs.	40
2.4.2 Calculs GGA de la MAE des différents superréseaux.	40

—*Remerciements*—

Avant tout, je rends mes profondes gratitudee à notre dieu clément et miséricorde pour tous ses bienfaits.

Au terme de ce modeste travail, je tiens à exprimer mes vifs remerciements à mon encadreur Madame Y. BENCHERIF pour sa disponibilité, son aide efficace, son orientation et ses conseils précieux.

Je tiens aussi à remercier doublement le président et les membres de jury, premièrement d'avoir accepté de juger avec volonté mon travail et deuxièmement pour avoir contribué à notre formation.

Mes remerciements s'adressent également à tous les enseignants du département de Physique de l'université de mostaganem, et spécialement à Monsieur A. BOUKRA.

—*Dédicaces*—

Je dédie ce modeste travail

A Ma soeur Kheira ullah yerhamha

A mes parents qui sont toujours avec moi

A mon frère arbi

A tous mes soeurs chahra, marwa et zina et tata

A Toutes mes familles batache, mahmoudi, keddar, keceir et tous.

A ma copine Keddar Fatima

Aux étudiants de physique, spécialement master 2 physique promotion 2014/2015

A tous mes enseignants.

A toutes mes amies, en particulier wafa, rachda, asma, ikram, nouria, imane, amina, bakhta, hanan.

Je remercie également tous ceux qui m'ont aidé à réaliser ce mémoire.

INTRODUCTION GENERALE

Le développement de la recherche dans le domaine du magnétisme s'explique par le progrès des techniques de dépôts permettant la préparation de matériaux de haute qualité dont les propriétés magnétiques sont intéressantes du point de vue applications (enregistrement magnétique, capteurs de champ,...). Les superépaisseurs et multicouches sont obtenues en déposant alternativement des couches magnétiques et non magnétiques sur un substrat. Le superépaisseur est une supercellule constituée de couches monocristallines en épitaxie. Les premiers superépaisseurs métalliques ont été obtenus par la technique d'épitaxie par jet moléculaire [1]. Par contre les multicouches polycristallines sont élaborées par pulvérisation cathodique. Les structures alternées sont à l'origine de l'effet de la magnétorésistance géante [2] et de l'apparition de l'anisotropie magnétique induite par les contraintes aux interfaces. Le magnétisme est de façon générale très sensible à l'environnement atomique local.

Les effets de l'environnement dissymétrique des atomes magnétiques avoisinants, situés aux interfaces donnent naissance à une anisotropie géante. Celle-ci maintient fortement l'aimantation dans la direction perpendiculaire aux plans des couches, une caractéristique importante pour des applications dans le domaine de l'enregistrement magnétique. Un autre phénomène aussi important, rencontré dans les multicouches minces, est celui du couplage entre les couches magnétiques, jouant ainsi un rôle prépondérant dans l'orientation de leurs aimantations [1].

Le ferromagnétisme est dû aux électrons non appariés qui occupent les orbitales localisées des couches 3d, 4d ou 5d incomplètes.

L'apparition du ferromagnétisme dans le Fer, le Cobalt et le Nickel à l'état massif est d'origine microscopique. Elle réside dans les interactions de couplage ou d'échange entre les moments magnétiques voisins. Le ferromagnétisme est décrit

par le modèle des électrons itinérants, où l'on considère que les électrons responsables du magnétisme sont les électrons de conduction qui se meuvent dans tout le matériau.

La propriété principale des matériaux ferromagnétiques est la présence d'une aimantation spontanée due à l'interaction d'échange en absence d'un champ magnétique extérieur, et cela au dessous d'une température caractéristique appelée, température de Curie T_c . Les résultats expérimentaux montrent que l'aimantation s'aligne généralement suivant des directions préférentielles par rapport aux axes cristallographiques et aussi selon la forme extérieure du solide (anisotropie de forme) [3]. Cette propriété s'appelle l'anisotropie magnétique. L'énergie mise en jeu lors de la rotation de l'aimantation de la direction de basse énergie (axe de l'aimantation facile) vers la direction de plus haute énergie (axe de l'aimantation difficile) est de l'ordre de 10^{-6} à 10^{-3} eV/atome [3].

On débutera ce mémoire par des généralités sur les matériaux magnétiques, tout en rappelant les notions de moment, de magnétisation et d'anisotropie magnétique.

La suite du manuscrit sera consacré aux calculs ab-initio, on débutera par les propriétés structurales, électroniques et magnétiques du Fer et du Cobalt massifs avant d'entamer l'étude sur les superéseaux Fe/Co (001). On s'intéressera en particulier au calcul de l'Energie d'Anisotropie Magnétique et de son évolution en fonction de l'épaisseur des plans des couches de Fer et de Cobalt.

Chapitre I

MATÉRIAUX MAGNÉTIQUES

1.1 Généralités

Un atome isolé est magnétique s'il est porteur d'un moment magnétique permanent représenté par un vecteur d'aimantation de module constant. Pour un cristal contenant plusieurs atomes magnétiques, et s'il n'existe pas d'interaction magnétique entre eux, les moments magnétiques seraient thermiquement désordonnés à toute température (ordre paramagnétique). Par contre, si interaction a lieu, en dessous d'une température critique T_c , le cristal sera magnétiquement ordonné. Ce cristal, d'un point de vue microscopique peut avoir une aimantation spontanée non-nul, il se trouve dans ce qu'on appelle un état ferromagnétique (ou ferrimagnétique). Cependant les moments magnétiques peuvent s'additionner pour donner aussi dans ce cas ordonné une aimantation globale nulle, l'ordre microscopique est alors dit anti-ferromagnétique [4].

L'ordre ferromagnétique est défini par un ensemble de moments magnétiques ayant tous la même amplitude et la même direction. Si les moments locaux ne sont pas tous orientés dans la même direction que celle de l'aimantation spontanée, on parle d'ordre ferrimagnétique (figure 1.1.1). Les trois ordres dits magnétiquement ordonnés le sont uniquement si la température du système est inférieure à une température critique.

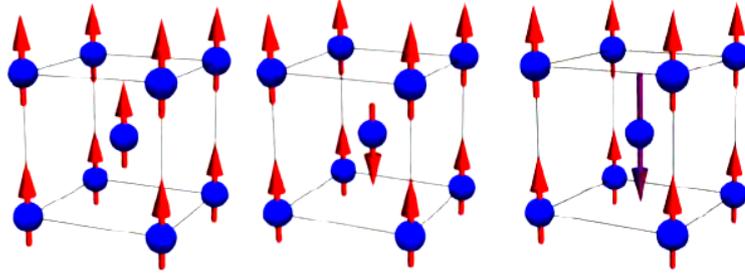


FIG. 1.1.1: Illustration de l'ordre magnétique dans une maille cubique centrée. de gauche à droite : Ferromagnétique, anti-ferromagnétique et ferri-magnétique [4].

1.2 Moment Magnétique

Le magnétisme a son origine dans le moment magnétique intrinsèque de l'électron (le moment magnétique de spin) et le mouvement des électrons autour du noyau atomique (le moment magnétique orbital). La mécanique quantique impose au spin de l'électron deux projections possibles le long d'une certaine direction. Ces états quantiques sont représentés par un 'état haut' ou 'état bas'. Tous les atomes libres avec des états électroniques non remplis sont magnétiques et chaque électron non apparié contribue avec 1 magnéton de Bohr (μ_B) au spin total du moment magnétique. Pour des atomes isolés, il y a aussi une contribution de moment orbital angulaire des électrons au moment magnétique total. Cependant, dans les métaux de transition (3d), il a été montré expérimentalement que le moment magnétique orbital est approximativement nul [5]. Les métaux de transition Fer et Cobalt ont des configurations électroniques respectives $[\text{Ar}] 3d^6 4s^2$ et $[\text{Ar}] 3d^7 4s^2$. Ceci donne, si la règle de Hund est appliquée, des moments magnétiques de $4\mu_B$ et $3\mu_B$, respectivement pour les atomes libres de Fe et de Co. D'autre part, en volume les électrons de la couche externe deviennent des électrons libres, le Fe et le Co restent toujours magnétique avec un moment magnétique moyen par atome beaucoup plus bas, $2.2 \mu_B$ et $1.7\mu_B$ respectivement.

1.2.1 Moment magnétique orbital

On considère un électron qui gravite autour du noyau avec une vitesse linéaire \vec{v} sur une trajectoire circulaire de rayon r , figure (1.2.1).

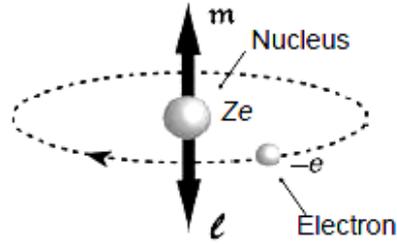


FIG. 1.2.1: Atome de Bohr, l'électron décrit une orbite circulaire où le moment angulaire \vec{l} et le moment magnétique orbital \vec{m} ont des directions opposées [6].

Le moment angulaire de cet électron est donné par :

$$\vec{l} = \vec{r} \wedge m_e \vec{v} = m_e r^2 \omega \vec{n} \quad (1.2.1)$$

Où \vec{n} est la normal au plan contenant l'orbital et ω la vitesse de rotation de l'électron autour du noyau.

L'orbital est assimilable à une boucle de courant dont le moment dipolaire magnétique est donné par :

$$\vec{m} = IS \vec{n} \quad (1.2.2)$$

Avec $S = \pi r^2$ et I l'intensité du courant donnée par :

$$I = \frac{dq}{dt} = -\frac{e}{T} \quad (1.2.3)$$

Avec la période $T = 2\pi/\omega$, d'où $I = -\frac{e\omega}{2\pi}$

Le moment magnétique orbital sera donné par :

$$\vec{m} = -\frac{e}{2} \omega r^2 \vec{n} \quad (1.2.4)$$

Ainsi on peut trouver une relation entre \vec{m} et \vec{l} , $\vec{m} = \gamma \vec{l}$

Une relation valable même pour les atomes poly-électroniques. Où $\gamma = e/(2m_e)$ est appelé le rapport gyromagnétique.

L'électron ne peut passer que d'un niveau à un autre en absorbant ou en émettant l'énergie correspondant à la différence des énergies des deux niveaux. Pour tenir

compte de ce fait Bohr a émet une hypothèse selon la quelle le moment angulaire est proportionnel à \hbar

$$l = n\hbar = \frac{nh}{2\pi} \quad (1.2.5)$$

Où h représente la constante de Planck.

$$m = \gamma l \Rightarrow m = -\frac{e}{2m_e} n \frac{h}{2\pi} \Rightarrow m = -n \frac{eh}{4\pi m_e} \Rightarrow m = -n\mu_B \quad (1.2.6)$$

μ_B est le moment magnétique élémentaire dit magnéton de Bohr, de valeur $\mu_B = 9,273.10^{-24} A.m^2$.

1.2.2 Moment magnétique de spin

L'électron possède un moment angulaire intrinsèque de spin avec un nombre quantique $s = \frac{1}{2}$. Le spin de l'électron est une propriété intrinsèque comme la charge ou la masse.

Les particules possédant un spin demi-entier s'appellent fermions, celles ayant un spin entier s'appellent bosons, tous les fermions ont un spin et un moment magnétique associé. Le moment magnétique de spin est donné par :

$$\vec{\mu}_s = -g \frac{e}{2m} \vec{S} \quad (1.2.7)$$

Où g représente le facteur de Lande de valeur proche de 2 et \vec{S} le moment angulaire de spin

$$\text{Avec } \vec{S} = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$$

suivant z : $S_z = m_s\hbar$ où $m_s = \pm\frac{1}{2}$ représente le nombre quantique de spin magnétique.

Le moment magnétique de spin devient :

$$\mu_s = -\frac{e}{m_e} m_s \hbar \quad (1.2.8)$$

1.3 Magnétisation et anisotropie magnétique

1.3.1 Magnétisation

La magnétisation se produit quand les moments magnétiques des atomes s'alignent d'une manière régulière, elle est définie par le moment magnétique par unité de volume. Dans la plupart des matériaux, les moments magnétiques sont séparés dans plusieurs domaines magnétiques, et orientés aléatoirement quand il n'y a aucun champ magnétique appliqué. Quand un champ magnétique est présent, les domaines magnétiques s'alignent progressivement avec la direction du champ. En présence d'un champ magnétique pour différents matériaux le degré de l'ordre magnétique varie. Cependant, les matériaux ferromagnétiques présentent des moments magnétiques spontanés ou une apparition de moments magnétiques alignés en absence d'un champ appliqué.

