

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE ...DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE
N° :.....



DOMAINE : SCIENCES DE LA MATIERE
FILIERE : PHYSIQUE
OPTION : SCIENCES DES MATERIAUX

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: BENREZGUA Elhadj

Intitulé

**Effet du substrat sur l'anisotropie magnétique
de la monocouche du Co bcc**

Soutenu le 08/06/2017 devant le jury composé de:

| | | |
|------------------------|------------|------------|
| BAADJI Nadjib | Université | Président |
| BOUSSENDEL Abdelmadjid | Université | Rapporteur |
| BENHAMIDA Mohamed | Université | Examineur |

Année universitaire : 2016/2017

REMERCIEMENTS

Je tiens profondément à remercier tout d'abord DIEU l'unique qui a permis à ce travail de voir la lumière.

JE remercie, en premier lieu, mon encadreur Monsieur BOUSSENDEL Abdelmadjid, Maitre de conférences à l'Université Mohamed BOUDIAF de M'sila, qui malgré ses nombreuses occupations, à dispenser sans compter son temps et ses conseils pour l'élaboration du mémoire.

JE tient à remercier les membres de jury, Monsieur BAADJI Nadjib, Maitre de conférences à l'Université Mohamed BOUDIAF de M'sila et BENHAMIDA Mohamed, Maitre de conférences à l'Université Mohamed BOUDIAF de M'sila, d'avoir accepté d'évaluer ce travail, Mes remerciements s'adresse aussi à mes enseignants du département de Physique.

BENREZGUA Elhadj

| | |
|------------------------------|---|
| Introduction générale :..... | 1 |
|------------------------------|---|

Chapitre I *Théorie de la fonctionnelle de densité*

| | |
|--|----|
| I.1 Introduction : | 2 |
| I.2 L'équation de Schrödinger | 2 |
| I.3 L'approximation adiabatique de Born-Oppenheimer :..... | 3 |
| I.4 Approximations de Hartree et de Hartree-Fock : | 4 |
| I.5 La Théorie de la Fonctionnelle de Densité (DFT)..... | 5 |
| I.5.1 L'approche de Thomas-Fermi Dirac | 6 |
| I.5.2 Les théorèmes de Hohenberg et Kohn | 7 |
| I.5.3 Les équations de Kohn- Sham | 8 |
| I.6 L'approximation de la densité locale (LDA) | 8 |
| I.7 L'approximation du gradient généralisé (GGA) | 9 |
| I.8 Solution de l'équation de Kohn Sham | 9 |
| Références..... | 11 |

Chapitre II *La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) :*

| | |
|---|----|
| II.1 Introduction : | 12 |
| II. 2 La méthode des ondes planes augmentées (APW) : | 12 |
| II.3 La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) : | 15 |
| II.3.1 Les bases de la FP-LAPW :..... | 15 |
| II.4 Les rôles des énergies de linéarisation E_l : | 16 |
| II.5 Construction des fonctions radiales..... | 16 |
| II.5.1 Les fonctions radiales non relativistes :..... | 17 |
| II.5.2 Les fonctions radiales relativistes :..... | 18 |
| II.6 Résolution de l'équation de Poisson : | 22 |
| II.7 Le code Fleur..... | 23 |
| Références..... | 24 |

Chapitre III *Le couplage spin orbite*

| | |
|---------------------------|----|
| III.1 Introduction :..... | 25 |
|---------------------------|----|


| | |
|---|----|
| III.2 Détermination de $L \cdot \sigma$ | 26 |
| III.3 Théorème de force appliqué à l'anisotropie magnétique | 27 |
| III.4 Théorème de force : | 28 |
| Référence | 30 |

Chapitre IV Résultats et discussions

| | |
|--|----|
| IV.1 Détail de calcul | 31 |
| IV.2 Propriétés magnétiques | 32 |
| IV. 3 Densité d'états (DOS)..... | 33 |
| IV.4 l'énergie de l'anisotropie magnétique | 35 |
| Références..... | 39 |



Introduction

A decorative graphic of a scroll with a green border and grey circular accents at the corners. The text is centered within the scroll.

Chapitre I
Théorie de la fonctionnelle
de densité

I.1 Introduction :

Afin de bien saisir et comprendre les multiples caractéristiques physiques plutôt des matériaux, on a besoin de connaître le système d'électron, et ainsi son interaction avec les ions. Il y a une difficulté de calcul pour ses propriétés à l'état fondamental d'un système à N électrons dans un cristal, pourtant, toutes les particules sont interagies entre autres. L'équation de Schrödinger devient de ce fait mathématiquement insoluble. Plusieurs approximations ont été faites pour résoudre cette situation difficile. Une des méthodes utilisées est la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), développée par Hohenberg et Kohn [1]. Elle est définie comme la méthode la plus efficace dans le calcul des structures de bandes pour les solides, nous l'utiliserons par conséquent dans cette étude.

I.2 L'équation de Schrödinger :

La résolution de l'équation de Schrödinger pour les états stationnaires obtient facilement le calcul de l'énergie totale d'un système composé d'ions et d'électrons :

$$H\Psi = E\Psi \quad (\text{I. 1})$$

où : \mathbf{H} : est l'Hamiltonien du système

Ψ : la fonction d'onde du système (fonction propre)

E : l'énergie totale du système

L'hamiltonien exact d'un cristal qui résulte de la présence des forces électrostatiques d'interaction (répulsion ou attraction suivant la charge des particules (ions, électrons)) est donné par la relation suivante :

$$H = T_e + V_{ee} + V_{eN} + T_N + V_{NN} \quad (\text{I. 2})$$

Soit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i^n \nabla_i^2 - \frac{\hbar^2}{2} \sum_k^N \frac{\nabla_k^2}{M_k} + \frac{1}{2} \sum_i^n \sum_{i \neq j}^n \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_k^N \sum_l^N \frac{Z_k Z_l e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{kl}} + \sum_i^n \sum_k^N \frac{Z_k e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ik}} \quad (\text{I. 3})$$

L'opérateur Hamiltonien peut être décomposé en deux contributions, cinétique et potentielle.

T_e : est l'énergie cinétique des électrons.

T_N : est l'énergie cinétique des noyaux.

V_{ee} : est l'énergie potentielle de répulsion entre les électrons.

V_{NN} : est l'énergie potentielle de répulsion entre les noyaux.

V_{eN} : est l'énergie potentielle d'attraction électrons-noyaux.

Les formules utilisées sont exprimées en unités atomiques (u .a)

($\hbar^2 = e^2 = m = \hbar\pi\epsilon_0 = 1$); on écrit ce Hamiltonien Pour un système ayant N noyaux et n électrons.

i et k indicent les électrons, M_K et Z_K sont respectivement la masse et la charge du noyau considéré, r_{ij} , r_{ik} et R_{kl} sont respectivement les distances électron/électron, électron/noyau et noyau/noyau.

La solution de l'équation de **Schrödinger** d'un système complexe conduit à la résolution d'un problème à N corps, il faut faire recours à des approximations, en particulier à celle de Born-Oppenheimer.

I.3 L'approximation adiabatique de Born-Oppenheimer :

L'approche de Born et Oppenheimer [2], en connaissant que les noyaux sont plus lourds que les électrons, donc plus lents, on commence par négliger le mouvement des noyaux par rapport à celui des électrons et l'on ne prend en considération que celui des électrons dans le réseau rigide périodique des potentiels nucléaires. La négligence de l'énergie cinétique des noyaux et l'énergie potentielle noyaux-noyaux devient une constante. On définit un nouveau Hamiltonien, c'est celui des électrons H est donné par

$$H_e = T_e + V_{ee} + V_{eN} \quad (\text{I. 4}) \quad \text{alors}$$

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_i^n \sum_{i \neq j}^n \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} - \sum_i^n \sum_k^N \frac{Z_K e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ik}} \quad (\text{I. 5})$$

L'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i^n \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_i^n \sum_{i \neq j}^n \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} - \sum_i^n \sum_k^N \frac{Z_k e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ik}} \right] \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (\text{I.6})$$

Alors, il existe de multiples méthodes de résolution de l'équation (I.5) dont les premières sont celles de Hartree [3] et Hartree-Fock [4] qui basent sur l'hypothèse des électrons libres (individuels) interagissant avec les noyaux et tous les autres électrons du système.

I.4 Approximations de Hartree et de Hartree-Fock :

Hartree considère la présence d'un déplacement libre de chaque électron, dans le champ moyen créé par les noyaux et l'ensemble des autres électrons [5]. L'Hamiltonien peut être écrit comme une somme des Hamiltoniens chacune décrit le comportement d'un seul électron:

$$H = \sum_i H_i$$

$$\text{avec :} \quad H_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + U_i(\vec{r}_i) + V_i(\vec{r}_i) \quad (\text{I.8})$$

où

$$U_i(\vec{r}_i) = -\sum_k \frac{Z_k e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{R}_k^0|} \quad (\text{I.9})$$

C'est l'énergie potentielle de l'électron (i) dans le champ de tous les noyaux (k).

\vec{R}_k^0 : est la position fixe des noyaux (k).

$$V_i(\vec{r}_i) = \frac{1}{2} \sum_j \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (\text{I.10})$$

c'est le champ effectif de Hartree.

Le potentiel effectif est la somme de ces deux contributions :

$$V_{\text{eff}}(\vec{r}) = V_H(\vec{r}) + V_N(\vec{r}) \quad (\text{I.11})$$

$V_H(\vec{r})$: Le potentiel de Hartree.

$V_N(\vec{r})$: Le potentiel d'interaction électron-toutes autres noyaux.

Dans l'équation de Schrödinger, en introduisant le potentiel effectif. On trouve :

$$\frac{1}{2}\nabla^2\Phi_i(r) + V_{\text{eff}}(\vec{r})\Phi_i(r) = \varepsilon_i\Phi_i(\vec{r}) \quad (\text{I.12})$$

où est un potentiel effectif qui tient compte de l'interaction de l'électron avec les noyaux et de l'interaction moyenne avec les autres électrons.

La fonction d'onde du système électronique est parallèle à celle du produit de fonction d'ondes des électrons, et on remarque une égalité entre l'énergie de ce système et les énergies de tous les électrons.

$$\Psi(r_1, \dots, r_N) = \Phi_1(r) \cdot \Phi_2(r) \dots \Phi_N(r) \quad (\text{I.13})$$

$$E = E_1 + E_2 + \dots + E_n \quad (\text{I.14})$$

L'équation (I.13) c'est une solution de l'équation (I-12) mais sans respect du principe de Pauli. Ensuite l'approximation de «Hartree-Fock » [6,7] a été introduite afin de savoir le spin des électrons pour la résolution de l'équation de Schrödinger. Mais la différence entre l'énergie du système multiélectronique réel, et l'énergie obtenue dans l'approximation de Hartree se présentent comme celle du reste des interactions électroniques. Savoir que l'une de ces interactions qui manque dans le modèle de Hartree est les deux concepts: l'échange et la corrélation. L'échange est d'origine purement quantique. C'est cet effet qui exprime l'antisymétrie de la fonction d'onde par rapport à l'échange des coordonnées de tous les électrons menant à décrire le système à N corps (électrons) par l'égalité

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N) = -\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N) \quad (\text{I.15})$$

ψ doit être antisymétrique. Donc, elle s'écrit sous la forme d'un déterminant de Slater.

$$(\text{I.16}) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Phi_1(\vec{r}_1) & \Phi_1(r)(\vec{r}_2) & \dots & \Phi_1(\vec{r}_n) \\ \Phi_2(\vec{r}_1) & \Phi_2(\vec{r}_2) & \dots & \Phi_2(\vec{r}_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \Phi_n(\vec{r}_1) & \dots & & \Phi_n(\vec{r}_n) \end{vmatrix}$$

avec, $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ est le facteur de normalisation.

$\Psi_i(\vec{r}_i)$ est la fonction d'onde mono électronique qui dépend des coordonnées spatiales et du spin des électrons.

Ce sont les méthodes les plus utilisées en chimie quantique pour traiter les atomes et les molécules, mais pour les solides, elles sont moins précises. D'autre part il existe une méthode

moderne et certainement plus forte qui est la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

I.5 La Théorie de la Fonctionnelle de Densité (DFT) :

Dans cette théorie, les propriétés de l'état fondamental d'un système de particules interagissant entre-elles, sont exprimées en fonction de la densité électronique. Depuis l'ancien temps, les premières idées de la théorie de la fonctionnelle de la densité furent introduites dans les travaux des deux : Thomas [8] et Fermi [9] en 1927. Notons cependant que la DFT a été réellement établie avec l'apparition des théorèmes fondamentaux exacts d'Hohenberg et Kohn en 1964 [1] qui fait un relief de l'énergie de l'état fondamental et sa densité de façon unique.

