

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

UNIVERSITE FERHAT ABBAS-SETIF
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de

MAGISTER

Option : physique du solide

Par

BOUKELKOUL MEBAREK

Thème

**Propriétés magnéto-optiques des films minces de Fe déposés sur
Ir(001)**

Dr. A.Chergui	Professeur	UFA. SETIF	Président
Dr. A.Haroun	Professeur	UFA. SETIF	Rapporteur
Dr. A.Bourzami	M.C	UFA. SETIF	Examineur
Dr. Z.Chaoui	M.C	UFA. SETIF	Examineur
Dr. A.Bouhemadou	M.C	UFA. SETIF	Examineur

Remerciement

Ce travail est le fruit d'une recherche effectuée au laboratoire de mécanique quantique et systèmes dynamiques de l'université Ferhat Abbas-Sétif.

Je tiens à exprimer mes plus vifs remerciements au professeur Abd El Halim Haroun de m'avoir accueilli dans son équipe. Il a dirigé mon travail avec beaucoup de patience et de compétence. Ses qualités humaines et ses remarques m'ont été précieuses.

Je tiens à remercier Makhlouf Kharoubi qui m'a aidé à manipuler la méthode SPR-LMTO-ASA. Ses conseils, sa patience et son intérêt pour mon travail avaient eu l'impact le plus précieux dans la réalisation de ce travail. Qu'il trouve ma profonde reconnaissance et ma sincère fraternité.

Je remercie le professeur Abd El Hamid Chergui de l'université Ferhat Abbas de m'avoir honoré par sa présidence du jury de ce mémoire.

Mes remerciements vont également au Docteur A.Bourzami, au Docteur Z.Chaoui et au Docteur A.Bouhmadou de l'université Ferhat Abbas d'avoir accepté de faire partie de ce jury.

Je tiens à remercier vivement ma mère, mon père et tous les membres de ma famille pour leur encouragement et leur soutien.

Mes remerciements vont aussi à tous mes amis : Rachid, El Kheir, Zinelabidine, Azouz, Farouk... pour leur encouragement pendant la réalisation de ce travail.

TABLE DES MATIERES

1. Introduction générale	1
1. La théorie de la fonctionnelle de densité	3
1.1 Introduction	3
1.2 Approximations Fondamentales	4
1.2.1 Approximation de Born Oppenheimer	4
1.2.2 Approximation à un électron	5
1.2.3 Approximation de Hartree	5
1.2.4 Approximation de Hartree-Fock	7
1.3 Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)	9
1.4 Equations de Kohn-Sham	10
1.5 Approximation de la densité locale (LDA)	11
1.6 Approximation de la densité locale des spins (LSDA)	12
2. Le Formalisme théorique	13
2.1 L'importance des effets relativistes	13
2.2 Equation de Dirac	14
2.3 Equation de Klein-Gordon	14
2.4 Equation de Dirac pour une particule libre	17
2.4.1 Equation de continuité et interprétation probabiliste	18
2.5 Equation de Dirac pour une particule dans un champ électromagnétique	19
3. Méthodes de calcul	20
3.1 Introduction	20
3.2 Méthode cellulaire	21
3.3 Méthode SPR-LMTO-ASA	23
3.3.1 Approximation <i>muffin-tin</i>	23
3.3.2 Approximation de la Sphère Atomique (ASA)	23
3.3.3 L'orbital muffin-tin non relativiste	24
3.3.4 L'orbital muffin-tin relativiste	26
3.4 SPR-LMTO-ASA	29
3.5 Convergence et stabilité	30
4. Les propriétés magnéto-optiques	31
4.1 L'optique classique	31

4.1.1	Les équations de Maxwell.....	31
4.2	Les effets magnéto-optiques.....	33
4.2.1	L'effet Kerr.....	33
4.2.1.1	<i>L'effet Kerr polaire (P-MOKE).....</i>	<i>34</i>
4.2.1.2	<i>L'effet Kerr longitudinal (L-MOKE).....</i>	<i>35</i>
4.2.1.3	<i>L'effet Kerr transversal (T-MOKE).....</i>	<i>36</i>
4.3	L'effet Faraday.....	37
4.4	Formalisme de Kubo.....	38
4.5	Théorie de Drude et Sommerfeld.....	40
4.6	<i>L'interaction électron- photon et les éléments matriciels.....</i>	41
5.	<i>Résultats et discussion.....</i>	43
5.1	Introduction.....	43
5.2	Technique de calcul	43
5.3	Modélisations de la surface : super cellule.....	43
5.4	Elaboration du système $Fe_n / Ir(001)$	44
5.5	Elaboration du substrat.....	46
5.6	Détails de calcul.....	47
5.7	Le système $Fe_1/Ir(001)$	48
5.8	Le système $Fe_2/Ir(001)$	54
5.9	Le système $Fe_3/Ir(001)$	59
5.10	Discussion.....	64
5.11	Comparaison.....	70
6.	<i>Conclusion.....</i>	71
	<i>Bibliographie</i>	72

INTRODUCTION GENERALE

Notre étude porte sur les propriétés magnéto-optiques des couches ultraminces à base de métaux de transition notamment le Fer déposé sur un substrat d'Iridium (001). Ces propriétés sont mises au point à travers le calcul du spectre de l'effet Kerr dans ses trois géométries distinctes : polaire, longitudinale et transversale.

Nous nous intéressons particulièrement à l'effet Kerr polaire (P-MOKE) qui est largement utilisé grâce à la réponse magnéto-optique qu'il peut provoquer.

Le choix de l'étude des propriétés magnéto-optiques est justifié par la possibilité d'obtenir des matériaux possédants des propriétés physiques (structurales, magnétiques, magnéto-optiques) exotiques qui seront l'objet d'éventuelles applications technologiques notamment dans le domaine d'enregistrement et de stockage magnétique.

Théoriquement, il y'a plusieurs approches qui ont été développées parallèlement aux expériences pour essayer d'expliquer les spectres magnéto-optique mesurés.

Les méthodes *ab initio* à un électron basées sur la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) s'intéressent aussi à ce problème. En ce qui nous concerne, nous avons utilisé la méthode SPR-LMTO-ASA (Spin Polarized Relativistic – Linear Muffin Tin Orbitals- Atomic Sphere Approximation) avec des corrections combinées où les effets relativistes sont pris en compte dans le cadre de l'approximation de la densité locale du spin (LSDA).

Cette méthode est très bien adaptée au calcul des éléments du tenseur de la conductivité optique qui est à l'origine du calcul des rotations Kerr.

La méthode SPR-LMTO-ASA est numériquement moins lourde que les autres méthodes *ab initio* et aussi elle est suffisamment précise dans le calcul des propriétés physiques étudiées dans ce travail.

Les vecteurs et valeurs propres sont obtenus par un processus auto cohérent (self consistent) puis utilisés dans le calcul de la structure de bande et la densité d'états.

Cette thèse comporte cinq chapitres.

Le premier chapitre est consacré à la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), dans le deuxième chapitre nous présentons le formalisme théorique, dans le troisième nous résumons les méthodes de calcul qui sont adoptées dans ce travail et comme le but principal de ce travail est l'étude du spectre de l'effet Kerr, nous avons réservé le

quatrième chapitre aux propriétés magnéto-optiques, le cinquième chapitre contient les résultats et les discussions.

Chapitre 01

Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

1.1 Introduction

Décrire un système physique et déterminer ses propriétés est de nos jours une tâche rarement accomplie avec perfection. En tenant compte de la complexité de la plupart des systèmes à étudier, avoir recourt aux approximations est donc inévitable, car c'est la seule manière de conditionner les problèmes étudiés aux outils disponibles.

La description d'un système quantique (ensemble de particules : atomes, molécules...) et la détermination de son état ainsi que ses propriétés passent nécessairement par la résolution de l'équation centrale en mécanique quantique qui est l'équation de Schrödinger

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (1-1)$$

Or les solutions analytiques de cette équation ne peuvent être obtenues que dans de très rares situations : cas de l'atome d'hydrogène et de l'ion moléculaire H^{2+} .

Les systèmes réels sont plus compliqués car chacun de leurs éléments obéit à une statistique particulière d'une part, de l'autre part l'interaction entre ces éléments fait de la séparation de l'équation de Schrödinger en un système d'équations indépendantes une tâche impossible. On est donc obligé de faire appel à des approximations mathématiques pour obtenir des résultats fiables.

Les approximations portent soit sur le hamiltonien lui-même cas de la méthode des perturbations, soit sur la forme de la fonction d'onde qui doit entre autres satisfaire certaines conditions physiques et c'est le cas de la méthode des variations.

1.2 Approximations Fondamentales

Un cristal est constitué d'un très grand nombre de particules en interaction, les électrons et les noyaux atomiques, de sorte que le calcul des états d'énergie du système passe nécessairement par un certain nombre d'hypothèses simplificatrices.

L'Hamiltonien total du système s'écrit

$$H = T_e + T_n + V_{ee} + V_{en} + V_{nn} \quad (1-2)$$

Où T_e et T_n représentent les énergies cinétiques des électrons et des noyaux V_{ee} , V_{en} et V_{nn} les énergies d'interaction électron-électron, électron-noyau et noyau-noyau respectivement.

La première approximation consiste à limiter les interactions entre particules au terme le plus important que constitue l'interaction coulombienne. L'Hamiltonien du système s'écrit alors :

$$H = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_k \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_k^2 + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} - \sum_{i,k} \frac{Z_k e^2}{|R_k - r_i|} + \sum_{i<j} \frac{Z_k Z_j e^2}{|R_k - R_j|} \quad (1-3)$$

Où les indices i, j, k, J se rapportent respectivement aux électrons et aux noyaux, et Z représente la charge nucléaire.

Les états d'énergie et les fonctions d'onde du système sont donnés par les solutions de l'équation de Schrödinger

$$H \psi(R, r) = E \psi(R, r) \quad (1-4)$$

Où R représentent les coordonnées des noyaux et r celles des électrons.

1.2.1 Approximation de Born Oppenheimer

Les électrons et les noyaux atomiques ont des masses très différentes de sorte que l'on peut utiliser l'approximation de Born-Oppenheimer pour séparer l'équation aux valeurs propres des noyaux de celle des électrons. Les états propres du système sont alors caractérisés par des fonctions d'onde produit d'une fonction d'onde électronique par une fonction d'onde nucléaire [1].

$$\psi(R, r) = \psi_n(R) \psi_e(R, r) \quad (1-5)$$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$[T_e + T_n + V_{ee} + V_{en} + V_{nn}] \psi_n(R) \psi_e(R, r) = E \psi_n(R) \psi_e(R, r) \quad (1-6)$$

Et se ramène à deux équations interdépendantes :

$$\begin{cases} [T_e + V_{ee} + V_{en}] \psi_n(R) \psi_e(R, r) = E_e \psi_n(R) \psi_e(R, r) & (1-7) \\ [T_n + V_{nn} + E_e(R)] \psi_n(R) = E \psi_n(R) & (1-8) \end{cases}$$

Ces équations constituent les équations de base de ce qu'on appelle *l'approximation adiabatique*. La première donne l'énergie électronique pour une valeur déterminée R des coordonnées nucléaires. Cette énergie électronique apparaît ensuite comme contribution potentielle dans l'équation aux valeurs propres du mouvement des noyaux.

Pour étudier les états d'énergie électronique du cristal on n'utilise que l'équation (1-7) en supposant les noyaux sont fixes à leur position d'équilibre (vu leur énergie).

1.2.2 Approximation à un électron

L'équation qui traduit l'évolution d'un système à n corps, demeure un problème difficile à résoudre et pour simplifier ce problème, on se place dans *l'approximation à un électron* qui consiste à globaliser les interactions individuelles électron-électron et à écrire que chaque électron évolue dans un potentiel moyen résultant de la présence de l'ensemble des autres électrons (Miedel Field Theory).

1.2.3 Approximation de Hartree

Mise au point par Hartree en 1928, elle consiste à considérer la fonction d'onde totale d'un système poly-électronique comme étant le produit d'un ensemble de fonctions d'onde mono-électroniques, chacune est solution de l'équation Schrödinger à un électron dans un potentiel moyen effectif V_{eff} (potentiel de Hartree) qui tient compte de l'interaction de ce dernier avec les autres électrons.

Alors on a :

$$\psi(R, r) = \prod_{i=1}^N \phi_i(R, r) \quad (1-9)$$

Tels que : $\phi_i(R, r)$ vérifie l'équation :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{eff} \right) \phi_i(R, r) = E_i \phi_i(R, r) \quad (1-10)$$

L'expression de V_{eff} est donnée en utilisant la méthode des variations.

$$\langle H_e \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (1-11)$$

$|\psi\rangle$ est normalisé et $|\psi\rangle = \left| \prod_i^N \phi_i \right\rangle$

On a :

$$H_e = T_e + V_{en} + V_{ee} = \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m_i} \Delta_i - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i \sum_k \frac{Ze^2}{|r_i - R_k|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_i \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \quad (1-12)$$

Posons :

$V_i^N = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_k \frac{Ze^2}{|r_i - R_k|}$: Le potentiel de l'électron i dans le champ de tous les

noyaux.

Compte tenu des considérations suivantes :

- $\sum_i \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta_i$ et $\sum_i V_i^N$ agissent sur $|\phi_i\rangle$ et $\langle\phi_i|$
- $\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_i \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$ agit sur $|\phi_i \phi_j\rangle$ et $\langle\phi_i \phi_j|$

On obtient :

$$\langle\psi|H_e|\psi\rangle = \sum_i \langle\phi_i| \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i - V_i^N + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \langle\phi_j| \left(\frac{e^2}{|r_i - r_j|} \right) |\phi_j\rangle \right] |\phi_i\rangle \quad (1-13)$$

Donc l'énergie d'un électron i est donnée par :

$$E_i = \langle\phi_i| \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i - V_i^N + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \langle\phi_j| \left(\frac{e^2}{|r_i - r_j|} \right) |\phi_j\rangle \right] |\phi_i\rangle \quad (1-14)$$

D'où

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i - V_i^N + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \langle\phi_j| \left(\frac{e^2}{|r_i - r_j|} \right) |\phi_j\rangle \right] |\phi_i\rangle = E_i |\phi_i\rangle \quad (1-15)$$

C'est l'équation de Hartree. C'est une équation non linéaire qui fait appel à un processus itératif pour obtenir des solutions dans le cadre de la méthode des variations.

Le potentiel de Hartree quant à lui est donné par l'expression :

$$V_{eff} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\sum_k \frac{Ze^2}{|R_k - r_i|} - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \langle\phi_j| \left(\frac{e^2}{|r_i - r_j|} \right) |\phi_j\rangle \right] \quad (1-16)$$

L'approximation de Hartree est insuffisante car elle ne tient pas compte du principe d'indiscernabilité des électrons (fonctions anti-symétriques) ainsi que le principe d'exclusion de Pauli.

1.2.4 Approximation de Hartree-Fock

L'approximation de Hartree-Fock est une approximation variationnelle qui consiste à restreindre les fonctions d'onde de minimisation, aux seules s'écrivant sous la forme d'un déterminant de Slater qui tient compte des insuffisances de l'approximation de Hartree.

Dans ces conditions, la fonction d'onde s'écrit sous la forme :

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(r_1) & \phi_1(r_2) & \dots & \phi_1(r_N) \\ \phi_2(r_1) & \phi_2(r_2) & \dots & \phi_2(r_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_N(r_1) & \phi_N(r_2) & \dots & \phi_N(r_N) \end{vmatrix} \quad (1-17)$$

Où $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ est la constante de normalisation de la fonction d'onde

L'évaluation de l'énergie dans le cadre de la nouvelle expression de la fonction d'onde conduit à :

$$H_e = \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m_i} \Delta_i - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i \sum_k \frac{Ze^2}{|r_i - R_k|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_i \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \quad (1-18)$$

On pose

$$V_{ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \text{ : (Interaction entre deux électrons).}$$

$$V_i^N = \sum_k \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{|r_i - R_k|} \text{ : (Interaction entre l'électron } i \text{ et l'ensemble des noyaux).}$$

En tenant compte des permutations suivantes :

$\{\phi_i(r_i), \phi_j(r_j)\}$ et $\{\phi_i(r_j), \phi_j(r_i)\}$ dans l'expression de $|\psi\rangle$ et $\langle\psi|$, on aura :

$$\langle\psi|H_e|\psi\rangle = \sum_i \left[\langle\phi_i| \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i - V_i^N + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \langle\phi_j(r_j)|V_{ij}|\phi_j(r_j)\rangle \right) |\phi_i\rangle - \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \langle\phi_i(r_j)\phi_j(r_i)|V_{ij}|\phi_i(r_j)\phi_j(r_i)\rangle}_{\text{Terme d'échange}} \right] \quad (1-19)$$

Pour l'électron i on peut écrire

$$E_i = \langle H_e^i \rangle = \langle \phi_i | \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i - V_i^N + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \langle \phi_j(r_j) | V_{ij} | \phi_j(r_j) \rangle \right) | \phi_i \rangle - \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \langle \phi_i(r_i) \phi_j(r_i) | V_{ij} | \phi_i(r_i) \phi_j(r_i) \rangle \quad (1-20)$$

C'est l'équation de Hartree-Fock. Elle diffère de celle de Hartree par un terme supplémentaire appelé *terme d'échange* ayant la forme d'un opérateur intégral.

Puisque elle n'est pas linéaire en $\phi(r)$ alors sa résolution est très difficile.

L'approximation de Hartree-Fock constitue le point de départ pour la plupart des autres méthodes qui permettent le calcul de la structure électronique d'un solide.

1.3 Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est une approche différente de celle de Hartree-Fock. Son idée est de considérer l'énergie de l'état fondamental comme une fonctionnelle de sa densité électronique $E[\rho]$ ainsi que toute observable relative à ce système.

Cette théorie est sous-tendue par deux théorèmes proposés par Hohenberg et Kohn [2].

- Théorème 01: *l'énergie totale d'un système de particules s'exprime comme une fonctionnelle unique de la densité totale $\rho(r)$*
- Théorème 02: *cette fonctionnelle est minimale pour la densité d'électrons correspondant à l'état fondamental ψ_0 .*

Donc pour déterminer l'énergie totale du système, on n'a pas besoin de connaître la fonction d'onde de tous les électrons, mais il suffit pour ça de déterminer une certaine fonctionnelle $E[\rho]$ et d'obtenir son minimum.

Dans le cadre de cette théorie, le solide est représenté par un ensemble de particules évoluant dans un champ extérieur créé par l'ensemble des charges du réseau.

Pour tenir compte des corrélations électroniques, on a introduit un potentiel d'échange et de corrélation.

L'énergie du système est donnée par :

$$E[\rho(r)] = T[\rho(r)] + \int dr \rho(r) V_{ext}(r) + \iint dr dr' \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} + E_{xc}[\rho(r)] \quad (1-21)$$

Où

$V_{ext}(r)$ est le potentiel d'interaction des électrons avec les champs externes y compris celui dû aux noyaux.

$T[\rho(r)]$ représente l'énergie cinétique d'un système de particules indépendantes de densité $\rho(r)$.

Le troisième terme désigne l'interaction coulombienne.

$E_{xc}[\rho(r)]$ est l'énergie d'échange et de corrélation qui corrige les modifications subies par l'interaction électron-électron.

L'énergie totale du système est donnée par l'extremum de la fonctionnelle.

1.4 Equations de Kohn-Sham

La DFT avec les équations de Kohn-Sham fournissent une procédure pour décrire le système réel par « un système fictif » constitué d'électrons sans interactions mutuelles. Ces électrons s'appellent « Les électrons de Kohn-Sham ».