1.3.2 Anisotropie magnétique

1.3.2.1 Introduction

L'interaction spin-orbit (SO) est un effet relativiste, son intensité augmente avec l'augmentation du numéro atomique Z . Sa contribution est négligeable dans le massif des éléments légers, par contre son impact est important pour les éléments lourds à savoir les éléments de transition possédant la couche 3d. Le couplage SO peut produire de l'anisotropie magnétique de 10 à 100 μeV pour le bcc et fcc de Fe, Ni et Co respectivement [3]. C'est le mécanisme responsable de la stabilisation des directions suivant l'axe de l'aimantation facile et difficile. Les matériaux ferromagnétiques jouent un rôle clé dans l'industrie et la technologie, leur utilité se détermine par rapport à une propriété très importante dite « anisotropie magnétique », qui signifie la dépendance de l'énergie et de l'aimantation de la direction considérée. Cependant, l'énergie d'anisotropie magnétique MAE (Magnetic Anisotropy Energy) est définie comme la dépendance de l'énergie de la direction de l'aimantation.

1.3.2.2 Couplage spin orbite

Généralement, un électron possède des moments angulaires de spin et orbitale. Ils peuvent être couplés par interaction spin-orbite pour créer un moment angulaire électronique total j , avec un moment magnétique résultant :

$$m = \gamma j \quad (1.3.1)$$

Vu de l'électron, le noyau tourne autour avec la vitesse v (voir figure 1.3.1). Le mouvement est équivalent à une boucle de courant $I_n = Zev/2\pi r$ qui crée un champ magnétique $\mu_0 I_n/2r$ au centre. L'interaction spin-orbite est dû à ce champ magnétique, $B_{so} = \mu_0 Zev/4\pi r^2$, qui agit sur le moment magnétique intrinsèque de l'électron. L'énergie d'interaction $\varepsilon_{so} = -\mu_B B_{so}$ peut être écrite approximativement en fonction du magnéton de Bohr et du rayon Bohr, avec $r \cong a_0/Z$ pour un électron interne et $r = na_0$ pour un électron externe, et $m_e v r \approx \hbar$, dans ce cas :

$$\varepsilon_{so} = -\frac{\mu_0 \mu_B^2 Z^4}{4\pi a_0^3} \quad (1.3.2)$$

La valeur de ε_{so} devient beaucoup plus importante pour les éléments lourds.

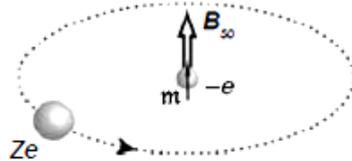


Fig. 1.3.1: Interaction spin-orbite [6].

1.3.2.3 Energie d'anisotropie magnétique

L'anisotropie magnétique est un phénomène naturel dans les cristaux magnétiques massifs dont l'aimantation permanente s'oriente dans une direction préférentielle, appelée axe de facile aimantation, puisque favorisée énergétiquement.

Pour modifier la direction de l'aimantation, il faut ainsi fournir une énergie via un champ magnétique extérieur, la différence d'énergie entre les directions de facile et de difficile aimantation est appelée énergie d'anisotropie magnétique (MAE). Dans un cristal magnétique cubique centré (cc), cubique (fcc) et hexagonal compact (hcp), différents axes d'aimantation existent comme le montre la figure (1.3.2).

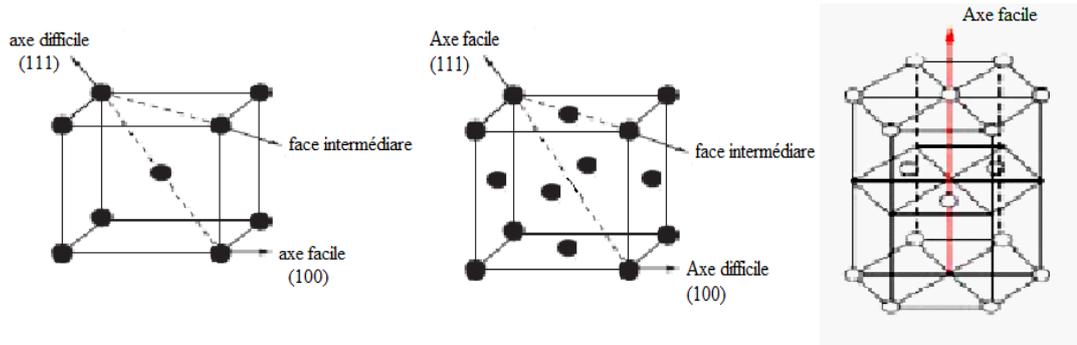


Fig. 1.3.2: Représentation schématique des différents axes d'aimantation.

L'existence de l'anisotropie magnétique dans les corps ferromagnétiques est prouvée par les cycles d'hystérésis, où on peut observer une nette différence des allures des courbes d'aimantation spontanée suivant des directions différentes, en particulier suivant les directions de facile et difficile aimantation figure (1.3.3).

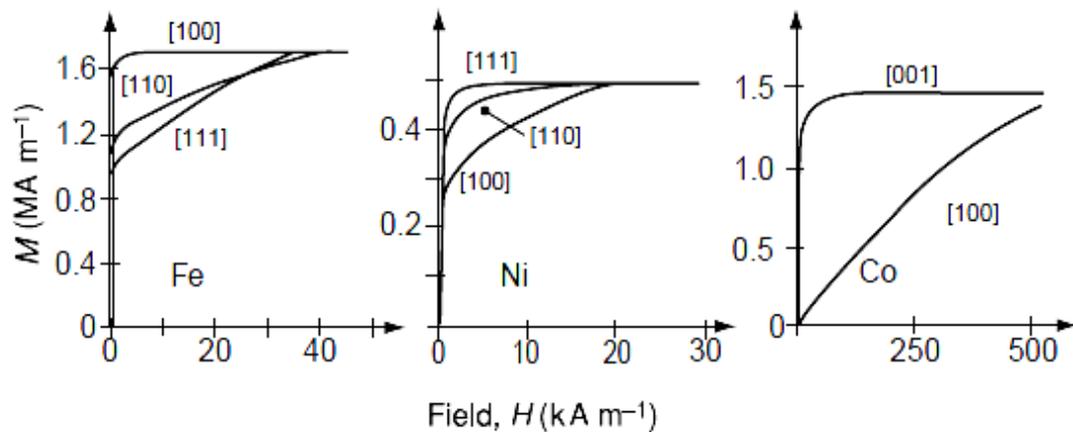


FIG. 1.3.3: Aimantation en fonction du champ appliqué pour le Fer (bcc), le Nickel (fcc) et le Cobalt (hcp) d'après [6].

L'effet le plus spectaculaire est l'anisotropie magnétique perpendiculaire favorisant un axe d'aimantation perpendiculaire au plan de la couche magnétique en dessous d'une épaisseur critique. La figure (1.3.4) illustre ce phénomène en décrivant l'orientation des moments magnétiques dans un superréseau et dans une couche relativement épaisse. Dans le premier cas, correspondant à des couches magnétiques composées d'un seul plan atomique, les moments magnétiques des atomes sont orientés perpendiculairement aux interfaces alors que, pour la couche plus épaisse, l'aimantation est dans le plan de la couche [7].

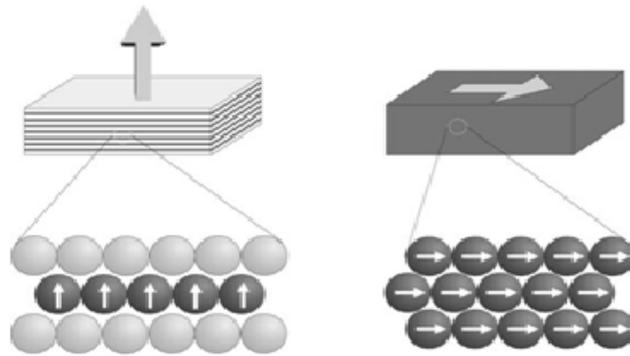


FIG. **1.3.4:** Illustration schématique de l'orientation des moments magnétiques dans des couches magnétiques. Dans un superréseau (à gauche) et dans une couche magnétique épaisse (à droite) [7].

1.3.3 La MAE selon le model de Néel

Un modèle, relativement simple de l'anisotropie, valable au moins pour les métaux de transition a été proposé par Louis Néel (1957). Il proposa d'abord une approximation commode pour calculer l'énergie d'un solide en fonction d'un nombre restreint de paramètres et d'écrire celle ci comme la somme d'énergie de paires. Ces modèles sont très utiles pour décrire les propriétés des gaz rares ou pour comprendre les phénomènes d'ordre et désordre dans les alliages [8].

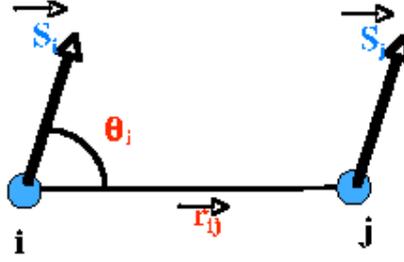


Fig. 1.3.5: Schéma du modèle de Néel.

Il considère donc une paire d'atomes i et j (voir figure (1.3.5)) dont les moments magnétiques sont couplés par, l'énergie d'Heisenberg (qui est aussi sous la forme d'une énergie de paires). La symétrie de cette paire d'atome est axiale dans ce cas l'énergie d'anisotropie ne peut dépendre que l'angle θ_{ij} entre les moments magnétiques et le vecteur joignant les deux atomes, r_{ij} la distance entre ces atomes, il écrit donc :

$$E_{An} = W_{an}(\vec{r}_{ij}) = g_0(r_{ij}) + g_2(r_{ij})P_2^0(\cos \theta_{ij}) + g_4(r_{ij})P_4^0(\cos \theta_{ij}) + \dots \quad (1.3.3)$$

Ou plutôt, en modifiant légèrement les polynômes de Legendre :

$$E_{An} = W_{an}(\vec{r}_{ij}) = g_0(r_{ij}) + g_2(r_{ij})(\cos^2 \theta_{ij} - 1/3) + g_4(r_{ij})(\cos^4 \theta_{ij} - 6/7 \cos^2 \theta_{ij} + 3/35) + \dots \quad (1.3.4)$$

L'énergie d'anisotropie magnétique sur le site i étant donnée par la somme de toutes les énergies de paires de la forme (1.3.4). Pour rendre les calculs plus explicites on écrit :

$$\cos \theta_{ij} = \alpha_1 \beta_1^{ij} + \alpha_2 \beta_2^{ij} + \alpha_3 \beta_3^{ij}$$

Ou les α_n sont les cosinus directeurs de l'aimantation dans le système d'axes lié au cristal que l'on a choisi et les β_n^{ij} sont les cosinus directeurs du vecteur r_{ij} .

- Calcul de l'énergie d'anisotropie d'ordre 2 :

L'énergie du second ordre s'écrit donc :

$$E_{An}(i) = \sum_j g_2(r_{ij}) \left(\cos^2 \theta_{ij} - \frac{1}{3} \right)$$

Soit :

$$E_{An}(i) = \sum_j g_2(r_{ij}) \left(\left(\sum_n \alpha_n^2 (\beta_n^{ij})^2 + 2 \sum_{n,m} \alpha_n \beta_n^{ij} \alpha_m \beta_m^{ij} \right) - \frac{1}{3} \right) \quad (1.3.5)$$

Le terme : $\sum_j g_2(r_{ij}) \left(\sum_{n,m} \alpha_n \beta_n^{ij} \alpha_m \beta_m^{ij} \right)$ est nul pour un cristal contenant des centres de symétrie et il reste donc :

$$E_{An}(i) = \sum_j g_2(r_{ij}) \sum_n \alpha_n^2 \left((\beta_n^{ij})^2 - \frac{1}{3} \right) \quad (1.3.6)$$

Louis Néel a supposé que les fonctions $g_2(r_{ij})$ décroissent vite avec la distance et donc il suffit de calculer les sommes (1.3.6) sur les premiers voisins. Dans le cas du cubique simple, le calcul est direct puisque :

$$E_{An}(i) = \sum_j g_2(r_{ij}) \sum_n \alpha_n^2 \left((\beta_n^{ij})^2 - \frac{1}{3} \right) = (\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2) g_2(\alpha) (2 - 2) = 0 \quad (1.3.7)$$

Dans le cas cubique centré et du cubique à face centrée, le calcul est analogue. On a donc une anisotropie d'ordre 4 pour les réseaux cubiques.