I.5.1 L'approche de Thomas-Fermi Dirac :

Cette approche considère l'énergie d'un système d'électrons en interaction dans un potentiel libre de la distribution de densité de ces électrons $\rho(\mathbf{r})$. Cette idée forme la base de la méthode de Thomas-Fermi (1927), utilisent l'expression locale de l'énergie cinétique et l'énergie d'échange et de corrélation du gaz d'électrons homogène considéré comme une unité de fermions indépendants à la température $T=0^\circ\text{k}$ pour construire les mêmes quantités du système hétérogène sous cette façon:

$$(I.17) E = \int \varepsilon_i[\rho(\mathbf{r})] d\mathbf{r}$$

$$\text{La densité du gaz homogène: } \rho = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} E_f^{\frac{3}{2}} \quad (I.18)$$

Avec: E_f est l'énergie de Fermi.

$$\text{L'énergie cinétique du gaz homogène: } T = \frac{3}{5} \rho E_f \quad (I.19)$$

De (I.17) et (I.18), on obtient la densité d'énergie cinétique comme suit :

$$T = \frac{3\hbar^2}{10m} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \rho^{\frac{5}{3}} \quad (I.20)$$

L'énergie cinétique de Thomas-Fermi par unité de volume dans un tel gaz dépend seulement de la densité ρ des électrons donnée comme suit :

$$T_{TF} = \int T d\mathbf{r} \Rightarrow T_{TF} = \frac{3\hbar^2}{10m} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \int \rho^{\frac{5}{3}} d\mathbf{r} \quad (I.21)$$

donc l'énergie totale d'un système d'électrons :

$$E = \frac{3h^2}{10m} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \int \rho^{\frac{5}{3}} dr + \int V(r)\rho(r)dr + \frac{1}{2} \int \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} drdr' \quad (I.22)$$

I.5.2 Les théorèmes de Hohenberg et Kohn :

Dans les années 1964/1965, vient le commencement du développement de la théorie de la fonctionnelle de densité selon les publications de Hohenberg et Kohn [10] (1964). Les deux théorèmes sont les suivants:

Théorème 01 :L'énergie totale de l'état fondamental E est une fonctionnelle unique de la densité des particules $\rho(\vec{r})$ pour un potentiel externe $V_{\text{ext}}(\vec{r})$ donnée. Il signifie qu'il suffit de connaître seulement la densité électronique pour savoir toutes les fonctions d'onde. Par conséquent, l'énergie totale E d'un système d'électrons interagissant dans un potentiel extérieur est représentée comme une fonctionnelle de la densité électronique de l'état fondamental, ρ_0 , par:

$$E = \langle \varphi | H | \varphi \rangle = F[\rho] + \int V_{\text{ext}}(\vec{r})\rho(\vec{r})dr \quad (I.23)$$

$$F[\rho] = \langle \varphi | U + T | \varphi \rangle \quad (I.24)$$

T et U sont respectivement l'énergie cinétique et l'interaction inter-particules qui ne s'intéresse pas à un potentiel extérieur. Sachant l'appel à l'approximation de Hartree, on trouve :

$$F[\rho] = \iint \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} drdr' + G[\rho] \quad (I.25)$$

$G[\rho]$: Représente l'énergie cinétique et aussi la différence entre l'énergie d'interaction vraie et celle donnée par le terme d'interaction de Hartree. Les fonctionnelles de la densité électronique $F[\rho]$ et $G[\rho]$ sont valables quelque soit la forme du potentiel extérieur et le nombre d'électrons.

Théorème 02: La fonctionnelle de l'énergie totale à plusieurs particules possède un minimum qui s'intéresse à l'état fondamental. La densité des particules de l'état fondamental vérifie :

$$E[\rho_0] = \text{Min}E(\rho) \quad (I.26)$$

Hohenberg et Kohn ont montré que la vraie densité de l'état fondamental c'est celle qui minimise l'énergie $E[\rho]$, ainsi que toutes les autres propriétés sont aussi une fonctionnelle de cette densité. Trouvant que l'énergie de l'état fondamental d'un système électronique dans un potentiel extérieur est déterminée par la méthode variationnelle.

I.5.3 Les équations de Kohn- Sham :

Ces équations ont pour objectif la détermination des fonctions d'ondes électroniques Ψ_0 qui minimisent l'énergie totale. Les fonctions d'ondes sont déterminées à partir d'une équation similaire à l'équation de Schrödinger d'une manière auto-cohérente. L'équation est donnée par [11] :

$$[-\nabla + V_{eN}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{XC}(\vec{r})]\Psi_i(\vec{r}) = E_i\Psi_i(\vec{r}) \quad (I. 27)$$

C'est là en donnant la somme de la densité de probabilité sur les orbitales occupées (on unité atomique u. a)

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\text{occ}} \Psi_i^*(\vec{r})\Psi_i(\vec{r}) \quad (I. 28)$$

où : $\Psi_i(\vec{r})$ est la fonction d'onde à une particule l'énergie mono particule, $V_{eN}(\vec{r})$ le potentiel coulombien dû aux noyaux, $V_H(\vec{r})$ potentiel de Hartree et $V_{XC}(\vec{r})$ le potentiel d'échange-corrélation. Ces potentiels sont donnés par:

$$\begin{cases} V_H(\vec{r}) = \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3r' \\ V_{XC}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{XC}[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} \\ V_{eN}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}\vec{t}} \frac{Z_{\vec{t}}}{|\vec{r}-\vec{R}-\vec{t}|} \end{cases} \quad (I. 29)$$

En connaissant que la DFT est une méthode qui caractérise par l'exactitude, mais pour que la DFT et les équations de Kohn-Sham deviennent utilisées dans la pratique, c'est pourquoi on a besoin de proposer une formule pour et pour cela, on est obligé de passer par des approximations.

I.6 L'approximation de la densité locale (LDA) :

On conclut que l'approximation la plus simple de l'énergie d'échange-corrélation est celle de la densité locale (LDA). L'idée de LDA est de définir la densité électronique d'un système réel par celle d'un gaz d'électrons homogène. En autre terme, on suppose que dans une petite

région spatiale, la distribution de charges d'un gaz non-homogène à une densité similaire à une distribution de charges d'un gaz homogène.

$$E_{xc}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] d^3\vec{r} \quad (I.30)$$

Détermine l'énergie d'échange-corrélation par électron dans un gaz d'électrons $\varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})]$: dont la distribution est supposée uniforme. C'est en général, donc la dépendance de potentiel d'échange et de corrélation est de la forme:

$$V_x = C_x \rho(\vec{r})^{\frac{1}{3}} \quad (I.31)$$

I.7 L'approximation du gradient généralisé (GGA) :

Afin d'améliorer certains problèmes de la LDA pour certaines applications, il y a certains termes que nous avons besoin de les introduire en gradient dans l'expression de l'énergie d'échange et de corrélation, c. à. d. tenant en considération l'inhomogénéité de la densité électronique. Cette amélioration est prise l'appellation de L'approximation du gradient généralisé (GGA), Generalized Gradient Approximation) [12]. Ainsi la fonctionnelle prend compte du caractère non uniforme du gaz d'électrons.

Dans ce cas, la contribution de à l'énergie totale du système peut être additionnée de façon cumulée à partir de chaque portion du gaz non uniforme comme s'il était localement non uniforme. Elle s'écrit de la forme suivante:

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})] \cdot |\nabla \rho(\vec{r})| d^3\vec{r} \quad (I.32)$$

où $\varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})] \cdot |\nabla \rho(\vec{r})|$ représente l'énergie d'échange-corrélation par électron dans un système d'électrons en interaction mutuelle de densité non uniforme.

Alors l'utilisation des fonctionnelles de type GGA laisse d'accroître de façon significative pour préciser des calculs en comparant avec la description fournie par la LDA en particulier pour l'énergie de liaison des molécules. Ce qui est à l'origine de l'utilisation massive de la DFT par les chimistes dans les années 90.

I.8 Solution de l'équation de Kohn Sham :

On trouve les différentes méthodes de calcul de la structure de bandes sur la DFT qui sont classifiées selon les représentations utilisées pour la densité, le potentiel, et les orbitales

de Kohn et Sham. Dans la méthode LAPW, les orbitales de Kohn et Sham peuvent être présentées sous la forme:

$$\Psi_i(\vec{r}) = \sum C_{i\alpha}(\vec{r}) \quad (I.33)$$

où $\phi_\alpha(\vec{r})$ sont les fonctions de base et les coefficients de développement. La solution de l'équation de Kohn-Sham est obtenue pour les coefficients qui minimisent l'énergie. En cohérence, jusqu'à minimisation de l'énergie totale:

$$(H-E_iO)C_i = 0 \quad (I.34)$$

où H est l'hamiltonien de Kohn-Sham et O la matrice de recouvrement. Ensuite, la nouvelle densité de charge ρ_{out} est faite avec les vecteurs propres de cette équation séculaire avec l'utilisation de la densité de charge totale qui peut être obtenue par une sommation sur toutes les orbitales occupées (I. 28).

$$\rho_{in}^{i+1} = (1-\alpha)\rho_{in}^i + \rho_{out}^i \quad (I.35)$$

Représente la itération et α un paramètre de mixage. Ainsi la procédure itérative peut être poursuivie jusqu'à ce que la convergence soit réalisée.

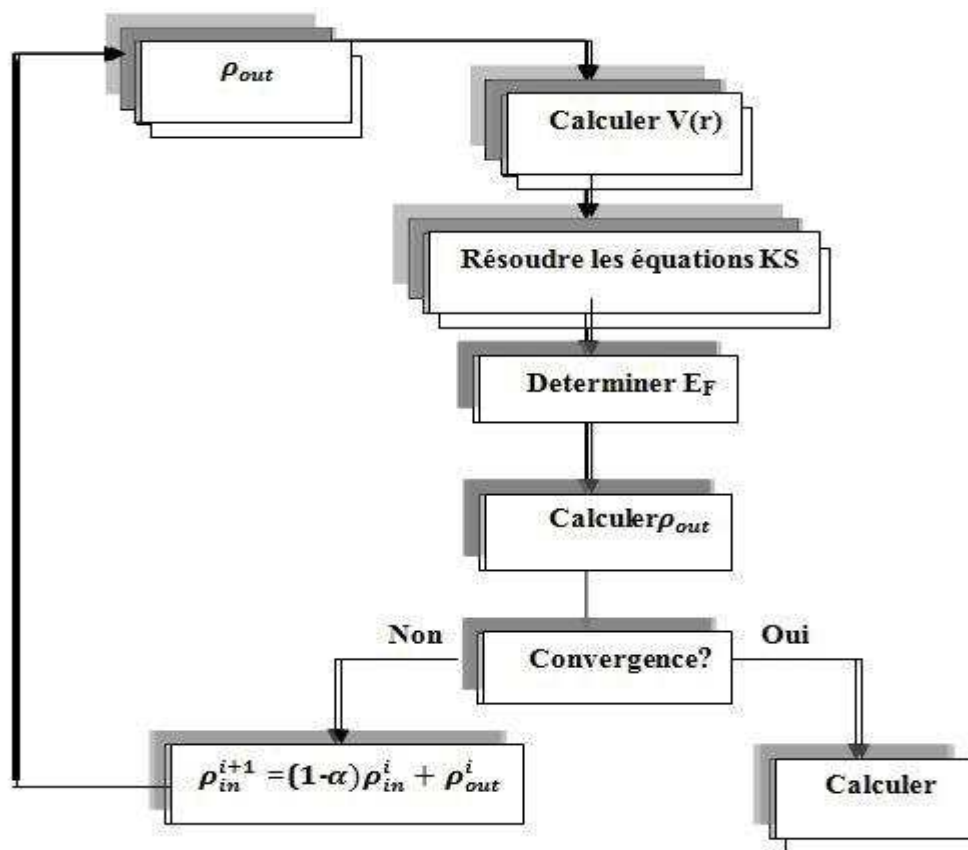
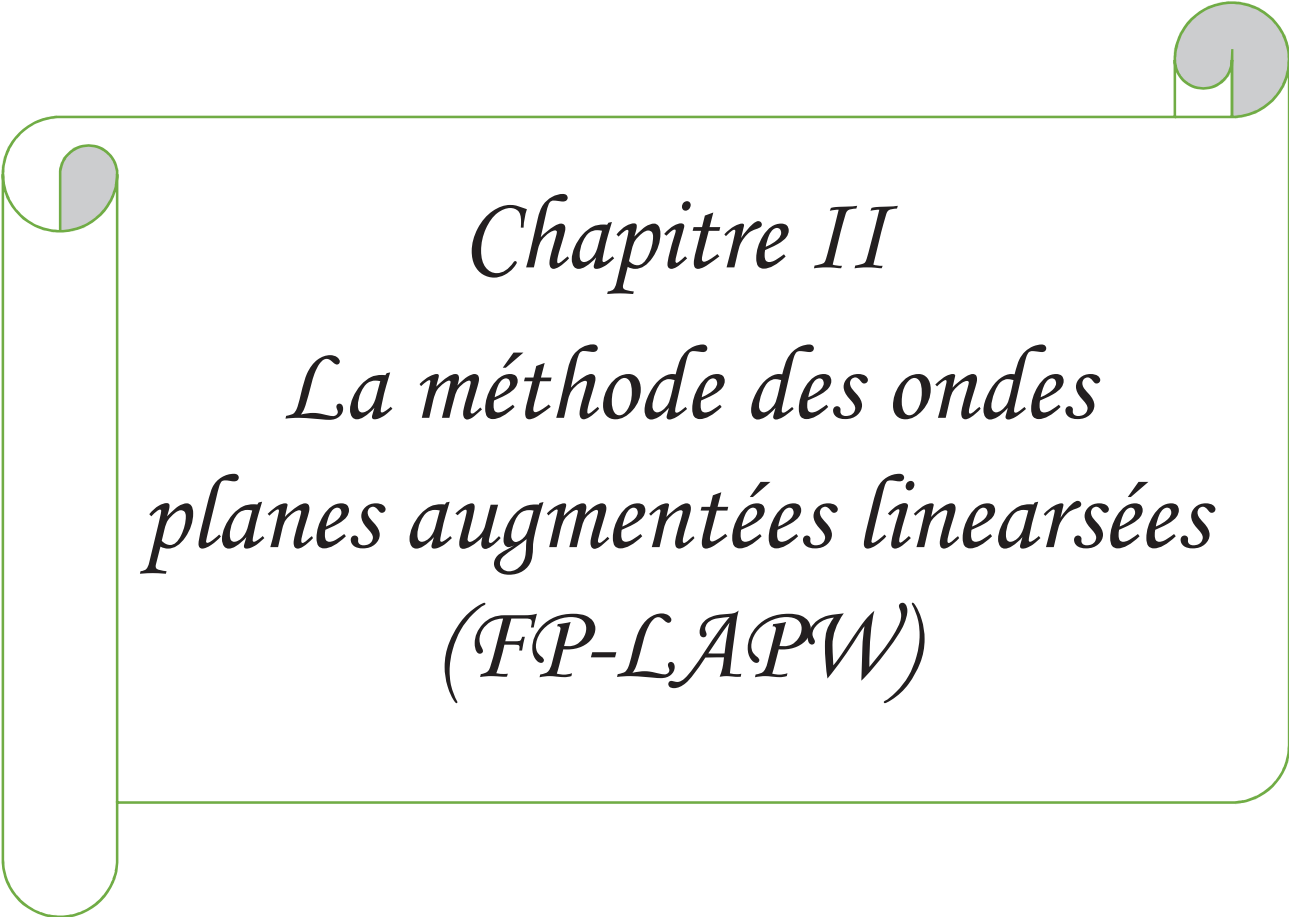