Dans le nouveau système $\rho(r)$ est exprimée comme suit :

$$[\rho(r)] = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(r)|^2 \quad (1-22)$$

N est le nombre d'électrons.

Les fonctions $\varphi_i(r)$ qui figurent ici sont les orbitales monoélectroniques de Kohn et Sham.

Elles obéissent à l'équation suivante :

$$[-\Delta + V_{eff}] \varphi_i(r) = \varepsilon_i \varphi_i(r) \quad (1-23)$$

Où

$$V_{eff} = e^2 \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' - \sum_I \frac{Ze^2}{|r-R_I|} + \frac{\delta E_{xc}[\rho(r)]}{\delta \rho(r)} \quad (1-24)$$

Le premier terme est le potentiel de Hartree, le deuxième est celui de l'interaction électron-noyau et le dernier décrit l'interaction d'échange et de corrélation.

Puisque la variation du dernier terme en fonction de la densité est inconnue, les approximations utilisées doivent être basées sur la forme de E_{xc} .

L'ensemble des équations (1-22), (1-23) et (1-24) constituent les équations de

Kohn-Sham qui sont résolues d'une façon auto-cohérente. En effet, à partir d'une densité de test, on obtient un potentiel V_{eff} pour lequel l'équation (1-23) est résolue et une nouvelle densité électronique est obtenue. Le processus continue jusqu'à l'auto-cohérence.

1.5 Approximation de la densité locale (LDA)

Pour estimer l'énergie d'échange et de corrélation dans les équations de Kohn-Sham, plusieurs approximations basées généralement sur la nature des distributions de charges des atomes ont été développées.

Dans le cadre de l'approximation LDA, l'énergie d'échange et de corrélation est donnée par [2]

$$E_{xc}[\rho(r)] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}[\rho(r)] dr$$

Où ε_{xc} est l'énergie d'échange et de corrélation par électron d'un gaz homogène d'électrons en interaction et de densité totale uniforme $\rho(r)$.

Le potentiel d'échange et de corrélation est donnée généralement par :

$$V_{xc}[\rho(r)] = \frac{\delta E_{xc}[\rho(r)]}{\delta \rho(r)}$$

Von Barth et Hedin ont développé une expression de $V_{xc}[\rho(r)]$ pour les matériaux magnétiques dans laquelle ils définissent un potentiel $V_{xc\sigma}[\rho(r)]$ pour chaque direction de spin de l'électron.

Dans ce travail, nous avons adopté l'expression de Von Barth- Hedin ou $V_{xc}[\rho(r)]$ est donné sous la forme paramétrée suivante [3]

$$V_{xc}[\rho(r)] = A[\rho] \left(2 \frac{\rho^\sigma(r)}{\rho(r)} \right)^{1/3} + B[\rho] \quad (1-25)$$

Avec

$$A[\rho] = -2 \left(\frac{3}{\pi} \rho(r) \right)^{1/3} + c_z \left(-c_F F \left(\frac{r_s}{r_F} \right) + c_p F \left(\frac{r_s}{r_p} \right) \right) \quad (1-26)$$

$$B[\rho] = -c_p \text{Log} \left(1 + \frac{r_p}{r_s} \right) - c_z \left(-c_F F \left(\frac{r_s}{r_F} \right) + c_p F \left(\frac{r_s}{r_p} \right) \right) \quad (1-27)$$

$$\frac{4}{3} \pi r_s^3 = \frac{1}{\rho(r)}, \quad F(z) = (1+z^3) \text{Log} \left(1 + \frac{1}{z} \right) + \frac{z}{2} - z^2 - \frac{1}{3} \quad (1-28)$$

$$c_z = \frac{4}{3} \frac{2^{-1/3}}{1 - 2^{-1/3}}, \quad r_p = 30, \quad c_p = 0.0504, \quad r_F = 75, \quad c_F = 0.0254 \quad (1-29)$$

1.6 Approximation de la densité locale des spins (LSDA)

Pour les systèmes aux spins polarisés, la densité du système est donnée par la somme des deux densités :

$$\rho(r) = \rho^\uparrow(r) + \rho^\downarrow(r) \quad (1-30)$$

L'expression de l'énergie d'échange et corrélation devient

$$E_{xc}[\rho(r)] = \int [\rho^\uparrow(r) + \rho^\downarrow(r)] \varepsilon_{xc}[\rho^\uparrow(r) + \rho^\downarrow(r)] dr \quad (1-31)$$

Dans cette approximation l'énergie du système est une fonctionnelle des deux densités de spins :

$$E[\rho(r)] = E[\rho^\uparrow(r), \rho^\downarrow(r)] \quad (1-32)$$

Il existe d'autres types d'approximations qui tiennent compte des caractéristiques des systèmes étudiés. Parmi elles, on peut citer celle du gradient généralisé (GGA) qui prend en considération la variation locale de la densité à travers son gradient et l'approximation qui traite les corrections dues à la polarisation orbitale.

Chapitre 02

Le formalisme théorique

1.4.1 L'importance des effets relativistes

La conséquence directe de la présence de l'aimantation spontanée dans un matériau, est la dépendance de la symétrie du système de la direction de l'aimantation \vec{M} . Puisque la symétrie impose des restrictions sur la forme de n'importe quel tenseur qui exprime les propriétés d'équilibre d'un système, ce dernier doit dépendre de la direction de l'aimantation.

Pour le tenseur de la conductivité optique $\sigma(\omega)$ qui englobe toutes les propriétés magnéto-optiques, on a pour un système cubique : $\sigma(\omega)^{[001]} \neq \sigma(\omega)^{[110]}$.

Cette réduction de symétrie due à l'aimantation n'est appréciable que lorsqu'on tient compte des effets relativistes notamment la présence du couplage spin-orbite.

Par exemple, dans le cas de $\sigma(\omega)^{[001]}$ et pour des fréquences finies les éléments non diagonaux de $\sigma(\omega)$ sont responsables de l'effet Kerr (MOKE) dans le domaine visible aussi bien que dans le régime des rayons X. Le dichroïsme circulaire est aussi relié à la partie responsable de l'absorption de ces éléments non –diagonaux.

Si l'on tient compte du couplage spin-orbite dans l'expression de l'Hamiltonien, le spin et le moment orbital cessent d'être de bons nombres quantiques (constantes de mouvement).

Pour les éléments légers, le couplage spin-orbite est faible de sorte qu'il est considéré comme une perturbation et le calcul de la structure de bandes se fait dans le cadre de la théorie des perturbations.

Dans les métaux lourds comme l'Or, le couplage spin-orbite est très important et on obtient une séparation de la bande de valence en deux sous-bandes de caractères

$\frac{5}{2}$ et $\frac{3}{2}$.

En tenant compte de toutes ces considérations, la meilleure façon pour calculer le magnétisme et les propriétés magnéto-optiques, c'est d'adopter une approche purement relativiste.

2.2 Equation de Dirac

Vu l'importance des effets relativistes dans la mise en relief des propriétés magnéto-optiques, toute étude de ces derniers doit s'inscrire dans le cadre de la mécanique relativiste.

La conséquence directe de ces considérations est le fait de remplacer l'équation de Schrödinger par celle de Dirac.

Pour que la description soit complète ; on commence par l'équation de Dirac pour une particule libre, puis celle d'une particule chargée dans un champ extérieur.

2.3 Equation de Klein-Gordon

En mécanique quantique non-relativiste, l'équation de Schrödinger est obtenue en s'appuyant sur les règles de correspondance suivantes :

$$\begin{aligned} E &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{p} &\rightarrow -i\hbar \vec{\nabla} \end{aligned} \quad (2-1)$$

L'expression de l'énergie pour une particule relativiste est donnée par [4-5]

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (2-2)$$

Klein et Gordon ont suggéré que l'équation d'onde relativiste pouvait être obtenue en utilisant les mêmes règles de correspondance, entre grandeurs physiques et opérateurs, qu'en théorie non-relativiste ; ce qui conduit à l'équation de *Klein-Gordon* :

$$\left(\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \hbar^2 \Delta + m^2 c^2 \right) \psi(r, t) = 0 \quad (2-3)$$

La relation énergie impulsion $E = \frac{1}{2m} p^2$ donne $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$ qui est l'équation de Schrödinger pour une particule libre.

En mécanique relativiste, on définit le 4-vecteur énergie-impulsion : $p^\mu = (\frac{E}{c}, p)$

On a

$$p^\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - p^2 = m^2 c^2 \quad (2-4)$$

Donc

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^2} \quad (2-5)$$

La règle de correspondance conduit à l'équation

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \sqrt{-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4} \psi \\ &= (1 - \frac{\hbar^2}{2mc^2} \Delta + \dots) \psi \end{aligned} \quad (2-6)$$

C'est une équation non locale où la symétrie (t,x) est complètement masquée.

En utilisant la règle de correspondance on aura

$$p^\mu = (\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -i\hbar \nabla) = i\hbar \partial^\mu \quad (2-7)$$

D'où l'équation issue de la relation de dispersion $p^\mu p_\mu = m^2 c^2$

$$[-\hbar \partial^\mu \partial_\mu - m^2 c^2] \psi(x) = 0 \quad (2-8)$$

Soit encore

$$\left[\partial^\mu \partial_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi(x) = 0 \quad (2-9)$$

C'est une équation du second ordre dont les solutions de type onde plane $\psi = e^{-i\frac{px}{\hbar}}$

donne

$$p^2 = m^2 c^2 \quad (2-10)$$

Soit

$$p_0 = \frac{E}{c} = \pm \sqrt{p^2 + m^2 c^2} \quad (2-11)$$

Les solutions d'énergie sont positives et négatives ; on peut dans le cas libre sélectionner les solutions positives. Mais cette séparation n'est en général pas possible en présence d'un champ externe.

L'équation de Klein-Gordon n'admet pas une interprétation probabiliste.

En effet

$$\psi^* \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi - \psi \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi^* = \frac{\partial}{\partial t} \left[\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right] \quad (2-12)$$

$$\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^* = \vec{\nabla} \left[\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right] \quad (2-13)$$

Posons

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \quad (2-14)$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right) \quad (2-15)$$

Comme conséquence des équations de mouvement, on obtient

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0 \quad (2-16)$$

Mais ρ n'est pas toujours positive car pour une onde plane $\psi = Ae^{-ipx/\hbar}$

$$\rho = \frac{P_0}{mc} |A|^2 \quad (2-17)$$

On a donc $\text{signe}(\rho) = \text{signe}(E)$. Et par conséquent dans le cas des solutions à énergie négative, ρ ne représente plus une densité de probabilité. Cependant il est possible de donner un sens physique à ρ en l'identifiant à une de charge électrique d'antiparticules portant une charge négative.

2.4 Equation de Dirac pour une particule libre

Le concept qui sous-tend l'équation de Dirac est le fait d'établir une équation d'onde du premier ordre dont le carré redonne l'équation de Klein-gordon.

Pour une particule libre l'équation de Dirac est donnée sous la forme hamiltonienne par l'expression [6]

$$i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{\hbar c}{i} \left(\hat{\alpha}_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \hat{\alpha}_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \hat{\alpha}_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) + \hat{\beta} m_0 c^2 \right] \psi \quad (2-18)$$

Les coefficients $\hat{\alpha}_i$ et $\hat{\beta}$ sont des matrices d'ordre 4×4 et par conséquent la fonction d'onde est un spineur d'ordre quatre.

Elles s'écrivent sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \alpha_i &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad i \equiv x, y, z \\ \beta &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \psi &= \begin{bmatrix} \xi \\ \chi \end{bmatrix} \quad \text{avec : } \xi = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \chi = \begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2-19)$$

Et :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} ; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

En outre les matrices doivent satisfaire les relations d'anticommutation

$$\begin{aligned} \alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k &= 2\delta_{kl} 1 \\ \beta \alpha^k + \alpha^k \beta &= 0 \\ \beta^2 &= \alpha^k \alpha^k = 1 \end{aligned} \quad (2-20)$$

L'équation de Dirac se met sous la forme hamiltonienne :

$$i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H_D \psi \quad (2-21)$$

Avec

$$H_D = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + m c^2 \beta \quad (2-22)$$

2.4.1 Equation de continuité et interprétation probabiliste

En utilisant les règles de correspondance, l'équation de Dirac s'écrit sous la forme

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar c \alpha^k \frac{\partial \psi}{\partial x^k} + mc^2 \beta \psi \quad (2-23)$$

Avec

$$H = -i\hbar c \alpha \vec{\nabla} + mc^2 \beta \quad (2-24)$$

Prenons l'adjoint de (2-23)

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^+}{\partial t} = i\hbar c \vec{\nabla} \psi^+ \alpha + mc^2 \psi^+ \beta \quad (2-25)$$

Il vient

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^+ \psi) = i\hbar \frac{\partial \psi^+}{\partial t} \psi + i\hbar \psi^+ \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar c \vec{\nabla} (\psi^+ \alpha \psi) \quad (2-26)$$

Donc

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0$$

Avec

$$\rho = \psi^+ \psi > 0 \quad (2-27)$$

$$\vec{j} = c \psi^+ \alpha \psi \quad (2-28)$$

2.5 Equation de Dirac pour une particule dans un champ électromagnétique

Le passage de l'équation de Dirac à particule libre vers celle à particule chargée dans un champ électromagnétique s'effectue par les correspondances et les substitutions suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} &\rightarrow \frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{e}{c} V \\ -i\hbar \vec{\nabla} &\rightarrow -i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \end{aligned} \quad (2-29)$$

Où \vec{A} et V sont respectivement le potentiel-vecteur et le potentiel électrique du champ électromagnétique.

L'équation de Dirac devient

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eV)\psi = c\alpha^k (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x^k} - \frac{e}{c} A^k)\psi + mc^2\psi \quad (2-30)$$

Ou encore

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi \quad (2-31)$$

Avec

$$H = c\vec{\alpha}(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}) + mc^2\beta + eV \quad (2-32)$$

Dans la représentation où les matrices $\vec{\alpha}$ et β sont remplacées par leurs expressions

$$H = \begin{pmatrix} mc^2 + eV & c\vec{\sigma}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) \\ c\vec{\sigma}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) & -mc^2 + eV \end{pmatrix} \quad (2-33)$$

Posons

$$\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \quad (2-34)$$

Introduisons les spineurs à deux composantes : $\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$

On obtient un système d'équations couplées :

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = c\vec{\sigma}\vec{\pi}\chi + (mc^2 + eV)\varphi \\ i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = c\vec{\sigma}\vec{\pi}\varphi + (-mc^2 + eV)\chi \end{cases} \quad (2-35)$$

Chapitre 03

Méthodes de calcul

3.1 Introduction

La détermination des propriétés physiques des matériaux telle que la structure électronique, se fait selon les données utilisées, dans le cadre de trois modèles.

- modèle empirique : basé sur les données expérimentales.
- modèle semi empirique : fait appel à des paramètres expérimentaux ou des résultats *ab-initio* pour prédire d'autres propriétés physiques.
- modèle *ab-initio* : utilise uniquement des constantes atomiques comme paramètres d'entrée pour résoudre des équations différentielles telle que l'équation de Schrödinger ou celle de Dirac.

Ce dernier modèle englobe trois classes principales :

1. Méthodes à bases fixes dans lesquelles la fonction d'onde est développée dans une base d'orbitales connues (gaussienne, ondes planes, orbitales atomiques...). dans cette classe figurent la méthode des liaisons forte et la méthode des ondes planes orthogonalisées OPW (Orthogonalized Plane Waves)
2. Méthodes cellulaires où l'espace est divisé en des sphères centrées sur chaque site atomique, et séparées par un espace interstitiel. La solution de l'équation de Schrödinger à l'intérieur de la sphère est raccordée à celle de l'espace interstitiel. Dans cette catégorie se trouve la méthode des ondes planes augmentées APW (de l'anglais : Augmented Plane Waves) et la méthode KKR du nom de ses auteurs Korringa, Khon et Rostoker.
3. méthodes linéarisées : elles sont conçues de sorte à dépasser les insuffisances rencontrées dans les méthodes précédentes et unir leurs avantages. Parmi celles-ci, on cite la méthode linéarisée des ondes planes augmentées LAPW (de l'anglais : Linearized Augmented Plane Waves) et la méthode LMTO utilisée dans le cadre de ce travail et dont les principales caractéristiques seront rappelées dans les paragraphes suivants.

3.2 Méthode cellulaire

L'équation centrale de la mécanique quantique qui permet de calculer les niveaux d'énergie de n'importe quel système est celle de Schrödinger donnée par l'expression :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right) \psi_k(r) = E(r) \psi_k(r) \quad (3-1)$$

La première méthode pour calculer la structure de bandes d'un cristal ; mise à part la *méthode des liaisons fortes* ; était celle proposée par Wigner et Seitz en 1933 [7,8].

Elle consiste à diviser le cristal en cellules polyédriques contenant un seul atome. Le potentiel dans chaque cellule est supposé à symétrie sphérique.

En utilisant la relation de Bloch [9]

$$\psi_k(r + R) = e^{ik \cdot R} \psi_k(r) \quad (3-2)$$

Il suffit de résoudre l'équation de Schrödinger (3-1) à l'intérieur d'une seule maille primitive et grâce à la condition (3-2), la fonction d'onde peut être déterminée pour n'importe quelle autre maille.

Mais les solutions de l'équation de Schrödinger ne seront pas toutes acceptées car $\psi(r)$ et $\nabla \psi(r)$ doivent être continus lorsque r traverse le bord de la maille primitive. Par conséquent, la continuité va imposer les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{cases} \psi(r_0) = e^{-ik \cdot R} \psi(r_0 + R) \\ \hat{n}(r) \cdot \nabla \psi(r_0) = -e^{-ik \cdot R} \hat{n}(r_0 + R) \cdot \nabla \psi(r_0 + R) \end{cases} \quad (3-3)$$

Avec r_0 et $r_0 + R$ sont des points sur la surface de la maille primitive de Wigner-Seitz et $\hat{n}(r)$ est la normale dirigée vers l'extérieur de la surface.

Puisque le potentiel est choisi à symétrie sphérique, alors à l'intérieur de la maille primitive de Wigner-Seitz la solution de l'équation de Schrödinger est donnée sous la forme [10]

$$\psi_{lm}(r) = Y_{lm}(\theta, \phi) \chi_l(r) \quad (3-4)$$

Où les $Y_{lm}(\theta, \phi)$ sont les harmoniques sphériques et $\chi_l(r)$ satisfait à l'équation différentielle ordinaire [11]

$$\chi_l''(r) + \frac{2}{r} \chi_l'(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - U(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \chi_l(r) = 0 \quad (3-5)$$

Pour $U(r)$ donné et E quelconque $\chi_{l,E}$ est unique comme solution à l'origine.

Ces $\chi_{l,E}$ sont calculées numériquement.

La méthode cellulaire a deux difficultés majeures :

- Les difficultés de calcul qui apparaissent lors de la vérification numérique de la condition aux limites sur la surface de la maille primitive de Wigner-Seitz qui a souvent une forme polyédrique très complexe.
- Les difficultés relatives au fait de savoir si un potentiel présent à un ion isolé constitue la meilleure approximation du potentiel correct à l'intérieur de la maille primitive de Wigner-Seitz toute entière. En effet, le potentiel utilisé dans les calculs cellulaires possède une dérivée discontinue chaque fois que l'on traverse la limite entre deux mailles primitives [11].