-Energie d'anisotropie d'ordre 4 :

Le terme d'ordre 4 s'écrit :

$$E_{An}(i) = \sum_j g_2(r_{ij}) \left(\cos^2 \theta_{ij} - \frac{6}{7} \cos^2 \theta_{ij} + \frac{3}{35} \right) \quad (1.3.8)$$

Et en utilisant les cosinus directeur comme plus haut, avec les symétries du cubes (qui éliminent immédiatement les puissances impaires) :

$$E_{An}(i) = g_4(d) \left(\sum_n \alpha_n^4 \sum_j (\beta_n^{ij})^4 + \sum_{n,m} \alpha_n^2 \alpha_m^2 \sum_j (\beta_m^{ij})^2 (\beta_n^{ij})^2 - \frac{6}{7} \sum_n \alpha_n^2 \sum_j (\beta_n^{ij})^2 + \frac{3}{35} \right) \quad (1.3.9)$$

Dans le cas d'un cristal cubique, $S_n = \sum_j (\beta_m^{ij})^2 = S$ est indépendante de n et le dernier terme s'écrit donc : $-\frac{6}{7}S \sum_n \alpha_n^2 = -\frac{6}{7}S$ est une constante. Le premier contient $\sum_j (\beta_n^{ij})^4$ qui est également indépendant de n peut s'écrire :

$$\begin{aligned} \sum_n \alpha_n^4 \sum_j (\beta_n^{ij})^4 &= K(\alpha_1^4 + \alpha_2^4 + \alpha_3^4) = K(\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2)^2 - 2K(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_1^2\alpha_3^2) \\ &= K - 2K(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_1^2\alpha_3^2) \end{aligned} \quad (1.3.10)$$

Et comme la somme $\sum_j (\beta_m^{ij})^2 (\beta_n^{ij})^2$ est également indépendante de n et m en symétrie cubique, l'énergie d'anisotropie au quatrième ordre s'écrit simplement :

$$E_{An} = K_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_1^2\alpha_3^2) + cste \quad (1.3.11)$$

En poussant le développement jusqu'à l'ordre 6 on trouve :

$$E_{An} = K_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_1^2\alpha_3^2) + K_2\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2 \quad (1.3.12)$$

Si on exprime cette formule en fonction des angles on obtient :

$$E_{An} = K_1 \sin^2 \theta (\cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi) + K_2 \sin^4 \theta \cos^2 \theta \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi \quad (1.3.13)$$

On remarque sur ces deux formules que les trois axes du cube sont parfaitement équivalents. L'énergie correspondant à (1.3.12) est null ($E=0$) pour $\alpha_1=1$, et $\alpha_2=\alpha_3=0$ (les axes du cube).

et égale $E = \frac{1}{3}K_1 + \frac{1}{27}K_2 + \dots$ pour $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}$ (la grande diagonale du cube).

Si K_1 et K_2 sont positifs, les directions faciles seront donc les directions (100) (axes faciles selon les arêtes du cube). Si K_1 et K_2 sont négatifs, la direction facile sera une direction (111) (grande diagonale du cube). Dans le Fer $K_1 = 4,7210^4 J/m^3$ et $K_2 = 0,07510^4 J/m^3$ l'énergie vaut donc 0 pour les arêtes et $1,5710^4 J/m^3$ pour

la grande diagonale, les axes facile sont donc parallèles aux arêtes du cube. Pour le nickel on a $K_1 = -5,710^3 J/m^3$ et $K_2 = -2,310^3 J/m^3$, la direction de facile aimantation sera la grande diagonale. On remarque que ces termes du quatrième ordre sont nettement plus petits que les termes du second ordre dans le cas du cobalt [8].

Dans la figure (1.3.6) on donne la représentation polaire de l'énergie d'anisotropie d'une symétrie cubique pour un cas simple quand $K_2 = 0$ et K_1 positif ou négatif pour une direction d'aimantation contenue dans le plan, ce plan contient les trois directions principales. Comme l'anisotropie est définie à un terme constant, K_0 est ajouté à l'anisotropie pour faciliter la présentation graphique.

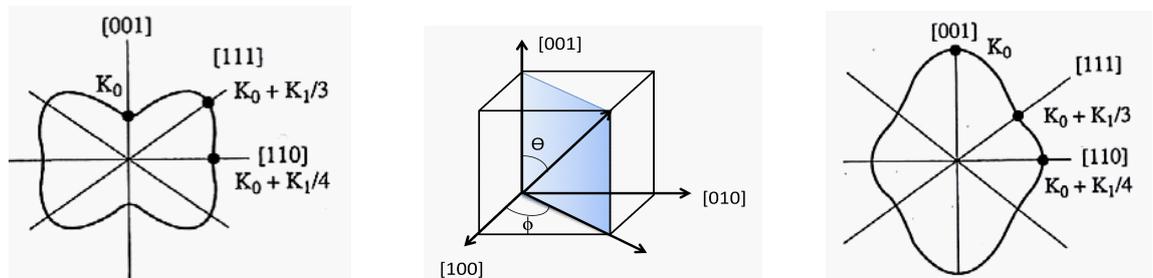


FIG. 1.3.6: Représentation polaire de l'énergie d'anisotropie . $K_1 > 0$ (à gauche), $K_1 < 0$ (à droite) [9].

Chapitre II

ENERGIE D'ANISOTROPIE MAGNÉTIQUE DES SUPERÉSEAUX Fe/Co (001)

2.1 *Détails de calcul et code utilisé*

Le code utilisé pour les calculs est le logiciel Wien2k. Ce code émane de travaux de l'Institut viennois de chimie des matériaux, travaux coordonnés depuis près de 25 ans par Karlheinz Schwarz et Peter Blaha [10]. Il utilise un potentiel complet linéarisé et des ondes planes augmentées (FP-LAPW) comme ensemble de base pour résoudre les équations de Kohn-Sham. Cette méthode est dite tout-électron, car tous les électrons sont considérés dans les calculs, ainsi il n'y a pas d'approximation sur le potentiel autour des noyaux. Dans cette technique, la maille élémentaire est divisée en deux régions. Une région au voisinage du noyau atomique ou sphères atomiques dites sphères Muffin Tin (R_{MT}) qui sont centrées autour des noyaux dans les quelles le potentiel et les fonctions d'ondes sont décrites par des fonctions atomiques sphériques. La deuxième région est la région interstitielle entre les atomes, elle est décrite par des ondes planes. Le calcul est basé sur l'énergie de coupure (cut-off) qui sépare les états du coeur de ceux de valence et le produit sans dimension $R_{MT}K_{max}$, qui représente l'énergie de coupure des ondes planes de la zone interstitielle, où K_{max} représente la valeur maximale du vecteur d'onde de la base utilisée dans la description de l'ensemble du système des électrons présents dans l'espace entre les sphères atomiques.

Le package Wien2k est écrit en FORTRAN90 et fonctionne sous un système d'exploitation LINUX. Il est constitué de plusieurs programmes indépendants basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Le terme d'échange-corrélation figure dans le code Wien sous la version LDA de Perdew et Wang

(PW92) [11] et GGA de Perdew, Burke et Ernzerhof (PBE 96) [12].

Plusieurs propriétés des matériaux peuvent être calculées par le biais du logiciel Wien2k, parmi les quelles on peut citer :

- Les bandes d'énergie, la densité d'états.
- Densités d'électrons et de spin, et facteurs de structure des rayons X.
- L'énergie totale, les forces atomiques, les géométries d'équilibre, les optimisations de structure, dynamique moléculaire.
- Calcul des Phonons.
- Gradients de champ électrique, les déplacements isomériques.
- Polarisation des spins (structures ferro ou antiferromagnétiques), le couplage spin-orbite.
- Les spectres d'émission et d'absorption des rayons X.
- Les propriétés optiques.
- Surfaces de Fermi.

Nous avons utilisé la méthode ab initio dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) sur une base d'ondes (Full Potential Linearized Augmented Plane Waves ou FP-LAPW) implémentée dans le code Wien2k où le terme d'échange et corrélation est de type GGA (PBE96) pour le calcul des paramètres d'équilibre et de la MAE. Pour résoudre l'équation d'état dans les différentes phases structurales des matériaux étudiés, nous avons utilisé des rayons RMT constants et propres à chaque type d'atome. La valeur du rayon a été fixée à 2.0 u.a. pour Le Fer et le Cobalt. L'énergie de coupure des ondes planes de la zone interstitielle est choisie de sorte que $R_{MT}K_{max} = 7$. L'échantillonnage de la zone de Brillouin a été effectué avec un nombre total de 200 points k dans le cas du calcul des paramètres d'équilibre, et 40000 point k dans le cas du calcul de la MAE. L'énergie de coupure (cut-off) a été prise égale à -6Ry, la précision de calcul sur l'énergie étant de 0,0001 Ry. La procédure d'autocoherence du calcul de la densité de charge de l'état fondamental du système est représentée par l'organigramme de la figure (2.1.1).

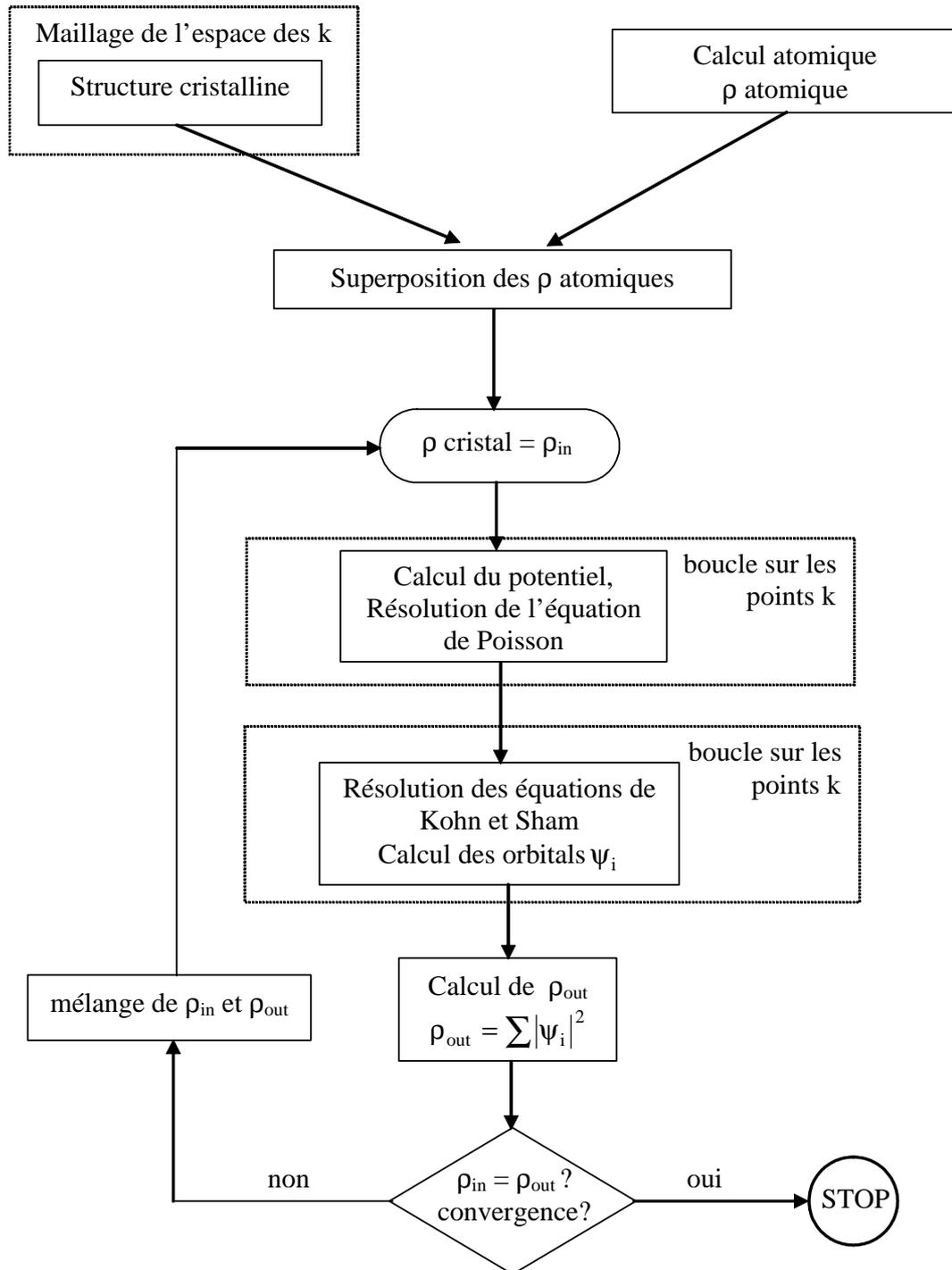


FIG. 2.1.1: Procédure d'autocohérence du calcul de la densité de charge de l'état fondamental du système.

2.2 *Fer et Cobalt massifs*

Le Fer (numéro atomique $Z=26$) existe à l'état massif dans plusieurs types d'empilement : une structure cubique centrée (cc) ferromagnétique, stable en dessous de 1184 K (911°C) ($Fe\alpha$), une structure cubique à faces centrées (cfc) antiferromagnétique, stable entre 1184 K (911°C) et 1665 K (1392°C) ($Fe\gamma$), une structure cc non magnétique au dessus de 1575 K (1302°C) ($Fe\delta$) [13].