Fig.1 : Diagramme de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT)

Références

- [1] P. Hohenberg, W. Kohn: Phys. Rev. B 136, 864 (1969).
- [2] M. Born, J. R. Oppenheimer, ann. Phys .87. 457 (1927).
- [3] D. R. Hartree, Proc. Combridge Philos. Soc. 24, 89 (1928).
- [4] V. Fock, Z. Phys. 61, 126 (1930); 62, 795 (1930).
- [5] D.Vogel, P.Krueger, and J. Pollmann,Phys.Rev.B55, 12 836 (1997).
- [6] D. R. Hartree, Proc. Combridge Philos. Soc. 24, 89 (1928).
- [7] V. Fock, Z. Phys. 61, 126(1930); 62, 795 (1930).
- [8] L.H. Thomas, Proc. Camb. Phil. Sos. 23, 542 (1927).
- [9] E.Z. Fermi, Phys. 48,73 (1928).
- [10] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. B 136, 864 (1964).
- [11] W. Kohn and L J. Sham Phys. Rev 140 (4A) 1133 (1965).
- [12] J. A.White and D.M.Bird. Implementation of gradient-corrected exchange-correlations potentials in Car-Parrinello total-energy calculations. Phys .Rev. B. 50 (70): 4957, Aug1994.

A decorative graphic of a scroll with a green border and grey circular accents at the corners. The text is centered within the scroll.

Chapitre II
La méthode des ondes
planes augmentées linearsées
(FP-LAPW)

II.1 Introduction :

Pour définir la théorie de la fonctionnelle de la densité, on peut dire qu'elle est une approche qui avait d'une puissance pour traiter du problème à multiples corps. D'autre part, il apparaît l'importance de faire le choix qui convient aux fonctions d'onde, c'est dans la résolution des équations faite par Khon-Sham. Pour la résolution de Schrödinger, en trouvant des méthodes importantes et assez beaucoup qui sont intéressantes à cette équation. Mais en remarquant une différence entre les méthodes soit par la forme utilisée du potentiel ou bien par les fonctions d'onde prises comme base. En distinguant premièrement les méthodes basées sur une combinaison linéaire d'orbitales atomiques (LCAO) [1, 2], qui a le rôle de traiter les métaux de transition. Par addition, il y a les méthodes des ondes planes orthogonalisées qui s'appellent (OPW) et leurs dérivées [2, 3] sont applicables aux bandes de conduction de caractère « s-p » des métaux simples. Puis en traitant les méthodes de cellules d'ondes planes augmentées, selon cette abréviation (APW) [4]. Finalement, en citant ces méthodes linéarisées mises au point par Andersen [5] : qui expliquaient en ondes planes augmentées linéarisées (LAPW) et orbitales « muffin-tin » linéarisées (LMTO), qui ont l'importance de prendre des ordres variés de grandeur selon les temps quand on fait du calcul.

II. 2 La méthode des ondes planes augmentées (APW) :

Pour résoudre l'équation de Schrödinger à un seul électron, cette dernière correspond à l'équation de Kohn et Sham basée sur la DFT. Slater [2] proposa, les fonctions d'ondes planes augmentées (APW: Augmented Plane Wave) comme base en 1937.

Pour simplifier de l'équation de Schrödinger nous prenons considérons un cristal représenté par un réseau de sphères sans recouvrement centrées sur les différents sites atomiques. Dans cette sphère le potentiel cristallin est remplacé sa moyenne sphérique périodique $V(r)$ (approximation muffin-tin). Dans la zone interstitielle entre les sphères le potentiel est supposé constant, égale à sa valeur moyenne V_0 (zéro muffin-tin):

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} V(r) & r \leq r_0 \\ 0 & r > r_0 \end{cases} \quad (\text{II. 1})$$

Avec : $r = |\vec{r}|$

En principe, dans des bases différentes, les fonctions d'onde du cristal sont développées, selon la région considérée: solutions radiales multipliées par des harmoniques sphériques dans les sphères MT et ondes planes dans la région interstitielle (figure (II.1)).

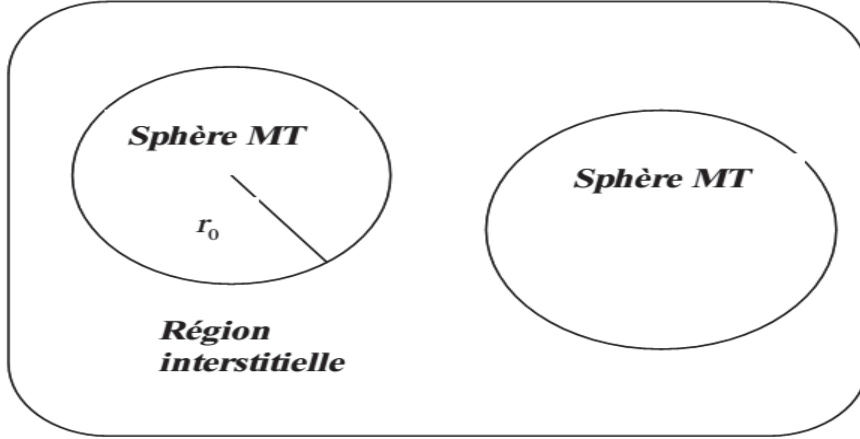


Fig. (II.1) : Schéma de la répartition de la maille élémentaire en sphères atomiques et en région interstitielle.

donc la fonction d'onde s'écrit sous la forme :

$$\phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_G e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{K})\mathbf{r}} & r > r_0(I) \\ \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(\mathbf{r}) & r < r_0(MT) \end{cases} \quad (\text{II. 2})$$

Où :

r_0 : Représente le rayon de la sphère muffin-tin.

Ω : est le volume de la cellule élémentaire.

G : est le vecteur du réseau réciproque.

C_G et A_{lm} les coefficients du développement en harmonique sphériques Y_{lm} .

A signaler que les centres des sphères atomiques c'est l'origine des coordonnées sphériques.

La fonction $U_l(r)$ est une solution régulière de l'équation de Schrödinger pour la partie radiale qui s'écrit sous la forme :

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} V(r) - E_l \right\} r U_l(r) = 0 \quad (\text{II. 3})$$

où E_l : paramètre d'énergie.

$V(r)$: Le composant sphérique du potentiel dans la sphère.

L'équation précédente, définit Les fonctions radiales, sont orthogonales à tout état propre du cœur, cette orthogonalité disparaît sur la limite de la sphère [3], et l'équation suivante montre ça :

$$(E_2 - E_1)rU_1U_2 = U_2 \frac{d^2rU_1}{dr^2} - U_1 \frac{d^2rU_2}{dr^2} \quad (\text{II. 4})$$

U_1 et U_2 : sont les solutions radiales pour ces énergies E_1 et E_2 respectivement.

Dans cette méthode, pour les fonctions d'ondes, Slater prouve que les ondes planes sont les solutions de l'équation de Schrödinger dans un potentiel constant. Et la solution cas du potentiel sphérique c'est les fonctions radiales. Donc il montre que E_l est égale à la valeur propre E .

Cette approximation est très bonne pour les matériaux à structure cubique à faces centrées, et de moins en moins satisfaisante avec la diminution de symétrie du matériau.

Les A_{lm} coefficients doivent être développés en fonction des coefficients C_G des ondes planes existantes dans les régions interstitielles pour assurer la continuité de la fonction $\phi(\mathbf{r})$ à la surface de la sphère MT, Ainsi, après quelques calculs algébriques [4], nous trouvons que :

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\Omega^2 U_l(r_l)} \sum_G C_G J_l(|K + G|r_0) Y_{lm}^*(K + G) \quad (\text{II. 5})$$

J_l : La fonction de Bessel.

Où l'origine est prise au centre de la sphère et r_0 est son rayon, les coefficients des ondes planes déterminent tout les A_{lm} , et le paramètre d'énergie E_l sont des coefficients variationales dans la méthode (APW).

Dans la région interstitielle, Les fonctions d'ondes se comportent comme des ondes planes, et elles augmentent dans la région de cœur et se comportent comme des fonctions radiales, la solution de l'équation de Schrödinger c'est Les fonctions APWs. Pour l'énergie E_l . Avec E_l est égale à la bande d'énergie indiquée par G. une simple diagonalisation ne donne pas les bandes d'énergie, et ceci implique de traiter le déterminant séculaire comme une fonction de l'énergie.

La fonction qui apparaît dans l'équation (II.4) est dépendante de r, et peut devenir nulle à la surface de la sphère MT, cela conduit à la séparation entre les fonctions radiales et les ondes planes. Différentes modifications ont été apportés sur la méthode (APW) Pour

résoudre ce problème. Parmi ces dernières, on mentionne le travail d'Anderson [5], ainsi que celui de Koelling [6]. La modification consiste à représenter la fonction d'onde $\phi(\mathbf{r})$ à l'intérieur de la sphère par une combinaison linéaire des fonctions radiales $U_l(r)$ de leurs dérivées $\dot{U}_l(r)$ par rapport à l'énergie.

II.3 La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) :

Il y a deux régions pour un cristal : la première région est la sphère du Muffin-Tin, et la deuxième représente la région interstitielle. La fonction de base de la méthode (FP-LAPW) a des ondes planes dans la région interstitielle et harmoniques sphérique multiplient par les fonctions radiales dans les sphères.

II.3.1 Les bases de la FP-LAPW :

Les fonctions de base à l'intérieur de la sphère sont des combinaisons linéaires des fonctions radiales $U_l(r)Y_{lm}(r)$ et leurs dérivés $\dot{U}_l(r)Y_{lm}(r)$ par rapport à l'énergie.