3.3 Méthode SPR-LMTO-ASA

3.3.1 Approximation *muffin-tin*

Dans l'approximation « *muffin-tin* » le cristal est représenté, comme dans les autres méthodes cellulaires, par des sphères de rayon s et de volume Ω centrées sur chaque site atomique et séparées par un espace interstitiel.

Le potentiel est supposé à symétrie sphérique à l'intérieur de chaque sphère et constant dans la région interstitielle.

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} V(r) & , r < s \\ V_c & , r > s \end{cases} \quad (3-6)$$

3.3.2 Approximation de la Sphère Atomique (ASA)

La méthode proposée par Wigner-Seitz en 1933 était parmi les premières méthodes de calcul de la structure de bandes.

Dans cette méthode, le cristal est divisé à des cellules polyédriques de sorte que le potentiel à l'intérieur de chaque cellule est supposé à symétrie sphérique.

La solution de l'équation de Schrödinger est donnée par l'expression :

$$\Phi_L(E, r) \equiv u_l(E, r) i^l Y_L(\hat{r}) \quad (3-7)$$

L'indice L représente désormais la combinaison des nombres quantiques l et m

$u_l(E, r)$ est la solution de l'équation radiale de Schrödinger. Ainsi, la fonction d'onde pour un électron de Valence dans le cristal a la forme :

$$\Psi_k(E, r) = \sum_L C_L(k) \sum_R e^{ik \cdot R} \theta(r - R) \Phi_L(E, r - R) \quad (3-8)$$

Où R est le vecteur du réseau

$\theta(r - R)$ est une fonction égale à l'unité à l'intérieur de la cellule située à l'origine est égale à zéro à l'extérieur.

Si, pour une énergie et un vecteur d'onde \vec{k} on trouve les coefficients $C_L(k)$ et par conséquent $\Psi_k(E, r)$, et si les dérivées de $\Psi_k(E, r)$ sont des fonctions continues en passant d'une cellule de Wigner-Seitz à une autre, la fonction (3-8) est la solution de l'équation de Schrödinger dans le cristal et E est la valeur propre de l'énergie pour le vecteur d'onde \vec{k} .

Il est clair que les conditions aux limites dépendent du vecteur \vec{k} et de la structure du cristal.

Dans l'approximation ASA, la cellule de Wigner-Seitz est remplacée par une sphère atomique de même volume et les conditions aux limites sont remplacées par celles spécifiées par la dérivée logarithmique définie par :

$$D_l(E) \equiv su'_l(E, s)/u_l(E, s) \quad (3-9)$$

S : est le rayon de la sphère atomique défini à partir de la condition $s = (3\Omega_0/4\pi)^{1/3}$

Ω_0 est le volume de la cellule de Wigner-Seitz.

3.3.3 L'orbital muffin-tin non relativiste

Considérons une sphère atomique de sorte que le potentiel à l'intérieur de la sphère est à symétrie sphérique et à l'extérieur l'énergie cinétique $q_0^2 = E - V_c = 0$.

À l'intérieur de la sphère, la fonction d'onde d'un électron va satisfaire l'équation de Schrödinger qui conduit à la séparation des variables (partie radiale et harmonique sphérique) et à l'extérieur, on a l'équation de Laplace $\nabla^2 \Psi = 0$.

Dans le cas général la partie radiale de la fonction d'onde a la forme [12]

$$\Phi_l = a_l r^l + b_l r^{-l-1} \quad (3-10)$$

Les coefficients a_l et b_l sont déterminés à partir des conditions de continuité et de différentiabilité de la fonction d'onde sur la surface de la sphère.

Ainsi la fonction radiale est donnée par:

$$\Phi_l(r, E) = \begin{cases} u_l(r, E), & r \leq s \\ \left[\frac{D_l + l + 1}{2l + 1} \left(\frac{r}{s}\right)^l + \frac{l - D_l}{2l + 1} \left(\frac{r}{s}\right)^{-l-1} \right] u_l(s, E), & r > s \end{cases} \quad (3-11)$$

$u_l(r, E)$ est la solution de l'équation de Schrödinger radiale dans la sphère atomique de rayon s .

Mais ces fonctions ne sont pas utilisées comme fonctions de base à cause de la partie

divergente $\frac{D_l + l + 1}{2l + 1} \left(\frac{r}{s}\right)^l$ pour $r > s$.

Alors les fonctions d'onde sont écrites sous la forme :

$$\bar{\Phi}_l(r, D) = \begin{cases} \Phi_l(r, D) - \frac{D + l + 1}{2l + 1} \frac{\Phi_l(s, D)}{\Phi_l(s, l)} \Phi_l(r, l), & r \leq s \\ \frac{l - D}{2l + 1} \left(\frac{r}{s}\right)^{-l-1} \Phi_l(s, D), & r > s \end{cases} \quad (3-12)$$

Cette expression de la fonction d'onde est obtenue à partir de $\Phi_l(r, E)$ par la suppression de la partie divergente.

Pour $r \leq s$, l'expression $\left(\frac{r}{s}\right)^l$ est remplacée par $\Phi_l(r, l)/\Phi_l(s, l)$ et la variable E est substituée par la dérivée logarithmique D correspondant à l'énergie E .

En utilisant la fonction (3-12), on écrit la fonction de base :

$$\bar{\Phi}_L(r, D) = i^l Y_L(\hat{r}) \bar{\Phi}_L(r, D) \quad (3-13)$$

Pour former le cristal, considérons l'approximation ASA c'est-à-dire remplacer chaque site atomique par une sphère équivalente à la cellule de Wigner-Seitz et pour plus de simplicité, on suppose que chaque cellule contient un seul atome.

Dans ces conditions et pour écrire les fonctions de base, il faut tenir compte de toutes les contributions des autres sites atomiques situés à R par rapport à l'atome central.

Pour décrire tout le cristal, la somme de Bloch s'écrit :

$$\chi_L^k(r, D) = \sum_{R \neq 0} e^{ik \cdot R} \bar{\Phi}_L(r-R, D) \quad (3-14)$$

La contribution (tail) venant du site R est donnée par :

$$\bar{\Phi}_L(r-R, D) = i^l Y_L(\hat{r}, D) \left| \frac{r-R}{s} \right|^{-l-1} \frac{l-D}{2l+1} \Phi_l(s, D) \quad (3-15)$$

En utilisant le théorème de l'additivité [13]

$$i^l Y_L(\hat{r}, D) \left| \frac{r-R}{s} \right|^{-l-1} = 4\pi \sum_{L'L''}^{l''=l+l'} C_{LL'L''} \frac{(2l-1)!!}{(2l-1)!!(2l'+1)!!} \times (-i)^{l''} \left(\frac{R}{s}\right)^{-l''-1} Y_{L''}^*(\hat{R}) \times i^{l'} \left(\frac{r}{s}\right)^{l'} Y_{L'}(\hat{r}) \quad (3-16)$$

Pour que la fonction soit continue et différentiable à la surface de la sphère, il faut établir une augmentation c'est-à-dire utiliser $\Phi_{l'}(r, l')/\Phi_{l'}(s, l')$ au lieu de $(r/s)^{l'}$ dans (3-16) et finalement, on obtient l'expression des fonctions de base :

$$\chi_L^k(r, D) = \begin{cases} \Phi_L(r, D) - \Phi_l(s, D) \frac{l-D}{2l+1} \sum_{L'} [S_{LL}^k - \frac{l+1+D}{l-D} 2(2l+1)\delta_{LL}] \times \Phi_{L'}(r, l') \frac{1}{\Phi_{l'}(s, l')^{2(2l'+1)}}, & r \leq s \\ \Phi_l(s, D) \frac{l-D}{2l+1} \left[i^l Y_L(r) \left(\frac{r}{s}\right)^{-l-1} + \sum_{L'} S_{LL}^k \times i^{l'} Y_{L'}(\hat{r}) \left(\frac{r}{s}\right)^{l'} \frac{1}{2(2l'+1)} \right], & r > s \end{cases} \quad (3-17)$$

S_{LL}^k est la constante de structure donnée par

$$S_{LL}^k = \sum_{R \neq 0} e^{ik \cdot R} S_{LL}(R) \quad (3-18)$$

$$S_{LL}(R) = -\frac{8\pi(2l+2l'-1)!!}{(2l-1)!!(2l'-1)!!} \times \sum_{L''}^{l''=l+l'} C_{LL'L''} (-i)^{l''} \left(\frac{R}{s}\right)^{-l''-1} Y_{L''}(\hat{R}) \quad (3-19)$$

Avec $C_{LL'L'}$, sont les coefficients de Gaunt données par :

$$C_{LL'L'} = \int Y_L(\hat{r}) Y_{L'}^*(\hat{r}) Y_{L''}(\hat{r}) d\Omega \quad (3-20)$$

La combinaison linéaire des orbitales *muffin-tin* donne la solution de l'équation de Schrödinger pour tout le cristal.

Cette combinaison s'écrit sous la forme :

$$\Psi_k(r) = \sum_L C_L(k) \sum_R e^{ik \cdot R} \chi_L(k, r-R, D_l(E)) \quad (3-21)$$

3.3.4 Les orbitales *muffin-tin* relativistes

Pour tenir compte des effets relativistes, l'équation de Schrödinger doit être remplacée par celle de Dirac qui est donnée par :

$$\left[c\alpha \cdot p + \beta c^2/2 + V(r) \right] \Psi_k(r) = (c^2/2 + E) \Psi_k(r) \quad (3-22)$$

Où c est la vitesse de la lumière.

$p = -i\nabla$ est l'opérateur du moment.

α et β sont les matrices de Dirac à quatre dimensions

La solution de l'équation de Dirac avec un potentiel à symétrie sphérique est donné par :

$$\Phi_K(r, E) = i^{-l} Z_K(\hat{r}) \Phi_\kappa(r, E) \quad (3-23)$$

Avec $K = (\kappa, \mu)$ et κ le nombre quantique relativiste.

$\Phi_\kappa(r, E)$ est la matrice des solutions radiales telles que

$$\Phi_\kappa(r, E) = \begin{pmatrix} g_\kappa(r, E) \\ if_\kappa(r, E) \end{pmatrix} \quad (3-24)$$

$Z_K(\hat{r})$ est la matrice des fonctions angulaires de spin

$$Z_K(\hat{r}) = \begin{pmatrix} \chi_\kappa^\mu(\hat{r}) & 0 \\ 0 & \chi_{-\kappa}^\mu(\hat{r}) \end{pmatrix} \quad (3-25)$$

$$\chi_\kappa^\mu(\hat{r}) = \sum_{m=\pm\frac{1}{2}} C_{l, \mu-m, 1/2, m}^{j\mu} Y_{l, \mu-m}(\hat{r}) \chi(m) \quad (3-26)$$

$C_{l, \mu-m, 1/2, m}^{j\mu}$ sont les coefficients de Klebsch-Gordan.

$Y_{lm}(\hat{r})$ sont les harmoniques sphériques.

J est la valeur propre de l'opérateur de moment total $j = l \pm \frac{1}{2}$ $\chi\left(\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\chi\left(-\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

sont les spineurs de Pauli.

La fonction radiale est normalisée à l'intérieur de la sphère *muffin-tin*

$$\langle \Phi_{\kappa}(r, E | \Phi_{\kappa}(r, E) \rangle = \int_0^s r^2 dr (g_{\kappa}^2(r, E) + f_{\kappa}^2(r, E)) = 1 \quad (3-27)$$

La forme analogue de la dérivé logarithmique de la partie radiale est donnée par :

$$D_{\kappa}(E) = s \frac{cf_{\kappa}(s, E)}{g_{\kappa}(s, E)} - \kappa - 1 \quad (3-28)$$

En tenant compte du fait que $E = V_c = 0$ dans la région interstitielle, l'équation radiale de Dirac s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1-\kappa}{r} \right) \tilde{f}_{\kappa}(r) &= 0 \\ \left(\frac{d}{dr} + \frac{1+\kappa}{r} \right) \tilde{g}_{\kappa}(r) - c\tilde{f}_{\kappa}(r) &= 0 \end{aligned} \quad (3-29)$$

Les solutions sont [14]

$$\tilde{\Phi}_{\kappa}(r, D) = \begin{pmatrix} g_{\kappa}(D, r) \\ if_{\kappa}(D, r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (r/s)^{\kappa} \\ i(2\kappa+1)/cs (r/s)^{\kappa-1} \end{pmatrix}, \quad D = \kappa \quad (3-30)$$

$$\tilde{\Phi}_{\kappa}(r, D) = \begin{pmatrix} g_{\kappa}(D, r) \\ if_{\kappa}(D, r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (r/s)^{-\kappa-1} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad D = -\kappa - 1 \quad (3-31)$$

Et

$$\tilde{\Phi}_{\kappa}(r, D) = i^l Z_{\kappa}(\hat{r}) \tilde{\Phi}_{\kappa}(r, D) \quad (3-32)$$

L'expression des solutions singulières à l'origine (3-30,3-31) c'est-à-dire ($D = -l - 1$) est :

$$\tilde{\Phi}_{\kappa}(r, -l - 1) = i^l Z_{\kappa}(\hat{r}) \begin{pmatrix} (r/s)^{-l-1} \\ i(-l-1+\kappa+1)/sc (r/s)^{-l-2} \end{pmatrix} \quad (3-33)$$

Et les solutions régulières ($D=l$):

$$\tilde{\Phi}_{\kappa}(r, l) = i^l Z_{\kappa}(\hat{r}) \begin{pmatrix} (r/s)^l \\ i(1+\kappa+1)/sc (r/s)^{l-1} \end{pmatrix} \quad (3-34)$$

Ainsi dans la région interstitielle, la solution de l'équation de Dirac qui doit être continue à la surface de la sphère est donnée par :

$$\Phi_K(r, D) = i^l Z_K(\hat{r}) \times \begin{cases} \begin{pmatrix} g_K(D, r) \\ if_K(D, r) \end{pmatrix}, & r \leq s \\ \left(\frac{D+l+1}{2l+1} \tilde{\Phi}_K(r, l) + \frac{l-D}{2l+1} \tilde{\Phi}_K(r, -l-1) \right) g_K(s, D), & r > s \end{cases} \quad (3-35)$$

Par analogie à l'équation (3-12), on écrit des nouvelles fonctions en supprimant les parties divergentes. Et par conséquent, on obtient des solutions de l'équation de Dirac

$$\bar{\Phi}_K(r, D) = i^l Z_K(\hat{r}) \times \begin{cases} \Phi_K(r, D) - \frac{D+l+1}{2l+1} \frac{g_K(s, D)}{g_K(s, l)} \tilde{\Phi}_K(r, l), & r \leq s \\ \frac{l-D}{2l+1} \tilde{\Phi}_K(r, -l-1) g_K(s, D), & r > s \end{cases} \quad (3-36)$$

Pour décrire le cristal, on écrit la somme de Bloch :

$$\chi_K^k(r, D) = \sum_R e^{ik \cdot R} \bar{\Phi}_K(r - R, D) \quad (3-37)$$

et on développe la contribution de la fonction provenant d'un site situé à R .

Pour cette raison, on utilise la forme généralisée du théorème d'additivité

$$i^l Z_K(\hat{r}) \tilde{\Phi}_K(|r - R|, -l - 1) = \sum_{K'} i^{l'} Z_{K'}(\hat{r}) \tilde{\Phi}_{K'}(r, l') \frac{S_{KK}(R)}{-2(2l' + 1)} \quad (3-38)$$

Où

$$\begin{aligned} S_{KK}(R) &= \sum_{LL'}^{l''=l+l'} \left(-\frac{1}{2} \right) \frac{4\pi(2l''-1)!!}{(2l-1)!!(2l'-1)!!} C_{l', \mu'-m, 1/2, m}^{j, \mu'} \\ &\times C_{L'L'L}(-i)^{l''} \left(\frac{R}{s} \right)^{-l''-1} Y_{L'}^*(R) C_{l, \mu-m, 1/2, m}^{j, \mu} \end{aligned} \quad (3-39)$$

et $C_{L'L'L}$ sont aussi les coefficients de Gaunt.

On effectue une augmentation par analogie aux cas non relativiste pour obtenir finalement l'expression exacte des orbitales MT relativistes à l'intérieur de la sphère

$$\begin{aligned} \chi_K^k(r, D) &= i^l Z_K(\hat{r}) \Phi_K(r, D) - \frac{D-l}{2l+1} g_K(s, D) \times \sum_{K'} i^{l'} Z_{K'}(\hat{r}) \Phi_{K'}(r, l') \frac{1}{g_K(s, l')} \left(-\frac{1}{2} \frac{1}{2l'+1} \right) \\ &\times \left(S_{KK}^k - \delta_{KK} \frac{D+l+1}{D-l} 2(2l+1) \right) \end{aligned} \quad (3-40)$$

S_{KK}^k est la constante de structure .

3.4 SPR-LMTO-ASA

La méthode SPR-LMTO-ASA (Relativistic Spin-Polarized LMTO) est utilisée pour étudier la structure de bandes des systèmes aux spins polarisés.

Les systèmes ferromagnétiques possèdent de telle structure d'où la nécessité d'utiliser cette méthode pour décrire le système étudié dans ce travail.

Elle consiste à exprimer la fonction d'onde du cristal comme une combinaison linéaire des orbitales muffin-tin relativistes puis résoudre l'équation de Dirac avec un potentiel dépendant du spin.

Il a été montré par H.Ebert [15] Feder et al [16], Strange et al [17] et Cortona et al [18] que le potentiel dépendant du spin dans l'équation de Dirac conduit à un nombre infini d'équations couplées de la fonction radiale.

Pour remédier à cette situation, on néglige le couplage spin-orbite d'ordre $(1/c^2)(1/r)[dB(r)/dr]$ entre les états avec $\Delta l = \pm 2$ et $\Delta j = \pm \frac{1}{2}$ de sorte que l'ensemble infini se décompose à un ensemble de quatre (pour $|\mu| \leq l - 1/2$) ou deux (pour $|\mu| = l + 1/2$) équations couplées pour chaque $l\mu$.

La solution de l'équation de Dirac à l'intérieur de la sphère atomique s'écrit sous la forme

$$\psi(E,r) = \sum_{l\mu} \sum_{\eta=1,2} c_{l\mu}^{\eta} \phi_{l\mu}^{s,\eta}(E,r) \quad (3-41)$$

Avec

$$\phi_{l\mu}^{n,s}(E,r) = i^l \begin{pmatrix} g_{l\mu}^{s,\eta}(E,r) & \chi_{l\mu}^s(r) \\ f_{l\mu}^{s,\eta}(E,r) & \chi_{l-2s,\mu}^s(r) \end{pmatrix} \quad (3-42)$$

L'expression de la fonction d'onde avec une dérivée logarithmique arbitraire D est donnée par

$$\phi_{l\mu}^s(D,r) = \sum_{\eta} \left[a_{l\mu}^{\eta}(D) \phi_{l\mu}^{\eta,s}(E_v, r) + b_{l\mu}^{\eta}(D) \dot{\phi}_{l\mu}^{\eta,s}(E_v, r) \right] \quad (3-43)$$

3.5 Convergence et stabilité

La cohérence est obtenue par un processus itératif qui consiste à construire le potentiel d'entrée $V_{n+1}(r)$ à la $(n+1)^{ième}$ itération à partir de la densité de sortie $\rho_n^{out}(r)$ de la $(n)^{ième}$ itération.