Le cobalt (numéro atomique $Z=27$) existe à l'état massif dans deux types d'empilements : une structure hexagonale compacte (hc) en dessous de 688K (425°C) et une structure cfc à haute température [13].

2.2.1 Propriétés structurales, électroniques et magnétiques

Tous les calculs qui vont suivre pour le Fer et le Cobalt constituent une étape indispensable pour l'étude des propriétés électroniques et magnétiques des superréseaux dans la suite du chapitre.

2.2.1.1 Paramètres d'équilibre

Notre étude a pour but de déterminer la phase la plus stable et de calculer par la méthode (FP-LAPW) les propriétés structurales (pas de réseau et module de rigidité) à l'équilibre de la structure cubique centrée des deux composés Fer et Cobalt. La figure (2.2.1) représente la structure atomique cubique centrée (cc) utilisée dans les calculs.

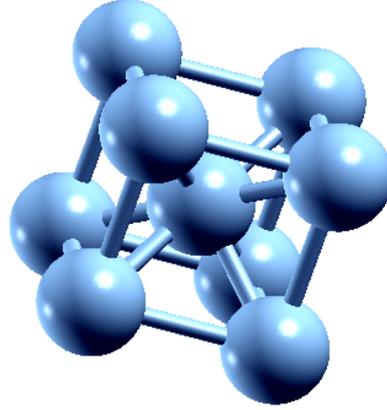


Fig. 2.2.1: Structure atomique cubique centré.

Les paramètres de réseau à l'équilibre sont calculés en ajustant l'énergie totale en fonction du volume en utilisant l'équation de Murnaghan [14] donnée par :

$$E(V) = E_o - \frac{(B_o V_o)}{B'_o - 1} + \frac{B_o V}{B'_o} + \left(\frac{(V_o/V)^{B_o}}{B'_o - 1} + 1 \right) \quad (2.2.1)$$

V_o : le volume d'équilibre à l'état fondamental.

B_o : module de rigidité et B'_o sa dérivée première.

Avec

$$V = V_o \left(1 + \frac{B'_o P}{B_o} \right)^{-\frac{1}{B'_o}} \quad (2.2.2)$$

Le module de rigidité B_o est déterminé par :

$$B_o = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (2.2.3)$$

L'optimisation du paramètre de maille du Cobalt et du Fer pour les deux états, magnétique et non magnétique est représentée par la figure (2.2.2). Le minimum de ces courbes correspond au paramètre de maille à l'équilibre de la structure cubique centré du Cobalt et du Fer. On remarque que la phase de plus basse énergie est la phase magnétique pour les deux matériaux, et donc la phase la plus stable. La différence d'énergie entre les deux phases est de l'ordre de 0.40 eV pour les deux matériaux.

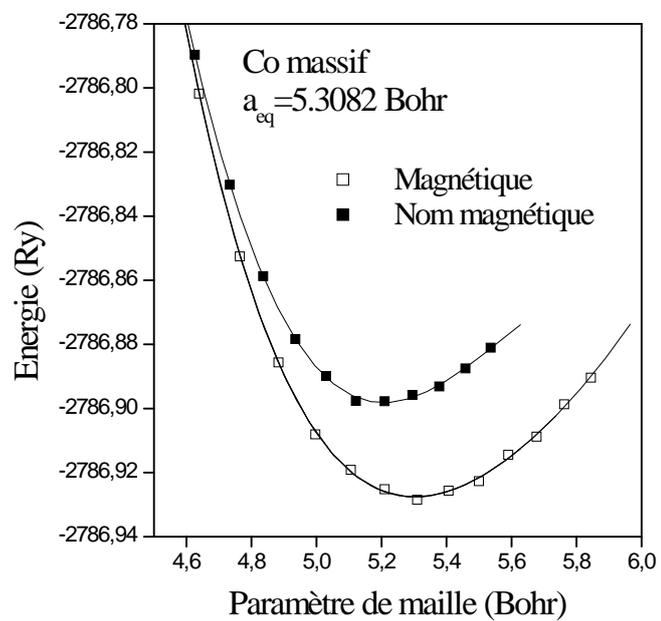
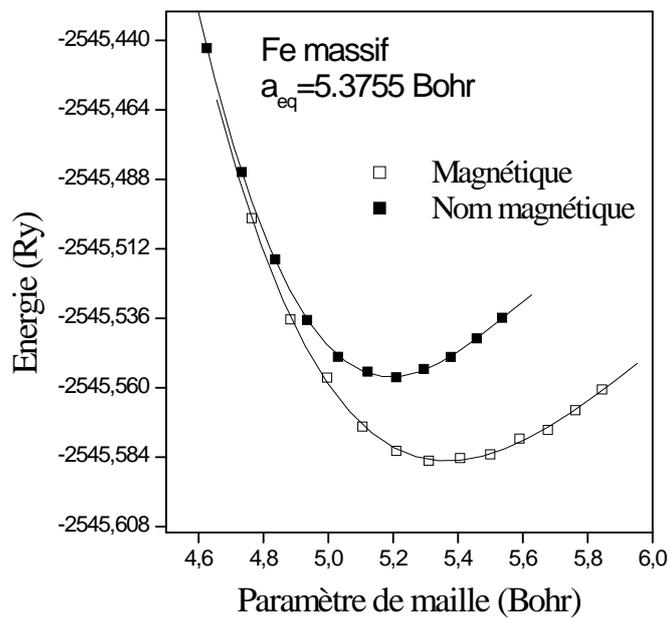


FIG. 2.2.2: Energie totale du Fer et du cobalt (cc) en fonction du paramètre de maille.

Les valeurs des paramètres structuraux à l'équilibre pour le Fer et le Cobalt sont regroupées dans le tableau (2.2.1). On remarque que nos résultats sont en bon accord avec les valeurs déjà trouvées.

	Fer		Co	
	$a_{\acute{e}q}(Bohr)$	B(GPa)	$a_{\acute{e}q}(Bohr)$	B(GPa)
Notre calcul	5.375	174.5417	5.308	212.3528
Autre calcul	5.227 ^a		5.18 ^a	
Expérimental	5.416 ^a		5.32 ^a	

^a[13]

TAB. **2.2.1:** Paramètres de maille de Fer et de Cobalt comparés aux résultats théoriques et expérimentaux.

2.2.1.2 Structures de bandes

La structure de bande, le long des lignes de haute symétrie dans la zone de Brillouin, pour la structure cubique centrée des matériaux Fe et Co est représentée par la figure (2.2.3) . Le caractère métallique est bien clair pour les deux directions de spin et pour les deux matériaux.

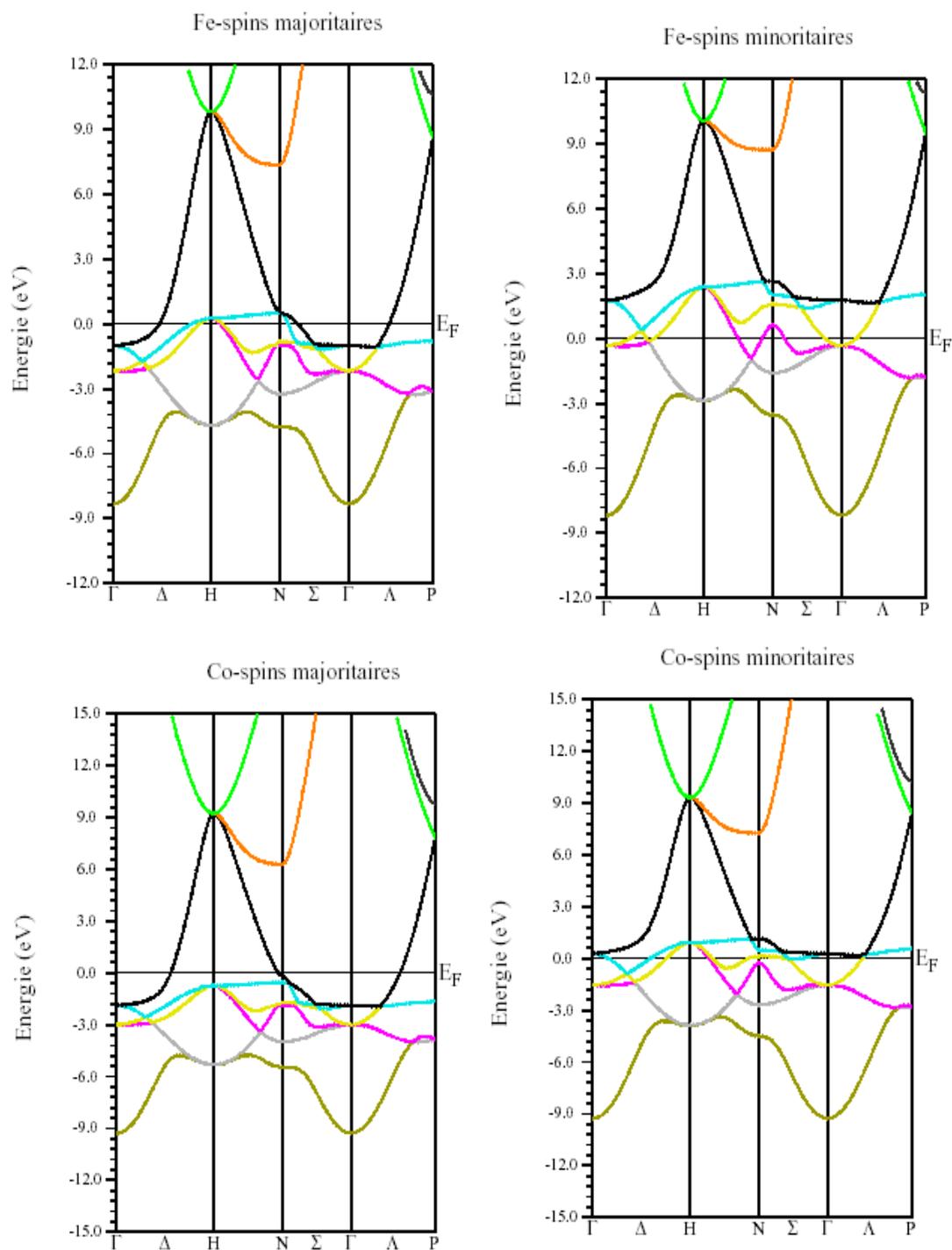


FIG. 2.2.3: Structure de bandes des spins majoritaires et minoritaires du Fer et du Cobalt.

2.2.1.3 Densité d'états

Les densités d'états (DOS : Density of states) des deux types de spins (spin up et spin down) calculées pour le Fer et le Cobalt sont représentées sur la figure (2.2.4). Le caractère métallique est clairement visible pour les deux états de spin (up et down) et pour les deux matériaux. On remarque que les DOS calculées pour le Fer et le Co de structure cc sont très similaires mais le niveau de Fermi du Co est décalé vers les hautes énergies par rapport à celui du Fer, cela est dû à l'électron supplémentaire dans le cas du Cobalt. Ce résultat est en accord avec la littérature [15]. La DOS est dominée par un large pic proche du niveau de Fermi qui est responsable de la phase ferromagnétique stable de ces matériaux.