Les fonctions U_l sont définies comme dans la méthode (APW) et la fonction $\dot{U}_l(r)Y_{lm}(r)$ doit satisfaire la condition suivante [7].

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r \dot{U}_l(r) = r U_l(r) \quad (\text{II.6})$$

La fonction d'onde s'écrit comme suit :

$$\Phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(\vec{G}+\vec{K})\vec{r}} & r > r_0 \\ \sum_{lm} \left(A_{lm} U_l(r) + B_{lm} \dot{U}_{lm}(r) \right) Y_{lm}(r) & r < r_0 \end{cases} \quad (\text{II.7})$$

Où :

A_{lm} : Sont des coefficients correspondant à la fonction U_l .

B_{lm} : Sont des coefficients correspondant à la fonction \dot{U}_l .

Les fonctions (FP-LAPW) sont des ondes planes seulement dans les zones interstitielles comme dans la méthode APW. au voisinage de E_l Les fonctions radiales peuvent être développées [8] :

$$U_l(E, r) = U_l(E_l, r) + (E - E_l) \dot{U}_l(E, r) + O((E - E_l)^2) \quad (\text{II.8})$$

Avec :

$O((E - E_1)^2)$ dénote l'erreur quadratique commise.

Deux erreurs causé par la méthode(FP-LAPW),l'un sur les fonctions d'ondes de l'ordre de $O((E - E_1)^2)$ et l' autre sur l'énergie de bande de l'ordre $O((E - E_1)^4)$ [7],par un seul E_1 on peut produire toutes les bandes de valence dans une grande région d'énergie.(on divise la fenêtre énergétique en deux parties dans le cas de l'impossibilité)

II.4 Les rôles des énergies de linéarisation E_1 :

Les fonctions U_1 et \dot{U}_1 sont orthogonales à n'importe quel état de cœur strictement limité à la sphère MT, dans le cas où il n'y a pas d'états de cœur avec le même l ; la condition est satisfaite, d'autres cas la condition ne satisfait pas. Et par conséquent, on prend le risque de confondre les états de semi-cœur avec les états de valence. la méthode APW ne traite pas ce problème, alors que la non orthogonalité de quelques états de cœur dans la méthode FP-LAPW exige un choix délicat de E_1 . dans ce cas ,on ne peut pas faire le calcul sans modifier E_1 . La solution la plus efficace est d'utiliser un développement en orbitales locales. dans ce cas, on doit choisir un rayon de la sphère le plus grand possible parce que cette option n'est pas disponible dans tous les programmes. Finalement.il faut observer remarquer que les divers E_1 devraient être définis indépendamment les uns des autres. Les bandes d'énergie ont des orbitales différentes. Pour un calcul précis de la structure électronique, E_1 doit être choisi le plus proche possible de l'énergie de la bande si la bande a le même l .

II.5 Construction des fonctions radiales :

Les fonctions de base de la méthode FP-LAPW sont développées sous la forme de fonctions radiales numériques à l'intérieur des sphères MT à condition que les fonctions de base et leurs dérivées soient continués à la surface de la sphère MT .à signaler qu'elles sont des ondes planes dans la zone interstitielle. Ainsi la construction des fonctions de base de la méthode FP-LAPW revient à déterminer :

- Les fonctions radiales $U_1(r)$ et leurs dérivées par rapport à l'énergie $\dot{U}_1(r)$.
- Les coefficients A_{1m} et B_{1m} qui satisfont aux conditions aux limites.

Les conditions aux limites fournissent un moyen simple pour la détermination du cut-off du moment angulaire l_{\max} et pour la représentation du cut-off G_{\max} des ondes planes dans la sphère de MT pour un rayon R_s . Une stratégie raisonnable consiste à choisir ces cut-off, tels

que $R_s G_{\max} = l_{\max}$, ce qui est réalisé en pratique puisque la convergence des calculs de FP-LAPW est assurée pour $R_s G_{\max}$ compris entre 7 et 9.

On note aussi qu'il y a deux types de fonctions radiales : les fonctions radiales non relativistes et les fonctions radiales relativistes.

II.5.1 Les fonctions radiales non relativistes :

Le premier type c'est : les fonctions radiales non relativistes dont les fonctions radiales $U_1(r)$ sont des solutions de l'équation de Schrödinger avec un potentiel sphérique et une énergie fixe E_1 .

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_1 \right\} rU_1(r) = 0 \quad (\text{II.9})$$

Où :

$V(r)$: est la composante sphérique du potentiel dans la sphère MT.

La dérivée par rapport à l'énergie E_1 donne l'équation différentielle suivante :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_1 \right\} r\dot{U}_1(r) = rU_1(r) \quad (\text{II.10})$$

Les solutions radiales doivent être normalisées dans la sphère MT.

$$\int_0^{r_0} [rU_1(r)]^2 dr = 1 \quad (\text{II.11})$$

U_1 est une solution homogène de l'équation inhomogène (II.11) de la forme

$$h\dot{U}_1 - E\dot{U}_1 = U_1$$

En utilisant la condition de normalisation (Eq(II.11)), il apparaît dans l'immédiat que la fonction $U_1(r)$ et sa dérivée $\dot{U}_1(r)$ sont orthogonales :

$$\int_0^{r_0} r^2 U_1(r)\dot{U}_1(r) dr = 0 \quad (\text{II.12})$$

La fonction $\dot{U}_1(r)$ est normalisée :

$$N_1 = \int_0^{r_0} [r\dot{U}_1(r)]^2 dr = 1 \quad (\text{II.13})$$

Cette condition de normalisation dans la méthode FP-LAPW peut être remplacée par l'équation suivante :

$$r_0^2 [U_1'(R_s)\dot{U}_1(R_s) - U_1(R_s)\dot{U}_1'(R_s)] = 1 \quad (\text{II. 14})$$

Avec :

$$U_1'(E, r) \equiv \left(\frac{\partial U_1(E, r)}{\partial r} \right)$$

$$\dot{U}_1(E, r) \equiv \left(\frac{\partial U_1(E, r)}{\partial E} \right)$$

Cette équation sert à déterminer numériquement les fonctions $U_1(r)$ et $\dot{U}_1(r)$. Avec cette normalisation on peut développer $U_1(r)$ sous la forme :

$$U_1(E + \delta) = U_1(E) + \delta \dot{U}_1(E) + \dots \quad (\text{II. 15})$$

Avec ce choix, la norme de $\dot{U}_1(r)$, soit $(\|\dot{U}_1(r)\|)$, indique l'ordre de la grandeur de l'énergie E_1 . En particulier, selon Anderson[9] les erreurs sur l'énergie de linéarisation sont acceptables quand :

$$\|\dot{U}_1\| |E_1 - E| \leq 1 \quad (\text{II. 16})$$

Si un tel choix impossible, plusieurs options sont disponibles :

- 1- On divise les rangs d'énergie dans les fenêtres, et chacune fenêtres est traitée séparément.
- 2- On emploie un développement sous la forme d'orbitales locales (ceci est effectivement la méthode quadratique).
- 3- On réduit la taille de la sphère, donc, on réduit la norme de la dérivée.

Les deux premières options sont les plus utilisées $\dot{U}_1(r)$.

II.5.2 Les fonctions radiales relativistes :

On prend en considération l'effet relativiste Dans le cas des éléments lourds qui ont un nombre atomique élevé.

Les effets relativistes concernent uniquement les fonctions radiales dans les sphères MT. Pour introduire cet effet, il faut remplacer les équations (II-9) et (II-10) par les équations de Dirac et leurs dérivées par rapport à l'énergie. Pour résoudre ces équations, Koelling et Harman[10]

trouvaient une technique qui néglige l'effet spin-orbite (Roskey [11], Wood et Boring[12] Tekeda [13], Macdonald et al [14]).

L'Hamiltonien de Dirac pour une seule particule est donné par :

$$H_D = C\alpha p + (\beta - 1)mc^2 + V \quad (\text{II. 17})$$

Où :

C ; est la vitesse de la lumière, P est l'impulsion, $V(r)$ est la partie sphérique du potentiel, m est la masse de l'électron et les deux matrices α et β sont données par :

$$\alpha = \begin{bmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{bmatrix} \quad ; \quad \beta = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (\text{II. 18})$$

Si Ψ sont les vecteurs propres de H_D , ils s'écrivent à l'aide des deux fonctions ϕ et χ :

$$\Psi = \begin{bmatrix} \phi \\ \chi \end{bmatrix} \quad (\text{II. 19})$$

ϕ : est appelé la grande composante de la fonction d'onde et χ la petite. L'équation de Schrödinger conduit à :

$$c(\sigma p)\chi = (\varepsilon - V)\phi \quad (\text{II. 20})$$

$$c(\sigma p)\phi = (\varepsilon - V + 2mc^2)\chi \quad (\text{II. 21})$$

A partir de ces deux équations, il vient

$$\frac{1}{2m}(\sigma p) \left(1 + \frac{\varepsilon - V}{2mc^2}\right)^{-1} (\sigma p)\phi + V\phi = \varepsilon\phi \quad (\text{II. 22})$$

En utilisant l'approximation

$$\left(1 + \frac{\varepsilon - V}{2mc^2}\right)^{-1} \approx 1 - \frac{\varepsilon - V}{2mc^2} \quad (\text{II. 23})$$

Avec :

$$pV = Vp - i\hbar\nabla V \quad (\text{II. 24})$$

$$(\sigma\nabla V)(\sigma p) = (\sigma\nabla p) + i\sigma[\nabla, p] \quad (\text{II. 25})$$

On obtient l'équation différentielle vérifiée par Φ

$$\left[\left(1 - \frac{\varepsilon - V}{2mc^2}\right)\frac{p^2}{2m} - V\right]\phi - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}(\nabla\nabla\nabla\phi) + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}(\sigma[\nabla V, p])\phi = \varepsilon\phi \quad (\text{II. 26})$$

Dans le cas où le potentiel possède une symétrie sphérique, l'équation devient :

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V - \frac{p^4}{8m^3c^2} - \frac{\hbar^2}{8m^3c^2}\frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}(\vec{L} \cdot \vec{S})\right]\phi = \varepsilon\phi \quad (\text{II. 27})$$

Les deux premiers termes correspondent à l'équation de Schrödinger non relativiste, les deux derniers proviennent respectivement de la correction de masse et de Darwin. Quant

au dernier terme, il correspond au couplage spin-orbite. A cause de ce dernier terme, Ψ n'est plus une fonction propre du moment de spin.

La solution de l'équation de Dirac à l'intérieur de la sphère MT devient :

$$\Psi_{k\mu} = \begin{bmatrix} g_k \chi_{k\mu} \\ -if_k \sigma_r \chi_{k\mu} \end{bmatrix} \quad (\text{II. 28})$$

et les fonctions f_k et g_k vérifient les équations radiales suivantes :

$$\frac{df_k}{dr} \equiv f'_k = \frac{1}{c} (V - E)g_k + \left(\frac{k-1}{r}\right) f_k \quad (\text{II. 29})$$

$$\frac{dg_k}{dr} \equiv g'_k = -\frac{(k+1)}{r} g_k + 2Mc f_k \quad (\text{II. 30})$$

Où :

$$M \equiv m + \frac{1}{2c^2} (E - V) \quad (\text{II. 31})$$

k : le nombre quantique relativiste.

$\chi_{k\mu}$: représente les deux composantes spin-orbite.

m et c , la masse et la vitesse de la lumière.