Théoriquement, la convergence est obtenue lorsque le potentiel $V_{n+1}(r)$ conduit à une densité

$$\rho_{n+1}^{out}(r) = \rho_{n+1}^{in}(r)$$

Où

$$\rho_{n+1}^{in}(r) = \alpha_n \rho_n^{in}(r) + (1 - \alpha_n) \rho_n^{out}(r) \quad (3-43)$$

α_n est le facteur de mélange (mixing). Il varie entre zéro et un selon le problème traité et la précision escomptée.

CHAPITRE 04

Les propriétés magnéto-optiques

4.1. L'optique classique

4.1.1. Les équations de Maxwell

L'interaction des radiations électromagnétiques avec un milieu magnétique est décrite par les équations de Maxwell (en c.g.s) suivantes :

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \vec{0} \quad (4-1)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (4-2)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \vec{J} \quad (4-3)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 4\pi\rho \quad (4-4)$$

\vec{B} : L'induction magnétique

\vec{H} : Le champ magnétique macroscopique

\vec{D} : Déplacement électrique

ρ : La densité de charge

Les équations (4-1) et (4-2) sont satisfaites par un potentiel-vecteur et potentiel scalaire tel que $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$

et

$$\vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \phi \quad (4-5)$$

Si l'on remplace les expressions de \vec{E} et \vec{B} ci-dessus dans l'équation de Ampère et en utilisant les identités vectorielles, on aura :

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \vec{J} + \frac{1}{c} \vec{\nabla} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) \quad (4-6)$$

Cette dernière équation a le caractère d'une équation d'onde car elle combine les dérivées secondes de temps et de l'espace.

L'équation de Coulomb (4-4) donne

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi\rho = -\vec{\nabla}^2 \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) \quad (4-7)$$

En utilisant la jauge de Coulomb : $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$

On aura : $\vec{\nabla}^2 \phi = -4\pi\rho$

On obtient une relation similaire pour le potentiel vecteur à partir de l'équation (4-3) en utilisant la définition [19]

$$\nabla^2 \vec{A} = -\frac{4\pi}{c} \vec{J} \quad (4-8)$$

Les équations de Maxwell sont complétées par d'autres équations appelées *équations de matériau*, qui introduisent les propriétés spécifiques du matériau à travers la conductivité électrique σ , la permittivité diélectrique ε et la perméabilité magnétique μ .

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} = \vec{E} + 4\pi \vec{P} \quad (4-9)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} = \vec{H} + 4\pi \vec{M} \quad (4-10)$$

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad (4-11)$$

\vec{M} est l'aimantation.

La conductivité électrique et la constante diélectrique sont des quantités complexes :

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i \frac{4\pi}{\omega} \sigma_1 \quad (4-12)$$

$$\sigma = \sigma_1 + i \sigma_2 \quad (4-13)$$

Elles sont reliées par la relation

$$\varepsilon = 1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma \quad (4-14)$$

Les paramètres d'un matériau tel que ε et σ gèrent la charge et le courant des champs en présence de la matière, tandis que l'indice de réfraction \hat{N} est utilisé pour décrire la propagation des ondes électromagnétique dans un milieu quelconque

Avec

$$\hat{N} = \hat{n} + i\hat{k} = \left[\varepsilon_1 \cdot \mu_1 + i \frac{4\pi\mu_1\sigma_1}{\omega} \right]^{1/2} = [\hat{\varepsilon} \cdot \mu_1]^{1/2}. \quad (4-15)$$

4.2. Les effets magnéto-optiques

Les effets magnéto optiques résultent de l'interaction des radiations avec des matériaux aimantés spontanément ou soumis à un champ magnétique externe.

Cette interaction conduit à deux phénomènes :

- Un changement de l'état de polarisation de la lumière en réflexion ou en transmission qui conduit respectivement à *l'effet Kerr* et *l'effet Faraday*.
- La différence dans l'absorption des radiations polarisées circulairement (gauche ou droite) qui conduit au phénomène de *Dichroïsme circulaire*.

Du point de vue microscopique et dans le domaine visible des radiations, les effets magnéto optiques résultent de l'excitation des électrons de la bande de conduction par contre dans le régime des rayons X, ces phénomènes sont dus aux transitions des électrons des niveaux de cœur vers des niveaux dans la bande de valence.

A partir des considérations de symétrie, les effets magnéto optiques sont causés aussi par la réduction de la symétrie due à l'ordre magnétique [20]. Mais, ces phénomènes ne peuvent être traités que si l'on tient compte de couplage Spin-Orbite dans les calculs.

4.2.1. L'effet Kerr

L'effet Kerr magnéto optique MOKE a été découvert par le physicien écossais John Kerr en 1877-1878. Il avait constaté que lorsque la lumière plane est réfléchié à la surface d'une substance magnétique après une incidence normale, devient polarisée elliptiquement de sorte que le grand axe de l'ellipse subit une rotation en respectant le plan de polarisation du faisceau incident [21].

En spectroscopie magnéto optique et pour une lumière incidente polarisée linéairement, on distingue deux modes de polarisation :

Modes s et p dans lesquels, le champ électrique est orienté respectivement perpendiculairement ou parallèlement au plan d'incidence.

L'effet Kerr et en fonction de l'orientation du vecteur de l'aimantation par rapport à la surface de réflexion et le plan d'incidence à la fois ,représente trois types de géométries :

4.2.1.1. L'effet Kerr polaire (P-MOKE)

Sa géométrie est conçue de sorte que le vecteur de l'aimantation soit orienté perpendiculairement à la surface réfléchissante et parallèlement au plan d'incidence figure (1-a).

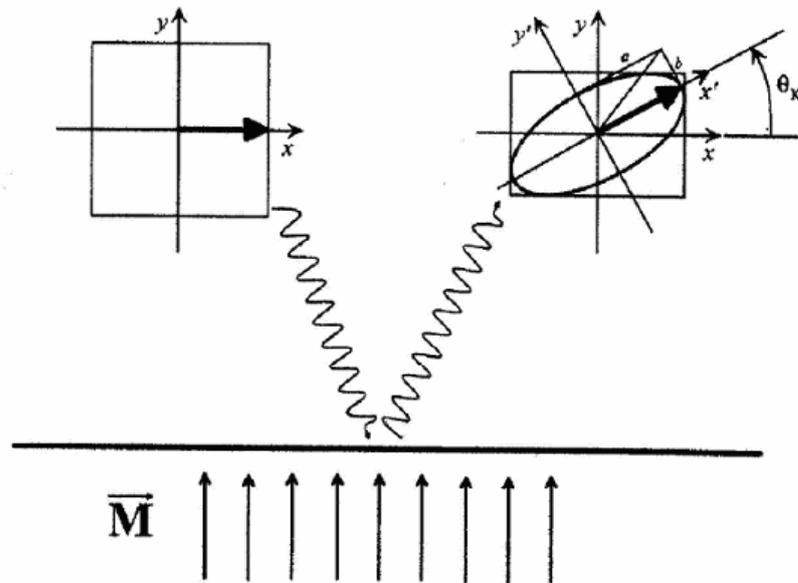


Figure 1.a. Effet Kerr Polaire

L'effet Kerr dans sa géométrie polaire est le plus utilisé dans les études théoriques et expérimentales grâce à ces applications technologiques (enregistrements magnétiques). Puisque toutes les propriétés magnéto optiques sont liées directement à la conductivité optique ; dans un système téragonal dans lequel l'aimantation est orientée suivant l'axe z , le tenseur de la conductivité est donné par l'expression [22]

$$\hat{\sigma}(\omega) = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (4-16)$$

La lumière plane réfléchiée sur une surface métallique d'une couche mince, devient polarisée elliptiquement et son grand axe subit une légère rotation.

Dans ces conditions, l'angle complexe de Kerr est donné par la relation [23]

$$\frac{1 + \tan \eta_k e^{i2\theta_k}}{1 - \tan \eta_k} = \frac{(1 + n_+)(1 - n_-)}{(1 - n_+)(1 + n_-)} \quad (4-17)$$

Où

θ_k est la rotation Kerr

η_k est l'ellipticité de Kerr

n_{\pm}^2 sont les valeurs propres du tenseur $\hat{\sigma}(\omega)$ donné par l'équation (4-16). Elles sont données par :

$$n_{\pm}^2 = 1 + \frac{4\pi i}{\omega} (\sigma_{xx} \pm \sigma_{xy}) \quad (4-18)$$

Puisque θ_k et η_k pour la plupart des matériaux sont inférieurs à 1° , la relation (4-17) s'écrit sous la forme

$$\theta_k + i\eta_k \approx \frac{-\sigma_{xy}}{\sigma_{xx} \sqrt{1 + \left(\frac{4\pi i}{\omega}\right) \sigma_{xx}}} \quad (4-19)$$

4.2.1.2. L'effet Kerr longitudinal (L-MOKE)

Dans cette géométrie, le vecteur de l'aimantation est orienté parallèlement à la surface de réflexion et au plan d'incidence en même temps figure (1-b).

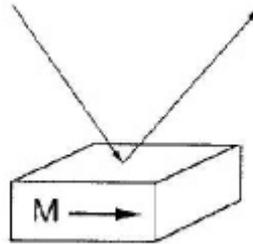


Figure.1.b. l'effet Kerr longitudinal

En utilisant la géométrie *L-MOKE*, le tenseur diélectrique s'écrit sous la forme :

$$\hat{\epsilon}(\omega) = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & 0 & \epsilon_{xz} \\ 0 & \epsilon_{xx} & 0 \\ -\epsilon_{xz} & 0 & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (4-20)$$

L'angle complexe de Kerr est donnée par la relation [24]

$$\theta_{s,p}^L + i\eta_{s,p}^L = -\frac{2\varepsilon_{xz} \sin \varphi \cos \varphi \sqrt{\varepsilon_{xx}}}{D} \quad (4-21)$$

Avec

$$D = \left(\sqrt{\varepsilon_{xx}(\varepsilon_{zz} - \sin^2 \varphi)} + \sqrt{\varepsilon_{zz}(\varepsilon_{xx} - \sin^2 \varphi)} \right) \left(\sqrt{\varepsilon_{xx} - \sin^2 \varphi} \pm \cos \varphi \right) \left(\sqrt{\varepsilon_{xx} \varepsilon_{zz}} \cos \varphi \mp \sqrt{\varepsilon_{zz} - \sin^2 \varphi} \right) \quad (4-22)$$

φ : est l'angle d'incidence

Les signes (+) et (-) correspondent respectivement aux polarisations p et s de la lumière incidente.

Dans le cas où $\varepsilon_{xx} \approx \varepsilon_{zz}$, la formule (4-21) devient

$$\theta_{s,p}^L + i\eta_{s,p}^L = -\frac{\varepsilon_{xz} \sin \varphi (\sqrt{\varepsilon_{xx} - \sin^2 \varphi} \pm \sin \varphi \tan \varphi)}{(\varepsilon_{xx} - 1)(\varepsilon_{xx} - \tan^2 \varphi) \sqrt{\varepsilon_{xx} - \sin^2 \varphi}} \quad (4-23)$$

4.2.1.3. L'effet Kerr transversal (T-MOKE)

Cet effet est observé lorsque le vecteur de l'aimantation est dirigé perpendiculairement au plan d'incidence figure (1-c).

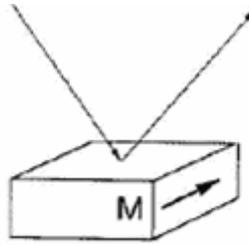


Figure 1-c. L'effet Kerr transversal

Le T-MOKE ne mesure pas la rotation ou l'ellipticité, mais il mesure la différence dans l'intensité de la lumière réfléchie. Il existe uniquement lorsque le mode de la lumière incidente est de type p .

La différence de la réflectivité est donnée par :

$$\delta_K = \text{Re} \left[\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_{xz} \sin 2\varphi}{\varepsilon_{xx}^2 \cos^2 \varphi - \varepsilon_0 \varepsilon_{xx} + \varepsilon_0^2 \sin^2 \varphi} \right] \quad (4-24)$$

Le *T-MOKE* est utilisé essentiellement dans l'étude des propriétés magnétiques notamment l'observation des domaines magnétiques sur les surfaces des matériaux magnétiques.

4.3. L'effet Faraday

en 1845, Michael Faraday a constaté que lorsqu'un bloc de verre est soumis à un champ magnétique, devient optiquement actif. En effet lorsqu'une lumière plane traverse un verre parallèlement au champ magnétique appliqué, son plan de polarisation subit une rotation ϕ_F [25].

Ce phénomène est expliqué par le fait que les indices de réfraction n_+ et n_- pour la lumière polarisée circulairement droite et gauche dans une substance inactive, deviendront différents l'un de l'autre lorsque cette dernière est soumise à un champ magnétique.

La lumière polarisée linéairement peut-être représentée comme une superposition de deux ondes l'une polarisée circulairement droite et l'autre polarisée circulairement gauche. Par conséquent lorsqu'une lumière polarisée linéairement traverse un matériau aimanté ou soumis à un champ magnétique de sorte que $n_+ \neq n_-$, les deux ondes polarisées circulairement (droite, gauche) vont se propager avec deux vitesses différentes $\frac{c}{n_+}$ et $\frac{c}{n_-}$.

Alors le plan de polarisation va subir une rotation d'un angle θ_F donné par l'expression

$$\theta_F = \frac{\omega}{2c}(n_+ - n_-).L \quad (4-25)$$

Où ω et c sont respectivement la fréquence et la vitesse de la lumière.

L : est le chemin optique du faisceaux lumineux dans le milieu considéré.

La rotation Faraday θ_F et l'ellipticité η_F sont définies en utilisant les mêmes conventions adoptées pour l'effet Kerr polaire.

Pour les petits angles, l'expression de l'effet Faraday est donnée par

$$\phi_F = \theta_F + i\eta_F \approx \frac{i\varepsilon_{xy}}{\varepsilon_{xx}} \frac{\omega L}{2c} = \frac{\sigma_{xy}}{\sqrt{1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma_{xx}}} \left(\frac{2\pi L}{c} \right) \quad (4-26)$$

Dans la géométrie longitudinale, l'effet Faraday est donné par l'expression approximative [23]

$$\phi_F = \theta_F + i\eta_F \approx \frac{i\varepsilon_{xy}}{\sqrt{\varepsilon_{xx}}} \frac{\omega L}{2c} \tan \varphi_l \quad (4-27)$$

Où φ_l est l'angle de réfraction.

L'effet Faraday est utilisé pour l'étude des propriétés magnéto optiques des semi-conducteurs transparents

4.4 Formalisme de Kubo

La réponse d'un milieu aux ondes électromagnétiques est décrite par la conductivité électrique ou la constante diélectrique qui dépendent toutes les deux de la fréquence de l'onde électromagnétique incidente. D'où la nécessité de trouver un lien entre ces paramètres et les changements des états électroniques afin de comprendre l'interaction des ondes électromagnétiques avec les solides.

La meilleure manière pour appréhender cette tâche est d'utiliser le formalisme de *Kubo* dans lequel la conductivité est interprétée en termes de transitions interbandes.

Soit un solide constitué de N électrons. À la présence d'un potentiel vecteur est un potentiel scalaire, l'Hamiltonien de système s'écrit sous la forme [26]

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N \left(p_i + \frac{e}{c} A(r_i) \right)^2 + \sum_{i=1, k=1}^{N, M} V_k(r_i - R_k) + \frac{1}{2} \sum_{i=1, j=1}^{N, N} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} - \sum_{i=1}^N e\Phi(r_i) \quad (4-28)$$

Le premier terme traduit le couplage entre les ondes électromagnétiques (décrites par le potentiel vecteur) et les électrons décrits par les moments p_i et les positions r_i .

Le deuxième terme définit l'interaction entre les ions et les électrons, elle est donnée par le potentiel V_k .

Le troisième terme décrit l'interaction électron-électron et le dernier terme représente un potentiel scalaire externe.

En général, le Hamiltonien s'écrit sous la forme

$$H = H_0 + H_{\text{int}}$$

H_0 est le Hamiltonien en l'absence de $A(r)$ et $\Phi(r)$ tels que

$$H_0 = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N p_i^2 + \sum_{i=1, k=1}^{N, M} V_k(r_i - R_k) + \frac{1}{2} \sum_{i=1, j=1}^{N, N} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \quad (4-29)$$

H_{int} décrit l'interaction du système avec $A(r)$ et $\Phi(r)$. Il est donné par l'expression :

$$H_{\text{int}} = \frac{e}{2mc} \sum_{i=1}^N [p_i \cdot A(r_i) + A(r_i) \cdot p_i] - \sum_{i=1}^N e\Phi(r_i) \quad (4-30)$$

Dont cette expression nous avons négligé les termes en A^2 .

L'opérateur de la densité de courant électrique est donné par :

$$J(r) = -\frac{e}{2} \sum_{i=1}^N [v_i \delta\{r - r_i\} + \delta\{r - r_i\} v_i] \quad (4-31)$$

Dans la limite non relativiste la vitesse s'écrit sous la forme :

$$v = \frac{p}{m} + \frac{eA}{mc} \quad (4-32)$$

Donc

$$J(r) = -\frac{e}{2} \sum_{i=1}^N [p_i \delta\{r - r_i\} + \delta\{r - r_i\} p_i] - \frac{e^2}{mc} \sum_{i=1}^N A(r_i) \delta\{r - r_i\} \quad (4-33)$$

Le premier terme s'appelle le *courant paramagnétique* et le deuxième est le *courant diamagnétique*.

Puisque $p = -i\hbar\nabla$

En utilisant la définition (4-31) de la densité de courant électrique, et pour un champ transversal ($\Phi(r)=0$) le terme d'interaction dans l'expression de H est donné par :

$$H_{\text{int}} = -\frac{1}{c} \int J(r) \cdot A(r) dr \quad (4-34)$$

Dans l'espace k ce terme s'écrit :

$$H_{\text{int}} = -\frac{1}{c} J(k) \cdot A(k) \quad (4-35)$$

D'après la règle d'or de Fermi, le nombre de transitions par unité de temps et par unité de volume de l'état initial $|n\rangle$ vers l'état final $|n'\rangle$ est

$$W_{m'} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |\langle n' | H_{\text{int}} | n \rangle|^2 \delta\{\omega - \omega_{m'}\} \quad (4-36)$$

Où $\hbar\omega_n$ et $\hbar\omega_{n'}$ sont respectivement les énergies de l'état initial et final.

L'énergie absorbée par unité de temps et par unité de volume s'écrit sous la forme

$$P = \hbar\omega W = |A(k)|^2 \sum_n \frac{\omega}{\hbar c^2} \int dt \langle n | J(k, 0) J^*(k, t) | n \rangle \exp(-i\omega t) \quad (4-37)$$

En tenant compte du fait que le potentiel vecteur est donné par

$E = \frac{i\omega}{c}A$ et $P = \sigma E^2$, on obtient la formule dite de Kubo-Greenwood [27, 28,29].

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{\pi e^2}{m^2 \omega} \sum_k \sum_{nn'} \frac{f(\varepsilon_{nk}) - f(\varepsilon_{n'k})}{\omega_{nn'}(k)} \frac{M_{nn'}^\alpha(k) M_{nn'}^\beta(k)}{\omega - \omega_{nn'}(k) + i\gamma} \quad (4-38)$$

Où $f(\varepsilon_{nk})$ est la fonction de Fermi, $\hbar\omega_{nn'} \equiv \varepsilon_{nk} - \varepsilon_{n'k}$ est la différence d'énergie entre les niveaux de Kohn-Sham et γ l'inverse de temps de relaxation.

$M_{nn'}^\alpha$ Sont les éléments matriciels des transitions optiques.