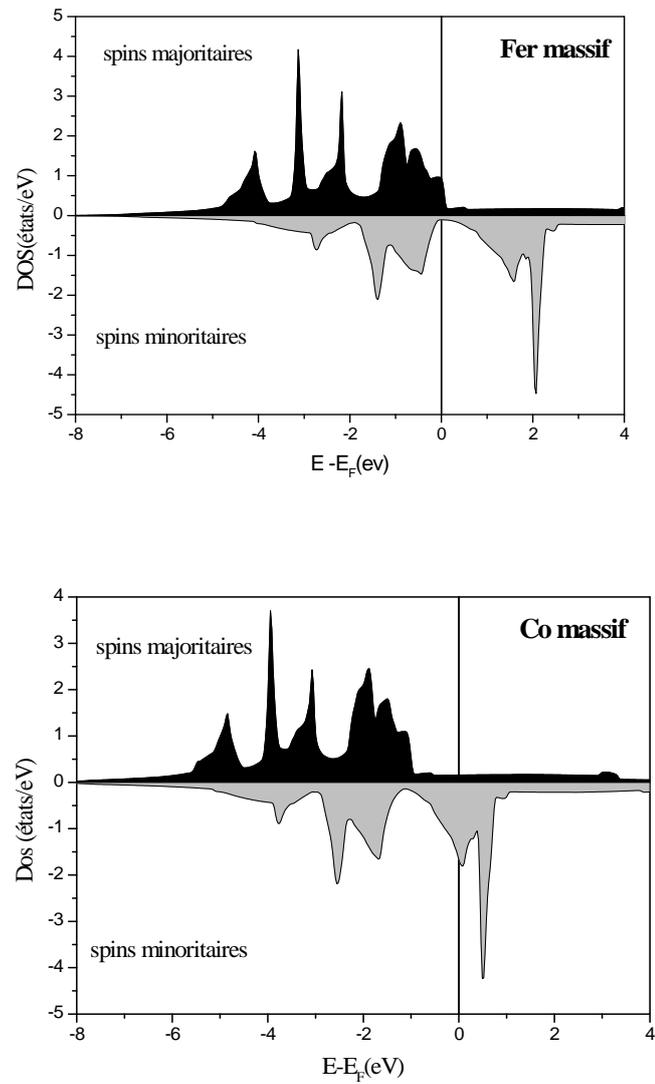


Fig. 2.2.4: DOS total du Fer et du Cobalt

2.2.1.4 *Moment magnétique*

Le moment magnétique correspond à la différence entre les populations de spin majoritaire et minoritaire à l'intérieur des sphères atomiques. Les moments magnétiques des atomes de Fer et de Cobalt mesurés expérimentalement [13] sont respectivement de $2,2 \mu_B/\text{atome}$ et $1.3-1.7 \mu_B/\text{atome}$. Dans la figure (2.2.5) on représente l'évolution du moment magnétique de spin dans les sphères atomiques de Fer et de cobalt, calculé en fonction du paramètre de maille. L'allure du moment magnétique du Cobalt est similaire à celle du Fer de structure cc. Nos calculs montrent que le moment magnétique de la phase ferromagnétique croît avec le paramètre de maille. Les valeurs calculées des moments magnétiques des atomes de Fer et de Cobalt sont regroupées dans le tableau (2.2.2). On remarque que nos résultats coïncident bien avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux .

	Moment magnétique (μ_B)	
	Fer	Co
Notre calcul	2.13	1.67
Autres calculs	$2.05^a, 2.2^b$	$1.62^a, 1.7^b$
Expérimental	2.2^a	$1.3-1.7^a$

^b [16], ^a[13].

Tab. 2.2.2: Moments magnétiques du Fer et du Cobalt.

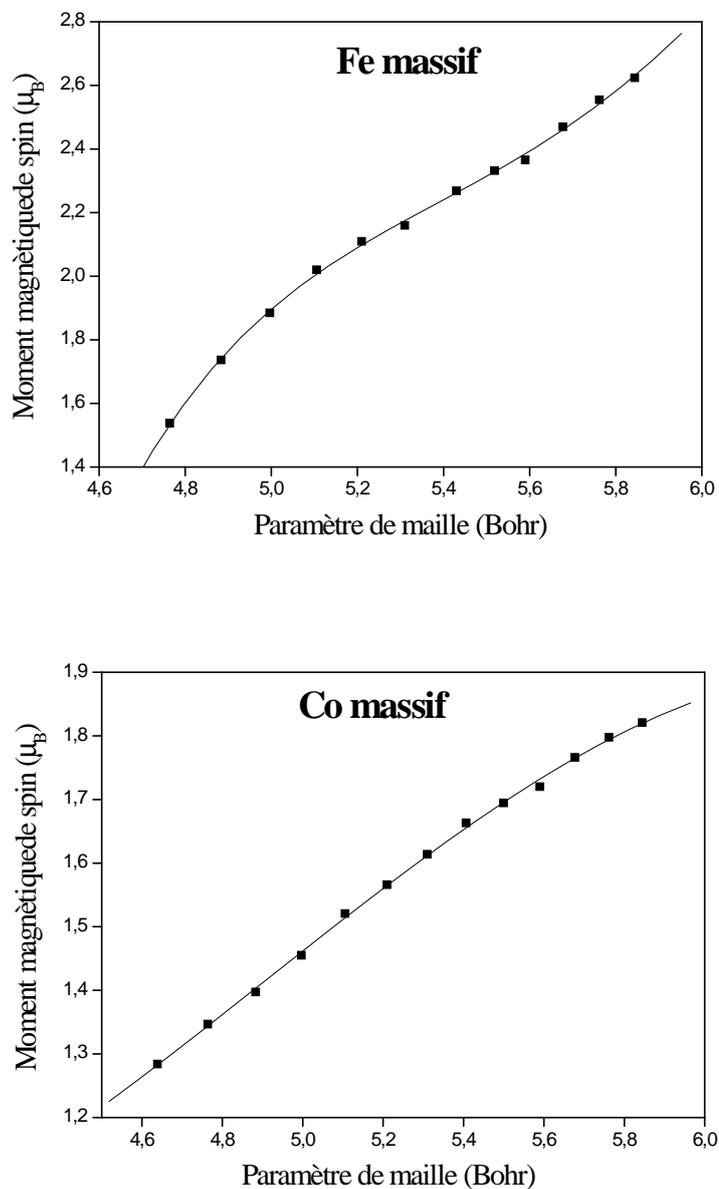


FIG. 2.2.5: Evolution du moment magnétique de spin du Fer et du Cobalt en fonction du paramètre de maille.

2.3 Superréseaux Fe/Co (001)

2.3.1 Introduction

Depuis le développement important des techniques de préparation sous ultra-vide et de caractérisation, l'étude des multicouches et superréseaux magnétiques a connu un essor considérable. Ces structures artificielles, qui sont utilisés principalement pour le stockage magnétique de l'information, sont obtenues en déposant alternativement et périodiquement des couches magnétiques et non magnétiques sur un substrat. Notre étude est basée sur un modèle aux multicouches de structure cubique centrée épitaxiée suivant l'axe [001].

Les multicouches étudiées sont assimilées à un superréseau parfait, réalisé par la déposition alternative des métaux magnétiques (A) formant une couche d'épaisseur x et des métaux non magnétiques (B) formant une couche d'épaisseur y . Dans le cas de la figure (2.3.1), le superréseau est noté A_3/B_2 .

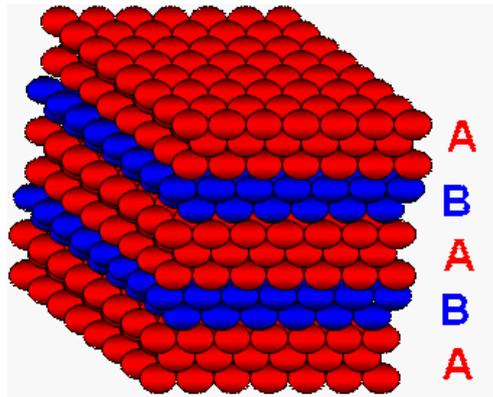


Fig. 2.3.1: Représentation schématique d'un superréseau (A_3/B_2).

2.3.2 Structures cristallines des superréseaux Fe/Co

Dans les calculs ab-initio des superréseaux Fe/Co (001), nous avons utilisé des modèles de structure atomique correspondant à la structure cristalline observée expérimentalement [10], il s'agit de structures périodiques, avec une période constituée d'une couche mince de Cobalt épitaxiée sur une couche mince de Fer dans la direction (001).

La période des supercellules utilisées pour le calcul de la structure électronique des superréseaux Fe/Co est constituée d'un certain nombre de plans atomiques de Fer et d'un certain nombre de plans atomiques de Cobalt. Tous les atomes d'un plan atomique sont équivalents ; les plans atomiques de Fer sont équivalents deux à deux par symétrie par rapport au centre de la couche de Fer. Il en est de même pour les plans atomiques de Cobalt. Un exemple parmi les supercellules utilisées dans les calculs est représenté sur la figure (2.3.2).

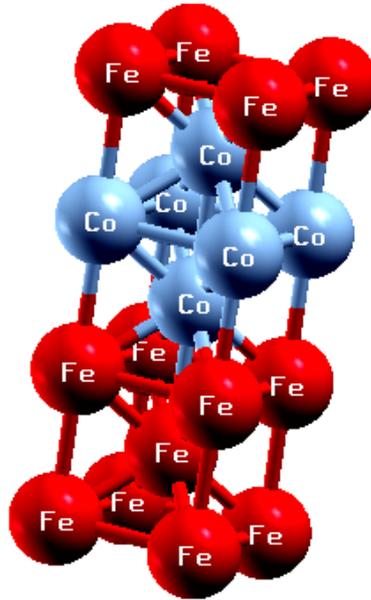


Fig. 2.3.2: Supercellule représentant 3 plans de Cobalt sur 3 plans de Fer.

2.3.3 Paramètres d'équilibre

On rappelle que les rayons des sphères atomiques (R_{MT}) ont été choisis égaux à 2.0 u.a pour les atomes de Fe et de Co respectivement et que de le calcul a été effectué d'une manière auto-cohérente avec 200 points k dans la zone réduite de Brillouin en phase cubique centrée. Les figures (2.3.3) et (2.3.4) représentent respectivement les variations de l'énergie de l'état fondamental de la cellule élémentaire des superréseaux Fe_nCo_1 et Fe_1Co_m ($n=m=1,3,5$) en fonction du paramètre de maille.

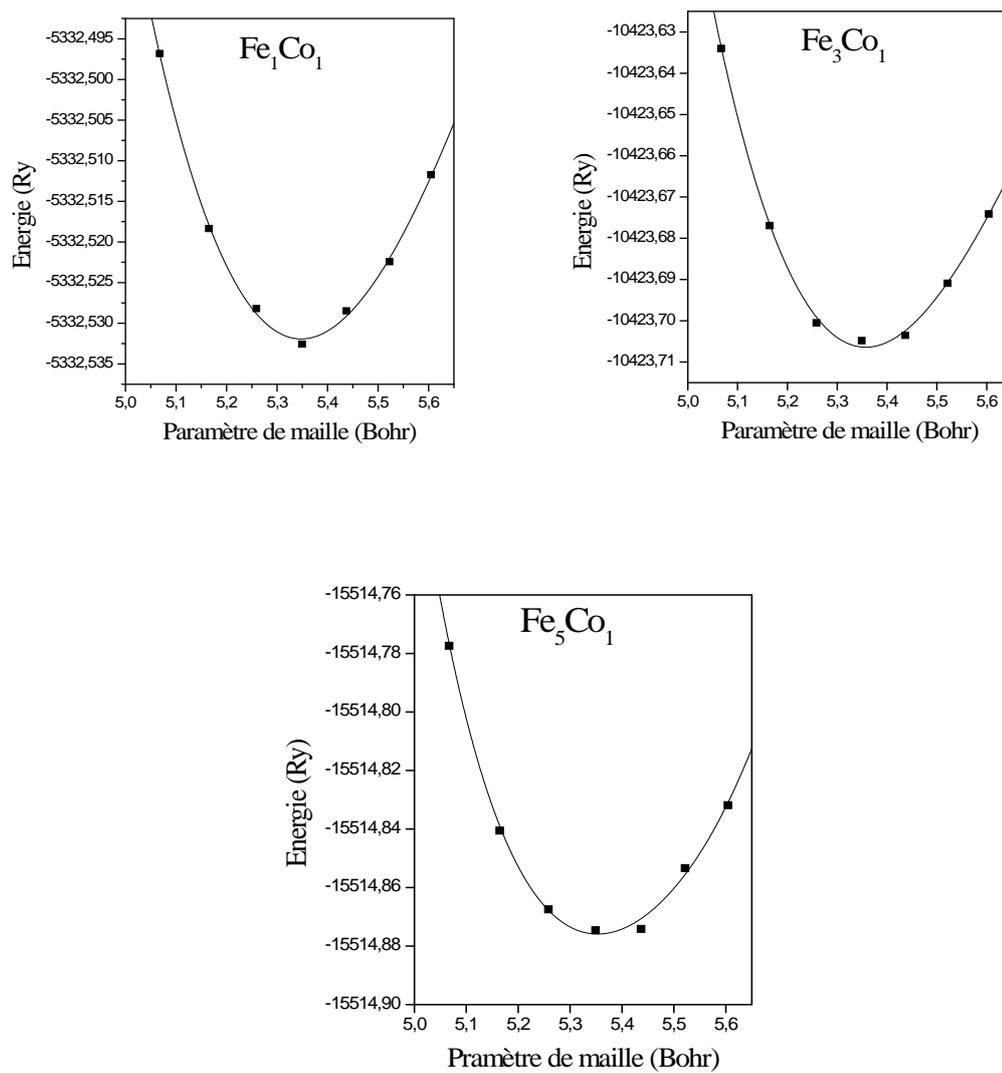


Fig. 2.3.3: Optimisation du paramètre de maille des superréseaux Fe_nCo₁.