Le traitement des deux équations couplées (II.29) et (II.30) donne :

$$\left(\frac{-1}{2M}\right) \left[g''_k + \frac{2}{r} g'_k - \frac{l(l+1)}{r^2} g_k \right] - V' g'_k / 4M^4 c^2 + V g_k - \frac{k+1}{r} \quad (\text{II. 32})$$

Le dernier terme qui représente le couplage spin-orbite et qui dépend de la valeur de k ($k=1$ ou $k=-(l+1)$) est négligeable dans un premier temps et sera pris en considération par la suite. on utilise une technique présentée par Koelling et Harmon, Takeda, Macdonald et al[15] ; Pour résoudre ces équations pour un potentiel sphérique. Dans cette technique on utilise une nouvelle fonction :

$$\phi_k \equiv \frac{1}{2Mc} g'_k \quad (\text{II. 33})$$

Qui donne, compte tenu de l'équation (II.30):

$$f_k = \phi_k + \frac{1}{2Mc r} (k+1) g_k \quad (\text{II. 34})$$

A partir de l'équation (II.34), on négligeant le dernier terme et en remplaçant g'_k par sa valeur, on obtient l'expression :

$$\phi'_1 = -\frac{2}{r} \phi_1 + \left[\frac{l(l+1)}{2Mc r^2} + \frac{1}{c} (V - E) \right] g_1$$

Dans la quelle on a remplacé l'indice k par l. Les équations (II.33) et (II.34) forment un système d'équations couplées. On peut le résoudre de la même façon que pour l'équation radiale standard de Dirac. L'équation (II.28) devient :

$$\Psi_{k\mu} \cong \begin{bmatrix} \tilde{\Phi} \\ \tilde{\chi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_l \mathcal{X}_{k\mu} \\ -i \left(-\phi_l + \frac{(k+1)}{2Mcr} g_l \right) \sigma_r \mathcal{X}_{k\mu} \end{bmatrix} \quad (II.35)$$

et l'équation (II.35) écrite avec les nombres quantiques l et m :

$$\Psi_{lms} = \begin{bmatrix} g_l y_{jlm} \mathcal{X}_s \\ \frac{i}{2Mc} \sigma_r \left(-g'_l + \frac{1}{r} g_l \sigma \cdot L \right) y_{lm} \mathcal{X}_s \end{bmatrix} \quad (II.36)$$

Où : \mathcal{X}_s est l'opérateur de spin non relativiste (spin-haut,spin-bas). Pour faciliter la résolution des équations séculaires relativistes (II.34) (II.35) Louks [16] définit les fonctions suivantes :

$$\begin{cases} p_l = r g_l \\ Q_l = r C \phi_l \end{cases} \quad (II.37)$$

Qui donne :

$$p'_l = 2MQ_l + \frac{1}{r} p_l \quad (II.38)$$

$$Q'_l = -\frac{1}{r} Q_l + \left[\frac{l(l+1)}{2Mr^2} + (V - E) \right] p_l \quad (II.39)$$

Ces équations peuvent être résolues numériquement de la même façon que pour l'équation de Schrödinger non relativiste à l'aide de la condition aux limites suivantes :

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{Q}{P} = c \frac{1}{(2Z/C)} \left([l(l+1) + 1 - (2Z/C)^2]^{1/2} - 1 \right) \quad (II.40)$$

Le terme de spin-orbite $\left(\frac{V}{4M^2C^2}\right)(k+1)P$ est alors ajouté à l'équation (II.39). La dérivée par rapport à l'énergie conduit à des équations semblables à celles du cas non relativiste, soit :

$$\dot{P}'_l = 2(\dot{M}Q_l + M\dot{Q}_l) + \frac{1}{r} \dot{P}_l \quad (II.41)$$

$$\dot{Q}_l = -\frac{1}{r} Q_l \left[\frac{l(l+1)}{2Mr^2} + (V - E_l) \right] \dot{P}_l - \left[\frac{l(l+1)\dot{M}}{2M^2r^2} + 1 \right] P_l \quad (II.42)$$

Les composantes g_l et f_l peuvent être déterminées en utilisant les définitions de P_l , Q_l et ϕ_l .

On utilise les deux composantes pour construire de la densité de charge ou l'évaluation des éléments de matrice. Ainsi la quantité U_l^2 est remplacée dans l'équation (II.11) de normalisation par le terme $g^2 + f^2$.

II.6 Résolution de l'équation de Poisson :

Le potentiel utilisé dans l'équation de Kohn et Sham contient le potentiel d'échange corrélation et le potentiel de Coulomb (une somme du potentiel de Hartree et le potentiel nucléaire).

À l'aide de l'équation de Poisson. On peut déterminer le potentiel coulombien.

On a :

$$\nabla^2 V_c(r) = 4\pi\rho(r) \quad (\text{II. 43})$$

Hamann [17] et Weinert [18] ont proposé une méthode de résolution dite "pseudo-charge", Pour résoudre cette équation dans le réseau réciproque. elle est essentiellement basée sur les deux observations suivantes.

- La densité de charge varié rapidement dans la région de cœur, par contre elle est continuée et varié lentement dans les régions interstitielles. et le potentiel coulombien dans la région interstitielle dépend des charges dans cette région, comme il dépend des charges dans la région de cœur.

- La densité de charge est décrite par une série de Fourier dans la région interstitielle comme suit :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_G \rho(G) e^{iG \cdot r} \quad (\text{II. 44})$$

et les ondes planes $e^{iG \cdot r}$ sont calculées à partir de la fonction de Bessel J_1 .

$$\int_0^R r^{l+2} j_l(Gr) dr = \begin{cases} \frac{R^{l+3} j_l(Gr)}{Gr} & G \neq 0 \\ \frac{R^3}{3} \sigma_{l,0} & G = 0 \end{cases} \quad (\text{II.45})$$

$$e^{iG \cdot r} = 4\pi e^{iG \cdot r_\alpha} \sum_{lm} i^l j_l(|G||r - r_\alpha|) Y_{lm}^*(G) Y_{lm}(r - r_\alpha) \quad (\text{II. 46})$$

Où : r est la coordonnée radiale, r_α la position de la sphère α et R_α son rayon.

$$V_{PW} = \sum_{lm} V_{lm}^{PW}(r) Y_{lm}(r) = \sum_V V_V^{PW}(r) K_V(r) \quad (\text{II. 47})$$

Où : V_{PW} : Le potentiel interstitiel.

Soit :

$$K_V(r) = \sum_{lm} C_{v,m} V_{lm}^{PW} \quad (\text{II. 48})$$

Donc :

$$V_{PW}(r) = \sum_{lm} C_{lm} T_{lm}(r) \quad (\text{II. 49})$$

On détermine le potentiel à l'intérieur de la sphère MT par l'utilisation de la fonction de Green.

$$\begin{aligned}
V_0(r) = V_{lm}^{PW}(r) \left[\frac{r}{R} \right]^l + \frac{4\pi}{2l+1} \left\{ \frac{1}{r^{l+1}} \int_0^r dr' r'^{l+2} \rho_v(r') \right. \\
\left. + r^l \int_0^R dr' r'^{l-1} \rho_v(r') - \frac{r^l}{R^{2l+1}} \int_0^{Rr} dr' r'^{l+2} \rho_v(r') \right\} \quad (\text{II. 50})
\end{aligned}$$

Où, $\rho_v(r')$: sont les parties radiales de la densité de charge.

II.7 Le code Fleur :

Le code Fleur est une implémentation de la méthode FLAPW qui a été développée essentiellement à Juelich [19] par le groupe de Stefan Blügel et Gustav Billmeyer, mais en s'intéressant au système de dimension réduite surface et chaîne par exemple. Dans notre cas on a étudié les couches minces, Fleur est plus performant car il ajoute aux deux régions (interstitielle+Muffin-tin) une région de vide où la fonction d'onde décroît exponentiellement.

Références

- [1] O. K. Andersen, Phys. Rev B 12, 3060 (1975).
- [2] J. C. Slater, Phys. Rev, 51, 846 (1937).
- [3] J. C. Slater, Phys. Rev. 51, 846 (1937).
- [4] M. B. Kanoun. thèse de doctorat. First-Principles study of Structural, Elastic and Electronic Properties of AlN and GaN Semiconductors under Pressure Effect and Magnetism in AlN: Mn and GaN: Mn systems, université de Tlemcen. (2004).
- [5] D. D. Koelling and G.O. Arbman, J. Phys. F 5, 2041 (1975).
- [6] M. Z. Huang, W. Y. Ching, J. Phys. Chem Solids. 46. 977 (1985).
- [9] S. Goedecker, Phys. Rev. B 47, 9881 (1993).
- [10] W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. A 1133, 140 (1965).
- [11] F. Rosicky, P. Weinberg and F. Mark, J. Phys. B 9, 2971 (1976).
- [12] J. H. Wood and A.M. Boring, Phys. Rev. B18, 2701 (1978).
- [13] T. Takeda, J. Phys. F 9, 815 (1979).
- [14] A. H. Macdonald, W. E. Pickett and D. D. Koelling, J. Phys. C 13, 2675 (1980).
- [15] D. D. Koelling and B. Harmon, J. Phys. C 10, 3107 (1977).
- [16] T. L. Loucks, «The augmented Plane Wave Method» Benjamin, New York (1967).
- [17] D. R. Hamann, Phys. Rev. Lett. 42, 662 (1979).
- [18] M. Weinert, J. Math. Phys. 22, 2433 (1981).
- [19] www.flapw.de



Chapitre III

Le couplage spin orbite

III.1 Introduction :

Le couplage spin-orbite, à l'origine de l'anisotropie magnéto-cristalline et du déblocage du moment orbital des matériaux ferromagnétiques [1], il contient un produit scalaire de moment cinétique orbital et de moment cinétique de spin, un angle entre les axes cristallographiques et l'aimantation est fait intervenir par Le couplage spin-orbite, avec des termes supplémentaires l'hamiltonien de Dirac peut être transformé en un hamiltonien analogue à l'Hamiltonien de Schrödinger. Cette partie traite du terme de couplage spin-orbite, en posant :

$$H = H_0 + H_{SOC} \quad (\text{III.1})$$

où H_0 est l'Hamiltonien de Kohn-Sham semi relativiste.

La méthode de la seconde variation consiste d'abord à résoudre le problème aux valeurs propres et aux vecteurs propres de H_0 , puis à calculer l'action du terme SOC sur ces vecteurs

Propres, par diagonalisation de l'Hamiltonien total. Pour un système ordonné, les valeurs

Propres de H_0 s'écrivent :

$$H_0 |n, K, \sigma\rangle = \varepsilon_{n,K}^\sigma |n, K, \sigma\rangle \quad (\text{III.2})$$

Dans la méthode FLAPW les fonctions d'onde sont données par :

$$|n, K, \sigma\rangle = \Phi_{n,K}^\sigma(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{G}} C_{n,K}^\sigma(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\mathbf{r}} & \mathbf{r} \in I \\ \sum_{lm} [A_{n,K}^{lm\sigma} U_l^\sigma(\mathbf{r}) + B_{n,K}^{lm\sigma} \dot{U}_l^\sigma(\mathbf{r})] Y_{lm}(\mathbf{r}) & \mathbf{r} \in \text{MT} \end{cases} \quad (\text{III.3})$$

Où l'indice I représente la région interstitielle et MT les sphères muffin-tin. Dans la région MT le potentiel cristallin possède la symétrie sphérique et se développe sur les harmoniques du réseau, dans ce H_{SOC} cas devient :

$$H_{SOC} = \xi(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{III.4})$$

Où :

$$\xi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m^2 c^2 r} \frac{dV}{dr}, \quad \boldsymbol{\sigma} \text{ sont les matrices de Pauli et } \mathbf{L} \text{ est l'opérateur du moment orbital.}$$

III.2 Détermination de $\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}$:

On suppose que l'axe de quantification des spins est suivant un axe \mathbf{u} déterminé par les angles θ et φ par rapport à l'axe z . Pour déterminer la partie angulaire du couplage spin-orbite $\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}$. L'opération de rotation du SOC est donnée par :

$$[\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}]_Z = R(\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma})R^\dagger \quad (\text{III.5})$$

Où R est l'opérateur de la matrice de rotation [49]

$$R(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\frac{\varphi}{2}} & \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\frac{\varphi}{2}} \\ -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\frac{\varphi}{2}} & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} \quad (\text{III.6})$$

On écrit l'opérateur de spin $\boldsymbol{\sigma}$ en termes de matrices de Pauli σ_x, σ_y et σ_z

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{III.7})$$

Et l'opérateur du spin-orbite prend la forme :

$$\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} L_z & L^- \\ L^+ & -L_z \end{pmatrix} \quad (\text{III.8})$$

Où

L^- et L^+ sont les opérateurs du moment orbitales donnés par :

$$L^- = L_x - iL_y, \quad L^+ = L_x + iL_y \quad (\text{III.9})$$

Substituons les équations (III.8), (III.6) dans l'équation (III.5), on trouve :

$$[\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}]_Z = \begin{pmatrix} \left[\cos(\theta)L_z + \frac{1}{2}\sin(\theta)(e^{-i\varphi}L^- + e^{-i\varphi}L^+) \right] & \left[\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\varphi}L^- - \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\varphi}L^+ - \sin(\theta)L_z \right] \\ \left[-\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\varphi}L^- + \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\varphi}L^+ - \sin(\theta)L_z \right] & -\left[\cos(\theta)L_z + \frac{1}{2}\sin(\theta)(e^{-i\varphi}L^- + e^{i\varphi}L^+) \right] \end{pmatrix} \quad (\text{III.10})$$

Les éléments de matrice de l'hamiltonien totale s'écrivent :

$$\langle n, \mathbf{K}, \sigma | H | n', \mathbf{K}, \sigma' \rangle = \varepsilon_{n,K} \delta_{n,n'} \delta_{\sigma,\sigma'} + \langle n, \mathbf{K}, \sigma | H_{SOC} | n', \mathbf{K}, \sigma' \rangle \quad (\text{III.11})$$

Et les éléments de matrice de H_{SOC} sont donnés par :

$$\langle n, K | H_{SOC} | n', K \rangle = \begin{pmatrix} H_{n,n',k}^{\uparrow\uparrow} & H_{n,n',k}^{\uparrow\downarrow} \\ H_{n,n',k}^{\downarrow\uparrow} & H_{n,n',k}^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \quad (\text{III.12})$$

Les éléments non diagonaux $H_{n,n'}^{\uparrow\downarrow}$, couplent les deux composantes de spin, et par conséquent, les deux sous bandes de spin majoritaire ne sont pas indépendantes. En plus de l'écart en énergie des niveaux $\varepsilon_{n,K}$ dû aux éléments diagonaux du SOC, il se produit un renversement de spin dû aux éléments non diagonaux.