Dans le cas relativiste, le vecteur de la densité de courant est donné par

$$j = -ec\alpha \quad (4-39)$$

Avec α l'opérateur de Dirac et par conséquent

$$M_{nn'} = \langle \Psi_n^k | c\alpha | \Psi_{n'}^k \rangle \quad (4-40)$$

Où Ψ_n^k est la fonction d'onde à quatre composantes.

4-5 Théorie de Drude et Sommerfeld

Pour les métaux, les composantes du tenseur de la conductivité optique sont données par la somme de la contribution interbande et intra bande [30]. Dans le domaine optique et pour les énergies basses des photons, la contribution intrabande est dominante.

À partir de l'équation (4-38) l'expression de la conductivité optique possède une double somme, l'une sur les bandes d'énergies c'est à dire $n \neq n'$ qui décrit la contribution interbande et l'autre exprime la contribution intrabande i.e $n = n'$.

L'expression de la conductivité s'écrit sous la forme :

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \sigma_{\alpha\beta}^{inter}(\omega) + \sigma_{\alpha\beta}^{intra}(\omega) \quad (4-41)$$

Le modèle de Drude-Sommerfeld stipule que le métal est considéré comme un gaz classique dans lequel l'électron effectue un mouvement diffusif. En présence d'un champ électrique \vec{E} , l'équation de mouvement est donnée par [31]

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\frac{\langle p \rangle}{\tau_D} - eE \quad (4-42)$$

τ_D le temps de relaxation

La densité de courant est donnée par

$$j = -Ne \frac{p}{m} \quad (4-3)$$

N : la densité de charges

m et e sont respectivement la masse et la charge de l'électron.

Si l'on prend : $p = m \frac{dr}{dt}$, la solution de l'équation(4-42) donne l'expression de la conductivité sous la forme [32]

$$\hat{\sigma}(\omega) = \frac{Ne^2 \tau_D}{m} \frac{1}{1 - i\omega\tau_D} = \frac{\omega_p^2}{4\pi[1/\tau_D - i\omega]} \quad (4-44)$$

Avec ω_p ; la fréquence plasma, elle est donnée par :

$$\omega_p^2 \equiv \frac{4\pi e^2}{m^2 \Omega} \sum_{nk} \delta(\varepsilon_{nk} - E_F) |M_{mn}|^2 \quad (4-45)$$

Où

E_F est l'énergie de Fermi.

Ω est le volume atomique

Le paramètre de temps de relaxation $\gamma_D = \frac{1}{\tau_D}$ qui figure dans la formule de

Drude-Sommerfeld est différent de celui de l'équation (4-38)

C'est un paramètre intrinsèque qui diffère d'un métal à un autre.

4-6 L'interaction électron- photon et les éléments matriciels

Toutes les spectroscopies s'articulent sur l'interaction entre les électrons et les photons. Les radiations électromagnétiques sont traitées dans le cadre classique c'est à dire on utilise le potentiel –vecteur $A_{q\lambda}(r)$ pour représenter les photons avec un vecteur d'onde (q) et une polarisation λ . L'opérateur qui correspond à l'interaction electron-photon est donné par

$$\chi_{q\lambda} = -\frac{1}{c} J \cdot A_{q\lambda}(r) = -\frac{1}{c} J \cdot \hat{a}_\lambda A e^{iqr} \quad (4-46)$$

Avec J l'opérateur de la densité de courant

$$j_{el} = -ec \alpha \quad (4-47)$$

Le vecteur de polarisation dans l'équation (4-46) est réel pour la lumière polarisée linéairement avec $\lambda = x, y, z$. Pour q dirigé suivant l'axe z , le vecteur de polarisation complexe est

$$\hat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4-48)$$

Il représente respectivement la polarisation circulaire gauche (droite) de la radiation.

Dans le régime des fréquences optiques l'amplitude du vecteur potentiel varie lentement à l'échelle microscopique. Donc on peut développer le facteur exponentiel selon une série de Taylor

$$e^{iqr} = 1 + iqr - \frac{1}{2}(qr)^2 + \dots \quad (4-49)$$

Les matériaux dont on calcule les spectres magnéto-optiques possèdent un paramètre de maille $a \approx 2-10 \text{ \AA}$. Or, la lumière visible a une longueur d'onde qui varie entre 600 et 800 nm. Puisque $q = 2\pi/\lambda$, on peut faire l'approximation $q \rightarrow 0$ et garder uniquement le premier terme dans l'équation (4-49) pour calculer l'interaction du dipôle électrique.

Dans le cas d'étude des phénomènes magnéto-optiques d'un système à spins polarisés, le calcul de la structure électronique s'effectue dans un cadre purement relativiste et avec l'expression de l'interaction électron-photon, les éléments matriciels ont la forme

$$M_{mn'}^{q\lambda} = \langle \psi_{n'}^k | \chi_{q\lambda} | \psi_n^k \rangle \quad (4-50)$$

ψ_n et $\psi_{n'}$ sont respectivement les fonction d'onde de l'état initial et final.

L'évaluation des éléments matriciels conduit dans le cadre de la méthode SPR-LMTO-ASA aux règles de sélection suivantes [33]

$$\Delta l = \pm 1 \quad (4-51)$$

$$\Delta j = 0, \pm 1 \quad (4-52)$$

$$\Delta m_j = \begin{cases} +1 & \text{pour } \lambda = + \\ -1 & \text{pour } \lambda = - \\ 0 & \text{pour } \lambda = z \\ \pm 1 & \text{pour } \lambda = x, y \end{cases} \quad (4-53)$$

λ ici est la polarisation du potentiel-vecteur.

Ce sont les règles de sélection dans la spectroscopie magnéto-optique.

Chapitre 05

Résultats et discussion

5.1 Introduction

La motivation est d'élaborer de nouvelles structures cristallines à base de métaux de transition ayant des propriétés physiques (magnétiques, électriques, optiques ...) exotiques différentes de celles observées dans les états cristallins usuels.

Dans ce travail l'accent a été mis sur les propriétés magnéto-optiques notamment l'effet Kerr décrit par la rotation θ_K dans un système en couches ultra minces de Fer déposé sur Ir(001) via les propriétés magnétiques et structurales.

5.2 Technique de calcul

L'étude des surfaces par la méthode SPR-LMTO-ASA diffère de celles utilisées pour le volume. En effet, la cellule qui génère tout le système dépend de l'orientation de la surface considérée et elle doit être définie pour chaque orientation.

Pour une surface d'un cristal mono-atomique, la rupture de la symétrie à la surface crée un environnement différent qui rend certains sites inéquivalents.

L'application de la méthode SPR-LMTO-ASA à l'étude des surfaces nécessite la définition de certains détails techniques qui permettent l'élaboration des surfaces dans la direction volume (001).

5.3 Modélisations de la surface : super cellule

Dans ce travail, la méthode utilisée (SPR-LMTO-ASA) est basée sur le théorème de Bloch et elle est conçue pour étudier des systèmes possédant une symétrie de translation dans les trois directions cristallographiques x , y , z (cristaux considérés infinis à l'échelle microscopique).

Le traitement théorique des surfaces pose alors le problème de la symétrie cristalline du matériau qui est brisée dans la direction perpendiculaire à la surface (cristaux semi-infinis) et par conséquent, le théorème de Bloch n'est plus applicable.

Pour remédier à ce problème de périodicité, on représente le cristal semi-infini par un empilement fini de plans atomiques appelés *slab* (en anglais) orientés de sorte que le plan de surface soit perpendiculaire à l'axe z . le *slab* est répété infiniment, en séparant deux *slabs* consécutifs par un certain nombre de plans constitués d'atomes sphériques de charge nulle qu'on notera E (Empty).

L'association d'un *slab* et une couche de sphères vides, constitue une super-cellule et la succession suivant la direction perpendiculaire à la surface d'un nombre infini de super-cellules devient symétrique dans la direction z .

Pour que la surface conçue soit bien adaptée à l'étude théorique, le choix de nombre de plans atomiques du *slab* ainsi que l'épaisseur de l'espace vide séparant deux *slabs* consécutifs doit respecter les deux conditions suivantes :

- a) l'espace vide entre deux *slabs* doit être suffisamment grand pour supprimer toute interaction mutuelle entre deux *slabs* consécutifs. Pour cela, on doit s'assurer que la charge électronique du plan central de l'espace vide reste nulle [34].

Cette condition assure la périodicité suivant l'axe perpendiculaire à la surface sans affecter le calcul de la structure de bandes

- b) le *slab* autant que représentant du cristal semi-infini (volume+ surface) doit garder les propriétés de l'état massif. Pour cela le nombre de plans atomiques du métal dans le *slab* doit être suffisant pour retrouver les propriétés du cristal infini au centre du *slab*.

5.4 Elaboration du système $Fe_n / Ir(001)$

Le système étudié contient deux éléments : l'Iridium (Ir) et le Fer (Fe)

L'Iridium en volume cristallise dans la structure *cfc* avec un paramètre de maille $a=3.84\text{\AA}$ tandis que le fer présente deux phases qui varient en fonction de la température :

- Fe_α cristallise dans la structure *cubique centrée(bcc)* avec un paramètre de maille $a_{Fe_\alpha} = 2.86 \text{\AA}$ stable à la température ambiante
- Fe_γ cristallisant dans la structure *cubique à faces centrées (cfc)* avec un paramètre de maille $a_{Fe_\gamma} = 3.58 \text{\AA}$. Cette dernière phase apparaît à des températures dépassant 912°C .

La super cellule qui satisfait les deux conditions ci-dessus est composée de 7 plans d'Ir empilés suivant la direction (001) et n plans de Fe tel que $n= 1, 2,3\dots$

La super-cellule obtenue est schématisée dans la figure ci-dessous :

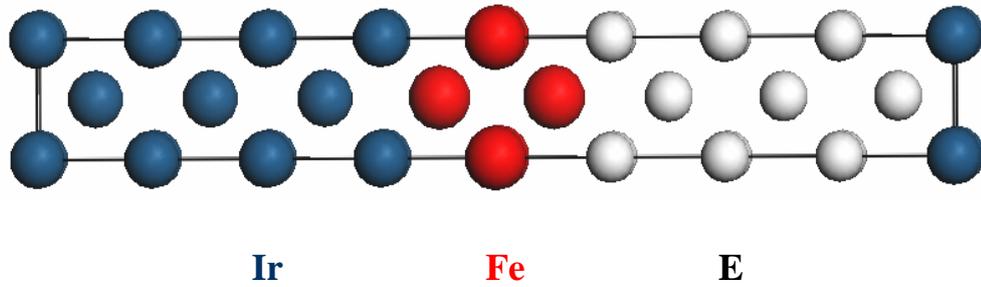


Figure.5.1 : Schéma de la super-cellule $Fe_n/Ir(001)$

5.5 Elaboration du substrat

Le choix du nombre de plans atomiques dans le substrat n'est pas arbitraire. Il doit satisfaire deux conditions :

- Le substrat doit regrouper toutes les propriétés physiques de l'Iridium massif.
- Le nombre de couches d'Iridium doit être le plus petit possible pour minimiser le temps de calcul.

En tenant compte de ces deux conditions, nous avons choisi un substrat d'Iridium constitué de sept plans atomiques.

Après avoir fait ce choix, nous avons bénéficié d'un plan de symétrie ce qui a facilité le calcul des propriétés physiques du substrat.

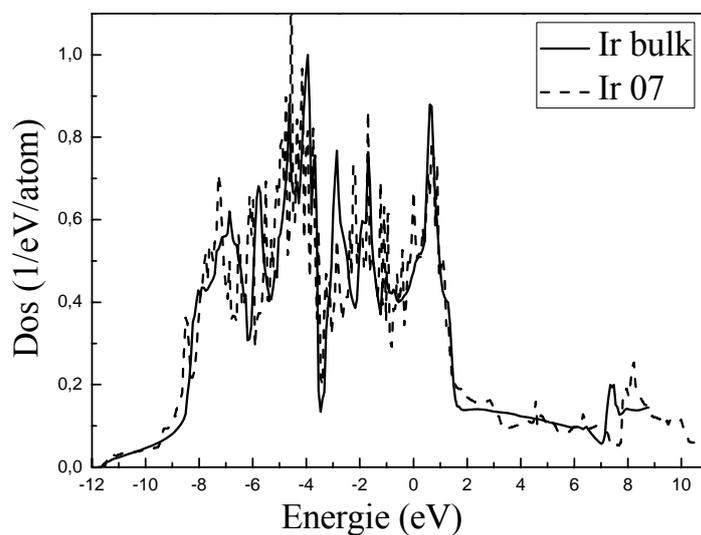


Fig. 5.2 : Les densités d'états de Ir massif et sept plans de Ir

5.6 Détails de calcul

La méthode utilisée pour le calcul de la structure de bandes est la méthode SPR-LMTO-ASA avec un potentiel d'échange et de corrélation paramétré par la loi de Van Barth Headin dans le cadre de l'approximation de la densité locale (LSDA) avec des corrections combinées.

La géométrie de base dans cette méthode de calcul est divisée en deux parties : une partie interstitielle et une partie *muffin-tin*.

À l'intérieur des sphères *muffin-tin*, les fonctions de base sont développées en termes d'harmoniques sphériques et des fonctions radiales solutions de l'équation de Dirac.

Dans la partie interstitielle les fonctions de base sont proportionnelles à la solution régulière de l'équation de Laplace.

Les queues (tails) provenant des autres sphères sont données sous forme d'une combinaison linéaire des fonctions de Hankel ou de Newman. Le terme spin-orbite est introduit directement dans l'Hamiltonien pour la partie qui se trouve dans les sphères *muffin-tin* et l'équation de Dirac est résolue d'une manière auto cohérente.

La convergence est obtenue en utilisant un nombre adéquat de points k qui correspondent à une subdivision k_x, k_y, k_z dans la zone irréductibles de Brillouin.

Pour le calcul des propriétés magnéto optiques, les composantes du tenseur de la conductivité optique sont donnés par la somme des transitions interbande et

Intra-bandes. Pendant l'évaluation des transitions interbandes, nous avons adopté l'approximation du dipôle électrique et les éléments du tenseur de la conductivité optique sont donnés par la formule de Kubo-greenwood.

Les transitions intra-bandes quant à elles sont données par la formule de Drude. Nous ne les avons pas prises en considération car elles ne sont appréciables qu'au voisinage de faibles valeurs de l'énergie des radiations incidentes ($\sim 1\text{eV}$).

5.7 Le système Fe₁/Ir(001)

- **Le comportement structural**

Avant de procéder à n'importe quel dépôt. Les expérimentateurs ainsi que les théoriciens s'interrogent sur la possibilité d'avoir une compatibilité entre le substrat et le film.

Alors ce système a un grand intérêt car il constitue la première étape du dépôt de Fer sur l'Iridium.

Pour avoir la distance optimale entre le substrat et le premier plan de Fer, nous avons effectué une optimisation de l'énergie totale du système en fonction de cette distance.

La distance de référence f_0 est celle qui sépare deux plans atomiques d'Iridium. Elle est prise dans tous les systèmes égale à 1.92Å.

Après avoir fait le « fit », nous avons obtenu la courbe suivante :

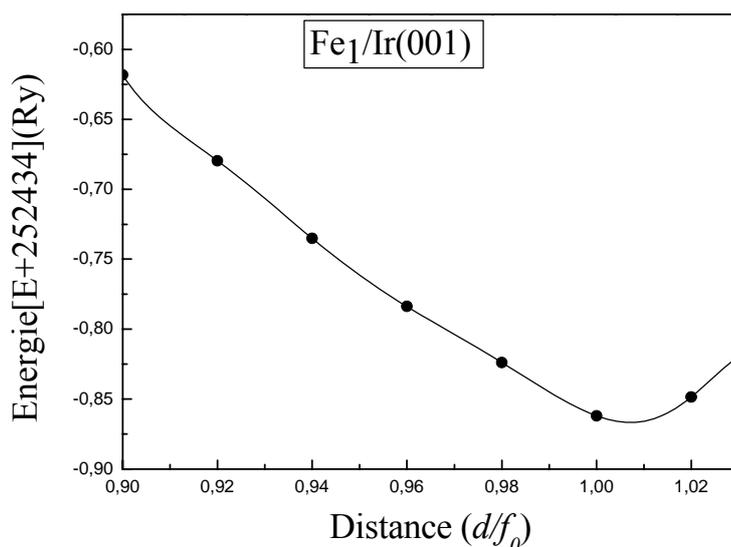


Fig.5.3 : Optimisation de l'énergie en fonction de la distance dans le système Fe₁/Ir(001)

D'après ce schéma, l'équilibre est atteint à une distance entre le premier plan de Fer et le substrat égale 1.92Å.

Dans le plan perpendiculaire à la direction du dépôt, la distance entre les plus proches voisins dans le plan de l'interface c'est-à-dire (001) correspond à $\frac{1}{2}[110]_{Ir} = 2.71 \text{ \AA}$.

Cette distance est plus petite que le paramètre de maille dans la structure *bcc* de fer ($[100]_{\text{Fe-bcc}}=2.86\text{\AA}$).

En tenant compte du fait que le module d'Young pour l'Iridium ($E_{\gamma\text{-Ir}}=536\text{ GPa}$) est plus grand que celui de Fer ($E_{\alpha\text{-Fe}}=214\text{ GPa}$) [35], la distance entre les atomes de Fer est imposée par le substrat.

Alors le développement à deux dimensions se fait de sorte que la couche de Fer est considérée comme un cristal à deux dimensions cristallisant dans la structure cubique simple avec un paramètre de maille $a=2.71\text{\AA}$.

- **Le comportement magnétique :**

Pour mettre en évidence le comportement magnétique du système $Fe_1/Ir(001)$, nous avons calculé la densité d'états de l'Iridium à l'interface c'est-à-dire Ir07 ainsi que celle de Fer. Les résultats obtenus sont résumés sur la figure suivante.

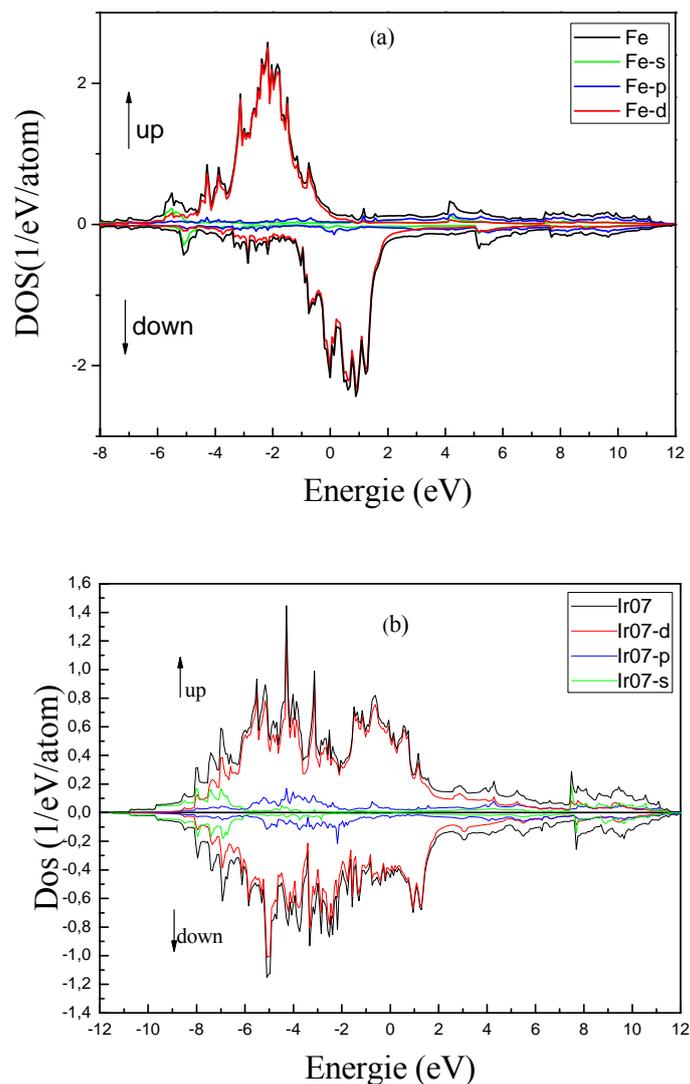


Fig. 5.4 : densités d'états dans le système $Fe_1/Ir(001)$
 (a) le premier plan de Fer (b) le plan d'Iridium à l'interface

D'après cette figure, on constate que toutes les propriétés magnétiques proviennent de la bande d notamment pour le fer.