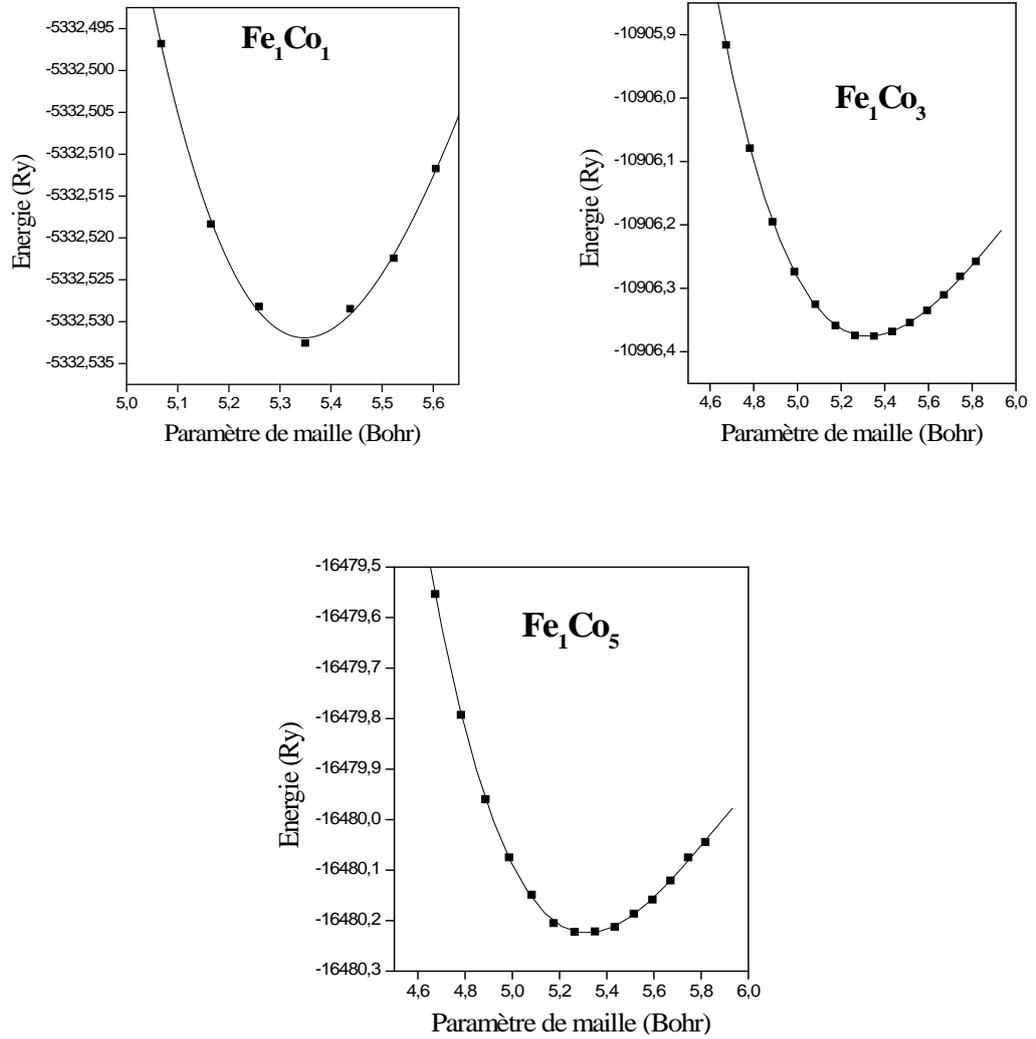


Fig. 2.3.4: Optimisation du paramètre de maille des superréseaux Fe_1Co_m .

Les valeurs du paramètre de maille et du module de rigidité des différents superréseaux sont regroupées dans le tableau (2.3.1).

Superréseau	$a_{\epsilon q}$ (Bohr)	B(GPa)
Fe_1Co_1	5.3481	213.572
Fe_3Co_1	5.3579	196.928
Fe_5Co_1	5.3504	180.151
Fe_3Co_3	5.357	195.126
Fe_1Co_3	5.335	203.529
Fe_1Co_5	5.329	203.944

Tab. 2.3.1: Paramètres de maille et module de rigidité des superréseaux Fe/Co.

En traçant le paramètre de maille à l'équilibre en fonction du nombre de plans atomiques de Fer et de Cobalt (figure (2.3.5)) , on remarque que dans le cas des superréseaux Fe_1Co_m le paramètre de maille diminue avec le nombre de plans de Co, il en est de même pour le module de rigidité. Les superréseaux Fe_nCo_1 présentent un comportement similaire pour le module de rigidité, par contre le paramètre de maille croît avec le nombre de plans de Fe.

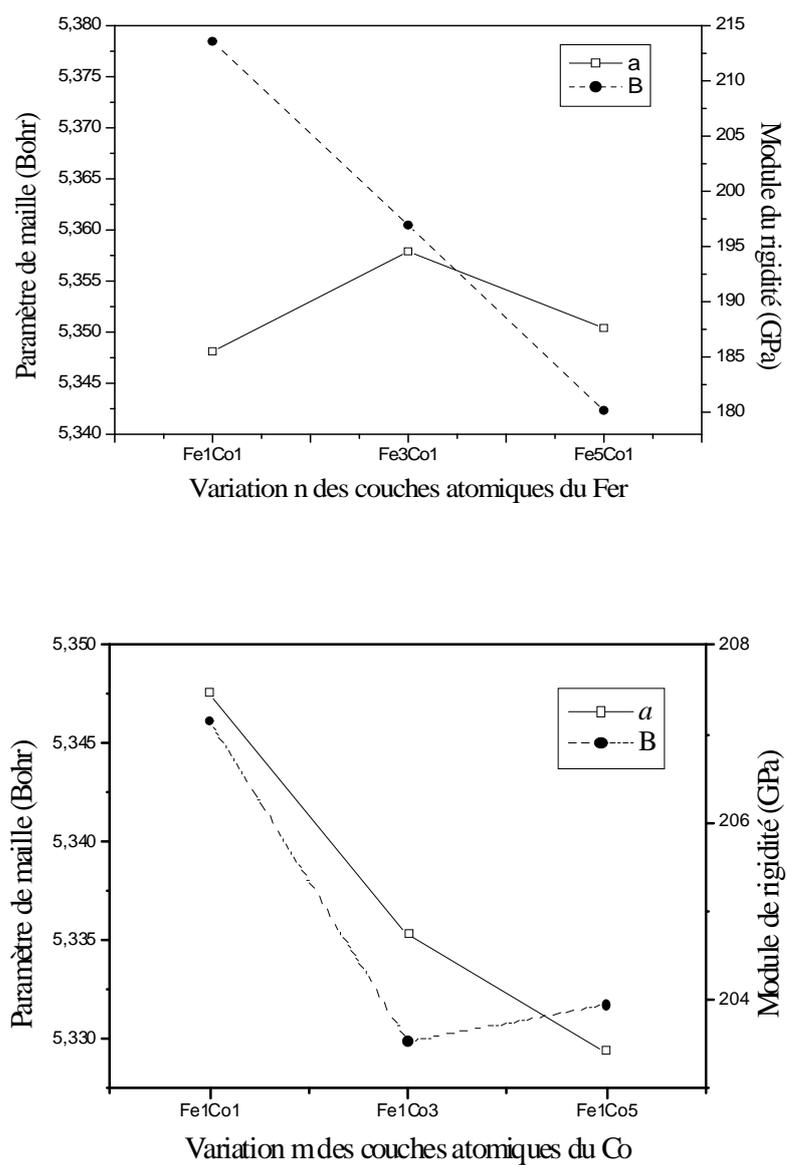


FIG. 2.3.5: Variation du paramètre de maille en fonction du nombre n de couches atomiques de Fer et de Cobalt.

2.3.4 Densité d'états

La densité d'états (DOS) est définie comme le nombre d'états d'énergie permise par unité d'énergie et unité de volume. Dans les figure (2.3.6) et (2.3.7) , nous présentons respectivement la DOS totale et partielle des spins majoritaires et minoritaires des superréseaux Fe_nCo_1 et Fe_1Co_m . Le mélange des états des atomes de Fer et de Cobalt suit la proportion des plans atomiques. Le niveau de Fermi se décale vers les basses énergies pour le superréseau Fe_nCo , par contre il se déplace vers les hautes énergies dans le cas du superréseau Fe_1Co_m .

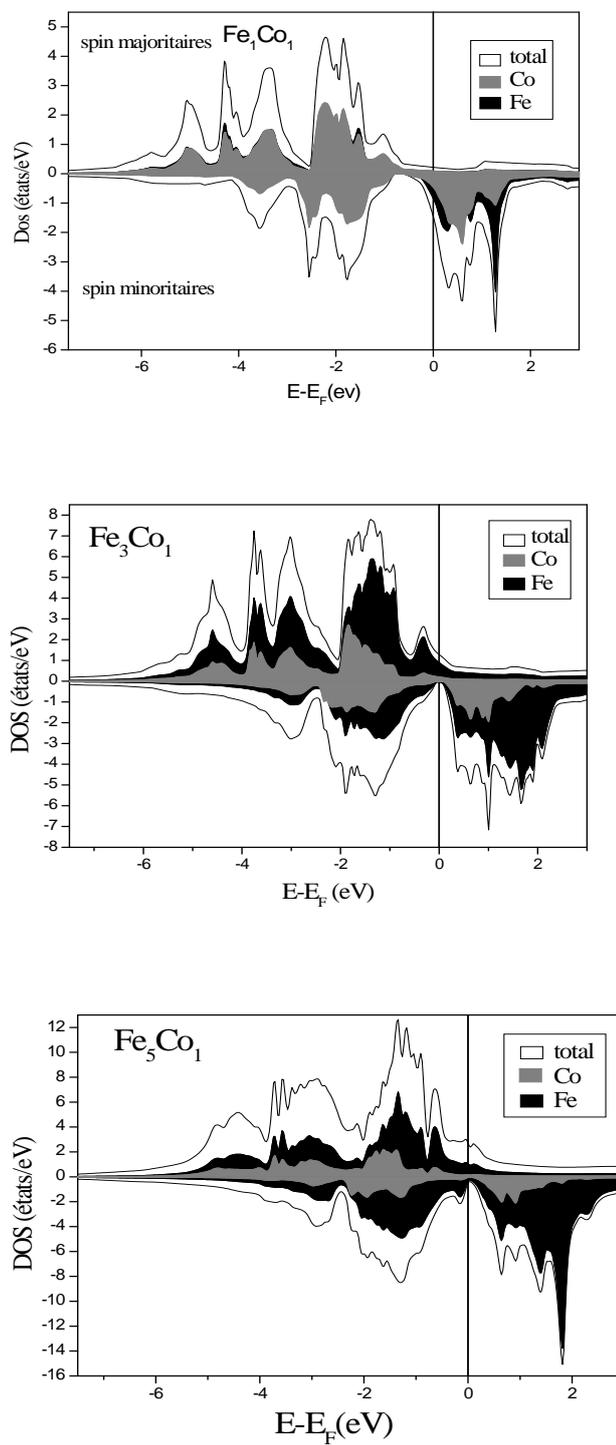


Fig. 2.3.6: DOS totale et partielles des superréseaux Fe_nCo_1

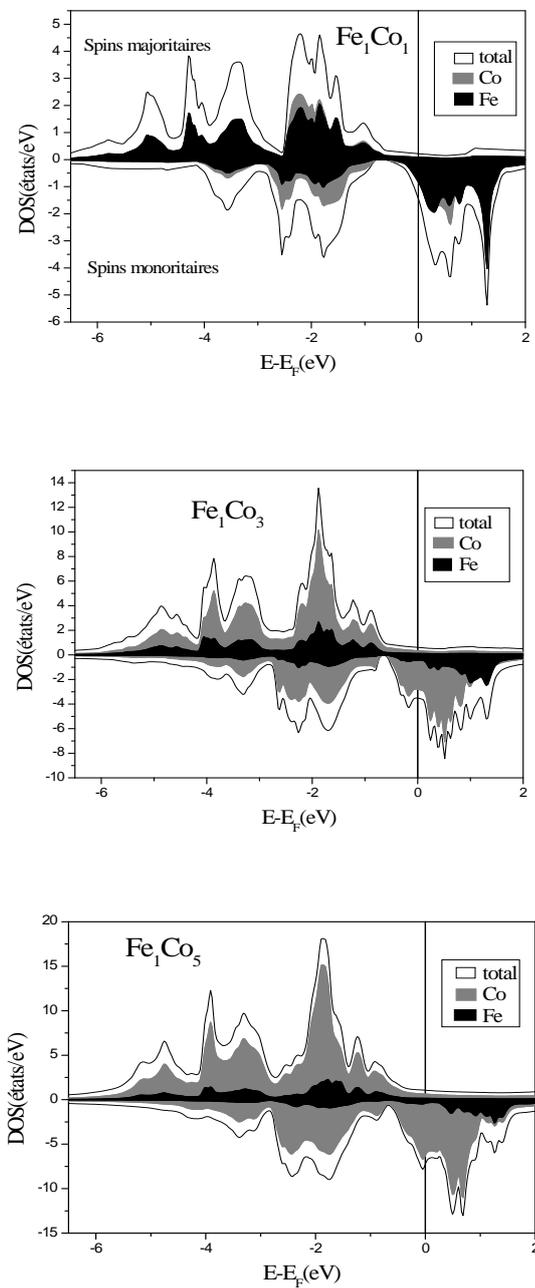


Fig. 2.3.7: DOS totale et partielles des superréseaux Fe_1Co_m

2.3.5 Moments magnétiques

Les résultats du calcul du moment magnétique en magnéton de Bohr des différents superréseaux sont regroupés dans le tableau (2.3.2). Le moment magnétique total croît avec l'augmentation des plans atomiques de Fer et de Cobalt et se rapproche de la valeur entière dans le cas du superréseau Fe_nCo_1 . La valeur du moment de spin moyen décroît quand la concentration de Co augmente, avec un changement de 2-5% par rapport à la valeur du massif. Cependant, il ya une reprise de la valeur du moment magnétique lorsque la concentration de Co est de 50%.