III.3 Théorème de force appliqué à l'anisotropie magnétique :

L'anisotropie magnétique est un aspect intéressant du magnétisme, En effet cette anisotropie résulte d'une interaction complexe que traduit l'interaction spin-orbite [2]. par exemple Pour les matériaux magnétique $3d$, , l'énergie d'anisotropie magnétocristalline (MAE) trouvée est de l'ordre de quelques μeV [3, 4] en volume et de l'ordre de quelques meV [5, 6] dans les surfaces et les couches minces. Selon les modèles de Bruno [5] et van der laan [7] ces petites valeurs du MAE est une conséquence du petit effet du couplage spin-orbite comparé au reste des contributions des termes de l'hamiltonien. Cette interaction peut être traitée comme une perturbation.beaucoup de calculs basés sur cette méthode ont été effectués [9 ,10 ,11] A cause de leur simplicité et le temps gagné par la méthode du théorème de force [8], pour expliquer les résultats expérimentaux correspondants [12, 13]. Ces calculs ont donné des meilleures valeurs de l'énergie d'anisotropie magnétique des métaux de transition $3d$.

L'énergie d'anisotropie magnétocristalline (MAE) est défini comme la différence d'énergie :

$$MAE = E(\text{axe difficile}) - E(\text{axe facile}) \quad (\text{III.13})$$

Parfois, la direction difficile et la direction facile ne sont pas connus d'avance, dans ce cas l'énergie d'anisotropie magnétocristalline référée comme la différence entre deux axes cristallographiques, ou dans un cristal hexagonal par exemple, on peut écrire :

$$MAE = E(\text{axe } a) - E(\text{axe } c) \quad (\text{III.14})$$

On peut aussi définir l'anisotropie magnétocristalline, où l'énergie dépendante de l'orientation de l'aimantation, $E_A(\theta)$ comme

$$E_A(\theta) = E(\theta) - E(\text{axe } ref.) \quad (\text{III.15})$$

Où axe ref. Indique l'axe choisi comme référence, (généralement est l'axe facile ou l'axe de symétrie du cristal) et θ est l'angle mesurée à partir de lui. L'énergie d'anisotropie peut être aussi développée dans un cristal cubique comme :

$$E_A(\theta) = K_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_1^2\alpha_3^2) + K_2(\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2) + \dots \quad (\text{III.16})$$

Où α_1 , α_2 et α_3 sont les cosinus directeurs entre l'aimantation et les axes cristallographiques. Dans le cas d'un cristal hexagonal ou tétragonal a un seul axe de symétrie (la direction c), qui s'appelle l'anisotropie magnétocristalline uniaxe, l'énergie d'anisotropie dans ce cas s'écrit sous la form :

$$E_A(\theta) = K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta + \dots \quad (\text{III.17})$$

Où K_i sont les constantes d'anisotropie qui deviennent plus en plus petites.

III.4 Théorème de force :

En supposant que le couplage spin-orbite (SOC) est une perturbation dans l'hamiltonien total pour calculer l'anisotropie magnétique, ce que stipule le théorème de force. C'est surtout par rapport au temps de calcul que ce théorème est utile. nous avons pas besoin de converger le calcul autocohérent si le terme du SOC est de petite contribution. Une seule itération serait suffisante pour introduire cette contribution pour différentes directions de l'aimantation Pour calculer ses effets sur la structure électronique. La façon de calcul de l'anisotropie magnétique par cette méthode est aussi citée dans le papier [8]. Énergie totale de système est donnée par l'équation suivante si on le considère non perturbé :

$$E = T_0[\rho(\mathbf{r})] + \int V_{ext}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})d^3r + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')d^3rd^3r'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} + E_{xc}[\rho(\mathbf{r})] \quad (\text{III.18})$$

En introduisant une perturbation, l'énergie totale change et on aura un changement du premier ordre de la densité de charge, $\delta\rho$:

$$\delta E = \delta T_0[\rho(\mathbf{r})] + \int V_{ext}(\mathbf{r})\delta\rho(\mathbf{r})d^3r + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\mathbf{r})\delta\rho(\mathbf{r}')d^3rd^3r'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} + \int \mu_{xc}[\rho(\mathbf{r})]\delta\rho(\mathbf{r})d^3r + O(\delta\rho^2) \quad (\text{III.19})$$

$$\equiv \delta T_0[\rho(\mathbf{r})] + \int V(\mathbf{r})\delta\rho(\mathbf{r})d^3r + O(\delta\rho^2)$$

Et les identités suivantes :

$$E_{xc} = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}[\rho(r)] d^3r \quad (\text{III.20})$$

$$\frac{\delta E_{xc}}{\delta \rho(r)} = V_{xc}(r) = \rho(r) \frac{\varepsilon_{xc}[\rho(r)]}{\rho(r)} + \varepsilon_{xc}[\rho(r)] \quad (\text{III.21})$$

$$V = V_{ext}(r) + V_H + V_{xc} \quad (\text{III.22})$$

Ont été utilisées. L'énergie cinétique peut écrire sous la forme :

$$T_0[\rho(r)] = \sum_i \varepsilon_i - \int V(r) \rho(r) d^3r \quad (\text{III.23})$$

Où ε_i sont les énergies de particules (les valeurs propres de Fock) et le changement de l'énergie cinétique (aussi au premier ordre dans le changement de la densité de charge) est :

$$\delta T_0[\rho(r)] = \delta \sum_i \varepsilon_i - \int \delta V(r) \rho(r) d^3r - \int V(r) \delta \rho(r) d^3r \quad (\text{III.24})$$

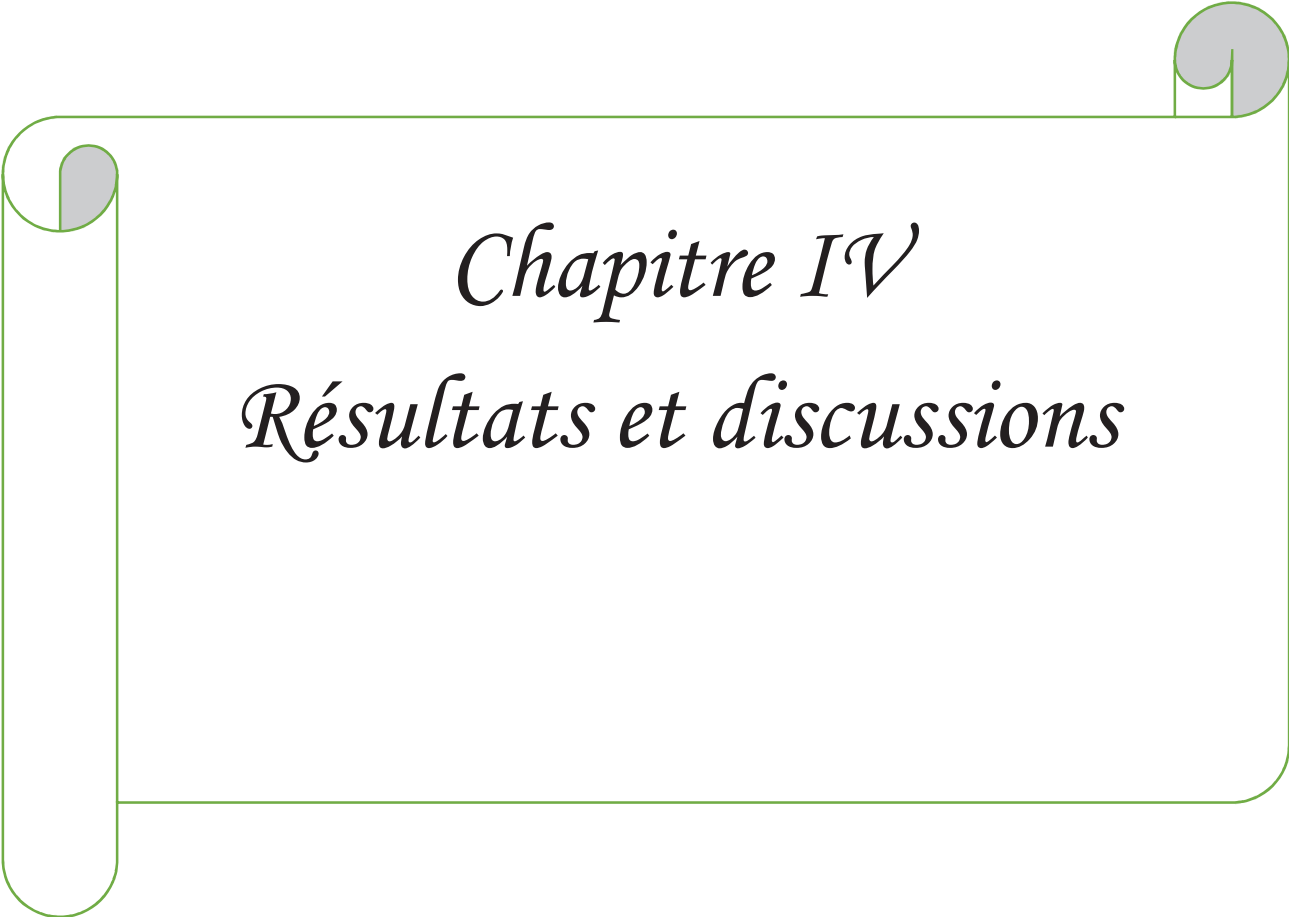
Donc si le potentiel est reste constant (invariant), nous substituons l'équation (III.24) dans (III.19), on obtient :

$$\delta E = \delta \sum_i \varepsilon_i \quad (\text{III.25})$$

Le théorème de force que nous voulons dériver où la différence de l'énergie totale entre deux configurations de spin peut se rapprocher par la différence entre la somme des valeurs propres jusqu'à l'énergie de Fermi pour deux directions de l'aimantation [8], et les deux sommes sont calculées avec le couplage spin-orbite (SOC). un grand effort de calcul sera gagné Quand le SOC est seulement introduit à la dernière étape. en effet ,au premier pas nous faisons un potentiel scalaire relativiste et sans l'interaction spin-orbite jusqu'à la convergence, et après nous calculons les valeurs propres y compris l'interaction spin-orbite pour une seule itération pour un axe de spin donné sans faire un changement du potentiel self-consistent. A' signaler que les deux calculs doivent convergés avec le même nombre de point \mathbf{k} utilisé dans la détermination de l'énergie d'anisotropie magnétocristalline.

Référence

- [1] C.Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe, *Mécanique Quantique* (Hermann, Paris, 1996), vol I, chap. IV, complément B, pp. 418-422.
- [2] J.H. van Vleck, *Phys. Rev.* **52**, 1178 (1968).
- [3] R. Wu and A. J. Freeman, *J. App. Phys.* **79**, 6209 (1996).
- [4] S. Ostanin, J.B. Staunto, S.S. A. Razee, C. Demangeat, B. Ginatempo, and E. Bruno, *Phys. Rev. B* **69**, 64425 (2004).
- [5] P. Bruno, *Phys. Rev. B* **39**, 865 (1989).
- [6] A. B. Shick, D. L. Novikov, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **65**, 14259 (1997).
- [7] G. van der laan, *J. Phys. Condens Matter* **10**, 3239 (1998).
- [8] A. R. Makintosh and O. K. Andersen, in *electron at the Fermi Surface*, edited by M. Springford (Cambridge University Press, 1980).
- [9] G. H. O. Daalderop, P. J. Kelly, and M. F. H. Schuurmans, *Phys. Rev. B* **41**, 11919 (1990).
- [10] D. S. Wang, R. Wu, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 869 (1993).
- [11] X. Wang, R. Wu, D. S. Wang, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **54**, 61 (1996).
- [12] A. Hubert, W. Unger, and J. Kranz, *Z. Phys.* **148**,224 (1969).
- [13] P. Escudier, *Ann. Phys.* **9**, 125 (1975).