Pour l'analyse qualitative des résultats, nous avons calculé les différents moments magnétiques par atome pour chaque plan atomique du système. Pour cela, nous avons utilisé (pour les trois systèmes) les formules de calcul suivantes [15]

$$\mu_{spin} = \mu_B \sum_{j,k} \langle \psi^{j,k} | \beta \sigma_z | \psi^{j,k} \rangle \theta(E_F - E_{jk})$$

$$\mu_{orb} = \mu_B \sum_{j,k} \langle \psi^{j,k} | \beta I_z | \psi^{j,k} \rangle \theta(E_F - E_{jk})$$

Nous avons résumé les résultats dans la figure ci-dessous

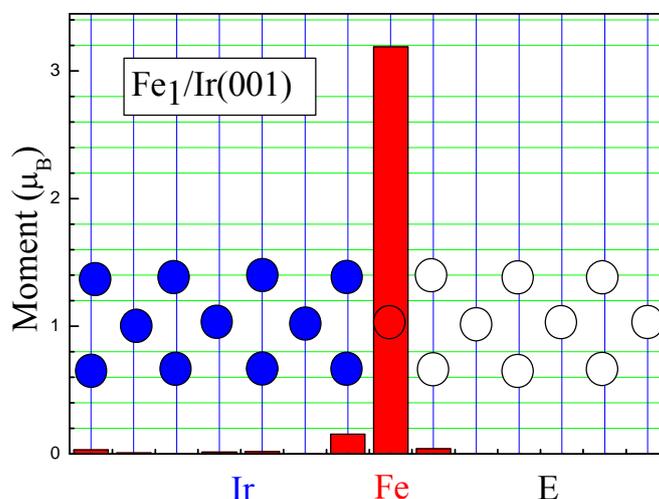


Fig.5.5 : variation du moment magnétique en fonction de nombre de plans Atomiques

D'après la figure ci-dessus, on constate que l'Iridium à l'interface a subi une légère polarisation suite au dépôt de la première couche de Fer.

Cette polarisation est décrite par l'apparition de moments magnétiques :

$$\mu_s(\text{Ir}) = 0.15081 \mu_B$$

$$\mu_l(\text{Ir}) = 0.00348 \mu_B$$

$$\mu_{tot}(\text{Ir}) = 0.15429 \mu_B$$

Les autres plans d'Iridium ont gardé leur état paramagnétique.

Le plan de Fer et vu sa position à l'interface, il « ressent » deux milieux différents (le substrat et le vide). Après avoir calculé les moments magnétiques, nous avons obtenu les valeurs suivantes

$$\mu_s(\text{Fe}) = 3.07282 \mu_B$$

$$\mu_i(\text{Fe}) = 0.11619 \mu_B$$

$$\mu_{\text{tot}}(\text{Fe}) = 3.18901 \mu_B$$

La valeur totale du moment magnétique dans le Fer est en bon accord avec la littérature [36-37]. Elle diffère de celle de Fe massif qui est égale à $2.2 \mu_B$ [38].

Donc elle représente une augmentation de 31 %.

Cette différence est due au fait que les atomes de Fer sont confrontés simultanément à l'effet de surface et celui d'interface et donc la stabilité de la phase magnétique est considérée comme étant le résultat de la compétition des deux effets.

Tenant compte du fait que la structure cristalline agit sur le comportement magnétique [39], alors la dilatation entre les atomes des deux plans d'interface conduit à la domination de l'effet de surface devant celui d'interface qui tend à minimiser le moment magnétique et par conséquent le moment par atome dans le plan de Fer augmente.

- **Le comportement magnéto-optique :**

Les propriétés magnéto-optiques que nous avons obtenues, résident dans l'étude de l'effet Kerr dans sa géométrie polaire (P-MOKE).

La gamme d'énergie des radiations incidentes que nous avons utilisée a été élargie jusqu'à 10 eV.

Les rotations correspondantes sont illustrées dans la figure suivante :

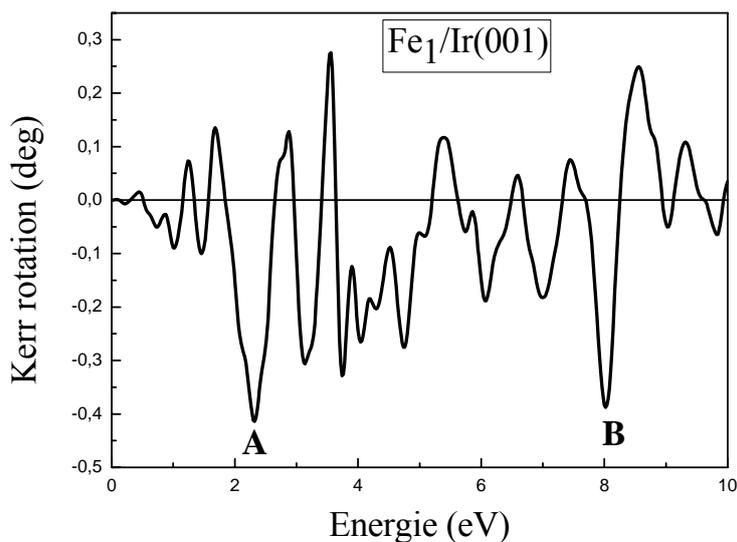


Fig.5.6 : Spectre des rotations Kerr θ_K dans le système $Fe_1/Ir(001)$

Le spectre décrivant la réponse magnéto-optique dans le système $Fe_1/Ir(001)$ est caractérisé par deux pics négatifs, le premier dans le domaine visible à $E=2eV$ et le deuxième dans le domaine ultra violet à $E=8eV$.

La valeur des rotations qui correspond à ces deux pics est $\theta_K=-0.4deg$.

5.8 Le système Fe₂/Ir(001)

- **Le comportement structural**

La distance entre le premier et le deuxième plan de Fer est obtenue par le même processus d'optimisation de l'énergie totale du système en fonction de cette distance.

Après avoir fait le « fit », nous avons obtenu la courbe ci-dessous.

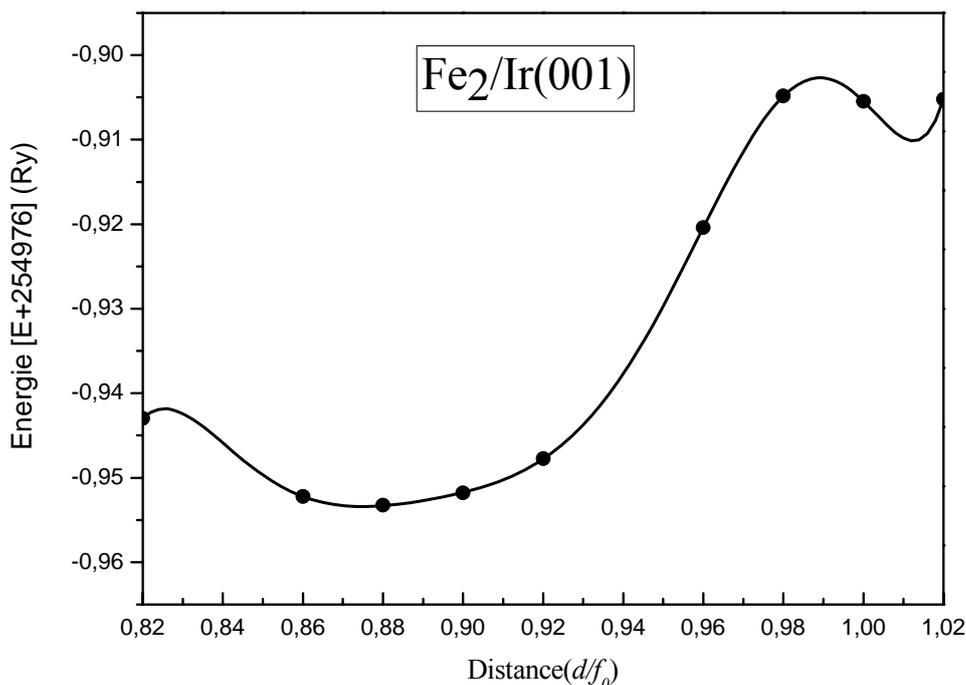


Fig.5.7 Optimisation de l'énergie en fonction de la distance dans le système Fe₂/Ir(001)

A partir de cette courbe, la position d'équilibre coïncide avec la distance entre les plans de Fer $d\langle\text{Fe}_1\text{-Fe}_2\rangle=1.67 \text{ \AA}$.

Nous avons eu une augmentation de 14.37% par rapport à celle de Fe_{bcc} massif qui est 1.43 Å. La nouvelle structure cristalline du Fer est donc tétragonal centré *bct* (*body centred tetragonal*) avec les constantes $a=b=2.71 \text{ \AA}$ et $\frac{c}{2}=1.67 \text{ \AA}$.

- **Le comportement magnétique**

Le point de départ pour l'étude du comportement magnétique est la structure de bandes et les différentes densités d'états.

Dans le système $\text{Fe}_2/\text{Ir}(001)$, les résultats obtenus sont schématisés dans les figures ci-dessous.

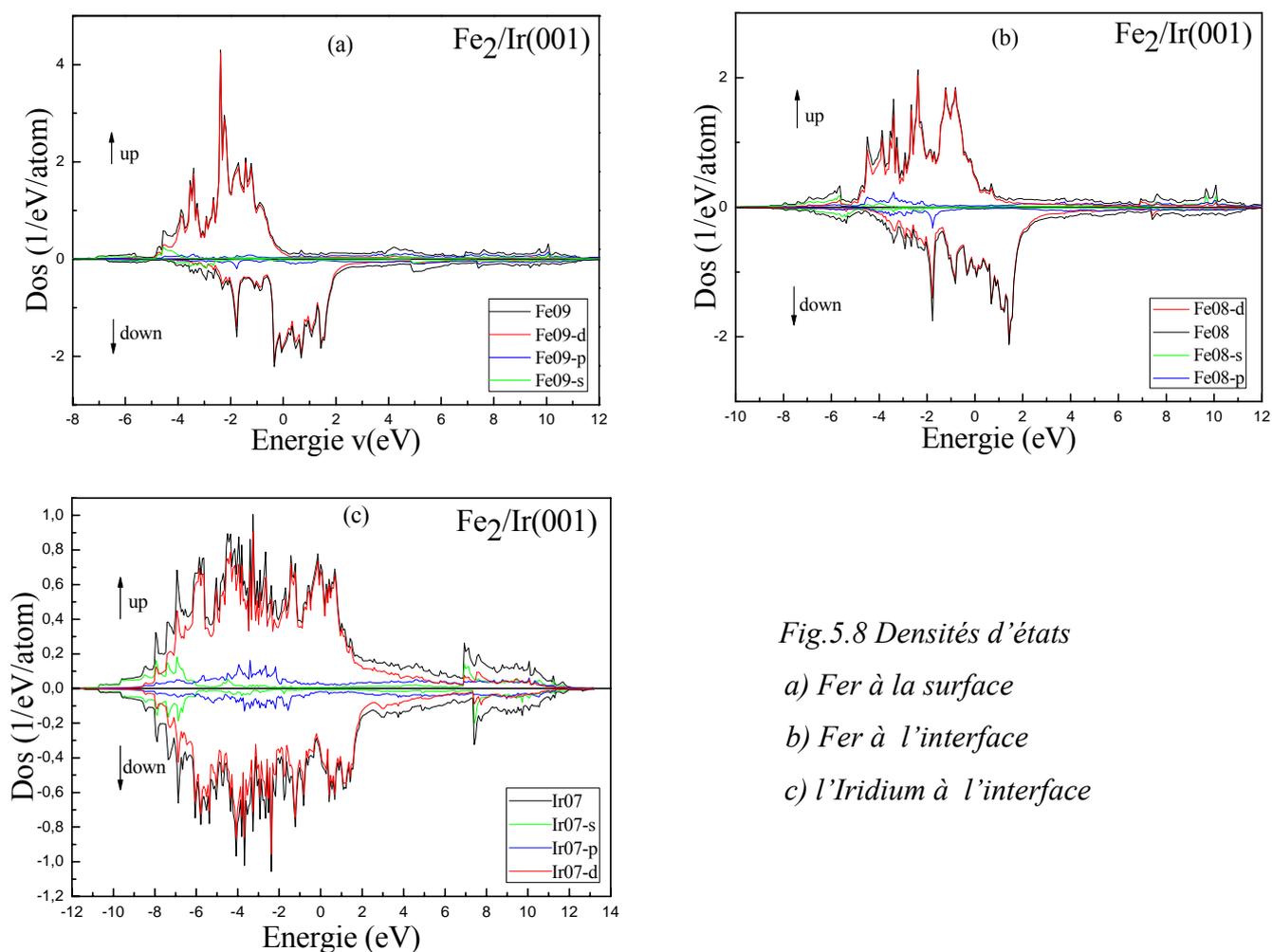


Fig.5.8 Densités d'états

a) Fer à la surface

b) Fer à l'interface

c) l'Iridium à l'interface

A partir des courbes ci-dessus, on constate que toutes les propriétés magnétiques proviennent surtout de la bande *d*.

Les moments magnétiques du système sont présentés dans la figure suivante :

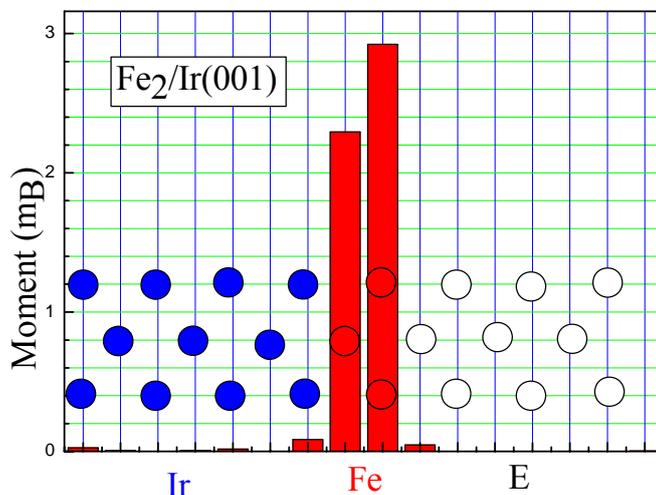


Fig.5.8 : variation du moment magnétique en fonction de nombre de plans Atomiques dans le système $Fe_2/Ir(001)$.

A partir de cette figure, nous avons trouvé les valeurs des moments magnétiques suivantes :

	$\mu_s (\mu_B)$	$\mu_l (\mu_B)$	$\mu_{s+l} (\mu_B)$
Ir (07)	0.08436	0.00059	0.08494
Fe (01)	2.20459	0.08915	2.29375
Fe (02)	2.80827	0.11433	2.92260

Tableau01 : Valeurs de moments magnétiques dans le système $Fe_2/Ir(001)$

En tenant compte de la structure cristalline obtenue après avoir déposé le deuxième plan de Fer, le système que l'on a est un Fe_{bcc} dilaté et par conséquent les moments magnétiques des atomes de Fer augmentent : ils dépassent la valeur du moment magnétique de Fe_{bcc} massif ($\mu=2.2 \mu_B$). Par contre la polarisation de l'Iridium à l'interface a diminué de sorte à être considérée nulle ($\mu_{Ir}=0.085 \mu_B$).

Le plan de Fer à l'interface ne « ressent » plus le même environnement qu'auparavant. Il est séparé de la surface par un plan de Fer ce qui va favoriser l'effet de l'interface qui va diminuer le moment magnétique des atomes de Fer obtenu dans le système précédent ($\text{Fe}_1/\text{Ir}(001)$).

Le deuxième plan de Fer constitue le plan de surface et en tenant compte du fait que ses atomes ont un nombre de coordination plus petit que celui des atomes de volume ; alors l'effet de surface l'emporte devant l'effet d'interface et par conséquent l'augmentation du moment est justifiée [40-42].

- **Le comportement magnéto-optique**

Dans ce système, nous avons adopté la même géométrie de l'effet Kerr et la gamme d'énergie des radiations incidentes est étendue sur un intervalle allant de 0eV à 10eV.

Le spectre des rotations est illustré dans la figure ci-dessous.

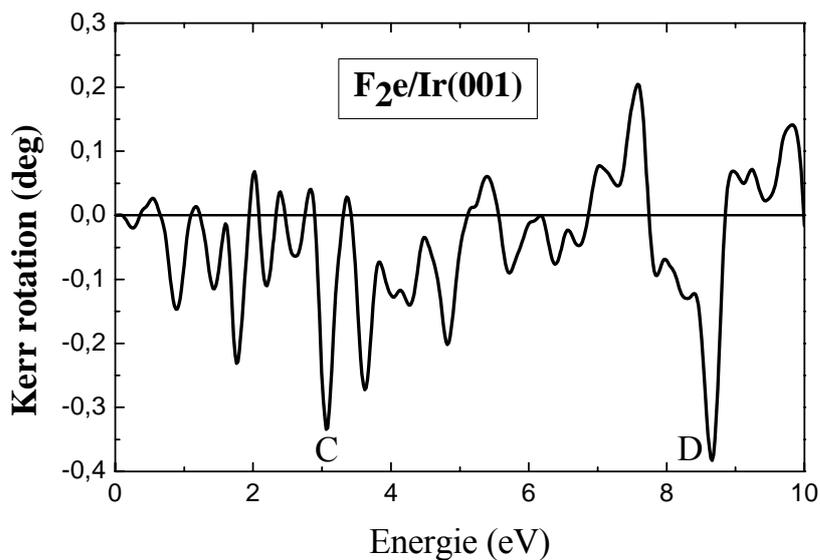


Fig.5.9 : Spectre des rotations Kerr θ_K dans le système Fe₂/Ir(001)

A partir de ce spectre, la réponse magnéto-optique dans le système Fe₂/Ir(001) est décrite essentiellement par deux pics négatifs **C** ($E=3.05\text{eV}$) et **D** ($E=8.64\text{eV}$)

Correspondant respectivement à $\theta_K = -0.33^\circ$ et $\theta_K = -0.38^\circ$ avec une atténuation appréciable des pics positifs.

5.9 Le système Fe₃/Ir(001)

- **Le comportement structural**

Après avoir déposé le troisième plan de Fer, la structure Fe tétragonal centré *bct* devient de plus en plus claire. En effet dans ce système, on obtient la première maille conventionnelle de Fer.

Pour mettre en évidence cette structure, nous avons effectué une optimisation de l'énergie totale du système en fonction de la distance entre le deuxième et le troisième plan de Fer.

Les résultats de « fit » sont schématisés dans la figure suivante.