Superréseau	Moment magnétique (μ_B)							M/atome
	Fe ₁	Fe ₂	Fe ₃	Fe ₄	Fe ₅	Co ₁	Total (M_t)	
Fe ₁ Co ₁	2.783					1.816	4.485	2,242
Fe ₃ Co ₁	2.551	2.551	2.339			1.779	8.99	2,247
Fe ₅ Co ₁	2.536	2.145	2.536	2.154	2.162	1.766	12.999	2,165
	Fe ₁	Co ₁	Co ₂	Co ₃	Co ₄	Co ₅	Total(M_t)	M/atome
Fe ₁ Co ₁	2.783	1.816					4.485	2,242
Fe ₁ Co ₃	2.659	1.750	1.812	1.811			7.798	1,949
Fe ₁ Co ₅	2.636	1.772	1.770	1.809	1.836	1.809	11.242	1,873

TAB. 2.3.2: Moments magnétiques par atome de Fe et de Co des différents superréseaux.

La figure (2.3.8) représente le moment magnétique par atome de Fe et de Co des superréseaux Fe_nCo_1 et Fe_1Co_m . Dans le ces superréseaux on remarque que la valeur du moment de l'atome de Cobalt demeure constante mais dépasse celle du Cobalt massif. L'atome de Fer à l'interface Co présente un moment moins élevé que l'atome de Fer dans le volume. A l'interface, une amélioration significative dans le moment magnétique de Fer est obtenue. On remarque que le moment magnétique a augmenté d'environ 16 à 23% par rapport au moment de Fer massif. Ce n'est

pas le cas pour les atomes de Co situés à l'interface où ils ne présentent pas un changement significatif dans le moment magnétique par rapport à la valeur du Co massif, ils changent d'environ 5 à 8%.

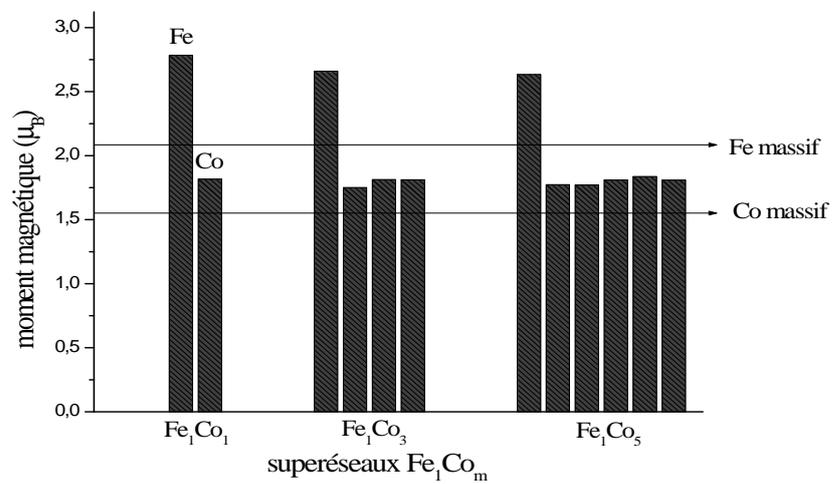
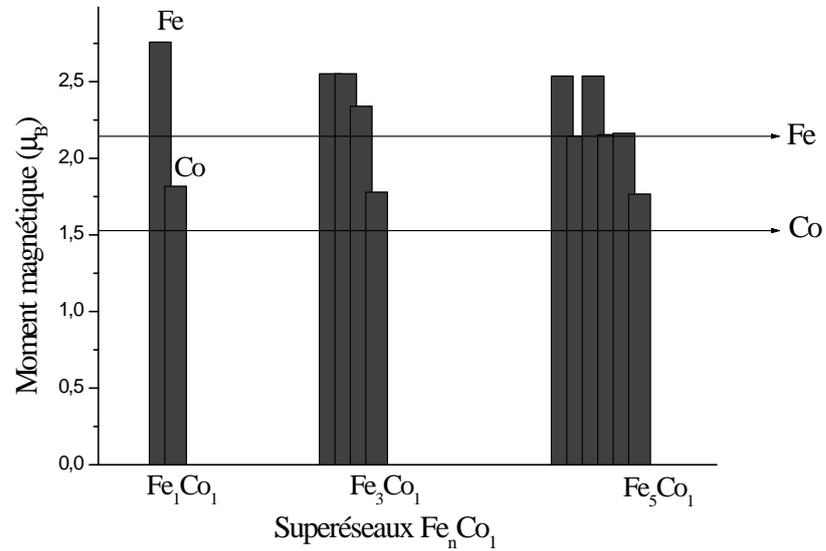


FIG. 2.3.8: Moments magnétiques des atomes de Fer et de Cobalt des superréseaux Fe_nCo_1 et Fe_1Co_m .

La figure (2.3.9) représente la variation du moment magnétique total en fonction du nombre de plans atomiques de Fer et de Cobalt . On note une variation linéaire du moment magnétique en fonction des couches atomiques de Fer, $M_t = 4.25n + 0.31$ dans les superréseaux Fe_nCo_1 , alors que la variation du moment magnétique en fonction des couches atomiques de Cobalt dans les superréseaux Fe_1Co_m est une fonction polynomiale $M_t = 0.8 m^2 - 0.57 m + 5.73$.

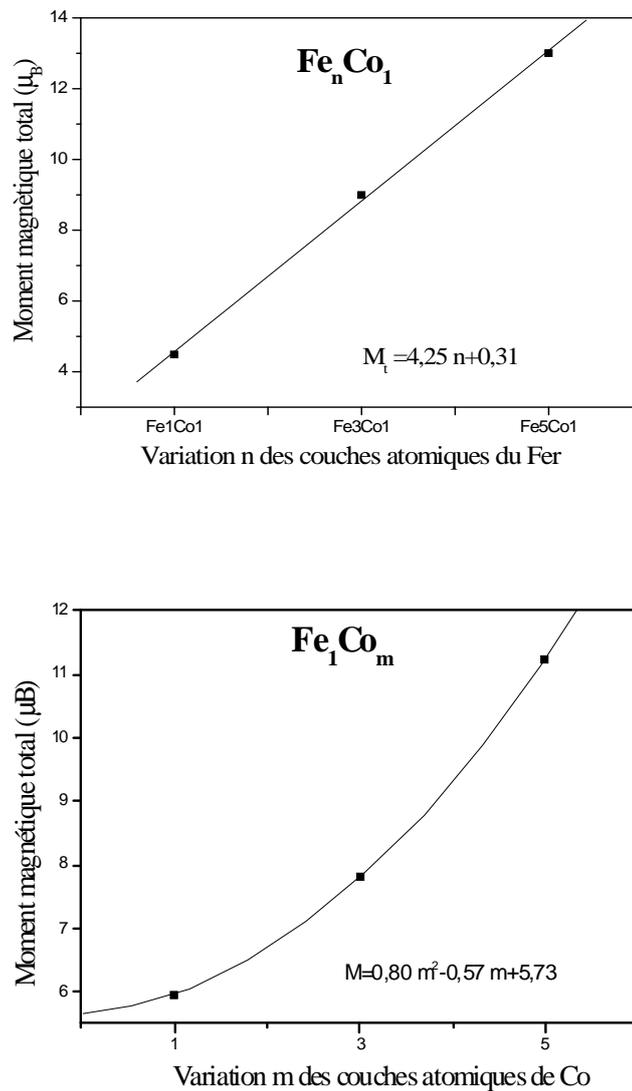


FIG. 2.3.9: Variation du moment magnétique totale en fonction de nombre de plans atomiques de Fer et de Cobalt.

2.4 Energie d'Anisotropie Magnétique (MAE)

La MAE peut être mesurée expérimentalement par le magnétomètre à SQUID (pour Superconducting Quantum Interference Device), il est parmi les dispositifs les plus sensibles pour la mesure des champs magnétiques (aimantation). La MAE peut être obtenue théoriquement par la différence des énergies totales correspondant à la magnétisation suivant les directions de difficile et de facile aimantation du superréseau. $MAE = E(111) - E(100)$. Une valeur négative de la MAE signifie que la magnétisation préfère s'orienter le long de la direction (111), et une valeur positive signifie que l'orientation est suivant l'axe facile (100) du superréseau.

Le calcul est basé sur l'ajout du couplage spin orbite, ce qui nécessite une précision importante au cours des cycles auto-cohérents. Pour cela nous avons calculé et tracé sur la figure(2.4.1) l'évolution de la MAE du superréseau Fe_1Co_1 en fonction du nombre de vecteurs d'onde k dans la première zone de Brillouin. On remarque que la valeur de la MAE est influencée par la valeur du vecteur d'onde, à partir de $k=40000$ la valeur de la MAE demeure constante. C'est cette valeur qui a été choisie dans tous les calculs de la MAE.

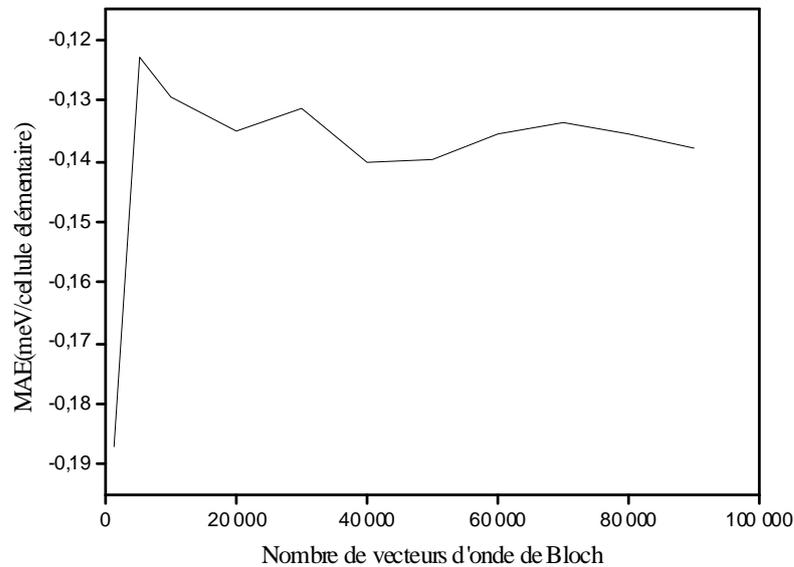


FIG. 2.4.1: Energie d'anisotropie magnétique en fonction du nombre de valeurs d'onde de Bloch dans la première zone de Brillouin, cas du superréseau Co_1Fe_1

2.4.1 Fer et Cobalt massifs

Les MAE calculées pour des spins dirigés suivant [100], [001], [101], [110] et [111] ont reproduit des axes faciles dans le plan le long de la direction [100] et perpendiculaire le long de [001] pour le Fer et le Cobalt respectivement. Le tableau (2.4.1) regroupe les valeurs de la MAE du Fer et du Cobalt.

Matériau	MAE (mRy)				
	[100]	[001]	[101]	[110]	[111]
Fe [100]		$6,2610^{-3}$	$1,1610^{-2}$	$1,6210^{-2}$	$9,3010^{-3}$
Co [001]	$1,8310^{-2}$		$1,3110^{-2}$	$3,7410^{-3}$	$2,5610^{-3}$

Tab. 2.4.1: Calculs GGA de la MAE du Fer et du Cobalt massifs.