A decorative graphic of a scroll with a green outline and grey circular accents at the corners. The text is centered within the scroll.

Chapitre IV
Résultats et discussions

Résultats et discussions

Dans cette section nous étudions l'effet de substrat sur l'anisotropie magnétique de la monocouche de Co (001) avec $a_{\text{Co}} = a_{\text{Rh}}$ et $a_{\text{Co}} = a_{\text{Ir}}$ par la méthode FLAPW. Le cobalt cristallise dans une structure cubique centré (bcc) avec une distribution électronique : $[\text{Co}] 4s^2 3d^7$, et les positions des deux atomes de la monocouche en configuration ferromagnétique que nous allons étudier dans ce travail sont: (0.0.0) et (0.1/2.1/2) respectivement comme montre dans la figure IV.1 ci-dessous.

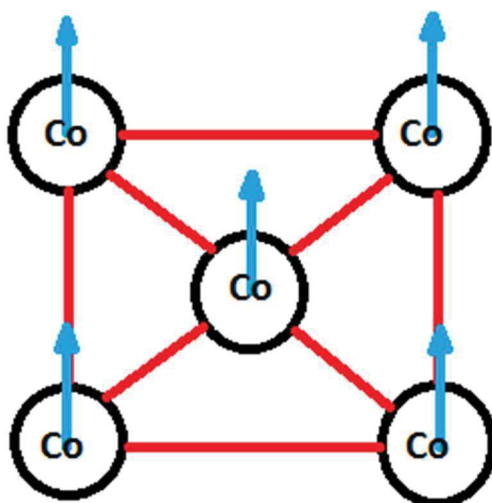


Fig.IV.1 : La configuration AF d'une monocouche de Co (001)

Le Cobalt est un métal de transition de la couche 3d qui ont une propriété remarquable d'avoir une aimantation spontanée en absence de champ magnétique à des températures inférieures à la température de Curie (T_c) [1].

IV.1 Détail de calcul

Nous utilisons la méthode de linéarisation des ondes planes augmentées à potentiel total (FLAPW), appliquée dans le cadre du code Fleur [2] avec l'utilisation de l'approximation du gradient généralisé (GGA). Le cut-off des fonctions d'ondes planes qui limite le nombre des vecteurs de réseau réciproque qui entre dans le développement des fonctions d'onde de Kohn-Sham sur les fonctions de la base LAPW, $K_{max} = 4.0 \text{ a.u}^{-1}$ et le cut-off dans l'espace réciproque qui limite le nombre d'onde planes utilisées dans le développement de la densité de charge et le potentiel dans la région interstitielle $G_{max} = 12 \text{ a.u}^{-1}$, et le cut-off dans l'espace

réciroque qui limite le potentiel « échange-corrélation » $G_{maxxc} = 10.2 \text{ a.u}^{-1}$, et le rayon de la sphère muffin-tin est: 2.52, 2.43 et 2.41, pour le Co , Ir et Rh respectivement. Les fonctions d'onde ainsi que la densité de charge et le potentiel à l'intérieur de la sphère muffin-tin sont développés jusqu'à $l_{max} = 10$.

IV.2 Propriétés magnétiques

Pour étudier les propriétés magnétiques, nous avons calculé de manière autocohérente les moments magnétiques de spin et d'orbital du **Co bcc**, **Co** ($\mathbf{a}_{Co} = \mathbf{a}_{Rh}$) et **Co** ($\mathbf{a}_{Co} = \mathbf{a}_{Ir}$) dans des différentes directions et les résultats trouvés sont représentés dans les tableaux (IV.1), (IV.2) et (IV.3).

| moments magnétiques les directions | $m_s (\mu_B)$ | $m_{or} (\mu_B)$ |
|---------------------------------------|---------------|------------------|
| 001 | 2.18 | 0.34 |
| 110 | 2.16 | 0.36 |
| 100 | 2.17 | 0.22 |

Tableau IV.1: Résultats des moments de spin et d'orbital de la monocouche de **Co bcc**, calculés par la méthode GGA.

| moments magnétiques les directions | $m_s (\mu_B)$ | $m_{or} (\mu_B)$ |
|---------------------------------------|---------------|------------------|
| 001 | 2.14 | 0.15 |
| 110 | 2.14 | 0.27 |
| 100 | 2.14 | 0.27 |

Tableau IV. 2: Résultats des moments de spin et d'orbital de la monocouche de **Co** ($\mathbf{a}_{Co} = \mathbf{a}_{Rh}$), calculés par la méthode GGA.

| moments magnétiques les directions | $m_s (\mu_B)$ | $m_{or} (\mu_B)$ |
|---------------------------------------|---------------|------------------|
| 001 | 2.14 | 0.16 |
| 110 | 2.14 | 0.27 |
| 100 | 2.14 | 0.27 |

Tableau IV.3: Résultats des moments de spin et d'orbital de la monocouche de Co ($a_{Co} = a_{Ir}$), calculés par la méthode GGA.

A partir des tableaux. IV.1, IV.2 et IV.3 on remarque que les valeurs des moments magnétiques de spin et le moment magnétique orbital sont presque constantes, on voit que la contribution du moment magnétique orbital au moment magnétique total de l'atome est presque négligeable par rapport au moment magnétique de spin, ce qui implique que le magnétisme dans les métaux de transitions devient de spin ('interaction entre les spins).

IV. 3 Densité d'états (DOS)

La densité d'états (DOS) totale du Co est calculée en utilisant l'approximation GGA. Les figures (IV.2, IV.3) représentent la densité d'états totale de la monocouche du Co. Nous rappelons que les DOS sont calculés à partir de valeurs propres de l'équation Kohn-Sham et s'obtiennent après intégration surtout les vecteurs "k" de la première zone de Brillouin [3].

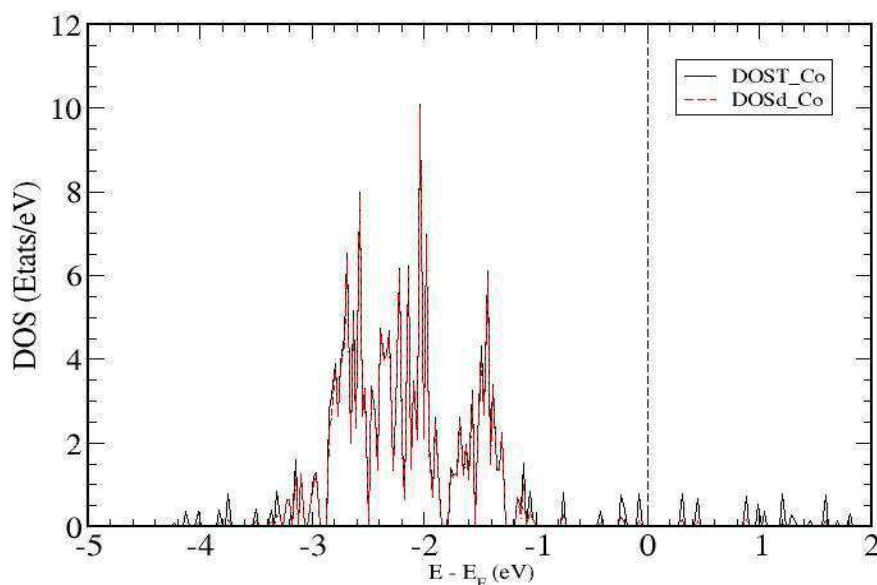


Fig. IV.2 : La densité d'états de la monocouche Co calculée par GGA.

Sur cette figure, on remarque que la densité d'état totale (spdf) est la même que celle de la couche d ce qui implique que la contribution des couches spf au magnétisme est négligeable, et le magnétisme de du Co devient de la couche d .

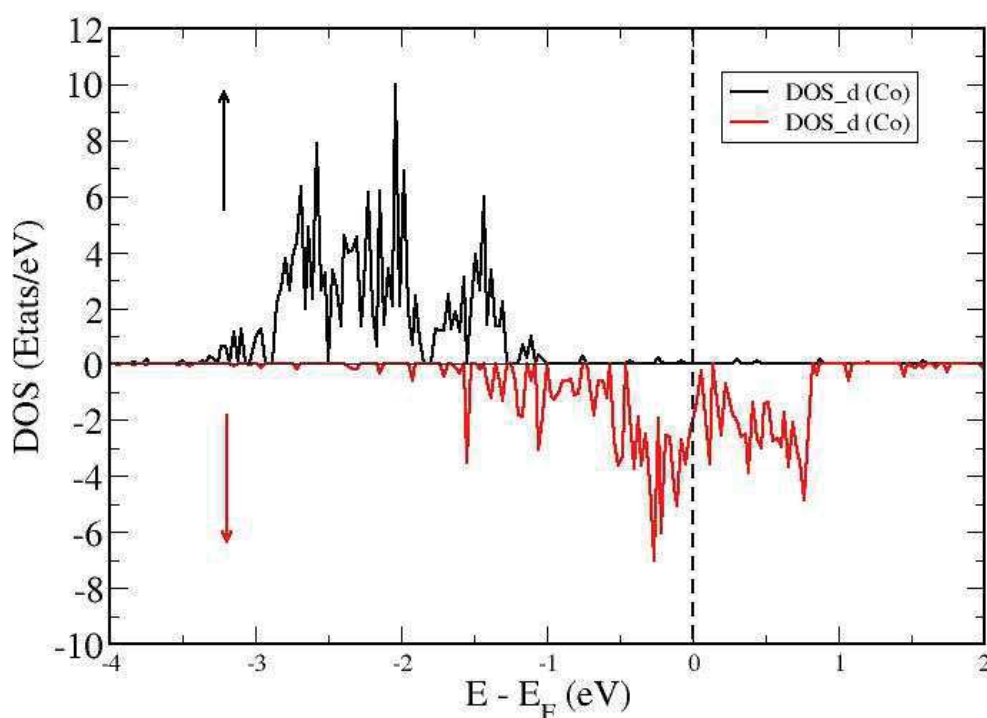


Fig. IV.3 : La densité d'états (DOS-d) de la monocouche Co calculée par GGA.

La figure IV.3 montre que les états occupés du spin up sont situés en dessous du niveau de Fermi et les états du spin down sont situés au dessus du niveau de Fermi, on voit clairement que la densité de spin up presque complètement occupée au contraire les états occupés de spin down. Ce qui donne une valeur importante du moment magnétique sachant que la valeur du moment magnétique est calculée via la relation suivants

$$\mu = \mu_B(N^+ - N^-)$$

où N^+ : Nombre des électrons de spin up

N^- : Nombre des électrons de spin down. μ_B : est le magnéton de Bohr

IV.4 l'énergie de l'anisotropie magnétique

Le calcul de l'énergie d'anisotropie magnétique (MAE), a été fait par la méthode du théorème de force (FT : Force Theorem) [4, 5], l'énergie d'anisotropie magnétique peut être calculée comme la différence dans l'énergie totale entre deux directions cristallographiques.

| Nombre de points k | MAE [meV] | |
|----------------------|-------------------|-------------------|
| | $E(001) - E(110)$ | $E(001) - E(100)$ |
| 100 | 4.95 | 4.99 |
| 256 | 4.86 | 4.91 |
| 1024 | 4.95 | 4.98 |
| 2500 | 4.97 | 5.00 |
| 4096 | 4.97 | 5.01 |
| 4900 | 4.97 | 5.07 |

Tableau IV. 4 : Energie d'anisotropie magnétique (MAE) de la monocouche Co bcc en fonction de points k .

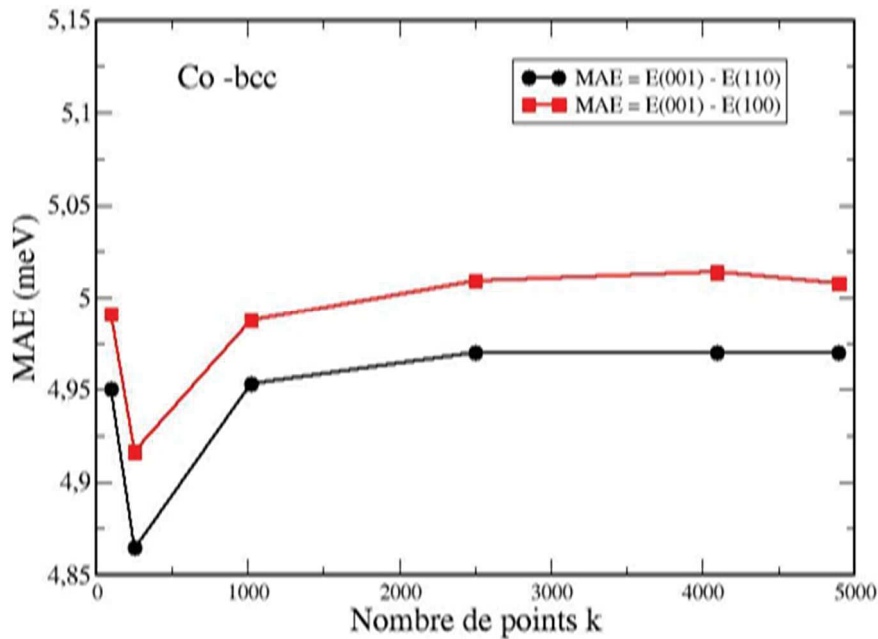


Fig. IV.4 : Energie d'anisotropie magnétique (MAE) de la monocouche Co bcc en fonction du nombre de points k en utilisant la méthode GGA.