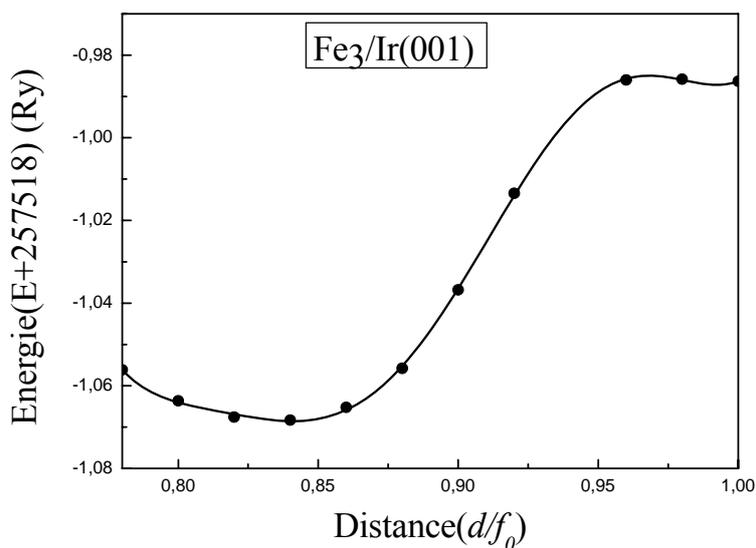


Fig.5.10 : Optimisation de l'énergie en fonction de la distance dans le système Fe₃/Ir(001)

D'après cette figure, la position d'équilibre correspond à la distance optimale $d\langle\text{Fe}02\text{-Fe}03\rangle=1.61\text{\AA}$ entre les deux derniers plans de Fer.

En regroupant les données structurales après le dépôt du troisième plan de Fer, nous avons trouvé que le Fer cristallise dans la structure *bct* avec les paramètres $a=b=2.71\text{\AA}$ et $c/a=1.21$.

L'origine de cette nouvelle structure de Fer provient essentiellement des nouvelles propriétés élastiques du système. En effet, l'énergie élastique mise en jeu dans le processus d'optimisation est minimale lorsque le système atteint sa distance d'équilibre.

D'autre part, l'influence du substrat sur le plan de Fer notamment sur la structure cristalline est due à la différence entre les deux modules d'Young pour chaque élément.

Alors les positions des atomes de Fer sont affectés par le substrat c'est-à-dire l'Iridium impose les sites des atomes de Fer dans le système.

- **Le comportement magnétique**

Dans ce système, les propriétés magnétiques sont obtenues à partir des densités d'états partielles qui sont schématisées les figures ci-dessous.

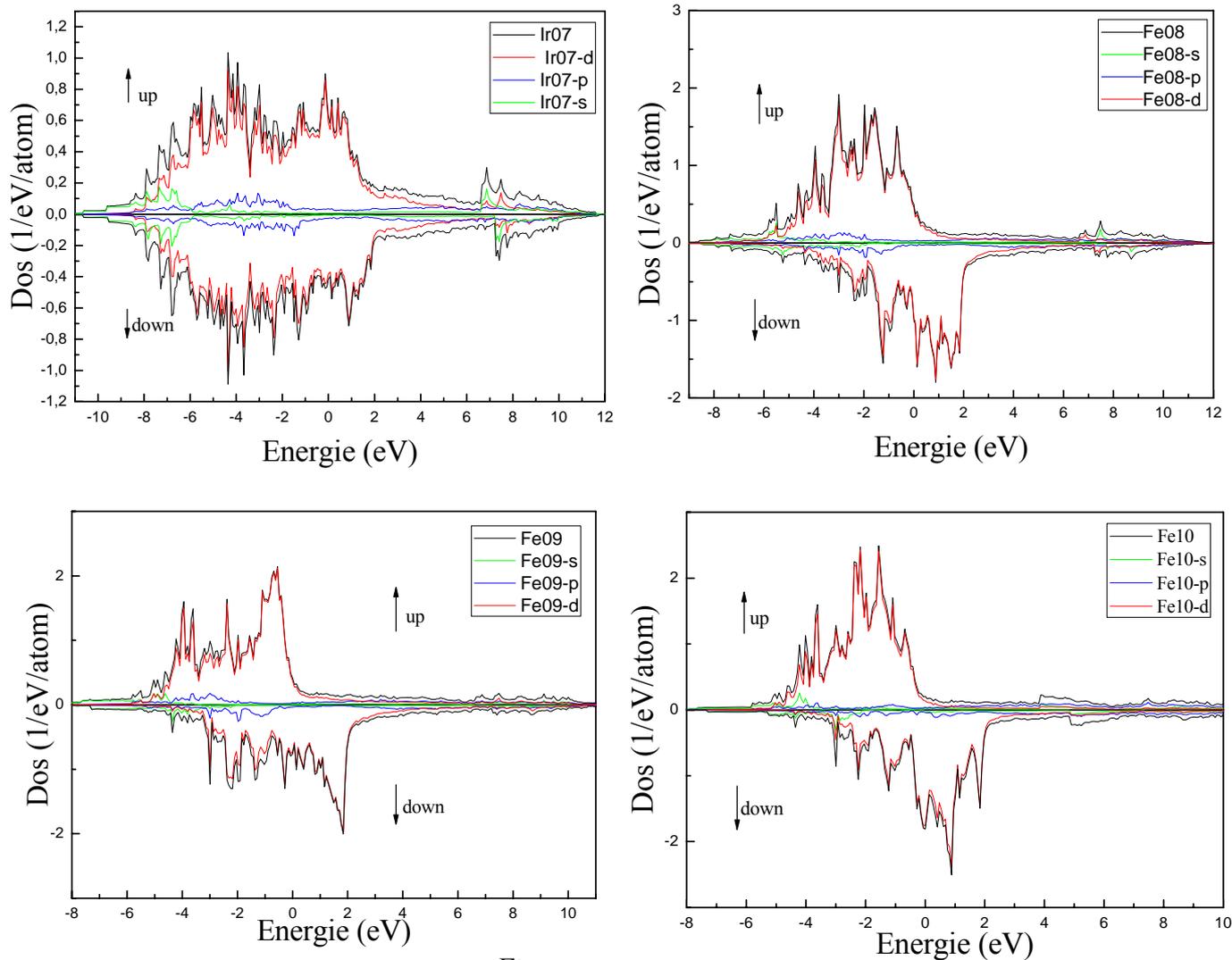


Fig.

5.11 : densités d'états dans le système $Fe_3Ir(001)$

Comme les systèmes précédents, il est clair que toutes les propriétés magnétiques proviennent aussi de la bande *d*.

Nous avons calculé les moments magnétiques par atome pour chaque plan de système et nous avons trouvé les résultats illustrés dans la figure suivante :

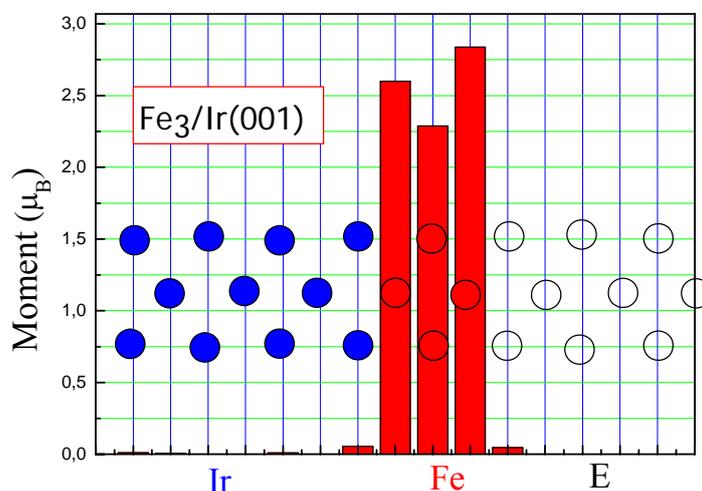


Fig.5.12 : variation du moment magnétique en fonction de nombre de plans atomiques

D'après cette figure, on constate que la polarisation de l'Iridium à l'interface a disparu, en revanche le moment magnétique dans le premier et le deuxième plan de Fer a retrouvé sa valeur de Fe massif.

Le tableau suivant résume les valeurs des moments magnétiques obtenus

	$\mu_s (\mu_B)$	$\mu_l (\mu_B)$	$\mu_{s+1} (\mu_B)$
Ir (07)	0.060	-0.005	0.05
Fe (01)	2.51	0.089	2.60
Fe (02)	2.20	0.081	2.28
Fe (03)	2.72	0.12	2.83

Tableau02 : Valeurs de moments magnétiques dans le système $Fe_3/Ir(001)$

- **Le comportement magnéto-optique**

Les propriétés magnéto-optiques sont mises au point à travers l'étude de l'effet Kerr polaire qui est caractérisé à son tour par le spectre des rotations θ_k .

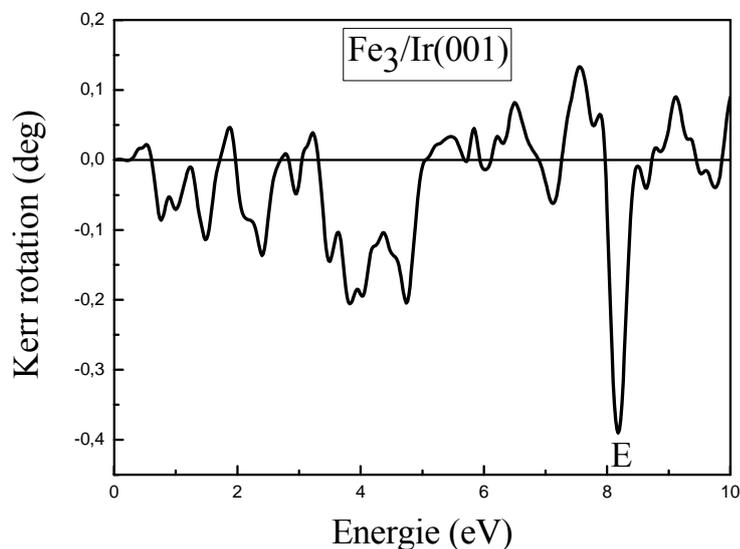


Fig.5.13 : Spectre des rotations Kerr θ_k dans le système $Fe_3/Ir(001)$

Dans ce système, il y'a un pic négatif $\theta_k = -0.39^\circ$ dans le domaine ultraviolet à $E=8.18\text{eV}$.

Ce pic qui caractérise ce système est décalé vers les énergies élevées par rapport aux deux systèmes précédents.

Les pics positifs deviennent pratiquement négligeables en les comparant avec le pic négatif.

5.10 Discussion

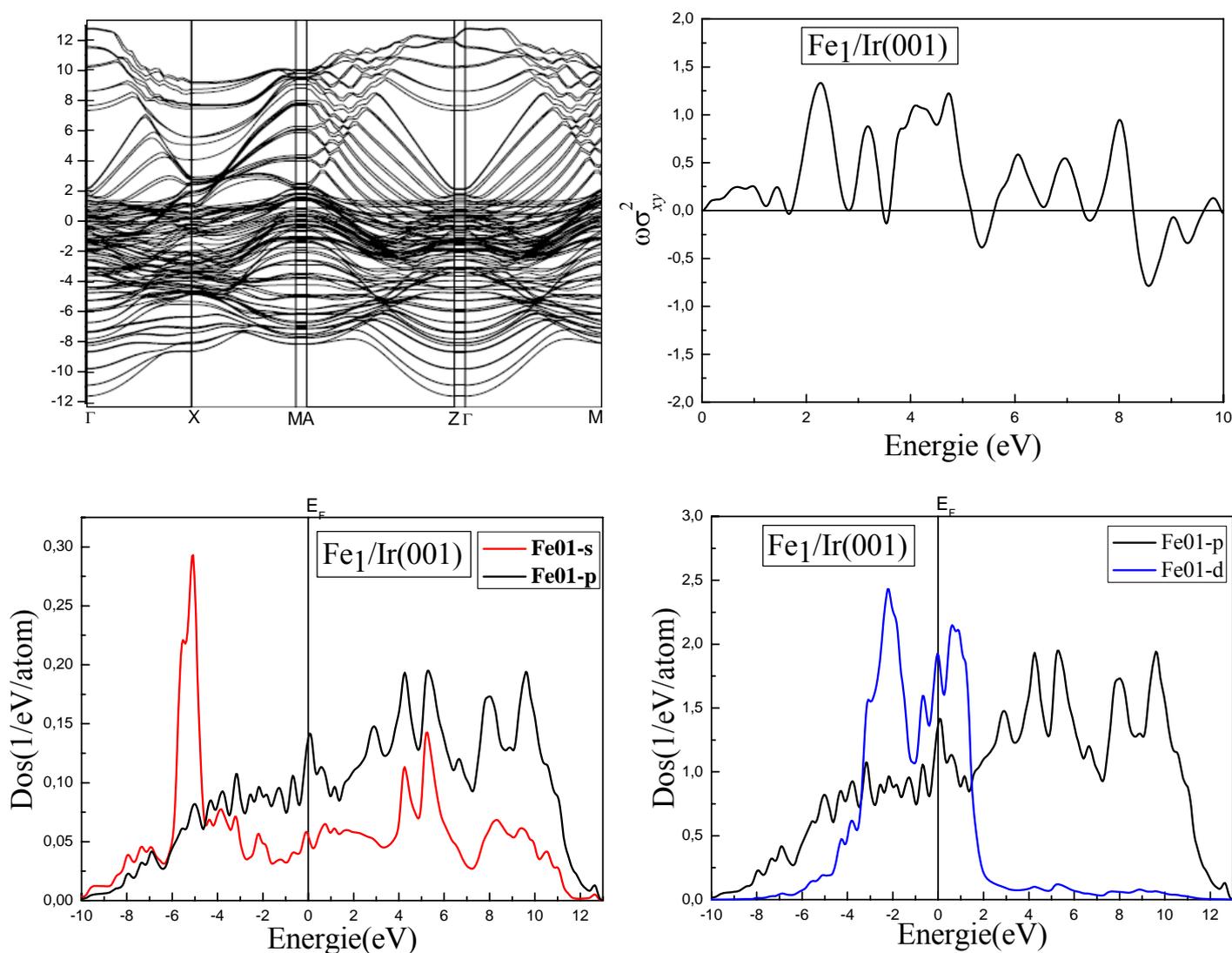
Dans cette section, nous allons donner une interprétation qualitative des résultats magnéto-optiques obtenus dans le but de déterminer l'origine microscopique des différents pics dans le spectre de l'effet Kerr qui caractérise le système étudié.

Notre discussion est basée sur une analyse combinée de la structure de bandes, les densités d'états, les éléments non-diagonaux du tenseur de la conductivité optique et les spectres de l'effet Kerr calculés ci-dessus.

Le système $Fe_1/Ir(001)$

Le système $Fe_1/Ir(001)$ est caractérisé par les pics **A** ($E=2.30\text{eV}$) et **B** ($E=8.02\text{ eV}$) dans le spectre de l'effet Kerr.

Les différents spectres qui caractérisent ce système sont représentés dans les figures ci-dessous



Les états localisés les plus probables sont résumés dans le tableau suivant :

Symétrie	Etats occupés (eV)	Etats vides (eV)
<i>s</i>	-5.07 -3.82 -2.18 -1.28	0.76 1.16 4.26 5.26 8.30
<i>p</i>	-7.32 -6.92 -5.62 -4.28 -3.77 -2.53 -2.18 -1.83	0.56 1.12 2.91 4.26
<i>d</i>	-3.08 -2.18 -0.68	0.61

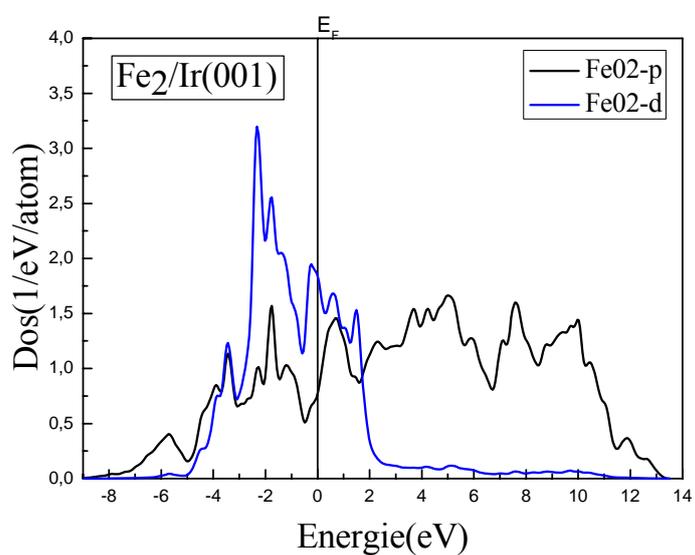
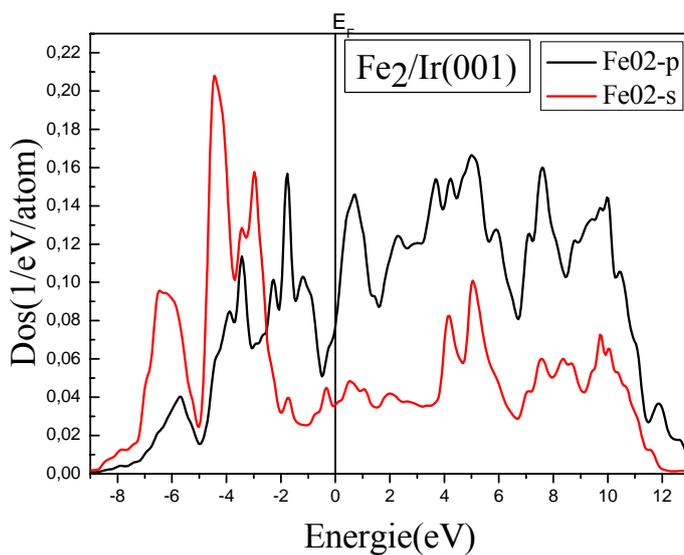
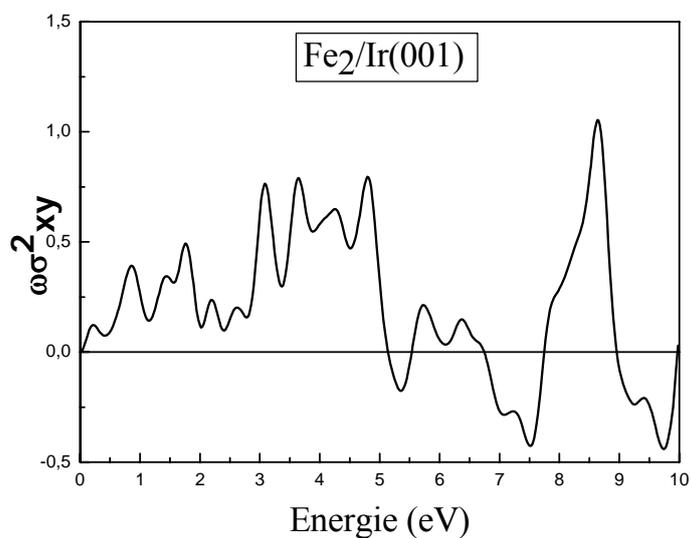
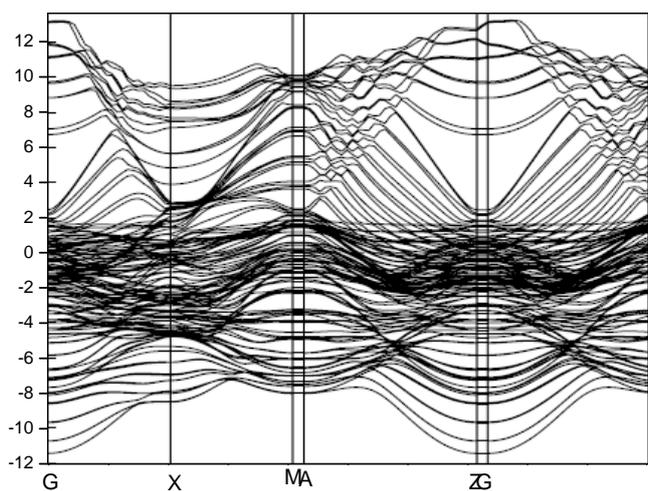
Transitions inter bandes

Le pic **A** est du aux transitions $s \rightarrow p$ dans le plan de Fer. Il est repéré dans la zone de Brillouin par les points de haute symétrie M et A.