2.4.2 Superréseaux Fe_n/Co_1 et Fe_1Co_m

Dans l'approximation GGA nous avons calculé l'énergie d'anisotropie magnétique des superréseaux Fe_n/Co_1 et Fe_1Co_m , en faisant varier le nombre de plans atomiques de Fer et de Cobalt respectivement. La MAE a été calculée en utilisant la différence d'énergies de l'axe facile et difficile. Le tableau (2.4.2) regroupe les résultats des différents superéseaux.

Superréseau [100]	MAE (mRy) [110]	MAE (mRy)[001]
Fe_1Co_1	$-9.51 \cdot 10^{-4}$	$8.19 \cdot 10^{-2}$
Fe_3Co_1	$1.97 \cdot 10^{-2}$	$3.90 \cdot 10^{-2}$
Fe_5Co_1	$3.93 \cdot 10^{-2}$	$6.25 \cdot 10^{-2}$
Fe_3Co_3	$2.78 \cdot 10^{-2}$	$4.66 \cdot 10^{-2}$
Fe_1Co_3	$2.20 \cdot 10^{-2}$	$3.34 \cdot 10^{-2}$
Fe_1Co_5	$3.15 \cdot 10^{-2}$	$6.03 \cdot 10^{-2}$

Tab. 2.4.2: Calculs GGA de la MAE des différents superéseaux.

Pour le superréseau Fe_1Co_1 on assiste à une transition de l'axe facile vers la direction [110] pour une concentration de 50% de Cobalt. Ce résultat est similaire aux conclusions expérimentales de l'équipe de Hagstrom [17], qui a observé que les moments magnétiques des multicouches Fe/Co(001) ne présentent aucune composante perpendiculaire par rapport au plan de l'échantillon. Dans le cas des superréseaux Fe_1Co_m et Fe_nCo_1 l'axe facile est maintenue dans la direction [100], il en est de même pour le cas du superréseau Fe_3Co_3 . On remarque que la MAE impliquée dans la rotation des spins hors plan est supérieure à celle de la rotation des spins dans le plan.

La figure (2.4.2) représente le calcul GGA de la MAE des différents superréseaux. On remarque que la MAE dans le plan des superréseaux pour différentes couches n de Fer et de Cobalt augmente avec n.

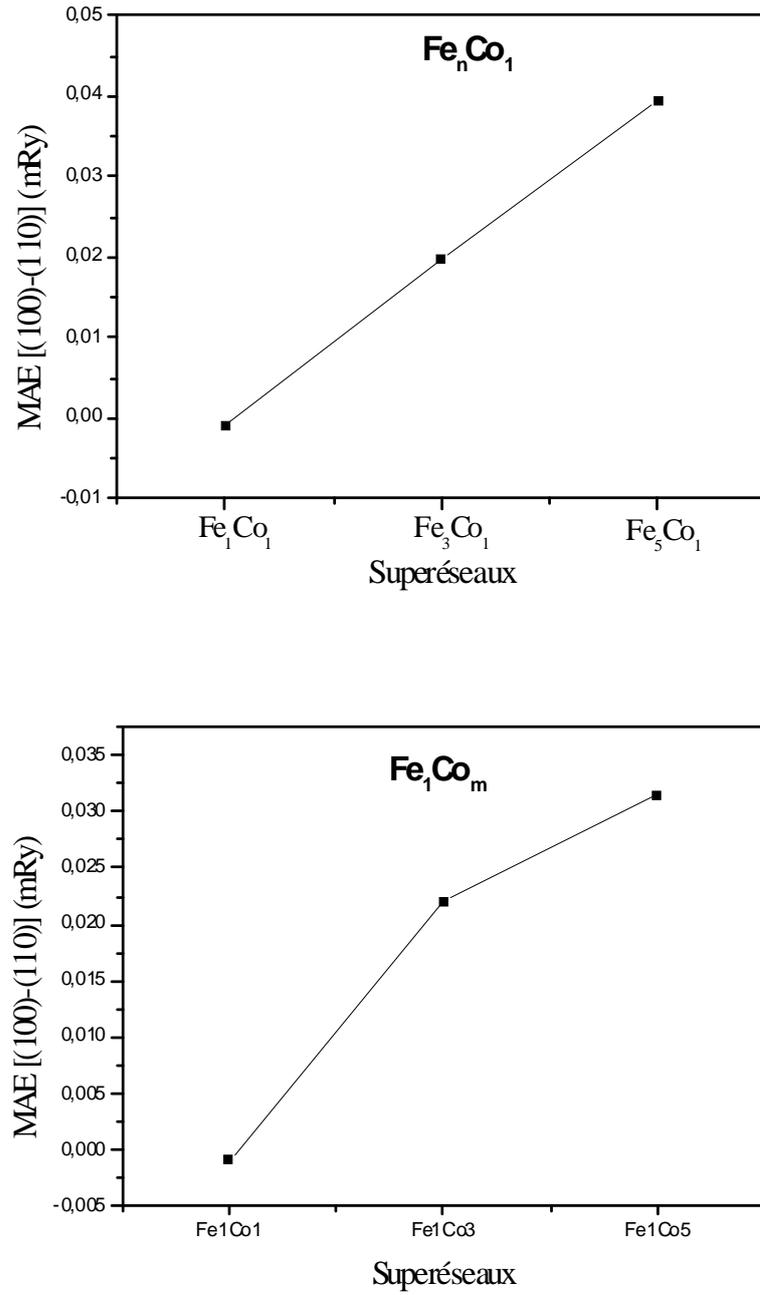


Fig. 2.4.2: Variation de la MAE du superréseau Fe_nCo_1 et Fe_1Co_m .

En vu de prédire l'évolution de la MAE en fonction du moment magnétique total des superréseaux Fe_nCo_1 et Fe_1Co_m , on trace la figure (2.4.3). On constate que la MAE augmente avec le moment magnétique et suit la même allure que celle de la figure (2.4.2), donc le moment magnétique joue un rôle important dans la variation de la valeur de la MAE.

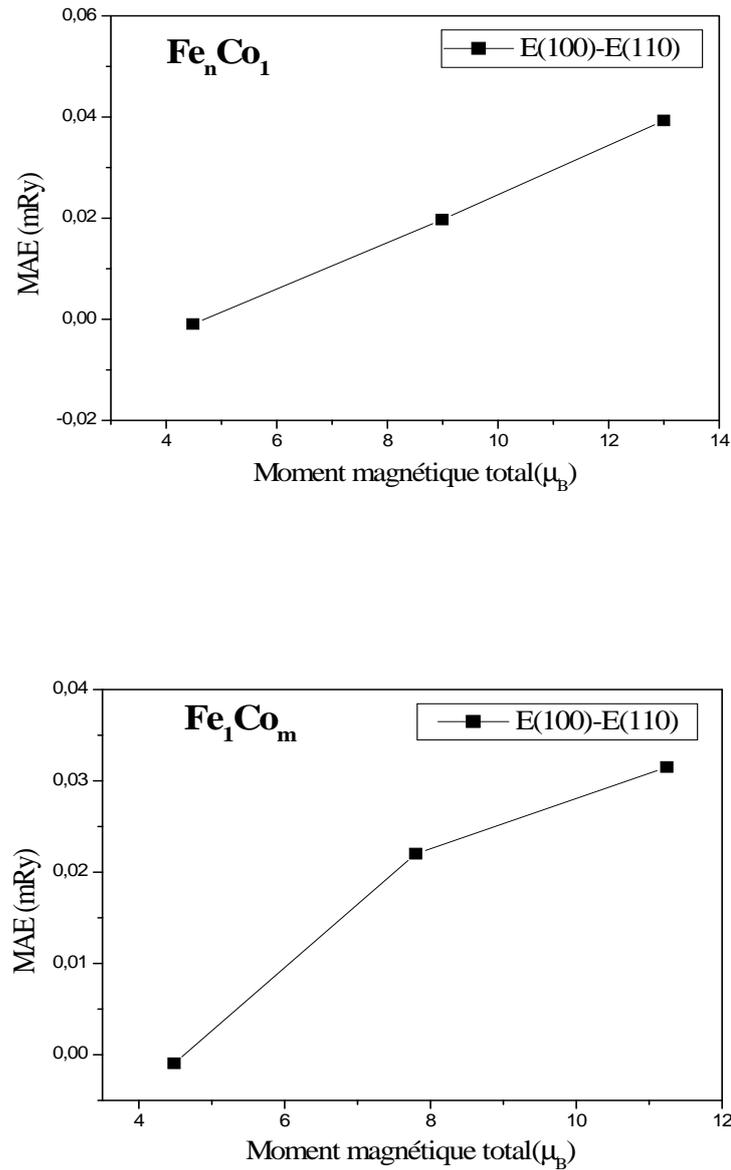


FIG. 2.4.3: Variation de la MAE en fonction du moment magnétique total des superréseaux Fe_nCo_1 et Fe_1Co_m .

CONCLUSION GÉNÉRALE

Le présent travail a été consacré à l'analyse de la structure électronique et des propriétés magnétiques du Fer, du Cobalt et des superréseaux Fe/Co (001) à l'aide de calculs ab-initio en utilisant le code Wien2k. Dans un premier temps, on s'est intéressé aux matériaux massifs Fer et Cobalt en optimisant la structure cubique centrée en phase magnétique et non magnétique, la différence trouvée entre les deux phases est de l'ordre de 0.40 eV, avec une phase magnétique plus stable. En traçant la structure de bandes des matériaux massifs on a remarqué un caractère métallique pour les deux directions de spin, les résultats du moment magnétique pour le Fer et le Cobalt coïncident bien avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux. Le moment magnétique total croît avec l'augmentation des plans atomiques de Fer dans le cas du superréseau Fe_nCo_1 et se rapproche de la valeur entière, de même pour le superréseau Fe_1Co_m mais la valeur du moment reste réelle. On note une variation linéaire du moment magnétique en fonction des couches atomiques de Fer, et polynomiale pour le Cobalt.

L'objectif principal de ce mémoire était d'étudier l'énergie anisotropie magnétique (MAE), Les MAE ont été résolues avec succès. Le Fer cc possède un axe facile dans le plan, le long de la direction [100], tandis que l'axe facile pour le Cobalt cc est au long de la direction [001]. Pour les différents superréseaux Fe/Co, la MAE a été calculée de deux manières, en utilisant la différence d'énergies de l'axe facile et le plan (110), et celle de la différence d'énergie de l'axe facile et l'axe perpendiculaire (l'axe z). Tous les superréseaux étudiés présentent une MAE positive assez élevée et une aimantation dans le plan des couches (suivant l'axe x) contrairement au cas du superréseau Fe_1Co_1 où la MAE est négative et une aimantation dans le plan [110].

Pour tous les supéreseaux étudiés la MAE croît avec le nombre de plans atomiques quand on passe de la direction [100] à une direction [110]. On remarque que la MAE impliquée dans la rotation des spins hors plan est supérieure à celle de la rotation des spins dans le plan. Le tracé de l'évolution de la MAE en fonction du moment magnétique total des superéseaux Fe_nCo_1 et Fe_1Co_m prévoit une augmentation avec le moment magnétique, donc le moment joue un rôle important dans la variation de la valeur de la MAE.

RÉFÉRENCES

- [1] K. Chafia, thèse de Doctorat, Université de Aïn Chock, Casablanca, Maroc, 2012.
- [2] G. Binasch, P.Grunberg, F.Saurenbach, and W.Zinn, Phys. Rev. B, 39, 4828-4830, 1989.
- [3] K. Boufala, thèse de Doctorat, Université de Sétif, Algérie, 2011.
- [4] F. Viot, thèse de Doctorat, Université d'aix Marseille, France 2012
- [5] P. Blomqvist, thèse dePhD, Université d'Upsala, Suède,2001.
- [6] J. M. D. Coey, Magnetism and Magnetic Materials, Cambridge University press, 2010.
- [7] F. Gimbert, thèse de Doctorat, Université de Toulouse, France, 2012.
- [8] L. Néel, Journal de Physique, 15, n°4, 1954
- [9] M. Gottwald, thèse de Doctorat, Université de Nancy, France, 2011.
- [10] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka et J. Luitz, Wien2k, an Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, édité par KarlHeinz Schwarz, Techn. Universität, Autriche, 2001.
- [11] J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B 45, 13244, 1992.
- [12] J. P. Perdew, S.Burke and M. Ernerhof, Phys. Rev. Lett 77, 3865, 1996.
- [13] R. Serra, thèse de Doctorat, Université de Toulouse, France, 2009.
- [14] F. D. Murnaghan, Proc, Natl, Acad, Sci. USA, 30, 5390, 1944
- [15] R. Wu, A. J. Freeman, Phys. Rev. Lett. 73, 1994
- [16] C. Kittel , Physique de l'état solide, Dunod, 1998.
- [17] L. Hagstrom , B. Kalska, E. Nordstrom, P. Blomqvist and R. Wappling, J. Alloys. Comp. 347, 252-258, 2002.