Sur les tableaux (IV.4, IV.5 et IV.6), nous présentons les calculs de l'énergie d'anisotropie magnétique pour des plusieurs points k dans les directions [001], [110] et [100]. (voir figure IV.4).

| Nombre de points k | MAE(FT) [meV] | |
|--------------------|-----------------|-----------------|
| | E(001) - E(110) | E(001) - E(100) |
| 100 | 4.16 | 4.02 |
| 256 | 3.79 | 3.65 |
| 1024 | 3.95 | 3.80 |
| 2500 | 3.91 | 3.75 |
| 4096 | 3.89 | 3.73 |
| 4900 | 3.91 | 3.76 |

Tableau IV.5: Energie d'anisotropie magnétique (MAE) de la monocouche

Co($a_{Co} = a_{Rh}$) en fonction de points k.

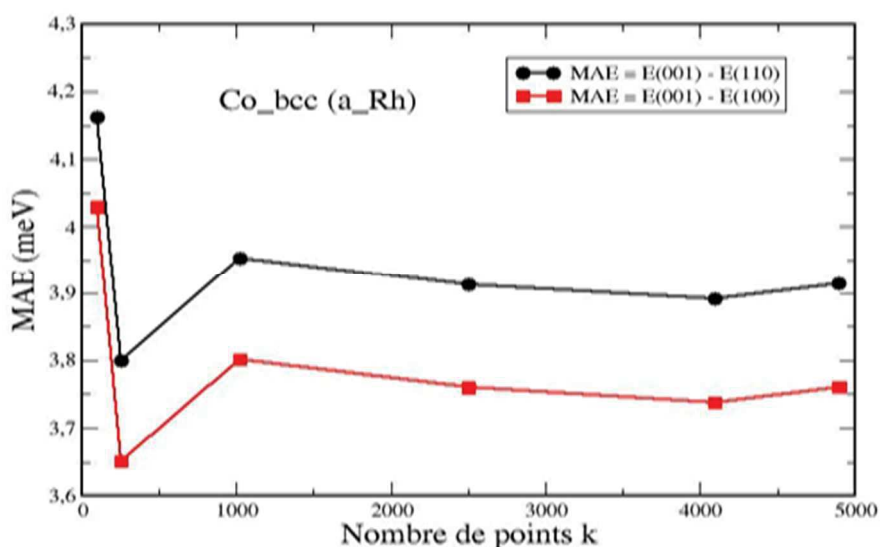


Fig. IV.5 : Energie d'anisotropie magnétique (MAE) de la monocouche Co ($a_{Co} = a_{Rh}$) en fonction du Nombre de points k en utilisant la méthode GGA.

| Nombre de points k | MAE[meV] | |
|--------------------|-----------------|-----------------|
| | E(001) - E(110) | E(001) - E(100) |
| 100 | 4.29 | 4.17 |
| 256 | 4.07 | 3.94 |
| 1024 | 3.91 | 3.76 |
| 2500 | 3.89 | 3.75 |
| 4096 | 3.86 | 3.71 |
| 4900 | 3.87 | 3.72 |

Tableau IV.6: Energie d'anisotropie magnétique (MAE) de la monocouche Co($a_{Co} = a_{Ir}$) en fonction de points k.

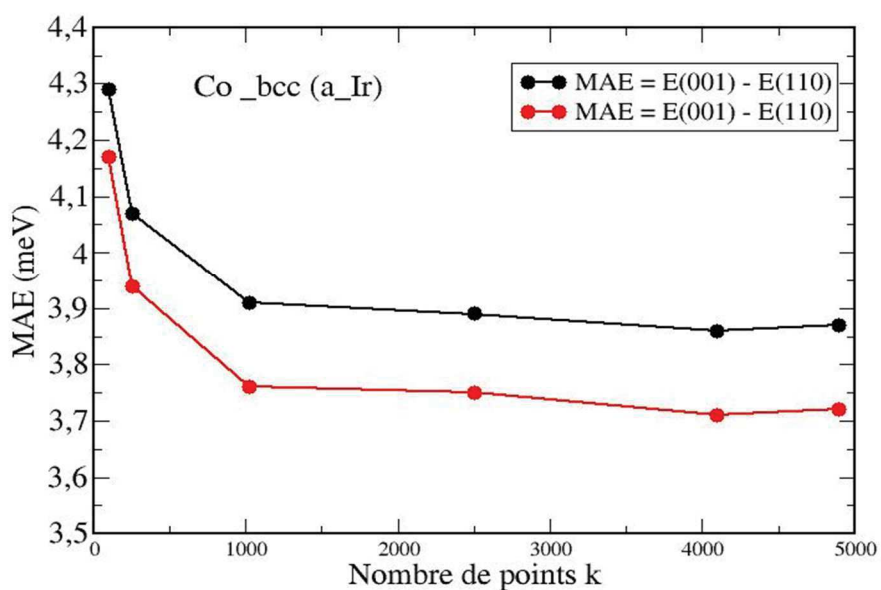


Fig. IV.6 : Energie d'anisotropie magnétique(MAE)de la monocouche **Co** ($a_{Co}= a_{Ir}$) en fonction du nombre de points **k** en utilisant la méthode GGA.

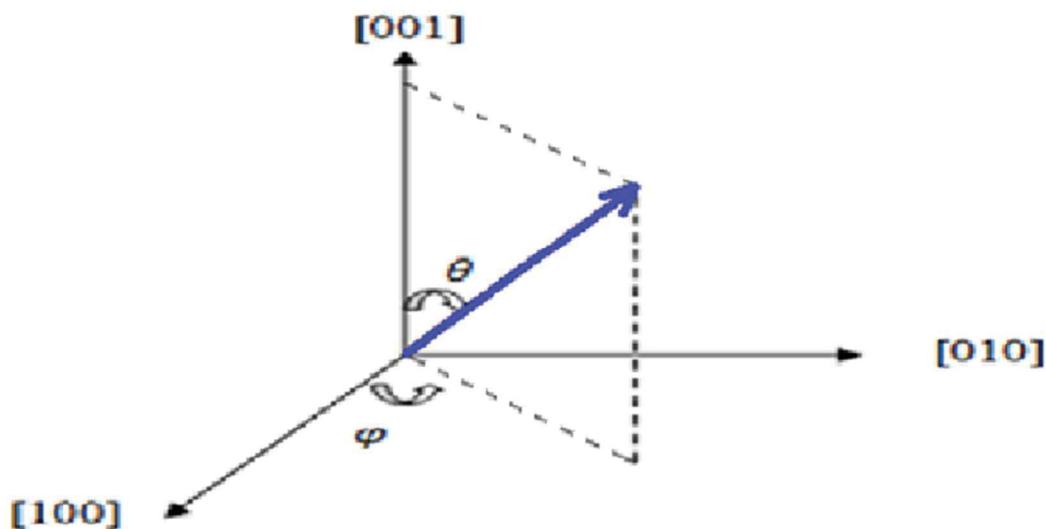


Figure IV.7: Orientation de l'aimantation par rapport aux axes de coordonnées.

A partir des tableaux IV.4, IV.5 et IV.6 et les figures IV.4, IV.5 et IV.6 on remarque que la valeur de l'énergie d'anisotropie magnétique reste presque constante à partir du nombre de points **k** égale 1024 dans les trois systèmes, cependant une petite variation a été remarquée sur la quantité du MAE (de 4.97 meV à ~ 3.9 meV) lorsque on passe du **Co bcc** aux systèmes **Co** ($a_{Co}= a_{Rh}$) et **Co** ($a_{Co}= a_{Ir}$).

La direction facile de l'aimantation dans les trois systèmes est suivant le plan (xy) (in plane) et la direction difficile selon la direction [001] (out of plane).

Références

- [1] R. Serra, Moments magnétiques et structure électronique au voisinage des interfaces : étude par spectroscopie de pertes d'énergie d'électrons et calculs ab-initio, thèse de doctorat, Universités Toulouse III-Paul Sabatier, 2009
- [2] <http://www.flapw.de>
- [3] A. R. Makintosh and O. K. Andersen, in *electron at the Fermi Surface*, edited by M. Springford (Cambridge University Press, 1980).
- [4] A. R. Makintosh and O. K. Andersen, in *electron at the Fermi Surface*, edited by M. Springford (Cambridge University Press, 1980).
- [5] M. Weinert, R. E. Watson, and J. W. Davenport, *Phys, Rev, B* **32**, 2115 (1985).



Conclusion

Conclusion

Dans ce travail nous avons présenté une étude théorique de l'effet des contraintes sur les propriétés magnétiques et l'anisotropie magnétique d'une monocouche de Co-bcc, $\text{Co}(a_{\text{Co}}=a_{\text{Ir}})$ et $\text{Co}(a_{\text{Co}}=a_{\text{Ir}})$. Les calculs ont été effectués par la méthode des ondes planes linéarisées (FP-LAPW) dans le cadre de la fonctionnelle de la densité (DFT), et pour déterminer le potentiel d'échange et de corrélation, on a utilisé l'approximation GGA. Les résultats trouvés montrent que la valeur du moment magnétique de spin reste presque constante dans les trois systèmes étudiés **Co bcc**, **Co ($a_{\text{Co}}=a_{\text{Rh}}$)** et **Co($a_{\text{Co}}=a_{\text{Ir}}$)**.

La valeur de l'énergie d'anisotropie magnétique reste presque constante à partir du nombre de points k égale 1024 dans les trois systèmes, cependant une petite variation a été remarquée sur la quantité du MAE (de 4.97 meV à ~ 3.9 meV) lorsque on passe du **Co bcc** aux systèmes **Co ($a_{\text{Co}}=a_{\text{Rh}}$)** et **Co($a_{\text{Co}}=a_{\text{Ir}}$)**.

Nous avons montré que la direction facile de l'aimantation dans les trois systèmes est suivant le plan (xy) (in plane) et la direction difficile selon la direction [001] (out of plane).

في هذا العمل قمنا بدراسة تأثير الحامل على الخصائص المغناطيسية وخصائص تباين المناحي المغناطيسي لاحادى الطبقة لـ: Co bcc, Co($a_{Co}=a_{Rh}$), و Co($a_{Co}=a_{Ir}$) , وهذا بطريقة التدرج العام (GGA) وذلك باستعمال دالة الموجات المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل (FLAPW) المدمجة في برنامج "Fleur" التي تتركز على نظرية دالية الكثافة. نتائج الحسابات بينت ان الاتجاه السهل للمغطة في حالة Co bcc, Co($a_{Co}=a_{Rh}$) و Co($a_{Co}=a_{Ir}$) في المستوي (xy) والاتجاه الصعب وفق المحور [001] اما قيمة طاقة تباين المناحي المغناطيسي فهي في حدود 4.97 meV و 3.9 meV على الترتيب.

Abstract

In this work, we studied the effect of the substrate on the magnetic properties and the magnetic anisotropy of the monolayer: Co bcc, Co($a_{Co}=a_{Rh}$), et Co($a_{Co}=a_{Ir}$), by the generalized gradient approximation (GGA), using the Full potential linearized augmented plane waves method (FLAPW) based on the density functional theory. The results of the calculations showed that the easy direction of the magnetization in the three systems is in the plane and the hard direction is along the axis [001]. The value of the magnetic anisotropy energy varies between 4.97 meV and 3.9 meV.

Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié l'effet du substrat sur les propriétés magnétiques et l'anisotropie magnétique de la monocouche: Co bcc, Co($a_{Co}=a_{Rh}$), et Co($a_{Co}=a_{Ir}$), par l'approximation de gradient généralisé (GGA), dans le cadre de méthodes des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (FLAPW) basée sur la théorie de la fonctionnelle de densité en utilisant le code Fleur. Les résultats des calculs ont montré que la direction facile de l'aimantation dans les trois systèmes est dans le plan et la direction difficile est selon l'axe [001]. La valeur de l'énergie d'anisotropie magnétique est de l'ordre de 4.97 meV à 3.9 meV.