Le pic **B** est localisé au point de haute symétrie M dans la direction ΓM . Il est du principalement aux transitions $s \rightarrow p$ dans le même plan de Fer.

Le système Fe₂/Ir(001)

Pour mettre en évidence l'origine microscopique des pics **C** (3.05eV) et **D** (8.64eV), nous avons calculé les spectres cités ci-dessus. Ils sont illustrés dans les figures ci-dessous.



Les états localisés

Symétrie	Etats occupés (eV)	Etats vides (eV)
<i>s</i>	-6.48 -4.44 -3.43 -2.98 -1.75 -0.33	0.52 1.03 1.99 4.17 5.04 7.07 8.34
<i>p</i>	-5.71 -3.90 -3.43 -1.76 -1.20	0.72 1.33 2.30 3.67 4.23 5.90 7.12 8.80
<i>d</i>	-3.43 -2.31 -1.75	0.62

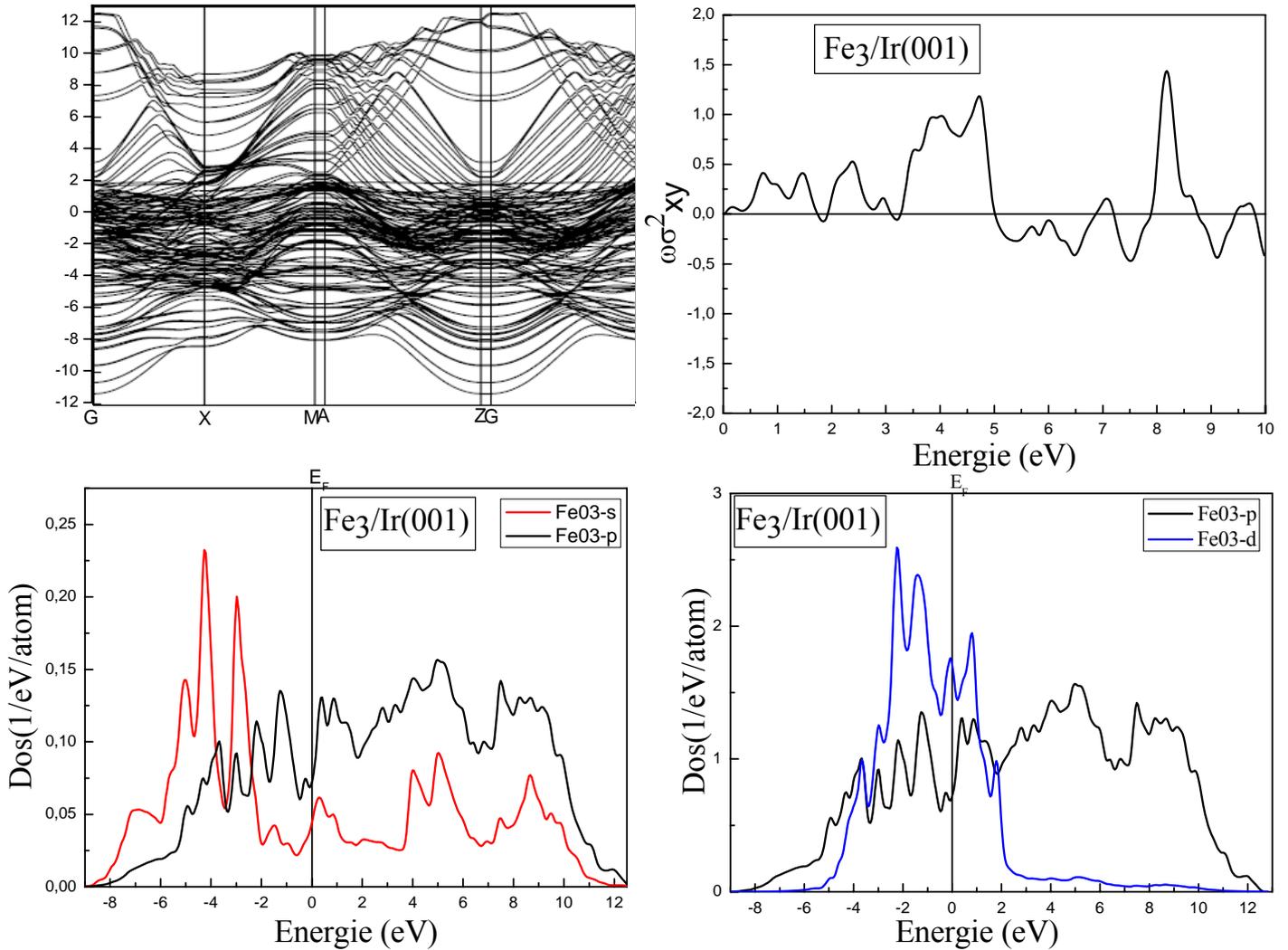
Les transitions inter bandes

Le pic **C** correspond aux transitions $s \rightarrow p$ dans le plan Fe(02) localisés dans la zone de Brillouin aux points de hautes symétrie Z et G et aux transitions $p \rightarrow d$ correspondant au point X dans **ZB**

Le pic **D** est du principalement aux transitions $s \rightarrow p$. Il est localisé aux points de haute symétrie M et A.

Le système Fe₃/Ir(001)

Ce système est caractérisé par un pic E (8.18eV) dont les spectres sont illustrés dans les figures suivantes.



Les états localisés

Symétrie	Etats occupés (eV)	Etats vides (eV)
<i>s</i>	-7.05 -5.04 -4.25 -2.97 -1.45 -0.96	4.00 5.03 7.50 8.67
<i>p</i>	-4.94 -4.30 -3.66 -2.97 -1.25 -0.27	0.41 0.85 2.82 3.31 4.04 4.93 6.85 7.49
<i>d</i>	-3.71 -2.71 -2.24 -1.40	0.80 1.78

Les transitions inter bandes

Pour le pic **E**, la contribution la plus importante vient des transitions $s \rightarrow p$ dans le plan Fe (03). Elle est localisée au point de haute symétrie Z dans la zone de Brillouin.

5.11 Comparaison

Nous avons fait une comparaison entre les trois systèmes étudiés dans le but de mettre en relief l'effet de l'épaisseur sur les propriétés magnéto-optiques.

La figure suivante représente la réponse magnéto-optique de ces trois systèmes

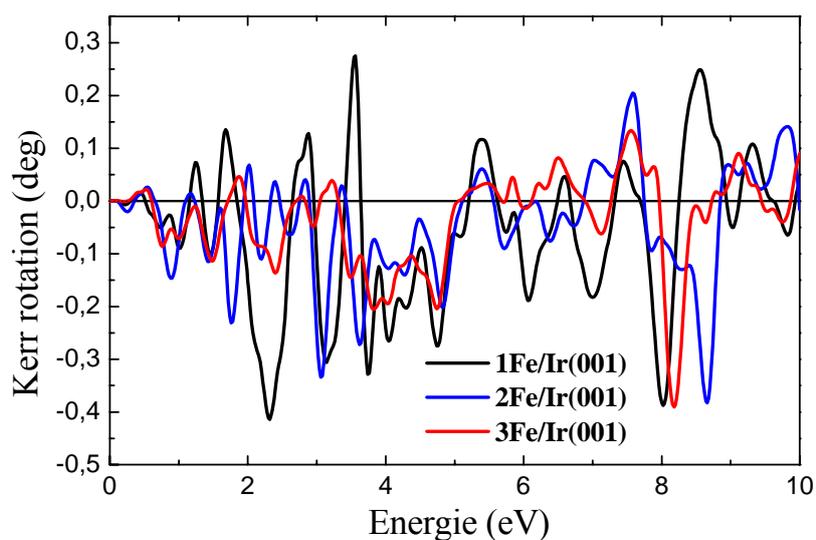


Fig.5.14 : Spectre des rotations Kerr θ_K dans le système $Fe_n/Ir(001)$

D'après cette figure, le système $Fe_n/Ir(001)$ est caractérisé par un pic négatif au voisinage de $E=8$ eV qui tend à se déplacer vers les énergies élevées lorsque n augmente.

Le pic négatif à $E=2$ eV dans le système $Fe_1/Ir(001)$ disparaît après le dépôt du deuxième plan atomique de Fer.

Les pics positifs s'atténuent progressivement avec l'augmentation des plans de Fer.

Conclusion

Nous avons étudié théoriquement les propriétés magnéto-optiques dans les couches ultra minces de Fer déposé sur l'Iridium (001) dans le but de mettre en évidence les propriétés magnéto-optiques de ce système qui vont avoir d'éventuelles applications technologiques, notamment dans le domaine de stockage et d'enregistrement magnétique.

Pour mettre en évidence ces propriétés, nous avons calculé le spectre de l'effet Kerr dans sa géométrie polaire (MOKE) décrit par la rotation θ_K .

La réponse magnéto optique ne peut avoir lieu que dans le cas où l'on tient compte de l'interaction spin orbite d'où la nécessité de choisir une approche purement relativiste pour calculer le spectre énergétique.

Nous avons calculé la structure de bande en utilisant la méthode SPR-LMTO-ASA (Spin Polarized Relativistic – Linear Muffin Tin Orbitals- Atomic Sphere Approximation) avec des corrections combinées.

Le terme d'échange et de corrélation introduit dans l'hamiltonien est donné par la loi de Von Barth-Hedin et les éléments du tenseur de la conductivité optique sont calculés dans le cadre du formalisme de la réponse linéaire de Kubo-Greenwood.

Le système que nous avons étudié théoriquement a été élaboré de sorte à avoir la formule $\text{Fe}_n/\text{Ir}(001)$ ($n=1, 2, 3$).

La distance inter-plane à partir du substrat est calculée par un processus d'optimisation de l'énergie totale en fonction de la distance. Nous avons trouvé que le film de Fer cristallise dans la structure *bct* (*body centred tetragonal*) avec les paramètres $a=b=2.71\text{\AA}$ et $c/a=1.21$.

Cette nouvelle structure a conduit à un comportement magnétique différent de ceux étudiés auparavant [36] car il a favorisé un couplage ferromagnétique entre les plans de Fer.

La réponse magnéto-optique que nous avons étudiée a révélé que le système $\text{Fe}_n/\text{Ir}(001)$ est caractérisé par un pic négatif dans le domaine ultraviolet au voisinage de $E \approx 8\text{ eV}$ et tend à se décaler vers les énergies élevées lorsque n augmente.

Le système $\text{Fe}_1/\text{Ir}(001)$ aussi possède un deuxième pic négatif à $E=2.5\text{ eV}$.

Les pics positifs qui caractérisent le système ont tendance à s'atténuer avec l'augmentation de n .

Bibliographie

- [1] Henry Mathieu, *Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques*.
- [2] W.Kohn and L.J.Sham, Phys.Rev.A140, 1133(1965).
- [3] U.Von Barth and L.Hedin, *J.Phys.C* 4, 1629 (1972).
- [4] Dieudonné. *Abrégé d'Histoire des mathématiques* (Herman) tome 1 p 108.
- [5] Elie Cartan. *Leçons sur la théorie des spineurs* (Herman 1983).
- [5]W.Greiner, Robert-Mayer-Strasse, *Relativistic Quantum Mechaics Wave Equations* pp.120-122.
- [6] E.P.Wigner et F.Seitz, Phys.rev. 43, 804 (1933).
- [7] E.P.Wigner et F.Seitz, Phys.rev. 46, 509 (1934).
- [8] *phys. des solides*, N.W.Ashcroft N.D.Mermin .pp158.
- [9] D.Park, *introduction to the quantum Theory*, Mc Graw-Hill, New York, 1964, pp. 516-519.
- [10] N.W.Ashcroft N.D.Mermin. *phys. des solides*, pp234.
- [11deuxième] N.W.Ashcroft N.D.Mermin. *phys. des solides*.,pp236.
- [11] V.Antonov, B.Harmon, A.Yaresko, *Electronic structure and Magneto-optical properties of solids* ,pp455
- [12] D.A.Varshalovich, A.N.Moskalev, and V.K.Khersonskii, *Quantum theory of angula momentum* (Nauka, Leningrad, 1975).
- [13] V.V.Nemoshkalenko, A.E.Krasovskii, V.N.Antonov, U.Fleck, H.Wonn, and P.Ziesche, Phys Status Solidi (b) 120, 283 (1983).
- [14chap03] V.Antonov, B.Harmon, A.Yaresko, *Electronic structure and Magneto-optical properties of solids* ,pp461.
- [15] O.K.Andersen, Phys.Rev.B, 12, 3060 (1975).
- [16] M.E.Rose , *Relativistic Electron Theory* (Wiley, New York, 1961) .
- [17] A.H.MacDonald and S.H.Vosko, J.Phys.C12, 2977 (1979).
- [15] H.Ebert, Phys.Rev.B, 38, 9390 (1988).
- [16] R.Feder, F.Rosiky, and B.Ackermann, Z.Phys.B 52, 31 (1983).
- [17] P.Strange, J.B.Staunton, and B.L.Gyorffy, J.Phys.C 17, 3355 (1984).
- [18] P.Cortona, S.Doniach, and C.Sommers, Phys.Rev.A 31, 2842 (1985).
- [19] W.Reim and J.Schoenes,in *Ferromagnetic Materials* ,edited by E.P
- [20] W.Reim and J.Schoenes,in *Ferromagnetic Materials* ,edited by E.P Wohlfarth and K.H.J.Buschow (North-Holland, Amesterdam, 1988),vol.4,p.588.

- [21] S.Visnovsky,Czech.J.Phys.B **34**,969 (1984).
- [22] M.Faraday ,Phil.Trans.R.Soc.**136**,1 (1846).
- [23] Z.Szotek, W.W.Temmerman, and H.Winter , Phys.Rev.B.47 , 4029 (1993).
- [24] C.S.Wang and J.Callaway, Phys.Rev.B 9, 4897 (1974).
- [25] m.Singh, C.S.Wang and J.Callaway, Phys.Rev.B 11, 287 (1975).
- [26]P.Ravindra,A.Delin,P.James,B.Johansson,J.M.Wills,R.Ahuja and
O.Erikson,Phys.Rev.B **59**,15680 (1999).
- [27] V.Antonov, B.Harmon, A.Yaresko, *Electronic structure and Magneto-optical properties of solids*.pp 64-67.
- [28]M.M Dujardin, and M.C.Thèye, J.Phys .Chem.solids **32** 2033 (1971).
- [29] J.Friedel, in: Dislocations (Pergamon, Oxford, 1964).
- [30] M.Alén, H.L.Skriver and N.M.Rosengaard, Phys.Rev.B, 46 6303 (1992).
- [31] A.J.Freeman, R.Wu,JMMM 100 (1991) 497.
- [32] P.Cortona, S.Doniach, and C.Sommers, Phys.Rev.A 31, 2842 (1985).
- [33] m.Singh, C.S.Wang and J.Callaway, Phys.Rev.B 11, 287 (1975).
- [35] R.Wu, A.J.Freeman, Phys.Rev.Lett. 69 (1992) 2867.
- [36] A.Mokrani, C.Demangeat, H.Dreyssé. Phys.Rev.B 42 (1990) 10319.
- [37] K.Louzazna, A.Haroun, Solid State Commun.112, 649 (1999)
- [38] M.A.Alden, et al., Phys.Rev.B 46 (1992) 6303.
- [39] A.Vega, et al., JMMM 104-107 (1992) 1687.
- [40] S.Ohnishi, A.J.Freeman, M.Weinert, phys.Rev.B 28 (1993) 6741.
- [41] O.Erikson, et al., Solid.State Commun. 78 (1991) 801.
- [42] G.L.Krasko, Solid State Commun. 70 (1989) 1099.

Résumé

Dans ce mémoire, nous avons étudié le comportement structural, magnétique et magnéto-optique des couches ultraminces de Fer déposées sur l'Iridium (001) définies par la formule $Fe_n/Ir(001)$ avec $n=1, 2, 2, 3$.

Dans cette étude, nous avons utilisé un calcul *ab-initio* basé sur la théorie de la fonctionnelle de densité DFT en utilisant la méthode SPR-LMTO-ASA pour le calcul de la structure électronique avec des corrections combinées. Le terme d'échange et de corrélation est introduit et paramétrisé par la loi de Van Barth-Hedin. Nous avons également utilisé l'approximation LSDA pour tenir compte de la polarisation de spin. Les éléments du tenseur de la conductivité optique utilisés pour le calcul du spectre de l'effet Kerr sont évalués dans le cadre du formalisme de la réponse linéaire de Kubo-Greenwood. Les équations de Kohn-Sham ont été résolues d'une manière self consistent. Nous avons trouvé que le Fer dans le système étudié cristallise dans la structure *bct* (body centred tetragonal) avec un taux de tétragonalité $c/a=1.21$ et aussi la réponse magnéto-optique est très appréciable.

Abstract

We have studied the structural, magnetic and magneto-optical behaviors in the ultra thin layers of Iron deposited on Iridium (001) defined by the formula $Fe_n/Ir(001)$ with $n=1, 2, 2, 3$. In this study, we have used *ab-initio* calculations based on the density functional theory DFT using the SPR-LMTO-ASA method to calculate the electronic structure with combined corrections. The exchange and correlation term was introduced and parameterized by the Von Barth-Hedin law. We have also used the LSDA approximation in order to highlight the spin polarisation. The elements of the frequency dependent conductivity tensor used in the calculation of the Kerr spectra, are given by Kubo-Greenwood linear response formalism and the Kohn-Sham equations are resolved self consistently. We have found that the Iron atoms in the system described above, crystallize in the *bct* (body centred tetragonal) structure with a tetragonality ratio $c/a=1.21$ and the magneto-optical response is very significant.

خلاصة:

في هذه المذكرة قمنا بدراسة السلوك البنيوي المغناطيسي و المغناطيسي الضوئي في الطبقات الجذ رقيقة المكونة من الحديد الموضوع فوق الإيريديوم (001) و المعطاة بالعلاقة $Fe_n/Ir(001)$ حيث $n=1,2,3$. خلال الدراسة استخدمنا حساب من المبدأ الأول مع استعمال نظرية TDF مركب مع طريقة SPR- LMTO-ASA. و لأخذ الجانب النسبي بعين الاعتبار تم تبني التقريب LSDA. أما الكمون التبادلي التداخلي فقد تم حسابه بطريقة Von Barth-Hedin. معادلات كوهن وشام حلت بطريقة التناسق الذاتي. على المستوى البنيوي وجدنا أن الحديد في طبقات المركب المذكور أعلاه تتبلور في البنية الرباعية tcb مع الثابت $c/a=1,21$ أما الاستجابة المغناطيسية الضوئية فقد كانت جد مقبولة.